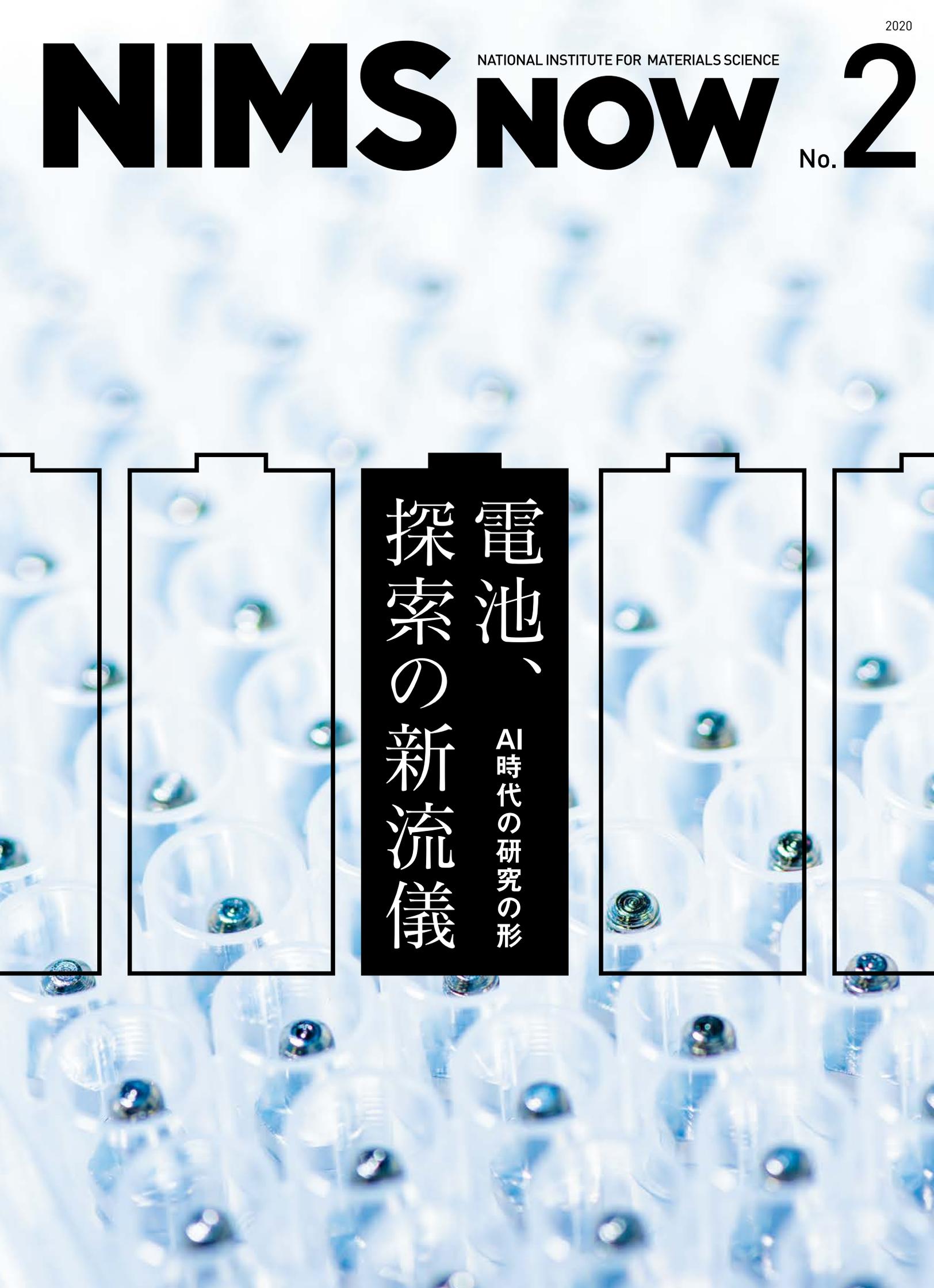


# NIMS NOW No. 2

NATIONAL INSTITUTE FOR MATERIALS SCIENCE

電池、  
探索の新流儀

AI時代の研究の形



# 電池、 探索の新流儀

## AI時代の研究の形

電気自動車が街中を走り、人々がスマートフォン片手に歩き回る。

今や当たり前となった光景を生んだ「リチウムイオン電池」の登場から約30年、一層の大容量化や小型化、ドローンのような軽量化への要求が高まりをみせる今、抜本的に電池を構成する材料を変えるべき岐路に、私たちは立っている。

電池材料の候補は膨大な数に及ぶ上、材料同士の相性も問われる。

この電池が抱える難問に立ち向かう上で、近年導入が進むのが「人工知能(AI)」だ。AIは、人力を超えた探索を可能にするツールとして、急速に存在感を強めている。

だが一方で、それをどう使いこなしていくのか、

電池開発に挑む科学者たちの模索は、まだ緒についたばかりでもある。

電池研究が迎えた新時代。

「実験」や「理論計算」の重要性、“人”の役割、

そして最適な研究の形とは――。

松田翔一主任研究員が開発した「ハイスループット電解液探索システム」の内部。ロボットアームが持ちあげているプラスチック製の「電気化学セル」の各穴(表紙写真)には、正極・負極のシートとそれらを隔てるセパレータが仕込んであり、電解液の注入によって微小な蓄電池サンプルができて上がる(詳細はp8 下開み)。

# どこから来て、どこへ向かうか 電池研究の現在地

## 材料も探索手法も進化する

「リチウムイオン電池の登場からおよそ30年、性能を飛躍的に向上させるには、根本的に材料を変えていかなければならない」

そう語るのは、全固体電池の研究開発に携わってきた高田和典だ。高出力化や小型化、長寿命化、超軽量化。次世代蓄電池に寄せられるさまざまな期待を実現するべく、蓄電池を構成する新たな材料開発に世界各国がしのぎを削っている。

だが、電極と電解質というシンプルな構成ながらも、蓄電池内で起こる化学反応は極めて複雑。求める性能を有する材料を見つけ出すのは決して容易なことではない。

これまで材料探索の手法には、材料科学者の勘と経験による試行錯誤に加え、「計算科学」が活用されてきた。その主力が第一原理計算で、ミクロな世界を支配する量子力学に基づき、原子の間に働く力や電子のふるまいを計算する手法だ。これを、スーパーコンピュータで高速かつ大量に処理し、蓄電池内の化学反応の様子をシミュレーションすることにより、詳細なメカニズムの解明や、新材料の提案がなされてきた。

とはいえ、蓄電池内での化学反応を高精度で計算するには、たとえスパコンを使ったとしても、膨大な時間とコストがかかるのもまた事実。そこで、目的の材料にいち早くたどり着く手段として、材料科学界のトレンドとなっているのが「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」だ。

## いち早く新材料を導く データの使い方、選び方

MIとは、機械学習や深層学習といった「情報科学」の手法、いわゆる「人工知能(AI)」によって物性データを解析し、材料と性能との相関関係を推定、新材料を見つけ出そうとするものだ。NIMSでMIを推進する上で中心的な役割を担う伊藤聡はこう説明する。

「世界的にみて、MIは蓄電池材料分野でもすでにその威力を発揮しています。たとえば、米・カリフォルニア大学のガーブランド・セダー氏(p12参照)が優れた実施例を示してくれました。セダー氏は、第一原理計算で導きだした大量のシミュレーションデータを集めて機械学習にかけ、導きだした候補物質を実際に合成。優れた蓄電池材料を見いだし、MIによる材料開発の道筋を示されたのです」

その功績を称え、NIMSはセダー氏に、材料科学分野において飛躍的な成果を挙げた研究者に贈る『NIMS Award 2019』を授与した。

NIMSにおいても、MIによる蓄電池材料の探索に精力的に取り組んでいる。計算を効率化した機械学習モデルの構築(p7下囲み参照)や、MIの提案に基づき、自動で電解液の作製から性能評価まで行うことができるマシンの開発(p8下囲み参照)など、蓄電池開発における一連のプロセスの大幅なスピードアップに挑んでいる。



高田和典

Kazunori Takada

エネルギー・環境材料研究拠点  
拠点長



伊藤 聡

Satoshi Itoh

統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)  
情報統合型物質・材料研究拠点(CMI)  
拠点長

今や世界中で進むMIによる材料探索だが、NIMSの強みについて、伊藤はこう語る。

「MIにおいては、データの質と量が結果を大きく左右します。使うデータベースによっては、MIによる探索で導きだされた新材料が自然界には存在せず、実際には合成できない場合もあるのです。その点、セダー氏と同時にNIMS Awardを受賞されたピエール・ピラース氏(p14参照)が、NIMSと共同で構築してきた世界最大級の無機材料データベース『AtomWork Adv.』が、NIMSの大きな強みといえます。なぜなら、AtomWork Adv.のデータは、すべて世の中に存在する合成可能な材料なので、現実的な材料探索が可能だからです」

さらに、高田は別の強みを強調する。

「世界各国で行われているMIによる材料探索では、実験データ量の不足を、公開されている論文から抽出したデータで補うケースもあります。ですが、注意しなければならないのは、論文の場合、もともと性能が低い材料を改良することで性能を向上させた、というケースが多いこと。つまり、MIのリソースとなるデータが論文データに偏りすぎると、性能の低い材料を中心に探索することになってしまいかねません。その点、NIMSではAtomWork Adv.の他にも、論文になっていないものを含め、蓄電池に関する膨大な量の実験データを蓄積してきたから、より効率的に優れた材料にたどり着けると期待しています」

## 情報科学者と蓄電池の専門家、 連携の理想形

一方で、高田と伊藤は共に「情報科学者と、蓄電池に精通した材料科学者、どちらが欠けてもMIによる優れた蓄電池の実現はない」と声をそろえる。

高田は「MIによって良い特性を持つ材料が提案されたとしても、大量生産やデバイス化ができなければ意味がありません。蓄電池を実際に組みあげる我々の側からすると、合成に手間とコストがかかりすぎて現実的とは思えない材料が提案されることもある。そうならないためにも、どのような探索を行えばいいか、探索結果をどう解析・解釈すればいいかを示していくのは、材料科学者の役目だと思っています」と語る。

伊藤はさらにこう続けた。「MIの学習モデルの構築を担う我々としては、今後、材料科学者から“材料をどうやって合成していったのか”といった『製造プロセス』のデータを提供してもらい、データベース化していくことも、現実的な材料探索を行っていく上で必要不可欠だと考えています」

実際、NIMSは現在、製造プロセスを含め材料に関するあらゆるデータを集めたデータベース、「材料データプラットフォーム」を構築中だ。情報科学者と材料科学者が集う環境を活かし、蓄電池開発に取り組んでいく。

(文・山田久美)

# 次世代蓄電池開発の キープレーヤー、 探索の流儀を語る。

蓄電池の研究開発は、その手法も大きく進化を遂げている。

従来の実験主体の研究開発に、計算科学や、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)と呼ばれる

大量のデータをもとにした人工知能(AI)による探索を取り入れることで、効率は飛躍的に向上しているという。

新世代の研究者たちに、蓄電池開発の最前線について聞いた。

## 万代俊彦

Toshihiko Mandai

エネルギー・環境材料研究拠点  
二次電池材料グループ  
主任研究員

## ランディ・ハレム

Randy Jalem

エネルギー・環境材料研究拠点  
界面計算科学グループ  
主任研究員

## 松田翔一

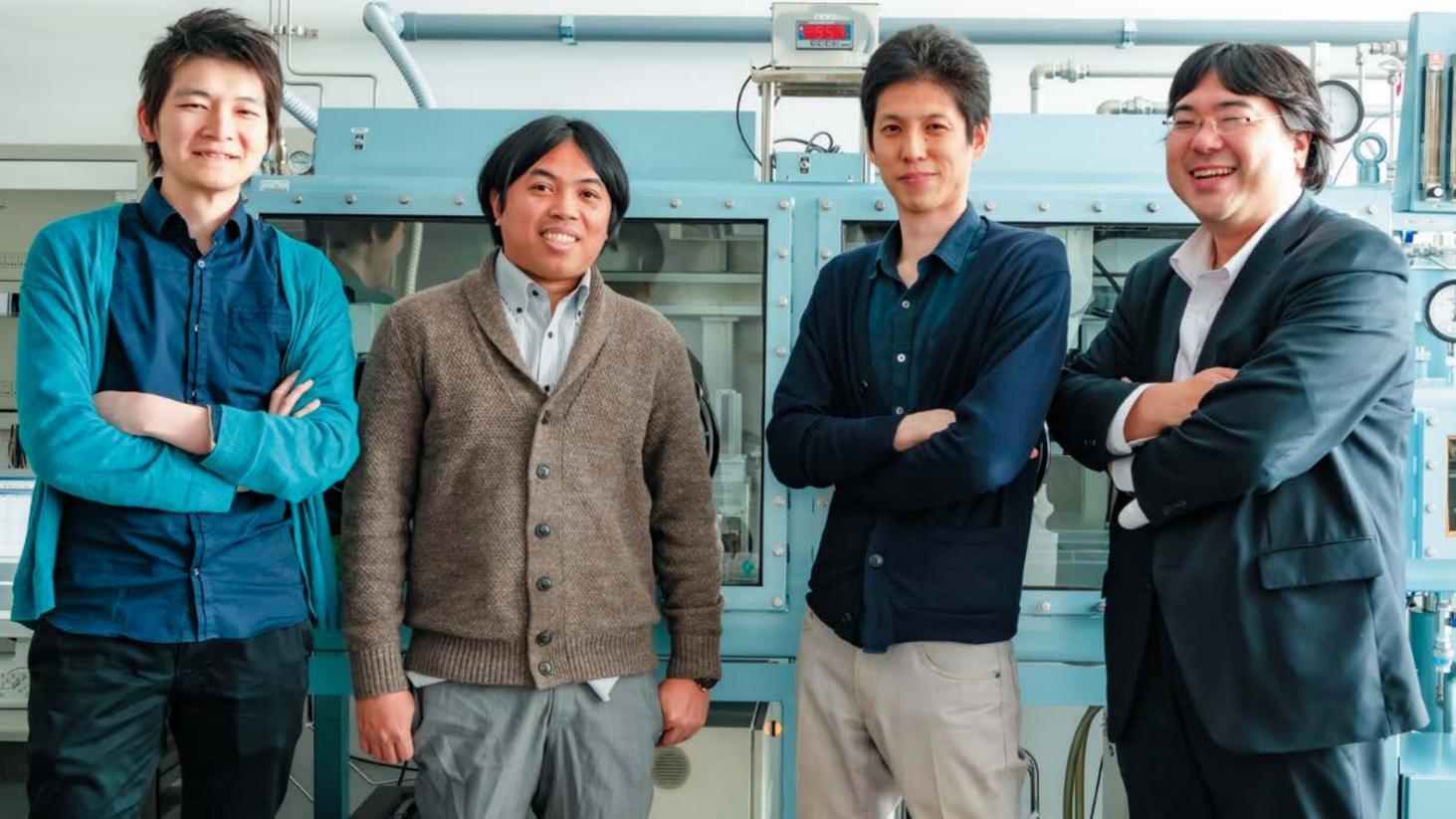
Shoichi Matsuda

エネルギー・環境材料研究拠点  
二次電池材料グループ  
主任研究員

## 袖山慶太郎

Keitaro Sodeyama

統合型材料開発・  
情報基盤部門(MaDIS)  
エネルギー材料設計グループ  
グループリーダー



## 電池は難しい、 だから面白い

— 皆さん、次世代蓄電池を研究開発されているという共通点がありますね。研究対象や手法は、それぞれ違うのでしょうか。

**袖山** 4人ともみんな違います。松田さんと万代さんは、実験側。私とランディさんは、計算・シミュレーション側です。研究対象は、松田さんは「リチウム空気電池」、万代さんは「マグネシウム電池」、ランディさんは「全固体電池」が中心です。私は電池全般です。

**松田** ターゲットはそれぞれ違いますが、電池である以上、正極と負極、電解液の組み合わせとしてうまく機能させなければならない点は同じです。そして、広く社会で使われるものだからラボで動くだけではダメで、薄くして、パッケージして、安全性を担保して……。電池は社会に出るまでが長いし、たくさんの制約があります。そこが難しい。  
**ランディ** 私が研究している全固体電池は、一番実用化に近いと言えます。今、最も普及しているリチウムイオン電池の電解液を、不燃性で安全な固体電解質に置きかえたものが全固体電池ですが、固体電解質の

イオン伝導率はリチウムイオン電池の電解液よりもずっと低く、高出力化を阻んでいます。リチウムイオン電池の電解液と同等か、それ以上のイオン伝導率を持つ材料が見つければ、実用化にグッと近づきます。

**万代** 松田さんのリチウム空気電池は、現行のリチウムイオン電池を超えるエネルギー密度が実現できることは確認されている一方で、サイクル寿命が短いことが最大の課題で、電解液や添加剤の改良を目指しています。私の研究しているマグネシウム電池は、資源が豊富で安価なマグネシウムを負極材料に使った電池で、大容量化が期待されているものの、負極以外の要素、つまり正極と電解液はまだ有望な材料が見つかっていません。新しいものをイチからつくらないといけないので、研究開発としては最初期段階です。

**ランディ** もともと電池というのは全体的に不安定なものです。たとえば、電極部で電解質は分解されて、充放電を繰り返すうちにやがて劣化していきます。それを踏まえた上で、どのように全体の材料のバランスをとるか、どう寿命を制御していくかが重要です。しかし同時に面白いところでもありますね。

## 「実験×MI」が 電池開発力を強くする

— 次世代蓄電池の開発手法として、今の世界的なトレンドなどはあるのでしょうか。

**袖山** 従来は、実験する人がトライアル・アンド・エラーを繰り返して達人の直感のようなもので見つけていくというスタイルでしたが、スーパーコンピュータの性能が上がるにつれて、計算科学によるシミュレーションの精度が向上し、既存の材料をどう改良すればいいかといった方向性を示すことができるようになりました。さらに今は、実験や計算で蓄積されてきた大量のデータを情報科学の手法で解析する、いわゆるMIが盛んです。私自身、理論・計算科学を専門に、スパコンを使って化学反応のシミュレーション



## NIMSの電池研究

### 機械学習で計算を高速化! 固体電解質用の予測モデルを開発

ランディ・ハレム

全固体電池の高出力化に向けて、高いイオン伝導率を持つ固体電解質の登場が待たれている。理論計算やデータに基づく材料探索が盛んに行われているが、高精度な予測モデルが確立されているとは言い難い。

そこでランディは、従来の第一原理計

算に、ベイズ最適化をはじめとしたさまざまな機械学習の手法を組み合わせることにより、計算を効率化した予測モデルを構築。実際にこれを使い、タボライト型と呼ばれる結晶構造を持つ材料について、イオン伝導率の予測を行ってみたところ、従来に比べて約2~3倍

の速度で高精度な結果を導きだすことに成功した。この予測モデルは、大量のデータを取りこむほど探索効率が高まることから、今後のMIによる材料探索において強力なツールとなると期待されている。

Shoichi Matsuda



を行ってきました。今は情報科学の手法である機械学習を取り入れながら、実験側に探索の方向性を提案しています。

**松田** 実際に、私は袖山さんの力を借りて、実験の効率化を図っています。私がやっているのは、リチウム空気電池用の電解液を探索するために、電解液の作製から性能の評価までを自動で行うことができるマシンの開発です(下囲み参照)。手動で行っていたときには1日10種類の電解液しか探索できなかったものを、1日1000種類の探索まで、スピーディに行うことができます。このとき、探索空間をどれくらい絞るのか、比喩的にいえば、広く浅く掘るのか、狭く深く掘るのか。そうしたことを計算やMIによって提案してもらおうと、さらに効率率が上がるのです。

**袖山** 以前、とても面白いと思ったことがありました。電解液には、充放電の繰り返しによる劣化を防ぐために添加剤を加えることが多いのですが、添加剤の候補を探そうと、化合物の組み合わせをさまざまに変えて松田さんのマシンで評価を行い、1万から2万ほどのデータをこちらで解析しました。すると、あまり評価を行ってこなかった探索空間で、有望と思われる組み合わせが見つかりました。そのデータをもとに松田さんのマシンで改めて実験的に評価を行ったところ、添加剤として有名なビニレンカーボネート(Vinylene Carbonate)と同等の機能を持ちながらも、これまで添加剤としては知られていなかった化合物の組み合わせが見つかったのです。

**松田** 闇雲にやっていたら、いつまで経っても見つからなかったでしょう。人が実験できる量には限りがあって、総当たりで調べていくことは、達人であってもやはり難しいわけです。材料の組み合わせは無限に近いので、探索空間を絞る必要がある。そこは計算やMIの力を大いに借りたいところで、私の開発しているマシンは、もともとそうした手法と組み合わせることを前提にしています。

**万代** 探索空間を絞らなければならないというのは、私も同じです。私はマグネシウム電池用の新規電解液の設計・合成が研究の中心です(p10 下囲み参照)。マグネシウム電池の電解液開発は、先ほどもお話ししたとおり、全くの手探り状態です。だから、まずは先人の論文を読みあさって、得られた知見をいったん計算側に渡すようにしています。私たち人間はどうしても恣意的にデータを見てしまうのでそれを排除したい。うまくいったケースのどこが有効なのかを、客観的な情報として得たいわけです。それからまた実験をして、結果を計算側に渡して、という繰り返しですね。

**ランディ** 実験のスピードアップだけではなく、実は計算自体においても探索速度は重要です。コンピュータのリソースにも限度がありますから、計算上の探索速度を向上させる手法を編みだすことがとても重要になります。私は、第一原理計算を使って、固体電解質の有力候補である、セラミック材料のイオン伝導率の評価を行っているのですが、従来はスパコンで膨大な時間をかけて計算しなければなりません。それが、新しい機械学習モデルを組み合わせることによって計算サイズを最適化できるようになり、探索のスピードは着実に向上しています(p7 下囲み参照)。

**万代** こうやっていろいろな手法が開発されて、異なる分野同士の研究者が協力し合

うことで、確実に相乗効果が出るようになってきていますね。手法次第で探索効率も結果も変わってきますから、これからは、より柔軟な発想が求められるんじゃないかな。私は“包容力”と呼んでいるんですが。材料も手法も新しいものに変えようとしているのだから、より広い心を持って互いを受け入れることが必要になってくる(笑)。

**松田** その点、NIMSはオープンな風土がありますよね。こうして若手同士のコミュニケーションも密に取れていますし。

**袖山** 良い関係を築けているからこそ、まだ論文発表していないような実験データを渡してもらえたりするので、解析する側としてはそれに応えたいし、うまく連携してどんどん現実的に進めていきたいですね。

**万代** 私は「この現象はどうやって理解したらいいんだろう」というときには、すぐに袖山さんに聞くんです、いつも。計算科学と実験をちゃんとマージさせるというのは意識的にやっています。

#### — 計算科学やMIの使い方で難しい点は。

**袖山** 機械学習の専門家の先生がよく口にしてるのが、「MIは打ち出の小槌じゃないんだ、なんでもできるわけじゃない」。要するに、使う人が電池というものを理解した

上で、何に対してどんな計算をして、どんな機械学習モデルを使うか、という課題設定が問われるんです。最終的なゴールは何かで手法も変わる。「クーロン効率(充放電効率)を改良したい、ならこの機械学習モデルを使ったらどうか」とか。

**松田** 実は、その課題設定が一番センスを要求される場所ですね。そこを外してしまうと、個々の材料でいい結果が出ても、電池として組み合わせたときに実際には使えない、ということが起きてしまう。

**ランディ** 私は出口に近い研究開発をしているからこそ、その難しさを痛切に感じています。ゴールは間近にある、シミュレーションもできた。でも、実際に計算やMIの提案通りに合成できるか、機能が再現できるかというのはまた別の話です。だから、計算やMIのモデルを構築するときには、本質的な課題がどこにあるのかをよく見極めなければいけません。

#### エネルギー問題と向き合いつつサイエンスの面白さを追求する

— 将来、研究をどのように発展させていきたいと考えていますか。

**袖山** 電池はもちろん、とにかく新しい材料

をつくることに貢献したい。そのためには手段を選びません。目標は、いろんな分子データをそろえて、この分子はこの電池に使える、場合によっては電池以外に使える、といった柔軟な提案ができる材料探索モデルをつくること。それを使って、今あるデータベースに存在しないような、まったく新しい材料や、探索手法を開拓していきたいです。

**ランディ** 私は全固体電池の材料探索だけではなく、さまざまな課題をMIの手法で解決したいと思っています。たとえば、固体電解質の粒界でイオンがどう動いているのかを明らかにしたり、固体電解質と電極材料との間で起こってしまう抵抗の原因を明らかにしたり。つまり、「現象」を正確に理解したいのです。その上で、MIによって優れた材料を見つけたいですね。



Keitaro Sodeyama

## NIMSの電池研究

### 実験×MIでスマートな材料探索を—「ハイスループット電解液探索システム」

松田翔一 × 袖山慶太郎

固体材料に比べて計算での取り扱いが難しい電解液は、実験による材料探索が有効だが、その候補は膨大にある。そこで松田が開発したのは、人手よりはるかに高速な探索を行うことができるマシンだ。これを使えば、50種類以上の化合物を組み合わせるさまざまな組成の電解

液を作製する作業から、「電気化学セル(p3に解説)」に注入して特性を評価する作業に至るまで、すべてを自動で行うことができる。

一方、袖山はグループメンバーであるギョム・ランパール主任研究員と共に、データ科学の観点から松田の探索をサポー

ト。松田と議論を重ねて本質的な課題を抽出し、大量の実験データから有望な組成を導く「MI予測モデル」を開発している。今後はこれを活用し、MIによる予測と実験というサイクルを自動化した、スマートな材料探索に挑戦する計画だ。



**分注操作ユニット**  
組成の異なる電解液を、それぞれのセルに注入。注入を終えたプレートは、ロボットアームによって電極部へと運ばれる。



**ロボットアーム**



**電極部**  
プレートで上下の電極で挟み、電解液特性を計測。計測後は、ロボットアームが廃棄。

Toshihiko Mandai



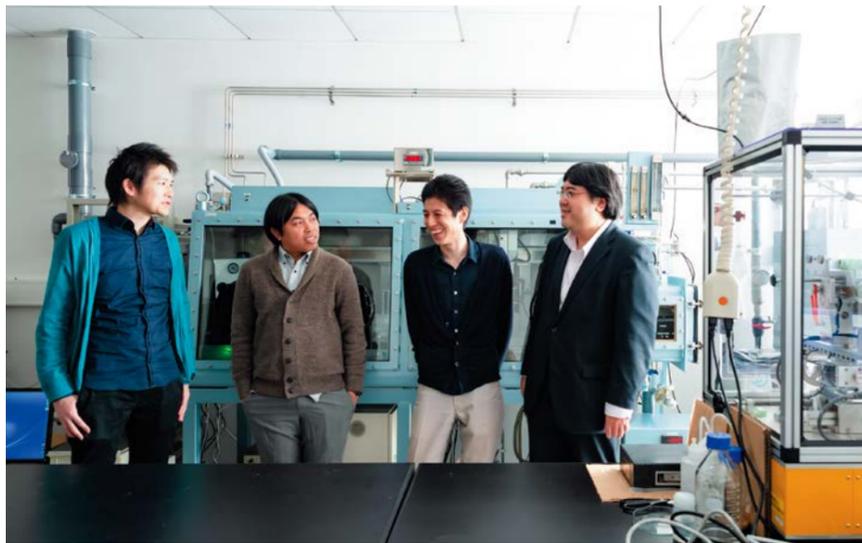
**松田** 私はやはり、世に出るものを見つけたい。それに尽きます。合成や評価にマシンを使う、MIを使うというのはあくまで方法論なので、実際に使える材料を見つけないと意味がない。今、大量の実験データにMIを適用することで、高い電池特性が期待される電解液組成を導く予測モデルもできてきているので、それも使いたいと思っています。

**袖山** 松田さんのマシンでは、少しずつ組成が異なる、統一的で横並びの実験データを取得できますから、それは現象の理解に大きく寄与すると思っています。電池の機能の向上はもちろん大事ですが、なぜ機能が向上したかという理解は置き去りに

されやすい。パラメータを統一してデータを取っていくことで、機能が発現したときに何が起こったのかを考える手がかりになる。今でも電池の現象って分からないことが多いままなんです。シミュレーションをやるメインの目的は基本的には現象の理解なので、私たちはそれも重視したい。電池ならではのサイエンスの面白さが、そこにあるので。  
**万代** そうですね。サイエンスの面白さも追求していきたいですし、科学者としては、ずっと言われつつけているエネルギー

問題を、なんとか解決したいです。私はマグネシウム電池を、50年、100年先と言わずに、自分が生きている間に製品化して世に送りだしたいと思っています。たとえば、ナトリウム電池も実現に時間がかかると言われていましたが、もうヨーロッパでは販売されています。実際に電池として世に出たときに自分の開発した材料が入っていたら、それ以上の喜びは研究者としてないですね。

(文・小森岳史)



## NIMSの電池研究

### 構造設計と合成プロセスの開拓で、オリジナルの電解液を

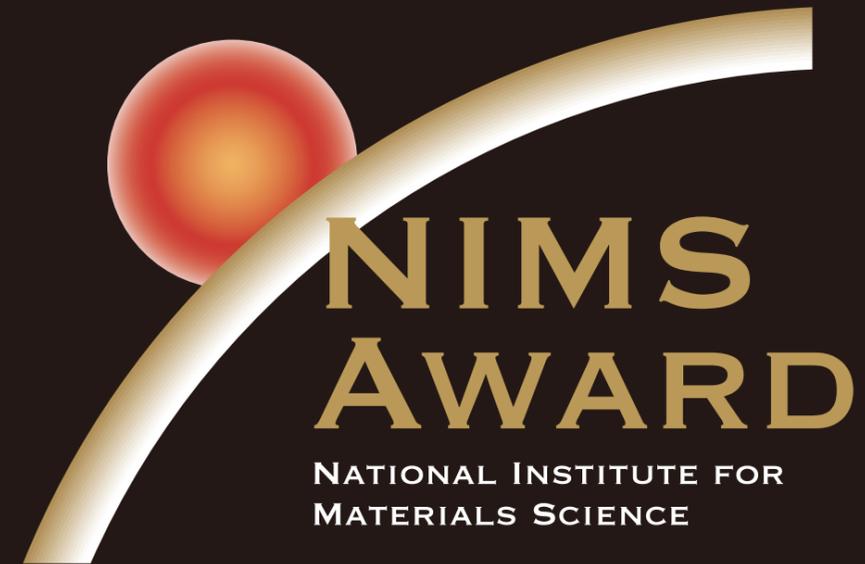
万代俊彦

溶媒と、陽イオンと陰イオンが結合した塩から成る、電解液。その特性を決定づけるのが、電解液の“構造”だ。万代は、負極にマグネシウムやアルミニウムを用いた「多価金属電池」をターゲットに、電解液の構造設計と、設計の実現に向けた塩・溶媒の合成プロセス開拓によって、オリジナルの電解液開発に取り組んでいる。これまでに、マグネシウム電池用

電解液の有力候補である「ホウ素系電解液」の合成プロセスを簡略化し、合成にかかるコストを従来の約9分の1まで削減。また、合成の再現性を高めることにも成功した。現在は、袖山ら理論計算の専門家との連携を強め、電解液が蓄電池内で示す挙動の解明や、計算による予測をもとにした新たな電解液の設計・合成にも挑戦している。



合成した「ホウ素系マグネシウム塩」



## 受賞者インタビュー

NIMSが毎年、物質・材料に関わる科学技術分野において飛躍的な進歩をもたらした個人、グループを対象に授与しているNIMS Award。

2019年度は、大量のデータを活用して新材料を開発する「データ駆動型研究」の分野から、カリフォルニア大学バークレー校教授のガーブランド・セダー氏とMaterial Phases Data System社のオーナーであるピエール・ビラース氏が受賞しました。

今日のマテリアルズ・インフォマティクス(MI)に至る道を切り拓いてきたお二人の特別インタビューをお届けします。

# 大量の計算データで 新材料への道を照らす

## Gerbrand Ceder 氏

カリフォルニア大学バークレー校 教授

ガーブランド・セダー氏は、量子力学に基づき原子や電子のふるまいを導く第一原理計算を、自動化して大規模に行う「ハイスループット計算」の先駆者である。そして、ハイスループット計算によって得た大量のデータを材料設計に活かすMIの手法を確立し、蓄電池の正極材料や固体電解質、熱電材料などの開発を実現。学术界、産業界に大きなインパクトを与えてきたセダー氏に、自身の研究やキャリアについて聞いた。

まずは NIMS Award の受賞、おめでとうございます。

ありがとうございます。材料科学界で世界的に権威のある NIMS に認められ、また、実験データの収集・普及に努められてきたピエール・ピラス氏と共にこの賞を受賞できたことを嬉しく思います。

材料開発にハイスループット計算を使い始めたきっかけを教えてください。

1980年代から1990年代にかけて、材料の特性を予測する計算手法の開発が行われていました。2000年代半ばになって私たちは、これを大規模化して自動的に大量のデータを生成する、いわゆるハイスループット計算の手法確立に取り組み始め

ました。それまで、個々の計算手法やモデルを構築しようと多くの労力を注いでいましたが、実験結果とすり合わせながら計算プロセスを見直したり、より効率的な計算式に置きかえたりすることで、計算にかかる時間をうんと短くできるだろう、と気がついたのです。いったんメソッドが確立してしまえば、計算上のさまざまな工程を短縮するのは、実に簡単なことでした。

アメリカでは2011年から、材料開発に情報科学やデータ科学の手法を取り入れた Materials Genome Initiative (MGI) が始まりましたが、MGIにおけるご自身の役割を教えてください。

MGIが始まるまで、大量のデータを活用して新材料を開発するというアイデアを口

にする人など誰もいませんでした。

もともと私は民間の企業と共同で、材料設計の指針となるシミュレーションデータをハイスループット計算で大量に生み出すことを目指して、純粋に計算手法だけをターゲットにした研究を行っていました。そのうちに、情報を適切なルールのもと収集すれば、材料設計はより定量化でき、実験による余計な試行錯誤を繰り返す必要がなくなるのではないか、と考えるようになったのです。

科学技術政策局に知り合いがいたのは幸いでした。彼らにそのアイデアを話したところ、材料の開発、さらに最終的には製造産業に活気を与える、革新的で面白い方法だと思ってくれたようです。MGIは巨額の資金を投じた国家プロジェクトとなり、他の国もそれに続きました。

大量の計算データをつくり、それを材料設計に生かす上で、どのような困難がありましたか。

大量のデータをつくるには、計算プロセスを自動化する必要があります。それまでは1回にひとつの計算を行い、それを一人で監督し、エラーが起こった場合には一人で対処できるようにしていました。しかし、1回に何千もの計算を行うには、完全に自動化し、エラーは必ず修正されるように、また失敗したものはやり直しされるようにする必要があります。自動的かつ正確に機能するようにシステムを修正していくことは、深い科学の知識を必要としなかったとはいえ、非常に根気のいる作業でした。

さらに、計算データをもとに材料設計を進める上では、たくさんの課題に直面しました。私は常々、「さまざまな分野に関わっているよりも、ど真ん中にいることの方が楽だ」と話しているのですが、それはつまり、計算や理論が得意であっても、応用分野についてはたくさんのことを学ばなければならなかった、ということです。材料を実用化する上で、注意すべき特性はひとつではありません。安定で毒性がないことや、そもそも合成可能な材料でなければならないことなど、数多くの制約があります。実際、何が問題か分かっていたつもりでも、当初の想定よりもずっと多くの課題に対処する必要がありました。

計算の重要性が増す中で、研究における実験と理論計算のバランスについてどう考えておられますか。

実験と理論計算はうまくバランスを取らなければなりません。理論計算の裏づけは必須なので、今後も実験の重要性は決して変わりませんが、計算で比較的簡単に導けることなのにわざわざ手間をかけて実験をする必要はありません。むしろ、その

分の時間や労力を、現象が複雑すぎて計算で答えを導くのが現実的ではないような実験に割くべきです。

その上で重要なのは、論文や人々の頭の中、コンピュータの中にしま込まれているデータを、実験上のものか理論上のものかに関わらず余すことなく収集して、誰もが利用できるようにすることです。なぜなら、科学は事実の上に成り立ち、その事実はデータの上に成り立っているのですから。

産業界との連携についてはどうお考えですか。

とても重要です。私にとって、公的機関と比べて積極的にリスクを負ってくれる複数の企業と出会えたのは幸運でした。新しい材料は実用化まで非常に時間がかかるのですが、産業界は、リスクが高いほど利益が大きくなること、また、新しいことに挑戦するときには必ずしも結果に結びつかないことを理解しています。材料開発は難しい賭けです。多額の投資が無になることもありますし、勝者総取りとなることもあります。

とはいえ、長期的なサポートという面では、公的機関もやはり重要です。政府は大抵、施設やビームライン、電子顕微鏡の構築などは喜んで支援してくれます。しかし、データベースやデータ収集にも、そうしたハードウェアと同じくらいの価値があることを理解してもらわなければなりません。総じて、こうした考えは政府にはまだ受け入れられていません。

現在の研究について教えてください。

一番興味を抱いているのは、材料設計において培ったMIの手法を、合成や加工といった材料の製造プロセスにも適用することです。そのためには、まず、材料がどのように形を成し、どのようにつくられるのか、合成の理論を構築する必要があります。

そうした古典的なアプローチに加えて、機械学習にも取り組んでいます。科学者が学んでいくのと同じように、コンピュータにたくさんの情報を与えることで合成を学習させるのです。合成の学習はいわば修行のようなものですが、ひとたび技やテクニックをすべて学んでしまえば、コンピュータが合成を行う速度は早まります。

そして究極的な目標は、ロボットの活用です。ロボットが合成を行い、その結果をAIが分析し、次に行うべき実験を決定できるようにになれば、材料開発の時間はこれまでの何倍も速まることでしょう。

材料開発、そして NIMS に期待することは。

材料開発において、今後データの重要性は増していくことでしょう。材料科学は物理学と化学、そして工学といった多数の要素が複雑に融合しています。だからこそ、多様なデータの収集にとっても力を入れている NIMS は、今後も重要な役割を担ってくれると期待しています。

将来、ロボットが人間に取って代わるのでは、という懸念をよく耳にします。しかし、私はそうは思いません。未だに、物を混ぜ合わせたり、動かしたり、洗浄したりといった単純作業に、多くの科学者が時間を費やしています。

計算も同じでした。20年前、計算科学者たちは、入力ファイルの作成やデータの変換、アルゴリズムの開発に多くの時間を費やしていました。それは科学をやっているとは言い難いものでした。アルゴリズムが発展し、自動化されるに従って、計算の細部について心配する必要が減っていきました。

同様に、実験が自動化されていくことで、科学者たちはより多くの時間を人間の本分といえる思考や解釈に充てることができるようになるに違いありません。

(文・ロバート・キャメロン)

# データの美を通して 自然の美を見いだす

## Pierre Villars 氏

Material Phases Data System社 オーナー兼ディレクター

ピエール・ビラース氏は、世界最大の無機材料データベース「Pauling File」の創設者の一人で、編集長だ。研究開発におけるデータ収集の重要性が広く認識される前から、いち早くデータベースの構築に取り組み、独自のキュレーションと地道な努力の積み重ねによって、今日のMIの礎を築いた。2019年10月、授賞式のため日本を訪れたビラース氏に、自身の仕事やキャリアについて聞いた。

1981年、スイス連邦工科大学チューリッヒ校にて博士号取得。同校にて研究員を務めた後、1986年から、カナダ国立科学技術情報機関でビル・ピアソン教授指導の下、結晶データベースの編集や、本の編集に従事。1995年から、Pauling Fileの構築を開始。

まず NIMS Award の受賞、おめでとうございます。

ありがとうございます。材料科学界の世界的な研究者として認められたのは名誉なことです。予想していなかったもので、とりわけ嬉しく思っています。世界的に評価の高い NIMS によるからこそ、この受賞の意味は大きいと感じています。

Pauling File について教えてください。

Pauling File は世界最大の無機材料のデータベースで、1900 年以降に 1000 種類以上の科学雑誌で発表された 18 万本以上の文献から情報を抽出した、高品質で網羅的なデータベースです。現在のところ、結晶構造データを約 33 万 5000 件、状態図データを約 4 万 4000 件、特

性データを約 40 万件収録しており、継続的にアップデートを行っています。

Pauling File は今や、さまざまなニーズに応えられるデータを備えています。NIMS が提供している「AtomWork」や「AtomWork Adv.」を含めた 8 つのデータベース製品と、目的別にデータを引き出しやすく整理した 8 種類の出版物（ハンドブック）があり、世界中で広く使用されています。

1 か月あたりのアクセス数は約 100 万件で、ユーザーは増え続けています。これは大事なことです。ユーザーが多くなれば、データベースは価値がなくなってしまいますから。多方面で活用できる、汎用性の高さが重要なのです。

Pauling File という名前は、化学者で化学エンジニア、平和活動家の顔をもち、史上最も偉大な科学者の一人であるライ

ナス・ポーリング博士にちなんでいます。ポーリング博士には、私が 1980 年代に、結晶学で有名なビル・ピアソン教授の研究室で働いていたときに会いました。のちに私が Pauling File をつくるプロジェクトに取りかかったとき、博士にそのことを話すと、自分の名前を冠することに快く同意してくれました。

この分野での仕事を決心した理由は。

私は自然界の“パターン”に常に魅了されていました。注意深くみれば、自然界は規則性にあふれています。そうした自然の美を、データの美を通して見いだすということが私の喜びなのです。

私はスイス連邦工科大学で「金属間化合物の規則性」をテーマに博士号を取得した後、カナダに渡り、ピアソン教授のも

とでポスドクとして働き始めました。それが私の人生を決定づけました。

ピアソン教授は、数多くの無機材料の結晶構造を収集し、それを本にまとめる仕事に取り組んでおられました。「Peason's Handbook」をはじめとしたそれらの本は大変な評判を呼んでいて、当時、金属工学や結晶学、その他の物質科学の研究を行う、世界中の研究室で使われていました。教授はすでに 2 冊を刊行しており、3 冊目の編纂のために私を雇用したのです。

ピアソン教授は当時、すでにかなりお年を召されていましたが、科学が進みつつある方向性を理解していらっしゃいました。教授は 3 冊目の編纂にあたって私にパソコンを与え、「これでデータを入力していくように」と言いました。小さなスクリーンがついた小型のポータブルコンピュータでしたが、それでもミンくらい大きさがあり、データはフロッピーに保存していました。さらにインターネットが登場すると、教授は自分たちの仕事が研究の在り方を大きく変えることになるだろうと確信を深められ、まさにそのとおりになっていったのです。

Pauling File の開発は大変な仕事だったでしょう。

大変でした。1995 年にプロジェクトを開始したときには、収集対象となる分野の論文は年間約 2000 本ほどでした。「やれる」と思いましたが、2005 年には年間約 8000 本にまで増加し、一人で処理することができなくなりました。現在は年間約 1 万 6000 本ですが、今後これは確実に増えます。なぜなら、10 年前は中国からの論文はほとんどありませんでしたが、今では全体の約 35% 占めるまでになり、その論文数は年々増大しているからです。

私たちは結晶構造・状態図・特性データの三種類を扱っていますが、特性データ

は非常に複雑です。すでに公開されている特性データだけでも 500 種類以上あります。つまり、さまざまなデータの種別を理解できる専門家を、大勢必要としたのです。

しかも、長期間にわたってこの仕事ができる力のある人を見つけることは、当初大きな課題でした。非常に時間がかかりましたが、最終的には化学者、物理学者、材料科学者、結晶学者、そしてソフトウェアの専門家からなるチームを結成できました。博士号を取得しているような、高い専門性を持った人々と協力しながら進めていくのが、私のスタイルです。

専門家が厳密に評価した、質の高いデータを提供していることを私たちの強みとすべきことは分かっていました。だから、データのチェックには特別に注意を払いました。多くのデータは非常に低品質でした。単純に間違っているものもあれば、単位系が異なるものや、考慮すべきコメントが書き添えられているデータもあり、少なくとも 3 分の 1 のデータは変更する必要がありました。それは多大な労力を必要とする大仕事でした。

データに対する需要は、時代とともに変化していますか？

はい、大きく変わりました。25 年前は、データはごくわずかしか使われていませんでしたが、ここ数年、アメリカの Materials Genome Initiative (MGI) のおかげで需要は大きく伸びています。以前、特性予測や材料設計には、ほとんどシミュレーションしか利用されていませんでしたが、やがて人々はデータベースの有用性に気づき始めました。MGI が始まった 2011 年ごろ、大規模なデータベースは Pauling File だけだったため、ユーザーが一気に増えました。

データベースの存在は研究の在り方を大きく変え、新しい材料の発見を加速させる

こととなりました。今やデータのおかげで、何千もの試料を実際につくって解析する必要は減り、貴重な結果を見落とすことも少なくなっています。

最後に、今後についてお聞かせください。

ひとつには、研究者や大学が独自に持っているシミュレーションデータを統合したいと考えています。これには多くの人手が必要になります。統合前に、シミュレーションデータと実験データが混ざり合うことがないように、約 20 万のデータセットのデータを検証しなければならないからです。

また、文献が増えれば、人や資金も必要になります。そうした中で、すでにデータを活用して多くの成果を挙げ、その重要性を実感している NIMS などの研究機関がこの活動を支援してくれていることは、理にかなっています。

産業界からの支援も重要です。企業が自らデータを収集するのは多大な費用がかかります。ですので、NIMS がデータ収集を行い、企業はそのデータにアクセスした分に対して料金を支払う、というやり方が良いのではないかと思います。誰もが何かに貢献して、誰もがその利益を得るような仕組みができれば素晴らしいのではないのでしょうか。

しかし、一番の優先事項は、Pauling File のプロジェクトを継続させることです。このプロジェクトは、現時点では数人のメンバーに依存しています。しかし、私たちがいなくなってもプロジェクトが継続されるよう、次の世代に引き継がなければなりません。

先に進むためには、科学的努力とともにビジョンを持たなければなりません。そして前を見て、自分のビジョンの実現のために取り組むことが重要です。待っていてばかりではチャンスを取り逃がしてしまいます。

(文・ロバート・キャメロン)

# 「未来の科学者たちへ」が DVDブックに!

## 絶賛 発売中!

### このスプーンは、 結構うるさい

科学映像集  
DVD-Book

物質・材料研究の最前線!



佐藤雅彦 + ユーフラテス  
NIMS (物質・材料研究機構)

「ピタゴラスイッチ」のスタッフが作る、  
楽しくも興味深い科学映像8本 + 特典11分



## —— 未来の科学者たちへ

第55回 科学技術映像祭  
文部科学大臣賞 受賞

小学館

注文はこちら



厳選映像8本 + 解説ブック、

さらに! この本のためだけに撮り下ろした未公開映像7本!



NIMS NOW vol.20 No.2 通巻181号 2020年3月発行  
国立研究開発法人 物質・材料研究機構



古紙配合率70%再生紙を  
使用しています



植物油インキを  
使用し印刷しています