

科学技術未来戦略ワークショップ
—新材料設計・探索—
報告書

平成 17 年 11 月 20 日 (日) 開催



Executive Summary

- 画期的な材料や材料技術は産業を興す。高純度シリコン(半導体産業)、光ファイバー(光通信産業)、最近では化合物半導体(発光デバイス、光源の革命)が良い例である。我が国の科学技術を持続的に発展させ、イノベーションを誘発し、社会・経済を活性化するためには、今後も独自の革新的材料及び材料技術を創出し続けることが肝要である。
- 技術の変遷が複雑かつ急速で、製品のライフサイクルが急激に短命化した現在、企業単独での新規材料開発は投資効率上困難であり、国の戦略的な投資が必要である。
- 一方、学術上の実情を言えば、所望の機能を持つ新規材料をゼロからスタートして理論的に設計・探索する普遍的な方法は存在しない。従って個々のケースでアプローチは多様である。しかしながら過去の物質探索・材料設計の成功例からは以下の要件が共通項として浮かび上がる。
 - (1)深い学術的専門知識に裏打ちされた独自の物質観(勘)を持つリーダーの存在、
 - (2)最先端の物質科学、十分整備された計算ソフトとデータベース、高い演算能力のコンピュータなどを融合させた計算機シミュレーション技術の高度化と駆使、
 - (3)作製パラメータの高速スキャンによる系統的かつ高速の試料合成・評価手法の開発と活用

(1)は属人的かつ絶対的な要件であるが、材料探索のスピードを上げるためには、(2)、(3)に関する技術への投資も本質的に重要である。
- 以上を総括して研究開発投資が強く期待されている研究領域例を挙げれば、
 - ①自己組織化、自己集合化によるボトムアップ型ナノ構造形成・集積化技術
 - ②異種物質・状態間の界面機能の基礎研究(有機半導体/無機材料、有機半導体/有機金属、生体材料/無機材料を含む)
 - ③次世代エレクトロニクスを実現するナノ構造材料
 - ④省エネ・省資源・環境対応の希少元素、規制元素の代替技術(元素戦略)
 - ⑤新エネルギー技術を目指した触媒や電池電極用のナノ構造材料
 - ⑥より複雑な現象のシミュレーションを目指すマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション手法の深化とプログラム開発
 - ⑦材料探索の高速化・高効率化のためのマテリアル・インフォマティクスの構築
 - ⑧戦略的材料データベースの構築と継続的アップデート
 - ⑨日本が世界をリードしてきた革新機能材料(超電導材料、強相関電子系材料を含む)の継続研究などがある。
- さらに重要な施策として研究推進基盤の整備がある。材料探索の研究開発を効率的に進めるためのリーダー選出の仕組み、中長期を見越した戦略的投資、研究システムの工夫などが不可欠である。
 - (1)学術的に世界をリードする力量を持ち、技術全般に俯瞰的視野を有するリーダー選出

の仕組みの構築。

- (2)研究ステージに対応した柔軟なファンディングシステム。萌芽的研究への少額長期投資、優れたリーダーの下に異分野チームを集結して革新材料探索を狙う集中研方式の戦略センターへの投資、傑出した成果を上げたプロジェクトへの継続投資。
- (3)異分野融合と組織連携を促進する戦略。融合へのインセンティブを与える重点投資策、異分野研究者の共有オフィス設置への投資。
- (4)先端測定機器の集積センター設置と支援人材の充実。第3期科学技術基本計画におけるナノテク総合支援プロジェクトの拡大強化。

目 次

Executive Summary	i
[1] WSの趣旨及び問題提起	1
[2] 材料探索・設計指針／コーディネータ 細野秀雄（東工大）	4
2.1 基調講演 発色に着目した新物質創成／細野秀雄（東工大）	4
2.2 水を分解する光触媒の開発／堂免一成（東大）	7
2.3 これ何による色？／渡邊順次（東工大）	8
2.4 CsLiB ₆ O ₁₀ 波長変換結晶の発見からタンパク質結晶化技術開発への展開／ 森勇介（阪大）	10
2.5 結晶内部の“すきま”を利用する新物質・材料開発／山中昭司（広島大）	11
2.6 精密分子集合に基づく材料設計／藤田誠（東大）	13
2.7 材料探索・設計指針 —強相関電子材料の例—／十倉好紀（東大）	15
2.8 まとめ	18
[3] 探索手法／サブコーディネータ 川崎雅司（東北大）	19
3.1 ペプチドアレイによるタンパク質検出のためのバイオチップの開発／ 軒原清史（ハイペップ研究所）	19
3.2 新材料探索とハイスループットアプローチ／竹内一郎（メリーランド大）	20
3.3 コンビナトリアル・イニシアチブへのいざない／川崎雅司（東北大）	21
3.4 材料探索 —高速物性評価—／長谷川哲也（東大）	24
3.5 マイクロ・ナノ化学システムと高速スクリーニング技術／北森武彦（東大）	25
3.6 まとめ	27
[4] 「理論・計算・モデル」／サブコーディネータ 伊藤聡（東芝）	29
4.1 計算機マテリアルデザインからみた新材料設計・探索／ 赤井久純（阪大）	29
4.2 Si／イオン結晶界面の新しいピニング機構の理論的提案／ 白石賢二（筑波大）	31
4.3 理論・計算・モデルの役割 —高分子材料—／土井正男（東大）	33
4.4 コンビナトリアル計算化学手法による新材料設計・探索／ 久保百司（東北大）	35
4.5 産業界から見た材料シミュレーションの問題と今後の課題／ 高田章（旭硝子）	37
4.6 Data-Driven Materials Design／岩田修一（東大）	38

4.7 コメント／伊藤聡（東芝）	41
4.8 まとめ	42
[5] 総合討論における論点／コーディネータ 田中一宜（JST-CRDS）	44
5.1 日本の新材料探索・設計の現状と問題点	44
5.2 新材料設計・探索を活性化するための方策	46
[6] 総括と提言	49
Appendix（ワークショップの開催日時・場所、プログラム、参加者の構成）	51

【1】WSの趣旨及び問題提起

我が国の科学技術を持続的に発展させ、イノベーションを誘発し、社会・経済を活性化するためには、新規の革新的な技術の創製が不可欠である。人類の文明を支えてきたのは材料であり、また革新的な新規材料の創製がイノベーションを実現してきた。しかしながら、昨今、特にこの十余年の状況を見る限り、①製品や技術のライフサイクルが格段に短くなり、エレクトロニクスを筆頭にテクノロジー全般に亘り多種多様な材料の短期間開発が必須になった、②国内企業にあっては、不況の影響もあって部品材料をはじめ材料全般の研究人材が著しく縮減され、新規材料創出への機運が低迷しているのが現状である。材料開発こそ産業発展のインフラであることを考慮すれば、国が主導して革新的な新規材料創製を目指す中長期的なビジョンを構築し、新たな産学官の研究体制を整備する必要性は極めて高く、喫緊の課題と考えられる。

一方、国際的には我が国の材料研究レベルは依然として高い水準を誇る。例えば物質科学の分野においては、ナノ材料の代表であるカーボンナノチューブの発見や製法、あるいは強相関電子系物質の開拓において世界をリードしてきており、新物質創製の卓越したセンスを有する研究者を数多く擁している。国としての新たなシナリオとコーディネーションの下にこれらの人材を結集して戦略的な研究体制を整備することができれば、変化の早い企業ニーズに対応しうる新しい研究インフラが自ずから生まれ、ひいては、イノベーションの創出や材料研究者層の拡大と言う好循環が大きく期待される。以上が今回のワークショップの動機である。

JST研究開発戦略センターのミッションは、単なる科学技術の調査にとどまらず、それを戦略にまで練り上げて戦略プロポーザルとして世に発信することであり、具体的には、構想の大きさによって戦略イニシアティブ、戦略プログラム、戦略プロジェクトとしてプロポーザルを策定し、オールジャパンの立場で提言を行うことである。「戦略イニシアティブ」は「かなり大きな技術分野あるいは産業領域を生み出す」ことを意図した政策的な狙いを持つ戦略プロポーザルであり、「戦略プログラム」、「戦略プロジェクト」はその順に、より具体的な研究課題に絞られる。

そのための最初のステップが“研究俯瞰マップ”の作成である。我々が担当しているナノテクノロジー・材料関係では、(1)物質材料、(2)技術要素、(3)社会・経済、の3つの軸で研究全体を俯瞰する。作成過程で“俯瞰ワークショップ”を実施し、そこでの有識者、研究者の方々の意見を取り入れて、グループで蓄積してきたデータベースを元にマップを完成させ、1年毎に見直しを行う。図の俯瞰マップは、物質材料軸と技術要素軸を合体させ、社会・経済軸に対して作成した2軸俯瞰図の一例である。(図1)

俯瞰図はさらに、領域を細分化したもので、それらに対応する多くの研究課題にまでブレークダウンされたものへと階層化されている。俯瞰マップの中から戦略イニシアティブ、戦略プログラム、戦略プロジェクトを抽出する。抽出したのから“深掘ワークショップ”を行い、その分野の専門家に意見を聞き、さらには海外調査を実施して、国際的な情勢の

ナノテクノロジー・材料研究開発戦略俯瞰図

【Objectives / ナノテクノロジー・材料達成目標】																	
① ナノ構造・材料		② ナノバイオシステム			③ ナノ材料・加工プロセス			④ ナノデバイスシステム		⑤ 設計・探査		⑥ 計測・評価・標準					
1	人工ナノ構造	1	生体内送達治療材料	1	機械的ナノ加工技術	1	設計・微細加工・製造技術	1	材料設計シミュレーション	1	S P M システム開発	1	計測・評価・標準				
2	超分子	2	医療診断プローブ材料	2	自己組織化・自己集合技術	2	半導体複合デバイス	2	DBの構築と新材料設計	2	材料探索手法の開発	2	3次元計測技術(4次元計測)	2	超高速・チップ利用計測技術		
3	ハイブリッドナノ構造	3	生体適用材料	3	ナノ粒子の複合化材料技術	3	エネルギー変換デバイス	3	材料設計シミュレーション	3	材料探索手法の開発	3	超高感度・極微量分析技術	3	超高感度・極微量分析技術		
4	ソフトマター	4	生体物質を基盤とする高機能材料	4	高次ナノ構造制御材料技術	4	光機能デバイス	4	新材料用いた複合デバイス	4	材料設計シミュレーション	4	材料探索手法の開発	4	超高速・チップ利用計測技術	4	超高速・チップ利用計測技術
5	微粒子・クラスター	5	複合バイオシステム	5	ナノ構造・ナノ材料分離技術	5	新材料用いた複合デバイス	5	新材料用いた複合デバイス	5	材料設計シミュレーション	5	S P M システム開発	5	3次元計測技術(4次元計測)	5	3次元計測技術(4次元計測)
6	有機・生体関連分子	6	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン	7	ナノカーボン

【Innovative Goals】

- 0. 物質科学・社会基盤
 - 1. 革新的基盤技術創製
 - 2. 標準化
- ① エネルギー・資源
 - 1. 再生可能エネルギー変換技術
 - 2. 再資源化技術・リサイクル技術
 - 3. 省エネルギー・エネルギー貯蔵技術
 - 4. 戦略的要素代替・元素戦略
- ② 安全・環境
 - 1. 生活・環境モニタリング・環境浄化／保全技術
 - 2. 低環境負荷技術
 - 3. 安全対策技術／食品・医薬品・化粧品を含む
 - 4. 認証・偽造防止技術
- ③ 輸送・社会基盤システム
 - 1. 建設・住宅・土木用技術
 - 2. 輸送・自動車用技術
 - 3. 電力・エネルギー社会基盤技術
- ④ 生活・文化
 - 1. 少子高齢化社会対応技術
 - 2. ロボティクス
 - 3. 快適な生活環境のためのナノテク
 - 4. 人類のフロンティア開拓のためのナノテク
- ⑤ 医療・食料
 - 1. 創薬技術
 - 2. 医療器技術
 - 3. 診断・権識・迅速検査計測技術
 - 4. 食品関連技術・食品創製技術
- ⑥ 情報・通信
 - 1. 表示・記録装置
 - 2. 記憶・メモリ装置
 - 3. 情報処理・通信システム
 - 4. 半導体機器製造装置・製造技術

物質科学「超微・極微・超微素子」

物質科学「超微・極微・超微素子」

図1 「物質材料・技術開発」軸と「社会・経済」軸による2軸の研究俯瞰マップ

中の位置付けと日本としての戦略性を確認する。今回の「新材料設計・探索ワークショップ」は深掘ワークショップの位置付けであり、議論等は戦略プロポーザルに反映される。

[2] 材料探索・設計指針／コーディネータ 細野秀雄（東工大）

「材料探索・設計指針」セッションでは、細野秀雄氏（東工大）、堂免一成氏（東大）、渡邊順次氏（東工大）、森勇介氏（阪大）、山中昭司氏（広島大）、十倉好紀氏（東大）が講演し、コーディネータ及び司会を細野秀雄氏が務めた。十倉氏はコメンテータを兼ねた。「探索手法」セッションで講演した藤田誠氏（東大）については、内容の整合性のため本セッションで報告する。細野氏は透明導電性酸化物の発見などで知られるセラミックスの研究者、堂免氏は触媒の専門家であり、渡邊氏は液晶の研究で知られている。森氏は光波長変換用の結晶材料が専門であり、山中氏は超伝導材料などの無機固体化学の大家である。藤田氏は独自のアプローチによる分子性材料のデザインで知られ、十倉氏は高温超伝導体、強相関係材料などで世界的な成果をあげている。本セッションでは、このように多彩な講演者が自身の材料探索方法を整理し、設計指針を述べたほか、今後の材料探索に必要なインフラ、システム、体制等を提案した。

2.1 基調講演／細野秀雄（東工大）

<発色に着目した新物質創成>

かつて、学部の学生が実験でセメントを作るのを見ていた時のことである。原料である酸化カルシウムと酸化アルミで構成されるC12A7を溶かすと、200℃程度で着色がみられた。酸化カルシウムと酸化アルミだけからなる、白色の典型的絶縁体であるC12A7を加熱しても、色が付くはずがない。それにもかかわらず着色したのを見て不思議に思い、高純度化を行ってみたが、全く同じ現象が起きた。「これは何かあるな」と直感し、この物質に興味を持った。C12A7は、ガラスにして電気炉で熱処理を行うと真っ白になり、全面から泡を発生する。これを割って泡の中身を分析したところ、全て酸素分子であることが判明した。このガラスはフォトセンシティブであり、還元するとフォトクロミックになる。結晶構造は特異な籠型で、籠の部分がプラスに帯電し、この電荷を補償するためのフリーな酸素イオンが12個の籠の中2個だけに入っている。この酸素イオンによる光吸収が高温における着色の原因であり、このような状態の酸素は例がない。（図2-1）

この酸素イオンを、通常の状態では不安定なアニオンで置換してみた。ペロブスカイト系の物質は全てカチオンを置換して機能を出すのが、ここではその裏をいって、 O^- 、 H^- あるいは電子で置換して機能発現を狙った。これが功を奏して、 O^- 置換では非常に強い酸化力が出現し、 H^- で置換して光を当てると導電性を示すなど、興味深い物質群が得られた。材料研究者の心理的動機としては固体物理屋の鼻をあかし、セラミックス屋の意地を示したいということがあったが、真の動機は「イオン性アモルファス物質を作る」「透明半導体を作る」にあり、それらがフレキシブルトランジスタにつながった。（図2-2）

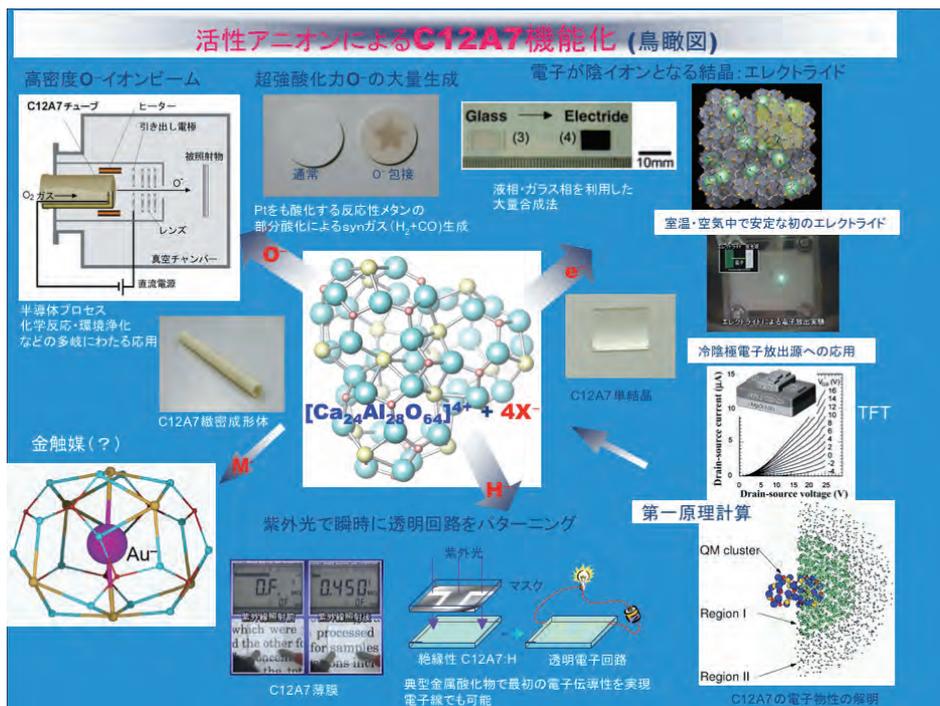


図2-1 活性アニオンによるC12A7機能化

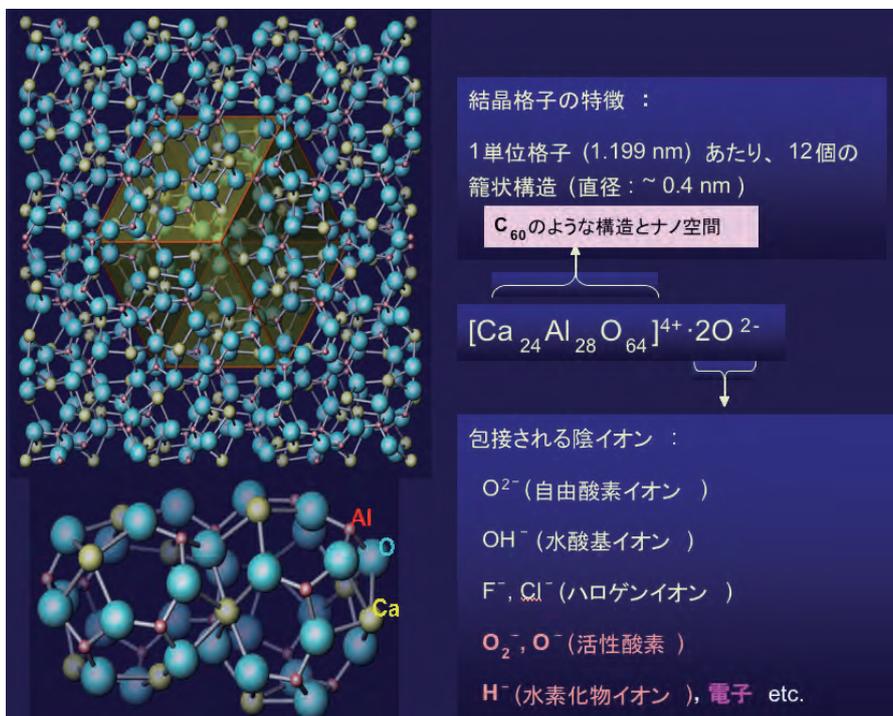


図2-2 イオン性アモルファス物質

<システム>

新材料とは、従来存在しなかったユニークかつ社会に直接役立つ性質をもった物質のことである。日本は材料研究者数が非常に多く、伝統的に固体物理のレベルが高いことから、材料研究では世界最高水準にある。しかし新材料探索という観点で見ると、本気で新材料創出に意欲を燃やす研究者は少ない。「もう大きな新材料の鉱脈は掘り尽くしたのではないか」、「やっても発見の確率が低いのではないか」という不安感、あるいは天井感が、若い研究者から年配の研究者に至るまで蔓延している。新材料の発見に成功した研究者は特定のグループに偏在している。新材料探索の手法は、勘と頭と腕力の3つであり、成功しているグループはこれらを組み合わせて研究を進めている。材料研究は、この3つの要素をうまく組み合わせ、図の三角形の全体を効率よくカバーするように行うのがよい。

一方、学会やファンディング・エージェンシーの役割も重要である。学会には、新しいテーマをどん欲に取り込む進取性と開放性、産官学あるいは国際といったヘテロな構成、強い自浄作用などが求められる。ファンディングについては、ハイリスク・ハイリターン研究や必ずしも大きな研究費を必要としない研究にも支援を行うとともに、見事な失敗をきちんと評価することが望ましい。また、大きな資金を短期間支給するよりも、年間1千万円程度のお金を5年から10年間継続的に支給することが効果的であり、芽が出たら、それを成長させるフレキシブルなファンディングシステムも重要である。

まとめると、新材料探索・設計に必要な条件は以下のように整理される。

- (1)本気で新材料を探索する決意をもった人材の存在
- (2)新材料を創った実績のある人材が身の周りにいること
- (3)ヘテロ（異分野混合的）な人的構成
- (4)長期に亘る継続的なファンド
- (5)開放的で進取の精神をもって運営されるプロジェクト、自浄作用のある学会（専攻）あるいは組織これらが揃うことで、新しい発見や革命的な材料が実現する。（図2-3）

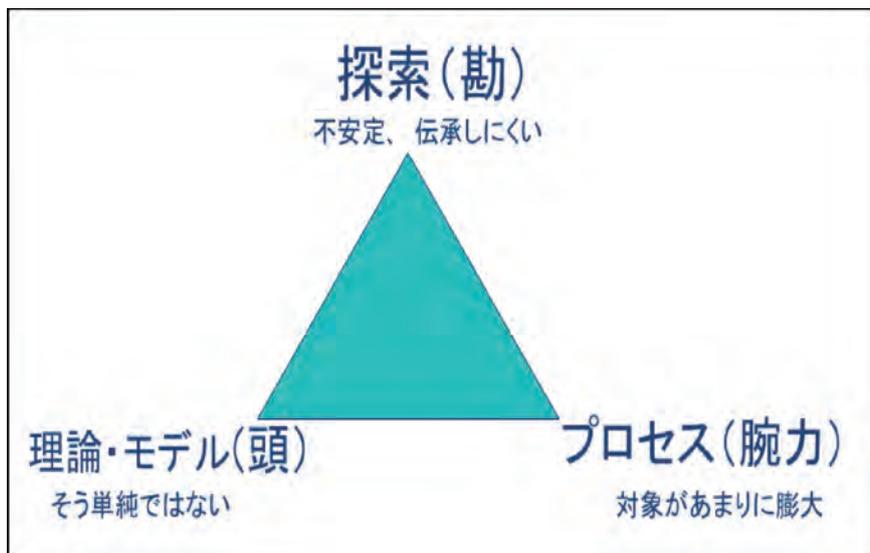


図2-3 新材料探索・設計モデル

2.2 水を分解する光触媒の開発／堂免一成（東大）

＜新たな光触媒材料の発見＞

光のエネルギーを使って純粋な水を水素と酸素に分解する、不均一系光触媒の開発を行っている。これは、クリーンで再生可能なエネルギーの実用化につながる。太陽光を当てて実際に水素と酸素を発生させるためには、可視光を吸収し、水の酸化還元準位がバンドギャップの中に入りかつ安定であることが必要であり、これを満たす材料を探索してきた。(図2-4)

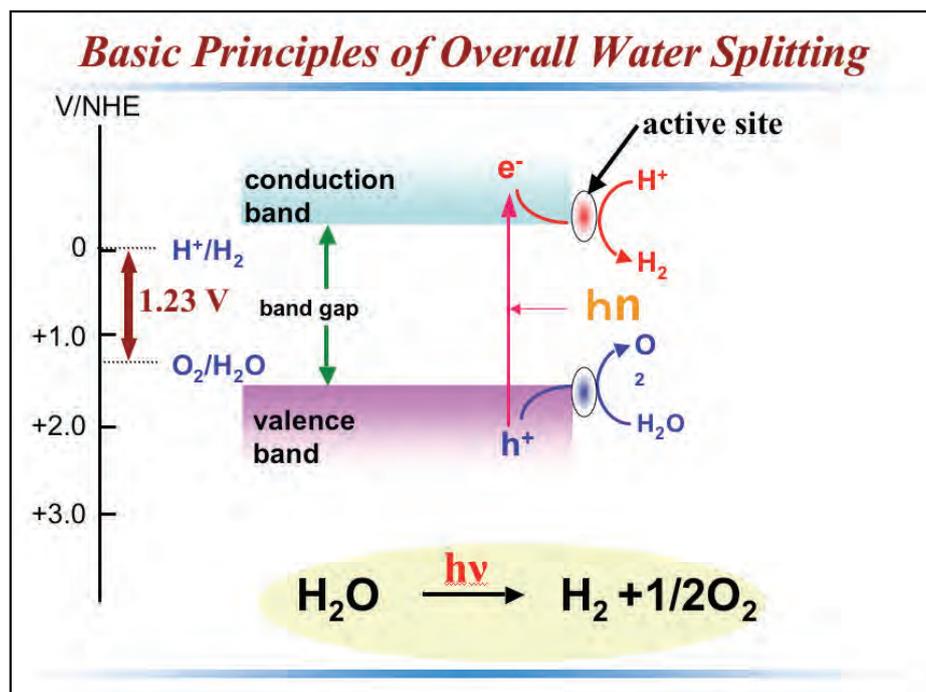


図2-4 水分解光触媒の基本的な考え方

GaNの粉とZnOの粉をある手法で混ぜると、サイズが数百nmで黄色に着色したGaN:ZnOの固溶体微粒子が得られる。写真に示した材料で表面に分散しているのがRuO₂ナノ粒子で、ここが水素活性サイトになる。この材料に実際に可視光を当てた場合、水素と酸素が正確に2対1の割合で出てくる。「簡単じゃないか」と思われるかもしれないが、新規材料開発には多くの時間と労力を要する。窒素の生成はなく、安定な材料である。これは、可視領域にバンドギャップを持つ光触媒で、水素と酸素を定常的に生成した最初の例である。現状の量子効率紫外光で50%、波長500nmの可視光で2～3%である。目標値は600nmくらいの光で30%を達成することである。このとき、日本の平均的な日照条件を仮定すると、水素の生成速度が1平方キロメートルあたり16,500リューベ／時間くらいになる。これは現在稼働しているメタン改質による水素製造プラントの標準的な能力に匹敵する。(図2-5)



図2-5 GaN:ZnOの固溶体微粒子

<システムについて>

この分野の材料探索において重要なことを挙げる。

①迅速な研究開発

アメリカではブッシュ大統領がこの分野でかなりの研究費を出しはじめており、ヨーロッパも巻き込んで多くの研究者が研究を始めている。

②材料探索のみでなく、それを利用した反応系を構築してはじめてひとつの仕事になる。

このためにはいくつかの分野の専門家が同じ目標に向かって連携できるグループの形成が必要である。

2.3 これ何による色？／渡邊順次（東工大）

<生物の羽根に学んだ新材料開発>

昆虫の羽根は、光反射率が非常に高く、きらびやかで華麗な色彩をもつ。こうした輝きを示す生物は、孔雀、蝶、海ネズミ、ハチドリなど数多く存在する。ここで発現している色は、染料や顔料による色ではない。全て構造色と呼ばれるものであり、基本的には見事なナノ周期構造による光の干渉、回折で輝いている。私は、このナノ構造によって生じる干渉光や回折光を利用して、光の位相を制御する材料創成の研究を行っている。具体的には、生物のさまざまな構造色の原理を解明し、その創製プロセスを学び、液晶や微粒子を用いてナノ周期構造を人工的に作製し、発色させ、均質な光学材料として様々な工学用途に展開している。

従来、このようなナノ構造材料を作り出すには、非常に高い技術力を要するトップダウ

ン方式が採用されていたが、最近では、生物に学び、分子の自発的凝集特性を利用することで作製が容易になってきている。生物のナノ構造からは、具体的に次のようなことを学ぶことができる。

1) 生物のナノ構造も化学、物理の原理に基づいている

物理・化学では、液晶、ゲル、コロイド、相分離、有機・無機複合材といったソフトマテリアルにおける“非平衡系あるいは平衡系も含めた複雑系での秩序形成”という現象が知られている。生物の場合もまったく同じであり、そういう視点で研究が続けている。

2) 高い歩留まり

生物がこうした材料を作り出す際の歩留まりは非常に高く、構造物のサイズも大きい。人間には均一に作り出すのが不可能と思われるものを、“生物は十分大きなサイズで、再現性よく作り出している”。これが本来、我々が生物に学ぶべき最も重要な部分である。(図2-6)



図2-6 濃厚系コロイド結晶発色の実例

<応用について>

液晶の場で構造制御と固定化を行うことにより、液晶ディスプレイ用の光学フィルム、視野角拡大フィルムなど、光位相差板、偏光板に液晶を使ったフィルムが開発されており、一部はベンチャー企業で実用化されている。その他、数社の企業と共同で、液晶微粒子による塗料を自動車のボディや、さまざまな装飾品に展開することを試みている。

さらに我々は、コレステリック螺旋の第一次周期構造の中にレーザー色素を導入し、その発光蛍光を増幅させ、レーザー発振させる方法、つまり光バンドギャップを利用した分

布帰還型のレーザーの開発研究なども行っている。

2.4 CsLiB₆O₁₀波長変換結晶の発見からタンパク質結晶化技術開発への展開／森勇介 (阪大)

<半導体の経験にもとづく新材料創成>

1990年代、私が光波長変換結晶の研究に着手した当時、レーザーによる加工、計測技術の分野で重要といわれていたのは波長の短波長化であった。短波長化については、エキシマーによる紫外線レーザーがあったが、気体レーザーは使い勝手が悪く、レーザー光の品質も悪い。そこで全固体レーザーによる紫外光発生にシフトしたいということになるが、固体レーザーは赤外領域のものが大半であり、赤外光を紫外光に変換することが求められた。レーザー自体の研究開発は企業やアメリカで非常に進んでいたが、波長変換結晶の研究が遅れていた。紫外光を発生できる波長変換結晶には、ホウ酸化物系材料などがあり、主に中国で開発されていたが、波長変換効率に大きく影響する複屈折の値が適当な材料が開発されていなかったことが最大の問題だった。もともと半導体の研究をしていた私は、「2つの材料を混晶化してバンドギャップ制御をする半導体の方法が、ホウ酸化物での複屈折制御にも使えないだろうか」と考えた。そこで、さまざまなアルカリ金属を系統的に混ぜた混晶の探索を始めたところ、幸運にして数ヶ月で、複屈折の値がこれまでより適度なCLBOというセシウムとリチウムのホウ酸化物結晶を発見することができた。

次に、実用化に向けて「強力な赤外レーザーを基本光にして高出力の紫外線を出す」ということが課題になった。紫外線はエネルギーが高いため波長変換結晶におけるダメージの発生や発熱が問題になり、その解決には結晶成長の改良による材料の高品質化がカギであった。この物質は溶液が非常に高い粘性をもつので、「ジッとしていても動かないから、攪拌した方が過飽和やクラスターが制御できるのではないかと、独自の溶液攪拌法を提案した。これにより最終的には、産学連携を通じて世界最高出力42Wの全固体紫外レーザーが完成した。

その後、この攪拌技術は、タンパク質というちょっと意外な分野に展開できることが分かった。タンパク質を使った創薬を行うためには、タンパク質の構造を知る必要があり、構造解析には良質な結晶が不可欠である。我々は、この攪拌技術をレーザー照射による核発生と組み合わせることにより、タンパク質結晶の高品質化に成功した。(図2-7)

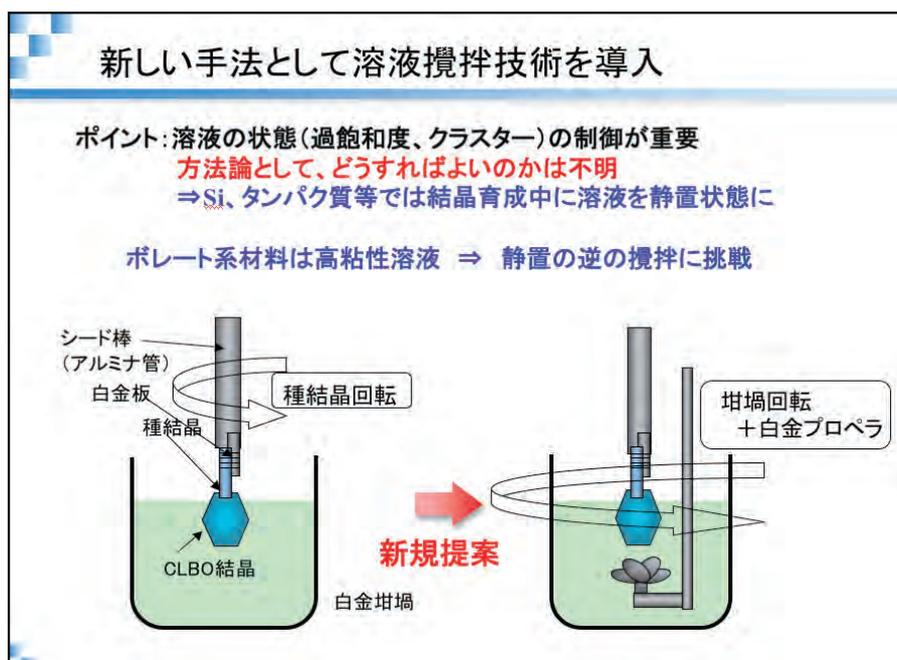


図2-7 溶液攪拌技術による結晶育成法

<異分野連携・産学連携について>

異分野への展開と連携を通じて学んだことは、その場その場の問題・課題に対応することが重要であるということであり、そのことを実践してこられたことが、新材料探索から高品質結晶化、実用化までの研究開発を達成できた要因であると考えている。特に、異分野・産学において有機的な連携をするためには、自ら積極的に異分野の相手に働きかけることが重要であると思う。

2.5 結晶内部の“すきま”を利用する新物質・材料開発／山中昭司（広島大）

<“すきま”から機能へ>

私は、学生の頃からインターカレーションの研究をおこなってきた。インターカレーションというのは、層状物質の層間にいろいろな物質を入れることによって新しい材料を作る反応のことである。例として、層間に水が出入りする粘土やリチウムイオン電池などがある。(図2-8)

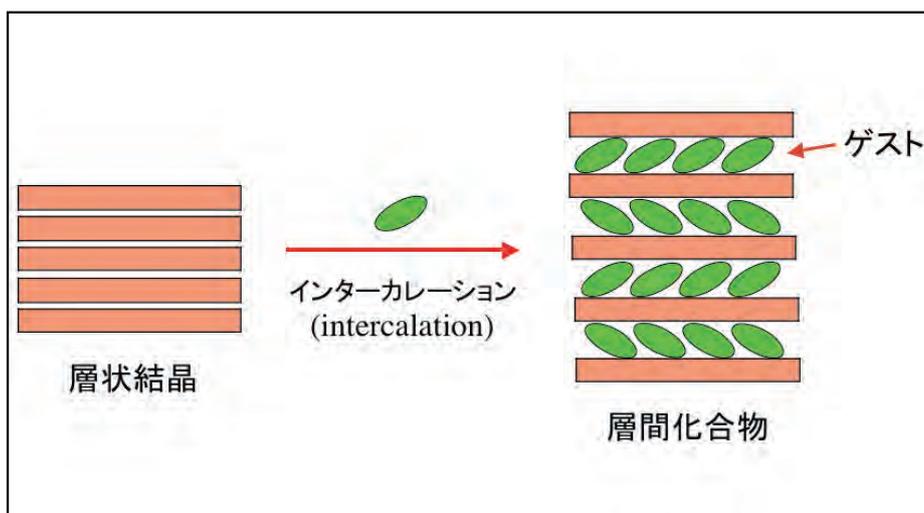


図2-8 インターカレーションの概念図

モバイル電子機器に搭載されているリチウムイオン電池では、アノード（負極）にグラファイトが使われ、その層間にリチウムが出入りするのに対して、カソード（正極）はコバルトの酸化物で、その酸素8面体の“すきま”にリチウムが出入りする。どちらもインターカレーションを利用して充電と放電を行う。“すきま”を持つ物質は層状結晶に限られるものではなく、非常にバラエティに富んでいる。それを示したのが上の図である。図の右上は、セラミックスで馴染みの深いセラミックハニカムであり、サブミリメートルの非常に大きな“すきま”を持っている。矢印に沿って左下に行くに従って“すきま”は小さくなり、分子を認識するゼオライトのような物質、あるいはガスを分離するセラミックス・フィルターなどがある。さらに小さい“すきま”に着目すると、上述のリチウムがやっと動くようなサブナノメートルサイズの“すきま”をもったリチウムイオン電池の電極材料や水素吸蔵合金に至る。同じ図に示したシリコンクラスレート化合物は、シリコン sp^3 結合のカゴ状ネットワークを有し、カゴの内部にバリウムが入ったものは8Kで超伝導になる。このほか多くの超伝導物質は、酸化銅超伝導体に見られるように層状で、その結晶は超伝導のパスとなる層と、その“すきま”の電荷を制御する部分とで構成される。このように、相互の“すきま”に入り組んだ（インターカレーションした）構造の物質も加えると、“すきま”を有する物質は、極めて多彩な物質群を構成する。

このように、結晶構造の“すきま”には、①分子を認識する、②物質やエネルギーを貯蔵する、③イオン伝導や格子振動などさまざまなものを伝達する、といった機能がある。我々は、“すきま”を持つ物質に特有の機能に着目し、新しい機能性材料の探索をおこなっている。(図2-9)

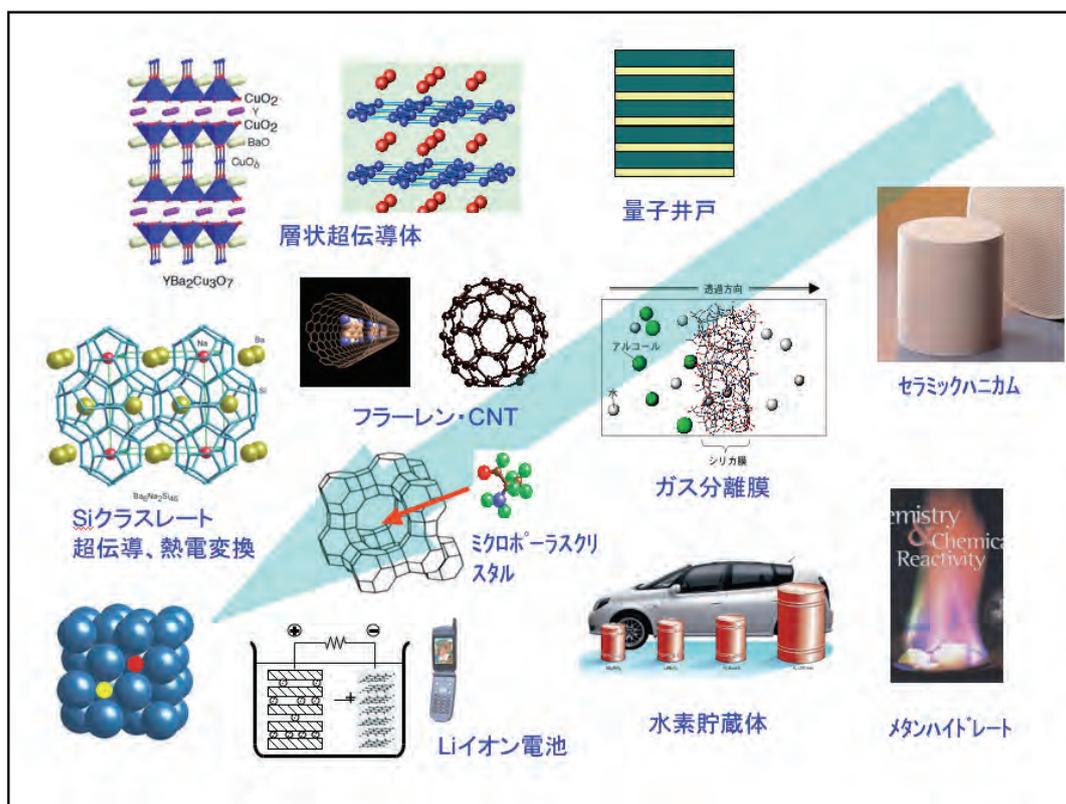


図2-9 “すきま”を持つ様々な物質

2.6 精密分子集合に基づく材料設計／藤田誠（東大）

材料というと無機の固体物質というイメージがあるが、我々は水溶性の分子性有機材料を研究している。情報の記録や処理の究極的な姿は生命体である。遺伝情報は、一本の紐に4進法で記録されているが、この密度に人工的に迫ることはとても困難である。反面、様々な研究から「生物は物を作るのにめちゃくちゃ難しいことをやっているわけではない」というのも分かっている。生物は、構成部品が非常に巧妙かつ自発的に集まる、いわゆる自己組織化をおこなっている。生物の世界はボトムアップ型のナノテクノロジーである。部品となる分子が自然に集まって、溶液中で機能的なデバイスになる。膜のような物を基板にしてその中にデバイスが浮遊しており、電流も電子よりプロトンが担うという、非生物とは全く異なるナノテクノロジーを展開している。

自己組織化の研究というと、これまではナノ粒子が狭いサイズ分布で作れるとか、規則的なパターンが出来るとか、構造的に明瞭性を伴わない「ものづくり」が多かった。我々は、明確な構造をもった精密分子集合体を作ることを目指している。例えば、サイズが直径3.5nmの非常に大きな球状構造で、小さな成分から自己組織化で形成されている分子を示す。この分子は金属イオンと有機分子、全部で36成分から構成され、フラスコの中で混合するだけで瞬時に定量的に組み上がる。精密な分子集合にこだわる理由のひとつは、隅々まで化学構造式が書けることである。結果としてこのような物ができるのではなく、設計図通りの精密な「ものづくり」ができるのである。設計できるということは、好きな位置に好きな機能を付加することも可能で、自在な機能化が可能となる。(図2-10)

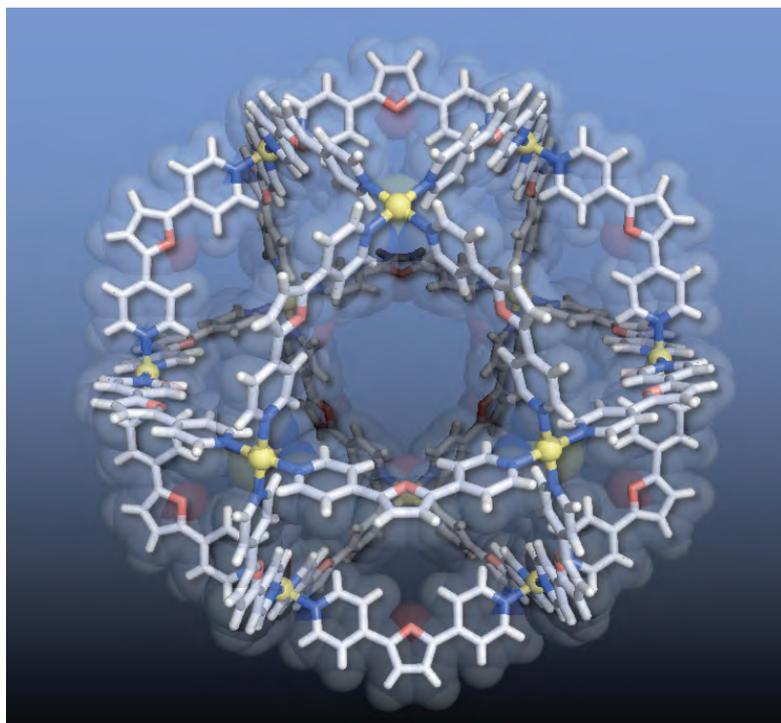


図2-10 自己組織化により形成される球状構造分子

光で形を変えるような分子を籠の内側につけたものを示す。光によって構造がトランスからシスに転移することにより隙間のサイズが変わり、物質を吸蔵したり放出したりすることが出来る。このほかにも、内面のポリエーテル修飾により金属イオン吸蔵を示すナノ球や、フッ素修飾により水も油もはじいてフッ素化合物だけを閉じこめるナノ球、さらには化学反応を高度に制御するナノスケールのフラスコなど様々な精密分子集合体を作ることが出来る。(図2-11)

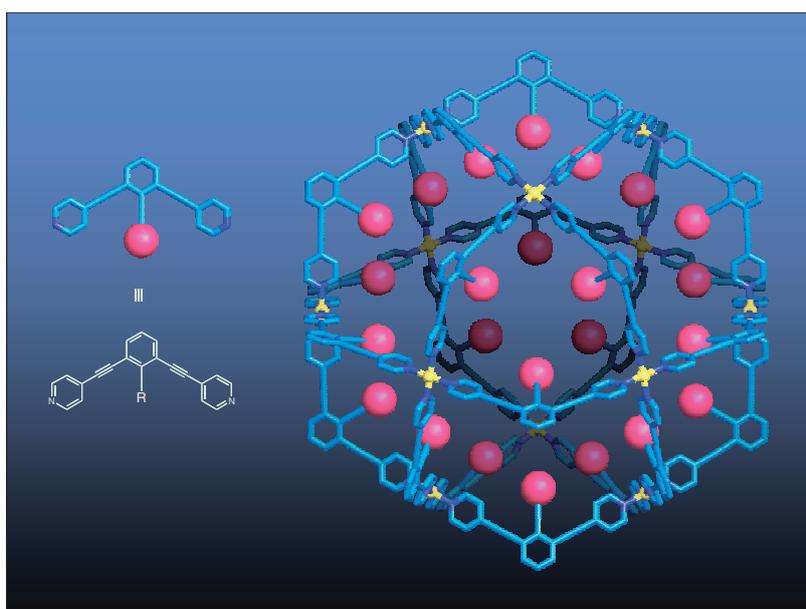


図2-11 精密分子集合体

2.7 材料探索・設計指針 —強相関電子材料の例— / 十倉好紀 (東大)

よく「ニーズがシーズ」を生むとかいわれるが、私自身は好奇心駆動型でない研究はしたくないと思っている。こういうと「利己的研究者」と思われがちだが、科学として面白くなければ新しいものは生まれて来ない。例えば、強相関材料がどういう機能を持ち、何が重要かと質問されるが、それに対しては「多自由度系で、電子ひとつをとっても多くの自由度を持ち、それがたくさん複雑に絡み合うことこそが今世紀の新しいパラダイムである」と答えている。具体的には、結晶の2つの電子状態であるBloch状態（波動的）とMott状態（粒子的）の狭間での現象に興味を持ち、超伝導酸化物や強相関系酸化物においてさまざまな研究をおこなってきた。これには、スピン・エレクトロニクス、オービトロニクス、電気磁気効果、磁気抵抗、強相関酸化物エレクトロニクス及び熱電効果などが含まれる。こうした物質の物理的な制御因子としては以下のようなものがある。(図2-12)

- ①電子のバンドフィリング：すなわち電子や正孔の濃度。
- ②電子バンド幅：電子がどれくらい動き易いかを表しており、電子相関強度の尺度でもある。
- ③結晶格子のトポロジー：次元性、フラストレーションとか、乱れの度合いに関係する。

これに、外部制御因子である温度、電場、光、圧力、磁場が加わる。このかけ算を行うことによって、非常にグローバルな電子相図を系統的に作成し俯瞰し、面白い所を見つけ新物質の設計や開発をおこなっている。

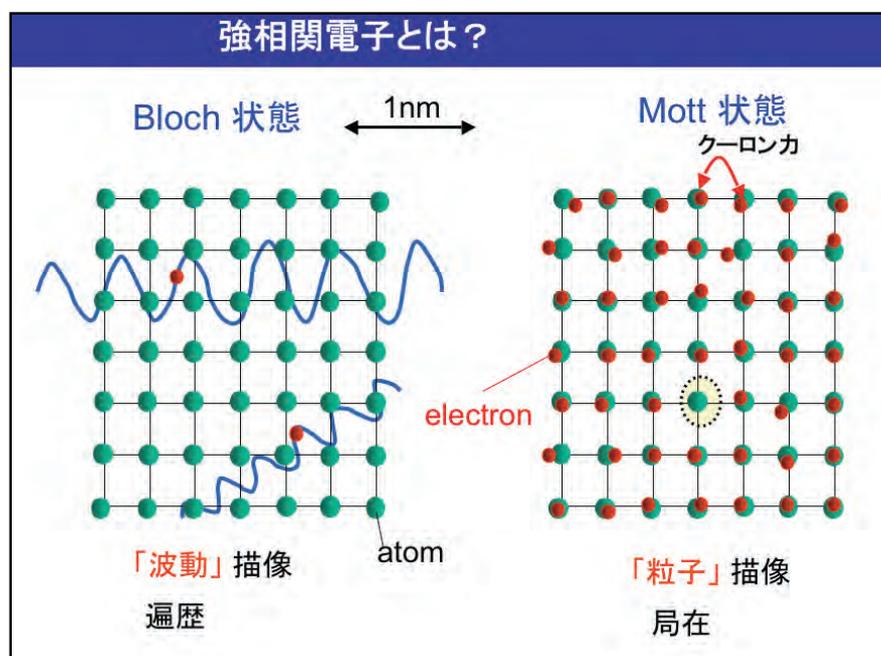


図2-12 強相関電子の概念図

電子は多くの自由度を持つので、この自由度を結合させて従来にない新しい機能、物性を出していきたいと考えている。2つの自由度を結合させたものは従来も存在した。スピ

ントロニクス、フォトニクス、誘電体工学、磁気光学、フォトクロミズムなどである。最近になって、電子の形（軌道）を上手く制御すれば電荷や光の性質が変わることに着目した、いわゆるオービトロニクスを提案している。例えば、電場を加えるとある所で軌道状態が変わり、それによってスピン状態が変わる、というふうに、外部からの摂動によって思わぬ所で、“風が吹くと桶屋が儲かる” 式の交差相関（クロスコリレーション）が生じる。（図2-13）

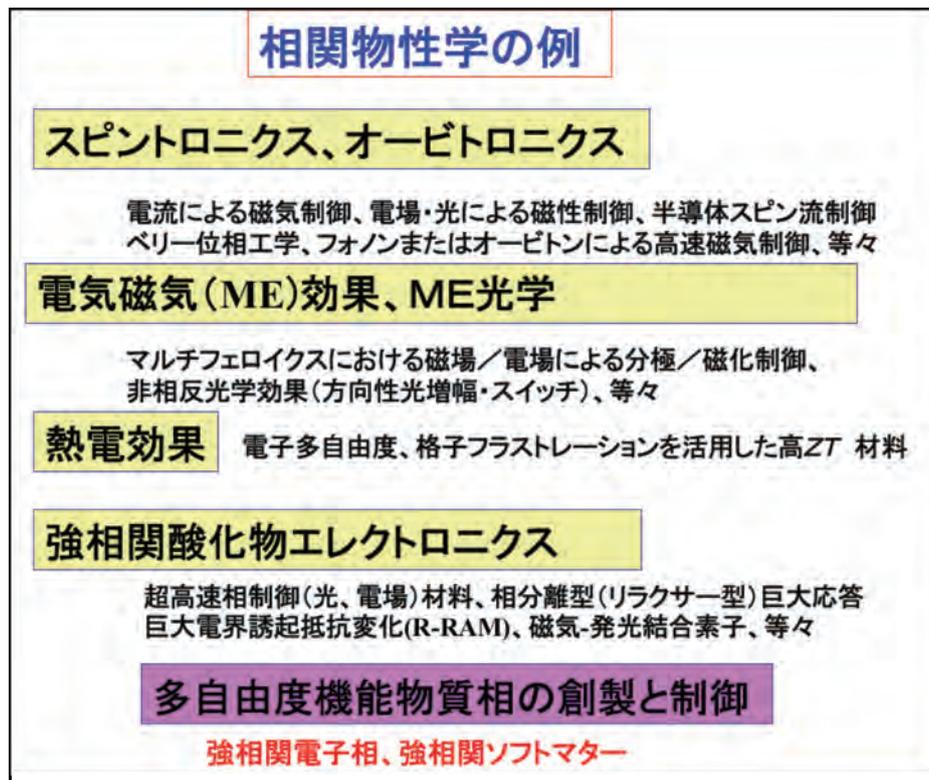


図2-13 相関物性学の例

これは、材料開発の今後の方向ではないかと考えている。これには電子相を制御すれば良い。例えば、秩序パラメータAと秩序パラメータBとが制御パラメータの元で競合していたとすると、両者が互いを抑えようとするので、制御パラメータ空間のある1点（二重臨界点）で劇的な一次転移がおき、その点が相の境界になる。例えば、電子が結晶化した電荷秩序状態と、電子がどろどろに溶けた強磁性金属状態が競合している系では、一方に有利な磁場を掛けると一気に状態が変わって巨大磁気抵抗が生じる。（図2-14）

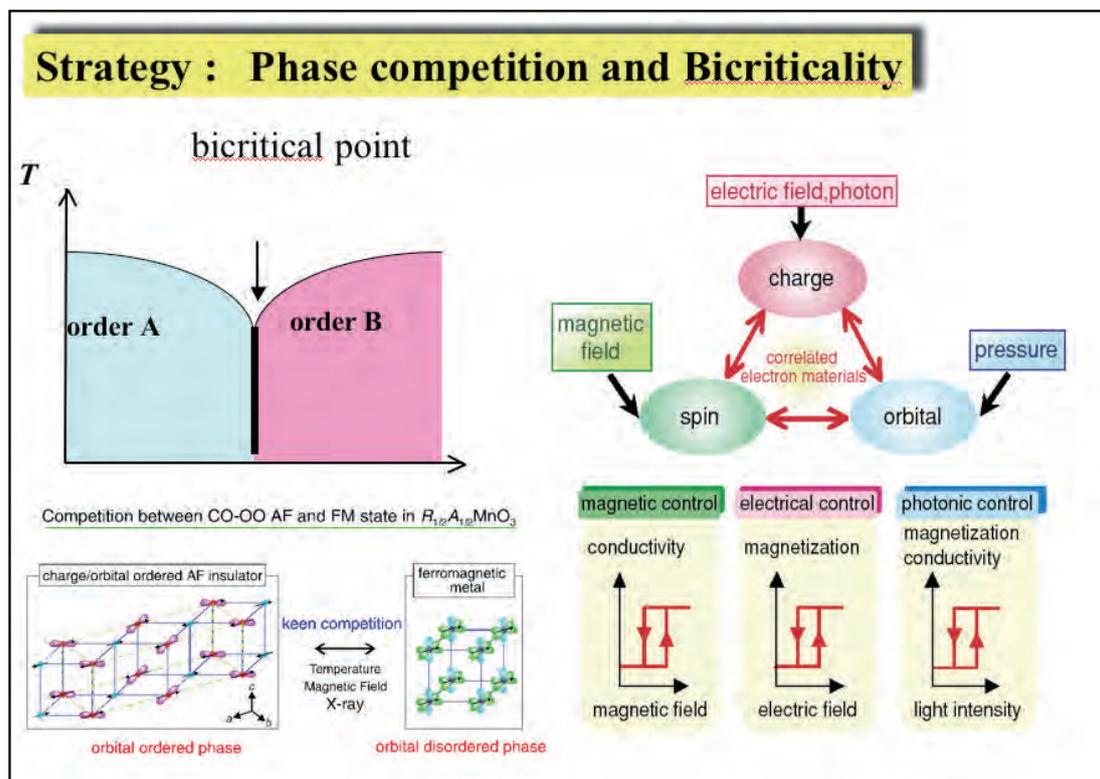


図2-14 Phase competition and Bicriticality

<システム>

新材料の開発研究には、MOR (management of research) が大変重要である。効率的な組織編成は、昔のベル研タイプ、産総研タイプ、孟掌君タイプの3つに大別される。このうち昔のベル研タイプは、精鋭研究者が少人数でグループになる方式で、優れた研究者1名、ポスドク1~2名、テクニシャン1名といった構成をとる。産総研タイプはユニット長の元に研究者を集める方式、孟掌君タイプはカリスマリーダー以外はすべて特殊技能者で揃える方式である。私が産総研で構築している強相関電子技術研究センターは、40~50人の規模を統括するユニットリーダー、グループリーダーと常勤職員から構成される。各ユニット内を有機的に結びつけるために、週1回バリアフリーな議論をおこなう、チーム間の共同研究を主体とする、予算運営のほとんどすべてをユニットリーダーが行う、といった工夫をしている。

革新的材料の設計、作製および評価の集中共同研究を行う場合には、統括的なリーダー、最低限のインフラ、先端技術設備のルーチン化の3点が重要である。また、研究者を信用してもらうこと、信頼に足るリーダーを選ぶことが大切である。さらに、材料について複眼的な視点、いろいろな価値観を持つことが大切である。広範な興味がないと、セレンディピティ (思わぬことを偶然に発見する才能) をもって面白いことができない。JSTで研究開発を行う場合は、CRESTのように各拠点にばらまくのではなく、一つの巨大なインフラを活用しつつ、信頼に足るリーダーを選び専属化する。つまりCREST型とERATO型の融合という新形態が、新材料開発には望ましい方向と考えられる。

2.8 まとめ

- ・本セッションで発表された仕事は、いずれも価値観が明確な志の高い研究であり、このために方針にブレが少なく、アクティブな研究グループを牽引できる可能性を秘めている。また、自身のコンセプトに従った進展を行っており、結果的にみると古典的学問領域にとどまらず分野横断型の研究になっている。
- ・勘（センス）一頭（計算）一腕力（プロセス）という3つの要素の比重は各人によって異なるものの、うまくバランスがとれており、どれか1つに特化しているようなことはない。この3つの要素を上手く効率的に機能させることが重要であり、それを決めるのが研究リーダーである。
- ・総括すると、価値観の明確な志の高い研究テーマを掲げた、実績のある研究リーダーの指揮の下で、目標の達成にあった、既成の領域にとらわれない、連携のしっかりした研究チームが、ある程度長期間に亘って、集中研方式で探索を行うのが効果的である。例としてJSTのCRESTとERATOの融合型の研究システムが提案された。（図2-15）

以上の他、各講演者が一致して指摘した点を以下に別記する。

- (1)最低限の多面的な測定が可能な汎用分析機器センターなどのインフラ整備が重要
- (2)中規模予算で長期の継続ファンディングというシステムも必要で、研究経過状況によりフレキシブルに使い分ける
- (3)異分野を取り込むシステム、そのような動機を与えるシステムが必要

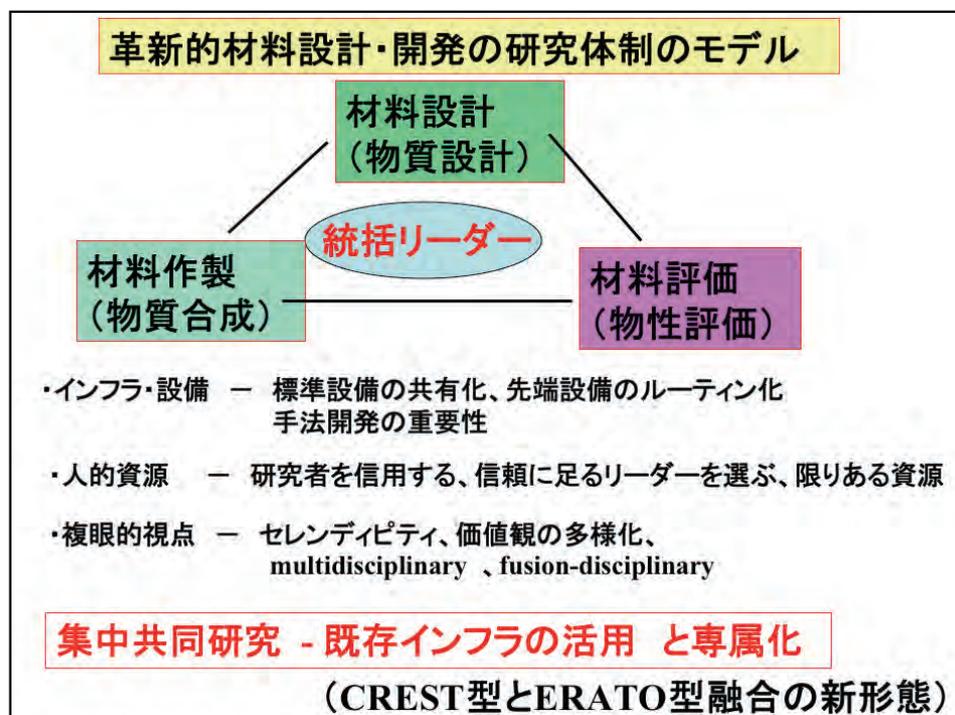


図2-15 革新的材料設計・開発の研究体制のモデル

【3】探索手法／サブコーディネータ 川崎雅司（東北大）

「探索手法」セッションでは、軒原清史氏（ハイペップ研究所）、竹内一郎氏（メリーランド大）、川崎雅司氏（東北大）、長谷川哲也氏（東大）、北森武彦氏（東大）、藤田誠氏（東大）が講演し、川崎氏が司会を務めた。軒原氏はバイオ材料のハイスループット探索を事業化したベンチャー経営者、竹内氏はアメリカでコンビナトリアル材料研究開発を精力的に進めている若手国際派研究者である。川崎氏はコンビナトリアル手法を薄膜電子材料に適用して優れた成果をあげ、特にZnOによる青色LEDの発明で知られている。長谷川氏はハイスループット評価システムの研究開発、北森氏はインテグレートド・ケミストリーによるハイスループット探索の第一人者である。（藤田氏の講演は、第2章に含めた。）

3.1 ペプチドアレイによるタンパク質検出のためのバイオチップの開発—デザインし、化学合成したペプチドをセンサー素子材料に応用する研究—／軒原清史（ハイペップ研究所）

<生体における分子認識の産業応用>

一般的にペプチドは創薬や診断薬などに使われているが、我々は機能を持った生体材料としてとらえている。我々の最大の目標は、生体における分子認識機構を産業につなげることである。

ペプチドは短いタンパク質であるが、生体内の免疫応答、受容体を介した情報伝達などで非常に重要な働きをし、認識部位の核になる物質である。生体内の分子認識はタンパク質同士の相互作用だが、ミクロな観点で見ればペプチド同士の相互作用と考えられることから、ペプチドに着目した。現在、膨大なゲノム情報、ヒトゲノムが分かってきており、それらの機能を解明することは緊急な課題である。我々は、独自のコンセプトにもとづくバイオチップ、すなわちデザインペプチドをアレイとしてチップ基板上に並べ、ハイスループットにタンパク質を検出するデバイスを開発している。ペプチドはコンビナトリアル化学のルーツであり、多様性という点からは非常によく研究されているが、マイクロデバイスへの応用はほとんど見られない。ペプチドはタンパク質と比べて分子量が小さく、タンパク質へのアフィニティが低いため、多くの研究者は、微小な領域で認識を行うチップ応用には向かないと考えている。しかし我々は、極めて有用性の高いプロテイン・フィンガープリント法を開発し、ペプチドチップ実用化への道を拓いた。実用化への課題、迅速性、価格、再現性、操作性を合わせて考慮しつつ、最適化することが重要である。

<ベンチャー企業における研究開発を阻害する要因>

ベンチャー企業における研究開発を阻害している要因としては、オリジナリティ（既存の類似品がない事）の軽視と、事業化計画等を評価測定する能力の欠如があげられる。すなわち、まだ海外で着手されていない、類似品がない等が、潜在的な理由となつてで評価されない場合が多く、事業化計画を出しても正当な評価を受け難い。さらに、せっかくの

助成金も用途に関する様々な制約や支払い方法（精算払い等）が問題となり、有効活用の妨げになっている場合が多い。

最先端研究の成果は、基本的に実用化されねばならない。また、クオリティー・オブ・ライフ（QOL）の向上を通じて社会に貢献しなければいけない。たとえば、発症を押さえるだけで完治させないために生涯服用し続けなければならない薬よりはむしろ、予防と完治の実用的医薬品がのぞまれる。

3.2 新材料探索とハイスループットアプローチ／竹内一郎（メリーランド大）

<アメリカにおける材料研究開発の現状>

アメリカに比べ、基礎的な部分は日本の方がかなりリードしていると認識しているが、National Academies and National Research Council の 2005 年 の 調 査 (Globalization of Materials R&D:Time for a National Strategy) は、「全体的にはまだアメリカがリードしているが、日本の方が進んでいる分野が増えつつある」という見解である。例として、磁性材料（超伝導を含む）、合金、フォトニクスといった分野があげられる。アメリカから見た国際研究のパートナーとしては、ドイツが一番、つづいて日本とイギリスが並んでいる。アメリカのファンディングに関しては、6～7年程前までは予算が漸増傾向にあったが、最近では戦争のために状況が変わってきている。特に材料研究への助成は国防総省が中心に行っており、徐々に削減されている。状況は深刻である。

コンビナトリアル材料研究の国際動向はというと、欧米では様々な研究テーマに、すでに盛んに取り入れられている。アメリカは触媒、高分子、機能性材料が中心で、特に NIST (Combinatorial Methods Center) は高分子に力を入れている。触媒コンビナトリアルは米国 MRS でシンポジウムが 3 回開催されている。無機機能性材料は主として大学で研究されている。General Electric 社や Dow 社のように、かなり大規模な企業がほとんどすべてのテーマに手を出している場合もある。一方、ヨーロッパでは触媒、高分子が主体で、Dutch Polymer Institute、U.K. Inorganic Functional Materials Consortiumなどが知られている。(図 3-1)

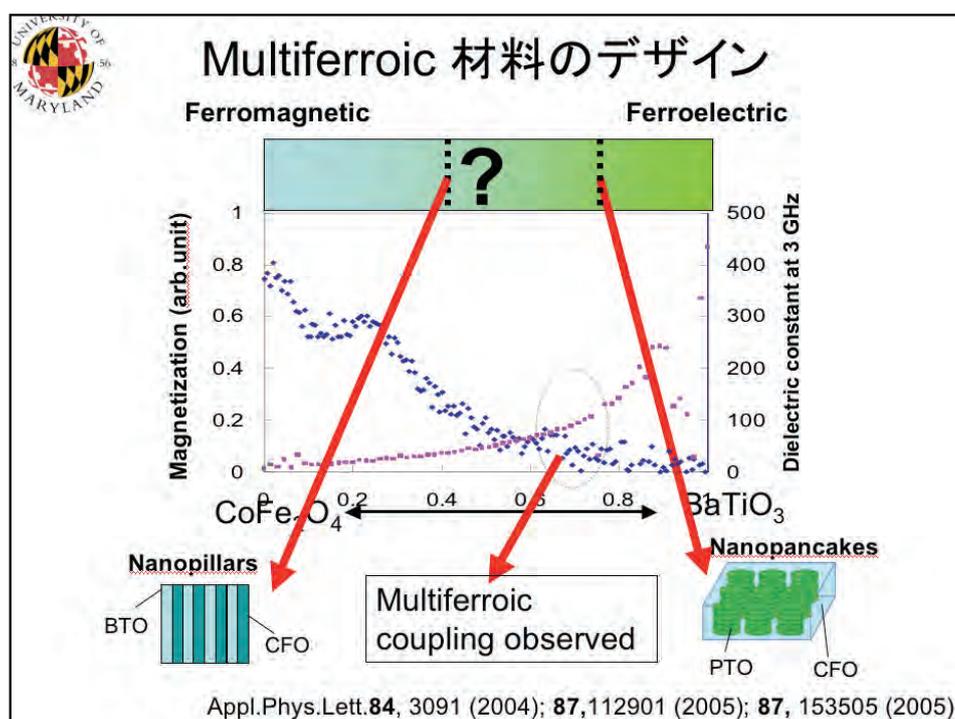


図3-1 Multiferroic材料のデザイン

<マテリアル・インフォマティクスの課題>

マテリアル・インフォマティクスの重要な要素には以下のものがある。

- ・データ管理／移行／共有
- ・データの可視化／分析
- ・データベースの構築／アクセス
- ・データ・マイニング

最後のマイニングは特に興味深く、これを行うことで、従来全く考えられていなかった材料の予言が可能になると考えている。

一方、問題となるのは、コンビナトリアル実験におけるデータ管理であり、膨大なデータに解析が全然追いつかない。人を雇用するにも物理や材料を知っている人でなくてはならず、そのような人材を見つけるのが困難である。アメリカでも、マテリアル・インフォマティクスはこれからの分野ということで、国際的展開が必要と考えられている。

3.3 コンビナトリアル・イニシアチブへのいざない／川崎雅司（東北大）

<コンビナトリアル研究開発の現状>

細野氏の講演で、コンビナトリアルは「腕力」、「頭」、「勘」の中の「腕力」に相当するという話があったが、私は「強い腕力ではなく、効率の良い腕力が必要」という様に認識している。

多数の試料を一括合成するコンビナトリアル薄膜合成のスキームを示す。基板の端だけをレーザー加熱して、1000℃から700℃までの範囲における最適合成温度を一発で決

めている。この方法で酸化亜鉛LEDの開発に成功した。装置については、バスケットボール程度の大きさのチャンバーをもつものが既に市販され、納入実績が100台を越えている。しかしながら、「コンセントさえ用意すれば動く」という謳い文句に反して、納期遅れやメンテナンス不良、使用者のトレーニング不足など、最新鋭装置にはありがちな問題が顕在化している。有機分子の場合は、どこで誰が作ろうと同じ化合物であれば同じ性質を示すが、無機電子材料では組成が同じでも性質に良し悪しがあり、“条件出しという謎の儀式”が必要である。しかし、コンビナトリアルはこれも高速化できるのが売りである。(図3-2)

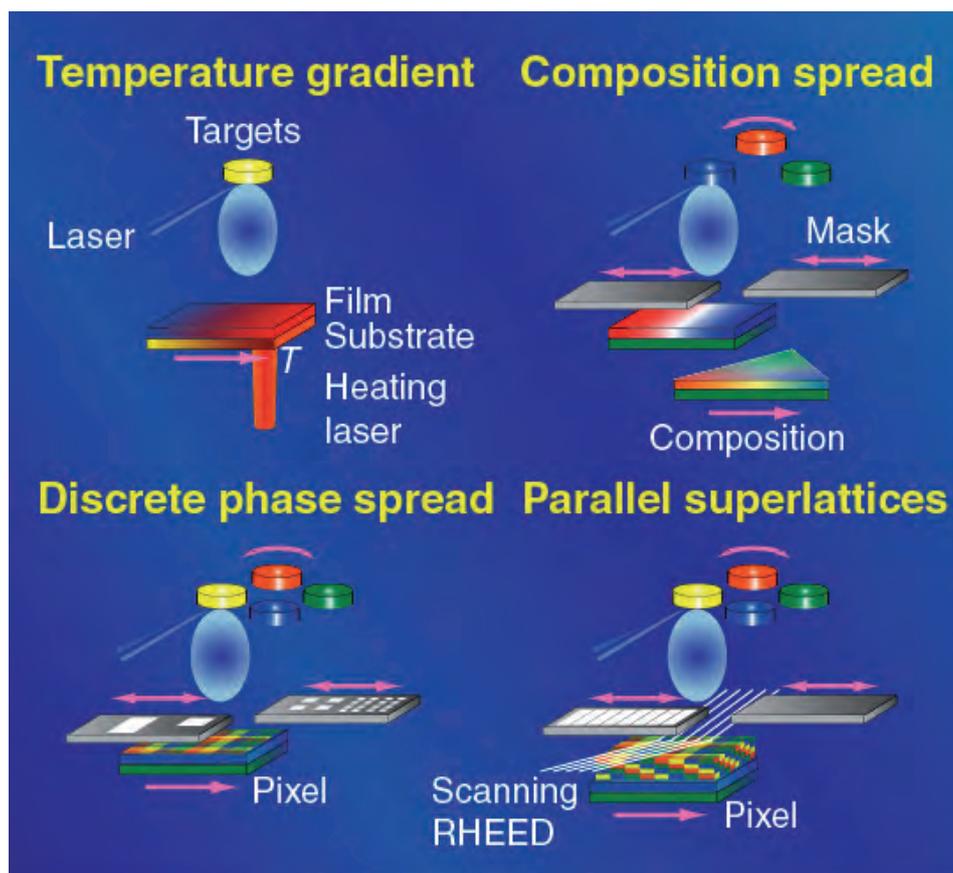


図3-2 コンビナトリアル薄膜合成のスキーム

例えばZnO/MgZnO超格子をコンビナトリアル合成して系統的なデータを求める場合などは、たった2つの試料から20報の論文を書くことができた。しかし一方、一連の試料の作製には2日しかかからないのに、光物性の評価に半年、データ整理、論文執筆、特許手続きには2年もの時間を要した。合成、評価、インフォマティクスの3つのステップの中で、合成はかなり進歩しているのだが、特性の評価とデータ整理やインフォマティクスが非常に大変だというのが現状である。コンビナトリアルで合成し評価したものに対して、データ解析とデータ・マイニングを循環的に行わないと、コンビナトリアルの本当の威力は発揮できない。評価とインフォマティクスの部分がボトルネックである。

コンビナトリアル法で材料を探す際に、ある指針に基づき、条件Aと条件Bの範囲を決

めて探索を行ったとする。望みの効果が得られれば、次のステップでは「この辺りをさらに細かく探索しよう」とか「新たな条件を足してみよう」といった作業に進む。その際、「いろいろなことを狙いながらブレークスルーの片鱗を発見し、作業仮説を作り直し、さらに精密な実験を行う」か「絨毯爆撃を行う」か、という選択を行う。何十次元ものパラメータ空間の中から最適値を見つけ出す作業は、狙いのない絨毯爆撃では無理である。何十次元の中である程度狙いを付け、そこに対しては、旧来のピンポイント攻撃のかわりに、線で切ったり面で切ったり、またはある領域に散弾銃式にコンビナトリアルを行うのが最適であると考えている。従って、狙いの付けどころと、コンビナトリアルをいかに上手に使うかが非常に重要になってくる。しかし、大きな驚きのあるブレークスルーは、触媒の量を間違えたり、予定外にパラメータを振ったことで見つかるケースも案外多い。時間と経費の無駄が少なければ、このようなチャレンジも意識的に可能であり、偶然を必然に変えるような物質探索も可能になると考えている。そのためにも、評価法、あるいはインフォマティクスが重要だと思う。(図3-3)

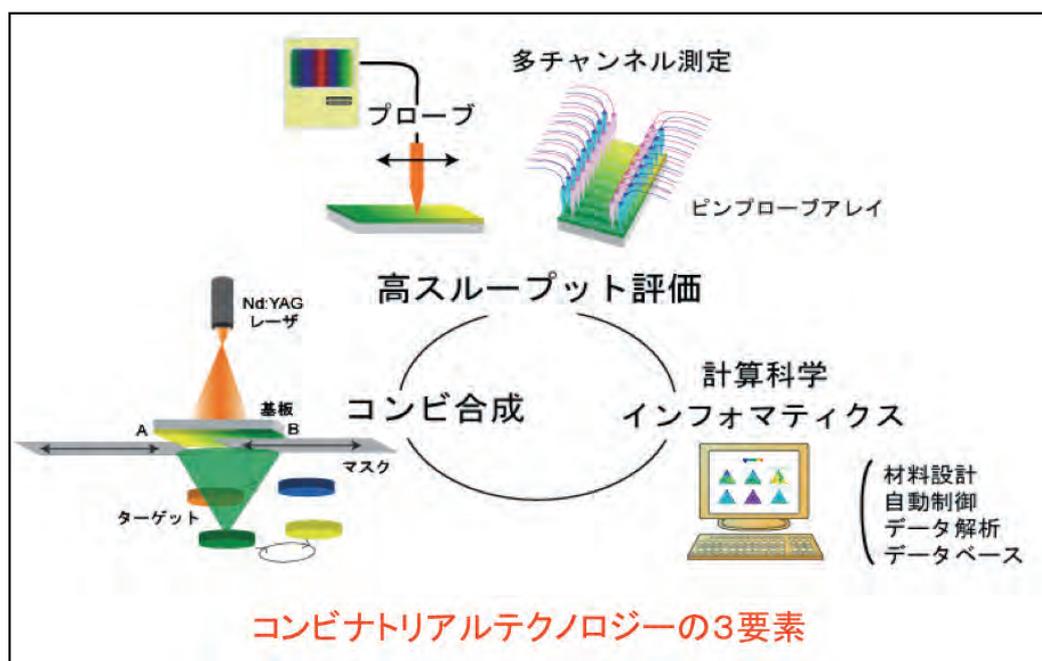


図3-3 コンビナトリアルテクノロジーの3要素

<コンビナトリアル法の問題点と重要なポイント>

現状の問題点と重要なポイントを整理すると次のようになる。

- ・データに埋もれる学生——試料のナンバリング、ファイルネームとデータの関連づけ、ハイスループット対応のデータ管理・データ・マイニングといった上手なインフォマティクスが、データに埋もれがちな学生を救済するために必要である。
- ・真の探索への道の険しさ——当たりくじを判定する評価・スクリーニングツール、研究者が外れを引き続けてもめげないようにするシステムについて検討する必要がある。

- ・試料の質に依存する困難さ——これは有機物質の合成にはない難しさである。
- ・評価軸の多様性
- ・仕組まれたセレンディピティーの設計

インフラを集中させる事は大切であり、ばらばらに研究していてもあまり効果はない。インフラをどこかに集中し、企業と大学との連携を上手に考えるべきである。また、企業研究者やさきがけ研究者が、コンビナトリアル法を簡単に試せるようなラボがあればと考えている。竹内氏の講演にもあったとおり、インフォマティクスでは国際標準を取ることが大切である。

3.4 材料探索 —高速物性評価— / 長谷川哲也 (東大)

<微小物性プローブを用いた高速物性評価>

無機物質のコンビナトリアル実験では、大量かつ並列的に試料を作製し、評価する必要がある。特に電子材料の物性をターゲットにすると、多様な物性をマッピングする必要性から評価を高速化しなければならない。高速評価の装置として、微小物性プローブの利用に着目している。磁性、導電性、磁気光学効果、誘電性、屈折率等の物性に応じ、様々なプローブを用いた装置を開発している。磁性測定用プローブを例にとると、SQUIDと呼ばれる超伝導でできた非常に小さなリング (~10 μ m) を利用している。このリングを貫く磁束を計測することで、非常に高感度な測定が可能である。磁性半導体については様々な理論的予測があり、その結論が大きく異なるので、実験を行うことが必要である。例えば、半導体に様々な元素をドーピングして磁性を測定したところ、酸化チタンにコバルトを添加した場合に強磁性を示すことがわかった。(図3-4)

<コンビナトリアル法による材料探索の課題>

コンビナトリアル法による材料探索の課題を、ハードとソフトに分けて述べる。

○ハードウェア

- ・企業においてはコンビ設備への投資が困難——企業は、現在のところコンビナトリアルのための評価設備を購入する余裕がない。大学に持ち込んでくるケースもあるが、対応には限界がある。

○ソフトウェア

- ・材料探索のためのツールとしてまだ未成熟——ソフトウェアにかなり力点をおく必要がある。合成技術、評価装置を作製する技術など、ハードウェアはかなり進歩してきているが、それら個々の技術をつなぐ糊の所がまだ未成熟である。
- ・探索的な研究が不十分——企業と一緒に実用的な材料を作製しようとする場合に感じる事がある。材料作製のコンビナトリアル最適化は素早くできる。しかし、企業が大学に求めているのはブレークスルーである。すなわち、2~3倍良くするのではなく、1桁2桁良くするといったことを期待しており、それをうまくコンビナトリアルで行なうことが必要である。

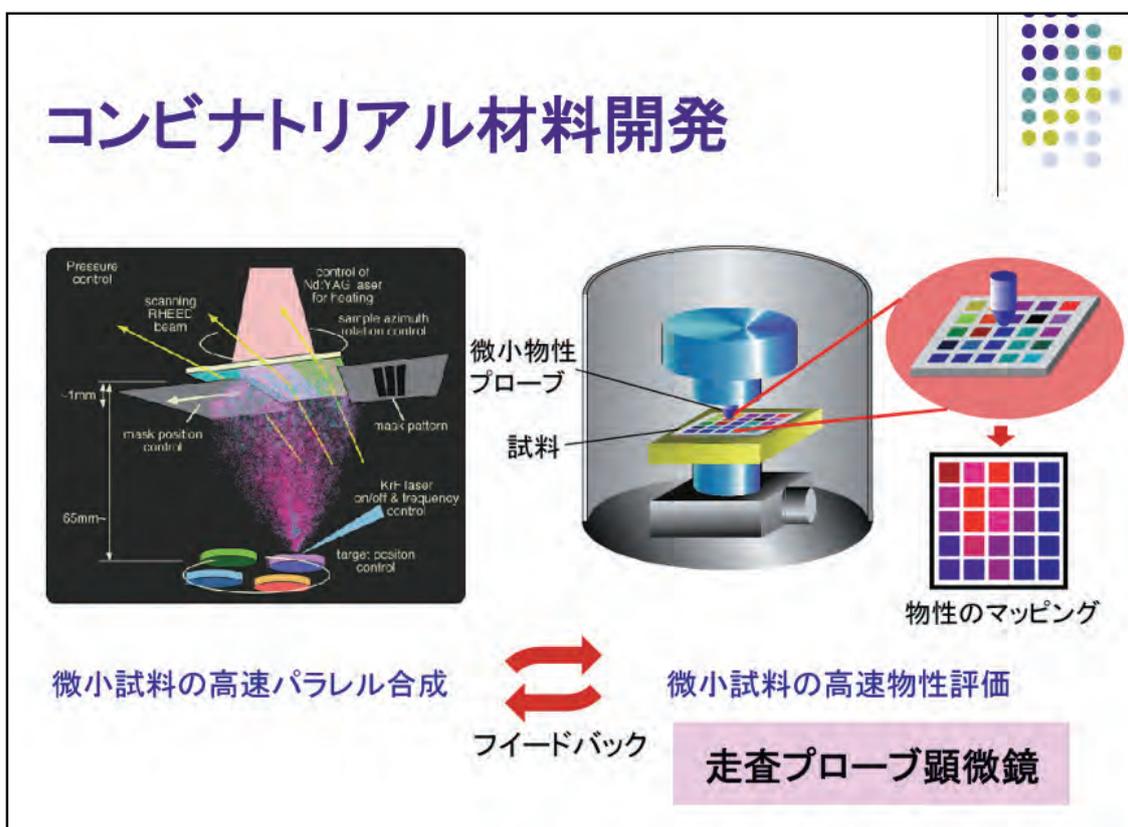


図3-4 微小物性プローブを用いた高速物性評価

- ・偶然の発見をいかに引き出すか——発見を目的としない研究をいかに発見につなげるかが問題である。例えば、二酸化チタンにコバルトを添加した強磁性材料は、触媒の研究の際に見つかったものである。最近、KASTで見つかった透明導電体は、強磁性材料の探索の際に起きた発見である。つまり、当初の狙いと違うところに起きるまぐれ当たりをいかに捕らえるかである。もう一つは、まぐれ当たりが出た時にそれを本当に捕らえられる能力があるかという人材の問題である。

まとめると、ソフトウェアの部分の補完が重要である。コンビナトリアル実験で得られた膨大なデータの中には、世に出ていない重要なものがある。データベース化により、それらデータを使用できるようなシステムを構築する必要がある。

3.5 マイクロ・ナノ化学システムと高速スクリーニング技術／北森武彦（東大）

<ガラスチップと独自技術によるハイスループット>

我々はガラスのチップに微細な配管を行って液体を通し、この中でプロセスを行う研究に取り組んでいる。我々の独自技術はマイクロ単位操作（MUO）、連続流化学プロセス（CFCP）、熱レンズ顕微鏡（TLM）の3つである。これらは分析・診断チップに応用できるほか、薬の副作用の検査、あるいは人工授精などといった使い道もある。さらに、合成条件探索、物質探索、細胞探索といったコンビナトリアル化学への応用も可能である。コンビナトリアル化学が進めば、チップをうまく積層してプラントを作ることにより、

30万トン／年の生産も可能と考えている。この方法の長所は、微少量の物質を扱えることと、非常に高速なことである、だいたい3桁程早いといわれている。さらに、積層可能性を使えば高機能なチップを作ることもでき、例えば不斉合成などもできるようになってきている。ナノ流体化学など新しい研究領域も拓きつつある。(図3-5)

マイクロ・ナノ化学システムと高速スクリーニング技術
東京大学大学院工学系研究科 北森武彦

独自技術

- 1) マイクロ単位操作(MUO)
- 2) 連続流化学プロセス(CFCP)
- 3) 熱レンズ顕微鏡(TLM)



図3-5 マイクロ・ナノ科学システムと高速スクリーニング技術

<研究開発の環境と目標>

日本には研究者が77万人いると言われる。77万人全員に独創性を求める必要があるのだろうか。研究開発というのは、分からないことを分かるようにしたり、できないことをできるようにしたりするのが仕事である。その過程で大発見や大発明があるかもしれないが、発見や発明が目的ではないと思っている。評価の基軸に関して、独創性だけでなく、飛躍的な改善、有効な活用なども重要でないかと思う。けもの道を作るような独創的な人も必要だが、これと同時にハイウェイを建設するような革新的な人、ハイウェイを利用する人なども大切である。(図3-6)

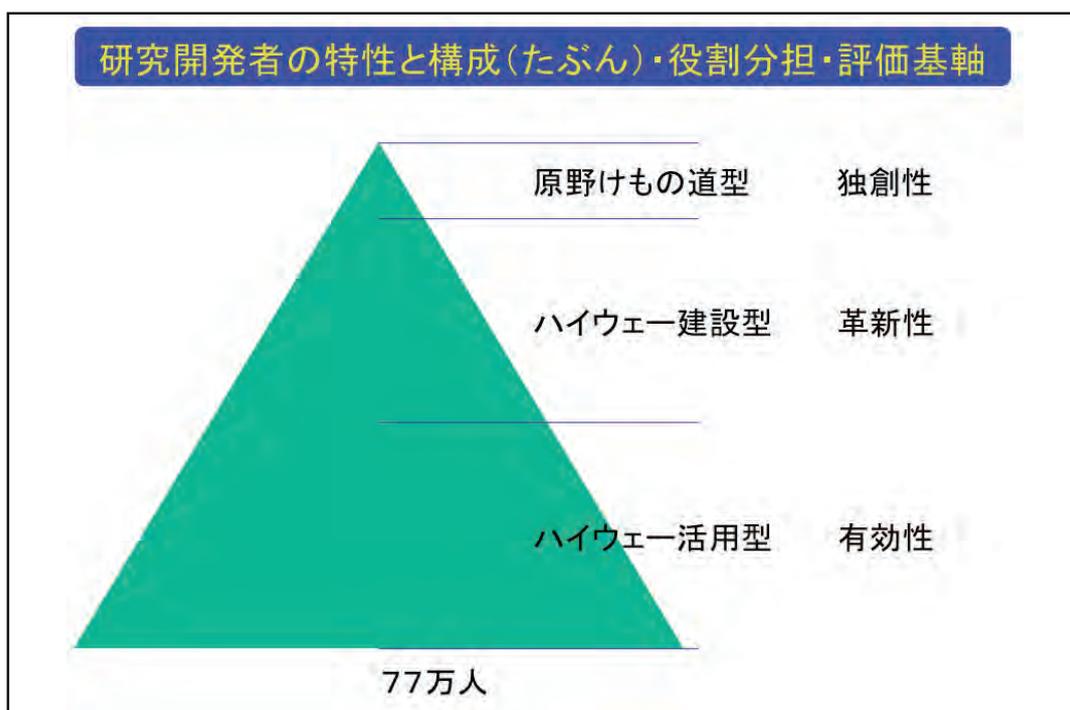


図3-6 研究開発者の特性と構成・役割分担・評価基軸

3.6 まとめ

- ・ 広い物質パラメータ範囲の探索や品質最適化にはハイスループット合成・評価が不可欠である。期間を設定した短期材料探索にも有効である。薄膜材料では成功例があるが、今のところ適用できる材料に制限もある。
- ・ パソコンの普及と高性能化により、取扱える情報量は確実に増加している。ハイスループット合成・評価では扱うデータが多い。データハンドリング方法（データ取得、可視化等）の工夫により、取扱える情報量はさらに増加する。データの見落としがあるという指摘もあるが、データの可視化により解決可能であろう。ただ、ソフト・ハード面で大量の情報を扱える人材が限られており、人材養成が必要である。
- ・ 情報機器や装置性能が進んでいる現在では、実験スタイルもハイスループットにして、互いにポジティブなフィードバックをかけつつ進めるべきである。最近の計算科学ではマテリアルデザインが可能になってきているので、計算のスピードに匹敵する実験シミュレータも可能ではないだろうか。それらのポジティブなフィードバックを容易にするには、各分野の選ばれた人材をリーダーとする集中的共同研究とインフラ整備が必要である。
- ・ 無機材料においては、データ・マイニングは有効性を試す段階にあり、今後の進展が望まれる。
- ・ すでに開拓された分野はハイスループット法が有効である。試料数の生産性も高いため、目標を幅広く設定できる。その意味では、新発見の可能性も増すため、けもの道開拓にフィードバックできるのではないか。
- ・ 現在の日本の材料研究は非常に高いレベルにあるが、これを持続させるためには、人材

養成や環境整備が必要である。

- ・材料を作製する技術と評価する技術の両方の進歩が大事。それらのニーズが上手くマッチした場合に大きなブレイクスルーとなる可能性が高い。

【4】「理論・計算・モデル」／サブコーディネータ 伊藤聡（東芝）

本セッションでは、赤井久純氏（阪大）、白石賢二氏（筑波大）、土井正男氏（東大）、久保百司氏（東北大）、高田章氏（旭硝子）、および岩田修一氏（東大）が講演した。さらに、樋渡保秋氏（金沢大）にはコメントをお願いした。赤井氏は第一原理計算にもとづく物性探索を行い磁性材料などですぐれた成果をあげている。白石氏は、そのままでは大きすぎて計算で取り扱えない系（シリコンLSI）を直感的にモデル化・単純化して理論の俎上に載せ、直ちに実用に役立つ結果を導いた。これら無機材料に対して、有機材料特有の複雑な特性を示す高分子に計算科学の手法を適用し、優れた成果を上げてきたのが土井氏である。久保氏は宮本明氏（東北大）のもとで、厳密性（第一原理からの演繹）を多少犠牲にしても実際に役立つ材料設計を大学の立場から推し進めてきた。高田氏は産業界の立場からの材料設計に長年携わり、最近はロンドン大学にもプロジェクトを持って活躍している。最後の講演者である岩田氏は、データベースとその活用に関わる知識工学という観点で材料設計を俯瞰的に捉えるマテリアル・インフォマティクスの第一人者である。

4.1 計算機マテリアルデザインからみた新材料設計・探索／赤井久純（阪大）

＜計算機マテリアルデザインの方法 現状と今後の見通し＞

物質・構造を与えてその物性・機能を予測することは、計算機を用いること（シミュレーション）によりかなりの精度で可能になってきた。その反対に物性・機能を与えて、それを実現する物質・構造を求めること（デザイン）は逆問題であり、その答えを出すのは依然として困難とはいえ、ある程度の方向性が見え始めている。

これまでの材料開発でデザインが成功した例を示す。まず、無限に多くの物質の中からデータベース、データ・マイニング、経験則、理論などによって100万種類ほどを抽出する。次にシミュレーションにより、この100万種類を1000個程度に絞る。最後にコンビナトリアル実験でさらなる絞り込みを行い、最終的なターゲットを選び出す。この方法は創薬などに有効だが、効率は十分とはいえない。（図4-1）

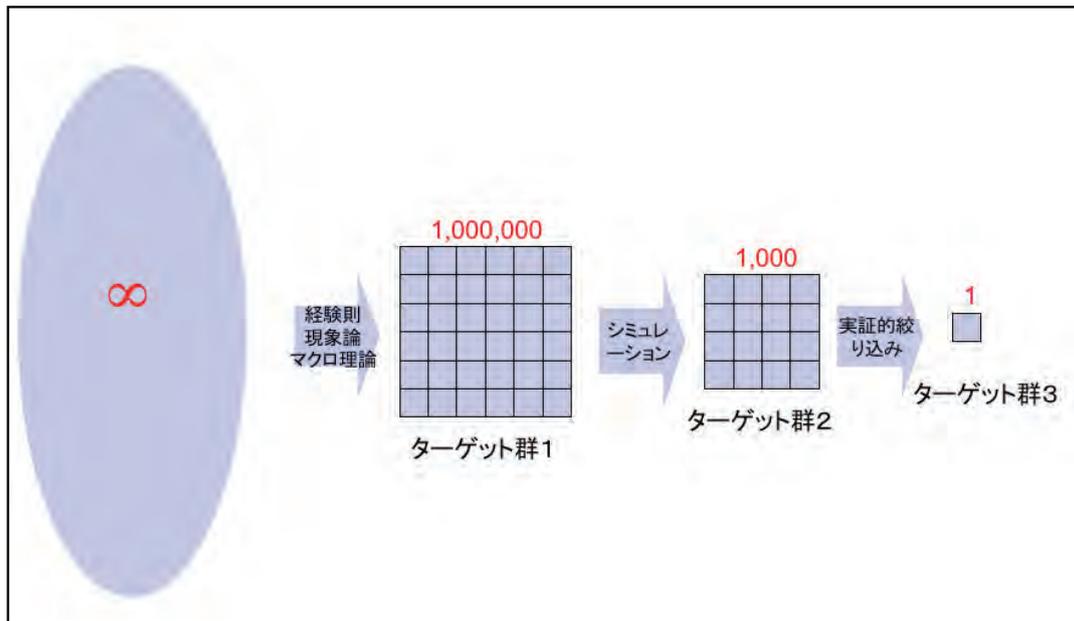


図4-1 材料開発デザイン

これを進化させたのが「計算機マテリアルデザイン」、すなわち量子シミュレーションによる「計算機実験」を行い、その結果に対して頭脳を働かせて物理機構を推測し、その機構にもとづいて考え出した仮想物質に対して再びシミュレーションを行う、というフィードバック的的手法である。この手法を最初から適用して候補を数百種類程度に絞ったのちコンビナトリアル・スクリーニングに移れば、新材料開発の効率を飛躍的に高めることが出来ると考えられる。実際、この方法は最近稀薄磁性半導体の開発で成功を収めた。

<日本の材料研究開発における問題点>

次のような問題点を指摘することが出来る。

- ・ 研究風土——計算手法の開発は時間のかかる基礎研究であるため、研究者には出口が見えない不安がある。また、不適切な評価のため、失敗が大きなダメージとなりやすい。さらに、日本の研究者や科学施策は流行に弱い。
- ・ 基礎研究と応用研究の乖離——基礎研究者は視野が狭い一方、応用研究者は資本集約工程のため思考する機会が少ない。結果として、基礎と応用のバランスが崩れている。
- ・ 産学共同の困難——産学共同のしくみを理解している人が少なく、知財の問題がある。
- ・ 研究委託側と研究者の感覚のずれ——独立法人化以前には、国立大学がJST等から委託されておこなう研究はすべて「受託研究」、すなわち受託研究契約書に基づき大学のルールに従って行われる研究であった。多くの場合、用途に関して委託者側は口をはさめない契約で、成果が厳しく問われることもなかった。法人化後は委託者側のルールで契約がなされるケースが増えているが、委託者側と研究者の間に意識のずれが見受けられる。委託者側には研究者の自由な発想をもっと尊重する配慮・器量が求められる一方で、研究者は受託に伴う責任を理解することが必要であろう。

- ・研究成果は目標達成率だけでは測れない——どんな物を創造したが、それまでどんな過程を経たかが評価されるべきである。
- ・社会的課題を見据えた研究への意欲を起こさせるような科学行政の欠如
- ・ファンディング・エージェンシーにおける目利き人材の欠如

<ブレークスルーのための方策>

材料探索研究を活性化し、新たなブレークスルーを生み出すためには、次のような方策が有効である。

- ・局所密度汎関数近似を超える新たな手法の開発
- ・手法の公開と普及人材——手法のパッケージ化、インターフェース作成、データの標準化
- ・研究拠点とデザイン・ファウンドリーの設置
- ・国内、国際リサーチ・トレーニング・ネットワークの設置

4.2 Si/イオン結晶界面の新しいピンング機構の理論的提案／白石賢二（筑波大）

<CMOS用high-k絶縁膜材料の創成>

シリコンLSIにはこれまで絶縁膜としてSiO₂が用いられてきた。しかし近年、集積度の向上とそれに伴うゲート絶縁膜厚の減少によってリーク電流が増大し、シリコンベースの半導体の限界が取りざたされるようになった。問題の解決にはSiO₂を、これほど薄くせずに同等の機能を発揮できるhigh-k膜で置き換えることが有効と考えられ、有望な材料であるHfO₂膜の研究が活発化した。当初LSI技術者達は、「いい膜さえできれば問題なし」と思っていたが、次第に以下のような問題が明らかになった。

n⁺ドープのポリシリコンゲートと、p⁺ドープのポリシリコンゲートの間には1 eV程のフェルミレベルの差があり、この差はCMOSを作る上の必要条件である。ところが、これらをハフニウム系絶縁膜の上に乗せた途端フェルミレベルの差は0.15 eV程度に減少してしまう。最低でも0.5から0.6 eVはないとCMOSとしてきちんと動作させられない。この結果は、半導体各社のプロセス条件の違いによらず同じで、HfO₂のイントリンシックな物性に起因する現象を示唆している。

日頃から色々な物質の酸素空孔の波動関数の形状（計算結果）を見ていた経験から、HfO₂の酸素空孔のエネルギー準位はSiO₂の場合よりずっと高いと予想した。（因みに、第一原理計算では波動関数の形はある程度わかるが、準位エネルギーは正確に求められない。）一方、HfAlO_xとp⁺ポリシリコンの界面に何らかの界面層があるというTEM（透過型電子顕微鏡）写真（未発表）を、身近な実験グループから見せてもらったことも役立った。さらに、「TiO₂の酸素空孔がドナーに近い位置にある」というデータベース情報も参考になった。このことから、白石は「イオン性の強い結晶であるHfO₂をp⁺ポリシリコンと接触させると、界面付近に大量の酸素空孔（プラスの電荷をもつ）が生じると同時に、余った電子がポリシリコンの伝導帯に移る結果、界面に双極子層が生じてフェルミ準位が

ピンされる。SiO₂では、酸素空孔のエネルギーが低いため、このようなことは起きない」という予想を立て、これにもとづくモデル計算を行った。(図4-2)

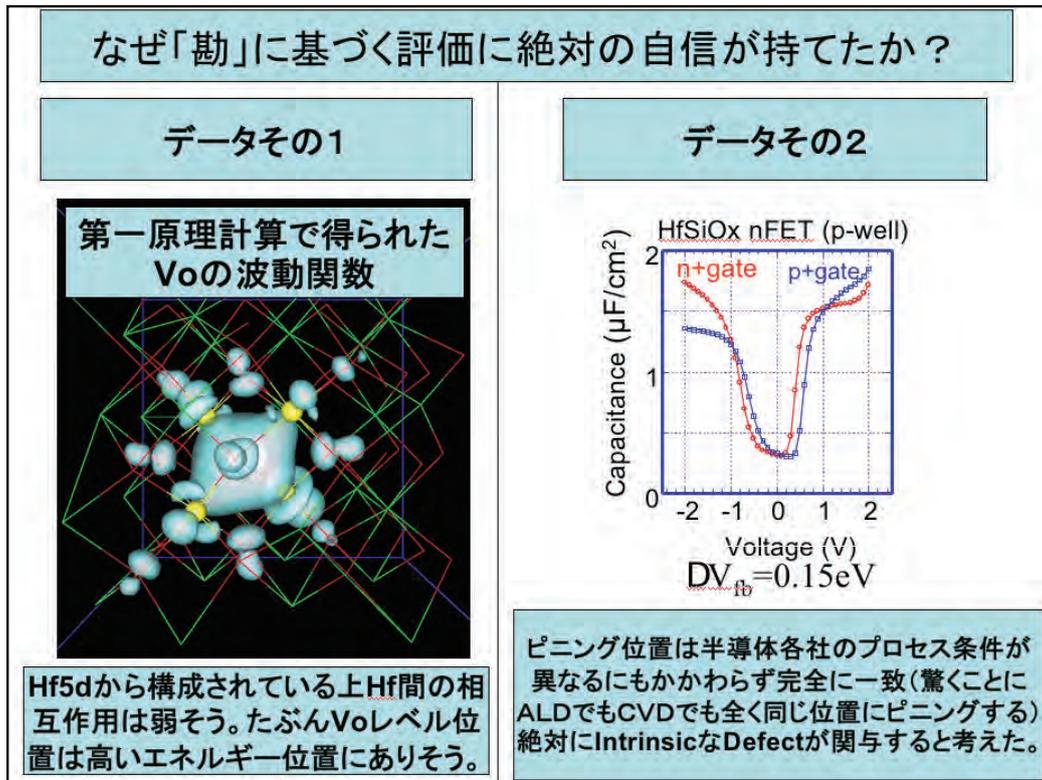


図4-2 なぜ「勘」に基づく評価に絶対の自信が持てたか？

結果は、2004年1月にSymposium on VLSI Technologyに投稿したが、この時点では酸素空孔準位に関する実験は存在しなかった。理論的にも、従来の局所密度近似に基づく第一原理計算では定量的な評価は不可能である。従って、この提案は勘のみにもとづいて行ったのだが、発表の日には図らずもこのモデルを支持する実験事実が多数報告された。少し後には、HfO₂中の酸素空孔のエネルギーが実験で求められ、上のモデルの正しさを立証した。このことから、「65nmノードのLSIにポリシリコン/HfO₂という解はなく、たとえ45nmノードを目指しても金属ゲートを開発すべきである」という結論が得られた。

この提案以後、high-k技術のトレンドは激変した。2004年のVLSI Symposiumではポリシリコンゲートの発表が60%だったものが、2005年は10%に減った。

この成果は産官学の共同研究を通じて得られた。計算はほんの一部で、様々な分野の実験研究者との共同作業が新概念の創出を育んだ。また、LSIというのは基礎物理とは無関係と思われがちだが、実は基礎物理に非常に近い所にある技術だということを、この結果は示している。(図4-3)

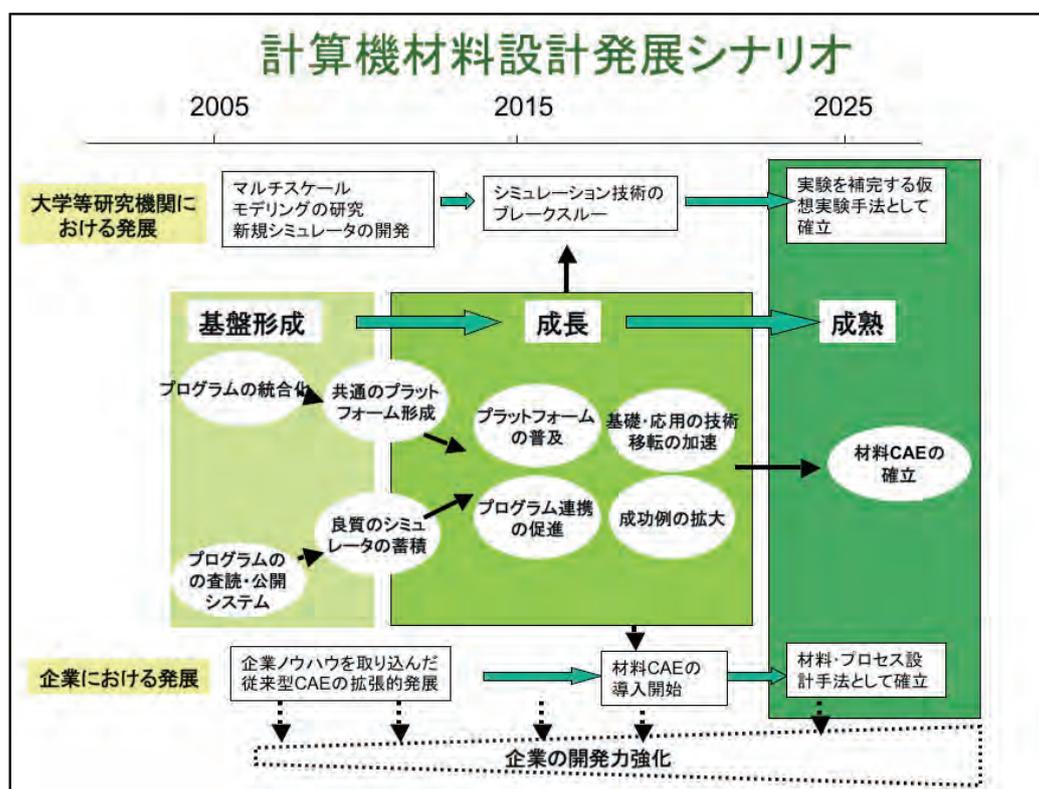


図4-3 計算機材料設計発展シナリオ

<ブレークスルーの背景>

以上の研究が成功した理由の一つは、SELETE（半導体先端テクノロジーズ）、物質材料研究機構などで、さまざまな分野の実験研究者と、2週間に1度は顔を付き合わせて議論したことである。シリコンの微細加工技術というのは、産官ではかなり成熟しているが、それに対応し有効活用できる研究拠点は日本にはひとつもない。（韓国にも中国にもあり、欧米には多数存在する。）このような拠点はナノサイエンスを中心としたものが望ましい。たまたまシリコンテクノロジーの研究を10年ほどやっていたために、そういった人たちとつき合えたが、一般にそのような経験がないとうまくいかないであろう。省庁の壁を破ってこうした拠点を作ることが、政策的に必要とされている。

4.3 理論・計算・モデルの役割 —高分子材料— / 土井正男（東大）

<高分子材料に求められるもの>

繊維、ゴム、プラスチックなどの高分子は非常に安価だが、今やナノテクのコア材料としてデバイス、表示素子などに利用されている。高分子には、フィルムやフィラメントが簡単にできる、加工・ハンドリングが容易である、などのメリットがあり、ごく普通の機能であっても、それを高分子化することで高い付加価値が生じる。このため高分子の研究は、従来にない新機能の創製よりも、すでにある機能を高分子で実現することを狙って行われることが多い。

高分子材料の開発では、少し材料を変えるたびに、材料とプロセスの最適化に多くの時間と人が投入する必要がある。しかし多くの場合、材料とプロセスの研究者は別々で、

あまり共通の言語を持っていない。例として、インクジェット・プリンタの開発における材料とプリントの条件出しを考えてみる。この時、材料のどこを良くする必要があるか、プロセスのどこを変えるべきかを検討する際に使える共通の言語がない。それを結ぶようなサイエンスがないからだ。材料開発とプロセス開発のギャップを埋めるサイエンス、理論を作ることが重要である。

粘着、濡れ、はがれなどの古く泥臭い現象、摩擦、潤滑、磨耗や化学反応系における重合、ゲル化など、化学者が日常的に利用している概念のサイエンスを定量化し、できれば計算機に乗せて予測できるところまで持っていく必要がある。さらに、そのサイエンスをベースにしたエンジニアリングを作るという土壌があって初めて、計算機材料設計が現実になってくる。これは特に高分子の場合、困難で時間を必要とする。

<計算材料設計の発展シナリオ>

2005年1月、科学技術政策研究所から計算機材料設計の発展シナリオを書いてほしいという要請があって、次のような結果をまとめた。

大学や研究機関については、理論、実験いずれの分野においてもシミュレーションの比重は確実に増大すると思われる。CAE（コンピュータ支援エンジニアリング）はマクロな系の設計に欠かせない技術となっているが、ナノテクでは“ナノテクのためのCAE”が必要である。特に重要なのは、相関を含めメソスコピックな系の扱いである。さらに界面構造も重要である。一つのスケールだけではなく、ミクロ、メソ、マクロなどさまざまなスケールに亘って複眼的な視野を持った理論やモデリングが必要になる。これは、キーワード的にいうとマルチスケールあるいはマルチフィジックス・モデリングである。すでに流行になっている言葉だが、今後も引き続き重要であろう。これに伴って、マルチスケールモデリングのための基礎研究、粗視化の方法（ホモジナイゼーション、アップスケールモデリング）の研究などが盛んになるであろう。

一方、企業において、このよう研究がなされてゆくとはいえ考えにくい。しかし、企業競争力の源泉としての計算科学技術は、引き続き重要であることはまちがいない。現在のところ、一般企業材料計算の部隊は、非常に優れた人は別として、分析などのサポート的な役割を果たしているにすぎない。しかし、マクロなCAEのニーズがある限り、計算材料技術は、マクロなCAEの延長として企業の中での物作りに必要なものだという認識が、さらに強まるとと思われる。例えば、LSIを作る場合には、材料とプロセスの混合問題を解く必要がある。こうしたCAEのための材料設計のニーズはたくさんあり、そこに企業ノウハウを積み込んだシステムがこれから発展すると予想している。

<計算科学技術の発展に必要なもの>

計算科学技術に対してかなり投資は行われているが、汎用性を意識したプログラムは少ない。特にシミュレーション・プログラムなどは、作る側も汎用性を意識していないと思われる。たとえ汎用性が意識されている場合でも、マニュアルや動作チェックが不十分で

あったり、インターフェースに問題があったりして、使える物は少ない。さらに、これをクリアしたとしてもプログラムを維持発展させていくことは困難で、ファンディングが終わった後は、ボランティアに頼らざるを得ないという状況がある。その対策としては、プログラムを公的に評価・保管するシステムや、プログラムを集めた国会図書館のようなものの構築が有効であろう。

またミクロ、マクロ、メソをつなぐマルチスケールモデリングを実現させるためには、プログラム間の連携も大切である。現在独立に走っている色々なプロジェクトを大きな立場からオープンに統合したり、その組み合わせを考え、何ができるのかというビジョンを作る作業をスタートする時期である。

4.4 コンビナトリアル計算化学手法による新材料設計・探索／久保百司（東北大）

<コンビナトリアル計算化学>

従来の計算化学は、既の実験によって素晴らしい性能・機能をもっていることがわかっている材料に対して、実験的には理解しがたい電子・原子レベルの機能発現メカニズムを解明することを主目的としてきた。これに対し、我々は実践的に役立つ計算化学を実現するための方法論として、実験のコンビナトリアル手法と計算化学を組み合わせたコンビナトリアル計算化学手法を開発した。具体的に、自動車排ガス浄化用のNO_x還元触媒の探索をコンビナトリアル計算化学によって高速に行った結果、イリジウムでイオン交換したゼオライト触媒が最も耐水蒸気性に優れることを予測した。この結果はその後実験的にも検証され、ホンダのステップワゴンなどに実装された。これが発端となって、我々はエレクトロニクス、発光素子、半導体、セラミックス、電池など様々な材料を対象としたコンビナトリアル計算化学を実践し、多くの成功例を生み出した。

一方、従来の計算化学は材料の機能・物性評価を主目的としてきたが、量子論に基づくプロセス設計の実現が切望されていた。プロセス設計の実現には、化学反応に加え、衝撃、応力、摩擦、流体、構造、電場、光などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象をシミュレーションする必要があるが、従来の第一原理計算では全く不可能であった。これに対し我々のグループでは、従来の第一原理計算に比べ5000倍の高速化を実現することで、化学反応に加え、衝撃、応力、摩擦、流体、構造、電場、光などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象をシミュレーション可能なプログラムを新たに開発した。(図4-4)

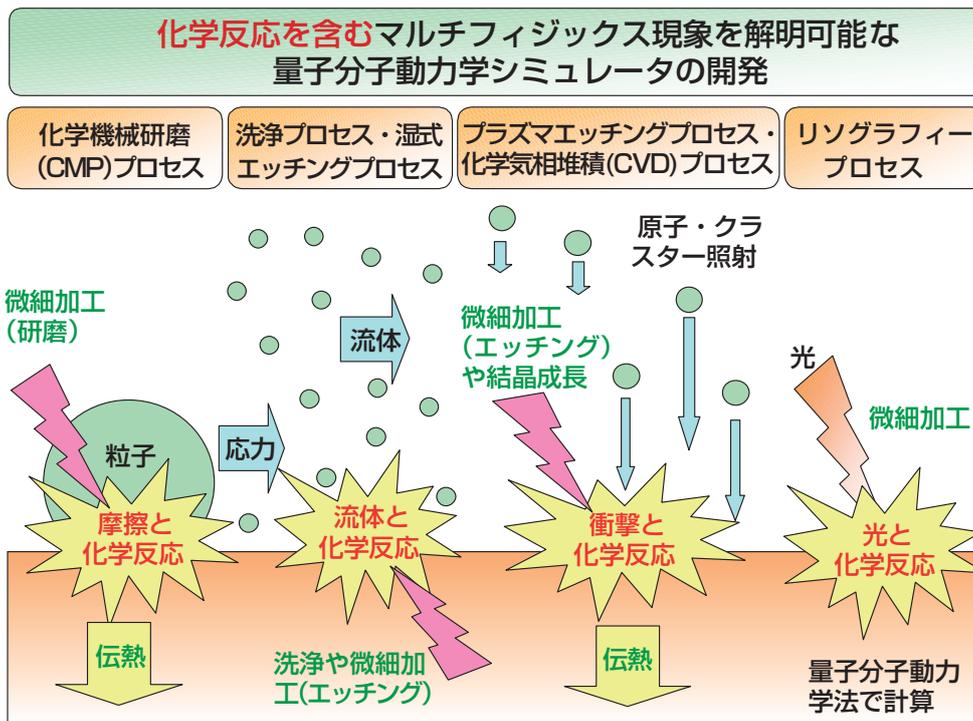


図4-4 量子分子動力学シミュレータの開発

本手法を用いることで、シリコン半導体におけるエッチング、化学機械研磨（CMP）、インプラネーションなどのシミュレーションを可能とし、さらに量子論に基づくプロセス設計を実現した。最近では量子論に基づくデバイスシミュレータの開発にも成功した。

<独自の産学連携研究システム>

我々のグループでは、個別の問題、例えば、エッチング、CMPなどに特化した専用プログラムを開発するとともに、企業からその市販を行っている。市販による企業の利益をもとに、東北大学にコンビナトリアル計算化学寄附講座（床面積600平方メートル）を開設した。これにより、以前悩まされていたスペースの問題が解決し、現在では総勢165人体制で研究を進めている。

<今後重要となる研究分野>

今後より複雑化する材料・デバイスの理論設計には上記で開発したマルチフィジックスシミュレータにマルチスケールの導入が不可欠である。実際に我々のグループでは燃料電池を例に、化学反応が重要な部分を量子分子動力学法、拡散が重要な部分を分子動力学法、そして全体を連続体近似で計算を行うマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発を進めている。

4.5 産業界から見た材料シミュレーションの問題と今後の課題／高田章（旭硝子）

<シミュレーション分野における現状認識と問題点>

企業の立場からすると、実験家でも手軽に使用できるシミュレーションが普及することが望ましい。しかし、これにはいくつかの問題がある。

ハードに関しては、簡単な計算化学の問題はパソコンで扱える時代になったとはいえ、企業の現場で出会う現実的な問題は、大型計算機でも依然として扱いが難しい。実際の問題を解くためには、複雑な現象の組み合わせを扱う手法や、マルチスケール・アプローチなどが必要である。また、実験結果の裏付けや説明だけならターゲットが定まっているので計算しやすいが、新しい材料の探索のためのシミュレーションには、さらに高性能のコンピュータが必要である。

シミュレーション・ソフトについていうと、企業では、米国の国防省で最初に開発されたNASTRAN等の欧米系ソフトを使っているのが実態である。優れたソフトには違いないが、ユーザーの「ああしたい、こうしたい」という個別ニーズには対応出来ない。日本でもオリジナルで優秀な計算ソフトを開発している人がおり、期待しているが、そのままでは企業で使えないという点が問題だ。さらに、日本ではソフト開発が評価されにくく、メンテナンスの人や体制も存在しない。欧米では安価なプログラムが流通し、ソフトと情報の交換といった人的ネットワークも含めて、非常に利用しやすい形になっている。この違いは、長い目で見ると致命的と思われる。アメリカのように、優れたソフトを見つけてそれに投資するシステム、研究者がソフトを売って自立できるようなシステムを是非とも作る必要がある。

さらに、サイエンスの問題がある。材料の世界では基本的なサイエンスの部分で分かっていないことが多く残されている。そのため、最近の計算能力向上のお陰で車をまるごと1台シミュレーションして設計できる時代になりつつあっても、材料分野ではなかなか設計まで到達できない。また、最近は生き残りを賭けた競争に勝つために、結果さえ分かれば良いという風潮が広まり、若い人が現象を見たり、理解したりする機会が少ない。市販ソフトがブラックボックスとして使われている状況に、危惧を感じる。

<計算による材料開発の成功例>

10年程前に、フロン113がオゾンを破壊することが問題となり、代替物質を見つける必要に迫られた。

オゾンを破壊する前に自ら分解してしまう物質で、フロン113と同等の機能を持つもの、という条件で検索すると、異性体を含めて約3000種類の候補物質が得られた。実験では1つのテストに1週間から1ヶ月もかかることから、シミュレーションによるスクリーニングを行った。

手順としては、まずガウシアン分子軌道計算の結果に構造物性相関を適用して沸点を推定し、3000種を300種に絞った。これを、結合エネルギーから50種類に絞り、さらにフィードバックをかけることにより、フロン225caとフロン225cbという2種類の物

質を特定することが出来た。

<産学連携について>

産学連携というと、学が産に近づくべきだと言う議論が多いが、産の人をもっと勉強して学に近づく必要がある。共有できる言葉をお互いが持たないと本当の産学連携にはならない。また、特に大事なのは、産産と学学の連携、異業種とか異分野の連携であろう。さらに、このワークショップのように、産学が同じところに集って議論ができるような場がもっと必要である。

(付記) 計算材料科学分野の産学交流をめざしたフォーラムとしては、例えば戦略的革新シミュレーションソフトウェアプロジェクト(東大生産研)、新化学発展協会CC分科会、NAREGIプロジェクト、企業研究会CAMMフォーラムなどがある。

4.6 Data-Driven Materials Design / 岩田修一 (東大)

<原子炉材料の開発>

ジルコニアを例として、材料開発がどのように展開してきたかを示す。最初は汚い材料から始まって、だんだん純度、性能を上げようとする中で、まったく新しい性能への展開が行われる。ジルコニア ZrO_2 は、原子炉の燃料棒として用いられる非常に複雑な系である。こうした原子炉材料の開発では、1つの実験に2~3億円を必要とし、1つのデータが数百億円規模の経済損失をもたらすことがあるため、研究には神経を使う。「ここまで安全です」と言えるようにするにはどうしたら良いか、と考え悪戦苦闘している。

新しいサイエンスが始まる時のきっかけはデータである。きちんとしたデータとそれを記述するナレッジベース(KB)があり、これらを使ってシミュレーションプログラムを作り、さらにそこに実験を合わせるという段階を経て知識が深化する。コンビナトリアルなアプローチなどはその典型である。このように人間の知を加えて初めてデザインソリューションが可能となり、特性が発現する。

矢印は順問題、下が逆問題である。逆問題は、多数の解があることと、解の存在を保証する数学的な裏付けが必要という点が、解を難しくしている。(図4-5)



図4-5 Design Solutions and Selection

<データベース>

20世紀に、アフガニスタンからモロッコまでの間で発表された、無機材料関係の基礎データを全て集めたマップを示す。2種類の元素の組み合わせでどんな結晶構造パターンが現れるかを示す。適当なエディティングとフィルタリングを行うと、系統的に物質材料の探索マップを求めることができる。ここには100万人の専門家の知恵が集約されており、その知恵をソーティングすることによって様々なパターンを明らかにし、解を求めることができる。(図4-6)

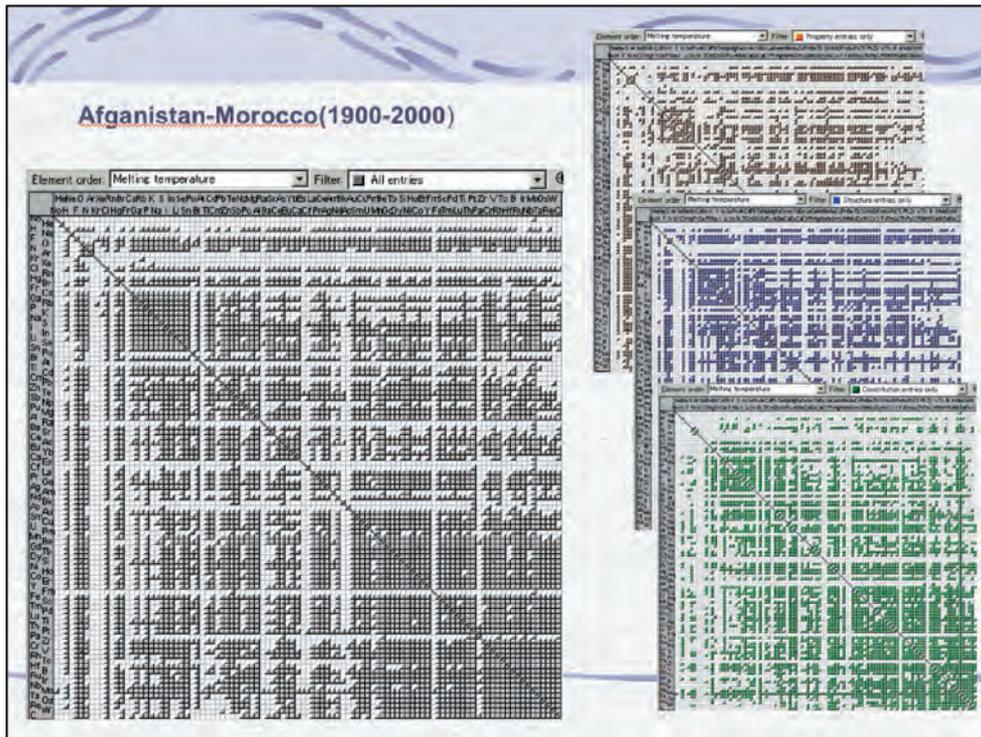


図4-6 無機材料関係の基礎データマップ

例えばAT&Tという組織名でマッピングすると、非常に戦略的な材料開発を過去において行っていたことが分かる。一方、日本の会社をキーワードとして同様なマッピングをすると、ほとんどパラパラなのが現状だ。これは基本的に国力の違いが主な原因で、やはり第二次世界大戦は終わっていないことを感じる。日本のデータベースの問題は、中途半端だということだ。いつも、世界の一員になる前に断念してしまうので、「世界の戦いには勝てない」という感じを持っている。

このような基礎データはさまざまな形で使えるが、日本国内でこれを使いこなせる人はあまりいない。中国語に“不射而射”という言葉がある。「できれば矢は打たない方が良い。矢を打たなくてもだいたい検討がつけられることが一番大事」という意味だ。全ての入手可能なデータ、使用可能なシミュレーションプログラム、さらには組織化可能な実験を「活用しぬいて勝つ」というのが、戦略として大事なことであろう。

<原子炉材料開発とデータベース>

核燃料関係では、データが割と揃っているのは2元素までだ。そのようなデータに、電子、元素、原子・元素クラスター、さらにはマクロな結晶や結晶粒界などの「部品」をどんどん加え、それぞれの部品についてのコンプリートで質の高いデータ集合と、マクロ・バルク物質に対するクオリティーの高いデータ集合を構築する。すると、量子力学あるいは熱力学の助けを借りて、2つの集合の間の対応関係、すなわちモデルを見つけ出すことができる。非常に系が大きくて連続体近似ができるような場合は、ユニークな関数関係が得られる。

核燃料には、多元系かつ非平衡であり、継続的に欠陥が導入されるという難しさがある。このような系を物理で説明することが、ようやく可能になりつつあるというのが現状である。説明ができると、それぞれの予測に根拠が与えられ、予測結果の精度を議論できるため、安全に対してなんらかの意見が言えることになる。これは非常に困難な仕事で、あるレベルを超えると数学的な対応関係がほとんど無限に近くなり、求めるのが難しくなる。いかに収束条件を経験的なアルゴリズムとして準備していくかが大事である。

<国際的な連携と戦略の必要性>

材料に関する膨大な情報とモデルを研究者の共通資源にする必要がある。情報資源は世界に分散しているが、それらをできるだけ有効かつ国際的に融合・統合し、特に知財権では、欧米の知財権戦略と、本来の科学技術が持つべきミッション、さらに大きな出版社等が主張したい知財権をダイナミックかつバランスよく管理しながら国際的な戦略を作る必要がある。

日本は、アメリカと並んで製造技術に優れている。その技術に関するさまざまなデータベース、モデルその他をしっかりとまとめて、世界各国（特にアメリカ以外の中国、インドなど）とうまく連携を保ちながら、日本なりのしっかりしたアイデンティティを確立しなければいけない時期に来ている。

4.7 コメント／伊藤聡（東芝）

<ソフトの問題>

日本はJST他の支援によって優れた解析ソフトを開発してきた。しかし、開発プロジェクトが終了すると保守・管理が困難となり、最後は死蔵されてしまうことが多い。またこれらの多くは、産業上の課題を直接対象として設計されていないため、探索・設計の現場で使うには無理がある。このような課題に対応するため、最近ではテストベッド（新しい技術を実運用する前に実運用と同じ環境で試してみることで、おおよそその場）という仕組みが議論されている。材料探索・開発向けの恒常的なテストベッドは、特に必要性が高い。テストベッドはビジネスになりにくいので、JSTなどの公的機関での設置が望ましい。

より産業寄りのスタンスとして、久保氏らのようにソフト産業として自立するやり方もある。最近の例では文部科学省の戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトが開発ソフトを取り扱うベンチャーを最初から想定した開発体制を敷いている。OCTAも日本総研から商用版が販売されている。ミッションの異なる開発と販売を組織としても分離することでしっかり機能させようという考え方は今後主流となるであろう。なお、ソフト開発においては、重複開発を避けるための施策が求められる。

<異分野連携>

産業界が望む新材料と大学・国研が探索している材料には違いがあり、間には大きな“死の谷”が存在する。これを乗り越えるには二つの方法が考えられる。

ひとつは、「物質としての面白さ」をニーズに結びつける目利き（技術プロデューサー）の育成である。もうひとつは「面白い物質」を「使える材料」にするための一貫した試行環境である。これには分析装置や合成装置もある程度必要なので、集中研的な組織になるべきである。計算・理論・モデルだけに限定すれば、次世代計算科学技術センターのようなものが産官学の共用設備として設置されるべきである。計算資源として日本を代表できる設備も必要である。この環境が基礎研究+応用研究の場であり、直接的な産業界の材料探索・設計センターとしても機能し、さらにはソフトのテストベッドをも兼ねるというものである。

<マテリアル・インフォマティクスの重要性>

材料探索・設計は我々が持っている知識と技術の総力戦であり、そのためにはマテリアル・インフォマティクスを推し進める必要がある。これまでJST等でも材料データベースを構築するプロジェクトは沢山あったが、構築するだけに終わっており、これを活用するプロジェクトは殆どすすんでいない。しかしデータベースは先人の知恵のかたまり（岩田）であり、材料研究開発に不可欠である。

データベース構築も含めて、従来の研究プロジェクトは同じ階層（量子シミュレータの開発、触媒開発、高分子材料データベース構築など）の中で行われるものが多かった。しかし、意図的に異なる階層を横断するような取り組みが必要である。また、ナノのスケールからミリのスケールまでカバーするマルチスケールのシミュレーション、より複雑な系を対象にするマルチフィジックスシミュレーションの開拓が期待される。この階層間にわたる研究でのナビゲーターとなるのがインフォマティクス本来の役割であり、材料のオントロジー技術に対する施策が望まれる。

4.8 まとめ

- ・ 計算材料科学、特にナノ計算材料科学におけるマルチスケールモデリングの必要性についてはこれまでも指摘されているが、その研究はまだ緒に就いたばかりであり、今後本格的に推進する必要がある。これには、個々のシミュレーションソフトのマルチスケール化と、様々なスケールに対応したソフトの間のゆるい連携によるオープンな統合化、という2つの側面がある。基本的な手法開発からCAEに至るまで、戦略的かつ効率的な施策が求められる。
- ・ 計算材料科学への日本のこれまでの公的ファンディングは、プログラム開発が主であり、基礎的な方法論研究に対するサポートは弱かった。そのこともあって基本的な手法では米国、イタリア、ドイツなどに比べて大きく遅れを取っている。「遅れているものは捨てる」のか、「キャッチアップを図る」のか、きちんと議論すべきである。
- ・ 多くのプログラムが日本で開発されてきたが、汎用のものは少なく、あっても欧米のようなメンテナンス、普及、トレーニングの体制がない。プログラムを評価し、集積するシステムと、重複開発を避けるための施策が必要である。また、公的機関によるテスト

ベッドの設置も有効である。

- ・ 計算コミュニティと材料研究コミュニティの間が乖離しており、両者が日常的に議論し、互いに学びあう機会が少ない。バーチャルな連携では不十分で、場の共有が不可欠である。集中研的な研究拠点とデザインファウンドリーが有効、という指摘があった。
- ・ 材料データベースおよびマテリアル・インフォマティクスの重要性は論を待たない。米国、中国などは早くからそのことに気づき、国家戦略として取り組んできた。日本は、優れたデータベースが存在するにもかかわらずバラバラで、その全体を国としてどうするのかという戦略がない。日本は米国と同様、製造技術に優れているので、きちんとした戦略を立て、国際連携を保ちながらアイデンティティを確立することが必要である。
- ・ 材料研究、特に高分子材料研究においては、材料とプロセスをつなぐサイエンスが欠如しているために、意思の疎通が阻まれている。こうした曖昧で泥臭い問題の本質を見通して現象論を構築するためには物理、化学に対する深い理解が必要である。優れた研究者を上手に誘導することには大きな意味がある。
- ・ シミュレーションはもともと海外の方が盛んである。日本は、人材トレーニングを含めてもっと国際連携に力を入れるべきである。

【5】 総合討論における論点／コーディネータ 田中一宜 (JST-CRDS)

「材料探索・設計指針」、「探索手法」、「理論・計算・モデル」の各セッションにおける発表と討論の中から論点を抽出し、全体を見渡した総合討論を行った。また、本ワークショップに先立って行われたプレリサーチにおいても、新材料設計・探索に関する学術上の諸問題から研究開発の進め方や制度の現状認識・問題点・解決方策まで含め、この分野のトッププレーヤー（本ワークショップ出席者）から広く意見や提言を頂いた。

本章では、これらを総合して以下のように論点を整理した。

5.1 日本の新材料探索・設計の現状と問題点

<学術的・技術的側面>

ゼロの状態からの新材料発見は極めて困難。特に、所望の機能を持つ新規物質を設計することは逆問題を解くことに相当し、普遍化された方法は存在しない。また、ケースによって物質の組成や構造が予見できた場合でも、結晶化を含む構造制御や作成技術に大きな壁が存在することもある。そのような状況下での物質探索あるいは構造制御には次のようなものが必要である。(図5)

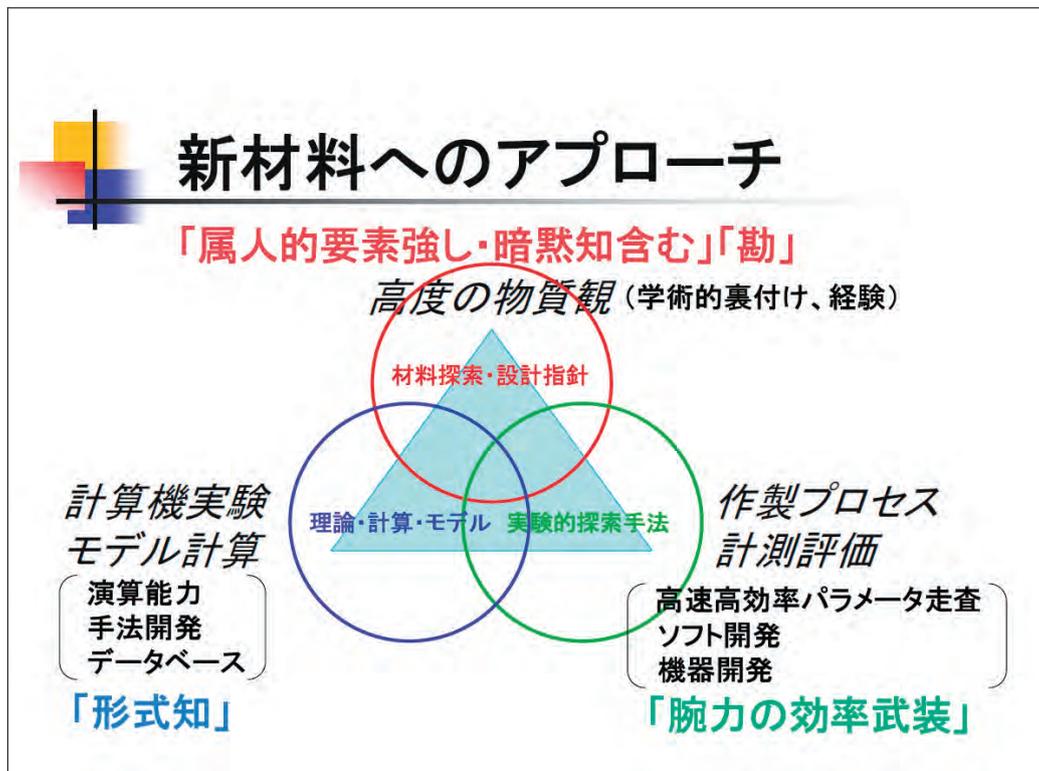


図5 新材料へのアプローチ法

- (1)深い学術的専門知識と研ぎすまされた固有の物質観（勘）を持つ人材の存在、
 - (2)既存の物質科学、材料技術、実験の集積を整理したデータベース、高い演算能力のコンピュータ、計算手法、等を融合した計算科学の発展、
 - (3)コンビナトリアル・アプローチを代表とする、腕力に頼った絨毯爆撃の効率化
- 具体的には作製パラメータの高速スキャンによるサンプル高速作製と特性高速評価の実現が必要であり、過去の新物質探索の数少ない成功例においては、(1)を主としつつも、(2)、(3)が自然かつ適当に組み合わされている場合が多い。

問題点は何だろうか。

(1)は属人的要素が極めて強く、そのような人材輩出のためには後述の教育システム、研究システムなど基本的な制度上の改革が求められる。現状はそのような人材は少なく、何よりも若い世代に意欲が薄く、また、彼らを教育する環境にも問題がある。

(2)については、豊富かつ効率的なデータベースの不備、より複雑な現実の系をシミュレートするための計算手法の未熟、コンピュータ演算能力の問題などがある。例えば、構造や組織が与えられた場合の物性予測は順問題だから原理的には達成可能であるはずだが、未だほんの一部についてしか可能になっていない。また、企業側から見て使いやすい計算ソフトが圧倒的に少なくそのためのテストベッドが不在である。

(3)はバイオや創薬の世界で発達したコンビ手法であるが、無機材料（特に多元系）への展開については不十分、特に評価手法の開発と高速化、全体のデザインを目指すマテリアル・インフォマティクスの未成熟という問題がある。

<政府機関のファンディングシステム>

発見型の物質探索は極めてハイリスクである。一定期間だけ大予算をつければ達成されるという保証はほとんどない。そのような分野への投資に対する適当な評価方法も存在しない。このような状況下では大規模予算でなくても長期間継続してサポートするファンディングシステムが必要と思われるが、現在、日本にはそのような制度は存在していない。一方、国立研や大学では、法人化以後、研究期間を細切れにしてチェックアンドレビューを行うなど短期成果主義の傾向が強くなり、ますます長期研究開発を保証し難い研究環境になっている。

研究ステージによってフレキシブルに運営を使い分ける予算制度も極めて少ない。最近NEDOで始まった「ステージゲート型」プロジェクトは、基礎研究で成果が出た場合、実用化研究への延長が認められるという新しい試みである。しかしながら最長5年間で産業化が要求されるという厳しいものである。

<研究制度・運営・成果の管理システム>

- (1)異分野をどう取り込むのか。物理、化学、計算科学、合成技術、測定評価技術等の専門家を含むチーム編成、あるいは実験と計算の密な連携を促進する制度が不足している。また、サイエンスとエンジニアリングの溝を埋めることができ、しかもチーム全体を

率いる目利きのリーダー人材が不足している。

- (2)材料探索を進める際に、最低限必要な多面的測定が迅速に行える共用測定機器センターが徹底的に不足している。支援人材の不足も深刻。体力のない大学ではこれが大きな問題である。
- (3)従来のプロジェクト成果の蓄積や一括管理がなされていない。それらの効率的運用を促す継続的なシステムが不在である。データベースの規格化、統一化と戦略的活用・運用がなされずに死蔵されている場合が多い。

<日本のアカデミアの問題>

古典的分類の殻に閉じこもる日本の学会の体質がある。最初に種を播いた研究者への敬意と評価が不足している。オープンで自浄作用のある学会が必要である。また、長期間かけて難問に取り組むという空気に欠けている学会もあり、新しい学問の作り方について、日本のアカデミアには本質的な問題がまだ残っているのではないか。

5.2 新材料設計・探索を活性化するための方策

5.1で提示された各課題について、今後の対策、解決策が議論された。概略は以下の通りである。

- (1)価値観の明確な、志の高い研究テーマを掲げる実績ある研究リーダーの指揮の下で、目標の達成のために既成の領域にとらわれない研究チームがしっかり連携し、一定の長期間に亘って集中研方式で探索を行う。例としてJSTのCREST型とERATO型の融合方式があげられる。そのための研究システムやファンディングシステムについては、①多面的かつ先端的測定が可能なインフラ整備の充実、②中規模で長期の継続的ファンディングを柔軟に使い分けるシステム、③異分野を取り込むためのシステム、④社会が必要としている材料研究を先導し日本のアイデンティティを示すことができる人材やシステム、などが必要である。
- (2)物質のデザインはいわゆる逆問題に相当し、また、ナノ材料には様々な電子レベルの相関や界面の問題、現実の系ではミクロ、メソ、マクロのスケールでそれぞれ異なる複雑な問題が存在する。そのため物質やナノ材料の物性およびプロセスのシミュレーションには、複眼的な視野を持った理論やモデリングが必要で、マルチスケールあるいはマルチフィジックス・モデリングは今後の計算科学の中で一層の進化が求められる。一方、物理的洞察と精緻な計算機シミュレーションのキャッチボールに際しては、充実したデータベースの整備や、使いやすい計算ソフトが用意されるべきである。また、産業界には、材料開発とプロセス開発のギャップを埋めるサイエンス構築のニーズが存在する。これらに答えるため①「物質としての面白さ」をニーズに結びつける目利き（技術プロデューサー）の育成、そのような俯瞰的視野を持ったリーダーの選出、②理論と実験（分析装置、合成装置）、異分野の研究者が共存する集中的連携組織、③ソフトのテストベッドも兼ねたマルチファンクショナルな集中研究開発機構、さらには、省庁の壁

を破った半導体、ナノサイエンス、ナノテクノロジーが共存するセンター（拠点）の構築も必要となろう。

- (3)材料探索にはパラメータを徹底的に走査してブルドーザ的に広範囲整地を必要とするステージがある。そのような物質パラメータの幅広い試行や品質最適化には、高速に試料を合成し、高速に評価することが不可欠である。多様な材料に対応するハイスループットシステム開発が重要。これらハイスループットシステムの有効活用のため、計算機材料設計、得られる膨大なデータの高速度処理、システムの自動制御、データ解析、可視化、データベースを介した情報の国際化・標準化を目指す新分野(マテリアルインフォマティクス)を国際連携のもとに構築すべきである。

以上を、研究システムや国の研究開発戦略の面から再整理すると、以下のようになる。

<材料の位置付け>

材料は国の基盤であり、研究と開発のための継続的な投資は今後も絶対に必要である。

<材料開発におけるマネジメントの多様性>

材料研究のステージによって、研究のマネジメントには多様な形がある。課題設定、組織構成、ファンディングは研究ステージによってそれぞれ好適な形がある筈。萌芽的研究には少額で長期的予算保証。一方、新原理に基づいた革新的新材料開発には、MOR (Management of Research) が重要。革新性を謳い学術的にも人間的にも研究者から信頼されるリーダーの選定、基本的インフラ整備、先端機器による測定ルーチン化、がセットになって満足される集中共同研究が不可欠である。また、成果が出始めた頃に、評価に関係なく、制度の切れ目として投資を切ってしまうことの無駄と愚かさを断つべき。そのようなMORが可能な新システムを作るのはJSTの使命である。

<俯瞰的視野を持つ人材の重要性>

新しい学術的原理に基づく革新的な新材料探索には、学術的にも人間的にも研究者から信頼され彼等に動機を与えつづける強いリーダーシップを持った人材が必要。また、社会ニーズに基づいた材料探索においては、社会の要求に答え得る材料開発のターゲットを適格に技術者に示し、基礎研究者には好奇心を刺激するインセンティブを与える人材、つまりサイエンスとエンジニアリングをつなぐリーダーが必要である。研究開発への投資に責任を持つJSTのようなファンディング機関には、上記のような人材を選び抜く目利きが必要である。

<異分野融合と連携システム>

材料探索には物理・化学・合成（薄膜・結晶・ナノ構造）、測定評価、理論、計算機シミュレーション、等の集積と融合が必要。また材料開発のターゲットの設定には、社会や産業

側のニーズをリアルタイムで知るために産官学の連携が必要。そのためのリーダー選定と、異分野の研究者が物理空間を共有する拠点作りが重要である。

<先端計測機器の集積センター>

材料探索のプロセスには必ず多くの試料を多面的に計測評価する作業が不可欠。いかに多量の試料を多面的に精度良く、短時間に測定するかが全探索プロセスを律速するケースが多い。そのため、先端計測機器を1箇所に集積し、それらを専任で管理する支援スタッフを置くことが重要である。また、ナノの特徴である極めて高精度の評価には、別途スプリング8など大型施設の使用について運営の工夫も必要だろう。

<具体的な材料探索研究例>

新しい学理を巻きこんだ新電子系材料の展開の例として、強相関電子系材料や、イオン性アモルファス酸化物半導体という領域の開拓が紹介された。構造制御に関しては、ボトムアップ型ナノテクノロジーの典型例として自己組織的に組み上がる精密分子集合の話、また融液の結晶成長において常識を破った攪拌法によるタンパク質結晶の作製などが紹介された。

今後の材料探索の方向として、(1)ナノ材料特有の界面の基礎的な問題の解決、(2)応用上の課題として、有機半導体へのキャリア注入で問題となる、有機半導体と無機金属の組み合わせと技術開発、(3)環境対応や省エネルギー、低コストを目指す材料開発においては、白金などの希少元素を置きかえる元素戦略技術の展開、(4)より複雑な現象に対応可能なマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションの方法の深化とプログラム開発強化、(5)データベース整備、無機薄膜系材料の高速パラメータスキャン、高速作製の評価を含む、全行程を効率よくデザイン可能なマテリアル・インフォマティクスの構築、等の重要性が示唆された。

【6】総括と提言

前章で論点を整理した通り、新材料設計・探索の位置づけと現状認識は次のように総括される。

- (1)我が国の科学技術を持続的に発展させ、イノベーションを誘引し、社会・経済を活性化するためには、今後も新規の革新的な材料創製が不可欠である。
- (2)過去15年を振り返る時、①製品や技術のライフサイクルが格段に短命化、②不況下で企業は材料開発への研究投資・人材投資を大幅に縮減、の現実があり、今後、公的機関の材料開発への投資と戦略的な運営が喫緊の課題となる。
- (3)所望の機能を持つ革新的な新規物質をゼロの状態から設計し創製することは、逆問題を解くことに相当し、普遍的な解法は存在しない。過去の成功例から経験的に学習されることは、①深い学術的専門知識に裏打ちされた固有の物質観（勘）を持つ人材の存在がまず絶対的な条件としてあり、②最先端の物質科学、データベース、高演算能力のコンピュータをベースとする計算科学の駆使、③作製パラメータの高速スキャンによる絨毯爆撃的な試料合成・評価の実施、がからんでいることが多い。
- (4)普遍的なアプローチが存在しない材料開発においては、従って、最前線の学術的状況を適確に把握し研ぎ澄まされた物質観と使命感を有するリーダーの選定が最重要となる。また、材料研究においては必要研究期間を予測することが難しい。そのため、成果の出かかったところで、例え外部評価が高い場合でも、制度上の制約から投資が断たれることが多い。これは国家的な損失である。また、国立研や国立大の法人化以後、評価制度の施行・強化によって短期成果主義にシフトする傾向が増し、材料開発にとっては研究環境の悪化という一面も無視できない。ファンディングシステムの改善や見直し、あるいは柔軟な運営が必要である。
- (5)技術の進展が急激にスピードアップされる中で、材料探索のスピードと効率をどう上げていくのかは本質的に重要な問題である。(4)であげた要素以外に2つ指摘しておく。①材料探索には、物理、化学、合成（薄膜・結晶・ナノ構造）、測定評価、理論、計算機シミュレーションの融合が不可欠で、そのためには、異分野間の融合促進の場が必要。欧米に比較すると日本では、この工夫が極めて弱い。②材料探索のスピードアップには、多くの試料を多面的に計測評価する作業が不可欠。先端計測器を1箇所集積し、それらを専任で管理する支援スタッフが必要だが、日本の大学ではこれが徹底的に不足している。米国、EU、韓国、台湾では、これらセンターへの投資を戦略的に行っている。

以上の総括に基づいて、以下に、新材料設計・探索についての提言をまとめる（文責：CRDS）

- (1)研究課題については、①萌芽的研究として自己組織化、自己集合によるボトムアップ型

ナノ構造材料（システム）創製技術、②材料のデバイス応用やナノ構造材料開発において避けて通ることのできない界面の基礎的研究（有機半導体／無機半導体、有機金属／有機半導体を含む）、③環境対応や省エネルギーのニーズに対応した希少元素、規制元素の代替技術（元素戦略）、④新エネルギー技術を目指した触媒機能や電池電極用のナノ構造材料、⑤より複雑な現象のシミュレーションを目指すマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレータの開発、⑥パラメータの高速スキャンによる試料高速合成・評価、データの高速処理、システム自動制御、データ可視化などハイスループットシステムのためのマテリアルインフォマティクスの構築、これらは少なくとも今後挑戦すべきターゲットの一部である。

(2)これらの研究課題を効率的に進めるための研究システムとしては、以下のようなものが必要である。

①研究ステージに対応した柔軟なファンディングシステム。成果の高いものについては投資の継続性が保証されるプログラム運営。それらを公正に評価し政策として正当化し得る評価システムの構築。②異分野融合を促進するための方策、融合のインセンティブを誘発するファンディングシステムの構築、例えば異分野のチームリーダー複数による共同提案を条件とするプロジェクトへの重点投資など。また、異分野の研究者、技術者が物理的空間を共有するオフィスや独立したセンターの設立、及び研究者同士の接触機会を増やす時間のマネジメント。③各種物性が迅速に測定できる先端機器の集積センターの設置と支援人材の充当。現在、走っているナノテク総合支援プロジェクトの拡大強化が必要。

以上の工夫は、国レベルでトップダウン的に実施すべきものが大半ではあるものの、研究開発を実施する国立大学や国立研究所が、法人になることによって獲得したマネジメントの自由度の範囲内でボトムアップ的に実施できるものもある。大学法人、独立行政法人側のマネジメントにも期待したい。

(3)俯瞰的視野を有する真のリーダー選出のしくみをつくる必要がある。研究投資側、実施者側、各部署、各レベルでのリーダーが必要である。

①新しい学理に基づく革新的な新材料探索には、学術的に世界のトップに立ち、かつ、チーム全体に強いインセンティブを与え得るリーダーが選出されるべき。②社会ニーズ対応の材料探索においては、社会が緊急に必要とする技術分野を俯瞰する能力を有し、かつ、物質科学、材料技術の問題に翻訳できるスペシャリスト・ゼネラリスト的リーダーが不可欠である。戦略的な研究開発投資に責任を持つ公的機関には、上記のようなリーダーを選ぶ目利きが必要である。あるいは、高い確率で適任のリーダー人材が選出されるしくみを作ることが新しい時代における重要な責務となる。

Appendix

1. 本ワークショップの開催日時・場所

日時：平成17年11月20日（日） 10時15分～19時30分

会場：芝パークホテル [東京都港区芝公園]

2. 本ワークショップのプログラム、参加者の構成について

表1 本ワークショップのプログラム

オープニング 10:15～10:25	田中一宜（総括コーディネータ）
基調講演「発色に着目した新物質創成」 10:25～10:45	細野秀雄（総括コーディネータ）
I. 材料探索・設計指針 10:45～12:30 進行：細野秀雄（サブコーディネータ（兼））	
「水を分解する光触媒の開発」	堂免一成
「これ何による色？」	渡邊順次
「CsLiB ₆ O ₁₀ 波長変換結晶の発見からタンパク質結晶化技術開発への展開」	森 勇介
「結晶内部の“すきま”を利用する新物質・材料開発」	山中昭司
「材料探索・設計指針—強相関電子材料の例—」	十倉好紀
II. 探索手法 13:30～15:30 進行：川崎雅司（サブコーディネータ）	
「ペプチドアレイによるタンパク質検出のためのバイオチップの開発—デザインし、化学合成したペプチドをセンサー素子材料に応用する研究—」	軒原清史
「新材料探索とハイスループットアプローチ」	竹内一郎
「コンビナトリアル・イニシアチブへのいざない」	川崎雅司
「材料探索—高速物性評価—」	長谷川哲也
「マイクロ・ナノ化学システムと高速スクリーニング技術」	北森武彦
「精密分子集合に基づく材料設計」	藤田 誠
III. 理論・計算・モデル 15:45～17:45 進行：伊藤 聡（サブコーディネータ）	
「計算機マテリアルデザインからみた新材料設計・探索」	赤井久純
「Si/イオン結晶界面の新しいピニング機構の理論的提案」	白石賢二
「理論・計算・モデルの役割—高分子材料—」	土井正男
「コンビナトリアル計算化学手法による新材料設計・探索」	久保百司
「産業界から見た材料シミュレーションの問題と今後の課題」	高田 章
「Data-Driven Materials Design」	岩田修一
IV. 総合討論 18:00～19:30 進行：細野秀雄・田中一宜	

表2 本ワークショップ参加者一覧

(a) 発表者

氏名	所属・役職（いずれもワークショップ開催当時）	
細野秀雄	東京工業大学大学院 総合理工学研究科 材料物理学専攻 教授	
堂免一成	東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 教授	
渡辺順次	東京工業大学大学院 理工学研究科 有機・高分子物質専攻 教授	
十倉好紀	東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授	
森 勇介	大阪大学大学院 工学研究科 電気電子情報工学専攻 助教授	
山中昭司	広島大学大学院 工学研究科 物質化学システム専攻 教授	
川崎雅司	東北大学 金属材料研究所 教授	
北森武彦	東京大学大学院 工学系研究科 応用化学専攻 教授	
竹内一郎	メリーランド大学 助教授	
軒原清史	株式会社ハイペップ研究所 代表取締役	
長谷川哲也	東京大学大学院 理学系研究科 化学専攻 教授	
藤田 誠	東京大学大学院 工学系研究科 応用化学専攻 教授	
伊藤 聡	株式会社東芝 研究開発センター 先端機能材料ラボラトリー 研究主幹	
赤井久純	大阪大学大学院 理学研究科 物理学専攻 教授	
岩田修一	東京大学大学院 工学系研究科・新領域創成科学研究科 環境系人間環境学専攻 教授	
白石賢二	筑波大学 物理学系 助教授	
高田 章	旭硝子株式会社 中央研究所 主幹研究員	
土井正男	東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授	
久保百司	東北大学 未来科学技術共同研究センター 助教授	
コメンテータ	玉尾皓平	理化学研究所 フロンティア研究システム長
	樋渡保秋	金沢大学 理学部 計算科学科 教授
	十倉好紀	東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻 教授
	藤嶋 昭	神奈川科学技術アカデミー 理事長

(b) 発表者以外の参加者

	氏名	所属・役職 (いずれもワークショップ開催当時)
	福村知昭	東北大学 金属材料研究所 講師
	林 克郎	東京工業大学 フロンティア創造共同研究センター 助手
文科省	宮本智之	文部科学省材料開発推進室 学術調査官
JST/CRDS	村井眞二	JST/CRDS ナノテク・材料グループ 上席フェロー
	田中一宜	JST/CRDS ナノテク・材料グループ シニアフェロー
	江口 健	JST/CRDS ナノテク・材料グループ シニアフェロー
	井下 猛	JST/CRDS ナノテク・材料グループ シニアフェロー
	鯉沼秀臣	JST/CRDS ナノテク・材料グループ 特任フェロー
	木村茂行	JST/CRDS ナノテク・材料グループ 特任フェロー
	宮本 宏	JST/CRDS ナノテク・材料グループ 特任フェロー
	雄山泰直	JST/CRDS ナノテク・材料グループ フェロー
	田中秀治	JST/CRDS ナノテク・材料グループ フェロー ／東北大学大学院 工学研究科 ナノメカニクス専攻 助教授
	中山智弘	JST/CRDS ナノテク・材料グループ アソシエイトフェロー
	横田 修	JST/CRDS ナノテク・材料グループ アソシエイトフェロー
	中島啓幾	JST/CRDS 情報通信グループ シニアフェロー
	成瀬雄二郎	JST/CRDS 情報通信グループ シニアフェロー
	伊東義曜	JST/CRDS 情報通信グループ 主任調査員
石田千織	JST/CRDS ナノテク・材料グループ 事務補助員	
JST/ 戦略的創造 事業本部	廣田勝巳	JST 特別プロジェクト推進室 副調査役
	小泉輝武	JST 研究推進部 研究第一課 課長代理
	吉田秀紀	JST 研究企画調整室 副調査役

研究開発戦略センター報告書

**科学技術未来戦略ワークショップ
—新材料設計・探索—**

CRDS-FY2006-WR-01

独立行政法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター

平成18年3月

村井グループ

(ナノテクノロジー・材料分野担当)

〒102-0084 東京都千代田区二番町3番地

電話 03-5214-7483

ファクス 03-5214-7385

<http://crds.jst.go.jp/>

平成18年3月

©2005 JST/CRDS

許可なく複写・複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。
