

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ)  
最終成果報告会

# 超超プロジェクト総括

2022年1月18日(火)

PL 村山宣光(産総研 副理事長)

1. プロジェクトの背景
2. プロジェクトの概要
3. プロジェクトの成果と実用化
4. データ駆動型材料開発の今後

# 1. プロジェクトの背景

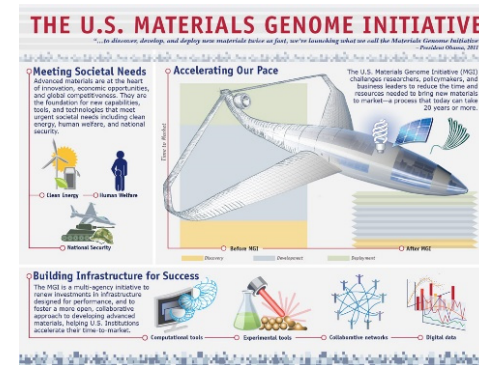
## プロジェクト始動前後の世界における取組状況

**米国:** Materials Genome Initiativeを**2011年**に立上げ。マテリアル開発の短期化・低コスト化に向け、従来の実験、計算に加え、データの重要性に着目。2014年6月に”Strategic Plan”を公表。2016年までに約5億米ドル(約560億円)を投資。

**欧州:** EUの枠組みでNOMAD (Novel Materials Discovery) プロジェクト(**2015**~2018: 約500万ユーロ(約7億円)を実施。マックスプランク協会フリッツ・ハーバー研究所が中核。

**韓国:** **2015年**から10年計画で「Creative Materials Discovery Project」を実施(採択課題あたり最大約2.4億ウォン(約2500万円)/6年)。2016年、韓国科学技術研究所(KIST)に「Materials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS)」を設置。

**中国:** **2016年**、国家重点研究開発計画の一つとして、「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」(約3億元(約50億円)/5年)を開始。上海、北京において大学を中心に拠点を構築。



<https://www.mgi.gov/>



NOVEL MATERIALS DISCOVERY

<https://www.nomad-coe.eu/>

文科省 マテリアル革新力強化に向けた準備会合(第2回)資料より抜粋

# 国内における各プロジェクトの位置づけ

材料  
設計



物質  
探索

## 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

- ・マルチスケールシミュレーション開発
- ・高速試作・革新プロセス技術開発
- ・先端ナノ計測技術開発
- ・AIを活用した材料開発手法の開発

2016～

有機機能性材料  
(半導体、誘電材料)  
高性能高分子  
機能性化成品(触媒)  
ナノカーボン)

施策間連携

## SIP革新構造材料/MIシステムの開発

- ・性能まで予測する開発システム構築
- ・各モジュール開発とその統合化
- ・プラットフォームの基盤構築

2014～2018

## SIP(第2期)統合型材料開発システム によるマテリアル革命 2018～

構造材料 (CFRP、耐熱合金、セラミックス)

*Mi<sup>2</sup>i* "Materials research by Information Integration" Initiative  
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

2015～2019

## 情報統合型物質・材料イニシアティブ

- ・基礎データベースの整備
- ・データ解析ツールの開発
- ・物質探索の成功事例の創出

磁石材料、蓄電池材料、伝熱制御・熱電材料

有機材料

無機材料

無機材料

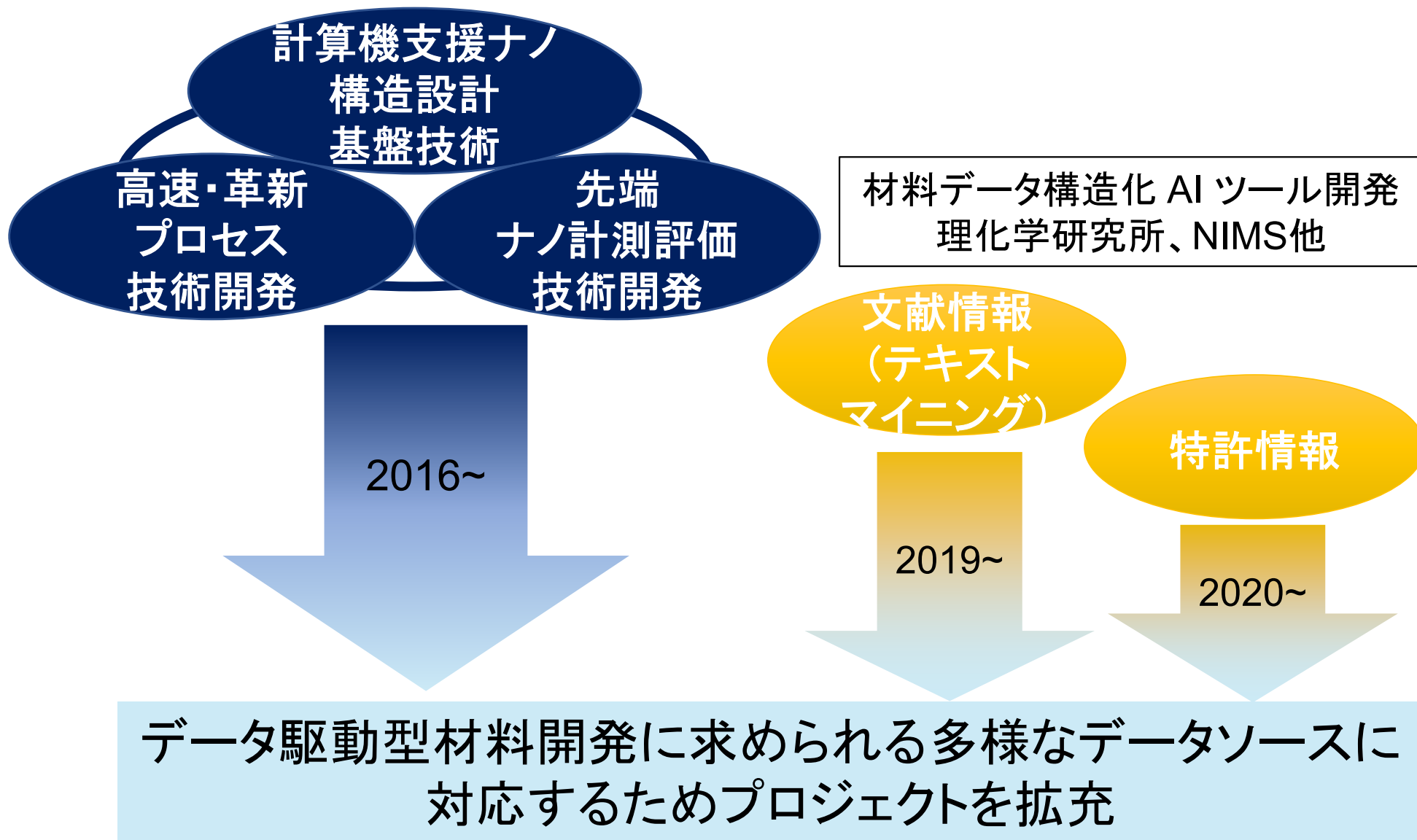
有機材料

機能材料

構造材料

# PJ期間中の動向(追加課題)

計算・プロセス・計測三位一体の基盤技術構築  
産総研-ADMAT



## 2. プロジェクトの概要: 狙いと目標

### <プロジェクトの狙い>

主に**有機系材料**を対象にした従来に無い材料設計シミュレーションの開発や人工知能(以下、AI)を活用した材料開発支援等を、革新的な試作プロセス開発や評価計測技術開発と共にナショナルプロジェクトとして行うことで、これまで“経験と勘”に基づいた材料開発文化に変革の兆しを誘発すると共に、**競争力の高い日本の素材産業の優位性を確保する。**

### <アウトプット目標>

高性能材料・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・開発期間の1/20の短縮**を目指す。

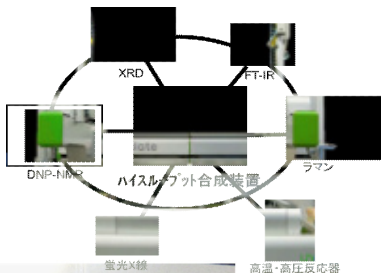
基本計画より抜粋



# 超超PJのコンセプト: 計算・プロセス・計測の連携



ハイスループット合成



マルチスケール計算  
シミュレータ技術

計算機支援  
ナノ構造設計  
基盤技術



スーパー  
コンピューター

機能性材料開発

高速・革新  
プロセス  
技術開発

高速かつ自在な製造  
が可能なプロセス技術

先端  
ナノ計測評価  
技術開発

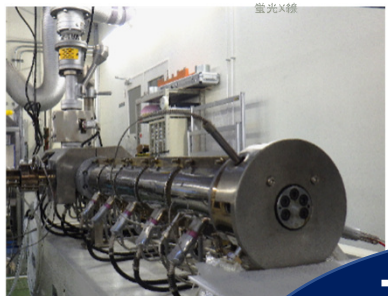
機能と構造の関係などを  
精密に解析する先端計測技術

電子分光型電子顕微鏡



陽電子消滅法

計算/AI・プロセス・計測の  
連携による研究開発促進

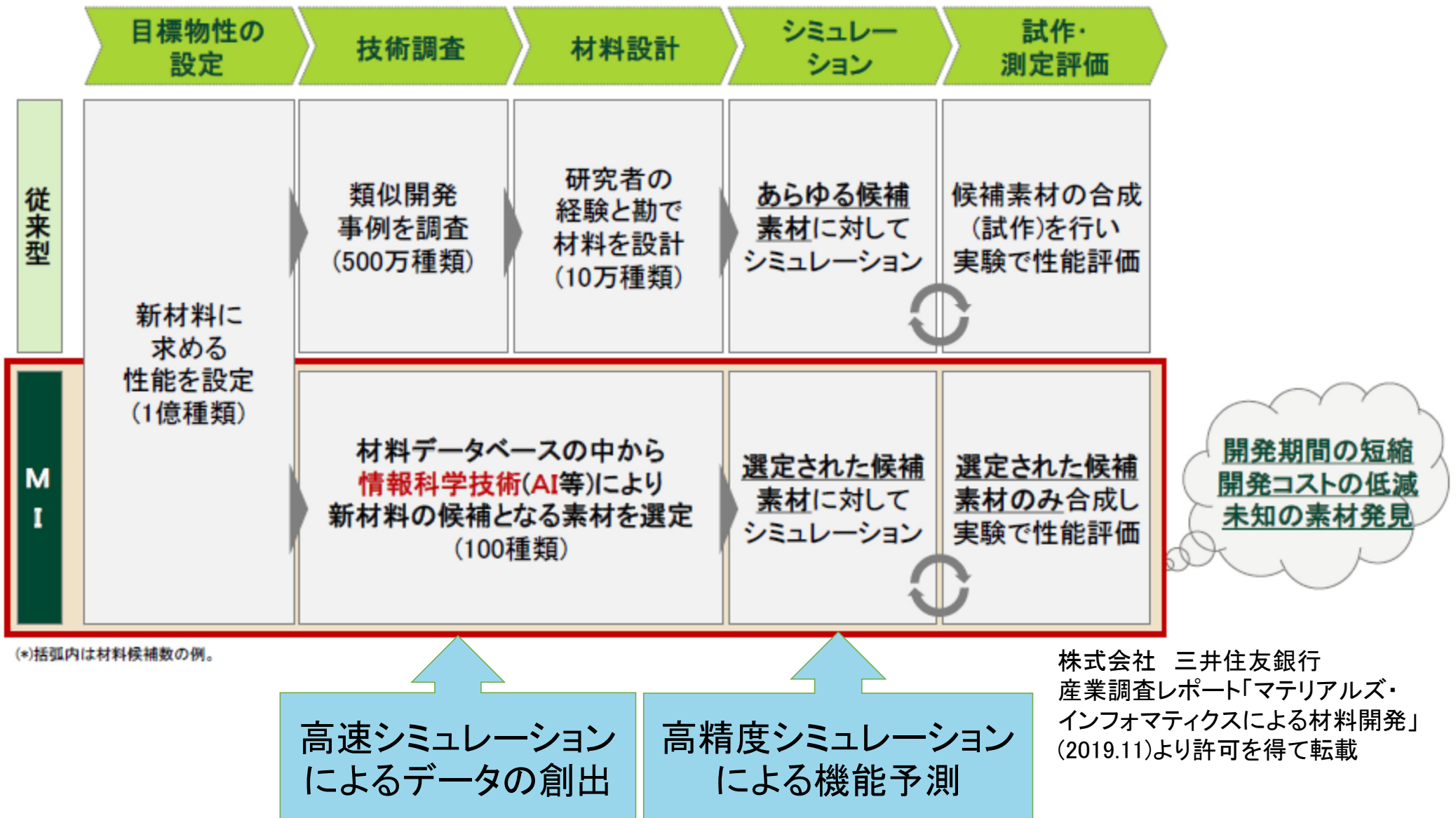


連続押出発泡

# 超超PJの特徴

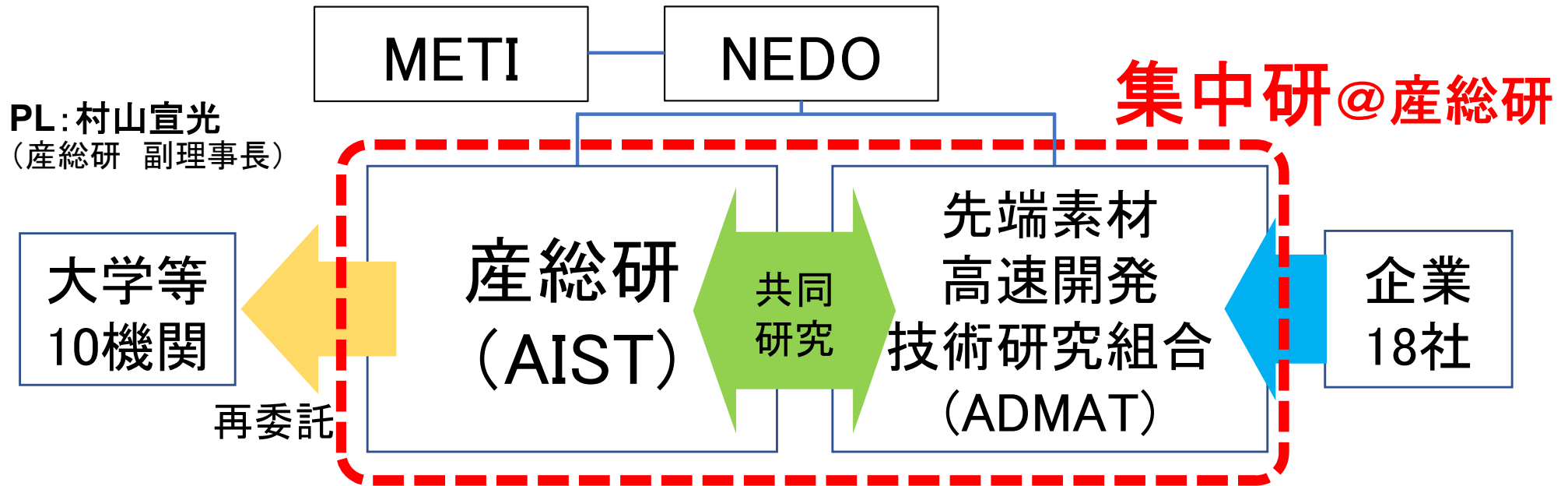
## 機能性材料開発のためのマルチスケールシミュレーター群の開発

材料開発プロセスの比較





# 実施体制



## 先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)

- 設立年月日 : 2016年 7月12日
- 理事長 : 北弘志 (コニカミノルタ(株) 技術フェロー)
- 組合員(18社) : 出光興産(株)/ 宇部興産(株)/ (株)カネカ/ コニカミノルタ(株)/ JSR(株)/ 昭和電工(株)/ 昭和電工マテリアルズ(株)/ 積水化成品工業(株)/ DIC(株)/ 東ソー(株)/ 東レ(株)/ 日鉄ケミカル & マテリアル(株)/ (株)日本触媒/ 日本ゼオン(株)/ パナソニック(株)/ 古河電気工業(株)/ (株)村田製作所/ 横浜ゴム(株)

# 研究開発のスケジュール

第1期(3年)

第2期(3年)

2016年度

2017年度

2018年度

2019年度

2020年度

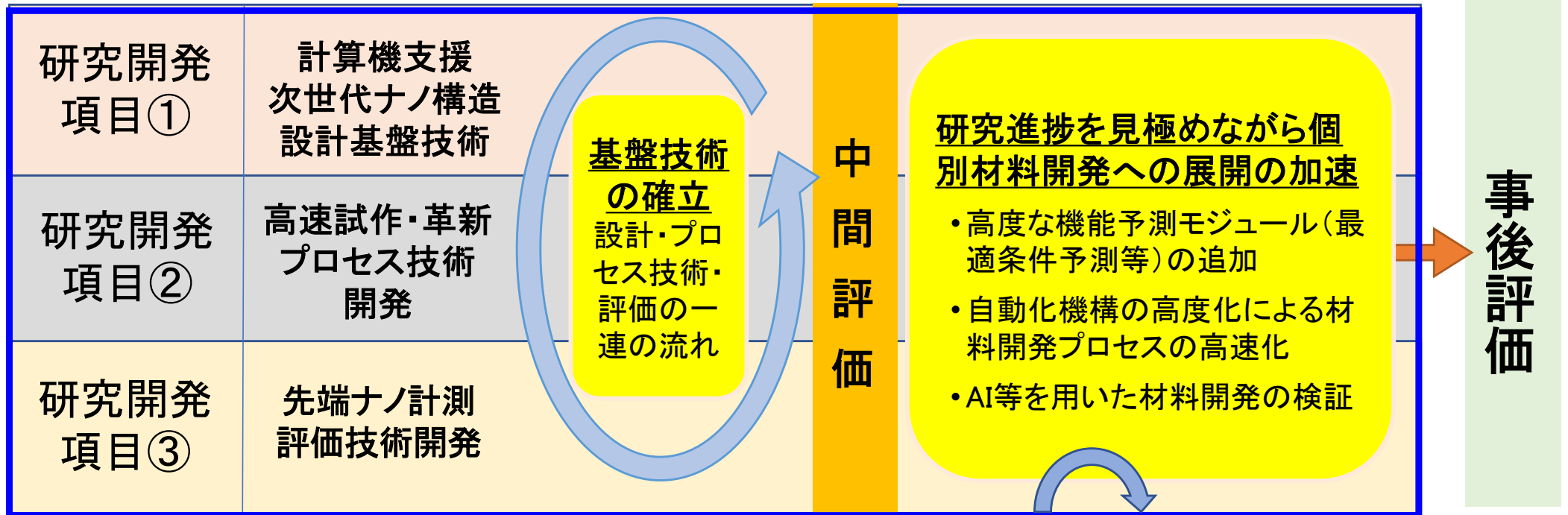
2021年度

個別技術の開発

モデル材料等を利用した  
一連の流れの確立

基盤技術システムの高度化、および  
革新的機能性材料の自動創製

## <委託事業>



## <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

NEDO基本計画より

# 基盤技術開発テーマ



## 計算科学

- ① キャリア輸送マルチスケール計算シミュレータ
- ② 外場応答材料と複雑組成材料の大規模計算シミュレータ
- ③ 機能性ナノ高分子材料のマルチスケール計算プロセスシミュレータ
- ④ マルチスケール反応流体シミュレータ
- ⑤ 深層学習・機械学習(AI)、離散幾何解析

## プロセス

- ⑥ 自在なヘテロ接合素材の開発(ナノ粒子合成)
- ⑦ ポリマー系コンポジット材料プロセス(ブレンド・発泡)
- ⑧ 自在合成を可能にするフローリアクター(ハイスループット)
- ⑨ ナノカーボン材料プロセス

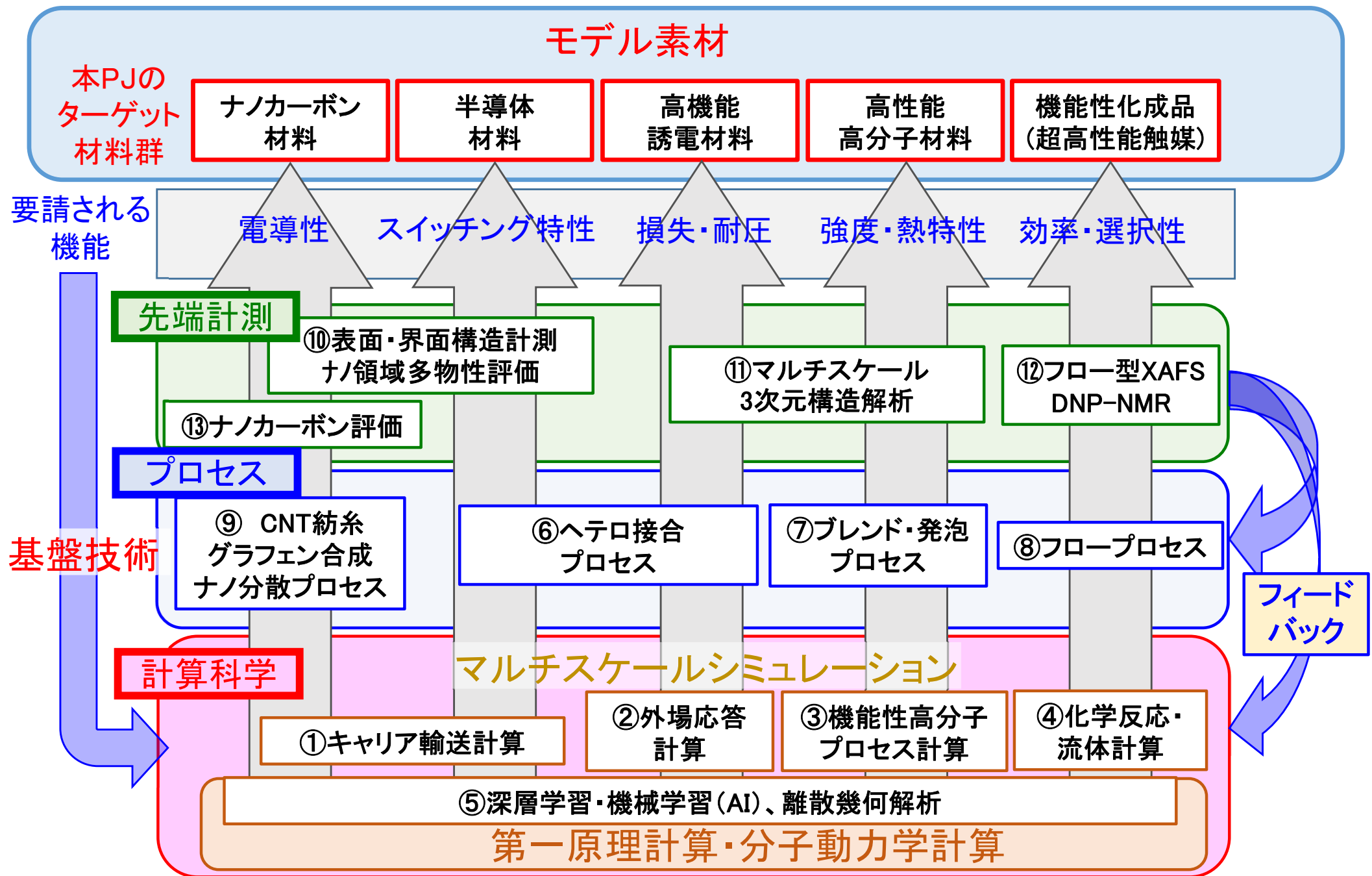
## 先端計測

- ⑩ 表面・界面構造計測/ナノ領域多物性評価(和周波/ナノプローブ分光)
- ⑪ 有機(無機)コンポジット材料3次元構造解析(TEM、陽電子消滅、X線CT)
- ⑫ フロープロセスの高感度 In-Situ 計測(XAFS、NMR)
- ⑬ ナノカーボン材料の構造・特性評価

# モデル素材開発テーマ

研究開発テーマ名		開発目標材料	企業名
<b>(1) 半導体材料</b>			
1	高機能光学材料の研究開発	サーモクロミックフィルム（近赤外線の制御幅60%）	コニカミノルタ
2	有機半導体材料の研究開発	高移動度(10cm <sup>2</sup> /Vs) p型有機半導体材料	東ソー
<b>(2) 高機能誘電材料</b>			
3	高周波フレキシブル誘電材料の研究開発	高周波領域CCL用誘電材料(ポリマー)(低誘電率と低誘電正接(1/10)の両立)	日鉄ケミカル&マテリアル
4	電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発	電歪ソフトマテリアル構造と外部応答予測	パナソニック
5	有機・無機ハイブリッド誘電材料の研究開発	有機・無機ハイブリッド高誘電材料(高耐電圧と高誘電率の相反機能最適化)	村田製作所
<b>(3) 高性能高分子材料</b>			
6	複合系の反応設計の研究開発	機能性材料(添加剤処方最適化)	出光興産
7	樹脂/無機フィラー複合材料の研究開発	樹脂/無機フィラー複合材料（目視により透明、熱伝導率 $\geq 1.5\text{W/mK}$ ）	カネカ
8	機能性合成ゴム材料の研究開発	機能性ゴム材料	JSR
9	フレキシブル透明フィルム(熱硬化性樹脂)の研究開発	熱安定性透明フレキシブル熱硬化性樹脂(透過率 $\geq 85\%$ 、耐熱性とフレキシブル性相反機能)	昭和電工
10	ナノ発泡断熱材料の研究開発	高光透過性断熱シート（光透過性 90%、熱伝導率 0.025W/mK）	積水化成工業
11	スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発	スーパーエンプラナノコンポジット/アロイ材料(Tg150°C、強度・剛性維持)	DIC
12	革新分離材料の研究開発	革新的分離材料（所望の透過速度、分離性能を有する）	東レ
13	異方性導電性フィルムの研究開発	異方導電性フィルム（高い接着性）	昭和電工マテリアルス*
<b>(4) 機能性化成品(超高性能触媒)</b>			
14	多次元高度構造制御金属ナノ触媒の研究開発	多元系コアシェル型金属ナノ触媒（低貴金属・高活性）	宇部興産
15	CO <sub>2</sub> を利用する有用化学品合成技術の研究開発	置換型アクリレートと合成用触媒の迅速開発(PMMAの特徴保持、欠点を克服する革新材料)	日本触媒
16	天然資源からゴム材料の研究開発	超高機能ゴム材料（天然資源由来のゴム材料を用いたタイヤ）	横浜ゴム
<b>(5) ナノカーボン材料</b>			
17	CNT複合材料の開発	CNT複合材料	日本ゼオン
18	CNT線材の開発	CNT線材（高い導電性を有する）	古河電気工業
19	大面積グラフェン高速合成および積層技術の基盤開発	大面積グラフェン高速合成	産総研

# モデル素材と基盤技術との関係



## プロジェクトの最終目標

1. 計算・プロセス・計測の三位一体による革新的な**材料基盤の構築**を行う
2. 従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間の1/20の短縮**を達成する
3. 国内素材産業の優位性を確保するため、**プロジェクト成果の実用化**を行う

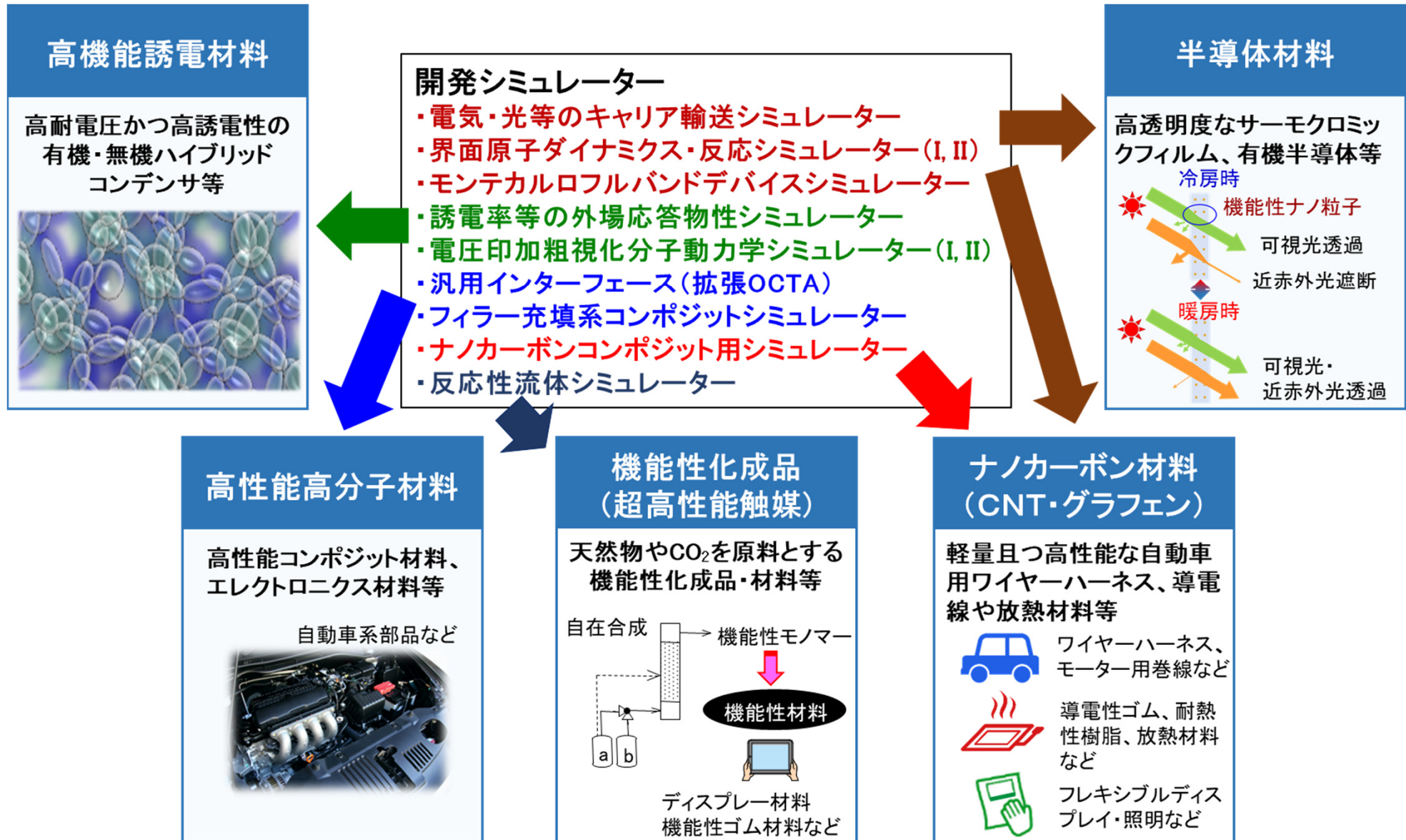


## プロジェクトの最終目標

1. 計算・プロセス・計測の三位一体による革新的な**材料基盤の構築**を行う
2. 従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間の1/20の短縮を達成する
3. 国内素材産業の優位性を確保するため、プロジェクト成果の実用化を行う

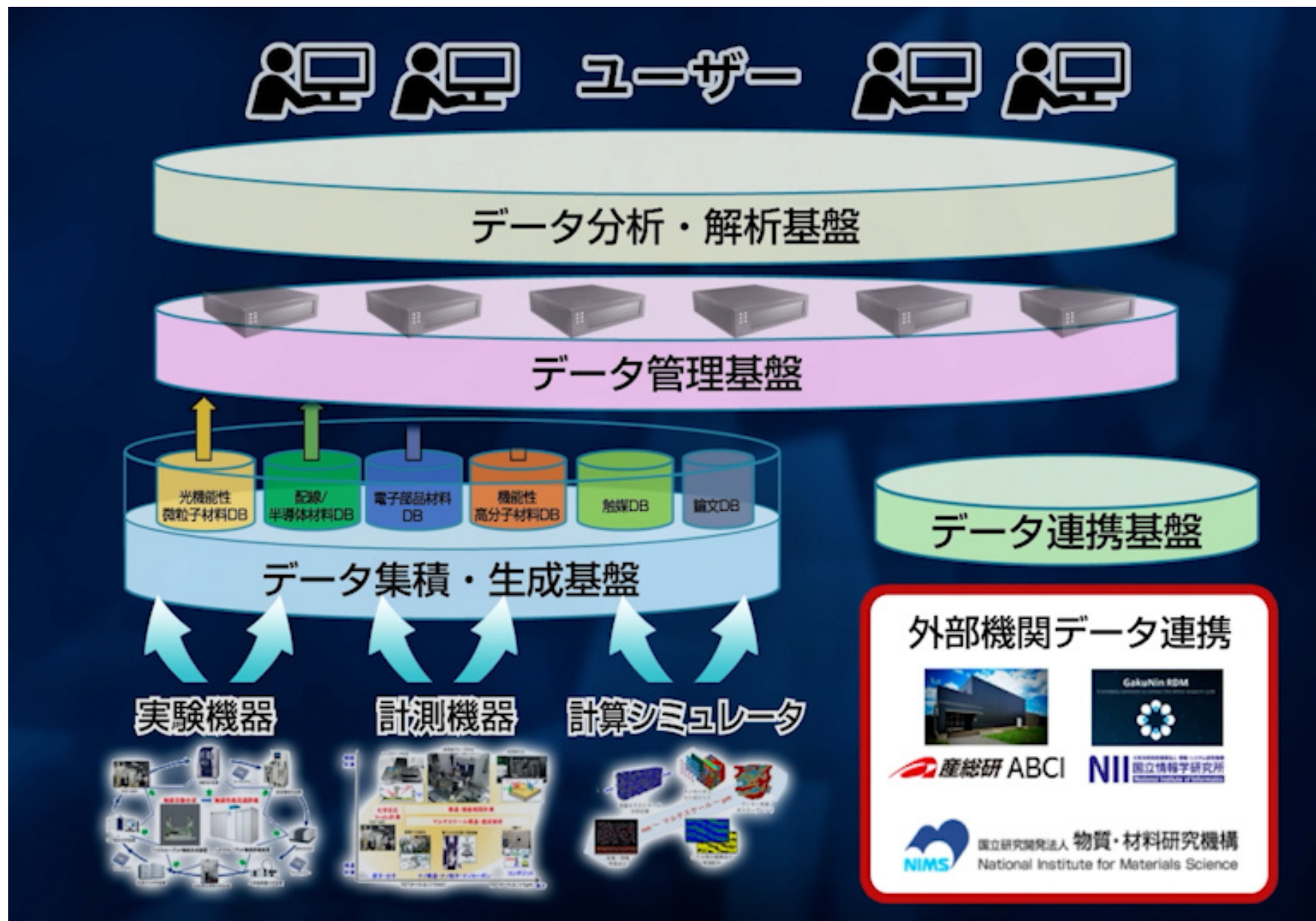
# 3-1. 材料基盤の構築：計算

広範な時空間スケール、多様な材料・機能に対応したシミュレータ群  
オープン戦略により成果の普及を図る



# 材料基盤の構築：データプラットフォーム

プロジェクトにより得られた材料データを整備・運用

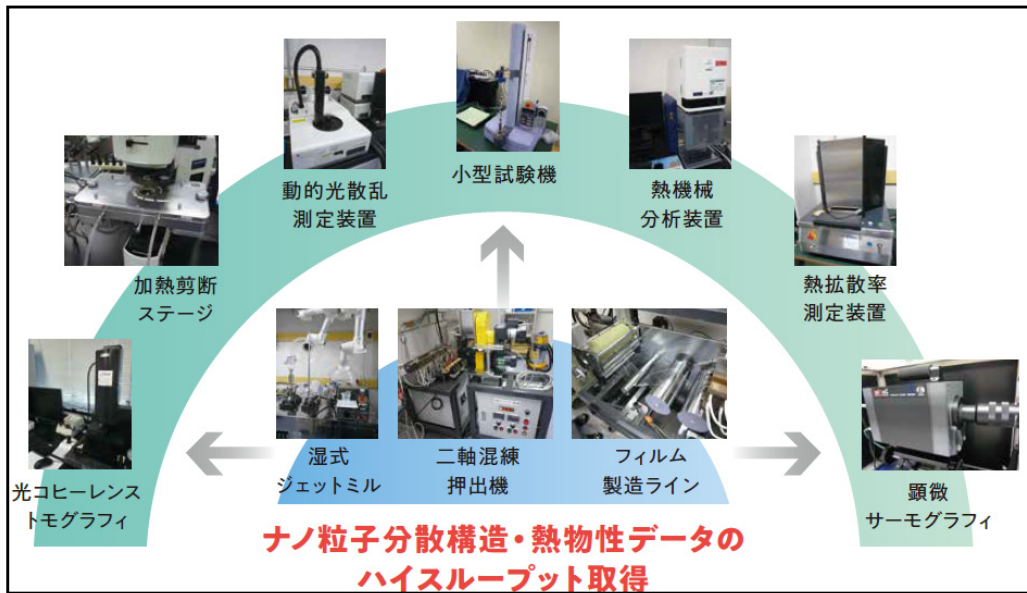




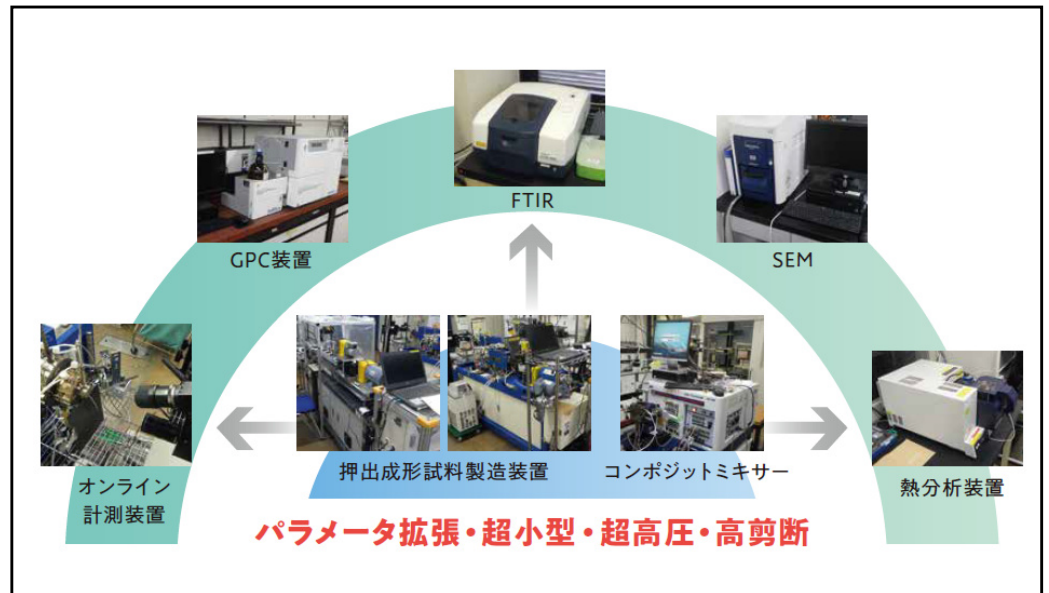
# 材料基盤の構築: プロセス

プロセス基盤技術は成果の実用化のためPJ後も活用

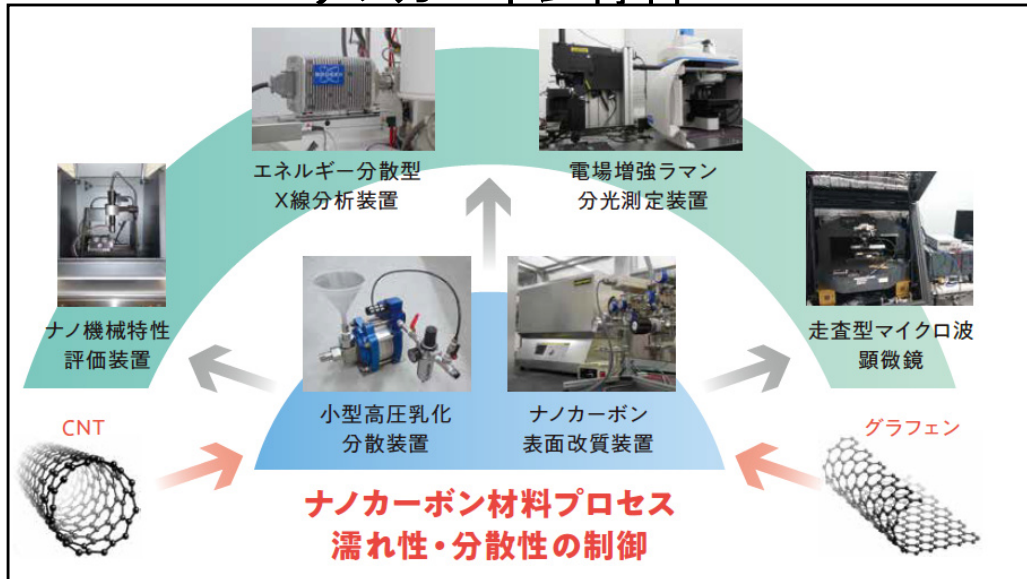
## ナノ粒子分散ポリマー



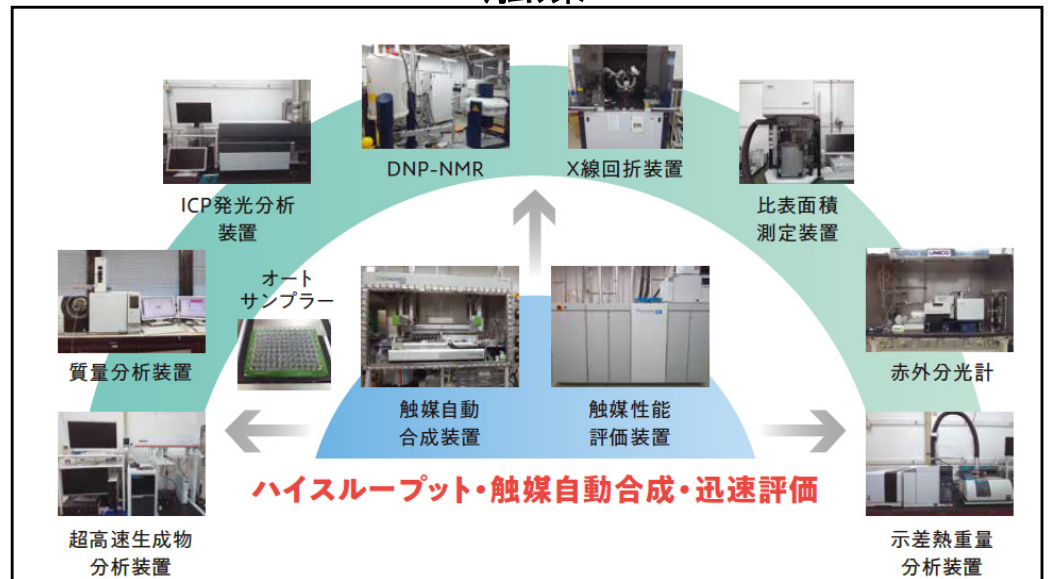
## 混練・発泡



## ナノカーボン材料



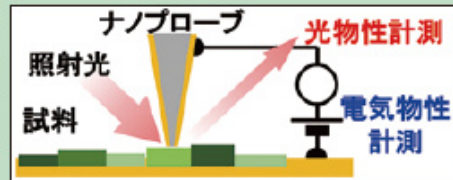
## 触媒



# 材料基盤の構築：計測

## 計測基盤技術に関してもPJ後活用

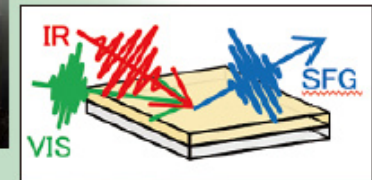
ナノプローブ分光



走査型マイクロ波顕微鏡



和周波分光



### 構造・機能相関計測

### 化学反応 In-situ計測

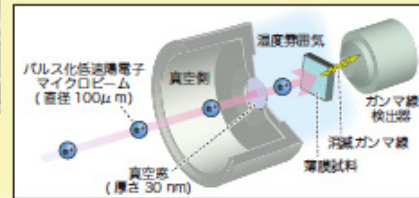
DNP-NMR



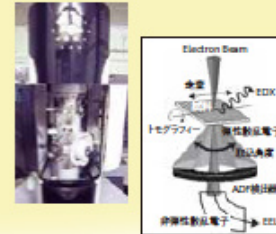
陽電子消滅法



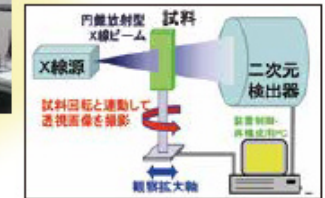
### マルチスケール構造・組成解析



電子分光型電子顕微鏡



X線CT



### 原子・分子

### ナノ構造・ナノ粒子・ナノカーボン

### コンポジット

10<sup>-9</sup>メートル (=1nm)

10<sup>-6</sup>メートル (=1μm) サイズ

## プロジェクトの最終目標

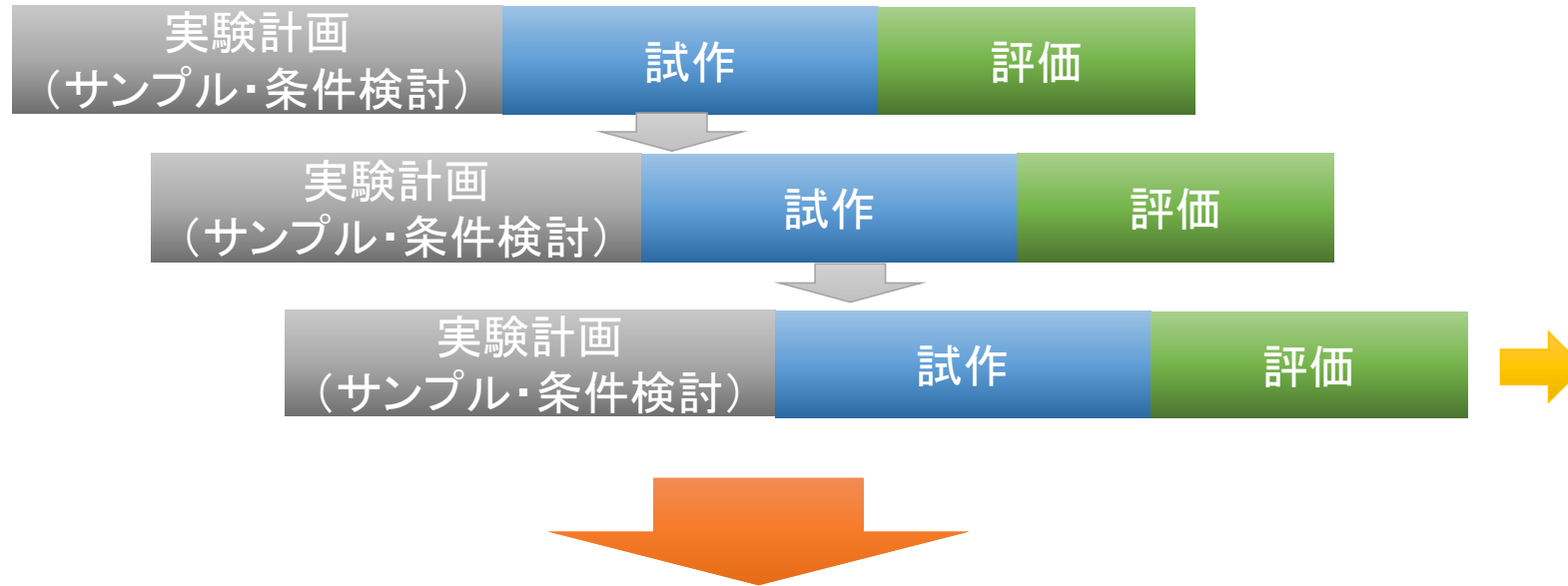
1. 計算・プロセス・計測の三位一体による革新的な材料基盤の構築を行う
2. 従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間の1/20の短縮**を達成する
3. 国内素材産業の優位性を確保するため、プロジェクト成果の実用化を行う



# 3-2. 試作回数・開発期間の1/20の短縮

従来の材料開発

- 長時間の条件検討、試行錯誤
- 局所的な探索による低い的中率
- 数多くの実験、評価



超超プロの目標

- AIによる高速・高精度な絞り込み
- 広域の探索による高い的中率
- 実験・評価のハイスループット化



数多くの課題で試作回数・開発期間の短縮を達成

# 試作回数・開発期間短縮の成果事例

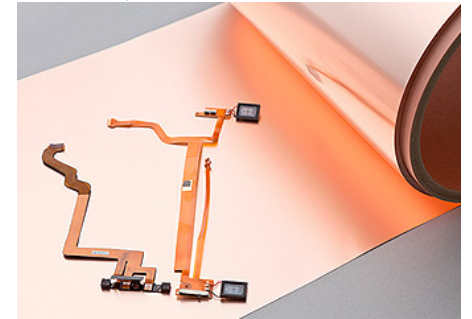
複数の要求特性を満たす  
フレキシブル透明フィルム  
開発の実験回数を大幅低減<sup>1)</sup>



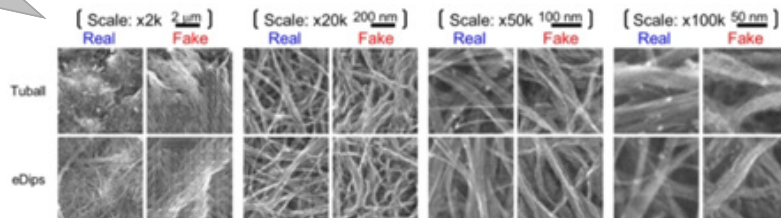
高活性ブタジエン合成  
触媒の開発により、バイ  
オマス由来のブタジエン  
ゴムでタイヤを試作<sup>2)</sup>



5G,6G向け高周波対応  
フレキシブル誘電材料  
の分子設計<sup>3)</sup>



仮想実験によるキャパ  
シタ用途CNT不織布の  
高速特性予測<sup>4)</sup>



銀ナノ粒子分散液の  
光学特性制御と  
高速試作<sup>5)</sup>



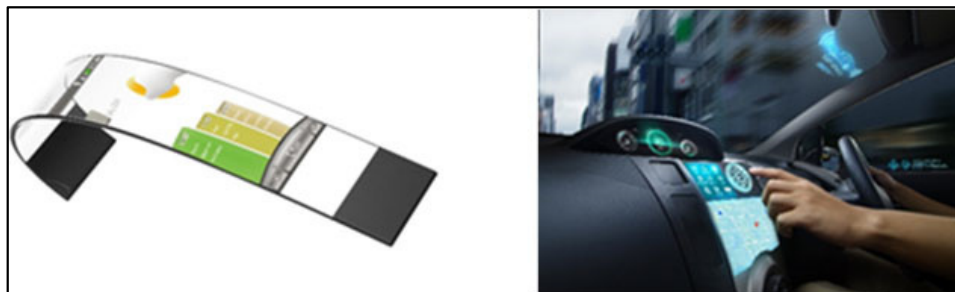
- 1) 「AI解析による熱硬化性樹脂フィルムの研究開発」
- 2) 「ハイスループットシステムとデータ科学を活用した高活性ブタジエン合成触媒の開発」
- 3) 「高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発」
- 4) 「CNT複合材料の開発」
- 5) 「高機能光学材料の研究開発」

# AIを活用し、フレキシブル透明フィルム開発の実験回数を

## 1/25以下に大幅低減

フレキシブル透明フィルムの開発に人工知能(AI)を活用し、透過率、破断応力、伸びの3項目の特性に優れたフィルムの開発実験回数を従来比25分の1以下に低減することに成功

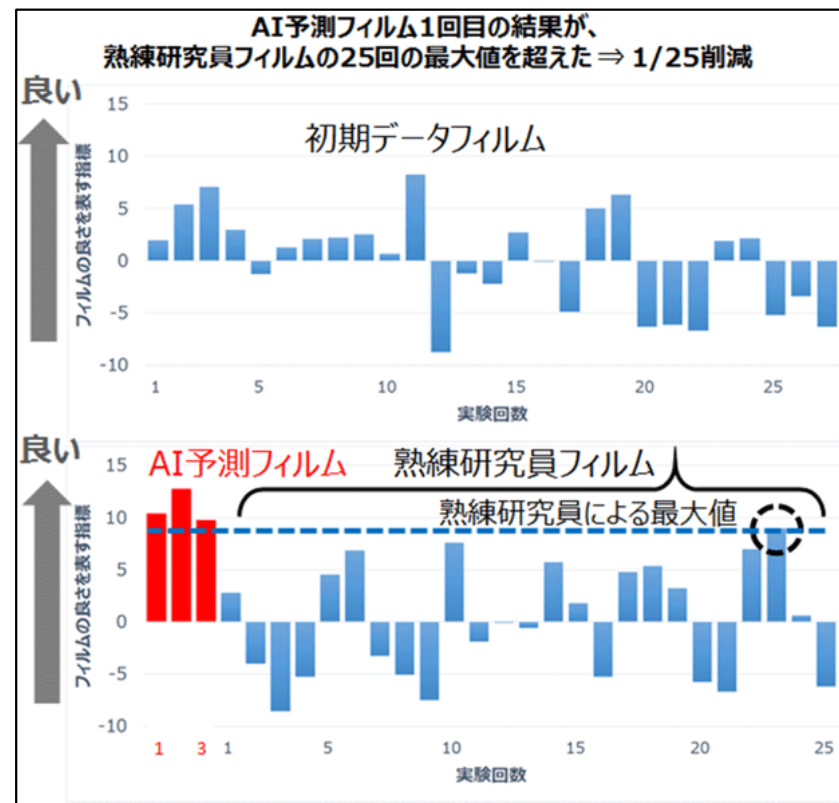
### モバイル機器などへの用途



### 計算とプロセスの連携によるフレキシブル透明フィルム開発サイクル



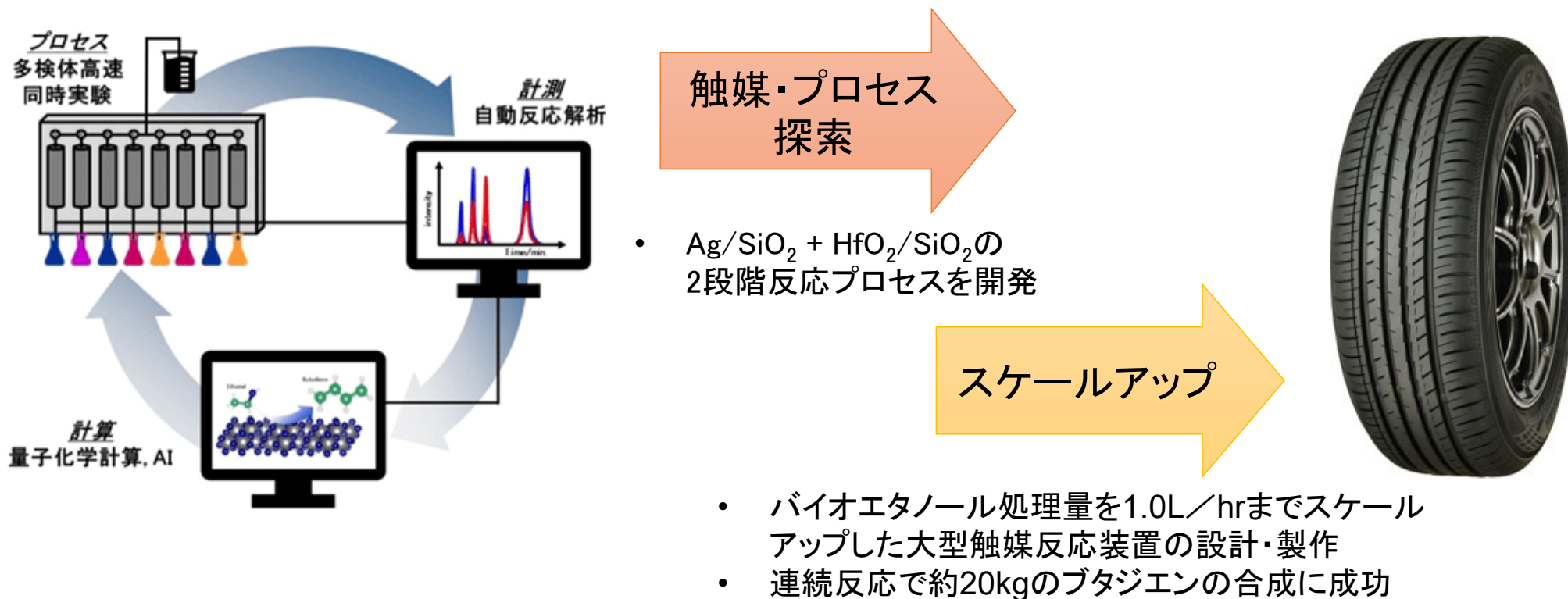
### 実験回数の評価フロー



27種の実験データに基づいてAI予測したフィルムの特性値は、熟練研究員が作成した25種類のフィルムを超えた！

# バイオマス由来のブタジエンゴムでタイヤを試作

- ◆ ハイスループットシステムとデータ駆動型学習、触媒インフォマティクスの活用により、世界最高クラスのブタジエンの収率を持つ触媒システムを開発し、生成したブタジエンからブタジエンゴムの合成に成功
- ◆ さらに、ブタジエンの反応条件の最適化および生成したブタジエンの捕集方法の改良などにより、バイオエタノールからブタジエンを大量合成し、それを原料にした合成ゴムで従来と同等の性能を持つ自動車用タイヤを試作する一連のプロセスを実証することに成功



2019/7/22 産総研プレスリリース [https://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2019/pr20190722/pr20190722.html](https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2019/pr20190722/pr20190722.html)

2021/8/10 産総研プレスリリース [https://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2021/pr20210810/pr20210810.html](https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2021/pr20210810/pr20210810.html)

Y. Shinke et al., Reaction Chemistry & Engineering, 2021, 6, 1381–1385.



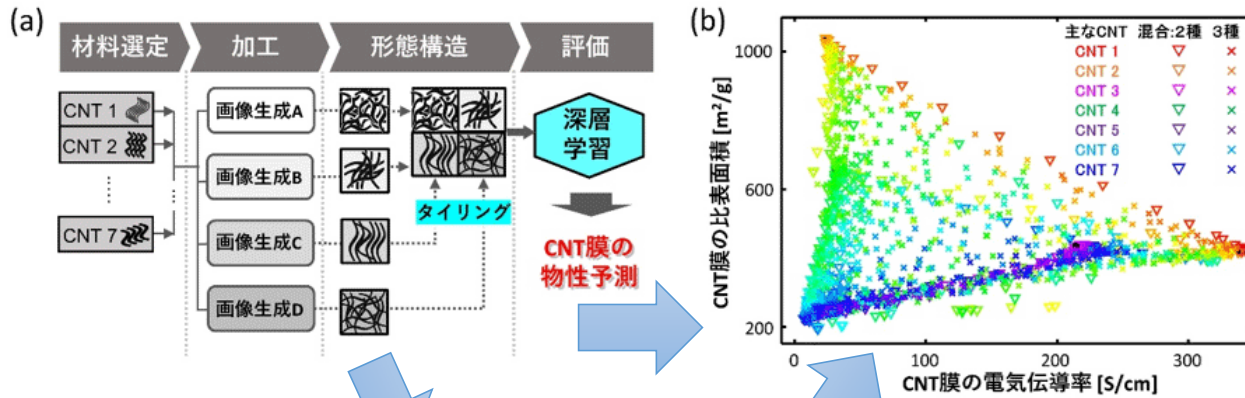
# 人工知能により材料の構造画像を生成し、物性を予測する技術を開発

## — AI技術で扱える材料を広げ、材料開発加速へ —

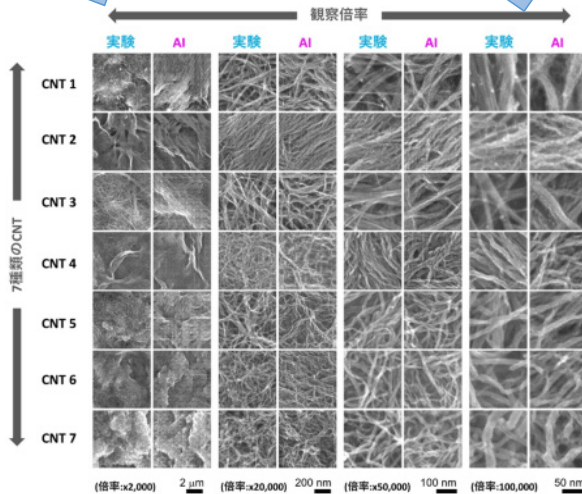
カーボンナノチューブ(CNT)を用いて作製した膜について、その構造画像と物性値をAIに学習させたのち、コンピュータ上で2~3種類のCNTを任意の割合で混合した膜のAI画像を生成することで、CNT膜の物性値を精度よく予測することを可能にした

### 構造画像(実測)と物性との回帰

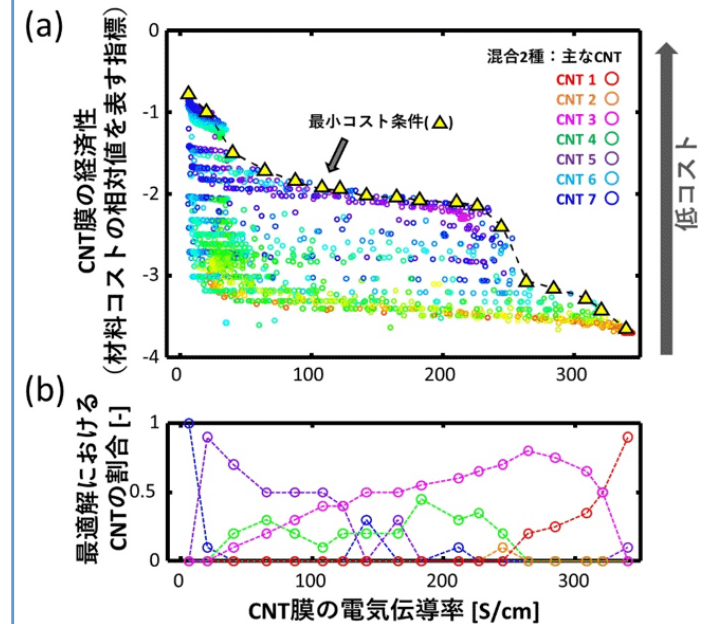
### 組成と物性の広範なマップを作成



深層学習(GAN)による構造画像から疑似画像の作成



性能とコストを両立する組成の提案などを実現



# 基盤技術及び材料開発により得られた 知財・対外発表

	2016	2017	2018	2019	2020	2021	計
特許		3	11	4	11	9	38
プログラム			1	7	3		11
プレスリリース	1	2	2	4	2	8	19
論文	1	17	18	21	42	21	120
研究発表	17	55	119	115	69	65	440
展示会出展	1	1	2	3	2	2	11

2022年1月18日時点の暫定値



## プロジェクトの最終目標

1. 計算・プロセス・計測の三位一体による革新的な材料基盤の構築を行う
2. 従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間の1/20の短縮を達成する
3. 国内素材産業の優位性を確保するため、**プロジェクト成果の実用化**を行う

### 「実用化」の考え方

本事業における実用化とは本プロジェクトで開発したマルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術が適切な管理の下、プロジェクト終了後も持続的にブラッシュアップ出来る運営体制を構築し、国内素材企業の材料開発支援に資することをいう。

# 材料設計プラットフォーム(MDPF)構想

## プロジェクトにおける 実施内容

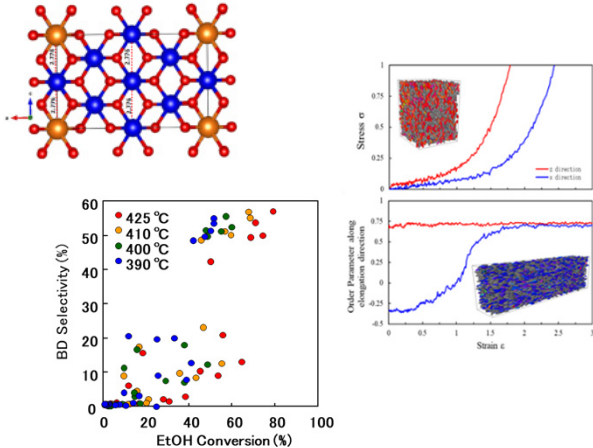
プロジェクト  
終了

### 材料基盤の構築

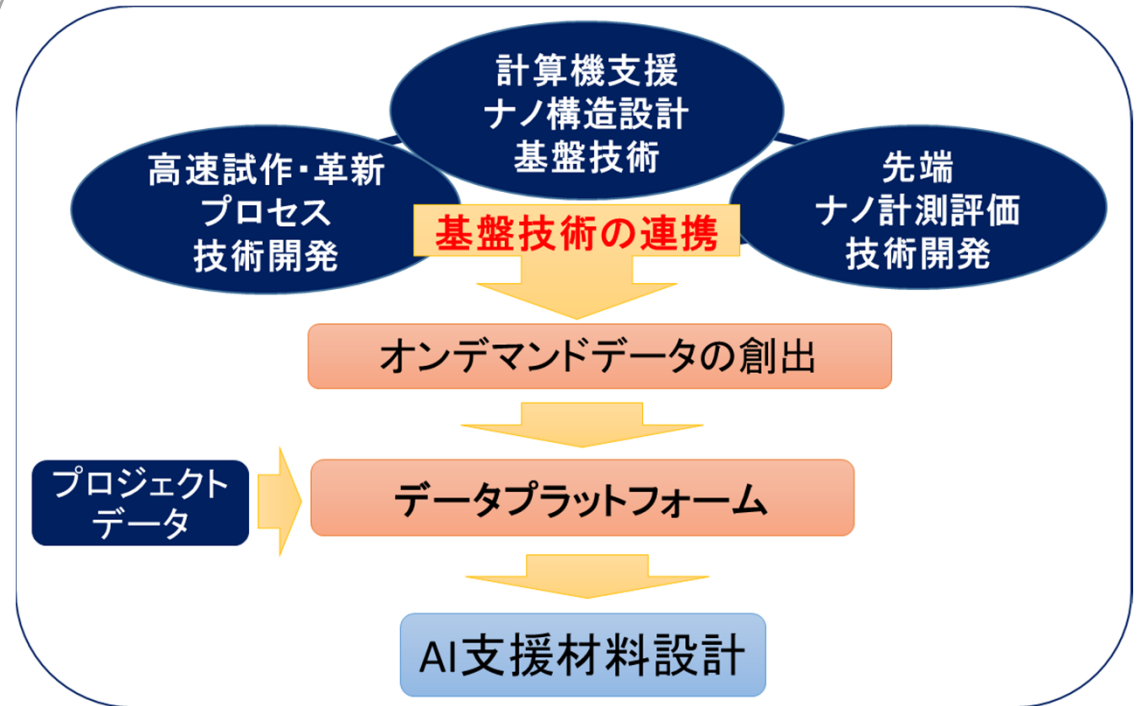


- ・技術
- ・設備
- ・知財
- ・データの集約

### 個別課題への適用



## 材料設計プラットフォーム (MDPF)の提供



ニーズ

ソリューション

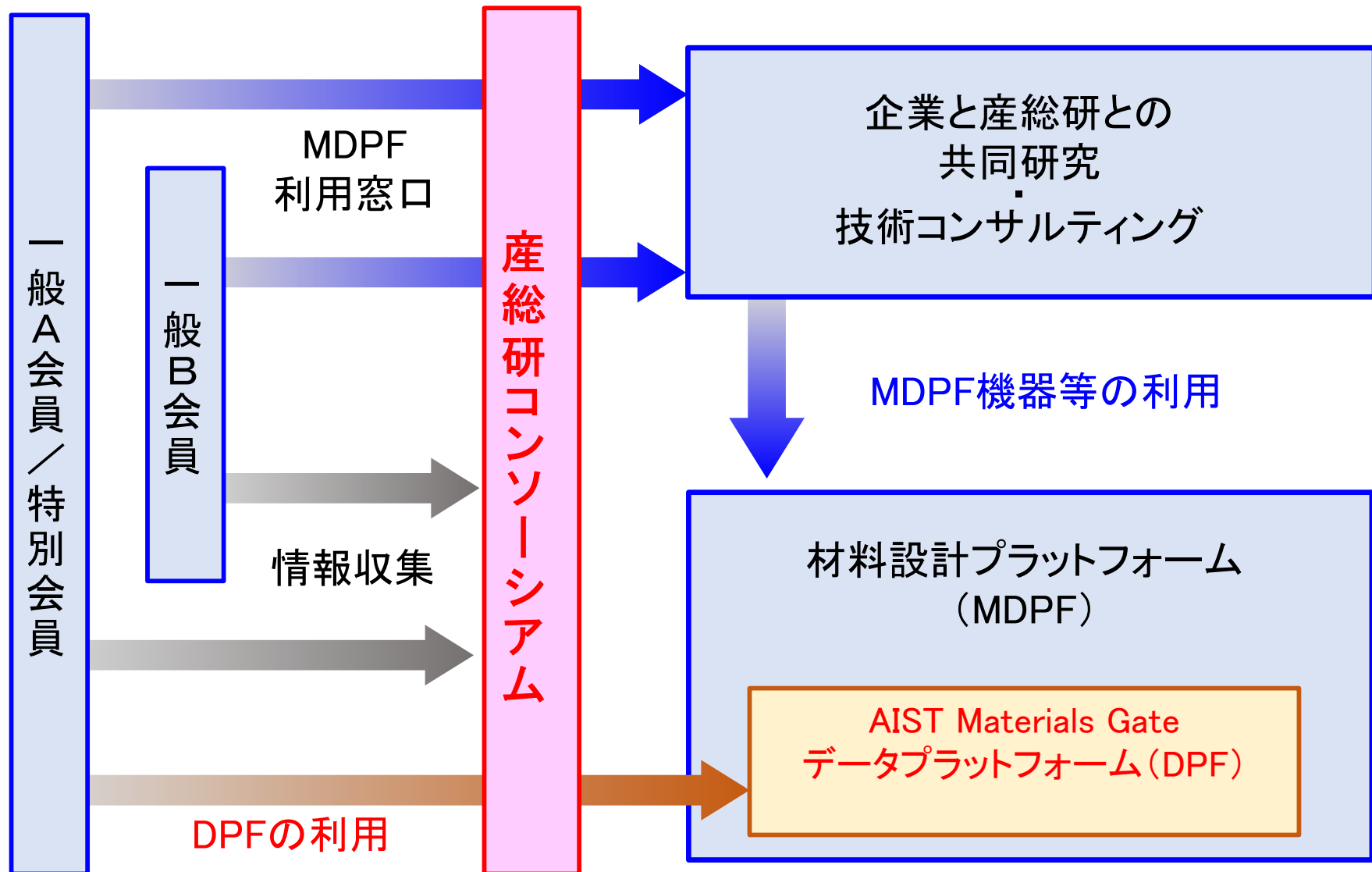


日本産業における  
材料開発の加速



# 材料設計プラットフォーム普及のための体制

コンソーシアムを窓口とした、共同研究・技術コンサルティングにより  
プロジェクト成果物を活用していく



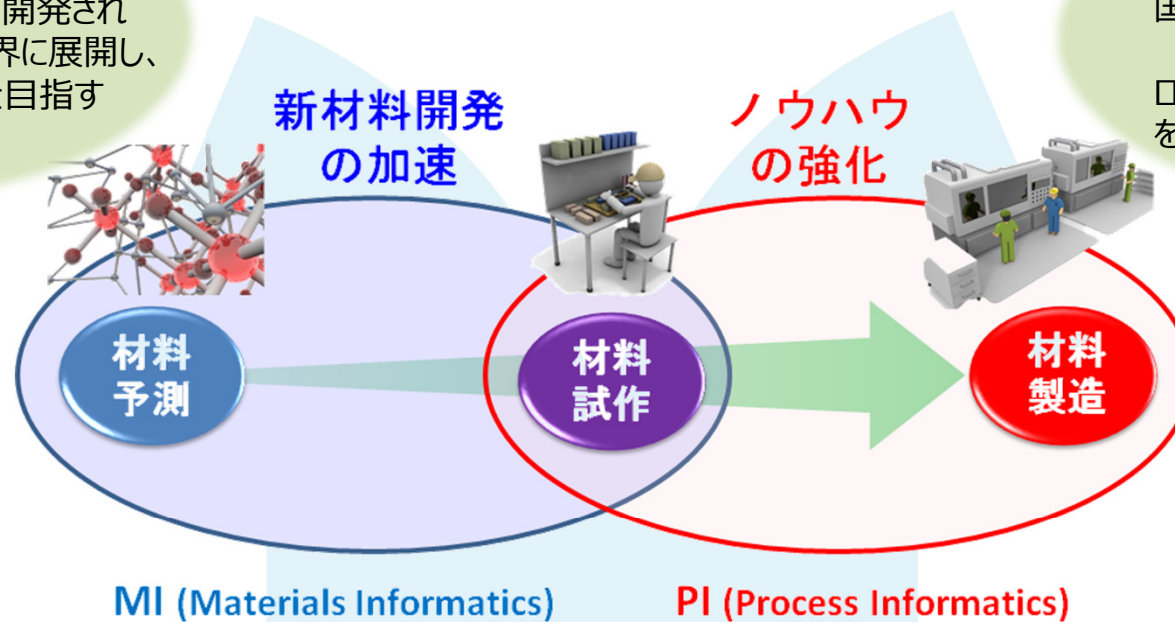
# 4. データ駆動型材料開発の今後

## MI基盤技術の展開

超超プロジェクトにおいて開発された基盤技術を広く産業界に展開し、競争力のさらなる強化を目指す

## PI基盤技術の開発

国プロ等を利用し、重点プロセス（機能性化学品、セラミック、セルロース等）における、PI基盤技術を開発



## AIST Materials Gate データプラットフォーム

超超プロジェクトにより創出された材料データをベースにデータ駆動型材料設計に資する

## 秘匿計算技術の開発

企業データを安心して提供頂くための秘匿計算技術を開発し、企業データを含めたMI・PI用のビッグデータを創出

材料設計から製造プロセス最適化まで一貫した  
データ駆動型材料開発の実現



# 最後に：集中研により得られたもの

ADMAT出向研究員の感想など

他社の研究員との  
交流により視野が  
広がった

企業の壁を越え  
て基盤技術を  
共有できた

データ駆動型  
材料設計のコミュ  
ニティー・人脈が  
形成された

先端の研究現場  
を肌で感じるこ  
とができる

コロナ禍で  
心残りはい  
るが...