

平成28年度新たに取り組むべき課題・領域の動向(俯瞰)について

平成27年2月26日

JST研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット

ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰図（2015年版）

豊かな持続性社会

地球規模の課題解決

国際的な産業競争力

生活の質の向上

システム化 量産化 高機能 コスト 信頼性 環境負荷 安全 省エネ リサイクル

エネルギー

太陽電池
人工光合成
バイオマス
燃料電池
熱電変換
二次電池・キャパシタ
エネルギーキャリア

パワーデバイス
エネルギーハーベスト

環境
環境浄化膜
排ガス浄化触媒
環境モニター（デバイス）

健康・医療

生体適合性材料
再生医療材料
人工組織・人工臓器
診断・治療デバイス
DDS（薬物送達システム）
分子イメージング

社会インフラ （水・電力・交通・通信）

超電導線材
超軽量・高強度材料
断熱材料・耐熱材料
水処理膜
モータ・高保磁力磁石
センサネットワーク

情報通信・エレクトロニクス

極限CMOS
記録媒体
光インターコネクト
スマート・インターフェース
（センサ、ロボット、ウェアラブル）
固体照明・ディスプレイ
量子コンピュータ・通信

新興・融合 領域

スピントロニクス プラズモニクス シリコンフォトニクス トポロジカル絶縁体 有機エレクトロニクス

フォトニック結晶 メタマテリアル 量子ドット MEMS マイクロ・ナノフルイディクス 分子ロボティクス

ナノ粒子・クラスター ナノチューブ/CNT ナノワイヤ・ファイバ グラフェン/ナノシート/二次元薄膜 多孔性配位高分子（PCP）/金属有機構造体（MOF） 超分子

基盤領域

高温超伝導材料 強相関電子材料 金属ガラス 複合材料 イオン液体 機能性ゲル

金属材料 磁性材料 半導体材料 酸化物材料 分子・有機材料 生物材料

設計・制御

分子技術 ナノ界面・ナノ空間制御 マイクロ・ナノトライボロジー ナノ熱制御 バイオ・人工物界面 バイオミメティクス マテリアルズ・インフォマティクス

元素戦略

製造・加工・合成

フォトリソグラフィ ナノインプリント ビーム加工 インクジェット

自己組織化
結晶成長
薄膜、コーティング
付加製造（積層造形）

計測・解析・評価

電子顕微鏡
走査型プローブ顕微鏡
X線・放射光計測
中性子線計測

理論・計算

第一原理計算
分子動力学法
分子軌道法

モンテカルロ法
フェーズ・フィールド法
有限要素法

共通支援策
【システム化促進策】

教育
人材育成
研究インフラ
異分野融合
国際連携
知的財産
標準化
EHS・ELSI
産学連携
府省連携

ナノサイエンス

物質科学、光科学、生命科学、情報科学、数理科学

主要な研究開発領域（2015年版）

俯瞰区分	研究開発領域
環境・エネルギー	太陽電池
	人工光合成
	燃料電池
	熱電変換
	蓄電デバイス
	パワー半導体デバイス
	グリーン触媒
健康・医療	生体材料（バイオマテリアル）
	再生医療材料
	薬物送達システム（DDS）
	計測・診断デバイス
	バイオイメージング
社会インフラ	分子イメージング
	構造材料（金属）
	構造材料（複合材料）
	分離機能材料
	放射性物質除染、減容化
	高温超伝導（線材）
	センシングデバイス・システム

俯瞰区分	研究開発領域	
共通基盤／科学技術	設計、制御	界面制御
		空間・空隙構造制御
		バイオミメティクス
		分子技術
		分子ロボティクス
	加工、プロセス	元素戦略・希少元素代替技術
		マテリアルズ・インフォマティクス
		トップダウン型プロセス（半導体超微細加工）
	計測	ボトムアップ型プロセス（自己組織化等）
		走査プローブ顕微鏡
電子顕微鏡		
理論、計算	放射光・X線	
	その他の主要な計測技術	
EHS, ELSI	物質・材料シミュレーション	
	リスク評価・リスク管理・リスクコミュニケーションと社会受容	

俯瞰区分	研究開発領域
ICT・エレクトロニクス	超低消費電力ナノエレクトロニクスデバイス
	スピントロニクス
	二次元原子薄膜
	フォトニクス
	有機エレクトロニクス
	MEMS
	異種機能三次元集積チップ

グローバル、国内の社会的期待や研究開発動向等を踏まえ、3章の研究開発領域として41領域を選定

報告書は4月発刊予定

マテリアルズ・インフォマティクス (データ駆動型ハイスループット材料探索・設計)

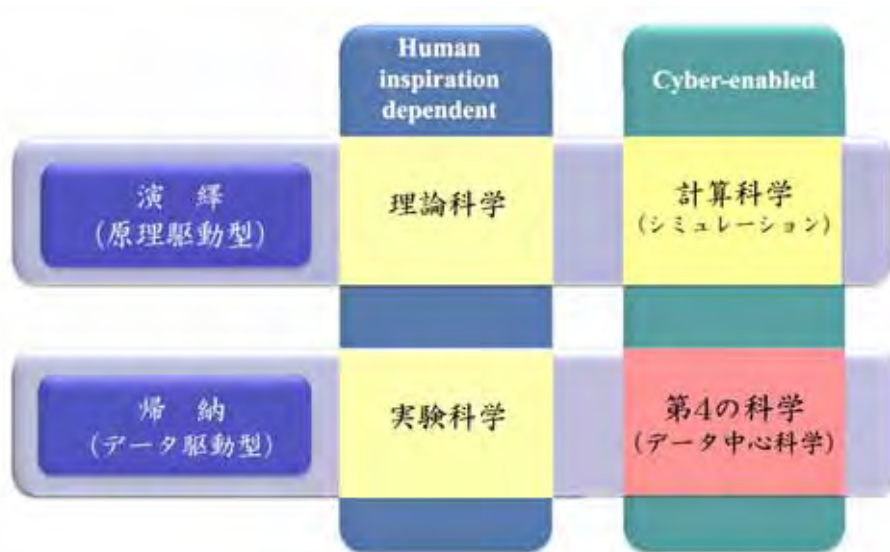
マテリアルズ・インフォマティクス（データ駆動型材料研究）とは

1. 扱う物質・材料の種類（元素の種類や組合せ）、パラメータなどが複雑化。
2. 科学技術のグローバル化によって、研究開発のスピードが加速。
3. 計算機（計算科学、データ科学）の短期間での大幅な進展・コストダウン。
4. 有機、無機、金属などの分野でなく、機能に基づく材料開発への要求が増大。

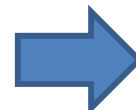


研究者が演繹、帰納の両手法の組合せ（図参照）により、ハイスループットに物質・材料科学の諸問題を解明し、材料開発を行うスキームを構築

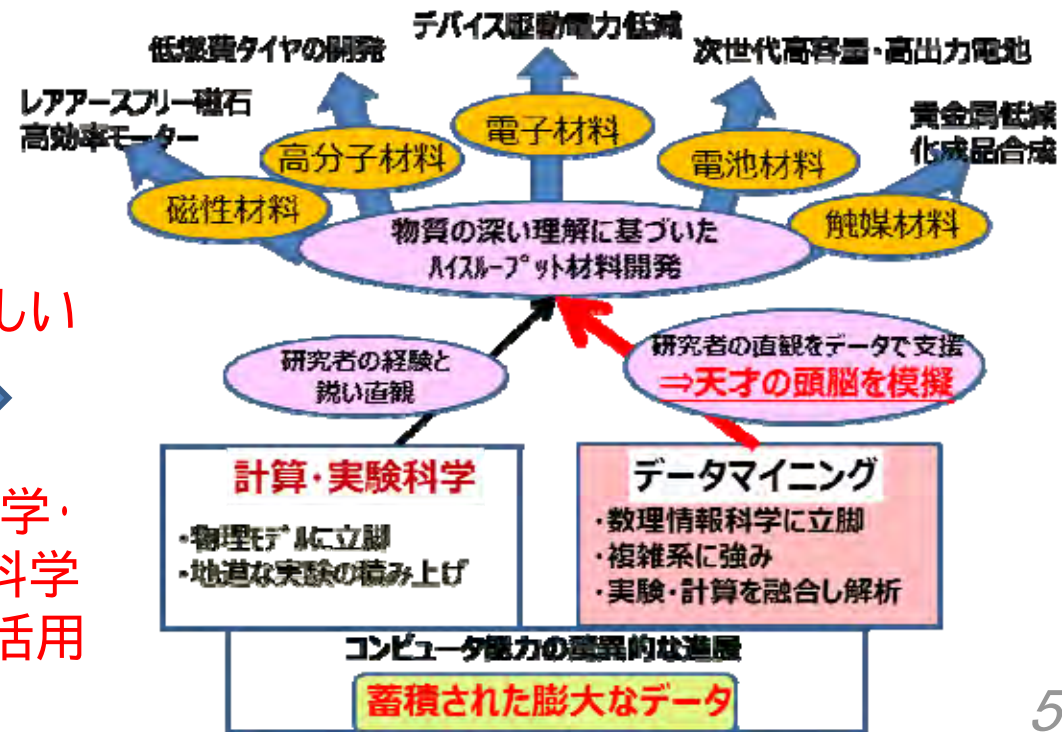
1. 発見：特定の機能をもつ物質・材料の高効率な探索（予測）を促進
2. 理解：組成 / 構造 / 組織および物性 / 特性の相関について、無限の因子の組合せから特性・物性発現の指導原理（キーファクター）を見出す
3. 設計：最終的には、無機・金属、有機・高分子など分野の縦割りでない、機能に基づく材料設計



進展著しい



計算科学・
データ科学
のフル活用



マテリアルズ・インフォマティクス（データ駆動型材料研究）とは

当面のキーワードは「ハイスループット」な新規機能物質の発見。
計算やデータ(情報)処理による予測・設計はもとより、合成や計測・評価においても重要。
将来的には、構造と物性(及びプロセス)の間にある法則の理解への活用が想定される。

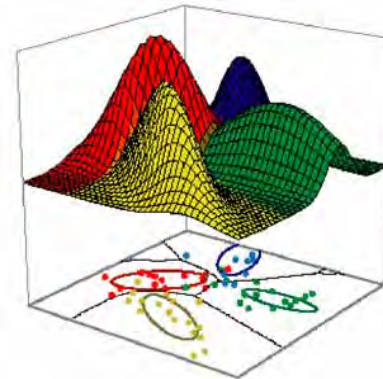
データベース の構築



データの 収集・統合



データマイニング、 機械学習、モデリング



可視化、 バリデーション

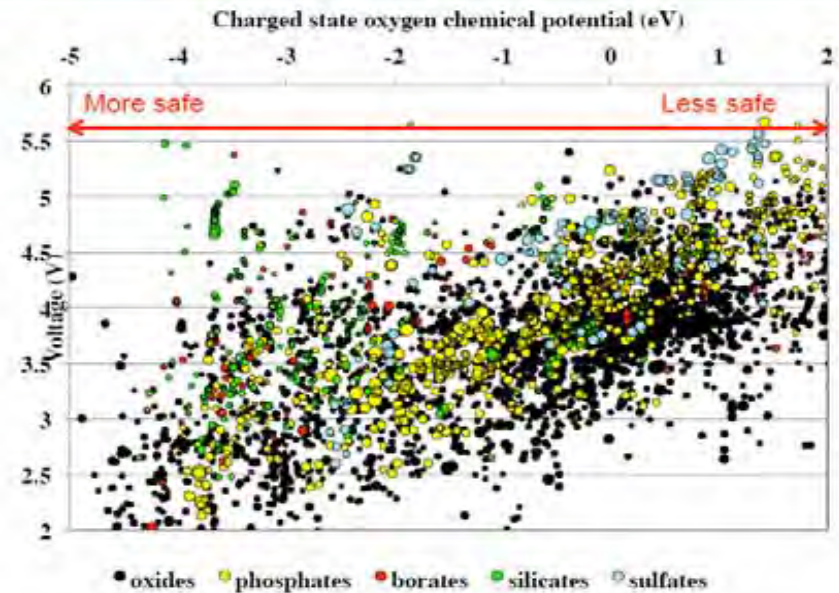
実験による検証
理論による理解



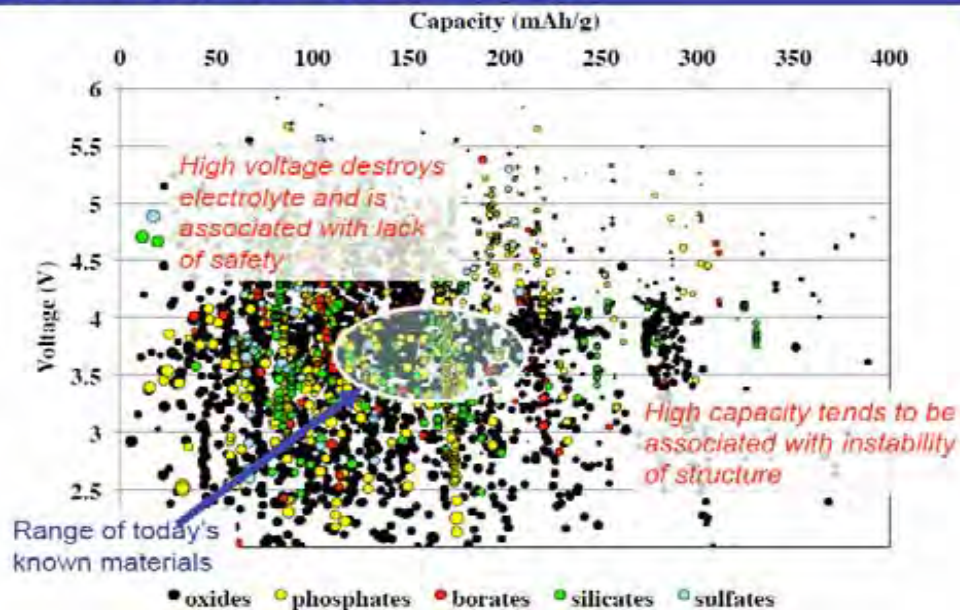
実現すること事例 ~ 二次電池正極材料の例 ~

- スクリーニングのための俯瞰図
- 軸のとり方(三次元含む)と分析ツール次第でいろいろなもの(候補物質、パラメータ間の相関、法則)が見えてくる。
- そのためには多くの物質に関する構造、物性、プロセス等に関するデータの蓄積が必要。

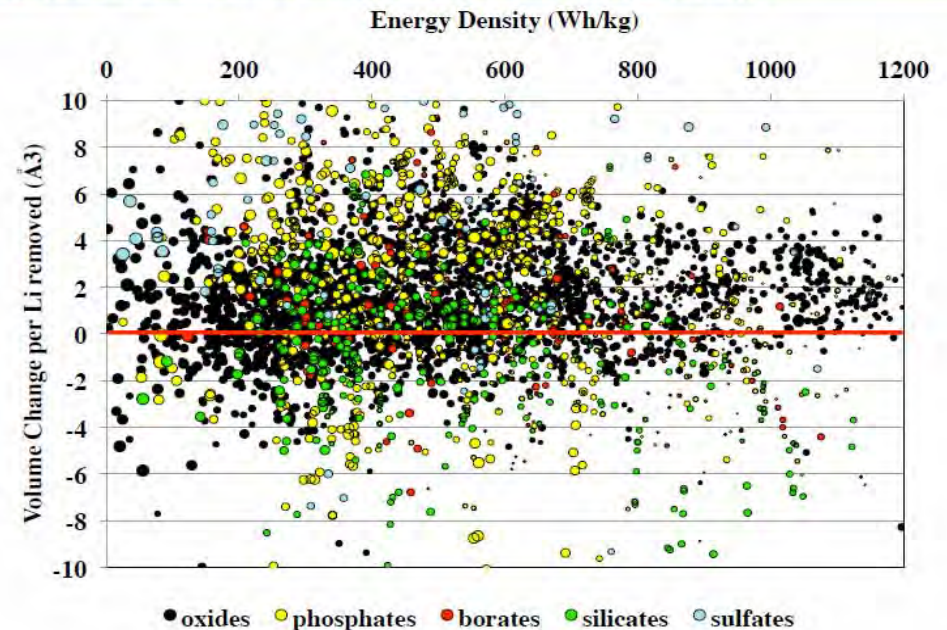
Is high voltage related to lack of safety ?



High-throughput voltage calculations



What is the volume change for lithium insertion ?

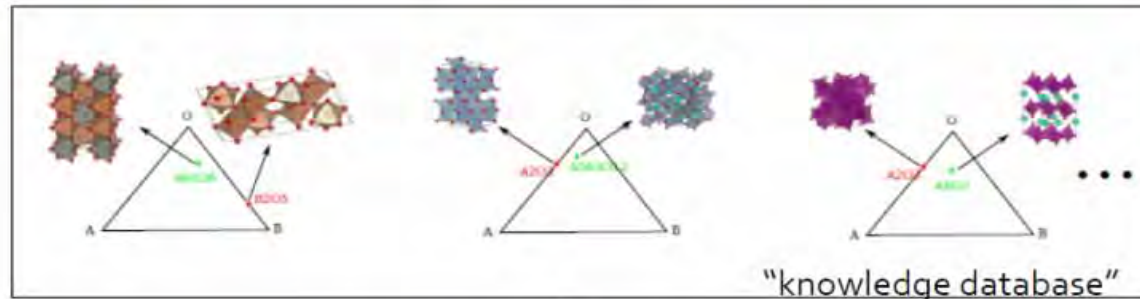


実現すること事例

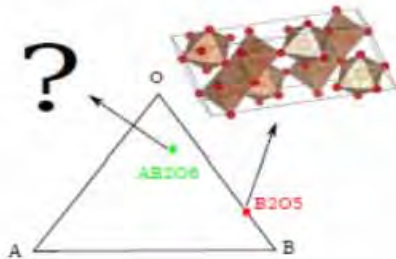
- 実験DBと数値計算のデータをあわせ、マイニングすることで、DBにないデータや計算で出せないデータを予測可能。

Structure prediction methodology

Step 1: Predict
(using data-mined correlations)



Partially unknown system



Statistical Inference

Structure Predictor

Fischer, C. C., Tibbetts, K. J.,
Morgan, D., & Ceder, G.
Nature Materials (2006)
Hautier, G., Fischer, C., Jain, A.,
Mueller, T., Ceder, G.
Chemistry of Materials (2010)

Step 2: Confirm
(using DFT computations)

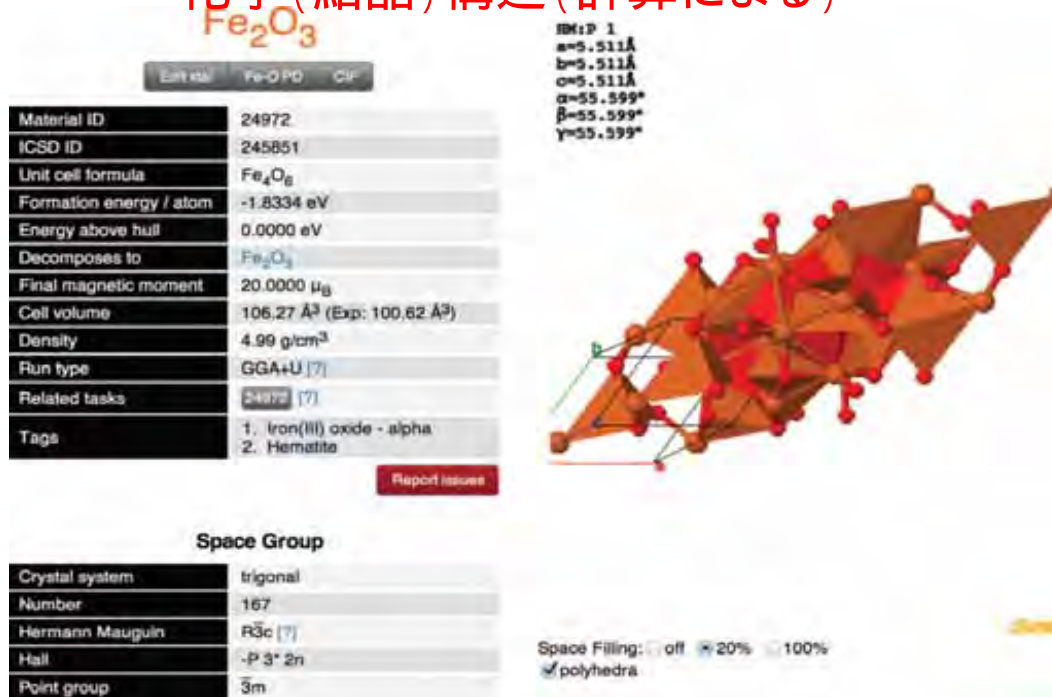


$$i\hbar \frac{d\Psi(\{r_i\}; t)}{dt} = \hat{H} \Psi(\{r_i\}; t)$$

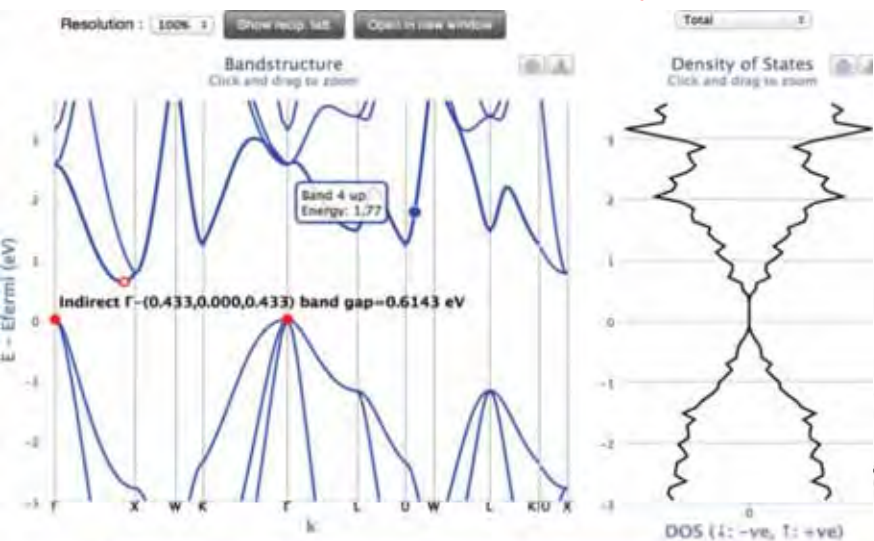
$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N_e} V_{nuclear}(r_i) + \sum_{i=1}^{N_e} V_{effective}(r_i)$$

データベース収録コンテンツ例 ~ 機能材料の場合 ~

化学(結晶)構造(計算による)



バンド構造と状態密度 (Band structure and density of states)



相図 (phase diagram)

