

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
終了報告書(探索研究)

令和2年度
終了報告書

平成 30 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：知京 豊裕]

[物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門・特命研究員]

[研究開発課題名：Materials Foundry のための材料開発システム構築とデータ
ライブラリ作成]

実施期間：平成 30 年 11 月 15 日～令和 3 年 5 月 31 日

§ 1. 研究実施体制

(1)「Materials Foundry における材料設計・実証」グループ

(国立研究開発法人 物質・材料研究機構)

① 研究開発代表者:知京豊裕 (国立研究開発法人 物質・材料研究機構

統合型材料開発・情報基盤部門 特命研究員)

② 研究項目

- ・材料開発を加速するバーチャルスクリーニング手法の開発
- ・機械学習を取り入れたハイスループット材料合成・評価
- ・材料とプロセスデータの蓄積

(2)「Materials Foundry における高効率合成」グループ(東京大学 物性研究所)

① 主たる共同研究者:Mikk Lippmaa (東京大学 物性研究所、教授)

② 研究項目

- ・リモートアクセス技術の実証 (ハイスループット酸化物材料のパラメーター取得)

§ 2. 研究実施の概要

Materials Foundry では、多様な材料を高速に開発のためのプラットフォームの開発を目指している。そのためには材料候補の仮想スクリーニングツールからハイスループット合成・評価の高速化と自動化を念頭においたツールの開発が必要である。自動計算の事例としてハイエントロピー合金を取り上げた。ハイエントロピー合金は多元系であるために、組成の組み合わせだけで、500 万通以上の組み合わせがある。そのために機能性の探索はほとんどなされていない。ここでは、第一原理計算の一つである KKR 法を用いて 4 元系ハイエントロピー合金に関して構成元素を変えたときの磁化と磁気転移温度、電気抵抗の自動データ生成に成功した。また、いくつかの組成での実験データをつかうことで新しい軟磁性材料予測のための回帰モデルも作成することができた。

自動計算で予測された新材料の合成に関するプロセス探索を高速化するために、その条件決定をベイズ推定で行い目的とする成長条件を短時間で決定することに成功し TiN 薄膜の超伝導臨界温度の更新に成功した。

評価では多様な構造をもつ薄膜材料開発において 2 次元 X 線回折手法 (2D-XRD) の自動的な解析手法の開発も行った。ここでは二次元-X 線回折データセットを、非負値行列因子分解を用いて分類し、変分オートエンコーダを用いて分類結果を自動化し視覚化する方法を使った。また、標準的な 4 種類の計測を自動で行いその結果をメタデータをつけてデータサーバへ格納する方法も開発した。

離れた場所からの実験装置のリモート制御のための高速電子線回折からの結晶構造の予測や制御方法も開発した。これらの成果は未知の新材料探索を目的とする Materials Foundry を有効に機能させる成果である。