

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

林 博之（京都大学大学院工学研究科 助教）

3. 事後評価結果

近年、理論計算やマテリアルズインフォマティクスにより、新物質の予測が行われるようになってきたが、実際に合成できるかどうかは、どのような合成条件を選ぶかによる。本研究では、成功、失敗を問わず合成条件と結果のデータを蓄積してデータベースとし、それをもとに合成条件の推薦システムを構築することで、高効率な新物質合成の実現を目指した研究である。対象を擬二元系酸化物に絞り、その並列合成により、3,000 件の均質な合成データを集め、合成条件に関する類のないデータベースを構築した。このデータベースから、データベースにない化学組成を持つ物質の合成条件を予測する推薦システムを構築し、既知物質の交差検定でその実効性を確認した。さらに学習データに含まれていない未実験の既知酸化物 17 種類の合成を、予測した合成条件で実際に行い、推薦上位の合成条件では 8 割以上の成功率で目的組成の酸化物を得ることに成功した。

本研究は、合成がうまくいったデータだけでなく失敗したデータも活用することで、指導原理の発見が困難な合成条件についてもデータ科学的手法が有用な知見を与えてくれることを示しており、試行錯誤が当然だった合成実験に新たな戦略を提案する、波及効果の大きな成果である。このようなデータベースが研究者間で共有され、データの蓄積が進むことを期待したい。