

コンビナトリアルテクノロジーとマテリアルズ インフォマティクスの融合によるラボ改革



国立研究開発法人 物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点

後藤 真宏

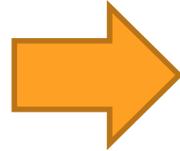
高速な材料開発の必要性

高性能なエネルギー変換材料の創製が急務



Web. JAXA

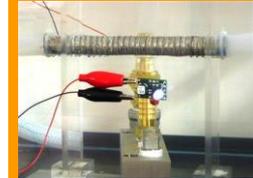
地球環境の悪化が進行



自然エネルギー生成



エネルギー有効利用



省エネルギー



摩擦力低減など

非常に過酷な制約がある

短期間で！

ユビキタス・
無害な元素



原子から材料まで

原子
(110種)

物質

化学式、状態、結晶構造
(既知物質約15万種、二元系
72%, 三元系10%, 四元系
<0.5%を占める)

材料

ナノ・ミクロン構造、形状、サイズ
(作製プロセスによって全て異なり、無限の種類がある。)

研究手法の現状

計算: CALPHAD、第一原理

材料作製: 状態図作成、単結晶成長等

計測: 結晶構造解析(XRD)等

実験から計算へシフト。既存のMIプロジェクトの対象領域であり、コンビナトリアル手法によって状態図作成の高速化も進んでいる。

計算: Phase Field、有限要素法

材料作製: 薄膜、バルク、ナノ材料等

計測: 構造解析(SEM、TEM等)、物性測定

従来の実験手法が中心。研究者の経験と勘に強く依存し、材料開発の最も時間かかる段階。自動化、高速化のニーズが高いが、既存のMIプロジェクトでは取り上げられていない。

材料開発を加速するために

化学組成・物質設計
計算科学、MI、実験
などにより材料の化学組成や結晶構造などを予測、設計

物質候補

高速・自動化材料創製

コンビナトリアル手法により化学組成とプロセス条件を制御し、材料創製の高速化、自動化を実現

再現性

プロセス条件

人工知能

機械学習によるプロセス条件と計測条件の最適化

試料

高速構造解析・物性計測

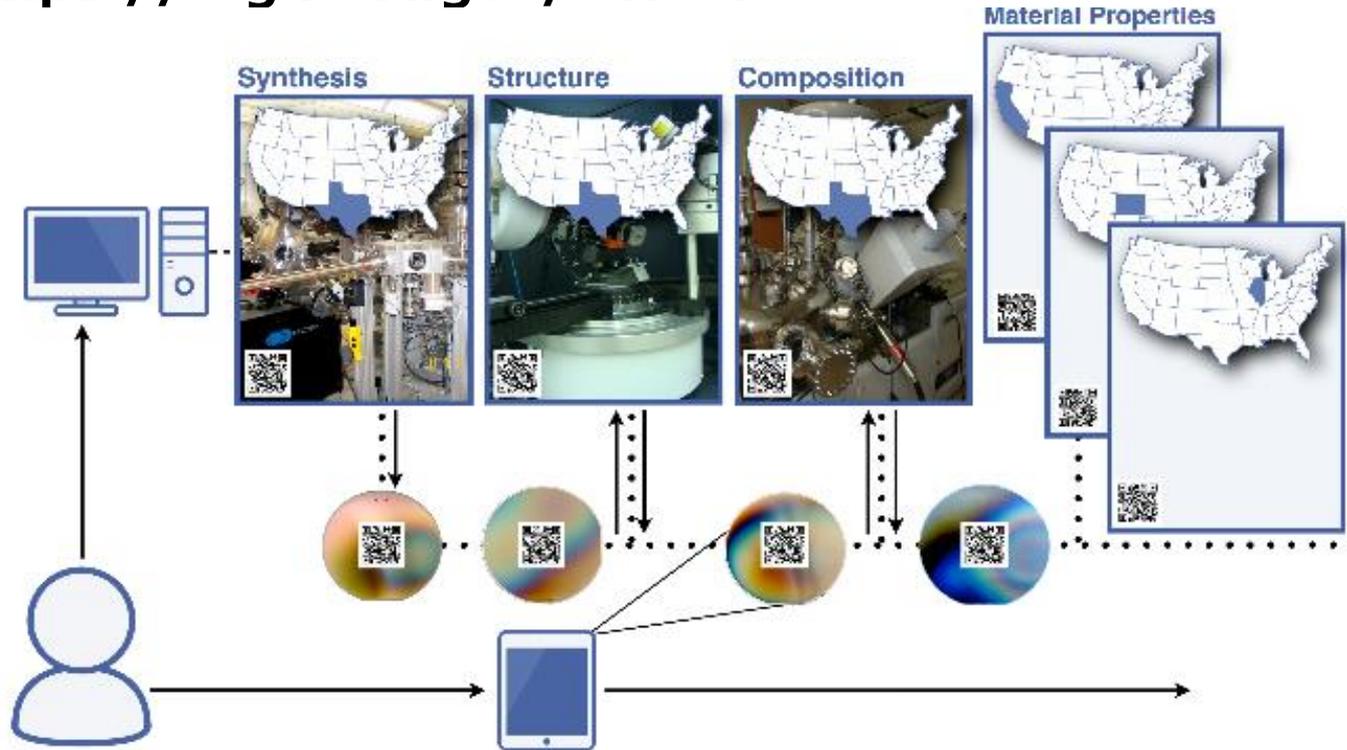
結晶構造やナノ・ミクロン構造の高速解析、光・電・熱・力学等特性の高速測定・マッピング

測定条件



海外関連プロジェクト(1)

- アメリカ(NIST) : High-Throughput Experimental Materials Collaboratory
<https://mgi.nist.gov/htemc>



状態図作成、物質探索を中心

海外関連プロジェクト(2)

中国MGE (Materials Genomic Engineering)

- “十三五”国家重点プロジェクト (2016-2020) : 予算規模 : 15.44億元 (五年) . キー技術 : ハイスループット計算 ; ハイスループット材料合成 / 成形 / 加工技術 ; ハイスループット材料評価 ; 材料ビッグデータ
- 中国科学院プロジェクト (物理研究所) : Materials Genome Research Platform (MGRP). 予算規模 : 5.5億元。キー技術同上、対象材料 : 単結晶薄膜、合金、バルク材料

1元 ~ 17円

材料“ゲノム”を探るものではなく、先進材料の開発と応用を加速するのが目的

材料開発を加速するために

化学組成・物質設計
計算科学、MI、実験
などにより材料の化学
組成や結晶構造など
を予測、設計

高速・自動化材料創製

コンビナトリアル手法により化学
組成とプロセス条件を制御し、材
料創製の高速化、自動化を実現

2001年～

【後藤真宏:学振
151依頼講演資料
より抜粋 2010年
2月】

その先には人工知能や材料データ
ベースなどの情報科学の最先
端技術を導入し、研究者が必要
な薄膜特性をコンピュータに与え
ると、COSMOSが成膜、評価プロ
セスを行う過程で最短のパラメ
ータ選択方法を随時見つけ出し、
最短の研究時間、最低の費用、
最小の労力で理想的なコーティ
ング膜が実現できるような装置に
していきたいと考えている。

人工知能

機械学習によるプロセス条件
と計測条件の最適化

高速構造解析・物性計測

結晶構造やナノ・ミクロン構造
の高速解析、光・電・熱・力学
等特性の高速測定・マッピング



理想のラボとは

【材料探索からデバイス化までを短期間で一気に通貫して行なえるラボ】

高性能エネルギー変換材料の探索

エネルギー変換材料の実用化

広範囲探索

探索

実材料化

デバイス化

計算科学・データ科学

従来型コンビ

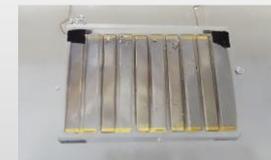
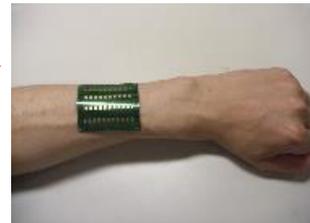
当方が目指す新規コンビナトリアル技術

組成
結晶構造
ナノ・マイクロ構造

大面積化
厚膜化
マクロ評価可能
(熱測定など)
フレキシブル化

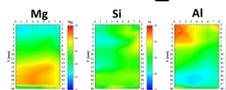
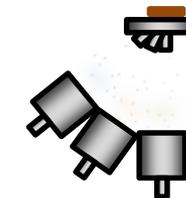
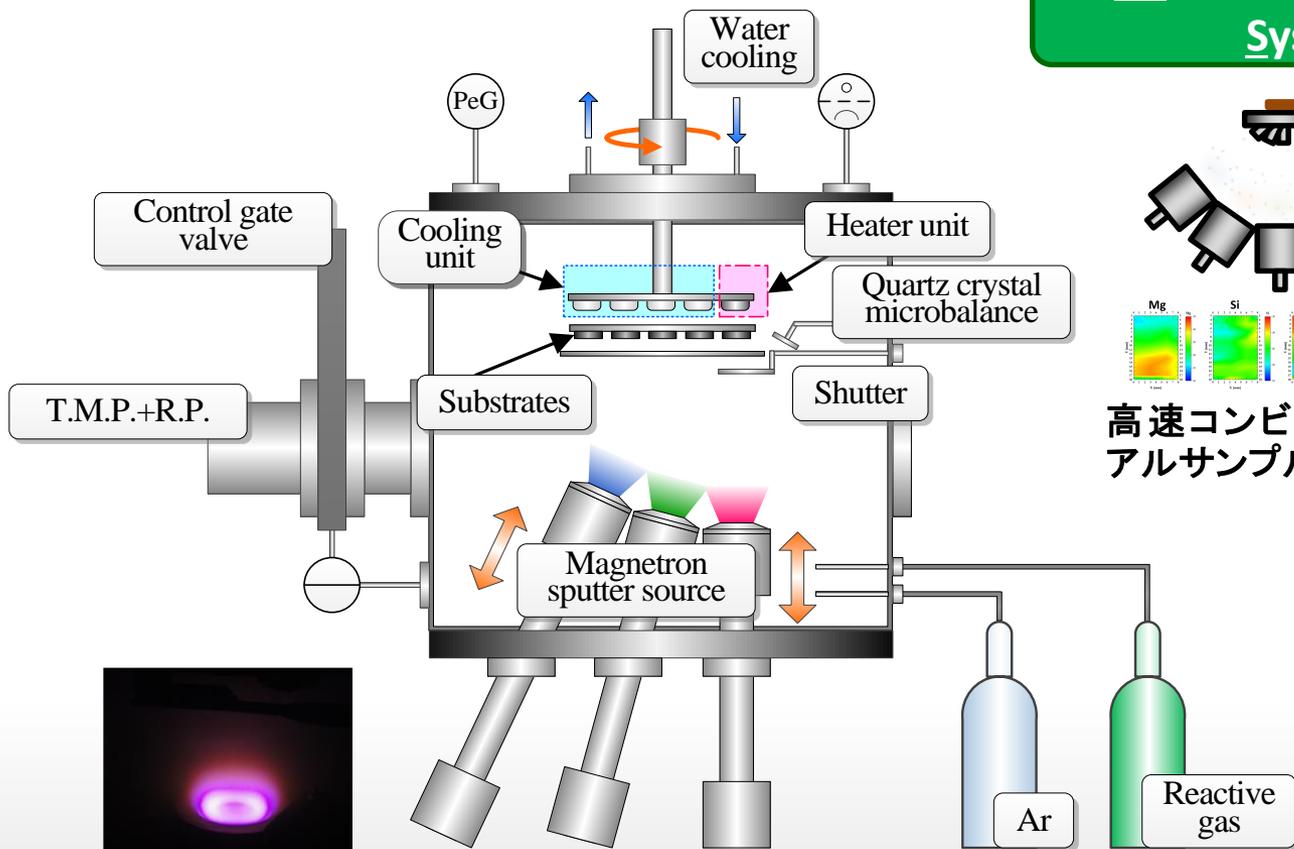
プロセスの
最適化
(素子構造、
電極接合)

再現性



コンビナトリアルスパッタ材料作製装置

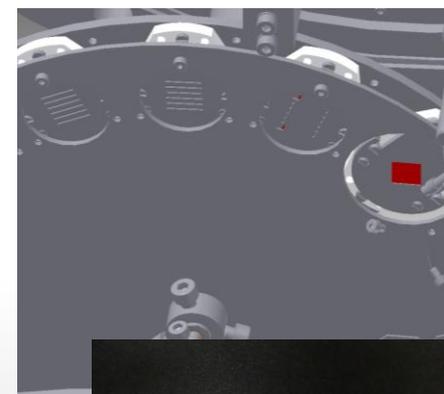
Combinatorial Sputter Coating System (COSCOS)



高速コンビナトリアルサンプル作製



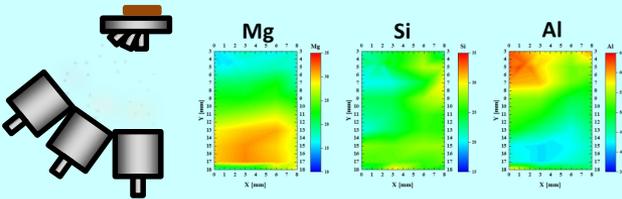
ナノ構造・界面制御
サンプル作製



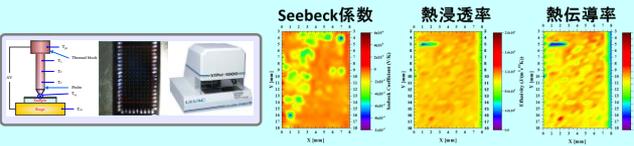
コンビナトリアルスパッタ材料作製装置

再現性

① 物質探索モード



各種マッピング測定

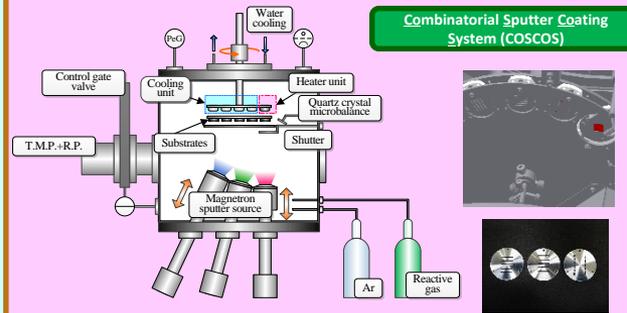


特徴: 広い材料種、成分、結晶構造の候補の中から、高性能熱電材料を見出すもの

長所: 高性能材料の探索を広範囲で短期間で行なえる

短所: 再現性に乏しく、また、広範囲に同様の膜を作製することができず、応用性に乏しい

② 薄膜作製モード

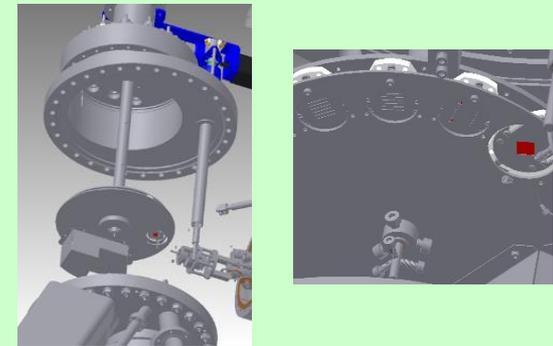


特徴: 全自動で成膜パラメータを変化させながら複数のサンプルを効率よく作製するもの、**ナノ構造制御も可能**

長所: 比較的広範囲の厚膜を作製できる。パラメータの高精度な制御、自動化プロセスで再現性が良い。ナノ構造制御もできる。

短所: ①と比べると材料の探索領域が狭くなる

③ デバイス作製モード



特徴: 自動でサンプル、マスクパターンを選択しながらデバイスを作製するもの

長所: 実際に熱電素子を作製して実証試験が可能となる。素子と電極との相性や接合状態についての最適化が可能となる

短所: デバイス化するべき材料が見つかるまで威力を発揮できない

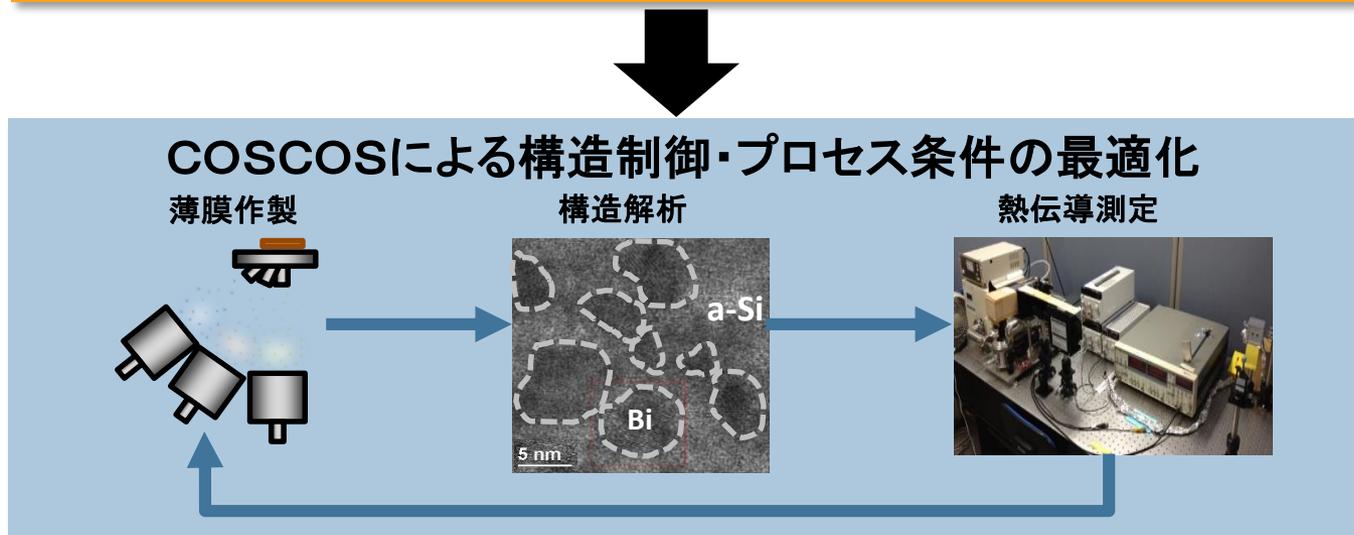
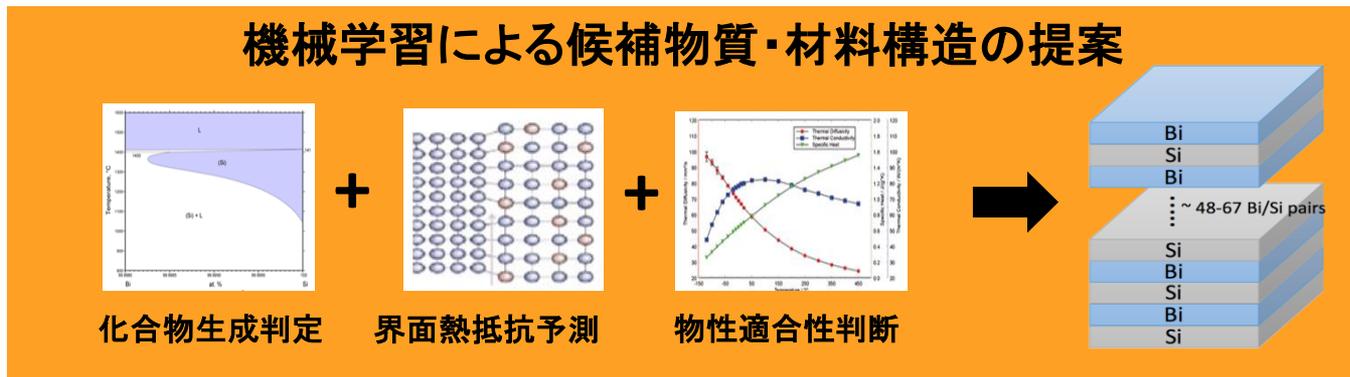
本当に役立つラボ改革なのか？

実績はあるのか？

実績 ①断熱材料

NIMS: 吳彦儒、方蕾、徐一斌、佐々木道子、後藤真宏

目的: ナノ構造と界面熱抵抗を利用して、極低熱伝導率を実現

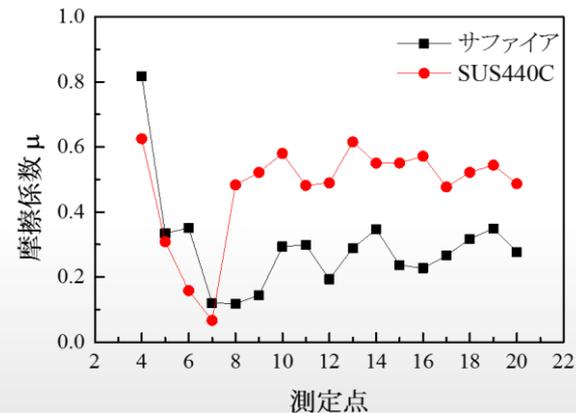
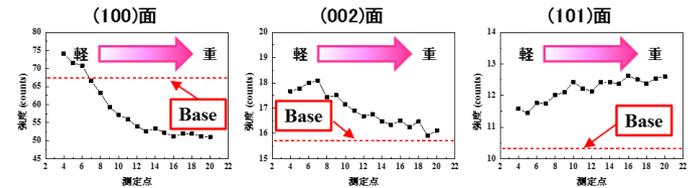
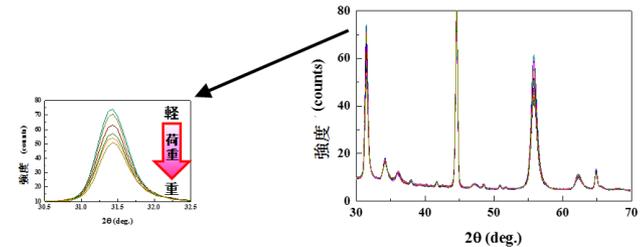
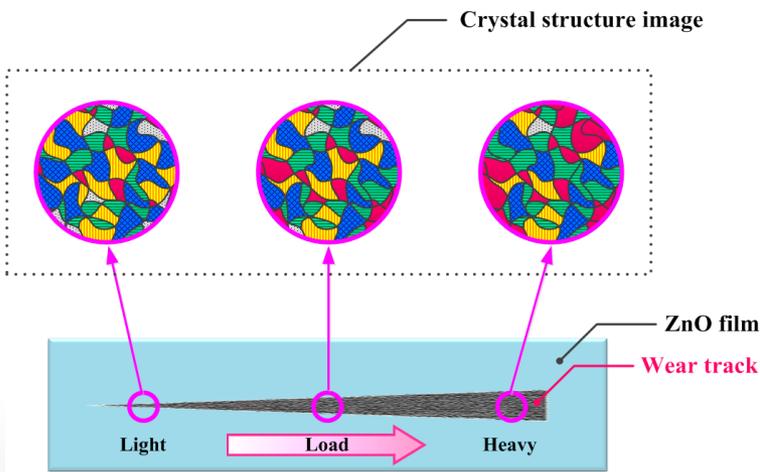
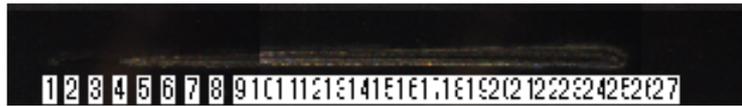


無機材料世界最小熱伝導率を達成！

実績 ② 低摩擦材料

目的: ナノ構造を制御して、ユビキタス酸化物で低摩擦を実現

コンビナトリアルZnO結晶配向性制御



1回のコンビナトリアル実験で、低摩擦現象を発現する結晶配向性を決定

実績 ② 低摩擦材料

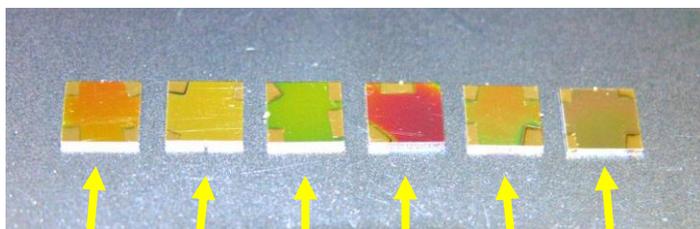
広範囲探索

探索

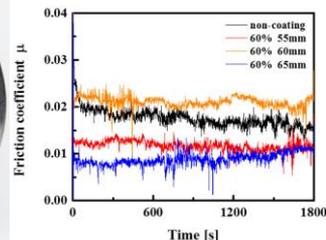
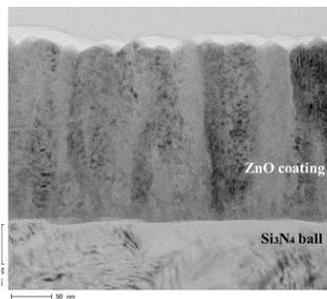
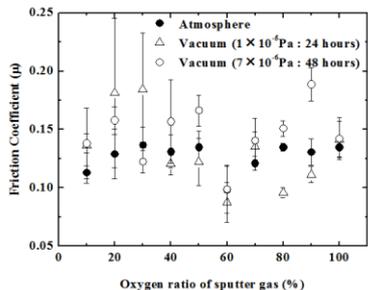
実材料化

デバイス化

ZnO酸素分圧変化

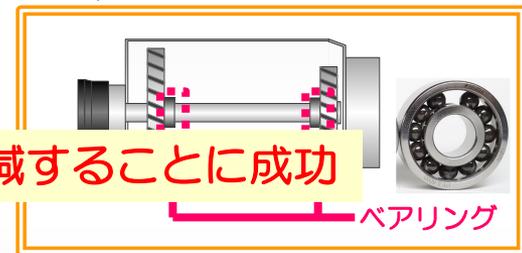


O₂/Ar 100% 80% 60% 40% 20% 0%



燃料消費量を1%削減することに成功

マイクロガスタービンを用いたベアリングの性能試験の実施（燃料消費量、トルク、温度、内部圧力など諸条件を測定）



災害用小型発電機の開発に成功！



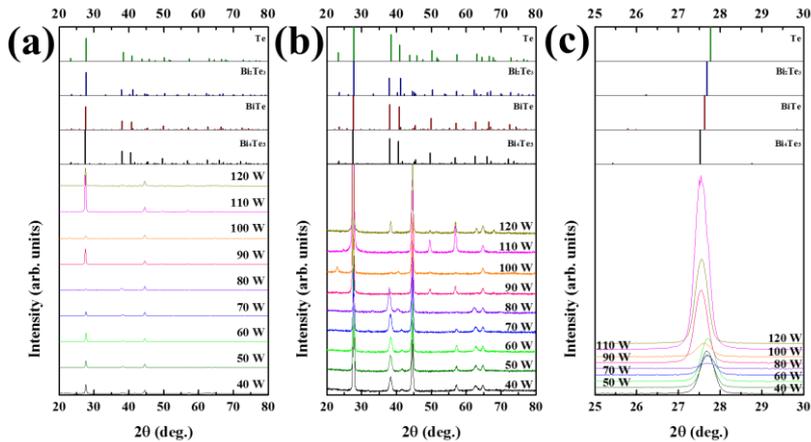
結晶構造・配向の最適化による低摩擦現象の発見！

ユビキタス酸化物低摩擦材料の発見から産業応用まで！

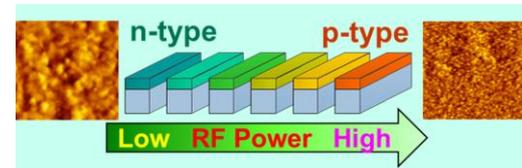
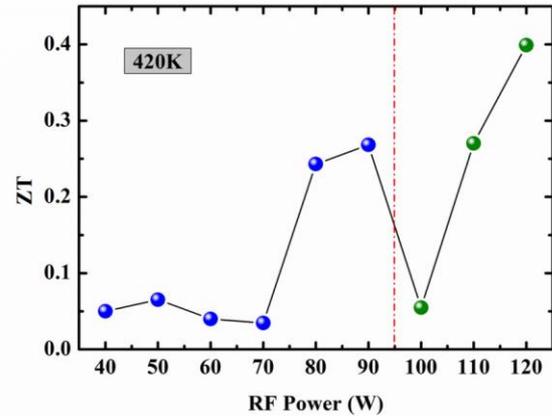
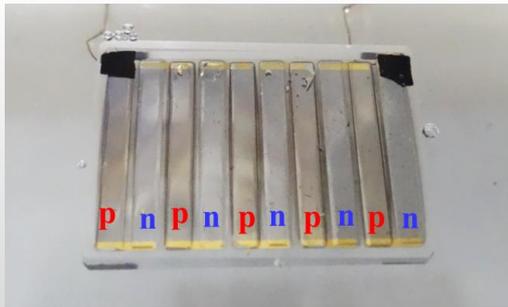
実績 ③ 熱電材料

目的: 結晶構造・配向制御を利用して、熱電材料の高効率化を実現

例: Bismuth Telluride



結晶構造・配向の連続変化



p,n型変化と効率の最適化



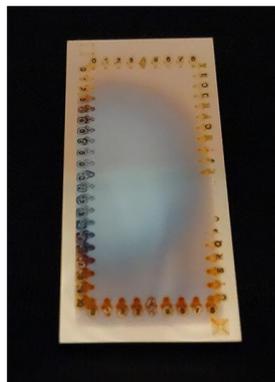
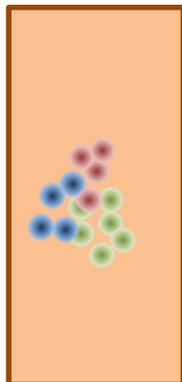
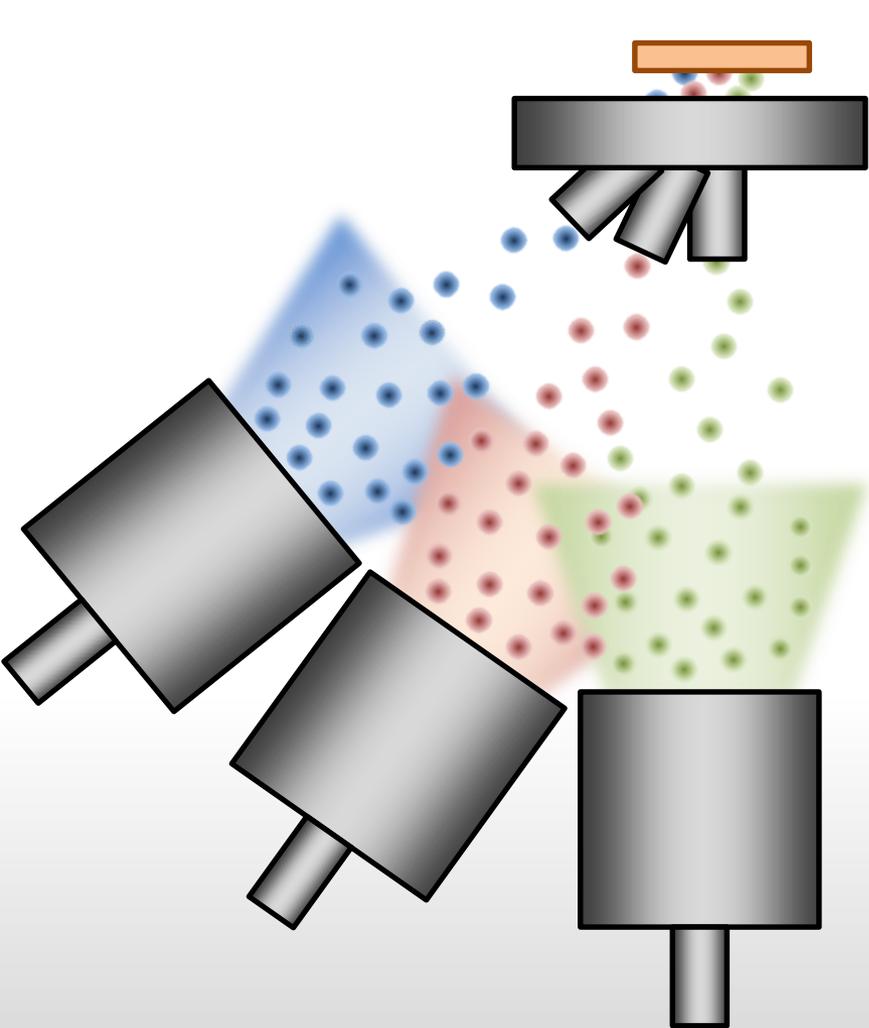
薄膜熱電素子の作製

後藤真宏、佐々木道子、徐一斌、他3名、特願2009-59154

Applied Surface Science, 407 (2017) 405-411

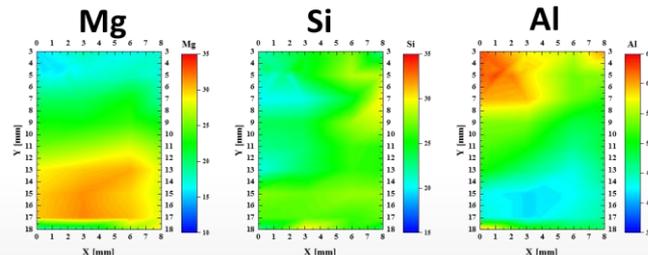
実績 ③ 熱電材料

目的: 未知の高性能熱電材料の探索

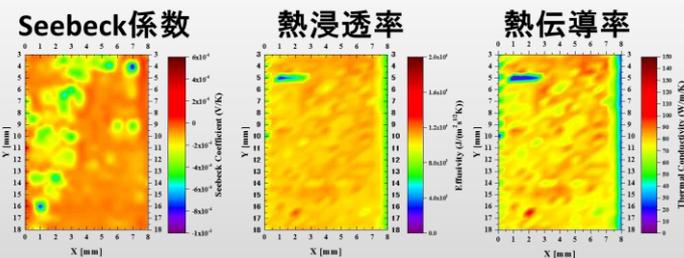


コンビナトリアルスパッタ方法及び装置
特願2016-251841

各種物性マッピングデータ取得例



探索中



まとめ

コンビナトリアルテクノロジーとマテリアルズ
インフォマティックスの融合によるラボ改革は、
あらゆる分野の新材料を短期間で見出すこと
を可能とする