

材料開発に変革を促す Materials Informatics の最新動向

神鋼リサーチ (株) 南 怜奈、本城 貴充

技術情報協会が開催したセミナー「マテリアルズ・インフォマティクスを活用した材料設計の動向、応用事例」、国立研究開発法人物質・材料研究機構（以後 NIMS）が主催した「第 7 回 MI²I フォーラム」、公益社団法人応用物理学会が主催した特別シンポジウム「インフォマティクスへの招待 ～機械学習・インフォマティクスは応用物理をどう変えるか?～」について聴講、動向について纏め報告を行った。

【マテリアルズ・インフォマティクスを活用した材料設計の動向、応用事例】

近年、“Materials Informatics（以下、MI）”が取り沙汰されている。MI は米国の Materials Genome Initiative を発端に世界中に広がった材料開発の新たな流れで、材料科学とデータ科学の融合によって材料開発から実用化に要する時間、コストを大幅に削減しようという試みである。本セミナーは MI の最新動向、各種材料における活用事例や世界中で整備が進められているデータベース、今後の活用に向けた課題、展望が主たる講演内容であった。全 4 件の講演のうち、2 件をここでは紹介をする。

① MI を活用した事例と高分子材料設計の展望（みずほ情報総研 加藤氏）では、MI が現在に至るまでの経緯や各国、地域の取組みや動向についての紹介がなされた。これまでは各国ともデータベースの整備を進めるなど、シミュレーションから材料を設計し、機能を導出する順方向の材料開発が主であったが、今後は逆問題（逆解析）と呼ばれる、ある特定の機能、所望の機能を持った材料の設計が出来る開発がより進むとみられるとの見解であった。

② 機械学習による物質探索と材料開発技術（情報・システム研究機構 吉田教授）では、特定の機能を持った物質群の特性データが少ない場合（20～40 点程度の）であっても、別の物性データを利用し他領域で学習させ、この学習させたモデルを適用する転移学習によって、関連のあるデータを得ることが出来るとの紹介がなされた。また、逆方向の予測について同氏らは SPACIER（Go Beyond Interpolative Prediction）という手法を提案している。

これは、計算プログラム内に実験室を有している状態にし、仮想的に材料創生と実験を繰り返し行い、計算で徐々に新しい領域（今まで物質が存在しなかった領域）に物質とデータを創出していくもので、1 ヶ月ほど計算機で実行させると、徐々に新しい領域に物質が生成され始める。このプログラムより排出された結果から、すでにいくつかの物質の合成が試みられ、所望の特性データが得られたという説明がなされた。

未踏領域への限界（機械予測の限界）はあり、計算科学単独では成立しない。そのため、データ科学と実験計画法により新しいデータセット（データの集まり または 纏まり）を取り入れる必要があるとのことであった。

【第 7 回 MI²I フォーラム】

材料科学では、MI 推進において、機械学習を行うためのビッグデータが存在しないことや良質のデータが揃っていないことがボトルネックとなっている。何人かの登壇者からは、先の情報・システム研究機構の吉田教授の研究結果が紹介されていたことから、同氏の提案する計算科学の分野（機能から材料を生成する逆問題の予測について研究されており、物質のデータの無い領域に物質を生成していく）は、他の材料研究者達からも注目されて

いるようである。ここでは4件の報告のうち、1件について紹介をする。

MIによる熱物性および電熱制御材料研究の新展開(NIMS 徐氏)は、固体界面熱抵抗を利用し、高性能断熱材料の開発を試みた結果についての報告がなされた。界面熱抵抗予測は、界面へ影響する要因として物理的、材料的、化学的要因があり、これらすべての要因を1つの物理モデルに取り込むことは不可能であり、有効なモデリング手法がなく困難であった。これに対して、データベースから得られる記述子データと実験データの相関関係の分析を行い、計算に使用する記述子を限定し、さらに化合物形成可能性、化学結合のし易さ、化合物安定性等の要素を考慮したモデルを構築し、相関あるデータを取得することが出来た。その結果、界面熱抵抗は膜厚に強く依存することが分かり、2000種以上の界面の熱抵抗を計算・スクリーニングを行い、コンビナトリアルスパッタ成膜装置を使用して実験的にも検証を行った結果が報告された。

【インフォマティクスへの招待】

AIブームに代表されるインフォマティクスは、サイバー空間のプラットフォームとして現代社会において大きな変革をもたらそうとしており、すでにインフォマティクスを活用した成果が数多く報告され始めている。本シンポジウムでは、インフォマティクスを取り入れ加速度的な進化を遂げた特定の材料開発やプロセス開発、あるいは解析手法についての講演が主たる内容であった。ここでは全13件の講演のうち、特に印象に残った2件についての紹介を行う。

① AIを用いた磁性材料開発(NEC 岩崎氏)では、スピン熱伝導材料開発に関する報告がなされた。熱電素子では、物理的なアプローチが難しいため、異種混合学習(FAB/HMEs)を行い、実験ではコンビナトリアル実験を使用して評価し、記述子は第一原理計算より導出した。この異種混合学習へは、従来の機械学習のブラックボックス部分をホワイトボックスへと見える化、計算の過程が排出されるプログラムを構築、適用した。計算より得られた結果を実験的にも合成し、検証された事例であった。同氏の発表の最後では、AIが学習し、最終的に吐き出してきた材料を人間側が作って実評価を行うが、第一原理計算で出てきたものをきちんと作るのが難しいとの意見が述べられた。

② AI技術で結晶研究開発を桁違いに高速にする(名大 宇治原教授)からは、SiCの結晶成長において10mm角サイズから、 ϕ 3inchを超えるウェハを得るまでにたった1年ほどで達成し、以前と比較して格段に試作速度が向上した事例についての紹介がなされた。

シリコン半導体を例にとると、現在量産化されている ϕ 300mmサイズは、高品質化技術(1958年)が開発されてから40年程度経過しており、その歴史を考えると、サイズの口径アップは必要である一方、非常にタフな課題であることも冒頭紹介された。通常SiCは、昇華法で単結晶を育成するが、本手法では溶液法で育成している。溶液法ではどれだけ短くてもひとつのサンプル(10mm角)を得るのに2日程度要するため、開発速度は決して早くないものの、高品質なものが作れる魅力がある。

そこで、るつぼの中で溶液内部の温度、組成、流れ等、制御パラメータ7つ、設計パラメータ4つをピックアップし、機械学習(ニューラルネットワーク)を導入し解析を行った。その結果、従来手法であるシミュレーションによる計算結果と比較して、機械学習で得られた最適解は、同等の計算結果で、かつシミュレーションの1000000分の1程度の計算速度で予測モデルの導出が達成された。この時間の短縮と共に、先の実験パラメータの最適化も進め、溶解用によるSiCウェハのサイズアップを進めている。それとともに、現

在では酸化ガリウムへの結晶成長に機械学習を適用し、計算と実験の両方から検証を行っているとの事であった。

【全体を通しての所感】

インフォマティクスは基本的な組成、構造等の材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス）に限らず、すでに顕微鏡画像（測定点のスペクトル）の解析や、SiCの結晶成長に関わるプロセス開発などの応用が始められている。これまでの材料開発のツールのひとつとしての考え方だけでなく、MIを包括するインフォマティクスは適用範囲の広さから、継続的なフォロー、情報ならびに知識の蓄積の必要性を強く感じた。

以上