

量子ビーム計測におけるインフォマティクス活用

Materials informatics in quantum beam characterizations

高工研¹ ○小野 寛太¹

KEK¹ °Kanta Ono¹

E-mail: kanta.ono@jsap.or.jp

将来の物質・材料の研究開発を支える手法としてマテリアルズインフォマティクス (MI) が注目を集めているが、MI はあくまでも研究開発を支えるための手段であり、将来の物質・材料の研究開発をどのようにしたいのか、あるいはどうあるべきかと言ったことを議論しなければならない。そのような観点から、将来の物質・材料の研究開発のあるべき姿を考えたとき、1) 研究開発あるいは科学法則発見の自動化、2) 研究開発のための自律的なロボット技術、3) 材料研究のための AI 技術、4) 材料データの収集・統合・公開のためのインフラ、5) マルチスケール・マルチモードでの材料評価、についての研究開発を進めることが喫緊の課題であると考えている。

本講演ではマルチスケール・マルチモードでの材料評価について議論する。X 線や中性子をはじめとした量子ビームを用いた計測は物質・材料のマルチスケール・マルチモードでの評価に不可欠である。近年のハイスループット計測の進展により、計測自体の高速化や効率化は飛躍的に進んだ。しかしながら、材料計測の本質は材料研究にとって有用な情報を抽出することであり、単にハイスループットで計測を行い、大量の計測データを収集するだけでは材料研究の効率化につながらない。講演では、材料計測において時間・コストあたりに得られる情報を最大化するための方法論を議論する [1-4]。計測のハイスループット化が進む一方で、計測データ解析は熟練した専門家により人手で行われている場面がほとんどであり、材料の研究開発の効率化におけるボトルネックとなっている。インフォマティクスを活用したハイスループット計測・解析により、研究者を単純作業などの労力から解放し研究活動に専念できるようにするほか、従来は熟練した専門家しか出来なかった材料計測・解析が誰にでも可能になるコモディティ化が進む、このことにより計測・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る。

- [1] T. Ueno, H. Hino, A. Hashimoto, Y. Takeichi, M. Sawada, and **K. Ono**, “Adaptive design of an X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy experiment with Gaussian process modelling”, npj Computational Materials **4**, 4 (2018).
- [2] K. Saito, M. Yano, H. Hino, T. Shoji, A. Asahara, H. Morita, C. Mitsumata, J. Kohlbrecher and **K. Ono**, “Accelerating small-angle scattering experiments on anisotropic samples using kernel density estimation”, Sci. Rep. **9**, 1526 (2019)
- [3] Y. Suzuki, H. Hino, M. Kotsugi and **K. Ono**, “Automated estimation of materials parameter from X-ray absorption and electron energy-loss spectra with similarity measures” npj Computational Materials **5**, 39 (2019).
- [4] Y. Ozaki, Y. Suzuki, T. Hawaii, K. Saito, M. Onishi and **K. Ono**, “Automated crystal structure analysis based on blackbox optimisation”, npj Computational Materials **6**, 75 (2020).