

NIMSデータ駆動型研究成果事例

物質・材料研究機構

橋本 和仁

マテリアルデータプラットフォーム事業

研究所の特性を活かしたプラットフォーム戦略

データをつくる

論文からデータベース構築



実験データの自動収集 -スマートラボトリー化



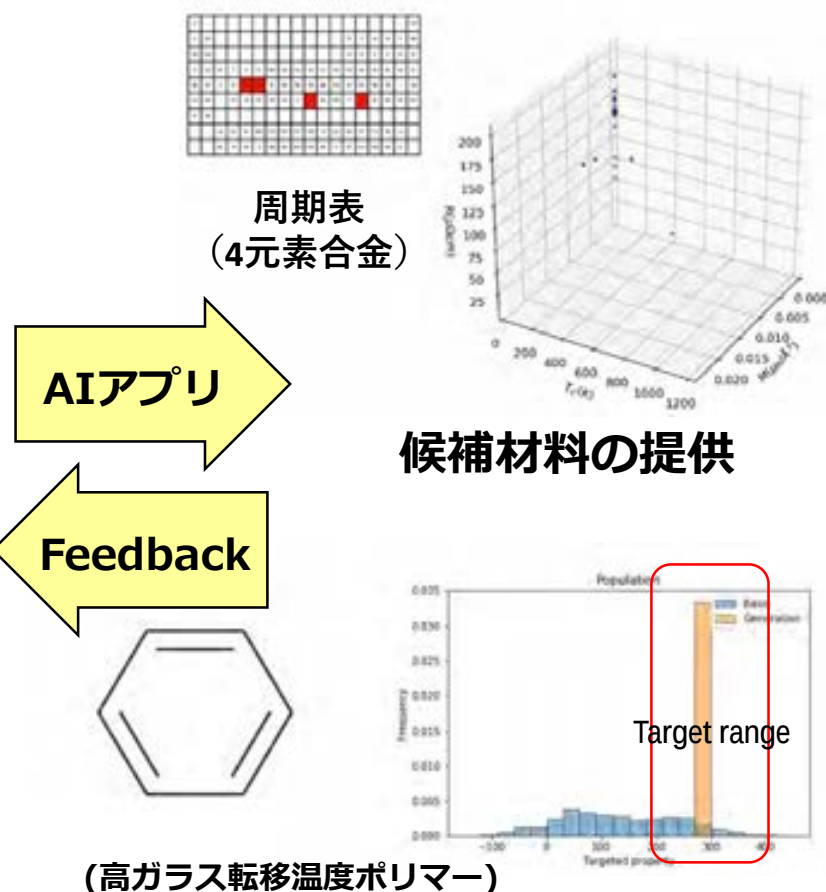
データをためる

集めたデータを 統合・機械可読化



大容量・高速解析 クラウド・サーバ

データをつかう



AIアプリ

Feedback

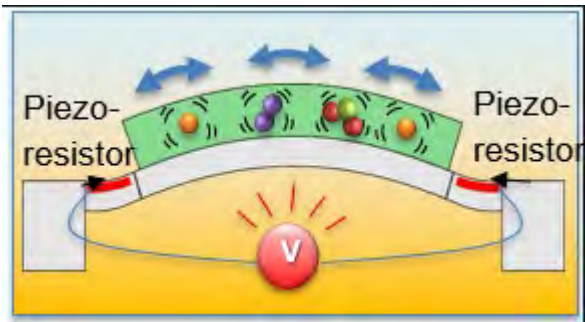
(高ガラス転移温度ポリマー)

ターゲット機能を持った材料の設計 2

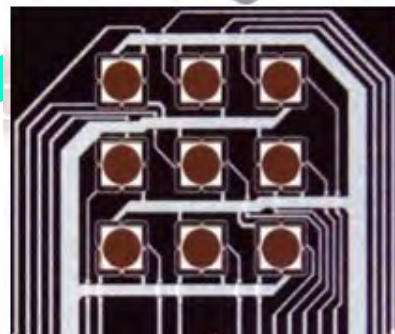
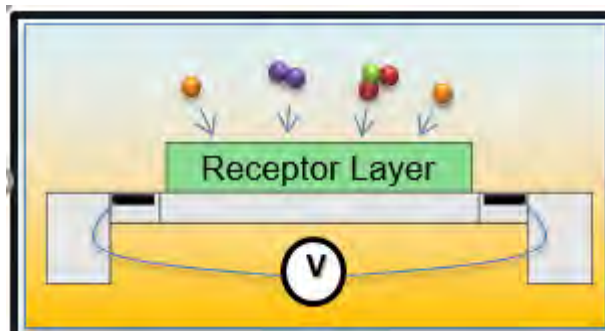
- 1. データベースを使ってデータ解析**
- 2. データベースを使って新規物質合成
(スマートラボラトリー)**

嗅覚センサーによるにおいの自動判別

フィジカル領域
【嗅覚センサ】



応力発生 ↑ におい分子

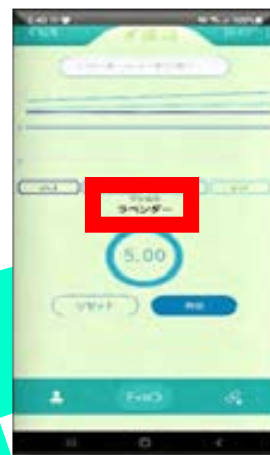


サイバー領域
【クラウドサーバー】



データ連携基盤

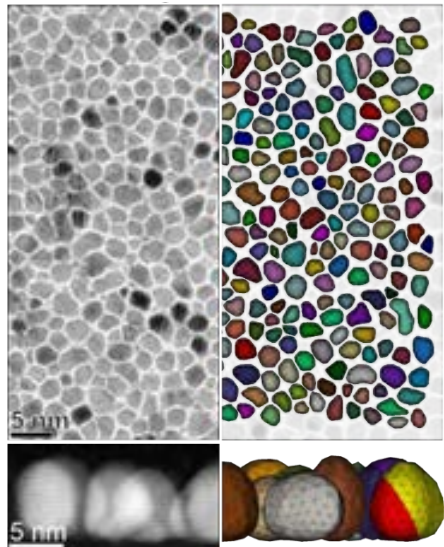
ニオイ
判別結果



https://drive.google.com/open?id=1NhsH-AsIWc5IQnbkKyBO80uo-j9PSlpJ&authuser=genkya10%40gmail.com&usp=drive_fs

TEM画像データから磁気特性を予測

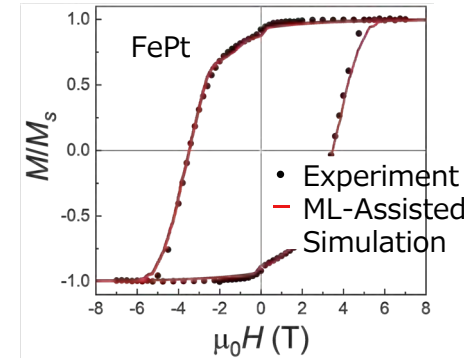
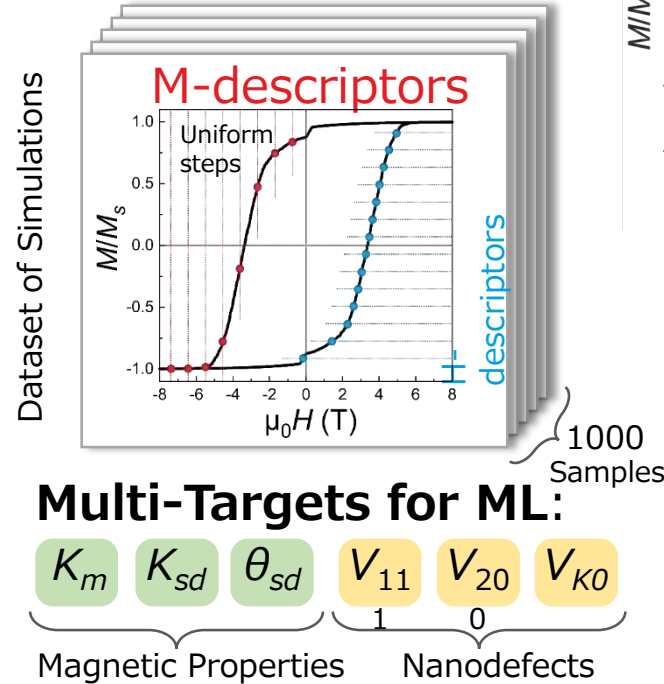
TEM画像ベースのマイクロ マグネティック計算



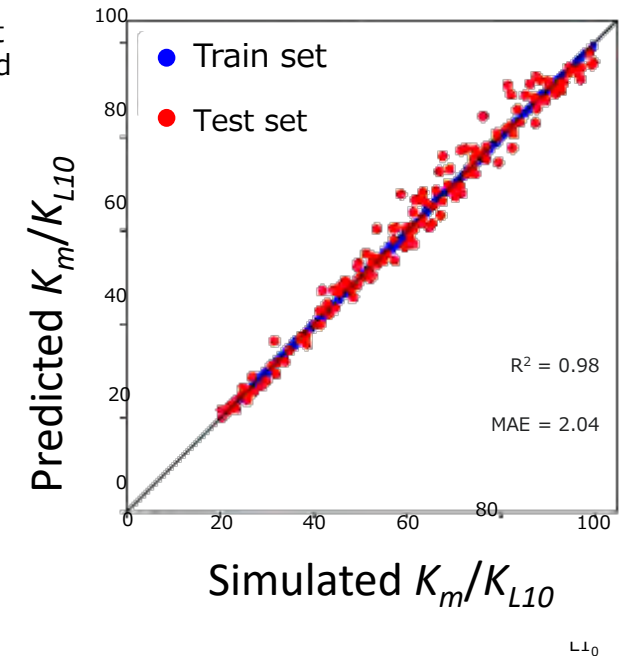
TEM像

FE Model

機械学習



FePtナノ粒子媒体 の特性予測



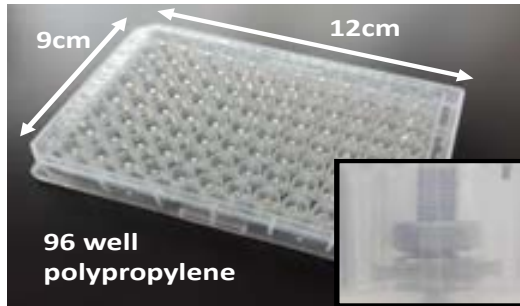
- 熱アシスト磁気記録方式(HAMR)のFePtナノ粒子媒体中に存在する欠陥をTEMで同定し、画像をデジタル化することにより有限要素モデルを作製
- マイクロマグネティック計算で磁化曲線をシミュレートする課程で、**各種欠陥の体積分率による磁気特性変化を機械学習**

1. データベースを使ってデータ解析
2. データベースを使って新規物質合成
(スマートラボトリー)

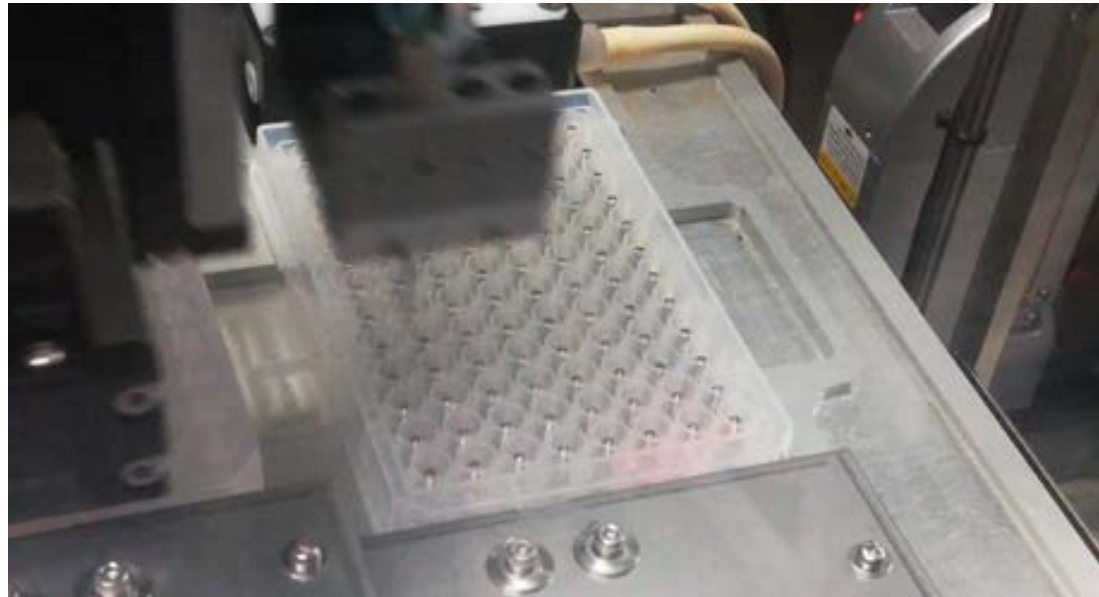
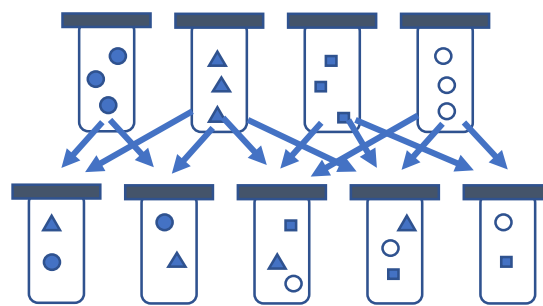
二次電池電解液開発

:データ駆動型電気化学自動実験システム

マイクロプレート型
電気化学セル



電解液のコンビナ
トリアル合成



1000サンプル/日

ロボット自動実験



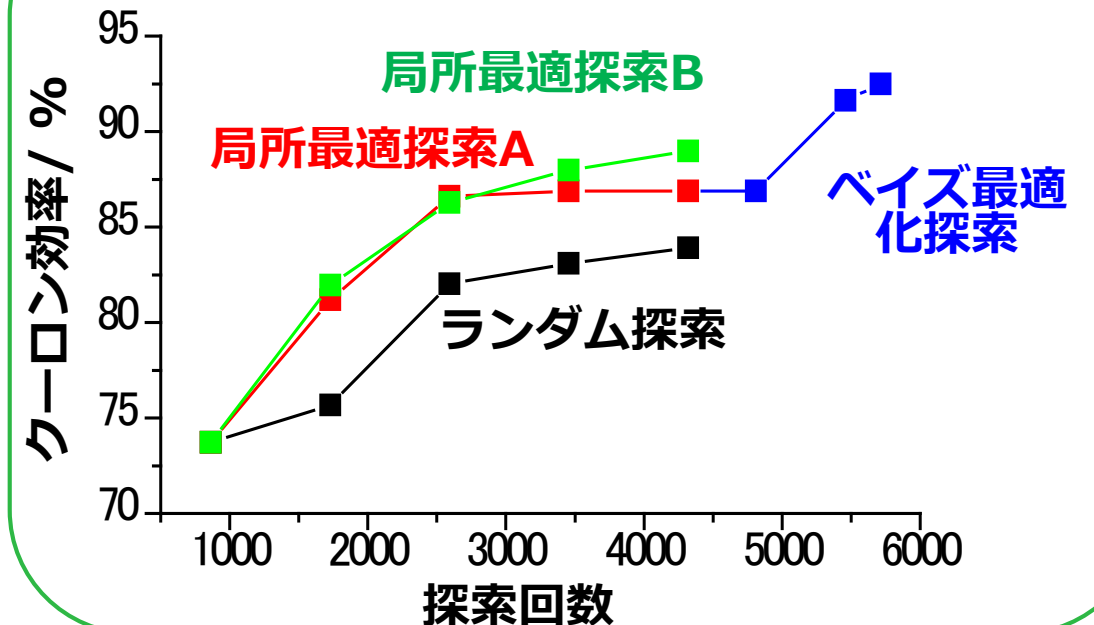
データ

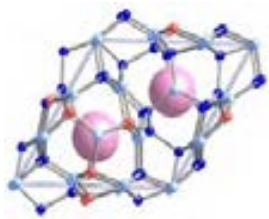


実験計画

データ蓄積・AI解析

開発した電解質の性能



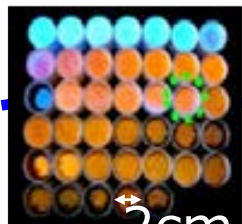


SiAlON蛍光体開発

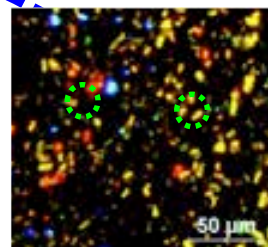
原料混合、焼成



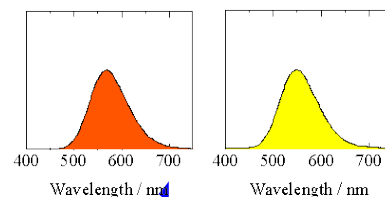
粉末生成物



単結晶混合物
(顕微鏡拡大像)



自動PL測定



単粒子診断法

実験データ



自動結晶構造解析

組成 $A_aB_bC_cD_dY_yZ_z$

文献データ



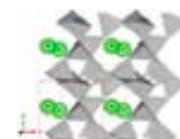
候補提案



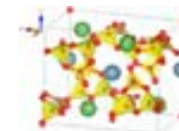
蛍光体市場（世界）における
サイアロン蛍光体のシェア

約30%（約500億円）
（2010年推定値）

スマートラボ化により探索
速度を10倍に加速



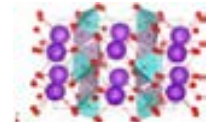
$SrSi_7N_{10}$



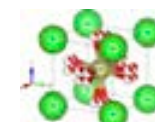
$La_2CaB_{10}O_{19}$



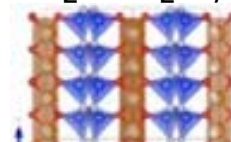
$LaSi_9Al_{16}N_{29}$



$K_2ZnP_2O_7$



$SrHfO_3$



$Cs_2Na_2Sr(B_9O_{15})_2$

データ活用により多くの新規
蛍光体の発見が可能に

参考資料（その他事例）

NIMSにおけるデータ駆動型研究に係るこれまでの取組（１）

これまでNIMSにおいて、データをつくる・ためる・つかうを自動化・高速化し、材料開発を飛躍的に加速する取組を実施



成果事例 1：断熱性無機薄膜

① 機械学習モデル作成

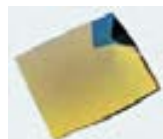
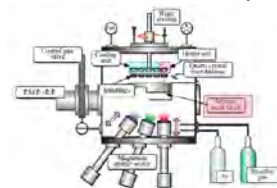
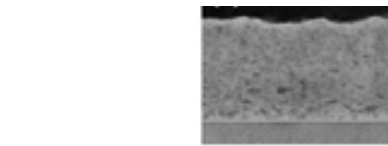
NIMSのAtomWork（無機材料データベース）の論文86報のデータ（データポイント1,317点）から界面（性質が異なる2つの物質が接する境界）の熱抵抗を予測する機械学習モデルを作成。

② 材料の組み合わせを選択

293種80,000通りの中から、界面の熱抵抗が大きく、作製可能な材料の組み合わせとしてBi/Si（ビスマスとシリコン）を選択。

③ 成膜実験

NIMS独自開発の精密制御自動成膜装置を利用し、Bi/Siの薄膜を作製。



世界最小の熱伝導率0.16W/m・Kを示す無機薄膜を発見！
既存熱遮蔽コーティング材YSZに比して5倍以上の断熱性能。

Wu et al., npj Computational Materials, 5, 56 (2019)

成果事例 2：メタノール燃料電池用触媒

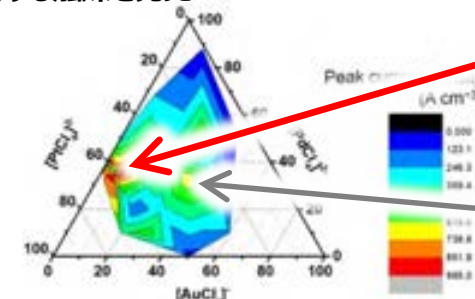
① 初期実験

17回の初期実験を行い、白金（Pt）、パラジウム（Pd）、金（Au）の3種元素の合金触媒によるメタノール酸化効率のデータを取得。

② 機械学習と検証実験

3種元素の配分比率 5150通りの組み合わせから、機械学習の一手法であるベイズ最適化により候補10点を予測し、実験で効率性を検証。これを3サイクル（実験30回）実施。

合計47回の実験（従来手法の1/100以下の実験回数）で最高性能を有する触媒を発見！



**Au極少量の組合せ
Pt: Pd: Au=59: 40: 1を発見
従来比1.4倍の活性**

従来は
Pt: Pd: Au
同分量あたりが
良いとされてきた

Nugraha et al. J. Mater. Chem. A 8, 13532 (2020)

NIMSにおけるデータ駆動型研究に係るこれまでの取組（2）

材料の組合せ/機能のデータ

AIによる解析

得られた/想定される成果

超耐熱合金

- 合金には、多種類の金属元素と無数の組成比の組み合わせが存在。



- NIMSは40年間にわたって、**組成比/金属の寿命**に関する高品質データを蓄積。

(例) 元素の組成比 機能

	ニッケル	アルミニウム	クロム	破断時間
サンプル1	0.52	0.36	0.09	713
サンプル2	0.52	0.36	0.05	1222
サンプル3	0.49	0.37	0.05	820



- NIMSの蓄積したデータを基に、**AIが、最も性能を発揮する、金属元素と組成比の組み合わせパターンを予測・提案。**

- AIに提案された混ぜ方で試作・評価



AI提案

試作・評価



- NIMSは、最適な材料・配合比の算出で、**世界最高性能の耐熱タービン**を実現。

- ロールス・ロイス社製ジェットエンジンの標準部品として採用され、**1機あたり約1億円/年の燃料費削減に貢献。**



大容量・低消費電力メモリ

- 次世代の半導体メモリとして期待されているMRAMは、40以上の層を重ねた複雑な構造。

- NIMSは、ロボットによる自動化により、高品質な**積層の組合せ/磁気特性データ**を高速で創出。



ロボットによる自動化



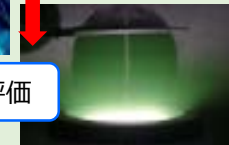
- NIMSが開発したAIに大量の**積層の組合せ/磁気特性データ**を入力し、**AIがより高性能な薄膜の重ね方を提案。**

- AIに提案された薄膜の重ね方で試作・評価



AI提案

試作・評価



- 実験の自動化による高速なデータ取得と機械学習の相乗効果により、従来なら**人間の手で最適解を導くのは事実上不可能な積層の組合せ探索の30倍高速化を想定。**

- 現行DRAMに比べて**消費電力が数分の1、記憶容量100倍以上の大容量・低消費電力メモリの実現を目指す。**

