

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

|        |                                |
|--------|--------------------------------|
| 研究担当者  | 林 博之                           |
| 研究機関名  | 京都大学                           |
| 所属部署名  | 大学院工学研究科 材料工学専攻                |
| 役職名    | 助教                             |
| 研究課題名  | 新規多元系物質群の自律探索システム開発            |
| 研究実施期間 | 2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日 |

研究成果の概要

本研究は、新規の無機物質が既存物質の機能を大幅に上回る可能性を探るものであり、物性発現機構の理解を深め、産業のイノベーションを促進することを目指している。現在、「熱力学的に安定もしくは準安定な組成は何か」という問いに対しては、欧米を中心に大規模な計算データベースの構築と機械学習手法によるアプローチが進められている。「目的物質をどのように合成するか」については、従来の勘と経験に依存した試行錯誤的な方法に代わり、機械学習手法による合成成功条件の予測が試みられている。研究代表者が提案した手法は、並列合成実験によって作成したデータベースを基にテンソル分解手法を用いた推薦システムで、未実験の新規物質の合成成功条件を予測するものである。しかし、多元系物質の合成条件予測には課題がある。特に、多元系物質の探索範囲は二元系から三元系に増えるだけで候補化学組成の組み合わせ数が約千倍に増加し、第一原理計算による網羅的探索は現実的に困難である。また、合成条件推薦システムの予測精度は、探索範囲に対する学習データの割合に大きく依存するが、探索空間が千倍に拡大しても合成実験の速度に制約され学習データ数を千倍に増やすことは難しいため、予測性能が低下する。本研究では、単純な系でも多元系でも同じ次元のデータ構造で表現する手法を考案し、擬二元系酸化物のデータベースを用いて擬三元系酸化物の合成条件が予測可能かを検討した。その結果、102 の擬三元系酸化物の約 7 割において、合成成功条件の予測が正確であることが確認された。これは、原料が二種類から三種類に増えても合成条件空間が多次元化しないことを示唆している。