

データ科学を取り入れた材料探索プロトコルの開発： 常誘電体の適用事例を通じて

(株式会社村田製作所¹) ○尾崎 仁亮¹・池田 潤¹

The Development of a Materials Exploration Protocol Utilizing Data Science: A Case Study on the Search for Paraelectric Materials

(¹Murata Manufacturing Co., Ltd.) ○Noriaki Ozaki,¹ Jun Ikeda¹

As the usage environment of electronic components becomes more severe, such as high temperatures and high voltages, the search for new materials with high characteristics becomes increasingly important. Considering that such materials are rare among synthesizable materials, it is necessary to utilize existing knowledge for the efficient exploration of material. However, over-reliance on existing knowledge can limit the exploration to only a small portion of materials, reducing the likelihood of discovering innovative materials. We believe that the key to overcoming this dilemma lies in data science, and we have developed a materials exploration protocol. This protocol divides the exploration process into three stages: wide-area exploration, narrow-area exploration, and local optimal solution exploration, applying or developing effective data analysis methods at each stage. This enables efficient material exploration using existing knowledge while also discovering innovative materials from new perspectives. As a demonstration of the protocol, the presentation will introduce the search for dielectric materials.

Keywords : *Materials Informatics; Dielectrics; Materials Exploration; Data Science; Protocol Development*

電子部品の使用環境が、高温、高電圧など過酷になるにつれ、高特性な新材料の探索が重要になってきている。優れた特性を持つ材料が、合成しうる材料に対して希少であることを考慮すると、材料探索の効率化には、既存知識の積極活用が必要である。しかし、既存知識を重用しすぎると、合成しうる材料のごく一部しか探索できず、革新的材料発見の見込みが小さくなることが懸念される。我々は、この既存知識活用に関するジレンマを克服する鍵がデータ科学にあると考え、材料探索プロトコルを開発した。このプロトコルでは、探索のプロセスを、広域探索、狭域探索、局所最適解探索の3つに分け、各段階で有効なデータ解析手法を適用、または開発している。これにより、材料探索の中で、既存知識の活用による効率的材料探索と、新視点の獲得による革新的材料の発見を両立することが可能になった。発表では、プロトコルの適用事例として、常誘電材料の探索を紹介する。

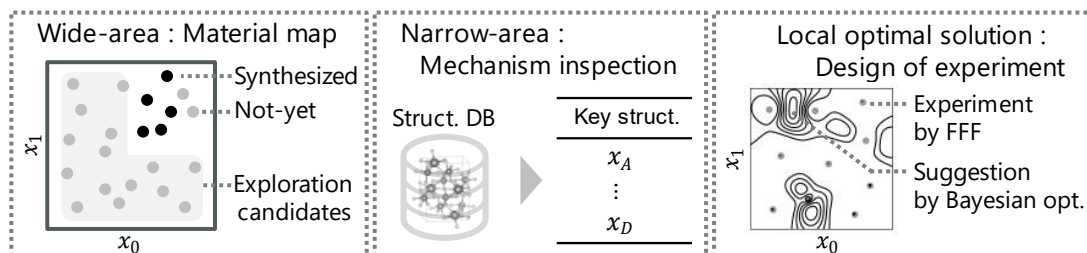


Fig. 1. Schematic illustration of the protocol for material exploration.