

# プロセスインフォマティクスによるフラックス法結晶材料 育成条件導出法および実装システムの構築

信州大学・山田哲也、土井達也、明治大学・金子弘昌、信州大学・手嶋勝弥

- ① 当研究グループでは、高機能化を目的に、無機結晶材料を開発しています。
- ② 本研究では、フラックス法へのデータ駆動型手法の導入に取り組んでいます。結晶材料の高機能化及び、そのマスプロダクションのプロセス提案の迅速化を実現します。
- ③ 高機能なフラックス結晶を社会実装することにより、次世代型材料開拓に貢献します。

## 信州大学が掲げるアクイノベーション



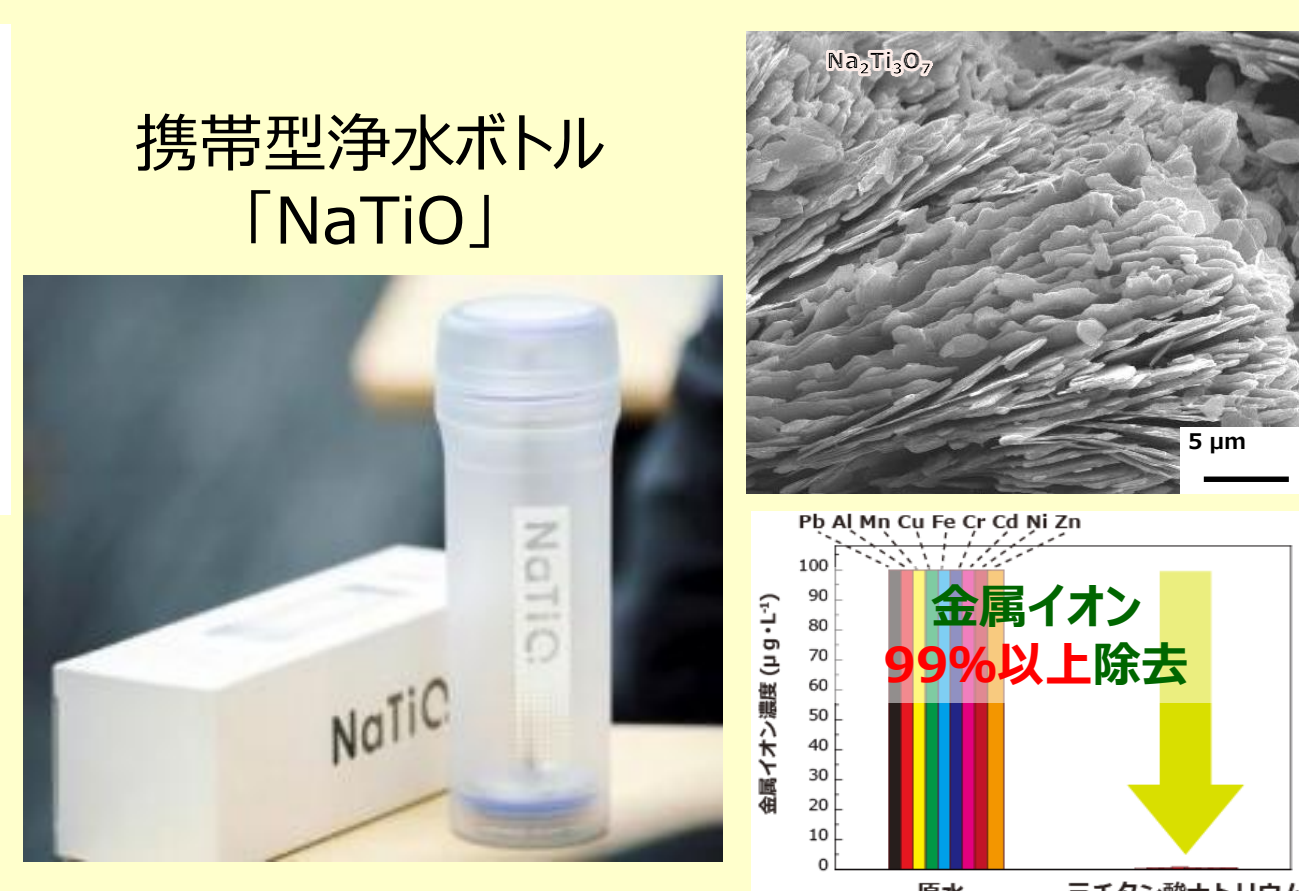
「世界中の人々がいつでも十分な水を手に入れられる社会」の実現のため、**拠点発の材料技術を社会実装する必要がある。**

[https://greenz.jp/2010/05/12/bop\\_desighn/](https://greenz.jp/2010/05/12/bop_desighn/)

### フラックス育成



信州大学が世界を先導する無機結晶育成技術「**フラックス法**」で育成した**信大クリスタル**は、**粒子として高性能!**



## 商品化に向けた実験レシピ最適化には、時間コストがかかる!

<https://www.askul.co.jp/p/3750846/>

### 第1の壁：材料探索と育成



用途・顧客にカスタムフィットしたレシピ

### 第2の壁：小スケール生産



性能保持するレシピ

### 第3の壁：量産プロセス



性能保持かつ量産可能なレシピ



[https://iiot.jp/iiot\\_specials/is\\_0004/](https://iiot.jp/iiot_specials/is_0004/)

「信大クリスタル」の量産に至る**実装の壁**を、**プロセスインフォマティクス (PI)**や**ベンチャービジネス**を掛け合わせて乗り越える!

## 本プロジェクトのワークフロー

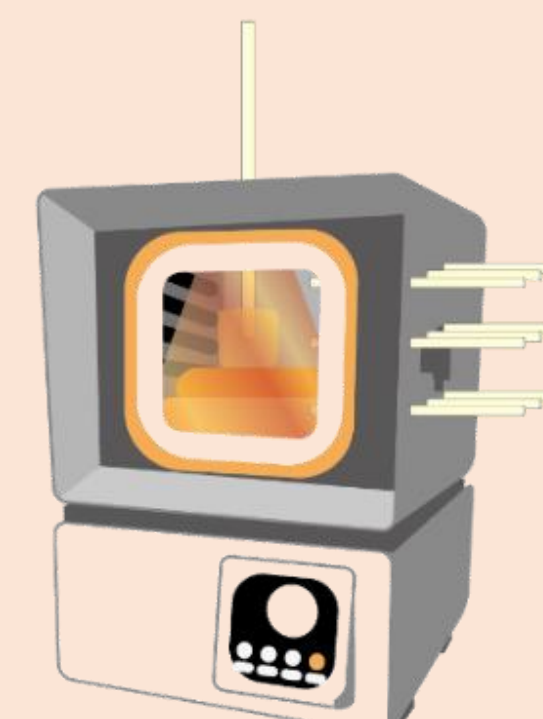


課題間連携により目標達成を強力に推進

## ビジネスプラットフォーム構築

スケーラブルな結晶育成を可能にするスマートフラックス炉の開発

PI活用を前提としたビジネスモデル



- 実験 & ビッグデータ取得を同時実行 (炉内環境を時間・空間分解で取得)
- 最適加熱条件オートコントロール

大学発ベンチャー  
想定する商品 (B to B)  
・結晶育成予測レシピ  
・結晶材料  
・スマートフラックス炉 (包括販売)



予測レシピのアップデータサービス ↔ 実験データ提供

顧客企業  
・購入商品をもとに、用途・顧客ニーズに応じた材料開発実験  
・商品販売 (B to C)

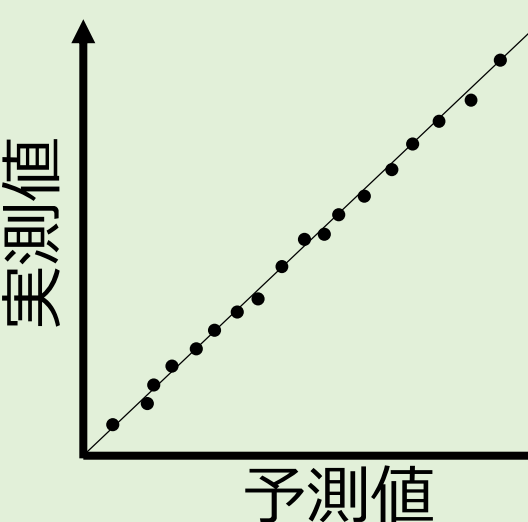
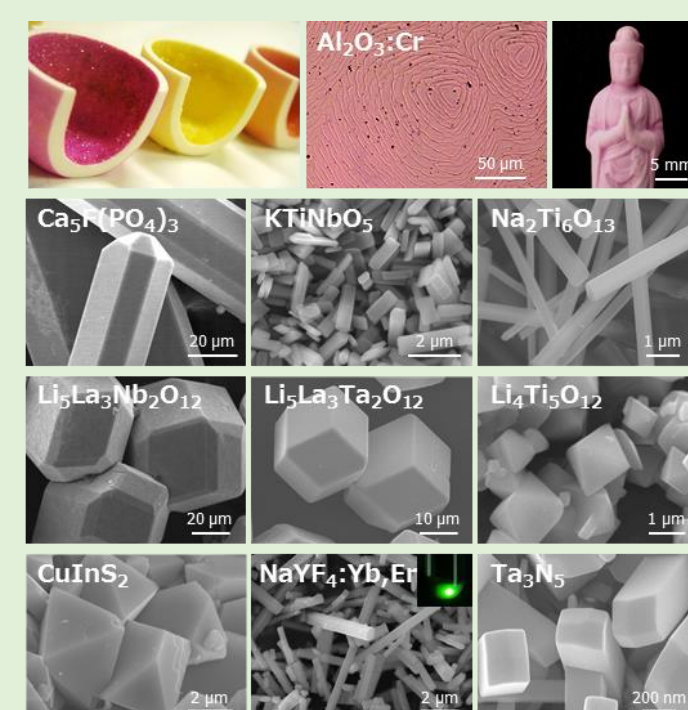


## フラックス法技術の商品化システム確立へ

## フラックス法結晶成長の機械学習

300種類の実験データ

30以上の実験変数



結晶成長予測モデル関数  
 $y = a + bx_1 + cx_2 + dx_3 + ex_4$  実験条件

成長寄与因子特定モデル関数  
 $y = a + \sum bx_i + \sum cx_j + \sum dx_k + \sum ex_l$  寄与因子

蓄積データを使い、**フラックス法結晶成長を説明・予測するAIモデルを構築。**

## AI予測による結晶成長の実験レシピ提案へ

## データ駆動型材料開発によるPI実証

1. プロセス条件探索
2. 結晶育成
3. モデル更新

数値モデル  $Y = f(X)$   
目標の結晶特性を満たす、低コストな結晶育成プロセス条件の探索を効率的に達成!

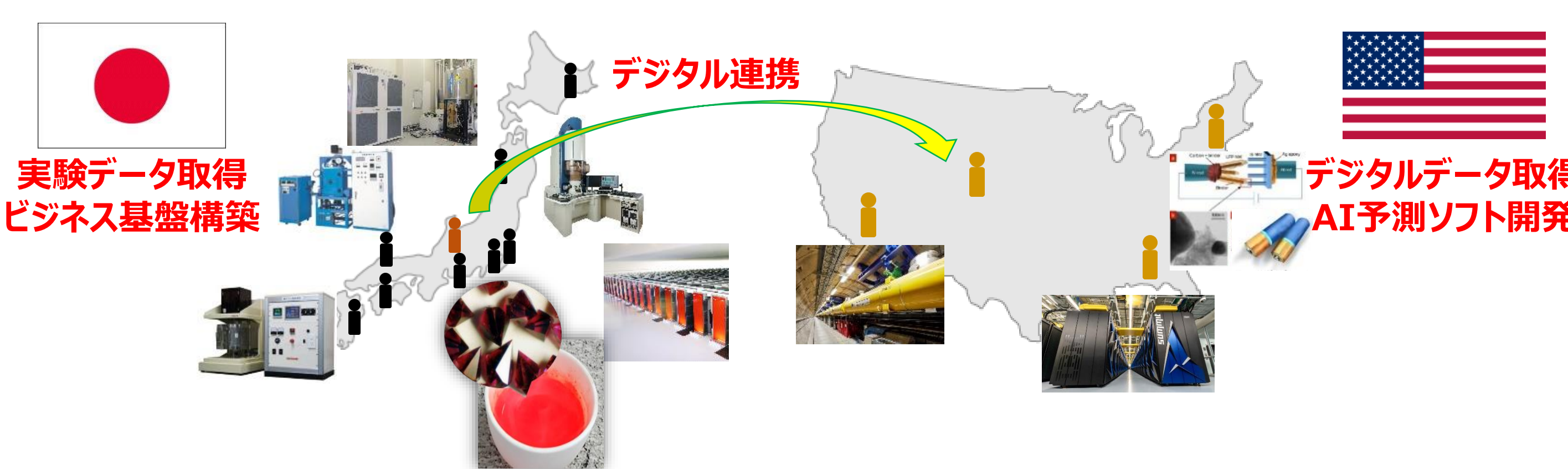
機械学習

データベース

Y: 結晶の形状・サイズ・露出結晶面、実験コスト  
X: 溶液における化学種の種類や組成および圧力・温度プロファイルなど

## 結晶材料の迅速開発・提供へ

## デジタル分野での海外連携構築



## 機械学習用データの取得体制強化へ

### 今後の展開



#### 短期目標 (〜3年)

- PIによるフラックス結晶育成の基盤構築 (機械学習・ネットワーク形成)
- リアルタイム熱計測可能なPI用スマートフラックス炉開発と外部への展開
- ビジネス体制 (内部・外部) の構築およびコアビジネスの始動

#### 中長期目標 (4〜10年)

- PIによる信大クリスタル育成の確立とPIによる材料社会実装の始動
- フラックス法結晶成長ビジネスの多品種 (〜100種) 展開
- スマートフラックス炉による結晶育成パラメータの自動取得および外部展開