

2024 年度
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

研究担当者	林 博之
研究機関名	京都大学
所属部署名	大学院工学研究科 材料工学専攻
役職名	助教
研究課題名	新規多元系物質群の自律探索システム開発
研究実施期間	2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究は、多様な金属イオンからなる多元系物質において、その膨大なイオン種や構成比の組み合わせから成る探索空間を効率的に探索し、未知の新規物質の発見を目指すものである。現在、欧米を中心に、熱力学的に安定または準安定な組成の探索には大規模な計算データベースと機械学習が活用されている。また、物質の合成条件の予測にも、従来の試行錯誤に代わり機械学習の導入が進みつつある。研究代表者は以前、並列合成実験によって得られたデータを用い、テンソル分解による推薦システムを提案し、未実験の物質の合成成功条件を予測した。しかし、多元系では二元系から三元系に移行するだけで候補組成数が約千倍に増え、学習データの割合が下がることで予測精度が著しく低下するという課題がある。これは、実験速度の制約により学習データ数を比例して増加させることが困難なためである。本研究では、単純系と多元系を同一次元のデータ構造で表現できる手法を考案し、擬二元系酸化物の組成データベースのみを用いて、擬三元系以上の酸化物組成を予測できるかを検討した。その結果、既存の多元系物質の多くを、単純な擬二元系の情報から予測することに成功した。この成果は、物質の合成可否に対して構成元素種の数に依存しない潜在的な法則が存在する可能性を示唆しており、今後の高次系物質探索における新たな指針となる。さらに本手法は、データの次元削減と情報抽出に優れ、実験資源が限られる環境でも有効に機能するため、広範な応用が期待される。