

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

林 博之

京都大学大学院工学研究科
助教

高効率な新物質発見のための合成手法推薦システムの構築

§ 1. 研究成果の概要

無機結晶構造データベース(ICSD)には、重複を除くと約5万件の物質が登録されている。しかし元素の組み合わせ数はこれよりは遥かに多く、未発見の物質が依然として多く存在していると想定される。本研究では、並列合成実験データに機械学習の手法を適用することで、対象物質の合成可否を予測する手法の開発を行った。本手法により、物質の合成可否と合成条件間の関係性を直接的に評価し、未知物質においても最適な合成条件を的確に推薦することができる。2018年度は、擬二元系酸化物において1000件程度の合成実験を行い、合成条件データベースを作成した。

§ 2. 研究実施体制

①研究者:林 博之 (京都大学大学院工学研究科 助教)

②研究項目

- ・並列錯体重合法の実施
- ・合成条件データベースの作成
- ・テンソル分解を用いた推薦システムの構築