

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

2019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。2019年度は、前年度に収集した合成結果をテンソル型データベースにし、テンソル分解手法を用いた推薦システムを構築し、全く未実験の化学組成の合成条件であっても合成に成功する条件を予測可能であることを示した。