

物質・材料DX

～マテリアルズインフォマティクスとその先～

2020年9月28日～11月30日

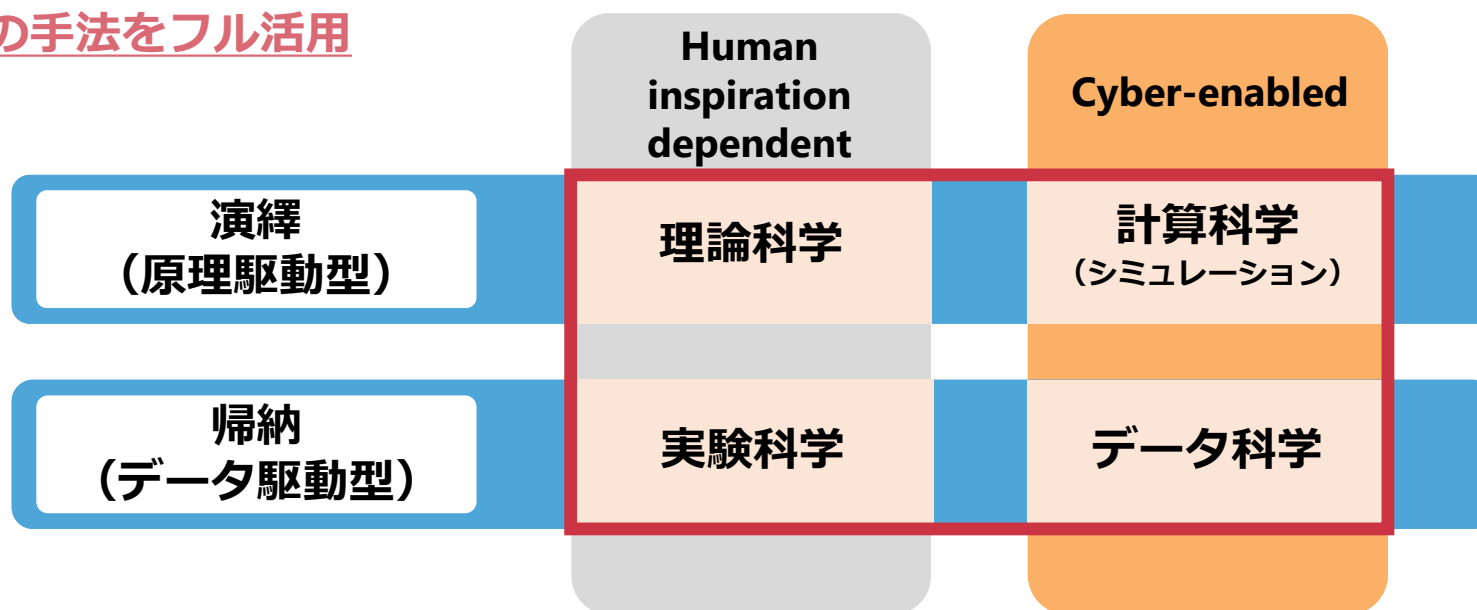
ナノテクノロジー・材料ユニット 福井 弘行



国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy Japan Science and Technology Agency

4つの科学的手法の組合せ（4輪駆動）と加速プラットフォームにより、
諸科学の問題をハイスループットに解明し、開発を行うスキームを異分野連携で構築

4つの手法をフル活用



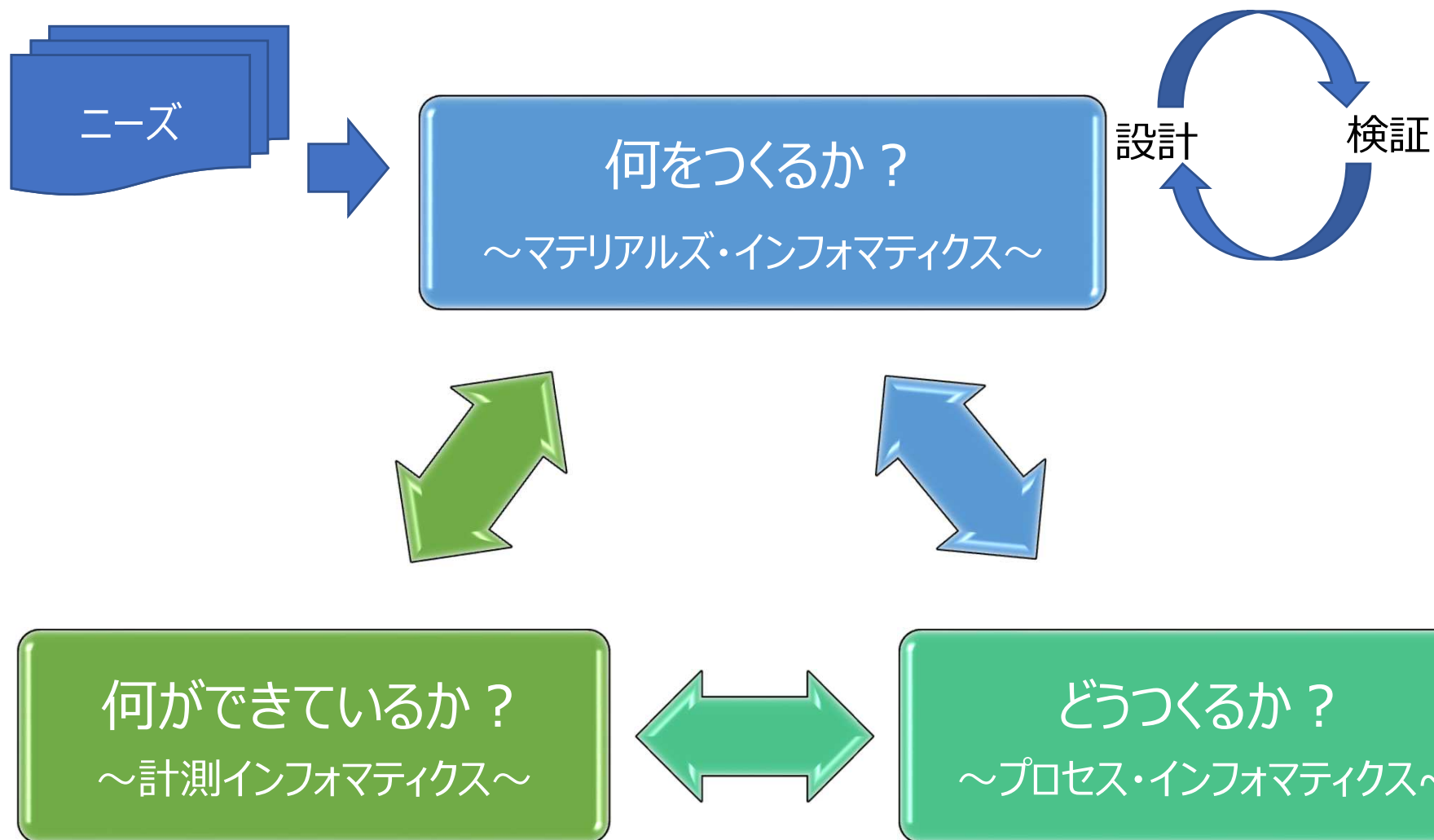
加速プラットフォーム

研究機器にIoT、ロボティクスを
導入することによる
実験データ取得工程の自動化

インフォマティクスによる予測結果の
IoT、ロボティクスを活用した
ハイスループット実験による検証

データベース、解析ツール、APIからなるデータプラットフォーム

データ駆動型ものづくりスキーム



JST-CRDS 俯瞰ワークショップ「プロセスインフォマティクス」伊藤特任フェロー(CRDS)プレゼン資料から

マテリアルズインフォマティクスの3つの方向性

[新物質探索]

- 第一原理計算とデータ科学（ベイズ最適化、ディープラーニング等）を併用することで効率的に候補物質をスクリーニングし、新規物質探索を行う手法が主流である。ターゲットは電池材料、半導体材料、触媒材料など様々である。

[ミクロな微細構造と材料物性との相関]

- 同じ組成をもつバルク物質であっても、無数の種類の界面や異なる微細構造が存在することで、電気伝導率やイオン伝導性、熱輸送特性などが大きく影響を受けることが知られている。
- そのため、ナノ構造や界面構造などのミクロな微細構造とバルクの材料特性との相関を解明することが必要となるが、物質から材料にする際には様々な階層構造が存在するため、それらの相関を解明するためにデータ科学を活用する。

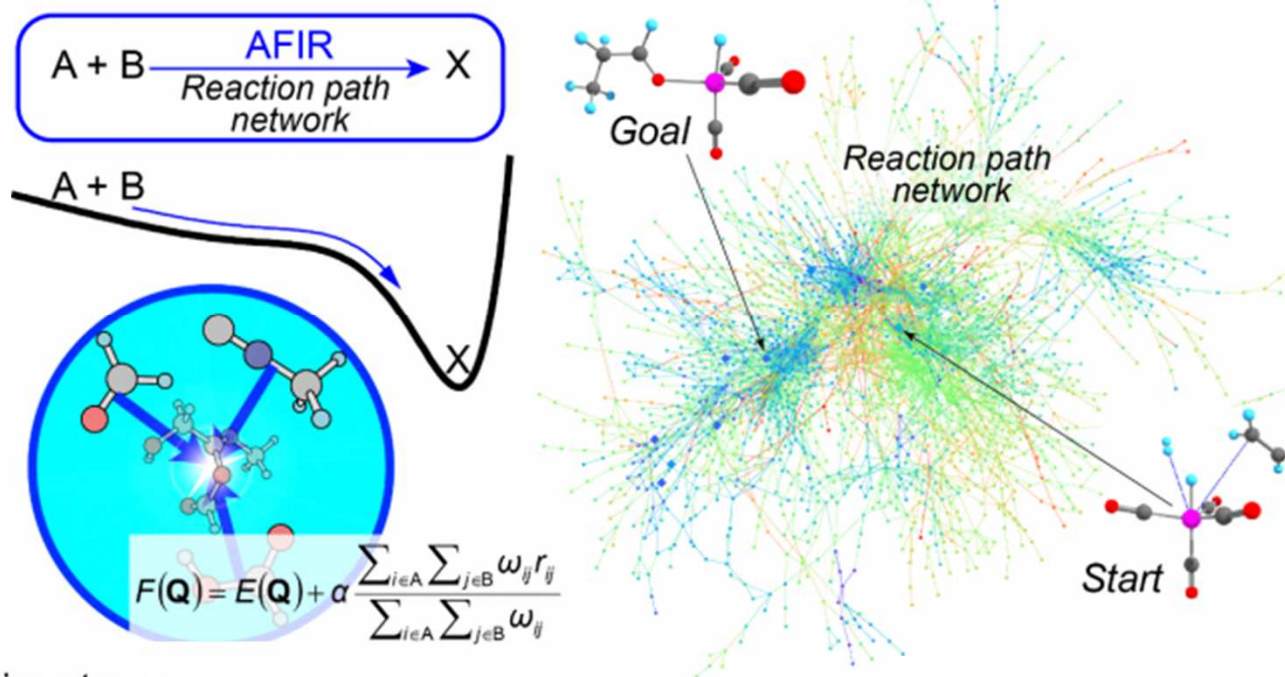
[結晶構造から材料組成までのマルチスケール統合]

- 鉄鋼やゴムなどの構造材料のさらなる高性能化・高機能化には、原子・ナノスケールの微細構造と組織構造やマクロ特性、製造プロセスとの関係を明らかにすることが重要となっている。
- ナノ／メソ／マクロのそれぞれのスケールにおける組織情報が重要であり、画像情報との相性がよいディープラーニングによるMI が期待されている。

反応経路自動探索

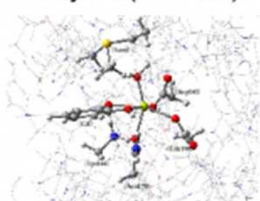
<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/1591>

- ✓ 人が考えられる範囲を超え
化学反応の経路を
自動探索できる計算法
- ✓ AFIR法(人工力誘起法)により
反応経路ネットワーク構築
- ✓ 未知反応の予測が可能に

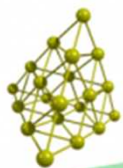


AFIR is applicable to reactions of various types

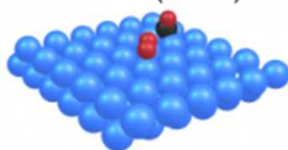
Enzyme (QM/MM)



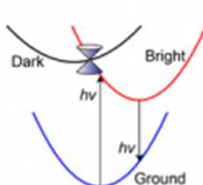
Metal cluster
catalysis



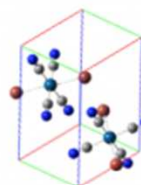
Surface (PBCs)



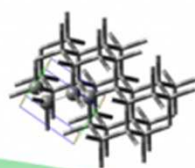
Photoreaction



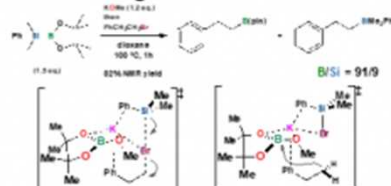
Photoreaction
in crystal (PBCs)



Crystal (PBCs)



Organic reaction



Artificial Force Induced Reaction (AFIR)

- ✓ さまざま化学反応に適用可能
 - 有機合成反応
 - 光反応
 - 微粒子触媒
 - 固体触媒
 - 相転移反応など
- ✓ AFIRアルゴリズムを搭載した
GRRMプログラムが公開されている

<https://iqce.jp/GRRM/index.shtml>

ハイスループット実験

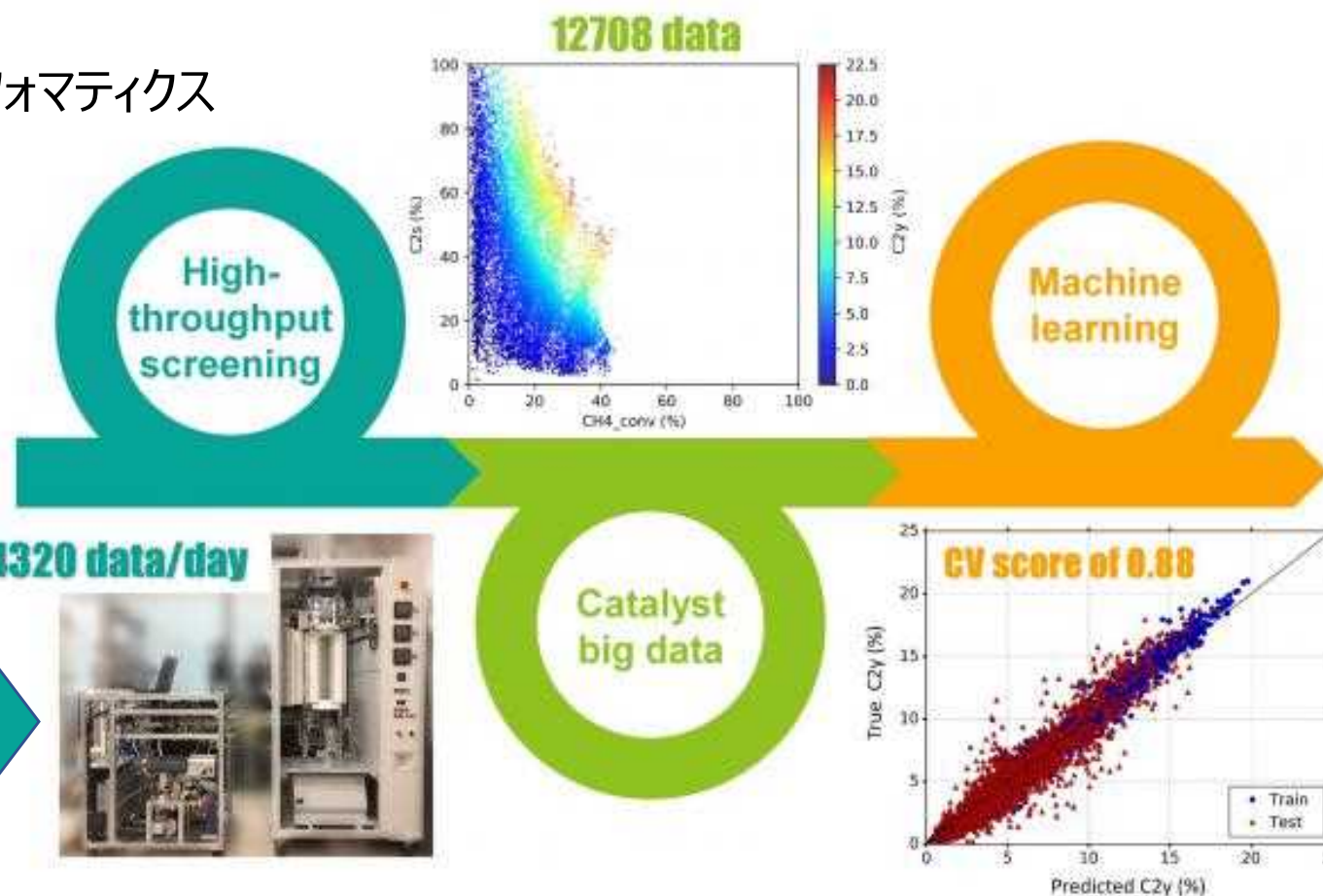
1. マテリアルズインフォマティクスで予測・設計された材料物性を効率的に検証
2. 材料組成・構造とプロセス条件を同時に最適化

✓ 触媒インフォマティクス

メタン酸化カップリング反応
ハイスループット実験装置



4320 data/day



<http://www.jaist.ac.jp/ms/labs/taniike/research/>

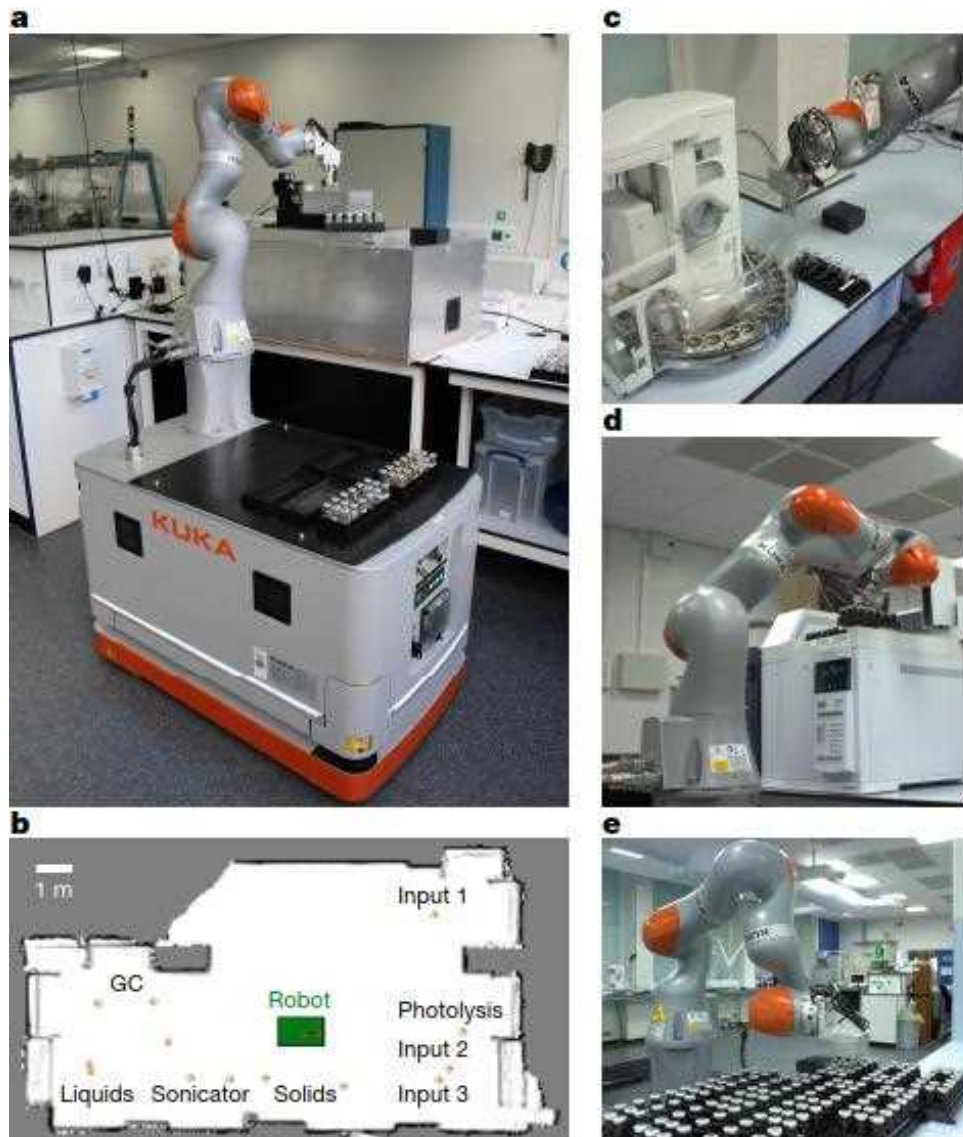
自走するロボット化学実験者

■ 従来

- 各実験装置とロボットアームを連動させるための実験プラットフォームのカスタム設計が必要



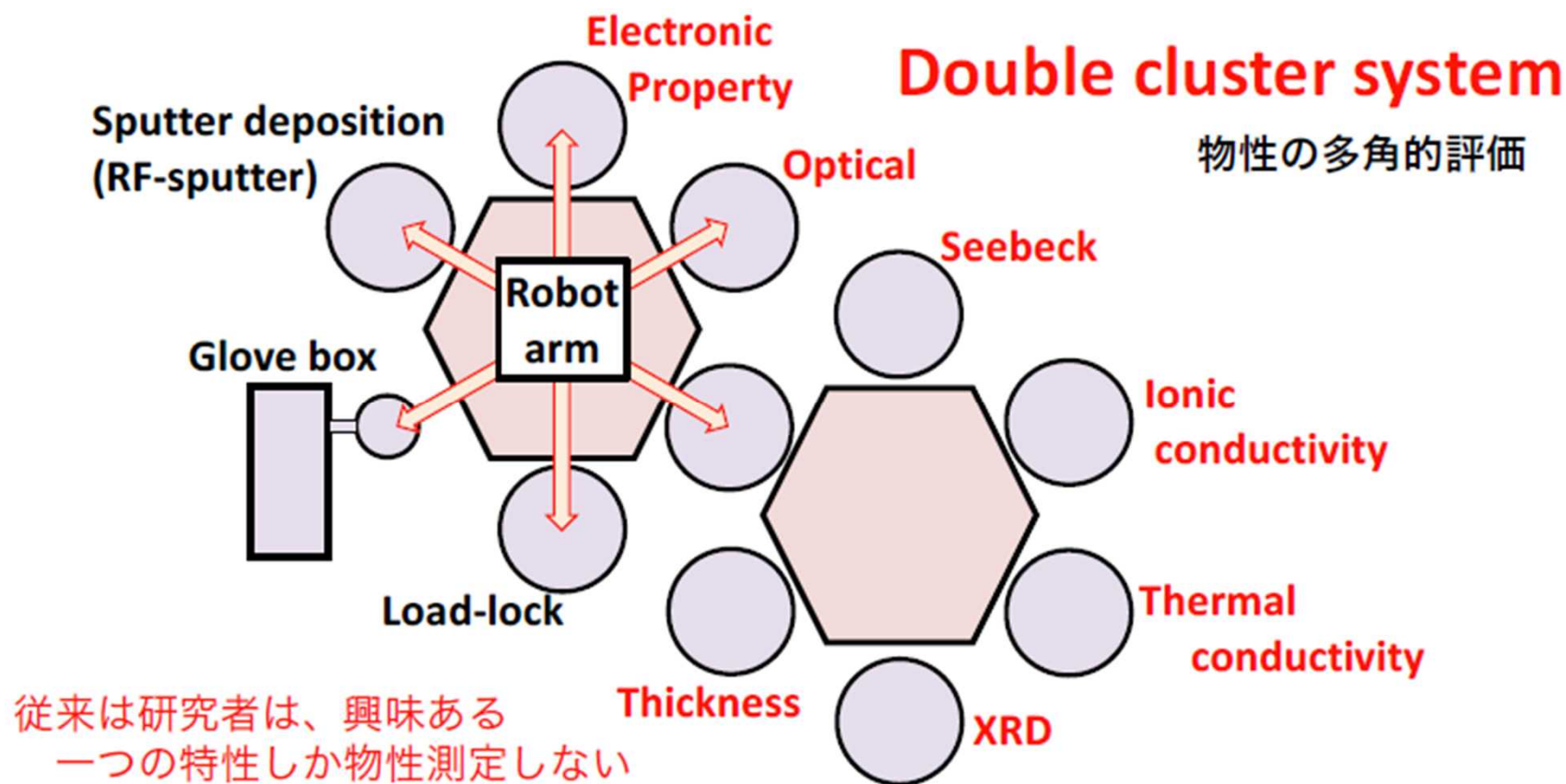
- ✓ 一般的な自走式ロボットを改良により、実験室の中を移動し人間の化学者と同じ機器を用いた実験を可能にした。
 - ✓ 位置精度： $\pm 0.12\text{mm}$
 - ✓ 角度制度： $\pm 0.005^\circ$
 - ✓ 実験室： $7.3\text{m} \times 11\text{m}$
- ✓ 光触媒の性能向上
 - ✓ バイズ最適化
 - ✓ 8日間で688回の実験
 - ✓ 21.6時間/日
 - ✓ 人間が行えば 数か月
 - ✓ 活性が6倍向上
- ✓ 実験機器でなく実験者を自動化する方法
⇒ 幅広い応用が期待される。



Burger, B., Maffettone, P.M., Gusev, V.V. et al.
A mobile robotic chemist. Nature 583, 237–241 (2020)

マテリアルズ・ドック

- ✓ 人間ドックの材料版
 - データベース蓄積
- 組成、成膜条件(**IoT**)、電気抵抗、イオン伝導、光学特性、誘電率、...



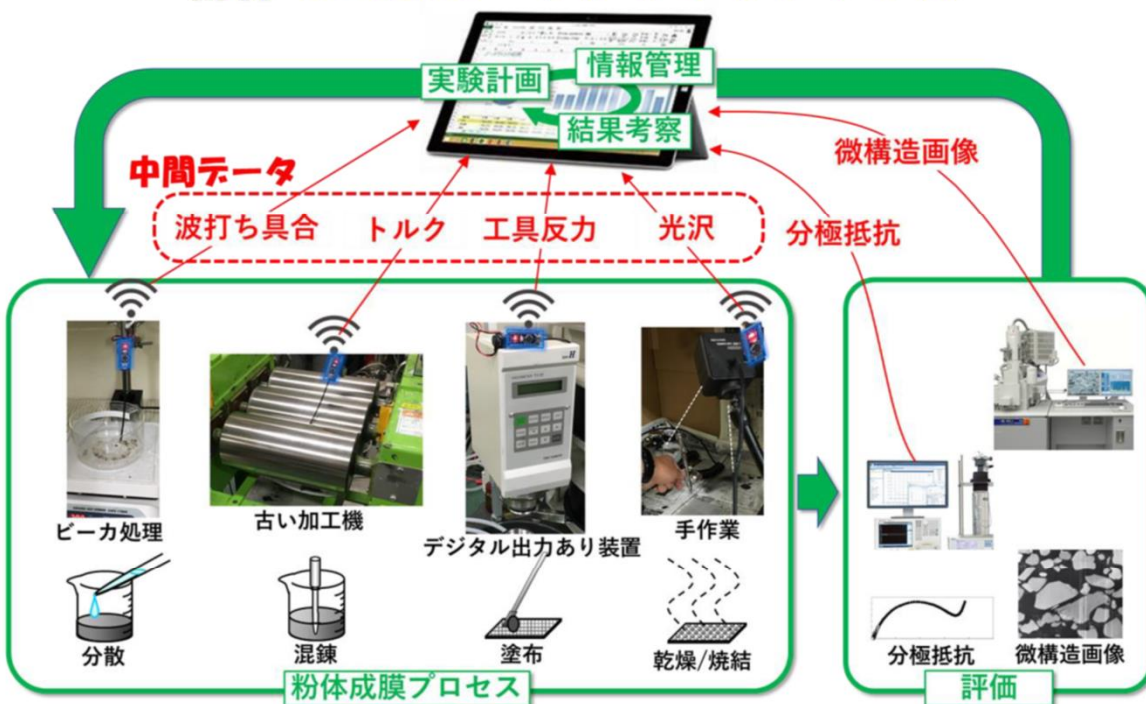
JST-CRDS科学技術未来戦略ワークショップ「多様な安定相からの高機能材料の創製」
一杉教授(東工大)プレゼン資料から

プロセス・インフォマティクスの一例

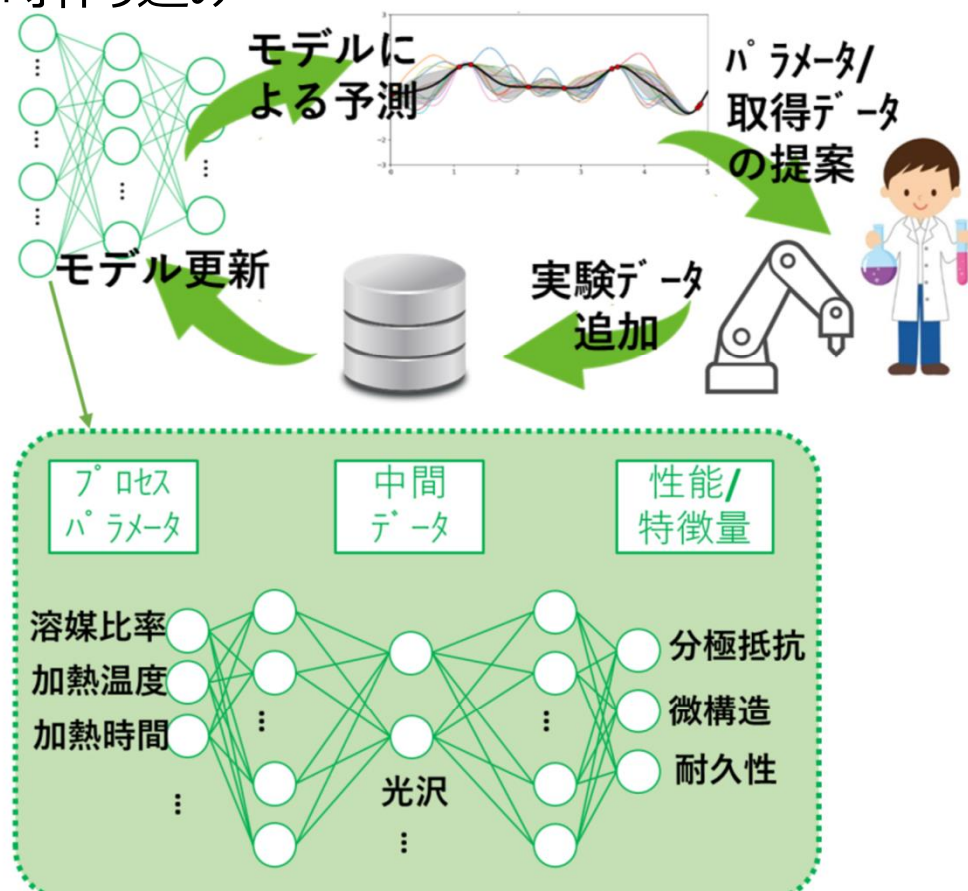
✓ 粉体プロセス・インフォマティクス

➤ 燃料電池触媒組成と成膜プロセスの同時作り込み

“粉体プロセス・インフォマティクス”



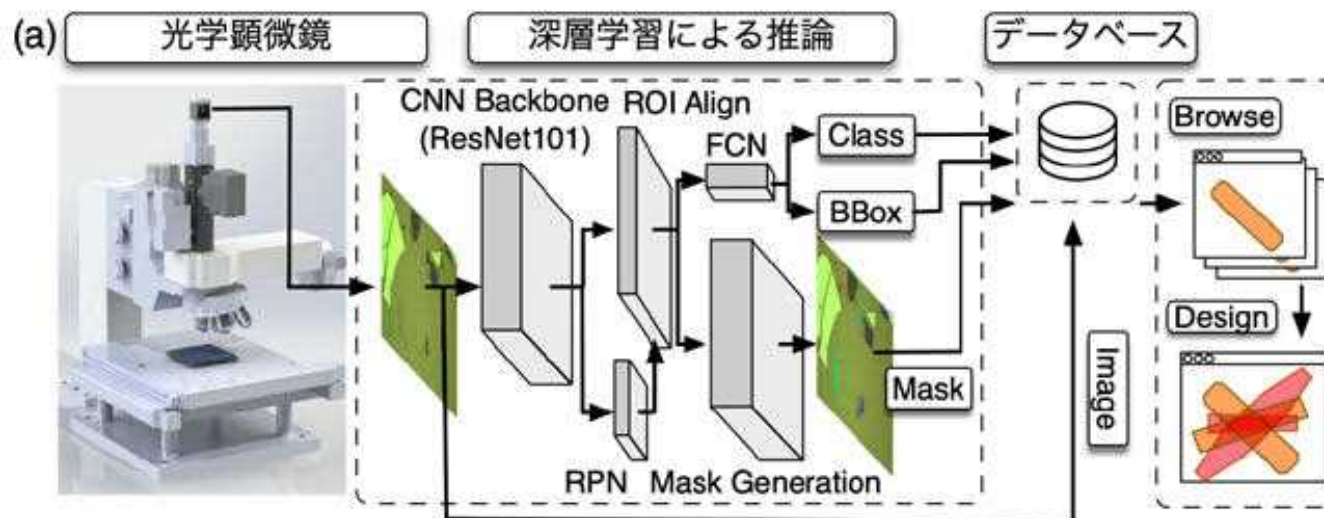
勘コツを象徴する中間データの
見極めが重要



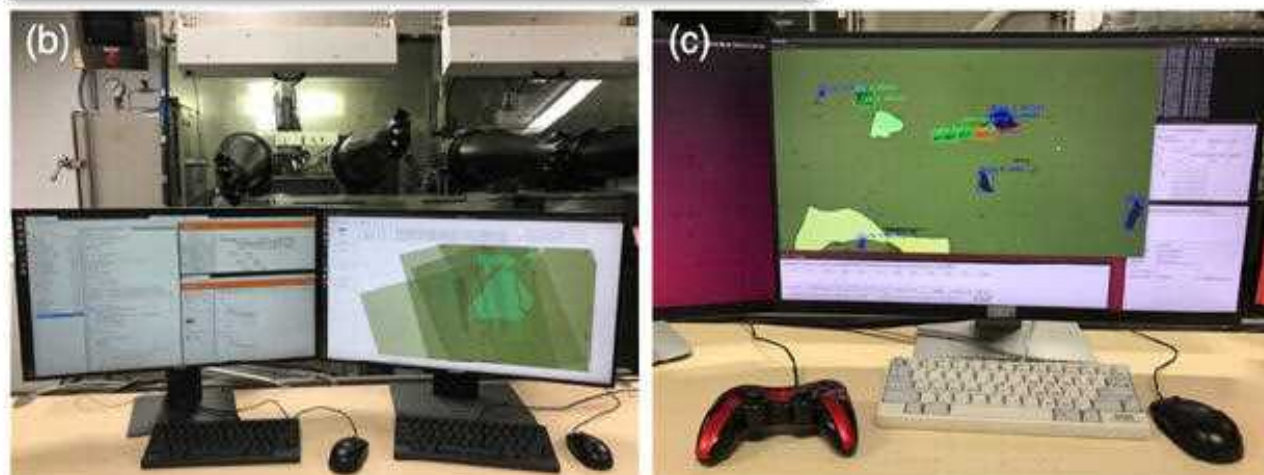
能動学習, オートエンコーダ 技術を
ベースにした開発

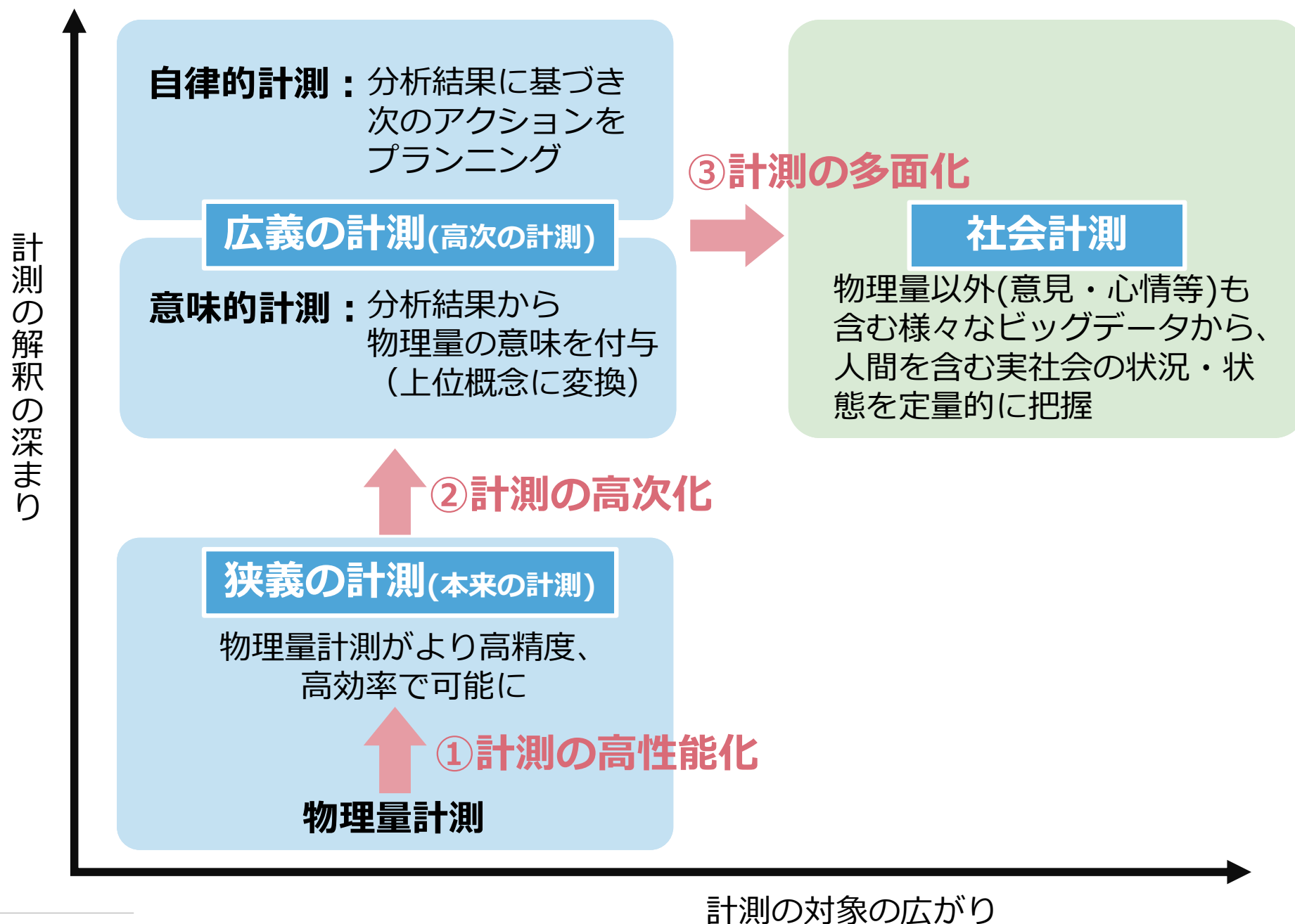
計測インフォマティクスの一例

- ✓ AI画像認識アルゴリズムを搭載した光学顕微鏡
 - 二次元結晶を全自動探索が可能に

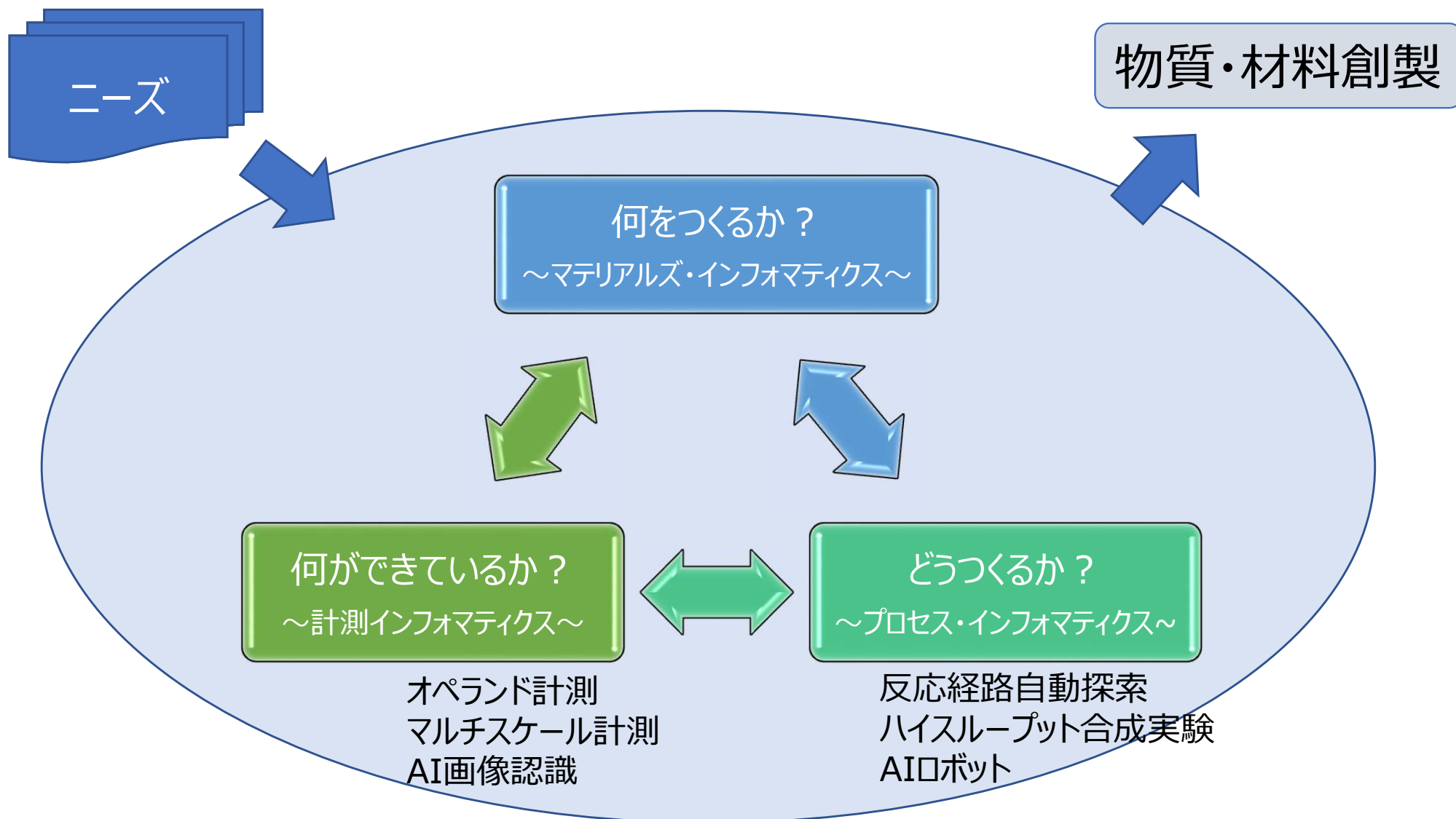


原子層探索システムと深層学習による推論の例





データ駆動型ものづくりスキーム



CRDS-FY2019-SP-02

戦略プロポーザル

未来材料開拓イニシアチブ

～多様な安定相のエンジニアリング～

STRATEGIC PROPOSAL

Future Materials Exploring Initiative

- Engineering for Diverse Stable Phases -



国立研究開発法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

<https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2019/SP/CRDS-FY2019-SP-02.pdf>

CRDS-FY2020-RR-01

The **Beyond Disciplines** Collection

デジタルトランスフォーメーションに伴う 科学技術・イノベーションの変容



国立研究開発法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

<https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2020/RR/CRDS-FY2020-RR-01.pdf>

最後までご覧頂きありがとうございました。

■ DXに関するCRDS報告書はこちら



<https://www.jst.go.jp/crds/report/report04/CRDS-FY2020-RR-01.html>

■ CRDSの活動・成果・コラムは ウェブサイトでご覧いただけます



<https://www.jst.go.jp/crds/>



■ 最新情報はメールマガジン、Facebookでも配信中



<https://www.jst.go.jp/melmaga.html>



<https://fb.com/170314426446196/>

■ その他 お問い合わせはこちらまで



crds@jst.go.jp