

## データ駆動型材料研究による新物質・新材料の合成事例

Data-driven development of new materials

伊藤 聡 ITOH.Satoshi@nims.go.jp

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点

現在、データをもとに機械学習や数理統計などを使って新物質・新材料を設計・合成する動きが急速に高まっているが、特性予測あるいは安定性予測と、合成可能性の予測とは別であり、合成法・作成法が分からないということが起きる。ここではデータ科学的アプローチによって新機能材料を実際に合成した事例を紹介する。

結晶構造データベースには自然界に存在する物質の結晶構造が収集されているが、その物性が十分に分かっているわけではない。そこで、無機材料データベース AtomWork-Adv から単位胞の大きさや構成元素などに制限を加えて1600物質を抽出し、電子構造計算によって高圧下で金属化する半導体材料を15物質、見出した。これらは超伝導転移する可能性がある。その中から  $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$  を選び、ダイヤモンドアンビルを使い、高圧をかけたところ、20.2GPa で  $T_c=2.5\text{K}$  の転移温度を持つ超伝導体を得られた。さらにこの物質は42.9GPa 下で  $T_c=5.9\text{K}$  の転移温度を持つ別の超伝導体に転移することも分かった。<sup>1)</sup> このようにデータベースを用い、計算と実験をうまく組み合わせることで新機能材料を効率的に探索・スクリーニングすることができる。

データ科学を適用する上で、データの存在は前提であるが、物質・材料に関してはデータ量の少ないことが大きな課題となっている(スモールデータ問題)。これを乗り越える一つの方向性について紹介する。高熱伝導性高分子材料の探索を考える。高分子の物性はモノマー構造だけでなく、高次構造によって決まるし、重合度分散などさまざまな要因でその物性は決まると考えられているが、高分子に関する物性データは非常に限定的なものしか得られていない。熱伝導を設計対象の特性とするのであれば、さまざまな高分子の熱伝導度のデータを使い、構造と熱伝導度の関係を機械学習によってモデル化する必要があるが、そもそも高分子の熱伝導度は高分子データベース(PolyInfo)にも数十点しか収集されていないため、学習モデルを作ることが困難である。一方、高分子ではガラス転移温度  $T_g$  や融点  $T_m$  はかなりのデータ数が収集されている。そこで、まずモノマーの分子構造と  $T_g$  や  $T_m$  との関係を学習したモデルを構築し、この学習モデルに、少ないデータ数しかない熱伝導度のデータを、追加学習させて、熱伝導と分子構造の関係を記述する学習モデルを構築した。このような或るデータセットで学習した機械学習モデルに、別のデータセットを追加的に学習させる方法を「転移学習」という。転移学習はデータセット間の関係を陰に考慮する手法であって、数十点しかデータ数

のない熱伝導度に関してはよい学習モデルを構築することが出来た。この学習モデルを使い、高熱伝導性の分子構造を確率的に予測することができる。機械学習モデルは多数の候補を発生するが、その中から高熱伝導性への寄与や合成可能性の観点からスクリーニングし、3種類の新規モノマー分子を選定した。これは実際に収率97%で合成でき、熱伝導率  $\lambda=0.4\text{W/Km}$  という高分子としては高い熱伝導度を示した。<sup>2)</sup> 材料データが少ないことはデータ科学的には難しい課題であるが、一方で物質・材料は熱伝導度、電気伝導度、光学的特性、磁気特性など多様な特性を示す。その特性間の関係は物性物理学的に理解できるはずであるが、要因が複雑に絡み合っているため、そこには踏み込まず、まずは転移学習を適用することで新機能材料の設計・合成を行うことが出来る。その一方でなぜ、設計できたのかを理解することは重要である。分子構造-ガラス転移温度の機械学習モデルを分子構造-熱伝導度のモデルに転移できたのは、どちらも原子間ポテンシャルが主要因であるからのように、物性物理の立場からは思われる。

データ科学は具体的な物質開発に寄与する段階に入りつつある。同時に、プロセス設計や計測解析も高速化する必要がある、この面でもデータ科学の適用が始まっている。

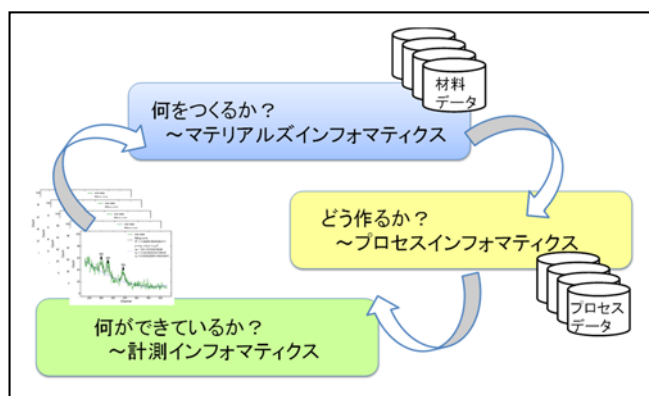


図 物質・材料研究におけるデータ駆動型科学

【関連プロジェクト】

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>)

【参考文献】

- [1] Matsumoto, R. et al. Appl. Phys. Express 11 093101 (2018).  
 [2] Wu, S. et al. npj Comput Mater 5, 66 (2019)

【関連WEB】

- [1] <https://www.nims.go.jp/MI<sup>2</sup>-I/index.html>