

マテリアルズ・インフォマティクス手法により

超低熱伝導物質を高効率に多数発見

－材料科学と情報科学の融合研究に革新的成果－

概要

京都大学の 世古 敦人 工学研究科材料工学専攻准教授、林 博之 同特定助教、田中 功 同教授、東後 篤史 学際融合教育研究推進センター構造材料元素戦略研究拠点ユニット (ESISM) 特定准教授らは、津田 宏治 東京大学新領域創成科学研究科教授、Laurent Chaput フランス・ロレーヌ大学准教授との共同研究により、材料科学と情報科学が融合したマテリアルズ・インフォマティクス手法に基づいて、超低熱伝導物質を高効率に多数発見するという革新的な成果を上げました。従来知られている低熱伝導度物質に比べて、1桁以上低い熱伝導度であり、構造材料における熱遮蔽体のみならず、熱電変換材料の開発において、材料の選択肢を大幅に増大させた重要な成果であります。

本成果は、米国科学誌フィジカルレビューレターズ (Physical Review Letters) 誌の 2015 年 11 月 13 日号に公開されます。

1. 背景

現代社会を支える輸送用機器、環境・エネルギー、半導体デバイスなど、様々な用途において、発生する熱を的確に制御することは極めて重要です。また工場等で発生する排熱を電気エネルギーに効率よく変換できる熱電変換材料の重要性は、年々増大しています。このような多様なニーズに応えるためには、様々な用途に対応する多様な物質の選択肢を持つことが重要です。しかし、これまでの低熱伝導度材料開発研究の殆んどは、既に知られている物質の元素置換や合金元素添加などの改良型研究であり、画期的に新しい物質系が出現することは稀でした。

本研究チームは、材料科学者と物性物理学者に加え、情報科学者が密接に連携することで、大きなブレークスルーを達成しました。従来知られている低熱伝導度物質に比べて、1桁以上低い超低熱伝導度物質を高効率に多数発見したのです。

このように、材料科学と情報科学が密接に連携する分野は**マテリアルズ・インフォマティクス**と呼ばれ、2011年6月に米国オバマ大統領が毎年120億円の予算を新しく注ぎ込むとアナウンスしたマテリアル・ゲノム・イニシアチブほか、世界各国で大型予算が生まれ、研究にしのぎが削られているものです。わが国でも、本年度から物質・材料研究機構 (NIMS) に、「情報統合型物質・材料研究拠点」が形成されるなど、国を挙げて注力し始めています。

本研究成果は、科学研究費補助金・新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学の新展開」(領域代表者 田中 功 平成 25 年度から 29 年度)における京都大学と東京大学、およびフランス・ロレーヌ大学の共同研究の成果です。

2. 研究手法・成果

研究の流れは、①熱伝導度を実験と比肩できる精度で計算できる量子力学に基づいた第一原理計算手法を開発して約 100 種類の物質についての室温での熱伝導度を計算、②その計算結果をもとに、マシン・ラーニング (機械学習) と呼ばれるデータ科学の先端手法に基づいて熱伝導度の予測モデルを構築し、無機結晶構造データベース ICSD 収録の約 55,000 物質全体の熱伝導度をランキングする (バーチャル・

スクリーニング). ③ランキング上位の物質について, 高精度の計算を実施することで, 室温での熱伝導度を確認. というものです.

3. 波及効果

- ① 低熱伝導度材料において, 様々な用途に対応する多様な物質の選択肢を持つことが可能となり, 熱遮蔽材料や熱電変換材料開発に, 大きな進歩が期待されます.
- ② 第一原理計算と機械学習の手法を組み合わせ, 全無機化合物のライブラリをバーチャル・スクリーニングにより探索するという新しい方法は, 低熱伝導材料に留まることなく様々な分野の材料開発において汎用的に利用できるものと考えられ, 材料開発研究に大きな変革をもたらす可能性があります.

4. 今後の予定

- ① 第一原理計算による熱的性質の理論計算では, 本グループが開発したプログラム **Phonopy** (フォノパイ) が世界標準となっており, 今後も世界中との共同研究を通じて材料科学のフロンティア開拓を進めます.
- ② マテリアルズ・インフォマティクス手法の更なる深化と, 適用範囲の拡大を目指します.

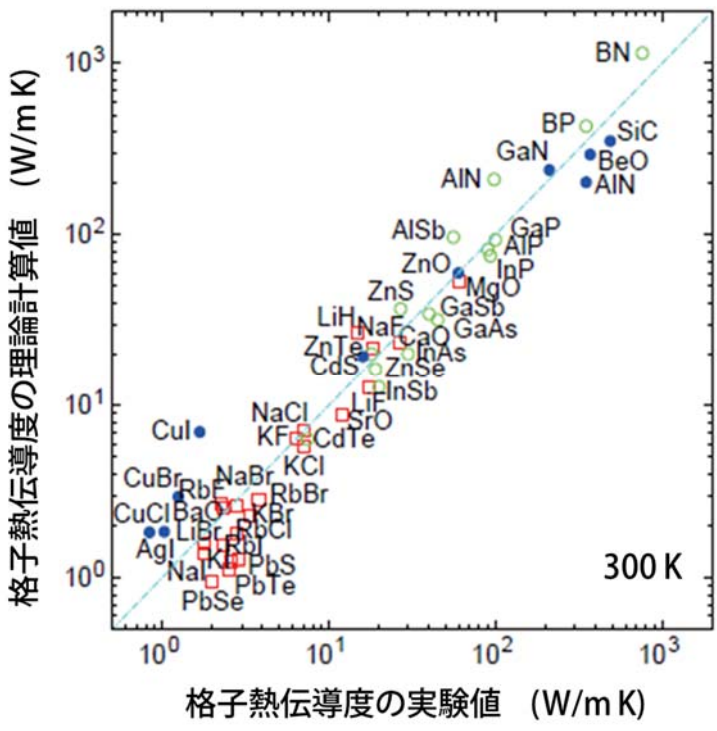


図1 本研究において開発した計算方法による格子熱伝導度が, 実験と比肩できる精度であることを示す図

54,779 化合物のバーチャル・スクリーニング結果

| ランキング | スコア | 化合物 | | 熱伝導度 計算結果 (W/mK) |
|-------|------|-----------------------------------|--------------|------------------------|
| | | 化学式 | 空間群 | |
| 1 | 1.90 | PbRbI ₃ | <i>Pnma</i> | 0.10 |
| 2 | 1.76 | PbIBr | <i>Pnma</i> | 0.13 |
| 3 | 1.56 | PbRb ₄ Br ₆ | <i>R-3c</i> | 0.08 |
| 4 | 1.56 | PbI ₂ | <i>Pnma</i> | 0.18 |
| 5 | 1.56 | PbClBr | <i>Pnma</i> | 0.09 |
| 7 | 1.44 | PbI ₂ | <i>R-3m</i> | 0.29 |
| 8 | 1.43 | PbI ₂ | <i>P63mc</i> | 0.29 |

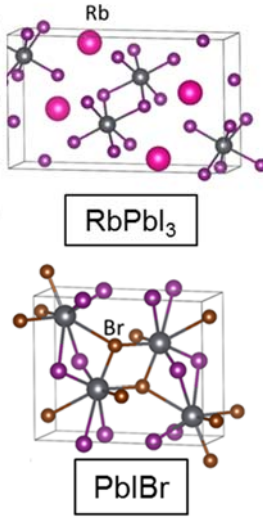


図2 構造既知の全無機化合物結晶についてのバーチャル・スクリーニングによるランキングの上位と、実際に高精度計算によって確認された超低熱伝導度物質

<論文タイトルと著者>

Prediction of Low-Thermal-Conductivity Compounds with First-Principles Anharmonic Lattice-Dynamics Calculations and Bayesian Optimization

(第一原理からの非調和格子動力学計算とベイズ最適化による低熱伝導度化合物の予測)

Atsuto Seko, Atsushi Togo, Hiroyuki Hayashi, Koji Tsuda, Laurent Chaput, and Isao Tanaka

Physical Review Letters 115, 205901 (2015)

<用語解説>

*マテリアルズ・インフォマティクス

材料科学と情報科学が融合した新分野であり、最近になって世界各国がしのぎを削っている。第一原理計算データや、電子顕微鏡、放射光などの各種実験データを活用し、最先端の機械学習手法や人工知能を利用して新材料や機能、プロセスや法則を効率的に発見することを目指している。米国では、マテリアルズゲノムイニシアティブが有名。

*バーチャル・スクリーニング

ライブラリに登録されている全物質について、実際に実験や精密計算によって特性評価する前段階として、比較的単純な「記述子」によって対象を絞り込むプロセスのこと。医薬品開発では、広く用いられている技術であるが、無機物質・材料研究に利用された例は未だ殆んどない。本研究の成果は、まさに先駆的なものといえる。

*第一原理格子動力学計算

量子力学の原理のみに基づき、経験的な情報を入力として用いない計算のことを第一原理計算と呼んでいる。この第一原理計算に基づいて格子動力学計算を行い、結晶の熱的性質とその温度依存性を計算するものを第一原理格子動力学計算と呼んでいる。京大グループが開発したプログラム **Phonopy** (フォノパイ) は公開されており、世界標準として広く利用されている。格子熱伝導度の高精度計算も可能である。

*無機結晶構造データベース

FIZ Karlsruhe (独)と NIST (米)が共同開発した無機結晶構造データベース (ICSD) が世界最大のもので有償公開されている。約 17 万件の化合物が登録されているが、データの重なりなどを除外すると、約 55000 件となる。



文部科学省 科学研究費補助金 新学術領域研究

ナノ構造情報のフロンティア開拓 – 材料科学の新展開

Exploration of nanostructure-property relationships for materials innovation

科研費
K A K E N H I