

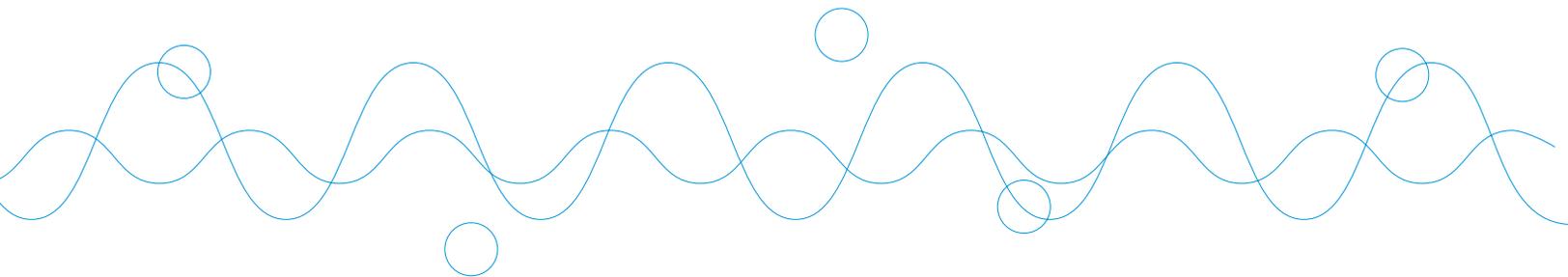
ATTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
CTC GCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAAC
TGA C CTAAC T CTCAGACC

戦略プロジェクト

Dynamic Observationと Modelingの協奏による 「界面現象の実環境動的先端計測」

劣化しない環境・エネルギー材料の実現のために
「見えないものを見る」

0101 000111 0101 00001
001101 0001 0000110
0101 11
0101 000111 0101 00001
001101 0001 0000110
0101 11
00110 11111100 00010101 011



戦略イニシアティブ

国として大々的に推進すべき研究で、社会ビジョンの実現に貢献し、科学技術の促進に寄与する

戦略プログラム

研究分野を設定し、各チームが協調、競争的に研究することによって、その分野を発展させる

戦略プロジェクト

共通目的を設定し、各チームがこれに向かって研究することによって、その分野を発展させると同時に共通の目的を達成する

Executive Summary

米国では2009年1月にオバマ大統領が就任し、グリーン・ニューディール政策が実施されようとしている。世界的にみても、環境・エネルギー技術が今後の産業のコアになることはほぼ確実である。自然エネルギーの利用や省エネ・省資源を推進していくためには、薄く分布したエネルギーを取り扱うことを可能にする劣化しない大面積のデバイスの実現が求められる。

しかし、劣化しない大面積デバイスを実現するためには、製品と劣化現象の間にある巨大な空間的・時間的ギャップを乗り越える必要がある。例えば、大面積のデバイスは、サイズがメートルオーダーであるが、劣化の起点となるのは主に界面で発生する欠陥であり、その大きさは原子・分子のサイズである。また、化学結合が光によって切断されるメカニズムはフェムト秒 (fs; 10⁻¹⁵秒) オーダーで解析を行う必要があるが、劣化しない材料の持つべき寿命は10年オーダーである。このような大面積デバイスにおける空間的・時間的ギャップを乗り越えるためには、人間の想像力や直感力に訴える「動的な映像＝イメージ」を描き出すような先端計測技術の開発を行うことによって、日本が持つ緻密で信頼性の高いモノづくり技術の優位性を高めることが必要である。

そこで、Dynamic Observation と Modeling の協奏による「界面現象の実環境動的先端計測」を提案する。この「界面現象の実環境動的先端計測」とは、再現された製造過程や使用状況において、実環境下の界面におけるナノプロセスをダイナミック（動的）に測定し、劣化というマクロレベルで起きる現象を予測するための新たな計測アプローチである。具体的には、ほぼ完璧な界面制御が可能な製造プロセスを創造することを目的として、計測法とモデリングが協調しながらナノからメソ¹へ、一方でマクロからメソへと、サイズと時間の二種類のギャップを埋める知見と科学的知識を得るための方法である。原子・分子レベルの科学的な知識を集積する計測を可能にし、ナノスケールの現象とマクロスケールの現象との連関をつけて、初めて劣化という実用的な難題解決の方向性を得ることができよう。

¹ 本提案におけるメソまたはメゾ (meso) とは、「中間」という意味の接頭語であり、いわゆるマクロスケールとナノスケールの間の中間的な大きさを指す。

目 次

Executive Summary

1. Dynamic Observation と Modeling の協奏による「界面現象の実環境動的先端計測」 とは	1
2. 界面現象の動的先端計測に投資する意義	4
3. ニーズに対応する課題の例	6
4. 研究開発の推進方法	7
5. 科学技術上の効果	9
6. 社会・経済的效果	10
7. 時間軸に関する考察	11
8. 検討の経緯	12
9. “メタモデル” の実例 — ミルククラウド	16

1. Dynamic Observation と Modeling の協奏による「界面現象の実環境動的先端計測」とは

「界面現象の実環境動的先端計測」とは、実環境下での製造過程や使用状況を再現しつつ、界面におけるナノプロセスをダイナミック（動的）に測定し、劣化というマクロレベルの現象を予測するための新たな計測アプローチである（図1）。具体的には、製造プロセスに関わる動的界面を解析対象とし、「見えないものを見る」という目標を設定する。そして、この目標設定に適合するナノ～メソスケールの先端計測機器群を開発しながら、多粒子集合体（10万個程度まで）を対象とするナノ～メソスケールのシミュレーションにより動的界面現象をモデル化することで動的なイメージングを実現する。一般に、先端計測技術により得られた情報は不確定性が多いものの、界面モデルによるシミュレーションをつきあわせることで、精度・確度の向上と開発の効率化を目指すことができる。このように、計測技術とモデリング手法という2つの異分野の「協奏」を図るアプローチにより、ナノからマクロまでの現象の接続が可能になり、製造プロセスに関わる動的界面における劣化現象の理解、さらには劣化しない大面積環境・エネルギー材料の製造法の確立へとつながることが期待される。

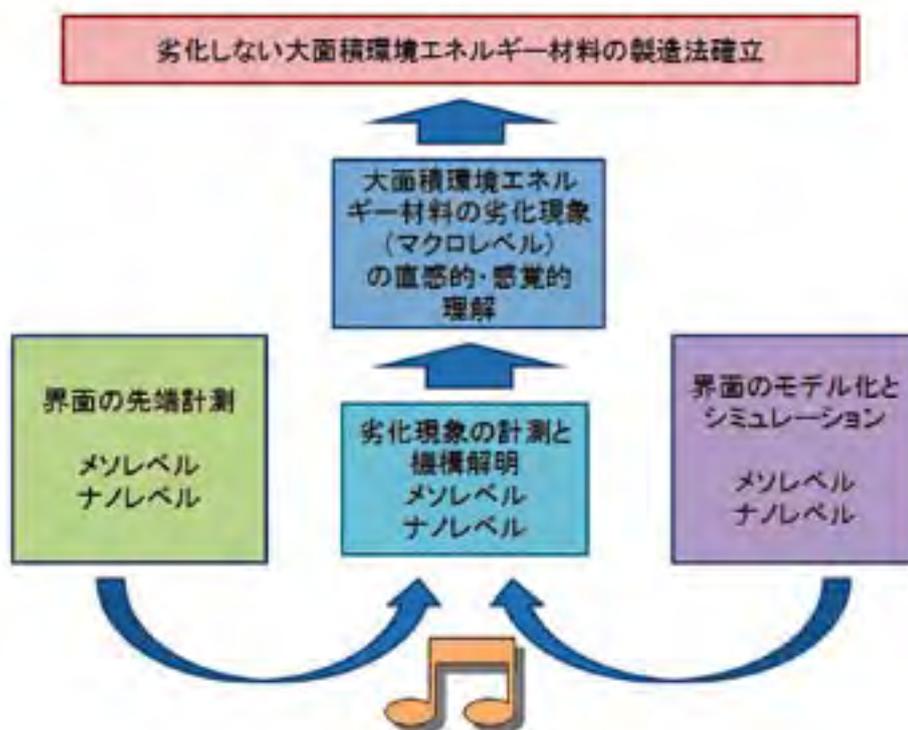


図1 協奏的研究スタイルによる動的界面現象の研究イメージ

「界面現象の実環境動的先端計測」とは

界面現象の動的先端計測に投資する意義

ニーズに対応する課題の例

研究開発の推進方法

科学技術上の効果

社会・経済的效果

時間軸に関する考察

検討の経緯

メタモデルの実例
—ミルクラウン—

世界的にみても、環境・エネルギー問題を解決する技術が今後の産業の中心になることはほぼ確実である。自然エネルギーの利用や省エネ・省資源の推進において、劣化しない大面積デバイスの実現が求められている(コラム1参照)。しかし、劣化の起因となる欠陥形成(ナノ～サブナノレベル)と大面積・長寿命デバイス製品(メートルオーダー)との間には、実に $10^{20} \sim 10^{23}$ にもおよぶ空間的・時間的ギャップの問題が存在する(コラム2参照)。このような空間的・時間的ギャップを乗り越えるためには、人間の想像力や直感力から導かれるブレイクスルーが必要である。そこで、この二つの力に訴える「動的な映像＝イメージ」を描き出す、人間をサポートする先端計測技術が求められる。例えば、原子レベルでかつフェムト秒(fs; 10^{-15} 秒)レベルの現象が対象であったとしても、研究者が十分に認識できるサイズと時間に引き延ばして、動的に表現するようなイメージング技術が活用できれば、見えないはずのナノプロセスが人間に見えるようになり、その時人間の感性は飛躍に拡大されるだろう。

「界面現象の実環境動的先端計測」の推進により、大面積のデバイスと動的界面のナノプロセスとの間にある大きな空間的・時間的ギャップを埋めるために有効な科学的な知見を得ることが期待できる。原子・分子レベルの知識を集積する計測を可能にし、ナノレベルの現象とマクロレベルの現象との連関をつけて初めて、劣化という実用的な難題解決の方向性を得ることができるだろう。

本提案は、最先端の計測技術とモデリング手法という2つの異分野の協奏が重要であることを強調したい。本提案の推進には、広い視野をもった計測技術分野の研究者が、モデリング分野と材料分野の研究者と連携し、異なる3つの分野の研究者から構成される研究体制を敷くことが望ましい。革新的な計測技術開発を加速させるためには、要素技術や機器開発そのものだけでなく、異分野との協奏を図るような新しい計測アプローチが求められている。このような新しい方法論の確立には、国などの公的機関が積極的に関与し、次世代の技術と人材を育成していく必要がある。

コラム1 ナノデバイスから大面積デバイスの時代へ

製造業の歴史をみると、繊維産業から造船産業に至る大型化の時代と真空管からLSIに移行する小型化の時代を経て、さまざまな技術が進歩してきた。現在、米国オバマ大統領のグリーン・ニューディール政策により、環境・エネルギー対策用の技術が世界的な産業の核になることはほぼ確実な情勢である。そのため、自然エネルギーの利用や省エネ・省資源を可能にする製品に注目が集まっている、しかし、このような製品、例えば有機薄膜太陽電池や有機ELディスプレイ、貴金属の微粒子を分散させた触媒などは、「薄く分布したエネルギー」を取り扱う必要があるために、必然的にメートルオーダーの大面積を有するマクロデバイスが要求される。さらに、装置が大型化すれば廃棄の環境負荷も大きく、劣化しないこと（長寿命であること）も求められる。現在、平板型ディスプレイでは大型化が実現されており、ものづくりの技術は再び大型化の時代を迎え、さらに無劣化も必須条件として付け加わることが予想される。

コラム2 先端計測の障害となる空間的・時間的ギャップ

劣化に影響を与える欠陥には様々なスケールのものであるが、一般には、製造過程や使用過程で生じた界面における原子・分子レベルの欠陥が起点となり、時間の経過とともにそれがマクロレベルまで広がっていくものと考えられる。そのため、界面における欠陥を計測するような先端技術が、無劣化・長寿命な大面積製品を製造するキーテクノロジーといえるが、実際は極めて困難であり、これまでまともにチャレンジすることすら行われてこなかった。

まず、大面積製品の劣化現象はどの場所からも起こりうる。したがって劣化現象を発見するためには、大面積をくまなく見張る必要がある。しかし、見張るべき対象はナノレベルもしくはサブナノレベルの欠陥であり、大面積製品がメートルオーダーであった場合、サブナノメートルの欠陥のサイズとは 10^{10} もの違いがあることになる。実際に計測を行う場合には、長さではなく面積が問題になるため、実に 10^{20} ものギャップが存在していることになる。

次に、無劣化・長寿命を目指す環境・エネルギー技術製品は長寿命であることが求められ、使用時間は最長で数十年にも及ぶ。例えば、太陽電池は日中休みなく稼働することが求められるため、一日に一時間程度しか使用されない洗濯機や掃除機などの一般の電化製品と比べると、圧倒的にその実働時間は長い。事実、シリコン系の太陽電池は20年以上の製品寿命を実現している。その一方で、欠陥を形成する現象、例えば光によって化学結合が切断される励起現象等は、フェムト秒レベルで起きる。したがって、実利用と劣化現象の時間としては 10^{23} ものギャップが存在しているといえる。

このように、空間的・時間的に 10^{20} 以上という大きなギャップがある中で、確率的に発生する微視的な劣化現象をとらえて計測することは、通常の連続的な発想だけでは困難であろう。このギャップを乗り越えるためには、人間の想像力や感性の可能性に期待することが必要である。難題の解決のためには、科学的に厳密であることも重要ではあるが、時に楽天的で、ポジティブであることもイノベーション創成における重要な要素なのかもしれない。

2. 界面現象の動的先端計測に投資する意義

2-1 界面はなぜ重要か

界面は、ある材料が他の材料と接している境界であり、特異点、すなわち欠陥点が発生しやすいのが特徴である。自然エネルギーの利用や省エネ・省資源を可能にする製品は、その製造過程において、フィルム化、塗布、積層、分散、乾燥、接合、混合、などの異なった材料を制御するプロセスが伴うため、これらの製品には必然的に界面が存在する。そして、「薄く分布したエネルギー」を取り扱うことが求められており、必然的に大面積な製品を使用せざるを得ない。つまり、大面積デバイスの劣化現象は、必然的な界面における原子・分子レベルの構造に主に支配されている。

特に、環境・エネルギー問題への対応で必要となる多くの材料は、より高い機能が求められる場合が多い。例えば、新型二次電池や、水の気相電気分解、燃料電池などである。それ以外にも、DVDをはじめとする記録膜などのように、薄膜関係の技術の多くは界面の動的な特性に依存している。

したがって、大面積デバイスの機能とその信頼性を決めるカギは「界面」にあるといえる。しかし、界面構造や界面現象は非常に複雑である。科学的な進歩によって、その静的な構造がやっと解明されてきたが、界面におけるダイナミック（動的）な特性に対して、いまだに学問的に十分な理解が進んでいるとはいえない。自然エネルギーを自由に操る環境・エネルギー技術の実現に向けて、界面の機能と劣化につながる諸現象を解明することが必須である（コラム3参照）。

2-2 なぜ実環境計測なのか

界面における劣化現象は、「実環境」、つまり温度・湿度（水分）・応力（衝撃力）・紫外線・放射線・酸素・不純物質など、周囲の環境に大きく依存する。加えて、ナノ構造は本質的に非平衡状態にあるため、熱的に平衡状態に移行して劣化するようなメカニズムもある。そのため、計測対象を入れる試料室を実環境の条件に近づけることが、劣化現象の解明に必要不可欠である。さらには、このような界面における欠陥は、大面積を有する界面の微小領域で確率的に起きるため、劣化の制御において製品サイズが大きな要素となる。そこで、大面積の試料をそのまま短時間で計測できるような技術の開発も求められている。

これまでの多くの計測技術では、原子・分子レベルの観測を行う場合、真空、極低温といった特殊な環境下で測定を行わざるを得ない状況にあった。一方で、例えば、電子顕微鏡では、顕微鏡下で応力を印加することにより材料の変形や破壊をその場で観察することが可能になりつつある。実

環境における計測技術は進歩しつつあり、さらなる発展が望まれる。

2-3 環境・エネルギー技術の革新のために必要不可欠

環境・エネルギー技術の条件に大面積と無劣化の二つを挙げたが、もう一つの条件として、世界中に普及できることが挙げられる。そのため、レアメタルに全面的に依存するような技術では、地球の資源限界に抵触してしまうため、地球上に豊富に存在する資源を利用するような技術が求められる。最も有力な候補は、炭素、水素、酸素を主たる構成元素とし、多彩な化合物設計が可能な有機物である。また、無機物でも、鉄、アルミ、シリコン、カルシウム、ナトリウム、酸素、窒素など、いわゆるユビキタス元素を構成元素とするような無機材料であれば、資源的な問題はない。しかし、一般には、無機系の材料は製造時に多くのエネルギーを消費するため、有機系の材料のほうが製造に要するエネルギーという点で有利である。

有機系の材料は空気による酸化劣化、湿気による劣化、さらには光による劣化を受けやすく、寿命が短いことが最大の問題である。機能劣化を起こさない有機系の材料、あるいは汎用元素を用いた無機材料や有機-無機複合材料から機能部材を開発、製造するためには、まずは、界面において、劣化の基点となる欠陥（特異点）が生成しないような材料開発やその製造プロセスを制御することが必要である。そのような材料とプロセスを開発するためには、本提案の「界面現象の実環境動的先端計測技術」の開発が必要である。

2-4 日本の技術的優位性を保つ

日本のもつ緻密で信頼性の高い大面積対応技術は、世界的にみても優位性が高い。例えば、大型液晶の製造技術は韓国、台湾と並んで世界有数のレベルを保持しており、製造設備についても日本製が世界の市場の主要部分を占めている。また、デジタルカメラの感光部に使用されるCCDやCMOSデバイスは、2,000万画素を越す受光部を持つデバイスが実現されており、日本のデジタル一眼レフカメラが世界市場を独占している。有機ELについては、小型の製品はすでに実用になっており、SONY製の11インチのテレビはまだ試作品的な位置づけではあるが、市場先行型商品である。さらには、大面積を均一に処理するのではなく、特定の場所に機能素子を形成するといった技術も、インクジェット技術を中心に存在している。

モノづくりの基盤となる界面現象の実環境動的先端計測を強化することで、ほぼ完璧に界面制御を可能にするような製造プロセスが創成されるだろう。そして、日本の製造業が環境・エネルギー技術分野において国際的な優位性をさらに高めることができると期待される。

3. ニーズに対応する課題の例

本提案では、様々な界面においてマクロスケールで起きている現象や製造プロセスを対象としているため、研究開発課題は多岐にわたるが、劣化ないし寿命が特に問題となっている以下の技術群が主な対象として考えられる。

- ・ 固体高分子型燃料電池の有機電解質膜
- ・ 固体高分子型燃料電池の触媒活性
- ・ 高温型燃料電池の無機電解質膜と電極
- ・ 超微粒子を大面積に分散した排気ガス浄化触媒の寿命
- ・ 有機EL用の各種高分子膜の寿命
- ・ 大面積有機太陽電池用高分子膜の機能劣化

これらについて、次の「4. 研究開発の推進方法」に示すアプローチに従って、研究開発を進めていくことが必要である。

コラム3 界面研究による劣化克服の例

(1) 超大型液晶テレビ

超大面積液晶テレビの歩留りは高くはないものの、以前に比較すればかなり良くなったといえる。それは、ガラス基板の表面のキズの発生を防止すること、液晶をムラなく配向させる高分子薄膜形成技術や表面処理技術の進歩など、いずれも界面技術の進歩に依存する部分が多い。

(2) 半導体レーザー

林巖雄氏、南日康夫氏らの研究グループは、早くより室温で連続動作可能な、いわゆるGaAs- (Ga・Al) Asダブルヘテロ接合レーザーの研究に従事してきた。そして半導体レーザーの速い劣化が、その実用性に疑問をいだかせる最大の理由であることを見だし、当時手がかりが皆無であった劣化の研究に本格的に取り組んだ。

両氏は、光学顕微鏡、赤外線顕微鏡、走査形電子顕微鏡、X線装置などを駆使して、異種半導体のエピタキシャル結晶成長されたいわゆるヘテロ結晶内の欠陥をつぶさに観察した。そして、速い劣化が従来の半導体素子でしばしば見られた不純物の拡散によるものと異なって、ヘテロ結晶の格子の破壊に基づくものであることを見出した。

4. 研究開発の推進方法

4-1 公開可能なメタモデルと共通のテーマ「見えないものをDynamicに見る」

固体材料の薄膜やナノテクノロジーを研究する科学分野において界面科学の研究が行われている。しかし、現象があまりに複雑であるため、基礎研究は遅れている状況にある。一方で、各企業において実プロセスに関する界面制御研究が行われているが、コア・コンピタンスに関わるような製造の実プロセスを公開し、多くの研究者が取り組むことができるような体制の構築は困難である。そこで、ある象徴的な物理現象を取り上げ、その現象を対象として一斉かつ協奏的に研究に取り組むような新しい研究体制の構築を提案したい。具体的には、興味ある動的界面現象とそれを発現する材料を選定し、「見えないものをdynamicに見る」という目標を設定する。この共通の現象・材料・目標（＝メタモデルと定義）に対し、複数のグループが異なるアプローチにより取り組むことである。

このメタモデルが満たすべき条件は、実プロセス中の界面現象を象徴するようなモデルであることである。そのため、複数のアプローチが可能な適切なモデルを発見し、メタモデルを組織することが、この研究領域の進展に非常に重要である。適切なメタモデルの例として、例えば、大日本印刷と大阪大学の共同研究の対象になった「ミルククラウン」が挙げられる（9章を参照）。このようなメタモデルを設定することにより、基礎研究とモノづくり現場のニーズをつなげ、両者を同時に推進することが可能になるだろう。

4-2 Dynamic Observation と Modelingの協奏

計測技術とモデリング手法という2つの手法の「協奏」を図ることが本提案の重要なポイントである。先端計測によって得られるスペクトル情報や回折情報などを、シミュレーションにより原子座標やダイナミクスを算出することが求められる。得られたシミュレーション結果と計測結果を比較して、不確定性の検証を行い、さらなる精度・確度の向上をそれぞれが目指す。したがって、可能な限り様々な計測手法とシミュレーションを組み合わせたことが望ましく、そのため広い視野をもった先端計測分野の研究者がプログラムを統括することが求められる。そして、モデリング・シミュレーション分野と材料分野の研究者を組織し、異なる3つの分野の研究者から構成される研究チーム体制を敷くことが必須条件である。

科学技術立国の実現には革新的な計測技術が必要である、ということは、共通の認識であるといつてよい。従来の装置開発が高感度化・高分解

能化へと向かっていくのは、計測技術における共通かつ永遠の方向性である。しかし、その絶対的な流れの中で、計測技術開発のさらなる革新を実現するためには、本提案のような新しい計測アプローチへの投資が公的機関によってなされることが求められる。すなわち、既存の機器の高機能化を目指すような研究開発は企業に任せることができるが、必ずしもすぐには製品につながらない新しい計測アプローチの開発は、国などの公的機関によって育成していく必要性があるためである。

4-3 集中すべきポイント

企業から強いニーズがあるにもかかわらず、研究が遅れているメソスケールのプロセスモデリング技術が重要である。メソ～マクロスケールのモデリングでは、純粋な物理・化学理論だけでは説明できない現象が含まれるため、厳密性を求める傾向がある理学系の研究者の参入が少ない。したがって、メソスケールのモデリングを推進する研究領域を設定すると同時に、それらに取り組むためのインセンティブを与えるべきである。

計測については、実環境・実材料に対する応用力を高めることが必須である。そのために、さらなる高感度・高速・高分解能化に取り組むべきことも重要と考えられる。

5. 科学技術上の効果

<計測技術分野>

超高感度、超高精度、超選択性、超高速性、良好な操作性、インパクトのあるイメージングなどは計測技術の共通かつ永遠の課題である。そのため、従来の装置をより高感度・高分解能にするといった差別的な進歩を目指すことは常時行われている。しかし、最先端の技術により「見えないものを見る」ことが実現できたとしても、得られた情報（像）にはノイズの重畳があるといった不確実性からは逃れられず、機器開発を停滞させる原因ともなる。本提案のアプローチにより、理論的に観察値（像）の正しさを検証することができるため、計測機器開発のスピードを加速化することが期待できる。

<モデリング分野>

原子・分子集合系を対象としたモデリング法は、物性解明・材料設計などを対象とした研究として行われ、今も物理学的により厳密な、第一原理計算などに研究者の興味が行っている状況である。そのため、スーパーコンピュータの開発が見込まれる現在、企業からのニーズが高いメソレベルのモデリングに取りくむべき時期がようやく来たものと考えられる。本提案により、メソスケールのモデリングに取り組む研究に対してインセンティブが与えられれば、研究者コミュニティにおいても明確な研究対象として意識され、モデリング技術開発がメソレベル、マクロレベルの方向へ拡がることを期待される。

<材料分野>

界面科学、特に界面の動的な性質が解明される。これまで、単純でシンプルな系を対象とする界面科学が主流であったが、実環境を含む様々な界面への取り組みが増加し、界面科学の全面的進歩に寄与するものと期待される。そして、実環境における界面現象の理解が深まることで、実用材料の製造プロセスが格段に進展することが期待できる。さらには、見えないナノプロセスをイメージとして表現する手法が確立することで、人間の想像力・直観力が飛躍的に拡大し、革新的な材料の開発にもつながることが期待される。

6. 社会・経済的効果

本提案の実施により、環境・エネルギー技術に適合した材料が開発されることで、地球環境の持続可能性を高めることに寄与する。同時に、日本が優位である環境・エネルギー技術をますます優位にし、新興国への技術移転などを通じて、社会的・経済的な価値を生み出すことができる。

研究開発における明確な方向性を異なるセクターに対して提示することで、産学連携の促進を実現する。大面積、無劣化・長寿命というキーワードは、産業界にとって極めて重要な課題であり、大学にとっては無限のチャレンジを必要とする魅力的な課題である。このような共通課題を提示することで、産学が協調しつつ取り組むことが可能になり、真の産学連携が実現されると期待できる。

7. 時間軸に関する考察

メソスケールのシミュレーションの発展を促すために、2年程度のフィージビリティ研究プロジェクトを先行実施し、その後5年間で本プロジェクトを実施することが望ましい。既にいくつかの先行事例が見られることから、そのフィージビリティ研究に必要な時間は2年程度で十分であろうと思われる。また、(独)科学技術振興機構における戦略的創造研究推進事業(CRESTプログラム等)で実施する場合には、フィージビリティ研究に加えて、学会などの場を活用して、募集前に十分なアナウンスを行うことも求められる。

ナノスケールのシミュレーションを行う研究は比較的多いものの、メソスケールの現象のシミュレーションに従事する研究者数は余り増えていない。まして、計測技術との協奏を意識したシミュレーションを実現しようとする研究者はさらに少ない。これらのことが、提案する研究プログラムの律速となりうることを十分に考慮すべきである。

8. 検討の経緯

実環境下の特徴は状況が変化することであり、「どこで何が起きているか（起きたか）」(=3次元の位置情報+時間変化)という4次元的な計測が必須である。これらのニーズに対して、計測技術だけではなく、時間軸+3次元の情報が得られる予測技術を組み合わせる必要性が共通して浮かび上がった。そこで、実環境4D計測チームでは、平成20年度の一年間で、下記のように検討を行った。

8-1 分析・計測ニーズの把握 例題を提示しての検討

現在、特に喫緊で重要とされている分析・計測は、理想的とはいえない複雑な状況の”実環境“である。特に、実環境として重要な、環境分野、材料分野、バイオ・ライフサイエンス分野において、下記に示すようなニーズに対して、必要なアプローチの検討を行った。

環境関連分野

- ・ベクター（マラリア蚊など）の生息域拡大予測と実測
- ・病原性微生物の環境中の分布と時間推移
- ・大規模プランテーションの生態系サービスへの影響の計測と予測

材料分野

- ・膜分離プロセスの機構解明と新規膜材料
- ・動的界面現象（接着、酸化、析出、イオン移動）の機構解明
- ・試料の作製条件下における複数パラメータの同時計測技術
- ・燃料電池の性能劣化の機構の解明

バイオ・ライフサイエンス分野

- ・肺胞の中での微粒子（ディーゼル起源など）の挙動可視化技術
- ・有害化学物質の代謝過程の実計測

8-2 対象周辺領域を含む既存の研究プロジェクトの調査

資料による情報収集、大学・研究機関・企業に対して研究会やヒアリング調査を行い、各分野の動向を把握した。

環境分野

気候変動など限られた環境問題においては、予測技術の進歩がみられた。しかし、他の分野と異なり、見えないものを見るのではなく、見えているものをどうやって取り入れていくかというアプローチが必要である。

材料分野

材料分野では、ターゲットとして界面現象が特に重要である。ラマン分光法など、界面現象に資する計測技術が進展しつつある。予測技術としては、シミュレーション法を使うことが可能になりつつある。

バイオ・ライフサイエンス分野

イメージング技術に関する大規模なプロジェクトが複数動いており（例えば京都大学とキヤノンの共同事業や文部科学省プロジェクトなど）、イメージングそのものに対する技術開発課題がまだまだ求められている。また、“細胞を生きたまま見る”という別方向の強い要求がある。

8-3 対象分野の優先付け

バイオ・ライフサイエンス分野では、予測技術に関する時期が熟していないこと、また、細胞を生きたまま見るという別の要求があり別途検討を要することを考慮し、検討において、この分野への優先順位を一旦下げることとした。

環境と材料の両分野ともに、予測技術を組み合わせていこうとする試みは存在する。しかし、予測に関する理論面が進展しているという点では、環境分野よりも材料分野に優位性がある。よって、まずは、材料分野を取り扱うべきであると結論づけた。

8-4 キーワードの選択：「動的界面現象」と「シミュレーション法」

8-1で列挙した材料分野のニーズ例について、再度検討を行った。

材料分野で計測技術が特に必要とされているのは、界面に関わる分野である。この分野では、未知の要素が多いために新しい特性が発現する可能性が高く、また、環境・エネルギー用材料の多くはイオン、電子、微構造を制御する必要がある。界面、特に、動的界面現象の重要性は高い。しかし、界面の構造は複雑であるためまだ十分な理論的研究が行われていない。一方で、予測技術として寄与可能な手法は、目安として、10万個オーダーの多数の原子からなる集合体を取り扱うことができるシミュレーション技術にほぼ限られる。

以上の状況を踏まえ、「動的界面現象」と「シミュレーション法」をキーワードとして選択した。

8-5 ワークショップにおける検討

平成21年1月8日に、深掘ワークショップ「見えないものを見る— ObservationとModelingとの協奏—」を開催し、「ObservationとModelingを協奏させることによって、これまでの“見える限界を乗り越える”ことが可

能かどうか。現状で、どのような限界が阻害要因となっているか」、ならびに、「可能であるならば、どんなファンディングを行うことがもっとも効果的なのか」について議論を行った（詳細はCRDS-FY2008-WR-20深掘ワークショップ報告書を参照）。

ワークショップにおける討論やその他の調査の結果、以下の項目で様々な先端計測技術の進歩が起きていることがわかった。

(1) 界面計測技術の進歩

a. 時間分解・高感度計測技術

- ・時間分解ラマン分光装置：ピコ秒 (ps; 10^{-12} 秒) からフェムト秒 (fs; 10^{-15} 秒) 単位のラマンシフトの観察が可能になった。塗料のような複雑な微粒子と液体の挙動に対する新しい情報を得ることができる。
- ・CCDの性能向上：時間分解能がマイクロからナノ秒の応答速度で得られるようになった。感度は過去3年間で1,000倍になっている。
- ・増強ラマン技術：多重増強ラマンなどの技術開発がなお進んでおり、空間においても数十万倍の高感度化が期待できる。
- ・X線ピンポイント構造計測：SPring-8の強力な放射光X線により、X線のナノビーム化が実現し、高速で起きる構造変化と機能発現挙動のプロセス解析に使うことが可能になった。
- ・電子顕微鏡を用いた電子線ホログラムの観測：実時間で構造変化に対応した電子状態試料変化が観測可能になりつつあり、電気的・磁気的な機能を利用した材料やデバイスの開発に役立つ。ドーパントの分布解析や有機ELの品質管理などに使用できる。
- ・球面収差補正技術を用いた高角度散乱暗視野法（通称Zコントラスト）：単一原子カラムごとの原子・電子構造分析により、界面などで微量添加原子が果たす機能の解析が可能なレベルに到達しつつある。
- ・イメージング技術の進歩により、目に見えない微小領域や高速現象でも、より直観的に訴えるデータが得られるようになってきている。
- ・表面プラズモン励起を利用した局所ラマン分光により、半導体表面の微量分析が可能になってきている。
- ・高速度カメラによって微小液滴の挙動が撮影可能になったことやイメージング技術の進歩により、より直観的に訴えるデータが得られるようになってきている。

b. 実環境における計測技術の進展

- ・携帯が可能なラマン分光装置によって、製造現場での原材料や製造プロセス中における素材のミクロからマクロへの変化挙動をリアルタイムにスペクトルとしてリアルタイムに測定することも可能になってき

た。

- 環境制御型TEM：試料の使用環境や製造環境に近い環境（ガス中、高温中など）を電子顕微鏡内に作り出し、その環境変化に伴う原子や電子の構造変化を観察・解析を行うことも可能になっている。
- 電子顕微鏡内で応力を印加することによって材料の破壊や変形のその場観察が原子レベルで可能である。
- パルスレーザーを用いたDynamic-TEM：空間分解能が通常のTEMより劣る（2 nm程度）が、マイクロ～ピコ秒（ 10^{-6} ～ 10^{-12} 秒）という時間分解能を実現し、ナノスケールの構造変形が見えるようになってきている。
- 電子顕微鏡の試料作製技術の進展：集束イオンビーム（FIB）加工装置を用いて、試料を観察しながら、任意の位置での微細加工が可能である。

(2) 原子・分子レベルとマクロレベルをつなぐメソスケール・シミュレーション

- SPH法（Smoothed Particle Hydrodynamics）：相互作用を持つ粒子の集合体として流体を表現することにより、非常に複雑なマクロスケールの動的形状変化を表現することができる。
- メソスケール・シミュレータSNAP（Structure of Nano Particles）：ナノ粒子を含む高分子液体が乾燥してナノ粒子を含む膜を形成するプロセスのシミュレーションが可能である。
- 実践的マルチスケール／マルチフィジックス（MS/MP）シミュレーション：量子論をベースとした原子・イオンレベルのシミュレーション法が、実プロセスレベルのサイズまで拡大される可能性が見えてきている。
- 原子の世界のダイナミックなプロセス（基底/励起状態、スピン、エネルギー、時間など）をシミュレーションで表現できるようになってきた。
- 加速実験の妥当性をシミュレーションで補える可能性がある。

9. “メタモデル” の実例 - ミルククラウン

図2に示すものがミルククラウン現象の高速ビデオカメラ画像である。CCD素子やMOS素子を使った高速ビデオカメラは、最近では1マイクロ秒レベルの時間分解も可能となっており、高速現象を撮影することができる。

Milk droplet falling onto milk surface

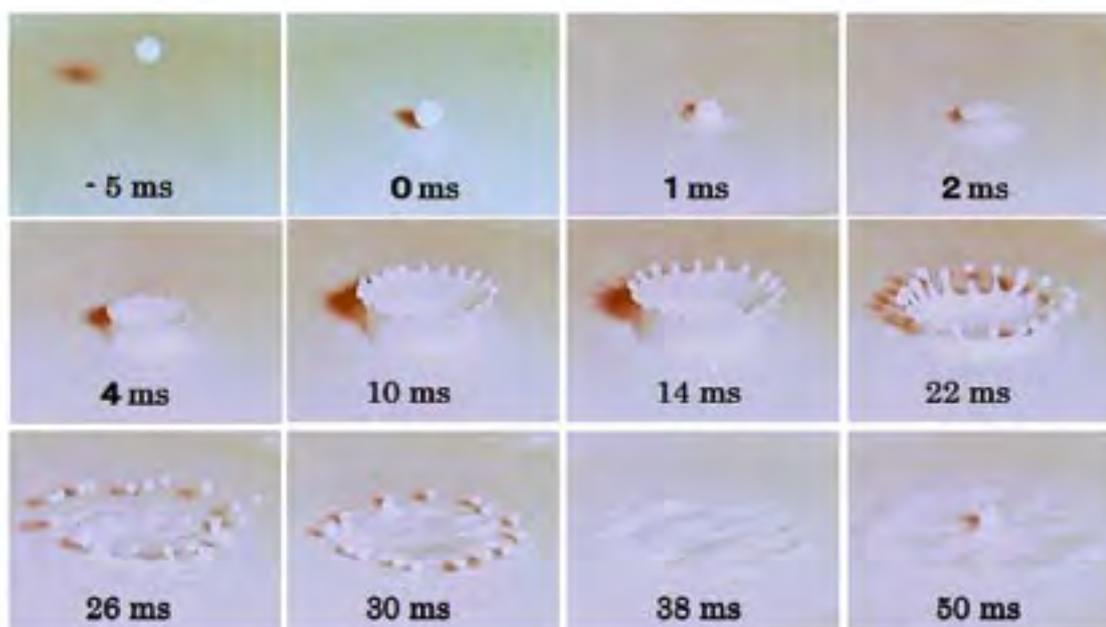
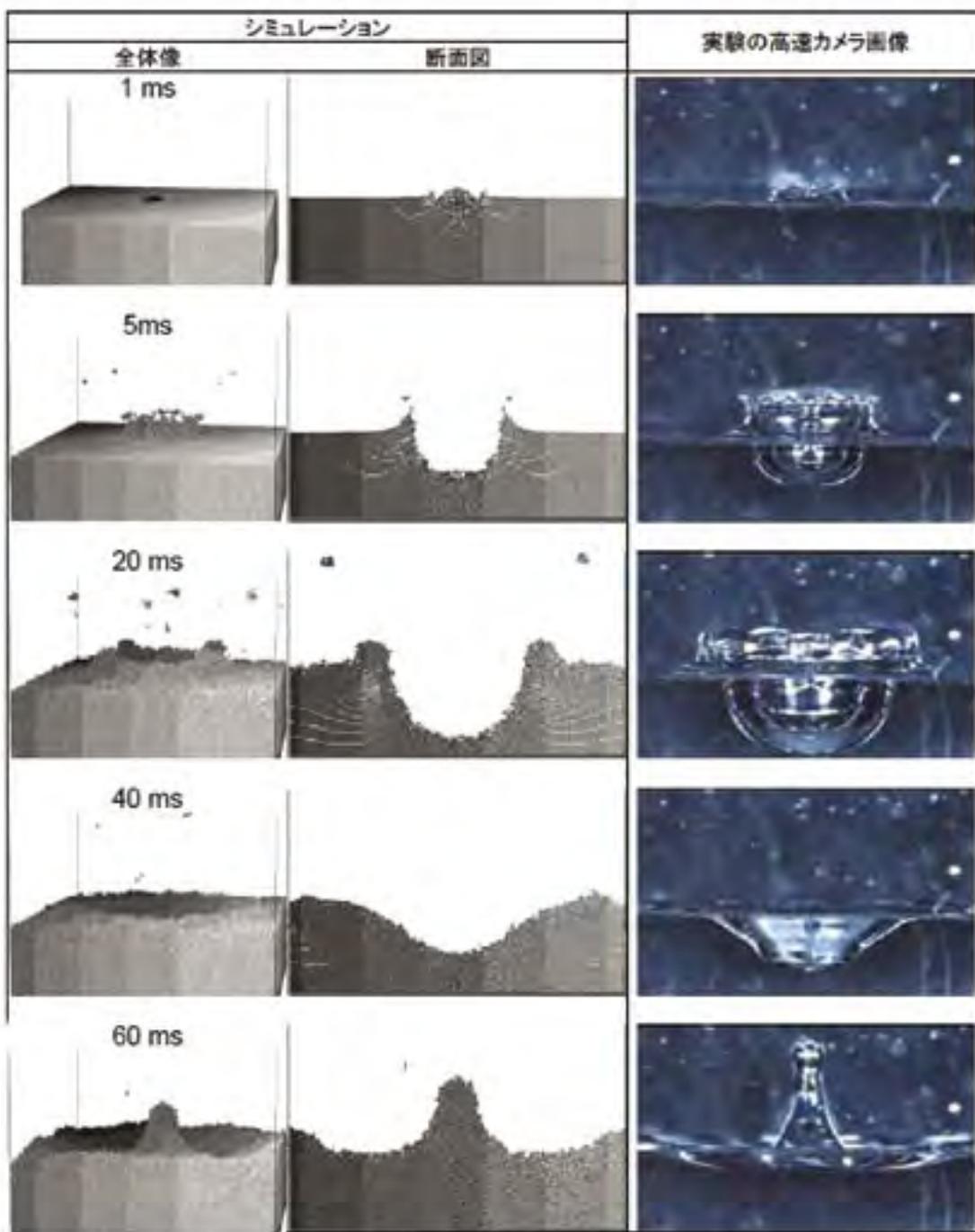


図2 ミルククラウンの観測例
(CRDS-FY2008-WR-20深掘ワークショップ報告書より)

次に、図3にミルククラウン現象の高速ビデオカメラ画像とメソスケールのシミュレーション結果との対比を示す。原子・分子のレベル、すなわち、ナノレベルのものと異なり、メソスケールのシミュレーションはなんらかの中間媒体を用いた手法をとる。いくつかの方法があるが、連続体である物質をいくつかの多面体に分割する方法が主流である。液体などの動的な性質を再現するためには、物質を球の集合体として近似することがしばしば行われる。



液面 30 cm 上から直径 4 ミリの液滴を落とした時のシミュレーションと高速カメラ画像

図 3 SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法によるミルククラウンの観測された形状の再現シミュレーション。グリセリンの約30%水溶液 (粘度3.5 mPa・s) を同一水溶液に滴下した。(大阪大学大学院工学研究科 山口康隆研究室より提供)

「界面現象の実環境動的先端計測」とは

界面現象の動的先端計測に投資する意義

ニーズに対応する課題の例

研究開発の推進方法

科学技術上の効果

社会・経済的効果

時間軸に関する考察

検討の経緯

メタモデルの表例
— ミルククラウン

■実環境4D計測チーム■

安井 至	上席フェロー	(計測技術ユニット)
黒田 孝二	特任フェロー	(計測技術ユニット)
武内 里香	フェロー	(計測技術ユニット)
沼田 真也	フェロー	(臨床医学ユニット)

※ お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

戦略プロジェクト

「Dynamic Observation と Modeling の協奏による
「界面現象の実環境動的先端計測」
報告書

CRDS-FY2008-SP-12

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21年3月

計測技術ユニット

〒102-0084 東京都千代田区二番町3番地

電話 03-5214-7485

ファックス 03-5214-7385

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

©2009 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。
