

2023 年度年次報告書

未踏探索空間における革新的物質の開発

2021 年度採択研究代表者

塩見 淳一郎

東京大学 大学院工学系研究科

教授

巨大連続空間探索による不秩序熱機能材料の革新

主たる共同研究者:

後藤 真宏 (物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 主席研究員)

津田 宏治 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 教授)

研究成果の概要

本研究では、「固体成膜プロセス」と「ウェット塗布プロセス」の 2 つの系について Quantum Robotics Loop の確立を目指している。

固体成膜プロセスにおいては、1 基板上に数十点のコンビナトリアルサンプルを自動成膜するためのハードウェアを整備した。本年度は、1mm 角程度の微小領域でかつ数十～数百 nm の極薄膜からなるコンビナトリアルサンプルの膜厚・組成・密度・熱伝導率をハイスループットに評価する実験スキームを確立した。

不秩序構造の熱輸送の学理構築において、Ge 薄膜を異なる成膜条件で作製し、トポロジカルデータ解析(TDA)と主成分分析を用いて構造的特徴を抽出する手法を構築した。この手法により、従来の解析法では識別できなかった異なる熱伝導率を持つアモルファス材料の構造を初めて明確に識別することに成功した。またアモルファス超格子の非弾性 X 線散乱測定を実施し、Diffuson が界面で散乱されることを確認した。

ウェットプロセスについては、主に熱放射複合材塗膜の要素技術の開発を進めた。まず、熱放射ファイラーについて、量子アニーラを利用した連続値ブラックボックス最適化アルゴリズムである CONBQA と電磁場計算を組み合わせ、Si/SiO₂ の多層膜の最適構造の提案と実際のサンプル作製・反射スペクトル評価を実施し狭帯域熱放射を実証した。次に、スペクトルの特徴に基づいた目的関数を定義し、例題としてベイズ最適化による目的関数の評価値最大化が可能であることを実証した。

さらに、熱的カモフラージュ材料の開発に取り組み、条件付き拡散モデルを用いて理想的な熱輻射スペクトルを持つメタマテリアルの構造を生成し、高効率な熱的カモフラージュ技術が実現可能であることを確認した。解釈可能 MI の開発と実践では、2 次元ヘテロ構造の熱伝導制御を実施し、Bayesian や Random サンプルングと比較して、より真の状態密度に近い分布を効率的に得ることに成功した。

ゲート型量子計算機による材料設計法の開発では、ゲート型量子計算機を用いた高次相互作用ハミルトニアン最適化手法を開発し、GPU による数値実験を通じてその有効性を確認した。