

第3回 第12期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会  
でのご紹介資料

説明時間14分

# トヨタにおけるマテリアルズインフォマティクス 材料データの相互利用と材料宝の地図

2024年 1月 19日

トヨタ自動車株式会社  
先端材料技術部

平田 裕人

## 1. 取り組みの背景

2. 材料の類似性と材料宝の地図

3. やりたいこと

4. データ相互利用の考え方（協調と競争）

5. 仲間づくり

6. 国に期待すること

# はじめに：私たちの仕事

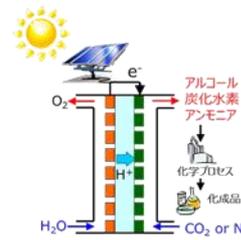
## HEV



## PHEV



## 水素



カーボン  
ニュートラル  
人工光合成

排ガス浄化  
触媒



モーター  
磁石



パワーコントロール  
ユニット 半導体



## BEV



## ロボット

## 材料合成



## 評価・解析

<https://japan.rigaku.com>



<https://www.jeol.co.jp>

## 電池



パーソナル  
モビリティ

## FCEV



## FC材料



# 材料研究

HEV



排ガス浄化  
触媒



モーター  
磁石



## 人類の永続的繁栄に資する 新奇な材料(今まで、地球に 無かった)を創製し世に出す 材料の新・他・多用途展開



本日の主な話題

材料合成



評価・解析

<https://japan.rigaku.com>



<https://www.jeol.co.jp>

### 材料研究



FC材料



FCEV

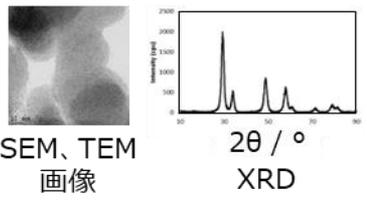


パーソナル  
モビリティ

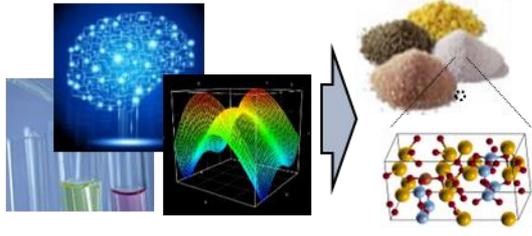
## 本日は、 この部分の話



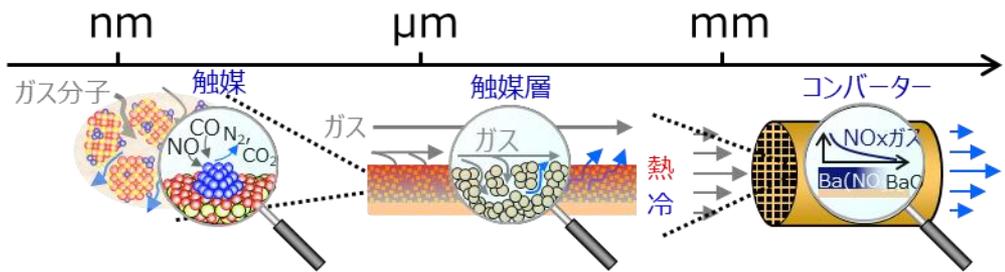
**(1) 分析・解析技術**  
データノイズの低減  
画像の特徴量抽出



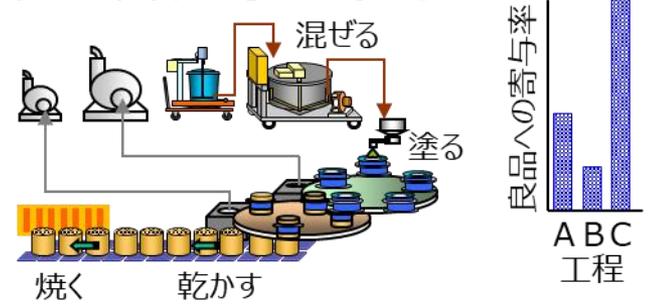
**(2) 材料探索**  
DATAを活用した材料の探索



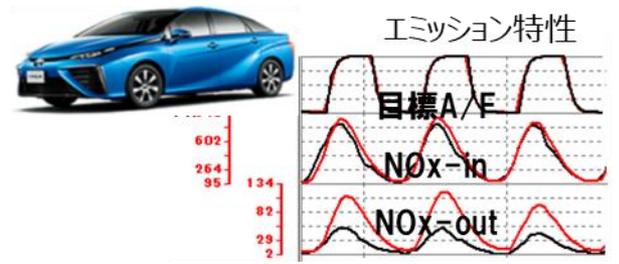
**(3) 階層構造**  
物質・電子・熱輸送に  
最適な構造の提示



**(4) 材料合成、部品化プロセス**  
最適条件の予測・提示



**(5) 車両での使い方**  
材料性能を最大限引き出す  
使い方、使用限界の予測・提示



1. 取り組みの背景

**2. 材料の類似性と材料宝の地図**

3. やりたいこと

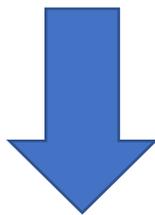
4. データ相互利用の考え方（協調と競争）

5. 仲間づくり

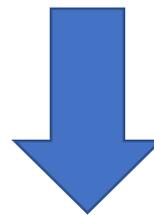
6. 国に期待すること



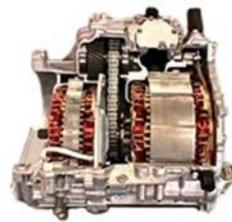
半導体



電池材料



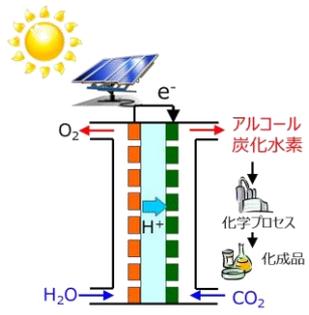
磁石  
(モーター)



排ガス触媒



カーボン  
ニュートラル



材料は、良く見てみると共通性がある

## 初期の燃料電池車



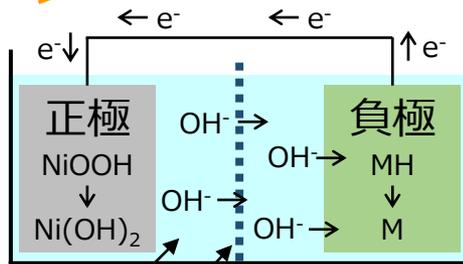
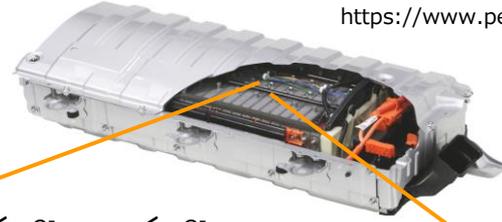
FCHV-3 (2001)

**燃料(水素)タンクに  
水素吸蔵合金を使用**

[https://www.toyota.co.jp/jpn/company/history/122years/data/automotive\\_business/products\\_technology/technology\\_development/hv-fc/details.html](https://www.toyota.co.jp/jpn/company/history/122years/data/automotive_business/products_technology/technology_development/hv-fc/details.html)

## 車載ニッケル水素電池

<https://www.peve.jp/product/pack/>

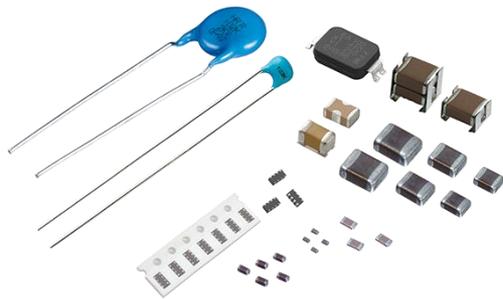


**負極に  
水素吸蔵合金  
を使用**

セパレータ (不織布)  
電解液 (KOH水溶液)

**材料の多用途での活用は有り得る**

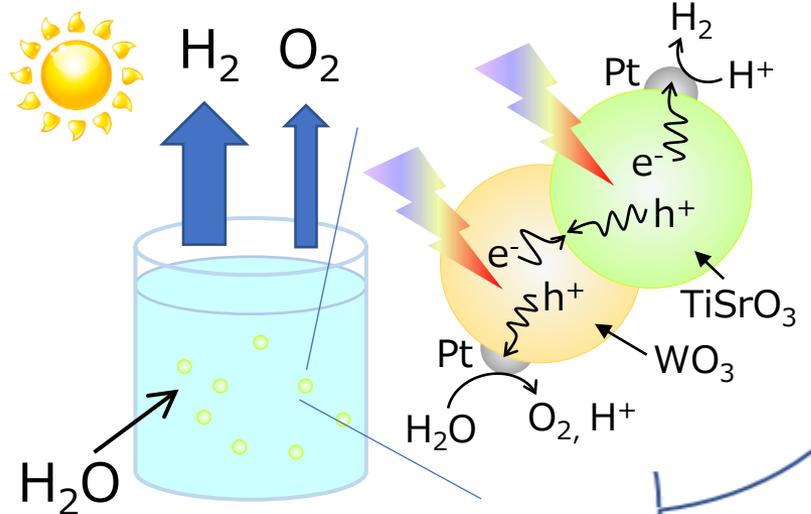
## 電子部品 セラミックコンデンサー



<https://www.murata.com/jajp/products/capacitor/ceramiccapacitor>

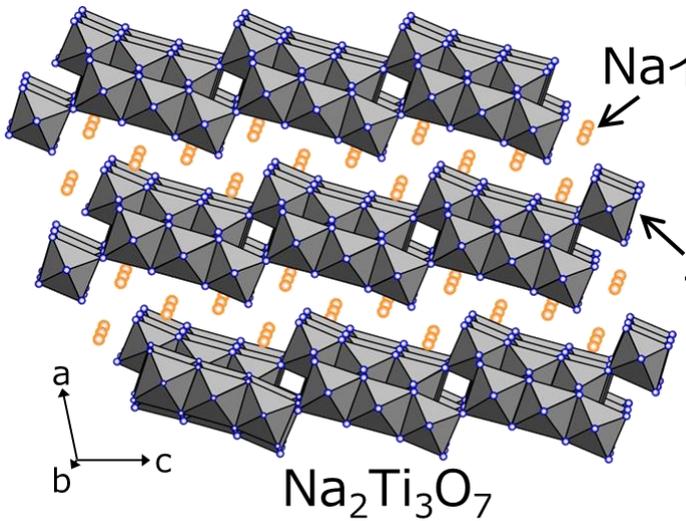
**チタン酸ストロンチウム  
SrTiO<sub>3</sub>が使用されている**

## 水分解触媒

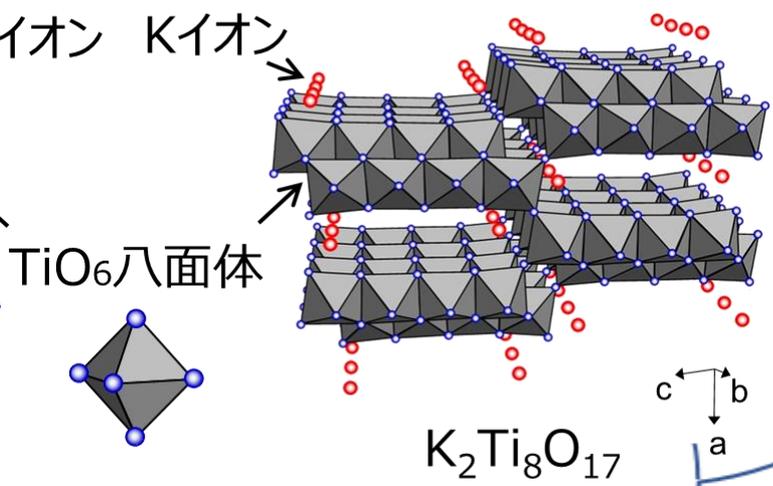


### 材料の多用途での活用事例の一つ

**Naイオン電池正極材料**

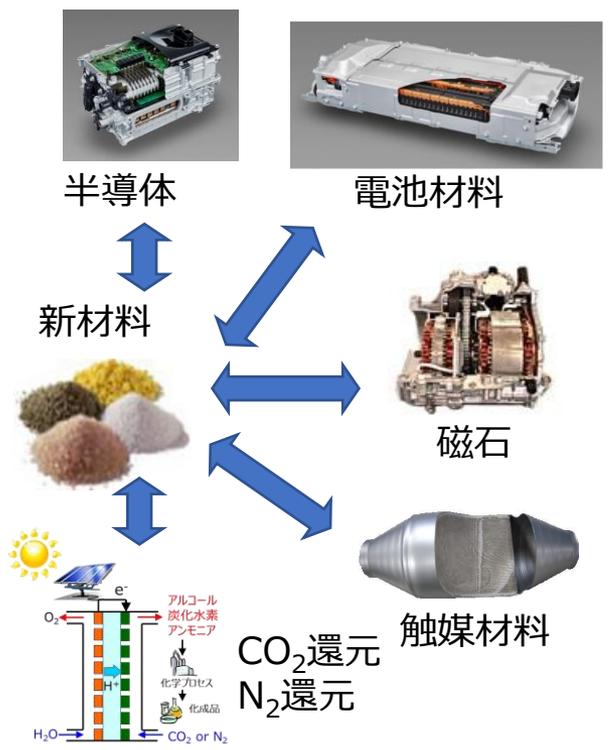


**排ガス触媒材料  
(NO<sub>x</sub>吸着剤)**

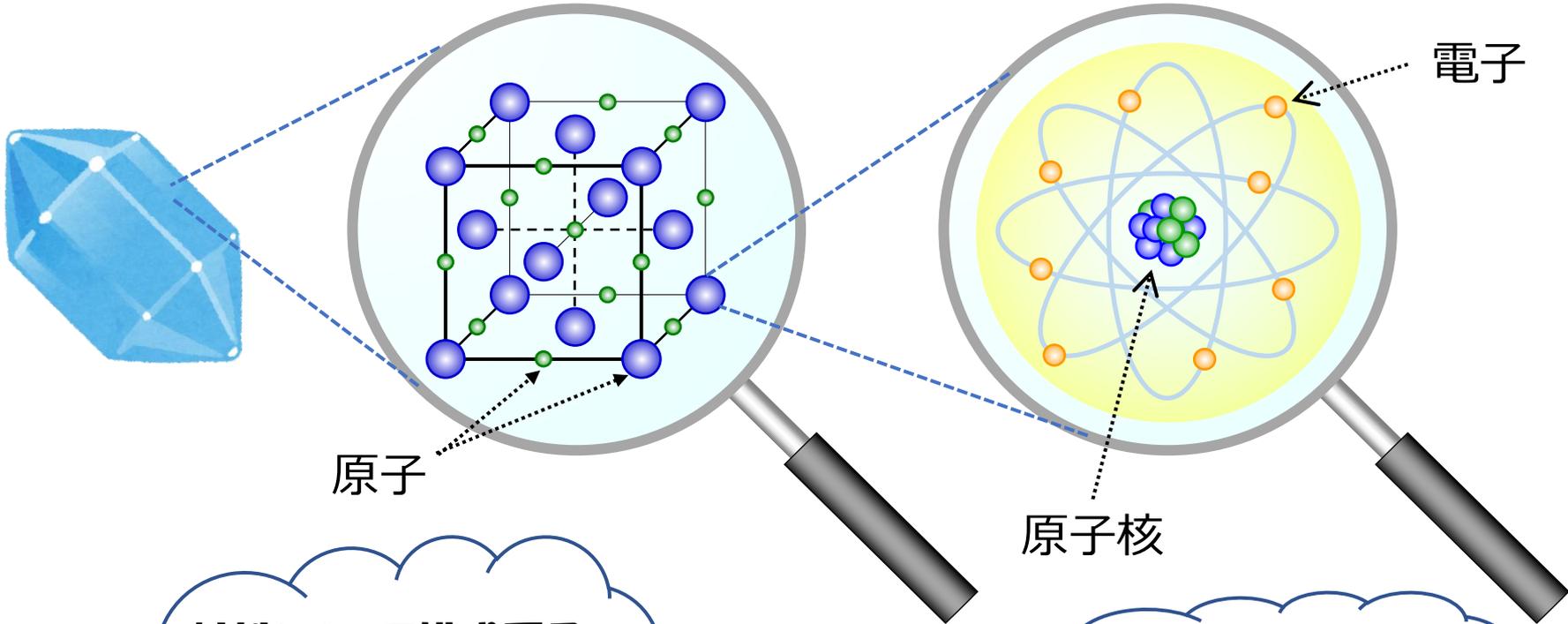


**良く似ている**

だったら  
いっそのこと



もっと広く  
融通し合えないか？  
部内でやってる事だし

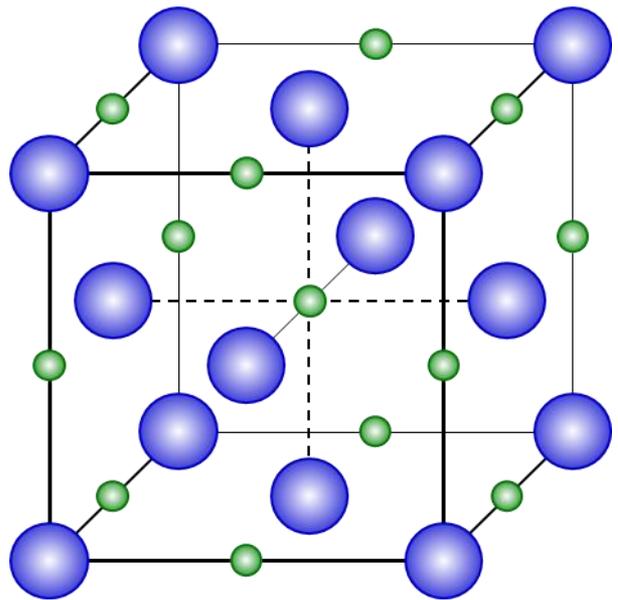


**材料によって構成原子の種類、並び方が違う**

**原子は、原子核と電子から出来てる**

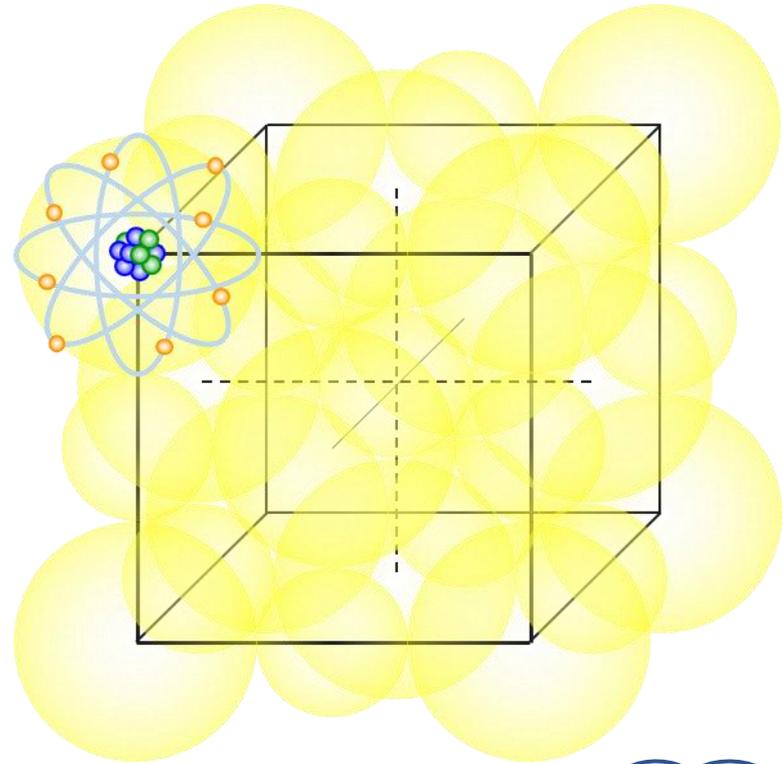
**原子ごとに、電子の数、エネルギーなど電子状態が違う**

## 原子の種類と並び方 原子配列



構成原子の種類、並び方  
電子の状態と分布・・・  
ちょっと分かり難いな

## 電子の数とエネルギー分布 電子状態密度



どうやって  
表現するか？

# 原子配列の表現法

X線回折  
(XRD) で

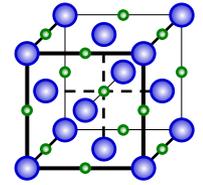
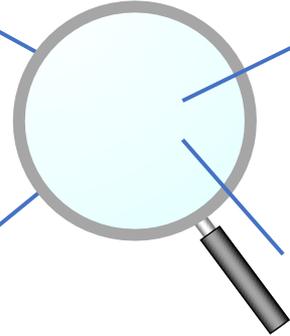


<https://japan.rigaku.com>

金属



セラミック



原子の並び方  
を解析

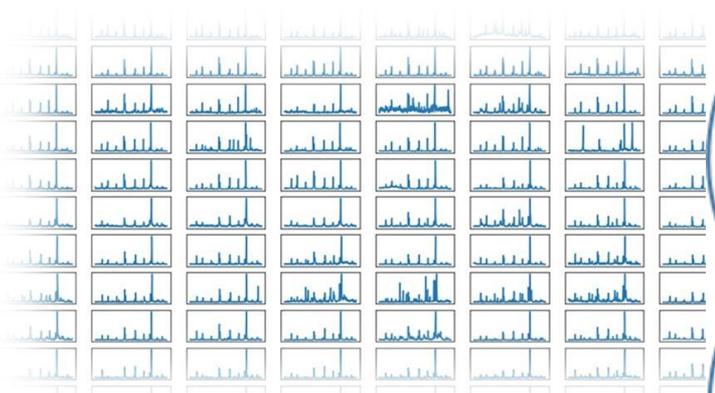


大量のスペクトルデータ

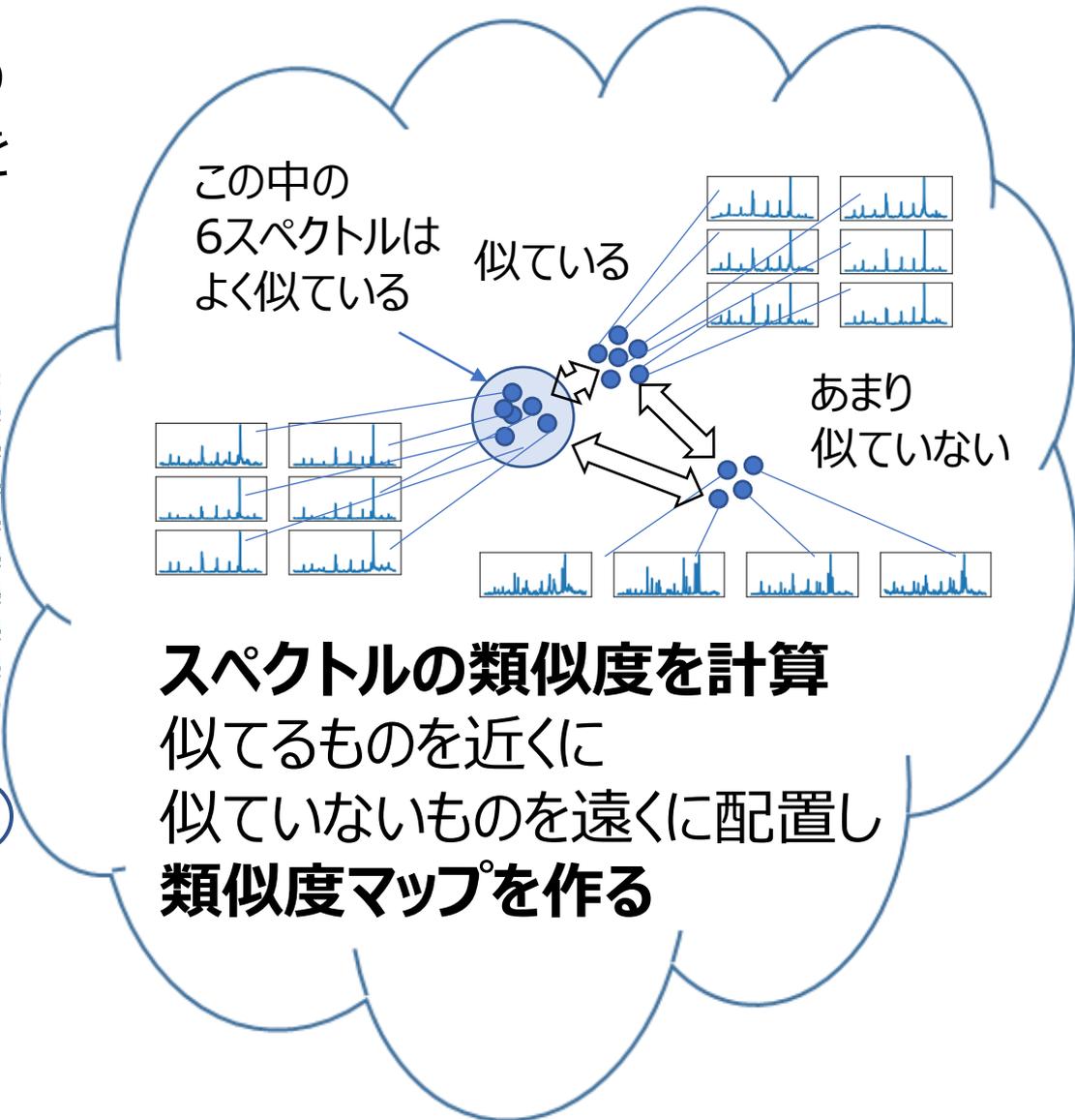


X線で材料中の  
原子の並び方を  
測定

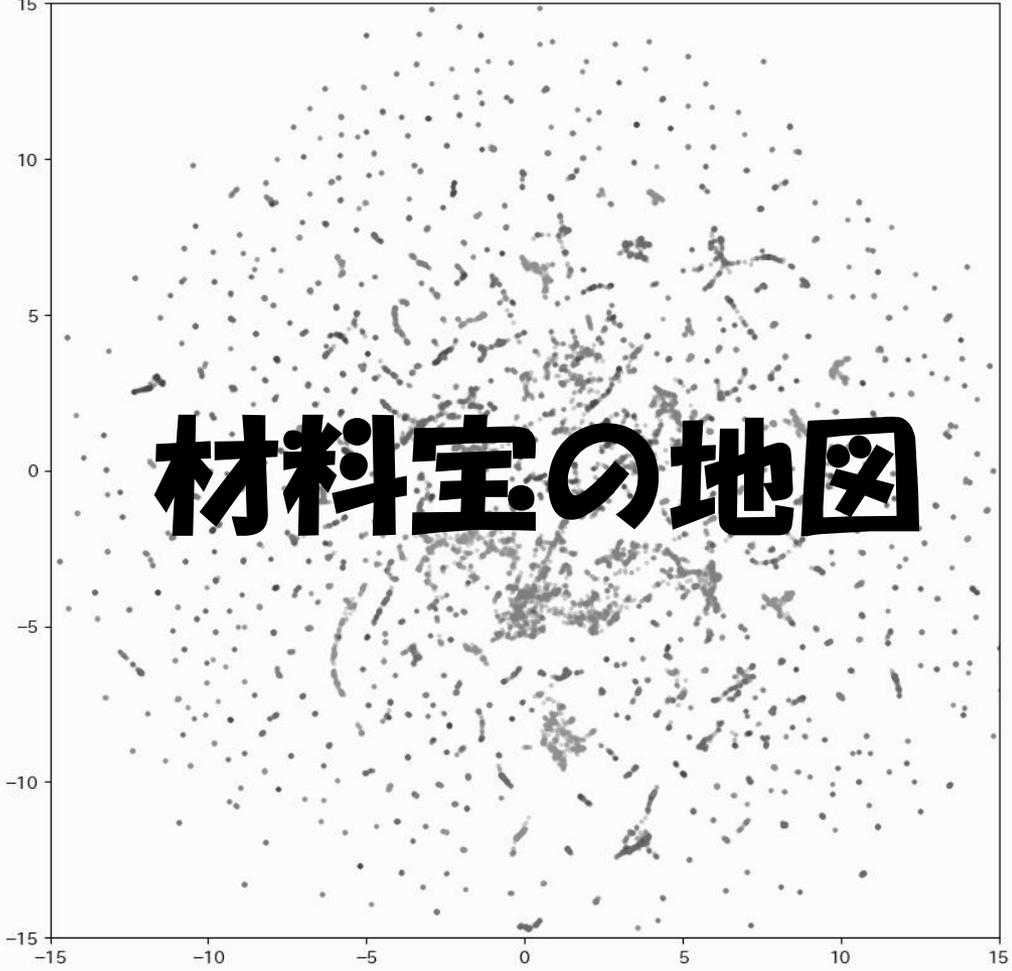
<https://japan.rigaku.com>



**データを  
解析・整理**



UMAP : Uniform Manifold Approximation and Projection

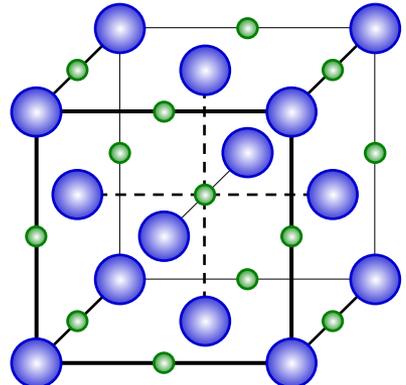


合成した新材料の結晶構造（原子の並び）をX線で測定し、類似性を可視化

触媒	6,051
電池	6,588
磁石	4,715
半導体	629
蓄熱材料	1,301
合計	19,284

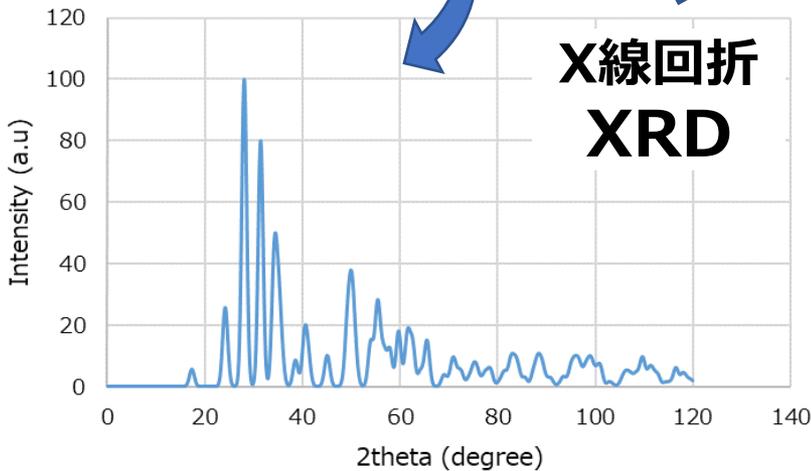
プロットされた点が入り乱れている = 材料の共通性が有る  
⇒ 材料データは、共通で使うことが出来る

原子配列：どんな原子がどんな位置関係で並んでいるか？

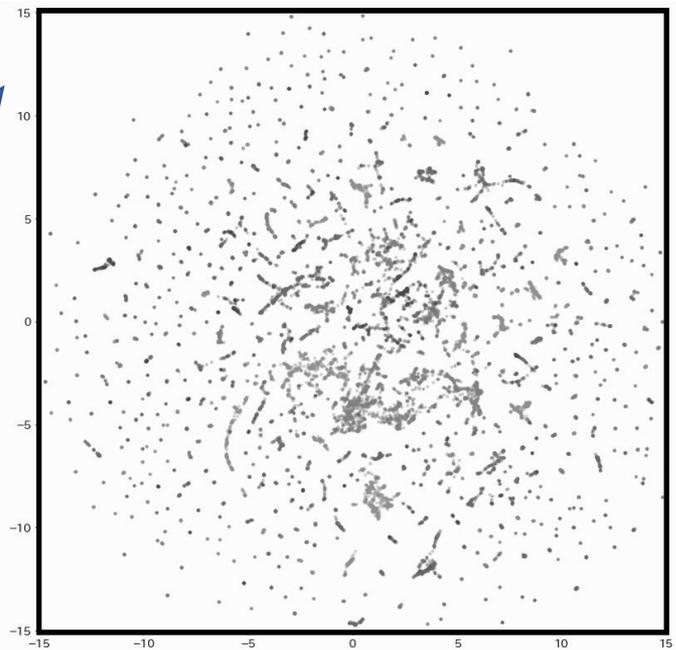
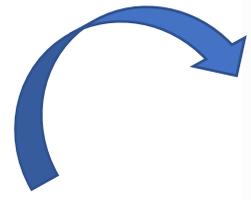


材料宝の地図：  
原子配列（結晶構造）版

配向の強さ

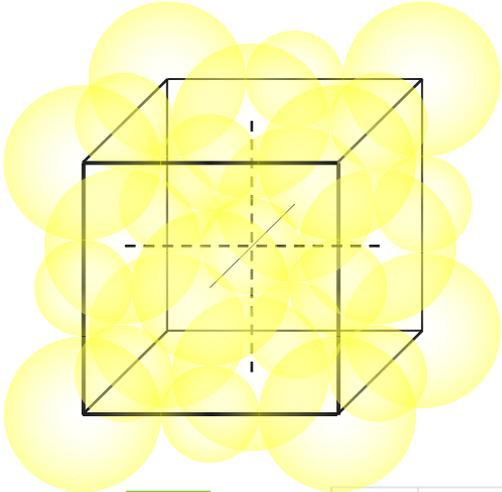


原子間距離（に対応）



# 電子状態版の“材料宝の地図”

電子状態：どんなエネルギーの電子がどれくらい有るか？

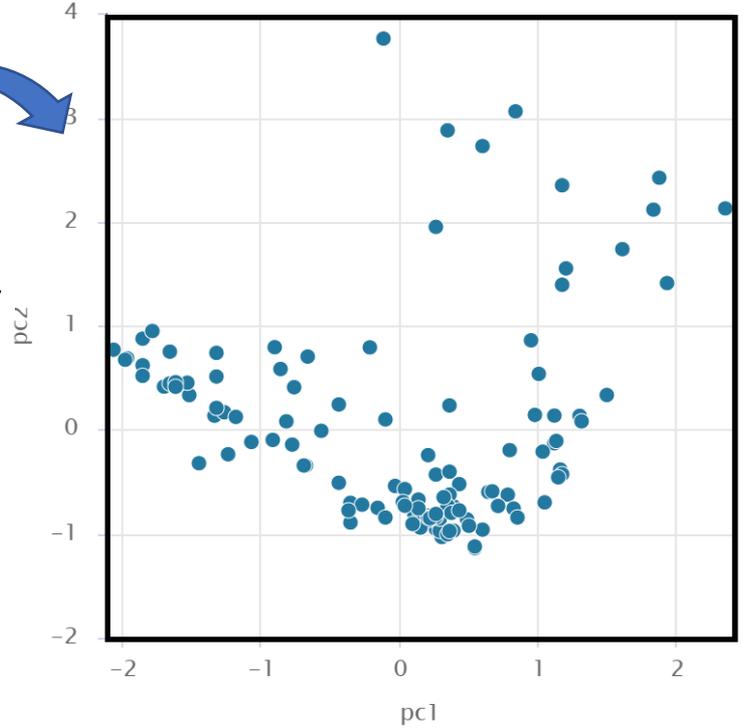


∝ 放出電子の数



光電子分光  
XPSスペクトル

材料宝の地図：  
電子状態版



結合エネルギー

# 材料研究は まず 当たいません

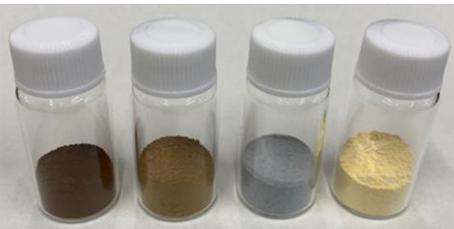
材料の最終製品での使い方、使われ方を  
予め知っている私たちが



- ・使用環境
- ・制御法
- ・耐久
- など...

## 用途を狙って研究しても

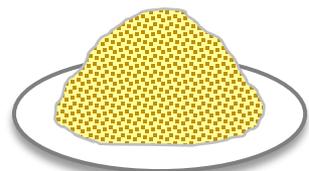
新材料  
(研究フェーズ)



100



従来品より  
性能が優れる材料



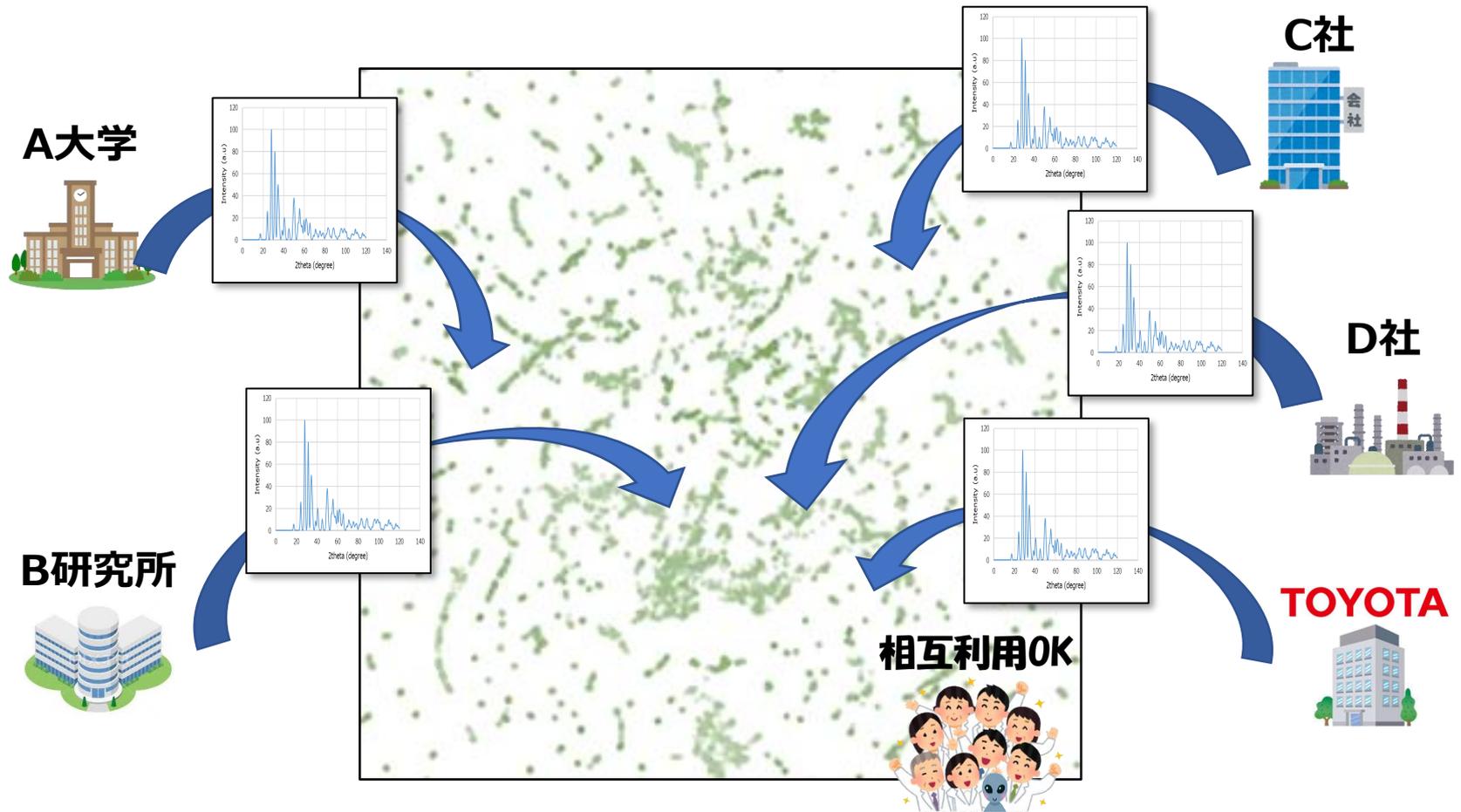
5



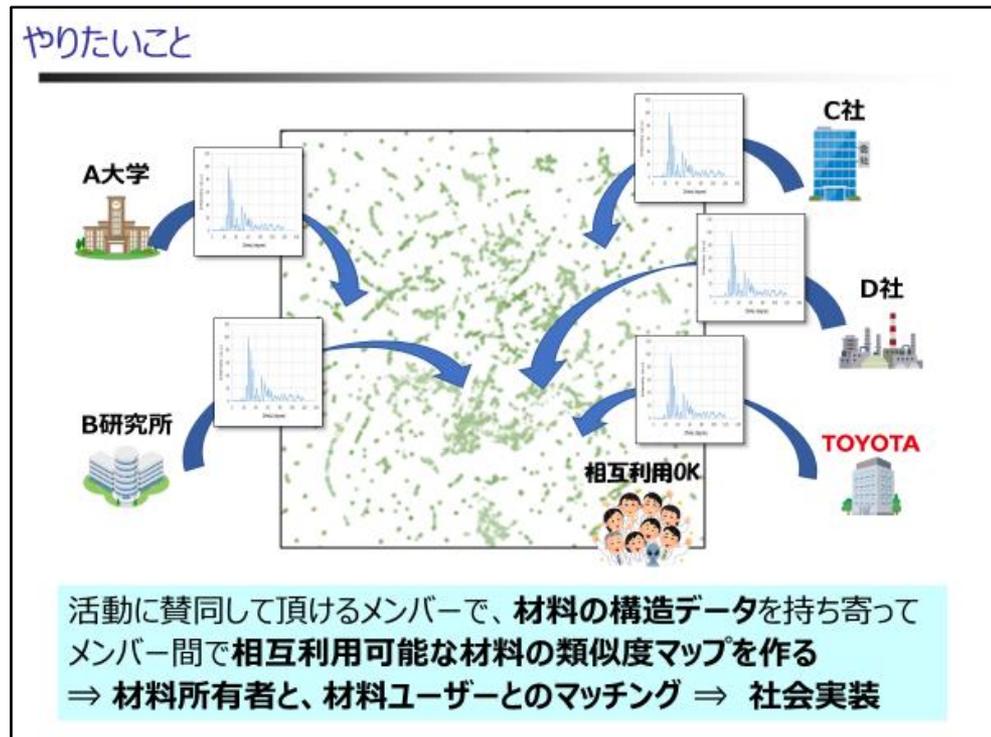
部品・製品で使っても  
性能の優れるモノ



1



活動に賛同して頂けるメンバーで、**材料の構造データ**を持ち寄って  
 メンバー間で**相互利用可能な材料の類似度マップ**を作る  
 ⇒ **材料所有者と、材料ユーザーとのマッチング** ⇒ **社会実装**



この部分

- やりたい人にご参加頂く
- 材料保有者が、地図に掲載する材料（データ）を選ぶ
- 論文などで公知になっているサンプル・データでもOK
- データは、無償でご提供頂く

1. 取り組みの背景
2. 材料の類似性と材料宝の地図
3. やりたいこと
- 4. データ相互利用の考え方（協調と競争）**
5. 仲間づくり
6. 国に期待すること

## 材料を記述するデータ

## 特性・性能データ



B  
さん

C  
さん

D  
さん



ワレワレハ  
ウチュウジンダ

化合物A

結晶構造 電子状態 ...

化合物B

結晶構造 電子状態 ...

・

化合物G

結晶構造 電子状態 ...

・

化合物R

結晶構造 電子状態 ...

・

化合物Z

結晶構造 電子状態 ...

化合物X

結晶構造 電子状態 ...

秘

...

秘

秘

...

秘

秘

...

秘

研究機関ごとで  
閉じた情報

秘

秘

通常の3倍  
のスピード

秘

7-7  
テキル

秘

### 相互利用したい部分

## 材料を記述するデータ



化合物A

結晶構造	電子状態	...
------	------	-----

化合物B

結晶構造	電子状態	...
------	------	-----

⋮

B  
さん

化合物G

結晶構造	電子状態	...
------	------	-----

⋮

C  
さん

化合物R

結晶構造	電子状態	...
------	------	-----

⋮

D  
さん

化合物Z

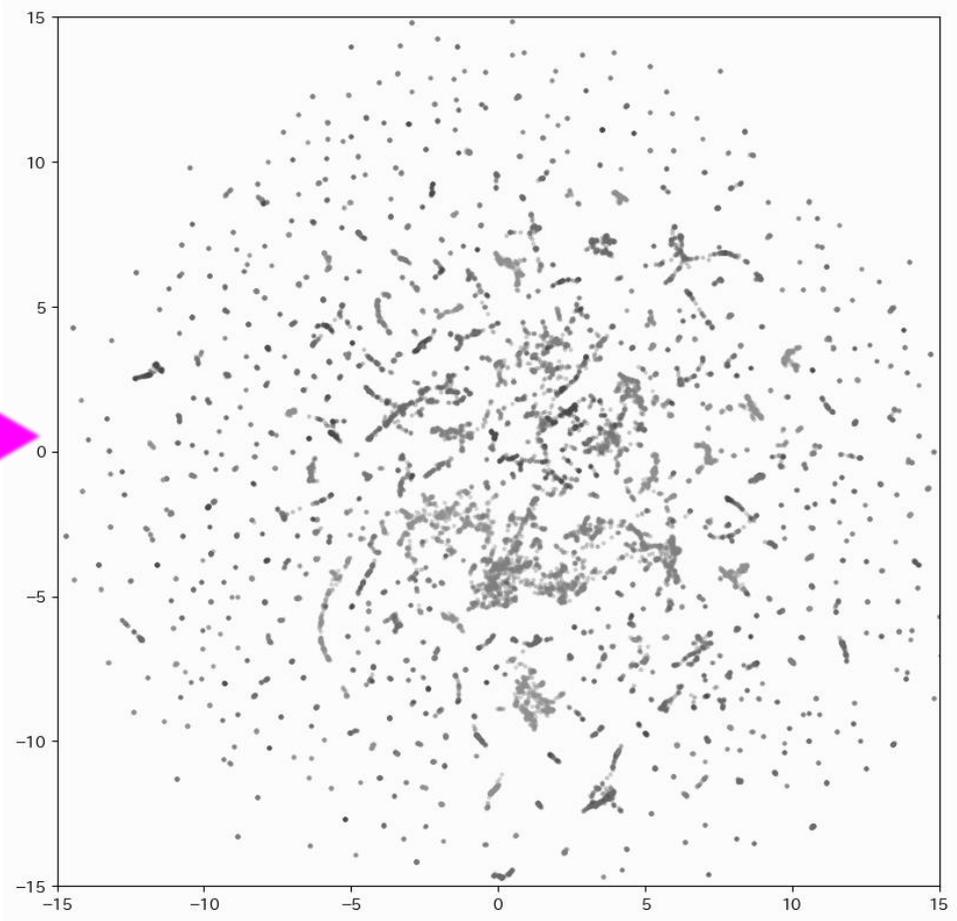
結晶構造	電子状態	...
------	------	-----



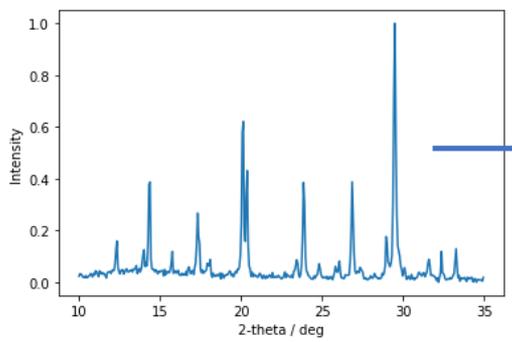
化合物X

結晶構造	電子状態	...
------	------	-----

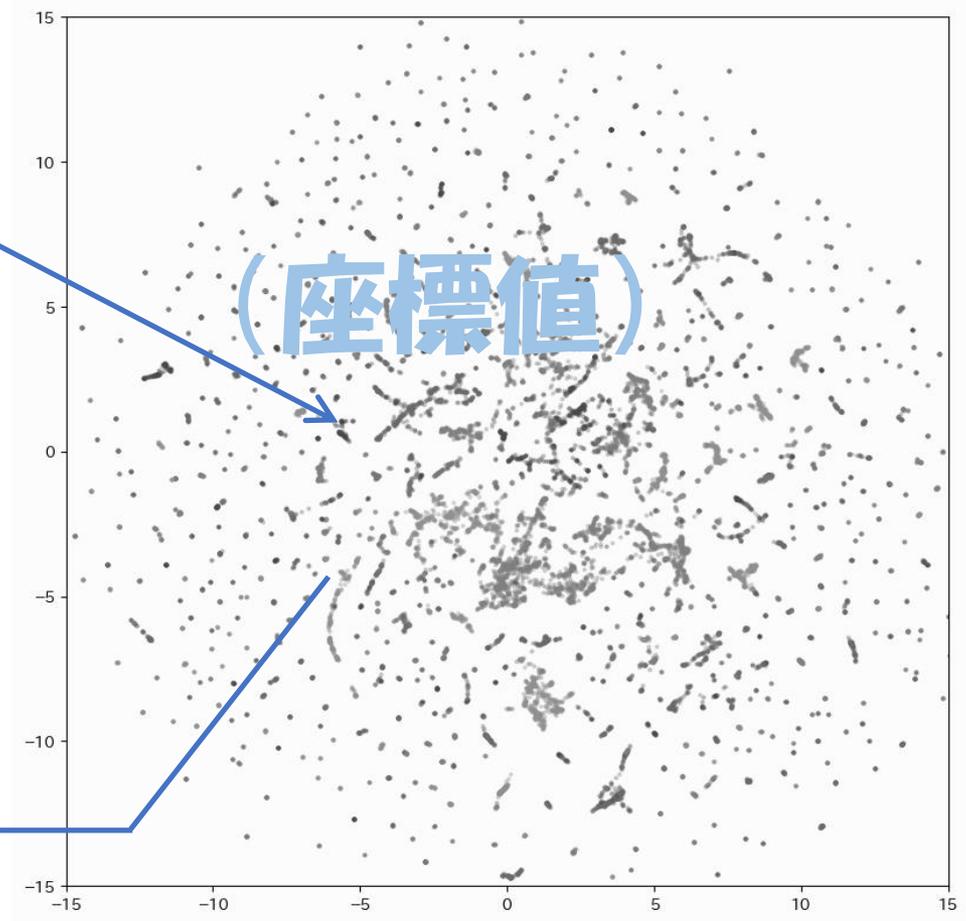
ワレワレハ  
ウチュウジンダ



### 相互利用したい部分



**次元削減**



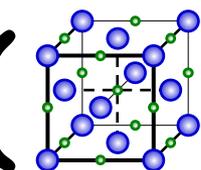
~~化学式、組成式~~

連絡先  
○◇大学 □□先生  
E-mail:  
TEL:

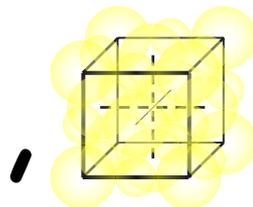
**暗号化されたデータ、  
機密性も高い**

一般的に、材料の

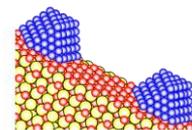
$$\text{性能} = f(\text{バルクの原子配列}, \text{バルクの電子状態}, \text{表面}, \dots)$$



バルクの  
原子配列



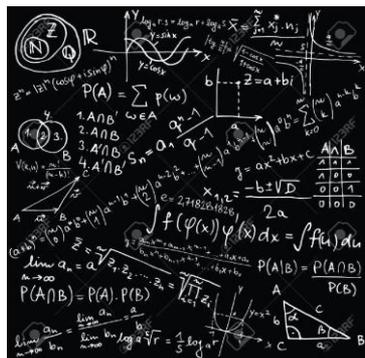
バルクの  
電子状態



表面

●●●

などなど



& % δ Σ \$ @ \* ¥



**パラメータが多い程、  
正確性は増す**

**多過ぎは  
大変...**

**材料特性を予測する  
“魔法の方程式”**

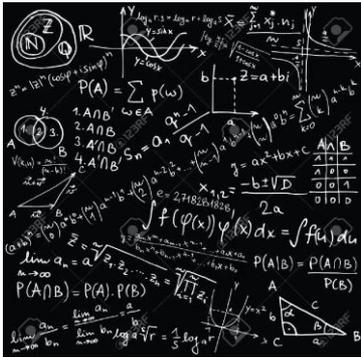
**えいっ!**

# Step 2 : 魔法の方程式を作る

一般解として、材料の特性 = 性能 が何であれ

$$\text{性能} = f(\text{Crystal Structure}, \text{DOS})$$

= f(XRDの主成分1、主成分2, ..., DOSの主成分1, 主成分2, ...)



& % δ Σ \$ @ \* ¥



## 私たちの目的



材料特性を予測する

# “魔法の方程式”

## 材料を記述するデータ

## 特性・性能データ



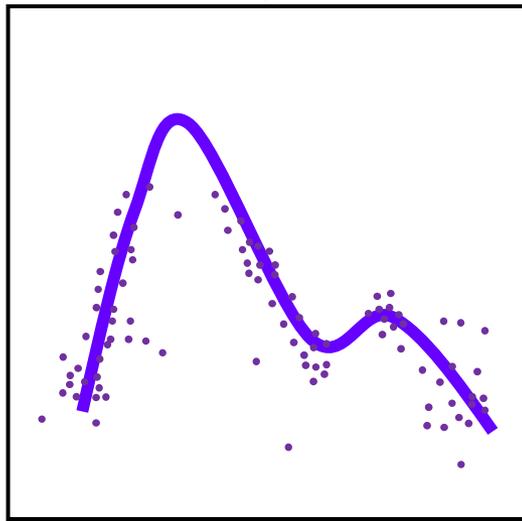
化合物A  
化合物B  
...

結晶構造	電子状態	...
結晶構造	電子状態	...
...	...	...

表面積	...	触媒活性
表面積	...	触媒活性
...	...	...

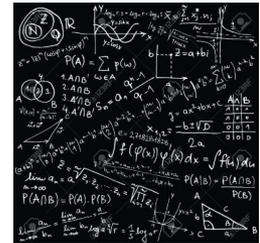


だけが  
知っています



$$\text{性能} = f(\text{結晶構造}, \text{電子状態})$$

# 魔法の方程式



&%δΣ\$@\*¥



材料を記述するデータ

特性・性能データ



化合物A  
化合物B

結晶構造 電子状態 ...  
結晶構造 電子状態 ...  
⋮ ⋮

秘 ... 秘  
秘 ... 秘  
⋮ ⋮



他人は、このデータを知らず  
他人には、魔法の方程式は  
作れません

どなたにも  
安心して頂けると  
思います

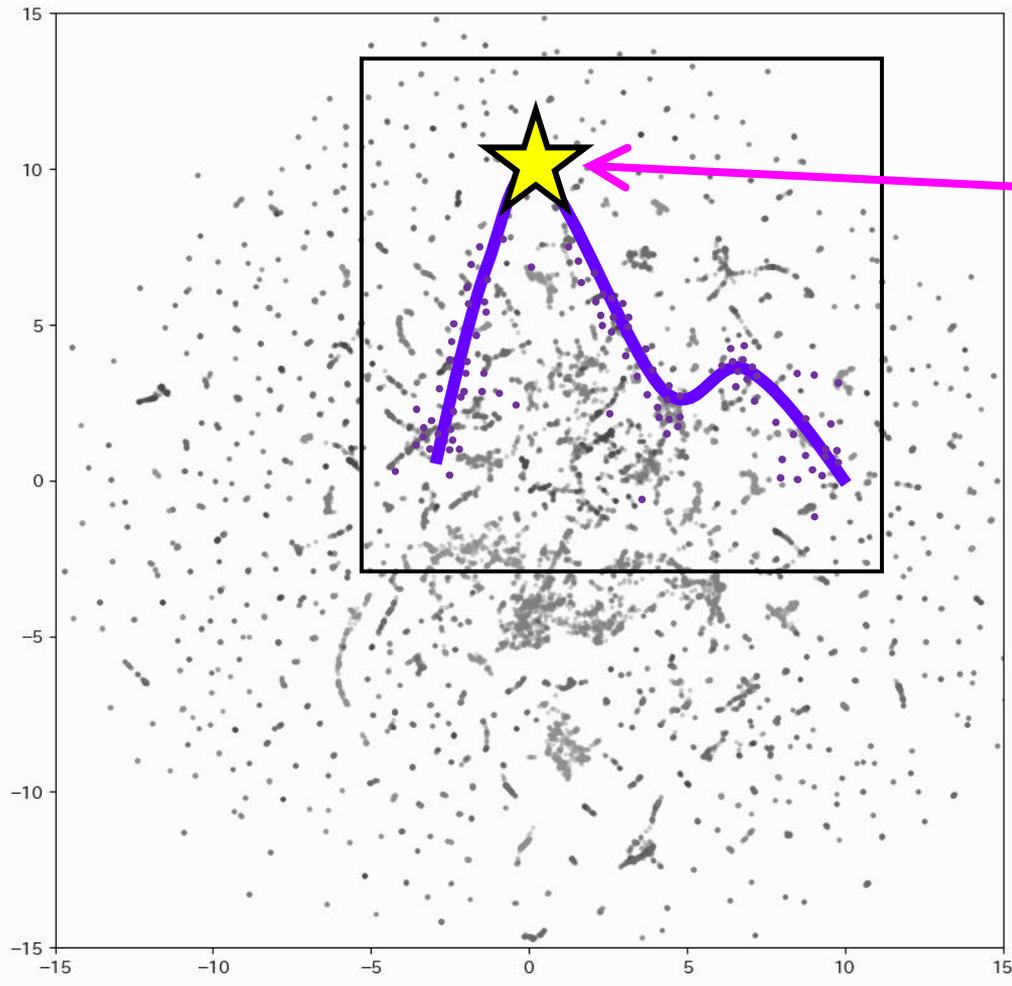


アンシンシタ

通常の3倍  
のスピード 秘

7-7  
テキル 秘

UMAP : Uniform Manifold Approximation and Projection



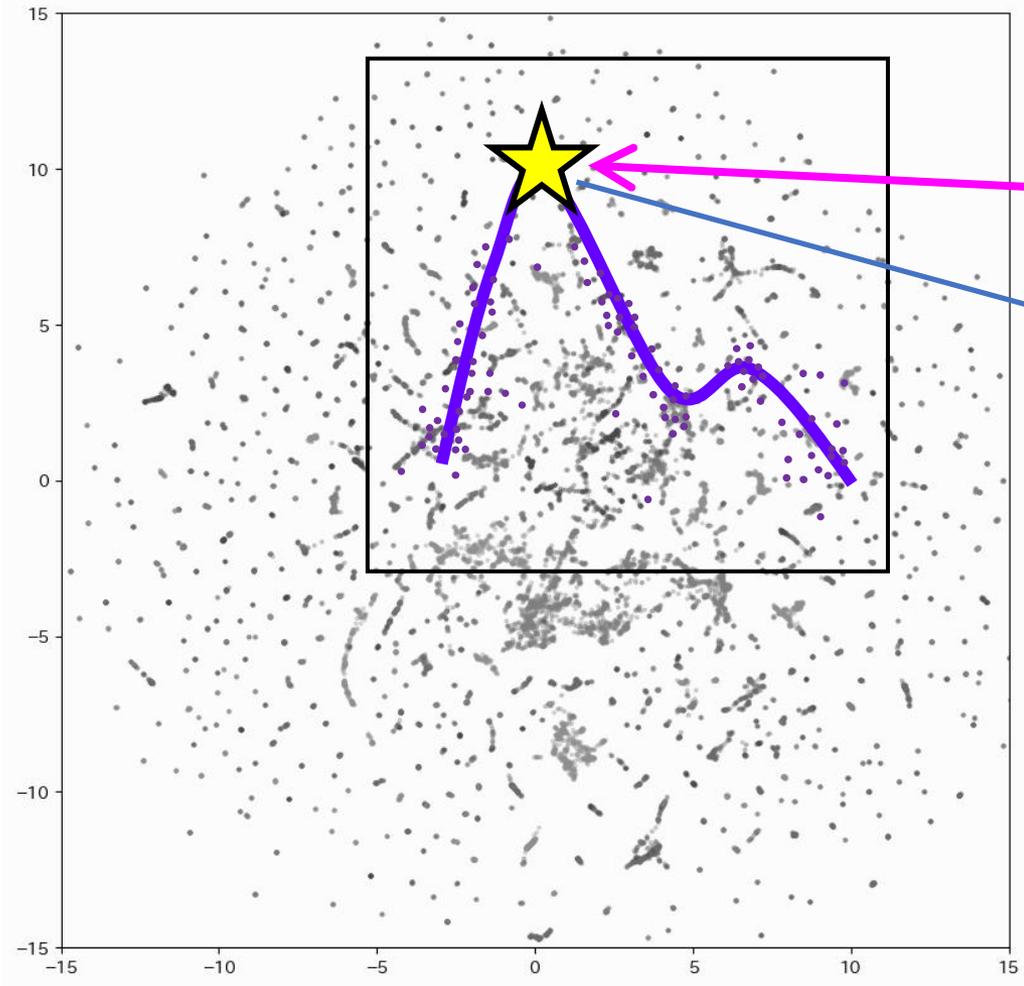
どれに  
しよっかな～



暗号化された材料カタログからより良い材料を選ぶイメージ

# Step 4 : 材料保有者にコンタクト

UMAP : Uniform Manifold Approximation and Projection



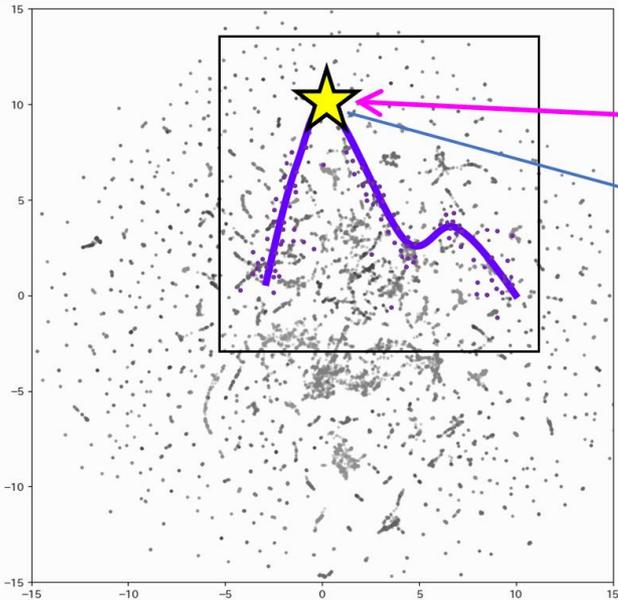
**!**  
**おっ、  
あの材料  
使えそう**

**連絡先**  
〇〇〇〇〇大学  
E-mail:  
TEL:

**共同研究の  
ご相談**

**大学**





! あっ、あの材料使えそう

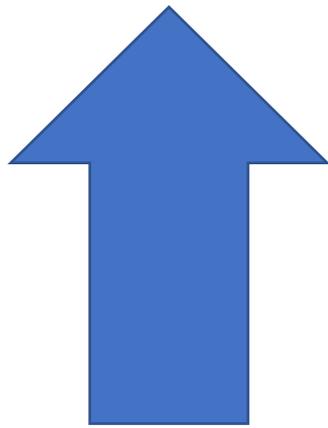
連絡先  
 ○○○○大学  
 E-mail:  
 TEL:

共同研究のご相談

大学

An illustration showing a man in a white lab coat on the left, an envelope with an '@' symbol in the center, and a brown university building on the right. Blue arrows indicate communication between the man and the email icon, and between the email icon and the university building.

研究実務



協議



合意・契約

私たちの目的は、より良い製品を、より早く、より安価に、より多くのお客様に届けること。従って

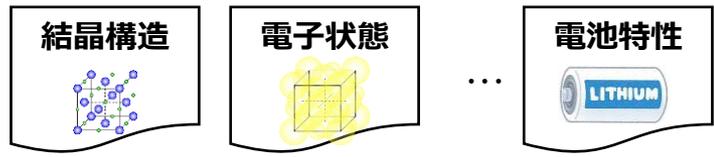
- **企業、大学で普通に測定されているデータを使う**
- **企業のエンジニア、学生が使いこなせる手法**
- **当たらずしも遠からずの結果が得られればOK**

**参画のハードルを  
極限まで下げる**

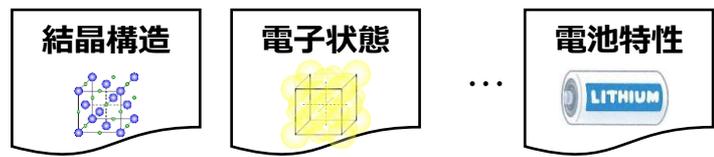
# 研究開発対象が同じでも

材料を記述するデータ      性能データ

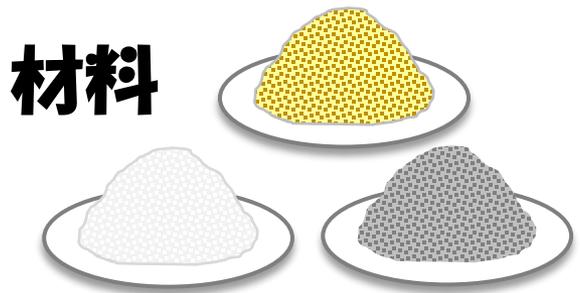
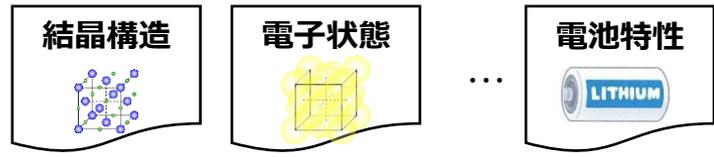
○○ 化合物G  
大学 :



◇ △ 化合物M  
研究所 :



□ ▽ 化合物P  
会社 :



などが異なる

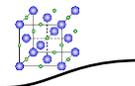
# 研究開発対象が同じでも

材料を記述するデータ      性能データ

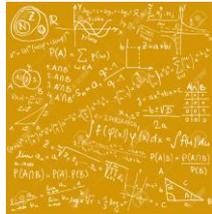
## 魔法の方程式

○○ 化合物G  
大学 :

結晶構造      電子状態

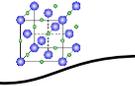
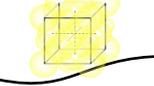



電池特性

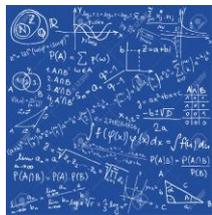



◇ △ 化合物M  
研究所 :

結晶構造      電子状態

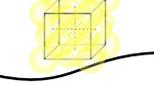



電池特性

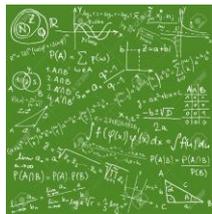



□ ▽ 化合物P  
会社 :

結晶構造      電子状態

電池特性

### 魔法の方程式は、それぞれ異なる

# 協調と競争

○○  
大学

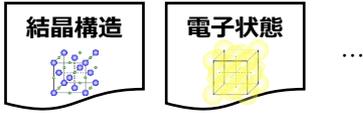
化合物G  
:  
:

材料を記述するデータ



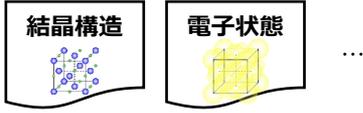
◇△  
研究所

化合物M  
:  
:



□▽  
会社

化合物P  
:  
:



性能データ

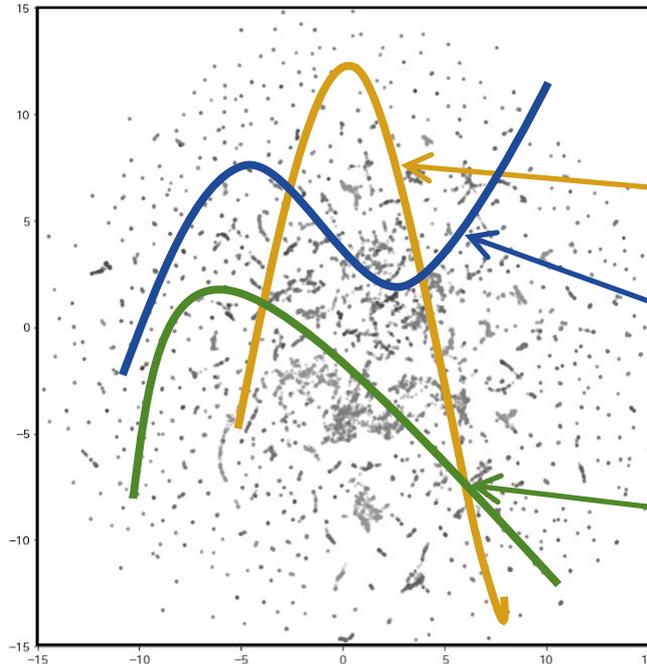


宝物が見つけれられるか？は、  
各研究機関、各企業の  
“魔法の方程式の精度”しだい  
= 技術力しだい

## 競争する部分



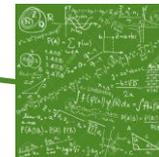
### 協調する部分



&%%θΣΣ@\*¥



αβ&δΣΣ@\*ζ



φβ&δΩζΔΓ



1. 取り組みの背景
2. 材料の類似性と材料宝の地図
3. やりたいこと
4. データ相互利用の考え方（協調と競争）
- 5. 仲間づくり**
6. 国に期待すること

# 取り組みが広がって行けば

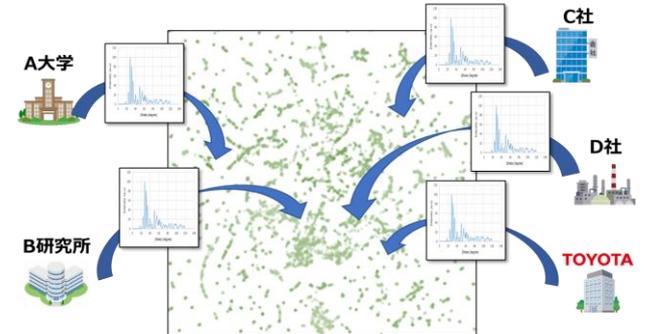
一山当てる



マッチングが増える



データが増える



仲間を増やす



1. 取り組みの背景
2. 材料の類似性と材料宝の地図
3. やりたいこと
4. データ相互利用の考え方（協調と競争）
5. 仲間づくり
- 6. 国に期待すること**

**ここまでの話と、毛色は違いますが**

**国、文部科学省には**

**企業では、到底できない  
想像し得ない**

- ・広い視野、長期目線での基礎力づくり**
- ・ぶっ飛んだ研究**

コレ  
ワタシ/  
ホシニモ  
ナイヨ



**を期待**

**最近 えっ、マジ！、  
こりゃまずいぞ！**



公益社団法人

**日本化学会**

12/2 会員委員会

小中高生の理科・化学教育に関して

担当理事として  
たまたま参加

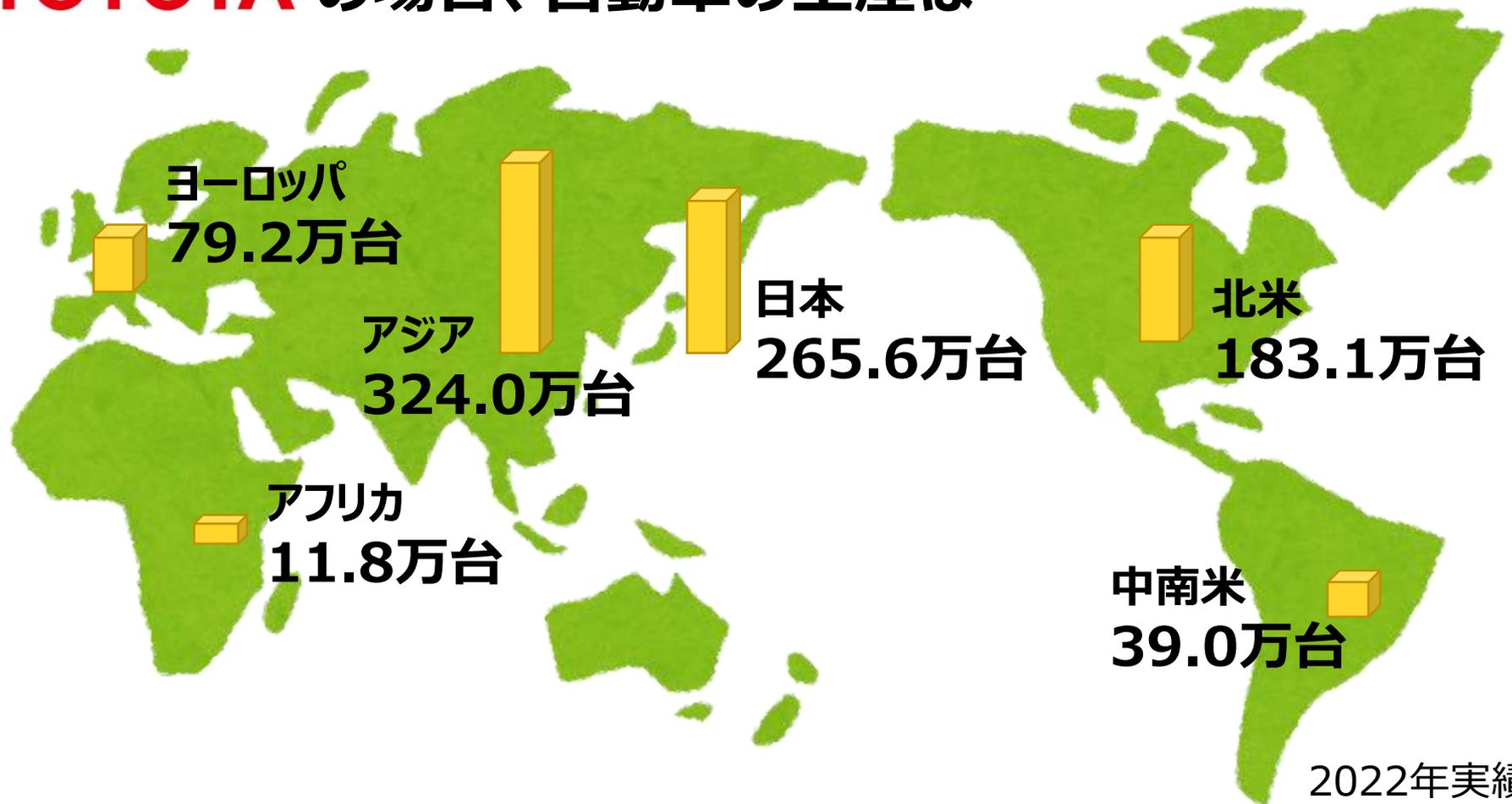
**理系を目指す中高生  
二十数%？**



先進7カ国中  
**最下位**

**アメリカ、中国の半分**

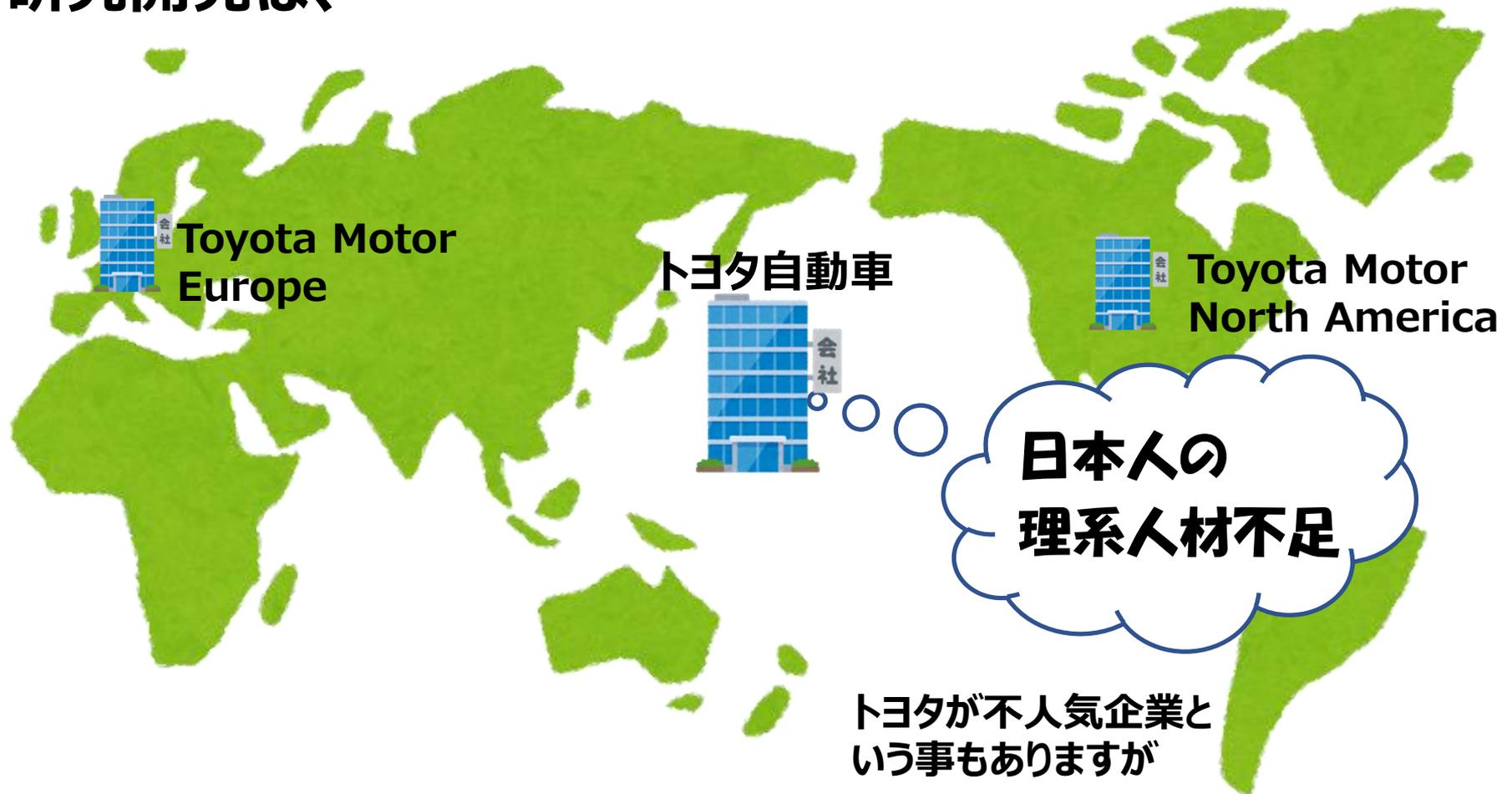
# TOYOTA の場合、自動車の生産は



2022年実績

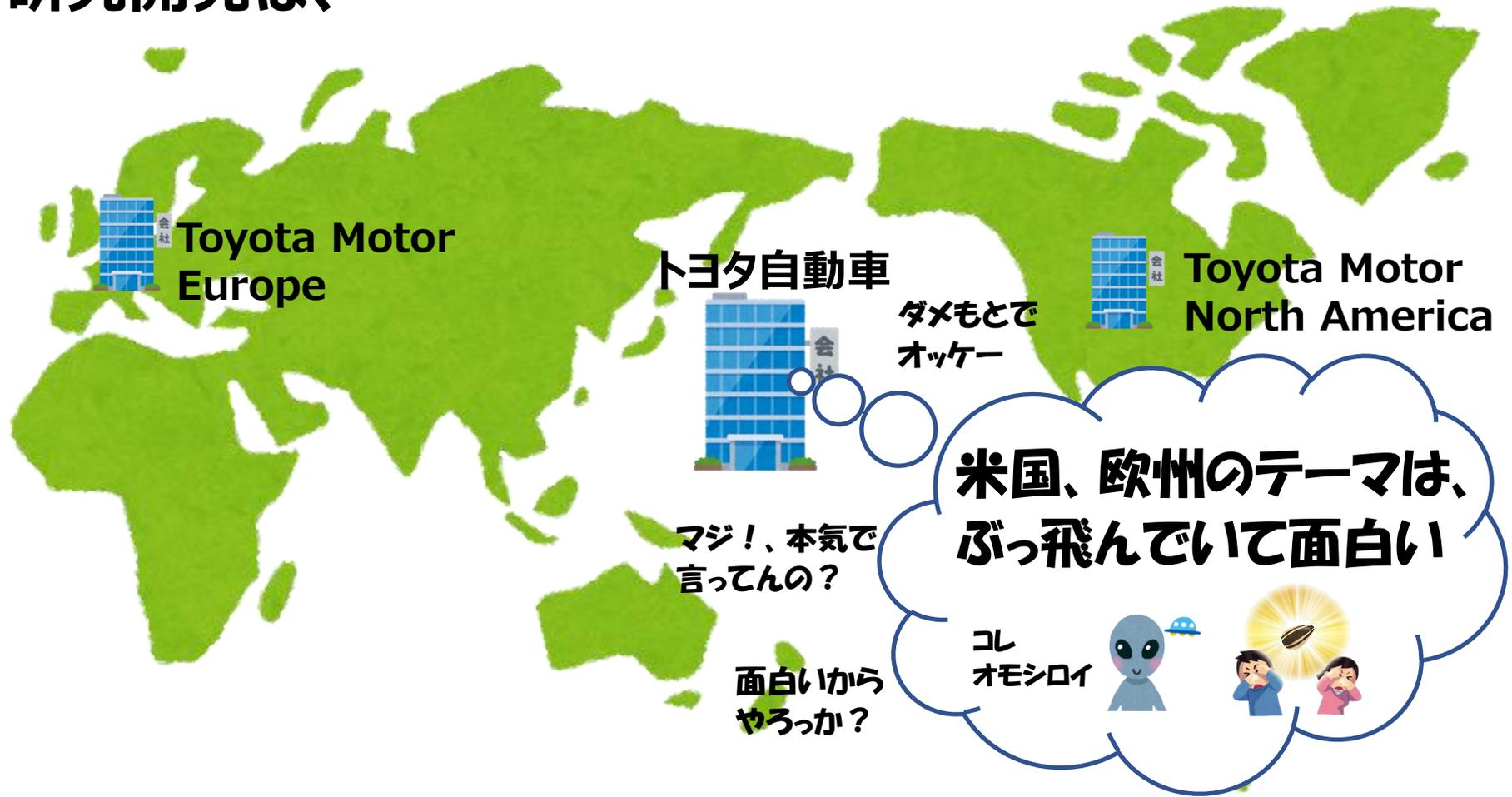
日本 : 海外 ≒ 3 : 7、既に海外が主体

## 研究開発は、



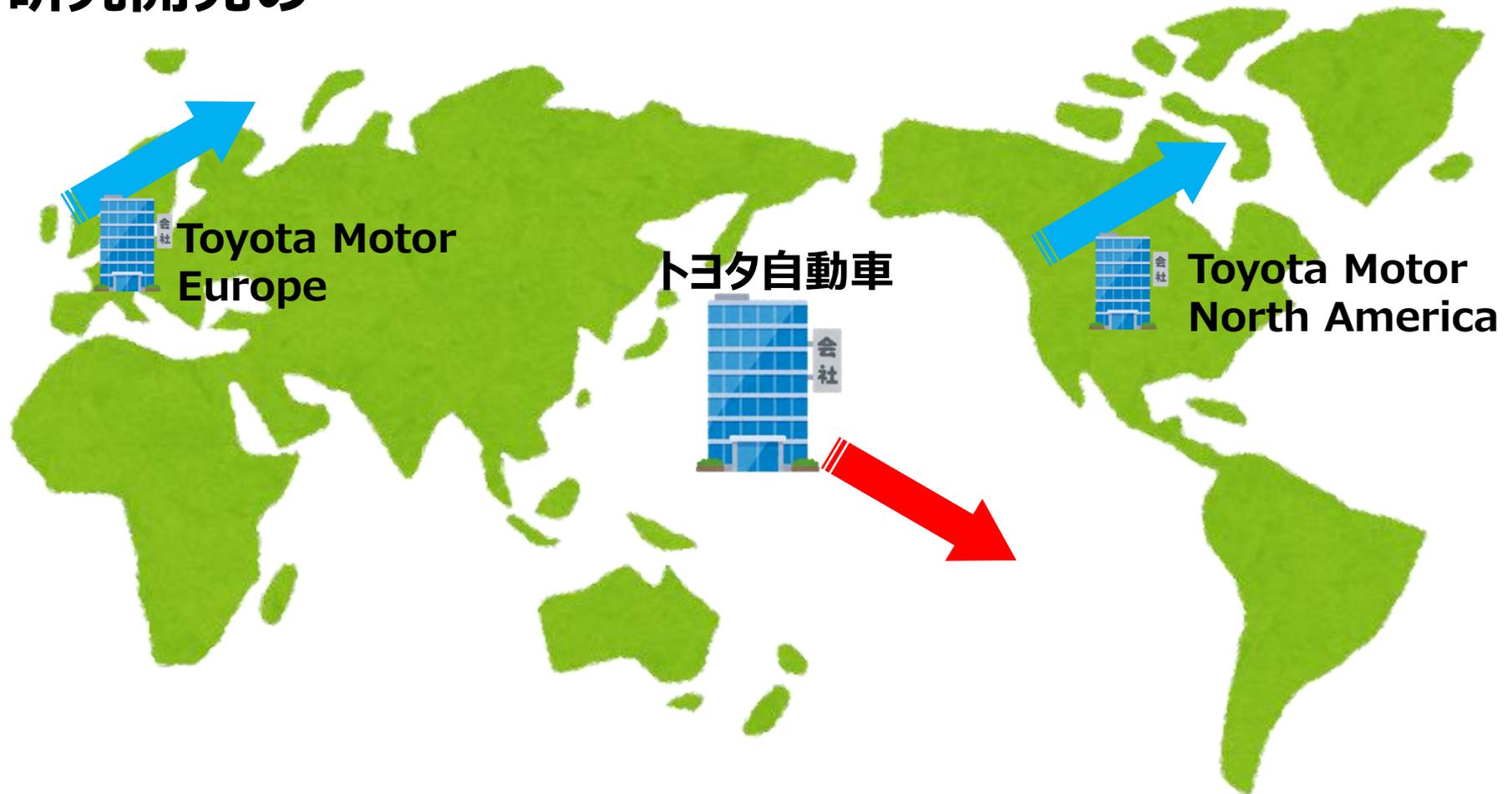
今のところ、日本が主体 ですが...

# 研究開発は、



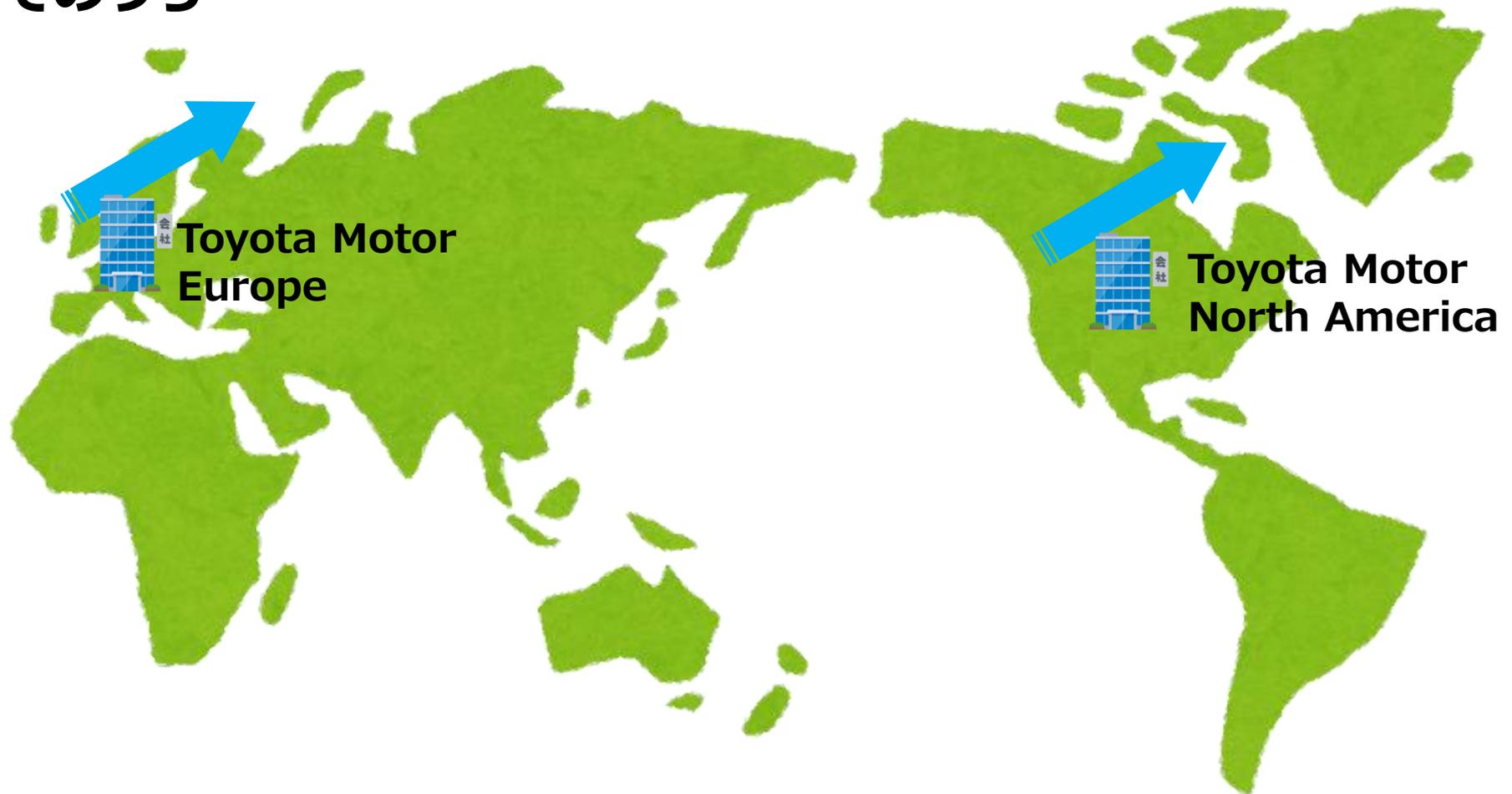
今のところ、日本が主体 ですが...

## 研究開発の



**海外シフトも、確実に進んでいます**

## そのうち

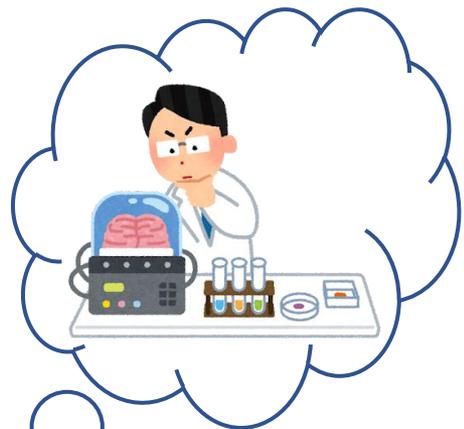


**日本の研究開発は無くなるかも・・・ 知れません**

# そうならない、ためには 将来を支える 能力の高い人材確保が必須



すてき



大人に  
なったら



将来は、  
科学者に  
なって欲しい



そのためには



**子供たちが、科学に興味を持てる教育**

**研究職が憧れの職業になる**

**理工科系の先生方の給与up**

例えば、  
**教授 年俸1億円〜**

**国際卓越研究大学の費用から出しては？  
優秀な研究者も集まるのでは？**

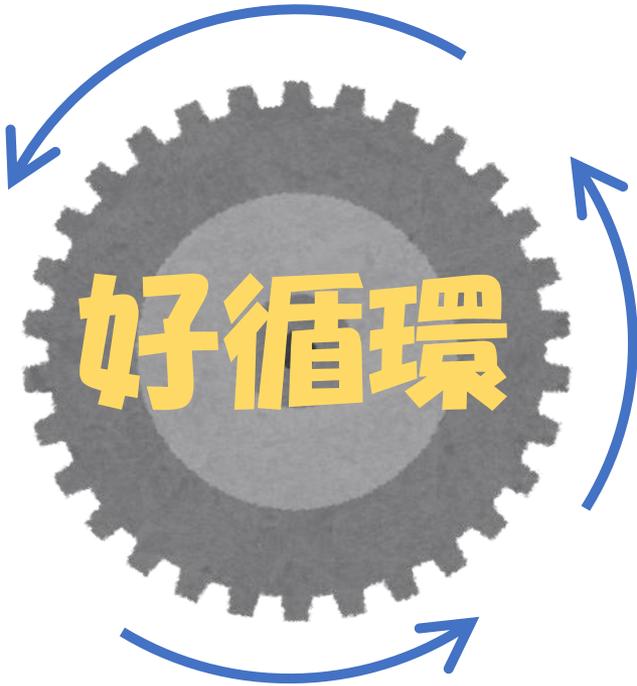
# 取り組みが広がって行けば

## 産業利用され 経済成長する



## 科学が進歩、あっと驚く 成果が生まれる

### 収入up 税収up



コレ  
ワタシ/  
ホシニモ  
ナイヨ



## 優秀な 人材が増える



### 理系希望者 が増える



ご清聴ありがとうございました