

材料開発の新潮流 ～マテリアルズインフォマティクス～

加藤幸一郎ⁱ 谷村直樹ⁱⁱ

New Trend of Material Development ～ Materials Informatics ～

Koichiro KATO Naoki TANIMURA

近年、各所で“Materials Informatics（以下、MI）”が取り沙汰されており、この言葉を耳にされた方も多いのではないだろうか。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あり、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。本稿では、MIに関する世界・日本の取組状況と適用事例、今後の課題について紹介する。

(キーワード): ナノ, 材料, シミュレーション, 第一原理計算, 機械学習

1 はじめに

材料開発は日本が得意としてきた分野であるが、近年、米国発の“Materials Informatics（以下、MI）”が大きな注目を集めており、日本の優位性が危ぶまれつつある。これまでの材料開発は、研究者個人（もしくは組織）の培ってきた経験と勘によって、新たな材料を合成し、その材料の特性を調べることで進められてきた。また、革新的な材料については、“偶然”によって発見されたものも珍しくはなく、材料開発には俗人的かつ偶発的な要素が多分に含まれているといっても過言ではない。さらに、本来必要なのは“機能・性能”であり、材料開発はその目的を達成するための手段である。したがって既存の材料開発の方向（材料を合成して機能・性能を調べる）とは逆方向（必要な機能・性能から合成すべき材料を決める）にシフトしていくことが、材料開発の高度化・高速化には不可欠である。この逆方向の材料開発を実現し、材料開発における俗人性・偶発性を減少させる鍵と目されているのがMIである（図1）。

MIは、その名称からお分かりのとおりデータ科学の手法を材料開発に取り入れるものである。当然ながらデータ科学の手法を適用するためのデータが

必要であるが、材料分野において一般的にビッグデータと呼ばれる規模のデータを入手することは難しく、世界中で材料分野のデータベース構築が進められている。一方、材料分野の強みとしてシミュレーションによる物性値の算出が可能である点が挙げられる。所望の機能・性能と関連のある物性値をシミュレーションで算出することができれば、データを作成することが可能である。近年のソフト・ハード両面の進展から、現実的な時間・コストでデータの作成を行える環境が整いつつあり、シミュレーションにより生成されたデータに対してデータ科学の手法を適用することがMIの1つの大きな流れとなりつつある。

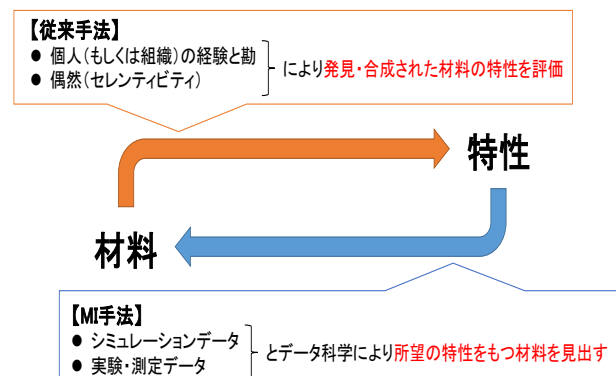


図1 従来手法とMI手法の違い

ⁱ サイエンスソリューション部 業務推進チーム チーフコンサルタント 博士(理学)

ⁱⁱ サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム シニアコンサルタント 博士(理学)

MI は特に無機材料での進展が著しいが、これはまさに、ターゲットとなる材料の所望の特性・機能特徴付ける物性値を、シミュレーションにより計算可能なレベルになってきたことが 1 つの大きな要因であると考えられる。原子・分子スケールの電子状態計算や分子動力学法といったシミュレーション手法によってデータを作成し、得られたデータに対してデータ科学の手法を適用する研究が盛んに行われている。一方、既存シミュレーション技術の高度化・高速化をデータ科学の手法を用いて実現しようという方向性の研究も盛り上がりを見せている。これら 2 つの方向性は密に関連しており後者が達成されることで大量な高精度データの蓄積が短期間で可能になることから、前者の加速に繋がると期待される。

2 各国での取り組み

米国で世界的な MI ブームの先駆けとなる Materials Genome Initiative (以下, MGI)¹⁾ がオバマ大統領(当時)の主動で 2011 年からスタートした。その後、世界中で MI に関する研究開発プロジェクトが開始しており、欧州では European Center of Excellence の一環として Novel Materials Discovery (以下, NOMAD)²⁾ が 2015 年から、スイス独自の取組として Materials Revolution Computational Design and Discovery of Novel Materials (以下, MARVEL)³⁾ が 2014 年から開始されている。アジア圏においても、中国及び韓国において 2015 年から MI に関する大型プロジェクトが開始されており、世界中で MI に関する研究開発が驚くべき早さで展開されている。

3 日本での取り組み

日本でも、2012 年の文部科学省の進学術領域“ナノ構造情報のフロンティア開拓”を皮切りに、大型のプロジェクトが遂行されている。科学技術振興機構(以下, JST) のイノベーションハブ構築支援事業として、物質・材料研究機構を中核とした情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(以下, MI²I)⁴⁾ が 2015 年に発足し、蓄電池材料、磁性材料、伝熱制御・熱電材料という具体的なターゲット材料に対してデータ駆動型の研究手法の開発を進めると共に、産官学の研究者・技術者が研究開発の現場で活用できる情報統合型物質探索・材料開発システムの構築を進めている。

また、新エネルギー・産業技術総合開発機構(以下, NEDO)において超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(以下, 超超プロジェクト)⁵⁾ が 2016 年よりスタートしており、産業技術総合研究所に集中拠点が構築された。機能材料コンピューショナルデザイン研究センター⁶⁾を中心に有機系機能性材料を対象とした材料の「構造」と「機能」を結びつけたデータ群を作り出すためのマルチスケールシミュレーション等の計算科学の技術開発が進められており、MI との融合による革新的な機能性材料の創成・開発の加速化を目指している。超超プロジェクトにおいては、計算科学だけでなく、実際に材料を試作するプロセス技術、これまで観測出来なかった計測技術も並行して開発し、機能性材料の産業競争力の強化に貢献すべく研究開発が推進されている。

他にも、MI に関連したプロジェクトは数多く存在し、SIP 革新的構造材料⁷⁾ や JST-CREST において実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新⁸⁾、計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用⁹⁾などが推進されている。

4 材料データベースの構築状況

MI では、利用可能なデータをどのように整備するかが大きな鍵となる。MGI においては、カリフォルニア大学バークレー校を中心に Materials Project¹⁰⁾が進められており、7 万件近い無機材料データ、50 万件近いナノ多孔質材料データなどの整備に加え、結晶構造の作成・予測や Li イオン電池材料探索のためのツール群が公開されている。計算物性データベースについては、デューク大学においても AflowLib¹¹⁾の整備・公開が進められており、175 万件近い材料についてのデータ蓄積が報告されている。欧州の NOMAD においても、NOMAD Repository¹²⁾として材料データの収集を進めており、世界中の研究者がデータ登録可能な仕組みを提供している。Materials Project や AflowLib では、開発グループによって構築された自動計算システムによりデータが日々蓄積されているのに対し、NOMAD Repository では、利用者が多い 20 種以上の計算プログラムに対するインターフェースを用意し、ユーザーが持つ様々な計算データを集約してデータを蓄積している点に違いがある。2018 年 1 月時点で、NOMAD Repository には 4 億件超のデータが登録され、その中には Materials Project

や AflowLib のデータも含まれており、米国・欧州が連携してデータベース整備を進めている様である。さらに、これらのデータベースにおいては DOI (Digital Object Identifier) が付与されており、データ作成者の権利を守りつつ、オープンサイエンス・オープンイノベーションを進める仕組みが作られている。これらのデータベースを用いた MI 研究事例の報告は、それぞれの開発グループからだけでなく外部ユーザーからも相次いでなされている。

日本においては、以前から物質・材料研究機構にて NIMS 物質・材料データベース(MatNavi)の整備が進められてきており、近年の MI の流れを受けて MI²¹の中で材料データプラットフォームセンターとして更なる進化を遂げようとしている。MatNavi は計算材料物性だけではなく、高分子や金属材料などの様々なデータを揃える世界最大級のデータベースであり、今後の展開にかかる期待は大きい。

5 MI の適用事例と普及への課題

ここまで MI に関わる研究開発状況やデータベース構築状況について紹介した。以下では、MI を用いた研究開発事例を紹介する。

日本において MI への注目を集めるきっかけの 1 つとして知られるのが、マサチューセッツ工科大学とサムスン電子社による Li イオン電池の固体電解質材料の発見¹³⁾⁻¹⁵⁾である。従来の電解質材料(液体やゲル)が持つ問題点(発火性、劣化、エネルギー密度など)を克服すべく、固体電解質材料の開発が精力的に進められているなかで、彼らは実験をすることなく、シミュレーションとデータ科学を用いた MI 手法により新材料を発見した。実験によるトライ&エラーを繰り返していた研究者に対し、この研究成果は大きなインパクトを与えた。国内の事例としては、京都大学と株式会社シャープの産学協同研究による MI を用いた 2 次電池材料の開発^{16),17)}も MI の有用性を示す好事例である。彼らも、シミュレーションとデータ科学を用いた MI 手法により、従来の 6 倍以上の寿命を持つ Li イオン電池正極材料を発見した。MI 手法による新材料の提案報告は増えつつあったが、実際に材料合成まで行い電池特性を評価した研究は当時まだ少なく、民間企業との共同研究であった点も含め、大きな注目を集めた。電池材料以外では、東京工業大学のグループが MI 手法を用いることで希少元素を用いない赤色発光半導体の発見・合成を報告

^{18),19)}している。彼らは、シミュレーションにより発光に関わる電子物性を高精度に計算しただけでなく構造安定性についても同様に計算することで、583 種の既知・未知化合物から赤色に発光するだけでなく安定して存在可能な材料を選択し、実際に合成した上で赤色発光を確認している。発見・合成された材料は、従来の材料開発手法では思いもよらない元素の組み合わせとなっており、先進計算科学に基づく MI で物質探索を大きく加速できることを示した。上記以外にも、機能性分子材料に対する適用事例としては、ハーバード大学と IBM 社による有機太陽電池材料探索²⁰⁾や、同大学とサムスン電子社による LED 用有機分子デザイン²¹⁾が好事例として挙げられる。

上記の事例は、いずれも電子状態計算や分子動力学法といったシミュレーションとデータ科学手法を組み合わせ成し遂げられたものである。裏を返せば、シミュレーションにより計算可能な物性値により所望の特性を特徴づけることができたからこそ、成功した事例であると言える。一方、高分子材料などターゲットとする材料によっては、シミュレーションによって得られる物性値による所望の特性の特徴づけが困難であることも多いのが実情である。この様な材料系への MI の適用は今後の課題と考えられ、更なる進展が期待される。

また、実用化という観点では、データの公開可否についても考えなければならないだろう。世界中で進められているデータ整備であるが、共通する点はオープンにできる公開可能なデータの蓄積という点である。しかし、真に民間企業で実用化するためには、民間企業が持つオープンにできないデータも含めたデータに MI を適用する必要がある。企業内で作成されたクローズデータに、データベースから抽出された関連オープンデータを加え、企業内で MI 手法を扱えるような環境・システムを構築していくことが、今後の MI の発展・MI を用いた材料開発の加速には必要になっていくと考えられる。

引用文献

- 1) <https://www.mgi.gov/>
- 2) <https://NOMAD-coe.eu/>
- 3) <http://nccr-marvel.ch/>
- 4) <http://www.nims.go.jp/MII-I/>
- 5) http://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html
- 6) <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/>
- 7) <http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/index.html>
- 8) http://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoi

- ng/bunyah29-3.html
- 9) http://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html
- 10) <https://materialsproject.org/>
- 11) <http://www.aflowlib.org/>
- 12) <https://repository.NOMAD-coe.eu/>
- 13) <https://www.nikkei.com/article/DGXLZO88347560R20C15A6TJM000/>
- 14) Y. Mo, S.-P. Ong and G. Ceder: First Principles Study of the Li₁₀GeP₂S₁₂ Lithium Super Ionic Conductor Material, *Chem. Mat.*, 24(1), (2012) pp15-17,
- 15) <http://news.mit.edu/2015/solid-state-rechargeable-batteries-safer-longer-lasting-0817>
- 16) http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2014/140730_1.html
- 17) M. Nishijima, T. Ootani, Y. Kamimura, T. Sueki, S. Esaki, S. Murai, K. Fujita, K. Tanaka, K. Ohira, Y. Koyama and I. Tanaka: Accelerated discovery of cathode materials with prolonged cycle life for lithium-ion battery, *Nat. Commun.*, 5, (2014) 5553-1-7
- 18) <http://www.titech.ac.jp/news/2016/035528.html>
- 19) Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono and F. Oba: Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis, *Nat. Commun.*, 7, (2016) 11962-1-10
- 20) J. Hachmann, R. Olivares-Amaya, A. Jinich, A. L. Appleton, M. A. Blood-Forsythe, L. R. Seress, C. Román-Salgado, K. Trepte, S. Atahan-Evrenk, S. Er, S. Shrestha, R. Mondal, A. Sokolov, Z. Baod and A. Aspuru-Guzik: Lead candidates for high-performance organic photovoltaics from high-throughput quantum chemistry – the Harvard Clean Energy Project, *Energy Environ. Sci.*, 7, (2014) 698–704
- 21) R. Gómez-Bombarelli, J. Aguilera-Iparraguirre, T. D. Hirzel, D. Duvenaud, D. Maclaurin, M. A. Blood-Forsythe, H. S. Chae, M. Einzinger, D.-G. Ha, T. Wu, G. Markopoulos, S. Jeon, H. Kang, H. Miyazaki, M. Numata, S. Kim, W. Huang, S. I. Hong, M. Baldo, R. P. Adams and A. Aspuru-Guzik: Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a high-throughput virtual screening and experimental approach, *Nat. Mat.* 15, (2016) 1120-1127