



National Institute for Material Science



# 実験研究者からみたMi²i

国立研究開発法人 物質・材料研究機構  
統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)  
情報統合型物質・材料研究拠点 (CMi2i)  
副拠点長 知京豊裕  
([CHIKYO.toyohiro@nims.go.jp](mailto:CHIKYO.toyohiro@nims.go.jp))

2020.2.19 Mi2i最終報告会資料

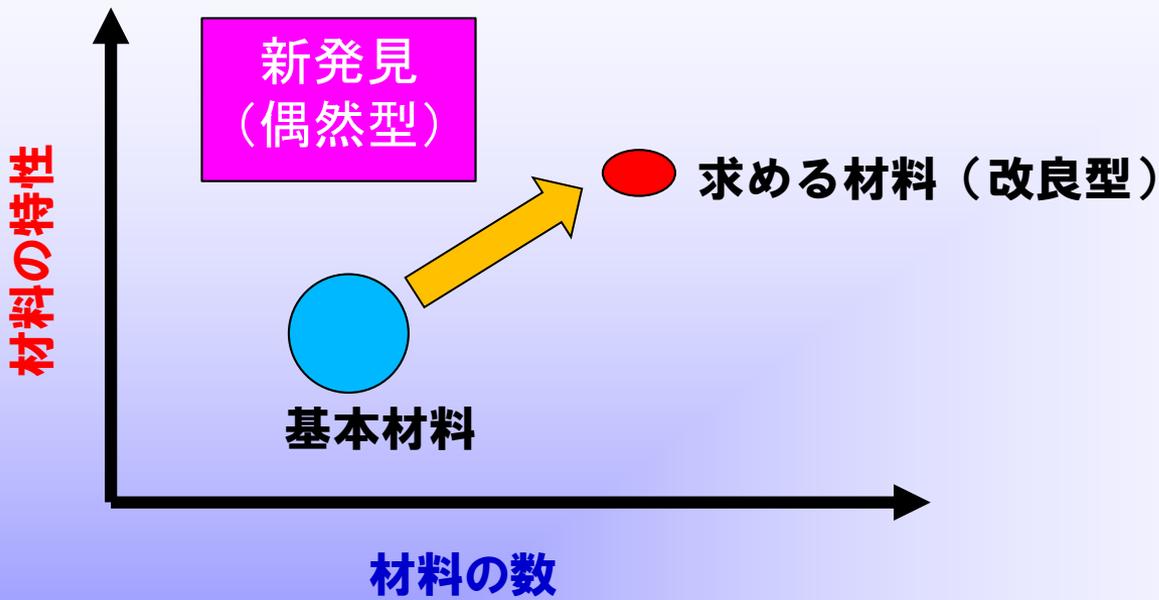
# 実験研究者からみた *Mi2i*

広大な材料データ空間

*Mi2i*の示した方向性



# なぜ、新材料の発見は難しいのか？



基本材料 → 基本材料 + A → 基本材料 + A + B → 基本材料 + A + B + C

A: 特性改善  
他の改悪

A: 特性改善  
B: 他の改悪の改善  
別の特性劣化

A: 特性改善  
B: 他の改悪の改善  
別の特性劣化  
C: 別の特性劣化の改善

$$A > B > C$$

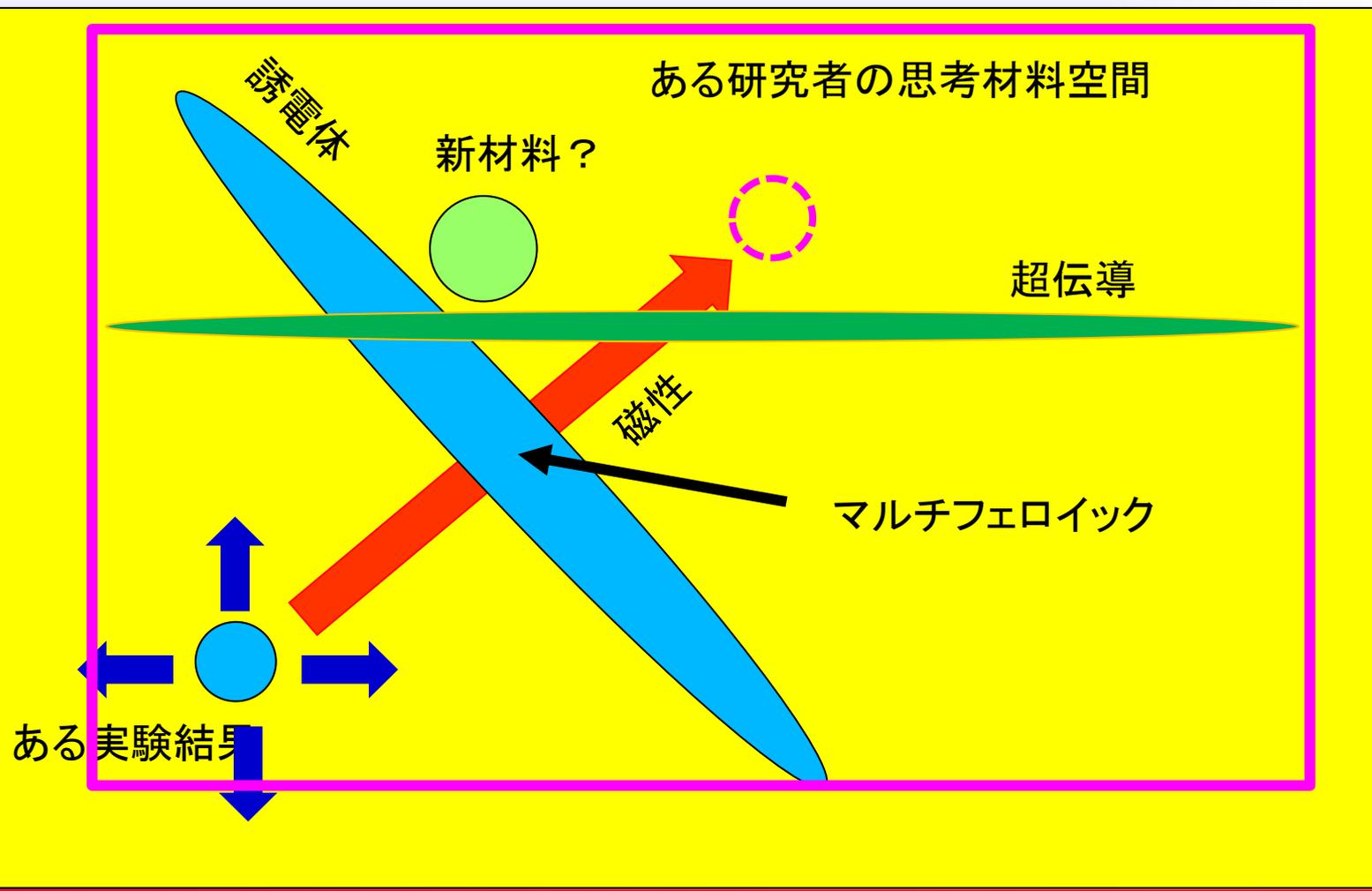
# 優れた材料研究者はどのように思考するのか

National Institute for Material Science



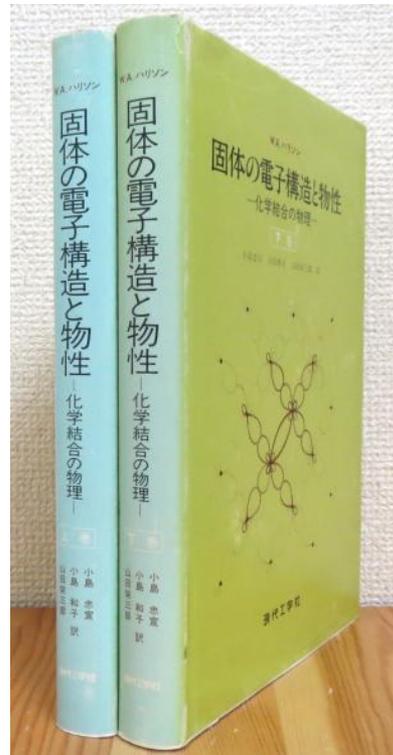
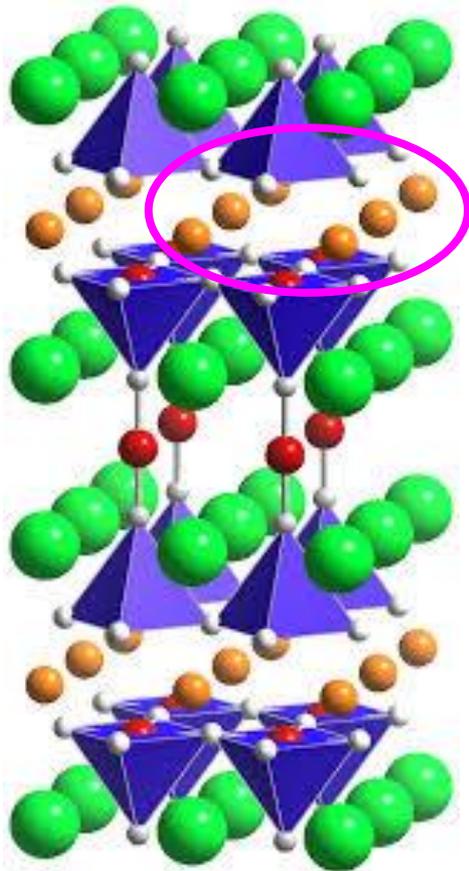
パラメータX

例：ペロブスカイト酸化物

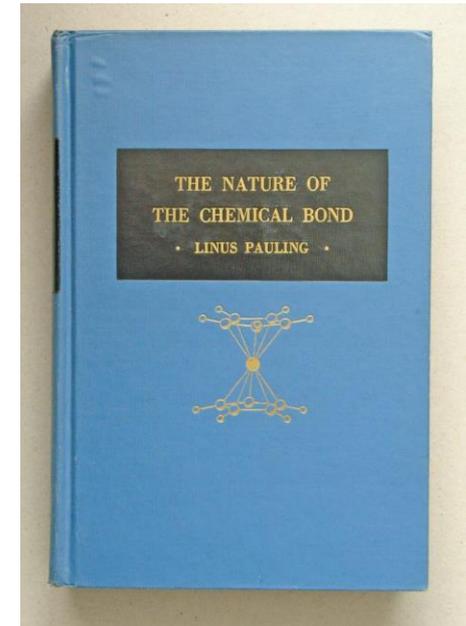


パラメータY

# 材料設計の勘所: 結晶の構造に注目するが...



W.A Harrison: 固体の電子構造と物性  
強結合近似

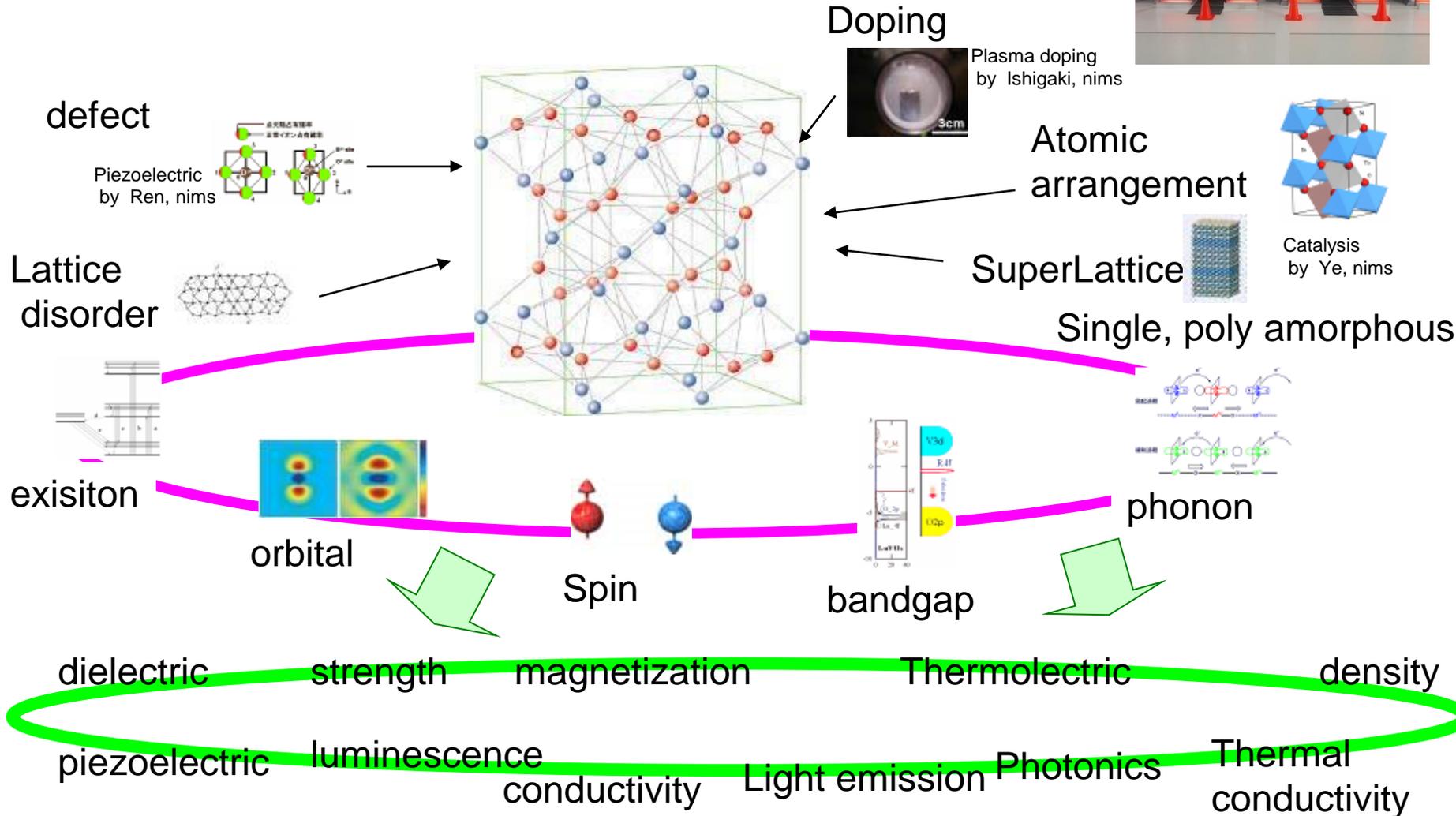


L.Pauling: 化学結合論  
電気陰性度

# New materials discovery by "Computation"

Points: Materials are reviewed by "Lattice and elements"

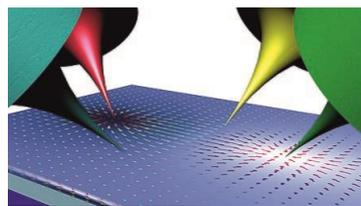
NIMS is involved in "Phase" development



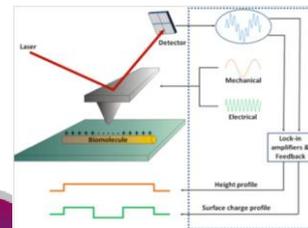
Design new materials which does not exist before

# いかに材料データ空間を広く探索するか： High Throughput挑戦

First Screening  
(Wide range)

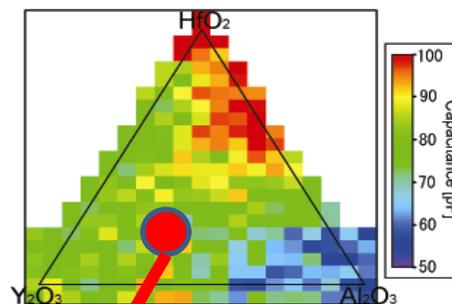


各種走査型  
プローブ顕微鏡

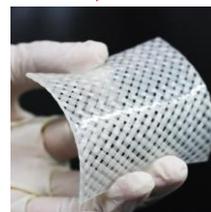
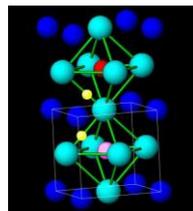


First  
Screeningに  
膨大な時間と  
コストが発生

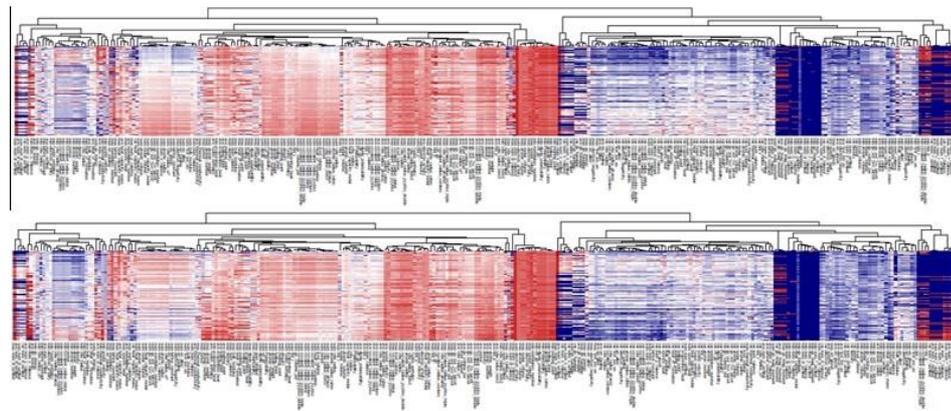
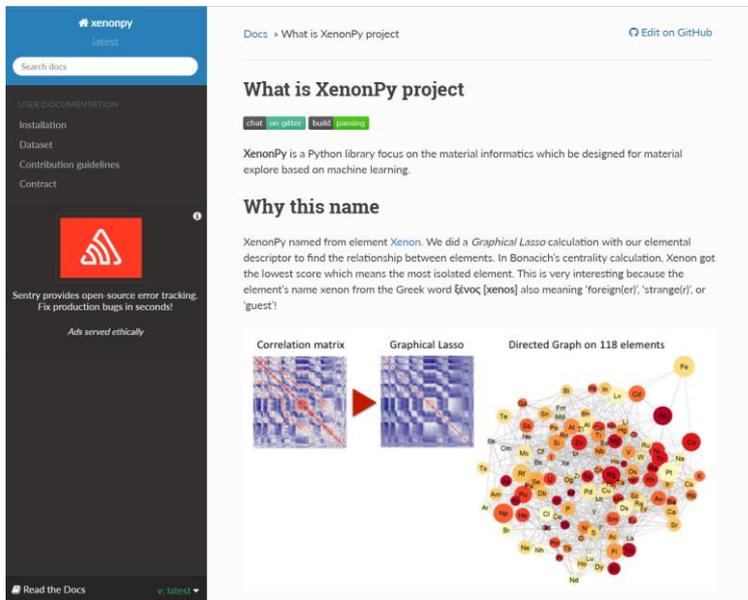
Second Screening  
(Narrow range)



New Materials  
Discovery



# 物質・材料記述子ライブラリーの開発

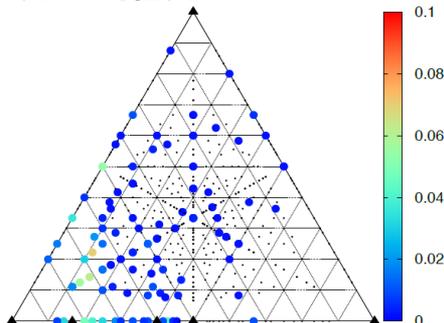


## 記述子ライブラリーの自動作成

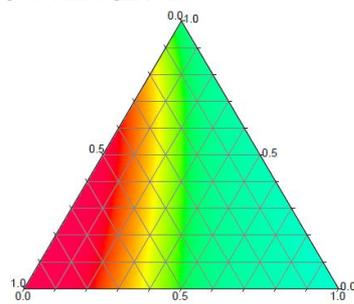
統計数理研究所、吉田亮先生、NIMS小山幸典  
が開発したライブラリー（Python 対応）

機械学習を用いた物性推定

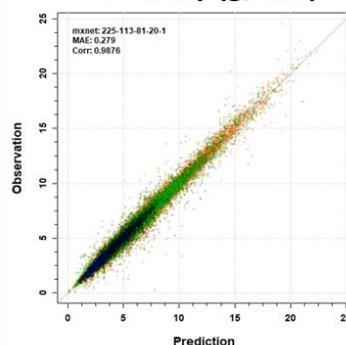
安定性推定



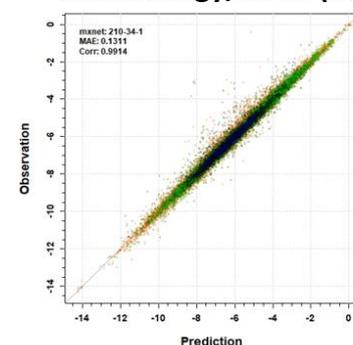
物性推定



Density (g/cm<sup>3</sup>)

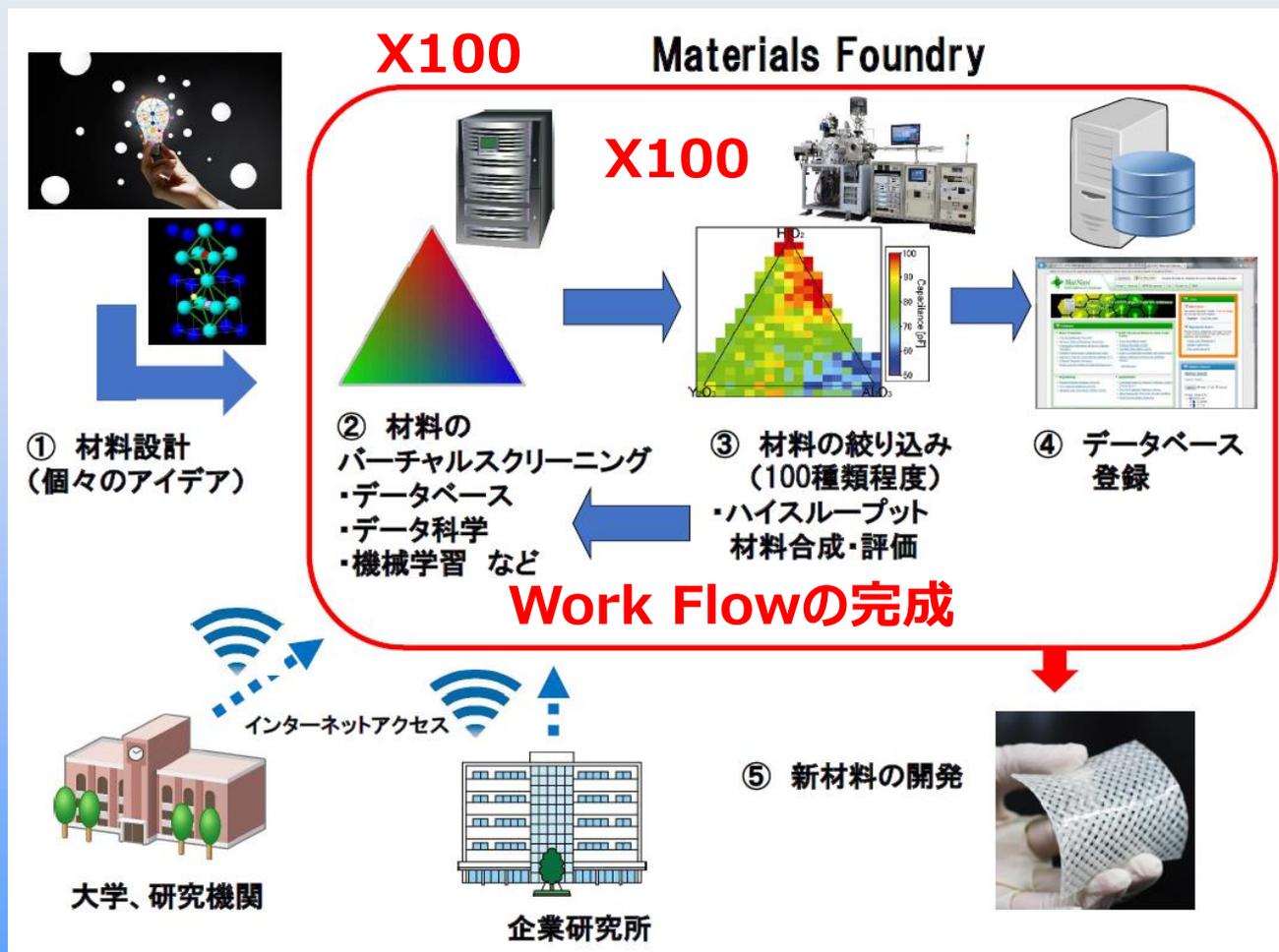
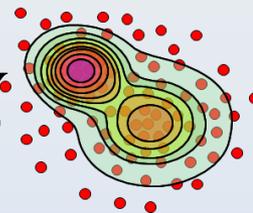


Final energy/atom (eV)



機械学習を用いた新規材料探索

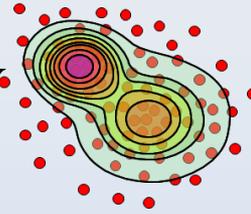
# 材料開発を加速するMaterials Foundry MATERIALS FOUNDRY



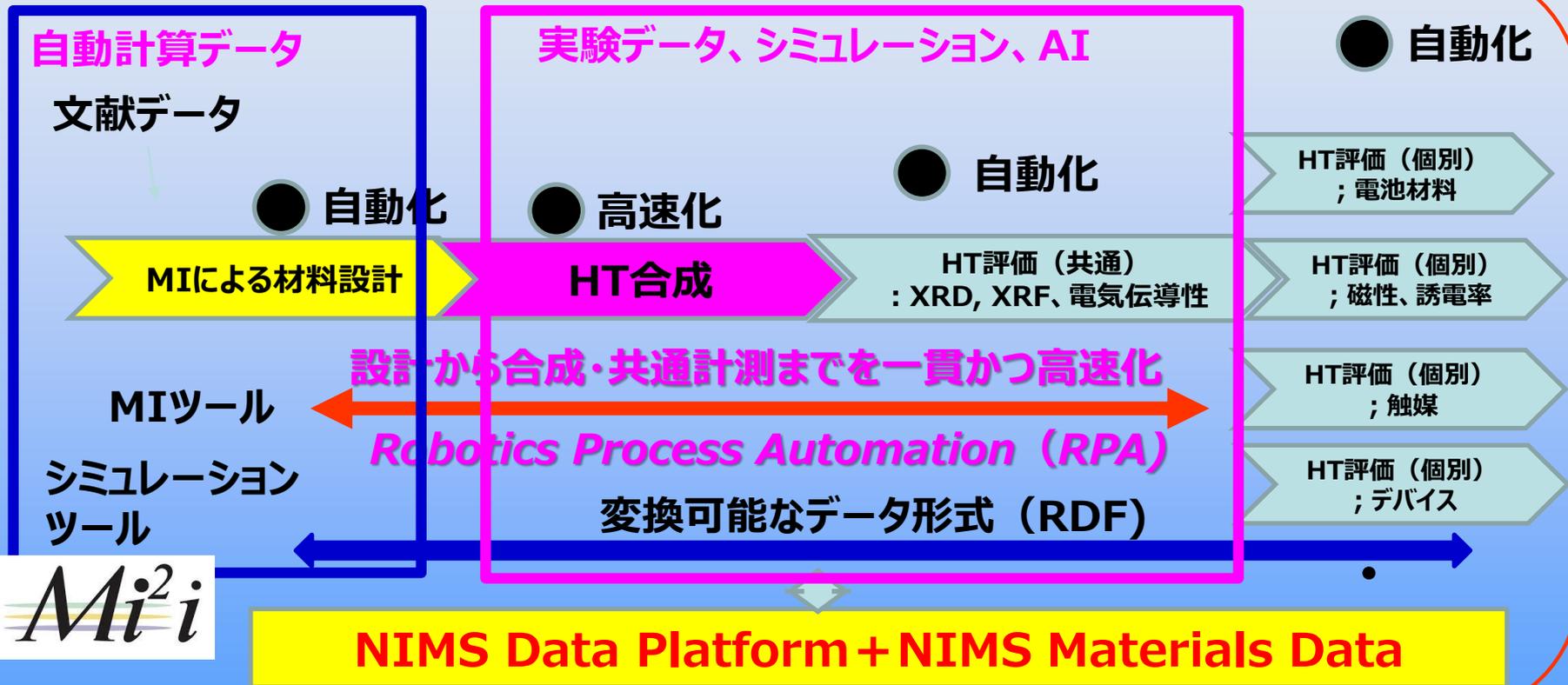
マテリアルズインフォマティクスと、ハイスループット合成・評価の自動化により、  
材料のスクリーニングを加速して新材料の発見につなげる。

(JST 未来社会創造事業「共通基盤」領域 Materials Foundryのための材料開発システム構築と  
データライブラリー作成)

# 材料設計から合成・計測まで One Stop 化 MATERIALS FOUNDRY



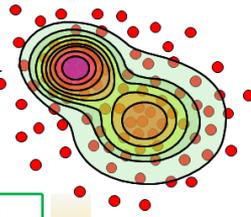
MI: マテリアルズインフォマティクス HT:ハイスループット



特徴:

- MIによる材料設計から合成・評価まで一貫した体制は => One Stop Foundry
- 共通データ形式 + データ蓄積の加速 => 機械学習の精度向上 => ユーザの増加  
=> 共通データの蓄積…… 相乗効果

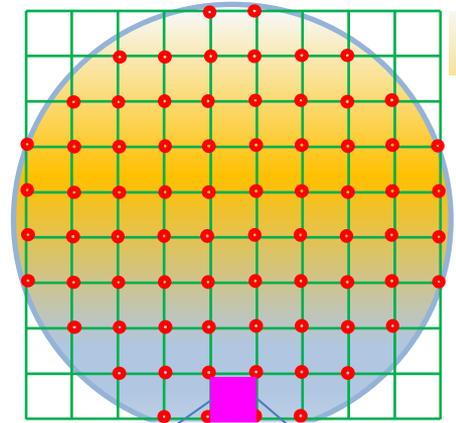
# ハイスループット合成 MATERIALS FOUNDRY



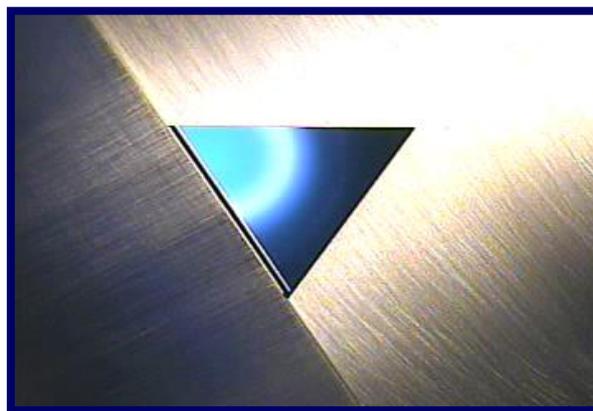
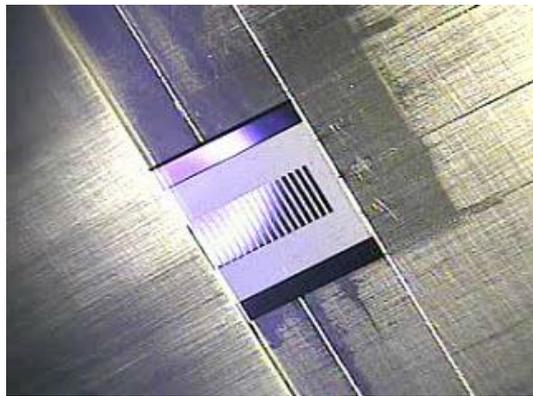
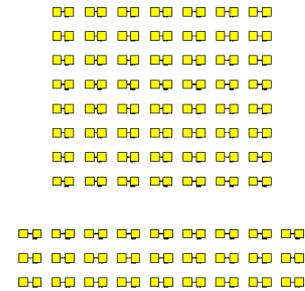
コンビナトリアルスパッタ装置



組成傾斜膜



15 mm x 15 mm chip

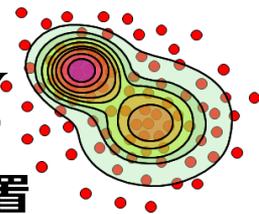


電気伝導性 (イオン電導性) 計測パターン

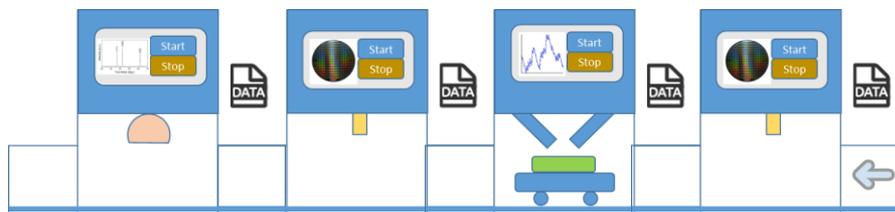
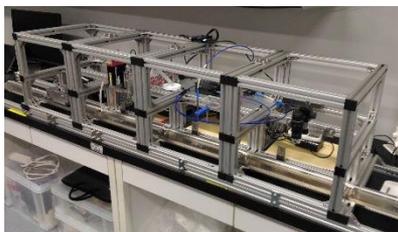
# 多変量簡易自動測定装置 (マテリアルシーケンサー)

NIMS 柳生進二郎

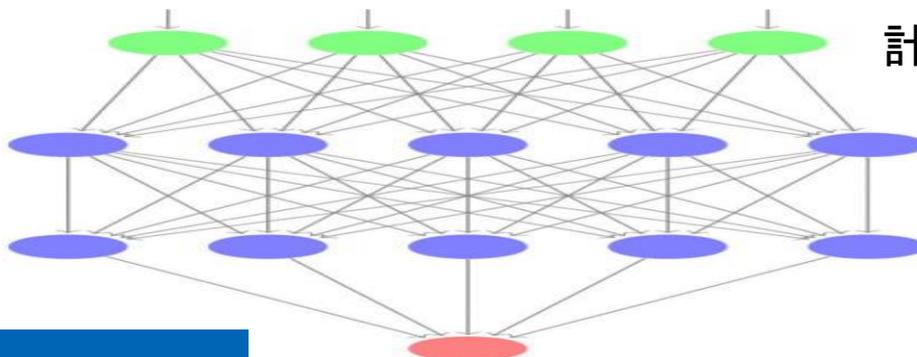
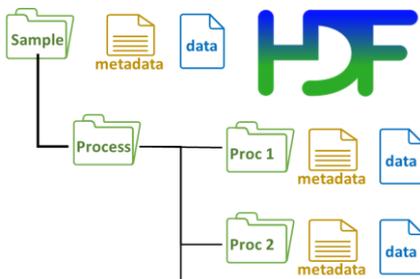
MATERIALS FOUNDRY



## 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

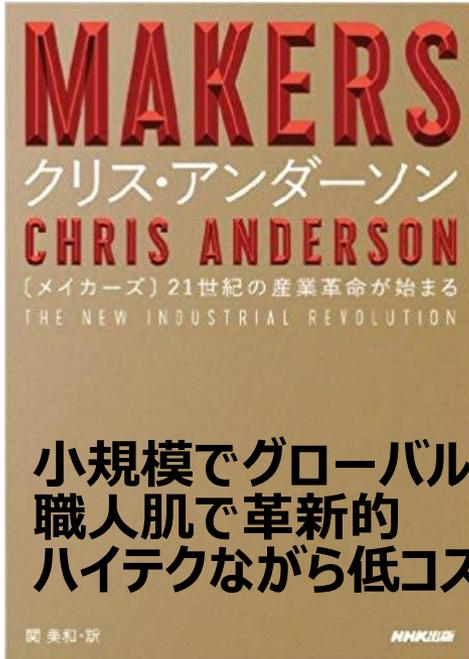
機械学習

転位学習へ

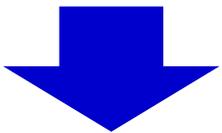
マテリアル  
シーケンサー

M-DataC  
Materials Data Conversion Tools

# マテリアルズインフォマティクス後の世界の潮流



- 小規模でグローバル
- 職人肌で革新的
- ハイテクながら低コスト



- 人工知能
- オープンハードウェア
- 自動化
- クラウド
- マニファクチャリング



MATERIALS DISCOVERY

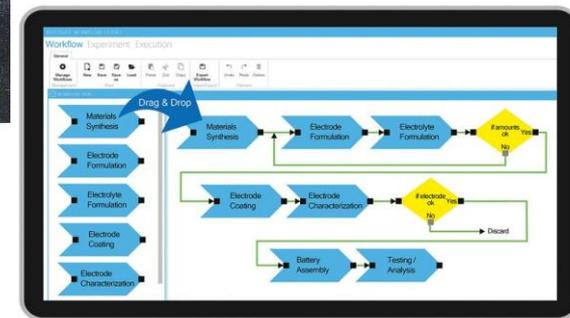
## Kebotix

AI meets robotics in the materials lab



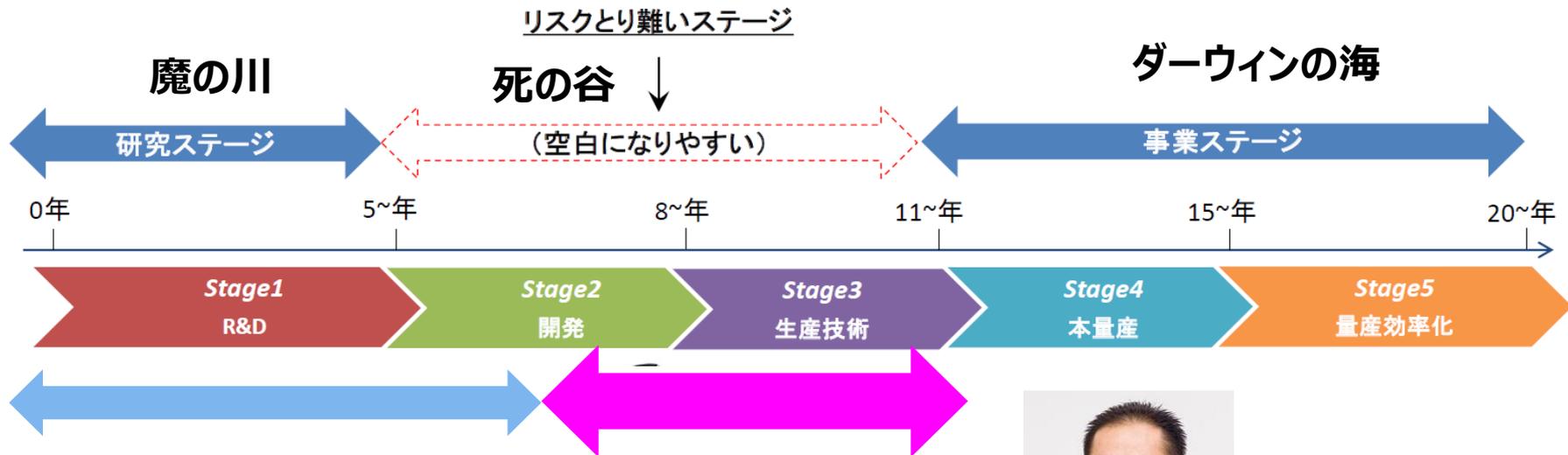
From left: Alán Aspuru-Guzik, Dennis Sheberla, Jill S. Becker, Semion Saikin, and Christoph Kreisbeck, the founders of Kebotix

Kebotix founded  
by Prof. Alan .A.Guzik



Chemspeed Inc.  
"flex shuttle" system

# MIとHTで材料開発の死のを乗り越える。



マテリアルズインフォマティクス (MI)

- ・新材料開発のリスクを低減
- ・開発速度を加速
- ・データ駆動型材料開発

例: MGI(アメリカ)

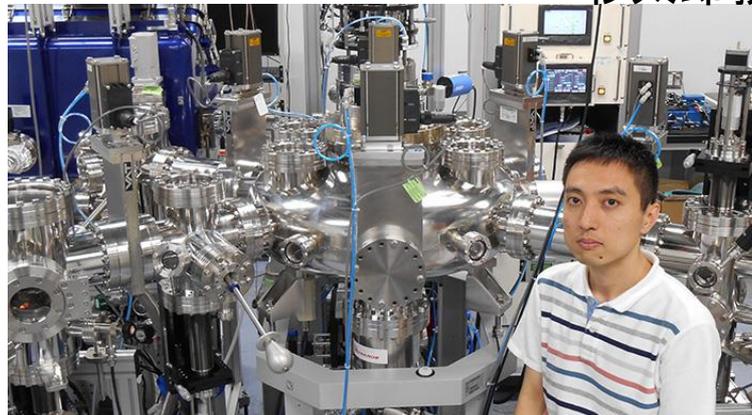
中国版MGI(中国)

NOMAD (欧州)など

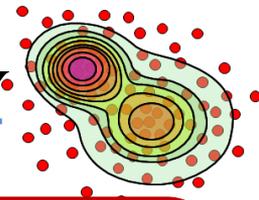
HT合成の挑戦:  
AI+ロボティクス+  
プロセス技術の融合



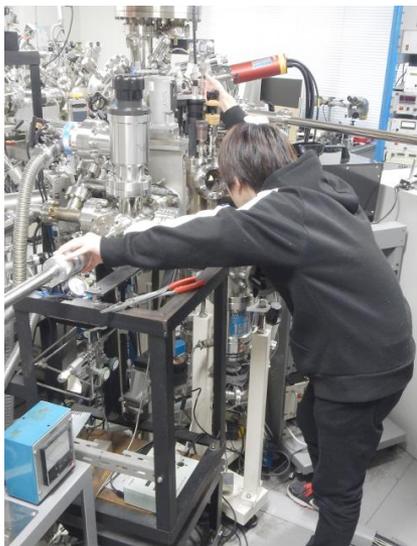
東京工業大学  
一杉太郎教授



# 材料Makersが目指すもの MATERIALS FOUNDRY

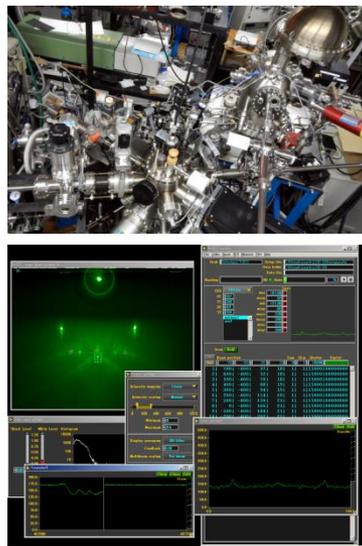


## 第一世代



これまでの合成  
(すべてが手作業)

## 第二世代



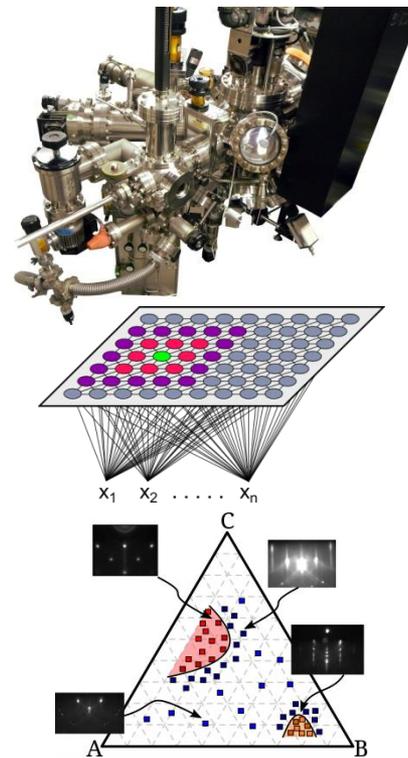
コンピュータ制御  
と一部自動化  
の導入

## 第三世代



オンラインで  
制御  
(開発中)

## 第4世代



機会学習と  
自動相図作成を  
入れた自動製膜

現時点での製膜

未来社会創造事業研究で実現

最終目標(全自動化)

# 世界の潮流 1 : Materials Innovation Factory at University of Liverpool

Denbun - Group eMail x Materials Innovation Factory - U... x +

University of Liverpool [GB] | <https://www.liverpool.ac.uk/materials-innovation-factory/>

UNIVERSITY OF LIVERPOOL

Study with Liverpool ▾ Our research ▾ About us ▾

Search everything 🔍 [A-Z Sign in](#)

## Materials Innovation Factory

Materials Innovation Factory

- Approach
- Facilities
- Research
- Services
- People
- News
- Contact Us

Feedback

*Unique facilities, innovative attitude*  
**Gain competitive advantage in your sector or**

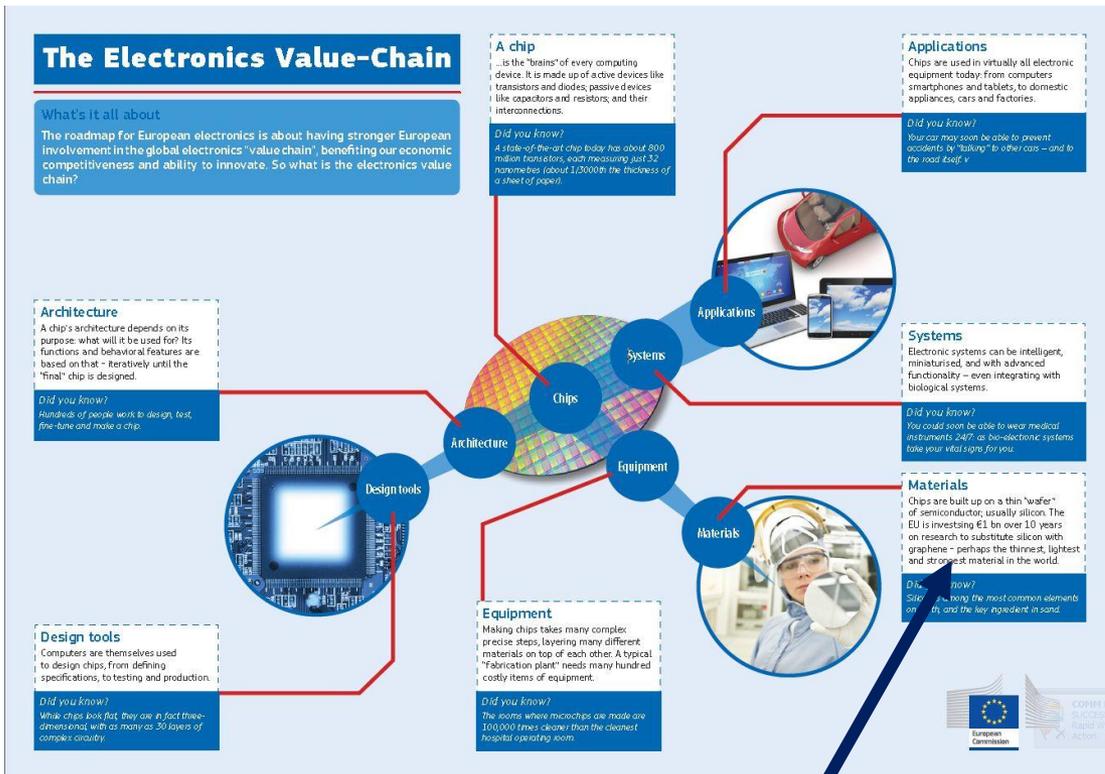
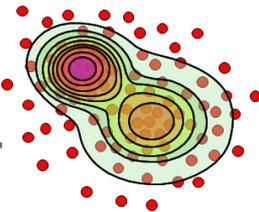
ここに入力して検索

15:03 2019/05/23

Chemispeedなどの自動化された装置を導入。開発を加速する。

# 産業のバリューチェーンの一角を占める材料

# MATERIALS FOUNDRY



シリコンバレーの次は  
シアトルだ

日経BP  
シリコンバレー支局長  
市嶋洋平 / インベーション・アドバイザー  
江藤 哲郎  
シリコンバレー代表

amazon  
Microsoft  
Google  
facebook

# AI ゲーム チェンジャー

GAFBA, BATH.....  
大手テック企業が乗り込む  
AI都市で今、何が起きているのか?

シリコンバレー  
だけを見て、  
全てが分かったと  
思っているはいない

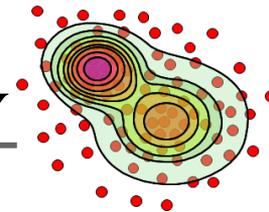
世界最先端の  
AIテクノロジー

マイクロソフト  
伝説のプログラマー  
中島聡 氏  
推薦!

日経BP  
XTREND

INC11: Peter Simkens  
の発表資料から

マテリアルズインフォマティクス  
はここに関係する。



国立研究開発法人 物質・材料研究機構

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)

材料データ科学グループ

小山幸典

木野日織

山崎裕一

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

長田貴弘

柳生進二郎

大久保勇男

東京大学 物性研究所

Mikk Lippmaa

# まとめ：Mi<sup>2</sup>i プロジェクトから見えてきたもの

- これまでの材料科学にデータ科学や人工知能などの情報科学を取り入れた材料開発が加速している。
- 日本の強みのロボティクスと高度な材料合成法、データ科学、データベースを融合した体制を構築し、日本の材料研究を加速する。
- スマート化は今後の材料開発のトレンドになる。
- 世界の速い変化をキャッチする情報収集の場としての“コミュニティー”を維持する。