

# 革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

## マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築

研究開発代表者：長藤圭介 東京大学 大学院工学系研究科 准教授

共同研究機関：東京科学大学，大阪大学，物質・材料研究機構，オムロンサイニックエックス株式会社



### 目的：

マテリアル研究開発の効率を上げるため，日本の強みである人の勘・コツ・経験を生かした新たなマテリアル探索手法「マテリアル探索空間拡張プラットフォーム」を構築する。

**研究概要：** 材料探索スループット1,000倍をKPIとし，下記3つの柱をPOCに掲げる。電池材料を題材とする。

#### ①ハイスループット自律探索システム要素技術

「つくる」：真空成膜を用いた自律実験システム

「はかる」：自動結晶構造解析システム

「ためる」：材料特性予測システム

#### ②データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究

「わかる」：勘・コツ・経験に基づいてヒラメキを誘発する工程要素を

「つくる」→「はかる」→「ためる」各工程要素と

データをつなぐ機械学習等の仕組みを開発する。

#### ③ナレッジシェアリング

データから得られるナレッジ，すなわち人のヒラメキを誘発する知識を研究開発機関、研究開発企業、計測器メーカーなどと共有し，マテリアル研究開発エコシステムにつなげる。



# Realization of common platform technology, facilities, and equipment that creates innovative knowledge and products

## Materials Exploration Platform; Expanding Search Space by high-throughput technology

**Project Leader :** Keisuke Nagato

Associate Professor, Graduate School of Engineering, The University of Tokyo

**R&D Team :** Institute of Science Tokyo, Osaka University,  
National Institute for Material Science (NIMS), Omron Sinicx Co.



### Summary:

In order to improve efficiency of material research and development, we build a new material search method “Materials Exploration Platform”, utilizing experience which is Japan’s strengths.

POCs are following three for KPI of 1,000-times throughput on battery materials synthesis;

- ① High-throughput autonomous exploration systems;
  - “Prototype”: autonomous experiment system
  - “Measure”: automatic crystal structure analysis
  - “Accumulate”: properties prediction system
- ② Data-driven/hypothesis-driven hybrid research style;  
“Understand (induce inspiration based on experience)” is connected to “P”→“M”→“A” by machine learning.
- ③ Knowledge shearing;  
Knowledge obtained from data, inspiring researchers, is shared with R&D institution, R&D company, and measuring instrument manufacturers for future materials R&D ecosystem.

