

材料解析プラットフォーム"Material DX"による 材料の構造解析と材料設計指針の導出

トヨタ自動車株式会社 先端材料技術部

矢野正雄、佐久間紀次、木下昭人、加藤晃、庄司哲也

1. 測定実施日

2020年	7月	28日	BL5S2	(1シフト)
2020年	9月	9日	BL5S2	(1シフト)
2020年	9月	10日	BL5S2	(2シフト)
2020年	11月	12日	BL5S2	(1シフト)
2020年	11月	12日	BL8S3	(1シフト)

2. 概要

材料研究開発の加速には、材料の計測と解析をハイスループット化することが求められている。データ解析による計測時間とデータ解析時間の短縮を目指し、開発中のデータ解析プラットフォーム活用の有用性を実証する。

3. 背景と研究目的

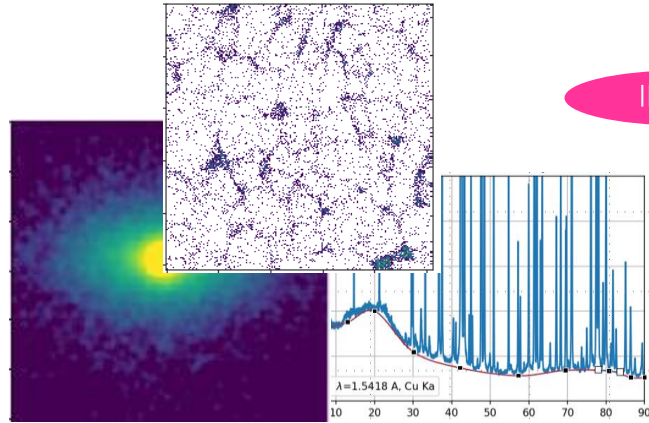
自動車の環境性能向上を目指して車両動力の電動化が進んでいる。この電動化には様々な材料が関連しており、例えば、カーボン材料においてはその多様な用途に応じた高性能化はFC、電池、キャパシタほかの部品、それを使った将来モビリティの高性能化につながる。また、磁性材料においては、磁石の高性能化は、モータの小型化、高トルク化につながる。いずれの材料にも共通して構造と物性の相関を知り、材料設計指針を獲得することが重要である。一方で、AI技術の普及、様々な産業のデジタルトランスフォーメーション（DX）が急速に進む中、素材産業においてもマテリアルインフォマティクス（MI）の普及等、材料開発手法にも大きな変革が起きつつある。しかし、材料の試験評価のデータからMIの実現までには、データの蓄積・整理とデータ解析の間に大きな溝がある。そこで今回各種構造解析データに関して、**ハイスループット測定**で多くのデータを獲得し、新たに開発した**材料解析プラットフォーム“Material DX”**を用いて、それらのデータをクラウド上で自動で蓄積・整理するとともに、機械学習手法を用いた解析を施し、MIサイクルを効率的に回す材料開発を実施した。

Material DX概要

データ整理・蓄積・解析

Material DX

測定した材料の評価データ



INPUT

整理された数値データ
(データセット)

File_name	R_ave	R_sd	R_vf	R_sub_ave	R_sub_sd	R_sub_vf
MS000	5	2.5	10	1	0.5	90
MS001	10	3.4	20	2	0.68	80
MS002	12	2.1	24	2.4	0.42	76
MS003	16	1	32	3.2	0.2	68
MS005	4	2	8	0.8	0.4	92
MS005	20	5	40	4	1	60
MS006	35	3.2	70	7	0.64	30
MS007	30	5.7	60	6	1.14	40
MS008	19	9.2	38	3.8	1.84	62
MS009	12	8.5	24	2.4	1.7	76
MS010	50	10	100	0	0	0

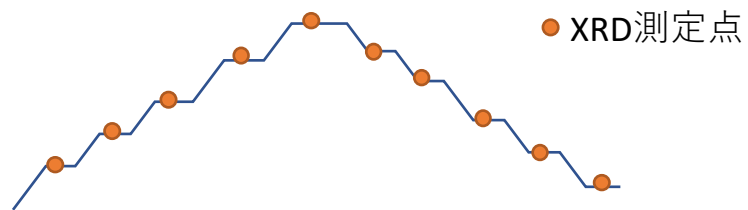
OUTPUT



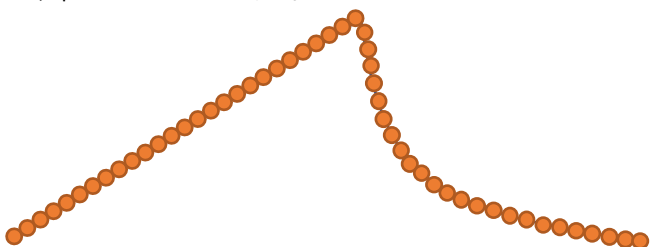
ユーザー

計測データをアップロードすると、所定の前処理+データ蓄積を行う
→実験方針決定、ビームタイム中に解析完了

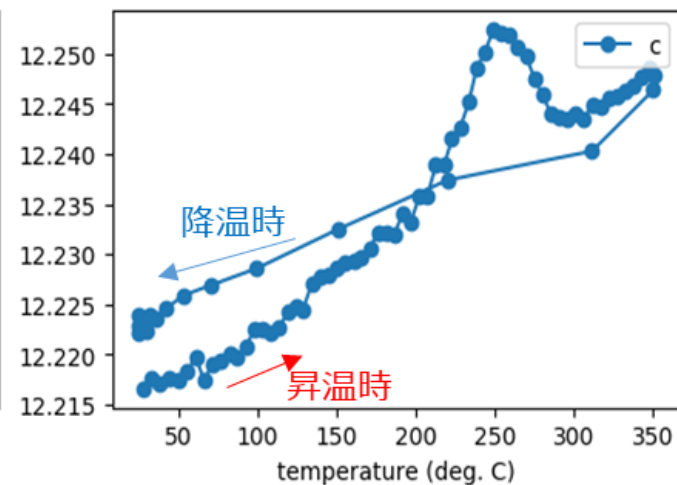
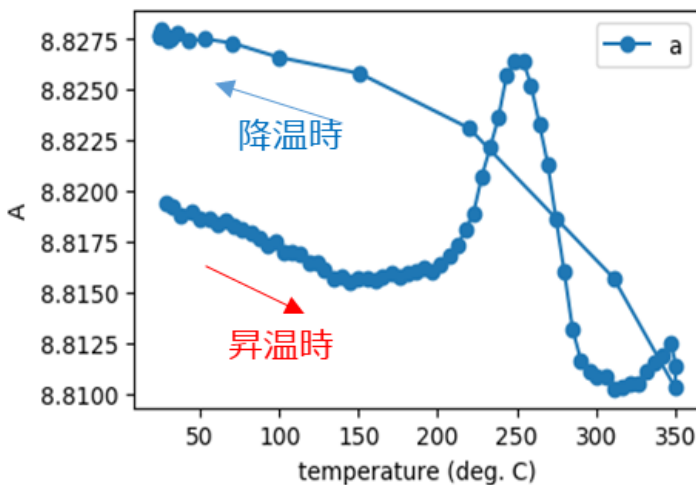
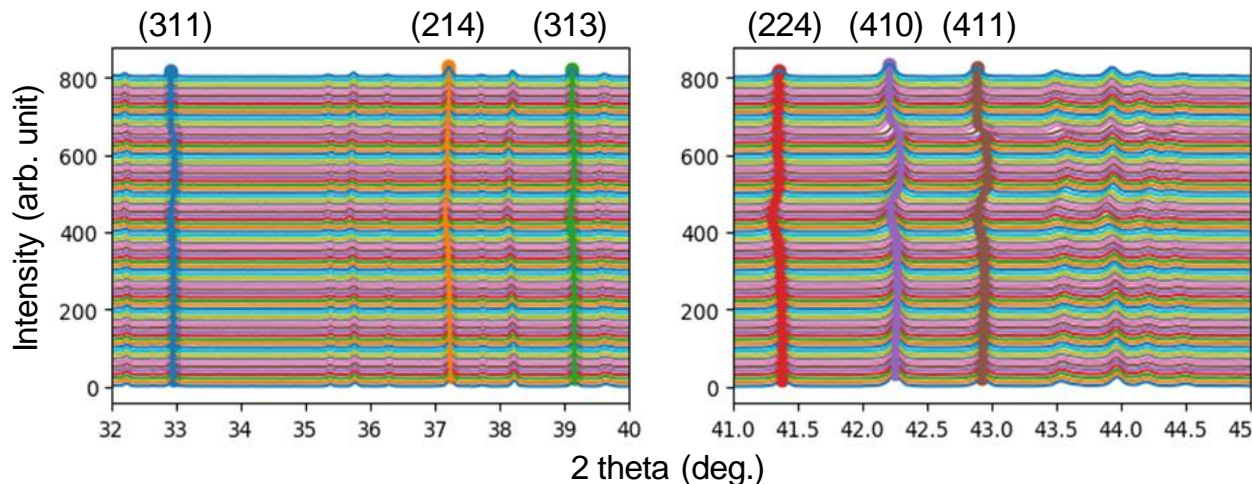
解析的定量化例：ネオジム磁石の高温XRD



従来：温度安定待ち時間がほとんど
→低スループット



今回：昇降温を止めることなく連続測定
→高スループット

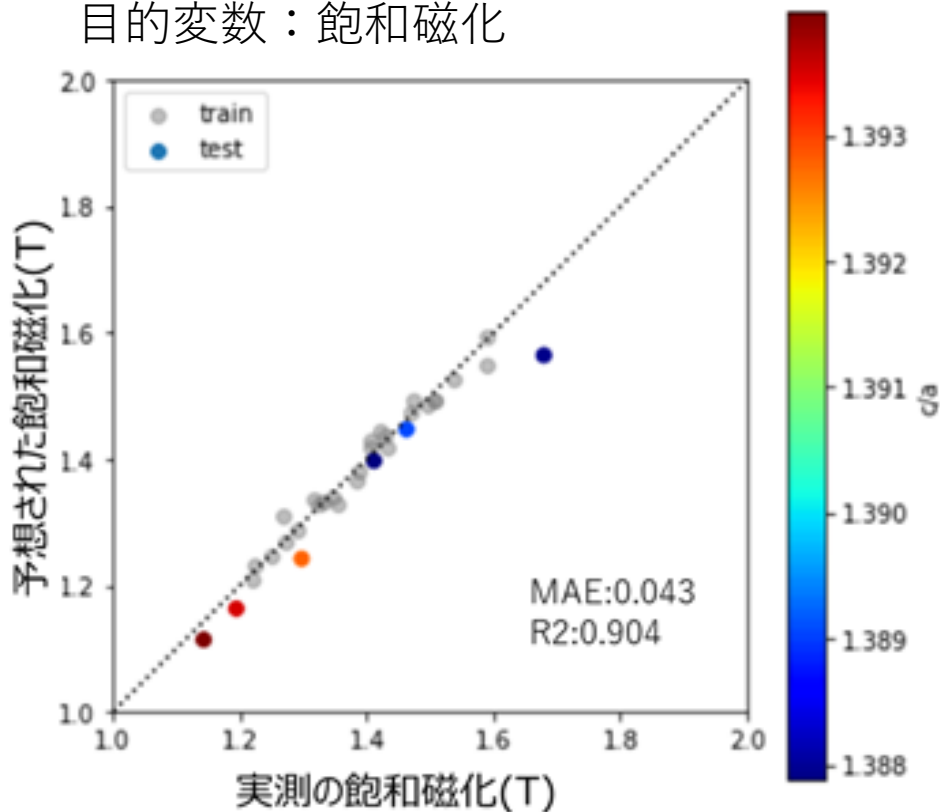


解析の自動化により、大量取得のデータをその場で解析可能となった

解析的定量化例：ネオジム磁石の高温XRD

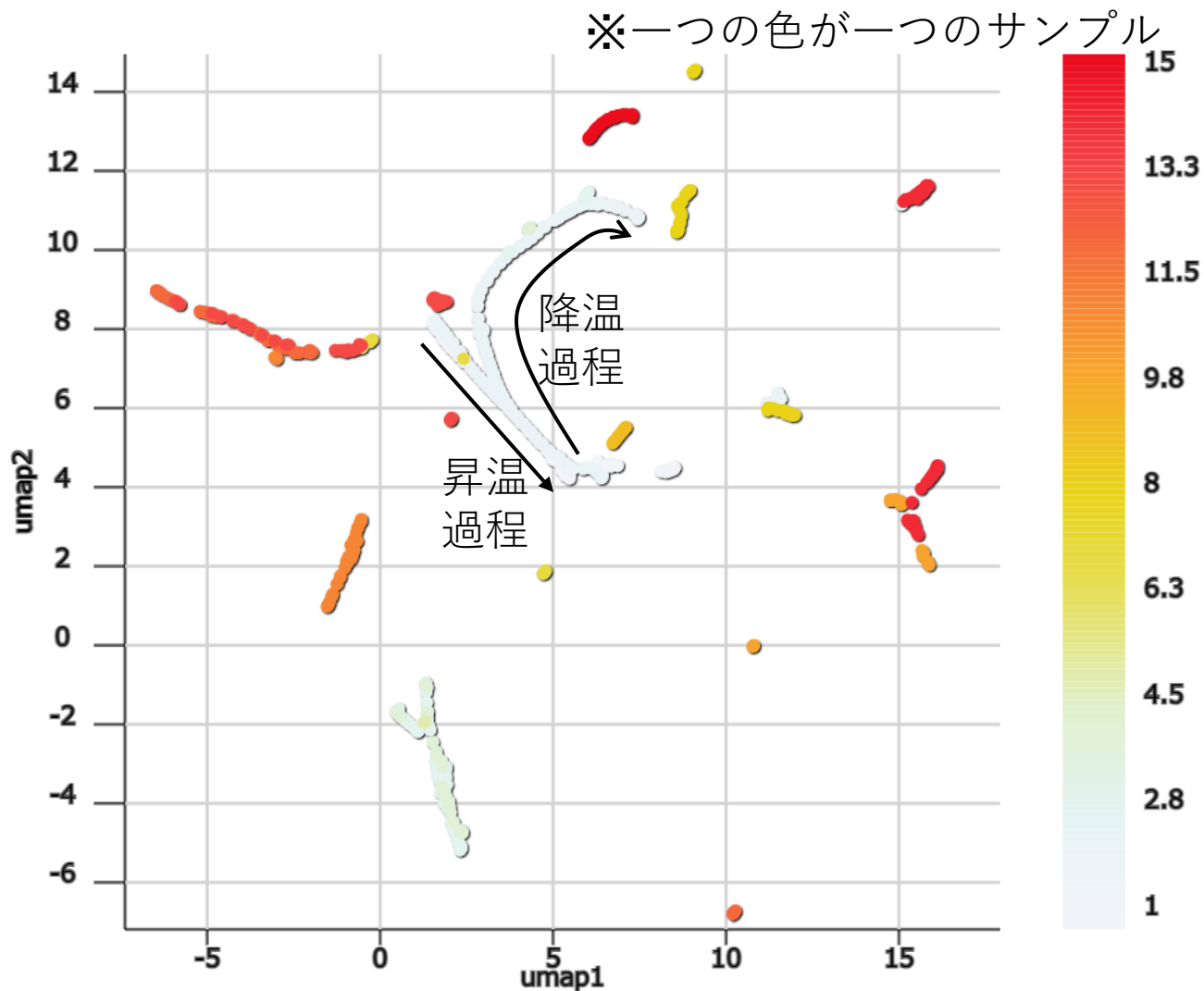
説明変数：結晶構造データ、組成

目的変数：飽和磁化



室温から T_c 近傍までは a 軸方向の格子定数が減少 (c 軸方向の格子定数が増加)、 c/a 比も温度とともに増加。
⇒ c/a 比が変化しないか、温度とともに c/a 比が減少するような材料設計が有効

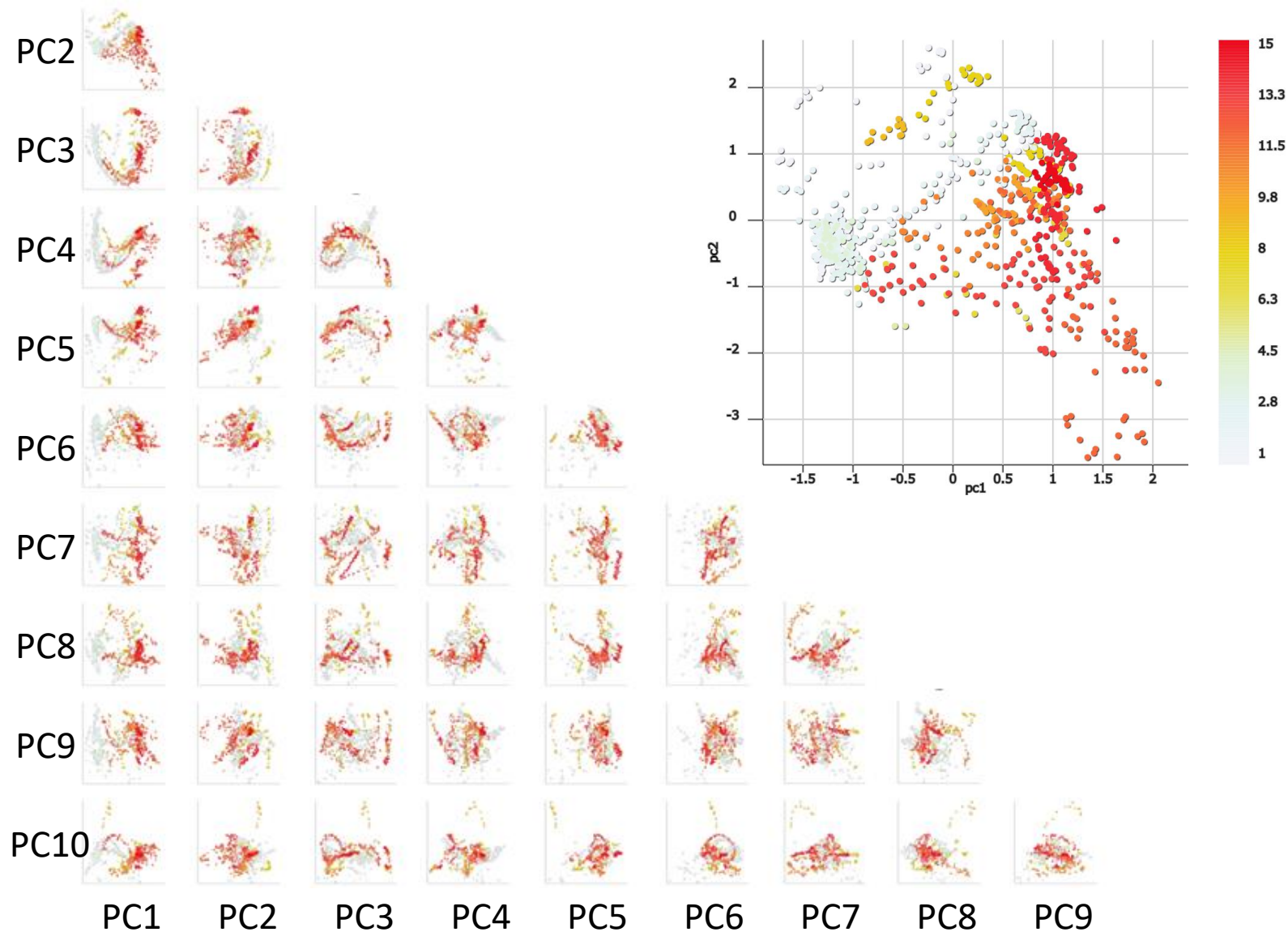
機械学習的定量化例：ネオジム磁石の高温XRD



データ数=786(15種類)の類似度マッピング

システム利用により ビームタイム中に取得した全XRDパターンの俯瞰が可能

機械学習的定量化例：ネオジム磁石の高温XRD



データ数=786(15種類)の主成分分析結果

システム利用により ビームタイム中に取得した全XRDパターンの俯瞰が可能

まとめ

データ解析/蓄積システム'Material DX'の有用性を確認するため、永久磁石の粉末X線回折実験を実施。連続昇温中にXRDを計測し続けることで、RT→600°C→RTを30分/サンプルで取得。以下を実施し、大量の取得データ解析の有用性を確認した。

- ・ 解析的定量化
 - ・ 格子定数の温度変化を自動取得
 - ・ 大量データも一括で処理できることを確認
- ・ 機械学習的定量化
 - ・ スペクトル類似度を計算し全計測データをマッピング
 - ・ サンプルごとの温度変化の挙動を把握

今後 データ解析精度向上、汎用性担保によるMIの深化につなげる。

謝辞：BL5S2では連続昇降温測定を、BL8S3では多試料チェンジャーによる計測の高速化を実施いただきました。この場を借りてお礼申し上げます。