

第3回 スマート情報技術研究センターシンポジウム
センター研究成果報告

マテリアルズインフォマティクス
応用に向けた実験データの取集

豊田工業大学
スマート情報技術研究センター
表面科学研究室

原 正則



40th Anniversary



インフォマティクスを用いた材料開発

組成や構造などで定義される超広大な材料空間の中から材料特性の良い新材料を発見・予測すること

マテリアルズインフォマティクスの実施上での課題

- ・ 全ての新材料の候補を調査するのは数が多すぎて非現実的
- ・ 目的が複数ある場合での最適化の方法(トレードオフの場合など)
- ・ 解析・学習用の整理されたデータの量が少ない場合が多い ←
- ・ 機械学習で得られた相関関係や因果関係の正しさの検証法

→ データ取得方法の選択から手法・目標設定まで課題が多い

研究背景: マテリアルズインフォマティクス

マテリアルズインフォマティクスのボトルネック: **データ不足への対応**

- ・ 効率的に材料データを収集・蓄積する
- ・ 少ないデータに対応可能な学習法の利用

効率的に材料データを収集・蓄積する方法

- ・ 実験の(ロボットを用いた)**自動化・高速化・多条件同時計測** ←
- ・ ベイズ最適化を用いた実験条件の**探索の自動化** ←
- ・ シミュレーション・機械学習(GANなど)を用いた**模擬データの作成**
- ・ 大規模**データベース**(Materials Projectなど)の活用

少ないデータに対応可能な学習法の利用法

- ・ **効果的な機械学習法**の開発(スパースモデリング、転移学習など)
- ・ 複数の測定法結果を用いた**マルチモーダル学習**の開発 ←

研究目的: マテリアルズインフォマティクス(MI)を用いた材料開発

MIを用いたナノカーボン材料の合成・評価・開発プロセス

反応のパラメータ

原料(分子、導入量)
基板(構造、組成)
触媒(サイズ、組成)
温度(T、昇温速度)
圧力(P、混合比)
時間(t、時間分配)

合成
反応
成長

計測手法

AFM・STM
電子顕微鏡
光学顕微鏡
ラマン分光
光電子分光
X線回折 他

機械
学習
(MI)

予測・提案

材料物性
最適組成
構造・形状
プロセス条件
デバイス特性
計測補助

計測インフォマティクス

推定・逆問題(MI)

研究目的

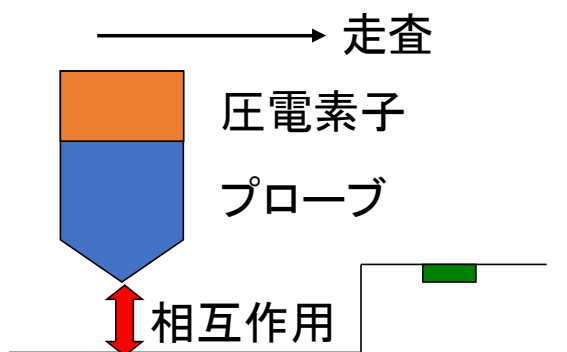
マテリアルズインフォマティクス(MI)を用いた実験の測定データからの新規材料の開発・特性の予測、および最適な反応プロセスの構築

計測インフォマティクス: SPM測定データに対する機械学習によるデータ処理

走査プローブ顕微鏡 (SPM) の原理図

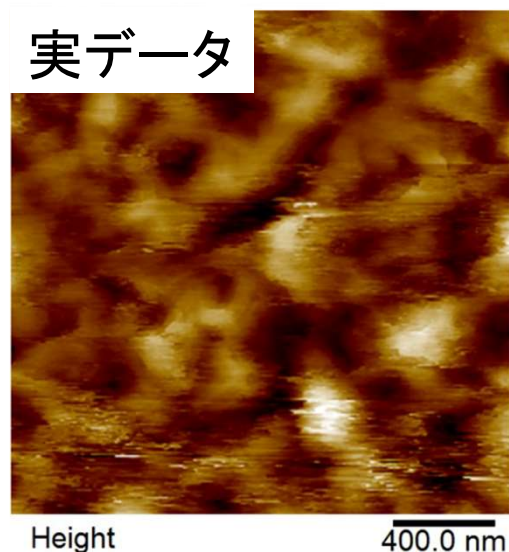
自動計測に向けた機械学習技術を用いたSPM像の再構築

カーボンナノチューブ

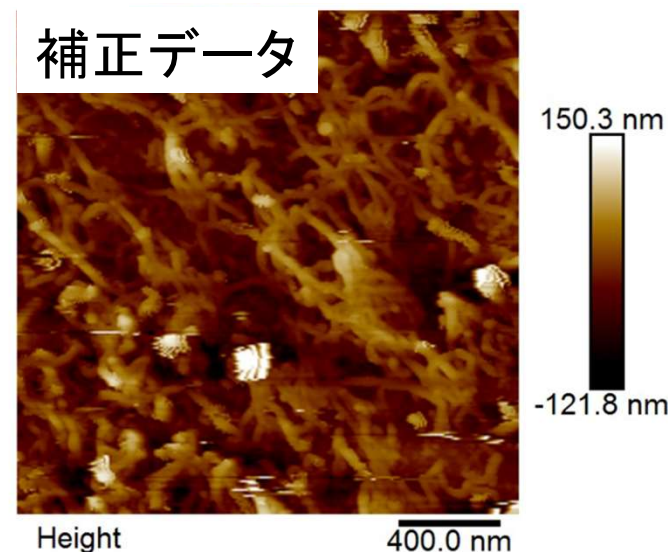
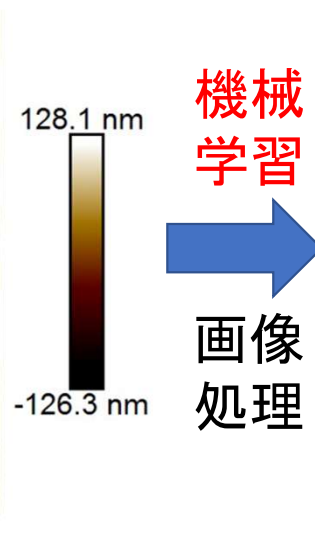


探針-基板間の相互作用を検出し表面形状を計測

↓
ナノ構造観察



ぼやけた画像



シャープな画像

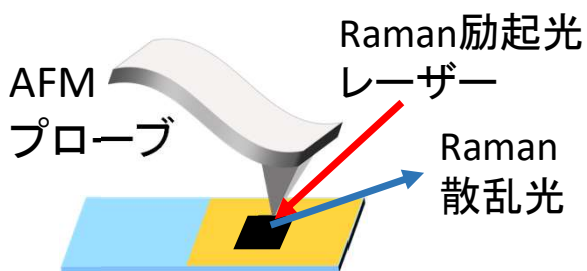
画像処理手法開発: 知能情報メディア研究室¹⁾

機械学習による画像処理により、実験で得られた画像を鮮明化
⇒ 光学顕微鏡像、電子顕微鏡像や分光法のマッピング測定等へも応用可能

1) F. Yasue, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 61, 095502 (2022).

計測インフォマティクス: TERS測定データに対する機械学習によるデータ解析

探針増強ラマン分光法 (TERS) の原理図



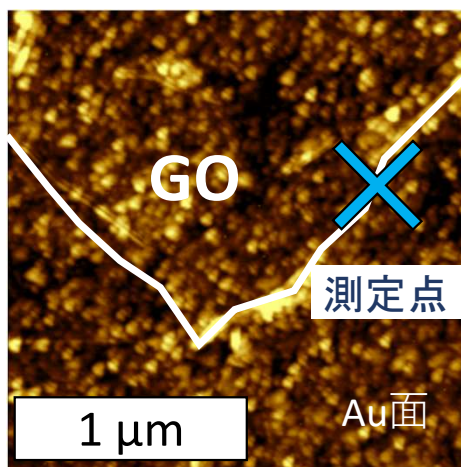
探針-Au基板間に強力な電場が発生



ナノスケールでのラマン分光が可能

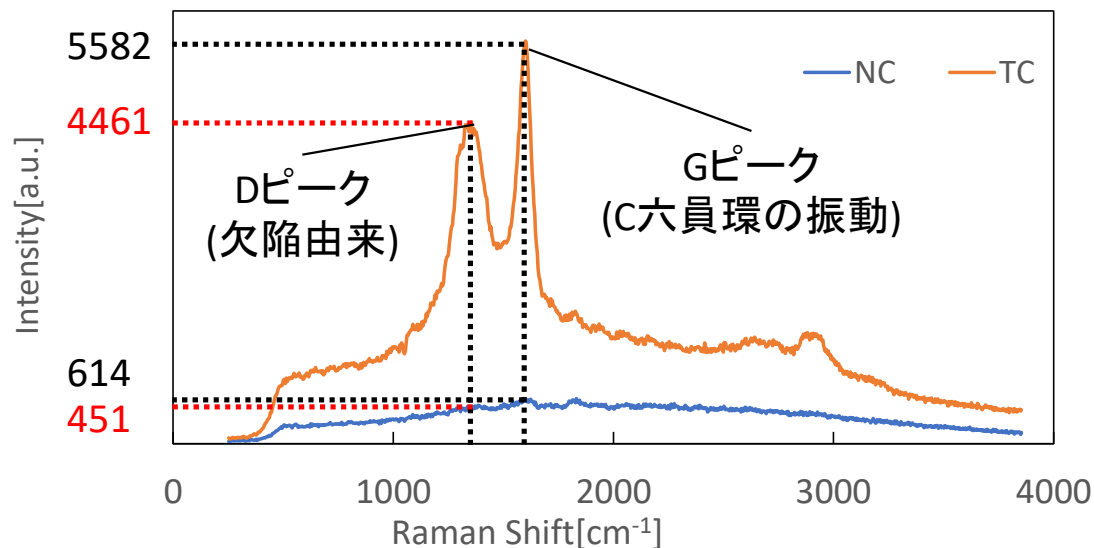
TERSを用いた金電極上のグラフェンのマッピング測定

原子間力顕微鏡像 (AFM像)



GO on Au蒸着表面

GOのラマンスペクトル

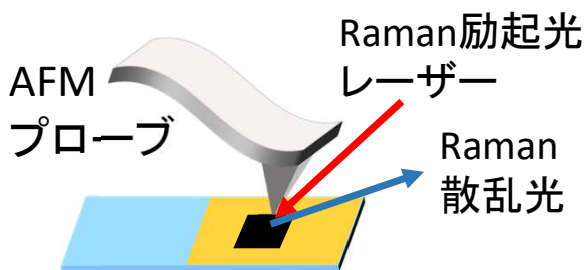


GOのラマンスペクトルが増強して観察

TERSでは高空間分解能でラマンスペクトルのマッピング測定が可能
⇒ 形状(画像)データとスペクトルデータが同時に取得可能

計測インフォマティクス: TERS測定データに対する機械学習を用いた解析

探針増強ラマン分光法 (TERS) の原理図



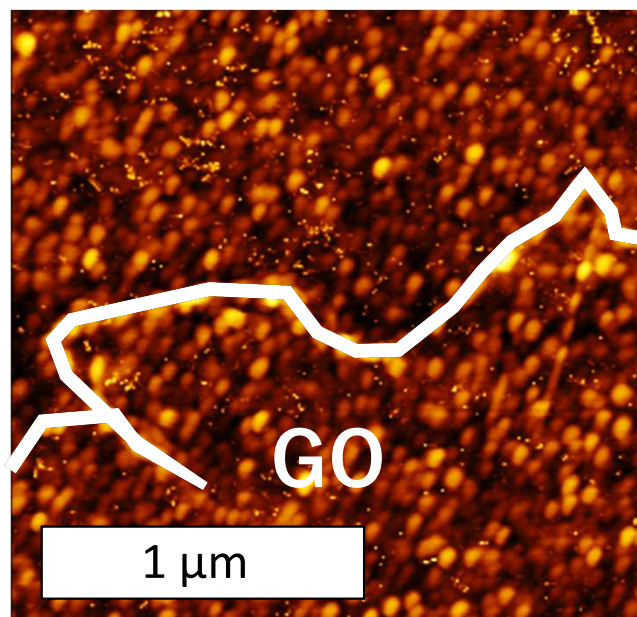
探針-Au基板間に強力な電場が発生



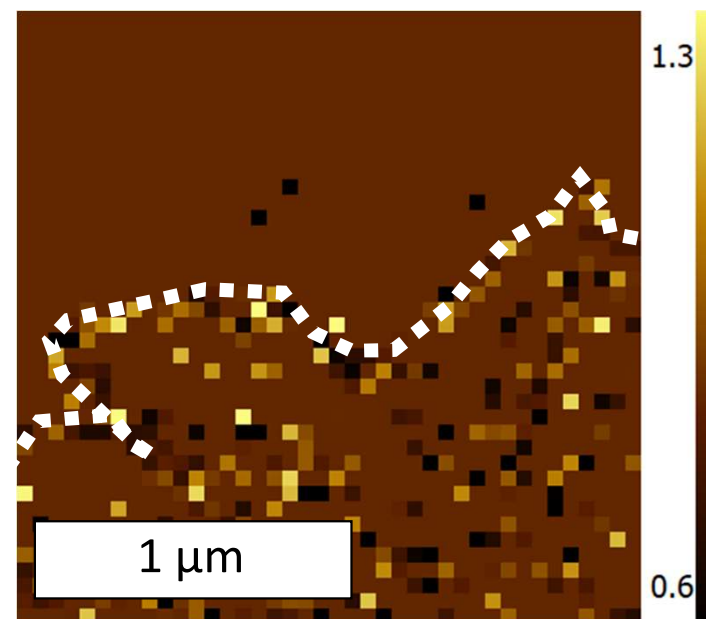
ナノスケールでのラマン分光が可能

TERSを用いた金電極上のグラフェンのマッピング測定

AFM像(GO on Au蒸着表面)



TERSのD/G比 (画素数: 40 × 40 pts)



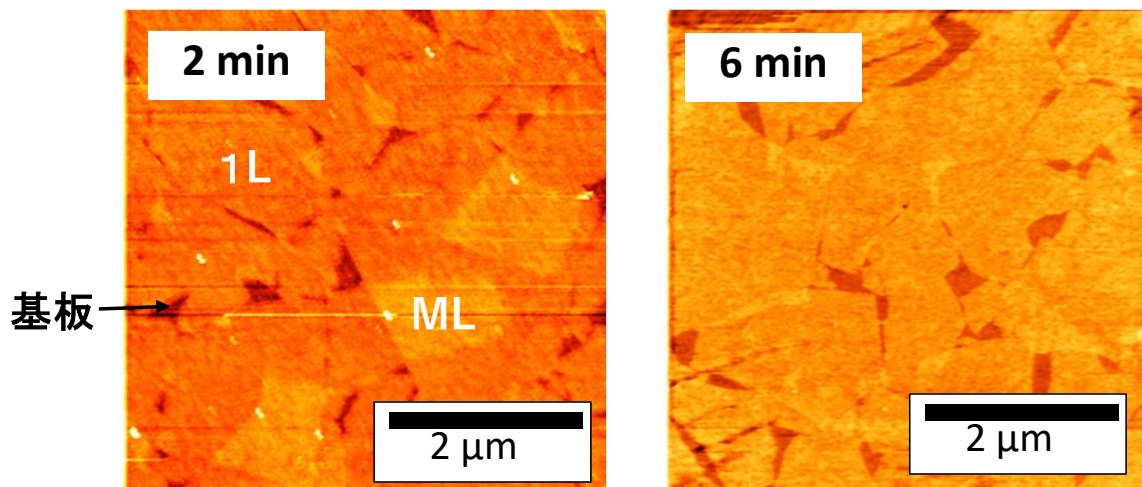
機械学習による各ラマンスペクトルのデータ解析

⇒ TERS計測のスペクトルの解析による表面組成分析の自動化

※ 光学顕微鏡、電子顕微鏡での組成のマッピング測定等へも応用可能

マルチモーダル学習: SEM像・ラマン分光測定データを用いたデータ解析

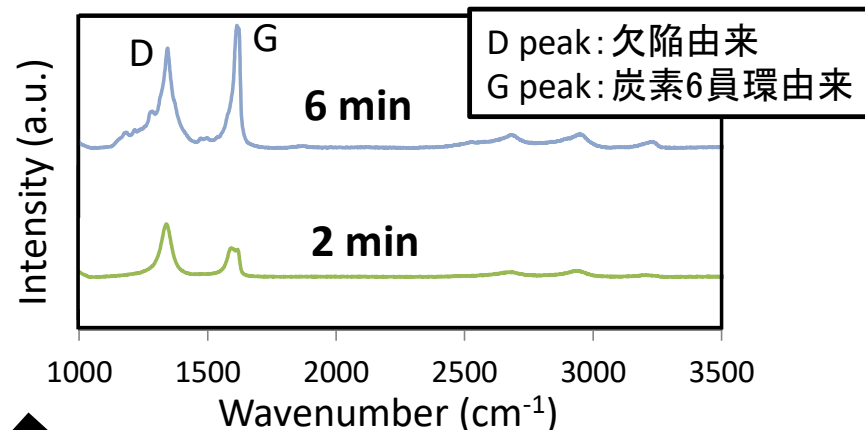
還元型グラフェンオキサイド単層膜(rGO)の原子間力顕微鏡(AFM)像



プラズマ照射によるGO膜の還元¹⁾

機械学習(マルチモーダル学習)に活用

rGO単層膜のラマンスペクトル



rGO単層膜の抵抗

プラズマ処理時間	シート抵抗 [kΩ/sq]
2 min	3474 ± 1285
6 min	84 ± 28

様々な測定データ(画像、スペクトル、物性値等)の関係性を調査
⇒ AFM像やSEM像、スペクトルデータなどからrGO膜の物性を予測

1) Y. Morikuni, et al., Appl. Surf. Sci., 569, 151022 (2021).

結言

マテリアルズインフォマティクス(MI)を用いた材料開発・物性予測

- 実験の測定データを用いたマテリアルズインフォマティクスには**多くの測定データ**が必要になる
 - マッピング・画像データの自動収集にはデータの補正を行える機械学習技術(計測インフォマティクス)が有効
 - 複数の測定データを組み合わせて学習する(マルチモーダル学習)ことで少ないデータ数でも高精度な予測が期待できる
- 現在：測定データ収集の段階 → 今後：MIによる材料特性の予測

謝辞

本研究は豊田工業大学スマート情報技術研究センターの支援により行われた。関係者各位に感謝いたします。