

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

概要説明資料

先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)
国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (AIST)

プロジェクトの狙いとアウトプット目標

<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

プロジェクトの特徴と期待効果

特徴：機能性材料開発への計算科学/AIの本格活用

<実施内容>

- ・有機・高分子材料の構造、物性シミュレータの開発
- ・精密計算およびマルチスケール計算による
有機系機能性材料の構造・物性データの推算
- ・AI等を活用した有機系機能性材料の設計
- ・高速プロセス技術、先端計測技術との連携



<期待効果>

- ・機能性材料の開発を飛躍的にスピードアップできる
基盤技術(手法)の獲得
- ・国内素材メーカーの国際競争力の大幅な強化

超超PJのコンセプト: 計算・プロセス・計測の連携



マルチスケール計算
シミュレータ技術



スーパー
コンピューター

計算機支援
ナノ構造設計
基盤技術

機能性材料開発



連続押出発泡

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

基盤技術の活用による機能性材料の開発

機能性材料

本PJの
ターゲット
材料群

ナノカーボン
材料

半導体
材料

高機能
誘電材料

高性能
高分子材料

機能性化成品
(超高性能触媒)

要請される
機能

電導性

スイッチング特性

損失・耐圧

強度・熱特性

効率・選択性

先端計測

⑩表面・界面構造計測
ナノ領域多物性評価

⑬ナノカーボン評価

⑪マルチスケール
3次元構造解析

⑫フロー型XAFS
DNP-NMR

プロセス

⑨ CNT紡糸
グラフェン合成
ナノ分散プロセス

⑥ヘテロ接合
プロセス

⑦ブレンド・発泡
プロセス

⑧フロープロセス

フィード
バック

必要な
基盤技術

計算科学

マルチスケールシミュレーション

①キャリア輸送計算

②外場応答
計算

③機能性高分子
プロセス計算

④化学反応・
流体計算

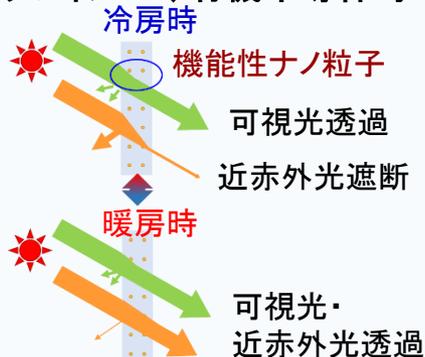
⑤深層学習・機械学習(AI)、離散幾何解析

第一原理計算・分子動力学計算

超超PJ成果で開発加速が想定される製品群

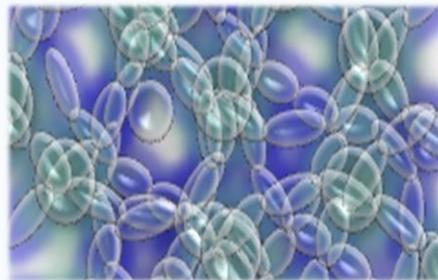
半導体材料

高透明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

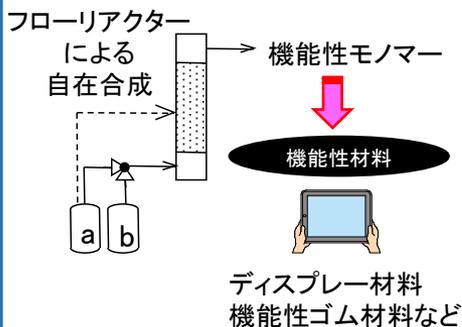
高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

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

超超PJの開発テーマ：高速開発に向けた連携

原子

反応・
重合

低分子/
高分子

高次
構造

高分子反応/
表面修飾

複合材料(有機/
有機・無機)

成形加工
(積層/配向)

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

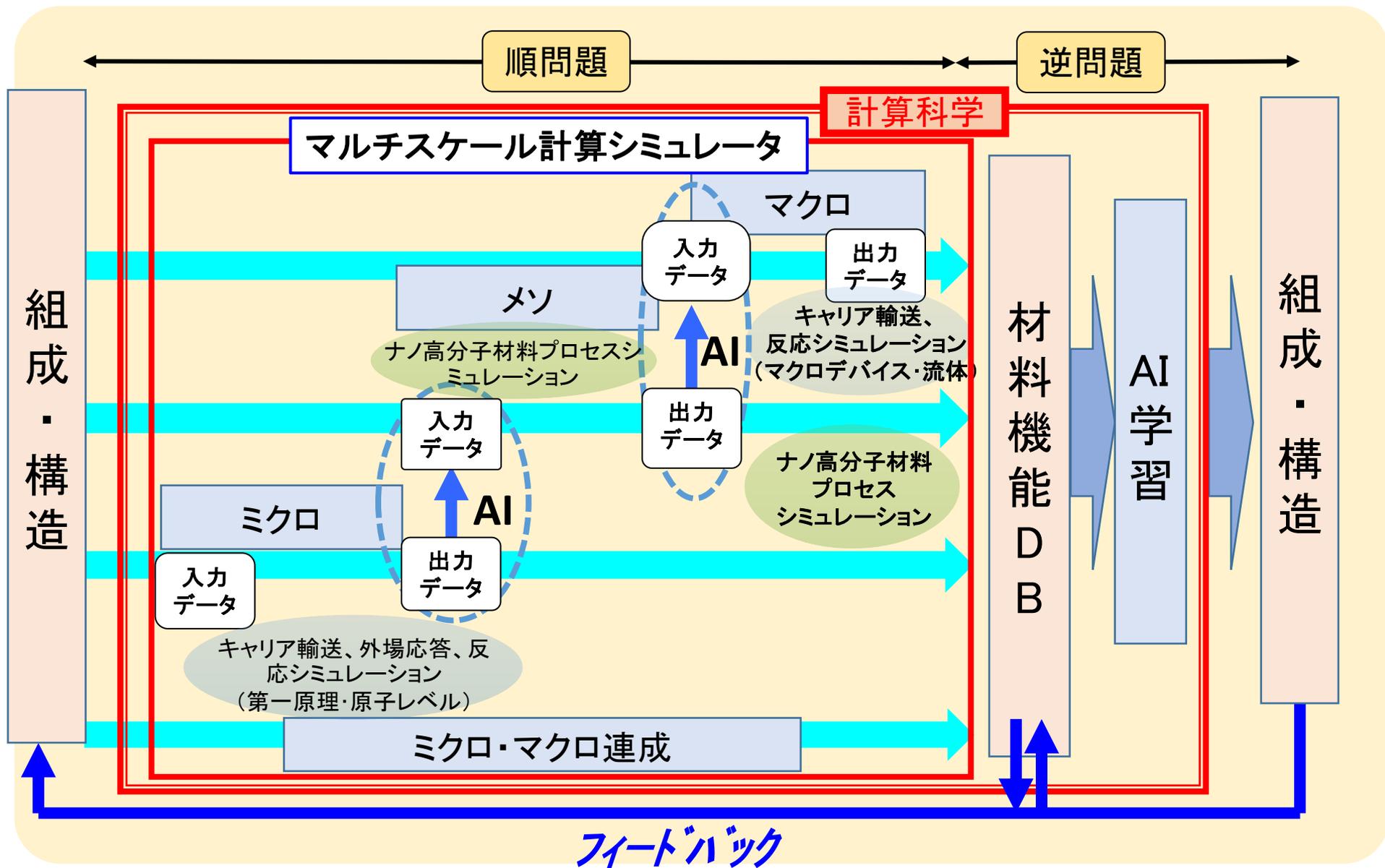
プロセス

- 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

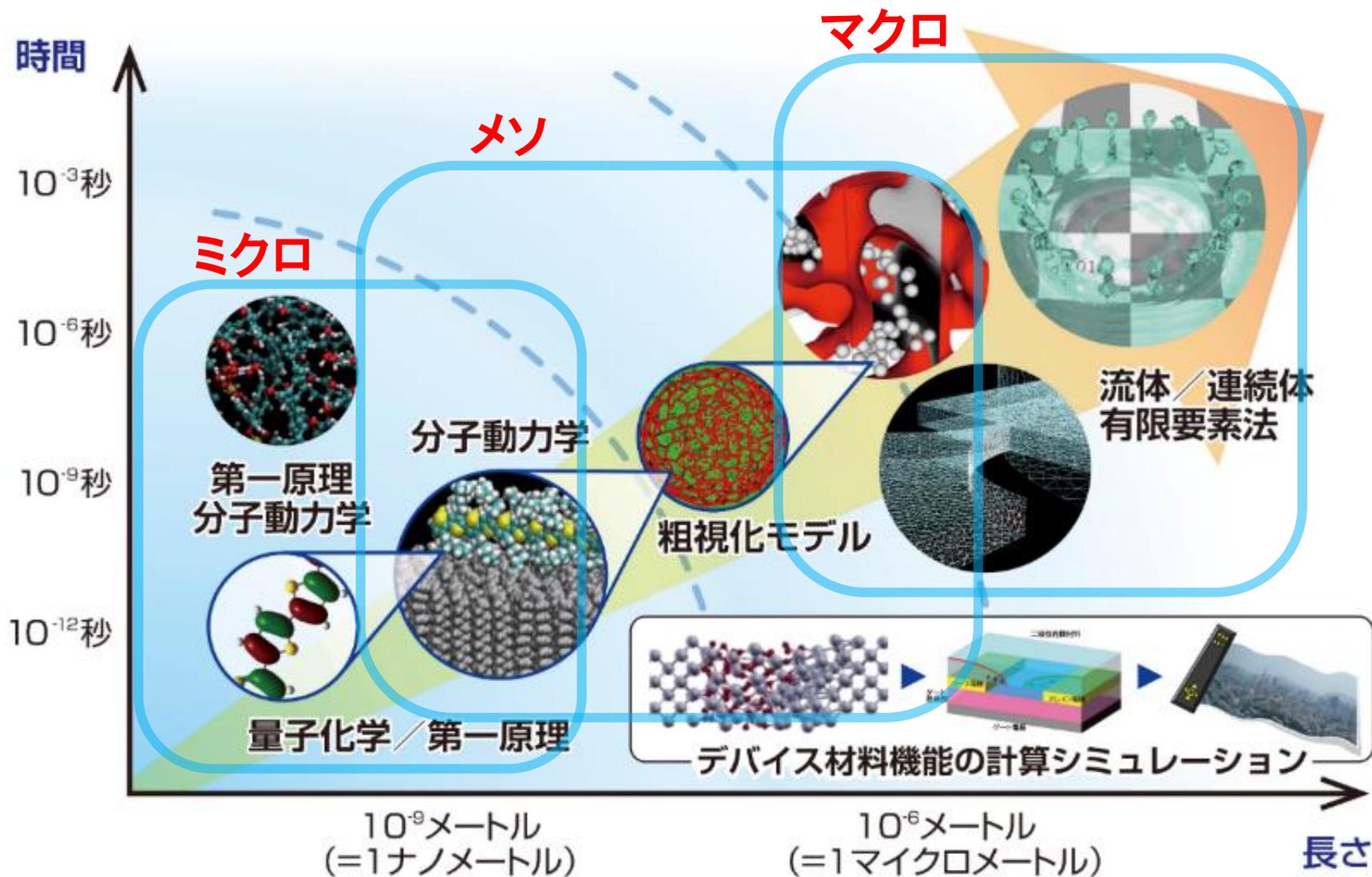
先端計測

- 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

計算科学-1: 計算科学と機能性材料の開発

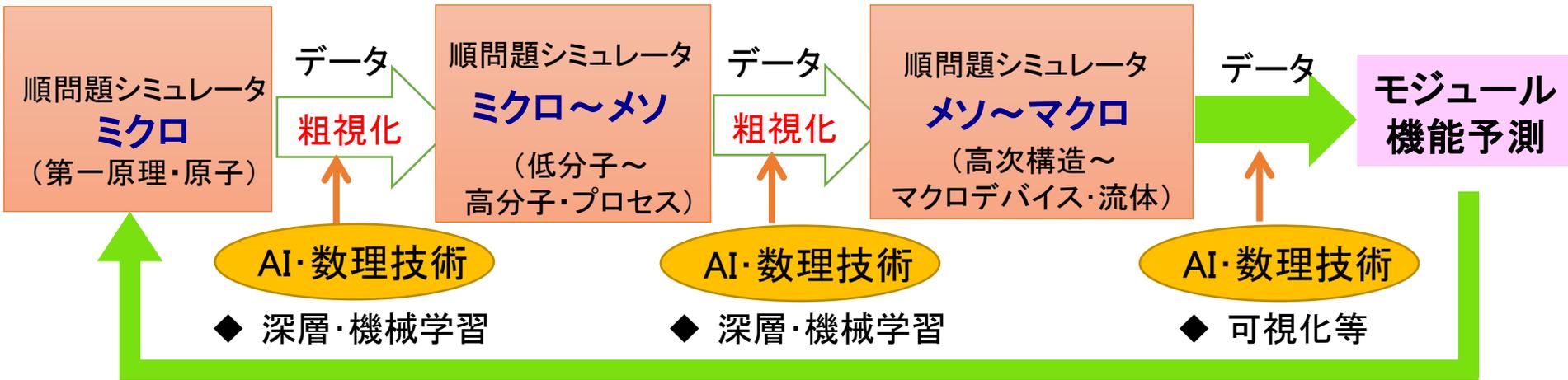


マルチスケール計算による材料設計

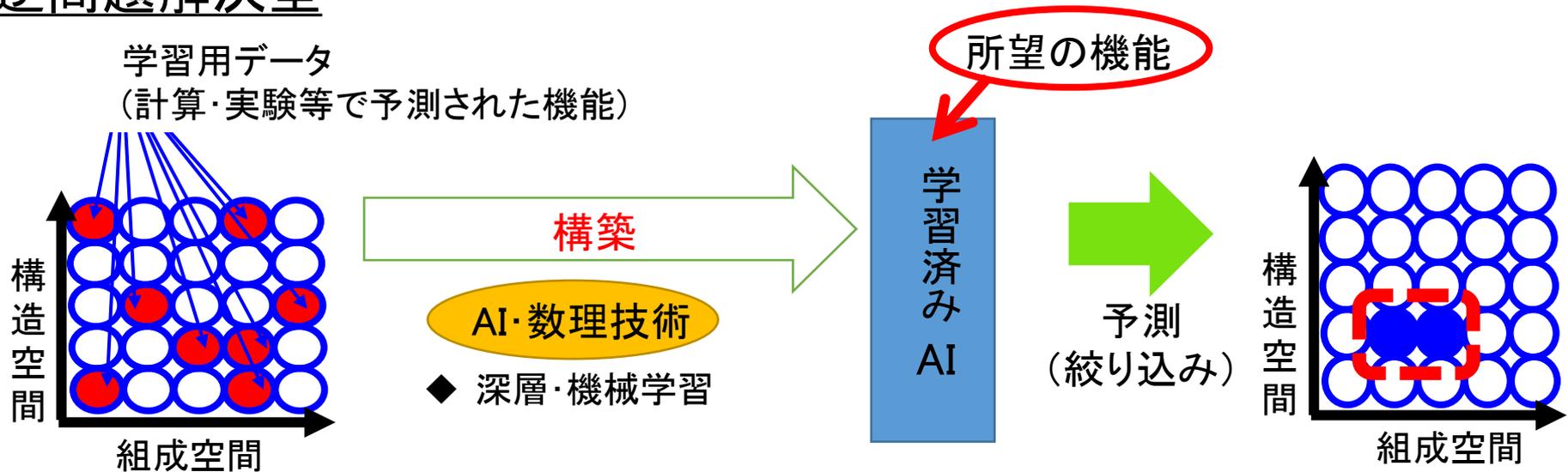


AI・数理技術の適用

順問題加速型



逆問題解決型



超超PJにおいて開発中のシミュレータ

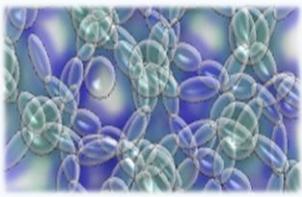
多様な材料・機能に対応したシミュレータ群

開発シミュレータ

- ・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)
- ・フィ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

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

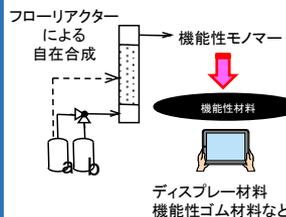
高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

自動車系部品など



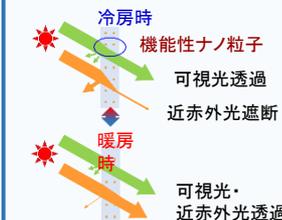
機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等



半導体材料

高透明なサーモクロミックフィルム、有機半導体等

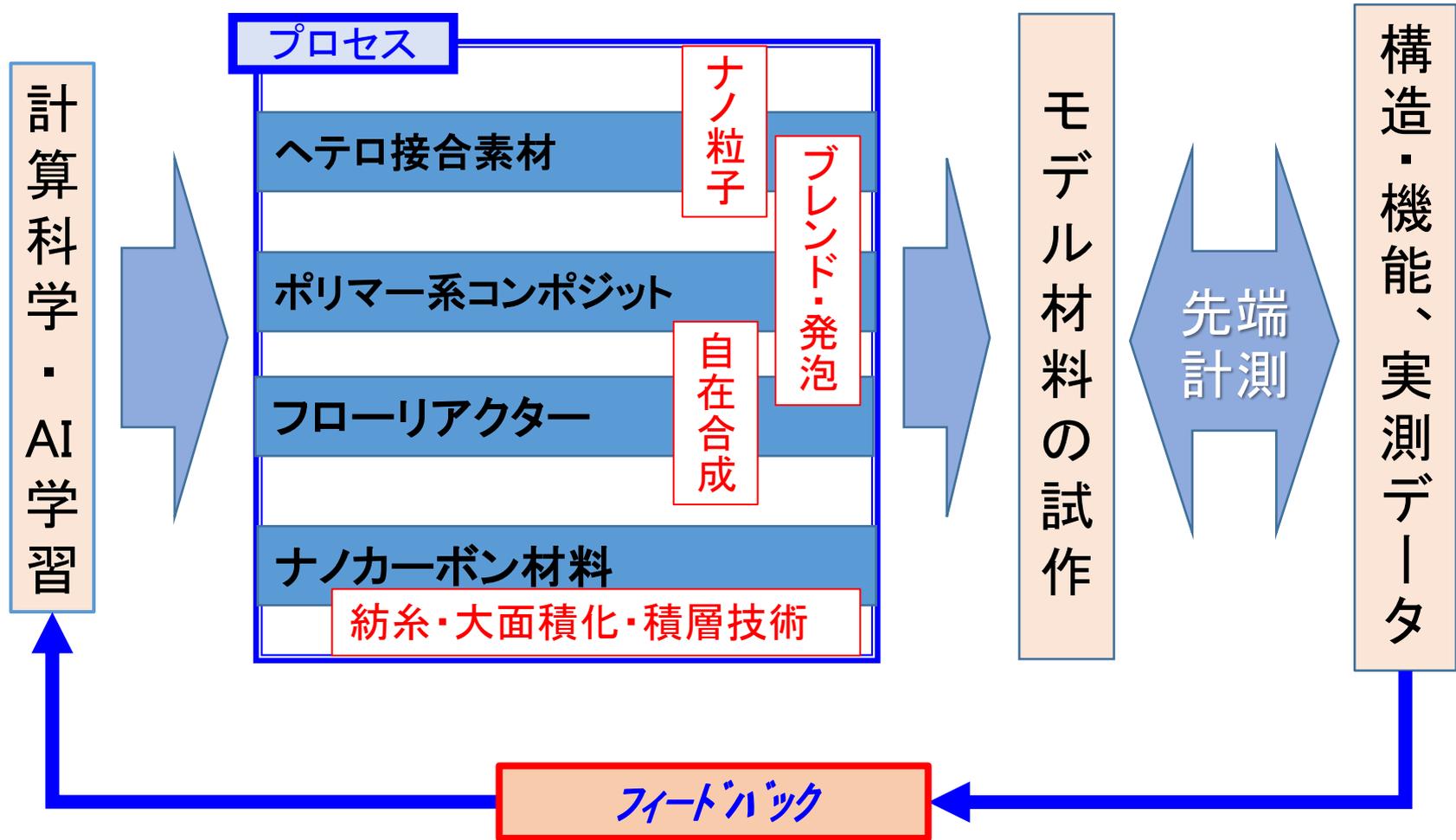


ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

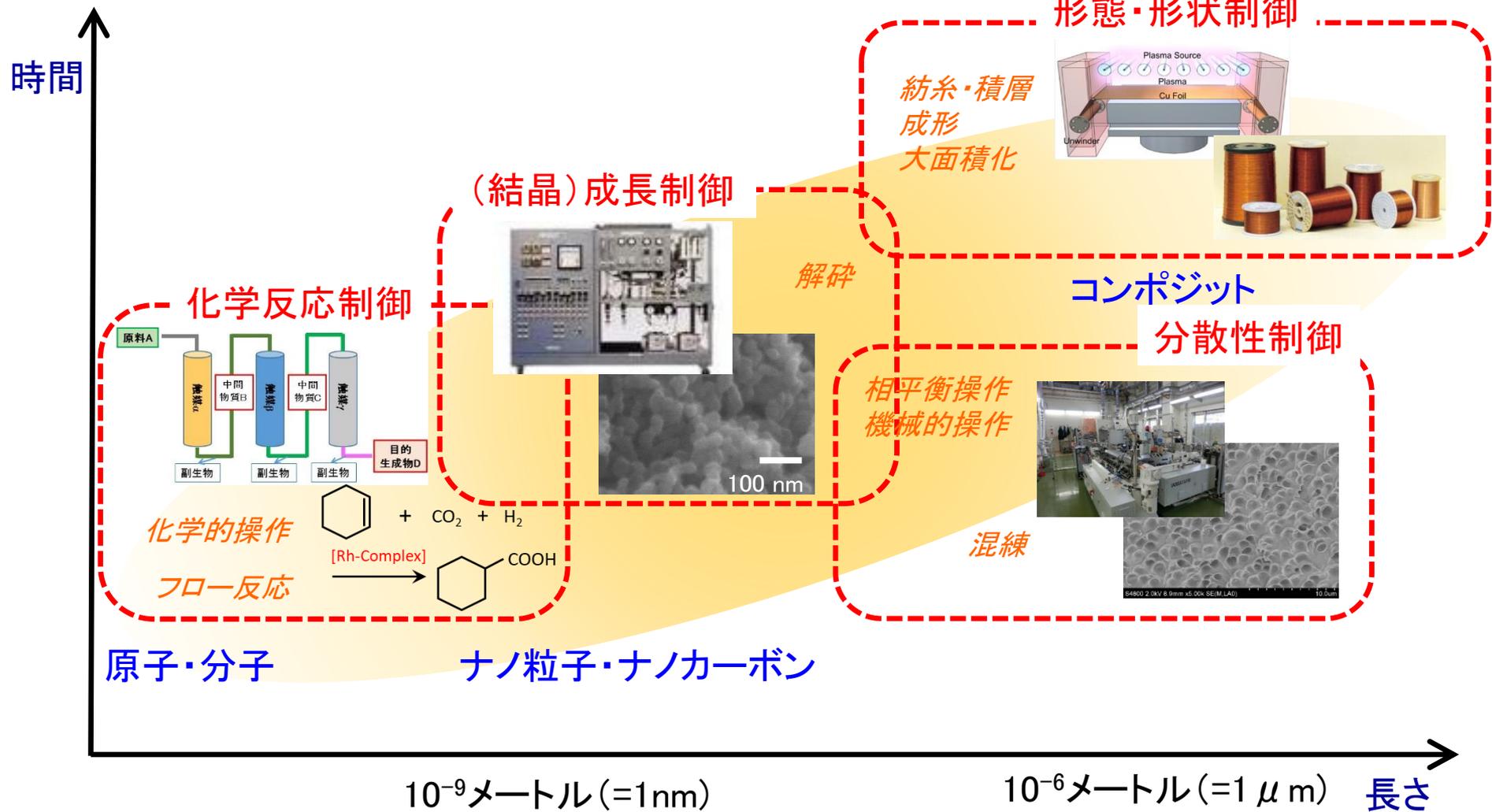
軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等



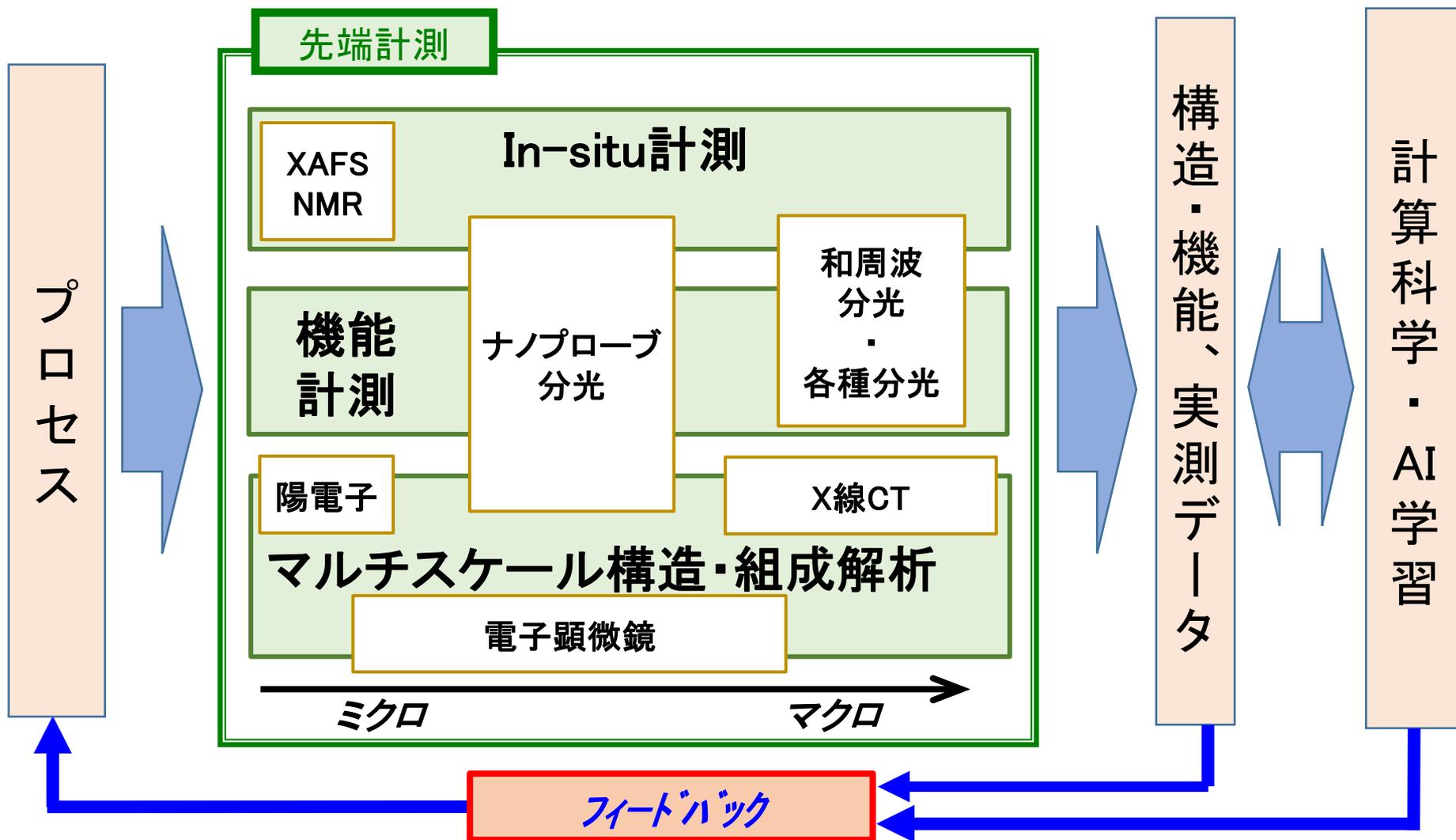
プロセス-1: プロセス技術と機能性材料の開発



プロセス-2: 高速・革新プロセス技術開発



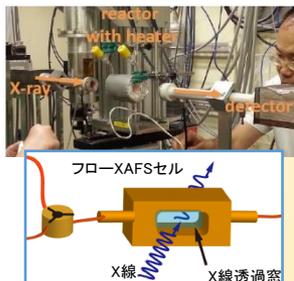
先端計測－1：先端計測技術と機能性材料の開発



先端計測-2: 先端ナノ計測評価技術

機能計測

フロー型XAFS

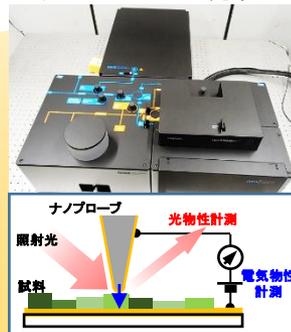


化学反応
In-situ計測

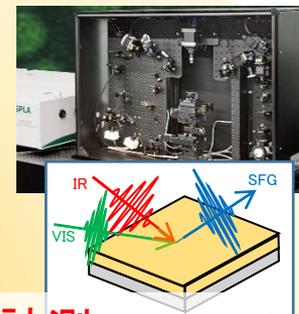
DNP-NMR



ナノプローブ分光



和周波分光

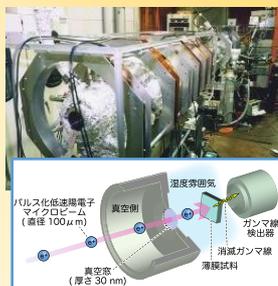


構造・機能相関計測

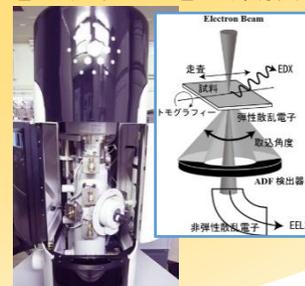
マルチスケール構造・組成解析

構造計測

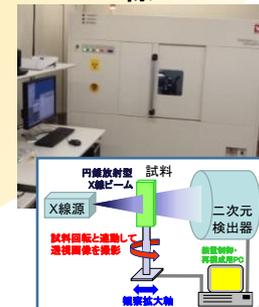
陽電子消滅法



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^{-9} メートル (=1nm)

10^{-6} メートル (=1 μ m) 長さ



材料構造設計と計算科学・プロセス・計測の連携

マルチスケール3次元構造解析

時間
エネルギー

形態・形状制御

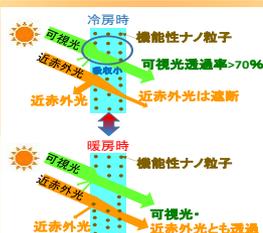
紡糸・積層・成形技術



In-situ計測

高次・界面構造制御

ナノ粒子
技術
表面改質



複合材料・コンポジット

相平衡操作・機械的操作

分散性制御



化学反応制御

化学的操作・フロー反応



低分子・高分子
ナノ粒子・ナノカーボン

解砕・混練

原子・反応

量子化学・第一原理・分子動力学

粗視化モデル

流体/連続体・有限要素法

ミクロ

メソ

マクロ

<物性制御>

伝熱・導電・熱応答・弾性率・誘電率 etc.

<機能制御>

断熱・遮光・高強度・高耐熱・高耐電圧 etc.

ナノ領域多物性評価(機能評価)

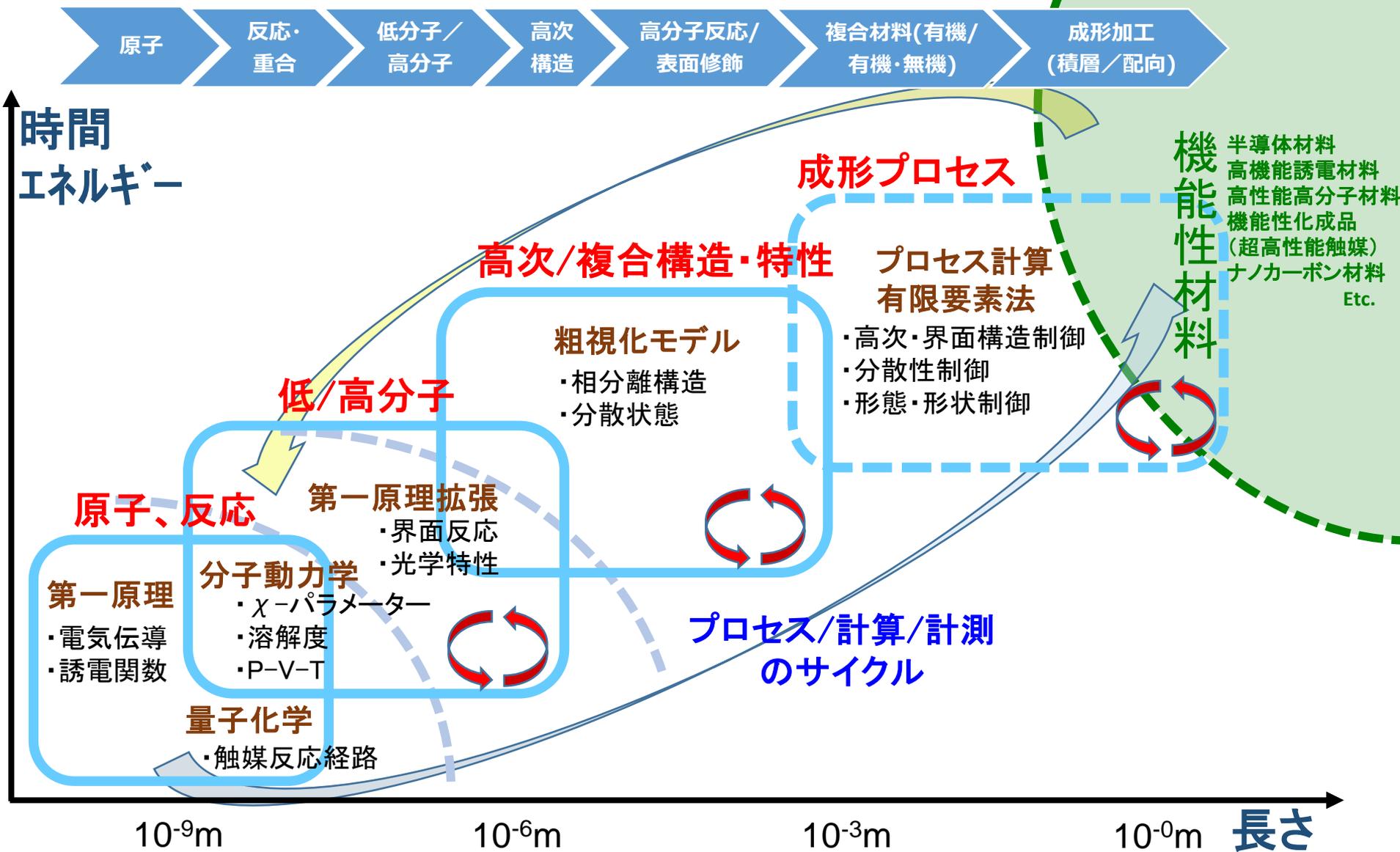
長さ

10^{-9} メートル(=1nm)

10^{-6} メートル(=1 μ m)

10^{-3} メートル(=1mm)

三位一体による機能性材料高速開発の将来像



実施体制

PL: 村山宣光
(産総研 理事、材料・化学領域長)

METI

NEDO

集中研@産総研

大学等
12機関

再委託

産総研
(AIST)

共同
研究

先端素材
高速開発
技術研究組合
(ADMAT)

企業
18社

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 : 腰塚國博(コニカミノルタ(株) 上級技術顧問)
- 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)

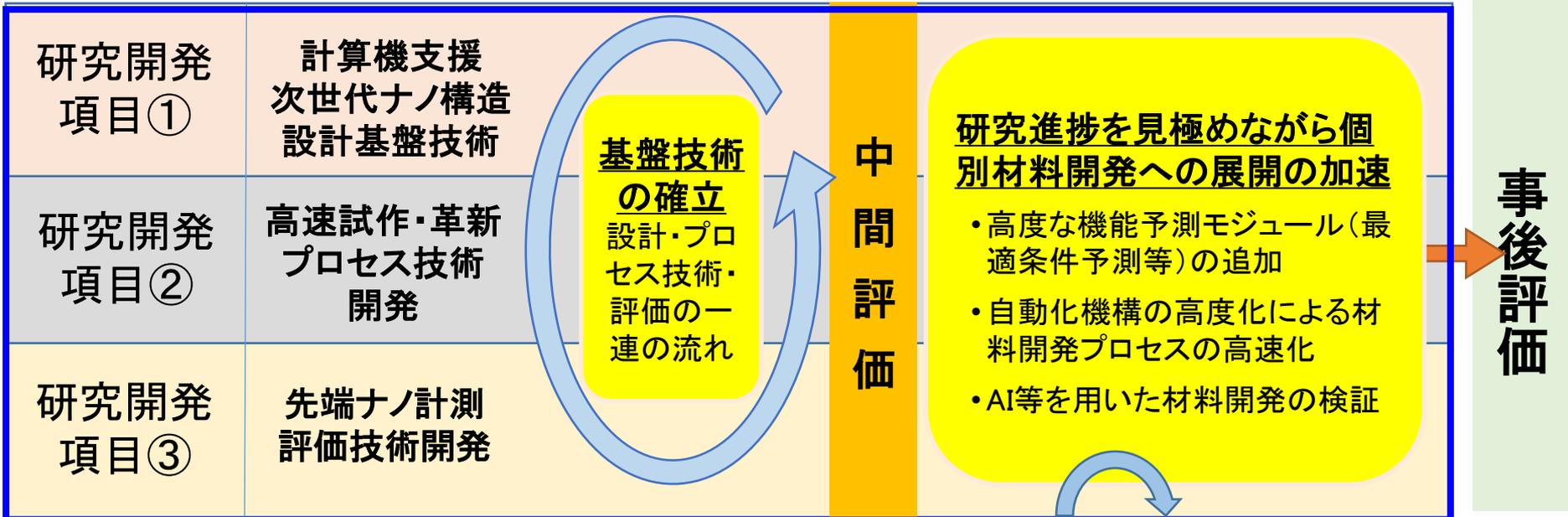


個別技術の開発

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>

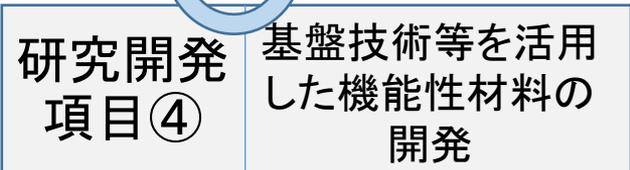


**基盤技術
の確立**
設計・プロ
セス技術・
評価の一
連の流れ

**研究進捗を見極めながら個
別材料開発への展開の加速**

- 高度な機能予測モジュール(最適条件予測等)の追加
- 自動化機構の高度化による材料開発プロセスの高速化
- AI等を用いた材料開発の検証

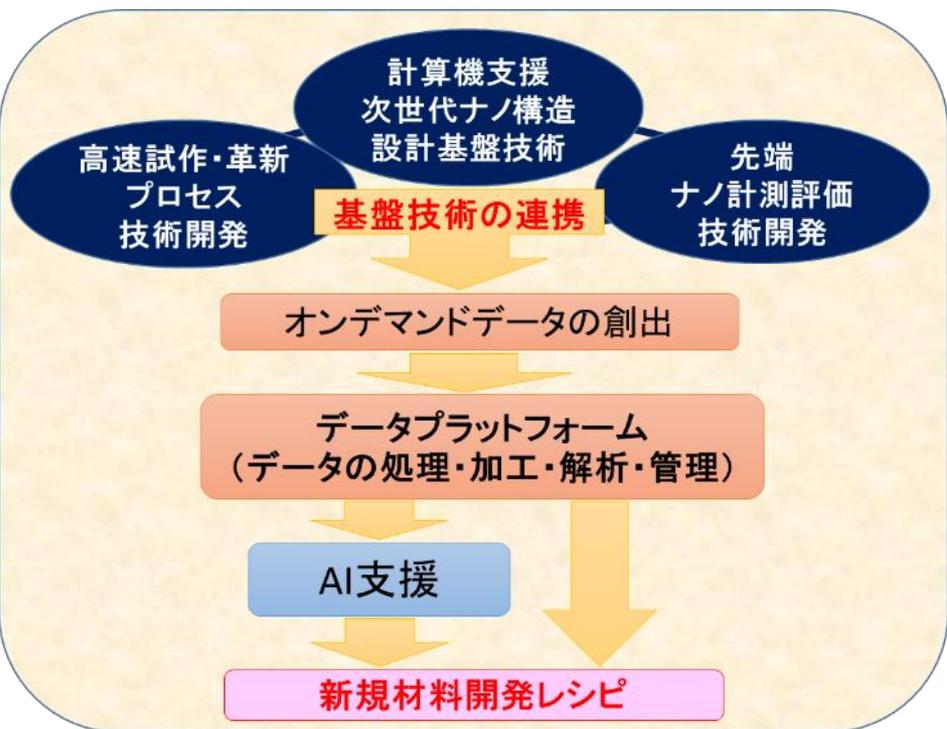
<助成事業>



NEDO基本計画

成果の実用化に向けての取組及び見通し

材料設計プラットフォーム



拠点の
構成要素



産総研を拠点と位置付けて、個々の要素を一括して産業界へ提供

- ・コンソーシアム
- ・共同研究
- ・コンサルティング
- ・共用設備 等