

マテリアル研究開発プラットフォームの構築

データ科学グループ



グループメンバー

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

知京豊裕 (分担 代表)

統合型材料開発・情報基盤部門: 木野日織、小山幸典、山崎裕一

機能性材料研究拠点: 長田貴弘、柳生進二郎、吉武道子

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点: 大久保 勇男

エネルギー環境材料研究拠点: 桑田直明、

磁性材料研究拠点: 高橋有紀子

東京大学 物性研究所

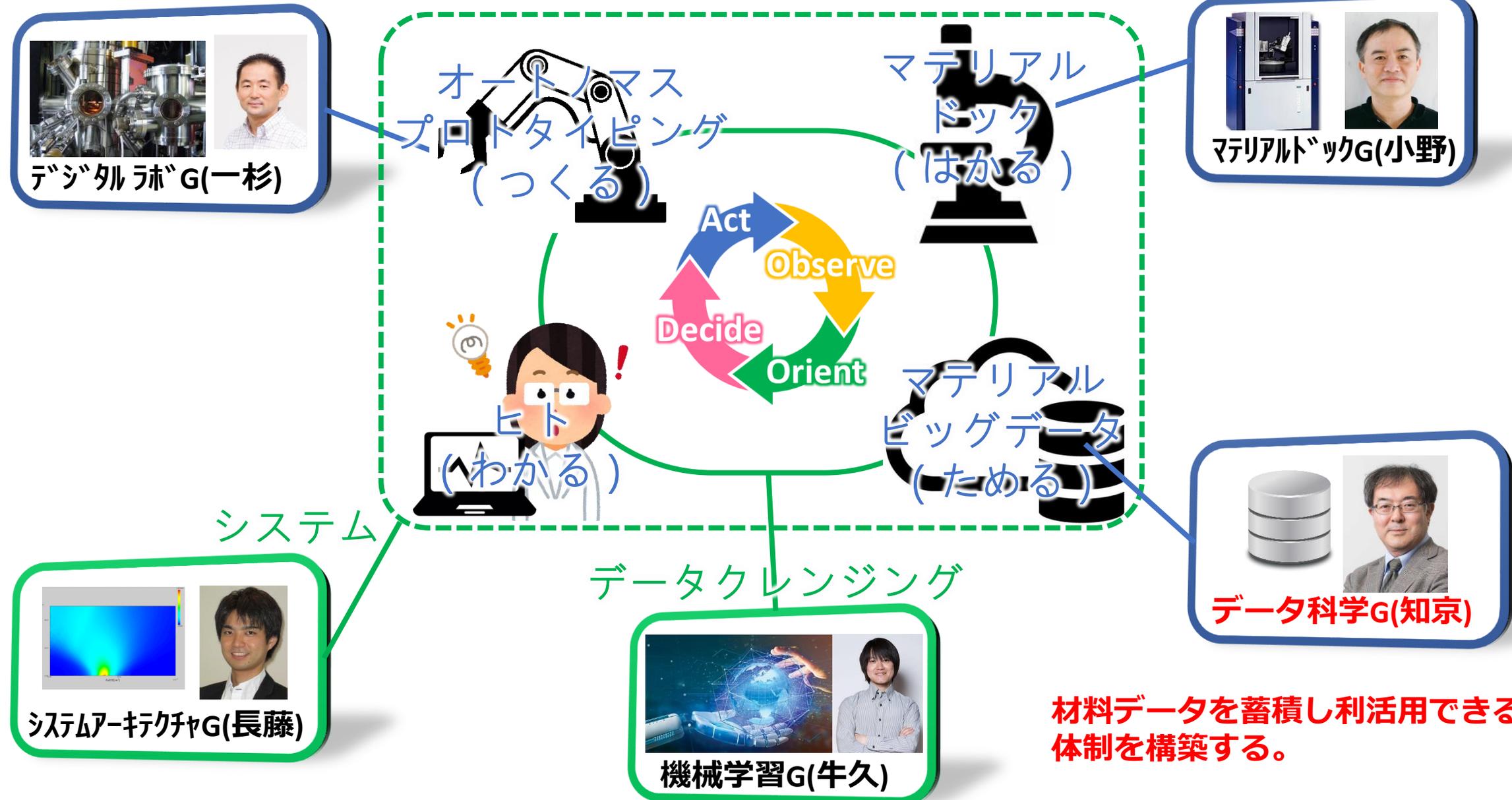
Mikk Lippmaa

森 泰蔵

福島 鉄也

3. 研究内容

3-1 研究体制



材料データを蓄積し利活用できる体制を構築する。



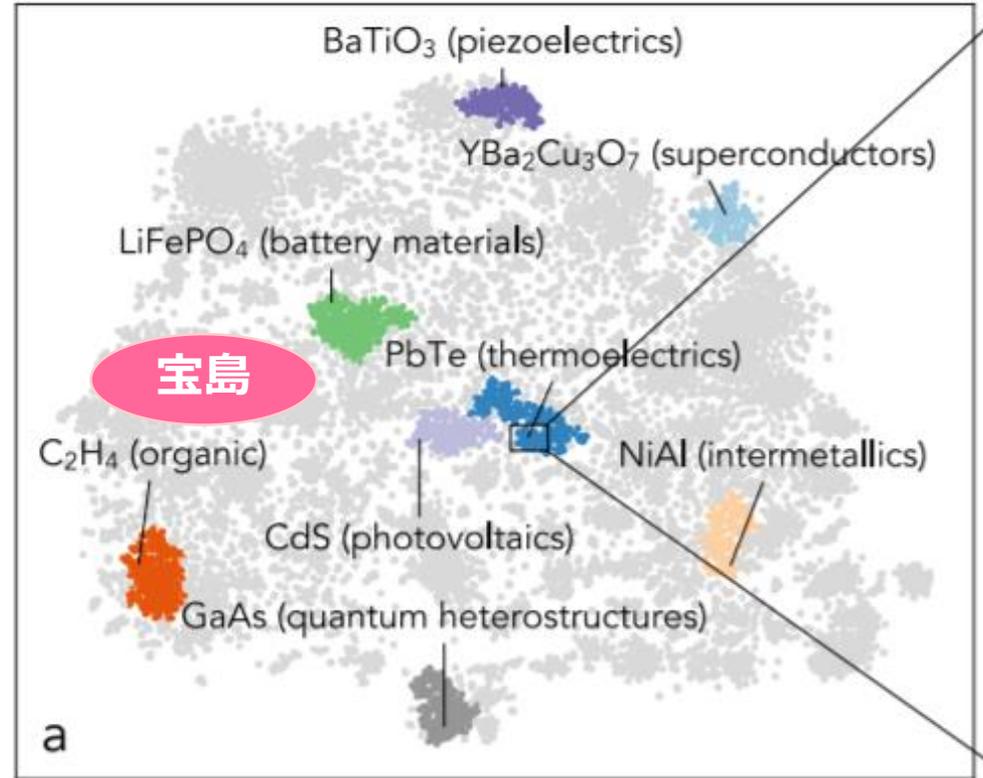
私たちは材料に関して、どれだけ知っているだろう？

海図をつくる
(インフォマテックス)

宝島に到達する
(ハイスループット合成)

宝島を掘る
(ハイスループット評価)

宝島の詳細な地図をつくり
財宝（材料）の視覚化。
(みえるか+きづき、知識化)



V. Tashitov et al,
Nature **517** 95 (2019)

「マテリアルマップ」上で調べられている材料はごく一部
日本に **高速・高効率な 道具・しくみ** それを使いこなす **方法**が必要

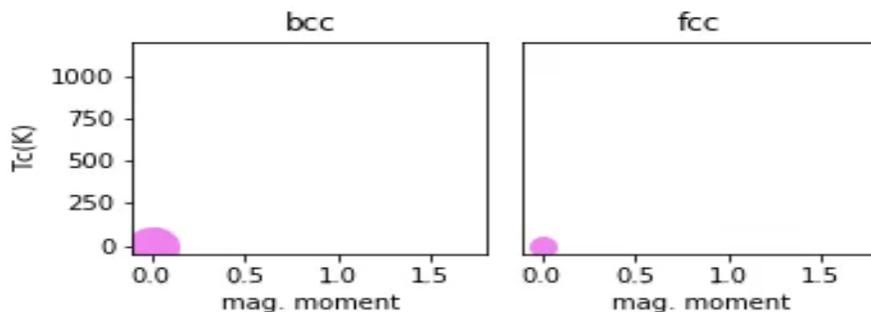


海図をつくる (インフォマティクス)

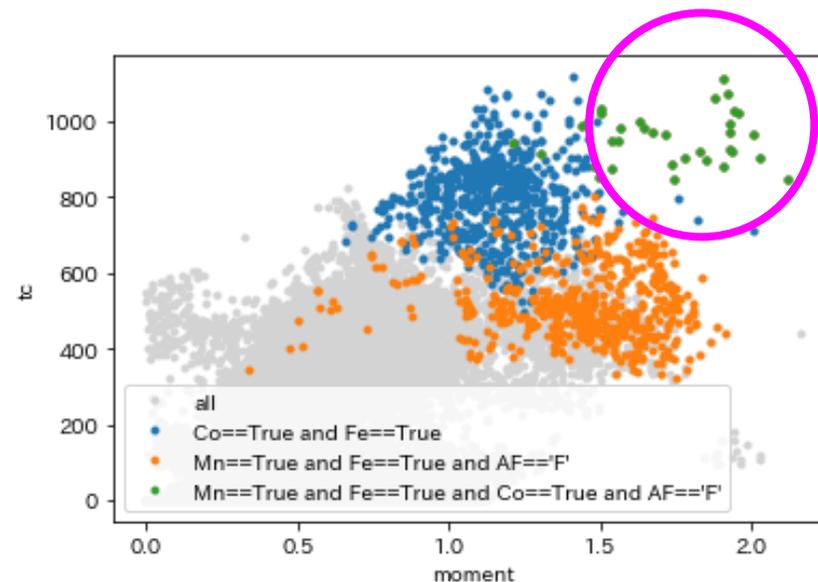
- エネルギー積分領域および第一原理収束パラメタの自動決定を行う科学ワークフロー作成により自動化する。
- FCC,BCC合計14万個四元系ランダム合金の自動計算によるデータ作成と良い特性を持つ物質の特定を行った。

NIMS 木野日織

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra																
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		



ハイエントロピー合金の自動計算の試み
横軸は磁気モーメント、縦軸は
磁気相転移温度を示す。



7万個以上のBCC四元系ランダム合金における磁気モーメント（横軸）対 磁気相転移温度（縦軸）を示す。
良い特性を示す物質がCo、Fe、Mnの組み合わせにある。



多目的ベイス最適化



木野日織
(NIMS)

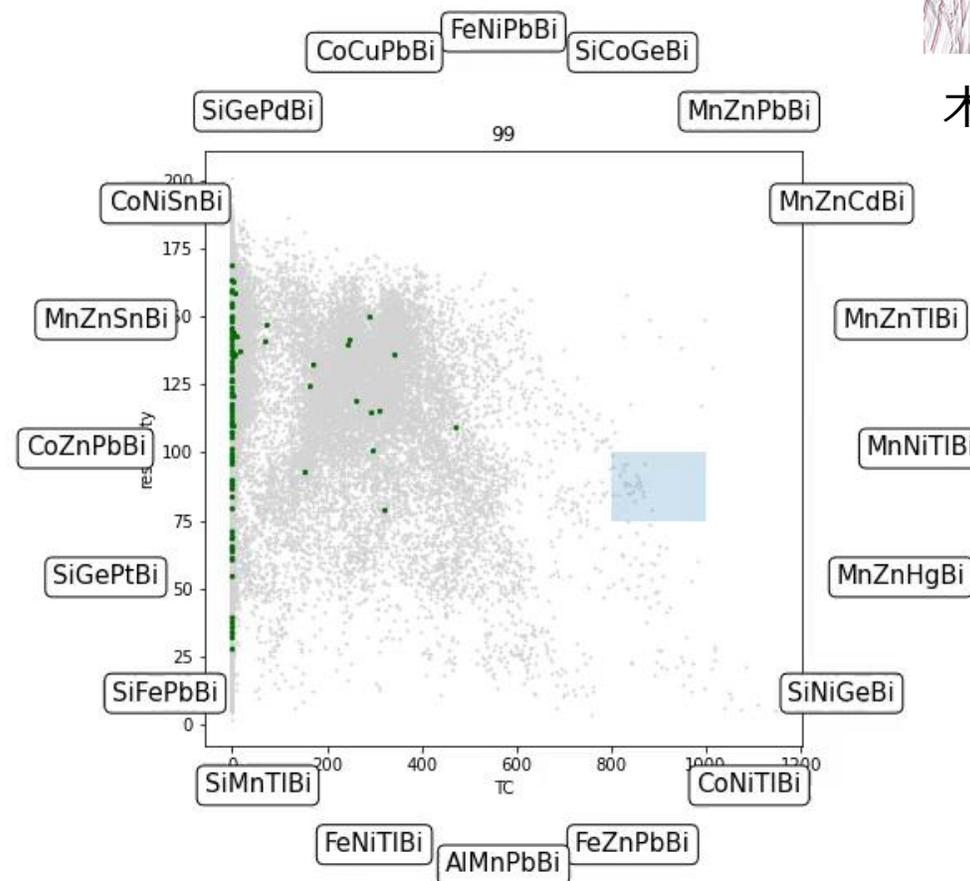
最適化シミュレーション

目的：（母集団データをほぼ全て持っている。）現実の物質での磁気相転移温度（ T_C 、横軸）と電気抵抗率（resistivity、縦軸）に対する多目的探索の性能を評価する。

- 目標領域を薄青色で示す。
- 既観測物質を緑色で示す。
- 一度に20物質提案を行い、赤色の物性値を観測する。観測済の結果をオレンジ色で示す。

手法：Bayesian Ridge回帰とLower Critical Bound

- 物性の知識を用いずにデータだけからベイズ最適化を行う。（常温で磁性があるなら3d遷移金属が多いはずなので、かなり悪い条件。）



データ科学グループ: データの蓄積とキュレーションで海図の精度を上げる。

データ科学チーム

木野日織 (第一原理計算+機械学習)
 小山幸典 (第一原理計算+機械学習)
 山崎裕一 (計測+機械学習)
 福島鉄也 (第一原理計算)

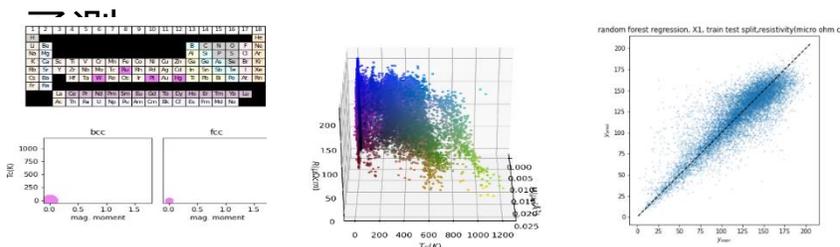
キュレーションチーム

長田貴弘 (スパッタ製膜+酸化物、計測)
 柳生進二郎 (計測+機械学習)
 吉武道子 (データ科学+キュレーション)
 大久保勇男 (MBE+データ科学、窒化物)
 桑田直明 (PLD+電池材料、計測)
 高橋有紀子 (バルク材料+金属、磁性計測)
 Mikk Lippmaa (PLD+機械学習、計測)
 森 泰蔵 (有機合成+機械学習)

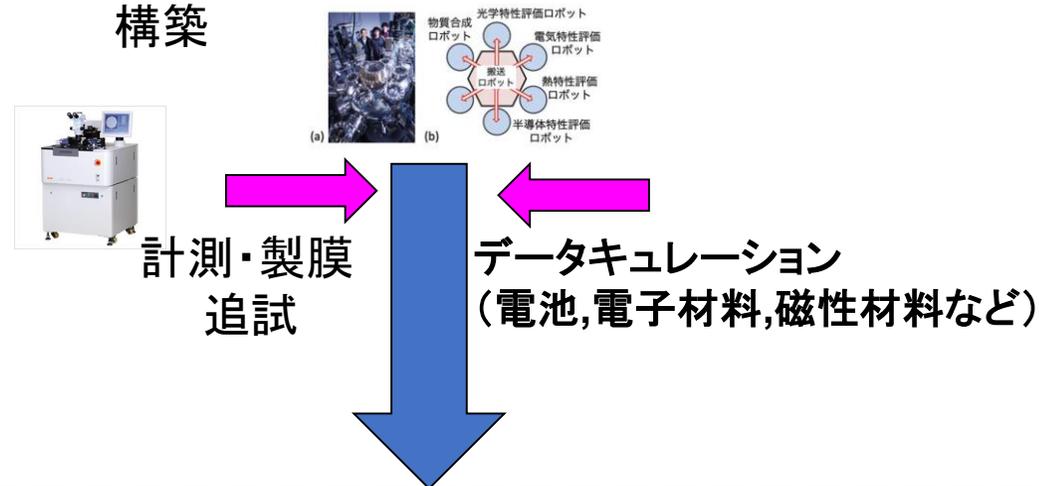
DPFC

谷藤美紀子 門平卓也 吉川英樹

- 自動計算によるデータ拡張とインフォマティクスを使った材料



- データ検証と利活用可能なデータベース構築

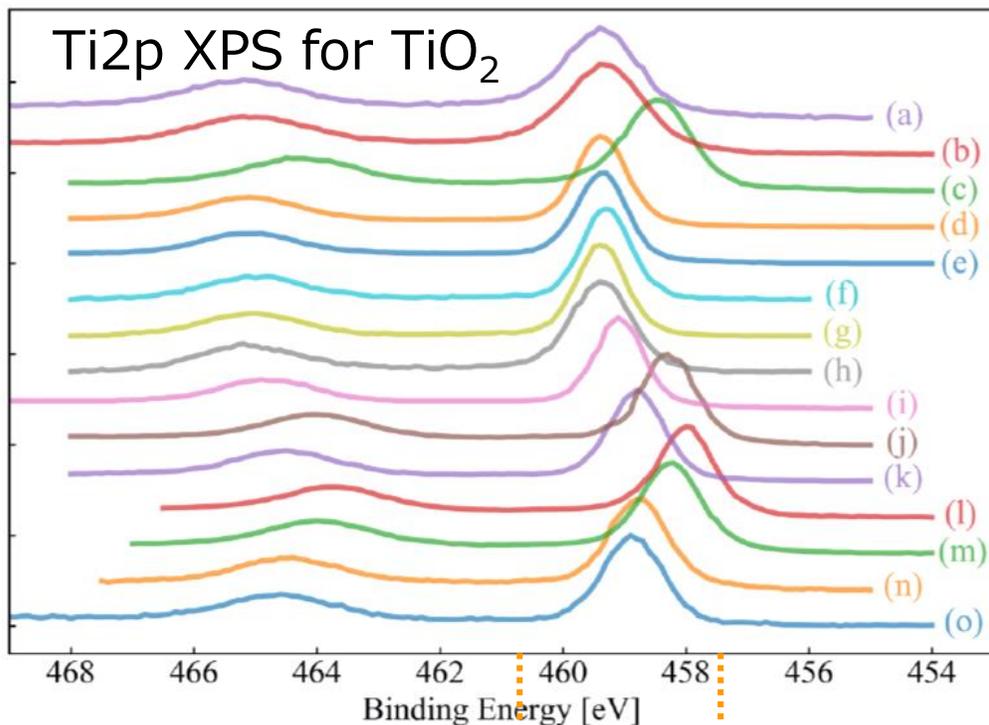


NIMSのDPFCを利用

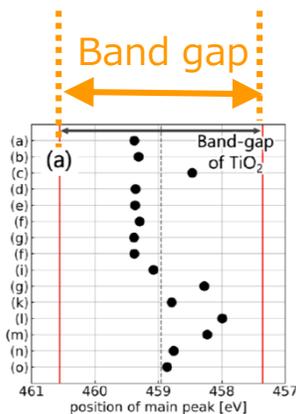


利活用可能なデータベース構築

なぜ、キュレーションが必要なのか？



15種の文献にあるTiO₂のTi2pXPSスペクトルデータ



スパッタ製膜法



パルスレーザ堆積法

製膜方法や条件で同じ材料でも結果が異なる

成長条件や周辺条件も記録する必要がある。

**データの視覚化が材料を理解するきっかけとなる。
気づきが生まれる。**

2021年秋季応用物理学会シンポジウム「データの蓄積と共有がもたらす革新と課題 ～マテリアルズインフォマティクスを中心に～」
吉川 英樹, 松波 成行「材料研究データの収集・判読化・高付加価値化のワークフローを自動化したデータプラットフォーム」から引用

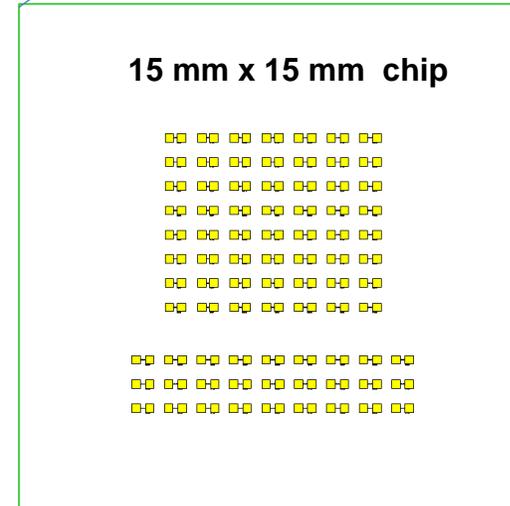
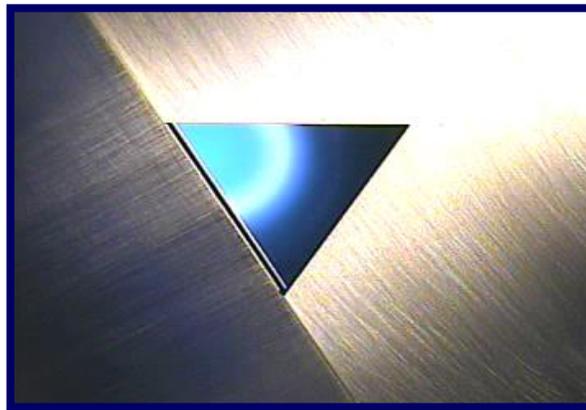
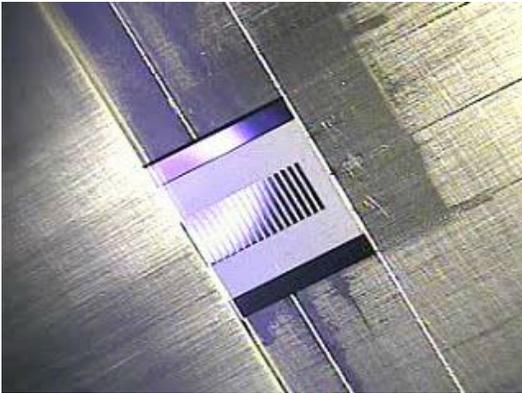
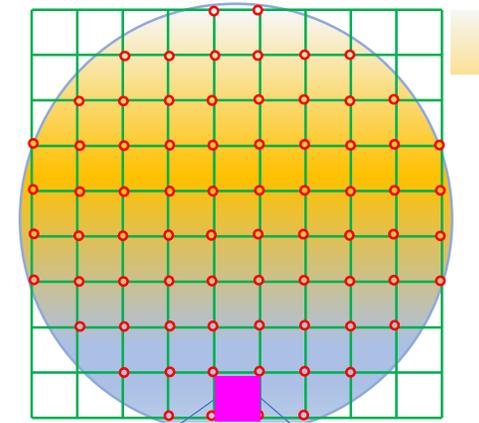
ハイスループット合成で周辺データをつくる。



コンビナトリアルスパッタ装置

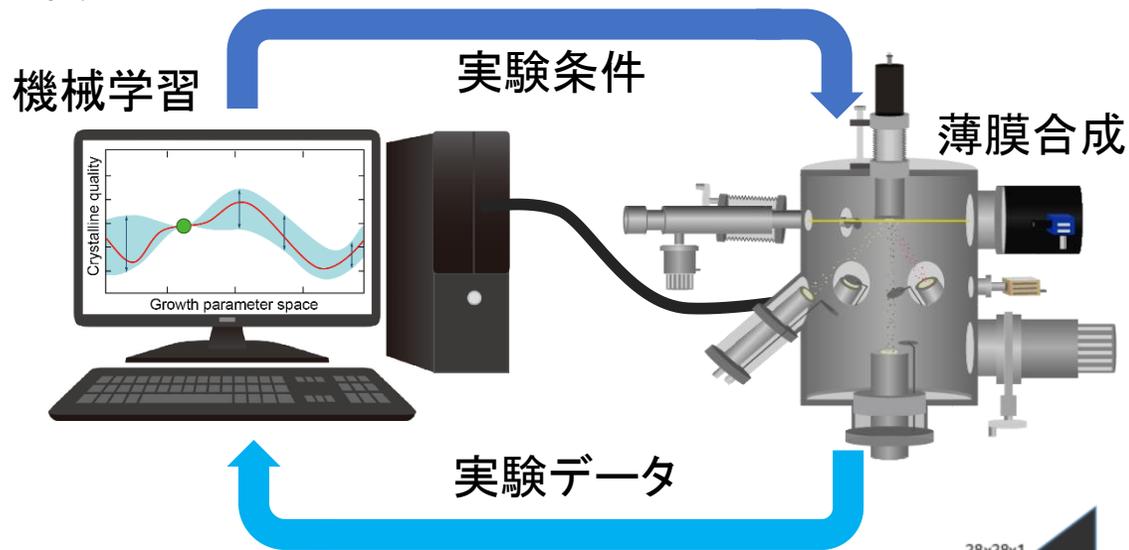


組成傾斜膜



電気伝導性（イオン電導性）計測パターン

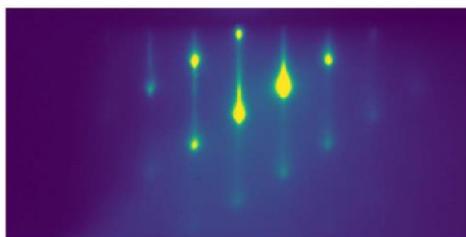
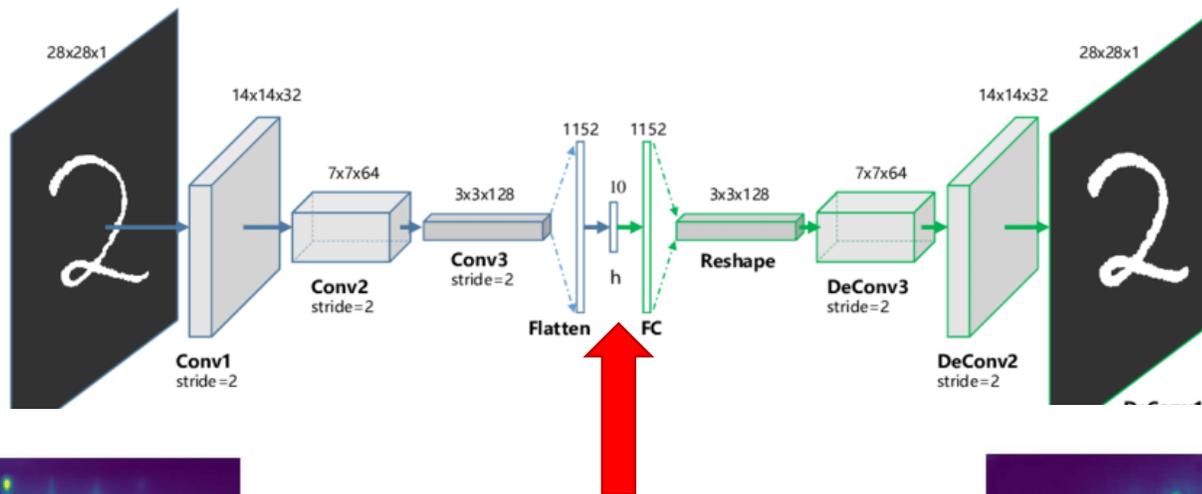
合成条件の最適化・高速化



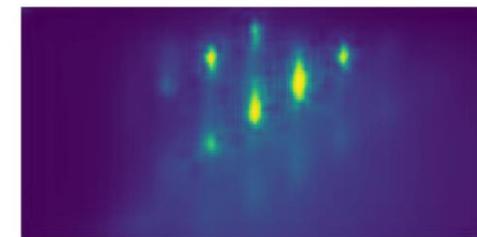
成長条件のベイズ最適化 (NIMS 大久保勇男)



成長の条件探索の高速化
ニューラルネットワークの適用
東京大学 Mikk Lippmaa

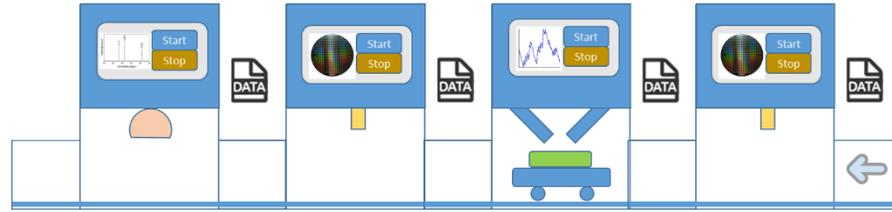
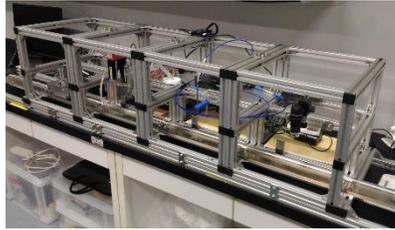


Minimize the number of descriptors here.

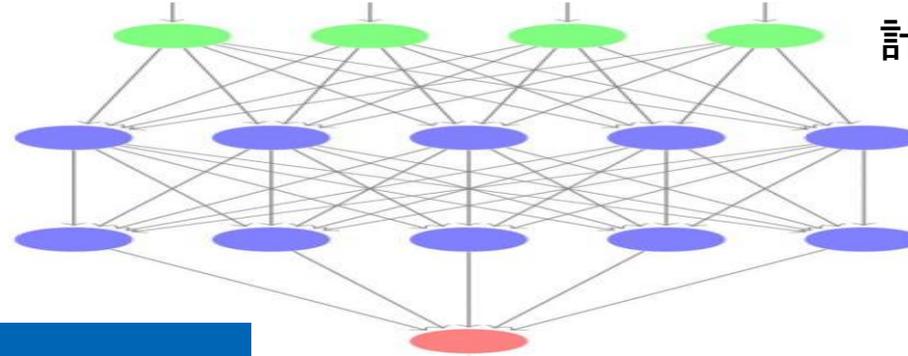
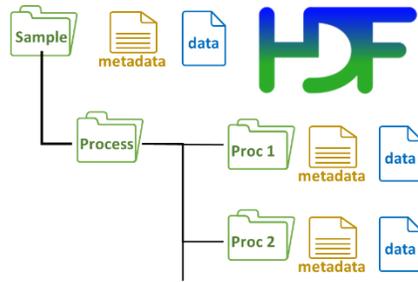


ハイスループット計測 + 自動化でデータ蓄積を加速

機械学習の利用を前提とした多様な特徴量データを生成する自動測定装置



形状・光学特性
電気特性・磁気特性
電子特性・組成
構造 など



計測・解析結果 = 特徴量

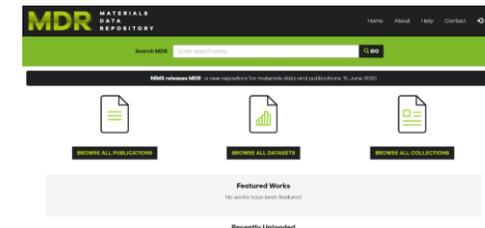
機械学習

材料開発

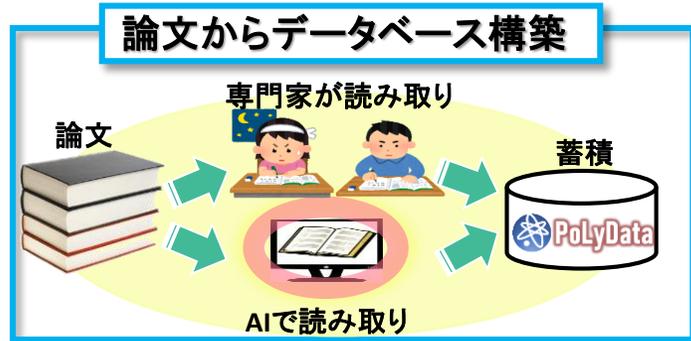


柳生進二郎
(NIMS)

マテリアル
シーケンサー



データをつくる



- 谷藤：機能材料. Vol. 40, No. 10 (2020) pp. 4-16.
- 松波、松田、知京、原田、吉川：情報処理学会トランザクションデジタルプラクティス Vol. 2 (2021).

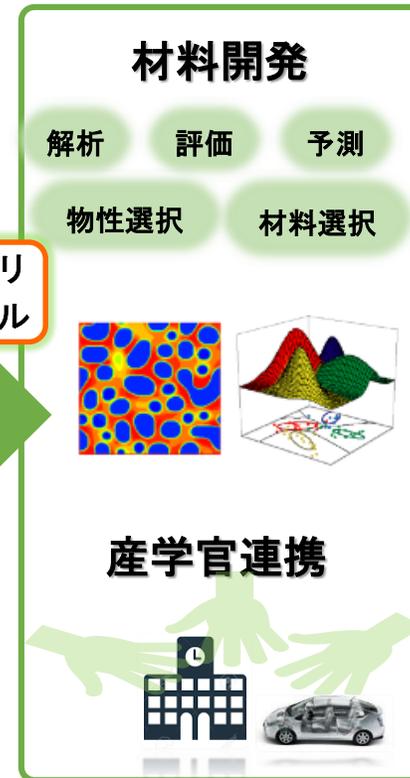
データをためる



- Dieb、石井 他：J Appl Phys Vol. 128 (2020) 074901.
- Daほか：Sci. Report (2021) 5954.
- 谷藤、吉川：情報処理学会トランザクションデジタルプラクティス Vol. 2 (2021) Apr.

2021年秋季応用物理学学会シンポジウム「データの蓄積と共有がもたらす革新と課題
谷藤幹子「DICEにおけるデータの蓄積と信頼性」から引用

データをつかう



データを公開する



- Dieb、石井 他：STAM Methods Vol. 1 (2021).

データ科学チーム



木野日織



小山幸典



山崎裕一



福島鉄也 (東大柏)

キュレーションチーム



長田貴弘



柳生進二郎



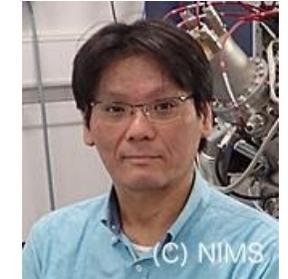
高橋有紀子



吉武道子



大久保勇男



桑田直明



Mikk Lippmaa (東大柏)



森 泰蔵 (東大柏)

まとめ：

- データ科学グループは材料開発のためのマップ作成を目指す。
- データ作成・蓄積とキュレーションを通じて信頼性のあるマップ作成の手法を確立する。
- NIMSのデータプラットフォームとの連携を進め、効率的なデータ収集をすすめる。
- 各グループとの連携をすすめ、データ科学を使った材料科学の理解を実現する。