



九州大学
マテリアル研究の新展開
～先端機器の共用とデータ利活用～

講演概要集

日時 : 2024年 2月 21日 (水) 13:30 ~ 17:10

場所 : 九州大学 稲盛財団記念館1F 稲盛ホール
(伊都キャンパス: 福岡市西区元岡)

主催 : 九州大学 超顕微解析研究センター
文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) 九大ハブ
公益財団法人九州大学学術研究都市推進機構 (OPACK)

後援 : 日本電子株式会社
株式会社 日立ハイテク
サーモフィッシャーサイエンティフィック
株式会社 メルビル

〒819-0395 福岡市西区元岡744
九州大学 超顕微解析研究センター
マテリアル先端リサーチインフラ 事務局
TEL : 092-802-3489
E-mail : nano_hvem@hvem.kyushu-u.ac.jp

【研究会の概要】

マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) では、先端機器の共同利用とともに、共同利用で取得されたマテリアルデータの利活用の推進が重要なテーマとなります。

今回の研究会では、最先端の設備から収集されるデータの利活用や、DxMTをはじめとする関連事業との連携など、ARIMの基軸的な取組みについて、重要技術領域の一つである「次世代ナノスケールマテリアル」の立場から議論します。

【プログラム内容】

- 13:30-13:35 主催者挨拶・研究会の主旨
村上 恭和 九州大学 工学研究院／超顕微解析研究センター 教授
- 【第1部】 データ事業の強化・拡充に向けて**
〈 座長：安田 和弘 九州大学 工学研究院／超顕微解析研究センター 教授 〉
- 13:35-14:05 「多元素ナノ合金の第一原理計算データベース：
活用事例とサイバー物質科学への展望から見すえたデータ整備」
古山 通久 信州大学 先鋭材料研究所 教授
- 14:05-14:35 「文科省DxMT事業による二酸化炭素分離回収材料開発構想のご紹介」
星野 友 九州大学 工学研究院 応用化学部門 教授
- 14:35-15:05 「先端計測技術からみた実験データの定量性と取り扱い」
杉山 昌章 大阪大学 超高压電子顕微鏡センター 招聘教授
- 15:05-15:20 ————— 休憩（15分） —————
- 【第2部】 次世代ナノスケールマテリアル領域の取り組み**
〈 座長：山本 知一 九州大学 工学研究院／超顕微解析研究センター 助教 〉
- 15:20-15:40 「生成系AI, プロンプトエンジニアリングの材料分野への期待」
小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授
- 15:40-16:10 「カーボンデータベースの設計と今後」
藤ヶ谷 剛彦 九州大学 工学研究院 応用化学部門 教授
- 16:10-16:30 「信州大学スポークにおけるデータ収集へ向けた取り組み」
橋本 佳男 信州大学 先鋭材料研究所 教授
- 16:30-16:40 ————— 休憩（10分） —————
- 16:40-16:55 総括：高価値なデータベースの構築に向けて
村上 恭和 九州大学 工学研究院／超顕微解析研究センター 教授
- 16:55-17:10 「九州大学学術研究都市の紹介2023」
本田 一郎 (公財)九州大学学術研究都市推進機構 産学連携主幹
-
- 17:30-19:30 談話会：レストラン イトリー・イト (椎木講堂 2F)

多元素ナノ合金の第一原理計算データベース：

活用事例とサイバー物質科学への展望から見すえたデータ整備

古山通久¹

1. 信州大学先鋭材料研究所

1. 信州大学におけるデータ駆動化

信州大学では、世界に誇る特色ある研究を研ぎ澄まし、新たな融合研究領域を創造するため、2014年に先鋭領域融合研究群を設置した。著者は2018年に着任し、凝縮系材料を中心としたデータ駆動化のための体制づくりを行ってきた。コロナ禍の真ただ中の2021年、先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所にデータ駆動型AIラボが設置された。主眼は、「普通の研究者が普通に機械学習・データ科学を活用する」ことであり、人材育成の観点では教員・研究者を主対象としてきた。機械学習・データ科学をまがりなりにも活用することのできる教員を育成すれば、学生の教育や指導もできるようになる、との考えに立脚しており、現在は、複数の教員・研究員が自身でデータ駆動型の研究を推進するだけでなく、それぞれの学生に機械学習・データ科学に関連する研究課題を設定し、指導する体制に広がってきている。

2. ナノ粒子の並列化第一原理計算データを貯める

著者は、2014年に大型計算機の活用を開始し、金属ナノ粒子の世界最大規模の成果¹⁾を公表するとともに、2017年ごろから系統的なデータ蓄積を行ってきた。きっかけは必ずしもデータ活用の視点ではなく、1,000コアのCPUをフルに活用して数週間かかる計算を、学生が追試しようとしたことであり、限られた計算資源を有効に活用したいとの視点である。論文で公表された計算結果を自身でも再現し、検証を行った上で新しい課題に取り組む、という従前の研究の進め方からの転換の必要性を感じたため、と換言できる。ナノ粒子の大きさにおいては世界トップの計算結果を含むデータの蓄積を進める中で、高速な予測をする基盤としてデータを活用する展開が拓け、現在では多元素ナノ合金の安定性・活性を予測するデジタルスクリーニングに取り組んでいる²⁾。

3. 蓄積したデータの活用

データの蓄積のあり方はデータ活用の視点からは2つに大別されるだろう。一つは、いわゆるビッグデータの蓄積、すなわち少数のデータでは見出すことのできない何かを見出すための目的指向が希薄なデータ蓄積であり、もう一つはある目的に向かったデータ蓄積である。前者に必要なのは、活用に必要となるクリティカルマスを超えることであり、後者に必要なことは系統性や網羅性である。そして、ともに必要となるのは、材料科学の進展の速度を凌駕するデータ蓄積の速度であろう。

著者は、多元素ナノ合金の第一原理計算結果を約10,000点整備し、それを基盤の一つとして、実験科学のデジタルツインとなるサイバー物質科学の展開を見据えた取り組みに着手している。その具体例とともに、データ整備あり方の議論に資する話題を提供する。

参考文献

1) D. S. Rivera Rocabado, T. Ishimoto, M. Koyama, SN Appl. Sci., 1 (2019) 1-15

2) 日経サイエンス 2024年1月号, pp. 28-39

文科省 DxMT 事業による二酸化炭素分離回収材料開発構想のご紹介

星野 友¹

1. 九州大学大学院工学研究院

我が国のマテリアル DX プラットフォーム構想の中では、マテリアル先端リサーチインフラ事業 (ARIM) により、全国的な最先端共用設備体制と高度な技術支援提供体制を整え、リモート化・自動化・ハイスループット化された先端設備を導入し、マテリアルデータを収集し、NIMS を中心としたデータ中核拠点にてデータを構造化、蓄積、管理することで日本全体でのマテリアルイノベーションを創出のインフラを構築する計画となっています (図 1)。当該構想の中で、実際に新物質・新機能材料の創出を目指すのが文部科学省の「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT)」です。DxMT は、令和 3 年度の 1 年間のフェイジビリティスタディを踏まえて、令和 4 年 4 月から 9 年間の事業として開始されました。DxMT 事業では、材料研究の革新のため、従来とは全く異なる先駆的なデータ駆動型研究手法を生み出し、研究 DX を進める計画で、東北大学、NIMS、東京大学、東京工業大学、京都大学の 5 つの拠点が中心となり、それぞれ構造材料、磁性物質、電池材料、セラミック材料、バイオアダプティブ材料の開発が進められています。

本講演では、DxMT 事業の京都大学拠点で進められている研究の概要とくに二酸化炭素分離回収材料の開発プロジェクトの研究についてご紹介します。

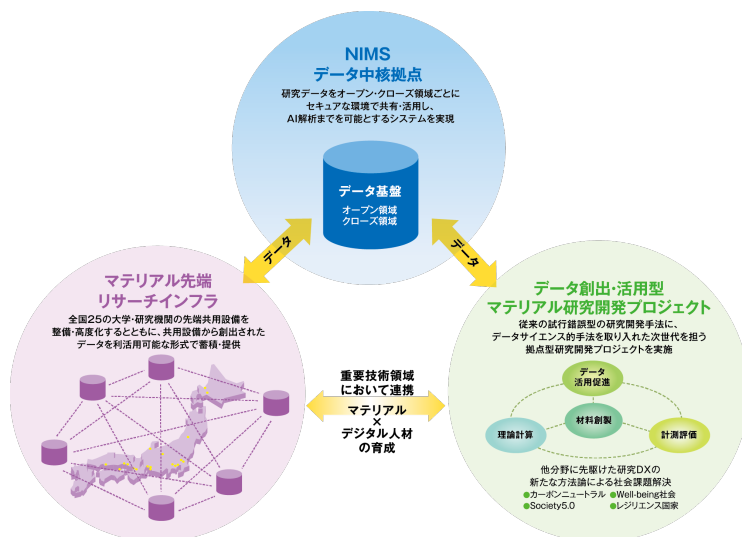


図 1 我が国のマテリアル DX プラットフォーム構想

(<https://nanonet.mext.go.jp/page/page000006.html>)



図 2 DxMT 事業の京大拠点のプロジェクト構想

(<https://dxmt.mext.go.jp/about>)

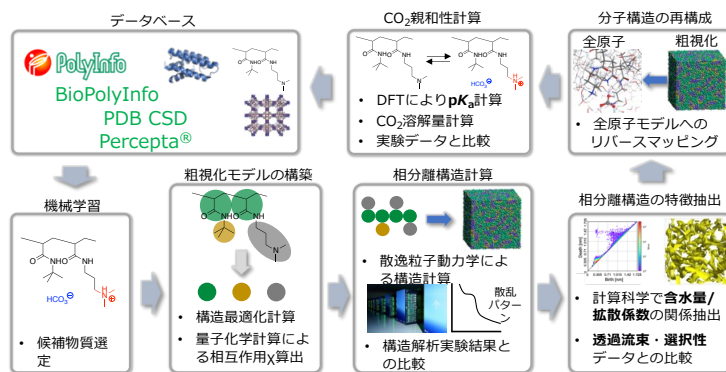


図 3 DxMT 事業京大拠点の『バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全炭素循環を実現するバイオアダプティブ材料の創出』プロジェクト構想図

先端計測技術からみた実験データの定量性と取り扱い

杉山 昌章¹

1. 大阪大学 超高压電子顕微鏡センター

1. 背景

2004年に開始されたJSTの先端計測・機器開発プログラムに端を発し、国策としての産学連携は、ナノテクプラットフォームや拠点型計測技術開発、さらには現在のマテリアル先端リサーチインフラへと進む中で、ハード面での計測装置開発だけでなく、データ事業としての取り扱いが様々な視点から議論されている。このような中、日本学術振興会産学協力委員会の一つであるR026先端計測技術の将来設計委員会は、企業競争力を左右する先端計測技術という共通分野で、産学が同じ土俵で産業界の事情に併せた将来の技術課題を抽出し、それらを解決するための課題をハードとソフトの両面から議論することを目的としている。この活動を含め、またISO活動などから見えてくる実験データの定量性について、TEMを中心に話題提供する。

2. 転位密度と試料厚み（構造用部品に向けて）

画像データとAIとの相性は良く、破壊や強度に結びつく金属破面のディンプル構造や粒径等の画像データの蓄積は各拠点で精力的に行われている。他方で、材料組織を見ただけでは特性と結びつかない転位は、その転位密度の計測となった瞬間に重要なデータとなる。理由は、衝突安全設計などのために仮想空間での材料特性を盛り込んだ車の衝突実験などが検討される中、その材料特性を記述するパラメータに転位密度が含まれるからである。転位密度はX線回折線の線幅から求まるが、TEMで直接観測した数値とはオーダーで異なる。またEBSD法からGND（幾何学的必要転位）密度を求めて塑性変形時の構成式も検討されている。他方、海外よりTEMによる転位密度測定法に関わるISO規格の提案が現在行われている。試料厚みをCBED法で求めるのかEELS法で求めるのか気になる所であるが、日本では研究者がその素性を理解して使っている転位密度という計測値が、原理を知らない人でもISO規格に基づき定量化して使われようとしている時代が来るかもしれない。これまでの真理を追究する材料研究とは全く違った方向で、実験データの定量性が問われている。転位の運動はTEM観察では薄膜効果が出やすいので、超高压TEMで厚い領域を観察する価値があるが、観察時の厚さまでデータ化された論文は少なく、計測という視点で考える事は多い。

3. 3次元半導体素子の定量計測（次世代半導体に向けて）

我が国で再び急速に力を入れ始めた次世代半導体研究では、ムーアの法則の延長として3次元構造の素子開発が進み、2nmプロセスで採用されるパワーデバイス構造は配線が上下両面に設計される予定である。この時、計測目的となる素子中心部分が深い所に位置し、Ga-FIBでは簡単に薄片試料が作れないとされている。さらに数nm精度で積層される素子構造の定量的な計測には収差補正TEMでも必ずしも容易ではなく、放射光や超高压TEMなど、新たな視点からの検討も重要である。

これらの将来想定される実用的な課題に対して、現在の先端計測技術がどれだけ役に立つのか、R026委員会では希望者によるラウンドロビンテストの実施を検討している。さらに異なる装置や手法で同じ対象物を計測した場合、各データの定量性をどのように評価すべきかを含め、検討する必要がある。個別技術の深堀から、データ駆動の時代に向けた技術課題を探っていききたい。

生成 AI、プロンプトエンジニアリングの材料分野への期待

小野 謙二¹

1. 九州大学 情報基盤研究開発センター

科学技術分野だけでなく、社会一般に大きなインパクトを与えた Chat-GPT に代表される生成系 AI に大きな期待が集まっている。2017 年に登場した Transformer という大規模言語モデル (LLM) がその中核技術であり、近年のコンピュータアーキテクチャと親和性の高いアルゴリズムにより並列処理が可能で、大量のデータを実用的な時間内で学習可能になった点がブレークスルーの源になっている。具体的には、学習時に調整される値である内部ネットワークの重み (パラメータ) は何千億にも及び、Chat-GPT2 では 1.5B (15 億)、GPT3 では 175B、GPT4 に至っては推定 1 兆超えと言われている。人間の脳のシナプス数の約 100 兆と比べるとまだ少ないが、今後の進展は興味深い。Chat-GPT は対話しながらテキストを生成する対話 AI であるが、学習にはテキスト、画像、音楽、プログラムなどマルチモーダルなデータを利用する。Chat-GPT の最大のインパクトは自然言語による AI の操作が可能になった点であろう。従来の機械学習の利用は、その技術を使うためにはコードを書く必要があったが、自然言語による AI の操作が可能になり専門的な技術が誰でも使えるようになった。Chat-GPT の浸透に伴い、「プロンプトエンジニアリング」という言葉が使われるようになってきた。生成 AI の活用には自然言語のインターフェイスが提供され、AI に与える命令文、つまり「プロンプト」をどのように設定するかが鍵となる。従来もウェブ検索でほしい情報を得るためにはどのようなキーワードを設定するか工夫していたが、プロンプトの質によって得られる結果の質も変わるため、その利用技術がより重要になり、適切なプロンプトを作成するテクニック、論理性などのスキルが要求される。いわば AI とのコミュニケーションスキルということだろう。

一方で、クエリに対して提示された結果を判断するのは人間の見識に依存し、結果の選別・判断の力が重要になる。特に、ハルシネーションと言われる虚偽の情報を出力する問題点が指摘されており、性質上、これを完全に防ぐことは難しい。この点においては、人間の知識・見識が要求され、専門分野のみならず広範囲な教養が役立つ。このような特徴をもつ生成 AI であるが、課題も多く残っている。収集したデータの偏りに起因するバイアス、個人情報や秘匿情報の流出、粗製濫造、強化学習により人が好みそうな回答をする点、利用に関する倫理的な側面の課題などである。学習過程も取り込まれるため、利用側では個人情報や秘匿情報の流出に留意しなくてはならない。

企業における利用では特に技術流出に気を配るだろう。現在はクラウドで利用されている生成 AI であるが、様々なタスクに共通的な汎用の基盤モデルを学習させ、その後少量の教師ありデータで個別のタスク向けにファインチューニングする 2 段階アプローチも研究されており、社外秘のデータを使う場合に向いている。基盤モデルとしては、OpenAI が「GPT-4 ターボ」を発表し、利用者が独自にカスタマイズした AI をつくりやすくすることも検討している。また、日本国内でも NICT が日本語 40B パラメータの精度・品質の高い日本語に特化した基盤モデル構築を目指している。これからの研究を加速する上では、生成 AI の特徴を理解し、効果的に活用する技術を身につけることが研究者の能力として要求されるだろう。特に、早い段階から Material Informatics に着手した材料科学分野からは生成 AI と組み合わせた研究成果が現れ始めている。ARiM の活動も、当初の目標を初志貫徹し、データの整備に加え、フロントエンドに生成系 AI を組み合わせる技術開発が新たな研究テーマとなると考えている。

カーボンデータベースの整備状況

藤ヶ谷 剛彦^{1,2,3}

1. 九州大学大学院応用化学部門、2. 九州大学分子システム科学センター (CMS)、
3. 九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (I2CNER)

1. カーボンデータベースの必要性

装置共用事業とデータベース構築を掛け合わせた ARIM 事業においては収集されるデータは広大なデータ空間を疎に埋めていくため、密な材料データ群にするためには時間を要する。従って特定のテーマでデータ領域を拡張していく流れも特に ARIM 初期においては必要であると考えている。また、ARIM におけるデータの品質は、研究者のある種の威信をかけて構築される商用データベースと異なり、(経験を積んだ技術スタッフのサポートを介しているとしても) 玉石混合にならざるを得ないのが悩みである。その中で、独自の企画で蓄積される謹製データベースは質を担保しやすい。何より、重要技術領域の特徴を出すことをミッションとする本事業においても好きな色を出しやすい点でも独自データベースの構築は好都合である。信州大と本学は偉大な先駆者の功績もあり、カーボン材料の研究において強みを持っているため、カーボンデータベースの構築は自然な流れであった。

2. 目指すデータベース像

ARIM-RDE の特徴の一つは計測データに含まれないメタデータも RDE 上で付与できることであり、作製条件等の試料情報をセットにすることで既存データベースにない高価値なデータを構築できることである。カーボンデータベースにおいてもスペクトルデータに合成情報を付与したデータベースの構築を目指している (右図)。

		合成条件・観察条件 (手入力ファイル)				物性・スペクトル (生データファイル)			
		原料	温度	時間		RFT	XPS	XRD	Raman
市販品	Aブラック								
	Bチューブ								
	カーボンC								
			⋮						
合成品	カーボンM								
	カーボンN								
			⋮						
既存DB	カーボンS								
	カーボンT								

注: 市販品 Aブラック, Bチューブ, カーボンC の Raman 列には「FS dat」と記載されている。また、市販品 Aブラック, Bチューブ, カーボンC の Raman 列には「ショーケースデータ」という赤い枠で囲まれた注釈がある。

3. ルール決め

データベース構築は最初のルール作りが肝心である。この2年間、試行的なデータ蓄積の傍ら、重要技術領域内において議論を進め、以下の観点においてすり合わせを行ってきた。詳細は当日に紹介するが、項目のみリストアップした。

- 試料名の分類法、RDE 項目との対応ルール (装置ごとに分割される RDE 空間でデータ群であるために)
- 合成条件メタデータの蓄積ルール (多様なカーボン合成に対応した項目とは? RDE への登録方法)
- 測定条件の統一化 (装置ごとの測定項目の設定とそれぞれの条件決め)
- ARIM スタッフの活動の取り扱い (費用負担、採番ルール)
- 活動の拡大戦略 (学会・業界団体・ARIM ユーザーへの働きかけ)
- 今後のアクションプラン

本活動が他の重要領域での活動の参考になれば幸いである。

信州大学スポークにおけるデータ収集へ向けた取り組み

橋本佳男

信州大学 先鋭材料研究所

1. 信州大学におけるカーボン、材料研究

信州大学では、気相法によるカーボンナノチューブの合成法の開発からナノカーボン研究を広く展開し、民間企業とも連携した材料開発を手掛けてきた。平成 25 年よりセンターオブイノベーション (COI) 事業を実施するとともに、キャンパス内の国際科学イノベーションセンターに多くの分析機器を導入した。また、平成 24 年からのナノテクノロジープラットフォーム (分子・物質合成) にも参加し、カーボン合成などの研究支援を実施してきた。

2. マテリアル先端リサーチインフラへの要請

マテリアル先端リサーチインフラ (ARIM) においては、次世代ナノスケールマテリアル領域に参加している。ARIM では、データの収集が新機軸として加わったが、新しい材料を合成する支援も継続することとなった。現在実施している合成支援は、ナノダイヤモンドの合成や合金の合成、有機合成支援などである。

3. 信州大学における計測機器の運用

信州大学スポークでは、従来より共用していた設備に加え、COI の際に導入したオージェ電子顕微鏡、TOF-SIMS や多くの利用が見込まれるナノインデント (図 1) などの設備を共用装置とした。さらに、ARIM にて整備した FE-EPMA、3 次元高分解能 X 線顕微鏡を用いて、広範な計測手法による研究支援を実施する。このうち、3 次元高分解能 X 線顕微鏡では、分解能 $0.5 \mu\text{m}$ までの断面の非破壊解析 (X 線吸収から形状解析、原子種依存性より特定物質の分布解析など) が可能である。現在利用中の課題では、アルミ合金への添加物の分布の解析や、酸化グラフェンの分散状態の解析、生体系材料の内部形状評価などに活用している。



図 1 ナノインデント。
STM を応用した nm サイズの
押し込み試験機。

4. データ収集へのむけて

信州大学スポークでは ARIM 開始当初より解析装置による、マテリアル DX に資するデータの収集を図ることを企画した。一方、実際のユーザーは必ずしもナノマテリアルのみを対象とせず、広範な用途で材料分析を求めた。このため、有効なデータ収集には、カーボンデータベース構築のように、データ利用につながると考えられる分析を事業実施者が積極的に実施して行くことが重要である。これに加えて、データ収集にも直結するナノマテリアルの分析を行うユーザーを集める努力も行っていきたい。前事業のナノテクノロジープラットフォームは多くの研究者に利用され、学術的發展に大きく寄与してきた。一方の ARIM では、データの登録、利活用のシステムの構築に腐心しているところである。この事業からのマテリアル DX の発展のために、「集めるべきデータを探索する」とことと現在得られる「限りあるデータからその活用を進める」ことが肝要と考えられる。



図 2 3 次元高分解能 X 線顕微鏡。
非破壊の断面構造解析を行う。

九州大学学術研究都市の紹介

本田 一郎¹

1. 九州大学学術研究都市推進機構 産学連携主幹

1) 九州大学学術研究都市づくりの経緯

九州大学学術研究都市づくりの経緯

1991年 九州大学新キャンパス移転構想を九大内評議会で承認

1998年 九州大学学術研究都市推進協議会設立(構想検討委員会設置)

2001年 推進協議会総会で「九州大学学術研究都市構想」を承認

2004年 九州大学学術研究都市推進機構(OPACK)設立
(推進体制:九州経済連合会、九州大学、福岡県、福岡市、糸島市)

2005~2021年 九州大学の統合移転(六本松・箱崎・原町→伊都キャンパス)

九州大学学術研究都市推進協議会

九州大学新キャンパス移転構想を九大内評議会で承認

九州大学学術研究都市推進協議会設立(構想検討委員会設置)

推進協議会総会で「九州大学学術研究都市構想」を承認

九州大学学術研究都市推進機構(OPACK)設立
(推進体制:九州経済連合会、九州大学、福岡県、福岡市、糸島市)

2005~2021年 九州大学の統合移転(六本松・箱崎・原町→伊都キャンパス)

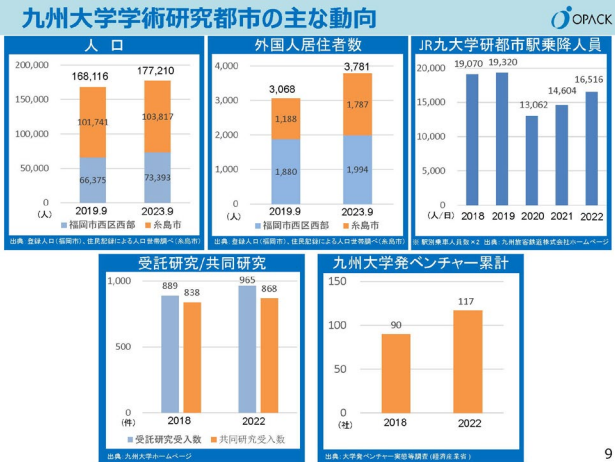
【目標】

九州大学伊都キャンパスを核とした世界的な学術研究都市「知の拠点」を構築

2) 都市づくりの状況

快適空間(都市基盤)の形成

3) 人口や九大発ベンチャー数などの動向



4) プラットフォーム活動(脱炭素)

①九州脱炭素化研究会

【目的】 九大エネルギー研究教育機構での研究成果を基に脱炭素化に関連する学術的、技術的課題について、自由な討論の場を提供することにより再生可能エネルギーが豊富な九州地域を中心に研究開発とその社会実装性の向上に寄与

【主な事業内容】 研究会(ワークショップ等)を年に6回開催(7件程度/回の研究シーズ紹介) → 法人会員が興味を持った研究シーズをもとに、深掘りに向けた個別の共同研究へ移行

【研究会の体制】

【脱炭素関連の九州大学研究シーズ項目例】

5) プラットフォーム活動(農林水産業)

②農林水産物の輸出促進研究開発プラットフォーム@九州・沖縄

【目的】 九州・沖縄地域における農林水産物輸出の実践的取組みを基盤に、輸出プロセスを生産から輸送、販売、消費までシームレスにとらえ、プロセスの制約要因となる本質的な課題に対して産学官連携で構築する研究開発体制により解決を図る。

【主な事業内容】 公開シンポジウムによる活動周知、産学連携交流会による課題の顕在化及び研究プロジェクトの構築を経て、クローズドの勉強会によりコンソーシアム組成、産学連携による事業化を目指す。

【プラットフォームの体制】

【キーコンセプト】

6) プラットフォーム活動(ヘルステック)

③オープンサイエンスプラットフォーム(OSP)

【目的】 ヘルステック分野において、リスクを抑えつつ前例のない価値を生み出すため、医療ビッグデータ解析から新たな価値を創出し、総合知による課題解決を図る。

【主な事業内容】 ビッグデータ解析による予想外の因子探索とデータエビデンスで担保された因子を用いて、広範なバックグラウンドを持つ多くの研究者と参画企業がオープンに討議することで総合知を形成し、参画企業の所有する課題解決のアイデアを創出する。

【オープンサイエンスプラットフォーム(What to do型)】

【社会デザインの生きた実験と創造の場「いとしま免疫村」】