

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

「樹脂／無機フィラー複合材料の  
研究開発」

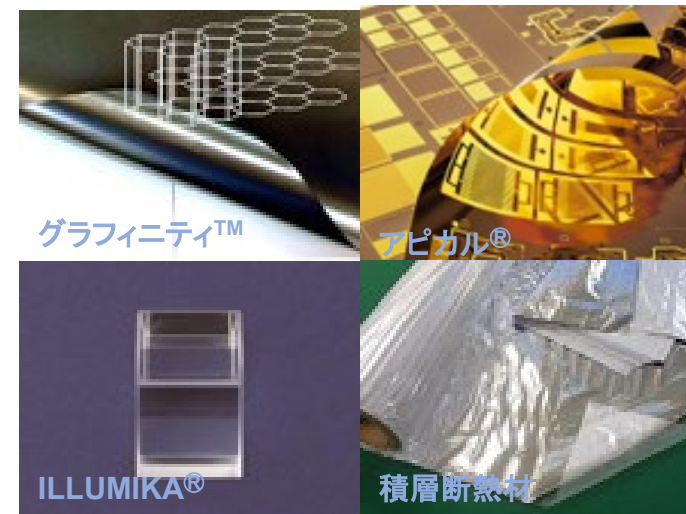
2022年1月19日(水)

株式会社カネカ  
小澤 伸二

Thermal Management は省エネルギー社会、情報化社会の重要課題

## ■ カネカの Material Solutions

- 超高熱伝導グラファイトシート (グラフィニティ™)
- 超耐熱ポリイミドフィルム (アピカル®、ピクシオBP)
- 耐熱耐光透明樹脂 (ILLUMIKA®)
- 積層断熱材 (スーパー・インシュレーション)



## ■ 「放熱部材」は成長が続く有望市場。調査<sup>a)</sup>によると、

- 2018年実績: 24億4190万米ドル
- 2023年予測: 30億7190万米ドル

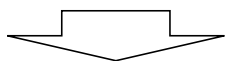


製品改良、新製品開発に向けた基盤技術をプロジェクトの中で開発

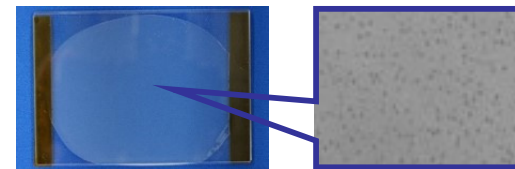
(a) 放熱部材 (樹脂/無機フィラー複合材料に限らない) の世界市場予測。出典: 株式会社富士経済「2019年 熱制御・放熱部材市場の現状と新用途展開」及び 同書籍のプレスリリース (第19098号、2019年11月21日)

# テーマの背景(技術面)

- 基盤技術を開発するにも、放熱部材のみをターゲットとすると適用範囲が狭い
- 当社の事業領域を広くカバーする基盤技術を開発すべき

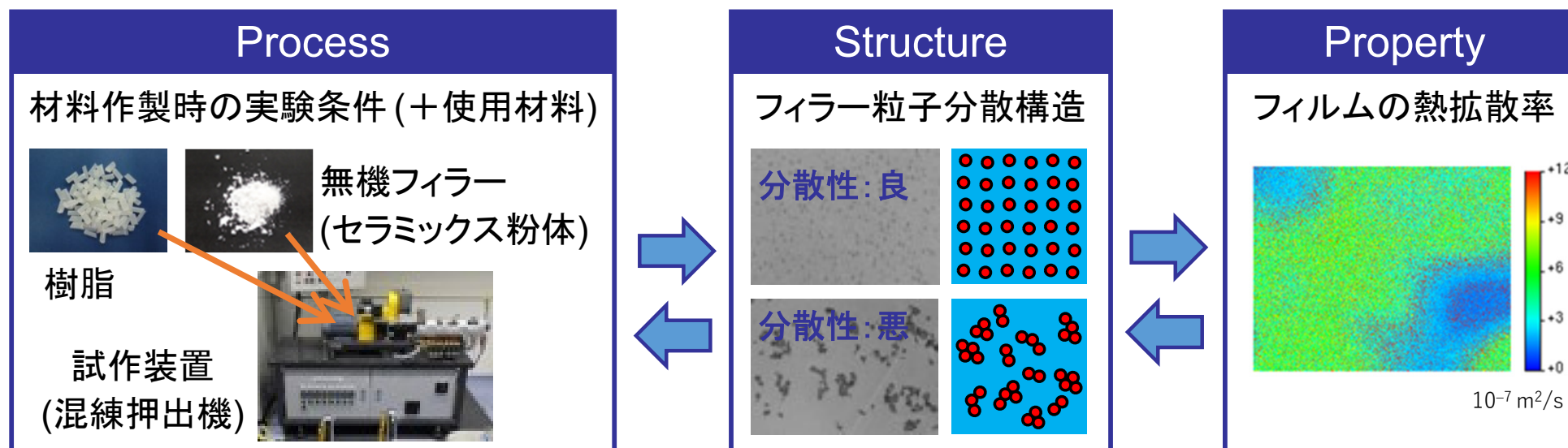


- モデル材料を樹脂／無機フィラー複合材料に広く設定



- プロジェクト期間中: 放熱機能(熱拡散)をターゲットに基盤技術開発
- プロジェクト終了後: 放熱部材以外にも基盤技術を適用

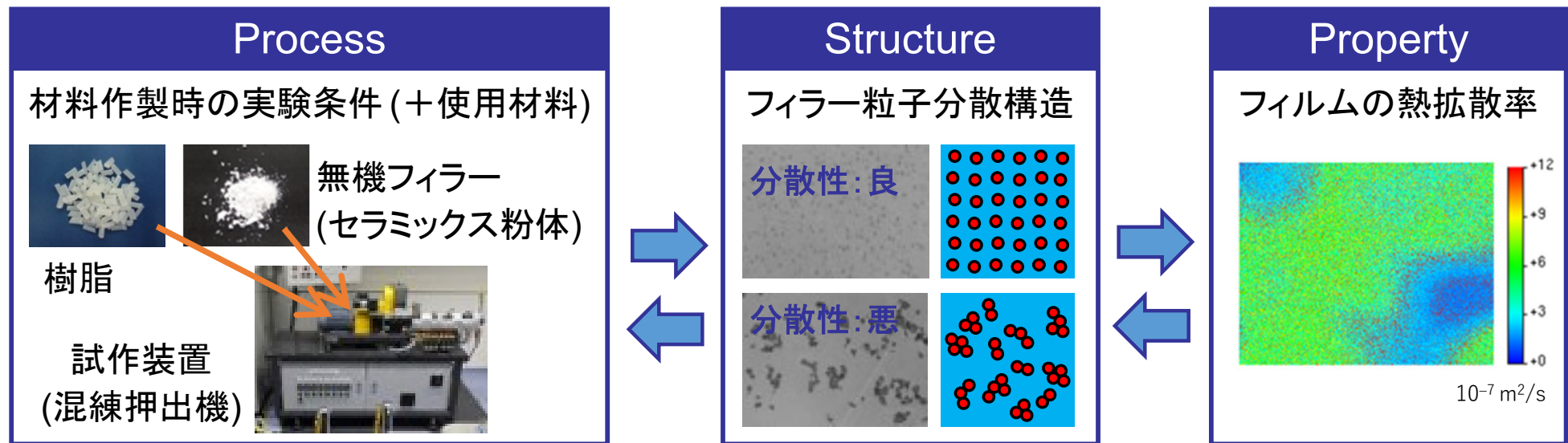
- 複合材料の機能発現のメカニズム: Process—Structure—Property (PSP) linkage



放熱部材以外への適用も視野に入れ、PSP linkageに着目した基盤技術開発を行った

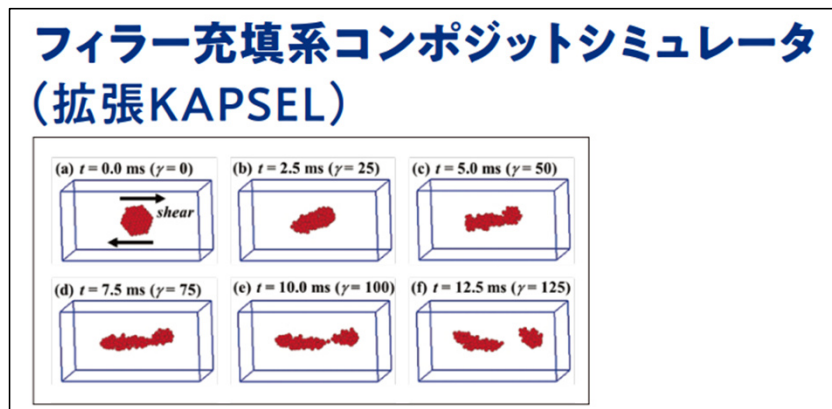
# テーマの目標

目標1: 熱拡散特性を例に、「Process-Property」ではなく「Process-Structure-Property」に準じた材料開発を実践し、Structure (高次構造) を挟むことの有効性を確認する



目標2: 目標1と新規プロセス技術の開発により、材料開発期間を短縮させる

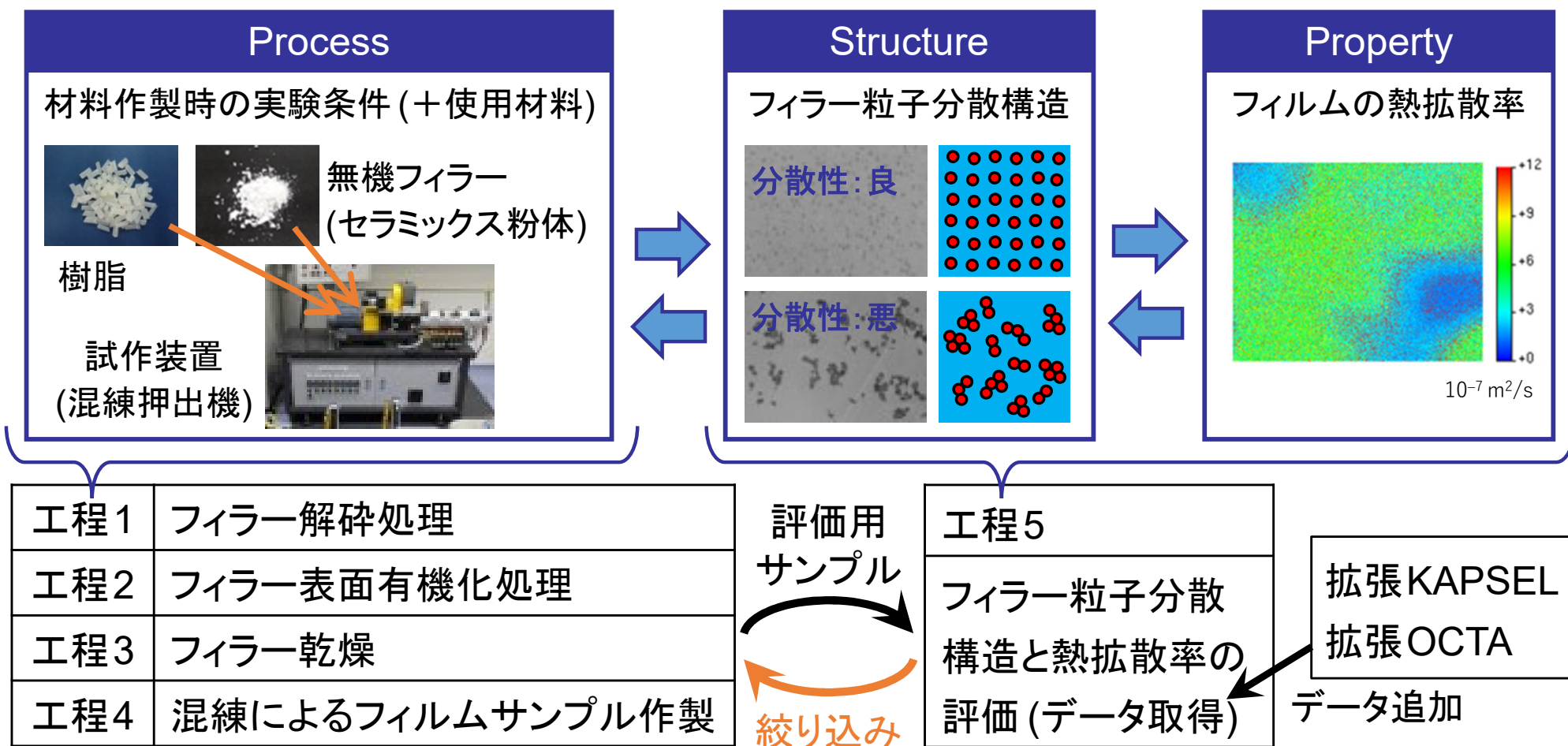
目標3: 2件のシミュレータを開発・公開する。※開発シミュレータは目標1と2に活用する



シミュレータの図は「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」パンフレットから引用。一部レイアウト変更。

# 超超プロジェクトにおける開発の方向性

- 材料開発を工程1-4のサンプル作製プロセス、工程5の構造・特性評価に分割



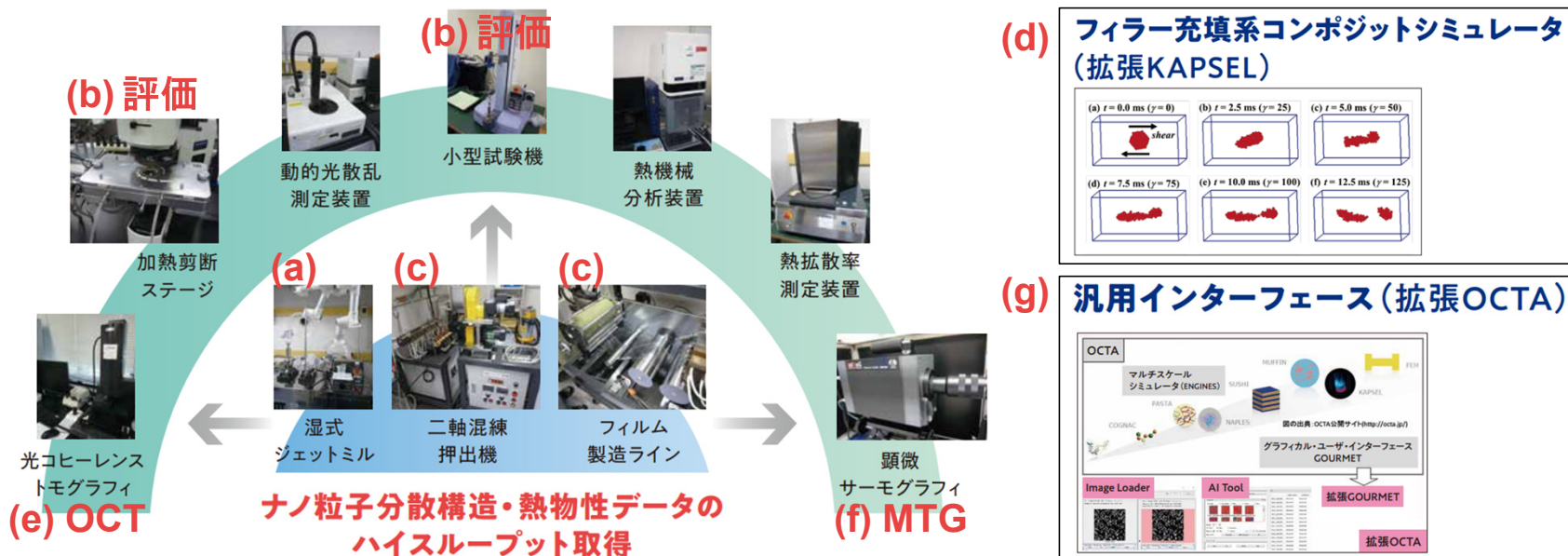
- 工程1-4は、プロセス技術開発によって時間短縮
- 工程5の評価データには、拡張KAPSELと拡張OCTAによる計算値データも追加
- 実験値、計算値の評価データを拡張OCTA等を利用して統計解析 (AI解析) し、  
プロセス条件・使用材料を絞り込む ⇒ 材料開発期間短縮

# 超超プロジェクトにおける開発の取り組み

		プロセス・計測	計算
工程1	フィラー解砕処理	(a) 湿式ジェットミルによる一括処理技術の開発・活用	(d) 拡張KAPSELによるDNSシミュレーション (プロセス条件・材料からフィラー粒子分散構造を計算)
工程2	フィラー表面有機化処理		
工程3	フィラー乾燥	(b) 複数の乾燥方法を試行・評価 ⇒ 最適方法確立	
工程4	フィルムサンプル作製	(c) 溶融混練(従来技術活用)	

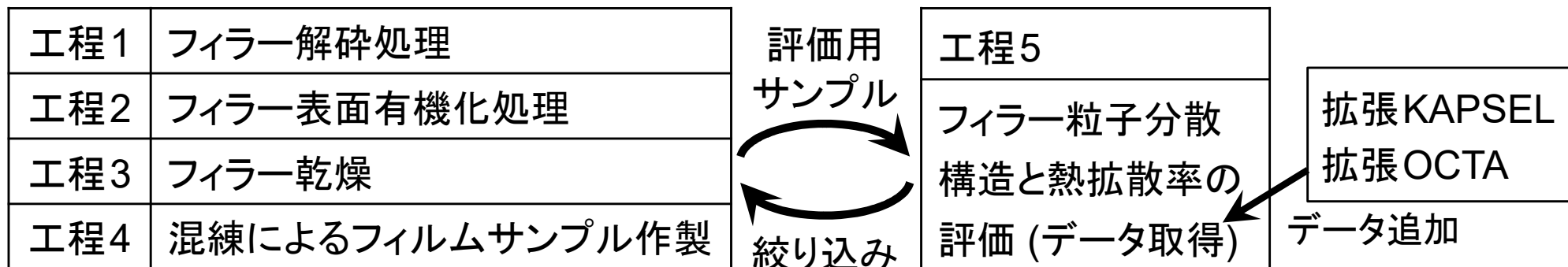
実験値、計算値データの統計解析(AI)による条件絞り込み(解析には拡張OCTA<sup>g)</sup>も利用)

工程5	フィラー粒子分散構造と熱拡散率の評価(データ取得)	(e) OCTと(f) MTGの併用によるハイスループットデータ取得技術の開発・活用	(g) 拡張OCTAによるFDMシミュレーション(粒子分散構造から熱拡散率を計算)
-----	---------------------------	--	---



図は「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」パンフレットから引用。一部レイアウト変更。

# 開発成果の概要



## ■ 工程1-4関連

- **湿式ジェットミルを用いた新規プロセス技術**に関して、産総研中部センターより  
学術論文1報発表 (*J. Compos. Mater.* 2021, 55, 521)、特許1件出願
- **複合材料のフィラー分散構造を実験とシミュレーションから比較検討した研究**に関して、  
ADMATと産総研中部センターより学術論文1報発表 (*Polym. Compos.* 2022, 43, 339)

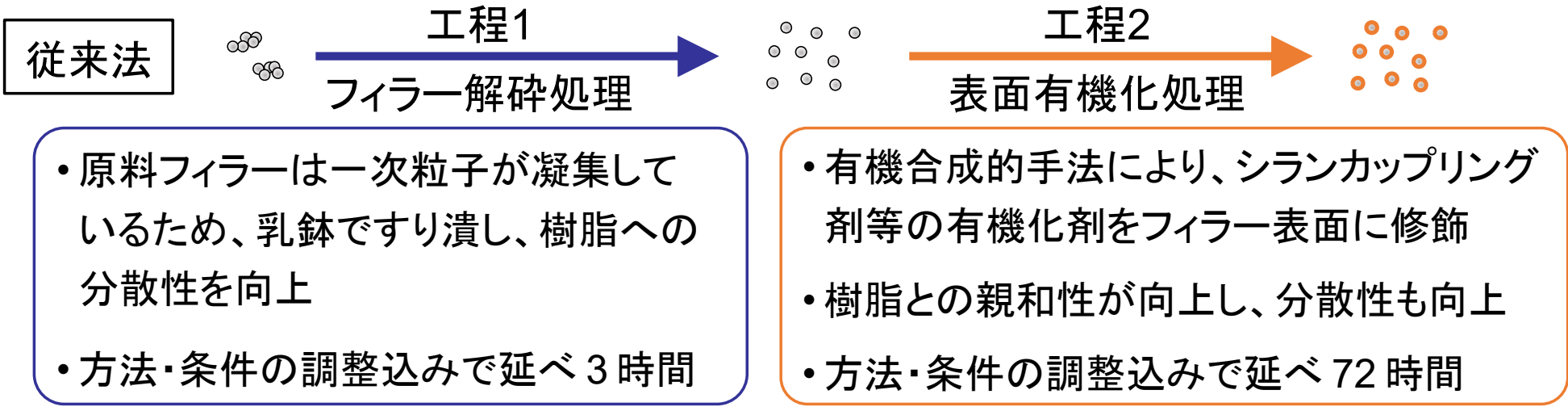
## ■ シミュレータ関連

- **拡張KAPSEL**は、産総研CD-FMatの開発・公開に協力
- **拡張OCTA**は、産総研CD-FMat、JSR、日本ゼオンと連携して開発・公開
- 両シミュレータ共に公開後もバージョンアップを実施。これまでの全バージョンのダウンロードの総数は、延べ700件以上

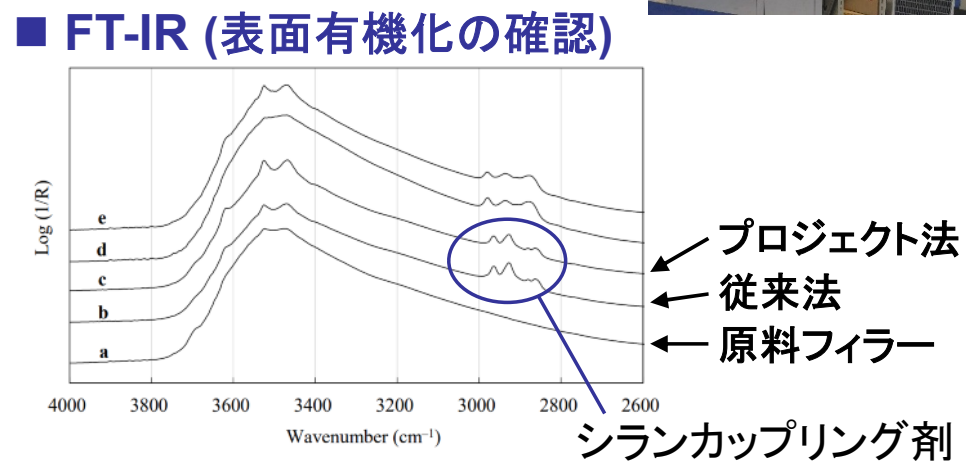
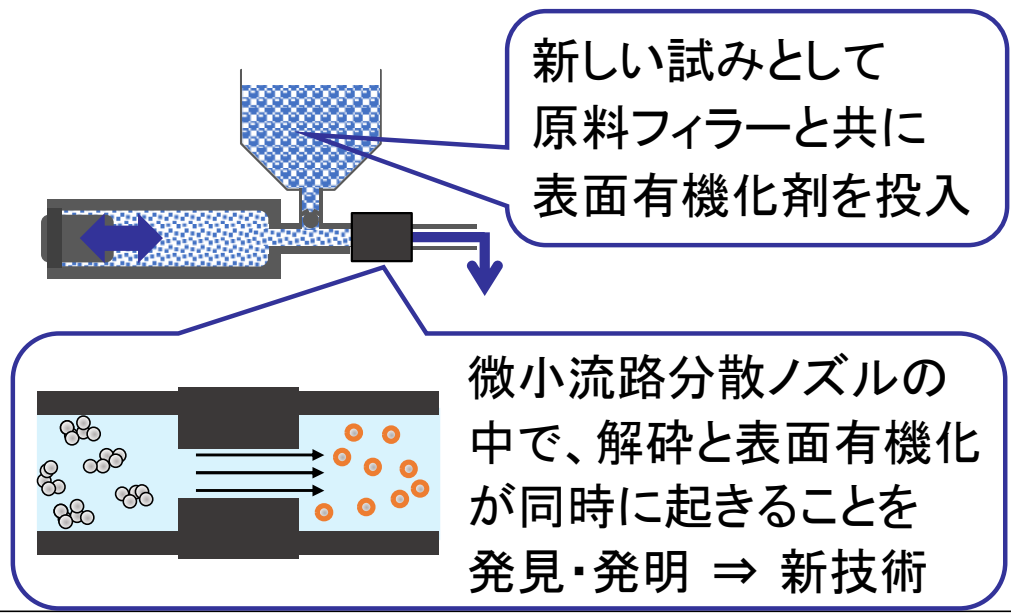
■ 上記以外にも学会発表、誌上発表等の成果公開を15件以上実施

■ 以上の成果により、材料開発期間の短縮が果たされた。その一部をトピックとして紹介

# トピック1：新規プロセス技術開発による工程1、2の時間短縮



**プロジェクト法** 産総研中部センターが新技術を開発  
**湿式ジェットミルによるフィラー解砕・表面有機化一括処理技術**  
 (学術論文1報: *J. Compos. Mater.* 2021, 55, 521. 特許出願1件)



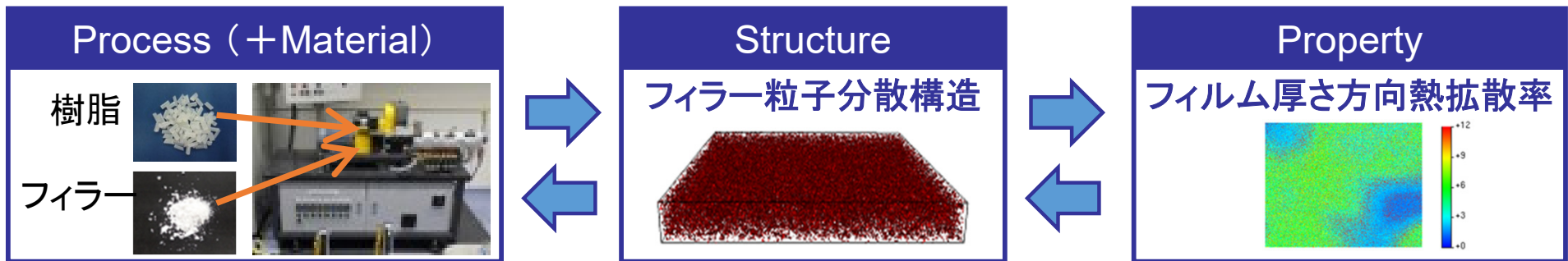
■ 工程時間の短縮  
 1サンプル当たり75時間 → 3時間



# トピック2-1: Process-Structure-Property linkage

## ■ PSP linkage に準じた材料開発を実践して再認識したこと

- 計算機シミュレーションによる材料開発では、Structureを挟むのが重要。必須の場合もある



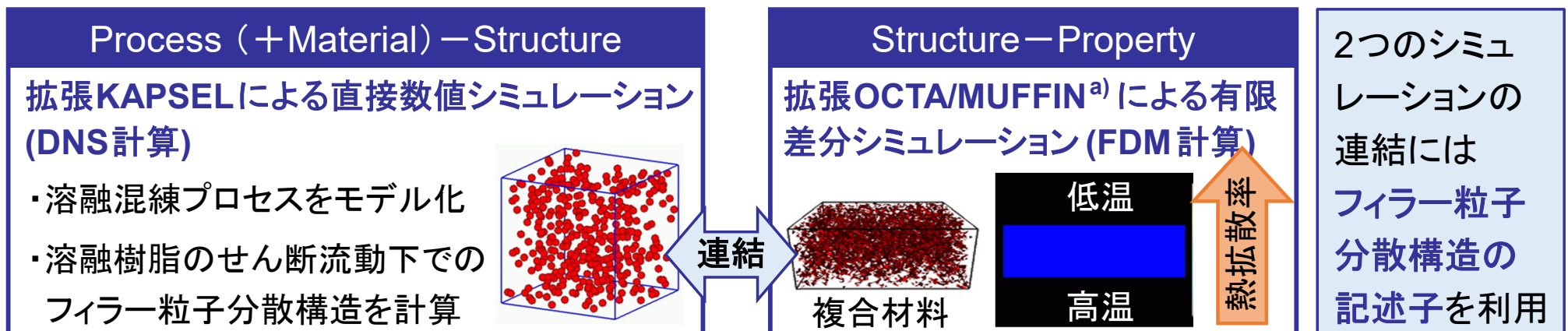
根拠1: 実験の場合は、Structureを挟まない「Process-Property」であっても材料開発可能。

Processでサンプルを作製し、Propertyを評価すれば、材料開発を進められる。

根拠2: 計算機シミュレーションの場合は、「Process-Property」では研究できないことがある。

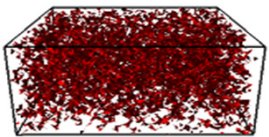
本テーマの場合、プロセスをインプット、熱拡散率をアウトプットとした計算手法はない。

根拠3: Structureを挟み、「Process-Structure-Property」とすれば、計算からも材料開発可能

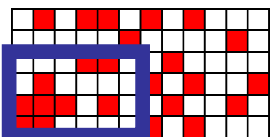


(a) MUFFINは、拡張OCTAの非拡張部分のシミュレータ(従来のOCTAにも同梱されている)

# トピック2-2: フィラー粒子分散構造の記述子

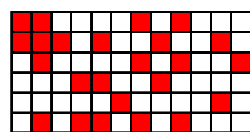


フィラー粒子を立方体メッシュにモデル化し、  
3種類の倍率 (スケール) に注目して記述子データを取得

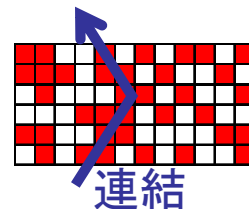


① 低倍率: フィルムサンプル全域に対するフィラー粒子分散構造の記述子

例: 臨界浸透確率 (白の何%を赤に置換すれば厚さ方向が連結するか?)

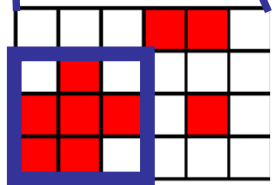


白の25%を  
赤に置換



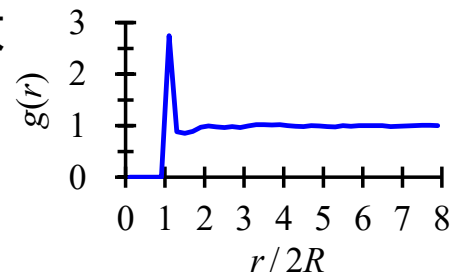
連結

臨界浸透確率 25%

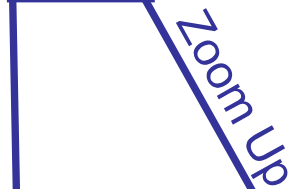


② 中倍率: フィラー粒子の周辺のみ注目した分散構造の記述子

例: 各粒子の動径分布関数、配位数



配位数 1.2



③ 高倍率: フィラー粒子の凝集塊の形状を表した記述子

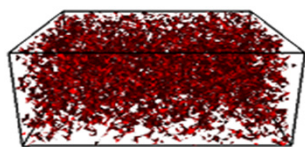
例: 個々の凝集塊の体積、表面積、体積表面積比、厚さ方向幅、水平方向幅、  
最長幅を評価し、全ての凝集体の平均値、分散、最大値、最小値、中間値  
を記述子データとして取得

各記述子データは、拡張OCTAと自作プログラムを利用して取得

# トピック2-3: Structure-Propertyからの粒子分散構造設計

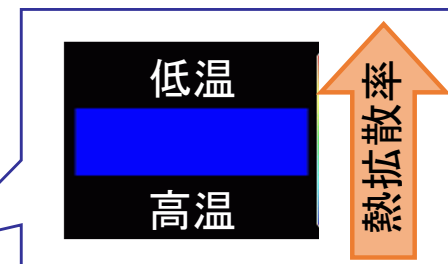
## ■ Structure-Property を検討するためのデータセット作成

- 5000水準の粒子分散構造をランダムに作成



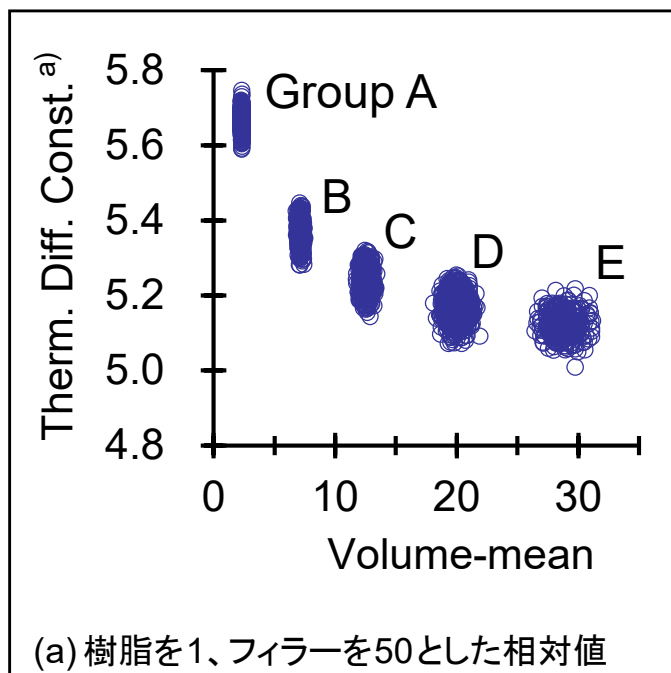
粒子分散構造の記述子データ

FDMシミュレーションによる熱拡散率データ



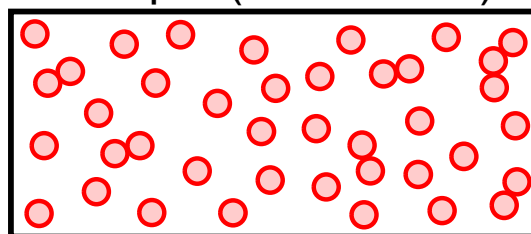
## ■ 分散構造記述子と熱拡散率の関係をプロットするだけでも材料設計の指針が得られた

例: 熱拡散率 対 凝集塊体積平均値プロットを作成 ⇒ 5つのグループA-Eが現れた



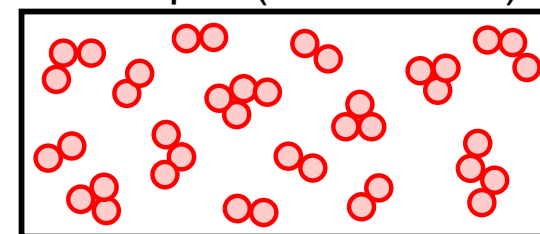
Group A, Bの粒子分散構造の模式図 (どちらも40粒子)

Group A (高熱拡散率)



小さな凝集塊と粒子が分散

Group B (低熱拡散率)



大きな凝集塊が分散

熱拡散率を高めるための粒子分散構造の設計指針:  
できるだけフィラー粒子の凝集が解けた分散構造にする

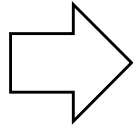
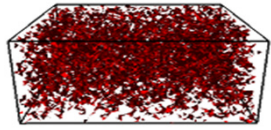
## ■ Group Aの範囲内で熱拡散率を高めるための設計指針

- 分散構造記述子を用いた機械学習解析から導出 ※内容は省略

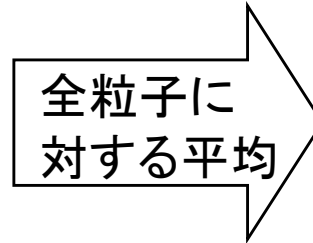
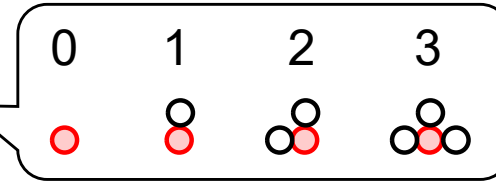
# トピック2-4: Process-Structureとの連結によるプロセス・材料設計

フィラー粒子分散構造の「配位数平均値記述子」によって連結する例を説明

## ■ 配位数平均値記述子



サンプル中の  
各粒子の配位数  
を評価

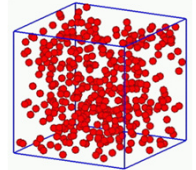


記述子

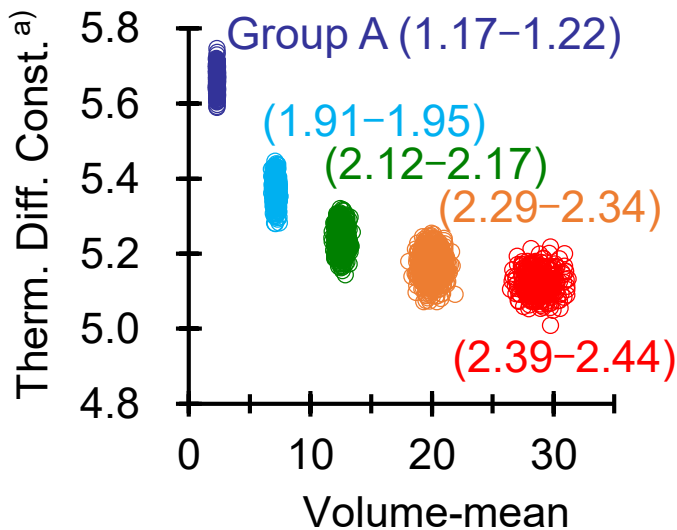
## ■ 熱拡散率 対 凝集塊体積平均値プロットを再確認 (スライド左下)

- 各グループの配位数平均値の範囲を追記 ⇒ 高熱拡散率の Group Aは1.17-1.22

## ■ 拡張KAPSELによる「Process (+Material)-Structure」のシミュレーションを確認



- 計算された粒子分散構造を配位数平均値に換算し、下の表に纏めた



		混練機のスクリー回転速度 (プロセス) <sup>b)</sup>			
		遅い	やや遅い	やや速い	速い
樹脂と フィラー 表面有機 化剤との 親和性 (材料) <sup>b)</sup>	低い	2.9	4.1	4.0	3.8
	やや低い	1.6	1.2	1.1	1.0
	やや高い	1.2	1.0	1.1	1.0
	高い	0.9	1.0	1.0	0.9

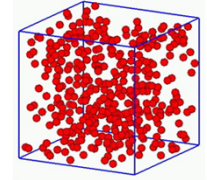
熱拡散率が高い Group A の材料作製の設計指針:  
プロセス・材料の条件を表の紺色のものにする

(a) 樹脂を1、フィラーを50とした相対値. (b) ここでは速い/遅い、高い/低いと表記したが、実際は数値データとして取り扱っている

# 今後の展開

## ■ シミュレータ2件の展開

- 拡張KAPSEL: 現行版は、プロジェクトで開発された拡張COGNACシミュレータ、SOBAシミュレータと共に拡張OCTAに同梱して公開中
- 拡張OCTA: 2022/03までに最終版を公開し、世界中の研究者に展開予定  
無償のユーザ登録により誰でも利用可能



(1)

## ■ 機能性高分子 Data Platform (DPF) への展開 ⇒ 2件のデータセットを提供

- (1) 拡張KAPSELによる「Process - Structure」の計算値データ
- (2) 拡張OCTA/MUFFINによる「Structure - Property」の計算値データ

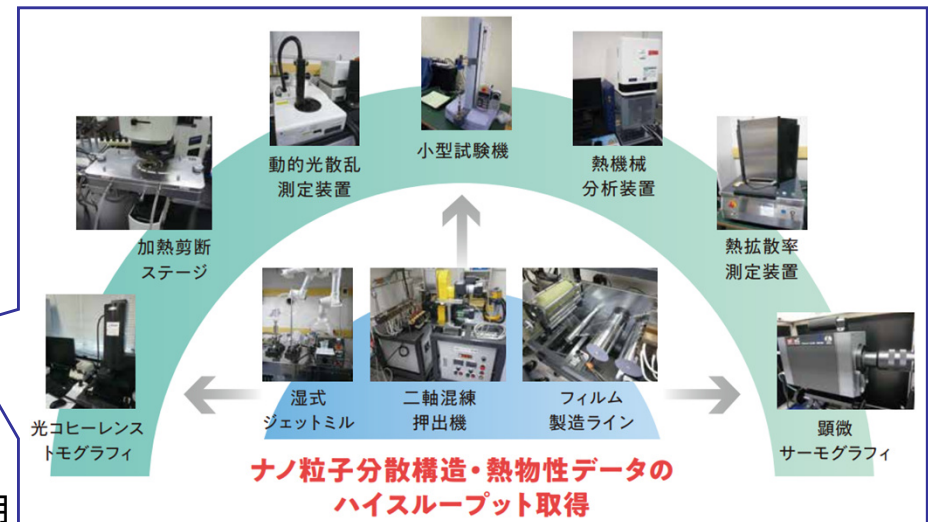


(2)

## ■ 樹脂／無機フィラー複合材料のサンプル作製・評価に用いた実験装置

- Materials Design Platform (MDPF) に展開
- 「ナノ粒子分散ポリマー」用装置群の一部に

装置の図は「データ駆動型材料設計技術  
利用推進コンソーシアム」パンフレットから引用



## ■ 「Process - Structure - Property」に注目した材料開発の経験・ノウハウ

- 当社における放熱材以外も含めた「樹脂／無機フィラー複合材料」の新製品開発に展開

以上