

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2019年度採択研究代表者

2019年度 実績報告書

桂 ゆかり

東京大学大学院新領域創成科学研究科
助教

新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発

§ 1. 研究成果の概要

新物質探索は宝探しのような研究であり、既存材料を超える特性を示す可能性がある点で、機能材料科学にブレイクスルーをもたらさう。だが新物質探索は、同時に「成果の出にくい研究」でもある。このため本研究では、桂 G(グループ)、秋山 G、森戸 G、藤岡 G、菅原 G の 5 つのグループで、データ科学と大規模合成実験によって新物質探索を効率化する研究に取り組んだ。

桂 G では、元素の組み合わせを与えると、規則正しい結晶構造を形成するかどうかを予測する機械学習プログラムを開発した。結晶構造データベースに掲載された 3 万個の安定な結晶構造から、配位多面体のデータを抜き出すことで元素の特徴をベクトル化した。これを用いて、約 9 万組の元素の組み合わせを網羅した 80 枚の「**新物質探索マップ**」(図 1)を出力した。

続いて、桂 G と秋山 G が共同で、統計的情報のみから結晶構造を予測するモデリングツール「**結晶構造シミュレータ**」の開発に取り組んだ。今年度はその基盤となる技術として、140 万個の原子四面体を収録した**四面体データベース**を構築し、Web 上で原子四面体を 3D 表示・編集する技術の開発を進めた。桂 G では過去に出版された熱電材料や磁性材料に関する論文から実験データを集める独自開発のオープンデータベース Starrydata2 を保有しており、これを用いたデータ収集を進めた。このデータを機械学習することで、第一原理計算などの計算データを全く使うことなく、化学組成のみから熱電特性を予測できる技術の開発を行った。また実験室で生まれた大規模実験データを一括管理する web システム LabMine の開発も進めた。秋山 G では、論文などに報告された 3~4 元系組成図上の等物性面の立体的可視化技術を開発した。これにより、組成図上には現れない 5 元系組成での等物性面を明らかにして、優れた特性の得られる組成を算出することを目指した。

新物質探索マップの化学組成に基づき、**ハイスループット新物質探索実験**を行った。森戸 G では、**M-Al-Ge** ($M = \text{Mg, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ag, Ta}$) の三元系について約 100 個の試料を合成した結果、既知化合物の部分元素置換や二元系高压相と同形の三元系新規相などの新規物質が見出された。また、Na フラックス法を拡張することで、Na-B 二元系化合物のバルク体[1]や、 $(\text{Na}/\text{Ba})_{24}\text{Si}_{136}$ クラスレート単結晶、 $(\text{Na}/\text{Mg})\text{-B-Si}$ 新規化合物などの合成に成功した(図 2)。藤岡 G では、高压合成法によって **Cu-B-A** ($A = \text{Pd, Ni, Co, Fe, Mn}$)系に着目して 89 個の試料を合成して、3 元系化合物を探索した。また森戸 G・藤岡 G の共同で、 NaAlB_{14} 多結晶および

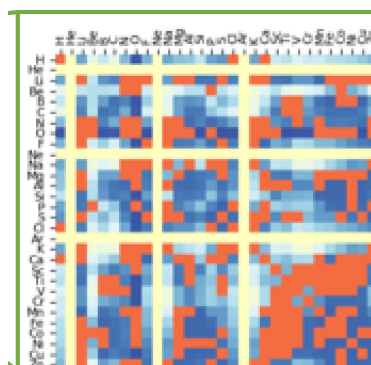


図 1. 新物質探索マップ(抜粋)

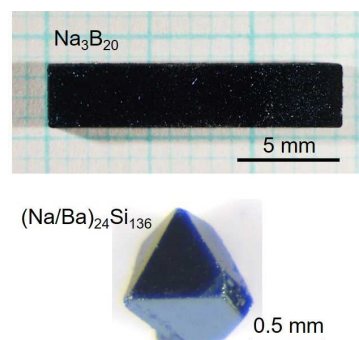


図 2. Na フラックス法で作製された Na_3B_{20} バルク体[1]と $(\text{Na}/\text{Ba})_{24}\text{Si}_{136}$ クラスレート単結晶

Na-Si クラスレート単結晶から電気化学により Na を脱離させることに成功した。

菅原 G では、さまざまな材料への電極形成条件を短期間で最適化する技術として、TLM (Transfer Length Model)法を応用した接触抵抗測定装置の開発に取り組んだ。また、図 3 に示す高密度なフレキシブル熱電材料モジュールの開発に成功した[2]。

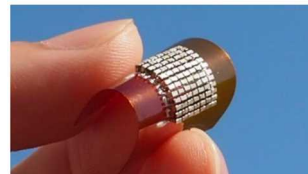


図 3. 開発した熱電モジュール

【代表的な原著論文】

[1] Haruhiko Morito, Syouta Shibano, Takahiro Yamada, Takuji Ikeda, Masami Terauchi, Rodion V. Belosludov, and Hisanori Yamane, "Synthesis and electrical conductivity of Na₃B₂O₇", Solid State Sciences, vol. 102, pp. 106166-1-5, 2020

[2] Yusufu Ekubaru, Tohru Sugahara, Kenzo Imano, Aiji Suetake, Maki Tsurumoto, Noriko Kagami, Katsuaki Sugauma, "Fabrication and Characterization of Ultra-Lightweight, Compact, and Flexible Thermoelectric Device Based on Highly Refined Chip Mounting", Advanced Materials Technologies, vol. 5, 1901128 (2020).

§ 2. 研究実施体制

(1) 桂グループ

- ① 研究代表者:桂 ゆかり (東京大学大学院新領域創成科学研究科 助教)
- ② 研究項目
 - ・マテリアルズ・インフォマティクスによる新物質候補の提案
 - ・結晶構造シミュレータの開発
 - ・ハイスループット合成による新物質探索
 - ・革新的材料候補の選定と検討
 - ・新規応用デバイスの創成

(2) 秋山グループ

- ① 主たる共同研究者:秋山 正和 (明治大学研究・知財戦略機構 特任准教授)
- ② 研究項目
 - ・四面体の分類に関する数理的研究
 - ・結晶構造シミュレータの開発に関して
 - ・等物性面の推定方法の研究

(3) 森戸グループ

- ① 主たる共同研究者:森戸 春彦 (東北大学金属材料研究所 准教授)
- ② 研究項目
 - ・固相反応法を用いた新規多元系化合物の探索
 - ・Na フラックス法を用いた新規物質探索

(2) 藤岡グループ

- ① 主たる共同研究者:藤岡 正弥 (北海道大学電子科学研究所 助教)
- ② 研究項目
 - ・高圧合成を利用したナノフレーム化合物の合成
 - ・ NaAlB_{14} および $\text{Na}_{24}\text{Si}_{136}$ のキャリアチューニング

(5) 菅原グループ

- ① 主たる共同研究者:菅原 徹 (大阪大学産業科学研究所 准教授)
- ② 研究項目
 - ・特殊材料への電極形成技術の確立
 - ・バリアメタル候補化合物の提案
 - ・TLM 法によるハイスループット接合評価技術の確立