

3.5 機能と物質の設計・制御

物質もしくは機能を設計・制御する概念や技術はナノテクノロジー・材料分野全体に関与するものである。物質の設計・制御に関わる研究開発領域として、「元素戦略・希少元素代替」、「分子技術」、「データ駆動型物質・材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス）」などがあり、機能の設計・制御に関わる研究開発領域として、「空間・空隙設計制御」、「バイオミメティクス」、「フォノンエンジニアリング」などがある。これらはいずれも目的とする物質・機能を実現させるための構造の設計・制御手法として、サイエンスの新局面を拓き、社会・産業に貢献しうる領域である。以下は本節で取り上げた研究開発領域の概略である。

[空間・空隙設計制御]

物質・材料中の微細な空間構造や空隙構造の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性および界面をナノ～メソ～マイクロメートルで設計・制御・階層組織化することによって、従来の空間利用の常識を超える機能を発現する材料を開発することを目指したものである。空間・空隙構造制御材料の代表格としては、ゼオライト、メソポーラス材料、多孔性金属錯体、ポーラスカーボン、などがある。

[バイオミメティクス]

生物の構造と機能、さらには生態系に関する知見を、材料、デバイス、機械、構造物、システム等の設計・製造に総合的に活用することを目指す。生物・生態系に学ぶことにより、製造・使用時のエネルギー消費が少なく、持続可能性の実現を意識したプロセス技術、エネルギー、農業、建築・都市設計の開発など、幅広い分野での研究開発が進められている。

[分子技術]

分子を設計・合成・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するために必要な一連の技術を指す日本発の新しい概念である。「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る6つの横断的技術概念で捉え直し、それぞれで連携しながら研究開発を推進することを目的とする。

[元素戦略・希少元素代替]

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発することを目的とする。

[データ駆動型物質・材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス）]

計算科学による物性予測とそれを実証するハイスループット材料合成・評価、それらのデータを統合管理する材料データベースや機械学習などを統合的に活用することで物質・材料探索・設計を実現することを目的とする。実験、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータを駆使して、統計的手法により物質・材料の機能を制御する規則を探り、それを通して具体的に新物質・新材料の発見を加速する。

[フォノンエンジニアリング]

ナノスケールの微小空間、微小時間での熱（フォノン）の振る舞いを理解し制御する

ことにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現することを目的とする。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノン／電子／フォトン／スピンなどの量子系の統一的理解、革新的な材料・デバイス技術などに関する研究開発を推進する。

3.5.1 空間空隙設計制御

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

物質・材料中の微細な空間構造や空隙構造の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性および界面をナノ～メソ～マイクロメートルで設計・制御・階層組織化することによって、従来の空間利用の常識を超える機能を発現する材料を開発する研究開発領域である。空間・空隙構造制御材料の代表格としては、ゼオライト、メソポーラス材料、多孔性金属錯体 (PCP: porous coordination polymer, MOF: metal-organic framework)、ポーラスカーボン、などがある。多様な空間・空隙構造制御材料は、構造の特長と設計の自由度、そこから生まれる機能の観点から、透過・分離・吸着・変換・貯蔵材料、触媒・反応性制御、構造材料、電池材料、エネルギー変換材料、ドラッグデリバリーシステム、生体適合材料、分子認識材料、電子材料など様々な応用の可能性をもつ。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の研究開発動向

新機能・性能の追求や、シェール革命や地球温暖化への対応といった大きな流れが、空間・空隙構造を制御できる材料の研究開発に拍車をかけている。世界的にはゼオライトから多孔性金属錯体の研究へ転向する研究が目立つが、現時点で、産業で活躍しているのはゼオライトである。国際学会として、ゼオライトは1967年以来、International Zeolite Conference (IZC)、多孔性金属錯体は2008年以来、International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds をそれぞれ開催している。多孔性金属錯体は2007年以降 IZC のセッションに加わり、2013年以降は Metal Organic Frameworks の委員会が設置された。以下では、材料系ごとに3つに分けて記載する。

●ゼオライト、メソポーラス材料

1756年にスウェーデンの鉱物学者 Axel F. Cronstedt により、自然界でゼオライトが見出された (天然ゼオライト)。それ以来、様々な角度からゼオライトの利用が検討されてきたが、とりわけ20世紀半ば以降の英国の Richard M. Barrer によるモルデナイトの合成、1972年の Mobil グループの構造規定剤 (SDA) を用いた ZSM-5 合成、1988年の黒田一幸 (早稲田大学) によるメソポーラスシリカの発見を経て、展開は大きく加速した。今日では数百種のゼオライト構造が作られ、吸着剤、イオン交換剤、触媒として様々な分野で利用されている。二酸化ケイ素を主骨格とする多孔性物質という点ではゼオライトもメソポーラスシリカも同じだが、ゼオライトは細孔径が主に 0.5–2 nm 程度であるのに対し、メソポーラスシリカはそれよりもやや大きい 2–10 nm 程の細孔径を持つ。ゼオライトによる分子を識別できる機能「分子ふるい」を利用した吸着分離は当初、直鎖と分岐を有する炭化水素分子を分離できることで注目を集めた。三種類のキシレンの異性体間分離は、沸点差が小さく蒸留が適用できないが、工業的に有用な p-キシレンの製造には世界中でゼオライトを用いた擬似移動層吸着装置が用いられている。ゼオライトの骨格は負に帯電しているため、電荷補償体として交換可能なカチオンを内包している。カチオンを Li⁺ に交換した X 型ゼオライトは空気中の酸素分子よりも窒素分子と相互作用が大きい。この特徴をいかして、空気から酸素/窒素を製造する装置としてゼオライトが幅広く用いられている。圧カスイング吸着法は工業的な利用

に加え、酸素吸入が必要な患者のための移動可能な酸素供給装置として日本でも広く利用されている。

イオン交換能は、天然ゼオライトの時代からよく知られたゼオライトの特性である。1970-80年代に、洗剤にビルダー（洗浄助剤）として加えられていたリン酸塩の環境中への排出が、赤潮の発生に代表される公害（湖沼・河川の富栄養化）を引き起こした。そのためリン酸塩に代わるイオン交換剤の開発が進められた。今日に至るまで利用されているビルダーがA型ゼオライトである。A型ゼオライトのイオン交換能により、水中で界面活性剤の働きを阻害するカルシウムやマグネシウムイオンがナトリウムイオンに交換され、使用後は環境中に放出されている。世界中で大量のA型ゼオライトが環境中に放出されているが、その構成成分はSi、Al、Oであるため、大きな環境問題を起こすことなく利用が続いている。

ゼオライトの触媒としての利用は、石油精製、石油化学の歴史とともに発展した。石油精製において蒸留と共にその根幹をなすプロセスは、重油留分を触媒作用によって分解し、低沸点の炭化水素に変換するプロセスである。この技術には流動層が用いられているため、流動接触分解 (Fluid Catalytic Cracking: FCC) と呼ばれている。本技術を支えているFCC触媒の主成分は、固体酸性を有するプロトン交換Y型ゼオライトである。さらに石油化学分野における低分子炭化水素の機能化にもY型ゼオライト、ZSM-5、モルデナイトをはじめとする様々なゼオライトが利用されている。工業的な利用は、ビルダーに関してはドイツのHenkel社、石油関連技術に関しては、米国のUnion Carbide社 (現、UOP社) やMobil社 (現、ExxonMobil社) をはじめとする石油メジャーの貢献が大きい。

メソポーラス材料の代表格であるメソポーラスシリカは、上述の早大の黒田らの合成報告以降、1992年のモービルR&Dのグループから、六方及び立方構造のメソポーラスシリカ (MCM-41, MCM-48) の合成が発表された。そして1993年には、豊田中央研究所と早稲田大学との共同で、六方構造のメソポーラスシリカ (FSM-16) の合成が報告された。これらをきっかけにして、メソポーラス物質の研究は世界中に拡がり、関連する論文数は急増した。当初は、合成面での進展が目覚ましく、様々な骨格組成、細孔構造、形態（粒子、薄膜、モノリス等）のメソポーラス物質が合成された。特に骨格組成はシリケートだけでなく、遷移金属酸化物、カーボン、そして金属と無機物質全般に拡張され、更に有機シリカハイブリッド系にも拡張された。応用も多岐に渡っており、当初は触媒担体や吸着剤が主であったが、最近では、ドラッグデリバリーシステム (DDS) や二次電池への応用に関する論文数が急増している。応用面から見たメソポーラス物質の特徴は、次の通りである。(i) 大きな細孔直径、(ii) 細孔容量が大きい、(iii) 多様な骨格組成、(iv) 共有結合の安定な骨格構造。メソポーラス物質の最も大きな構造的特徴は、名前についている通り、細孔直径が“メソポア”領域にあることである。ゼオライトは、結晶構造に基づく細孔直径はすべてマイクロポアである。MOFやCOFも、多くはマイクロポアが主体であるが、最近ではメソポア領域の大きな細孔径を有するものが報告されている。応用面からメソポアのメリットを考えると、細孔内での物質の拡散が有利な点を挙げることができる。これは触媒への応用を考えた場合には、大きなメリットとなり、細孔内部まで有効に活用できることになる。一方、マイクロポアでは、拡散律速となり、細孔の入り口付近のみしか利用されない。また、細孔容積が大きいという特徴は、多く

の薬剤を保持する必要がある DDS への応用には大きなメリットとなる。また、多様な骨格組成を取る得ることから、応用分野も多岐に渡っている。特に、導電性のあるカーボンや遷移金属酸化物のメソポーラス物質は、電池材料として活発に研究がなされている。更に、共有結合の安定な骨格構造を有することは、応用面では大きなメリットとなる。日本化成はメソピュア®の商品名で、シートに加工して結露防止、調湿、防曇用に、メソポーラスシリカ粉体として触媒担体、ガス吸着、吸着物の放除用に販売している。大手架装メーカーではトラックの荷台部の結露防止用に採用している。また太陽化学は世界初のメソポーラスシリカの実証プラントを建設し、調湿材料や、Low-k 材料、触媒材料へと展開している。最近の例からは、2013年に北大の福岡淳ら報告したメソポーラスシリカ担持白金がエチレンを 0°C以下の低温で完全酸化 ($C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$) する特異な触媒特性がある。エチレンは、野菜や果物の保管中に発生し、そのまま放置すると腐食を促進することが知られている。2015年に日立アプライアンス株式会社は、メソポーラスシリカ担持白金触媒を、鮮度保持機能付きの新型家庭用冷蔵庫として実用化した。この特異な触媒特性に対するメソポーラスシリカの役割はまだ分かっていないが、他の担体（シリカ、アルミナ、チタニア、ジルコニア等）と比較して顕著な効果が見られている。今後、業務用冷蔵庫や流通過程（トラック、船、飛行機等）での鮮度保持への利用拡大が期待されている。

海外では、欧州の FP-7 のもと進められた 3 つのプロジェクト、ECO-ZEO（266 万ユーロ）、ZEOMORPH（152 万ユーロ）、ERC-SG（152 万ユーロ）を経て、現在は Horizon2020 のもとでオランダを中心としたバイオ原料からの基幹化学品製造触媒プロジェクト（ZeBioApp, 1800 万 Euro）や、スペインを中心とした CO₂ 分解光触媒プロジェクト（ZESMO, 1600 万ユーロ）が実施されている。米国ではバイオマス原料を用いた化学品製造に関する研究プロジェクトがエネルギー省（DOE）の支援で発展し、University of Delaware を中心に研究が進められている。2009年に同大に Catalysis Center for Energy Innovation が設立され、とりわけ糖を起点として様々な機能性化学品の製造が検討され、多くのプロセスでゼオライト触媒が利用されている。様々なゼオライト触媒を組み合わせのみで、糖からペットボトル原料が合成できることが示されている。

ゼオライトの特異な応用例として、銀イオンで交換したゼオライトを用いた抗菌技術がある。シナネンゼオミック社はある種の金属イオンが抗菌性を有することに着目し、銀イオンを放出する担体としてゼオライトに着目した。純度が高くアルミを多く含むゼオライトを合成し、これを銀イオンとイオン交換することで、抗菌剤として商品化することに成功した。この素材をデオドラント製品として商品化したものが資生堂の Ag+ シリーズである。これ以外にも銀イオン交換ゼオライトは、様々な日用品の抗菌化に貢献した。コンクリートに添加することで抗菌化し、下水道施設の腐食防止に活かす等の成果が得られている。

その他、環境中に放出された放射性同位体元素の濃縮・回収にゼオライトを用いたイオン交換法が検討されている。福島第一原子力発電所より放出された放射性セシウムイオンを、共存するアルカリ金属イオンから濃縮・回収するため、天然ゼオライトならびにゼオライトと類似のマイクロ多孔性を有するシリコチタネートがイオン交換剤として

用いられている。

●多孔性金属錯体

有機配位子を金属イオンによって配位結合を介して連結することで作られる無限骨格構造をもつ錯体で、1959年に世界で初めて銅(I)アジポニトリル錯体のフレームワーク構造が示された。その後 Omar M. Yaghi (UC Berkeley) が MOF と名付け精力的に展開した。1997年に北川 進 (京都大学) らが溶媒を含むクラスレート構造ではなく、室温でポロシティをもつ安定なフレームワークを発表し、多孔性金属錯体の概念が提唱された。その後現在までに 6,000 以上もの構造が発表されている。

吸着・分離材料への応用は引き続き研究課題として大きなトピックではあるが、最近ではその他の機能性として導電性、反応場、センサ、エネルギー捕集、医療応用などにも注目が集まってきており、応用範囲は拡大しつつある。MOF と同様の分子性多孔性結晶として共有結合性有機構造体 (Covalent Organic Framework: COF) に関する研究開発も世界中で活発に行われている。COF は MOF と異なり、骨格中に金属を含まず、有機元素のみから構築された結晶性ネットワーク型構造を有しており、アメリカの Omar M. Yaghi らにより 2005 年に最初に報告された。MOF と同様に高い設計性を有しているため、世界中で多くの研究者がこの材料の開発に参入しており、日本では北陸先端大の江東林らが積極的に研究を展開している。江らは特に COF の電子的特性に着目し、精密に機能性部位を配置できる結晶性構造を利用して、新たな電荷輸送材料などの開発を進めている。

従来型の多孔性材料はゼオライトや MOF のようにネットワーク型骨格構造を有しているものがほとんどであり、ネットワークを組まない多孔性分子の例は少なかった。しかし、ここ数年でイギリスのリバプール大学の Andrew I. Cooper らを中心として、多孔性有機ケージ化合物の開発が精力的に行われるようになっており、日本でも金沢大学の生越らが独自の化合物を使って研究を進めている。このような材料は分子内部の空間と分子同士のパッキングにより生じる外部の空隙がつながることで多孔性構造を構築しており、そのパッキング構造の変化により動的に空間構造を変化しうる材料となっている。また、ネットワーク型の材料と異なり、様々な溶媒に可溶なものが多いことから、溶液からのプロセスが可能になる。様々な溶媒を用いることで、有機ケージのパッキング構造を変化させることや、数種類の有機ケージを混合することが可能であり、通常のネットワーク型多孔性物質にはないアモルファス状態での高いポロシティなどが報告されている。置換基の改変により様々な機能の発現 (吸着、分離、キラル認識など) が可能になり、分子性空間材料の新しい可能性を示している。多孔性構造を有する有機高分子材料の開発は過去から行われており、基本的には高分子鎖の架橋により空隙構造を作り出すものがほとんどであった。しかし、このような手法を用いると、高分子の溶媒への溶解性は低く、成形加工性に優れた材料とはいえない。これに対して、溶媒に可溶でプロセスが容易な多孔性材料として Polymers of Intrinsic Microporosity (PIM) と呼ばれる物質群が 2000 年代に入って研究されている。イギリスの Peter M. Budd らは効率よくパッキングできないひずみ構造を持った一次元鎖高分子を用いて、固体状態で多孔性を示す材料の開発を行っている。規則的な細孔形状を持たないアモルファスな材料ではあるが、高いプロセス性を有し、フィルムなどへの加工が容易であるため、機能

性多孔性材料としての展開が期待されている。加工性と機能性の観点から、多孔性材料と高分子材料とのハイブリッドである Mixed Matrix Membrane (MMM) が注目を集めており、上述の MOF や COF、有機ケージ材料との複合体形成の報告がここ数年で非常に増えている。実際、MOF や COF などの材料のモルフォロジーは結晶性粒子であり、高い分子認識能や吸着能を有していたとしても、ガス分離技術に使うには障壁が高い。様々な有機高分子との MMM を構築することで、結晶間隙をすり抜けるガス漏れの影響を大きく下げることができ、実用的なポーラスフィルム材料開発への取り組みが世界中で精力的に行われている。

応用面では多孔性金属錯体の試薬販売を除くと、米国の NuMat 社の産業ガスの貯蔵ボンベへの利用がある。毒性の高い半導体製造用ガスを多孔性金属錯体に吸着させてシリンドーに充填したもので、通常のボンベでは容器内が高圧のため、リーク時に高い圧力のまま外部へガスが放出されるのに対して、多孔性金属錯体に吸着させた場合、ボンベ内の圧力が高くならず、ガスが外部との圧力差で拡散していくためリーク時の安全性が高められる特長がある。産業用途として規模の大きいものは BASF 社の車両用ボンベへの利用である。仏石油企業の TOTAL は 2009 年～2013 年のプロジェクト、MACADEMIA (MOFs as Catalysts and Adsorbents: Discovery and Engineering of Materials for Industrial Applications) で、多孔性金属錯体による分離に関する研究開発を報告した。プロピレンの重合で未反応プロピレンを回収する窒素/プロピレンの分離の回収条件を求める検討を行った。その他、PSA による CO₂/硫化水素、プロパン/プロピレン、フィシャートロブシュ反応、メタノール製造に関連する水素/CO₂/一酸化炭素の分離の検討も行っている。また TOTAL を含む MACADEMIA のパートナーは後継の M4CO2 プロジェクトで CO₂ の回収に取り組んでいる。

米国では DOE や NSF を通じて、欧州では Horizon2020 を通じて、いずれも多数且つ多様なテーマ・切り口からの、多孔性金属錯体関連のプログラム・プロジェクトが進行している。相当数のためにここでは書き切れないが、例として NSF のプロジェクトをいくつか挙げると、“A Novel MOF Material for the Separation and Recovery of Unprocessed Natural Gas During Oil and Gas Production” や、“Hierarchical MOF Assemblies for Solar Energy Harvesting and Storage”、など、環境・エネルギー関連のテーマが目立つ。他にも計算科学を用いた材料設計を指向した “High-throughput Computational Discovery of New Nanoporous Materials for Energy Storage” や、触媒応用を指向した “Engineering MOF Catalysts using Advance Functionalization Techniques” など、多様な構成で実施されている。米国は NSF を中心として大学研究者の参画プロジェクトが特に充実しているが、欧州では産業界やベンチャーが参画するプロジェクトが目立つ。

アジアでは、中国の研究規模が際立っている。米国や日本での研究・留学経験のある MOF/PCP 関連の研究者が多数活躍しており、政府によるプロジェクトも充実している。日本では、JST 戦略的創造研究推進事業の CREST およびさきがけの「超空間」領域、ACCEL の多孔性金属錯体を基盤とした二つの課題 (PCP ナノ空間による分子制御科学と応用展開、自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析) が進行している。また、科研費特別推進研究 (階層的配位空間の化学) が進行している。2016 年度からは新学術領域研究「配位アシンメトリー」がスタートし、多くの研究者が参画している。

● ポーラスカーボン

ポーラスカーボンの特徴は、構造中の様々な大きさの細孔と、それに起因する大きな表面積である。特に、径 2 nm 以下のマイクロ孔と径が 2 ~ 50 nm のメソ孔の存在が吸着作用の源である。高性能化・新機能を発現させるためにはマイクロ孔とメソ孔の制御が第 1 に重要となる。しかし、ゼオライトや多孔性金属錯体のような規則的な結晶構造に由来する均一な細孔とは違い、炭素構造そのものが乱雑であるため本質的に不均一である。そのため、炭素の細孔構造を自在に制御することは簡単ではない。たとえば、典型的なポーラスカーボンである活性炭は、ガス賦活あるいは薬品賦活のどちらかの方法で炭素構造を化学的に酸化消耗させることで細孔を作り出しているが、炭素構造が乱雑なので生成してくる細孔のサイズは均一にはならない。もちろん、細孔サイズだけでなく細孔の形状や次元の制御も不可能である。つまり、従来の賦活法で作製する活性炭は空間・空隙構造制御材料とはならない。活性炭は精製、分離、触媒といった用途はもちろん、エネルギー貯蔵や環境浄化、医療の分野で活躍している材料である。現在も活性炭のさらなる高性能化は産業界において強く求められており、空間・空隙構造を精密に制御することが課題である。以下では空間・空隙構造制御をマイクロ孔、メソ孔、マクロ孔の制御という観点で順に記載する。

マイクロ孔の制御：マイクロ孔は径が 2 nm 以下の細孔で、孔の径や形状を制御するには分子レベルの制御技術が要求される。したがって、このサイズの空間・空隙構造制御は難度が高く、成功例も多くない。マイクロ孔の中でも 0.7 nm 以下のウルトラマイクロ孔を分子設計し自在に制御することは実現していない。しかし、0.7 nm 以上のスーパーマイクロ孔になると空間・空隙構造制御が可能となってくる。従来の賦活法でも、賦活の程度を制御することでマイクロ孔のみの活性炭を作製することができる。しかし、表面積は 1000 m²/g 程度と低く、マイクロ孔のサイズも制御されているとは言えない。2000 年に東北大学の京谷隆らは Y 型ゼオライトを鋳型として利用することで、ゼオライトの規則性を転写した大表面積のマイクロポーラスカーボンを合成した。このポーラスカーボンは径 1.2 nm のマイクロ孔しかない極めて特異なポーラスカーボンであり、合成法を最適化すると表面積は 4000 m²/g に達する。さらに、生成したマイクロ孔はゼオライトの 3 次元チャンネルのように規則的に相互に貫通している。マイクロ孔は水素や天然ガスの吸蔵や電気化学キャパシタにおける電解質イオンの貯蔵サイトになる。そのため、活性炭はガス貯蔵材料の有力候補であり、電気化学キャパシタ用電極として実際に使用されている。しかし、これらの用途における飛躍的な性能向上を目指すとなると活性炭では難しくなり、空間・空隙構造制御によりマイクロ孔が制御されたポーラスカーボンが必要となる。たとえば、水素吸蔵ではゼオライト鋳型から作製したゼオライト鋳型炭素が 30 °C で水素圧 35 MPa において 2.2 wt% の水素吸蔵能を示しており、ポーラスカーボンでは世界最大の値である。平成 25 から 29 年度の NEDO 委託事業「燃料電池自動車用水素貯蔵材料に関する研究開発」においては貯蔵容器も含めた水素貯蔵量として 6 mass%、体積貯蔵密度は 5 kg/100 L が求められており、まだ現状と目標値のギャップは大きい。天然ガス吸蔵では多孔性金属錯体が有望視され、ポーラスカーボンの研究は低調である。一方、電気化学キャパシタ用電極では、表面科学が制御された多種多様のポーラスカーボンが評価されており、報告例も極めて多い。マイクロ孔の次元制御は、カーボンが sp² 炭素原子からなる巨大な平面状の多環芳香族分子の集合体である限り、カーボン中で生

成するマイクロ孔はスリット状にならざるを得ない。したがって、マイクロ孔の次元制御は本質的に不可能と思われる。しかし、唯一の例外は単層カーボンナノチューブであり、その内径はマイクロ孔の領域であるにもかかわらず孔の形状は円筒状である。単層カーボンナノチューブの例はマイクロ孔制御の新しい可能性を示している。

メソ孔の制御：径が2～50 nmのメソ孔の領域になってくると空間・空隙構造制御の難度は下がってくる。賦活法においてもメソポーラスな活性炭を作製することは可能だが、メソ孔とともに相当量のマイクロ孔も生成する。しかしこの方法でメソ孔のサイズを精密に制御することは困難である。賦活法と異なる方法としてゾルゲル法と鋳型法があり、メソ孔制御で最も頻繁に利用されているのは鋳型法である。1981年にJ. H. Knox(英国 University of Edinburgh) がシリカゲルや多孔質ガラスを鋳型としてポーラスカーボンを合成した。1995年に京谷隆(東北大学)らは直線状細孔をもつアルミニウム陽極酸化皮膜を鋳型とすることで均一な径と長さをもつカーボンナノチューブを合成できることや、1997年にゼオライト鋳型からメソポーラスカーボンが生成することを示し、鋳型法の有用性が認識されるようになった。その後、多くの研究者が様々な無機鋳型を用いるようになった。2004年に稲垣道夫(愛知工業大学)らは弱酸に可溶性のMgOやその前駆体となるMg塩を鋳型とすることでメソポーラスカーボンを作製することに成功、この方法で作製されたメソポーラスカーボンは東洋炭素(株)からクノーベル®として商品化されている。無機鋳型の代わりに有機鋳型を利用すれば、炭素化中に有機鋳型は熱分解していくので、鋳型除去のためのフッ酸やアルカリ処理が不要になる。しかしこの方法は、細孔構造の均一性や、炭素前駆体が高度に架橋した熱硬化性樹脂に限られてしまうなどの欠点がある。これら種々の方法を組み合わせることなどによって、それぞれの持つ欠点を克服する研究開発が進められている。最近では、グラフェンを3次元化することでポーラスカーボンを作製しようとする試みが増えている。いわゆる、3次元グラフェンである。しかし、メソポーラスカーボンに限ると、ほとんどの研究ではグラフェンの前駆体としてグラフェンオキシサイドまたはグラファイトオキシサイドを利用している。グラフェンオキシサイドを還元して得たグラフェンは欠陥が多く、CVD法等で得られる高品質のグラフェンには及ばない。折角のグラフェンの特徴を活かすことができず、本当の意味で3次元グラフェンとは言えないだろう。

マクロ孔の制御：径が50 nm以上の細孔はマクロ孔とよばれる。一般にマクロ孔は吸着分子の移動や拡散を促進するには重要だが吸着のサイトにはならない。とくに電池や電気化学キャパシタ、ガス吸蔵などのエネルギー貯蔵材としての用途ではマクロ孔の存在は体積当たりのエネルギー密度を低下させるので、できるだけマクロ孔の生成は避けたい。しかし、マクロ孔が多いと非常に軽い炭素多孔体ができる。1987年にPekala(米国 Lawrence Livermore National Laboratory)らは岩塩を鋳型として低密度カーボンフォームを作製している。その後、疎水性の高いマクロポーラスカーボンである膨張黒鉛が海水に流失した重油や水中の有機溶媒の収着に高い性能を示すことがわかり、重油の収着を主な目的にして様々なマクロポーラスカーボンが作製されてきた。グラフェンやカーボンナノチューブを基本単位としてマクロポーラスカーボンを合成しようとした試みが多い。どの場合もグラフェンの原料としてグラフェンオキシサイドを用い、そのゲル化能を利用してマクロ孔を形成させている。例えば、2013年にC. Gao(中国 浙江大学)らはグラフェンオキシサイドとカーボンナノチューブの混合物を水中でゲル化させ、それ

を凍結乾燥、さらにグラフェンオキサイドを還元することで超軽量カーボンエアロゲルを合成している。この物質は超軽量性ととも広い温度範囲で弾性を示し、重油の収着材以外にも材料として応用の可能性がある。マクロ孔の段階になると高品質な3次元グラフェンを合成できるようになる。

(3) 注目動向

●イオン性の空間・空隙材料

新しいタイプの材料として、分子性のイオン結晶でありながら階層的な空間・空隙構造を持つ物質が近年研究されている。イオン結晶は、クーロン力により組み上がるため多孔体のモチーフとしては不向きであると考えられてきたが、単核イオンの代わりにナノサイズの分子性イオンを構成ブロックとすると、イオン間の隙間がサブナノサイズの細孔になり、階層性を持つ構造の構築が可能であることが見出されている。このイオン性物質はゼオライトやMOFと比べると、結晶格子内に働く電場がゲスト分子やイオンの吸着状態に影響を及ぼすことや、構成ブロック間に強力な共有結合がないため、予め構成ブロックに構築した吸着点や反応活性点を結晶化後も活用できるなど、結晶構造の柔軟性に特徴がある。内田さやか（東京大学）らは、ポリオキソメタレートアニオンを設計し、分子性カチオンとの自己組織化によるナノ多孔体の創製に成功している。新物質開拓の余地があり、イオン結晶に特有な機能、ガスやイオンの吸着分離、イオン・電子伝導、触媒、光学特性などの機能発揮が今後期待される。

●ゼオライト、メソポーラス材料

ゼオライトを吸着剤として、ガソリンエンジン車から排出される hidrocarbon の回収（HC Trap）へ応用する研究開発が依然として活発である。HCは主としてエンジン始動時に排出されるため、一時的に吸着剤でトラップし、排ガス温度が高温になった段階で脱着させることができれば、三元触媒におけるNO_xの還元剤として利用することが可能になる。このようなコンセプトのもとで当初はZSM-5が利用されたが、HCの分子サイズの関係でより細孔が大きいβ型ゼオライトが利用されてきた。初期はβ型ゼオライトの耐久性に問題があり、一時HC Trapに頼らずに対応する方向に舵が切られたが、エネルギー効率の面からリーンバーン条件の適用が検討される中で、新規なゼオライトの開発もあり、三元触媒にHC Trap技術を組み合わせる方法が改めて注目されている。

ゼオライトの触媒利用で注目される技術は、ディーゼル車からの排出されるNO_xの選択還元法（SCR）である。ディーゼル排ガスはガソリンに比べ、温度が低く、また共存する酸素濃度が高いため、三元触媒を利用することができない。そこで固定源でNO_x除去に用いられているアンモニアを用いた選択還元法（アンモニアSCR）の利用が検討された。アンモニアそのものを自動車に搭載することはリスクが高いため、高温下で分解しアンモニアを発生する尿素水溶液を還元剤に用いたNO_x還元法（尿素SCR）が開発され、その触媒としてゼオライトが注目を集めている。当初、ドイツBASF社が開発した銅イオン交換したCHA型ゼオライト（Cu SSZ-13）が有効と考えられていた。しかし最近の検討から、HC TrapやDOC触媒にも利用された実績を有するβ型触媒やCHA以外の八員環ゼオライト触媒でも期待される触媒が見出されてい

る。

海外では、触媒メーカーよりゼオライトを用いた SCR 触媒関連の特許の出願が増加している。これまで ZSM-5 やベータ型ゼオライトが使用されてきたが、既存品とは異なる新規構造を持ったゼオライト、たとえば CHA 構造を有するアルミノシリケートである SSZ-13、同構造の SAPO-34、AEI 型、RHO 型等の構造を有する触媒の開発が進んでいる。アジアにおけるモータリゼーション、化学触媒の性能的飽和状態、環境規制、温暖化抑制機運の高まりは、自動車排ガス触媒市場は今後も拡大基調にあると考えてよいだろう。

日本では、内燃機関に関する基盤技術の強化と次世代を担う産学双方の研究開発人材育成を理念に掲げ、自動車会社 9 社が学官と連携し、自動車内燃機関技術研究組合 (AICE) を立ち上げている。その大きな柱の一つが尿素 SCR に関する触媒の開発である。わが国の自動車工業界においてこのような共同の取り組みは初めてのものととして注目される。

東大の大久保らは、従来ハイシリカのゼオライトの合成には必須と考えられていた有機構造規定剤 (OSDA) を用いずに、数々のゼオライトが合成可能であることを示した。その中で開発された β 型ゼオライトは、従来品に比べて Al を骨格中に多く含むためイオン交換容量が大きく、かつ欠陥が少なく耐久性が高いというこれまでにない特徴を有している。また NO_x に対する特異な吸着特性や触媒反応特性を有している。これらを背景に、産業革新機構の投資を得たユニゼオ株式会社が設立され、また JST A-Step で OSDA フリー合成技術による β 型ゼオライトの量産に向けた検討が進んでいる。

これらの他、ゼオライトの薄膜化による分離膜の開発があげられる。ゼオライト分離膜の開発は 1990 年頃より進められてきた。三井造船株式会社が世界に先駆けて A 型ゼオライト膜を上市したが、A 型ゼオライトは耐久性に限界があるため、主としてアルコールからの脱水に適用対象が限られてきた。最近ではよりハイシリカ型のゼオライトを用いたゼオライト膜の開発が注目される。早稲田大学の松方教授が代表をつとめた NEDO の「GSC/規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」プロジェクトと共同で、三菱化学は 2010 年に CHA 構造のアルミノシリケートゼオライト膜の開発に世界で初めて成功した。この膜は高い配向性を有し、ほぼ無欠陥であることから、高い分離選択性、また大きな分離速度が得られる。JX 社の定期点検中のプラントにおける実証実験を通して、ゼオライト膜分離技術が省エネルギーに大きく貢献することを明らかにした。プロジェクトに参画した三菱化学、日立造船、ノリタケカンパニーリミテドはこれらの技術の実用化に向けた検討を進めている。ガス分離については、UOP 社の高分子膜が東南アジアで天然ガスと CO₂ の分離において実用化されているが、CH₄/CO₂ のガス分離性能ではゼオライト膜が圧倒的に優れており、三菱化学と千代田化工のグループが JOGMEC のプロジェクトにおいてこの課題に取り組んでいる。CO₂ の排出削減法として CCS が提唱されているが、安価な補集法が求められている。アミン類を含有したヒドロゲルを支持体に固定した促進輸送膜については、国内で住友化学が RITE を核とする技術組合を通じて検討している。

メソポーラス材料に関しては、メソポーラスシリカナノ粒子のドラッグデリバリーシステム (DDS) への応用に関する論文が増加傾向にある。2015 年には関連論文数はおよそ 900 報に上っているが、この数は MOF の DDS への応用に関する論文数の約 200 報

を大きく上回る。これは、メソポーラスシリカの大きな細孔容積（多くの薬剤を保持できる）、無毒で生体適合性がある、表面修飾が容易（薬剤保持・放出の制御が可能）という特長に基づいている。刺激（pH, 光など）に応答した薬剤の放出制御も行われている。また、電池材料へ応用する論文が急増している。メソポーラスカーボンや窒素ドーピングメソポーラスカーボンを利用したスーパーキャパシタ、Li イオン電池、Li-S 電池への応用、メソポーラス金属酸化物を利用した、Li イオン電池、Li-S 電池への応用、そして窒素ドーピングメソポーラスカーボンを利用した燃料電池の電極触媒（水の還元反応）への応用が多数報告されている。これらの応用は、電子活性なカーボンや遷移金属酸化物にメソポーラス構造を形成することで、表面積を大きくしたり（キャパシタ容量の向上）、物質拡散を容易にする（リチウムイオン電池の充放電レート向上）などを狙ったものである。触媒関係では、分子触媒の固定担体としての利用が増えている。メソポーラスシリカは細孔径が大きいいため、分子触媒を細孔内に固定しても、細孔が閉塞することなく、嵩高い基質もスムーズに拡散できる。また、脇・稲垣（豊田中央研究所）らにより、リンカーを使わずに金属錯体を細孔表面に直接固定できる方法が開発され、均一系の錯体触媒と同等の触媒活性の発現に成功している。錯体触媒の固定化により、触媒の回収・再利用が可能となり、医薬品や化成品の製造コスト低減や環境負荷低減への貢献が期待される。

●多孔性金属錯体

有機ケージ分野の特筆すべき研究として、Stuart James (Queen's University Belfast) らが液体状の多孔性材料の開発を可能にした。有機ケージの骨格に環状エーテル部位を導入することで、ケージ同士のパッキングを阻害するだけでなく、融点の低下までも引き起こしている。このような多孔性液体はこれまでの固体状多孔性物質とは一線を画した革新的な新材料となり得る可能性を秘めており、今後の展開が期待されている。

君塚信夫（九州大学）らはジフェニルアントラセンを配位子として作製した MOF 結晶の表面にドナー性分子を結合させることで、太陽光程度の弱い光でも効率よくフォトンアップコンバージョンを起こすことができることを報告した。一般的な分子の拡散を用いる方法ではなく、エネルギーの拡散を効率よく行うことで、固体状態でも高い性能が発現することを見出した。

植村卓史（京都大学）らは MOF の細孔内で異なる種類の高分子を順次合成し、得られた複合体から MOF のみを除去することで、分子レベルで相溶化した高分子ブレンドを取り出すことに成功した。常識的には混合することはない高分子の組み合わせでも、相溶化が可能なことを証明し、高い一般性も示された。慣例的な方法で得られたブレンド体に比べてはるかに高い熱安定性を示したことから、分子レベルで究極に混合することにより、プラスチック材料の持つ様々な機能を飛躍的に向上できる新手法になると期待されている。

Easan Sivaniah（京都大学）らは、PIM に特殊な熱処理を施し架橋構造を形成することで、世界最高性能のガス分離膜材料を作成することに成功している。このガス分離膜は、従来用いられているガス分離ポリマー膜に比べて、ガス透過速度が約 100 倍、ガス選択分離度も約 2 倍という極めて優れた性能を示している。また、この PIM 材料に MOF やシリカなどを複合させた Mixed-matrix membranes (MMM) を作成するこ

とも可能であり、ガス選択分離率をさらに上昇させることにも成功している。

藤田誠（東京大学）らが開発した MOF を用いた「結晶スポンジ法」による分子構造解析は飛躍的な進化を遂げており、ナノグラム量の液状サンプルの測定や通常は困難なキラル化合物の絶対構造解析などを可能にしている。NMR などと組み合わせることで、複雑な構造を持つ生体分子の構造解析をも可能にし、未知試料の構造解析を可能にする汎用的手法となりつつある。

● ポーラスカーボン

マイクロ孔の制御：ガス分離や透過に使用されるカーボン膜では、その厚さが薄いほど透過流量が増えるので、薄くてかつ丈夫な膜が望まれる。その意味で究極の薄さを誇る単層グラフェンが分離あるいは透過膜として利用できれば理想であるが、グラフェンにはガス透過能はない。しかし、2014年に A. K. Geim (The University of Manchester) らは単層グラフェンに電圧を印加すればプロトンが透過することを発見した。さらにグラフェンに Pt ナノ粒子を担持するとその透過能が促進されるとしている。一方、2015年に F. M. Geiger (Northwestern University) らは水中で単層グラフェンがプロトンの透過能を持つことを発見した。グラフェン表面にある原子レベルの欠陥に水酸基があり、それによって Grotthuss 機構でプロトン伝導が生じていると報告している。どちらにしても単層グラフェンが透過膜として機能すれば、従来のウルトラマイクロ孔を通じて透過能を発現していたカーボン膜とは全く異なる新しい原理のカーボン透過膜となる。マイクロポーラスのゼオライトを鋳型として利用すれば均一な細孔をもつマイクロポーラスカーボンが生成するが、2016年に R. Ryoo (韓 KAIST) らはランタンをイオン交換したゼオライトを用いれば、ゼオライトのナノチャンネル中への炭素導入がさらに容易になることを示した。この研究によりゼオライト鋳型法によるマイクロポーラスカーボンの作製が今後さらに拡がり、一般化すると期待される。

メソ孔の制御：単層カーボンナノチューブが密集して成長したものを押しつけるとナノチューブ同士がお互い凝集して薄いシートになる。産業技術総合研究所が開発したスーパーグロース CVD 法を用いてシリコン基板上に垂直に成長した単層カーボンナノチューブも基板から取り出してシート状にすることができる。カーボンナノチューブシートは表面積 1300 m²/g 程度であるが、最大細孔径 10 nm のメソポーラスカーボンであった。このカーボンは単層カーボンナノチューブからできているので活性の高いエッジサイトもなく電気伝導性も極めて高い。4 V の高電圧下でも電極として作動し、極めて高いエネルギー密度を示した。2009年に西信之（分子研）らは銀アセチリドを炭素前駆体としてデンドライド状のメソポーラスカーボンを合成した。このカーボンの表面積は 1610 m²/g であり、その骨組みは主に単層グラフェンからなっており、極めてユニークな構造をしている。そのため、活性の高いエッジサイトも少なく、耐酸化性の高い多孔質炭素電極として新日鐵住金化学からエスカーボン®として製品化されている。現在、車載用の燃料電池の炭素担体として実用化のための試験が進んでいる。2016年に西原、京谷ら（東北大学）はアルミナナノ粒子を鋳型としてメソポーラスな 3D グラフェンを合成した。この炭素の表面積は 2000 m²/g 近くあり、平均細孔径は 5.8 nm である。また、その骨組みはほぼ単層グラフェンからなっており、電気化学的な耐酸化性が高く、4 V の高電圧下でも電気化学キャパシタ用電極として作動する。さらに骨組みがグラフェン

からできているので、機械的柔軟性が極めて高く、500 MPa という高圧で圧縮して細孔径を 0.7 nm まで縮めても、力を取り除くと完全に元の形に戻る。

(4) 科学技術的課題

●ゼオライト、メソポーラス材料

ビルダー（洗浄助剤）として利用されている A 型ゼオライトを除き、ゼオライトは競合する無機材料（シリカ、アルミノシリケート、種々の金属酸化物など）に比べて高額であることが課題である。1990 年頃からゼオライト合成における有機構造規定剤（OSDA）の理解と利用が進み、それに伴い様々な新規なゼオライトが見出されてきた。今世紀に入り OSDA の多様化に加え、Al 以外の金属とフッ素の鋳化剤としての利用を組み合わせ、数多くの新しいゼオライトが合成され、*Nature* や *Science* 誌の表紙を飾った。この点でゼオライト科学は大きく進展したが、その一方で、合成に用いた金属や鋳化剤は工業生産にはコスト的にも環境的にも難しく、利用された OSDA は構造的に複雑で高コストのものあり、実用化に対する距離はむしろ大きくなってしまった。また大学では、合成に特殊なオートクレーブが必要となることから、原料のハンドリングに工夫を要するゼオライトよりは、メソポーラスシリカや多孔性金属錯体といった新しい多孔性材料に研究の中心を置くグループが増えてきた。東大の久保らは上述の OSDA フリー合成法や三菱化学との共同研究の成果としての超高速合成法を開発するなどの取り組みを進め、ゼオライトを安価に生産する技術開発を進めている。

メソポーラス材料に関しては、構造の多様性が飽和に達しつつあるため、各応用分野での技術的・工学的課題の解決に焦点が移ってきている。

●多孔性金属錯体

PCP/MOF 材料は通常の合成法では粒子状の結晶性化合物として得られ、その成型加工性が低いことが課題である。Tomas D. Bennett（ケンブリッジ大）らは融解挙動を示す MOF を作り出し、アモルファス化したガラス状態での多孔性構造の解析を可能にした。この研究によって、結晶性の MOF を薄膜にすることやファイバー状に加工することが進展する。日本でも堀毛悟史（京都大学）らが MOF のアモルファス化をすることで、イオン伝導性などの物性が向上することを発見しており、MOF 材料の応用における新たな可能性を引き出されつつあるのではないかと期待される。

また、PCP/MOF は結晶性制御が課題である。Roland A. Fischer（ミュンヘン工科大）らは、欠陥構造を制御することで、機能のチューニングすることを行っている。無機酸化物の系にはよく見受けられるコンセプトだが、最近 MOF の構造内にも積極的に欠陥を導入することが行われ、その量や位置、分布に応じた吸着挙動や触媒機能が見出されている。

●ポーラスカーボン

ポーラスカーボンの高性能化のために様々な方法で空間・空隙構造制御が行われている。しかし、どの方法においても、炭素前駆体から炭素化する過程を人工的に精密制御することは実現していない。炭素化過程を分子レベルで制御することが求められている。フラーレン（0次元）やカーボンナノチューブ（1次元）、グラフェン（2次元）を

基本単位として規則的で整然とした分子構造のポーラスカーボンをもし合成できれば、ポーラスカーボンもゼオライトや多孔性金属錯体と同レベルの空間・空隙構造制御材料となる。分子レベルで大きさやサイズが制御された積み木を化学結合で繋いでいく技術である。そのためには、ベンゼン環 (5員環、7員環、8員環も含めて) を有機化学の手法で縮合させて炭素構造体を合成していく、「炭素構造合成化学」とも言えるアプローチが模索される。その意味で、Max Planck 研究所の K. Müllen らのグループらの低分子からグラフェンナノリボンを作製する合成法、また、2013年から開始された JST ERATO の「伊丹分子ナノカーボンプロジェクト」と「磯部縮退 π 集積プロジェクト」は注目に値する。しかし、このような「炭素構造合成化学」のアプローチから合成された構造体はまだまだ有機化合物の域は出ておらず、実際のポーラスカーボンとのギャップは大きい。高温で進む複雑な化学反応である炭素化過程の積極的な制御が課題である。

(5) 政策的課題

全般的傾向として、欧米のプロジェクトは基礎研究と応用研究をバランスよく進めている。一方で日本のプロジェクトは、基礎と応用が、プロジェクト毎にどうしても乖離しがちである。本来、両者の活動には現場レベルでも相当の重なりが必要となり、両者の往来・浸み出しが国際競争上は肝要になる。基礎的な研究および開発が必要な技術要素は個々の研究者が取り組みやすい一方で、技術要素の「分解」とは逆の過程として、要素技術群を統合して実用技術へ適用しようとする際には、「統合」を志向するキー概念として、ナノからマクロへの「規模拡大」、統合して拡大しても全体調和が崩れない「高強度化」、現実的な時間と資源などのリソースに適応する「高速大量合成」「低コスト化」などが求められる。これらを科学的原理に翻訳し、各シーズ技術の基本原則との関連性を明確化することが重要であろう。それによって、要素の学術的深掘基礎研究であっても、成果を再び水平統合、再構築して実用技術へ接続することが可能になる。従来滞りがちであった社会ニーズと技術シーズの間を自由自在に往来することを可能とする技術開発体制が課題である。

2016年に、日本学術振興会に「ナノ多孔性材料とその産業応用」に関する先導的研究開発委員会が設立された。様々な多孔性材料 (ゼオライト、シリカ、MOF/PCP、カーボン) に関する産学の研究者・技術者が参画しており、新しい産業応用への展開が期待される。

(6) キーワード

空間空隙、超空間、ナノ空間、メソ孔、超分子、ゼオライト、メソポーラス、メソポーラスシリカ、多孔性金属錯体 (PCP: porous coordination polymer、MOF: metal-organic framework)、共有結合性有機構造体 (COF: covalent Organic Framework)、ポーラスカーボン

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	大学のグループ数は限られているものの、個々のアクティビティは非常に高い。JSPSに「ナノ多孔性材料とその産業応用」に関する委員会が設立(2016)。ゼオライトに関しては、有機構造規定剤(OSDA)を用いずに、数々のゼオライトが合成可能であることを、東大の大久保らが示した。このβ型ゼオライトは、従来に比べてイオン交換容量が大きく、欠陥が少なく耐久性が高いというこれまでにない特徴を持つ。ポラスカーボンに関しては、東北大・京谷らの鑄型炭素化法や、JST ERATO「伊丹分子ナノカーボンPJ」「磯部縮退π集積PJ」など革新的合成技術を開拓。MOFでは、第一線級の研究者が基礎研究をリード。MOFの認知度は広がりを見せ、研究者数は着実に増加。主要プロジェクト(ACCEL、CREST、さきがけ、ACT-C、特別推進研究)の新規採択は終了しているが、新学術領域研究などで多くの研究者をカバーしている。
	応用研究・開発	○	↑	ゼオライトに関しては、応用・製造とも層が厚い。上述のβ型ゼオライトは、産業革新機構の投資を得たユニゼオ社が取り組む。JST A-Stepでも量産検討が進んでいる。NEDO「GSC/規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」PJと共同で、三菱化学は2010年にCHA構造のアルミノシリケートゼオライト膜の開発に成功。日立造船、ノリタケカンパニーリミテドとともに実用化を検討。また、自動車会社9社が学官と連携し、自動車内燃機関技術研究組合(AICE)を設立。天然ガス/CO ₂ の分離では、三菱化学と千代田化工がJOGMECのプロジェクトで取り組んでいる。ポラスカーボンに関しては、稲垣らや西らの大学発の研究が東洋炭素や新日鐵住金化学から商品化されている。MOFに関しては、多くの企業がその魅力を認識するものの、開発コストの問題などから、基礎研究に留まっているケースが多く、まだ大きな進展は見せていない。
米国	基礎研究	◎	↑	ゼオライトに関しては、バイオマスを用いた化学品製造に関するプロジェクトがDOEの支援で発展し、University of Delawareを中心に研究。2009年に同大にCatalysis Center for Energy Innovationが設立、糖を起点として機能性化学品の製造が検討され、ゼオライト触媒を利用。糖からペットボトル原料が合成できることが示されている。カーボン系に関しては、Gogotsi(Drexel大)らによるカーバイド由来カーボン、F. M. Geiger(Northwestern大)らが発見した水中で単層グラフェンがプロトン透過能を持つことなどオリジナルの研究が多い。MOFでは、創始者の一人であるOmar Yaghiらを中心としたレベルの高い基礎研究、ScienceやNatureへの掲載数も多い。NSFのプロジェクトが充実しており、環境・エネルギー関連が目立つ。計算科学を用いた材料設計を指向したPJや、触媒応用を指向したPJなど、多様な構成で実施。
	応用研究・開発	◎	↑	ExxonMobil、Chevron、UOP社などゼオライト関係は石油メジャーでの研究開発力が高い。カーボン系では、上記のようなオリジナルの基礎研究とともに応用研究も多い。MOFに関しては、ノースウェスタン大学発のベンチャー企業であるNuMATが精力的に応用・開発を進め、多くの企業や国の支援を受け材料開発を行っている。
欧州	基礎研究	◎	↑	独創的な研究開発を行っているグループが各国にある。ゼオライトでは、Horizon2020のもとオランダを中心としたバイオマスからの化学品製造触媒PJ(ZeBiolApp, 1800万Euro)や、スペインを中心としたCO ₂ 分解光触媒PJ(ZESMO, 1600万ユーロ)を実施。カーボン系では、石炭由来の活性炭の研究が盛んだったので、賦活法や炭素表面化学の基礎研究が未だ多い。ポラスカーボンではJ. H. Knox(英)による鑄型炭素化の研究がある。K. Müllen(独)らによるグラフェンのボトムアップ合成の研究は注目に値。MOFに関しては、多孔性有機ケージ状材料などの開発も精力的に進め、幅広く進展。Tomas D. Bennett(ケンブリッジ大)らは融解挙動を示すMOFを作り出し、アモルファス化したガラス状態での多孔性構造の解析を可能にした。

欧州	応用研究・開発	◎	→	BASF 社が群をぬいた存在。各国から多様なベンチャー企業も生まれている。ポーラスカーボンに関して、M. Titirici (Max-Planck) らによるバイオマス由来多糖類の水熱炭素化の研究などがある。J. H. Clark (英 York 大) はデンプンからメソポーラスカーボンを合成し、大学発ベンチャーで商品化。BASF は MOF 材料の量産・販売を行っている。仏石油企業の TOTAL は MACADEMIA-PJ で、MOF による窒素/プロピレンの分離を研究。PSA による CO ₂ /硫化水素、プロパン/プロピレン、フィシャートロブシュ反応、メタノール製造に関連する水素/CO ₂ /一酸化炭素の分離の検討も行っている。また TOTAL を含む MACADEMIA のパートナーは後継の M4CO2 プロジェクトで CO ₂ の回収に取り組んでいる。産業ガスの世界シェア一位である Air Liquide 社 (フランス) も積極的に MOF 材料の開発に乗り出し、日本にも研究拠点を設けている。
中国	基礎研究	◎	↗	米国や日本での研究・留学経験のある MOF/PCP 関連の研究者が多数活躍。政府によるプロジェクトも充実。研究者数・論文数ともに極めて多く、資金が潤沢、知見は膨大なものとなっている。ポーラスカーボンに関しては、Zhao らの soft templating 法の研究等があるが、オリジナルの基礎研究例は多くない。しかし、中国に 3 つあった炭素関係の学会が合併して大きな炭素材料学会になるという動きがあり、今後早い時期に成果が出てくることは間違いない。MOF 材料に関する論文数は世界でトップであり、最近ではその研究内容のレベルも上がっている。特に Nature 姉妹誌などへの論文掲載数は飛躍的に上昇しており、独創性と先進性のある研究が着実に増えてきている。
	応用研究・開発	◎	↗	積極的な展開を図っている。潤沢な資金により、挑戦的な課題を大規模に展開。応用研究も極めて多く、その数は他の国を圧倒。MOF や COF 材料の開発に関するベンチャー企業が現れてきており、試薬などで購入できる機会が増えている。
韓国	基礎研究	○	→	メソポーラス材料は、R. Ryoo (KAIST) を中心に基礎から応用研究に到るまで開発が活発に進められている。2016 年に R. Ryoo らはランタンをイオン交換したゼオライトを用いれば、ゼオライトのナノチャンネル中への炭素導入がさらに容易になることを示した。この研究によりゼオライト鑄型法によるマイクロポーラスカーボンの作製が今後さらに拡がり、一般化すると期待される。MOF 材料の開発を基礎レベルで行っている研究者の数は増えておらず、革新的な研究結果も顕在化していない。
	応用研究・開発	△	→	実用・製品化につながる企業での研究・開発は少なく、顕著な動きは見せていない。ポーラスカーボンに関しては、鑄型炭素化法による応用研究が多い。国家プロジェクト「21th Frontier Hydrogen Energy R&D Center Program」のなかで、多孔性金属錯体による水素関連の応用開発が進められている。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 資源エネルギー庁、石油産業における研究開発の現状と課題について (2014)
一般財団石油エネルギー技術センター「次世代石油エネルギー研究会」報告書
- 2) 新学術領域研究「配位アシメトリー」
- 3) NEDO「水素利用技術研究開発事業」事業方針：平成 28 年度版
- 4) 新日鉄住金化学株式会社, <http://www.nssc.nssmc.com/news/download/130620.pdf>
- 5) 株式会社エヌ・ティー・エス「ナノ空間ハンドブック」
- 6) JST-CREST「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」
- 7) JST- さきがけ「超空間制御と革新的機能創成」
- 8) CRDS-FY2009-SP-05 戦略プログラム「空間空隙制御材料の設計利用技術」
- 9) CRDS-FY2009-WR-05 科学技術未来戦略ワークショップ「空間空隙制御・利用技術」報告書

3.5.2 バイオミメティクス

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

生物の構造と機能、さらには生態系に関する知見を、材料、デバイス、機械、構造物、システム等の設計・製造に総合的に活用するための研究開発領域である。生物・生態系に学ぶことにより、製造・使用時のエネルギー消費が少なく、持続可能性の実現を意識したプロセス技術、エネルギー、農業、建築・都市設計の開発など、幅広い分野での研究開発が進められている。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の研究開発動向

生物は進化の過程で、様々な試行錯誤や淘汰を経た結果、極めて理にかなった構造や機能を有するものが多い。例えば、昆虫の体表面や植物の葉表面に形成されるナノ・マイクロ構造は、機械的強度による内部器官の保護、保湿、超撥水性などの特徴的な機能を有しているが、その形成過程と機能発現機構は人工的に設計・製造されたものとは異なる原理に基づいている。また、生物は化石燃料や多量の希少元素を使わずに、常温・常圧にて再生可能エネルギーと再生可能資源を利用し、環境に負荷をかけずに自然と調和をしながら生存している。したがって、生物の構造・機能を解明・解析して得られる知識は、持続可能な社会に必要な新たな技術体系を構築する上で重要な指針になると期待される。生物の構造・機能に学ぶことは、材料科学からロボット工学に至るまで、ものづくりの規範のひとつとなってきた。今世紀になって、高性能の走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡ならびに走査プローブ顕微鏡が普及したことにより、これまで未開拓であった細胞内部や表面に形成される数百ナノメートルから数マイクロメートルの自己組織化構造とその機能が明らかにされるようになった。さらに、精密な合成・加工や自己組織化を含めた構造制御などのプロセス技術の大幅な進歩とも相まって、それらを模倣するナノテクノロジー・材料の開発が行われている。特に生物の表面構造の解明ならびに模倣を行う研究開発が盛んに行われており、古くは面ファスナー（マジックテープ、ベルクロ）の開発に始まり、ハスの葉を模倣した超撥水表面、超親水表面、低騒音新幹線パンタグラフ、新幹線車体、鮫肌水着、構造色繊維、ガの眼を模倣したモスアイフィルム、ゲッコーテープ、無痛注射器など、商業化まで展開された事例も見られ、最近では大型構造物や建築、都市設計などデザインの最適化にも適用され始めている。

多岐にわたる科学技術分野に関して、画像データや専門用語について分野横断型のデータベースプラットフォームに関する研究が日本で先行して進められている。また、生物学および工学の画像をデータベース化する発想支援型のデータベースや分野専門用語を階層化するオントロジーの取り組みが行なわれている。

諸外国の取り組みについては、米国では2008年に全米アカデミーズが、科学技術政策の提言書においてバイオミメティクスを強力に推進すべき課題として取り上げた。欧州ではこれに先立ちイギリスにおいて1990年代より「生物学から工学への体系的技術移転」として、バイオミメティクス研究が積極的に進められてきた。ドイツは政府主導のもと2001年にBIKON (Bionics Competence Network) を設立し、産学連携および産業化を目指した本格的な国際見本市“International Industrial Convention on Biomimetics”を開催するなどバイオミメティクスの振興に積極的に取り組んでいるとともに、2012年には国際標準化を提案しISO TC266が発足した。更に、Industrie 4.0を全面に打ち出

した2015年のハノーバーメッセでは、生物模倣自律分散型ロボットが展示され、IoTの分野でもバイオミメティクスの重要性が示された。フランスでは2013年に、Centre Européen d'Excellence en Biomimétisme de Senlis (CEEBIOS) というバイオミメティクスの産学連携センターを設立し、2016年には環境・エネルギー・海洋省との共催により様々な業界の参加のもとで“Biomim'expo 2016”を開催した。

一方、我が国でも研究開発としては、平成11年度に日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業の生物模倣型材料開発として「バイオミメティック材料プロセッシングの開発」（名古屋大学）が採択された。また文部科学省の21世紀COEには、平成14年度工学分野における生物模倣型モノづくりとして「自然に学ぶ材料プロセッシングの創成」（名古屋大学）と平成16年度農学分野の生物資源の新しい利用として「昆虫科学が拓く未来型食料環境学の創生」（京都大学）に関する大学院教育プログラムがそれぞれ採択されている。また、平成24年度より科研費新学術領域研究として「生物多様性を規範とする革新的材料技術」が採択された。

情報プラットフォームの整備だけでなく、平成24年に高分子学会にバイオミメティクス研究会を設置してバイオミメティクスの国際標準化に関する技術委員会であるISO/TC266にメンバー参加し、政策提案も視野に入れた活動を開始しており、平成27年にはナノテクノロジービジネス推進協議会にバイオミメティクス分科会が設立され、産業化の加速が予想される。

バイオミメティクスに関する国際学術誌としては、Elsevier社より“Journal of Bionic Engineering”が2004年より、IOP publishing社より、“Bioinspiration & Biomimetics”が2006年より、それぞれ刊行されている。またバイオミメティクス関連の論文は、材料、化学、バイオマテリアル、バイオメディカル等の学術誌に掲載されており、2016年のnature誌には、化学、材料、工学、細胞・分子生物学に限っても25,000以上の論文があり増加傾向が続いていると報じられた。このうち中国は、材料分野を中心にバイオミメティクス関連の論文数が著しい増加傾向にあり、近年では米国に次ぐ論文数となっている。また上述の“Journal of Bionic Engineering”のスポンサーになるなど、国際的な貢献も行うようになっており、その動向に注意する必要がある。また、特許庁が注目技術分野における特許の出願動向調査結果をとりまとめ平成26年度特許出願技術動向調査報告書「バイオミメティクス」においても、多様な分野において、世界的に特許出願数が増加していることが示された。

(3) 注目動向

今世紀になって、ロータス効果やゲッコーテープなどの表面ナノ・マイクロ構造制御を特徴とする材料開発がバイオミメティクス研究の新しい潮流として注目されている。

ナノ・マイクロ構造制御では、ナノとマイクロ・マクロとをつなぐ技術が重要であり、3Dプリント技術の飛躍的な発展に伴い材料の高次構造化が図られている。海洋生物に学ぶ防汚材料は、流体抵抗低減効果もあることから船舶のみならず航空機や自動車への展開が見られる。さらに、各種植物や昆虫、さらに菌類のさまざまな機能に着目した技術が発展する。

国内の注目研究動向としては、生物の電子顕微鏡観察について従来用いられてきた凍結乾燥や組織固定などの特有の前処理に対し、生きたままの生物の構造を観察するナノスー

ツ法が開発され、今後、バイオミメティクスに関する生体研究に加えて、医薬・医療分野での革新的な発展につながる可能性がある。

注目すべきプロジェクトとしては、国際光工学会（SPIE）や Material Research Society（MRS）など欧米を中心とする国際会議で、バイオミメティクスに関するセッションが常設されている。米国では Bioinspired Materials に関するゴードン会議が 2012 年、2014 年と開催されている。また、Biomimicry 3.8 Institute（米国 NPO）、サンディエゴ動物園、BioTRIZ 社（英国）、BIOKON International（ドイツ NPO、ドイツ政府支援を受けたバイオミメティクス専門家のネットワーク）などの活動も注目される。ドイツ材料学会（Deutsche Gesellschaft für Materialkunde (DGM)）は、2013 年から生物学と材料科学の連携のもと European Symposium on Intelligent Materials を開催しており 2017 年は 3 回目が予定されている。ドイツの大型科研費に相当する CRC では、バイオミメティック・アーキテクチャーのプロジェクトもあり、欧米ではバイオミメティック・デザインやバイオミメティック・スマートシティなどの生態系バイオミメティクスとも言うべき新しいトレンドが目立つ。

欧州では、EU の 7th Framework Programme (FP7、2007～2013 年) において “Bio-inspired Hierarchical Super Nanomaterials”、“Biomimetic Approaches of Natural Functional Surfaces with hierarchical micro & nano structure and the extreme Wettability” などバイオミメティクス関連のプロジェクトが多数採択されており、FP7 の後継フレームワークプログラムである Horizon 2020 ではバイオミメティックを表記するプロジェクトが増えており、分野は多岐にわたる。

ドイツの標準化機関であるドイツ規格協会（DIN）から国際標準化機構（ISO）に対し、バイオミメティクスに関する技術委員会（TC）の設立提案が行われ、2012 年 10 月から「ISO/TC266 Biomimetics」として活動が開始されている。事務局は DIN が担当し、我が国を含む 24 カ国の参画のもと、WG1 “Terminology, concepts and methodology”、WG2 “Biomimetic materials, structures and components”、WG3 “Biomimetic structural optimization” の審議が始まり、2015 年に京都で開催した国際委員会において発行した。我が国では 2012 年に高分子学会の研究会として発足したバイオミメティクス研究会が国内審議機関となり、2013 年には WG4 “Biomimetics –The knowledge infrastructure for biomimetics” の幹事国になり、生物から工学への“技術移転”を可能とする「オントロジー強化シソーラス」の概念を TR として文書化することになった。

一方、日本、韓国、中国を初めとしたアジアにおいても、バイオミメティクスに関連した国際会議や学術集会在定期的に開催されるようになっており、バイオミメティクスの学術的な注目度は全世界的に増え続けている。

国内では、平成 24 年度から文部科学省科学研究費新学術領域において、「生物多様性を規範とする革新的材料技術（生物規範工学）」が開始されている。細胞内部や表面に見られる数百ナノメータから数マイクロメータの構造を「サブセルラー・サイズ構造」と位置づけ、この構造のもつ機能の解明を通じて、新たな技術体系の確立を目指し、データベースの構築も行っている。

環境省は、平成 25～26 年度に「自然模倣技術・システムによる環境技術開発推進」

に関する検討を行い、また平成28年4月には国立科学博物館においてバイオミメティクスの企画展「生き物に学び、暮らしに活かす 博物館とバイオミメティクス」が開催されるなど、バイオミメティクスの社会貢献、アウトリーチに関する取り組みがはじまりつつある。さらに、バイオミメティクスの基盤となる生物学データの重要性が見直されており、スミソニアン博物館では“NEXT ENGINEERING REVOLUTION IS HIDING IN MUSEUM COLLECTIONS”というコンセプトのもと、2016年に“NSF-sponsored Workshop on Biological Collections as a Resource for Technical Innovation”に関するワークショップを開催している。

(4) 科学技術的課題

バイオミメティクスをさらに深化させて、次世代の技術体系の一部として組み込んでいくには、構造と機能の相関、構造形成の原理を系統的に整理し、人間が工学的に設計・製造したものと異なる原理の解明を飛躍的に進展させる必要がある。このためには、観察・分析・解析技術をより高度化した上で、生物学、農学、材料科学、機械工学、電子工学、建築学、都市工学、環境科学、航空工学、医学、歯学、自然史学などの幅広い分野との連携・融合が必要である。

また膨大な生物学情報から工学的に有用な知識に“技術移転”するためには、オントロジーや画像検索技術により発想支援を可能とする情報技術も必要となる。生物模倣の基盤は生物多様性にあることを認識し、膨大な生物学データから工学的発想を導き出すための基盤を整備する必要がある。科研費の新学術領域研究「生物多様性を規範とする革新的材料技術」では、生物学データベースと材料データベースの統合化を可能とする検索システムの開発が進められつつある。

(5) 政策的課題

欧米におけるバイオミメティクスでは、分類学、形態学といった生物学分野が先導的役割を果たしてきたものの、ロボティクス、機械工学、航空工学、電子工学、情報工学、医学、歯学、農学など幅広い分野でも研究が進展してきた。電子顕微鏡写真なども含むデータベースを基に、それらの分野の研究者と材料・デバイスの研究者との連携や産学連携が積極的に進められており、業界は多岐に渡る。

生物を工学的な視点から理解するためには、生物学を主とする理学と材料科学を中心とした工学の連携融合が不可欠である。しかし、これまで国内では両者が議論する場が少なく、研究を発展させる上で障害となっていた。近年ようやく新学術領域研究や国際会議等を通して、生物学、自然史学などの研究者と材料科学、機械学、環境科学、医学などの研究者との連携が始まったが、産学連携や産学官連携については未だ不十分な状況にある。今後、バイオミメティック関連の拠点形成などを通じて、バイオミメティクス自体の研究を促進させるとともに、将来を担う人材の育成にも注力する必要がある。

(6) キーワード

生体模倣材料、自己組織化、生物多様性、機能形態学、バイオニクス

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	自己組織化材料や表面ナノテクノロジー、ソフトマテリアル等の材料技術は世界的に高く評価されており、Biomimetic Materials Processing の国際会議は 16 回、Engineering Neo-Biomimetics の国際会議も 6 回開催された。2012 年に高分子学会にバイオミメティクス研究会が設けられ、バイオミメティクスの国際標準化 (TC266) に対応する国内審議機関として活動。2012 年に文部科学省科学研究費新学術領域として「生物多様性を規範とする革新的材料技術(生物規範工学)」がスタート、異分野連携に基づく横断的研究組織の形成による基礎研究加速が期待されている。
	応用研究・開発	○	↑	材料分野における応用・開発トレンドは、撥水・親水材料や反射防止光学材料などを中心に建材、繊維、エレクトロニクス、建築など多岐にわたる。一部企業は関心を示し、2015 年のナノテクノロジー展では産学連携のブースを展示した。構造色繊維・フィルム（帝人、凸版印刷）、防汚船底塗料（日本ペイントマリン）、モスアイフィルム（三菱レイヨン、大日本印刷）、ゲッコーテープ（日東電工）、セルフクリーニング建材（LIXIL）、超はっ水材料（竹田印刷、日華化学）、ヨーグルトが付着しないふた（森永乳業・東洋アルミ）、コンクリート用基材（清水建設）など、材料分野での商品開発が進んだ。生物模倣の家電製品（シャープ）、無痛注射針（ライトニックス）、低騒音パンタグラフや車体デザイン（JR 西日本）、自動車の自動運行システム（日産）などの開発も実用化した。ロボティクスを中心とした機械系、システム系の開発も進みつつある。NBCI にバイオミメティクス分科会が設立された。
米国	基礎研究	◎	↑	環境・エネルギー問題の視点に立つ研究、ホームランドセキュリティや軍事研究をニーズとする研究、古くからある Biomimetic Chemistry の研究、バイオマテリアルに直結する研究などがある。前者は biomimicry という言葉を生み、中者はロボットやセンサ技術と材料技術の融合が図られつつあり、後者は DNA origami を象徴とする self-assembly nanotechnology を中心とする bio-inspired materials の再展開である。ハーバード大学、ワシントン大学、パデュー大学、ノースウエスタン大学、ダートマス大学、スタンフォード大学、南カリフォルニア大学、ローレンスバークレー研究所など多くの機関が基礎研究を行っている。Bioinspired Materials に関するゴードン会議も開かれている。
	応用研究・開発	◎	↑	Biomimicry の提唱者である J.Benyus を中心にした Biomimicry Group がコンサルティングや教育啓蒙活動を積極的に展開してきた。関連して Biomimicry San Diedo もバイオミメティクスに関する教育およびコンサルティングを展開。2013 年には Applied Biomimetic という会社がデンマークと米国で設立されるなど、バイオミメティクスの概念に基づく応用研究・開発を目的とする企業活動が行われている。2010 年 11 月に刊行された報告書 “Global Biomimicry Reports -An Economic Game Changer-” において生物模倣技術の大きな経済効果について記述。2012 年以降、ハーバードビジネススクールと共同しての活動など、今後の展開が注目される。最近では、イガイに真似た水中接着剤、ヤモリテープを持つ垂直歩行ロボット、鮫肌模倣の防汚材料、くじらのひれ模倣の風力発電翼、自己修復力を増した絆創膏など多岐の分野において活発な商品開発がなされている。
欧州	基礎研究	◎	↑	Biomimetic Chemistry の提唱とその研究、Lotus Effect（ボン大学の商標）の超はっ水加工に関する研究、またゲッコーテープ、モスアイ構造、構造色、鮫肌リブレットなど、イギリス、ドイツ、フランスなど欧州では現在も多くの基礎研究がなされている。欧州では、ナノ材料から機械、航空機まで幅広く、政策的な異分野連携を強く推進している。FP7 等の EU 全体の大型プロジェクトでは、Re-Liver (The bottom-up reconstitution of a biomimetic bioartificial liver) が 2012 年より行われており、PF7 の後継の Horizon2020 でも関連プロジェクトが見込まれている。

欧州	応用研究・開発	◎	<p>英国の BioTRIZ、スウェーデンの SWEDISH BIOMIMETICS 3000 など、生物模倣技術のコンサルティングやファンディングなど、基礎研究から産業化への橋渡しが着実にこなわれている。ドイツが国内コンソーシアムであった BIONIK (Bionics Competence Network) を BIONIK International にするなど、欧州では一歩先んじた感がある。ただし、2013年にフランスが CEEBIOS というバイオミメティクスの産学連携センターを設立した上、Biomimicry Europe に参画する国数も増加している現状から、ヨーロッパ全体での切磋琢磨が暫く続く状況とも言える。また、欧州宇宙機関 (ESA) も、先進概念チームを設けてバイオセンサなどバイオミメティクス関連の応用研究を進めている。2007年に発刊した“National Strategy on Biological Diversity”において BMU は“Biological diversity and its innovation potential”という項目でバイオミメティクスの産業化に言及していた。2008年5月にボンで開催された国連生物多様性条約第9回締約国会議 (COP9) において、ドイツ連邦環境・自然保護・原子炉安全省 (BMU) は、ビジネス・民間部門による生物多様性保全への貢献を目的として“Biodiversity in Good Company”を設立した。さらに、2011年3月に BIONIK International はドイツ政府支援のもと、世界最初の“International Industrial Convention on Biomimetics”を開催した。また、ドイツ規格協会 (DIN) はドイツ技術者協会 (VDI) との共催で国際標準化活動へ向けた事前イベント“ISO BIONIK”を開催した。DINからの提案で、2012年に国際標準化機構 (ISO) のバイオミメティクスに関する技術委員会 ISO/TC266 Biomimetics が発足し、欧州を中心に活動を進めている。このように欧州はバイオミメティクス分野での産業化において国際標準化を先導している。トンボの羽に着想した飛行ロボット“BioniCopter”やサメの肌を模倣した機体塗料など先駆的な産業化を含め、基礎研究の項に記載したように、各種製品が開発、販売されている。メルセデスベンツやルノー、エアバス社やルフトハンザなどの大企業がバイオミメティクス・デザインを積極的に取り入れつつあり、関心度は年々高まっている。FESTO 社は Industrie 4.0 の中核技術である IoT を支える生物模倣自律分散型ロボット等を開発しており、ドイツ政府の戦略性が反映されている。</p>
	基礎研究	◎	<p>撥水材料に関しては中国科学院の江雷教授のグループが論文数では世界トップである。材料系と機械系の研究潮流が交わること無く独自展開している感があったが、英国との連携が切っ掛けになって生物学の寄与が見られるようになった。吉林大学は Journal of Bionic Engineering のスポンサーになり、バイオミメティクス分野に力を入れている。この国際誌を刊行する Intenationa Society of Bionic Engineering は中国を中心とするメンバーから構成されている。ロボットなど機械分野から材料開発まで、広い分野の基礎研究が進められている。</p>
中国	応用研究・開発	◎	<p>上海を中心にロボティクスの研究が活発である。吉林大学は英国の Nottingham 大学と UK-China biomimetics research initiative を締結している。中国科学院化学研究所、吉林大学などを中心に、応用研究・開発も積極的に行われている。Intenationa Society of Bionic Engineering は、2013年に The 4th International Conference on Bionic Engineering (ICBE 2013) を開催し、基礎研究に加えて応用研究が発表された。また、吉林大学がスポンサーの Journal of Bionic Engineering は Elsevier と共同で、2011年に International Bionic Engineering Conference 2011 を米国ボストンで開催し、バイオミメティクス分野での応用研究および企業における研究開発の重要性を強調している。撥水加工技術は衣料や印刷製版へ応用されている。撥水加工ネクタイ、光触媒商品などは発売されており、バイオミメティクス関連の産業化はあるものの、国際標準化では P メンバーとして登録されていないが委員会には出席していない。</p>
韓国	基礎研究	◎	<p>材料、ロボティクス、センサ、メディカルなど幅広いテーマを扱う International Symposium on Nature-inspired Technology (ISNIT) を 2006 年以来定期的に開催している。ソウル大学、KAIST、浦項工科大学、韓国機械・材料研究所 (KIMM) を中心にヤモリ模倣の接着、ハスの葉模倣のはっ水、昆虫模倣のナノセンサなどの基礎研究が進んでいる。ドイツとのコネクションも強く、最近米国で学位をとった若手教授が水中接剤やオプティクスの分野などで活躍している。生物学の寄与はほとんど無い。</p>
	応用研究・開発	○	<p>KIST や KIMM、ソウル大学など複数の研究組織がタイアップして基礎から応用に向けての活動を積極的に展開しているように思われる。10 回目を向かえた 2012 年の NANO KOREA でもバイオミメティクス関連の発表が増えてきており、化粧品、接着剤、センサ、ロボットなどに企業の関心は高くなっているが、まだ産業化は進んでいない。ISO の TC266 のメンバーに参加するなど積極的な動きが見える。</p>

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

- 応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル
 (註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。
 ◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている
 △ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない
 (註3) トレンド
 ↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Emilie Snell-Rood, “Interdisciplinarity: Bring biologists into biomimetics”, Nature 529, 277–278 (2016),
<http://www.nature.com/news/interdisciplinarity-bring-biologists-into-biomimetics-1.19188>
- 2) 特許庁 平成26年度特許出願技術動向調査報告書「バイオミメティクス」
https://www.jpo.go.jp/shiryoku/pdf/gidou-houkoku/26_15.pdf
- 3) 環境省 自然模倣技術・システムによる環境技術開発推進事業 成果報告書
http://www.env.go.jp/policy/report/h27-01/report_H26.pdf
http://www.env.go.jp/policy/report/h27-01/report_H25.pdf
- 4) Collaborative Research Center SFB-TRR 141: Biological Design and Integrative Structures – Analysis, Simulation and Implementation in Architecture
<https://www.trr141.de>
- 5) 下村政嗣 編著、「トコトンやさしい バイオミメティクスの本」、(日刊工業新聞社、2016)。
 篠原現人・野村周平 編著、国立科学博物館叢書16 「生物の形や能力を利用する学問バイオミメティクス」、(東海大学出版部、2016)
- 6) ISO/TC266 国内審議委員会ニューズレター Issue 4 (2015)
<http://main.spsj.or.jp/pdf/TC266NL4.pdf>
- 7) ISO/TC266 国内審議委員会ニューズレター Issue 5 (2015)
<http://main.spsj.or.jp/pdf/TC266NL5.pdf>
- 8) 「特集バイオミメティクス」、OHM (2015年1月)
<http://www.ohmsha.co.jp/ohm/201501h.htm>
- 9) 「特集本格化するバイオミメティクス材料の開発」、工業材料 (2015年8月)
<http://pub.nikkan.co.jp/magazines/detail/00000558>
- 10) 「特集バイオミメティクスの産業応用へ向けた新たな歩み」、機能材料 (2015年7月)
https://www.cmcbooks.co.jp/products/detail.php?product_id=4913
- 11) 「小特集バイオミメティクスと表面技術」、表面技術 64 巻 1 号 (2013年1月)
<http://www.sfj.or.jp/journal/conts/6401.html>
- 12) 「特集バイオミメティクスの新たな展開」、化学経済 (2016年8月)
<http://www.chemicaldaily.co.jp/monthly/201608.html>
- 13) 下村政嗣他、「バイオミメティクスの技術展望と産業動向」(シーエムシー出版、2016年6月)
- 14) 下村政嗣監修、「インスツルメンテーションの視点からみたバイオミメティクス」(シーエムシー・リサーチ、2016年7月)

- 15) スミソニアン博物館、NSF-sponsored Workshop on Biological Collections as a Resource for Technical Innovation to be hosted by the Smithsonian's National Museum of Natural History in Washington, DC on May 10th, 2016. <http://www.cpe.vt.edu/bioinspiration/index.html>
- 16) スミソニアン博物館、NEXT ENGINEERING REVOLUTION IS HIDING IN MUSEUM COLLECTIONS
<http://insider.si.edu/2016/06/engineers-future-may-use-3d-scanned-museum-specimens-blueprints/>
- 17) 国立科学博物館、「生き物に学び、暮らしに活かす 博物館と バイオミメティクス」
<https://www.kahaku.go.jp/event/2016/03biomimetics/>

3.5.3 分子技術

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

「分子技術」は、分子を設計・合成・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するために必要な一連の技術を、「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る6つの横断的技術概念で捉えなおし、研究開発を推進する領域であり、日本発の新しい研究領域である。上記のそれぞれの技術概念は、今後、それぞれの分子技術の研究が進展すれば、新しい独立した個別の研究領域を構成できるが、6つの研究領域はお互いに密接な関係を持ち続ける。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

環境・エネルギー、医療・健康などに関する社会的課題の解決に貢献し、持続性社会の実現に資するために分子科学の成果を活用するためには、課題解決に必要とされる機能をもった分子を創出し、それを自在に制御できることが望まれる。

分子科学が、分子および分子集合体の構造や物性を解明し、化学反応や分子の相互作用およびその本質を、理論と実験の両面から理解することを目的とする学問であるのに対し、分子技術は、分子科学がもたらす知見・理解を基盤として所望の機能・物性を創出することを明確な目的とする、工学的な技術概念である。解決すべき多様な課題に対し、問題点を分子レベルまで掘り下げ、所望の機能を持つ分子を設計・合成・操作・制御・集積することで、革新的かつ精密な分子や分子集合体を創出できれば、効果的な課題解決が可能になるとともに、課題解決の技術が産業化された際には圧倒的な競争力の獲得につながる。一方、従前の化学は自然の神秘を解き明かすことに、営々と挑戦し続けてきた。ここでは、健康・医療分野や環境・エネルギー分野に関わる重要課題の解決に向けて、制限された条件の下に最適・最善の解を求めるという工学の手法を化学の領域に取り入れ、従前の自然の神秘を解き明かす化学から、課題追求型の化学へと、非常に大きなパラダイム・シフトが要求される。分子技術はこうしたパラダイム・シフト実現へのキーテクノロジーであるといえる。

従来、様々な分野で分子の設計・合成が行われてきたが、普遍的な技術として分子技術が明確に意識されることはほとんどなかった。例えば、医薬、農薬、物質・材料などの研究開発において、最適・最善の化合物に到達するまで研究開発されることは稀で、一定の機能が得られた段階で商品開発のフェーズに移行するのが普通である。分子設計が比較的進んでいる医薬品開発ですら、薬効や副作用の点で最適、最善といえるような新規分子設計まで行うことは珍しい。次善の分子でも十分に利潤があげられてきたからである。しかし、今後、医薬品開発のプロセスは、急激な投資金額の激増により、先進国から開発途上国にゆるやかに移行することで、肌理（きめ）の細かい開発が難しくなり、その結果、緻密な分子技術に至ることが一層難しくなっている。

新規分子の設計と合成に至らない段階で開発が進んでしまった場合には、採用された分子技術は未成熟で比較的模倣されやすい。また、特許対策も十分とは言えないので、市場での成功例が明らかになる段階で、開発途上国で、様々な後発品が上市されるようになる。

オンリーワン分子の設計と合成を進めるためには、高い分子技術力が必要となるが、この基盤技術の育成に十分な資金を継続的に提供できる国・企業は世界的に少ない。なお、分子技術の重要性に対する認識が十分に浸透していないこと、および分子技術は多岐にわたる応用分野をもつことから、目に見える末端の結果は比較できるものの、その比較が分子技術自体の比較には必ずしもつながらないことから、国際的な比較を行うのは困難な面がある。

分子技術は、精密合成技術と理論・計算科学との協働により新機能物質を自在に設計・創成する「設計・創成の分子技術」、分子の形状構造を厳密に制御することにより新たな機能の創出に繋げる「形状・構造制御の分子技術」、分子レベルでの構造設計に基づく新たな触媒・システム開発に繋げる「変換・プロセスの分子技術」、分子の電子状態を自在に制御する「電子状態制御の分子技術」、分子集合体・複合体の形成や機能解析・化学制御に関連する「集合体・複合体制御の分子技術」、膜物質を介した分子・イオンの輸送速度や選択性向上などの分子・イオンの輸送に関する「輸送・移動制御の分子技術」の6つの横断的技術概念からなるものとして捉えることができる。しかし分子技術は分子のレベルで根源的な物質の性質を創ることから、今後さらに社会の要請課題に沿って新しい研究課題が出現してゆくことが予想される。

俯瞰区分と研究開発領域
機能と物質の設計・制御



各技術概念について、今後必要となる研究課題は以下の通りである¹⁾。

1) 「分子の設計・創成技術」

- ・機能から分子を創出するための理論創成とシミュレーション技術の開発
- ・分子構造の予測を可能にする分子デザイン手法の開拓

1 CRDS 戦略イニシアティブ「分子技術」(CRDS-FY2009-SP-06)

- ・機能設計・予測に基づく精密合成法の開発
- ・分子性物質の高純度精製法の開発
- 2) 「変換・プロセスの分子技術」
 - ・酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング触媒の開発
 - ・金属フリー有機合成触媒の開発
 - ・触媒・生成物の *in situ* キャラクターゼーション法の開発
 - ・マイクロ反応装置などによるシステムケミストリーの開拓
 - ・原料転換プロセスの開発 (未利用化石資源、バイオマスなどの利用)
 - ・室温稼働化学プロセスの開発
- 3) 「分子の電子状態制御技術」
 - ・電極—有機分子間 (電荷注入)、有機分子同士 (電荷輸送) の電荷授受の機構解明
 - ・高純度化によるキャリアトラップの解消
 - ・分子性物質の純度測定評価技術の開発
 - ・デバイス上での分子配列技術・階層性構築制御技術の確立
 - ・液体半導体などによる自己修復可能なデバイスの開発
 - ・分子性物質・分子材料の劣化機構の解明
- 4) 「分子の形状・構造制御技術」
 - ・自己組織化などビルドアップおよびトップダウン手法による空間空隙構造形成技術
 - ・ナノからマクロ構造への規模拡大技術、高強度化、高速合成、低コスト化
 - ・マクロ構造を持つ材料における物理的諸現象 (貯蔵、物質・エネルギー変換など) の観測・解析技術
 - ・計算機シミュレーションによるマクロ構造の合成および構造・機能の設計・解析
- 5) 「分子集合体・複合体の制御技術」
 - ・電子デバイス表面における分子集合体の精密配置技術の開発
 - ・創薬開発を目指した分子集合体の動的構造変化と機能制御の解析
 - ・タンパク質への非天然アミノ酸導入による人工酵素の構築
 - ・液体分子の構造と機能制御の解析とシミュレーション
- 6) 「分子・イオンの輸送・移動制御技術」
 - ・電極への効率的なイオンの挿入・移動を可能にする有機蓄電材料の開発
 - ・不純物の選択的移送と捕捉を目指した超高性能分離膜の開発
 - ・高効率の薬物輸送を実現する高度 DDS の開発

上記の他、JST-CREST「新機能創出を目指した分子技術の創出」領域のアドバイザーを中心に検討がおこなわれた「革新的分子技術リスト」として以下のような課題が挙げられている²⁾。

●革新的分子技術の例—分子技術とその分野—

(※(P)記号は、未だ十分に分子技術の基礎が確立されていない新分野を指す)

2 CREST 革新的分子技術リスト <http://mt.jst.go.jp/outline/list.html> より引用

【分子技術、触媒】

〈重合〉

- ・モノマー・オリゴマーを自在にかつ可逆的に高分子量化する技術
- ・ビニルハライドやジビニルハライドの立体選択的ラジカル重合触媒開発
- ・ポリオレフィン分岐構造の精密制御反応：PPをベースとするブロックコポリマーの製造：エンプラ/ポリオレフィンブロックコポリマーの製造
- ・ポリマーからモノマーへの完全分解触媒反応 (P)
- ・シーケンスや分子量が厳密に制御された共役系共重合体の構築技術 (触媒、C-H活性化)

〈酸化〉

- ・官能基なしのCH自在活性化：CH活性化によるハロゲン原子の自在の位置選択的導入反応開発：単純アルキル基の位置特異的酸化反応 (例えば、エタノールから1工程でエチレングリコールを合成、プロピレンから1工程で1,3-プロパンジオールを合成する)：アルカンの触媒的官能基化反応：水酸化酵素 P450 の高活性化：ブタンからブタジエンの製造：シェールガスからオレフィン類の製造：エタン、プロパン等アルカンからポリオレフィンの製造 (P)
- ・タンパク中の任意の位置 (アミノ基、カルボキシル基) に様々な置換基を導入する。
- ・ベンゼンから直接フェノール製造 (微生物、固体触媒)

〈C-C 合成〉

- ・二酸化炭素からハロゲン化ビニルへの合成系の開発 (P)
- ・ハロゲン化物や、ホウ素化合物を用いない炭素-炭素カップリング反応、メタンから芳香族化合物、オレフィン類の製造
- ・アルコールを触媒的に活性化 (ハロゲン化、スルホナート化を経ない) し、アルキル化やシリル化する。

〈還元〉

- ・重金属を用いない NOX や COX の還元法 (P)
- ・炭化水素を用いない水素製造法
- ・新規なアンモニア合成法：常温・定圧での触媒的窒素固定化反応 (P)
- ・炭酸ガス固定化による発酵生産性向上
- ・水素と炭酸ガスからメタノール合成触媒

〈分解〉

- ・NO の直接分解 (還元剤を使わない)：様々な気体が共存する中で特定の気体 (NO や SO) のみを選択的に捕捉し還元や酸化する原理の探求
- ・セルロースから直接エタノール製造

〈触媒〉

- ・セルフアセンブリーが能動的に働いて成り立つ触媒反応の創出
- ・汎用ラセミ化法 (P)
- ・任意の原子クラスターを合成するための複核錯体分子

【マテリアル】

〈デバイス〉

- ・Si に匹敵する性能を有する Printable 有機材料からデバイスまで、シリコン化学を

脱した新しい元素化学のデバイス (P)

- ・低分子で π 共役軸方向の電導を活かした電子デバイス
- ・単分子・単分子鎖トランジスタとロジック回路の構築技術
- ・劣化した機能分子を刺激による固相・液相の相転移等によって置換できる自己修復型機能デバイス創生の分子技術

〈膜〉

- ・有機単結晶薄膜の溶液からの成膜技術 (P)
- ・人工的に制御された分子配列を持つ自己組織化膜
- ・分子デバイスのオーミック接触の革新
- ・欠陥を極小化 (欠陥フリーならベスト) する薄膜界面制御技術
- ・圧倒的に薄く均一な導電、半導電、絶縁層を容易に形成する技術
- ・高分子有機 EL や高分子有機薄膜太陽電池等の半導体物理では理解できない現象の物性理論体系の構築に基づく分子技術

〈光〉

- ・光合成の原理を模倣した高効率 (>50%) な太陽電池：大幅に変換効率を向上させた人工光合成
- ・超高効率な有機太陽電池を目指した、一重項・三重項変換 (分裂、融合) が高効率で可能な材料の設計技術：超高効率光電変換システムの分子論的解析と人工光合成系の設計
- ・大腸菌、枯草菌による光合成

〈ナノより上の階層分子制御〉

- ・分子からナノではなく、それよりも上の階層構造 (実用領域) までの自在制御
- ・高効率熱電変換材料 $ZT>4$ の開発
- ・室温で電気抵抗ゼロの超伝導物質の設計 $T_c>400K$

〈自己修復〉

- ・熱・紫外線等で切断されても自己修復する分子；自己修復機能をもつやわらかい物質のデザイン

〈高分子、樹脂材料〉

- ・リングポリマーなどトポロジ的拘束のある超高分子の物性論の体系化に基づく分子技術による新たな機能発現
- ・電荷注入機能、電荷輸送機能、発光機能の有機 EL 機能を一つに融合した高分子の創生分子技術 (例えば、クロスカップリングによる dendritic 型高分子創生や有機触媒による手法等)
- ・非晶 (ポリマー、溶液中) の分子構造解析、特に溶媒に溶けない高分子の構造解析など
- ・低濃度水溶液から目的イオンを選択吸着、脱離できる分子技術 (海洋資源濃縮)
- ・様々な気体が共存する中で特定の気体 (NO や SO) のみを選択的に捕捉し還元や酸化する原理の探求

【医薬】

- ・老化メカニズムの更なる解明とアンチエイジング・再生技術
- ・人工アミノ酸 (例えば含フッ素アミノ酸) を含むペプチドやタンパクの合成 (人工ア

ミノ酸に対応する mRNA, tRNA を用いる)

- ・ 組織（細胞）再生誘導化薬（例えば腎不全状態まで行った腎臓が再生し、腎機能を取り戻す）、医療材との融合でも可
- ・ 低分子触媒医薬（P）
- ・ 医薬品包摂、移動、細胞膜通過、放出を可能とするバクテリオファージのような分子ロボット設計（P）
- ・ 診断、計測への画期的化学、巨視的なケミカルバイオロジー

【計算科学】

- ・ 計算科学は様々な分野に対して幅広い寄与をすることが期待される。
- ・ 望む変換反応（多段階も含む）を手書き入力すれば、おすすめ反応剤、反応条件を文献つきで10件だすソフト（P）
- ・ 分子パッキング状態の計算による予想
- ・ 理論の裏打ちのある機能から最適分子構造を予測
- ・ 反応の遷移状態の計算を目標とする計算化学から脱却し、遷移状態の予測が可能な計算化学の誕生を目標とする計算化学の推進。
- ・ さらに、所望の物性を期待できる化学構造の予測を目標とする日本発の新しい計算化学の誕生に向けての積極的支援。

【その他】

- ・ 多重の刺激（情報）を検出・判断し、その重要度から行うべきタスクの優先順位をきめ、機能する人口知能的刺激応答機能材料：触感を再現する（温度、湿度、圧力等を同時にセンシング可能な）デバイス分子技術（医療用ロボット、パートナーロボットにおける人体との接触インターフェイス）
- ・ 用途→機能→構造→反応というターゲットドリブン型の分子技術において、出口サイドからできるだけ川上に踏み込んだニーズの開示できる人材・仕組み（製薬、化学では既に進んでいるが、機械、電機、制御通信、システムの領域では不足）：機能物質、材料の逆問題的設計・開発手法の開発
- ・ 上記の手段として的高速材料スクリーニング手法や機能予測データベースや計算解析手法の開発
- ・ 50年で半減するリン元素の枯渇問題解決に資する化学イノベーション（農業化学）
- ・ 均一系（有機合成など）と不均一系（排ガス、FC触媒、電池など）の相互理解と補完関係の構築
- ・ DNA やタンパクの高次構造、たとえばDNAの3次構造、タンパクのβシートなどを工業材料として使える分子骨格に置き換えて構築
- ・ 毎年、1兆個のセンサが使われていく世の中を想定したプロジェクトで、以下の課題等への挑戦
 - － 各種センサ：薄く、軽く、小型、高感度、超低消費電力で、大量に製造可能な各種センサ、特にバイオ系のセンサ。
 - － Energy Harvesting 素子/材料：大量のセンサネットワークに必須の、Energy Harvesting。EHは、センサの役目と重なったら、なお好都合。世の中に充滿している微小エネルギーを回収する素材、素子を、分子技術により、同じように、薄く、軽く、小型、高効率で、大量に製造可能な技術の創成。

- 二次電池：EH デバイスに向けての二次電池が必要。1) 最低でも 10 年以上の寿命、2) 10～20 万回以上のサイクルで、薄く、軽く、小型、高容量で、大量に製造可能な二次電池の開発。

(3) 注目動向

すでに、今日様々な部品や機器が、既存の半導体や金属から、分子素材である「ソフトマテリアル」に移行しつつある。これは低環境負荷、資源制約への対応、高い生体親和性といった人間社会全体の課題に対する解決策、そして低コスト化を「ソフトマテリアル」や、それを実現する分子技術が提供することを示唆している。すなわち、健康・医療分野と環境・エネルギー分野に関わる様々な革新的成果を創出するためには、個別応用課題の研究開発とは別に、多様な分野への展開が可能な分子技術を確認たる土台として築いておくことが必須であり、これによって一層異分野融合が加速され、真に有効なライフ・イノベーションおよびグリーン・イノベーションが達成できる。

注目すべきプロジェクトとしては、平成 24 年 JST で CREST 「新機能創出を目指した分子技術の構築」、およびさがけ「分子技術と新機能創出」が開始された。また、平成 26 年より「国際科学技術共同研究推進事業（戦略的国際共同研究プログラム）」において日本－フランス共同研究課題の募集が開始された（日本側 JST、フランス側 ANR）。

さらに、北海道大学の前田理准教授が進める CREST 分子技術のプロジェクトである「反応経路自動探索法を基盤とする化学反応の理論設計技術」は量子化学計算で未知の素反応、未知の化合物、未知の物性を系統的に自動探索することになり、これまでの科学技術の質的変革を促すものであり、我が国発の破壊的イノベーションに育つ要素を持っている。

(4) 科学技術的課題

今後必要となる取り組みとして、将来を見据えたニーズと分子技術との間をシームレスに結びつける必要がある。社会的ニーズに沿って、現在の技術レベルでは達成できない「夢の目標」を掲げ、それぞれの研究テーマにおいて、従前の研究の延長とは一線を画した、まったく新規な研究プランを提案し、それを達成するための明確で独創的な分子技術の「イメージ・ストーリー」を描き、それを実現することが求められる。これには、アカデミアと産業界の双方で分子技術の重要性を認識し、化学に対する姿勢を根本的に変えて行く必要がある。すなわち、これらの課題を分子レベルで解決するためには、課題解決を目標とする分子技術の重要性を認識した上で、以前にも増して学際的な研究推進が必須であり、また、研究チーム間の連携や共同研究が求められる。多岐にわたる応用分野、専門分野で各々活躍している比較的接点の少ない研究者が「分子技術」という共通の土台に立って互いの研究・技術を見つめ直し、新たな展開を生み出せる。

(5) 政策的課題

幅広い社会・産業ニーズに応える物質・材料開発にブレークスルーを起こすために、それを強く意識した分野貫通型チームが、意欲的かつ挑戦的な研究課題で、数年おきに、次々と生まれることが望ましく、今後は文部科学省と経済産業省の緊密な連携が求められる。化学は「破壊的イノベーション」を誕生させるための、様々な要素を他の学問領域に比べ

て、比較にならないほど豊かに備えている。そして、「破壊的イノベーション」の主役となる分子技術を充実させることで、我が国の多様な科学技術・政策的課題が解決されることが期待される。

(6) キーワード

ソフトマテリアル設計、医薬品設計、農薬設計、設計・創成の分子技術、形状・構造制御の分子技術、変換・プロセスの分子技術、電子状態制御の分子技術、集合体・複合体制御の分子技術、輸送・移動制御の分子技術

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↗	分子技術に着目し、その重要性が社会的に認知されたのは、ここ数年のことである。しかし、その重要性が世界で初めて日本で明確に認知されたことは極めて重要なことであり、今後、すでに高いレベルの研究基盤を持つが、分子技術間の連携が一層進めば、我が国がこの分野を世界的に牽引すると考えられる。既に日仏の2国間国際共同研究プロジェクトが開始されている。
	応用研究・開発	◎	→	ナノテクノロジー、環境、エネルギー、ものづくり、ライフサイエンスなど、分子技術が鍵となる応用分野は多岐にわたる。我が国は、それぞれの分野での、末端技術では問題があっても、基盤となる分子技術の部分は高いレベルを維持している。産業化については、いくつかの特定分野で進んでおり、例えば、ナノテク材料分野では、非常に高いレベルにある。しかし、平均的には米国などに較べて、必ずしも十分な競争力がなく、韓国、中国などに追い上げられている。残念ながら、どちらかといえば、持続的イノベーションの研究が多く見られる。
米国	基礎研究	◎	↘	米国でも、ここ数年分子工学の重要性が認識され始めているが、バイオ、マテリアルなどの非常に応用末端の分野に研究が集中している。つまり、化学という側面より工学の面が正面にでているので、分子レベルまで掘り下げた設計・合成へ注目した研究は極端に少ない。
	応用研究・開発	◎	↗	基礎研究とは異なり、応用研究は非常に進んでいる。特に資金の集中しているライフサイエンスは圧倒的なレベルにあり、今なお向上し続けている。産業化については、ベンチャーが牽引する部門は極めて迅速に諸課題に対応している。特にライフサイエンスの分野では積極的に次々と新しい投資部門に展開している。巨大な製薬会社が成功したベンチャーを買い上げることで投資の危険分散を行っている。
欧州	基礎研究	◎	→	ドイツでは、大学改革に成功し、分子科学基礎研究は高いレベルにあり、分子技術に於いても世界的にトップクラスである。一方、英国はライフサイエンス部門の分子技術は進んでいるが、これは米国に影響されていると思われる。フランスはフッ素化学などの限定的な分野では優れているが、一般には低調である。しかし日本との2国間の分子技術共同研究によって新しい分子技術が誕生し始めている。
	応用研究・開発	○	→	ドイツ、英国のライフサイエンス部門では、非常に優れているが、他は全般的には平均的レベルにある。産業化については、一般にライフサイエンス部門は堅調であり、特に産業化を促進する制度的バックアップが優れている。しかし、特に分子技術という面からはすこし手薄い。
中国	基礎研究	○	↗	分子技術の面では、現時点では欧米を追う仕事が目立つ。しかし、ウミガメ政策以来、欧米で成功した研究者が多くの資金を持って次々と本国に招聘されており、彼らの活躍が目立つ。しかし、中国国内で製薬系の大企業が育っていないため、若い研究者の就職先が非常に限られているのが現状であるが、この状況は近年中に変わる可能性がある。
	応用研究・開発	○	↗	急速に成長している。特に多くの研究費が大学や研究所に流れている。産業化については、米国と似た制度の下でベンチャー企業が誕生しやすい体制を取っている。
韓国	基礎研究	△	→	日本よりは米国型の研究スタイルであり、欧米からの帰国者を優遇している。その点では中国と状況は似ているが、研究レベルは中国に若干の遅れ。しかし、最近、大学や政府研究機関で外国人研究者の雇用を打ち切る現象が見られる。
	応用研究・開発	○	→	萌芽的な応用研究が進んでおり、今後の発展が見込まれる。比較的ダイナミックに産業化を進めている。

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

- 応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル
(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。
◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている
△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない
(註3) トレンド
↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) <http://molecularengineering.uchicago.edu/>
- 2) <http://provost.uchicago.edu/Pritzker%20Director%20of%20the%20Institute%20for%20Molecular%20Engineering.pdf>
- 3) 文部科学省（戦略目標）環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築
http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/24/02/attach/1316324.htm
- 4) CRDS-FY2009-SP-06 戦略イニシアティブ「分子技術」
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/SP/CRDS-FY2009-SP-06.pdf>
- 5) CRDS-FY2009-WR-07 科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」報告書
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/WR/CRDS-FY2009-WR-07.pdf>
- 6) 応用物理学会・JST 共同特別公開シンポジウム「分子技術、新ステージへの胎動」
<http://www.jst.go.jp/crds/sympo/20100916/bunshi100916summary.pdf>
- 7) CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」
<http://mt.jst.go.jp/>
- 8) CREST 革新的分子技術リスト
<http://mt.jst.go.jp/outline/list.html>
- 9) さきがけ「分子技術と新機能創出」
<http://www.jst.go.jp/presto/moltech/>
- 10) 化学と工業「分子技術 貫通型研究領域誕生への挑戦・日本化学会」
<http://www.chemistry.or.jp/opinion/doc/ronsetsu1310-1.pdf>

3.5.4 元素戦略・希少元素代替

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発する研究開発領域である。一般に「元素戦略」とは、元素に焦点を当てサイエンスに基づいた物質・材料科学の基盤を構築する戦略であり、「代替」「減量」「循環」「規制」「新機能」の5つの柱で構成される。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の研究開発動向

ハイブリッド自動車やスマートフォンを始めとした我々の日常生活を支える製品の中には希少元素が使用されているものが数多く存在する。希少元素はもともとの存在量が少ない上に年々需要が増加傾向にあり、さらには産出国が偏在している。このため希少元素を用いた製品開発を行う各国には、世界的な供給量不安定化や価格高騰を含めた資源問題に対応するための戦略が求められるようになった。

この問題は、工業製品を輸出の主軸とするが資源に乏しい我が国にとっては特に死活的である。1980年代には、少生産量で市場の動きが不安定な特殊金属のうち、日本の産業に欠かせないという政策的観点から31鉱種が「レアメタル」の呼称で経済産業省により指定され、それらの資源開発促進や備蓄を行ってきた。しかし21世紀に入って、透明電極に用いられるインジウム（In）や永久磁石に必要なジスプロシウム（Dy）の価格高騰・供給不足を始めとした各種レアメタルの価格の乱高下や供給の不安定さが顕著になり、リーマンショック直前の2007年には多くのレアメタルの価格が数倍に高騰するなど、資源開発や備蓄のみでは対応しきれない事態に発展する懸念が生じた。さらに、資源メジャーのM&A、占有化、国家資本の積極的参入が続く最中に、中国の希土類金属輸出制限に端を発した30倍以上の希土類金属価格の暴騰が世界を襲った。これにより資源問題は一過性のものでなく構造的問題として国際的に協調して対処すべきとの風潮が一気に強まった。

そのような中、我が国においては、資源は供給されうるものという従来の考え方から脱して、資源を素材化しそれらをデバイス・部材の中で如何に効率よく使うかという視点に立ちながら、資源の持続可能な利用や高付加価値製品の安定生産を目指す取り組み（一般に「元素戦略」と呼ばれる）を、2004年に諸外国に先駆けて提唱した。

「元素戦略」とは、上述の通り、「代替」「減量」「循環」「規制」「新機能」の5つの柱によって構成される物質材料科学の基盤を構築する戦略である。

- ① 代替：特定の元素に依存することなく、豊富で無害な元素により目的機能を代替する
- ② 減量：希少元素・有害元素の使用量を極限まで低減する
- ③ 循環：希少元素の循環利用や再生を推進する
- ④ 規制：有害物質に対する各国の使用量規制や基準を乗り越える高い技術を戦略的に開発する
- ⑤ 新機能：元素の秘められた力を引き出すことで新たな機能を生み出す

この概念の特徴としては、化学、物理、金属、セラミックスや磁石など、多彩な学界が共

通して取り組めるといふ点にある。

元素戦略・希少元素代替材料技術に関する研究開発は、2007年に文部科学省による「元素戦略プロジェクト〈産学官連携型〉」、および密な連携を行う経済産業省による「希少金属代替材料開発プロジェクト」に始まる。前者が長期的視点からの基礎研究を実施し学術的基盤の構築を目標としたことに対し、後者は5年を目処として実用化のステップに乗せうる短期的テーマを推進することを目的とした。後の府省連携施策の原型となる極めて先進的な国家プロジェクトであり、内閣府を積極的に巻き込み、共同での公募や、役割分担に沿った審査の相互乗り入れを行うなど、従来になかった協力体制で取り組まれた。

その後、2010年にはJST戦略的創造研究推進事業CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」（玉尾皓平研究総括）およびさがけ「新物質科学と元素戦略」（細野秀雄研究総括）が発足し、さらに2012年から10年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」においては、磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料を各研究開発テーマとする4つの研究拠点が形成され、「材料創製」「解析評価」「理論」が三位一体となった研究体制が構築されている。

一方、経済産業省・NEDOは比較的短期間での実用化を目指すプロジェクトを中心に「希少金属代替材料開発プロジェクト」を進めてきた。2008～2013年度は委託事業として、元素ごとのリスク評価に加えて、リスクの増大が懸念される透明電極向けインジウム（In）、希土類磁石向けジスプロシウム（Dy）、超硬工具向けタングステン（W）、排ガス浄化向け白金族・セリウム（Ce）、精密研磨向けセリウム（Ce）、蛍光体向けテルビウム（Tb）・ユーロピウム（Eu）等を対象元素とした代替材料の開発や使用量低減技術の開発を行った。2012～2015年度には産業界での希少金属の使用量低減を促進するため、民間企業から広くテーマを公募し、早期の活用が期待される研究開発として、鉛フリーはんだ（Bi）、樹脂難燃剤（Sb）、ランガサイト型圧電素子（La, Ga, Ta）、レアアースレスモータ（Nd, Dy）、レアアースレス蛍光体（Eu, Ce, Y）、排ガス浄化触媒（Pt, Pd, Rh）、超硬工具（W）、太陽電池波長変換膜（Y）等に対して助成を行った。これらの研究開発を推進するとともに、関連する研究開発動向の調査、事前検討、中長期戦略立案に関する事業など幅広い取り組みを行っている。

2012年からは経済産業省による未来開拓研究プロジェクトの中で「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」を開始し、その後NEDOが引き継ぐ形で2014～2021年度の8年間という長期プロジェクトが始まっている。

他にも、JSPS科研費の新学術領域研究として、「元素ブロック高分子材料の創出」、「ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開」、「 π 造形科学：電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」、「3D活性サイト科学」など、元素戦略と関連するものが2012年以降から開始されている。内閣府のSIP「革新的構造材料」、文部科学省の「東北発素材技術先導プロジェクト」、JSTの「先端的低炭素化技術開発（ALCA）」、「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」、「革新的次世代高性能磁石創製の指針構築」、日EU共同研究「希少元素代替材料」などの関連プロジェクトも推進されている。また、レアメタルに係る安定したマテリアルフローを実現したサプライチェーンの確立を目指した東北大学レアメタル・グリーンイノベーション研究開発センター（2014年1月設立）などの研究開発拠点も整備されつつある。

[米国]

米国では日本に追随する形で、2010年にエネルギー省（Department of Energy : DOE）が“Critical Materials Strategy”を発表し、Li, Mn, Co, Ni, Ga, Y, In, Te, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Tb, Dyをキーマテリアルとして戦略的に供給の安定と代替技術、循環技術を確認すべき対象とした上で、研究プロジェクトの組織化や国際協力の提案を行っている。またその一環として、2012年からInnovation Hub for Critical Materials Researchという拠点形成も進めている。また、同時期に日本の元素戦略を意識した取り組みとしてMaterials Genome Initiativeも開始された。これは理論やデータが材料研究を牽引するとした内容であるが、元素戦略が先導した「理論」「材料創製」「解析評価」が三位一体となった研究開発は時代の趨勢となりつつある。

[欧州]

欧州では2007年から2013年にわたるFP7（第7次研究枠組み計画）においてCritical MaterialsとしてLi, Co, Ga, Ge, Y, Ru, Pd, In, Te, Ta, Ptおよび希土類を定め、2014年より開始された後継プログラムであるHorizon 2020の中でも原材料の持続可能な供給の促進、資源効率の向上等を目的とした積極的なテーマ探索を進めている。特に2015年2月より欧州の社会的課題解決プログラム（European Innovation Partnerships: EIPs）の一つとして、Horizon 2020支援の下、International Raw Materials Observatory (INTRAW)の活動が開始されている（2018年1月までの3年間）。INTRAWでは、原材料資源に関する技術先進国もしくは鉱物資源保有国である米国、カナダ、オーストラリア、南アフリカ、日本等との国際協力の促進、共通に抱える資源問題を解決するためのベストプラクティスの俯瞰、欧州における原材料資源に関する戦略策定や政策提言、およびファンディングを実施する国際機関設立を目指している。

[アジア]

中国、韓国でも資源制約へのアプローチが行われているが、中国は資源国としての強みを活かした輸出制限などによるアプローチ、韓国は最終製品の競争力を活かした部材開発力の強化を睨んだ戦略を取っている。

なお、2011年から毎年、Trilateral U.S. - EU - Japan Conference on Critical Materialsという施策上重要な物質に関する日米欧三極会議が行われている。ここでは、レアアース等の供給を取り巻く世界的な問題に関する共通理解を深め、レアアース代替技術やリサイクル技術など将来の安定供給を目指した戦略的な取り組みについて議論している。

なお、現在日本は材料開発に注力しているが、採掘・生成・回収技術面での技術力、すなわち「循環」の取り組みが不足している。希土類元素や貴金属などの抽出技術が様々検討されているが、その中心となっているのは文部科学省「東北発素材技術先導プロジェクト」における希少元素高効率抽出技術領域である。ここでは、都市鉱山を対象とし、有用金属を多量に含む電気電子機器の廃棄物から物理的な分離・選別技術、新しい希少元素の抽出・分離技術および反応解析を含む応用技術を研究し、その連成による「元素循環の科学」を確立することで、都市鉱山からの希少元素の回収・再生への応用に繋げることを目

指している。

持続可能な豊かな社会の実現には、物質・材料の開発の継続に加え、希少元素の再利用技術の開発、再利用システムの構築が必要不可欠であり、今後は元素毎のマテリアルフローの追及にさらに注力することが必要になる。また、資源の乏しい我が国の現状を鑑みるに、今後の元素戦略は多様な電子・原子配列による機能発現を多量データの統計的解析により整理・理解した上で新規材料の設計・開発につなげる「マテリアルズ・インフォマティクス」の視点の強化も重要であると考えられる。

(3) 注目動向

これまで我が国においては、対象を絞りそこに技術と知識を集約して解決する集中型の研究開発により、元素戦略の5つの柱の中の「代替」「減量」に関する取り組みが主に行われてきたが、ありふれた元素（earth-abundant elements）で従来を凌駕するあるいは新規の機能発現を目指す創成型の研究開発が求められる。そのためには、特定元素がなぜその機能を発揮しているのかについて科学的に解明し、その機能発現原理を具現化するためのナノスケールの物質構造（原子配列、格子欠陥、結晶粒、磁区構造、分子構造、表面・界面構造など）をデザインすることによって、希少元素・有害元素の代替に留まらない、「新機能」に関する取り組みを推進することが重要である。そこで文部科学省は2010年の戦略目標として「レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出」を掲げた。これを受けてJSTにおいて前述のCREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」およびさきがけ「新物質科学と元素戦略」を発足させた。CRESTにおいては、物質の特性・機能を定める特定元素の役割を理解し有効活用することで、既存の延長線上にはない物質・材料の革新的な特性や機能の創出を目指している。さきがけでは、クラーク数上位の元素を駆使して、ナノ構造や界面・表面、欠陥などの制御と活用による革新的な機能物質や材料の創成と計算科学や先端計測に立脚した新しい物質・材料科学の確立を目指している。京都大学の北川宏らによる元素間融合による新規ナノ合金の開発、九州大学の永島らによるアルケンのヒドロシリル化用鉄・コバルト触媒の開発など、実用化に繋がる成果も次々に創出されている。

2012年から10年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」における4つの研究拠点の目的を以下に示す。

[磁石材料研究拠点]

磁石の性能に与える元素の役割を基礎物理に遡って解明することにより、ハイブリッド自動車の駆動モーター等に用いられている現在の最高性能を有する希土類永久磁石と同等の性能を有する磁石を、希少元素を用いることなく作成することを目指す。

[触媒・電池材料研究拠点]

今日の環境産業やエネルギー産業に欠かせない触媒及び二次電池の部材について、固体及び気体／液体との間での元素の複雑系反応を基礎科学と実験科学の緊密な連携を通じて解明することにより、触媒及び二次電池に対する元素の機能を予測し、貴金属や希少元素を用いない代替材料の開発を目指す。

[電子材料研究拠点]

エレクトロニクス産業を支える電子部材（半導体、透明電極・伝導体、誘電体等）を中

心として、幅広い材料分野に有効な新しい材料科学を、基礎物理、計算科学、先端解析技術の協働により構築して、希少元素や環境負荷の高い元素を用いない代替材料の開発を目指す。

[構造材料研究拠点]

材料の「強度」（変形への抵抗）と「延性」（破壊への抵抗）といった相反する性質を基礎科学の段階から解明することで、社会基盤を支え、安全・安心な社会に不可欠な構造材料において、現在大量に使用されている希少元素を抜本的に削減した代替材料の開発を目指す。

本プロジェクトでは、2015、2018年度にそれぞれ中間評価を行い、2021年度に事後評価を行うこととしている。2015年には第1回目の中間評価が行われ、「各研究拠点の進捗状況等を踏まえ戦略的な予算配分を行い、効果的な研究推進体制を再構築すべき」であるとし、構造材料研究拠点に関しては「電子論から物質創製・解析評価に重点を移し、これまでに得られた成果をフィードバックした研究展開を推進するための研究体制変更を行うべき」とした。これを受けて各拠点において2016年度以降の研究体制および推進方策について対応策が講じられ、現在も精力的な研究が行われている。

経済産業省からNEDOに移管した「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」（2014～2021年度）において、レアアースに依存しない革新的高性能磁石の開発、モーターを駆動するためのエネルギーの損失を少なくする高性能軟磁性材料の開発ならびに新規磁石、新規軟磁性材料の性能を最大限に生かして更なる高効率を達成できるモーター設計の開発を行っている。次世代自動車や家電、産業機械の心臓部であるモーターの省エネ化を図り、競争力を確保し、我が国産業全体の活性化に寄与することが目的である。

これら一連の取り組みの顕著な成果として、2016年7月に大同特殊製鋼と本田技研工業から、重希土類元素を使わないネオジム磁石の開発に成功したことが共同発表され、2016年秋発売のハイブリッド自動車に既に採用されている。さらに、同年11月には東芝と東芝マテリアルから、重希土類フリー高鉄濃度サマリウムコバルト磁石の開発に成功し、サンプル出荷を開始したことが共同発表された。

(4) 科学技術的課題

材料開発が原子レベルで行われるようになり、材料の分析手段も原子レベルで行われる必要が出てきており、放射光施設や高性能な電子顕微鏡を用いることで材料の静的な構造などは詳しく解析されるようになっている。しかし、例えば触媒材料開発に注目すると、実際の反応場で材料（触媒）がどのように振舞っているかの多くは未だ解明されておらず、特に、鉄触媒研究においては鉄触媒活性種が不安定かつ常磁性状態が安定になりやすいため、溶液中での反応機構の解析手法、それに基づく合理的な触媒設計や触媒反応設計が確立していない。鉄触媒反応に限らず、様々なメカニズムの解明は材料開発にとって不可欠であり、新たな指針を与えるものである。そのためにはその場観察（オペランド）実験手法の確立が必要となる。中でも高分解能電子顕微鏡のオペランド観察は、反応場における原子の動きを実際に観測することが出来、非常に強力な手段と考えられる。日本では最先端の電子顕微鏡があまり普及されていないが、欧州では国立研究所（Ernst Ruska-Centre）と電子顕微鏡メーカー（FEI）などが共同開発を行い、実際の反応条件と同等の

環境で観察を行える環境制御型電子顕微鏡の開発が盛んに行われており、材料開発を促進している。

(5) 政策的課題

元素機能の発現機構は、物理、化学、金属などの既存の学問領域が単独で解明できるものではないため、異分野の力を結集することが重要である。異分野連携・融合によって様々な学問領域の視点から機能発現機構を解明することが材料挙動の原理解明に直結し、材料の革新につながる可能性が高いと考えられる。しかし、この異分野連携・融合が自然発生的に生まれることは一般的には期待できず、政策的な誘導が必要である。JST-CRESTにおいては、各研究チームに理論グループの参画を必須とする等、トップダウンによって異分野連携を促進したが、そのCRESTも2017年度で終了する。元素戦略プロジェクトやNEDOプロジェクトを補完、またはサポートする新たな方策が必要であると考えられる。

また、元素種ごとのリスク分析を綿密に行い、優先順位と数値目標を明確に掲げた上で、効率的な取り組みを進めることも肝要である。都市鉱山などで指摘されるリサイクル技術の開発においては、製品の回収方法のシステム化などの要素が含まれており、科学技術行政のみならず、環境、総務行政との連携も必要であると考えられる。希少元素を循環的に利用するシステムの確立に向けた技術開発や規制戦略も重要である。

元素戦略・希少元素代替戦略の確立・達成には人材育成も含めた産学官の密接な連携を通じたオールジャパン体制の整備が必要であることは言うまでもない。

(6) キーワード

元素戦略、Critical Materials、希少元素、希土類元素、循環、減量、代替、材料設計、構造制御

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	・ 文部科学省、経済産業省、JST、NEDO などにおける各プロジェクトの推進により基礎学理の構築および研究コミュニティの拡大が進んでいる。
	応用研究・開発	◎	↑	・ 上記のプロジェクトで開発された新物質・新材料の実用化が進みつつある。 ・ 2016年7月に大同特殊製鋼と本田技研の共同研究により、重希土類フリーネオジム磁石の開発に成功。 ・ 同年11月に東芝と東芝マテリアルの共同研究により、重希土類フリー高鉄濃度サマリウムコバルト磁石の開発に成功。
米国	基礎研究	◎	↑	・ 2011年の“Critical Materials Strategy”や“Material Genome Initiative”の発表以来、各分野において理論・計算科学によるハイスループットスクリーニングを駆使した材料開発が行われており、徐々に成果が出つつある。
	応用研究・開発	○	→	・ 有機金属錯体触媒、オレフィン重合、ヒドロシリル化など化学分野で実績がある。 ・ 希土類磁石メーカーがないため、基礎研究を産業へ結びつけることが難しくなっている。

欧州	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・英国を中心にアクティビティの高い研究者が Fe 錯体を使った触媒反応について研究を展開しており、オレフィン重合、クロスカップリング反応に関する優れた研究がある。 ・ドイツの IFW Dresden、ダルムシュタット工科大学、フラウンホーファー研究機構、フランスの CNRS などを中心に磁石研究が盛んに行われている。 ・欧州における原材料資源に関する戦略策定や政策提言、およびファンディングを実施する国際機関設立を目指した INTRAW の活動が活発化している
	応用研究・開発	△	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・米国と比べると顕著ではないものの、英国を中心にアクティビティが上がっている。
中国	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・貴金属代替 (削減) 材料の開発が多数報告され始め、論文数は急増している。 ・積極的に先端技術を導入して研究を進めている。
	応用研究・開発	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・特許出願数は多いがほとんどが大学からのものであり、産業界との連携状況は不明。 ・有害廃棄物の処理としてのリサイクル開発が中心に行われている。 ・すでに世界で最も磁石生産量の多い国になっている。また、日本の最先端技術を利用できるようになっており、レベルの高い製品を作れるようになっている。
韓国	基礎研究	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・米国の Material Genome Initiative や日本の元素戦略の成果に倣った研究成果が出ているが、独自性のある成果は見られない。
	応用研究・開発	×	→	<ul style="list-style-type: none"> ・特に目立った動きは見られない。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター：戦略イニシアティブ「元素戦略」, 国立研究開発法人科学技術振興機構, <http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2007/SP/CRDS-FY2007-SP-04.pdf>, (参照：2016.7.28)
- 2) E. Nakamura, et al. : Managing the scarcity of chemical elements, Nature materials 10, p.158-161 (2011)
- 3) 中山智弘: 元素戦略 科学と産業に革命を起こす現代の錬金術, ダイヤモンド社 (2013)
- 4) 日本化学会: 未来を拓く元素戦略 持続可能な社会を実現する化学, 化学同人 (2013)
- 5) ニュートン別冊 マテリアル革命, p.128-157, ニュートンプレス (2015)
- 6) U.S. Department of Energy : Critical Materials Strategy, U.S. Department of Energy, http://energy.gov/sites/prod/files/DOE_CMS2011_FINAL_Full.pdf, (参照：2016.7.28)
- 7) INTRAW : INTRAW Project, <http://intraw.eu/>, (参照 2016.7.28)
- 8) Kohei Kusada et al., “Hydrogen-Storage Properties of Solid-Solution Alloys of Immiscible Neighboring Elements with Pd” J. Am. Chem. Soc. 132 (2010): 15896-15898, DOI: 10.1021/ja107362z
- 9) Kohei Kusada et al., “Solid Solution Alloy Nanoparticles of Immiscible Pd and Ru Elements Neighboring on Rh: Changeover of the Thermodynamic Behavior for Hydrogen Storage and Enhanced CO-Oxidizing Ability” J. Am. Chem. Soc. 136 (2014): 1864-1871, DOI: 10.1021/ja409464g
- 10) Katsutoshi Sato et al., “A Synthetic Pseudo-Rh: NO_x Reduction Activity and

Electronic Structure of Pd–Ru Solid-solution Alloy Nanoparticles” Sci. Rep., 6 (2016): 28265, DOI: 10.1038/srep28265

11) D. Noda, A. Tahara, Y. Sunada, H. Nagashima, J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 2480-2483.

12) http://www.daido.co.jp/about/release/2016/0712_freemag_hevmotor.html

<http://www.honda.co.jp/news/2016/4160712.html> (参照 2017.3.9)

13) http://www.toshiba.co.jp/about/press/2016_11/pr_j1001.htm (参照 2017.3.9)

3.5.5 データ駆動型物質・材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス）

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

計算科学による物性予測とそれを実証するハイスループット材料合成・評価、それらのデータを統合管理する材料データベースや機械学習などを統合的に活用した物質・材料探索・設計の取組全般を指す研究開発領域である。実験、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータを駆使して、統計的手法により物質・材料の機能を制御する規則を探り、それを通して具体的に新物質・新材料の発見を加速する。究極的には、規則の背景にある材料特性を支配する法則を発見し、自在な材料設計を可能とする系統的アプローチの構築を目指す。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の研究開発動向

計算科学に基づいたデータ駆動型物質・材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス）の概念は、2000年頃から提唱されていたが、当時は計算機で取り扱える原子数や精度が不十分であった。また、大量データを統合し材料科学の問題をマイニングする手法も未開拓であった。しかし、近年の計算機能力の著しい向上と大量データを取り扱える環境が整ったことで、状況は劇的に変わりつつある。2011年に米国が「Materials Genome Initiative (MGI)」を発表したことをきっかけに、計算科学とデータ科学を融合させたデータ駆動型材料設計が注目され、世界中で精力的な研究がなされている。かつて、理論、実験に次ぐ「第3の科学」として計算科学が物質・材料研究における解析や予測の手段として重要な位置を占めるようになったことと同様に、特に最近になって「第4の科学」としてデータ科学の重要性が指摘されるようになってきている。

第5期科学技術基本計画（2016年1月22日閣議決定）においては、超スマート社会「Society 5.0」の実現に貢献する11のシステムの1つである「統合型材料開発システム」として表現され、「計算科学・データ科学を駆使した革新的な機能性材料、構造材料等の創製を進めるとともに、その開発期間の大幅な短縮を期待する」と記載されている。将来的には開発期間・コストの短縮・削減だけではなく、人工知能が新規な物質を予測・予言したり、材料化のレシピを示したり、新たな物理法則を発見することができるのではないかと期待されている。

以下では、我が国および諸外国の政策および研究開発動向について記述する。

[日本]

我が国では、2013年8月にJST研究開発戦略センターが戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）～物質・材料研究を飛躍的に発展させるための新たなパラダイムシフト～」を発行し、データ駆動型物質・材料開発の重要性について政府に提言を行ったことをきっかけに、2015年にNIMSを中核機関とする「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（“Materials research by Information Integration” Initiative : MI²I）」（PL：寺倉清之、2015～2019年度）が発足した。それ以前の2014年に開始した内閣府戦略的イノベーション創造プログラム（Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program : SIP）「革新的構造材料」（PD：岸輝雄、2014～2018年度）の中の研究開発項目の一つ「マテリアルズインテグレーション」（領域長：小関敏彦）、2016年に開始した経済産業省／

NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト（超超プロジェクト）」（実施機関：産業技術総合研究所など、2016～2021年度）の3つのプロジェクトが補完的に研究開発を実施している。また、内閣府における統合型材料開発システムとして、上記の3プロジェクト（MI²I、マテリアルズインテグレーション、超超プロジェクト）の間で、実施者を加えた3府省連絡会議等を適宜開催し、各事業の進捗や成果の共有を図ることとしている。さらに、データ駆動型物質・材料開発の基盤構築と本研究分野を牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの育成を目指して、2015年にJST戦略的創造研究推進事業（さきがけ）「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」（研究総括：常行真司、2015～2020年度）が発足している。

[米国]

米国では、2012年より国家的な取り組みとしてMGIが開始され、材料開発に要する期間を2分の1に短縮するという目標を掲げ、「計算ツール」「実験ツール」「デジタル・データ」を材料イノベーション基盤として整備するべきであるとしている。この背景としては、計算機を使った物質・材料に関する研究活動についての数千件のヒアリングが行われた結果、大規模数値計算に対する期待よりも、大量データをどう活用するかという問題の解決に対する期待の方がはるかに大きかったということがある。具体的な取り組みとして、以下の3つに分類される。

まず1つ目としては、第一原理計算を主体として物質の構造や物性に関するデータを作り出し、所望の性能や機能を持つ物質・材料を見つけ出そうとする流れであり、実験と計算科学に基づくデータベースとデータ科学に基づく各種分析ツールを融合させて、物質の網羅的スクリーニングを行おうとするものである。例えば、マサチューセッツ工科大学（MIT）のグループ（現在はUC Berkeley）とローレンス・バークレー国立研究所による“Materials Project”では、無機結晶構造データベース（Inorganic Crystal Structure Database : ICSD）に収録された結晶構造データをもとに網羅的に第一原理計算を行った結果と国立標準技術研究所（National Institute of Standards and Technology : NIST）の熱力学データベースをリンクさせて、状態図や構造予測、化学反応予測などを収録したデータベースを公開しており、知りたい化合物名を入力するとその物質の結晶構造、第一原理計算で求めた電子状態、X線回折データなどが表示される仕組みになっている。さらに、これらのデータを活用できる各種アプリケーションソフトウェアも公開しており、リチウムイオン電池の正極材料の探索などに用いられている。同様のデータベースはデューク大学のCenter for Materials Genomicsが主導するコンソーシアム“aflowlib.org”からも公開されており、結晶構造、電子特性、熱電特性などを見ることが出来る。米国ではこれらのグループが、第一原理計算から得られたデータの高度な共有と利用を牽引している。触媒分野では、スタンフォード大学とSLAC国立加速器研究所が共同でThe SUNCAT Centerを設立し、キャタリスト・インフォマティクスという形で、固体表面の触媒特性を調節する因子を同定し、新しい触媒を開発する試みが取り組まれている。また、米国立スーパーコンピュータ応用研究所（National Center for Supercomputing Applications : NCSA）とアルゴンヌ国立研究所が連携してMaterials Data Facilityを運営している。

2つ目の流れとしては、コンビナトリアル合成・計測であり、実験家を中心に、ハイスループットに物質を合成し、物性を計測し、データベース化するとともに、視覚化ツール、分析ツールを用いて最適物質、構造を予測するというサイクルを構築するものである。放射光を利用したコンビナトリアル X 線回折実験の手法なども開発されている。

3つ目としては、統合計算材料工学（Integrated Computational Materials Engineering：ICME）の流れであり、構造材料を中心に、結晶構造（第一原理計算）から材料組織までのマルチスケールをプロセス、材料組織との関係も含め、データから相関を統合していくものである。2014年、NISTが、ノースウェスタン大学、シカゴ大学を中心とした Center for Hierarchical Materials Design（CHiMaD）を立ち上げた。熱力学・状態図計算など、個別のニーズに合わせて速度論のシミュレーションを行い材料特性の予測、材料開発の支援を実施している。

MGIに関連するその他の取り組みとして、ミシガン大学が中心となって材料のマルチスケール・マルチフィジックスの課題を解くための様々なツールを開発している Predictive Integrated Structural Materials Science（PRISMS）、空軍研究所では Integrated Collaborative Environment（ICE）と呼ばれる汎用データプラットフォームが構築されている。

また、米国における汎用データプラットフォームに関連したベンチャー企業としては Citrine Informatics 社、Materials Research LLC が注目されている。さらに、Globus 社における材料科学分野向けのデータレポジトリ Materials Data Facilities も存在感を増している。

[欧州]

欧州においては、Horizon2020の支援の下、European Materials Modeling Council（EMMC）の中に組織されている European Multiscale Modeling Cluster において、LED、太陽光発電、発泡ポリウレタン、二酸化炭素回収・貯留、マイクロ流体デバイスをターゲットにした計5つのプロジェクトが推進されており、全てのプロジェクトで固有のデータマネジメント（ワークフロー）を自動化するための汎用データプラットフォームを構築している。さらに、これらのプロジェクト間の連携およびシミュレーションソフト間の相互利用性（interoperability）の確保を目的に Integrated Computational Materials Engineering Expert Group（ICMEg）というネットワークングのプロジェクトが推進されている。この他、スイス科学財団（Swiss National Science Foundation）が推進している MARVEL プロジェクトのデータプラットフォームとして運用されている AiiDA、マックスプランク協会フリッツ・ハーバー研究所が中心になって進める NoMaD Repository の活動が顕在化している。

[中国]

中国においては、2014年に上海市と上海大学が共同で進める Shanghai Materials Genome Institute を設立し、最近、急速にデータ科学を活用した材料開発研究を進めている。また、2016年に中国科学院物理研究所と北京科技大学が共同で北京マテリアルズゲノム工学イノベーション連盟を設立している。さらに同年、上海交通大学においてもマテリアルズゲノム連合研究センターを設立するなど、国を挙げてマテリアルゲノム研究に

力を入れ始めていると同時に欧米の研究者との連携を強くしている。2016年3月に発表された科学技術イノベーション第13次五ヵ年計画においても、中国産業の国際競争力向上のための重点技術の一つ「新素材技術」の中に「マテリアルズゲノム工学（目標：新材料の開発期間・コストの半減）」と明記され、6月には、中国国家重点研究プロジェクトとしてMGI関連の14課題を採択した（研究費総額：3億元（約48億円））。

[韓国]

2015年から10年計画でCreative Materials Discovery Projectが開始している。また、最近、韓国科学技術研究所（Korea Institute of Science and Technology：KIST）において計算科学を中心としたMaterials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS)が設置された。

以上のように、米国MGIの開始以降、データ駆動型物質・材料開発は世界的な潮流となり、過去10年で第一原理計算や分子動力学などの計算科学が研究開発に浸透したここと同様に、データ科学を用いた新たな手法が研究開発に浸透しつつある。

(3) 注目動向

上述の世界的な動向の中でここ2～3年のトピックスを中心に各国の取り組みについて記載する。

[日本]

・「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）」

MI²IはJST「国立研究開発法人を中核としたイノベーションハブの構築支援事業」の2015年度の課題に採択され、最大5年度、4.5億円／年の規模で実施されている。ここでは、データ科学と物質・材料科学の融合によって新物質・材料科学研究を加速する取り組みの場として、Matnaviを中心とするデータベースの開発・整備、物質・材料から情報・数理科学にわたる産学官の協働作業の体制の構築、より広範な企業の参画を促進し、オープンイノベーションに繋がるハブ拠点化を目指している。具体的課題としては、画期的な蓄電材料、磁性材料、伝熱制御材料を開発し社会実装へ繋げると同時に、新しい物質・材料科学手法の開発・蓄積を進め情報統合型物質・材料開発手法のパッケージ化・システム化を目的としている。2016年4月からMI²Iコンソーシアムが設立され、法人会員、個人会員の受付を随時行っている（2016年7月末時点で参加企業31社）。コンソーシアム会員には、各会員が関心を持つテーマに対して情報統合型の研究手法を確立する取り組みを行う一方で、国家的課題である情報統合型物質・材料開発の研究手法を早期に実現するため、オープンイノベーションを体現する場の創成に積極的に関わることが求められている。

データベース整備に関しては、世界最大級の物質・材料データベース「MatNavi」を有するものの、データ解析を前提として作られていなかったため、データ駆動型物質・材料開発に適したデータベースに再構築する必要があり、MI²Iの中にデータプラットフォーム委員会を設けて、今後のグランドデザインについて検討を始めている。

- SIP マテリアルズインテグレーション

マテリアルズインテグレーションとは、材料の組織や特性、構造体としての性能、寿命を決定する時間依存の性能などに関して、理論、計算、実験データ、経験則を融合（Integration）して予測する手法である。組成などの材料条件および製造や利用加工などの材料プロセス条件を元にして材料内のマクロ／ミクロな組織や残留応力、負荷応力や温度などの使用条件や使用環境における材料・部材・構造体の信頼性や寿命に関わる時間依存の使用性能（疲労、クリープ、腐食、脆化による性能劣化や破壊など）を予測することによって、材料開発を加速することを目的としている。材料の組織形成、特性の発現、性能劣化、破壊の素過程に関する理論や計算、組織や性能に関する様々な蓄積された実験データ、それらの記述や予測の理論や経験則などをモジュール化し、それらを柔軟に組み合わせて連結することで組織や性能を一貫して予測するシステムの構築を目指している。個々のモジュールの高度化とともに、実験データとの融合により、理論やシミュレーションに必要な物性値やパラメータの予測やシミュレーションとの同化を可能にし、組織や性能の予測をより現実的にできる。またシステムとしては、時間・空間スケールやデータ構造の異なる様々なモジュールを自由に接続可能にすることによって、材料組成やプロセスから性能までの一貫した性能予測のフロー（ワークフロー）が可能になる。ワークフローの蓄積や学習によって、目標性能から最適材料を逆問題解析的に示唆できるようになることが期待されている。

- 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

MI²I、マテリアルズインテグレーションでは計算や実験などのビッグデータが存在するという前提を持つ。そしてデータベースの構築と活用に重きを置き、人間の洞察の助けを借りて、機械学習等を用いるデータ解析を行う。これにより、機能と強く相関する因子（記述子）を見つけ出し、それを手がかりにして物質予測を行うというスキームが採用されている。一方で、産業分野で用いられる複雑で不均質な機能材料に関しては、マイクロ構造や不均質な組成分布が非常に重要な影響を及ぼしていることから、情報のデータベース化は困難である。また、産業分野で用いられる材料に対しては相反する機能の最大化が要求されるのが常であり、こういった相反問題に対して記述子を人的に洞察することは困難である。こういった産業用の機能性有機材料を想定し、深層学習等の人工知能（AI）技術を積極的に利用する試みが超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトで実施されている。すなわち、深層学習においては、基本アルゴリズムによって、機械学習において必要である記述子が自動的に決められるという点が大きな違いである。しかしながら、機能性有機材料分野においては材料設計 AI（深層学習）の“教育”用の学習用データに適した大量の実験結果は存在しないため、計算シミュレーションによりこれを補う必要がある。計算シミュレーションによる材料機能の順方向（組成・構造→機能）の予測性能を向上すると同時に複雑構造材料の数理モデリング技法を構築する。これにより質の高い学習用データを AI に供給する一連のスキームを構築する。このスキームで、計算シミュレーションにより学習用ビッグデータを生み出し、それを活用して AI による材料の逆予測（機能→組成・構造）技術を確立することが期待されている。そのような方向性で立案されている研究プロジェクトは世界においても類を見ず現時点では本取り組みが唯一の試みであると言える。

- さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」研究領域

本研究領域は、2015年度に発足した。目的は二つである。①実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合によって、それぞれの手法の強みを活かし、得られた知見を相互に活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの確立、②それを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出である。

2015年度に1回目、2016年度に2回目の公募が行われ、それぞれ14課題、12課題を採択している（各研究課題の研究費規模は最大4000万円／3年半である）。本研究領域の特徴としては、提案前から提案者自身と異なる知識・技能を持つ専門家と提案内容について議論を深めておくことを強く推奨し、コラボレーションを含む研究提案（連携提案）も可能にしている点である。ただし、さきがけ研究は個人型研究であるため、採択にかかる評価はあくまで個人研究としての提案をもとに行われる点に留意が必要である。

[米国]

- Materials Genome Initiative (MGI)

2014年、NSTCのMGI分科会より戦略プランが公表され、「計算、データ、実験の各手法を連携させた統合アプローチを主流にするための研究者意識の醸成」「実験・計算・理論の各研究者の統合」「データへの容易なアクセス環境の整備」「世界水準の人材育成」とし、計算科学・データベース・機械学習・深層学習を用いた材料開発の高効率化が進められている。ここで特に重要な点は機械学習や深層学習に使う実データの蓄積であり、データ蓄積のためのWebサイトの準備が進められており、今後は全米からボランティアによる材料合成とその結果の投稿が進むと期待されている。それと並行して、合成条件や組成変化、計測結果を系統的に調べるコンビナトリアル材料合成が再注目され、国立標準研究所（National Institute of Standards and Technology : NIST）においてコンビナトリアル材料合成を含む高速材料合成と評価に関する研究が進められている。

MGIで特徴的な点は、系統的なキュレーションが材料開発に適用されつつあることである。これによって盲目的に材料データを収集するのではなく、次にどのようなデータを集めればいいかを判断することとなり、その過程で機械学習において重要な記述子の蓄積も可能となる。

- Materials Project

2011年、当時マサチューセッツ工科大学のCeder（現・カリフォルニア大学バークレー校）らはエネルギー省（Department of Energy: DOE）の支援を受け、ローレンス・バークレー国立研究所と共同で革新的なオンラインツール「Materials Project」を立ち上げた。2016年11月時点で「Inorganic Compounds」「Band Structure」「Molecules」「Nanoporous Materials」「Elastic Tensors」「Piezoelectric Tensors」「Intercalation Electrodes」「Conversion Electrodes」の5つの項目のデータ数は総計約70万件であり、ユーザ数は約25000名である。

• **Integrated Computational Materials Engineering (ICME)**

ICME のコンセプトは、材料が実際に適用されるまでの期間短縮のために、データを相互利用可能にし、コンピュータ上でシミュレーション・実験・データベース等の様々なツールを組み合わせ、適用する部材に応じた材料の最適化まで行うものであり、2000～2003年に DARPA プロジェクト「Advanced Insertuin of Materials」などの活動の延長線上にある。ICME については 2008 年に米国科学アカデミーにおいて議論がなされ、ミシガン大学、アイオワ州立大学、マサチューセッツ工科大学などの大学関係者や DOE のサンディア国立研究所、空軍研究所などの公的研究所の関係者のみならず、Lockheed Martin 社、Pratt & Whitney 社、GE Aviation 社、Ford 社、Microsoft 社などの産業界関係者を委員として報告書が公表されている。2011 年の MGI 公表後、ICME の実装に向けた議論が継続的になされ、2013 年には自動車・船舶・航空機産業への実装について、2015 年にはマルチスケールモデリングへの実装について、The Mineral, Metals and Materials Society (TMS) から報告書が発行されている。また、TMS においては ICME を主題とする国際会議を 2011 年から隔年開催している。

[欧州]

• **European Multiscale Modeling Council (EMMC)**

EMMC の下で組織された European Multiscale Modeling Cluster (Eu-MMC) において、以下の 5 つのプロジェクトが推進されている。

プロジェクト名	応用ターゲット	データプラットフォーム	開発母体
DeePen	LED	UNICORE	TiberLAB (イタリア)
MMP	太陽光発電	MuPIF	Czech Technical University (チェコ)
MoDeNa	発泡ポリウレタン	Orchestrator	Norway University of Science and Technology (ノルウェー)
NanoSim	二酸化炭素回収・貯蔵	Porto	Stiftelsen SINTEF (ノルウェー)
SimPhoNy	マイクロ流体デバイス	SimPhoNy	FhG-IWM (ドイツ)

また、EMMC においては、「ビジネス意思決定支援 (Business Decision Support)」「利用相互性 (Interoperability)」「材料モデル市場 (Materials Model Marletplace)」など 10 のワーキンググループを設置(各ワーキンググループには運用チームマネージャー (Operational Team Manager:OTM) と副 OTM を 1 名ずつ置く) し、欧州の中のようなステークホルダーを交えた活動を展開している。

[中国]

• **北京マテリアルズ・ゲノム・エンジニアリング・イノベーション連盟**

2016 年 1 月、中国科学院物理研究所において設立式典および第 1 回全体会員大会が開催された。本同盟は、中国科学院物理研究所と北京科技大学によって共同創設された。創設の趣旨は関連分野において優位性を有する大学、科学研究院(所)および企業など計 36 の機関によって構成されており、マテリアルズ・ゲノムに関する研究を行うことで北京および中国全体の新材料の研究開発プロセスの加速、開発周期およびコストの半減、新材料の産業体系の構築・完備、製造業の復興、イノベーション駆動型発展戦略の実施を支援することを目的としている。

(4) 科学技術的課題

データ駆動型物質・材料開発を進める上で主要な科学技術的課題として物質から材料に至るまでの特性や性能のデータに関する課題がある。

物質から材料へ至るにはナノ、ミクロ、マクロの各スケールで多くの構造や組織の因子が関係する。例えば、構造材料においては、ナノスケールでは転位を含む欠陥の密度や分布、溶質原子の配列や分布、粒界や界面の構造、ミクロスケールでは、結晶粒のサイズや形状、応力やひずみの分布、マクロスケールでは欠陥や溶質偏析、残留応力など極めて多様な因子が相互に関係している。それらの因子を如何にデータベース化するか、またこれらの因子は製造や加工のプロセス条件によって変化するものであるため、そのようなメタデータをどのように付与するのか、さらに各因子の空間分布や時間変化などの情報をどのように付与するか等、課題は山積している。どの程度まで網羅的なデータベースを構築すればよいか、理想的なデータベースが構築できたとしてもデータから元の物質・材料が再現可能であるのか等についても検討が必要である。

(5) 政策的課題

材料は全ての産業の基盤であり、そのデータは広く共有されるべきであるが、現時点で材料データは我が国ではMatNaviや各種便覧で閲覧できるに留まり、その数が不足している状況である。特に材料合成時のプロセスデータは皆無に等しく、企業が持っているデータのシェアが必要となる。しかしながら、企業においては一つの材料を開発するのに数十年もの試行錯誤を経ることもあり、データを囲いこむことで競争力を保持している例が多々ある。そもそも材料分野は競争的性格の強い分野であるため、他者とのデータシェアリングが歓迎されない文化が醸成されている。そのことによって、データの相互利用を礎とするデータ駆動型物質・材料開発を推進する上で、材料分野における競争的性格が最も大きな障壁になっていると言えるため、オープン&クローズド戦略をどう構築するかが重要である。

また、データ提供のインセンティブを促進することも重要であり、例えばデータを提供することによって研究者の評価につながる新たな研究評価システムを構築する必要がある。同時に、この新たな融合分野を世界的に牽引する産学それぞれにおける人材育成が急務である。

(6) キーワード

Materials Genome Initiative、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルズ・インテグレーション、データベース

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・NIMSのMI2I、SIPのマテリアルズインテグレーション、JSTのさきがけなど、様々な取り組みがなされている。 ・データプラットフォーム構築へ向けた取り組みが始まっている。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・SIPに産業界の関与。実際への応用展開はこれから ・経産省／NEDOの超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトで研究開発が開始されている。
米国	基礎研究	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・広範囲な基礎研究支援体制が充実している。また、NISTでは24の部門がMaterials Genome Initiativeに関係し、計算科学、材料合成、評価などに機械学習を併用する試みが進んでいる。 ・産官学それぞれでICMEツールの基盤研究が行われおり、汎用データプラットフォームのプロトタイプ開発が始まっている。 ・材料分野のデータ関連活動における国際連携を取りまとめている。 ・産業界で応用例が出始めている。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・Citrine Informatics、Globus社のMaterials Data Facility、Materials Resource LLCなどにおける汎用データプラットフォームの運営が始まっている。
欧州	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ドイツをはじめとして各国でICMEの基礎研究、ツール開発、連結の動きがある。 ・人工知能、数学、計算シミュレーションのどの分野でも顕著な活動・成果が見えておりポテンシャルは高い。 ・Eu-MMCの活動と関連プロジェクトをネットワーク化するICMEgの活動実績があり、施策継続の決定がなされている。 ・第一原理計算向け汎用データプラットフォームが顕在化している。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒開発のための装置ベンダーが複数あり、それらがドイツのインダストリー4.0に対応した高効率化のためのシステム開発を進めている。 ・英国GRANTA社の活動が顕著である。 ・スウェーデンThermo-Calc社、オーストリアの工科大学発の材料特性解析ソフトウェアMatCalc、ドイツ発の多元系Phase Field Solver MICRESS、ダッソー社のCAEソリューションなどソフトウェアベンダーを中心としたInteroperabilityの確立に向けた連携が始まっている。
中国	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・北京や上海を中心に中国版MGIがこの1年間で急速に進展している。 ・特に上海では計算科学や機械学習、さらにデータリポジトリのシステムを構築するなど短期間で目覚ましい進歩を見せている。 ・多額の投資がなされて、ポテンシャルが蓄積されている可能性が高い。
	応用研究・開発	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・特に目立った動きは見られないが、着実に応用研究を展開している可能性がある。
韓国	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・2015年からCreative Materials Discovery Projectが始まり、KISTにはMIDASが設置され、計算科学とデータ科学を使った材料研究へ移行しつつある。
	応用研究・開発	×	→	<ul style="list-style-type: none"> ・特にこれといった動きは見られない。

俯瞰区分と研究開発領域
機能と物質の設計・制御

(8) 参考文献

- 1) JST, 戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）」
- 2) JST, ワークショップ報告書「データを活用した設計型物質・材料研究（マテリアルズ・インフォマティクス）」
- 3) JST, 研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野（2015年）
- 4) NIMS, NIMS NOW Vol.16 No.2 (2・3月号)
- 5) About the Materials Genome Initiative | The White House, <https://obamawhitehouse.archives.gov/mgi>
- 6) 小関敏彦, “材料データとマテリアルズインテグレーション, 情報管理 戦略的イノベーション創出 (2016): 165. 7)

、マテリアルズインテ

- グレーション、<http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d1.html>
- 8) Center for Hierarchical Materials Design, CHiMaD: Center for Hierarchical Materials Design, <http://chimad.northwestern.edu/>
 - 9) PRISMS Home, <http://www.prisms-center.org/#/home>
 - 10) National Institute of Standard and Technology, usnistgov/MDCS: Materials Data Curation System, <https://github.com/usnistgov/MDCS>
 - 11) ICMEg - Integrated Computational Materials Engineering Group, <http://web.micress.de/ICMEg1/index1st.html>
 - 12) Materials Project, Materials Project <https://materialsproject.org/>
 - 13) The European Materials Modelling Council, The European Materials Modelling Council, <https://emmc.info/>
 - 14) Duke University, Aflow - Automatic - FLOW for Materials Discovery, <http://www.afflowlib.org/> [アクセス日：2016年9月27日]
 - 15) MARVEL, nccr-marvel.ch :: NCCR MARVEL, <http://nccr-marvel.ch/> [アクセス日：2016年9月27日]
 - 16) Integrated Computational Materials Engineering Expert Group, ICME, <http://www.icmeg.euproject.info/> [アクセス日：2016年9月27日]
 - 17) <http://www.sjtu.edu.cn/info/1623/63556.htm>
 - 18) http://www.most.gov.cn/kjbgz/201602/t20160205_124052.htm
 - 19) <http://www.mgi.shu.edu.cn>

3.5.6 フォノンエンジニアリング

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

ナノスケールの微小空間、微小時間で熱の振る舞いを理解し制御することにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現する。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノン／電子／フォトン／スピンなどの量子系の統一的理解、革新的な材料・デバイス技術などの研究開発課題がある。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の研究開発動向

近年の情報化・ネットワーク社会においては、情報通信デバイスの高性能化によってわれわれの生活の利便性が大きく改善されてきた。一方、新たに生成される情報量は飛躍的に増加しており、2020年には現在の約10倍の40ゼタ（ 10^{21} ）バイトになると予測されている。この情報爆発に対応するためには、今後も情報処理やデータストレージの大幅な高性能化・省電力化に向けた技術革新が不可欠である。しかし、半導体集積回路ではナノスケールに微細化されたデバイスの発熱・放熱の問題が高性能化を阻害するようになっており、また、ハードディスクではナノスケールの微小な磁石の熱揺らぎの問題から大容量化の大きな壁に直面している。一方、廃熱からのエネルギーの回収やIoTの普及に向けたエネルギーハーベスティング用の熱電変換素子の実用化が期待されているが、性能向上のために高電気伝導度で低熱伝導度の半導体材料が必要であり、この相反するような課題をマイクロなレベルでの熱制御により克服する必要がある。このような課題に対し、ナノスケールの熱制御手法の開発によるこれらの問題の解決、あるいはナノスケールでの熱発生を積極的に活用した新たな動作原理のデバイスの開発が強く望まれる。

このような状況では、ナノスケールでの物質中の熱の輸送を格子振動の量子であるフォノンの輸送という概念に基づいて扱う必要がある。フォノンの概念は20世紀初めに発見されたが、従来のデバイス開発にはその深い理解や制御はほとんど必要ではなかったため、フォノンを基礎とするナノスケールの熱の理解や制御技術は電子物性や光学物性に比べ大きく遅れた。一方で、電子デバイス、光デバイス、磁気デバイスの微細化がナノスケールまで進むにつれ、電子、フォトン、スピンとフォノンとを別々に取り扱っては、デバイス動作を正しく理解し、設計する事は不可能になっている。このため、微小領域の「熱」に対してナノサイエンスの立場で理解を深め、新たな熱制御・利用技術（フォノンエンジニアリング）を確立することで、新たな学術領域の構築と材料・デバイスの革新を図ることが重要になっている。

フォノンエンジニアリングの応用は、熱輸送制御、断熱、蓄熱、排熱利用などの時間および空間における賢い熱マネジメント全般をカバーするため多岐にわたるが、その一例として熱電変換材料開発における研究動向を紹介する。熱電変換材料を高性能化する指針として電子輸送を妨げずに熱輸送のみを低減するというアプローチがあり、この熱輸送制御にフォノンエンジニアリングが用いられる。具体的には、電子とフォノンの平均自由行程スペクトルの違いを利用し、結晶粒の寸法や不純物の濃度・間隔などを制御することが、試みられている。フォノンエンジニアリングを用いた熱電変換材料開発は、1990年代中頃からアメリカを中心に欧州、中国など世界中で活発に行われており、日本において

も多くのグループが取り組んでいる。米国では、MIT、Stanford、UCSB、Caltechなどで熱設計、熱電変換素子、フォノン制御材料などの先駆的な研究が行われており、DOEのEnergy Frontier Research Center (EFRC)として、S3TECなどナノスケールの熱制御に関する3つのセンターが作られている。欧州では、2011年に分野融合のナノスケール熱制御の研究ネットワーク形成の必要性を提言したEUPHONON、ナノスケールの熱計測で産学連携を推進するQUANTIHEATのコンソーシアムがある。中国では同済大(Tongji Univ.)にフォノンクス・熱エネルギーセンターが設立され、2013年にフォノンクスと熱エネルギー科学に関する第1回国際会議を開催するなど、活動が活発になっている。国内でも、NEDOの「未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究開発」やJSTのCREST・さきがけ「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」が2015年から始まり、その中の一部でフォノンエンジニアリングに基づく研究が進められている。また、情報科学的手法を利用した材料開発(マテリアルインフォマティクス)の応用の1つとして、伝熱制御と熱電材料をターゲットとした研究が情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)で進められている。産業のニーズはより幅広く、超断熱材やサーマルバリアコーティングなどの低熱伝導材料から、TIM(Thermal Interface Material)材や放熱材などの高熱伝導材料の開発が産学で行われている。

フォノンエンジニアリングは、材料中のフォノンの平均自由行程よりも小さいナノ構造を導入することによって可能になる。現在は、フォノンエンジニアリング研究のほとんどは、フォノンを粒子として解釈した領域で行われている。一方、微細化が進むと格子振動に起因する本来フォノンが有する波動性が顕著になってくる。このフォノンの波動性を積極的に利用するフォノン輸送制御技術はフォノンクスと呼ばれ、フォノンの集団輸送である熱流をフォノンクスによって制御する分野の研究が活発になってきている。フォニック結晶と呼ばれるマイクロ/ナノスケールの半導体周期構造が用いられ、伝熱工学を波動性領域に拡張することの重要性を見越したいくつかのグループが研究を進めてきた。2010年頃から米国ではCaltech、サンディア国立研究所など、欧州ではフランス、スペイン、フィンランドで研究が活発化し、日本でも東京大学のグループが研究を進めている。フォニック結晶は、主にシリコン薄膜に周期的ナノ構造を設けたマイクロ構造が多く、周期構造によってフォノンが回折されることによって輸送特性が大きく変化し、フォノンにおけるバンドエンジニアリングが可能になっている。

フォノン輸送の解析には、ナノ構造では第一原理法や分子動力学法、非平衡グリーン関数法があり、米国カーネギーメロン大や東大、東京理科大などがリードしている。また第一原理法によって原子間力を計算し、格子動力学法によって熱伝導特性を求める手法があり、ここでも米国のMITや東大など日米がリードしている。一方、電子とフォノン両方の非定常輸送を同時に扱うことが、ナノスケールのトランジスタの動作解析・特性予測で重要となるが、このような用途に関しては現時点ではボルツマン輸送方程式を基にしたモンテカルロ粒子シミュレーション法が最有力である。この手法はすでに微細トランジスタの電気的特性解析においては、最も汎用性の高いシミュレーション手法として位置付けられており、研究においては日米欧が拮抗している。従来は、電子輸送はモンテカルロ法で行い、フォノン輸送は計算量の少ない流体モデルなどが用いられてきたが、2010年に大阪大学のKamakuraのグループによって、初めて電子とフォノンの輸送の両方をモンテカルロ法で解析する試みがなされ、2013年に慶應大学のAwanoらのグループにより収

束性の問題を解決する新しい手法が考案され、2014年に米国イリノイ大学の Ravaoli のグループから類似の試みが発表された。この最新のシミュレーション技術においては日本と米国が優位に立っている。

高熱伝導材料、TIM (Thermal Interface Material) として、ナノカーボン材料が注目されている。カーボンナノチューブ (CNT) やグラフェンといったナノカーボン材料は、全ての材料中で最も高い $3,000 \sim 3,500 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ の熱伝導率が実測されており、伝導の異方性が大きく、機械的強度が高いことなどから、これらを用いた放熱技術が期待されている。半導体の基板から垂直方向に高密度に配向した CNT 配向膜による垂直方向の熱伝導や、多層グラフェンで面に沿った熱伝導を用いた放熱の研究が行われている。CNT 配向膜の高密度化については日本と英国が先行しており、多層グラフェンの高品質化については報告例が少ないが、日本は優位にある。チップ積層 3 次元実装構造への応用として、多数本の配向成長 CNT の束をシリコン基板中に貫通させた、シリコン基板貫通ビア (Through Silicon Via; TSV) も提案されている。

(3) 注目動向

ナノ構造のサイズ効果や界面を利用してフォノン輸送を低減する技術 (構造作製、理論・数値解析、物性評価) が発展し、シリコン材料ではアモルファス構造よりも熱伝導率が低いナノ結晶コンポジットが実現されている。また、フォノンの波動性を利用する戦略においては、フォノンニック結晶などの周期構造の界面や表面での反射を用いて干渉効果を誘起するためにはナノレベルの微細加工が必要で作製が難しいため、局所的な干渉効果 (共鳴効果) を誘起する手法や構造が提案され始めている。

一方、熱伝導率を高める方向では、グラファイトシートなどの高熱伝導率材料の開発が進んでいる。富士通や早稲田大学で高密度・長尺 CNT の成長に成功しており、CNT の TIM 構造まで作製して金属 (インジウム) TIM と同等の熱抵抗を得ることに成功している。

理論・数値解析技術においては、フォノン輸送に電子やマグノンとの相互作用を含めた解析も急速に進んできている。慶應大学では半導体デバイス中の電子輸送とフォノン輸送のセルフコンシステントな解析を可能とするモンテカルロ・シミュレーション技術を開発している。

計測技術においては、単一ナノ材料の熱伝導計測やサイズ効果を利用したフォノン平均自由行程測定などで引き続き進展が見られる。これらの技術をもとに、熱伝導率をスカラー量でなく、スペクトル量 (フォノンのモードごとの熱伝導能) として評価し、制御性の自由度を高める研究も進んでいる。また、局所温度測定法として空間分解能の高い方法として、走査型熱顕微鏡、チップ増強ラマン散乱法、AFM ラマン法など、いくつか開発されたことで局所加熱に関する測定精度が格段に高くなっている。

マテリアルインズフォマティクスでは、第一原理計算によって得た単結晶の熱伝導率をもとに、数万種類の結晶構造をスクリーニングして低熱伝導率材料を探索すること、熱輸送計算と最適化計算を交互に行うことによって、合金や超格子などの複合的な材料を所望の熱輸送特性に対して構造最適化することなどが報告されている。

また、産業ではより複雑な構造へのニーズが高いが、この点においても、ポリマー、エアロジェルなどのネットワーク構造、アモルファス構造などの熱伝導制御の研究が進んでいる。これらの構造においては、フォノン輸送は伝播するフォノン (Propagon)、拡

散的に伝わるフォノン（Diffuson）、局在するフォノン（Locon）に分類され、これらを階層的に理解し評価することによって、非秩序構造の熱輸送を制御する試みが始まっている。例えば、結晶とアモルファスを複合することで、界面を使ってアモルファス中の Propagon を散乱し、アモルファスよりも熱伝導率を低減できることが予測されるなど、非秩序構造を絡めることで熱制御に新たな自由度をもたらす試みが報告され始めている。

欧米中におけるナノスケールの熱制御に関する研究は依然として活発であり、日本も大学・企業を問わずここ数年で非常に活発化してきた。また、学会においても応用物理学会、日本伝熱学会、日本熱物性学会、フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会、日本表面科学学会、化学工学会、ナノ学会、日本熱電学会などで関心が高まり、シンポジウムなどが盛んに開催されている。例えば、日本伝熱学会では産学合同で特別推進研究領域としてシーズからニーズまでを見通した研究テーマを議論し実施している。また、応用物理学会では、2015年および2016年の春に学会主催で他学会の共催・後援による特別シンポジウムが開催され、2016年秋には新たにフォノンエンジニアリングの合同セッションが誕生し、多くの投稿と参加者を集めて、潜在的な研究者人口の多さを示した。

(4) 科学技術的課題

ナノスケールの熱計測、熱輸送の理論・シミュレーション、熱伝導制御、新たなデバイス開発のそれぞれの研究において、課題はまだ多い。ナノスケールの熱伝導やフォノン輸送を正確に把握し理解するためには、ナノスケールの局所的な温度測定や熱伝導の計測技術および解析・評価技術が不可欠である。また、実際のデバイスの動作を考えると、定常的な状態だけでなく、動的・過渡的な温度変化、熱伝導率の変化についても把握する必要がある。これに対応できる計測・解析・評価技術についても研究開発する必要がある。

熱輸送理論・シミュレーションにおいては、材料の表面／界面／不純物／構造欠陥などを考慮したナノスケールでの熱伝導の理論の構築およびシミュレーション手法の開発も求められる。二次元物質のような極薄膜や、一次元の極微細線のような低次元系、非秩序構造、コンポジット材料などの構造・材料、材料表面、異種材料界面におけるフォノン輸送についても扱う必要がある。これらの物理モデルの構築が重要である。また、フォノンと電子、スピン、マグノン、フォトン（光）など他の量子との相互作用を取り込んだ手法の開発も必要になる。

ナノスケールの熱伝導を制御するためには、フォノンの特徴をうまく利用した制御手法を開発するとともに、これを活かした材料設計、デバイス設計について研究開発を行っていく必要がある。また、実際に新規デバイスを作製するための基盤的な微細構造作製技術を高度化しておく必要もある。さらに、熱的特性に加えて、機械的、光学的、電気的、磁氣的、イオン伝導などの他の特性との相関を意識した熱制御や、工学的有用性（コスト、スケーラビリティ、環境親和性）を意識した機能材料の開発なども重要になる。具体的には、熱伝導を大幅に抑制する材料形成、界面熱抵抗を減少させる界面形成技術や TIM、フォノンの制御性の高いフォノン結晶の作製などの研究課題がある。

ナノスケールの熱制御技術を活用して、熱輸送が性能・機能の面でボトルネックとなっている半導体集積回路、パワー半導体、次世代ハードディスク、熱電素子などのブレークスルー技術の開発や、ナノスケールの熱制御技術を活用したメモリやセンサなどの新規デバイス創出への展開も併せて行っていく必要がある。これにより、熱制御の基礎・基盤技

術の高度化とデバイスへの応用がうまく回るようになる。

(5) 政策的課題

学術分野や応用分野の垣根を越えて、ナノスケールの熱伝導に関わる研究者・技術者が研究開発の目標を共有しながら取り組むことが重要であり、これを後押しするような国の政策が必要である。特に、すでにナノスケールの熱制御に関係する個別のプロジェクトが数多くある欧米に対抗していくためには、様々な分野の知識を集めて融合させ、効率的な研究を実施できる体制を早期に作る必要がある。これは、ナノスケール熱制御が単一の専門知識・技術領域では扱いきれないからであり、学術分野や応用分野の垣根を越えて、研究者・技術者が集まって議論をする場と、常に密な情報交換が可能なネットワーク環境が重要となる。例えば、日本が優位にある化合物半導体デバイス、ナノカーボン材料、デバイスシミュレーションなどのコミュニティの間をつなぎ、材料・デバイスの研究者と熱物性測定や熱伝導理論・シミュレーションの研究者とが課題を共有し、同じ場所で一つのマネジメントの下で研究を行うようにする。このような体制を早期に構築することが課題である。

また、広く活用できるような、熱物性に関する知識基盤の整備・運用が求められる。ナノスケールの材料・デバイスに関する熱物性は、いまだ体系的に整理された知識基盤がなく、学術領域としても確立していないことから、研究者が新たに参入する際の障壁となっている。ナノスケールの熱物性に関する詳細なデータベースを構築し、関係者が自由にアクセスして利用できる利用環境・ツールの整備が必要である。

(6) キーワード

フォノンクス、フォノンニック結晶、ナノスケール熱伝導、モンテカルロ・シミュレーション、第一原理計算、分子動力学計算、格子動力学、フォノン散乱、平均自由工程、カーボンナノチューブ (CNT)、グラフェン、実装・アッセンブリ技術、熱伝導率測定、Thermal Interface Material (TIM)、Through Silicon Via (TSV)

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> 第一原理計算を用いた原子間力ポテンシャルや非調和格子動力学による散乱緩和時間の導出、マルチスケールシミュレーションなど理論・シミュレーション技術が進展している。 ナノカーボンのフォノン伝導の理論、多層 CNT や多層グラフェンの成長メカニズムの研究、高密度 CNT 配向膜の成長技術が進んでいる。 Si フォノンクス結晶による熱伝導制御などの取り組みが進められている。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> モンテカルロ法による電子とフォノンセルフコンシステント・モンテカルロデバイスシミュレーション技術が開発されている。 LSI の放熱技術として、CNT 高密度配向膜を用いた TIM の作製が進められている。
米国	基礎研究	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> DOE の EFRC で3つの大型プロジェクトが走っている。 MRS や APS でのナノ熱輸送関係の特別セッションが開催されており、この領域の Assistant Professor が増加している。 熱伝導の理論・シミュレーションなどで注目される論文が量産されている。 1本の CNT や単層グラフェンの熱伝導評価技術が開発されている。

米国	応用研究・開発	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> ・Siemens のHAMR（熱アシスト磁気記録方式）などでナノスケール熱輸送の研究が活かされている。 ・熱電変換のスタートアップが多数設立されており、alphabet 社など順調な企業もある。 ・基礎から応用のリンクが課題であるが、学会でファンディング機関も含めたセッションを開催するなどの取り組みが始まっている。 ・イリノイ大学で慶應大学に次いで電子とフォノンのセルフコンシステント・モンテカルロ解析を実施している。 ・多層CNTの放熱フィン構造の作製が進められている。 ・フォノニクス応用研究をサンディア国立研究所が積極的に進めている。
欧州	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・EUPHONON および QUANTHEAT などナノスケールの熱制御関係の産学のネットワークが作られている。 ・フォノニクス関係のグループ数が最も多く、活発である。 ・高密度CNT配向膜の成長技術で優位にある（ケンブリッジ大、LETI）。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・リード大でモンテカルロ・デバイスシミュレーションでのフォノン解析を初めて実施した。 ・ナノカーボン材料と金属との複合材料の熱伝導評価などが進められている。
中国	基礎研究	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・少し前までは分子シミュレーションを用いた研究が多かったが、予算増の影響で計測装置が充実してきており、高精度、高解像度の熱計測技術が急速に発展している。 ・優秀な人材が中国に残るようになり、一部の大学（例えば精華大学）の学生のレベルは米国の一流校に引けを取らない状況になっている。 ・基礎科学の基盤が充実し、様々な新しい理論モデルや、前衛的な実験が出てきている。 ・2016年にナノ伝熱の領域の若手を集めたグループが組織されている。 ・Tongji 大学にフォノニクスのセンターがあるなど、かなりの設備・人的リソースに投資がみられる。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・熱電をはじめとする材料側では、産業化が加速している。 ・携帯電話などの中国で伸びている分野において、ナノ伝熱技術が活かされている。 ・HEMT などデバイス内の局所加熱に関するデバイスシミュレーションの報告がある。 ・グラフェンを含む複合材料の開発とその熱伝導特性評価が進められている。
韓国	基礎研究	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・韓国科学技術院（KAIST）にナノスケール熱輸送研究室が設立され、効率的な太陽エネルギーハーベスタのためのナノ構造応用、ナノスケール熱分析、理論ナノサイエンス等の研究が進められている。
	応用研究・開発	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・目立った活動が無い。

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Junichiro Shiomi, “Phonon engineering of nanocrystalline silicon thermoelectrics”, APL Materials Vol. 4, APL Materials 4, 104504 (2016).
- 2) Yoshiaki Nakamura, Masayuki Isogawa, Tomohiro Ueda, Shuto Yamasaka, Hideki Matsui, Jun Kikkawa, Satoaki Ikeuchi, Takafumi Oyake, Takuma Hori, Junichiro Shiomi, Akira Sakai, “Anomalous reduction of thermal conductivity in coherent nanocrystal architecture for silicon thermoelectric material”, Nano Energy, Rapid communication, Vol. 12, 845 (2015).
- 3) Dengke Ma, Hongru Ding, Han Meng, Lei Feng, Yue Wu, Junichiro Shiomi, and

- Nuo Yang, “Nuo Nano-cross-junction effect on phonon transport in silicon nanowire cages”, *Physical Review B* 94, 165434 (2016).
- 4) Atsuto Seko, Atsushi Togo, Hiroyuki Hayashi, Koji Tsuda, Laurent Chaput, and Isao Tanaka, “Prediction of Low-Thermal-Conductivity Compounds with First-Principles Anharmonic Lattice-Dynamics Calculations and Bayesian Optimization”, *Physical Review Letters* 115, 205901 (2015).
 - 5) Shenghong Ju, Takuma Shiga, Lei Feng, Zhufeng Hou, Koji Tsuda, Junichiro Shiomi, “Designing nanostructures for interfacial phonon transport via Bayesian optimization”, arXiv:1609.04972v1 (2016).
 - 6) Meguya Ryu, Hideo Takezoe, Osamu Haba, Koichiro Yonetake, and Junko Morikawa, “Photo-controllable thermal diffusivity and thermal conductivity driven by the orientation change of nematic liquid crystal with azo-dendrimers”, *Applied Physics Letters* 107, 221901, (2015)
 - 7) Yuri Kobayashi, Tsuguyuki Saito, Akira Isogai, “Aerogels with 3D Ordered Nanofiber Skeletons of Liquid-Crystalline Nanocellulose Derivatives as Tough and Transparent Insulators”, *Angewandte Chemie-International*, 53, 10394-10397 (2014).
 - 8) Y. Kamakura et al., *Proc. IEEE SISPAD* pp. 89-92 (2010)
 - 9) T. Misawa et al., *Proc. IEEE SISPAD*, pp. 308–301 (2013)
 - 10) M. Mohamed et al., *IEEE Trans. on Elec. Device*, 61, 4 (2014)
 - 11) A. A. Balandin: *Nature Materials*, vol. 10, pp. 569-581 (2011)
 - 12) 日本熱物性学会 編、ナノ・マイクロスケール熱物性ハンドブック、養賢堂 (2014)
 - 13) T. Kawanabe, et al., *Proc. of the 2013 IEEE International Interconnect Technology Conference (IITC) 2013*, pp. 1-3 (2013)
 - 14) T. Iwai, et al., *Technical Digest of IEEE International Electron Devices Meeting, (IEDM) 2005*. pp. 257–260 (2005)
 - 15) N. Na, et al., *Jpn. J. of Appl. Phys.*, vol. 54, 095102 (2015)
 - 16) A. Kawabata, et al., *Jpn. J. of Appl. Phys.*, vol. 54, 045101 (2015)
 - 17) M. Nihei, et al., *Technical Digest of IEEE International Electron Devices Meeting, (IEDM) 2012*, pp. 797-800 (2012)
 - 18) 戦略プロポーザル「ナノスケール熱制御によるデバイス革新 ―フォノンエンジニアリング―」、CRDS-FY2014-SP-04