

2024 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

実験から取得する巨大なデータ群にもとづいた不秩序熱機能材料の巨大空間探索を実現するべく、「固体成膜プロセス」と「ウェット塗布プロセス」の2つ系について研究を進めた。

固体成膜プロセスにおいては、独自に開発したコンビナトリアルスパッタ法にさらに特殊なマルチ元素ターゲットを融合することにより、ハイエントロピー合金作製・評価の効率化を行い、新規材料探索空間の拡大を実現した。その結果、熱伝導率の低い新規ハイエントロピー合金の作製に成功した。当該手法は、ハイエントロピー合金の他の諸特性の最適化にも適用でき、多分野の更なる新規ハイエントロピー合金材料開発への応用が期待される。

ウェットプロセスについては、熱放射塗膜の自動作製・評価システムによって、材料パラメータとプロセスパラメータを合わせた9次元のパラメータ空間で、1万を超える試料を作製して可視光領域の反射と赤外光領域の放射のスペクトルを計測した。これで得られる1万超のデータに対して機械学習を適用し、入力パラメータからスペクトルを予測する Forward モデリングと、所望のスペクトルからこれを実現する入力パラメータを予測する Inverse モデリングを実施した。その精度のデータ数に対するスケール則が成立することを示すとともに、モデルに依存しない普遍的な特徴も明らかにした。また、この巨大データ創出によって、従来のチャンピオンデータに匹敵するスカイラジエータ性能を、より薄い膜厚で実現することに成功した。

並行して、イジングマシンとニューラルネットワークポテンシャルによる結晶構造最適化法 CRYSIM の開発を行った。量子計算機も含むイジングマシンを用いたアルゴリズムを開発することで、さらなる性能向上と、材料開発への広範な応用が期待できる。

以上の研究成果については、現在論文を投稿中である。その他、前年度から取り組んでいるテーマの研究について、以下の論文を発表した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) W. Ding, Z.-Y. Ong, M. An, B. Davier, S. Hu, M. Ohnishi, J. Shiomi, “Optimally suppressed phonon tunneling in van der Waals graphene-WS₂ heterostructure with ultralow thermal conductivity”, *Nano Letters*, **24**,13754 (2024).
- 2) H. Chandra, S. Sasano, B. Xu, R. Ishikawa, S. Noda, N. Shibata, J. Shiomi, “Modulating the cross-plane thermal conductivity of graphite by MnCl₂ and FeCl₃ co-intercalation”, *Journal of Materials Chemistry A*, **12**, 23848 (2024).
- 3) W. Ding, J. Guo, M. An, K. Tsuda, J. Shiomi, “Human-AI collaboration for modeling heat conduction in nanostructures”, *npj Computational Materials*, **11**, 158 (2025).
- 4) B. Xu, M. An, S. Masubuchi, Y. Li, R. Guo, T. Machida, J. Shiomi, “Modulation of Heat Conduction in Twisted Bilayer Transition-Metal Dichalcogenides”, *Advanced Functional Materials*, 2422761 (2025).
- 5) Y. Wu, K. Akagi, M. Goto, Y. Xu, “Topological data analysis of TEM-based structural features affecting the thermal conductivity of amorphous Ge”, *Int J Heat Mass Transfer*, **221**, 125012 (2024)
- 6) R. Shibukawa, R. Tamura, K. Tsuda, “Boltzmann sampling with quantum annealers via fast Stein

correction”, *Physical Review Research*, **6**, 043050 (2024).