

平成28年度実施方針

材料・ナノテクノロジー部

1. 件名：超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

2. 根拠法

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第15条第1号の二及び9号

3. 背景及び目的・目標

近年の最先端製品では、機能性材料の先進的な機能がもたらす付加価値によって製品全体の差別化が図られている場合が多い。従って社会要請に合致した素材機能についての戦略的ターゲットを絞り込み、素材そのものの機能が最大限発現するプロダクトイノベーションを誘発することが、我が国素材産業の提案力の高度化、ひいては産業全体の競争力強化につながる。NEDO技術戦略研究センターの「平成26年度日本企業の国際競争力ポジションに関する情報収集」によると、我が国の機能性材料の開発・製造を担う部材産業は、機能性化学分野を中心に、市場規模相対的に小さいながらも高いシェアを確保しており、これらをまとめると大きな市場を獲得している。また、日本企業の世界シェアが低い最終製品分野においても、それらを構成する部材・素材においては、我が国が中核的な地位を占めている状況。従って本分野は日本の産業競争力の源泉であり、今後も世界トップを走り続けていく必要がある。

機能性材料には大幅な省エネ性能や複合化による多種類の機能の発現といった性能向上が期待されているが、従来の機能性材料開発は、これまで蓄積してきた多くの材料の構造や物性、触媒を含む反応経路などの実験・評価データを踏まえ、“経験と勘”に基づく仮説を立てて、それを実験によって検証しながら、時間をかけて進められてきた。

本事業では「経験と勘」による非効率な開発プロセスを刷新し、高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術及び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技術を構築する。

[委託事業]

事業目標：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の構築を目指す。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。

研究開発項目①計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術

最終目標（平成33年度）

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。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・運営体制の計画を示す。

中間目標（平成30年度）

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。

研究開発項目②高速試作・革新プロセス技術開発

最終目標（平成33年度）

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。

中間目標（平成30年度）

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。

研究開発項目③先端ナノ計測評価技術開発

最終目標（平成33年度）

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。

中間目標（平成30年度）

研究開発項目①「計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術」の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「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”又は“In situ”で評価を可能とする計測手法を確立する。

4. 事業内容

プロジェクト・マネージャーに NEDO 材料・ナノテクノロジー部の國谷 昌浩を任命して、プロジェクトの進行全体を企画・管理やそのプロジェクトに求められる技術的成果及び政策的効果を最大化させる。

プロジェクトリーダーは国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域長 村山 宣光を任命して事業を推進する。

4. 1 平成28年度（委託）事業内容

研究開発項目①「計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術」

量子力学、粗視化分子動力学、有限要素法などを活用してナノスケールから マクロスケールまでの以下材料設計を信頼性高く予測可能なマルチスケールシミュレーション手法の開発に着手する。

- 1) 有機系材料の光電変換デバイス等への応用を想定したヘテロ接合構造と電子・熱・イオン等の挙動の相関をシミュレーションするキャリア輸送設計
- 2) 機能性高分子材料への応用を想定したコンポジット素材の相分離、微粒子分散、ナノ空孔等を最適に制御し、相反する機能（光学特性/断熱特性や力学特性/誘電特性等）の両立をシミュレーションする相反機能両立材料設計
- 3) ハイスループットな有機材料合成への応用を想定した触媒の反応過程の網羅的な探索技術と反応速度計算、触媒-流体界面設計を一連でシミュレーションするリアクター反応設計

等

なお、開発するシミュレーション手法は上記1) 2) 3) の課題間の連携を考慮し、材料開発の試作回数・開発期間短縮に資するツールとして統一感のとれたものとして計画する。

また、国内の他の研究開発の動き・成果と連携して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の開発に着手する。

研究開発項目②高速試作・革新プロセス技術開発

研究開発項目①「計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術」のシミュレーション手法の高精度化とAIを活用した材料開発のために、組成や反応場等の様々なプロセス条件パラメータを制御して設計通りのサンプルを自在に試作する以下の高精度なサンプル作製技術の開発に着手する。

- 1) 研究開発項目①の1)に対応したサンプル作製のために、接合層の層間距離制御、傾斜機能制御等の技術を確立し、様々な界面を自在に制御して多層ヘテロ界面を作製する精密積層プロセス技術等の基盤の構築に着手する。
- 2) 研究開発項目①の2)に対応したサンプル作製のために、原料種、組成比、温度、圧力等の条件を自在に制御して複雑なコンポジット材料の構造と機能発現の相関を評価可能とするサンプルの作製手法等の基盤の構築に着手する。
- 3) 研究開発項目①の3)に対応したサンプル作製のために、連続で反応を精密に制御可能なフローリアクタープロセス技術等の基盤の構築に着手する。

等

研究開発項目③先端ナノ計測評価技術開発

研究開発項目①「計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術」のシミュレーション手法の高精度化と AI を活用した材料開発に必要な評価データを提供するために、研究開発項目②「高速試作・革新プロセス技術開発」で試作したサンプル等を“非破壊”又は“In situ”で構造評価・機能評価を可能とする以下の計測装置・手法の開発に着手する。

- 1) 研究開発項目②の 1) 等で作製したサンプルを評価するために、非破壊で特定の界面の分子の化学構造、電子状態等の情報を得る計測技術等の構築に着手する。
 - 2) 研究開発項目②の 2) 等で作製したサンプルを評価するために、非破壊でシングル nm レベルの細孔構造の計測技術やサブ μm レベルで三次元の構造や組成分析を同時に可能とする計測技術等の構築に着手する。
 - 3) 研究開発項目②の 3) 等で作製したサンプルを評価するために、反応器内の触媒の固体表面状態を連続、高感度、高速で計測する技術等の構築に着手する。
- 等

なお“非破壊”、“In situ”で材料を評価する先端ナノ計測評価技術は、特にシングルナノレベルの微細化を目指す半導体分野では極めて有効であり緊急性が高い。このためシングルナノレベルのシリコン半導体量産技術に関する物質計測、欠陥評価等の高速計測技術を 3 年以内に確立するシーズについて、公募の結果提案があり、審査の結果実施が妥当と認められたため、研究開発項目③「先端ナノ計測評価技術開発」単独の課題として開発に着手する。

その他、必要に応じプロジェクト成果の最大化や加速化が期待できる事案が生じた場合、プロジェクトの一環の活動として積極的に実施していくものとする。

4. 2 平成 28 年度事業規模

	委託事業
需給勘定	1780 百万円（新規）
	事業規模については、変動があり得る。

5. 事業の実施方式

5. 1 公募

(1) 掲載する媒体

「NEDO ホームページ」等に掲載する。

(2) 公募開始前の事前周知

公募開始の1か月前にNEDOホームページで行う。本事業は、e-Rad 対象事業であり、e-Rad 参加の案内も併せて行う。

(3) 公募時期・公募回数

平成28年3月に1回行う。(必要に応じプロジェクト成果の最大化や加速化が期待できる事案が生じた場合、時期を勘案して公募を行う。)

(4) 公募期間

原則30日間とする。

(5) 公募説明会

NEDO 本部で開催予定。

5. 2 採択方法

(1) 審査方法

e-Rad システムへの応募基本情報の登録は必須とする。

委託事業者の選定・審査は、公募要領に合致する応募を対象に NEDO が設置する採択審査委員会(外部有識者(学識経験者、産業界の経験者等)で構成)で評価(技術評価及び事業化評価)を行う。その結果を参考に、NEDO は本事業の目的の達成に有効と認められる委託事業者を契約・助成契約助成審査委員会に附議して委託事業者を決定する。

提案者に対して、必要に応じてヒアリング等を実施する。

採択審査委員会は非公開とし、審査経過に関する問い合わせには応じない。

(2) 公募締切から採択決定までの審査等の期間

45日間以内とする。

(3) 採択結果の通知

採択結果については、NEDO から提案者に通知する。なお不採択の場合は、その明確な理由を添えて通知する。

(4) 採択結果の公表

採択案件については、提案者の名称、研究開発テーマの名称・概要を公表する。

6. その他重要事項

(1) 評価の方法

NEDO は、技術的及び政策的観点から、研究開発の意義、目標達成度、成果の技術的意義並びに将来の産業への波及効果等について、外部有識者による研究開発

の中間評価を平成30年に実施する。

(2) 運営・管理

公募の結果、基本計画に合致する優れた提案があった場合、4.2の事業規模に加え、加速予算の獲得を検討する。

本事業を広く周知することが重要であることから、研究成果や今後の方向性などを発表するフォーラム等の実施の検討を図る。

(3) 複数年度契約の実施

平成28～30年度の複数年度契約を行う。

(ただし部分提案で採択した研究開発項目③に対する契約は平成28～29年度の複数年契約)

(4) 知財マネジメントにかかる運用

「NEDOプロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」に従って事業を実施する。

7. スケジュール

7.1 本年度のスケジュール：

平成28年3月下旬・・・公募開始

4月上旬・・・公募説明会

5月上旬・・・公募締切

5月中下旬・・・契約・助成審査委員会

6月中下旬・・・採択決定

7.2 来年度の公募について

事業の加速化や効率化を図るため、必要な追加公募等は適宜実施する(実施内容は、本実施方針を改定して定める)。

8. 実施方針の改定履歴

(1) 平成28年3月、制定

(2) 平成28年10月、公募の結果等を踏まえ、実施体制図の追加等の改定

**超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト実施体制図
変更後(下線部分)**

NEDO
プロジェクトマネジャー(PM): 材料・ナノテクノロジー部 國谷昌浩

プロジェクトリーダー: 国立研究開発法人 産業技術総合研究所
材料・化学領域長 村山 宣光

委託(連名契約)

(集中研究拠点) ● 国立研究開発法人 産業技術総合研究所

- ・研究実施場所: 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター(茨城県つくば市) AIST中部センター(名古屋市)
- ・研究開発項目: ① 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術
② 高速試作・革新プロセス技術開発
③ 先端ナノ計測評価技術開発

再委託

- (国研) 物質・材料研究機構
 - ・研究開発項目: ①の内「大規模第一原理計算のマルチスケール拡張」
- 東北大学
 - ・研究開発項目: ①の内「大規模第一原理計算のマルチスケール拡張」
 - ・研究開発項目: ①の内「数学と材料化学の連携」
 - ・研究開発項目: ①の内「第一原理フェースフィールド計算手法の開発」
 - ・研究開発項目: ①の内「高分子の平均場理論と全原子分子動力学計算手法の開発」
- 名古屋大学
 - ・研究開発項目: ①の内「高分子の平均場理論と全原子分子動力学計算手法の開発」
 - ・研究開発項目: ①の内「実空間反応シミュレータの開発」
- 京都大学
 - ・研究開発項目: ①の内「大規模第一原理計算のマルチスケール拡張」
 - ・研究開発項目: ①の内「反応路の自動探索計算シミュレーション」
- 筑波大学
 - ・研究開発項目: ①の内「マルチスケール複合材料プロセスシミュレータの開発」
 - ・研究開発項目: ②の内「自在合成を可能にするフローリアクターに関する基盤技術」
- 東京大学、● 名古屋工業大学、● 大阪大学
 - ・研究開発項目: ①の内「大規模第一原理計算のマルチスケール拡張」
- 公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI)
 - ・研究開発項目: ③の内「フロープロセスの高感度in-situ計測」

● 超超PJ技術研究組合(仮称)

・研究実施場所: 茨城県つくば市(AIST集中研究拠点内)

組合員: コニカミノルタ(株)、東ソー(株)、(株)村田製作所、パナソニック(株)、新日鉄住金化学(株)、日立化成(株)、DIC(株)、(株)カネカ、東レ(株)、積水化成工業(株)、出光興産(株)、JSR(株)、昭和電工(株)、(株)日本触媒、横浜ゴム(株)、宇部興産(株)

- ・研究開発項目: ① 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術
② 高速試作・革新プロセス技術開発
③ 先端ナノ計測評価技術開発

NEDO
 プロジェクトマネジャー (PM) : 材料・ナノテクノロジー部 國谷昌浩
 サブプロジェクトマネジャー (SPM) : 材料・ナノテクノロジー部 片岡茂

委託

研究開発拠点

- ・名称 スーパークリーンルーム産学官連携研究棟
- ・住所 茨城県つくば市小野川 16-1

株式会社先端ナノプロセス基盤開発センター

- ・研究開発項目 : ③「先端ナノ計測評価技術開発」
- ③-[1] 「ナノ物質計測技術開発」
 - ③-[1]-1) 「液中ナノ粒子/ナノバブル 計測技術開発」
 参加企業: リオン株式会社、株式会社東芝
 ・液中低屈折率材料(フッ素樹脂等)向けの清浄な検査標準溶液の調査・開発 (③-[1]-1)-1)
 - ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
 参加企業: 富士フイルム株式会社、信越化学工業株式会社、株式会社ニコン、東京エレクトロン株式会社、東京応化工業株式会社、株式会社堀場エステック、株式会社東芝
 ・シングルナノターニング材料(レジスト)による計測技術検証 (③-[1]-2)-1)
 ・次世代レジストアウトガス計測技術開発 (③-[1]-2)-4)
 ・DSA 精密計測技術開発 (③-[1]-2)-5)
- ③-[2] 「ナノ欠陥検査用計測標準開発」
 - ③-[2]-1) 「ナノ欠陥検査用計測標準技術開発」
 参加企業: 株式会社東芝、大日本印刷株式会社
 ・プログラム欠陥マスク技術開発

**国立研究開発法人 産業技術総合研究所
物質計測標準研究部門 粒子計測研究グループ**

- ・研究開発項目 : ③「先端ナノ計測評価技術開発」
- ③-[1] 「ナノ物質計測技術開発」
 - ③-[1]-1) 「液中ナノ粒子/ナノバブル 計測技術開発」
 ・液中異種ナノ粒子/ナノバブル計測技術開発 (③-[1]-1)-2)
- 研究実施場所: 茨城県つくば市東 1-1-1 中央第 5

再委託

大阪大学

- ・研究実施場所: 大阪府茨木市美穂ヶ丘 8-1
- ・研究項目: ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
 シングルナノターニング材料(レジスト)の反応機構解明 (③-[1]-2)-2)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

- ・研究実施場所: 茨城県つくば市並木 1-1
- ・研究項目: ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
 光励起状態のナノターニング材料の物性評価 (③-[1]-2)-3)

京都大学

- ・研究実施場所: 京都府京都市西京区京都大学桂
- ・研究項目: ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
 DSA ナノ欠陥計測技術開発 (③-[1]-2)-6)
 DSA 精密計測支援技術開発 (③-[1]-2)-8)

インテル コーポレーション(Intel)

- ③-[1]-1) 「液中ナノ粒子/ナノバブル 計測技術開発」
- ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
- ③-[2]-1) 「ナノ欠陥検査用計測標準技術開発」
 アドバイザーとして参加

東京工業大学

- ・研究実施場所: 東京都目黒区大岡山 2-12-1 S8-36
- ・研究項目: ③-[1]-2) 「ナノ計測技術検証」
 DSA 相分離精密測定技術 (③-[1]-2)-7)