

## 多元化合物とマテリアルズインフォマティクス

### Materials Informatics for Multinary Compounds

物材機構 伊藤 聡

NIMS, Satoshi Itoh

E-mail: ITOH.Satoshi@nims.go.jp

データ駆動型科学がさまざまな分野で注目を集めているが、材料分野ではマテリアルズインフォマティクス (MI) が材料開発の在り方を革新するのではないかと注目を集めている。とくに 2011 年 6 月の米国オバマ政権における Materials Genome Initiative (MGI) はこの分野の初めての国家レベルでの動きとして重要であった。MGI では、モノづくり競争力の源泉は材料であり、その研究開発期間を半減するという明確な目標を打ち出した。その一方で、新しい学問としての MI も注目されるようになり、日本においては 2015 年 7 月より情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Materials Research by Information Integration Initiative: MI<sup>2</sup>I) が開始されている。

MI<sup>2</sup>I では NIMS をハブ拠点として、多くの研究者を糾合し、学際的な分野である MI の深耕と産業界への普及促進活動を行っている。研究基盤の面では MI 研究に欠かせない材料データベースの整備・拡充とともに、データ科学的な研究成果に基づく解析ソフトウェアを開発・実装したデータプラットフォームを構築している。研究応用の面では、材料データプラットフォームを生かして、永久磁石材料、蓄電池材料、伝熱制御材料を中心的に取り組んでおり、いくつかの有望な材料の候補物質を MI 的手法によって見出している。それ以外にも発光材料の探索にも取り組んでおり、ユビキタス元素のみから構成される新規材料を実際に合成することにも成功している。

MGI が目標に掲げているように、MI は物質・材料の見方に新しい視点を与え、我々の理解を深めるだけでなく、材料開発に関する期間の大幅削減という側面もある。その意味では産業界での活用が強く望まれるところであるが、MI への期待は大きいものの具体的な姿は見えてはいない。MI<sup>2</sup>I ではそうした状況を踏まえて、まずはコミュニティーを形成し、MI に関する情報交換のみならず、自らの手を動かして MI を皆とともに学んでいける場として MI<sup>2</sup>I コンソーシアムを立ち上げた。ここでは座学で学ぶだけでなく、データプラットフォーム上でそれぞれが、あるいは皆で手を動かすことを目指している。

MI が特に効力を示すのは多元系化合物のような複雑な組成・構造をもつものである。多元系化合物では単結晶は得にくいので、不純物や構造欠陥がその特性を決めると考えられる。それはプロセスと表裏一体である。したがって、“現場で役立つ MI” に必要なデータは単純な物質データだけでなく、プロセスデータが重要となる。プロセスデータはこれまで研究者の実験ノートにとどまっていた。これらの情報を横断的に活用できれば、そのシナジー効果は非常に大きなものがある。そうした新しいプロセスデータの収集方法とそのデータベース化についても簡単に紹介したい。