

先端研究拠点事業 - 拠点形成促進型 -

平成17年度 実施計画書

採用年度	平成16年度	採用番号	16007	系	拠点形成促進型	分科	5402
------	--------	------	-------	---	---------	----	------

研究交流課題名 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

International collaboration on combinatorial materials exploration and its application to informatics

研究交流課題に係るホームページ：<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/frontier/mlippmaa/combi/>

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)

先端研究拠点事業としての全期間（経費支援終了後5年間を含む）を通じた交流目標

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。しかし、コンビナトリアル材料研究に求められ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。この研究事業では、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クス」の基本構造の構築を我が国が中心となって進めることを目標とする。

前年度までの交流活動による目標達成状況

材料イオンフォーマティクス構築の観点から、酸化物材料に関してワシントン大学と、次世代ゲート絶縁膜に関してNISTとそれぞれ研究員を派遣して共同実験を行った。また、マックスプランク研究所とはコンビナトリアル手法で合成した多元系金属とゲート絶縁膜界面研究に関して研究員を派遣し共同研究を実施した。さらに、各種材料に関する知見の収集の観点から研究員をEUの複数の研究機関とアメリカで開催された国際会議に派遣し、本事業の紹介とイオンフォーマティクスへの参加を呼びかけた。この他、材料イオンフォーマティクスのデータ形式とデータ構造の国際共有化の観点から沖縄でワークショップを開催し、金属、セラミクス、有機材料などにおけるイオンフォーマティクスの問題点を議論して今後10年間のロードマップを作成した。

本年度の交流計画の概要

(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するデータベース作成に関する共同研究を進める。

アメリカ合衆国：

昨年度に引き続き、アメリカ合衆国の研究機関としてワシントン大学とは酸化物熱電材料に関して、メリーランド大学とは酸化物誘電体に関して、アメリカ標準研究所(NIST)とはゲート絶縁膜やゲートスタック構造に関して、引き続き研究を進める。また、本年度はノースカロライナ大学との間で金属磁性体に関する共同研究を進める。本年度も以上の分野を中心にコンビナトリアル手法によるデータ収集を各機関と連携して進めるが、特に NIST とは物質・材料研究機構との包括協定に基づき金属/酸化物界面の構造と電気的特性に関する基礎・基盤技術のデータベース化をさらに進め、次世代電化効果トランジスタ開発のためのデータベースを完成させる。

ヨーロッパ：

マックスプランク研究所との研究協力として進めてきた薄膜系金属材料の3元合金のデータの収集を進める。ここでは計算科学や相図に関する理論を使ってバルク相図と薄膜相図の違いを明確にする。また、有機材料に関する研究も進めるため研究員を派遣し、実験と評価を行う。

(セミナー)

インフォーマティクスに関する意見交換をわが国が中心になって進める観点から、本年度は EU における代表研究機関であるマックスプランク研究所とコンビナトリアル及び材料インフォーマティクスに関するミニワークショップを開催する。

また、アメリカ合衆国ボストンで開催される Materials Research Society (アメリカ材料学会) において、” Combinatorial and Artificial Intelligence Methods in Materials Science ” を主催し、各方面からコンビナトリアル材料データ、高速材料評価方法、データの視角化の方法とデータ解析法、人工知能を使った材料予測に関して意見交換をする。

(研究者交流)

コンビナトリアル手法による材料探索と材料インフォーマティクスの構築のため、研究員をワシントン大学、メリーランド大学、NIST、ノースカロライナ大学、マックスプランク研究所に派遣する。また、これらの機関の近郊でコンビナトリアル材料科学や材料インフォーマティクスに関心のある研究機関も訪問し、材料インフォーマティクスのロードマップを示し、データ形式等の世界標準化を進める。

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
実施組織代表者 職・氏名	ナノマテリアル研究所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 所属部局・職・氏名	ナノマテリアル研究所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
協力機関名	東京工業大学、東京大学、東北大学

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・職・氏名	工学部材料工学科・教授・大内二三夫
協力機関数	3
協力機関名	NIST、メリーランド大学、ノースカロライナ大学

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
コーディネーター 所属部局・職・氏名	金属研究所・室長・Thomas Wagner
協力機関数	1
協力機関名	Ceaser研究所

共同研究による交流計画

【研究課題・テーマ別の内容】

整理番号	H17-1
研究課題・テーマ名	(和文) コンビナトリアル手法によるゲートスタック構造の評価
	(英文) Gate stack characterization by combinatorial method
代表者 国名	アメリカ合衆国
氏名・所属・職	(和文) マーティン グリーン・NIST
	(英文) Dr. M. Green・NIST
17年度の研究計画の予定(特徴及び期待される成果)	<p>1) NIST で作製された HfO₂/SiO₂/Si(100)基板上に物質・材料研究機構のコンビナトリアル薄膜堆積装置を使って Pt-Ta-Ru と Ni-Ta-Ru 系 3 元金属合金を作製する。</p> <p>2) この試料を NIST で I-V, C-V 計測を行い、各組成でのフラットバンドシフト、界面準位密度などを計測する。</p> <p>3) この図と 3 元金属の相や結晶構造を比較して、金属の仕事関数変化と電気的特性の関係を解明する。</p> <p>4) これらのデータをインフォーマティックスとして整理する。</p>

共同研究による交流計画（つづき）

整理番号	H17-2	
研究課題・テーマ名	（和文）コンビナトリアル金属/ゲート絶縁膜/Si 界面評価	
	（英文）Combinatorial characterization of metal/gate insulator/Si interfaces	
代表者 国名	ドイツ連邦共和国	
氏名・所属・職	（和文）トーマス ワグナー・マックスプランク研究所・室長	
	（英文）Thomas Wagner・Max Plank Institute・Group leader	
17年度の研究計画の予定（特徴及び期待される成果）	<p>1）次世代のゲートスタック構造を念頭に置き、Ru系金属合金/HfO₂/SiO₂/SiO₂(100)構造を物質・材料研究機構で作製する。</p> <p>2）各組成の試料を物質・材料研究機構にて透過型電子顕微鏡用試料として加工する。</p> <p>3）この試料をマックスプランク研究所のもつ高分解能超高压電子顕微鏡で観察する。</p> <p>4）この一連の観察結果をまとめ、金属/HfO₂との反応性に関するデータとして材料インフォマティクスに加える。</p>	

整理番号	H17-3	
研究課題・テーマ名	（和文）コンビナトリアル有機合成と構造評価	
	（英文）Combinatorial Organic thin film growth and characterization	
代表者 国名	ドイツ連邦共和国	
氏名・所属・職	（和文）ヘルムート=ドッシュ・マックスプランク研究所・教授	
	（英文）Helmut Dösch・Max Plank Institute・Professor	
17年度の研究計画の予定（特徴及び期待される成果）	<p>1）Si上に介在層を使って有機薄膜のコンビナトリアル合成を物質・材料研究機構にて行う。</p> <p>2）この試料をマックスプランク研究所の高輝度X線回折装置で構造解析をする。</p> <p>3）この結果を用いて、有機デバイス用材料の成長条件をデータベース化する。</p> <p>4）このデータを材料インフォマティクスに加える。</p>	

共同研究による交流計画（つづき）

整理番号	H17-4
研究課題・テーマ名	(和文) 材料データベースの視角化と材料インフォマティクスの構築
	(英文) Materials data visualization and formatting the materials informatics
代表者 国名	日本
氏名・所属・職	(和文) ミック リップマ・東京大学物性研究所・助教授
	(英文) Mikk Lippmaa・University of Tokyo・Associate Professor
17年度の研究計画の予定（特徴及び期待される成果）	<p>1) 物質・材料研究機構、東京大学、東京工業大学、東北大学の4研究機関で集めたデータを一定の形式にする。</p> <p>2) それらの膨大なデータを既存ソフトを使って視角化する。</p> <p>3) それらをつかって材料インフォマティクスの構造を決める。</p>

セミナー開催予定

セミナー名 (和文)	第3回NIMS-MPIワークショップ:「高速材料開発と精密評価の両立」
(英文)	The 3rd NIMS-MPI Workshop on Material Science Topics: "Compromise between Efficient Material exploration and Precise characterization"
開催予定期間	2005年7月25日～27日
開催国・場所(和文)	マックスプランク研究所 シュットガルト研修所
開催国・場所(英文)	Max Plank Institute, Stuttgart, Seminar House
日本側開催責任者(所属・職・氏名)	物質・材料研究機構・ディレクター・知京豊裕
相手国側開催責任者(所属・職・氏名)	マックスプランク研究所・教授・Helmut Dosch
参加者数	31人