

## 2021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（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

2019年度に引き続き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。

2019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、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実施者に国立研究開発法人理化学研究所（以下、「理研」という）を追加し、理研 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年度に引き続き東レ株式会社、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 2020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 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・高速化を行うとともに、準問題予測によるデータ蓄積、逆方向予測技術の検討を行った。

##### 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

光学応答計算の高度化及びデータ蓄積を加速した、カーボンナノチューブに関してはファイブリル構造の抵抗回路モデルの検証、マイクロマクロ連成等のシミュレータの改良検討やデータ蓄積、及びさらにマクロデバイスシミュレータによりデータを追加し、構造－機能の相関検証を行った。

###### 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

引き続き開発したシミュレータやツール群の高速化・機能追加、ユーザビリティの向上をはかるとともに様々な条件下での計算を追加し、計算データの蓄積及び逆方向予測の予測精度向上を進めた。

##### 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

引き続き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によるモデル材料の複素誘電関数や光学伝導率の第一原理計算データ蓄積を行うとともに、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・記述子の特定を行った。

#### 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

粗視化 MD—有限要素法(FEM)の連成スキームの高速化・高度化を引き続き行いながら、電歪ソフトマテリアルの様々な構造に関して創出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構築を行った。また、誘電体材料等に関しては、分子動力学シミュレータの高度化・高速化、検証を引き続き進めるとともに検証データの蓄積を行った。

#### 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るとともに、引き続き拡張 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—計測連携による3次元電子顕微鏡像等を用いた構造データを同化させたシミュレーション技術の開発、特徴構造技術の検討、有限要素法による弾性解析シミュレーション等を実施した。

#### 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

ナノフィラー分散、相分離系高分子を対象とするシミュレータの高度化・高速化を引き続き行い、フィラー分散構造の構造解析、記述子の抽出、実測データを相補的に用いたデータセット構築等を行い、機械学習の援用によるプロセス条件、フィラー分散構造、材料機能三者の相関解明等も試みた。さらにナノカーボン及びフィラー充填溶融高分子向けシミュレータに関する機能の高度化・高速化を継続、相溶性や分子運動性を定量的に予測し、その結果を SCF 計算や粗視化 MD に適用することによる、相分離挙動の半定量的予測を実施した。

### 3) マルチスケール反応シミュレータの開発

反応流体シミュレータの改良・高度化を引き続き行うとともに触媒反応システムの基本設計を検討した。また、反応経路自動探索法及び反応流体シミュレータとハイスループット事件を組み合わせるモデル材料に必要なデータの蓄積を行い、蓄積されたデータを利用し触媒活性に関わる支配因子・記述子の探索を行い、その結果を基に高性能触媒の提案を行った。

### 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

機械学習ポテンシャル作成技術を拡張し、粗視化 MD 等のシミュレーションとの連携技術を確立すると共に、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した。またインフォー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立した。

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の拡充やエンティティ抽出、図表からの情報抽出ツールの改良、標準データフォーマットの項目検討、オントロジー用データ収集などを行った。また、2020 年度よりアノテーションのための標準データフォーマットとオントロジーをデータ連携に拡張し、様々なデータリソースを MI のために統合する仕組みであるデータ連携プロトコルの作成、さらに特許データベースの概念設計及び要件定義を行った。

## 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、引き続き開発した高精度なサンプル作製技術によるデータベース化を進めるとともに高速化したプロセス技術の実証、触媒自動探索の検討や樹脂素材の設計指針の検討を行った。

### 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、ナノ粒子の多条件ハイスループット合成プロセスの開発、また高次構造制御試作におけるプロセス条件と構造・機能の相関関係の解明のためにデータ蓄積を行うとともに機械学習・深層学習計算科学との連携によりプロセス条件の最適化検討を行った。

#### b) CNT線材作製プロセスに関する基盤開発

2019年度に得られた計算・計測データをもとに、マルチスケールシミュレータの抵抗回路モデルのパラメータ推定に必要なフィブリル構造等を分析するためのCNT線材を試作した。試作したCNT線材の分析・評価し、構造データとして蓄積することでプロセス条件の改善に貢献した。

#### c) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

プラズマCVDによる原子層グラフェンの更なる高スループット化を目指して、基材温度の適正化や巻取り方法の検討を行い合成基材の巻取り速度の向上を行った。また二次元材料による導電体、絶縁体、半導体の積層を実施し、多層ヘテロ構造形成における課題抽出、さらに、ラマン分光等の光学特性から積層状態の確認を行い、今後の積層技術検討に資する実験データの蓄積を行った。

### 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

開発及び機能追加を行った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おいて計算科学、計測と連携して、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及び強度、断熱性等の機能向上の検証を行った。

#### b) CNT複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

CNT種（単層、多層）、表面改質法、分散法の異なった分散液から、様々なCNT膜を作製し、均一な膜を作成できる分散法、成膜法を確立した。作製したCNT膜については電気伝導度測定を行い、CNTネットワーク構造との相関解析に提供した。また、実験結果との比較によるナノファイラー分散高分子材料シミュレータの改良を行った。

### 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

引き続き触媒情報及び樹脂素材のデータベース化を進めると共に、ハイスループット触媒自動合成装置、フロー反応評価装置等で得られた触媒データを基に、高性能触媒の選出を行い効率良

く高性能触媒を合成できる触媒調製プロセスの開発及び AI 解析による高制御樹脂設計・合成を行う一方、実験データと計算データを組み合わせて計算科学と協力して、データプラットフォームの構築ならびに触媒自動探索についての検討を行い、高機能触媒の提案、さらに開発した触媒を用いて最適反応器のシミュレーションを行い触媒反応システムの基本設計検討を開始した。

### 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、前年度より微小な領域の測定に向けて、光学系を再構築して測定を進め、有機薄膜トランジスタ (OFET) 測定の開発と FET 特性との相関の解明を行った。また、高圧力下測定では、有機溶媒中の分子の挙動解析を行った。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し、その解析方法の検討を行った。
  - 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線材では開発した評価技術を基に、各種 CNT 線材に関する物性と構造の相関データの取得を行った。得られたデータはデータプラットフォーム構築のために活用し、またシミュレータ構築の為の情報として提供した。
  - 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温度等の環境条件の電気的特性への影響評価、最終用途を視野に入れた電磁波特性評価の高周波化対応等を検討し、ミリ波・テラヘルツ領域の計測技術との比較やデータの補完についても検討した。取得したデータは計算及びプロセスチームへ提供した。また、グラフェン及び h-BN 等のモデル材料についてのデバイス構造を利用した特性評価において測定精度の向上を行った。
- 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-クライオトモグラフィーにより、ゴムブレンド/シリカコンポジットの3次元構造と3次元元素分布情報を解析し、ブレンドの配合、シリカの添加量による3次元構造決定因子を解明し、構造・物性予測プラットフォームを開発した。また、リアクティブポリマーブレンドの相分離構造をSTEM-EDX/EELSにより解析し、構造形成メカニズムの解明を行った。さらに、計算シミュレーションと連携した計測結果について、実サンプルでの解析結果との整合性を検証し、構造発現メカニズムの検討を行った。

b) 陽電子消滅法とX線CT

陽電子消滅法では、外場応答計算シミュレーションと連携した高速計測技術の実証を行った。X線CT計測技術においては、サブミクロン分解能X線CT計測技術に向上させて、さらに計算シミュレーションと連携した高速計測技術への展開をはかり、実サンプルとの整合性を検証し、誘電材料、ポリマー系コンポジット材料のメカニズムを検討した。

c) CNT複合材料評価に関する基盤技術開発

様々なCNT膜材料に関しSEM等を用いることで、CNTネットワーク構造の特長を抽出し、電気特性との相関解析を行った。また、実験で得られた計測結果とシミュレーション結果との比較検討を行った。

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、液相及び気相反応中でのin-situ分析を引き続き行い、触媒反応中における固定化触媒の解析やコアシェル触媒の生成過程の解明を行うとともに、触媒開発のための学習用データを引き続き収集した。DNP-NMRについては、触媒構造支配因子の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を進め、高度測定法の構築を行うとともに触媒開発のための学習用データ収集を引き続き行う一方、DNP-NMRの活用範囲拡大を目的とし、新規分極剤の開発を進めた。

[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革新分離材料の研究開発

実際に製膜試作を行い、相分離シミュレーションのチューニング、実証を行った。またシミュレータの機能追加を行った。

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

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継続し、候補物質の選定を開始した。

4. 2 実績推移

	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度	2020年度
	委託	委託	委託	委託・助成	委託・助成
需給勘定(百万円)	1,780	2,400	2,650	2,650	2,476
特許出願件数(件)	2	4	9	4	9
論文発表数(報)	25	24	23	25	37
フォーラム等(件)	17	16	15	15	10

## 5. 事業内容

引き続き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。

2020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、理研、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理研 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」の設計を行い設立を準備する。

### 5. 1 2021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によるデータの蓄積、Ai 解析の高度化を計るとともに、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」の設計を行い、設立を準備する。

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）のプロトタイプを開発・公開する。

#### [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速、高度化を進めるとともにデータの蓄積を行い、深層学習・機械学習プログラムの学習用データとして用いる事により、高い逆方向予測性を持つ AI を構築し、従来の試作回数・開発期間比で 1/20 の時間短縮に資する基盤技術を確立する。

##### 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

開発したマルチスケールキャリア輸送計算シミュレータによる大量のスクリーニング

に資するデータ、マイクロ-マクロ連成データ群、それらを用いた高い逆問題予測性を持つ AI 技術を構築し、所望の性能を持つナノ粒子、カーボンナノチューブ、有機半導体材料やグラフェンの設計を行い、プロセス技術による検証を行う。

- 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
- MD シミュレータとデータ科学的な手法を加え合わせる事により、大規模複雑材料の分子、イオン・界面原子ダイナミクスに対する順方向予測性能を高める。MD シミュレータを用いた物性推算と実験データを比較し予測技術の妥当性を確認するとともに、データをプラットフォームに提供するとともに、AI 技術を活用し材料組成を絞り込む予測技術を開発する。

## 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

機械学習モデルを適宜改良した上で、モデル材料の結晶の化学組成・構造の最適化を実行し、得られた粒径・形状、分散状態に対する知見と合わせて、光学応答を制御するための設計指針を得る。また、引き続き、順問題シミュレータと機械学習利用による逆問題ソルバを併用し、有機誘電体、モデル材料の組成、構造の最適化を実行し、探索された材料系によるデバイスの基本設計を行う。

### 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

分子構造及び高次構造と力学的特性及び電歪特性等の物性ととの相関を学習し機械学習モデルと、粗視化 MD-FEM スキームを活用することにより、目的の物性を発現する化学構造、高次構造を絞り込み公知データ及び実験データとの比較を行う。さらに引き続き、物性データの追加、一連のスキームによる検証を行い、新規デバイス提案に結び付ける。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 シミュレーションにより得られたデータ、及び構造情報からパーシステントホモロジー解析等により得られた圧縮された情報を用いて機械学習を行い分子構造と機能との相関を明らかにし、スクリーニングと最適化による逆問題に取り組み、新規材料の提案を行う。

### 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

フィラー分散高分子材料等の高分子コンポジット材料について、プロセス・計測から提供される各データを含めた三位一体の材料開発研究を進める。特に計測から得られた画像からの特徴構造抽出技術についての研究を進めることで、分散構造の記述子を用いて、AI 連携ツールを用いた研究を進め成果をまとめる。

### 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

フィラー分散構造の構造解析により、現実のプロセスによるフィラー分散構造、物性値等を高速で予測する機械学習システムを構築する。また、実測データを相補的に用いたデータセットを拡充、機械学習を援用しプロセス条件、フィラー分散構造、材料機能の三者の相関解明を進め、プロセス条件最適化への指針を提案する。また、ナノカーボンシミュレータに関しては順方向シミュレータの検証と、精度の向上を進め実材料への適用の可能性を示す。さらに相分離挙動の半定量的予測を高精度化、及び分離膜中のガス透過性、選択性に関する新規方法論の有効性検証を行う。

### 3) マルチスケール反応シミュレータの開発

蓄積データとAI技術活用により、触媒活性を支配する因子を特定し最適構造を探索するとともに、最適触媒構造探索のためのデータプラットフォームを構築する。また、シミュレーション及びAIを用いた触媒の分子構造の提案及びフローリアクターに最適な条件を確立し、反応性流体シミュレーション技術を用いた量産モデルを構築する。

### 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

2020年度までに開発した機械学習ポテンシャル技術は高精度高速順方向シミュレーション技術として統合し、表面・界面での材料特性予測、材料スクリーニング技術の実証検証を行い、反応解析システムは他のAI関連技術及び可視化技術と統合し、反応解析パッケージを完成させる。また、逆方向予測を可能とする手法を開発し、熱可塑性樹脂モデル素材及び熱硬化性樹脂モデル素材での実証を行う。また、透明フレキシブル樹脂素材に関する物性・組成等の逆問題に関するAI関連技術の開発、深層学習、転移学習等の機械学習の適用を継続して行い、材料設計技術の高度化を確立する。さらに、材料解析データプラットフォームの高度化を進め、基幹システムとして当該プロジェクトのデータ管理の運用を実施する。

材料データ構造化AIツール開発に関しては、プロセスデータの関係性抽出、コーパスの改善継続、特許データベースの詳細設計及び基幹開発、テキストから物性情報を抽出する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の改善及びツール統合、及び標準データベース、オンロジーにおいてはプロセス情報の追加、オンとロジーマッピングを行う。

## 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、データを蓄積するとともに開発期間の短縮に貢献する。

### 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

モデル材料の多条件ハイスループット合成プロセス技術の改良を行い、ナノ粒子合成に必要な実験データを蓄積する。また、ナノ粒子の構造制御から界面・高次構造制御までの一貫したプロセスによって、ナノ粒子分散ポリマー材料を試作し、実験データを蓄積する。さらに、AI技術連携によりプロセス条件と構造・機能の相関解明を高度化し、プロセス条件最適化への指針を提案し、以上の取り組みからナノ粒子合成・分散ポリマー材料の開発期間の短縮を実証する。

#### b) CNT線材作製プロセスに関する基盤開発

試作したCNT線材の分析・評価とシミュレーションとの連携により導電阻害要因の検証を行うことにより得られた設計指針を元に、CNT線材作製プロセスに関するデータプラットフォームを構築し、CNT線材開発の試作回数1/2削減を行う。

c) 大面積グラフェン高速合成及び積層技術の基盤開発

超高スループットのグラフェン合成技術とそれを用いた大面積高移動度透明導電フィルムを作製し、積層状況や品質の相関を見極めると同時に、工業材料としての可能性を検討する。並行して大面積 TMDC 発光デバイスの試作を試みる。これにより高スループットグラフェン合成技術を基盤とするナノカーボン材料の開発期間短縮効果を検証する。

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の改良とモデル材料の試作を進め、ポリマー系材料の開発に広く活用できる試作プラットフォーム構築に必要な検証や改良を行い、5倍高速化を実証、確立する。また、軽量・高強度・高耐熱のスーパーエンブラ系ナノコンポジット材料、光透過性・高断熱のナノ発泡断熱材料について機能・性能向上と開発高速化、製造システムと方法論の原理の実証を行うとともに、モデル材料以外への適用可能性について検討する。

b) CNT 複合材料作製プロセスに関する基盤技術開発

シミュレーションによりデータを蓄積し材料試作データプラットフォームを構築し所望の物性を発現できる CNT ネットワーク構造を実現可能なプロセス技術を確認する。それを用いて、機械学習等で予測される最適な組成やプロセス条件に基づいた CNT 複合材料を作製し、逆方向予測の実例を提示するとともに実測のデータとの相関を解明する。

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

触媒スクリーニングをハイスループット装置により実施し、さらに計算科学・AI の結果と合わせ、フロープロセス用の新規な固定化触媒を開発する。また、天然資源をゴムに転換できる触媒プロセスの開発、一連の過程を連続的に合成するフロープロセスの設計、フロー型反応器のスケールアップを行い、従来法と比べ5倍以上高速化する自在合成技術を開発する。

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・手法の開発、データ蓄積、高速化等を行う。

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、OFET に測定を行い、素子駆動、劣化機構を解明する計測技術開発を進める。また計算手法との連携をすすめ、実測データとの相関を確認する。また、高剪断力下測定では、特性影響因子の抽出を行い、分子設計へフィードバックするための基盤を構築する。一方、ナノプローブ分光法では、計測システムの最適化・高速化を進めると

ともに、計算シミュレーションと連携を深めることで、材料開発の高速化に資する。

b) CNT線材の導電障害部を可視化する計測技術基盤開発

インライン測定可能な高速評価手法の開発に取り組むとともに、引き続き各種 CNT 線材に関する多種類の物性ならびに構造データの取得を行う。得られたデータはデータプラットフォーム構築、シミュレータ構築の為の情報として提供する。

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

ナノ領域の計測結果と既存のマクロ計測技術により得られる電気的特性との相関性を明らかにする。取得したデータについては、データベース化し計算・プロセス開発に供する。また、グラフェン及び h-BN 等のモデル材料についてのデバイス構造を利用した特性評価において、デバイスシミュレーション・電磁界シミュレーションとの比較を行い測定可能範囲・精度を明らかにする。

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

ゴムブレンド/シリカ多成分コンポジット材料、高せん断リアクティブポリマーブレンド、及びナノ発泡断熱材料について、多次元構造情報をハイスループットで取得し材料のプロセス-構造-物性相関予測を可能とする高度計測技術として実証するとともに、計算シミュレーションとの連携のためのデータを提供する。

b) 陽電子消滅法とX線CT

陽電子消滅法では、陽電子プローブ制御パラメータが最適化された計測装置を用いた nm 解析技術を共用利用化する。X線CTでは、従来法と比べて5倍以上高速化するハイスループット技術を完成させる。

c) CNT複合材料評価に関する基盤技術開発

CNT 複合材料におけるフィラー分散状態・空間分布状態といった評価計測を材料製造のインラインならびにオフラインにて行う技術を確立し、機械学習とともにナノカーボン材料の評価に関するデータプラットフォーム構築を行い、最適な実験パラメータの提示や従来は非自明であった相関関係の解明を目指し材料開発の大幅な期間短縮に貢献する。

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

最適な分極剤を駆使して触媒反応中や材料合成中の in situ 測定を行い、金属酸化物やポリマー等の触媒作用状態での反応過程やポリマー合成過程を直接的に観測し、反応機構や合成過程の解明を行う。In-situ XAFS については、触媒反応中の in-situ 測定を行う。それらの測定データは AI 技術とともにデータプラットフォーム化するとともに、プロセス技術と協力して高性能触媒の開発法開拓へと繋げる。

[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

(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  
2 製膜設備による収集データの検証、マルチスケールシミュレーションモデル改良及び計算結果の試作へのフィードバック、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  
前年度までに選定した候補材料の製造プロセス検討及び試作・評価を行う。

## 5. 2 2021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

本年度が事業最終年度であることから、NEDOは2022年度、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、外部有識者による事後評価を実施する。

### (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

事業開始年度～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 2021年度の公募について

事業の最終年度にあたることから本年度は事業の公募は実施しない。

## 8. 実施方針の改定履歴

- (1) 2021年3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)」
- 名古屋大学
  - ・研究開発項目: ①の内「高分子溶液のレオロジー物性予測の高度化(増淵)」
- 東京大学
  - ・研究開発項目: ①の内「全原子分子動力学の大規模化(岡崎)」
- 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: ①の内「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(大谷)」
  - ・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)」
- 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)」
- 慶應義塾大学
  - ・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)」

#### ● 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)、宇部興産(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)、昭和電工マテリアルズ(株)、横浜ゴム(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: 国立研究開発法人 理化学研究所 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)理化学研究所

- ・研究実施場所: 革新知能統合センター(東京都中央区)
- ・研究開発項目: ①の内「PDFからの図表の領域認識」、「表の構造解析」

●(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」
- ・研究実施項目: ①の内「特許データベースの設計」

●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

<b>NEDO</b> 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>●東レ株式会社</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>	