

紹 介

NIMS- 三菱マテリアル情報統合型材料開発センターの取り組み

山口 健志

MMC-NIMS Center of Excellence for Materials Informatics Research

Kenji YAMAGUCHI

Abstract

Mitsubishi Materials Corporation (MMC) and the Japanese National Institute for Materials Science (NIMS) established the MMC-NIMS Center of Excellence for Materials Informatics Research in 2020. In this chapter, an overview is provided of the background and process leading to the establishment of the center, the considerations for selecting themes during actual activities, and the results achieved over nearly five years of operation.

キーワード：NIMS, マテリアルズインフォマティクス, CoE

1. 背景とセンター設立の経緯

現在ではマテリアルズインフォマティクス (Materials Informatics: MI) と称される数理統計学的手法を材料開発に適用する試みは 20 世紀末から見出されるが^{1,2)}、コンピュータの演算能力の飛躍的発展に伴って可能となった大量のデータ収集、分類、それらに基づく帰納的な知見による材料科学的研究の遂行、すなわちデータ駆動型材料開発による新規材料発見の期待やその重要性は、2011 年米国オバマ政権による Materials Genome Initiative (MGI) が契機となって改めて認識されるに至った²⁾。我が国においても MGI の動きを受けて 2015 年国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS) に情報統合型物質・材料研究拠点 (Mi2i) が設立され、2020 年 3 月の終了まで我が国における MI の普及・発展をリードした³⁾。当社も Mi2i が主導するコンソーシアムに 2018 年から参加し、紹介された事例などを参考にしながら、いくつかの取り組みを行った^{4,5)}。

Mi2i コンソーシアムが終盤となった 2019 年の暮れ、当社での材料開発加速に資する MI の取り組みの次なる打ち手を模索していた筆者は、たまたま参加した NIMS フォーラムにおいて、本特集号の巻頭言をお願いした出村雅彦先生にお会いし、そのご見識に感銘を受け、改めて当時の研究所長磯部毅、銅合金開発の責任者森広行、分析評価部門の二田伸康、CAE の川合俊輔らと共に NIMS の出村先生の研究室を訪問した。この訪問が NIMS- 三菱マテリアル情報統合型材料開発センター設立のきっかけとなり、途中コロナ禍の勃発による思いもよらぬ障害に見舞われたが、諸準備を進めたうえで 2020 年 6 月の設立を迎えることができた。

2. NIMS- 三菱マテリアル情報統合型材料開発センターにおける研究課題

研究課題の選定に当たっては、当社から①当社製品・プロセスへの適用を目指したデータ駆動型研究、②データ科学に基づくことで属性を排した最先端の分析評価設備によるデータ取得技術、③量子技術や先進的なシミュレーション手法による数値データ取得技術、の 3 つの観点でテーマ検討、NIMS 側研究者とのマッチングなどを経て、具体的な複数のテーマでの共同研究の遂行に至った。①のみならず②③を入れたのは「データ駆動型研究」のまさしく「素材」であるデータの取得が、NIMS の最先端の研究活動を支えているという当社側の理解に基づき、当社研究員も具体的に関与して習得させたいという考えで設定した次第であった。また「データ駆動型材料開発」とは、ものづくりを遂行するにあたって現れる種々のパラメータの目的に対する最適化であるとの理解に基づき、①においてはプロセス開発の課題も入れた。

さて、このような設立準備を進めて 2020 年 6 月 5 日正式発足日にプレスリリース⁶⁾にて『本開発センターでは、NIMS の情報統合型材料開発基盤に、MMC が材料開発において蓄積した実験データや解析モデル、経験則等さまざまな要素を融合させることで、複数の素材・プロセスの組み合わせによって製造される実用材料の性能・寿命等を予測する情報統合型材料開発システム（以下「本システム」）を構築してまいります。具体的には、2025 年までに非鉄金属、薄膜材料、無機有機複合材料等を対象とした本システムの構築を目指します。』と打ち出した次第であった。詳細は本特集号での各記事をご覧いただきたいが、2025 年 3 月までの 5 年弱の活動を経て、銅固溶

合金の添加元素を機械特性と電気伝導特性のバランスのみならず、コスト、安全性の観点で総合的に比較した結果、当社開発合金に用いられる Cu-Mg が最も優れた組み合わせであると示したこと⁷⁾、機械学習を適用した銅めっきの平坦性改善のためのプロセスパラメータ最適化⁸⁾、3 次元構造の複雑な流路を持つ系のモデル化及び熱流体解析技術に基づく AI 製多孔体金属の熱交換過程の解析⁹⁾、量子アニーリングと機械学習を組み合わせた最適化手法の開発とその光学ナノ結晶の多層膜構造設計への応用¹⁰⁾、機械学習ポテンシャルを用いた表面吸着構造の高速最適化¹¹⁾、粒界判定¹²⁾ やスペクトル分解¹³⁾など従来は属人性に左右された分析技術に機械学習を適用することにより、属人性を排したデータ取得を可能としたこと、アトムプローブ¹⁴⁾ や EELS¹⁵⁾ など NIMS の最先端の設備と解析技術をフルに活かした当社開発材料の分析評価など、NIMS 側共同研究者の皆様のご協力により多彩な成果を上げられた。一方で当初目指した「システム」を名乗るほどの統合的かつ包括的な体系が得られたとは言い難いというのが正直なところである。当社内での研究テーマの改廃に合わせて、年度毎に設定した課題を通じて、個々の成果をまとめ上げて行ったというのが実情であった。当社が中期経営戦略 2030¹⁶⁾ に示した人事戦略において掲げる『人材の価値最大化』『共創と成長を生み出す基盤の構築』の一端を担うべく、得られた経験を元に当社研究員が獲得した技術を自律的に活用できる素地が得られたことが、最終的に大きな成果であったと考えている。

3. おわりに

2020 年 6 月のコロナ禍初期に設立した NIMS- 三菱マテリアル情報統合型材料開発センターは、当社中央研究所（現イノベーションセンター）の中心拠点がある茨城県那珂市と NIMS の所在するつくば市が同一県内であることから、比較的人流の制限が少なかったことも幸いし、参画した研究員の多くが貴重な経験を積むことが出来た。改めて NIMS 側関係各位に感謝の意を表したい。

文 献

- 1) 棚田東作, 荒川正幹, 西村竜一, 船津公人, *J. Comput. Aided Chem.*, **1**, 35–46 (2000).
- 2) 知京豊裕, 情報知識学会誌, **27**(4), 297 (2017).
- 3) <https://www.nims.go.jp/MII-I/>.

- 4) 倉田悠都, 三菱マテリアル中央研究所 R&D レビュー, **9**, 39–41 (2020).
- 5) K. Kanahashi, M. Urushihara and K. Yamaguchi, *Sci. Rep.*, **12**, 11159 (2022); 漆原誠, 山口健志, 三菱マテリアルイノベーションセンター ものづくり・R&D レビュー, **2**, 23–29 (2023).
- 6) <https://www.mmc.co.jp/corporate/ja/news/press/2020/20-0605.html>.
- 7) K. Yamaguchi, T. Ishigaki, Y. Inoue, S. Arisawa, H. Matsunoshita, Y. Ito, H. Mori, K. Suehiro, K. Maki, K. Nagata and M. Demura, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods*, **3**, 2250704 (2023).
- 8) R. Tamura, R. Inaba, M. Watanabe, Y. Mori, M. Urushihara, K. Yamaguchi and S. Matsuda, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods*, **4**, 2416889 (2024).
- 9) S. Kawai and I. Watanabe, *Appl. Therm. Eng.*, **249**, 123375 (2024).
- 10) M. Urushihara, M. Karube, K. Yamaguchi and R. Tamura, *Adv. Photonics Res.*, **4**, 2300226 (2023).
- 11) M. Urushihara, K. Yamaguchi and R. Tamura, *AIP Adv.*, **14**, 125008 (2024).
- 12) D. S. Bulgarevich, M. Sakaguchi, N. Nita and M. Demura, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods*, **4**, 2423599 (2024).
- 13) H. Okumura, H. Shinotsuka, R. Murakami, K. Nagata, S. Okamoto, M. Sato, S. Oshima, M. Mita, A. Nii, N. Nita and H. Yoshikawa, *J. Surf. Anal.*, **31**, 234 (2025).
- 14) N. Kon, N. Nita, J. Uzuhashi and T. Ohkubo, *Microsc. Microanal.*, **30**(Suppl. 1), 104–106 (2024).
- 15) J. Kikkawa, A. Nii, Y. Sakaniwa, N. Kon, M. Sakamaki, T. Ohashi, N. Nita, K. Harano and K. Kimoto, *J. Chem. Phys.*, **159**, 174708 (2023).
- 16) <https://ssl4.eir-parts.net/doc/5711/tdnet/2234936/00.pdf>



山口 健志 Kenji YAMAGUCHI
開発 TMO 解析領域
主席研究員 博士（理学）