

# 材料設計・プロセス設計のためのデータ駆動型化学

## Data-driven Chemistry for Materials and Process Design

東大院工 船津 公人

The Univ. of Tokyo, KimitoFuntsu

E-mail: funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

現在の我が国の素材・材料研究・開発分野は、産業の発展に大きく貢献するとともに、国際的にも優位な位置を堅持していると言われている。材料開発にはこれまで経験と勘に裏打ちされた実験的手法が中心的な役割を果たしてきたが、これがゆえに、新物質の発見から材料としての実用化（デバイスへの最適組み込みのための周辺技術の開発と最適化も含めて）には非常に長い時間と費用を要しているのも事実である。今後もグローバルレベルで産業競争力を発揮し続けるためには継続的に分野融合の創造的な取り組みが必要であるが、そのためにはこれまでの材料開発で蓄積された多くのデータ・情報を駆使し、材料開発に要する時間と費用を合理的に短縮する環境整備が重要となってくる。これまで研究開発の効率化を謳い、所与の機能を持つ材料を理論的に探索・設計した上で合成・評価するという方向に注目が集まりずいぶんと多くの予算が投下されてきたが、その方法論は必ずしも期待したほど成功してきたとは言えない。それは何故か。順方向の予測、つまり与えた構造、材料の評価はできても、逆に具体的な構造、材料候補の提案に目が向いてこなかったからである。そしてまさに、この逆解析がデータ駆動型化学に求められる重要項目の一つであると理解され始めてきたのである。一方で、ある物質が優れた特性を持つことがわかって、その構造と物性の相関、物性を支配する原理（パラメータや関数）が不明なものも多く、これを解明する科学としてこれまでとは異なる視点での動きが存在する。この場合も量子化学計算によるパラメータとインフォマティクスとを組み合わせることでこの課題を克服する研究も行われている。

ビッグデータ応用の声がこのところ頻繁に聞こえてくる。化学の世界にもその期待と動きが加速し、特に新しい分子構造、材料の研究開発、さらには生産プロセスの立案およびそのプロセスにける製品品質維持のためのプロセス監視とその制御のために、データ駆動型化学にこれまでにない強い期待が寄せられている。目的物性・特性を持つ新規分子・材料開発に相当する「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そしてそれを安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応するには、いまや多くのデータ、情報の積極的活用が不可欠となってきたとの時代の判断がそこにある。

これについては図1に示したようなプロセス・インフォマティクスが今後必要になろう。材料物性はプロセス条件によって変化することがほとんどで、

単に物性と構造（組成）の相関モデルだけでは物性推算モデルの精度は上がらず、またそのモデルの逆解析によって得られる、目的物性を満足するとされる構造組成だけではプロセス情報が反映されていないためにあまり有益ではない。また目的物性をどう実現すれば良いか曖昧なままである。まさに構造（組成）物性相関モデルにプロセス条件を織り込む必要が出てくる。これができれば、材料製造における品質管理の際にどのプロセス項目をどのように操作することで製品品質の維持、つまりプロセス制御が可能になるかも自ずとはっきりしてくる。材料設計、プロセス条件検討、品質管理まで一連の流れとして扱えるようになってくる。

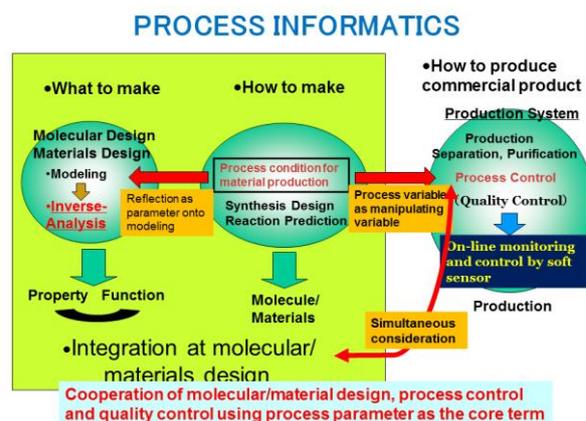


Figure 1. Concept of Process Informatics.

データ科学は単にデータが大量にあることのみをもって成り立っている科学ではない。大量のデータをもとに統計的な推論モデルにより科学を展開することを目指して提案された。そのために必要もしくは欠落している情報・データは、実験、あるいはそれが実験的には得にくいコストがかかる場合にはシミュレーションによって“意図的に”得ることが求められる。データが示す化学空間の全体像を知るためである。全体像を知ることができれば材料設計などの標的領域も明確になるであろう。そこを攻めるための足掛かりも得られよう。このための必須な手法としてケモインフォマティクス、計算化学、そしてその連携は増々その存在意義を増していくと思われる。