

# 材料開発における分析技術への期待



石切山 一彦

企業での材料開発現場では、種々の物性のトレードオフを解消し、物性・品質向上のため、物性発現メカニズムの究明や、物性低下・劣化等の本質原因究明が求められている。まずは仮説を立て、その仮説に基づいて材料を試作し、その妥当性を検証、そして再び仮説を立てて物性向上を図る、というサイクルを高速回転させることによって材料開発を加速させてきた。この仮説検証段階では、材料分析・評価が重要なキーになることも多い。製造工程や研究開発におけるトラブルの問題解決の場合にも仮説を立てて、それを検証するために分析を実施する。ときには仮説成分が微量すぎて検出限界以下であることがあり、仮説を検証できないことがある。分析技術の進歩・発展により、感度や分解能の向上が実現すると、トラブルの原因究明が格段にスピードアップし、短時間で問題解決する。材料・素材にかかわる産業界では分析技術は極めて重要な役割を担っている。

最近、データサイエンスが注目されている。マテリアルズ・インフォマティクスの登場により物性予測がある程度可能になってきた。分子構造から物性への順方向予測だけでなく、その逆方向の予測、すなわち本質原因を究明せずとも目的の物性を有する分子構造を予測でき、高性能の物性を有する材料開発が進展する可能性が拓けてきた。実際、その手法により新規物性を有する化合物を提案・合成し、物性向上を確認したという研究成果が報告され始めている。人工ニューラルネットワーク等のデータサイエンスにより、研究開発の方法はパラダイムシフトするかもしれない。

データサイエンス関連のプログラムライブラリは急速に整備されつつあり、プログラムを簡単に自作できる環境が整ってきている。スペクトルをディープラーニングさせ、学習済みモデルを使って効率的に予測することも可能になってきた。ただし、入力データの品質が重要で、データの前処理を必要とし、それに案外時間と工夫を要する。分析装置からの出力データをそのまま学習させることができれば、効率的かもしれないが、各社のデータ構造が統一されておらず、現状難しい。データの統一化については様々な取り組みが進行しているので、その成果を待ちたい。

JST 元研究開発戦略センター長の吉川弘之教授は、『計測は「mother of science」』と看破されていたと伺っている。いわば「先端分析」には「新たなサイエンス」と「新たな産業」を切り拓く力があり、基礎研究に携わるアカデミアだけでなく産業界にとっても波及効果は大きい。今後、データサイエンスの技術も取り入れ、分析技術が大いに進化・発展することを期待したい。

[Kazuhiko ISHIKIRIYAMA, 株式会社東レリサーチセンター, 近畿分析技術研究懇談会会長]