

令和 3 年 6 月 23 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03974

研究課題名(和文)非周期的メタマテリアルによる熱ふく射スペクトル制御

研究課題名(英文)Thermal radiation control using aperiodic metamaterials

研究代表者

櫻井 篤 (Sakurai, Atsushi)

新潟大学・自然科学系・准教授

研究者番号：20529614

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、機械学習を熱ふく射物性計算に応用することを試みた。多層膜の熱ふく射物性は、マクスウェル方程式を周波数領域で展開する厳密結合波解析法を用いて数値解析を行った。この電磁波解析法と機械学習を組み合わせることによって、熱放射性能(ここでは熱ふく射スペクトルを狭帯域化させるという意味)を最大にする多層膜構造の設計手法を確立することを目的として研究を行った。その結果、高い熱放射性能を持つ非周期的メタマテリアル構造を見出すことができた。この予測結果を基に超狭帯域熱ふく射エミッターの実証実験にも成功し、その物理的メカニズムについて明らかにすることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

熱ふく射スペクトル制御の応用例として、波長選択性太陽光吸収材料を用いた太陽熱発電、熱光起電力発電、大気窓領域に高い放射率を持つスカイラジエータ、有機溶剤の吸光スペクトルに合わせた波長選択性赤外線ヒーター等が挙げられる。このように可視光から赤外光まで多種多様な社会・産業界からのニーズがある中で、何兆通りにも存在する組み合わせから高性能なメタマテリアルを導き出すことはできるのだろうか？その課題解決のため、機械学習を用いた熱ふく射物性計算方法を確立した。さらに、機械学習から導かれた非周期的なメタマテリアル構造体ではどのような新しい熱ふく射特性が発現するのかといった学術的知見を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：In this study, we have tried to apply machine learning to the calculation of thermal radiation properties. The thermal radiation properties of the multilayer film were analyzed numerically using the rigorous coupled wave analysis method, which expands Maxwell's equations in the frequency domain. By combining this electromagnetic wave analysis method with machine learning, we aimed to establish a design method for multilayer structures that maximizes the thermal radiation performance (in this case, narrowing the thermal radiation spectrum). As a result, we found an aperiodic metamaterial structure with high thermal radiation performance. Based on this prediction, we have successfully demonstrated an ultra-narrowband thermal emitter and clarified its physical mechanism.

研究分野：熱工学

キーワード：熱ふく射 機械学習 電磁波 メタマテリアル

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) メタマテリアルとは、ナノ構造体によって電磁波を制御し、自然界には存在しない新しい光学特性を持つ人工物質のことである。熱ふく射は本質的にスペクトル成分を持つ光の一つであり、もし熱ふく射を自由自在にコントロールできるようになれば、省エネルギー社会の実現に大きく寄与できる。しかし、現状では自由自在に熱ふく射のスペクトルを制御できるものは実現されておらず、実用化までにはクリアすべき問題点が山積している。

(2) 熱ふく射スペクトル制御の応用例として、波長選択性太陽光吸収材料を用いた太陽熱発電、太陽熱光起電力発電、太陽熱電発電、他にも大気窓領域に高い放射率を持つスカイラジエータ、有機溶剤の吸光スペクトルに合わせた波長選択性赤外線ヒーター等が挙げられる。このように可視光から赤外光まで多種多様な社会・産業界からのニーズがある中で、何兆通りにも存在する組み合わせから高性能なメタマテリアルを導き出すことはできるのだろうか？そして、従来のメタマテリアルはほとんどが周期的な微細構造体であったのに対して、非周期的な構造体によるメタマテリアルではどのような新しい熱ふく射特性が発現するのか、といった学術的にも未解明な点が多い。そこで、本研究ではマテリアルズ・インフォマティクスによるメタマテリアルの逆デザインに着目する。マテリアルズ・インフォマティクスとはビッグデータと機械学習を駆使し、要求される性能に合わせた材料の逆デザインを行う研究領域である。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、この機械学習の手法をメタマテリアル構造の最適化に応用し、電磁波シミュレーションによって熱ふく射スペクトルの予測を行う。何兆通りにも存在する候補の中から最適な構造へ最短距離で到達するためには、機械学習の力を借りることは効率的である。

(2) 社会・産業界のニーズに合わせて自由自在に熱ふく射のスペクトルを制御できるメタマテリアルを、機械学習によって逆デザインする。メタマテリアルのプロトタイプ作製および計測・評価までを一貫したケーススタディとして行うことにより、早期の実用化に向けた設計指針を見出す。非周期的な新しいメタマテリアル構造を見出し、そこから派生する新たな熱ふく射スペクトル制御について理論的解釈を見出す。このように原理原則に基づいた新しいメタマテリアル創製のための知識基盤を構築する。

3. 研究の方法

(1) 本研究では、機械学習によりメタマテリアルの材料と構造の最適化を行う。要求される熱ふく射特性をまとめると、1) 制御したい波長領域(例:可視光域、赤外光域、など)、2) 放射率のピーク形状(例:狭帯域、広帯域、など)がポイントである。このような熱ふく射特性を持つメタマテリアルを逆デザインするためには、設計指針のインプットからアウトプットまで一貫した数値解析ツールを構築する必要がある。また機械学習によって見出された新たなメタマテリアル構造について、研究室レベルで実際にプロトタイプを作製することが、実用化へ向けた設計指針を見出すために重要である。そこでまず本研究の有効性を示すために、ケーススタディを行う。

(2) 逆デザイン用の数値解析ツールの構築を行う。1次元メタマテリアルの場合は多層膜構造であるため、各層の厚さと材料の組み合わせが主な設計パラメータとなる。したがって比較的容易に電磁波シミュレーションを行うことが可能である。ここで材料の選択肢は多ければ多いほど良い。さらに多くの材料データベースをライブラリとして集積し、これは次の2次元メタマテリアルの設計に役立てる。次に2次元メタマテリアル用の数値解析ツールの構築に取り組む。具体的には光アンテナに相当する構造体を2次元的に配列したものであり、機能的な表面を持つ材料であるからメタサーフェスと呼ばれることもある。具体的には、どのようなナノ構造パターンを形成するかが重要なパラメータとなる。

(3) メタマテリアルのプロトタイプ作製と光学測定による性能評価を行う。機械学習によって見出された新たな1次元、2次元メタマテリアル構造について、研究室レベルにおいて実際にプロトタイプを作製する。ナノ構造を作製するためには、スパッタリングあるいは蒸着による薄膜形成とエッチングによりナノ構造パターンを形成する。また、分光エリプソメトリー、可視分光計測、赤外フーリエ分光計測等を行うことにより薄膜の光学評価を行う。

(4) 性能評価から数値解析ツールへのフィードバックを行う。具体的には熱ふく射の放射機構として、新しいメタマテリアルのバンド構造がどのようになっているのか、電磁波の共鳴が何故どのようにして起こるのかを電磁気学や光物性物理学の観点から明らかにする。これにより、原理原則に基づいた熱ふく射スペクトル制御に関する基礎的知見を蓄積する。

4. 研究成果

(1) 本研究では、機械学習を熱ふく射物性計算に応用することを試みた。多層膜の熱ふく射物性は、マクスウェル方程式を周波数領域で展開する厳密統合波解析法を用いて数値解析を行った。この電磁波解析法と機械学習を組み合わせることによって、熱放射性能(ここでは熱ふく射スペクトルを狭帯域化させるという意味)を最大にする多層膜構造の設計手法を確立することを目的として研究を行った。

(2) 機械学習アルゴリズムは、共同研究者の東京大学津田宏治先生が開発されたベイズ最適化アルゴリズムであるCOMBO(COMmon Bayesian Optimization Library)を使用した。このCOMBOは、マテリアルズインフォマティクスやバイオインフォマティクスの領域で盛んに活用されている。COMBOによる最適化フローの概略について図1に示す。はじめに計算する構造体(今回は多層膜構造だが、グレーティング構造なども可)と候補材料を設定した。多層膜の材料にはゲルマニウム(Ge)、シリコン(Si)、シリカ(SiO₂)の3種類を候補とした。全体の層数は18層としたので、3種類の材料をここにどう並べるかといった多層膜構造の候補数は318(約3億8千万)通り存在することになる。また多層膜構造の全体厚さも計算するので、全体の候補数は合計で約80億通り存在する。機械学習では、これら全ての候補について網羅的に解析するのではなく、最初に候補の一部をランダム探索することによって、最適化の元となるデータを得る。その構造情報を電磁波解析に渡し、熱ふく射物性を計算した。

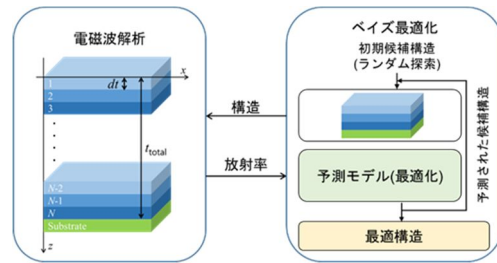


図1 機械学習の最適化フロー

(3) この最適設計の結果を図2に示す。この図を見てわかるように、ターゲット波長5、6、7 μm の設計においては、材料がGeとSiO₂の2種類に絞られており、得られた構造は直感的ではない非周期的な多層膜となった。また、この構造を得るためには、全体候補数の約0.5%程度の計算で、候補の中から最大FOMの構造を発見できていることがわかった。

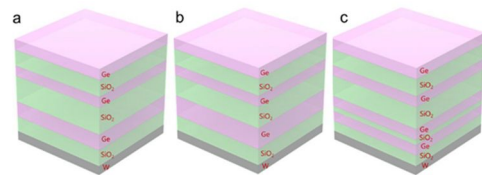


図2 各目的波長に対する最適計算結果

(a) 5.0 μm , (b) 6.0 μm , (c) 7.0 μm

次に得られた構造の放射率スペクトルを図3に示す。縦軸に指向性放射率、横軸に波長を示している。いずれの波長帯においても非常に鋭い放射率スペクトルが得られているが、この鋭さを評価する指標としてQuality factor(Q値)で比較してみる。Q値はそれぞれ217($\lambda_t = 5.0 \mu\text{m}$)、273($\lambda_t = 6.0 \mu\text{m}$)、233($\lambda_t = 7.0 \mu\text{m}$)を示しており、極めて狭帯域化された熱放射特性を示していることがわかる。この設計結果に基づいて、実際にエミッターをスパッタリングにより作製し、光学特性の測定を行った結果を示す。放射率はFTIR(フーリエ変換赤外分光光度計)を用いて反射率を測定し、キルヒホッフの法則から放射率を導出した。測定した放射率を図4に示す。その結果、実験的にも非常に鋭い熱放射特性が確認された。しかし、図3の計算結果と比較すると、いずれのピーク波長もちょうど約0.5 μm ほど長波長側にシフトしている。この不一致の原因として、スパッタリングの成膜条件などによって実際に作製された薄膜の光学特性が変化するため、誘電関数を文献値で設計した今回の数値解析結果とは異なってしまったといった問題が考えられる。しかし、こういった問題を踏まえた上で、実験結果においては、それぞれの目的波長帯で最大放射率0.76、0.83、0.61であり、Q値は132、188、109と高い値を示していることから、超狭帯域熱ふく射エミッターの実証実験に成功したと言える。

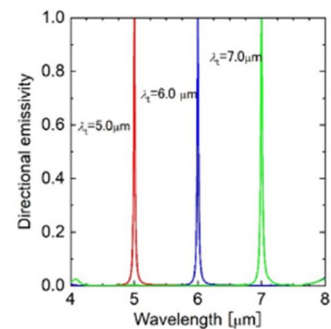


図3 放射率の予測

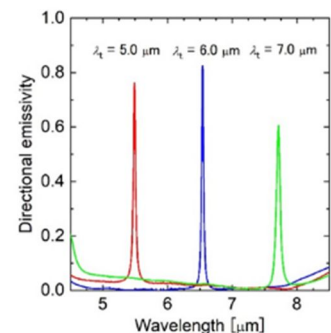


図4 放射率の測定

最後に、何故このような多層膜構造で超狭帯域熱ふく射を発生させることができたのかを考察した。その結果、周期・非周期のハイブリッド構造になっており、広い波長帯でフォトニックバンドギャップを形成しつつ、狭帯域な光の局在モードが存在していることが明らかになった。その結果、非常に鋭い熱ふく射スペクトルを持つエミッターを実現できたのだと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Yada Kyohei, Sakurai Atsushi	4. 巻 260
2. 論文標題 Active thermal radiation control with nanoslit graphene metasurface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer	6. 最初と最後の頁 107450 ~ 107450
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jqsrt.2020.107450	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Sakurai Atsushi, Matsuno Yuki	4. 巻 10
2. 論文標題 Design and Fabrication of a Wavelength-Selective Near-Infrared Metasurface Emitter for a Thermophotovoltaic System	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Micromachines	6. 最初と最後の頁 157 ~ 157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/mi10020157	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Sakurai Atsushi, Yada Kyohei, Simomura Tetsushi, Ju Shenghong, Kashiwagi Makoto, Okada Hideyuki, Nagao Tadaaki, Tsuda Koji, Shiomi Junichiro	4. 巻 5
2. 論文標題 Ultrathin Narrow-Band Wavelength-Selective Thermal Emission with Aperiodic Multilayered Metamaterials Designed by Bayesian Optimization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 319 ~ 326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.8b00802	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 櫻井 篤	4. 巻 63
2. 論文標題 機械学習を用いた熱ふく射制御に関する研究	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本燃焼学会誌	6. 最初と最後の頁 60 ~ 64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.20619/jcombsj.63.203_60	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件（うち招待講演 7件 / うち国際学会 12件）

1. 発表者名 櫻井篤
2. 発表標題 機械学習を用いた超狭帯域熱放射多層膜の開発
3. 学会等名 Nano tech 2020 特別シンポジウム：マテリアルズ・インフォマティクス：「できる」から「できた」へ（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kyohei Yada, Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Active Thermal Radiation Control Based on Graphene Metasurface
3. 学会等名 The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Hasegawa, M. Araki, H. Kishi, A. Sakurai
2. 発表標題 Active Thermal Radiation Control Based On MIM Metasurface
3. 学会等名 ICFD2019（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Igarashi, A. Sakurai
2. 発表標題 A Spectrally Selective Solar Absorber based on a Double-layered Film
3. 学会等名 ICFD2019（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Wavelength-selective thermal emission with metamaterials
3. 学会等名 The 1st Asia-Pacific Thermofluid Science & Engineering Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tsuyoshi Totani, Sakurai Atsushi, Tadaaki Nagao, Kondo Yoshio
2. 発表標題 Infrared ray drying by emitting to the absorption band of solvents
3. 学会等名 The 1st Asia-Pacific Thermofluid Science & Engineering Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Spectral Control of Thermal Radiation based on Metamaterials
3. 学会等名 The 4th A3 Metamaterials Forum (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 櫻井 篤
2. 発表標題 熱輻射メタマテリアル (Thermal radiation based on metamaterials)
3. 学会等名 フォノンエンジニアリング研究グループ第3回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Ultra-Narrowband Wavelength-Selective Thermal Emitter and Absorber with Multi-Layered Metamaterials Designed by Bayesian Optimization
3. 学会等名 MRS Spring Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Controlling thermal radiation spectrum with metamaterials
3. 学会等名 China-Japan Heat Transfer Symposium 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Wavelength-selective metasurface absorber and emitter for energy applications
3. 学会等名 Progress In Electromagnetics Research (PIER) Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 櫻井 篤, 牛木 開陸, 横山 達也, 宮崎 康次
2. 発表標題 サーメット型太陽光吸収材料の直接電磁波シミュレーション
3. 学会等名 日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小川 稜太, 岸 秀俊, 櫻井 篤
2. 発表標題 放射冷却デバイスに関する研究
3. 学会等名 日本伝熱学会北陸信越支部 秋季セミナー
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 下村 哲志, 矢田 恭平, 鞠 生宏, 柏木 誠, 岡田 英之, 長尾 忠昭, 津田 宏治, 塩見 淳一郎, 櫻井 篤
2. 発表標題 ベイズ最適化を用いた超狭帯域熱ふく射エミッターの開発
3. 学会等名 熱工学コンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yiming Huang, Hideyuki Okada and Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Solar-selective Absorber based on Dielectric Multi-layers
3. 学会等名 Fifteenth International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kairi Ushiki and Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Direct Electromagnetic Simulation of Cermet-based Solar Selective Absorber
3. 学会等名 Fifteenth International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hideyuki Okada, Kyohei Yada and Atsushi Sakurai
2. 発表標題 Optical Switching by Graphene-based Metamaterials
3. 学会等名 Fifteenth International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 狭帯熱放射スペクトルを有する構造体	発明者 塩見淳一郎, 櫻井篤, 津田宏治	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、2018-087363	出願年 2018年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

researchmap https://researchmap.jp/sakurai1817/
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------