



# 物理工学科セミナー

日時：6月18日（木） 16:30 - 17:30

場所：葛飾キャンパス研究棟8F第1セミナー室

Speaker： **大西 正人 氏 (Masato Ohnishi)**

Affiliation： **統計数理研究所** マテリアルズインフォマティクス  
研究推進センター **特任准教授**

Title：フォノンから材料設計へ：  
第一原理計算データベースの構築とAI駆動型探索

## Abstract：

フォノン（格子振動の量子）は材料の熱輸送を担う基本的なキャリアであり、その制御は電子デバイスの熱マネジメントや断熱材の開発に不可欠である[1]。本講演では、フォノンの基礎から出発し、これまで取り組んできた原子シミュレーションに基づく研究を紹介する。カーボンナノチューブ[2]やクラスレート化合物[3]を対象に、欠陥・ひずみ・非調和性がフォノン輸送に与える影響を明らかにしてきた。こうした個別系の知見を基盤として、近年は無機化合物を対象とした大規模フォノンデータベース「Phonix」を構築した[4]。このデータセットと機械学習を組み合わせることで、熱伝導率の高精度な予測や新規材料の高速スクリーニングが可能となりつつある。データ駆動型アプローチが次世代の熱機能材料探索をどのように加速するか、展望とともに議論する。

## Reference

- [1] M. Ohnishi et al., APL Mater. **7**, 013102 (2019). [2] T. Kodama, M. Ohnishi et al., Nat. Mater. **16**, 892-897 (2017). M. Ohnishi et al., Phys. Rev. B **104**, 014306 (2021). [3] M. Ohnishi et al., Phys. Rev. B **106**, 024303 (2022) and Chem. Mater. **36**, 10595-10604 (2024) [4] M. Ohnishi et al., npj Comp. Mater. **12**, 150 (2026)