

## 「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」基本計画

材料・ナノテクノロジー部

## 1. 研究開発の目的・目標・内容

## (1) 研究開発の目的

## ①政策的な重要性

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。国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（以下「NEDO」という。）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。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。

科学技術イノベーション総合戦略2015（平成27年6月19日閣議決定）の「統合型材料開発システム（マテリアルインテグレーションシステム）」の中で重点的に取り組むべき課題として位置付けられている。

## ②我が国の状況

内閣府が戦略的イノベーション創造プログラム（SIP：Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program）の中で岸 輝雄氏（東京大学名誉教

授、物質・材料研究機構顧問)をプログラムディレクターとして「革新的構造材料」(2014～)で推進。研究テーマの「マテリアルズインテグレーション」領域の中で構造材料を対象としてシミュレーションや数学的アプローチを活用しながら材料開発期間の一桁短縮する取り組みが行われている。

科学技術振興機構が「イノベーションハブ構築支援事業」の中で、寺倉 清之氏(物質・材料研究機構)をプロジェクトリーダーとして「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>I: “Materials research by Information Integration” Initiative)」(2015年～)を推進。重点分野として電池材料、磁性材料、伝導材料を対象に2015年7月から物質・材料科学とデータ科学とを融合させた新しい材料開発手法で、膨大なデータ群の蓄積と、ビッグデータ解析の一種である機械学習など、最先端の情報科学を駆使した解析を組み合わせ基盤の構築を図っている。

このような中、有機系の機能性材料を対象とした計算科学を活用した材料開発プロジェクトは存在せず、日本の強みである本分野の更なる産業競争力強化に向けて本プロジェクトを推進するもの。

### ③世界の取組状況

米国では、2011年6月に新たな素材開発インフラの構築を目指すプロジェクトとしてマテリアル・ゲノム・イニシアチブ(以下、MGI)をオバマ政権が打ち出した。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 Material Design)は2014年からNIST(National Institute of Standards and Technology)が運営するMGIの中核を担うプロジェクトであり、目的は革新的素材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。

欧州では、欧州委員会が開始した「Horizon 2020」において、2015年から「Novel Materials Discovery(以下「NoMaD」という。)」プロジェクトがコンピュータ科学分野の「Centers of Excellence」の一つとして推進されることとなった(2016-2018)。NoMaDプロジェクトは、2013年よりドイツの研究機関や大学を中心に第一原理計算による物質材料データの収集を進めてきており、今後、材料科学のためのデータベースとビッグデータ分析ツールを開発していくことを目指している。

韓国では「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付けることにより、ナノテク・材料分野の研究を推進している。2013年12月に策定した「第6次産業技術革新5か年計画(2014-2018

年)」において、「素材・部材」を含む4分野の課題を「未来産業エンジン」に指定して支援している。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）」を公表した。素材分野のフォロワーから抜け出し市場のリーダーになることを目標としている。

中国では「国家中長期科学技術発展計画（2006-2015）」の重点8分野の一つとして「素材（新材料技術・ナノ研究）」を指定した。現行の「第12次5ヵ年計画要綱（2011-2015年）」で特定されている7つの戦略的振興産業の一つとして「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。

#### ④本事業のねらい

一企業で出来ない、非連続でインパクトが大きい課題を対象とした、次世代の材料開発の基盤技術開発として材料開発と計算科学の融合・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。

具体的には主に有機系材料を対象とした従来に無い材料設計シミュレーションの開発や人工知能（以下「AI」という。）を活用した材料開発支援等を、革新的な試作プロセス開発や評価計測技術開発と共にナショナルプロジェクトとして行うことで、これまでの“経験と勘”に基づいた材料開発文化に変革の兆しを誘発すると共に、競争力の高い日本の素材産業の優位性を確保する。

### （2）研究開発の目標

#### ①アウトプット目標

高機能材料・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。

#### ②アウトカム目標

材料開発に掛かる年間エネルギー使用量を削減することにより 2030年に約136.8万kLの原油削減が期待される。また、本研究が関連産業の競争力強化に貢献することで2030年において約2兆円規模の市場獲得に資する。

#### ③アウトカム目標達成に向けての取組

プロジェクトで確立する基盤技術は、NEDOの成果報告や展示会、セミナー等で積極的に宣伝し、国内の材料開発研究者へ本基盤技術を周知することにより成果の拡大を促進する。

### （3）研究開発の内容

以下の研究開発項目について別紙の研究開発計画に基づき研究開発を実施する。

【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

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③先端ナノ計測評価技術開発

本研究開発は、長期間の開発を要し高機能材料産業分野の研究開発を支援する「基盤的技術」に対して、産学官の複数事業者が互いのノウハウ等を持ちより協調して実施する事業であり、委託事業として実施する。

【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

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用いて、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。

## 2. 研究開発の実施方式

### (1) 研究開発の実施体制

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 政美を任命して、プロジェクトの進行全体を企画・管理や、プロジェクトに求められる技術成果及び政策的効果を最大化させる。

NEDOは公募によって研究開発実施者を選定する。研究開発実施者は、企業や大学等の研究機関等（以下「団体」という。）のうち、原則として日本国内に研究開発拠点を有するものを対象とし、単独又は複数で研究開発に参加するものとする。ただし、国外の団体の特別の研究開発能力や研究施設等の活用又は国際標準獲得の観点から必要な場合は、当該の研究開発等に限り国外の団体と連携して実施することができるものとする。

研究開発能力を最大限に活用し、効率的かつ効果的に研究開発を推進する観点から、NEDOは研究開発責任者（プロジェクトリーダー 村山 宣光、及びサブプロジェクトリーダー 松本 裕治）を選定し、各実施者はプロジェクトリーダー及びサブプロジェクトリーダーの下で研究開発を実施する。

本事業は、基盤技術の確立を目的としているため、研究開発実施者はNEDOと協議の上、可能な限り研究拠点を集約して、プロジェクトリーダー等の指揮の下、組織的に知見・ノウハウを蓄積しながら研究開発等を推進することとする。

## (2) 研究開発の運営管理

NEDOは、研究開発全体の管理、執行に責任を負い、研究開発の進捗のほか、外部環境の変化等を適時に把握し、必要な措置を講じるものとする。運営管理は、効率的かつ効果的な方法を取り入れることとし、次に掲げる事項を実施する。

### ① 研究開発の進捗把握・管理

NEDOは、主としてプロジェクトリーダー、サブプロジェクトリーダーを通じて研究開発実施者と緊密に連携し、研究開発の進捗状況を把握する。また、外部有識者で構成する技術検討委員会を組織し、定期的に技術的評価を受け、目標達成の見通しを常に把握することに努める。

### ② 技術分野における動向の把握・分析

NEDOは、プロジェクトで取り組む技術分野について、内外の技術開発動向、政策動向、市場動向等について調査し技術の普及方策を分析、検討する。なお、調査の効率化の観点から、本プロジェクトにおいて委託事業として実施する。

## (3) その他

本プロジェクトは非連続ナショナルプロジェクトとして取扱う。

## 3. 研究開発の実施期間

2016年度から2021年度の6年間

(2016年度から2018年度までを第1期、2019年度から2021年度までを第2期とする。第1期においては基盤技術の確立を目的とし、第2期においては研究進捗を見極めて、個別材料開発に資する展開フェーズとして研究を加速する。)

## 4. 評価に関する事項

NEDOは(1)事業の位置付け・必要性、(2)研究開発マネジメント、(3)研究開発成果、(4)実用化、事業化に向けた見通し及び取組の4つの評価項目について、外部有識者によるプロジェクト評価を実施する。評価の時期は、第1期終了時期を目途とした中間評価として2018年度、事後評価を第2期終了時期の2022年度に実施する。

なお、中間評価結果を踏まえ必要に応じて事業の加速・縮小・中止等の見直しを迅速に行う。評価の時期については、当該研究開発に係る技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況等に応じて、事業実施を前倒しする等、適宜見直すものとする。

## 5. その他重要事項

### (1) 研究開発成果の取扱い

#### ① 共通基盤技術の形成に資する成果の普及

研究開発実施者は、研究成果を広範に普及するよう努めるものとする。NEDO

は、研究開発実施者による研究成果の広範な普及を促進する。

#### ② 標準化施策等との連携

得られた成果については、知的基盤整備又は標準化等との連携を図ることとし、開発する計測技術等の標準案の提案等を構築する出口戦略に照らし合わせて戦略的かつ積極的に実施する。

#### ③ 知的財産権の帰属、管理等取扱い

研究開発成果に関わる知的財産権については、「国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 新エネルギー・産業技術業務方法書」第25条の規定等に基づき、原則として、全て委託先に帰属させることとする。なお、共通基盤技術の開発段階から、事業化を見据えた出口戦略（データ管理を含む）を構築し、適切な知財管理を実施する。

#### ④ 知財マネジメント

「NEDOプロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」を適用する。

#### ⑤ 人材育成・要素研究等

研究開発成果の最大化や周辺要素研究の加速を図るために本事業に関連する人材育成や要素研究等を実施する。

### (2) 基本計画の見直し

NEDOは、当該研究開発の進捗状況及びその評価結果、社会・経済的状況、国内外の研究開発動向、政策動向、研究開発費の確保状況等、プロジェクト内外の情勢変化を総合的に勘案し、必要に応じて目標達成に向けた改善策を検討し、達成目標、実施期間、実施体制等、プロジェクト基本計画を見直す等の対応を行う。

### (3) 根拠法

本プロジェクトは、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、三号及び九号に基づき実施する。

## 6. 基本計画の改訂履歴

(1) 2016年 3月、制定

(2) 2017年 3月、「非連続ナショナルプロジェクト」の選定を受け、文言を追記等

(3) 2019年 2月、研究開発項目④として助成事業の追加等により、文言を追記等

(4) 2019年 10月、プロジェクトマネジャーの変更、サブプロジェクトリ

一ダ-の追加、一部元号から西曆への変更

## (別紙1) 研究開発計画

### 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

#### 1. 研究開発の必要性

素材機能を最大限に発現し豊かな社会に貢献するプロダクトイノベーションの早期実現には、従来の「経験と勘」に基づいた材料開発ではなく、近年飛躍的に進歩している高度な計算科学をベースとした機能と構造の予測を材料開発に適用することが重要。素材産業分野は現時点では日本企業に優位性があるが、アメリカの MGI など海外においても材料開発を強化するプロジェクトが立ち上がっている状況であり、早期に高付加価値な材料を市場へ提供する手段としての基盤技術を開発し、競争力の高い日本の素材産業の優位性を確保していく。

#### 2. 研究開発の具体的内容

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に示す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する。

- 1) 有機系材料の電子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を開発する。

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を開発する。第2期以降は、経済産業省の Connected Industries 政策を踏まえ、特許・論文等のすでに公開されている材料データや、素材企業が保有する材料データを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）開発を実施する。

これにより、これまでに実施してきたシミュレータ開発によるシミュレーションデータ、実験データ創出に加え、公知材料データをAI学習に活用することにより、AIを活用した材料開発の取組を一層加速する。



### 3. 達成目標

#### 【中間目標】

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。

#### 【最終目標】

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。

### 研究開発項目②高速試作・革新プロセス技術開発

#### 1. 研究開発の必要性

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」の着実な実施にはシミュレーションにより予測されたサンプルを試作・評価し、シミュレーションの結果と照合することが重要である。一方、シミュレーション結果の中には従来試作が難しい条件等が最適解となる場合があるため、多様なサンプルを自在に試作可能とするプロセス開発の基盤構築が必要である。

#### 2. 研究開発の具体的内容

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」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とその高速化技術を開発する。

- 1) 研究開発項目① 2. 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を構築する。
- 2) 研究開発項目① 2. 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を構築する。
- 3) 研究開発項目① 2. 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を構築する。

等

### 3. 達成目標

#### 【中間目標】

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。

#### 【最終目標】

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。

### 研究開発項目③先端ナノ計測評価技術開発

#### 1. 研究開発の必要性

本事業の特徴である計算-試作-評価のサイクルの高速化のためには、試作したサンプルの構造や機能を短時間に十分な精度で、可能な限り“非破壊”又は“In situ (実環境や動作中)”で評価することが重要である。また、新規計測手法で従来計測手法では獲得しえなかった未開拓データが獲得可能となるため、新発見による材料開発の更なる高度化や開発期間の高速化を促す可能性があり重要な開発要素である。

#### 2. 研究開発の具体的内容

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」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・手法の開発を行う。

- 1) 研究開発項目② 2. 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を構築する。
- 2) 研究開発項目② 2. 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  $\mu\text{m}$  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を構築する。
- 3) 研究開発項目② 2. 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を構築する。  
等

### 3. 達成目標

#### 【中間目標】

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。

#### 【最終目標】

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。

### 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

#### 1. 研究開発の必要性

日本の素材産業の優位性を確保する観点から、早期に高付加価値な材料を市場に提供することがきわめて重要である。そこで、研究開発項目①の第1期で開発されたシミュレーション手法を個社での機能性材料開発へ適用し、実用化の加速を実証する必要がある。

#### 2. 研究開発の具体的内容

第1期の委託事業で中間目標を達成したシミュレーション手法（研究開発項目① 2. 1)～3)) をもとに、試作回数・試作期間 1/20 を可能とする課題を設定して実施する。

#### 3. 達成目標

##### 【最終目標】

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

(別紙2) 研究開発スケジュール

