

平成 28 年度 未来研究ラボシステム 研究成果報告書

研究種目：個人研究

研究期間：平成 28 年 10 月～平成 29 年 9 月

研究課題名：計算科学とデータ科学の融合による高温超伝導水素化物探索のための基盤構築
ラボ長

所属：極限科学センター

氏名：石河 孝洋

研究成果：

当初の研究目的

1911 年に水銀で超伝導が発見されて以来、実験・理論の両面から室温超伝導物質の探索が行われている。2015 年に Drozdov、Eremets らによって、高圧縮された硫化水素が 203 ケルビンの超伝導になることが発見され、これまで銅酸化物系で記録された超伝導転移温度の最高値（164 ケルビン）を 20 年ぶりに更新した。これは、「水素化合物で高温超伝導が得られる」という 2004 年に発表された Aschcroft の予言を実験的に証明した重要な成果である。硫黄単体における超伝導転移温度の最高値は 17 ケルビン程度であることから、高温超伝導の主な要因は化合物中に含まれる水素の効果によると考えられており、新奇高温超伝導水素化合物を求めて現在世界規模で研究が行われている。

高圧力下における水素化合物の超伝導を測定するためには技術的に困難な部分が多く、現状では実験データが十分に得られていない。そのため、計算科学的手法によって水素化合物の高圧相や超伝導性を予測し、候補物質や実験方法を実験家に提案することは、研究を効率化するうえで必須となる。しかし、膨大な数が存在する水素化合物に対して絨毯爆撃的に計算科学的手法を適用させる方法はあまりにも非効率的であるため、探索の指針を決定する必要がある。そこで本研究では、異分野のデータ科学的手法を融合させてターゲット物質を選定する独自の方法を構築し、その本格的な探索に向けた準備を行うことが目的となる。計算科学的手法によって水素化合物の結晶構造、電子状態、超伝導性など各種データを収集してデータベース化し、データ科学的手法に基づく機械学習により高温超伝導の候補を予測する。計算科学に戻って予測結果の検証を行い、それらのデータを加えてデータベースを強化し、機械学習を再度実行するというサイクルを回すことによってターゲット物質選定の精度を向上させる狙いがある (Fig. 1 参照)。



Fig. 1 高温超伝導水素化合物探索の概略図。

得られた結果

平成 28 年度は Fig. 1 における「データ科学」の部分について開発・改良を実施した。まずは文献から 23 種類の 2 元系水素化合物に関する物性データを収集してデータベースを更新した。これと同時平行で、計算科学的手法を用いて酸素-水素系 (M1 の首藤祐希氏に協力を依頼)、及びアルゴン-水素系における結晶構造及び超伝導性を予測し、これらの結果もデータベースに加えた。アルゴン-水素系について、1500 万気圧付近まで圧縮するとアルゴン格子間に存在する水素分子が解離して超伝導性が急激に強まり、 ArH_2 や ArH_4 で 70 ケルビンの超伝導になることを予測した。この成果について第 57 回高圧討論会にて発表した。次に、機械学習に利用する遺伝的プログラミングコードの修正を行い、更新したデータベースを使ってターゲット物質の選定を実行した。関数に使用する変数を圧力、空間群、原子量、水素含有量、電子間クーロン斥力パラメータ μ^* の 5 つに絞り、機械学習によって超伝導転移温度と相関の強い関数 (超伝導評価関数) を決定した。Fig. 2 で示すように、プログラムを使って網羅的に作成した 3 元系水素化合物のデータリスト (テストとして空間群を三斜晶 (No. 1)、圧力を 100 万気圧、 μ^* を 0.13 に固定) を超伝導評価関数に照合させたところ、 $\text{H}_5\text{Li}_3\text{S}_2$ 、 H_4FP 、 H_4NaAl などの化合物が高温超伝導の候補として選出された。最も可能性の高い $\text{H}_5\text{Li}_3\text{S}_2$ は上で述べた硫化水素の高温超伝導に関連する物質であるため、特に興味深いものとなっている。

平成 28 年度はマテリアルズ・インフォマティクスに関連するふたつの研究会に参加し、データ科学の専門家と議論する機会に恵まれ、本研究課題の手応えや過学習などの問題点が明らかになった。これらのことを踏まえて、平成 29 年度は手法やプログラムの更なる改良、及び機械学習に用いる変数の最適化に取り組むとともに、選定されたターゲット物質について計算科学的手法による検証を実施する計画である。

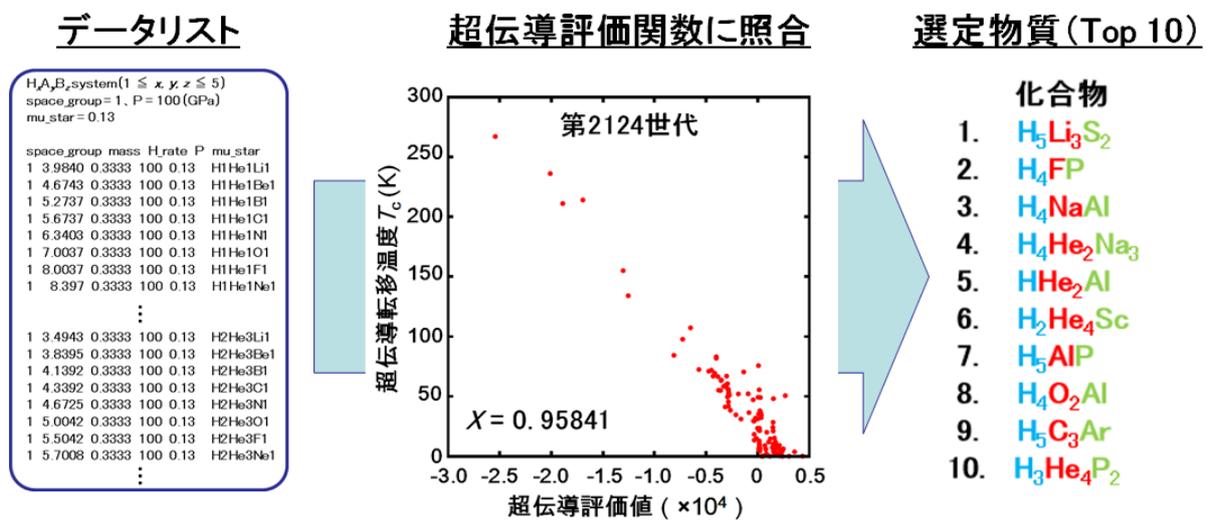


Fig. 2 データリスト照合によるターゲット物質の選定

キーワード:

第一原理電子状態計算、遺伝的アルゴリズム、遺伝的プログラミング、水素化合物、超伝導

研究経費（H28年度）の内訳

備品費	消耗品費	旅費	謝金	その他	合計
716,364円	183,636円	円	円	円	900,000円

共同研究者等

(1) 共同研究者（氏名・所属）

該当なし

(2) 研究協力者（氏名・所属・学年（学生の場合））

首藤祐希・物質創成専攻未来物質領域・M1

発表論文等（平成29年3月31日現在）

[学会発表]

日本物理学会領域7若手奨励賞受賞記念講演

1. 石河孝洋、「高圧極限環境下における物質の結晶構造と超伝導性に関する第一原理的研究」、日本物理学会第72回年次大会、大阪大学豊中キャンパス、2017年3月17日-20日。

一般講演（全て口頭）

2. 石河孝洋、「計算科学とデータ科学の融合による高温超伝導水素化物の探索」、ナノテクイニシヤティブ研究会「マテリアルズ・インフォマティクス・ネットワーク」、メープル有馬、2017年1月9日、10日。
3. 石河孝洋、「計算科学とデータ科学の融合による高温超伝導物質の探索」、第1回大阪大学豊中地区研究交流会、大阪大学会館アセンブリーホール、2016年12月20日。
4. 石河孝洋、「計算科学とデータ科学の融合による高圧下高温超伝導物質の探索」、マテリアルズデータビリティサイエンス第1回ワークショップ、大阪大学基礎工学国際棟、2016年11月11日。
5. 石河孝洋、中西章尊、清水克哉、小田竜樹、「アルゴン水素化物の結晶構造と超伝導に関する第一原理的研究」、第57回高圧討論会、筑波大学、2016年10月26日-29日。

外部資金獲得状況・申請状況（本研究課題に関連して、科研費、JST等の競争的資金、受託研究、奨学寄付金等を受給された場合、また、申請された場合はその状況を記入ください）

1. 科研費基盤研究C 研究代表者

「計算高圧科学とデータ科学の融合による高温超伝導水素化合物の探索」（採択）

2. 公益財団法人旭硝子財団自然科学系「研究奨励」 研究代表者

「計算高圧科学とデータ科学の融合による水素化物高温超伝導体の探索」（採択）

参考となるHP等

該当なし