

産業競争力懇談会（COCN）  
2019年度推進テーマ活動企画書【継続テーマ】

1. 推進テーマのタイトル

「エネルギー革新に向けたMI基盤の構築」

2. 提案の背景・理由（産業競争力強化上の効果）

- ・ 世界全体での温室効果ガス削減に向け、省エネルギー／蓄エネルギー／創エネルギーで、革新的な性能を有するデバイスの社会実装が必要とされている。本プロジェクトのターゲットは、エネルギー機能を有する革新的なデバイスに用いられる高分子機能材料の創生であり、我が国が中長期の機能材料開発で世界をリードし続けるためには、データ駆動型科学の活用が不可欠である。
- ・ 2018年度は、高分子機能材料のマテリアルズ・インフォマティクスを、「社会ニーズと目標性能の整合」「データ科学と検証実験の協同」「データ科学の素養もつ材料科学者の育成」の3つの切り口で踏み込むマテリアルズ・インテグレーション（MI）として検討し、材料開発のための産学共用のMI拠点として整備すべき項目について取りまとめた。
- ・ 「データ科学と検証実験の協同」「データ科学の素養もつ材料科学者の育成」については、引き続き産学が協働すべき課題が明確になったため、2019年度も継続して議論し、大学へのMI拠点構築を具体化する。

3. 実現すべき目標とベンチマーク

- ・ 本プロジェクトの最終目標は、2050年の温室効果ガス削減に資する、エネルギー機能を有する革新的なデバイスの創生であり、時間軸としては2030年頃のデバイスの社会実装開始および2040年頃の本格的な普及を想定している。
- ・ 軽量、加工性、資源的制約の少なさから、エネルギーデバイスの構成材料としての期待が大きい高分子機能材料開発の加速を目指す。高分子機能材料のデータベースはNIMS PoLyInfoで着手されているが物質毎の入口視点からの構成にあり、NEDO超々プロジェクトはインフォマティクス・ツール開発に力点を置き進んでいる。出口の機能視点から成るデータベースそのものが国内外で開示されていないのが現状である。

4. 検討内容と構築すべきエコシステムの要素（技術・システム、制度・規制、人材育成、社会の受容等）

- ・ 2018年度の成果
  - ✓ 産学が強い関心を持ち、かつ挑戦的な2つの材料性能を設定した（超高イオン伝導性、透明・超高導電性）。
  - ✓ 材料性能に特化したデータベースを初めて構築し、新規構造群の提案に至るマテリアルズ・インフォマティクスの流れを例示した。イオン伝導性ポリマーについての産業界データとの連結は、データ連携の意義を明示する切掛けとなった。
  - ✓ 人材育成に向け、早稲田大学でマテリアルズ・インフォマティクスの新科目を立ち上げた。

- ・ 2019 年度の検討内容
  - ✓ 産業界が有する材料データを産学、産々で連携する仕組み構築（電導性等対象も拡張）
  - ✓ データ連携をベースとしたコンソーシアム化による協調領域での材料開発支援の整備
  - ✓ 学問体系としてのM I の整理

## 5. 想定される課題、解決案、官民の分担

- ① 産業界データの連携：データ連携に関しては、拠点となる大学と企業の1対1の連携を通して企業の材料データ活用を開始する、スモールスタートが重要である。大学はそのデータ科学センターも活用し、各社データの秘匿性の担保はもちろん、その後の国レベルでのデータ連携まで視野に入れ、機能材料に適した標準フォーマット作成に向け先導的に寄与する。
- ② 協調領域の材料開発：スモールスタートした連携の有用性が強く確認できれば、自ずと他社とのデータ融合に進むと期待でき、推進体制として大学を核にしたコンソーシアムを形成し、データ連携による協調領域の材料開発を under one roof で進めるためのM I 拠点を構築する。拠点においては、大学と企業の1対1の関係をベースとしつつ、大学にハイスループット開発のための必要なインフラ(合成、分析)を整備し、産業界が共用できる運用体制を構築することも重要となる。
- ③ 学問体系としてのM I の整理：卓越大学院等の枠組みを活用したM I 人材育成を踏まえ、社会実装を前提としたM I の学問分野としての体系化も目指して検討する。

## 6. 目標実現までのロードマップ

- ・ 2020 年～：
  - ✓ 国プロを活用した大学へのM I 拠点構築とコンソーシアム体制での研究開発推進（データベース整備、ハイスループット開発インフラ整備、産学共同研究による人材育成）
  - ✓ M I 拠点でのデータ連携と各社独自データの融合による競争領域の研究開発の推進
- ・ 2030 年頃：
  - ✓ 革新的性能を有する高分子機能材料の創出

## 7. プロジェクトの出口、その後の推進主体案

- ・ 2018 年度は高分子機能材料M I 拠点構築に関し、整備すべき項目について取りまとめた。
- ・ 2019 年度はデータ連携の仕組みを構築した上で、大学が核となり、複数の企業が連携した形でマテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発を推進するコンソーシアム体制を具体化する。
- ・ 今後の推進主体は大学およびコンソーシアム参画企業であり、大学を拠点とした国プロの活用を視野に入れ、産学連携を担うとともに、人材育成枠組みへの直接参加により推進していく。

## 8. プロジェクトの推進体制と想定する主なメンバー

- ・ リーダー：早稲田大学（西出 宏之）
- ・ 共同リーダー兼事務局：J X T G エネルギー
- ・ 想定メンバー：理化学研究所、島津製作所、東芝、日産化学、日本電気、パナソニック、富士通研究所、富士フイルム、三菱ケミカル、三菱総合研究所