

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ  
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

清水 亮太

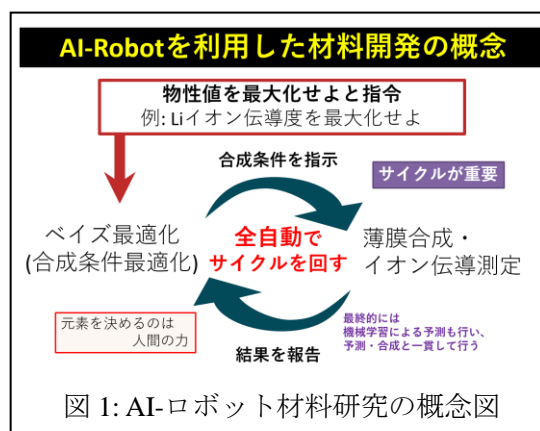
東京工業大学物質理工学院  
助教

自律的ものづくりを導入した金属水素化物の革新的新機能創出

## § 1. 研究成果の概要

本研究では、AI(ベイズ最適化)とロボットを組み合わせた「材料合成と条件最適化を全自動で行う装置」を開発し、新たな機能をもつ材料創製を目指している(図 1)。2018 年度には、①: ロボットアームによる自動搬送、②: 全自動成膜のシステム構築を進めた。次年度は③: 全自動膜厚・抵抗評価と最適化プロセスのフィードバックによるシステムの完成を目指す。

本研究では、開発すべき材料を「Li イオン固体電解質」と「水素を含む金属化合物」と定めている。前者は次世代型蓄電池である全固体 Li 電池への展開を目指している。アモルファス Li イオン伝導体として、 $\text{Li}_3\text{PO}_4 \cdot \text{LiBO}_3$  などの混合薄膜を作製し、「ベイズ最適化と全自動成膜・評価」によるイオン伝導率最適化を目指す。後者は軽い水素ならではの新しい光学・電気特性を目指している。例えば、イットリウムの酸素と水素の化合物では、薄膜の結晶性を向上させることで、光照射によって 5 桁もの抵抗変化を可逆的に制御できることを見出している。しかしながら、水素・酸素のアニオンに関して、局所配位構造や組成と光学・電気伝導特性の相関はまだよくわかっていない。検出の難しいアニオンの構造・組成を光学・電気伝導特性からベイズ最適化して性能向上を目論む。このように、バルクにはない「薄膜ならではの」特異な光応答性を利用して、スマートウィンドウや光センサなどへの展開を目指す。



## § 2. 研究実施体制

①研究者:清水 亮太 (東京工業大学物質理工学院 助教)

②研究項目

1. AI-ロボット統合環境の開発

- ・ ベイズ最適化による条件最適化プロセスの導入 (AI 部)
- ・ 全自動の搬送・成膜・評価の統合環境の開発 (ロボット部)
- ・ AI 部とロボット部を融合した全自動化

2. 水素を含む化合物の材料物性開拓

- ・ 金属の水素化合物の薄膜合成と電気・磁気物性の水素含有量依存性評価
- ・ 希土類元素の水素化合物の薄膜合成と電気・磁気物性の光応答評価