マテリアルズインフォマティクスに基づく物質合成

Synthesis of Novel Materials Based on Materials Informatics

物･材機構　○後藤 真宏

NIMS, ○Masahiro Goto

E-mail: goto.masahiro@nims.go.jp

【はじめに】エネルギー・環境問題がより深刻化を増す中で、この対策の一環として、エネルギーの有効利用を促進するための新規材料開発が急務となっている。例えば、未利用の熱エネルギーを有効活用する材料では、伝熱制御・熱電材料があり、省エネルギー化材料には、低摩擦材料などがある。これらの材料開発を加速するために計算科学を導入する取り組みは従来から行われているが、近年では、材料データとデータサイエンスを融合した新しい材料研究手法であるマテリアルズインフォマティックス（MI）が注目されており、様々な材料の特性予測に活用されるようになりつつある。その一方、MI により材料特性が予測できるようになったとしても、実際に利用可能な材料を創製するためには、そのプロセス制御・特性最適化を行なうことが重要となる。我々は、これまでに、実験研究の立場から材料開発を加速するべく、コンビナトリアルスパッタコーティングシステム（COSCOS）を独自に開発してきた。当該装置は、コンビナトリアル技術による効率的な材料探索だけではなく、高度なプロセス制御に優れている。この COSCOS と MI による材料特性予測を融合した効率的な材料開発基盤を新たに構築し、短期間でエネルギー材料の開発に取り組んでいる。

【研究手法】コンビナトリアル物質合成と MI との融合概念を **Fig.**に示す。はじめに、MI によって予測された材料系に的を絞り、その後、COSCOS により、組成・結晶構造・配向性・ナノ構造などが異なる様々な種類の複数サンプルを効率良く作製すると共に、その材料特性･プロセス条件をデーターベースに格納する。さらに、それらのデータは、MI により解析され、必要とされる材料特性を得るために必要なプロセス条件を選び出し、次の成膜条件を新たに設定してプロセスを継続する。この過程をフィードバックすることにより、短期間で必要な機能を有する材料を創製することができる。

当日は、幾つかある材料開発例の中から低熱伝導率を有する薄膜無機材料開発を例にして研究開発内容をご紹介する。

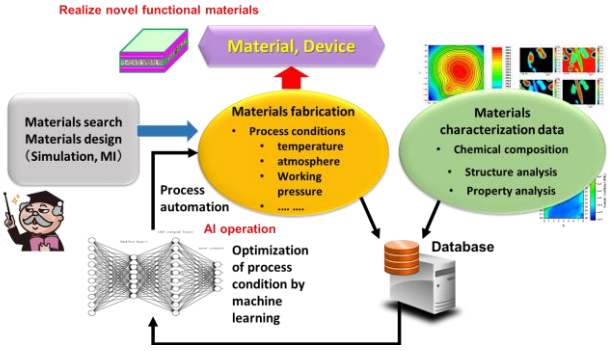

Fig. Concept of novel materials development based on combination of materials informatics and combinatorial materials synthesis.

【謝辞】本研究は、NEDO 産業技術研究助成事業（ID:00X27002x）、（ID:02A27010c）、（ID:06A24007d））、科研費基盤 A（21246030）、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：MI²I）、CREST（JPMJCR16Q5）の助成によるものである。

© 2019年 応用物理学会