

2023 年度年次報告書

社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出

2022 年度採択研究代表者

多田 朋史

九州大学 エネルギー研究教育機構

教授

デバイスインバースデザインのための表界面稼働状態計測解析法の確立

主たる共同研究者:

洗平 昌晃 (名古屋大学 未来材料・システム研究所 助教)

立川 仁典 (横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究科 教授)

谷口 正輝 (大阪大学 産業科学研究所 教授)

田村 亮 (物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター チームリーダー)

## 研究成果の概要

2023 年度における本チームの研究計画はデバイスインバースデザインに必須の計算科学・情報科学基盤手法の構築と、連動解析のため導入された光電子分光装置(XPS)による最適化対象電池材料の電子状態計測である。それぞれの成果概要は以下の通りである。

【ナノスケール領域】 多田グループ・谷口グループにより、1分子伝導計測データ[1]をもとに観測された分子の特定を高速に行える量子逆推定法の有効性が実証された[2]。逆推定対象が分子ではあるが、同推定手法は電池材料最適化への展開へとつながる成果である。立川グループ・洗平グループでは、経路積分 MD 法と物理モデル内包機械学習ポテンシャル法の融合が達成され、プロトン量子性を考慮した電池材料中での正確な反応障壁計算が実行可能な状態となった。以上により、ナノスケールで必要な技術基盤が構築できた。

【ナノ～メソスケール領域】 多田グループでは最適化対象となる電池材料の各種素過程イベントの第一原理計算が実施され、複雑計算に展開する上で必要となる第一原理計算の素過程データの大半が取得できた。ナノからメソスケールへ接続するには複雑表界面構造生成や反応イベント抽出が必須のため、洗平グループにて物理モデル内包機械学習ポテンシャル法が開発され、多田グループの第一原理計算データを学習データとし機械学習ポテンシャル法の最適化が実施された。以上により、ナノ～メソスケールで必要な技術基盤の大半が構築できた。

【メソ～マクロスケール】 メソからマクロスケールをシームレス接続する情報科学手法の開発が必要であり、田村グループ(手法開発)と多田グループ(データ生成)により開発を実施した。シームレス接続に必要な微視的記述子の決定法を構築するとともに、標的物性から微視的構造を予測する逆推定モデルも構築した。また、多田グループにより最適化対象材料の XPS 計測も実際され、表界面稼働状態決定法にむけて順調に計画が進んでいる。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Total variation denoising-based method of identifying the states of single molecules in break junction data, Yuki Komoto, Ryu Jiho, Masateru Taniguchi, Discover Nano, 19, 20 (2024).
- 2) Masateru Taniguchi, Takahito Ohshiro, Tomofumi Tada, Single-Molecule Identification of Nucleotides Using a Quantum Computer, J. Phys. Chem. B, 127, 6636 (2023).