

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトの概要

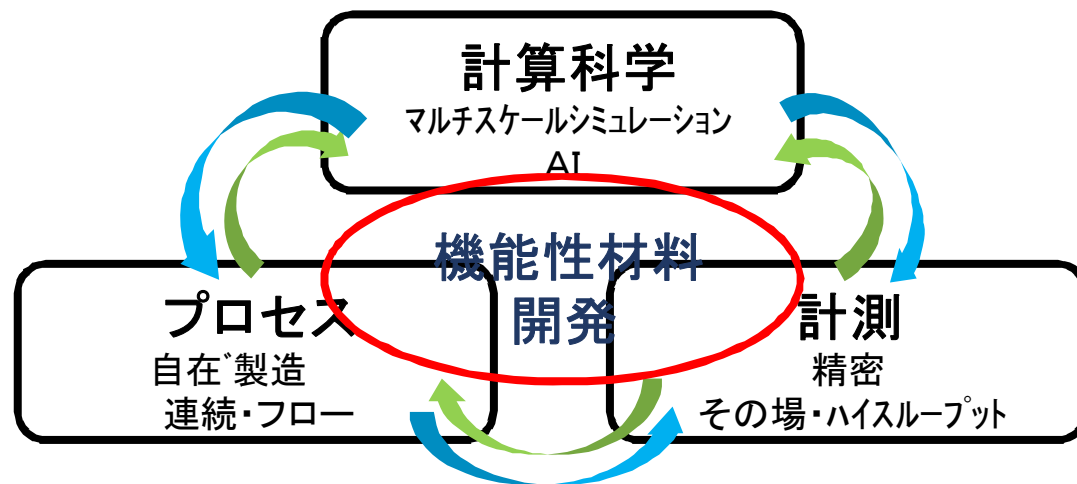
国立研究開発法人 産業技術総合研究所
先端素材高速開発技術研究組合

平成29年2月22日

プロジェクトの必要性と意義

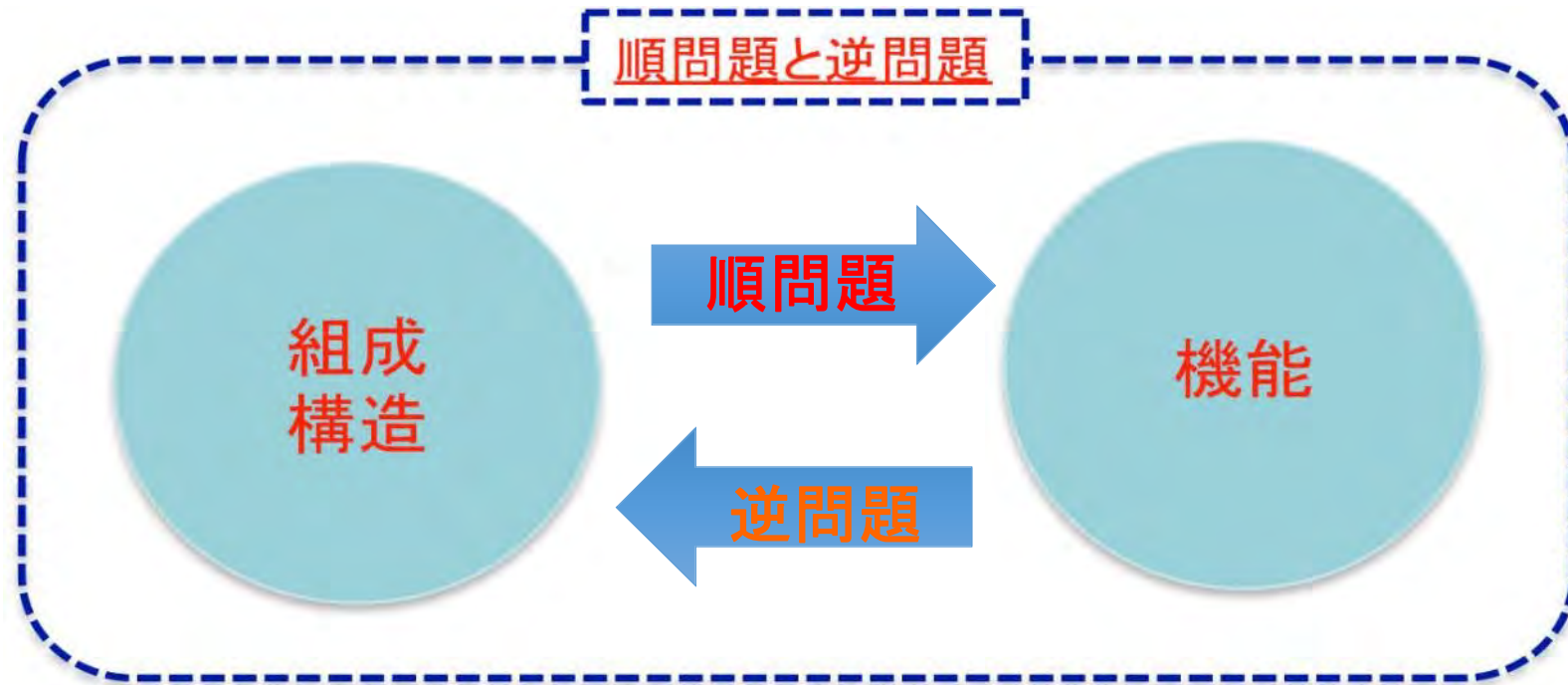
経済産業省/NEDO：平成28年～33年

- 個社支援ではなく、有機材料や機能性材料の素材産業全体の底上げのため、材料開発の共通基盤技術確立が目的
- 計算科学、製造プロセス技術、先端計測技術を高度に統合化する必要があり、一企業、一大学では出来ない複雑かつリスクの高い基盤技術開発
- 国の強力なイニシアチブの下での委託事業として、国研、大学、企業が結集して開発を行う必要あり。



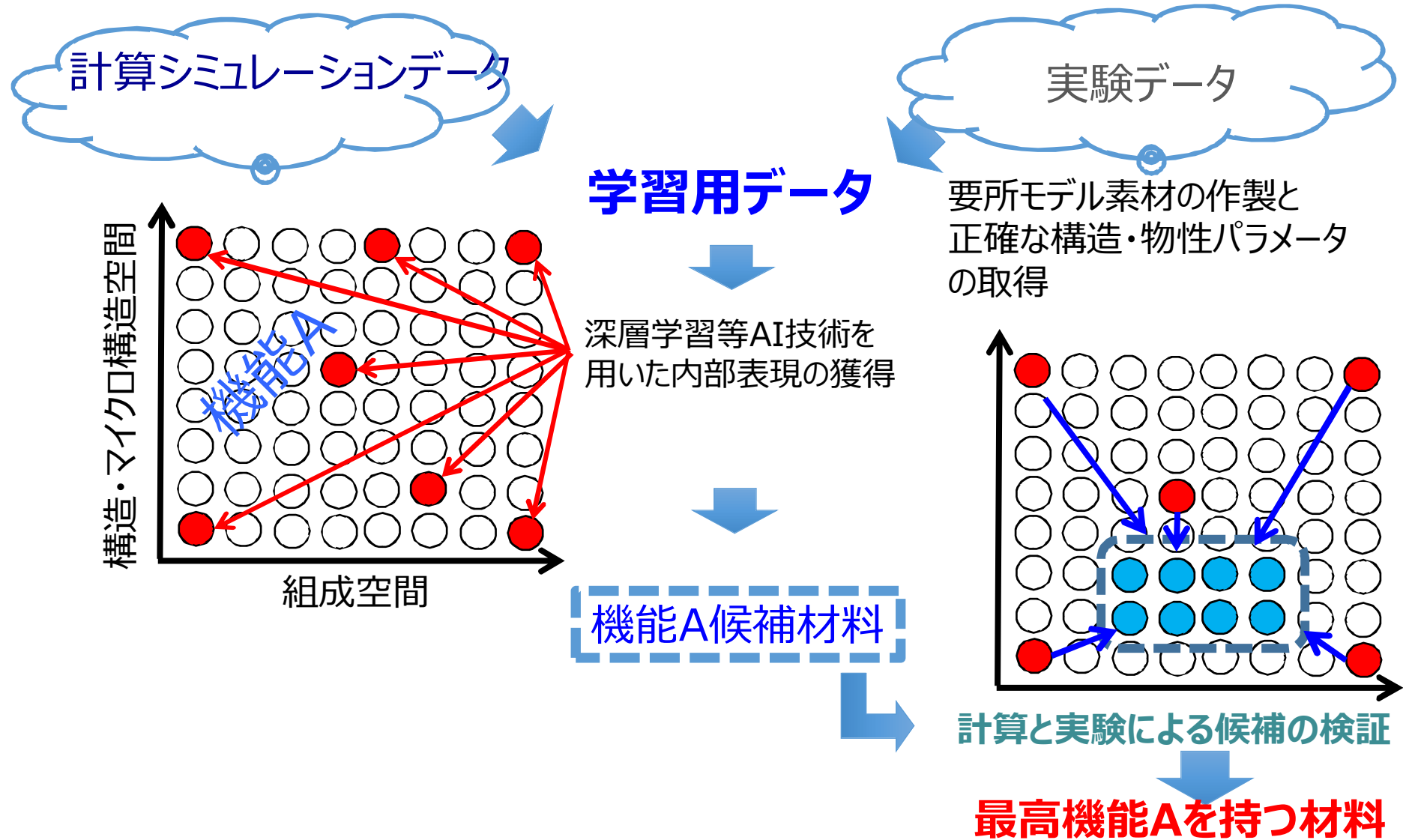
開発期間を
1/20に短縮

順問題、逆問題とは？



逆問題を直接解く事は材料問題では不可能。順問題解を「外れ」の材料も含めて沢山用意し、それらのデータに対して機械学習・深層学習などを適用する事により逆問題に対して推定解を得る事ができる。

材料開発の迅速化の考え方



年次計画



個別技術の開発

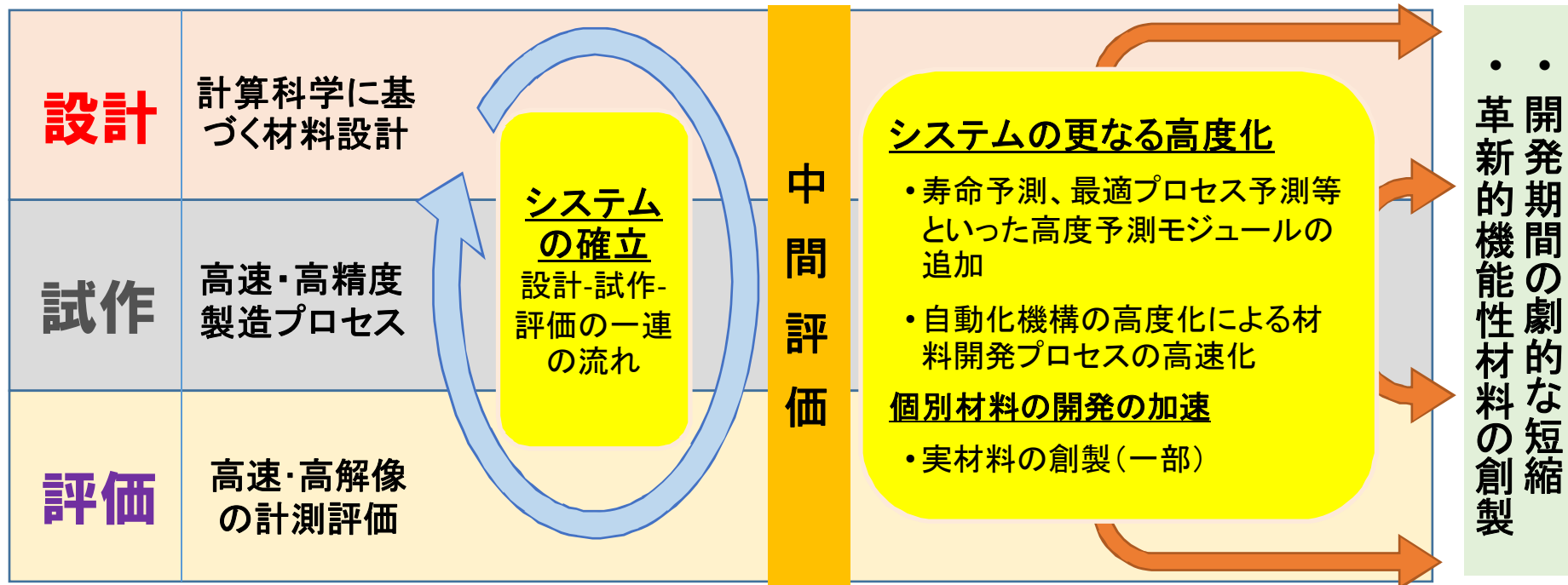
モデル材料を用いた個別技術の統合

化

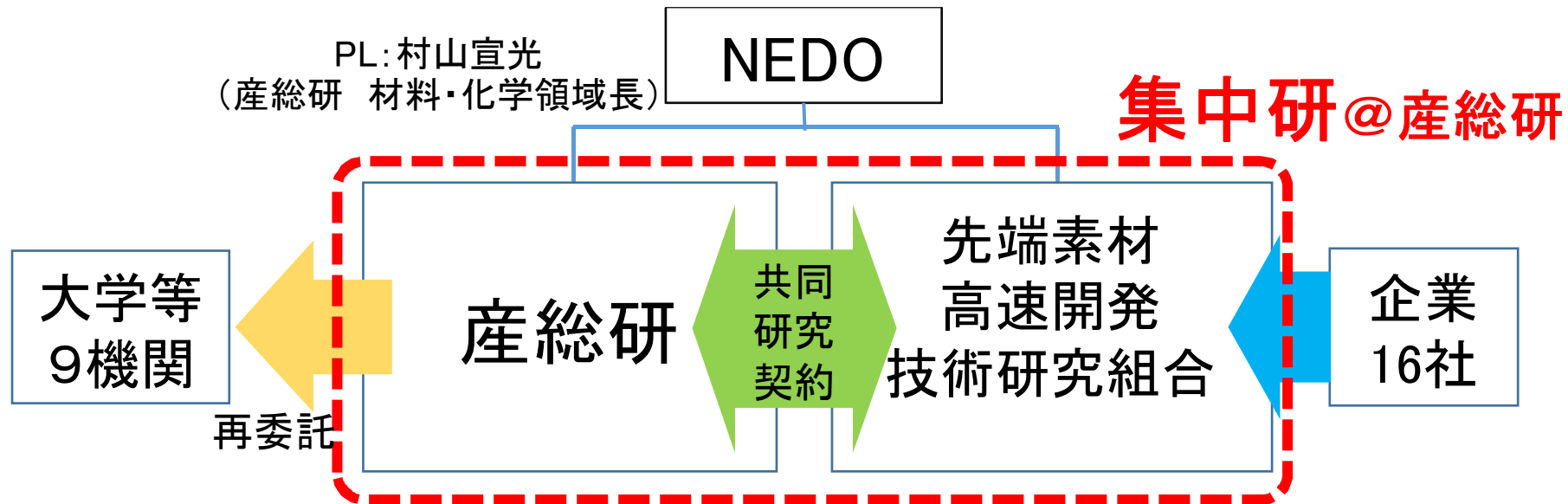
システムの確立

・システムの更なる高度化

・自動化による機能性材料創製の高速化



実施体制



先端素材高速開発技術研究組合

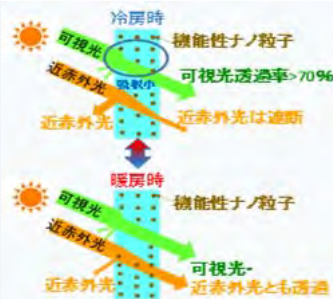
- 設立年月日 : 平成28年7月12日
- 理事長 : 腰塚 國博(コニカミノルタ(株) 取締役)
- 組合員(16社) : コニカミノルタ(株)/ 日立化成(株)/ 出光興産(株)/ DIC(株)/ 東レ(株)/ (株)東ソー/ 昭和電工(株)/ 新日鉄住金化学(株)/ JSR(株)/ 横浜ゴム(株)/ 宇部興産(株)/ (株)村田製作所/ パナソニック(株)/ (株)カネカ/ 積水化成品工業(株)/ 日本触媒(株)

事業化に向けて想定される研究開発成果

半導体材料

多層有機素材のキャリア輸送設計技術の開発

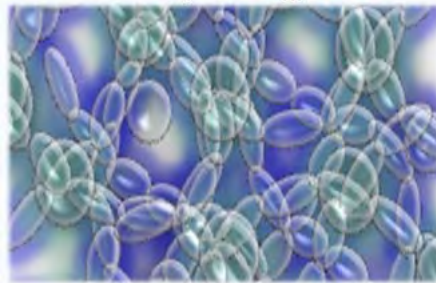
透明度の高いサーモクロミックフィルム等



誘電材料

有機・無機ハイブリッド3次元エレクトロニクス部材の設計技術の開発

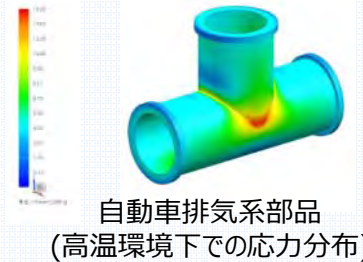
高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等



超高性能ポリマー

多成分組成の機能性ナノ高分子構造素材の機能性設計技術の開発

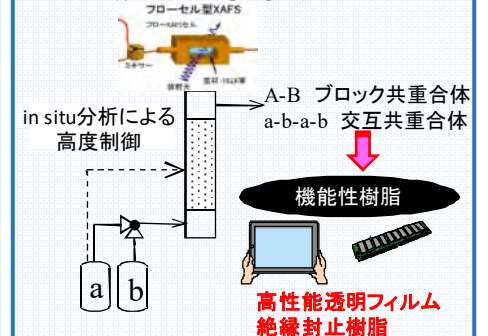
高耐熱かつ高強度なスーパーエンジニアリングプラスチック等



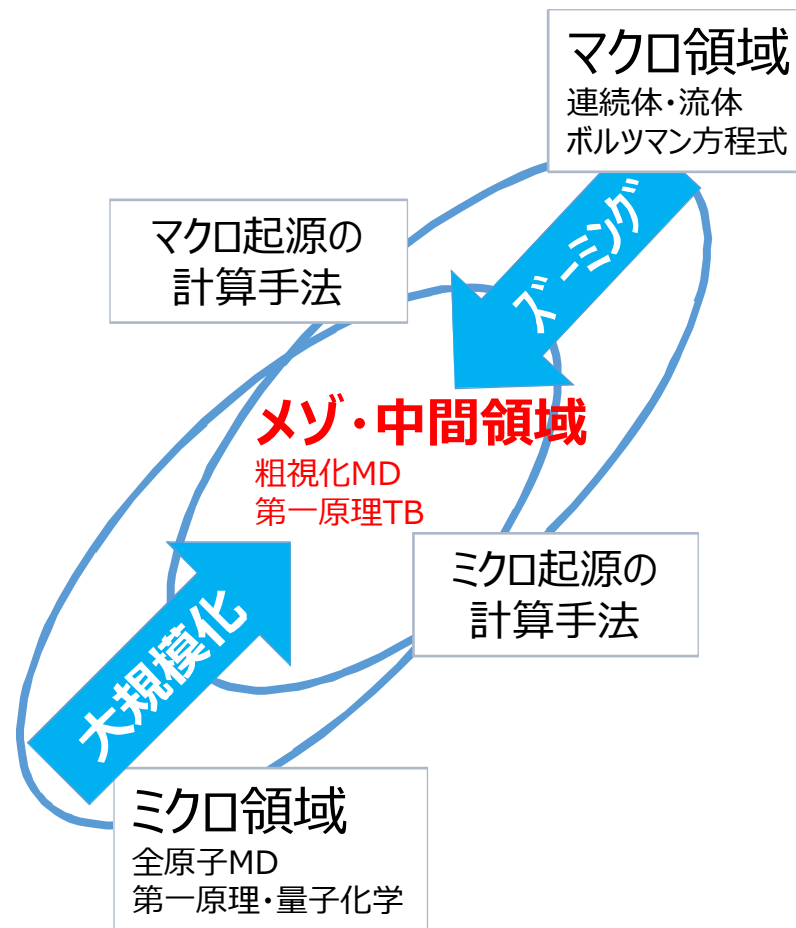
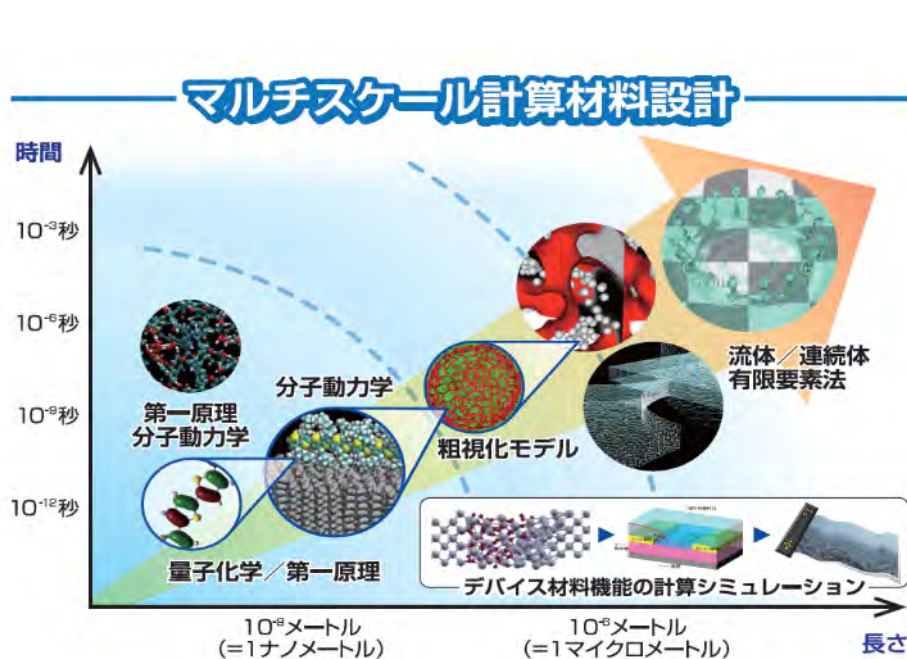
超高性能触媒 (機能性化成品)

自在合成を可能にするフローリアクターの総合的な触媒-流体界面設計技術の開発

熱安定性透明フレキシブル熱硬化性樹脂等



シミュレーションのマルチスケール化の基本的な考え方



メゾ・中間領域ではマイクロ起源の計算手法とマクロ領域の計算手法が共存する。

密度、流速密度、エネルギー密度を共通言語としてマイクロとマクロを双方向に繋げる事が可能

濃度場（マクロ） ⇔ 粒子座標（第一原理）

シミュレーションデータによる学習データの供出の例

ドライブシミュレータを用いた自動運転AIの構築



コンピューターの画面上で仮想のクルマにコース上を周回させ走行を学習させる

ミニカーでも交差点をスムーズに走行可能になった



<https://www.preferred-networks.jp/ja/> より引用

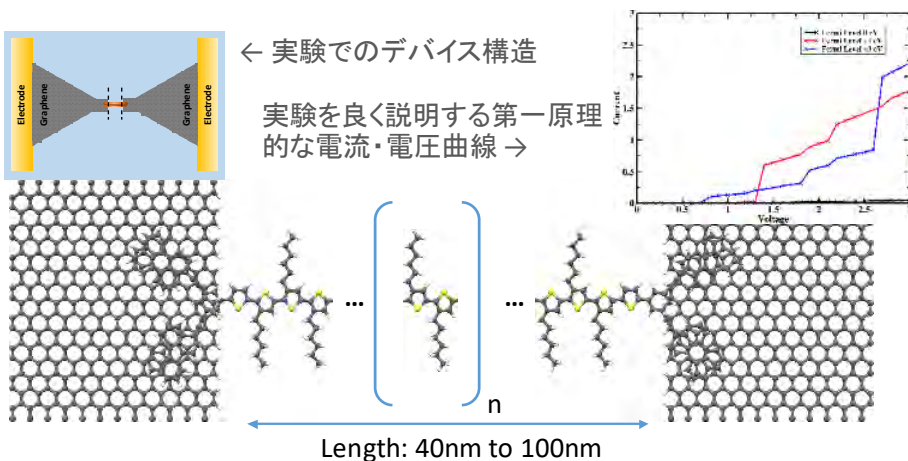
材料探索の場合：
材料機能と構造組成を直接ひもづけるシミュレータの開発が重要

シミュレータに関するH28年度の成果例 その1

第一原理キャリア輸送シミュレータの開発

【背景と課題】

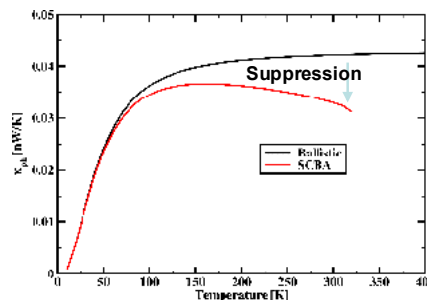
- ・古典ボルツマン方程式にもとづく従来のデバイスシミュレータ(TCAD)はシリコン半導体において多用されたが、ターゲットが化合物半導体へと拡がり、量子効果も無視出来なくなるにつれて、第一原理非平衡グリーン関数法(NEGF)にもとづくデバイスシミュレータに置き換わりつつある。
- ・従来の第一原理NEGF法の課題は適用可能なデバイスサイズが小さい、対象が電子のバンド伝導機構に限られる事である。



【サイズの拡大】大規模電子状態計算プログラムConquest上に第一原理NEGFプログラムを実装。

$$\Pi_{\alpha}^{\alpha}(E) = \text{a1 (36)} + \text{b1 (12)} + \text{a2 (36)}$$

現実に近づける: 非調和ポテンシャルに由来するフォノン・フォノン散乱効果 →



機能の直接予測

【対象の拡大】
第一原理NEGF法をフォノン熱伝導の計算に拡張

粗視化MDを用いたフィラー充填高分子材料の破壊

目的:

フィラー充填高分子材料の破壊挙動について、OCTAを用いた粗視化MDシミュレーションを実行し、破壊挙動を解明する。

主な成果:

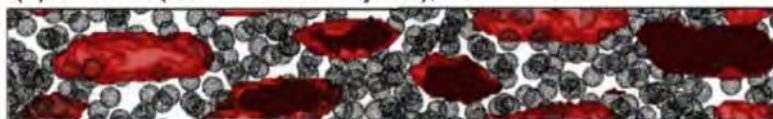
フィラー高分子間の相互作用を引力、もしくは斥力に変更しながらシミュレーションを行い、その結果を解析した。破壊時にみられるキャビティの生成・合一等の破壊挙動がフィラー・ポリマー相互作用を変えることで、大きく変化することが明らかになった。

今後の展開:

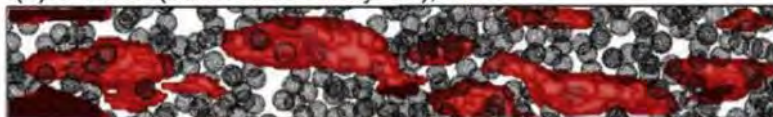
本研究の更なる展開の可能性: フィラー高分子相互作用を実在系に対応するポテンシャルに考えることで、実材料への破壊挙動予測へ検討可能となると思われる。また、発泡プロセスへの展開も期待できる。

機能の直接予測

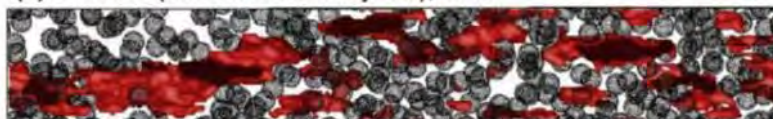
(a) $\lambda=300\%$ (attractive NP-Polymer), CR0



(b) $\lambda=300\%$ (attractive NP-Polymer), CR1



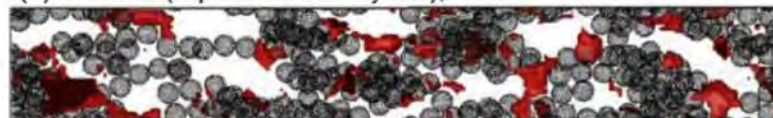
(c) $\lambda=300\%$ (attractive NP-Polymer), CR3



(a) $\lambda=300\%$ (repulsive NP-Polymer), CR0



(b) $\lambda=300\%$ (repulsive NP-Polymer), CR1



(c) $\lambda=300\%$ (repulsive NP-Polymer), CR3

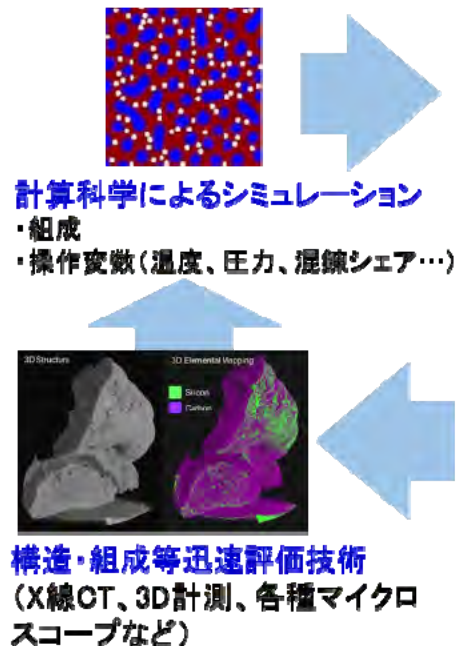


フィラー充填高分子における伸張破壊シミュレーションにおけるスナップショット

プロセス基盤技術に関するH28年度の成果例

ポリマー系コンポジット材料の製造・評価プラットフォームの構築

ポリマーブレンド/ナノコンポジット、発泡体などのポリマー系コンポジット材料の製造・評価プラットフォームを構築し、モデル材料の試作を行う。



溶融混練技術
開発要素:
小型化、高せん断力、超高トルク化、気密化、温度制御

押出成形技術
開発要素:
マイクロ化による温度制御性改善、各種パラメータ制御の自動化

バッチ発泡技術
開発要素:
超高圧化

ポリマー系コンポジット材料の製造・評価プラットフォーム
(押出成形・バッチ発泡・溶融混練)



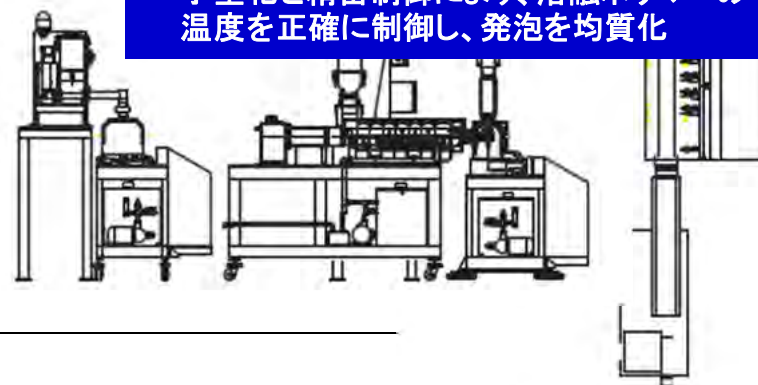
小型溶融混練装置

- ・高回転、高せん断力
- ・小型化による精密温度制御により、混練時のポリマー温度上昇を抑制

小型発泡押出装置

- ・超高圧化(100MPa)
- ・小型化と精密制御により、溶融ポリマーの温度を正確に制御し、発泡を均質化

計算科学による材料設計の具現化を目指し、従来より幅広い操作因子、正確な制御によるモデル材料の試作を可能にする製造装置を開発した。



計測基盤技術に関するH28年度の成果例

複数物性同時計測可能なナノプローブ分光技術の開発

【プローブ分光】

メリット: 表面構造とともに有用な各種物性情報が得られ、各種環境下で測定が可能

デメリット: 測定速度が遅い

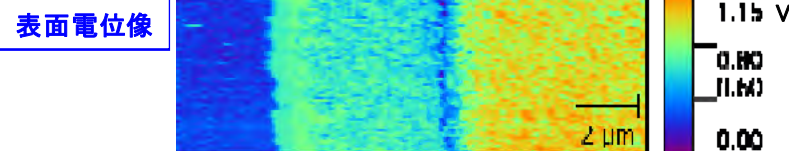
【PJにおける解決策】

複数の物性情報を同時に得ることで高速化するとともに、構造・各種物性の正確な空間相関を得る

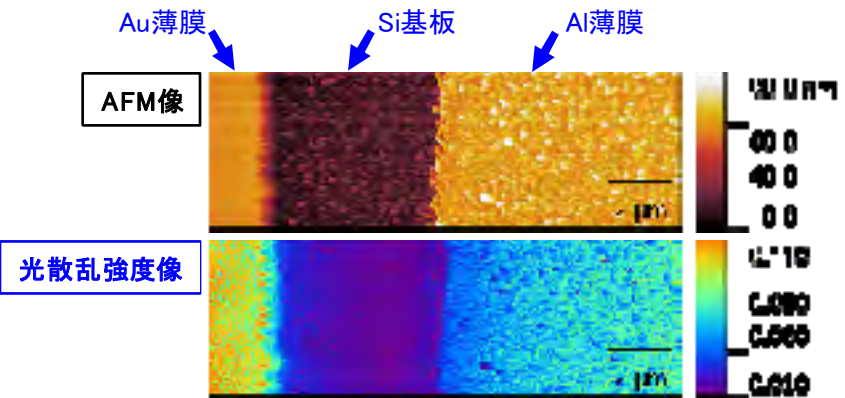
【H28年度の成果】

分子判別能力を有する光プローブと電気プローブを融合した「ナノプローブ分光装置」の導入

H28年度に導入したナノプローブ分光装置



金属蒸着膜標準試料を用いた電気・光プローブの動作確認



近接場光を用いることで照射光の波長 ($6.9 \mu\text{m}$) よりもはるかに高い空間分解能 ($<100\text{nm}$) が得られることを確認

光プローブ動作と同じプローブ (導電性AFMカンチレバー) を用いて電気プローブ測定 (表面電位測定) が可能であることを確認

来年度は電気・光同時測定に向けた技術開発を進めるとともに、モデル試料の評価を並行して行う。

- ◆ 基盤技術課題と個別応用課題とのマトリックスマネジメント
- ◆ オープン・クローズマネジメント
- ◆ 集中研の価値の最大化