

超先端材料**超**高速開発基盤技術プロジェクト 紹介

国立研究開発法人

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)

材料・ナノテクノロジー部

三宅 政美

●マテリアルインフォマティクス(MI)を活用した材料開発

- ・2011年Materials Genome Initiative (米国)が発端、各国(欧州・中・韓)が追随
- ・2012年韓国B社・MIT論文公開、2015年日経新聞に上記論文の記事掲載

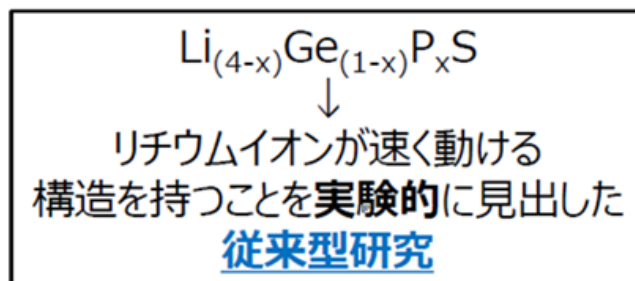
●機能性材料

- ・国内において無機材料等のプロジェクトが開始
- ・市場規模は小さいが、高い世界シェアを確保し我が国産業競争力の源泉

海外では、インフォマティクスの手法を活用し材料開発を既に実施！

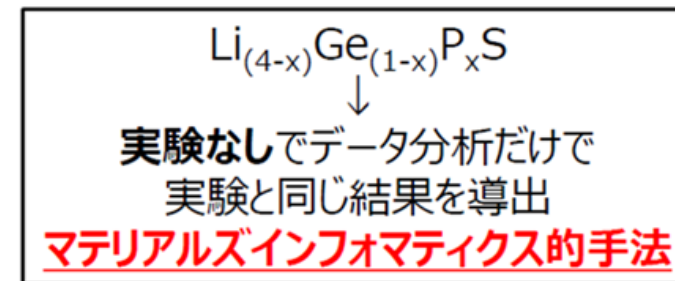
国内

2011年5月：国内A社 特許出願
(特許公開は2012年11月)



海外

'12年10月：韓国B社・MIT論文公開
*この系の開発情報なく、突然特許公開前に論文発表



米国“Material Genome Initiative”の中心研究者が深く関与し推進

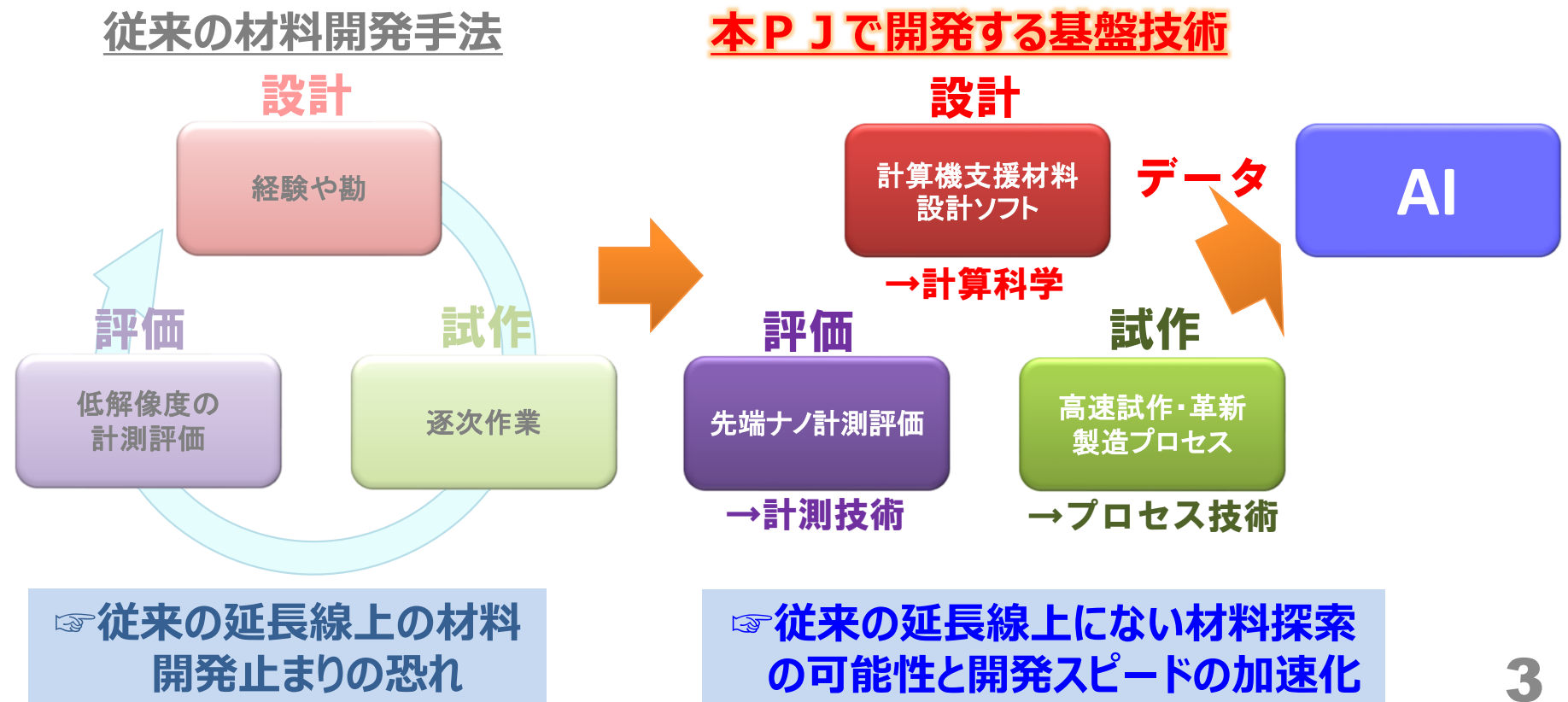
出典：文科省研究振興局

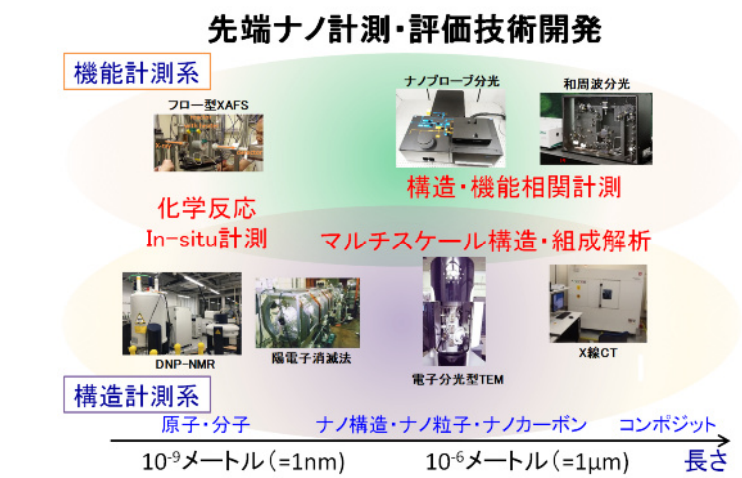
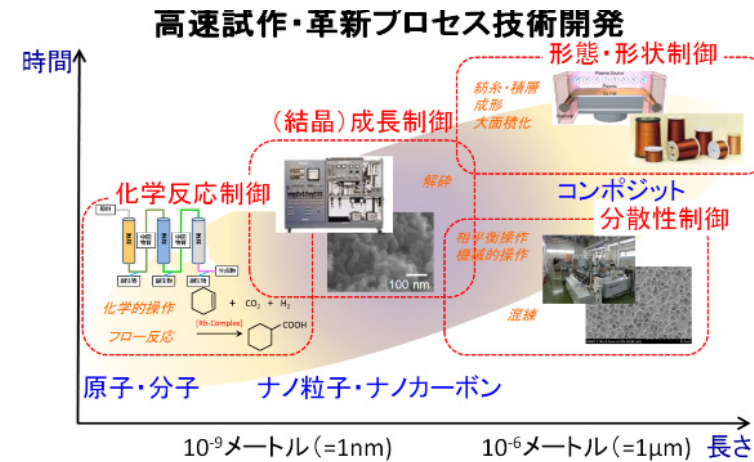
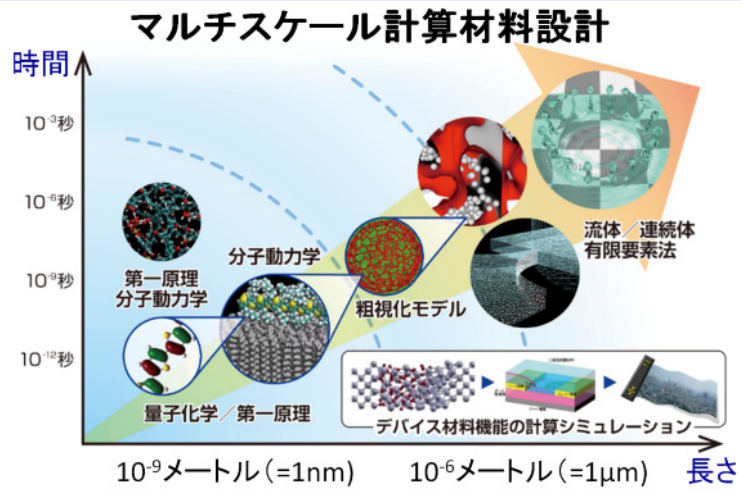
→ 有機系機能性材料・材料設計

- ・有機系機能性材料を対象として、材料開発基盤技術(「計算科学」、「プロセス技術」、「計測技術」)を開発
- ・材料設計、プロセス技術、解析技術にスパコン・人工知能(AI)を徹底活用
- ・**開発期間・試作回数を1/20に削減**

デジタル技術を活用した新しい素材開発インフラの整備

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト 計算科学等による先端的な機能性材料の技術開発事業

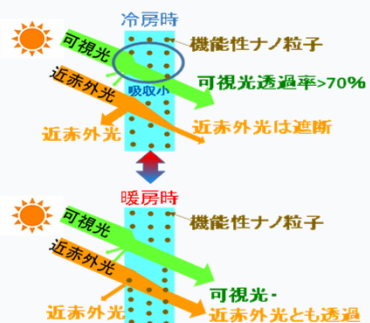




- ## 三位一体の研究開発
- ### モデル材料（有機系機能性材料）を対象として
- ・シミュレーション技術のマルチスケール化による材料物性予測技術の確立（順方向予測）
 - ・実サンプル試作の高速かつ自在な製造が可能な革新的プロセス技術の確立
 - ・従来観測出来なかった構造の精密観測や、機能発現のその場観測等の先端計測技術の確立
- ↓
- ・創り出したデータを活用してAIを学習させ、特定の材料物性の発現条件の予測技術を開発（逆方向予測）

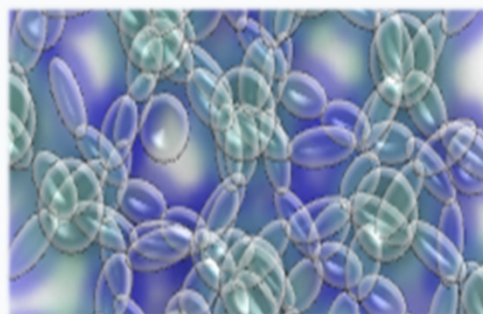
半導体材料

高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッド コンデンサ等



高性能高分子材料

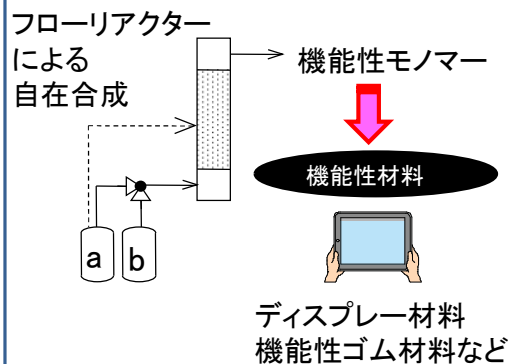
高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

自動車系部品など



機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等



ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等



自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など



導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など



フレキシブルディスプレイ・照明など



基盤技術の確立

データ創出・材料設計スキームの確立

<h3>設計</h3>	 <p>スーパーコンピュータ</p> <p>シミュレータの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> 電気・光等のキャリア輸送シミュレータ 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ (I, II) モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ 誘電率等の外場応答物性シミュレータ 電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ (I, II) 汎用インターフェース (拡張OCTA) ファイラー充填系コンポジットシミュレータ ナノカーボンコンポジット用シミュレータ 反応性流体シミュレータ 	 <p>材料データ構造化 AIツール開発</p> <p>データ創出・MDP</p> <p>機械学習・深層学習</p>
<h3>試作</h3>	 <p>混練装置</p> <p>射出成形機</p> <p>ハイスループット触媒合成装置</p>	<h3>中間評価</h3>  <p>プロセスデータ解析</p> <p>仮想実験</p> <p>反応経路探索</p>
<h3>評価</h3>	 <p>ナノプローブ分光装置</p> <p>X線CT装置</p> <p>DNP-NMR装置</p>	 <p>多物性同時測定</p> <p>X線CT3Dマップ</p> <p>触媒活性解析</p>

材料設計プラットフォーム

事業終了後の管理・運営の体制

データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

NEDO 特別講座

ナノカーボン(2017年度～)

構造化AIツール開発(2019年度～)

助成事業(2019年度～)

実材料の創製実証を行い、個別材料の開発の加速化を図る。

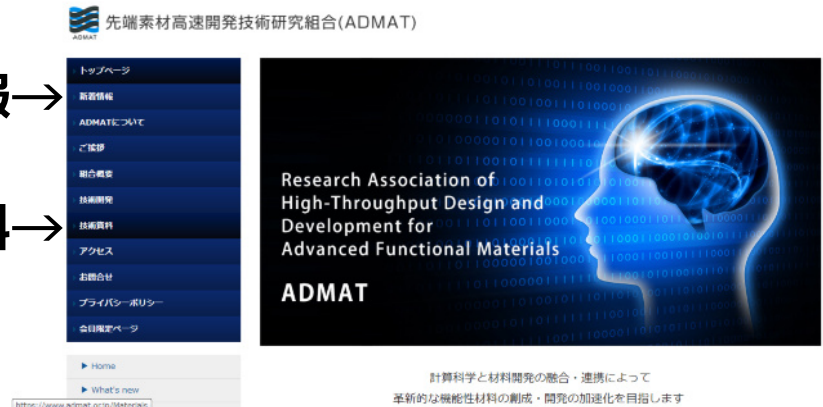
今年度のリリース成果

- ・ 計算シミュレーションとAIを連携させ、仮想実験環境を構築(1/18 13:00~)
- ・ 液晶がナノ構造をつくる際の新現象を発見(1/18 13:00~)
- ・ 固体表面上の酸素原子を高分解能2次元NMRで測定する技術を開発(1/18 14:20~)
- ・ ポスト5G・6Gの材料開発に向け、誘電体基板の温度特性を計測する技術を確立(1/18 14:20~関連)
- ・ カーボンリサイクル社会を実現する化学品原料(カルボン酸)合成技術を開発(1/19 14:00~)
- ・ バイオマス由来のブタジエンゴムでタイヤを試作(1/19 14:20~)
- ・ AIが生成した材料の構造画像を用い、物性を予測する技術を開発(1/19 15:00~)
- ・ 連続・自動合成法でPEFC向け高性能触媒の合成に成功、高効率合成も実現(1/19 13:40~)

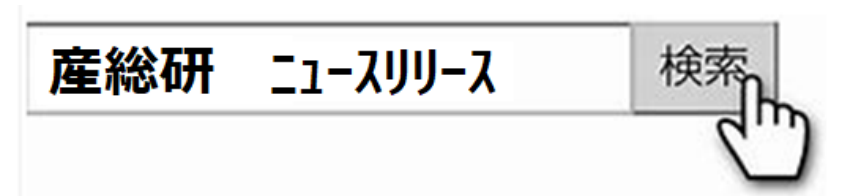


新着情報 →

技術資料 →



②



- 目的：技術文献から高分子材料の物性情報等を抽出するツールの構築
- 目標：高分子材料に関する日本語論文から材料開発に必要な物性情報やプロセス情報を取得するための基盤データと構造化ツール構築

論文、特許、社内データ



PDFファイル

データの自動抽出

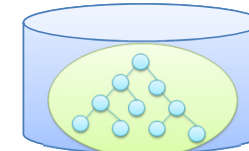


<構造化AIツール>
 ・テキストから抽出
 ・表・グラフから抽出

構造化データ

	書誌情報			原料組成			合成条件			
	文献名	著者	タイトル	A	B	...	温度	時間	濃度	...
特許A 実施例1	●●	●●	●●	●●	●●		●●	●●	●●	
特許A 実施例2	△△	△△	△△	△△	△△		△△	△△	△△	
特許B 実施例1	◆◆	◆◆	◆◆	◆◆	◆◆		◆◆	◆◆	◆◆	
...										
文献A 条件1	○○	○○	○○	○○	○○		○○	○○	○○	
文献A 条件2	▲▲	▲▲	▲▲	▲▲	▲▲		▲▲	▲▲	▲▲	
文献B 条件1	◇◇	◇◇	◇◇	◇◇	◇◇		◇◇	◇◇	◇◇	
文献B 条件1	◇◇	◇◇	◇◇		◇◇	◇◇		◇◇	◇◇	◇◇
文献B 条件1	◇◇	◇◇	◇◇		◇◇	◇◇		◇◇	◇◇	◇◇

オントロジー



多種・多量のデータを迅速にAI解析に供することが可能となり、材料機能を最適化する構造の推定や合成プロセスの提案を効率化

**ご清聴ありがとうございました
引き続き最終成果報告会を
ご覧ください**

以上