

ハイスループット技術と機械学習を活用した 機能的な材料探索

藤本憲次郎¹・相見晃久¹・康本航洋¹・北嶋友樹¹・

山本信雄²・下西裕太²・吉田周平²・大木島俊²

¹東京理科大学・²株式会社デンソー

背景・経緯

様々な分野で材料創製や素材の機能予測におけるAIによる予測がなされるようになってきた。膨大な実験データを基に創出可能な材料を予測してから合成実験と物性検証をすることで、効率的に材料研究をすすめるケースが報告されている。一方で、その材料予測をするうえで、ばらつきのある実験パラメータではなく、合成プロセスにある一部の条件を統一させた一連の実験データの生成も材料予測の精度向上のために求められる。Materials Genome Initiative (MGI)におけるツールのひとつである「Experimental tool」は、研究者の求める方向性によって様々なため、ニーズによってすべて一から開発しなければならない。

2017年度に効率的な放射光粉末X線回折測定のための治具を開発し、従前の準備の手間を省いて、ある程度の測定することができることを確認した。今年度は、最適な治具の利用方法を模索するとともに、並行して開発を進めている自動リートベルト解析ソフト¹⁾と組み合わせ粉体試料の測定・解析の高速化を試みた。

1). A. Aimi, K. Fujimoto, 日本セラミックス協会 第56回セラミックス基礎科学討論会講演要旨集

開発治具

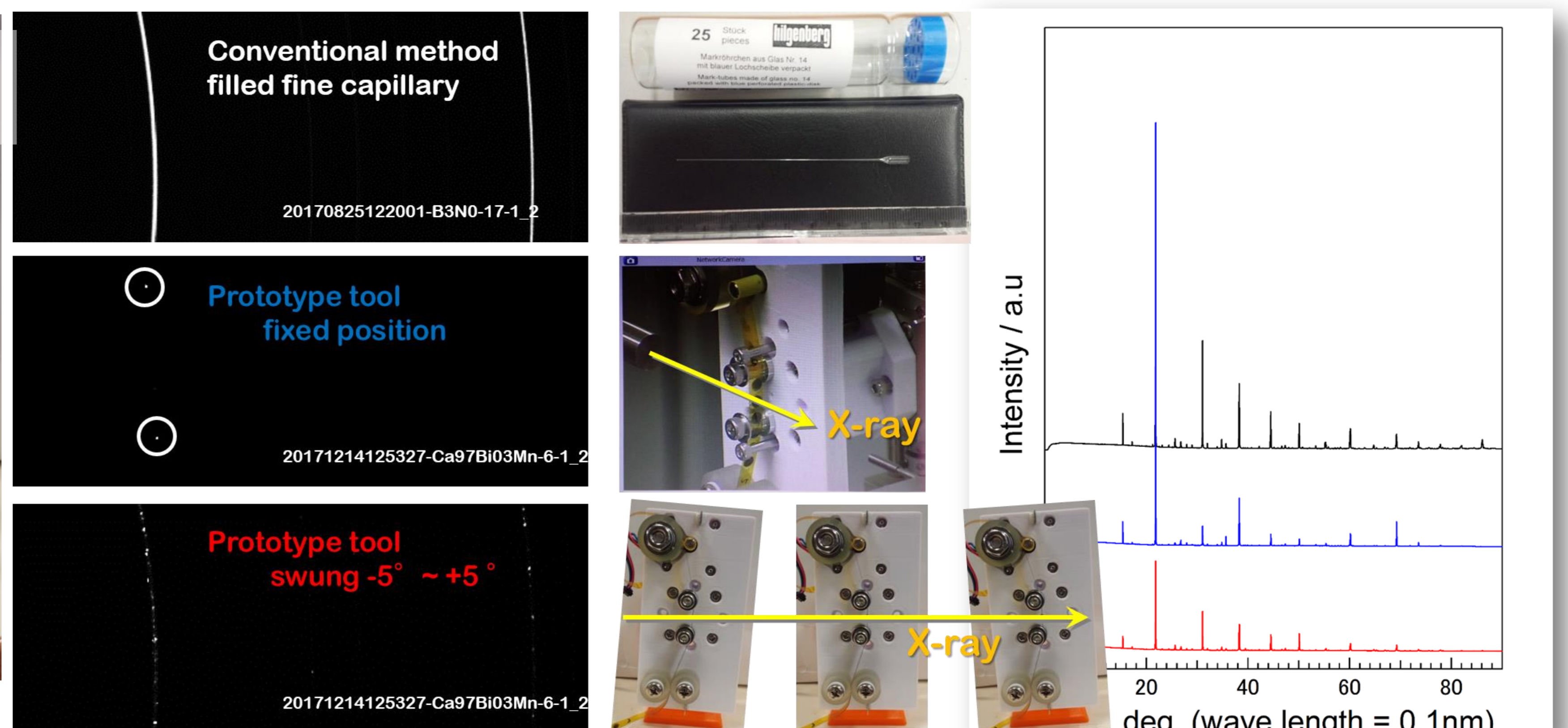
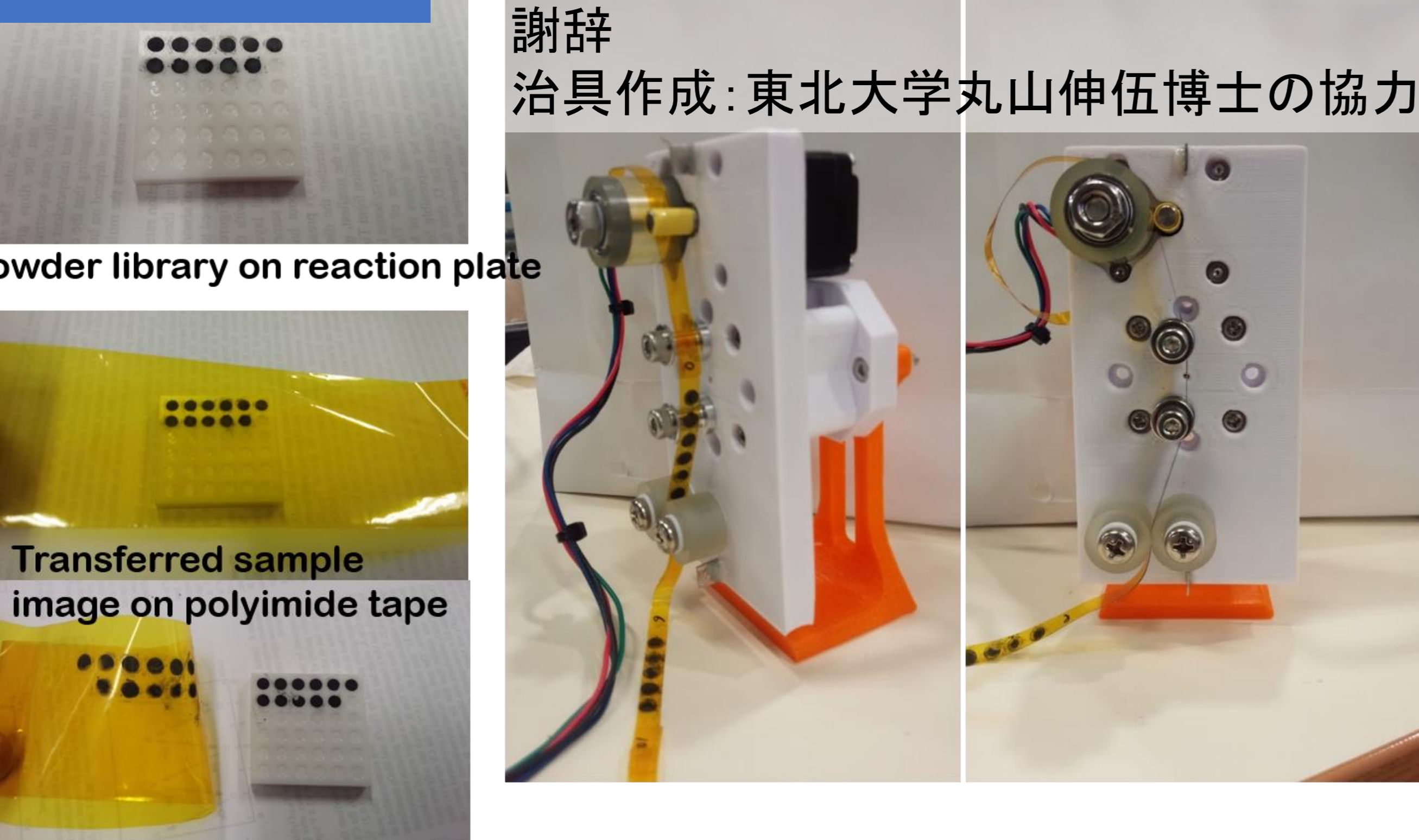


Fig.1 Fully automatic X-ray diffraction measurement tool for synchrotron radiation

Fig.2 Diffraction image and powder X-ray diffraction patterns of $\text{Ca}_{0.97}\text{Bi}_{0.03}\text{MnO}_{3-d}$ (@ BL5S2)

治具結果

Table.1 Lattice parameter of $\text{Ca}_{0.9}\text{Bi}_{0.1}\text{MnO}_{3-d}$ using Rietveld refinement

	swing	a / nm	b / nm	c / nm	Rwp	S
Capillary		0.531435(3)	0.749138(5)	0.529366(4)	4.858	0.3508
LabXRD		0.53133(2)	0.74908(4)	0.52920(3)	8.687	1.0254
Tool	0°	0.53115(2)	0.74868(4)	0.52959(3)	16.492	1.6187
Tool	5°	0.53132(2)	0.74865(3)	0.52929(2)	7.941	0.7814
Tool	7°	0.53124(1)	0.74897(2)	0.52917(2)	6.25	0.6084
Tool	10°	0.53121(1)	0.74897(2)	0.52921(2)	6.896	0.6722

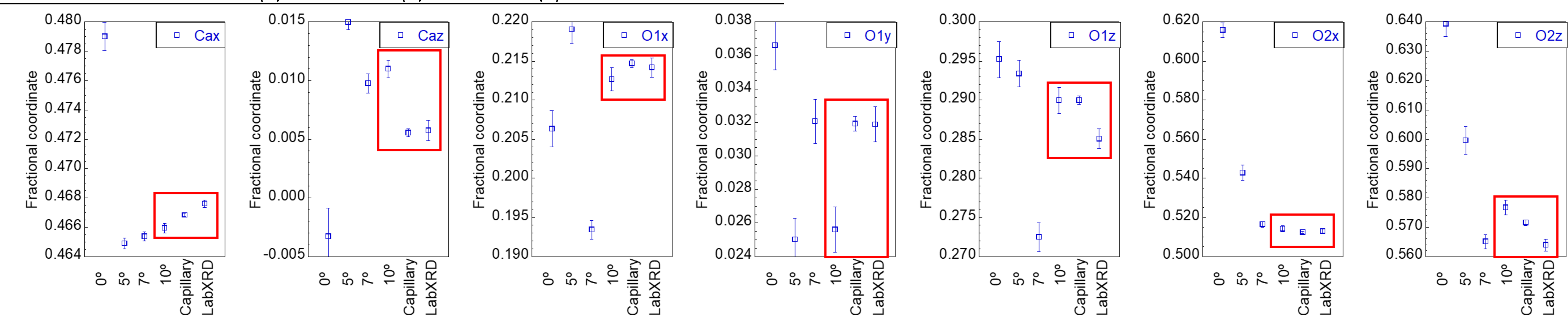


Fig.3 Fractional coordinate of $\text{Ca}_{0.9}\text{Bi}_{0.1}\text{MnO}_{3-d}$ using Rietveld refinement

期待される効果

治具の揺動制御により従来測定に近い回折データが得られた。「キャピラリー充填が不要」、「キャピラリーのセンタリングが不要」により、一般的な回折測定であれば従前の倍の試料数が可能になった。また、初期構造設定に結晶学の知識は必要だが、1試料あたり10分程度での構造精密化が可能となった。XAFS測定でのペレット化作業も減らすことが可能で、これらの高速・効率化が同一実験条件のビックデータ回収へ貢献すると期待している。

補足 (同概念による XAFS測定)

Fig.4 XAFS measurement image with powder library attached to polyimide tape and XAFS spectrum of $\text{Ca}_{1-x}\text{Bi}_x\text{MnO}_{3-d}$ powder

