

## サブ課題C 個別テーマ(1)「マテリアルユニコーン予備軍創出支援」研究開発課題の概要

## 1. 「海水と淡水の出会いが生み出すクリーンエネルギー～大規模濃度差発電プラントの事業化と世界展開～」

- ・研究開発責任者：一ノ瀬 泉
- ・代表研究開発機関：国立研究開発法人物質・材料研究機構

研究開発課題の概要
風力や太陽光などを利用した再生可能エネルギーは、主要な一次エネルギーとなりつつあるが、天候による変動が大きく、設置場所にも限界がある。本研究では、これまで活用されていない淡水（河川水、下水、工業排水）と海水との塩濃度差を利用することで、安価で省スペースな安定電源を提供することを目指す。イオン交換膜のスタック構造からなる低コストで高効率な 10kW 級発電モジュールを開発し、事業化に向けてオペレーション技術を蓄積する。
用途特化型モジュール（アプリ）の概要
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 性能予測アプリ：濃度差発電モジュールの構造・物性から発電性能を予測する。</li> <li>2. 基礎物性推定アプリ：素材と製造プロセスから力学・クリープ特性を予測する。</li> <li>3. 劣化予測アプリ：水環境データ・運転状況・メンテ方法から長期劣化を予測する。</li> </ol>
用途特化型モジュール（アプリ）に必要なデータ、その生成技術の概要
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. (1) イオン交換膜の膜抵抗 (2) 膜厚 (3) 含水率等に関するデータ</li> <li>2. (1) イオン交換能をもつ架橋高分子やエンジニアリングプラスチックの分子構造 (2) プロセス特性 (3) 材料物性に関するデータ</li> <li>3. (1) 砂ろ過・繊維ろ過と水質に関するデータ (2) 水溶性有機物の固着に関するデータ</li> </ol>

## 2. 「フラックス法育成結晶に基づくシリアルマテリアルユニコーン創出」

- ・研究開発責任者：手嶋 勝弥
- ・代表研究開発機関：国立大学法人信州大学

<b>研究開発課題の概要</b>
データ駆動開発による新たな無機結晶材料創製のためのアプローチを構築する。陽イオン／陰イオン交換体を開発材料の先鞭として、ハイスループット合成、逆解析による合成プロセス条件の効率的選定、ならびに計算材料科学に立脚する超高速なデジタルスクリーニングの3つを融合させ、膨大な材料探索空間から未知の機能を備える無機結晶材料を次々と創製する基盤技術を構築する。
<b>用途特化型モジュール（アプリ）の概要</b>
<p>1. ハイエントロピー材料探索支援システム</p> <p>(1) 逆解析による合成プロセス条件の選定、ハイスループット合成実験計画の構築、合成に用いるロボットを制御、するためのソフトウェア</p> <p>(2) 超高速計算材料科学計算のプレ・ポストおよび実行を半自動化できるソフトウェア</p> <p>用途特化型アプリ1については、上述の2つが想定される。それぞれ、個別系においては予備的な取り組みには着手済みである。そこで、本申請で取り組む材料系に適用できる汎用性を高め、用途特化型アプリとして完成させる。</p> <p>2. カスタマイザブル浄水設計支援システム</p> <p>世界中に安全・安心な飲み水を提供するため、<b>対象となる地域ごとに異なる</b>水質に対応した浄水パッケージを提供する必要がある。浄水材料の種類やその量を適切に配合し、設置場所や規模に合わせたデバイスを設計するためのシステムを用途特化型アプリとして開発する。</p>
<b>用途特化型モジュール（アプリ）に必要なデータ、その生成技術の概要</b>
<p>1. ハイエントロピー材料探索支援システム</p> <p>(1) a. 既存データベース外の実験系結晶構造データ</p> <p style="padding-left: 20px;">b. 熱力学的最安定領域から外れる結晶化構造予測データ</p> <p>(2) a. ハイエントロピーに関する結晶構造データ（酸化物・非酸化物、合金系など）</p> <p style="padding-left: 20px;">b. 計算科学をもとに作成した結晶構造予測データ（結晶構造探索データ）</p> <p>2. カスタマイザブル浄水設計支援システム</p> <p>a. 世界各地の水質データ（クラウドで集積）</p> <p style="padding-left: 20px;">(a) GIS(地理情報システム)などと連動した水質データ</p> <p style="padding-left: 20px;">(b) ICPなどの大規模な分析装置を用いず、簡便な計測デバイスにて収集したデータ</p> <p style="padding-left: 20px;">(c) 各地の計測データ</p> <p>b. 実硬度下での浄水性能データ</p> <p style="padding-left: 20px;">(a) 浄水設計の基盤となる「各地域の硬度に対応した条件」での浄水性能データ(<b>特に</b>硬水地域)</p> <p style="padding-left: 20px;">(b) データ1に対応した硬度下での浄水性能試験による収集データ</p> <p>c. 浄水システムのSOH (State of Health) データ</p> <p style="padding-left: 20px;">(a) 設置した浄水システムの状態の診断データ</p> <p style="padding-left: 20px;">(b) 浄水特性のリアルタイム計測したデータ</p> <p style="padding-left: 40px;">例：浄水システムの前後にセンサーを設置し、イオン濃度を追跡してデータを収集する</p>

(その他必要と想定するデータ)

- a. 大気・土壌汚染の状況（土壌については、地域・流域などの微小区分にて）  
（各地域の法規制や法制度を含む）
- b. 土壌ミネラルの分布状況
- c. 各種汚染（風土病や地域性）と病気の関連性データ
- d. 農作物や家畜の生育変遷（食消費の変遷含む）
- e. 市販材料(原料)の純度（産地との関連性）
- f. 基本インフラ（水・電気）設備の経過年数，材質など
- g. 世界の過疎化，人口爆発の地域マップ（集落単位）

3. 「究極素材ダイヤモンドが実現する超高速 IT インフラ—世界初のダイヤモンド半導体の社会実装とデファクト化を目指して—」
- ・研究開発責任者：星川 尚久
  - ・代表研究開発機関：大熊ダイヤモンドデバイス株式会社

研究開発課題の概要
<p>研究開発の主な取り組みとして、用途特化型アプリの開発による製造歩留まりの改善を行う。本プロジェクトにて開発を行う用途特化型アプリにより製造技術構築を達成し、製品製造期間を大幅に短縮するとともに、製造技術ノウハウを横展開して新製品、特にエネルギーハーベストデバイス等の研究開発 PoC を行う。</p>
用途特化型モジュール（アプリ）の概要
<p>1. 本用途特化型アプリでは、ラボスケール段階から生産施設等の環境データ及び各装置データの統合による、データベース群の構築及びデータ分析・パラメータ最適化等が可能なアプリの開発及び運用を行うことで、ダイヤモンド半導体の歩留まり改善・準量産化に向けた、生産技術の暗黙知・ノウハウの可視化とプロセス技術の改善を目指す。</p> <p>2. ダイヤモンド基板の大型化やメガファブ構築等による生産設備変更を視野に入れ、装置や環境に依存しないパラメータに変換し、既存の製造プロセスとの比較・変化点検知を行うことで、製造装置ごとの問題の顕在化や課題解決に対するアプローチの応用展開を可能とし、設備規模拡大時における工数の大幅な短縮とデータ分析ノウハウの構築の促進を目指す。</p>
用途特化型モジュール（アプリ）に必要なデータ、その生成技術の概要
<p>これまで見逃されてきたパラメータや、人知の及ばなかったパラメータ間の相関関係、熟練技術者の持つ技術の違いを明確にすることが、次世代のダイヤモンド半導体開発において極めて重要である。これに向け、半導体製造のプロセス中に発生するあらゆるデータを徹底的に収集・解析することを計画している。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>a. 筐体の物質特性に起因するデータ <ul style="list-style-type: none"> <li>(a) 300°C以上高温耐性のあるアンブユニットを製造する際の材料選定に資するデータ</li> </ul> </li> <li>b. 環境に起因するデータ <ul style="list-style-type: none"> <li>(a) クリーンルームの温度、湿度、気圧などの環境条件</li> </ul> </li> <li>c. 各装置に起因するデータ <ul style="list-style-type: none"> <li>(a) 使用される各種装置の入出力パラメータ</li> <li>(b) 装置内の温度、圧力、ガスの流量</li> <li>(c) 装置内でのダイヤモンド基板の位置や温度</li> </ul> </li> <li>d. ダイヤモンド基板に起因するデータ <ul style="list-style-type: none"> <li>(a) 各プロセス後のダイヤモンド基板の表面の画像や電圧特性</li> </ul> </li> <li>e. 作業者に起因するデータ <ul style="list-style-type: none"> <li>(a) 作業者の情報</li> <li>(b) 作業を行った時間帯</li> <li>(c) 作業者の動きや、ダイヤモンド基板の取り扱い方法</li> </ul> </li> </ul>