

AI から導くバンドギャップ設計とペロブスカイト合成

～AI と実験を融合した無機材料開発フローを実現～

ポイント

- ・ペロブスカイト材料のバンドギャップを予測する記述子を発見。
- ・1,800 超の化合物を予測し、目的に適した新規材料の合成に成功。
- ・構造・組成・光学特性を一致させたバンドギャップ設計の実証。

概要

北海道大学大学院理学研究院の高橋啓介教授、高橋ローレン助教、フェルナンド・ガルシア＝エスコバル博士研究員、同大学大学院理学院博士後期課程 1 年の田代智哉氏、修士課程 2 年の柴田憲伸氏らの研究グループは、機械学習によってバンドギャップ*¹（光吸収の指標）を精密に予測・設計できるペロブスカイト無機材料の開発手法を確立しました（図 1）。

これまで、ペロブスカイト材料*²は太陽光を効率的に吸収できる優れた構造として知られていましたが、バンドギャップがわずかな構造変化で大きく変動するため、材料設計は困難でした。

本研究では、過去の文献に基づく 282 件の実験データを用い、材料中の元素の性質と構造に基づく記述子（特徴量）*³を数千種類生成しました。研究グループが独自開発した MonteCat 法*⁴を用い、バンドギャップに強く関与する 24 個の記述子を選び出し、予測精度の高いサポートベクター回帰モデルを構築しました。

このモデルを用いて、1852 種類の仮想ペロブスカイト化合物のバンドギャップを一括予測しました。その中から、太陽光エネルギー変換に適したバンドギャップ（0.45–2.2 eV）と構造安定性を持つと予測された 86 種を抽出し、最終的に LaCrO₃、LaFeO₃、YFeO₃、YCrO₃の 4 種を実際に合成しました。合成後の X 線回折（XRD）、走査電子顕微鏡（SEM-EDS）、紫外可視近赤外分光（UV-vis-NIR）による評価では、すべての材料で構造・組成・バンドギャップが予測通りであることを確認しました（図 2 と図 3）。これは、機械学習で設計した記述子に基づく材料設計が、実験によっても実証されたことを意味します。

本研究のように、機械学習による記述子選定・予測、そして実験合成と特性評価までを一貫して行うことで、バンドギャップなどの特性を自在に設計する“インフォマティクス主導型の材料開発”が可能になることが示されました。

本成果は、再生可能エネルギー活用や光触媒、水分解用材料の加速的開発に資するだけでなく、材料インフォマティクスと実験を統合した設計フローの基盤となります。研究グループは、今後さらに複雑な材料系や他の光・電気・磁性特性への展開も視野に入れ、記述子駆動型の材料探索を拡張していく予定です。

本研究成果は、2025 年 8 月 19 日（火）公開の英国王立化学会のフラッグシップジャーナル Chemical Science 誌にオンライン掲載されました。

【背景】

近年、マテリアルズインフォマティクスの発展により、機械学習を用いた新材料設計が急速に進展しています。とりわけ、光エネルギーを活用する太陽電池や光触媒材料においては、材料のバンドギャップ（光の吸収範囲を決定する物性）の最適化が性能を左右する重要因子です。しかし、バンドギャップは材料の構造や原子配置に強く依存するため、実験的に制御することは非常に困難でした。

これまでの研究では、単一の組成や構造に対する計算的な探索にとどまり、機械学習による設計が実験まで結びつく例は限られていました。そこで研究グループは、機械学習でバンドギャップを精密に予測し、実際に合成と検証まで行う一貫した材料開発手法の確立を目指しました。

【研究手法】

研究グループは、過去の実験文献から収集した 282 種のペロブスカイト型化合物のバンドギャップ情報をもとに、構造情報と元素の特徴から数千種類におよぶ記述子（特徴量）を生成しました。その後、独自のアルゴリズム「MonteCat 法」によって最適な記述子を選定し、サポートベクター回帰 (SVR) モデルを構築しました。これにより、構造や組成に基づいてバンドギャップを高精度で予測するモデルを開発しました。

次にこのモデルを用いて、理論的に安定とされる 1852 種の仮想ペロブスカイト化合物のバンドギャップを予測しました。その中から、太陽光応用に適した 0.45–2.2 eV のバンドギャップと、構造安定性を満たす 86 種の有望候補を選定しました。そのうち 4 種 (LaCrO_3 、 LaFeO_3 、 YCrO_3 、 YFeO_3) を実際に合成し、X 線回折 (XRD)、走査電子顕微鏡 (SEM-EDS)、紫外可視分光 (UV-vis-NIR) によって、構造・組成・バンドギャップの予測通りの特性を持つことを確認しました。

【研究成果】

この研究により、構造・組成情報から記述子を抽出 → バンドギャップを予測 → 実際に合成 → 物性評価で検証という、機械学習と実験を融合した新たな材料開発フローの構築に成功しました。バンドギャップという感度の高い物性に対して、記述子ベースでここまで高い予測精度を実現し、さらに合成と一致させた研究は非常に珍しく、今後の材料開発の標準モデルとなることが期待されます。

【今後への期待】

本研究成果は、太陽電池・光触媒・水分解触媒などのエネルギー関連材料の加速的開発に貢献するだけでなく、物性設計を起点としたインフォマティクス主導の合成可能材料設計を強く後押しします。今後は、磁性・誘電性・熱電など他の物性領域にも記述子ベースのアプローチを応用することで、より多様で高機能な材料の発見が期待されます。

【謝辞】

本研究は、科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業 ERATO (JPMJER1903)、PRESTO (JPMJPR24T5)、及び JST 未来社会創造事業 (Mirai Program) (JP-MJMI25G1)、並びに日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費助成事業 (科研費) 基盤研究 (B) (JP23H01762、JP24K01241) の支援を受けて実施されました。

論文情報

論文名 Designing and Synthesizing Perovskites with Targeted Bandgaps via Tailored Descriptors
(高度に練り上げた記述子によるバンドギャップを制御したペロブスカイト合成)
著者名 柴田憲伸¹、エスコバー・フェルナンド²、田代智哉¹、高橋ローレン²、高橋啓介²
(¹北海道大学大学院理学院、²北海道大学大学院理学研究院)
雑誌名 Chemical Science (英国王立化学会が発行する化学ジャーナル)
DOI 10.1039/d5sc04813c
公表日 2025 年 8 月 19 日 (火) (オンライン公開)

お問い合わせ先

北海道大学大学院理学研究院 教授 高橋啓介 (たかはしけいすけ)

T E L 011-706-4661 メール keisuke.takahashi@sci.hokudai.ac.jp

U R L <https://takahashigroup.github.io/>

配信元

北海道大学社会共創部広報課 (〒060-0808 札幌市北区北 8 条西 5 丁目)

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

【参考図】

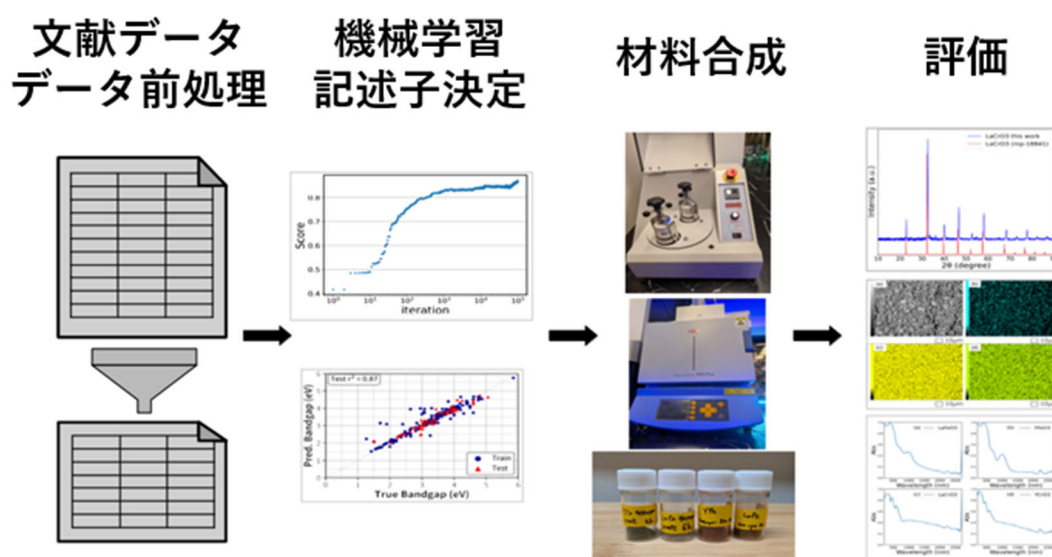


図 1. 文献データから材料合成までの道筋

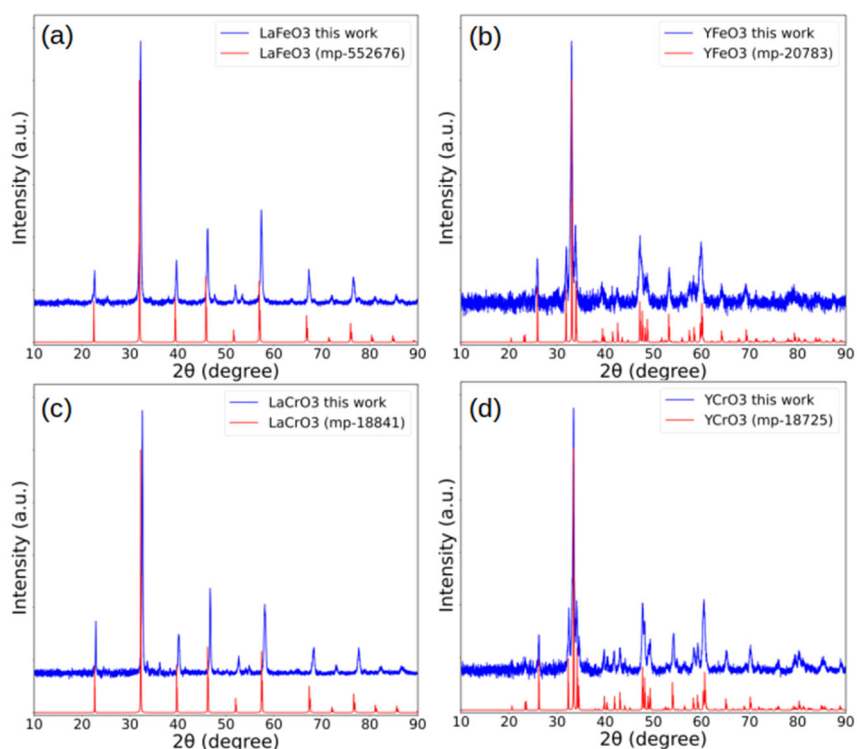


図 2. 合成した材料の XRD ピーク、(a) LaFeO_3 (b) YFeO_3 (c) LaCrO_3 (d) YCrO_3

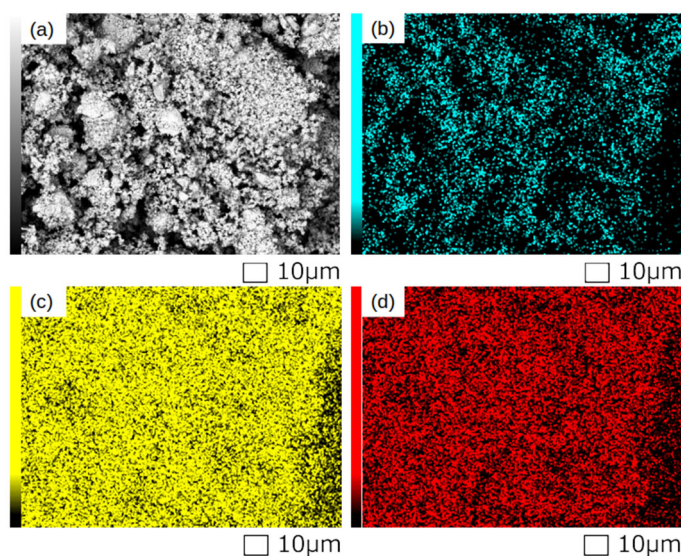


図 3. 合成した材料 (LaFeO_3) の電子顕微鏡画像

【用語解説】

- *1 バンドギャップ … 材料の電子状態における価電子帯と伝導帯間のエネルギー差。太陽光吸収や光触媒反応に大きく関わる。
- *2 ペロブスカイト材料 … ABX_3 の一般式で表される結晶構造。太陽電池・光触媒・磁性体など多分野で注目されている。
- *3 記述子（特徴量） … 材料の性質を数値的に表す指標。機械学習では特徴量とも呼ばれる。
- *4 MonteCat 法 … 記述子の最適組み合わせを探索するためのモンテカルロベースのアルゴリズム。研究グループが独自に開発したプログラム。Github で公開中 (<https://github.com/Materials-Informatics-Group/MonteCat>)