

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 (NIMS)

情報統合型物質・材料開発イニシア  
ティブ (MI<sup>2</sup>I)  
を推進する新領域融合拠点

平成27年8月19日  
ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

# プレゼンテーションの概要

- (1) 情報統合型物質・材料研究の意義について
- (2) 新領域融合拠点の概要
  - 目的、期待される成果
  - 組織、体制、連携
  - 将来展望、社会実装への道筋 等
- (3) 情報統合型物質・材料研究の推進方策
  - データプラットフォームの整備、ツール開発 等

# **(1) 情報統合型物質・材料研究の意義について**

# エネルギー問題解決の早期実現に向けて



自然再生エネルギーの蓄電 発電機：エネルギー創成

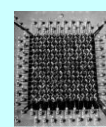
## 磁性材料

強力磁石

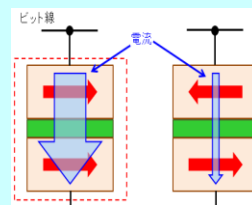


モータ 節電

情報機器の節電  
不揮発性磁気記録



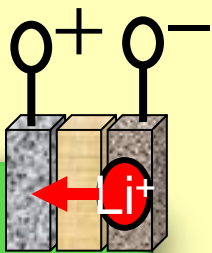
MRAM  
ノーマリー・オフ



情報機器の  
省エネルギー

## 全固体電池

不燃性・化学的安定性



安全

高効率

電気自動車



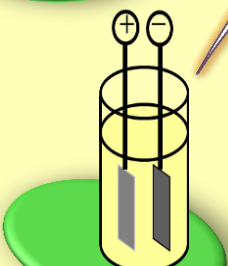
ガソリン自動車

航続距離

高効率

## 多価イオン電池

大容量化



3	12	13	20
Li	Mg	Al	Ca
6.94	24.305	26.982	40.078

## 蓄電池材料

## 高热伝導材料：

電子・電気機器の放熱

長寿命、高効率

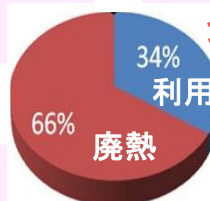


熱による発光  
効率低下防止

## 熱電材料：

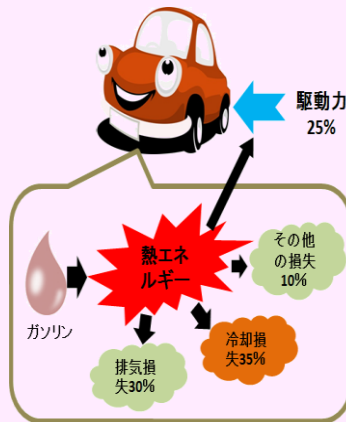
廃熱利用、環境発電

発電



## 断熱薄膜：

自動車エンジンの  
冷却損失低減



## 伝熱制御材料

# プロジェクト終了時のイメージ

NEDO蓄電池  
ロードマップ  
2013



### 既存リチウムイオン電池

**電池の材料は25年間変化なし!**

+

1980年 層状岩塩  
LiCoO<sub>2</sub>

電解液

環状エーテル

-

1985年 炭素

### プロジェクト終了後と将来

革新蓄電池に使われる材料候補の効率的抽出  
キーワード: 材料探索、高速・高効率

ロードマップ  
期間の短縮

5年短縮

2030年  
以降?

ベスト材料  
の発掘

**次の25年間を強力な材料  
知財で蓄電立国を実現**

安全性と大容量の両立する新材料開発

磁性材料、伝熱制御材料でも事情は同じ!

最強磁石 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B の開発(1983)  
以来、新材料の開発はない。

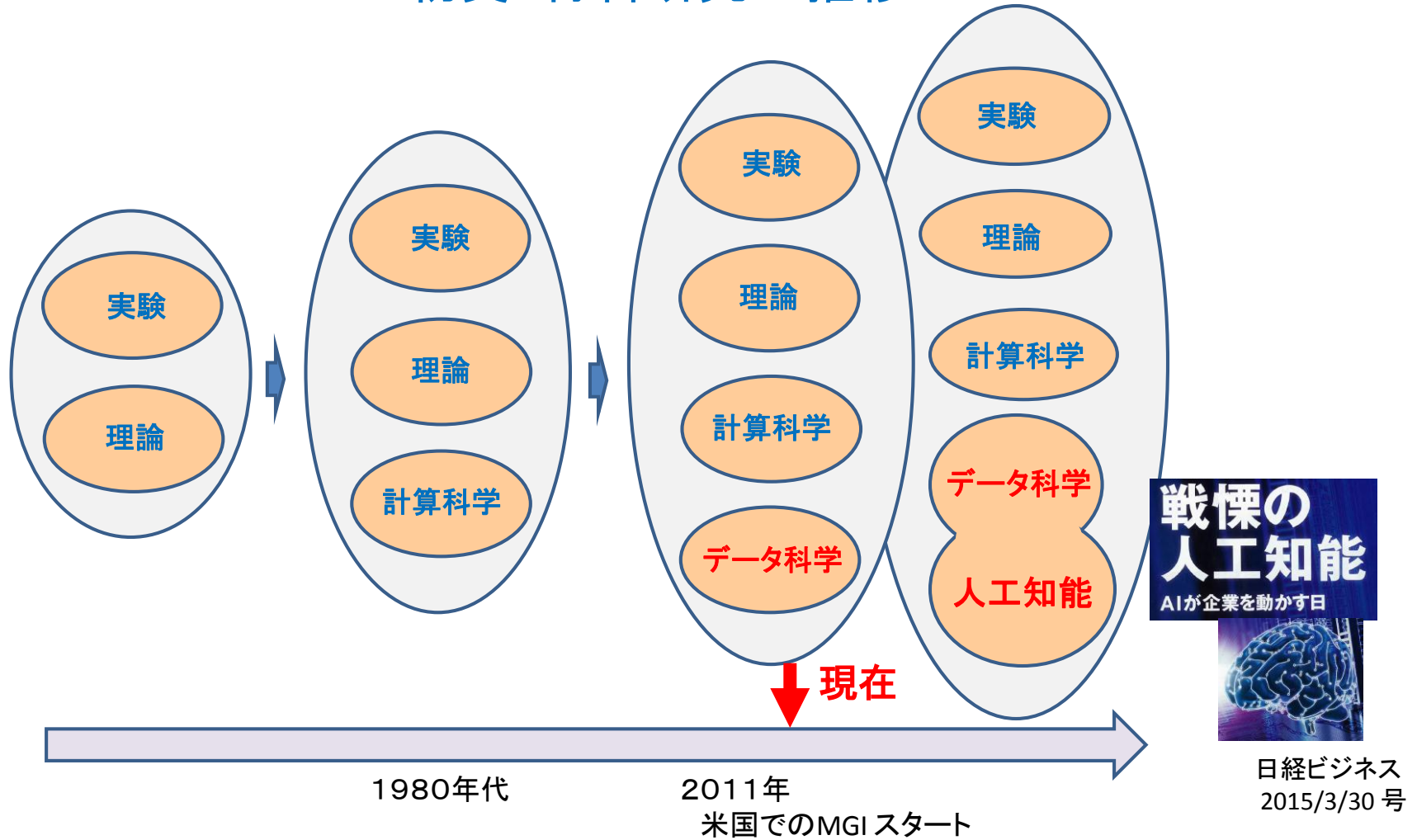
高性能 Dy フリー新磁石材料開発

実用レベルに達した熱電材料は、  
Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (1950年代発見)しかない。

ユビキタス元素系新熱電材料開発

# 本提案の意義

## 物質・材料研究の推移



## **(2)新領域融合拠点の概要**

**目標**

**組織、体制、連携**

**将来展望、社会実装への道筋 等**

# 拠点の目標

システム

産業界の物質・材料研究開発課題に対して、有効なソリューションを短期間で開発・提供。

目標を実現するために、

ツール

○劇的な変革をもたらす新物質探索・設計パッケージに必要なツール群を人工知能の基礎技術等を活用しながら開発。

さらに、

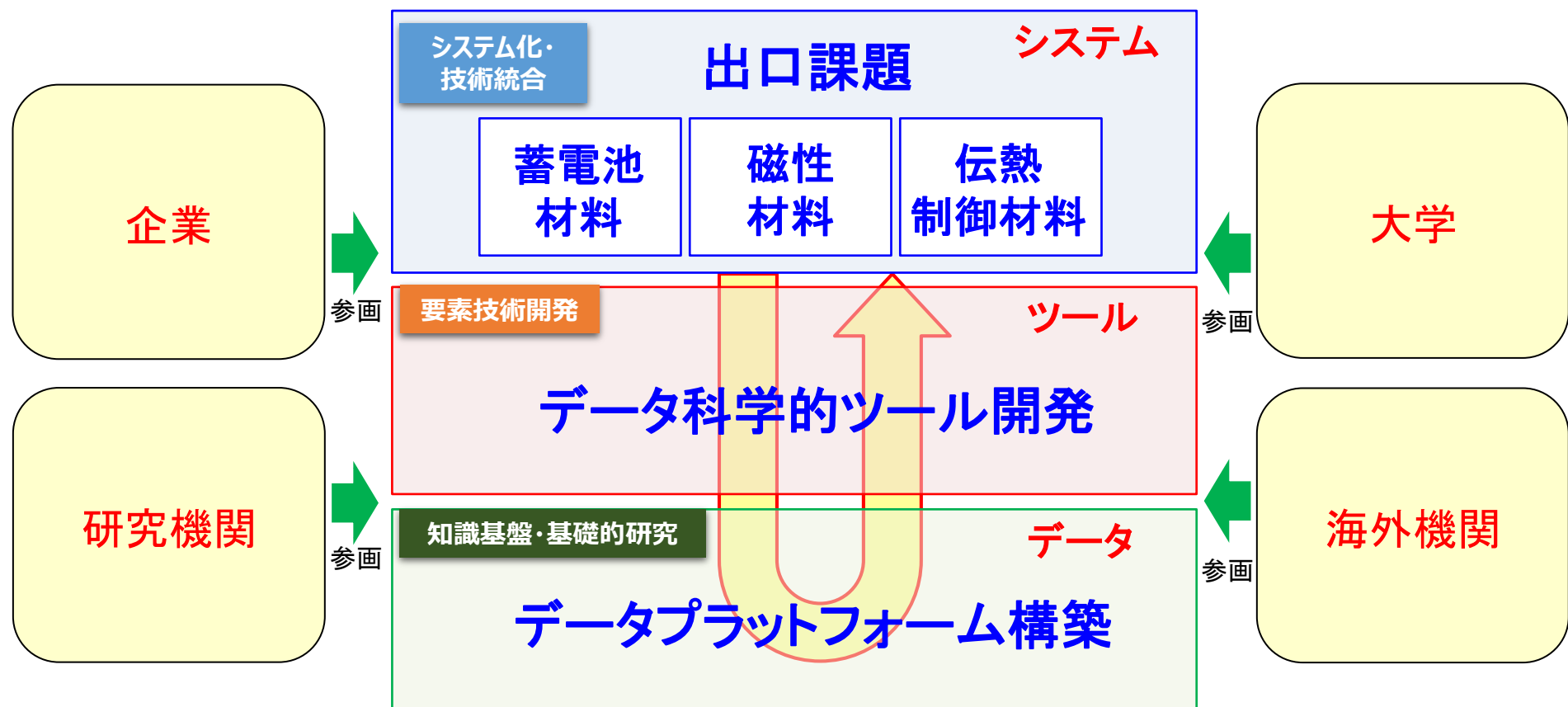
データ

○使えるデータベースを整備、上記ツール群を加え、国の知的資産として新たな研究開発手法の基盤（データプラットフォーム）を構築。



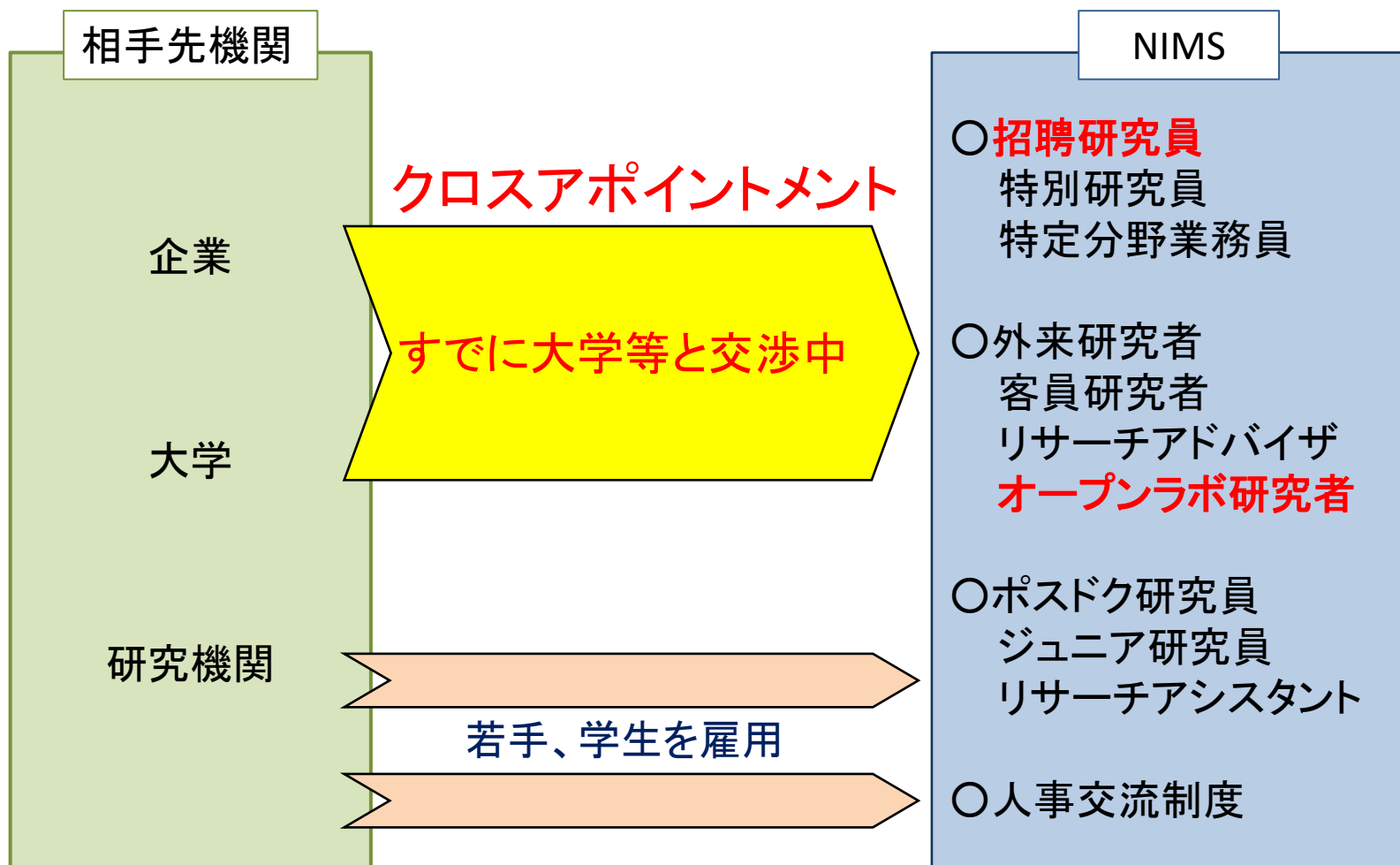
# 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>I) を推進する新領域融合拠点

出口課題を起点とした三層構造による強力なプロジェクト推進体制



# NIMSハブ拠点へ人材を糾合する仕組み

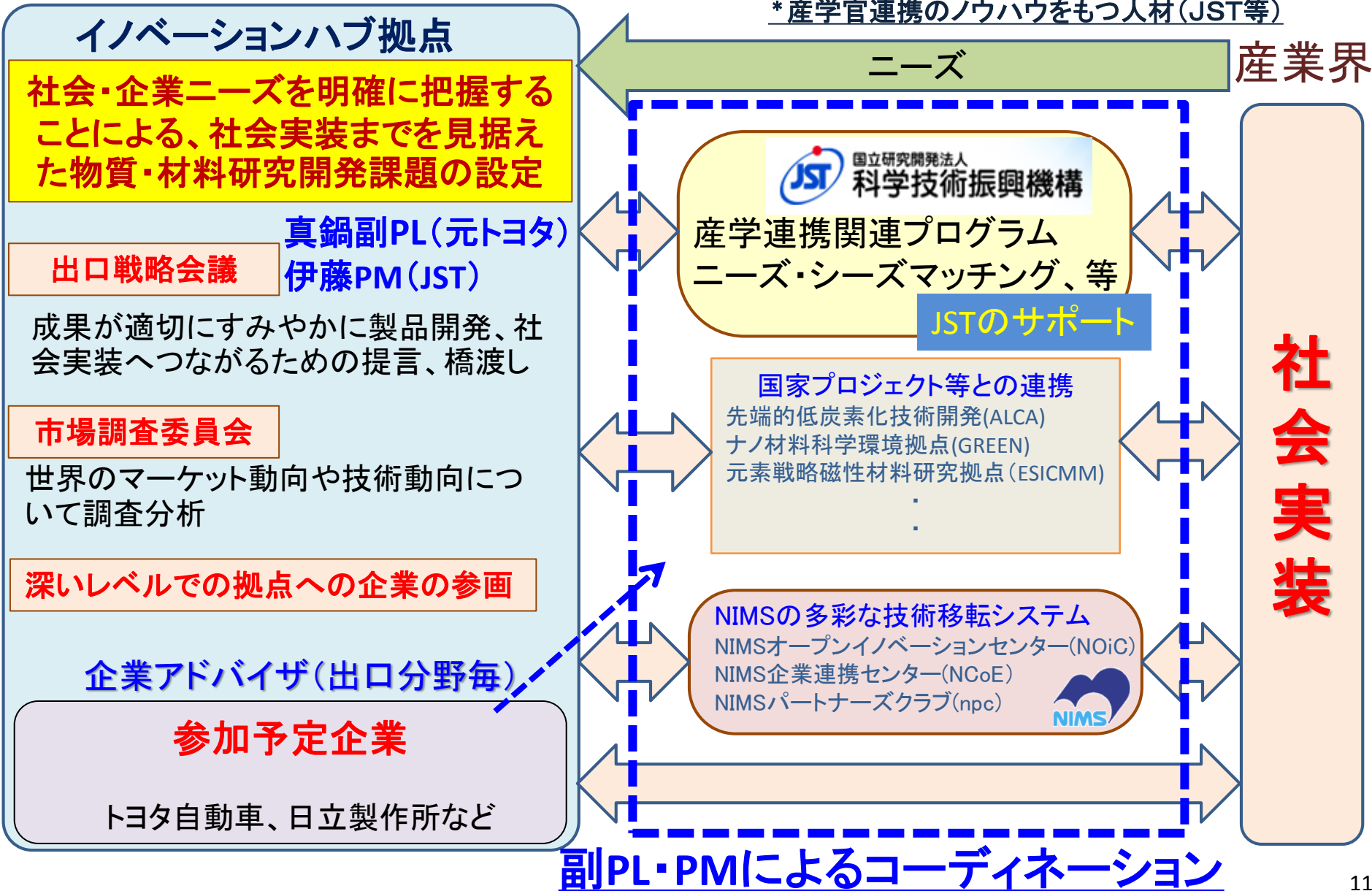
相手先機関・研究者の都合・意向に  
さらに柔軟に対応し、あらゆる形態で受け入れが可能



# 社会実装の仕組み

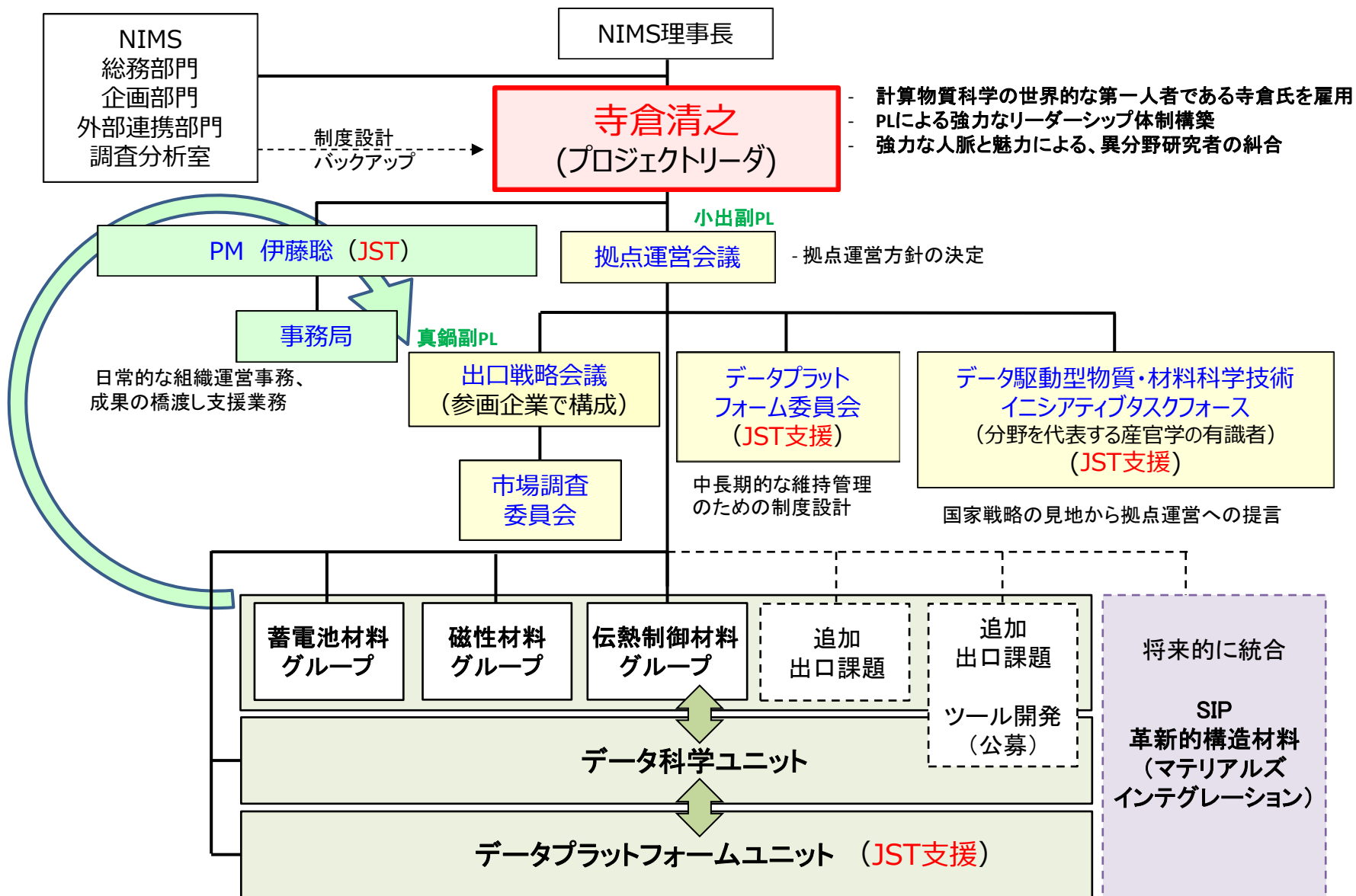
企業出身の出口戦略担当副PL・PM\*が先導

\*産学官連携のノウハウをもつ人材(JST等)



# 拠点の運営体制(案)

プロジェクトリーダーのもと、運営組織を適切に設置し、強力なプロジェクト推進体制を構築



### **(3) 情報統合型物質・材料研究の推進方策 データプラットフォームの整備、ツール開発 等**

# Upper Level: システム化・技術統合 = 3つの出口課題

## (1) 蓄電池材料

テーマ1: 全固体電池材料 (固体電解質、正極、電極・電解質界面の予測・探索・解明)

テーマ2: 多価イオン電池用材料 (液体電解質、正極・負極、電極・電解質界面の予測・探索・解明)

## (2) 磁性材料

テーマ1: 永久磁石材料 (高保磁力新規磁石材料の予測・探索)

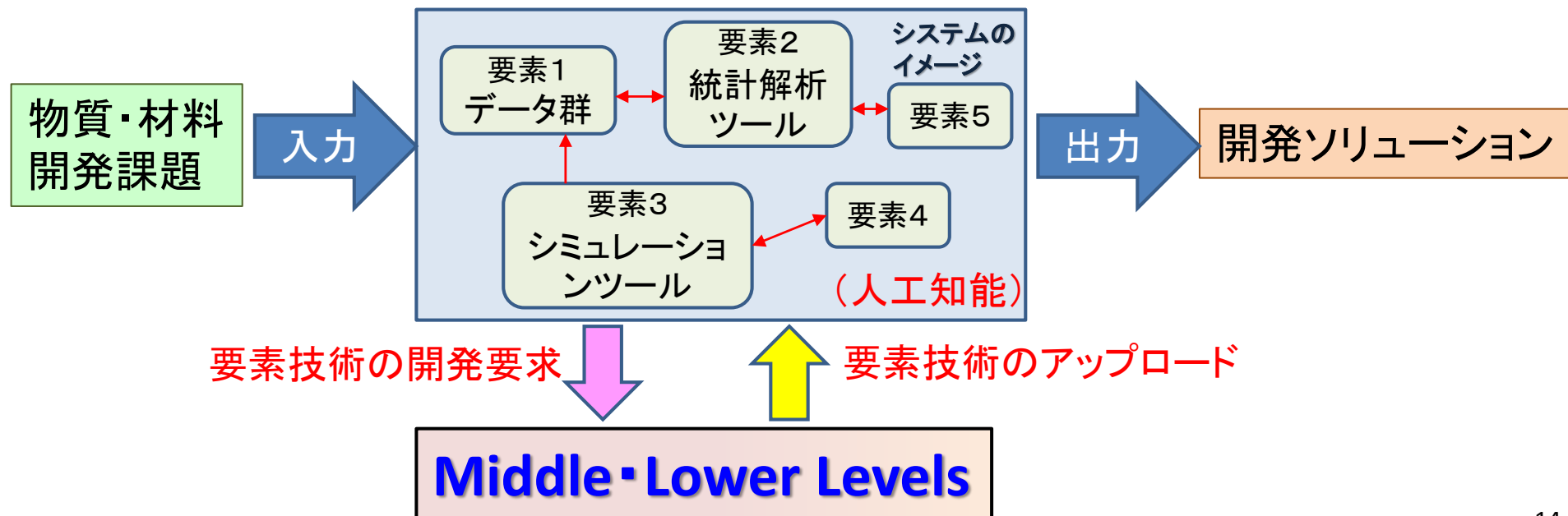
テーマ2: スピントロニクス材料 (不揮発性メモリ、スピン移行トルク発信素子用材料等の予測・探索)

## (3) 伝熱制御材料

テーマ1: 伝熱制御材料 (高熱伝導材料、高分子・高分子複合TIM材料、無機断熱薄膜の設計・探索・開発)

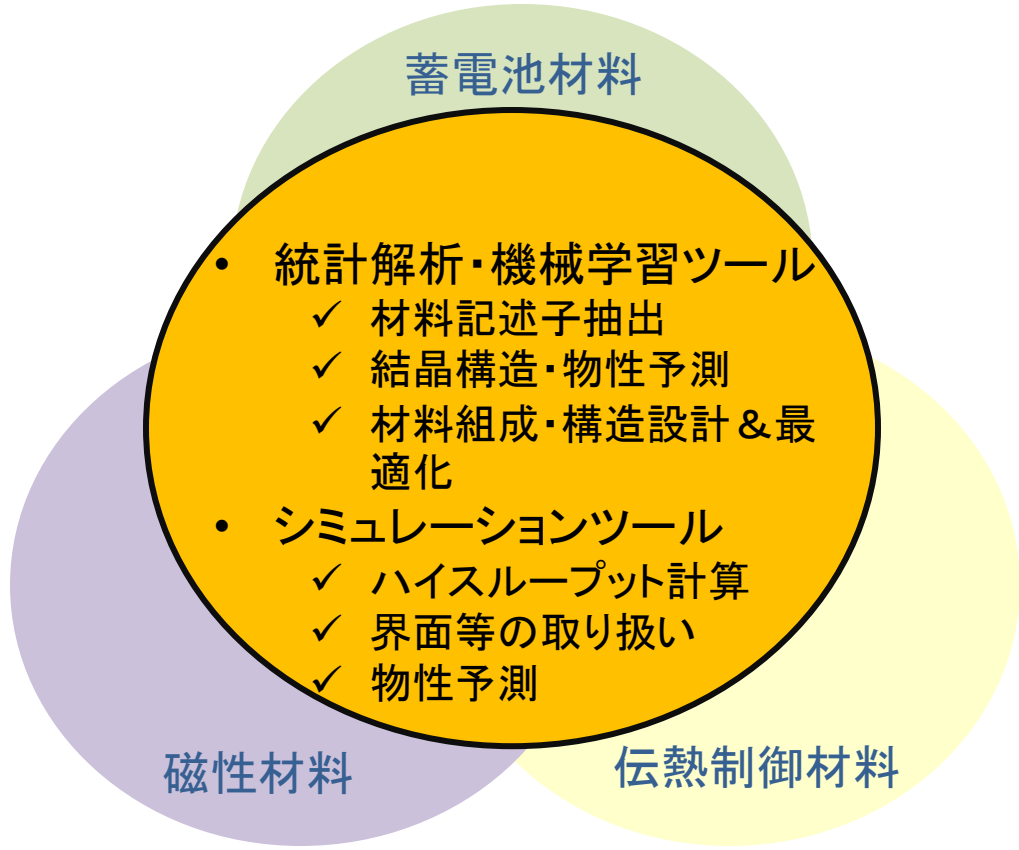
テーマ2: 熱電変換材料 (ユビキタス元素系熱電変換材料の探索・試作)

## それぞれの課題に最適な新物質・材料探索の開発システム



# Middle Level: 実現化技術・要素技術開発≡ツール開発

「膨大なデータ解析から帰納的に材料設計指針を得る研究手法」を可能にする



「物質・材料開発」のこれまでとこれから

これまで

経験者の「閃きと勘」



これから

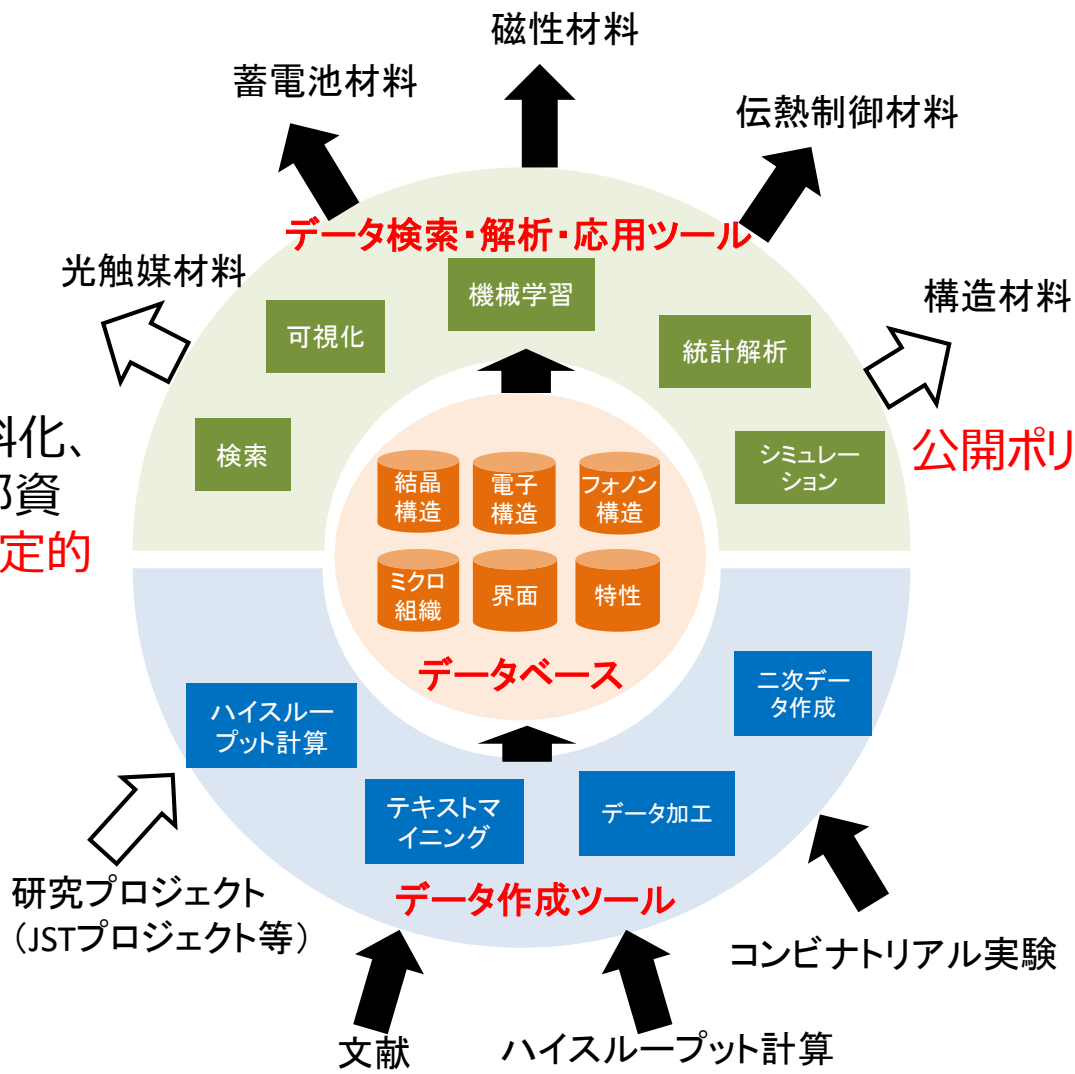
データ科学: 計算機による高速で網羅的な探索

**物質・材料研究開発が超加速化する！！**

# Lower Level: 知識基盤・基礎的研究

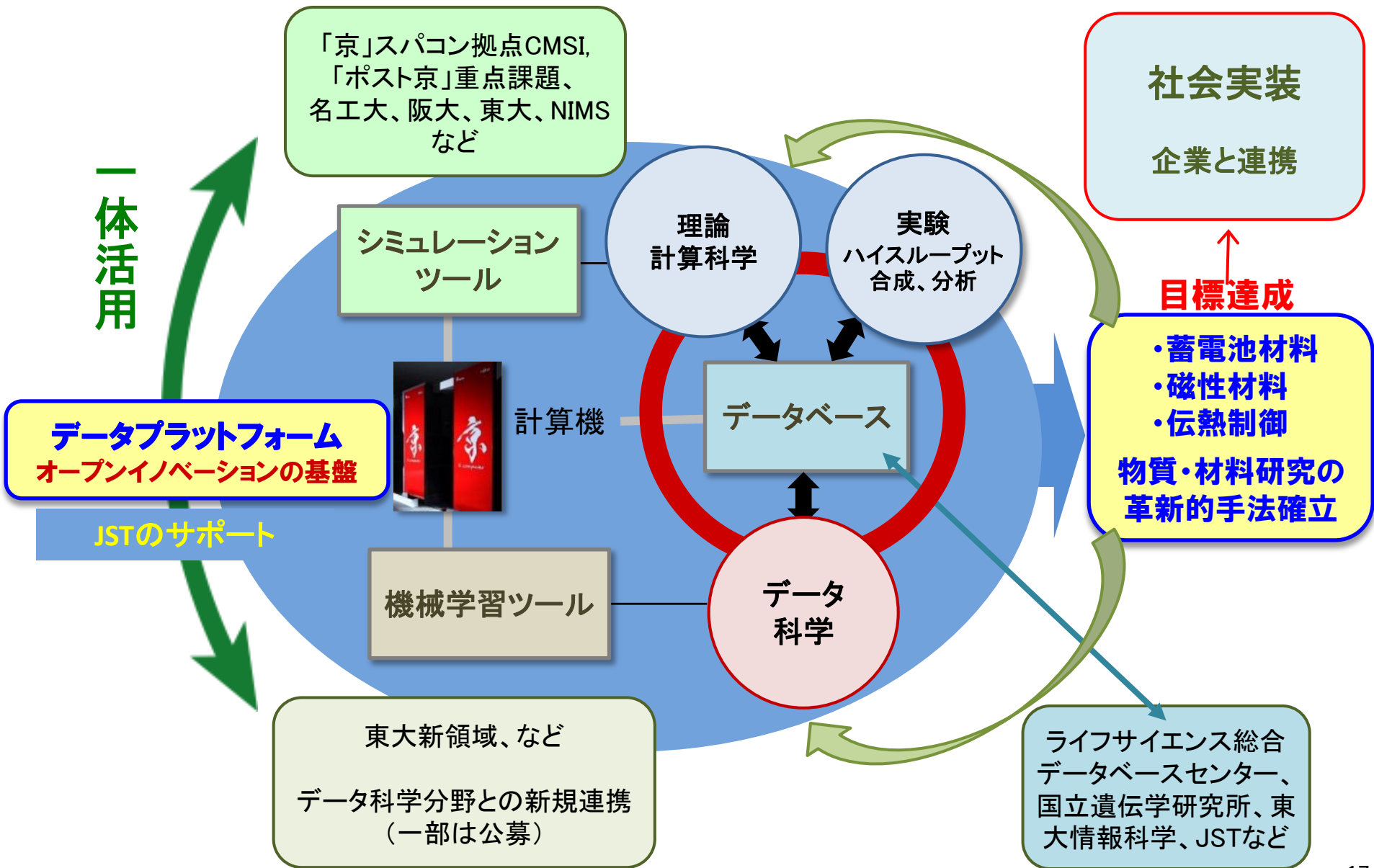
## ＝情報統合型物質・材料研究プラットフォームの構築と公開

委託費終了後も有料化、  
運営費交付金、外部資金等により、**長期・安定的**  
に維持・更新





# 情報統合型物質・材料研究の遂行



# 情報統合型物質・材料開発 イニシアティブ(MI<sup>2</sup>I) 提案概要

産業界の物質・材料研究開発課題に対して、情報統合型物質・材料科学を用いることにより、**有効なソリューションを短期間で開発・提供**。(→産業競争力強化、低炭素社会実現)

そのために

1. 産学官の人材を糾合し、**データ科学と計算科学、物質・材料科学の融合**を実現するイノベーションハブ拠点を形成。
2. **広範な企業の参画**を促し、企業ニーズに基づいて、革新的な新材料を実現。
3. **情報統合型手法を普遍化**することで、材料科学技術に革命をもたらす。…**データプラットフォームの構築と公開**

主な論点:

○ハブの体制論(産業界との連携等)、 ○研究推進方策(ツール整備、DBの扱い)等

## 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I: "Materials research by Information Integration" Initiative) 第1回 MI<sup>2</sup>Iフォーラム

### ■ 趣 旨

物質・材料研究機構 (NIMS)は、第4の科学といわれるデータ科学手法を物質・材料研究に展開することで、新規材料の開発を飛躍的に加速し、新たな産業イノベーションの創生につなげたいと考えています。この戦略のもと、科学技術振興機構のJSTイノベーションハブ構築支援事業に応募、採択され、7月1日より情報統合型物質・材料開発 (MI<sup>2</sup>)イノベーションハブ構築に向けた活動を開始しました。本フォーラムではMI<sup>2</sup>イニシアティブ拠点の全体構想と、そこで推進されるプログラムの概要を初めて公開します。特に企業側から見たニーズ、期待について講演いただきMI<sup>2</sup>の理解を図ります。

### ■ 概 要

- 名 称：** 第1回 MI<sup>2</sup>Iフォーラム
- 日 時：** 平成27年9月7日(月) 13時～17時
- 場 所：** 一橋講堂 (東京都千代田区一ツ橋2-1-2 学術総合センター内)
- 主催(共催)：** 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS) / 国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST)
- 対 象：** 企業、大学、研究機関の関係者等。一般参加も可。
- 参加者数：** 400名程度 (定員になり次第、受付を終了させていただきます。)
- 参加登録：** 参加を希望される方は、下記からお申し込みください。

<https://conf-reg.nims.go.jp/nims/jsp/Entryform.jsp?id=014>

## ■ プログラム (予定)

受付開始	12:00-
<b>開会挨拶</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS) 理事長 潮田 資勝</li> <li>・ 文部科学省</li> <li>・ 国立研究開発法人 科学技術振興機構 (JST)</li> </ul>	13:00-13:15
<b>MI<sup>2</sup>I拠点紹介</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI2I) プロジェクトリーダー 寺倉 清之</li> </ul>	13:15-13:45
<b>拠点の社会連携コンセプト</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI2I) プログラムマネージャー 伊藤 聡</li> </ul>	13:45-14:15
<b>MI<sup>2</sup>I研究グループ紹介</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ データプラットフォームグループ (データプラットフォームグループリーダー 徐 一斌)</li> <li>・ データ科学グループ/物理モデルグループ (データ科学グループ 木野 日織)</li> <li>・ 蓄電池グループ (名古屋工業大学大学院 工学研究科 助教 田村 友幸)</li> <li>・ 磁性グループ (産業技術総合研究所 エネルギー材料シミュレーショングループ 主任研究員 三宅 隆)</li> <li>・ 伝熱制御グループ (伝熱制御材料グループリーダー 徐 一斌)</li> </ul>	14:15-15:15
コーヒーブレイク	15:15-15:35
<b>企業のニーズと期待</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ トヨタ自動車株式会社 電池研究部 斎藤 俊哉</li> <li>・ 一般社団法人ナノテクノロジービジネス推進協議会 副会長 塚本 建次</li> <li>・ 株式会社日立製作所 研究開発グループ 材料イノベーションセンタ 主管研究員 宮内 昭浩</li> <li>・ 新日鐵住金株式会社 技術開発本部 顧問 潮田 浩作</li> </ul>	15:35-16:35
質疑応答	16:35-16:55
<b>閉会挨拶</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS) 理事 室町 英治</li> </ul>	16:55-17:00

## ■ お問合せ先

国立研究開発法人物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点

e-mail : [mi2i-forum@ml.nims.go.jp](mailto:mi2i-forum@ml.nims.go.jp)

URL : <http://mi2i.nims.go.jp/forum/>