

## 2019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十五条第一号の二、三及び九号

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、市場規模が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である。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等の実験・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。

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・開発期間を1/20に短縮することを目指す。

[委託事業]

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（2021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、論文・特許等の公開データに対する、材料データの構造化 AI ツールのプロトタイプを作成するとともに、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（2018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（2021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（2021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（2021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（2018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”または“In situ”で評価を可能とする計測手法を確立する。

[助成事業（助成率：1／2または2／3）]

研究開発項目④基盤技術等を活用した機能性材料の開発

**【最終目標（2021年度）】**

第1期で確立されたシミュレーション手法を個社での材料開発に適用し、その有用性（試作回数・試作期間 1/20）を実証する。

#### 4. 実施内容及び進捗状況

プロジェクトマネジャーに NEDO 材料・ナノテクノロジー部 岡本 昌彦 主査を任命してプロジェクトの進行全体を企画・管理、技術的成果及び政策的効果を最大化させた。

2017年度に引き続き、国立研究開発法人産業技術総合研究所（以下、「AIST」という）と先端素材高速開発技術研究組合（以下、「ADMAT」という）は AIST 村山 宣光 氏をプロジェクトリーダー（以下、「PL」という）として研究開発項目①②③を実施した。AIST と株式会社先端ナノプロセス基盤開発センター（以下、「EIDEC」という）は研究開発項目③の一部を実施した。

##### 4. 1 2018年度事業内容

###### 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

（実施体制：AIST、ADMAT）

量子力学、粗視化分子動力学、有限要素法等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を開発した。

###### 1) キャリア輸送マルチスケール計算シミュレータの開発設計

第一原理シミュレータの対象規模拡大、マクロ側におけるドリフト・拡散方程式に基づく TCAD デバイスシミュレータの有機材料への適用拡大や、幾つかの計算機能の追加等を行い、マイクロ-マクロ連携強化による順方向予測性能の高度化等を図った。

###### a) 電気・熱等のマルチスケール伝導計算シミュレータの開発

第一原理シミュレータとマクロシミュレータをつなぐ階層間連携（マルチスケール）を強化し、ナノメートルスケールからミリメートルスケールの部材の電気・熱等の伝導に関する順問題ソルバ群を構築した。

###### b) 分子、イオン界面原子ダイナミクスに関するマルチスケール計算シミュレータの開発

第一原理分子動力学シミュレータとデータ科学的手法を組み合わせる事により、第一原理分子動力学シミュレータ単独では実施が不可能な、大規模かつ複雑な界面近くの分子、イオン、原子ダイナミクスが関わる複雑なモデル材料に対する順方向予測手法を開発した。

###### 2) 外場応答材料と複雑組織材料の大規模計算シミュレータの開発

###### a) 第一原理多体計算に基づく外場応答の大規模計算シミュレータの構築

複素誘電率や光学伝導率といった外場応答機能に対する大規模第一原理シミュレータを構築した。また時間・空間粗視化分子動力学法や第一原理経路確率法計算等の開発を行った。

###### b) 組織材料とマイクロ構造に関する計算シミュレータの構築

時間・空間粗視化分子動力学法や第一原理経路確率法計算等の開発を行うことにより、液晶エラストマー系ポリマーのマルチスケール計算手法等の材料組織とマイクロ構造に関するマルチスケール計算シミュレータの構築を行った。

### 3) 機能性ナノ高分子材料のマルチスケール計算シミュレータの開発

#### a) ソフトマテリアル統合シミュレーションプラットフォームOCTAの拡張

大量データ解析や AI との連携を想定したソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA のプラットフォームの拡張、画像処理ツールの開発、機械/深層学習連携インターフェースの開発を行った。

#### b) 機能性ナノ高分子材料のための粗視化シミュレーション機能強化

コロイド・微粒子分散系シミュレータのフィラー間相互作用、ポリマーブレンド相分離等の拡張を行った。また、ナノカーボンシミュレータの大規模拡張、高速化、さらに温度・電流の拡散方程式を解く機能の追加等を行った。

### 4) マルチスケール反応シミュレータの開発

量子化学計算をもとにした全素過程反応経路の自動探索計算技術を効率化、触媒塊等の影響も含めた流路解析に資する流体・構造物連成シミュレーション等の開発研究、さらにこれらの方法を分子集合体中で起こる現実の複合化学反応系の化学反応シミュレーションへの適用を行い、これらの構築されたシミュレータとAIを用いることによって未知の系の収率予測が可能であることを確認した。

### 5) 深層学習・機械学習、離散幾何解析を用いた材料データの解析技術の開発

複雑材料を対象とした材料設計を行うための離散幾何解析に基づく構造情報解析環境や、材料データ解析のための可視化支援サービス等、マルチスケール計算シミュレータと機械学習法とを融合するためのソフトウェア群を開発した。

また2018度からの新規取組みとして、データを活用した材料開発(マテリアルズインフォマティクス)の実施を指向する企業群を支援するため、材料開発データの共通フォーマット整備、公知の論文、特許等の材料データ構造化のために必要なテキストマイニング・画像認識技術等に関する研究等に関する調査等を行った。

## 研究開発項目②高速試作・革新プロセス技術開発

(実施体制：AIST、ADMAT)

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を開発した。

#### 1) 様々な界面制御技術による自在なヘテロ接合素材の開発

ナノ粒子合成法の検討を行い、ナノ粒子の小径化と均一粒径化、さらに結晶化時間短縮が可能であることを見出した。合成した粒子の分散粒径を制御することで、良分散液を得ることが出来た。さらにフィルム試作条件の検討を進め、フィルム中で良分散を保持でき、さらに分散性の向上条件を見出した。また、ナノ粒子解砕・分散技術では、混練に供する前の凝集状態の適切な制御によって、大幅な易分散化が可能であることを見出した。

## 2) ポリマー系コンポジット材料プロセスに関する基盤技術

ポリマー系コンポジット材料、発泡材料の製造・評価プラットフォームの確立、モデル材料について試作の高速化整備、プロセスデータ取得システムの高度化を行った。発泡材料は、核材が発泡構造に及ぼす影響のシミュレーションを行った。CNT 複合材料作製プロセスでは表面改質技術における処理ムラの問題を解決するべく、気相法を利用した表面改質技術の開発を行った。

## 3) 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

反応経路自動探索計算 (GRRM/AFIR) 技術を触媒反応の機構解析に応用し、モデル反応の触媒活性種と反応機構を解明し、触媒反応機構の解析系を構築することに成功し、これによりフロー合成用の固定化触媒及びフロー合成反応の設計が可能となった。

## 4) ナノカーボン材料プロセスに関する基盤技術開発

### a) CNT線材作製プロセスに関する基盤開発

CNT線材は試作品の配向状態と導電率との相関から、分散液中におけるCNTの分散が伝導特性へ影響を与えていることが示唆された。ヨウ素ドーピングしたCNT線材については、ドーパント分布が線材全体に一樣であることが分かり、成果から得られた知見を、シミュレータのモデル構築に提供した。

### b) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

プロジェクト開始前と比較して3倍の銅箔巻き取り速度でのグラフェン合成を達成した。また、合成面積1 cm<sup>2</sup>で高品質な厚膜h-BN合成の再現性を著しく高めることに成功した。

### c) CNT複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

ナノカーボン複合材料のCNTに対して官能基付与を行い、表面エネルギーを制御するためCNT・フィラーおよび高分子母材間の相互作用を自在に制御できる気相法を利用した表面改質技術、及び表面エネルギー評価システムの開発を行った。

## 研究開発項目③先端ナノ計測評価技術開発

(実施体制：AIST、ADMAT)

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”または“In situ”での構造評価・機能評価を可能とする以下の計測装置・手法を開発した。

### 1) 表面・界面の構造計測とナノ領域の多物性同時評価：和周波分光及びナノプローブ分光

和周波分光システムは高速測定が可能なSFG分光により膜界面の分子挙動だけでなく、実動作条件下での界面の電荷挙動の観察が可能となった。ナノプローブ分光システムではSi平坦基板上に分散したVO<sub>2</sub>ナノ粒子試料のナノ粒子像とSi基板部とのコントラストの変化から個々の粒子の相変化を確認した。

2) 有機(無機)コンポジット材料の3次元マルチスケール構造評価:電子分光型電子顕微鏡、陽電子消滅及びX線CT

a) 電子分光型電子顕微鏡

ポリマーブレンドモデル試料のSTEM-EELS、EDX分析手法の最適化を行い相容化剤の界面での局在性を明らかにした。また、STEM-EDX トモグラフィーによるSBR/IR/シリカ3成分コンポジットの3次元構造解析では、ゴムブレンド+フィラー系における相構造・フィラー分散状態の3次元観察が可能となった。

b) 陽電子消滅法とX線CT

陽電子消滅法では、難観測材料として知られるポリイミド材料の解析技術を開発、更なる高精度化に加え、測定条件最適化により、細孔構造を非破壊かつin-situで評価するシステムの高効率化を実現した。X線CT計測では、サブマイクロメートルオーダーでの三次元構造ならびに組成分析を同時に可能とするオンサイト計測技術の構築を進めた。

3) フロープロセスの高感度・in-situ計測:フロー型XAFS及びNMR

In-situ XAFSについては金属ナノ粒子のフロー合成条件下における測定条件について検討を行い。反応開始から約0.5秒後のPd K吸収端XANESスペクトルの取得に成功し、数nm程度のPdナノ粒子形成を確認した。

DNP-NMRについては不溶性有機ポリマーの超高速解析を進めるためのベンチマークとして架橋型ポリスチレンの測定方法の検討を行い、NMRのシグナルを85倍(測定時間換算で7000分に1に相当)向上させることに成功した。

4) ナノカーボン材料の構造・物性評価技術開発

a) CNT線材の導電障害部を可視化する計測評価技術開発

CNT電線中のバンドル構造と電気伝導性との関係を検討するとともに、ナノ材料内部のドーパント位置観察技術の開発を行った。

b) 積層グラフェンの局所電気物性計測に関する計測技術基盤開発

グラフェンでは電磁波顕微鏡計測システムにおいて、グラフェン/h-BNの実サンプル測定を行い、既存の電磁波入力・検出装置の高周波化、測定精度及び電気特性解析技術の改良を行い測定条件のライブラリを構築した。

c) CNT複合材料評価に関する基盤技術開発

CNT複合材ではアニユラー型EDSシステムを導入し、10nm以下の高い空間分解能にて軽元素イメージングすることを可能にし、空間分布を含めた官能基評価法の開発に成功した。また、ロックイン発熱解析イメージングを用いて複合材内に内包される $\mu\text{m}$ スケールの微視的なCNT導電パスをcmスケールの巨視的な視野で可視化することを可能とした。

また研究開発項目③「先端ナノ計測評価技術開発」単独の課題として以下を開発した。

(実施体制：AIST、EIDEC)

#### 1) ナノ物質計測技術の構築

流れ速度分布の新規計測手法 (NPTV 法)、FPT 法で計測される粒子径分布の不確かさを補正する BC-PTA 法等の基盤技術を構築することで、動的光散乱法や単一粒子光散乱法を凌駕する新規評価手法である「流れ場」における粒子追跡評価法 (Flow Particle Tracking (FPT) 法) を確立した。[AIST]

シングルナノパターンニング材料 (レジスト) による計測技術検証、次世代レジストアウトガス計測技術の開発及び有効性確認、DSA 精密計測支援技術を確立した。[EIDEC]

#### 2) ナノ欠陥検査用計測標準技術の構築

計測標準としての Ta 吸収体構造の PDM (Programmed Defect Mask) を作製し、自然欠陥 (ブランク欠陥)、パターン欠陥等それぞれ評価指標を定め、検証を行った。

### 4. 2 実績推移

	2016年度	2017年度	2018年度
	委託	委託	委託
需給勘定 (百万円)	1, 197	2, 561	2, 512
特許出願件数 (件)	2	4	9
論文発表数 (報)	25	24	23
フォーラム等 (件)	17	16	15

### 5. 事業内容

プロジェクトマネジャーに NEDO 材料・ナノテクノロジー部 三宅 政美 主査を任命して、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。

2018年度に引き続き、AIST と ADMAT は AIST 村山 宣光 氏を PL として研究開発を実施する。また、2019年度から奈良先端科学技術大学院大学、NIMS、東京大学、AIST (人工知能研究センター)、大阪電気通信大学、旭化成株式会社、住友化学株式会社、積水化学株式会社、東レ株式会社、三井化学株式会社、三菱ケミカル株式会社は奈良先端科学技術大学院大学 松本 裕治 氏をサブプロジェクトリーダーとし研究開発項目①の一部を実施する。

産官学の参画者がより一層シナジー効果を発現できるような報告会を企画すること等により、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。また、チュートリアル・セミナー等を開催しプロジェクト内外の人材育成にも努める。

さらに、プロジェクト終了後においても、プロジェクト成果の基盤技術を引き続き活用できるようにするため、基盤技術を統合した「材料設計プラットフォーム」の設計を行う。

## 5. 1 2019年度事業内容

プロジェクト最終目標の達成に向けて2018年度までに開発した計算機支援次世代ナノ構造設計技術、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術の高度化、高速化を計るとともに、プロジェクト終了後においてプロジェクトの成果である基盤技術を統合的に活用できる、「材料設計プラットフォーム」の設計を行う。

また、2018年度に行った、材料開発データの共通フォーマット整備、公知の論文、特許等の材料データ構造化のために必要なテキストマイニング・画像認識技術等に関する調査に基づき、公開されているデータや、企業が保有するデータをAIが機械学習できる状態（構造化）にするためのツール（構造化AIツール）を開発する事業（委託）を開始する。

### [委託事業]

#### 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

(実施体制：AIST、ADMAT等)

量子力学、粗視化分子動力学、有限要素法等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高度化、ユーザビリティの向上等を行う。

##### 1) キャリア輸送マルチスケール計算シミュレータの開発

###### a) 電気・熱等のマルチスケール伝導計算シミュレータの開発

開発したシミュレータやツール群のユーザビリティ向上や計算速度の向上を行うとともに、各種データの供出、順方向予測を進めるとともに、逆方向予測技術適用の検討を進める。

###### b) 分子、イオン・界面原子ダイナミクスに関するマルチスケール計算シミュレータの開発

第一原理分子動力学シミュレータ単独では実施が不可能な、大規模かつ複雑なモデル材料に対する順方向予測手法の確立のため、開発したシミュレータやツール群のユーザビリティ向上や計算速度の向上を行うとともに、各種データの供出、記述子検討を行い、順方向予測を進めるとともに、逆方向予測技術適用の検討を進める。

##### 2) 外場応答材料と複雑組織材料の大規模計算シミュレータの開発

###### a) 第一原理多体計算に基づく外場応答の大規模計算シミュレータの構築

複素誘電関数と光学伝導率に関する計算データや、広い物質空間における第一原理計算データを蓄積するとともに、得られた複素誘電関数のモデル化、さらに機械学習の回帰モデルの構築に着手することにより、開発したシミュレータの展開を拡大する。

###### b) 材料組織とマイクロ構造に関する計算シミュレータの構築

液晶エラストマーについて、電圧印加粗視化分子動力学シミュレータの高速化、高次構造の特徴を抽出する手法、及び電歪ソフトマテリアルを用いたアクチュエータデバイスの設計手法を確立する。粗視化MD-FEMの連成スキームの高度化等を行う。



### 3) 機能性ナノ高分子材料のマルチスケール計算シミュレータの開発

#### a) ソフトマテリアル統合シミュレーションプラットフォームOCTAの拡張

開発した拡張 OCTA の機能向上、安定動作等のアップデートを進める。拡張 OCTA を用いたコンポジット材料等の画像解析を用いた構造—物性解析技術の研究、計算—計測連携を進める。さらに弾性解析シミュレーション、高分子材料中の構造の記述子の研究等を実施する。

#### b) 機能性ナノ高分子材料のための粗視化シミュレーション機能強化

ファイラー充填系溶融高分子を対象とするコンポジットシミュレータの高度化、ファイラー分散構造の構造解析を行い、機械学習に適用可能な記述子の抽出を試みる。ファイラー解砕のシミュレーションでは、プロセス条件最適化への指針提案を目指す。さらにナノカーボンシミュレータに関して機能の高度化・高速化、ユーザビリティの向上を継続、相溶性や分子運動性を定量的に粗視化モデルに適用する手法の開発等を進める。

### 4) マルチスケール反応シミュレータの開発

反応経路自動探索法及び反応流体シミュレータの高度化を行うとともに、モデル材料等に対する第一原理計算による反応経路探索、反応流体シミュレータを用いたフローリアクターの最適化等を検討する。平行して AI 解析に必要な実験データ蓄積・整備する。

### 5) 深層学習・機械学習、離散幾何解析を用いた材料データの解析技術の開発

さらに新しい機械学習ポテンシャル作成技術、最適化 AI 技術の応用技術の開発、さらに離散幾何解析関連技術を用いた各種物理量依存性や物性の構造組成依存性解明を行う。またプロセス・計測と連携し深層学習・機械学習解析によるインフォマティクス計算を高精度化するに足るデータ生成・収集・収納のためのデータプラットフォームのプロトタイプを構築する。

2019年度からは特許・論文等の公開材料データや、素材企業等が保有する材料データを AI が機械学習できる状態にする（構造化）ためのツール（構造化 AI ツール）開発を開始するとともに、抽出したデータを構造化するための標準データフォーマットの基本設計を行う。

## 研究開発項目②高速試作・革新プロセス技術開発

(実施体制：AIST、ADMAT)

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を開発し、データを蓄積する。

#### 1) 様々な界面制御技術による自在なヘテロ接合素材の開発

ナノ粒子・分散ポリマー材料合成プロセス技術開発のため、ナノ粒子の形状・サイズ・表面界面特性を制御したハイスループット合成プロセスを開発することで、ナノ粒子合成プロセス条件—粒子特性—分散ポリマー試作プロセス—ポリマー構造・物性間の相関データを蓄積する。

## 2) ポリマー系コンポジット材料プロセスに関する基盤技術

小型熔融混練装置、小型発泡成形装置において精密計測機能の追加、高速化及び自動化等により、さらなる高度化を図り、ポリマーブレンド/ナノコンポジットモデル試料、発泡体モデル試料の試作迅速化課題、問題点の抽出を行う。

## 3) 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

二酸化炭素利用、機能性ゴム原料及び高機能コアシェル型触媒においては、ハイスループット開発手法の確立、及び触媒の性能と物理的・化学的性質の解明を行う。

高制御熱硬化性樹脂においては、ハイスループット合成技術の構築、物性データ取得、データベース化ならびに計算科学・AIとの連携を検討する。さらに触媒反応経路自動探索及びフローリアクター設計に向けたアプローチについて検討を開始する。

## 4) ナノカーボン材料プロセスに関する基盤技術開発

### a) CNT線材作製プロセスに関する基盤開発

CNT 線材は導電性に影響を及ぼすと推定される構造因子の異なる複数の CNT 線材を試作し、試作品の実測データは計算シミュレーション用に供する。

### b) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

用いる素材も含めたグラフェンの転写技術の高度化をはかり、より高速な転写法の探索を行う。

### c) CNT 複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

CNT 複合材は表面改質技術を確立する。さらに、二種類のフィラーを用いる三元系複合材料について、第三成分フィラーと複合材物性の関係について検討等を行う。また、ナノフィラー分散高分子材料シミュレータの妥当性検証を行う。

## 研究開発項目③先端ナノ計測評価技術開発

(実施体制：AIST、ADMAT)

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”または“In situ”で構造評価・機能評価を可能とする以下の計測装置・手法を開発する。

### 1) 表面・界面の構造計測とナノ領域の多物性同時評価：和周波分光及びナノプローブ分光

和周波 (SFG) 分光法では、その測定対象を拡張し、その特性の違いを界面計測の観点から検討する。また、高剪断力下測定では、動的状態での分子の構造と配向状態の変化を解析するための基盤を確立する。ナノプローブ分光法では、測定波長範囲を拡大するとともに、装置改良により、半導体材料等の測定精度の向上を図る。

### 2) 有機(無機)コンポジット材料の3次元マルチスケール構造評価：電子分光型電子顕微鏡、

陽電子消滅及びX線CT

#### a) 電子分光型電子顕微鏡

透過型電子顕微鏡により多成分系ポリマーコンポジット材料の多次元構造情報を同時に取得する手法を確立する。また、2種類の4元構造情報をSTEM-EDX/EELS同時取得する手法の開発を行う。得られた構造情報と物性との相関情報は計算シミュレーションへのフィードバックを行う。

#### b) 陽電子消滅法とX線CT

陽電子消滅法では、スクリーニング測定、及び陽電子プローブ制御の最適化により、評価の高速化を行う。X線CT計測技術においては、内部発泡のサブマイクロ空隙構造を精密に3D解析する計測技術を開発、ならびにポリマー発泡系コンポジット材料のサブマイクロ空隙構造の3D解析結果について、実サンプルとの整合性を検証し、解析結果の妥当性を評価する。

#### 3) フロープロセスの高感度・in-situ計測：フロー型XAFS及びNMR

in-situ XAFSについては、触媒反応条件下での触媒表面構造及び表面組成に関する情報を収集する。得られた情報は機械学習による触媒開発のための学習用データを収集する。DNP-NMRについては、フロー型触媒反応前後での触媒を解析し、フロープロセスの転化率や触媒寿命の向上の検討、反応条件下での触媒のin-situ測定を行う。

#### 4) ナノカーボン材料の構造・物性評価技術開発

##### a) CNT線材の導電阻害部を可視化する計測技術基盤開発

CNT線材ではCNT線材の伝導特性の温度依存性に関する評価方法等、さらなる伝導メカニズム解明に向けた評価技術の展開を行う。

##### b) 積層グラフェンの局所電気物性計測に関する基盤開発

グラフェンではグラフェン/h-BNの実サンプルを定量的な評価手法を確立したものから随時測定し、計算及びプロセスヘデータの提供を開始する。また、ダイオード等実際のデバイス構造を形成し、諸特性の評価を実施する。

##### c) CNT複合材料評価に関する基盤技術開発

CNT複合材では第三成分添加複合材料に対する計測評価を行う。また、空間分散状態との関連性について調べる。さらに、ラマン分光における標準試料の探索及び計測条件の確立を行う。

### [助成事業]

#### 研究開発項目④基盤技術等を活用した機能性材料の開発

(実施体制：助成事業公募採択者)

本研究開発は、第1期までに開発された計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術等を企業における製品開発を支援し、実用化を加速するための助成事業（助成率：1/2または2/3）とする。

#### 5.2 2019年度事業規模

	委託、および1/2または2/3助成事業
需給勘定	2,650百万円

事業規模については、変動があり得る。

## 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「材料設計プラットフォーム」のあり方に関するアドバイザリーボードを2019年に実施する。

### (2) 運営・管理

研究の進捗に応じて加速予算の趣旨に合致する優れた成果等が挙げられた場合、5.2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等を発表するフォーラム等の実施を検討する。

### (3) 複数年度契約の実施

2016～2018年度の複数年契約を行ったものであって、研究開発期間の延長が決定したものは変更契約により2016年度～2021年度の複数年度契約とする。また、2019年度から開始する事業は2019年度～2021年度の複数年度契約を原則とする。

### (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 2019年度の公募について

事業の加速化や効率化を図るため、以下の公募を実施する。

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（委託事業）

研究開発項目④基盤技術等を活用した機能性材料の開発（助成事業）

（研究開発項目④の実施内容は、本実施方針を改定して定める）。

### 7.2 公募事業の実施方式

#### (1) 掲載する媒体

「NEDO ホームページ」で行う。

#### (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。

#### (3) 公募時期・公募回数

研究開発項目①は2019年4月、研究開発項目④は2019年5月に1回行う。

(4) 公募期間

原則 30 日間とする。

(5) 公募説明会

NEDO 本部等で開催予定。

(6) 公募締切から採択決定までの審査等の期間

原則 45 日間とする。

(7) 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。

8. 実施方針の改定履歴

(1) 2019年3月、制定

(2) 2019年10月、プロジェクトマネジャー変更、サブプロジェクトマネジャー追加、公募・採択による体制表の追記、元号から西暦に変更、重複・誤字・段落等修正。

## 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

NEDO  
プロジェクトマネジャー(PM): 材料・ナノテクノロジー部 三宅政美

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 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: つくばセンター(つくば)、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「電子状態計算基幹部分の大規模、高速化(宮崎)」
- 東北大学
  - ・研究開発項目: 「高分子平均場理論等からの階層化(川勝)」
- 名古屋大学
  - ・研究開発項目: ①の内「全原子分子動力学の大規模化(岡崎)」、「粗視化モデル機能強化(篠田)」、「実空間反応シミュレーション開発・階層化(長岡)」
- 京都大学
  - ・研究開発項目: ①の内「触媒反応素過程の理論解析と反応経路自動探索技術の触媒反応適用効率化(榎)」、「フィルター分散状態シミュレーション技術(山本)」
- 筑波大学
  - ・研究開発項目: ①の内「流路内複雑構造シミュレーションに向けた階層化・流路解析との接続(松田)」
  - ・研究開発項目: ②の内「バイオマス原料の機能性化成品化(門脇)」
- 名古屋工業大学
  - ・研究開発項目: ①の内「電子状態計算部分のマルチスケール化・ハイブリッド化(尾形)」
- 大阪大学
  - ・研究開発項目: ①の内「分子動力学計算手法の時間・空間粗視化と階層化(尾方)」
- 奈良先端科学技術大学院大学
  - ・研究開発項目: ①の内「反応経路自動探索法の高度化(畑中)」
- 豊橋技術科学大学
  - ・研究開発項目: ①の内「結晶構造予測シミュレーションの有機半導体への応用(後藤)」
- 九州工業大学
  - ・研究開発項目: ③の内「二次元材料の電気特性評価(松本)」

#### ● 先端素材高速開発技術研究組合

- ・研究実施場所: 茨城県つくば市(AISTつくばセンター内)、名古屋市(AIST中部センター内)
- 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)、日立化成(株)、日鉄ケミカル & マテリアルズ(株)、DIC(株)、(株)カネカ、東レ(株)、積水化成品工業(株)、出光興産(株)、JSR(株)、(株)日本触媒、昭和電工(株)、横浜ゴム(株)、宇部興産(株)、古河電気工業(株)、日本ゼオン(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

委託(共同実施、個別契約)

サブプロジェクトリーダー: 国立大学法人 奈良先端科学技術大学院大学 松本裕治

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(追加)

●奈良先端科学技術大学院大学

- ・研究実施場所: 奈良先端科学技術大学院大学(生駒市)
- ・研究実施項目: ①の内「PDFからの図表の領域認識」、「表の構造解析」

再委託: ●千葉工業大学

- ・研究実施場所: 人工知能ソフトウェア技術研究センター(習志野市)
- ・研究開発項目: ①の内「グラフのオブジェクト認識と数値読み取り」

●(国研)物質・材料研究機構

- ・研究実施場所: 物質・材料研究機構(つくば市)
- ・研究実施項目: ①の内「高分子論文コーパスの研究開発」

●東京大学

- ・研究実施場所: 東京大学大学院工学系研究科(文京区)
- ・研究実施項目: ①の内「高分子論文コーパスの研究開発」

●(国研)産業技術総合研究所

- ・研究実施場所: 産業技術総合研究所人工知能研究センター(江東区)
- ・研究実施項目: ①の内「技術文献から物性情報を抽出するツールの開発」

●大阪電気通信大学

- ・研究実施場所: 大阪電気通信大学情報通信工学部(寝屋川市)
- ・研究実施項目: ①の内「材料データ構造化のための標準データフォーマット・オントロジーの研究開発」

●旭化成株式会社

- ・研究実施場所: 旭化成株式会社本社(千代田区)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

●住友化学株式会社

- ・研究実施場所: 住友化学株式会社本社(中央区)、先端材料開発研究所(袖ヶ浦市)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

●積水化学工業株式会社

- ・研究実施場所: 積水化学工業株式会社高機能プラスチックカンパニー先端技術センター(三島郡)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

●東レ株式会社

- ・研究実施場所: 東レ株式会社先端材料研究所(大津市)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

●三井化学株式会社

- ・研究実施場所: 三井化学株式会社本社(港区)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

●三菱ケミカル株式会社

- ・研究実施場所: 三菱ケミカル株式会社本社(千代田区)、Sience & Innovation Center(横浜市)
- ・研究実施項目: ①の内「AIツールの高度化に向けた教師データ作成技術の開発」

助成

