

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : マテリアルズ・インフォマティクスの実践的応用 : 多元素化による未踏機能の創出

■ 2025年3月29日(土) 13:00 ~ 15:40 ■ [E]F401(第2学舎 4号館 [4階] F401)

[[E]F401-4pm] マテリアルズ・インフォマティクスの実践的応用 : 多元素化による未踏機能の創出

座長、シンポジウム関係者 : 鎌田 洋平、古山 通久、是津 信行

化学分野の材料開発はこれまで経験と勘に重打ちされた実験的手法が中心的な役割を果たしてきましたが、新物質の発見から実用化までには長い時間とコストを必要とします。蓄積された多くのデータ・情報を駆使して所望の構造・材料候補を導き出すデータ駆動型科学「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」の重要性が益々高まっています。材料開発現場では、概念や理論の構築に留まらず、MI戦略を実践に移す段階にきました。本セッションでは、多元素化による未踏機能の開拓と材料創製インフォマティクスを主眼に、ハイスループット実験・計算やデジタル技術を駆使する、MI応用の新潮流に焦点をあて最新の研究成果について講演頂きます。

本セッションは**午前**、**午後**に実施されます。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

13:00 ~ 13:30

[[E]F401-4pm-01]

物質設計に向けた機械学習手法の開発とその応用

○溝口 照康¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

13:30 ~ 14:00

[[E]F401-4pm-02]

機械学習と高エネルギー混合を活用したナノ多結晶型超伝導材料の合成

○山本 明保¹、徳田 進之介¹、石井 秋光^{1,4}、山中 晃徳¹、嶋田 雄介²、飯田 和昌³、波多 聡² (1. 東京農工大学、2. 九大、3. 日大、4. 物材機構)

14:00 ~ 14:05

休憩

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:05 ~ 14:35

[[E]F401-4pm-03]

多元素組成空間における新規熱電材料のハイスループット探索

○池田 輝之¹ (1. 茨城大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:35 ~ 15:05

[[E]F401-4pm-04]

ベイズ最適化を用いた負熱膨張材料の多元素化

○東 正樹^{1,2}、柴田 勇介¹、西久保 匠^{2,1}、清原 慎³、熊谷 悠³ (1. 東京科学大学、2. 神奈川産技総研、3. 東北大金研)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

15:05 ~ 15:35

[[E]F401-4pm-05]

金属結晶に基づいたイオン結晶の多元素設計

○横山 智康¹ (1. パナソニック ホールディングス株式会社)

15:35 ~ 15:40

[4E_F40105-09-7add]

インキュベーションタイム

物質設計に向けた機械学習手法の開発とその応用

(東大生研¹) 溝口 照康¹

Development and application of machine learning method for materials design

(¹*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo*)

In recent years, the use of machine learning and data-driven approaches in materials development has been rapidly advancing. The value of data has grown significantly, and the ability to possess and utilize meaningful data in accessible formats has become directly connected to research activities and capabilities. In my presentation, detailed investigations of spectrum analysis, chemical bonding analysis, and materials development through the integration of computational science and machine learning will be presented. Furthermore, approaches to material analysis and inverse design based on these methods will be touched.

Keywords : Machine learning, DFT simulation, atomic level characterization, materials design

近年、マテリアル開発に機械学習やデータ駆動型手法が積極的に使用されている。マテリアルに関するデータの価値は近年急激に増しており、いかにして意味のあるデータを、利用できる形式で所有している（もしくはアクセスできる）か、そしてそのデータを活用するための技術を持っているかどうか、研究力や開発力に直結する時代が到来している。

そのような状況の中、発表者の研究グループは、2015 年ごろから機械学習を研究に取り入れ、格子欠陥（界面や表面）の解析[1]やスペクトル解析[2]に利用してきた。また、近年では層間化合物の設計指針の確立[3]やスペクトル生成の物理を超えた情報の抽出[4]に取り組んでおり、それに伴って層間化合物のバンド構造や炭素 K 端スペクトルのデータベースなども公開している[5]。

本発表では計算科学と機械学習を統合的に活用したスペクトル解析、化学結合解析、および物質開発に関する研究を紹介する。さらに、それらの手法を応用した物質解析および逆設計のアプローチについて触れる。

[1] S. Kiyohara et al., *Sci. Adv.*, 2 (2016) e1600746, R. Ohani et al., *App. Phys. Exp.* 13 (2020) 065504, E. Suzuki et al., *App. Phys. Exp.* 14 (2021) 085503.

[2] S. Kiyohara et al., *J. Phys.: Mater.*, 2 (2019) 024003, *npj Comp. Mater.*, 6 (2020) 68, K. Kikumasa et al., *Adv. Int. Sys.* 4 (2022) 2100103.

[3] N. Kawaguchi et al., *J. Phys. Chem. C*, 127 (2023) 9833 *ACS Phy. Chem. Au*, 4 (2024), 281.

[4] PY. Chen et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 14 (2023) 4858, I. Takahara et al., *J. Phys. Chem. C*, 128 (2024), 13500.

[5] K. Shibata et al., *Sci.Data*, 9 (2022) 214, N. Kawaguchi et al., 11 (2024) 1244.

機械学習と高エネルギー混合を活用したナノ多結晶型超伝導材料の合成

(農工大院工¹・NIMS²・九大総理工³・日大⁴) ○山本 明保¹・徳田 進之介¹・石井 秋光²・山中 晃徳¹・嶋田 雄介³・飯田 和昌⁴・波多 聡³

Synthesis of Nano-Polycrystalline Superconducting Materials Using Machine Learning and High Energy Milling (¹*Graduate School of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology*, ²*National Institute of Materials Science*, ³*Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University*, ⁴*College of Industrial Technology, Nihon University*)
○Akiyasu Yamamoto¹, Shinnosuke Tokuta¹, Akimitsu Ishii², Akinori Yamanaka¹, Yusuke Shimada³, Kazumasa Iida⁴, Satoshi Hata³

A practical application example of Materials Informatics in polycrystalline, multi-element, high-temperature superconducting materials will be reported. Polycrystalline superconducting materials have the advantage of being easier to synthesize than single-crystalline materials, but they are complex systems consisting of a network of numerous crystals and grain boundaries, making it challenging to understand and control their transport function. To address this issue, we have investigated mechanochemical synthesis using a high-energy milling method and process design incorporating machine learning ^{1,2)}.

Keywords : *Machine Learning; BOXVIA; High Energy Milling; Nano Structural Analysis; Polycrystalline Superconducting Materials*

多結晶型の多元系高温超伝導材料におけるマテリアルズ・インフォマティクスの実践的応用例を紹介します。多結晶型超伝導材料は、単結晶材料と比較するとより作り易い利点がありますが、無数の結晶と粒界のネットワークから構成される複雑系のため、その輸送機序理解や制御手法の確立に課題がありました。これに対し、高エネルギー混合法によるメカノケミカル合成や機械学習を取り入れたプロセス設計 ^{1,2)}を検討したので報告します。

1) Super-strength permanent magnets with iron-based superconductors by data- & researcher-driven process design. A. Yamamoto, S. Tokuta, A. Ishii, A. Yamanaka, Y. Shimada, M. D. Ainslie, *NPG Asia Mater.* **2024**, *16*, 29 1-10.

2) Integrating Machine Learning with Advanced Processing and Characterization for Polycrystalline Materials: A Methodology Review and Application to Iron-based Superconductors. A. Yamamoto, A. Yamanaka, K. Iida, Y. Shimada, S. Hata, *Sci. Technol. Adv. Mater. (STAM)* **2025**, *27*, <https://doi.org/10.1080/14686996.2024.2436347>

多元素組成空間における新規熱電材料のハイスループット探索

(茨大院理工¹) 池田 輝之

High-throughput search for novel thermoelectric materials in multicomponent systems
(¹*Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University*) ○Teruyuki Ikeda¹

The number of constituent elements in materials in practical use and under study in these days has been increasing due to the complexities required for tuning their properties in various aspects. For enhancing thermoelectric conversion efficiency, for example, studies are being conducted to enhance phonon scattering due to nanostructuring via phase transformations or alloying resulting in lower thermal conductivities, to tune carrier concentrations, or to engineer band structure, and hence state of the art thermoelectric materials often are composed of three or more constituent elements. Another example is high entropy alloys, which are composed of five or more elements and have large configurational entropies. To study such multi-component materials, much more time and effort are required compared to studying single or binary component materials. Here, as a tool to study phase diagrams and compositional effects of bulk materials on material properties, we propose a high throughput approach to exploration of the relationship between the phase diagram, composition, microstructure, and properties in large compositional spaces. Both a unidirectional solidification by Bridgman method accompanied with a steep temperature gradient and a low velocity and a multiple diffusion technique, that is, sintering powder of multiple elements enables us to prepare samples with compositional gradation. This approach can greatly accelerate explorations of multi-component compositional spaces in pursuit of excellent materials. We will provide results on some of our experimental efforts of studying complex thermoelectric material systems involving silicide thermoelectric materials, a high entropy material, and so on to discuss the capability of the techniques.

Keywords : *Sintered diffusion multiples; Phase diagrams; Multicomponent systems*

材料特性をさまざまな面から最適化することが要求されるにともない、最近の実用材料、あるいは研究の対象となっている材料は、構成元素数が増加している。例えば、熱電変換効率を高めるために、相変態利用したナノ構造化や合金化に伴うフォノン散乱の増大による熱伝導率の低下、キャリア濃度の調整、バンド構造の設計などの研究が行われており、先端材料の多くが3つ以上の元素で構成されている。他の多元系材料の例として、5つ以上の元素で構成され大きい配置エントロピーを有する高エントロピー合金がある。このような多元系材料を研究するには、単元素材料や二成分系材料を研究する場合に比べて、はるかに多くの時間と労力が必要である。

ここでは、状態図とバルク材料の材料特性に対する組成の影響を研究するためのツールとして、大きい組成空間における状態図、組成、微細構造、および特性の間の関係を探るためのハイスループットな実験的アプローチを提案する。急峻な温度勾配と低速移動を利用するブリッジマン法による一方向凝固、あるいは複数の元素の粉末を焼結した試料を利用する多元系焼結拡散などにより、組成勾配のある試料を作製

することができる。この組成勾配を利用すれば、一つの試料で多元系状態図や材料特性の組成依存性を調べる事が可能である。このアプローチにより、優れた材料を見出すための多成分組成空間の探索が大幅に加速される。本講演では、シリサイド熱電材料、高エントロピー材料などを含む複雑な多元系材料を研究する実験的取り組みのいくつかを紹介しこの手法のもつ可能性を議論する。

ベイズ最適化を用いた負熱膨張材料の多元素化

(東京科学大学総合研究院¹・神奈川産技総研²・東北大金研³) 柴田 勇介¹・西久保 匠^{2,1}・○東 正樹^{1,2}・清原 慎³・熊谷 悠³

Multiple element substitution in negative thermal expansion materials with the aid of Bayesian optimization (¹*Institute of Integrated Research, Institute of Science Tokyo*, ²*Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology*, ³*Institute for Materials Research, Tohoku University*) Yusuke Shibata,¹ Takumi Nishikubo,^{2,1} ○Masaki Azuma,^{1,2} Shink Kiyohara³, Yu Kumagai³

The perovskite compound BiNiO₃ stabilized by high-pressure synthesis has a characteristic Bi³⁺_{0.5}Bi⁵⁺_{0.5}Ni²⁺O₃ charge distribution. It exhibits a pressure induced charge transfer transition to Bi³⁺Ni³⁺O₃ accompanied by a 3% volume shrinkage owing to the contraction of Ni-O bond stemming from the Ni²⁺ to Ni³⁺ oxidation. Fe substitution for Ni enables a temperature induced charge transfer transition and BiNi_{1-x}Fe_xO₃ exhibits giant negative thermal expansion with linear coefficient of thermal expansion of $-187 \times 10^{-6}/\text{K}$, about five times of the existing materials. This compound is expected to be applied to the suppression of thermal expansion of resins, but its narrow operating temperature range of about 30 K is problematic. We succeeded in expanding the operating temperature range to 170 K by substituting multiple elements for Fe. Proposing compositions with wider temperature range by Bayesian optimization and experimental evaluation of the thermal expansion properties of the samples with multiple element substitution were repeatedly conducted.

Keywords : Perovskite; Negative Thermal Expansion; Charge Transfer; Multiple element substitution; Bayesian optimization

高圧合成されるペロブスカイト酸化物 BiNiO₃ は、Bi³⁺_{0.5}Bi⁵⁺_{0.5}Ni²⁺O₃ の特徴的な電荷分布を持ち、4 GPa に加圧すると Bi³⁺Ni³⁺O₃ への電荷移動転移が起こる。この際 Ni²⁺ → Ni³⁺ の酸化に伴ってペロブスカイト構造の骨格である Ni-O 結合が収縮するため、約 3% の不連続な体積収縮が起こる。Ni を Fe³⁺ で一部置換した BiNi_{1-x}Fe_xO₃ では常圧下の昇温で電荷移動転移が起こるようになり、負熱膨張を発現する。既存材料の約 5 倍の $-187 \times 10^{-6}/\text{K}$ の巨大な負の線熱膨張係数から樹脂の熱膨張抑制への応用が期待される一方、動作温度範囲が 30K 程度と狭い事が問題である。Fe を多元素置換した組成について、ベイズ最適化による組成提案と合成・熱膨張特性評価を繰り返すことで、動作温度範囲を 170K にまで拡大することに成功した。

1) Colossal negative thermal expansion in BiNiO₃ induced by intermetallic charge transfer, M. Azuma *et al.*, *Nature Commun.* **2011**, 2, 347.

2) Suppression of temperature hysteresis in negative thermal expansion compound BiNi_{1-x}Fe_xO₃ and zero-thermal expansion composite, K. Nabetani *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2013**, 103, 061909.

金属結晶に基づいたイオン結晶の多元素設計

(パナソニック ホールディングス (株)) 横山 智康

Multi-element design of ionic crystals based on metallic crystals (*Panasonic Holdings Corporation*) ○Tomoyasu Yokoyama

Ionic crystals play a crucial role in energy storage and electronic devices. The virtual screening for new ionic crystals requires the virtual structures. Conventional methods for generating crystal structures struggle to balance diversity and synthesizability as the number of elements increases, hindering multi-element design. This study proposes the Met2Ion method, which leverages the structural relationships between ionic crystals and metal crystals. By substituting metals with anions (or cations) and placing cations (or anions) in interstitial sites, new ionic crystal structures can be generated. Using first-principles calculations, we screened candidate structures generated by our method for multi-element materials with high ionic conductivity.

Keywords : *Crystal Structure; First-Principles Calculations; Ionic Conductivity; Materials Informatics*

イオン結晶は、エネルギー貯蔵や電子デバイスにおいて重要な役割を果たしている。新たなイオン結晶のバーチャルスクリーニングには、実験報告のない仮想構造を準備する必要がある。しかし、現状の結晶構造生成手法では、元素数の増加に伴い生成される構造の多様性と合成可能性の両立が困難であり、イオン結晶の多元素設計の妨げとなっている。

そこで、これらを両立する構造生成手法「Met2Ion 法」を提案する¹⁾。我々は多くのイオン結晶の構造が金属結晶と構造的な関係性を持つことを見出した。例えば、銀イオン伝導体として報告がある $\text{Ag}_5\text{Te}_2\text{Cl}$ や $\text{Ag}_{10}\text{Te}_4\text{Br}_3$ は、 Te^{2-} や Cl^- などのアニオンからなる構造が、それぞれ Al_2Cu と Zr_4Al_3 の金属結晶の構造と一致する。この知見に基づき、Met2Ion 法では金属結晶をアニオン (or カチオン) に置換し、その格子間サイトにカチオン (or アニオン) を配置することで構造を生成する。これにより、多様で合成可能性の高い複合アニオンおよびカチオン化合物の結晶構造が生成可能となる。

図 1 のように本手法により生成されたイオン結晶候補構造を、第一原理計算を用いてスクリーニングを行い、高いイオン伝導性を示す有望な材料を探索した。本発表では、Met2Ion 法の着想に至った経緯、及びスクリーニング結果について報告する。

1) T. Yokoyama, *et al.*, *arXiv*, 2407.02838 (2024).

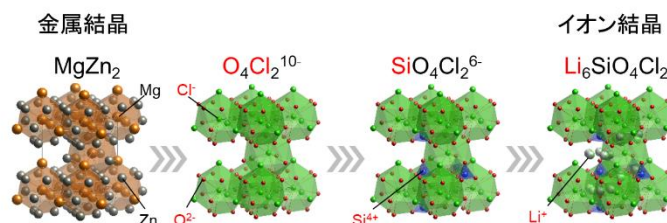


図 1. Met2Ion 法による MgZn_2 から $\text{Li}_6\text{SiO}_4\text{Cl}_2$ の生成例。