

# データ駆動型材料設計技術 利用推進コンソーシアム

Consortium for Data-Driven Materials Design

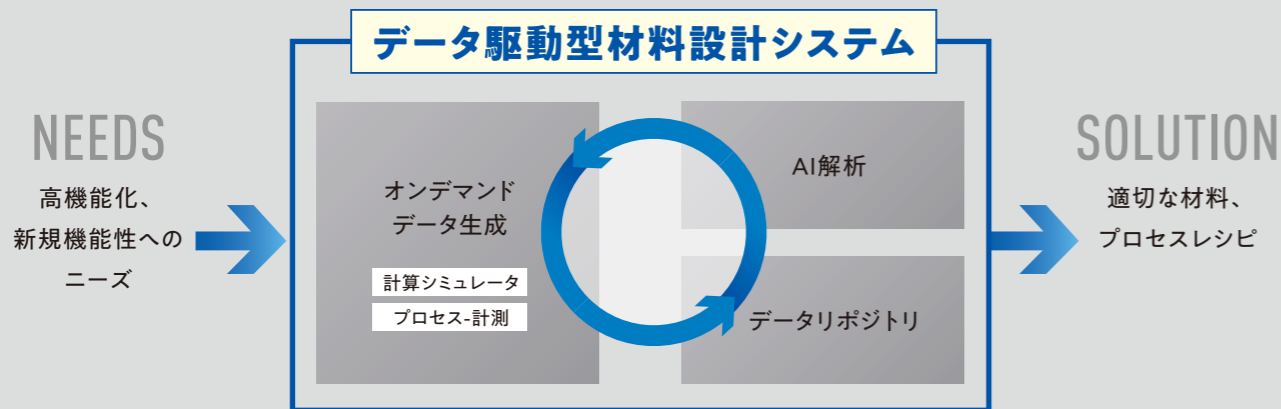
高度なデータ解析技術が拓く  
新たな材料開発の世界へ。



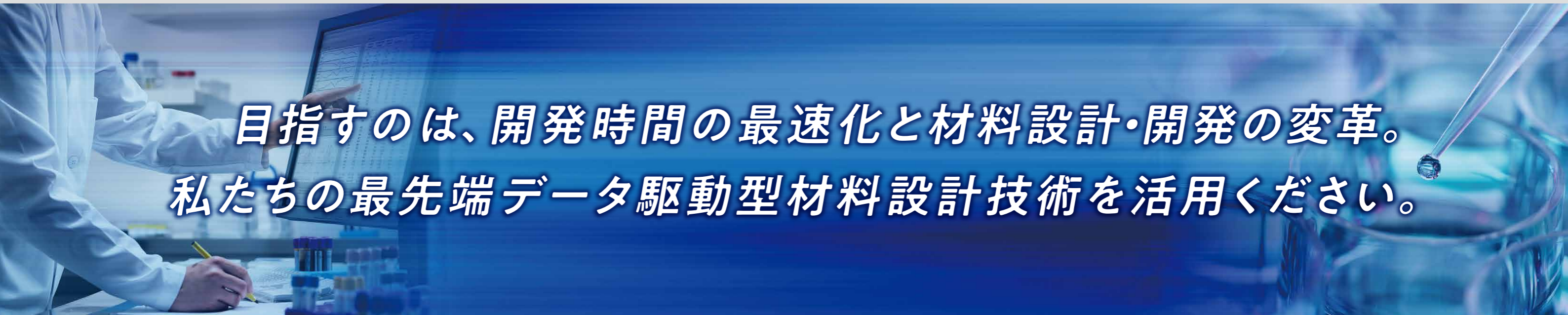
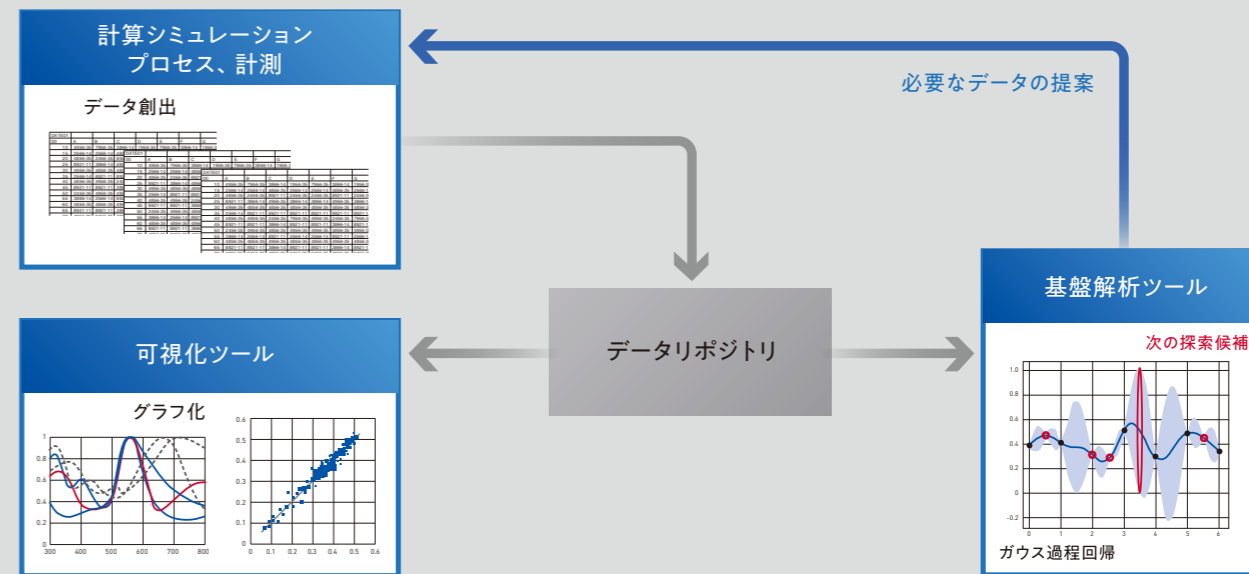
国立研究開発法人  
産業技術総合研究所

新しい材料開発の潮流

材料開発の飛躍的なスピードアップ  
 “経験と勘”に基づいた材料開発文化からの変革



本コンソーシアムを利用した材料設計の例



目指すのは、開発時間の最速化と材料設計・開発の変革。  
 私たちの最先端データ駆動型材料設計技術を活用ください。

代表挨拶

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高いシェアを確保しており、部材・素材においても我が国が中核的な地位を占めている状況にあります。今後も世界トップを走り続けていかねばなりません。

しかし、従来の機能性材料開発は、蓄積してきた多くの材料の実験・評価データを踏まえて、「経験と勘」に基づく仮説を立て、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ました。

NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(略称:超超プロジェクト)」(2016-2021年度)では、このような状況を打破すべく、「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、革新的な材料開発の基盤技術を構築するべく開発を進めてまいりました。

本コンソーシアムは、このプロジェクトにおける成果を広く利用していただくために設立いたしました。材料開発の飛躍的なスピードアップとともに、「経験と勘」に依存した材料開発からデータに基づく材料開発への変革に貢献できればと考えています。



国立研究開発法人 産業技術総合研究所  
 材料・化学領域 領域長  
 データ駆動型材料設計技術利用推進  
 コンソーシアム会長

濱川 聡

材料開発の革新に向けた国内外の状況

**内閣府**：「戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)」の「革新的構造材料」(2014年~)では、「マテリアルズインテグレーション」領域で材料開発期間を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**：「イノベーションハブ構築支援事業」の「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MIPI)」(2015-2019年度)において、膨大なデータ蓄積と最先端情報科学を駆使した解析を組み合わせた開発基盤の構築が図られている。

**米国**：2011年のマテリアルズ・ゲノム・イニシアチブ(MGI)により、最先端素材の開発から市場導入までの時間半減を目標に掲げ、デジタルデータ活用による素材開発基盤の高度化を推進している。

**欧州**：「Horizon 2020」では「Novel Materials Discovery(NoMaD)」プロジェクトが推進され、第一原理計算による材料データ収集と、データベースとビッグデータ分析ツールの開発を推進している。

**韓国**：「第3次科学技術基本計画(2013年)」で、材料技術を重点国家戦略技術に位置付け、ナノテク・材料分野の研究を推進し、「素材・部材」を含む課題を「未来産業エンジン」として支援している。

**中国**：「国家中長期科学技術発展計画(2006-2015年)」で重点分野として「素材(新材料技術・ナノ研究)」を指定し、「第12次5ヵ年計画要綱(2011-2015年)」では戦略的振興産業として「新素材」を指定して、新材料の研究開発と産業化を推進している。

NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」基本計画より抜粋



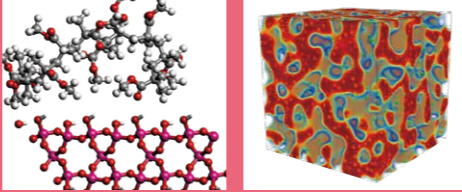
高品質なオンデマンドデータの創出環境と高度なデータ解析技術で、  
設計から試作まで一貫した未来の機能性材料開発のソリューションを提供します。

## 材料設計プラットフォーム (MDPF)

**計算シミュレータ**

- ミクロ～マクロまでを扱うマルチスケールシミュレーション
- 材料の構造・機能予測するための10種類のシミュレータ

P11 ▶



**AI 利用技術**

- 深層・機械学習による予測
- 逆問題解決への対応



**AIST Materials Gate データプラットフォーム (DPF)**

◆ DPFを利用し易くするために目的別に整備  
◆ データに対するセキュリティを最重要視  
◆ 解析ツールによるデータ可視化と有用情報の抽出

解析ツールの特長

- 学習用データから特徴量を抽出
- 未知の材料に対する予測モデルの構築
- 予測モデルを用いた逆予測
- 構築した予測モデルを別の機能予測に転用 (転移学習)

目的別のDPFセクション

- 光機能性微粒子DPF**  
調光材料、インク、感光材料など
- 配線/半導体材料DPF**  
電線材、フレキシブルデバイス、メモリなど
- 電子部品材料DPF**  
フレキシブル回路基板材料、キャパシタなど
- 機能性高分子DPF**  
ゴム材料、放熱/断熱材料、アクチュエータなど
- 触媒DPF**  
燃料電池材料、バイオマスを原料とする化合物など

解析ツール群

データリポジトリ

データ管理基盤

MDPF機器群

ユーザー

NEEDS

SOLUTION

P7 ▶

**プロセス装置**

- ナノ粒子分散ポリマー、触媒、混練・発泡、ナノカーボンに対応
- 各種計測機器群とも直結

P13 ▶



**計測機器**

- マルチスケール解析、In-situ計測、構造・機能相関に対応する先端計測機器

P14 ▶



## 会員種別とサービス内容

種別	一般A会員	一般B会員	特別会員*
サービス内容	① セミナー、技術交流会への参加 ② 個別課題に対応した技術コンサルティング・共同研究の窓口		
	③ DPFの利用 ④ 外部データベースのワンストップ利用		③ DPFの利用 ④ 外部データベースのワンストップ利用
年会費	¥ 1,000,000	¥ 300,000	¥ 0

\* 大学や公的機関等の個人、団体

### サービスの詳細

#### 1 セミナー、技術交流会による最新情報の提供

全会員

- データ駆動型材料開発に関する最新の研究動向、成果などの情報を提供
- 目的・対象者でレベル分けし、ニーズに応じたセミナー等を主催

例

- シミュレータの機能および事例、プロセス・計測装置群の活用事例の紹介
- DPF利用説明会 など

#### 2 技術コンサルティングの窓口、および共同研究のマッチング

全会員

- 会員から持ち込まれた個別課題に対して、技術コンサルティングや共同研究により課題解決へ

#### 3 データプラットフォーム (DPF) 利用と、チュートリアルによる実習・人材育成

一般A会員 特別会員

- 5つの目的別DPFが利用可能
- 基礎的な利用方法についてのチュートリアルを提供

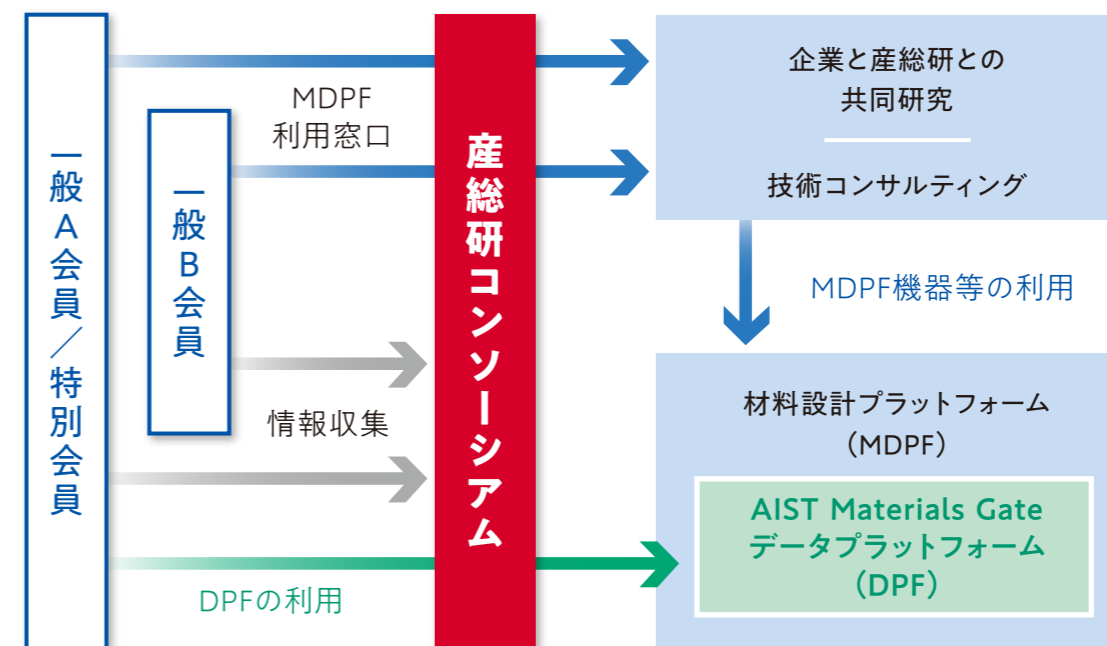
#### 4 外部データベースのワンストップ利用

一般A会員 特別会員

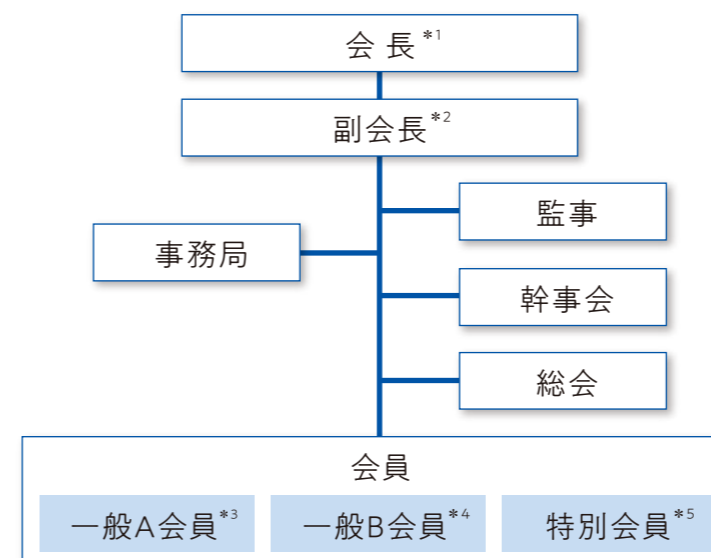
- 材料研究に関わる産総研内外のデータベースへのインターフェースを提供

## 産総研コンソーシアムを通じたMDPF、DPFの利用スキーム

- MDPFの利用窓口としてのコンソーシアム
- マテリアルズインフォマティクス (MI) に関する最新情報の収集



## コンソーシアム運営体制



- \*1 産総研材料・化学領域長
- \*2 会長が指名した者
- \*3 情報交換に加えてDPFを利用する会員
- \*4 情報交換を主たる目的とする会員
- \*5 大学、公的機関等





## 目的別DPF群とその用途例

### 1 光機能性微粒子DPF

調光材料、インク、医療分野イメージング、屈折率制御フィラー、感光材料など

### 2 配線/半導体材料DPF

電線材、フレキシブルデバイス、メモリなど

### 3 電子部品材料DPF

フレキシブル回路基板、キャパシタ、高周波対応通信機器など

### 4 機能性高分子DPF

ゴム材料、放熱/断熱材料、アクチュエータ、微多孔膜など

### 5 触媒DPF

固体高分子形燃料電池用触媒、バイオマス为原料とする化合物、二酸化炭素の化学原料化など

## 1 光機能性微粒子DPF

対象材料 | 分散ホスト中の微粒子材料、ナノ粒子材料

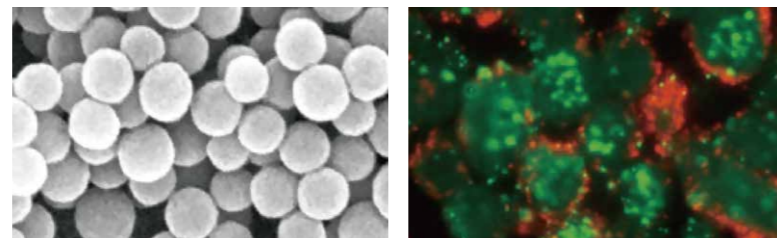
データ | 光機能/誘電機能と粒子の形状・サイズ・構造・組成の相関データ (単元素材料、化合物材料)

### 計算シミュレーションデータ

- 光機能/誘電機能と粒子の形状・サイズの相関データ
- シミュレータ入力情報の粒子組成・構造依存性、粒子分散構造依存性データ

### プロセス・計測データ

- 微粒子の合成条件と形状、粒径分布
- 単一微粒子の光散乱スペクトル
- 微粒子の構造変化と光機能の相関



### 解析ツール・特徴など

- 機械学習により相関データから特徴量抽出
- 誘電機能で構築した予測モデルを電気機能に転用

## 2 配線/半導体材料DPF

対象材料 | 複合カーボン材料、有機半導体・EL材料等の電気/半導体材料

データ | 電導度(率)/デバイス特性 (単体・結晶材料、複合・複雑材料)

### 計算シミュレーションデータ

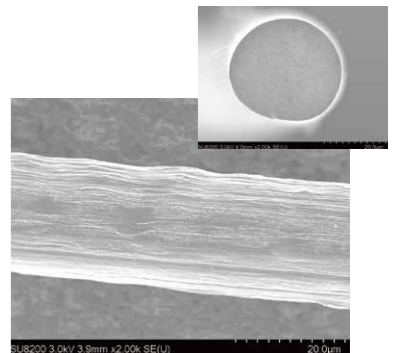
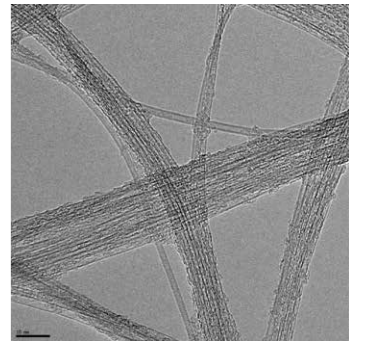
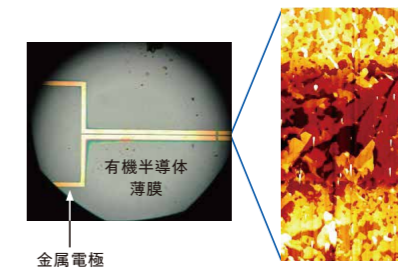
- 単体材料と複合材料中の部分ユニットの全抵抗/抵抗成分と組成・構造の相関データ
- 複合材料の電導度と部分ユニット間構造の相関データ
- 半導体のデバイス特性と組成・構造の相関データ
- 複合材料中の部分ユニット間構造と部分ユニット内の組成構造の相関データ

### 計測データ

- 複合材料の電導度と部分ユニットネットワーク構造の相関

### 解析ツール・特徴など

- 機械学習により相関データから特徴量抽出
- 電導機能で構築した予測モデルを誘電機能に転用



## 3 電子部品材料DPF

対象材料 | 高分子機能材料、無機誘電材料

データ | 複素誘電率、導電率、伝送損失 (高分子材料、無機材料)

### 計算シミュレーションデータ

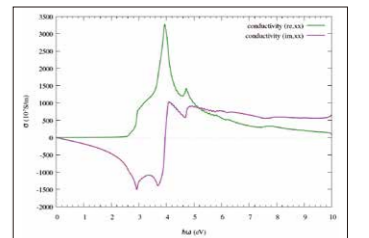
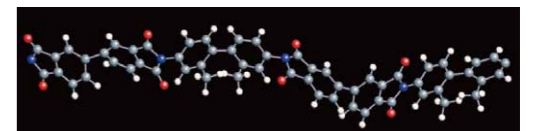
- 結晶構造とバンドギャップ
- 複素誘電関数、光学伝導度

### 計測データ

- 複素誘電率
- 誘電体損失を含む伝送損失

### 解析ツール・特徴など

- smiles形式から構造を自動モデリング (PSACS)
- 機械学習 (scikit-learn等) により相関データから特徴量抽出
- 誘電機能で構築した予測モデルを電気機能に転用





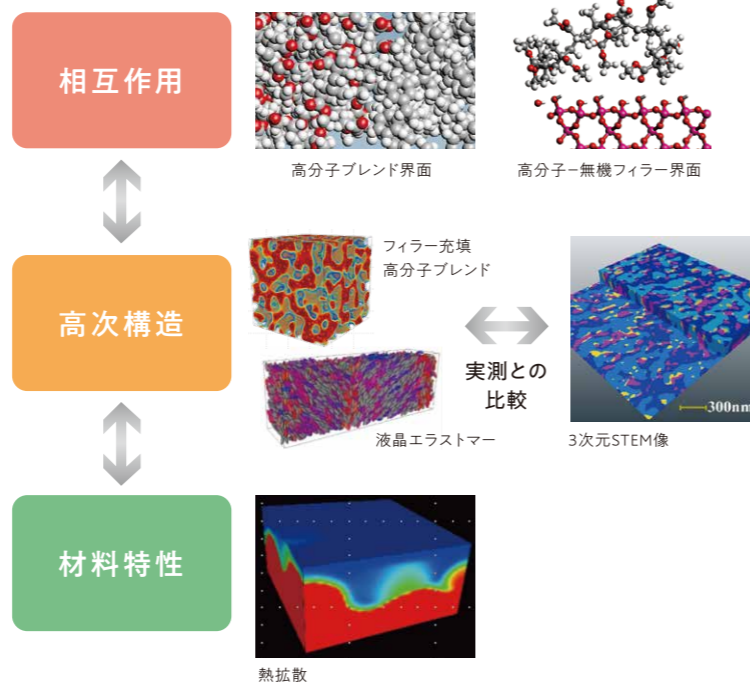
## 4 機能性高分子DPF

**対象材料** | 相分離、フィラー充填、発泡等による高次構造を持つ樹脂・エラストマー材料

**データ** | 相溶性、高分子-無機界面相互作用、高次構造、熱拡散、弾性挙動  
(相溶性、界面相互作用と高次構造との相関、高次構造と物性との相関)

### 計算シミュレーションデータ

- 高分子界面張力、高分子-無機フィラー間相互作用
- フィラー分散構造、相分離構造
- 熱拡散係数 (ポリマーブレンド)
- 線形弾性率 (合成ゴム)
- 応力-ひずみ挙動 (液晶エラストマー)
- 分子構造と動的粘弾性の相関データ



### 計測データ

- 組成・混練条件と分散構造の相関
- 電子顕微鏡、SPM、光散乱

### 解析ツール・特徴など

- 機械学習、深層学習による相関データからの帰帰モデル

## 5 触媒DPF

**対象材料** | 均一触媒、不均一触媒、電池材料

**データ** | 触媒の電子状態、構造、形状と触媒活性の相関データ  
(触媒候補物質 (固定化触媒、金属・金属酸化物材料) の物性及び化学データ)

### 計算シミュレーションデータ

- 電子状態計算データ: dバンドセンター
- 触媒候補材料の物性値: 表面電荷、表面の酸・塩基性指標
- 反応性解析に資する物理化学的指標: 触媒と吸着分子との相互作用エネルギー、分子振動解析データ
- 流体マクロシミュレーション用データ: 流速、粘度、反応キネティクス (活性化エネルギー等)

### プロセス・計測データ

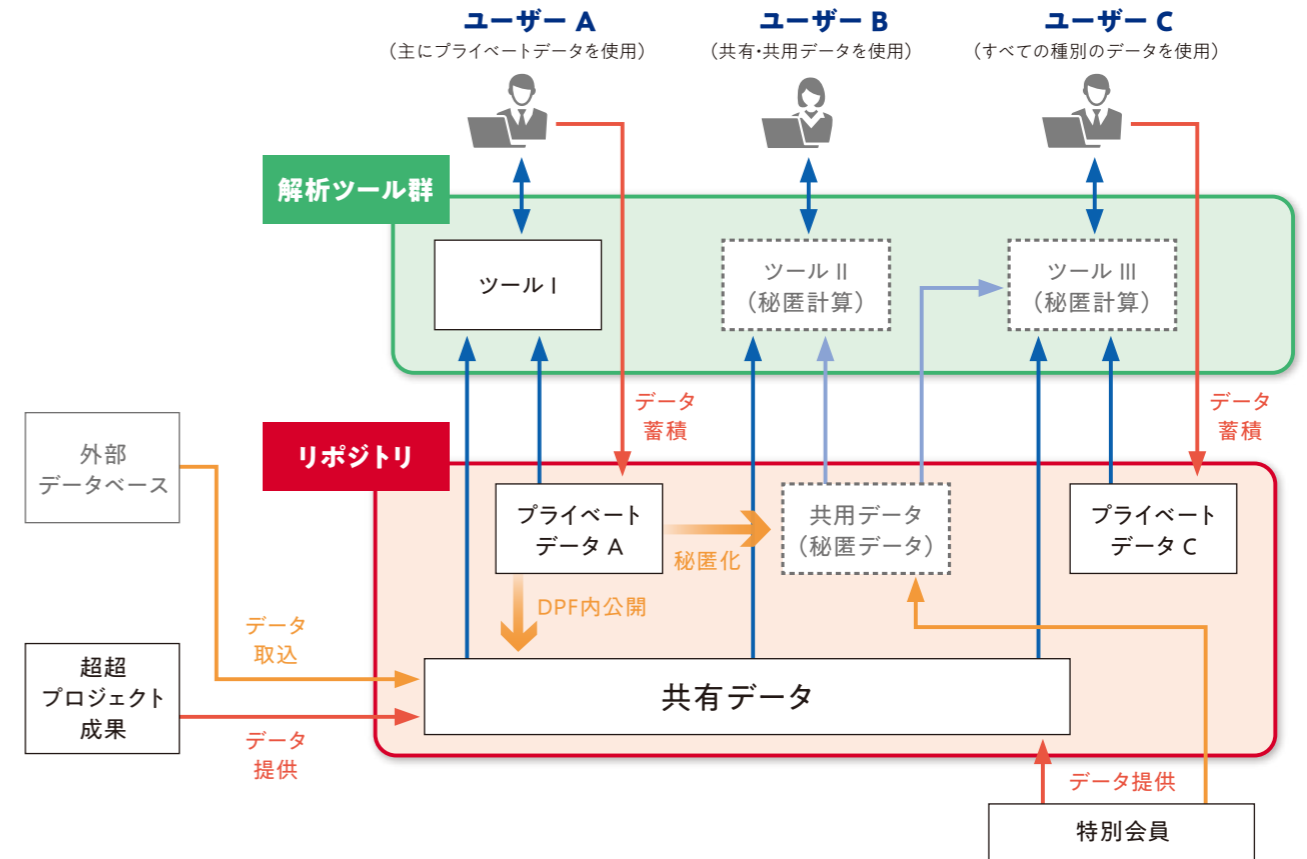
- ハイスループットによるプロセス条件と触媒性能の相関
- 触媒表面の構造、吸着分子振動及び触媒活性との相関
- 触媒素過程のキャラクタリゼーション

### 解析ツール・特徴など

- 計算シミュレーションデータと触媒活性の実験データとの相関及び支配因子の推定
- 未知の触媒に対する予測モデルの構築



## DPFにおけるデータの取扱い



### DPF内のデータの種別

- 共有データ** | 一般A会員、特別会員に対してオープンなデータ。
- 共用データ** | 暗号化処理された秘匿データ。一般A会員、特別会員からのアクセスは秘匿計算ツール (AI学習など) からのみで、アクセスした会員に対してデータ情報は秘匿される。
- プライベートデータ** | 個別の共同研究等で創出されたデータで、作成した企業のみがアクセス可能。

### 一般A会員が (個別の共同研究等により) 創出したデータの取扱い

- 共同研究契約の内容等により、「共有」、「共用」、「プライベート」データを規定
- 「共用」では、データを秘匿化し、秘匿計算にて利用することを想定

### データの利用と得られた成果の帰属

- 一般A会員・特別会員等は自らの利用のために、データの閲覧、取得、加工が可能
- DPF利用により得られた知的財産権は利用者に帰属
- DPF提供のデータを加工して作成したデータや、DPF利用により得られた学習済みAI等の成果物は利用者に帰属

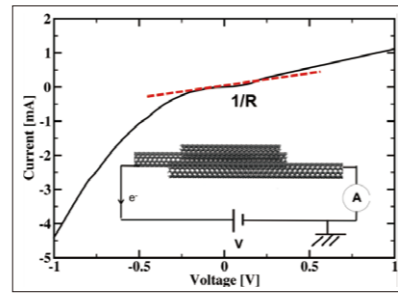




## 1 電気、光等のキャリア輸送シミュレータ (拡張CONQUEST)

大規模電子状態計算プログラムCONQUESTに、電気や光等のキャリア輸送特性の予測機能を追加。デバイス系の電圧-電流特性やナノ粒子の光学特性の予測が可能。

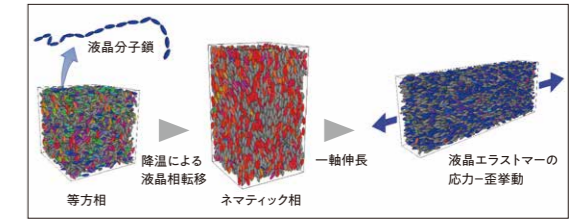
**用途** | ナノカーボン、有機材料デバイスの電流-電圧特性予測、異種材料接合による接触電気抵抗予測、金属・半導体ナノ粒子の光学機能設計



## 6 電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ (拡張COGNAC/Lammps)

一定電圧下における分子動力学/粗視化分子動力学を解析可能。メソゲンを持つ高分子鎖の粗視化分子動力学に対応。OCTA/COGNACおよびLammpsの拡張モジュールとして提供。

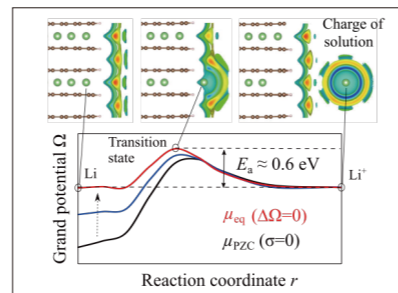
**用途** | 液晶エラストマーの弾性/電歪特性解析、荷電ポリマーの電場配向



## 2 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ (I) (ESM-RISM)

第一原理電子状態計算パッケージ(Quantum ESPRESSO)に、固液界面における化学反応を扱う機能を追加。

**用途** | 固体・液体界面での電気化学反応メカニズム解析、電極表面の電気化学反応電位計算、電極材料のスクリーニング、電気化学センサー・腐食のシミュレーション



## 7 汎用インターフェース (拡張OCTA)

マルチスケールシミュレーションシステムOCTAを拡張。高分子複合材料を想定し、グラフィカル・ユーザ・インターフェースGOURMETの機能拡張、Image Loader、AI Toolを実装。

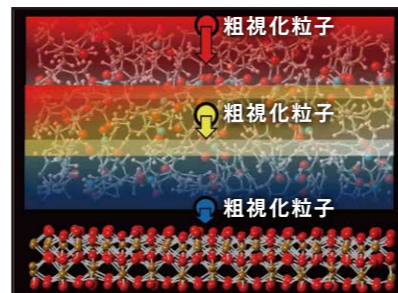
**用途** | 電子顕微鏡像を取り込んだシミュレーション、相分離構造に対する機械学習・深層学習、1000万粒子・1億メッシュ相当の大規模シミュレーションの結果描画・解析



## 3 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ (II) (HybridQMCLT)

ハイブリッド量子古典計算により、界面へのマクロなシアーストレスの印加が可能。大規模・複雑な対象における原子・イオンのダイナミクスを計算。

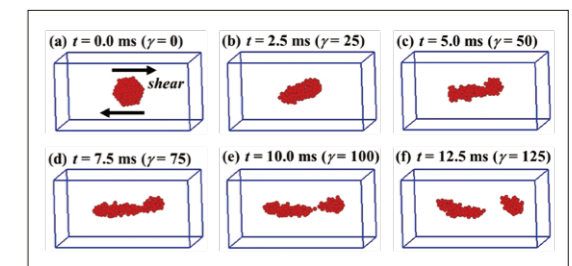
**用途** | 固液界面での修飾・腐食反応ダイナミクス、複雑な接触界面が誘起する特異な物性値の予測、摩擦過程の原子ダイナミクス



## 8 フィラー充填系コンポジットシミュレータ (拡張KAPSEL)

コロイド・微粒子分散系シミュレータ KAPSELに、フィラー充填系ポリマーコンポジットの扱いを追加。

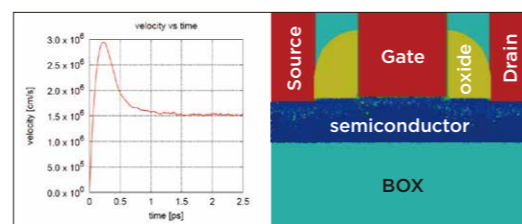
**用途** | ポリマーコンポジット混練時におけるフィラー解砕・凝集挙動解析、フィラー入りポリマー相分離構造・偏析挙動の予測



## 4 モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ

古典的ボルツマン輸送方程式をモンテカルロ法により解き、ドリフト速度などキャリア輸送パラメータを計算。

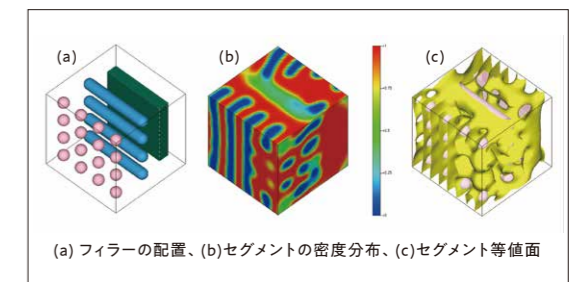
**用途** | バンド計算からキャリア輸送パラメータを解析、速度オーバーシュートなど非定常輸送現象を解析、デバイス構造から不均一場のキャリア輸送状態を解析



## 9 ナノカーボンコンポジット用シミュレータ (SOBA Ver.1.0)

OCTAエンジンをPythonスクリプト言語でラップし、新機能を追加したシミュレーションプラットフォーム。機械学習への情報提供も容易。

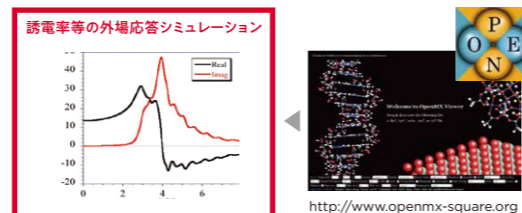
**用途** | フィラー入り高分子複合材料のマルチスケールシミュレーション(相分離構造、凝集、パーコレーション等)、高分子溶液中の粒子間相互作用エネルギー予測



## 5 誘電率等の外場応答物性シミュレータ

第一原理計算プログラムOpenMXに、電子寄与の複素誘電関数と光学伝導率を計算する機能を追加。

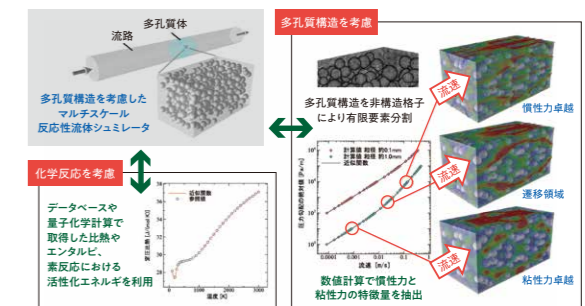
**用途** | 有機・無機固体やナノ物質の複素誘電関数と光学伝導率、結晶やナノ物質の光吸収スペクトル



## 10 反応性流体シミュレータ

熱と化学反応を伴う現象や多孔質構造等を考慮した連続体モデルを用いたマルチスケール反応性流体シミュレータ。

**用途** | 触媒塊および触媒反応を考慮した熱流体、浄化用フィルタ内の流体、反応性流体における多孔質体を含めた流入流量や流路形状などの性能評価





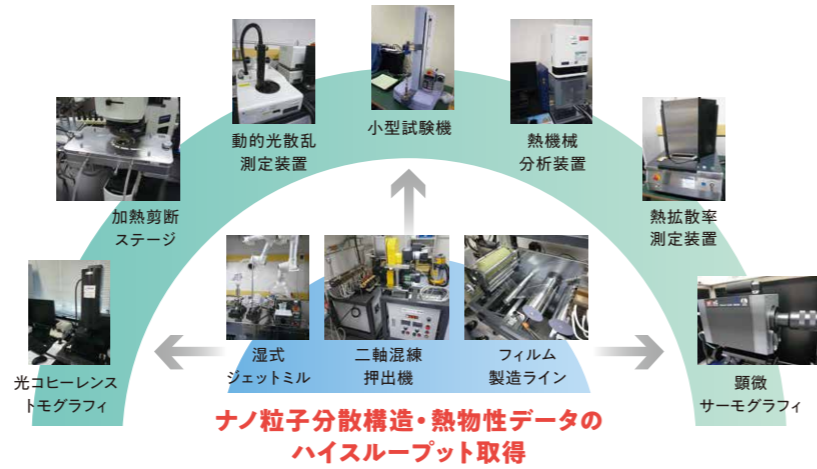


## ナノ粒子分散ポリマー

**プロセス**  
半導体や金属ナノ粒子の高速合成とポリマーへの分散プロセス

**特徴**  
マイクロ波合成、湿式ジェットミル

**計測との連携**  
粒径評価、構造・組成分析、光学評価、粒子界面特性評価



## 混練・発泡

**プロセス**  
混練・発泡押出成形による発泡ポリマー・ポリマーコンポジット作製プロセス

**特徴**  
超小型、超高压、高剪断力押出成形

**計測との連携**  
マルチスケール構造解析、3D構造解析、オンサイト計測

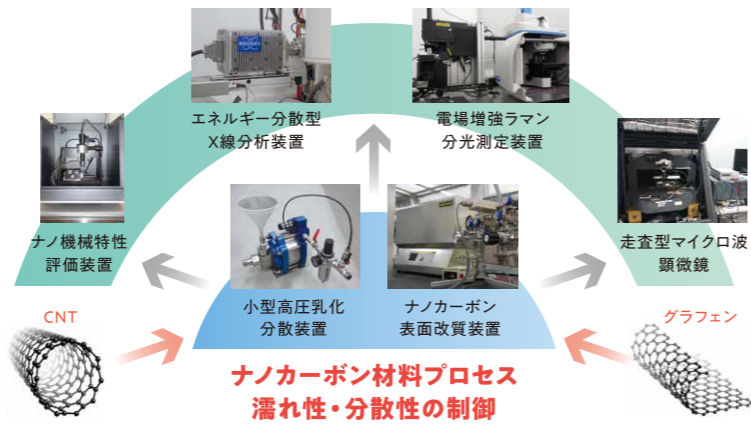


## ナノカーボン材料

**プロセス**  
CNTなどのナノカーボン材料の分散と表面改質プロセス

**特徴**  
高压乳化分散

**計測との連携**  
局所成分・品質分析、局所物性計測（機械特性、電気特性など）

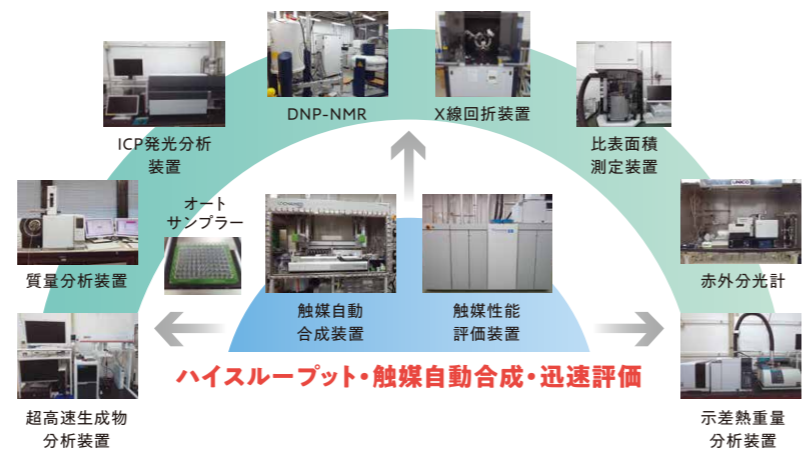


## 触媒

**プロセス**  
ハイスループット触媒合成と触媒性能迅速評価（反応）プロセス

**特徴**  
触媒自動合成、多連式フロープロセス

**計測との連携**  
構造解析、比表面積測定、各種の化学物質分析



## 化学反応 In-situ計測



原子・分子  
10<sup>-9</sup>メートル (=1nm)

各計測機器の特徴

## DNP-NMR

核スピンの分極増強により従来のNMRの100倍以上の高速化、従来困難な核種の測定  
**用途** ● ポリマー末端基やポリマーブレンド界面に生じる微量な構造の分析

## 陽電子消滅法

試料中の空隙に捕獲された陽電子（電子の反粒子）が、空隙サイズに応じた寿命で対消滅する現象を利用して、サブナノメートルの空隙サイズを評価  
**用途** ● 機能性材料（バリア膜など）の微小空隙評価、金属や半導体中の原子空孔評価

## 電子分光型電子顕微鏡

TEMによる3次元構造解析と電子非弾性散乱を用いた元素組成、化学構造分析  
**用途** ● ポリマーブレンド等多成分・多相系材料の分散状態の解析、界面の化学状態解析、接着界面での相互作用・接着メカニズム解析

## 炭素材料の高空間分解元素イメージング

SEM中での元素分析（エネルギー分散型X線分光法：EDS）において、軽元素イメージングを10 nm以下までの高空間分解評価  
**用途** ● CNT等のナノ材料における表面官能基の分布分析、ドーパントの局在性評価

## X線CT

高速化X線CTにより、1μm分解能前後までの微細構造の非破壊型観察が可能  
**用途** ● 試料内の欠陥検出・分布状態解析、多孔質体のセル構造精密解析、繊維状配向状態解析、マルチマテリアル部材内部の材料・材質評価

## ナノプローブ分光

AFM技術を基盤に、材料の表面構造と複数の物性情報（光学、電気、機械）を同時計測。その場測定（電場印加等）も可能。  
**用途** ● コンポジットの成分分布評価、材料・デバイスの電位分布評価、弾性局所評価

## 走査型マイクロ波顕微鏡 (SMM)

AFM技術を基盤に、マイクロ波への応答特性 (<16GHz) も同時に評価可能。  
**用途** ● 材料の面内及び数 μm深さまでの導電率・誘電率分布、フィラー等の分散評価

## 和周波分光

赤外光と可視光を照射し、表面・界面で発生する和周波光を検出する振動分光法。波長・偏角を組み合わせることで界面等での分子配向などを評価。  
**用途** ● 界面等での官能基同定、分子配向解析や化学反応追跡、電子デバイスのその場測定





国立研究開発法人  
産業技術総合研究所

## データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2  
国立研究開発法人産業技術総合研究所  
材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター  
データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 事務局  
E-mail: M-cdmd-office-ml@aist.go.jp

令和3年10月発行