

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 合成-情報科学の融合によるリチウムイオン導電体の探索手法開拓

2. 個人研究者名

鈴木 耕太（東京工業大学物質理工学院 助教）

3. 事後評価結果

二次電池のための新規酸化物系リチウムイオン導電体の開発を目的とし、固体化学者の持つ元素選択基準や様々な実験手法と、機械学習から予測される安定相予測の情報を組み合わせた物質探索を行った。後者については、本研究領域1期生の世古敦人研究者と連携し、結晶構造データベース（ICSD）の機械学習から化学的に類似した未知の安定組成を提案する「材料推薦システム」から提供される情報を利用した。その結果、これまで見つかっていなかった複数の擬似三元系化合物（单相）を発見した。

本研究で用いた材料推薦システムは、類似の化学組成を持つ物質があるかどうかという情報のみを使って物質の安定性を予測する手法であり、結晶構造情報を使わず、凝集エネルギーの理論計算も行わない。それにもかかわらず、本研究によって材料推薦システムの導入による新材料の発見効率向上を実証できたことで、研究者の経験と勘に頼ることの多かった化合物材料探索に、新しい道を示したことになる。今後材料特性についても学習することで、優れた特性を持つ材料の探索が加速できる可能性があり、今後の発展が期待される。