

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

2021 年度 年次報告書

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

§ 1. 研究成果の概要

全自動で成膜条件を変化させながら様々な組成や構造の材料作製が可能であるコンビナトリアルスパッタ成膜装置「COSCOS」によって、プロセスパラメータを系統的に変化させてアモルファス Si_3N_4 膜を作製した。得られた試料について、サーモフレクタンス法によって熱伝導率を評価した。試料間で熱伝導率に大きな差異が見られ、プロセスパラメータによって多様なアモルファス・準安定相が作り分けられ、それが熱伝導率に大きく影響することを確認した。

アモルファスや準安定構造と熱伝導率の因果関係を同定して記述子の生成やメカニズムの解明に役立てるため、透過型電子顕微鏡 (TEM) によるアモルファス薄膜の微細構造解析を行う実験手法の構築を進めた。局所的微細構造の解析の際に準安定相を乱さずに試料を TEM グリッドに転写する方法を確立した。また、TEM の全体像から構造に係る特徴量を抽出すべく、熱伝導率の異なる Ge アモルファス膜のトポロジカル解析を行い、構造的な違いを見出すことに成功した。

加えて、機械学習によるアモルファス構造の熱輸送の予測可能性を検討した。結晶/結晶界面および結晶/アモルファス界面の熱コンダクタンスを対象に、定量的かつロバストな機械学習モデルを構築した。これにより、構造の分布を考慮した記述子を用いることで結晶からアモルファス構造までを統一的にモデルリングすることが可能であることがわかった。

また、量子アニーリングなどの量子計算を用いた新たな実験計画法の開発を進めた。並列実験計画法 SLEPA を開発し、ソフトウェアを公開した。この手法では数百並列の実験計画が可能であり、同時に記述子と物性の分布推定も可能なため、材料科学で必要な解釈可能性も備えている。さらに、複数の物性を同時に最適化することが可能な、量子アニーリングを用いた多目的最適化アルゴリズム MOQA の開発も行った。

§ 2. 研究実施体制

(1) 塩見グループ

- ① 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)
- ② 研究項目
 - ・熱伝導率と機械特性のマッピングシステムの開発・実践
 - ・不秩序構造の熱輸送の学理構築
 - ・ウェットプロセス QR-Loop システムの開発・実践
 - ・データ整備、インフラとの交流、他の物性への展開・応用

(2) 津田グループ

- ① 主たる共同研究者: 津田 宏治
(東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・量子アニーリングを用いた探索手法の開発
 - ・ゲート型量子計算機を用いた探索手法の開発
 - ・量子計算を用いた探索手法の実装

(3) 後藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 後藤 真宏
(物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点、主席研究員)
- ② 研究項目
 - ・固体成膜プロセス QR-Loop システムの開発・実践
 - ・フィルター材料探索システムの開発・熱電物性のマッピング計測