CRDS-FY2014-WR-01

ナノテクノロジー・材料分野

俯瞰ワークショップ報告書
物質・材料領域分科会

2014年1月20日（月）・21日（火）開催

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

エグゼクティブサマリー

本報告書は、(独) 科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）が平成 26 年 1 月 20 日、21 日にＪＳＴ東京本部にて開催したナノテクノロジー・材料分野俯瞰ワークショップ「物質・材料領域分科会」に関するものである。このワークショップは物質・材料領域における各コミュニティの現状把握、注目される科学技術の潮流、今後求められる研究開発の方向性などについて、議論を深める目的で開催した。

CRDS ではナノテクノロジー・材料分野の俯瞰報告書を２年毎に出すとしているが、これまでに「ナノテクノロジー・材料分野俯瞰ワークショップ（研究開発領域別分科会）報告書」などの活動に基づき、「研究開発の俯瞰報告書ナノテクノロジー・材料分野（2013 年)」を発行した。これに続く、2015 年度版を検討するにあたって、今年度は、光、ナノ計測、バイオ・ナノテクノロジー、物質・材料、製造・加工技術の 5 つの領域に焦点を当てて活動をしている。その一環として、今回のワークショップがあり、話題提供や議論を通じて、以下のような課題が抽出された。

★物質・材料分野における７つの大きな研究の方向性

１．3D プリンタなど積層造形技術の活用による革新的材料の創出
２．マルチスケールの連結とメゾ領域（数十 nm からｍｍのオーダー）の制御による革新的材料・デバイスの創出
３．ボトムアップ的手法とトップダウン的加工法の活用による革新的デバイス創出
４．理論と実験の一層の連携による予測に基づく物質・材料研究の促進
５．演繹的手法と帰納的手法の双方向の活用による革新的な物質・材料設計（マテリアルズ・インフォマティクス）
６．二次元薄膜の複合・積層化による革新的デバイスの創製
７．輸送、相変化、非平衡、揺らぎなどの現象をテーマに異分野が連携することによる新しい価値（材料の機能）の創出

★日本の競争力強化に向けて国、独法や大学、学会が取組むべき７つの課題

これらの環境を整備することにより、イノベーションが起こる確率を上げていくことが重要となる。

１．大学研究者の産業への貢献を評価する仕組みの必要性
２．大学と企業の定常的なコミュニケーションの場の必要性
３．大学研究におけるシステム統合（垂直連携）の仕組みの必要性
４．明確な目標の下、コーディネータの巧みなさばきによるプロジェクトの必要性
５．ソフト・サービス基盤の強化の必要性
６．異なるキャリアを持つ人材の役割連携によるチーム形成の必要性
７．新たな価値を創造できる人材育成のための教育や人材循環の必要性

これらの活動の結果は、2014 年度末に発行予定のナノテクノロジー・材料分野の俯瞰報告書の中に反映させていく予定である。

目　次

エグゼクティブサマリー

１．主催者あいさつ　曽根純一、川合知二（JST-CRDS）…… 1
２．趣旨説明　島津博基（JST-CRDS）…… 2

３．話題提供
３．１　若林克法（物質・材料研究機構)…… 4
「複合原子膜超構造デバイスによる新機能創出」、「原子スケールで構造制御されたデバイスによる新機能創出」
３．２　町田友樹（東京大学)…… 9
「物性の発現と制御」
３．３　組頭広志（高エネルギー加速器研究機構)…… 13
「拡張２次元空間の機能と設計」、「不均一ナノ空間の計測技術と機能設計」
３．４　福村知昭（東京大学)…… 18
「ワイドギャップ酸化物半導体の電子デバイス応用」、「非平衡合成によるセラミックス新電子材料の開発」
３．５　溝口照康（東京大学)…… 22
「原子分解能動的計測技術」
３．６　藤田武志（東北大学)…… 26
「３次元原子積層造形技術と新材料設計」、「２次元半導体シリセンの創製と新機能デバイス」
３．７　大野宗一（北海道大学)…… 31
「メゾを機軸とした計算材料科学の包括的アプローチの構築」
３．８　重田育照（大阪大学)…… 36
「計算物質予測学」、「スピン制御物質科学」
３．９　堀毛悟史（京都大学)…… 43
「固体内における分子・イオン輸送の包括的理解と機能創出」
３．10　田原一邦（大阪大学）…… 49
「固体表面・界面ナノ（分子）材料」
３．11　永野修作（名古屋大学）…… 54
「ソフトナノメカニクスへの挑戦」
３．12　北野政明（東京工業大学）…… 59
「メタンから有用化学物質を創出する新材料」
３．13　山本浩史（分子科学研究所）…… 63
「高度化 Crystal Engineering」、「バイオインスパイアード分子システム」
３．14　葛谷明紀（関西大学）…… 69
「試験管内完全鏡像生物界の創出」、「ヒドロゲルの統一的理解とインテリジェント化」
３．15　コメンテータからのコメント …… 74
３．16　コーディネータからの二日目の発表に向けたお願い …… 77

４．創発・発見・気づき事項の発表…… 78
５．総合討論…… 104
６．サマリー…… 113

付録
付録１　プログラム…… 117
付録２　参加者一覧…… 119

1. 主催者あいさつ

○曽根純一（JST-CRDS　上席フェロー）

このワークショップでは特に物質・材料分野に関して最先端の科学技術が今どういう方向に動いているのか、あるいはその社会的なニーズや環境はどう変わってきているのか、国際的な日本のポジションはどうなっているかを議論し、次の日本の科学技術が向かう方向に関してプランをつくっていく。そこから様々な研究開発プログラムが進んでいく一つの大きな根拠になると考えている。そういう意味で非常に重要な場である。

この 2 年でいろいろなことが大きく変わっている。一つは、グリーンテクノロジーの分野で、石油資源の枯渇などの問題から、太陽電池を始めとした再生可能エネルギーにおける物質・材料への期待が非常に高まっていたが、アメリカなどでシェールガスの開発が進む中で、少し時間的な余裕が出てきた。再生可能エネルギーは最終的には絶対に重要なので、この間にしっかりと次世代の技術をつくりあげていこうという状況になってきた。生命科学の分野では、iPS 細胞の進展に代表されるような非常に著しいものがあり、バイオの世界もかなり様子が変わってきている。経済的には、リーマン・ショックの後、日本のエレクトロニクス産業、電機産業は非常に厳しい状況になっていたが、ここに来て立ち直りの兆しが見えてきた。同時に、日本の素材産業の強さというものが強くクローズアップされてきた。そういう産業はあだ花でも、浮き島のように浮かぶものではなく、根がしっかりしている。日本の物質材料を支えている科学技術まで含めたコミュニティがしっかりしているから可能になっている。

その意味で、これから物質・材料分野の研究がどういう方向に向かっていくかをここで議論することは日本にとって非常に重要であり、参加者のいろいろなアイデアをいただいて、研究開発戦略のプランニングをしていきたい。

○川合知二（JST-CRDS　特任フェロー）

まず、国際的に競争して絶対に負けられないというのがナノテクノロジー・材料分野なのではないかという意識は共有されているのではないか。中国や韓国がものすごい勢いで追い上げて来ているので、ここでナノテクノロジーや材料が弱くなっては日本としては非常にまずいと考える。

ナノテクノロジーや材料というのは、ある大きな課題がある時に、その課題を解決するために、デバイスを使ったり、素材を使ったり、システムを使ったりする、どんな機能で課題を解決していくかという実体のある科学技術だと思う。

そこで、国が今後どういうふうにこの分野にファンディングしていくかということを考えた時に、非常に重要なワークショップである。今日集まった研究者は比較的若いということで、期待していることは、実際に研究して日頃考えていること、そういう現場からの今後に対する見通しを自信を持って述べていただきたい。展望を述べていただくと同時に、他の人たちの話も聞いて自分の考えも加えて、今後のナノテクノロジー・材料分野でこういうものが絶対に必要なのでこういう研究開発をすべきということを表明していただきたい。

2.趣旨説明

○島津博基（JST-CRDS）

JST 研究開発戦略センターは主に 3 つの活動をしている。まず、それぞれの分野別ユニットが担当の分野で 2 年間かけて研究開発動向の俯瞰を行っている。そのアウトプットとして、それぞれの分野で「俯瞰報告書」を出している。今回の俯瞰ワークショップの中から出てきた情報を抽出してここに書きたい。俯瞰活動の中から重要なテーマをセンター全体として抽出し、年間 10 件程度を深掘り調査する。この特定のテーマについての深掘り調査の結果が「戦略プロポーザル」であり、CREST、さきがけの戦略目標に活用される他、総合科学技術会議を始めとする関係省庁に提案して施策に活かしていただくという形が、センターの活動の基本となっている。

今回のワークショップの目的は、まずは物質・材料分野を可能な限り広く俯瞰し、そこからトレンドやホットトピックスを把握すること。第二に、その中から特定テーマにつながるようないくつかの今後の方向性、センターでは「スコープ」と呼んでいるが、ある一定の範囲を持った領域、方向性を見出したい。第三に、今後、日本が世界を先導する新しい価値は異分野融合から生まれる可能性が高いのではないかという仮説の下、物質・材料分野における融合の例について検討することである。

ナノテクノロジー・材料ユニットにおいて俯瞰している範囲は、物質科学の領域から出口のデバイス、システムの領域までかなり広いが、今回の物質・材料領域のワークショップでは、応用は必ずしも意識せずに、その基盤となっている物質、物性、材料といったどちらかというと基盤となっているところを俯瞰したい。

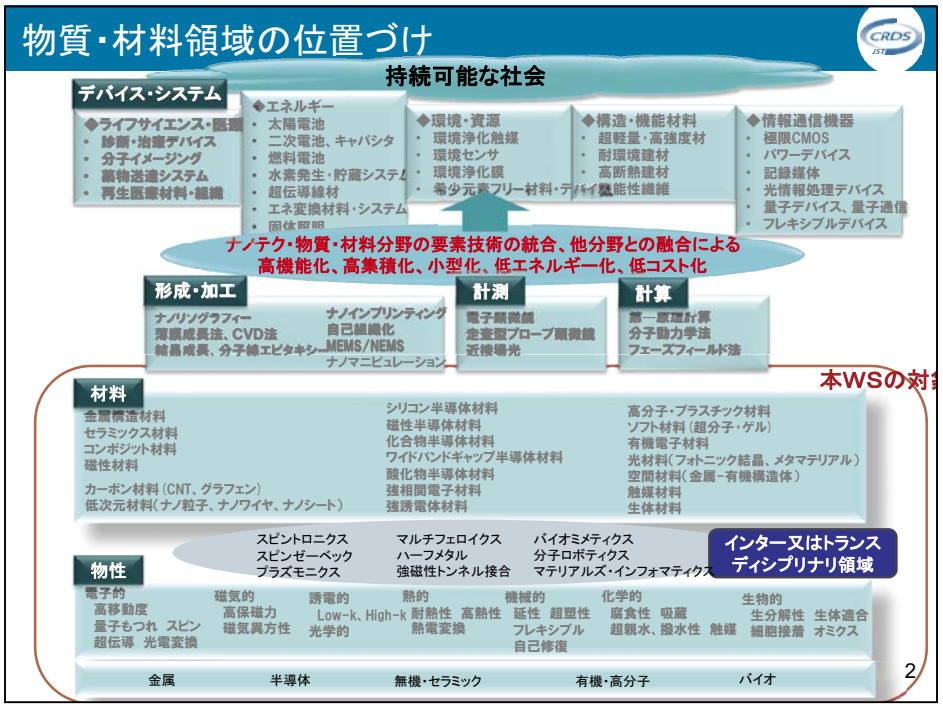


図 1

既に深掘り調査を行ってプロポーザルを出したテーマを並べた（図中、緑色の四角）。下のほうにはどちらかというと基盤的な領域があり、上のほうにはどちらかというと応用に近いプロポーザルが並んでいるが、多くのものは CREST やさきがけの戦略目標として実現している。電子材料、カーボン材料、分子材料という流れもあるし、既に活動してきた内容もにらみながら、新しいスコープ、流れ、方向性が見出せないかということを考えていく場である。

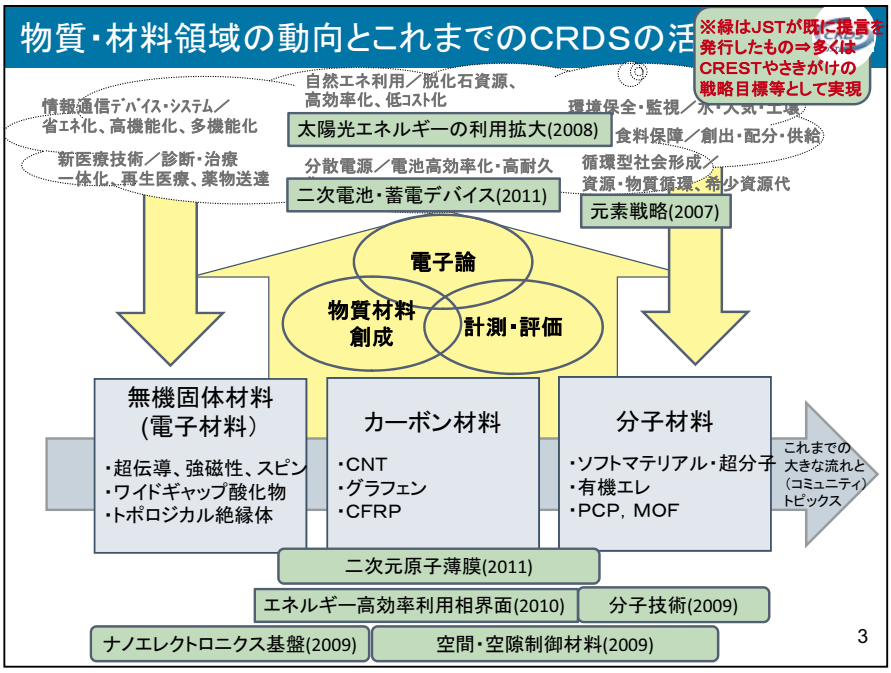


図 2

もう一つの留意事項としては、JSPS の科研費と NEDO における企業に近い研究開発とは何が違うのかというところは考えていきたい。JSPS は自由に研究者に学術を切り拓いていただくというものであり、NEDO は産業・企業の課題に近い研究ということで、JST ではその中間、社会や産業をにらみながら基礎研究をする。そういった機関にふさわしいテーマとはどういうものか、なかなか難しい問題だが、そういうことも考慮したい。

CRDS では昨年度、「2 次元機能性原子薄膜による次世代ナノシステムデバイス」という提言を出したが、グラフェン、ポストグラフェンの 2 次元原子薄膜という基盤的なものがトレンドとしてあったわけだが、そういうことを考える上でも、どういうものにつながっていくかということをきちんと描いて考えた。出口についても言及いただけるとありがたい。

このワークショップはセミクローズドで行うが、発表いただいた内容、議論いただいた内容はワークショップ報告書としてアウトプットし、一般公開させていただく予定である。

3. 話題提供

第一部「物性から材料へ」

3．1　若林克法（物質・材料研究機構）

「理論・計算科学からの視点」と題した発表を行う。私は、物性理論および理論ナノ科学を専門としており、グラフェンやトポロジカル絶縁体などのディラック電子系、および 2 次元電子系などにおける物理的特性を、理論数値解析によって研究している。主に活動している学会・領域は、物理学会の領域 7、領域 4 などである。応用物理学会とは、ナノカーボン領域や機能性薄膜領域などとのオーバーラップがある。現在、特に関係する大型の研究プロジェクトは、科研費新学術領域研究「原子層科学」である。平成 25 年度から 5 年間の予定で進行しており、私は計画研究の分担者として参画している。科研費なので、大型と言っても、CREST やさきがけと比べて、1 人当たりの額は極めて限られている。また、JST による資金支援と異なり、ボトムアップ研究が中心であり、当領域の発展に寄与する共同研究が求められている。

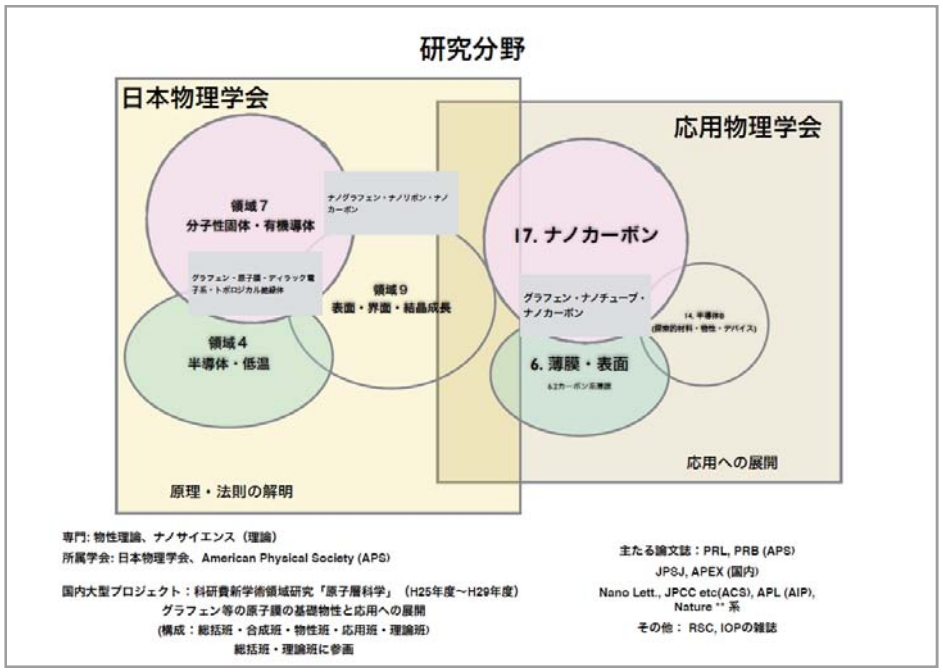


図 1

2 次元の炭素原子膜であるグラフェンには、機械的にとても強い力学的特性、非常に高い電子移動度に基づく電気特性や熱伝導度があり、応用の観点から大変期待されている。また、ディラック電子系は、さまざまな興味深い物理現象を示すため、物理の立場から言うと、それ自体が大変面白い系である。２年前に CRDS に呼ばれて「グラフェンはどうですか」と聞かれて、「もうやることないですよ」と言った。確かに、実際にグラフェンだけで何かやるのは難しい。しかし、2 次元の原子膜というのは、グラフェン以外にも、様々なものが新たに発見・合成されている。例えば、NIMS で合成されている六方晶窒化硼素（h-BN）は、その一例である。h-BN 膜は、原

子レベルで極めて平坦であることから、グラフェンの電子移動度を向上させるのに、大変重要な役割を果たしている。他には、MoS_2 などの遷移金属ダイカルコゲナイド系がある。この系は、バンドギャップを持っていて半導体デバイスとして使うことができる。さらに、酸化物ナノシートというものが NIMS で合成されている。この系の特徴は、厚みがナノスケールの膜にも関わらず、高い誘電率を有することにある。こういった様々な特徴を有する原子薄膜を組み合わせることによって、グラフェンだけでは実現できない物性や機能をつくるというのが、現在最も重要な課題になっている。原子膜の人工積層による機能制御の研究は、始まったばかりであると言える。

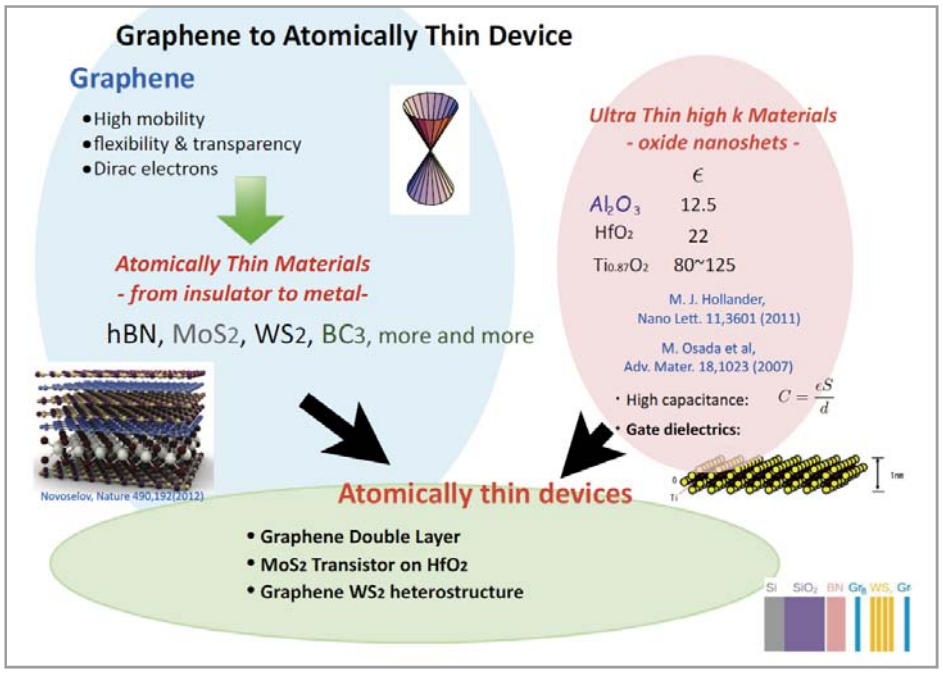


図 2

ここで最近の報告例を示す。WS_2 という半導体原子膜を 2 枚のグラフェンで挟み込むことで、グラフェンが透明電極として働き、このデバイスに光を照射してバイアスをかけるとフォトカレントを引き出すことができる。さらにその上に金の粒子をばらまくと、プラズモン効果でフォトカレントが 10 倍増強されることが、マンチェスター大学のグループによって報告されている。また、このような 2 重層グラフェン系では、グラフェンの間にいろいろな誘電体を挟み込むことができる。挟み込む物質の違いで、キャリア移動度が、制御することが可能と考えられる。つまり、挿入する物質の厚さや、誘電率などの物質パラメーターによって、デバイスの特性が制御でき、設計の自由度が格段に増える。

社会的意義としては、デバイスの低消費電力化がまず言える。次に、薄膜の重要な点はウェアラブルや、フレキシブルデバイスに応用できる点である。例えばグーグルグラスなどが最近出てきているが、そういうビッグデータにアクセスするツールを実現する可能性があるのではないか。

注目すべき動向として、イギリスではノーベル賞の効果もあってナショナルグラフェンインスティチュートをマンチェスターにつくって巨額の研究開発をやっている。あとは、シンガポールには、グラフェンリサーチセンターがあり、活発な材料開発を行っている。

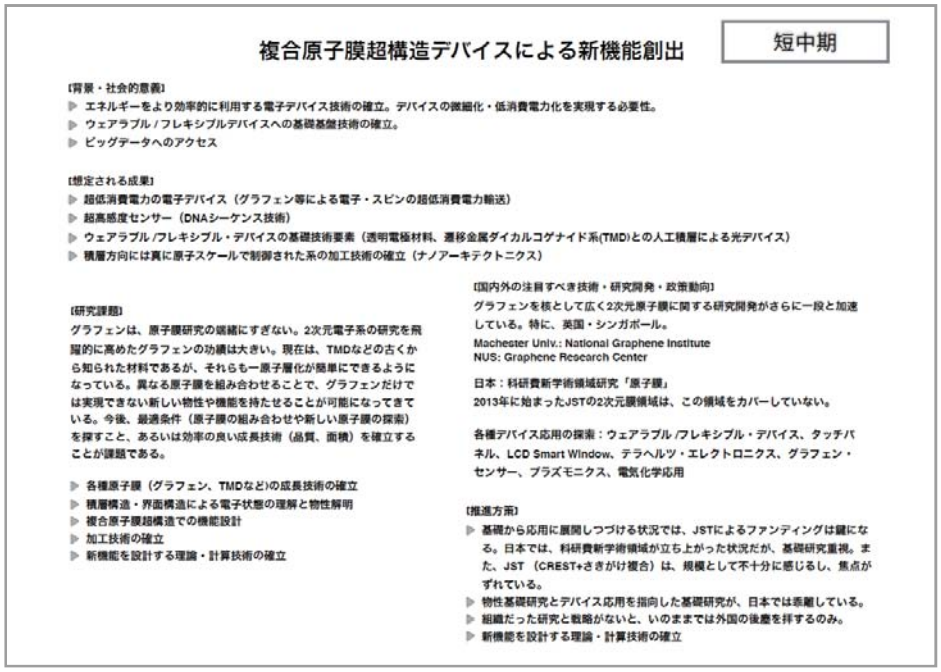


図 3

今後の研究課題としては、ある種の機能を実現するためには、どういう最適な材料を持ち出してくるのか、どういった原子膜材料の組み合わせが必要なのかを、答えること。この点において、理論・計算による予測が、ますます重要となると考える。すなわち、機能を設計するための理論・計算技術というのが必要だろうと考える。また、設計した機能を実現するための加工技術やプロセス技術の研究は、今後とも重要な位置を占める。しかし、基礎物性研究とデバイス・プロセスの研究が、日本では乖離していると感じる。ある意味、物理学会のセクターと応用物理のセクターは分離していて、コミュニケーションが足りないのかなと感じている。最近では理論＝第一原理計算になってしまうが、これも正しい図式ではない。計算をいくらやっても、指導原理となる理論指針がないと何も出てこない。

原子膜人工積層でデバイスをつくるというのは 10 年以内でやってほしい。このワークショップはもう少し先も含めてということだったので、そうなると先は自然で、積層方向のナノアーキテクトニクスの次は、面内でのナノアーキテクトニクスをやらないといけない。たとえば、ナノチューブや、巨大な芳香族分子などを考えると、それらの電子状態はサイズや構造に強く依存する。サイズであったり、エッジであったりをちゃんと制御しなければいけない。例えば、ナノチューブを基板の上に持ってきて、所望のところにナノチューブを配置して電子デバイスをつくるというのは、たぶん 10 年でも難しいと思うが、例えば原子膜の中に、ドメインウォールなどを利用して微細構造を作り込むことなどは、ある程度できるのではないかと思う。

ここで幾つかの例をお示ししたい。15 年ほど前、我々はグラフェンナノリボンの電子状態を理論計算していた。当時はそんなものはできないと言われていたが、10 年経ったらできているということになった。予言をちゃんとフォローアップしてくれる実験屋さんが常に出てくる。これは理論をやっていて大変にありがたいが、ただ残念なことに常にアメリカから出てくる。今のはナノリボンの例だが、その他にもドメインウォールなどもある。例えばグラフェンを成長させた時にちょうど結晶軸が 90° 異なった二つのドメインが繋がる場合がある。ドメインバウンダリを介

した電子伝導は、理論で考えると面白いことが色々ある。例えば、これら二つのドメイン間に、電流が流れると皆さんは考えるかもしれないが、これは理論的には流れない。なぜなら、偽スピンというのが二つの領域で直交しているので、量子力学的にはトンネルが禁止されている。こうした、原子薄膜でしか実現しない物理現象をナノスケールで組み込んでいければ、新しいデバイスが設計できる。JST には、すぐに応用が見える研究ではなく、リスクが高い基礎研究への投資をしてほしい。

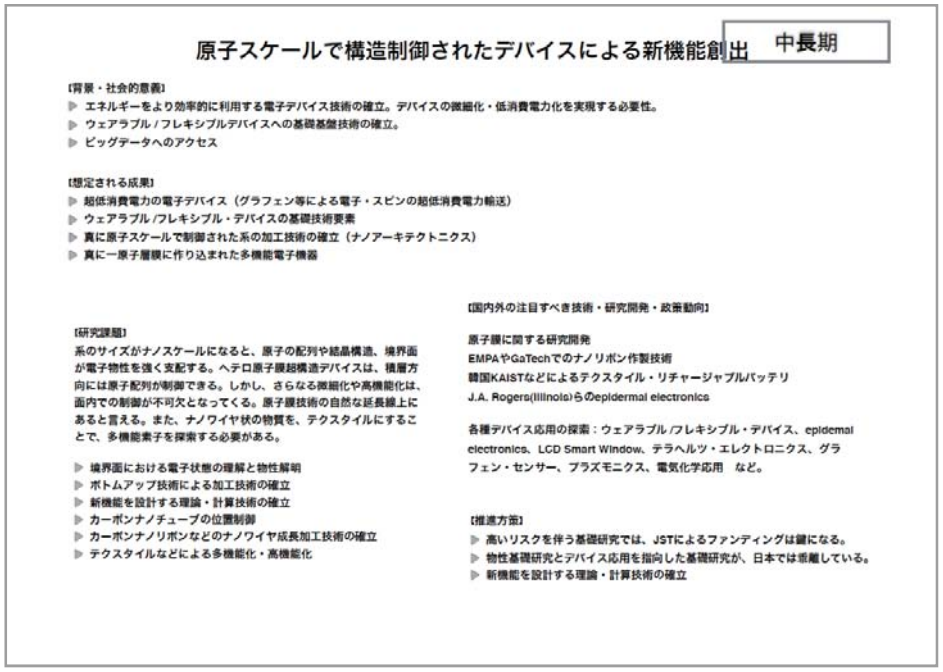


図 4

最近ウェアラブルデバイスが出始めてきている。ワイヤやナノリボンをテクスチャみたいにして織り込めば、それはそれで新しい機能が出せるという提案である。自然な流れとしては積層方向だけでなく、一つの面の中でのナノアーキテクトをやっていくということになる。ナノワイヤの研究は、いずれまた重要になってくると思う。ある意味、ポストグラフェンはカーボンナノチューブではないかと個人的には思っていたりする。織物技術などが使えるのかもしれない。

結局のところ、材料研究というのは総合力だと思う。グラフェン研究がなぜ他国の遅れを取っているのか？それは、グラフェンは簡単につくれるからだろうと考えている。特殊な装置も使わずに、インドでも、中国でも簡単に作ることができる。だから日本の優位性がまったく出なかった。一方で、デバイスの特性、グラフェンの特性を本当に出すためには、h-BN というものを基板に入れないといけない。それは日本にしかできない。だから、機能というか、そういうものを絞り込んで、ターゲットのイメージを持った上で材料を総合的に検討するような領域を考えるべきである。

【質疑応答】
○質問　ダイヤモンドでシートなどをつくれたらおもしろいと思うが、そういう方向性はないか。
○若林　元々バルクの材料を薄くしていくことで、新規性が出せないかということかと。例えばあるグループはバルクのシリコンをナノスケールまで薄くしていって、それを基板上にアコーディオンを波打たせるような感じでファブリケーションしている。そうすると、皮膚などに載せるデバイスができるようになる。シリコンでも、そういう方向性がある。
○質問　なぜアメリカばかりいつもそういう結果が出てくるのか。
○若林　一つ思うには、若手を支援するというのはとてもよいけれど、若手 PI というのがたくさんできた。それはただ小さな山が日本全国にできただけで、その間の連携が何もできていない。アメリカは一つ大きな山があるとそこにみんなが群がっていくのではないか。

○質問　ジグザグのエッジの話のように、理論屋が予め「こういう機能が出るのではないか」と予測したものは、実際に実現される機能をどの程度正確に予測できるか。
○若林　どの現象を見るかによる。カーボン系は簡単な計算を 2003 年頃に第一原理計算でもやって、それは実験的にも STM などの表現をうまく再現している。皆さんナノリボンをつくると、トランスポートギャップができて金属が絶縁体になるという。単純につくるとそうなるが、ちゃんと端を制御すればメタルになるということをだいぶ前に予言している。最近、アメリカの GaTech のグループがおもしろい方法でやって、SiC の上のグラフェンに微斜面をつくる。トレンチ構造を人工的に SiC 基板につくって、その中でリボンを溶出化させると金属的挙動が出てくることを報告している。
○質問　理論屋と実際にデバイスをつくる人との連携がうまくいっていればそういう結果が出やすいのか。例えば触媒の分野で理論屋さんと組む時には、何か触媒の現象が見られて、その証拠のために計算屋さんと組んで何かやってもらうことが多い。
○若林　連携の重要性はある。例えば、シンガポールにも UK にもキーになる人がいる。マンチェスターはノーベル賞を取った二人がいて、シンガポールはアントニオ・カストロネトという理論屋がうまく束ねている。それぞれのチームメンバーのレベルを比べると、日本のほうがはるかにポテンシャルが高いと思う。しかし、結果として見ると、ペーパーの数であったり、出版論文のインパクトファクターの高さという点で、日本は負けてしまっている。これは、そういうリーダー的な人がアイデアを出して、「こういうところを狙え」という形で進めているからだと思う。シンガポールなどがなぜあんな短期でうまくいったのか？私は 5 年前、あまりうまくいかないだろうと思っていた。しかし、今現在、外形基準だけ見れば、リサーチセンターとしてのアウトプットは十分に評価に値する結果を出していると思う。それはなぜだろうと思うと、やっぱり核になる人。日本ではどうも外野が「これは役に立たないだろう」と決めてしまう。例えばシンガポールで出てきている結果もすぐに役に立つとは思えないが、もう少し温かい目が必要ではないか。

3．2　町田友樹（東京大学）

バックグラウンドは物性物理の実験。基本的に低次元電子系の量子輸送現象で、量子ホール系、量子ドットなどを研究している。最近はグラフェンに注力。キーワードは低次元電子系、つまり 2 次元、1 次元、0 次元の電子系。電気伝導測定では低温強磁場を使う。ナノ、量子効果などもキーワード。一方、スピンを制御するスピンエレクトロニクスというのがあり、また量子状態を制御する量子情報という分野がある。私はここの部分になる。物理現象としては非常に基礎的なものを使うが、スピンの一つである核スピンを制御して量子情報に役立つような研究を目指した。

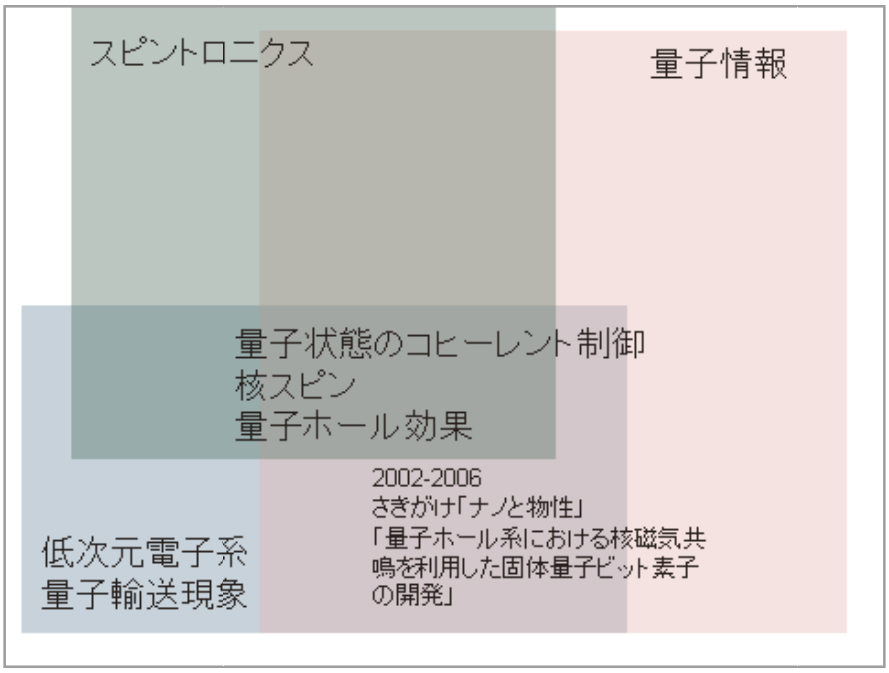


図 1

グラフェンでは基礎寄りのテーマを研究している。劈開法という素子作製法を使っているが、基本的には大面積は取れないし、商品化は難しいが、非常に高品質のグラフェンでディラックフェルミオンの物理を調べるとか、デバイス応用としてのポテンシャルを提示することを目指している。一方、世の中では大面積グラフェンをつくろうという応用の研究をやっている大学、企業がたくさんあるので、最終的には基礎研究で「こんなことができる」というポテンシャルを提示したものと、実際にコストなども含めた大面積グラフェンの作製という合成、応用といった方向が合わさると強くなる。

学会としては、物理学会、応用物理学会、グラフェン・ナノチューブ学会とあるが、グラフェンに関しては学会がまたがってしまっていて、日本のグラフェン業界は学会がうまく連携できていない印象がある。

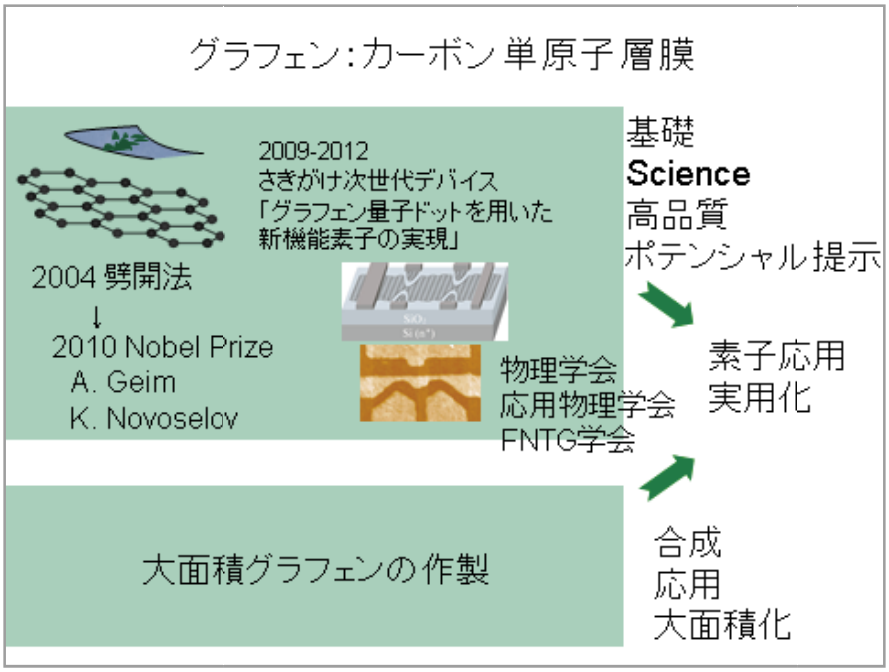


図 2

グラフェンを使っていろいろな素子応用のポテンシャルを示す、非常に感度の高い電子波検出器とか、スピン伝導素子をつくる。グラフェン以外にもいろいろな原子層を超格子にできるという研究がいろいろなところで進められている。私のところでは、ボロンナイトライド、グラフェンを非常に原始的な手法を使って顕微鏡の下で位置合わせをしながら押しつける方法でつくることができる。室温でも既存の材料では全然実現できないキャリア移動度が実現できる。

こういったバックグラウンドをベースに、敢えて「物性の発現と制御」という一見広く見えるようなテーマとした。ごく当たり前の材料でも何らかの操作とか、何か新しい技術、品質の向上、作製法とか、何か新しいスパイスを加えることによってまったく新しい物性ができて、新しい物性が制御できれば、実質的には新規材料になる。例えばグラフェン。元となるグラファイトは別に新しくも何ともなくて日常生活のいろいろなところで使われているが単原子層の薄さにすると突然、特殊な物性が出てくる。昨年の『ネイチャー』の特集号では、グラフェンのことを「ニュー・スター・オブ・マテリアル・ワールド」という言い方で紹介している。既存の材料では絶対に得られないような物性が現われてくるなど。同様に MoS2 という材料がある。これは潤滑剤として非常に普及している材料だが、単原子層にすると間接遷移が直接遷移の半導体になって発光するという非常に特殊なものである。これ以外にも、トポロジカル絶縁体もそうだし、例えば有機伝導体でもキャリアを今までにない技術でたくさん注入したり、圧力をかけたり歪みをかけたりすると超伝導が出る。また絶縁体の中をスピン流を流すことでスピンゼーベック効果と言ってスピン流を発電に使うといった技術が出てきているが、使っている材料も例えばガーネットとか古くから知られている磁性材料である。元素や物質自体は新しくなくても、新しい工夫によって新規物性を発現させる。これが実効的な新物質、新材料の開発になるのではないかと考える。

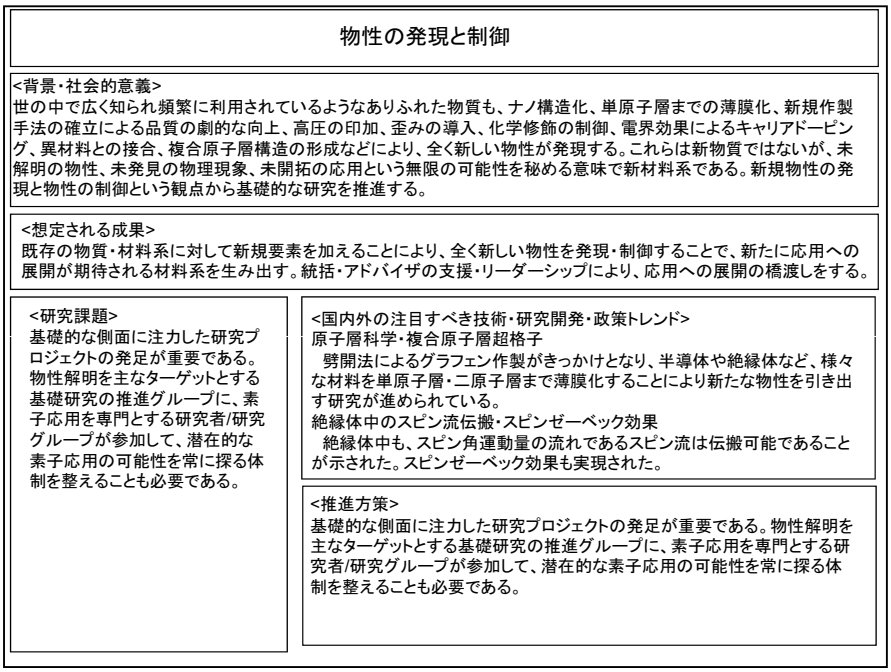


図 3

研究の方向性というのは 360°いろいろな方向があり得るが、すぐに応用になるように考えようとか、現状の技術やアイデアでなるべく役に立つものを考えようとすると、だいたい 90°くらいの方向に限定される。ところが、残った部分は何の役にも立たないかというと、そんなことはなくて、ダイヤの原石はいろいろなところに散らばっている。重要なのは、ダイヤの原石を見つけて応用に持ってくるということではないか。

ファンディングという観点からすると、JST にはダイヤの原石をこっちに持ってくる、そういうものに対してファンディングしてほしい。JST は CREST にしてもさきがけにしてもその後のフォローがあるので、こういった領域からなるべくこういうふうにするのだというモチベートするような仕組みがあればよい。具体的には、ベースは今のシステムで言うとさきがけではないかと思う。例えば A、B、C の研究者がいてそれぞれの研究があった時に、ここをやればおもしろいとみんな思うが、なかなか他には手が出ないというのが実情である。例えば A の場合に B の技術を使うと自分のここが発展するとか、A の技術を提供すると B の研究が発展するという形での連携はけっこうあると思うが、本当にこの間の領域をゼロからスタートしようというのは難しい。そういった意味では、統括やアドバイザーの方がここを進めるようなことをよりリーダーシップを持って主導していただくとか、ここをやるのであればポスドクや予算をここ用に新しく付けるというような仕組みを使って、融合領域、境界領域をより促進させるというシステムがあってもよいと思う。統括やアドバイザーというのは非常に重要で、個人的にはややシニアな方、研究者を卒業した直後くらいとか、でもまだ元気でヒューマンネットワークも持っているような方がいていただくと非常によいのではないかと考える。

【質疑応答】
○質問　ダイヤの原石はどうやって探すのか。
○町田　なるべく広い領域を無駄なく捜索していく戦略は必要だと思う。最初にさきがけをやった時には、量子ホール効果という現象を使って核スピンを制御して量子ビットをつくるという研究だったが、量子ホール効果というのは 1K とか 100mK の極低温で磁場をかけて低次元電子系で見る現象なので、それが応用につながるとは誰も思っていなかった。でも、うまく使うと核スピンが電気的に制御できることがわかった。
○曽根　原石をどうやって見つけるかというのは難しい話で、CREST などを見ていてつくづく思うが、原石というのは、スタートした時にロードマップに載っているような技術ではなくて、独創性がすごく重要。それがすごくうまく発揮できると、やがて仲間がたくさんついて大きく広がる。今までの技術の歴史というのは、そういうものの集積でこの時代がつくられている。それから、NEDO に持っていくのは、なかなか難しい問題で、技術のよしあしだけではなくて社会が味方してくれるかなど別の要素がたくさん関わってくる。だから、我々のここでの責任というのは、そこはとても予測しがたいので、ともかく独創的でおもしろい機能を持ったものをつくりだす。その仲間をどうやってつくっていくかということが重要。

○質問　日本では、個々のプロジェクト自体はうまくいっているが、隣のプロジェクトとは何のアクションもない。欧米を見たりすると、途中で融合したり非常にうまくやっている。日本ではタコツボ化することがあって、どこに問題があるのか。せっかくよい技術があっても、隣の領域は知らないとかいうことがいっぱいある。僕は分析法だが、モノづくりのほうから見てそういったところで何が欠けているとかあれば。
○町田　グラフェンで、最近はいろいろな分析方法があるので興味を持って、これで測れたらいいなと思って相談することはあるが、例えば、測定するためのサンプルの条件がすごく制約が強くて、そういうものは現状ではつくれないとか、つくれてもすぐに壊れてしまうとか、そういう部分がけっこう大きい。
○佐藤　外国では、測定屋さんが一所懸命になる。

3．3　組頭広志（高エネルギー加速器研究機構）

主に放射光を用いた機能性材料の評価・分析等を行っている。実際、放射光施設で最新鋭の測定装置を用意して物質材料評価を請け負っていると、測定依頼内容からどういったことが最近の物質開発のトレンドなのか見えるので、そういった観点からの話させていただければと思う。これに加えて、元素戦略の細野先生の電子材料のほうで PI に参画して主に放射光解析に携わっている観点からの課題提起もさせていただければと思う。基礎物性、応用物性、デバイス開発、プロセス開発というところの横の軸。先端分光開発の観点から、高精度評価、及び通常の評価手法、及び産業利用という縦の軸。こういう縦横の軸を考えると、主に私はここに属している。研究分野では、学会で言うと、物理学会、さらに分析技術で放射光学会、表面科学会に属している。

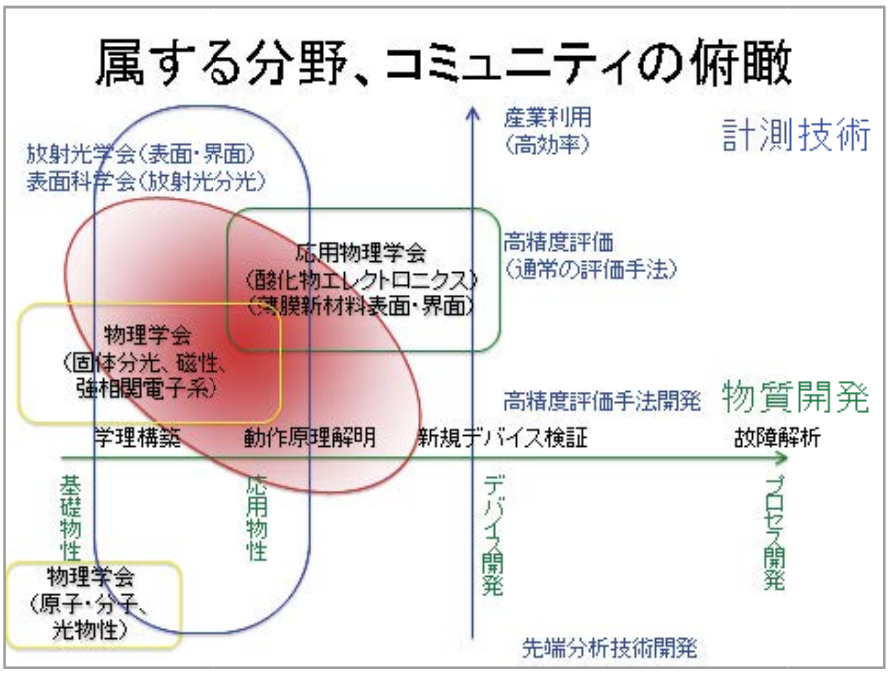


図 1

提案として、「拡張 2 次元空間の機能と設計」と「不均一ナノ空間の計測技術と機能設計」という 2 つを挙げさせていただく。

「拡張 2 次元空間の機能と設計」では、2 次元という空間を広く捉えたい。2 次元というと、グラフェンとか鉄系超伝導体とか、そういったトピックがいろいろあるキーワードであるが、これは定義で対象がいろいろ変わってくる。「2 次元空間」というものを厚さで見ていくと、グラフェンのような 2 次元原子薄膜やトポロジカル絶縁体、ラッシュバー効果、これらは本当に原子一層レベルでの表面・界面の問題。少し厚くなって、原子数層の銅酸化物高温超伝導体、鉄系超伝導体から、10 数ナノで機能が発現する量子デバイスという観点での酸化物エレクトロニクス。さらに半導体の 2 次元電子ガスは数百 nm になるが、これも 2 次元空間と捉えてもよいと思う。さらに拡張すると生体膜、固液界面や液液界面といったものも広い意味での 2 次元空間になるだろう。これまで、2 次元空間というのは、超流動、電荷密度から

始まって、高温超伝導、鉄系超伝導体、グラフェンと常におもしろい研究領域を提供しているので、この後にも必ず何かおもしろいものがあるだろうと考える。

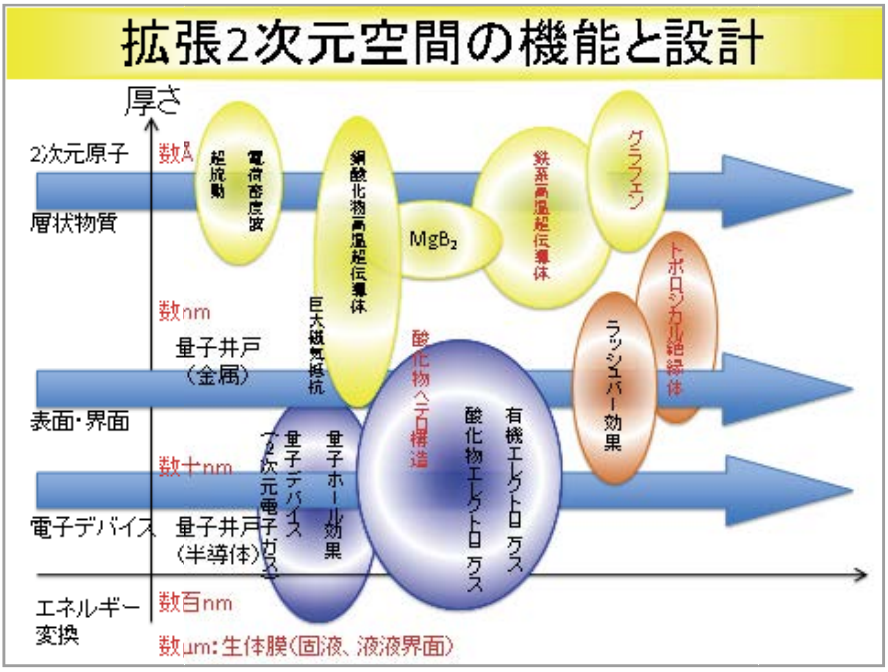


図 2

これらの物質系というのは、いま放射光施設にいてユーザーが実際に測定・解析する過程を見ていると、お互いにサイエンスとしてオーバーラップがあるにもかかわらず、それぞれ独立して研究されていて相互作用がないように思える。私は酸化物ヘテロ構造のエレクトロニクスの分野で 2 次元状態の研究を行っているが、例えばグラフェンとかの分野の方と、同じような 2 次元というキーワードがあるにもかかわらずお互いにあまり研究のオーバーラップがない。我々はある酸化物を 1 層、2 層、3 層と積み重ねて量子井戸を作製し、強相関の電子の 2 次元量子化状態をつくる技術を確立して、その結果を論文として『サイエンス』に出したのだけれども、その後「2 次元つながり」でグラフェンの業界や鉄系超伝導体の会議のようなところから講演してくださいという話があるかと思ったが全くなかった。ところが外国からは、何かつながるかもしれないという事で、様々な分野からの招待講演の依頼があって、これまで 20 数件こなしてきた。

そこで、それぞれのコミュニティによって定義、厚さスケールが違うと思うが、この 2 次元空間というのを「拡張」というキーワードで広く捉え、拡張 2 次元空間というキーワードで縛りをかけることにより、新たな基礎と応用の連続性、及びそれぞれの分野間のシナジー効果が出せるのではないかと思っている。

もう一つが、「不均一ナノ空間」。これまで半導体デバイス、太陽電池、CMOS などの日本を支えている半導体デバイスというのは、基本的には均一な構造、均一性というものがキーワードであった。ナノ構造体というのも、微細化技術か自己組織化反応を利用して基本的に均一な構造をつくってその機能を調べようということで、ベースとしては均一な構造体というものがある。それに対して最近は一部に、抵抗変化型不揮発性メモリとか NIMS の青野先生の原子スイッチなど不均一な構造があって、不均一であるということがその機能の本質で

あると考えられているデバイスがある。さらに、リチウムイオン電池、光触媒や永久磁石の一部などでもある不均一な状態が重要であるという指摘がある。これらの、不均一な状態のある特定の領域でエネルギーの変換が行われることによって機能が生じているデバイスということで、従来の半導体「均一」デバイスに対して、ここでは「不均一デバイス」と呼ぶ。この研究開発においては、今までの均一なナノ構造体で培われた研究スキーム、演繹的な手法、つまり基本的には現象は理論的に記述できるという考えを適用するのが難しい。

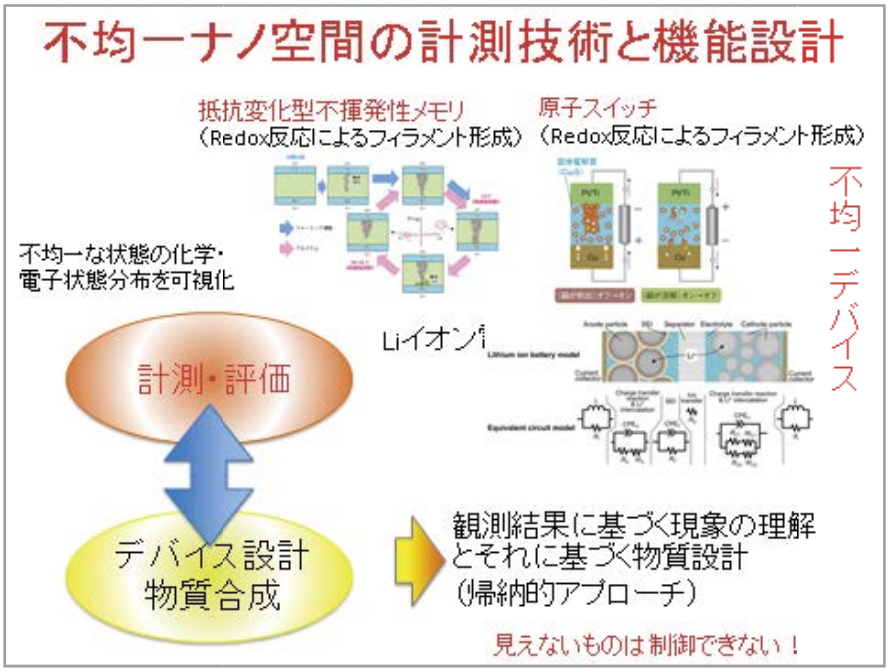


図 3

ナノテクノロジーのキーワードの一つとして、「見えないものは制御できない」ということがある。そのため、不均一な状態での化学・電子状態を可視化できる手法を今後開発していきたい。従来の均一デバイスは基本的には理論計算で記述できるという前提が適応できた系であり、理論予測された現象を確認するという意味で演繹的なアプローチがうまくいっていたと思うが、不均一デバイスをやるためには、計測・評価技術とデバイスの作製・合成がうまくタッグを組んで、基本は観測の結果に基づく現象の理解と、それに基づく物質の設計という帰納的アプローチをやっていかなければならない。そのためには見る技術というのは非常に重要である。

最後に分析技術開発における問題提起させていただくと、日本では個別の技術、例えばX線ナノ集光技術とかゾーンプレート技術というのは世界のトップ水準にあるが、それらをインテグレートして、ある製品にするという段階でうまくいっていなくて、欧米、特にヨーロッパ系の企業に駆逐されている。我々のところは一応、独自開発している部分もあるが、多くの放射光施設などでもヨーロッパで開発されたものを購入している。これはなぜかというと、開発時間のスケールが違う。例えばグラフェンのプロジェクトに参画しグラフェン材料開発のための計測技術を開発するということをやっていくのだが、5 年間で終了した時にそこで装置開発は切れてしまう。その場合に、材料開発から機器開発へのフィードバックもないま

ま、ノウハウも人材も流出してしまう。材料開発の時間スケールに合わない装置開発は瀕死になってしまうことが多い。特に新しい原理に基づく計測技術においては何回か継続を重ねて 10 年という長いスパンでやるようなプロジェクトを考えていただきたい。もう一つ問題があり、日本には研究者はいるが計測技術やソフトウエア開発を現場で担当するテクニシャンの数が圧倒的に少ないために、大学はのみならず大型施設などでも装置開発のノウハウの蓄積ができてないことが多い。

【質疑応答】
○佐藤　不均一系の問題は、今まであまり議論されていなかったが、磁性半導体もそういうところがあるし、いわゆる高周波半導体などはほとんどでスピンの分化が起きているという話もある。触媒屋さんなどは界面の問題などすごく関係があるのではないか。
○質問　よくある触媒というのは、単一の材料で単一の酸化物などに載せるようなものが多いが、最近はやはり金属間化合物であったり、いろいろなものが混ざった状態で、なおかつそのものだけを使うのではなく、担体となるような物質との界面で新たな機能が発現するということがよく見られる。こういう不均一デバイスというのは研究例としては多いのか。
○組頭　測定技術という点では、透過型電子顕微鏡（TEM）での研究が多いと思うが、TEM にも限界があるので、計測技術的にはむしろ未開発。どうしても我々は理想系、例えば単結晶を用意してモデル触媒をつくってその反応を調べるとかそういうアプローチを取らざるをえない。ただ、それは実デバイスで起こっていることとはずいぶん違うということがだいたいわかってきている。
○質問　TEM という話が出たが、例えば電子線を当てた時に界面そのものが観察中に変化するので、実際の性能があるところは見ていないということがあるが、そういうところは計測の側でも問題点としては挙がっているか。
○組頭　もちろん。強いビームを当ててしまうと壊れて、本質を見ていないのではないかという議論はある。一方で、弱いビームにするとシグナルも弱くなるので、検出器側の開発をしようということという事になるが、ここは計測とモノづくりがお互いにフィードバックをかけ合って開発していくことが非常に重要。○佐藤　分子系のものは、ある意味ではほとんどが不均一ではないか。
○質問　どのくらいのナノスケール、どのくらいの不均一性を今の計測技術では評価することができるか。リチウムイオン電池など、ある程度の大きさを持った 3 次元的な材料を評価することになると思うが、そういったところに計測技術はどのくらいいけるか。
○組頭　電子顕微鏡などはサブナノくらいまで。放射光、例えば量子ビームなどでは回折限界近くまで来ている。X 線のスペクトロスコピーの分野では、光電子顕微鏡（PEEM）でだいたい 10nm くらい。だた、これらはいずれも 2 次元的な分布情報を見ている。そのため、不均一な 3 次元の状態を見るというのは、我々にとっては一番難しい課題。ただ、医療でもレントゲンから CT スキャンになって病状が飛躍的にわかるようになった。今後開発していかなければいけない技術でいま一所懸命やっているが、どうしても触媒を 3 次元解析してくださいという話が来ると、まずモデル計測をつくって 2 次元系の計測法でやりましょうということになってしまう。ただ、これでは駄目で、本質を理解するためには不均一状態を見なければいけないということが皆さん共通してわかってきた。

○佐藤　さっきの質問は、非常に大きなものの中の、しかも小さなところを見たいということ。
○組頭　それらはすべて「3 次元解析」になるので現状ではとても難しい。ただ、それに向けての開発もやっていかなければいけないし、今は半導体「均一」デバイスから触媒・電池といった「不均一」デバイスへ舞台が移っていく過程でそういう要請が非常に強くなっていると感じている。

○質問　ターミノロジーで、不均一と均一というのはちょっと違和感がある。先ほどのスピノーダル分解も熱力学的には平衡。不均一というのは、動的ということか、それとも非平衡か。
○組頭　個別には不均一な平衡状態だと思うが、従来の均一のものをつくってそれをナノ化していくというアプローチではなくて、アトランダムに起こるという意味で不均一と。動的も含めて広い概念で。均一性触媒と不均一性触媒もそういう意味ではないか。

○質問　産業で何かやろうとすると、大きなすそ野があって、一つの知的集合体、それから人的集合体、それから産業の場合にはインフラが要るが、そういう大きな集合がないと物はできない。先ほどおっしゃったのは、5 年したらプロジェクトが終わって瓦解してしまう。
○組頭　人口に膾炙した計測技術、産業界に非常に役立つ技術として広がっていったものはどんどん継続していく。それは技術の淘汰が行われているということで、それでよいだろうという考え方もあると思う。ただ、トンネル顕微鏡（STM）の開発過程のように、長い間基礎的な装置開発を続けてきた上に新原理が開発された例がある。新たな分析技術というのは、非常にロングスタンディングなもので、これらの開発は欧米がとても強い。そういった技術開発を継続するのが重要ではないか。
○質問　産業側から見たら、どれだけのビジネスになるのかという考え方をした時に、それを使い込んでいくような産業が予測できるのか。ヨーロッパでは予測できているから物がつくれていくのか。それとも、日本にも日立とか日本分光とかいろいろあるけれど、その人たちが魅力を感じないのか。彼らはその開発をしていったのか、それとも分化に至るまでの間にもう一つ何かの仕掛けがあったのか。それを育て上げるようなことが、日本の産業界に残念ながらそれがないからなのか。
○組頭　経済的に魅力を感じるような分析技術とかデバイスとか、原理が確立していてかつ役に立つとわかったものは企業の方も投資して育っていくのだと思う。それは、例えば放射光施設のところに限って言えば、応用装置である X 線吸収微細構造（XAFS）測定とか、X 線回折・散乱測定の測定装置など。しかしながら、ここで話したのはもう少し基礎的な装置開発という意味。例えば STM とか電子顕微鏡のようにコンベンショナルになった時点では企業の方も投資してどんどん進んでいくと思うが、プリミティブなベンチャー企業がやるような段階のところでは日本は非常に弱い。ヨーロッパなどでは、今後こういう技術が絶対に重要になる、例えば不均一のものを測るために 3 次元解析ができるようなナノ顕微鏡が必要だとなると、それに向けてこつこつと技術開発が行われていって、インストールメントサイエンティストのような人がずっと継続して技術のノウハウなどをやっていく。そういうシーズを育てる底辺のところが日本とは違うのではないか。

3．4　福村知昭（東京大学）

提供する話題は、酸化物エレクトロニクスに関する分野である。私は機能性酸化物の主に薄膜材料に関する研究をしている。例えば、ワイドギャップ酸化物半導体に遷移金属をドープして室温強磁性体を作る提案をしたが、二酸化チタンという光触媒材料に遷移金属を入れると室温強磁性が出て、2001 年に論文が出た。強磁性を否定する意見が国内外からあり、研究をやめようかと思ったこともあるが、不思議なことに若手向けの大型予算を継続できて、最終的に、世界で初めて室温で電気的に強磁性をコントロールするところまで到達した。

酸化物は、これまで粉末の光触媒とか、フェライトの黒板に付く磁性体とか、非常によい絶縁体といった身近だが目立たない材料だった。しかし、最近では酸化物単結晶の作製技術が向上して、酸化物薄膜の基板としても使うことができてきた。酸化物薄膜のクオリティが上がってくると、単なるセラミックスではなく電子材料としてのポテンシャルがどんどん見えてきた。例えばこれまで ITO のような透明電極で使われていたような酸化物半導体も、より高機能な半導体のエレクトロニクス材料としてのポテンシャルが出てきた。ほかにも、15 年、20 年前になるが、高温超伝導のように、酸化物は応用に役立つ基礎物性の宝庫である。そこから、高温超伝導体や巨大磁気抵抗に表される強相関電子系と呼ばれる分野も確立された。それから最近では、トポロジカル絶縁体というものも（まだ少ないが）出てきている。ほかには、いま世の中で使われているリチウムイオン電池材料とかもある。

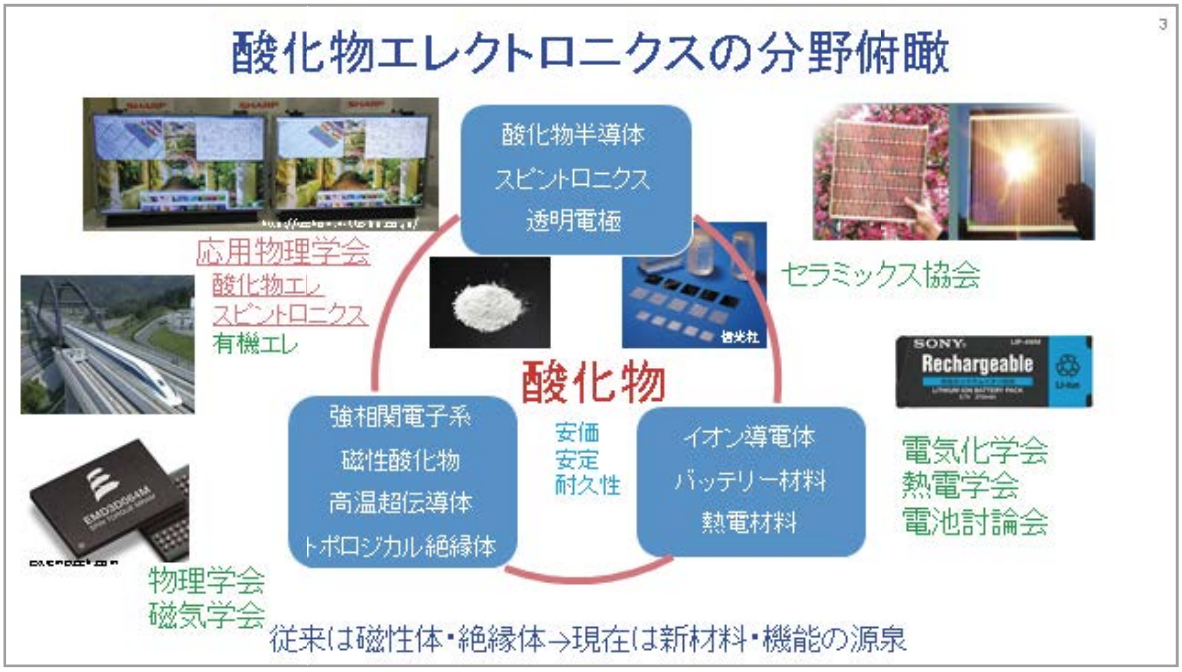


図 1

所属している学会は、応用物理学会の酸化物エレクトロニクス分野、スピントロニクス分野である。また、透明（酸化物）電極というのは必ず有機エレクトロニクスの電極として使われていていることから、有機エレクトロニクスにも少し関わっている。ほかに関連のある

学会としては、基礎的なところでは物理学会、あとは電池関係の学会、またセラミックスの学会である（しかし、今のところ会員ではない）。

これから短中期的に重要な分野である。特に日本が貢献しているワイドギャップ酸化物半導体というのが注目されているが、デバイス応用までたどり着くことが重要である。ワイドギャップ酸化物の応用のひとつの透明電極としては ITO が一番有名であり、IGZO（In-Ga-Zn 酸化物）も実際に応用までいっているが、インジウム代替などの課題がある。また、ITO というのは仕事関数の深い透明酸化物として有機デバイスにも使われているが、ワイドギャップ酸化物半導体全般が有機デバイスにももっと貢献できるのではないかと考えている。例えば、室温で透明な窓ガラスにも貼れる有機デバイスであろう。別の応用例として、GaN や ZnO などを短波長の応用や有機エレクトロニクスにうまく使って太陽電池を高性能化するといったことが考えられる。課題はいろいろあるが、最初の一歩としては、酸化物半導体は基本的に n 型ばかりなので、いわゆるエレクトロニクスに使われる半導体のように p 型を探していく必要があろう。n 型としては、IGZO のトランジスタがあって、これは応用までいった。酸化亜鉛の量子ホール効果や紫外 LED もしばらく前に報告されている。最近、有機・無機の接合の太陽電池にはブレイクスルーが出ている。

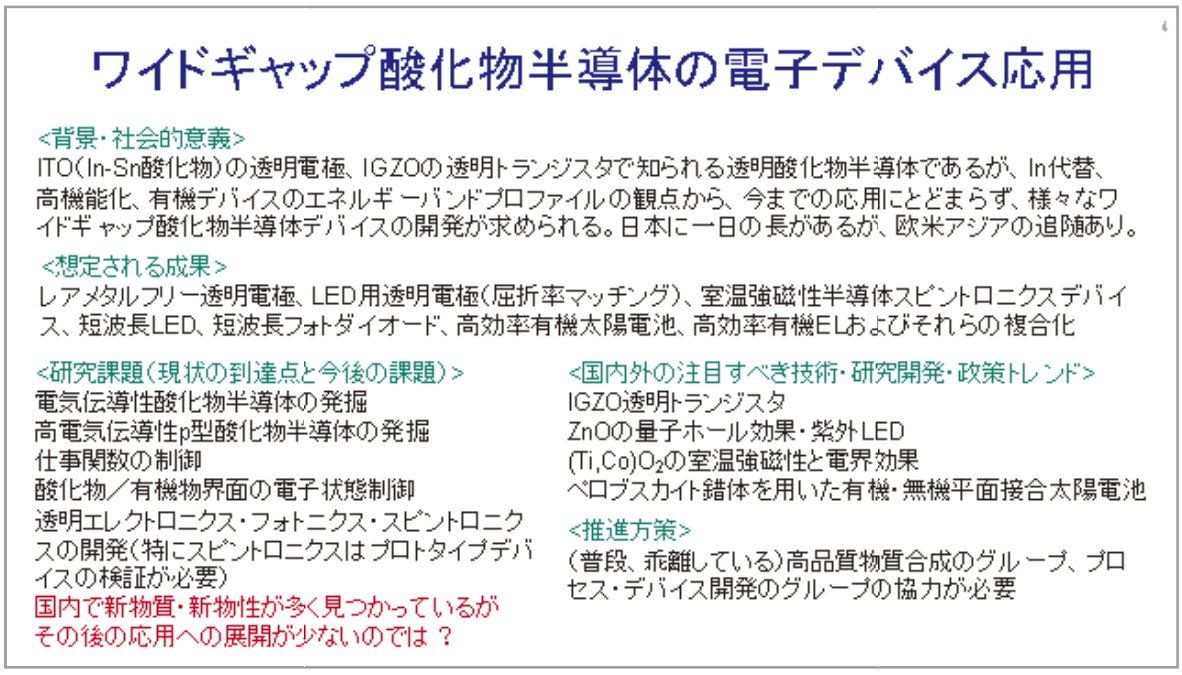


図 2

日本からよい研究が発信されているが、その後に何かの役に立ったという話は、IGZO 以外には少ない。大学では研究費をもらってよい論文を出せば、それで達成感が出てしまうが、その達成感が出た研究成果から、企業の方が応用に使おうとするモチベーションまでのギャップがけっこうあって、よいアカデミックな成果が出たが企業のほうはなかなか手を出さないという例を見ている。学術的には、物性を調べたり新規酸化物を合成したりするところまでは充実しているが、応用に持っていくという流れがうまくできていない。学会の中を見ても、今は既存物質を薄膜化して、それでバルクの単結晶と同じ特性が出るというところは日本でも複数のグループでできていて、グループによっては高度な薄膜技術を使ってバル

ク物質よりも純度を上げて、半導体としてよい特性を出していくというところがいくつか出ている。ただ、新物質を探索しようという試みはそれほど多くなく、その助けとなる構造・物性予測の理論や計算アプローチというのも、グラフェンや金属などについてはけっこうあるが、酸化物に限ってはまだ単発的に見える。

もう一つの重要分野は、「非平衡合成によるセラミックス電子材料の開発」。これまで元素戦略という広い分野の中でもインジウム代替などの希少元素の代替というプロジェクトはかなり走っているが、少々高価な元素でも、その元素にしか出せない物質・機能を出すというアプローチはそれほどない。酸化物に限らず、窒化物や酸窒化物、酸フッ化物というのは作製法が似ていて、プロセスも普通の蒸着法から固相成長法などいろいろあり、機能もいろいろある。新規電子導電体、イオン導電体、強誘電体と最近いろいろ見つかっている。

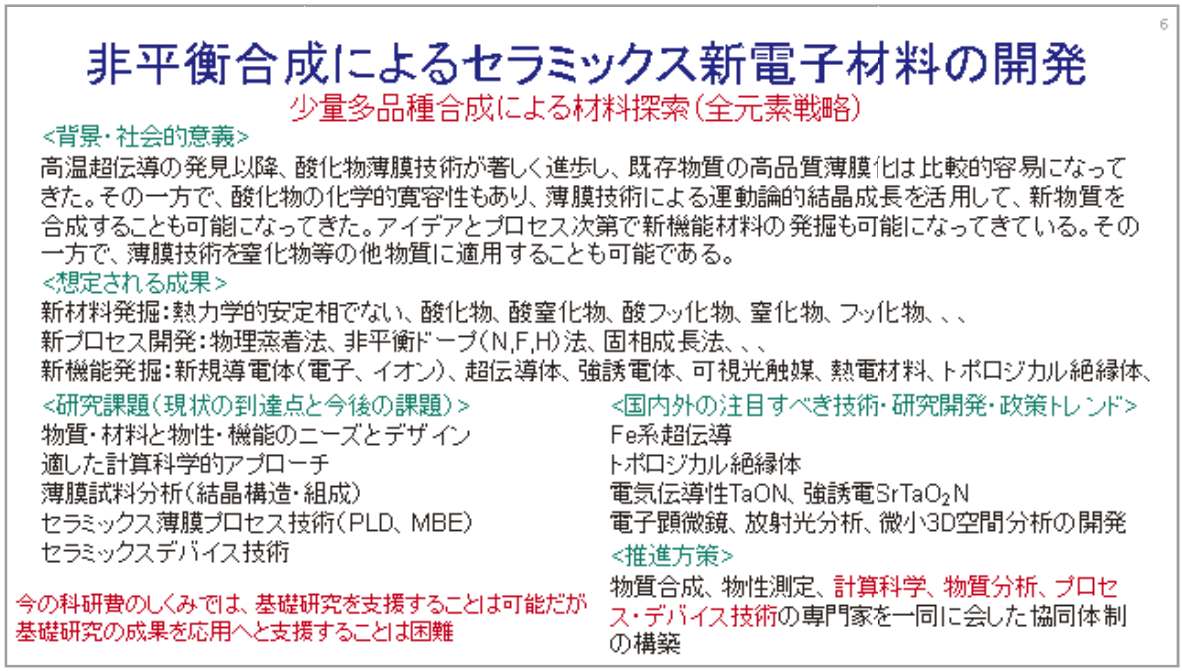


図 3

注目されるトレンドとしては鉄系超伝導、トポロジカル絶縁体である。薄膜の非平衡合成ではいろいろな世の中にない物質ができるが、薄膜というのは少量なので、なかなか組成や構造を分析できないということで、合成、測定、理論、計算、分析をもう少し有機的につなげる必要が出てくる。

ところで、今の科研費の仕組みでは研究者個人の着想に基づいて、応用に役立つかどうかはともかく、研究費が支弁されて、よい論文が出ればよいというサイクルになっているが、それだけでは応用の芽がある成果を結びつけることは困難なので、そこは JST のほうで、基礎研究にとどまらずうまく応用の支援にもっていくことが重要ではないか。

非平衡材料では、今後の論文になりそうな成果では、例えばバルクでは安定ではない結晶構造を薄膜では安定化できて、窒素というのも非平衡にヘビードープすることができて、そうすると半透明の電気電導体ができる。ほかにもプロセスを工夫した物質合成で新物質合成が可能になってきている。こういった分野では、理論と計算、分析のサポートがないと、合成のみでは試行錯誤で時間がかかって仕方がないので、協力体制が必要であろう。

日本発の注目すべき技術として鉄系超伝導があるが、200K 超伝導は難しい。一方で、メタルオーガニックフレームワークというのは無機・有機の複合材料として非常に美しい形で物質を実現できた。トポロジカル絶縁体は理論が高度だが、実際に実験サイドでどこまでいけるかはわからない。なお、最近の論文雑誌を見ると、固体物理とか固体化学のテーブル・オブ・コンテンツの 7～8 割は中国人で、数でかなり圧倒されている。日本のモノづくりの技術もだいぶ追い上げられているという感じがする。

今後は、それぞれに特化した分野の専門家というよりは、独創性と深さを保ちつつも分野横断を実践して研究し、それで新しい分野をつくる人材が必要なのではないかと考えている。

【質疑応答】

○質問　酸化物エレクトロニクスの話で、けっこうよい電流値を出すものがたくさん見つかっているけれどもなかなかデバイスに至らないというところは、デバイス化するのが難しいのか。それとも、よい値が出ていると言っても実用化に行くにはたいしたことのない値だからか。

○福村　インジウム酸化物の例に限ると、透明電極の ITO が一番電気伝導性が高い。それと同じオーダーくらいまで電気伝導性が高い材料は見つかっているが、例えば我々の例でいくと、二酸化チタンにニオブをドープした系が非常に電気伝導性が高いが、高温に加熱しないと電気が流れない。そういったプロセス上の理由でもカットされてしまう。大学の研究レベルで「これは役に立つ」と研究者自身がエキサイトしても、結局そういうプロセスなどの問題で切られてしまうという例が多い。

○質問　「場所によっては使える」というのは、アピールの仕方がまずいからか。

○福村　それはある。透明電極の材料があって、それを超えれば「すごい」と大学の研究者は言ってしまうが、もう少しよく考える必要があって、例えば ITO では屈折率が低いが、例えば酸化チタンは屈折率がやや高めで、ちょうど屈折率がうまく合う物質に積層すると光のロスが少ないとかいったことがあるので、そこまで考えないといかによい基礎研究の成果でも応用に結びつかない。

○質問　よく言われるのは、論文にしやすいところだけをやって完成度が低いと。日本の研究は欧米、特にヨーロッパと比べてそういう側面が大きいのではないか。

○佐藤　いま提起された点はかなり深刻な問題である。特に、モノづくりでは大変に日本は進んでいたはずなのに、すぐに役に立ちそうにないとなると、あまり研究者が増えていかないということもあるし、チャレンジングな提案が出てこない。

○福村　グラフェンは、実験を再現しやすいから多くの研究者が参入したという感じがある。ただ、先ほど話した非平衡物質などというのは、それなりに酸化物薄膜の技術をきちんと持っていないと作りにくい物質も多く、否定的な追試が多くなって、それを見た外野の人が「これはだめなんだな」という判断をされてしまうこともある。新物質探索から応用展開までスピーディーに行えないと、難しい面もある。

3．5　溝口照康（東京大学）

私の専門分野は、分光スペクトルの計算。実際に電子顕微鏡を使って実験スペクトルを測定したり、そのスペクトルが電子励起に関係してくるスペクトルの場合は波動関数を計算する必要があるので、DFT や CI 法を用いて第一原理計算をする。そういった意味で、電子顕微鏡屋でもあり、第一原理計算屋でもあるが、今日は主に電子顕微鏡屋の立場となって、「原子分解能動的計測技術」を話題提供として提案する。

顕微鏡分野の俯瞰に関しては、透過型の電子顕微鏡は、近年、収差補正技術が確立されて空間分解能が飛躍的に向上した。一方で、時間分解能に関してはやはり X 線のほうがすぐれておりピコ秒まで至っている。一方で電子顕微鏡でも、米国の Caltech のグループが時間分解能の高い TEM の方法、4D-TEM を開発しており、15 ナノ秒の時間分解能を有している。一方で、空間分解能はそれほどよくなく、通常の TEM レベル。この 4D-TEM は FEI というオランダの電子顕微鏡会社から既に販売されているが、日本では研究する人はほとんどいない。

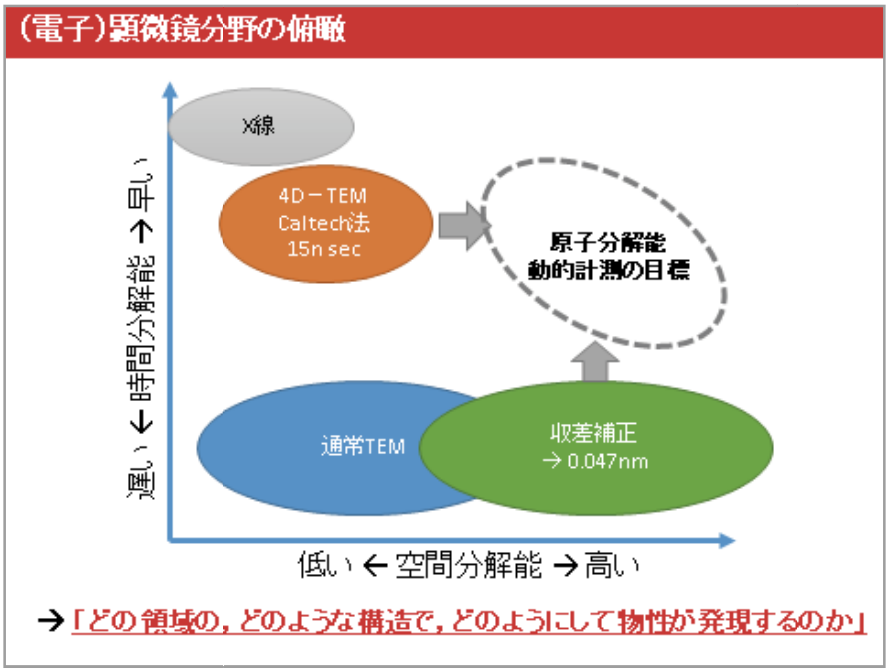


図 1

材料の機能を大まかに二つに分けた。一つ目が静的な挙動を起源とする物性。電気伝導性や電子の易動度などで、これらは基本的には組成と構造が与えられバンド構造が決まれば、バンドの分散やバンドギャップなどから、物性がわかる。一方で動的な挙動を起源とする物性としては、例えば触媒や電池寿命などだが、組成だけではなく、いろいろなものを制御しなければ機能は出ない。また、どこでどういった反応が起きているかということはなかなかわかっていない。たとえば触媒では貴金属の表面や端で反応が起きている等、いろいろなことが言われ続けているが、本来このようなことは平均的な情報を見る分析手法ではわからない。また電池でも動的な挙動が寿命や容量に重要である。例えばリチウムを多く含むような

化合物があれば、理論的には高容量になるが、充電を繰り返すと容量が急激に低下する。その容量が低下するメカニズムは、表面構造の変化とか、電解質との反応とか、負極の問題であるとか、いろいろなことが言われる。このような動的な挙動を起源にもつ物性は、まだメカニズムが明確に分かっておらず、ブラックボックスである。

私が提案したいのは、原子分解能で原子と電子の動的な挙動を観察する「原子分解能動的技術」。例えば先ほどの触媒反応も、分子がどこにくっついて、そこで電子をあげたりもらったりして、なおかつ周辺の別の分子がくっつくということを原子分解能でリアルタイムで見る。電池の場合は、充放電の際にリチウムが動いている領域を観察する。さらに充放電を繰り返した結果、表面層が変化して、リチウムの動きが悪くなる。こういう原子の動的挙動はいろいろ提案されているが、イマジネーションの域を出ない。実際に原子や電子の動的な挙動をリアルタイム・リアルスケールで見ることで、材料開発にとって重要な情報が得られる。

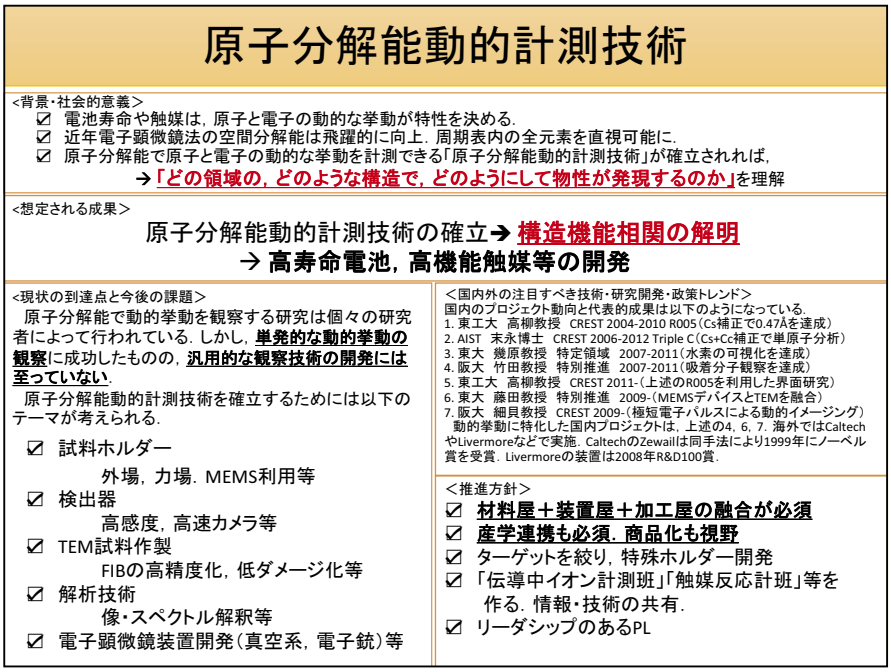


図 2

「原子分解能動的計測」が実現されれば、どの領域のどのような構造で、どのようなメカニズムで、どのような物性が発現するかがわかる。そうすると、生物の分野でよく言われている構造機能相関というものが材料学の分野でも解明されるのではないか。そして、さらに高性能な材料の開発につながるのではないかと考える。

今回このテーマを提案させていただいたのは電子顕微鏡の空間分解能が近年飛躍的に上がったため。今世紀に入ってドイツの研究者らが磁界レンズの収差補正技術を確立し 0.5Å を切るような空間分解能が得られるようになっている。これを活用した研究は世界でも、また日本でもたくさん行われていて、例えば高柳先生の CREST では 0.47Å を達成したり、東大の幾原先生の特定領域では水素の可視化に成功している。産総研の末永先生の CREST では、単電子の電子構造分析が達成されている。今は TEM、STEM の空間分解能はほぼ究極的なところまで来ている。これは収差補正技術の生みの親の一人であるマックス・ハイダー

先生が昨年の国際会議でおっしゃったことだが、収差補正技術が確立された今、分解能を決めるのは熱により発せられるノイズである。

今の世界的な潮流としては、こういった高い空間分解能を活かして動的な挙動を見るということ。これは日本でも行われていて、例えば阪大の竹田先生が特別推進で球面収差補正を使った環境型の TEM で、金属表面に吸着した分子を観察している。また東大の藤田先生は、TEM の中で MEMS を動かして原子一面が動く時の電気信号を明らかにした。世界的にみると Caltech の Zweil 先生のグループが先導しており、1999 年にこの分野でノーベル化学賞を得ている。彼らは 50 ナノ秒や 600 ナノ秒という非常に高い時間分解能観察している。同様の手法は Livermore 研究所でも行われている。残念ながら、この手法は日本ではあまり行われていないのが現状。現在先導している米国だが、彼らも「原子分解能」は達成していない。今後彼らも原子分解能で動的に計測する技術に向かっていくと思う。

「原子分解能計測技術」を達成するために、電子顕微鏡の方の開発も重要だが、専用の試料ホルダーの開発が最も重要である。日本は遅れていて、欧米のベンチャーが先導している。一つの分野だけではなく様々な分野の融合が重要。材料系、電気系や物理系、機械系との共同研究も必要になってくる。また、検出器も CCD が高感度、高速になれば時間分解能がよくなるし、見えるものも変わってくる。それ以外にも、TEM の試料を作製することも重要で、いろいろなナノ加工の技術があるが、それらを高度化する必要がある。また、得られるデータを膨大になるため、それらを解析する高速な解析技術も必要になってくる。

電子顕微鏡を開発するプロジェクトで非常に成功したのが、アメリカ DOE が行った TEAM プロジェクト。これは球面と色収差補正技術を確立することが主な目的のプロジェクトで、2004 年から 2009 年まで行われた。TEAM プロジェクトでは全米の主な研究機関が一丸となっているだけではなく、電子顕微鏡メーカーや収差補正メーカーなども入ったチーム構成であり、リーダーシップもよくとれていた。また、このプロジェクトから試料ホルダーのベンチャーが始まっている。なおかつ、このプロジェクトが終了した後には各研究所にプロジェクトで開発された顕微鏡が導入され、いまも共同装置として使われている。

先ほど言ったように日本にも電子顕微鏡のプロジェクトが立ち上がっているが、「原子分解能動的計測」を目指していない。これを推進する手法では、やはり分野間の融合が重要だし、なおかつ商品化も視野に入れて企業が参画することが必要。

予算方針について、中庸な立場が重要で、NEDO は応用で、科研費は基礎ということが言われているが、科学技術を二分するのはおかしい。もう少しブロードな考え方をすべきでは。集中的に資金を投入することは重要だが、分野や時代によって適切な予算があるはず。それを判断できるようなコーディネータが必要では。俯瞰的な立場に立って、幅広い知識と専門性を有していて、なおかつ国際的、国内的な動向にも明るいコーディネータを育成することも必要ではないかと考えている。

【質疑応答】

○佐藤　例えばこれをやると新物質としてはこんなものがということはあるか。

○溝口　原子が見えるので、原子と電子が関連している物性であれば、今回提案した研究で物性が発現するメカニズムがわかる。例えば先ほどのリチウムイオン電池の場合には、表面

が変化して、そこでリチウムが本当に止まっているかということわかり、それが分かればそれをどう抑えるのかの方針がたつ。
○佐藤　電子顕微鏡では「その場観察」は無理でしょう。水があるところで見えるか。
○溝口　環境 TEM は進んでいて、阪大の竹田先生はガスを導入している。その場観察用の試料ホルダーも発達していて、例えばグラフェンではさんでその中に液体を入れるという報告が『Science』にでている。世界的にどんどん進んでいる。
○質問　環境 TEM はガスを流せると言っても、大気圧は無理ではないか。研究レベルでは例えば薄膜性能が上がって、大気圧でなおかつ数 100℃に加熱しても大丈夫だという研究はあるか。
○溝口　膜で隔離すれば液体や比較的高い気圧は可能。ただ、既存のシリコンナイトライドの膜では原子分解能は出せない。グラフェンを使うのは一つの手段。

○質問　電子顕微鏡を見ていて感じるのは、ある特定のグループの技術に投資して新しい電子顕微鏡はできる。でも、そういう電子顕微鏡はクローズドである。それはなぜか。やはり TEAM プロジェクトのようにオープンにして、競わせることで何か成果が出せるようにするべきではないか。
○溝口　本日紹介した日本のプロジェクトの装置が、今後使われていくかどうかというのはわからないが、低炭素事業やナノテクプラットホーム事業で装置は公開されている。
○佐藤　先端計測でもこの問題があって、オープンにしましょうということも行われているが、なかなかそれがまだ限られていて、予算的なこともあって、今後このあたりは一番大きな問題になるだろう。

○川合　原子分解能で原子と電子の動的計測というのは、例えばリチウム電池のような不均一もしくは複雑なところで実体を表わすと重要だというのは、そう思う。質問はそれに至るところで 2 つあって、収差補正がなぜ日本でできなかったのかということと、さっきの TEAM プロジェクトのようなものがなぜ日本でできなかったのか。この 2 つの問題がはっきり解決しないと、次の時にも同じようなことが起きるのではないかということが心配である。
○溝口　まず、ドイツのダルムシュタット大学で脈々と受け継がれたことが重要。シェルツァー→ローズ→ハイダーという流れによって実現した。
○佐藤　X 線のほうでも今のような問題はあるか。
○回答　X 線の解析技術で、技術的な問題ではなく運営的な問題という面ではタンパク 3000 は、とにかく議論をやって、サンプルホルダーなども全部統一する場をつくりましょうということで、マイクロスコープみたいなものをつくってうまくいった。解析ソフトなどは全部統一して、解析の場をつくるというストラテジーもやればできる。そことこの物質材料との差はどこにあるのかということは、一つは、物性というのはかなりパラメータがたくさんあって難しいということがあるのではないか。タンパクは構造解析と機能だけだったが、物性の場合は電池特性から構造から触媒反応とか多岐にわたるので難しいのかなと。

3．6　藤田武志（東北大学）

自分の立ち位置だが、基本的には電子顕微鏡を活用した構造・機能性材料の研究をやっている。電子顕微鏡で見えるものが研究対象になるが、最近では特に元素戦略で、ナノポーラス金属と言われているポーラス状の金属を活用して金属フリーの触媒であったり、それを用いた革新的電池の電極をつくっている。ナノポーラス金属の他にこれまで扱った材料としてはチタンアルミ合金、セラミックス、それから鉄系の超伝導体であったり、ナノシートなどがある。学生の時は金属材料組織学講座だったので、究極の組織制御とはどういったものかについて考えていた。これまでにいろいろな組織を人間はつくってきたが、欲しい組織を任意の形に自在につくることが究極の組織制御であると言える。

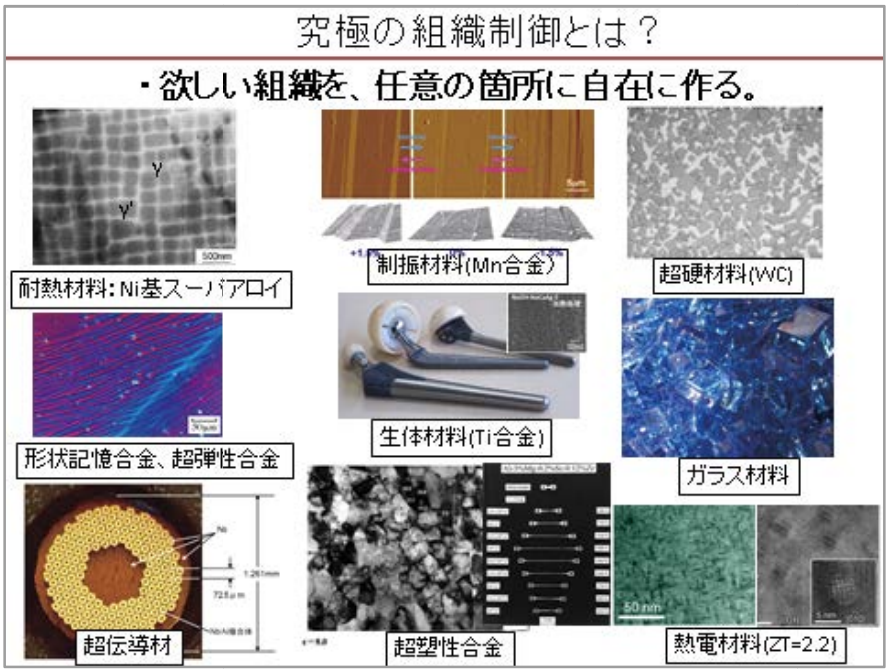


図 1

そういった組織制御が、10 年くらいをめどにそういったことが可能になるだろうと思っている。どうするかというと、アイデアは基本的には単純で、ある組織の種となるものを 3D プリンタで自分の好きなところに並べる。金属酸化化合物であってもよいし、ガラスでもよいし、ナノ粒子のようなものでつくってもよし、グラフェンやカーボンナノチューブでつくってもよい。今の 3D プリンタは一つのコンポーネントで複雑な形状にはできるだけ。自分の好きなところに好きな組織を置くことで、プロセスだけではなく、それが新しい材料設計に活かされるということが 10 年後にはできるだろうと思う。3D プリンタの現状は、レーザーが 1 点に当たって、横から粉末が出て来て焼き固めている。これはまだ粉末冶金のプロセスの域。今は、こういったプロセスをできるだけ速くしてできるだけ制御してつくるということが焦点になっている。しかしながら、技術は非常に発展していて、今は数 10 μ の分解能だが、それが 5 年後、10 年後にはサブミクロンレベルに到達し、非常に革新的なプロセスになるのではないか。今は一つの金属を焼き固めるようなプロセスだが、このインクをセラミッ

クスであったり、屈折率の違うガラスであったりを使うことで、複合材料を超えた革新的な材料の設計が可能になる。

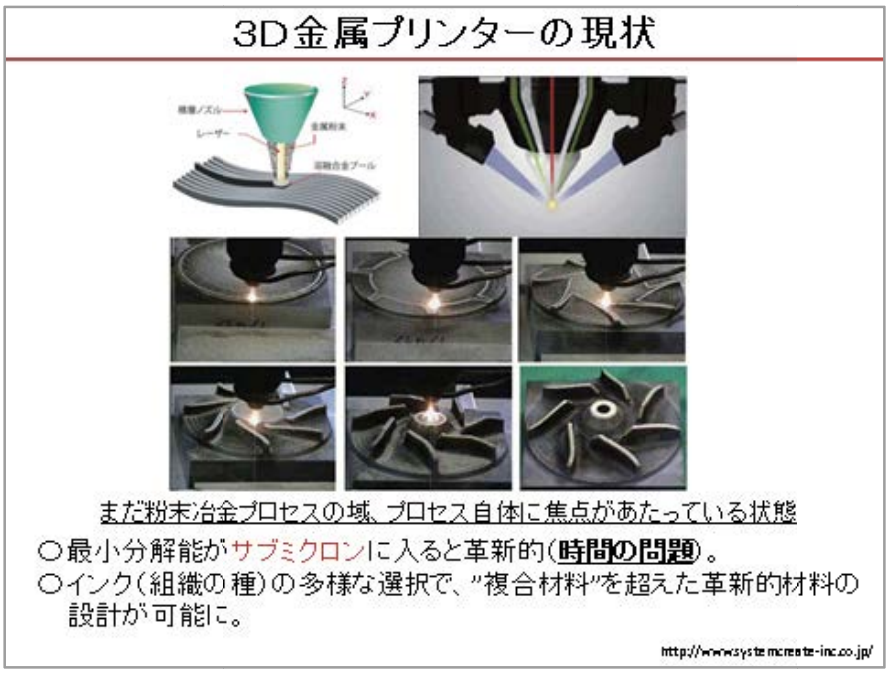


図 2

領域は「3 次元原子積層造形技術と新材料設計」ということで、想定される成果としてはつくれなかったものがつくれる。超弾性の超伝導材料であるとか、制振機能を持つ生体材料であるとか、屈折の違うものと組み合わせることで新奇のフォトニックガラスをつくる。また、物性のオーダーメイドができる。欲しい物性をインプットして、表面は硬い組織にして中は柔らかい組織にするといったことを予め入力すれば、そのとおりにつくってくれるようなプリンタができるのではないか。

国内外の現状としては、金属粉体を用いた積層造形装置の生産シェアは、ドイツやスウェーデンなどの欧州勢に独占されていて、日本はゼロ。日本の導入シェアはせいぜい 10%くらいということ。まだいろいろな課題があって、材料はまだ 1 種類程度しかできていない。製作スピードが遅いとか、位置精度は数 10μ程度。隙間ができるということもあるし、装置自体がまだ非常に高価。後工程に時間がかかるし、表面仕上げなどにも手間がかかる。また、3D データの準備に時間がかかる。レーザーなので、低温プロセスの確立も必要になっている。

3D プリンタを材料科学のほうに持ってくるには、産学協働の大きなコミュニティをつくって推進する必要がある。レーザーの出力についてはレーザーメーカーであったり、位置精度についてはインクジェットの技術であったり、ソフトウェアはデザイナー、実際にどういうものを設計するかということではアカデミアの研究者が入ってやる必要がある。

次に、拡張 2 次元空間とか 2 次元相原子層ということで話題提供されているが、シリセンに絞った領域であるべきではないかということ。なぜかというと、シリセンというのはグラフェンのカーボンをシリコンに換えるという非常に明瞭なコンセプトが存在している。日本人のベースを実現するような領域を持ち上げるべきではないかということで、シリセンに関しては日本人研究者がこれまでがんばっていろいろやってきている。例えば、1994 年に NTT 基礎研究所の武田先生、白石先生がシリセンの可能性を示唆した研究が出ているし、ポリシランという水素で終端したシリコンの膜を広島大学がつくっているし、ケイ素四員環の合成を玉尾先生がつくっている。

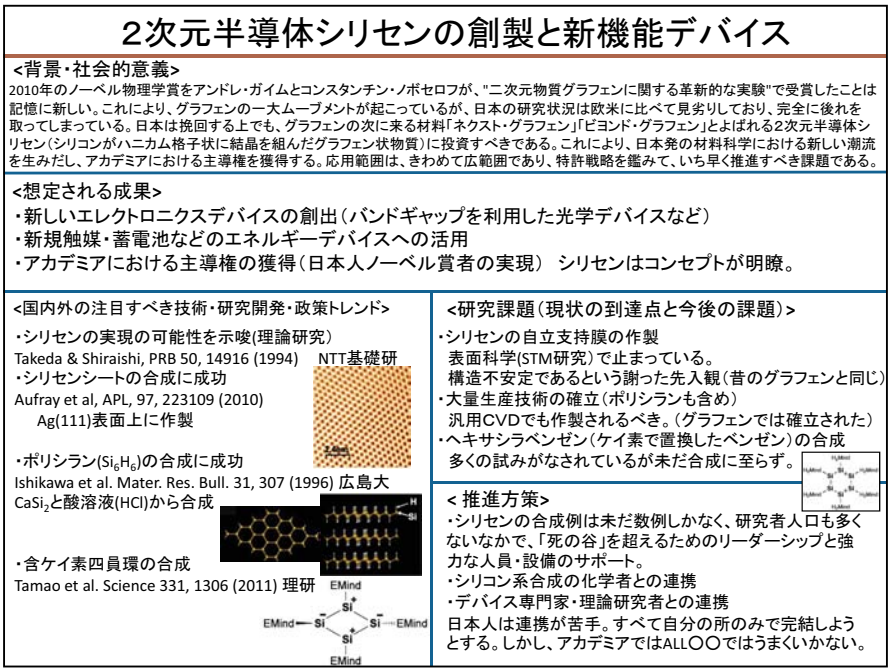


図 3

しかし、これまでは表面科学で止まっていて、構造が不安定である先入観がある。また、科学者の夢と言われているケイ素で置換したベンゼンの合成なども考えられる。グラフェンの研究は非常にスピードが速くて、ノーベル賞を取ったグループなどが既にボロンナイトライドとグラフェンの積層技術を『ネイチャーマテリアル』などに出している。また、昨年の今頃、グラフェンの量産技術がプレスリリースされた。ある会社でグラフェンを量産化するための検証をするということが出ている。大量生産にはまだ時間がかかるだろうということ。しかし、アメリカではグラフェンは普通に買えるという現実も見なければいけない。実際に、グラフェンインクが普通に売られていて、500g で 100 ドル程度。実際にこれを買って、ろ紙に付けて測ってみると、確かに電気が通る。電子顕微鏡で見てみると非常にたくさんのグラフェンが入っており、グラフェンを手に入れるには買ったほうが早いというふうになっている。この差を縮めるために税金を使うのではなく、もっと新しい領域に使うべきではないか。

シリセン以外の 2 次元半導体の動向では、日本は既に後れを取っている。論文データベースで調べたところ、グラフェンは 2004 年からぐっと増えて、2013 年には 1 万を超えている。ダイカルコゲナイド、シリセンも増えていて、現状で毎日 1 本ずつ論文が出ている。ただ、

シリセンはダイカルコゲナイドなどに比べてだいたい 2 年遅れているので、シリセンを今やっておけばまだ間に合うのかなと。ここに焦点を絞ればまだ勝機はあるのかなと思う。

最後に、融合研究をするためにどういったことが一番よいかと考え、ジャイアントクロスというコンセプトを考えた。これは First、ERATO レベルの総括、いわゆるジャイアンツが手を組んで研究を進めていくということ。クロスというのは横断するという意味もある。総括というのはその人自身がその分野の代名詞になっているはずで、そういう人たちが手を組んで研究をするということは、研究分野が融合され、統合されていくだろう。例えば、期間は 5 年にして、予算規模は ERATO の 2 倍にする。総括 2 人が融合研究所のようなところで研究を立ち上げ、研究を実施するが、何かしらのアイデアの核となるもの、卵をひなにかえすというのがこの時期になる。5 年後には、総括は元の機関に戻って、残った若手主体で研究をする。そして、その動向を頻繁に総括が観察する。これはさきがけを模している。そうすることで、融合分野で研究が育つので、たとえ統括がいなくなっても、若手研究者を育てることで融合分野が育っていく。

【質疑応答】

○質問　組織を 3D プリンタでつくるというところで「組織の種」という言葉があったが、もう少し説明していただきたい。

○藤田　組織にはいろいろな特徴があって、耐熱材料に適している組織、制振機能に適している組織とか、そういうものを予め仕込んでおく。それを 3 次元的に焼き固めて製品にする。好きな組織を好きなところに置くイメージ。例えば周りは耐熱材料にして、中身は形状記憶合金を残したような材料にするとか、そういったことが可能になるのではないか。

○質問　傾斜機能材料的なものを 3D プリンタでつくるようなイメージか。

○藤田　もう少し高度化なもの、傾斜機能ではつくれないようなものもつくれるようなイメージ。

○質問　3D プリンタについては私も興味を持っていて、今は材料が限られているが、それぞれの材料を持っている人たちは、何とか 3D に載せられないかという動きを顕在化はしていないけれどもうやっていると思っている。材料屋は自分の材料を、要するに耐熱材料を載せたいとか、別のメタルを載せたいということは考える。逆に、もっと焦点深度の浅い線源とガスでもって、ナノのデバイスが 3D でつくれるというそちらの発想はやられていないのか。

○藤田　3D デバイスの制御が案外進んでいない。パターンニングする技術などはエレクトロニクスの分野でものすごく高度化されているようなイメージがある。ここでは、そういった薄膜成形技術をちょっと外れてスケール的には大きな物を考えている。

○質問　シリセンに特化すべきというアイデアは、やって先鞭をつけるというのはよい着眼点だと思うし、やっていく途中でシリセンならではの物性も見つかってくると思うが、その時にある程度、世界の人にまねしてもらうような仕組みをつくらないと、日本で閉じた領域になると、日本がリードすると世界が日本を無視するという傾向が過去の分野でもあったの

で、その繰り返しにならないように途中でわざと脇を甘くして、世界にまねしてもらうような餌をつくっておく必要がある。

○質問　シリセンに特化するというのは何か具体的なターゲットがあるか。

○藤田　一つに、2 次元層材料というふうに非常に広くやってしまうと、ものすごくたくさんある。

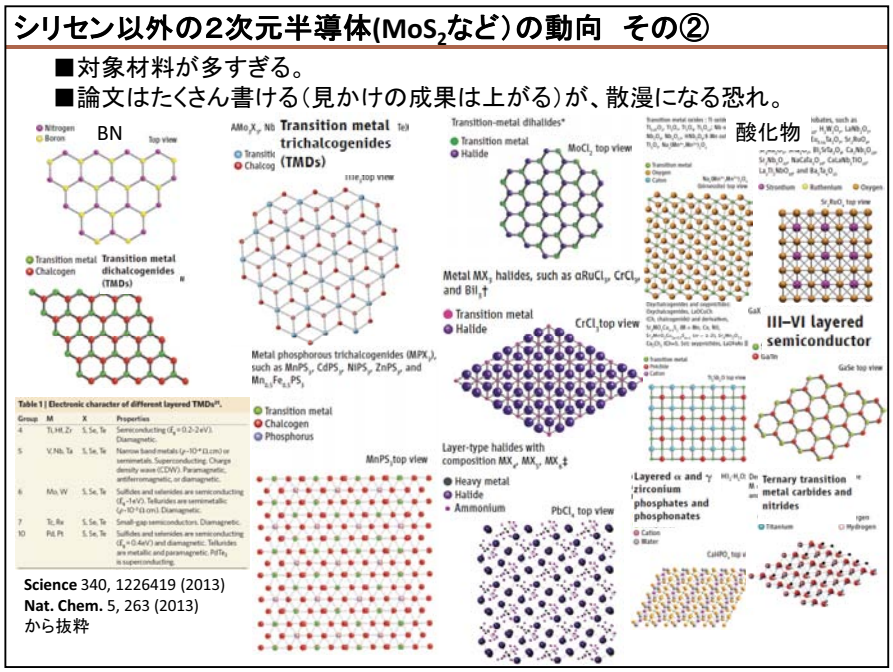


図 4

○質問　グラフェンのほうの問題は、実際にどういうものに使うかによってグラフェンのクオリティも重要で、パウダーが大量に市販されているのはあまり問題ではない。例えば透明電極で使いたいとか、CMOS に入れたいとか、IC の中に入れるとか、用途によって求められるクオリティが全然変わってくるので、こういったインクの場合には電子デバイスに載せることはできない。積層はできているというか、機械というか手で貼り合わせているだけなのでそれはできるが、実際にすばらしいデバイスができた時に、それをプロセスに乗せるにはもう少し基礎的な知識を積まないと。

○佐藤　「シリセンでこんなデバイスができて、今までのグラフェンの問題点をこんなふうに突破できる」という提案があるとすごく前向きだが、ただ「これならノーベル賞が取れる。アカデミア的によい論文が書ける」ということでは物足りないのではないか。

3．7　大野宗一（北海道大学）

私の専門は材料科学の中で金属材料であり、中でも構造用材料である鉄鋼材料、非鉄材料の開発や製造に関わるところを研究している。その中にあって計算材料科学という分野に属している。図１には計算材料科学でよく使われる手法を並べている。縦軸には各手法が対象とする時空スケールを取り、横軸でそのモデルが物理的なのか、もしくは工学的なアプローチなのかを区別している。このようにミクロ、メゾ、マクロにわたるたくさんの手法があるが、この中でミクロの領域の計算手法は、物性や分子のコミュニティの方と多くの接点を持っており、マクロな構造解析、伝熱・流体解析などは主に機械系の方々が発展と応用をしてきた。ここで各手法が一つの学問体系を表わしていると見ると、この分野全体として学際的な分野になっているとも言える。

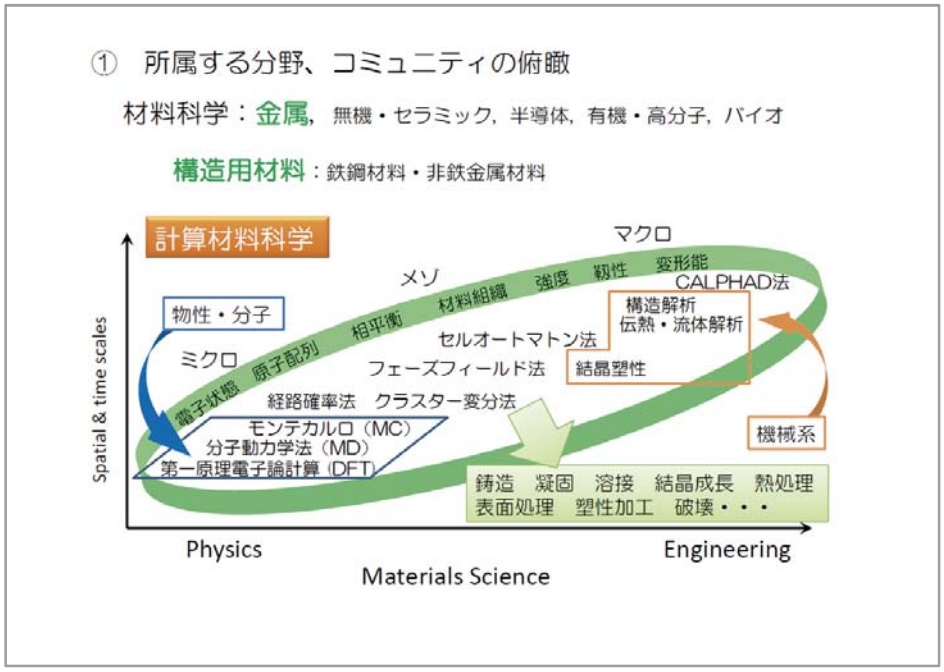


図 1

この中にあってメゾ領域こそ、材料科学、狭くは金属工学を特徴づける重要な領域になる。時空スケールとして中間であるというばかりではなく、物理的、工学的アプローチの中間に位置している。したがって、今後、計算材料科学が材料開発に使える形に発展していくためのブレイクスルーというのは、まさにここにあると考えられる。

提案内容として、「メゾを機軸とした計算材料科学の包括的アプローチの構築」とした。構造用材料は、安全性、信頼性などをクリアするために、その開発に非常に長い年月が必要とされている。最近では、社会的に大きなインパクトを持つという視点から、多くの革新的構造材料プロジェクトがスタートしており、それらのプロジェクトにおける共通のキーワードは「材料組織」である。これは、ミクロ組織、顕微鏡組織、内部組織とも呼ばれるが、数十 nm～数 mm のスケールで観察される構造や成分濃度の不均一パターンのことを指す。材料

組織は非常に多様であり、その多様性こそ材料科学の可能性を示している。これは、材料の物性・特性というのは材料組織によって決められているからである。

今後、材料の開発・設計においてシミュレーションの重要性が益々高まることは言うまでもないが、個々の手法にはそれぞれ適用限界があり、単一の手法のみで解決できる問題は限られる。そこで、この計算材料科学分野内の連携が今後必要になってくる。

計算材料科学分野の連携については海外が進んでいて、例えばドイツの DFG では Steel-ab initio というプログラムが進行している。このプログラムでは、鉄基合金の開発をターゲットとして電子論計算、原子、組織、そして製品レベルの諸問題を解決するために計算材料科学全体の分野内連携を行っている。また、ルール大学においては ICAMS（インターディシプリナリ・センター・フォー・アドバンストマテリアル・シミュレーション）というセンターが設立されている。このセンターにおいては、スケールの異なる手法のそれぞれの専門家が集まって分野内連携を促進するという目的で設立されている。

以上のように、分野内連携によってレベルアップしていくことが必要と考えているが、その時に分野内連携の機軸を明確しておく必要がある。先ほど述べた通り、金属材料の開発におけるキーテクノロジーは材料組織の制御にある。そこで、将来の材料科学、工学の発展に資する計算材料科学のためには材料組織、メゾスケール手法の高度化、高精度化に向けた分野内全体の戦略的発展が必要である。この時の中心となるメゾスケール手法として、フェーズフィールドモデルが適切だと考えている。フェーズフィールドモデルというのは、材料組織をディフューズインタフェースというユニークな概念に従って計算することが特徴で複雑形態の組織が比較的簡単に計算できる。さらに、マルチフィジックスの現象も取り扱うことができるという利点がある。図 2 にその応用例をまとめたが、非平衡パターン形成の一般的ツールとして発展を遂げつつある。

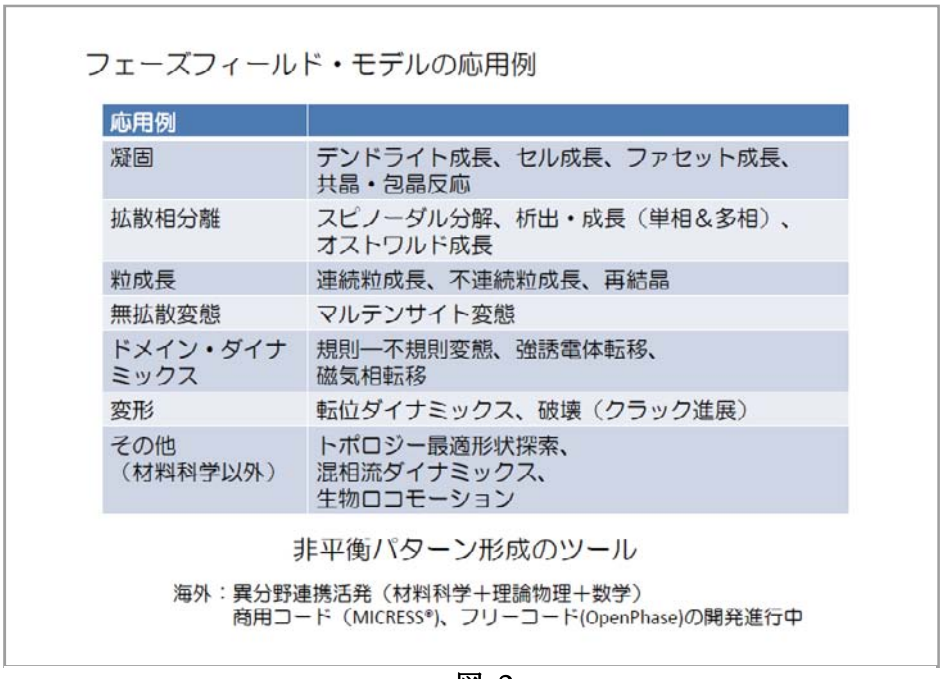


図 2

海外においては、異分野連携によってこのモデルを発展させる試みが活発で、商用コード、フリーコードの開発も進んでいる。そして、産業界からもこのモデルの発展に寄せられる期待が高まっている。ただし、このモデルが材料開発・設計を支援・主導していくためにはまだ解決すべき問題がある。例えば、モデルの定量性が欠如している。さらに、物性値も欠如している。さらに、現象間の共通項が未整理で、まだモデルの高度化が不十分な点がある。

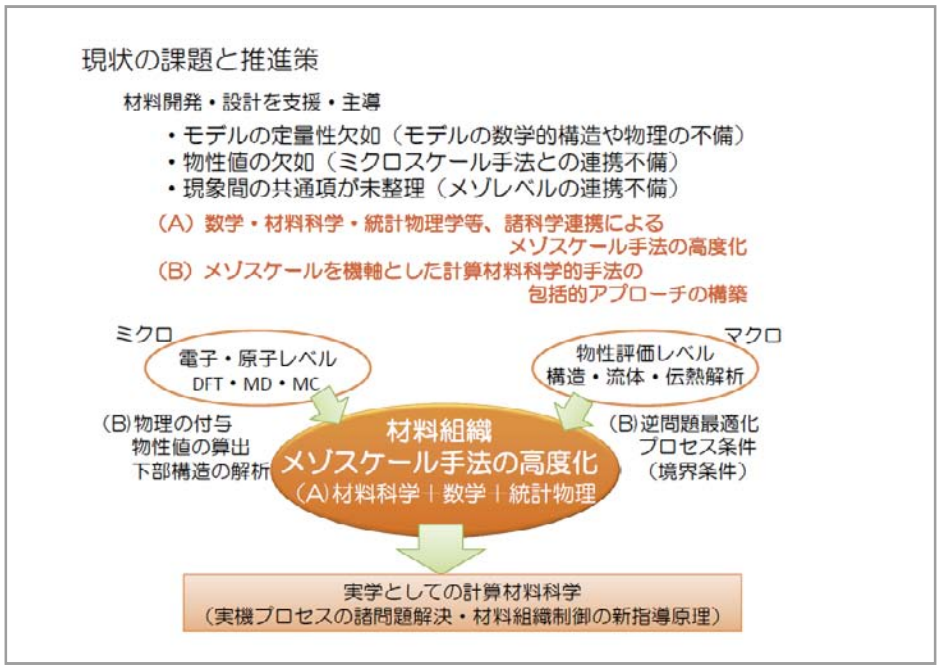


図 3

そこで、こういった問題を解決するために、二つの取り組みを実施する必要があると考える。一つは、数学、材料科学、統計物理、もしくは理論物理の方々の諸科学連携によるメゾスケール手法の高度化といった取組みであり、メゾレベルの物理を整理し、モデル化するとともに、数理構造の高度化を実施する。そして二つ目の取り組みは、メゾスケールのシミュレーションの高度化を機軸としたミクロ・マクロスケール手法の発展である。ミクロスケール手法の専門家と協力して材料組織のための物性値を算出する、そしてマクロスケール手法から逆問題として組織形成の境界条件を与えるであるとか、組織形成におけるプロセス条件の算定といったところで連携を図るといった連携の形が考えられる。こういった取り組みを通じて、材料設計・開発に資する計算材料科学の発展が見込めると考えた。

【質疑応答】
○佐藤　フェーズフィールドは結晶成長学のほうから始まったが、ただ、パラメータ理論的なところがあるから、これを本当の物理的なものとつなげるというのは大変に難しいところがあるのではないか。
○大野　先ほど言った高度なモデリングといったものは、パラメータを、測定できるパラメータにどんどん関連付けていくというようなこともされているので、状況は少しずつ改善しつつある。

○質問　フェーズフィールド法の式の意味が物理的な起源ではなくて現象論的な起源から来ているので、逆に実験データから帰納的にパラメータを推論して成績のよいものを使うというやり方もあると思ったが、今日のお話はそうではなくて、演繹的に求めたものから現象論的なものをブラッシュアップするというほうがよいということか。
○大野　おっしゃったとおり、実験屋との接点を図ってパラメータを求めていくという方法が何年か前からある。ただし、例えば私がやっている凝固などでは、実験との連携がなかなか図れない。凝固というのは見ることができないから。そういった広い意味でさまざまなプロセスに適用可能な形で発展させるためには、計算材料科学分野内での連携によってパラメータを抽出していく取組みが重要ではないかと考える。
○質問　フェーズフィールドの方程式の形そのものも変えたほうがよいということか。
○大野　数学者との連携はまさにそういうところ。現象論なので、直観的には「この項がこう働いて、こういう界面移動が出る」というのはすごくよくわかる。ただし、それが現実をどれだけ再現しているかという数学構造の解析をしていくと、実はそれほど簡単ではない。実際に数学者の研究対象になっているような方程式を我々は扱っているので、その点において正しい物理を導入するために数学者と連携するということがある。
○佐藤　例えば磁性材料のドメインなども同じ方法で進んでいる。
○大野　そのとおり。私は構造材料について話したが、機能性材料についても同じような展開ができると考える。

○質問　午前中に、理論や計算と応用や実用といったところはなかなかつなげることが難しいという議論がずいぶんあった。鉄鋼材料は、分野の性格からも産業の性格から言って、そのあたりはうまくいっているのか。実際に社会的な問題がそういうところから来て、計算科学手法でどういう問題が解決されようとし、あるいは、解決の期待があるか。
○大野　我々の分野においても実験、計算、理論の連携が十分に図られているとは考えていない。その一つの理由としては、現在までやるべき計算をしてきたわけではなくて、やれる計算をやってきたから。ところが、計算機の能力が向上しているので、やるべき計算にテーマが移りつつある。例えば鋼の鋳造という分野に関しては、企業の方から計算材料科学に寄せられる期待というのはどんどん大きくなっている。鋳造というのも見ることができないから。実機になるとトン単位での凝固の流れを解析したいという要求がある。その中でこういった組織の形成を議論することになるので、シミュレーションによって何かを明らかにしなければいけないという状況になっている。組織レベルの課題を解決してほしいという要望はたくさんある。例えば鋼の連続鋳造の中でスラブというのができるが、スラブの中点の表面近傍に粗材で柱状の結晶ができる。それがなぜできるか、ずっとわからなかった。ところがフェーズフィールドシミュレーションを行うことで、そのメカニズムがわかったので、その形成条件もわかった。したがって、どういう原理に基づいてその組織を防ぐべきかというところまできている。

○質問　工業的に見ると、いろいろなパラメータで計算できるのはよいが、その計算されたパラメータが現実に工業的に制御可能なパラメータかどうかということが非常に大事。理屈

がわかって、それを温度なり組成なりでコントロールできないと、学術的にはおもしろくても産業的にはどうするのかということになる。
○大野　そのコントロールすべきパラメータもわからない状況だった。現在は、どのパラメータをコントロールできるかわかったというところまで来たので、そうすると次につくるべき実機の装置の設計が変わってくるということになる。

○質問　この分野は重要で、国策として注力しているということもあると思うが、例えばグラフェンの分野の方は『ネイチャー』『サイエンス』にどんどん出されている。でも残念ながら機械的特性、組織の方々というのはなかなか難しい。私自身も危機感を感じているのですが、こういった分野から『ネイチャー』『サイエンス』に、必ずしもそれが指標ではないが、出さないといけないのではないかと思う。
○大野　世界全体でも、この構造材料の分野でそういう派手な雑誌に出るのはなかなか難しい状況にある。例えば、我々の分野で何かのチャンピオンデータを出す。それが間違いか正しいかという議論はすべきではない。というのは、構造材料というのは、その性質そのものが先ほど言ったように責任とか信頼に関係してくるから、長い年月をかけて慎重に結論を出さなければいけない分野でもある。ですから、『ネイチャー』『サイエンス』にはあまり向いていないのかもしれない。もちろん一部、耐熱材料で『サイエンス』か『ネイチャー』に載ったものもある。私も、存在感を出せないという意味において危惧は感じている。

第二部「分子から材料へ」

3．8　重田育照（大阪大学）

専門は計算化学。私のメインのフィールドである計算物質の予測に関する最新の動向について説明したい。ここに示したのは「計算物質予測学」のコミュニティの俯瞰図になる。我々の目標というのは、例えば電子構造の複雑な物質というものを予測する。あるいは、非常に大きな物質、例えばタンパク質であったり、さらにはタンパク質の集合体であったり、そういったものを kcal／mol のオーダーで非常に高精度に予測するということになると思う。ここ 10 年で、計算機の能力が非常に高くなってきた。あるいは複雑な物質を計算する理論、あるいはそういったものを実行可能なプログラムが効率的に並列コンピュータで実装することができた。さらに、「京」のような非常に大きなコンピュータの環境もだんだん整いつつあり、非常に複雑かつ大規模な計算ができるようになってきた。

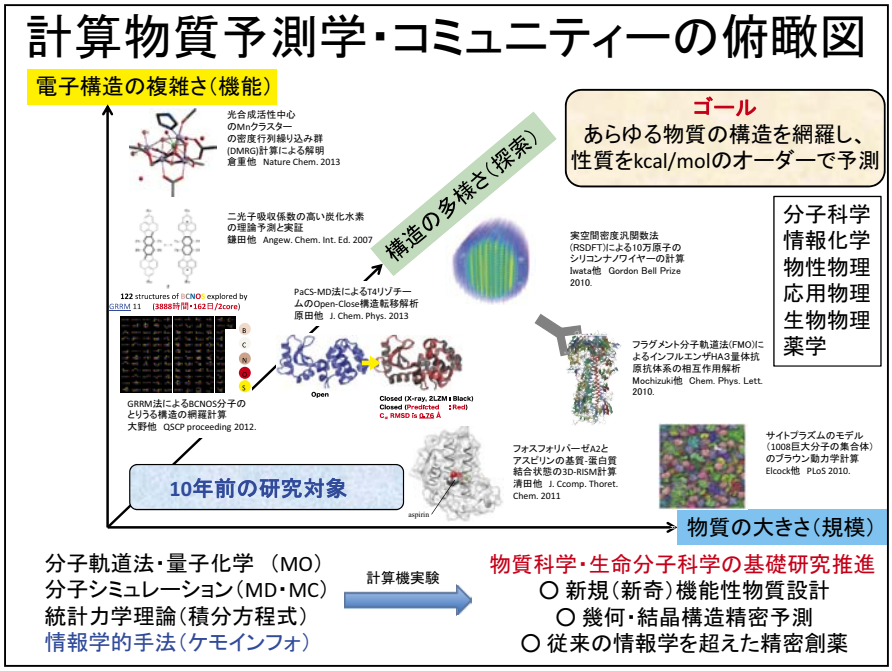


図 1

例えばこれは私の上司がやった計算で、一重項開殻性を示す特殊なスピン状態を持つような物質は非線形工学応答特性が非常に大きくなるのだというモデルを提案し、それを実際に有機化学者との共同研究として合成して頂き、２光子吸収強度を測ったところ、こんな小さな物質で、同じサイズの物質では世界最高規模の有機化合物が設計できた。あるいは実空間密度汎関数法コードというものを使って 10 万原子くらいのシリコンナノワイヤーなどの実在系の電子状態が可能になってきた。一方、分子動力学の世界ではもっと大きな系が計算できる。例えば 1000 個のタンパク質の集合体は分子混雑環境、タンパク質混雑環境と呼ばれ、細胞内を想定した物質濃度でどういったことが起きるかという計算ができるようになってきた。このように規模が大きくなったり、あるいは電子構造が複雑になったりするともう一つの軸が必要になってくる。それが構造の多様さであり、多様な構造・電子状態からどうやっ

て有用な機能性物質を探索するかという問題が重要になってくる。その分野に関しても、ここ 10 年くらいで急速に進展してきている。これはまだ 10 原子とか 20 原子程度だが、第一原理の計算を用いて安定構造を網羅的に計算し、さらに構造と構造をつなぐ遷移状態も丸ごと計算するということが可能になっている。あるいは、タンパク質の折り畳みの問題というのも非常に効率的に計算できるようになってきている。

これは、光合成活性中心の電子構造の計算例になる。このスライドは倉重博士、柳井博士から提供頂いたものです。光合成活性中心は遷移金属であるマンガンのクラスターからなり、複数の d 電子のレベルが絡み合った状態である。しかも、その中に電子がどれだけ詰めるかということに対して非常に多くの配置が必要になる。こういった問題は物理では強相関系と言われる研究対象になっていて、理論も計算のどちらのアプローチも非常に難しい例になっている。ちなみに、こういった物質は電子状態の配置数は 10 の 18 乗通りの電子配置が必要で、それを本来であれば丸ごと計算しなければいけなかったものを、密度行列繰込み群法と第一原理計算と組み合わせた手法が近年開発され、こういった複雑な電子状態を効率的に解くことができて、昨年、『Nature Chemistry』に出た。この計算から、スピン状態のクロスオーバーがこの反応を駆動していることがわかった。

構造探索の話では、これは東北大学の大野博士と今は北海道大学にいる前田博士のつくられた GRRM というプログラムの例である。これは、電子状態計算のプログラムと一緒に使って構造探索をするというプログラムである。ここにあるのはホウ素、炭素、窒素、酸素、硫黄という原子を含む仮想系で、化学組成をインプットするとどういった構造が出るかということを網羅的に計算した例になる。CPU が 2 つあるような 4 年くらい前のたいしたことのないコンピュータで、3,888 時間で 122 個の構造と、それらを結ぶすべての遷移状態構造を求めることができた。我々計算化学の人間は、こういったものを手でインプットして探すということをしているが、漏れが出る可能性は否定出来ない。その困難を克服し、漏れをなくしてすべてを探索するプログラム今できるようになってきた。

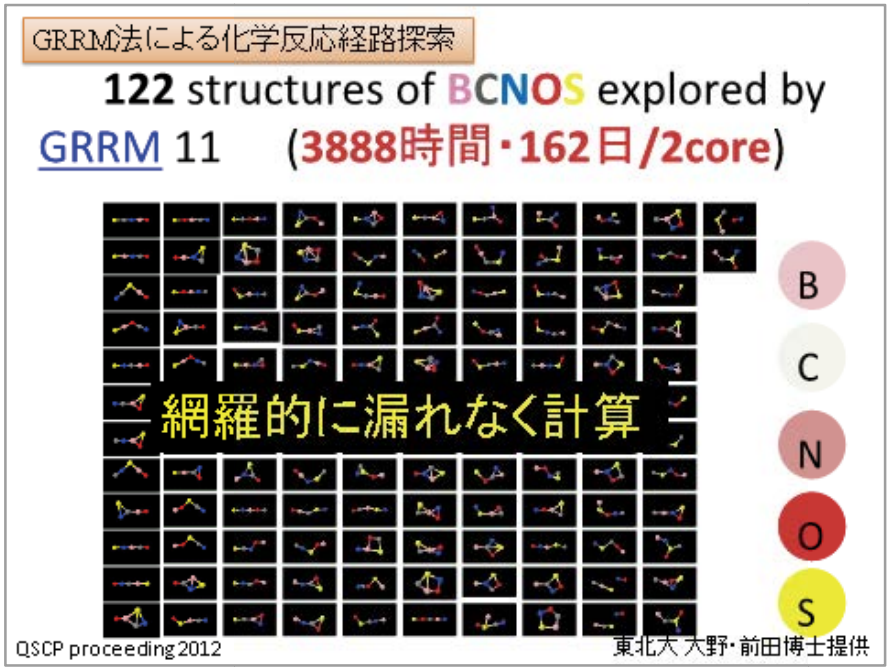


図 2

こういったものを使うと何に応用できるか、例えば材料科学で問題になっているのは結晶構造がどんなものであるかがある。例えば、何気圧くらいでどういう構造ができるか、あるいは分子性結晶はどういう構造を持っているかということが問題になるが、こういうものを結晶の分野に応用すると、どんな結晶構造が出てくるかということが網羅的に出てくるのではないか。

これは以前、CREST のマルチスケール・マルチフィジックスの分野で代表の押山淳先生（東京大学）の下、支援いただいた研究で、実空間密度汎関数法コードによる超並列の第一原理計算の話になる。これは 7、8 年前の計算なので原子数は 1 万原子程度のシリコンナノドットだが、これがバルクのシリコンの電子状態で、ナノドットもだいたい似たようなものを模しているということがわかってくる。ナノドットとバルクのシリコンの違いにはどういうものがあるかということもわかるようになってきた。さらに、こういったプログラムを用いて「京」コンピュータを用いて計算した 4 万原子の例で、ゴードン・ベル賞を取った。このように一つの構造の電子状態を求めるのも重要ではあるが、さらに発展的な課題として、こういった構造がどういうふうに動的に変化するか。あるいは構造の統計平均みたいなものをどうやって取るかということに対して、第一原理分子動力学手法をさらに付け加えている。これは最近のデータで、「京」コンピュータで 1000 原子くらいのシリコンの系ではだいたい 1 ステップ、3 秒くらい（2014/3/10 現在：２秒に短縮した）。これを 3 分の 1（２分の１）くらいに抑えられると、数千原子くらいの計算は実用規模になるということで、実在系への展開の手前にあるといった状況にある。

タンパク質の世界でも構造探索は重要である。例えば、どうやってタンパク質が折りたたまるかという、いわゆるファネル仮説では、タンパク質がのびた状態から折りたたまる状態に自然に自由エネルギーが低くなるということを仮定している。ただし、レアイベントという問題がある。例えばタンパク質が折りたたまるのに実験ではミリ秒くらいかかると言われているが、タンパク質のミリ秒の計算はある特殊なコンピュータを使わないとできないというのが実情である。こういったものを非常に高速に、かつ探索に向いたような MD 計算の手法を開発し、例えばこれは T4 リゾチームと言うタンパク質の計算例で、ここが開いた状態から閉じた状態に構造変異させて、例えば結晶構造と予測した構造が非常に良い一致を示す。また、タンパク質とリガンドが結合する過程というのは非常に長い過程であるが、先ほどの計算手法を使うとその構造予測ができるようになってきている。こういうものを使うことによって機能性物質、あるいは機能性物質と小分子の相互作用というものもきちんと予測することができるという状況になった。

次に問題点を述べる。先ほどの方法というのはほとんど日本の研究者のオリジナルの研究データであり、本国の理論計算物質科学のレベルでは世界有数である。個々の研究者を見ればトップの人間が何人もいる。ただし、外国製のプログラムが日本を席捲している。特に実験研究者は日本のプログラムを使うより、海外のプログラムを使うのがほとんど。例えば電子状態ではほぼ GAUSSIAN だし、分子動力学であれば Amber 社などの商用ソフトが使われている。データベースでは Chemical Abstracts や PubChem などが使われているが、日本のデータベースはあまりない。この先、計算物質予測に関してはデータベースが非常に重要な役割を占める。データベースに関しては、構造情報を自動的に取得し、その量子化学計

算を自動的に実行して、そのアウトプットを得るというプロジェクトが日本の科学者によって近年なされている。

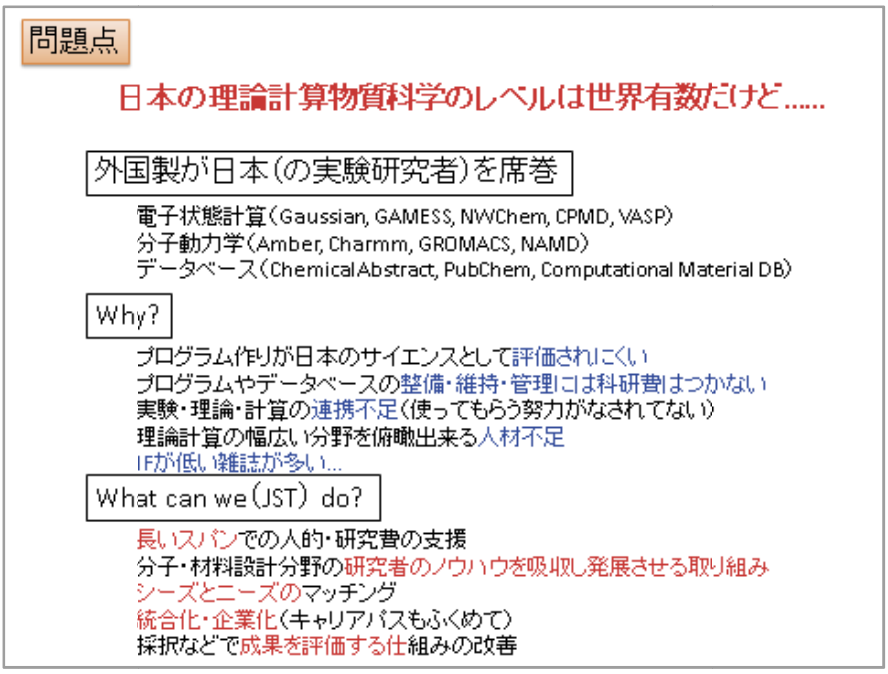


図 3

なぜ外国製が多いのかというと、プログラムづくりは日本のサイエンスの中では評価されにくい。あるいは、プログラムやデータベースの整備、維持、管理には科研費がつかない。実験、理論、計算の連携不足がある。あるいは、理論計算の幅広い分野を俯瞰できる人材が不足している。優秀な人材はいるが、幅広い分野を俯瞰する人材は欠けているということがある。インパクトファクターが低い雑誌が多くて、こういうプログラムをつくっている人がインパクトファクターの高い雑誌に載ることは非常に難しい。我々に何ができるかと考えると、非常に長いスパンでやるべきであると。あるいは、作っている人と材料設計をする人の距離が遠いので、研究者のノウハウを吸収して発展させるとか、あるいはシーズとニーズをマッチングさせるとか、ばらばらにやっているいろいろなことを統合する、あるいは企業化していく。また、採択などで成果を評価する仕組みを変えていただくとよいのかなと思う。

もう一つは、スピンを制御するようなサイエンスにつなげていければよいと考えている。

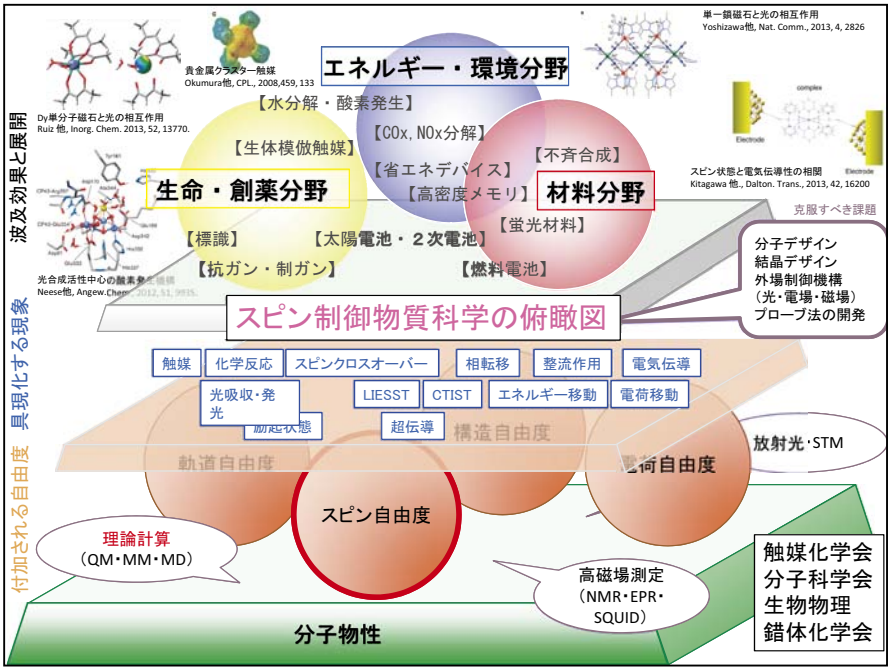


図 4

最後に一つだけ、インターディシプリナリ研究を推進するに当たって、私は生体材料に着目していている。生体機能を物質化学で活用する。例えば DNA の構造などを使ったり、タンパクの中のコファクターの構造をモデル化して化学に役立てるということがあるし、生体機能を物質化学に実現するということがあるが、やはりこの間には溝がある。自己組織化、集団揺らぎ・創発といった平衡状態の秩序状態、あるいは平衡状態で秩序から無秩序の間くらいにあるような状態というのはあるが、時空間で制御する、例えば同一成分であっても時間の遅れとか記憶がある系を物質科学によって創造するというのはまだ未解明の分野なので、ここから何か新しい機能を持ったような物質系が出てくるとおもしろいし、そういうことを今後自分の研究の中でもやっていきたいと考えている。

【質疑応答】

○質問　探索になると、今の話ではしらみ潰しに計算機でやっていくということになるのだと思うが、実際どの方向に行くのか。しらみ潰しの方法が根本的に意味のある方法なのか、ない方法なのかというジャッジはどういうふうに考えるか。

○重田　基本にあるのは、物質設計というものを理論的にやるためには物質設計指針が重要。例えば 2 光子吸収材料とその構造、電子状態相関がどうなっているかということを明らかにするような研究を介して、機能をマキシマイズするような構造探索の手法。要は、今は構造をしらみ潰しに求めているが、今後は機能をどうやってマキシマイズするかということに対する探索問題というのも重要。例えばそういう中で「こういう電子構造が出るはずだ」ということになれば、そういった電子状態が出るような条件であるとか、あるいはそういったものをいろいろな構造でやってみて、どういう相関があるかということを情報学的に出して、

いろいろなものでスクリーニングをかけながら最適なもの、あるいは最適に近いものをしていくことが重要と考える。
○佐藤　ある意味で今は、下手な実験をするよりはマテリアルインフォマティックスという話もある。そのへんのところとこれがうまく結合していくとおもしろい。
○重田　先ほどの大野先生の話にもあったとおり、第一原理計算やフェーズフィールドといったいろいろな計算の情報もデータの中に入れて、さらにマテリアルインフォマティックスの幅広い探索を可能にするというのが一つの方向ではないかと考えている。

○質問　スピンについては計算による予測の具体例とか延長ということか。
○重田　延長ではないが、例えば最初に示した計算例。端にスピンがあるジラジカル系。それから、マンガン錯体の電子状態が計算できるようになったということで、今までは無機化合物、特に錯体化学の電子状態というのは精度が低いということがあったが、こういう複雑な電子構造を持つような電子状態も計算できるようになってきたので、そういったものが発展すれば、スピンを制御するような科学全体に波及する。さらに今スピンの分野、特に錯体の分野では、希土類の単分子磁石や 1 次元構造を持ったもの。例えばニッケルが 4 つとか 3 つ、5 つと並ぶようなものの直接的な単分子伝導のようなものも測れるようになってきていて、錯体分野とデバイス分野もだんだん距離が近づいてきている。有機物でも、例えばラジカルを持つような物質で太陽電池とか、あるいはシングレートフィッション（一重項融合）と言って 1 重項状態というのは 2 つの 3 重項に分裂することでキャリアの寿命を延ばすことで効率を上げたり、そういったことにもつながってきて、スピン自由度を有機、無機、あるいは錯体などの分野でどんどん広げていくと、非常に広い応用範囲があるのではないか。
○質問　スピンの自由度に関しては、例えば NMR などの実験で実験から先に決めることはそんなに簡単ではないということか。
○重田　構造などに関しては、NMR 実験は非常によいが、ESR みたいなものでは、例えばどういう構造を持っているかとか、スピンクロスオーバーの途中であるとか、どうすればスピンクロスオーバーが起きるような材料を設計できるかというようなところはまだ制御することは非常に難しい。さらにもう一つ難しくて非常におもしろいターゲットは励起状態で、光有機スピンクロスオーバーみたいな励起状態を介して何かが起こる。発光現象もそうで、例えば希土類の発光はいったん励起状態に上げて、励起状態の間でスピンのエネルギー遷移が起きてある希土類から発光するという過程がある。私の共同研究者がやっているのは、シングレットの光吸収するような有機物を励起状態に上げて希土類から発光するよりも、実はスピン 3 重項を持つような有機分子を励起状態に上げたほうが光の強度が強いということがあって、それは 1 重項から 7 重項までスピンのエネルギーを伝達するよりは、1 重項から 3 重項の間でスピン転移して、3 重項から 5 重項、7 重項に行くが、基底状態が 3 重項であれば直接的な励起状態も 3 重項になるので、そのほうが 1 ステップ得する。スピンの分野というのは有機、無機、いろいろなものの組み合わせでおもしろいものができると思っている。

○質問　日本で優れたアルゴリズムがいくつかできているということだが、なぜあまりオープンにならないのか。アメリカではいろいろなものがオープンになっていて、いろいろなディスカッションができると思う。

○重田　日本のサイエンスでは、例えば分光の分野では装置をつくるというのが重要で、新しい装置づくりで評価されるが、例えば量子化学の計算プログラムをつくっても、サイエンスとしてはそれほど評価されない。
○質問　例えばガウシアンや VASP は開発する当時、そういうお金はついたか。私は VASP を使っているが、何となくの印象として、世の中で第一原理計算が重要だという歯車が回る時にさっとつくって、その歯車に乗ってユーザーがどんどん増えて、ユーザーがどんどん開発するという、まさに波に乗ったことが重要ではないかと。
○重田　確かにガウシアンの中にも日本の研究者が日本の研究費を使って組み込んだところがある。そういう仕組みづくりが日本にはなかったということがあると思うが、JST の少し前のもので革新的プログラム開発というものがあってそういうものでやっていたし、アドバンストソフトというソフトウェア会社もできている。もう少し組織的にこういったものを整備するような環境があれば、もっと普及すると考えている。
○佐藤　固体物理のほうではマチカネヤマなどはみんなに報告されて、みんなが使っている。
○質問　装置づくりのほうでは、先端分光、サクラのピコスコープなどは論文になるが、それをユーザーインタフェースをしっかりして皆さんに使いやすいような計測器にしようというところでは同じような問題を抱えている。理論計算でも、先端の新しいアルゴリズム開発などは評価されるが、マテリアルの人に使ってもらうものは一段下げるような。
○重田　あとは、そういう講習などにも予算がつかない。要は、使う人とつくる人を結ぶところがちょっと弱いのかなと思う。
○佐藤　それは今後の方向性の一つとして重要である。

3．9　堀毛悟史（京都大学）

専門は錯体化学で、去年 JST の戦略創造に立ち上がった「空間・空隙材料」に関連する材料を取扱っている。空間・空隙材料というのは、内部にさまざまな空間を持つ材料で、カーボンから粘土までさまざまなものがある。私が専門にしているのは、錯体をベースにした空隙材料で、いわゆる MOF と呼ばれる材料。学会は日本化学会などがある。

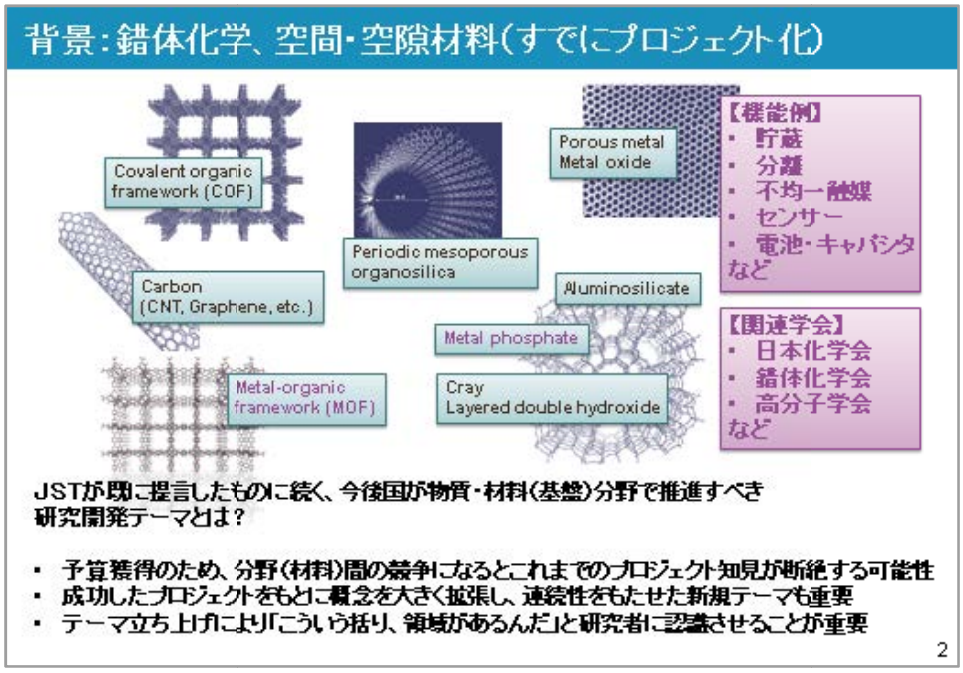


図 1

新しいテーマを立ち上げる時に非常に大きな予算が動くが、予算獲得のために分野あるいは材料の縦割りの競争になると、これまでがんばってきたプロジェクトの知見が断続してしまう。そこで一つのアイデアとしては、プロジェクトを断絶させることなく、成功したプロジェクトを元にして概念を大きく拡張し、連続性がわずかでもあるような新テーマというのがあってもよいのではないか。私はさきがけで「元素戦略」をやっているが、例えば 10 回前の「さきがけ」で生まれた分野、技術、もしくは新しい材料が今も連綿と受け継がれているような時間軸のプロジェクトテーマが希薄なのではないかと感じる。テーマを立ち上げる際に、例えば「計算」分野とか「無機」材料のように分野や材料ベースに立ち上げるというのも一つのアイデアだが、テーマを立ち上げることによって、こういうくくり、あるいは領域があるのだということを多くの研究者、特に若手の研究者に認識させることが非常に重要なのではないか。「元素戦略」とか「分子技術」というキーワードを出しておいて、何かアイデアを思いついた時に、「自分の研究はこういうところにリンクするのではないか」と思わせるためのテーマの立案が重要である。

今回提案するのは、「固体内における分子およびイオン輸送の包括的理解と機能創出」で、分子あるいはイオン輸送の固体化学、材料科学。その背景、社会的意義としては、空間材料分野をはじめ固体材料の合成化学というのは急速に進んでいる。ただ、構造内部において分子あるいはイオン輸送の理解というのはなかなか進んでいない。そういう現状を一部目の当

たりにして、合成固体化学において「輸送」というキーワードで材料設計を見直すことができれば、輸送ということ自体は機能ではないが、今後の機能創出ができるのではないかと考えた。

想定される成果としては、これまで不可能であった分子の識別や分離。あるいは、新たな電池、キャパシタ。さらに、例えば生体系でも人工イオンチャネルなどの材料であったり、非常に高速に触媒できる物質など、想定される成果は非常に幅広くなるのではないか。多孔性材料に限って言うと、輸送というのはもちろん応用に直結していて、例えばアメリカでは新しい多孔体がたくさん生まれているが、これらは一気に応用に進んでいて、世界一の化学会社である BASF が MOF という材料をタンクに積んでカリフォルニアからボストンまで走らせているということで、非常にホットに応用まで直結している。

課題としては、新しいテーマを立案する時に物質ベース、分野ベースにし過ぎるとなかなか融合は起こらない。輸送というくくりで新しいテーマを立ち上げると考えれば、インターディシプリナリな研究領域が考えられるのではないか。

なぜ今「輸送」か。さきがけの「元素戦略」にいて 3 分の 2 くらいは物理の先生。客観的に見ていてエレクトロニクスやスピントロニクスといった分野に比べて、イオニクスあるいは中性の分子輸送の分野というのは、材料革新の速度に比べて解釈が遅れているのではないかと思うようになった。例えば我々のグループの、新しい多孔性材料の中で CO ガスと窒素ガスを選択的に分離できる材料。ほとんど同じ特性を持っているのに、なぜこれほど分かれるのか。分子やイオンということでくくって、輸送の科学というものを最新の物質系に合わせた技術として包括的に確立するようなテーマがあればおもしろいのではないか。輸送と考えた時に、材料を扱っているほとんどの方は「それは非常にユニバーサルな現象でどこにでもあるじゃないか」と思うが、輸送という現象を積極的に機能に活かしている例はそんなにない。例えば空間・空隙の分野においても輸送というキーワードは入っているが、それは現象としてあり得るというだけで、その機能を出そうというようなイメージではない。先ほど非平衡という話があったが、平衡系では不可能な速度論的な現象、機能をこのテーマの中で実現しようと。そして、特に分子、イオンに重点を置いて応用の要請を念頭に機能を展開する。非常に多彩な物質合成化学がこの数 10 年で起こっているので、こういう輸送挙動があれば機能に直結するのではないか。そして、それを非常に精密に見る力。顕微鏡に限らず場面に応じて分光を使ったり、そのような現象を解析するトップの研究者がそろうべきである。

そして、輸送現象がどのように機能につながるかということを考えなければいけない。例えば結晶なりアモルファスがあった時に、一方向だけに分子を輸送できるものができるか。そうするとエネルギーに密接に関連してくるし、イオン伝導においては、例えば電子伝導の理論値の最高は超伝導になると思うが、イオン伝導の理論値を実現できるような合成化学ができるか。さらには、非常に重要な同位体の化学。同位体のガスなどの分離を輸送によって実現できるか。そして、非平衡における有機あるいは高分子合成。マイクロ流体なども関連するが、そういうことができれば自ずと、応用に直結して新しい材料ができるのではないか。

図 2

例えば解析という観点においては、電子顕微鏡、化学工学における輸送論。例えばテラヘルツ波であったり、拡散 NMR、中性子回折。このへんは合成の化学者からすると非常にとっつきにくい。それを「輸送」というくくりにしていただいて協働で研究できると、実は知られている材料も一気に物性の理解が進むかもしれない。生体化学においては一分子イメージングなどがある。合成においては、今回は固体材料というくくりにしているが、さまざまな新たな輸送を基盤とした機能材料がある。例えば固体化学では酸・窒・硫化物、それからイオンチャネルをつくる技術、マイクロ流体や電気化学、私がやっている多孔性材料。コンビナトリアル合成も入ってくる。さらには機能発現という立場から、現象をテーマに設定すると考えた時に、「それが本当に材料なのか」と言われた時にサポートする上で、化学工学やコロイド化学というものを積極的に入れて本当に応用にできるのかということをやっていくべき。

輸送現象が本当に役に立つのかということについて、日本学術会議の 2 年前くらいのロードマップを見てみた。固体における輸送現象を制御あるいは合成、解析によって新しいことがわかれば、さまざまなロードマップに関連する新しい材料が出てくるのではないかと思う。例えば、多孔性材料は、性能において例えばガス挙動などが平衡論的に非常に高いポテンシャルを持っていても、速度論的あるいは時間的に応用の要請を満たさなければ社会には役に立たないということが非常に多い。

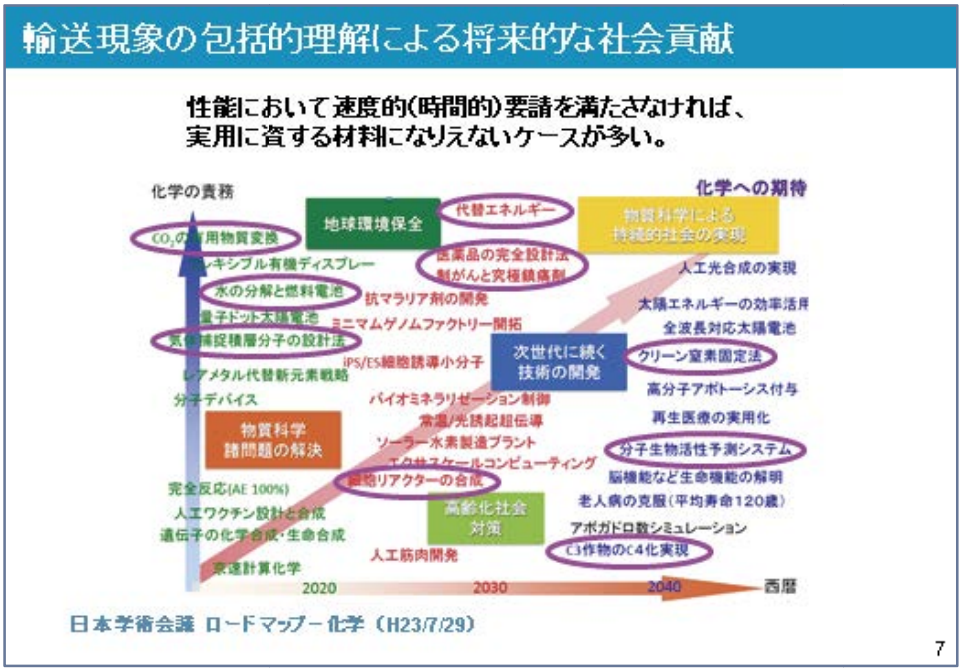


図 3

分子輸送あるいは分離の潜在的なイノベーションは何かというと、これは数年前の産業別エネルギー消費量だが、化学は産業全体が消費するエネルギーの 14%以上を分離という技術に費やしている。この莫大なエネルギーをどうやって減らすのかと考えると、やはり輸送をベースにした材料が重要になってくる。例えば、つい数週間前に、このような粉末の多孔性の固体が希ガスを非常に精密に分けるというような機能が出てきている。キセノンなどの希ガスを分離するのは非常に難しく、今の技術で分離するには温度を非常に下げなければいけないので、莫大なエネルギーを必要とする。国際的に大きな問題になっていて大きなマーケットがあるということで、応用においても輸送材料というのはそういう課題を一気に解決できる可能性がある。例えばイオン伝導においても重要なアウトプットがあるが、東大の山田先生、あるいは Caltech の山崎先生、あるいは京大の陰山先生のように無機物の酸化物の例においても、輸送現象を詳細に観察することで新しい機能や解釈が出ている。輸送現象を緻密に見ることによって、リチウム電池の材料やプロトン伝導の低温化などを実現する化学が潜在的にあるのではないか。

材料として応用機能が本当にあるのかというのは、これはむしろ JST のほうでプロジェクトリーダーがうまくオーガナイズする必要があるのではないかと思う。限られた著名研究者がすぐに思いつくような材料テーマ設定は、特に若手研究者の異分野の出会いを妨げる。なぜ日本がやるのかと。日本が先導する新しい価値として、敢えて輸送という現象をテーマとすることによって、欧米のプラグマティックなやり方とは一線を画すようなスタンスをとる。それは、すぐには機能に結びつかないかもしれないが、ユニークな提案、材料が出てくるのではないかと考えている。

【質疑応答】
○質問　おもしろいテーマだと拝聴したが、輸送現象と分離工学というのは化学工学では別の分野になっている。化学工学の中でもあまり協同してやっているような風潮はなくて、今の先生の提案されるテーマの時にどういうふうに融合すればよいのかという方策と、あとは分業するためには恐らく何か認識させなければいけないと思うが、その認識を固体材料でどうやって実現するか。
○堀毛　今まさに質問されたことを私はJSTがやってほしいと思っている。1点目については、例えばクラシカルな化学工学において分かれているというのは、多彩な研究者のプロポーザルを精査することによって、輸送現象にどれだけチャレンジングなテーマを立案してきたかということだけで判断したらよい。

○佐藤　物質内のイオン輸送というのは、それなりに昔から理論はある。それと今の提案は何が違うのか。手掛かりがちょっと見つからない。何がポイントになっているから、こういうところを攻めていかなければいけないというのがもうひとつ見えない。
○堀毛　例えば、ナノイオニクスというイオニクスの一分野においても説明できていない。例えば界面においても、イオン伝導機能が出ているものがたくさんあるけれど、それは一義的には説明できない。私が専門にしている錯体材料では非常に高いイオン伝導が出るものがあるが、その理由がわからない。それは、既存の測定技術で見てもわからないし、解析だけではだめで、合成と解析の両輪が必要だと考えている。
○佐藤　ガス分離となると、それは気体と固体。だから、固体自身のイオン伝導みたいなものとは違うのではないか。それを一緒にされているので、概念的に少しわかりにくい。
○堀毛　ある意味では意図的に提案しているが、例えばイオン伝導で、もしくは生体で1分子をモニタリングするような技術が例えばガスに適用できるといったようなことがあるのではないか。

○質問　ナノスケールの空隙の輸送現象はいわゆる拡散現象で説明できないというスタンスで話しているかと思ったが、濃度勾配を逆転するような輸送現象があるとか、そういったことを念頭においているのか。そういう意味で、材料に絞らずに現象でテーマをつくって、それに関わるものは何でも受け入れるほうがよいということか。生体分子の浸透圧に抗うようなイオンの輸送があり、それが主になってしまうのではないか。
○堀毛　非平衡をどのくらい制御できるかというのはもちろん難しいと思う。能動的な輸送、プロトンポンプにしろ、本当に濃度勾配によって一方向にしか行かないものを固体材料でつくれば、熱輸送ではないが、まったく新しいエネルギーデバイスになるのではないかと思っている。それを外部刺激によって変えることができれば、さらにおもしろいのではないか。例えば違う分野の人の材料を見て、実は分子輸送などに使えるのではないかと思っていても、その人たちはまったくその解析のツールを持たなかったりということが多々あるので、そういう意味でそういうカテゴリーをうまくつくれるような仕組みがあれば、材料に直結するのではないかと思う。もちろんイオンチャネルを人工的につくるだけでも非常に大きな成果だと思うが、どのレベルの目的を設定をするかによる。

○質問　我々もガス分離などをいろいろやっているが、企業から見れば、足元では例えば材料の寿命とかコストとかの関係で、MOF は今の段階ではまったく使い物にならない。基礎サイエンスの中でも、MOF のデュラビリティや製造過程でのいろいろなコントロールのパラメータをどうするかとか、わかっていないことがたくさんある。もう少しこれをやる前にやることがいっぱいあるのではないか。
○堀毛　私も NEDO に参加しているので、プロジェクトを立ち上げる際には化学工学の知識を持っていなければいけないと思った。例えば固体材料としてガス分離を検討する場合は、化学工学の人をもっと入れていかなければいけない。そして、どのサイズのスケールで使うのか。例えば非常に小さなスケールで使うのか、付加価値なども考えていかなければいけない。同時並行でプロジェクトの中に違う分野の人を入れていくことによって、相補的に何か生まれるのではないかと思って提案した。

○佐藤　これは計測の問題がかなり関わってくると思うが、計測屋さんの目から見てこういうイオンの動きを見るというのはどうか。
○質問　非常に難しい。私はつくるのと測定の両方をやったことがあるが、つくれる、機能が出ればよいだけではこういう研究は進まないので、実際に何が起こっているか知りたい。特に動くようなものは非常に難しい。
○堀毛　分子化学の観点からすると、やはり位置関係を非常に精密に撮れるようになってきたので、材料を系統的にすることによって見えてくるものがある。トップの性能があるところだけを見るのではなくて、それに付随するものをつくっていって見るとか。
○質問　今の半導体のように設計指針がわかっているものは、1 点を押さえればあとは派生させることができた。フィードバックがかかるのが、設計指針が立っていないものを観測に基づいてしっかりつくろうとすると、観測技術のほうもしっかりしていないと難しいところがあって、そこがいつも困っているところ。最近こういう化学系の話が多い。
○質問　TEM でも見えたらよいというのが私の提案だったので、現状ではなかなか難しい。あとは時間スケールとの兼ね合いだが、時間スケールはどのくらいか。
○堀毛　例えばガス分散だったら、拡散で言うと 10 のマイナス 10 乗とかでしょうか。
○佐藤　けっこう速い。μs 以下。
○堀毛　ただ、アウトプットからすると、分離というのは拡散係数を測ればよいだけ。

3．10　田原一邦（大阪大学）

私の研究分野は、有機化学の中でも構造有機化学または物理有機化学と呼ばれる分野である。国内の学会としては基礎有機化学会がある。この分野は、日本のプレゼンスが非常に大きくなっている。例えば、国際会議では ISNA というのがあり、開催国にかかわらず参加者の 2～3 割が日本人の研究者で占められている。主題は、構造が新しい化合物、特にパイ共役化合物を合成し、合成された分子の基礎的な物性、電子物性を調べ、構造と分子の相関を明らかにするという基礎的な面を追究が以前からの主題となっている。

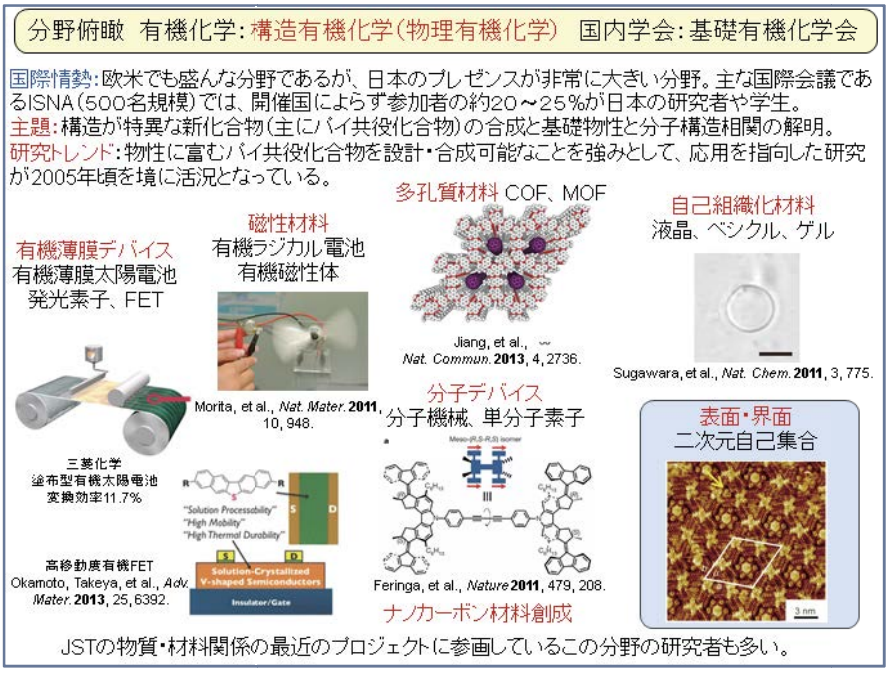


図 1

2000 年代に単一分子の物性が理論的に容易に予測することが可能になったこととから、出口指向の研究が盛んに行われた。例えば有機太陽電池や発光素子、LED などに代表される有機薄膜デバイス、有機ラジカル電池、有機磁性体が代表例として挙げられる。なお、これらはドナー、アクセプターと呼ばれる分子が混合することで構成される。そのため、それら内部オーダーが極めて重要である。他にも、多孔性の物質、分子機械や単分子素子の合成とその物性調査、ナノカーボンの材料の創製なども行われている。自己組織化材料としては液晶、ベシクル、ゲルといったものがあり、これらはしばしば集合体形成と集合体の構造変化に伴う機械・電気物性の変化等に注目した研究がされている。中でも私が携わっているのは、合成した分子の自己組織化を表面で行い、表面で数 nm オーダーで周期を持つ構造を作成した研究を行っている。この分野は非常に多様な分子を合成できることを強みとして、JST の材料関連のプロジェクトに多くの研究者が参画している。

次に、表面における自己集合によるナノ構造の作製について説明する。そもそも表面における単分子膜というのは、チールの金表面への化学吸着などにより 1990 年代に多くの研究がされた。その後、2000 年代に入って化学吸着よりも弱い物理吸着を使った単分子膜の形成が広く行われている。これは分子と基板との相互作用が弱いために分子間の相互作用が最大に働き、複雑な構造、機能を持った薄膜をつくることが期待されているため。この構造というのは、主に走査型トンネル顕微鏡（STM）を用いて観察される。2000 年代には超高真空下に代わって有機溶媒と固体の界面で自己集合によって分子を配列させてナノパターンをつくる研究が盛んになされている。その代表例として、金属の成長表面に分子を多孔性に配列させたものや、こちらの例にある固液界面における、4 つの異なる有機分子を自己集合によってナノレベルできっちり配列するといった研究が行われている。分子構造と形成される構造の相関関係に関する基礎的な学理の蓄積が進み、2010 年代に入り物理吸着させた分子間で化学反応を行うことで、溶液中では得られない新材料をつくるといった研究も行われている。例えば、グラフェンのナノリボンのほか、単原子厚の薄膜材料として 2 次元ポリマー合成もなされている。ごく最近では、グラフェン上にさまざまな電子状態を持つ有機分子を配列させ、そのことでグラフェンの電子状態を制御し、バンドギャップを制御することで新しい半導体をつくるといった研究がされている。

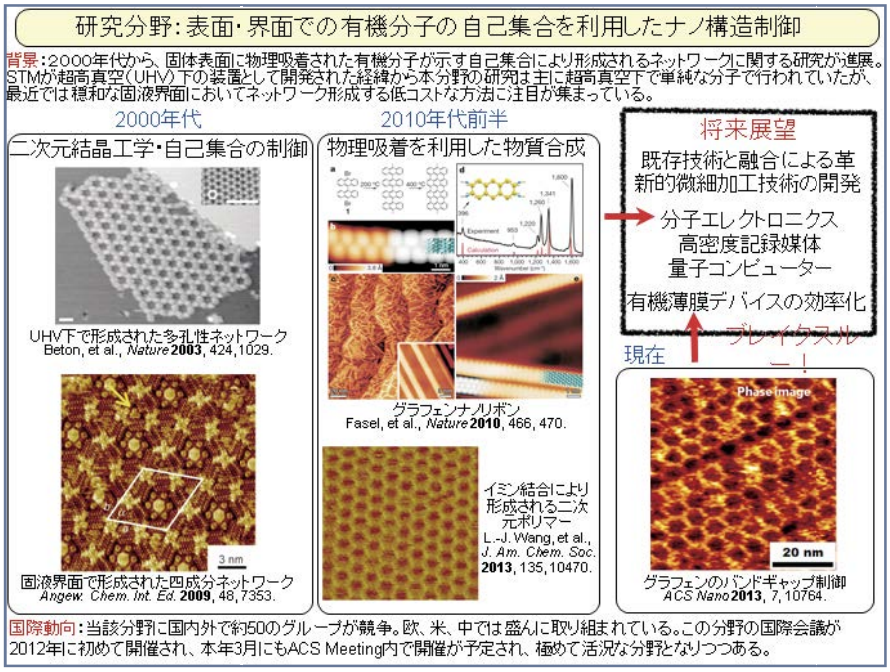


図 2

私はこの分野において、三角形の分子に化学反応性の官能基を導入しておいて、グラフェンの表面において配列させ、グラフェンとこの分子を反応させることで周期的にグラフェンを修飾してバンドギャップを制御するといった研究に取組んでいる。すでにグラフェンを積層するだけでなく 2 次元的に修飾するのもおもしろいという話があった。この分野はこのように分子を配列させる、または化学反応を利用して新しい材料をつくるということが盛んになされている。

世界でこの分野の研究は 50 グループくらいが行っている。特にヨーロッパで盛んで、次いでアメリカ、中国が行っている状況で、日本はあまり活発ではない。しかし、この分野を包括的に議論するような国際会議が 2 年前に初めて行われ、本年 3 月にもアメリカ化学会のミーティングでセッションが組まれるなど、今後非常に注目される分野になるであろうと期待されている。現状では基礎的な段階ではあるが、将来展望としてはこちらに挙げられるようなことが考えられる。

このような状況を踏まえ、私が提案するのは「固体表面・界面におけるナノ分子材料創製」である。背景、社会的意義、目的に関しては、高度情報化社会や省エネルギー、もしくは自然エネルギーの有効利用といった面に対して新材料の創出が必要であることが挙げられる。また、これまで JST も含めて既に重点的に資金が配分され、研究されてきた自己集合の科学、分子エレクトロニクス、それと表面・界面における計測技術、この 2 つの重点的に研究された分野を今ここで再び合わせて、表面におけるナノ材料、特に分子を中心としたナノ材料創製にフォーカスして、最終的には機能から構造、分子、または無機材料を合成することで、新しい機能を持った材料・素子を作成するというのが目的である。

期待される成果として、既存技術の加工限界を超えるような微細加工技術の創出がある。あとは、高速な電子回路、エネルギーの高効率化、また表面改質などが考えられる。この分野の課題として、原子・分子を自己集合によって自在に表面に配列させるための基本的な学理を確立することが重要。特に実験的な面だけでなく理論的な面で、「こういう分子を使えばこういう構造ができる」、「こういう分子を配列すればこういう物性が出る」といったところがまだ十分に研究されていない。2 つ目の課題として、分子をどう集積化していくか。これは既存のリソグラフィ法と融合することになる。しかし、これをどう集積化するかについてはまだ明確な答えがない。推進方策は、化学と物理が融合した分野なので、その分野を俯瞰的に眺めることのできるリーダー的な存在の方が重要。対象となるのは数 nm オーダーで、材料としては分子、ナノ粒子、金属酸化物、ナノワイヤなどが挙げられる。これらをいかに既存技術と組み合わせて物にするかということが目的となる。

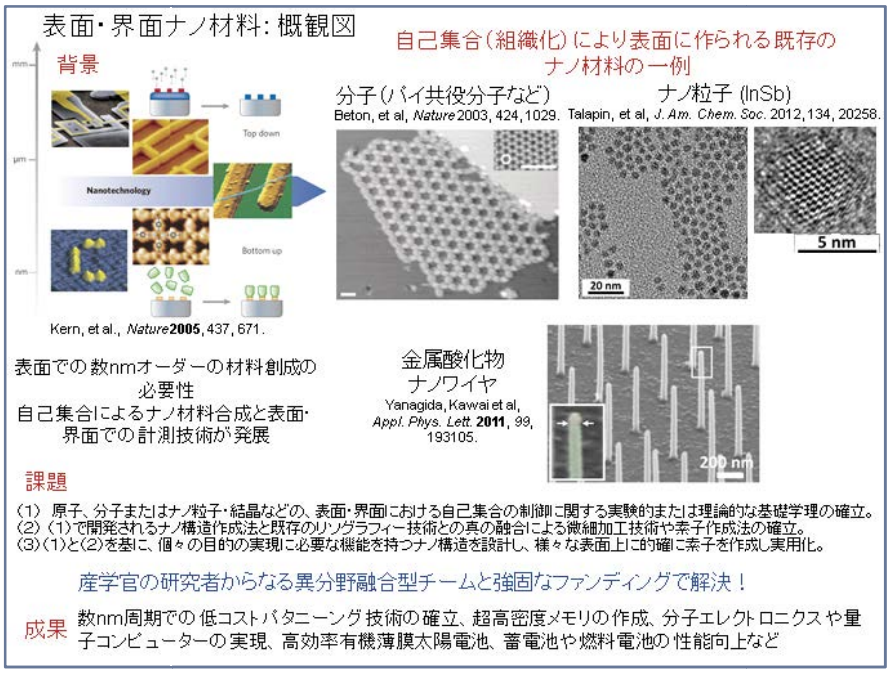


図 3

【質疑応答】
○質問　2 次元のパターンはおもしろいと思うが、どのくらいの大きさになるか。実際に局所的にパターンができたとしても、それが 1mm、2mm 離れたところで同じような向きで同じ周期が続いているのかということも気になる。
○田原　基板は金属、グラファイトなどがよく使われ、そのテラスいっぱいには構造が広がる。ドメインサイズは、1 マイクロとかそのくらい。単結晶グラフェンの上でやるとかなり大きなマイクロを超えるようなサイズで分子が並ぶということもわかっている。ただ、欠陥がないかと言われると、例えば分子が数個抜けるなどはあると思うが、ドメインというレベルで見た時にはかなり大きなところまでできるようになってきている。

○質問　集積化させるのが問題と言われていたが、きれいに配列させるというのは、そういうものが得意な分子とそうでないものがあると思うが、苦手なものに関しては、例えばこういう分野と組めばうまくいくのではないかとか、そういう指針はあるか。
○田原　基本的には、我々は合成的に分子を変えてしまって並べてしまっている。他にも製膜条件を変更して調製することも行われている。2000 年代にそういうことがかなり研究されていて、だいぶ知見が溜まってきて、ある程度コントロールできるようになりつつある。分子のサイズが小さくなってくると、超高真空下という上に何もないような状態だと並ぶが、例えば固液界面、有機溶媒と表面の界面で小さな分子を並べようとすると、どうしても溶媒の中に溶解され配列しないなどの問題があるので、必ずしもこの分子はこの条件でちゃんと並ぶというものではなくて、それぞれの条件に合わせてきっちり分子を選択すれば、並べることができるという状態。

○佐藤　エレクトロニクスと書かれているが、電気伝導制御という点ではどのくらい可能性があるか。
○田原　単分子レベルで 2 つの電極をはさんで電気伝導性を測るといった研究は多くやられていて、分子自体がそういうポテンシャルを持っていることは最近明らかになっている。ただ、それをつなげてどういうふうに電流が流れるのか、それがどう制御されるのかというのはわからない。
○佐藤　先ほど太陽電池とかいろいろ書かれていたと思うが、例えばこういうことをするとうまく太陽電池の効率が上がるというような指針はもう出ているということか。普通はバルクヘテロということでまぜこぜにする。
○田原　有機太陽電池の電極上に、ドナーとアクセプターの 2 つの成分、p 型と n 型をナノレベルで分散させて。表面できっちり並べておいて、そこから成長させることで、3 次元構造で p と n が分離したような構造ができれば効率が上がると思う。

○質問　表面加工をされている人は、表面イメージでは確かにおもしろいパターンをたくさんつくるが、それからなかなか上に行かないのはなぜか。
○田原　並べて観察するということはできるが、その物性を測るというところに問題が多くて、そこが解決できていないということだと思う。

○質問　それは、技術的にどういったところに課題があるのか。例えばこういった構造の両端に電極をつけて電気特性を測るということはできるとは思うが。広い面積にするところにまでなかなか行かないような気がする。
○田原　分子を使ってナノレベルできっちり配線するといったところができていない。周期的に同じ分子を並べて数 10 ナノというサイズはできているが、例えば 4～5 種類の 1nm の分子をきっちり通電しながら結んでナノ構造をしっかり組むというようなことはできない。それができないと、分子が集合して回線をつくった時に本当に働くかどうかということがわからない。
○質問　流れるか流れないかという意味では、グラフェンには流れることは流れると思うが、それは共有結合でつながっているからで、弱い相互作用しかないので、トランスファーで言えば本当に 0.1 ミリエレクトロンボルトとかそんなもの。そうすると電気は流れないはず。真ん中と左ではつなぎ方がまったく違うので。真ん中のものは、本当に長いものができるのかというのはまだ懐疑的。
○田原　これはしかも方向が定まっていない。きっちりある方向を定めてこういうものをつくるというのが次のステップになる。
○質問　それができたらよいと思う。金属の上に載せても問題なので、違うものの上で成長させる、そういう基板のことはどこまで研究が進められているのか。
○田原　これはこの基板の上でないとつくれない。その後、この研究ではシリコンの基板の上に転写して、それで電子物性を測っている。
○質問　下があるとどうしようもないが、後で写して伝導を測れればよいと思うし、大きさも先ほど紹介したようにナノギャップみたいなもので単分子も測れるし、テラスの話があったが、1μ くらいあれば狙って電極も付けられるので、十分に電気伝導度は測れると思う。

3．11　永野修作（名古屋大学）

私は分子配向技術を基盤としている。分子が自発的に並ぶ力を使ってナノレベルで液晶構造を並べたり、ミクロ相分離構造というメゾスケールのものを並べたり、また巨視的なマイクロレベルのものを分子の力を基点として並べていくということをやっている。

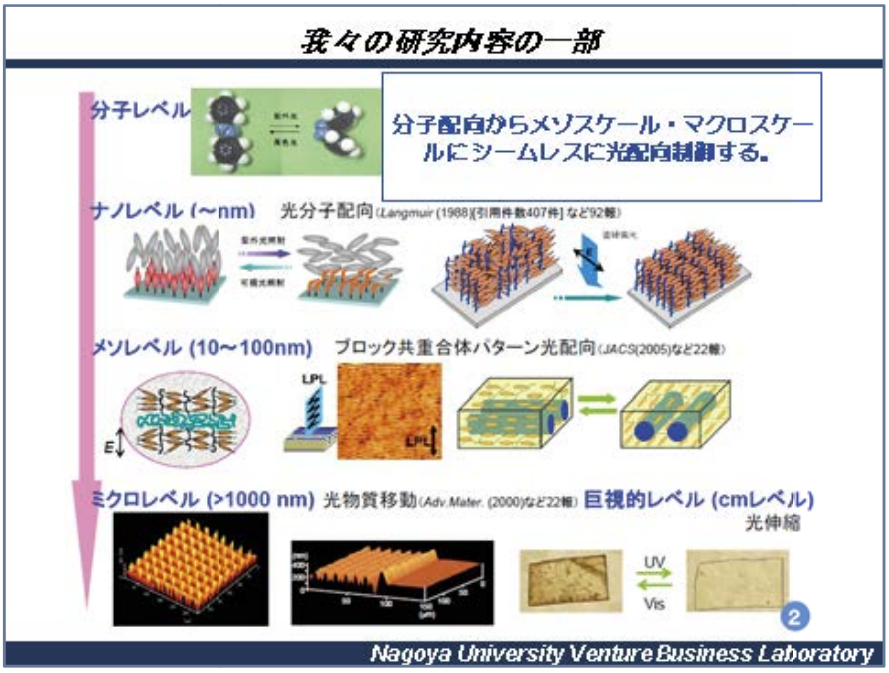


図 1

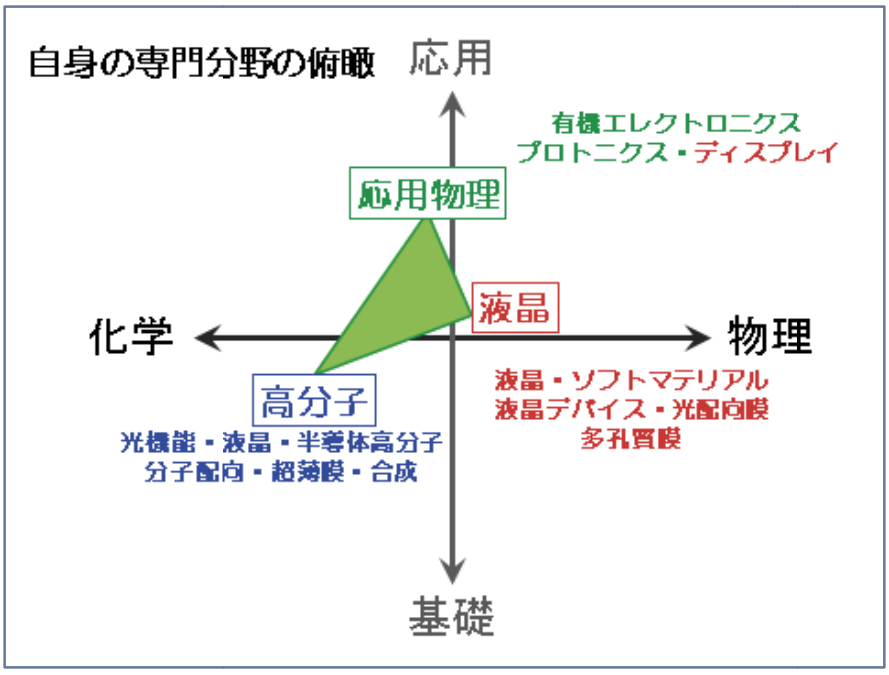


図 2

高分子材料、液晶といった分野に所属するが、高分子を並べるという話は、高分子の半導体を分子配向とともにどういうふうなキャリアが流れるか、最近では、プロトニクスでもど

ういった分子配向の方向にプロトンが流れ易いかなどを調べている。応用物理的な有機エレクトロニクスから高分子化学、また合成もやっている。私は、企業では、液晶デバイスや液晶ディスプレイの研究もしていたので、やっていることは基礎的だが、応用面をいつも模索している。

私の属するこのような分野を俯瞰して足りない部分がこれからの分野として、「ソフトナノメカニクスへの挑戦」という題名で提案をする。「分子マシン」や「分子ロボティクス」分野では、アイデアあふれる分子設計で、おもしろい分子の形をつくっているが、実際のところは分子の形しか変えていない。ロボット、または、マシンと言うのであれば、やはり何かに「物理的な仕事」をしていかなければならない。「仕事」を行うアウトプットとしては、「MEMS」とか、「メカニカルシステム」とか、そちらの方向へ発展させるということを考えるべきであろうというものが趣旨である。

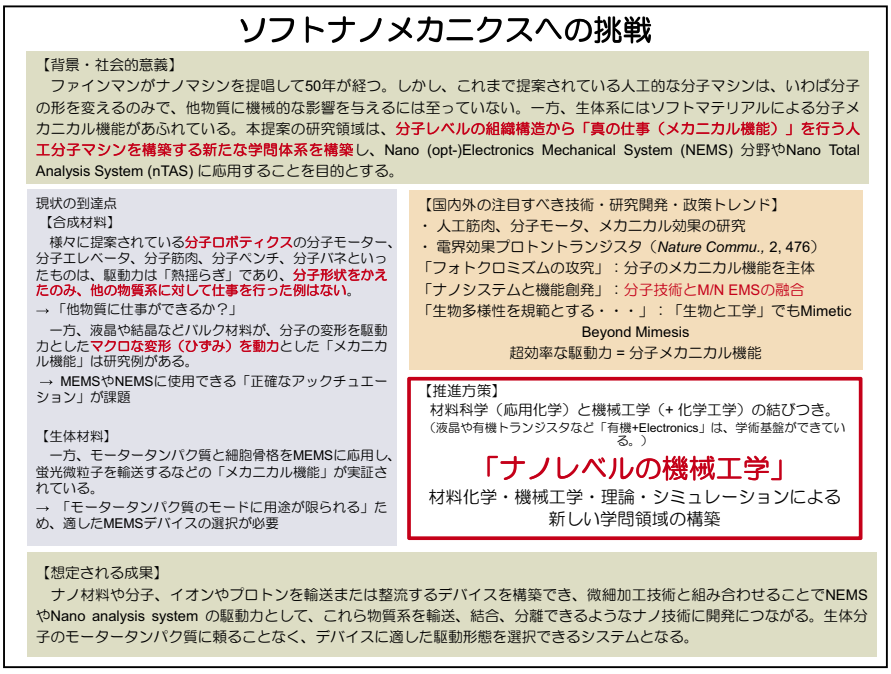


図 3

「分子ロボティクス」という分野があって、「分子モーター」、「分子エレベータ」、「分子筋肉」、「分子ペンチ」、「分子バネ」というふうに合成・超分子分野で、分子の形を変えたいという分野が確立されている。また、DNA 系の材料に少し細工をして、分子がくっついたり離れたりというものもある。そこで、あくまでもメカニカルな部分にこだわると、何が問題になるかというと、駆動力は結局、熱揺らぎであるということ。

こういった分子を組織化していって、何か他物質に対して仕事ができるようになるのではないかという期待がある。どのように組織化すればよいのか？私の分野に入るが、液晶中や結晶中の分子の形が変わると、マクロな領域で見ると歪みが起こって動くという例がある。これは「仕事」をしていると言える。ただ、マクロな変形による仕事である。偏光により様々な動きができる有名な材料があり、光によって歪むと何か仕事をする。結晶系の光変形では、シリカ微粒子を蹴飛ばすというような話があり、仕事ができている。非対称な液滴の濡れ性、ヒステリシスのようなものを使うと、液滴が動くという話もある。こういった例は、分子に

よる歪みをマクロな領域につなげて、動かして、仕事をしている例である。しかし、ナノオーダーの MEMS に適用するとなると、ナノスケール下の正確な動作やアクチュエーションを求められた時に、本当にできるのかということが課題になる。一方、生体系の例として、モータータンパク質を使って微細管上をキネシンが動いて、実際に蛍光微粒子を動かしている例がある。これは、ある物質、蛍光微粒子に対して仕事をしていることになるので、生体系では分子によるメカニカル機能は、ちゃんとできているといえる。しかしながら、現状、モータータンパク質の動きに合わせた MEMS デバイスに制限される。それゆえ、人工合成系で分子メカニカル機能ができた場合、様々なアウトプットに対して、ナノの動きをしっかりと「仕事」にして、様々な MEMS のデバイスに応用できるようになると思う。

これまでのプロジェクトとしては、先ほどの分子変形からの歪みで動くといったメカニカル機能や分子技術関連の分子ロボット分野は、大いに関連するものである。特に「ナノシステムの機能創発」というプロジェクトは、私も参画させていただいたが、分子技術分野と MEMS 分野の融合があって、「何かできそうだ」とよく議論に挙がっていた。また、「生物多様性を規範とする革新的材料技術」、生体のミメティックの先を行くものとしてある。人工合成系として、どのように真の分子メカニクスをつくっていくか。やはり、アウトプットとしては MEMS になると思っている。

推進方策としては、私は材料化学、応用化学にいるが、機械工学、化学工学との結びつきが希薄である。ただ、有機トランジスタや液晶デバイスは、光学などの物理、機械工学やエレクトロニクスとの結びつきが生産工程も含めて入っているので、ディスプレイ関連の開発を行っていた時は、そういった分野との有機的な結びつきがかなり重要であった。「ナノレベルの機械工学」といったものを構想すると、材料化学から機械工学、シミュレーション分野の方々も巻き込んで、「このくらいのものをこのくらい並べたらこのくらいの力が出るはずだ」のような計算まで可能となれば、新しい学問領域になるのではないかと考えている。

最後に、興味あるインター/トランスディシプリナリとしての話題を提供する。スピントロニクスのような分野というのは微細加工技術とナノ構造化学といったものがかなり結びつい

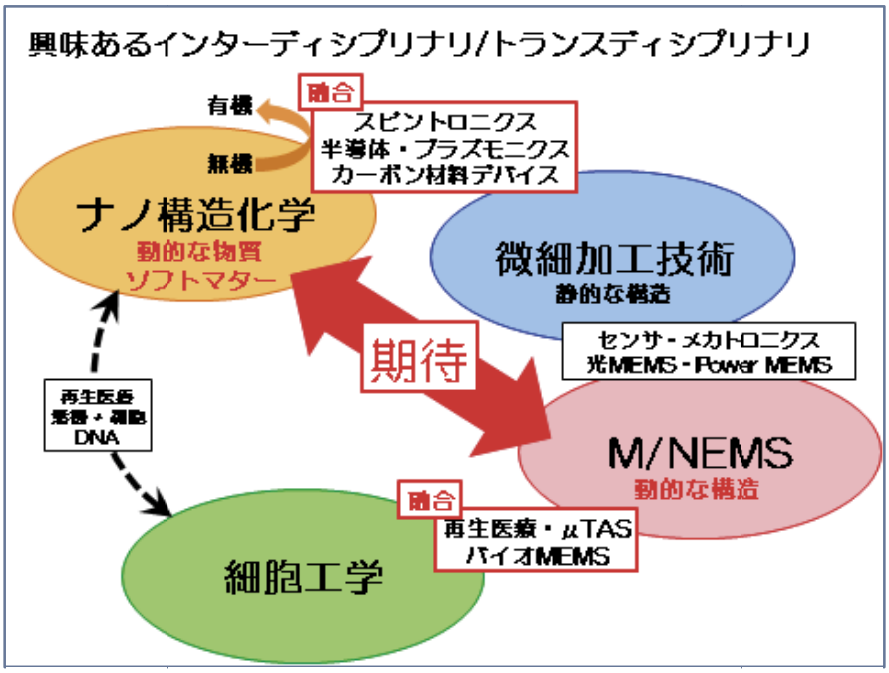


図 4

てできている。微細加工技術を静的な構造とすると、MEMS／NENS といったものは動的な構造。そうすると、ナノ構造化学の中で動的な物質として、液晶やゲルなどが昔からあるが、そういったナノマテリアルの動的な構造をいかに駆動力として使うかという結びつきを今後期待していきたい。

最後に、スピントロニクスのような分野というのは微細加工技術とナノ構造化学といったものがかなり結びついてできている。微細加工技術を静的な構造とすると、MEMS／NENS といったものは動的な構造。そうすると、ナノ構造化学の中で動的な物質として、液晶やゲルなどが昔からあるが、そういったナノマテリアルの動的な構造をいかに駆動力として使うかという結びつきを今後期待していきたい。

【質疑応答】

○質問　分子ロボティックスということなら仕事をしないといけないというのは確かにそのとおりだと思う。しかし、実際に何を使っているかを考えると、小さくなってくると軟らかくて、仕事を取り出すのが難しい。タンパクなどは完全にソフトマテリアルで、有機化合物もかなりぐにゃぐにゃしてしまうということがあって。また実際には水の粘度とかそういうところがきいてくる。

○永野　まずは、「仕事」の対象として、ここで示したようなナノ粒子材料を動かすとか、金のナノロッドが並び替えられるとか、そういったところから始めるだけでも起点が見えてくるのではないか。軟らかくてもそのくらいはできるというところから始めていって、それを積み重ねていけば 15 年後にはできるようになるのではないかと思う。後者については表面化学、界面化学とそのへんのこともどんどん入れていかないと。まず分子は動いてしまうので、それを固定化する技術から始めないといけない。

○質問　ダイニンという 100 万原子くらいのタンパク質だとすごく大きなコンピュータを使って 3 カ月くらいかかる。そういうことをやって思うのは、駆動力を何にとるかということと、集団性をどうやって出すかということが難しいところで、例えばタンパク質だったら 1 個 1 個で運べるが、それを例えば材料として物に使おうと思ったら、もっと集団的に動かすと。それは大きな力になると思うが、方向性をどうやって出すか。

○永野　集団的に並べて、一つ一つの力が同じ向きに同じふうにかかるようにというのは分子を並べる分野から言えばできると思っている。しかし、それがどのくらいの力を持って、どのくらい並べたらちゃんと物を動かせるようになるのか、アクチュエーションするようになるのかという問題はある。

○質問　では分子のシミュレーションをやる立場への要求は、どのくらいの力を測るかということを測定してください、あるいは理論で予測してくださいという。

○永野　ヤング率などは市販のシミュレーションでわかるようになっている。そういったものを見ていると、近い将来には可能なのではないかと思っている。

○佐藤　従来はブラウン運動を使ってラチェットか何かで動かしていた。それとは根本的に違うのだと。だけど、エネルギー的にはすごく小さい。ブラウン運動とそう変わらないくら

いのものでしょう。MEMS 以外にもこういう小さいものの動きを制御するというのは、別の目的にも使えないか。

○永野　そこは、分子の集合構造と協同的な振る舞いで何とかしたいところ。動的な構造と動的な分子を結びつけたいということ。生体系では ATP が必要だから合成系で行いたい。私の専門みたいなことになってしまうが、そういう意味では必要なエネルギーとしては光が適していると思う。

○川合　MEMS においてアクチュエーターというのは、応用や製造で最も制約になっている。その点で新しいアクチュエーターというのは非常に重要だというところまではよいと思う。おっしゃったようにキネシンなどで動かしたというような研究はわりとたくさんある。でもほとんどの場合は、エクスキューズのために応用をやっているようなもので、役立ったためしはほとんどない。その延長上ではない何か違うものがないと、ちょっと難しいという気はする。

3．12　北野政明（東京工業大学）

私は触媒化学の分野の専門家。例えば、窒素ガスと水素ガスをいくら混ぜて 1000℃付近まで加熱してもほとんどアンモニアは出ないが、鉄系の触媒を一緒に存在させると、500℃くらいの温度でかなり効率よくアンモニアが出る。これは 1913 年にハーバー、ボッシュによって実用化された有名なプロセスだが、アンモニアは窒素肥料の原料なので、このプロセスによって人工的に肥料を合成できるようになって現在 70 億人に達する人口を支えている。環境浄化では、自動車触媒が非常に有名で、三元触媒と言われるパラジウム、白金、ロジウムが無機酸化物の担体にくっついたもので、排気ガスに含まれる炭化水素や一酸化炭素、NOx などを酸化還元反応を同時に起こして無害化する。チタニアは光触媒で非常に有名で、バンドギャップ以上のエネルギーの光が照射されると酸化還元の反応を起こす。この技術は空気清浄機とか、建物の壁などに塗布することによって壁が汚れないといった技術に応用されている。石油化学でも触媒はナフサのクラッキング等に使われて、こういった分野でもゼオライトが非常に有名で、実用化されている。私は元々光触媒をやっていたが、バイオマス変換とか、最近ではチタン酸化合物とナノチューブ材料が固体酸触媒として機能するとか。あとは細野先生と一緒にエレクトライドと呼ばれる材料を触媒に応用してアンモニア合成するといった研究もやっている。

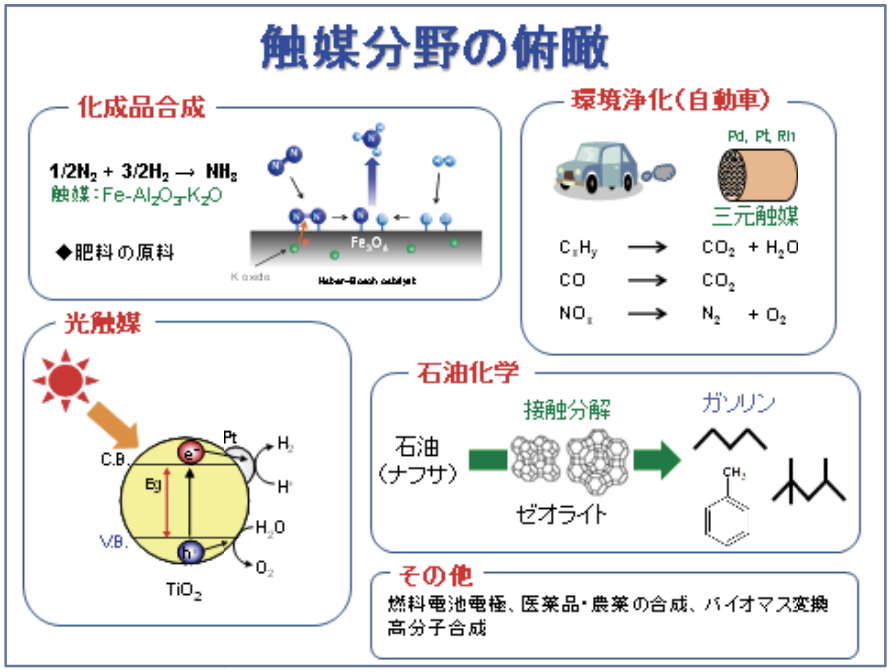


図 1

今回は物質・材料に特化して、応用面からフォーカスして、「メタンから有用化学物質を創出する新材料」というテーマ。メタンというのは、自然界においては天然ガス、シェールガス、メタンハイドレートやバイオガスなどに含まれている分子で、天然ガスとシェールガスは両方とも地中に含まれる化石資源。バイオガスは、家畜のふんや生ごみを菌で発酵することによって得られるガス。シェールガスの約 90%はメタンで、メタンの主な用途は火力発電や都市ガス、また水素製造などがあるが、燃やして消費してエネルギーを取るということが

用途のほとんどの部分である。メタンというのは、燃焼した時の CO2 排出量が石炭や石油に比べるとおよそ半分と言われていて、メタンを使うと温室効果ガスの削減につながるというううたい文句が言われるが、結局、大量に消費して燃やせば大量に CO2 が出る。なぜメタンを燃やしているのかと言うと、メタンは芳香族・炭化水素の中で最も安定な化合物で、それを有用なものに化学変換することは非常に高い難度の反応で、十分な開発が行われていない。燃やして使うほうが便利だからそうしているというのが現状。これを燃やして使うのではなく、うまく変換して有用な化学物質にする、そういう新材料を見つけることが今後重要ではないかと考える。

例えば有名な反応としてはメタンの水蒸気改質で一酸化炭素や水素をつくる。これは工業的な水素の製造方法としてよく知られているが、水素を得るだけではなく、合成ガスと言って一酸化炭素と水素から例えば鉄やコバルト系の触媒を使うと人工的な合成ガソリンがつくれる。また、銅や亜鉛系の触媒を使うと、メタノールを合成できる。そういった方法はあるが、この反応は吸熱反応で、800℃付近などのかなり高温でエネルギーが非常にかかるプロセスをとらないとこういうことができない。また、多段プロセスですのでロスもけっこう大きいという問題点がある。

具体的にメタンを直接有用なものにしようという研究例はある。例えばメタンと酸素を直接反応させてメタノールを合成する。メタノールは燃料や樹脂の原料となる有用な化学物質で、この反応で問題になるのはメタンよりメタノールのほうが酸化されやすいので、ここで止まらずに CO2 まで酸化されてしまう。これを実現するのは夢の反応と言われている。例えば、白金系の錯体の触媒を使って硫酸を酸化剤にするとメタノールを少量合成できたり、金やパラジウムの合金の触媒を使って過酸化水素を酸化剤に使うとメタノールが合成できる。こういった研究は比較的あるが、直接酸素を使ってメタノールを取るというのは非常に難しい。ほかには、例えばメタンの酸化的脱水素によってエチレンやベンゼンをつくる反応がある。エチレンやベンゼンは基本的に石油ナフサからつくることが多いが、シェールガスやシェールオイルが開発されたことによって、ナフサからの石油化学は日本としては弱っている部分もあるので、メタンからこういったプロセスをつくるということも大事ではないか。

このプロセスは、例えば NaMnO4/MgO 触媒を使うとメタンの転化率は 20%で、C2 選択率は 80%ということで、選択率はよいが転化率はあまりよくない。モリブデン系の触媒を使うと、転化率は 10%で選択率は 60%ということで、なかなか高収率には得られない。反応が理想的に進むと副生成物は水だけなので非常によいが、副反応として CO2 が出るような反応がどうしても起こってしまう。平衡論的な問題もある。またもう一つの問題は、こういったものを原料として用いると触媒の上に炭素が析出してしまって、性能が劣化してしまって長期にわたっては使えないということもある。

もう一つのメタンの改質は、メタンと CO2 から合成ガスをとる。これもけっこう注目されている反応で、両方とも温室効果ガスから有用な合成ガスをつくろうという反応。こういう反応において非常に優秀な成績を示す触媒というのは貴金属、ルデニウム、ロジウムといったものが多いが、できれば元素戦略的な観点も含めてニッケルとか、そういうあまり希少な金属ではないものでいくほうが望ましい。平衡論的には、これも高温でやるほうが収率が高いが、エネルギー的には低温でより高選択的に進行するほうが望ましい。この反応について

も、メタンの分解による炭素の生成、CO の不均化による炭素の生成という炭素ができるような反応が起こりやすいので、どうしても触媒の劣化が起きてしまう。

こういう課題がある中で大事だと思うのは、例えばアンモニア合成であればルテニウム触媒は非常に性能がよいと言われているが、そこに例えばアルカリ土類の酸化物を添加するとルテニウムの触媒作用を向上させるという研究がある。そういったよく知られている貴金属の触媒、わかっている物質の性能を向上させるための複合化ではなく、まったく反応しないような物質同士を組み合わせることで劇的な性能を示すような、例えば金属間化合物であったり層状酸化物、ナノ空間を利用するとか、新たなものが必要ではないかと思う。例えばアセチレンの水素化反応においてパラジウム触媒が非常に優秀な成績を示すが、アルミ・鉄の金属間化合物がパラジウムよりも非常に優れた性能を示すということが最近『Nature Materials』などで報告されている。そういった材料設計が重要ではないかと思う。触媒反応は平衡の制約を受けやすいので、どうしてもそれを回避するためには平衡をずらすようなプロセスを同時に構築することが重要となる。

今後期待されるインターディシプリナリ、トランスディシプリナリの方法について、触媒化学というのは触媒材料合成、表面解析、速度論的解析が得意だが、基本的な欠点としては経験的なアプローチが多くて、こういう設計すればこういうふうになるという指針があるものもあるが、じゅうたん爆撃的な方法で見出すことが多いので、やはり触媒化学だけでこういう難しい反応にアプローチするというのでは限界がある。例えば材料、プロセス、計算をよく知っている方とうまく融合することによって、経験則だけではなく本当に新しい触媒材料の設計が可能になるのではないか。

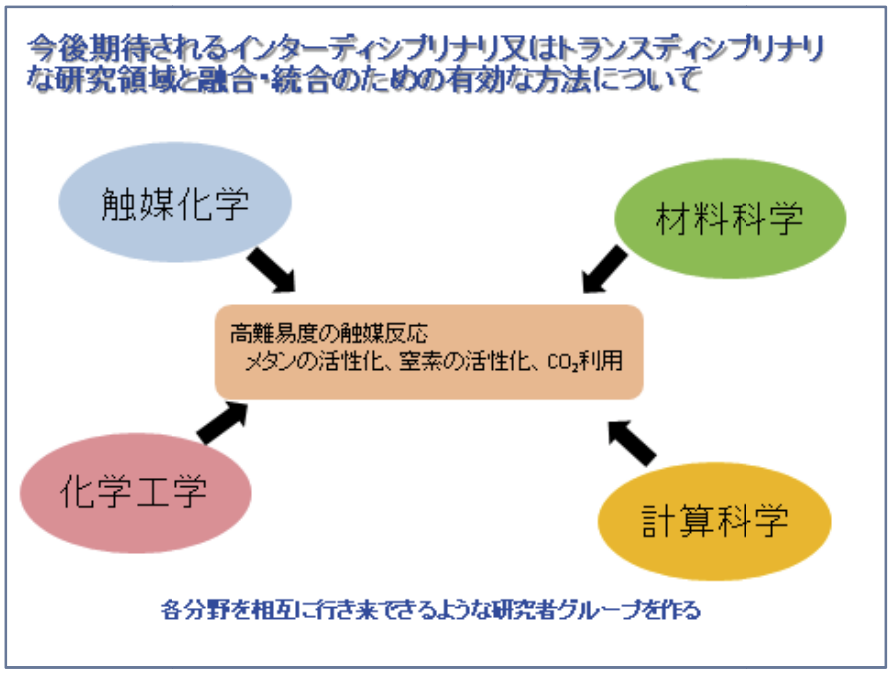


図 2

こういったことを実現するには、共同研究は大事だが、共同研究ではそれぞれの分野の中で都合のよいようにやりとりすることが多いので、できればこういった真ん中の領域を自由にいろいろなところを行き来できるような若手の研究者による組織があったほうがよい。例

えば触媒の分野だけではなく、計算とか材料とかいろいろなところにつながれるような、そういった人がいないとなかなか本当の融合というのはできないのではないかと感じている。

【質疑応答】
○佐藤　触媒というのは永遠の謎があると言われているが、最近になってモデル触媒などによって電子論的な扱いもされるようになってきているから、むしろ材料科学だけでなく物理の人も入ってもらうとよいのではないかと思う。

○質問　化学のプラントを持っている立場からすると、メタノールとかベンゼンとか、C1 から C9 までのケミストリーがあるが、その手のトランスファーだけではほとんど魅力がない。例えばハーバーボッシュのような極めてコストの安いプロセスが出れば別だが、そうは思えない。もう少し特殊な合成物、例えばブダジオールとか。ターゲット材料を価格の通るような、あるいはケミストリーとして少し難しい、合成過程が非常に長いものとか、それをメタンから出発してつくっていけるとおもしろい。
○北野　メタンの活性化というところは専門分野ではないので、知っている範囲で調べたので、不十分だったとは思うが、現状としてメタンの用途として主に燃やしているということを考えると、そういうところにチャレンジすることによって、うまく活性化し、それを有用なものにもっていけるような技術を生みだす。研究分野としてもまだ全然不十分と感じたので、そこにもっと積極的にアプローチする研究者がもっと増えてもよいのではないかと。

○佐藤　シェールガスを石油化学のために使おうという形でプロセス屋さんがアメリカにずいぶん動いている。そのへんは何を狙っているのか。
○質問　基本的には、メタンであろうがナフサであろうがカーボン源としてあらゆるものがつくられていく。ただ、メタンはカーボンが 1 個だから、それから C3 とか C4 にしていくと当然ポテンシャルは上がっていくので化学的には無理がある。だから、どちらかというと分解する方法でどうするか。あるいは、触媒化学の中で新しい物質を創製するかという方向へ行かないと、結局は安い燃料として使うのが一番簡単。当分はそういう世界から出られないと思う。

○川合　メタンの活性化というのは僕自身のテーマにしたこともあるがなかなか本当の意味の選択性、90%以上が難しい。すごく大事なテーマではあるが、このまま放っておいて、誰かがよいことを考えてくれるのを期待するか、せっかくよい機会なので何か突破できるような、こういうものに適したフォーメーションというのは何か現場として考えられるのかどうか。
○北野　確かに古くから検討されているテーマだが、どちらかというと触媒分野の中だけの検討が多いので、計算科学とか、違う分野を学ぶ若い人材を育成しないと、なかなかこういったアプローチは実現できないのではないか。個人的には、金属間化合物であったり、従来の「こういう反応だったらこういう貴金属が有効だ」ということとは全然違う材料からそういったものをつくりだすということに興味がある。

3．13　山本浩史（分子科学研究所）

私の分野は、物理と化学の両方にまたがっている状態で、そこでデバイスを目指していきたいと思っている。今まで応用のほうからいろいろな情報のインプットをもらってやってきたが、これからは生物などの情報も入れてやっていきたいと思っている。代表的なテーマとしては、有機モットトランジスタとか有機の超伝導トランジスタ、それから超分子ナノワイヤをやっていて、基本的には測るのではなく、作るという立場。コミュニティとしては有機エレクトロニクス、あるいは分子エレクトロニクス、それから強相関電子を使ったデバイスをやっている。学会としては物理学会と分子科学会が多く、応用物理学会と化学会に時々行く。

まず、分子を使ったナノテクノロジーは、STM、AFM などがどんどんできてきて、分子を見るとか、ちょっと動かすとか、伝導度を測るといったことはできるようになってきた。一方で、こういったものを 3 次元的に並べたり、配線したりということはまだできない。特に動くようなものを捉えるとか、3 次元的に構造を見たり制御したりといったことはなかなか難しい。こういったことを受けて、今回は 2 つの提案を持ってきた。

最初の「高度化クリスタル・エンジニアリング」というのは、有機結晶の中で分子の持つ構造をデザインすることによって伝導体とか誘電体、磁性体、熱電材料といったものを開発していくことが一つ。それから、分子メモリを配線していくような結晶をつくることができないかと考えている。実際に今年は世界結晶年で、有機結晶のデザインや予測といったものをいろいろディスカッションする機会があると思う。有機化学や計算科学がすごく大事ですが、結晶というのは最初の核をつくるところが非常に重要なので、微細加工技術と連携できるとおもしろい。

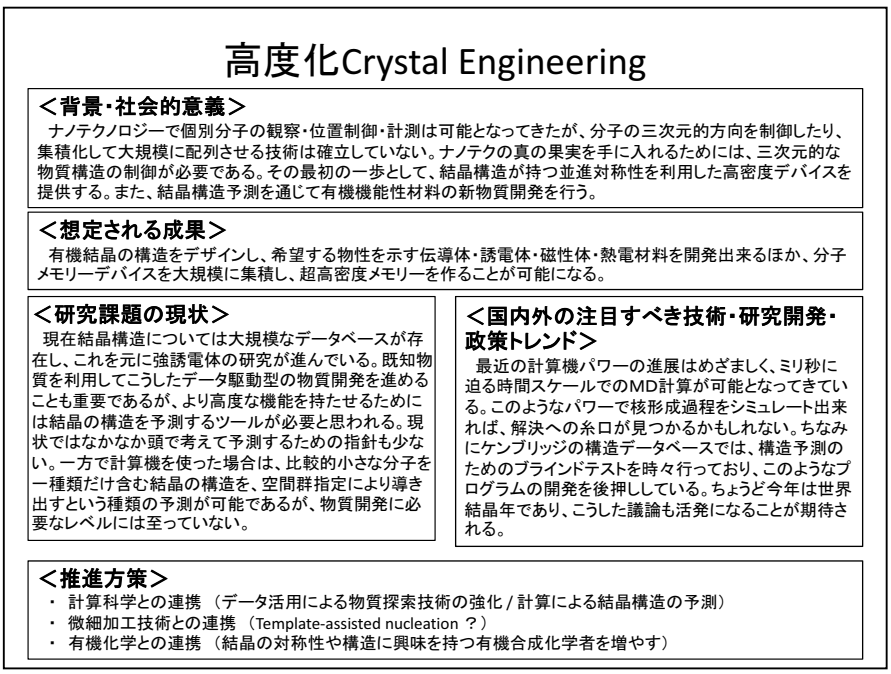


図 1

これは産総研の堀内さんの例で、クロコニック・アシッドは分子自体は 180 年前に合成されたもので、結晶構造は 10 年前に解かれたが、その結晶構造を解いた人も、その結晶がすばらしい性能を持っているということは知らずにデータベースにただ登録したというもの。堀内さんはこういう対称性を持った結晶であれば強誘電が出るはずだと考えて、ケンブリッジのデータベースから結晶構造をサーチして、網に引っかかってきた分子を結晶にして測ったら、チタン酸バリウムにかなり近い強誘電体が見つかったという例。こういったことをもっと続けていくと、既知のものであっても見逃しているものをいっぱい拾ってこられる可能性がある。ただ、こういったことでは既知の物質ばかりということになるので、実際に結晶構造を計算で求めることが非常に重要である。これは分子研の大峯先生が水の結晶ができる過程を実際にシミュレーションした時のデータで、ランダムなところからだんだん核ができてきて、最終的に水の結晶になる。水の場合は、プロトンの位置が 2 通りあるので結晶の過程の計算は難しいが、実際にできる。有機物でもこういったことをどんどん進めていくと、いろいろな物質を合成する前に、結晶がどういう構造を持つかということが言えるようになるのではないかと思う。

最終的に目指すものの例として、黄色の部分が伝導体で、緑の部分が絶縁体だが、結晶の中に x 方向と y 方向にナノワイヤを並べて、その交点のところに分子デバイスを入れていく結晶を考えている。分子デバイスというのは 1970 年くらいから提案されており、実際にメモリのような動作をするようなものが単分子計測によって見つかっている。ただ、配線する方法がなくて、カーボンナノチューブで並べるという人もいるが、カーボンナノチューブを並べる方法論がない。私は、結晶の 3 次元の並進対称性を使うことができるのではないかと思っている。

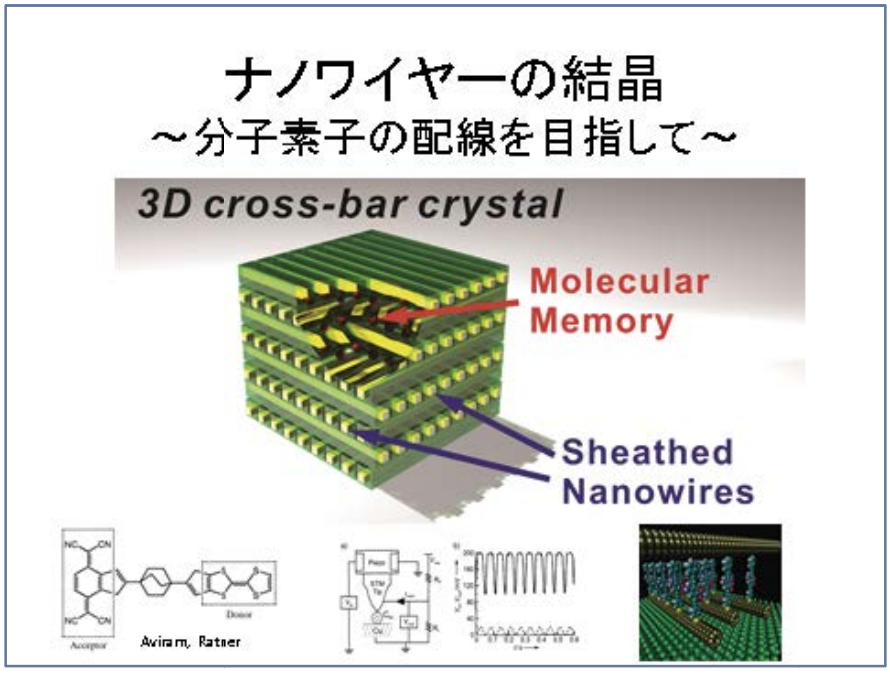


図 2

ナノワイヤというのは、多くの場合は結晶にならなくて、カーボンナノチューブなどもこの中に入るが、一部、結晶になるものがあり、しかも絶縁体がついているものもある。これ

は、ロッドをパッキングする時にどうなるかということで結晶学者が分類したもの。一番簡単なのは平行になっている場合で、時々直交する場合もあるということが知られている。

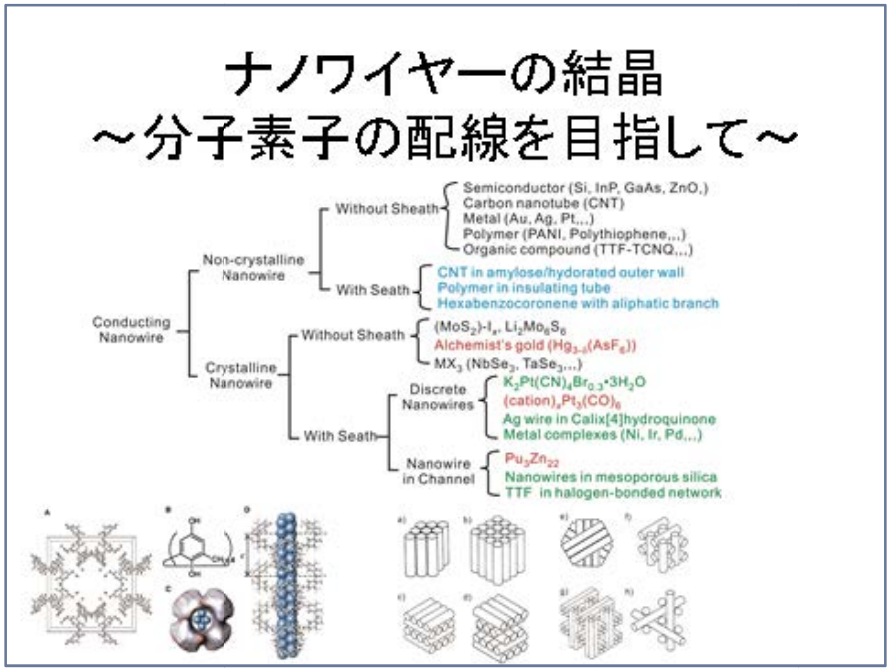


図 3

例えば、Alchemist's gold という非常に古い物質で、水銀が直交した形になっている。ただ、水銀同士の距離が近いのでショートしている。それから、白金の 3 量体に二酸化炭素を付けていくとワイヤになって電気が流れるが、これを結晶化すると直交ワイヤの結晶ができることが知られている。ただ、これは偶然的な要素が強過ぎて、改良していくことができない。我々はもう少し複雑な系として、分子性の伝導体を分子の絶縁体で囲ってネットワーク構造をつくるという研究をしている。ハロゲン相互作用が分子間をつなぐような形になっていて、これを混ぜるとチャネル構造をつくる。この絶縁体のチャネルの中に伝導体のワイヤを入れることで結晶化させることができる。そうすると、カーボンナノチューブのようにぐにゃぐにゃしていなくて、真っ直ぐ伸びたものが整列して出てくる。例えば絶縁性がこの場合は伝導度の異方性の 2、000 倍くらいしかなくて横方向にも少し流れてしまうが、この間を少し空けて 1nm くらいにすると、伝導度の異方性が 1、000 万倍くらいになる。1 本の分子だけではところどころで格子欠陥があって切れてしまうので、それを 2 本入れる、4 本入れるというふうにどんどん増やしていく必要がある。今のところ、直交の系はうちではできていないが、チャネル構造だけはつくることができて、六角形のチャネルをこっち方向と直交方向という感じでつくることができる。将来的にはこういったものにナノワイヤを入れていくことができると、実際に直交の分子配線ができるのではないかと考えている。手作りでつくるのは大変で、方法論開発が必要である。このような機能性の結晶によって、1 個の結晶で 1 ペタバイトくらいのメモリ容量が出る。そのほかに、こういった格子欠陥を含んだデバイスの使い方も開発する必要がある。それから、こういう結晶は白金電極の上に生えてくるので、白金電極を微細加工でパターンしておいて核成長を促すと、最終的にできた時にパターンに接続されているようなデバイスができるのではないかと考える。実際にバイオ系で

は、貝の形をつくるような時に生物というのはバイオミネラリゼーションということをやっていて、そういったものを微細加工と組み合わせていくというのもおもしろいのではないか。

もう一つは「バイオインスパイアード分子システム」。これは似たような分野でファンディングがずいぶんなされており、バイオミメティックということでヤモリのテープとかいろいろなものがあるが、最近は生体分子系の科学に進展があって、細かい構造や動作原理がわかってきたので、そういったものを取り込んだメゾスケールの分子デバイスを考えていくとおもしろいのではないかと思っている。歴史的には触媒とか色素増感電子などがあるが、最近はPSⅡのタンパク質の構造が解かれたり、ミオシンとキネシンのダイナミックスなどがわかってきたので、こういうものを取り込んでいく。最近のおもしろい例の一つは、安達先生のところの蛍光物質で、トリプレットに落ちたものを実際に熱揺らぎでシングレットに戻して発光効率を上げることが知られている。光合成の系でも、一回下のほうのレベルに落ちたものを熱エネルギーで上げて、それを光合成に使うというようなことをしているが、こういったものにも何か共通している部分があるかなという感じがしている。

揺らぎの系では、特にエントロピーとかエネルギーというのは短時間ではあまり気にしなくてよくて、普通はエントロピーは正に増えていくが、部分的には負になっていても構わないという系なので、たぶん今までの熱力学などとは違う学問を考えていかないと、デバイスをつくる時にもうまくできないのではないか。メゾ系も考えていく人が同時に必要である。

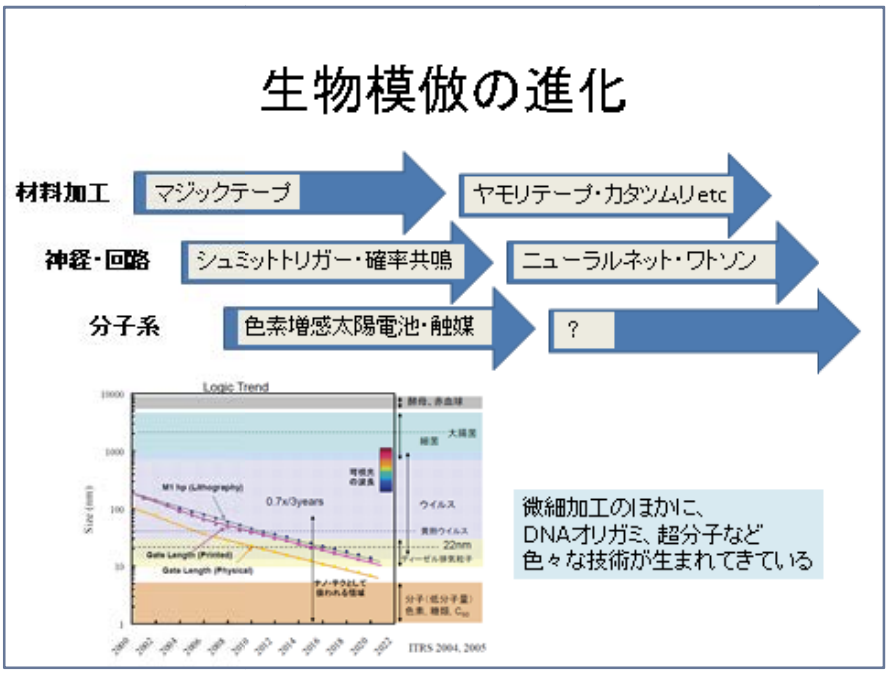


図 4

生物のほうでは、材料系ではマジックテープから始まって、最近はヤモリの手とかカタツムリの壁とかいろいろあるが、そのほかに神経系というのがあって、シュミットトリガーなどが IBM のワトソンなどのデバイスになってきている。同時に分子系でも色素増感電池、あるいは触媒から次のものがそろそろ始まるのではないか。微細加工のほかに DNA オリガミとか超分子などをインテグレートしていって新しいものがつくれるのではないかと思っている。

ちなみに有機エレクトロニクスの反省としては、日本人は最初から電気が流れるという話はしていたが、電気を流すほうばかりに行って、デバイスのほうはこの分野の人たちにとってはお留守だった。そのへんで欧米にやられたという感じがしている。この分野で一つおもしろいのは、1 人の研究者がいろいろな分野にまたがって活躍しているということと、同じ分子がいろいろなところに顔を出してくる。例えばルブレンというのは最初は光るための分子だったが、今は FET に使われている。それから、地道に性能を伸ばす努力がこの分野では必要で、そこを飛ばしてしまうと、最初に見つけたのにいつの間にか抜かれていたみたいなことがあり得る。昔は企業の中央研が非常に活躍していて、今はどうするのかということが私としては懸念しているところで、JST がやってくれたらよいと思っている。

【質疑応答】
○佐藤　1 つ目のほうは意欲的だが、本当にそういう構造をつくれるか。
○山本　恐らく微細加工の技術としては、8nm くらいまでは行くのではないかと思っている。結晶の格子として 80Å というのはそれほど珍しい大きさではない。ですから、結晶のパターンと微細加工のパターンが 10 年以内には一致してくると思うので、そんなに無理はない。

○質問　伝導性のポリマー部分の PT がけっこう小さいと思うが、そこを他の電極などとどう結んでいくかとか、単分子素子と被覆された導電性ポリマーをどのようにきっちり接合するのか。
○山本　接合というか、そこはトンネル電流などでも構わないと思う。この系では、なぜこれが直交しているかというと、カウンターイオンがテトラエチレンアンモニウムという分子で、この中に例えばレドックスアクティブな金属錯体などを入れておいて、そこに対して電子を入れたり抜いたりするというようなことで接続することはできる。そんなに離れていなければ十分に流れる。

○質問　結晶構造を予測するということだが、その一点を取ってもものすごく難しいと思うが、それについて何かアイデアはあるか。
○山本　結晶構造を予測するという意味では二つの方向性があり、一つは、ユニットセルを決めて、その中に分子を入れてどこに最適化するか計算する手法と、あとは大規模に実際の分子の系をシミュレーションして MD でやって核をつくっていくという二つ。その研究をやっている人はすごく少ない。結果が出にくいからだと思う。今のところは、水をやったりして、それで終わってしまう状況。原理的にはできるのだから、それは他のものにも拡張していけばできるはず。それは「京」コンピュータの次の次くらいかもしれないが、不可能ではないと思う。
○佐藤　それはむしろメゾスコピックな部分を考えなければいけない。
○山本　そう。ナノのもう少し上、そこが一番わからないところが多いので、そこはやらなければいけない分野だと思う。ちょっと時間スケールが長いかもしれない。
○佐藤　これまでの結晶工学、クリスタル・エンジニアリングというのは無機結晶の、しかも非常に均一な系のものを考えていた。

○山本　有機系でデシラージュ(G.R. Desiraju)という人がいるが、その人が中心人物の一人として進めてきた新しい分野が Crystal Engineering。いわゆる結晶工学という結晶の形を変えていくという学問とは違う領域で、有機のほうで分子相互作用をうまく使ってできてくる結晶構造を意図的に変えていこうと試みている。だから有機合成の結晶版。現在のところ、結晶構造のデザインはあくまで手作業だが、一応、分野としては成り立っている。

○質問　恐らく原理的にはクロスバーでメモリはつくれると思うが、そこまで多重に積層しなくても単層でも現実にメモリが起こるということを実証しないと、なかなか産業界から見て、これに金を掛けてみようとは思えない。
○山本　単分子でメモリになるというのは、実際に電極を付けるとヒステリシスループが出るということは報告されている。ただ、2 次元でやると、長い周期ができないので、3 次元でやらなければいけないのではないかと思っている。むしろ、実際に使う上で障害になるのは、例えばワイヤの抵抗値などは気になる。抵抗が多少高くても読み書きできるような技術があるのかないのか、そういうところは大事だと思う。

○質問　東大で揺らぎと非平衡に関することをやっていて、例えば量子論的な揺らぎでやるとか、熱力学を超えたようなところを取扱っているが、問題は、それをどう物質科学に転換するか。例えば、合成のほうに転換するかというところがまだオープンクエスチョンだと思う。
○山本　合成のところまで展開するのはなかなか難しいが、歴史的に熱力学では蒸気機関の効率を上げるために圧力を上げたほうがよいとか、温度を下げたほうがよいとかいう議論をした。そういう意味で物理的な効率を上げるための方法論というのは、佐野先生の領域などから出てくる可能性があって、あとは分子化学者が自分の中で翻訳するしかないと思う。さっきのヤモリの手の話ではないが、意外とダイレクトにつながることもあるので、発想が独創的なものがあれば十分につながってくる可能性はある。

3．14　葛谷明紀（関西大学）

メインの仕事は DNA オリガミで、すごく長い DNA をうまくたたむといろいろな構造ができる。例えば 2 次元の構造を使ってタンパクを 1 分子ずつ並べたり、3 次元構造をつくって 40nm 角の箱をつくったりできる。最近は形の変わるオリガミをつくろうということで、タンパクを 1 分子だけつまんで閉じているオリガミを示しているが、タンパクだけではなく小さいところではプロトンからナトリウムイオン、大きいほうでは分子量 150kD の抗体 1 分子を、1 つの分子だけで検出できるというような研究をしている。

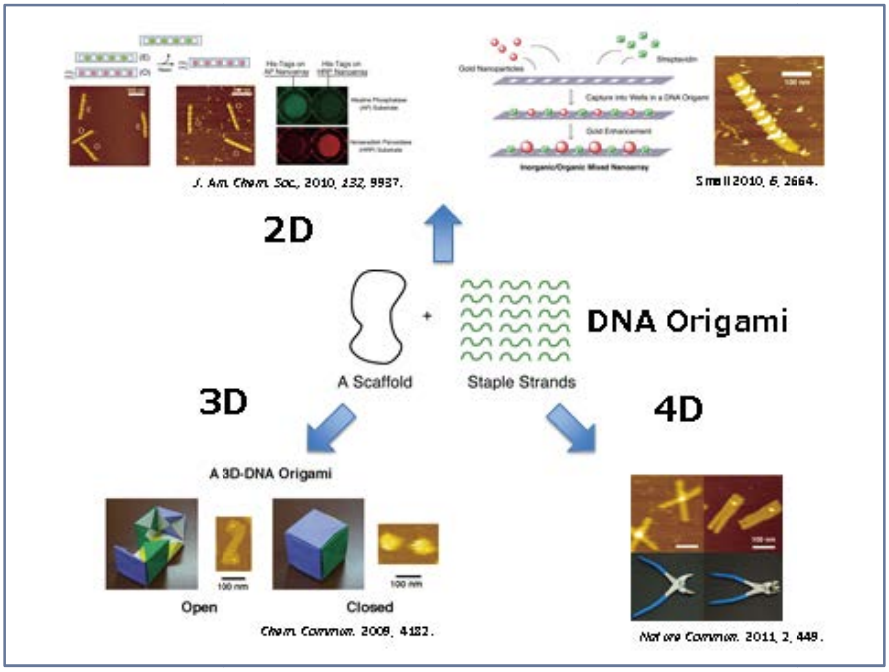


図 1

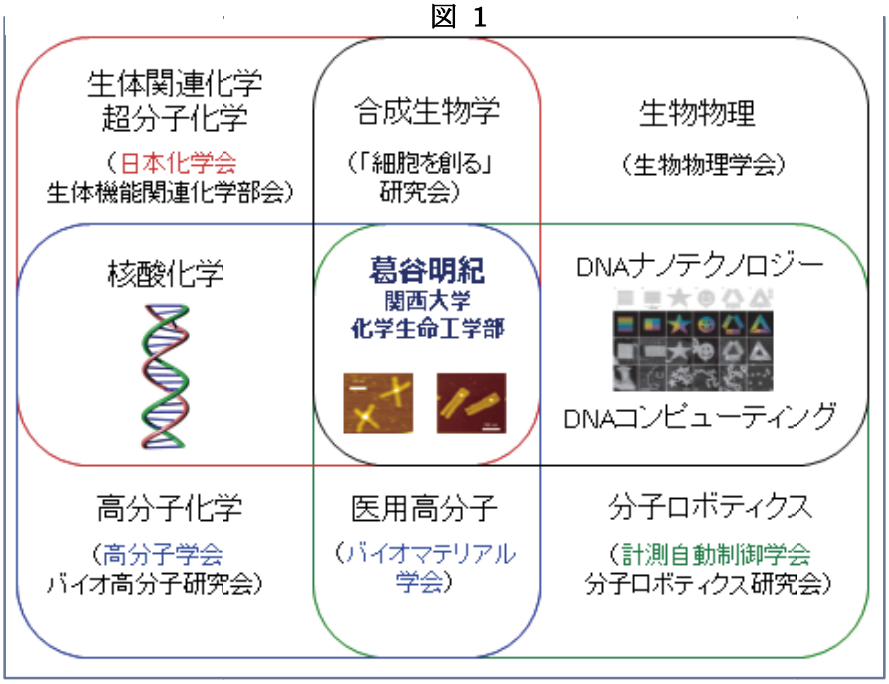


図 2

私のメインのテーマは DNA ナノテクノロジーと核酸化学の真ん中あたりという感じになる。DNA ナノテクノロジー業界は、DNA コンピューティングなどから名前が売れはじめたということがあって、どちらかと言えば数学とか分子計算などの研究者が多く、DNA は情報を持っている分子として扱うけれども化学物質としては使っていない。日本化学会の生体機能関連化学部会で、核酸とタンパクと糖を使っている先生方が多いところで勉強していて、ほかに高分子学会や、大学の周りにはイオン高分子をやっている先生方がいるので、そこにもちょっと首を突っ込んでいる。生体機能関連の部会でやっているのは、これまでは核酸とタンパクと糖は別々にそれぞれ自分たちのターゲットを研究していたが、最近になって、行き詰まりが見えてきたようなところがあって、次はいかにタンパクと核酸を組み合わせるかとか、実際にインターディシプリナリな感じになってきている。そこで立ち上がってきているのが合成生物学と分子ロボティクスになる。前者がトップダウンで、後者がボトムアップの考え方に基づいているのではないかと考えている。合成生物学というのはどちらかと言えば生物をそのままあるものとして考えて、生物の中身はブラックボックスでよいけれど、それを改造して好きなように使おうと。逆に分子ロボティクスはそういうブラックボックスはなくて、下から必要な要素だけを組立てて有用な、結局は細胞もどきのようなものをつくろうとやっている。「分子ロボティクス」の計画班のところでやっている内容は、分子モーターを DNA を情報分子に使って制御して動くアメーバ型のものをつくろうとしている。

既に合成生物学と分子ロボティクスという 2 つの方向があるので、今まで誰もやっていない隙間的なところということで、基本的にはセントラルドグマの生物の基本現象のところを、鏡像の一番小さなシステムをつくるというのが大きなテーマになるのではないか。有機分子は右手の形のものと左手の形のものの両方があって、地球上の生物は DNA もアミノ酸も基本的には片側の鏡像しか使っていないが、その完全にひっくり返ったものをつくってしまおうという提案。核酸の Spiegelmer というものをつくっている会社があるが、これはアプタマーというターゲットとくっつく核酸の配列が開発されていて、これを医薬に役立てようというもの。核酸そのものはすごく不安定なので、体内に入れるとすぐに分解されてしまう。本来ターゲットとなるはずのものの鏡像の分子をターゲットとしてアプタマーを取ってくる。RNA の鏡像体を使うと、そのターゲットは鏡像になるので、本来取りたかったものを鏡像の核酸でアプタマーとして釣ってくることができれば、体内とは別の系になっているので、それは分解しない。核酸というのはいろいろな系で合成が安くできたり、長いものをつくったりすることができるようになっているので、その技術を使ってそのまま生体適合性のあるものをつくれる。

核酸の場合には、ひっくり返っているものは DNA 合成系でいけるが、タンパクでも同じことをやったらできるのではないかということで、そこがテーマになる。今の技術では、タンパクの化学合成は、論文で出ているのは 150 残基くらいまではつくっている。例えば完全にひっくり返っているタンパクを力任せに化学合成して、それで新しい世界をつくるのが最初に手をつけるところになる。基本的に生物の情報の流れというのは DNA から RNA、タンパクをつくってしまえば後は自己複製できるので、最初の突破口になる鏡像タンパクができてくると、運がよければこの世界を全部日本がゲットできる。合成生物学の分野でも日本の先生方はかなり強くて、特に無細胞抽出系、タンパクの合成系を細胞から持ってきて、生物を使わないでタンパクを合成するという系をつくっている先生方がいて、うまく鏡像型のア

ミノ酸を連結してくれるような人工的な系を探すというのも、リソースとしては日本にかなりそろっている。生物学的な方面と有機化学的な方面の両方から攻めていくという系ができる。かなり夢物語的な話なので、10 年 20 年どころではなくてもしかするとうまくいかない可能性もある。

もう一つ、もう少し現実的なところで提案すると、日本の高分子化学が強いところでヒドロゲルがある。ヒドロゲルというのはゼラチンや寒天など、架橋されて水を含んで膨潤しているもの。中身が不均一でよくわからないのであまり使えなかったが、この 10 年くらい、機能性を持ついろいろなゲルが報告されてきている。

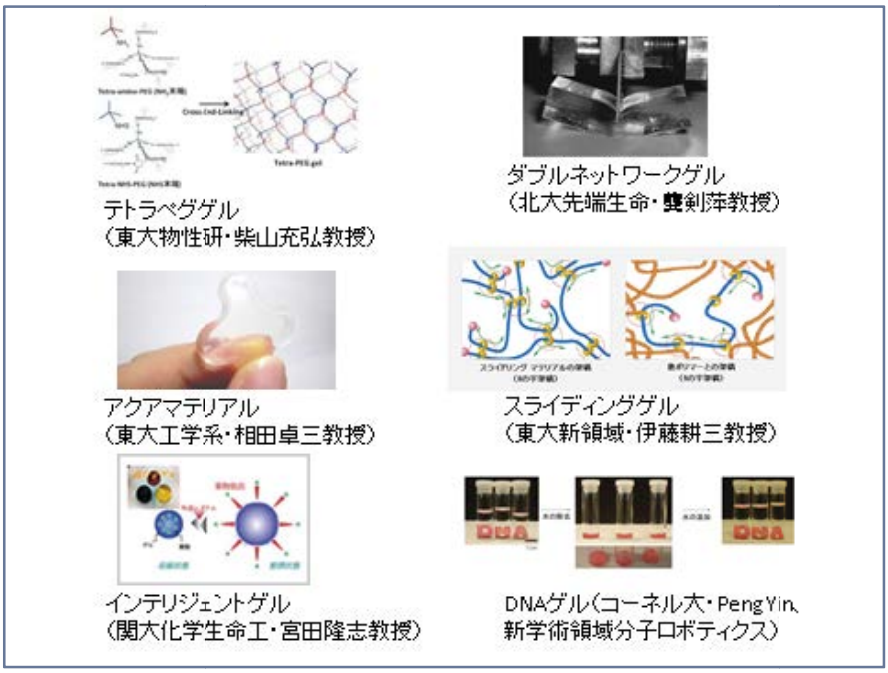


図 3

このテトラペグゲルとダブルネットワークゲルというのは非常に強いゲルで、均一な網目構造を持っているものをつくっていたり、2 種類のものを混ぜ合わせて絡み合わせたりしている。あとは無機材料をベースにしたゲルで、トポロジカルなスライドするような機械的な動きを入れるとすごく伸びるものができている。本来であればぐちゃぐちゃしていてわけがわからなかったゲルという素材を、分子の構造から設計して機能をつくっていくと、すごく機能があるようなものができるのではないか。物性と架橋度、力学特性などがわかるようなヒドロゲルを統一的に理解するための一つの領域をつくる。

応用としては、3 次元の培養基材に使って iPS 細胞の培養に使うとか、体内埋め込み型材料。生物は 70%が水でできているということでヒドロゲルとも親和性がよいということで、例えばドラッグデリバリーシステムなどに使える。分子ロボティックスの話も、出口でいま考えられているのは DNA でゲル状のものを制御して動かしてやろうということになっているので、そこにも寄与すると思う。

インターディシプリナリな研究領域というのは、分子ロボティクスという領域がドラスティックにインターディシプリナリなテーマで、分子技術と制御理論や数学、プログラミン

グなどが組んでいる。この新学術の領域を立ち上げたメンバーは DNA ナノテクノロジーの業界の人たちで、制御の部分は全部核酸でやることがありきになっているが、分子を制御するというだけのベーシックな考えに基づくところが、いま私がいるコミュニティ以外の人にも広く提供できるような概念になるのではないかと考えていて、もう少し国策として広い目で分子をプログラミングするという路線をつくってくれると、もっと幅広い人たちが参画できるような流れになるのではないかということで提案した。

もう一つは、DNA オリガミをつくって、単分子で動きますと言っても実際には混ざっているものから取ってきている。実際に私が使っていた系では 1μ 角の中に 0.4 分子というような濃度でやっているが、そういうチャンバーで、それをさらに分子の数だけアレイ化してやってみると、1 分子で動いているようなデバイスができたら嬉しい。東大の野地先生の分子モーターが回っているものはかなり近いものだと思うが、それを観察するためではなく、ディテクターなどに使えないかなと考えている。

【質疑応答】

○佐藤　自在に鏡像ができるということはすごい夢ではないかと思うが、手がかりになる技術はあるか。

○葛谷　パーツはあって、化学合成をやればできるが、一番長いものがちゃんとつなげていけるかどうかというところが技術開発になってくる。生物学的なほうからは、本当に答えがあるのかないのかよくわからないところがあり、そこは未踏のところ。

○佐藤　アプタマーは抗体の別の形だと思うが、アプタマーをドラッグデリバリーなどに使っていく時に L 体と D 体を使い分けるというのはすごく重要な鍵になると思うが、そのへんの見通しはどうか。

○葛谷　もうそこは会社が実用化してしまっているので、次はタンパクかなという気がする。

○佐藤　日本ではそのへんの研究はあまりないのか。

○葛谷　先ほどの無細胞抽出系はベンチャーを展開していて、最近上場したペプチドリームで、その手前のところではいくつかある。

○質問　どんなゲルが生まれればインパクトがあるのか。

○葛谷　もの自体はたくさんつくられているので、どういう構造をしているとどういう力学特性が出るかとか、そういう理論的な体系が足りない。統一理論みたいなものがあれば、逆にそちらから設計のほうにもってきてつくりやすくなる。最近の話で、例えば分化誘導の時に基板の硬さなどが影響しているのではないかという話がいくつか出ているが、そういう時に理論に基づいて最適な硬さや弾性率がちゃんと調節できるような体系ができればよいと思う。

○佐藤　DNA ゲルというのは超弾性みたいなものがあるが、そういうものは第一原理から説明されているか。

○葛谷　まだそこまで行っていないのではないか。いろいろなモノマーの構造や強度などを変えて経験的に DNA ゲルは硬いものと軟らかいものがうまく組み合わさっているのがよいというような説明が、ようやく始まったところ。

○佐藤　こういうものは、次の世代の新しい材料になっていくだろうと思うし、潤滑のほうでも大変に注目されているが、MEMS の立場からするとこういうものはどうか。
○質問　MEMS もゲルみたいな材料が重要になってくると思う。メカニズムの解明の部分と、使っていくということが同時に必要。
○佐藤　ここのコミュニティというのは、物理屋さんなどとはあまり接点がないか。
○質問　こういう感じのゲルを使ってみるというのは、研究としてはある。DNA オリガミというのはおもしろいとは思うが、その先というのはどういうところを目指しているのか。
○葛谷　今のところは構造をつくるところで流れてきて、もうそろそろつくるものがなくなってきて、次にはどういう機能を持たせるかというところになってきているのだと思う。足場材料にするか、あるいはオリガミでロボットをつくると言っている人たちもいる。一番のネックになっているのは、DNA 自体はかなり軟らかい素材なので、あまり力学的に強度がないということ。もう一つは、水の中でしか今のところは機能できていないというところがあって、オリガミ自体もだいぶ袋小路に入りつつある。
○佐藤　さっきの 4 次元というのは、そういう新しい機能ということ。
○葛谷　はい。あとは、機能性のあるタンパクをくっつけて、形が変わると活性制御とか。そのくらいしかネタはないのではないかと思うが、オリガミでチャネルをつくって、細胞というかリボソーム、ナノコアに差したりといったことをやっている人たちがいるので、何かと組み合わせていくということ。

3．15　コメンテータからのコメント

○北岡康夫（経済産業省）
「現象」というキーワード。僕は非常によいと思っていて、最終的にそれをテーマにするかどうかは別にしても、例えばイオン伝導と言うといろいろなところで使われているので、例えばセラミックス屋さんやいろいろな人たちが参画できる。そういった意味で、そういうキーワードで、それに何か考えられる人たちが集まって議論して、そういうものをバッファに入れて次のステップを議論していくということは非常によいと思った。
シェールガスというキーワードが出たが、シェールガスは経済政策や産業政策に絡んできて、今日のご提案は、いま自分の持っているコア技術からどう考えるかという言い方だが、一歩下がってみるとシェールガスによって社会がどう変わるかということを見た上で、その中で自分がどう貢献できるかという見方も重要かなと。実際に今年度、JST や経済産業省でもシェールガスについてどう政策を立てていくかということはすごく議論になっていると思うので、そういう動向を見ながらテーマを、自分がどう貢献できるかという見方をしていくというのも重要かなと思う。
金属のところで出た『ネイチャー』『サイエンス』に書ける分野ではないという話については、経済産業省の中でも相当に議論になっている。逆に経済産業省からすると、こういう分野をどういうふうに支援していくかということで、今年度から始まる革新的構造材料のプロジェクトも総額で 40 億中のうち、4 億くらいを 98 大学に出す。そういった意味で、『ネイチャー』『サイエンス』に出ることが文部科学省のプロジェクトでは必要だということになったら、経済産業省がそういう形で産業政策上、人材育成とか基盤技術の維持という意味でやっていかなければいけないので、そのへんはこれからも NEDO、JST、MEXT、METI の中で、どういうふうに国がこういう分野を維持するかということについては議論していきたいと思う。
メモリは私も一時期やっていたので思うのが、何に使うかによって全然違ってくる。アメリカでは宇宙とか軍事産業ということがあって、その中で使われるメモリと汎用部品として使われるメモリは全然違っている。そういった意味では、確かに研究する時には「おもしろいね」ということでよいと思うが、一歩下がって考える時は、どこで使われるのかということを見据えた上で課題をもう一度考えるということが重要と思う。
シミュレーションの議論は「革新的構造材料」でも非常に議論があって、機械系の先生が議論するような破壊学と、電子論から入る新しい創製ということと、プロジェクトの中で融合しなければドイツやアメリカには勝てないだろうという議論が行われている。そういう意味では、学術のほうでも機械学会と物理学会といろいろしている場合ではなくて、やはりこういう場でいろいろ議論していく中で、機械系の先生と物理屋さんが一緒のテーブルにつくような議論が実際に必要と思う。
これは今日の場とは違うのですが、JST と MITI や NEDO と議論している中で、パワーエレクトロニクスでも議論があって、パワーエレクトロニクスと言いながらパワーデバイスの人しか入っていないという議論が相当にされている。パワーエレクトロニクスになると当然、制御の方からパッケージの方、半導体の方までという議論になるが、日本でパワーエレクトロニクスと言うとどうしても半導体が中心になってしまうというところがあって、こういう

ところも実は研究者の融合という意味で定義をうまくこちらが変えれば融合する場面はたくさん出てくるのかなと。

○松下伸広（東京工業大学、JST-CRDS 特任フェロー）
ここにいる若手の研究者の方からすると、まさに自分のやっていることがまずはシーズとして科研費で、あるいはちょっと進めて JST で受け止めてもらった後、その先にさらに行きたい時に NEDO に引き継いでいくというモデルケースがいくつか出てくるといいなと。それから、分野融合が大事だということをベースに皆さんで議論していただいて、その中で、どうしても JST 側としていろいろなプロジェクトを立てようとした時に、材料ごとで切ったり分野ごとに切ったりということにどうしてもなりがち。そういう中で、現象ということで縦の軸で捉えて、そこに関係する人たちで議論するというやり方は、ややもすると科研費的になってしまう可能性もあるが、そういう捉え方で若い方に議論していただくというのは一つのあり方としてあるのかなと考えた。

○塚本健次（昭和電工株式会社）
今日のお話では、融合することでどういう価値を提供するのかというところが案外はっきりしていない議論がけっこうあった。学術論的には、狭間を埋めるという議論があるが、その先に単一の学術では成立できないような新しい価値が提供できるのか。価値には二つあって、創出される新しい機能とか、あるいは代替であればどれほど圧倒的に機能が上がるのか。まったく新しい世界であれば、実は学術的にはそう見ているけれど、本当にスペースが残っているかどうか調べてみると、特許が山のように出てくるということはよくある。そういう意味では、知財のスペースがあるかどうかということはまったく議論に入っていないところに非常に危惧を感じた。恐らくインターディシプリナリになればなるほど、実は特許を押さえられると手も足も出なくなってしまう。そういうところは日本はとかく遅れてしまうが、なぜそうなるかと言うと、日本の特許はサイエンスリンケージが非常に低いということで世界的に有名だが、それがこういう議論の中にも出ているのではないかと思った。
狭間を埋めることが必要ではないかということはそのとおりだと思う。我々産業のほうは四半期単位で収益のことを株主から言われるから、明日のことしか考えない頭の構造になっている。実は産業界も、システムとか、ある全体を統合できるような学者の方に入っていただいて、それをデバイスとか素材とかのそれぞれのところにどう期待するかというような動きをしたほうが良くて、今日のような議論では産業界とのギャップが大き過ぎて、どうしても我々の意見は厳しいということになってしまう。

○大林元太郎（東レ株式会社）
私が皆さん方に期待するのは、「ゼロを 1 にする世界」であり、今はまだないもの、価値をつくっていくこと。代替材料というか、いま世の中にある機能を別のシステムや材料で置き換えるということを考えると、産業界で言うとプロセスの問題、コストの問題。ビジネス的に考えてそれを凌駕するほどの機能・特性の向上。私自身は材料屋だが、電機業界の人に言われたのは、log で桁上がりの性能が確保できるなら代替材料をやってもよいと言われた。

私のやっている材料が世の中に出せる材料になった時に、倍数くらいではほかの材料が追いついてきているよと言われた。
それから、次の日本の新しいターゲットは何なのかと。私たちは電機業界に物を売る時に、半導体ができて、その後は DVD をつくって、その後は液晶をつくって、その後は太陽電池があった。では日本は、次にどの分野で勝っていくのかということを、若い方々にもぜひお考えいただきたい。今日のご提案が果たして日本の産業競争力につながっていくものになっていくだろうかということを考えてほしい。これからは年寄りが増えるので、機械系で人間の動作をアシストするマシンを一所懸命につくっているが、ゲル系とか人工筋肉的なものなどで人間の行動を 10%か 20%アシストできる材料とか、それから電気屋さんが言っているのは、吊るしているカーテンそのものが機能性を持っている、太陽電池とか、ディスプレイとか。それから、着ている物の繊維の中に発電機能があるとか、あるいは表示機能があって、着ている物で人間が動くとエナジーハーベストができるとか、そういう「将来あってほしい」というものに対して、きょうご発表いただいたものがなかなかつながっていかないという思いがある。
本当にメタンハイドレートを日本で使えるようになっていくのか。もしそうであれば、メタンをどうやってこなしていくかというテーマは確かにあり得ると思うし、逆に鉄鋼みたいなものは、国家戦略で考えていくと絶対に譲ってはいけない、なくしてはいけない分野。もう一つ心配しているのは、半導体を全部よそに取られてしまって、日本はどうやって半導体を維持していくのかとか、心配事はいくつもある。
最後に、皆さんがやっておられることを産業に結びつけていくところにはギャップがあるが、逆に産業は何かを実現したいと思った時には、必死でそれにマッチする材料はないのか、あるいは原理はないのかということを探す。ですから、ぜひとんがったゼロを 1 にする世界もやっていただきたいと思う。

3．16　コーディネータからの二日目の発表に向けたお願い

○川合知二（JST-CRDS　特任フェロー）

これは物質・材料領域に関する俯瞰という作業である。応用的なところもいろいろあるが、基盤的な科学技術で大学や研究者がどんなことができるかということを気にしておいていただきたい。ただ、考えていただきたいのは、材料というのは役に立って材料なので、物質の場合には新しい構造自体に興味があるが、材料ということになると、今までにないすごい機能が出て、何らかの形で有用でなければいけないので、そういう意味では社会とか産業をにらみつつ、特徴や自分たちの持っている強みを活かすというところは持っていてほしい。その上で、例えば今までにプロジェクトになった 2 次元機能性薄膜とか、分子技術とか、空間・空隙材料とか、そういうものの次の材料の方向を知りたいというのがこのワークショップの目的である。

そういうことで、私からは 2 点だけ、二日目の発表のために注意していただきたい。よく議論が混乱するのはインベンションとイノベーションとインプルーブメント。インベンションというのはゼロから 1 か 10 か 100 に、ゼロから生みだすこと。インプルーブメントというのは、いわば 1 から 10 というふうに改良して実際に使えるようにしていくこと。イノベーションはよく「技術革新」と言われているが、元々シュンペーターが言ったのは「新結合」。だから、違ったものと結びつけて飛躍するということ。ここで強いて分ければ、インベンションは科研費の役割だと思う。インプルーブメントはどちらかと言うと NEDO。この WS が望んでいるのはイノベーションである。イノベーションというのは、本当の意味で新結合で飛躍できるような形。

できれば二日目の発表で期待したいのは、非常に基本的でもゼロから生みだすような新しい発見をしながらも、しかしそれが世の中や社会に対してどういうふうに用いられるか。もしくは、何か新機軸を拓けるかどうかということは真剣に考えてほしい。今までと違う何が異分野融合に必要なのかは言ってほしい。そうでないと、「分野融合が必要だ」と言うだけでは何の進歩もない。そういう意味では先ほど出てきたように、ある特定の構造・分野というより、何か現象に関してやったらよいかというのは一つの提案だと思うが、そのほかにもいろいろあると思う。融合するということ自体が目的ではないので、融合してどんな価値があるか。なぜそれによって価値が生まれるのかということは少し言っていただかないと、融合するという言葉だけが独り歩きする。

同じことが「適切なリーダー」ということで、あまり功成り名を遂げたリーダーが余計なことを言わないでほしいという話はけっこう重要だと思う。どういう目利き的なところをそれぞれのところで望まれているかということを言っていただくと、ファンディングの時にも役立つ。

それから、日本の技術は優れていると言いつつ、ペシミスティックな発表が多かったので、どうすれば本当に勝てるのかということを含めて物質・材料分野について有効なディスカッションをしていただきたい。

4.創発・発見・気づき事項の発表

○若林克法（物質・材料研究機構）

【研究開発テーマ】

各種材料の要素技術ができあがっていて、それをどう組み合わせるかということが問題になっている。例えばエネルギーを輸送するにはどうするかとか、転換効率を上げるとか、ビッグデータにどうアクセスするかなど。広い意味で機能、あるいは現象を明確化して、それを軸にして理論、計算科学、実験、計測による分野を捉え直すことが必要である。

グラフェンでは論文が 1 万くらい出ているのでやるのは難しいということは確かにあるが、一方で、キーになる論文は、そんなに多くない。原子膜の研究は現在活発化しているが、本当の出口がまだ見えていない状況。その解をいち早く提示することが重要。

【推進方策】

異分野融合に必要なものは何か？結局、個々の研究者、ある程度のレベルの人が強くリンクする必要があって、そのリンクが今はかなりいろいろな分野の中で閉じている。そういう意味で、今回のようなブレインストーミングみたいなことをやるのはよいのかもしれないが、ただ「集まって何かやってください」と言っても何も出てこない。

我々理論家の責任としては、もう少しこういう材料を組み合わせたらこういう機能が出るというはっきりしたターゲットを示さなければいけない。ある意味で、理論や計算の力不足の感は否めないし、実験のことをちゃんとわかっていないのかもしれない。そこはもう少し実験とインタラクションしなければいけない。

Faculty や PD の流動性はかなり悪くなっている。一つは、Faculty が動けなくなってきている。装置の問題もあるし、ポストも減っていて、一回行ってしまうとそこに留まったままで動けない。また、ファンディングの問題として、大きなファンディングがつくと、その中で人を囲ってしまう。それは若手にとって、とても悪いことになっている。PD にとっては、ドクターを取ったところと近い研究室でもう一度ポスドクをやってしまうことになって、すごく視野が狭くなっているのではないか。

適切なリーダーというのは難しい。強力なリーダーシップを持っている人を連れてくると、そのリーダーの利益誘導型になる危険性があり、たぶん下の人はやる気がなくなる。調和型になると、科研費のような互助会型になる。どうすればよいかというと、2 つ作って競わせればよい。

どうすれば日本として勝てるかというのは難しい。勝ちたいのであれば、日本でしかつくれない高度な材料を組み合わせた新しい機能をつくる。高い付加価値を持ったデバイスを生みだすしかない。それは、ガラパゴス化する危険性もある。ナノチューブは日本で高度に発展したけれど、外国での研究者人口が減少している状況もある。一方で、今の研究室にはどこでも中国人、韓国人がたくさんいて、いくら高度なものをつくっても次の日には持っていかれる。高度なことをやりたいのであれば、全員が日本人という研究室をつくらなければいけないことになる。日本というくくりを諦めるか、二者択一しかない。基礎研究は国際連携をどんどん進めるしかないのではないかと、個人的には思う。しかし、外国人をどんどん入

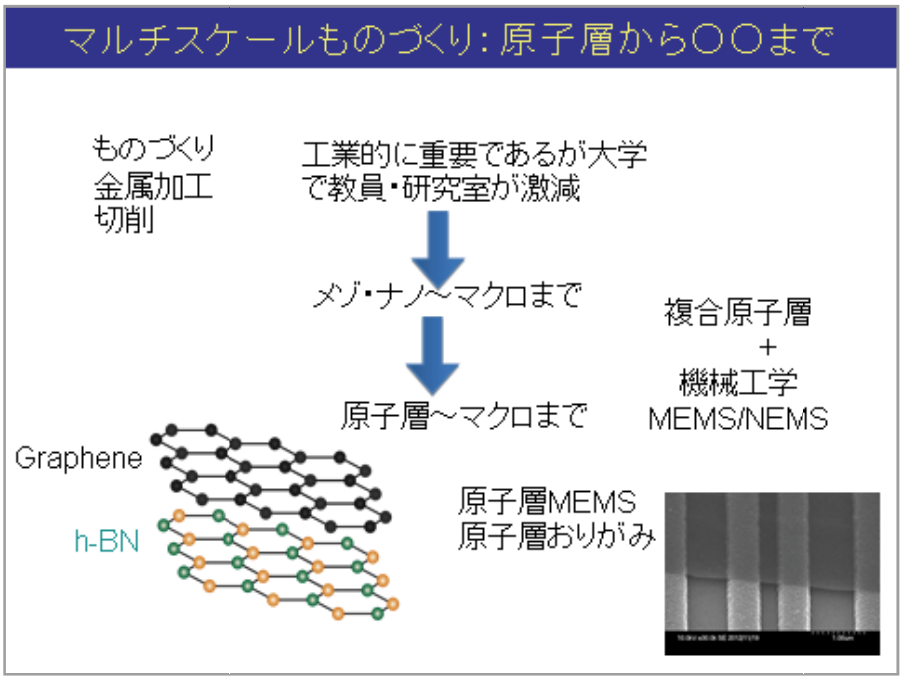
れればよいかというと、そうではないということはひしひしと感じている。外国人研究者を増やしすぎることによる不利益も考慮しなければならない。

○町田友樹（東京大学）

【研究開発テーマ】

1 日目では、金属加工や切削、モノづくりというのは工業的にはすごく重要だけれど大学では教員や研究室が減っているとか、技術が継承されづらい、『ネイチャー』などに載りづらいという話があった。原子層からマクロまでの加工を一つのプロジェクトとしてはどうか。マクロなものの加工は実は原子層の加工にも有益なのではないか。我々は切ったり貼ったりを原子層でやっているが、例えば原子層をスコッチテープでつくって、でこぼこにしたところに後から貼り付けて宙づりにするということをやっている。端をどうするかとか、切ったり貼ったりする時に切削ごみのようなものが出てきてこれが折れてしまう。そういうところには、金属加工などでマクロなものづくりをやっている人のノウハウが使えるのではないかと思っている。

そういう意味では、原子層からマクロまでの非常に幅広いマルチスケールのモノづくりというテーマができる。複合原子層という我々の分野プラス、機械工学、MEMS という方向性がおもしろい。原子層 MEMS などはやっているグループも若干あるが、まだすごく初期の段階だと思う。今は原子層の技術も進んでいるので、原子層の MEMS や NEMS。それから、DNA オリガミの話があったが、原子層も折ったりできる。原子層オリガミということも含めて、そういった加工ができたらよいのではないか。



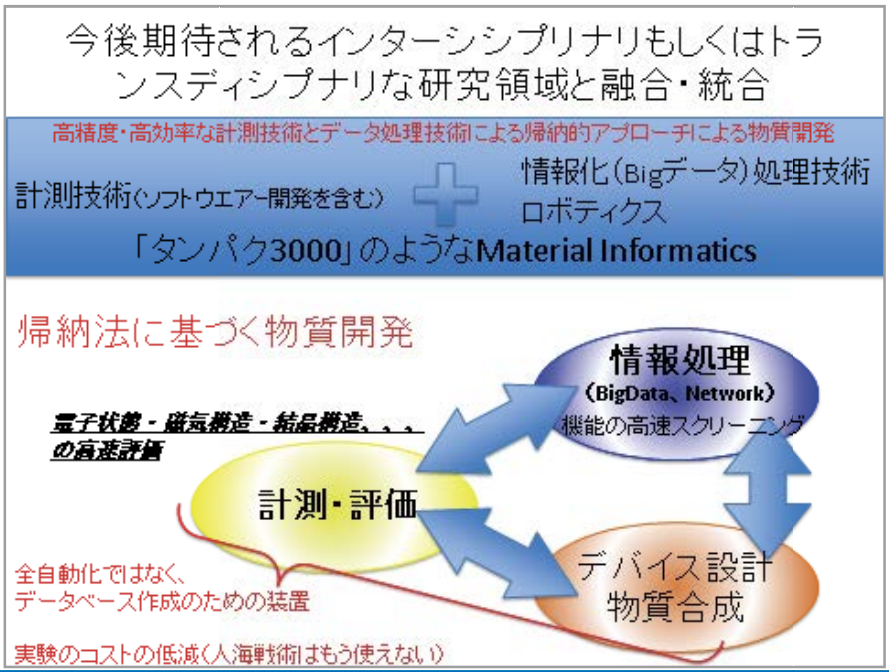
○組頭広志（高エネルギー加速器研究機構）

【研究開発テーマ】

物質・材料の研究においても「ビヨンド・アナリシス」と言うか、これまでのシリコン半導体におけるスキームを見直す必要がある。これまでは、現象は理論的に記述できるという前提に立って演繹的にアプローチしていくというスキームになっていた。特に、半導体デバイス開発においては「バンド理論」に基づく理論的記述がうまく機能したので、この 3 つのスキーム、理論計算による機能予測・シミュレーションによる機能設計、実際のデバイス設計・材料合成して、評価・計測を行ってその結果をフィードバックする、が有効であった。ただ、これは半導体デバイスの成功体験に基づいたスキームで、成功体験が大きすぎるのかどのプロジェクトもこのスキームで進められている。これは 10 何年前から変わっていない。

しかし、触媒などの不均一性が本質と思われるものは、このスキームでは進まないのではないかという実感がある。例えば構造生物学などでは、「現象は数学的には記述できない」という前提に立って、代わりに精密なデータベースを構築することによって機能と構造の相関をとりましょうというアプローチになっている。触媒・電池・磁石などの最近の物質・材料開発は、この構造生物的なアプローチと半導体デバイス的なアプローチの中間に位置していると考えられるのではないかと思う。

そこで提案するのは、高精度・高効率な計測技術と、ビッグデータを含むようなデータ処理技術を融合することによって、帰納的なアプローチ、つまりマテリアルインフォルマティクスみたいなもので物質開発を進めるというスキームである。例えば、機能の高速スクリーニングや実験データのビッグデータ化およびそれらのネットワーキングというのが、一つの重要になるキーワードではないかと考える。もちろん、これはコンビナトリアル合成のような「ビヨンド・シンセサイズ」と一体となって進めるべきである。また、こういったこと軸に置くことで、測定・解析技術開発を単なる全自動化ではなくて、実験のデータベースを作成するためのソースとして標準化していくことによって、全体的に見れば相当な実験コストが低減される。今後は人海戦術が日本のマテリアルサイエンスの駆動力として使えなくなってくることを鑑みると、このような「ビヨンド・アナリシス」は特に重要になるのではないかと思われる。



【推進方法】

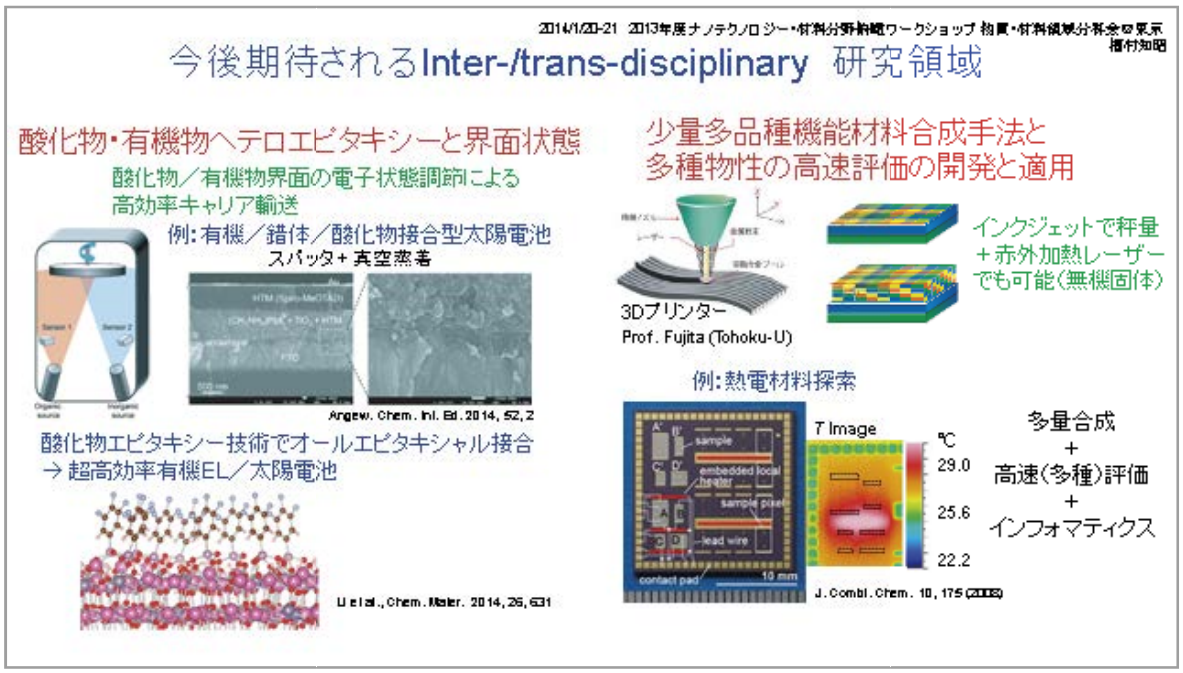
異分野融合のキーワードとして「異動度」という指標を提案したい。例えば、学位取得後にどれだけ機関を移動したかその回数を「異動度」として評価してみたらどうかと思う。人間は環境を変えないと新しいことはできないので、こういうファクターが重要。大型プロジェクトが走ると、その遂行のために教え子などを囲い込むことが多くなるため、逆に人事的な交流とそれに伴う異分野融合を妨げているのではないかと思う。そのため、プロジェクトの評価の考え方の一つとして、どれだけ人が動くか、違う機関から人を採ったかというところを評価する仕組みがあってもよいのではないか。

○福村知昭（東京大学）

【研究開発テーマ】

酸化物・有機物のヘテロエピタキシーというのは重要である。有機物と金属の界面の電子状態というのは前に名古屋大の関先生が精密な研究をされたが、実際に有機デバイスに使われている透明酸化物が重要である。酸化物というのはデバイスでは多結晶で、有機物も多結晶で、有機の太陽電池ではヘテロ接合という、界面がミキシングしている半導体物理では考えられないような構造をとっている。しかし最近、ペロブスカイト錯体が報告されてから、有機の太陽電池も平面接合をつくろうという動きも出ている。ただ、これもスパッタ法やゾルゲル法などでつくられているのでクオリティはそれほどでもない。有機デバイスの高品質化を図っていけば、もっと性能が上がるのではないかと考える。

もう一つは、3D プリンタの活用。3D プリンタは無機の材料をつくるのに適しているので、近い将来、アメリカのベンチャーもしくは大学がコンビナトリアルライブラリで物質開発を委託生産するといった動きがあるのではないか。こういう技術と基板のテクノロジーを融合すると、いろいろな物性や機能を高速に評価することが可能になる。たとえば、基板の中に配線や抵抗ヒーターを埋め込んだ基板（数センチ角）を企業から購入して、薄膜をつければ、薄膜の抵抗をプローバーで測定できるし、中に埋め込んだヒーターで熱勾配をつけて赤外線カメラで温度差を測れば熱電評価もできる。このような技術を活用すれば、かなり材料開発のスピードが上がるのではないかと思う。



【推進方法】

著名な論文誌を見ると、欧米や中国は多国間共同研究が目立つ。日本では国内のグループで閉じているケースが多い。昨日も話が出たように、log スケールで性能がすばらしい物質なり現象なりが見つかれば、日本で知財を維持するためには国内で閉じた研究グループのほ

うがよいが、欧米とコンペティティブな性能の場合には、国内で閉じたループで研究しているとガラパゴス化して、外交戦術で欧米や中国にスタンダードを持っていかれる。

インパクトファクターの高い雑誌に出ないとだめではないかという話もあったが、それは違うと思う。研究の重要性として学理の構築が挙げられ、それはわりとよいジャーナルに出る。一方で技術化で利潤が出るようなもの、例えばガリウムナイトライドのダイオードの主要な論文はJJAP というインパクトファクターが高くない論文誌に主要な論文が出ている。新しい学理を構築するか、産業に貢献する研究をするか、どちらかを満たせば研究室の講座として研究資金が得られるであろう。ただし、材料分野で重要だが地味で外部から重要性を理解されない分野もあり得て、研究資金が不幸にも得られない場合は、大学運営の観点から研究講座が消滅することもあり得るであろう。そのような状況に陥らないように、ファンディング側や大学も注意することが必要であろう。

○溝口照康（東京大学）

【推進方法】

材料設計において三位一体のプロジェクト構成をうまく回すために、例えば「○○の設計を実現する」と。例えば構造材料の強度をこれだけ上げるとか、この触媒の性能をこれだけ上げるというような、目的が具体的な比較的小さいサイズのプロジェクトがいくつかあってもよいのではないか。そうすると、プロセス、理論計算、計測の方々が、目的に合わせてそれぞれに適切な手法を選ぶ。

また、学会のシステムに問題があるのではないか。セッションが細分化し過ぎている。例えばアメリカの顕微鏡学会（Microscopy and Microanalysis）も以前は「Aberration Corrected Microscopy（収差補正顕微鏡）」という大括りなセッションだったが、最近は「Aberration Corrected Microscopy for Energy materials（収差補正電子顕微鏡を使ったエネルギー材料解析）」というセッションになったりする。これでは細分化し過ぎていて、広い分野の人間での議論がしにくい。良いセッションと思ったのは、電気化学会で「電池の新展開」など。もちろん材料や手法の「旬」具合にもよるが、適切な分類が重要。学会の役割も最近変化しているように感じる。学会の再編成を考えてもよいと思う。

どうやったら日本が勝てるのか。やはり人が重要である。リーダーにしても実働部隊にしても、何よりも人を育てることが重要で、これは短期的にはできない。システム全体の再考が必要では。サポーティングスタッフがしっかりサポートしつつ、教授や PL が研究に専念できるようにする必要がある。私のところでは装置や学生の PC が壊れたら、私が行くまで話が進まない。人をうまく使っていないように感じる。

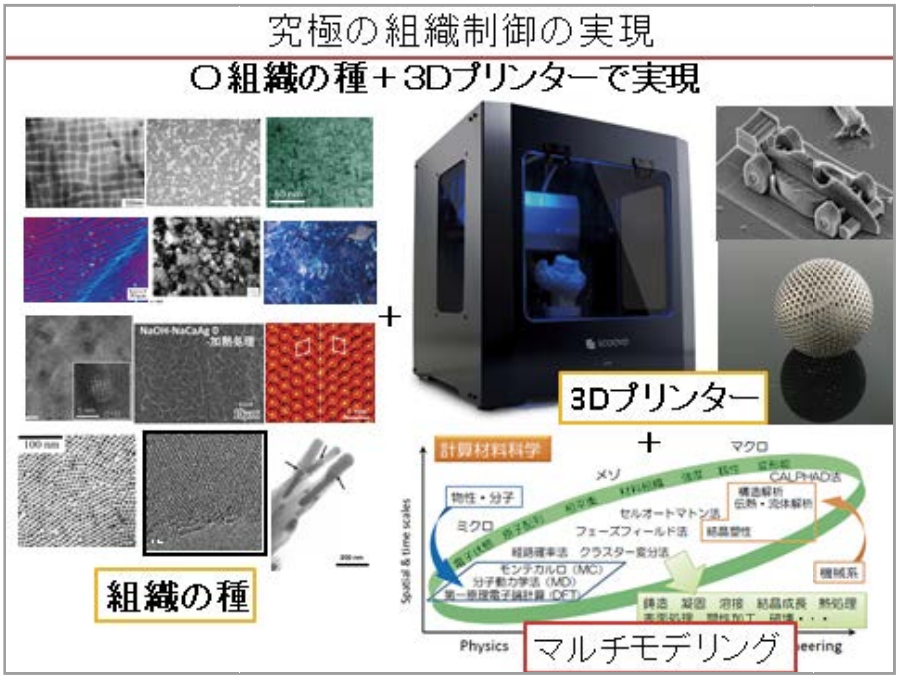
今後の日本のものづくりについて、付加価値の高いものをつくるのと同時に、そのメカニズムを明らかにしておいて、さらによいものをつくれるようにしておく。競争社会はどうしようもないので、瞬発力も重要だが、長距離の競争に生き残れる体力をつくることも重要。

あとは適切なファンディングも重要で、「選択と集中」といわれているが、各分野に適切なファンディングの量というのがあるはず。それを見極めて適切にファンディングしていく必要がある。

○藤田武志（東北大学）

【研究開発テーマ】

1 日目の発表で提案した 3D プリンタについては、組織の種、そしてマルチモデリングという計算技術を加えることで、いろいろな組織にどういう可能性があるかということが非常にわかりやすくなるのではないか。



それから、イノベーションを起こすためにどうしたらよいかということを考えると、IGZO とか鉄系超伝導のように基本に返って新物質の創造に特化した領域をつくってはどうか。誰も知らない新物質を創造するだけの領域を用意したらおもしろいことができるのではないか。それをやるためには計算機、ビッグデータを支援したほうがよいし、計算機を使わずにじゅうたん爆撃でもよいから、我々が知っている領域からバウンダリーを越えて新しい物質の合成にどんどん挑戦していくような新物質をつくるのだという高い意思を共有するような研究領域があるとよい。

【推進方法】

いろいろな研究スキームを見てみると、一番うまくいっているのは FIRST と ERATO ではないか。これは総括の卓越したセンスなどがあると思うが、日本人はオーサーシップの問題もあって、どうしても共同研究は苦手。だから ERATO 型の自己完結型のプロジェクトが日本ではうまくいっているのではないか。そこは仕方ないので、ファンディングを変えて ERATO の枠を 10 倍にするとか。例えば新しい物質ができて、それを新しい電子顕微鏡で見たいという場合に、同じ研究室で見られるようにすればうまくいくのではないかと思う。

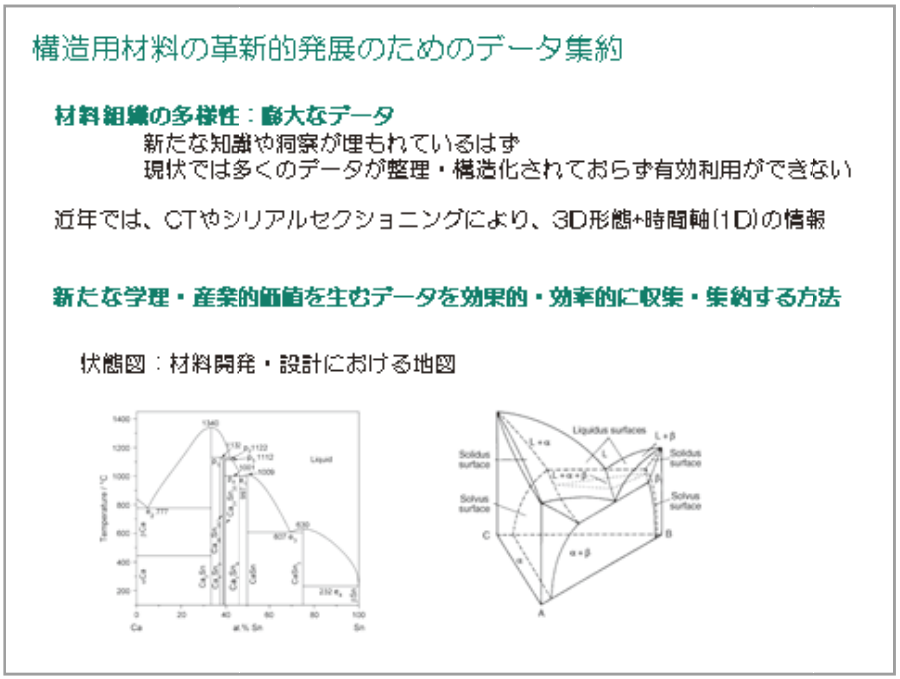
融合分野の提案としては、学会や研究会を一度全廃して再構築する。そうすることで一つの大きなグループができる、異分野の人が集まる機会が生まれるのでよいのではないか。福

井謙一先生は「自然は学問の垣根を知らない」とおっしゃっていて、物理とか化学という人間の都合で決めた分野を一度取り払ってみるのがよいのではないかと思う。

○大野宗一（北海道大学）

【研究開発テーマ】

1 日目の発表を聞いて、ところどころでビッグデータという言葉が出てきたので、思うところをまとめてみた。構造材料の今後の革新的発展を決めるのは材料組織の多様性にあるなかで、現在までに既に膨大なデータがある。その中に新たな知識や洞察が必ず埋もれているはずである。さらに、現状では多くのデータが整理・構造化されていないので有効利用ができていない。近年ではさらに CT やシリアルセクショニングによって 3 次元形態をデータとして集約し、さらに時間軸を含めた 4 次元の情報がどんどんこれから出てくるという状況になっている。したがって今後、新たな学理、産業的価値を生むデータを効果的・効率的に収集・集約する方法が必要である。



効率的にデータを集約する方法として、我々の分野において成功例が一つある。状態図に関するもので、材料開発・設計における地図となるものである。実際は多元系で実用合金を設計するので、例えば 3 元系合金では、このような成分で表わされる三角形の上に温度軸を取って立体で表わすことになる。しかし、状態図が複雑になると立体形状で表わすことができないので、各温度のセクションで表わしていくことになる。例えばあるマグネシウム・カルシウム合金の状態図を見てみると、温度を何 100℃置きにとってもこのようにたくさんのセクションをとらなければいけない。例えば室温から 3,000℃まで 10℃刻みでとったら 300 枚の情報が必要になるし、4 元系になれば 1,000 枚以上になる。実際に我々の図書館においては、状態図集がある棚を占めているという状況が続いていた。

現状では、CALPHAD 法という計算材料科学の手法が発展して、これが解決された。この中では何をしているかというと、各層の自由エネルギーをシンプルな形で表わす。その自由エネルギーの係数を実験データを表わすようにどんどん求めていく。実際に必要なのは、自

由エネルギーモデルを計算するソフトウェアと、各系を表わす数値、自由エネルギーのパラメータである。こういった形にすると、3 元系の状態図も 7KB のデータファイルに収まる。さらに、例えば 17 元素、これはマグネシウム合金のデータベースであるが、17 元素の状態図は図書館に収まり切らないような状況になるが、これを 200KB のデータファイルに集約することができる。CALPHAD 法というのは元々、我々が知らない相平衡を内挿したり外挿したりする方法として発展したが、現在においては相平衡データの集約方法の一つとみなすことができる。

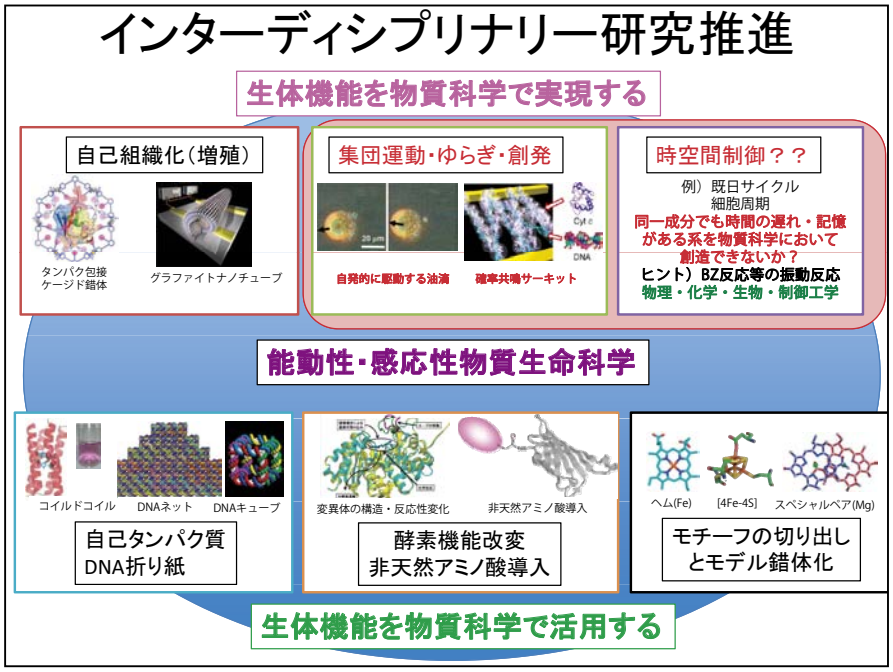
こういった成功例を元に考えると、例えばフェーズフィールドモデルはあらゆる現象に適用可能な非平衡パターンの形成ツールとして発展しつつあるので、3 次元形態＋時間軸の 4 次元情報の集約方法として、パラメータをデータベースとして集約していくという方法もあってよいのではないかと考えた。

それから、組織形成における核発生や界面形状の不安定化というのは揺らぎに支配されている。組織形成モデルが本当に予測できるモデルになるためには揺らぎを正しく扱う必要があるが、これをどう理解すればよいのかわかっていない。平衡状態周りの揺動散逸定理を基に現在モデリングが行われているが、ナノスケールの組織制御となった時には揺らぎが顕在化してくる。そのような揺らぎが顕著な系に対してまだモデル化が進んでいない。重田先生の発表、永野先生の発表の中に揺らぎというキーワードが出てきて、さらに山本先生の話にも揺らぎ定理に関する話が出ていたが、揺らぎをキーワードとした諸分野連携があるといいのではないかと思う。

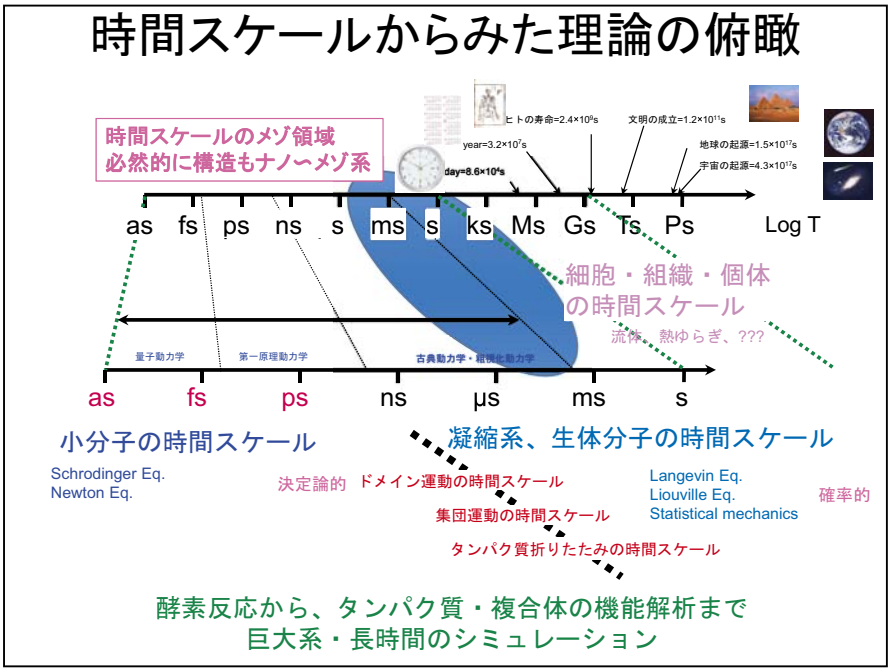
○重田育照（大阪大学）

【研究開発テーマ】

ゼロを１にするという観点では、インターディシプリナリ研究推進で提案した集団運動・揺らぎ・創発、あるいは時空間制御というのは新しい価値を生みだすのではないかと考えている。時間スケールをどうやって制御していくかということが、新しい価値、つまり時空間制御の中で非常に重要だと考える。



時空間領域のメゾ領域として、シミュレーションでできないのはこのへんの領域である。これは普通の分子動力学シミュレーションの決定論的な方程式だけではなく、確率論的な方程式、さらには大野先生が言われたフェーズフィールドというのも、この領域で時間スケールに使っていけるのではないかと考えているので、広い意味でのシミュレーションの融合領域が必要である。



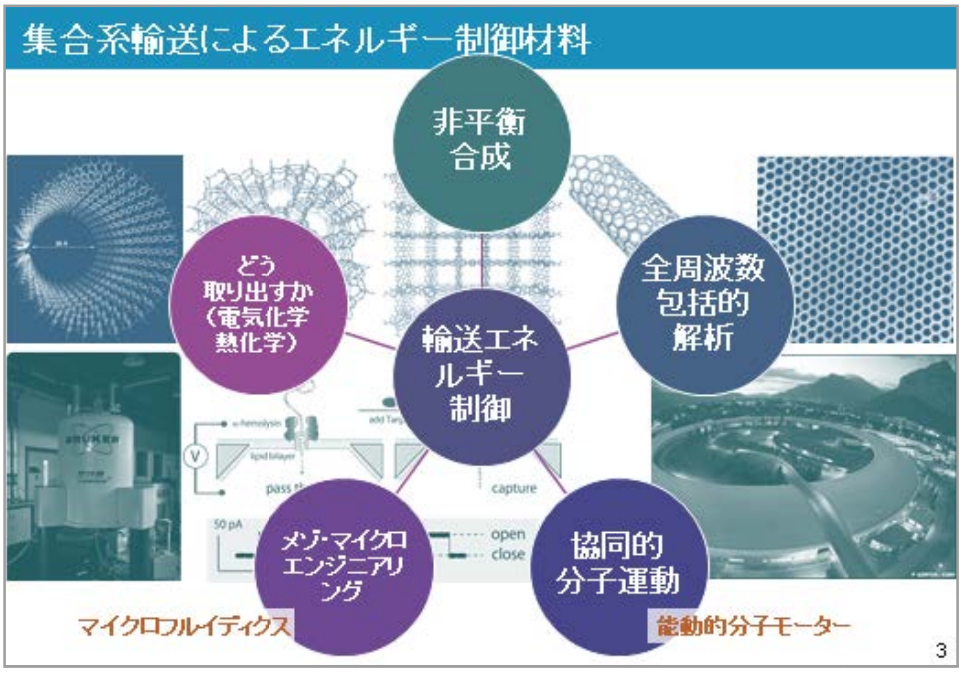
【推進方策】

そういった意味で何が必要かというと、これからは具体的な材料ターゲットに導くガイドラインをどうやって導くかというところをいろいろな方で議論すべきと考える。計算理論の研究者と合成研究者との共同作業が非常に重要で、話し合いをして、設計指針を出したら、その実証研究までもっていくという一連の流れが重要である。また、こういうモデル方程式から材料物性のターゲットを絞り込むことも重要ではないか。実時間で観測して、それが理論でどういうふうに対応づけられるかというのは重要。

理論に対する要望、連携の希望が多いということは、いろいろな先生方が重要性は指摘されているが、お互いを知る必要があるということで、例えば少数グループ、若手による調査型研究。例えば、ここに集まっている皆さんに、年間 100 万円ずつで調査してもらい、どんな研究に使ってもよいからということで調査型研究をして、こういうような場をつくる。1日だけで俯瞰するのは不可能に近いというか、表面的になってしまうところがあるので、もっと深い意味での俯瞰事業をやって、本採択に至るような道筋をつけるのがよいのではないか。

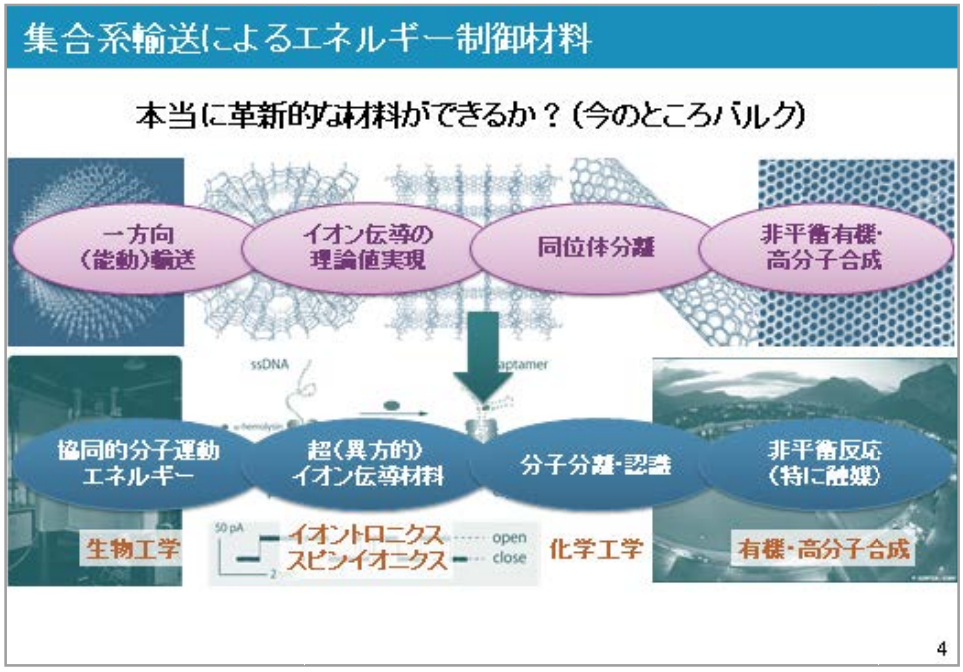
○堀毛悟史（京都大学）

1 日目に私は輸送というテーマを提案して、それに関連して印象に残ったキーワードとしては、非平衡。また、メゾ領域を含む計算が例えば物理と化学をつなぐような役割を果たすと思っている。輸送という言葉については、要するに材料となると固体なので、集合系というふうに考えて、分子であったり、原子でもよいが、集合系における輸送を用いたエネルギー制御材料という概念があると思う。輸送というのはさまざまな意味でエネルギーが動くので、それをどう取り出すかということは電子のほうではだいぶできていると思うが、ほかでもできるのではないか。



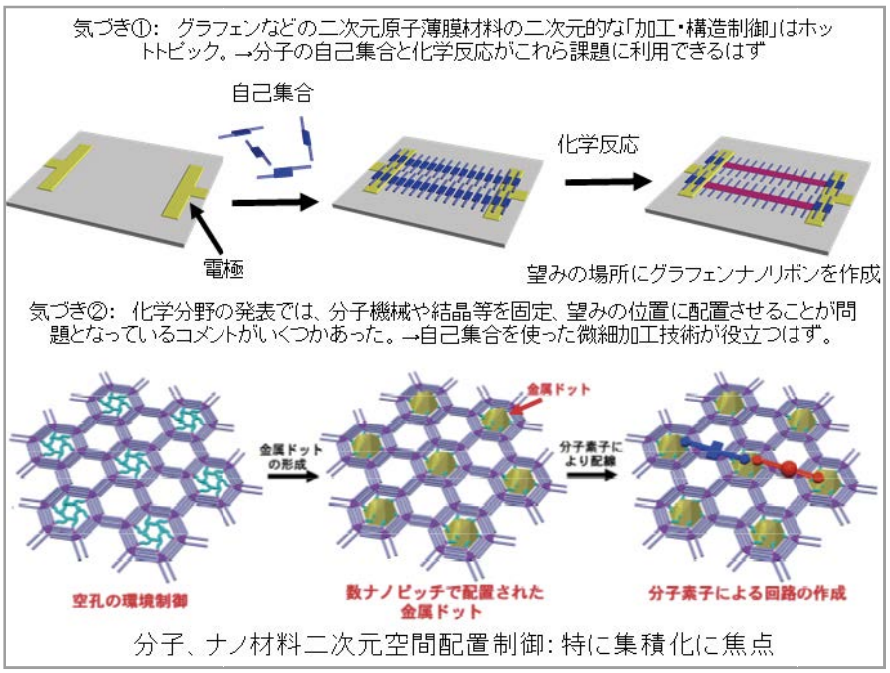
固体中の輸送に係る周波数を包括的に解析できる技術がこれから必要になるし、微小な電流なりをどう取り出すかということに関してはまだ知見がない。それを取り出すことができれば、マイクロな領域でもエネルギーの材料になり得るのではないかと思う。例えば、永野先生が昨日話したように、実際に協同的に分子を並べて一方向に回転させて動力をとったら、大きなエネルギーになる。私の分野では、例えば 3 価の金属が超イオン伝導的に流れればバッテリーの特性は大きく上がる。あとは、非平衡を使って新しいものを生みだすというのは非常にチャレンジングで、ある瞬間にしか変わらない分子を捕まえて、それを触媒で一気に次のほうにもっていくというのは、概念としては昔からあるが、それを解析して合成とともに展開した例はほぼない。

分野としては生物工学、スピンイオニクスとか、そのような分野に化学工学者が入って展開していけば、その中から新しい材料の核ができるのではないか。


集合系輸送によるエネルギー制御材料
本当に革新的な材料ができるか？（今のところバルク）
一方向
（能動）輸送
イオン伝導の
理論値実現
同位体分離
非平衡有機・
高分子合成
ssDNA
aptamer
協同的分子運動
エネルギー
超（異方的）
イオン伝導材料
分子分離・認識
非平衡反応
（特に触媒）
生物工学
50 pA
イオントロニクス
スピンイオニクス
open
close
化学工学
有機・高分子合成
4

○田原一邦（大阪大学）

【研究開発テーマ】
1 日目に、自己集合を使って数ナノオーダーの材料を表面でつくるということにフォーカスした領域を提案した。グラフェンなどの 2 次元原子薄膜材料がトピックスとなっているが、特に 2 次元での加工ということが一つの課題となっているということで、ここで示しているのは表面に、例えば電極の間に有機分子を自己集合で配列させた後に、化学反応でグラフェンをつくる。このようにして望みのグラフェンナノリボンを望みの場所につくるといったところが技術として足りていないのではないか。



それからもう一つ、化学分野の発表を聞くと、単一の分子同士とか生体分子等を望みの位置に固定して、そこで動かす、機能を持たせる、単分子での特色を持った機能の創出ということが重要だと思われるが、うまく集積化するという技術がないのではないか。そのあたりを自己集合を使った技術、または既存のリソグラフィ法を合わせた技術で足場のようなものをつくり、そこに単一の分子素子を自在に並べて、融合して機能を出すようなところから取組むというのが考えられ、分子ナノ材料 2 次元空間配置制御が活かせるのではないかと考える。。特に、集積化に焦点を当てるということが、この分野での課題と考えられるのではないか。そういう時に、有機化学者や表面化学者だけではなく、物性物理の方とチームを組んで取組まないといけないだろう。

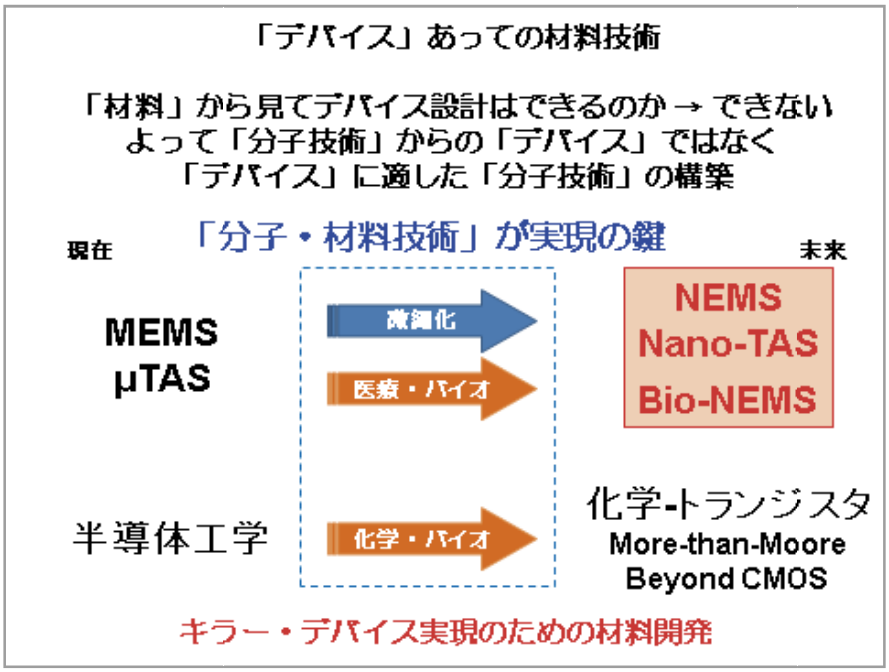
【推進方策】
従来のさきがけでは、戦略目標が設定され、総括が決定され、そこに若手研究者が提案書を出して、相対評価で戦略目標に沿ったものが選ばれるということになっている。そうではなくて、ある目標に対してリーダーの方が、このリーダーの方は恐らく現役でない人、退職し

てすぐの先生がよいと思うが、その方が若手研究者を指名する。それに対して同意した若手研究者に義務が生じて、目標に対して分担していくというようなシステムもあるのではないか。その時には、新学術領域よりも結びつきが強くて、研究所をつくるよりも弱い結びつきをつくる。達成目標や対象となる材料を毎年検討していって、期間は最低 5 年くらいは必要だろうと考える。

○永野修作（名古屋大学）

【研究開発テーマ】

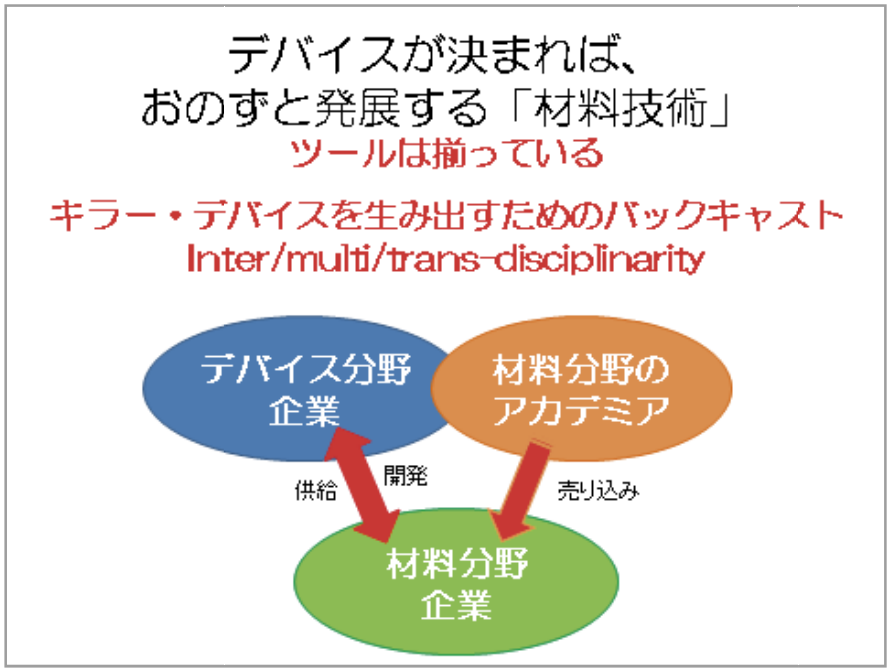
材料というのはやはりデバイスあっての材料ではないか。分子技術を眺めていてもデバイスは出てこないのではないかという議論をした。デバイスに適した分子技術の構築ということを考えると、MEMS というターゲットを置いた時に、NEMS、ナノ TAS、バイオ NEMS といったものを考えていくと、動力技術は界面に支配されるものなので、分子論的な壁が動力の基準になれば動くものになるとか、電子でもエレクトロニクスでのモーターのようなものは使えないのではないか。それを解決する手段として、分子技術が鍵になってくるだろうという説明をすれば、もう少し納得していただけるのではないか。もう一つ、Beyond CMOS のような提案で化学トランジスタみたいなものを提案しようと思ったが、できなかった。理由は、キラーデバイスがないからだ。やはりデバイスが見えてこないものについて材料は提案できない。もちろん、バイオと化学のインタフェースとして分子技術は必要だという言い方はできるが、今はキラーデバイスができないということが一番まずいことではないかと考える。デバイスが決まれば、おのずと材料技術は発展する。ツールはかなりそろっている。そうすると、キラーデバイスを生みだすためのバックキャストを起こせる融合の分野を考えなければいけないのではないか。



【推進方策】

デバイス分野の企業と材料のアカデミアが会う機会が少ない。アカデミアは当然こういった人たちとの連携が必要だが、そこの結びつきがない。私は、プリンタの会社にいたが、その時に「デバイスをつくるぞ」と集まる時には、物理屋と化学屋は当たり前で、生産、オプティクス、電子回路と全部集まってバックキャストを始めるというのがプロジェクトの最初

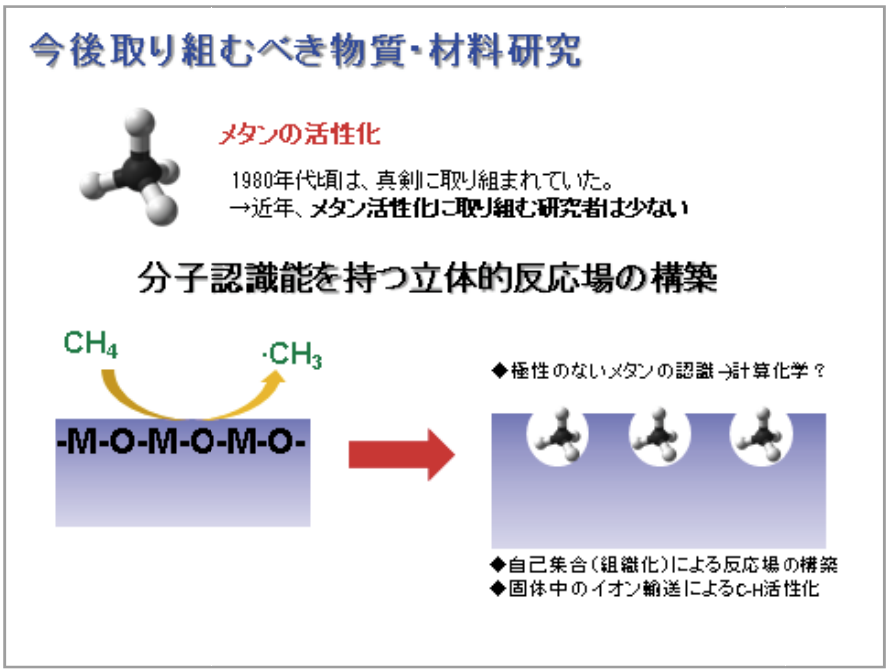
となる。アカデミアではそういった試みには出合っていない。なので、そういう試みをくくりとしてつくって、まさにキラーデバイスをつくっていけば、材料分野はきちんと発展するだろう。



○北野政明（東京工業大学）

【研究開発テーマ】

1 日目はメタンの活性化の話をした。産業界ではメタンからメタノールをつくったり、エチレンをつくったりといった反応はコスト的にもあまりよろしくないという話はあったが、燃やして CO2 を大量に排出することはどう考えてもよくないので、メタンの活性化というところは一つの大事なテーマとして進めていくべきではないか。メタンの活性化は新しく言われていることではなく、1980 年代頃の触媒の分野では盛んに研究されていた。最近はメタンの活性化に取組む研究者はほとんどいなくて、若手の研究者では特に少ないので、安定な分子であるメタンを活性化するというのは学術的にも非常におもしろい分野である。



以前やられていた研究というのは、例えば金属酸化物の活性酸素種によってメタンの CH 結合を活性化して H を引き抜いてメチルラジカルをつくって、これがカップリングして反応が進行するのだが、これができてしまった後はあまり材料の制御ができていない。なので、分子認識能を持つような立体的反応場を構築し、例えば極性のないメタンの分子なので、それをどう認識するかというのは難しいとは思うが、例えば CH 結合の一部を緩めてやるような機能を持たせた材料をつくるとか、極性を持たないメタンと親和性のある材料はどういうものがあるかということを、例えば計算科学と連携してやってみるとか、先生方の話を聞くと、分子や原子のレベルで表面の構築ができるような材料の提案もあったので、そういう構造を表面につくってそういう場を構築するとか、例えばアニオンが移動することによって活性化されるとか。

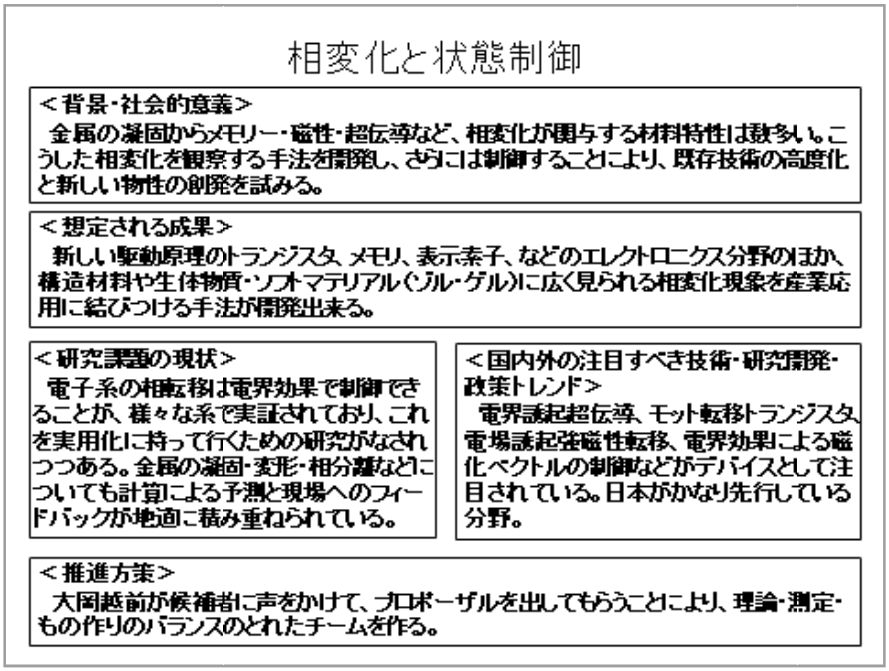
【推進方策】

革新的な触媒をつくろうと思うと、触媒屋がよく考えるような案だけではなく、そうではない分野の人から材料設計に認識を持ってもらうようなテーマを設定することが必要である。どういうふうに融合するのがよいか。いろいろ考えたが、やはり強制的に連携せざるを得ない環境をつくるしか、本当に融合することはないのではないか。それぞれの所属にいると、時間をつくってわざわざ他の研究者と連携しようという場を設ける機会はない。私自身が元々触媒の研究室にずっといる立場だったが、その時にやっているテーマを強制的に排除して物理系の研究者と共同研究のテーマをやりなさいという、ある意味で強制力のある環境に放り込まれたので、必然的に違う分野と交流せざるを得なかった。そうでないと結果が出せないし、特に若手の研究者にそういう機会をつくらないとなかなか融合はできないのではないか。

○山本浩史（分子科学研究所）

【研究開発テーマ】

現象でくくるというのが評判がよかったので、私も 1 日目に発表した 2 つに加えてもう一つつくった。相変化現象をコントロールするということを一つのテーマにしてみたらどうか。



実際にトランジスタの中で電子系の相転移を起こすという研究をやっていて、そういったものと、例えば相変化しているかどうかはわからないが組頭さんのメモリとか、それから磁性・超伝導などや金属が凝固していく過程なども相変化、こういったことはいろいろなところで出てきて、それを観察する計測手法も取り込めるし、理論もすごく重要である。

【推進方策】

どうやったら日本として勝てるかということをいろいろ考えたが、特に 3D プリンタにしてもマイクロプロセッサにしても、日本人の発明なのになぜやられているのか。先見の明がないということなのか、諦めてすぐに引き下がってしまうところがよくないのか。とにかく、しつこく続けるというしぶとさがちょっと足りないのかなと思う。有機 FET も、最初の頃には日本の研究グループがけっこうやっていたにもかかわらず、しばらく放置している間にアメリカなどに追いつかれ、追い抜かれてしまった。一つの反省として、一流を超一流にする努力をもっとしなければいけない。

もう一つのメンタリティとして、新しいものに飛びつきやすい。日本のものより外国製のものが好きというメンタリティがあるような気がしている。プロジェクトを新しく提案することも大事だが、過去のプロジェクトで何がよくて何が悪かったのかということを、情報として最初にインプットしたほうがよいのではないか。

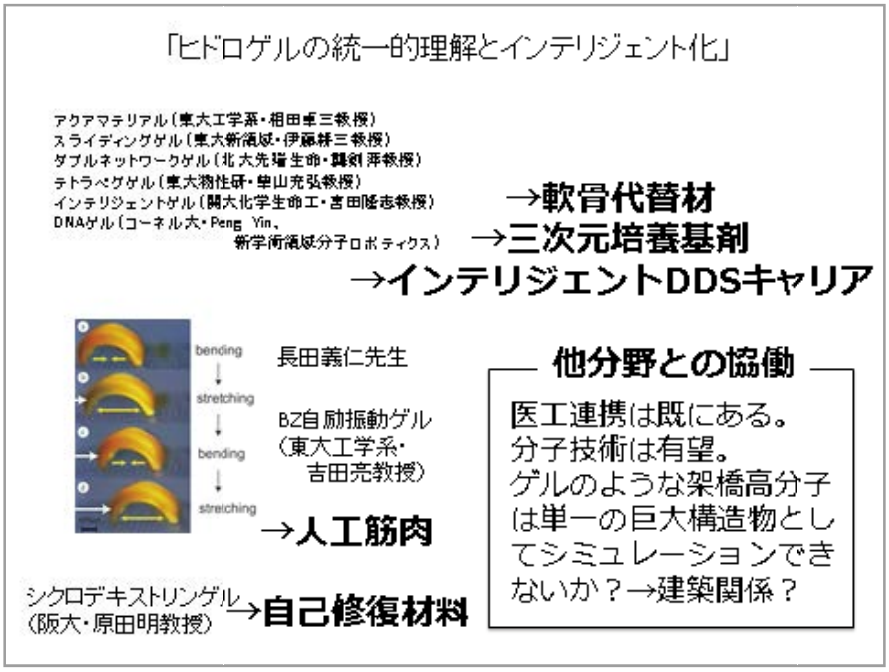
ソフトウェアが日本から出てこないというのも、使うほうは外国製のほうが安心なのかもしれないということと、実際に仲間を世界中から集めるとか、マニュアルを英語でつくるとか、そういった言語やコミュニケーションの部分でも壁があり、少し違うのかなと感じた。

ダイヤの原石を見つけるというのも、応用のことばかり考えていてもなかなか難しいのではないか。アカデミアの中だけの組み合わせではなくて、もう少し幅広い人を集めて議論をやったほうがよいのではないか。あまり均一なところで議論していても仕方がない。

それから、大岡越前が声をかけて集めていくというのも一つのやり方。そういう適任者がいるかどうかはわからないが、そういう方法もある。

○葛谷明紀（関西大学）

ゲルでいろいろと使えそうなものができており、動くゲルとか、自己修復材料みたいなものも発表されていて、そういう応用を追加しておきたい。分子技術的なところでもっていくのもそうだし、シミュレーションでは小さな分子の動力学シミュレーションとはまた違った考え方でゲルのシミュレーションはできるだろう。



3D プリンタはすごくおもしろい、このまま進んでいくと、たぶん原子レベルで並べていくという話になっていくと思うが、そうすると、STM で局所的に還元するとか、AFM の針にタンパクをくっつけて貼る Dip-Pen リソグラフィーという技術があるので、そちらに注力していくといい。

【推進方策】

推進方法のところで、溝口先生も同じようなことをおっしゃったが、突拍子がなくてもよいから「とにかくこれをつくれ」という形でプロジェクトをやるのも一つの手かなと思う。自分がいろいろ参画していて思っているのは、共同研究してくださいでは、どうしても自分のやりたいことをやっていく。それを防いで、とにかく目標の実現のためにいかにやらせるかというところだと思う。最終的にそれは、「これができなければ失敗ですよ」という指定の仕方にして、無理やりそちらにもっていくというのが一つの形なのかなと思う。ただ、事後評価の時には、それができないと文字通り失敗とするのか、それを目指して何か新しいイノベーションが見つかったらよしとするのか、そのへんは難しいところで、議論が必要。

それから、日本人が勝てないという話も印象に残ったが、DNA ナノテク業界ではわりとよく『ネイチャー』『サイエンス』に載る。なぜかというとコミュニティの中で仲がよくて、みんなで助け合っているからである。日本人は一つのパイを食い合っているようなところが

あるのではないか。国際的に、日本で団結して他の国と戦うような施策が、みんなが伸びる方向に行くのではないか。

もう一つは、もう少し外国人が入ってきて戦うような形にするのはどうか。募集要項などは日本語がベースになっているところがあるので、そのへんももう少し開いてはどうか。

5. 総合討論

コーディネータ：川合知二（JST-CRDS　特任フェロー）

【理論の重要性】
理論からやるのは難しいという立場と、やはり理論が必要という立場があった。
○理論は要らないと言ったわけではなく、一電子近似に基づいたバンド理論に基づく物質設計という半導体の今までのアプローチは適用できない系が主流になってきているのではないかという問題意識があるということ。例えば生物学のタンパクの機能について、どういった理論があるのか、またそれで有効な予測ができるのか。生物学的な機能予測においては半導体テクノロジーでやっていた計算は適用が難しいことは明らかなので、そういったものに近い系として触媒・電池は捉えられるのではないかという問題提起をした。
○理論は必要だと強調したいが、やはり理論の限界はあるので、こういうところに参加している先生方が共有し、どういう問題があって理論が進んでいないのかということを分解して、どう乗り越えられるかということを理論研究者、あるいは計算のプログラムの人に投げかけてくれれば、解決することが新しいイノベーションにつながる。最近は少し様相が変わってきて、タンパクに使われているフラグメント分子軌道法というのを使って、今はシリカの上だが、シリカの表面に何かくっついた系の理論計算などはされている。そういう技術も物性やナノにも流用できる。
○川合　理論と計算もしくはデータベースは違うのではないか。それは、非平衡の科研費で強く感じたところだが、非平衡で物をつくるというところまでやろうとすると、ちゃんとした理論がない。それで、九大の甲斐先生やいろいろな方が苦労して、柳田先生がそれに基づいて非常によい材料をつくった。そういう意味では、理論がやっと結びつき始めた。一方で、少し現象論的な計算でも有効。データベース、データマイニング的に材料を設計していくのも重要だが、今回の話ではミックスされている。
○理論はある限定されたバウンダリー・コンディションで成立する。材料設計には、まず理論が必要になる。ただし、ある種のバウンダリー・コンディションでしか成立しない理論がある。それを現実のものに近づけるのが計算機シミュレーションなので、理論と実験の間に境界条件をもっと自由にしたものを扱えるシミュレーションがはさまっているイメージ。実験の方法もシミュレーションの方法も、やはり一つの原理でたどり着くべきで、そこには望ましい理論があるべき。最終的には材料設計は理論をベースに行っていくべきなのではないか。
○基本的にはフォーミュレーションを指しているとすれば、できあがっている部分もある。もう一つ理論の重要な役割は、ストーリーをつくる人。「こういう機能が出せるはず」という飛躍。計算だけだとじゅうたん爆撃的になる。そうではなくて、そこを飛べば何かあるということを指し示すというのは、とても重要。だから、ターゲットをつくる役割を理論が本当は持たないといけない。
非常に需要はあり、「実験をやるとこういうものが出てくるけれどどうすればよいのか」と、実験を先にしてから、何かおもしろい話にもっていきましょうみたいな話になる。彼らが求めている理論というのはそういうことかもしれないし、ちょっとデータを解析してほしいと

いうレベルの話もあるし、もう少しおもしろいストーリーをつくってくれという要求もあるし、いろいろなレベルがある。ただ、理論＝第一原理計算と言われると違う。
○佐藤　ヒューリスティックという言葉がある。日本語で「発見法的」と訳されているが実はガイディング・プリンシプルを与える理論。そこで理論が役に立つ。
○元素戦略はその枠組みをつくろうとした。
○計算というのはツール。理論は、実験の人もたぶん持っているもので、例えばいろいろな物質をつくる際、物質群の中から直観的に「これがよい」と選ぶのには、ある種の経験の中の何かの価値観から導かれるもので、それはその人の理論に基づいている。そういったものを数式に具体化するのが物理の理論研究者で、どうやって実証するかというのが計算なので、いろいろな意味でリンクはしている。計算の結果が本当に合っているか合っていないかというのは、その研究者がちゃんと積み重ねた何かがあって、「これは絶対に正しい」というところまで導けば理論に格上げされるし、わからずに「こんなものでこんなふうにできました」ということで終わってしまえば、それはただの計算である。
○川合　ラフリンはアメリカ物理学会で「Theory of everything」と言って、結局、計算機さえ進めていけば全部できてしまうと言った。理論とは、物理的描像があって、そういうものを数式に表わしたものなので、いわば哲学のようなもの。ここでも、「理論」と「計算」という言葉が出てくるが、材料においてはどこを攻めていくかということをそろそろきちんとしないといけない。その背景としては、今、マテリアルインフォマティクスが大事だという話がある。しかしそれが進んで何になるのか、今まで解決できなかったすごいことができるということを最初に示さないと、プロジェクト化はできない。そういう背景があるので、理論や計算がどこまでできて、どういう意味があるかということを明確にしながらプロジェクト化していかなければ乗り切れない状況にある。

【3D プリンタの可能性】
3D プリンタによって今後どういった新しい物質材料の領域が広がるか。一番極端な例ではドレクスラーの言う分子ナノテクノロジー。原子分子をアセンブラ（ここでは 3D プリンタ）にかければ何でもできてしまうと言っている。もう少し現実的には、分解能を高めていけば微細に制御した新しい材料やデバイスができるという話もあった。
○佐藤　切り口として、結晶成長エピタキシーがある。これもある意味では 1 原子層ずつつくっていくという 3D プリンタ。そういうものと、印刷機でやるのとでは本質的に違うのではないか。
○エピタキシーを使ってコンビナトリアルをやるという鯉沼先生がリーダーのプロジェクトがあった。コンビナトリアルというのは試験管を 12×8 のマトリックスに並べ、溶液法でどんどん高分子や薬品をつくっていくということで、合成法も評価法も規格化されていて、買えば誰でもできる。このプロジェクトは、まず PLD で薄膜を原子層でエピタキシャルでつくりましょうということで、苦労もあった。
今回の 3D プリンタでは、エピタキシーができるかどうかというのは疑問が残るが、例えば金属なり酸化物を 3 種類か 4 種類、例えば 10×10 の組み合わせの組成でどんどん混ぜて、その後は最近では鉄板を焼き切るような高温で加熱できるようなレーザーもあるので、とにかく組成をどんどん振って、あとは基板をうまく使えば固相エピタキシーで、単結晶ライク

な小さいピクセルでできたサンプルはつくれるのではないか。もちろん、すぐにできるわけではなくて、機械の発展やそれなりに試行錯誤を経ないといけない。
○ノウハウがなくて、例えば誰かが 3D プリンタを買って鉄板の上に組成の粉をまいて焼き固めればできるかとなると、多結晶とかクオリティが落ちてしまって、材料の固有の組成を入れるところまではいかない。結晶成長の技術を融合させると、強力になるのではないか。
○最小の構造ユニットをどういうイメージで捉えるか。例えば多元系をつくる時に、溶融でつくるのか、液層でつくるのか。アモルファス結晶をつくってもよいが、その時にどこまでの構造ユニットをコントロールできるかによって、バルクの材料として特性が変わるか混ぜ物をした時に、最小の構造ユニットがなぜそこで安定化するのか。例えば超伝導でも、どの元素がどこに留まってほしいということをやった。そういう最小ユニットみたいなものをどう考えるか。
もう一つ、3D では今は限られた材料しかできていないけれど、あの技術があったら、新しい材料をつくって、意味のある構造体をつくりたいと思う人は山ほどいるわけで、ぜひとも新しい材料ができたら速やかに特許を出してほしい。
○最小ユニットは、昔、薄膜プロセスで蒸着のようにやってつくった時には、例えば固溶体をつくる時に、数Åの中で A と B をうまく混ぜないと固溶体がバルクでできなかったという経緯がある。その時に使っていたのは、非常に蒸着レートが遅くて、原子層内で固溶体をつくるということができたが、3D プリンタの場合には、たぶんミクロンもしくはサブミクロンで着いていくはずなので、それではただのサンドイッチ膜になるので、ポストプロセスで、3D プリンタで堆積した後、例えば真空内もしくは適した雰囲気内で溶融するまで加熱する、あとは固層エピタキシーという方法もあるので、基板をうまく選んで結晶成長をうまくするというのが考えられるのではないか。
○アモルファス材料の相転移のスピードをいかに上げるかという研究をやったことがある。その時にどうしてもわからなかった一つは核発生。核発生のコントロールは今はできているか。それとも、確率論でしかやりようがないのか。揺らぎとローカルな秩序性みたいな理論があって、そこと核発生の段階というのは結びつくのか。
○酸化物の薄膜に特化して、アモルファスでまず室温でつくったものを単結晶化するというのは、限られた物質ではできる。基板を選ぶとできて、基板とアモルファス薄膜の界面から成長していくのだろうと考えているが、裏付けはきちんと取れていなくて、今は経験に頼っている。
○例えばレーザーや、インクジェットのノズルのところなど、機械系の人とのコラボレーション、共同研究が重要になってくるだろう。
○川合　要するに 3D プリンタを非常に精細なものにすれば、ヘテロエピタキシーもできるし、場合によっては不均一ナノ空間をつくることもできるし、その時に非平衡のプロセスを取り入れれば、それなりのものができる。そういう意味では、手段として 3D プリンタを非常に高性能にして、2 次元および 3 次元のいろいろな構造をつくって、それをいろいろな手法で解析していくと言うとつながっていきそう。あとはそれでいったい何をつくりたいのか。今まではできなくて、しかも企業の方が欲しいと思うような、もしくは世の中が「こんなものができるといい」というものがあると、非常に大きな分野に育っていく。

○佐藤　過去の例で言うと、鉄と銅、あるいは鉄とクロムの積層膜をつくっただけで GMR というノーベル賞になった。そして、数年後にはすべての磁気ヘッドはそれになった。まだまだ組み合わせはあるのではないか。今はたまたまそういう組み合わせが出たが、組み合わせを機能という面から見てもう少し突き詰めていく必要があるのではないか。
○分子をやっている者からすると、置換基を変えたり、有機物を変えればいろいろなものが山ほどできるが、3D プリンタでどう有機分子にするか、合成化学者からすると、まずそこで悩む。今回は材料だが、3D プリンタというと機械工学の人などが主なのか、材料に浸透してきている技術なのか。
○例えばガラスをつくろうとすると、曲げようとすると不均一に曲がってしまうが、一列に違うガラスを均一に並べたりすると、新規のガラスができる。骨の部材をつくるにしても、チタンというのは普通の骨に比べると硬いから、他の骨に負担がかかってしまうので、例えば表面をチタンだけにして中は軟らかいものにする。これまでの複合材料ではなくて、もう少しいろいろなバリエーションがあるものをつくることができる。中に制振材料の機能を持つようなマンガン合金をつくるとか、そういったものをターゲットにするのはどうか。これらはただの複合材料だが、ミクロンレベルになると、例えばニッケルのナノ粒子とアルミのナノ粒子を合金にすると、普通にアルミにすると絶対にできないような合金組織ができる。
○佐藤　それはエピタキシーで既にやっているのではないか。それと 3D プリンタでやれることとは違うべき。
○エピタキシーは、薄膜で機能材料をつくる場合にはよいが、ミクロンレベルが限界なので、そういった意味ではバルクを意識したモノづくりになる。
○3D というのは、空間をつくりつつつくるようなイメージがある。普通のインクジェットで塗り分けて重ね塗りすればよい話と、3D との差は何か。
○3D は形にできるので、最終製品まで直接できる。
○いま可能な範囲からすれば、マイクロ制御の形をつくる手段として、適した形があって、その形に何か材料としての機能を入れる。形が適した形というものをつくる。合金などの話になると、単なる塗り分けでよい。
○佐藤　構造を考えたものでないとだめだろう。そういう意味では、例えばフォトニッククリスタルをつくれるのか。野田先生がやっているのはナノメートル以下の制御をしている。
○そうすると、3 次元レジストみたいなものとのすみ分けも必要になってくる。
○佐藤　今の 3D では無理で一皮むけた 3D が必要。
○川合　この議論を進めるために、積層複合原子デバイスなどがいくつか出ていたが、これですごくよい巨大物性、まったくの新機能、確実に今までを 10～100 倍超えるような特性例の可能性を聞きたい。3D は使わなくてもよいが。
○薄膜を使う利点は、グラフェンなどは透明性が使えると思う。例えば Google が売り出したビッグデータに簡単にアクセスするためのツールがそういう身近なものにできる。それは超軽量で、しかもグラスに載せるためには透明である必要がある。フレキシブルデバイスやウェアラブルというのは、そういうものの基礎デバイスがまだちゃんと考えられていないのではないか。その一つの解になり得る。
○佐藤　今のところ 3D は 1 種類しかできていないけれど、何種類かのものでやれる見通しはついているのか。

○簡単なチタン合金とかニッケル合金などはできている。
○インクジェットを何に使っているのかというと、体積が小さい吐出液滴中の溶媒は早く揮発するため、例えば、ポリマーブレンドの相分離が早い段階で凍結されるであろうという研究に使っている。通常、スピンコート法に頼っているが、インクジェット法では、溶媒の飛ぶ過程がより速くなるので、より細かい構造ができる。非平衡でフリージングした状態が見えて、より細かい相分離界面を増やすと、機能が上がってという流れで研究を行っている。それはある意味で、高分子で言うところの分子レベルの溶液の相溶状態から相分離し始め止めて、有効な非平衡構造を生みだそうということをやっている。
○3D は 2 次元も兼ねるという意味で、それはそれで使い道がある。フレキシブルエレクトロニクスで透明なデバイスをつくる時に、よく動物の脳に回路を貼り付けたりということをやっていて、軟らかい素材をいちいち精製して使わなくても、そのままプリンタで回路をつくって脳波をそのまま測るなど、そういったことはある。
○もっと大きなサイズで、細胞を 3 次元に積層して臓器をつくってみようというような流れがある。細胞そのものを重ねるのもそうだし、細胞を培養するための足場材料を 3 次元で肺の形にするというような話がある。あとは、細胞の種類をいくつも重ねて組織にするという、そういう用途もできる。
○佐藤　むしろそういう大きなものがよいのでないか。

【イオン輸送】
イオン輸送は一見確立している。でもそうではないという話だったが、現象としてのイオン輸送は切り口が非常に難しく、どのレベルでどういうふうにやると固体化学としてものすごい進展があるのだということを言ってほしい。
○生体におけるイオンの選択的輸送というのが参考になる。固体のイオニクス材料は分野として閉じている印象がある。電池というアウトプットに特化し過ぎている。もう少し、ファンダメンタルだがイオニクスという観点と、例えばエレクトロニクスとかスピントロニクスの分野を融合できれば新しい領域として何か生まれるのではないか。エレクトロニクスと違ってイオニクスはイオンに半径があるので、分子や空間を使わないと輸送できないという感覚がある。そこに以前より検討されている酸化物と無機物の融合する領域において何か機能が出るのではないか。
○佐藤　組頭さんのやっている ReRAM やレドックスでは明らかに輸送。そういうものと、有機物における輸送とは何か性格が違うが、同じものなのか。生体におけるカルシウムチャネルなどのイオン輸送もまた違う。
○イオニクスの移動は今、電池を始めとするプロトン伝導現象などで盛り上がっているが、その物質・材料開発指針は、酸化物でも構造の中に大きい空隙をもつものをよく利用して、その中に分子、いろいろなイオンを通そうということ。なるべく母体は大きくてイオンは小さいほうがよいとか、そのくらいの発想しかなく、どういうふうにこれらが機能と相関しているのかというのは全然わかっていない。メゾスコピックな構造の空隙を利用し、イオンもしくは分子が通るパスをうまく制御した新たな物質創製は、一つのキーワード。
○非常に簡単な応用としては触媒の話があるが、固体面のイオン輸送を制御できると酸、塩基の強弱にもつながってくる。多孔性材料では、最近プロトンベースのキャパシタなどがや

られているが、エレクトロンとプロトンを両方使っているようなキャパシタなどは概念としておもしろい。
○イオン輸送と言えるかどうかはわからないが、材料の中に入っているアニオンが出入りすることで反応を促進するような触媒を実際に使っている。例えば最近、層状複水酸化物の中に炭酸イオンが入っているものが空気中の二酸化炭素と常に入れ替わるというものが JACS の論文の中に出ていた。選択的に反応させたい分子を取り込んだり放出したりするような材料が、イオン輸送に関連するかどうかは別だが、そういう材料の開発がもっと進展したら、新たな触媒材料が生みだされるのではないか。
○無機材料のメゾスコピック系をつくる技術でイオンチャネルの反応場を制御する試みはないのか。空隙と言うと、ナノポーラスとかシリカ材料とかそちらの結晶化学的な空隙を使うイメージしかない。
○今、プロトニクスの分野では水は入れるなという話もあるが、高湿度下で駆動する系は、リオトロピック液晶という分野に属する。この液晶性を使うとメゾスコピックな系で構造をある一方向につくれたり、それを立てたりできる。メゾポーラス系研究でも、同様な原理でポーラス構造の配向制御ができる。
○電界効果型トランジスター（FET）をつくって電解をかけてイオンを駆動するとか、そちらのほうに頭が行ってしまうが、それと反応場をうまく組み合わせればおもしろい。
○プロトン制御性にはすごく興味があるが、FET などをつくるにしても界面。界面の移動度が高くて、プロトンの連動性が観測できる輸送路がある薄い薄膜。FET でかかる厚みの領域はどのくらいか。
○これまでに、そういった電界をかけて反応場を制御するとか、そういったアプローチはないか。
○プレゼンテーションでは、プロトン FET の例を 1 報挙げていたが、原理がわかったものはない。

【分子の制御】
有機分子の 2 次元、構造を確立するという 3 次元。それをさらに分子レベルでメカニカル機能を行うところと、その中のキーワードとしてメゾ領域というものがある。全体の意識としては、有機材料、できれば生体まで行くとして、その 2 次元もしくは 3 次元の完全制御的なキーワードが多い。こういうものができたら材料として今まで困っている何が解決できるか。
○3 次元化すると、密度がはるかに上がるので、キュービックで上がっていくので 2 次元とは全然違う。分子のレベルなら数ナノ、高分子が凝縮してもそのくらいだが、それをいかに並べてその方向に増幅させるかということで、光学的なシャッターのようなものは作れる。その分子の駆動は、アクチュエーションにも展開できるだろう。または、表面のみ運動性の材料に改質し、例えば、ぜん動運動により物を輸送するようなものができる。このように、分子を配置・配向して、組織化し、それを動かしてメカニズムまで観察することは、できるだろう。
○2 次元で並べるということでは、光合成なども膜の上にタンパクが並んで連動して働いているが、2 次元空間内に載せて順番に電子を受け渡すようなことがある。個々の機能している分子が、ばらばらだとうまく連動できないものを 2 次元、3 次元に位置を固定すると、も

う少し多段階の反応を連動させられるような材料ができる。協同的に働かせる系をよりつくりやすい。それに続いて、位置を決めるだけではなく、さらに情報を制御してスイッチのオン／オフをちゃんと制御するところまで来ると、生物に近いものをボトムアップでつくるという話になってくる。
○揺らぎが連動するということで、分子からさらに大きいスケールの異なる階層構造の揺らぎを独立に制御できれば、『ネイチャー』級の仕事になる。
○佐藤　例えば、次世代シーケンサーなどで、この最後の部分はすごく意味があるように思うが、議論はないか。
○川合　DNA や生体物質を分離したり、うまく一方向にもっていくというのはすごく重要。今後のバイオデバイスのキーテクノロジーなので、そういうものにつながれば大変良い。
○2 次元系ということでは、分子の分野では精密に位置をコントロールして素子をちゃんと並べたりといったことはやられていない。
○佐藤　ポリマーブラシなどはスケール的にはどうか。
○もう少し大きい。その小さいものをやっていく必要がある。

【推進方策・研究環境】
○川合　国として取組むべき課題。特に進め方について、いろいろな意見が出た。計測技術そのものはよいけれど集積化でヨーロッパに負けているので、10 年くらいの長期の推進体制が必要であるという意見や、基礎的におもしろい物性が出ても、応用されないところがあるのではないかと。それから、グラフェンではなくシリセンのような日本独自のものを進めるような施策があってよいのではないか。それから、数理構造ベースの異分野連携があったほうがよいのではないかと。特にプログラムやデータベースで外国製が日本を席捲している。それは、プログラムづくりなどが評価されない。これは日本の技官問題とも少し関係している。それから連携不足。異分野融合は適切なリーダーが必要。むしろテーマは決めないで民間とアカデミアが交流して少し自由度を持たせる。
昨日から出ていた問題は、異分野融合というのは具体的にどういう融合をすると効果的かということで、理論・計算分野、物質を合成する分野、計測分野。それから、材料とバイオを結びつける。それぞれ特徴のある交流の仕方があるのかどうか。適切なリーダー、PM、PI。どのような技術の目利きがよいかということで、リタイアした研究者の有効活用をするとよいのではないか。PM に対する要請があったが、たくさん出てきたのは、どうも日本の技術は優れていながら外国に負けてしまう、地味な仕事、プログラム作製などは報われないという話。
異分野融合に関して改めて、それぞれに特徴はあるのか。今後ぜひこういうふうにしたほうがよいということがあれば、もう一度念を押すような意見をうかがいたい。
○異分野融合について、「融合しなさい」というトップダウンの命令に合わせて、適当に「計算の人が必要と言っているから、入ってよ」という付け焼刃の融合ではだめ。例えば電池の寿命や容量をどれくらいにしなさいとか、何かの設計指針を見つけなさいという目的を明確にした融合を設定することが重要。

○宮野　今、異分野融合研究というタイトルで仕事をしている。異分野融合と語る範囲は 2 つの意味がある。一つは、チームビルディングの話。つまり、正確に言うと異分野連携。これは、目的を明確にして組織をきちんとすればよいだけ。これはこれで方法論もたくさんあるし、例えば計測とバイオとか、医学と工学でやる時には目標を一致させるだけではなく、実は分野同士の研究スタイルや研究に対するマインドや前提条件を共有することが本邦でもたくさんある。
もう一つは、ちょっとメタな話に戻るが、まったく新しいものを生みだしたいという時には、融合という言葉を使う。これをもっと正確に言うと、哲学的に言うと対立関係なので、もっと喧嘩しなければだめ。硬い材料の人たちと軟らかい材料の人たちが喧嘩して初めて融合になるので、新価値を生みだそうということが主眼であれば、また別の理念と方法論がある。そこが混乱している。また、価値と技術も混乱している。
○佐藤　喧嘩する場が必要ということか。
○宮野　場が要る。もちろん、喧嘩するためには共通の目標や、ステータス、インセンティブも必要である。歴史的に見ても、喧嘩して融合した例はあまりない。分野はどんどん細分化している。融合したらなくなる。実は派生しかしていない。
今後何が必要か。まず一つは、もし異分野融合が必要であれば、この分野独特の方法論が必要である。もう一つ、まったく新しい価値を生みだすのであれば、それはそれで別の方法論が必要で、例えば、ここに物質以外の研究者を入れる必要がある。新価値というのは、物差し。例えば企業の人が何が欲しいという発想ではなく、最近流行のアーティストを呼んできて、アーティストが「これがあれば、こんな作品がつくれる」というようなことを主眼に置いたら、全然違う発想が出てくる。そういう方法論の話。

○川合　もう一つ、適切なリーダーというところで大変に意外な気がしたが、リーダーが決めろという意見が出た。SIP はその方式で、最初に PM 的な人を決めて、その人がチームをまとめていくというもので、そういう意見が若手の方から出たというのは大変に印象に残っている。
○PM が自分の身内だけで固めるとまずいので、それは本当によい人でないとまずいということがある。
○ある程度若い人で、本当に融合させたいと思ったら、そういう上からのやり方が必要なのではないか。
○川合　共通しているのは、その人が現役の科学者だとかえって制限してしまうので、卒業したばかりの人がよいというのがだいたいの意見。そのほうが若手を育てられるということを皆さんが言っているように感じた。いずれにしても、そこがすごく重要だという意見が多かった。
○川合　科学者は自由にやりたいというのが原動力になっているので、たとえすごい人であっても上から押さえられるよりは、うまく自分の個性を伸ばしてくれる人のほうがよいと感じているということだろう。
○目的意識ははっきり持っていただいて、方法論は自由度を与えてあまり制限をかけないこと。

○川合　いろいろなところで日本の技術のほうが個々に見れば優れているのに、どうも外国に負けてしまう。そういう中の一つとして、地味な仕事、例えばプログラム作成とか地味な技術開発があまり評価されないということで、ヨーロッパでは技官制度がしっかりしていて彼らが非常にプライドを持って息長くやっている。技官、技術者をエンハンスするような施策はけっこう効果があるが、そういう意味で材料や物質というのは幅広くて、地味な蓄積の上にぽっと生まれるということがある。

6.サマリー

★以下の７つの大きな研究の方向性が抽出された。

１．3D プリンタなど積層造形技術の活用による革新的材料の創出
現在は、数十マイクロオーダー、単一材料での積層技術が、サブマイクロになり、複数元素を扱えるようになれば、組織を制御した材料の創製が可能となる。同時に装置の空間分解能の高度化（粒子の精密制御法）や時間の短縮などの技術開発が必要となる。
用途について、バルクの構造材料、ナノスケールの半導体材料、生体材料・組織など何を対象にするかによって方法論が異なってくる。材料（種類、粒径など）、加工法、これらと機能の相関などに関して、学理の構築が必要となる。また、エピタキシャル成長（ＭＢＥやＭＯＣＶＤ等）などの技術との差別化やマルチスケールでの加工技術の連携についても可能性を検討する必要がある。将来的には、大量合成、高速評価、インフォマティクスというコンビナトリアルのスキームが必要になる。

２．マルチスケールの連結とメゾ領域（数十 nm からｍｍのオーダー）の制御による革新的材料・デバイスの創出
計算科学手法において､物理モデルと現象論モデルの境界､メゾスケールの扱いが課題となっている。これは構造材料などで機能の発揮と直結し、制御すべき材料組織の大きさとも一致する。個々の分野（スケール）に優秀な人材はいるが、幅広い分野（スケール）を俯瞰する人材が欠けている。機械系、材料系、物理系の人が一緒にやっていく場が必要。化学（電気化学、触媒化学、高分子化学、合成・構造化学など）の分野でも、メゾスケールの現象の理解・制御が課題となっており、方法論の確立が必要となっている。

３．ボトムアップ的手法とトップダウン的加工法の活用による革新的デバイス創出
リソグラフィのようなトップダウン的超微細加工技術と、自己組織化プラス化学合成のようなボトムアップ的手法とが、１０nm あたりでクロスして、相互作用（相乗効果）が出せる。これはあと１０年以内にそういうタイミングが来る可能性がある。これによって、いわゆる分子エレクトロニクスが実現し、高性能、低消費エネルギーデバイスが生まれる。そのためには、分子を望みの位置に二次元、三次元的に精密に並べる技術が欠けており、高純度化、超高真空など超清浄環境における作製技術の構築が求められる。材料としては、グラフェン、カーボンナノチューブやナノワイヤの活用も見込まれる。化学工学、計算化学の参加が求められる。また高分子やゲルなどの材料とＭＥＭＳの連携によるアクチュエーション機能の実現も期待される。これらを活かすにはエネルギー源と有望なアプリケーションの探索が必要。ＣＲＤＳが２０１０年度に「分子技術」というプロポーザルを発行し、戦略創造事業において実施されている領域と関連する部分がある。動向を継続的にウォッチするべき。

４．理論（演繹的手法）と実験の一層の連携による予測に基づく物質・材料研究の促進。
理論は、演繹的な数理構造ベース（特に物理モデル）からの仮説の設定・議論の発展を指し、電子論とも称することができる（実験結果から導かれる設計原理とは異なる）。計算機の能力

が向上し、やれる計算からやるべき計算にテーマが移りつつあり、実験家にとって、ようやく理論・計算が実験結果に結びつくという実感が持てる状況になってきた。
シンガポールおよびUKのグラフェンセンターでは、キーになる理論家がアイデアを出して、「こういうところを狙え」という形でうまく束ねている。それぞれのチームメンバーのレベルを比べると、日本の研究レベルのほうが高いが、結果として見ると、ペーパーの数、インパクトファクターが高い。
日本においても文部科学省で平成２３年度より実施している「元素戦略（拠点形成型）」はこれを実践する体制を整備している。
物質・材料のプロジェクトにおいては、理論・計算と実験が具体的な目標を設定し、チームを組んで理論・計算側の予測に基づく取り組みを実践していくことが望ましい。今後一層、理論や計算と実験が歩み寄ってインタラクションしなければいけない。

５．演繹的手法と帰納的手法の双方向の活用による革新的な物質・材料設計（マテリアルズ・インフォマティクス）
現在の革新的な高機能材料と言われるものの多く、例えば構造材料（金属、高分子、セラミクスなど）、エネルギー材料、触媒などは、複雑系、不均一性が本質となっており、従来の手法だけでは現象の理解（機能と構造の相関の理解）が進まなくなってきている。また多様な構造から、どうやって機能性物質を探索するかという問題が重要になっている。
そこで、従来の理論・計算アプローチに加えて、多種大量の実験（計測）データを積極的に活用することによる帰納的かつハイスループットなアプローチを確立し、これによって設計原理を導き出す必要がある。物質・材料研究においては、今後データベースが非常に重要な役割を占める。そのためには、計測技術の高度化も必要で、空間分解能や時間分解能の両方を進めることによって原子、イオンレベルで構造－機能相関を明らかにすることができる。
本テーマについては、ＣＲＤＳが２０１３年度に「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）」というプロポーザルを発行している。

６．二次元薄膜の複合・積層化による革新的デバイスの創製
原子レベルでは、グラフェンだけではなくてＮＩＭＳ発のヘキサボロンナイトライドの薄膜やMoS_2、タングステン膜との組合せが主流になっている。日本が強いシリセンなどもある。2 次元空間を拡張して考えると、表面・界面におけるトポロジカル絶縁体、ラッシュバ（Rashba）効果の活用などもあり、数十ナノの量子デバイスでは酸化物エレクトロニクス、数百 nm 2次元電子ガス、さらに生体膜の利用などもある。この領域はこれまでにも高温超電導、グラフェンなど物性の宝庫。積層の次は面内における制御が求められる。
ＣＲＤＳが２０１１年度に「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」というプロポーザルを発行している。しかし、この分野では、その後、世界的に急速な進展があることから、実際の事業の推進にあたっては、本ワークショップの内容も取り込んだ取り組みがなされることが望まれる。

７．輸送、相変化、非平衡、揺らぎなどの現象をテーマに異分野が連携することによる新しい価値（材料の機能）の創出

例えばイオン伝導はいろいろなところで使われており、いろいろな研究者が参画できる。酸化物多層膜で電子の高移動度（伝導）も注目されており、酸化物や窒化物、その他の材料は、界面や格子欠陥などの非平衡性が、物性・機能に大きな影響を及ぼしているが、まだ、氷山の一角である。そういった意味で、現象をキーワードに関係する人たちが集まって議論して、次の領域を設定していく方法が考えられる。一方、アカデミックにはおもしろいが、ともすると科研費的になってしまう面に留意が必要。バイオインスパイアード材料などもこの範疇で捉えることができる。これらを積極的に活用した材料やデバイスの出口イメージをもつことが必要となる。

★日本の競争力強化に向けて国、独法や大学、学会が取組むべき７つの課題が抽出された。これらの環境を整備することにより、イノベーションが起こる確率を上げていくことが重要となる。

【前提となる背景】

日本は、優秀な人・技術がそろっている。にもかかわらず、分野によっては中国やシンガポールなどで質の高い論文が日本に先行して出されている、または、大学における研究成果が必ずしも産業に結びついていない、といった状況がある。今後 10 年、15 年を考えたとき、アジア諸国では資金が豊富で人海戦術も使える一方、日本はそうはいかない。以上の状況に鑑み、産官学で危機感をもって本気で考えなければいけないし、各研究者の立場からも考えていかなければいけない。

【国、独法や大学、学会等が取組むべき課題】

1. 大学研究者の産業への貢献を評価する仕組みの必要性
   日本では科学技術でよい研究や論文が出ているが、その後に直接的に産業につながったという話は、光触媒、TMR 素子、IGZO など数える程度である。大学では研究費をもらって科学的によい論文を出せば、それで達成感が出てしまう。また、サイエンスやネイチャーに載りにくい分野、例えば構造材料は産業への貢献は大きいにも関わらず、研究費が少ない、評価されにくいといった理由で研究人口が減っていき絶滅危惧種になりつつある。大学研究者の産業への貢献を評価するシステムを、国や大学が検討する必要がある。
2. 大学と企業の定常的なコミュニケーションの場の必要性
   現状では大学の研究と産業界とのギャップはすさまじいものがある。企業が大学の研究成果を応用に使おうとするモチベーションがない。大学人は企業と話す機会がないので、実際に物をつくっているところのニーズなどが見えない。普段からもう少しざっくばらんな話ができるような機会や場が必要である。
3. 大学研究におけるシステム（垂直連携）統合の仕組みの必要性
   材料というのはデバイスあっての材料という側面もある。デバイスが決まれば、おのずと材料技術は発展する。日本の素材産業はそれで発展してきた経緯がある。デバイス化に向け物質・材料のツールはかなりそろっているが、現状は分野が細分化し過ぎているし、材料とデバイスの研究者の距離が離れすぎている。キラーデバイスを生みだすため、

材料とデバイスの研究者が連携して、機能や現象などをキーワードに近傍のコミュニティの集積を図り、バックキャストによって集積・統合の方法や取組むべき物質・材料の分野を考えていかなければいけない。

4. 明確な目標の下、コーディネータの巧みなさばきによるプロジェクトの必要性
出口を意識したプロジェクトを立ち上げるとき、研究者の自主性に委ねると、各研究者はこれまでの研究の延長で取組むことに止まり、連携・融合は実現しない。材料設計においてプロセス、理論・計算、計測の三位一体のプロジェクト構成がうまくいっていないのもこの理由による。単独の研究者が集まるだけでなく、うまく歯車を回すために、例えば構造材料の強度をこれだけ上げるとか、触媒の性能をこれだけ上げるというような、具体的な目標をもったプロジェクトがあると、三者がそれぞれに適切な手法を選ぶ。現役を引退したばかりの大岡越前的なコーディネータが目的を明確に示し、それに向かって各研究者の集積を図りながら、研究全体を正しい方向に導くとともに、方法論は自由度を与えて研究をさせるような仕組みが必要となる。

5. ソフト・サービス基盤の強化の必要性
今後の物質・材料研究において益々重要となるソフトウェア（プログラム）やデータベースにおいて外国製が日本を席捲している。大学でプログラムをつくっても日本のサイエンスの中では評価されない、あるいは、プログラムやデータベースの整備、維持、管理には科研費がつかないといった環境を改善する必要がある。米国では、物質・材料の研究者がいろいろなソフトウェアツールをつくって、それでドクターを取って、会社に就職するし、ソフトウェア会社にとってもそのような基礎研究への期待が大きく、人材の受け皿となっている。

6. 異なるキャリアを持つ人材の役割連携によるチーム形成の必要性
プロジェクトを組む時にテクニシャンなどキャリアの異なる専門家が入ることが重要。欧州では技官制度がしっかりしていて彼らが非常にプライドを持って息長くやっている。計測機器やプログラムの開発や維持管理、データベースの整備などが対象となる。国の支援で行われたプロジェクトの研究成果（例：計測機器やシミュレーションプログラム）をオープンにして、他の研究者が使えるようにしてくことも重要である。研究マネジメント人材（リサーチ・アドミニストレーター：URA）や知財人材も同様である。

7. 新たな価値を創造できる人材育成のための教育や人材循環の必要性
研究者が、一つの大学・分野にずっと留まるとそこで考えや研究が固まってしまい、視野が狭くなってしまう。理論がわかる実験家、実験がわかる理論家、という専門性に加えて、分野外の技術・研究に対し一定の理解ができる人材の育成が必要となる。目を開く仕組みづくりが非常に大切となる。一つの評価の考え方として、どれだけ人が動くか、違う機関から人を採ったかというところを評価する仕組みがあってもよい。そもそも学部教育から分野が分かれるというところから始まっているので、大学院教育等で融合を意識させるようなカリキュラムを積極的に組んでいくことも必要である。

付録１　プログラム

プログラム（敬称略）

◆１月２０日(月)

10:00～10:10　開会挨拶　曽根純一（JST-CRDS）
川合知二（JST-CRDS）

10:10～10:25　ワークショップの趣旨説明　島津博基（JST-CRDS）

10:25～12:05　第一部「物性から材料へ」　(各講演 15 分+議論 10 分)

10:25～10:50　話題提供-1　若林克法（物質・材料研究機構）【ナノサイエンス理論、物性理論】
10:50～11:15　話題提供-2　町田友樹（東京大学）【物性物理学】
11:15～11:40　話題提供-3　組頭広志（高エネルギー加速器研究機構）【酸化物界面物性、固体分光】
11:40～12:05　話題提供-4　福村知昭（東京大学）【酸化物エレクトロニクス】

12:05～12:45　昼　食

12:45～13:10　話題提供-5　溝口照康（東京大学）【無機材料・物性】
13:10～13:35　話題提供-6　藤田武志（東北大学）【材料科学（材料組織学)、電子顕微鏡】
13:35～14:00　話題提供-7　大野宗一（北海道大学）【材料科学・金属材料学・計算材料科学】

14:30～15:50　第二部「分子から材料へ」　(各講演 15 分+議論 10 分)

14:30～14:55　話題提供-8　重田育照（大阪大学）【理論化学・計算化学】
14:55～15:20　話題提供-9　堀毛悟史（京都大学）【錯体化学、材料化学、固体イオニクス、多孔性材料】
15:20～15:45　話題提供-10　田原一邦（大阪大学）【有機合成化学、構造有機化学、超分子化学、表面化学】
15:45～16:10　話題提供-11　永野修作（名古屋大学）【高分子化学・光機能化学】

16:10～16:20　休　憩

16:20～16:45　話題提供-12　北野政明（東京工業大学）【触媒化学】
16:45～17:10　話題提供-13　山本浩史（分子科学研究所）【有機デバイス】
17:10～17:35　話題提供-14　葛谷明紀（関西大学）【生物有機化学･生体超分子化学・核酸化学・分子ロボティクス】

17:35～17:45 翌日のワーキング確認

◆１月２１日（火）
9:30～12:15　　創発・発見（気づき）事項の発表と議論・まとめ
9:30～10:45　　他者の話題提供を聞いての意見の発表（全員、３～４分／人）
10:45～12:15　　議論・まとめ

12:15～12:20　　閉会

付録２　参加者一覧

参加者（敬称略、五十音順）

◆招聘識者

（発表者）

・大野宗一　北海道大学大学院工学研究科 准教授
・葛谷明紀　関西大学化学生命工学部 准教授
・北野政明　東京工業大学元素戦略研究センター 准教授
・組頭広志　高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 教授
・重田育照　大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授
・田原一邦　大阪大学大学院基礎工学研究科 助教
・永野修作　名古屋大学大学院工学研究科 准教授
・藤田武志　東北大学原子分子材料科学高等研究機構 准教授
・福村知昭　東京大学大学院理学系研究科 准教授
・堀毛悟史　京都大学大学院工学研究科 助教
・町田友樹　東京大学生産技術研究所 准教授
・溝口照康　東京大学生産技術研究所 准教授
・山本浩史　分子科学研究所協奏分子システム研究センター 教授
・若林克法　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(MANA) 独立研究者

（コメンテータ）

・大林元太郎　東レ株式会社 研究本部顧問
・北岡康夫　経済産業省製造産業局 産業戦略官
・塚本健次　昭和電工株式会社 技術顧問
・田中秀治　東北大学大学院工学研究科 教授、JST-CRDS 特任フェロー
・松下伸広　東京工業大学応用セラミックス研究所 准教授、JST-CRDS 特任フェロー

◆JST-CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット

・曽根純一　上席フェロー・ユニットリーダー
・河村誠一郎　フェロー・エキスパート
・佐藤勝昭　フェロー
・島津博基　フェロー
・永野智己　フェロー
・中山智弘　フェロー・エキスパート
・中本信也　フェロー
・馬場寿夫　フェロー
・川合知二　特任フェロー・大阪大学産業科学研究所 特任教授

◆関係府省・独法

色川 芳宏　内閣府 総合科学技術会議事務局 共通基盤技術グループ ナノテクノロジー・材料担当
立松 慎也　文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 参事官補佐
河村 麻美　文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 係長
宮野 公樹　文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 学術調査官
門平 卓也　物質・材料研究機構 調査分析室 主任エンジニア
渡津 章　経済産業省 産業技術環境局 研究開発課 課長補佐
内藤 泰久　経済産業省 産業技術環境局 研究開発課 研究開発専門職
宮本 良之　産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門
吉田 勝　産業技術総合研究所 ナノテクノロジー・材料・製造分野 研究企画室 室長
王 正明　産業技術総合研究所 環境管理技術研究部門 上級主任研究員
飯塚 薫　新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO） 電子・材料・ナノテクノロジー部 主査
坂下 幸雄　新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO） 電子・材料・ナノテクノロジー部 主査

◆JST

浅野 佳那　科学技術イノベーション企画推進室　ナノテクノロジー・材料分野 メンバー
勝又 康弘　戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 主任調査員
橋本 典親　戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 主査

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

曽根	純一	上席フェロー
河村	誠一郎	フェロー／エキスパート
佐藤	勝昭	フェロー／研究広報主監
島津	博基	フェロー
永野	智己	フェロー
中本	信也	フェロー
中山	智弘	フェロー／エキスパート
馬場	寿夫	フェロー
魚崎	浩平	特任フェロー
川合	知二	特任フェロー
河田	聡	特任フェロー
北澤	宏一	特任フェロー
田中	一宜	特任フェロー
田中	秀治	特任フェロー
松下	伸広	特任フェロー
村井	眞二	特任フェロー

CRDS-FY2014-WR-01

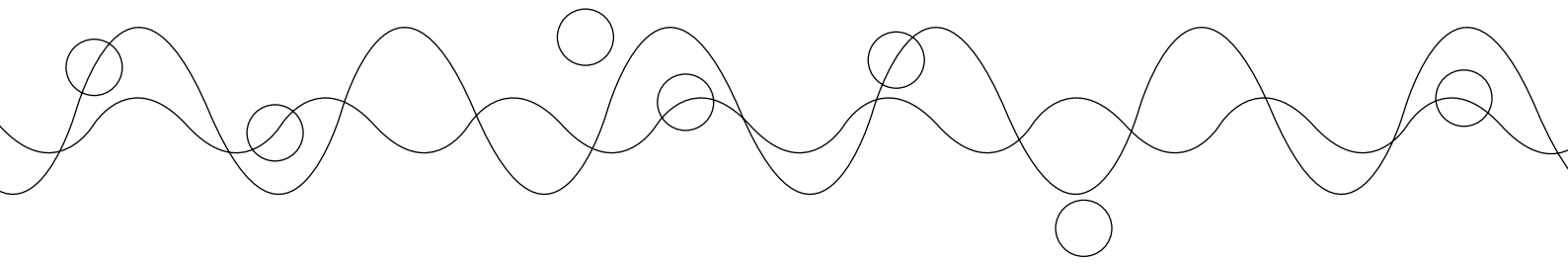
ナノテクノロジー・材料分野

俯瞰ワークショップ報告書
物質・材料領域分科会

平成 26 年 5 月

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
Nanotechnology/Materials Unit, Center for Research and Development Strategy
Japan Science and Technology Agency

〒102-0076　東京都千代田区五番町 7
電　　話　03-5214-7481
http://crds.jst.go.jp/

ⓒ2014 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.