

「次世代ファインセラミック製造プロセス基盤構築・ 応用開発プロジェクトの研究開発」（中間評価）

2022 年度～2026 年度 5 年間

プロジェクトの詳細説明（公開版）

2024 年 6 月 18 日

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

材料・ナノテクノロジー部

2. 目標及び達成状況（詳細）

研究開発項目 ●

- (1)アウトカム目標及び達成見込み
- (2)アウトプット目標及び達成状況

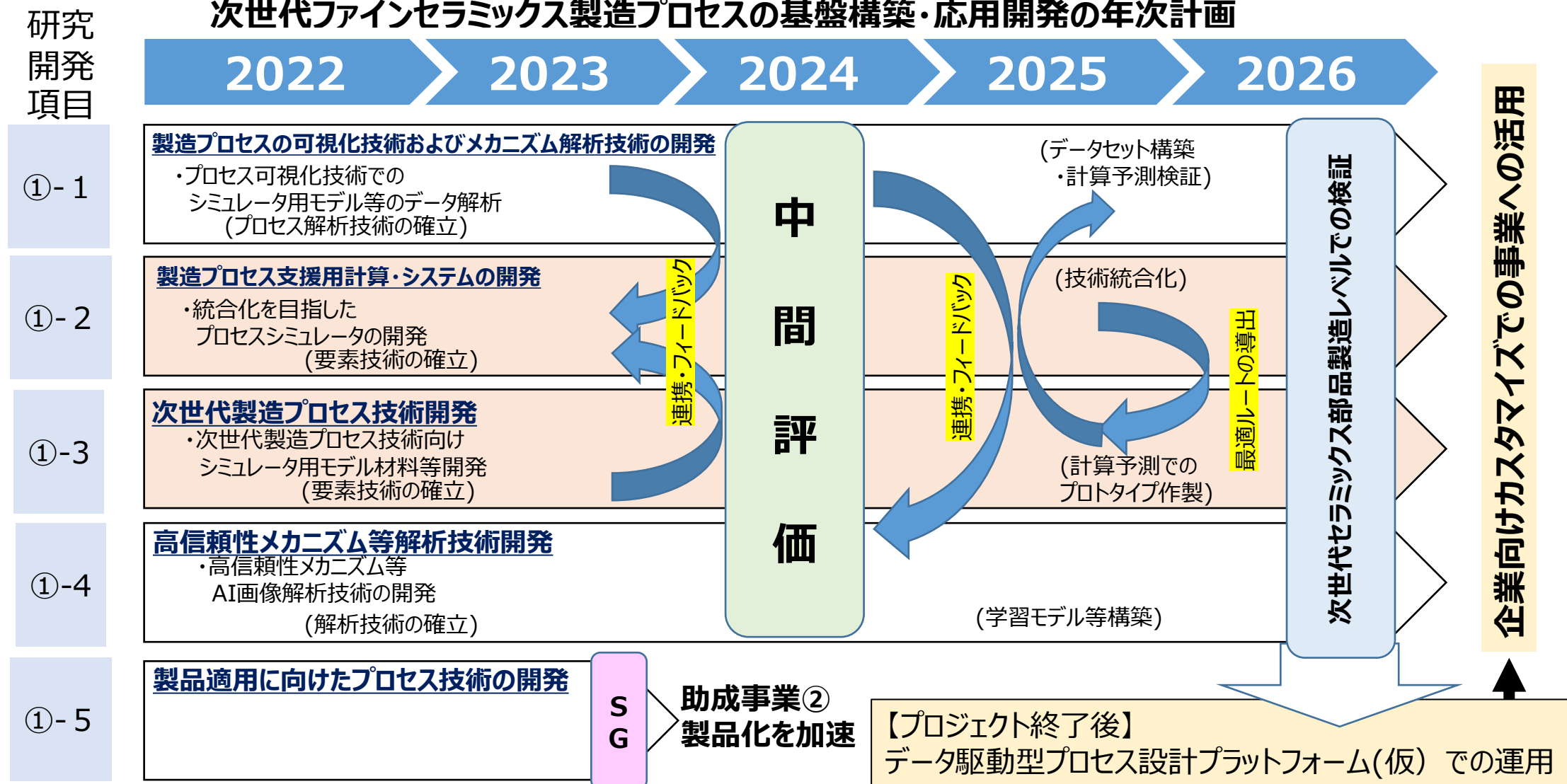
ページ構成

- アウトカム達成に向けた戦略・具体的な取組
- アウトカム目標達成の見込み
- 個別事業ごとの目標と根拠
- 個別事業ごとの目標達成状況
- 個別事業の成果（アウトプット目標達成度）と意義

アウトカム達成に向けた戦略・具体的取組

アウトカムを実現するために必要なアウトプット（プロセス開発と部品試作）を得るための各研究項目の関係

次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発の年次計画



アウトカム達成に向けた戦略・具体的取組

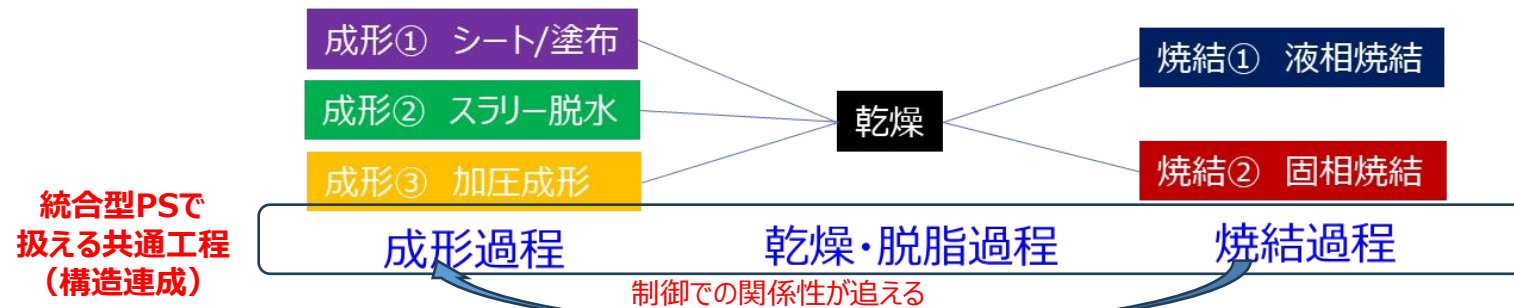
アウトカム実現に資するアウトプット(新規プロセス開発)のカギとなるのは[プロセスシミュレータ\(PS\)](#)

参画企業の実施計画との対応
(PJ前半のオープンな開発でのプロセスシミュレータ等の開発・検証)

	原料	成形	乾燥脱脂	焼結
エレセラ3社 (村田、京セラ、太陽誘電)	酸化物誘電体/金属電極 (~100 nm)	成形① シート/塗布 シート成形 塗布(金属層)	乾燥脱脂 常圧・加熱	焼結① 液相焼結 還元雰囲気 液相焼結
AGC	非酸化物スプレードライ粉	成形③ 加圧 固相加圧成形	常圧・加熱	不活性雰囲気 ガス圧・液相焼結
TOTO	酸化物スラリー	成形② スラリー脱水 鋳込成形	常圧・加熱	大気 液相焼結
日本ガイシ	酸化物スラリー	フィルター成形	常圧・加熱	焼結② 固相焼結 大気 固相焼結
日特	酸化物/金属	成形① シート/塗布 シート成形 塗布(金属層)	常圧・加熱	大気 固相焼結
リタケ	ガラス	塗布(ガラス層)	常圧・加熱	ガラスの緻密化 金属との接合

各社が必要とする
プロセスに対応した
PSを開発

企業のプロセスに合わせた開発プロセスシミュレータの共通基盤での関係 (組織構造変化)



2023.06.14 集中研技術会議

アウトカム目標の達成見込み

	電子セラミックス (エレセラ)	エンジニアリング セラミックス (エンセラ)
原料粒子	10～100 nm	数100 μm
部材構造	金属/セラミックス積層体	緻密体、多孔体、積層体
原料	スラリー	粉体、スラリー
プロセス	シート成形、シート圧着、 共焼成等	加圧成形、鋳込成形、シー ト成形、フィルター成膜等
企業 (略称)	村田、京セラ、太陽誘電	AGC、Nittera、NGK、 TOTO、リタケ

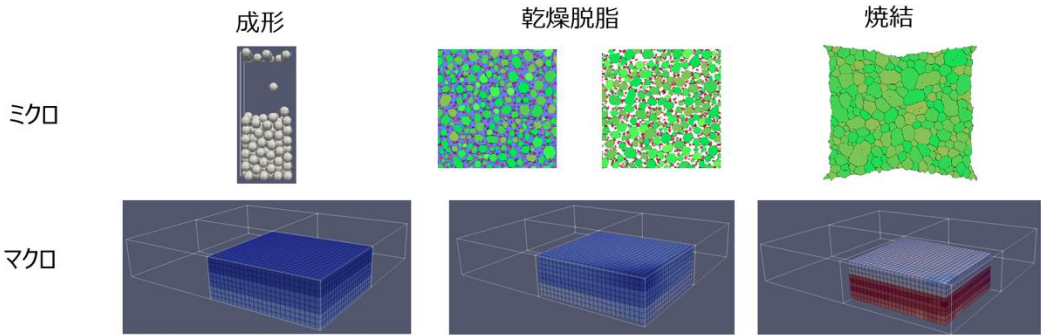


アウトカム(売り上げ1兆円、CO2削減)目標を 実現するための新規プロセス開発

- ・事業前半では、アウトカムを実現するためのアウトプット目標である
20種以上のプロセス開発へ繋げるためのプロセスシミュレータ群を準備・開発し、
検証を進めた。
- ・計算手法の特徴を生かした事業オリジナルのモデル創出や本事業独自の
手法提案の確認を行った。

目標実現のためのマクロ・ミクロ・ナノレベル構造を 設計するプロセスシミュレータ

○統合型シミュレータの動作テスト開始



高度化によりアウトプット目標を実現

アウトカム目標の達成見込み

開発中のプロセスシミュレータの状況と目標実現に向けた今後の開発課題

計算コア技術	対象プロセス		現時点でできること	今後の開発課題 (PJ期間内)
DEMコード（固相） FSI-DEMコード（スラリー） （マイクロ・マクロ プロセス動的挙動）	・加圧成形 ・顆粒加圧成形 ・鋳込成形 ・フィルター成形 ・シート成形		・成形時の密度分布予測 ・成形条件による欠陥生成の定性的予測（スラリー） ・3次元対応完了	・微小粒子の粒子間相互作用 ・シート成形時の剪断力 ・鋳込成形/フィルター成形で用いられる多孔 質基板からの透水 ・離散要素法の複雑形状粒子への対応
MCコード FEMコード （マイクロ・マクロ プロセス動的挙動）	・加熱脱脂 ・常温乾燥 ・固相焼結 ・液相焼結		・混合液相（溶媒、バインダー、分散剤）への対応 ・乾燥脱脂に伴う粒子の再配列、収縮挙動 ・焼結に伴う粒成長、緻密化、収縮挙動 ・異方粒成長 ・3次元対応完了	・固相反応によって液相が生成する系への対 応（反応そのものは取り扱わずに、実験で生 成した液相のみ考慮）
MPH-I コード （マイクロ・マクロ プロセス動的挙動）	混合 成形	・混合、多層圧着、 ・シート成形、CIP、塗 布、鋳込み 等	・高粘度、複雑回転・変形への対応 ・外力・自重等に対する変形への影響の考慮 ・プロセス装置（ダイス等）にそった形体での 計算モデル対応	・非Newton性を有するスラリーの対応 ・微粒子挙動
FSI-DFEM コード （ナノ～マイクロ構造）	成形	・鋳込成形 ・フィルター成形 ・シート成形	・形状や分布をもった原料粒子での成形時の外力と密度分布・溶媒の分布 等の予測 ・成形時の外力や時間経過による凝集構造変化の予測・欠陥生成の定量 的な予測（スラリー・ペースト）	・各種レオロジー特性への対応（各種モデル 実験との整合）
FSI-DFEM コード （ナノ～マイクロ構造）	乾燥 脱脂	・加熱脱脂 ・常温乾燥	・マイクロ成形シミュレーション結果の取り込み ・混合液相（溶媒、バインダー、分散剤：媒体の影響考慮）への対応 ・乾燥脱脂に伴う粒子の再配列、収縮挙動（形状や粒子径分布の影響）	・各種モデル実験との整合
PFMコード （ナノ～マイクロ構造）	焼結	・固相焼結 ・液相焼結 ・異種材の積層焼結	・乾燥・脱脂計算結果の取り込み ・焼結に伴う粒成長、緻密化、収縮挙動 ・異種材料（多相・多層）を考慮した焼結 ・欠陥状態や雰囲気の影響（拡散係数） ・任意の温度プロファイルの設定 ・実時間、実スケール（物理量・理論密度値）での計算 ・3D大規模並列計算への対応	・液相焼結への対応 ・異方粒成長への対応 ・温度空間分布への対応 ・①～4 機械学習モデルへの連携

個別課題ごとの目標と根拠、目標達成状況

プロセスシミュレータのモデルや計算検証で必要なデータや確認したいプロセス挙動を再現するプログラムの準備のための目標を設定し実施

研究開発項目① 革新的プロセス開発基盤の構築

研究開発項目	中間目標（2023年度）	得られている成果（2023年度）	達成状況
研究開発項目①-1 製造プロセスの可視化技術及びメカニズム解析技術の開発	・粒径100nm～数umオーダーのセラミックス粒子に対して、10 nmオーダーのセラミックス粒子を含むスラリー中の分散状態可視化技術を開発する。さらに、前年度に引き続き、10 nmオーダーのセラミックス粒子内の欠陥状態に関する評価手法について分光学的手法や核磁気共鳴法等の検討を進め、評価技術の信頼性確認を経て、データの収集を開始する。また、開発した技術等を用いてプロセスシミュレーションを構築するためのデータセットを10種類以上蓄積する。	・誘電顕微鏡と画像処理技術を組み合わせ観察技術で、10nmオーダーの解像度でスラリーの直接観察を行い、ペーストを扱うシミュレータモデルの開発につなげた。また、市販アルミナおよびBaTiO3で、粒径やバインダーの組み合わせが異なる12種・20項目の物性等のデータセットを取得した。	100% 達成
研究開発項目①-2 製造プロセス支援用計算機システムの開発	・開発する各プロセスシミュレーションの目標精度は原料粒子のサイズを基準に策定し、成形・乾燥脱脂シミュレーションにおいては原料粒子の「抜け」や「凝集」、焼結においてはこれらの「抜け」や「凝集」に起因する欠陥が再現・予測可能なシミュレータを開発する。具体的には、200 nmの粒子を原料として用いるプロセスについて、成形・乾燥脱脂シミュレーションでは100 nm（粒子サイズの1/2）の空隙、焼結シミュレーションでは、50 nm（粒子サイズの1/4）の空隙を再現・予測可能とする。	・セラミックスのプロセス挙動を計算するDEM法、DFEM法、PFM法、MC法等で、市販の200nmのアルミナ原料を用いた、ペーストのナノ構造の凝集・分散モデルを構築し、粒度分布や粘度等の違いにより、外力との構造変化の計算実験や、温度プロファイルや時間を変えて焼結構造の変化(空隙は10nm以下) 計算できる計算手法を開発した。	100% 達成
研究開発項目①-3 次世代製造プロセス技術開発	微小原料粒子のフロー製造において、複数の金属から構成される酸化物粒子の粒径や分布の制御に関するプロセス-分析データセットを50種類以上蓄積し、AIなどの活用による最適製造条件探索の有用性を例証する。また、スラリーデータセット構築のための技術を確認する。固相原料では、セラミックス原料の平均粒径との比、セラミックス原料粒子との接着性、融点等の異なる代表的可塑性有機バインダー10種以上を用いた成形、乾燥脱脂実験を行い、固液複合原料では、溶媒成分の体積分率、分散剤の分子サイズ、セラミックス粒子表面との結合状態が異なる10種以上のスラリーを用いたシート成形を行い、溶媒およびバインダー成分の性状が異なる20種以上のシートを作製する。固相原料では、前年度に引き続き、データセットを用いたシミュレーションおよびAIなどの活用から提案される最適条件の妥当性を、実実験により検証し、開発技術の有用性を実証する。	・多点モニタリングが可能な原料ナノ粒子のフロー製造装置を開発しBaTiO3系で、95種（条件）のフロー水熱原料合成のプロセス-分析データセットを構築し、AI（機械学習）により粒径20nmの粒子製造条件を推定し、実際に粒子を合成した。課題①- 1に必要な12種のスラリーや20種のシート部材等を作製し、プロセスシミュレータの計算での構造変化の検証を行った。 ・データセットを用いたシミュレーションおよびAIなどの活用から提案される最適条件の妥当性を、実実験により検証し、開発技術の有用性を実証ができていない。	90% 達成
研究開発項目①-4 高信頼性メカニズム等解析技術の開発	破壊現象メカニズムの解析手法を開発するにあたり、破壊に影響を与える構造因子を明らかにするとともに、数～数10 umオーダーの気孔や欠陥を予測・解析・数値化するための手法を探索する。また、熱応力解析技術ならびに温度変化時のデバイス変形挙動等の計測技術を活用し劣化要因となる因子を明らかにし、加速劣化試験法開発の方向性を検討する。	・アルミナにて破壊現象に関わる数～数10 umオーダーの粒界や気孔等の実組織画像を学習させ（1000～1500個の画像をAI学習）その学習画像と破壊特性の相関より、シミュレーションによる破壊予測に基づく組織画像のAI予測が可能な技術を確認した。さらに10～50個の学習データから破壊予測をする技術も開発した。金属セラミックス接合での2～3段階の温度差で剥離特性との相関性が確認できた。 成果の一部は「 ファインセラミックス内部のキラー欠陥の可視化技術を開発 」としてNEDOプレスリリースをおこない、 日経新聞web版等 に掲載された。	100% 達成
研究開発項目①- 5 製品適用に向けたプロセス技術の開発	ステージゲート審査にて各社の達成状況を確認。（全課題、後半事業への移行が承認）		84% 達成 (平均値)

個別の開発目標はほぼ達成、プロセス技術開発のための実装・連携に遅れが生じている。

プロジェクトとしての達成している成果（アウトプット目標達成度）と意義

＜達成状況＞

- ・次世代セラミックス部材のプロセス最適化のためのデータ創出（20種類以上のプロセスをカバーする）プロセスシミュレータ手法の選定、実験データの実験と計測での取得（12種）を行い、ナノオーダーの組織の挙動を扱える準備を行った。
- ・事業後半での、プロセスシミュレータの適応条件範囲の拡張や、構造連成での解析を可能とする実験からパラメータを取得する「統合化」プロセスシミュレーション（DME,MC）の要素プログラムやそれを補完する数理モデルのプロセスシミュレータ（PFM、DFEM）作動を確認した（PFM焼結シミュレータについては、事業での活用に向け、参画企業等へ配布を進めチュートリアルを進めた）。
- ・各研究課題の開発目標はほぼ達成、新規プロセス開発のためのプロセスシミュレータ実装と連携が遅れており、加速が必要。

統合型プロセスシミュレータ開発・解析での共通基盤技術を産学でしっかり作り上げるため事業後半での課題を全体で確認、優先順位をつけて開発内容の選択と集中をおこなった。

＜成果の意義＞

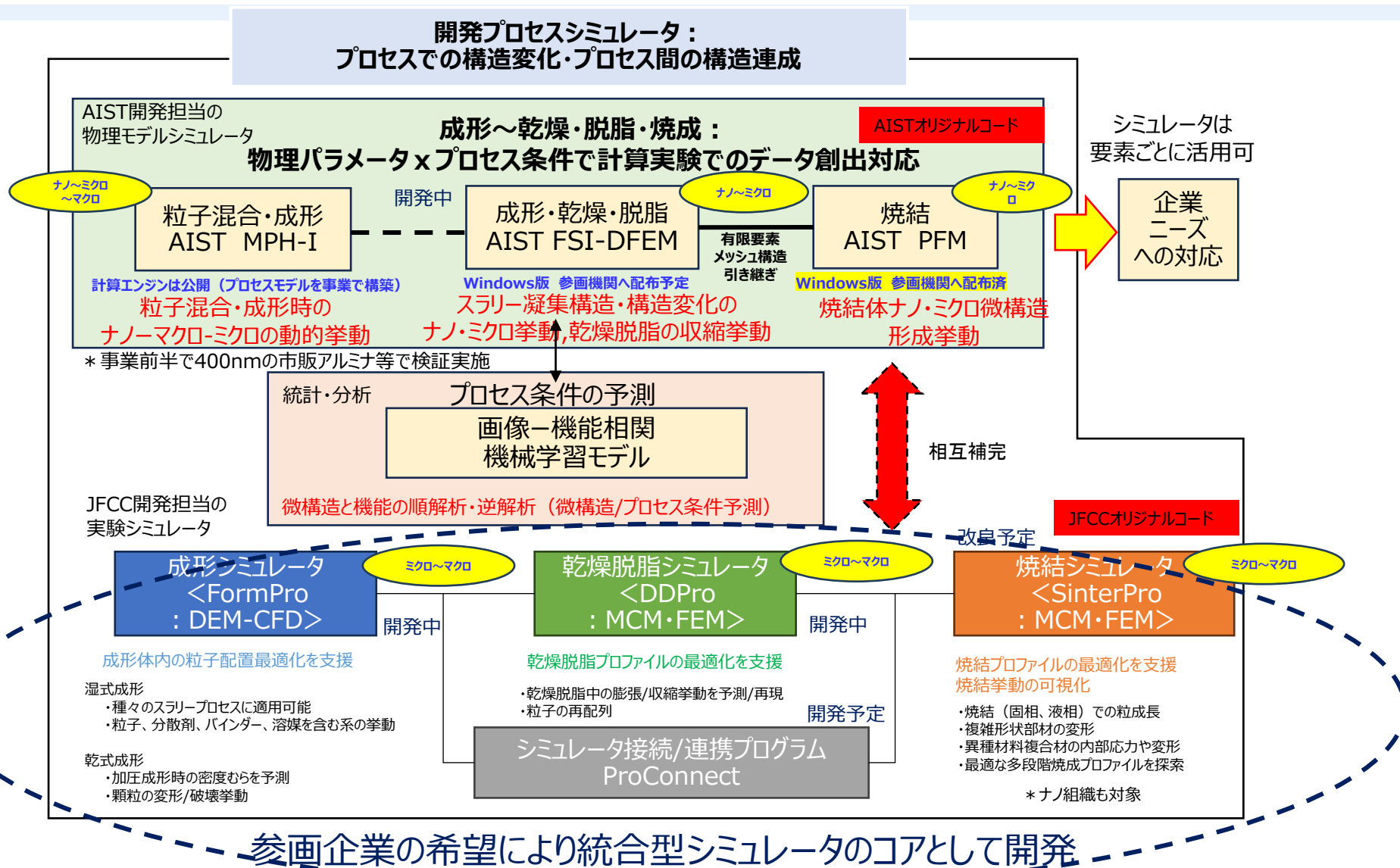
- ・本事業で開発した統合型プロセスシミュレータを活用した、事業後半でのプロセス開発手法での事例創出にて、参画企業でのデータ駆動型プロセス開発へ進め、プロジェクト終了後、ファインセラミックス産業での開発力・競争力強化に寄与する。

研究開発成果

次世代ファインセラミックス事業 統合型シミュレータの概要

理論式をベースとした
シミュレータ

実験パラメータを
ベースとしたシミュレータ



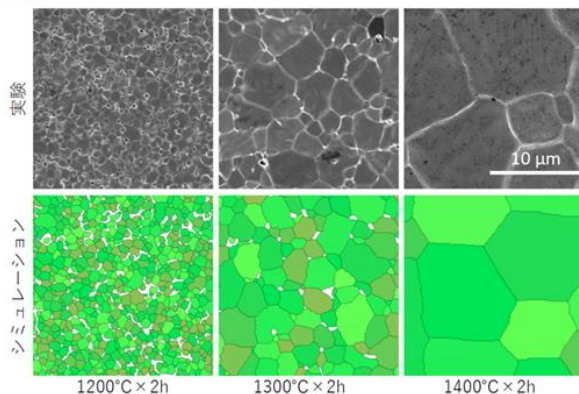
研究開発成果

研究開発項目 ①ー2

プロジェクト開始前（2021年先導研究時）

組織変化 焼結体のSEM写真とシミュレーション画像

MC法

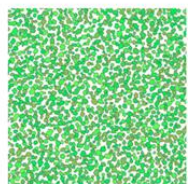


BaTiO₃ (BT-01、初期粒径0.4 μm) の焼結後組織のSEM写真とシミュレーション画像

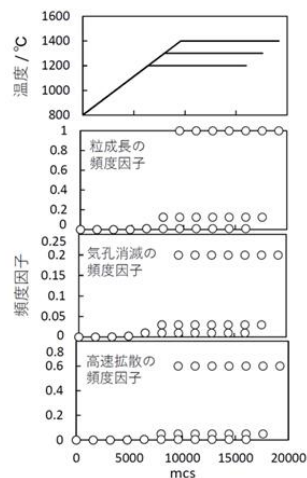
- ・1300°C以上で緻密化し、著しく粒成長した。
- ・シミュレーションはBaTiO₃の焼結・粒成長挙動を再現した。

組織変化 チタン酸バリウムの焼結シミュレーション条件と初期組織

焼結シミュレーション条件	
項目	条件
格子サイズ	500×500 cell
BT-01の初期粒径	4.46 cell
粒界エネルギー(γ_{GB})	1
表面エネルギー(γ_{SV})	1.4
モンテカルロステップ(mcs)	19200



BT-01の初期組織



温度とmcs、頻度因子とmcsの関係

実験よりシミュレーションパラメータ取得

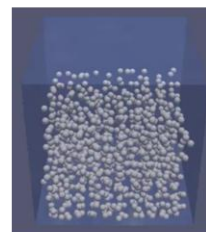
プロジェクト開始後（2023年度末）

マクロ-ミクロ構造の実験を再現するシミュレータの統合化

DEM、MC、FEM プログラムによる ミクロ～マクロ構造での実験シミュレータでの統合化状況

○成形シミュレータの高精度化・大規模化

3Q終了時点

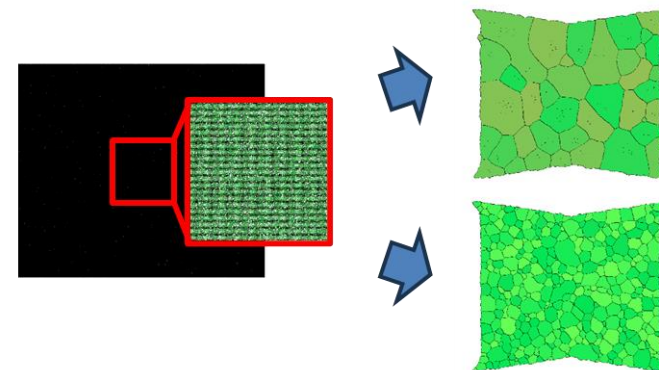


4Q

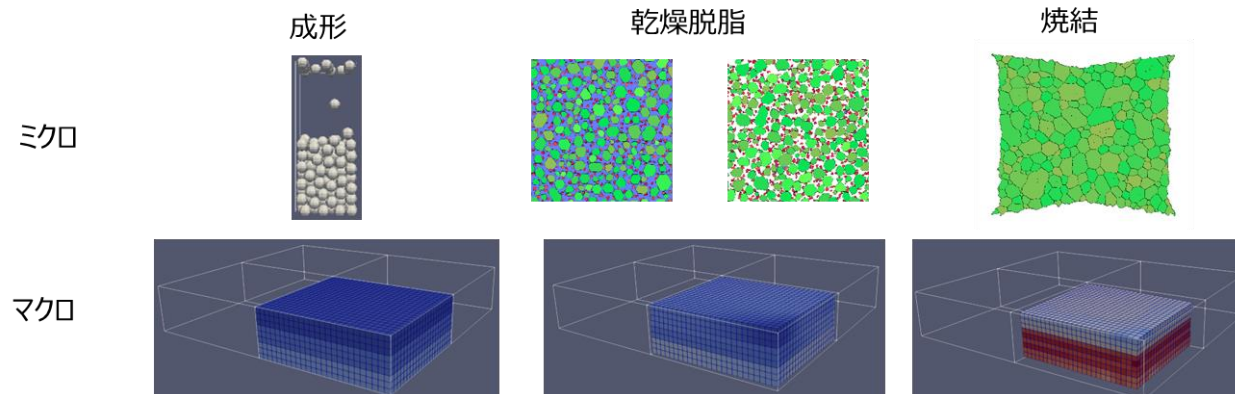


単純系→実部材模擬系
粒子数 1,000→20,000

○焼結シミュレータを用いた異常粒成長の再現



○統合型シミュレータの動作テスト開始



研究開発成果

研究開発項目 ①-2

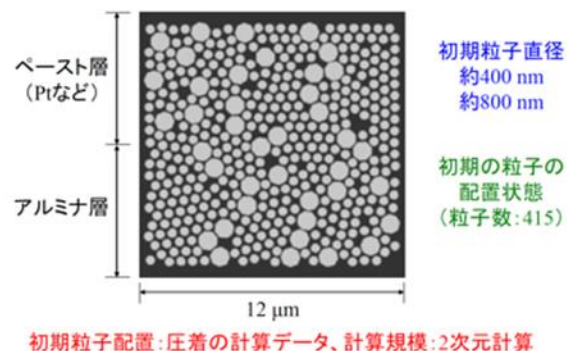
プロジェクト開始前 (2021年先導研究時)

プロジェクト開始後 (2023年度末)

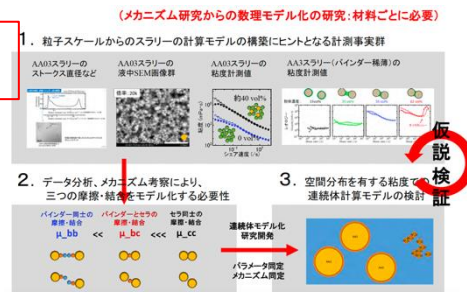
実験ナノ-マイクロ構造を再現する成形～焼結の統合化を実現

PFM法

積層構造の焼結(異種材料の粒成長)
フェーズフィールド法による計算例

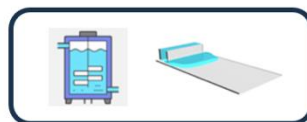
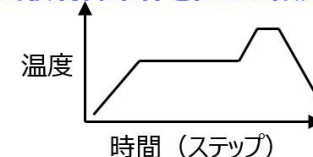


DFEM法



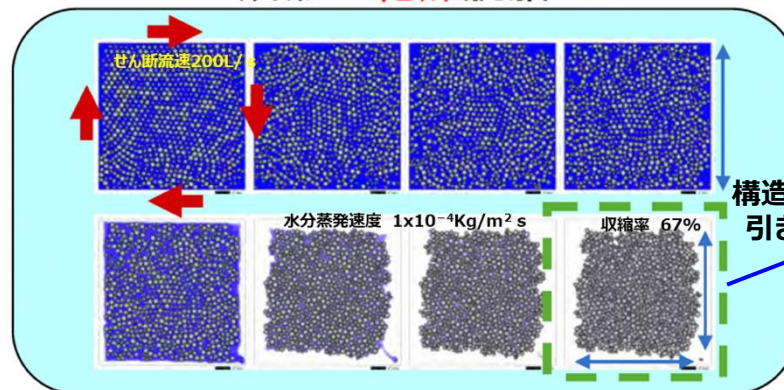
PFM法

- 3) 物理法則に基づいて自動で凝集構造(初期の隙間)・配列を計算<予測>
- 4) 拡散計数等の物理定数を設定、温度プロファイル等の条件入力(実験制御条件を任意に設定可能)

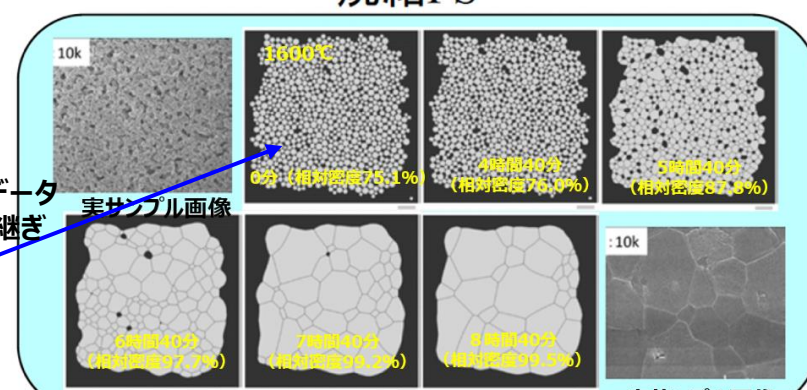


- 2) 攪拌・せん断力・圧力等の外力の入力(実験制御条件を任意に設定可能)

成形・乾燥脱脂PS



焼結PS



異相の界面関数での数値モデルと物性値よりシミュレーション

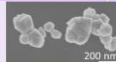
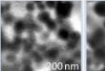
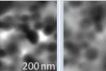
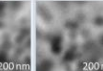
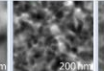
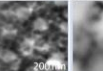
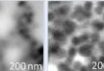
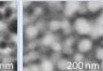
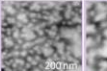
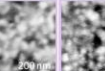
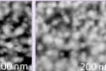
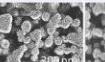
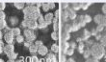
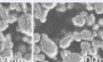
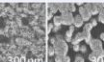
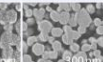
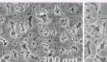
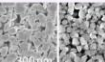
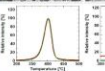
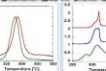
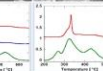
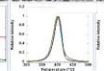
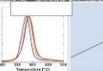
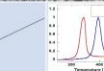
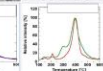
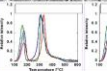
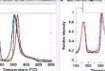
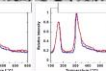
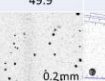
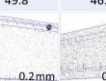
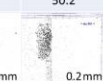
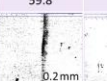
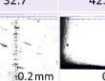
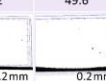
アルミナ湿式シートプロセス、焼結を計算

研究開発成果

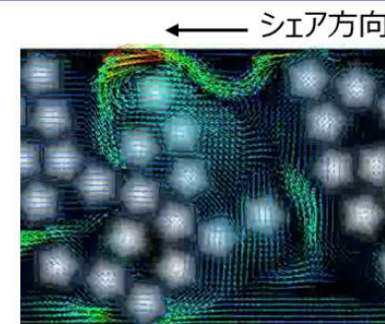
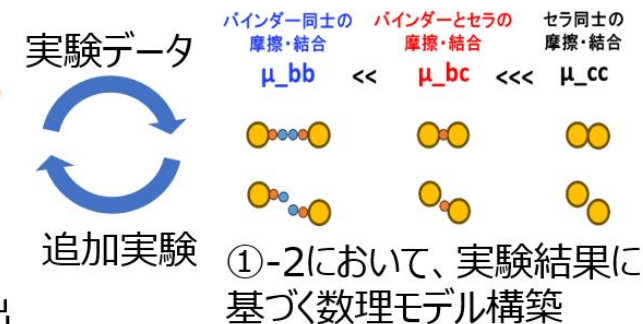
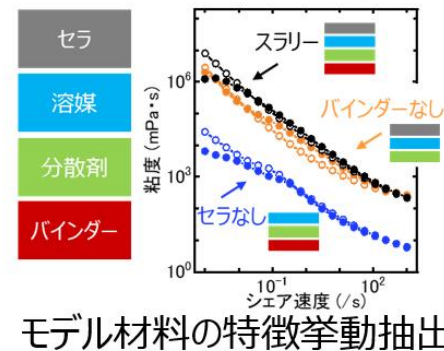
研究開発項目 ①-1、①-2、①-3

アルミナおよびチタバリ粉体を用いたモデル材料について、スラリー、成形シート、脱脂体、焼結体のシミュレーション構築データセットの収集蓄積

12種・20項目の物性等のデータセットを取得

#	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
セラ	Al ₂ O ₃ -1	Al ₂ O ₃ -2				Al ₂ O ₃ -3		Al ₂ O ₃ -4	AA03		BaTiO ₃ -1	BaTiO ₃ -2			
分散剤	分散剤A								分散剤B		分散剤C				
バインダー	Binder-A	Binder-B	Binder-A	Binder-C	Binder-D	Binder-B	Binder-A	Binder-A	Binder-E	Binder-F	Binder-E				
溶媒	水								IPA/BuOH		IPA/BuOH		IPA/3メトキシ-1ブタノール		
助剤等	---								可塑剤DOP		---		可塑剤DOP		MgO, MnO ₂ , Dy ₂ O ₃ , BaSiO ₃
セラ構造：SEM															
スラリー内部構造：誘電率顕微鏡															
粒径-DCS (μm)	3.1	0.52	0.52	0.39	0.39	0.21	0.21	0.22	0.40	0.40	0.35	0.40	0.27	0.27	
密度(g/cm ³)	2.37	2.01	2.02	1.57	1.55	2.02	2.05	1.60	1.57	1.96	1.31	1.30	1.35	1.31	
接触角(°)	62.4	79.9	58.5	86.6	84.9	78.5	69.5	66.7	90	86	46.9	49.3	51.4	50.5	
表面張(mN/m)	12.6	21.5	10.7	30.3	29.0	4.6	< 2	< 1	3.0	21.2	16.2	15.7	16.8	16.4	
粘度(mPa・s @10/s)	249	240	2,000	113	870	15,500	23,200	21,740	3,180	337	240	86	305	314	
せん断応力(Pa@10/s)	3.2	3.1	25.9	1.4	11.1	197.4	295.8	277.0	40.5	4.3	3.1	1.1	3.8	3.9	
熱伝導率(W/mk)	1.87	2.02	1.91	2.02	1.91	1.14	1.11	0.89	0.38	1.33	0.19	0.18	0.20	0.21	
比熱(MJ/m ³ K)	2.98	3.66	3.25	3.66	3.25	3.68	3.33	3.13	2.02	3.17	1.76	2.08	1.79	1.77	
潜熱(kcal/kg)	8.7	10.0	8.3	3.0	3.7	11.2	9.9	9.7	3.3	3.2	4.1	3.8	3.5	4.5	
相対密度(%)	71.2	62.6	65.9	55.8	63.8	64.8	64.9	58.9	51.0	65.0	69.9	40.0	89.4	91.5	
ヤング率	0.27	1.98	(0.5)	1	0.4	1.7	2.7	測定不可	1.52	0.31	1.55	1.50	測定予定	測定予定	
ポアソン比	0.17	0.1	0.13	測定不可	測定不可	0.12	0.2	測定不可	0.12	測定不可	測定不可	測定不可	測定予定	測定予定	
断面構造 (SEM)															
発生ガス															
相対密度(%)	---	49.9	49.8	46.6	47.3	53.5	50.3	---	46.4	50.2	59.8	32.7	42.2	49.6	
X線CT															
断面構造															
相対密度(%)	緻密化不可	96.5	99.1	99.5	99.4	93.5	94.9	緻密化不可	83.3	95.6	76.5	55.8	98.8	96.8	

成形シミュレータの数値モデル構築に貢献



課題①-2において、スラリーのレオロジー挙動を再現する成形シミュレータの開発に成功

後半は、実験研究者もシミュレーション計算をおこない課題①-2へフィードバックすることによってシミュレータ開発を加速

研究開発成果

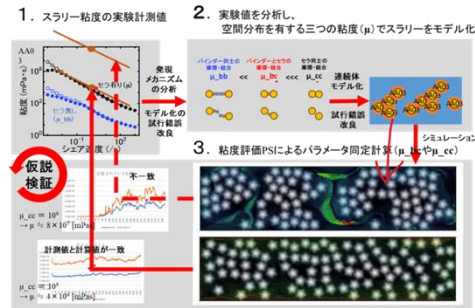
研究開発項目 ①ー2

出力を汎用形式に対応させることで各シミュレーション間の統合、外部出力を実現
開発数値モデルプログラム利用でのナノ～マイクロ構造での統合化状況計算結果の一気通貫での可視化

粒度・粘度・外力・初期構造
=> ①成形・乾燥構造計算実験

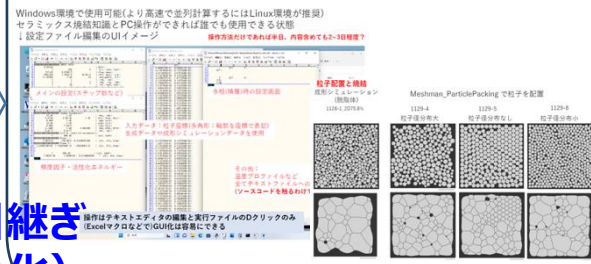
温度・時間のステップ初期構造 (①計算乾燥構造)
=> ②焼結構造計算実験

DFEM 成形・乾燥シミュレーション プログラムWindows版



形状 + 溶媒・バインダ・粒子間の相互作用力 (奥行き考慮)

PFM 焼成シミュレーションプログラム Windows版の画像 (インプットファイルと計算構造画像)



実験で取得できないパラメータも任意に入力可能

構造引継ぎ
(統合化)

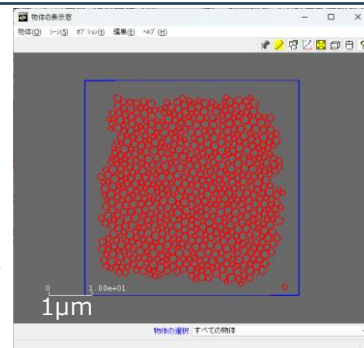
INP形式で出力

INP形式を焼結計算の
入力形式に変換プログラム作成

STL形式で出力対応

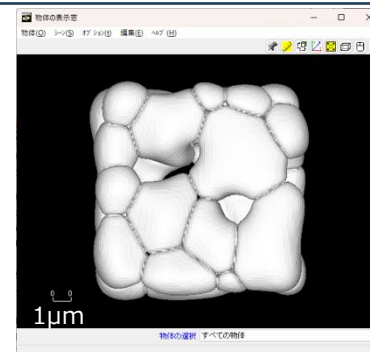
汎用描画ソフト (microAVS*など) で“成形・乾燥・焼結計算”の構造画像の確認が可能なフォーマット

乾燥脱脂後粒子
(粒子の輪郭)



STL形式は有限要素
計算ソフト (ANSYS
等) の構造データとし
て利用可能

焼結計算(過程)
粒子表面



外部(市販)シミュレータ
との連携も可能

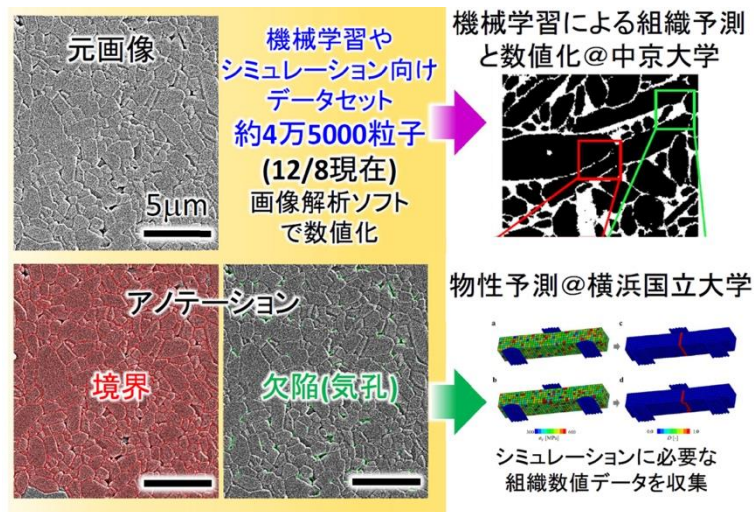
*<https://www.cybernet.co.jp/avs/products/microavs/>

研究開発成果

研究開発項目 ①ー4

プロジェクト開始前（2021年先導研究時）

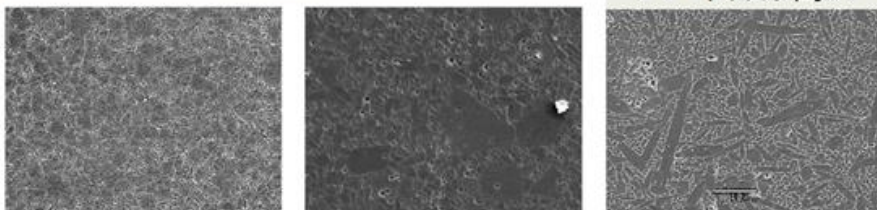
破壊や劣化に影響する欠陥解析に向けたセラミックス組織の画像特徴や特性の解析事例



3種類の組織(教師)データ

各班共通材

機械学習のハードルが高い



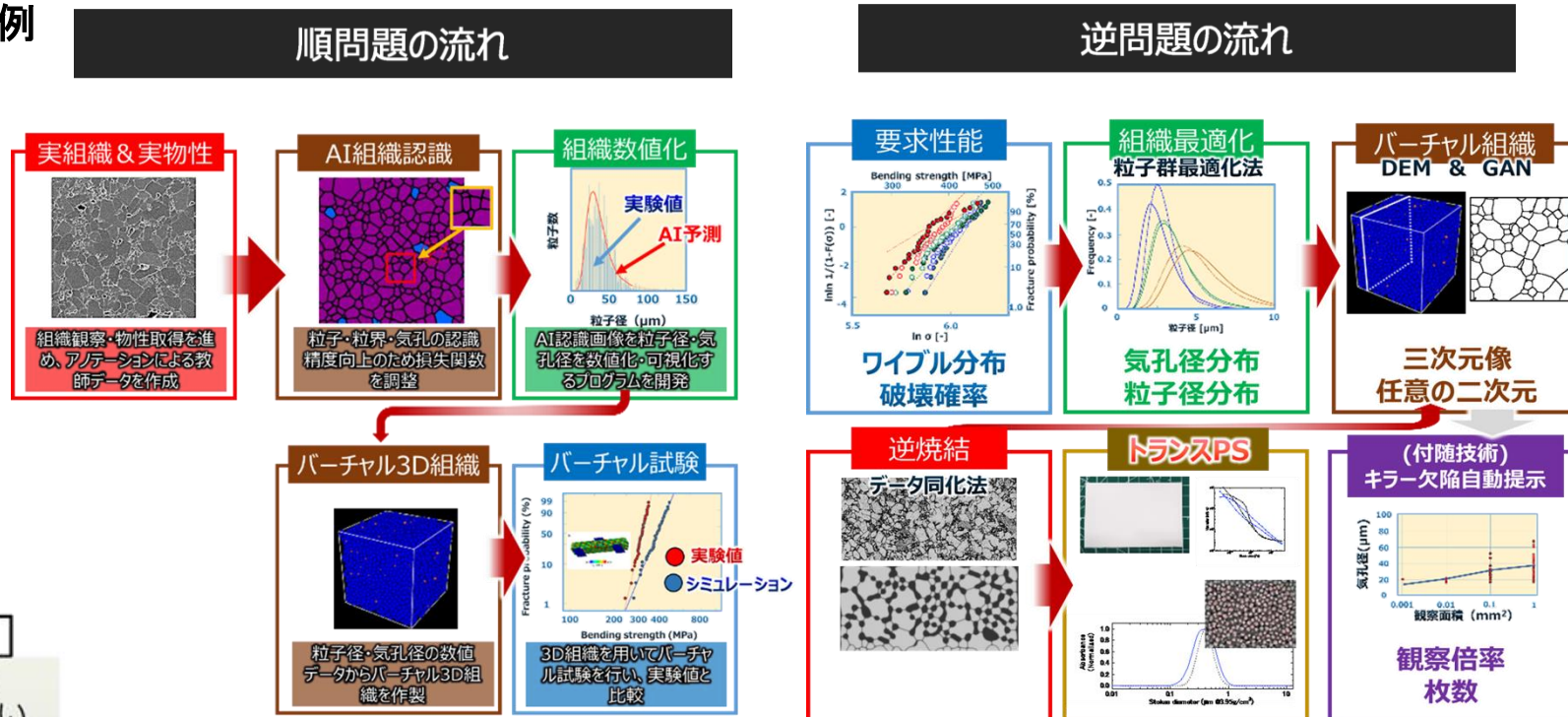
- 組織が比較的均質
- 等軸状粒子が多い
- 気孔が見当たらない

- <D班提供>
- 粒成長が観察
 - 気孔が散見

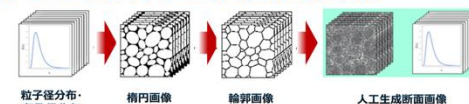
- 異方性粒成長
- 粒界ガラス相
- 気孔

プロジェクト開始後（2023年度末）

機能から構造を予想する逆解析に成功



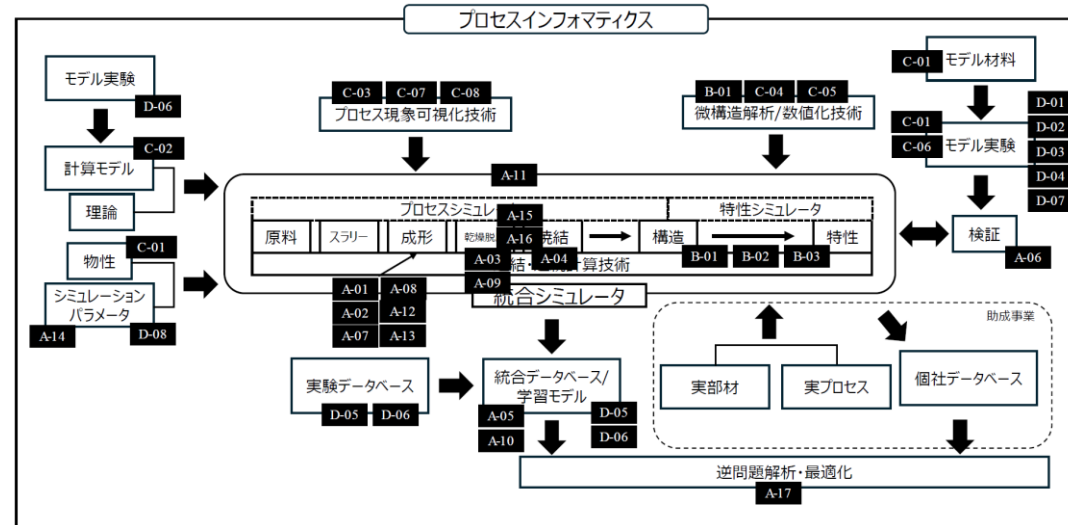
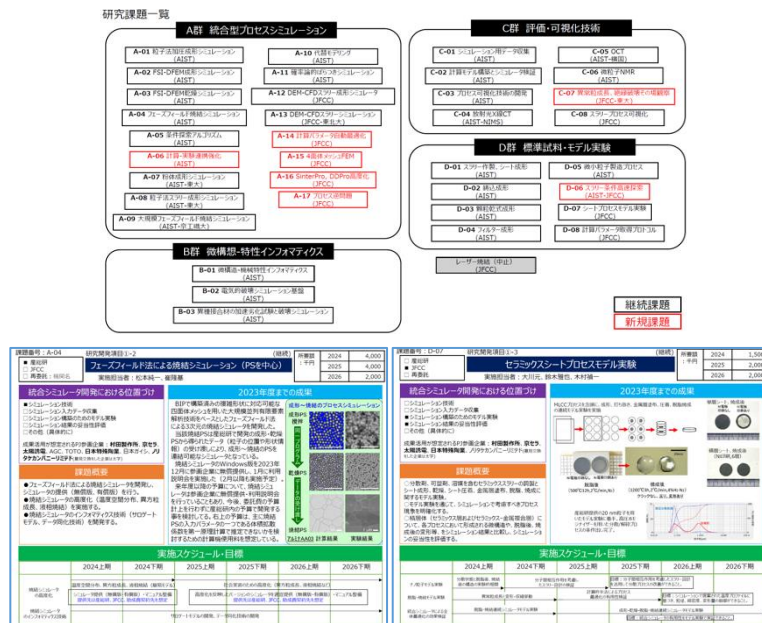
【粒子群最適化法】：実験値と逆解析による粒子径分布の一致を確認
【AIによる人工画像生成】：任意の粒子径分布・気孔径分布から、楕円(輪郭)画像を生成しGANにより人工断面画像を合成。



シミュレーションとの連携により求める物性・組織を実現する実験条件の予測することを目指す

その他 プロセスシミュレーション実装・連携を強化するための取り組みについて

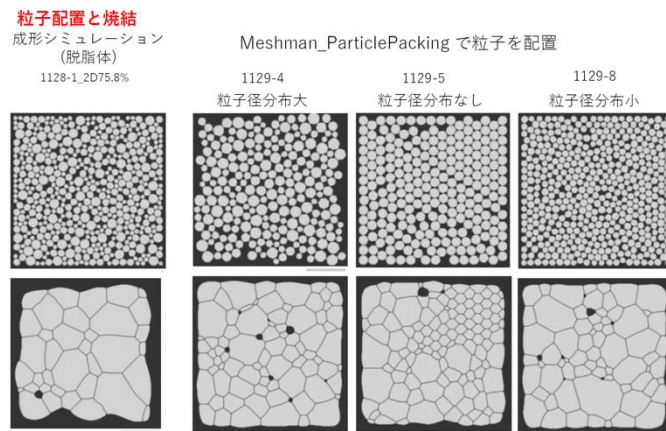
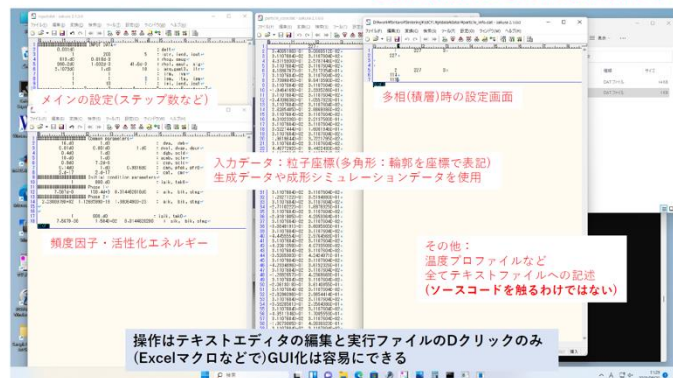
1.プロジェクト内での事業後半での共通課題の精査



参画機関での現状及び事業後半での共通開発課題の確認（スクリーニング）を1 - 2月で実施

2.プロジェクト内での開発シミュレータ（第一弾：フェーズフィールド焼結シミュレータ）の共有

Windows環境で使用可能(より高速で並列計算するにはLinux環境が推奨)
セラミックス焼結知識とPC操作ができれば誰でも使用できる状態
↓設定ファイル編集のUIイメージ



Windows版焼結シミュレータの
配布とマニュアルの整備、
利用説明会を実施（24年1～3月に3回）
→継続して実施

特許出願及び論文発表

	2022年度	2023年度	2024年度	2025年度	2026年度	計
特許出願（うち外国出願）	0	0	－	－	－	0
論文	3	11	－	－	－	14
研究発表・講演	7	60	－	－	－	67
受賞実績	0	0	－	－	－	0
新聞・雑誌等への掲載	1	1	－	－	－	2
展示会への出展	1	1	－	－	－	2

※2024年5月9日現在

事業の軸であるプロセスシミュレータ開発はプログラムのため特許出願は無し（著作権）
後半事業はシミュレータを使用したプロセス開発について出願がある見込み

まとめ

前半2年では次世代ファインセラミック製造プロセス基盤となるプロセスシミュレーション(PS)技術の開発およびPS技術に欠かせない可視化及びメカニズム解析技術、プロセス技術、信頼性メカニズム解析技術の開発を実施した。各研究課題の中間目標に対する主な成果は以下の通り

①-1：10 nmオーダーのセラミックス粒子内の欠陥状態に関する評価手法について分光学的手法等の検討。データセットを10種類以上蓄積する。

→誘電顕微鏡観察技術で、10nmオーダーの解像度でスラリーの直接観察を行った。組み合わせが異なる12種・20項目の物性等をデータ取得した。

①-2：ナノオーダーの原料粒子の「抜け」や「凝集」、焼結においてはこれらの「抜け」や「凝集」に起因する欠陥が再現・予測可能なシミュレータを開発する。

→・200nmのアルミナ原料を用い外力との構造変化の計算実験や、温度プロファイルや時間を変えてナノオーダーの焼結構造の変化が計算できるプログラムの開発をおこなった。

①-3：プロセス—分析データセットを50種類以上蓄積し、AIなどの活用による最適製造条件探索の有用性を例証。原料の平均粒径との比、10種以上のスラリーを用いたシート成形を行い、溶媒およびバインダー成分の性状が異なる20種以上のシートを作製する。固相原料ではシミュレーションの最適条件の有用性を実証する。

→粒径・分布の制御に関するデータセット50種以上、12種のスラリーや20種のシート部材等を作製し、プロセスシミュレータの計算での構造変化の検証した。固相原料でのシミュレーションの最適条件探索妥当性の実証は一部できていない。

①-4：破壊に影響する構造因子の解明と数～数10 μm オーダーの気孔や欠陥を予測・解析・数値化するための手法を探索する。劣化要因となる因子を明らかにし、加速劣化試験法開発の方向性を検討する。

→アルミナにて破壊現象に関わる数～数10 μm オーダーの粒界や気孔等の実組織画像を学習させ、シミュレーションによる破壊予測に基づく組織画像のAI予測が可能な技術を確認した。

①-5：各社の目標に沿ってステージゲート審査にて各社の達成状況を確認。

統合的なシミュレーションで、インフォマティクス展開に必要な十分なデータ蓄積までは未達。