

先端研究拠点事業  
事業実績報告書

採用年度	平成16年度
種別	拠点形成促進型
分科細目	5402
採用番号	16007

領域・分野	拠点形成促進型 無機材料・物性
分科細目(分科細目コード)	5402
採用番号	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
研究交流課題名(英文)	International collaboration on combinatorial material exploration and its application to informatics
採用期間	平成16年 4月 1日 ~ 平成18年 3月31日(24ヶ月)

《実施組織体制》

日本側

拠点機関名	独立行政法人物質・材料研究機構
実施組織代表者(職・氏名)	ナノマテリアル立体配置グループ ディレクター 知京豊裕
コーディネーター(職・氏名)	ナノマテリアル立体配置グループ ディレクター 知京豊裕
協力機関数	3 機関
参加者数	63 名

相手国 1

国名	アメリカ合衆国
拠点機関名	ワシントン大学
実施組織代表者(職・氏名)	工学部材料工学科 教授・大内二三夫
コーディネーター(職・氏名)	工学部材料工学科 教授・大内二三夫
協力機関数	3 機関
参加者数	8 名

交流相手国が複数の場合、適宜、枠を追加して記入すること。

相手国 2

国名	ドイツ連邦共和国
拠点機関名	マックスプランク研究所
実施組織代表者(職・氏名)	金属研究所 室長・Thomas Wagner
コーディネーター(職・氏名)	金属研究所 室長・Thomas Wagner
協力機関数	1 機関
参加者数	4 名

## 交流目標の達成（見込）状況

全交流期間を通じての達成目標（申請書で示された内容と同一のもの）

創薬の分野で広く普及したコンビナトリアル手法は材料分野に応用されつつある。特にわが国では東京工業大学、物質・材料研究機構を中心とし、薄膜からガラス材料まで幅広い材料開発にコンビナトリアル手法を適用し材料の高速合成と材料評価手法の開発で世界をリードしてきた。しかし、コンビナトリアル材料研究に求められている本質は、これらの合成・評価によって生まれた成果から、新しい材料、特性を予測する「イオンフォーマティックス」の構築である。これは材料科学の世界と情報科学との融合を目指す新しい試みでもある。しかし、材料は同じ材料でも多面的な特性を持っているために「イオンフォーマティックス」の構築は有機物質などに比べて容易ではない。また、データベースとして使用する際には国際的な標準化を念頭においた戦略が必要である。今回の提案は、多様化し、高速化する材料開発のための「材料データベース」の作成を国際協力の下に進め、国際的な「イオンフォーマティックス」の基本構造の構築を我が国が中心となつて目指すものである。

交流目標の達成状況

**A 学術的な成果：**本研究に於ける最大の成果は、マテリアルイオンフォーマティックスにおいて国際標準の基盤となるデータ形式を我が国から発信し、それが国際的に認知されたことである。マテリアルイオンフォーマティックスは、これまでのデータベースと異なり、大量かつ多様な実験データ、材料データを扱い、材料の合成から構造、多様な特性を扱うデータの集合体である。そのためにデータの拡張性や汎用性、異なる環境でもデータ交換できることなど、多様な条件を満たす必要がある。そのために、東京大学 Lippmaa 教授を中心としてメークアップ言語である XML を使ったデータ形式を提案し、それを「コンビナトリアル材料科学に関する国際ワークショップ」「ゴードン会議」「米国材料学会」等で提案した。また、「第1回材料イオンフォーマティックスに関するロードマップ委員会」を米国で開催し、マテリアルイオンフォーマティックスに関するロードマップを策定した。その結果、このデータ形式の汎用性が認められ、まず、米国メリーランド大学との間でこのデータ形式を使った互いの材料データ交換が実現し、その後、同大学と本プロジェクト参加機関で作製、評価されたコンビナトリアル材料データの web を介した交換の試みが進められている。また、同大学で開発された X 線構造解析データを 3 次元的に視覚化するソフトウェアもこの web 上で公開され、自由に使える環境を整備した。この web サイトはネットワーク上の安全が確保された後、06 年 4 月中旬に公開予定である。

また、本事業ではコンビナトリアル材料科学とマテリアルイオンフォーマティックスに関する国際共同研究を支援してきたが、その中で米国 NIST との間において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、組成傾斜を持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。さらにこの研究は、ドイツマックスプランク研究所との間で構造評価が行われ、Pt-W の傾斜膜を酸化物である  $\text{HfO}_2$  上に作製して、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。これらの成果は次世代集積回路における金属ゲート材料選択の指針を与える成果となっている。以上の他にも、酸化物材料に関する多くの成果がこの拠点形成事業から生まれた。また、国際会議の主旨を通じて、海外の研究事情を我が国に紹介した。これらの成果の一部は Applied Surface Science 252 2445-2646 (2006) にまとめられている。

**B 若手研究員の育成の成果：**本事業を通じて、若手研究員が海外にて共同研究をする機会と国際会議に参加することを支援した。その結果、若手研究者が海外機関で研究員として採用されるなど国際交流の機会を与えることとなった。

**C 国際的学術情報の収集と整備：**マテリアルイオンフォーマティックスに関する連携は続いており、本事業に関係した国内、国際機関を中心に XML ベースのデータ形式を用いた国際マテリアルイオンフォーマティックスが構築されつつある。これによりコンビナトリアル材料合成とそれによって得られる結果にアクセスできる環境を整備することができた。

**D 事業の波及効果：**2006 年、ヨーロッパ連合 (EU) は“TOPCOMBI”という多国間のプロジェクトを開始したが、そこでも本拠点形成事業で提案したデータ形式への対応が検討されている。このプロジェクトとの共同研究に関する会議では、今後、データマイニングにおけるソフト開発の協力を進めていくことで合意を得ることができた。

コンビナトリアル材料科学とマテリアルイオンフォーマティックスは今後、材料科学の新しい潮流になる。しかし、有効で膨大な材料データを蓄積するという観点からすると、この作業は単独の機関では不可能であり、国内はもちろん国際協調のもとでの長期的な作業が必要である。我が国では、残念ながらこの分野の重要性の認識が諸外国に比べて低いのが現状である。すべての製造産業の基盤は材料にあることと今後の材料戦略を考えると、我が国でも革新的な材料開発が期待できるコンビナトリアル材料科学とマテリアルイオンフォーマティックスの重要性を強く認識し、特に無機材料の研究開発に関しては系統的なデータの蓄積を急ぐ時期に来ている。

## 実施状況

### 研究交流計画実施にあたる実施体制

米国：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、1名の研究員をNISTへ派遣した。ここでは3種類の金属の組成比を変えたMOS構造を作製し、電気特性を系統的データに取得することを行った。ワシントン大学とはNSF予算により大学院生を物質・材料研究機構に受け入れ、三元系酸化物熱電材料に関する各種薄膜材料の電子構造に関して系統的な結果を得ることができた。

ドイツ：材料インフォーマティクスの構築を目的として、マックスプランク研究所と物質・材料研究機構とのミニワークショップを開催した。また、金属薄膜、酸化物薄膜の相図作成と結晶構造データ蓄積を目的として、研究員を2名マックスプランク研究所に派遣し、コンビナトリアル合成された酸化物材料の構造評価方法に関しても意見交換と構造評価に関する実験を行った。

### 日本側拠点機関における研究交流課題への取り組み（事務支援体制等の観点より）

「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、東北大との連携で進め、本プロジェクトで提案するコンビナトリアルデータフォーマットを使ったデータの蓄積とデータサーバー間のデータ共有を進めた。そのwebsiteはネットワーク上の安全を確保した後に06年4月に公開予定である。また、酸化物材料に関するデータ共有の基礎として、コンビナトリアルX線回折による計測を義務付け、全ての材料データが最低限X線データでリンクできるシステムを構築した。当該webサイトの開設では物質・材料研究機構広報室（ネットワーク管理室）の支援を受けるとともに、本拠点形成事業の遂行に当たっては総務部業務推進課の支援を受け、それらの事務的支援を助力として、本事業を円滑に進めることができた。

## 共同研究

本事業では、米国と欧州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

米国：NISTとの間で、次世代ゲート酸化膜であるHfO<sub>2</sub>上の金属ゲート材料に関する研究を行い、Pt-Wの連続組成傾斜膜を用いて、仕事関数を変化させたときの金属/HfO<sub>2</sub>/Si(100)界面の電気特性を評価した。その結果、HfO<sub>2</sub>の電荷中性点を境にして電気特性が大きく変化することを実験的に証明した。また、ワシントン大学とはTiO<sub>2</sub>-CoOと他の酸化物を混合させた試料を物質・材料研究機構で作製し、その電子構造を光電子分光により評価し、材料インフォーマティクスのための基礎データを収集した。

ドイツ：物質・材料研究機構で作製したNiO-CuO-MnO系3元酸化物材料に関する構造評価をマックスプランク研究所と共同で行い、3元領域に於ける構造評価を30μmの精度を維持しつつ短時間で行うことができた。この手法は、今後のコンビナトリアル試料の高速構造評価手法として有効であることがわかった。また、CeO<sub>2</sub>系次世代ゲート絶縁膜に関する結晶構造のデータなど、これまでわかっていなかった原子の配置も解明することができた。

### 進捗・交流状況

米国メリーランド大学で開催された「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」における取り決めに基づき、機関間でデータを共有するためのデータフォーマットを提案した。このデータフォーマットを使い、メリーランド大学、物質・材料研究機構と東京大学間でデータ共有と構造解析の実験を行った。また、メリーランド大学は共有されたX線回折データを解析するためのソフトを開発し、機能の一部をwebサイトで使えるようにした。

## セミナー

コンピナトリアル手法とマテリアルインフォマティクスという新しい材料科学のために、今回の研究プロジェクトでは、まず、様々な分野でコンピナトリアル材料研究を進めている世界の研究者を集めて、2004年12月8日～10日に沖縄にて「コンピナトリアル材料科学に関する国際会議」を主催した。ここでは特に、異分野間の材料情報をどのようにして交換するかに関して活発な意見交換が行われた。その結果、それぞれの研究分野のデータがどのようなもので、それらを交換する際にはどのような問題が生じるかが明らかとなった。その後、同会議に参加した機関間で研究者の交流を行い、実際の材料合成や試料の交換、計測など現場での意見交換を促進した。特に、ワシントン大学、NIST、マックスプランク研究所など本プロジェクトと関係のある機関とは積極的に研究者交流を行い、コンピナトリアル材料データを機関間で共有するための試料交換、情報交換を進めた。これらの結果を踏まえて、東京大学のLippmaa先生を中心に「マテリアルインフォマティクスにおけるデータ形式はどうあるべきか」を検討した。

検討の結果、コンピナトリアル手法で得られた材料データは個々の研究機関の持つデータサーバに蓄積し、それらのサーバが互いにリンクされてひとつの巨大な仮想データベースを構築することを最終目標とした。この際、最も便利で現実的な手法は Web 技術を用いることである。材料データを収集する場合、これまで特定分野における材料の種類とその特性など決まったデータだけを集めてデータベースにすることが行われてきた。しかしながら、これでは異分野間の情報交換はできない。また、既存のデータベースは過去の実験結果のみを集めてきた「データコレクション」の傾向があり、研究開発の段階で知りたい合成条件や計測手法などの項目が含まれていないことが大半である。以上を考慮して本プロジェクトでは、1) 材料の合成条件もデータとすること、2) 異分野間の方法交換をするための共通のデータとしての X 線による構造解析を必ず行うこと、3) 不特定の評価結果を交換する際に、データの拡張性に優れる XML という形式で書かれたデータ形式にすることなどの条件を定めた。この形式は 2006 年 1 月に開催された「第 1 回インフォマティクスに関する国際ロードマップ委員会」、同年 7 月のマックスプランク研究所 - 物質・材料研究機構ワークショップ、同年 8 月 15 日～19 日までイギリスのケンブリッジで開催された「コンピナトリアル材料科学に関するゴードン会議」で発表し、各研究グループから評価を得ることができた。さらに、この方式は同年 12 月 5 日～9 日まで、米国ボストンで開催された米国材料学会 (Material Research Society (MRS) Fall Meeting) において、本プロジェクトに関係した多くの講演とともに発表した。現在、このネットワークを核にして国際的なマテリアルインフォマティクスのためのシステム構築が始まっている。この web サイトは情報交換に関する安全性が確保された後、06 年 4 月に公開予定である。

## 研究者交流

米国：半導体関連材料および酸化物材料に関するインフォマティクス構築のため、物質・材料研究機構より研究員を NIST へ派遣した。ここでは 3 種類の金属の組成比を変えた MOS 構造を作製し、電気特性を系統的データに取得することを行った。ワシントン大学とは NSF 予算により大学院生を物質・材料研究機構に受け入れ、三元系酸化物熱電材料に関する各種薄膜材料の電子構造に関して系統的な結果を得ることができた。

ドイツ：材料インフォマティクスの構築を目的として、マックスプランク研究所と物質・材料研究機構とのミニワークショップを開催した。また、金属薄膜、酸化物薄膜の相図作成と結晶構造データ蓄積を目的として、研究員を 2 名マックスプランク研究所に派遣し、コンピナトリアル合成された酸化物材料の構造評価方法に関して意見交換と構造評価に関する実験を行った。また、有機材料に関する研究のために物質・材料研究機構より研究員をドイツに派遣した。

国内連携：「材料インフォマティクス」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、東北大との連携で進め、本事業で提案するコンピナトリアルデータフォーマットを使ったデータの蓄積とデータサーバ間のデータ共有を進めた。このデータは Web 上で 06 年 4 月に公開予定である。