

委託調査公募のご案内(2022年度)

公益社団法人 新化学技術推進協会
先端化学・材料技術部会
コンピュータケミストリ分科会

(公社)新化学技術推進協会の先端化学・材料技術部会は、触媒材料、新素材ならびにコンピュータケミストリ分野の技術動向を調査していくとの方針に基づいて活動を行っています。

この度、調査活動の一環として、『欧米の化学系シミュレーションの最新動向』についての委託調査を行うに当り、委託先を公募することと致しました。

応募される方は、以下の公募要領に従い、応募書類を当協会まで電子メールにて提出下さい。

公募要項

1. 件名 『欧米の化学系シミュレーションの最新動向』

2. 背景と目的

プラスチックのリデュース・リユース・リサイクルやカーボンニュートラルの実現に代表されるSDGsの諸問題の解決に向けて、化学産業分野では環境・エネルギー・ヘルスケアなどを革新する高機能材料の創出が求められている。このような革新材料の創出を加速するために、2010年代初頭より材料開発にマテリアルズ・インフォマティクス(MI)を活用する取り組みが進められており、様々な成果をあげる一方でデータの数や質が重要であることがわかってきた。そのため、実験していない条件を探索したり分析ではわからない特性を把握したりすることができる計算化学シミュレーションにあらためて注目が集まっている。

ここ数年、化学系企業でもMIの導入やMIのためのプラットフォーム・データベースなどの検討が進められてきたが、計算化学シミュレーションの最新技術の検討や導入までは十分に行えていなかった。国内は高分子計算機科学研究会・分子シミュレーション学会・理論化学会などの発表内容により技術の進展を追跡しているが、海外の情報に対しては感度の低い状態が続いている。

この間にも、欧米では計算化学シミュレーションについて継続的な活動が行われており、手法面ではAIや量子コンピュータの計算化学への先端的な活用が模索されているほか、応用面では世界が抱える課題であるカーボンニュートラルの実現を出口に見据えた取り組みも始まっている。そこで、近年の欧米における計算化学分野におけるシミュレーション技術の進展を把握することにより、更なる新技術を活用して材料開発の革新に取り組む会員企業に有益な情報を提供することを目的とした調査を企画する。欧米で発展した理論・手法をもとに様々な材料への応用が継続的になされている。最近追跡できていなかった欧米発の最新理論および手法をいち早く取り入れ活用することにより、カーボンニュートラル等の社会課題で求められる新材料開発につなげることを期待する。

3. 調査内容

2010年代以降の欧米における計算化学シミュレーションの理論・手法・応用の研究について調査する。調べた結果は手法毎および材料毎に整理してまとめる。もし活躍目覚ましい研究グループや研究者があれば別項目として取り上げる。手法・材料・特性の一例を以下にあげるが、これらに限定するものではない。

手法

- ・量子化学に基づく手法(第一原理計算、密度汎関数法、変分量子固有値法、等)
- ・分子あるいはその集合体を粒子として扱う手法(分子動力学法、粗視化分子動力学法、等)
- ・材料を粗視レベルあるいはマルチスケールでシミュレーションする手法(自己無頓着理論、ギンツブルグ-ランダウ理論、レピュテーション理論、線形応答理論、ランジュバン方程式、等)

材料

- ・高分子
- ・電池
- ・半導体
- ・カーボンニュートラル技術(代替エネルギー、CCS、CCUS、水素活用、等)に資する材料

特性

- ・機械的特性
- ・導電性
- ・電気伝導性
- ・エネルギー変換、貯蔵特性、分離特性、触媒反応特性

計算理論の発展や計算機性能の向上による持続的進歩だけではなく、AI・クラウド・量子コンピュータの技術利用による先端的な研究も調査対象に含める。いずれの対象も従来のシミュレーション技術に対する新規性、進歩性が明確となる形で調査結果をまとめたい。調査は欧米の文献の調査に加えて、産学連携組織の活動状況やキーパーソンへのヒヤリングなども行えると望ましい。

なお、調査会社選定後、本調査を通して各基本仕様に変更の必要性があれば、担当の許可の下、変更できるものとする。

上記目的が達成できるように、開始前の企画詳細打合せ、報告会までに適宜意見交換を行う。また、2022年12月上旬頃に中間報告会、報告書提出前後に最終報告会を行う。

4. 応募資格:

当該技術または関連技術についての調査実績を有するもしくは十分な調査能力を有し、かつ、調査目標の達成及び調査計画の遂行に必要な組織、人員を有している企業。

5. 調査期間: 原則として契約締結の日から2023年3月15日まで

6. 応募提出書類・提出期限:

①調査対象、調査方法、調査スケジュール、調査体制、目次案等を含む企画提案書: 書式自由

- ②費用の内訳(積算):A4版 1枚
- ③応募会社及び担当者のこれまでの本テーマ関連の実績(又は経歴):A4版 1枚
 - ①②③を纏めた企画提案書を1つのPDFファイルとし、2022年9月20日正午まで(必着)に当協会に電子メールにて送付のこと。

7. 委託先の選定:

- ①下記の審査項目に基づき、提出書類を審査する。なお、追加資料の提出依頼、ヒヤリングを実施することがある。(ヒヤリングを行う場合は9月下旬を予定している。)
 - a. 組織体制及び実施担当者
 - b. 実施方針及び調査スケジュール
 - c. 調査の企画内容
 - d. 調査の実施手法
 - e. 類似調査の実績
 - f. 調査内容に対する知識・理解度
 - g. 調査内容に対する調査・分析能力
 - h. 調査の経済性
- ②提出された企画提案書等は返却しない。委託先の選定は非公開で行い、審査の経過等に関する問い合わせには一切応じない。
- ③選考結果については、2022年10月中旬頃(予定)に当協会ホームページに公表する。

8. 調査費用: 200万円以下(税込)

9. 募集件数:1件

10. 調査結果の報告形式:

- ①中間報告会(プレゼンテーション形式) 2023年 1月中旬頃(予定)
- ②最終報告会(プレゼンテーション形式) 2023年 3月上旬頃(予定)
- ③報告書の提出(電子媒体) 2023年3月15日まで(予定)
- ④調査報告会(当協会会員限定・講演会形式) 2023年4月下旬頃(予定)

11. 秘密の保持:企画提案書等提出書類は、本委託先選定のためにのみ利用し当協会において厳重に管理する。

12. 個人情報の取扱いについて

- ①取得した個人情報については委託業務推進の上での情報管理(連絡・資料送付等)のために利用する。
- ②提供いただいた個人情報は、上記の利用目的以外で利用することはない。
(ただし、法令等により提供を求められた場合を除く。)

13. 著作権:

- ①受託者は、成果物の著作権(著作権法第27条及び第28条に規定する権利を含む。以下同じ。)を当協会に無償で譲渡するものとし、著作者人格権を行使しないものとする。
- ②成果物については、第三者が権利を有する著作物(以下「既存著作物等」という。)が含まれる場合には、受託者は当該既存著作物の使用に必要な費用の負担及び使用許諾契約等に係わる一切の手続きを行うこととする。また、著作権関係の紛争が生じた場合、受託者の責任において一切を処理するものとする。

14.その他:

- ①企画提案費用は、応募者の負担とする。
- ②その他詳細については当協会担当者と打ち合わせの上、行うものとする。

問い合わせ先・応募申請先
公益社団法人 新化学技術推進協会
〒102-0075 東京都千代田区三番町2 三番町 KSビル 2F
TEL 03-6272-6880 FAX 03-5211-5920
E-mail chousa-koubo@jaci.or.jp URL <https://www.jaci.or.jp>