

CRDS-FY2011-SP-10

戦略プログラム

「二次元機能性原子薄膜による 新規材料・革新デバイスの開発」

STRATEGIC PROGRAM

Development of New Materials
and Innovative Devices Using
Atomically Thin 2D Functional Films



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

本提言「二次元機能性原子薄膜による新規材料・革新デバイスの開発」は、近年注目を集めているグラフェン（炭素の二次元的な単原子結晶）を始めとする二次元機能性原子薄膜を用いた新規材料や革新デバイス・ナノシステム*の研究開発に関するものである。

「二次元機能性原子薄膜」とは、原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面・界面などに有する機能性を持った薄膜物質と定義して用いている。これらは、従来のバルクや単なる薄膜とは異なる特性・構造を持ち、新しい機能や従来材料の特性を凌駕する機能を発現することが可能であり、新規材料や革新デバイスの開発につながることを期待されている。本研究開発を実施することで、次世代の電子デバイス・システムに求められる大幅な低消費電力化、小型化およびそこに付加される新機能の創出が期待される。それにより、わが国のエレクトロニクス産業および次世代の電子デバイス・ナノシステムに供される関連産業の国際競争力の強化を図ることが可能になる。さらに、基礎科学における新機能の発見や機能性原子薄膜研究に関する学術分野間の融合促進、並びに本分野を国際的にリードする若手研究開発人材の中長期的な育成につながることも期待される。この分野はまさに現在国内外で研究が沸騰し始める状況にあり、今後日本がこの分野で先導的な役割を果たすためにも、早期の国家的な研究開発施策を実施することが必須と思われる。

提言する具体的な研究開発課題は、「アプリケーション・ニーズに応える機能性原子薄膜による革新デバイス基盤技術の創出」と「シーズ技術の先鋭化に資する新構造原子薄膜の機能研究とデバイス設計学理の創出」の二点に集約される。アプリケーションからの明確な機能への要求に基づく課題と、その要求に応えるシーズ技術課題の、重層的な研究開発が求められる。アプリケーションを目指した研究開発はグラフェンを代表とした物質について、透明電極、導電性薄膜、LSI用の配線、センサー、高速電子デバイスなどへの応用を目標とする。シーズ技術に関する研究テーマとしては、原子薄膜に関する様々な要素技術、特に機能性原子薄膜の合成技術、結晶成長技術、加工プロセス技術、計測・分析・評価技術、探索理論解析・シミュレーション技術などを対象とする。

このような重層的研究開発を実施することで、実用技術開発により得られた技術を基礎研究へフィードバックすることが可能となり、その結果新たなゲームチェンジング・テクノロジーの創出につながることを期待される。

本提言に掲げる目標を実現するためには、いくつかの戦略的な研究開発の推進方策が必要となる。

国際的な研究開発の競争がますます激しくなる中で、研究開発の投資効率を可能な限り向上させ、実用化までの開発のスピードアップを図るための共通インフラとして、TIA**（つくばイノベーションアリーナ）の活用を提案する。現在ナノエレクトロニクス関係だけで100名程度（TIA全体で約300名）の企業研究者が参加しているTIAを中心としたプロジェクト型研究と、JSTなどの公募型プログラムによって構成される施策を連携して実施することで、当初から産業界と一体的な産学独連携研究開発の推進が可能になる。

プロジェクトの内容検討に当たっては、文部科学省、経済産業省および関連する独立行政法人とも十分な連携をとった上で、産業界の意見を取り入れ、実用化へ向けた産業界のコミットメントも担保することが必要である。

研究開発投資にあたっては、公募でおこなう場合の応募者、例えば物理的アプローチと化学的アプローチの両方の研究チームの異分野融合を求めるような制度設計により、なかば強制的に融合研究を推進することを提案する。また、この分野に中長期的に必要となる人材育成を進めるには、科研費などの学術研究の成果を、JSTの戦略的創造研究推進事業のような課題達成型基礎研究へ展開する制度を経て、さらにNEDO等の実用化開発を図るプログラムへつなげるシームレスなファンディングシステムの導入が必要である。

グラフェンを例にとると、わが国の研究開発施策は欧米に比較して不活発であり、この分野における国際的な貢献も低いとの声が大勢である。しかしながら、日本は材料分野の研究では国際的にトップレベルであり、機能性原子薄膜研究では、物理学者と化学者の連携・融合が核心であることを考えると、今後のわが国の取り組みとして、周辺分野との融合、応用分野との垂直連携を基軸とし、さらに人材育成や国際連携も視野に入れた大型の国家プロジェクトやプログラムを推進すべきである。これらの二次元機能性原子薄膜の研究開発の進展により、将来的には新規材料を使った超低消費電力エレクトロニクスデバイス・システムを実現し、今後の持続性社会実現に強く求められる省エネルギー、省資源を達成し、社会的期待を充足していくことを目標とする。

(*) 「ナノシステム」とは、ナノテク・材料分野の要素技術や他の要素技術を集積【統合・融合】し、全体として重要課題の解決に資する高度な機能を提供することが可能で、かつ社会的に認知される部品・装置・システムのことと定義する。

(**) TIAは平成22年に閣議決定された「新成長戦略」において科学技術で成長を促すものの一つとして記載され、また「第4期科学技術基本計画」の中で推進する産学官協働の場に対応している。さらに、TIAで推進されているプログラムのいくつかは、総合科学技術会議が定めた平成24年度科学技術重要施策アクションプランの対象施策に選定されている。

Executive Summary

This proposal, entitled "Development of New Materials and Innovative Devices Using Atomically Thin Two-Dimensional Functional Films," is about research and development (R&D) of new materials, innovative devices, and nanosystems¹ that use atomically thin two-dimensional functional films such as graphene which has attracted attention in recent years.

An atomically thin two-dimensional functional film is defined as a functional thin-film material whose surface or interface has a two-dimensional atomic crystal structure or an equivalent two-dimensional electronic state. Such films have properties and structures different from those of traditional bulk materials or simple thin films, are capable of having new functions or functions superior to those of traditional films, and are anticipated to contribute to the development of new materials and devices. The proposed R&D is expected to lead to significant reduction in power consumption and device size, which is needed for next-generation electronic devices and systems, and to the creation of new functions incorporated into such systems. These potential outcomes can strengthen the international competitiveness of Japan's electronics industry and other industries related to the production of electronic devices and nanosystems. Moreover, it is hoped that the proposed R&D will lead to the discovery of new material functions in basic science, to integration of academic fields related to functional thin-film research, and to medium- to long-term training of young researchers who will become international leaders in this field. At present, the field is indeed at a stage where research activities are being intensified in Japan and overseas, and thus it is essential to implement national R&D policies early so that Japan can play a leading role in this field.

Two main R&D-related challenges are proposed: (1) creation of fundamental technologies for innovative devices with atomically thin functional films that serve application needs and (2) research on the functions of atomically thin films with novel structures and establishment of scientific principles in device design that will contribute to advancing technologies offered to the market. A multilayered approach to R&D is necessary that responds to both the first challenge, which is based on clear user needs, and the second challenge for which such needs are met through the provision of relevant technologies. Application-oriented R&D is aimed at the practical use of graphene and other materials in transparent electrodes, conductive thin films, LSI wiring, various sensors, and high-speed electronic devices. Research topics related to technologies offered to the market include various component technologies associated with atomically thin films, particularly synthesis technologies; crystal growth technologies; manufacturing technologies; measurement, analysis, and

evaluation techniques; and exploratory theoretical analysis and simulation methods.

Achieving the goals in this proposal requires several measures for promoting strategic R&D.

As international competition in R&D becomes increasingly severe, this proposal suggests utilizing the Tsukuba Innovation Arena (TIA)² as a common infrastructure for improving the efficiency of R&D investment to the greatest possible extent and for increasing the speed of pre-application development. Through research projects centered on the TIA (which has 100 corporate nanoelectronics researchers and 300 researchers overall), and through publicly offered projects sponsored by JST and other organizations, it will be possible to promote R&D projects that are conducted cooperatively by industry, universities, and independent administrative agencies. With regard to the details of projects, it is necessary to strongly collaborate with the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology, the Ministry of Economy, Trade and Industry, and relevant independent administrative agencies, to incorporate opinions from industry, and to secure industry's commitment to efforts for realizing the practical application of technologies.

As for the promotion of R&D, execution of the aforementioned multilayered R&D is expected to bring about incorporation of techniques gained through the development of applied technologies into basic research and will consequently lead to the creation of game-changing technologies.

As for R&D investment, this proposal suggests that integrative research be promoted somewhat forcibly by designing rules that require interdisciplinary collaboration among applicants to a publicly offered program, for example, between a team that approaches problems from a physics standpoint and a team that approaches problems from a chemistry standpoint. Also, in order to promote training of researchers which will be needed in the field of atomically thin films, a funding system must be established that will seamlessly connect the results of academic research projects receiving Grants-in-Aid for Scientific Research to objective-oriented basic research supported by, for example, the JST Strategic Basic Research Programs and then to programs for the development of practical applications sponsored by the New Energy and Industrial Technology Development Organization and other organizations.

In the case of graphene, Japan's R&D policy is less active relative to those of European countries and the United States, and it is generally considered that Japan makes only a small contribution in this field. However, Japan is a leading country in the field of materials science. Since cooperation and collaboration among physicists and chemists is essential to research on atomically thin functional film, Japan's future efforts

should include promotion of large-scale national projects and programs that not only are based on research integrated with related fields and "vertical" cooperation with applied fields, but also should include researcher training and international cooperation. The goal is to realize ultra-low-power electronic devices and systems with new materials, to achieve energy and resource conservation, which is strongly needed to create tomorrow's sustainable society, and to meet societal expectations.

¹ A nanosystem is defined as a part, device, or system that is socially recognizes and is capable of providing high-level functions contributing to the solution of important issues as an aggregate/integration/unification of component technologies in the fields of nanotechnology and materials science and other fields.

² The TIA is listed as one of the factors in science and technology that contribute to growth in the New Growth Plan approved by the Cabinet in 2010 and satisfies the description of the place for industry-academia-government cooperation promoted in the Fourth Science and Technology Basic Plan. Also, some of the programs promoted by the TIA are included in the Action Plan for the 2012 Priority Measures in Science and Technology.

目 次

Executive Summary

1. 提案の内容	1
2. 研究投資する意義	3
3. 具体的な研究開発課題	6
4. 研究開発の推進方法	10
5. 科学技術上の効果	12
6. 社会・経済的効果	14
7. 時間軸に関する考察	16
8. 検討の経緯	17
9. 研究開発課題の詳細	20
10. 国内外の状況	30
専門用語説明	33
参考文献	34

1 提案の内容

本提言は、近年のナノテクノロジーやナノエレクトロニクス技術の進展に伴い、その驚異的な物性が明らかになりつつあり、世界的に注目されているグラフェンを始めとする、二次元機能性原子薄膜を新規材料・革新デバイス・ナノシステムに応用しイノベーションへ導くための重要課題とその推進方策を提案するものである。「二次元機能性原子薄膜」とは、原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面、界面などに有する機能性を持った薄膜物質と定義する。従来のバルク物質や単なる薄膜とは異なる特性・構造を持つことで、新たな機能や従来材料の特性を凌駕する機能を発現することが可能であり、新規材料や革新デバイス・ナノシステムの開発につながることを期待される。

提言する研究開発の内容は大きく以下の2点に集約される。

(課題 A) アプリケーション・ニーズに応える機能性原子薄膜による革新デバイス基盤技術の創出

(課題 B) シーズ技術の先鋭化に資する新構造原子薄膜の機能研究とデバイス設計学理の創出

明確な機能への要求（ニーズ）に基づく機能設計技術と開発技術の研究開発（課題 A）を縦糸とし、その課題に応えるシーズ技術の多様性拡張と機能設計手法の学理抽出（課題 B）を横糸とする、重層的な研究戦略を提案する。

課題 A に関しては、現在注目を集めている代表的な原子薄膜として、グラフェンを中心に研究開発を提案する。主な応用先としては、透明電極、導電性薄膜、LSI 用の配線、センサー、高速電子デバイスなどである。

課題 B に関しては、課題 A を実現するために不可欠となる要素技術、特に機能性原子薄膜の合成技術、結晶成長技術、加工プロセス技術、計測・分析・評価技術、探索理論解析・シミュレーション技術などである。

これらを実行する上で求められる研究開発の推進方法は、以下である。

1. 実用技術開発を推進する水平展開型応用研究とシーズ指向型創造的基礎研究の重層的な研究開発の推進

従来のリアモデルの研究開発ではなく、実用技術開発により得られた技術を学術・基礎研究へフィードバックすることで、従来と異なる方向性の研究推進が可能になり、その結果新たなゲームチェンジングテクノロジーを創出する。

2. TIA（つくばイノベーションアリーナ）における産学独連携プロジェクトの推進

現在ナノエレクトロニクス関係だけで100名程度（TIA全体で約300名）の企業研究者が参加しているTIAを中心としたプロジェクト型研究とJSTやNEDOなどが連携するかたちでの公募型プログラムによって構成される施策を実施することで、当初から産業界と一体的な産学独連携研究開発の推進が可能になる。プロジェクトの内容検討に当たっては、文部科学省、経済産業省および各関連する独立行政法人とも十分な連携をとった上で、産業界の意見を取り入れ、実用化へ向けた産業界の

コミットメントを担保することが必要である。国際的な研究開発競争が激化する中で、研究開発の投資効率を可能な限り向上させ、実用化までの開発のスピードアップを図るための共通インフラとして TIA の十分な活用を提案する。

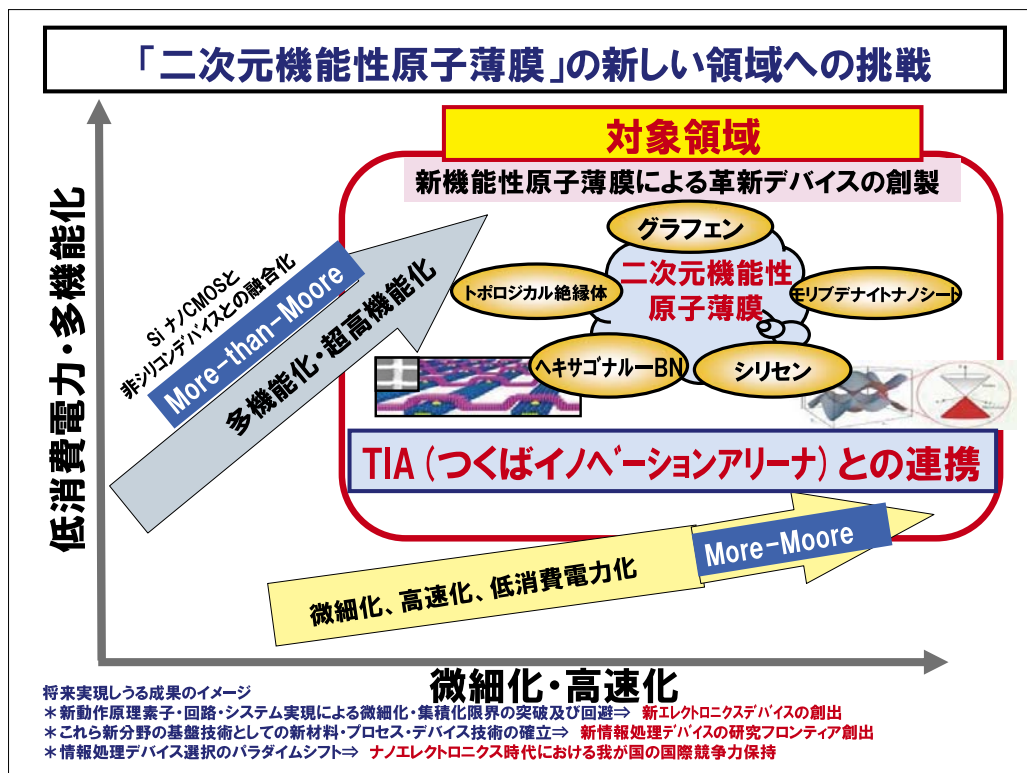
3. 異分野融合を誘導する制度設計と研究開発人材の中長期的な育成

研究開発投資にあたっては、公募でおこなう場合の応募者、例えば物理的アプローチと化学的アプローチの両方の異分野融合による共同提案を求めるような制度設計により、なかば強制的に融合研究を推進することを提案する。また、この分野に中長期的に必要な人材育成を進めるには、科研費などの学術研究の成果を、JST の戦略的創造研究推進事業のような課題達成型基礎研究へ展開する制度を経て、さらに NEDO 等の実用化開発を図るプログラムへつなげるシームレスなファンディングシステムの導入が必要である。

4. アジアを中心とする国際連携

現在、グラフェンに関して応用に重点を置いた研究が進んでいるアジア諸国との連携を提案する。日本の基礎研究の強みを生かし、win-win の関係を築くことが可能であり、国際共同型の研究プロジェクト推進を提案する。

「二次元機能性原子薄膜による新規材料・革新デバイスの開発」が目指す研究開発の対象領域は下図のような位置づけになる。



2 研究投資する意義

本研究開発に投資する意義は、以下の3点に集約される。

1. 次世代のデバイス・ナノシステムの創出に求められる抜本的な低消費電力・省エネルギー化と小型化、およびそこに付加される新機能の創出
2. わが国のエレクトロニクス産業並びに次世代のデバイス・ナノシステムの創出等に供される関連産業の国際競争力の強化
3. 基礎科学における新機能の発見および二次元機能性原子薄膜研究に資する学術分野間（物理学、化学、関連するデバイス物理）の融合促進、並びに本分野を国際的にリードする研究開発人材の中長期的な育成

第一の意義は、本研究開発の結果として、次世代のデバイス・ナノシステムの創出等に求められる抜本的な低消費電力・省エネルギー化と小型化、およびそこに付加される新機能の創出をおこなうことである。

これまでシリコンを中心に進展してきたデバイス技術は、2000年代に入って微細化の限界が現実的な壁として議論され始めて久しい。世界のエレクトロニクス企業はこの限界突破の対策が必要な局面に立たされているが、未だ明確な突破口は確立されていない。しかしながら、この分野の研究開発は長い時間と多額の資金が必要であり、わが国の産業界だけでは手を打てない状況にある。海外では既にこの状況を回避するために、次世代のデバイス研究に大規模な研究開発投資が行われている（第10章に詳細記載）。本提言では、シリコンを中心としたエレクトロニクスデバイスの微細化、集積化、低消費電力化の限界を突破または回避できる可能性がある科学技術として機能性原子薄膜を捉え、新動作原理素子・回路・システムを実現することによる「次世代デバイス・ナノシステムの創出」が目標となる。

過去、シリコン CMOS 技術はムーアの法則に沿った微細化、集積化により、高性能化、低消費電力化、低コスト化が進められてきた。しかし、シリコン CMOS 技術の微細化限界は ITRS（国際半導体技術ロードマップ）における検討のなかで、限界に到達するであろうその先（Beyond CMOS）を探求するアプローチが求められている。ITRS の ERD（Emerging Research Devices）と ERM（Emerging Research Materials）のワーキンググループでは、現在の CMOS 動作原理とは異なる新しい動作原理を用いた新デバイス、新回路、新システムの実現を提案している。こうしたなか、CMOS デバイスを中心にした従来のデバイス・システムは、電子に基づく動作原理による電子デバイスが主流であったが、新デバイスの登場による異なる動作原理に基づくデバイスの選択肢を獲得できる可能性がある。これらの新動作原理に基づくデバイスは、超低消費電力や超高速性等を特徴としており、IT 機器の設計自由度を大きく向上させる。更に幾つかの動作原理に基づくデバイスで構成された融合デバイスの実現により、そのデバイス選択肢はより多様になり、パラダイムシフトを引き起こす可能性がある。また、この過程で実現される材料技術、プロセス技術、デバイス技術、回路技術を他の動作原理デバイスへ応用することで、デバイス作製技術に大きなブレークスルーを引き起こすことが期待される。エレクトロニクス動

提案の内容

研究投資
する意義

具体的
な
研究開発
課題

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

研究開発
課題の詳細

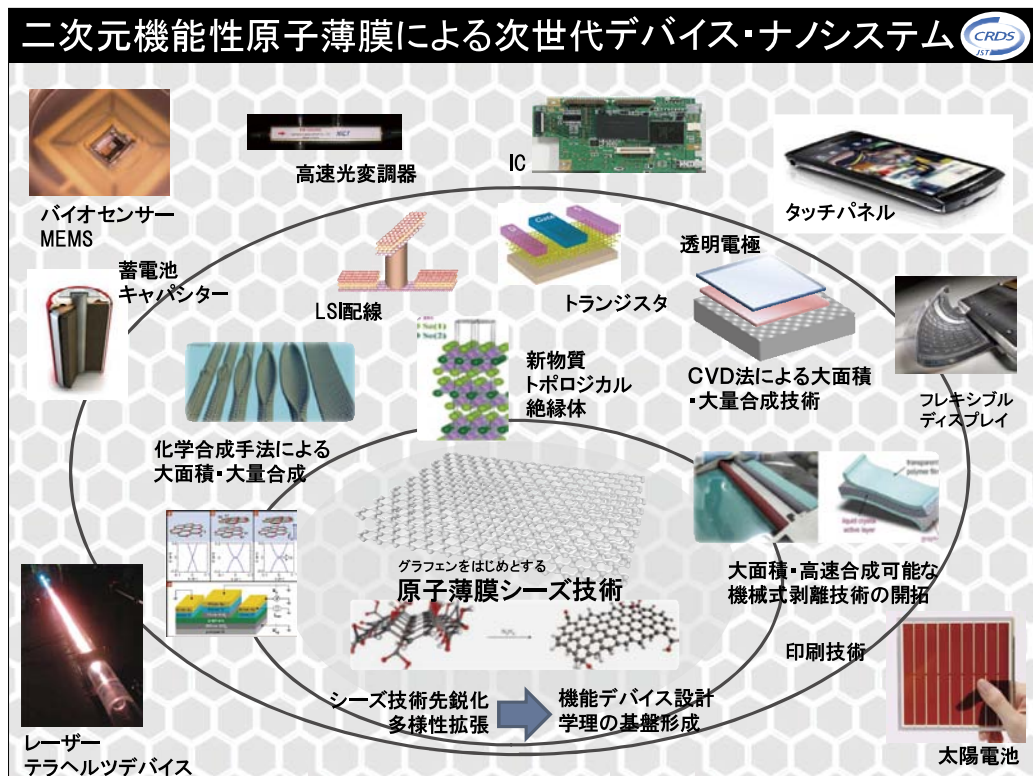
国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

作に際してのエネルギーロス最小化には、究極的に薄い膜、つまり原子層レベルの薄膜が理想的であり、本提言を実施することでこれらが実現できる可能性がある。機能性原子薄膜によって実現される新デバイス・システムは、シリコン CMOS より更なる消費電力の低減を可能とし、今後の IT 機器増加による消費電力増大の懸念に対応するものである（第 6 章に IT 機器の増加に伴う電力需要予測について詳細記載）。二次元機能性原子薄膜を用いたデバイスの一つの狙いは、現在の低消費電力原理限界を突破することであり、電力消費量の抑制を牽引することで、省エネに対して大きな効果をもたらすことが期待される。

また、次世代デバイス・ナノシステムにおける新機能は、多方面での応用が期待されており、具体例としては、タッチパネルやフレキシブル・ディスプレイ、薄膜太陽電池に用いられる透明電極（導電性フィルム）、LSI 配線、高速光変調器、リチウムイオン電池、太陽電池、バイオセンサ等があげられ、モバイルコミュニケーションとクラウドシステムが構成する真のユビキタス社会実現に大きく寄与することが期待される。



第二に、わが国のエレクトロニクス産業並びに次世代のデバイス・ナノシステムの創出等に供される関連産業の国際競争力の保持・強化に資することを目的とする。

エレクトロニクスは広い産業分野を支えるキーテクノロジーであるが、CPU などのアーキテクチャでは欧米に先行され、メモリなどの製造では韓国、台湾を筆頭にアジア諸国が台頭している。今後、シリコン CMOS の延長では対応できない「次世代エレクトロニクスへの壁」を突破できた国および企業が、10 ～ 20 年後の関連産業の主導権を握ると考えられるが、もはや一国一企業だけでは実現することのできない極めて高度な研究開発力と、その後の大規模な産業展開が求められる。本提言は、わが国の強みを活かしてそれらを特にアジア地域での国際連携によって実現し、わが国産業の国際的地位を確たるものにしていくことが狙いである（上述の具体応用例に関しての市場や将来予測については第 6 章

に記載)。次世代エレクトロニクスが現実的なものになるであろう 10 ～ 20 年後にも、日本が関連産業において現在と同様に国際的に重要な位置を占めるためには、これから長期にわたる産学官の連携した取り組みが不可欠であり、日本の持続的な地位確保を狙うものである。また、二次元機能性原子薄膜によって、安価で豊富な元素を用いて従来以上の機能を持つ材料機能を創出することが実現すれば、様々な産業分野において元素の希少性や地域偏在を危惧することなく、産業構造に大きな変革をもたらすことが期待される。

第三の意義として、基礎科学における新しい機能の発見および二次元機能性原子薄膜研究に資する学術分野間の融合促進、並びに本分野を国際的にリードする研究開発人材の中長期的な育成が挙げられる。

二次元機能性原子薄膜には、(1) 二次元性という構造の単純性や独特の対称性により、三次元的物質と比べて特異な性質を有する、(2) 異種材料との組み合わせが容易である、(3) 薄膜であるがゆえに例えば電界による外部変調が容易である、等々の多くの長所があり、新しい機能を発現できる可能性が高い。同時に、その諸課題には今後新しいサイエンスが生まれる可能性が含まれており、理論的な新概念が得られれば研究が大きく進展するとの期待が大きい。これまでは、高品質な原子薄膜をそもそも安定的に作製することが困難であったため、学術的に未解明の問題が数多く残されている。しかしながら近年、グラフェン研究のノーベル賞受賞に代表される世界的な成果以降、内外で様々な新しい薄膜作製手法が見出されている。日本はこれまで半導体で培った結晶成長技術など、産学には多くの展開可能な技術や知識が蓄積されており、それらを活用して従来の薄膜とは異なる究極の物質としての原子薄膜研究をおこなうことで、新しい理論やそれにもとづく新たな特性・新材料・新デバイスへの展開が生まれる可能性がある。これまでわが国における原子薄膜研究は、主として応用物理学会に軸足を置く大学研究者や一部の企業でおこなわれてきたが、上記の新しい展開を生むためには、今後は物理学、特に固体物理の理論家、実験家と、合成化学や分子設計の専門家との融合研究が不可欠である(第5章に詳述)。さらに、究極の物質系である原子薄膜を設計して自在に作製し、目的とする機能を発現させることや、実用的なデバイスを生み出すためには、近年進展の著しい計測技術や計算科学との協働も必須であり、そうした学際融合の研究から新たな研究領域や課題の発見、新しい取り組みが生まれるものと期待される。それはすなわち、新電子デバイス・システム研究のフロンティアを創出することに他ならない。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

3 具体的な研究開発課題

機能性原子薄膜には、その構造の特異性・新規性に基づいた、これまでにない多様かつ高度な機能の発現が期待されている。また、その二次元的構造の単純性から、物質の機能を設計する原理を明らかにするために適した基本的な材料といえ、原子薄膜の構造と機能に関する基礎学理の構築と機能デバイス応用双方の視点を包括する戦略的研究推進が求められる。

機能性原子薄膜の一例を挙げると、現在注目を集めている代表的な原子薄膜として、炭素の二次元的な単原子層結晶であるグラフェンがある。その二次元的な結晶構造に由来する特異な電子状態を反映して、集積回路の主役である半導体シリコンの100倍ともいわれる巨大な電子移動度や、驚異的な機械強度、大きな熱伝導率等の特徴が注目を集め、次世代エレクトロニクス材料をはじめ、多様な技術分野におけるブレークスルーの可能性を秘めた材料として、潜在的可能性に期待が持たれている。その際立った特徴を、デバイス新機能の発現や既存デバイスの高機能化・高性能化につなげるための機能設計を志向する基盤技術研究を、以下では課題Aとして3.1に提示する。

一方、原子薄膜はその構成元素の種類や構造と物性の関係、あるいは、合成技術等が必ずしも明確になっていない研究途上の段階にある物質群を多く含み、今後これまでに知られていなかった構造や機能が見出される可能性が大いにある。このような背景から、応用上重要な機能が現段階では知られていない原子薄膜も、その構造と機能の関係や、合成・制御の方法を理論的・実験的に明らかにする研究と、その原理的本質の解明および体系化が重要であり、その中から将来の機能設計に資する原子薄膜を合理的に見出すための基盤的知識体系（学理）が構築される。このようなシーズ技術の先鋭化や多様性の拡張に資する研究は、機能設計を志向する課題Aと対比して、課題Bとして3.2に提示する。

課題Aおよび課題Bは、革新デバイス創成と新物質の探索という観点で不可分・表裏一体の研究課題であるが、研究を推進する際の思考過程が、構成的であるか分析的であるか、深化を志向するか拡張的であるか、現象論的か本質論的か、などの観点では相反する側面を多分に有し、異分野間の用語や文化の違いなども加わって、それぞれを担う研究者・研究組織同士の連携や融合的研究が容易には進まない不確実性を有している。本研究プログラムは、それらの研究課題を統合的に擁する研究領域を設定し、研究者・研究組織の相互作用を誘引する仕組みを内蔵する重層的な研究戦略を構成することを提案する。

3.1 アプリケーション・ニーズに応える機能性原子薄膜による革新デバイス基盤技術の創出（課題A）

- (1) 透明電極・配線・導電性薄膜など、極限薄膜としての導電性に着目し、同時にその他の特異的物質機能を付加した応用技術に関する研究。

特異的性質の例としては、低抵抗性、柔軟性、透明性、高強度、高耐熱等がある。既存技術である酸化物導電膜等との機能差別化が重要課題の一つとなる。

- (2) センサーデバイス等、原子薄膜の物性が物質の吸着などにより敏感に変化する性質（高感度性）をデバイス応用する技術に関する研究。

選択性、安定性、再現性等の指標とのバランスを考慮した物質とデバイスの設計が重要課題である。

- (3) 高速電子デバイス等、原子薄膜中の電子の高速輸送特性など特有の優れた電子物性をデバイス応用する技術に関する研究。

例えば、トランジスタチャネルの原子薄膜化による高速化の研究に加え、ソース・ドレイン・ゲート電極等のデバイスの構成要素としての電極への原子薄膜応用、スピン流の発生・制御を基本原理とするスピントロニクス・デバイスへの応用研究等を含む。また、機能性原子薄膜としては、グラフェン以外にも、トポロジカル絶縁体（下記 3.2. (1) 参照）など二次元的な電子状態を介して高速電子伝導や磁気的に特異な性質を発現する物質群があり、それらを含む新規材料の理論的物性解明と革新的デバイスへの応用を志向する研究は、本研究課題に含まれる。デバイスイメージを持たない機能探索フェーズの研究で、原理的な重要性を有する研究は課題 B で扱う。

- (4) 原子薄膜と異種材料との接合による新機能デバイスの提案と原理実証。

原子薄膜は構造が確定しており、原子レベルでの膜厚制御が原理的には可能であり、他の異種材料との接合により新構造・新原理デバイスを設計する際のビルディングブロックとして原子薄膜を活用するデバイスの研究は、新機能デバイス開発の戦略として有効である。また、電子と光、あるいはスピン、スピン流、格子振動等との相互作用に起因する原子薄膜の特異な物性を応用するデバイス開発も挑戦的なテーマとして本課題に含める。ここでは、トランジスタのみでなく、例えば、熱電変換デバイスのように、電子伝導と熱伝導（格子振動の伝播）の独立的な制御を、原子薄膜の構造・物性制御に帰着させて実現しようとする革新的熱電変換デバイスのような、画期的かつ挑戦的なデバイス材料技術の研究開発を含む。

- (5) デバイス機能を発現・最適化するための物質構造およびデバイス構造の探索および計算機シミュレーション技術。

デバイス機能の実現や最適化等に必要な性質を有する原子薄膜の設計・シミュレーションは重要課題となる。例として、原子薄膜を高速トランジスタのチャネルとして用いようとする場合には、半導体的な性質の確認、なおかつ、他の物質では得られない高電子移動度や高電流密度、高 ON / OFF 比等を得られる原子薄膜の設計および計算機シミュレーションが必要不可欠となる。近年計算機の進歩に伴って進展の著しい第一原理による電子状態計算や、各種輸送シミュレーションの成果を戦略的に組み込む必要がある。

3.2 シーズ技術の先鋭化および多様性の拡大に資する新構造原子薄膜の創出および電子機能の研究とデバイス設計学理の創出（課題 B）

- (1) 原子薄膜の完全結晶実現を志向する結晶成長・合成技術の創出。

対象となる原子薄膜の一例として、グラフェン（多層を含む）、シリセン（グラフェンのシリコン版）、硫化マグネシウムなどの研究例がある。また、層状化合物の無機ナノシートや有機分子の二次元的自己組織化プロセスは、原子薄膜形成技術の開発に有力な示唆を与える。既存技術をヒントに、新規な原子薄膜構造を設計する手法の研究は本研究課題の趣旨に鑑み、大いに推進すべきである。研究推進に当たっては、

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
の説明

参考文献

実験的研究と、合成メカニズムに関する理論モデリング・シミュレーションの研究が協調的に実施される必要がある。また、三次元的なバルク結晶の表面や界面に出現する二次元的な電子状態が、原子薄膜と等価で特異な性質を示す物質群が近年発見され、トポロジカル絶縁体と呼ばれて研究が活発化している。このように、これまでに知られていない新規の原子薄膜およびそれと本質的に等価な物理的対象の探索は挑戦的な研究として本研究課題に含まれる。どのような物質、構造の場合でも、原子薄膜であれば、その下地基板との相互作用や触媒の選定や後処理などは共通のキー技術であり、想定される応用形態に応じて柔軟なプロセス技術開発が必要となる。この派生研究として、完全結晶を変調する技術、すなわち、原子層数制御、pn制御、キャリア濃度制御、禁制帯幅制御、エッジ状態制御、異種材料との接合形成技術等があり、応用研究と不可分な構造形成に関わる要素技術研究課題群を構成する。

(2) 原子薄膜の構造や物性に関する計測・解析・加工プロセス技術開発

a) 原子薄膜の構造及び物性の計測・解析技術の研究開発

構造解析（電子線、X線、中性子等の回折技術、電子顕微鏡、走査プローブ顕微鏡等、各種顕微鏡技術）、化学結合状態解析（ラマン分光法、光電子分光法、電子スピン共鳴法等）、光学的特性、電子輸送特性解析技術は、手法としては確立しているが、原子薄膜の評価・解析手法としては必ずしも確立していない。合成・制御・加工プロセス開発研究の中にこれらの計測・解析手法を組み込んだ上で、これまでにない革新的かつ挑戦的な評価手法の研究開発が本課題に含まれるべきである。

b) デバイス加工プロセス技術の研究開発

原子薄膜の加工プロセス技術は、デバイス構造形成に必須であり、原子薄膜の構成元素と結合形態、および基板等支持媒体を考慮した、低ダメージで精度の高いエッチングや蒸着、吸着等のプロセス要素技術の開発は避けて通ることができない。この研究開発を効果的に推進するためには、無機・有機化学、プラズマ工学、イオン、電子等の各種ビーム技術、既存の半導体プロセス技術など物理学、化学に関する深い洞察と幅広い技術知識の体系が必要であり、それらの融合的な研究体制が必須である。

(3) 原子薄膜新構造の機能解明と学理構築

課題Aのデバイス応用を見据えた観点から、注目する機能として、機械的強度、耐熱性、導電率、移動度、光透過率、熱伝導率、キャリア濃度、スピン分極率、スピン流密度等が挙げられるが、本課題Bでは、直接の応用が現時点で見出されていなくとも、原理的な重要性を有する物理的性質について、その制御方法とその科学原理の解明をテーマとして扱うことができる。ただし、その重要性は戦略的ストーリー性を持って語られ、判断されなくてはならない。原子薄膜の構造と機能の対応関係を明確化するとともに、基礎的知見をデータベース化し、その機能設計の指導原理を抽出することにより、課題Aで提示された応用志向型研究課題に対しても、重厚な説得力を有する示唆を提供可能な基盤的知識体系を戦略的に構築する。この研究課題には、原子薄膜の新機能に関する理論モデリング・計算機シミュレーション技術の研究開発が有機的に組み込まなければならない。これらは、シーズ研究（課題B）とニーズ対応研究（課題A）の橋渡しとなる重要な研究課題と位置づけられる。

デバイス機能設計に本質的に重要な、電子輸送特性、光吸収特性、フォノン散乱や熱伝導、スピン流、スピン伝導等の物理的・化学的相互作用に起因する物性に関する基礎的知見の探求とその蓄積を、革新的な機能デバイス開発の設計指針抽出にフィードバックすることにより、課題 A との協奏的な研究の推進環境を構築する。

これら課題 A と課題 B は、明確なデバイス機能への要求（ニーズ）に基づく機能の設計技術と製造プロセス技術の研究開発（課題 A）を縦糸とし、その課題に応えるシーズ技術の先鋭化、多様性拡張、および、それらの知見の整理による機能設計手法の学理抽出（課題 B）を横糸とする重層的な研究戦略を形成する。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

4 研究開発の推進方法

前章に示す研究開発課題に取り組むには、以下に示す4つの戦略的な研究開発の推進が必要となる。特にTIA（つくばイノベーションアリーナ）を活用したプロジェクト型研究とJSTやNEDO等が連携するかたちでの公募型プログラムによって構成される推進方法が望ましい。

1. 実用技術開発を推進する水平展開型応用研究とシーズ指向型創造的基礎研究の重層的な研究開発の推進

従来のリニアモデルの研究開発ではなく、実用技術開発により得られた技術を学術・基礎研究へフィードバックすることで、従来と異なる方向性の研究推進が可能になり、その結果新たなゲームチェンジングテクノロジーを創出する。

2. TIA（つくばイノベーションアリーナ）における産学独連携プロジェクトの推進

現在ナノエレクトロニクス関係だけで100名程度（TIA全体で約300名）の企業研究者が参加しているTIAを中心としたプロジェクト型研究とJSTやNEDO等が連携するかたちでの公募型プログラムによって構成される施策を実施することで、当初から産業界と一体的な産学独連携研究開発の推進が可能になる。プロジェクトの内容検討に当たっては、文部科学省、経済産業省および各関連する独立行政法人とも十分な連携をとった上で、産業界の意見を取り入れ、実用化へ向けた産業界のコミットメントも担保することが必要である。国際的な研究開発競争が激化する中で、研究開発の投資効率を可能な限り向上させ、実用化までの開発のスピードアップを図るための共通インフラとしてTIAの十分な活用を提案する。

3. 異分野融合を誘導する制度設計と研究開発人材の中長期的な育成

研究開発プロジェクトの公募にあたっては、応募者について、例えば物理的アプローチと化学的アプローチの両方の研究チームの異分野融合による共同提案を求めるような制度設計により、なかば強制的に融合研究を推進することを提案する。また、上述のような拠点を活用したプロジェクト型の研究において、産学独の研究者が連携して研究開発を行うことを公募要件にした制度を検討することを提案する。

この分野の研究開発を効率的に進めるには、科研費などの学術研究の成果をJSTの戦略的創造研究推進事業のような課題達成型基礎研究へ展開する制度を経て、さらにNEDO等の実用化開発を図るプログラムへつなげるシームレスなファンディングシステムが必要である。

4. アジアを中心とする国際連携

アジア諸国との連携を提案する。グラフェンを例に見ると欧州では基礎研究から応用研究・イノベーション創出まで、多くのプロジェクトが推進されており、また米国では多数の個別研究機関の研究が非常に盛んである。一方で欧米に比べアジアでは応用に重点を置いた研究が進んでおり、日本の基礎研究の強みを生かしたwin-winの関

係を築くことが可能であり、アジアとの国際共同型の研究プロジェクトを提案する。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

5 科学技術上の効果

本提言の実施により、次のような科学技術上の効果が期待される。

- 1) 新規材料・革新デバイスを支える新機能の発現と新技術の開発
- 2) 二次元機能性原子薄膜にかかわる新しいサイエンスの創出
- 3) 二次元機能性原子薄膜の研究に資する学術分野間の融合促進、並びに本分野を国際的にリードする研究開発人材の中長期的育成

5.1 新規材料・革新デバイスを支える新機能の発現と新技術の開発

第1章で述べたように、本提言が対象とする『二次元機能性原子薄膜』、すなわち原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面、界面などに有する機能性を持った薄膜物質には、

- ・構造の単純性や独特の対称性により、三次元的物質と比べて特異な性質を有する
- ・異種材料との組み合わせが容易である
- ・薄膜であるがゆえの実用的特長を有する。例えば、電界による外部変調が容易である等々の多くの長所がある。このため本提言の実施によって新しい機能を発現できる可能性は高い。

このような二次元機能性原子薄膜の長所や可能性は以前から指摘されていたが、高品質な原子薄膜を安定的に作製することが困難であったため、実験的研究やそれに基づく理論的研究の壁となり、学術的に未解明の問題が数多く残されてきた。しかしながら、二次元機能性原子薄膜の代表例であるグラフェンの研究によるノーベル賞受賞のきっかけとなった世界的な成果以降、内外で様々な新しい薄膜作製手法が見出され、現在、第10章に示すように国内外において関連研究が進みつつある。また、最近では、例えばグラフェンのシリコン版とも言うべき新材料“シリセン”のような新しい物質も脚光を浴びている。こうした世界の潮流の中で、日本は独自の高い技術を有するカーボンナノチューブ（CNT）に研究の主体を置いてきたこともあって、グラフェンの研究については世界のトップレベルからやや差をあげられているとの見方が強い。しかしこれまで半導体で培った結晶成長技術など、多くの展開可能な技術や知識が蓄積されており、ナノテクノロジー・材料分野全般では依然として世界のトップレベルにある。わが国でそれらの技術蓄積や知識を活用して、従来の薄膜とは異なる究極の物質としての機能性原子薄膜研究をおこなうことにより、グラフェン等の二次元機能性原子薄膜完全結晶を設計通りに形成する技術などの新技術が開発され、それにもとづく新規材料・革新デバイスへの展開が生まれることが期待される。

5.2 二次元機能性原子薄膜にかかわる新しいサイエンスの誕生

第3章にも示すように、二次元機能性原子薄膜には、その構成元素の種類、構造と物性・機能との関係、合成・制御の方法等が必ずしも明確になっていない、研究途上にある多くの物質群が含まれる。二次元機能性原子薄膜の長所や可能性を追求するため、現段階では知られていない新しい構造や応用上重要な機能を見出すには、上述のような歴史的背景と

技術的な研究進展状況のもとで検討・提示された多くの研究課題（第3章、第9章に例示）に取り組む必要がある。その研究の過程において、原子薄膜の構造と機能の関係や、合成・制御の方法を理論的・実験的に明らかにする研究とその原理的本質の解明および体系化が進む結果、目的機能を有する原子薄膜を合理的に見出すための基盤となる知識体系（学理）が構築されることが期待される。そうした体系・学理は、将来の機能設計に資するところが大きい。すなわち、本提言の実施によって、新機能の可能性を有する新しい原子薄膜の物性の基礎原理が解明され、二次元原子薄膜自体の特異性と新規性に基づく新しいサイエンスが創出される可能性がある。

5.3 二次元機能性原子薄膜の研究に資する学術分野間の融合促進、並びに本分野を国際的にリードする研究開発人材の中長期的育成

第4章に述べたように、本提言によって二次元機能性原子薄膜の研究に資する学術分野間の異分野融合研究が促進される。わが国における従来の原子薄膜研究は、主として応用物理学会に軸足を置く大学研究者や一部産業界でおこなわれてきたが、上述の新しい展開に向けて、例えば物理学、特に固体物理や関連するデバイス物理の理論家、実験家と、化学、特に合成化学や分子設計の専門家といった、異分野の専門家による融合研究が進む。さらに、究極の物質系である原子薄膜を設計して自在に作製し、目的とする機能を発現させ、実用的なデバイスを生み出すため、近年進展の著しい計測技術や計算科学との協働も進展する。そうした学際融合の研究から新たな研究領域や課題の発見、新しい取り組みが生まれるものと期待される。

このような期待は、第4章で提案した人材育成の面でも言える。すなわち、新しい発見とパラダイムを切り拓いていこうという共通目標のもとで、例えば物理と化学といった異分野の研究者による実質的相互連携や、周辺分野・応用分野との連携・融合によって基盤研究を実施するプロセスが重要である。これらを通じて、これまで不可能であった全く新しい機能の基礎理論や新材料の創出など、日本が本分野を国際的にリードする科学技術成果を生み出すような、新しい研究開発人材の中長期的育成の促進が期待される。

以上、5.1、5.2、5.3で指摘した科学技術上の効果は、第4章で提案したTIAを活用したプロジェクトを推進することによって、より強め合い増幅されることが期待される。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

6 社会・経済的効果

本研究開発への投資によって、以下のような社会的効果・経済的効果が得られる。

- 1) 次世代のデバイス・ナノシステム等に求められる抜本的な低消費電力・省エネルギー化と小型化、およびそこに付加される新機能の創出
- 2) わが国のエレクトロニクス産業並びに次世代のデバイス・ナノシステムの創出等に供される関連産業の国際競争力の強化

6.1 次世代のデバイス・ナノシステム等に求められる抜本的な低消費電力・省エネルギー化と小型化、およびそこに付加される新機能の創出

二次元機能性原子薄膜は、従来の薄膜とは異なる特性・材料・構造によって、新たな機能や従来膜の特性を凌駕する機能を発現することが可能であり、革新的な新規デバイスの開発につながる。すなわち、本研究開発の結果、次世代のデバイス・ナノシステム等に求められる抜本的な微細化、集積化、小型化が進み、低消費電力・省エネルギー化の限界を突破できる可能性がある。

例えば、これまでシリコンを中心に進展してきた電子デバイス技術は、2000年代に入って微細化の限界が現実的な壁として議論され始めて久しい。本提言の実現によって、シリコンを中心とした電子デバイスの微細化、集積化、低消費電力化の限界を突破または回避できる可能性がある。すなわち、従来と異なる新動作原理に基づく素子・回路・システムが実現されることによって、超低消費電力や高速性等を特徴とする革新的な新電子デバイスが創出される。この結果、IT機器の設計自由度が増し、さらに、幾つかの動作原理に基づくデバイスで構成された融合デバイスの実現によってデバイス選択肢がより多様になり、デバイス選択のパラダイムシフトを引き起こす可能性もある。

また、IT機器の増加による電力需要の大幅な増大は世界的な課題となっている。仮にIT機器が今後も現在のCMOS技術を用いて作り続けられるとすると、機器数の増加とともにその電力消費量が2025年では2006年比で国内では5.2倍(2400億kWh)となって総電力需要の20%を占めると予想される。世界全体では、先進国に加えてBRICsなどの急速なIT化に伴い、2006年の4900億kWhから、2025年には約9.4倍の4兆6000億kWh(世界の総発電量の15%超)になると推計され、日本を上回るスピードで消費電力が増加することが見込まれ、その対策が求められている(経済産業省/グリーンIT推進協議会試算2008)。本提言の実施によって原子レベルの薄膜が実現することにより、エレクトロニクス動作におけるエネルギーロス最小化が実現できる可能性がある。

さらに、本研究開発への投資によって、社会的経済的に有意義な多くの革新的な新機能デバイスが創出されよう。例えば、第3章に示す“トポロジカル絶縁体”はビスマス系化合物などの熱電変換材料として実用化されている物質系を多く含んでいるので、革新的な熱電変換デバイスを生み出す可能性がある。

このように、機能性原子薄膜によって実現される新動作原理素子・回路・システムによる次世代デバイス・ナノシステムは、シリコンCMOSの低消費電力原理限界を突破して更なる電力消費量の低減を可能とし、省エネに対して大きな効果をもたらすととも今後

の IT 機器増加による消費電力増大の懸念に対応する。

6.2 わが国のエレクトロニクス産業並びに次世代のデバイス・ナノシステムの創出等に供される関連産業の国際競争力の強化

二次元機能性原子薄膜は、その先駆的実例であるグラフェンについては既に具体的な応用に向けての開発が進んでいる。透明電極（導電性フィルム）、LSI 配線、高速光変調器、リチウムイオン電池、太陽電池、バイオセンサ等の基盤技術の開発に基づき、タッチパネルやフレキシブル・ディスプレイ、薄膜太陽電池等々、多方面の分野での次世代デバイス・ナノシステムへの応用が期待されている。これらは、モバイルコミュニケーションとクラウドシステムが構成する真のユビキタス社会実現に大きく寄与することが期待される。

これらの具体応用例に関して現在の市場をみると、今後成長が見込まれるタッチパネルやフレキシブル・ディスプレイ、有機 EL 照明、薄膜太陽電池用に用いられる透明電極 (ITO) は、2009 年の市場規模 52 億ドルに対し、2014 年には 09 年比 159% 増の 83 億ドルまで成長することが予測されている (Nanomarkets 社 2009 年)。また、LSI 配線への応用に関しては、世界の IC 製品市場 2500 億ドル (WSTS 2011 年) において、現在の IC 製品の歩留まりを左右する LSI 銅配線をグラフェンなどのより高性能な原子薄膜に置きかえる可能性がある。これらはいずれも、機能性原子薄膜のなかでもグラフェンの適用を想定したものであるが、米 BCC Research の予測調査 (2011 年) では、最初のグラフェン製品の実用化は 2015 年以前に実現し、同年の市場規模は 6,700 万米ドルになると推測され、さらにグラフェン市場は 2015 年から本格化すると見られており、2020 年には 6 億 7,500 万米ドルに近い規模に達することが見込まれている。

半導体技術は広い産業分野を支えるキーテクノロジーであるが、CPU などのアーキテクチャでは日本は欧米に先行され、メモリなどの製造では韓国、台湾を筆頭にアジア諸国が台頭している。本提言に基づく高度な研究開発と、その後の大規模な産業展開により、今後、シリコン CMOS の延長では対応できない「次世代エレクトロニクスへの壁」を突破し、10 ～ 20 年後の関連産業の主導権を握ることによってわが国産業の国際的地位を確たるものにしていくことができる。また、二次元機能性原子薄膜によって、安価で豊富な元素を用いて従来以上の機能を持つ材料機能を創出することができれば、様々な産業分野において、元素の希少性や地域偏在を危惧する必要がなくなる。

このように、本研究開発への投資は、第 4 章に示すような産業界を巻き込んだ研究体制ともあいまって、わが国のエレクトロニクス産業並びに次世代のデバイス・ナノシステム等を利用する関連産業の国際競争力の保持・強化にも資する。

7 時間軸に関する考察

本提言は早期の実施が必要であり、第3章に記載する研究開発課題Aと課題Bのそれぞれの基盤技術に対し、図7.1に示すような時間軸で取り組むことが望ましいと考えられる。

本研究開発は、応用研究上のボトルネックを認識した上で、既存の延長線上にはない新規材料・革新デバイスの開発が必要となるため、従来のリニアモデルではなく、アプリケーション・ニーズに応える課題Aとシーズ技術を先鋭化する課題Bが常に互いにフィードバックし合いながら研究を

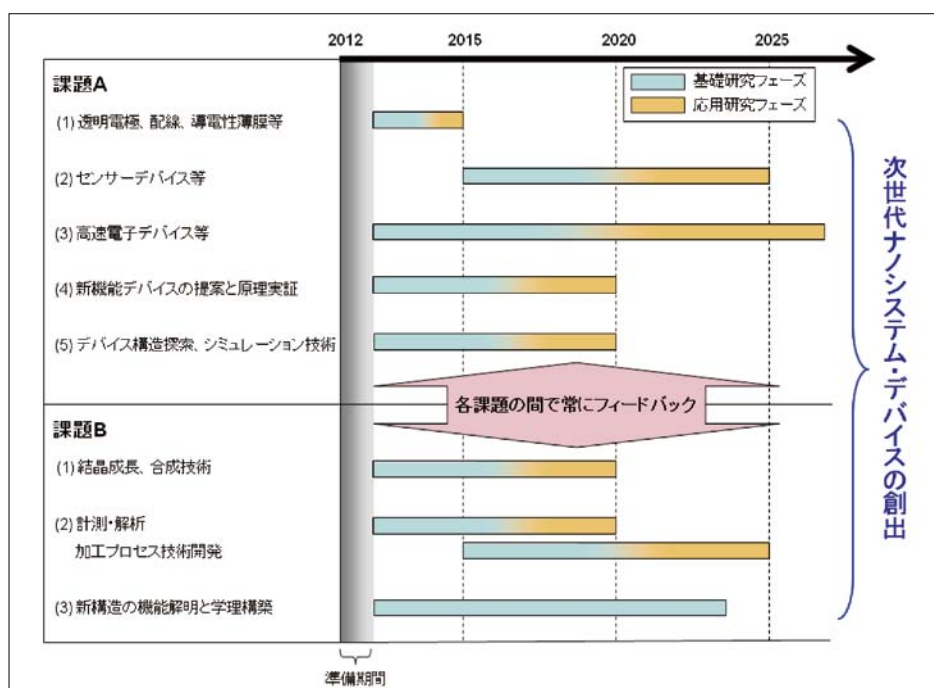


図 7.1

推進することが求められる。研究開発の実施期間としては10～15年間程度の中長期的な取り組みが必要である。研究対象によっては基礎研究に一定の期間(5～10年)を要する可能性があるが、透明電極のような既にアジア・欧州諸国において企業主導の大型プロジェクトに発展しているケースでは、2015年頃の実用化が想定される。実用化を妨げているボトルネックが解消されさえすれば、ただちに「応用・開発研究フェーズ」の施策に引き渡すことが必要であり、顕著な技術的成果が出始めた際にいち早く経済産業省やNEDO等のプロジェクトへ移行する柔軟な運営が求められる。また、研究開発の実施者は、国内外の他の研究チームから革新的な成果が生まれた際に、ただちにその検証や発展的テーマに取りかかるなどの柔軟かつ素早い行動が求められる。

第4章に記載するように、異分野融合型の国家プロジェクトおよびプログラムを文部科学省・経済産業省の連携によって推進することが求められる。そのためには、準備段階として材料開発とデバイス研究の乖離を埋めることが必要であり、物理学・化学等の基礎研究者と企業等の応用研究者の間で解決すべき課題を共有し、十分なネットワークを形成する必要がある。二次元機能性原子薄膜に関する基礎研究の現状を応用研究者が把握し、また、基礎研究者は応用研究が現在直面しているボトルネックを理解するためのワークショップやシンポジウム等の開催が効果的である。

8 検討の経緯

JST 研究開発戦略センター (CRDS) ではナノテクノロジー・材料分野の「俯瞰ワークショップ」を定期的で開催しており、俯瞰ワークショップの議論を経て抽出された今後の重要課題群において、カーボンナノチューブやグラフェンを用いたカーボンエレクトロニクスや、二次元機能性原子薄膜があげられた。CRDS は平成 23 年度に、提言作成に取り組むテーマの一つとして「グラフェンなどの二次元物質を活用した新デバイス開発による省エネルギー」を指定し、これに伴い「二次元物質」チームを発足し、本提言作成へ向けて以下の活動をおこなった。

8.1 研究者セミナー

チームによる事前の調査・分析を踏まえ、二次元機能性原子薄膜の関連研究者による研究者セミナーを下記 18 回に渡って開催した。各回の専門家との意見交換を通じて、二次元物質に注目する理由、研究開発課題、応用先、海外・国内の研究投資の状況等の情報収集を行った。

	セミナータイトル
(1) 7月27日 吾郷浩樹 (九大)	ナノエレ応用グラフェン成長制御
(2) 8月22日 春山純志 (青学)	グラフェンの新展開
(3) 8月23日 高村由紀子 (北陸先端)	Si 版グラフェンの「シリセン」
(4) 9月7日 長汐晃輔 (東大)	グラフェンの FET への応用
(5) 9月8日 尾辻泰一 (東北大)	グラフェンのテラヘルツ素子応用
(6) 9月14日 小林俊之 (ソニー)	グラフェンのエレ応用
(7) 9月15日 松本和彦 (阪大)	グラフェン研究最新動向
(8) 9月28日 上野啓司 (埼玉大)	塗布法によるグラフェン形成
(9) 9月30日 塚越一仁 (NIMS)	機能性原子薄膜のエレ応用
(10) 10月5日 佐々木高義 (NIMS)	無機ナノシート
(11) 10月12日 若林克法 (NIMS)	グラフェン電子状態の基礎理論
(12) 10月14日 楠美智子 (名大)	SiC 上のグラフェン成長
(13) 10月14日 藤井健志 (富士電機)	グラフェンの透明電極応用
(14) 10月17日 秋永広幸 (産総研)	グラフェンプロジェクトの TIA nano への展開
(15) 10月20日 久保孝史 (阪大)	化学素材としてもグラフェンの現状と将来性
(16) 10月27日 笹川崇男 (東工大)	トポロジカル絶縁体
(17) 10月28日 栗野祐二 (慶応大)	グラフェン研究の現状と将来動向
(18) 10月28日 酒井忠司 (東芝)	産業界から見たグラフェン研究

他のインタビュー実施: 榎敏明 (東工大)、前口賢二 (東芝 / TIA ナノエレ WG 委員長)
(敬称略)

8.2 ワークショップ

上記の研究者セミナーおよびチームによる調査・分析結果を踏まえ、科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜／分子薄膜の創生と展開」を開催した。ワークショップではグラフェンのみならず、広く二次元機能性原子薄膜、さらに分子薄膜まで対象を広げ、現在の最先端の研究開発状況から今後の方向性を討議し、その上で重要となる具体的な研究開発課題を抽出することを目的とした。

シリコンを中心に進展してきたエレクトロニクスデバイスの微細化、集積化、低消費電力化の限界を突破できる可能性がある技術として、なぜ今 原子薄膜、分子薄膜なのか、具体的な研究開発課題、開発手法、予想される成果、社会への波及効果、国外のファンディング状況、などを議論した。

ワークショップにおける議論から、二次元機能性原子薄膜、分子薄膜は、従来の薄膜とは異なる特性・材料・構造によって、新たな機能や従来の材料の特性を凌駕する機能を発現できる可能性があり、革新デバイスの開発への期待が認識された。

科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜／分子薄膜の創生と展開」

主催 : 独立行政法人科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター (CRDS)

開催日時 : 2012年2月2日 (木) 12時半～18時

場所 : JST 東京本部別館 2階セミナー室 (東京都千代田区五番町7 K's 五番町)

コーディネータ : 塚越一仁 (NIMS) (敬称略)

オーガナイザー : 田中一宜 (JST CRDS)

コメンテータ : 栗野祐二 (慶応大)、榎敏明 (東工大)、小林俊之 (ソニー)、
曾根純一 (NIMS)、福島伸 (東芝)

プログラム

セッション1 ワークショップ開催趣旨

12:30-13:30 主催者挨拶 田中一宜 (JST CRDS)

趣旨説明 河村誠一郎 (JST CRDS)

WSの課題と論点 塚越一仁 (NIMS)

セッション2 グラフェン

13:30-13:50 グラフェンのマテリアルサイエンスと将来展望 吾郷浩樹 (九州大)

13:50-14:10 グラフェンのアクティブチャネル応用はあり得るか?

長汐晃輔 (東大)

セッション3 無機系機能原子薄膜

14:10-14:30 無機ナノシートー2次元機能ナノ物質としての可能性ー

佐々木高義 (NIMS)

14:30-14:50 原子薄膜機能の電界制御

岩佐義宏 (東大)

14:50-15:10 強磁性超薄膜における磁性の電界制御

小野輝男 (京都大)

セッション4 有機系機能分子薄膜

15:30-15:50 大環状π共役平面分子の平面配位による無機ナノ粒子の機能変換

寺西利治 (京都大)

15:50-16:10 二次元物質の合理的デザインへ向けた基盤技術創出

- 福島孝典（東工大）
- 16:10-16:30 ラダー型環状オリゴマーを基盤とした分子レジスト材料の開発
 style="text-align: right;">工藤宏人（神奈川大）
- セッション5 全体討論（司会：塚越一仁）
- 16:40-17:55 コメンテータ：栗野祐二（慶応大）、榎敏明（東工大）、小林俊之（ソニー）、
 曾根純一（NIMS）、福島伸（東芝）
- 17:55-18:00 閉会挨拶 田中一宜（JST CRDS）

ワークショップ参加者一覧（敬称略、所属・役職は開催時点）

氏名	所属	役職
◎塚越 一仁	(独) 物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	主任研究者
○吾郷 浩樹	九州大学先導物質化学研究所	准教授
○長汐 晃輔	東京大学大学院工学系研究科	准教授
○佐々木 高義	(独) 物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	フェロー
○岩佐 義宏	東京大学大学院工学系研究科	教授
○小野 輝男	京都大学化学研究所	教授
○寺西 利治	京都大学化学研究所	教授
○福島 孝典	東京工業大学資源化学研究所	教授
○工藤 宏人	神奈川大学工学部	准教授
*栗野 祐二	慶應義塾大学理工学部	教授
*榎 敏明	東京工業大学大学院理工学研究科	教授
*小林 俊之	ソニー（株）先端マテリアル研究所	研究員
*曾根 純一	(独) 物質・材料研究機構	理事
*福島 伸	(株) 東芝研究開発センター	主席技監

◎：コーディネータ ○：発表者 *：コメンテータ

上記のワークショップ参加者には、本提言検討に関する助言や、最新の研究開発動向についての知見を随時提供していただいた。ワークショップの詳細内容・結果は、下記の報告書にまとめている。

科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜 / 分子薄膜の創生と展開」報告書
 2012年3月発行 科学技術振興機構研究開発戦略センター
 CRDS-FY2011-WR-12 下記 URL よりダウンロード可
<http://crds.jst.go.jp/type/workshop/201203020946>

9 研究開発課題の詳細

現在注目を集めている代表的な原子薄膜として、炭素の二次元的な単原子結晶であるグラフェンが挙げられる。2004年に機械的剥離法によりその物性値がはじめて明らかになったグラフェンは、二次元的な結晶構造に由来する特異な電子構造を反映して、集積回路の主演である半導体シリコンの100倍ともいわれる巨大な電子移動度や、驚異的な機械強度、大きな熱伝導率等の特徴が注目を集め、次世代エレクトロニクス材料をはじめ、多様な技術分野におけるブレークスルー材料としての潜在的可能性に期待が持たれている。

理想的で欠陥のない炭素の1原子層単結晶としてのグラフェンは元来、禁制帯を有しない金属的な性質を有するため、グラフェンの第一の応用としては、配線や電極など導電性薄膜としての機能を発揮できるアプリケーションが有望である。強力な共有結合により巨大な電流密度にも断線せず（高エレクトロマイグレーション耐性）、なおかつ高移動度による低抵抗性を兼ね備えることから、現在LSI配線で主流の銅よりも優れた特性を潜在的に有すると考えられている。また、原子レベルの超薄膜でも十分低いシート抵抗が期待できることから、透明電極への応用も検討されている。これら導電性薄膜への応用は、グラフェン本来の持つ特性を理想的極限まで引き出すことにより最大化されると考えられ、完全単結晶としての一層グラフェン、ないしは、その多層構造としての多層グラフェンの実現が、製造技術上の一つの目標として設定できる。また、グラフェンと金属電極等、異種材料界面における導電特性の制御が、重要課題の一つである。

一方、機能性原子薄膜の高速電子デバイス応用に関しては、集積回路の低消費電力化の観点で電極・配線応用が重要であることに加え、トランジスタのチャンネルに応用して高速な電子デバイスを実現しようとする研究がある。この方向性の研究では、機能性原子薄膜に半導体的な性質を付与または制御する技術や、pn伝導型制御やキャリア濃度制御を実現する物質設計コンセプトとその合成技術の研究開発が重要課題となっている。機能性原子薄膜は、これまでに知られている材料には無い特異な性質を持つことが理論的、実験的に明らかになりつつあるが、アプリケーションに応じてそれらの機能を実現し、最適化するための、物質およびデバイス設計の指導原理を明確化することが今後の重要課題といえる。

グラフェンをはじめとする二次元物質は、構成元素の種類が限られており、構造も比較的単純なため、理論的な考察や解析がしやすく、物質設計の指針を研究する対象として適している。また近年、二次元物質を単離、または合成する機械的・化学的手法が次々と見いだされ、実験的に研究開発を推進することが可能な状況になってきた。そのような背景の下、グラフェンをはじめとする機能性原子薄膜の研究は近年国際的な盛り上がりを見せているが、現在までのところ、グラフェンおよび異種材料界面における伝導機構や、製造技術上の重要課題である結晶成長および化学合成に関する基本的な物理メカニズムは明確に解明されていない。この原理解明と物性制御技術を世界に先駆けて確立するためには、戦略的に設計された総合的な研究開発プロジェクトが必要不可欠である。すなわち、物理学および化学を背景とする物質科学に基づく洞察力と計算科学に基づく設計支援アプローチ、そして、各アプリケーションに必要なとされる要素を総合的に備える機能デバイス開発に必要なデバイス工学的アプローチを一体的に取り入れた研究開発体制の構築が必要不可

欠となる。

第3章に述べた課題Aは、その中でも特に、アプリケーションから要求される機能を実現するための機能性原子薄膜の設計・合成およびデバイスの研究開発課題を指す。

また、課題Bは、各種原子薄膜の合成方法の開拓と、その物性の理論的・実験的解明に関する研究を指し、これらは課題Aに必要とされる基盤技術を構成する。その具体例を以下に示す。

9.1 課題A：高効率・低消費電力・高信頼化等のアプリケーション・ニーズに応える機能性原子薄膜の創成とデバイス基盤技術構築

課題Aでは、アプリケーションサイドから機能性薄膜に要求される機能を最大化するための物質・デバイス設計と作製プロセスの創出を目指した研究開発を推進する。ここから抽出された設計原理の検証や、新たな作製プロセス技術を探索するためのシーズ技術研究は、課題Bの基礎的課題にフィードバックされることが有り得る。また、シーズ技術研究の課題Bの研究成果から、課題Aの問題解決に適用可能な技術が創出されるケースもあり得る。このような課題A、Bの相互作用を促進する研究体制の構築が重要である。グラフェンを例にとって、現時点で想定可能なアプリケーションイメージを元に、応用開発課題を時間軸とともに次に示す。共通基盤技術は、課題Bに対応し、各種応用技術は課題Aを想定している。

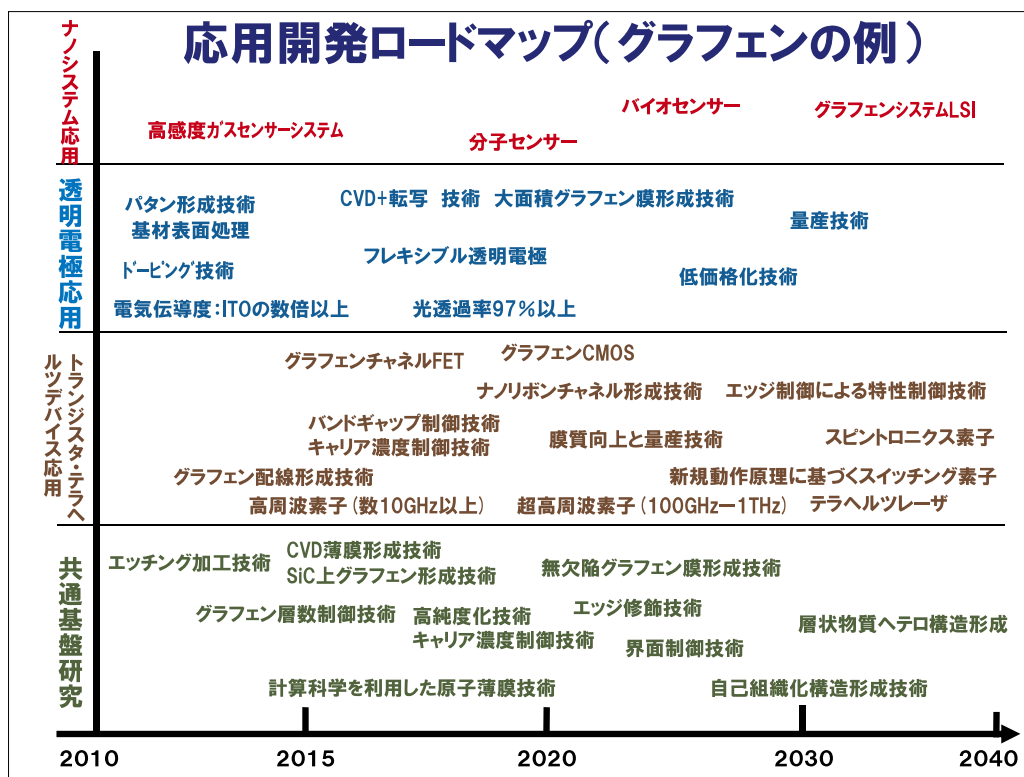


図 9.1

以下では、課題Aの研究課題を例示する。それぞれ二次元薄膜に期待される特異な物性を最大化、最適化することで、既存応用技術の先鋭化や高性能化のみならず、新規な物質の設計・創出に関わる基盤技術を応用技術開拓へ直結させるイノベーション志向のアプリ

提案の内容
研究投資
研究開発課題
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
研究開発
課題の詳細
状況
専門用語
参考文献

リケーション・ドリブンな研究課題を構成する。

(1) 原子薄膜の導電性に基礎を置くアプリケーション

a) 透明電極

機能性原子薄膜、中でもグラフェンは、原子数層レベルの極薄膜でも実用に耐える低抵抗性を確保できることから、膜厚の極薄化による光吸収の低減により透明性を実現可能で、高温耐性、機械的高強度、さらにフレキシブルな性質とあわせて、透明導電膜としての応用が期待されている。現在広く研究されている酸化物系透明導電膜に対する元素代替や高性能化などの期待から、アジア・欧州諸国においては、企業も巻き込んだ研究開発プロジェクトが国際的に展開されている。機能性原子薄膜の物質設計という観点からは、光吸収係数、すなわち光と電子の相互作用の強さを決定する電気双極子モーメントと、電流を担う電子・正孔の状態密度等、物質パラメータの人為的制御により膜の抵抗率の低減を主目標としつつ、応用上重要な金属電極とのコンタクト抵抗の低減、キャリア濃度、pn型制御など、透明導電膜応用上の重要パラメータについて、複数パラメータの最適化を行う物質設計コンセプトの明確化、および、観察技術を含む製造プロセス技術の確立、が最重要課題となっている。現状では未解明な部分を多く残しており、物質科学的な洞察とナノ計測・解析・合成技術を総合した基盤的研究課題として戦略的に推進する必要がある。透明電極応用に重要な特性を以下に列挙する。

- ・高い透明度（透過率）と低い電気抵抗（シート抵抗）：
- ・金属との低いコンタクト抵抗
- ・高フレキシビリティ
- ・高機械強度・高耐熱性
- ・高信頼性

b) 透明導電性薄膜・フレキシブル電極

現在、導電性有機高分子が主流となっている導電性薄膜技術の代替材料、あるいは、高温耐性、機械的高強度など、原子薄膜特有の特徴を生かした新規応用分野開拓が期待される。研究開発課題は、透明電極の開発課題と重なる部分が多いが、透明性を考慮しない物質設計により、応用範囲は飛躍的に拡大する。

c) LSI 配線

炭素原子同士の強力な共有結合に基づく高電圧マイグレーション耐性（高電流密度耐性）により、原子薄膜としてのグラフェンは、導電性薄膜として一つの究極の物質と考えられている。現在 LSI 配線に用いられている銅（Cu）と比較して、グラフェンの電圧マイグレーション耐性は数倍優れていると考えられており、今後の研究開発により銅をしのぐ配線材料として進化する可能性を有する。

主要な研究開発課題を以下に挙げる。

- ・低シート抵抗化
完全単結晶構造の実現による粒界抵抗の低減が一つの目標となる。そのための触媒、原料供給法、下地基板表面制御、キャリア濃度制御等の技術開発が必要である。
- ・高電圧マイグレーション耐性

粒界のない、完全な単結晶の実現が一つの究極の理想となるが、グラフェン薄膜とビア配線との接続境界、半導体デバイス、金属配線とのコンタクト接合界面における抵抗低減やエレクトロマイグレーション特性に関する問題点、課題の明確化が今後の重要課題である。

・ドーピング技術の開発とキャリア型 (pn) 制御

厳密な意味での純粋なグラフェンは真性であり、元素置換や表面吸着によりドーピング制御、すなわち、pn の型制御が可能である。しかしドーピング濃度の制御範囲および精度、再現性の向上が今後の重要研究課題である。

・加工プロセス技術開発

配線形成技術に対応可能なパターニングプロセス技術の開発はデバイス応用に避けて通ることはできない今後の重要課題である。

(2) センサー等、原子薄膜の性質が外部からの物質吸着等により敏感に変化する性質に基礎を置くアプリケーション

原子薄膜の一つの有力な応用分野は、高感度センサーである。膜に平行方向の高い導電性が、膜表面への原子・分子吸着等により極めて敏感に変化する性質を利用する。この性質は、膜厚が原子層程度に薄いことから必然的に生じる性質であって、究極的な高感度センサーの基本原則として期待される。課題は、センサーとしての選択性、安定性の確保と高感度性の両立である。デバイス構造および原子薄膜の物質設計両面からの工学的最適設計が必要となる。

(3) 原子薄膜の特異な電子輸送特性を原理基礎とする革新的高速電子デバイス

a) グラフェン高速電子デバイス

機能性原子薄膜、その中でもグラフェンの際立った特徴の一つとして注目を集めているのが、室温でシリコンの 100 倍ともいわれる電子移動度であり、この直接の応用として期待されているのが、機能性原子薄膜を電子走行チャンネルとして用いる高速電子デバイスである。高周波発振増幅器では、テラヘルツ (THz) 周波数帯にまで応答可能なデバイスの研究例が報告されている。これまでに開発が試みられているグラフェン高速電子デバイスの例を下記に示す。

- ・ (コンピュータの基本演算素子としての) 高速・低消費電力スイッチング素子、メモリ素子
- ・ テラヘルツ (THz) におよぶ超高周波にまで応答する増幅素子、発振素子、ミキサ等の電子素子
- ・ 高周波検出器

これらの高速機能素子実現へ向けた取り組みとして、機能性原子薄膜に半導体的な性質を付与する結晶成長あるいは化学合成技術の確立が不可欠である。二層グラフェンやその類似構造などにより、これらの特性が期待される物質構造が、理論的、実験的に示唆されており、理論・実験両面からの研究の進展が期待される。グラフェンをはじめとする機能性原子薄膜の物性制御技術の現状における到達点に関しては、科学技術未来戦略ワーク

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

シヨップ「機能性原子薄膜／機能分子薄膜の創生と展開」において議論され、グラフェンの二層化により、バンドギャップ（禁制帯幅）として $0.2 \sim 0.3\text{eV}$ が可能との研究成果が紹介されている。スイッチング素子としての応用には禁制帯幅 0.5eV 以上が必要とされ、独自の物質科学的アプローチによるブレークスルーが期待されている。

一方、低抵抗で、かつ大電流の供給が可能な電極や配線への応用は集積回路の究極的な高性能化の観点で極めて重要であり、将来性の期待できる研究分野といえる。

これらの研究開発課題では、理論と実験の緊密な連携研究が必要不可欠であり、戦略的な研究分野構築が必要とされる。

原子薄膜の代表であるグラフェンは、そのエネルギーバンド構造が本来、禁制帯幅（バンドギャップ）を有しないことから、グラフェンを電子走行チャネルとする電子素子は、電流の遮断、すなわちオフ状態を作ることに向きであり、スイッチング素子をはじめ、エネルギー効率に優れた高速電子デバイスの実現が困難という問題点が指摘されている。この問題を解決するため、単一原子層のグラフェンを二層重ねた二層グラフェン構造やグラフェンナノリボンなど半導体的性質を付与するための新構造の提案と実証が重要課題となっている。また、グラフェンの高い電子移動度は、電子の物質中での質量（有効質量）が軽いためだけでなく、伝導キャリアの供給数上限を意味する状態密度が小さいことによる電子散乱の抑制に一因があるが、これはスイッチや増幅器等の高速動作に不可欠な大電流密度の確保とトレードオフの関係にあり、これら一連の物性を適切な範囲に設計し、信頼性の高い製造技術を確立することが研究開発の最重要課題となる。二層グラフェンをはじめとする派生構造により、良好なデバイス特性が期待される物質構造が、理論的、実験的に示唆されており、理論・実験両面からの研究の進展が期待される。

以上より、グラフェンをはじめとする機能性原子薄膜を高速・高周波デバイスへ応用するためには、グラフェンの構造を単原子層構造から変調し、下記のような特性を有する新構造物質を創出するための研究開発が必要不可欠となる。

- ・ 0.5eV 程度、またはそれ以上の禁制帯幅を有する半導体的なバンド構造
- ・ キャリアの高速移動を実現する小さな有効質量
- ・ 大電流密度と、電子の高速性を担保するための低散乱確率を両立するキャリア状態密度の適切な設計
- ・ 低コンタクト抵抗を実現するための電極等異種材料間のヘテロ界面構造設計技術および製造技術

これらの研究課題では、理論と実験の緊密な連携研究が必要不可欠であり、戦略的な研究体制の構築が必要である。

b) トポロジカル絶縁体等の二次元的電子物性を応用した革新的電子デバイス

機能性原子薄膜としては、グラフェン以外にも、トポロジカル絶縁体と呼ばれる物質系が近年発見され、研究開発が盛んになりつつある。トポロジカル絶縁体とは、本来は絶縁体の性質を示す固体の表面近傍に出現する二次元的な電子状態を介して高速電子伝導や磁

氣的に特異な性質を発現する物質群であり、その物性の理論的解明と革新的デバイスへの応用を志向する研究は、本研究課題に含まれる。また、対象とする革新的デバイスとしては、配線やトランジスタのみでなく、例えば、熱電変換デバイスのように、電子伝導と熱伝導（格子振動の伝播）の独立的な制御を、原子薄膜の構造・物性制御に帰着させて実現しようとする革新的熱電変換デバイスや、電子と光、あるいはスピン、スピン流、格子振動等との相互作用に起因する原子薄膜の特異な物性を応用した画期的デバイス開発も挑戦的なテーマとして本課題に含める。

機能性原子薄膜は、二次元電子状態の設計自由度が、炭素の1原子層薄膜であるグラフェンよりも多様であるため、要求機能の実現に資する材料デバイス設計の自由度が格段に増大することが期待されている。現状は原理探索の基礎研究フェーズにあり、機能（相互作用）と原子の結合構造の対応関係や、理想とすべき材料およびデバイスの構造の明確化が最重要課題となっている。要求機能を実現するための手段として、電子状態を二次元的に制御することで革新的な機能を発現する物質系の研究とそのデバイス応用は本課題に含まれる。特に要求機能を設計する研究は課題Aであり、一方、未だ機能は明らかではないが、新規の二次元的新物質を合成する技術の研究や、その機能を明らかにする研究、また、その物性を人為的に制御する研究などは、シーズ研究として後述する課題Bに含める。

(4) 原子薄膜と異種材料との接合による新機能デバイスの提案と原理実証

機能性原子薄膜の重要な特徴として、構造が確定しており、原子レベルでの膜厚制御が原理的には可能であることが挙げられる。三次元の非晶質や多結晶では原子寸法での構造が不確定なため、原子層厚の制御は概念上成立せず、また、単結晶構造では、概念としての原子層数制御は成立するが、層間の結合エネルギーが層内と同等の場合、原子寸法での層数制御に困難が生じやすい。一方、二次元的な構造が安定な原子薄膜は、相対的に層間の結合エネルギーが小さいため、デジタル的な原子層数制御に適している。量子閉じ込めによるエネルギー準位の制御や共鳴トンネルなどの量子効果を積極的に利用するデバイスでは、原子層単位の層厚制御が必須となる場合があり、異種材料との積層膜形成により新構造・新原理デバイスを設計する際のビルディングブロックとして原子薄膜を活用することにより、ナノ構造新機能デバイスの設計自由度や、製造プロセスの実現性が飛躍的に向上することが期待される。

(5) 機能設計を志向した原子薄膜およびデバイスの理論モデリング・計算機シミュレーション技術開発

要求機能から、その実現に必要な原子構造を理論的に見出す研究。特に、課題Aで必要とされる構造を理論的に探索し、発見するための構成的研究を戦略的に組み込むことが必要である。実験的に既に見出された、あるいは、与えられた構造の機能を理論解析により理解するための分析的研究は課題Bにカテゴライズされる。

(a) 半導体としての機能を制御するための構造および方法の研究

- ・手法の一例として、第一原理計算、分子動力学法などがある
- ・注目する物性値として、バンドギャップ、有効質量、状態密度、スピン状態、電気双極子モーメント、移動度などがある
- ・散乱メカニズム、量子輸送シミュレーション

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

- ・ 導電率制御（状態密度、キャリア濃度、移動度、キャリア型（pn））
- ・ 光吸収係数制御（電気双極子モーメント、状態密度）
- (b) 電極コンタクトや異種材料界面における高速輸送、低エネルギー損失を実現する界面構造の研究
- (c) 触媒・吸着・輸送・エネルギー変換等の機能実現および性能シミュレーション
- (d) 高品質・大面積・均質な完全結晶成長を実現する手法を見出すための結晶成長分子動力学シミュレーション
- (e) 有機分子を平面的に合成・自己組織化することによる原子薄膜の構築および機能シミュレーション

9.2 課題 B：シーズ技術の先鋭化に資する合成・結晶成長・加工プロセス技術、および、新原理・新構造原子薄膜・デバイス設計学理の創出

課題 A を実現するのに必要不可欠となる要素技術、特に、機能性原子薄膜の合成技術、結晶成長技術、加工プロセス技術、観察・分析技術、理論解析技術等については、技術の先鋭化、および、多様性の拡張の双方の視点で、飛躍的な進展が期待される。高度かつ柔軟なシーズ技術無くして、高度な機能要求に応えるデバイス技術の確立は困難である。原子薄膜の基本構造と機能の対応関係を網羅的に明らかにし、その制御の原理を明らかにすることは、課題解決に必要な不可欠なシーズ技術の戦略的研究開発として重要であり、この方向性の研究を課題 B とする。

主な研究開発課題を以下に挙げる。

(1) 原子薄膜の完全結晶実現を志向する結晶成長・合成技術の創出

完全な理想構造を有する原子薄膜結晶を合成する技術の追求は本研究課題の根幹を成す。結晶成長法には、下記のように多様な方法があるが、これら既に知られている手法の先鋭化、精密化という方向性の研究に加えて、物質科学の根本原理に立ち返った洞察から、原理的に新しい合成手法の研究が果敢に挑戦されるべきである。合成手法は、アプリケーションに応じて適切な技術が選択されるべきではあるが、たとえば、グラフェンのディスプレイ、タッチパネル等を意識した導電薄膜応用へ向けては、大面積の理想単結晶実現が直近の目標となろう。この研究課題に対する現状における到達点に関しては、科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜／機能分子薄膜の創生と展開」において議論され、原子配置の規則性、周期性に優れた単結晶の銅薄膜上に、極めて配向性の高いグラフェン膜を大面積で形成可能であることを示す研究成果が紹介されている。アプリケーションへの適用に際しては、透明度や導電率、膜強度、フレキシビリティや耐熱性の制御が必要とされ、さらには任意の支持基板への転写技術や物性制御など、物質科学の基礎学理に基づいた独創的工学技術の創出に期待がかかっている。

その次に重要な課題は、キャリアの pn 型制御および濃度制御、コンタクト抵抗の制御技術などである。原子薄膜の新物質探索は、重要課題であり、理論的実験的研究に広がりを持たせるべきである。また、結晶成長・合成技術の研究開発には、合成された物質の原子レベルの観察・解析技術が必要不可欠であり、これらの基盤技術開発と有機的な連携の下で推進する必要がある。

重要課題を以下に列挙する。

- ・二次元的電子構造を実現するため、理想的単結晶構造の完全性を志向する結晶成長および合成の研究
- ・グラフェン結晶成長・合成法（他の新原子薄膜材料の結晶成長・合成法にも強い示唆を与える）
 - (a) 機械的剥離法（ロール to ロール等生産性の大規模化研究を含む）
 - (b) Cu, Ni 等金属触媒上への結晶成長、転写、エッチング技術（触媒機能の解明を含む）
 - (c) 相互作用の少ない基板材料（たとえばグラフェン成長における六方晶ホウ化窒素（h-BN）など）の上への結晶成長技術
 - (d) 化学気相成長法（CVD 法）：量産性に有利。触媒や下地テンプレートの最適化
 - (e) 酸化グラフェンの還元による合成法：大面積一括大量合成に有利、欠陥低減が課題。
 - (f) 炭化ケイ素（SiC）の Si 昇華によりグラフェンを合成する技術：単結晶基板を出発材料とすることで高品質のグラフェン生成。SiC 基板との相互作用の解明が課題。コストと大面積化に課題。
 - (g) 有機分子の二次元的結合および合成・自己組織化によるナノリボン等ナノ構造の合成、エッジ状態の制御による物性制御技術

原子薄膜の構築には、自己組織化の利用、適切な触媒の設計、表面吸着によるキャリア濃度制御、総数制御による半導体的な性質の付与などの検討が必要である。

- ・原子薄膜の結晶成長、合成メカニズムの解明（理論、実験）
- ・有機分子、無機物質、無機ナノシート等の自己組織化による二次元電子状態の創出
無機系新原子薄膜の例：トポロジカル絶縁体（ビスマステルル： Bi_2Te_3 ）、層状無機化合物（二硫化モリブデン： MoS_2 ）、（六方晶窒化ホウ素： h-BN ）、等。
有機系原子薄膜の自己組織化原理：共有結合、非共有結合、金属錯体による配位結合などを利用した多様な薄膜またはチューブ状疑似原子薄膜の設計と合成法
- ・原子薄膜の結晶成長、合成メカニズムの解明（理論、実験）
- ・触媒作用や結晶成長メカニズム解明を含む、バンドギャップ創出等の機能制御
- ・キャリア濃度制御技術、キャリア型（pn）制御
- ・その他のデバイス機能に影響を与える物性値と合成技術、結晶成長技術との関連性の合理的明確化：有効質量、状態密度、散乱時間、移動度等
- ・異種材料間の結晶成長技術（電極コンタクト抵抗の低減、ヘテロ界面における輸送と散逸のメカニズム解明と、機能デバイス設計論へのフィードバック）

(2) 原子薄膜の構造や物性に関する計測・解析・加工プロセス技術開発

a) 構造および物性の計測・解析技術の研究開発

構造解析（電子線、X 線、中性子等回折技術、電子顕微鏡、走査プローブ顕微鏡等、各種顕微鏡技術）、化学結合状態解析（ラマン分光法、光電子分光法、電子スピン共鳴法等）、光学的特性、電子輸送特性解析技術は、手法としては確立しているが、原子薄膜の評価・解析手法としては必ずしも確立していない。合成・制御・加工プロセス開発研究の中にこれらの計測・解析手法を組み込んだ上で、これまでにない革

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

新的かつ挑戦的な評価手法の研究開発が本課題に含まれるべきである。原子薄膜の機能を調べるためには、電子・格子（熱）、電子・光、電子・電子、スピン等相互作用によるエネルギー変換、散逸等に関する実験的な計測と、その実験結果を科学原理に基づいて合理的に理解するための理論・モデリング・シミュレーション技術開発が併せて行われることが必要である。

研究推進に当たっては、必要に応じて SPring-8 や X 線自由電子レーザなど高度共用設備が有効利用されるべきである。

b) 加工プロセス技術の研究開発

原子薄膜の加工プロセス技術は、デバイス構造形成に必須であり、原子薄膜の構成元素と結合様式、および基板等支持媒体や環境雰囲気を考慮した、低ダメージで精度の高いエッチングや蒸着、吸着等のプロセス要素技術の開発は避けて通ることができない。この研究開発を効果的に推進するためには、無機・有機化学、プラズマ工学、イオン、電子等の各種ビーム技術、既存の半導体プロセス技術など物理学、化学に関する深い洞察と幅広い技術知識の体系が必要であり、それらの融合的な研究体制が必須である。加工プロセス技術を理論的に理解し、計算機支援設計を可能とするシミュレーション技術の開発と並行的に研究が推進されるべきである。

(3) 原子薄膜新構造の機能解明と学理構築

本研究課題では、機能や応用デバイスのイメージが必ずしも明確になっていないが、戦略的に重要と考えられる新構造原子薄膜物質について、その合成、物性測定、理論モデリング・シミュレーションを統合的に研究する課題を扱う。具体的には次のような研究課題がある。

- ・新構造二次元物質の機能を理論解析と実験の双方から明らかにする研究
- ・二次元物質と金属・半導体等、異種材料接合の機能解析

これまでに知られている二次元物質の例としては、無機系原子薄膜として、シリセン、層状無機ナノシート、二硫化モリブデン (MoS_2)、六方晶窒化ホウ素 (h-BN)、トポロジカル絶縁体として、ビスマステル (Bi_2Te_3)、ビスマスセレンなどがある。これら既知物質を超える新規材料の探索的かつ挑戦的研究が積極的に提案されてよい。

- ・構造と機能のデータベース化による、機能設計学理の創出

原子薄膜の構造と機能の対応関係はスタティックな概念ではなく、基板や雰囲気などの環境との相互作用や過渡応答などの動的、時間的対応関係を含んでいなければならない。このようなデータベースの構築法に関する基礎的検討は本課題に含まれる。

- ・マルチスケール、マルチフィジックスによる機能性原子薄膜の物質設計物と機能シミュレーション技術

原子薄膜は膜厚方向には原子層寸法のスケールを有するが、膜の広がり方向には分子〜ナノ〜マクロスケールまでさまざまなスケールを考慮する必要がある、特にそのエッジ構造の制御は基礎物性上もデバイス応用上もきわめて重要なポイントである。さらに、原子薄膜と電極とのコンタクトなど、マクロスケールの物質との界面形成とその機能発現は応用を考えるうえで不可欠の要素であるが、このシミュレーション手法はマルチスケールの視点でのシミュレーション技術構築が不可欠である。また、光、格子振動、スピン等と原子薄膜との相互作用から新機能を抽出、顕在化させるために

は、マルチフィジックスによる統合的な解析手法が必要不可欠となる。

- ・機能デバイス設計へのフィードバック可能な機能設計学理の構築

原子薄膜の機能設計に関する指導原理を抽出することにより、課題 A で提示されたニーズ対応型研究課題に対しても、重厚な説得力を有する示唆を提供可能な基盤的知識体系を戦略的に構築する。すなわち、デバイス機能を設計・構築する上で基本となる物理的・化学的相互作用に起因する機能性に関する基礎的知見の調査・解析とその知識の蓄積を、革新的な機能デバイス開発の設計指針抽出にフィードバックすることにより、課題 A との協奏的な研究の推進環境を構築する。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的
な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

10 国内外の状況

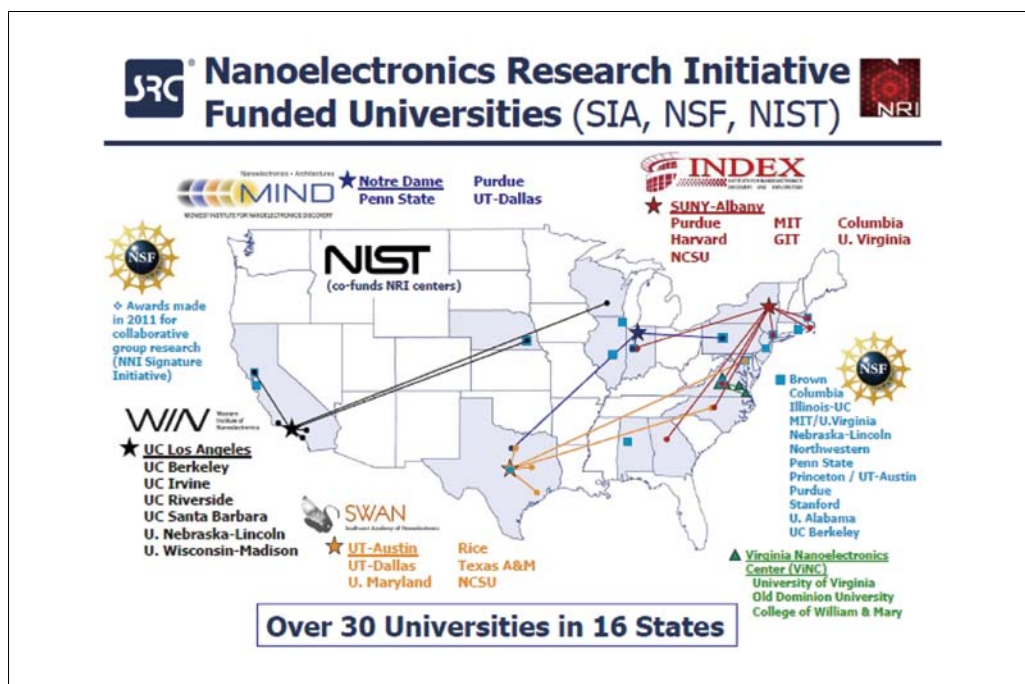
国内の状況

わが国では、本提言に関連する公的研究開発は部分的に実施されている。いずれも個別の要素技術に特化した研究課題の域を出ない状況にあり、今後の国際競争に対応できるような、本提言で掲げる基礎と応用をシームレスにつなぐ、様々な要素技術と応用開発を包括する取り組みはなされていないのが現状である。下表に、JSPS や JST、NEDO が近年実施してきた施策の主要な例をまとめた。

	事業名	課題名	研究期間	主な研究実施機関
JSPS	特別推進研究	ナノグラフェンの端の精密科学：エッジ状態の解明と機能	2008～2012年度	東京工業大学
JST	CREST「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究」	グラフェン・オン・シリコン材料・デバイス技術の開発	2007～2012年度	東北大学
	CREST「ナノ科学を基盤とした革新的製造技術の創成」	無機ナノシートを用いた次世代エレクトロニクス用ナノ材料／製造プロセスの開発	2010～2015年度	物質・材料研究機構
NEDO	希少金属代替材料開発プロジェクト	透明電極向けインジウムを代替するグラフェンの開発	2010～2011年度	技術研究組合 単層CNT融合新材料研究開発機構
	革新的ナノカーボン材料先導研究開発	湿式プロセスによるグラフェンを活用した高周波帯域電磁波吸収体の研究開発	2011～2012年度	技術研究組合 単層CNT融合新材料研究開発機構
		窒化物材料上グラフェンを活用したテラヘルツ帯デバイスの研究開発		住友電気工業（株） 東北大学
		グラフェンを活用した高感度汎用FETバイオセンサ材料の研究開発		メルク（株） 大阪大学
低炭素社会を実現する革新的カーボンナノチューブ複合材料開発プロジェクト（グラフェン基盤研究開発）	本提言発行の時点において未定	2012～2014年度（予定）	本提言発行の時点において未定	

海外の状況

米国では、半導体、ナノテク関連の連携組織であるNRI（Nanoelectronics Research Initiative）に35大学、21州が参画し、2020年までに新しいコンピュータのためのBeyond CMOSデバイスの実証を目指す計画が進められている。さらに大統領の優先事項とイノベーション戦略の支援においてナノテクノロジーの開発を加速させるために、OSTP（Office of Science and Technology Policy）およびNNI（National Nanotechnology Initiative）メンバー機関は、省庁間連携によるターゲットを絞ったプログラムレベルでのナノテクノロジーシグネチャーイニシアチブとして3つの分野を特定しており、そのうちの1つが「2020年およびその先のナノエレクトロニクス」である。ここで炭素ベースナノエレクトロニクスの探索が推進されている。米国は個別研究が中心で、いろいろな所から出てくる独自の成果が、総体として米国の材料科学技術を支えている。



EUでは、ベルギーのIMEC (Interuniversity Microelectronics Center) のほか、フランスにMINATEC (Microelectronics Nanotechnology Innovation Center) のような拠点が構築され (2007年)、ナノエレクトロニクスの研究開発が活発化している。グラフェンに限って言えば、2009年にEuropean Science Foundationがヨーロッパ22ヶ国のプログラム、Euro Grapheneを実施しており、36グループに2010年から2013年にかけて7Mユーロが配分されている。さらにFP7の枠組みでは、複数国間の小中規模の共同研究プログラム Concept Graphene に、2010年から2013年で、15Mユーロが投資されている。EUでは、基礎・開発・応用研究、イノベーションと、多様な階層のプロジェクトが並走しているのが特徴である。また、英国、ドイツなどの各国においても、グラフェンの研究開発に対する積極的な投資が行われている。

European graphene funding	
2006	Annual <i>Graphene Week</i> Conference series has been started (MPG, ESF, ICTP-UNESCO)
2007	Netherlands: VOM Programme <i>Graphene</i> (5 M€ in 2008-12)
2008	UK: EPSRC <i>Science and Innovation Awards</i> for 4 Graphene Centres, 15 M€ in 2009-14
2009	ESF (22 countries): Eurocores Programme <i>EuroGraphene</i> , 7M€ for 36 groups in 2010-13
2010	Germany: DFG Priority Program <i>Graphene</i> , 15 M€ for 36 groups in 2011-16 EU-FP7 STREPs <i>GRAND</i> , <i>ConceptGraphene</i> ; <i>RODIN</i> , <i>GRANADA</i> (15 M € in 2010-13)
2011	UK Graphene Hub (£50M investment into infrastructure in 2012-2013); Sweden: 10M€ investment in Chalmers graphene centre (2012-2016); Denmark: 5M€ investment in Danish graphene centre (2012-2015).

提案の内容

研究投資
する意義

具体的な
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
の説明

参考文献

韓国は、nanomaterials based soft electronics、の中で有機物も含め、42人のグラフェン研究者が一緒になって9年間のプロジェクトを実施しており、年間 \$9M ~ \$13M が投資されている。産業界のアクティビティとしては、例えばサムスンや LG が活発に研究をしており、トータルで大体 US \$200M の規模の投資がなされている。

シンガポールのグラフェンセンターには、およそ5年間で S\$100M (100 ミリオン・シンガポールドル) の運営費の配分がある。世界中の優秀な研究者をスカウトしており、ボストン大・Neto 教授を所長に採用している。それとは別に S\$30M が研究者や産業界にファンディングされており、全体としては S\$130M が投資されている。

中国では、973 プロジェクトの一環としてグラフェンのナショナルプロジェクトがあり、清華大学を中心におよそ年間 US\$10M が投資されている。加えて、個々の研究者に与えられるファンドが \$14M あり、これらの合計として年間約 US\$20M ~ \$30M でファンディングが実施されている。

なお、最近特許庁が公表 [* 1] した『炭素材料及びその応用技術』平成 23 年度特許出願動向調査 [* 2] によると、他のナノ炭素材料 (CNT、ナノファイバ、フラーレン等) が減少気味なのに対して、グラフェンだけは (日米欧中韓への) 出願は 2006 年以降急増している。

[* 1] <http://www.meti.go.jp/press/2012/04/20120425001/20120425001.html>

[* 2] http://www.jpo.go.jp/shiryoku/pdf/gidou-houkoku/23tanso_ouyou.pdf

専門用語説明

二次元機能性原子薄膜：原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面、界面などに有する機能性を持った薄膜物質。代表的な二次元機能性原子薄膜としては、グラフェン、六方晶窒化ホウ素（h-BN）、シリセン、トポロジカル絶縁体（表面層）、モリブデナイトシート（二硫化モリブデン MoS_2 ）、酸化チタンナノシート、ビスマステルル（ Bi_2Te_3 ）などがある。

グラフェン：炭素（グラファイト）の二次元的な単原子結晶。一次元的なものがカーボンナノチューブで、ゼロ次元のものがフラーレン（ C_{60} ）である。また、リボン状に切り取ったものをグラフェンナノリボンと呼ぶ。

シリセン：Si 原子がハニカム（蜂の巣状）構造を採る二次元シート状の材料。グラフェンのシリコン版。

トポロジカル絶縁体：電子波動関数の集合が作る空間構造の形（トポロジー）に基づく分類により発見された新しい絶縁体。内部（バルク）は絶縁体で、表面のみ特殊な金属状態をしめす。材料としては、ビスマステルル、ビスマスセレンなどがある。

テラヘルツギャップ：1 テラヘルツ程度から 10 テラヘルツ程度の間の周波数を持つ適当なデバイスが存在しないことから、この範囲をテラヘルツギャップと呼ぶ。

提案の内容

研究投資
する意義

具体的
研究開発課題

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

研究開発
課題の詳細

国内外の
状況

専門用語
説明

参考文献

参考文献

- 【1】 科学技術未来戦略ワークショップ「機能性原子薄膜／分子薄膜の創生と展開創と展開」報告書
- 【2】 戦略プロポーザル「ナノエレクトロニクス基盤技術の創成 -微細化、集積化、低消費電力化の限界突破を目指して-」（09SP01）
- 【3】 科学技術未来ワークショップ「次世代を拓くナノエレクトロニクスー 2030年の先を求めてー」報告書
- 【4】 経済産業省 / グリーン IT 推進協議会試算 2008
- 【5】 International Technology Roadmap for Semiconductors
<http://www.itrs.net/reports.html>

■戦略プログラム作成メンバー■

田中 一宜	上席フェロー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット)
河村誠一郎	フェロー・リーダー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット)
島津 博基	フェロー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット)
永野 智己	フェロー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット)
渡辺 正裕	フェロー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット) H24年3月まで
石原 聡	特任フェロー	(CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット)
佐藤 一美	主任調査員	(研究プロジェクト推進部)
宮下 哲	主査	(戦略研究推進部)

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2011-SP-10

戦略プログラム

「二次元機能性原子薄膜による新規材料・革新デバイスの開発」

STRATEGIC PROGRAM

Development of New Materials and Innovative Devices Using Atomically Thin 2D Functional Films

平成 24 年 3 月 March 2012

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット

〒 102-0076 東京都千代田区五番町 7

電 話 03-5214-7481

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

© 2012 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 CTCTAACT CTCGCC
AA TAATC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT CTAAT A TCTAT
CTCGCC AATTAATA
ATTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
CTCGCC AATTAATA
TTAATC A AAGA C CTA ACT CTCAGACC
AAT A TCTATAAGA CTCTAACT
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

