

巻頭言

人工知能とビッグデータとフラックス成長

Artificial Intelligence, Bigdata, and Flux Growth

中山 将 伸*



本誌の読者の皆様には馴染みのない名前かと思えます。専門をリチウムイオン電池の材料研究とし、実験屋出身ですがここ10年は材料計算を研究手段の軸にすえて活動をしています。どうぞ宜しくお願いします。縁あって巻頭言を執筆する機会を頂戴しましたが、これまで必ずしもフラックス成長の研究に軸足を置いてきたわけではないため、何を書こうか悩んでおりましたが、異分野の人間がフラックス成長研究に対して持つ興味という視点で、個人的所感を述べさせていただきます。

フラックス成長は、異分野の人間からは無機化学分野における合成法の一つという位置づけに矮小化されることもあるかもしれません。しかし、産業界では半導体シリコンの製造に欠かすことのできない重要なテクノロジーです。半導体産業は海外に対する競争力を失っているように見える一方、わが国におけるシリコンウェハ製造は世界市場の半分以上を占有し、単結晶やウェハを作るための装置産業にもその恩恵が波及していると聞き及んでいます。シリコンを引き合いに出したのは、著者が約20年前に大学院修士を修了後に、シリコンウェハ製造シェア1位であった信越化学工業社に入社した縁があったためです(所属は別部門ですが)。当時、ウェハ径が300 mmになったところだと記憶していますが、「現在はどうかのかな?」とネットで調べてみると現在も300 mmが主流ということで、ウェハ径も変わらないまま20年間も国際産業競争力をキープしてきたというのはある種の驚きです。素人ながらに想像するのは、高度な熟練の技術やノウハウの蓄積と、地道なカイゼンの追求の結果だと想像しています。おそらくフラックス成長に関わる研究開発は長い目でコツコツと技術蓄積しなければいけない分野であり、しかし得られた成果は長い期間にわたって国の産業の礎になるものと考えています。

アメリカ合衆国前大統領のオバマ氏は、材料・素材産業全体においても、上述した「熟練」や「ノウハウ」といった研究開発過程の長大化という課題と、産業界への大きな波及効果の重要性を認識して、2012年にMaterials Genome Initiativeと呼ばれる研究体を設立しました。材料の研究開発を効率化・高速化するために、データベースや材料計算技術、そしてインフォマティクス(情報学)などを統合した研究領域「マテリアルズ・インフォマティクス」をつくるという構想です。最近のニュース用語で平たく言えば「人工知能とビッグデータで材料研究をしよう」となるかもしれません。著者も、わが国で2015年から始まった情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi²i)に参加し、材料計算と情報学に基づいて膨大な結晶構造データベースから蓄電池材料を探索しようという課題に取り組んでいます。しかし研究をすすめるにつれて論文に書くようなデータは出せるけど、産業に直結するような手法論が出来るのかという点では、どんどんとゴールが遠ざかるような錯覚に陥ります。諸々を省いて結論を言えば、現状の材料計算で扱えるスケールが限定されていることが致命的ではないかと思っています。著者が主として扱っている電子構造計算では、高々数百原子のサイズの系しか取り扱うことができないのですが、材料機能を予測するにはバルク・粒子・組織・複合体とマルチスケールで議論する必要がありますと痛感しています。

その点で、フラックス成長は産業的重要性だけではなく、マルチスケールという学問領域を開拓する上で魅力的な分野に映ります。フラックス成長ではバルクの組成・構造(原子・格子スケール)のみならず、粒子の晶癖(ナノ~ミクロンスケール)を精密制御することで材料機能を発現させるというマルチスケール性があり、更に単結晶精度の高いクオリティのデータが期待できます。また、通常の固相反応では大気中の雰囲気構成す

る元素の化学ポテンシャルしか制御できないが、フラックス法は任意に反応場における元素の化学ポテンシャルを制御できる稀有な手法です。現実の晶癖の制御はこのような化学ポテンシャル制御の結果といえ、自由度の高い研究が可能になっている(そのためにノウハウの蓄積が重要となっている)分野ではないかと推察しています。その点でまさにマテリアルズ・インフォマティクスの研究分野確立に必要な要素を兼ね備えた分野と考えられます。

もちろん、フラックス成長研究分野で長年にわたり蓄積されてきたノウハウを、新規参入でいきなり研究テーマ化しようと思っても火傷するのは目に見えています。それでもなお、自分自身の課題にたいしての突破口になるような知識があるのではないかという直感もあり、まずは横目で研究会の活動をチラチラ眺めながら自分自身のテーマに対して何か横断的な接点が無いかと勉強しているところです。

*Masanobu NAKAYAMA, 名古屋工業大学フロンティア研究院, 物質・材料研究機構(NIMS/MaDIS/Mi²i)