

ATTAATL A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
CTC GCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAAC
TGA C CTA ACT CTCAGACC

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

～異分野融合による持続可能社会への貢献～

STRATEGIC PROGRAM

Design and Utilization Technology for Controlling
Spaces and Gaps in Advanced Materials

- To assure a sustainable society by fusing multi-disciplinary fields -



独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

研究開発戦略センターでは、国として重点的に推進すべき研究領域や課題を選び、以下3種類いずれかの戦略プロポーザルとして発行している。

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

エグゼクティブサマリー

本戦略プログラムの「空間空隙制御材料の設計利用技術」とは、物質／材料中の微細な空間空隙の形状・寸法・次元および配列などの構造を設計・制御して革新的物質機能を発現させるための、科学的方法論と実現技術の体系であり、人類が直面する地球的規模の課題（グローバル課題）の解決に資する新機能材料や新機能素子の実現を可能とする基盤的技術と位置づけられる。以下、設計・制御された空間空隙を持つ材料を「空間空隙制御材料」と呼ぶ。具体的には、ポーラス（多孔質）材料、層状材料、カゴ状構造物質、ナノチューブなどがある。本戦略プログラムは、空間空隙制御材料に関する先鋭的シーズ研究の開発課題だけでなく、それらを社会的課題解決へ向けた応用研究に自然につながくことを可能とする課題設定方法や、研究体制、ファンディングシステムなどの研究推進方法を提言する。これらは、新しい横断的学術分野の形成をも視野に据えるものである。

本戦略プログラムの「空間空隙」とは、物質を構成する元素とその結合によって構成される元素ネットワーク・トポロジーにおける「すき間」を意味する概念であり、あらゆる寸法レベルで物質が発現する機能を理解し、設計・制御する際の一つの鍵概念と位置づけられる。例えば、ナノレベルの空間空隙は物理的・化学的相互作用を規定することによって機能発現の起源となり、また、マクロレベルの空間空隙は、階層組織間の歪の蓄積を緩衝し、マクロな複合的全体構造を安定化する。

近年、社会的にその開発に対して強い期待が寄せられている物質／材料の諸機能の中でも、光、電気、熱、化学、力学的エネルギーなど各種エネルギーや物質の相互変換あるいは輸送などの諸機能も、構成元素の配置と結合、さらにそれによって定まる電子状態によって決定されることが明らかになってきた。機能物質／材料研究の広大かつ多様な諸相を、「界面」「表面」といった概念から一歩進んで、「空間空隙」を舞台とするアトムレベルの科学原理に翻訳することにより、基礎基盤的学術分野と課題解決型応用技術分野の双方向的コミュニケーションが可能となり、ひいては、異分野融合による新学術分野創出が期待される。

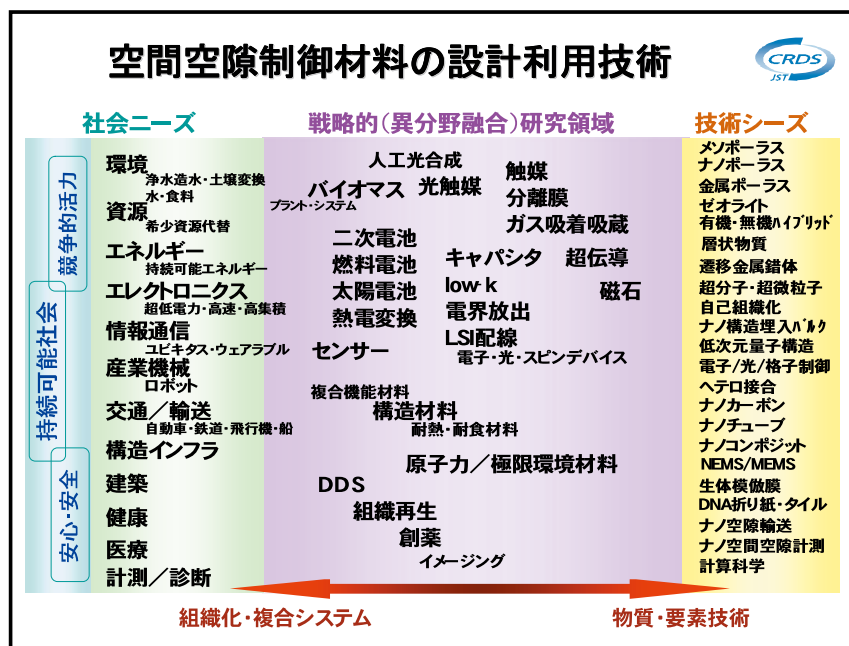
最近になって、物質／材料の設計自由度ならびに制御性が格段に向上し、既存バルク材料では実現困難な新機能を発現する物質が多数創出されている。特に、持続可能社会の実現や生物多様性の確保に不可欠な、環境、資源、エネルギー、バイオなどの諸分野における新材料開発においては、貯蔵、分離、触媒、光電／熱電変換、超伝導、構造材料、生体材料などに関わる新機能の発現や、飛躍的な機能性の向上に世界的な期待が高まっている。それら新物質の研究開発を先導し、推進するための指導原理の一つとして、「微細な空間・空隙を設計・制御することにより、革新的物質機能を生み出す方法論」が、コアとなる概念として抽出できる。これら新物質開発の方法論と具体化するための諸技術は、地球規模の社会的課題解決や、我が国の産業競争力強化に大きく寄与することが期待される（図参照）。

本戦略プログラムの研究開発課題は、大きく次の3課題で構成される。

- A：空間空隙制御材料の設計と合成： 機能先鋭化
- B：空間空隙インプリメンテーション技術： 応用促進
- C：共通基盤技術： 観察・解析技術、原理解明

課題Aは、空間空隙制御材料の新構造新機能の設計と合成に関するシーズ先鋭化研究である。一方、本戦略プログラムで最も特徴的な提言として、課題Bのインプリメンテーション技術がある。たとえば、課題Aで要素技術を研究する際に、将来社会ニーズに応える技術へ適合させていくために必要とされる可能性がある技術群（インプリメンテーション技術）を想定し、それらに必要とされる科学的原理を抽出した上、それらの科学的原理の1つ以上を、あらかじめ要素技術の研究に組み込むか、または、科学的原理との関連性を明示した要素技術の研究提案を奨励する。本戦略プログラムで想定するインプリメンテーション技術の例としては、ナノ構造物質のマクロ化（機能規模拡大）、高強度化、高速合成、低コスト化などの諸技術が挙げられるが、想定される社会ニーズに応じてインプリメンテーション技術自体の新提案も大いに奨励される。課題Cは、ナノメートルスケールの空間空隙における反応や輸送などの諸現象を観察・解析する技術である。各種顕微鏡、回折分析技術などの観測・解析技術および計算化学に基づく解析技術の進展は本戦略プログラムに欠かすことができない。

これら研究開発の実施にあたっては、異分野間の交流による融合の促進やシナジー効果が不可欠である。異なる学問分野間の交流、融合が必要なことはもちろんであるが、それに加えて、往々にして学術志向の基礎研究者と実用化志向の応用研究者の間、あるいはデバイス・システム・プラントなどの各技術者の間などでは志向性が異なり、時には共通言語すら異なるため、グローバル課題の解決へ向けた協調的相互交流に支障をきたす実状がある。そこで、このような溝を有する異分野コミュニティ間で、単なる技術知識共有という視点を超えて問題意識を共有し、イノベーションを誘発するための推進方法として、要素技術探索・先鋭化を主眼とする創造的深堀型基礎研究と、分野横断的に実用技術開発を推進する水平展開型応用研究との連携促進メカニズムを内蔵するようなファンディングシステムや、課題解決型異分野融合連携ネットワーク型拠点の形成などの仕組みも、本戦略プログラムの一部として提言する。



Executive Summary

A strategic proposal “Design and utilization technology for controlling spaces and gaps in advanced materials” consists of a comprehensive package of scientific methodology and implementation technology to explore and develop cutting-edge functional materials and devices. The materials are named “spaces and gaps controlled materials (SGCM)” that include nano-porous, meso-porous, nano-tube, and layered compounds synthesized by self-organization process. This strategic project proposes R&D subjects to fully cultivate the potential of SGCM in terms of basic science and practical development as well. It also proposes an effective network approach for research-enhancing collaborative organization and research funding system as well. The execution of the proposal provides challenges and opportunities to create a new academic field and to achieve solutions for various difficult global issues in the field of environment, natural resources and medical health we are facing, paving the way for the sustainable society.

“Spaces and gaps” refers to free spaces embedded in topological networks composed of constituent atoms and chemical bonds connecting them, which is considered as a key component to understand mechanism for emerging functionalities of materials in various aspect, specifically dimension of the space. For example, nano-sized spaces create material functionalities by controlling physical and chemical interactions among the spaces and surrounding walls. Further, macro-sized spaces relax mechanical stress inside the materials, for instance, to stabilize whole bulk structures.

It has been clarified recently that configuration, chemical bonding and energy states of constituent atoms around the “spaces and gaps” primarily define performance of the materials such as efficiencies of energy conversion between different types of energy including optical, electrical, thermal, chemical and mechanical ones, and mass transport capability. With an extension of scientific concept of the “spaces and gaps” to what includes interface and surface, an academic platform is provided where fusion of multi-disciplinary fields takes place, leading to the creation of a new scientific field. The concept accelerates seamless connection of seed-oriented fundamental research with need-driven development.

Recent progress in design flexibility and controllability in materials science enables to develop new advanced materials, whose functions have been hardly realized by conventional techniques developed for bulk materials. In particular, discovery and development of innovative materials have attracted much attention in the fields of environment, natural resources, energy, chemical separations, catalytic reactions, optoelectronics, superconductivity, construction materials and bio-materials. Enhancement of performance of these materials is also important for “biodiversity”

and “sustainable society”. The generalized concept of the space and gaps works as a guiding principle to achieve above mentioned target. These concepts and procedures for material development, together with necessity for elementary technologies contribute to providing solutions to the global issues, resulting in strengthening international competitiveness of our country.

This strategic program consists mainly of the following three subjects:

A: Design and synthesis of SGCM: Maximization of functionalities

B: Implementation technologies of SGCM: Promotion of applications

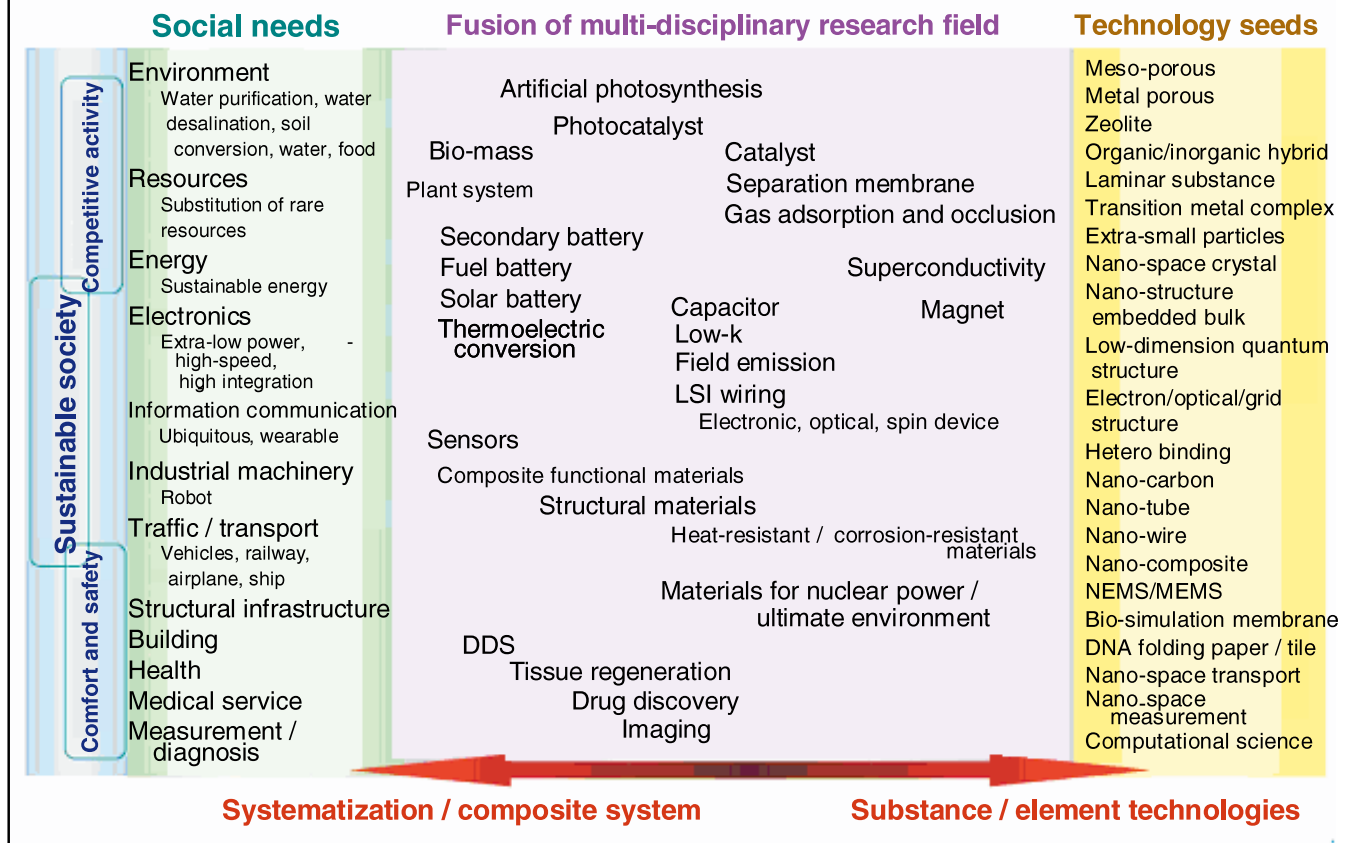
C: Common basic technologies: Measurement, analysis, clarification of scientific mechanism, and computer simulation

Subject A is the seed-oriented research for designing new structures and functionalities, and synthesizing SGCM. On the other hand, Subject B, the most distinct feature of this strategic program, covers a set of implementation technologies, which is necessary for the application of elemental seed technologies in Subject A to practical developments in order to meet the social needs. Examples of Subject B include technologies related to realization of microscopic functionality in macroscopic scale, increase in robustness, mass production with high yield and speed, and cost reduction. This strategic program encourages proposal of an implementation technology itself to meet an individual social need. Subject C refers to common basic technologies for both Subjects A and B, consisting of measurement, analysis of chemical reactions, mass-transport, and other relevant phenomena in the nano-scaled “spaces and gaps”. Various kinds of measurements and analyses such as microscopes, diffraction measurements and computer simulations are inevitably important for this strategic project.

Smooth execution of the project requires synergy of multi-disciplinary fields through communication among those who are involved in different stage of efforts from exploratory research to commercialization over various technical fields. Those involved in basic and applied researches differ in their standpoints and final targets, which sometime causes various difficulties in communication due to the lack of common language. To eliminate these difficulties the strategic project proposes research funding system and research organization with a center of expertise surrounded by networked satellites, which promote fusion spontaneously among fundamental researches covering vertically expanding areas and target-driven developments spreading over horizontally diversified fields.



Design and utilization technology for controlling spaces and gaps in advanced materials



目 次

エグゼクティブサマリー

Executive Summary

1. 提案の内容	1
2. 研究投資する意義	4
3. 具体的な研究開発課題	7
4. 研究開発の推進方法	17
5. 科学技術上の効果	24
6. 社会・経済的効果	26
7. 時間軸に関する考察	28
8. 検討の経緯	29
9. 研究開発課題の詳細	30
10. 国内外の状況	35
専門用語説明（本文中でアンダーラインした用語の説明）	38
参考文献	41

1. 提案の内容

本戦略プログラムの「空間空隙制御材料^{*}・設計利用技術」とは、物質／材料中の空間空隙の形状・寸法・次元および配列などの構造を形成、制御して革新的物質機能を発現させるための、科学的方法論と実現技術の体系であり、持続可能社会の実現など、グローバル課題の解決に資する新機能材料や新機能素子の実現を可能とする基盤的技術と位置づけられる。

本戦略プログラムの「空間空隙」とは、物質を構成する元素とその結合によって構成される元素ネットワーク・トポロジーにおける「すき間」を意味する概念であり、あらゆる寸法レベルで物質が発現する機能を理解し、設計・制御する際の一つの鍵概念と位置づけられる。例えば、ナノレベルの空間空隙は物理的・化学的相互作用を規定することによって機能発現の起源となり、また、マクロレベルの空間空隙は、階層組織間の歪の蓄積を緩和し、マクロな複合的全体構造を安定化する。

近年、社会的にその開発に対して強い期待が寄せられている物質／材料の諸機能の中でも、光、電気、熱、化学、力学的エネルギーなど各種エネルギーや物質の相互変換あるいは輸送などの諸機能も、構成元素の配置と結合、さらにそれによって定まる電子状態によって決定される。機能物質／材料研究の広大かつ多様な諸相を、「界面」「表面」といった概念から歴史的に一步進んだ「空間空隙」を舞台とするアトミックレベルの科学原理に翻訳することにより、基礎学術分野と応用技術分野の双方向的コミュニケーションが可能となり、ひいては、異分野融合による新学術分野創出が期待される。

科学技術基本計画をはじめとするナノテク研究投資の成果として、物質／材料の設計自由度ならびに制御性が格段に向上し、既存バルク材料では実現困難な新機能を発現する物質が多数創出されている。特に、持続可能社会の実現や生物多様性の確保に不可欠な、環境・資源、エネルギー、バイオなどの諸分野における新材料開発においては、貯蔵、分離、触媒、光電／熱電変換、超伝導、構造材料、生体材料などに関わる新機能の発現や、飛躍的な機能性の向上に世界的な期待が高まっている。それら新物質の研究開発を先導し、推進するための指導原理の一つとして、「微細な空間・空隙を設計・制御することにより、革新的物質機能を生み出す方法論」が、コアとなる概念として抽出できる。これら新物質開発の方法論と具体化するための諸技術は、地球規模の社会的課題解決や、我が国の産業競争力強化に大きく寄与することが期待される。

物質／材料の諸機能、すなわち、光、電気・磁気、熱、化学、力学的エネルギーなど各種エネルギーや物質の相互変換・輸送などの諸機能は、構成元素の配置と結合によって作られるすき間、すなわち「空間空隙」における物質と電子との相互作用によって発現する。すなわち、物質／材料の機能の発現と制御は、アトミックないしはナノメートルスケールの「空間空隙」を有する構造の形成とその制御であるとも言える。したがって、空間空隙

*本文中でアンダーラインした用語については、P.38以降の「専門用語説明」に簡単な説明があります。

制御材料の研究においては、その構造と機能の両立的な設計とその合成が目指すべき本丸となる（課題A）。ナノ空間を活用する材料の開発という観点では、ここ20年来の研究で我が国からも重要な成果を出してきた経緯はあるが、課題解決に資する戦略的技術として日本のリードを保つためには、技術と学問のさらなる深化発展が必要不可欠である。したがって、空間空隙物質の新構造新機能の探索的研究を強力に推進する（課題A-1）とともに、物質合成に関する諸科学を総動員した空間空隙構造の形成方法に関する研究を重点的に推進する（課題A-2）。

生命現象は、自己修復、自己複製、階層的自己組織化など、物質合成の本質において、空間空隙制御技術の一つの究極を体現しているといえる。セントラルドグマに象徴されるこの指導原理のエッセンスを、生命を構成する物質を超えて、より一般の物質/材料へ拡張的に適用するための技術と学問基盤の研究は、本戦略プログラムの重要な一部を構成する（課題A-2 分子プログラミング）。

一方、本戦略プログラムで最も特徴的な提言として、課題Aで各要素技術を研究する際に、社会ニーズに応える技術へ適合させていくために必要とされる可能性がある技術群（インプリメンテーション技術）を想定し、それらに必要とされる科学的原理を抽出した上、それらの1つ以上を、あらかじめ要素技術の研究に組み込んでおく研究提案を奨励することが挙げられる。本戦略プログラムで想定するインプリメンテーション技術の例としては、ナノ構造物質のマクロ化（規模拡大）、高強度化、高速合成、低コスト化などの諸技術が挙げられるが、想定される社会ニーズに応じてインプリメンテーション技術自体の新提案も大いに奨励される（課題B）。上記のような研究を進めるにあたり、実際上のネックになるのは、ナノメートルスケールの空間空隙における反応や輸送などの諸現象を観察・解析する技術である。広い分野に共通的に、しかも本質的な寄与を与える各種顕微鏡、回折分析技術などの観測・解析技術の進展は本戦略プログラムに欠くことができない（課題C-1）。同様な意味で、空間空隙構造の機能の設計と作製との理論面からのリンクが重要である。近年、計算化学による第一原理に基づく物性計算は飛躍的な進展を遂げているが、マルチスケールシミュレーションなどの手法を取り入れた物質設計手法の研究を組み込むべきである。（課題C-2）。

以上を総括し、国として投資すべき研究開発課題として以下を提案する。

A：空間空隙制御材料の設計と合成

(A-1) 空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現

(A-2) 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓

- ・自己組織化などビルドアップメカニズムによる空間空隙構造形成技術
- ・トップダウン手法による空間空隙構造形成技術

B：空間空隙インプリメンテーション技術

- ・ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化

C：共通基盤技術

(C-1) 空間空隙制御材料における物理的諸現象（物質輸送・貯蔵及び物質・エネルギー変換など）の観測・解析技術

(C-2) 計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術

上記の技術課題の実施にあたっては、異分野間の交流によるシナジーや融合の促進が不可欠である。しかし、本戦略プログラムが対象とする「空間空隙」をキー概念とする物質・材料に関連する多くの研究コミュニティは、広くは例えば物理学者と化学者、狭くは各専門分野に縦割りのまたは分散して存在していて、その間に深い意識の溝がある。また、同一分野であっても、学術志向の基礎研究者と実用化志向の応用研究者の間、あるいはデバイス・システム・プラントなどの各技術者の間などでも志向性が異なり、時には共通言語すら異なるため、グローバル課題の解決へ向けた協調的相互作用を阻害している実状がある。そこで、このような溝を有する異分野コミュニティ間で、単なる技術知識共有という視点を超えて問題意識を共有し、イノベーションを誘発するための仕組みとして、要素技術探索・先鋭化型基礎研究（深堀型）と戦略的分野組み換え型応用研究（水平展開型）との分野間融合促進メカニズムを内蔵するようなファンディングシステムや、課題解決型異分野融合連携ネットワーク型拠点の形成などの仕組みを本戦略プログラムに組み込んで実施することが必要である。

2. 研究投資する意義

人類が直面する地球規模の課題（グローバル課題）の解決には、科学技術の力が必要不可欠であり、なかでも、近年、世界的に注目が集まっている環境・資源・エネルギー・健康などの諸問題の解決には、物質及びエネルギーの変換や輸送、貯蔵などの諸機能を発現する革新的な物質／材料の研究開発が必要不可欠である。特に一次資源の乏しいわが国では、国際競争力、およびその両輪としての国際貢献力を発揮し、国際社会に確固たる存在感を確立するためには、科学技術基本計画に基づいてこれまでに培ってきたわが国のナノテク・材料分野における研究開発の成果を存分に生かしつつ、課題解決に必要とされる機能物質をオンデマンドに生み出すための戦略的科学技術政策の実施が必要とされている。一方、課題解決型の問題設定に的確に応えるための科学技術研究には、応用的・融合的機動力に基づいて実用化を志向する水平展開型研究と、確固たる学術基盤に則った洞察力、分析力に裏打ちされた創造的深掘型基礎研究の双方を武器として内蔵する、重層的な研究戦略の構築が必要不可欠である。

本戦略プログラムの「空間空隙制御材料・設計利用技術」とは、ポーラス（多孔質）材料や層状物質、ナノチューブや分子自己組織構造などに見られるような物質／材料中の微細な空間空隙の形状・大きさ・次元および配列を制御して形成し、その結果発現する固有の機能を活用する一群の技術体系とその方法論であり、革新的な新材料及び新機能素子の開発を可能とするものである。

本戦略プログラムの、学術的背景という観点でその歴史的な位置づけを概観すると、その思想的源流は、1920年前後にラングミュアらが創始した表面・界面の化学に遡ることができる。すなわち、物質機能の発現を担う本質が、物質の「表面」あるいは「界面」にあることを看破し、その定量的実証研究に端著が付けられた。折りしも、厳密科学の分野では、量子力学の勃興により物質の科学的理解が一新された時代に当たり、その後の固体物理学及び化学の学術体系の進展に支えられた半導体工学や生命科学の興隆を経て、物質機能の本質が、表面・界面という舞台上で生じることが明確に実証された。その後、各種観測・観察・解析技術の高度化もあいまって、近年では、表面・界面の原子構造や結合のネットワーク・トポロジーと機能発現の関係に注目が集まると同時に、その人為的な構造と機能の制御を、新しい科学ないし工学の新分野として創出する時代に立ち至っている。このような流れの中から必然的に、物質の示す諸機能が、表面や界面によって囲まれた空間によって構成される「空間空隙」を相互作用および物質構造の構築の場として捕らえ直す学術的ムーブメントの到来を迎えている。

この15～20年間に渡る内外のナノテク物質／材料分野における研究開発の成果として、ポーラス（多孔質）材料、メソポーラス材料、層状、カゴ状構造物質、ナノチューブ、超分子、生体分子の自己組織化構造などで、特異なナノ構造を特徴とする新物質の形成法や、物質・エネルギーの変換・輸送などに関わる多様な機能を引き出すシーズ技術が多数発掘され、熾烈な国際競争の中で、技術の先鋭化が著しく進展してきた。その中には、わが国がプライオリティーを有する技術も多く生まれ育ってきており、これら技術シーズの蓄積はわが国にとって重要な資産であり、戦略的基盤として育成し活用していくことが強

く望まれる。「空間空隙制御材料」が、持続可能社会の実現に資する物質機能としては、触媒、吸着・吸蔵、選択・分離膜、光合成、太陽電池、二次電池、熱電変換、電子放出、LSI 関連素子、軽量高強度構造材料、創薬、薬送システム、生体材料などが考えられており、環境・エネルギー・健康・情報通信などの21世紀の基幹産業分野で必要とされる材料群を網羅するとともに、それらを支える要素技術に不可欠な材料・デバイスに関する「ものづくり」に関連する産業基盤技術群をも同時に提供する。この関係を模式図に整理したのが図2-1である。



図2-1 空間空隙制御材料の設計利用技術 ミニ俯瞰マップ

科学技術立国を標榜するわが国は、持続可能低炭素化社会実現へ向けて国際社会でイニシアティブを発揮すべき重要なタイミングを迎えている。この期に及び、わが国の科学技術戦略の要として、環境・資源・エネルギー・健康などの分野が注目を集め、それを支える、IT・ナノエレクトロニクス、メカ・ナノバイオなどの先端技術分野とあわせて、革新的な新材料の開発が各分野で切望される状況にある。このような背景から、わが国の科学技術政策として、革新的機能を生み出す物質/材料の設計・合成・評価技術の研究開発を一貫して中長期に渡り戦略的に推進する国家プロジェクトの創設が必要不可欠である。材料開発にまつわる個別研究プロジェクトは過去から現在を通して無数に存在するが、複数の個別プロジェクト間を、求心力を有する指導原理の下、協調的・発展的に統合し、基礎・応用、物理・化学など、立場の異なる研究者間の意識を高いレベルで共有し、人的ネットワーク形成を促進しつつイノベーション創出の基盤形成を目指した国家プロジェクトは見当たらない。「空間空隙設計」による革新機能材料の創出、というコンセプトは、これまでに

研究投資する意義

なく広範囲な物質／材料設計の考え方や方法論を包含することが可能であり、関連する「異分野」間のコミュニケーションの促進が期待され、ひいてはイノベーション創出へ向けた強固な学術基盤の形成に貢献する。

マクロスコピックな寸法の空間空隙を有する構造材料は、生体組織、建築用コンクリート、ポーラス金属など数多く存在し、そうした材料中での空間空隙は、軽量化、衝撃吸収、断熱などの機能を果たしている。また、ポリイミド膜のメソスコピックな空間空隙を利用した逆浸透膜（RO膜）、ゼオライトなどのマイクロな空間空隙を利用した吸着、触媒材料は、すでに実用化されており、さらに高度な機能を実現するために、空間空隙の大型化、ヘテロ原子導入、電荷制御性の多様化、空間の規則配列性の実現、新しい合成法の開発、すなわち、大規模化、高速合成、低コスト化を志向した結晶成長、超分子、微粒子などの自己整合的手法を用いた合成など、また、ホスト／ゲスト・スキームに基づく機能（相互作用）の設計などの研究開発が各分野で進められている。

ここで、本戦略プログラムにおける、生命科学の位置づけについて言及しておきたい。いうまでもなく、生命現象は、階層的自己組織化に象徴される物質合成の本質において、空間空隙制御技術の一つの究極を体現しており、物質／材料の創造的構成技術の構築を目指す人類にとって輝ける憧れの星である。セントラルドグマに象徴されるこの指導原理のエッセンスを、生命を構成するための物質という枠組みを超えて、より一般化された物質／材料へ拡張的に適用するための技術と学問基盤の研究は、本戦略プログラムの本質的に重要な一部を構成する。

一方、研究体制やファンディングの問題に目を移すと、空間空隙制御材料に関連する既存のファンディングは多数存在するが、これらの研究開発ファンドは、対象とする研究範囲が点状であり、また、同様な物質／材料を研究対象としながらも、基礎基盤研究と実用化応用研究がともすれば分離しやすい傾向は否めない。基礎基盤研究者の学術的・原理的な深い知識や洞察が応用研究に活かされず、実用化志向応用研究者の融合促進的機動力が、伝統的基礎分野の新展開に活かされないといった負の連鎖を避け、それらがお互いに相互作用し合い、強め合う方向で連携できる制度設計が緊急の課題となっている。

技術的な個別課題に関しては、既存のプロジェクトでカバーされている部分も存在するが、本戦略プログラムで重視する基本的な考え方は、深掘志向基礎研究者と、実用化志向応用研究者の双方が参画し、お互いのモチベーションやアイデアを交換する「場」を形成し、議論を深める活動を継続的に実施できる制度の構築が必要である、という点にある。例えば、その実現のための方策として、ファンディングの募集時に、基礎研究者には応用技術への展開促進を意識した原理や構造の思考実験や関連性の明確化を課すことが挙げられ、また一方、実用化志向の応用研究者には、応用上必要とされる機能を、その基礎となるシーズ技術に分解した上で、その科学的原理モデルを構築することを課し、プロジェクトにおいてはそれらの題材を双方で議論する場を設けるなどの運用が考えられる。いずれにせよ、基礎と応用の各領域間で、モチベーションや方法論、研究成果に関する情報を共通の言語を介して交換するための仕組みを、ファンディングシステムの中に埋め込んでおく制度設計が重要である。省庁や分野の壁を超えた相互交流の仕組みの構築が必要である。

3. 具体的な研究開発課題

21世紀に必要とされる課題解決型の物質／材料技術開発では、社会的に要求されるニーズを、科学上の技術要素、およびその根本的科学原理にまで分解、翻訳する作業が必要不可欠である。先の図2-1に示した空間空隙制御材料技術の俯瞰図を元に、想定される未来社会ビジョンに関連する社会ニーズから、その実現に必要とされる機能要素を分解抽出し、さらにそれらを、物質技術におけるシーズ的要素へと翻訳する。たとえば、「環境」というキーワードから、「浄化」「改質」「センシング」などの各機能項目が抽出され、それに対する技術要素として、「選択的分離」「吸着・吸蔵」「分解」「触媒」などの機能要素が挙がってくる。原子・分子の選択分離には、対象となる分子がやっと通過できるほどの径を有する細孔による分子フィルタが必要である。また、触媒には、分子が1つ入れるほどの寸法の細孔空間の中で所望の化学反応を誘起する原子及びイオンを配した格子構造を有するゼオライトなどの細孔物質が使われる。これら典型的な空間空隙制御材料である、「ゼオライト」「メソポーラス」「規則性細孔ポリマー」「ナノチューブ」などの多孔性物質／材料群が機能を発現する原理を抽出すると、「細孔や層間の寸法、形状、次元、極性、規則性」による物理的・化学的相互作用の制御や、空間空隙制御材料と物質との相互作用性を象徴する「ホスト／ゲスト」、「鍵と鍵穴」の概念、構造形成の基本原則として「自己組織化」などを抽出することができる。空間空隙制御材料を、社会ニーズあるいは「機能」・用途の観点から整理した表を表3-1に示す。

一方、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」などの要素を挙げるができる。これら、社会ニーズへの適応を志向する技術要素を、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しておくことが重要である。それによって、ある要素技術の学術的深掘基礎研究であっても、その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容易になり、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確立される。

本戦略プログラムの課題を下記に示す。以下に各項目について課題の内容を述べる。

A：空間空隙制御材料の設計と合成

(A-1) 空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現

(A-2) 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓

- ・自己組織化などビルドアップメカニズムによる空間空隙構造形成技術
- ・トップダウン手法による空間空隙構造形成技術

B：空間空隙インプリメンテーション技術

- ・ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化

C：共通基盤技術

(C-1) 空間空隙制御材料における物理的諸現象（物質輸送・貯蔵及び物質・エネルギー変換など）の観測・解析技術

(C-2) 計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術

出口分野	機能	用途		空間空隙制御材料				
持続可能社会・生物多様性	環境・資源・健康	物質変換	触媒	有機無機合成 酸化・還元	ゼオライト メソポーラス			
		物質貯蔵、捕獲	吸着・吸蔵	水素吸蔵 CO2 吸蔵 除湿・乾燥剤 ドラッグ・デリバリーシステム (DDS)	規則性多孔ポリマー(PCP) 有機/無機フレームワーク(MOF), 遷移金属錯体 デンドリマー メソポーラス 層状粘土 規則化層状グラフェン ナノチューブ			
						イオン交換	海水淡水化, イオン濃度調整	ポリイミド系高分子 ゼオライト
						分子認識	創薬, センサー	メソポーラス
		物質輸送	選択分離	フィルタ 希薄ガス濃縮	ゼオライト, 高分子			
安心・安全	エネルギー	エネルギー変換	光電変換	太陽電池	メソポーラス, 有機無機ハイブリッド			
			光合成	人工光合成	メソポーラス			
			電気化学変換	二次電池, 燃料電池, 固体電解質	メソポーラス			
			熱電変換	熱電変換素子	スクッテルダイト, クラスレート, 超格子, LAST			
			摩擦熱変換	免震・制震ダンパーゴム, オイル	潤滑性分子			
国際競争力・公権力	電気・磁気的 material 機能	誘電体 導体, 半導体 磁性体 超伝導	誘電体 (Low-k), 光捕集アンテナ 電界電子放出 スピン素子	メソポーラス, ポーラス, 有機無機ハイブリッド 磁性ゼオライト C12A7				
					構造材料機能	低密度・高剛性固体	軽量, 高強度, 高耐久材料	発泡性ポーラス金属 コンポジット

表 3-1 社会ニーズと空間空隙制御材料

本戦略プログラムの課題Aは、要素技術研究におけるシーズの深化発展のための課題である。(A-1)は空間空隙物質の機能と構造の両立的設計、(A-2)は空間空隙制御材料の合成、成長技術のポートフォリオ強化を主眼とする。これらの要素技術研究には、その基本的なアイデアの中に、次のニーズ適応課題Bとの関連性が明示されることを原則とする。課題Bは、実用化の際にアプリケーションによっては必要とされることが想定される技術要素であり、ここでは一例を挙げているが、この要素は想定される社会ニーズに応じて新たに提案されるものを含めることができる。これを「空間空隙インプリメンテーション技術」とした。空間空隙インプリメンテーション技術の要素課題も、本質となる科学原理が抽出されていることを原則とする。社会実装に適応するために必要とされる課題は本質的に自然科学のみで解決できない場合も多く、経済学、社会学、人文学的な要素を含む場合もあるが、少なくとも、自然科学的な側面からの原理抽出は行われるべきである。本戦略プログラムでは専ら技術的な側面を扱うが、環境やエネルギーなどに直接関係する地球規模課題に対しては、科学以外の分野との関連性が議論されるきっかけとすることもできよう。課題Cは研究開発を支える観察技術や解析技術を提供する基盤的技術群である。(C-1)は各種顕微鏡、回折解析技術など、空間空隙構造と、その中で起こる反応、輸送などの諸現象の観測・解析技術を想定し、(C-2)は、計算科学に基づいた、空間空隙構造の構築シミュレーションや、電子状態解析、さらには、反応・輸送などに関わる動力学解析などの計算機支援による解析技術を想定している。

以下では、それぞれの課題について詳しく述べ、さらに9章で補足を加える。

A：空間空隙制御材料の設計と合成

(A-1) 空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現

本課題は、プログラム全体の中でも最も先端的な独創技術開発を想定している。すなわち、空間空隙構造と、そこで生じる相互作用を両立的に設計し、設計した物質を作製する手法を見出す研究である。物質設計の基本原則に基づいて理論的に設計し、実験的に作製し、その機能を検証する。設計には、計算化学の支援を強く意識しているが、前提としているわけではなく、物理学、化学など諸科学の根本原則に基づいた検証可能な推論を広く意味している。

このような方向性の研究として、これまでに行われた研究として下記のような例を挙げることが出来る。

ゼオライト、あるいはメソポーラス構造の触媒・選択分離・吸着吸蔵機能、規則性メソポーラスによる光捕集機能(人工光合成)、ゼオライトを骨格とした磁性制御物質の合成、超分子あるいは遷移金属錯体などによる自己組織化細孔性ポリマー、有機/無機ハイブリッド、金属/有機分子フレームワークなど。

ここで、ゼオライトやメソポーラスは、数ナノメートルのカゴやチューブ様の細孔構造を有する骨格を有し、その空間空隙中の化学反応中心での触媒反応や、吸着吸蔵、細孔による分子フィルタなどの機能が研究されている。ゼオライトの代表的な骨格構造である酸化珪素の珪素原子をアルミニウムに置換したアルミノシリケート構造を基本骨格とする単結晶であり、メソポーラスは数ナノメートル径のミセルを鋳型としてシリカを縮合したメ

ソポーラスシリカ、メソポーラスシリカを鋳型としたメソポーラスカーボンなどの展開がある。シリカは基本的に非晶質で規則性がなく、この点が周期結晶性を有するゼオライトなどとの相違点になるが、近年、規則性の有機分子とシリカのハイブリッド骨格などの形成例が報告されており、その構造制御性に関する研究には進展が見られる。無機元素を用いた細孔構造には、ゼオライトをはじめ、セラミックス、セメント系物質群の広大なバリエーションがあり、有機物とのハイブリッドも含め、これまで発見されてこなかった新構造が見出される可能性が大きい。細孔構造を形成する手法として、遷移金属錯体をビルディングブロックとして、有機合成の手法を用いて形成される配位結合ネットワークにより3次元的な細孔構造を構築する研究からも、多様な機能を発現する細孔立体構造が生み出されつつある。これらの要素技術から、共通の科学原理の基礎を抽出し、あわせて、社会ニーズ適応型課題Bのエッセンスとの関連性を明確化したうえで、融合的課題設定の道筋が見出されるケースも出てこよう。

(A-2) 空間空隙構造を有する物質の合成技術開拓

- ・自己組織化などビルドアップメカニズムによる空間空隙構造形成技術
- ・トップダウン手法による空間空隙構造形成技術

構造形成法は、本戦略プログラムの根幹を成す基本要素技術である。機能発現が原理的には期待されても、研究初期には、構造形成とそのキャラクター化が調査される段階を経る。この合成法、形成法のバリエーションをデータベースとしていかに多様に取り揃えるかは、わが国の物質/材料研究開発のポートフォリオとしての重要性を有する。広範囲の空間空隙制御材料の形成技術を調査した結果の一部を整理した表を表3-2に示す。

手法	原理・考え方		作製方法	機能物質/材料
ビルドアップ法	結晶成長	原子・イオンの組織化	気相・液相・固相成長、焼結、堆積、析出、縮合重合反応、有機化学合成、高分子合成	クラスレート、スクッテルダイト、ナノチューブ、規則化グラフェン、ゼオライト、有機/無機ハイブリッド、組織化超分子金属錯体、多孔性規則化ポリマー
	化学合成	結合と解離の制御		
			錯体、超分子などの組織化、	
分子プログラミング	非周期配列設計	DNAなどの分子選択的結合	分子生物学的方法 DNA増幅	DNAタイル、リボン、DNA配列金属
エッチング法	化学エッチング 物理エッチング	物質「除去」による空隙構造形成	陽極酸化、溶解、ガス・プラズマエッチング、選択エッチング、発泡(多孔性金属)	ポーラスシリコン、ポーラスアルミナ、ポーラス金属、
テンプレート	ビルドアップまたはエッチングの位置制御	鋳型、マスクによる選択性	ミセル凝集、分子鋳型、メソポーラス鋳型、選択マスク	メソポーラスシリカ、メソポーラスカーボン、ゼオライト

表3-2 空間空隙制御材料の形成技術

以下に、課題A-1およびA-2に関する、具体的研究課題を例示する。これらは、既存研究の調査の中から抽出したものであるから、本戦略プログラムの実施時においては、既存の枠組みを突破する発想を持ったテーマ設定の提案が強く望まれる。

空間空隙制御材料の設計と合成の新展開

- ① 空間空隙形状・次元・寸法の制御による機能発現 [ガス貯蔵、ガス選択透過 (分子ふるい)、分子の反応場 (結晶フラスコ)、軽量化、低屈折率化、など]
- ② 空間空隙を伝送路とする高速イオン伝導
- ③ ホスト/ゲスト型空間空隙構造における、ゲストの多様化による機能発現 (アルカリ金属イオンによる強磁性、電気伝導、電子放出、ゼーベック係数増大、超酸素ラジカルイオンないしハイドライトイオン、電子をゲストとした酸化・還元触媒機能、ゲストイオンの移動による高速プロトン、酸素イオン伝導など)
- ④ ホスト/ゲスト型空間空隙構造における、フレームワーク組成の多様化および化学修飾による機能の発現 (親水性/疎水性の制御、触媒活性点の添加、電気伝導の付与、エネルギー伝達、エネルギー捕集など)
- ⑤ 空間空隙の量子効果による機能発現 (トンネル効果、超伝導、超イオン伝導、擬似高温効果、擬似低温効果、擬似高压効果など)
- ⑥ 空間空隙中のイオン・原子による格子振動制御 (低熱伝導材料、熱電変換材料)
- ⑦ 分子プログラミングによる空間空隙制御 (準結晶、DNAリボンなど)

新合成法、構造形成法の探求

- ① 自己組織化プロセスによる空間空隙化合物の合成
新形状・新材料メソポーラス、遷移金属錯体、超分子、Porous Coordination Polymer (PCP)、Metal Organic Framework (MOF) など
- ② 結晶成長技術 [ビルトインナノ構造物質: ゼオライト、クラスレート、アパタイト、 $12\text{CaO} / 7\text{Al}_2\text{O}_3$ (C 1 2 A 7) などナノポーラス結晶、層状化合物、ナノチューブ]
- ③ エッチング法 (陽極酸化ポーラスアルミナ、ポーラスシリコン)
- ④ 分子プログラミング (DNAタイル、DNAリボン、人工酵素、人工たんぱく質)
- ⑤ その他の物理的・化学的手法 (発泡性ポーラス金属、コンクリート)

表3-3に、課題Aについての具体的な研究開発課題例を、短中期課題と中長期課題に整理してまとめて示す。

空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現		(短中期課題)	(中長期課題)
課題A (技術シーズ創出型)	①空間空隙形状の制御による機能発現	分子クラスタの反応場 (結晶クラスコガス貯蔵 ガス選択透過 (分子ふるい) など 軽量化 低屈折率化	分子クラスタ、人工酵素、人工タンパク質の反応場 ガス高密度貯蔵 低濃度不純物ガスの吸着・除去
	②ホスト/ゲストスキームにおけるゲストの多様化による機能発現	アルカリ金属イオンによる強磁性電気伝導および電子放出 O ₂ 、H ⁺ 、電子をゲストとした酸化・還元触媒機能 プロトン、酸素イオン伝導など 空間空隙のイオン・原子による格子振動散乱	強磁性転移温度および超伝導転移温度の高温化 異方的イオン伝導 高速金属イオン (Li イオン、Na イオン、Ag イオン) 伝導 ゼーベック係数増加と高効率熱電変換
	③フレームワーク組成の多様化および化学修飾による機能の発現	親水性/疎水性の制御 触媒活性点の添加 電気伝導の付与 イオン伝導およびエネルギー伝達の付与 エネルギー捕集	親水性/疎水性制御による水分子透過性の向上 触媒活性点の選択的添加 電伝導付与による磁気転移点の高温化 高速イオン伝導および高効率エネルギー伝達 低密度エネルギーの捕集
	④フレームワークとセルの相互作用による機能の発現	フォノン散乱制御 (低熱伝導度)、イオン伝導、選択ガス吸収・透過、高輝度蛍光体	エネルギー集光太陽電池システム、センシング機能付加 DDS、革新的熱電変換材料
	⑤量子効果に基づく機能の発現	超伝導、強磁性、低仕事関数、トンネル効果	超イオン伝導、高圧効果 (高密度ガス貯蔵)、高温・低温効果 (高速イオン伝導、高速化学反応)
空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓			
①結晶、エピタキシャル成長技術	ゼオライトなど空間空隙化合物の育成 クラスレート スクッテルダイト アパタイト C 1 2 A 7 の合成 各種下地基板へのエピタキシャル成長 ヘテロ成長 アモルファス状態の電子構造の解明	新構造ゼオライトの合成 超微粒子、ヘテロ原子導入 クラスレート C 1 2 A 7 アパタイトの合成制御 準結晶育成 融液状態の解明 表面・界面状態の解明	
②自己組織化による複合細孔構造の合成	超分子、遷移金属錯体の自己組織化構造の探索 Porous Coordination Polymer (PCP) Metal Organic Framework (MOF) メソポーラス構造作成手法の探索	メソポーラス構造作成手法の高度化 複合細孔構造の制御、実用技術探査 新規単位構造分子の探索	
③分子プログラミング技術	DNA タイル、DNA リボン、人工金属原子配列、人工タンパク質の合成	DNA などのゲノム・スキームによる空間空隙制御材料の設計と合成	
④トップダウン手法によるナノ・メソスコピック空間空隙構造の作成技術	溶解凝縮法 (発泡金属など) ゾルゲル法 (ポーラスガラスなど) 架橋高分子重合法 (RO膜など) ガス発泡 (マクロポーラスメタル、発泡コンクリート) 電極反応 (アルマイト) 化学エッチング (ポーラスアルミ) リソグラフィー (フォトニック結晶、ファイバーなど)	溶解凝縮法 (発泡金属など) ゾルゲル法 架橋高分子重合法 (プロトン伝導膜など) 微粒子の集合 電極反応 (アルマイト) 化学エッチング (ポーラスシリコン) リソグラフィー (フォトニック結晶など)	

表 3-3 「空間空隙制御材料の設計利用技術」の研究開発課題
A 空間空隙制御材料の設計と合成 (技術シーズ創出型)

B：空間空隙インプリメンテーション技術

- ・ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化など、ニーズ志向課題の解決を見据えたシーズ技術の改変、組み換え、複合技術

空間空隙インプリメンテーション技術とは、空間空隙制御材料を、具体的なアプリケーションに対して実用化する際に要求される技術課題の解決を見据えて、シーズ要素技術の改変、組み替え、複合により生み出される新たなシーズ技術を指す。ニーズ適応型課題として、ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成などを例示しているが、アプリケーションに応じた重要課題が提示されてよい。

空間空隙制御材料のナノ空間における特異な物性は、それ自体ですばらしい可能性を有していても、エネルギーや資源分野への応用では特に、大規模化が要求されて実用化への道が阻まれる場合がある。例えば、ナノメートル空間で生じる高効率な光・電気エネルギー変換現象を研究対象とする場合、最終的な出口イメージとしてエネルギー応用を考えた場合には、マクロスコピックな規模の変換エネルギーの絶対量が必要とされる。このような課題に対応するためには、ナノ空間を多数配列させてマクロなレベルまでサイズを拡大したり、ナノ空間を規則化してエネルギー密度を高めたり、変換された電気エネルギーを低損失で電極まで伝送する構造を組織化するなどのスキームを必要に応じて組み込む必要が出てくる。これらニーズ側から要求される要素技術は、アプリケーションによって多様な観点を持つが、これに柔軟に応えるのもまたシーズ技術において他にない。すなわち、複数の異なる発想に基づくシーズ技術を科学的に戦略的に複合し、あらたな技術を生み出すことが求められる。ニーズドリブン型のシーズ組み換え研究ともいべきフェーズにある一連のシーズ研究を、課題Bで扱う。また、課題Aの各研究課題においても、課題Bで扱うような技術の組み換えに備えた変換インターフェースが科学の言葉で明示されている必要がある。

課題Aは先鋭化シーズ技術、課題Bは課題解決志向シーズ技術で、結局両者ともシーズ技術であるが、課題解決を見据えた基盤的技術の研究開発を中長期にわたって育成するには、両者がバランスよく必要である。運用上、課題Aと課題Bは別々の領域として分離独立的に運用されるべきではなく、一体的に運用されるべきである。また、課題Bとして、実用技術の単なる改良型研究は含まないが、科学に基づく指導原理と実証的方法論を備えていればその限りではない。

なお、課題Bで想定するニーズ適応課題の抽出には、空間空隙制御材料が応用されることが想定される下記に例示される分野における技術的・社会的・経済的ニーズから、シーズ技術開発に要求される共通的な概念を抽出する。

- ① エネルギー分野：太陽電池（色素増感、微結晶薄膜）、燃料電池用プロトン伝導体および酸化触媒材料、二次電池電極材料、熱電変換材料、電力貯蔵用超伝導コイル材料、直流送電用高温超伝導線材、人工光合成など
- ② 情報通信分野：低誘電率（Low-k）材料、電子放出材料、有機エレクトロニクス、ナノカーボン系材料、フォトニッククリスタル、メタマテリアル
- ③ 交通輸送分野：電気自動車用蓄電池（Li電池、アニオン電池、多価カチオン電池）、

燃料電池、排ガスPM除去触媒、無反射ガラス、軽量ポーラス金属、超伝導リニアモーター用超伝導コイルなど

- ④ 医療・健康分野：薬送達システム、NMR-CT、人工骨、人工歯根など
- ⑤ 構造・インフラ分野：高強度軽量コンクリート、金属系構造材、免震・制震材料、無反射ガラス、軽量ガラス

表3-4に、課題Bについての具体的な研究開発課題例を、短中期課題と中長期課題に整理してまとめて示す。

課題B (グローバル社会ニーズとインプリメンテーション技術)	空間空隙構造の物質・エネルギーの輸送・変換・貯蔵など諸機能の規模拡大とその利用技術	(短中期課題)	(中長期課題)
	① エネルギー分野： 太陽エネルギー発電 EV車および電力貯蔵用電池 EV車用および定置型燃料電池 電力貯蔵システム 新型発電システム 送電システム	化合物半導体太陽電池、色素太陽電池、タンデム型太陽電池(エネルギー密度・効率及び発電量の拡大、低コスト化) プロトン、酸素イオン、金属イオン伝導体、活性酸素イオンラジカル包接化合物、Pt担持ポーラスシリカ(カチオン二次電池、固体高分子型燃料電池) 空間空隙超伝導化合物、超伝導コイル(超伝導電力貯蔵) 排熱利用熱電システム(高効率熱電変換材料) スマートグリッド(二次電池、超伝導ケーブル、電力制御素子)	機能インテグレーション型光電池システム 太陽光/熱複合発電システム 多価イオン伝導体、空間空隙酸化触媒化合物(多価イオン二次電池、SOFC) 電力用熱電システム 高温超伝導化合物、高臨界電流超伝導ケーブル(超伝導送電)
② 情報通信、エレクトロニクス分野： 光通信 エレクトロニクス	フォトニックファイバー(100Gbps/チャンネル級システム) Low-k材料(高集積・高速CMOS)	フォトニック結晶(1Tbps/チャンネル級伝送システム) クローンブロンケット素子、単電子トランジスタ(ポストCMOS)	
③ 交通輸送分野： 自動車 鉄道	二次電池(プラグインハイブリッド自動車)酸化触媒(低公害ジーゼルエンジン車) 軽量金属、無反射ガラス(高燃費・安全自動車)	多価カチオン電池、SOFC(EV車) 高磁場発生超伝導コイル(超伝導リニアモーター)	
④ 医療・創薬・健康分野： 創薬・送薬・医療材料 診断医療機器	選択イオン・超分子包接機能(DDS) ポーラス金属、ポーラスシリカ、アパタイト(人工骨、人工歯根) 超伝導コイル、高感度X線センサー(NMR-CT, ポジトロンCT、赤外線CT)	選択イオン・超分子包接機能、高感度センシング機能(DDS)	
⑤ 構造・インフラ分野： 建築物	軽量コンクリート、免震材料(免震建築)	耐震材料(耐震建築) 炭素無消費住宅	

表3-4 「空間空隙制御材料の設計利用技術」の研究開発課題B 空間空隙インプリメンテーション技術(グローバル社会ニーズ)

C：共通基盤技術

(C-1) 空間空隙制御材料における物理的諸現象(物質輸送・貯蔵及び物質・エネルギー変換など)の観測・解析技術

空間空隙制御材料の構造や、現象のダイナミクスを科学的に理解する鍵は、計測技術であるといえる。これらは共通基盤技術として発展されたものを、空間空隙の観測に適合させる工夫が必要であり、本戦略プログラムの共通基盤的要素を成す。

- ① 透過型電子顕微鏡、電界電子放出顕微鏡、電子線回折、中性子回折、X線回折およびリードベルグ解析、MEM解析による電子状態の観察
- ② 原子分解能STM, AFMによる空間空隙化合物の表面・界面の観察

(C-2) 計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術

計算化学的手法を用いた物質の性質の予測において、用いる元素の数が1000以下であれば、現実的にかかなりの精度で第一原理計算が可能になってきている。一方、物質科学に対する社会的な期待は、環境・エネルギー分野など、地球規模の課題解決に資する領域にまで広く深くなっており、そのような期待に応える実際的な物質系では、1000よりも数多くの原子を必要とするのが一般的である。そのような大きなサイズの系に対して、原子構造のみならず、機能を生み出す相互作用まで考慮に入れようとした場合には、スケールの階層に応じた近似計算モデル(マルチスケール・モデリング)を導入して、計算と実験の双方を比較考量の上、状況に応じて適した理論モデルを見出し、それらをデータベース化してあらためて「機能設計」に活用する、という手法を採るのが有効である。逆に考えると、未だに発見されていない画期的な物質機能や、その実現方法を見出していくためには、科学的原理に基づいた洞察と、経験的に得られたデータ(偶然による発見を含む)、それに、計算科学によるモデル計算の結果を総合して、創造的な実験的研究と分析的な理論的研究を交互に積み上げることが、今後とも極めて重要な研究手法であり、機能物質開発の本道ともいえる研究開発モデルといえる。積み上げが有効な科学技術領域では、積み上げるピースは一つ一つが問題解決への武器であり、その数が多く、多様であるほど、課題解決システムとしての有効性は高まる。一方、計算科学的な予測から、社会的に必要とされる、あるいは、これまでに発見されたことのない、画期的な物質機能を(経験からの類推を経ずに)純理論的に予測し、一気に実験的に検証してみせる、というスタイルも、先鋭的かつ野心的な研究者によって、挑戦されるべき余地を残しておくべきである。

計算化学シミュレーションによる空間空隙制御材料の設計・解析支援

- ① 平均場埋め込み量子クラスターモデル、周期モデル、ないし新しい境界条件を用いた第一原理計算による空間空隙構造および電子構造のシミュレーション、分子動力学法による合成・成長シミュレーション
- ② 空間空隙構造ユニット機能のモデルリングとそれら物理的・化学的相互作用のインテグレーションモデル(マルチスケール・シミュレーション)

表3-5に、課題Cについての具体的な研究開発課題例を、短中期課題と中長期課題に整理してまとめて示す。

課題C (共通基盤技術)	空間空隙制御材料における物理的諸現象の観測・解析技術	(短中期課題)	(中長期課題)
	① ゲスト原子、イオンの包接構造、反応点の電子状態の観察	電子線回折、X線回折およびリードベルグ解析、MEM解析による空間空隙ゲストイオン、原子、およびホスト構造、電子状態の観察	電界電子放出顕微鏡、中性子回折、X線回折MEM解析による空間空隙ゲストイオン、原子、およびホスト構造、電子状態の観察
	② 空間空隙化合物の表面・界面の観察	原子分解能STM, AFMによる空間空隙化合物の表面・界面の観察	空間空隙における物理的・化学的現象の時間分解動力学解析、反応ダイナミクス解析
	計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術		
	① ゲスト原子、イオンの包接構造、電子状態の観察	平均場埋め込み量子クラスターモデル、周期モデルを境界条件とした第一原理計算による空間空隙構造(分子動力学法)および電子構造のシミュレーション	新しい境界条件を用いた第一原理計算による量子力学的分子動力学法および電子構造シミュレーション
② 空間空隙構造ユニット機能のモデルリングとそれら機能のインテグレーションモデル	空間空隙構造ユニット機能のモデルリング	空間空隙構造ユニット機能インテグレーションのモデルリング	

表3-5 「空間空隙制御材料の設計利用技術」の研究開発課題
C 共通基盤技術

4. 研究開発の推進方法

本戦略プログラムは、要素技術探索・先鋭化を主眼とする創造的深堀型基礎研究と、分野横断的実用技術開発を推進する水平展開型応用研究を協調的に組み合わせる手法により、基礎学問の振興とイノベーション創出へむけた技術開発の双方を協調的に推進する研究課題へのファンディングシステムを提言する。その出口イメージは、一方で、新物質／材料を創造する根本的叡智の発見とその学術体系化であり、もう一方で、その直接の成果として、社会的課題解決を志向した基礎研究の進展と、ひいては、それにより導かれるイノベーションを視野に据える。また、そのための研究推進体制として、異分野融合型研究開発拠点の形成と、そのネットワーク化をあわせて提言する。一つ屋根の下（Under One Roof）で目的を共有し、異分野間の横断的かつ本質を射抜くコミュニケーションを深め、シーズとニーズの邂逅を取り持つ、同時協調的（コンカレント）な研究開発推進体制の実質的な運営が鍵となる。この精神を意識的に埋め込んだ公募要項を開発するとともに、現行のステージゲート（段階的多軸評価）方式を採用している既存プログラムを分析・評価して、新規プログラムに反映させる。研究課題へのファンディングおよび拠点形成の両面において、リーダーによるマネジメントの役割が本質的に重要であり、リーダーへの裁量権付与（エンパワーメント）と責任（コミットメント）強化が有効と考えられる。本戦略プログラムに期待される成果としては、技術的知見の獲得に加え、異分野融合推進を担う人材の育成を挙げることができる。本研究開発の推進方法を図4-1にまとめる。

1. 異分野融合促進システム

1-1. 本戦略プログラムに適した異分野融合促進ファンディングシステムの開発

- 創造的深堀型基礎研究と水平展開型応用研究との連携
- 応募者に異分野の融合、シーズとニーズの邂逅を意識させる公募要項の開発
- 同時協調的（コンカレント）な研究開発の推進

1-2. 異分野融合ネットワーク型研究開発拠点の形成

- 一つ屋根の下（Under One Roof）で、目的を共有し、課題解決を志向したネットワーク型研究開発拠点の形成
- 異分野の融合、シーズとニーズの邂逅、同時協調的研究開発の格段の推進

1-3. ステージゲート（段階的多軸評価）方式の適用

- ステージゲート方式採用の既存プログラムの徹底分析と評価
- 分析・評価結果を新規プログラムに反映

2. リーダーシップとマネジメントの確立

- 産学独官を超えて選抜されたリーダー（専任）の任命
- リーダーへの裁量権付与（エンパワーメント）・責任（コミットメント）の強化
- リーダーとリーダーを支える戦略マネジメントチームによるマネジメント
- 異分野融合研究の評価法の開発
- 科学コミュニケーション推進活動による普及促進

図4-1 「空間空隙制御材料の設計利用技術」研究開発の推進方法

(1) 異分野融合促進システム（研究ファンディングシステムとネットワーク型拠点形成）
 空間空隙制御材料に関連する研究者や研究グループを取り巻く環境は一様ではなく、多くの場合、様々な分野間の壁が存在し、各研究者を陰に陽に孤立させる要因となっている。とりわけ当該分野は鍵となる物質・要素技術の発見が分野全体を先導してきた経緯もあり、探索的深堀型基礎研究への志向性が強く見られる。その結果、シーズ技術が各分野に散在した状況となり、当該技術が有するポテンシャルがニーズに結びつくチャンスに出会うことが困難な環境にあることを既に指摘した。空間空隙制御材料研究開発には、「ニーズ⇔シーズ」間の壁のみならず、「化学・生物⇔物理・デバイス」間、「無機⇔有機」間、「素材⇔モジュール⇔プラント」間、「基礎研究⇔応用研究」間の壁が存在する。この様な多くの壁は、研究者のメンタリティはもとより国民性を端緒に学術分野、学会、企業における業種、縦割り行政などに起因する。

近年、科学技術への社会的期待として、持続可能社会の実現や生物多様性の確保などがグローバル課題として注目を集めている。わが国は、科学技術を以て国際競争力を堅持し、国際貢献を果たすべき重要な局面を迎えている。これに応える物質／材料技術の体系を提供するためには、あらゆる分野間の壁を取り払い、課題解決型でかつ、異分野融合的な研究志向を持つファンディングシステムを構築する必要がある。（図4-2）。

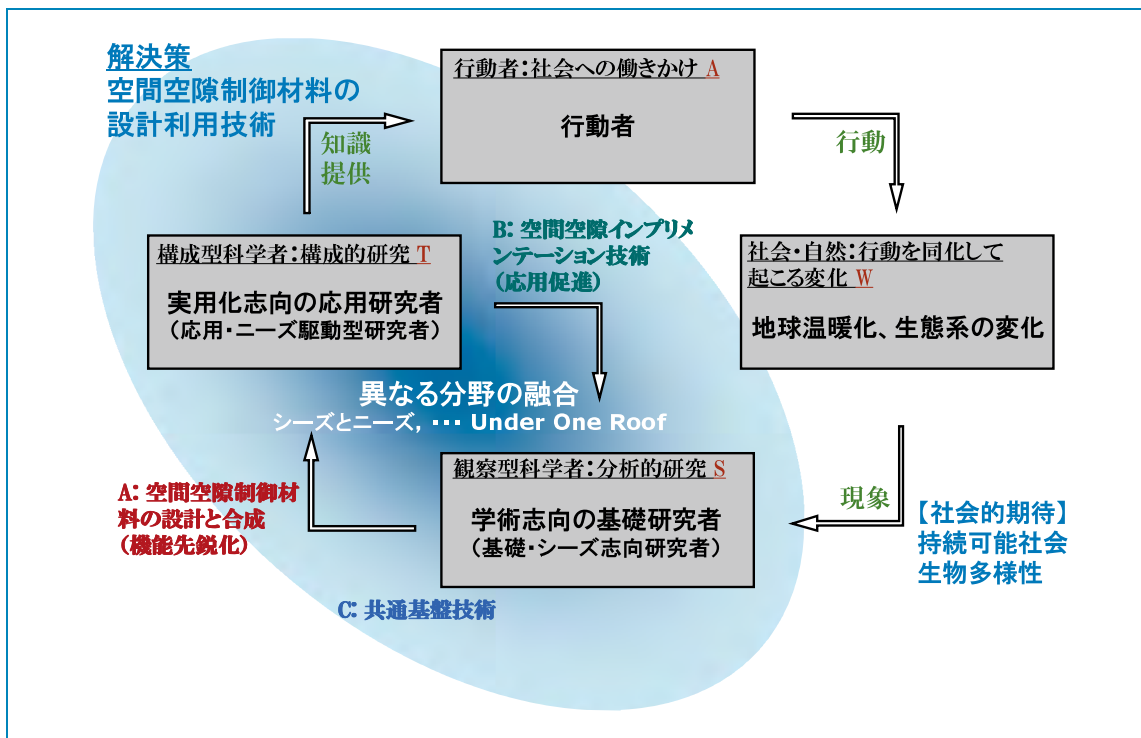
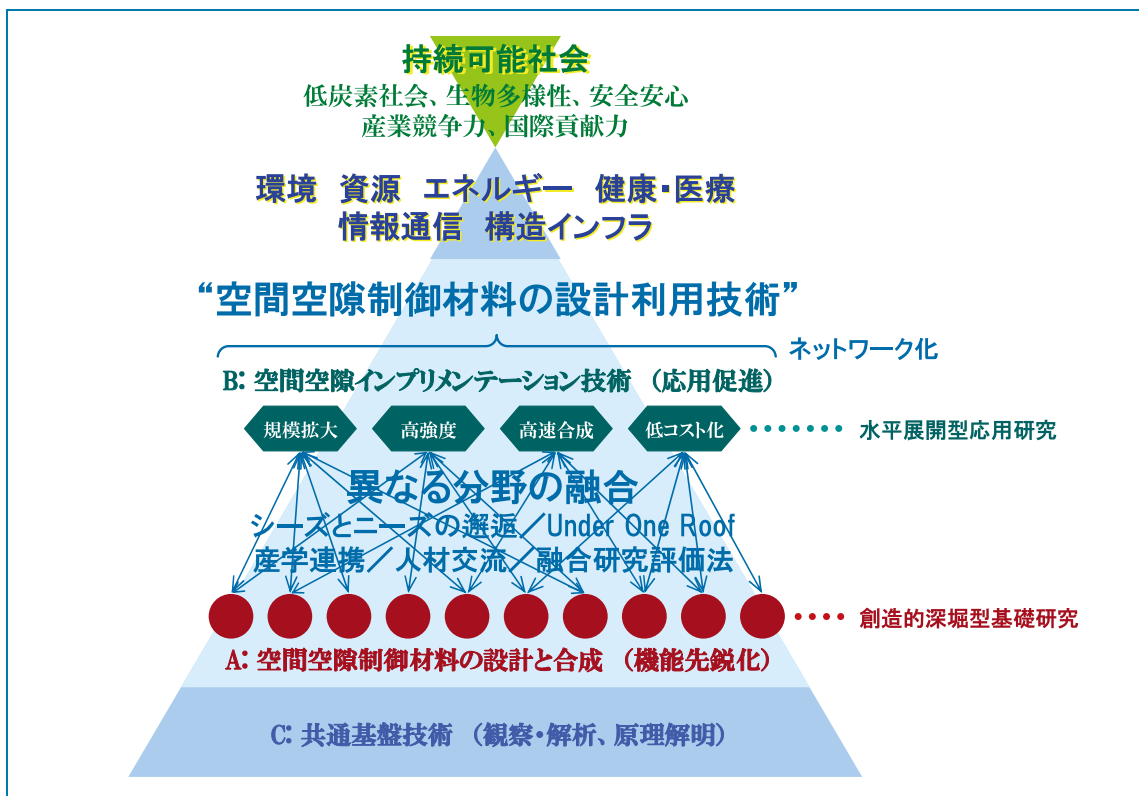


図4-2 「空間空隙制御材料の設計利用技術」構造化俯瞰図

課題解決型異分野融合研究には、共通理念の下、“場”を共有する仕組みが有効である。イノベーションには新結合の遂行が不可欠である。すなわち、①新しい商品・商品の新しい品質の開発、②新しい生産方法の開発、③新しい市場の開拓、④新しい材料供給源の獲得、⑤新しい組織の実現という5つの類型がある（シュンペーター、1912年）。これまでに培われた研究成果および研究組織の新結合を図り、我が国が強みとする物質／材料研究

の蓄積を活用し、新開発を加速するために“空間空隙”を共通概念として課題解決型基礎研究を推進するファンディングシステムの枠組みと、研究開発拠点の形成を提案する（図4-3）。

特に本戦略プログラムでは、空間空隙制御材料の機能先鋭化を図るシーズ志向の課題Aと、ニーズドリブンな課題解決を志向した課題B、基盤技術である課題Cの組み合わせにより、基礎研究の深化と応用技術研究の相補的進展を意図しており、課題AとBの双方を備えた研究開発課題（A+B）や、基盤技術開発を含む課題（A+B+C）などの個別研究課題によって、新しい学問体系の発掘や、実用技術への端緒をつかむ成果が期待できる。さらに本戦略プログラムでは、個別研究課題へのファンディングにとどまらず、Under One Roofで異分野融合およびシーズ志向型・ニーズ駆動型研究の邂逅を促し、環境、資源、エネルギー、健康・医療、情報通信、構造インフラに資する技術の基盤となる研究開発を推進する。特に課題Cで挙げた計測・解析基盤技術では、文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワークプログラム（通称ナノネット）」（2007年度～）に代表されるナノテク関連共用設備などのネットワーク型拠点を、しかるべき制度設計上の改良を施した上で活用すべきである。また、Under One Roofのコンセプトを実現するためには、短期集中合宿形式のワークショップや、拠点の形成が必要となる。



研究開発の推進方法

図4-3 課題解決型異分野融合ネットワーク型拠点のイメージ

本戦略プログラムの特性上、基礎研究から応用研究にシームレスに移行するリニアモデルでは、個別の技術シーズのポテンシャルを十分に発揮することは難しい。基礎研究から応用研究への転換のみを成果と認め奨励するという立場ではなく、基礎研究を継続する自

由度を残しつつ、応用研究の、特に「ニーズ」の本質にベクトルを向け、プロジェクトの初期フェーズから関係者が緊密なコミュニケーションを図り、コンカレントに研究開発を推進する仕組みを構築すべきである。研究チームの編成としては、複数の学問分野に跨る（Cross disciplinary）メンバー構成や、基礎志向と応用志向研究者をバランス良く配するなど、課題A、B、Cの複合を意識させる公募の仕組みと組織編制方法を開発する。

研究推進のコンカレント性を特色とする本戦略プログラムでは、マネジメント上、時間軸の概念を折込むことが必要になる。その結果、ステージゲート方式に近い運用方式が有力であろうと考えられる。これは、初期ステージでフェーズやベクトルの異なる複数の研究プロジェクトを走らせ、研究の進展に応じて、徐々にそれぞれの方向性を明確化しながら研究開発を推進する手法である。コンカレントであることによって、基礎志向の研究者には、研究の初期の段階から、社会ニーズを認識し、実用化に必要なエッセンスを意識の中に織り込む機会が高まるであろうし、一方、実用化を志向する応用研究者には、膨大な実験データの解析から原理原則を抽出して新たな飛躍の洞察を得る学術的センスを磨くことも可能となる。また、5年～10年を目安にした時間軸の設定により、適切な評価の下、プロジェクトやチームの組み替えなどを実施する機会を設ける。ただし、評価軸は研究者の特徴を引き出すために柔軟性を持つことが望ましく、研究成果の本質を見抜き、その科学技術上の意義など実質的な内容で評価が実施されるべきであろう。形式だけの数値目標を意識する余り、見せ掛けだけの安易な出口志向の研究開発にシフトすることは本戦略プログラムの意図するところとはいえない。米国のパルミサーノ・レポート（2004年12月）では、評価を強調しすぎると研究が短期的となり、新しいものが生まれないことを指摘し、ハイリスク・ハイインパクトでハイリターンな研究、長期的で基礎的な研究に全研究費の3%を充てるべきと提言している。当初の計画になかった萌芽的研究課題を発掘、推奨し、育成することには特に留意が必要である。

ステージゲート方式を採用している新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）による「ナノテク・先端部材実用化研究開発」プログラム（通称、21世紀ナノテクチャレンジプログラム：平成17年度から平成21年度）は、事業化を出口としたファンディングシステムとしてその仕組みと運用の実際は参考になる。このプログラムでは、最初の2～3年をステージ1とし、残り期間をステージ2と位置付け研究開発課題の絞り込みを実施している。平成17年にスタートし、ステージ2を通過した研究開発テーマがまもなく終了する。この機に研究開発成果はもとより、この試行の有効性や改善点を徹底的に追跡調査することを提案する。研究開発費、期間、チーム、マネジメントの適切性などインタビュー、ヒアリングを交えて関係者が感じている問題点を明らかにし、分析・評価結果を新規プログラムの制度設計に反映させることが望まれる。また、この分析・評価結果は、例えば、産業化および革新的基礎研究の複数出口を想定して運用されている科学技術振興機構（JST）による戦略的イノベーション創出推進事業（通称、Sイノベ）^{*}の運用にも

^{*} 科学技術振興機構（JST）では、平成21年度より戦略的イノベーション創出推進事業（通称、Sイノベ）が推進されている。これはJST戦略的創造研究推進事業等の成果から産業創出の礎となる研究開発テーマを設定し、産学連携による複数研究開発チームがステージⅠ「応用基礎研究及び要素技術の研究開発（2～3年）」、ステージⅡ「要素技術の研究開発（3～4年）」、そしてステージⅢ「アプリケーションの開発（2～3年）」の3つのステージから構成される長期一貫（最長10年）の研究開発を推進する。NEDO 21世紀ナノテクチャレンジプログラムの2倍の研究期間を設定しているのを特徴とする。

有益と思われる。

個別から融合・統合へ、リニアモデルからコンカレントモデルへの変革を加速するために、拠点のネットワーク化を進め、Network of Excellence を形成することが重要である。これには、時として既存の制度的な隘路が立ちほだかる。これには科学技術担当大臣のリーダーシップを以て隘路を除去し、政府主導による府省間を横断する施策の推進が必須である。

(2) リーダーシップとマネジメント

仕組みだけでは、課題解決型異分野融合研究開発拠点の形成とネットワーク化を実現することはできない。実際、これまでも多くの拠点形成が試みられてきたが、概念先行で実際には真の拠点形成に至っていないとは言えない。とりわけ異分野融合を志向する場合、研究者一人ひとりの意識改革が本質的に重要であり、変革を推進するリーダーシップと円滑・効率的に運営するマネジメントが決定的に重要である。これまでも国の政策目標に基づくプロジェクトでは、研究領域・研究内容に応じて研究総括、研究開発テーマの取りまとめ役にプログラムオフィサー (PO)、研究開発チームの取りまとめ役にプロジェクトマネージャー (PM) が任命され、それぞれ重要な役割を担ってきたが、よりコミットメントとエンパワーメントを伴ったリーダーシップとマネジメントが不可欠である。

米国では、オバマ大統領によるグリーン・ニューディール政策を受けて、エネルギー研究戦略の抜本的見直しが進められている。研究現場では、新戦略に呼応して意識改革が進み、研究の新潮流を生み出そうとしている。オバマ大統領のリーダーシップの下、研究現場を熟知するエネルギー省 (Department of Energy: DOE) スティーブン・チュウ長官らによるトップマネジメントが研究者の信頼を生み、現場を動かしていることが明らかになってきた [参考文献 1]。リーダーシップとマネジメントが如何に重要かが示唆されている。制度設計には、科学プログラム担当の局次長パトリシア・ダーマー博士が中心的役割を果たした。あるべきエネルギーシステムを描き出し、5年掛けて課題解決型基礎研究テーマを抽出し、DOE のトップマネジメント層、そして米国議会に対する交渉、説得に参与したことも判明した。研究現場を動かすリーダーシップ、それに呼応する科学技術政策と中長期に渡る一貫した責任あるマネジメントが米国では根付いている。

そこで本戦略プログラムでは、リーダーシップとマネジメントを発揮するために産学独官を超えて選び抜かれた Chief Technology Officer (CTO) に学理 (Science) の素養を合わせた Chief Science and Technology Officer (CSTO) を新たに提案する (図 4-4)。兼任ではなく専任とする。CSTO をリーダーとして少数精鋭のスタッフからなる戦略マネジメントチームを編成し、研究開発課題を総括する。国の政策目標に基づくプログラムには、事業の公募→審査→採択→実施→評価なる流れがある。CSTO は全てに参与する。公募、審査、採択が計画 (Plan)、実施は実行 (Do)、評価は文字通り価値判断 (Check) であり、フィードバック (Action) を掛ける PDCA サイクルに責任を持つ。研究者にもリーダーシップとマネジメントの考えを併せ持つことによって力強い現場力を備え、世界中から優秀な人材が集結する研究開発拠点を目指す。

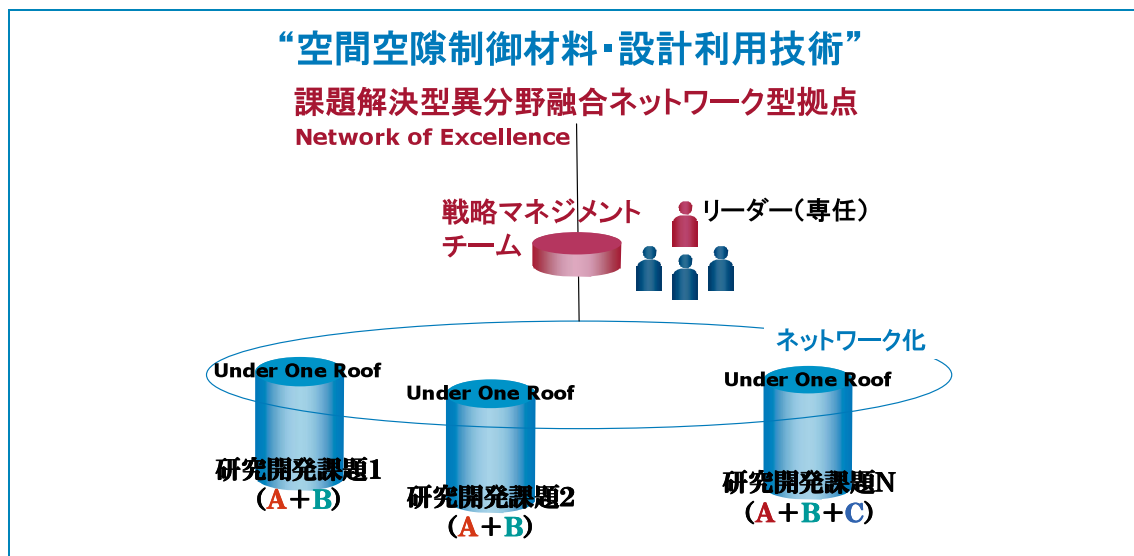


図4-4 戦略マネジメントチームのイメージ

研究開発の推進には、ステージゲート方式が有効であると考えられる。CSTO への権限委譲を含むエンパワーメントを付与した上で、評価システムを確立する。公明正大な評価によって、研究者にインセンティブを与える工夫は避けて通れない。評価を通じて、本戦略プログラムのミッションとの整合を図る。なお、異分野融合研究の場合、真の成果が出来るには5年程度の期間を想定することが適当である。研究課題によっては、最初の3年間は論文が出なくても良いといった理解と許容度も必要である。

異分野融合には、関係者が物理的にも精神的にも等距離感が得られることが大切である。例えば、研究開発共用施設は連携する大学、企業にそれぞれ作ることで等距離感を出す。米国カリフォルニア大学ロサンゼルス校 (UCLA) には、2000年12月に設立されたカリフォルニア・ナノシステム・インスティテュート (CNSI) が存在する。産学連携の促進とナノシステムの商用化をミッションとしており、UCLA キャンパスのほぼ中央、UCLA Medical Center の北に位置し、Life science, Neuroscience, Molecular Biological Science, Engineering の建物に囲まれている。仕組みやマネジメントを調査し、融合研究の好例として参考にすべきである。

せつかくの研究開発体制も、プロジェクト終了と共に解散、離散してしまうのであれば無意味である。国家予算をベースとするものの、研究開発実施機関からの拠出、企業からの委託費・寄付金を誘導し、利用者課金システムを導入する創意工夫による自立性・継続性の視点も戦略マネジメントチームには求められる。

異分野融合的研究開発の成果として、人材形成がある。長期的視点に立つと、拠点形成の成果としては、研究開発の技術的成果のみではなく、輩出される人材を成果として捉える視点が必要である。異分野融合研究、産学連携研究、コンカレント研究に取り組みつつ、これらを担う人材が育成される仕組みと環境が作られる。本戦略プログラムでは、例えば、

空間空隙制御材料を共通言語として、多様な人材交流の場となるワークショップ、物質・材料からデバイスそしてシステム化に関するセミナーなどが有効である。ここでも、戦略マネジメントチームによるしっかりとしたコーディネート力が欠かせない。通常の学会、研究会やセミナーとは異なる目的意識による運営が求められよう。

一方、人材確保には、科学コミュニケーション推進活動も効果的である。研究開発の成果を公表し、国民に分かりやすく説明し、理解と普及に努める。国家予算で研究開発を推進する以上、国民に対する説明責任（アカウンタビリティ）が求められる。科学コミュニケーション推進活動を通じて、アカウンタビリティを果たすと共に人材を確保する。JSTには科学コミュニケーション事業が既に存在するが、公募するのではなく、参画する研究者に対し、年1回を目安に科学コミュニケーション推進活動を義務化することが考えられる。人材育成と確保する仕組み作りも戦略マネジメントチームの仕事とする。

5. 科学技術上の効果

- (1) 本戦略プログラムは、科学技術基本計画に基づいてこれまでに培われたわが国のナノテク・材料に関する高い学術ポテンシャルと優れた技術を背景とした提言であり、新機能物質／材料の研究開発における基礎研究と応用研究の両面的な出口イメージを持つ研究開発を、通底する科学原理の共通言語で結び付けることにより、相補的・協調的に振興する。
- (2) 基礎と応用の視点のみにとどまらず、物理⇔化学、物性⇔デバイスなどの異分野を横断する共通の概念基盤の形成に貢献する。その結果、分野が異なる研究者間で情報を共有する制度的、心理的素地が形成されることから、学術および産業界双方の観点から協調的に成長を促進するイノベーティブな研究開発環境が創出される。
- (3) 本提案には、フェーズの異なるいくつかの課題が含まれる。学術基礎から実用化に近い技術シーズが、空間空隙制御材料という概念軸を共有して協調的に育成されつつ、発展段階に応じて時間的な差を伴って深掘型基礎研究や、実用化研究へそれぞれ発展的に移行していくことが期待される。
- (4) 本戦略プログラムの学術的意義という観点でその歴史的な位置づけを概観すると、その思想的源流は、1920年前後にラングミュアらが創始した表面・界面の化学にその萌芽を見ることができる。すなわち、物質機能の発現を担う本質が、物質の「表面」あるいは「界面」にあることを看破し、その定量的実証研究に端著が付けられた。折りしも、厳密科学の分野では、量子力学の勃興により物質の科学的理解が一新された時代に当たり、その後の固体物理学及び化学の学術体系の進展に支えられた半導体工学や生命科学の興隆を経て、物質機能の本質が、表面・界面で生じることが実証された。それに加えて、各種観測・観察・解析技術の進展もあいまって、近年では、表面・界面の原子構造や結合のネットワークトポロジーと機能発現の関係に注目が集まると同時に、その人為的な構造と機能の制御を、新しい科学ないし工学の新分野として創出する時代に立ち至っている。この期に及び、物質の示す諸機能が、表面や界面によって囲まれた空間によって構成される「空間空隙」を相互作用および物質構造の構築の場として捕らえ直す学術的ムーブメントのさきがけが、本戦略プログラムの科学技術上の主要な効果であるといえる。すなわち、表面・界面科学の発展段階として、「空間空隙」の科学と技術が、物質科学の本質を追求する新しい学術体系として創出される。
- (5) 国際競争力という観点では、わが国のナノテク技術の先進性を反映して、空間空隙制御材料の分野においても、すでに工業的に実用化され、国際的に存在感を示している製品群が存在する。水浄化の逆浸透膜、触媒・吸着剤、超分子自己組織化材料は、学術的評価も高い。一方、計算機支援の物質設計モデリング、シミュレーションなどに関しては、一部先駆的仕事があるものの、諸外国と比較して、研究

者の層が薄いという指摘がある。さらに、ここ数年、この分野の研究開発に参画する研究者の数がアジアを筆頭に急増してきており、我が国が、今後とも、学術的・技術的優位性を維持できるかは明確でない。本戦略プログラムにより、出口イメージを科学原理に翻訳した基礎研究と、それら基盤要素技術を必要とする応用研究を統一的に推進することにより、物質／材料に関わる科学技術の振興に貢献し、国際的なステータスを確固たるものとする。

- (6) 環境・エネルギー分野をはじめとして、IT・エレクトロニクス、ナノバイオなど革新的新材料開発競争が活性化され、わが国のみならず、環境・エネルギー技術におけるアジア圏を中心とした世界的ハブ拠点形成への重要な布石となる。
- (7) 吸着・吸蔵、触媒、電池、分離などの各分野の先端材料研究の中から、産業界とのコラボレーションにより実用化フェーズに移行する物質／材料群が多数現れる。
- (8) 異分野融合を促進するネットワーク型拠点で本研究プログラムを実施することにより、特に、課題Cで挙げた計測・解析基盤技術が強力に振興され、研究者の交流も深まる。ナノレベルおよび原子レベルの空間空隙構造の観察、ならびに、その中で起きる物理的・化学的相互作用の動的観察と解析は、その実現に最高度の技術と科学的問題解決能力が要求される。この研究を通して、他分野への水平展開も十分可能な計測・解析基盤技術が創出され、わが国の研究競争力の抜本的強化に貢献する。

6. 社会・経済的効果

- (1) 20世紀の科学技術は質と量の拡大を追及して発展したが、21世紀に入って、これまでの拡大型技術開発手法に持続可能性や生物多様性などの観点で修正が必要とされ、科学技術研究開発の推進方針は大きな転換点に差し掛かっている。これからの科学技術研究体制には、質と量の観点に加え、資源やエネルギー、時間などリソースの有限性を考慮した最適設計が求められる。持続可能性が保証された社会には、相応の資源・エネルギーの循環機構が実装されているはずであり、そのメカニズムの中で、適切な環境の維持が担保される。本戦略プログラムが提案する空間空隙制御材料技術は、21世紀型の技術革新を誘発する機能物質／材料群と、その創出に関する科学的原理および実用技術を提供する。世界的に喫緊の課題となる環境、エネルギー、食料、水、健康・福祉などのアイテムが、情報通信・交通輸送などのインフラ技術を通じて金銭と等価な価値基準として地球上を流通し、国内外を問わず、社会と経済が新しい基準の「豊かさ」にもとづいて再構築されるはずである。このような背景から、科学技術上はもとより、政治経済上においても、当該分野において国際的イニシアチブを確立することは、21世紀においてわが国が国際的な存在感を際立たせることに直結する。
- (2) 日本は要素技術に強く、システム化に弱いといわれる。最終製品が社会の中でどのように活用されるかというビジョンの提示、それを実現するための社会的合意形成と経済システムへの組み込み手法の強化は今後の日本の課題であろう。一方、ナノテク技術に代表される要素技術開発の強みは今後とも強力に維持し、発展を目指すべきである。ただし、システムの実現には一般に1つの技術のみでは不可能であり、必要とされる技術群の複合最適化が必須となる。今後の要素技術開発は、複合最適化に耐える研究開発メカニズムを持つ必要がある。そのために、本戦略プログラムで提案する異分野融合的視点でのシーズ技術開発が本質的に有効な戦略として機能する。また、要素技術開発の現場から発せられる基礎基盤研究への要望は、基礎学問基盤の深化・発展の重要な契機となり得る。
- (3) 21世紀型の課題解決型の科学技術開発では、社会的に要求されるニーズを、科学技術上の要素へ分解、翻訳する作業が必要不可欠である。先の図2-1に示した空間空隙制御材料技術の俯瞰図を下に、想定される社会ニーズから、その実現に必要なとされる技術要素を分解し、技術シーズのキーワードへの翻訳過程を一部分のみ例示すると、たとえば、「環境」というキーワードに対しては、次のようになるであろう。
- 環境：
- 環境浄化→ 空気・水・土壌の浄化→選択的分離膜、吸着材、化学分解、触媒
環境改質→ 空気・水・土壌の成分調整→物質送達システム、プロセス・プラント
環境センシング→ 大気・水・土壌センサー、都市環境動態計測→気候変動、地質、海洋に関係する各種センシングシステム→センサー、集積回路、LSI、MEMS、情報通信ネットワーク、データベース、分析解析システム

このわずかな一例を見るだけでも、本技術領域が潜在的に有する社会・経済上の巨大なインパクトを推し量ることが出来る。環境以外にも、資源、エネルギー、健康福祉などの社会ニーズに対して、同様の分析を行った。これら抽出された機能的技術要素から、さらに、その実現に必要な物質／材料的要素技術の抽出を行った。この作業により、各専門分野における技術要素がどのようにして社会的ニーズと関連しているかを俯瞰することが可能となった。さらに、その要素技術から、基本となる科学上の原理的課題と、実現するための技術論を軸として、本戦略プログラムは形成されている。

- (4) 持続可能性・生物多様性の担保、産業競争力・国際貢献力、安心安全など、21世紀の社会ビジョンの実現に不可欠な物質／材料の研究開発に関わる国家戦略と行動方針が明らかになるとともに、研究開発の成果としてだけではなく、その活動そのものが、経済政策となり、教育、外交、国際貢献策となりえる。
- (5) 開発された研究成果を、アジア地域を中心としてグローバルに展開することで、わが国の経済的地位の安定に貢献する。
- (6) 持続可能社会、安心安全、生物多様性、競争力など、わが国が目指す社会像実現の目標に対して、科学技術上の根拠が与えられ、国際的なステータスを確立する。

7. 時間軸に関する考察

我が国の鳩山首相が就任直後の2009年9月の国連総会の演説で提示した『2020年までに1990年比で25%の温室効果ガスを削減』という目標に象徴されるように、地球規模の諸問題等をめぐる社会の動きは極めて急であり、この分野の研究開発によるイノベーションへの期待は大きい。特に、持続可能社会の実現に不可欠な、環境・資源、エネルギーなどの諸分野における新材料開発に対する社会の要請は、緊急を要している。

他方、次章8. で述べる「空間空隙制御・利用技術」WSでも明らかにされたように、本『空間空隙制御材料の設計利用技術』分野においては、最近の物質・材料設計自由度ならびに制御性の格段の進展によって、既存バルク材料では実現困難な新機能を発現する物質が多数創出され、貯蔵、分離、触媒、光電／熱電変換、超伝導、構造材料などに関わる新機能の発現や、飛躍的な機能性の向上が内外で相次いでいる。まさに、新物質開発の方法論と具体化するための『空間空隙制御材料の設計利用技術』が本格的に開花し、地球規模の社会的課題解決に大きく寄与する機が熟していると言える。

このような社会要請及び技術的背景の二つの観点から、本戦略プログラムは直ちに着手される必要がある。

本戦略プログラムには、比較的早期に実用化に結びつけ社会ニーズに応えることを目的とする短中期的課題から成る研究開発と、次々世代の技術領域の中長期的課題を含む基礎基盤の開発との両方が含まれている（表3-3～表3-5を参照）ので、研究の促進にあたっては、各々に対応した体制をとるべきである。また、4. 研究開発の推進方法で述べたように、いわゆる「ステージゲート方式」を有効に活用すべきである。

具体的には、「3. 具体的な研究開発課題」のうち、表3-3～表3-5に示す短中期的課題については、既に社会課題解決へのイメージがある程度形成されているので、早急に着手する必要がある。研究開始後5年程度の期間の後、ある程度の成果の有無や実用化の可能性を照準に研究の継続可否を検討する必要がある。同じく、表3-3～表3-5の中長期的課題についても早期の着手が望ましいが、基礎的な研究の必要度が高いため、最初のステージゲートまで約10年程度の期間が必要と考えられる。

なお、実際的な応用製品として最終的に社会に貢献する時期としては、早いもので2015年頃、全体的には2020～30年頃を目指すものとする。

8. 検討の経緯

本研究開発戦略センター（CRDS）では、我が国が重点的に推進すべき研究開発戦略を立案、提言する活動を行っているが、その一環として、ナノテクノロジー、物質・材料分野についての研究開発状況を俯瞰してきている。この物質・材料分野俯瞰の2008年度の改訂のために2008年7月に開催した「物質・材料分野」俯瞰ワークショップ〔参考文献2〕において、近年の物質・材料設計自由度ならびに制御性の格段の進展により、既存バルク材料では実現困難な新機能を発現する物質が多数創出されていることが見出され、さらに、社会的背景・ファンディング状況などをも踏まえた物質・材料及びナノテクノロジー両ユニットにおける検討の結果、公的資金を投入する必要性・意義を精査する戦略スコープの2009年度重要候補として「ナノ空間創出制御による新材料構築と利用技術」が抽出、提案された。これを受けたCRDS 2008年度戦略スコープ検討委員会は、文科省からの「ナノ空間・時間制御材料の開発」、CRDS内の産業ユニットからの「環境負荷を低減し、国際競争力を強化するための産業横断の軽量化技術」といった関連提案をも合わせ検討した結果、2009年度において『空間空隙制御・利用技術』の研究開発に関して戦略プロポーザル作成することを決定し、空間空隙制御・利用技術チームが設置された。

チームでは、まず、『空間空隙制御・利用技術』を「ナノスケールの微細な空間・空隙を有する物質の次元、形状、寸法、組成、規則性、結晶性が設計、制御され高度に組織化された材料の創出とその利用技術」と捉え、関連する技術シーズと社会ニーズ、既存の関連ファンディングの状況などの徹底的な調査を行った。まず文献（CRDS資料、学会資料、論文、WEBなど）及び最近の関連ファンディング（文科省科研費特別推進研究、特定領域研究、JSPS学術創成研究、基盤研究S、JST CREST、ERATO）の詳細な調査によってこの分野の技術シーズと社会ニーズを明らかにし整理した後、これを元に、国内の主要な研究者、学識経験者15名を選定し、訪問・面談による調査を実施した。さらに、それらの調査の結果に基づき、技術開発分野、応用分野双方の有識者を招き、公的投資の必要性・意義の明確化を企図する深掘ワークショップ（WS）の開催が必要との判断に達した。2009年10月26日にCRDSで開催されたこの「空間空隙制御・利用技術」WSでは、研究開発動向および応用分野の現状や将来の見通しなどを踏まえた上で、研究開発のあり方が集中的に議論された。なお、WS参加者に対して、議論の対象となる事項や、事前に設定された『仮説』の可否についての事前アンケートを実施し、その結果をWS当日の議論に反映した。このWSで交換された情報や議論は、WS報告書〔参考文献3〕として公開されている。

本戦略プログラムの内容は、このWSの成果も踏まえ、さらに追加の調査及びCRDS内での討議を経て、「空間空隙制御材料の設計利用技術 ～異分野融合による持続可能社会への貢献～」としてまとめたものである。

9. 研究開発課題の詳細

本章では、3章で述べた各研究開発課題について補足する。

A. 空間空隙制御材料の設計と合成

A-1. 空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現

空間空隙化合物の呈する機能は、ゲスト（原子、イオン、分子）、ホストの機能およびそれらの相互作用に由来している。また、それぞれの機能を複合化・インテグレーションして、より高度の機能を実現できると期待される。

ゲストに由来する新機能は、ゲスト種の特性に著しく依存する。ゲストが電子である場合は、空間空隙への閉じ込め効果により、運動エネルギーが増加する。その結果、仕事関数の低下（空間空隙から電子をはぎ取りやすくなる。）、アルカリ金属などの非磁性イオンの包接による強磁性の発現などが見られる。（角運動量の大きな状態が混ざるため）また、包接された電子あるいは、プロトン、酸素イオン、Liイオン、Naイオンなどが空間空隙間を移動すれば、電気伝導ないしイオン伝導が付与される。さらに、超酸素イオン、ハイドライドイオン（ H^- イオン）など酸化還元化学種が包接された場合、空間空隙化合物は酸化ないし還元触媒として機能する。

空間空隙形状、特にサイズ、を制御することにより、包接されるゲストの大きさを選択することができる。この結果、特定のガス・イオンを選択的に吸収・貯蔵・透過させることができる。サイズが小さい場合は、量子効果が生じ、超伝導、超イオン伝導が生じると期待される。また、量子効果により、空間空隙が擬似高圧、ないし擬似高温・低温状態になることが予測され、高密度ガス貯蔵、高速イオン伝導などへの応用が期待される。サイズを大型にすれば、軽量化、低熱伝導率化、衝撃の吸収、低屈折率などのマクロな特性が生じ、さらに、分子量の大きな分子を包接することができ、超分子、分子クラスターの合成が可能となる。空間空隙の大型化に伴って、内壁の窓を大口径化することが可能で、イオン伝導の高速化が期待される。また、空間空隙の形状の違いにより、異なるゲストを選択的に包摂すれば、新たな機能が発現すると考えられる。たとえば、スピネル化合物では、四面体的および八面体的な空間空隙形状により、異なる磁性イオンが選択的に包接されるために、強磁性が実現できている。

さらに、個々の空間空隙の機能をマクロな機能として発現させるために、空間空隙配列に周期性を持たせること、および機能を階層化することが重要である。周期性が存在すると、個々の空間空隙の呈するマイクロ機能を、空間的、エネルギー的に共鳴増幅させ、マクロなバルク材料機能として引き出すことができる。一方、機能が階層化され、インテグレーションされた超分子、人工酵素、人工タンパク質などでは、すでに空間空隙が規則的に配列されており、バルク全体にわたる長期周期性は必ずしも必要でない。また、周期性と非周期性の中間にある準周期性を有する空間空隙準結晶が固有機能を示すか否かは興味深い研究課題である。

一方、ホスト（フレームワーク）の化学組成も、無機、有機、有機金属、有機・無機ハイブリッドへと多様化することが期待され、同時に、強度、熱伝導性、電気伝導性、イオ

ン伝導性などの機能を付加することが可能となる。さらに、ホストを化学修飾することにより、空間空隙の内面に化学活性点を導入し、ゲストを立体特異的に化学吸着させ、選択的な化学反応を起こすことができると考えられる。また、空間空隙内面に親水性ないし疎水性を付与して、空間空隙の窓を通過する水分子の透過率を制御することができる。さらに、電子活性基をゲスト内に導入することが可能で、光電変換・エネルギー伝達・磁性・誘電性などの機能を付与できる。

最後に、ゲストとホストそれぞれが有する機能を複合・融合化させ、より高度な機能を実現できると期待できる。たとえば、移動度の高いホスト組成とイオン移動度の大きなゲストイオンを組み合わせた“高速イオン伝導体”、酸化触媒機能を界面に有する“固体電解質”、光を電子エネルギーに変換する官能基を有し、高効率でエネルギーを伝達するホスト中の空間空隙に高効率発光センターをゲストとして包接する“蛍光体”、ホストとゲストの電気伝導タイプが異なるヘテロPN接合から構成される“太陽電池”などである。

以上をまとめると、空間空隙構造による新機能の発現に関する研究開発課題は以下に示す通りである。

- ① 空間空隙形状・次元・寸法の制御による機能発現 [ガス貯蔵、ガス選択透過 (分子ふるい)、分子の反応場 (結晶フラスコ)、軽量化、低屈折率化、など]
- ② 空間空隙を伝送路とする高速イオン伝導
- ③ ホスト/ゲスト型空間空隙構造における、ゲストの多様化による機能発現 (アルカリ金属イオンによる強磁性、電気伝導、電子放出、ゼーベック係数増大、超酸素ラジカルイオンないしハイドライトイオン、電子をゲストとした酸化・還元触媒機能、ゲストイオンの移動による高速プロトン、酸素イオン伝導など)
- ④ ホスト/ゲスト型空間空隙構造における、フレームワーク組成の多様化および化学修飾による機能の発現 (親水性/疎水性の制御、触媒活性点の添加、電気伝導の付与、エネルギー伝達、エネルギー捕集など)
- ⑤ 空間空隙の量子効果による機能発現 (トンネル効果、超伝導、超イオン伝導、擬似高温効果、擬似低温効果、擬似高圧効果など)
- ⑥ 空間空隙中のイオン・原子による格子振動制御 (低熱伝導材料、熱電変換材料)
- ⑦ 分子プログラミングによる空間空隙制御 (準結晶、DNAリボンなど)

A-2. 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開発

シリケート、アルミナート、フォスフェートなど複合アニオン基が頂点結合、稜結合した化合物中には、周期配列した空間空隙がビルトインされていることが多い。こうした化合物の単結晶、エピタキシャル薄膜ないし、配向膜成長技術の開発が重要である。大型バルク結晶には、液相から成長するチョクラススキー法 (Cz法)、フローティングゾーン法 (Fz法) が用いられることが多く、ホストが電荷を帯びたゼオライト、C12A7などの結晶成長では、融液状態、あるいは固液界面に存在するある種のイオンがテンプレートとして機能していると考えられる。空間空隙化合物の高品質単結晶を育成するために、テンプレートイオン種を同定し、融液状態および固液界面を理解することが重要である。

高品質薄膜の成長には、スパッタリング、パルスレーザー堆積法（PLD法）などが用いられるが、ゾルゲル法などの低コスト低温湿式法の開発も重要である。特に、燃料電池などに用いられる固体電解質膜は、高機密性配向膜の低コスト成膜法が不可欠である。準結晶は、アークメルトした融液を固化して得られているが、より高品質単結晶が得られる育成法の開発が必要である。

金属イオンと有機分子をうまく組み合わせ、自己整合化プロセスにより、規則的に配列した空間空隙を有する骨格構造（PCP: Porous Coordination Polymer, MOF: Metal Organic Framework）を作ることができる。また、 M_6L_4 （Mは金属、Lは配位子）を単位として、空間空隙を3次的に積み上げることができる。いわば、「あるがままの材料」（ビルトイン）から、「思うがままの材料」（テイラード）への発想転換であり、DNAリボンをテンプレートとした材料設計・製造は、「マテリアルミメチック」から「バイオミメチック」への発展とも言えよう。

上記の「ボトムアップ手法」による空間空隙の作成法に加えて、「トップダウン手法」（発泡、化学エッチングなど）は、ポーラス金属、ポーラスシリコンの作成で実用化している。また、リゾグラフィ法の微細化とともに、形成される空間空隙サイズが小型化しており、フォトニック結晶、フォトニックファイバーの作成に利用されている。

新合成法、構造形成法に関しては、以下の研究開発課題がある。

- ① 自己組織化プロセスによる空間空隙化合物の合成
新形状・新材料メソポーラス、遷移金属錯体、超分子、Porous Coordination Polymer (PCP)、Metal Organic Framework (MOF) など
- ② 結晶成長技術（ビルトインナノ構造物質：ゼオライト、クラスレート、アパタイト、C12A7など、ナノポーラス結晶、層状化合物、ナノチューブ）
- ③ エッチング法（陽極酸化ポーラスアルミナ、ポーラスシリコン）
- ④ 分子プログラミング（DNAタイル、DNAリボン、人工酵素、人工たんぱく質）
- ⑤ その他の物理的・化学的手法（発泡性ポーラス金属、コンクリート）

B. 空間空隙インプリメンテーション技術

- ・ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化など、ニーズ志向課題の解決を見据えたシーズ技術の改変、組み換え、複合技術

空間空隙の持つ機能を活用した、あるいは、空間空隙を利用して合成される新材料は、多くの分野で使うことができ、それらの分野の部品・システムの高度化をもたらす。たとえば、エネルギー分野では、低炭素化社会の実現を可能とする電力発生技術（太陽電池、燃料電池、電力貯蔵用電池など）、電力輸送技術（スマートグリッド、超伝導超コイルによる電力貯蔵、超伝導直流送電など）、エレクトロニクス分野では、空間空隙のクーロンブロンケット機構単電子デバイスなど、情報通信分野では、フォトニッククリスタル・ファイバーを用いた光ファイバーネットワークなど、交通輸送分野では、Li電池を用いた電気自動車（ハイブリッドカーないしプラグインカー）、PM (Particle Matter) 除去触媒を搭載したディーゼルエンジン、超伝導リニア鉄道など、医療・健康分野では、DDS (Drug

Delivery System)、超伝導コイルを用いたNMR-CT、ポーラス金属を用いた人工骨、人工歯根など、構造分・インフラ分野では、軽量発泡コンクリートなどである。

空間空隙制御材料の応用は、以下の分野が考えられる。

- ① エネルギー分野：色素太陽電池、燃料電池用プロトン伝導体および酸化触媒材料、電力貯蔵用超伝導コイル材料、直流送電用高温超伝導線材など
- ② 情報通信分野：フォトニッククリスタル、フォトニックファイバー、低誘電率(Low-k)材料、単電子トランジスタなど
- ③ 交通輸送分野：電気自動車用蓄電池(Li電池、アニオン電池、多価カチオン電池)、燃料電池(SOFC)、ディーゼルエンジン排ガスPM除去触媒、無反射ガラス、軽量ポーラス金属、超伝導リニアモーター用超伝導コイルなど
- ④ 医療・健康分野：DDS、NMR-CT、人工骨、人工歯根など
- ⑤ 構造・インフラ分野：軽量コンクリート、免震材料、無反射ガラス、軽量ガラスなど

C. 共通基盤技術

C-1. 空間空隙制御材料における物理諸現象(物質輸送・貯蔵及び物質・エネルギー変換など)の観測・解析技術

ナノ・メソスコピック空間空隙構造を解明するには、原子分解能を有する計測手法が不可欠である。カーボンナノチューブに包接された希土類金属イオンなど重原子イオンは、電子顕微鏡、電子線・X線回折法などで、観測が可能となっているが、電子・水素イオンなど軽原子は、これらの手法では、直接的には、観測できていない。これらの手法の高感度化、軽元素に感度が高い中性子回折法などの高度化が必要である。また、空間空隙化合物の表面は、完全にフラットではなく、原子オーダーの凹凸があると予測される。このため、現在のSTM、AFMでは、検針チップの影響が大きく、直接的に表面原子像を得ることができない。指針の改良、画像処理技術などSTM、AFM手法の高度化が不可欠である。

空間空隙構造および電子機能の計測技術に関しては、以下の研究開発課題がある。

- ① 透過型電子顕微鏡、電界電子放出顕微鏡、電子線回折、中性子回折、X線回折およびリードベルグ解析、MEM解析による電子状態の観察
- ② 原子分解能STM、AFMによる空間空隙化合物の表面・界面の観察

C-2. 計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成及び構造と機能の設計・解析技術

現在、1000個程度の原子を含むユニット・クラスターを対象に、第一原理計算を適用し、ユニット・クラスターの空間構造・電子状態を計算することができる。こうした計算では、周期モデル、ないし、平均場の中にユニットが埋め込まれたモデルが使われている。

より現実に近いシミュレーション結果を得るためには、大規模なユニット・クラスターを対象とする、現実に近い新しい境界条件を探索することが重要である。また、超分子・人工酵素・人工たんぱく質の機能モデル構築には、機能をユニット化し、それらをインテグレーションして、総合機能のモデルを構築することが有効と考えられる。

モデリング、及びシミュレーションによる空間空隙機能の設計においては、以下の研究開発課題がある。

- ① 平均場埋め込み量子クラスターモデル、周期モデル、ないし新しい境界条件を用いた第一原理手法に基づいたポテンシャル計算、および、分子動力学法による空間空隙構造および電子構造のシミュレーション、合成・成長シミュレーション
- ② 空間空隙構造ユニット機能のモデルリングとそれら物理的・化学的相互作用のインテグレーションモデル（マルチスケール・シミュレーション）

10. 国内外の状況

近年における内外のナノテク物質／材料分野における研究開発の成果で、特にわが国に学術的なプライオリティがある技術として、メソポーラス、カーボンナノチューブ、超分子・有機金属錯体などの自己組織化構造、ポーラス金属などがあり、特異なナノ構造を特徴とする新物質の形成法や、物質・エネルギーの変換・輸送などに関わる多様な機能を引き出すシーズ技術が多数発掘され、熾烈な国際競争の中で、技術の先鋭化が著しく進展してきた。これら技術シーズの蓄積はわが国にとって重要な資産であり、戦略的基盤として育成し活用していくことが強く望まれる。今後の技術育成戦略として、特に基礎的な研究フェーズにある基盤要素技術群については、学術的プライオリティに加え、タイムリーかつ網羅的な特許取得戦略への対応も必要となる。その際には、社会・産業ニーズに基づいた技術要素の分析と、将来の産業設計のビジョンが必要となるため、わが国の経済産業政策と科学技術政策の統合的な戦略立案の中で、技術育成策を打ち出していく必要がある。

空間空隙制御材料に関連する既存のファンディングを概観すると、科研費特定領域研究「配列ナノ空間を利用した新物質科学」、「配位空間の化学—分子凝縮、ストレス、変換場の創成—」、JST-ERATO「北川統合細孔プロジェクト」CREST「自己組織化有限界面の化学」などの研究開発ファンドが存在している。しかし、これらの研究開発ファンドは、対象とする研究範囲が点状であり、また、基礎基盤研究指向と、実用化応用研究志向がともすれば分離しやすい傾向は否めない。わが国の科学技術基盤を支える研究ポートフォリオとして、研究者の創造性に基づく基礎基盤研究、あるいは深堀型研究は重要であり、中長期的に幅広く推進されるべきであるが、基礎基盤研究者の学術的・原理的な深い知識や洞察が応用研究に活かされず、実用化志向応用研究者の融合促進的機動力が、伝統的基礎分野の新展開に活かされないといった負の連鎖を避け、それらがお互いに相互作用し合い、強め合う方向で連携できる制度設計が緊急の課題となっている。

太陽電池、燃料電池など具体的な開発目標を明示した産業化フェーズの開発ファンドもNEDOを中心に存在し、学の成果を産業界へ移行させることを主眼としたナノテクチャレンジや、基礎研究から応用研究への橋渡しを意識したJSTのS-Iノベなどのステージゲート型ファンドも増加傾向にあり、ファンドの多様化の試みがなされているが、現状では、ファンド間のコミュニケーションに関しては制度として考慮されていないケースが多く、参画している研究者においても、物質機能を生み出す「場」としての「空間空隙」に対する共通的な概念が描きにくい状況にある。

なお、本分野における国内外の状況については、参考文献3が参考になる。国外の状況の一例として、CRDSが調査した、米国「エネルギーフロンティア研究センター(EFRC)」の設立経緯を p.36～p.37 のコラムに示す。

米国の「エネルギーフロンティア研究センター」の設立経緯

米国には、エネルギー戦略を支える3つの研究イニシアチブが存在する。その内、最初にスタートした「エネルギーフロンティア研究センター（EFRC）」は、「グリーンニューディール」の下、国家的に大きな規模で取り組んでいる。この国家施策は、のべ1500名以上の研究者が約10年の歳月をかけて複数のワークショップなどを開催し、政策骨子をまとめ上げた成果の上に実行されているもので、その結果として取り上げられている重要課題には、空間空隙制御・利用技術に関連するものが少なくない。5年間で7億ドルを費やした合意形成プロセスを通して、社会ニーズ・ドリブンのいわゆる課題解決型テーマを選定し、それらをブレークして基礎研究課題を抽出し、そこから「挑戦すべき5つの科学原理」を示して基礎科学の言葉に翻訳することで、基礎・応用など、本来志向性の異なる研究者が共通の言語を獲得して、自己実現と社会目標への貢献の双方にコミットできる。大領域における重層的な戦略立案手法としても学ぶところが大きいので、ここにその設立の経緯を示す。

1) EFRCは、米国エネルギー省の科学局に属する「基礎エネルギー科学局（BES）」が、次のようなプロセスを経て立ち上げたものである。

2) 米国エネルギー省「基礎エネルギー科学諮問委員会」の下で、BESが、まず、2001年～2003年の約3年をかけて、「今後数十年、特に2050年」を見据えた場合の「米国がエネルギー供給システムを確保し、かつ低炭素社会を実現していく」ために克服すべき課題を検討した。具体的には、2002年10月、2003年1月に開催した2回に渡るワークショップ（大学、産業界、研究所などから100人以上が参画）での討議を経て、未来のエネルギーシステムを構築するために“目指すべき37の研究方向”を提示。「Basic Research Needs To Assure A Secure Energy Future」という報告書にまとめ、発表した。

3) その上で、提示した“37の研究方向”に対応する“10の重点研究領域”について、取り組むべき基礎研究群を抽出。具体的には、2003年～2007年の5年間に、10回に渡るシリーズの形で「基礎研究ニーズワークショップ」を開催。これらのワークショップには、大学、産業界、研究所などから、合わせて1,500人以上が参画。ワークショップ毎に、抽出された基礎研究群を報告書にまとめ、発表。各ワークショップのテーマ及び実施時期は、次の通り。

- ・「水素エネルギーに基づく経済」に対する基礎研究ニーズ、2003年5月
- ・「太陽エネルギーの利用」に対する基礎研究ニーズ、2005年4月
- ・「超伝導」に対する基礎研究ニーズ、2006年5月
- ・「固体照明」に対する基礎研究ニーズ、2006年5月
- ・「先端原子力システム」に対する基礎研究ニーズ、2006年7～8月
- ・「輸送燃料の無公害・高効率燃焼」に対する基礎研究ニーズ、2006年10～11月
- ・「エネルギーシステムのための地球科学（二酸化炭素、放射性廃棄物の長期貯蔵など）」に対する基礎研究ニーズ、2007年2月

- ・「電気エネルギーの貯蔵」に対する基礎研究ニーズ、2007年4月
- ・「極限環境下の材料」に対する基礎研究ニーズ、2007年6月
- ・「エネルギー関連プロセスのための触媒」に対する基礎研究ニーズ、2007年8月

4) 10回に渡るワークショップでの検討成果をもとに、基礎エネルギー科学諮問委員会に属する「グランドチャレンジ分科会」が、未来のエネルギーシステム構築に向け“挑戦すべき5つの科学原理”を特定。2007年12月に、「Directing Matter and Energy : Five Challenges for Science and the Imagination」という報告書にまとめ、発表。

- ①材料プロセスを電子レベルでいかに制御するか
- ②必要な特性を発現する新規構造をいかに設計し、原子やエネルギー効率の面で最適な方法でいかに形成するか
- ③原子や電子などの構成因子の複雑な相互作用から生まれる優れた特性を見出し、これをいかに制御するか
- ④生物や植物が行っているようなナノスケールでのエネルギーや情報の操作を可能にする新技術をいかに創出するか
- ⑤関係する事象を、特に非平衡下において、いかに評価し、そして制御するか

5) 以上の“12の報告書”で示した検討成果をもとに、「エネルギーフロンティア研究センター」を立ち上げ。2008年4月からファンディングのための公募活動を開始。2009年4月に、最終公募に残った約260件の提案の中から46のエネルギーフロンティア研究センター〔参考文献4〕を選定。

6) 選定された46の研究センターは、全て、未来のエネルギーシステム構築に有効な「次の2つの要件を満たした研究組織」となっている。

・センターの研究プログラムが、「基礎研究ニーズワークショップ」で取り上げられた“10の重点研究領域”の内、一つまたは複数を対象としている。

・センターの研究プログラムが、「Directing Matter and Energy : Five Challenges for Science and the Imagination」で提示された“挑戦すべき5つの科学原理”の内、一つまたは複数カバーしている。

専門用語説明（本文中でアンダーラインした用語の説明）○空間空隙制御材料 (p.1)

本戦略プログラムの目的・対象の本質を表現する造語。一般に、物質／材料の機能を、構成元素間の結合の「すき間」の形状・寸法・次元および配列などの構造によって制御した材料を指す。特に環境・エネルギー戦略上重要性を有する空間空隙制御材料として、「すき間」の寸法をナノメートル～マイクロメートル程度に制御し、触媒、吸着・吸蔵、エネルギー変換などの機能を発揮する材料を多数例示している。

○セントラルドグマ (p.2)

1958年にクリックが提唱した生命の基本原則。DNAの情報は複製され、RNAへ転写された後、タンパク質に翻訳されるという一方向の流れ。しかし後に、RNAからDNAが合成されるという、逆方向の現象が発見されたため、狭い意味でのセントラルドグマという語は使われなくなってきているが、DNAが生命の基本設計図であることを指摘した象徴的な学説として引用されることがある。

○分子プログラミング (p.2)

原子・分子レベルの構造設計性のある物質合成手法を指す。構造設計性の基本原理は、高い精度の分子選択性を有する結合機構である。超分子自己組織化を用いるものや、DNA自身を任意の形状に組み立てようとするもの(DNAリボン、DNAタイル)、DNAの自己複製機能を利用して金属原子などを任意の個数結合させるなどの報告例がある。

○第一原理[に基づく物性]計算 (p.2)

経験的パラメーターを使わずに、自然現象を理論計算する方法の総称。具体的には、経験的パラメーターを使わずに、量子力学方程式(シュレディンガー方程式)を解いて電子固有状態を計算する手法を指す。原子核や束縛電子によるポテンシャル、および、電子間相互作用を近似的に取り込み、一電子近似のもとで電子状態エネルギーを計算する。経験的パラメータは用いないが近似は用いることと、境界条件、初期条件が不可知の場合は結局仮定的モデル計算にならざるを得ないことから、計算結果の解釈には依然として実験との対応は欠かせない。

○マルチスケールシミュレーション (p.2)

原子レベル寸法のミクロな量子力学的計算手法をそのまま用いて、単に原子の数を増やすことによって、ミリメートル以上のマクロスコピックな材料特性を計算によって求めようとする、計算量の観点で困難な場合が多い。そこで、ある寸法で原子集団を多段階層的にモデル化し、より大きなスケール(原子の数、空間の大きさ)のシミュレーションを実現しようとする手法をマルチスケールシミュレーションと呼ぶ。大型コンピュータ、スーパーコンピュータなどを用いた大規模なシミュレーションになる場合が多い。プラズマ状態、原子数を多く含むメソスコピック系の熱力学定数、エネルギー状態などの計算に用いられている。

○ポーラス（多孔質）材料（p.4）

内部に無数の微細な孔を有する材料の総称。その性質は細孔の直径、分布、配列や細孔内の表面構造によって決定されるが、特に細孔径が重要。機能制御の観点から、細孔径1～100nmの材料が多く研究されている。分離材や吸着材、触媒あるいはその担体として使用される。古典的な多孔質材料として、シリカゲル、活性炭をはじめ、ゼオライト（沸石）、やアパタイト、セメントなどがあるが、近年、ナノテク材料開発の成果として、機能性、制御性を著しく向上させた人工合成ポーラス材料の研究例が多数出ている。

○層状物質（p.4）

グラファイトや雲母などのように、2次元的な原子面を多数積層させて構成された物質の総称。いわゆる粘土とよばれる物質にも層状構造を持つものが多い。層間の「すき間」にガスや各種分子やイオンをゲストとして吸蔵・保持する機能材料として研究が進んでいる。

○ナノチューブ（p.4）

太さがナノメートル単位の筒状の微細構造を持つ物質。カーボンナノチューブは炭素原子が網目のように結びついた筒状の物質。

○ラングミュア（p.4）

アーヴィング・ラングミュア（Irving Langmuir、1881－1957年）は、アメリカ合衆国の物理化学者。界面の物理化学の研究分野を開拓。1932年ノーベル化学賞を受賞。

○メソポーラス【材料】（p.4）

規則的、均一、かつ、寸法が、2～50nmの細孔（メソポア）を含む空間空隙制御材料（多孔質材料）。自己整合プロセスにより人工的に合成される。（細孔の径による分類として、～2nmは「ミクロポア」、50nm～は「マクロポア」という）メソポーラスシリカなど、多くの材料の合成が行われ、吸着・吸蔵材料、触媒、光学材料、DDS担体などへの応用が試みられ、一部事業化が始まっている。

○カゴ状構造物質（p.4）

ナノメートルサイズのカゴ（ケージ）状の形状を有する3次元立体的空間構造を持つ物質。ゼオライト、セメント、クラスレート、充填スクッテルダイトなど、周期結晶状の無機物質や、複雑な有機分子の集合体によって構成される立体構造物質などがある。たんぱく質の鍵と鍵穴の例えでは、鍵穴に相当する3次元的な空間構造が分子認識の本質となる。また、カゴ構造を「ホスト」と見なすと、その中に入るゲスト（分子、原子、イオン）によって機能を制御することができる。

○超分子、自己組織化（p.4）

樹状分子（ dendrimer ）や遷移金属錯体などの有機分子（超分子）は、共有結合よりは弱い結合により自己組織化し、適度な強度と機能性を備えた立体構造物質を形成する。これらの物質は「設計性」と「制御性」を兼ね備えており、材料合成手法の新しい方法論として近年急速に研究が進展している。

○ホスト／ゲスト (p.6)

「ホスト」は、物質の空間空隙を構成する格子(「フレームワーク」とも呼ばれる。。「ゲスト」は、空間空隙に内包される原子、イオン、分子。ホスト、ゲストそれぞれの機能、および、両者間の相互作用によって、物質機能が生じる。

○フレームワーク (p.9)

材料の土台となる枠組み。組成・構造の違いによって、異なる物性、反応性、機能を発現する。材料の構造をホスト／ゲストという観点でみると、フレームワークは「ホスト」に相当する。

参考文献

- [1] JST CRDS 編著「グリーン・ニューディール -- オバマ大統領の科学技術政策と日本」丸善プラネット (2009年12月)
- [2] 「物質・材料分野」俯瞰ワークショップ —— ナノテクの成果・融合の効果・今後の課題 —— 報告書, CRDS-FY2008-WR-05 (2008年12月)
- [3] 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, CRDS-FY2009-WR-05 (2010年2月)
- [4] http://www.er.doe.gov/bes/EFRC/files/EFRC_technical_summaries_Jan_2010.pdf

■戦略プロポーザル作成メンバー■

空間空隙制御・利用技術チーム

石原 聰	フェロー	(物質・材料ユニット)	チームリーダー①
金子 直哉	フェロー	(G-T e Cユニット)	
中山 智弘	フェロー／エキスパート	(物質・材料ユニット)	チームリーダー②
原田千夏子	フェロー	(物質・材料ユニット)	③
平野 正浩	フェロー	(ナノテクノロジーユニット)	④
渡辺 正裕	フェロー	(物質・材料ユニット)	
品田 賢宏	特任フェロー	(物質・材料ユニット)	
田中 一宜	上席フェロー	(物質・材料ユニット)	総括責任者

①：2009年6月23日から ②：2009年4月1日から6月23日まで

③：2009年8月18日から2010年3月25日まで ④：2009年11月17日から

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

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

～異分野融合による持続可能社会への貢献～

STRATEGIC PROGRAM

Design and Utilization Technology for Controlling Spaces and Gaps in Advanced Materials

- To assure a sustainable society by fusing multi-disciplinary fields -

平成 22 年 3 月 March 2010

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター 物質・材料ユニット
Materials Unit, Center for Research and Development Strategy
Japan Science and Technology Agency

〒 102-0084 東京都千代田区二番町 3 番地

電 話 03-5214-7483

ファックス 03-5214-7385

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

© 2010 JST/CRDS

許可無く複写／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。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

ATTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
CT CTCGCC AATTAATA
TAA TAATC
TTGCAATTGGA CCCC
AATTCC AAAA GGCCTTAA CCTAC
ATAAGA CTCTA ACT CTCGCC
AA TAATC
AAT A TCTATAAGA CTCTA ACT CTAAT A TCTAT
CTCGCC AATTAATA
ATTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTA ACT
CTCGCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTA ACT
ATTAATC A AAGA C CT
GA C CTA ACT CTCAGACC
0011 1110 000
00 11 001010 1
0011 1110 000
0100 11100 11100 101010000111
001100 110010
0001 0011 11110 000101

