

採用年度	種別	分科細目	採用番号
平成16年度	拠点形成促進型	無機材料・物性	16007

研究交流課題名 (和文)コンビナトリアル手法による新材料開発とその情報化に関する国際協力体制の構築
 (英文) International collaboration on combinatorial materials exploration and its application to informatics

経費支給期間 平成16年4月1日 ~ 平成18年3月31日(24ヶ月)

実施組織

日本側実施組織

拠点機関	独立行政法人物質・材料研究機構
コーディネーター所属部局	ナノマテリアル研究所
コーディネーター職・氏名(フリガナ)	ディレクター 知京豊裕(チキョウ トヨヒロ)
協力機関数	3

相手国側実施組織 1

国名	アメリカ合衆国
拠点機関	ワシントン大学
コーディネーター所属部局	材料工学科
コーディネーター職・氏名	教授 大内二三夫
協力機関数	3

相手国側実施組織 2

国名	ドイツ連邦共和国
拠点機関	マックスプランク研究所(シュツットガルト)
コーディネーター所属部局	金属研究所
コーディネーター職・氏名	研究員 Thomas Wagner
協力機関数	2

本年度の研究交流実績

(共同研究)

ここではアメリカ合衆国とヨーロッパの研究機関との間でインフォーマティクスに関係した国際共同研究を実施した。

研究成果

アメリカ合衆国：NIST との間で、次世代ゲート酸化膜と金属ゲート材料に関する研究を行い、組成傾斜をもつ金属間化合物を使ったメタルゲートの作製と電気特性について系統的な結果が得られた。

ドイツ連邦：マックスプランク研究所と Pt~W の傾斜膜を酸化物である HfO₂ 上に作製し、各組成での金属/酸化物界面の構造を観察し、その界面での反応性を系統的に調べることが出来た。

進捗・交流状況

NIST,メリーランド大学と連携して、国際的なインフォーマティクスに関する取り決めのために、第1回「材料インフォーマティクスに関するロードマップ委員会」をメリーランド大学で開催し、年次開発目標とデータフォーマットの標準化を策定した。

また、材料研究における EU の拠点としてマックスプランク研究所と提携し、人材交流と EU における「材料インフォーマティクス」のためのワークショップを開催することを決定した。

(セミナー)

「第3回コンビナトリアル材料研究とその技術に関する日米ワークショップ」を沖縄で開催し、アメリカ合衆国や EU など国内外の研究者と互いのデータを交換する際の課題とインフォーマティクス構築に関する議論を行った。また、次回の国際会議を2005年にプエルトリコで開催することも決定した。

(研究者交流)

アメリカ合衆国：半導体関連材料および酸化物材料に関するインフォーマティクス構築のために2名の研究員をNISTへ派遣した。ここでは各種メタルゲートの種類を変えたMOS構造を作製し、電気特性の系統的データを取得することに成功した。

NIST,メリーランド大学と連携して、国際的なインフォーマティクスに関する取り決めのための第1回「材料インフォーマティクスに関するロードマップ委員会」を開催し、年次開発目標を策定した。また、ワシントン大学とは人的交流を行い熱電材料に関する三元系酸化物の構造と電気伝導度との関係を調べ3種類の資料について系統的な結果を得ることができた。

ドイツ連邦共和国：金属薄膜の相図および、金属/酸化物界面の反応に関する研究のための研究員を2名マックスプランク研究所に派遣し、相図の理論的取り扱いと今後の方針、Pt-W系二元金属とHfO₂との界面反応に関する5種類の資料の系統的なデータを得ることができた。また、コンビナトリアル合成された酸化物材料のX線回折による構造評価方法に関しても意見交換を行い、今後の共同研究に関しても議論した。

国内連携：「材料インフォーマティクス」構築のためのデータ構造に関する協議を東京工業大学、東京大学、東北大学との連携で進め、標準データ例を掲載したwebsiteを立ち上げた。また、金属、酸化物、半導体材料に関する薄膜系データベース構築を連携して進めている。

年度計画の達成状況（自己評価）

本年度は材料インフォーマティックスのためのコンビナトリアル手法によるデータ収集とそのデータ標準化を提案した。またこの流れを国際的な連携のもとで進めるために、「第3回コンビナトリアル材料研究とその技術に関する日米ワークショップ」を主催した。併せて材料インフォーマティックスにおける標準化の課題とその国際連携に関して意見交換を行った。また、これを受けて「第1回材料インフォーマティックスに関するロードマップ委員会」に参加し、データ標準に関する提案をした。これらの成果は当初この研究計画に沿ったものであり、十分な成果を得ていると結論できる。

次年度以降の展望（計画目標の達成に向けた課題）

初年度は日米間での材料インフォーマティックス構築のための連携体制を確立した。この連携は平成17年度もひきつづき進めるべきものである。しかし、まだ多くのデータ蓄積が必要であり、データフォーマット標準化では課題も残されている。そのために日欧の間での材料インフォーマティックスの国際連携を目指して、マックスプランク研究所と連携し、ドイツでワークショップを開催する。これは物質・材料研究機構の材料開発とマックスプランク研究所のもつ材料の高速評価手法とのより深い連携を目指すものであり、場合によってはEUのいくつかの研究機関などでコンビナトリアル研究を進めている機関からの参加も促すものである。これにより日米欧での材料インフォーマティックスに関する基本的なデータ標準化が確立することになる。