

超超プロジェクトの成果と 材料設計プラットフォーム

三宅 隆

1. はじめに

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)は、材料データとAI・データ科学を活用した材料研究手法で、他分野のバイオインフォマティクスやケモインフォマティクスより遅れて2010年代から急速に発展した。米国では2011年にマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブを立ち上げ、オバマ大統領(当時)が材料開発の速度を2倍に加速すると宣言した。ヨーロッパやアジアなど世界各国でも同様の研究プロジェクトが推進された。材料開発の加速は産業競争力に直結するため社会的関心が極めて高く、産学官を巻き込んだ精力的な研究により、新しい研究分野が切り開かれた。

MIの初期(2010年代前半)は、計算シミュレーションが主導的な役割を果たした。特に、構造や組成を変えたハイスループット第一原理計算による物質探索がおこなわれ、得られた計算データのリポジトリ化が進められた。その後は徐々にAI・データ科学の活用に注目が集まり、機械学習モデルを用いた高速スクリーニングや材料記述子の研究がおこなわれた。また、実験データを用いたMIが進展した。材料開発には、新規物質の探索、化学ドーブによる組成最適化などの周辺探索、高次構造や微細組織の最適化など、物質探索から材料設計まで様々な研究ステージが存在するが、各ステージでMI手法が盛んに研究されている。

日本では、2010年代中頃からMIに関する国プロが推進された。代表的なものとして、SIP革新的構造材料「マテリアルズインテグレーション」(2014~2018年度)、JSTイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発

イニシアティブ」(MI¹, 2015~2019年度)、NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(超超プロジェクト, 2016~2022年度)が挙げられる。このうち、マテリアルズインテグレーションでは構造材料、MI¹では無機機能材料、超超プロジェクトでは主に有機機能材料が対象材料に選ばれた。研究のステージとしては、MI¹が物質探索、マテリアルズインテグレーションと超超プロジェクトでは材料設計が主な対象に設定された。

2. 超超プロジェクト

2.1 プロジェクトの概要¹⁾

超超プロジェクトは、村山宣光(産業技術総合研究所;産総研)がプロジェクトリーダーを務め、化学系企業18社から構成される技術組合「先端素材超高速開発技術研究組合」(ADMAT)、産総研、それに全国の大学・公的機関で構成されるオールジャパン体制で推進された。プロジェクトは集中研方式で実施され、ADMAT企業から出向した研究者が産総研に常駐し、企業の壁を越えて活発な議論がおこなわれた。各企業から具体的な課題が提示されたが、企業で秘匿すべき材料の代わりにプロジェクト内で開示可能なモデル素材を選定し、その材料開発に取り組んだ。プロジェクト成果で開発加速が想定される製品群は、次の5つに大別される。

- ①半導体材料：高い透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等
 - ②高機能誘電材料：高耐電圧且つ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等
 - ③高性能高分子材料：高性能コンジット材料、エレクトロニクス材料等
 - ④機能性化成品(超高性能触媒)：天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等
 - ⑤ナノカーボン材料(CNT・グラフェン)：軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等
- 成果目標としては、高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術を組み合わせた革新的



U2M Project and Materials Design Platform
Takashi MIYAKE
1998年 東京大学大学院理学系研究科博士課程修了 博士(理学)
現在 (国研)産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 研究チーム長
連絡先：〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1
E-mail t-miyake@aist.go.jp

2023年3月13日受理

な材料開発基盤を構築し、これを用いて従来の材料開発と比べて試作回数・開発期間を1/20に短縮することが掲げられた。

2.2 基盤技術の開発²⁾

世界の各種データベースに収納されている材料データの数は多い。しかし、材料開発で対象とする材料群や特性が多様多岐なため、個別の材料課題においてAI手法を適用するために利用できるデータは限られている。そこで、超超プロジェクトでは、設定された材料課題の解決を見据えてオンデマンドデータの創出技術が開発された。

計算科学技術開発では、対象となる機能を構造・組成等から導き出す技術として、次の9種の機能別の順方向予測マルチスケールシミュレータが開発された。これらのシミュレータの多くは公開されている。

- ①電気・光等のキャリア輸送シミュレータ(拡張CONQUEST)
- ②界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ (I : ESM-RISM, II : HybridQMCLT)
- ③モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ④誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ⑤電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ(拡張COGNAC/Lammps)
- ⑥汎用インターフェース(拡張OCTA)
- ⑦フィルター充填系コンポジットシミュレータ(拡張KASPEL)
- ⑧ナノカーボンコンポジット用シミュレータ(SOBA Ver.1.0)
- ⑨反応性流体シミュレータ

プロセス技術では、次の4つのプロセス実験基盤を構築した。

- ①ナノ粒子分散ポリマー(半導体や金属ナノ粒子の高速合成、ポリマーへの分散プロセス)
- ②混練・発泡(超小型、超高压、高剪断力押出形成の発泡ポリマー・ポリマーコンポジット作製)
- ③ナノカーボン材料(ナノチューブ等のナノカーボン材料の分散と表面改質)
- ④触媒(ハイスループット触媒合成と触媒性能迅速評価)

先端計測では、

- ①構造・物性・機能に関する見えない情報の見える化
- ②化学反応過程など機能発現中の「その場」評価
- ③原子スケールからミリメートルまでのマルチスケール構造解析の3つのニーズに対応するため、XAFS, DNP-NMR, ナノプローブ分光, 和周波分光, 陽電子消滅, 電子顕微鏡, X線CTなどの先端機器が整備された。

2.3 材料開発の成果事例³⁾

上記の基盤技術を用いたデータ駆動型材料設計手法をモデル素材に適用し、その有効性が検証された。ここでは、4つの研究事例を紹介する。

2.3.1 高機能性光学材料

分散インクの塗膜などへの展開を想定して、ナノ粒子の光学特性の制御に取り組んだ。モデル素材としては、貴金属として比較的安価な銀ナノ粒子を選んだ。ここでは、自動分注装置によるハイスループット合成と、プレートリーダーによるスペクトル評価の実験手法を開発し、分散剤や添加剤を変えた多数(96条件/日)の合成・評価を可能にした。一方、計算科学では離散双極子近似(Discrete Dipole Approximation: DDA)に基づいたシミュレーションで様々な粒径や形状に対するスペクトルデータを蓄積した。こうして得られた実験データと計算データを機械学習(lasso回帰)で解析することにより、実験スペクトルと粒径・形状を関係付けた。機械学習による解析を更に進め、所望のスペクトルを得るための実験条件を特定する技術を確認した。この研究は、コニカミノルタ, ADMAT, 産総研により実施された。

2.3.2 フレキシブル誘電材料

フレキシブル回路基板材料のモデル素材としてポリイミドの開発を実施した。まず、「誘電率等の外場応答物性シミュレータ」で誘電率の第一原理計算を実行し、得られたデータから機械学習モデルを構築した。この機械学習モデルを使い、820種類の候補材料から低誘電率の候補材料82個を選んだ。続いて、分子動力学シミュレーションを実行し、第一原理計算の結果とあわせて誘電正接を算出し、82個の材料から低誘電正接の材料8個を選んだ。この中から作成しやすさを考慮して2個の材料を合成し、誘電特性を実験検証したところ、1つのサンプルで誘電率3以下、誘電正接0.01以下という目標を達成することが確認された。この研究は、日鉄ケミカル&マテリアル, ADMAT, 産総研により実施された。詳細は、本特集の藤元氏の記事を参照されたい。

2.3.3 熱硬化性樹脂フィルム

熱硬化性樹脂には透過性、耐熱性など様々な特性が要求される。ここでは、同時に改良することが難しい3つの目的変数(屈折率、破断応力、伸び)に着目し、ポリマーの設計をおこなった。まず、モノマーや組成比の異なる27種類のポリマーのフィルムを作成した。これを訓練データとして機械学習モデルを構築し、3つの目的変数が等しい割合で最大となる配合を予測し、得られた3種類の候補材料を作成した。その特性を測定したところ、そのいずれもが、熟練研究者が作成した25種類のフィルムの特性よりも優れていることが分かった。研究でポイントとなったのは、機械学習モデルの記述子である。ポリマーを数値表現するために、数密度ECFPと呼ばれる記述子を開発した。この研究は、昭和電工, ADMAT, 産総研により実施された。

2.3.4 ブタジエン合成触媒

天然資源からゴム材料を作ることを目的として、エタノールからブタジエンを合成するための高活性触媒を開発した。計算科学的アプローチとしては、第一原理計算により触媒モデルの絞り込みをおこなった。一方、実験手段として、合成・反応評価・分析を高速におこなうハイスループットシステムを構築し、オンデマンドデータを迅速に収集することを可能にした。その上で、反応を2つの段階に分け、2段階法の反応条件を、ハイスループットシステムと機械学習を用いて最適化した。機械学習は、200サンプルに対して5個の記述子を用いてランダムフォレストで触媒活性モデルを作成した。新たに見出された金属種を用いた反応条件の最適化の結果、従来法に比べて1.5倍のブタジエン生成速度を達成した。この研究は、横浜ゴム、ADMAT、産総研により実施された。

3. 材料設計プラットフォーム

超超プロジェクトで材料開発が推進される過程で、様々な材料データが創出された。これらのデータを収納したデータプラットフォーム (AIST Materials Gate DPF) が構築された⁴⁾。AIST Materials Gate DPFは、材料データを集積・管理・解析・連携するための基盤システムで、データ生成者が主体的にデータ管理するインフラを提供している。次の5つのDPFと解析ツール群から構成されている。

- ①光機能性微粒子DPF (分散ホスト中の微粒子材料, ナノ粒子材料)
- ②配線/半導体材料DPF (複合カーボン材料, 有機半導体・EL材料等の電気/半導体材料)
- ③電子部品材料DPF (高分子機能材料, 無機誘電材料)
- ④機能性高分子DPF (相分離, フィラー充填, 発泡等による高次構造を持つ樹脂・エラストマー材料)
- ⑤触媒DPF (均一触媒, 不均一触媒, 電池材料)

材料系のデータベースは、伝統的には文献から結晶構造や物性値等を抽出して構築されてきた。日本ではNIMSのMatNavi⁵⁾が代表的で、高分子データベースPolyInfo、無機材料データベースAtomWorkなど十数種類のデータベースから構成されている。またMIの初期より、ハイスループット第一原理計算による計算データベースが開発されてきた。代表的なものに、Materials Project⁶⁾、Open Quantum Materials Database (OQMD)⁷⁾、AFLOW⁸⁾が挙げられる。これらは主に学術利用を指向したデータベースであるが、材料開発でも広く用いられている。ただし、産業応用の対象となる材料は、結晶や分子だけでは不十分で、不純物、欠陥、

微細組織、高次構造など不規則性、階層性への対応が必要となる。AIST Materials Gate DPFは、5つの材料群に対して、それぞれに応じた形式でデータベースを作成している。先述した通り、材料開発に利用できるデータは必ずしも豊富とは言えず、各種のデータ創出技術も重要である。超超プロジェクトで開発したシミュレータや実験機器とDPFを含めた材料設計プラットフォーム (MDPF) を構築し、整備を続けている。産総研は、超超プロジェクト終了後に「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」(データ駆動コンソーシアム)⁹⁾を設立し、①セミナー等の情報提供、②DPFの利用、③MDPF等を活用した技術コンサル・共同研究の窓口、等のサービスを提供している。2023年2月時点で、ADMAT企業18社を含む37社、それに特別会員として法人3機関、個人1名、連携会員として2法人が参加している。

4. おわりに

材料開発のステージが川上から川下に移るにつれ、「何を作るか」というMIから「如何に作るか」というプロセスインフォマティクス (PI) にデータ駆動型材料設計は広がりを見せている。PIは、材料試作から製造プロセスに至る広い研究開発ステージを対象に含む。その推進のため、産総研ではマテリアル・プロセスイノベーション (MPI) プラットフォーム¹⁰⁾を整備している。MPIプラットフォームには、最先端のプロセス装置や評価・分析装置が含まれ、先進触媒拠点 (つくばセンター)、セラミックス・合金拠点 (中部センター)、有機・バイオ材料拠点 (中国センター) で開発を進めている。

また、AIST Materials Gate DPFの高度化としては、複数の企業が利用することを念頭に、データを共有しないが共用する「秘匿共用」を実現するため、情報技術とマテリアルの専門家が協力して、材料開発のための秘匿計算技術の開発と実装を進めている。

参考文献

- 1) 超超プロジェクト概要: <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/ja/tech/index.html>
- 2) MDPF-技術情報: <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/ja/tech/tech-mdpf.html>
- 3) 超超プロジェクト最終成果報告会資料: <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/ja/freport/index.html>
- 4) DPF-技術情報: <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/ja/tech/tech-dpf.html>
- 5) MatNavi: <https://mits.nims.go.jp>
- 6) The Materials Project: <https://materialsproject.org>
- 7) The Open Quantum Materials Database: <https://oqmd.org>
- 8) AFLOW: <https://www.aflowlib.org>
- 9) データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム: <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html>
- 10) マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム: <https://unit.aist.go.jp/dmc/platform/MPI/index.html>