

技術展望

革新的な新材料探索手法の到来

—熱電材料のバーチャル設計に向けた取り組み—

電子情報部 豊田文紫(とよだ たけし)

toyoda@irii.jp

専門：無機材料、構造物性

一言：再生可能エネルギーがより身近になる

技術開発を進めています。



新しい工業製品が実用化されるためには、従来の性能を上回る「新材料」の開発が必要です。これまで、新材料探索は専門家の経験と勘に依存していました。図1に新材料開発の相関図を示します。従来、試作と評価を繰り返すトライアンドエラーで新材料を発見してきました(実験科学)。次にこれらの評価データを体系化して新しい理論を構築しました(理論科学)。この繰り返しにより高い性能を持つ新材料の開発に繋げて産業が発展してきました。しかし、候補となる材料は構成元素や結晶構造といった無数の組合せがあり、既知のものだけでも膨大な数に上ります。そのため、新材料の探索には長い年月や多大な労力を必要とするという課題があります。一方で、コンピュータを活用した「計算科学」が発達してきました。以前は材料の結晶構造モデルから特性を予測するには膨大な計算が必要でしたが、近年の計算性能の飛躍的な発展により一般でも利用できるレベルとなってきました。更に情報処理技術の向上により、人工知能(AI)を活用して候補材料の選定を行う「第4の科学」の取り組みが始まっています。これは、既存の膨大な材料データを基にデータ駆動型の材料設計(バーチャル設計)をシミュレーション上でを行い、新材料を予測する試みです。これにより、未知の材料の発見など人間の頭脳を凌駕するものづくりの革新につながると期待されています。

工業試験場では今後の新材料開発の中心になると考

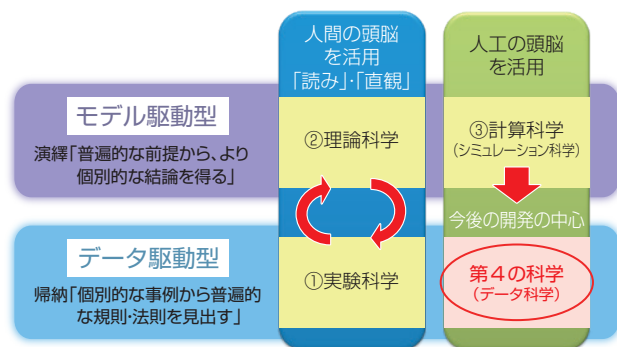


図1 研究領域に関する相関図

出典：情報・システム研究機構シンポジウム
「分野を超えたデータサイエンスの広がり」 資料改

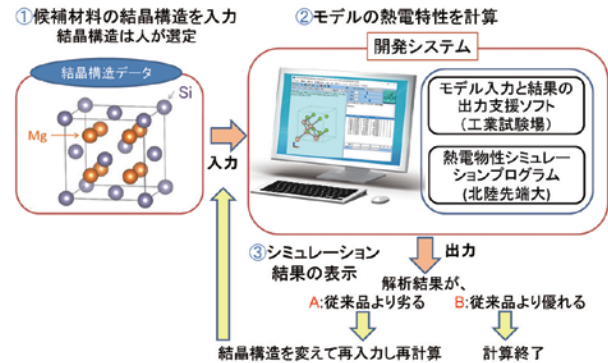


図2 熱電材料設計システムの模式図

えられている「第4の科学」の活用を念頭に、熱を与えると電気を発生する熱電材料を対象として計算科学の活用やバーチャル設計の基礎検討を行っています。図2に開発したシステムを示します。熱電材料の物性予測で研究実績を持つ北陸先端科学技術大学院大学(北陸先端大)と連携し、北陸先端大で開発された熱電物性のシミュレーションプログラムをパーソナルコンピュータ(PC)上で計算するための入出力支援ソフトを搭載したシステムを開発しました。図3は本システムを利用した熱電材料の計算結果であり、実際の材料の測定値と良い一致を示すことから、シミュレーションシステムとして正しく機能することが検証できました。今後はAI技術を活用することでこれまで人が入力していた結晶構造を、PCが自動的にシミュレーションを行うことで新材料の構造を提示できるようになります。また、最終製品である熱電モジュールの性能は、材料の構造だけでなくそのサイズや配置にも依存するため、モジュールの最適設計工程にもAIを用いることを目指します。

バーチャル設計は、太陽電池や次世代蓄電池の新材料探索といった環境・エネルギー問題の解決策を探る切り札として活用されていくことが予想されます。この材料探索手法に興味のある方はお気軽にご相談ください。

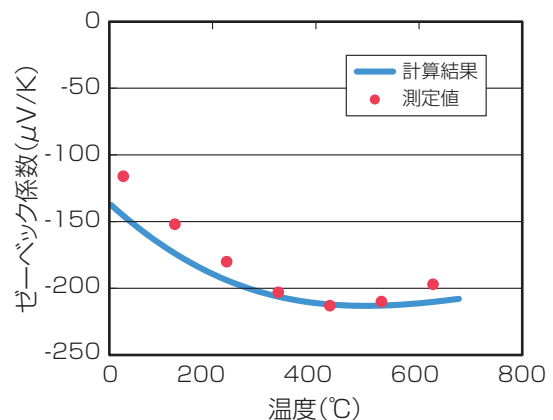


図3 開発システムのシミュレーション結果