

インフォマティクスがもたらす結晶成長プロセスの革新

名古屋大学・宇治原徹

最近、ディープラーニングなど機械学習の威力が広く理解されるようになり、データ科学の応用が様々な分野で進んでいる。材料分野においても新物質探索に向けた試み（マテリアルズインフォマティクス）が始まっている。また、物質を実際に使える材料にするためには、プロセス開発も重要であり、その分野におけるデータ科学の応用も期待されている。しかしながら、データ科学を活用するには、当然ながらデータが必要であり、その取得方法が、データ科学を物質探索やプロセス開発の強みにできるかどうかのカギとなり、それにはシミュレーションや物性評価、プロセス評価技術の革新も必要となってくる。本シンポジウムでは、半導体および関連材料の結晶成長において、物質探索とプロセス開発の観点から、データ科学、さらにはビッグデータ取得に重要となるシミュレーション技術と物性評価・プロセス評価技術に関連する研究者を一堂に集め、データ駆動型の物質探索、結晶成長プロセス開発において基礎となる技術や考え方、今後の方向性について概観することを目的とした。

最初に 2 件の講演では、すでにインフォマティクスを活用している分野で、その方法論、事例、課題について述べていただいた。最初に東京大学・船津公人氏からデータ科学の利用がいち早く進んでいるケモインフォマティクスの現状から将来展望までを概観していただいた。これまで、材料設計や分子設計において先行してきたが、次に生産技術をも含めたプロセス開発・管理におけるインフォマティクスの重要性を説明し、さらに、自身が進めている研究を例として、構造・物質設計とプロセス設計を同時に行うことの必要性を説明いただいた。また、シミュレーションによるデータ補完の重要性も説明いただいた。次に、物材機構・小出康夫氏からマテリアル・インフォマティクスの現状と課題について紹介された。現在、マテリアル・インフォマティクスに関連して進行中のプロジェクトの紹介と、事例をいくつか紹介いただいた。

続いての 2 件では、実際の材料合成・結晶成長における先進的な取り組みについて紹介された。東工大・大場史康氏よりインフォマティクスの事例として新規窒化物蛍光物質の発見の方法と経緯についての紹介があった。本研究では、実際にデータサイエンスにより合成手法を提案し、実際の合成も行っている。これはプロセス設計におけるデータ科学の応用例の一つである。次に名古屋大学・角岡洋介氏より SiC 溶液成長法の最適条件予測におけるデータ科学の活用について紹介された。溶液成長においては溶液中の流れや温度、組成分布の制御が重要であるが、それを直接制御することは困難であり、かつシミュレーションによる予測も非常に時間がかかる。本研究では、シミュレーション結果に対して機械学習を行うこ

とで、従来よりも桁違いに高速に計算結果を予測するモデルを構築、これにより帰納的に最適条件を見出される可能性を示唆した。これも、今後のプロセスにおけるインフォマティクスの代表的な活用例となりうるであろう。

結晶成長にインフォマティクスを適用するときに、シミュレーションは極めて重要な役割を果たす。名古屋大学・白石賢二氏からは、GaNのMOCVDに関する結晶成長シミュレーションの最新の結果に関して報告いただいた。本講演ではMOCVDにおいては結晶成長表面における新たな反応経路が示すと同時に、機械学習などのデータとして活用するうえでは、より正確なシミュレーションが必要であることを述べた。インフォマティクスにはデータ取得も極めて重要である。量研機構・高橋正光氏からは、半導体薄膜結晶成長におけるX線回折その場測定の有効性について紹介された。回折実験においては、回折像に着目されがちであるが、実は散乱像に多くの情報が含まれており、今後結晶成長インフォマティクスの重要なデータになりうることを示した。最後に一般講演として、結晶構造解析におけるデータサイエンスの新たな手法に関して提案があった。

参加者は概数ではあるが300人近くあり、注目度の高さがうかがえた。また休憩時間やシンポジウム終了後にも、多くの方々から司会をしていた筆者に「大変興味深かった」と声をかけていただいた。また、会場のあちこちで議論をしている様子が見られた。シンポジウムとしては大成功であったと自負する。

結晶成長分野でインフォマティクスを活用するには、データ科学だけではなく、シミュレーションと実験（成長実験、計測実験いずれも）これらが三位一体で取り組まなければいけないことが、メッセージとして強く伝えることができたと思われる。また、これまでインフォマティクスには興味があるものの、きっかけや取り掛かりが見いだせなかった方々にとっても、非常に参考になったと思われる。現在、結晶成長をはじめとする様々な材料プロセスにおいては、世界的にみてもまだまだ機械学習などの活用例が少ない。今回のシンポジウムがきっかけとなり、応用物理学会が起点となり、この分野が生まれ、発展していくことを切に願う。