

## 技術展望

## 材料開発の最前線

—計算科学による材料設計と実験室の自動化—

化学食品部 宗本隆志 (むねもと たかし)

munemoto.takashi@iriii.jp

専門：環境技術・環境材料、地球・資源システム工学

一言：再生可能エネルギーがより身近になる技術開発を進めています。



材料の特性は、原料物質の種類、割合、構造によって決まるため、新材料の開発には無数に存在する組み合わせの中から、最適な組み合わせを見つける必要があります。従来の材料開発の分野では、研究者の知識と経験、勘によって決めた組み合わせで、地道な実験・データ収集を行う手法が一般的でした。目的とする機能が発揮されなければ、原料物質を変更したり、添加物を入れたりといった試行錯誤を繰り返す必要があるため、新材料の開発には長い時間とコストがかかります。特に、グリーントランスフォーメーション(GX)に貢献する次世代電池や水素貯蔵材料など、環境・エネルギー分野の新材料開発は、競争が過熱しており、従来の方法では開発期間と費用がかかりすぎるため、より効率的な材料開発が求められています。

## ■材料開発におけるAIの活用と課題

近年、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)といわれるAIや機械学習、シミュレーションを活用した材料開発が注目されています。MIでは、目標とする材料の性能(例えば強度や特性など)が得られるような条件(材料の組成や割合など)を、AIなどを活用して予測します。画像認識など、既にAIが活用されている分野では、数千~数万といった膨大な画像データが用いられていますが、材料開発の分野では、企業が個別に取り組んでいたり、データの取得に時間がかかったりするため、数十ほどのデータしか集まらないという課題があります。また、データソースとなる論文データは、ほとんどが成功例であり、失敗データが集まらず、求めたい性能を適切に予測することが難しいといった課題があります。

## ■実験室の自動化とシミュレーション

MIを実現するため、実験室の自動化(ラボラトリーオートメーション(LA))やシミュレーションを活用したデータの収集が注目されています(図1)。LAは、工場における加工や組み立て、搬送などの生産工程の自動化であるファクトリーオートメーションと同様に、AIやロボットなどのデジタル技術を活用して実験室の自動化を図る取り組みです。新材料の開発や高性能化に必要な実験データの収集

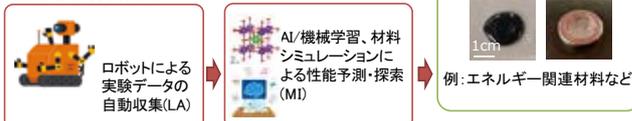
や研究の効率化が期待されています。また、構成元素や結晶構造等の材料データを基に、コンピュータによる材料シミュレーション(第一原理計算や分子動力学計算)を利用することで、機械的特性や電気的特性といった材料の性能を予測することができます。LAによるデータ収集に加えて、材料シミュレーションを活用することで、コスト削減と開発効率の向上が期待できます。今後は、前処理から合成、性能評価までを一気通貫で行える自律型材料開発システムの実現や新たな機能性材料の発見が期待されます。

## これまでの材料開発



地道な実験の積み重ね

## これからの材料開発



ラボラトリーオートメーション(LA)とマテリアルズ・インフォマティクス(MI)による材料開発

図1 LAとMIを活用したこれからの材料開発

## ■工業試験場の取り組み

工業試験場では、材料合成に必要なさまざまな原料物質を自動で調整し、実験データを大量に収集することができるLAシステム(図2)や材料シミュレーションソフトウェアを導入し、MI活用による環境・エネルギー材料の開発に取り組んでいます。今後は、合成プロセスの自動化によって革新的な材料開発に取り組む予定です。さらに、材料開発においてデジタル技術を効果的に活用いただくため、マテリアルDX研究会を発足します。LAやMIを活用した材料開発にご関心をお持ちの方はぜひ、お問い合わせください。



図2 材料調整自動化システムによる実験室の自動化