

遺伝的アルゴリズムを活用した新物質探索とその合成法予測

(トヨタ自動車株式会社¹) ○菊池 夏希¹・中野 高毅¹・山崎 久嗣¹・齋藤 信¹
 Novel Material Discovery and Synthesis Prediction using Genetic Algorithm (¹*Toyota Motor Corporation*) ○Natsuki Kikuchi,¹ Koki Nakano,¹ Hisatsugu Yamasaki,¹ Makoto Saito¹

With the advancement of Materials Informatics, the search for novel materials not listed in existing databases is accelerating. This study aims to establish simulation-based techniques for material discovery without synthesis attempts and to predict synthesis methods for new candidate materials. We developed a material exploration workflow for ionic conductive materials, combining genetic algorithms (GA) to generate novel crystal structures with the M3GNET machine learning force field for property prediction. Using this approach, we discovered metastable materials with high ionic conductivity (Fig. 1, 2). To validate these results, we attempted to synthesize the discovered materials by utilizing PIRO^[1] for precursor search and heat treatment temperature prediction, but a more stable alternative material was produced, preventing successful experimental validation. Metastable candidate materials are often obtained in new material discovery, highlighting the importance of synthesis prediction techniques. This presentation will discuss the theory behind synthesis prediction tools, intermediate data, and directions for improvement.

Keywords : *Materials Informatics, Evolutionary Algorithm, Novel Material Discovery, Computational Materials Science, Synthesis Route Prediction*

マテリアルズ・インフォマティクスの進化と共に、材料データベースに掲載の無い新奇材料の探索が加速している。本研究は、シミュレーションによる試作レス材料探索技術と、新奇有望材料の合成法予測技術の確立を目標とする。

イオン伝導材料探索を題材に、遺伝的アルゴリズム(GA)による新しい結晶構造生成と機械学習力場 M3GNET による物性予測を組み合わせた材料探索フローを開発した。これを用いることで高いイオン伝導度を示す準安定材料を発見した(Fig. 1, 2)。本結果を検証すべく、PIRO^[1]による試薬探索や熱処理温度予測を活用しながら、発見材料の合成を試みた。しかし、最安定な別材料が生成し合成実証には至らなかった。

新材料探索においては準安定な有望材料が得られる場合が多くあり、その合成法予測技術は重要と考えている。本発表では合成法予測ツールの理論や中間データを踏まえ、改善の方向性について議論する。

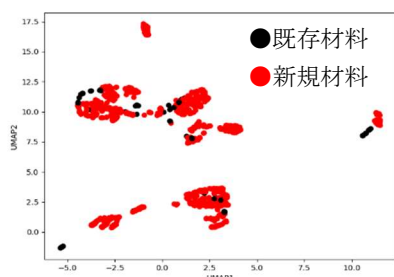


Fig. 1 GA/M3GNET で新材料を生成した結果 (UMAP)

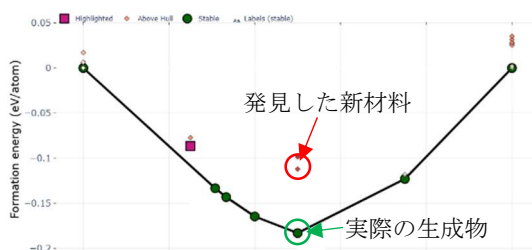


Fig. 2 凸包計算による安定性評価

[1] J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 9244–9259