

エネルギー材料 DX の研究事例と展望

(東大院工¹・NIMS²・東大新領域³) ○塩見 淳一郎¹・○松田 翔一²・津田 宏治³
Research cases and prospects of energy-materials DX (¹Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, ²National Institute for Materials, ³Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo) ○Junichiro Shiomi,¹ Shoichi Matsuda,² Koji Tsuda.³

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) は材料開発のリードタイムを低減する手法として期待されている。塩見と津田らは 2015 年から 2020 年まで実施された情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (*M²i*) で伝熱材料の MI 研究に取り組み、計算科学 (熱輸送計算など) と機械学習 (ベイズ最適化など) を組み合わせた手法を開発することを通じて、ナノ構造化結晶材料の効率的な構造最適化を実現し、実験で実証した⁽¹⁻⁴⁾。また、ファクタライゼーションマシンと量子アニーラを用いた最適化を実現し、より巨大な探索空間での構造最適化を可能にした⁽⁵⁾。その後 JST-CREST プロジェクトとして取り組んでいる準安定で不秩序な材料の開発では、計算科学による直接的な物性予測が困難である上にプロセスパラメータが材料の物性に大きく影響するため、実験プロセスを最適化ループに入れた MI を実践している。

このような MI の方法論は他の物性にも適用でき、文部科学省の「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」の「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」(略称 DX-GEM) では、松田らとともに、データサイエンス的手法を取り入れたデータ駆動型の先進的な研究手法を開発し、大容量、低コストの蓄電池と水電解システムを実現する材料の革新に取り組んでいる。なお、当該活動においては、文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) と連携している。

DX-GEM で松田らは、蓄電池用電解液の調整・評価を、人手よりはるかに高速に実験を行うことができる実験ロボットを開発している^(6,7)。これを使えば、50 種類以上の化合物を組み合わせて様々な組成の電解液の作製から、その電池特性を評価する作業に至るまで、全てを自動で行うことができる。人が行っていたときには 1 日 10 サンプル程度の評価しかできなかったものを、本実験ロボットを用いることで 1 日 1000 サンプル以上の評価が可能になる。さらに、取得した大量の実験データに対して、ベイズ最適化に代表されるデータ科学的手法を適用することで、より効率的に高機能電解液を探索することが可能となる。

本公演では、以上の MI プロジェクトの流れに沿って、いくつかの研究事例やデータベース構築の試みなどを紹介する。

- 1) Designing nanostructures for phonon transport via Bayesian optimization. S. Ju, T. Shiga, L. Feng, Z. Hou, K. Tsuda, J. Shiomi, *Physical Review X*. **2017**, 7, 021024.
- 2) Multifunctional structural design of graphene thermoelectrics by Bayesian optimization. M. Yamawaki, M. Ohnishi, S. Ju, J. Shiomi, *Science Advances*. **2018**, 4, eaar4192.
- 3) Machine-learning-optimized aperiodic superlattice minimizes coherent phonon heat conduction. R. Hu, S. Iwamoto, L. Feng, S. Ju, S. Hu, M. Ohnishi, N. Nagai, K. Hirakawa, J. Shiomi. *Physical Review X*. **2020**, 10, 021050.
- 4) Ultranarrow-band wavelength-selective thermal emission with aperiodic multilayered metamaterials designed by Bayesian optimization. A. Sakurai, K. Yada, T. Simomura, S. Ju, M. Kashiwagi, H. Okada, T. Nagao, K. Tsuda, J. Shiomi. *ACS Central Science*. **2019**, 5, 319.
- 5) Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines. K. Kitai, J. Guo, S. Ju,

S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, R. Tamura, *Physical Review Research*. **2020**, *2*, 013319.

6) High-throughput combinatorial screening of multi-component electrolyte additives to improve the performance of Li metal secondary batteries. S. Matsuda, K. Nishioka, S. Nakanishi, *Scientific Reports*. **2019**, *9*, 6211.

7) Data-driven automated robotic experiments accelerate discovery of multi-component electrolyte for rechargeable Li-O₂ batteries. S. Matsuda, G. Lambard, K. Sodeyama, *Cell Reports Physical Science*. **2022**, *3*, 100832.