

マテリアル革新力強化のための戦略策定に向けた準備会合

マテリアルのユーザ企業が考えるこれからの材料開発 ～日立を例に～

2020/04/27

株式会社 日立製作所 研究開発グループ
材料イノベーションセンタ 主管研究長

宮崎 克雅

基礎研究センタ 主管研究長

品田 博之

創業以来、材料起点のイノベーションで強いプロダクト・システムを提供

- 日立は、1910年の創業以来、Operational Technology (OT) ・プロダクト, IT・システム, そしてIoT・デジタルソリューションへと事業を変遷させてきた。(図1)
- 5馬力モータに始まり、様々なプロダクト・システムを提供してきたが、材料起点のイノベーションにより、強いプロダクト・システムを提供し、新事業を展開してきた。

1910 (工業化) 1960 (情報化)

2016 (デジタル化) 2020~

OT

Products・EPC・O&M

事業変遷

IT

System Integration

製品・サービス

IoT

Digital Solution

材料イノベーション



図1. 材料起点のイノベーションによる日立の事業変遷

プロダクト開発の短期・低コスト化のために、データ駆動型の材料探索へシフト

これまで

これまでのプロダクト開発では、製品の仕様を踏まえて、経験に基づく材料探索および選定、さらに、要素試作、製品試作に近い部分にも材料研究者が関与してきた。この中で、各プロセスに材料物性シミュレーションや解析シミュレーションを活用して、各工程の短縮化を実現してきた。（図2上）

これから

プロダクトの開発に際して、革新材料による高付加価値化、および、さらなる開発期間の短縮化が求められる中、材料探索および選定の短期・低コスト化を図るためには、製品の仕様を踏まえた上で、データベースを活用したデータ駆動型の材料探索スキームが必要である。（図2下）

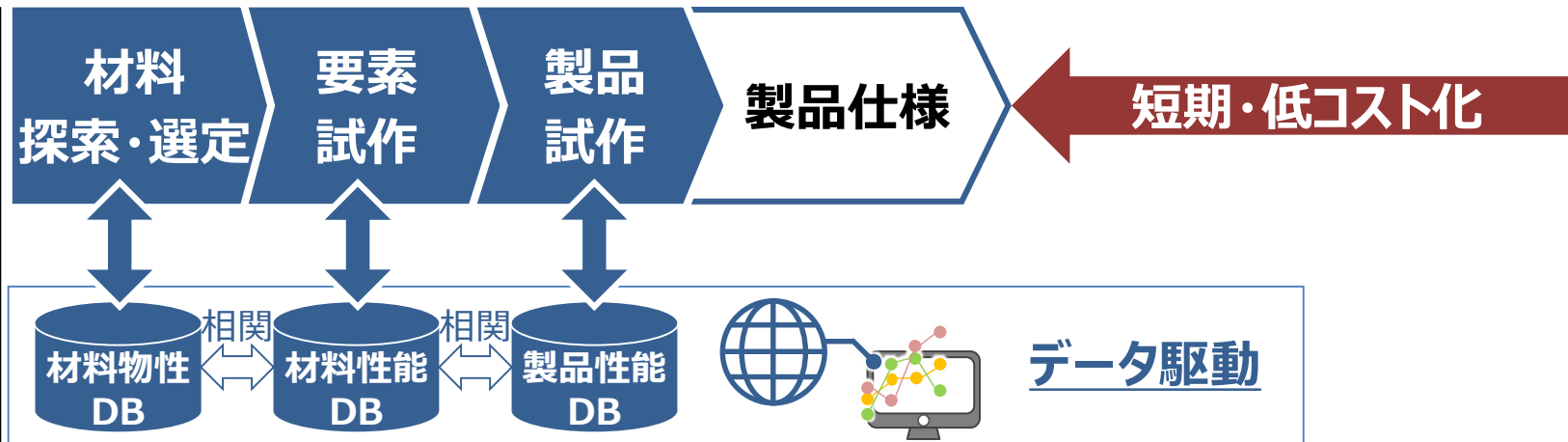
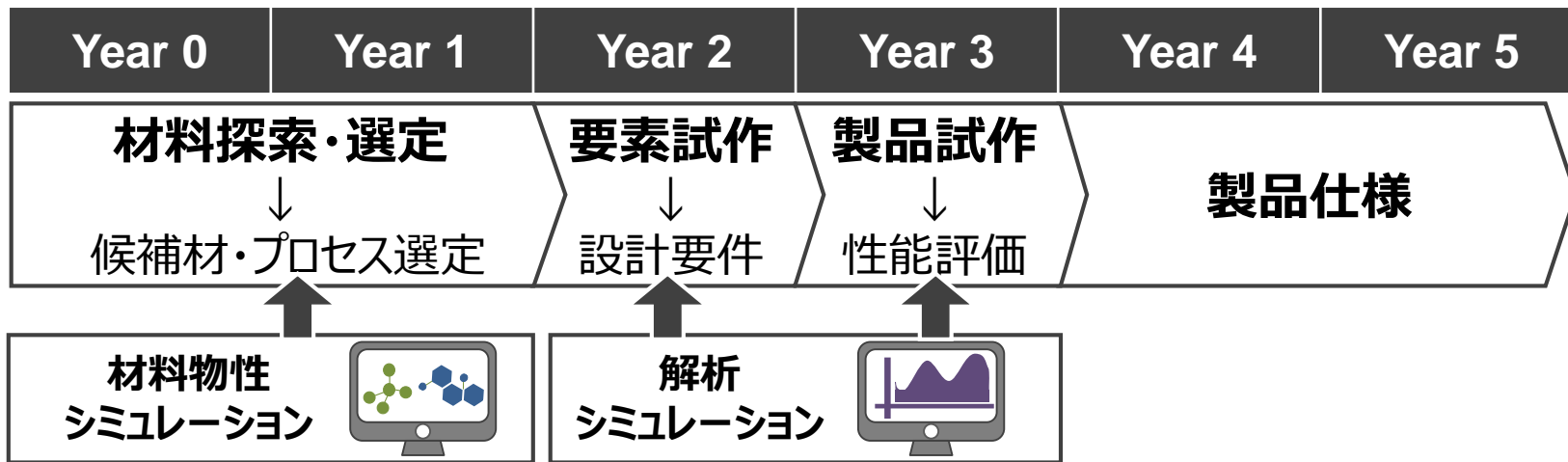


図2. これまでとこれからのプロダクト開発スキーム

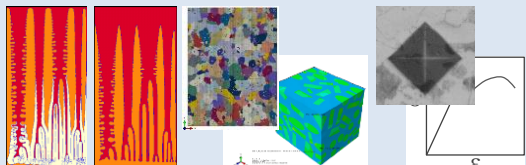
2-2. これからのデータ駆動型材料探索のアプローチ

- データベースには**プロダクト開発視点と材料開発視点の両方が必要**
- データベースの設計には、**データベースを活用する材料探索システムの考慮も必要**
- プロダクトの開発では、製品仕様に基づく製品性能から要求される材料性能を導く必要がある。 大学や素材メーカ、公的機関で開発されてきた新しい材料を製品に適用する場合、ユーザーが要求される材料性能を評価しなければならない。前述した**材料探索期間の短期・低コスト化の実現を目的に、データ駆動型の材料探索を活用する場合、各種の材料性能に関するデータベース(DB)、エンジニアリングDBが必要**になる。(図3)
- 一方、材料の開発では、プロセス、構造、さらに物性を含むデータベース(DB)、材料DBが重要である。この材料DBと機械学習等の手法を適用することにより、プロセス、構造、物性の相関関係を理解でき、**新たな機能の発現やこれまでの性能を大きく超える材料の短期間での開発が期待**される。
- プロダクト開発にデータ駆動型の材料探索を適用する場合、**プロダクト開発視点のエンジニアリングDBと材料開発視点の材料DBの両方が必要**であり、DBフォーマットの設計に考慮すべき点である。
- さらに、**DBの設計には、DBを活用するシステムを考慮することも必要**である。例えば、機械学習ツールを適用して各相関を探索するシステムやSIP2で開発が進められている統合型材料開発システム（MI：マテリアルズインテグレーションシステム）等を考慮したDB設計が必要である。
- なお、これらのDBに格納するデータの提供を単純に民間企業に求めることは、ノウハウ保持等の観点から容易ではない。一方、NIMSには、材料に関する基礎物性から材料性能に関するDBを充実させてきた歴史がある。**例えば、NIMS等に代表される公的機関において、新材料を対象に、データを系統的に取得して、質の高いエンジニアリングDBおよび材料DBを充実させる**ことが期待される。

大学・素材メーカー・公的機関等

ユーザ

材料開発



プロセス

構造

物性

原料
処理温度
処理時間
...

組成
結晶構造
配向
...

引張強度
拡散係数
腐食電位
...

材料性能

放熱性

耐熱性

耐食性

疲労強度

プロダクト・システム開発

製品性能

出力

寿命

サイズ

製品仕様

理論, 計算,
実験科学データ

データ駆動

データ駆動

ex.
Kinzoku,
PoLyInfo,
AtomWork

プロセス・
構造・物性

材料DB

材料性能

エンジニアリングDB

製品性能

図3. 材料DBおよびエンジニアリングDBによるデータ駆動型材料探索のコンセプト

蓄電池搭載電車の仕様から、あるべき電池を実現する材料を開発

- プロダクトの製品仕様を起点とした材料探索の事例として、非電化区間を走行する電車に搭載する蓄電池の構成材料の探索例を示す。(図4)
- 蓄電池搭載電車の製品仕様として、例えば、非電化区間での走行距離、電気容量当りの走行距離に相当する電費や寿命および信頼性等が挙げられる。これに対応した電池システムとしての製品性能は、エネルギー密度、出力密度、サイクル寿命、安全性である。
- 我々は、実験科学に基づき構築した製品性能DBと材料性能DB（エンジニアリングDB）から、電池としての製品性能を支配する材料性能の相関を見出している。例えば、エネルギー密度に強く影響する材料性能として、リチウムの伝導経路となる電解質の耐熱性を見出した。耐熱性の向上により、電池システムの冷却機構を簡素化でき、システム内の電池占有率を増すことでエネルギー密度を増加できるためである。耐熱性に相関のある材料物性として揮発温度に着目し材料開発を開始した。
- また、エンジニアリングDBからサイクル寿命向上に必要な材料性能として、電極と電解質の界面の劣化速度を抽出した。さらに、計算科学や高度計測を用いて構築した独自の物性・構造・プロセスDBを活用して、劣化速度に相関のある材料物性として電圧耐性を見出した。
- このように、蓄電池搭載電車の製品仕様を起点に、材料性能から求められる材料物性に落とし込み、大学や素材メーカーとともに試作・検証をすすめることで、製品性能を実現する新規材料として擬似固体電解質を開発した。
- この例では、製品仕様を起点に実験科学や計算科学を援用して短期化・低コスト化を進めてきたが、材料探索のさらなる加速には、データ駆動型のスキーム（データ駆動型科学）の活用が期待される。

電解質開発

蓄電池搭載電車開発

プロセス・構造・物性

材料性能

製品性能

不揮発性
擬似固体電解質



揮発温度

Li拡散係数

電極との密着性

電圧耐性

耐熱性

Li伝導性

電極/電解質
界面劣化速度

エネルギー密度

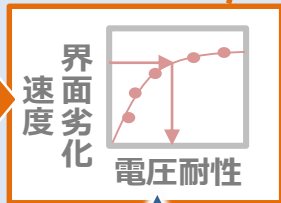
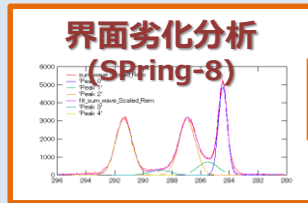
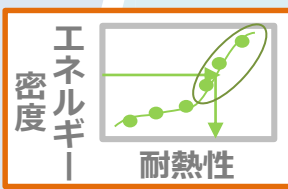
出力密度

サイクル寿命

安全性

製品仕様

- ・走行距離
- ・電費
- ・寿命
- ・信頼性



実験, 計算
科学データ

データ駆動

実験, 計算
科学データ

データ駆動

実験, 計算
科学データ

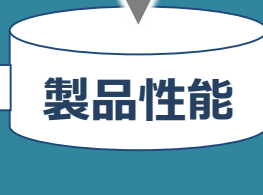


図4. 蓄電池搭載電車の電池開発における構成材料の探索例

ユーザ企業からみた新しい革新材料の開発のポイント：

製品の製品性能を支配する革新的な性能を持つ材料の開発には、プロセス、材料構造および材料物性、さらには材料性能の相関関係の把握とメカニズムに基づく理解が重要

これを実現するために・・・

- ・ ①データ駆動型科学に加えて、従来の②理論科学、③計算科学、さらに、④計測を含む実験科学のそれぞれの推進と積極的な各連携が必要
- ・ データ駆動型科学の推進には、データベースとその活用システムの構築と維持が必要
- ・ 計算科学の観点からは計算プラットフォーム、実験科学の観点からは計測プラットフォームの維持が必要。高度な計算科学および実験科学により、質の高いデータの収集を期待（3-2 参照、計測PF Spring-8 活用事例を図4に例示）

上記に加えて、成果帰属（データベースを活用して開発された材料、また、材料を活用した製品の知財の扱い）等の制度面での整備の必要性

3-2. 計測プラットフォームの構築に関する施策の提言

- データ駆動型材料開発を支えるのはNo.1・Only 1のマテリアルデータ
- 計測分析施設等の戦略的共用を通じたNo.1・Only 1のデータ基盤の整備

■ 計測分析基盤の開発と共用活用事業の状況（代表的な公的事業）

- 最先端研究開発支援プログラム
- 先端計測分析技術・機器開発プログラム
- 未来社会創造事業「共通基盤」領域



**日本独自の計測装置は
公的資金で多数開発**

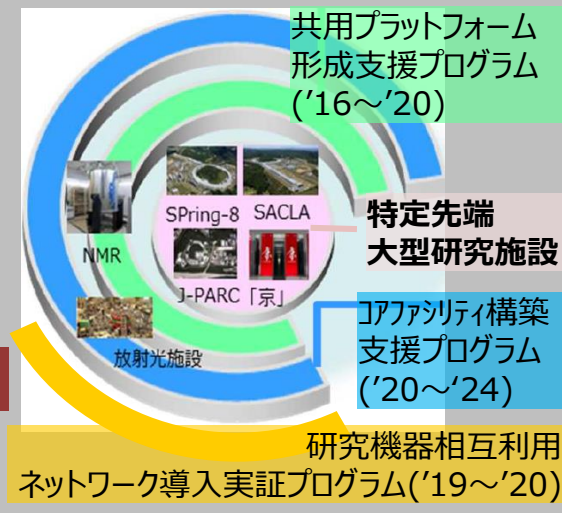
- ナノテクプラットフォームの3部門(～'21)
微細構造解析が計測装置の共用推進

微細構造解析 <11機関> 超高压透過型電子顕微鏡、高性能電子顕微鏡(STEM)、放射光等	微細加工 <16機関> 電子線描画装置、エッチング装置、イオンビーム加工装置、スパッタ装置等	分子・物質合成 <10機関> 分子合成装置、分子設計用シミュレーション、システム質量分析装置等
--	---	--



装置共用化事業は多数存在、実績多

- 先端研究基盤共用促進事業



■ 現状認識に基づく課題と提言

- 1) 現行共用PF事業をさらに発展
⇒ 先端研究基盤共用促進事業とナノテクPFの統合・再編で**継続的かつ大型の共用事業構築**
- 2) 共用施設・装置は、一部の例外を除き大学・国研・財団法人の設備
⇒ **公共財**として最大限活用する必要あり。**民間保有設備・装置**（特に国の助成による開発装置・技術）の**共用事業参画**へのインセンティブに関する施策
- 3) インフォマティクスデータ化の推進
⇒ **共用計測結果**をデータベースプラットフォームに**公開促進**するインセンティブに関する施策

マテリアルのユーザ企業の立場から、今後の材料開発の考え方を例示

強いプロダクト・システムの提供には材料起点のイノベーションが必要。プロダクト・システムの開発加速には材料探索および選定の加速が不可欠

データベースを活用したデータ駆動型の材料探索スキームによる材料探索および選定の加速を期待

プロダクト・システムの製品性能を実現する材料性能に関するエンジニアリングDB、プロセス－構造－材料物性の相関関係の導出を実現する材料DBが必要

いずれのDB設計に際しても、適用を想定する機械学習ツールや材料性能予測を目的とした統合型材料開発システム等の考慮が必要

- ①データ駆動型の科学に加えて、従来の②理論科学、③計算科学、さらに、④計測を含む実験科学の連携を支えるプラットフォームと制度面の整備が必要**

我が国の強みである計測装置の継続的かつ大型共用事業の構築と民間保有設備・装置の共用事業参画、さらに計測結果の共用促進に関する支援が必要

HITACHI
Inspire the Next