

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

年次報告書（本格研究）

令和 3 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:長藤 圭介]

[東京大学 大学院工学系研究科・准教授]

[研究開発課題名:マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築]

実施期間 : 令和 5 年 4 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

(1)「システムアーキテクチャ」グループ（東京大学）

①研究開発代表者：長藤 圭介（東京大学大学院工学系研究科、准教授）

②研究項目

・仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型研究開発のシステムアーキテクチャの開発

(2)「オートノマスプロトタイピング」グループ（東京工業大学）

①主たる共同研究者：一杉 太郎（東京工業大学物質理工学院、特任教授）

②研究項目

・成膜合成に基づく自律マテリアル探索システムの開発

(3)「マテリアルドック」グループ（大阪大学）

①主たる共同研究者：小野 寛太（大阪大学大学院工学研究科、教授）

②研究項目

・試作材料の自動測定解析システムの開発

(4)「データ科学」グループ（物質・材料研究機構）

①主たる共同研究者：知京 豊裕（物質・材料研究機構、特命研究員）

②研究項目

・サイバー空間の材料データと実験データを統合するデータシステムの開発

(5)「機械学習」グループ（オムロンサイニックス株式会社）

①主たる共同研究者：牛久 祥孝

（オムロンサイニックス株式会社、プリンシパルインベスティゲータ）

②研究項目

・ハイスループット自律探索システムの要素技術をデータでつなげるデータクレンジング技術
開発

§2. 研究開発成果の概要

マテリアル探索空間拡張プラットフォーム(MEEP; Materials Exploration space Expansion Platform)では, 3 つの POC(自律探索, 仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型開発, ナレッジシェアリング)を, 固体電池材料探索のハイスループット化を題材に実施する.

MEEP 第 1~3 年度は, 各研究グループの要素技術開発とその統合に位置づけて研究開発を進めた. 5 カ年計画の折り返しに相当する第 3 年度では, リバプール大学, トロント大学をはじめ, 海外のベンチマークプラットフォームの加速が相次いだことから, 計画に対する加速項目および追加項目に強化した. 特記すべき具体的な成果は以下のとおりである.

「オートノマスプロトタイピング」グループでは, 第 1,2 年度で構築した自律型マテリアル探索システム(AMES; Autonomous Materials Exploration System)を外部ユーザに活用してもらうことでユーザ目線の課題抽出を行った. 「マテリアルドック」グループでは, XRD にラマン分光を組み合わせた計測法の開発に加え, 海外情勢に対応し, 粉体プロセスの自動化を実証した. 「データ科学」グループでは, 第 1,2 年度に試行した NIMS-MDR-Closed への AMES のデータ導入からデータ活用に向けて, RDE の再開発を行った. 「機械学習」グループは, 上記 3 つの要素技術の機械学習に関する役割に加え, マテリアルズマップの活用方法に着手し, 材料分野に LLM を活用したヒトへのヒラメキ付与のベンチマーキングを行った.

【代表的な原著論文情報】

Shigeru Kobayashi, Ryota Shimizu, Yasunobu Ando, Taro Hitosugi

“Autonomous Exploration of an Unexpected Electrode Material for Lithium Batteries”
ACS Materials Lett. 2023, 5, 2711–2717.

<https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.3c00350>

Chiba, N., Suzuki, Y., Taniai, T. Ryo Igarashi, Yoshitaka Ushiku, Kotaro Saito, Kanta Ono

Neural structure fields with application to crystal structure autoencoders.

Commun. Mater 4, 106 (2023).

<https://doi.org/10.1038/s43246-023-00432-w>

柳生 進二郎, 吉武 道子, 長田 貴弘, 安田 剛, 桑島 功, 劉 雨彬, 中島 嘉之,

“有機半導体材料における光電子収量分光(PYS)データベース構築”,

J. Surf. Analysis 29 (2023) 146 – 154. (NIMS のデータ公開基盤である MDR での計測データライブラリの構築・公開を有機・無機半導体材料のイオン化ポテンシャルの情報を与える光電子収量分光(PYS)のデジタルデータベースで実証した成果。データ構造、ライセンスデータにも言及し、今後の RDE2.0 での基盤となる開発例。)