

化学産業の将来に強い危機感を抱く東京工業大学の一杉太郎物質理工学応用化学系教授が世界初の実験手法を開発、日本を世界の先端材料開発・製造の一大拠点にしようと産官学に協業を働きかけている。日本が高いシェアを持つファインケミカルとロボット技術を融合し、さらにAI（人工知能）技術を駆使することで競争力の維持を目指す。

材料産業に強い危機感 今こそデジタル化を

一杉 太郎・東工大教授 〈上〉

AI・ロボ融合で効率100倍

「デジタルラボ」の本格運用を始めた。

すでに酸化物固体2次電池の課題である界面抵抗を抑えるプロセス開発に成功し、ロボの有用性を証明している。具体的な成果は近く発表する予定だ。人の勤や経験に頼る従来手法より100倍も開発効率を高められるというが、普及が進むか否かは「トップの経営判断によるところが大きい」という。

「日本の材料産業もTSMCのようにならねばならない」と一杉教授はビジョンを語る。半導体受託生産で大半のシェアを持つ台湾TSMCには世界中からヒ



「デジタルラボ」の普及が進むか否かは「トップの経営判断によるところが大きい」と一杉教授

ジネスが無い込む。日本もファインケミカルで世界トップにあるうちに、TSMCのように揺るぎない地位を築けなければ衰退してしまふとの強い危機感があり、などといっていると竹

る。そこで注力するのが既存技術を自ら破壊してイノベーションを起し続けることだ。材料開発の実験室では研究者が粉混ぜから焼成、評価と20年前と

次世代ラボ本格運用

「棺」になってしまふ。そこで独創的な実験は人が経験や勘を頼りにやるものという概念を壊し、モビリティ業界で進むCASE（コネクテッド、自動化、シェアリング、電子化）の考えを導入した。それを具体化したのがデジタルラボであり、2019年から実証を始め、今年2月からは有益なデータが出てくるようになった。

海外でも「ロボットケミスト」（化学とロボット）、「ケムビューター」（化学とコンピュータ）などと異種技術を融合しての材料開発が活発になっているがメインは液体系だ。対して一杉教授は電池材料のような無機・固体材料に着目。合成条件をコンピュータに指示して試作し、その評価を行った結果を踏まえて改良した条件で再び指示を出すというPDCA（計画、実行、評価、改善）の全自動化を実現している。試料を運ぶ手間も省けたことにより実験効率が従来の10倍になった。

このラボでは実験データを蓄積して「マテリアルズドック」というデータベースを構築しつつある。電池の特性改善には役立たなくても、磁性を強くする画期的な機能を持っているかもしれない」と、失敗データも含め、あらゆるデータを集める。この膨大なデータをマテリアルズ・インフォマティクス（MI）に生かして探索する物質の候補を絞り込めばさらに10倍、従来比では100倍の効率改善が可能とみている。

化学と最新IT使いこなせ

今こそデジタル化を

材料産業に強い危機感

一杉 太郎・東工大教授 〈中〉

多くの材料開発にマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が使われるようになったが、実際にMIで具体的な成果を引き出すのは容易ではない。それには2つの問題がある。まずはMIを生かすために必須のデータが乏しい。次にMIで適切と思える化合物を予測できても実際に使えるかどうか、短時間では検証できない。これらを解決するのが「デジタルラボ」だ。

募らせている。MIを使いこなすにはデータだけではなく、「見極める力」も必要になる。「やってみたらMIは使いものにならない」との声は少なくないが、これは課題設定がうまくできていないのが原因。どのような課題がMIに向くのか、そこを見誤っていたら当然結果は出てこない。

このため東工大では、MIに適した課題を見抜ける人材を育成しようとする。2019年、物質科学と情報科学の両方を学ぶ物質・情報卓越教育院を開設した。化学の学生でも最新IT技術を使いこなせる「複素人材」に育て上げ、その能力を就職した企業で生かせるようにする。このため会員企業制度を設け、企業からのアドバイスを教育に反映させて



デジタルラボの中核。中央の円形部分に試料を扱うロボットが入っており、6本のパイプはそれぞれチャンバーにつながっている。

会員企業には材料系が多いが自動車や電機大手も入り、競争相手の韓国社が目を引くところだ。4月1日時点現在の会員企業は22社。AGC、旭化成、日立化成、JFEスチール、J

課題見極める力必要

X金属、カネカ、LGJAPAN Lab、マツダ、三菱ケミカル、三菱ガス化学、長瀬産業、日産自動車、日本ゼオン、パナソニック、昭和電工、住友電気工業、住友化学、TDK、東芝、東ソー、東洋製罐グループホールディングス、トヨタ自動車などが名を連ねる。

一杉教授とともに「デジタルラボ」を推進しているのが、MIに特化したスタートアップであるMI-6(東京都港区)。独自の解析アルゴリズムを強みとして化学業界にユーザーを増やしている同社の木崎博社長は「MIは魔法の杖ではない」と断言する。

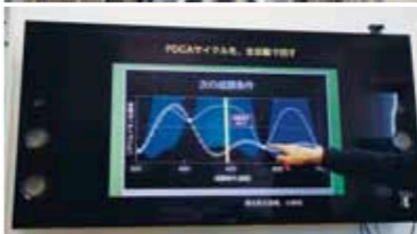
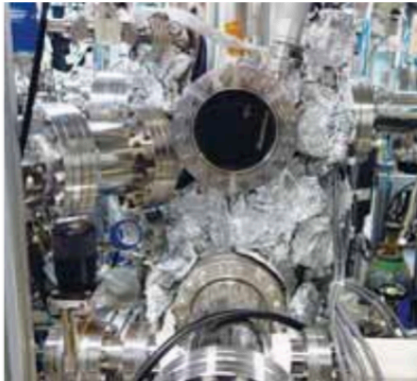
4次元以上の複雑なデータを解析することで従来の理論では予想もできない新材料の発見が期待できるMI研究者が経験で培ってきた勘を否定するものではなく、知見を属人化せず成果につなげる(木崎社長)のがMIの役割だ。18年にはキシタ化学とともにリチウムイオン2次電池(LiB)材料を開発したが、これも「データと経験値、そこから導き出されたもの」という。

MIに関する受託解析やコンサルティンクも行うMI-6。主要顧客はJSRや東ソー、キシタ化学、東洋アルミニウム、ダイキョーニシカワと広がり、順調に事業が拡大している。従業員増にとまない4月1日に本社を東京都港区芝浦3-17-11の天翔田町ビルに移転した。17年の創業ながら「株式上場も検討している」。

東京工業大学の杉太郎教授は、酸化物系固体リチウムイオン二次電池（LiB）のエネルギー密度を高められるプロセス技術にめどをつけた。安全性や信頼性に優れた酸化物系電解質だが、電極界面でのリチウムイオン伝導度の低さから電位が下がらないのが課題だった。一杉教授は固体電解質であるリン酸リチウム（Li₃PO₄）と、正極のリチウムニッケルマンガン酸化物（LNMO）の界面抵抗を既存のLiBの6分の1程度に低減することに成功した。一方で大気中の水分が抵抗増の原因であることも突き止め、改善策として電池の熱処理が有効なことを実証した。今後、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）を活用して、より優れた酸化物系固体電解

材料産業に強い危機感 今こそデジタル化を

一杉 太郎・東工大教授 〈下〉



酸化物系固体電解質の薄膜を試作する際の界面抵抗を最小化するための成膜条件を機械学習によって自動策定する

固体LiB高出力化に道筋

質を探索することにしていく。固体電池は電気自動車だけでなく、産業用にも需要が見込める。現状は硫化物系の開発が先行しているが、電位を高めてエネルギー密度を大きくできれば酸化物系固体電池が主導権を握るとみられる。このための最大の課題は、界面抵抗の低減。一杉教授は正極にリン酸リチウム、負極にリチウムを用いた固体電池において正極とLiBに比べても6分の1程度の約5平方センチメートルから取り出すと抵抗が増大するが、大気中にある水

ラボ装置を拡充へ

分の中のプロトンの作用によるものと分かった。これは電池に作り上げた後に熱処理を施すことでほぼ解決できるといふ。これらの成果はAI（人工知能）とロボット技術を導入した次世代実験施設「デジタルラボ」で生まれた。試料を扱うロボットを納めた大型チャンバーから6本のパイプが延びており、その先につながった6個のチャンバーで固体電解質や活物質の試作および評価を行う。全体の構成は半導体の成膜装置と同じ。電池の試作も口径1センチメートルのターゲットを用い、薄膜法で行う。一連の実験はAIによって自動化されており、最初に「界面の抵抗値を最小化」と指示を出せば、機械学習によって実験結果を予測し、最適な調合や合成温度、酸素分圧などを自動で設定し、試作する。それを評価したデータをコンピュータで解析し、さらに抵抗値を低減するための指示を自動で出す。このサイクルを繰り返すことで特性を改善するとともに、実験データを自動で「マテリアルズデータ」に蓄積する。このデータを基にMIで候補物質を絞り込み、開発期間を短縮していく。人の勘や経験では困難な4次元、5次元のパラメータも扱えるため、予想もできない新材料が生まれる可能性がある。「膨大な高機能材料の候補があるはずなのにみつけれない」と一杉教授は、デジタルラボを探索ツールとしてフル活用していく。現在は基礎だけの「成膜装置」だが、

実験室にはすでに増設用の機材が置いてある。ソニーで研究開発に従事していたころ、新技術への取り組みがいかに重要かを思い知った。「装置を数珠つなぎにしてより多くの材料を開発できるようにしたい。日本の競争力が高い今こそ、産学官連携でデジタル化を推進すべき」と、熱い思いを語る。

（広木功）

