

日本－フィリピン－シンガポールタイ 国際共同研究「材料分野（マテリアルズ・インフォマティクス）」 2022年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	触媒・電池応用に向けたハイエントロピー合金材料の理論的 設計
研究課題名（英文）	Computational Design of High Entropy Alloys for Catalyst and Battery Applications
日本側研究代表者氏名	清水 康司
所属・役職	東京大学・大学院 工学系研究科・助教
研究期間	2022年4月1日 ～ 2025年3月31日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
清水 康司	東京大学大学院・工学系研究科・助教	研究項目の全般を担当
渡邊 聡	東京大学大学院・工学系研究科・教授	計算結果の考察
山崎 駿輔	東京大学大学院・工学系研究科・大学院生	計算データ作成・収集・解析

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

2元素系合金材料の安定性および同材料における分子吸着エネルギーを密度汎関数法計算によって網羅的に探索し、計算データベースを作成する。また、得られたデータベースを活用し、触媒性能評価に重要となる物性を予測するマテリアルズ・インフォマティクス手法を開発する。さらに、ハイエントロピー合金表面での分子反応の動的過程の解析に向けて、多元素系に適用可能な機械学習による原子間ポテンシャルの手法を開発する。

3. 日本側研究チームの実施概要

本共同研究プロジェクトでは、新規の多元素材料であるハイエントロピー合金（HEAs）の触媒および電池への応用に向けた計算機による設計を目指している。2022年度は HEAs 材料の物理的性質を評価する上で基礎的な知見となり得る 2 元素系合金表面に着目した。

複数の遷移金属元素を対象として、全ての 2 元素系合金の組み合わせに対して、密度汎関数理論（DFT）に基づく第一原理計算による網羅的計算を実施した。また、酸素還元反応および二酸化炭素還元反応に対する触媒性能を評価するための指標として重要である、酸素原子・ヒドロキシ基および一酸化炭素分子・水素原子の表面への吸着状態を調査した。得られた結果から、触媒として有望な材料の候補が得られた。さらに、上記の吸着状態の計算データから、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）手法を用いた予測モデルの作成を試みた。元素および原子構造に関わる多数の特徴量を用意し、これらを適切に調整することで、DFT 計算に近い精度で物理量を得ることができた。他方、HEAs 表面上で起こる化学反応の動的な過程を調べることが、反応機構の詳細な理解につながる。この点についても第一原理計算の使用が望ましいが、本手法は計算が重く詳細な解析は困難である。そのような中、原子の間にはたらく相互作用をあらわす原子間ポテンシャルを機械学習する（機械学習ポテンシャル）という取り組みが近年注目されており、第一原理計算に匹敵する予測精度で計算量を大幅に削減することができる。そこで 2022 年度は、HEAs 表面上での化学反応を調査する前段階として、ニューラルネットワークをもとにした機械学習ポテンシャル手法を用いて、様々な原子配置での合金材料のエネルギー予測から安定な表面の探索に着手した。ここでも、上記 9 種類の遷移金属元素を対象とし、多量に生成したデータから機械学習ポテンシャルの作成を進めた。