

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	畠山 欽
研究機関名	早稲田大学
所属部署名	応用化学科
役職名	講師(任期付)
研究課題名	プロセスに強い MI の創出と複合機能材料での実践
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

データ駆動型の材料探索は次世代の研究スタイルとして期待されているが、実験系プロジェクトへの適用事例は限られていた。問題の 1 つは、日々の実験結果を記録、分析、共有するためのデータ科学に適合した情報基盤が無いことであった。そこで 2022 年度は当該要件を満たす電子実験ノートシステムを新たに構築した。構造・特性・プロセスの関係性をグラフ型データとして記録することで、情報損失少なく記述するデータプラットフォームのプロトタイプが提示された。

本システムを試験運用するため、高いイオン伝導性を持つ有機固体の探索・合成プロジェクトを推進した。具体的には、500 種を超える実験プロトコルと検証結果を電子実験ノートに記録した。実験研究と同時に、蓄積情報をデータ科学の視点で解析することで、室温での高いイオン伝導度 ($10^{-4} \sim 10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$) と Li^+ 輸率 (約 0.8) を可能にするための重要なプロセス・構造因子を特定できた。

材料・データ科学の進展に加えて特筆すべき成果は、従来の材料研究とは異なり、伝導度の低い「失敗データ」も含む 500 件の全ての研究記録(実験操作・分光データ・物性データなど)が、公開リポジトリ(<https://github.com/KanHatakeyama/GlassyIonicConductorDatabase>)でオープンアクセスになった点である。こうした生の研究データを世界中で共有する文化の浸透により、科学コミュニケーションの円滑化が加速すると期待される。

以上、2022 年度においてはデータ駆動型の材料探索を活用した有機イオン伝導体の探索研究を推進した。実験化学者のための実験データのプラットフォームを新たに構築することで、実験結果の記録、分析、共有作業を効率化できることを示した。今後は本システムを種々の実験系に展開し、研究開発をより高速化するための方法論を明らかにする予定である。