

2024 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

2024 年度の研究計画は、最適化目標の電池材料を対象として昨年度までに構築したデバイスインバースデザイン(以下、DevID)手法を用いた計算・計測の実施である。各グループの成果概要を以下に記載する。

【ナノスケール領域】

プロトン移動の精密計算である立川グループ・洗平グループ共同開発の PINN(Physically informed Neural Network)ポテンシャル立脚の経路積分分子動力学法が完成した。テスト系として Li 拡散を同手法により実行し量子効果が存在することを明らかにした。また、高プロトン伝導体固体材料に対して PINN を最適化し高精度ポテンシャルを取得した。谷口グループでは1分子伝導計測系の高度化・精密化を継続実施している。

【ナノ～メソスケール領域】

多田グループでは高プロトン伝導体固体材料と白金電極からなる燃料電池カソードの出力計算に必要な最低限の微視的素過程情報収集が完了し、プロトン流の大規模データ出力を調整し同電池カソードの出力計算実施に至った。

【メソ～マクロスケール】

DevID に必須の計測情報として、山崎・兵頭グループでは温度、酸素分圧の制御/記録ができる直流・交流電気化学測定装置系を立ち上げた。本評価系を用いて研究対象の高プロトン伝導体固体材料におけるプロトン伝導度の再現を確認し、電極特性評価を開始するとともに、カソード界面における反応素過程を実験的に決定する手法の構築を試みている。田村グループでは、DevID に必須の情報科学手法としてイジングマシン利用のブラックボックス最適化手法である FMQA を実施した。具体的には固体中の安定プロトン配置を効率的に探索することを目的としてテストモデルとしてプロトン伝導材料と知られる Sc 元素をドーブした BaZrO₃ 酸化物を対象とした配置最適化を実施した。第一原理計算による全エネルギーを最小化するためのプロトン配置探索が効率的に実施できることを示し[1]、目的とする物理量(状態)を入力し、それを満たす三次元微視的構造の逆推定が可能であることを明らかにした。

【代表的な原著論文情報】

- 1) J Lin, T. Tada, A. Koizumi, M. Sumita, K. Tsuda, and R. Tamura, Determination of Stable Proton Configurations by Black-Box Optimization Using an Ising Machine, J. Phys. Chem. C, 129, 2332-2340 (2025).