

超超プロジェクトの成果と 今後の展開

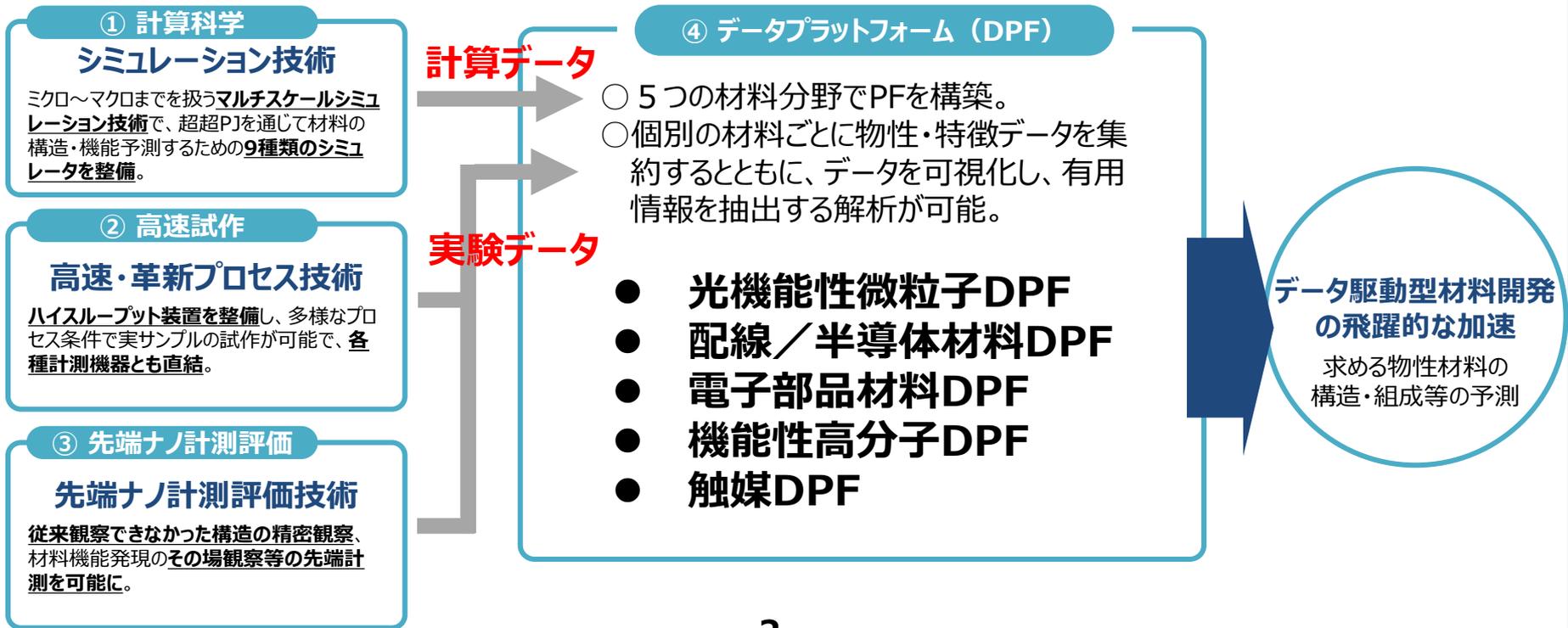
国立研究開発法人 産業技術総合研究所

副理事長 村山 宣光

NEDO超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト（'16～'21年度）

- 従来、材料の実験・評価データから「経験と勘」に基づく材料開発を主としてきたところ、高度な計算科学、高速試作、プロセス技術、先端ナノ計測評価技術を駆使し、データに基づく材料開発の飛躍的なスピードアップを狙う。
- 企業18社が参画する技術組合と産総研の共同で実施。主に有機系機能性材料を対象に、①計算シミュレータ、②プロセス装置、③計測装置の三位一体の研究開発により、従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間の1/20の短縮を目指して取り組んだ。
- この結果、9種類のシミュレータと各種先端ナノ計測機器群と直結した革新的なプロセス技術を開発。それらにより創出したデータを活用した材料探索技術を確立。これらの成果をもとに、材料設計プラットフォーム（MDPF）を今後運用。

材料設計プラットフォーム（MDPF）



開発期間短縮・新規材料設計の成果事例

例1) フレキシブル透明フィルムの開発

- 相反する複数の要求特性がある機能性材料の開発
- ➔ 開発者の“経験と勘”に基づく多数の実験が必要

構造・組成と機能のデータをAIに学習

➔ 研究者の知見のみに基づく実験に比べて**実験回数を25分の1以下**で、**相反する透過率、破断応力、伸びの3項目の特性が等しい割合で最高**となる要求を満たすフィルムの開発に成功



フレキシブル透明フィルム (昭和電工)

例2) バイオマス由来のブタジエンゴムのタイヤを試作

- 脱化石資源に向けて、再生可能なバイオマス由来原料からのタイヤ製造が必要であるものの、実用化に必要な**ブタジエン収率は、従来プロセスで開発する触媒では収率30-40%程度が限界**。

ハイスループット実験システムの活用

➔ 短い実験時間で大量のデータを取得

それらのデータを活用したデータ駆動型学習の活用

➔ バイオエタノールからブタジエンへの効率的な変換を実現する触媒を開発 (収率60-70%)

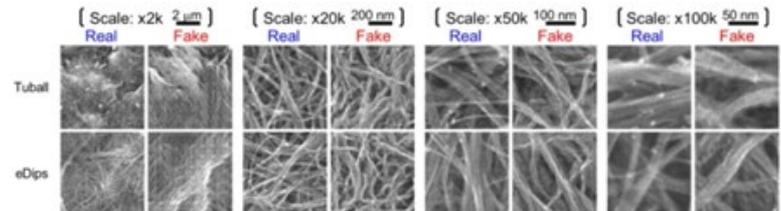
➔ **全体を通じて、この触媒開発時間も従来開発の1/20に短縮**



試作したタイヤ (横浜ゴム)

その他にも

- 深層学習を活用した仮想実験により、蓄電キャパシタ用途CNT不織布物性を、実験に比べて98.8%もの時間を短縮して予測
- 計算科学とAIを連携することにより、5G,6G用途高周波対応の誘電材料の新規構造を設計
- ハイスループット合成・評価システムと計算科学の利用により、銀ナノ粒子インクの迅速な色調制御に成功



CNT膜の構造画像 (実験およびAIで生成した画像)

産総研コンソーシアムを通じたMDPFの活用

- 産総研は、企業が広くMDPFを活用できる仕組みとして、「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」を設立。企業の製品化を見据えた材料開発のさらなる加速に向けて、今後、共同研究等を通じてさらなるデータの蓄積を図り、シミュレータ群を高度化（タテへの充実）し、シミュレータ群のターゲットを拡充（ヨコへの充実）を目指す。
- 一部のデータに対しては秘匿化技術も活用しつつ、プラットフォームを通じた加速度的な企業の呼び込みを狙い、広く素材産業でのデータ駆動型材料開発を促進する。

データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

- プロジェクトの成果であるMDPFを広く企業や研究機関が活用できるよう、産総研がワンストップサービスで運用。
- 企業等は加入することでMDPFが利用できるとともに、各企業のデジタル化や事業化等にも一体的に取り組んでいく。

1. セミナー・技術交流会による最新情報の提供

- データ駆動型材料開発に関する最新の研究動向、成果などの情報を提供
- 目的・対象者でレベル分けし、ニーズに応じたセミナー等を主催

2. 技術コンサルタントの窓口、および共同研究のマッチング

- 会員から持ち込まれた個別課題に対して、技術コンサルティングや共同研究により課題解決へ

3. DPF利用とチュートリアルによる実習・人材育成

- 5つの目的別DPFが利用可能
- 基礎的な利用方法についてのチュートリアルを提供

4. 外部データベースのワンストップ利用

- 材料研究に関わる産総研内外のデータベースへのインターフェースを提供

▶ 目指す姿

データ群、シミュレータ群の
タテ・ヨコへの充実

材料開発の迅速化のために、企業が積極的にシミュレータを活用

既に作製されたシミュレータ群のほか、企業のニーズに合わせてターゲットを拡充



➡ さらなるデータの蓄積・シミュレータを高度化

➡ より幅広い材料領域での活用が可能に

企業の利活用

データ駆動型材料開発の加速・裾野の拡大

<参考> ① 超超PJを通じて開発した計算シミュレータ

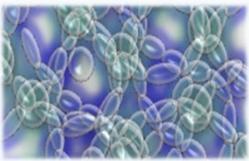
広範な時空間スケール、多様な材料・機能に対応したシミュレータ群

開発したシミュレータ

- ・電気・光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ
- ・モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ・誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ
- ・汎用インターフェイス (拡張OCTA)
- ・フィラー充填系コンポジットシミュレータ
- ・ナノカーボンコンポジット用シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

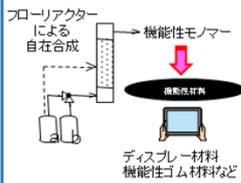
高機能誘電材料

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



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



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、放熱材料等
- フレキシブルディスプレイ・照明など

半導体材料

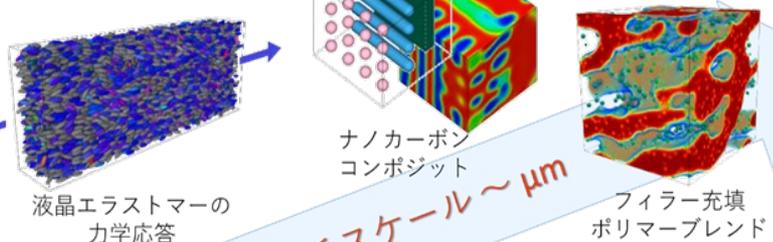
高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



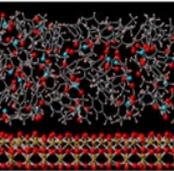
高性能高分子材料

高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

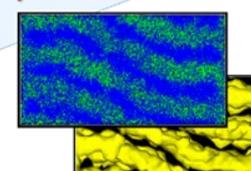
自動車系部品など



nm ~ マルチスケール ~ μm



有機-無機界面反応

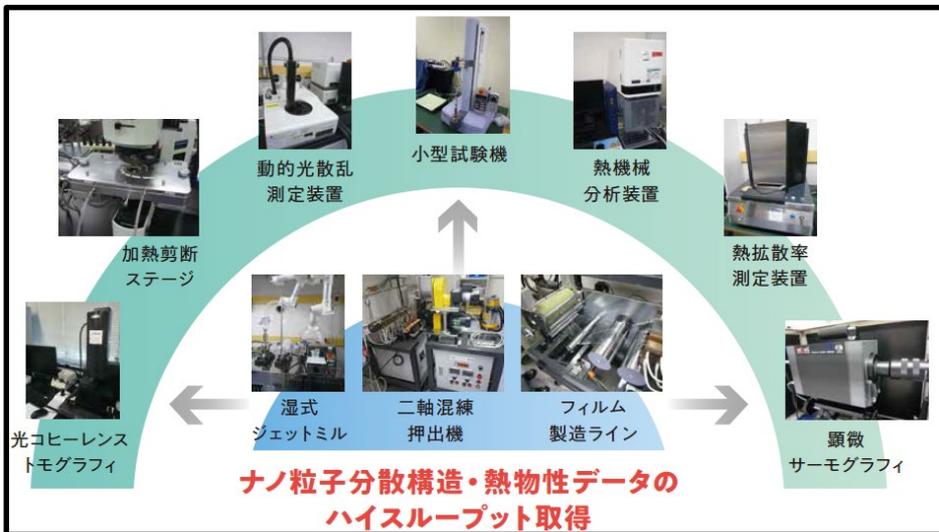


マイクロ相分離構造の電場配向

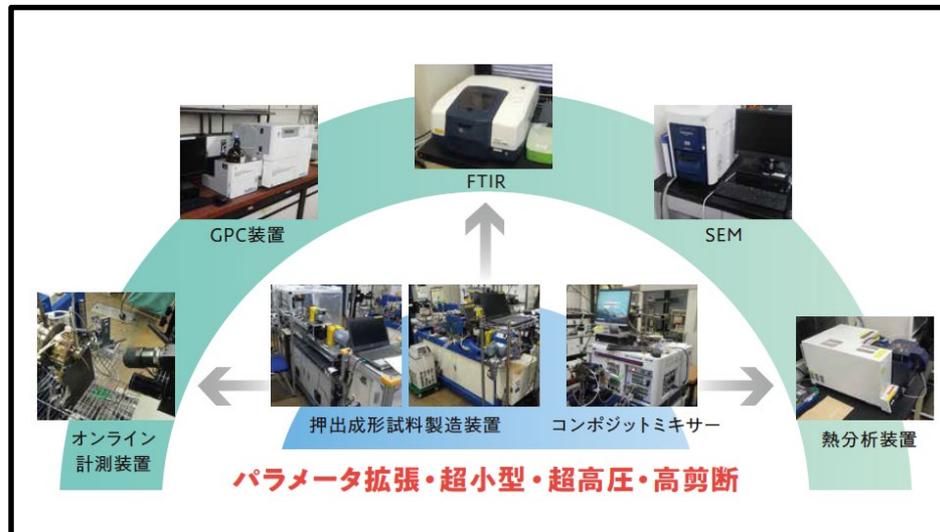
オープン戦略により成果の普及を図る

<参考> ② 超超PJを通じて整備・開発したプロセス装置、検証装置の例

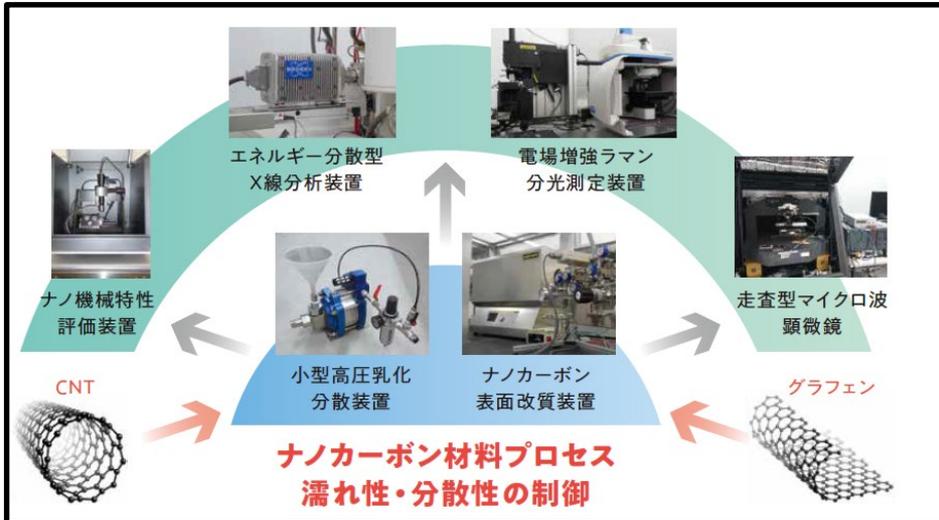
ナノ粒子分散ポリマー



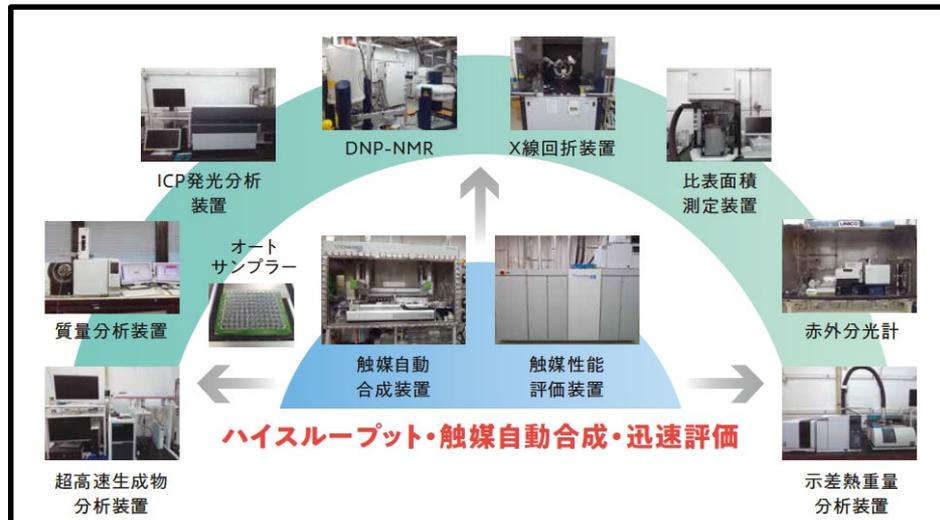
混練・発泡



ナノカーボン材料



触媒



<参考> ③超超PJを通じて整備・開発した先端ナノ計測機器の例



▶ 各計測機器の特徴

DNP-NMR	核スピンの分極増強により従来のNMRの100倍以上の高速化、従来困難な核種の測定 用途 ● ポリマー末端基やポリマーブレンド界面に生じる微量な構造の分析	X線CT	高速化X線CTにより、1 μ m分解能前後までの微細構造の非破壊型観察が可能 用途 ● 試料内の欠陥検出・分布状態解析、多孔質体のセル構造精密解析、繊維状配向状態解析、マルチマテリアル部材内部の材料・材質評価
陽電子消滅法	試料中の空隙に捕獲された陽電子（電子の反粒子）が、空隙サイズに応じた寿命で対消滅する 現象を利用して、サブナノメートルの空隙サイズを評価 用途 ● 機能性材料（バリア膜など）の微小空隙評価、金属や半導体中の原子空孔評価	ナノプローブ分光	AFM技術を基盤に、材料の表面構造と複数の物性情報（光学、電気、機械）を同時計測。 その場測定（電場印加等）も可能。 用途 ● コンポジットの成分分布評価、材料・デバイスの電位分布評価、弾性局所評価
電子分光型電子顕微鏡	TEMによる3次元構造解析と電子非弾性散乱を用いた元素組成、化学構造分析 用途 ● ポリマーブレンド等多成分・多相系材料の分散状態の解析、界面の化学状態解析、接着界面での相互作用・接着メカニズム解析	走査型マイクロ波顕微鏡 (SMM)	AFM技術を基盤に、マイクロ波への応答特性 (<16GHz) も同時に評価可能。 用途 ● 材料の面内及び数 μ m深さまでの導電率・誘電率分布、ファイバー等の分散評価
炭素材料の高空間分解元素イメージング	SEM中での元素分析(エネルギー分散型X線分光法：EDS)において、軽元素イメージングを10 nm ナノ機械特性 以下までの高空間分解評価 用途 ● CNT等のナノ材料における表面官能基の分布分析、ドーパントの局在性評価	和周波分光	赤外光と可視光を照射し、表面・界面で発生する和周波光を検出する振動分光法。 波長・偏光を組み合わせることで界面等での分子配向などを評価。 用途 ● 界面等での官能基同定、分子配向解析や化学反応追跡、電子デバイスのその場測定

<参考> ④データプラットフォーム (DPF) の例 (電子部品材料DPF)

材料： 高分子機能材料、無機誘電材料

データ： 複素誘電率、導電率、伝送損失

▶ 電子部品材料DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

誘電特性 (GHz-PHz領域を含む) と組成・構造との相関データ

- ✓ 組成： 有機材料、無機材料
- ✓ 物性： 複素誘電関数、バンドギャップ、電子状態密度

【計測データ】

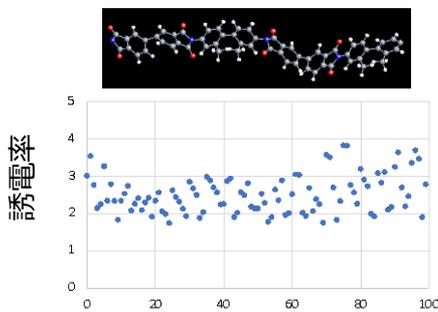
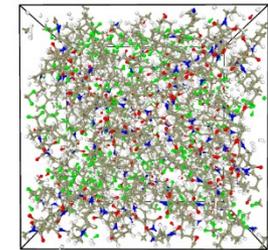
計算シミュレーションの検証データ

- ✓ 複素誘電率、伝送損失など

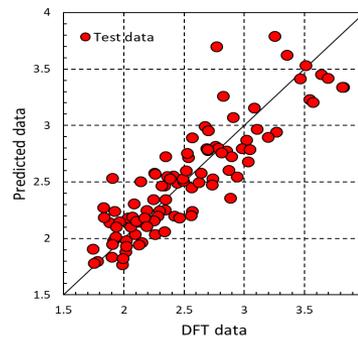
▶ 電子部品材料DPF上の解析ツール

電子部品材料の用途例

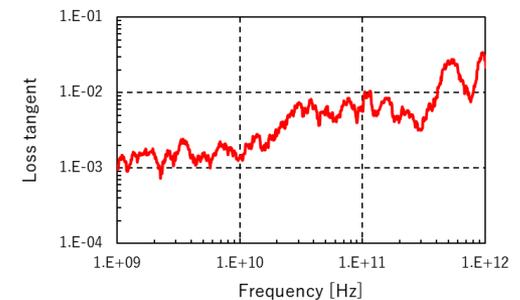
- ✓ フレキシブル回路基板材料
- ✓ 機能樹脂材料
- ✓ キャパシター
- ✓ 高周波対応通信機器



① 第一原理計算データの散布図
(機械学習モデル構築用のデータ)



② ガウス過程回帰による誘電率予測
(高分子材料探索の高速化)



③ シミュレーションによる誘電特性予測
(DPFデータと分子動力学法を組み合わせた誘電正接の評価分析)