8223036 栗山淳 磁性機能材料学 第 13 回 課題

マテリアルズインフォマティクスにおけるハイスループット実験の意義を述べてください。

マテリアルインフォマティクスにおいてハイスループット実験は、材料開発のプロセスを根本から変革する技術である。これは、ロボットや自動化されたシステムを駆使し、一度に数千から数万もの異なる材料組成やプロセル条件のサンプルを効率的に合成・評価することで、従来の試行錯誤的な手法では不可能だった膨大な実験データを短期間で生成する。この大量かつ高品質なデータは、マテリアルインフォマティクスの中核である機械学習モデルの訓練に不可欠な餌となり、材料の組成・構造・プロセスと特性間の複雑な関係性を学習させることを可能にする。

具体的な例としては、新しい電池材料を開発する際、ハイスループット実験は数えきれないほどの組成パターンを網羅的に評価し、その充放電特性や安定性に関する大量のデータを提供する。これにより機械学習モデルは、この組成の材料は高いエネルギー密度と優れてサイクル寿命を持つ可能性が高いといった高精度な予測を可能にし、研究者はやみくもな試行錯誤を避け、目的の特性を持つ材料をピンポイントで狙って探索することが可能となる。さらに、ハイスループット実験は、人間の直感や経験では見過ごされがちな未知の材料空間の探索を促進し、これまでに発見されていなかった高性能な新材料を見つけ出す可能性を高める。実際に、複雑な他成分系合金やセラミックスの分野で、この技術が新たな気の旺盛材料の発見に貢献している。よって、ハイスループット実験は、実験時間の劇的な短縮、人的リソースの最適化、材料・試薬の節約を通じて、材料開発の期間とコストを大幅に削減し、MIにおけるエンジンとして、社会のニーズにこたえる革新的な材料の創出を加速している。