

研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) FS ステージ (起業検証) 事後評価報告書

プロジェクトリーダー (研究責任者) : 大阪大学 笠井 秀明

側面支援担当 : (株) アセット・ウィッツ

研究開発課題名 : CMD による 21 世紀型新技術・新産業創生のための知的設計手法の実用化開発

1. 研究開発の目的

現在までに実用的な水素貯蔵材料が実現されていないのは、水素の質量が小さいために固体表面上においてエネルギー状態の離散、零点振動、空間的非局在化などの量子効果が顕著に現れ、最適設計が系統的にできないからである。プロジェクトリーダーの笠井らは、形式知と経験則 (暗黙知) を統合した第一原理計算シミュレーションの知的設計手法「CMD® (Computational Material Design)」を構築し、電子系と原子核を同時に量子力学で扱う世界初の第一原理計算手法「Naniwa」を独自に開発して CMD に組み込むことにより、水素の原子核運動を古典的に扱う従来のシミュレーション限界を打ち破ることに成功している。本研究開発は、水素貯蔵材料の実用化開発に携わる企業の技術者にとって、①材料の新機能創出を容易に実現し、②新材料の試作・実用化期間を著しく短縮し、③誰よりも早い特許出願を可能にするツールとして CMD 知的設計手法を実用化するためのソリューション・フローとインターフェース・コンセプトを明確にし、その基本コンセプトを実証することが目的である。

2. 研究開発の概要

①成果

〔成果 1〕 CMD 知的設計のソリューション・フローを明確にするという第一の目標に関しては、完全自動化と半自動化のプロセスを明確にし、入力データ作成部分を完全自動化するプログラムを作成し、その効果を実証した。併せて、合金系・有機系・炭素系の水素貯蔵材料に対するソリューション・フローの最適化を明確にした。

〔成果 2〕 さらに、CMD 知的設計ツールのインターフェース・コンセプトを明確にするという第二の目標に関しては、ウェブサイトを実際に構築し、マニュアルを不要とするワード並みに使いやすい操作環境を実証した。

〔成果 3〕 加えて、社会動向と市場ニーズに基づき、次の A-STEP 起業挑戦における CMD 知的設計対象の拡大を想定して、Advanced-CMD のアルゴリズムを創案した。

②今後の展開

21 世紀はナノからマクロまでの材料・プロセス・デバイスが渾然一体化する量子場サイエンスとテクノロジーによって、省エネ・創エネ・蓄エネ・省資源のグリーン・イノベーションを実現する時代である。

今後の展開としては、〔成果 1〕〔成果 2〕〔成果 3〕をさらに発展させて、21 世紀の環境問題解決の鍵となる太陽電池を中心とする創エネ分野での CMD 展開に注力し、ベンチャー起業展開に挑戦する予定である。

3. 総合所見

当初の目標に関し一定の成果は得られた。CMD の対象分野として水素貯蔵材料を選び、候補材料の特性を予測するための計算プロセスの自動化などの整備や、ユーザーインターフェースをウェブサイトを作成し企業技術者が第一原理量子シミュレーションを利用できる環境作りがなされたが、起業による事業展開の可能性についての検証が十分できていない。今後に予定している燃料電池や太陽電池などの創エネ分野への CMD の適用展開に向けた計算科学手法の研究開発を推進するとともに、最適な事業化構想を見出していきたい。