

「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」 (中間評価)

(平成28年度～平成33年度 6年間)
プロジェクトの概要 (公開)

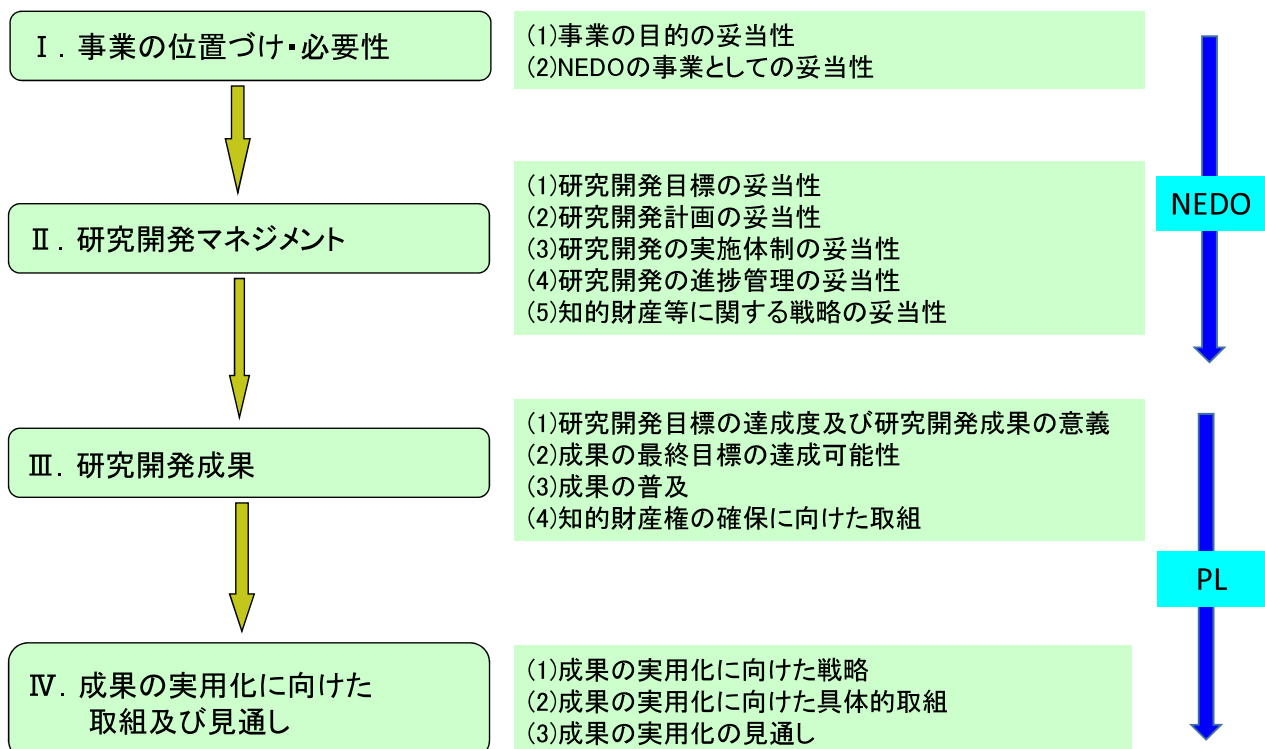
NEDO

材料・ナノテクノロジー部

平成30年9月11日

0

発表内容

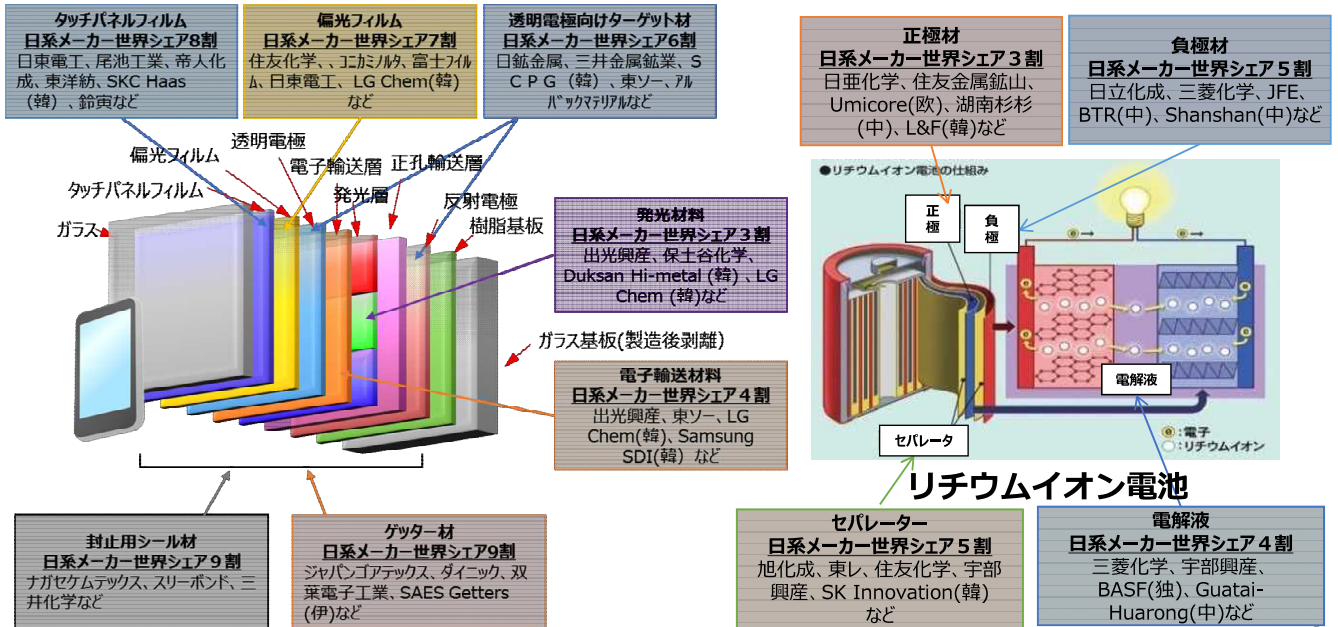


1

◆事業実施の背景と事業の目的

- 機能性化学品の世界市場規模は約50兆円(化学品全体の15%程度)。
- リチウムイオン電池や有機ELディスプレイの素材などに用いられる電子材料では、我が国の化学企業が高いシェアを有する分野が多く存在。

高いシェアを有する機能性化学品の分野(例)

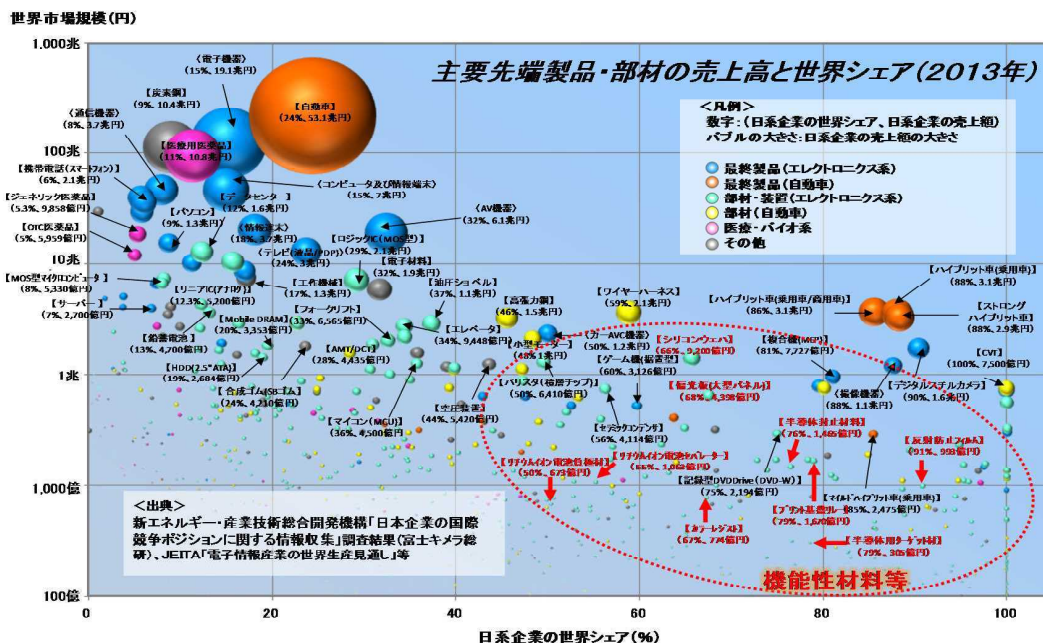


(出典) 世界有機ELディスプレイ製造装置・材料産業年間2018(グローバルネット)等よりDNEO作成

(出典) 平成27年度日本企業の国際競争力に関する情報収集等より経済産業省作成

◆事業実施の背景と事業の目的

- 機能性材料...(機能による分類) 光学材料、磁性材料、導電・絶縁材料、伝熱・遮熱材料、触媒、...
- (形態による分類) 粒子、繊維、フィルム、シート、膜、...
- ✓ 機能性材料が生み出す機能によって製品の付加価値が発現され製品の差別化が図れる。
- ✓ 機能性材料は、個々の市場規模は小さいが、各々で高いシェアを確保。

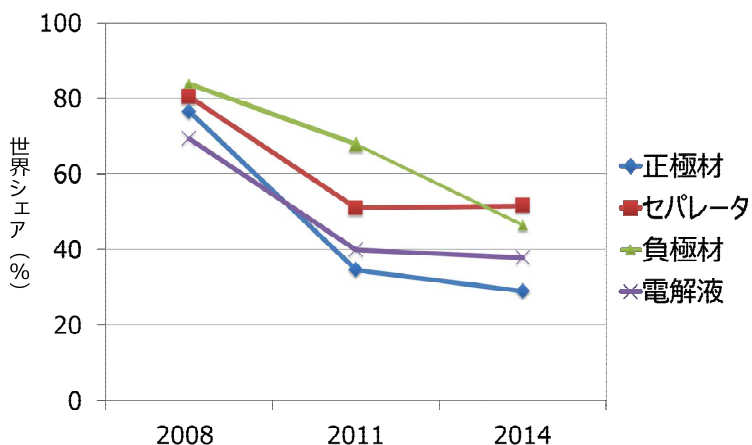


◆事業実施の背景と事業の目的

- 機能性素材（例：電子材料）を巡る環境の変化
 - ユーザー側の製品サイクルの短期化
 - 市場規模の拡大に伴う新興国メーカーの参入と積極的な投資
 - 多数ある日本企業間の競争激化

➡ 市場シェアの低下とコモディティ化の加速

日系企業のポジション変化（リチウムイオン電池材料の例）



(出典) 平成27年度 日本企業の国際競争ポジションに関する情報収集等より経済産業省作成

課題の解決に向けて

- ユーザー産業ニーズへの迅速な対応やそれらを取引した開発・提案を可能とする**イノベーションの質とスピードの高度化**（経験と勘からの脱却）
- 増大する研究開発費用や設備投資に対応できる企業体力の確保

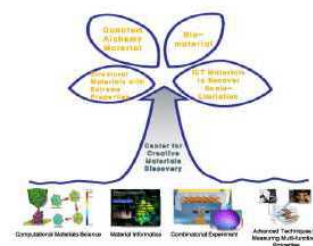
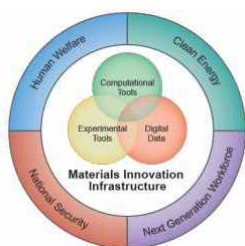
◆国内外の研究開発の動向と比較

- 米国では2011年、「Materials Genome Initiative (MGI) ~for Global Competitiveness」を発表。材料探索から商品化までの期間半減を目指している。
- 欧州もMARVEL、NOMADなどの計算科学、データベース構築、ビッグデータ分析ツールに関するプロジェクトを開始。中国や韓国も追随。

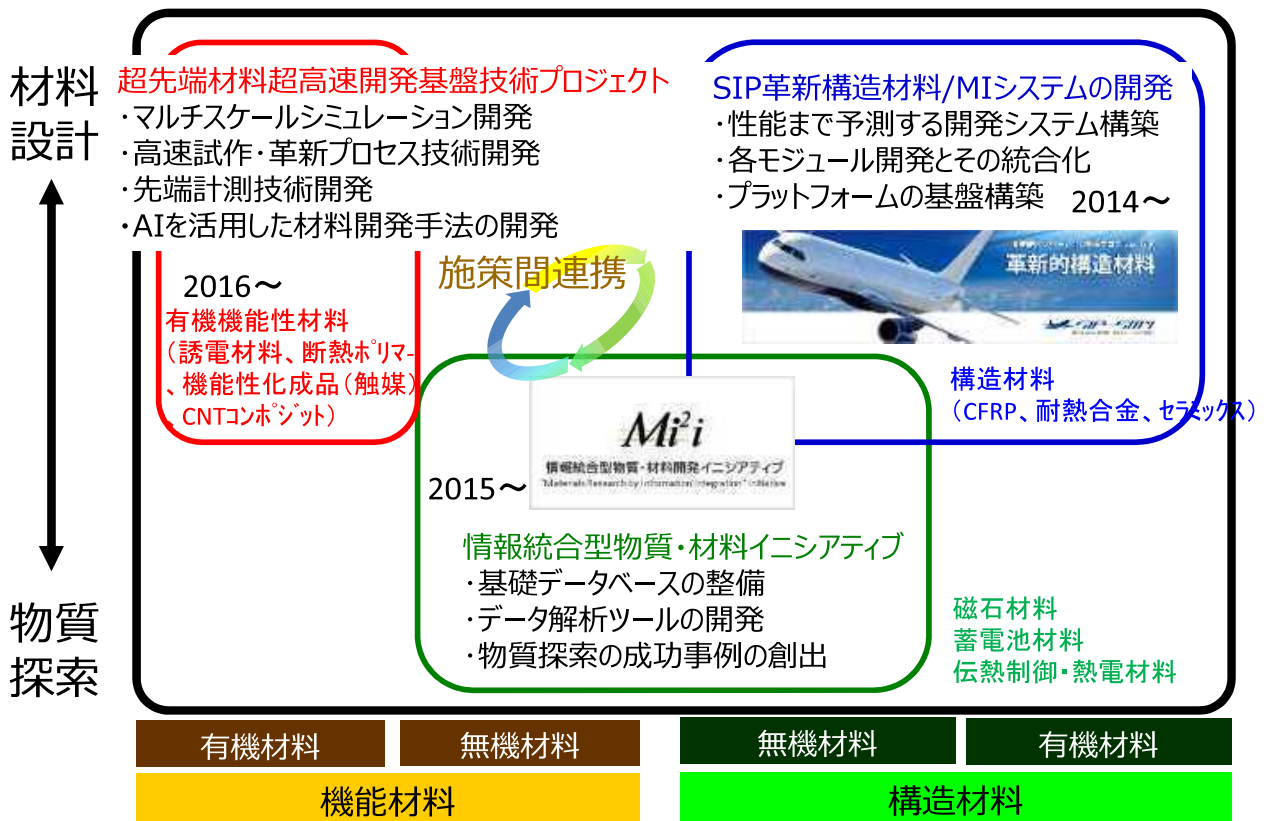
	特徴	具体的取り組み	代表的期間
米国	・データ科学の競争力を重視 ・早期に国としての取り組みを開始	・(2011) Materials Genome Initiative (\$1億/年) ・(2014) MGI Strategic Plan	NIST、NSF、DARPA、MIT、デューク大、ノースウェスタン大、アルゴン研究所
EU	・Computational Materials Engineeringに重点	・(2014) MARVEL ・(2015) Novel Materials Discovery (6億円/年)	ETHZ、EPFL、UNIBAS、UNIBE、UNIFR、UNIGE、USI、UZH、LMU München、UCD、フホルム大、ケンブリッジ大、MPCDF
中国	・新素材は戦略的振興産業との位置付け	・国家中長期科学技術発展計画 (2006-2020) ・China MGI (2016年度 約48億円)	中国科学院、中国工学院
韓国	・“フォロワーからリーダーへ”が目標	・(2013) 第3次素材・部品発展基本計画 ・(2015) Creative Materials Discovery Project	韓国科学技術院

出典：三井物産戦略研究所レポート情報を基にNEDOが改訂

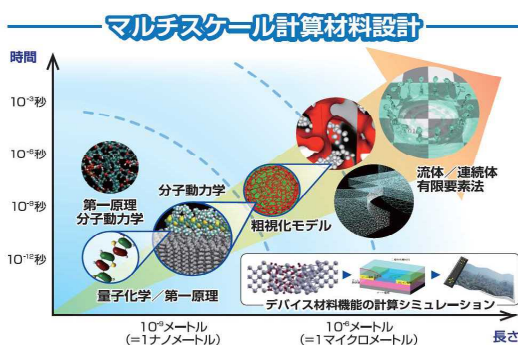
Materials Genome Initiative (米) The Novel Materials Discovery (EU) NOMAD Creative Materials Discovery Project (韓)



◆他事業との関係

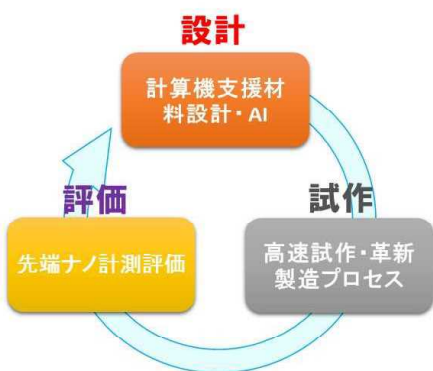


集中研究拠点で三位一体の研究開発



モデル材料（有機系機能性材料）を対象として

- ・計算科学（シミュレーション技術）のマルチスケール化による材料物性予測技術の確立（順問題解決）
- ・実サンプル試作の高速かつ自在な製造が可能なプロセス技術の確立
- ・従来観測出来なかった状態の機能や構造を精密に観測する先端計測技術の確立
- ・上記で創出したデータを活用してAIを学習させ、AIを用いて特定の材料物性の発現条件の予測技術の確立（逆問題解決）



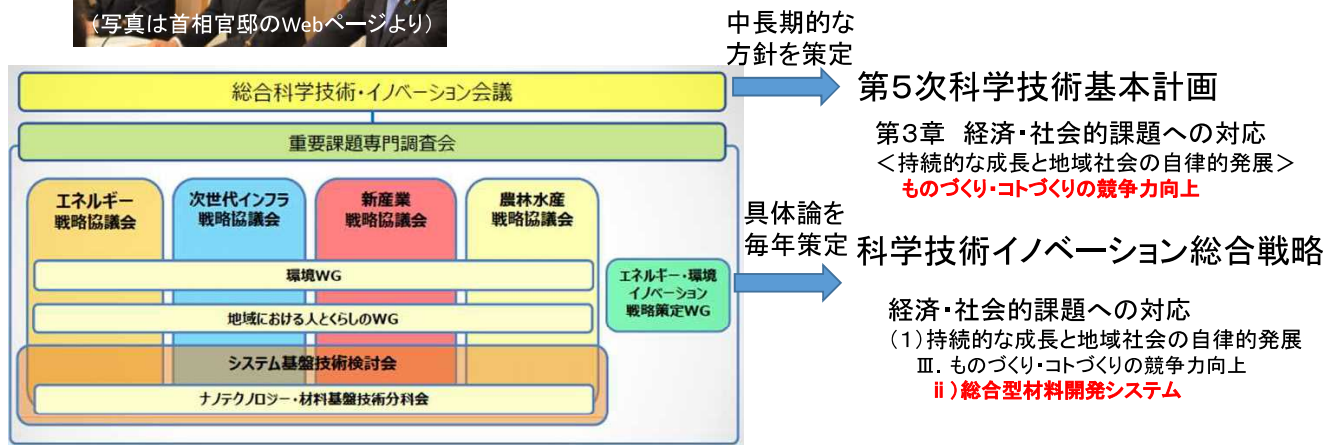
従来の延長線上にない材料探索技術の確立で
開発スピードの加速化
(試作回数・試作期間1/20を目標)

◆政策的位置付け



●総合科学技術・イノベーション会議

内閣総理大臣のリーダーシップの下、科学技術・イノベーション政策の推進のための司令塔として、わが国全体の科学技術を俯瞰し、総合的かつ基本的な政策の企画立案及び総合調整を行う。



システム	分類	施策番号	期間	施策名
統合型材料開発システム	マテリアルズイノベーション	材・文01 (継続)	H27~H31	情報統合型物質・材料開発の推進 (マテリアルズ・インフォマティクス推進)
		材・経02 (新規)	H28~H33	最先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト
		ち・経05 (新規)	H28~H32	CPSによるデータ駆動型社会の実現

「ものづくり・コトづくりの競争力向上」の文脈で重要施策として位置づけ

◆NEDOが関与する意義

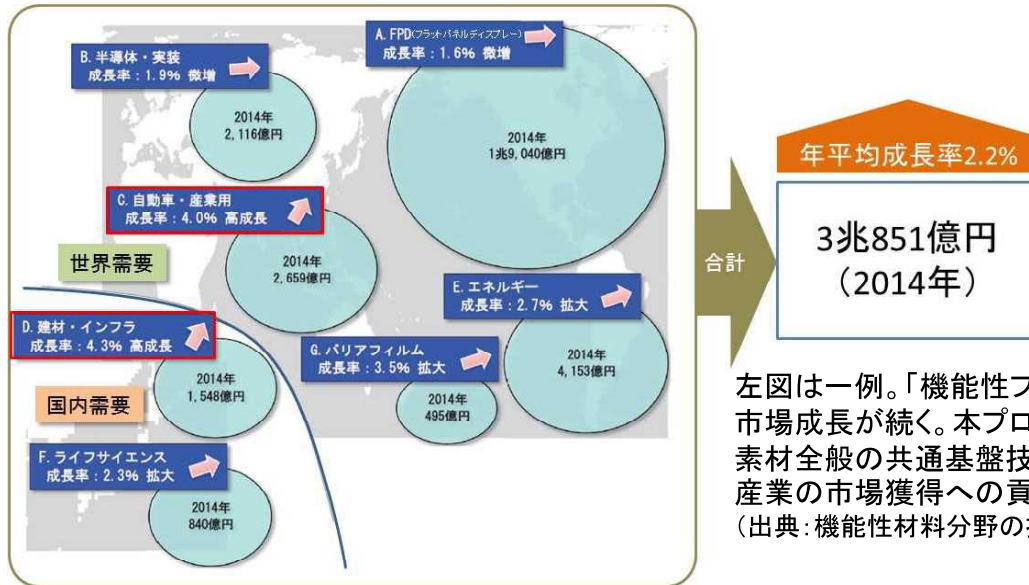
- 機能性材料産業全体の底上げのために、従来の「経験と勘」に基づく実験的手法に頼らず、更に個別の材料開発の対応ではなく、共通基盤性の高い新たな材料開発手法を開発する必要がある。
- 有機系機能性材料を対象として計算科学を中心に高速試作プロセス技術、先端計測技術と一体で開発することで材料開発の効率化・加速化を図る。更に「データを創出し、AIに学習させ、特定の材料物性の発現条件の予測技術の確立(逆問題解決) に対して挑戦。
- 一企業、一大学では出来ない複雑かつリスクの高い技術開発であるため、国研、大学、企業を一拠点に結集させて共通基盤技術の開発を行うため、NEDOの関与が必要不可欠である。



NEDOがもつこれまでの知識、実績を活かして推進すべき事業として「機能性材料分野の戦略」でも位置付けられている

◆実施の効果 (費用対効果)

- プロジェクト費用の総額 147億円 (6年間推定)
- 売上予測 2兆円市場獲得 (2030年)
- CO2削減効果 358.4万t/年 (2030年)



左図は一例。「機能性フィルム」では堅調な市場成長が続く。本プロジェクトでは機能性素材全般の共通基盤技術として日本素材産業の市場獲得への貢献を目指す (出典:機能性材料分野の技術戦略)

◆研究開発目標と根拠

- Materials Genome Initiative (2011~)



目標: This initiative offers a unique opportunity for the United States to discover, develop, manufacture, and deploy advanced materials **at least twice as fast as possible today**, at a fraction of the cost.

- SIP革新構造材料/MIシステムの開発 (2014~)



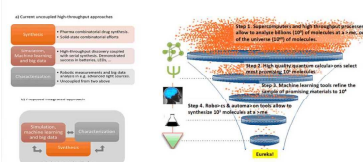
目標: 構造材料を対象としてシミュレーションや数学的アプローチを活用しながら「**構造材料開発の時間を一桁**(開発時間を90%短縮)短縮するのに役立つことを証明」

- 情報統合型物質・材料イニシアティブ (2015~)



目標: 産業界の物質・材料研究開発課題に対して、データ駆動型物質・材料科学を用いることにより、有効なソリューションを**短期間**で開発・提供する

- (参考) Mission Innovation Clean Energy Materials Innovation Challenge(2018~)



目標: The Materials Acceleration Platform, or MAP, aims to **reduce the materials development cycle from 10 to 20 years to 1 or 2 years**.

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

◆ 研究開発目標と根拠

アウトプット目標: 高機能材料・部材の研究開発支援を可能とする高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術を駆使して革新的な**材料開発基盤を構築**を目指す。これにより従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間1/20の短縮を目指す**。(難易度の高い目標を設定)

研究開発項目	中間目標(2018年度末)	最終目標(2021年度末)	根拠
①計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術	対象となる機能を構造、組成等から導き出せる 新規のマルチスケール計算シミュレータを構築する 。	構築した新規マルチスケール計算シミュレータを活用する事により、AI(機械学習やデータマイニング等)を活用した 材料探索手法を確立する 。またプロジェクト終了後の開発したマルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術の管理・運営体制の計画を示す。	有機系機能性材料に対してAIを活用した材料開発手法を確立するには、AIが学習するための「データ」が必要となるが、そのための有効なデータベースが存在しない。このため本プロジェクトでは新規なシミュレーション、高精度なプロセス手法・計測手法でのAI学習用の「データ創出」を指向している。プロジェクト後半でAIを活用した材料開発の本格的な実施を行う為に プロジェクト前半までに必要な基盤技術(シミュレーション開発や高速プロセス手法、新規計測手法)の確立に目途をつける中間目標設定 としている。
②高速試作・革新プロセス技術開発	研究開発項目①「計算支援次世代ナノ構造設計基盤技術」で開発するシミュレータの高精度化に貢献するために、シミュレーション結果(構造)に対応する サンプルを精密に作製可能なプロセス手法を確立する 。	中間目標までに開発したプロセス手法について高速化を図り、PJ全体目標である従来の材料開発と比較して 試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する 。	プロジェクト後半は前半で確立した基盤技術の高度化を行いながら、それぞれの技術でAI学習用データを創出し、AIを活用した材料開発手法を確立することにより 試作回数・開発期間1/20の短縮を目指す 。
③先端ナノ計測評価技術開発	研究開発項目②「高速試作・革新プロセス技術開発」で試作されるサンプル等を “非破壊”または“In situ”で評価を可能とする計測手法を確立する 。	中間目標までに開発した計測手法を汎用化するとともに、計測時間の高速化を図り、PJ全体目標である従来の材料開発と比較して 試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する 。	また本プロジェクト終了後に、開発した技術(特にシミュレータ、AI活用ノウハウ)を 継続的にブラッシュアップされる体制を構築することが重要である ことから、得られた成果・技術の管理・運営体制の計画をプロジェクト実施中から検討し、最終成果物として示す目標とした。

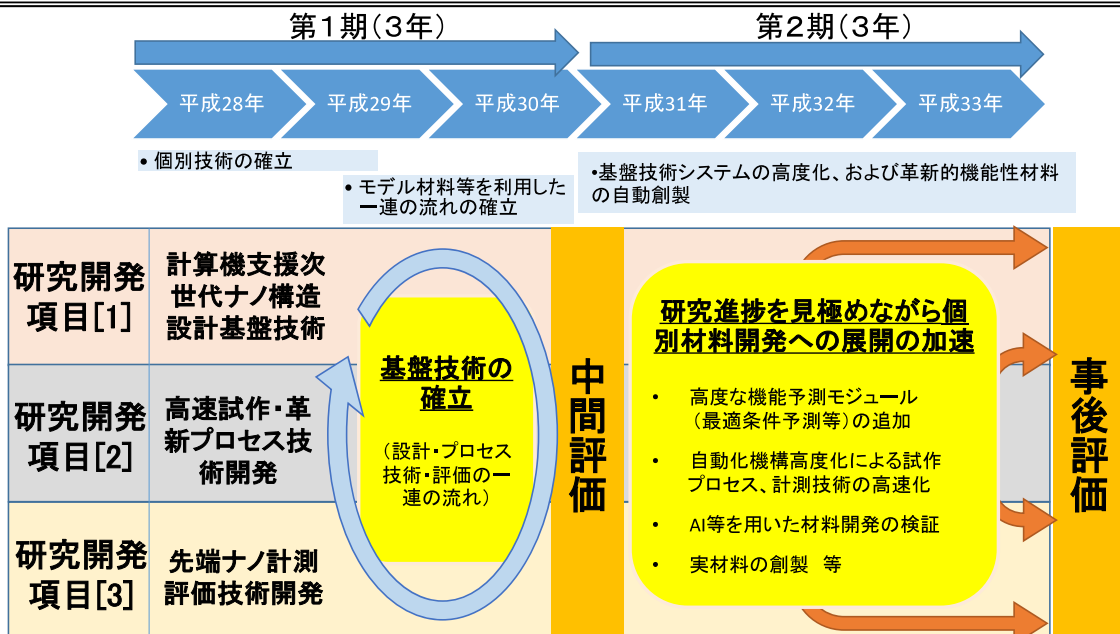
12

2. 研究開発マネジメント (2) 研究開発計画の妥当性

◆ 研究開発のスケジュール

(考え方)

- 最終出口となる有機系機能性材料のAIを活用した「材料開発手法の確立」は、**従来の材料開発とは全く異なる手法**
- AIを学習させるには「データ」が重要だが、世界中に有効な「データベース(セット)」が存在しない
- 従ってPJ前半までにシミュレーションの開発やプロセス、計測で「**データ創出**」を**可能とする環境を整備**
- PJ後半では前半技術の高度化に加え、AI等を用いた材料開発の検証を実施(材料開発手法の開発)

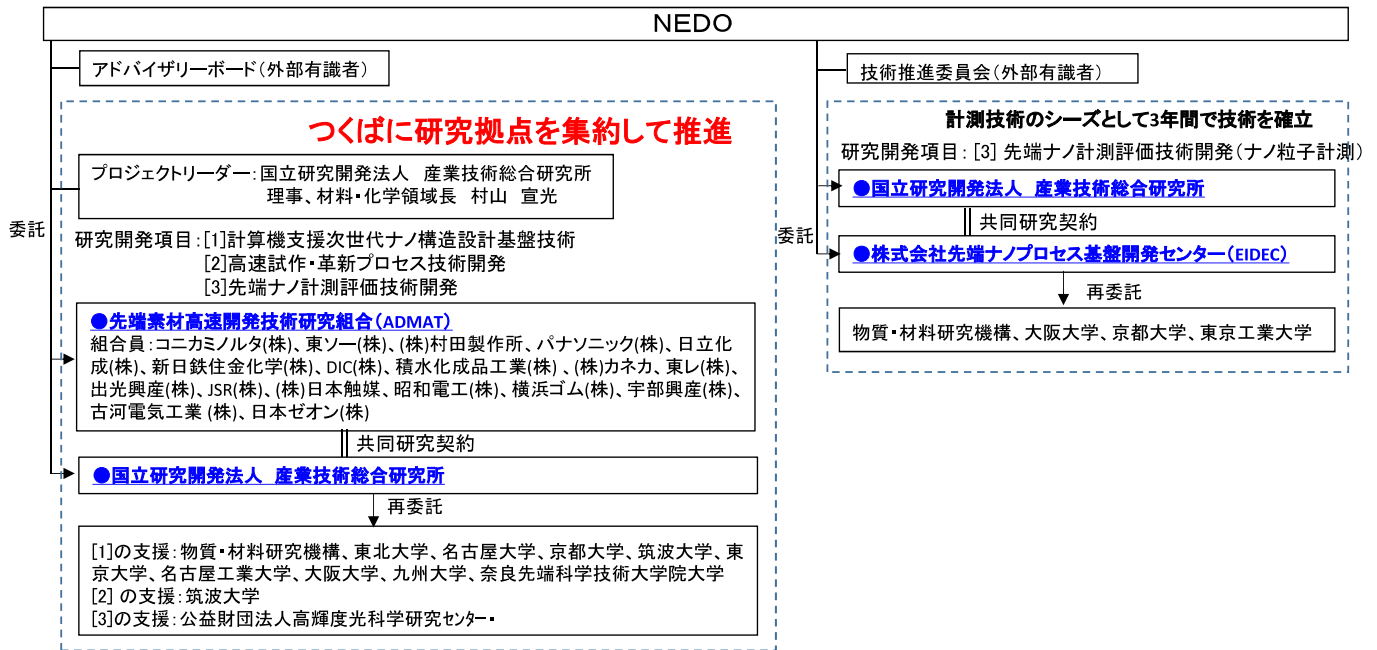


※研究開発項目内の各テーマの開発スケジュールは事業原簿参照

13

2. 研究開発マネジメント (3) 研究開発の実施体制の妥当性

◆ 研究開発の実施体制



実施2019年度から体制の柔軟な見直しとして、

- 2019年度から前半までに確立した基盤技術を活用した助成事業を導入し、「実材料の開発」の加速を図る予定
 - 2019年度から「データ創出」のみならず、公知データ等の「データの収集」に係る研究開発も追加予定
- いずれも概算要求中

14

2. 研究開発マネジメント (4) 研究開発の進捗管理の妥当性

◆ 研究開発の進捗管理

会議名	主なメンバー	目的・対象	頻度	主催者
アドバイザーボード	・外部有識者 ・PL、TL	・プロジェクト全体の方向性、目標設定の妥当性等を議論 ・全テーマ対象	年2回程度	NEDO
研究進捗報告会	・PL、TL ・AIST、ADMAT研究者	・全体での成果創出に向け、全関係者で事業の進捗を共有し、テーマ間連携を図る ・全テーマ	3か月に1回	実施者
運営企画会議	・PL、TL ・ADMAT事務局	・研究体運営の意思決定 ・進捗報告・確認	1か月に1回	実施者
ワーキンググループ	・TL ・AIST研究者 ・ADMAT技術委員	・技術ディスカッション ・計算、プロセス、計測の単位でWGを開催	1か月に1回	実施者
知財運営委員会	知財運営委員会規程メンバー	・特許出願、対外発表に関する報告、調整、アドバイス	随時	実施者

**各レイヤーで研究進捗確認会議を設置
プロジェクトに直接関与していない外部有識者の意見も取り込み客観的な視点も踏まえたプロジェクトマネジメントを実施**

15

◆ 動向・情勢の把握と対応

基盤技術の適用範囲拡大のための追加公募の実施

情勢	対応
<p>PJ開始当初(2016年度)から基盤技術の適用範囲拡大を目指すため、モデル材料の拡大を検討していたところ、NEDOの技術戦略研究センターの「ナノカーボン戦略」において、CNTやグラフェン等の応用製品開発が、従来の試行錯誤的な開発手法では開発スピードに限界があり、新手法であるマテリアルインフォマティクスを活用すること推奨されていたと共に、有識者ヒアリングを通じて、ナノカーボン応用製品開発が本PJで開発中の拡張OCTAなどと相性が良いことが判明。</p>	<p>2017年度に本PJのモデル材料として「ナノカーボン材料」を追加して公募を行い、古河電気工業株式会社と日本ゼオン株式会社を実施者として採択し、先端素材高速開発技術研究組合の構成員に追加して研究を開始した。(基盤技術の適用可能性拡大に努めた)</p>



産みであるリアルデータ

経済産業省のConnected Industries施策への取組み

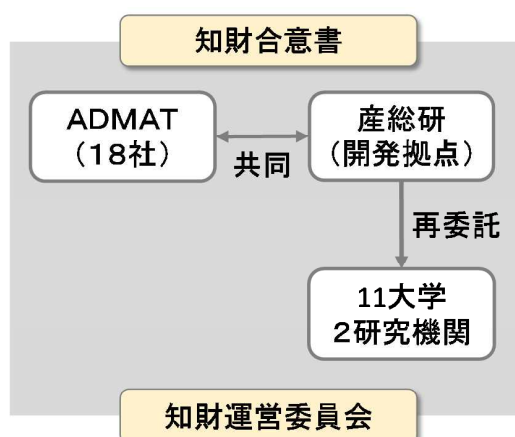
情勢	対応
<p>経済産業省が推進しているConnected Industries施策に対応して素材分野検討WGが大臣に答申した素材開発強化に向けた対応策として「AI活用型素材開発のための標準データフォーマットの整備」が今後、国で対応すべき課題として提言された。(2018年5月)</p>	<p>有機機能性材料の「データ創出」を指向している本PJにおいて、公知の「データ収集」を新機軸として加え、2019年度より本PJの両輪として実施することを経済産業省と確認。実施内容を具体化する為に、2018年度6月より「今後の材料開発に必要な共通データプラットフォームに関する調査」を開始した。</p>



◆ 知的財産権等に関する戦略

- 「NEDOプロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」に基づき、参画機関にて「知財の取扱いに関する合意書」を策定。
- 合意書では、知財運営委員会や知財の帰属、秘密の保持等、プロジェクトの出口戦略において、重要となる知財ルールを整備

- 事業活用を見据えて、計算科学関連の知財を開発拠点に集約する。
- 特許、プログラムに加えて、新たな情報財(データ・AI等)の取扱いを明確にする。
- 透明性の高い知財運営を行う。



【知財合意書】

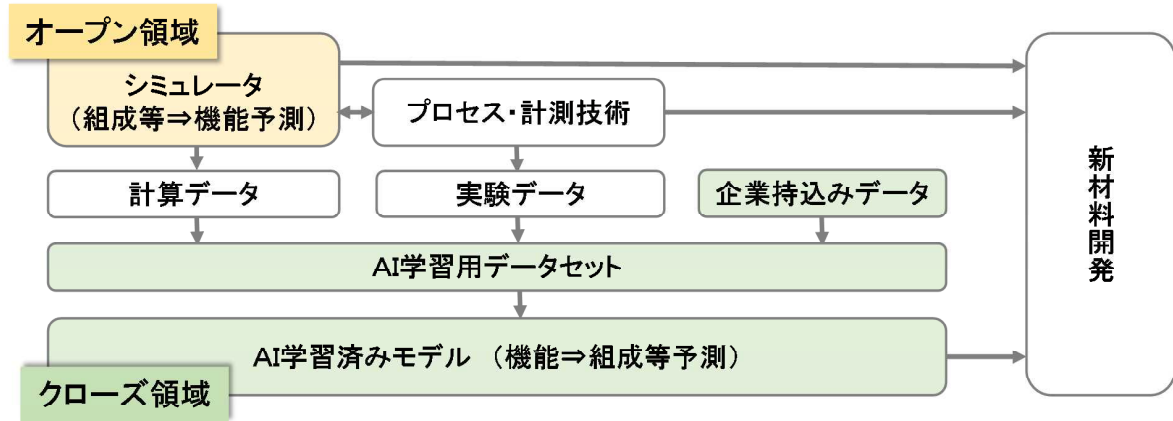
- 知財集約: 開発拠点にサブライセンス権(再実施権)付きの通常実施権を付与し、知財の一元管理によりスムーズな事業活用を図る。
- 現行制度で知財権が不明確なデータ等に関して、利用権の帰属など取扱いを規定している。
- 共有知財は互いに自由・無償実施を原則とするなど、プロジェクト内においてBIPを含めた積極的な相互活用を図る。

【知財運営委員会】

- 代表者(5~7名)で構成する委員会を定期的(週1回)に開催すると共に、成果届等の審議結果はプロジェクト全参加者に周知している。

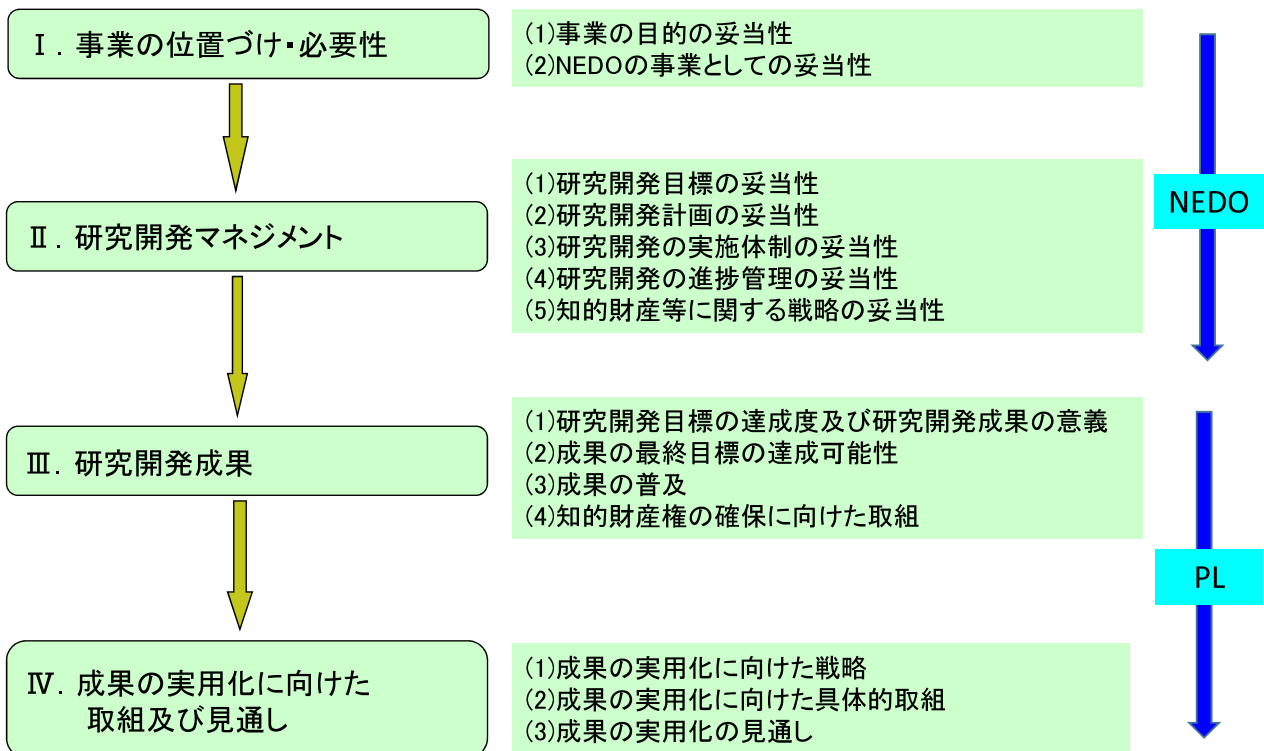
◆ 知的財産権等に関する戦略

- 【オープン&クローズ戦略】
- シミュレータは、開発技術の普及と新市場形成に向けたオープン領域と捉え、プログラムを積極的に公開して広範な利活用を図る。
 - AI関連技術(データセット、学習ノウハウ、学習済みモデル)は、市場競争力を確保のためのクローズ領域と捉え、独占的利活用を見据えた知財管理を図る。



➤ 独立行政法人 工業所有権情報・研修館の知財プロデューサ派遣事業を活用して、つくば集中研拠点の知財マネジメントを支援

発表内容



「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」 (中間評価)

(平成28年度～平成33年度 6年間)

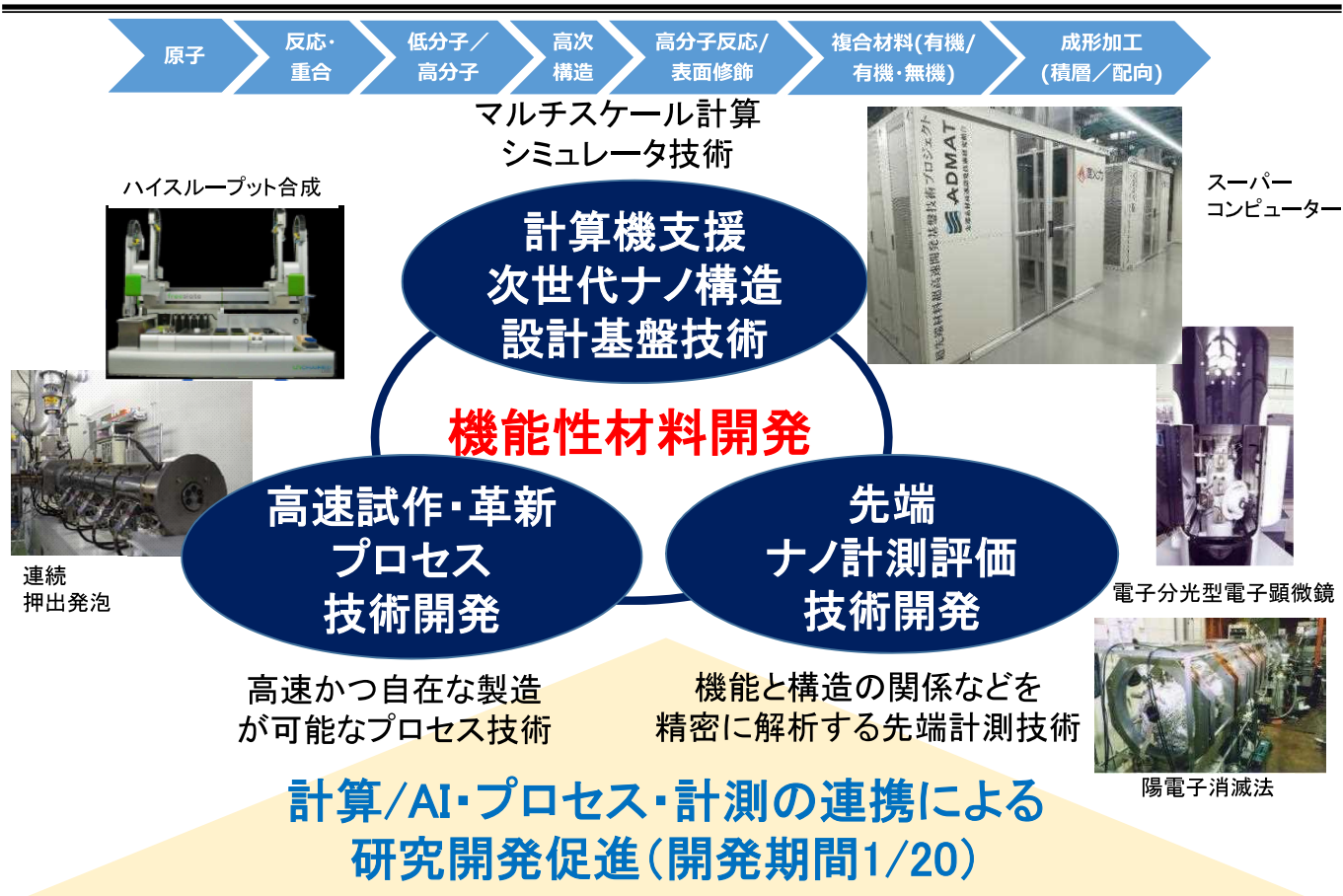
5. プロジェクトの概要説明資料 (公開)

5.2 「研究開発成果」及び「成果の実用化に向けた取り組み及び見通し」について

平成30年9月11日

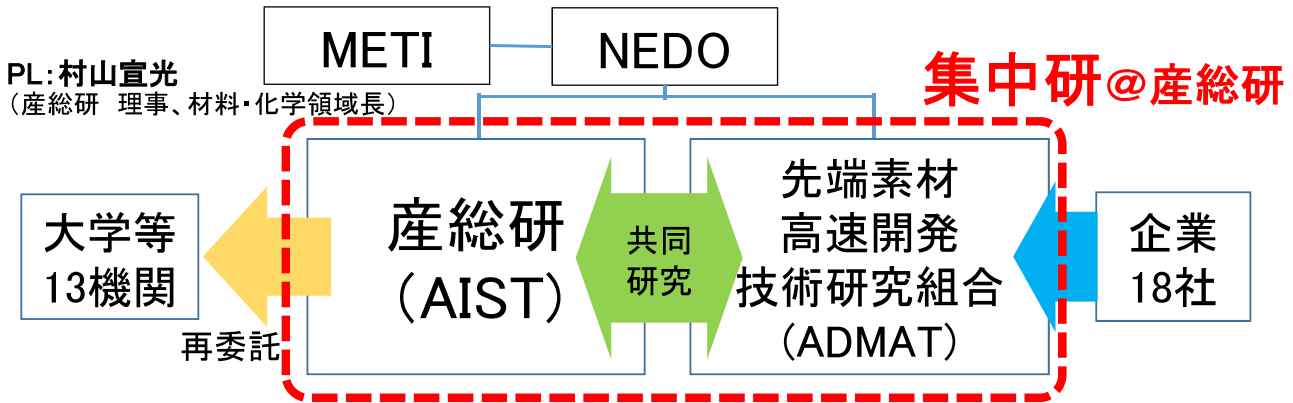
1

研究開発計画: 計算・プロセス・計測の連携



2

研究開発の実施体制

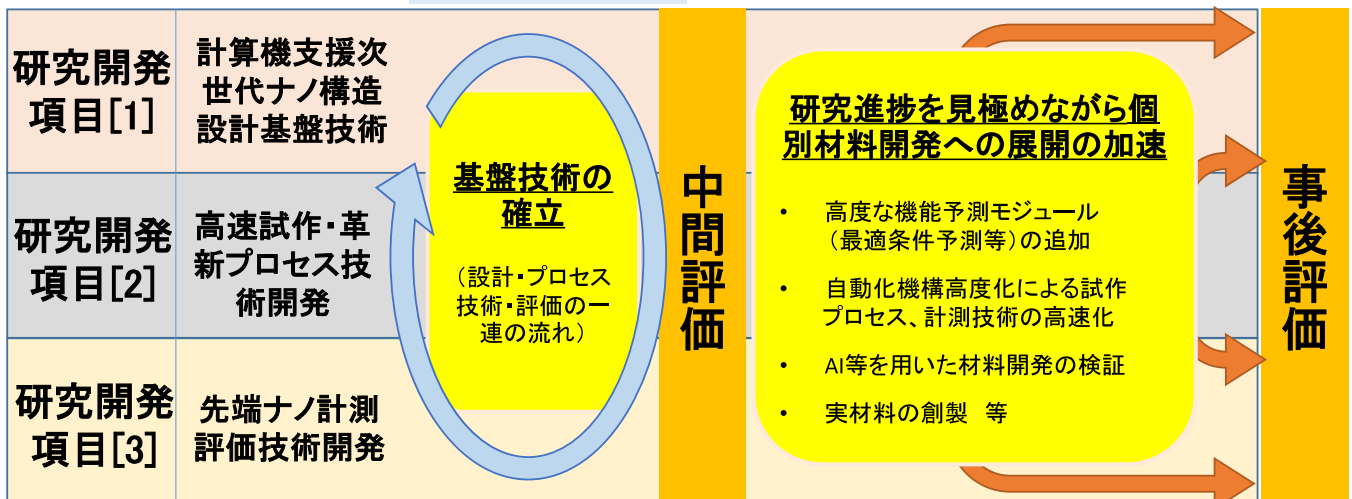
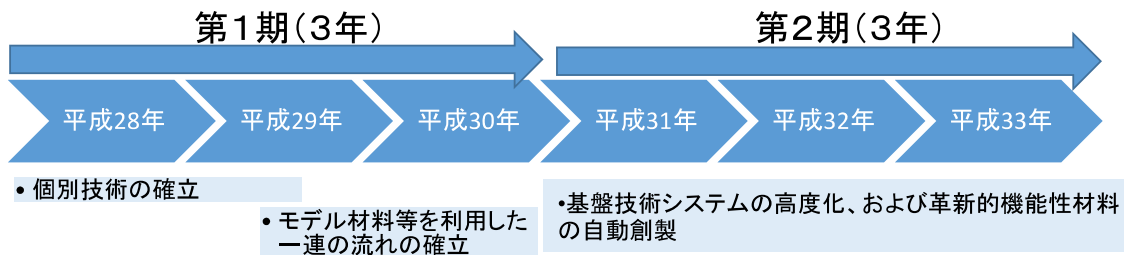


先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)

- 設立年月日 : 平成28年7月12日
- 理事長 : 腰塚國博(コニカミノルタ(株) 取締役)
- 組合員(18社) : 出光興産(株)/ 宇部興産(株)/ (株)カネカ/ コニカミノルタ(株)/ JSR(株) / 昭和電工(株)/ 新日鉄住金化学(株)/ 積水化成品工業(株)/ DIC(株)/ 東ソー(株)/ 東レ(株)/ (株)日本触媒/ パナソニック(株)/ 日立化成(株)/ (株)村田製作所/ 横浜ゴム(株)/ 日本ゼオン(株)/ 古河電気工業(株)

3

年次計画



4

◆研究開発項目毎の中間目標と達成状況

研究開発項目	中間目標	成果	達成度
[1] 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術 (計算科学)	対象となる機能を構造、組成等から導き出せる新規なマルチスケール計算シミュレータを構築する	<ul style="list-style-type: none"> ・9種の(機能別)順方向予測マルチスケールシミュレータの公開 ・AI環境の整備 ・触媒インフォマティクスによる逆方向予測実現に向けて先駆的な成果 	◎ (計画を前倒してAI活用を実施)
[2] 高速試作・革新プロセス技術開発 (プロセス)	研究開発項目[1]で開発するシミュレータの高精度化に貢献するために、シミュレーション結果に対応するサンプルを精密に作製可能なプロセス手法を確立する	<ul style="list-style-type: none"> ・粒径制御したナノ粒子の短時間合成に成功 ・ポリマーナノコンポジット/微細発泡体の連続製造試作装置の開発 ・反応機構と触媒活性種の解明 	○
[3] 先端ナノ計測評価技術開発 (先端計測)	研究開発項目[1]で開発するシミュレーションの高精度化に必要な計測手法として、研究開発項目[2]で試作されるサンプル等を“非破壊”又は“in situ”で評価を可能とする計測手法を確立する	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ粒子の個々の相変化の測定に成功 ・難計測材料(ポリイミド)の空孔評価に成功 ・微細発泡体構造のマルチスケール解析を実現 	○

◎ 大きく上回って達成、○達成、△達成見込み(中間)／一部達成(事後)、×未達

◆成果の最終目標の達成可能性

研究開発項目	現状	最終目標 (平成33年度末)	達成見通し
[1] 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術	<ul style="list-style-type: none"> ・9種の(機能別)順方向予測シミュレータをH30末より順次公開。公開後の管理・運用体制を計画 ・シミュレータのインターフェース機能強化とハイスループット実験との連携による材料データ駆動AI予測システムの構築を計画 ・深層学習などを用いた記述子・特徴量探索を必要としない材料AI技術の開拓を計画 	構築した新規マルチスケール計算シミュレータを活用することにより、AIを活用した材料探索手法を確立する。これにより従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。また、プロジェクト終了後の開発したマルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術の管理・運用体制の計画を示す。	○ (シミュレータ開発、運用体制検討は順調。AI活用も前倒しに着手)
[2] 高速試作・革新プロセス技術開発	<ul style="list-style-type: none"> ・各種プロセス手法における基盤技術を確立 ・ハイスループットシステムの導入による、プロセス高速化を計画 	中間目標までに開発したプロセス手法について高速化を図り、従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。	○ (ハイスループットシステムの導入・運用により加速)
[3] 先端ナノ計測評価技術開発	<ul style="list-style-type: none"> ・各種計測手法における基盤技術を確立 ・ハイスループット計測システムの導入による、さらなる高度化と高速化を計画 ・汎用化を目指し、モデル素材だけでなく実用材料に対応するための測定系のカスタマイズを計画 	中間目標までに開発した計測手法を汎用化するとともに、計測時間の高速化等の手法で従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。	○ (ハイスループットシステムの導入・運用により加速)

◆プロジェクトとしての達成状況と成果の意義

<達成状況>

- [1] 計算科学、[2] プロセス及び[3] 先端計測の各研究開発項目は、当初の目標を達成
- 計算・プロセス・計測の連携により、機能性材料(半導体、誘電材料、高性能高分子、機能性化成品(触媒)、ナノカーボン)の開発指針を構築

<成果の意義>

- プロジェクト後半における、基盤技術とAIの活用による個別材料開発への寄与
- プロジェクト終了後の国内素材産業の国際競争力の大幅な強化に寄与

7

◆研究開発項目と事業内容一覧

[1] 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術

- ① キャリア輸送マルチスケール計算シミュレータ
- ② 外場応答材料と複雑組織材料の大規模計算シミュレータ
- ③ 機能性ナノ高分子材料のマルチスケール計算プロセスシミュレータ
- ④ マルチスケール反応流体シミュレータ
- ⑤ 深層学習・機械学習(AI)、離散幾何解析

[2] 高速試作・革新プロセス技術開発

- ⑥ 自在なヘテロ接合素材の開発(ナノ粒子合成)
- ⑦ ポリマー系コンポジット材料プロセス(ブレンド・発泡)
- ⑧ 自在合成を可能にするフローリアクター(ハイスループット)
- ⑨ ナノカーボン材料プロセス

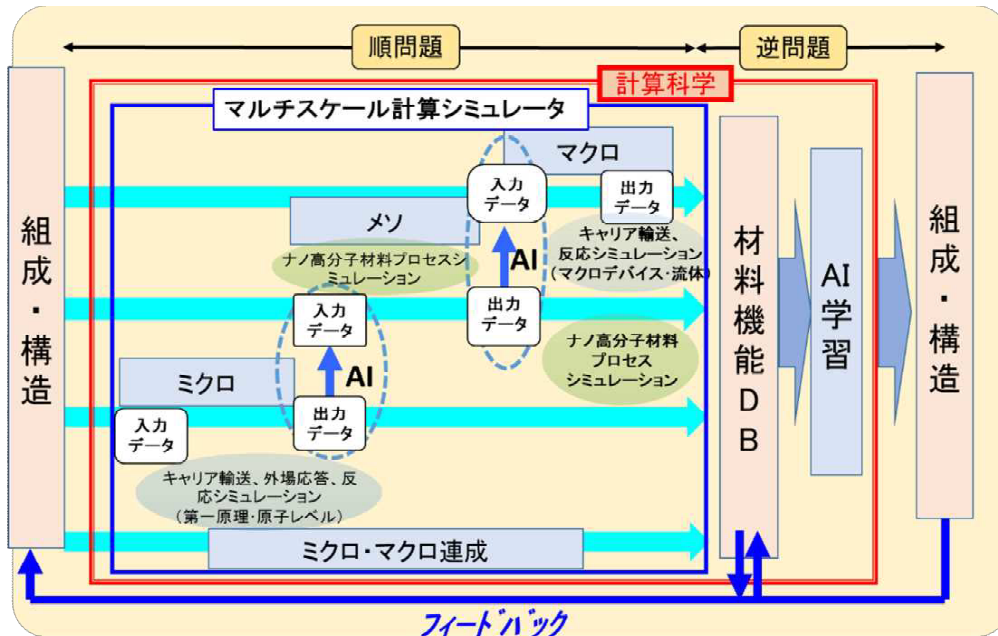
[3] 先端ナノ計測評価技術開発

- ⑩ 表面・界面構造計測/ナノ領域多物性評価(和周波/ナノプローブ分光)
- ⑪ 有機(無機)コンポジット材料3次元構造解析(TEM、陽電子消滅、X線CT)
- ⑫ フロープロセスの高感度 In Situ 計測(XAFS、NMR)
- ⑬ ナノカーボン材料の構造・特性評価

8

◆各個別テーマの成果と意義: [1] 計算科学

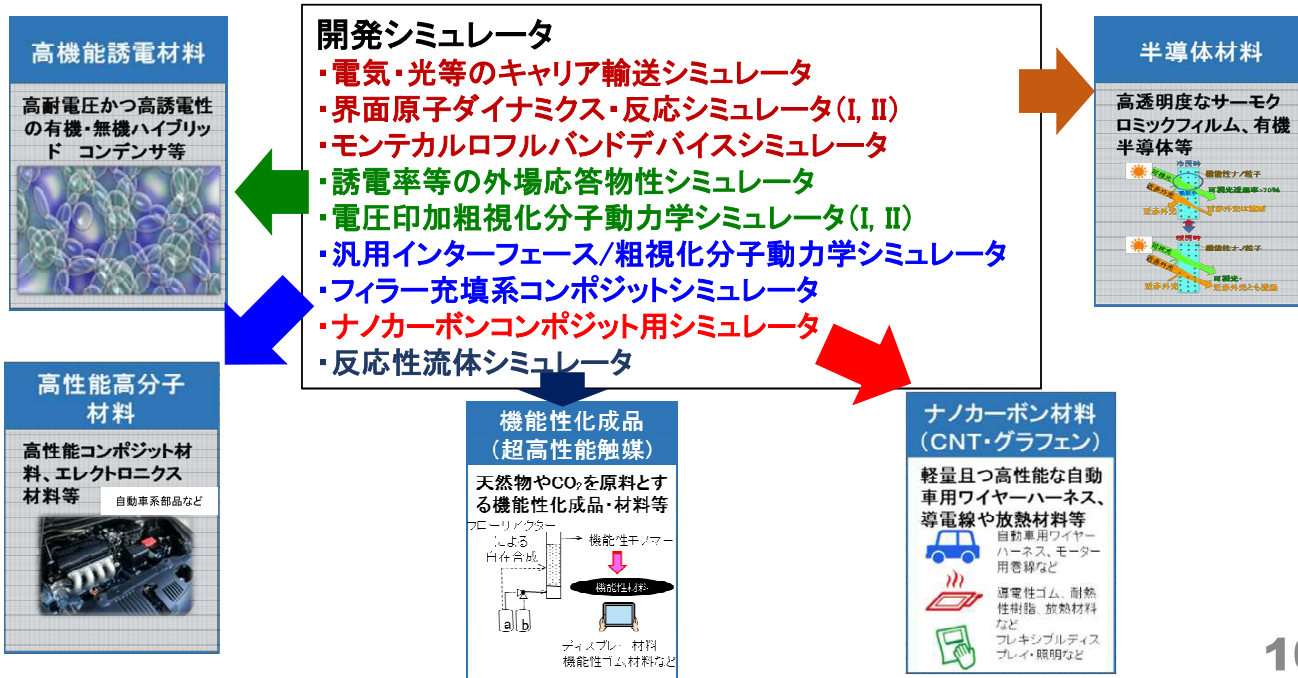
- 9種の(機能別)順方向予測シミュレータを開発
- 触媒インフォマティクスによる逆方向予測実現に向けて先駆的な結果を得た
- モデル素材に関する準備研究を実施(後半期に本格研究予定)
- AIを用いた逆方向予測の準備研究を実施(後半期に本格研究予定)



◆各個別テーマの成果と意義: [1] 計算科学

<順方向予測に向けた成果>

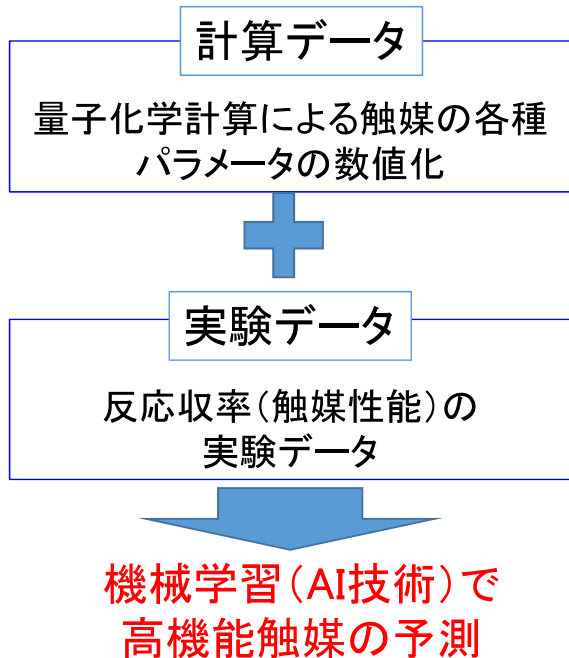
- 9種の(機能別)順方向予測シミュレータを開発し、機能性材料の設計に向けたAIによるデータ解析に向けた準備が整った



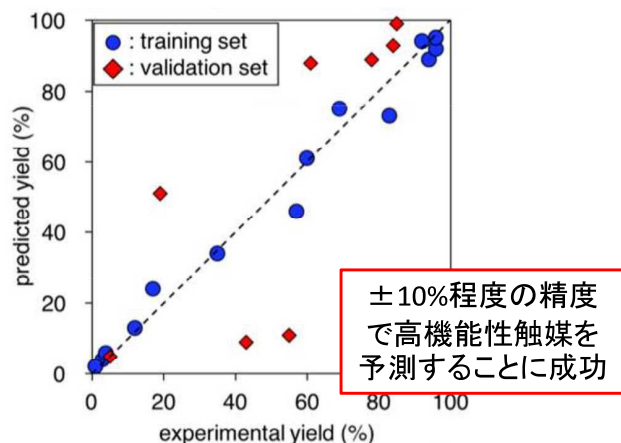
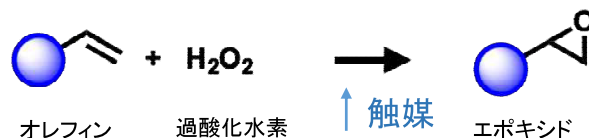
◆各個別テーマの成果と意義:[1] 計算科学

<逆方向予測に向けたアプローチ>

- ・ 逆問題解決の先駆的な成果を得た

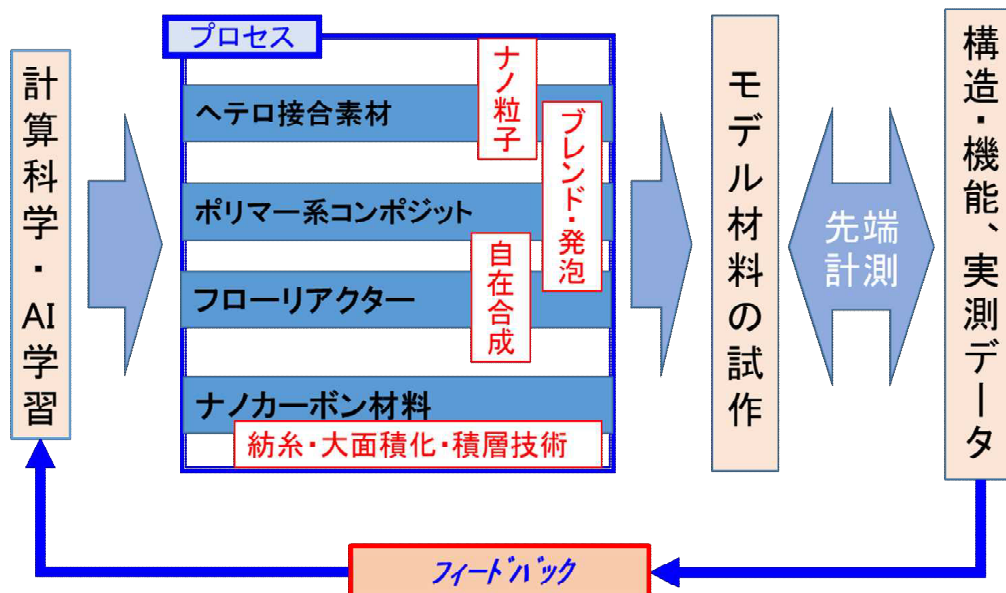


ターゲット反応



◆各個別テーマの成果と意義:[2] プロセス

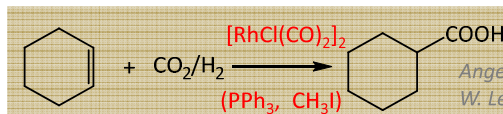
- ・ 粒径制御したナノ粒子の短時間合成と易解砕性ナノ粒子凝集構造制御に成功
- ・ 制御性に優れた試作装置によりポリマーナノコンポジット/微細発泡体を連続製造
- ・ 反応機構と触媒活性種の解明に成功し、フロー合成反応の設計に着手
- ・ 大面積グラフェンにおける結晶品質向上法の開発に成功



◆各個別テーマの成果と意義: [2] プロセス

J. of CO₂ Util. 25 (2018) 1-5

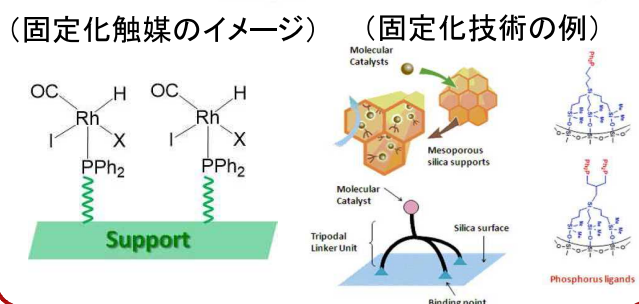
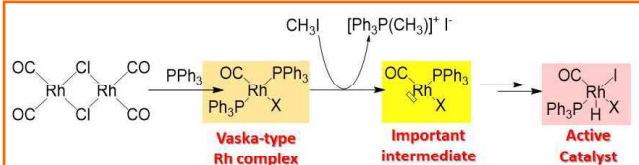
CO₂を原料とするシクロヘキサンカルボン酸合成反応(モデル反応)の**反応機構と触媒活性種を計算、実験の両面から明らかにし、固定化触媒及びフロー合成反応の設計指針を得た。**



Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52
W. Leitner

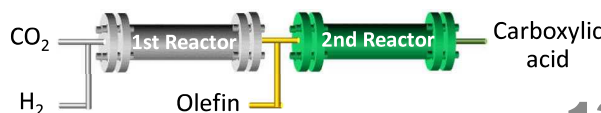
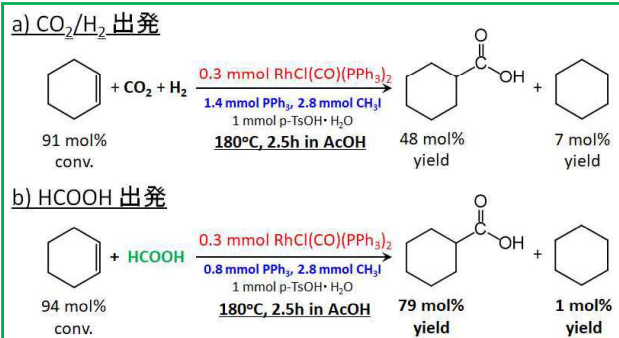
フロー合成用固定化触媒の設計について

プロモーター(PPh₃, CH₃I)の役割を解明し
固定化する有望触媒活性種を明らかにした



フロー合成反応の設計について

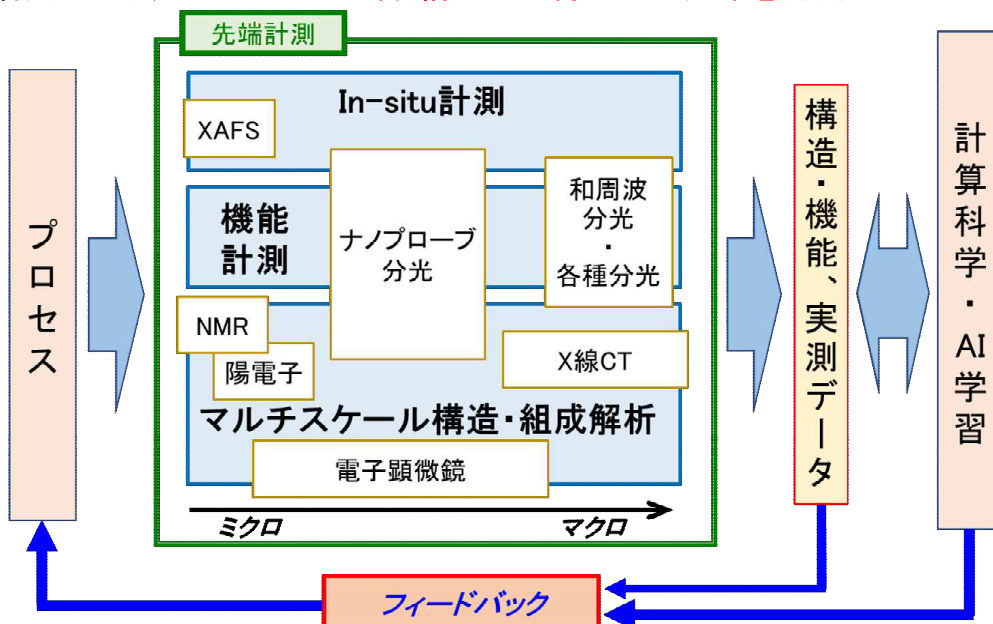
反応を分割することでシクロヘキサンの副生を抑制し、反応効率を向上させることが可能



13

◆各個別テーマの成果と意義: [3] 先端計測

- 温度制御ナノプローブ分光装置を開発し、**ナノ粒子の個々の相変化の測定に成功**
- 陽電子消滅法により、**難計測材料(ポリイミド)の空孔評価に成功**
- X線CTとTEMにより、**微細発泡体構造のマルチスケール解析を実現**
- フローXAFS測定系を開発し、**触媒性能の異なるPt系触媒の構造の違いを発見**
- ガス吸着法により、**CNTバンドル(群)構造の空隙サイズ分布を計測**



14

◆各個別テーマの成果と意義: [3] 先端計測

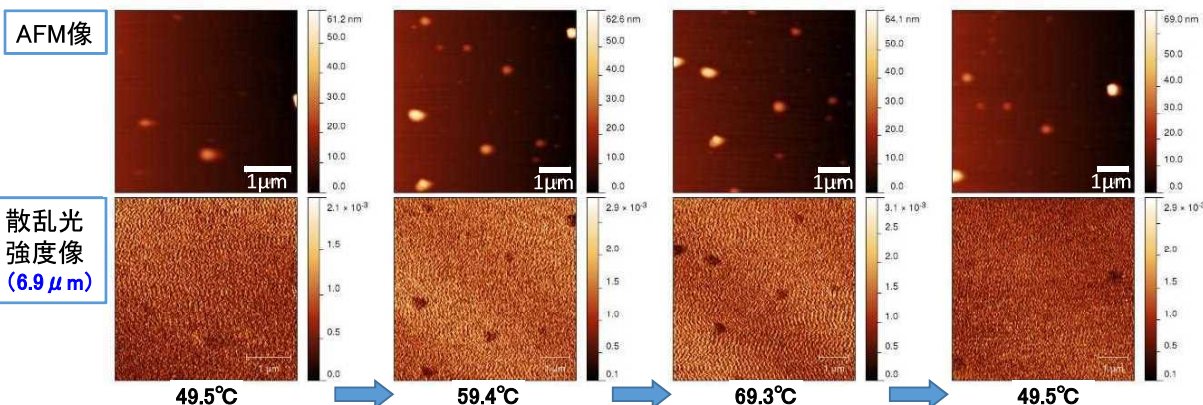
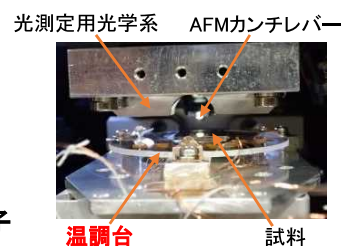
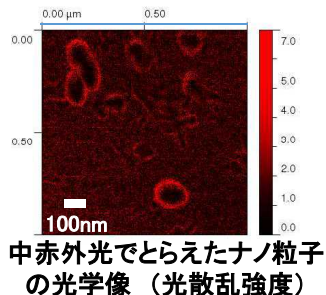
”その場”観察(温度依存性)用ナノプローブ分光法装置の開発と
ナノ粒子材料の光学機能性の評価に成功(事業原簿:2-⑩)

赤外光を用いたナノ光学評価

→ 回折限界を超えた分解能で吸収係数
などに関連した情報を取得

ナノ粒子(VO_2)の相変化計測
個々の粒子の相変化を観察

機能発現中の
”その場”評価

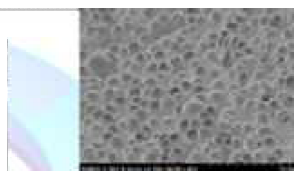


金属相(高温相)への相変化により散乱光強度が変化することを観察

◆各個別テーマの成果と意義: [1], [2], [3]の連携

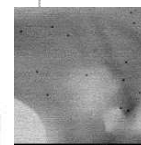
- 計算による発泡メカニズムのシミュレーション:核材と樹脂の親和性を考慮した発泡機構シミュレーション
- バッチ発泡での試作:核材が発泡に及ぼす影響の検証
- X線CT(~サブμm)と電顕(nm)によるマルチスケール構造評価:核材と発泡構造の可視化

プロセス



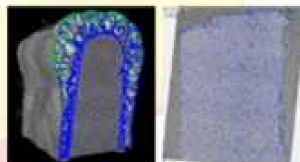
バッチ発泡による
発泡構造微細化
の検討
(事業内容⑦)

計測



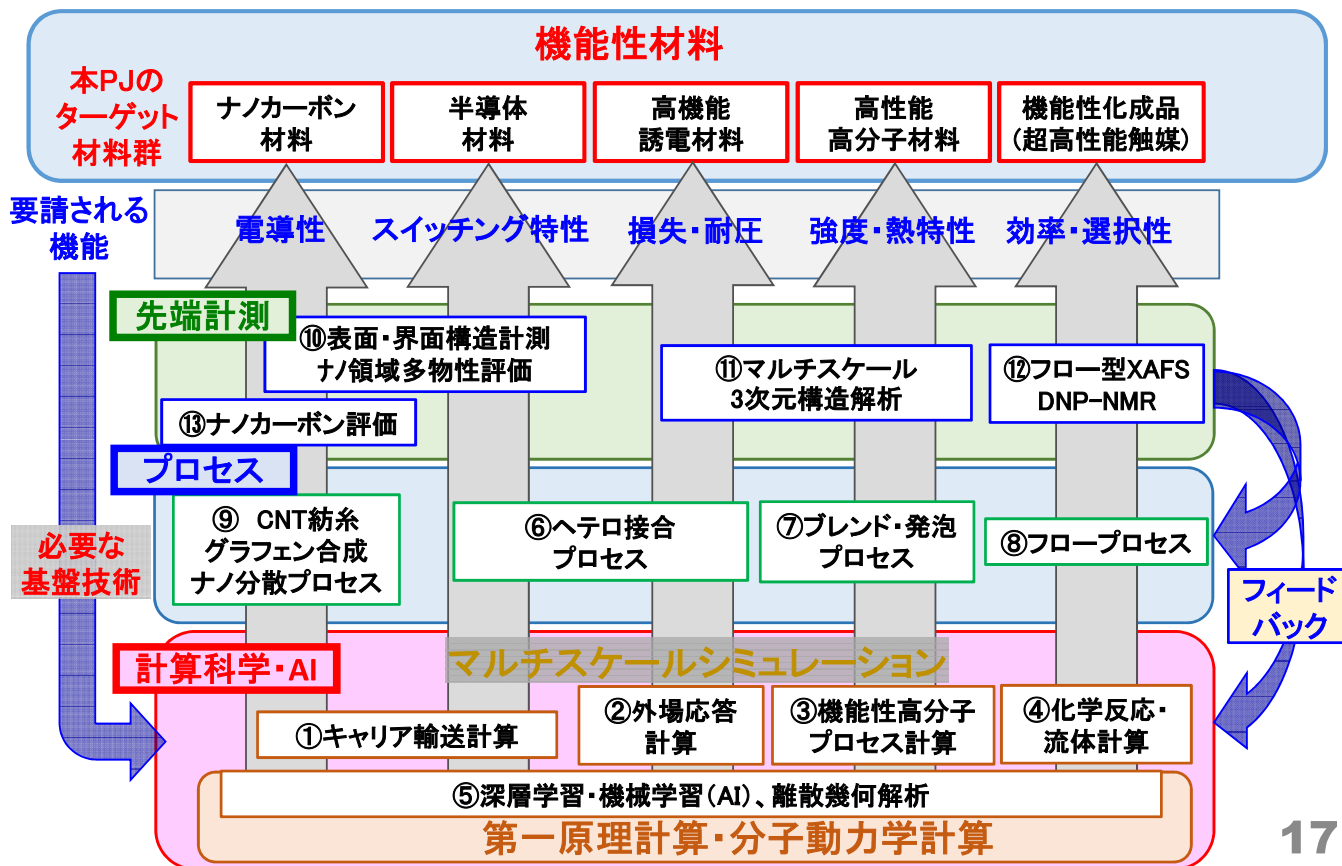
X線CTによる3次元発泡
構造の評価とTEMによる
微細構造の評価
(事業内容⑩)

計算



核材(フィラー)分散ポリマーの
発泡シミュレーション
(事業内容③)

◆ 基盤技術の活用による機能性材料の開発



◆ 超超PJ成果で開発加速が想定される製品群

半導体材料

高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等

高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等

高性能高分子材料

高性能コンジット材料、エレクトロニクス材料等 自動車系部品など

機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等

ディスプレイ材料
機能性ゴム材料など

ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等

- 自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など
- 導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など
- フレキシブルディスプレイ・照明など

3. 研究開発成果 (1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

◆ 参画企業および産総研の個別材料開発課題と事業内容との関連

研究開発テーマ名		企業名	担当事業内容番号
(1) 半導体材料	1 高機能光学材料の研究開発	コニカミノルタ	①、⑥
	2 有機半導体材料の研究開発	東ソー	①、⑩
(2) 高機能誘電材料	3 高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発	新日鉄住金化学	②、⑪
	4 電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発	パナソニック	②、③
	5 有機・無機ハイブリッド誘電材料の研究開発	村田製作所	②
(3) 高性能高分子材料	6 複合系の反応設計の研究開発	出光興産	①、⑩
	7 樹脂/無機フィラー複合材料の研究開発	カネカ	③、⑥
	8 機能性合成ゴム材料の研究開発	JSR	③、⑪
	9 フレキシブル透明フィルム（熱硬化性樹脂）の研究開発	昭和電工	⑤、⑧
	10 ナノ発泡断熱材料の研究開発	積水化成成品工業	③、⑦、⑪
	11 スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発	DIC	⑦、⑪
	12 革新分離材料の研究開発	東レ	③
13 実験データベースを用いた逆問題解決 ～異方導電性フィルムデータベース活用～	日立化成	⑤	
(4) 機能性化成品 (超高性能触媒)	14 多次元高度構造制御金属ナノ触媒の研究開発	宇部興産	④、⑧、⑫
	15 CO ₂ を利用する有用化学品合成技術の研究開発	日本触媒	④、⑧、⑫
	16 天然資源からゴム材料の研究開発	横浜ゴム	④、⑧、⑫
(5) ナノカーボン材料	17 第三成分添加CNT高機能複合材料の開発	日本ゼオン	③、⑨、⑬
	18 CNT線材の開発	古河電気工業	①、⑨、⑬
	19 大面積グラフェン高速合成および積層技術の基盤開発	産総研	①、⑨、⑬

黄色枠は、非公開セッションでの説明テーマ

19

3. 研究開発成果 (3) 成果の普及

◆ 成果の普及

	平成28年度	平成29年度	平成30年度	計
論文	1	17	5*	23
研究発表	18	52	28*	98
(内、招待講演)	7	16	11*	34
展示会への出展	1	1	2	4

* 平成30年7月末現在

20

◆ 成果の普及

プレス他掲載			
月日	掲載紙	表題	備考
2016/9/12	日刊産業新聞	産総研、16社と共同研究契約：新素材、開発期間を短縮	プレスリリース
2016/9/12	化学工業日報	機能性材料を短期に開発：産総研と材料16社 計算科学等活用	プレスリリース
2016/12/7	化学工業日報	材料インフォマティクス オールジャパンで攻勢：材料向けにAI最適化、計算	村山宣光PLへの取材記事
2017/6/2	日刊工業新聞	産学連携モデル 三者三様：理研・産総研・物産機構	
2017/10/2	日経	素材開発 データ・AI駆使：マテリアルズ・インフォマティクス	取材記事
2018/2/1	化学工業日報	触媒反応 AIで収率予測：産総研 開発期間を大幅短縮	プレスリリース
2018/2/9	日刊工業新聞	AIで収率予測	プレスリリース
展示会出展、シンポジウム他			
月日	場所	内容	備考
2017/12/8	産総研(つくば)	DNP-NMRワークショップ	
2018/2/14-16	東京ビックサイト	ナノテク展：出展及びワークショップ	
2018/5/31-6/1	産総研(つくば)	第1回DNP-NMRシンポジウム	
2018/10/23-26	タウンホール船堀	CSJ化学フェスタ：出展	
2019/1/30-2/1	東京ビックサイト	ナノテク展：出展	

人材育成：産総研集中研においてプロジェクト関係のセミナーを計22回開催

◆ 知的財産権の確保に向けた取組

- NEDO「知財マネジメント基本方針」に準じて、開発拠点への知財集約及びデータ等の取扱いを明記した知財合意書を全参加者で締結し、知財運営委員会の設置による透明性の高い知財管理を図っている。
- 主要な9種のシミュレータ(11プログラム)に対する権利帰属及びプロジェクト期間中・終了後の利活用方針を策定した。
- 経産省「データマネジメント運用ガイドライン」に準じて、プロジェクト取得データ及び企業持込みデータに対する管理・利活用方針を取りまとめた。

	平成28年度	平成29年度	平成30年度	計
プログラム	0	1	11*	12
特許出願	0	2	3**	5

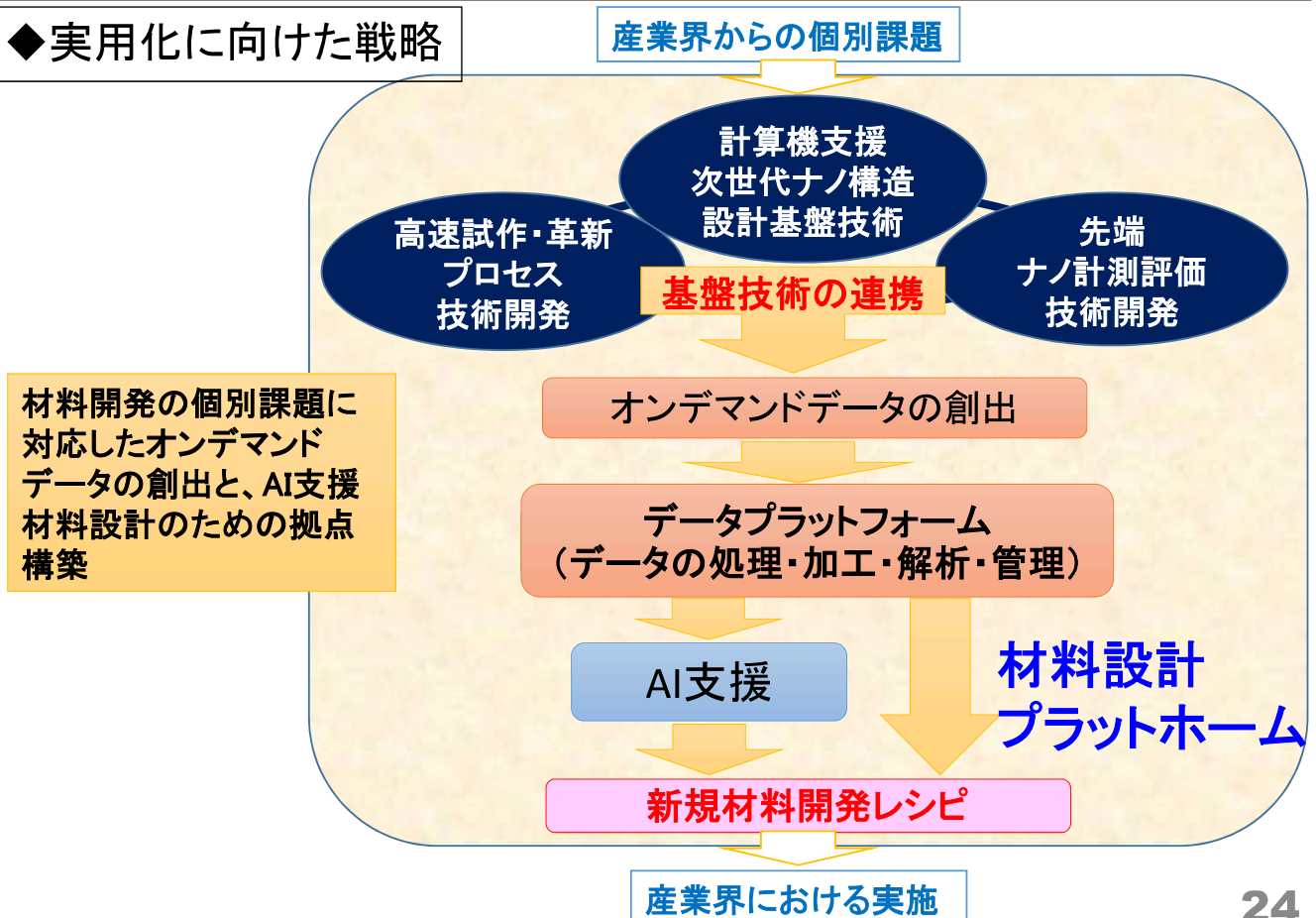
* 平成31年3月31日見込み

** 平成30年6月現在

◆本プロジェクトにおける「実用化」の考え方

本事業における実用化とは、本プロジェクトで開発したマルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術が適切な管理の下、プロジェクト終了後も持続的にブラッシュアップ出来る運営体制を構築し、国内素材企業の材料開発支援に資することを言う

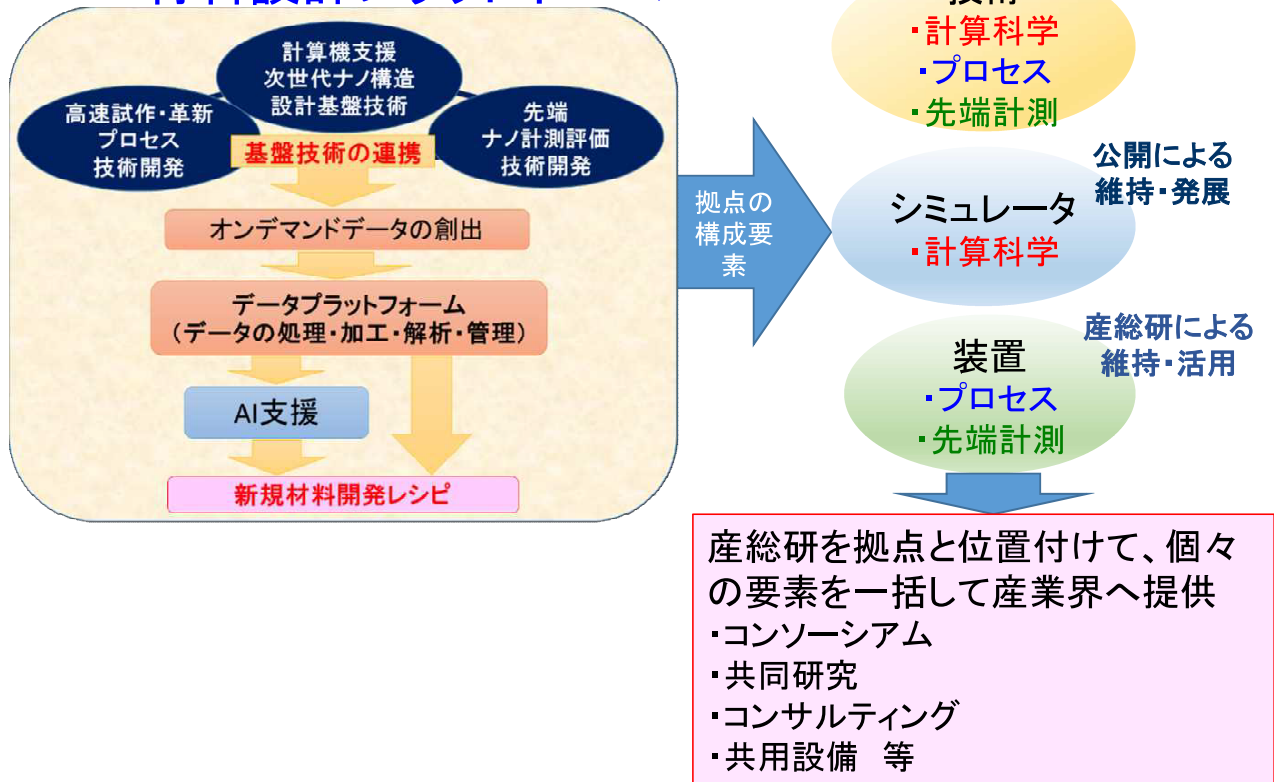
◆実用化に向けた戦略



4. 成果の実用化に向けての取組及び見通し (2) 成果の実用化の見通し

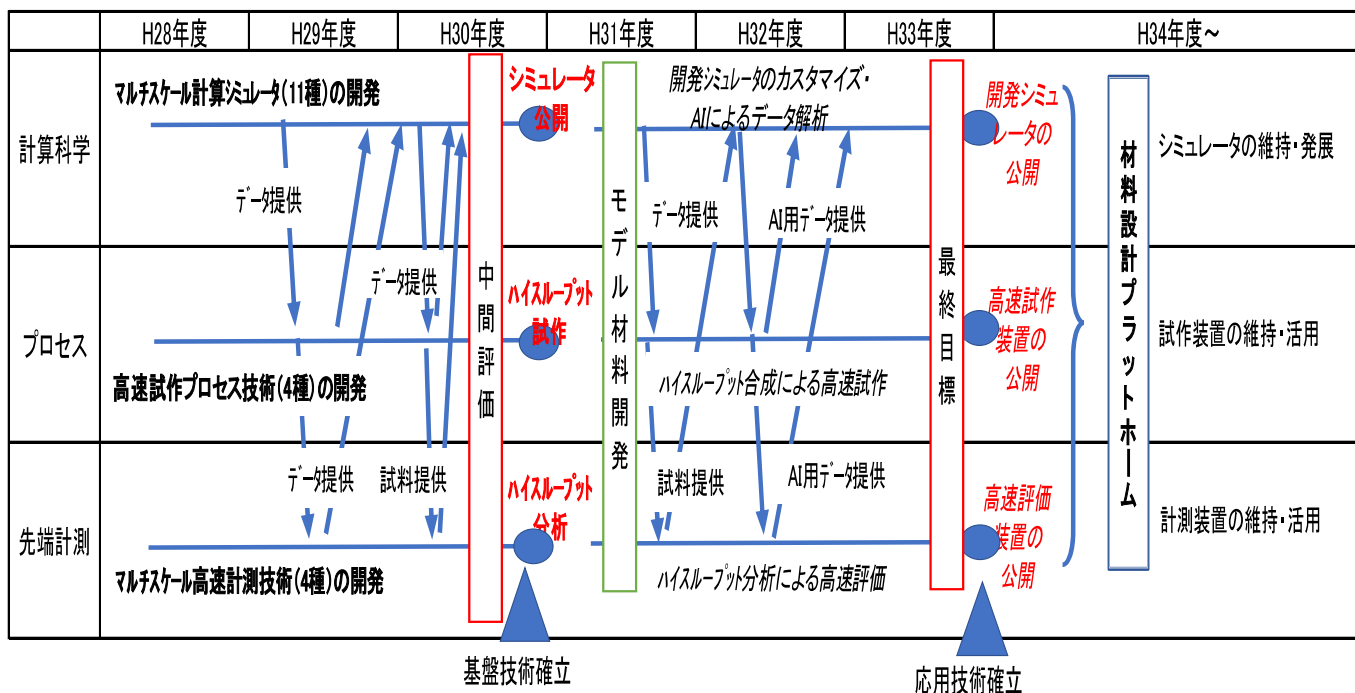
◆ 成果の実用化の見通し

材料設計プラットフォーム



4. 成果の実用化に向けての取組及び見通し (3) 成果の実用化に向けた具体的取組

◆ 実用化に向けた具体的取組



1. 企業担当研究課題(一部)
 - 高機能光学材料の研究開発 (コニカミノルタ)
 - 天然資源からゴム材料の研究開発 (横浜ゴム)
 - ナノ発泡断熱材料の研究開発 (積水化成品工業)
 - 高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発 (新日鉄住金化学)
 - 実験データベースを用いた逆問題解決
～異方導電性フィルムデータベース活用～ (日立化成)

2. 基盤技術研究開発項目
 - 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術 (産総研)
 - 高速試作・革新プロセス技術開発 (産総研)
 - 先端ナノ計測評価技術開発 (産総研)