

エレクトロニクス産業分野からの 数学パワーへの期待

株式会社 村田製作所
檜貝信一・神坂英幸





- I. 村田製作所と講演者の紹介 (4ページ)
- II. 材料の魅力 (4ページ)
- III. 分野の課題 (11ページ)
- IV. 数学への期待: プログラミングの数学化 (4ページ)
- V. 数学への期待: Study Group Workshop 2018での取り組み (6ページ)



I. 村田製作所と講演者の紹介

村田製作所の創業

- 創業者：村田昭 (1921-2006)
 - 陶磁器製造から、“特殊窯業品” (現在のファインセラミックス)
 - 航空機 の速度計(ピトー管)用碍子
 - 酸化チタン磁器コンデンサ
- 創業日 昭和19年10月15日 (1944)
 - 村田製陶所から日本陶磁器(有)をへて独立、創業
 - 世界的な電子部品メーカーへ
- 初期からの産学協同
 - 京都大学工学部電気教室、工業化学、化学教室
 - チタン酸バリウム
- 社風
 - 実直、真面目、機能重視



創業者 村田昭

社 是

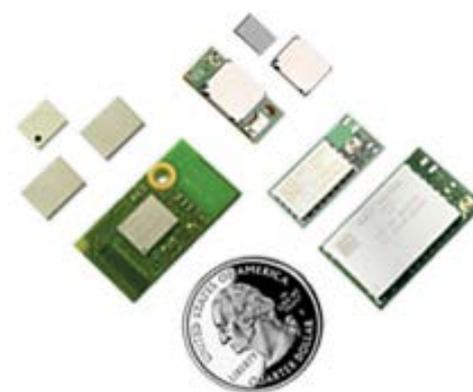
技術を練磨し
科学的管理を实践し
独自の製品を供給して
文化の発展に貢献し
信用の蓄積につとめ
会社の発展と
協力者の共栄をはかり
これをよろこび
感謝する人びと
ともに運営する

<https://recruit.murata.com/about/ambition/philosophy/>

- 電子デバイスの世界市場 (2018)
 - 半導体 (52兆円)、電子部品 (25兆円)、ディスプレイ (15兆円)
 - 電子部品は、日系企業が40%シェア
 - 積層セラミックコンデンサ (MLCC) 村田製作所が世界トップ (40%シェア)
- 村田製作所の主な製品
 - 積層セラミックコンデンサ (MLCC)
 - SAWフィルタ (表面弾性波フィルタ)
 - 温度センサ、ショックセンサ
 - RFモジュール
- 成長分野、将来分野
 - 車載向け部品、IoT (Internet of Things)
 - 医療、ヘルスケア分野



コンデンサ (キャパシタ)



RFモジュール

国内の事業所

- 本社
 - － 長岡京市 (京都府)
- 生産拠点
 - － 越前市 (福井県)、出雲市 (島根県)、
白山市 (石川県)、瀬戸内市 (岡山県) など
- 研究開発・生産拠点
 - － **野洲市** (滋賀県)、長岡京市 (京都府)、
東近江市 (滋賀県)、横浜市 (神奈川県)



野洲事業所の全景



工場の内部 (越前市)



スタッフルーム (事務所)

- 檜貝信一 (Principal Researcher)



- 筑波大学で学ぶ 金属材料技術研究所 (現在の物質材料研究機構) を経て入社 AIMaP運営委員
- 専攻：計算材料科学

- 神坂英幸 (Researcher)



- 北海道大学、総合研究大学院大で学ぶ 分子科学研究所、東京大学を経て入社
- 専攻：化学反応動力学理論、計算材料科学

社内での業務：研究開発の加速、知財の確保（特許など）
テーマ研究、社内依頼案件、外部技術の評価、公知情報の判断・検証

II. 材料の魅力



材料とは?

- 狭義には、工業製品（特に電子デバイス）を構成する物質を指す
 - 英語では Materials（Ingredientsではない）
 - 材料科学“Materials Science”
- 代表的な電子デバイスとその材料
 - 集積回路：トランジスタ (Si / MOSFET)、記録ディスク：(TeFeCo, Ge₂Sb₂Te₅)
 - 磁気ヘッド：(Co系多層膜, MgO絶縁層; GMR 巨大磁気抵抗 / TMR トンネル磁気抵抗)
 - 発光ダイオード LED (GaAs, GaP, GaN, ZnO)、フォトカプラ (SiやGeのpn接合)
 - コンデンサ (BaTiO₃)、圧電素子 (PZT)、熱電変換素子 (BiTe, PbTe, SiGe)
 - 温度センサ (Mn, Ni, Co酸化物)、ガスセンサ (SnO₂など)

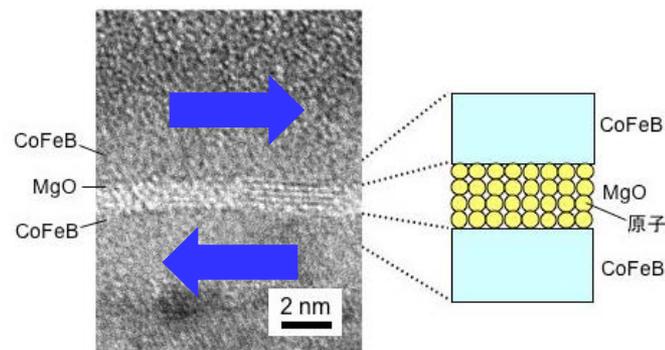
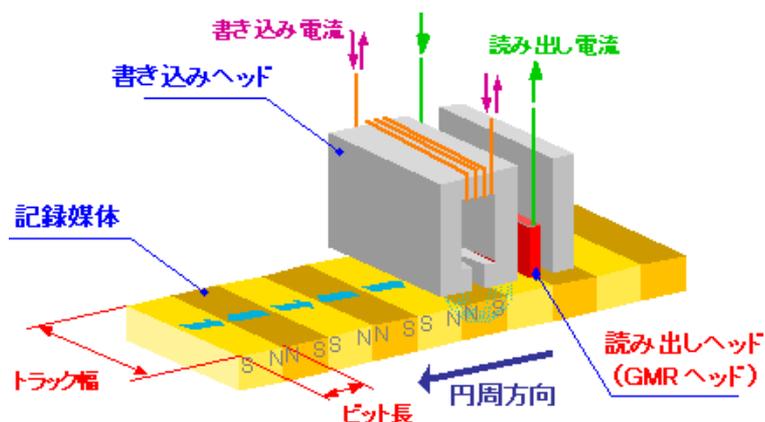
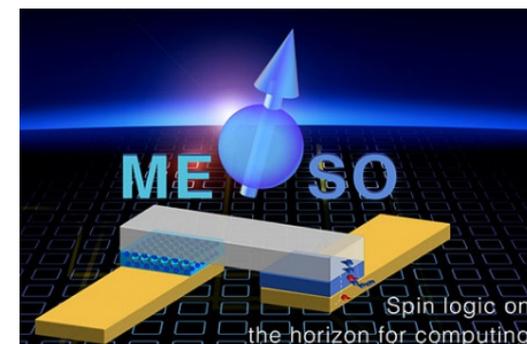


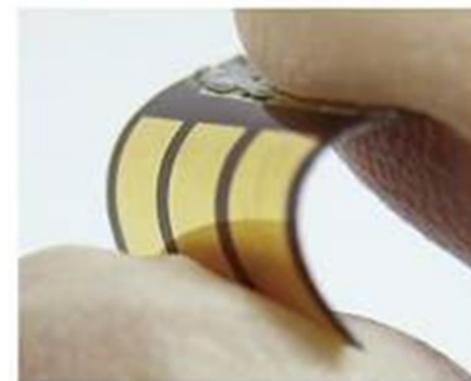
図6：作製したTMR素子の断面を示す電子顕微鏡写真

HDDのヘッドの構造（出典：AISTプレスリリース 2006年5月9日）

- CMOS代替の新材料 MESO (Magneto-Electric Spin-Orbit)
 - Intel Corporationとカリフォルニア大バークリー校 (2018年12月)
 - CMOS代替、消費エネルギー1/10以下、集積度5倍
 - 磁電気スピン軌道を用いたロジックデバイス
 - BiFeO_3 : マルチフェロイック、トポロジカル材料
- ペロブスカイト系太陽電池 (2009-)
 - 日本発
 - 高い変換効率 (20%超)、低コスト
 - 皮膜化、フレキシブル
- 酸化ガリウムパワー半導体
 - SiC, GaNに続く第3の材料 : Ga_2O_3
 - イオン注入ドーピング、ミストCVD法など



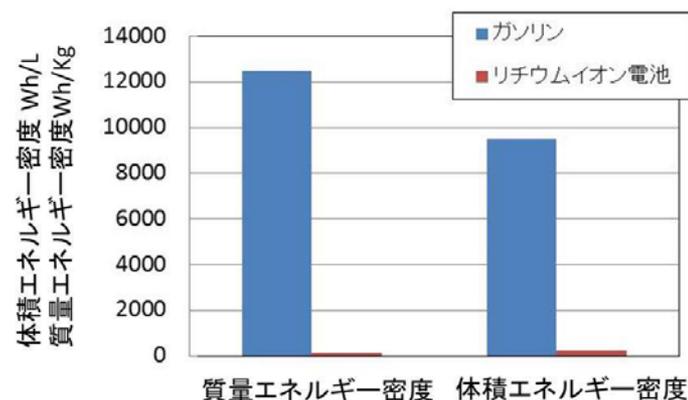
出典：Intelのプレスリリース



出典：科学技術振興機構 (JST)

- 物質は、超ミクロ、超高速、超パワフル
 - 超ミクロ
 - 全世界の総データ量：2020年に40ZB（ゼットバイト） = 4×10^{22}
 - アボガドロ数（18gの水の水分子数）： 6.02×10^{23}
 - 超高速
 - 平均的なCPUのクロック数 3.3GHz → 3×10^{-10} s = 0.3 ns（ナノ秒）
 - 水分子の振動（全対称伸縮振動） 3657 cm^{-1} → 9×10^{-15} s = 9 fs（フェムト秒）
 - 超パワフル
 - 巨視的な変形 << 吸着や挿入など << 化学結合 << 原子力
 - 現在のリチウムイオン電池は、Li原子の層間への挿入；“インタカレーション”（化学結合は利用していない）

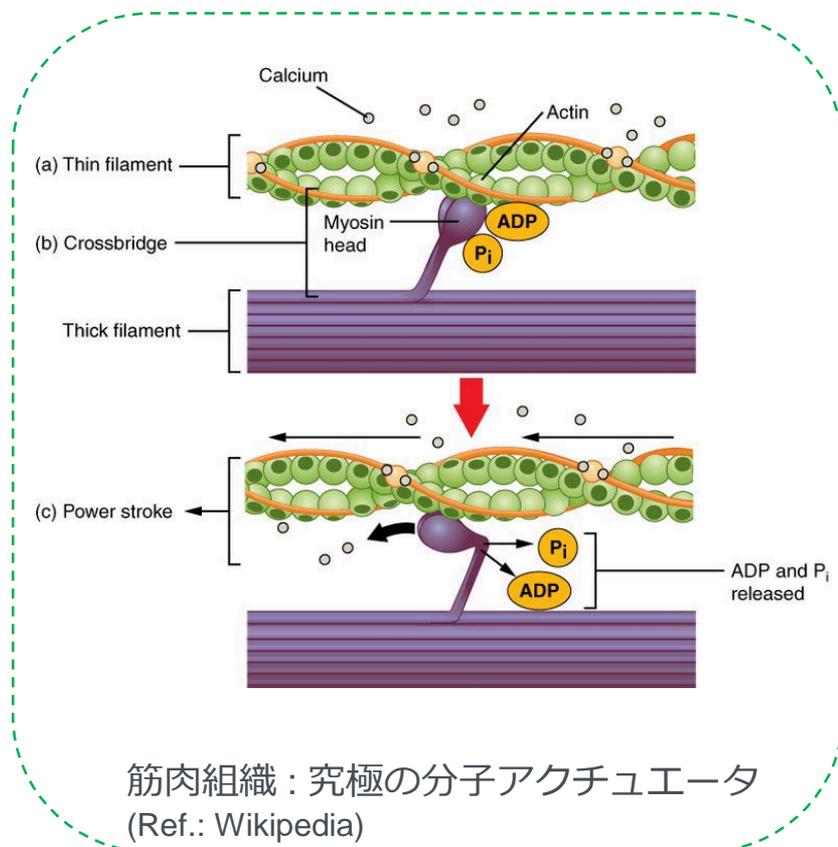
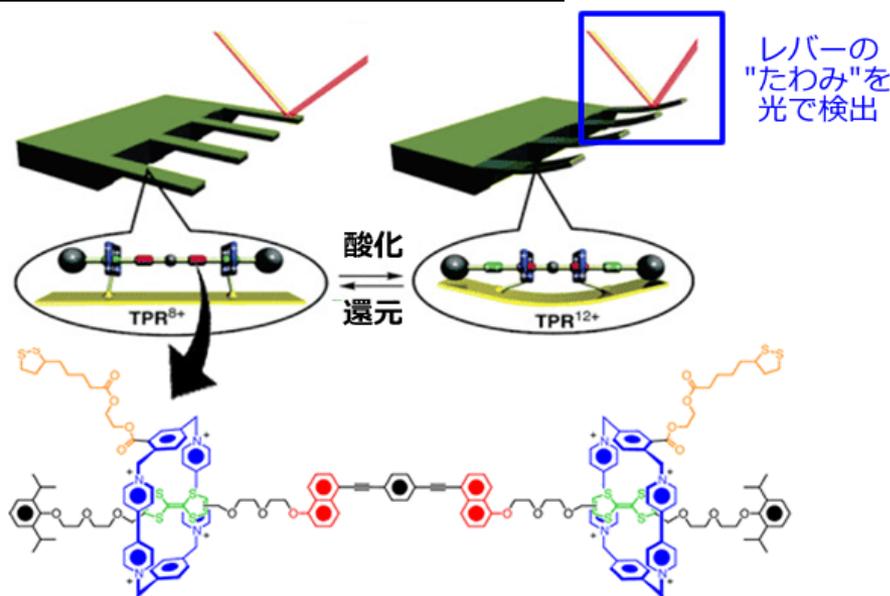
電池とガソリンのエネルギー密度 比較



出典：http://kenkou888.com/category18/enedensity_lib_gas.html

- 固体物性の応用（情報通信など）から、分子や化学結合を活用したエネルギー、ライフサイエンス分野へ
 - 分子エレクトロニクス、分子論理ゲート、分子モーター、分子マシン
 - 2016年ノーベル化学賞「分子マシンの設計と合成」

「分子筋肉」（アクチュエータ）への応用



出典：<https://www.chem-station.com/blog/2016/10/nobel2016.html>

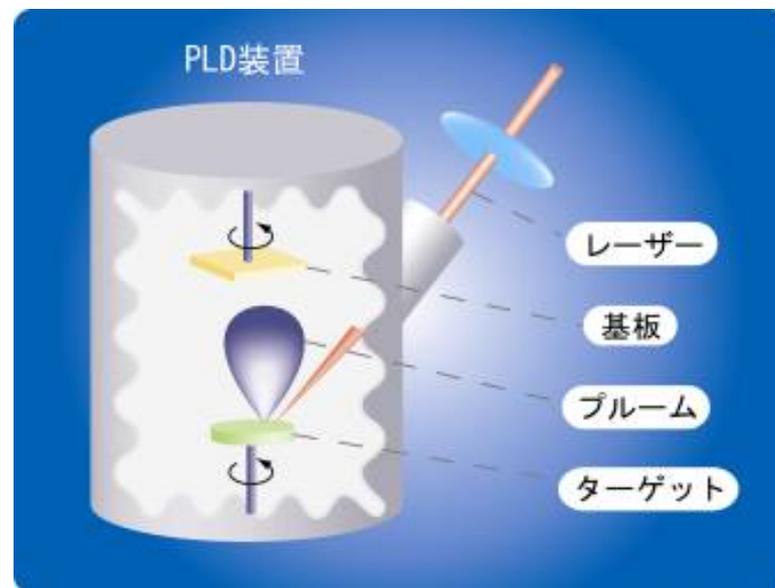
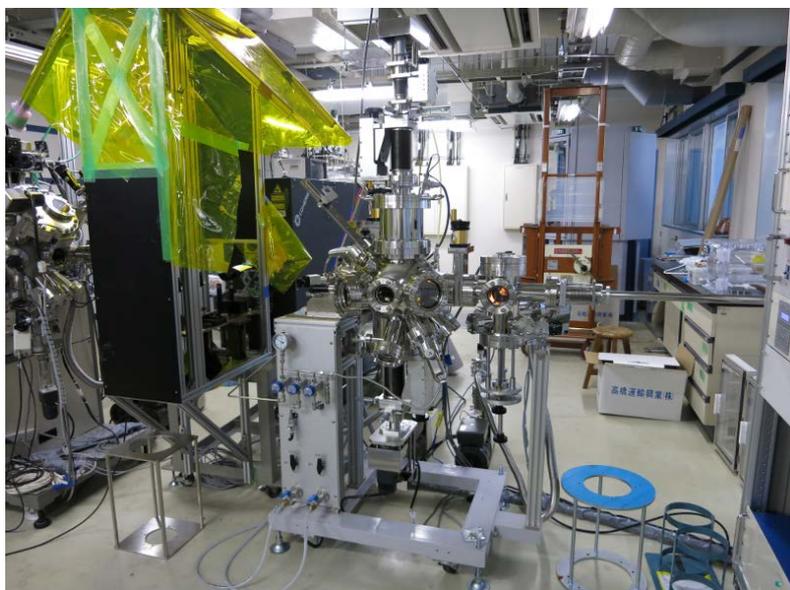
化学結合が駆動力源：電磁気や熱機関ではない

III. 分野の課題



- 固体の物質探索

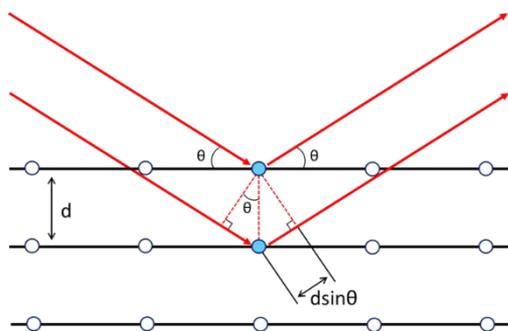
- PLD法 (Pulsed laser deposition法) による薄膜合成 ; 固体は合成手法が限られる
- 高価な実験装置 (全部で数千万円)、学部生から利用



<http://issc.chem.tohoku.ac.jp/FukumuraLabHP/facilities.html> <http://www.msl.titech.ac.jp/~hosono/facilities/PLD.html>

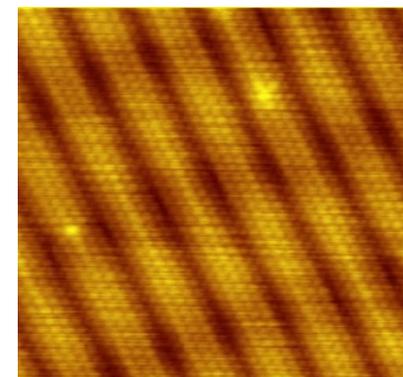
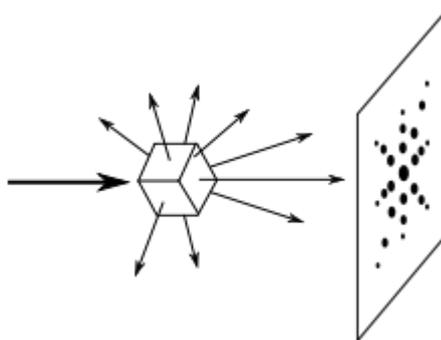
- 変更できるパラメータが少ない
 - ターゲット組成、温度、酸素分圧、レーザーパルス
- 期待した物質が生成しなくても、単に条件を変えて試すことが多い

- 多くの材料は、母物質 + 不純物 (添加物) で構成される
 - 材料によっては、”不純物“ が機能発現の鍵
 - 性能が飛躍的に伸びたり、新規物性が発現
 - 合成法、組成比の僅かな差 (non-stoichiometry) も影響
- しかし、純粋な結晶構造を外れると、ほとんど未知の領域
- X線：回折には周期性が必要、軽元素の識別が困難
 - STM像：最表面のみ、輝点・暗点の帰属が難しい (電子密度を反映)



X線回折の模式図

(Ref.: Wikipedia)



金表面のSTM像

(Ref.: Wikipedia)

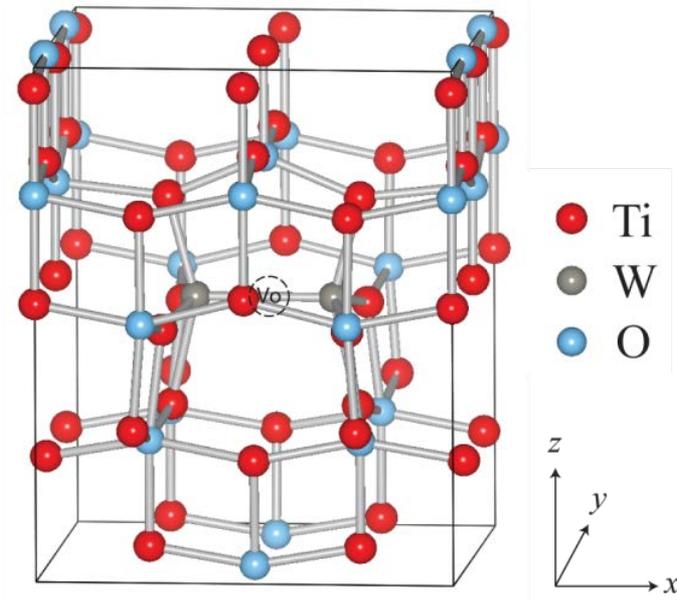
計算科学を使った 透明電極材料に適するドーパントの解明

- Nbドーパしたアナターゼ型TiO₂：透明電極材料 TNO
- Wドーパしたアナターゼ型TiO₂：電導性が発現しない

周期表

	4	5	6
	Ti²²	V ²³	Cr ²⁴
電導性発現	3d ² 4s ²	3d ³ 4s ²	3d ⁵ 4s
	Zr ⁴⁰	Nb⁴¹	Mo ⁴²
電導性消失	4d ² 5s	4d ⁴ 5s	4d ⁵ 5s
	Hf ⁷²	Ta ⁷³	W⁷⁴
	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	5d ³ 6s ²	5d ⁴ 6s ²

計算科学での
構造決定



TNO (組成より命名した略号)

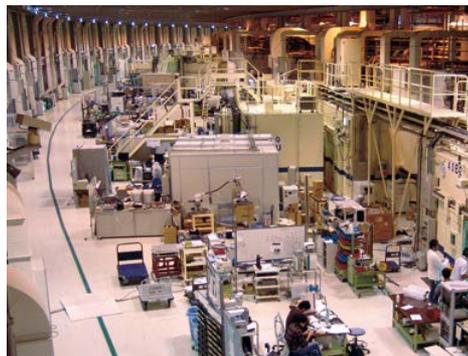


W≡W 三重結合に電子が捕捉される

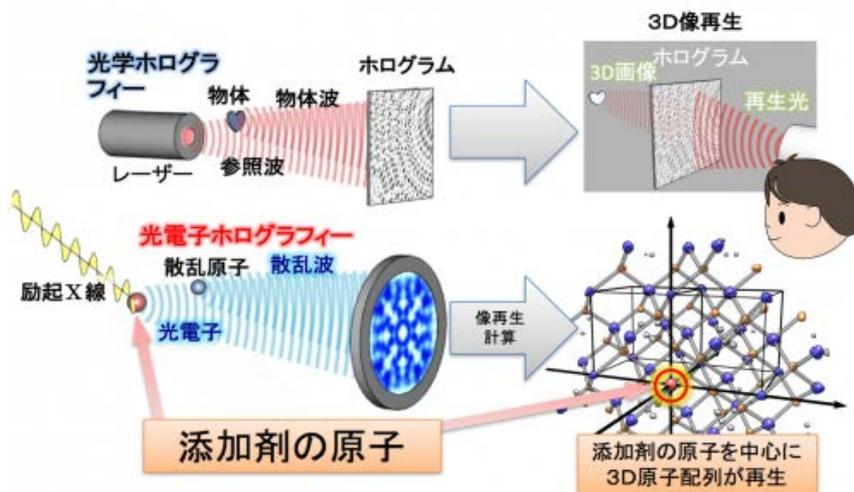
H. Kamisaka et al., *J. Phys. Chem. C* 114, 12777 (2010).

実験での取り組み: X線ホログラフィー

- 放射光による固体中の不純物 (添加物) 周辺構造の解明

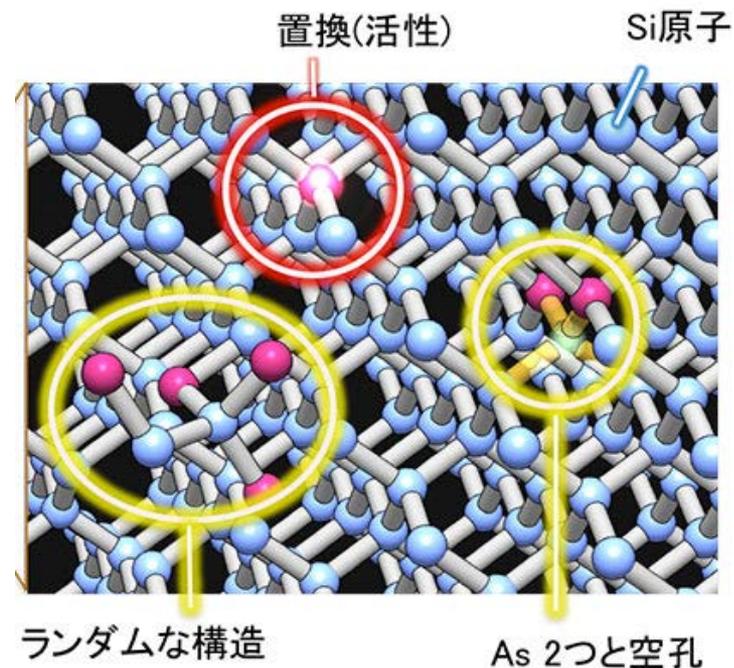


大型放射光施設 SPring-8 (公式webページより)
太陽の1億倍の輝度をもつ光



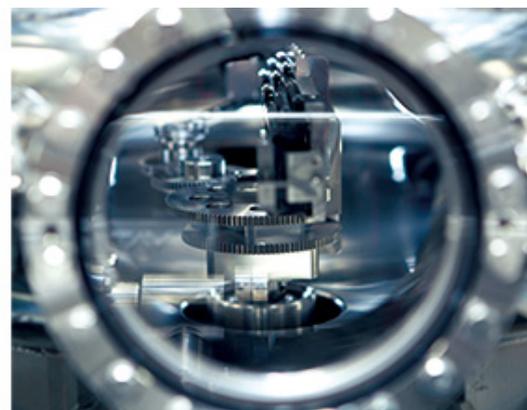
不純物原子をX線で励起；散乱波から周辺を再生

As ドープ シリコン



東京工業大学 プレスリリース
(2017年12月22日)

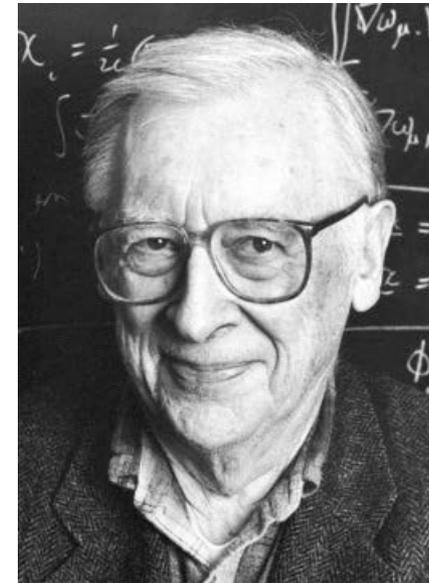
- 人工知能とロボットを駆使した新物質合成の実験装置
東工大物質理工学院応用化学系 一杉太郎教授
 - “材料開発 AIで脱・職人技” (日本経済新聞 2018年10月15日)
 - 「実験室のものづくり環境(専門:薄膜生成)はこの20年間変化なし 強烈な危機感『実験室の産業革命』が必要」



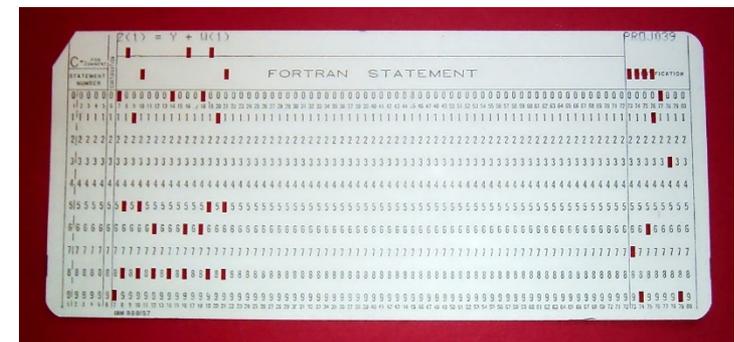
- 金属基板上の分子配列の自己組織化に関するガイドライン
 - 数理科学・理論化学の専門家 (D. Packwood講師) と協働
 - 「教師なし機械学習」を可能に

- 必要な力学法則は分かっている
 - 量子力学 (1925)、相対論的量子力学 (1928)、場の量子論
 - 近似理論：密度汎関数理論 (Density Functional Theory; DFT 1965)
 - 具体的な物質の計算：分子軌道法 (化学)、第一原理計算 (物理、固体)
- 計算の難しさ
 - 空間スケール、時間スケールの制約
 - 計算コストは、系のサイズに対し、通常 三乗で増加
 - ゆっくり進む反応 (レアイベント) を捉えにくい
 - 確率振幅としての粒子の運動
 - 状態の量子力学的重ね合わせ → 組み合わせが膨大 → 平均場
 - 平均場の破綻：電子相関、強相関系；酸化物エレクトロニクス of 要点
 - 固体での難しさ
 - 周期性は利用するが、扱っているのは無限個の電子
 - 縮退したレベルが連なる (影響がすぐに伝播する)

- デファクトスタンダードの確立、コモディティ化
 - Gaussian (1970-) : 分子軌道法
 - VASP (1993?-) : バンド計算 (固体)
- Gaussianの実装技術の古さ
 - FORTRAN77 (1977) による記述
 - コードの肥大化 (>100万行)、難読化
 - 拡張や改変がきわめて困難
- ライセンスを巡る問題
 - Gaussian設計者 J. A. Pople
 - ノーベル賞受賞時 (1998) には、Gaussianの権利を持っておらず
 - Gaussian Inc. と研究者達の対立
 - 現在Gaussianは、中国・インドにソースコード (設計図) を提供していない、

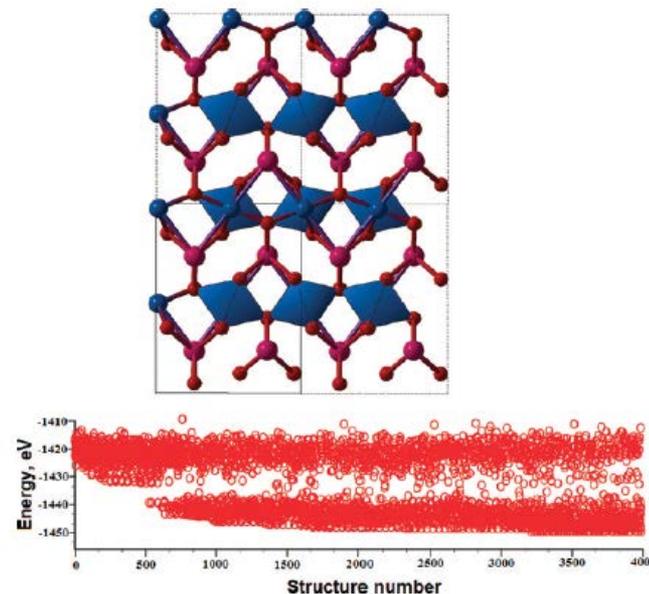


J. A. Pople (1925-2004)



FORTRANパンチカード

- 「ある固体の組成を与えたとき、どういう結晶構造をとるか？」という極めてシンプルな問い
 - 不純物がない場合ですら、未だ解決していない難問
 - 有限温度の扱い（構造相転移）が困難、振動の非調和性
 - 力任せな解法 (brute force) に頼ったソフトウェアのみ
 - USPEX (Universal Structure Predictor Evolutionary Xtallography; 2006)
 - 遺伝アルゴリズム (Genetic Algorithm; GA)
 - 高圧化での H_3S 超伝導を予測、脚光を浴びる
 - 右図: MgSiO_3 の構造予測
A. R. Oganov et al., Acc. Chem. Res. **3**, 227 (2011)
 - CALYPSO (2006)
 - Particle Swarm Optimization (PSO) 法
 - USPEXよりも単純なアルゴリズム
- どちらも第一原理計算には、VASP利用



複数の近似が絡み合い、論理では先に進めない

トレードオフの理解、経験的な選択の問題
逐次改良できない近似、その比較検討



ソフトウェア固有の利用スキルに収斂

ソフトウェアの内部を調べる時間がない
収束させるパラメータ探し（反復解法）、適切なオプション探し
バグ回避の方法探し



結果の解釈が困難

改良の指針がわからない（この点で実験と同じ）
実験サイドからは、ストーリーに沿った傍証を求められる



それらしい構造データ、計算リソースの入手

いち早く情報を収集する能力、コミュニケーション能力
事務処理能力（報告書作成など）、論文作成時のストーリー作り（後付け）

- 情報科学 や データ科学 (人工知能) を用いた物質探索
 - 分子軌道法や第一原理計算は、デファクトスタンダードを利用
 - 国家間の競争
 - 米国: Materials Genome Initiative (MGI; 2011-)
 - 中国: Shanghai Materials Genome Institute (2014-) など
 - 韓国: Creative Materials Discovery Project (2015-)
 - 日本: 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I; 2015-)
 - 大学や企業の取り組み
 - Ceder研 (MIT) : Materials Project, PyMatGen
 - Samsung + MIT : 固体電解質材料
 - 田中功研 (京都大学) : イオン伝導体、熱電材料、誘電材料
 - 東工大 : 「物質・情報卓越教育院」構想
- Googleなどの巨大IT企業も着目している

- データ科学の適用には、大量のデータが必要

- 過去の社内データを活用
- 社外のデータベースを利用
- 公知の論文、特許情報を利用
- 何らかの方法で自動的に生成

テキストマイニング
の技術に帰着

- “特徴量エンジニアリング”

- 例外的な現象を予測できるのか不明
- scikit-learn, TensorFlowの利用が多い
- 通常、なんらかの推論を行ってはいない
「データ科学 → 機械学習 → 人工知能」？

- 弊社での取り組み

- 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I) への参画
- テキストマイニングの技術開発

夢みる プログラム

人工無脳・チャットボットで考察する
会話と心のアルゴリズム

加藤真一
Shinichi Kato



加藤真一による書籍



IV. 数学への期待： プログラミングの数学化

- 関数型プログラミング言語 Haskell (1990-)
「関数プログラミング」R. ボード、P. ワドラー著、1991



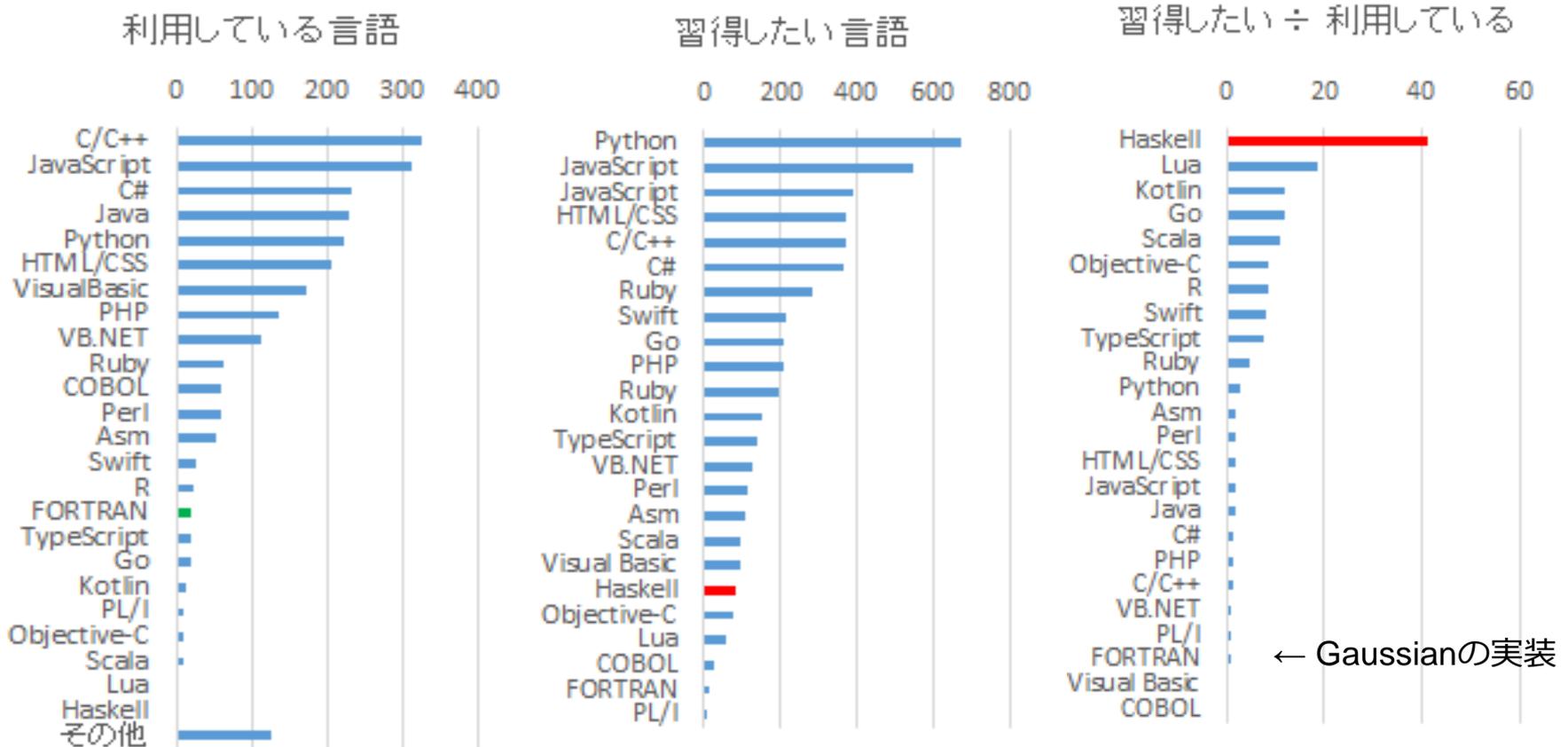
“ 関数プログラミングはプログラミングを
数学的な活動と捉える考え方であり、...”

- 圏論にもとづく純粹関数型プログラミング言語
 - ファンクター、アプリカティブ、モナド、モナド変換子 など
- チューリング機械から、ラムダ計算へ計算モデルの変更
 - 型によるプログラムの整合性チェック
 - カリー化、部分適用、遅延評価（停止条件の分離）、無限リスト
 - 並行・並列プログラミングにも強い
- 講演者の一人（神坂）が業務にも利用
 - 物質の構造モデルを操作するツールセット
 - Rubyからの乗り換え、現在2,500行程度、とにかくバグが出にくい

- Haskellから学んだこと
 - 良くあるプログラム開発方法論
 - 「 $\times\times$ 指向」「 $\times\times$ 駆動開発」「 $\times\times$ パターン」など
 - 状況に強く依存(体験ベース)、組織論や自己啓発書のような内容も多い
 - 読んでいるときは分かった気になるが、結局、自身に適用できない
 - 全体的にゴチャゴチャしている、体系的でない
 - 数学に根ざしている (Haskell) と、
 - 最初は何に役に立つのか、サッパリ分からない
 - 先に進むと、強固かつ強力な構築物ができてくる
 - 極限まで切り詰めてあり、無駄がない、覆らない
 - 率直なところ
 - Haskellを使うのに、圏論は必要ない、用語のみでOK (時間的コスト)
 - 無意味な勉強を避けることの方が、はるかに重要
 - その意味で、数学は試金石となる

Haskellの普及率、注目度

- 日経xTECHの調査 (日本経済新聞電子版 2019年1月8日)



<https://www.nikkei.com/article/DGXMZO38330120Z21C18A100000/>

Haskellにある程度関心はもたれている
実際に利用している人は少ない

- ベンチャーとの関係



- Preferred Networks社 (2006-) :

- 日本で現在、唯一のユニコーン企業、評価額2300億円、IoTや深層学習
 - 社名はHaskellに由来 (母体のPFI; 2006) :

... 社名は、「Haskell」に代表される「*Purely functional programming language*」(純粋関数型言語) から来ている。社員の1人がHaskell好きで「*Purely Functional*」を社名に使いたいとなったが、一般的でないと判断。そのため略語のPFIに語感からIをつけて、PFIとした。

(出典: <http://www.atmarkit.co.jp/news/200803/24/pfi.html>)

- 複数のHaskellerが在籍

- 講演者 (神坂) が Haskell 勉強会 (2011年頃; 数学出身多し) で面識ある人も

“ディー・エヌ・エー (DeNA) と人工知能 (AI) 開発のプリファード・ネットワークス (東京・千代田) は29日、(中略) 膵臓 (すいぞう) がんなど14種類のがんを見つける血液検査の研究開発に乗り出すと発表した。”

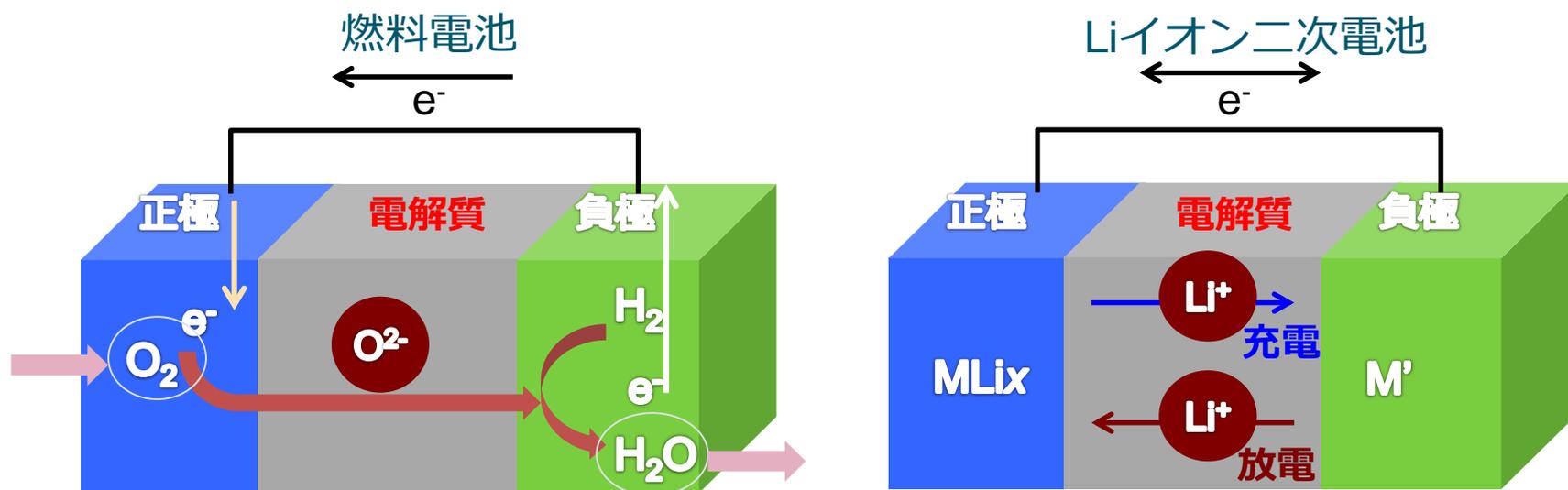
日本経済新聞オンライン 2018年10月29日



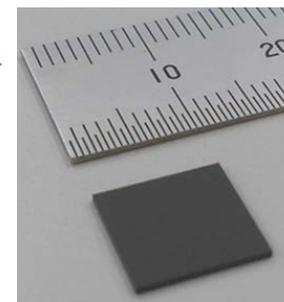
V. 数学への期待：
Study Group Workshop 2018での取り組み

電池の原理と全固体電池

- 電池の原理: イオンと電子が別ルートを通して進行する化学反応
→ イオンは通し、電子は通さない物質 (電解質) が必須



- 全固体電池:
 - Liイオン二次電池の電解液を固体電解質で代替
 - 安全、耐熱性、長寿命
 - 熾烈な開発競争
 - 国内では、トヨタ自動車株式会社、ムラタ、TDK株式会社など

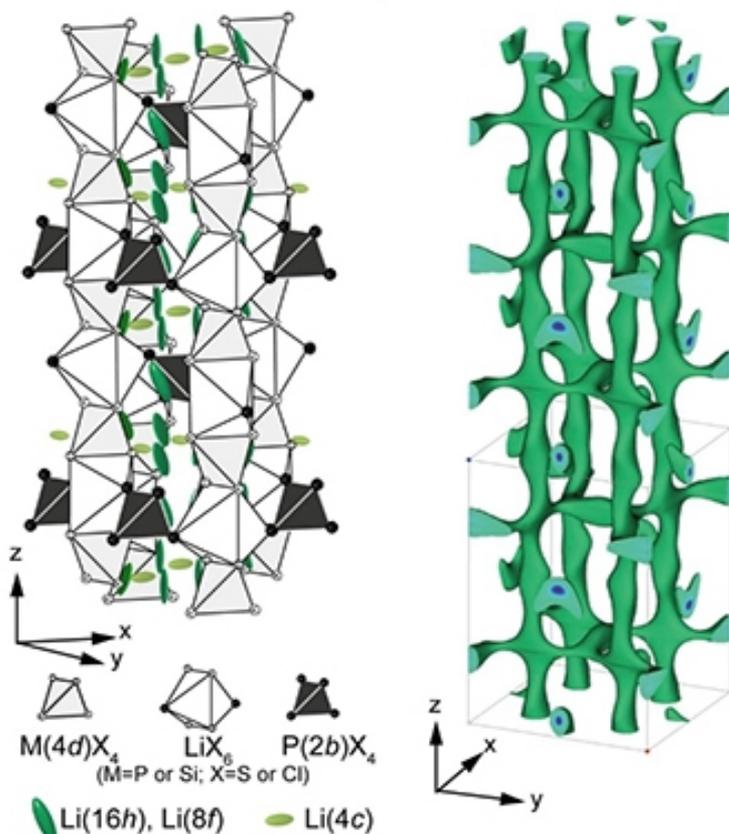


弊社による
全固体電池試作品

固体電解質のリチウムイオン伝導経路



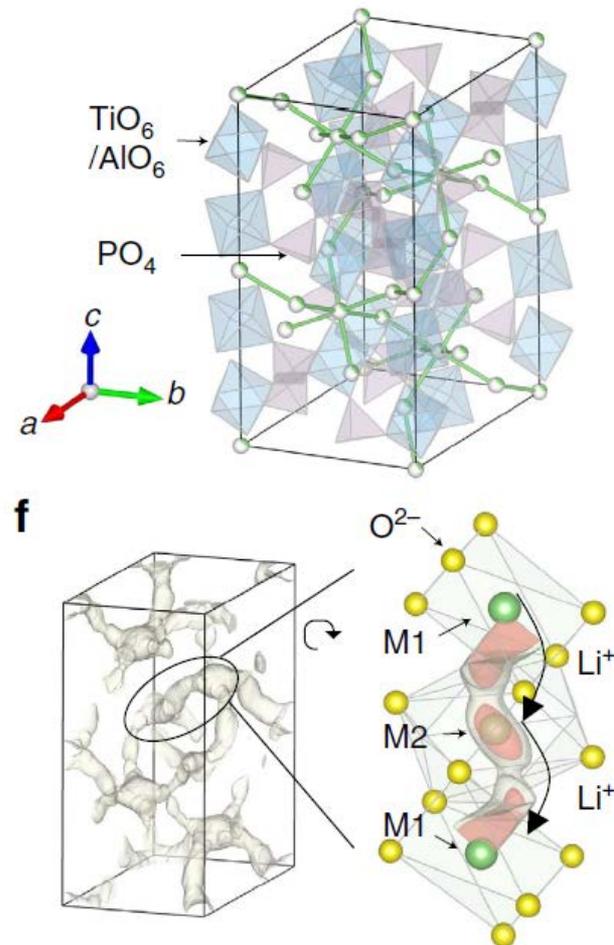
iMATERIA @ J-PARC による測定 (中性子線)



東工大プレスリリース 2016年3月22日



計算科学による研究



Ref: X. He, Y. Zhu, Y. Mo, *Nature Comm.* **8**, 15893 (2017).

何が問題か？

- ごく単純な一粒子モデルの理論で結果を解釈
 - ブラウン運動の理論、Einstein-Nernstの式 (1905)
 - 化学反応速度論 H.Eyring (1935)
 - 不帰点および準平衡仮説：固体中の拡散ではダメ
- 現象を適切に記述にするか不明
 - 複雑なネットワーク上の多粒子拡散、相互排除
 - ドープの影響、改良のための指針など不明

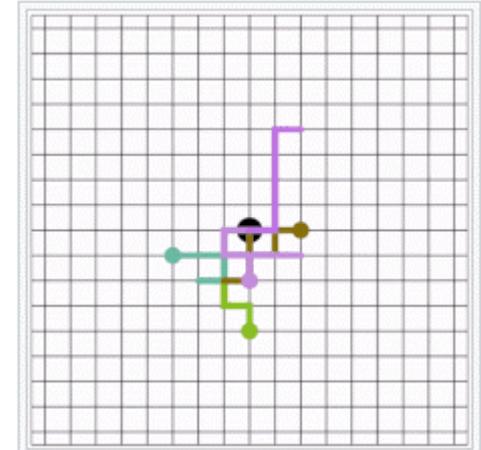


仮に高精度な分子動力学シミュレーションをしても、
結果の解釈が困難（実験と同じ）

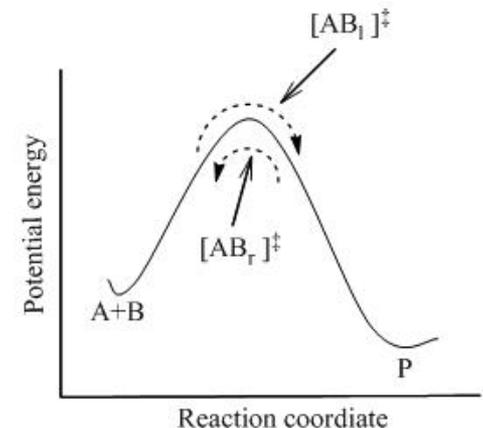


新しい視点がないと、議論が展開できない
数学の力を借りられないか？

- 幾何学や確率論
- イオン伝導以外にも、物質全般について新概念は？



格子上的ランダムウォーク



化学反応速度論

- 一口に数学といっても、広大な世界
 - 数学分野に関するさまざまな質問（講演者の勝手なイメージ）を問うと、「人による」「分野による」という回答が続いた
 - 「純粋数学」「応用数学」という用語
- 理論的考察よりも先に、数値実験を試みたのが意外
 - これは、ガウスの時代から変わらないらしい（リーマン予想もそうか）
 - いきなり壮麗な理論ができるわけではなさそう
- 紹介いただいた方
 - 藤森義弘氏
 - 一般社団法人産学協働イノベーション人材育成協議会 (C-ENGINE) 事業責任者
 - ポストドクターでも企業インターンシップが可能な仕組み



一般社団法人
産学協働イノベーション人材育成協議会



- 企業の価値観が理解できる人
 - 社会とのつながり、他社との競争、知財獲得、機密保持
 - 単なる製造業では立ち行かなくなることへの危機感
 - 知的産業との複合体、開発体制の変革が急務
 - 生産の場、一品モノには意味はない
 - 事業展開、コスト意識、利益率、「事業」「上市」「お客様」
- 数理に閉じこもるのでなく、現実の世界に展開できる人
 - 何が仕事か、きちんと定義できる人
 - 難しいことをやるのではなく、物事をシンプルにできる人
 - 変革のための思い切った取捨選択をする人
 - 現場の壁を越えていける人、批判を正しく受け止める人

難問にひるまず挑み続ける姿勢



2018年8月2日 @ 九州大学 伊都キャンパス

ご清聴ありがとうございました