

## 2020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・製造を担う部素材産業は、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（2018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等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 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、技術的成果及び政策的効果を最大化させた。

2018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。また、2019年度から奈良先端科学技術大学院大学（以下、「NAIST」という）、国立研究開発法人物質・材料研究機構（以下、「NIMS」という）、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 NAIST 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の一部を実施した。更に、2019年度から東レ株式会社、日鉄ケミカル&マテリアル株式会社は研究開発項目④を実施した。

#### 4. 1 2019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の、高度化、ユーザビリティの向上等を行った。

##### 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

###### 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

光学応答計算の高速化及び実験データとの比較、バンドル構造と導電性に関しては第一原理電気伝導シミュレータの更なる高速化とユーザビリティ向上及びマイクロマクロ連成数値技術の強化等を行いデータセットの構築、さらにマクロデバイスシミュレータのユーザビリティ向上とデータ蓄積を行った。

###### 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

開発したシミュレータやツール群の高速化等とともに様々な条件下で計算を行い、反応機構と、その反応に影響を及ぼす周囲環境を特定し、極限状況下における順方向予測における記述子検討を行った。また、モデル材料の組成や使用条件と構造や特性との関連について逆方向予測技術適用の検討を進めた。

##### 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

2018年度までに開発し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モデル材料に適用し、機械学習を活用した逆方向予測のための複素誘電関数や光学伝導率の第一原理計算データを生成し、蓄積を開始するとともに、機械学習モデルの構築に着手した。

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

電圧印加粗視化分子動力学シミュレータの高度化・高速化、及び計算データの蓄積、さらに粗視化 MD-有限要素法(FEM)の連成スキームの高度化を引き続き行いながら、電歪ソフトウェアを用いたアクチュエータの設計手法を確立した。また、誘電体材料等に関する、分子動力学シミュレーションの高度化を行った。

c) 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た。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-計測連携を進めた。さらに相分離構造を入力データとした有限要素法による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した。

d) 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

フィ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、フィ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た。フィラー解砕のシミュレーションでは、シミュレーション結果を用いた機械学習により凝集粒子の解砕・分散を促進するプロセス条件最適化の検討を行った。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た。

3) 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、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とともに、AI 解析に必要な実験データの蓄積、整備を行った。

4) 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

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った。また深層学習・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した。

2019年度から開始した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)開発に関しては教師データ作成、ツール開発に必要な基盤技術の調査を行い、設計を開始した。

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、データを蓄積した。

### 1) 界面制御技術の確立による精密積層プロセス技術等の基盤構築

#### a) 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、ナノ粒子特性を規定するプロセス因子の抽出、高次構造制御試作におけるプロセス条件と構造・機能の相関関係に関する機械学習・深層学習を含めた計算科学との連携に適したデータの蓄積を行った。

#### b) 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を第一原理計算シミュレータ開発用に提供した。

#### c) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

転写に用いる素材の検討等も含めたグラフェン転写技術のより高速な転写法の探索を行った。また、積層形成においても、より密着強度の高い転写法の開発を行い、プロセス条件・計測データをシミュレータ開発用に提供した。

### 2) プロセス条件制御による機能発現の評価が可能なサンプル作成手法等の基盤構築

#### a) 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

超小型押出プロセス計測装置を開発し、小型溶融混練装置、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の高度化検討を行い、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、問題点の抽出を行った。

#### b) CNT複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

CNT複合材は量産指向の窒素、酸素原子等を含む官能基付加表面改質技術を確立した。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の検討等を行った。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

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、ハイスループット反応評価装置、高圧且つ腐食性ガス対応設備を導入し、ハイスループット開発手法の確立加速、及び触媒の性能と物理的・化学的性質の解明を行った。

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との連携を検討した。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した。

## 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) 非破壊で特定の界面の分子化学構造、電子状態等の情報を得る計測技術等の構築

### a) 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

和周波分光法では、様々な素子構成での有機薄膜トランジスタ (OFET) 測定の際計測手法、解析技術を開発した。また、高剪断力下測定では、その場観察による界面分子構造の動的状態の解析を行った。ナノプローブ分光法では、物性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った。得られた計算データは計算・プロセスチームに提供した。

### b) CNT線材の導電障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とともに、特性の異なる種々のCNT線材を対象とした広範な材料に適用可能な手法を確立した。

### c) 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

グラフェン及びh-BNのモデル材料についての伝導率等の定量的な評価結果を、計算及びプロセスチームへ提供開始や誘電率等の諸特性や複合材料の分散性等の評価の可能性検証を行った。また、ミリ波共振器システムを前倒しで導入し、実デバイスのマクロスケール評価を開始した。

## 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

STEM-EDX/EELSによるポリマーブレンド／ナノコンポジット材料の3次元構造＋3次元元素分布及び2次元構造＋元素分布＋化学構造情報の同時取得による定性データを収集し計算チームへ提供するとともに、その定量性の評価を行った。また、得られた構造情報と物性との相関を検討し計算シミュレーションへのフィードバックを行った。

### 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が最適化された計測装置を用いて、評価の高速化を行った。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し、得られた計測データの蓄積、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、第三成分添加複合材料における表面状態評価と複合材料中の空間分布評価を行った。また、空間分散状態との関連性について調査した。

## 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、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し、機械学習による触媒開発のための学習用データを収集した。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を進めるとともに、計測可能元素の拡充を図った。また、反応条件下での触媒のin-situ測定を行い、機械学習の学習用データを収集した。

## [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：東レ株式会社、日鉄ケミカル&マテリアル株式会社)

#### 1) 相分離シミュレーションを活用した非溶媒誘起相分離による革新分離材料の研究開発

候補樹脂を用いた非溶媒誘起相分離シミュレーション予測に基づきパラメータを選定した。実際に製膜試作を行い、選定したパラメータの有効性を確認した。製膜設備を発注し、試作製膜の準備を整えた。分子シミュレーション実行環境の整備を完了し、候補樹脂の相互作用パラメータ作成に着手した。

#### 2) 高速通信用次世代対応フレキシブル誘電材料の研究開発

計算機環境を整備し、当プロジェクトで開発されたシミュレータを活用して検討する高分子系のモノマー選定スクリーニングの基礎となる計算データの蓄積を開始。関連する既存データの整理にも着手。また、既存材料の高周波特性の評価を開始し、測定データの蓄積を開始。

## 4. 2 実績推移

|           | 2016年度 | 2017年度 | 2018年度 | 2019年度 |
|-----------|--------|--------|--------|--------|
|           | 委託     | 委託     | 委託     | 委託・助成  |
| 需給勘定（百万円） | 1,780  | 2,400  | 2,650  | 2,650  |
| 特許出願件数（件） | 2      | 4      | 9      | 4      |
| 論文発表数（報）  | 25     | 24     | 23     | 25     |
| フォーラム等（件） | 17     | 16     | 15     | 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。

2019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、NAIST、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NAIST 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 2020年度事業内容

プロジェクト最終目標の達成に向けて2019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、2019年度から開始した、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）を引き続き行う。

### [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速、高度化を進めるとともにデータの蓄積を行い、検証結果に応じてデータプラットフォームに蓄積されるデータの精度向上を進め、逆方向予測技術の適用を試みる。

##### 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

シミュレータによる計算データの追加により、材料探索スクリーニングの精度を向上させる。また、計算データと計測データ等を利用し、マイクロ-マクロ連成モデルの高度化を進め、AI等技術利用による逆予測技術の適用を試みる。

###### 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

引き続き、シミュレーションの高速化を図る。ユーザビリティ向上のため、新たな条件下における計算機能の追加を行う。また、順方向予測手法に関して、極限環境のパラメータ空間及び材料組成のバリエーションを増やすことにより、計算データの蓄積を行い逆方向予測精度の向上を目指す。

##### 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

外場応答機能に対する大規模第一原理シミュレータによるモデル素材の複素誘電関数と光学伝導率のデータを追加する。また、引き続き機械学習モデルの高精度化を行い、逆方向予測技術による候補物質絞り込みを可能とするとともに、外場応答機能材料に特徴的な支配因子・記述子を特定する。

###### 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

シミュレータとして、粗視化MD-FEM連成スキームの高度化・高速化を引き続き実施し、電歪ソフトマテリアルの様々な構造に関して創出したデータの蓄積を行うと同時に、機械学習を適用し、逆方向予測につながる構造と力学的挙動及び電歪挙動の相関解析の学習セ



ットを構築する。有機・無機ハイブリッド誘電体材料やプリント基板材料に関しては MD シミュレーション結果と先端計測との連携による検証を行う。

c) 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

機能性ナノ高分子材料についての構造、及び物性の解析を実施するため、オンデマンドデータ構築を引き続き行う。具体的には、拡張 OCTA で開発してきた画像解析ツール及び拡張 Gourmet を用いて、実験構造データの解析を引き続き進める。さらに、拡張 OCTA で開発してきた画像解析ツール、AI 連携ツールについては、機能向上と安定動作（ユーザビリティ向上）のためのアップデートも引き続き進める。

d) 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

マルチスケールシミュレーションスキームにおいて、相分離等の高分子高次構造の定量的予測を引き続き行うとともに、その実験的検証を行う。さらに、ナノフィラー分散高分子材料や相分離構造制御高分子材料に適用可能なシミュレータの高速化・高機能化を引き続き進め、混練プロセス、充填剤の表面修飾等の影響を定量的に再現し、実材料への展開をさらに進めていく。

3) マルチスケール反応シミュレータの開発

引き続きモデル素材に対して、前半期で開発されたシミュレータを適応し、AI に必要なデータの蓄積・整備を行い、支配因子・記述子の探索を行うとともに、最適な触媒構造及びフロー条件の探索を行う。

4) 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

順方向予測解決のための機械学習ポテンシャル技術を有機高分子及び界面・表面シミュレーション等が可能な技術へ拡張し、粗視化 MD 等のシミュレーションとの連携技術を確認すると共に、2019 年度に開発したパラメータキャリブレーション技術を拡張し高機能有機高分子シミュレーションのパラメータ構築へ展開する。また、2019 年度に開発した基盤技術を拡張し、反応解析技術及び高機能材料物性逆方向予測技術の高度化を行い実用化技術を確認する。一方、材料解析データ可視化システム及びデータレポジトリを統合したデータプラットフォームプロトタイプを改良・拡張し、同プラットフォーム上での材料データ解析スキームを確認する。プロセス関連グループと連携し、データ生成・解析フローを確認する。

2019 年度から開始した論文等の材料データを構造化する AI ツール開発に関しては、抽出するデータの関係性抽出、プロトタイプツール作成、図表からデータを抽出するモデル構築、及び標準データベース、オントロジーにおいて関係性の構築を行う。

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) 界面制御技術の確立による精密積層プロセス技術等の基盤構築

#### a) 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

ハイスループット合成プロセス等のナノ粒子合成・分散ポリマー材料試作プラットフォーム構築のために、プロセス条件と構造・機能の相関関係に関するデータを蓄積し、機械学習等により構造・機能の相関解明を行い、プロセス条件最適化への指針提案等の高度化を目指す。

#### b) CNT線材作製プロセスに関する基盤開発

マルチスケールシミュレータの抵抗回路モデルに貢献するため、種々のCNT線材を試作、分析・評価し、構造データの蓄積を行う。

#### c) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

グラフェン合成のさらなる高スループット化及び半導体、導電体、及び絶縁体の二次元材料の積層技術を開発し、グラフェン等二次元材料とその積層体の合成プラットフォームの構築においてより広範なデータ蓄積を行う。

### 2) プロセス条件制御による機能発現の評価が可能なサンプル作成手法等の基盤構築

#### a) 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

新規開発の超小型押出プロセス計測装置、小型溶融混練装置、小型発泡成形装置によるモデル材料の試作高速化及び強度、断熱性等の機能強化の検討を行い、高速化及び機能向上を実証する。

#### b) CNT複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

組成の異なる種々のCNT膜作製法の最適化と、ネットワーク構造及び電気・熱特性評価を行うとともに、構造予測シミュレータの改良を行う。

### 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

前年度に蓄積された触媒情報及び樹脂素材のデータを活用してデータベース化を進めるとともに、触媒自動探索の検討や樹脂素材の設計指針の検討を行う。

## 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) 非破壊で特定の界面の分子化学構造、電子状態等の情報を得る計測技術等の構築

##### a) 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

和周波分光法では、微小領域でのOFET計測技術の開発とFET特性との相関の解明を行う。また、高圧力下での測定では、有機溶媒中の分子の挙動を解析する。一方、ナノプローブ分光法では、局所機械物性が同時測定可能な多物性値測定ナノプローブ分光システムを構築する。

b) 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。開発したCNT線材評価技術によるCNT線材に関するデータプラットフォームを構築する。

c) 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、計算及びプロセスへ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。グラフェンや他モデル材料の温度・雰囲気等の環境条件を拡大したナノ領域電気特性を評価する。

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

STEM-EDXによるポリマーブレンド/ナノコンポジット材料の3次元構造+3次元元素分布及び2次元構造+元素分布+化学構造情報の定量データを計算チームへ提供し、マルチスケール計算シミュレーション開発との連携を確立する。

b) 陽電子消滅法とX線CT

陽電子消滅法では、計算シミュレーションと連携した高速計測技術を開発する。また、X線CTでは、X線CT計測法と計算シミュレーションとの連携を確立する。

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。様々なCNT複合膜材料に関する評価を行い、得られたデータをデータプラットフォームに提供する。

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

精密測定を実現するため、測定条件、NMRパルスシーケンスの改良及び、NMR活用範囲拡大のための分極剤開発を行う。さらに触媒開発のための学習用データ収集を引き続き行う。

[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: 東レ株式会社、日鉄ケミカル&マテリアル株式会社)

1) 相分離シミュレーションを活用した非溶媒誘起相分離による革新分離材料の研究開発

2019年度に製作した製膜設備によるプロセス及び構造・物性データ収集を行う。マルチスケール相分離シミュレーションの理論モデル構築、相互作用パラメータ作成及びシミュレーションを実行する。相分離構造制御設備の設計及び製作を行う。

2) 高速通信用次世代対応フレキシブル誘電材料の研究開発

計算・測定データの蓄積を進め、これらのデータ群を使用した機械学習や統計解析にて最適材

料を設計する。また、製造プロセス条件も加味した機械学習等を実施し、プロセス条件での改良マージンを確認する。

## 5. 2 2020年度事業規模

委託、及び1／2または2／3助成事業

需給勘定 2, 476百万円

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、及び「材料データ構造化 AI ツール開発」のあり方に関するアドバイザリーボードを2020年度に実施する。

### (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った場合、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

2020年度から開始する事業は2020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 2020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④を 2020 年 3 月に 1 回行う予定。

(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) 2020 年 2 月、制定

## 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

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(榊)」、「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(東京都中央区)、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(大阪府三島郡)
- ・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(東京都港区)
- ・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)、Science & 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

|  |   |
|--|---|
|  | <p>NEDO<br/>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</p>   |
|  | <p>●東レ株式貴社</p> <ul style="list-style-type: none"><li>・研究実施場所:東レ株式会社先端材料研究所(大津市)</li><li>・研究実施項目:④基盤技術等を活用した機能性材料の開発(相分離シミュレーションを活用した非溶媒誘起相分離による革新分離材料の研究開発)</li></ul>               |
|  | <p>●日鉄ケミカル&amp;マテリアル株式会社</p> <ul style="list-style-type: none"><li>・研究実施場所:日鉄ケミカル&amp;マテリアル株式会社総合研究所(木更津市)</li><li>・研究実施項目:④基盤技術等を活用した機能性材料の開発(高速通信用次世代対応フレキシブル誘電材料の研究開発)</li></ul> |