

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究)

H30 年度 研究開発年次報告書

平成 30 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：知京 豊裕]

[(国研) 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点・副拠点長]

[研究開発課題名：Materials Foundry のための材料開発システム構築とデータ
ライブラリ作成]

実施期間：平成 30 年 11 月 15 日～平成 31 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

【記載例】

(1)「J」グループ(国立研究開発法人 物質・材料研究機構)

① 研究開発代表者:知京豊裕 (国立研究開発法人 物質・材料研究機構、情報統合型物質・材料研究拠点、副拠点長)

② 研究項目

- ・材料開発を加速するバーチャルスクリーニング手法の開発
- ・機械学習を取り入れたハイスループット材料合成・評価
- ・材料とプロセスデータの蓄積

(2)「東京大学 物性研究所」グループ(研究機関名)

① 主たる共同研究者:高橋 竜太 (東京大学 物性研究所、助教)

② 研究項目

- ・リモートアクセス技術の実証

§2. 研究開発実施の概要

本研究で提案する Materials Foundry は、多様な材料の開発を機械学習による仮想スクリーニングとハイスループット合成・評価を使って加速するためのプラットフォームの提供を目指している。平成 30 年度は機械学習による仮想スクリーニングの高速化のために 2000 種類以上の物性パラメーターの中から目的とする記述子候補を自動的に判別するツールの開発をすすめた。また、その記述子が選ばれた理由を理解するために、理論駆動から得られる記述子候補とデータ駆動による記述子の関係性の比較を行った。ハイスループット合成・評価では少ない条件探索で最適な製膜条件を探索する手法をベイズ推定を使って見出し、実際の製膜に適用し、その有効性を示した。また、光電子分光において、そのスペクトル解析を自動化するための手法の開発に行い、その有効性を確かめた。また、スパースモデリングを使い計測点の少ない計測から有効な結論を導くための実証実験を磁性の分布計測に適用した。最後に、遠隔操作で Materials Foundry での薄膜作製を可能にするためのデータとして各種酸化物薄膜を成長し、その表面のデータを蓄積した。



図 1 : Materials Foundry における材料開発のワークフロー図