

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

2022 年度  
年次報告書

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 主幹研究員)

## 研究成果の概要

2022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開発(2023年度末には構築予定)と、最適化対象である電池材料の基本情報の計測である。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】 化学反応の微視的素過程の正確な計算と、1分子計測による構造同定が必要である。微視的計算技術は、立川グループにより高精度量子化学計算として確立されているが、1分子計測には現行以上の高精度検出が必要とされるため、谷口グループによる1分子計測技術を開発基盤とし、分子識別能を向上させることを今年度目的として実施した。従来1分子識別手法は機械学習との併用により実施されているが、識別アルゴリズムに Positive Unlabeled (PU) 分類として提案したカーネル密度推定ベースの手法を用いることで、従来手法より精度よく濃度比を決定することが可能となった。2023年度以降は立川グループの高精度量子化学計算によって見出された有機分子種を1分子計測の対象とし、微視的素過程の高精度決定法の確立を目指す。

【ナノ～メソスケール領域】 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、洗平グループにて非従来型機械学習原子間ポテンシャル開発を実施した。従来機械学習ポテンシャルの精度を凌駕する結果を得、動力学計算においても従来機械学習ポテンシャルと同等かそれ以上の安定性を有していることを見出した。

【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)により同開発を実施した。固体酸化物をテスト対象とし開発を進め各種記述子の検討を行った。また、電池材料に関する電子顕微鏡観察も実施し、同材料の組成情報、表面情報を取得し、ナノ～マクロのシームレス接続に向けた準備が整いつつある。

### 【代表的な原著論文情報】

1) Jiho Ryu, Yuki Komoto, Takahito Ohshiro, Masateru Taniguchi, Direct Biomolecule Discrimination in Mixed Samples using Nanogap-Based Single-Molecule Electrical Measurement, Scientific Reports, 13:9103 (2023), DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-023-35724-1>