

革新的物質・材料の探索のための高効率量子ビーム実験

High-throughput quantum beam experiments for materials discovery

小野寛太・高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
量子ビーム連携研究センター

近年の情報科学の進展により、材料科学の研究手法の革新が起こっている。われわれは計測インフォマティクス手法の研究開発により、量子ビーム実験のハイスループット化および全自動での計測・解析を実現することを目指している。本マルチプローブ課題で目指す研究の目的は、大型施設での量子ビーム実験の単なる自動化や遠隔化ではなく、研究者をルーチンワークから解放しよりクリエイティブな研究活動に専念できるようにすること、および従来は熟練した専門家しか出来なかった高度な材料計測・解析を誰にでも可能にすることである。われわれの目指す自動化により、量子ビームを利用した計測・解析結果の再現性が担保されるため、材料科学の進展に欠かせない技術になりうると期待される。また、コロナと共存しなければならない現代において、高度な計測と評価が、熟練者のマンパワーを介することなく自動化されることには極めて重要な意義があると考えている。

これまでの研究で下記の研究成果が上がっているので報告する。

- 1) 統計的手法による量子ビーム計測の高速化 [1]
- 2) 次元削減と類似度評価による量子ビームデータ解析の自動化 [2]
- 3) ハイパパラメータ最適化を用いたリートベルト解析の自動化 [3]
- 4) リートベルト解析と第一原理計算の融合による全自動データ解析 [4]
- 5) 解釈可能な機械学習によるX線回折パターンからの知識発見 [5]

参考文献

- 1) K. Saito et al., Sci. Rep. 9, 1526 (2019).
- 2) Y. Suzuki et al., npj Computational Materials 5, 39 (2019).
- 3) Y. Ozaki et al., npj Computational Materials 6, 75 (2020).
- 4) M. Matsumoto et al., Phys. Rev. Applied 13, 064028 (2020)
- 5) Y. Suzuki et al., Sci. Rep. 10, 21790 (2020).