

産総研のデータ駆動型 材料研究開発



産業技術総合研究所 材料·化学領域 極限機能材料研究部門

産業技術総合研究所 全国の研究拠点



地域イノベーションに貢献するために全国に地域拠点を配置 地域の産業構造やニーズ・シーズに沿った研究開発を全産総研のネットワークを活用して実施

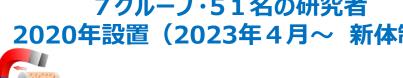
地域拠点	看板テーマ	
北海道センター(札幌)	バイオものづくり	10 000
東北センター(仙台)	資源循環技術	約10,000 名
中部センター(名古屋)	機能部材	が研究開発活動を実施
関西センター(池田)	電池技術、バイオ医療、生活素材	
中国センター(東広島)	材料診断技術	北海道センター
四国センター(高松)	ヘルスケア	
九州センター(鳥栖)	スマート製造センシング	
臨海副都心センター(お台場)	デジタル・AI、ゼロエミ、バイオ	
福島再生可能エネルギー研究所(郡山)	再生可能エネルギー	東北センター
柏センター(柏)	AI・人間工学	_=======
	=	福島再生可能エネルギー研究所
中国センタ	関西センター	
=		つくばセンター
		柏センター
	センター・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	臨海副都心センター
九州センター		



極限機能材料研究部門

Innovative Functional Materials

7グループ・51名の研究者 2020年設置(2023年4月~新体制)







光熱制御材料(材料表界面技術融合)

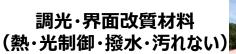
蓄電材料

固体イオニクス材料

ナノポーラス材料

次世代磁石材料

髙機能磁性材料







高感度ガスセンサ材料



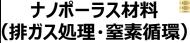


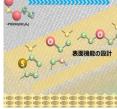
次世代磁石・モーター材料

新規磁性機能材料













燃料電池・電解セル材料 (高効率・高性能・高耐久性



次世代蓄電池~全固体蓄電池材料 (容量・高速充放電・安全)







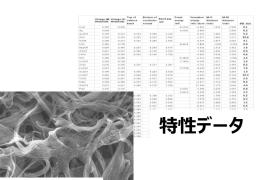


データ駆動型マテリアル研究開発とは?

情報科学(インフォマティクス)を活用し、材料開発を効率化する取組

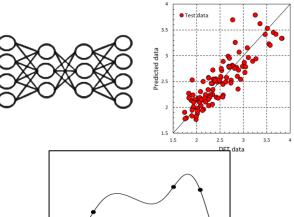
材料データ X AI・データ科学 =

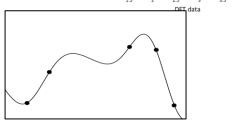
材料開発の スマート化



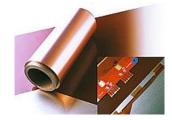
画像データ











- 新規物質を発見
- 変換効率を10倍に向上
- 開発期間を1/20に短縮

etc...

我が国の取組



マテリアル革新力強化戦略(内閣府統合イノベーション会議)

2020年度

統合イノベーション戦略推進会議において決定された、物質、材料、デバイスといった「マテリアル」の産業・イノベーション上の重要性の拡大と、**日本のマテリアル革新力の強化に向けた戦略**

マテリアル革新力強化戦略(概念図)

「マテリアル革新力」(マテリアル・イノベーションを創出する力)を強化するための戦略を、 政府の重要戦略の一つとして、産学官関係者の共通のビジョンの下で策定

戦略策定の意義

ESG/SDGs意識の高まり

- ・マテリアルはカーボンニュートラルやサーキュラー エコノミー(循環経済)に直結
 - ⇒ マテリアルの位置付けの高まり

社会実装が遅い

- ・社会を変える力を本来持つが、ドラスティックな 変化としては見えにくい
 - ⇒ 早く世に出し、走りながら変えていく姿勢

国際状況

- ・技術覇権争いの激化、サプライチェーンの脆弱性、 EU環境政策等
 - ⇒ 希少資源の確保や循環経済の重要性

我が国の強み(高い技術力、優れた人材、良質なデータ、高度な研究施設・設備、産学官の連携関係等)に立脚した差別化

目指すべき姿

マテリアル革新力を高め、経済発展と社会課題解決が両立した、持続可能性な社会への転換に世界の先頭に立って取り組み、世界に貢献

- ・Society5.0の実現
- ・世界一低環境負荷な社会システムの実現
- ・世界最高レベルの研究環境の確立と迅速な社会実装による 国際競争力強化

アクションプラン

有識者会議等において、着実にフォローアップを実施するとともに、 政府と産学の有識者による一層の議論と連携により、不断に改善

- 革新的マテリアルの開発と迅速な社会実装
- ・バリューチェーンの上・下流/業種横断的/産官学からなる、社会課題解決型プラットフォームの推進(ロールモデル:CLOMA)
- ・スタートアップ等が保有する未活用・埋没技術の活用促進
- ・重要なマテリアル技術・実装領域での戦略的研究開発の推進等
- マテリアル・データと製造技術を活用したデータ駆動型研究開発の促進
- ・良質なマテリアルの実データ、ノウハウ、未利用データの収集・蓄積、利活用促進(マテリアルDXプラットフォームの整備)
- ・製造技術とデータサイエンスの融合、革新的製造プロセス技術の開発(プロセス・イノベーション・プラットフォームの構築)
- 〇 国際競争力の持続的強化
- ・資源制約の克服に向け、希少金属等の戦略的なサプライチェーン全体の強靭化(供給源の多角化・技術開発・設備導入支援等)
- ・サーキュラーエコノミーの実現に向けた制度整備と技術開発・実装(プラ資源:2035年までに使用済プラ100%リユース・リサイクル等)
- ・産学官協調での人材育成(マテリアル分野の魅力向上、優秀な人材の確保、出口人材・データ人材の育成等)
- ・国際協力の戦略的展開(国際ネットワークの戦略的構築、戦略的な標準化の推進等)

<u>戦略において重視される</u> 4つの視点

- ① マテリアルズ・インフォマ ティクス
- ② 製造プロセス技術
- ③ サーキュラーエコノミー (資源循環)
- ④ 資源(金属資源等)

内閣府 マテリアル革新力 強化戦略資料より抜粋

データ駆動型マテリアル研究開発プラットフォーム



材料設計プラットフォーム (MDPF)によるデータ駆動型研究開発

NEDO 超先端材料超高速開発基盤PJ(2016-2022年)

プロジェクトにおける 実施内容

プロジェクト 終了

基盤技術 機能性材料開発

計算機支援

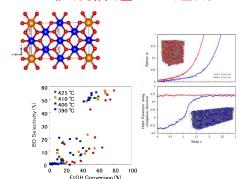
ナノ構造設計

高速・革新 プロセス 技術開発

先端 ナノ計測評価 技術開発



個別課題への適用



·技術

- ∙設備
- -知財
- データ の集約

材料設計プラットフォーム (MDPF)の提供



オンデマンドデータの創出

プロジェクト データ

データプラットフォーム

AI支援材料設計

ニーズ

産総研 材料·化学領域 ソリューション

3.

日本産業における 材料開発の加速

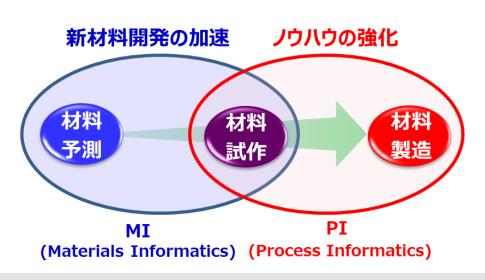


プロセス・インフォマティクスの推進



プロセス・インフォマティクスの重要性

- 従来サイエンスとして扱われていなかったプロセス過程についてデータを取得・解析し、製品 化までの試行錯誤や摺り合わせを簡略化するための取組としてプロセス・インフォマティクスは 極めて重要である。
- 産総研は、MIを「材料予測から試作に至る新材料開発をデータ活用により加速させる 技術」と定義した上で、PIは「材料試作から工業的に利用可能な製造方法に至る開発を データ活用により加速させ、各社が有するノウハウを強化する技術」と定義した。



MIとPIの両輪で材料設計から製品化までの全体を支援することがマテリアル革新力強化に繋がる

プロセス・インフォマティクスの推進

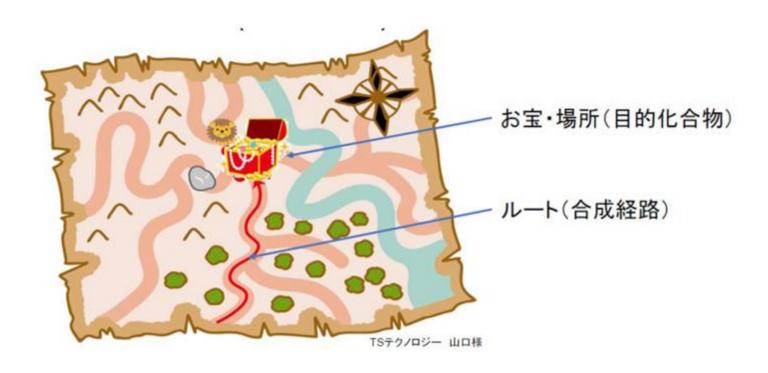


マテリアルズ・インフォマティクス(MI)との違い

	マテリアルズ・ インフォマティクス	プロセス・ インフォマティクス
ターゲット	材料探索	合成・製造プロセス
取り扱うデータ	原子や分子の特性データ (分子量、分子構造、官能基、電子 状態、溶解度など)	プロセスデータ (流量、圧力、トルク、昇温速度、温 度分布、濃度、スペクトルなど)
取組事例 (各国での大型PJ)	■ 日本:超先端材料超高速開発基盤 技術プロジェクト(AIST)、情報統合 型物質・材料イニシアティブ(NIMS) ■ 米国: Materials Genome Initiative ■ 欧州:NOMAD、MARVEL ■ 中国: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 ■ 韓国: Creative Materials Discovery Project、MIDAS	なし (大学等で個別の研究開発が報告されている程度)

プロセスインフォマティックスの概念





- 1. 地図上でお宝を探す⇒ マテリアルインフォマティクス(MI)
- 2. 地図上でお宝へのルートを決める⇒ プロセスインフォマティクス(PI)
- 3. 実際にお宝を取りに行ってみる⇒ 先端計測等による実証

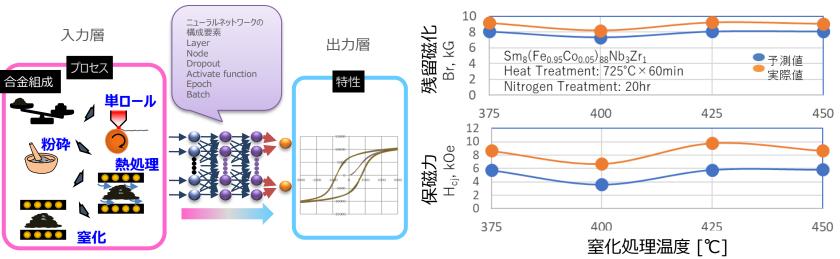
PI(プロセスインフォマティックス) の先行研究実例



- 従来材より高温域での特性が期待できるサマリウムー鉄 窒素系の磁性材料について、重要な特性値である残留磁化と保磁力を、合成条件を基にしてニューラルネットワークを用いて予測。
- 予測値と実測値の相関性が示された。本手法により、高特性を持つ材料の開発の迅速化が可能であることを実証。

ニューラルネットワークによるプロセス-磁気特性予測モデルの構築

Sm-Fe-N系磁石材料を対象として、 合金組成、プロセス、および、特性データを取得 ニューラルネットワークにより、予測値を出力し、 実測値の相関を評価



プロセス条件のデータ取得

単ロール:ロール回転速度

粉砕:粉末サイズ 熱処理:温度、時間 窒化処理:温度、時間 残留磁化、保磁力測定

高精度で特性を予測可能

H. Hosokawa et al, J. Magn. Magn. Mater., 526(2021) 167831.

プロセス-磁気特性予測モデルの構築に成功 →高特性材料開発の迅速化が可能



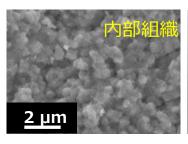
PI(プロセスインフォマティックス) の先行研究実例



- 室温近傍での革新セラミックス製造プロセスのパラメーターを高速に最適化
- 原料合成から、粉砕、成形、化学反応における各種データを収集
- 機械学習の活用により、重要パラメーターの抽出と焼結後の密度予測を可能に

化学焼結(AISTオリジナル) 酸塩基反応を利用した緻密セラミックス作製技術



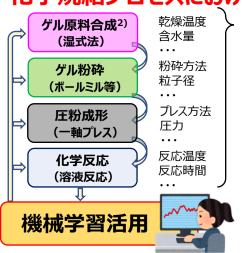


と密度の相関を機械学習

ランダムフォレスト回帰分析



化学焼結プロセスにおける密度向上を機械学習 (ML)で加速 製造時のパラメーター



反応に伴って 密度が向上 1.5 150

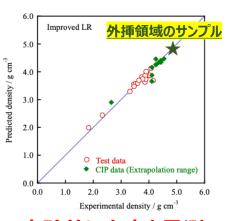
試作サンプル140個

重要な因子を精査 →プロセスに反映 0.06 →密度を予測 0.05 0.04 0.03 0.02 0.01

反応時間と密度の関係

Reaction time / h

未知試料の密度予測



パラメーターを最適化し再検討

プロセス・インフォマティクス拠点整備の推進

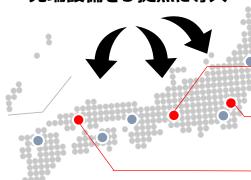


マテリアル・プロセスイノベーション(MPI)プラットフォーム事業 2021年度~

企業の製造プロセスの高度化を目的とし、3カ所の産総研地域センター(つくば、中部、中国)に最先端のプロセス装置群や分析装置群を導入、原料から製品に至るまでの製造プロセスデータを一括して収集し、その解析やデータ駆動型の製造プロセス改善ができる拠点の整備を進めている。



製造プロセスや評価に関わる 先端設備を3拠点に導入





MPIプラットフォーム

セラミックス、合金拠点 中部センター (愛知県名古屋)

先進触媒拠点 つくばセンター (茨城県つくば市)

有機・バイオ材料拠点 中国センター (広島県東広島市)

各種プロセスに対応した一気通貫での材料開発と部品等の試作機能と材料評価 プロセスデータを一気通貫・ハイスループットで収集できるプロセス・インフォマティクス(PI)プラットフォーム環境の整備







機械特性

シミュレーション



②粉砕・混練・分散







⑤加工・試作・評価

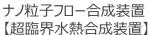
マテリアル・プロセスイノベーション(MPI) プラットフォーム@中部 セラミックス・合金拠点

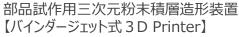
プロセス情報と物性を

シームレスに結び付ける

物性データ取得

AFM-ラマン分光装置【LabRAM HR





大幅シート作製装置 【ダイコーター、シート成形】







異種材料複合化装置 【プロセスガス対応PLD装置】

マルチスケール気相成長装置 【原子層堆積装置:CVD】

次世代電子材料向け絶縁高伝熱セラミックス 基板製造等特殊焼結炉

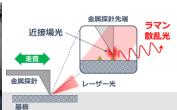




【多目的高温炉ハイマルチ10000 高温仕様 2500℃】

高性能集束イオンビーム走査電子顕微鏡(FIB-SEM)装置 【3D構造解析·加工·観察+EDA·EBSD·TOF-SIMS】









非平衡 MW加熱·焼成炉



MPIプラットホーム、それは企業にとっての最先端サテライトラボともに無む。つぎを創る





課題を抱える 中小・ベンチャー企業等





オール産総研や産技連等を生かした全国の窓口

共同研究、技術コン サルティング制度等で の拠点利用



先端設備群と産総研 の研究者による研究 開発支援

東北センター

北海道センター

MPI プラットフォーム

先進触媒拠点

セラミックス・合金拠点

有機・バイオ材料拠点

中国センター

つくばセンター

中部センター

四国センター

九州センター

全国展開

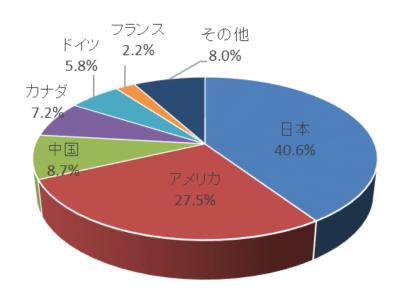
最先端サテライトラボ

14

粉末原料を先端部品化するファインセラミックス産業



- ・日本のファインセラミックス産業は世界のシェアの約40%を確保。
- ・ファインセラミックス部品はエレクトロニクスや自動車、防衛、医療、航空宇宙、通信など の様々な分野で使用されている。
- ・今後、ポスト5G・6G技術分野やエネルギー、IoT、医療・ヘルスケア分野などにおいても市場拡大が予想される状況。



持続可能で安全・安心な超スマート社会 スマート農業 スマートX スマート工場 スマート ヘルスケア 5G / 6G エッジ モビリティ コンピューティング パワエレデバイス RFフロントエンドデバイス エッジデータセンター ウェアラブルデバイス 高温使用デバイス ミリ波対応フィルタ AI搭載IoTデバイス 飲込み型デバイス 高電圧使用デバイス 超多素子アンテナ AIチップ 体内埋込み型デバイス デジタル機器 ⇒ 小型化・誤動作不安解消 セラミック電子部品 ⇒ 超小型化・高信頼性化 ファインセラミックス

ファインセラミックス生産額の国別世界シェア

(出典:一般社団法人日本ファインセラミックス協会資料、

富士経済「2020年 セラミック材料市場の現状と将来展望」)

将来像「セラミック電子部品が支える超スマート社会」のイメージ (出典: NEDO TSC作成(2021年度))

計算科学を活用したファインセラミックス製造の革新的なプロセス開発基盤の構築に着手



―日本のファインセラミックス産業の競争力強化を目指す―

2022年5月27日プレス発表

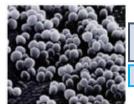
事業名: NEDO 次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発 2022年度~2026年度(予定)

実施予定先)産総研・JFCC・村田製作所・京セラ・太陽誘電・ルリタケ・日本特殊陶業・日本ガイシ・TOTO・AGC ファインセラミックス部品の小型化・高性能化・高信頼性化の実現のためには、従来の「経験と勘」や「製造プロセス間の人的なすり合わせ」に頼ってきたプロセス技術に代わる革新的なプロセス技術が必要。

一企業では困難な、ファインセラミックスの一連の工程を対象とした製造プロセス技術と計算科学の融合・連携により、ファインセラミックスのプロセスインフォマティクスの基盤技術を確立するとともに、企業における実用化を支援する。

*1:プロセスインフォマティクス

材料の形状や化学的な質が時間軸で変化するプロセス設計・制御の為のインフォマティックス技術。サイエンス (物理・化学) に基づき、多工程にわたる製造プロセスの基本設計や、そのスケールアップに活用できる計算科学と実験科学の融合技術。



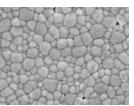
原料粉体製造添加剤

分散·成形

脱脂

焼成

焼結体 製品



製品組織

原料粉体

原料粉体の微細化

粒子充填率向上

欠陥低減

ファインセラミックスの製造プロセス

16

プロセス・シミュレーション技術【時間・空間のマルチスケール設計】



実 モデ ル 実スケ ル

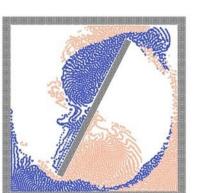
Y

ク

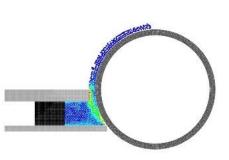
ス

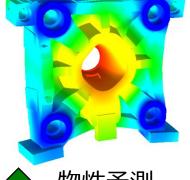
ケ

成形~焼成までのプロセスを統一的に扱えるシミュレーション技術の開発



粒子法ベースの解法(産総研開発の技術)



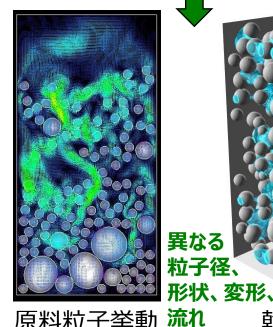


造粒

シート成形

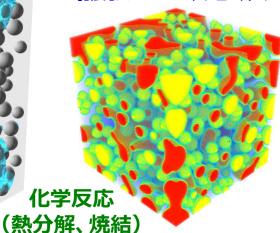
多積層体の焼結

物性予測



最先端技術の開発・導入

(拡張DEM、フェーズフィールド法、MC法など)



原料粒子挙動

乾燥•脱脂

粒成長·緻密化

組織構造

最も一般的な粉末原料を扱うセラミックスプロセス



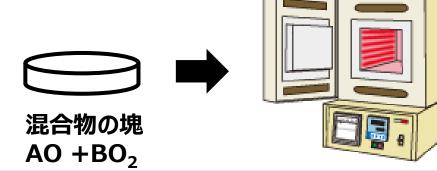
ABO3という組成のセラミックスを合成したい(作業に時間・再現性)

1300 °C, 5h

まぜて、焼く

 $AO + BO_2 \rightarrow ABO_3$





熱処理





生成物 ABO₃

ロボットアームを活用した粉体化学実験手法の開発 (愛知工業大学連携)



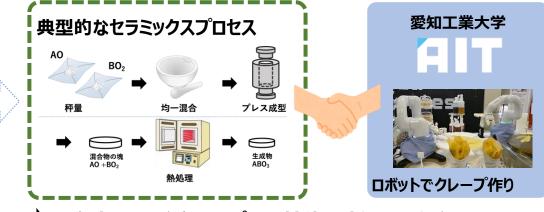
研究開発のDX化とハイスループット化:地域イノベーション

ハイスループット・自律実験

溶液や薄膜プロセスが主流
プロセスを評価を自動化

セラミックス合成プロセスもDX+自律化したいが、、

「粉体」プロセスの自動化は困難(ロボットに不向き)



➡ロボットアーム活用のプロの技術により課題解決へ



進行中のロボットによる粉体実験

現在の進捗状況

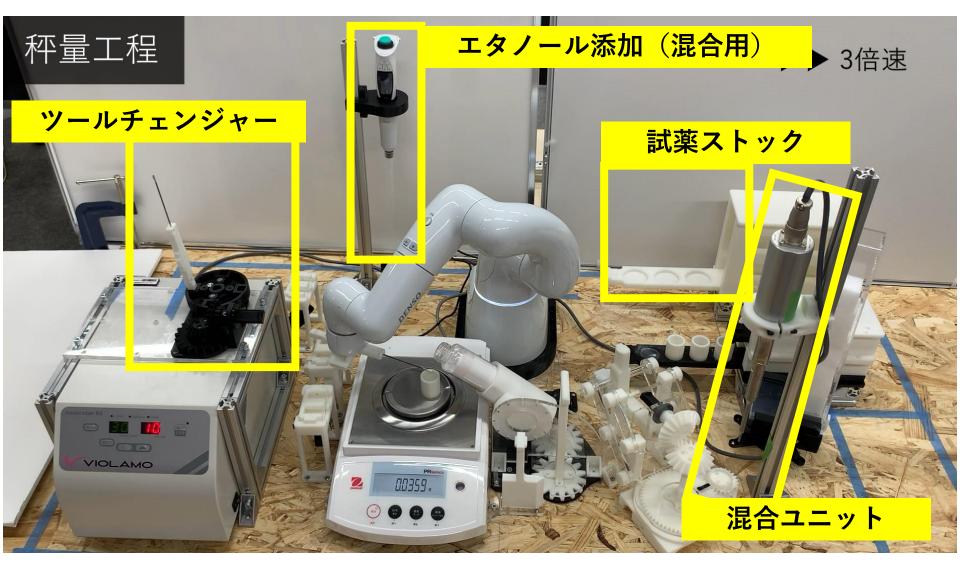
- ・ロボットアームで秤量誤差<1%を目指す
- ・粉体混合の仕組みづくり
- ・プレス→焼成まで展開できるシステムへ

来年度以降は、合成時の各種データを MPI装置(低温度焼結プロセス装置)と連携

自律駆動実験時のあらゆるパラメータを 自動で取得するシステム構築へ



ロボットアームと治具を合わせた粉体混合の自動化



マテリアルDXが拓く未来



DX推進

MI



PI



競争力のある製品に向けたマテリアル研究開発のソリューション提案

例えば、

- 研究開発期間の短縮
- CO₂の排出量を1/3にした製品化
- 顧客ニーズに対応した多品種変量生産

■ スマートファクトリー

(期待される成果と具体例)

■ 生産性の向上

- ① バーチャルファクトリー:離れた工場を仮想的に一つの工場として融合しコスト削減や短納期化
- ② デジタルマニュファクチャリング: ノウハウの見える化により生産性 を向上

■ 研究開発力の向上

- ① 仮想大部屋:デジタル空間で試作品の評価・検証
- ② 顧客が主役のものづくり: 顧客の声をデータベース化して製造現場につなげ、製品向上のヒントとする

● バリューチェーン強化 (期待される成果と具体例)

■ 異業種連携による新たな展開

- ① 素材企業とユーザー企業の協業による課題解決スピードアップ
- ② 製造業×サービス業による製品トレーサビリティや保守・管理 サービス事業など
- ③ サーキュラーエコノミーへのビジネス参入によるESG投資アップ

■ オープンイノベーションによる協創型研究開発

① 国研との連携:国研が有するノウハウやDBを利用した研究開発

マテリアルDX推進は、企業の競争力の源泉を生む!

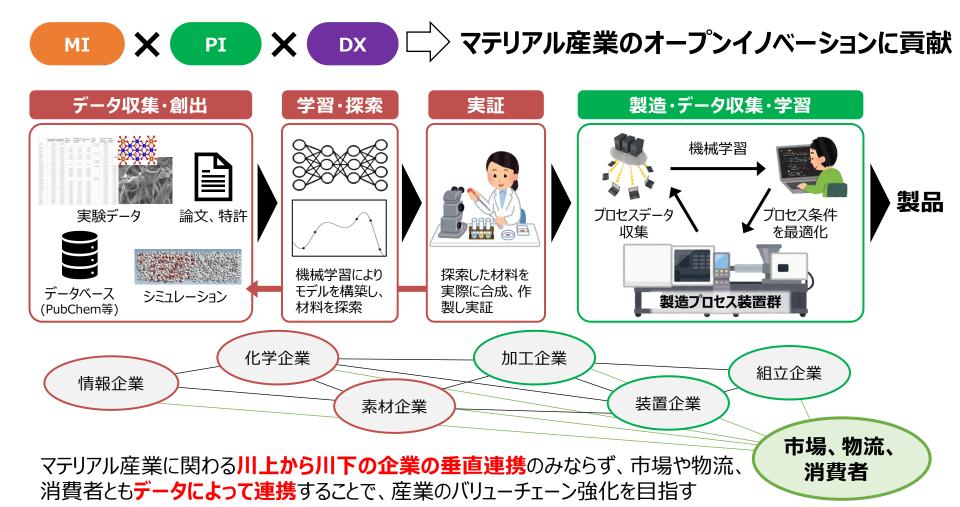
DXによる

変革

産総研のマテリアルDX



MIとPIのデータ駆動型マテリアル研究開発の成果を、**異種産業をつなぐこと(コミュニテイ形成)により、マテリアルバリューチェーンを強化する**ことでマテリアル産業へ貢献する。







ともに挑む。つぎを創る。