



技術戦略研究センターレポート

TSC Foresight

Vol. **2**

機能性材料分野の 技術戦略策定に向けて

2015年10月

1 章	はじめに	2
2 章	機能性材料技術の置かれた状況	4
2-1	機能性材料産業の動向	4
2-2	機能性フィルムの市場動向	6
2-3	機能性フィルムの技術動向	8
2-4	諸外国の研究開発政策の状況	12
3 章	計算科学を活用した機能性材料開発分野の技術課題	13
3-1	計算科学	13
3-2	数理・情報科学	16
3-3	計測評価・試作技術開発	18
4 章	おわりに	19

TSCとはTechnology Strategy Center（技術戦略研究センター）の略称です。

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

例えば、液晶ディスプレイの製品の日本企業シェアは11%にとどまるが、特定の振動方向の光だけを通過させる部材である偏光板は、日東電工や住友化学などの日本企業が58%のシェア、更に素材となると、偏光板保護フィルムで100%、カラーレジストで71%など、極めて高いシェアを占める(図2)。

このような日本企業が強みとする機能性材料分野の強化を通じて、我が国の素材産業を世界と戦える産業として、より一層強化していくことが期待される。また、これら素材産業の優位性を保つためにも、

革新的機能の発現サイクルを止めることなく、機能性材料の技術革新を遂げていく必要がある。

なお、革新的な機能性材料の開発においては、従来型の実験的手法を中心とする材料開発と計算科学との融合・連携によって機能性材料開発の高度化・加速化を実現することが効果的であるため、計算科学の戦略的な活用による革新材料開発手法の獲得に向けた取組を推進することが望ましい。

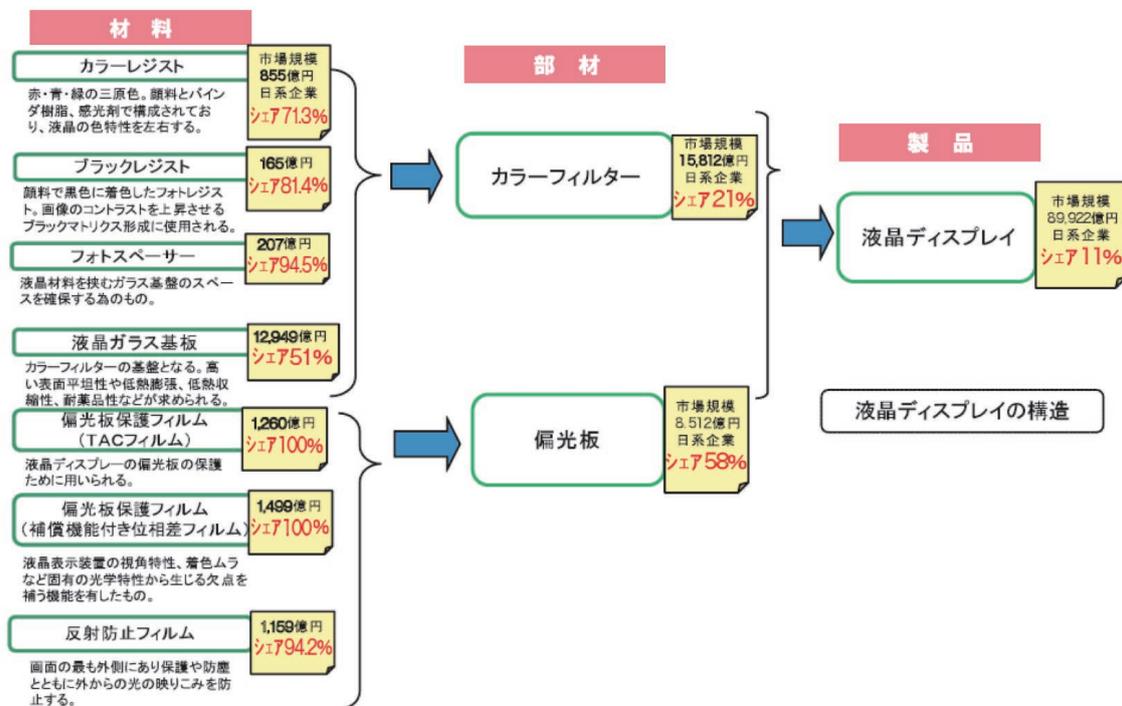


図2 液晶ディスプレイの例
出所: ものづくり白書(経済産業省, 2012)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

2章

機能性材料技術の置かれた状況

2-1

-1 機能性材料産業の動向

(1) 欧米

欧米企業は汎用事業と医薬品事業を大幅に売却し、機能性化学品の強化とともに、アグリ(種子、農業)、バイオ、バイオ樹脂、ニュートリション、パーソナルケア・コンシューマー分野に注力している傾向が強い(図3)。



図3 欧米大手化学企業の事業分野選択事例

出所: 各社公表資料よりみずほ銀行産業調査部作成(2015年1月時点調査)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

(2) 国内

日本企業においては、大型買収も売却もない安定事業が多く、また各社が幅広い事業分野を選択している。従来からの強みはエレクトロニクスであるが、近年は、高機能繊維、自動車、メディカル、ヘルスケア分野に注力している傾向が強い(図4)。



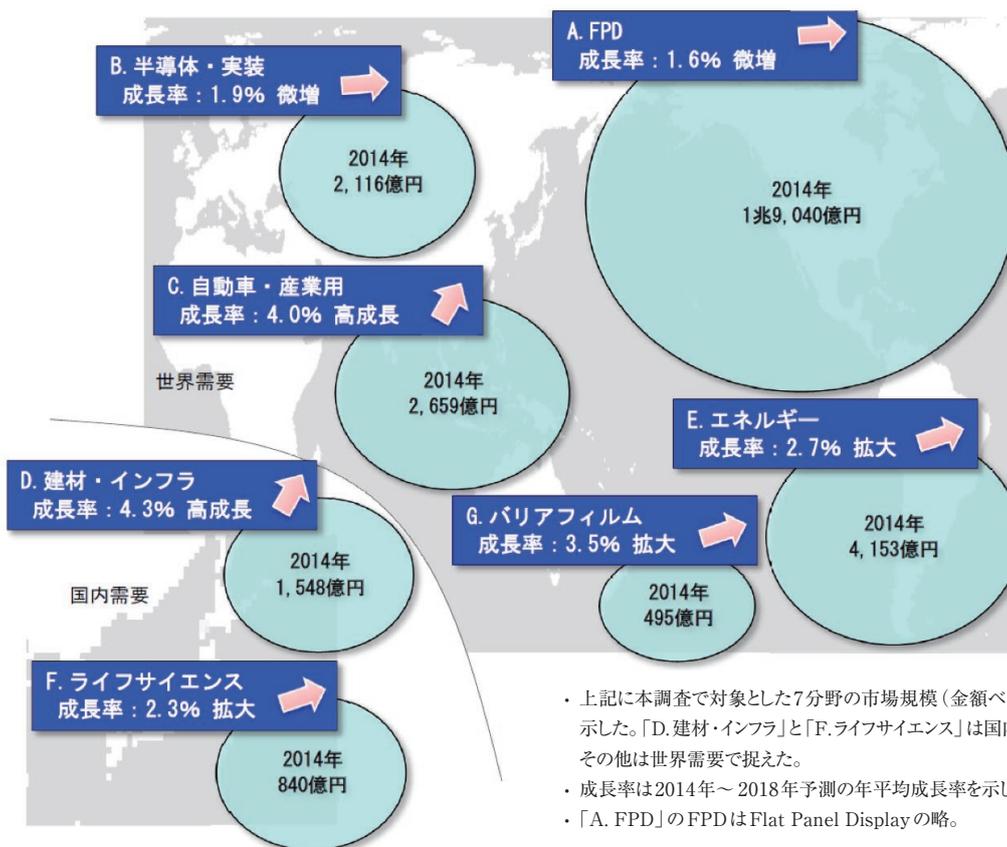
図4 国内大手化学企業の事業分野選択事例
出所: 各社公表資料よりみずほ銀行産業調査部作成(2015年1月時点調査)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

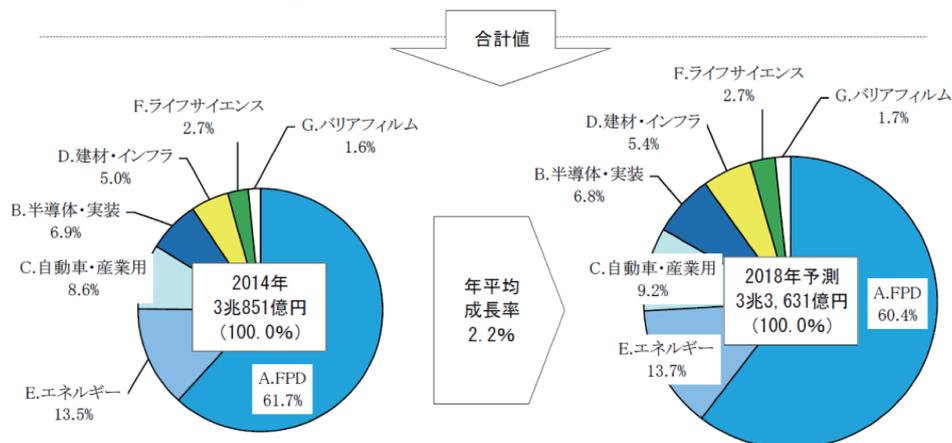
2-2 機能性フィルムの市場動向

ここでは、機能性材料のうち、材料の種類の多さ、成形自由度の高さ、後加工により様々な機能付与が可能といった特徴を持ち、幅広い分野で高機能化に繋がる2次元形態材料である機能性フィルムを対象に、その市場動向について調査・分析を行った。

2014年現在、機能性フィルムは3兆円を超える市場があり、今後も引き続き拡大する見通しである。特に自動車・産業用途、建材・インフラ用途の機能性フィルムは、高い成長率となることが見込まれている(図5)。



- ・ 上記に本調査で対象とした7分野の市場規模(金額ベース)を示した。「D.建材・インフラ」と「F.ライフサイエンス」は国内需要、その他は世界需要で捉えた。
- ・ 成長率は2014年～2018年予測の年平均成長率を示した。
- ・ 「A. FPD」のFPDはFlat Panel Displayの略。



※上記円グラフは本調査で対象とした7分野の合計値

図5 機能性フィルムの市場動向

出所:「2015年版 機能性高分子フィルムの現状と将来展望」(富士キメラ総研, 2015)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

様々な機能性フィルムにおいて、各機能性フィルムの世界シェア（販売量ベース）上位3社から日本企業を主要日本メーカーとして抽出し、それらのシェアを合算した。図6に示すように、主要日本メーカーが50%

以上のシェアを獲得している機能性フィルムの品種は全体の約7割を占めている。

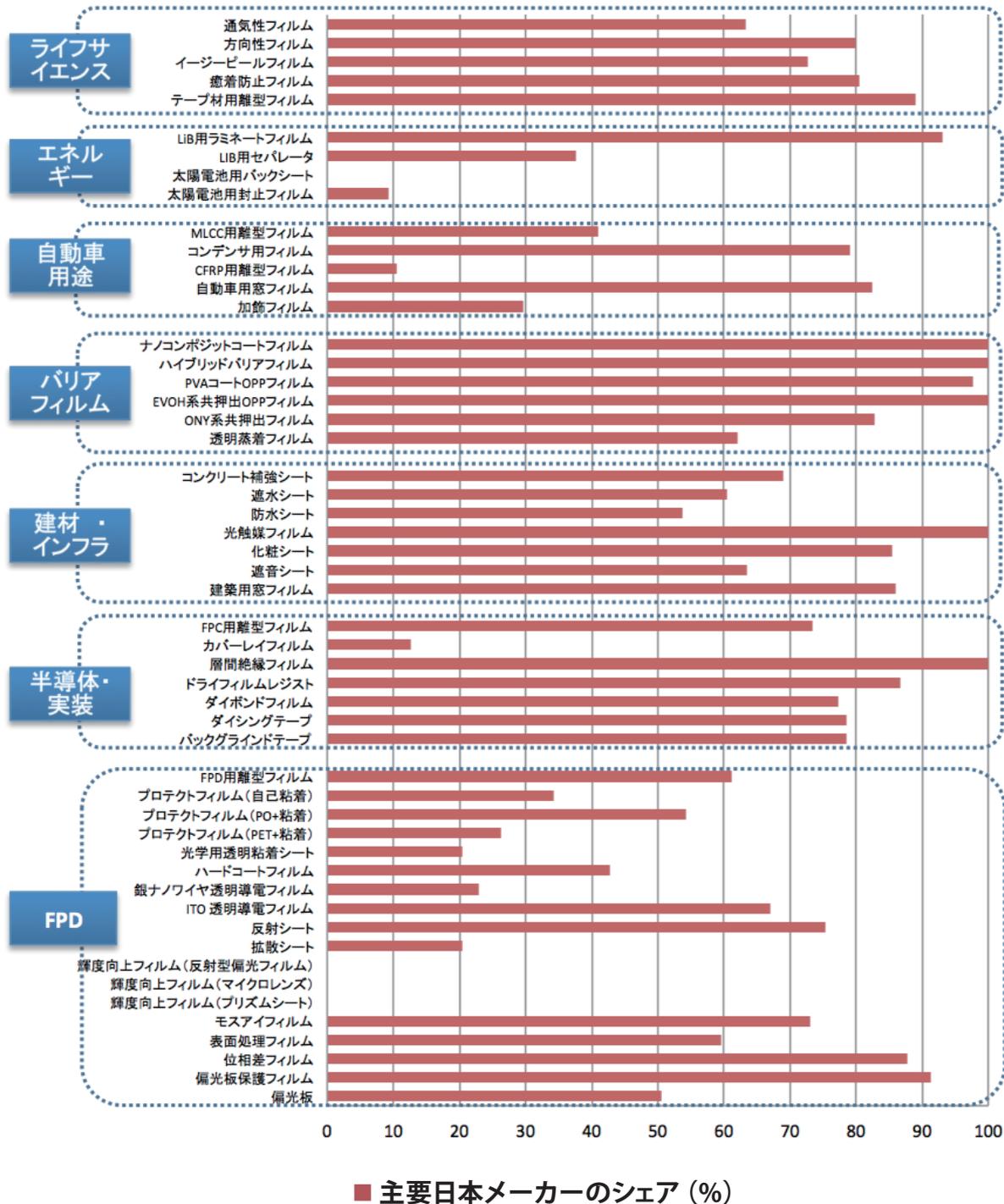


図6 機能性フィルム各品種の主要日本メーカーのシェア

出所：「2015年版 機能性高分子フィルムの現状と将来展望（富士キメラ総研）」よりNEDO 技術戦略研究センター作成（2015）

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

2-3 機能性フィルムの技術動向

(1) 発表論文数の推移

全ての分野の「機能性フィルム」論文数は年々増加傾向にある。近年、特に太陽電池や蓄電池等のエネルギー関連機器を主用途に見据えた研究の論文数が急激に増加している(図7)。

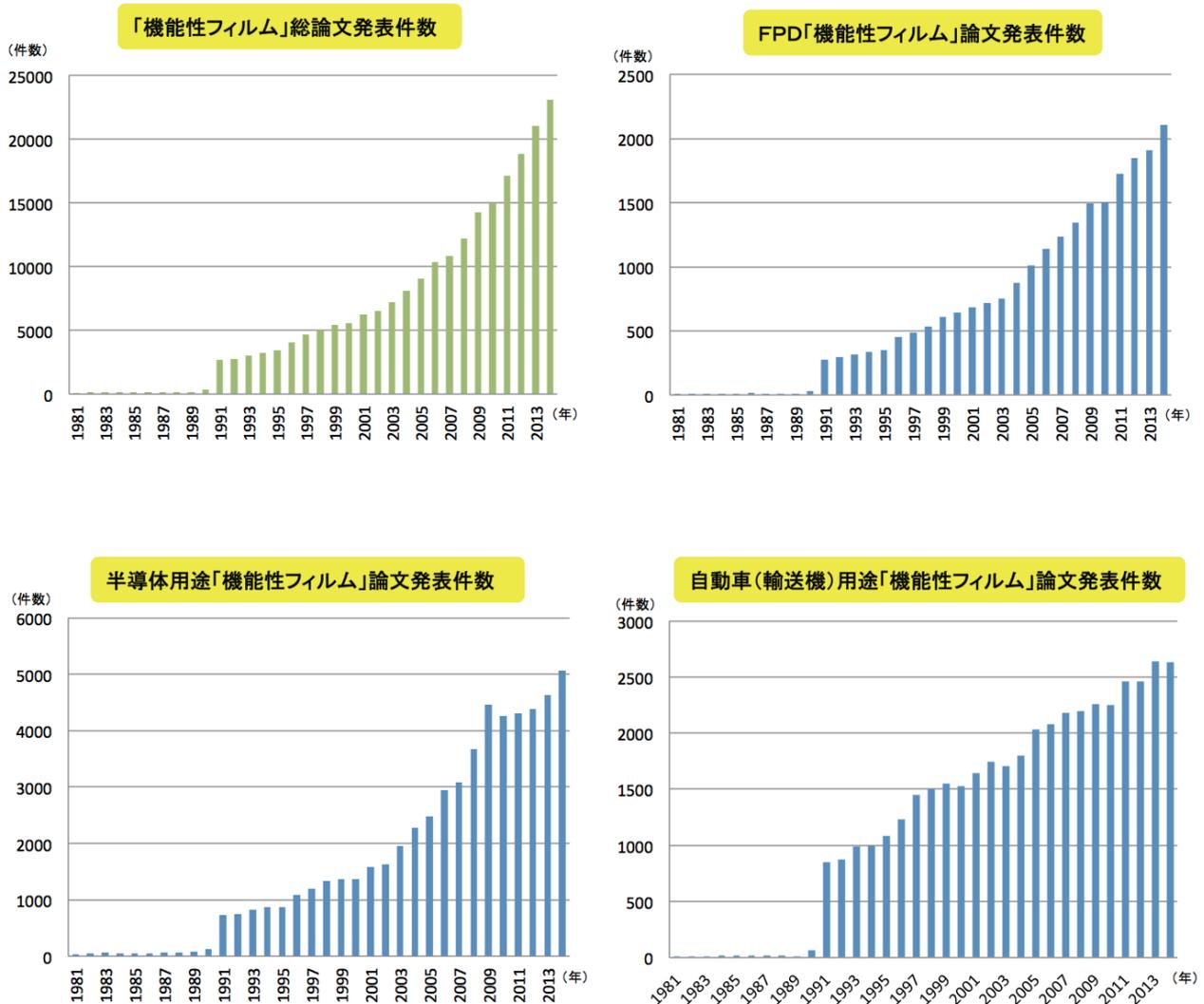


図7-1 機能性フィルムに関する論文数の年推移

出所: NEDO 技術戦略研究センター作成 (データベース: Web of Science Core Collection) (2015)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

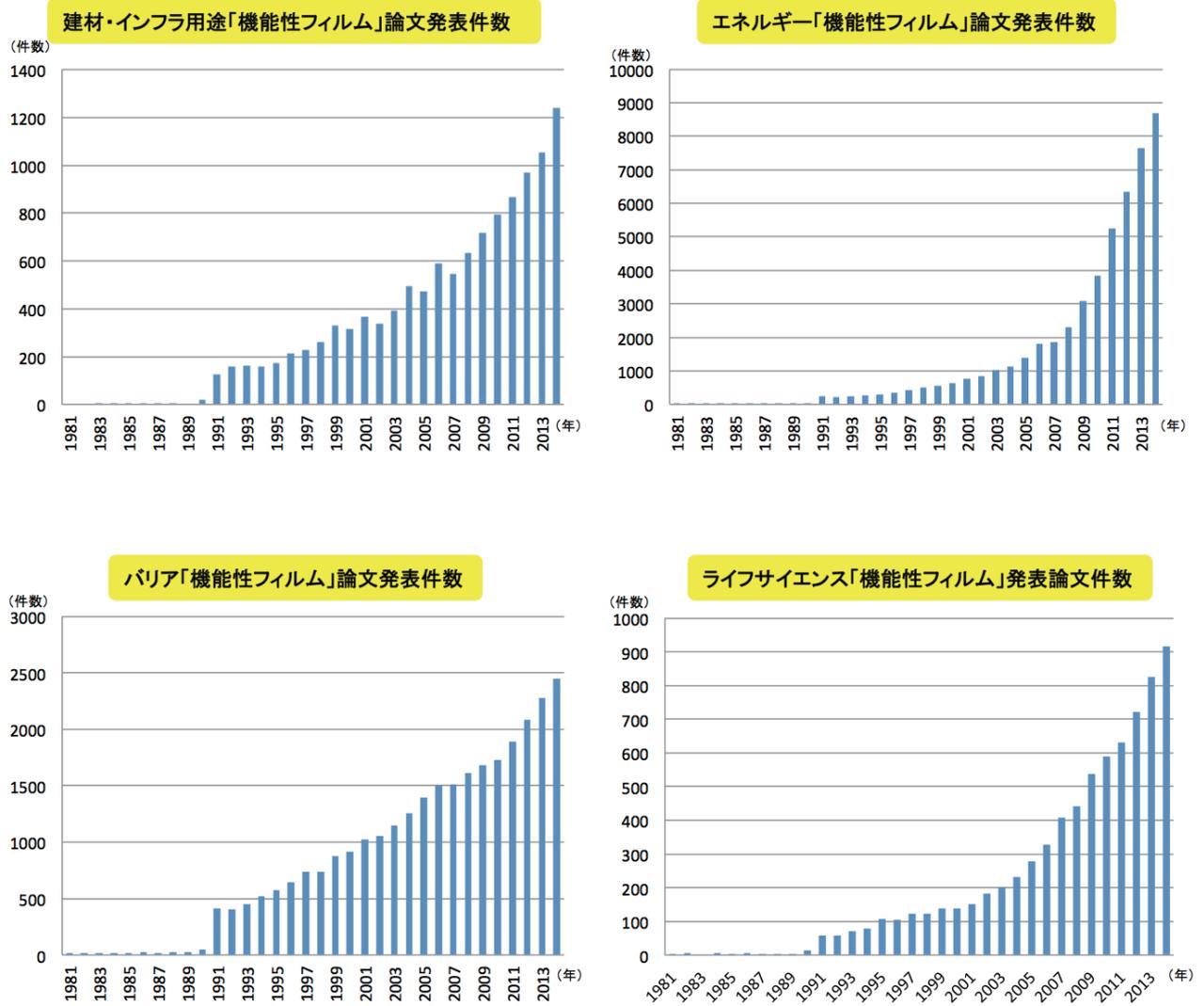


図7-2 機能性フィルムに関連する論文数の年推移

出所：NEDO 技術戦略研究センター作成（データベース：Web of Science Core Collection）（2015）

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

(2) 国別発表論文数の比較

日本は図示した全ての分野において2～4位に位置し、総数でも3位となっていることから、機能性フィルムに関する幅広い基礎技術力を有していることがわかる(図8)。

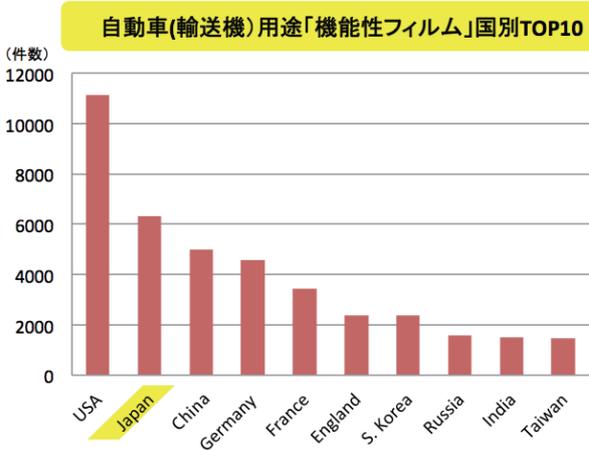
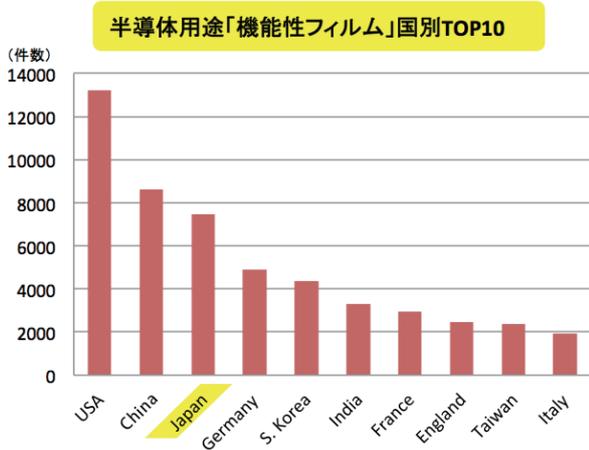
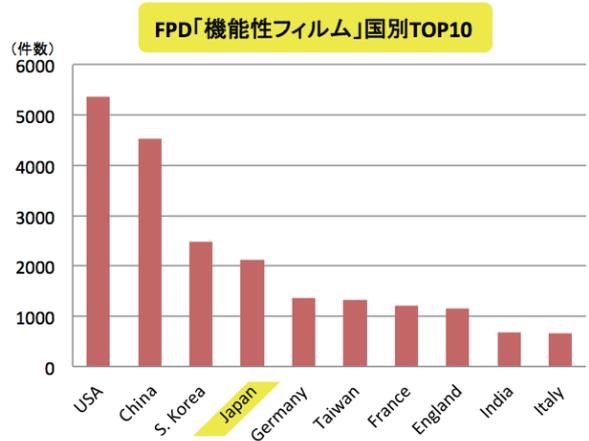
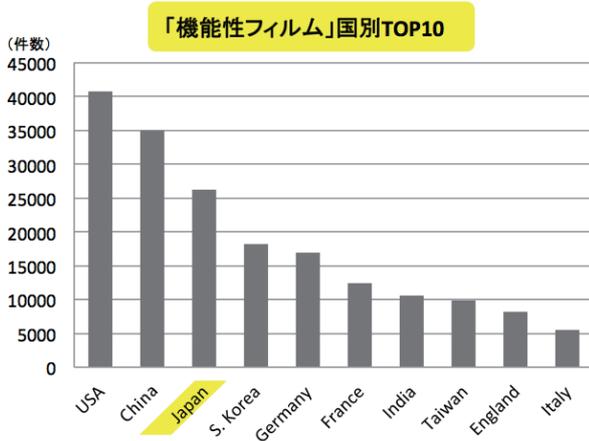


図8-1 機能性フィルムの国別発表論文数(上位10ヶ国)

出所: NEDO 技術戦略研究センター作成(データベース: Web of Science Core Collection) (2015)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

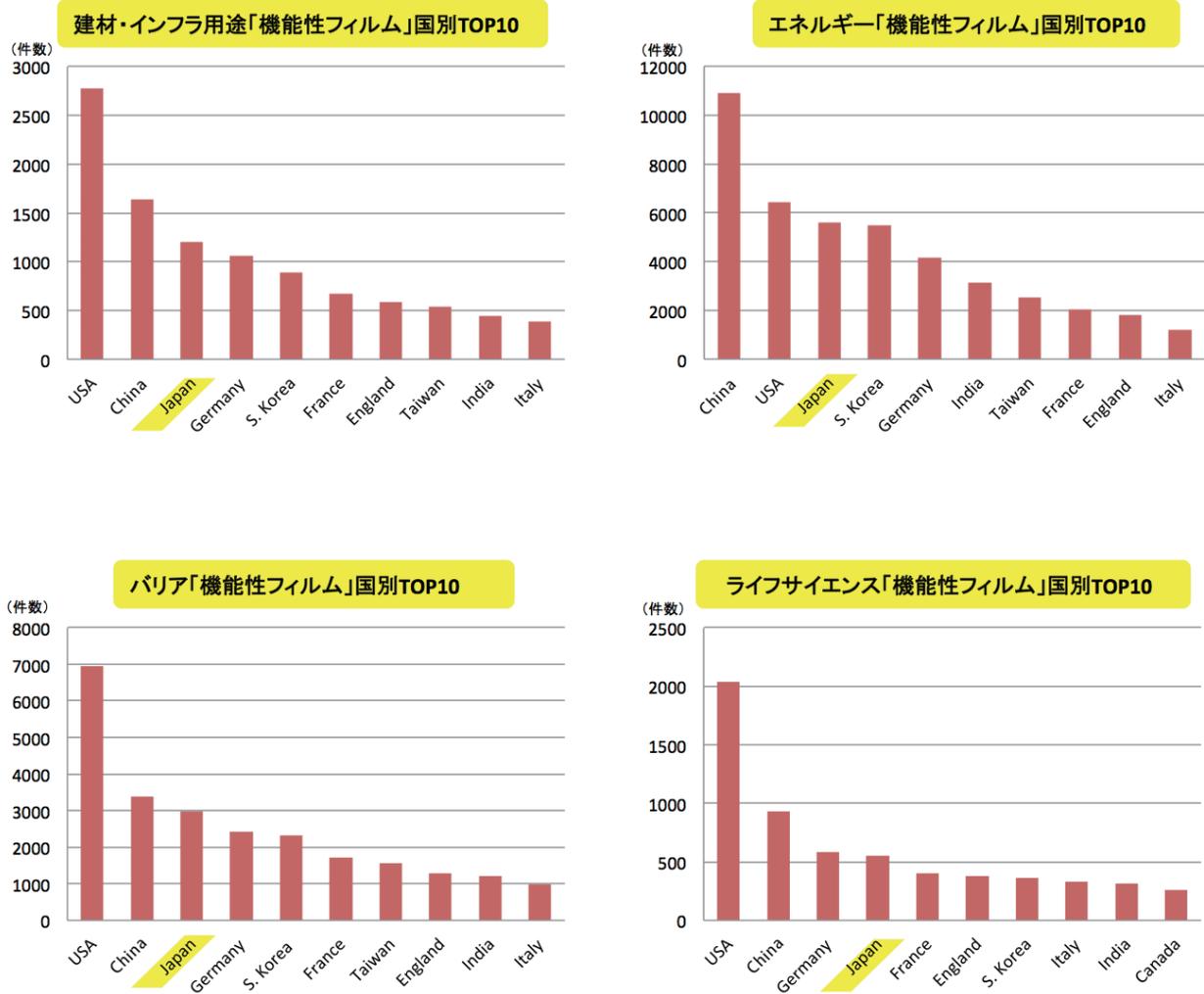


図 8-2 機能性フィルムの国別発表論文数 (上位10ヶ国)

出所: NEDO 技術戦略研究センター作成 (データベース: Web of Science Core Collection) (2015)

2 -4 諸外国の研究開発政策の状況

(1) 韓国

「第3次科学技術基本計画(2013年発表)」の中で、複数の材料技術を重点国家戦略技術に位置づけることにより、ナノテク・材料分野の研究開発を推進している。

2013年12月に策定した「第6次産業技術革新5カ年計画(2014-2018年)」において、「素材・部品」を含む4分野の課題を「未来産業エンジン」に指定し支援している。

2013年12月の「部品素材専門企業等の育成に関する特別措置法」に基づき、「第3次素材・部品発展基本計画(2013-2016)」を発表した。素材分野のフォロワーから抜け出し、市場リーダーになることを目標としている。

(2) 中国

「国家中長期科学技術発展計画(2006-2020年)」の8つの重点分野のひとつとして「素材(新材料技術・ナノ研究)」を指定した。

現行の「第12次5カ年計画要綱(2011-2015年)」で特定されている戦略的振興産業7つのうちのひとつとして「新素材」を指定し、新素材産業の発展のために新材料の研究開発と産業化を推進している。

(3) 米国

マテリアル・ゲノム・イニシアチブ(MGI)は、2011年6月にオバマ政権が打ち出した、新たな素材開発インフラの構築を目指すプロジェクトである。本プロジェクトでは、最先端素材の開発から市場導入までに要する時間を半減させることを目標に掲げ、素材開発に用いられる計算機シミュレーションや実験的手法など、様々なデジタルデータを活用した統合的アプローチの展開により、素材開発基盤の高度化を図ることを目指している。アプリケーションとしては、生活向上、クリーンエネルギー、人材育成、国家安全保障の領域を設定している。

CHiMaD(Center for Hierarchical Materials Design)は、2014年よりNISTが運営するMGIの中核を担う国家プロジェクトであり、目的は革新的素材(樹脂、合金)を開発設計するための次世代コンピューティングツール、データベース、実験手法の開発と産業界への導入にある。アルゴンヌ研究所、シカゴ大学コンピューティング機関等が参画している。

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

3章 計算科学を活用した機能性材料開発分野の技術課題

これまでの機能性材料開発では、経験と勘に裏付けされた実験的手法が大きく貢献してきた。現在の機能性材料は、材料のナノコンポジット化による機能の発現や、相反する二つ以上の機能を同時に高めることによる従来にない機能の実現など、材料の構造や合成手段等が複雑化する状況にある。このため、従来型の開発手法では実用化までに非常に大きな時間とコストがかかるという課題が顕在化しつつある。

このような課題の解決手段の一つとして、材料開発と計算科学との融合・連携によって革新的機能性材料の創成・開発の加速化を実現することが挙げられる。

具体的には、①マルチスケール（複数の階層）に応じた計算科学の高度活用、②高次元のデータから法則性を見いだす数理・情報科学の活用、③仮説⇔実証を効率的に行うための計測評価・試作技術との連携に関する各技術課題等を抽出していくとともに、これらを一体として推進していく必要がある（図9）。

3-1 計算科学

(1) 計算手法の分類

ここで取り扱う計算科学とは、「物質（材料）が従う力学（ニュートン力学・量子力学）の方程式を、コンピュータを使って近似的に解こうとする科学」である。方程式を数値的に解いた結果として分かる基本情報としては、①原子の位置（結晶構造や高分子鎖の折りたたみ構造など）と運動に関する情報、②電子の状態（軌道、エネルギーなど）、③物質のもつエネルギー、等がある。物質の機能に関わる物性データも、基本的には上記①～③のデータが基となって得られる。

扱う対象や注目する物性、近似の方法等により、計算科学における計算（シミュレーション）手法には多くの方法が知られているが、その手法は図10のように分類できる。

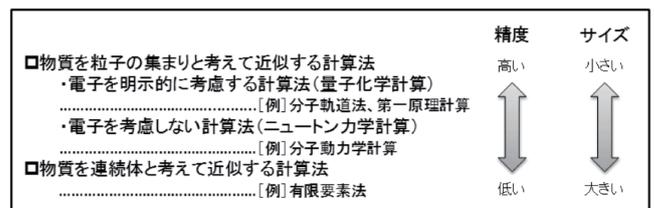


図10 計算手法の分類と特徴
出所：NEDO 技術戦略研究センター作成（2015）

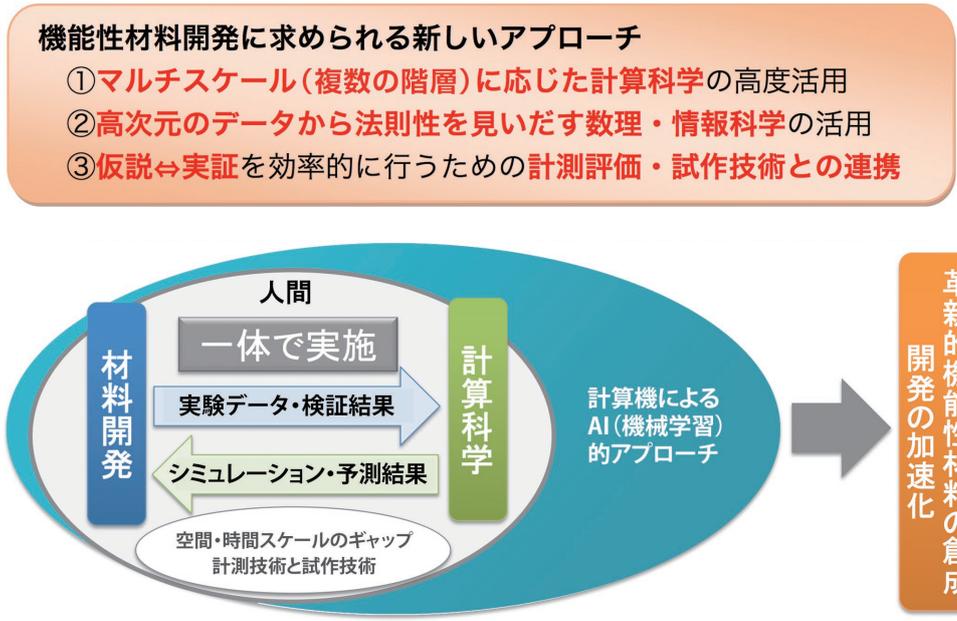


図9 機能性材料開発に求められる新たなアプローチ
出所：NEDO 技術戦略研究センター作成（2015）

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

(2) 材料開発への計算科学の適用

①無機材料・金属材料（結晶性材料）

無機材料や金属材料は、構造の最小単位となる結晶の構造（電子状態を含む）が計算や実験で分かると、材料のもつ電気的、磁気的、光学的性質を示すパラメータを第一原理計算等により求める（例えば、結晶の中に異なる元素をわずかに導入（ドーピング）したときに、これらの性質がどう変わるかについて計算により予測する）ことができる。このような材料構造の改変による物性変化をシステムティックに計算し、場合によっては実験と比較することにより物性の改良を行うことが可能となっている。

②ソフトマテリアル（高分子材料、非晶性材料）

高分子材料を代表とするソフトマテリアルは無機材料などと異なり、構造の単位が非常に大きいこと、結晶の単位格子のような明確な秩序性をもたないことなどの特徴がある。このため、量子化学的計算だけでソフトマテリアルを取り扱う場合には計算量が膨大となり、「京」の稼働する現在においても計算が困難である。したがって、ソフトマテリアルに対して計算科学を適用するためには、図11のように材料の持つ「階層」に合わせた計算手法（物質を粒子としてみる手法～物質を連続体とみる手法）を適宜活用する必要がある。

一方、時間スケールに関してもソフトマテリアル特有の問題がある。高分子材料の構造は不均質であることが多く、また、例えば荷重を加えたときの弾性・粘性・塑性的な変形挙動が材料の構成部位ごとに大きく異なり、変形過程で分子鎖の切断や結合といった反応も生じるなど、材料の内部構造の変化が時間に依存する。このため、計算においては時間スケールも捉えておく必要がある。

(3) マルチスケール・シミュレーション

材料の特性を知るために、量子化学計算などを用いたナノスケールシミュレーションを行う場合は、空間/時間スケールを数nm/数十ns程度の小さな計算モデルに限定せざるを得ないが、ほぼ計算したい化学構造式そのものをモデルとしたシミュレーションが可能である。そのため、計算結果の解釈が容易で、開発者が必要とする分子構造を直接取得することができる。一方で、前述したように高分子材料全体を考慮したナノスケールシミュレーションを行うことは、計算量の制限により現段階ではほぼ不可能である。

これに対して、高分子の構造を部分的に取り入れたメソスケールシミュレーションという手法がある。メソスケールシミュレーションにおいては、高分子の各構成部位を例えば、ビーズ（「ヒモ」と「玉」）とみなす（＝粗視化）。粗視化をほどこすことにより、現実の材料に近い空間

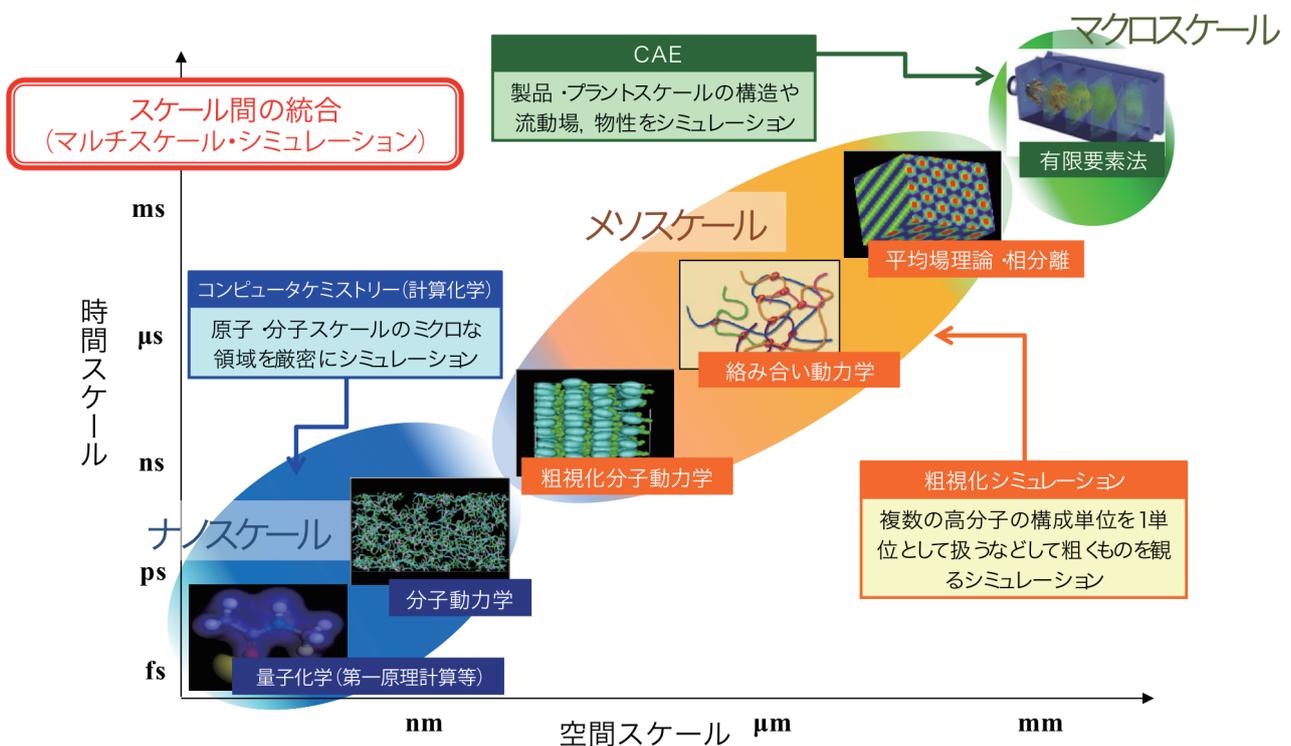


図11 高分子構造の各階層と計算手法の対応

出所：東レ株式会社作成資料を基に NEDO 技術戦略研究センター作成 (2015)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

及び時間スケールの計算が可能となり、材料の表面や界面の構造や材料内部における構造の多様性を包含したシミュレーションを行える可能性がある。その反面、粗視化したがいえに高分子の化学構造は抽象化されてしまう。メソスケールシミュレーションは現在発展途上の手法であり、例えば、パラメータの決定方法については研究が進行中である。

ソフトマテリアルを開発する目的で計算科学を利用しようとする場合には、上記のような種々の計算手法を使い分けるだけでなく、それぞれの手法の良さを一体として活用できることが望ましい。これが「マルチスケール・シミュレーション」の考え方である。各研究者らは、異なる階層のシミュレーション手法をうまく連成させて一体化したシミュレーション手法を研究している。ソフトマテリアルの開発には、最新の研究成果に基づくシミュレーション手法の適用が必要である。

(4) マルチスケール・シミュレーションの例

高分子材料を開発する上で、常に注目されるのが相分離挙動(2種類の高分子が混ざるか・混ざらないか、混ざらない場合にどのような状態をとるか)である。例えば、ほとんどの高分子は、異種混合しても均一に混ざらず、ミクロスケールの海島のような分離構造をとる。また、2つの混ざりの悪い高分子の末端を繋げたブロックコポリマーもある。このブロックコポリマーは、2つのブロック部は分離するが、結合されて繋がっているため、数nmの分子スケールで近接しなくてはならないことから、10～20 nm程度の「ドメイン」と呼ばれる部分構造を持ったマイクロ相

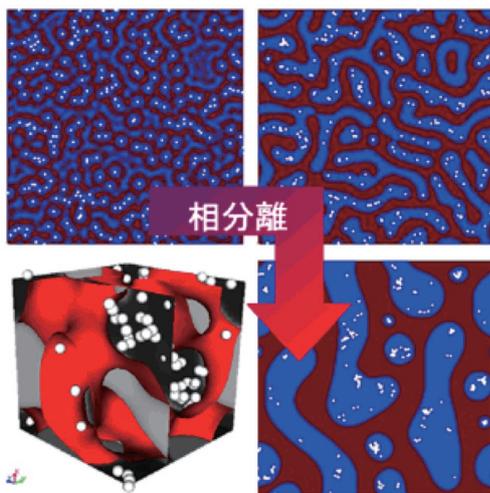


図12 粗視化シミュレーション事例
出所：ナノ粒子を含む高分子混合系材料の構造をシミュレーションするソフトウェア(産業技術総合研究所, 2010)

分離構造をとる。このように、相分離構造はソフトマテリアルの構造を規定する重要な因子であり、ソフトマテリアルの開発者は構造制御によって材料の使用目的にあった物性を発現させようとする。

現状から考え得る、近未来の相分離材料の設計には、①ナノスケールシミュレーションを用いることによって、高分子をメソスケールで記述するためのパラメータの設定、②メソスケールパラメータを入力とした相分離シミュレーション(メソスケールシミュレーション)、という手順がとられると考えられる。実際の実験結果(相分離構造データ)がある場合は、シミュレーション結果と対応させることでメソスケールパラメータの精密化が可能であるが、必ずしも実験結果が計算に必須というわけではない。シミュレーション結果から、例えば高分子の分子鎖を少し長くするといったパラメータ変更を行い、再度シミュレーションを実施し、所望の相分離構造に近づけていくことができる。

図12は2種類の高分子が混合された系とナノ粒子が充填された材料の分散構造のシミュレーションを行った事例である。材料の構造から、その機能を計算によって導出するためのシミュレーションを行うソフトウェアを開発していくことが必要である。

(5) 大型計算リソースの戦略的活用

材料シミュレーションの取組として、計算環境の整備も行われている。文部科学省のハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)により、「京」や大学の持つ大型計算リソースを高速ネットワークで結び、5つの戦略分野：「予測する生命科学・医療及び創薬基盤」、「新物質・エネルギー創成」、「防災・減災に資する地球変動予測」、「次世代ものづくり」、「物質と宇宙の起源と構造」を設定し、戦略的に活用されている。

上記HPCIの助成をうけ、3つの拠点(東京大、分子科学研究所、東北大)と11の協力機関が、物性科学、分子科学、材料科学を母体とする計算科学研究者で構成されるネットワーク型組織(計算物質科学イニシアティブ:CMSI)を結成し、研究活動が推進されている(図13)。



図13 計算機のインフラ整備
出所：NEDO 技術戦略研究センター作成(2015)

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

3-2 数理・情報科学

発現する材料の機能は、当該材料の合成プロセスや製造プロセスの条件によって大きく異なるため、大量の条件データから、目的とする機能に結びつく有効な条件（因子）を効率的に抽出できることが材料開発の迅速化につながる。また、機能（性能）目標を達成するための試行回数を有意に削減し、試行効率を向上させることが開発期間を短縮する上では効果的である。したがって、どのような合成や製造プロセ

スであれば目的とする機能が期待し得るかを類推する手法に関する技術（AI等）の開発が期待される（図14）。

近年、大量のデータを高次元データとして取り扱う統計・数理的手法が発達している。多次元の条件を変えて実際に製造した、又はシミュレーションにより予測した大量のデータから、要求機能に対する有効因子や発現機能を更に高度化するための材料構造や製造条件を、効率的に抽出・予測する検討が行われている（図15）。

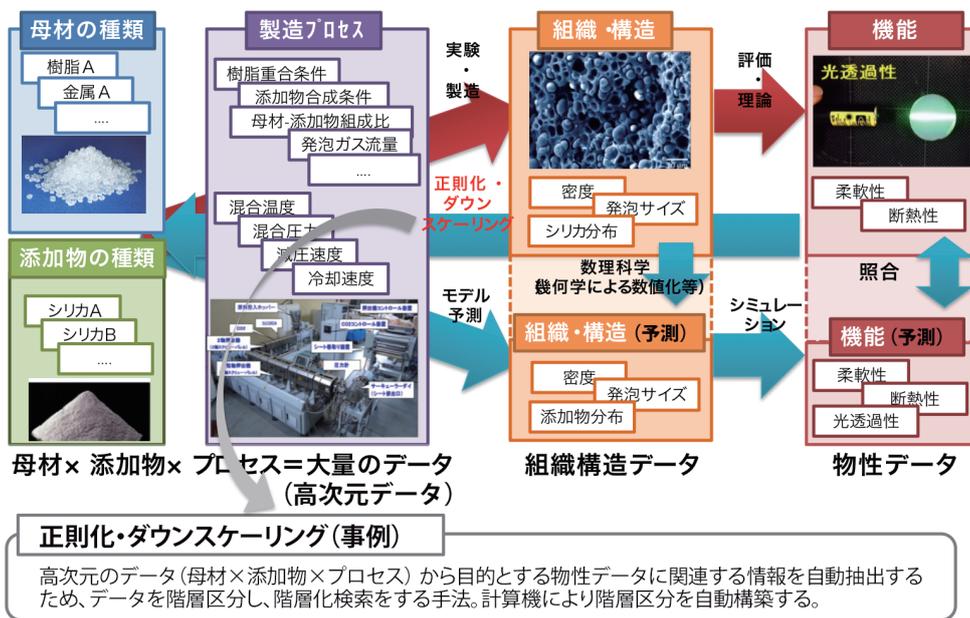


図14 素材合成・製造プロセス・構造・機能との概念図
出所：NEDO 技術戦略研究センター作成 (2015)

物質の階層構造をとりいれたマテリアル・インフォマティクス

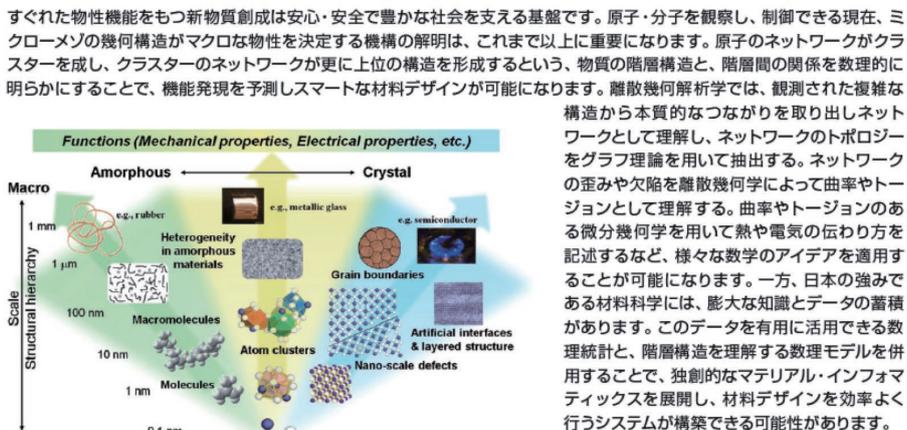


図15 材料開発による数理科学の研究事例
出所：東北大学大学院理学研究科数学専攻・WPI-AIMR (2014)

東北大学大学院理学研究科数学専攻・WPI-AIMR

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

具体的な計算手法としては前述のナノスケールシミュレーションや相分離シミュレーションを用いることになるが、いくつもの物性を最適化するために、必然的に実験データの数もシミュレーションの回数も増加する。限られた時間・リソースの中で開発を進めていかなければならない状況下で、大量のデータからの確に開発の方向性を見つけていくために、数理学・情報（データ）科学を用いた実験・計算結果の評価／フィードバックの可能性が注目されている。

仮説⇔実証によるアプローチと、勘と経験による試行錯誤を併用した従来の材料開発では、すでにある実験条件の周辺で新しい条件を設定する傾向や、多くの実験条件の中から注目する条件のみを変化させ、変化させた条件が目標とする機能に及ぼす効果を知ろうとする傾向があり、探索空間を意識・無意識にかかわらず狭めてしまうこと、実験の数の増大を招いてしまうことなどの問題がある。

更に、現在のシミュレーション技術は部分的・限定的であり、すべての実験条件を考慮し、アウトプットとして機能（性能）を予測する計算ができないことが多いために、シミュレーションの役割が研究者の思考の補助にしかならず、探索の方向づけは研究者の発想に依存している。加えて、過去の知識・経験を活かすということも研究者の主観による判断に依存している。

数理・情報科学と計算科学の協働による新しい材料開発では、現在の開発活動と、次にどこを探索すべきかの抽出活動を研究者の主観や発想だけに頼らず、計算機の力を借りてできるだけ客観化することを目標とする。すなわち、最終的な判断は研究者が行うとしても、過去の暗黙知も含めて、判断に至るプロセスにできるだけ計算機を関与させ、判断材料を客観化（見える化）することを目標とする。

近年、特に気象予報や気候予測の分野において実施されている大規模な予測シミュレーションが効果を上げている。データ同化と呼ばれるこの計算手法は、確率分布の考え方をベースに既存のデータに新しいデータが付加されたときの確率分布の変化を漸化式的に解いていく手法である。従来多く用いられてきた「最適化計算」とは異なり、予測値と予測値を取り得る確率という観点から予測・推測の妥当性を客観的に判断できる点に特徴があり、例えば、ある物性のピーク値が予測できた場合に、その予測がどれくらい確からしいかを予測により得られる物性の期待値の分布によって把握する。

データ同化手法には、カルマンフィルター、マルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）法等が、実際の計算アルゴリズムとしては粒子フィルター等が報告されている。ただし、データ同化の応用先としては気象や天体データなど、時系列性のあるデータへの適用が中心になっており、必ずしも材料開発への応用例は多くないことから、効果的な材料開発への適用方策について検討していく必要がある。

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

3-3 計測評価・試作技術開発

計算科学を活用した技術開発においては、革新的な機能性材料を創成するだけでなく、開発の過程そのものの効率を飛躍的に高めるための、以下のような先端的な共通基盤技術の検討を併せて推進していく必要がある。

(1) 計測評価技術開発

シミュレーションにより提案された設計どおりの材料を試作し、最適な合成や構造が実現できているか、目的とする機能が発現できている

るかの計測評価を行う技術開発が必要である。機能発現がナノ構造に起因していることから、ナノスケールでの計測技術が不可欠である。

ナノ計測評価技術の事例としては、素材の構造解析を行う陽電子消滅法 (PAS)、界面構造解析を行う和周波発生分光法 (SFG)、物質との相互作用解析を行う原子間力顕微鏡 (AFM) などがあり、これら複数の計測評価技術を組み合わせる必要がある (図16)。

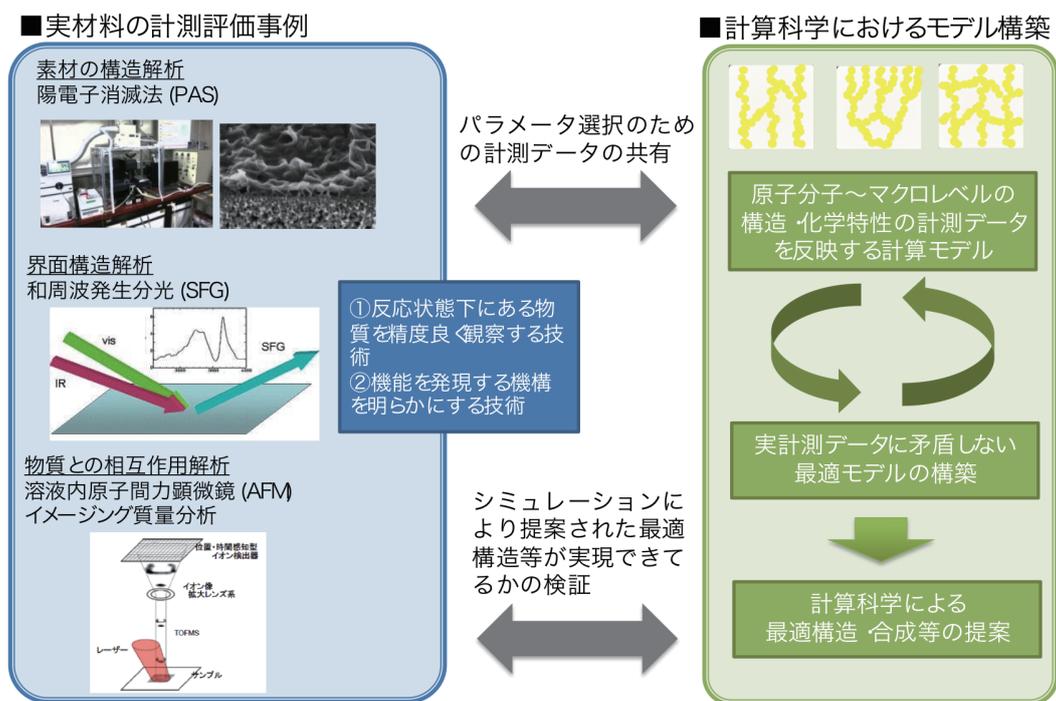


図16 計測・評価技術と計算科学との連携イメージ

出所：産業競争力懇談会 2014年度 プロジェクト 最終報告 革新的高機能分離素材の開発（分離・除去・吸着）（2015）、東北大学大学院理学研究科 森田明弘教授発表資料（2015）等を参考に NEDO 技術戦略研究センター作成（2015）

機能性材料分野の技術戦略策定に向けて

(2) 試作技術開発

従来の機能性材料の製造においては、コスト削減のための大型プラントでの多段階反応による大量合成が必要であったが、素材開発の加速化のためには、材料試作そのものを劇的に短縮し、高精度で新素材の試作を可能とするための、新しいプロセス開発が必要である。なお、創薬分野では、ロボットによる化学合成を利用した少量多品種合成による、コンビナトリアルな高速スクリーニングやフロー型反応器や固定化触媒を組み合わせる精密な化学合成を行い、新規化学材料の開発と製造を同時に進める、新しいアプローチが検討され始めているところである。

機能性材料開発においても、①迅速な反応を可能とする触媒技術、②マイクロリアクターの設計・製造技術、③マイクロ波やレーザー等による選択的・局所的な加熱技術、④新規吸着剤や膜等による分離・精製技術などを組み合わせ、これらをバッチ処理ではなく、全自動フロー型のこれまでにない高速プロセスで試作するための技術開発が必要である(図17)。



全自動フロー合成システム開発 シーケンス型ロボット合成システム開発

図17 高速試作プロセスの概念図

出所：産業技術総合研究所発表資料(金属ナノ粒子の連合成装置を開発(2011))等を参考に経済産業省産業技術環境局研究開発課作成(2015)

4章 おわりに

我が国の機能性素材産業は、個々の製品の市場規模は小さいものの、世界中で高いシェアを有しており、これらをまとめて大きな市場を獲得している状況である。この素材産業の優位性を保つためにも、機能性材料の技術革新を継続していく必要がある。

本レポートでは、機能性材料のうち、材料の種類の多さ、成形自由度の高さ、後加工により様々な機能付与が可能といった特徴をもち、幅広い分野で高機能化に繋がる2次元形態材料(機能性フィルム)を対象に、我が国の産業や技術動向について調査・分析を行った。その結果、多くの機能性フィルムの品種において日本企業のシェアが50%を超えており、論文発表に関しても我が国の優位性が依然として高いことがわかった。ただし、先進国のみならず、人海戦術方式の新興国の猛追を退け、将来にわたって我が国の優位性を維持するためには、技術開発を加速していく必要がある。

機能性フィルムを含む従来の機能性材料開発では、これまでの経験と勘に裏付けされた実験的手法が大きく貢献してきたが、開発対象材料の構造や合成手法等がますます複雑化しているために、近年では実用化まで非常に大きな時間とコストがかかるようになってきている。この課題を解決する手段として、材料開発と計算科学との融合・連携による機能性材料開発の効率化・加速化が有望視されている。

これまでにない革新的な機能性材料の開発、及び開発期間の短縮に向けて、①マルチスケール(複数の階層)に応じた計算科学の高度活用、②高次元のデータから法則性を見いだす数理・情報科学の活用、③仮説と実証を効率的に行うための計測評価・試作技術開発を実現することが有効と考えられるため、これらを一体で推進していく技術開発への注力が望まれる。

本資料は技術戦略研究センターの解釈によるものです。掲載されているコンテンツの無断複製、転送、改変、修正、追加などの行為を禁止します。引用を行う際は、必ず出典を明記願います。