

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）」 2023 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
宮本 健太郎	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
大塚 耕希	東京大学・工学部・大学生	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

本年度は、2 元素系合金表面に対する網羅的計算データベースをもとに、分子吸着が誘起する表面偏析反応のマテリアルズ・インフォマティクス手法を用いた解析を本格化する。さらに、多元素系合金表面の安定性評価に向けた計算データベースの拡充を進めるとともに、機械学習ポテンシャル手法の適用範囲を分子吸着系へと拡張することで、ハイエントロピー合金表面の安定性と分子反応の動的過程解析に向けた基盤構築に取り組む。

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。本プロジェクトにおいてこれまでに、密度汎関数理論（DFT）に基づく第一原理計算によって、9種類の遷移金属元素（Co, Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt, Au）の2元素系の組み合わせについて、単原子合金（SAAs）表面の偏析エネルギーを網羅的に調べた。また、酸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、酸素原子およびヒドロキシ基のSAAs表面への吸着状態とそこでの偏析エネルギーに対する計算データも蓄積してきた。そこで、これらの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を作成することで、表面偏析現象の評価に重要となる特徴量を割り出すとともにSAAs触媒の候補材料をスクリーニングすることができた。さらに、水素分離膜としての応用が期待されるPd/V表面系について、水素原子吸着時の表面偏析エネルギーのDFT計算を実施したところ、水素原子の吸着量の増加に伴ってV原子の表面偏析が誘起されることを明らかにした。その他にも、HEAs表面の安定性とそこでの分子反応の動的過程の解析に向けて、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）取り組みを昨年度に引き続き進めた。様々な原子配置の構造に対するDFT計算データベースを作成して機械学習ポテンシャルを訓練し、触媒応用に向けた組成最適化計算に取り組んだ。