

タテからヨコへ

日本MRS ニュース

For the Interdisciplinary Materials Research

Vol.31 No.3 August 2019

MRS-J

The Materials Research Society of Japan

発行 © 一般社団法人 日本 MRS 事務局
〒231-0023 横浜市中区山下町 2
産業貿易センタービル B123
E-mail: general-inf@mrs-j.org
https://www.mrs-j.org/Tel. 045-263-8538

||||||| やあ こんにちは |||||



石切山 一彦

材料開発のパラダイムシフトは起こるのか

株式会社東レリサーチセンター常務理事・IUPAC 賛助会員委員会委員長 いしきりやまかずひこ 石切山一彦

国連が2015年に採択したSDGs(持続可能な開発目標)には材料開発に関連する項目が多いが、なかでも目標9「産業と技術革新の基盤をつくろう」は我々への役割期待が大きい。材料・素材分野でのイノベーションは、革新的な製品群の創出に繋がることから、社会に与えるインパクトは計り知れない。これまで材料の研究開発現場では、種々の物性のトレードオフを解消し、物性・品質向上のため、物性発現メカニズムの究明や、物性低下・劣化等の本質原因の解明が求められていた。まずは仮説を立て、その仮説に基づいて材料を試作し、その妥当性を検証、そして再び仮説を立てて物性向上を図る、というサイクルを高速回転させることによって材料開発を加速してきた。謂わば、これまでは演繹的な手法により材料開発を進めてきたと言える。

ところが最近では、データ駆動科学の登場により、演繹法から帰納法への潮流変化が起こり始めている。データ駆動科学を活用すると、構造から物性への順方向予測だけでなく、その逆方向予測、すなわち本質原因を究明せずとも最適物性のための構造を予測でき、高性能の物性を有する材料開発が進展する可能性が開けてきた。実際、その手法により新規物性を有する化合物を提案・合成し、物性向上を確認したという研究発表が徐々にではあるが増加している。演繹法である第一原理計算をはじめとするシミュレーションでは、順方向予測のみ、すなわち構造を与えないと物性は予測できず、逆方向予測は難しい。データ駆動科学の登場により、研究開発の方法がパラダイムシフトする可能性が出てきている。

それでは、従来の演繹的方法是消失するのであろうか。オックスフォード大学のオズボーン准教授らは、2013年に702の職業について近い将来に自動化されるリスク分析した結果を報告している。それによると、10~20年程度のうちに自動化される可能性が70%以上と高い仕事は全体の47%、運送や物流に関連する仕事は大半が消滅、サービス業もかなりの部分が消滅、今後労働市場で生き残っていくためには、高い創造性と社会的スキルが必要と言われている。ここで興味深いのはマテリアルエンジニアとマテリアルサイエンティストの職業の消失可能性がいずれも2%と低いことである。これは材料開発を完全自動化するのは難しいことを示唆している。これは構造と物性の関係がプロセス条件に依拠し、一義的に決まらないことも関係しているのかもしれない。

高分子材料を例にとると、少なくとも結晶性高分子では1次構造だけでは物性は決まらず、前処理温度や延伸条件などのプロセス条件により、その高次構造、具体的には結晶、非晶、そして剛直非晶やメソフェーズ等の中間相の状態と量が変化するために、物性は大きく異なる。また非晶は、ガラス転移温度以下では非平衡状態のため、経時的に体積緩和が生じ、緻密化する。様々なプロセスで得られた材料の高次構造や物性、しかもその経時変化のデータを収集するのは、プロセスの種類や条件が無数に存在すること、かつ材料試作・測定・解析に膨大な時間を要することから必ずしも容易ではなく、そのためマテリアルインフォマティクスを活用して物性から構造への逆方向予測するのは難しい状況となっている。とはいえ様々なプロセス条件に対する物性データを力業で収集し、あるいはシミュレーション併用等によりデータ補完ができれば、将来的には機械学習が可能になり、逆方向予測により所望の物性を有する構造やプロセス条件を予測できるようになるかもしれない。今後のマテリアルインフォマティクスの進展に大いに期待したい。

最後に国際周期表年2019についてご紹介させて頂きたい。今年は、①2016年に113番目の元素ニホニウム(Nh)を含む118番までの4元素名が確定し、周期表の第7周期までが完成したこと、②2019年はドミトリ・メンデレーフが元素の周期律を発表してから150周年に当たること等の理由により、国連とUNESCOによって「国際周期表年2019」が宣言され、様々なイベントが開催されている。日本では、UNESCO・IUPAC(国際純正・応用化学連合)の要請により、2019年12月に閉会式が開催される予定である。それを受けて国際周期表年実行委員会(委員長:玉尾皓平)が設立され、国際周期表年の記念事業への協賛・支援をお願いしている(詳細は<https://iypt.jp>参照)。現在、アカデミア61機関、企業36社のご賛同を頂いているが、特に企業からはIUPAC賛助会員へのご支援も含めて決して多い状況ではない。持続的発展のためには、国際競争力の維持・強化のみならず、SDGsをはじめとする国際協調活動も同時並行的に実施することが求められている。材料・素材分野で強みを発揮している日本の動向には世界中から熱い視線が向けられていることを認識しておく必要がある。

目次

- 01 やあ こんにちは
材料開発のパラダイムシフトは起こるのか
石切山一彦

- 02 トピックス
酸化物イオン伝導体の
新材料探索とイオン伝導機構の解明
藤井孝太郎・
八島 正友

- 05 研究所紹介
産業技術センター
瀬戸窯業試験場
高橋 直哉

- 07 ご案内、新刊紹介

- 08 To the Overseas
Members of MRS-J,
編集後記