

話題

内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(SIP) 課題「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」  
研究開発課題「先端的構造材料・プロセスに対応した逆問題MI基盤の構築」

## 材料開発を加速させる産学官連携組織が発足

人工知能(AI)をはじめとする情報科学や計算機を活用した材料開発が世界各国で盛んです。日本でも物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門の出村雅彦部門長らが、材料工学の4要素であるプロセス、構造、特性、性能を計算機上でつなぐマテリアルズインテグレーションに基づき、より網羅的で高い効率を追求した統合型材料開発システム(MIntシステム)を開発しています。2020年12月1日にはMIntシステムを基盤とする産学官連携組織「マテリアルズインテグレーションコンソーシアム(MIコンソ)」を発足させ、会員の募集を開始しました。

中核となるMIntシステムでは、材料工学の手法とAIを含むデータ科学を活用し、計算機上でプロセスから構造、特性を経て性能までを予測できます。逆に、欲しい性能から最適なプロセスや化学成分を素早く探索することも可能

です。何千時間もかかる実験をわずか数時間の計算で推定するなど、実験を中心に行われてきたアイデアの検証作業を大幅にスピードアップできるため、コスト低減にもつながります。

MIコンソはMIntシステムを実際の社会に役立てることを目指した新しい産学官連携の研究スタイルです。産学官の会員が対等な立場で参画し、企業や

大学・公的機関の会員は研究開発にMIntシステムを活用、一体となって材料イノベーションを進めていきます。MIntシステムはMIコンソ会員の研究成果を取り入れながら進歩します(図)。

このエコシステムの発展は材料開発の加速とコスト低減をさらに促し、日本の材料開発力向上や部材産業の競争力強化に寄与することでしょう。

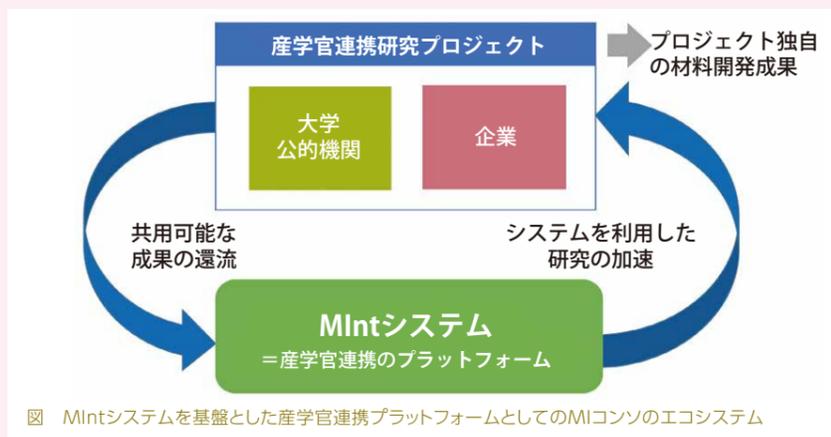


図1 MIntシステムを基盤とした産学官連携プラットフォームとしてのMIコンソのエコシステム

研究成果

戦略的国際共同研究プログラム(SICORP) EIG CONCERT-Japan「効果的なエネルギー貯蔵と配分」  
研究課題「高効率電力貯蔵を目指す低コストナトリウムイオン電池の開発」

## ナトリウムイオン電池の容量を増やす多孔質カーボン

周期表ではアルカリ金属としてリチウムの真下に位置するナトリウム。資源が豊富で毒性が低いため、蓄電池の材料として研究されている物質の一つです。特に災害時の備えや、太陽光発電、風力発電の平準化、夜間電力の貯蔵など定置型の大型電池として、安価なナトリウムイオン電池が望まれます。しかし、リチウムイオン電池と比べて電気を貯めておける容量「エネルギー密度」が低く、実用化に至っていません。

近年、黒鉛のような層状部分とナノサイズの空孔とで構成された多孔質な炭素材料「ハードカーボン」が、ナトリウムイオンを貯蔵し高容量の負極

材料になり得ることが注目されています。困難といわれたナトリウムイオン電池の研究開発に果敢に取り組んできた東京理科大学理学部第一部の駒場慎一教授らは、リチウムイオンに比べて径の大きいナトリウムイオンの貯蔵に適した、ハードカーボンの構造と合成手法を検討しました。

原料に用いたのは、グルコン酸マグネシウムとグルコースの混合物です。600度で前処理すると酸化マグネシウム(MgO)のナノ粒子を形成し、これが鑄型となります。MgOは薄い酸で簡単に溶出でき、多孔質なカーボンが得られます。また、混合試料を水に溶かしてから凍結乾燥したところ、粉

体混合による調整法よりもMgOナノ粒子がより均一に分散することが明らかになりました(図1)。

合成したハードカーボンを負極としてナトリウムイオン電池特性を評価したところ、478mAh/g(ミリアンペアアワー毎グラム)という高い容量を示しました。300~350mAh/g程度だった既存のハードカーボン材料を上回り、リチウムイオン電池の負極材料である黒鉛の理論容量372mAh/gと比べても高容量です。電池のエネルギー密度は容量と電圧(正極と負極の作動電位の差)の積で決まります。負極の作動電位が低いハードカーボンを高容量化したこと

研究成果

戦略的創造研究推進事業CREST 研究領域「イノベーション創発に資する人工知能基盤技術の創出と統合化」  
研究課題「人工知能を用いた統合的ながん医療システムの開発」

## 早期大腸がん発見を支援する医療ソフトを開発



図1 「WISE VISION内視鏡画像解析AI」の概略

がんの中で、日本人が最も多く罹患しているのが大腸がんです。内視鏡検査は大腸がんを早期発見するための有効な手段ですが、肉眼での認識が困難な病変もあり、医師の熟練度の差などの要因から前がん病変や早期がんが見逃されてしまうこともありました。

国立がん研究センターがん分子修飾制御学分野の浜本隆二分野長らの研究チームは、日本電気(東京都港区)と共同で、内視鏡検査中に目視では認識困難な病変の発見を人工知能(AI)が支援するソフト「WISE VISION内視鏡画像解析AI」を開発しました(図1)。

早期大腸がんや前がん病変の内視鏡

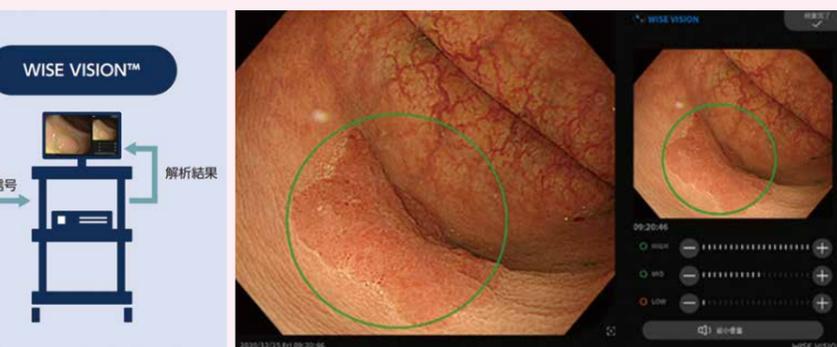


図2 「WISE VISION内視鏡画像解析AI」を用いた大腸がん検出の例

画像25万枚について、国立がん研究センター中央病院内視鏡科の専門医が1枚1枚に所見を付け、AIに学習させました。このAIは内視鏡検査時に映し出される画像全体を解析し、早期大腸がんや前がん病変が疑われる部位を検出すると、通知音と丸印で内視鏡医に伝えます(図2)。このソフトは主要メーカー3社の内視鏡と接続でき、効率的な利用が見込まれます。

ソフトの性能を検証するために臨床医の読影試験と比較したところ、見つけやすい隆起型の病変に対しては経験豊富な内視鏡医とほぼ同等の性能を示し、見つけにくい表面型病変の検出精

度はソフトの支援によって向上しました。この結果を受け、「WISE VISION内視鏡画像解析AI」は医療機器として承認されました。

さらに研究チームは、平坦または陥没している箇所など、ベテラン医師でも認識が困難な病変についてもAIに学習させようと考えています。将来はさらに難易度の高い大腸病変の質的診断や大腸がんのリンパ節転移の予測にも対応することを目指します。また、CT画像や病理画像、遺伝子の情報などとリンクさせることによって、多面的に幅広く活躍する内視鏡画像診断補助ソフトにすることを目標に掲げています。

で、極めて高容量な従来のリン系負極材料と同等のエネルギー密度を得ました。ナトリウムイオン電池は低工

ネルギー密度というこれまでの常識を覆す結果です(図2)。

正極材料や電解質とともにさらに

開発が進めば、高エネルギーで安価なナトリウムイオン電池の実現が期待されます。



図1 粉体混合よりも凍結乾燥の方が、より均一にMgOナノ粒子が分散したカーボン材となる。鑄型のMgOを溶出して、多孔質なハードカーボンを得た。

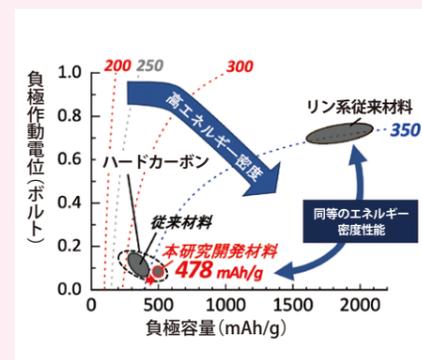


図2 ナトリウムイオン電池の負極の特性。右下に行くほど高エネルギー密度となる。開発したハードカーボンは負極容量が向上し、高いエネルギー密度を示した。