

3.5 基盤科学技術

応用分野を支えるとともに、それぞれの分野の最先端研究を牽引する「共通基盤技術」として、先端的な「加工・合成」、「計測・解析」、および「理論・計算科学」がある。

「加工・合成」については、トップダウン型プロセスの典型である超 LSI 微細加工技術に対して、ボトムアップ型プロセスの典型として、スループットの視点からは欠かすことのできない自己組織化がある。原子・分子から出発して材料やデバイスを逐次積み上げていくことを想定した場合、生体は自律的かつ階層的に構造形成が進む点で「階層的自己組織化」が実現されており、このプロセスの理解と応用がボトムアップアプローチの究極の目的の一つとなる。新しい材料として、ナノ・マクロの空間を制御した超分子材料、機能性ゲル、DNA 折り紙などが研究されてきたが、ナノテクノロジーとしてその成果を総体的に見ると、応用への展開は未熟である。自己集合の階層的発展の理論、非平衡開放系における時間・空間上の散逸構造の解明、平衡論と速度論の使い分け、ゆらぎの効果などサイエンスを巻きこんだ基本課題について出口からの位置付けが必須となる。

「計測・解析」については、選択したナノ領域を直接見る電子顕微鏡や SPM に加え、放射光・X 線、中性子、ミュオン、陽電子などの粒子線ビームが用いられる。放射光は構造解析や光電子分光、元素分析をはじめとする種々の用途に、中性子は重元素と軽元素が混在している結晶の解析や中性子の持つスピンを利用した磁気散乱による磁気構造の同定などに用いられる。ミュオンは磁性秩序や電子状態の測定あるいは元素分析などに、陽電子は格子欠陥の検出や空孔サイズの測定、あるいは結晶表面の解析などに用いられる。今後のナノサイエンスには、これらによる三次元計測、動的・リアルタイム計測、界面および内部計測などが必須であり、また、プロセスの微視的解明のためには、使用環境下でのその場計測技術に高いニーズが存在する。例えば、生体の細胞表面や細胞内部の三次元的観測、触媒や燃料電池の内部反応状態の解明に必要である。他にも高温、ガス環境、電場、磁場、応力などの「環境下」の問題がある。

「計算科学」も、今後、ナノテクノロジーの基盤的技術として本質的に重要な役割を果たす。特に目的機能を持つ新材料を創成するために必要となる動的過程のシミュレーション技術などには不可欠の武器である。特に、量子力学を考慮した第一原理計算による分子動力学は、原子数が数十万個程度の系を対象にできるようになり、存在感が急激に増している。今後は、理論モデルと計算を合わせたハイブリッドな方法で現実の複雑な系を追い込んでいくこと、特に非平衡開放系の現象をどう表現するかが重要な課題となる。データベースやインフォマティクスと結合したマクロ複雑系のシミュレーションによる現象解析に向けて、計算科学への期待は益々高まりつつある。

上記の共通基盤技術群の上位レイヤーとして、ナノテクノロジー・材料全体に関与する特有の「設計・制御概念・技術」がある。具体的には、「マテリアルズ・インフォマティクス」、「元素戦略」、「分子技術」、「空間制御」や「界面制御」、「バイオミメティクス」等であり、これらはいずれも目的とする機能を実現させるための構造の設計・制御手法として、サイエンスの新局面を拓くことによって社会・産業に貢献しうる領域である。

ー マテリアルズ・インフォマティクス：計算科学による特性予測、それを実証するハイスループット材料合成と評価、それらのデータを統合管理する材料データベースや機

械学習などを統合的に活用した物質・材料探索・設計の取り組み全般を指す。実験、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータに加えて、統計的手法を駆使して、新物質、新材料の「発見」を加速し、物質・材料の機能を制御する規則を探る。究極には、理論研究者の参画により、規則の背景にある材料特性を支配する法則を「理解」し、自在な材料「設計」を可能とする系統的アプローチを構築することを目指すものである。これにより新機能材料の開発速度の加速、およびコストの大幅低減が可能となり、我が国の産業競争力強化にもつながることが期待されている。

－ 元素戦略：比較的豊富に存在する元素や有機材料などを用いて、目的とする機能を備えた材料を開発するために、電子状態、原子配列、分子構造などの微視的な観点から目的機能を如何に発現させるかを検討し、計測技術や計算科学を活用して構造・機能・反応をデザインするものである。

－ 分子技術：分子を設計・合成・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するために必要な一連の技術群を指し、設計・創成、変換・プロセス、電子状態制御、形状・構造制御、集合体・複合体の制御、輸送・移動制御から成る。

－ 空間制御：物質・材料中の微細な空間構造や空隙構造の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性および界面をナノ～メソ～マイクロメートルで設計・制御・階層組織化することによって、従来の空間利用の常識を超える機能を発現する材料を開発するものである。

－ 界面制御：理論解析と精密な分子設計や構造制御による界面の創成、および計測法の開発やモデリングに基づく界面の特性解析を行い、界面が関与する新奇現象・物性を解明するとともに、界面の特性を活かした新たな機能材料、デバイスの開発を対象とする領域である。今後特に、細胞のような生体物質と半導体のような人工物の間の制御が重要になる。

－ バイオミメティクス：生物の構造と機能に関する知見を、材料、デバイス、システムの設計・製造に系統的に活用するための研究開発である。生物に学ぶことにより、製造・使用時のエネルギー消費が少なく、環境適合性の高い材料、デバイス、システムを実現することを目指すものである。

3.5.1 界面制御

（１）研究開発領域の簡潔な説明

理論解析と精密な分子設計や構造制御による界面の創成、および計測法の開発やモデリングに基づく界面の特性解析を行い、界面が関与する新奇現象・物性を解明するとともに、界面の特性を活かした新たな機能材料、デバイスの開発を対象とする研究領域である。本領域で得られた知見は、金属、粒子などのハードマテリアルをはじめ、高分子、分子集合体、ゲル、バイオ由来物質などのソフトマテリアルや無機－有機ハイブリッド材料による新規界面の構築に利用される。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

材料のマクロ物性やデバイス特性は、結晶粒界、焼結体界面、ナノ・メソ構造の接合部分など、物質の複雑な界面構造に大きく左右される。それは界面ではバルク固体にはない特異な電子状態を生じるため、結果として新たな物性・機能が生まれる可能性をもつからである。特にナノマテリアルにおいては、構成原子・分子ならびに電子数すべてが有限な、いわば「界面に囲まれた状況」とも言える。このことが新規な物性・反応性・外場応答性等を生じる理由にもなることから、ナノマテリアルの物性制御・新機能の発現には、界面状態・構造の解析・解明・制御が不可欠となる。

界面の状態・構造を原子・分子レベルで精確に計測・評価する技術としてアトムプローブ、走査型電子顕微鏡、高輝度放射光などが着実に進歩してきた。ただし、結晶性が悪く不純物の析出が伴うような複雑な界面状態・構造の特定と物性理解はなかなか進んでいない現状もある。複雑な界面における複合的な構造・反応機構をその場で観測・解析しうる先端計測法の開発が当然必要である。さらには、多様な電子・原子配列による機能発現を多量データの統計的解析により整理・理解して新規材料の設計・開発につなげる「マテリアルズ・インフォマティクス」の視点での研究開発が求められている。

本研究開発領域の進展によって永久磁石や高強度構造材料などナノ・メソスケールの微細組織が重要な材料の特性改善、ナノ構造デバイスの特性と安定性の改善、ナノ材料による巨大面積・精密加工のための基盤技術の確立、太陽電池・燃料電池・二次電池といったエネルギー変換デバイスの効率や寿命の向上などが期待できる。

〔これまでの取り組み〕

二次電池、燃料電池、色素増感太陽電池など、直接的な電子移動が起こる固体と液体の界面は、エネルギー変換の効率化に重要な役割をなす心臓部とも言え、効率や寿命の向上を目指す研究が各国で活発に行われている。これらの反応過程を如何に正確に把握するかが重要となるが、それらは固液、固々界面などの埋もれた界面で起こっており、そのような界面を動的にプローブすること自体が非常に困難である。水平分解能が非常に高い走査プローブ顕微鏡は主として最外層の情報のみが得られ、また時間分解能が低い。さらに固々界面に適用することはできない。埋もれた界面幾何構造の観察という観点からはシンクロトロン放射光（X線）や中性子を用いた計測法などに代表されるように、構造を反応が起こっているその場で実時間追跡する技術の開発が進んでいる。一方、

界面の電子構造や分子構造の測定には非線形分光法が有効であるが、水平分解能と時間分解能が低く、それらの向上のための装置開発が行われている。

このような界面の局所構造情報を得る方法は、X 線などの放射光を用いる方法、レーザーを用いた非線形効果による界面選択的分光など、面垂直方向の分解能は高いものの、面内分解能が低いものに限られてきた。固体／固体の界面については透過電子顕微鏡という極めて有効な手法があるが、液体／固体界面、とくに液体側の構造解析は困難である。液中周波数変調方式の AFM (FM-AFM) は、原子スケールの面内分解能をもちながら、界面近傍の液体の情報まで得られるため、数少ない有効な手法として発展が期待される。これまでは無機固体や有機薄膜についての測定に限られていたが、最近、電池が動作するような条件で、界面付近の電解質イオンの濃度が変化することによって、水和構造ネットワークが変化することが報告されている。さらに、例えばタンパク質が機能発現するために必要と考えられている強く水素結合した水と水の位置や吸着の強さを評価できる可能性もあり得る。

液中での電子移動反応の速度については、第一原理計算と分子動力学計算を組み合わせた手法によって、溶液内での分子間の電子移動はかなり正確に記述できるようになった。電極界面においても、対称性の高い金属単結晶電極については、Pt 上で電極電位に応じた水と水の配向変化や水の解離に関する計算がなされて、実験と対応する結果が得られている。

しかし、今日に至ってもなお、電子移動（酸化・還元）によって固体電極に生じる絶対的な電位と理論計算によって得られるエネルギーの比較には合理的な基準がない。

表面・界面における計測技術として最近注目されているのがスピン分解電子分光装置、先端的走査プローブ装置（超低温超強磁場中で動作可能、パルス電圧印加可能、フェムトレーザー照射可能、複数プローブ型など）、低速電子顕微鏡などである。これらは日欧が技術開発に伝統的に強く、産業化も進んでいる。米国は、研究室レベルでの開発能力は極めて高いが、それを産業化する企業がないのが実情である。超高感度検出器については、日本が大学での研究レベルであるのに対し、欧州ではメーカーによる初期段階の製品に近い試作レベルに達しており、かなり先行している。これらの電子線、X 線、光を用いた光学系の研究開発は、日本が強い分野であったにも関わらず、ここ 20 年ほどは常に欧州に先行されている。

【今後必要となる取組み】

機能性材料の創製には、固相法、スパッタ・PLD・CVD などのドライプロセスによる成膜法、共沈法・ゾルゲル法・水熱法のようなウェットプロセスなどの従来型合成法と、自己組織化のように分子の特異性、物質の界面特性、非平衡場などを利用する合成法が考えられる。界面制御は、これまでは応用ごとにプロセス技術の改良として主に行われており、分子材料と粉体 ($\mu\text{m}\sim\text{mm}$) の加工技術の延長で理解されている。ナノテクノロジー・材料分野で直面している課題のひとつとして、ナノ材料の特性を活かしたままナノ材料間をつなぐ界面層の開発がある。例えば有機デバイス（有機 EL や太陽電池など）の場合、微結晶中での電子およびホール移動度もさることながら、微結晶バウンダリー（界面）特性がバルク電子物性を決めることから、材料の特性を活かしなが

材料間をつなぎ、バルク特性として優れたものを得るための研究をさまざまな材料で横断的に行い、統一した指針を立てることが求められる。物質の界面に関する第一原理シミュレーション手法の高度化や探索アルゴリズムの開発も必要となろう。

電池などで特に重要な液体の中の固体やその外側の電気二重層、超伝導など新たな物性を示す新規物質層ともみなせる示す固体－固体界面などの埋もれた界面の非破壊解析技術の開発も引き続き必要である。一方、近年、界面選択的な分光手法、界面近傍の顕微画像化手法は発展を続けているものの、分子の動きまで含めた空間・時間分解能をもたせることは原理的に困難で、計算科学的手法に頼るところも大きい。物質と電子の移動が起こる固体電極と液体の界面の液体側を含む局所構造は、電池等の変換効率を左右する重要な要素であるが、その理解は未だ十分ではない。

高機能を求めると、ソフトマテリアル/ハードマテリアルからなるハイブリッド材料が今後重要な選択肢となることから、そのための評価技術の整備が必要である。既存の複合材料は有機成分と金属を含めた無機成分をただ混合したものが多く、機能を担う成分を配列制御して革新的な新機能を創製する研究の進展が望まれる。金属（無機）成分の空間配置は従来の顕微鏡技術で解析できるが、今後は界面における特徴的な相の存在や相互作用を可視化・分析する技術開発が必要となる。解析・評価技術としては、反応が進展するまさにその瞬間をとらえるための *In-situ* やデバイス等の実際の使用環境下での測定を行う *Operando* 解析など、真のその場解析の技術を着実に進めるとともに、実用的な表面・界面の理解を深めて行く必要がある。

界面創成と密接に関連する計測・評価技術の課題として以下のものが挙げられる。

・溶媒を含む状態での微細構造の観察技術

ナノスケールイメージングの代表的な装置である電子顕微鏡は、試料を超高真空状態に置く。しかし、ソフトマテリアルなどの材料、生物、医学分野の多くの試料は含水状態である。したがって溶媒を含む状態での微細構造の観察技術が実現できれば、応用分野は非常に広い。含水試料に対しては極低温で試料を固定（固化）し、その状態で観察する技術はすでにあるが、特殊で使いにくい。試料の構造を変化させない急速固定化の新技术が必要である。電子顕微鏡の場合、試料室のサイズが小さく、電子の透過力も小さいため、超薄膜の観察は可能であるが、変形、その他の試料環境を構築するのが難しい。高温、ガス下、低真空状態、力印加状態での電子顕微鏡法（環境 TEM）の開発が行われているが、3次元的な構造観察は実現していない。

・資料損傷の回避

電子や X 線などのプローブによる試料損傷が問題である。試料損傷の理論とそれを裏付ける基礎的実験が不備である。試料損傷を防げないのであれば、超高感度検出器を開発し、試料が損傷する前に画像を撮影する必要がある。プローブとして電子や X 線以外の可能性として、例えば He イオンあるいはその他の低ダメージのイオンビームの利用も検討する必要がある。

- ・イメージング技術

X線の場合は超高速でダイナミックレンジの大きな二次元検出器が必要である。また得られた大容量の画像を高速度で転送し、3次元（立体的に見える）あるいは4次元（変形、時間などの外部条件を次元と考えると4次元）化するイメージング技術を開発する必要がある。ここではイメージングと計算機科学の連携・融合が重要となる。

- ・ソフトマテリアルに適用できる原子分解能観察技術

ソフトマテリアルとハードマテリアルの界面構造・機能を原子～メゾスケールの空間領域でシームレスに観察できる顕微鏡が必要である。また、高圧下、溶媒中あるいは変形下などの外部条件を試料に加えた状態で観察ができる顕微鏡あるいは微細領域の高感度分光技術が必要である。

（３）科学技術的・政策的課題

物質の界面の問題は、様々な材料（鉄鋼、非鉄金属、セラミックス、半導体、有機材料）やデバイスに共通するテーマであるが、関連研究者は各分野に細分化されており連携が難しい。また、これまでの研究は特定の材料に関するもので、散発的という印象がある。関連研究者を専門分野の壁を越えて連携させ、複合的な手法開発を行うことが求められる。

日本には多くの優れた界面科学研究者がおり、また優れたナノ材料を扱う企業があり、環境は整っている。まずは、計算物質科学研究者、理論研究者、高度な計測技術を持つ実験研究者、および材料開発を行う研究者（企業を含む）の連携協力を促す仕組みが必要である。

さまざまなナノ材料、デバイスを網羅する意味で、複数の大学研究者と複数の企業との連携体制で、基礎から出口への一貫した研究を実施することが望ましい。産業界のニーズに基づき、主として大学・国研の研究者が理論や原理、手法開発を行い、開発された手法を用いた実際の材料開発、装置試作は、主として産業界が担当する。ただし、材料開発は競争的分野でもあり、知財が絡むため、企業間の連携は難しい面がある。

埋もれた界面の計測は、信号強度がある程度落ちることが避けられないため、放射光施設を用いて手法開発を進める必要がある。現状の個人的関係をもとにした開発のみに頼ることなく、統括者のもとに公募によりチームを作って予算を投入するような仕組みが試みられても良いと思われる。

国内のスパコンの利用については、昨年度より「京」の一般利用が一部公募開始されるなど、界面へ応用する環境面では整いつつある。また、CRESTや燃料電池関連のいくつかの研究プロジェクトにおいても、電極界面での電子移動に関わる計算機シミュレーションに関する研究投資は行われている。また、実験的な界面の解析は今後ますます重要となるはずであるが、常に計算手法とのリンクを意識して取り組むことが重要になる。

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

走査型透過電顕（STEM）、アトムプローブ（STM、AFMなど）による原子レベルで

の実空間観察の解像度が向上している。

位相差顕微鏡法により、軽元素からなる物質（生体組織なども含む）に対するコントラストが増大している。

多次元空間の探査手法の開発は世界的に多くの試みがあり、日本からも複数の研究者が強力な手法を提案している。とくに日本発のレプリカ交換法は世界的に広く使われている手法である。複雑な界面構造の探査については、シリコン表面酸化膜（ SiO_2/Si ）の構造シミュレーションの試みが IBM から報告されている。日本では比較的簡単な金属粒界の界面構造について、実験研究、理論研究が進められている。

真空中で真の原子分解能を有する AFM 手法として 1995 年に発表された周波数変調方式の AFM (FM-AFM) を、徹底的なノイズ低減を行うことで液中動作可能とした液中 FM-AFM 手法は、従来の AFM とは大きく異なり、液と接する固体の構造だけでなく、その近傍にある液体側の構造まで画像化することを可能とした。例えば 2010 年以降、水溶液中で、固体表面の構造に対してどの位置に水和水が構造化しやすいかという情報が界面近傍の 3 次元情報として得られるようになった。液中 FM-AFM の技術開発は、日本が圧倒的なリードを保って進んでおり、JST 先端計測分析技術・機器開発事業に採択され、製品化まで至っている。また、世界に先駆けて 2010 年には電気化学反応が起こる界面に本手法を応用する開発も行われ、現在は世界で 5 グループほどが同手法を用いた電気化学界面の局所構造解析に着手している。

〔注目すべきプロジェクト〕

インクジェットを用いるナノプリンティングが産学で研究され、銀粒子を用いる回路描画技術の実用化を目指している。

元素戦略プロジェクトでは、二成分ナノ粒子の混合系を用いて、代替元素を創出するという成果が出ており、材料に新しい可能性を示すものとして注目される。また、界面制御によりジスプロシウム使用量を減らしたネオジム磁石など、ナノ界面制御に関連する成果が得られている。

JST/CREST「エネルギー高効率利用のための相界面科学」とさきがけ「エネルギー高効率利用と相界面」（いずれも平成 23 年度開始）では、ナノテクノロジーを環境・エネルギー技術に用いるプロジェクトが推進され、界面が大きな技術要素となっている。また、JST/CREST「二次元機能性原子・分子薄膜による革新的部素材・デバイスの創製と応用展開」（平成 26 年度開始）ではカルコゲン化合物やトポロジカル絶縁体で新しい量子物理現象の室温での発現や電場でのスピン制御を可能にするデバイス開発や絶縁性脂質二分子膜に基づくイオン・電子ナノチャネルの創成など、界面での制御が最も顕著に現れる課題が採択された。

SPRING-8 の高輝度放射光や X 線自由電子レーザー (XFEL:SACLA)、J-PARC の強力な中性子源、熱ミュオニウムなど、大規模実験施設の整備も進んでいる。

2012 年には国内においてナノテクノロジー・プラットフォームが発足した。つくばにおける TIA とあわせ、国内の研究の牽引が期待される。

(5) キーワード

自己組織化、自己修復、電気二重層界面、Operando 解析手法、第一原理分子動力学計算、高分解能電子顕微鏡、ナノ材料、フレキシブル、インプリンティング、ハイブリッド界面、もれた界面、界面伝導、トポロジカルマテリアル、界面電子移動、エネルギー変換、溶媒和層

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↗	基礎研究は活発で、国際的にリードしている分野が多い。しかし、分野間の共同研究はまだ不十分である。 SPring8においてもX線回析・散乱・EXAFSなどの表面・界面を見る技術が進んでいる。 シリコンLSI分野では、研究・基礎技術レベルでは、日本が界面現象の物理的理解において一歩リードしており、米韓は新材料界面開発で世界をリードしている。 有機デバイスについては日本が高い技術的競争力を有する。有機低分子の存在下でグラフェンを焼結すると、接合部位の欠陥を有機分子から提供されたカーボン原子が補い、導電性を保った接合が可能である。それ以外（特にグラフェンなど新規材料）については米国に大きく立ち後れている。 半導体を中心とする真空中の研究に加え、固-液界面の研究が、評価手法の進歩と産業界の材料ならびに製造プロセスに関するニーズから活発になっており、世界的に研究水準は上昇している。
	応用研究・開発	◎	→	全体としてのレベルは高いが、分野間また産学間の連携が不十分であり、研究の展開がやや硬直的である。 材料分野の製品・技術開発において界面・表面の課題の解決は必須であるとの認識が高まっている。例えば、ナノインプリント技術には、広範なナノ材料基盤技術が関わっている。アカデミックな研究の成果が生かされてきている。 企業の官学の基礎研究のナノテクノロジー基盤を活用するという期待は以前にも増して高まっている。化学プロセスや材料の構造の精密化から表面・界面の吸着など、現象の解明と機能・特性制御への期待が大きい。例えば、SPring8での高分子に関するフロンティアソフトマター開発産学連合ビームライン（2010年竣工）、JST産学共創基盤基盤研究プログラムの中の「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」、燃料電池開発のための先端構造触媒反応「リアルタイム計測ビームライン」（2012年）が関連分野の基礎研究の成果を踏まえ実現した。 基礎研究により開発された装置が市販されるなど、基礎から応用への橋渡しがされているが、官学で開発した装置の普及には時間がかかる状況であり、ナノテクプラットフォームでの活用など工夫が必要である。
	産業化	○	→	JST先端計測プログラムの推進もあり、計測装置メーカーにおける先端機器の発売は増えており、特にAFM（高速AFM、液体構造観察用AFM）や電子顕微鏡関係が目立つ。 ナノフルイディクスのためのナノデバイスの製造技術の開発が進展しており、低コストで高品質のデバイス開発が実現されつつある。トライボロジー分野では固体潤滑膜や硬質膜を形成する製膜技術や製膜装置の開発に関して、DLC（ダイヤモンドライクカーボン）を中心として国内メーカーが積極的に取り組んでいる。また、添加剤開発に関するポテンシャルも高い。ナノプリンティング技術が活発に研究され（JST ERATO、コンソーシアムなど）、解像度が上がり、実用化へ期待が高まっている。ナノフルイディクスを用いるバイオセンサ、単一細胞センサなど、創薬研究への実用が試みられている。

米国	基礎研究	◎	↑	研究者層が厚く、境界領域の研究に積極的に参入する傾向がある。特にSEMATECHなどのコンソーシアムが材料科学分野を牽引し、グラフェン、トポロジカル絶縁体表面等の研究が爆発的に広がりを見せている。デバイスに向けた基礎研究も大学や企業の研究所でも活発に行われており、応用技術への展開が主要なモチベーションになっている。 ・米国化学会は雑誌の発刊に意欲的で、2009年にジャーナル“Applied Materials and Interfaces”、2011年にはACS Catalysisが発刊され、それぞれ2014年時点でImpact Factorが5.0を超えるなど、短期間で主要な雑誌の仲間入りをしている。化学・工学・物理・生物の融合研究領域をカバーする雑誌、界面に関する学術雑誌としては他にNano-Letters, ACS Nanoもあり、それぞれ12および9.5以上と非常に高いImpact Factorを得ている。 ・ハーバード大学、スタンフォード大学、UCLA、ノースウェスタン大学など多くの大学で、ナノ構造を用いたバイオ応用、センサを目指した研究開発が進んでいる。また、エバネッセント光を用いたナノ光学、さらに、ナノフルイディクスによる流体ダイオード開発のような新展開も見られる。トライボロジー分野では、SFA(表面間力測定装置)やSPMを用いた研究は盛んで、基板上の原子や分子を操作する研究が行われている。また、コンピュータシミュレーションでは、第一原理計算やMD(分子動力学)を用いた研究で世界一のレベルを維持している。
	応用研究・開発	◎	→	研究体制の流動性、研究者の意識、ベンチャー支援システムまで総合的にみて高レベルにある。デバイスに向けた基礎研究も大学や企業の研究所でも活発に行われており、応用技術への展開が主要なモチベーションになっている。電子顕微鏡および先端の走査トンネル顕微鏡(超低温超強磁場中やパルス電圧型)など先端の装置の開発が継続的に行われている。半導体分野では、SEMATECHなどのコンソーシアムが材料科学分野を牽引しており、応用技術への展開が図られている。ナノ流体研究では、多くのベンチャー企業が、大学の基礎研究に基づいて、バイオ・医療応用、バイオテロ対策などを目指した研究開発が進んでいる。トライボロジー研究では、計測機器の開発をきっかけとしたベンチャー企業の設立が行われている。
	産業化	◎	→	大学などの技術をベースにしたベンチャー企業が次々と生まれ力となっている。Intel、IBMなどの大企業を中心に緩やかな産業技術力の向上が認められる。人材の流動性により、複数の企業の共同研究が行われるなど機動力がある。 新しいインプリンティング技術などが多く開発され、低コストで高品質のデバイス製造技術が開発されている。ナノマテリアルなどの素材開発などで、技術力の高さが推察される。
欧州	基礎研究	◎	↑	・表面界面の研究は、ドイツを中心に伝統的に強い。金属表面での触媒作用に関する研究など根強いものがある。グラフェンなど新しい話題も欧州に端を発している。先端的な計測機器の開発も継続的に試みられている。欧州連合も基礎から応用までの研究支援に注力しており、IMEC・LETIなどのコンソーシアムを始めとして基礎研究の十分な支援がある。 ・基礎研究については、各国に特徴的な分野や中心になる研究機関があり、世界をリードしている。例えばドイツは、マックスプランク研究所がコロイド界面研究所、高分子研究所など複数の専門の研究所を有し、ミュンヘン大学などの大学のセンター、ミュンスターのCeNTechなどもある。トライボロジーはロンドンとリヨンに拠点がある。放射光施設などの国際的な存在感の大きい核になる研究機関が複数存在し、大型施設を用いる計測も含め欧州全体での研究交流・共同研究、人材育成も活発である。デンマークなどの小国でも理論(計算)科学の表面・界面への展開などユニークな国際レベルの研究が見られる。 ・英国王立化学会(RSC)や民間の出版社による関連分野の雑誌の出版も続いている。例えばRSCではLab on a Chip(2001～)、Soft Matter(2005～)、Nanoscale(2009～)、民間では、Small(2005～、Wiley)、Nature Nanotechnology(2006～、NPG)、Particles(2012～、Elsevier)などがある。 ・ナノフルイディクス分野では、オランダ・トウェンテ大学、フランス・CNRS、スウェーデン・カロリンスカ大学・ルンド大学などの大学で基礎研究が進んでいる。

欧州	応用研究・開発	◎	→	特色のある技術開発は一部に見られるが、全面展開の状況にはいたっていない。 ドイツの低速電子顕微鏡や走査プローブ顕微鏡、スウェーデンの高分解能電子分光器など表面界面に関する計測機器の開発力は高い。半導体界面に関しては、IMEC、LETIを中心に高い技術開発力を誇る。官学と企業の研究の間のバリアが低く、連携がはかられている。英国においてはロンドン大学とインペリアルカレッジの連携するナノテクノロジーセンターが材料ナノテクノロジーの応用をはかり10程度のスピンオフ企業が生まれている。 ナノフルイディクスに関し、いくつかのベンチャー・大企業において、研究開発が行われている。
	産業化	○	→	触媒など化学分野で伝統的に強い。表面界面に関する最先端計測機器メーカーの活躍が目立つ。産学連携により高い産業技術力を維持している。 化学や医療分野は国際化が進んでいるが欧州をベースとするトップ企業の産業技術力は高く、新しい展開に対しての関心も高い。研究開発の世界展開が図られ、日本に研究所がある企業も多い。 ナノ微細加工の製造技術は進んでいるが、低コスト化の点で日米に遅れている。トライボロジーに関しては、製膜装置メーカー、真空機器メーカー、計測機器メーカーが伝統的に強く、産業技術力の下支えをしている。
中国	基礎研究	○	↑	表面界面の多くのトピックスに関して、質・量ともに上昇している。国家政策として大規模な支援を受ける清華大学などの中核大学が世界的な成果を出し続け、存在感が急速に増しており、今後も継続する見込み。 研究拠点は大都市に集中しているがその研究設備は充実しており、条件探索などが活発に行われている。特に材料分野では、海外（欧米、日本）での経験を持つレベルの高い研究者が帰国しており、研究水準が急激に向上してきた。材料関連の多くの分野で国別発表論文数の1位となっている。ただし、その多くが既存概念の延長上の研究でもある。表面科学、固液界面、自己組織化単分子層といった分野で存在感が高まっている。 ナノフルイディクスにおいては、北京大学、南京大学などいくつかの大学において基礎研究が開始されているものの、国際的に注目に値する研究はまだ少ない。トライボロジーにおいては、経済的な発展を背景に研究開発力が急速に向上している。
	応用研究・開発	△	↑	半導体分野においては国策として大学を中心とした研究開発の躍進がめざましい。独自の技術開発を生み出すためには、今しばらく時間が必要と思われるが、半導体デバイス分野の研究開発水準の指標とされるIEDMにおいても存在感を急速に増すなど、進展速度が大きい。ナノフルイディクスにおいては、大学発ベンチャーにおいて、研究開発が開始されているが、日米には遅れており、トライボロジーについては、企業における研究開発は低調である。
	産業化	△	↑	大学発ベンチャーなどが出てきているが、世界的な水準まで達していないのが現状。中国にある国外のナノテク企業が高度な技術を持ち込んできている結果、人材の集積が進み、トップ企業の産業技術力は国際的レベルに到達している。全体としての産業技術力も向上しており、規模を考えるとそのポテンシャルは無視できない。

韓国	基礎研究	○	→	半導体界面の研究を中心に小数ながら世界的に高水準の研究成果が継続的に出ている。しかし、米国での研究経験者が多く、ナノバイオでも学際的、融合的研究が進んでいる。ナノテクに関する学科、学生数、および自国研究者による論文数はKNIが立ち上がった2001年から増加し続けており、今後も順調に増加していくと思われる。ナノテク特にナノバイオ関連のセンターが大学に国の支援によりいくつか設置されている。さらに引き続きエネルギー関連での研究機関（例えばGIST）の増強が進んでいる。近年の主な研究対象は、半導体、コーティング、ナノインプリントである。一方で、先端機器を用いる基礎研究のレベルは欧米に劣るが、放射光施設も浦項に開設されるなど進展も見られる。ナノフルイディクスにおいては、ソウル大学、KAISTを中心としたナノテクセンター構築など基礎研究でも日米を猛追しようとしている。トライボロジーにおいては、キャッチアップ的なテーマが多く、大学や公的研究機関のポストが少ないためか、優秀な人材が海外流出する傾向にある。
	応用研究・開発	◎	→	世界最先端の技術開発が行われた例は認められないが、多くの領域で基礎研究とその技術展開が行われており、今後発展期を迎える可能性がある。多くの領域で基礎研究とその技術展開が行われつつある。特に、燃料電池、二次電池、バイオセンサなどで産学連携研究が活発に行われている。ナノフルイディクスにおいては、大企業を中心に、バイオ応用のための研究開発が進展している。また戦略的に研究資源を投資する土壌があるため、今後ポテンシャルが向上していく可能性が高い。SPMの草分け的なメーカーが米国から韓国に本拠地を移し、レベルの高い機器開発を行っており、関連計測機器の研究開発が活発化しつつある。
	産業化	◎	↗	サムスンを中心に、グラフェンデバイス実用化のための研究が盛んに行われている。基礎研究より実用化志向の技術開発が盛んであるが、2014に入って半導体産業の経済的な打撃を受けて、イノベーション進展速度の低下も考えられる。ナノフルイディクスにおいては、製造技術について、新たな低コスト・高精度技術開発を行い、日米を急迫している。トライボロジーにおいては、自動車産業をはじめ、電子情報機器などの製造業を支えるのに必要十分な技術を保有していると推察される。

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 参考資料

- 1) 元素戦略 : H. Kobayashi, H. Morita, M. Yamauchi, R. Ikeda, H. Kitagawa, Y. Kubota, K. Kato, M. Takata, S. Toh, S. Matsumura, *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, 134, 12390
- 2) 高速 AFM : T. Ando, *Nanotechnology*, 2012, 23, 062001
- 3) 固・液界面観察 AFM :
T. Fukuma, K. Kobayashi, K. Matsushige, H. Yamada, *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 86, 193108
- 4) ナノインプリンティング: JST / y ERATO 下田ナノ液体プロセス:
http://www.jst.go.jp/erato/research_area/ongoing/snp_PJ.html

3.5.2 空間・空隙構造制御

(1) 研究開発領域の簡単な説明

物質・材料中の微細な空間構造や空隙構造の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性および界面をナノ～メソ～マイクロメートルで設計・制御・階層組織化することによって、従来の空間利用の常識を超える機能を発現する材料を開発する研究開発領域である。空間・空隙構造制御が可能な材料の代表格としては、主にゼオライト、メソポーラス材料（シリカ、アルミナ、金属酸化物など）、ポーラスカーボン、多孔性金属錯体（PCP: porous coordination polymer、あるいは MOF: metal-organic framework）などがある。

多様な空間・空隙構造制御材料は、構造の特長と設計の自由度、そこから生まれる機能の観点から、透過・分離・吸着・変換・貯蔵材料、触媒・反応性制御、構造材料、電池材料、エネルギー変換材料、ドラッグデリバリーシステム、生体適合材料、分子認識材料、電子材料など様々な応用の可能性をもつ。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

21 世紀になり世界の関心が「もの」から「機能」に変わってきた。新たなトレンドに対応する機能を発現する材料の探求と機能の追求が課題となっている。シェール革命や地球温暖化などへの対応がメガトレンドとなり、たとえば化学産業の石油化学からガス化学工業への変移や CO₂ 排出量の削減・回収に向けた取り組みが空間・空隙構造を制御できる材料の研究開発に拍車をかけた。

日本学術会議や日本化学会のロードマップでは、気体補足積層分子の設計、CO₂ の有用物質変換、代替エネルギー、人工光合成の実現、量子ドット太陽電池などのテーマが将来有望視されている。2014 年 6 月に発表された資源エネルギー庁の研究支援の考え方には、ガス化、C1 化学（炭素数 1 の一酸化炭素やメタノールなどの単純な分子を原料に、炭素数の多い有機化合物をつくること）が盛り込まれた「分解高付加価値化技術」のなかに、革新的ガス化技術を利用したコンビナート連携、新技術によるメタノール直接合成、新メタン活性化触媒によるトルエンへのメタン付加によるキシレンの製造、新フィッシャー・トロプシュ（Fischer-Tropsch）触媒とプロセス、酸素透過膜を利用したコンパクト合成ガス製造技術、プロパン/プロピレンの分離などのテーマが挙げられており、さらに「環境・省エネ技術」のなかに、酸素富化燃焼技術、二酸化炭素の化学品への転換技術などのテーマも盛り込まれている¹⁾。空間・空隙構造制御が可能な多孔性材料の特性を生かした課題解決が期待できる。

[これまでの取り組み]

多孔性材料としては、産業利用の観点ではゼオライトが、学術的な研究の傾向として、メガトレンドであるシェール革命や地球温暖化に関連するテーマが多くなっている。シェール革命によりアップストリームの分離（CO₂/メタン、窒素/メタンなど）やダウンストリームの分離（エタン/エチレン、プロパン/プロピレン、水素/CO₂ など）の報告が増えている。地球温暖化関連では、CO₂/窒素分離や蒸留から多孔性膜分離への転換を報告する傾向が現れている。またメソポーラス材料から多孔性金属錯体の研究へ転向する研究

が目立っている。国際学会としては、ゼオライトが 1967 年以来、International Zeolite Conference (IZC)、多孔性金属錯体が 2008 年以来、International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds をそれぞれ開催している。多孔性金属錯体は 2007 年以降 IZC のセッションに加わり、2013 年には Metal Organic Frameworks の委員会が設置された。

・ゼオライト

ゼオライトは 1756 年に Axel F. Cronstedt (スウェーデン) により天然のゼオライトが発見されてから、Richard M. Barrer によるモルデナイトの合成、1972 年 Mobil のグループの構造規定剤 (SDA) を用いた ZSM-5 の合成、1988 年に黒田一幸 (早稲田大学) によるメソポーラスシリカの発見を経て、現在 218 個のゼオライト構造が作られ²⁾、既に脱水剤、吸着材、触媒などの用途に広く産業利用されている。研究開発は、基礎研究で合成、膜、構造、物性が中心であり、SDA を用いないゼオライトの合成、メタノール/水分離膜などが注目される。応用研究で、石油/ガス化学触媒、環境触媒、吸着/分離材が中心であり、天然ガス関連の触媒、分離が注目される。

各国の施策では、欧州の EU FP-7 (第 7 次研究枠組み計画) で 3 つのプロジェクト、スペインの農業向けゼオライト (プロジェクト名: ECO-ZEO、266 万ユーロ)、ノルウェーで触媒用ゼオライト (プロジェクト名: ZEOMORPH、152 万ユーロ)、ドイツで有機ゼオライト (プロジェクト名: ERC-SG、152 万ユーロ) が進められている。米国エネルギー省 (DOE) では触媒の基礎研究に 48 万ドル、また NSF では 3 のプロジェクト、タールのクラッキング (プロジェクト名: Turning Tars into Energy、19 万ドル)、ゼオライトの Cu、Fe 活性点 (プロジェクト名: Chemical Catalysis、53 万ドル)、オレフィン/パラフィン分離 (プロジェクト名: SBIR Phase II、64 万ドル) が進行している。

・メソポーラスシリカ

メソポーラスシリカは日本では産業利用の段階に入っている。日本化成はメソピュア[®]の商品名で、シートに加工して結露防止、調湿、防曇用に、メソポーラスシリカ粉体として触媒担体、ガス吸着、吸着物の放除用に販売している。大手架装メーカーがトラックの荷台部の結露防止用に採用している。また太陽化学は世界初のメソポーラスシリカの実証プラントを建設し、調湿材料や、Low-k 材料、触媒材料への用途開拓を行っている。クラレと NIMS は共同で反射防止膜への利用を検討している。

施策としては、EU FP-7 でイタリアの医療用プローブ (プロジェクト名: FP7-PEOPLE、19 万ユーロ) が進められている。NSF では 3 つのプロジェクト、バイオメディカルへの応用 (プロジェクト名: SBIR Phase I、18 万ドル)、大細孔/ナノ細孔材料 (プロジェクト名: CERAMICS、30 万ドル)、MRI 造影剤 (プロジェクト名: RUI、14 万ドル) が進行している。

・多孔性金属錯体

多孔性金属錯体は有機配位子を金属イオンによって配位結合を介して連結することで作られる無限骨格構造をもつ錯体で、1959 年に銅(I)アジポニトリル錯体が世界で初めて

そのフレームワーク構造が示された。その後 Omar M. Yaghi (UC Berkeley) が MOF という呼称をつけ精力的に展開した。1997 年に北川進 (京都大学) らが溶媒を含むクラスレート構造ではなく、室温でポロシティをもつ安定なフレームワークを発表し、多孔性の金属錯体の概念が世界で初めて提唱された。その後現在までに 6,000 もの構造が発表されている³⁾。

応用面では多孔性金属錯体の試薬販売を除くとおそらく世界で初めての上市になるのが、米国の NuMat 社の産業ガスの貯蔵ボンベへの利用である。毒性の高い半導体製造用ガスを多孔性金属錯体に吸着させてシリンダーに充填したもので、通常のボンベでは容器内が高圧のため、リーク時に高い圧力のまま外部へガスが放出されるのに対して、多孔性金属錯体に吸着させた場合、ボンベ内の圧力が高くなり、ガスが外部との圧力差で拡散していくためリーク時の安全性が高められる特長がある。産業用途として規模の大きいものは BASF 社の車両用ボンベへの利用である。BASF 社は長年多孔性金属錯体の研究開発を行い、2014 年～2015 年にかけて米国で多孔性金属錯体を充填したシリンダーを自動車用燃料タンクとして販売することを計画している。既に 2013 年にはアトランタで多孔性金属錯体を充填したシリンダー搭載のトレーラーを展示発表している。使用予定の多孔性金属錯体も公表しており、欧州の工場で製造を計画している。米国ではシェールガスの台頭で天然ガスの価格がガソリンの価格より低く、燃費で約半分程度となっている。しかも家庭にきている都市ガスを昇圧して充填できることから、天然ガス自動車の普及が進んでいる。

仏石油企業の TOTAL は 2009 年～2013 年の 4 年間の EU のプロジェクト、MACADEMIA (MOFs as Catalysts and Adsorbents: Discovery and Engineering of Materials for Industrial Applications) で、多孔性金属錯体による分離に関する研究開発を報告している。プロピレンの重合で未反応プロピレンを回収する窒素/プロピレンの分離の回収条件を求める検討を行った。その他、PSA による CO₂/硫化水素、プロパン/プロピレン、フィシャートロプシュ反応、メタノール製造に関連する水素/CO₂/一酸化炭素の分離の検討も行っている。また TOTAL を含む MACADEMIA のパートナーは後継の M4CO2 プロジェクトで CO₂ の回収の検討を開始した。

〔今後必要となる取組み〕

空間空隙の本質的役割の理解と既存物質にはない本質的な機能の追求が大きな取り組みとなり、そこから新たな特性が発現されてくる。空間空隙を極めるなかで、改めて新たな材料の設計と合成方法が生まれてくる。そこには計算科学や超高分解能電子顕微鏡による解析などの力も必要になり異分野の研究者間の協業が重要になってくる。新興国の科学技術の猛追を躲す上でも本質的な機能の追求が今後重要になる。

産業面では今後の世界の潮流に対応した技術と製品の設計が重要になる。原燃料は可採年数と相対的な扱いやすさからみてもシェールガス、シェールオイルが中心となっていくと考えられる。一方安価な石炭の利用も進み、原燃料が多様化していくことが予測される。それら新しい原燃料に向けた分離、貯蔵、触媒を担う新たな空間空隙材料が求められるであろうし、またシェールガス、シェールオイルでは、それらからつくることができない基礎化学品の新しい製造方法の探索に向けた新たな空間空隙材料も必要にな

ってくる。また新たな原燃料の使用により CO₂ の排出量が通増することは必至である。空間空隙材料を利用した CO₂ 回収システム、エネルギーを大量に使うプロセスから転換するために必要な材料の開発は、今以上に重要視される。日本の製造業が戦後成し遂げたイノベーションは主として新生産方法の開発であり、日本はプロセス改良が得意である。今後の世界の潮流に対応し、日本に向けた技術と製品の設計が求められる。

以下に研究課題例を掲げる。下図に示す空間空隙制御材料技術のマッピング¹⁶⁾を元に、想定される社会ニーズから、その実現に必要とされる機能要素を分解抽出し、さらにそれらを、物質技術におけるシーズ的要素へと翻訳することで課題が見えてくる。たとえば、「環境」というキーワードから、「浄化」「改質」「センシング」などの各機能項目が抽出され、それに対する技術要素として、「選択的分離」「吸着・吸蔵」、「分解」「触媒」などの機能要素が挙げられる。原子・分子の選択分離には、対象となる分子がやっと通過できるほどの径を有する細孔による分子フィルタが必要である。また、触媒には、分子が1つ入れるほどの寸法の細孔空間の中で所望の化学反応を誘起する原子およびイオンを配した格子構造を有するゼオライトなどの細孔物質が使われる。これら典型的な空間空隙制御材料である、「ゼオライト」「メソポーラス」「規則性細孔ポリマー」「ナノチューブ」などの多孔性物質／材料群が機能を発現する原理を摘出すると、「細孔や層間の寸法、形状、次元、極性、規則性」による物理的・化学的相互作用の制御や、空間空隙制御材料と物質との相互作用性を象徴する「ホスト／ゲスト」、「鍵と鍵穴」の概念、構造形成の基本原則として「自己組織化」などを抽出することができる。

一方、技術要素の「分解」とは逆の過程として、要素技術群を統合して実用技術へ適用しようとする際には、「統合」を志向するキー概念として、ナノからマクロへの「規模拡大」、統合して拡大しても全体調和が崩れない「高強度化」、現実的な時間と資源などのリソースに適応する「高速大量合成」「低コスト化」などの要素を挙げることができる。これら、社会ニーズへの適応を志向する技術要素を、科学的原理に翻訳し、各シーズ技術の基本原則との関連性を明確化しておくことが重要である。それによって、ある要素技術の学術的深掘基礎研究であっても、その成果を再び水平統合、再構築して実用技術へ接続することが容易になり、従来滞りがちであった社会ニーズと技術シーズの間を自由自在に往来することを可能とする技術開発体制が確立される。このような考えにもとづく研究開発課題は、以下のように構成される。

1. 空間空隙制御材料の設計と合成

(1-1) 空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現

(1-2) 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓

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

2. 空間空隙インプリメンテーション技術

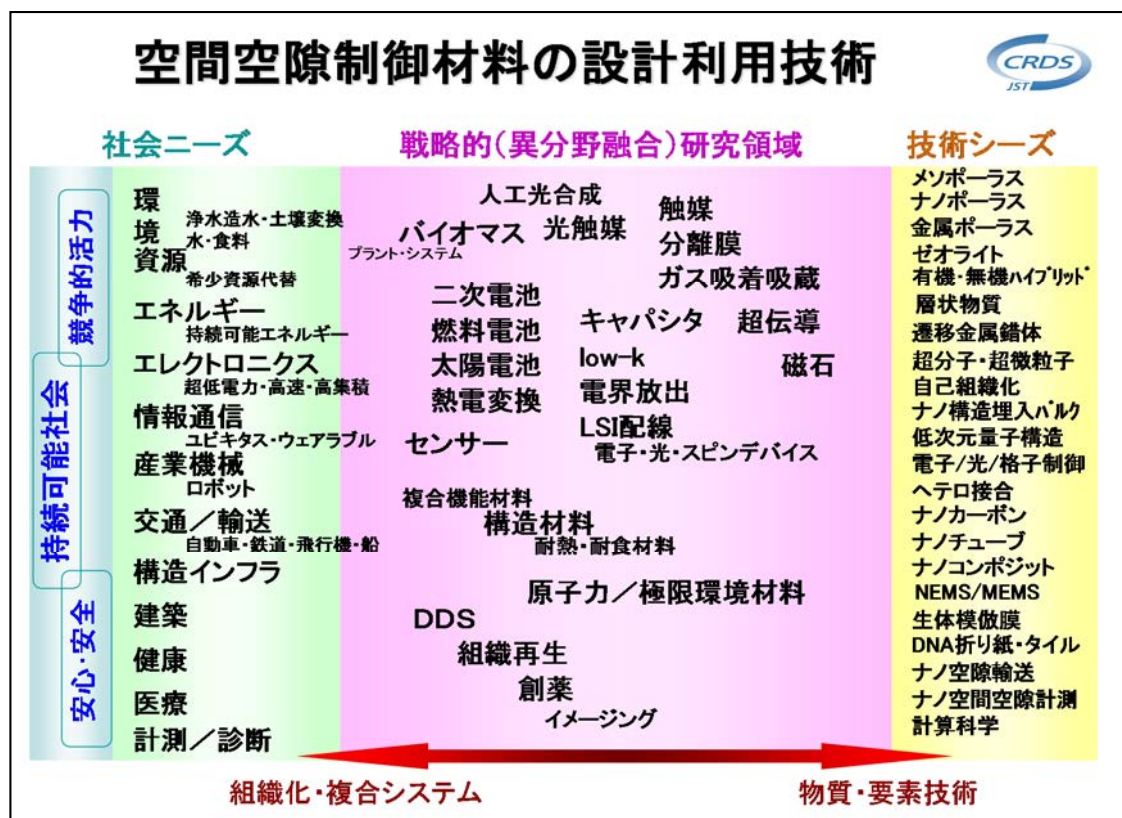
- ・ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化

3. 共通基盤技術

(3-1) 空間空隙制御材料における物理的諸現象（物質輸送・貯蔵および物質・エ

エネルギー変換など）の観測・解析技術

- (3-2) 計算機シミュレーションおよびマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術



(3) 科学技術的・政策的課題

欧米のプロジェクトは基礎研究と応用研究をバランスよく進めている。欧州は、応用研究で MACADEMIA プロジェクトの後継として M4CO2 プロジェクトがスタートするような継続的な進展が見られる。日本の基礎研究の大型プロジェクトは、戦略的創造研究推進事業の CREST およびさきがけの「超空間」領域、ACT-C（低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出）、ACCEL（PCP ナノ空間による分子制御科学と応用展開）、特別推進（階層的配位空間の化学）などがスタートしている。ところが、日本の応用研究のプロジェクトは、NEDO のグリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発事業で、ゼオライト、多孔性金属錯体の研究が 2013 年度に終了し、後継のプロジェクトが育っていない。

欧州では CO₂ 対策とガス化学工業への経済性を踏まえた将来展望、米国ではシェールガスへの確実な展望を掲げたプロジェクトを進めているのに対して、日本の政策で掲げる重点課題は素晴らしいものの、産業要請上のタイムスケールとは乖離して著名な研究者のテーマが優先実施されることがあり、現実的に実用困難な採択課題も散見される。テーマ毎の目標設定と、進捗に応じた軌道修正を図るとともに、研究者の能力を可視化して分かり易くする工夫が必要となる。

(4) 注目動向

[新たな技術動向]

・ゼオライト

従来の有機のテンプレートを使った合成方法（ボトムアップ式）から、親のゼオライトを分解して新たなゼオライトをつくる合成方法（トップダウン式）が開発された。親ゼオライトから生成した層状の前駆体に別のピラー分子を再結合させ焼結したもので、ポテンシャルの高い複雑なゼオライトのフレームワークをつくる画期的な方法である。J. Čejka (J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czech)らにより始められ ADOR (Assembly, Dis-assembly, Organization and Re-assembly) 法と名付けられている⁴⁾。ゼオライト合成の従来の方法では設計の自由度が低いことが欠点とされていたが、ADOR 法により、多孔性金属錯体並みの合成の自由度が出てきたといわれている。

・多孔性金属錯体

近藤篤 (東京農工大学)、Thomas E. Mallouk (Penn State)らは多孔性金属錯体を鋳型としてチタンイソプロポキシドから多孔性結晶の酸化チタンを合成した。親の多孔性金属錯体のモルフォロジーを転写しており、結晶も珍しいブルッカイトである⁵⁾。向吉恵 (京都大学)らは多孔性金属錯体の熱分解により、簡便に Ni ナノ粒子/多孔性金属錯体複合体を作製する方法を見出した⁶⁾。多孔性金属錯体触媒へつながる可能性があり興味深い。植村一広 (京都大学)らは、多孔性金属錯体内部に規則的に並ぶ有機配位子をモノマーとし、構造規則性を保ちながら重合することにより規則的な有機ポリマーを得、この手法によりこれまで難しかった有機ポリマーの高次構造制御の道を開いた⁷⁾。堀毛悟史 (京都大学)らは、多孔性金属錯体の骨格、およびそれらの規則的な内部空間にプロトンを輸送できる部位を導入することにより、結晶のみで湿度ゼロの環境で非常に高いプロトン伝導機能 (10^{-2} S/cm 以上)を見出した。100~200℃でこの高伝導特性は発現し、燃料電池の電解質としての応用が強く期待される⁸⁾。小林浩和 (京都大学)らは、パラジウム金属のナノ結晶を多孔性金属錯体で覆うことにより、水素吸蔵量と吸蔵速度が単体のパラジウムナノ結晶よりも増進することを見出した。特に水素吸蔵量はパラジウムナノ結晶の 2 倍となる⁹⁾。松田亮太郎 (京都大学)らは、銅イオンが配置された細孔を持つ多孔性金属錯体を合成し、CO ガスのみを選択的に吸着、分離できることを見出した。CO の銅イオン近傍への吸着機構も X 線で明らかにし、様々な排出ガスに含まれる CO 分離に期待される¹⁰⁾。

・多孔性高分子膜

Easan Sivaniah (京都大学)らはマイクロポラスポリマーと呼ばれる材料に熱処理を施し、架橋構造を形成することでガス分離膜材料を作成した。ガス分離能は市販のガス分離ポリマー膜に比べてガス透過速度が約 100 倍、ガス選択分離度が約 2 倍という極めて優れた性能を有している¹¹⁾。

・ 3次元多孔性グラフェンナノシート

伊藤良一（東北大学）らと Franklin Kim（京都大学）ら 2つのグループが独立に従来の 2次元グラフェンナノシートにない層方向に細孔をもつシートを作成した。伊藤らは多孔質の鋳型表面に CVD でグラフェンを成長させてから鋳型を除去する方法¹²⁾を用いた。Kim らはグラフェンオキサイドと分岐ポリエチレンイミンとのポリイオンコンプレックスを利用して、ポリエチレンイミンがグラフェンオキサイドに拡散し乍ら多孔性酸化グラフェン積層膜を形成することを利用した。3次元多孔性グラフェンナノシートは積層膜の熱処理で作成した。Kim らは彼らの方法を拡散誘起多層構造法 (dd-LbL) と名付けられた¹³⁾。

[注目すべきプロジェクト]

DOE のエネルギー高等研究計画局 (ARPA-E; Advanced Research Projects Agency-Energy) が、採択したプロジェクトに、自動車用天然ガス (Methane Opportunities for Vehicular Energy) があり、3億ドルの予算で、「天然ガスを燃料とする輸送機械のための経済性に優れた走行システムのプロジェクト」を 2012 年に開始した。それには充填剤として多孔性金属錯体を用いる研究があり、Texas A&M 大学が 300 万ドルの予算で、低圧の天然ガスを貯蔵する低コストの多孔性金属錯体の研究を行っている。その他、光関連に 36 万ドル、スピנקロスオーバー理論研究に 24 万ドル、細孔空間工学に 67 万ドル、量子効果に 37 万ドル、ヒドロゲナーゼのバイオミミックに 72 万ドル、触媒研究に 32 万ドル、無機のクラスレート研究に 39 万ドル、分子吸着相互作用に 108 万ドル、CO₂ の光還元で 27 万ドルの研究が進められている。

NSF では 14 のプロジェクト、エネルギー貯蔵 (プロジェクト名: SusChem、27 万ドル)、電子材料用産業ガス (プロジェクト名: SBIR Phase II、75 万ドル)、太陽光エネルギー (プロジェクト名: SOLID STATE & MATERIALS CHEMIS、47 万ドル)、触媒設計 (プロジェクト名: DMREF、120 万ドル)、触媒開発 (プロジェクト名: Chemical Catalysis、45 万ドル)、液体分離 (プロジェクト名: CHEMICAL & BIOLOGICAL SEPAR、32 万ドル)、CO₂ 分離 (プロジェクト名: CHEMICAL & BIOLOGICAL SEPAR、32 万ドル)、オレフィン/パラフィン分離 (プロジェクト名: CHEMICAL & BIOLOGICAL SEPAR、28 万ドル)、CO₂/天然ガス分離 (プロジェクト名: SBIR Phase I、15 万ドル)、空気中 CO₂ の分離 (プロジェクト名: SusChEM、91 万ドル)、MOF の熱特性 (プロジェクト名: THERMAL TRANSPORT PROCESSES、30 万ドル)、一酸化窒素の医療利用 (プロジェクト名: CAREER、20 万ドル)、熱特性 (プロジェクト名: THERMAL TRANSPORT PROCESSES、30 万ドル)、不斉触媒 (プロジェクト名: Chemical Catalysis、33 万ドル) が進められている。

欧州では 2014 年 1 月から 8 カ国から 16 の企業と大学が集まって CO₂ を捕集するプロジェクト M4CO₂ (Energy efficient MOF-based Mixed Matrix Membranes for CO₂ Capture) がスタートした。多孔性金属錯体と樹脂との複合化膜で、燃焼前分離 (Pre-Combustion、CO₂/H₂ 分離)、燃焼後分離 (Post-Combustion、CO₂/N₂ 分離) を行うプロジェクトで、MOF/樹脂膜を用い、CO₂ 回収コストをアミン法よりも低い 15 ユーロ/トン程度まで下げることが目標にしている。16 の参加企業と大学は、Technische Universiteit

Delft (オランダ、Coordinator)、DECHEMA e.V. (ドイツ)、TOTAL (フランス)、Johnson Matthey (英国)、Polymem (フランス)、HyGear (オランダ)、Tecnalia (スペイン)、Universidad de Zaragoza (スペイン)、University of Edinburgh (英国)、Université de Mons (ベルギー)、Consiglio Nazionale delle Ricerche ITM (イタリア)、Universität Leipzig (ドイツ)、Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover (ドイツ)、University of St Andrews (英国)、Bulgarian Academy of Sciences (ブルガリア)、Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) (フランス) である。各国の施策としては、EU FP-7 で 9 つのプロジェクト、スペインのエタノール/エチレン分離 (プロジェクト名: MOF-ET-WORK、17 万ユーロ)、多機能ナノマイクロ構造体 (プロジェクト名: INANOMOF、194 万ユーロ)、工業プロセス材料 (プロジェクト名: RASPA、137 万ユーロ)、英国の蛍光増幅 (プロジェクト名: FP7-PEOPLE、23 万ユーロ)、光学異性体分離 (プロジェクト名: CHIRAL-MOF、7.5 万ユーロ)、オランダで分離膜 (プロジェクト名: CRYSTENG-MOF-MMM、147 万ユーロ)、ノルウェーで CO₂ 吸着 (プロジェクト名: MATESA、571 万ユーロ)、ドイツでヘリウム/メタン分離 (プロジェクト名: GAMOF、16 万ユーロ)、オランダで CO₂ 捕集 (プロジェクト名: M4CO2、1050 万ユーロ)、フランスで CO₂ 捕集 (プロジェクト名: CAPZEO、22 万ユーロ) が進められている。

現在、日本は産業化に向けた大型プロジェクトはないが、基礎科学プロジェクトは充実している。平成 25 年から JST の CREST「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」、およびさがけ「超空間制御と革新的機能創成」が開始された。前者は選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製を戦略目標に掲げ、物質変換・エネルギー変換、貯蔵・分離・輸送、構造材料、ライフサイエンスの 4 分野で日本の新しい産業創生に貢献するとしている。後者は選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製を戦略目標に掲げている。環境・エネルギー、医療・健康など社会ニーズに応える新物質・材料の創製に向けて、従来の空間利用の常識を超える革新的機能の創出を目指している。

(5) キーワード

空間空隙、超空間、微小空間、微細空間、PCP (porous coordination polymer)、MOF (metal-organic framework)、ゼオライト、メソポーラスシリカ、メソポーラスアルミナ、メソポーラス金属酸化物、ポーラスカーボン、多孔性金属錯体、超分子

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	ゼオライトは大久保らにより構造規定剤を利用しない合成方法が検討されている。メソポーラスシリカは1988年に黒田が世界で初めて発見したが論文数では中国、米国に抜かれている。 多孔性金属錯体は、北川進を初めとした第一線の研究者が多い。論文数では5位と低いが、インパクトファクターの高い論文への掲載が多く、独創的な研究が進められている。 多孔性材料関連の大型プロジェクトは、戦略的創造研究推進事業のCRESTとさきがけ、ACT-C（低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出）、ACCEL（PCPナノ空間による分子制御科学と応用展開）、特別推進（階層的配位空間の化学）がスタートしており、基礎研究重視の考え方が示されている。
	応用研究・開発	○	↑	特許出願では出願数の増加から多孔性材料への研究開発が盛んであることが伺える。企業の姿勢が従来の選択と集中から成長と拡大に変わってきたこともあり、企業と大学との連携による研究開発が進んでいる。 大型プロジェクトはNEDOのグリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発の成果として、新規ゼオライトによるメタノール/水分離膜が実証試験の段階に入っている。
	産業化	○	↑	メソポーラスシリカが日本では産業利用の段階に入っている。日本化成はメソピュア®の商品名で、結露防止、調湿、防曇用、触媒担体、ガス吸着、吸着物の放除用に販売している。太陽化学は世界初のメソポーラスシリカの実証プラントを建設した。クラレとNIMSは共同で反射防止膜を検討している。 他の多孔性材料はゼオライトを除いて産業化には至っていない。
米国	基礎研究	◎	↑	メソポーラス材料は、触媒やバイオ医学へ展開が進められている。NSFで3つのプロジェクト、バイオメディカルへの応用、大細孔/ナノ細孔材料、MRI造影剤が進められている。 ゼオライトのプロジェクトは、DOEによる触媒の基礎研究とNSFによる3つのプロジェクト、タールのクラッキング、ゼオライトのCu、Fe活性、オレフィン/パラフィン分離が進められている。 多孔性金属錯体はYaghi、Longらを中心として独創的な研究がなされている。両者ともCO₂回収の実条件を想定した研究結果の発表が目立っている。特にLongは多成分ガス吸着分析器で、CO₂、N₂、H₂O、O₂、SO₂を含み混合気体を独立して28サンプル同時測定できる装置を使って多孔性金属錯体の新たな展開を始めた。 プロジェクトは、NSFで14のプロジェクト、エネルギー貯蔵、電子材料用産業ガス、太陽光エネルギー、触媒設計、触媒開発、液体分離、CO₂分離、オレフィン/パラフィン分離、CO₂/天然ガス分離、空気中CO₂の分離、MOFの熱特性、一酸化窒素の医療利用、熱特性、不斉触媒が進められている。DOEからは、光関連、スピントロニクスオーバー理論研究、細孔空間工学、量子効果、ヒドロゲナーゼのバイオミミック、触媒、無機のクラスレート、分子吸着相互作用、CO₂の光還元の研究が進められている。
	応用研究・開発	◎	↑	DOEのARPA-Eで、天然ガス自動車（Methane Opportunities for Vehicular Energy）があり、3億ドルの予算で、天然ガスを燃料とする輸送機械システムのプロジェクトが2012年より開始した。充填剤として多孔性金属錯体を用いた研究をTexas A&M大学が分担している。
	産業化	◎	↑	おそらく世界で初めての上市になるのが、米国のNuMat社の産業ガスの貯蔵ボンベへの利用で、毒性の高い半導体製造用ガスを多孔性金属錯体に吸着させて充填したシリンダーの販売を開始した。 産業用途として規模の大きいものはBASF社の車両用タンクへの利用である。2014年～2015年にかけて、米国で多孔性金属錯体を充填したシリンダーを自動車用燃料タンクとして販売することを計画している。機を見るに敏で、米国のシェールガスの台頭を狙ったものとなった。

欧州	基礎研究	◎	↗	ゼオライトでは、従来の有機のテンプレートを使った合成（ボトムアップ式）から、親のゼオライトを分解して層状の前駆体にし、再結合させた後、焼結する新たな方法（トップダウン式）が開発された。ポテンシャルの高い新しいゼオライトのフレームワークをつくる方法で、J. Čejkaらにより始められ、ADOR (Assembly, Dis-assembly, Organization and Re-assembly) 法と名付けられている。多孔性金属錯体のような設計の自由度があることが特長となっている。プロジェクトは、EU FP-7で3つのプロジェクト、農業向けゼオライト、触媒用ゼオライト、有機ゼオライトが進められている。メソポーラスシリカのプロジェクトは、医療用プローブが進められている。 多孔性金属錯体はドイツ、フランス、英国を中心にEUのプロジェクトに参加して盛んに研究が進んでいる。プロジェクトは、EU FP-7で9つのプロジェクト、エタノール/エチレン分離、蛍光増幅、光学異性体分離、分離膜、CO₂吸着、工業プロセス材料、ヘリウム/メタン分離、CO₂捕集、多機能ナノマイクロ構造体などが進められている。
	応用研究・開発	◎	↗	欧州では2014年1月から8カ国から16の企業と大学が集まってCO₂を捕集するプロジェクトM4CO₂ (Energy efficient MOF-based Mixed Matrix Membranes for CO₂ Capture) がスタートした。16の参加企業と大学から構成される。 TOTALは2009年～2013年の4年間のEUのプロジェクト、MACADEMIAで、多孔性金属錯体による窒素/プロピレンの分離、PSAによるCO₂/硫化水素の分離を行った。
	産業化	◎	↗	BASFは販売の拠点を米国にしているが、多孔性金属錯体の製造は欧州としている。アルミと亜鉛の錯体を2ヶ所で製造する。また引き続き商品名Basoliteの名で試薬販売をしている。
中国	基礎研究	○	↗	ゼオライト、メソポーラスシリカ、多孔性金属錯体何れの研究も中国が発表論文数では世界でトップである。特にメソポーラスシリカ、多孔性材料は全体の3割以上を占める。しかし乍ら世界をリードする先駆的な研究では欧米日の後塵を拝している。
	応用研究・開発	△	→	メソポーラス材料では復旦大学のZhaoが精力的に応用研究を進めている。太陽電池、光触媒、触媒担体、センサ、リチウムイオン電池などへの展開を進めている。
	産業化	△	→	多孔性金属錯体はベンチャーの試薬メーカーが現れ、配位子、錯体の販売を開始した。
韓国	基礎研究	△	→	メソポーラス材料、メソポーラスカーボン、KAISTのR. Ryooを中心に基礎から応用研究に到るまで開発が進活発にめられている。特にメソポーラス材料では、遺伝子導入試薬、分離、触媒、メソポーラスカーボンのテンプレート能などについて、メソポーラスカーボンは、触媒、水素貯蔵などについて研究がなされている。 多孔性金属錯体ではソウル国立大学のグループがCO₂分離、水素貯蔵を、KAIST、浦項工科大学のグループが分離、触媒の研究を行っている。
	応用研究・開発	△	→	韓国科学技術省によるプロジェクト「21th Frontier Hydrogen Energy R&D Center Program」のなかで、多孔性金属錯体による水素関連の応用開発が進められている。
	産業化	△	→	産業への応用は報じられていない。

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 引用資料

- 1) 資源エネルギー庁、石油産業における研究開発の現状と課題について (6/2014)から一般財団法人石油エネルギー技術センター「次世代石油エネルギー研究会」報告書
- 2) J. Yu, et al., Chem. Rev., 114, 7268 (2014)
- 3) M. Yaghi, et al., Science, 341, 1230444 (2013)
- 4) J. Čejka, et al., Nature Chem., 5, 628 (2013)
- 5) E. Mallouk, et al., J. Am. Chem. Soc. 135, 16276 (2013)
- 6) 向吉恵ら、ナノ学会第11回大会(2013)
- 7) T. Uemura, et al., Chem. Materials, 25, 3772 (2013)
- 8) S. Horike, et al., J. Am. Chem. Soc. 135, 11345 (2013)
- 9) H. Kobayashi, et al., Nature Mater. 13, 802 (2014)
- 10) R. Matsuda, et al., Science, 343, 167 (2014)
- 11) S. Sivaniah, et al., Nat. Commun., DOI: 10.1038/ncomms5813, (2014)
- 12) Y. Ito, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 53, 4822 (2014)
- 13) F. Kim, et al., Nat. Commun., DOI: 10.1038/ncomms6254, (2014)
- 14) JST-CREST「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」
http://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah25-3.html
- 15) JST-さきがけ「超空間制御と革新的機能創成」
http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/107space.html
- 16) CRDS-FY2009-SP-05 戦略プログラム「空間空隙制御材料の設計利用技術」
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/SP/CRDS-FY2009-SP-05.pdf>
- 17) CRDS-FY2009-WR-05 科学技術未来戦略ワークショップ「空間空隙制御・利用技術」報告書
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/WR/CRDS-FY2009-WR-05.pdf>

3.5.3 分子技術

（１）研究開発領域の簡潔な説明

「分子技術」は、分子を設計・合成・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するために必要な一連の技術を、「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る 6 つの横断的技術概念で捉えなおして研究開発を推進する領域である。これは日本発の新しい研究開発コンセプトである。それぞれの技術概念は今後、それぞれの分子技術の研究進展に伴い、新しい独立した個別の研究領域を構成するが、6 つの研究領域は互いに密接な関係を持ち続ける。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

環境・エネルギー、医療・健康などに関する社会的課題の解決に貢献し、持続性社会の実現に資するために分子科学の成果を活用するためには、課題解決に必要とされる機能をもった分子を創出し、それを自在に制御できることが望まれる。

分子科学が、分子および分子集合体の構造や物性を解明し、化学反応や分子の相互作用およびその本質を、理論と実験の両面から理解することを目的とする学問であるのに対し、分子技術は、分子科学がもたらす知見・理解を基盤として所望の機能・物性を創出することを明確な目的とする、工学的な技術概念である。解決すべき多様な課題に対し、問題点を分子レベルまで掘り下げ、所望の機能を持つ分子を設計・合成・操作・制御・集積することで、革新的かつ精密な分子や分子集合体を創出できれば、効果的な課題解決が可能になるとともに、課題解決の技術が産業化された際には圧倒的な競争力の獲得につながる。一方、従前の化学は自然の神秘を解き明かすことに、営々と挑戦し続けてきた。健康・医療分野や環境・エネルギー分野に関わる重要課題解決のに向けて、制限された条件の下に最適・最善の解を求めるという工学の手法を化学の領域に取り入れるには、従前の自然の神秘を解き明かす化学から、課題追求型の化学へと、非常に大きなパラダイムシフトが要求される。分子技術はこうしたパラダイムシフトの実現のキーテクノロジーであるといえる。

〔これまでの取組み〕

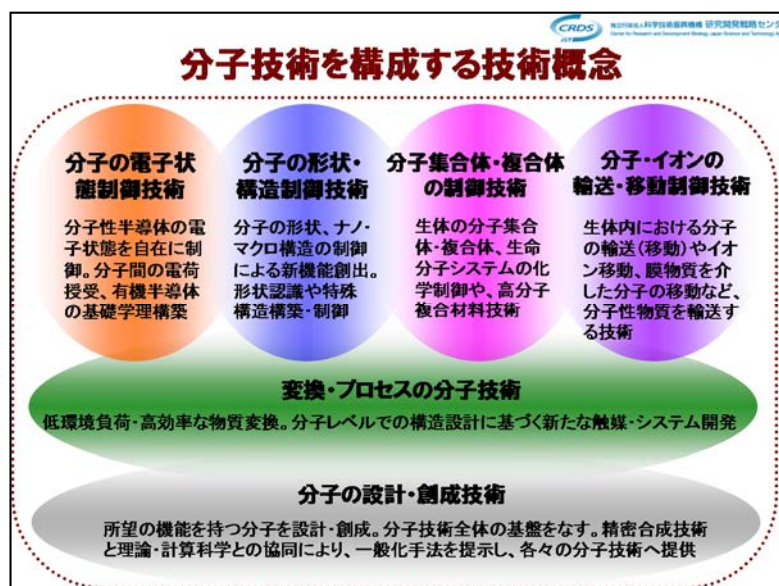
従来、様々な分野で分子の設計・合成が行われてきたが、普遍的な技術として分子技術が明確に意識されることはほとんどなかった。例えば、医薬、農薬、物質・材料などの研究開発において、最適・最善の化合物に到達するまで研究開発されることは稀で、一定の機能が得られた段階で商品開発のフェーズに移行するのが普通である。分子設計が比較的進んでいる医薬品開発ですら、薬効や副作用の点で最適・最善といえるような新規分子設計まで行うことは珍しい。次善の分子でも十分に利潤があげられてきたからである。しかし、今後、医薬品開発のプロセスは、急激な投資金額の激増により、先進国から開発途上国にゆるやかに移行することで、肌理の細かい開発が難しく、その結果、緻密な分子技術に至ることが一層難しくなっている。

新規分子の設計と合成に至らない段階で開発が進んでしまった場合には、採用された分子技術は未成熟で比較的模倣されやすい。また、特許対策も十分とは言えないので、市場での成功例が明らかになる段階で、開発途上国で、様々な後発品が上市されるようになる。オンリーワン分子の設計と合成を進めるためには、高い分子技術力が必要となるが、この基盤技術の育成に十分な資金を継続的に提供できる国・企業は世界的に少ない。

なお、分子技術の重要性に対する認識が十分に浸透していないこと、および分子技術は多岐にわたる応用分野をもつことから、目に見える末端の結果は比較できるものの、その比較が分子技術自体の比較には必ずしもつながらないことから、他の研究領域と同様の国際的な比較を行うのは困難である面がある。

〔今後必要となる研究課題〕

分子技術は、精密合成技術と理論・計算科学との協働により新機能物質を自在に設計・創成する「設計・創成の分子技術」、分子の形状構造を厳密に制御することにより新たな機能の創出に繋げる「形状・構造制御の分子技術」、分子レベルでの構造設計に基づく新たな触媒・システム開発に繋げる「変換・プロセスの分子技術」、分子の電子状態を自在に制御する「電子状態制御の分子技術」、分子集合体・複合体の形成や機能解析・化学制御に関連する「集合体・複合体制御の分子技術」、膜物質を介した分子・イオンの輸送速度や選択性向上などの分子・イオンの輸送に係る「輸送・移動制御の分子技術」の6つの横断的技術概念からなるものとして捉えることができる。しかし分子技術は分子のレベルで根源的な物質の性質を創ることから、今後さらに社会の要請課題にそって新しい研究課題が出現してゆくことが予想される。



各技術概念について、今後必要となる研究課題は以下の通りである²。

1) 「分子の設計・創成技術」

- ・機能から分子を創出するための理論創成とシミュレーション技術の開発
- ・分子構造の予測を可能にする分子デザイン手法の開拓
- ・機能設計・予測に基づく精密合成法の開発
- ・分子性物質の高純度精製法の開発

2) 「変換・プロセスの分子技術」

- ・酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング触媒の開発
- ・金属フリー有機合成触媒の開発
- ・触媒・生成物の *in situ* キャラクタリゼーション法の開発
- ・マイクロ反応装置などによるシステムケミストリーの開拓
- ・原料転換プロセスの開発 (未利用化石資源、バイオマスなどの利用)
- ・室温稼働化学プロセスの開発

3) 「分子の電子状態制御技術」

- ・電極—有機分子間 (電荷注入)、有機分子同士 (電荷輸送) の電荷授受の機構解明
- ・高純度化によるキャリアトラップの解消
- ・分子性物質の純度測定評価技術の開発
- ・デバイス上での分子配列技術・階層性構築制御技術の確立
- ・液体半導体などによる自己修復可能なデバイスの開発
- ・分子性物質・分子材料の劣化機構の解明

4) 「分子の形状・構造制御技術」

- ・自己組織化などビルドアップおよびトップダウン手法による空間空隙構造形成技術
- ・ナノからマクロ構造への規模拡大技術、高強度化、高速合成、低コスト化
- ・マクロ構造を持つ材料における物理的諸現象 (貯蔵、物質・エネルギー変換など) の観測・解析技術
- ・計算機シミュレーションによるマクロ構造の合成および構造・機能の設計・解析

5) 「分子集合体・複合体の制御技術」

- ・電子デバイス表面における分子集合体の精密配置技術の開発
- ・創薬開発を目指した分子集合体の動的構造変化と機能制御の解析
- ・タンパク質への非天然アミノ酸導入による人工酵素の構築
- ・液体分子の構造と機能制御の解析とシミュレーション

6) 「分子・イオンの輸送・移動制御技術」

- ・電極への効率的なイオンの挿入・移動を可能にする有機蓄電材料の開発
- ・不純物の選択的移送と捕捉を目指した超高性能分離膜の開発
- ・高効率の薬物輸送を実現する高度 DDS の開発

上記の他、JST-CREST「新機能創出を目指した分子技術の創出」領域のアドバイザーを中心に検討がおこなわれた「革新的分子技術リスト」として以下のような課題が挙げ

² CRDS 戦略イニシアティブ「分子技術」(CRDS-FY2009-SP-06)

られている³。

・革新的分子技術の例 -分子技術とその分野-

(※(P)記号は、未だ十分に分子技術の基礎が確立されていない新分野を指す)

【分子技術、触媒】

〈重合〉

- ・モノマー・オリゴマーを自在にかつ可逆的に高分子量化する技術
- ・ビニルハライドやジビニルハライドの立体選択的ラジカル重合触媒開発
- ・ポリオレフィン分岐構造の精密制御反応：PPをベースとするブロックコポリマーの製造：エンブラ/ポリオレフィンブロックコポリマーの製造
- ・ポリマーからモノマーへの完全分解触媒反応(P)
- ・シーケンスや分子量が厳密に制御された共役系共重合体の構築技術（触媒、C-H活性化）

〈酸化〉

- ・官能基なしのCH自在活性化：CH活性化によるハロゲン原子の自在の位置選択的導入反応開発：単純アルキル基の位置特異的酸化反応（例えば、エタノールから1工程でエチレングリコールを合成、プロピレンから1工程で1,3-プロパンジオールを合成する）：アルカンの触媒的官能基化反応：水酸化酵素 P450 の高活性化：ブタンからブタジエンの製造：シェールガスからオレフィン類の製造：エタン、プロパン等アルカンからポリオレフィンの製造(P)
- ・タンパク中の任意の位置（アミノ基、カルボキシル基）に様々な置換基を導入する。
- ・ベンゼンから直接フェノール製造（微生物、固体触媒）

〈C-C 合成〉

- ・二酸化炭素からハロゲン化ビニルへの合成系の開発 (P)
- ・ハロゲン化物や、ホウ素化合物を用いない炭素-炭素カップリング反応、メタンから芳香族化合物、オレフィン類の製造
- ・アルコールを触媒的に活性化（ハロゲン化、スルホナート化を経ない）し、アルキル化やシリル化する。

〈還元〉

- ・重金属を用いない NO_x や CO_x の還元法(P)
- ・炭化水素を用いない水素製造法
- ・新規なアンモニア合成法：常温・定圧での触媒的窒素固定化反応(P)
- ・炭酸ガス固定化による発酵生産性向上
- ・水素と炭酸ガスからメタノール合成触媒

〈分解〉

- ・NO の直接分解（還元剤を使わない）：様々な気体が共存する中で特定の気体(NO や SO) のみを選択的に捕捉し還元や酸化する原理の探求
- ・セルロースから直接エタノール製造

〈触媒〉

³ CREST 革新的分子技術リスト <http://mt.jst.go.jp/outline/list.html> より引用

- ・セルフアセンブリーが能動的に働いて成り立つ触媒反応の創出
- ・汎用ラセミ化法(P)
- ・任意の原子クラスターを合成するための複核錯体分子

【マテリアル】

〈デバイス〉

- ・Siに匹敵する性能を有する Printable 有機材料からデバイスまで、シリコン化学を脱した新しい元素化学のデバイス(P)
- ・低分子で π 共役軸方向の電導を活かした電子デバイス
- ・単分子・単分子鎖トランジスタとロジック回路の構築技術
- ・劣化した機能分子を刺激による固相・液相の相転移等によって置換できる自己修復型機能デバイス創生の分子技術

〈膜〉

- ・有機単結晶薄膜の溶液からの成膜技術(P)
- ・人工的に制御された分子配列を持つ自己組織化膜
- ・分子デバイスのオーミック接触の革新
- ・欠陥を極小化（欠陥フリーならベスト）する薄膜界面制御技術
- ・圧倒的に薄く均一な導電、半導電、絶縁層を容易に形成する技術
- ・高分子有機 EL や高分子有機薄膜太陽電池等の半導体物理では理解できない現象の物性理論体系の構築に基づく分子技術

〈光〉

- ・光合成の原理を模倣した高効率 (>50%) な太陽電池：大幅に変換効率を向上させた人工光合成
- ・超効率な有機太陽電池を目指した、一重項・三重項変換（分裂、融合）が高効率で可能な材料の設計技術：超高効率光電変換システムの分子論的解析と人工光合成系の設計
- ・大腸菌、枯草菌による光合成

〈ナノより上の階層分子制御〉

- ・分子からナノではなく、それよりも上の階層構造（実用領域）までの自在制御
- ・高効率熱電変換材料 $ZT>4$ の開発
- ・室温で電気抵抗ゼロの超伝導物質の設計 $T_c>400K$

〈自己修復〉

- ・熱・紫外線等で切断されても自己修復する分子；自己修復機能をもつやわらかい物質のデザイン

〈高分子、樹脂材料〉

- ・リングポリマーなどトポロジ的拘束のある超高分子の物性論の体系化に基づく分子技術による新たな機能発現
- ・電荷注入機能、電荷輸送機能、発光機能の有機 EL 機能を一つに融合した高分子の創生分子技術（例えば、クロスカップリングによる dendritic 型高分子創生や有機触媒による手法等）
- ・非晶（ポリマー、溶液中）の分子構造解析、特に溶媒に溶けない高分子の構造解析

など

- ・低濃度水溶液から目的イオンを選択吸着、脱離できる分子技術(海洋資源濃縮)
- ・様々な気体が共存する中で特定の気体 (NO や SO) のみを選択的に捕捉し還元や酸化する原理の探求

【医薬】

- ・老化メカニズムの更なる解明とアンチエイジング・再生技術
- ・人工アミノ酸 (例えば含フッ素アミノ酸) を含むペプチドやタンパクの合成 (人工アミノ酸に対応する mRNA, tRNA を用いる)
- ・組織 (細胞) 再生誘導化薬 (例えば腎不全状態まで行った腎臓が再生し、腎機能を取り戻す)、医療材との融合でも可
- ・低分子触媒医薬(P)
- ・医薬品包摂、移動、細胞膜通過、放出を可能とするバクテリオファージのような分子ロボット設計(P)
- ・診断、計測への画期的化学、巨視的なケミカルバイオロジー

【計算科学】

- ・計算科学は様々な分野に対して幅広い寄与をすることが期待される。
- ・望む変換反応 (多段階も含む) を手書き入力すれば、おすすめ反応剤、反応条件を文献つきで 10 件だすソフト(P)
- ・分子パッキング状態の計算による予想
- ・理論の裏打ちのある機能から最適分子構造を予測

【その他】

- ・多重の刺激 (情報) を検出・判断し、その重要度から行うべきタスクの優先順位をきめ、機能する人口知能的刺激応答機能材料: 触感を再現する (温度、湿度、圧力等を同時にセンシング可能な) デバイス分子技術 (医療用ロボット、パートナーロボットにおける人体との接触インターフェース)
- ・用途→機能→構造→反応というターゲットドリブン型の分子技術において、出口サイドからできるだけ川上に踏み込んだニーズの開示できる人材・仕組み (製薬、化学では既に進んでいるが、機械、電機、制御通信、システムの領域では不足): 機能物質、材料の逆問題的設計・開発手法の開発
- ・上記の手段として的高速材料スクリーニング手法や機能予測データベースや計算解析手法の開発
- ・50 年で半減するリン元素の枯渇問題解決に資する化学イノベーション (農業化学)
- ・均一系 (有機合成など) と不均一系 (排ガス、FC 触媒、電池など) の相互理解と補完関係の構築

【2014 年 3 月追加】

- ・DNA やタンパクの高次構造、たとえば DNA の 3 次構造、タンパクの β シートなどを工業材料として使える分子骨格に置き換えて構築
- ・毎年、1 兆個のセンサが使われていく世の中を想定したプロジェクトで、以下の課題等への挑戦
 - 各種センサ: 薄く、軽く、小型、高感度、超低消費電力で、大量に製造可能な

各種センサ、特にバイオ系のセンサ。

- Energy Harvesting 素子/材料：大量のセンサネットワークに必須の、Energy Harvesting。EHは、センサの役目と重なったら、なお好都合。世の中に充満している微小エネルギーを回収する素材、素子を、分子技術により、同じように、薄く、軽く、小型、高効率で、大量に製造可能な技術の創成。
- 二次電池：EHデバイスに向けての二次電池が必要。1）最低でも10年以上の寿命、2）10～20万回以上のサイクルで、薄く、軽く、小型、高容量で、大量に製造可能な二次電池の開発。

（３）科学技術的・政策的課題

今後必要となる取り組みとして、将来を見据えたニーズと分子技術との間をシームレスに結びつける必要がある。社会的ニーズに沿って、現在の技術レベルでは達成できない「夢の目標」を掲げ、それぞれの研究テーマにおいて、従前の研究の延長とは一線を画した、まったく新規な研究プランを提案し、それを達成するための明確で独創的な分子技術の「イメージ・ストーリー」を描き、それを実現することが求められる。これには、アカデミアと産業界の双方で分子技術の重要性を認識し、化学に対する姿勢を根本的に変えて行く必要がある。

すなわち、これらの課題を分子レベルで解決するためには、課題解決を目標とする分子技術の重要性を認識した上で、以前にも増して学際的な研究推進が必須であり、また、研究チーム間の連携や共同研究が求められる。多岐にわたる応用分野、専門分野で各々活躍している比較的接点の少ない研究者が「分子技術」という共通の土台に立って互いの研究・技術を見つめ直し、新たな展開を生み出せる。例えば、幅広い社会・産業ニーズに応える物質・材料開発にブレークスルーを起こすために、それを強く意識した分野貫通型チームが、意欲的かつ挑戦的な研究課題で、数年おきに、次々と生まれることが望ましく、今後は文部科学省と経済産業省の連携が求められる。

（４）注目動向

〔新たな技術動向〕

すでに、今日様々な部品や機器が、既存の半導体や金属から、分子素材である「ソフトマテリアル」に移行しつつある。これは低環境負荷、資源制約への対応、高い生体親和性といった人間社会全体の課題に対する解決策、そして低コスト化を「ソフトマテリアル」や、それを実現する分子技術が提供することを示唆している。すなわち、健康・医療分野と環境・エネルギー分野に関わる様々な革新的成果を創出するためには、個別応用課題の研究開発とは別に、多様な分野への展開が可能な分子技術を確認たる土台として築いておくことが必須であり、これによって一層異分野融合が加速され、真に有効なライフ・イノベーションおよびグリーンイノベーションが達成できる。

〔注目すべきプロジェクト〕

平成24年よりJSTでCREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」、およびさがけ「分子技術と新機能創出」が開始された。また、平成26年よりJST国際科学技術

共同研究推進事業（戦略的国際共同研究プログラム）において日本－フランス共同研究課題の募集が開始された（日本側 JST、フランス側 ANR）。

（５）キーワード

ソフトマテリアル設計、医薬品設計、農薬設計、設計・創成の分子技術、形状・構造制御の分子技術、変換・プロセスの分子技術、電子状態制御の分子技術、集合体・複合体制御の分子技術、輸送・移動制御の分子技術

（６）国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	分子技術に着目し、その重要性が社会的に認知されたのは、ここ数年のことである。しかし、その重要性が世界で初めて日本で明確に認知されたことは極めて重要なことであり、今後、すでに高いレベルの研究基盤を持つが、分子技術間の連携が一層進めば、我が国がこの分野を世界的に牽引すると考えられる。既に日仏の２国間国際共同研究プロジェクトが開始されている。
	応用研究・開発	◎	→	ナノテクノロジー、環境、エネルギー、ものづくり、ライフサイエンスなど、分子技術が鍵となる応用分野は多岐にわたる。我が国は、それぞれの分野での、末端技術では問題があっても、基盤となる分子技術の部分は高いレベルを維持している。
	産業化	○	→	上記のナノテクノロジー他いくつかの特定の分野で産業化が進んでいる。例えば、ナノテク材料分野では、非常に高いレベルにある。しかし、平均的には米国などに較べて、必ずしも十分な競争力がなく、韓国、中国などに追い上げられている。
米国	基礎研究	◎	↓	米国でも、ここ数年分子工学の重要性が認識され始めているが、バイオ、マテリアルなどの非常に応用末端の分野に研究が集中している。つまり、化学という側面より工学の面が正面にでているので、分子レベルまで掘り下げた設計・合成へ注目した研究は極端に少ない。
	応用研究・開発	◎	↑	基礎研究とは異なり、応用研究は非常に進んでいる。特に資金の集中しているライフサイエンスは圧倒的なレベルにあり、今なお向上し続けている。
	産業化	◎	→	ベンチャーが牽引する部門は極めて迅速に諸課題に対応している。特にライフサイエンスの分野では積極的に次々と新しい投資部門に展開している。巨大な製薬会社が成功したベンチャーを買い上げることで投資の危険分散を行っている。
欧州	基礎研究	◎	→	ドイツでは、大学改革に成功し、分子科学基礎研究は高いレベルにあり、分子技術に於いても世界的にトップクラスである。一方、英国はライフサイエンス部門の分子技術は進んでいるが、これは米国に影響されていると思われる。フランスはフッ素化学などの限定的な分野では優れているが、一般には低調である。
	応用研究・開発	○	→	ドイツ、英国のライフサイエンス部門では、非常に優れているが、他は全般的には平均的レベルにある。
	産業化	○	→	一般にライフサイエンス部門は堅調であり、特に産業化を促進する制度的バックアップが優れている。しかし、特に分子技術という面からはすこし手薄い。
中国	基礎研究	○	↑	分子技術の面では、現時点では欧米を迫る仕事が目立つ。しかし、ウミガメ政策以来、欧米で成功した研究者が多くの資金を持って次々と本国に招聘されており、彼らの活躍が目立つ。しかし、中国国内で製薬系の大企業が育っていないため、若い研究者の就職先が非常に限られているのが現状であるが、この状況は近年中に変わる可能性がある。
	応用研究・開発	○	↑	急速に成長している。特に多くの研究費が大学や研究所に流れている。

	産業化	○	↗	米国と似た制度の下でベンチャー企業が誕生しやすい体制を取っている。
韓国	基礎研究	△	→	日本よりは米国型の研究スタイルであり、欧米からの帰国者を優遇している。その点では中国と状況は似ているが、研究レベルは中国に若干の遅れ。しかし、最近、大学や政府研究機関で外国人研究者の雇用を打ち切る現象が見られる。
	応用研究・開発	○	→	萌芽的な応用研究が進んでおり、今後の発展が見込まれる。
	産業化	○	→	比較的ダイナミックに産業化を進めている。

（註 1）フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

（註 2）現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、
△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

（註 3）トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

（ 7 ） 参 考 資 料

- 1) <http://molecularengineering.uchicago.edu/>
- 2) <http://provost.uchicago.edu/Pritzker%20Director%20of%20the%20Institute%20for%20Molecular%20Engineering.pdf>
- 3) 文部科学省（戦略目標）環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築
http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/24/02/attach/1316324.htm
- 4) CRDS-FY2009-SP-06 戦略イニシアティブ「分子技術」
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/SP/CRDS-FY2009-SP-06.pdf>
- 5) CRDS-FY2009-WR-07 科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」報告書
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/WR/CRDS-FY2009-WR-07.pdf>
- 6) 応用物理学会・JST 共同特別公開シンポジウム「分子技術、新ステージへの胎動」
<http://www.jst.go.jp/crds/sympo/20100916/bunshi100916summary.pdf>
- 7) CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」
<http://mt.jst.go.jp/>
- 8) CREST 革新的分子技術リスト
<http://mt.jst.go.jp/outline/list.html>
- 9) さきがけ「分子技術と新機能創出」
<http://www.jst.go.jp/presto/moltech/>
- 10) 化学と工業「分子技術 貫通型研究領域誕生への挑戦 - 日本化学会」
<http://www.chemistry.or.jp/opinion/doc/ronsetsu1310-1.pdf>

3.5.4 バイオミメティクス

（１）研究開発領域の簡潔な説明

生物の構造と機能、さらには生態系に関する知見を、材料、デバイス、システムの設計・製造に系統的に活用するための研究開発領域である。生物の構成原理に学ぶことで、製造・使用時のエネルギー消費が少なく、持続可能性を意識したプロセス技術、材料、デバイス、システムの開発など、幅広い研究開発が対象となる。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

生物は進化の過程で、様々な試行錯誤や淘汰を経た結果、極めて理にかなった構造や機能を有するものが多い。例えば、昆虫の体表面や植物の葉表面に形成されるナノ・マイクロ構造は、機械的強度による内部器官の保護、保湿、超撥水性などの特徴的な機能を有しているが、その形成過程と機能発現機構は人工的に設計・製造されたものとは異なる原理に基づいている。また、生物は化石燃料や多量の希少元素を使わずに、常温・常圧にて再生可能エネルギーと再生可能資源を利用し、環境に負荷をかけずに自然と調和をしながら生存している。したがって、生物の構造・機能を解明・解析して得られる知識は、持続可能な社会に必要な新たな技術体系を構築する上で重要な指針になると期待される。

〔これまでの取り組み〕

生物の構造・機能に学ぶことは、材料科学からロボット工学に至るまで、ものづくりの規範のひとつとなってきた。今世紀になって、高性能の走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡ならびに走査プローブ顕微鏡が普及したことにより、これまで未開拓であった細胞内部や表面に形成される数百ナノメートルから数マイクロメートルの自己組織化構造とその機能が明らかにされるようになった。さらに、精密な合成・加工や自己組織化を含めた構造制御などのプロセス技術の大幅な進歩とも相まって、それらを模倣するナノテクノロジー・材料の開発が行われている。特に生物の表面構造の解明ならびに模倣を行う研究開発が盛んに行われており、古くは面ファスナー（マジックテープ、ベルクロ）の開発に始まり、ハスの葉を模倣した超撥水表面、超親水表面、低騒音新幹線パンタグラフ、新幹線車体、鮫肌水着、構造色繊維、ガの眼を模倣したモスアイフィルム、ゲッコーテープ、無痛注射器など、商業化まで展開された事例も見られる。

多岐にわたる科学技術分野に関して、画像データや専門用語について分野横断型のデータベースプラットフォームに関する研究が日本で先行して進められている。また、生物学および工学の画像をデータベース化する発想支援型のデータベースや分野専門用語を階層化するオントロジーの取り組みが行なわれている。

諸外国の取り組みについては、米国では 2008 年に全米アカデミーズが、科学技術政策の提言書においてバイオミメティクスを強力に推進すべき課題として取り上げた。欧州ではこれに先立ち英国において 1990 年代より「生物学から工学への体系的技術移転」として、バイオミメティクス研究が積極的に進められてきた。ドイツは政府主催のもと、産学連携および産業化を目指した本格的な国際見本市 “International Industrial

Convention on Biomimetics”を開催するなどバイオミメティクスの振興に積極的に取り組んでいるとともに、2012年には国際標準化を提案しISO TC266が発足した。フランスでは2013年に、Centre Européen d'Excellence en Biomimétisme de Senlis (CEEBIOS) というバイオミメティクスの産学連携センターを設立している。

一方、我が国でも研究開発としては、平成11年度に日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業の生物模倣型材料開発として「バイオミメティック材料プロセッシングの開発」（名古屋大学）が採択された。また文部科学省の21世紀COEには、平成14年度工学分野における生物模倣型モノづくりとして「自然に学ぶ材料プロセッシングの創成」（名古屋大学）と平成16年度農学分野の生物資源の新しい利用として「昆虫科学が拓く未来型食料環境学の創生」（京都大学）に関する大学院教育プログラムがそれぞれ採択されている。また、平成24年度より科研費新学術領域研究として「生物多様性を規範とする革新的材料技術」が採択された。

情報プラットフォームの整備だけでなく、バイオミメティクスの国際標準化に関する技術委員会であるISO/TC266にメンバー参加し、政策提案も視野に入れた活動を開始しており、今後、産業化の加速が予想される。

バイオミメティクスに関する国際学術誌としては、Elsevier社より“Journal of Bionic Engineering”が2004年より、IOP publishing社より、“Bioinspiration & Biomimetics”が2006年より、それぞれ刊行されている。またバイオミメティクス関連の論文は、材料、化学、バイオマテリアル、バイオメディカル等の学術誌に掲載されており、現在約3,000の論文が年に掲載され、その数は世界的に急速に増加している。このうち中国は、材料分野を中心にバイオミメティクス関連の論文数が著しい増加傾向にあり、近年では米国に次ぐ論文数となっている。また上述の“Journal of Bionic Engineering”のスポンサーになるなど、国際的な貢献も行うようになっており、その動向に注意する必要がある。

〔今後必要となる取組み〕

バイオミメティクスをさらに深化させて、次世代の技術体系の一部として組み込んでいくには、構造と機能の相関、構造形成の原理を系統的に整理し、人間が工学的に設計・製造したものとは異なる原理の解明を飛躍的に進展させる必要がある。このためには、観察・分析・解析技術をより高度化した上で、生物学、農学、材料科学、機械工学、電子工学、環境科学、航空工学、医学、歯学、自然史学などの幅広い分野との連携・融合が必要である。

また膨大な生物学情報から工学的に有用な知識に“技術移転”するためには、オントロジーや画像検索技術により発想支援を可能とする情報技術も必要となる。生物模倣の基盤は生物多様性にあることを認識し、膨大な生物学データから工学的発想を導きだすための基盤を整備する必要がある。科研費の新学術領域研究「生物多様性を規範とする革新的材料技術」では、生物学データベースと材料データベースを統合化した多分野統合化データベースの構築が進められつつある。

（３）科学技術的・政策的課題

欧米におけるバイオミメティクスでは、分類学、形態学といった生物学分野が先導的役割を果たしてきたものの、ロボティクス、機械工学、航空工学、電子工学、情報工学、医学、歯学、農学など幅広い分野でも研究が進展してきた。電子顕微鏡写真なども含むデータベースを基に、それらの分野の研究者と材料・デバイスの研究者との連携や産学連携が積極的に進められている。

生物を工学的な視点から理解するためには、生物学を主とする理学と材料科学を中心とした工学の連携融合が不可欠である。しかし、これまで国内では両者が議論する場が少なく、研究を進展させる上で障害となっていた。近年ようやく新学術領域研究や国際会議等を通して、生物学、自然史学などの研究者と材料科学、機械学、環境科学、医学などの研究者との連携が始まったが、産学連携や産学官連携については未だ不十分な状況にある。今後、バイオミメティクス関連の拠点形成などを通じて、バイオミメティクス自体の研究を促進させるとともに、将来を担う人材の育成にも注力する必要がある。

(4) 注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

今世紀になって、ロータス効果やゲッコーテープなどの表面ナノ・マイクロ構造制御を特徴とする材料開発がバイオミメティクス研究の新しい潮流として注目されている。

ナノ・マイクロ構造制御では、ナノとミクロ・マクロとをつなぐ技術が重要であり、3D プリント技術の飛躍的な発展に伴い材料の高次構造化が図られている。海洋生物に学ぶ防汚材料は、流体抵抗低減効果もあることから船舶のみならず航空機や自動車への展開が見られる。さらに、各種植物や昆虫、さらに菌類のさまざまな機能に着目した技術が発展する。

国内の注目研究動向としては、生物の電子顕微鏡観察について従来用いられてきた凍結乾燥や組織固定などの特有の前処理に対し、生きたままの生物の構造を観察するナノスーツ法が開発され、今後、バイオミメティクスに関する生体研究に加えて、医薬・医療分野での革新的な発展につながる可能性がある。

〔注目すべきプロジェクト〕

国際光工学会 (SPIE) や Material Research Society (MRS) など欧米を中心とする国際会議で、バイオミメティクスに関するセッションが常設されている。米国では Bioinspired Materials に関するゴードン会議が 2012 年、2014 年と開催されている。また、Biomimicry 3.8 Institute (米国 NPO)、サンディエゴ動物園、BioTRIZ 社 (英国)、BIOKON International (ドイツ NPO、ドイツ政府支援を受けたバイオミメティクス専門家のネットワーク) などの活動も注目される。

欧州では、EU の 7th Framework Programme (FP7、2007～2013 年) において “Bio-inspired Hierarchical Super Nanomaterials”、“Biomimetic Approaches of Natural Functional Surfaces with hierarchical micro & nano structure and the extreme Wettability” などバイオミメティクス関連のプロジェクトが多数採択されており、FP7 の後継フレームワークプログラムである Horizon 2020 での展開が注目される。

ドイツの標準化機関であるドイツ規格協会 (DIN) から国際標準化機構 (ISO) に対し、

バイオミメティクスに関する技術委員会 (TC) の設立提案が行われ、2012 年 10 月から「ISO/TC266 Biomimetics」として活動が開始されている。事務局は DIN が担当し、我が国を含む 24 カ国の参画のもと、WG1 “Terminology, concepts and methodology”、WG2 “Biomimetic materials, structures and components”、WG3 “Biomimetic structural optimization”の審議が始まった。我が国では 2012 年に高分子学会の研究会として発足したバイオミメティクス研究会が国内審議機関となり、2013 年には WG4 “Biomimetics –The knowledge infrastructure for biomimetics”の幹事国になった。

一方、日本、韓国、中国を初めとしたアジアにおいても、バイオミメティクスに関連した国際会議や学術集会が定期的に行われるようになっており、バイオミメティクスの学術的な注目度は全世界的に増え続けている。国内では、平成 24 年度から文部科学省科学研究費新学術領域において、「生物多様性を規範とする革新的材料技術 (生物規範工学)」が開始されている。細胞内部や表面に見られる数百ナノメートルから数マイクロメートルの構造を「サブセラー・サイズ構造」と位置づけ、この構造のもつ機能の解明を通じて、新たな技術体系の確立を目指し、データベースの構築も行っている。

(5) キーワード

生体模倣材料、自己組織化、生物多様性、機能形態学、バイオニクス

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	自己組織化材料や表面ナノテクノロジー、ソフトマテリアル等の材料技術は世界的に高く評価されており、Biomimetic Materials Processingの国際会議は14回、Engineering Neo-Biomimeticsの国際会議も5回開催された。2012年に高分子学会にバイオミメティクス研究会が設けられて、バイオミメティクスの国際標準化 (TC266) に対応する国内審議機関として活動している。2012年に文部科学省科学研究費新学術領域として「生物多様性を規範とする革新的材料技術 (生物規範工学)」がスタートし、異分野連携に基づく横断的研究組織の形成による基礎研究加速が期待されている。
	応用研究・開発	○	↑	材料分野における応用・開発トレンドは、撥水・親水材料や反射防止光学材料などを中心に建材、繊維、紙、エレクトロニクスなど多岐にわたる。生物多様性に基づく豊富な機能の理解は不十分である。一部企業は関心を示し、異業種間研究会の開催などがされているが様子見的な状況である。
	産業化	○	↑	構造色繊維モルフォテックス (帝人)、防汚船底塗料 (日本ペイントマリン)、モスアイフィルム (三菱レイヨン、大日本印刷)、ゲッコーテープ (日東電工)、セルフクリーニング建材 (LIXIL)、超はっ水ナノ分子ペーパー (竹田印刷)、ヨーグルトが付着しないふた (森永乳業・東洋アルミ) など、材料分野での商品開発が進んだ。生物模倣の家電製品 (シャープ)、痛くない注射針 (ライトニックス)、低騒音パンタグラフや車体デザイン、自動車の自動運行システムなどの開発も実用化した。ロボティクスを中心とした機械系、システム系の開発も進みつつあり、各種産業分野での発展が期待される。特定非営利活動法人バイオミメティクス推進協議会が発足した。

米国	基礎研究	◎	↑	環境・エネルギー問題の解決策としての視点に立つ研究、ホームランドセキュリティや軍事研究をニーズとする研究、古くからあるBiomimetic Chemistryの研究、バイオマテリアルに直結する研究などがある。前者はbiomimicryという言葉を生み出し、中者はロボットやセンサ技術と材料技術の融合が図られつつあり、後者はDNA origamiを象徴とするself-assembly nanotechnologyを中心とするbio-inspired materialsの再展開である。生ハーバード大学、ワシントン大学、パデュー大学、ノースウエスタン大学、ダートマス大学、スタンフォード大学、南カリフォルニア大学、ローレンスバークレー研究所など多くの機関が基礎研究を行っている。Bioinspired Materialsに関するゴードン会議も開かれている。
	応用研究・開発	◎	↑	Biomimicryの提唱者であるJ.Benyusを中心にしたBiomimicry Groupがコンサルティングや教育啓蒙活動を積極的に展開してきた。これに関連し、Biomimicry San Diegoもバイオミメティクスに関する教育およびコンサルティングを展開している。2013年にはApplied Biomimeticという会社がデンマークと米国で新たに設立されるなど、バイオミメティクスの概念に基づく応用研究・開発を目的とする企業活動が行われている。2010年11月には“Global Biomimicry Reports - An Economic Game Changer-”という経済的影響に関する報告書を刊行し、生物模倣技術の大きな経済効果について記述している。2012年以降、ハーバードビジネススクールとも共同して活動を行うなど、今後の展開に注目する必要がある。
	産業化	◎	↑	最近では、イガイに真似た水中接着剤、ヤモリテープを持つ垂直歩行ロボット、鮫肌模倣の防汚材料、くじらのひれ模倣の風力発電翼、自己修復力を増した絆創膏など多岐の分野において活発な商品開発がなされている。
欧州	基礎研究	◎	↑	Biomimetic Chemistryの提唱とその研究、Lotus Effect (ボン大学の商標)の超はっ水加工に関する研究、またゲッコーテープ、モスアイ構造、構造色、鮫肌リブレットなど、英国、ドイツ、フランスなど欧州では現在も多くの基礎研究がなされている。欧州では、ナノ材料から機械、航空機まで幅広く、政策的な異分野連携を強く推進している。FP7等のEU全体の大型プロジェクトでは、Biomimetic Bioartificial Liver (Re-Liver (Bottom-up Reconstitution of a))が2012年より行われており、FP7の後継のHorizon2020でも関連プロジェクトが見込まれている。
	応用研究・開発	◎	↑	英国のBioTRIZ、スウェーデンのSWEDISH BIOMIMETICS 3000など、生物模倣技術のコンサルティングやファンディングなど、基礎研究から産業化への橋渡しに着実にこなわれている。ドイツが国内コンソーシアムであったBIOKON(Bionics Competence Network)をBIOKON Internationalにするなど、欧州では一歩先んじた感がある。ただし、2013年にフランスがCEEBIOSというバイオミメティクスの産学連携センターを設立した上、Biomimicry Europeに参画する国数も増加している現状から、欧州全体での切磋琢磨が暫く続く状況とも言える。また、欧州宇宙機関(ESA)も、先進概念チームを設けてバイオセンサなどバイオミメティクス関連の応用研究を進めている。
	産業化	◎	↑	2007年に発刊した“National Strategy on Biological Diversity”においてBMUは“Biological diversity and its innovation potential”という項目でバイオミメティクスの産業化に言及していた。2008年5月にボンで開催された国連生物多様性条約第9回締約国会議(COP9)において、ドイツ連邦環境・自然保護・原子炉安全省(BMU)は、ビジネス・民間部門による生物多様性保全への貢献を目的として“Biodiversity in Good Company”を設立した。さらに、2011年3月にBIOKON Internationalはドイツ政府支援のもと、世界最初の“International Industrial Convention on Biomimetics”を開催した。また、ドイツ規格協会(DIN)はドイツ技術者協会(VDI)との共催で国際標準化活動へ向けた事前イベント“ISO BIONIK”を開催した。DINからの提案で、2012年に国際標準化機構(ISO)のバイオミメティクスに関する技術委員会ISO/TC266 Biomimeticsが発足し、欧州を中心に活動を進めている。このように欧州はバイオミメティクス分野での産業化において国際標準化を先導している。トンボの羽に着想した飛行ロボット“BioniCopter”やサメの肌を模倣した機体塗料など先駆的な産業化を含め、基礎研究の項に記載したように、各種製品が開発、販売されている。メルセデスベンツやルノー、エアバス社やルフトハンザなどの大企業がバイオミメティクス・デザインを積極的に取り入れつつあり、関心度は年々高まっている。

中国	基礎研究	◎	↗	撥水材料に関しては中国科学院の江雷教授のグループが論文数では世界トップになりつつある。材料系と機械系の研究潮流が交わることなく独自展開している感があったが、英国との連携が切っ掛けになって生物学の寄与が見られるようになった。吉林大学はJournal of Bionic Engineeringのスポンサーになり、バイオミメティクス分野に力を入れている。この国際誌を刊行するIntenationa Society of Bionic Engineeringは中国を中心とするメンバーから構成されている。ロボットなど機械分野から材料開発まで、広い分野の基礎研究が進められている。
	応用研究・開発	◎	↗	上海を中心にロボティクスの研究が活発である。吉林大学は英国のNottingham大学とUK-China biomimetics research initiativeを締結している。中国科学院化学研究所、吉林大学などを中心に、応用研究・開発も積極的に行われている。Intenationa Society of Bionic Engineeringは、2013年にThe 4th International Conference on Bionic Engineering(ICBE 2013)を開催し、基礎研究に加えて応用研究が発表された。また、吉林大学がスポンサーのJournal of Bionic EngineeringはElsevierと共同で、2011年にInternational Bionic Engineering Conference 2011を米国ボストンで開催し、バイオミメティクス分野での応用研究および企業における研究開発の重要性を強調している。
	産業化	○	↗	撥水加工技術は衣料や印刷製版へ応用されている。撥水加工ネクタイ、光触媒商品などは発売されているが、バイオミメティクス関連の産業化はまだ不十分である。国際標準化ではオブザーバとして登録されている。
韓国	基礎研究	◎	↗	材料、ロボティクス、センサ、メディカルなど幅広いテーマを扱うInternational Symposium on Nature-inspired Technology (ISNIT)を2006年以来定期的に開催している。ソウル大学、KAIST、浦項工科大学、韓国機械・材料研究所(KIMM)を中心にヤモリ模倣の接着、ハスの歯模倣のはっ水、昆虫模倣のナノセンサなどの基礎研究が進んでいる。ドイツとのコネクションも強く、最近では米国で学位をとった若手教授が水中接剤やオプティクスの分野などで活躍している。生物学の寄与はほとんど無い。
	応用研究・開発	○	↗	KISTやKIMM、ソウル大学など複数の研究組織がタイアップして基礎から応用に向けての活動を積極的に展開しているように思われる。
	産業化	○	↗	10回目を向かえた2012年のNANO KOREAでもバイオミメティクス関連の発表が増えてきており、化粧品、接着剤、センサ、ロボットなどに企業の関心は高くなっているが、まだ産業化は進んでいない。ISOのTC266のメンバーに参加するなど積極的な動きが見える。

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 参考資料

- 1) Lepora, N.F.; Verschure, P.; Prescott, T.J. The State of the Art in Biomimetics. 2013, Bioinspir. Biomim. 8, 013001, doi:10.1088/1748-3182/8/1/013001
- 2) 高井治. 「生物に学ぶ材料開発」特集号に寄せて. 2012, 材料の科学と工学 49(4), p.147-166.
- 3) 香西博明. 「自然から学ぶものづくり」特集号に寄せて. 2013, 材料の科学と工学 50(1), p.1-25.
- 4) 下村正嗣. 生物の多様性に学ぶ新世代バイオミメティック材料技術の新潮流. 2010, 科学技術動向 110(5), p.9-25.

- 5) 下村正嗣ほか. 【特集】バイオミメティクスと材料開発. 2013, 工業材料 61(11), p.17-68 (2013)
- 6) 科学研究費補助金新学術領域「生物多様性を規範とする革新的材料技術」
<http://biomimetics.es.hokudai.ac.jp/>
- 7) 阿多誠文. 国際標準化 ISO/TC266 Biomimetics が発足. 2012, PEN News Letter 3(1), p.3-5.
- 8) 李仁植. 韓国におけるバイオミメティクス. 2011, PEN News Letter 2(6), p.21-23.
- 9) 学術領域「生物多様性を規範とする革新的材料技術」.
<http://biomimetics.es.hokudai.ac.jp/index.html>
- 10) BIONIKON International.
<http://www.bionikon-international.com/index.html>
- 11) Biodiversity in Good Company.
<http://www.business-and-biodiversity.de/jp/the-initiative.htm>
- 12) BioTRIZ.
<http://www.biotriz.com/>
- 13) Interdisciplinary collaboration for biomimetic bioartificial liver design.
<http://www.reliver.eu/>
- 14) The Biologically Inspired Materials Institute (BIMat) .
<http://www.bimat.org/index.cfm>
- 15) Gordon Research Conferences. Conference Program. Bioinspired Materials. Newry, 2014-06-22/27.
<http://www.grc.org/programs.aspx?year=2012&program=bioinsp>
- 16) Biomimicry Group.
<http://biomimicry.net/>

- 17) San Diego Zoo Global.
<http://www.sandiegozoo.org/conservation/biomimicry/>
- 18) International Symposium on Biomimetic Materials Processing (BMMP)
<http://bmmp.numse.nagoya-u.ac.jp/>
- 19) Bioinspiration & Biomimetics
<http://iopscience.iop.org/1748-3190/>
- 20) Journal of Bionic Engineering
<http://www.journals.elsevier.com/journal-of-bionic-engineering/>
- 21) International Society of Bionic Engineering
<http://www.isbe-online.org/>
- 22) 公益社団法人高分子学会バイオミメティックス研究会
<http://main.spsj.or.jp/c12/gyoji/biomimetics.php>
- 23) ISO/TC266 国内審議委員会ニューズレター Issue 1 (2012)
<http://main.spsj.or.jp/pdf/TC266NL1.pdf>
- 24) ISO/TC266 国内審議委員会ニューズレター Issue 2 (2013)
<http://main.spsj.or.jp/pdf/TC266NL2.pdf>
- 25) ISO/TC266 国内審議委員会ニューズレター Issue 3 (2014)
<http://main.spsj.or.jp/pdf/TC266NL3.pdf>
- 26) International Industrial Convention on Biomimetics. Berlin, 2011-03-16/17.
<http://www.biomimetics-convention.com/>
- 27) BIONIKON
<http://www.biokon.de/>
- 28) Dept. of Biomaterials and Biomimetics, New York University College of Dentistry (NYUCD)
<http://www.nyu.edu/gsas/program/biomaterials/index.htm>
- 29) Biomimicry Institute
<http://biomimicry.org/>
- 30) Biomimicry 3.8
<http://biomimicry.net/>
- 31) Center for Bioinspiration, San Diego Zoo Global
<http://bioinspiration.sandiegozoo.org/>
- 32) Fermanian Business & Economic Institute. Global Biomimicry Reports -An Economic Game Changer-. 2010.
<http://bioinspiration.sandiegozoo.org/sites/default/files/BiomimicryEconomicImpactStudy.pdf>
- 33) Biomimicry San Diego
<http://biomimicrysandiego.org/>
- 34) Applied Biomimetic
<http://www.appliedbiomimetic.com/>

- 35) EU Seventh Framework Programme (FP7)
http://cordis.europa.eu/fp7/home_en.html
- 36) Center for Bio-Inspired Technology, Imperial College London
<http://www3.imperial.ac.uk/bioinspiredtechnology>
- 37) Festo. BionicOpter — Inspired by dragonfly flight
http://www.festo.com/cms/en_corp/13165.htm
- 38) Lufthansa Technik. Like a shark in the water
<http://www.lufthansa-technik.com/en/multifunctional-coating>
- 39) 2013 International Symposium on Nature-inspired Technology (ISNIT 2013), Gangwon-do, 2013-01-06/09.
<http://www.isnit.org/main/>

3.5.5 分子ロボティクス

（１）研究開発領域の簡潔な説明

プログラム可能な分子の自己組織化によって、原子分解能をもつ人工物を作り上げることを目的とした研究開発領域である。外界からの信号を受け取る「感覚」と、受け取った信号を判断する「知能」を備え、自律的に動作する人工物を分子レベルの精度で構築できれば、生体機能を人工的に再構成できるだけでなく、分子レベルの自己修復、自己改変といったことが可能となり、医療、食料、エネルギーをはじめ、さまざまな分野への波及効果が期待される。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

近年、分子合成技術の進歩により、新規かつ高度な機能をもつ分子デバイス・材料が続々とつくられ、さまざまな産業に応用されている。また、ヒトゲノム配列解析プロジェクト以降、核酸、タンパク質、脂質、糖などさまざまな生体分子の構成および構造が解明され、これらの情報を活用した生体分子のエンジニアリングも可能になってきている。しかし、これらの新しい分子デバイスおよび材料を組み合わせ「分子システム」を構成することはいまだに難しい問題である。なぜならそのような分子システムでは、多種類の化学反応が同じ時空間を占め、相互に密接に関連している中で、望みの反応だけを起こさなければならないからである。

分子ロボティクスでは、そのような分子システムとして、感覚と知能を備えた分子システム、すなわち「分子ロボット」を想定し、それを構築するための方法論の創成を目的とする。後述の DNA ナノテクノロジーなどを基盤技術として、様々な機能を実現する汎用的な分子部品を開発するとともに、分子部品のインターフェースを統一することにより、より高次の機能を発現し、様々な分野に応用可能な分子ロボットの構築を目指している。

複雑な分子システムを自在に構築する技術は、学術的に極めて重要な研究対象であると同時に、医療、環境、食糧等、我々人類が直面している諸問題を解決するためのキーテクノロジーになりうるものである。

〔これまでの取組み〕

分子ロボティクスの技術的系譜は、1994年に発表された DNA コンピューティングおよびその後継である分子プログラミングおよび DNA ナノ技術に源流を持つ。

DNA コンピューティングは多数の DNA 配列断片を用いて DNA ハイブリダイゼーションを用いて相補配列を検索すれば、分子の数だけの超並列処理が可能となり、原理的には通常の電子計算機の計算能力を凌駕できることを示した。その後、日本では文部科学省科学研究費特定領域研究の「分子プログラミング（研究代表萩谷昌己、2002 年度-2007 年度）」、米国では NSF の「The Molecular Programming Project (E. Winfree ら、2008 年度-2012 年度)」などにおいて研究が進められ、DNA 論理ゲートなど新しい計算原理に基づくプログラミング技術について、生化学者と計算科学研究者による共同研究が進められた。

DNA ナノテクノロジーは 1980 年代に M. Caruthers によって開発されたオリゴ核酸合成技術から始まった。1984 年に、N. Seeman は、人工的に合成した DNA でナノ構造をつくり、DNA 結合性タンパク質の構造解析にこれを応用するという着想を得た。その後、小規模なナノ構造から DNA タイルなどの大規模で複雑なナノ構造が作られるようになった。さらに、2006 年に P. Rothemund が DNA Origami を発表したことから DNA の自己組織化によるナノ構造生成技術の研究が大きく発展した。DNA Origami 設計ソフトウェアも開発され、様々な 2 次元構造やフタ付の箱などの 3 次元構造を比較的簡単に作ることが可能になっている。近年では、可動部分を持つ DNA 配列や光応答性の分子などを組み合わせることにより、センサ機能やチャネル機能を持つ DNA ナノ構造の設計が可能となっている。また、DNA 以外の生体分子 (RNA-タンパク質など) を用いたナノ構造形成も試みられている。

なお、2014 年 6 月に米国化学学会は The Accounts of Chemical Research 誌において DNA ナノ構造特集を刊行した²⁾。掲載された報文の内訳は、米国が 11 報、EU が 9 報 (ドイツ 3 報、イスラエル 3 報、デンマーク 2 報、フランス 1 報)、日本が 4 報、中国が 4 報、インドが 1 報であった。分子ロボティクス関連技術の国際的状況のある程度反映しているとみることができる。

[今後必要となる取組み]

分子ロボティクスを実用化するために必要な取組みとして、分子ロボティクスの多細胞化・リアルタイム性の実現など分子ロボティクスの高度化と応用分野の開拓が急務である。

・分子ロボティクスの高度化

分子ロボティクスの研究は、まだ、端緒についたばかりであり、最終目標となる「感覚と知能を備えた分子システム」の実現に向けて越えねばならないハードルがいくつもあるが、生命が単細胞生物から多細胞生物へと進化したように、分子ロボット進化シナリオにおいても、多細胞化は必須である。特に高度なシステムを実現するためには、非対称性階層構造の実現が不可欠である。すなわち、単細胞型分子ロボットがいくつかのヘテロな機能をもつものに分化し、さらにそれらが自律的に集合して高度な機能をもつ多細胞型分子ロボットを形成するしくみを創り出すことが必要になる。

さらに、分子ロボティクスを新産業に結び付けるためには、リアルタイム性の実現が不可欠である。高等生物の神経細胞は、環境に対するすばやい応答性を実現するために電気信号を活用している。分子ロボットに電気信号を伝達する電子部品や電子回路を融合し、化学的相互作用に基づく分子ロボットと既存の電子機械式ロボットの両方の性質を兼ね備えたハイブリッドシステムの構築も視野に入れた研究開発も必要となる。

・応用分野の開拓

「感覚と知能を備えた分子ロボット」は、化学、情報、生命に関連する先端テクノロジー群が、いずれひとつの大きなテクノロジーに収斂してゆくという大きな構想に基づいている。しかし、応用の立場からは部分的な機能だけでも十分役立つ分子ロボットが

考えられる。分子ロボットのための基盤技術開発と応用開発は卵と鶏のような関係であり、分子ロボットの研究で得られた知見や経験はただちに応用へ展開していくことが望ましい。特に医学薬学分野においては基礎研究から実用化まで膨大な労力と期間を有するため、早急なプロトタイプの実現と基本特許の取得を優先すべきである。たとえば、DNA ナノ構造やリポソームはそれ自体がセンサやアクチュエータとしても機能しうる。このような多機能性 DNA ナノ構造や多機能性リポソームについては、それ自体の応用可能性についても早急に検討し、分子ロボティクスコンセプトの有用性をアピールしなければならない。

（３）科学技術的・政策的課題

分子ロボティクスは日本がコンセプトの提唱にはじまり、研究としての先鞭をつけた研究領域であるが、今後、研究の重要性が認識されるにつれ、研究者の流動性が高い欧米や、米国において活躍している中国系若手研究者を積極的にリクルートしている中国を中心に研究開発が活発化するものと予想される。この中で日本の優位性を確保していくためには、人材育成、共用の研究インフラの整備、知識・技術・ノウハウの集積・交換、知的財産の取得、産学連携など戦略的に進めていく必要がある。

分子ロボティクスに関わる研究分野は、化学、生化学、生物物理、制御工学、計算科学と多岐にわたることから、一人の研究者がすべての分野に精通することは不可能であり、異分野の背景知識を持つ研究者が共同作業により目標を達成する仕組みとして、研究コミュニティを束ねる中核的な研究拠点の形成を早い段階で具体化する必要がある。研究拠点では、研究インフラを整備し、常勤および非常勤研究員の雇用、国内外からの客員研究員の招聘を行い、研究開発を加速するとともに、長短期の学生指導を進めることで人材育成にあたる。

分子ロボティクスは、現状コンセプトの実証を目指すフェーズにあるが、品質および生産コストを含めた生産技術の確立など産業化に必要な技術開発も視野に入れておく必要がある。上述の研究開発拠点は、分子ロボットアーキテクチャの策定、基本部品ライブラリの整備、自動設計システムの開発、核酸合成技術のスケールアップ等にも将来的に対応できる組織である必要がある。

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

DNA ナノ技術を中心に基礎的検討から応用を目指した技術開発まで、以下のように様々な展開が行われている。

- 空間的分子計算技術：反応拡散系によるパターン生成の分子実装など、DNA 計算デバイスを空間的に分布させて機能を発現させる研究が活発化している。
- DNA Origami をもちいた超高分解能光学計測：蛍光標識の 3 次元配置と画像処理技術の組み合わせによる新しいタイプのバイオマーカーの開発が盛んになってきている。
- DNA ロジックゲートの大規模化：簡単なニューラルネットワークなど、数百ゲート規模の回路を実装できるレベルに達している。

- DNA ブリック技術：任意の 3 次元 DNA ナノ構造を既存のパーツライブラリの組み合わせだけで作る技術が開発されている。
- DNA Origami を用いた一分子計測技術：DNA Origami をプラットフォームにした各種の生体分子の機能や力学特性の計測が行われている。
- DNA デバイスの生体内利用：DNA 論理素子による遺伝子発現計測、DNA ナノ構造によるドラッグキャリアなどの研究が継続的に蓄積されており、応用へ突破口が探られている。
- 大規模な DNA ナノ構造・デバイスシミュレーション技術：DNA Origami の形成過程やブランチマイグレーションなど重要な反応がシミュレーション可能になりつつある。

[注目すべきプロジェクト]

文部科学省科研費新学術領域研究「分子ロボティクス：感覚と知能を備えた分子ロボットの創生（萩谷昌己領域代表、2012 年度-2016 年度）」が発足し、分子プログラミング技術および DNA ナノ構造技術に加え、光応答性 DNA 素子、細胞サイズの巨大リポソーム構築技術、分子モータ技術、機能性高分子ゲル技術などを導入することにより、感覚と知能を備えたアメーバ型分子ロボットおよびスライム型分子ロボットの創出を目指している。現在、化学、生物物理、情報制御系を中心に、50 名を超える研究者が参画し、分子ロボティクスの研究開発が精力的に推進されている³⁾。

米国では、The Molecular Programming Project の後継プロジェクトとして、NSF の研究プロジェクト「Molecular Programming Architectures, Abstractions, Algorithms, and Applications(Lead PI, E. Winfree, 2013-2017)」が発足しており、分子プログラミングと DNA ナノ構造を中心とした研究開発が進められている。

研究開発プロジェクトではないが、ハーバード大学の Wyss Institute が主催する BIOMOD (International Bio-molecular Design Competition) は、若手育成の試みとして注目に値する。BIOMOD は 2011 年から毎年開催されている国際競技会で、学部生がチームを構成して生体分子をナノスケールで制御するための技術を習得し、その成果を競うものである。BIOMOD 開催に先立ち BIOMOD 日本大会も開催されている。2014 年日本大会には中国の天津大学も参加している。このような試みは、分子ロボティクスのような学際領域において高い教育効果がある。

(5) キーワード

リポソーム、DNA Origami、DNA 論理素子

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	科研費特定領域「分子プログラミング」(2002年度～2006年度)に参加した研究者を中心に、計測自動制御学会システム情報部門の調査研究会として「分子ロボティクス研究会(主査村田智)」が発足している。2012年度より科学研究費新学術領域「分子ロボティクス: 感覚と知能を備えた分子ロボットの創生」が始動し、世界的にも注目を集めている。
	応用研究・開発	×	→	—
	産業化	×	→	—
米国	基礎研究	◎	↑	DNAナノ技術の研究において20年以上の歴史と新コンセプトを次々に生み出す豊富な人的資源を持つ。2008年にはNSFのExpeditions in ComputingにMolecular Programming Project (2008-2013)が採択された。DNAやRNAを用いた分子コンピュータの開発を目的として、DNAナノテク、制御、ロボティクスの研究者が結集した。日本で分子ロボティクスの研究プロジェクトが始動したことを受け、2013年10月より、後継プロジェクトが発足している。
	応用研究・開発	○	↑	ハーバード大のWyss Instituteにおいて、ベンチャーを起こすにはリスクが大きい研究テーマの一つとしてDNAナノ構造(基本特許取得済み)を中心とした研究が進められている。ハーバード大学を中心にボストン近郊の病院、大学が地域コンソーシアムを設立し、製薬企業およびITベンチャーとも産学連携を進めている。
	産業化	×	→	—
欧州	基礎研究	○	↑	新材料および新デバイス開発が多く、システム化の研究はあまり始まっていない。
	応用研究・開発	△	→	DNAナノ技術の応用研究を目的として、2007年にCenter for DNA Nanotechnology がデンマークのAarhus大学に政府の支援でCOEとして設立されている。
	産業化	×	→	—
中国	基礎研究	△	↑	現状ではナノ構造およびナノデバイス関連の研究が多い。米国などから中国系のDNAナノ構造の研究者を積極的に国内に呼び戻している。現状ではまだ研究室単位の研究体制であるが、Wyss研究所からも関連研究者が帰国しており、今後急速に研究体制を整えることが予想される。
	応用研究・開発	×	→	—
	産業化	×	→	—
韓国	基礎研究	×	→	サムソンの研究所にバイオナノ構造の研究者がいる程度であり、目立った動きはみられない。
	応用研究・開発	×	→	—
	産業化	×	→	—

(註1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発(プロトタイプの開発含む)のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トренд

↑ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↓ : 下降傾向

(7) 参考資料

- 1) Ingber, Donald E. The Wyss Institute at Harvard University. IEEE PULSE July/August 2011, p.43-46
- 2) Nucleic Acid Nanotechnology special issue. 2014, Acc. Chem. Res. 47(6), p.1643-1922.
- 3) 分子ロボティクス. 感覚と知能を備えた分子ロボットの創製 新学術領域「分子ロボティクス」.
<http://www.molecular-robotics.org/>
- 4) California Institute of Technology. Molecular Programming Project.
<http://molecular-programming.org/>
- 5) Wyss Institute at Harvard University.
<http://biomod.net>
- 6) Aarhus University. Center for DNA Nanotechnology
<http://cdna.au.dk/>

3.5.6 元素戦略・希少元素代替技術

（１）研究開発領域の簡潔な説明

レアメタル・レアアースなどの希少元素に依存することなく、比較的豊富に存在する元素や有機材料などを用いて、目的の機能を備えた材料を創出する研究領域である。

物質中の元素機能の理論的解明から、新機能の創出、新材料の創製、特性評価等の諸課題がある。多様な元素の特性に着目し、「電子状態」「原子配列」「分子構造」「欠陥配置」などの微視的な観点から目的機能を如何に発現させるかを検討し、計測技術や計算科学も活用して構造・機能・反応をデザインする。資源の有効活用の観点から、希少元素を循環的に利用するシステムの確立に向けた技術開発や規制戦略も重要となる。天然資源に乏しいわが国が世界に先駆けて開始した研究施策の代表例でもある。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

スマートフォンやハイブリッド自動車を始めとした我々の日常生活を支える製品の中には希少元素が使用されているものが数多く存在する。これら希少元素はももとの存在量が少ない上に年々需要が増加傾向にあり、さらには産出国が偏在している。このため希少元素を用いた製品開発を行う各国はそれぞれの実情に合わせて、世界的な供給量不安定化や価格沸騰を含めた資源問題に対応するための戦略が求められるようになった。

この問題は、資源を持たない産業立国である我が国にとって特に切実であり、1980年代には少生産量で市場的に不安定な特殊金属のうち、日本の産業に欠かせないという政策的観点から「レアメタル」の名称で31鉱種が指定され、それらの資源開発促進や備蓄を行ってきた。しかし21世紀に入って、透明電極に用いられるInや永久磁石に必要なDyの高騰・供給不足を始めとした各種レアメタルの価格の乱高下や供給の不安定が顕著になり、リーマンショック直前の2007年には多くのレアメタルの価格が数倍にも高騰するなど、資源開発や備蓄のみでは対応しきれない事態に発展する懸念が生じた。さらに、資源メジャーのM&Aや占有化や国家資本の積極的参入が続く最中に、中国の希土類輸出制限に端を発した30倍以上の希土類価格の暴騰が世界を襲った。これにより資源問題は一過的なものではなく構造的問題として国際的に協調して対処すべきとの風潮が一気に強まった。

〔これまでの取組み〕

このような中、日本政府が入念に準備を進めていたのが元素戦略・希少元素代替に関する戦略である。これは、従来の資源は供給されうるものという捉え方を脱して、資源を素材化し、それらをデバイス・部材の中で如何に効率よく使うかという視点に立ちながら、資源の持続可能な利用や高付加価値製品の安定生産を目指すものであり、“減量化”、“代替”、“循環”の3つを柱として取り組まれてきた。この戦略が2007年より施策として具現化されたのが、文部科学省「元素戦略プロジェクト」と経済産業省「希少金属代替材料開発プロジェクト」である。前者が長期的視点からの基礎研究で学術的基盤を構築するのに対して、後者は5年を目処とする短期的取り組みで実用化のステップに載せるテーマを推進する省庁連携で取り組んだ国家プロジェクトであり、提案の募集の際

にも相互の役割分担に見合ったテーマを交換して審査するなど、従来にはなかった協力体制で取り組まれている。

元素戦略・希少金属代替に関連した成果として挙げられるのが、磁石材料におけるジスプロシウム(Dy)減量化・フリー化であり、結晶粒合径を磁区サイズより微細化して Dy の担っていた保磁力の低下を防ぐ技術と結晶粒界面の制御で逆磁区の核生成を抑制して保磁力を確保する技術からなっている。前者には微細で清浄な結晶粒制御のプロセス技術、後者は原子配置を三次元観察できる最新の解析技術といったいずれもナノテクノロジーの発展がもたらした成果であることを見逃すことはできない。また研磨材料における酸化セリウム CeO₂ の減量化技術でも優れた成果を上げている。これは研磨剤としての CeO₂ の使用環境を見直しコントロールすることで従来の数割程度の量でも液晶ディスプレイなどの機能硝子の精密研磨を可能としたもので、材料開発とプロセス開発とが一体となって取り組んだ成果と言える。これらはすでに実用化の段階に進みつつあり、一時は数十倍にまで高騰したレアアース価格を鎮静化させる要因の一つともなった。また、リチウムイオン二次電池の正極活物質に使用されるコバルト酸化物は安全性や供給の面で懸念があり、それを代替する目的で有機二次電池が日本から提案されている。競争の激しい太陽電池においても、化合物太陽電池に使用されるインジウムやガリウムなどの元素機能を代替するための有機太陽電池の研究開発が進んでいる。

米国では日本に追随する形で、DOE が 2010 年に“Critical Materials Strategy”を発表し、2011 年版も合わせて Li, Mn, Co, Ni, Ga, Y, In, Te, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Tb, Dy をキーマテリアルとして戦略的に供給の安定と代替技術、循環技術を確認すべき対象とした上で、研究プロジェクトの組織化や国際協力の提案を行っている。またその一環として、2012 年から Innovation Hub for Critical Materials Research という拠点形成も進めている。一方、欧州では 2007 年から 2013 年にわたる FP7(第 7 次研究枠組み計画)において Critical Materials として Li, Co, Ga, Ge, Y, Ru, Pd, In, Te, Ta, Pt および希土類を定め、2014 年より開始された後継プログラムである Horizon2020 の中でも原材料の持続可能な供給の促進、資源効率の向上等を目的とした積極的なテーマの拾い上げを進めている。

なお、2011 年、2012 年、2013 年に続き 2014 年 9 月にも Annual Trilateral U.S. – EU – Japan Conference on Critical Materials for a Clean Energy Future という施策上重要な物質に関する日米欧三極会議が行われ、レアアース産業の現状、物質のライフサイクル、代替方策のロードマップ、低コスト材料開発への定量的取組、リサイクル技術、分離・抽出技術などの最新状況に加えて、カナダや韓国の施策としての取組などが紹介されている。

中国、韓国でも資源制約へのアプローチが行われているが、中国は資源国としての強みを活かした輸出制限などによるアプローチ、韓国は最終製品の競争力を活かした部材開発力の強化を睨んだ戦略を取っている。

[今後必要となる取組み]

これまで我が国における元素戦略・希少金属代替の優れた成果は、対象を絞りそこに技術と知識を集約して解決する集中型の開発により、現在使われているものを代替する

形で行われてきた。

今後はよりありふれた元素 (earth-abundant elements) で同様の機能発現をさせていく創成型の抜本的代替が求められる。そのためには、既存の元素がなぜそこで機能を発揮しているのかを科学的に理解した上で、ナノ構造、界面・表面、欠陥などの制御と活用による革新的な機能物質・材料の創成と計算科学や先端計測に立脚した新しい物質・材料科学の確立が必要であり、さらには元素を組み合わせ、物質化、材料化するための設計指針の確立も求められている。

なお現在日本は、材料開発に注力しているが、採掘・生成・回収技術面での技術力が欠けている。今後の元素戦略・希少元素代替の取組には、物質材料の開発の継続に加えて、再利用技術の開発、再利用システムの構築が持続可能な豊かな社会の実現には必要不可欠である。そのため、今後は元素毎のマテリアルフローの追及に尽力することも必要になるであろう。

資源の乏しい我が国の現状を鑑みるに、今後の元素戦略は多様な電子・原子配列による機能発現を多量データの統計的解析により整理・理解した上で新規材料の設計・開発につなげるマテリアルズ・インフォマティックスの視点を踏まえたものとなって行くべきであろう。

(3) 科学技術的・政策的課題

こうした課題を推進する上でのポイントは、異分野の力を結集することである。元素機能の発現機構は、物理、化学、材料などにまたがる境界領域に位置し、既存の学問領域が単独で解決できるものではない。従来は経験則に基づいた材料設計指針が多かったが、これにサイエンスの視点による原理原則の指針を加えることが必要とされており、物理や化学の視点による元素機能の解明は、まさに材料挙動の原理に直結するものであり、材料の革新につながる可能性が高い。しかし、この異分野融合は、自然発生的に進むことは一般的に期待できず、したがって、政策的に誘導される必要がある。また、この課題が「元素戦略」と呼ばれるように、元素種ごとのリスク分析を綿密に行い、優先順位と数値目標を明確に掲げた上で、効率的な取り組みを進めることが肝要である。さらには、都市鉱山などで指摘されるリサイクル技術の開発においては、製品の回収方法のシステム化などの要素も含まれており、科学技術行政のみならず、環境、総務行政とも連携が必要である。希少元素を循環的に利用するシステムの確立に向けた技術開発や規制戦略も重要であり、これは我が国を希少元素大国へと変貌させうる可能性も持つ。

元素戦略・希少金属代替戦略の確立・達成には人材育成も含めて産学官の密接な連携を通したオールジャパン体制を整えることが必須であろう。

(4) 注目動向 (新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など)

[新たな技術動向]

原子炉や加速器などの莫大なエネルギーを用いずに元素種を変える元素変換する技術が報告されており、マイクログラム単位での変換も確認されている。数十 nm の厚さの Pd ナノ薄膜と数 nm の酸化カルシウムナノ薄膜を数回積み重ねた多層膜に変換したい金属を吸着させ、そこに重水素を透過させる。現在セシウムからプラセオジウム、ストロ

ンチウムからモリブデン、バリウムからサマリウム、タングステンから白金などの元素変換にも成功したとの報告もある。

一方、従来存在しなかった面心立方(fcc)構造を有するルテニウムナノ粒子の開発の成功も報告されている。ルテニウムは全温度領域で六方細密(hcp)構造の金属である。構造が異なれば同種の元素でも電子状態・触媒活性は異なり、CO 酸化反応において fcc-Ru は hcp-Ru とは全く異なる触媒活性を示す。また、Pt、Pd、Rh、Ir と白金族金属のほとんどが開発された Ru と同じ fcc 構造であり、これらは工業的に非常に重要な触媒反応活性を有する。その反応性はこれら金属の電子状態・表面結晶構造と密接に関わっているため、fcc 構造を有する Ru は従来の hcp 構造では活性に乏しかった反応においても、他の白金族金属と同等、ひいてはそれを凌駕する活性を示す潜在能力を秘めており、より安価なルテニウムが白金などの代替材料となり得ることが期待される。

12CaO・7Al₂O₃ エレクトライドに Ru ナノ粒子を固定化してなる触媒が、100 年以上にわたってアンモニア合成を工業的に担ってきたハーバー・ボッシュ法を大幅に凌駕するのはもとより、近年工業化されたルテニウム触媒よりも 10 倍高い触媒活性を示すことが 2012 年に報告されている。

CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」では、多孔性金属錯体がパラジウムの水素吸蔵量・吸蔵速度が 2 倍に向上させる研究、微生物が作る酸化鉄で電池の特性が向上し、高機能・低コスト・エコな次世代材料に期待できること、高い磁気転移温度を持つハーフメタル新材料の合成に成功し、超高密度磁気メモリなどスピントロニクスデバイスへ応用可能であること、酸窒化物で初めて強誘電体の挙動の観察に成功したこと、ダイヤモンド電極を用いて CO₂ と海水を原料とした有機物合成が可能となったことを始めとして、様々な興味深い成果が得られている。

[注目すべきプロジェクト]

文部科学省の「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」として磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の各研究開発を課題とする 4 拠点が 2012 年から 10 年間の事業として動いている。これらは材料創成、解析評価、理論のいずれかを主軸とする主拠点到それ以外を担当する二つの副拠点から構成されている。これらの拠点は Spring-8 や J-PARC、京コンピュータなどの基礎的・大型ファシリティと積極的に結びついて、物質の本性を理解することで抜本的代替材料開発への道を開こうとしている。磁石材料では磁力発生原理を理論的に解明し、希少元素を全く使わない磁性材料を、触媒・電池材料では反応機構を電子レベルで解明し、高い触媒・電池特性をもたらし代替材料を、電子材料では電子状態の理論設計を精緻化し、汎用元素のみからなる電子部材を、そして構造材料では、原子結合・格子欠陥を理論的に解明し、日本における希少元素の総使用量を抜本的に削減できる構造部材を、それぞれ試作段階まで持って行くことを目指した研究開発が進んでいる。構造材料の中でも、特に主要社会インフラ分野である都市建築、交通（輸送機器）、産業機器、環境・エネルギー、資源、航空・宇宙で使われる、いわゆる社会インフラ材料に関する研究開発が重要であり、その主要課題は“耐震化”、“軽量化”、“低温化”、“高温化”、“過酷環境化”、“長寿命化”である。

一方、経済産業省・NEDO は比較的短期間での実用化を目指すプロジェクトを中心に

希少金属代替材料開発プロジェクトを進めてきている。2008～2013 年度は委託事業として、元素ごとのリスク評価に加えて、リスクの増大が懸念される透明電極向けインジウム、希土類磁石向けジスプロシウム、超硬工具向けタングステン、排ガス浄化向け白金族・セリウム、精密研磨向けセリウム、蛍光体向けテルビウム・ユーロピウム等を対象元素とした代替材料の開発や使用量低減技術の開発を行っている。2012～2015 年度には産業界での希少金属の使用量低減を促進するため、民間企業から広くテーマを公募し、早期の活用が期待される研究開発として、鉛フリーはんだ(Bi)、樹脂難燃剤(Sb)、ランガサイト型圧電素子(La, Ga, Ta)、レアアースレスモータ(Nd, Dy)、レアアースレス蛍光体(Eu, Ce, Y)、排ガス浄化触媒(Pt, Pd, Rh)、超硬工具(W)、太陽電池波長変換膜(Y)等に対して助成を行っている。これら研究開発を推進するプロジェクトに加えて、それらに関する研究開発の最新動向の調査、事前検討、中長期戦略立案に関する検討などに関する事業など幅広い取組を行って来ている。

2012 年に経済産業省が開始した次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発を NEDO が引き継ぐ形で、2014～2021 年度の 8 年間という長期プロジェクトが始まった。レアアースに依存しない革新的高性能磁石の開発、モーターを駆動するためのエネルギーの損失を少なくする高性能軟磁性材料の開発ならびに新規磁石、新規軟磁性材料の性能を最大限に生かして更なる高効率を達成できるモーター設計の開発を行い、次世代自動車や家電、産業機械の心臓部であるモーターの省エネ化を図り、競争力を確保し、我が国産業全体の活性化に寄与することを目標としており、米国が志向するようなシステム全体を考慮した取り組みに対応する長期戦略といえる。

他にも、科研費の新学術領域研究として、「元素ブロック高分子材料の創出」、「ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開」、「π 造形科学: 電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出」、「3 D 活性サイト科学」など、元素戦略と関連するものが 2012 年以降から開始されている。他にも内閣府の SIP「革新的構造材料」、JST の CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」、さきがけ「新物質科学と元素戦略」、「先端的低炭素化技術開発 (ALCA)」、「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」などの関連プロジェクトも推進されている。

米国では Energy Innovation Hub for Critical Materials が活動しており、さらに 2011 年に発表された “Materials Genome Initiative” を受けて、計算、計測、データベースを組み合わせた次世代材料開発が進行している。

欧州では FP7 の後継プログラムとして Horizon2020 が 2014 年より始動している。ドイツが伝統的にこの分野に強く、米国同様、計算科学を積極的に活用している。アジアでは、産業界、学術界ともに、中国、韓国などの追い上げが著しい。

注目すべき研究機関として、米国 : Oak Ridge National Laboratory (ORNL)、National Institute of Standards and Technology (NIST)、ドイツ : Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH (MPIE)、Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)、Darmstadt University of Technology、スイス : Eidgenössische Materialprüfungs- und Forschungsanstalt (EMPA)、英国 : Imperial College、韓国 : Korea Institute of Material Science (KIMS)、Pohang University of Science and Technology (POSTECH)、中国 : Chinese Academy of Sciences (CAS) 傘下 Institute

of Metal Research (IMR)、Shanghai Institute of Ceramics (SIC) が挙げられる。

(5) キーワード

Critical material、EAE (earth abundant elements)、Materials Genome Initiative、レアメタル、レアアース、循環、減量、代替、材料設計、組織制御、高耐震化、軽量化、長寿命化

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	これまでの元素戦略プロジェクトを進化させた拠点形成型の10年プロジェクトも進展しており、SPRING-8をはじめとする基礎物性の解析・理論とを結びつけた取り組みも進んでいる。元素戦略に関するCRESTやさきがけの採択課題から新たな触媒や磁性材料に関する成果が出ている。
	応用研究・開発	◎	↑	希少金属代替技術開発で既に多くの実用化に向けた研究進捗がみられ、「レアアース・レアメタル使用量削減・利用部品代替支援事業」においても、レアアース磁石やタンタルコンデンサのリサイクルに関する研究開発で成果が出ている。
	産業化	◎	↑	材料開発では世界をリードしており、脱/消Dyや省CeO ₂ など世界に先んじて実用化されたものもある。元素戦略によって初めて実用化された画期的新製品の登場には知的所有権の問題から少し時間が必要かもしれない。リサイクル技術は依然欧州が追いかけている段階にあるものの、研究開発は着実に進んでいる。
米国	基礎研究	◎	↑	DOE主体でCritical Materials Strategyが行われ、希少元素に関する関心が高く開発も活発である。Ames National Laboratoryを代表にしてCritical Materials Hubと呼ばれる研究体が作られている。日米欧による国際会議であるConference on Critical Materials for a Clean Energy Futureも2011年以降で4回を数えるなど、諸外国からの情報収集も積極的に進めている。
	応用研究・開発	◎	→	DOEが主導して2010年、2011年に発表されたCritical Metal Strategyに続くものは出ておらず、省庁横断プログラムであるMaterial Genome Initiativeに集約された形となっている。2011年以降、材料開発、計算、計測、データベースの統合的アプローチが継続しており、各大学、研究機関で活発な研究活動が行われている。2011年以降、多数のレアース関連法案が提出・審議され、国内のサプライチェーンを復活させようとする動きもみられる。
	産業化	○	→	代替材料開発よりも特定の元素に頼らない代替システムの開発に重点を置き、材料への依存度を低めようとする動きが先行しているが、希少元素依存度を下げる試みも行われている模様。軍事産業に支えられた開発が進んでおり、非常時用の備蓄対策が行われている。
欧州	基礎研究	○	↑	日本と希少金属代替に関して戦略的国際共同プログラムが実施されているほか、独国、英国等では元素回収技術の発展等が目覚ましい。磁石、二次電池、触媒などターゲットを絞り込んだ取り組みが行われている。
	応用研究・開発	◎	↑	Scientific & Technological Report として“Critical Metals in Strategic Energy Technologies”を例年まとめており、SET-plan (Strategic Energy Technology plan) の中で開発対象を位置づけ、積極的な動きを見せている。2014年よりスタートしたHorizon2020では優れたアイデアを市場に繋げるための中小企業に対する資金的な補助が強化されている。

	産業化	○	→	モーターなどの設計技術が強く、米国と同様に特定の元素に依存しない設計技術で対応しようとの動きが強い。多国籍企業化を進め、また、アジアへの進出を図る。EU全体で希少金属問題に取り組んでおり、各国連携が活発。
中国	基礎研究	△	→	特に目立った動きはないものの、学術面では日本の元素戦略プロジェクトチームの結果をフォローした論文が増えつつある。
	応用研究・開発	○	↗	原料国としての強みをもつことから、代替、減量化よりは新機能開発に重きをおいた材料・出口製品の開発に注力している模様。特に磁性材料の研究が活発である。技術的には未熟ではあるものの電気自動車の実用化された例も少なからずあり、そのためにレアメタル、レアアースに関する研究開発が進められる可能性は高い。ナノコンポジット磁石等の日本の元素戦略研究のキャッチアップも多数行われている。
	産業化	△	→	代替、減量化にかんする動きはなく、むしろ用途開発、環境対応などに主眼がいつている様子。2014年WTOが日米欧が主張した中国のレアアース輸出規制の解除を全面的に認めたことで国際的に不利な立場となった。
韓国	基礎研究	○	→	学術面では日本の元素戦略プロジェクトチームの結果をフォローした論文が増えつつあり、応用を意識した研究が多い。
	応用研究・開発	○	→	素材一般に「部品・素材競争力総合対策」を策定して企業と研究機関の結びつきを強めている。また、出口製品から素材・部品力の強化を目指した産学連携も見られる。韓国機械・材料研究所（Korea Institute of Machinery and Materials, KIMM）の材料部門が2007年に独立した材料科学研究所（KIMS）が複合材料利用技術の開発をおこなっている。
	産業化	○	→	大手鉄鋼会社のPOSCOが18年までに2兆8千億ウォンを投じてレアメタル、非鉄金属などの素材事業に進出する計画を出すなど、政府が2018年までに液晶ディスプレイやハイブリッド車のモーターなどの原材料として、リチウムやインジウムなど10種類の需要が高まっているレアメタルの自給率を80%に引き上げる方針を出して取り組んでいる。

（註1）フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

（註2）現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

（註3）トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

（7）参考資料

- 1) DOE “Critical Materials Strategy 2011” ,
- 2) JRC Scientific & Technological Report “Critical Metals in Strategic Energy Technologies” 2011,
- 3) JST-CRDS 戦略イニシアティブ「元素戦略」CRDS-FY2007-SP-04
- 4) Nature
<http://www.nature.com/nature/journal/v501/n7467/full/nature12509.html>

3.5.7 データ駆動型材料設計 (マテリアルズ・インフォマティクス)

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

計算科学による特性予測、それを実証するハイスループット材料合成と評価、それらのデータを統合管理する材料データベースや機械学習などを統合的に活用した物質・材料探索・設計の取り組み全般を指す研究開発領域である。実験、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータを駆使して、統計的手法により物質・材料の機能を制御する規則を探り、それを通して具体的に新物質、新材料の「発見」を加速する。究極的には、理論研究者の参画により、規則の背景にある材料特性を支配する法則を「発見」し、自在な材料「設計」を可能とする系統的アプローチを構築することを目指すものである。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

計算科学に基づいたマテリアルズ・インフォマティクスの概念は 2000 年頃から提唱されていたが、当時は取り扱える原子数や精度にも限界があった。また大量のデータを統合し材料科学の問題をマイニングする手法も未開拓であり、そのアイデアの実現は限定的であった。しかし、ここ数年の計算機の進歩と大量なデータを取り扱える環境が、この状況を劇的に変えつつある。2011 年、米国で Materials Genome Initiative が発表されて以来、計算科学、データマイニングを融合させたデータ駆動型の材料設計 (ハイスループットスクリーニング) が再注目されている。

つまり、計算機、アルゴリズムの発展により、実験、理論と鼎立する第 3 の科学としての「計算科学」が、物質・材料研究においても解析や予測の手段として、重要な位置を占めるようになった。さらに、近年それら 3 本の柱を束ねる第 4 の科学として「データ科学」の重要性が認識されつつある。そのような時代背景において、1) 検索エンジンに代表される情報科学・技術の深化、2) 第一原理計算による物質データベースの構築、3) 大型施設や高度実験装置を用いた効率的合成・評価技術の深化と相俟って、物質・材料研究においてもシミュレーション技術が関連する実験的手法やデータベースと融合させ、「データ科学」を取り込むことにより、新機能材料のスクリーニングなどにおける開発コストを大幅に下げることができ、日本の産業競争力強化にもつながることが期待されている。

[これまでの取組み]

主たるアクティビティは米国にあり、①NREL, Colorado 大 Boulder 校(UCB), Northwestern 大(NWU)などで構成される Center for Inverse Design のチーム、②Duke 大の AFLOWLIB に基づいた共同研究、③MIT の Materials Project に基づいた共同研究、④その他に分類される。現状は、第一原理計算データベースおよびコンビナトリアル実験に基づいたハイスループットスクリーニングという色彩が強い。

Center for Inverse Design

元 NREL、現 UCB の Zunger らは、材料デザインに 3 つの必要な modalities (sub-tasks)が必要と主張している。modality1 は、inverse band structure に代表されるよう

に、バンドギャップなど決められた特性を与える物質を、第一原理計算に基づいて膨大な化学・構造スペースの中から探し出すことを指す。例として、光学ギャップと遷移強度を向上させるための Si-Ge 超格子の積層デザインを挙げている。modality2 は、ICSD などのデータベースに登録されている構造既知の物質を対象に、新しい機能を見つけ出すハイスループットスクリーニングを目指すものを指す。具体的には、網羅的な第一原理計算結果をもとに、たとえば太陽光の吸収率に関してスクリーニングを実施し、Fe₂SiS₄ などの優位性を見出している。modality3 は、第一原理計算に基づいて未知化合物を系統的に探索することを指す。A₂BX₄ 系では 39 種類の結晶構造を持つ 80000 通りの化合物について第一原理計算し、熱力学的安定性でスクリーニング。同様の計算を ABX 系化合物についても実施し、多数の安定な未知化合物を見出している。そのなかから、TaCoSn や TaIrGe のような新しい有用な半導体化合物を見出したと主張している。上記の理論計算による探索結果に基づいて、このチームでは、コンビナトリアル手法で網羅的な合成実験を大規模に実施している。

Materials Project

マサチューセッツ大学の Ceder らは、以前から計算科学によるハイスループット材料探索とデータマイニングに関する Materials Project 研究を行ってきた。これは、WEB 検索できる第一原理計算データベース Materials Explorer を起動し、知りたい化合物名をいれるとその物質の結晶構造、第一原理計算で求めた電子状態、X 線回折データなどが表示される仕組みになっている。現在、このサイトでは約 5 万件のデータが保存されており、実際に物質合成をする際の参考になっている。同じグループの Persson(LBL)は、Materials Project の中で Open materials design environment という観点でデータベースを公開しており、すでに登録ユーザが 5000 人を超え、様々な共同研究が進んでいることを強調している。また水溶液系での合成指針を得るために、第一原理計算による電位-pH 図データベースを最近公開した。近い将来に弾性定数データベースも公開する予定とのことである。

Ceder らは、東工大菅野グループが 2011 年に実験により発見した LGPS 系硫化物 Li イオン伝導固体電解質について、①Materials Explorer を利用して第一原理熱力学的スクリーニングを実施し、②短時間第一原理 MD 計算に基づいてバイズ推定することでイオン伝導度を的確に予測する手法を開発し、新しい固体電解質材料を設計と報告している。1 年間の研究で大幅な進歩があり、マテリアルゲノムの謳い文句である accelerated materials design ができていると主張している。

AFLOWLIB

デューク大学の Curtarolo は、Materials Explorer と同様の第一原理計算データベースである aflowlib.org を開発・運用している。すでに、これに基づいて太陽電池、トポロジカル絶縁体、二元合金、熱電変換材料などに関するハイスループットスクリーニングを行っている。また大量のスペクトル解析から新材料を見つけ出す手法も提案している。

Aflowlib を活用して共同研究を実施している竹内(Maryland 大)は、希土類フリーの永

久磁石をターゲットに、Mn-Ni-Ga 系などでハイスループットスクリーニングしている。放射光を利用したコンビナトリアル X 線回折実験の手法を確立させた結果、放射光側から XMCD や ARPES といった最新分光設備におけるビームタイムが提供されるようになり、さらなる発展を期待されている。

Montana(仏 Grenoble)は、Curtarolo と共同し、低熱伝導度の半導体を材料設計するために Half Heusler 型化合物のデータマイニングを行っている。第一原理計算に基づいた熱力学的安定性のスクリーニングを実施し、機械学習手法に基づいて熱伝導度を定める記述子を探索する。これによって、熱伝導度そのものを第一原理計算するというコスト高い計算をすることなしに、比較的簡単な第一原理計算に基づいて材料探索ができた」と報告。合成実験を実施中ということであった。Nardelli(North Texas 大)は、Curtarolo と共同し、密度汎関数法の一つである DFT+U 法を使って計算した酸化物などの状態図を計算している。現在では 600 種以上の状態図が自動計算されており、これらの結果はすでに公開されている。また、AFLOWLIB/ONR-MURI の枠組みで AFLOWLIB に第一原理計算 Quantum Espresso コードによる phonon 計算結果を掲載する予定とのことである。

物質・材料研究機構が提供している”MatNavi”では金属、無機材料、ポリマー、拡散、相図など多くのデータから構成されており、一般に無料公開されていることから、世界中で利用されている。しかし、データのデジタル活用の観点では構築されていないことから、事典的な活用にとどまっており、今後の改善が期待される。

化学でいえば、例えば Chemical Abstract (CAS) などの物質データは他の分野には類を見ないくらいビッグデータとなっている。合成する前に物質をスクリーニングし、最も効率的な物質を合目的的に探索することは、化学反応の解析と同じくらい重要である。実験研究者がそれらを有効活用するには、物質データと第一原理計算の有機的な融合による予測の推進が必須である。情報科学の手法を用いて、有機化合物の構造と生物学あるいは薬学的活性との相関を定量的に予測する試みは、定量的構造活性相関(QSAR)と呼ばれ、以前より研究が盛んに行われている。特に直線自由エネルギー関係を用いたモデリングは、分子の部分構造の情報を主パラメータとし、共鳴効果や立体効果などを補正として取り入れることで、有機化合物/水の分配係数や水溶解度の問題などにも適用されてきた。また、このような分割モデルの組み合わせにより、NMR の化学シフト、分極率、振動スペクトルなどの物性量もある程度記述出来る様になってきている。しかし複雑な構造を有し、高精度計算が要求される分子の設計は一般的に困難であり、情報学的手法と量子化学に基づく分子設計のハイブリッド計算手法を確立することが望まれている。

【今後必要となる取組み】

将来的には、必要とされる特性を持つ物質・材料を、多種多様な元素や分子種の組み合わせの中から選択し、設計することが可能となるレベルまで技術が進化すると想定され、世界の趨勢は確実にそれを志向している。これを可能とするために、今後の研究の方向性としては、データマイニング、データ同化など情報科学的手法の取込みなどが重

要になっている。その過程の中で、理論計算や実験によるビッグデータを取り扱いつつも、人の直観を利用することができるように、視覚的にその結果を表示しようとする機能を持つことも必要である。また第一原理計算とひとくくりにしても、現状で充分に実験を再現できる物性値から、粗っぽい近似を置かなければ計算できないものまでバラエティがあり、そのことについて正しい知識を持つことは重要である。しかし、それではやはり人の判断が介在する必要がある、自動計算を達成するには課題といえる。今後、このような課題が克服され、多元系を含む多様な物性値についての大きなデータベースとなるとその価値が飛躍的に高まると考えられるので、第一原理計算そのものの技術革新は、地道な努力であるが重要である。

また、多機関で集められたデータを統合し、誰でもが使えるデータベースに再構築することは望ましいが、それには課題が山積している。計算科学とハイスループット材料合成の手法が発展し、多くの材料の結晶構造、電子構造、特性などを羅列したデータセットが各機関に蓄積されても、共有化の段階では課題が残る。現時点ではそれぞれの機関、組織が独自のデータ形式を例えば SQL などの形式を設定し、リレーショナル・データベース形式で材料情報蓄積している。そのため、将来、多機関で連携して材料データを統合する場合には汎用性のある共通のデータ形式を決める必要がある。例えば、メタデータの表現方法の一つである RDF の活用により、情報の分類や検索などの自動化・効率化を図ることができる。このような汎用で広く普及しているデータ形式を採用することで、互いのデータの不足分を補完し、他機関のデータを効率的に使うことが可能になると期待される。

実験技術が発展してきた今こそ、実験研究と計算研究が融合した新たな材料研究体制を確立していくときである。わが国は、この分野の初動において、米国に少し遅れを取っている懸念があるが、①実験的な材料研究において世界を主導してきたこと、②学際的な連携に大きな盛り上がりが見られること、③放射光など大型施設や電子顕微鏡のような高度実験設備が整備されていること、④MatNavi を代表とするデータベースを持っていること、などを考えると、これから充分に世界の主導権を取った研究を行うことが可能と期待している。しかし、数学と材料科学の連携や、第一原理計算手法の技術革新など、長期的な取組みが必要な課題も多い。

このような観点から、今後、日本国内に長期的視点にたつマテリアルズ・インフォマティックスのための中心的拠点を設置することが望まれる。研究拠点では最先端の研究を実施して世界に向けて発信するのはもちろんのこと、マテリアルズ・インフォマティックスを使った材料開発事例や実際に材料を合成する場を提供する。データの標準化に関して我が国も積極的に発言し、国際化を推進するなどの取組みが必要となる。

（３）科学技術的・政策的課題

我が国ではこれまでの経験に裏打ちされた研究の蓄積が多い一方で、必ずしも異分野研究者との連携・融合が十分行われているとはいえない状況である。実験研究・計算研究・理論研究・企業等での開発研究が融合した、“風通しのよい”材料研究体制を確立する必要がある。

政策的な課題は明らかに人材育成である。米国のマテリアルゲノムイニシアチブ

(MGI)プロジェクトに関連して、現在、欧米において、計算科学、データ科学の各種手法を教育する環境整備が多く、主要大学に展開されているようである。最新鋭の材料計算解析技術を日常的な大学カリキュラム内で演習し、パッケージ化された第一原理計算、状態図計算、フェーズフィールド組織シミュレーション、また材料スクリーニング用の大量の材料データベース操作法、機械学習など、当たり前のように操ることのできる学生の連続的輩出を狙っている。材料開発の圧倒的スピードアップには、結局、それを遂行できる人材を効率的に増やすことが最も確実である。わが国でも、CMSI (計算物質科学イニシアティブ) や各学協会、大学院において各種セミナーや講義のWEB発信など様々な教育プログラムが開始されている。これらがプロジェクトに付随した一過性のもので終わってしまわないように、不転退の決意が必要である。

(4) 注目動向 (新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など)

[新たな技術動向]

コンビナトリアル合成は 10 年ほど前にブームがあったが一旦下火になった。最近、第一原理計算に基づいて抽出された候補物質のコンビナトリアル合成を行い、それを放射光でコンビナトリアル評価を行うという一連の流れで成果がでるようになり、Materials Genome や Center for Inverse Design などの funding に基づいて、大きなブームになりつつある。たとえば、2014 年 5 月に開催された OSTP 主催の会議では、マテリアルズ・インフォマティクスとハイスループット材料合成に関する議論が行われ、米国のコンビナトリアル材料科学をけん引してきた研究者が多く参加した。世界最大の半導体製造機器企業である Applied Materials 社、コンビナトリアル材料手法と得られたデータを管理しデータマイニングする手法をセットでサービスしている Intermolecular 社、ジェットエンジンや発電用タービンを製造している GE 社が重役や研究開発のマネージャーを参加させていた。これらの企業から、たとえば、多様な材料開発を先導するような研究、薄膜材料に関する材料データの蓄積、多元系特に 7、8 元系のデータの蓄積に関する要望が出ていた。これらの要求は現時点ですでにある Materials Project や aflowlib に対して、企業からみた課題を明らかにしている。

[注目すべきプロジェクト]

2011 年に米国で計画が公表され、2012 年からスタートした “Materials Genome Initiative” の下では、2014 年、NIST が、“The Center for Hierarchical Materials Design(Northwestern, U. Chicago, Argonne)” の支援を開始。今後も NIST 主導で、大規模大容量の物質データ処理分野への資金投入が予定されている。特に計算科学分野においては、プログラム開発やデータベースの基盤整備、およびその普及など、基礎研究への支援も手厚く行われているようである。本年度は MGI の 3 年目にあたり、各種学会や業界団体における白書の提出や、5 大学 (ノースウェスタン大学、南カルフォルニア大学、ライス大学、ジョージア工科大学、イリノイ大学) が産学官連携のための地域別会議を開催するなど、期間の後半に向けて出口戦略を模索している段階であると思われる。

中国でも米国の MGI の提案を受けて、Chinese Materials Genome Initiative が始まろうとしている。詳細は不明であるが、計算科学を使って多くの材料の探索を進めると予想されている。予算規模は 100 億円規模ともいわれ、人海戦術で網羅的に材料探索を

進め、その材料の知的財産の確保を目指していると思われ、今後、注視すべき研究である。

韓国では、米国の MGI の動きに触発されて、2015 年度より 10 年計画として Creative Materials Discovery Project が計画されているようである。

（５）キーワード

物質探索・材料設計（マテリアルデザイン）、データベース

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	△	↑	基礎研究に注力している例として、科研費新学術領域のスパースモデリング（代表者東大岡田真人）とナノ構造情報（代表者京大田中功）が挙げられる。東北大WPI（代表者小谷元子）が数学連携による基礎研究を開始しているほか、学際的・萌芽的な試みが始まっている。日本金属学会では公募シンポジウムが開催され、セラミックス協会ほか学協会誌特集号の企画もはじまっている。しかし、国際会議で発表するレベルの研究者数は、米国、欧州に比べて未だ少ない。
	応用研究・開発	△	↑	物質・材料研究機構グループによる3元コンビナトリアル材料合成手法の開発とそれを使ったゲート絶縁膜やメタルゲート材料開発への応用などを基に、スタートアップ企業、株式会社COMETが2007年に設立され、産学官における材料の開発支援などを行っている。特に一定の膜厚を保ちつつ組成だけが変化できる方式では、非常に狭い組成領域しかない特異的な材料も見つけたことができ。また、移動するマスクの穴の形状を変えることで3元コンビナトリアル材料合成の手法をさらに発展させたコンビナトリアルパルスレーザ堆積装置、コンビナトリアルスパッタ装置が市販され、材料開発を加速している。
	産業化	△	↑	電気、自動車、重工、素材メーカーなどで、効率的な材料探索・開発への期待が大きく膨らんでいる。計算科学が主導し新材料を発見した好例として、シャープと京大の産学連携による長サイクル寿命を示すLiイオン電池用正極材料の開発が挙げられる。ハイスループット材料合成やデータ解析を受注するような企業は育っていない。
米国	基礎研究	○	↑	プロジェクトが材料開発の効率アップを目指し工学的色彩が強いため、基礎研究としての進捗は十分とは言えない。しかし、数学や情報研究者と材料科学との連携は開始しており、学会シンポジウムや国際会議も頻繁に行われている。参考書や専門雑誌の発刊計画も米国の主導で進んでいる。
	応用研究・開発	○	↑	NISTではノースウェスタン大学、シカゴ大学、アルゴンヌ国立研究所などと連携して、“Center for Hierarchical Materials Design : CHiMaD”を設立し、計算科学を使ったマルチスケールでの材料特性、相図、熱力学データなどの情報を提供している。
	産業化	△	↑	米国では、ハイスループット材料合成やそのデータ解析に関するスタートアップ企業が存在する。代表的なものは電池材料の開発を行うWildcat社、半導体デバイス関連の材料開発を専門に進めるIntermolecular社などである。この会社は材料のデザインコンセプトの提案、300mmのSi基板を使ったハイスループット材用合成、得られたデータを管理しその中から新材料を見つけ出す、データ解析ソフトまでを統合したプラットフォームを提供している。パイオから触媒まで幅広くマテリアルインフォマティクスを展開したSymyx社は1994年に設立され急成長した会社だが、2010年には一部がハイスループット材料合成を専門に行うFreeslate社となり、データ解析などのソフト部門はAccelrys社に移り、現在でも積極的な材料開発を行っている。
欧州	基礎研究	○	↑	欧州は、第一原理計算の理論構築やソフトウェア開発において独擅場であり、近年になってそれをinformaticsにつなげようという意気込みが強い。たとえばドイツBerlinのFritz Haber研のScheffler教授のグループや、DusseldorfのMax Planck研のNeugebauer教授のグループは、高い基礎研究のポテンシャルを持ち、研究体制を整えつつある。欧州内で国際会議やワークショップも数多く実施されている。
	応用研究・開発	△	↑	例えば、オランダのEindhoven大学のSchubert教授らは、Dutch Polymer Institute(DPI)を立ち上げ、コンビナトリアル手法によるポリマー研究を精力的に行っている。また、スウェーデンのMaterials Evolutionのプロジェクトはハイスループット材料開発を目的としたプロジェクトであり、材料開発を加速するものである。

	産業化	△	↗	企業ではhte社（ドイツ）やflamac社（ベルギー）、それにiilka社（英国）などが活動している。hte社では“virtual library”という計算科学によるスクリーニング手法を用いている。また、彼らは、“MatInformatics”を提唱し、データマイニングに関する環境整備、およびソフト開発を行っている。
中国	基礎研究	×	↗	特筆すべき活動・成果が見えていないが、国際会議などではテーマとして取り上げられている。
	応用研究・開発	△	↗	中国マテリアルゲノムイニシアティブ(CMGD)は、中央政府や上海地方政府から日本円で総額100億円近い予算を受け、米国から帰国した中国人研究者をリーダーとして応用研究を加速させる計画らしい。
	産業化	×	→	特筆すべき活動・成果が見えていない。
韓国	基礎研究	×	↗	特筆すべき活動・成果が見えていないが、国際会議などではテーマとして取り上げられている。
	応用研究・開発	△	↗	2015年より10年計画としてCreative Materials Discovery Projectが計画されているようである。
	産業化	×	→	特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 参考資料

- 1) 戦略プロポーザル「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）」

<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/SP/CRDS-FY2013-SP-01.pdf>

- 2) 科学技術未来戦略ワークショップ「データを活用した設計型物質・材料研究（マテリアルズ・インフォマティクス）ワークショップ報告書」

<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/WR/CRDS-FY2013-WR-03.pdf>

3.5.8 トップダウン型プロセス（半導体超微細加工）

（１）研究開発領域の簡潔な説明

シングルナノメートルレベルまでの微細加工プロセスの高度化実現を目指す研究開発領域である。ナノインプリントやブロックコポリマー (block copolymer) の自己組織化パターン形成などの利用による従来リソグラフィ技術の限界を超えるシングルナノメートルレベルの新たなリソグラフィ技術と加工技術、およびこれらのトランジスタ・配線作製への適用性検証などの研究開発課題がある。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

現在の情報化社会を支える電子機器・通信機器の高性能化・高速化は、トランジスタなどの素子や配線の微細化による大規模集積回路 (LSI) の高集積化により実現されてきた。デジタル家電、パソコン、携帯電話・携帯端末などの小型化・高性能化による利便性の向上や、スーパーコンピュータを用いたシミュレーションによる新薬開発、天気予報や地球温暖化の予測精度向上などが図られている。一方、世界的な環境・エネルギー問題の顕在化により、多量の電力を消費するデータセンターなどの電力使用量の削減要求が近年高まっている。このため、より低電圧・低消費電力で動作できるようにさらなる微細化および回路機能の高集積化が望まれている。

このような高集積化による LSI の高性能化や低消費電力化を可能にするのが微細加工技術である。微細加工技術の中心となる光リソグラフィ技術は、使用する光の短波長化、縮小投影技術、近接効果補正、液浸技術など光学系やマスクの工夫、レジスト材料の改良、ケミカルメカニカルポリッシング (CMP)、ダブルパターニング技術など様々な技術を取り入れてきた。これらの合わせ技により、現在では波長 193nm のフッ化アルゴン (ArF) エキシマレーザー光を用いて、20nm を切る回路パターンの LSI の大量生産が実現されている。さらに、波長の短い次世代のリソグラフィ技術として波長 13.5nm の極端紫外光 (EUV) リソグラフィの開発も進められている。しかし、加工寸法の微細化に伴い、装置や材料のコストが急上昇しており、新たなリソグラフィ技術の検討が必要になっている。具体的には、ナノスケールの微細構造を形成したモールド（鋳型）をスタンプのように押し付けてパターンを形成するナノインプリント、ナノレベルの規則的な相分離構造を自己組織的に形成するブロックコポリマーを用いるリソグラフィ、ナノスケールの粒子の自己凝集性を利用して 規則格子構造を作製するナノ粒子リソグラフィ、アルミナの陽極酸化で形成される規則的な細孔構造を利用するアルミナ陽極酸化法、基板表面に分子が吸着する際に細密充填する現象を利用した Self-Assembled Monolayer (SAM) 法などが候補としてあり、これらの手法について素子作製への適応が可能かどうかも含め研究開発を進めていくことが重要になる。

これらのリソグラフィ手法は、微細パターン形成に高価な露光装置を必要としないため、これまでのリソグラフィ関連産業構造に変革をもたらす可能性がある。そのため、先端デバイスの開発と生産技術力の確立に成功すれば、圏内リソグラフィ関連産業 (LSI メーカー、装置・材料メーカー) が技術優位性を確保し、その結果、雇用創出および新規ビジネス開発が期待される。

〔これまでの取組み〕

2000年代初頭には、波長193nmのArFエキシマレーザー光の後継として、波長157nmのF2レーザーが候補となっていたが、光学系や材料開発の難しさの割に、ArFに比べ2割程度しか縮小メリットがないため開発が中断された。レンズとウエハの間に水をいれてNAを向上させる液浸技術が導入され、ArF光を継続利用して40nm程度のパターンを作製できるようになった。さらには、2回露光もしくはパターンの側壁を利用しピッチを半分にするダブル・パターニング（SADP）の利用により、20nmを切る回路パターンが得られ、LSIの大量生産に使われている。

次世代露光装置には、波長13.5nmの極端紫外光（EUV）リソグラフィの開発が進められている。EUV光に対しては透過型のレンズがなく反射光学系を用いる必要があるが、鏡面反射率が68%しかないため、6枚の鏡の光学系でも照度が1/10になってしまう。このため強力なEUV光源が必要とされるが、開発も難航している。実用的にはEUV光源として500W程度が必要になるが、現状の量産用として出荷されているEUV露光装置では40W程度となっている。EUVリソグラフィシステムにおける基盤技術であるマスク技術とレジスト技術の課題解決に向けて、国内の半導体デバイスメーカー、マスク関連メーカー、レジスト関連メーカー11社の出資および経済産業省の支援を受けて、EUVL基盤技術開発プロジェクトを推進するコンソーシアム企業として2011年1月に、㈱EUVL基盤開発センター（EIDEC）が設立された。更に、2013年4月には国内半導体製造装置メーカー2社が新たに株主として参加、DSA(自己組織化)技術の研究を開始し、EUVLとの組み合わせによってサブ10nmの技術の実用化を目指す研究開発を行っている。

ブロックコポリマーは、1980年代に主にバルクのモルフォロジーが研究されてきたが、1990年代に原子間力顕微鏡（AFM）の普及により、薄膜でもモルフォロジーの観察が容易になり、リソグラフィへの応用が始まった。ブロックコポリマーのミクロ相分離パターンをテンプレートとして基板を加工するパイオニア的研究は、米国プリンストン大から発表されている。初期の応用ターゲットは、ハードディスク用パターンドメディアの磁性粒子配列用テンプレート作製であり、東芝が2002年にデモを行っている。その後、ナノメートルの規則構造が簡単にできるため、光学とバイオ用の超微細構造作製に応用が広がっていった。2003年にウィスコンシン大から、従来のリソグラフィ手法で作製したパターンをガイドにしてブロックコポリマーの自己組織化パターンを配列させ、任意の場所にミクロ相分離パターンを得る誘導自己組織化（DSA）が発表され、半導体パターンニングへの応用が注目されるようになった。

2007年の国際半導体技術ロードマップ（ITRS）でDSAが次世代パターンニング手段の候補にあげられてから、米国のSEMATECHや欧州のIMECなどが、組織的にこれに取り組むようになってきた。また、韓国でもKAISTなどが、本格的に取り組んでいる。ブロックコポリマーリソグラフィは既存のリソグラフィとの親和性が良く、ITRSにも記載がある通り、ArF液浸+DSA、EUV+DSA、NIL+DSAのような形で使われる可能性が高い。特に装置導入コストが低いと考えられるため、産業界からも大きく注目されている。

NILは、1995年にミネソタ大学から10nmレベルのパターン形成が発表されて以来、

ナノレベルの新たなリソグラフィ技術として注目され、継続的に研究されてきた。特に、2003年のITRSでNILがリソグラフィ技術の候補となったことにより、その検討が本格化した。LSI向けのNIL装置については、米国のモレキュラ・インプリント社(MII)における開発が最も進んでいたが、2014年2月にキャノンがMIIの先端半導体ナノインプリント製造装置部門を買収し、東芝と共に先端フラッシュメモリ製造適用検討を開始している。

〔今後必要となる取組〕

国際半導体技術ロードマップ(ITRS) 2013年度版によると、2020年には、MPUで18nm、DRAMで15nm、フラッシュで12nmのハーフピッチ(hp)が必要である。これに対応可能なリソグラフィ技術候補は、EUVリソグラフィのダブルパターニング、NAを上げたEUVリソグラフィ、DSA、電子ビーム直描などのマスクレスリソグラフィ(ML2)、NILが挙げられている。今後、絞り込んでいくことになるが、将来のリソグラフィ技術候補のうちどれが本命であるか見極めが難しい。

EUVリソグラフィの技術的な課題としては、EUV光源の高出力化、光学系の改善、無欠陥マスク製造技術の確立およびインフラ整備が挙げられている。ML2については、複数の電子ビームを用いることで処理能力を改善できるが、特に全ビームの均一性を確保することに課題がある。NILではパターン欠陥低減と処理能力確保が大きな課題である。DSAで最も懸念される課題はパターンの精度と欠陥であり、ここ数年大きく改善されたが、まだ十分なレベルに達していない。これら候補技術のポテンシャルは高いと考えられるが、生産に用いられるためには、実用的な水準までコストを下げる必要がある。また一度導入すると、数世代に渡って適応が可能であることが必要である。ML2、NIL、EUVリソグラフィ、DSAについても、どれが本命ともいえないのが現状である。

このように、どのリソグラフィ技術が本命になるか見極めるのが難しい状況であるので、個々の技術について、原理に基づいて可能性や限界を明確にし、基本的な特性を詳細に分析するなどの基礎・基盤的な研究とスループット向上、パターン精度向上、欠陥除去などの実用面での研究開発を同時に行うことが必要である。例えば、NILにおいては高価な露光装置を必要としないものの、モールドの耐久性やその扱い方法、重ね合わせ精度の確保など、これまでの光リソグラフィとは異なるノウハウを必要とする。

リソグラフィ技術分野における日本の強みは、リソグラフィ用材料、塗布現像プロセス装置、検査・測定器、マスク技術、光源などにある。今後も、このような強みを維持できるような取組みが必要である。一方、日本の弱みは、リソグラフィシミュレーション技術、計算機リソグラフィ技術、OPC(Optical Proximity Correction、光近接効果補正)技術、リソグラフィに最適なパターンレイアウト技術などがあり、次世代のリソグラフィの研究開発ではこれらもあわせて強化していく必要がある。

(3) 科学技術的・政策的課題

リソグラフィ開発は技術的な困難さが増し研究開発期間が長期になって多くの開発コストが必要となってきている。また、国内ロジック系LSIメーカーの多くは自社工場による先端SoCデバイス製造から撤退し、外部ファブダリへの委託を進めており、リソグラ

フィ等の最先端製造プロセス開発に関する研究開発への参加意欲が衰退してきている。そのため、単独企業による研究開発が困難になってきており、世界的にコンソーシアムにおける研究開発が不可欠になっている。

日本においては伝統的に材料分野の研究開発が強いため、大学や研究機関における DSA や NIL の研究開発も多く行われ、レベルも欧米に続く力を持つ。EIDEC のプログラムの 1 つとして DSA が立ち上がってはいるものの、シングルナノメートル LSI 向けリソグラフィ技術を幅広く扱うコンソーシアム等の研究拠点は存在しないため、特に実用化を目指した研究開発領域においては欧米企業、コンソーシアムに参加している韓国・台湾企業に先行されてしまう恐れがある。シングルナノメートル領域は未踏の領域であり、基礎研究がきわめて重要であるが、現状では大学研究者の科研費による個別興味による研究が散見されるのみである。横断的かつ総括的な研究が行われていないために、シングルナノ研究の基礎となる物理や化学には未解決の問題が多い。シングルナノ研究の学術的学理を確立しつつコンソーシアム等の研究拠点で応用技術に結びつけることにより、世界をリードする学術的成果と技術イノベーションを生み出すことが期待される。

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

EUV リソグラフィ技術開発が、露光装置ユーザである半導体メーカーが求める光源出力が「少なくとも 450-500W」であるのに対して、2014 年 2 月の SPIE 国際会議で EUVL 装置メーカーの ASML が発表した光源出力は 70W に留まり、またその発光持続時間は 6 分にすぎなかった。12 月には出力 100W の光源の動作を実証したとの報告もあり、出力は徐々に上がっている。ただし、ユーザが求めるレベルとの間のギャップはまだ大きい。この現状から、台湾の大手ファブリーメーカーである TSMC では、EUV 露光装置技術開発が遅れていることから、40nm 世代で導入した ArF 液浸露光技術を、マルチパターニング技術と組み合わせて、28nm, 20nm, 16nm, 10nm 世代に渡って利用することを明言している。また、米国インテルも「EUV なしで 7nm 実現」に向けた検討を開始した。さらに、2014 年から IBM が 7nm 先端デバイス開発プロジェクトを開始した。これらの状況から、ArF 液浸技術の延命と共に、ナノインプリント、DSA 等の新リソグラフィ技術、シングルナノメートルに適した新デバイス開発が加速されると考えられる。2014 年の SPIE や EIPBN (Electron, Ion, Photon Beam and Nanofabrication) でも DSA のセッションが設けられ、実用化にむけた活発な議論がされた。

〔注目すべきプロジェクト〕

日本では(株)EUVL 研究開発センター (EIDEC) が EUVL プロジェクトと共に、サブ 10nm パターニングの研究として誘導自己組織化 (DSA) 研究プログラムが追加された。

米国では、2014 年から IBM が 7nm の先端半導体開発のために 5 年間で 300 億円の研究プロジェクトをスタートさせた。欧州では、2014 年から 3 年間の EU 研究プロジェクト “Single Nanometer Manufacturing for Beyond CMOS devices” がスタートした。中国では、2014 年から 2 兆円の投資を先端半導体研究開発に対して行う。韓国では、2014 年から 5 年計画で、50 億円投資する「先端半導体素子プロジェクト」を開始した。

(5) キーワード

- ・微細加工、リソグラフィ、レジスト、露光装置、シングルナノメートル、サブ 10nm
- ・EUV、ArF、液浸、ダブルパターニング(SADP)
- ・電子ビーム直描、マスクレスリソグラフィ (ML2)
- ・ナノインプリントリソグラフィ (NIL)
- ・自己組織化、誘導自己組織化材料、DSA (Directed Self Assembly)、ブロックコポリマー

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↘	大学や研究機関(東大、京大、東工大、東北大、早大、大阪府立大、兵庫県立大、AIST など)において自己誘導組織化 (DSA) やナノインプリントリソグラフィ (NIL) の基礎研究が行われており、基礎研究は世界的なレベルある。NILについて、CRESTプロジェクト「超高速ナノインプリントリソグラフィ技術のプロセス科学と制御技術の開発」(H20-H25年度)では20nmレベルのCMOSリソグラフィに対する研究成果が出ている。しかし、このCREST終了はNIL、DSA等のサブ10nmパターン形成研究の国家プロジェクトはなく、応用物理学会の「シングルナノパターニング新領域研究グループ」(2012年1月設立)で自主的な産学連携情報交換活動が行われているのみである。
	応用研究・開発	○	↗	DSAに関しては、複数の装置・材料メーカー (JSR、東京応化、東京エレクトロン応用研究など)、デバイスメーカー (東芝) において研究開発が行われている。また、NEDOの「超高密度ナノビット磁気記録の研究開発 (グリーンITプロジェクト) により、周期12nmのドットパターン形成に成功している。2013年からは、EIDEC内にDSA材料・プロセス研究を行うDSAプログラム追加され、急速に応用研究の機運が高まっている。
	産業化	○	→	半導体リソグラフィとしては、極端紫外線リソグラフィ ((EUVL)が1Xnmの有力候補として国家プロジェクトで推進されており、産業化が期待されるが、低い光源パワー等の問題により当初の2015年からの量産展開が遅れる状況になっている。DSAによるシングルナノパターン研究が急務であり、デバイスメーカー (東芝) では、ビアシュリンクプロセスにDSAの適用を目指した開発が進んでいる。複数の企業から、自己組織化ナノ加工を用いた製品のデモが発表されているが、まだ市場が小さく本格的な立ち上がりとはいえない。NILについては、キャノンが2014年2月に米国のベンチャー会社であるMolecular Imprint (MII) の半導体製造ナノインプリント装置部門を回収し、東芝と共に20nm以下のフラッシュメモリ製造へのナノインプリント適用検討を開始した。
米国	基礎研究	◎	↗	ブロックコポリマーを用いたリソグラフィの概念は1997年にプリンストン大から提案、DSAの概念は2003年にウィスコンシン大から提案されたものであり、現在もウィスコンシン大、テキサス大、スタンフォード大、NIST、MITなどで世界をリードする精力的なDSAの基礎研究が進められている。従来のPMMA-b-PSを用いたDSAではサブ10nmパターン形成を行うことが困難であり、新規のDSA材料開発研究が行われている。さらに、DSAを用いた回路パターン形成プロセス研究も行われている。また、ミネソタ大で発明されたNILは、現在はテキサス大やプリンストン大で研究が進められている

	応用研究・開発	◎	↑	半導体生産用NIL装置は、モレキュラ・インプリントが開発をリードしている。IBM がナノインプリントでFinトランジスタ試作している。DSA に関しては、複数の装置材料メーカー（アプライド・マテリアル、ダウ・ケミカルなど）、デバイスメーカー（IBM、グローバルファンドリなど）からの学会発表があり、特にIBMを中心に研究開発が盛んである。IBMは2014年7月に、ビッグデータやクラウド対応の機器に使う最先端の回路線幅7nm半導体開発のために、5年間で約3000億円の投資を行うことを発表している。電子デバイス、光学部品、バイオ応用に関しては大学で盛んに研究されており、NSFからかなりのファンドが投入されている。
	産業化	◎	↑	ニューヨーク州立大学（SUNY）ナノスケール理工学部（CNSE）において、2011年9月から次世代半導体技術開発を世界の半導体大手5社（米Intel、IBM、Globalfoundries、台湾TSMC、韓国Samsung電子）が約3500億円を共同出資して「Global 450 Consortium(G450C)」行っている。IBMを中心とする次々世代の14nm微細化先端半導体開発とIntelを中心とする450mmウエハによる半導体デバイス製造の実用化の2つの研究開発テーマからなるプロジェクトであり、5年以内の目標達成を目指している。2015年から450mmプロセス試作が開始される予定である。 SEMATECHが中心となり、EUVLと共にNIL、DSAの半導体リソグラフィ応用研究が進んでいる。IBMを中心に、材料・レジストメーカー（ダウ・ケミカル）、装置メーカー（アプライドマテリアルズ）が協力し、トップダウンのリソグラフィとブロックコポリマーを組み合わせたDSAリソグラフィの実用化が現実的になってきており、パターン欠陥評価結果や位置精度、シミュレーション技術などの実用化に即した検討結果が多く発表されている。
	基礎研究	○	↑	複数の大学や研究機関（ドイツ、オーストリア、フランス、スペインなど）において、LSI応用分野に限らないDSAやNIL材料の研究が行われている。また、NILによるブロックコポリマーへの直接パターンニングなどの研究が行われている。” Single Nanometer Manufacturing for beyond CMOS devices“のEUプロジェクトが2013年1月から2016年12月までの3年プロジェクトとして進められており、研究の中心は大学であるが、IBM、IMEC、EVG、oxford Instruments等のEU企業も参画している。ナノインプリント等によるサブ10nmプロセス研究、グラフェン等の新材料による先端デバイス等を研究開発目標としている。
欧州	応用研究・開発	◎	↑	450mmウエハに対応する製造ラインを欧州に構築することと、サブ10nmのプロセス技術の開発の可能性を探ることを目的とした「Enable450」3年プロジェクトが2013年4月に発足。ASML、IMEC、LETI、フラウンホーファー研究機構等が参加する。米国の G450Cとの連携も目指している。 コンソーシアム（IMEC、CEA-LETI）においてDSA応用研究の研究開発が盛んである。IMECは、東京エレクトロン、AZエレクトロニックマテリアルズ、ウィスコンシン大学との提携により、300mmファブ互換DSAプロセス研究開発を行っており、LETIもArFリソグラフィおよびNILによるガイドパターンを用いたDSA研究を進めている。
	産業化	○	→	ASMLが 2X, 1Xnmリソグラフィツールとして半導体量産用EUV装置を生産しているが、量産に必要とされる光源出力が450-500Wであるのに対して2014年2月のSPIE国際会議での発表では70W（発光持続時間は6分）に留まっている。また、STマイクロやインフィニオンはコンソーシアムに参加しているが、まだデバイスメーカーによる研究開発成果や有力な応用デバイスのデモはない。
	基礎研究	×	→	微細加工の国際会議（米国EIPBN、欧州MNE、日本MNC）での発表件数はきわめて少なく、LSI以外の用途（ロール・ツー・ロールなど）向けの発表はあるものの、LSI 向けの基礎研究に関する目立った発表はない。
中国	応用研究・開発	×	→	目立った活動は見られない。
	産業化	△	↑	2014年の政府からの半導体補助金約2兆円と推定されており、先端半導体製造装置・プロセス・技術研究開発へ精力的に投資している。サムソンが西安に建設したNAND工場が稼働し、半導体国産化を国策としていることから、いずれ技術移転が起これと考えられ、今後急速に成長することが予想される。

韓国	基礎研究	○	→	KAIST、POSTECH、ソウル大で 2000年代前半から、主に米国帰りの研究者によって自己組織化を利用したナノ加工の研究がなされている。ナノインプリントでは、国立機械研究所 (KIMM) およびソウル大学などにおいて、基礎研究が行われている。DSA研究については、ハンヤン大学、KAISTなどで基礎研究が行われている。国際会議 (米国 EIPBN、欧州MNE、日本MNC) での発表件数は2013年度から減少している。
	応用研究・開発	○	↗	超微細構造を利用した、半導体、光学、バイオ応用に関して、盛んに発表がなされていて、近年の学会動向をみると、多くの研究機関の参入がある。サムソンが、モレキュラ・インプリントの半導体装置を導入し、フラッシュメモリ用パターンの試作などリソグラフィへの適用研究開発を行っている。2014年から5年計画で、「先端半導体素子開発プロジェクト」を政府と産業界との共同出資 (約50億円) で開始。産官学共同研究により、半導体装置および材料の基礎技術開発を目指す。
	産業化	○	↗	韓国特許の出願状況を見る限り、サムソンがこの分野で多くの研究開発を行っていると考えられ、また、大学などへの資金提供もなされている。サムソンがASMLのEUVリソグラフィ装置を導入し、半導体への適用研究を継続している。特許出願状況を見ると、次世代リソグラフィに対しては欧米日の動向を注視しながら、あらゆる方向への対応に準備をしている。
台湾	基礎研究	○	↗	国立台湾大などで、基礎的な検討がなされていて、DSA関係のプロジェクトが立ち上がっている。
	応用研究・開発	○	↗	半導体応用を目指した研究が散見される。
	産業化	○	↗	TSMCにおけるシングルナノメーター対応のリソグラフィ技術について、EUVを第一候補として開発を加速している。また、NIL、DSAについても、半導体リソグラフィへの応用分野に興味を示している。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 参考資料

1) ITRS 2013 Lithography,

<http://www.itrs.net/Links/2013ITRS/2013Chapters/2013Litho.pdf>2) IMEC, <http://www2.imec.be/>3) LETI, <http://www-leti.cea.fr/en>4) SEMATECH, <http://www.semtech.org/research/litho/>5) EIDEC, <http://www.eidec.co.jp/>6) SPIE Advanced Lithography, <http://spie.org/advanced-lithography.xml>7) EIPBN, <http://eipbn.org/>

8) Abstract of the 58th EIPBN, Washington, DC, May 27-30, 2014.

9) 次世代リソグラフィワークショップ予稿集、平成 26 年 7 月 17~18 日、東京工業大学 蔵前会館 主催 応用物理学会 次世代リソグラフィ研究会

10) http://cordis.europa.eu/project/rcn/104931_en.html11) http://www.nikkei.com/article/DGXNASGM1000V_Q4A710C1MM0000/

- 12) <http://techon.nikkeibp.co.jp/article/NED/20140325/341956/>
- 13) <http://techon.nikkeibp.co.jp/article/NEWS/20130628/290463/?ST=SCR>
- 14) <http://eetimes.jp/ee/articles/1408/06/news059.html>
- 15) <http://www.sangyo-times.jp/article.aspx?ID=1077>
- 16) <http://www.sangyo-times.jp/article.aspx?ID=1156>
- 17) <http://eetimes.jp/ee/articles/1304/02/news035.html>

3.5.9 ボトムアップ型プロセス

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

ある条件下でナノスケールの構造が自発的に形成する自己組織化をはじめとして、二つ以上の分子がさまざまな相互作用で集まって作られるボトムアップ型プロセスを利用し、個々の原子や分子から設計・制御して構造体を作り上げ、革新的な機能を持つ新材料や新デバイスの創出を目指す研究開発領域である。原子・分子制御手法の向上、ナノ粒子の集合状態の理解と制御・作製手法の確立、設計手法の確立、自己組織化機構の理解と構造制御性の向上などの研究開発課題がある。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

トップダウン型プロセスによる微細加工技術の進展と共にデバイスの微小化が実現されてきたが、その限界が見え始めた現在、ボトムアップ的に原子・分子をパーツとして組みあげる自己組織化などのプロセスを活用して形成された新しい材料・デバイスが注目されている。ボトムアップ型プロセスの意義は、分子・ナノ物質などの自己集合・自己組織化過程によるもので、トップダウン型プロセスでは通常なしえないような、原子・分子・ナノレベルでの機能構造作製法を確立することにある。加えて、空間の狙いの位置に狙いの構造を形成する技術へと発展するポテンシャルも秘めている。人為的な構造作製技術が及ばないスケール領域をカバーするとともに、自発的な省エネルギープロセスで構造作成がなされるという利点もある。十分に発展しているトップダウン型プロセス（マイクロファブリケーションなど）を補うもの、あるいはこれと融合して新技術を生み出すという意義もある。

[これまでの取組み]

ボトムアップ型プロセスに関する研究は、自然界において営まれている自己組織化プロセスに関する研究に端を発し、それらの原理を人工的に展開し、狙いの分子ナノ構造を形成する研究へと発展してきている。自己組織化、超分子による研究は大変盛んで多くの研究成果を生み出してきた。それらは、分子、ナノ、メソの分野で様々な成果を上げ、科学的に評価されている。分子の自己組織化に向けたアプローチとしてさまざまなものがあるが、中でも「静電相互作用による自己組織化（交互積層法）」および「自己組織化膜（SAM：Self-Assembled Monolayer）」という2つが注目を集めてきた。

例えば、有機化学の分野では、藤田誠（東京大学）らが、自然界では生体分子が活用している弱い分子間相互作用に着目し、それらを人工的に設計することで高次の一義的な超分子ナノ構造体が形成されることを発見している。材料科学の分野では、空間の狙った位置に単結晶成長が可能な金属触媒を活用したナノワイヤ構造体に関する自己組織化研究が盛んである。また、ナノ構造形成に留まらず、これらのナノ構造特有の機能・物性を発現させ、多種多様なデバイスへと展開されるに至っている。

一方で、自己組織化やそれに関連する研究は、純粋な科学的観点からすでに幅広くなされており、一部の例外を除いて、これまでの研究の先鋭化に留まり、ボトムアップで作られる分子系・物質系の新しい類例を増やしているに過ぎない面も見受けられる。プ

プロセス開発・技術開発への新たな取組みがそれらの従来研究の成果に埋没しがちであり、技術としての展開の焦点が絞りきれていない面もある。

ボトムアップ型プロセスの真の意義を問うため、自己組織化構造作製に関する学術的研究だけでなく、ボトムアップ型プロセスの現存技術の問題点と動向をマクロスコピックな材料やシステムへの反映という観点から典型的な例を示す。ボトムアップ型プロセスが、実用技術となりうるためには、

- (a) ナノレベルでの精密な構造作製ができるか、
- (b) 単純ナノ構造ではなく意図したような複雑な構造を作ることができるか、
- (c) マクロスコピックな規模で簡易・安価に作ることができるか、

という条件が満たされなければならない。これらの観点から、現在アクティブに研究されている以下の例を検証する。

例 1：規則性多孔性物質

メソポーラス物質、MOF (Metal Organic Framework) 本技術は、わが国が強い分野であり、非常に単純な手順の組み合わせで、精密なナノ空間構造が得られ、量も大量に得られる。一部の企業の協力によるプラント化（太陽化学関連、BASF 関連）も試みられている。これは上記条件の (a), (c) を満たすことができる。一方で、得られる構造は正確ではあるが非常に単純なナノポア構造であり、(b) の条件を満たすように微細構造を複雑に組み立てられるわけではない。

例 2：DNA Origami

本技術は DNA の相補的な塩基対形成による自己組織化によってボトムアップ的に任意の構造体を作り出すものである。2006年 P. W. K. Rothemund の発表（Nature 2006, 440, 297-302.）以来多数の研究者により精力的に研究されてきた。DNA の作成技術および DNA Origami の設計技術が確立されている現状では、ナノレベルで正確な構造を思いのままに作り出せるということで (a), (b) の要件を満たすものである。しかしながら方法に致命的にかけているのが、(c) の観点であり、これを克服するのはきわめて困難であり、本技術が純科学的な研究に終始してしまう最大の要因である。

例 3：交互積層膜

親水処理（あるいは疎水処理）した基盤上に、正負の電解質ポリマーを交互に吸着させ、自己組織化させることにより有機超薄膜を製膜する技術であり、本技術は、(a) の構造作製の精度を層の厚さ方向のみに限定し、(b) と (c) の条件を満たすものである。非常に簡単な操作でナノメートルオーダーの薄膜を任意の順序で積層しうる技術である。これまでは、ビーカーレベルでの自動積層装置などのプロセス化がなされてきたが、近年スプレー法によるナノ薄膜作成技術が開発され、大掛かりなナノ積層膜の作成が可能になった。例えば、白鳥（慶應大学）らのベンチャー企業による試みでは、洗車機にスプレー法を取り入れことにより、車の車体をナノ薄膜でコーティングする例も実証されている。本法では、一層の膜面内のナノ構造制御がなされればすべての条件を満たしうることになる。

いずれの技術にも欠けている部分があり、また課題も浮き彫りになっており、この課題を解決できないとボトムアップ技術として展開できない。

これらは、科学研究費補助金・特定領域研究「フォトクロミズムの攻究とメカニカル機能の創出（代表：立教大学特任教授 入江正浩）平成 19～22 年度」や新学術領域研究「分子ナノシステムの創発化学（代表：大阪大学特任教授 川合知二）平成 20～24 年度」、JST CREST プロセスインテグレーションに関する 2 つの領域で推進されてきた。ボトムアッププロセスの行き着き先の一つであるトップダウン技術との融合を示すはすであるが、各論研究に終わっている感も強い。

ここでは詳しく取り上げないが、ボトムアップ型プロセスには、SPM を用いる原子レベルの制御や結晶成長技術も含まれる。前者は、歴史的には Eigler らによる STM 原子操作に遡るが、その後、AFM による原子操作、シリコン・化合物半導体陽極酸化、チップアレイを用いた加工スループット向上、ディップペン・リソグラフィー、STM 電界放出電子によるレジスト露光、インデンテーション、スクラッチ、熱機械加工、自己組織化単分子膜（Self-Assembled Monolayer, SAM）加工、IBM Millipede、電界蒸着、STM/AFM CVD、SNOM リソグラフィ、SNOM アブレーション、SNOM CVD などの技術が提案・実証されてきた。後者は、ナノ化・集積化・ヘテロ化・異種材料融合化が要求される領域について、有機材料・無機材料のナノスケール単結晶材料の学術研究が従来の単結晶試料の限界を打ち破りつつある。異なる種類・機能の単結晶ナノスケール試料を同一のプラットフォーム上でインテグレーションすることが可能となる。

〔今後必要となる取組み〕

ボトムアップによるアプローチの本来の意義は、ただ単に集合系・複合系の研究例を積み重ねることではなく、分子やナノ物質から出発してマクロの世界につなげることにある。ボトムアップ型プロセスを介して形成される新奇機能性ナノ構造体を“新しい機能”を生み出す材料・デバイスへと展開することが求められている。これまでに、プロトタイプは多く示されてきたが、真の意味で応用展開された材料・デバイスは未だ存在していない。その要因の代表的なものとして、デバイス中の狙った位置へのナノ構造体のアライメントが難しい点と統計的なバラツキ等が挙げられる。トップダウンによる微細加工技術により形成されるデバイス群は極めてバラツキの小さな特性と空間の狙った位置へ所望のデバイス構造を形成する事を可能にしている。この両技術の差異が、現在自己組織化ナノ材料をデバイス群へと展開する大きな阻害要因となっている。従って、この問題点を解決する方策としては、統計的なバラツキの小さなデバイスを自己組織化プロセスで組み上げる革新的な手法を創出するか、若しくは統計的なバラツキを許容しながら逆にそれらを活用したデバイスへと展開する方向がある。更に、生体に倣ったより高次のナノ構造体の形成という観点では、3 次元の狙った位置への原子・分子の選択性に関する科学技術を更に深化させる必要がある。

世界に先んじ国際的競争に打ち勝つためにも、現在、ボトムアップ型プロセスの真の意義を問うべき岐路に立っているといえる。

（３）科学技術的・政策的課題

ボトムアップ型プロセスを用いた機能性ナノ構造形成・物性・デバイスに関する研究分野は、本質的に分野横断的な分野であるために、物理的な視点と化学的な視点の両方に関する科学的知識が必要不可欠である。また材料によらない普遍的なナノ構造形成のメカニズムの解明、形成されたナノ構造が生み出す物性機能、更にはそれら構造・物性を活用した新奇機能デバイスの提唱に至る幅広い議論を行えるコンソーシアム等をトップダウン的に形成して、産官学連携による学術研究の推進が望まれる。

(4) 注目動向 (新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など)

[新たな技術動向]

ボトムアップ型プロセスを用いて形成されたナノ構造に外部刺激 (電場・磁場) を加えることでさらに構造内に階層構造を形成し、機能を発現する報告が出始めているが、ここ数年の研究動向で目を引くのは、力学的 (メカニカルな) 動作と機能分子材料のカップリングである。これまで、印加刺激は、電気・電子的あるいは光学的であることが多かったが、より汎用技術に通じる力学応答が研究対象として考えられてきている点は、ボトムアップ型プロセスで作製された機能材料がより汎用に使われるという観点から注目すべき動向である。この動向は、(a) ボトムアップ型の機能集積による力学応答の発現と (b) 力学的刺激による分子系のコントロールの二つに大別される。

(a) ボトムアップ型の機能集積による力学応答の発現 (化学→力学)

分子の異性化や分子認識などの分子機能を集積化・組織化させて、目に見える力学的な事象 (物体の変形など) に反映させるものである。海外のいくつかの例では、DNA の二本鎖形成、分子シャトルの動きなどを微細チップの動きに反映させたものがある。日本でも、フォトクロミック分子を利用した先駆的かつ顕著な研究成果が報告されている。アゾベンゼンの光異性化 (池田・東工大ら)、ジアリルエテンの光異性化 (入江・立教大ら)、シクロデキストリン包接体の形成やその光異性化 (原田・大阪大ら) を可視レベルの物体の変形や会合に反映させたものがある。このような研究動向は、国際的に活発になってきており、ボトムアップ的に機能を集積するというコンセプトが実現されつつある。ただし、多くの例は現象のデモンストレーションにとどまっている。

(b) 力学的刺激による分子系のコントロール (力学→化学)

メカノケミストリーとして近年注目されている分野であり、材料を力学的に変形させると、分子の異性化や二次結合 (水素結合など) の形成などを制御できるものである。イリノイ大学のグループにより報告されたメカノクロミズム特性 (力学的な刺激により色が変化する) を有する高分子材料が脚光を浴びた。自己修復材料などへの応用が提案されている。問題点は、マクロな力学的動きと分子レベルの構造との関連が必ずしも明確ではないことが多く、機能は出るがその精密なメカニズムはブラックボックス化している傾向がある。その欠点は、ボトムアップ型による組織体形成と組み合わせることによって回避できる。有賀(NIMS)らの例では、界面に分子マシンを集積させ界面の一方向から力学的摂動を加えることによって、合目的的に分子マシン変形を制御できることを報告している。本方法によれば、手の動きのような基本動作で所

望の分子を捕捉・開放したり、レセプター構造の微調節による生体物質の高度センシングが可能になることが示されている。後者のボトムアップ構造に立脚した力学的なマクロな動きによる分子機能の制御は、いわば「手で分子を操る技術」であり、類似例を見ない革新技术であるが、世の中を動かすためには時間がまだ必要である。

(c) 生物機能に学んだデバイスの構築

既に撥水効果や構造色などの物性において、バイオミメティックな材料を作るという研究はなされているが、これらはあくまで微細加工レベルでの話であり、本来生物が有している分子レベルでの機能性を実現している訳ではない。生物が本来持っている真の物質制御系である分子レベルでの生体系機能を模倣し、改造することが出来るようになった場合、その効果はさらに大きなものになる。

(d) ナノスケール単結晶科学

多結晶形態の有機材料においては電子移動度が無機材料と比較して圧倒的に低いことが問題であったが、単結晶有機ナノ材料によりこの問題点は克服されつつある。同様の事例は、グラフェン研究でも見られ、粒界の存在しない単結晶グラフェンを空間の狙いの位置に制御することがその応用展開において最も重要な課題となっている。シリコンにおいても、単結晶シリコンナノワイヤを用いることによって、従来はアモルファスシリコンのみが展開不可能と考えられていた低温プロセスへの展開が可能になりつつある。加えて、ナノスケール単結晶試料の極めて大きな降伏応力を活用して、無機材料の適用が不可能であると信じられてきたフレキシブルなデバイスへの展開が始まっている。

[注目すべきプロジェクト]

- ・ WPI (世界トップレベル研究拠点プロジェクト)において、物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス (MANA) が、ナノテクノロジーからナノアーキテクトニクス (ナノ建築) へのステップアップを具現化する試みを行っている。
- ・ JST ACCELにおいて、「自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析プロジェクト」が開始された。
- ・ 米国では、ハーバードを中心とした研究グループがナノスケール単結晶材料の有用性を実証しつつあり、その研究開発プロジェクトも超高効率なエネルギー変換素子 (太陽電池・色素増感太陽電池・水の電気分解・熱電変換素子等) から生体分子分析 (一分子解析技術) に至るまで幅広いものが展開されている。

(5) キーワード

自己組織化、超分子化学、ナノワイヤ、機能集積・材料化、光メカニカル機能、メカノケミストリー、選択性、マクロとのカップリング、トップダウンとの融合

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	藤田（東大）グループが金属錯体の自己組織化により形成されたナノ空間に有機化合物を配列させ、結晶構造解析を行える画期的な結果を報告している。 基礎研究レベルで被引用数が高いものは、原田、山口（大阪大学）らによるPhotoswitchable gel assembly based on molecular recognition (Yamaguchi et al., Nat. Commun. 2012)、有賀G (NIMS) と北川G (京大) によるDirect Carbonization of Al-Based Porous Coordination Polymer for Synthesis of Nanoporous Carbon (Hu et al. J. Am. Chem. Soc., 2012).が挙げられる。
	応用研究・開発	○	→	様々な研究分野で自発的に形成される自己組織化構造に対する関心は極めて高いが、産と学が共同で取り組む例は多くない。
	産業化	○	→	素材産業等では経験的に既に利用しているケースも多々あるが、意識的に自己組織化プロセスを取り入れ、成功している例は決して多くない。
米国	基礎研究	○	↑	自己組織化・自己集合の原理的な基礎研究と異分野との融合は極めてスピーディーに行われている。
	応用研究・開発	○	↑	多様な価値観に基づいた社会であるので取り組みにバラエティがあり、結果としてバランスが取れた展開を見せている。特に、得られた機能物質のエネルギー系・バイオ系への応用研究に力を入れていることが論文動向からもうかがえる。 米国の多くの教授は、自身の開発した自己組織化科学技術を基にベンチャー等を興しており、目的型基礎研究の進展が強く感じられる。
	産業化	○	↑	多くの教授が研究室で開発した技術を基に会社を興しており、基礎研究と結びついた産業技術力は柔軟性に富んでおり、将来性を感じさせる。 IBMは、ブロック共重合体のマイクロ相分離を利用したエア・ギャップやDNA折り紙構造を集積化した足場とする微細加工など、自己集合現象と現行のトップダウン・プロセスを組み合わせ、低コストで高精度微細化を実現しようとしている。
欧州	基礎研究	◎	↑	欧州には、基礎研究に力をおく社会的基盤と学術的余裕がある。自己組織化ナノワイヤに関しては、Sweden Lund大のSamuelson教授を中心としてグループが精力的な研究活動を行っている。
	応用研究・開発	○	→	欧州全体としては、必ずしも応用研究がうまく展開しているとは思えないが、ドイツのMax-Planck研究所等が精力的な応用研究開発を進めている。
	産業化	○	↑	米国と比較すると大手企業が自己組織化技術を応用展開する傾向が強い。BASF 社の MOF 材料への投資がよい牽引例となる可能性もある。
中国	基礎研究	△	↑	中国の自己組織化研究は、米国帰りの数多くの新進気鋭の研究者によって非常にアクティブに進められている。
	応用研究・開発	○	↑	基礎がおろそかでも、人力的な強みで産業化してくる可能性がある。成果主義を徹底しており、応用研究の発展と基礎研究の衰退も予想される。ボトムアップで材料を作ってくる研究者の層が厚い（応用への即効性が予想される）。
	産業化	○	↑	自己組織化研究の成果を産業へと発展させる気配はあるが、未だそのステージにまで達していない。

韓国	基礎研究	○	→	ソウル大・KAIST等の多くの研究室で自己組織化に関する研究が行われており、著名な学術論文への掲載が多々見受けられる。
	応用研究・開発	○	↗	論文投稿状況などを見ると、韓国はデバイス化が圧倒的に強い。それらは既成技術に立脚した応用研究である。
	産業化	○	→	自己組織化研究の成果を産業へと発展させる気配はあるが、未だそのステージにまで達していない。

（註1）フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

（註2）現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎：他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○：ある程度の活動・成果が見えている、

△：他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、×：特筆すべき活動・成果が見えていない

（註3）トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

3.5.10 ナノ計測

物質や材料の物性は、ナノスケールの構造に起因する。さらには、複雑な現象（生命現象を含む）も、ナノスケールの領域における原子または分子間の相互作用によって理解できる場合が多い。したがって、材料（無機、有機、生体を含む）の物性や諸現象の起源を明らかにするには、ナノスケールの構造や物性、さらにはその動的変化を、できれば *in-situ* (その場) で、直接計測できるナノ計測技術が求められている。ナノ計測技術は、物性や現象の起源を理解し、それを制御するための方針を立て、そして実現するための手段を確立する一連の過程において重要な役割を担うものであり、幅広い学術・産業分野・医療の発展にとって欠かせないものとなっている。

ナノ領域の計測・解析においては、例えば、選択したナノ領域を実空間で直接見る技術に加え、回折・干渉現象を使って逆格子空間で観測しフーリエ解析によって実空間像を得る手法がある。探針を用いて対象物の構造や物性を直接観察する走査型プローブ顕微鏡 (SPM) は実空間の直接観察であるが、電子線、中性子線、ミュオン、陽電子などの粒子線ビーム、および光・X線・ガンマ線などの電磁波を使ったものでは、実空間・逆格子空間の情報を得ることができる。また、超短パルス光はそれ自身、あるいは、他の計測手法と組み合わせることにより、物質の動的な応答を見ることができる。

以下では、3.5.10.1 で走査型プローブ顕微鏡、3.5.10.2 で電子顕微鏡、3.5.10.3 で放射光・X線によるナノ計測、粒子線のうち陽電子を用いた顕微計測、3.5.10.4 では超短パルス光を用いたナノ計測を取り上げた。

本報告書では、3.4.3 の記述のように、スピントロニクスが急速な進展を見ていることに鑑み、スピントロニクス計測に関連する磁気力顕微鏡 (MFM)、スピン偏極電子顕微鏡、放射光によるナノ磁気計測につきより詳細な記述を行った。中性子は、そのスピンを利用した磁気散乱が磁性体のスピン構造の同定などに用いられる。ミュオンは磁性秩序や電子状態の測定あるいは元素分析などに、有力な計測手段である。しかし現状でこれらの測定法は、ナノスケール物性の評価手段としては力不足の感があり、本報告書では割愛した。

本報告書では、環境下のナノ計測にも重点を置いて記述した。第2章で紹介しているように、特に生命科学やエネルギー・環境用途の材料においては、水中や大気中、表面ナノ形状や異種界面の接合、摩擦の状態など、多様な環境場における“その場ナノスケール計測”へのニーズが増大しており、環境下での計測のニーズが多いことから、溶液中 SPM および環境制御電子顕微鏡 (E-TEM) に詳しい記述をおこなった。

以上のように、取り上げた項目以外にもさまざまなナノ計測手法が開発され、実用に供せられている。しかし、限られた紙面の中でナノ計測のすべてを網羅することは不可能であるため、近年のトレンドとして重要なものに絞った。

3.5.10.1 走査型プローブ顕微鏡 (SPM)

(1) 研究開発領域の簡単な説明

尖鋭なプローブと試料の間に働くさまざまな近接相互作用を感度よく検出することにより、レンズを使わずにナノスケールの形状や物性を計測する顕微鏡を用いた研究開発領域である。これには走査型トンネル顕微鏡(STM)、原子間力顕微鏡(AFM)、走査型近接場光顕微鏡(SNOM)、磁気力顕微鏡(MFM)をはじめ、さまざまな相互作用を使った多種類のプローブ顕微鏡が開発されている。

今後の開発課題としては、SPM をナノスケールの形状観測にとどまらず、ナノスケールの物性測定や特性評価、さらには微細加工技術に積極的に利用することが望まれており、特に、様々な環境下での計測を可能にするプローブおよびシステムの開発が望まれている。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

SPM は先端が尖鋭な（先端の曲率半径が小さい）プローブと試料の間の近接場相互作用を感度よく検出することでナノスケールの形状や物性を計測するレンズを使わない顕微鏡で、原子分解能での計測も可能である¹⁾。レンズを使う顕微鏡では波長と開口数で決まる回折限界で分解能が制限されるのに対して、SPM では距離とともに急峻に変化する近接場相互作用を利用することにより高い分解能を実現している。SPM には表面の構造に非常に敏感であるという特徴があり、透過電子顕微鏡(TEM)では難しい表面の情報を得ることができる。また、TEM や SEM では、特殊な装置を用いない限り真空中での試料の観察しかできないのに対して、SPM では真空中のみならず、大気中、液中での観察も可能である。また、低温・極低温、高温、強磁場中といった極限環境下での観察例も報告されている。SPM で計測する近接相互作用の種類はトンネル電流、原子間力、交換相互作用、エバネッセント光、摩擦力、キャパシタンス、熱、コンダクタンスなどと豊富で、これらの選択によりさまざまな物性量を測定することができるのもその特長である。

SPM 分野の開発課題は、さらなる高速化、安定性・信頼性の向上、さらには、異種の SPM 間の複合、あるいは、SPM と電子顕微鏡との複合によって、さらに深化したナノスケールの形状と物性の情報を得ることである。

[これまでの取り組み]

1981 年に IBM チューリヒ研究所の G. Binnig, H. Rohrer らが走査型トンネル顕微鏡 (STM) を発明²⁾して以来、AFM³⁾、SNOM⁴⁾をはじめとする初期の重要発明が次々に行われた。これらのうち、トンネル電流を用いる STM は、極めて簡単な原理と装置によって原子分解能観察を可能とし、ナノ計測分野に大きな革新をもたらした。しかし、STM には、導電性の試料しか計測できないという制約もあった。この問題を解決したのが AFM である。

・ AFM

探針を試料表面に近づけた時に探針と試料の間に働く相互作用力（ファンデアワールス力）を検出する。そして、この相互作用力が一定となるように、探針—試料間距離を制

御する。この状態で、探針を試料に対して水平方向に走査すると、探針は試料表面の凹凸をなぞるように上下するため、その際の探針の軌跡から表面形状を知ることができる。AFM は、半導体、金属、絶縁体を含む幅広い試料の観察や、液中、大気中、真空中を含む様々な動作環境での観察に用いることができるため、STM に比べて格段に汎用性が向上している。また、AFM は、表面構造計測だけでなく、表面物性計測、表面形状制御・操作、表面間力（原子間力、分子間力など）の計測にも用いられ、幅広い学術・産業分野における研究を支える基盤技術となっている。

1986 年に AFM が発明され³⁾、その後の約 5 年間にわたる初期の AFM 技術開発は、IBM 社の研究所が中心となり、いくつかの大学と共同で行われた。この間に、現在用いられている主な AFM 動作モードの原型も発明された。具体的には、コンタクトモード AFM²⁾、振幅変調 AFM (AM-AFM、タッピングモード AFM と呼ぶ)⁵⁾、周波数変調 AFM (FM-AFM、非接触 AFM と呼ばれる)⁶⁾などの動作モードが挙げられる。その後、AFM 技術が世界中に広まり、米国、欧州、日本を中心として今日に至るまで技術開発が進められている。1990 年代から 2000 年代前半にかけて開発された技術は、AM-AFM もしくは FM-AFM を用いた 2 つの大きな基本技術体系と、各応用分野に特化して発展した多数の応用技術体系に分類できる。米国が中心となって開発された AM-AFM 技術は、高分子・生体分子試料などの比較的柔らかい試料の表面構造や力学的物性をナノスケールの分解能で、大気および液中で非破壊計測することを可能とした。欧州・日本が中心となって開発された FM-AFM 技術は、無機材料や低分子薄膜などの比較的平坦な試料の表面構造や電子物性を原子・分子スケールの分解能で、超高真空中で計測することを可能とした。一方で、半導体、生体試料、強誘電体、磁性体などの構造および物性をナノスケールで評価するための AFM 技術の開発も、米国、欧州、日本を中心として進められた。

・ MFM

磁気力顕微鏡 (MFM) は、1986 年の米国の IBM の研究所等による原子間力顕微鏡 (AFM) の開発の翌年に、同じく米国の IBM の研究所等が AFM 探針に磁性体探針を用いることで磁気力を検出する顕微鏡として開発し、直ちに当時の光磁気媒体や長手磁気記録媒体、磁気記録ヘッドの磁区観察に応用された。その後 AFM 技術の進歩を取り入れ、MFM では計測感度向上のために探針の機械的共振を利用することが一般的になり、検出物理量は探針のバネ定数の実効的变化を引き起こす磁気力勾配となった。

遠距離力である磁気力を測定するために、観察試料の表面近傍に働く近距離の原子間力（ファンデルワールス力）と区別するため、磁気力が主となる距離まで探針を試料表面から離して行う必要がある。この制約条件の下で欧州では AFM で培った探針振動制御技術を積極的に MFM に応用し、探針振動検出器の検出感度向上や MFM 探針の小振幅励振等により磁気力計測の高分解能化・高感度化が図られてきた。しかし、高密度磁気記録媒体やナノ磁性体、磁性ナノ粒子等のナノ磁気計測には分解能や感度が不足する問題がある。MFM 計測には、AFM の場合と同様に、探針加振周波数一定の下での探針振動の振幅または位相を検出する振幅・位相検出方式の MFM が開発され、次いで共振周波数を検出しその変化量を一定にする周波数検出方式の MFM が開発された。これら

MFM の技術的進歩は主に欧米でなされた。

以上を背景として米国、欧州、日本等で多くの特色ある走査型プローブ顕微鏡 (SPM) メーカーが生まれ、用途に応じ種々の MFM (大気雰囲気型、真空雰囲気型、大型試料ステージ型、等) が商品化され、現在では MFM は汎用の磁区観察装置として広く利用されている。同時に米国、欧州、日本等で SPM 用の探針メーカーが生まれ、MFM 探針として Si 探針等の先鋭探針に種々の磁性薄膜を成膜したものが商品化され現在に至っている。

・近接場顕微鏡 (SNOM)

波長以下の微少な散乱体をプローブとして、その周りにできる伝搬しない光の場であるエバネセント場中に置かれた微小物体からの散乱光を検出することにより光の回折限界以下の構造の観測を可能にした顕微鏡である。実用的な SNOM の原型は 1984 年に Pohl らによって提示され⁴⁾、最初のイメージングは 1985 年に行われた。その後、プローブとして細く伸ばしたマイクロピペットを用いる方法が開発され、ついで、細く引き伸ばした光ファイバーを用いる方法が開発された。大津らは、プローブの形状を工夫することによって高効率で近接場を得る技術を確立した。短針の先端部にプローブ光を照射して近接場を生み出すアパーチャレス SNOM も研究された。

これまでに出版されてきた SPM 関係の研究論文 29,000 報⁷⁾ の内訳を世界地域別に分析すると、米国 (7,406 報)、欧州 (ドイツ、英国、フランス、スイスの合計、6,296 報)、日本 (4,748 報)、中国 (4,068 報)、韓国 (1,407 報)、台湾 (875 報)、オーストラリア (751 報) の順となっている。特許出願数の比較では日本、米国、欧州、韓国、中国の順となるが、基本特許と重要特許の多くが米国から出願されていて、日本・欧州がそれに次いでいる。

市販 SPM 装置は日米欧での販売台数は飽和 (一部減少) 傾向であるのに対して、近年は中国を中心に日本以外のアジア・オセアニア地域での販売台数が伸びてきている。上述の世界地域別論文・特許件数に見られる通り、日本が SPM 技術の開発期に活発な活動を行ってきたことの甲斐があって日本製の SPM 装置の性能は優れている。国内においてはそれなりのシェアを維持しているが、海外では必ずしもあまり売れていない。需要地域が中国などの日本以外のアジア・オセアニア地域にシフトしてきていることが日本の SPM 装置メーカーの販売不振の原因となっている。

[今後必要となる取り組み]

SPM 装置を導入する側の産業分野や SPM 応用分野の研究者の立場になると、装置の基本性能はもちろん重要であるが、自分たちの用途に向けた機能と操作性、ユーザーインターフェースの実装が機種選定の際に重要となる。

- ・近年、SPM を含むナノ計測技術をグリーンサイエンスやライフサイエンスにおける研究課題の解決へと役立てることが強く求められている。これを推進するためには、固液界面における動的な物理・化学現象を原子・分子スケールで可視化できる AFM 技術の開発が望まれる。現在の AFM の再現性、安定性、分解能、定量性などの根本的な

限界は、主に探針先端の構造や化学状態で決まっている。したがって、これらの基本性能の向上させるために、原子・分子レベルで探針先端の状態を制御する方法の開発が望まれる。過去数年間で FPGA を用いた高速デジタル信号処理技術は長足の進歩を遂げた。この技術を用いたインテリジェントなリアルタイム制御法を AFM 計測に応用できれば、AFM の基本性能と機能性を格段に向上させられる可能性がある。

- ・ MFM 装置においては、より高感度・高分解能な高周波磁場計測方法の検討や、試料磁化の交流磁場応答の非線形性を含めた評価手法の検討が上げられる。高周波領域では磁気力と電気力の識別、磁場と電場の識別が困難となるので、磁場と電場を識別できる計測方法の検討も今後必要と考えられる。
- ・ SNOM 装置においては、スピン注入・蓄積の磁気光学的イメージングなど円偏光が関係する物性量の測定の学理と技術開発の必要性が挙げられる。

（３）科学技術的・政策的課題

SPM 技術は成熟し普及期に入っているため、産業界や各研究分野の SPM ユーザーと SPM 装置メーカーのマッチングを通じて一層の発展を実現することが求められる。

米国の国立科学財団（NSF）が進めてきた「国家ナノテクノロジー基盤ネットワーク（National Nanotechnology Infrastructure Network, NNIN）」では、全米の 14 大学がナノテクノロジー・ユーザー・ファシリティーのネットワークを形成している⁸⁾。これらの大学には全米のみならず世界の研究者・技術者に向けて開かれていて、研究者・技術者は自分たちの研究テーマ実施のための利用申し込みを行い、施設を利用している。一方、SPM 装置メーカーはこうした大学に最先端の SPM 装置を納品してユーザーの利用に供するとともに、大学は SPM 装置メーカー技術者によるユーザー向けの先端 SPM 技術紹介セミナーを開催⁹⁾して、ユーザーに最先端の装置技術を知る機会を与えるとともに、装置メーカー側にユーザーニーズを把握する機会を与える。こうした、ユーザーとメーカーのコミュニケーションが、ユーザーニーズに適合した SPM 装置開発に貢献していると考えられる。またナノエレクトロニクス・半導体技術分野を中心として IMEC などの国際的な研究開発拠点もまた SPM 装置メーカーとユーザーニーズのマッチングの場としての役割を担っている。

わが国では「ナノテクノロジープラットフォーム事業」¹⁰⁾が米国の NNIN に相当し、その一環として実施している「走査型プローブ顕微鏡(SPM)実践セミナー」¹¹⁾とそのための教科書「走査型プローブ顕微鏡入門」¹⁾が功を奏して、広くさまざまな分野の利用者の必要を満たす日本の SPM 装置が開発されて、今後日本の SPM 技術が利用しやすい技術として世界をリードするようになることが望まれる。なお、ナノテクノロジープラットフォームの実施機関には SPM 装置の操作に習熟した高度専門支援スタッフがいて利用者の研究開発目的に適合した支援を提供することを通じて幅広い分野の研究者・技術者に SPM 技術の利用を広めている。

SPM がこれだけ広く普及すると、「A 社製の SPM で求めた値と、B 社製の SPM で求めた値は一致するか、もし一致しない場合どちらが正しいか、また、それは何故か」といった議論が浮上する。これに 대응するため、国際標準化機構（ISO）の中で日本が幹事国を務める「ISO/TC 201 Surface chemical analysis」¹²⁾で 2004 年に SPM を所掌する小

委員会 (Sub-Committee) として「SC9 Scanning probe microscopy」を設置するなどして国際標準化活動を展開している¹³⁾。

AFM 技術の急速な進歩に比較して、その機能を十分に活用できる人材の育成は遅れている。AFM が幅広い学術・産業分野の研究開発現場で活用されるためには、AFM 装置のユーザビリティの向上に努める一方で、人材の育成を支援する方策も検討する必要がある。

MFМ によるナノ磁気計測は、我が国が得意分野としてきた磁性材料や磁気デバイスの研究開発で国際的に優位に立つための基盤技術であるが、ナノ磁気計測に係わる市場は評価対象である磁性材料や磁気デバイスの市場と比較して小さいので、企業活動として大きな設備投資は困難であり大きな利益を上げることは容易ではない。このため我が国では近年、MFМ を扱う国内の SPM メーカーの数が減少しており、国外の競争力のある SPM メーカーの進出が進んでいる。このため大学や国立研究所がリーダーシップを発揮して国際競争力のあるナノ磁気計測技術を国内の SPM メーカーと共同で開発し、必要とする産業分野へ利用を広く働きかけ、SPM メーカーが実用化する体制の構築が急務と考えられる。ナノ磁気計測の応用分野としては研究開発機器以外に、より市場の大きな製品検査装置への展開を図り直接生産活動に貢献することもナノ磁気計測が目指すべき方向と考えられる。

(4) 注目動向 (新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など)

[新たな技術動向]

現在の SPM 応用分野は多岐にわたり、半導体ナノエレクトロニクス、エネルギー・環境技術、バイオナノサイエンス、ナノテクノロジー・材料技術などでの研究展開が進んでいる。

- ・半導体製造技術分野では、高精度な平坦度測定、寸法測長 critical-dimension AFM (CD-AFM), あるいは異物検査などで、破壊検査のできるインライン評価手法として 300 mm 径ウェハ対応装置の導入が進んでいる^{14,15)}。
- ・トランジスタの微細化が進んで AFM による表面平坦性評価に加えて、ドーピング不純物やキャリア濃度の分布計測の手法が注目されている。走査型静電容量顕微鏡 (Scanning Capacitance Microscope, SCM) や走査型拡がり抵抗顕微鏡 (Scanning Spread Resistance Microscope, SSRM) を中心に、ナノエレクトロニクス研究開発コンソーシアム IMEC (Interuniversity Microelectronics. Centre) などで確立された後、各社で実用されてきた^{16,17)}。
- ・将来のデバイス技術を目指す先端的な研究分野でも、単一ドーパント原子トランジスタの実証に STM が用いられ¹⁶⁾、酸化グラフェンの還元と電気特性評価に AFM が用いられ¹⁹⁾、また、ナノデバイスの電子分光の研究に低温 STM/AFM が用いられる²⁰⁾ など SPM が中心的な技術として採用されている。
- ・エネルギーエレクトロニクス分野においても、米国国立標準技術研究所 (NIST)、コロラド大学、米国再生可能エネルギー研究所 (National Renewable Energy Laboratory, NREL) のグループが Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS) 薄膜多結晶太陽電池評価用の走査型マイクロ波近接場顕微鏡を報告²¹⁾ するなど幅広く活用されている。

- ・ SPM 型フォトマスクリペア装置 , EUV マスクリペア装置などは SPM によるマスク修正加工装置である。
- ・ マルチプローブ SPM では, 独立に駆動可能な SPM 探針を複数備えた機構によって, 微細デバイスの直接電気特性評価、ナノワイヤ、カーボンナノチューブ (CNT)、グラフェンを始めとする新材料、あるいは単電子トランジスタに代表される新探求デバイスに対する各種物性評価に活用され、また、SPM による加工の高スループット化に用いられる技術として重要である。
- ・ 液中 AFM 技術には目覚ましい発展があった。AM-AFM の高速化によりタンパク質分子の動態を分子スケールで直接可視化できるようになった²²⁾。また、FM-AFM の低ノイズ化により液中での原子スケール計測が可能となった²³⁾。
- ・ AFM による 3 次元計測法の開発と応用が活発化している。コンタクトモード AFM によるフォースカーブ測定を高速化したピークフォースタッピングなどにより表面の粘弾性分布計測が可能となっている²⁴⁾。一方、FM-AFM によるフォースカーブ測定を 3 次元化した方法により、固液界面における 3 次元水和構造の計測が可能となっている²⁵⁾。
- ・ AFM で得る情報を増やして、物性の定量計測を目指す動きも盛んになっている。3 次元走査や、電圧・周波数スイープにより、情報を多次元化する方法や^{26,27)}、カンチレバーの振幅・位相を複数の周波数で検出し、情報を多チャンネル化する方法²⁸⁾が提案されている。
- ・ 極低温・超高真空環境下での極限分解能計測技術も大きな進展を見せている。qPlus センサと呼ばれるクォーツ製の力検出器と、CO 分子探針を用いることで、分子内の構造を原子スケールの分解能で観察できるようになってきた²⁹⁾。
- ・ MFM の計測方法の分野では、磁場強度が大きい試料表面近傍で磁気力のみを検出する計測方法が進展しており^{30,31)}、直流磁場勾配および交流磁場勾配の計測において 10 nm 以下の高い空間分解能が得られている³⁰⁾。この手法には磁性探針にその共振周波数と異なる非共振の交番磁気力を印加した際に発生する探針振動の周波数変調現象が利用されており、交番磁気力顕微鏡 (Alternating Magnetic Force Microscope; A-MFM) と命名されている。さらに、観察試料から発生する交流磁場の発生場所の時間変化を計測できるストロボ磁場計測方法や、任意の観察方向の直流磁場の勾配を計測できるベクトル磁場計測方法も A-MFM の手法を応用して開発されている。さらに、本手法は原子分解能をもつスピン計測方法である超高真空雰囲気下での磁気交換力顕微鏡にも応用されている³¹⁾。ここでは交番磁気力の発生に、低い周波数で変調したマイクロ波照射による探針磁化の強磁性共鳴による励磁が用いられている。
- ・ 直流磁場の値を計測する計測方法が A-MFM を応用して提案されている³²⁾。ここでは外部磁場がゼロのときに探針磁化がゼロになる探針を用いて、外部から直流磁場を印加して観察試料からの磁場を打ち消す零位法が用いられている。直流磁場と直流電場の同時計測方法が A-MFM の技術を拡張して開発されている。これらの研究は日本が中心になって進められており、プロトタイプ機の開発を行う産学間連携も行われている。MFM の磁性探針の分野では、永久磁石等を観察するために保磁力が 15 kOe 以上の高保磁力探針が開発されている。この研究は日本や欧州で主に進められている。

- ・高周波磁気デバイスへの応用の観点から、GHz 以上の高周波数領域での交流磁場の検出や強磁性共鳴を含めた試料磁化の交流磁場応答の計測に対するニーズがある。これに答えるため米国 NIST で開発された強磁性共鳴力顕微鏡 (Ferromagnetic Resonance Force Microscope; FMRFM) の今後の展開にも注目したい。

[注目すべきプロジェクト]

- ・JST の先端計測技術・機器開発プログラムの中で、SPM 関係を含む研究開発から製品化への橋渡しが進められ成果を上げている。MFM については、試料表面近傍で磁気力のみを検出する計測方法である交番磁気力顕微鏡が秋田大学の齊藤らにより開発され、先駆的な成果を上げている。多機能な MFM 装置と高分解能 MFM 探針の開発を両輪とした研究開発が行われ、秋田大学、日立ハイテクサイエンス、日東光器、秋田県産業技術センターからなる産学連携チームで展開している。
- ・ナノテクノロジープラットフォーム事業の中では、SPM を含む先端機器の産学官研究者への共用と高度な技能を有する専任技術者による技術支援が遂行され、SPM 技術の応用展開推進に役立っているだけでなく、SPM ユーザーニーズと SPM 装置産業の先端技術のすり合わせ効果により実用性の高い製品開発に威力を発揮することが期待されている。米国では、ユーザーファシリティーが NSF の NNIN の他、DOE の各研究所や NIST で大々的に展開しているほか、DARPA グラント他により SPM 関連技術の開発が進められてきた。また NIST の物理計測部門では、半導体業界・コンソーシアムと連携して SPM を用いた表面粗さ、形状、長さなど表面ナノ計測分野の国際標準化活動をリードしている。
- ・日本学術振興会のナノプローブテクノロジー第 167 委員会において、AFM 技術に関する産学連携を推進する活動が行われている。
- ・金沢大学のバイオ AFM 先端研究センターでは、液中高速・超解像 AFM 技術の開発と、そのバイオ研究応用を推進している。バイオ AFM を名前に冠した研究センターは世界でも類を見ず、極めて特徴的である。

(5) キーワード

ナノ計測、ナノエレクトロニクス、ナノバイオ、ナノテクノロジー、近接場、トンネル電流、原子間力、ナノプローブ、カンチレバー、光てこ、ピエゾメカニカル駆動、フィードバック制御、共振周波数、原子分解能、原子分子操作、電気・磁気力、AM 変調、FM 変調、コンタクトモード、ノンコンタクトモード、液中観察、気中観察

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	日本では、海外でのSTMの発明が報じられてから早い時期にボトムアップの産学官共同開発体制を組んで追試に成功して以来、欧米と肩を並べる世界的レベルの研究グループが複数発展してきている。液中FM-AFMによる原子分解能計測 ²³⁾ や3次元水和構造計測 ²²⁾ 、液中高速AFMによるタンパク質動態計測 ⁵⁾ など、世界をリードする研究成果が報告されている。超高真空AFMによる原子識別・操作についても、世界トップレベルの成果が報告されている ^{34,35)} 。MFMのベースとなる原子間力顕微鏡AFMの研究水準は高いが、MFMに応用して高分解能化・多機能化を進める研究グループは少ない。交流磁場計測では、MFMを用いて探針磁化の強磁性共鳴以下のGHz域の周波数で、磁気記録ヘッド ³³⁾ やストリップ線路 ³⁶⁾ の交流磁場勾配の計測に成果が出ている。
	応用研究・開発	◎	↑	SPM関係の特許出願数が多い。ナノテクノロジープラットフォームなどユーザーファシリティーを拠点として次世代ナノエレクトロニクス、環境・エネルギー、ライフサイエンス、ナノテクノロジー・材料などの各分野の研究者がSPMを自分たちの研究ツールとして利用し、応用研究の力強い展開を進めている。生体分子研究所から市販されている液中高速AFM装置の開発・応用研究が金沢大学との共同研究で進められている。島津製作所から市販されている液中FM-AFM装置の開発・応用研究が京都大学や神戸大学との共同研究で行われている。MFMについては産学間共同研究により、新たな顕微鏡や磁性探針の開発が国プロ等の支援でいくつか進められている。
	産業化	○	→	拡大する海外新市場でのシェアを確保できずに苦戦しているが、国内のユーザーニーズに応える製品改良を進めることによる今後の健闘に期待できる可能性がある。産学共同開発プロジェクト成果のハイエンドSPMが最近市場投入された。生体分子研究所から販売されている液中高速AFMは、国際的に競争力のある商品であり、世界的に販売実績をあげつつある。島津製作所から市販されている液中FM-AFMも、世界的な競争力を持つ製品である。数社が大気型および真空型のMFMを販売している。中でも日立ハイテックスサイエンスが垂直/水平/回転磁場印加機構、Q値自動制御ソフト等の多数のMFMオプションを提供している。磁性探針では日東光器が高保磁力探針を実用化している。MFMの検査装置への展開が、磁気記録素子を対象として日立ファインシステムズにより進められている。
米国	基礎研究	◎	→	早い時期からこの分野の基礎研究をリードしてきた米国では、今後も堅実な活動が継続される。低温超高真空STMの研究者が、qPlusセンサとCO探針を用いたAFM計測に取り組み始め、数多くの基礎研究成果が報告している ²⁹⁾ 。一方、Band excitationやMulti-frequency AFMなどの新規技術により、定量的な物性計測技術の開発も進められている ²⁷⁾ 。MFMによる磁性ナノ粒子の評価計測が、医療や創薬、磁気記録デバイスへの応用を目指して盛んに行われている。FMR/MFMの開発と微小磁性体の強磁性共鳴の画像化の研究でも顕著な成果が出ている ³⁷⁾ 。
	応用研究・開発	◎	↑	NNINをはじめとするユーザーファシリティーの利用によるナノテクノロジー関係の応用研究が旺盛に進められている。また、エネルギー技術関係の応用研究はエネルギー省(DOE)のユーザーファシリティーで活発に進められている。NISTを中心にSPM技術を用いたナノ計測の国際標準化活動を早い時期から手がけて世界をリードしている。旧Asylum Research社が英国のOxford Instruments社に買収されたが、その開発拠点は依然米国にある。また、ドイツのBruker社SPM部門の開発拠点も米国にある。これらのメーカーでは、大学と同等レベルの研究開発が行われている。また、大学との共同研究も盛んである。その他、Agilent Technology社やRHK社などのメーカでも開発活動が活発に行われている。大手のハードディスクメーカー(Western Digital、Seagate等)が磁気記録ヘッド開発のためにMFMを高周波記録磁場の検出に利用している。

米国	産業化	◎	↗	米国はSPMを最初に製品化した国である。システム開発力、ソフトウェア開発力を駆使して、ユーザーニーズに応える製品群をそろえて拡大する海外新市場でのシェアを伸ばしている。アジア新市場各国では米国帰りの研究者がSPM応用研究に取り組むことも追い風となっている。Asylum Research社が英国のOxford Instruments社に買収されたが、これにより販売力は向上するものと考えられている。超高真空AFMについては、RHK社から販売されているが、最近ではドイツのメーカーに比べて、やや競争力が劣る印象がある。MFMについては走査型プローブ顕微鏡 (SPM) で実績のある複数のメーカー (Asylum社等) が販売している。
欧州	基礎研究	◎	→	STM発祥の地である欧州は現在もSPM全般についての高い基礎研究レベルを維持している。ドイツ、スイス、英国を中心として、超高真空STM/AFMに関する基礎研究において多くの成果があがっている。また、オーストリア、フランス、ドイツ、スペインを中心として、液中AFMを用いた生体分子計測の成果も多数報告されている。大学を中心にMFM全般で研究水準は高い。研究対象は米国と似た状況である。AFMで培った探針振動制御技術を積極的にMFMに利用した磁気力検出の高感度化に成果が見られる ³⁸⁾ 。特に、2共振 (Bimodal) 励振や振じりモード励振 ³⁹⁾ 、水晶振動子を用いた小振幅励振等 ⁴⁰⁾ が顕著である。FMRFMの研究でも米国と同様に理論・実験の両面で多くの成果が出ている。
	応用研究・開発	◎	→	ドイツ、英国、フランスを中心に応用研究が継続している。ナノエレクトロニクス半導体分野の応用研究はベルギーのIMECの影響力が強い。ドイツのOmicron社は英国のOxford Instruments社に買収されたが、その開発拠点はドイツにある。このメーカーから市販されているqPlusセンサの改良が大学と共同で進められている。現行の高密度磁気記録に係る研究は、欧州メーカーが少なくなったので下火である。替って、医療や創薬への応用を目指した磁性ナノ粒子の評価計測が盛んに行われている。
	産業化	◎	→	SPMプローブをリードするナノワールド社 (スイス)、SPMコントローラをリードするSPECS社 (ドイツ) など高い技術力を持つ企業が存在する。欧州に拠点を持つブルカー社はSPM事業を米国のビーコ・インスツルメンツ社より2010年に買収した。ドイツのSPECS社は、高性能なAFMコントローラを、ドイツのJPK Instruments社は、倒立型顕微鏡との複合化に適したAFMを、英国のOxford Instruments社 (旧Omicron社 (ドイツ)) は、極低温・超高真空AFMを、それぞれ世界的に販売している。また、スイスのZurich Instruments社は、AFM計測に多用されるロックインアンプと、高度な信号解析機能を統合させた装置を販売しており、世界的に多数の販売実績をあげている。世界的なシェアを持つ、MFMに有効な汎用性に優れた高性能な計測器、制御器を有する優れたSPMメーカー (SPECS社等) が多数ありMFMも販売している。また、MFM用カンチレバーメーカーも多い。
中国	基礎研究	×	→	SPM基礎研究についての特筆すべき活動が見えていない。いくつかの研究グループから、極低温超高真空STM/AFMを用いて行った分子内構造計測の結果が報告されている。
	応用研究・開発	○	↗	SPMを利用した研究成果の論文発表数が増加中。蘇州ナノテク国際イノベーションパークには巨額の研究開発投資が行われている。
	産業化	×	→	現在までのところ産業化についての特筆すべき活動が見えないが、今後の動向を注視する必要がある。
韓国	基礎研究	△	↘	韓国のSPM技術は米国からの輸入技術で、韓国発という意味では他国に比べて特に顕著な基礎研究成果は見えていない。MFMを用いた標準的な磁区観察が主である。
	応用研究・開発	○	→	National Nano Fab Center (NNFC)、Korea Advanced Nano Fab Center (KANC)などのナノテクノロジー拠点を中心に応用研究を進めている。特許件数では中国に勝っているが、論文数は中国の3分の1程度に過ぎない。Park Systems社において、SICM機能の付いた生細胞観察用のバイオAFMが開発され、市販化されている。

	産業化	○	→	1997年にカリフォルニアから移転して設立したPark Systems社から市販されている大型の走査範囲を持ち、高精度な距離・凹凸・粗さ計測を可能とするメトロロジー向けのAFMは、国際的な競争力を持つ製品であり、世界的な販売実績をあげている。また、上記のSICM機能付きのバイオAFMも着実に販売実績をあげている。Park SYSTEMSは大気型のMFМを販売している。また、ハードディスク基板の生産検査用AFMも販売している。
--	-----	---	---	--

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 引用資料

- 1) 「走査型プローブ顕微鏡入門」(オーム社, 2013) ISBN 4274214133.
- 2) G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, Phys. Rev. Lett. 49, 57 (1982).
- 3) G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett. 56, 930 (1986).
- 4) D.W. Pohl, W. Denk and M. Lanz: Appl. Phys. Lett. 44, 651 (1984).
- 5) Y. Martin, C. C. Williams, H. K. Wickramasinghe, J. Appl. Phys. 61 (1987) 4723.
- 6) T. R. Albrecht, P. Grütter, D. Horne, D. Ruger, J. Appl. Phys. 69 (1991) 668.
- 7) Web of Science.
- 8) <http://www.nnin.org/>
- 9) 例えば、<http://www.asylumresearch.com/Events/Harvard/index.shtml>
- 10) <http://www.jst.go.jp/nanotechpf/>
- 11) <http://nsn.kyoto-u.ac.jp/topic/25.html>
- 12) http://www.iso.org/iso/iso_technical_committee?commid=54618
- 13) http://www.iso.org/iso/standards_development/technical_committees/other_bodies/iso_technical_committee.htm?commid=354756
- 14) http://digital.hitachihyoron.com/pdf/2007/04/2007_04_05.pdf
- 15) <http://www.veeco.com/pdfs/webinar-slides/Introduction-to-CD-Metrology-in-the-Semiconductor-Industry-webinar-slides.pdf>
- 16) P. De Wolf, M. Geva, T. Hantschel, W. Vandervorst, and R. B. Bylsma, Appl. Phys. Lett. 73, 2155 (1998).
- 17) L. Zhang, K. Ohuchi, K. Adachi, K. Ishimaru, M. Takayanagi, and A. Nishiyama, Appl. Phys. Lett. 90, 192103 (2007).
- 18) Martin Fuechsle, et al., Nature Nanotechnology 7, 242 (2012).
- 19) Cristina Go' mez-Navarro, et al., Nano Letters 7, 3499 (2007).
- 20) T. Quaglio, et al., Rev. Sci. Instr. 83, 123702 (2012).
- 21) J. C. Weber, et al., Rev. Sci. Instr. 83, 083702 (2012).
- 22) N. Kodera, D. Yamamoto, R. Ishikawa, T. Ando, Nature 468 (2010) 72.

- 23) T. Fukuma, K. Kobayashi, K. Matsushige, H. Yamada, Appl. Phys. Lett. 87 (2005) 034101.
- 24) C. Su, Microsc. Microanal. 16 (2010) 364.
- 25) T. Fukuma, Y. Ueda, S. Yoshioka, H. Asakawa, Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 016101.
- 26) B. J. Albers, T. C. Schwendemann, M. Z. Baykara, N. Pilet, M. Liebmann, E. I. Altman, U. Schwarz, Nat. Nanotechnol. 4 (2009) 307.
- 27) S. Jesse, S. V. Kalinin, R. Proksch, A. P. Baddorf, B. J. Rodriguez, Nanotechnol. 18 (2007) 435503.
- 28) T. R. Rodriguez, R. Garcia, Appl. Phys. Lett. 84 (2004) 449.
- 29) L. Gross, F. Mohn, N. Moll, P. Liljeroth, G. Meyer, Science 325 (2009) 1110.
- 30) H. Saito, R. Ito, G. Egawa, Z. Li, and S. Yoshimura, J. Appl. Phys. 109, 07E330 (2011)
- 31) 有馬英司, 磯山季歩, 徳田郁美, 内藤賀公, 李艶君, 菅原康弘, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会 19a-D5-7 (2014)
- 32) 木下幸則, 江川元太, 吉村哲, 野村光, 中谷亮一, 齊藤準, 第 37 回日本磁気学会学術講演概要集, 3pF-10(2013)
- 33) 木下幸則, 江川元太, 吉村哲, 齊藤準, 第 37 回日本磁気学会学術講演概要集, 3pF-9(2013)
- 34) Y. Sugimoto, P. Pou, M. Abe, P. Jelinek, R. Perez, S. Morita, O. Custance, Nature 446 (2007) 64.
- 35) Y. Sugimoto, P. Pou, O. Custance, P. Jelinek, M. Abe, R. Perez, S. Morita, ience 322 (2008) 413.
- 36) Y. Endo, M. Fukushima, K. Arai, K. Yanagi, Y. Shimada and M. Yamaguchi, J. Appl. Phys. 115, 17D120 (2014)
- 37) I. Lee, Y. Obukhov, G. Xiang, A. Hauser, F. Yang, P. Banerjee, D. V. Pelekhov and P. C. Hammel, Nature, 466, 845 (2010)
- 38) C. Dietz, E. T Herruzo, J. R. Lozano and R. Garcia, Nanotechnology, 22 125708(2011)
- 39) A. Kaidatzis and J. M. Garcia-Martin, Nanotechnology, 24, 165704(2013)
- 40) M. Schneiderbauer, D. Wastl and F. J. Giessibl, Beilstein J. Nanotechnol. 3, 174(2012)

3.5.10.2 電子顕微鏡

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

電子顕微鏡は、材料の特性に決定的な役割をもつ界面や表面などの局所構造を直接観測できるという特徴をもつ。この局所構造におけるエネルギー変換や輸送現象、破壊、疲労、あるいは化学反応などの理解は、新規のナノ材料の設計に重要な指針を与える。

この項では、電子顕微鏡の研究開発領域として、電池の動作時の電気化学反応のその場観察や、生体材料の生きたままの観察などを可能にする「環境制御透過電子顕微鏡(E-TEM)」技術、および、急速に進展しつつあるスピントロニクスを支える「スピン偏極電子顕微鏡」技術にの課題に絞って報告する。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

・環境制御透過電子顕微鏡

電子顕微鏡は高真空を必要とする観測装置である。このため最近になるまで低真空環境でのガス反応過程や液中での化学反応などについての観察は不可能であった。しかし、生命現象の解明やリチウムイオン電池や燃料電池の性能向上等の社会的ニーズが高まってきたことから、試料周りの環境を制御して、数 Pa 程度の低真空条件や溶液中の試料の電子顕微鏡観察が必要になってきた。

低真空条件や溶液中の試料を電子顕微鏡で観察するための方法は、環境制御電子顕微鏡(Environmental Transmission electron microscopy: E-TEM)と呼ばれている。E-TEM は、大きく 2 つに分類される。1 つは、電子顕微鏡本体の排気系を改造し、試料近傍の圧力が上昇した際に、電顕本体の圧力上昇を防ぐような真空排気機構を持つ開放型と呼ばれるもの、もう 1 つは、密閉型の小部屋(環境セル)を準備し、このセル内に試料を配して、構造観察をする密閉型と呼ばれるものである。密閉型では、セルの上下に電子が透過できる隔壁と呼ばれる非常に薄い窓を配することで、観察と圧力制御を両立させており、隔壁型とも呼ばれている。

E-TEM の開発のニーズは非常に高いが、現在のところ環境制御条件や、測定可能な試料サイズに制約があり、測定可能な試料は限られており、利用者のニーズに合致した E-TEM の開発が求められている。

・スピン偏極電子顕微鏡

マイクロマグネティクス、および、スピントロニクスにおいては、物質・材料中のスピン磁気モーメントの分布を原子分解能で観測することが求められる。このための顕微鏡技術としては、スピン偏極走査電子顕微鏡 (SEM)、スピン偏極低エネルギー電子顕微鏡 (LEEM) および低エネルギー電子回折 (LEED)、スピン偏極透過電子顕微鏡 (TEM) がある。スピン偏極 SEM は、入射電子としてはスピンを区別しない通常の電子ビームを使う。スピン偏極 LEEM とスピン偏極 TEM は入射電子にもスピン偏極電子を用い、入射偏極電子と観察試料の磁気モーメントとの相互作用がアップスピン電子とダウンスピン電子の入射で何らかの差があることを利用する。

スピン偏極電子顕微鏡は、結像理論として従来のローレンツ力ではなく、量子力学の

根幹にかかわる試料中の磁気モーメントと電子のスピンとの相互作用を受けた電子の散乱断面積や位相ずれを根本的に考え直さざるを得ず、基礎物理学に寄与する新しい情報が提供されると期待される。

〔これまでの取組み〕

物質の究極粒子の一つである電子の波動的性質を使った電子顕微鏡には 1931 年のルスカによる発明以来 80 余年の歴史がある¹⁾。1940 年代には光学顕微鏡の分解能を僅か上まわる程度であったが、1970 年代には重い単原子の観察が可能になり²⁾、21 世紀には分解能は 0.05nm に到達し^{3,4)}、結晶中の水素原子のコラムも可視化できるようになった⁵⁾。またローレンツ電子顕微鏡モードやホログラフィーモードを使って磁性体の磁壁構造や磁場ベクトルも観察できるようになった⁶⁾。電子顕微鏡技術には、20 世紀末に非常に大きな革命的なブレイクスルーがあった。それが「収差補正技術」であり、残念ながらこの技術は日本発ではなく、ドイツ、米国を中心に開発が進んできた。これによって 2000 年を越えたあたりから空間分解能が飛躍的に向上し、TEM による原子分解能観察が日常的に可能になった。日本は、超高压電子顕微鏡技術に注力したため、収差補正技術開発の初期こそ欧米の後塵を拝したが、現在の技術力はドイツ、米国とも勝負できるレベルに達している。

・走査型 TEM(STEM)

STEM は、像コントラスト特性および他の分析装置とのマッチングの良さから、原子分解能解析装置の主流となりつつある。特に最近では STEM 像検出器、X 線分光装置、電子線エネルギー分光装置、カソードルミネセンス(CL)検出器などの検出系に大きな進展があり、原子 1 個レベルの観察や分析が可能になっている。日本においては、いくつかの国家プロジェクトを経て、国産の収差補正技術が確立され、日本の電子顕微鏡メーカーから製品として世界市場に投入されている。電子顕微鏡本体性能および電子光学系における日本の技術レベルは世界的に引けを取らないが、新技術の開拓や周辺機器開発においては常に欧米先行傾向が否めない。

・環境電子顕微鏡(E-TEM)

生体試料や電池試料など低真空や溶液など高真空環境を用いない試料観察に対するニーズが高まっている。環境電子顕微鏡(E-TEM)実現の試みは、透過電子顕微鏡の発明直後の 1940 年代から始まり、2000 年前後からナノテク分野の発展を背景に、幾つかのメーカーにより E-TEM 用の装置の開発が進んだ。国内の E-TEM 用の装置としては、開放型の試料ホルダーが日立によって開発され、その後、同社で環境セル試料ホルダーと差動排気システムを備えた H-9500 が開発された。日本電子では、既存の TEM に取り付けられる環境セルタイプの試料ホルダーの開発を行っている。複数の環境セルがあり、ガスの還流に加えて、溶液中の試料観察も可能である。近年では、幾つかの大学の研究室レベルで、隔壁タイプのホルダーを用いた応用データの報告や、独自に開発した環境セルの報告が行われている。国内いくつかの研究グループの開発努力によって、現時点では世界で唯一の装置が多数我が国に設置されている状況である。ほぼ実用に耐えるまで

技術が向上したのはこれには JSPS や JST の研究資金によるところが大きい。

欧米でも、研究室レベルで E-TEM 装置の開発が行われてきた。特に、米国では、TEAM プロジェクトの中で差動排気システムを有する電子顕微鏡の開発が行われ、球面収差補正装置を搭載した装置の 1 つのオプションとして TITAN ETEM が FEI 社から販売されている。複数のベンチャー企業から試料ホルダーや研究に必要な環境セルが開発・販売され、様々な研究グループが、これらを使った応用実験を進めている。特に、電池の動作中の構造変化のその場観察が幅広く行われている。球面収差補正装置を組み込んだ高分解能装置に環境制御機能を加えることで非常に質の高いデータの収集が可能になっている。欧州でも、E-TEM を用いての研究は進んでいるが、日米に比べると、それほど多くのグループが進めているとは言えない。欧州に電子顕微鏡メーカーがないことが関係していると考えられる。

生物試料を対象とした研究は、米国でも日本でもまだ多くない。これは、生物試料が、電子線照射ダメージに弱いため、非常に限られた条件での観察しかできないことが 1 つの原因で、トモグラフィーや位相板など、結像法の改良との組み合わせなどによる対策が今後の研究課題になる。

・スピン偏極電子顕微鏡

スピントロニクスの急速な進展にともなって、ナノ領域の磁性を観察するためのスピン偏極電子顕微鏡に対するニーズが高まっている。以下では、スピン偏極 SEM、スピン偏極 LEEM、スピン偏極 TEM などについて述べる。

スピン偏極 SEM は、通常の SEM と同様に収束電子線を試料上で走査し、入射電子に誘起されて試料内からでてくる二次電子が磁性体試料中の電子のエネルギーバンド上のスピン状態を保持している現象を利用したものである。この二次電子のスピン偏極方向

は、従来モット散乱検出器によって検出され、偏極ベクトルの x, y 成分を決定して、それぞれを 2 次元像としてマッピングすることが、1984 年に日立中央研究所の小池、早川らによって案出され⁷⁾、現在、商品化レベルにまで成熟した技術となっている。素粒子の散乱実験に使用されたモット散乱器を走査電子顕微鏡に適用し実用化までなしとげたことは日立中央研究所のグループの功績である。この装置は我が国における 1984 年の発明以来、現在では米国、ドイツ、スイスなどの国でも稼働している。

一方、スピン偏極 LEEM、スピン偏極 LEED、および、スピン偏極 TEM では、上記スピン偏極 SEM と異なって、スピン偏極電子銃を用いており、磁気偏向と静電偏向によって任意の方向にスピン軸を向けることもできるという大きな特徴がある。偏極電子を取り出す材料としては、アルカリ金属 (1972 年)⁸⁾からはじまり、タングステンチップ (1981 年)⁹⁾が検討されたがいずれも偏極率は数%で偏極電子源として使えるものではなかった。歪み半導体に円偏光を照射して選択的に偏極スピンを取り出す試みが日本で 1980 年代から行われ電子源としての実用化に成功した¹⁰⁾が、冷却が必要だった¹¹⁾。その後、半導体歪格子を使うことで偏極率 90%以上、量子効率 0.5%を達成、透明な半導体超格子を用いた後方光入射技術¹²⁾の実現によって電子の輝度は $4 \times 10^8 \text{ A/sr.cm}^2$ に達し、熱電界放射電子銃に近づく値を示した¹³⁾。これによって低エネルギースピン偏極電子顕

微鏡(SPLEEM)や、世界初のスピン偏極透過電子顕微鏡(SP-TEM)が我が国で実現した¹³⁾。

LEEM の電子銃をスピン偏極電子銃に交換することによりスピン偏極 SEM と同様、磁性体表面の磁区構造を観察することができる¹⁵⁾。SPLEEM では表面形状の情報と磁性状態の情報が同時に得られるため表面磁性の成因について研究することができる。背面レーザー照射半導体歪起格子を用いたスピン偏極電子銃の採用により、スピン偏極 LEEM でもビデオレートでのその場観察ができるようになった¹⁶⁾。最近、高輝度スピン偏極電子源を用い、前方散乱電子波を用いて結像するスピン偏極 TEM が世界で初めて完成した。試料の結像レンズ系は 3 段拡大系であるため通常の制限視野電子回折図形も得ることができる¹⁷⁾。この装置は、スピン偏極電子によるホログラフィーも可能である。スピン偏極電子銃の励起用レーザー光としてパルスレーザーを用いることで、パルス電子顕微鏡にも転用でき、すでに、パルス幅 10psec 以下の電子線パルスでの試料観察もできている¹⁸⁾。また、電子線版「ポンプ・プローブ実験」も可能である。このようなスピン偏極電子を用いた TEM は世界に前例がなく、すでに公刊した論文^{13,17,18)}によって米国やイタリアの大学の研究者により注目され、共同研究をおこなっている。

本研究領域のような未開の測定技術の開拓には、日立中央研究所、名古屋大学の支援が必要で、今後、少しずつでも支援を継続して、実験者にとっての良い研究環境を我が国の中に温存しなければならない。

[今後必要となる取組み]

現在、日本が優位な立場にある本体開発、収差補正技術開発、分析技術・検出器開発に関しては更なる研究強化を行い、世界をリードしつづけることが科学技術分野全体にとって重要である。一方、今後日本が新たに力を入れるべき分野(時間分解 TEM、量子ビーム制御、環境・その場手法開発など)に関しては基礎研究のレベルを上げて世界にキャッチアップし、産業化にもつなげていく必要がある。また、全体的には大学・研究所での基礎研究フェーズのレベルを高めることが極めて重要であるが、そのためには若手研究者の育成環境の整備が急務である。

・ E-TEM

試料環境制御という観点だけでなく、試料から構造に加えて付加的な情報を引き出すことも重要である。したがって、環境制御技術の開発にとどまらず、構造観察に加えて、分光を行うための光学系の改良や分光法の開発、あるいはトモグラフィーや位相板などと組み合わせた装置開発が今後必要になってくると考えられる。環境 TEM とそれを支えるための装置開発は、メーカーのレベルでも一定の開発が進んでいる。しかしながら、幾つかの課題がある。1 つは、なるべくユーザーフレンドリーなシステムにすることである。電顕本体の差動排気システムやホルダーのガス還流システムの自動化に加え、なるべく単純な構造にすることで、ユーザーが使用しやすく、場合によっては改造しやすいシステムへと改良することが必要である。また、環境セルを使用する場合、高い分解能の獲得にはセルの厚みを自在に制御することが必要であるが、使用に慣れないユーザーには、この点が障壁となっている点も挙げられる。高分解能のニーズに対応したものも研究室レベルでは開発されているが、利用しやすいシステムを構築することが必須で

ある。また、ユーザーの具体的なニーズに対応できるよう、新規開発・改造を援助するために、企業と大学、研究所の連携を進める仕組みの構築も必要と思われる。

・スピン偏極電子顕微鏡

大阪電通大学の LEEM と名大エコトピア科学研究所の TEM として、我が国がユニークさを持っている。前者については電子銃の小型化、商用化のための JST のグラント研究が現在進行中であり、その到達度合を中間評価によって正しく認識することが必要である。後者については、この電子銃が TEM 用に十分使えるための輝度を出すことは十分実証されたが、電子スピンと試料中の磁気モーメントの交換相互作用の精密な検出は今後の実験の進展を待つ段階である。この観察のための装置には最高度の安定度が求められるが、現在の実験装置は 1980 年代の装置を基礎としているため、高圧やレンズの安定度が精密な測定に耐えうるか不明な点もある。最新の電子顕微鏡(可能ならレンズの球面・色収差補正装置付き)をグループに提供し、その上でスピン偏極電子による電子回折実験、ローレンツ電子顕微鏡観察実験および電子線ホログラフィー実験がなされるような措置が望まれる。

（３）科学技術的・政策的課題

日本には電子顕微鏡開発メーカーが存在し、その製品は世界中で極めて高い評価を受けている。これは電子顕微鏡開発の黎明期から産学官を挙げて国家的に取り組んできた成果であると考えられる。しかし現在は、電子顕微鏡の新しい分野、技術を切り開く研究者層が薄いのが大きな問題となっている。これは、一つには電子顕微鏡開発のような骨太の大型プロジェクト、チャレンジングなプロジェクトに若手研究者が参画する機会が少なく、次世代を担う人材が育ちにくい環境があるためである。電子顕微鏡は様々な要素から構成されるため、個々の要素研究としての開発は様々な制度下で可能であるが、それを纏め上げ、電子顕微鏡本体として開発する制度には乏しい。また、このような大型プロジェクトが 40 代、30 代の次代を担う研究者に託されることは極めて稀であり、そのことがプロジェクトの躍動感・チャレンジ精神を削ぐことも念頭に置く必要がある。

二つ目には、先端ナノ計測研究者の置かれている現在の環境にもある。現在、電子顕微鏡研究者に強く求められていることは、材料・デバイスなどの出口に直結する応用研究や他研究者のサポート（共用化）であり、純粋な計測開発研究で予算をとることは難しい。このような環境下では優秀な若手計測研究者は育ちにくく、若手研究者は他分野へと研究領域をシフトせざるを得ない。最先端ナノ計測はその装置オペレーションもすることながら、データ解釈にも高い知識と豊富な経験が必須であり、そのような人材を一朝一夕に育成することは非常に難しいことを念頭におくべきである。世界的に見ると欧米や中国では電子顕微鏡分野における若手研究者の活躍が非常に目立つが日本では人材不足に陥っていることを危惧する。現在、日本は間違いなく世界トップクラスの研究力を有しているが、今後も日本の優位性を維持するためには、若手研究者を育成することが急務である。

研究の専門化が進み、ナノ構造計測技術を開発・研究するグループと、それを使って材料や試料の計測を進めるグループの連携が必要であり、これを支援する取り組みも求

められる。

我が国の問題として、電子のスピンと磁気モーメントの交換相互作用を数値までのレベルで検討できる理論物理学者がほとんどいないことがある。素粒子の実験を解説する理論家、計算家は多数おられるが、素粒子(電子のスピン量子数)と物性の境界領域の理論を確実に共同研究して下さる人材がほとんどいないことは、我が国の理論家養成に問題点を感じざるを得ない。米国および EU に理論家を探索し、現在複数人の共同研究者を得て、研究を進めているのが現状である。

近年、電子顕微鏡自身が複雑化し、高コスト化しているため、大学で装置開発を中心に進めるグループが減少している傾向がある。実際、電子顕微鏡を用いて材料科学の研究を進める大学研究室の多くは、学部、学科に所属せず、大学共通のセンターに所属するケースが増えている。この状況が進むと、我が国が維持してきた、高い電子顕微鏡技術を進化・発展させるための人材育成が困難になってくる。したがって、人材育成の仕組みも検討する必要がある。

(4) 注目動向 (新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など)

[新たな技術動向]

米国 (LLNL, CALTEC, PNNL など) を中心として開発が進められている時間分解能 TEM に大きな注目が集まっている。また、高次収差補正、色収差補正、モノクロメータなどの開発・高度化も順調に進展しており、これらを高度に応用した研究開発が期待されている。液中での観察やガス環境下での観察を可能にするその場手法への期待も大きく、世界中で鋭意開発が進められている。

封じ込め式の環境セルの window 材料として graphene の利用が注目されている^[1]。Window を使用する場合、その存在により、分解能に制約を与えるという点が問題であったが、Graphene は究極の薄さであることから、高分解能観察には適しており、今後、graphene や graphene を応用した材料を用いたセルの開発は活発化すると予想される。

スピン偏極電子顕微鏡はいずれも、円偏光レーザーによって電子の放出が行われるため、パルスレーザーを用いれば容易に「パルス電子顕微鏡」ができる。通常の光電子放出現象や熱電子放出現象を使ったパルス電子顕微鏡については米国で研究が急速に進んでおり、「単一パルスモード」と「繰り返しパルスモード」で観察がおこなわれている。前者は金属チタンの相変態現象の研究に¹⁹⁾、後者は炭素ナノチューブの光励起プラスモン²⁰⁾の研究に使われている。ここでスピン偏極電子顕微鏡をパルス化する意義は言うまでもなく、ナノレベルの磁気モーメントの過渡現象を定量的にとらえることである。

パルス電子線は生物試料の電子顕微鏡観察にも新しい可能性を提供する。すなわち、パルス電子線のパルス数と1パンチ当たりの電子数を調整することにより、従来の TEM より高精度で照射ドーズ量を制御し、生物試料へのダメージを減らし、これまで観察できていなかったバイオ・ソフトマテリアルの高分解能観察が可能になることである。

レーザー光で駆動されるスピン偏極パルス電子銃が実用化されることによって、レーザー光学で長年おこなわれている「ポンプ・プローブ分光」の電子線版¹⁸⁾が通常の実験室で実現することになり、我が国の最も得意とする電子線分析技術とレーザー分光技術が完全に統合する— (エネルギー)と (波数ベクトル)に関わる物性測定に広い地平を

与える一可能性をも示している。

我が国の内田・外村が発見した電子らせん波²¹⁾の研究も注目される。これは電子がもつ角運動量の量子数($\mathbf{l}$)を積極的ににつかったものであるが、スピン偏極電子顕微鏡のもつスピン量子数($\mathbf{s}$)との結合をさせれば、 $\mathbf{j}=\mathbf{l}+\mathbf{s}$ を使った新しい電子線分析器が構築できることになる。このらせん波の実験的研究はベルギー(Vebeeck)²²⁾と名古屋大学(齋藤晃)²³⁾のみによって行われており、スピン偏極電子顕微鏡とこの電子らせん波発生装置が名古屋大学内で統合すれば、新しい物理学の探索ができると考えられる。この電子らせん波ビームを用いた電子顕微鏡法が、現在欧州（アントワープ大、ウィーン工科大など）を中心として盛んに研究開発が行われており、画期的な成果が数多く報告されている。主に、磁性材料解析への応用が期待されている。

（５）キーワード

環境制御電子顕微鏡法（E-TEM）、その場観察、実環境、スピン偏極 SEM、スピン偏極 STM、スピン偏極 LEEM、スピン偏極 TEM、スピン検出器、スピン散乱、磁性体観察、時間分解（パルス）電子顕微鏡観察

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	収差補正技術や電子光学系の開発は主にメーカー主導で行われている。他の新技術に関しては、分析装置や検出器開発などのハード開発を行う大学・研究所の研究室はわずかである。しかし、新顕微鏡手法開発に関しての国際的な評価・レベルは高い。 E-TEM を利用した研究としては、 Au を始め、ナノ粒子のガス反応過程における触媒化学反応の研究を独自装置や、メーカーの装置を利用して進めている例が多い。多くは、材料科学が研究対象であり、生物分野の利用は少ないが、生物試料の液中その観察の例は世界で初めて報告されている ²⁴⁾ 。スピン偏極電顕については、日本の研究が世界をリードしている。
	応用研究・開発	◎	→	原子レベルの観察、分析を高度に応用した研究において、世界的な成果が多数報告されている。また、ナノテクノロジープラットフォーム事業などを通じて多くの異分野研究者にも最新電子顕微鏡技術が活用されている。燃料電池を中心としたガスの触媒反応について、市販 E-TEM を用いた研究成果が多い。溶液中の反応や生物試料への適応例は少ない。スピン偏極 TEM は名古屋大学と大阪電気通信大学で磁性試料や磁性体表面観察への応用が始まっている。
	産業化	◎	↗	代表的な顕微鏡メーカーである日立と日本電子が、自社開発の収差補正技術を用いた最先端透過型電子顕微鏡の販売を開始している。これらの装置は世界中に広く普及している。 E-TEM については、日立と日本電子が、ガス反応過程の観察が可能な装置の販売を行っている。
米国	基礎研究	◎	→	TEAM プロジェクト遂行時ほどの勢いはないが、このプロジェクト期間中に最前線で活躍した若手研究者が独立して研究室を率いており、原子分解能顕微鏡像、スペクトル定量化において高いレベルの研究を進めている。また、時間分解能 TEM 開発においては世界を頭一つリードしている。 E-TEM については、カーボンナノチューブの成長過程の触媒反応など、ナノ粒子のガス環境中の触媒反応過程のその場観察の報告が多くなされ、最近では、電界セルを使ったLiイオンセルなどの研究成果が多数報告されている。2012年には、グラフェンを使ったセルによる原子分解能観察例も報告された ²⁵⁾ 走査型の TEM(STEM) を使った生物試料の観察結果も報告されている ²⁶⁾ 。
	応用研究・開発	◎	→	国立研究所を中心としてユーザーファシリティーが充実しており、最新鋭収差補正付電子顕微鏡を用いた応用研究が数多く進行している。 EI 社の差動排気システムを有する E-TEM や、ベンチャー企業の環境制御用ホルダーを用いて、燃料電池やリチウムイオン電池の動作時の構造変化やナノチューブの成長過程など、触媒反応に関する研究例が多く発表されている。
	産業化	◎	↗	Nion 社開発の STEM 専用機が市場投入され、世界各国で高い評価を受けている。また、中規模・ベンチャー企業などがカメラ、特殊環境ホルダー等の開発・販売に参入しており、状況を呈している。 EI 社が差動排気システムを有する環境制御用の TEM の販売を、 Protochip, Hammingbird 社といったベンチャー企業が、環境制御用ホルダーの販売を行っている。
欧州	基礎研究	◎	↗	Voltex beam 、収差補正技術、環境制御など、世界をリードする基礎研究がすすめられている。 E-TEM については、独自開発の環境セルを用いた研究成果は、 Delft 工科大学から報告されている程度である。スピン TEM についてはドイツ、ユーリッヒ研究所に興味をもっている研究者がいる。
	応用研究・開発	◎	→	基礎研究と応用研究が高度に融合しており、最先端基礎研究で培った新技術を即応用研究に用いることに長けている。そのため、応用研究でも極めて高いレベルの成果が多数報告されている。 E-TEM については、主に米国のグループとの共同研究の形で、電池など触媒反応の研究が行われている。
	産業化	◎	→	FEI 社、 CEOS 社を中心として、最先端電子顕微鏡、高度収差補正システム、モノクロメーターなどがすでに市場投入されており、世界中で販売されている。

中国	基礎研究	△	↗	電子顕微鏡手法開発は他国の技術を利用することにより、より応用研究に重点をおいた研究がおこなわれている。E-TEMについては、既存の装置を利用した研究例が報告され始めた。
	応用研究・開発	◎	↗	最新鋭収差補正付電子顕微鏡が多くの大学、研究所に導入され、活発に応用されている。また、欧米で活躍する中国出身のスター研究者や留学中の若手研究者を積極的に登用し、電子顕微鏡研究に従事させているため、非常に勢いがある。
	産業化	×	—	特に目立った活動は無い。
韓国	基礎研究	△	→	電子顕微鏡法そのものの開発よりも応用研究への主眼が強い傾向がある。
	応用研究・開発	△	↗	半導体企業等ではすでに多くの最新鋭収差補正付電子顕微鏡が導入されていたが、昨今では大学、研究所などにも相次いで導入が始まっており、今後応用研究が加速すると考えられる。
	産業化	×	—	特に目立った活動は無い。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 引用資料

- 1) M. Knoll and E. Ruska, Z. Tech. Phys., 12 (1931) 389.
- 2) A.V. Crewe et al., Science., 168 (1970) 1338.
- 3) R. Erni et al., Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 096101.
- 4) H. Sawada et al., J. Electron Microsc., 58 (2009) 357.
- 5) R. Ishikawa et al., Nature Mater., 10 (2011) 178.
- 6) A. Tonomura, "Electron Holography", (North-Holland, 1995)
- 7) K. Koike and K. Hayakawa, Jpn. J. Appl. Phys., 23 (1984) L187.
- 8) V. Heinzmann et al., Z. Phys. 251 (1972) 354.
- 9) J. Kirshner et al., Phys. Rev. Lett., 47 (1981) 614.
- 10) T. Nakanishi et al., Phys. Lett., A158 (1991) 345.
- 11) D. T. Pierce et al., Phys. Lett., A51 (1975) 465.
- 12) N. Yamamoto et al., J. Appl. Phys., 103 (2008) 064905.
- 13) M. Kuwahara et al., J. Phys. Conf. Series, 298 (2011) 012016
- 14) E. Bauer et al., Rep. Prog. Phys., 57 (1994), 895.
- 15) T. Duden and E. Bauer, Rev. Sci. Inst., 66 (1995) 2861.
- 16) M. Suzuki et al., Appl. Phys. Express., 3 (2010) 026601.
- 17) M. Kuwahara et al., Appl. Phys. Lett., 101 (2012) 033102.
- 18) M. Kuwahara et al., Microscopy, 62 (2013) 607.
- 19) T. LaGrange et al., Acta Matter., 55 (2007) 5211.
- 20) P. Baum and A. H. Zewail, Nature, 462 (2009) 902.

- 21) M. Uchida and A. Tonomura, *Nature*, 464 (2010) 737.
- 22) J. Verbeeck et al., *Nature*, 467 (2010) 301.
- 23) K. Saitoh et al., *J. Electron Microsc.*, 61 (2012) 171.
- 24) H. Minoda, T. Okabe, Y. Inayoshi, T. Miyakawa, Y. Miyauchi, M. Tanokura, E. Katayama, T. Wakabayashi, T. Akimoto and H. Sugi, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 405 (2011) 651-656.
- 25) Jong Min Yuk, Jungwon Park, Peter Ercius, Kwanpyo Kim, Daniel J. Hellebusch, Michael F. Crommie, Jeong Yong Lee, A. Zettl, A. Paul Alivisatos, *Science* 336 (2012) 61-64
- 26) N.de Jong, D.B.Peckys, G.J.Kremers, D.W.Piston, *PNAS* 106 (2009) 2159-64.

3.5.10.3 放射光・X線・粒子線

(1) 研究開発領域の簡単な説明

放射光 X 線や X 線自由電子レーザー、陽電子の利用において、半値全幅 100 nm 以下に集光したナノビームを用いた局所領域の観察技術、および、100 nm より高空間分解能を有するイメージング技術などを研究開発する領域である。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

(a) 放射光・X線

放射光実験は、「物質と光の相互作用」に起因する現象を捉える解析プローブであり、電子顕微鏡や SPM 等と補い合うナノ計測技術と位置づけられる。まず、原子配列の解析に着目すると、電子顕微鏡や SPM は選択したナノ領域を直接見る観察技術であるが、X 線回折や X 線吸収微細構造(XAFS)では、X 線の照射領域に含まれる全てのナノ領域の平均的な原子配列の情報を逆格子空間の点や線として得る。また、光電子分光や磁気吸収などの放射光分光実験で得る物性値も、一般的には、照射領域平均の電子状態や磁気状態を与えるものである。このように、物質と光の相互作用という微視的な観測であるにも関わらず、照射領域の平均的な状態を解析することは、物質が巨視的に示す物性の理解に重要な知見を与えている。

一方、ナノ微粒子や表面・界面ナノ構造など、材料にナノスケールの不連続性を与えると新しい機能が生まれる。放射光実験はこれらのナノ解析課題に対しても X 線回折条件の制御や共鳴吸収条件を用いた元素選択性などを利用できる。例えば、斜入射 X 線回折による表面ナノ構造解析¹⁾、X 線反射実験による多層膜積層構造解析²⁾などの技術がある。さらに、基板表面に単原子層に満たない厚さで形成された金属ナノ構造の磁性³⁾や、超格子ヘテロ構造の界面 1 原子層に生じた磁気分極⁴⁾についても、元素選択性を有する XMCD 分光によって明らかにされた。測定できる対象は、ますます広範になっており、さらなる高感度化、高精度化が求められる。

さらに、スピントロニクスをはじめとする材料研究分野からは、100 nm 以下の領域を選択した構造・物性の解析や、高解像度の X 線イメージングの開発が要請され、放射光による先端計測技術の中心的な動向となっている。このほか、永久磁石材料、誘電体材料、電池材料、さらには、構造材料に至るまで、幅広い材料で材料機能を決定づけているナノ～メソスコピックなスケールでの不連続性および不均一性を計測しなければならない。100 nm の領域の端面の観測には 10 nm 以下の分解能が求められ、さらには、1nm をめざす空間分解能を有する計測技術の開発が必要とされている。

(b) 陽電子消滅法

結晶性材料中の原子空孔・空孔クラスター・マイクロボイド、あるいは非晶質材料中の分子間空隙・自由体積は、さまざまな材料特性（力学特性・電気的特性・分離特性・吸蔵特性等）に影響を及ぼす主要因となることが多く、それ故、ナノテク材料の開発や機能劣化の研究では、これらの極微小な空隙の評価が重要である。一般にこれら極微小空隙の評価は困難とされているが、陽電子やポジトロニウム（陽電子と電子の結合状態）をプローブとして、高感度での解析が可能である。

陽電子は、自然界にはほとんど存在しないが、放射性同位元素や加速器等を用いて生成し、材料評価に利用できる。材料中に入射した陽電子は、電子と対消滅して高エネルギーの光（消滅 γ 線）を放出するが、陽電子が消滅するまでの時間（陽電子寿命）や消滅する際に放出される γ 線のエネルギー分布は微小空隙のサイズや濃度と関係する。これらの原理に基づいた材料分析手法は、陽電子寿命測定法、ドップラー広がり測定法などと呼ばれるが、一括りに陽電子消滅法とも呼ばれている。なお、陽電子消滅法は、微小空隙だけでなく電子状態や不純物状態の評価にも頻繁に用いられている。

〔これまでの取り組み〕

（a）放射光・X線

我が国の放射光施設は、1974年に完成した田無のSOR-RING（第一世代）に始まり、1982年にKEKのPhoton Factory（第二世代）、1983年のUVSOR（第二世代）、1997年のSPring-8（第三世代）へと発展してきた。放射光X線の集光技術は、当初、主にイメージングや局所領域のX線蛍光分析を目的として開発された。軟X線では1980年代に100 nmのナノビーム集光が達成されたが、軟X線の集光で広く用いられるフレネルゾーンプレート（FZP）を製作する微細加工技術の進歩に応じて徐々に発展し、現在は最小ビーム径10 nmが得られている。また、硬X線の集光については、1990年頃に1 μ m以下のサブマイクロビームが生成できるようになると⁵⁾、1994年にはガラスキャピラリを用いて50 nm⁶⁾、2009年にはSPring-8において、当時、世界最小のX線ビームとなる7 nmを達成した⁷⁾。2013年にはドイツのグループが最小ビーム径を5 nmに更新している⁸⁾。このような10 nmを切るX線ナノビーム形成は、放射光の光源性能の向上、および、その光源性能を活かす光学素子の技術進歩によってもたらされた。

一方、ナノ計測にとってビーム径の微小化とともに特筆すべき進歩は、集光ビーム強度の向上であり、ナノビームを計測に応用する際に重要な技術要件である。例えば、1984年において300 nmの軟X線集光ビームに対する光量は毎秒 10^6 フォトン程度であったが、最近の第三世代光源では約100 nmに対して約 10^9 フォトンが得られるようになった。これは、1984年に比べて実効的に1,000倍以上も明るい軟X線ナノビームを意味し、分光実験などの幅広いナノ計測への応用が可能となったことを示している。このようにナノビームの応用計測を展開する取り組みとして、SPring-8では2010年に文部科学省「低炭素社会構築に向けた研究基盤ネットワーク整備事業」のグリーン・ナノ放射光分析評価拠点の支援を得て、2本の共用X線ビームライン（BL37XU、BL39XU）にK-Bミラーを集光光学系に採用した硬X線ナノビーム利用環境を整備した⁹⁾。これらのビームラインでは、前述の7 nmビームを形成した集光光学系で培った基盤技術を用いながらも、安定に生成可能なビームサイズとして50～100 nmの硬X線ナノビームを分光実験等に利用することを目指したもので、X線蛍光分析やX線磁気円二色性（XMCD）を含む吸収分光実験に利用されている。一方、VUV～低エネルギー側の軟X線領域では、2012年に第三世代放射光源へのアップグレードが完了したUVSORにおいて、透過型軟X線顕微鏡であるSTXM装置（Bruker製）が導入された¹⁰⁾。また、PFにおいてもSTXMが開発され、ビーム径約100 nmで実施したイメージングの結果が発表されている¹¹⁾。SPring-8の軟X線では、東京大学アウトステーション（BL07LSU）において、軟X線ナ

ノビーム (～70 nm) を利用した光電子分光実験装置が開発され、ナノ ESCA が測定できるようになった¹²⁾。さらに、2012 年度よりスタートした文部科学省「元素戦略プロジェクト (研究拠点形成型)」の磁性材料研究拠点において、永久磁石材料の組織別ナノ解析が要請されたことに対応し、BL25SU に全面的な改造を施してナノビームの利用基盤が整備された¹³⁾。

ここまでは FZP や K-B 集光素子を用いて生成したビーム径 100 nm 以下のナノビームを利用する場合について述べたが、放射光ビームを直接集光することなく 100 nm より高空間分解能を有するイメージング技術の開発も進んでいる。まず、X 線コヒーレンスを利用した X 線コヒーレントイメージングは、コヒーレント X 線を試料に照射した際に遠方で観測される回折パターンに位相回復計算を実行して試料像を得る手法である¹⁴⁾。X 線によるイメージング技術としては、最高空間分解能 2 nm が、SPring-8 の BL29XUL で得られている¹⁵⁾。透過配置では、試料電子密度分布が再構成され、反射配置では、歪み分布が再構成される^{16), 17)}。また、X 線コヒーレント回折に、位相情報を与える参照光を組み合わせた X 線フーリエ変換ホログラフィーがある^{18), 19)}。この方法では、軟 X 線を十分に遮光することが可能な金属膜 (たとえば、Au : 約 2 μ m) に、高アスペクト比で加工した参照光源生成用のピンホールを必要とする。このピンホール径が参照光源サイズに相当し、最終的なイメージング像の空間分解能の支配因子となっている。また、参照光が小さすぎるとホログラフィー像が暗くなるため、実際の実験では空間分解能 40 nm 程度が報告されている²⁰⁾。さらなる空間分解能を目指すには、光源の光強度と光の質の向上が望まれる。

一方、導電性のあるバルク表面を高空間分解能で観察するナノ計測として、光電子顕微鏡がある²¹⁾。光電子励起に放射光 X 線を用いれば、その吸収分光を利用した元素コントラストイメージや、円偏光を用いて XMCD による元素別磁気イメージングが可能となる。空間分解能は、静電レンズを用いた簡易タイプで約 100 nm²²⁾、磁場レンズやエネルギーフィルターを有する高性能タイプで約 20 nm が目安である²³⁾。光電子顕微鏡としては、更に高空間分解能の収差補正型もあるが、放射光での応用には至っていない。

また、これまで放射光と SPM を融合したナノ計測の試みも行われている^{24)・28)}。これらの方法は、放射光 X 線を試料上の比較的広域に照射しつつも、情報を取り出す領域を SPM の探針で限定し、高空間分解能のイメージングを行う方法である。主な目的は元素コントラストのイメージングであり、最高で 4 nm の空間分解能が得られている。さらに、SPM 探針付近に照射する軟 X 線としてナノビームを用いたシステムがスイスの放射光施設(SLS)の HP で紹介されている²⁹⁾。結果は示されていないが、その活用に興味を持たれる。日本での SPM と放射光の融合の取り組みは、まだ緒に就いたばかりであり、今後の研究開発課題である。

以上、これまでの放射光ナノ計測を、X 線ナノビームによるナノ計測、結像等による高空間分解イメージング、放射光と SPM の組み合わせによるナノ計測、と 3 つに分類して概観した。放射光によるナノ計測については、参考文献も加えつつ^{30)・34)}、表にまとめた。

計測手法 (略称)	空間分解能		光学系など	検出配置 /観察対象	三次元 観察法	特徴など	文献	
	現在の 最高値	一般的 な値						
X 線ビーム集光技術	~5 nm	50 ~ 100 nm	K-B ミラー※6	—	—	X 線光学としての挑戦的研究であり、近い将来にナノ計測への利用が期待される。	9) Mimura_Nature Phys (2009) 30) Ruhlandt_AIPAd (2012) 8) Döring_OptExp(2013)	
走査 X 線顕微鏡 (SXM※9)	10 nm	30 ~ 100 nm	走査型	透過	CT※15	FZP※9 (軟 X 線、硬 X 線)、または、K-B ミラー (主に、硬 X 線) により、X 線ナノビームを生成。走査型イメージング以外に、局所分光や回折への応用が重要である。検出配置のうち、全電子収量法は主に軟 X 線ナノビームで、また、X 線回折は硬 X 線ナノビームを使用する。	31) Raabe_RSI(2008) 32) Chao_OptEx(2012)	
	—	~ 100 nm (予想値※10)		蛍光 X 線	—		-	
	—	~ 100 nm		全電子収量				33) Nolle_RSI(2012)
	—	~ 70 nm		光電子分光				12) Horiba_RSI(2011) 34) Nagamura_APL (2013)
	—	~ 100 nm (予想値※10)		X 線回折				-
透過型 X 線顕微鏡 (TXM※10)	10 nm	30 - 100 nm	結像型	透過	CT	透過実験に適した試料にしか適用できないが、拡大レンズを通して検出器上に二次元像を結像するため、走査型に比べ 100 倍程度の高効率イメージングが可能。	31) Chao_OptEx(2012)	
X 線コヒーレントイメージング (CDI※11)	2 nm	20 ~ 100 nm	透過配置の回折	コヒーレント X 線回折	CT	コヒーレント X 線を試料に照射した際に遠方で観測される回折パターンに位相回復計算を実行して試料像を得る。透過配置では、試料電子密度分布が再構成され、反射配置では、歪み分布が再構成される。	14) Miao_Nature(1999) 15) Takahashi_PRB(2010)	
	~ 20nm	40 ~ 100 nm	反射配置の回折		ロッギング		16) Pfeifer_Nature(2006) 17) Hruszkewycz_Nano-Lett(2012)	
X 線フーリエ変換ホログラフィー (X-ray FTH※12)	~ 40 nm	50 ~ 100 nm	透過配置	透過	—	空間分解能は参照光用ピンホールの有効径で決まる。投影された二次元像をフーリエ変換するだけで実像が得られる。Lense less イメージングとも呼ぶ。	18) Aoki_JJAP(1974) 19) Eisebitt_Nature(2004) 20) Awaji_APEX(2010)	
X 線光電子顕微鏡 (X-PEEM※13)	~20 nm	40 - 80 nm	静電・磁場レンズによる電子顕微鏡	試料表面	—	X 線照射によって表面から放出された光電子を電子レンズで拡大投影。円偏光 X 線と組み合わせた元素別磁区観察やその時分割実験に応用されている。	21) Anders_RSI(1999) 22) Yasuhara_APL(2009)	
放射光走査型トンネル顕微鏡 (SR-STM※14)	4 nm	30 - 100 nm	トンネル電流	試料表面	—	原子スケールの分解能を有する STM と放射光 X 線吸収を組み合わせた手法。	25) Eguchi_APL(2006) 26) Okuda_PRL(2009) 27) Saito_JJAP(2006) 28) Saito_JSR(2006)	

・ X 線自由電子レーザー

SACLA(SPring-8 Angstrom Compact free electron LAser)³⁵⁾ は、2012 年 3 月に共用が開始され、現在、世界最短波長の XFEL として利用されている。SACLA では強力な短パルス X 線の照射が試料に対して破壊的ダメージを与えるが、破壊前の情報が散乱された X 線によって検出されるため、放射光や電子顕微鏡などで従来から行われている長時間照射による観察方法と異なり、ダメージを受けていない構造や物性を明らかにできる。SACLA の X 線レーザーは、最短 10 fs 以下のパルスで、かつ、コヒーレントな X 線であり、1 パルスの光子数は 10^{11} 個に達する。高精度の K-B ミラーにより、 $\sim 1 \mu\text{m}$ の集光ビームが標準的に利用され、さらに、約 50 nm のナノビーム生成が報告されている³⁶⁾。XFEL は、ビーム集光によるナノ観察の他に、XFEL がコヒーレントであることを活用した X 線コヒーレント回折法によるイメージングに有利である。最近では大阪大学の高橋らによって、空間分解能 10 nm より詳細な像が得られている³⁷⁾。SACLA の中心エネルギーは約 10 keV であり、範囲として 4~15 keV が利用されている。現在は、硬 X 線のみ利用であるが、SACLA では軟 X 線ビームライン(BL1)の計画が進められている。従来、材料分野において放射光を利用してきた研究者にも、材料の構造や物性を解明する上で SACLA の利用を考える機会が増えた。まだ世界的で 2 機しか稼働していない XFEL を先導的に利用する好機と考えられる。

(b) 陽電子消滅法

結晶性材料中の原子空孔・空孔クラスター・マイクロボイド、あるいは非晶質材料中の分子間空隙・自由体積は、さまざまな材料特性（力学特性・電気的特性・分離特性・吸蔵特性等）に影響を及ぼす主要因となることが多く、それ故、ナノテク材料の開発や機能劣化の研究では、これらの極微小な空隙の評価が重要である。一般にこれら極微小空隙の評価は困難とされているが、陽電子やポジトロニウム（陽電子と電子の結合状態）をプローブとして、高感度での解析が可能である。

陽電子は、自然界にはほとんど存在しないが、放射性同位元素や加速器等を用いて生成し、材料評価に利用できる。材料中に入射した陽電子は、電子と対消滅して高エネルギーの光（消滅 γ 線）を放出するが、陽電子が消滅するまでの時間（陽電子寿命）や消滅する際に放出される γ 線のエネルギー分布は微小空隙のサイズや濃度と関係する。これらの原理に基づいた材料分析手法は、陽電子寿命測定法、ドップラー広がり測定法などと呼ばれるが、一括りに陽電子消滅法とも呼ばれている。なお、陽電子消滅法は、微小空隙だけでなく電子状態や不純物状態の評価にも頻繁に用いられている。

【国内外の施設の状況】

わが国には、高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリー、SPring-8、自然科学研究機構分子科学研究所極端紫外光研究施設、広島大学放射光科学研究センターをはじめいくつかの放射光実験施設があり、種々の研究に利用されている。SPring-8 の X 線自由電子レーザー SACLA では世界最短波長の X 線レーザーの発振に成功し、利用研究がスタートしている。他に産業利用を主眼とした佐賀県立九州シンクロトロン光研究センターが運用されている。また、新たに中部シンクロトロン光利用施設が建設されている。放射光以外では、中性子源、ミュオン源が J-PARC において稼働開始している。

J-PARC のミュオンビームは世界トップクラスの大強度を誇る。現在、正ミュオンをエネルギー可変の超低速ビームとして取り出す装置の開発が進んでいる。

陽電子は放射線管理区域さえあれば大学の研究室や企業の研究所でも使用可能で、陽電子寿命測定、2光子角相関測定、ドップラー広がり測定、低速陽電子ビームを用いた測定などが行われている。しかし高強度低速陽電子ビームを生成するためには、加速器や原子炉を用いた施設が必要である。加速器を利用した施設は、産業技術総合研究所や高エネルギー加速器研究機構で稼働している。高エネルギー加速器研究機構では反射高速陽電子線回折が実用的なレベルで実現され、物質表面の解析方法として注目されている。原子炉を用いる高強度低速陽電子ビームは現時点ではわが国には存在しない。

国外においては、欧米を中心に高輝度化のための第3世代の放射光施設が稼働開始、あるいはその建設が進んでいる。次のような施設がある。

- スペイン ALBA (試運転中)
- ドイツ ANKA (2002 年から稼働)
- デンマーク ASTRID/ASTRID2 (ASTRID は稼働中、ASTRID2 は建設中)
- イタリア DAΦNE (1998 年から稼働)
- 英国 Diamond (2007 年から稼働中)
- ドイツ DORIS・ (1993 年から稼働中)
- イタリア Eletta (稼働中)
- フランス ESRF (欧州最大強度、稼働中)
- スウェーデン MAXIV (稼働中、新たな施設が 2015 年から稼働予定)
- スイス SLS (稼働中)
- ポーランド SOLARIS (建設中)
- フランス SOLEIL (稼働中)
- 米国 Argonne, Advanced Photon Source (稼働中)
- 米国 Brookhaven, NSLS (稼働中)
- 米国 Brookhaven, NSLS-II (2015 年稼働予定)
- 上海放射光施設 SSRF
- 台湾 TLS (1993 年から稼働、2005 年にアップグレード)
- 台湾 TPS (2013 年稼働開始予定)
- 韓国 PLS (1995 年稼働開始)

現在、稼働中の XFEL として、SACLA の他に米国のスタンフォードの SLAC がある。また、ドイツ、韓国、スイスで建設中であり、中国では計画中となっている。軟 X 線では、ドイツにおいて FLASH II が波長 0.8 nm (1 keV) を設計値として建設中である。なお、FLASH-I に相当する FLASH は、EUV 領域 (波長 10 ~ 40 nm) の光源であり、理化学研究所が建設した XFEL の試験機 (SCSS) と同様の波長帯である。

ミュオンビームは英国のラザフォード研究所やカナダのトライアンフで利用が可能である。陽電子ビームとして世界最大強度を持つのはミュンヘン工科大学に設置された原子炉を利用するものである。それ以外に、米国のアルゴンヌで高強度低速陽電子ビームが生成されている。カナダのマクマスター大学では、原子炉を用いた高強度低速陽電子ビームが建設中である。

〔今後必要となる取り組み〕

SPring-8 の共用開始から約 17 年が経過した現在、各国の放射光建設ラッシュを迎えており、光源の国際情勢に対してより注視が必要になっている。台湾に建設中の放射光施設（TPS: Taiwan Photon Source）が、極低エミッタンスの先端光源になる予定であるなど、アジア圏だけ概観しても我が国の放射光軟 X 線の優位性は失われつつある。我が国には、3 GeV クラスの第 3.5 世代軟 X 線リングが無く、高エネルギーの SPring-8 と、低エネルギーの UVSOR-II の間にあるべき高輝度光源が欠落している。より高いレベルの先端計測を産業イノベーションに活かすためにも、3 GeV クラスの中型高輝度放射光の実現が求められる。さらに、SPring-8 についても、現在よりも格段に低エミッタンスのリングへの改造が準備・検討されている。放射光によるナノ計測の重要性が増すなか、「他国で見えるものが国内放射光施設では見えない」という事態に陥ることは、材料評価技術の低迷から材料開発速度の低下や、産業イノベーションへのヒントを見逃すなどの深刻な弊害をもたらすと懸念されるため、放射光ナノ計測の一層の技術開発と利用が重要である。

既存の技術を越える野心的な開発も必要である。材料の特徴サイズのスケールダウンに関するロードマップを参照しつつ、「観たいときに観ることが可能なナノ計測技術」の開発を先取りする取り組みが求められる。さらに、放射光ナノ計測と、SPM や電子顕微鏡など、他のナノ解析とのベンチマークを行いながら放射光ナノ計測の位置づけと役割を明確化した利活用と開発が肝要である。

陽電子消滅については、バルク法やビーム法の市販化装置の開発や普及がいつそう進むと予測される。一方で、陽電子消滅法の測定データから、材料分析情報を正しく得るためには、経験を要す場面も多いため、講習会等を通して正しいデータ解析法・解釈法の習得機会の確保、陽電子消滅の専門家（研究者）の継続的な育成が重要である。なお、日本国内では、日本陽電子科学会等が学会誌発行や研究交流会等を通して、ユーザーのすそ野を広げる取り組みを行っている。ナノテク材料の性能と、微小空隙との関連性を明らかにするためには、陽電子消滅法と他手法との複合解析や、材料開発および材料評価それぞれの専門家（研究者）との共同研究を促進することが有効である。

（３）科学技術的・政策的課題

放射光によるナノ計測は、今後とも分光・回折と組み合わせた物質材料解析手法として、空間分解能と精度向上が見込まれる。特に、XFEL をはじめとして、高いコヒーレンスを利用したイメージングに分光を組み合わせた計測技の発展が期待される。一方、これまでの発展に光源性能の向上が欠かせなかったように、今後のナノ計測の発展過程においても光源性能の進歩が大きく関与すると予想される。従って、先端的な放射光施設が世界各所に建設されて光源性能の国際競争が激化するなかで、計測技術開発と合わせて我が国の放射光の光源性能のアップグレードが不可欠である。

陽電子消滅法であるが、現在までのところ、原子空孔を高感度に評価可能な手法は、陽電子消滅法だけであり、また計測法の進化も相まって、今後いつそうナノテク材料評価への利用ニーズが高まることが予想される。国内には、低速陽電子ビームや陽電子マ

マイクロビームを用いた測定装置が数台あるもの、外部ユーザーのニーズには既に十分応えきれていない状況にある。このため、測定装置の性能強化、および、測定データ量産体制の構築、を支援することが望ましい。

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

まず、国内では SPring-8 の共用 BL では、硬 X 線、および、軟 X 線のナノビーム化が急ピッチで進められていることが挙げられる。材料研究者がかなり標準的なナノ計測技術として X 線ナノビームを利用できるようになりつつある。「元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞磁性材料研究拠点」では、希少元素フリーの革新的永久磁石を創製するための解析ツールとして軟 X 線ナノビームの利用を必須とするなど、今後は大型プロジェクトのなかでの放射光ナノビームや高空間分解イメージング技術利用の重要性が増していくと予想される。

次に陽電子消滅法の動向について述べる。

(a) 市販化装置の開発および普及：数年前に低速陽電子ビーム法の測定装置が開発された。また、バルク法の測定装置（産総研）が開発中である。今後、これら装置の普及がすすむと予測される。

(b) 高強度ビーム利用施設の外部公開：電子リニアック（産総研・高エネ研）、原子炉（京大原子炉研究所）を用いての高強度低速陽電子ビームの発生、利用技術の高度化、および外部ユーザーへの利用がいつそうすすむと予期される。

(c) 陽電子マイクロビーム計測法：原子空孔のマクロスケール分布解析をシームレスに行うことで、材料劣化やメカニズムの解明がすすむと考えられる。（産総研・日本原研機構・千葉大）。ただし、データ量産体制の構築が重要である。

(d) その場計測法：一般に低速陽電子ビームは、真空中でのみで利用可能である。最近、マイクロビームを薄膜の真空窓を通して大気中で利用する技術が開発された。これにより、ナノテク材料を、実用環境を模擬した環境下にて評価（その場測定）することが可能となりつつある（産総研）。ただし、データ量産体制の構築が重要である。

(e) 新技術の開発：表面回折法による構造解析（KEK・日本原研機構）、偏極ビームによるスピントロニクス・磁性材料への応用（日本原研機構）が、新評価技術として発展しつつある。

（５）キーワード

陽電子消滅、微小空隙、格子欠陥、点欠陥、原子空孔、空孔クラスター、ナノボイド、マイクロボイド、自由体積、分子間空隙、電子運動量分布、不純物析出、機能性材料、先端材料、電子デバイス、磁性材料、表面回折、表面・界面・薄膜分析、陽電子マイクロビーム、陽電子スピン偏極ビーム

（６）国際比較

放射光

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	欧米と同様に基礎研究分野は物質、生命分野の多岐にわたり、ハイインパクトジャーナルにも多数掲載されている。基礎研究は、SPring-8、Photon Factory、UVSOR、HiSOR、さらに、SACLAなどで活発である。立命館など大学付置の放射光施設では、学生教育での利用も重視されている。一方、国内の軟X線ビームラインは、各国で建設ラッシュとなっている中型放射光施設と比較してハード面での競争力を失いつつある。そのため、新たな中型放射光建設の必要性を含め、将来計画が議論されている ^{38, 39)} 。
	応用研究・開発	◎	↑	SPring-8では、ナノビーム計測が推進され、その利用基盤整備が進んでいる。これらの整備が、グリーンナノイノベーションプロジェクトや元素戦略プロジェクトなど、社会要請に基づき進展したことから、ナノビーム計測の重要性が確認される。また、ナノ計測の更なる性能向上を可能にするアップグレード(SPring-8 II)が計画されている ⁴⁰⁾ 。SACLAでは、利用技術開発の面でも斬新でハイインパクトの成果が著名誌から数多く発表されている。
	産業化	◎	↑	SPring-8の産業利用率は約20%であり、大型放射光施設のなかでも高い水準を保っている。また、自動車部品、食品、健康製品など幅広い産業にわたり利用され製品開発への貢献が認められる点や、さらに、複数の企業または企業共同体が専用ビームラインを有する点で欧米との差異が認められる。佐賀県立九州シンクロトロン光研究センターでは産業利用の割合が50%を越え、また、あいちシンクロトロン光センターの稼働で産業界の利用機会が増えたにも関わらず、SPring-8の産業利用は成果占有課題を中心に利用が伸びている。
米国	基礎研究	◎	→	生命、環境、材料など、多分野に渡り活発である。
	応用研究・開発	◎	↑	ALSでは軟X線のナノ計測が重点化され、その開発と利用研究が盛んである。硬X線領域では大型放射光施設であるAPSが利用されている、また、3 GeVの低エミッタンス中型放射光 NSLS-IIの建設が進んでおり、2015年からの運転が予定されている。一方、XFEL施設SLACが稼働している。
	産業化	○	→	欧州と同様に創薬企業によるタンパク質結晶の構造解析での利用が顕著である。例として、APSにおける課題のうち、生物・ライフサイエンス系の課題の割合は36%であり、2番目に多い材料科学の19%と比較しても差は顕著である。産業分野での利用は比較的少なく、APSにおいても12%であるが ⁴¹⁾ 、この値は企業から大学等への委託研究の場合が含まれていない可能性もある。
欧州	基礎研究	◎	↑	ナノ計測、および、時分割実験によるダイナミクス研究などで高いレベルの基礎研究が行われている。
	応用研究・開発	◎	↑	長らく大型放射光ESRFやBESSY-IIが欧州の放射光研究を牽引してきたが、近年はSLS、SOLEIL、DIAMONDなどの中型施設の性能と成果が際立っている。このような中型リングは、ESRF等の大型施設に比べて建設・運転コストが低いため、各国が独自の放射光を所有することが可能になったと分析される。特記すべきは、中型放射光であるにも関わらず、軟X線～硬X線領域の高輝度放射光を利用することを可能にしたのは、日本の真空封止アンジュレーターの技術である。また、建設中のMAX-IVにおけるリングのエミッタンス特性は0.33 nmradと桁違いに高性能である。低エミッタンスであることは、ナノ計測に極めて重要な性能であり、今後のビーム性能や研究成果が注目される。また、ハンブルグに建設中のEuro-XFELは2017年に利用が予定されており、日・米のXFEL利用研究に対するキャッチアップが始まることになる。
	産業化	○	→	米国と同様に創薬企業によるタンパク質結晶の構造解析での利用が中心である。産業利用をプロモートしようとする政策についての情報もあるが、欧州全体をみれば多数の放射光があるので、一概に傾向を評価することは難しい。

中国	基礎研究	○	↑	中国の放射光施設 (SSRF、BSRF、NSRL、SSRL) に関しては、放射光施設HPの英語コンテンツが希薄であり、成果や技術情報の詳細を知ることが難しいが、上海放射光施設 (SSRF) ではハイインパクトジャーナルへの掲載数にも確実な伸びが見られる。
	応用研究・開発	△	↑	SSRFでは、ナノイメージング技術であるSTXMを重点技術と位置づけていると。また、XFELの建設計画がある。
	産業化	△	→	主として医薬品業界の利用が中心とされているが、産業利用の割合は採択課題の2%前後である。
韓国	基礎研究	△	↑	放射光施設PLS-IIを有しているPALにおける論文発表数は確実に伸びている。2011年にPLSを閉鎖し、アップグレード施設としてPLS-IIを供用したなかで、課題数や利用者数に伸びが見られることから、アップグレードが順調に進んだ効果と考えられる。各年、Nature Comm. や Nature Physicsなど、ハイインパクトの論文が5本程度発表されており、化学、物理、材料などの研究が中心。
	応用研究・開発	○	↑	2013年現在、PLS-IIにおいて研究者66名に対して技術者52名と、SPring-8に比べて技術者の割合が多い組織が特徴である。計画どおりであれば、2013年末から軟X線ナノ計測ステーション(BL-10A)の運用が開始されている。市販のSTXM装置が導入され20~100 nmのナノ計測が予定されている。XFELについては、加速電圧10 GeV、全長1100 m のPAL-XFELの建設が2013年から始まっている。
	産業化	×	↓	PALの産業利用者の絶対数は横ばいであり、2012年の産業利用者数は総数に対して約3%にまで低下している。

陽電子

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	高強度陽電子ビーム発生、マイクロビーム法、スピン偏極ビーム法、表面回折分析法、計測装置開発。
	応用研究・開発	◎	↑	機能性材料・先端材料への応用が増加。陽電子寿命値の標準物質の開発。バルク法の市販化装置を開発中。
	産業化	○	↑	ビーム法の寿命測定装置が市販化され、分析会社にて評価が実施されている。
米国	基礎研究	○	→	高強度陽電子ビーム発生、マイクロビーム法。
	応用研究・開発	△	→	目立った活動は無い。
	産業化	△		陽電子ビーム発生装置、陽電子蓄積装置が市販化され、日・豪・欧・米・中で導入利用されている。
欧州	基礎研究	◎	→	高強度陽電子ビーム発生、マイクロビーム法、計測装置。
	応用研究・開発	◎	↑	機能性材料・先端材料への応用が増加。
	産業化	×	→	目立った活動は無い。
中国	基礎研究	○	↑	高強度陽電子ビーム発生法、マイクロビーム発生法、計測装置。
	応用研究・開発	○	↑	機能性材料・先端材料への応用が増加。
	産業化	×	→	目立った活動は無い。
韓国	基礎研究	×	→	目立った活動は無い。
	応用研究・開発	×	→	目立った活動は無い。
	産業化	×	→	目立った活動は無い。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トренд

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 引用資料・参考資料

引用資料

- 1) 桜井健次, ぶんせき 第2号, 86 (2010)
- 2) N. Awaji, S. Ozaki, J. Nishino, S. Noguchi, T. Yamamoto, T. Syoji, M. Yamagami, A. Kobayashi, Y. Hirai, M. Shibata, K. Yamaguchi, K.Y. Liu, S. Kawado, M. Takahashi, S. Yasuami, I. Konomi, S. Kimura, Y. Hirai, M. Hasegawa, S. Komiya, T. Hirose, and T. Okajima, Jpn. J. Appl. Phys. 39, L1252 (2000).
- 3) P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, Nature 416, 301 (2002).
- 4) J. Garcia-Barriocanal, J. C. Cezar, F. Y. Bruno, P. Thakur, N. B. Brookes, C. Utfeld, A. Rivera-Calzada, S. R. Giblin, J. W. Taylor, J. A. Duffy, S. B. Dugdale, T. Nakamura, K. Kodama, C. Leon, S. Okamoto and J. Santamaria, Nature Communications 1, 82 (2010).
- 5) 竹中久貴, 放射光 23, 164 (2010).
- 6) D. H. Bilderback, S. A. Hoffman, and D. J. Thiel, Science 263, 201 (1994).
- 7) H. Mimura, S. Handa, T. Kimura, H. Yumoto, D. Yamakawa, H. Yokoyama, S. Matsuyama, K. Inagaki, K. Yamamura, Y. Sano, K. Tamasaku, Y. Nishino, M. Yabashi, T. Ishikawa, and K. Yamauchi, Nature Physics, Nature Physics 6, 122 (2010).
- 8) F. Döring, A. L. Robisch, C. Eberl, M. Osterhoff, A. Ruhlandt, T. Liese, F. Schlenkrich, S. Hoffmann, M. Bartels, T. Salditt, and H. U. Krebs, Optics Express 21, 19311 (2013).
- 9) 文部科学省「低炭素社会構築に向けた研究基盤ネットワーク整備事業」グリーン・ナノ放射光分析評価拠点 (独立行政法人理化学研究所、研究グループリーダー 石川哲也)
- 10) <https://www.uvsor.ims.ac.jp/beamlines/4U/bl4u.html>
- 11) Y. Takeichi, N. Inami, H. Suga, K. Ono, and Y. Takahashi, Chemistry Letters 43, 373 (2014).
- 12) K. Horiba, Y. Nakamura, N. Nagamura, S. Toyoda, H. Kumigashira, M. Oshima, K. Amemiya, Y. Senba, and H. Ohashi, Rev. Sci. Instrum. 82, 113701 (2011).
- 13) 中村哲也, 小谷佳範, 高田昌樹, 仙波泰徳, 大橋治彦, 後藤俊治, SPring-8 利用者情報誌 19, 102 (2014).
- 14) J. Miao, P. Charalambous, J. Kirz, and D. Sayre, Nature (London) 400, 342 (1999).
- 15) Y. Takahashi, Y. Nishino, R. Tsutsumi, H. Kubo, H. Furukawa, H. Mimura, S. Matsuyama, N. Zettsu, E. Matsubara, T. Ishikawa, and K. Yamauchi, Phys. Rev. B 80, 054103 (2009).

- 16) Mark A. Pfeifer, Garth J. Williams, Ivan A. Vartanyants, Ross Harder, and Ian K. Robinson, *Nature* **442**, 63 (2006).
- 17) S. O. Hruszkewycz, M. V. Holt, C. E. Murray, J. Bruley, J. Holt, A. Tripathi, O. G. Shpyrko, I. McNulty, M. J. Highland, and P. H. Fuoss, *Nano Lett.* **12**, 5148 (2012).
- 18) S. Aoki and S. Kikuta, *Jpn. J. Appl. Phys.* **13**, 1385 (1974).
- 19) S. Eisebitt, J. Lüning, W. F. Schlotter, M. Lörger, O. Hellwig, W. Eberhardt, and J. Stöhr, *Nature (London)* **432**, 885 (2004).
- 20) N. Awaji, K. Nomura, S. Doi, S. Isogami, M. Tsunoda, K. Kodama, M. Suzuki, and T. Nakamura, *APEX* **3**, 085201 (2010).
- 21) S. Anders, H. A. Padmore, R. M. Duarte, T. Renner, T. Stammli, A. Scholl, M. R. Scheinfein, J. Stöhr, L. Séve, and B. Sinkovic, *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 3973 (1999).
- 22) BL25SU, <http://www.spring8.or.jp/>.
- 23) R. Yasuhara, K. Fujiwara, K. Horiba, H. Kumigashira, M. Kotsugi, M. Oshima, and H. Takagi, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 012110 (2009); BL17SU, <http://www.spring8.or.jp/>.
- 24) T. Matsushima, T. Okuda, T. Eguchi, M. Ono, A. Harasawa, T. Wakita, A. Kataoka, M. Hamada, A. Kamoshida, Y. Hasegawa and T. Kinoshita, *Review of Scientific Instruments*, **75**, 2149 (2004).
- 25) T. Eguchi, T. Okuda, T. Matsushima, A. Kataoka, A. Harasawa, K. Akiyama, T. Kinoshita and Y. Hasegawa, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 243119 (2006).
- 26) T. Okuda, T. Eguchi, K. Akiyama, A. Harasawa, T. Kinoshita, Y. Hasegawa, M. Kawamori, Y. Haruyama and S. Matsui, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 105503 (2009).
- 27) A. Saito, J. Maruyama, K. Manabe, K. Kitamoto, K. Takahashi, K. Takami, S. Hirotsune, Y. Takagi, Y. Tanaka, D. Miwa, M. Yabashi, M. Ishii, M. Akai-Kasaya, S. Shin, T. Ishikawa, Y. Kuwahara, and M. Aono, *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 1913 (2006).
- 28) A. Saito, J. Maruyama, K. Manabe, K. Kitamoto, K. Takahashi, K. Takami, M. Yabashi, Y. Tanaka, D. Miwa, M. Ishii, Y. Takagi, M. Akai-Kasaya, S. Shin, T. Ishikawa, Y. Kuwahara, and M. Aono, *J. Synchrotron Rad.* **13**, 216 (2006).
- 29) Swiss Light Source (<http://www.psi.ch/sls/>).
- 30) A. Ruhlandt, T. Liese, V. Radisch, S. P. Krüger, M. Osterhoff, K. Giewekemeyer, H. U. Krebs, and T. Salditt, *AIP Advances* **2**, 012175 (2012).
- 31) J. Raabe, G. Tzvetkov, U. Flechsig, M. Böge, A. Jaggi, B. Sarafimov, M. G. C. Vernooij, T. Huthwelker, H. Ade, D. Kilcoyne, T. Tyliczszak, R. H. Fink, and C. Quitmann, *Rev. Sci. Instrum.* **79**, 113704 (2008).
- 32) W. Chao, P. Fischer, T. Tyliczszak, S. Rekawa, E. Anderson, and P. Naulleau, *Optics Express* **20**, 9777 (2012).
- 33) D. Nolle, M. Weigand, P. Audehm, E. Goering, U. Wiesemann, C. Wolter, E. Nolle, and G. Schütz, *Rev. Sci. Instrum.* **83**, 046112 (2012).
- 34) N. Nagamura, K. Horiba, S. Toyoda, S. Kurosumi, T. Shinohara, M. Oshima, H. Fukidome, M. Suemitsu, K. Nagashio, and A. Toriumi, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 241604 (2013).
- 35) <http://xfel.riken.jp/>

- 36) H. Mimura, H. Yumoto, S. Matsuyama, T. Koyama, K. Tono, Y. Inubushi, T. Togashi, T. Sato, J. Kim, R. Fukui, Y. Sano, M. Yabashi, H. Ohashi, T. Ishikawa and K. Yamauchi, Nature Communications 4539 (2014).
- 37) Y. Takahashi, A. Suzuki, N. Zettsu, T. Oroguchi, Y. Takayama, Y. Sekiguchi, A. Kobayashi, M. Yamamoto, and M. Nakasako, Nano Letters **13**, 6028 (2013).
- 38) SPRUC 放射光科学将来ビジョン白書・中間報告, SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC), 2014 年 4 月, (<http://www.spring8.or.jp/ext/ja/spruc>).
- 39) X 線吸収微細構造 (XAFS) 分光の将来展望, 日本 XAFS 研究会, 2014 年 9 月 29 日
- 40) SPring-8-II Conceptual Design Report, RIKEN SPring-8 Center, Sep., 2014, (<http://rsc.riken.jp/>).
- 41) <http://www.aps.anl.gov/Science/Reports/>

参考資料 (陽電子に関するもの)

- 1) 過去 10 年程の国際会議アブストラクト集 (対象とした国際会議は次の通り (全会議は 3 年おきに開催)
 - ・ International Conference on Positron Annihilation (ICPA)
 - ・ International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS)
 - ・ The International Workshop on Positron Studies of Defects (PSD)
 - ・ International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC)
- 2) 陽電子科学会会報「陽電子科学」: 2013 年 9 月号、2014 年 2 月号、2014 年 9 月号

3.5.10.4 超高速時間分解分光

（１）研究開発領域の簡潔な説明

超短パルス光を用いた計測は、フェムト秒パルスに代表される時間的に短いパルス光を用いて物質中の電子や原子核の動きに伴う光学的性質の超高速の時間変化を分光計測するものであり、一般的に超高速時間分解分光と呼ばれる計測法である。動いている物体をストロボ撮影するのと同様に、超短パルス光の持続時間の間で、時々刻々の変化を止めてコマ撮り写真を撮るような手法といえる。紫外～可視～赤外光領域で行われる物質の電子状態と振動状態についての分光計測を元に、テラヘルツやX線など、広範な波長領域の計測へと分光計測は拡大している。分光計測技術は、光科学の基盤であると同時にフロンティアであり続けている研究開発領域であり、生体イメージングやレーザー加工などの応用にも波及している。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

超高速時間分解分光は元来、主に光照射によって誘起される物質変化のメカニズムを解明しようとする学術的な研究領域として発展してきた分野である。

時間分解計測の分解能は、モード同期パルスレーザーの発明とその短パルス化に伴って、時代とともに著しく向上してきた。特に、1990年代初頭に極めて安定にフェムト秒パルスを発生するモード同期チタンサファイアレーザーが発明されたことによって、超短パルス光は分光研究を専門としない研究者にも広く普及するようになった。モード同期チタンサファイアレーザーおよび、その出力を増幅する再生増幅器の技術的進歩によって、基礎学問としての時間分解分光を実用技術に押し上げたといえよう。

超短パルス光を用いる利点は、時間分解能が向上しただけにとどまらず、光電場強度の尖頭出力が著しく増大したことも挙げられる。尖頭出力の増大により光電場強度のベキ乗に比例する非線形光学効果が効果的に発現し、光の波長変換も容易となった。この波長変換技術を活用して、紫外から可視域さらには赤外にいたる波長領域において、物質の電子状態や振動状態についての分光計測が可能となった。さらに今日では、テラヘルツやX線など、広範な波長領域へと分光計測の範囲が拡大している。

実用の光波長領域の拡大に伴って、その時代で得られる最先端光源を適用できる測定対象を選ぶという研究スタイルから、測りたいものに合わせて光源を選ぶという時代に転換している。レーザー技術、特に超短パルス光源技術の発展に呼応して、光科学という分野横断的な学際分野が形成されたといって過言ではない。光科学のフロンティアとして新しい技術が常に生み出されており、光検出技術、顕微技術、生体イメージング、レーザー加工などの応用分野へも波及している。

〔これまでの取組み〕

分子の振動モードや固体の光学フォノンを時間軸上で観察する振動分光が物質の構造情報を得るために多く適用されてきた。歴史的にレーザー光が可視及び近赤外域から実現されてきたことから、振動スペクトルの時間変化として物質変化を追跡する超高速振動分光は、可視領域の光のみを用いて測定できるラマン分光として発展してきた。ラマ

ン分光と相補的な関係にある赤外分光は、非線形光学過程によって波長変換された中赤外パルス光が安定して得られるようになってから実用的になってきた。

この振動分光法を紫外～可視域の超短パルス光で励起した過渡的な状態のプロープとして用いて、現在では、生体分子を含む複雑な分子系を対象に分光計測が行われている。例えば、励起状態のダイナミクス、結合の切断、分子内及び溶媒への振動エネルギー再分配、コンフォメーション変化などを追跡することが可能となっている。

近年では、中赤外域よりも低周波側にあるテラヘルツ領域（遠赤外領域）でも、短パルス発生が行われ、テラヘルツ光が観測のみならず物質の光励起にも使えるようになってきた。中赤外からテラヘルツ域は、分子の振動・回転や結晶格子のフォノンなど、物質の構造に関わる情報を豊富に含んでいる。それだけでなく、モノサイクルのテラヘルツパルスを用いた時間分解計測は、電荷キャリアの輸送特性といった固体などの凝縮系物質の基本的性質を調べるためにも有用であり、さらには、そのような電荷キャリアの集団運動を直接光で駆動することもできる。さらには、キャリアのスピンダイナミクスを解明したり、コヒーレントスピンを操作したりすることも可能になってきた。

深紫外領域においてもチタンサファイア再生増幅器と非線形光学効果を利用して 10 フェムト秒級の光パルスが生成され、光電子分光法の励起光源に用いられる。紫外光電子分光法では、金属の仕事関数や半導体のイオン化ポテンシャルの測定が可能である。

さらに短波長であるX線領域の時間分解X線計測は、物質の電子状態と構造力学の最も敏感なプローブである。時間分解X線計測には、大別して吸収分光法と回折法とがある。吸収分光法では、電荷分布やスピン状態の変化に関する情報を得ることができ、回折法は、タンパク質などの時間的構造変化を直接的に観測することができる。X線パルスを得るには、フェムト秒レーザー光を金属に集光させて発生させる方法の他、電子線ビームを加速させて放射させる方法もある。

フェムト秒よりさらに短いアト秒パルスの発生、それを用いたアト秒の超高速時間分解分光の試みも進んできた。アト秒パルスは、強力なレーザー光を原子・分子に照射することによって軟X線領域で発生させる。電磁波が伝搬するには、原理的に半サイクルを超える光電場振動が必要であるため、パルスの時間幅をアト秒領域とするには、必然的に光電場周期もアト秒台になる軟X線領域となる。

〔今後必要となる取組み〕

超短パルス光を用いたナノ計測においては、時間分解能と空間分解能と両立させることが必須課題となる。エレクトロニクスおよびオプトエレクトロニクスの多くの新たなナノテクノロジーにとっては、ナノ構造中での電荷キャリアの運動を詳細に理解することが非常に重要である。たとえば、太陽エネルギー変換及び貯蔵、光増感および光触媒作用は、電荷キャリア（電子および正孔）の移動度や寿命といった特性に大きく依存する。それゆえ、ナノ材料における光励起された電荷分布の空間・時間変化を測定するために、フェムト秒の時間分解能とナノメートルの空間分解能を同時に実現する技術開発が今後優先度の高い取組みとなる。

（３）科学技術的・政策的課題

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

【新たな技術動向】

「今後必要となる取組み」の項で述べた通り、他のナノ計測手段との組み合わせによって、空間分解能と時間分解能を両立させた計測の報告例が顕著に見られている。以下では、主に顕微鏡の方式で分類して、最近の技術動向を述べる。

【電子顕微鏡】

電子顕微鏡の有する優れた空間分解能に、ピコ秒からフェムト秒の時間分解能を組み合わせる手法として、超高速電子顕微鏡（UEM）が鋭意開発されている。この超高速電子顕微鏡では、顕微観察の電子放出源としてフェムト秒パルスのカソード電極に照射した際に放出される光電子を用いている。フェムト秒パルスで放出された光電子は、電子パルスの時間幅としてもサブピコ秒にとどまり、試料励起用のフェムト秒ポンプパルスと組み合わせて時間分解計測に用いることができる。実空間イメージングやブラッグ回折、あるいは電子エネルギー損失分光などによって単一の孤立したナノ構造のダイナミクスを観察することが可能となった。

特に、この超高速電子顕微鏡法のプローブ電子の生成技術も日々改良が重ねられている。時間分解能の観点からは、プローブ電子の時間幅を 15 fs (FWHM) まで圧縮した報告がある。また、光電子放出のためのレーザーパルスと同時にテラヘルツパルスを照射して、テラヘルツ電磁波の電場波形により、電子パルスを制御するという技術も報告されている。

外部からプローブとして電子線を当てるのではなく、試料に直接レーザーパルスを当て、そこから放出される光電子を検出する光電子放出型電子顕微鏡についても、サブピコ秒の時間分解能を実現した。GaAs 表面においてフェムト秒レーザーで励起された電子の再結合と外場によって駆動された電子輸送を撮像することに成功した。電子ドリフト速度と電場勾配との線形関係が確認され、それによって移動度を推定することができた。サブピコ秒の時間分解能およびサブミクロンの空間分解能で電荷キャリアの輸送を直接測定することができるため、微細な電子輸送と巨視的なデバイス性能との関係を定量化することによって、多種多様な電子デバイス及び光学デバイスを評価するのに用いることができる。

【走査型トンネル顕微鏡】

フェムト秒レーザーを走査型トンネル顕微鏡（STM）と組み合わせる試みでは、数百フェムト秒の時間分解能と数ナノメートルの空間分解能が同時に実現されている。従来の超高速 STM では、時間分解能は十ピコ秒程度が限界であった。最新の技術では、テラヘルツパルスを STM の走査プローブ先端に照射し、テラヘルツパルスが結合したサブピコ秒の間だけトンネル電流を取り出せる STM が実証されている。このテラヘルツ STM を用いて、単一 InAs ナノドット内のキャリアを近赤外レーザーパルス光で励起し、その直後からの超高速キャリア捕獲を直接撮像した報告がある。

【近接場光学顕微鏡】

超短パルス光計測の時間分解能を最大限に生かしつつ、光の回折限界を下回る空間分解能を実現する別の方法として、近接場光学顕微鏡がある。金属カンチレバーに超短パルスを照射し、プローブの先端に生じる近接場によって、試料の局所的な光学特性を測定できる。散乱型近接場光学顕微鏡 (Scattering-SNOM) を用いて、20nm の空間分解能を有するポンププローブ赤外分光法が実現されている。実施例として、剥離した単層グラフェンの中赤外域における局所的な光伝導度が測定されている。近赤外域の光パルスで励起すると、200 フェムト秒の時間スケールでグラフェンのプラズモン特性が変化し、これは電子温度の上昇を検出していることになる。超高速近接場光学顕微鏡は、ナノメートルの空間分解能とサブ 20 フェムト秒の時間分解能まで達成されている。パルス幅 12 フェムト秒の超短パルス光で、長さ 200nm の金ナノロッドを励起してプラズモンの定常波モードを 2 つ以上誘起する。2 つのプラズモンモードの重ね合わせにより、プラズモン励起の空間的構造が時々刻々と変化する様子が近接場像として撮像できた。

【X線回折・X線吸収】

X線を用いた計測は、試料に含まれる特定の元素について、その電荷分布や周辺原子間の結合距離などの微視的な構造に関する情報が得られる。X線計測の最新の動向としては、X線自由電子レーザー(XFEL)を用いた成果が顕著に増えてきた。米国の Linac Coherent Light Source (LCLS) と日本の SPring-8 Angstrom Compact Laser (SACLA) の 2 カ所で、最先端研究を競っている。X線回折の実験では、パルス幅 50 fs 程度のポンプパルスで励起された結晶格子の歪みの動的変化を時間分解能 80 fs 程度で時間分解測定している例が LCLS から報告されている。試料としては、金ナノ粒子や電子相関の強い酸化物薄膜などが対象となっている。超高速の相変化などを追跡するのに、適した方法である。一方、X線吸収については、SACLA からの広帯域放射を活用したマルチチャンネル方式の直接 X線吸収スペクトル一括測定が報告されている。主に金属錯体分子における中心金属の電荷分布や配位子との結合距離の測定に用いられている。

レーザーパルスを金属ターゲットに照射して発生させる方法については、硬 X線フラックスを生成する工夫が求められている。フェムト秒の時間分解 X線コヒーレント回折イメージング法により、粉末回折パターンから電子密度マップが測定されている。イオン性結晶における電荷分布やイオンの平行位置からの移動などが測定されている。

【コヒーレントラマン顕微鏡】

空間分解能という点からは光回折限界に留まっているが、コヒーレントラマン散乱による振動分光を顕微観察に活用している例が実用技術として定着してきた。コヒーレントラマン散乱は 3 次の非線形光学過程であるため、尖頭出力の高い超短パルス光のメリットを享受できる。広く普及している 2 光子蛍光顕微鏡と異なり、蛍光プローブを付けずに、物質固有の分子振動あるいは格子振動を指標として微視的構造の空間分布を画像化できる。また、時間分解測定により、振動寿命の異なるモードを分別することもできる。コヒーレントラマン顕微鏡は、多くの場合は生体関連分子の画像化に利用されるが、

半導体結晶の構造やキャリアドーパ量などの材料評価にも有用である。

【超解像蛍光顕微鏡】

時間分解計測ではないが、光の回折限界を超える超解像度を実現した STED (STimulated Emission Depletion: 誘導放出制御) 顕微鏡にも超短パルス光が用いられている。STED 顕微鏡では、蛍光顕微鏡像を撮影するのに、蛍光色素を励起するレーザーと同軸にドーナツ状のビーム断面を持つ誘導放出制御レーザーを重ねて照射する。ドーナツ形状の穴直径で決まる空間分解能は、光の回折限界で決まる分解能より数倍向上する。効率よく誘導放出を誘起するには、光の持続時間が短いパルス光の方が有利であり、フェムト秒パルスが実用的に使われる。

(5) キーワード

時間分解分光、パルスレーザー、紫外光、可視光、赤外光、テラヘルツ電磁波、X線、電子状態、振動状態、顕微技術、生体イメージング、レーザー加工、振動分光、ラマン分光、赤外分光、非線形光学過程、ダイナミクス、ピコ秒、フェムト秒、アト秒、時間分解能、高い尖頭出力、超高速電子顕微鏡、超高速近接場顕微鏡、時間分解回折、X線自由電子レーザー、コヒーレントラマン顕微鏡

（６）国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	○	↗	優れた分野も多いが、最先端では米国・欧州に次ぐ２番手であることも多い。国際共同研究の比率が低い印象があり、日本単独で奮闘しているところもある。
	応用研究・開発	○	→	最先端の基礎研究と応用開発との間にまだギャップがある感触
	産業化	△	→	システム製品は市場に出せているが、構成部品は能動素子・受動素子ともに海外製品に頼るところも大きい。機構部品は強い印象
米国	基礎研究	◎	→	レーザーの発明以来、米国が常に第一線を維持しているが、欧州に比べて分野の流行り廃りに連動している印象がある。出版論文や国際会議発表等で欧州との共同も目立ってきた
	応用研究・開発	◎	→	最先端の成果を製品に結びつける力は安定している印象
	産業化	◎	→	個別部品からレーザー装置、システム製品に至るまでを網羅的に扱う総合メーカーが強い
欧州	基礎研究	◎	↗	近年、ドイツが底力を十分に発揮している。米国に比べて、基礎研究を地道に着実に進めている感がある。英仏も実力は安定している伊、オーストリア、スイスなども着実。出版論文や国際会議発表等の伸びが著しい
	応用研究・開発	◎	↗	最先端の成果を製品に結びつける力が最近特に強い印象
	産業化	◎	↗	総合システムメーカーよりも個別部品あるいはレーザーや検出器などの単体装置で、米国よりも進んだ製品を出すことも多い
中国	基礎研究	△	↗	論文数、発表数の伸びは著しいが、最先端分野では欧米発祥のアイデアを踏襲することも多い。
	応用研究・開発	○	→	非線形光学結晶など、中国が特に強いという分野がいくつかある
	産業化	△	→	特に強い分野では独占的に製品供給を行っているものもある
韓国	基礎研究	△	→	韓国独自というよりは、欧米の研究機関に所属することで研究を進めている事例もある
	応用研究・開発	△	→	
	産業化	△	→	受動部品を扱っている印象しかない

（註１）フェーズ

基礎研究フェーズ：大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ：研究・技術開発（プロトタイプの開発含む）のレベル

産業化フェーズ：量産技術・製品展開力のレベル

（註２）現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎：他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○：ある程度の活動・成果が見えている、

△：他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、×：特筆すべき活動・成果が見えていない

（註３）トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

（７）参考資料

- 1) D. E. Spence, P. N. Kean, and W. Sibbett, Optics Letters, 16, 42-44 (1991)
- 2) T. Wilhelm, J. Piel, and E. Riedle, Optics Letters, 22, 1494-1496 (1997)

- 3) Bradley Ferguson and Xi-Cheng Zhang, *Nature Materials* 1, 26 - 33 (2002)
- 4) Ch. Spielmann, N. H. Burnett, S. Sartania, R. Koppitsch, M. Schnürer, C. Kan, M. Lenzner, P. Wobrauschek, F. Krausz, *Science* 278, 661-664 (1997)
- 5) Ahmed H. Zewail, *J. Phys. Chem. A*, 104 (24), 5660–5694 (2000)
- 6) Philipp Kukura, David W. McCamant, Sangwoon Yoon, Daniel B. Wandschneider, Richard A. Mathies, *Science* 310, 1006-1009 (2005)
- 7) Robert A. Kaindl, Matthias Wurm, Klaus Reimann, Peter Hamm, Andrew M. Weiner, and Michael Woerner, *JOSA B*, 17, 2086-2094 (2000)
- 8) Iban Amenabar, Simon Poly, Wiwat Nuansing, Elmar H. Hubrich, Alexander A. Gomyadinov, Florian Huth, Roman Krutokhvostov, Lianbing Zhang, Mato Knez, Joachim Heberle, Alexander M. Bittner and Rainer Hillenbrand, *Nature Communications* 4, 2890- (2013).
- 9) Masayoshi Tonouchi, *Nature Photonics* 1, 97 - 105 (2007)
- 10) Masaaki Sato, Takuya Higuchi, Natsuki Kanda, Kuniaki Konishi, Kosuke Yoshioka, Takayuki Suzuki, Kazuhiko Misawa and Makoto Kuwata-Gonokami, *Nature Photonics* 7, 724–731 (2013)
- 11) Albert Stolow, Arthur E. Bragg and Daniel M. Neumark, *Chem. Rev.*, 104 (4), pp 1719–1758 (2004)
- 12) Ch. Bressler, C. Milne, V.-T. Pham, A. ElNahas, R. M. van der Veen, W. Gawelda, S. Johnson, P. Beaud, D. Grolimund, M. Kaiser, C. N. Borca, G. Ingold, R. Abela, M. Chergui, *Science* 323, 489-492 (2009)
- 13) A. L. Cavalieri, N. Müller, Th. Uphues, V. S. Yakovlev, A. Baltuka, B. Horvath, B. Schmidt, L. Blümel, R. Holzwarth, S. Hendel, M. Drescher, U. Kleineberg, P. M. Ech- enique, R. Kienberger, F. Krausz and U. Heinzmann, *Nature* 449, 1029-1032 (2007)
- 14) A. H. Zewail, *Science*, 328, 187193 (2010)
- 15) S. Lüneburg, M. Müller, A. Paarmann, and R. Ernstorfer, *Appl. Phys. Lett.* 103, 213506 (2013).
- 16) R. M. vander Veen, O. -H. Kwon, A. Tissot, A. Hauser, and A. H. Zewail, *Nature Chem- istry*, 5, 5, 395402 (2013)
- 17) F. O. Kirchner, S. Lahme, F. Krausz, P. Baum, *New J. Phys.* 15 (2013).
- 18) L. Wimmer, G. Herink, D. R. Solli, S. V. Yalunin, K. E. Echternkamp and C. Ropers, *Nature Physics* 10, 432–436 (2014)
- 19) K. Fukumoto, Y. Yamada, K. Onda, and S. Koshihara, *Appl. Phys. Lett.* 104, 53117-53121 (2014).
- 20) T. L. Cocker, V. Jelic, M. Gupta, S. J. Molesky, J. A. J. Burgess, G. De Los Reyes, L. V. Titova, Y. Y. Tsui, M. R. Freeman, and F. A. Hegmann, *Nature Photon.* 7, 620-625 (2013).
- 21) Martin Wagner, Zhe Fei, Alexander S. McLeod, Aleksandr S. Rodin, Wenzhong Bao, Eric G. Iwinski, Zeng Zhao, Michael Goldflam, Mengkun Liu, Gerardo Dominguez, Mark Thiemens, Michael M. Fogler, Antonio H. Castro Neto, Chun Ning Lau, Sergiu Amarie, Fritz Keilmann, and D. N. Basov, *Nano Letters* 14, 894–900 (2014)
- 22) H. J. Wu, Y. Nishiyama, T. Narushima, K. Imura, and H. Okamoto, *Appl. Phys. Express*

- 5(6), 062002 (2012).
- 23) J. N. Clark, L. Beitra, G. Xiong, A. Higginbotham, D. M. Fritz, H. T. Lemke, D. Zhu, M. Chollet, G. J. Williams, M. Messerschmidt, B. Abbey, R. J. Harder, A. M. Korsunsky, J. S. Wark, I. K. Robinson, *Science* 341, 56 (2013)
- 24) C. I. Blaga, J. Xu, A. D. DiChiara, et al., *Nature* 483, 194 (2012).
- 25) Yuki Obara, Tetsuo Katayama, Yoshihiro Ogi, Takayuki Suzuki, Naoya Kurahashi, Shutaro Karashima, Yuhei Chiba, Yusuke Isokawa, Tadashi Togashi, Yuichi Inubushi, Makina Yabashi, Toshinori Suzuki, and Kazuhiko Misawa, *Optics Express*, 22, 1105-1113 (2014)
- 26) V. Juve, M. Holtz, F. Zamponi, M. Woerner, T. Elsaesser, and A. Borgschulte, *Phys. Rev. Lett.* 111, 217401 (2013).
- 27) Takayuki Suzuki and Kazuhiko Misawa, *Opt. Express* 19, 11463-11470 (2011)
- 28) B. Harke, J. Keller, C. K. Ullal, V. Westphal, A. Schonle, S. W. Hell, *Opt. Express*, 16, 4154-4162 (2008).
- 29) B. Hein, K. L. Willig, and S. W. Hell, *Proceedings of the National Academy of Sciences (USA)* 105, 14271-14276 (2008).

3.5.11 物質・材料シミュレーション

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

量子力学の諸知見を生かし、物質の構造、物性、材料組織、特性などを高精度に解析・予測できる方法論、あるいは原子・電子レベルの現象がどのようにミクロな組織や材料特性に影響をあたえるのか、またメゾスコピックレベルの非線形現象がどのようにマクロ的な材料特性と結びついているのかを理解・予測する方法論を開発する。開発された密度汎関数法 (DFT 法)、分子 (動) 力学法、分子軌道法、カルファド法、フェーズフィールド法などを解析手法として用い、これらの現象をどのように制御すべきか解明し、新しい機能や優れた特性をもつ材料の探索・設計指針 (発見および最適化) を提供する研究開発領域である。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

[背景と意義]

日本における喫緊の課題としてエネルギー問題があり、その解決の鍵を握るのは化学・電気・熱などのあらゆる形態のエネルギーの相互変換や貯蔵・輸送・利用であり、その技術を支えるのは物質科学的な総合知識基盤である。物質の性質はその電子状態をいかに制御するかに関わっており、構造自身の自由度に加えて電子状態における軌道自由度、電荷自由度、スピン自由度の4つの自由度を自在かつ同時に操る技術を確立することは、新規機能性物質を開発する上で極めて重要である。これら4つの自由度は、物質の反応性や構造特性、redox・導電性などの電氣的性質、磁氣的性質、光学的性質と密接に結びついている。また、光・圧力・熱などの外場との複合相関により、光導電性、非線形光学、光電変換、圧電変換、熱電変換など多彩な機能が発現する。

また材料設計・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。材料組織とは、顕微鏡で観察されるメゾスケール (数十 nm~数百 μ m) の不均一パターンであり、そのパターンのサイズや形態が機械的・熱的・電氣的・磁氣的特性、そして各種機能の発現に決定的な影響を及ぼす。したがって、メゾスケールの現象を如何に正しく理解して制御するのが、多くの材料開発・設計の現場における要諦となっている。

これまで実験分野では、実験的なスクリーニングや工学的技術に重きが置かれていたが、これまでにない機能分子の開拓には、より論理的・合理的な手法が不可欠である。そのような要請から、シミュレーション分野では、物質の性質を非経験的に極めて高い精度で予測し、その知見に基づき物質設計指針を導出することを目的とした研究の重要性が増している。また近年、分子シミュレーションや統計力学理論、連続体理論との融合によるマルチスケールモデリング研究が進展しており、研究対象や現象の幅が各段に広がってきている。しかしながら、単純なモデル計算には限界 (精度・時間・空間) があり、これらを克服していかなければならない。

[これまでの取り組み]

・固体系電子状態計算分野

日本の計算物性研究者のコミュニティにおいては、近年、プログラム開発が盛んに行われており、東京大学が主体となった xTAPP: 石橋 (AIST) や RSDFT: 押山 (東京大)、

大阪大学では複数のプログラム (Rspace : 小野、AkaiKKR : 赤井、Osaka2k : 白井、ABCAP : 浜田 (東京理科大)、HiLAPW : 小口など)、Phase (Advance Soft)、Open-MX : 尾崎 (東京大) などがある。これらは全て密度汎関数法に基づく平面波あるいは実空間基底擬ポテンシャル計算手法であり、主に基底状態の電子状態での構造や物性を計算することを得意としている。特に、岩田・押山 (東京大) らは実空間密度汎関数 (RSDFT) 法に基づく電子状態計算法を開発し、京コンピュータを用いた 10 万原子のシリコンナノワイヤの計算において Gordon Bell 賞を受賞している。現在では RSDFT に基づく、第一原理分子動力学法を開発しており、化学反応の構造サンプリングを効率的に行う手法の研究を精力的に行っている。また、多体相関手法である GW 法として ecalj : 小谷 (鳥取大) や Downfolding : 今田 (東京大)、Transcorrelated 法として TC++: 常行 (東京大) などとも開発中であり、固体の強相関電子系に対しても有効な研究手段が揃いつつある。超伝導体の転移温度の第一原理計算としては、有田 (理研) らが密度汎関数法に基づく計算手法を確立してきている。

海外においては、商用ソフトウェアである VASP や Wien2k が非常に良く使われており、標準的なソフトウェアとなりつつある。オープンソースとしては、Car-Parrinello 分子動力学シミュレーションが主体の CPMD 4.0、Bethe-Salpeter 方程式に基づく固体の光学特性計算を特異とする Octopus や PW-SCF、伝導計算に関しては SIESTA (Transiesta/ATK)、Quantum-Espresso など様々なプログラムが整備されてきている。大規模計算に関しては STREP European project が支援してきた、ウェーブレット基底を用いる Big-DFT などが高並列効率的なプログラムの代表例である。また、多体電子相関手法である GW 近似に関しては Yambo、BerkleyGW などのオープンソースも入手出来るようになってきている。これらの研究は欧州および米国が主体であり、日本以外のアジア各国における開発は進められていない。

・分子系電子状態計算分野

日本の分子科学研究者のコミュニティにおいては、長年にわたって理論開発、およびプログラム開発が行われてきており、現在でも世界的に非常に高い評価を得ている。

特に、多体電子相関をあらわに取り入れた高精度電子状態計算手法として、F12 : 天能 (神戸大)、モデル空間量子モンテカルロ法 : 天能 (神戸大)、SAC-CI : 中辻 (量子化学研究協会)、iExg : 中辻 (量子化学研究協会)、大規模系電子状態計算に向けたフラグメント分子軌道法として、FMO : 北浦 (理研 AICS)、Abinit-MP : 田中 (神戸大)、OpenFMO : 稲富 (九州大)、PAICS : 石川 (長崎大) や Divide & Conquer 法 : 小林 (北海道大)、O(N)法のプログラムである CONQUEST : 宮崎 (NIMS)、Elongation 法 : 青木 (九州大)、光励起状態計算が可能な多配置電子相関計算手法として、MR-MP2 : 平尾 (理研 AISC)、MCQDPT : 中野 (九州大)、DMRG : 柳井 (分子研)、相対論効果を含む統合プログラムパッケージ NWChem : 中嶋 (理研 AICS) など、様々なソフトウェアが現在も開発中であり、この分野の研究者の潜在的な能力は極めて高い。

しかしながら、応用や産業化の面ではまだまだ改善の余地がある。これは、海外の商用ソフトウェアである Gaussian が多くの実験研究者に浸透しているため、高機能であるが後発である日本製のソフトウェアが普及しないことも一因と考えられる。海外では、

Molcas、Molpro、Jugar、TURBOMOLE などの有償のプログラムパッケージ、GAMESS、NWChem、Dalton、Orca などの無償のプログラムパッケージも充実している。それぞれのプログラムパッケージ毎に得意不得意な計算があり、近年では複数のプログラムパッケージを併用した応用計算論文なども数多く見られるようになってきている。2013 年ノーベル化学賞を受賞した Warshel らは QM/MM 法を開発してきたが³⁾、現在ではこれらの計算手法も商用・無償のソフトウェアが豊富にあり、酵素の反応経路計算などで広く用いられている。以上の研究開発は欧州および米国が主体であり、日本以外のアジア各国における研究開発はほとんど進められていない。一方で、応用計算に関しては中国の研究者の活躍が目覚ましく、近年は数に加え質の改善も見られる。

・分子シミュレーション分野

分子動力学計算 (MD) はこれまで主に水溶液やタンパク質など、物質材料科学よりはむしろ生命科学分野において大きく進展してきたが、現在では、固体や表面等の構造サンプリング、脂質膜やイオン液体などの複雑かつ構造柔軟な系の構造計算に適応されつつある。この分野においては、タンパク質フォールディング経路の問題や、その自由エネルギー変化、水和自由エネルギー計算などで日本の研究者の活躍が目覚ましい。例えば、マルチカノニカル MD として MuCAMD : 岡本 (名古屋大) やレプリカ交換 MD 法として REMD : 杉田 (理研) などは、構造サンプリングや自由エネルギー解析に対して、当該分野において標準的な研究手法となっている。また、分子動力学計算と統計力学理論を組み合わせたエネルギー表示法に基づく水和自由エネルギー計算法として ERMod : 松林 (大阪大) は短時間かつ高速に計算可能である。本手法は通常の水液体はもちろん、超臨界流体・イオン液体など広範な溶媒種への溶解度を決定することができる。また、長岡 (名古屋大) や林 (京都大学) によって、個々に電子状態計算と組み合わせた QM/MM MD 法による自由エネルギー勾配法などの開発も進められており、溶液中の化学反応ダイナミクス of 自由エネルギー解析が可能となっている。この分野では、岡崎 (名古屋大) らが京コンピュータを用いて 1000 万原子からなるウィルスの全原子分子シミュレーションを達成するなど、世界的に見ても非常に注目度の高い研究がなされている。一方で生命分野では、杉田 (理研) により、細胞内の状況を模した分子混雑環境 (複数のタンパク質や水以外の溶質も数多く溶けている系) の全原子分子動力学シミュレーションがなされている。また、粗視化分子動力学法として CafeMol : 高田 (京都大) を用いて、キネシンの動態、多剤排出トランスポーターの動態、DNA ヒストン複合系 (ヌクレオソーム) 等の巨大な系のダイナミクスの研究も進められており、タンパク質孤立系から、その複合系、さらには細胞環境へと、研究のトレンドがシフトしてきている。

海外においては、数多くのプログラム開発がなされている。これらはタンパク質や脂質膜、糖などをターゲットとしたプログラムパッケージ (Amber、CHARMM、Gromacs、NAMD) が主であるが、近年、固体や無機系なども視野に入れたプログラムパッケージ (LAMMPS) も公開されている。また、プログラムパッケージの開発もさることながら、専用計算機と組み合わせたプログラム開発が行われている。特に Shaw らの分子シミュレーションシステム ANTON は従来の常識を超え、タンパク質のミリ秒 (msec) におよぶ分子シミュレーションを達成している。また、Baker および Hauk らは、量子化学的

に決定された遷移状態構造が、タンパク質内で安定になるように設計した人工酵素 (theozyme) を計算機上でモデリングし、生化学者との共同研究によりその有効性を検証している。まだ、天然の活性には及ばないものの、計算酵素デザイン研究の一つの大きな方向性を示した上で非常に意義深い。また、前述のプログラムパッケージもグラフィックボード計算 (GPGPU) やマルチコア加速器における計算が対応しつつあり、可能なシミュレーション時間も急速に長くなってきている。アルゴリズム開発としては、反応座標に沿った経路探索手法であるメタダイナミクス法の進展が著しい。プラグインプログラムである PLUMD が無償で入手可能であり、Amber や Gromacs などのプログラムパッケージと組み合わせて使用することができる他、自作のプログラムへの導入も極めて容易である。

・溶液の熱統計力学理論分野

日本では、溶液に対する積分方程式理論も大きく進展している。佐藤 (京都大) や吉田 (九州大) らは、参照サイト相互作用モデル (RISM) や分子 Ornstein-Zernike (MOZ) 方程式を用いて、溶媒和構造の分布関数や溶媒和自由エネルギーを高速に計算できる計算プログラムの開発を行っている。この手法はまた、タンパク質の内部の水和構造やタンパク質表面やポケットにおける基質結合サイトの理論予想にも適応されており、材料分野ばかりでなく、生命分野・創薬分野へと波及する可能性が高い。また本手法は、第一原理計算との融合が既になされており、溶液中の化学反応解析やなどの応用計算例も数多くある。また、電極の効果を Green 関数により連続体としてモデル化した有効遮蔽体法として、ESM: 杉野 (東大)、大谷 (AIST) により、電気化学反応の第一原理シミュレーションも、可能となってきた。海外においては、連続体モデルに立脚した Polarizable Continuum Model (PCM 法) や Conductor like Screening Model (COSMO 法) が主体であり、当該分野では日本独自の研究が数多くなされていることから、海外においても高く評価されている。

・固体のメゾ系理論分野

材料組織をシミュレートする手法として、フェーズフィールド法、モンテカルロ法、セルオートマトン法などがあり、その中でもフェーズフィールド法は原子レベルの計算では困難なサイズの構造モデリングを広範囲の現象に適用可能な強力な手法として 1990 年代頃から急速に発展している。この手法は、凝固、固相拡散相変態、マルテンサイト変態、結晶粒成長、再結晶、規則-不規則変態、クラック伝播 (破壊)、転位ダイナミクス等、極めて広範囲の現象に適用されており、さらにプロセス別にみても、 casting、熱処理、塑性加工、表面処理等々、多種のプロセスの解析に応用され、多くの研究者の興味を引いている。また、理論的にも第一原理からの導出やマルチスケールモデリングへの展開が期待されている。例えば、マルチスケール解析からスケールブリッジングへの切り替え、インフォマティクスを活用したコンビナトリアル計算、さらに非経験的な計算から、データ同化を援用した計算予測精度の向上など、現在の計算関連資源をいかに効果的に活用するかを念頭に置いた方法論が注目されてきている。日本においては、2011 年に東京工業大学のスーパーコンピューター TSUBAME2.0 を用いて、フェーズフ

ィールドによるデンドライトの成長シミュレーションに関する研究（青木（東工大）、高木（京都工芸繊維大）、山中（東京農工大））が Gordon Bell 賞・特別賞を受賞するなど、世界的にも高い評価を得ている。この分野も日本が世界をリードする分野となっている。

ACCESS e.V 社の商用ソフト MICRESS やルール大学のフリーソフト OpenPhase など、フェーズフィールド法のソフト開発がドイツで既に進められている

我が国における物質・材料分野は、実験・シミュレーション両分野において世界トップクラスの実力を兼ね備えており、新規機能性物質創成の土壌はすでにできているものと思われる。一方で、海外においては定期的にシミュレーションプロジェクトへの支援（Psi-k など¹⁾）や大型予算の措置、欧州においては CECAM（Center for European Calculation of Atoms and Molecules）²⁾のような EU における物質科学分野の研究教育拠点があり、ワークショップやチュートリアルを通じ基礎研究の底支えとなっている。総合的な研究水準としては、米国・欧州・日本で大差はないと考えるが、開発結果をソフトウェアとして公開あるいは市販する技術力は、米国・欧州が進んでいる。ソフトの市販や公開という点では、日本を始めとしてアジアの国は弱い（言語の問題や、ソフトに対する考え方等に課題があると考えられる）。なおここ数年、中国からの投稿論文数が急速に増加しつつあり、長期的には中国の存在は注視していく必要がある。

【今後必要となる取組み】

今後の研究の方向性としては、既存の各分野の資産を統合する枠組みの確立であろう。個々の計算・シミュレーション分野がかなり高度化しており、かつブラックボックスとして扱えない場合が増加してきている。高度な資産が十分に運用できていない状況は早急に打破すべきである。科学技術面においては、構造探索手法の開発（高性能触媒設計のための「高精度化学反応予測」や「ソフトマテリアル・界面・結晶構造予測」）、機能探索手法の開発（ナノ・メゾ物質の「(超)伝導性・磁性・光学特性予測」）や、マテリアルインフォマティクス^{3), 4)}、政策面においては「普及事業」が重要と思われる。

・物質科学シミュレーション手法の開発、および、現実系への応用

これまでの取組みにより、計算の大規模化や計算対象が大きく広がってきているが、下記についてさらなる研究が必要である。

- 数十原子系を化学精度（1 kcal/mol）で高精度計算可能な電子状態計算法
- 強相関電子系における機能発現機構解析のための高精度周期系電子状態計算法
- スピントロニクス・磁性材料設計のための相対論効果計算手法
- 熱電・耐熱材料設計のためのフォノン計算手法
- 電子材料設計のための欠陥等を含む構造不規則系の大規模系計算手法
- 分子集合体や表面・固体界面・欠陥系（数千～数万原子系）電子構造解析のための密度汎関数に基づく電子状態計算法
- 複雑な反応経路予測の自動化
- 光化学反応（励起状態）の高精度計算・非断熱ダイナミクス
- 遷移金属や希土類を含む系のスピン軌道相互作用・相対論効果を高精度に取込んだ計

算手法

- ソフトマターの構造決定・自己組織化分子の構造形成過程制御
- タンパク質集合体（数千万～1億原子系）解析のための（粗視化）分子動力学法
- 酵素反応や固液界面化学反応（数千～1万原子系）解析のための第一原理ダイナミクス計算法の開発

これらの計算に対して特に有効かつ効率的な構造探索・構造サンプリング法の開発も不可欠である。特に、膜などのソフトマテリアルは電池材料や生体材料において非常に重要な物質群であり、その構造特性の変化が機能の変化に大きく影響するが、このような系の構造機能相関の解析は極めて重要な問題である。また、自己組織化の問題は、タンパク質の折りたたみ問題から結晶成長、新規金属-有機構造体形成機構など、通常のシミュレーション時間では到達するのが困難なレアイベントであり、化学・物理・生命のあらゆる分野共通の課題である。レアイベントの問題を解決するための構造サンプリング手法の適用範囲は広い。さらに、光物性や光化学反応を解析するための新規励起電子状態計算手法や非断熱ダイナミクス計算手法は、基底状態の計算よりも格段に複雑であり非常にチャレンジングな課題である。また、膨大な物質・材料データと、第一原理計算や分子シミュレーションデータを融合し、物質設計に活かすマテリアルズ・インフォマティクスの分野も、今後、積極的に進めるべき課題である。

・材料開発研究に関連して、近未来的に重要となる内容

柱は3つあり、(1)単相の物質定数の解析、(2)組織形成の解析、および(3)特性の解析である。(1)は第一原理計算および原子・分子シミュレーションを活用した、格子定数、弾性定数、界面エネルギー密度などの物質定数の推定、および平衡状態図の熱力学的データベース構築である（第一原理計算とカルファド法の融合による合金状態図の更なる詳細データ蓄積も含む）。(2)はフェーズフィールド法を軸足に、材料における各種の内部組織形成の定量的モデル化である（ここで"組織"とは、相変態組織、結晶粒組織、欠陥組織など種々の組織一般を意味している）。(3)は(1)と(2)にて集積された相と組織の情報を境界条件とした材料特性予測であり、例えばイメージベース解析の例として、力学特性では均質化法や改良型セカント法、また磁気特性ではマイクロマグネティクス解析などが該当する。上記(1)～(3)は、これまで各々の学術分野で個別に進展してきたが、これらを相互に連携させることが近未来的なステップであろう。学術的な観点からは、マルチスケール・マルチフィジックスにおける連成解析を提唱し、上記(1)～(3)を有機的に統合することを考えがちであるが、短期的にはこの方向性は効率的でないように思われる。短期的に目に見える成果が期待できるのは、"有機的統合"ではなく"ブリッジ的連携"であろう。すなわち上記(1)～(3)はすでに個別の分野を確立しているので、それぞれの手法のインプットおよびアウトプット部分のみの連携を模索する立場である。

以上は計算のみに重点を置いて説明したが、全ての計算結果を、実験データを用いて、データ同化することが肝要である。近年の材料測定技術の進展は著しく、かつ得られる実験データ量はまさにビッグデータとなりつつある。したがって、この大容量データを効率的に材料設計に関連付けるために、データ同化の手法を活用することが有効である。なお上記の個々の段階で得られるインプット・アウトプット情報は、実験データも含め

て、系統的にデータベース化していくことも大切である。

（３）科学技術的・政策的課題

物質・材料シミュレーションの分野における個々の日本の研究者の層は非常に厚い。さらに、第一原理に基づく分子シミュレーション、および統計力学理論（溶液論、フェイズフィールド法）との融合など、より高度なマルチスケールモデリング計算手法を達成することで、より現実の系に即したナノ構造体における反応や物性の制御が可能となる。そのためには、物性・分子・材料科学の諸分野の力を結集するばかりでなく、数学・化学工学・機械などの分野の研究との融合が研究の駆動力となりうる。わが国の材料教育カリキュラムの早期の見直しが必要である。

近年、電気自動車をはじめ、新材料開発・最適化が実際の製品開発に直結するようになり、企業での開発研究者・技術者も理論・計算解析の必要性を高く認識するようになってきている。しかし応用に必要な計算・解析は、研究用とは異なり、種々の手法を組み合わせる状況が頻発すること、さらに実際の複雑系に対応するため、実際の現象の適切なモデル化に多くのノウハウを必要とすること等によって、迅速な進展は難しい状況にある。基本的に学習環境の整備であると結論できるので、このあたりの改革が早急に必要である。

研究の独自性やプログラムの機能的には欧米に負けていないものの、研究のフォロワー、および、ユーザーが少ない（シェアが小さい）ことが一番の難点である。現状を打破するためには、個々の研究を一つに束ねる核となる研究プロジェクトが必要である。また、研究開発はもちろんのこと、日本国内ばかりではなく、研究が立ち後れているアジア各国を含む、海外における普及や教育面にわたる細部までサポートすることで、当該分野の更なる進展、および成果の産業界への迅速なフィードバックが期待できる。そのためには、産官学の密接な共同研究体制、人材育成体制、人材活用体制の構築が望まれる。特にイノベーションの本質は人であることから、物質・材料シミュレーションのエキスパートが、産業の強化・革新、新産業の創出を担う企業において活躍できる場を設けることが政策的にみて極めて肝要である。

・教育・普及事業

現在、計算物質科学イニシアティブ（CMSI）でのハンズオン⁵⁾や、量子化学研究協会（NPO 団体）の量子化学計算の教育⁶⁾、量子化学探索研究所（NPO 法人）の反応経路探索手法の教育⁷⁾、大阪大学 CMD センターによる計算物性領域の教育⁸⁾が積極的に行われており、大学院生はもとより、企業からの参加者も多い。物質材料科学シミュレーション分野の進展においては、開発ばかりではなくプログラムのメンテナンス（マニュアル・チュートリアル英語化、配付サーバーの管理）や普及（ワークショップ開催）に対する支援も重要である。そう言った意味において、2005年に終了してから現在もソフトウェアの HP による公開を継続している、戦略的ソフトウェア基盤開発（文部科学省 IT プログラム）の取り組みは高く評価できる⁹⁾。しかしながら、普及と言う意味では、個人レベルでは限界があることから継続的な支援が必要である。前述の通り欧米各国におけるソフトウェア状況は、いわば飽和状態にあると言える。従って、今後は日本の産業界、

およびアジア各国でのソフトウェアの普及を視野に入れた戦略が必要と考えられる。

例えば、マルチスケール解析からスケールブリッジングへの切り替え、インフォマティクスを活用したコンビナトリアル計算、さらに非経験的な計算から、データ同化を援用した計算予測精度の向上など、現在の計算関連資源をいかに効果的に活用するかを念頭に置いた方法論が注目されてきている。このようなアプローチにおいては、人材育成がこれまでも増して重要な課題となる。つまり、従来の枠を超えた知識と、その活用方法（組み合わせ等）を自ら創造できる能力が必要となり、質・量ともに兼ね備えた分野俯瞰のエキスパートが不可欠となるからである。

（４）注目動向（新たな知見や新技術の創出、大規模プロジェクトの動向など）

〔新たな技術動向〕

- ▶ 日本では、スーパーコンピューター・京を用いたシリコンナノワイヤの第一原理計算¹³⁾やウィルスの全原子分子動力学計算、東京工業大学のTSUBAME2.0を用いた、フェーズフィールドによるデンドライトの成長シミュレーションに関する研究がGordon Bell賞を受賞するなど革新的な成果を挙げており、世界的にも高い評価を得ている。
- ▶ D. E. Shaw Researchによって開発されているアントンは、タンパク質など生体高分子の分子動力学シミュレーションに特化した超並列スーパーコンピュータシステムであり、多数の専用集積回路(ASIC)が、特殊な高速通信ネットワークにより接続することにより、汎用並列計算機の100倍程度の速度を実現している。今秋にはANTON2が公開され、これまで以上の規模（サイズ、時間スケール）での分子シミュレーションを実践している。
- ▶ フェーズフィールド法における材料組織形成の解析では、従来、局所平衡を前提とした解析が進められてきたが、近年、非平衡状態も考慮した新手法が提案され、注目を集めている。この新手法は、これまでの局所平衡の解を自動的に含んでおり、かつ計算手法が従来のアルゴリズムに比較して、よりシンプルなものとなっているため、今後、大きく広がる可能性を秘めている。また化学反応を直接考慮した組織形成の計算手法も最近提案され、電池等、化学反応を含む現象も直接扱うことが出来るようになりつつある。一方、組織イメージを活用した特性計算法とフェーズフィールド法を組み合わせる解析手法が種々の分野で広まりつつある。特にイメージベースの特性計算に関しては、有限要素法ひいては均質化法をベースとした形態（トポロジー）最適化法が、最近大きく進展している。

〔注目すべきプロジェクト〕

・日本

文部科学省の科研費新学術領域研究としては、「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」（代表：押山淳・東京大学¹⁰⁾）、「ナノ構造情報のフロンティア開拓・材料科学の新展開」（代表：田中功・京都大学¹¹⁾）など計算物性物理学および計算材料科学分野への支援がなされている。

次世代スーパーコンピューター戦略プログラムの一環として、第2分野＜新物質・エ

エネルギー創成>で、物性科学・分子科学・材料科学の3領域を母体とする計算物質科学イニシアティブ (CMSI)¹²⁾が形成され、はや5年目 (～平成27年度) となる。現在、5つの部会において7件の重点課題、および13件の特別支援課題が推進中である。また、CMSIは当該分野の若手研究者の支援、および、スキルアップのため学生の教育活動も行っており、この分野を牽引する次世代の研究者の養成の一助となっている。

また、元素戦略プロジェクトにおいては、電子材料 (東工大)、磁性材料 (物質材料研究所)、構造材料 (京都大学)、触媒・電池材料 (京都大学) などの拠点型研究プロジェクトが現在進行中であり、計算物質科学イニシアティブ (CMSI) が、各拠点での計算物質科学研究を横串で結ぶ役割を果たしている。

・ 米国

2011年に米国のオバマ大統領が「Materials Genome Initiative (MGI)」を立ち上げて以来、米国ではこの期間に物質・材料分野へ5年間で\$150 million (150億円程度) の巨額な資金投入が予定され、また、経済界からも物質デザイン分野への積極的投資が行われている。これまでの3年間では、「自己組織化バイオマテリアル」、「有機太陽電池」、「セラミクス」、「構造材料としての新奇高分子や合金」などの研究のため、国立標準技術研究所 (NIST) の Center of Excellence プロジェクトとして Center for Hierarchical Materials Design (ノースウェスタン大学他¹⁴⁾) の設立に\$25 million、当該分野への DOD、DOE、NSF などの公的研究費の増額など様々な物質科学分野への支援がなされており、それに比例してシミュレーション分野にも研究費がついている。

他にもノースウェスタン大とアルゴンヌ国立研究所がリンクした材料研究開発環境設立 (NAISE) などが挙げられる。また Integrated Computational Materials Engineering (ICME) においても、様々なシミュレーションソフトウェアをマルチスケールシミュレータとして統合し、材料の開発に活かしていく活動が活発に進展している。

・ 欧州

欧州科学財団 (European Science Foundation: ESF) は 2009 年に Materials Science and Engineering Expert Committee (MatSEEC) を組織し、欧州各国において物質材料科学分野に集中的な支援を行ってきている。MatSEEC では第4部会 (WG 4) として Computational Techniques, Methods and Materials Design が選定されている¹⁵⁾。一方で、2012年に Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) が組織され、2020年までの9年間にわたって、計算科学の諸分野への支援がなされる計画である。参加国は25カ国で、特に、計算機システムに関しては BSC (スペイン)、CINECA (イタリア)、GCS (ドイツ)、GENCI (フランス) の各国研究機関が担当する。PRACE では物質科学における研究動向調査が行われており、当該分野においての重点課題として「強相関電子系」、「ソフトマター」、「量子化学」、「光化学 (励起状態)」、「第一原理に基づくデバイス設計」、「ナノ構造形成」を挙げ、2020年までの達成目標としている¹⁶⁾。また、欧州では Integrated Computational Materials Engineering expert group (ICMEg) を中心に物質、構造材料、機械などの産業分野における計算科学分野の連携研究も重層的に進められている。

ドイツの DFG(German Research Foundation)で進められるプロジェクト(SFB761) “Steel –ab initio–”（第一期 2007-2011、第二期 2011-2015）では、第一原理計算、分子動力学法、フェーズフィールド法、有限要素法など異なるスケール・現象の計算専門家が集結し、鉄基合金の機能発現の解明と高強度化をターゲットとしながら、計算材料科学分野の連携強化と研究レベルの向上を目指したチーム研究が推進されている。

・アジア

日本を除くアジア各国の研究支援環境はそれほど整っていない。他方研究状況に関しては、中国において計算物質・材料科学研究に関する論文が極めて速いペースで増加しており、また、質の高い雑誌においても中国の研究者の活躍が目覚ましい。これは、論文に対して金銭的なインセンティブが支払われていることに起因しており、そのため、今後この勢いは益々増加して行く傾向にあると思われる。また、韓国、台湾やシンガポールでは当該分野への関心が高まっており、海外からの研究者の積極的な獲得を通じ、研究レベルの向上を図っている途上にあるものと思われる。特に韓国では電気・電子材料に、シンガポールでは生命分野への投資が多くなされていることから、関連分野における計算物質科学研究に関する論文がそれに比例して増加している。なお韓国の材料研究としては、KIST におけるマルチスケールシミュレーションプラットフォームがある。台湾においては基礎研究が重要視されており、この分野においては特に海外からの研究者の積極的な獲得に乗り出している。

（５）キーワード

計算物質探索・材料設計（コンピューショナルマテリアルデザイン）、第一原理電子状態計算、量子化学、分子シミュレーション、（第一原理）分子動力学法、（量子）モンテカルロ法、フェーズフィールド法、自由エネルギー解析法、誘電体モデル、マルチスケール・マルチフィジックス、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルズインテグレーション、データベース、データ同化

（６）国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↑	科学技術的には、本分野における日本の研究者のレベルは非常に高い。特に電子状態理論手法の開発に関しては、物性物理系、分子科学系、材料系ともに米国や欧州と匹敵するレベルである。特に大規模計算手法であるFMO法や、高精度計算手法開発は世界トップレベルである。（日本のオリジナリティ：FMO、ONIOMM、SAC-CI、F12、iExg、モデル空間量子モンテカルロ法）また、分子シミュレーションに関しては、理論的方法や計算アルゴリズムの開発において顕著な業績を挙げている。（日本のオリジナリティ：MuCA MD、REMD、ERmod、RISM、MOZ、Cafemol） 材料組織形成のシミュレーション開発についても「元素戦略」やS・イノベ「ヘテロ構造制御」などにより、当該分野の活性化が計られている。 もともと、MD-Grapeなどの専用計算機の文化があるものの、近年、ANTONのようなハードウェア開発に押されている。また、GPGPUなどの演算加速器へのプログラム対応が完全に立ち後れている。 政策的には、近年、新規物質材料設計の社会的要請により、次世代スーパーコンピュータプロジェクト、元素戦略などの大型予算プロジェクトから、この分野への支援がある程度なされている。一方で、シミュレーション手法の公開、普及活動が非常に弱い。
	応用研究・開発	○	↑	これまで我が国の計算物質科学分野は、方法論開発を重視して来た伝統があるため、物質材料の探索設計への応用分野が弱かった。しかしながら、次世代スーパーコンピュータプロジェクト、元素戦略、CRESTなどの大型予算プロジェクトに参画する研究者の増加にともない、プロジェクトドリブンな応用研究も徐々に増えてきている。一方で、化学工学・機械などの異分野との融合研究は、我が国では立ち後れており、欧米に比べ層が薄い。 近年、アカデミック分野においては、実験科学者が理論研究の必要性を高く認識するようになっており、計算シミュレーションを実行する実験研究者も増えてきている。また、化学・物理系の新学術領域研究などの大型プロジェクトにおいて計画研究・公募研究等で参画し、各分野において実験と密な共同研究がなされてきている。 上述の様に、シミュレーション手法の公開、普及活動が非常に弱いことから、欧米各国で開発された商用プログラムを使う研究者が多い。
	産業化	○	↑	材料系・製薬系のメーカーにおいて、物質・材料シミュレーションの重要性は高く認識され、計算部門を単独で持つ企業や、実験と計算を掛け持ちする研究者も徐々に増えてきている。また、研究会やワークショップなどでも企業研究者の参加が増えているなど、企業側は積極的に基礎研究から応用研究までのリサーチを欠かさず行っているようである。 一方、企業の研究成果は基本非公開であり、アカデミックとの共同研究においても、特許に関わらない範囲でのみ論文や学会発表などで公表している。研究レベルに関しても質の高い論文に出版されている。

米国	基礎研究	◎	→	新しい研究手法、理論の開発に関しては、優秀な研究者が世界中から集まり、極めて活発に研究を行っている。電子状態理論では、DMRG法、DFT法の汎関数開発、大型計算プログラムの開発などが例として挙げられる。分子系の電子状態計算プログラム開発は極めて充実しており、商用ソフトウェアではGaussian、Schrödinger、Spartan、Q-Chem、ACES-III、Jagurなど、無償のソフトウェアとしてはGAMESS、NWChemなどの主要プログラムが数多くの研究者によって開発されているだけでなく、個人グループでもBAGLEなど高機能なソフトウェア開発が進んでいる。また、LIBINT、Libxcなど、電子状態計算の要素技術のライブラリ化も進んでいる。GPGPU対応したプログラム(Terachem)も開発されている。一方、固体系の第一原理計算に関しては新しい計算理論の開発の最前線であるが、ソフトウェアはいくつか開発されているものの、パッケージ化されたものはあまり見られない。欧州主導の開発に参画している研究者もいる。 シミュレーション関係では、自由エネルギー解析手法の理論が、最近、MDシミュレーション専用計算機ANTONの開発により、ミリ秒程度のタンパク質の長時間計算が可能になり、様々なタンパク質のフォールディング過程が調べられている。また、今秋にはANTON2が発表されることから、さらなる長時間・大規模MDシミュレーションが可能となることが予想され、今後益々シミュレーション分野が活発になると思われる。商用ソフトウェアとしては、Amber、CharMMなどシミュレーション結果の解析までを一手に担うパッケージがある。無償ソフトウェアとしては、NAMD、PyMol、LAMMPSなど、GPGPU対応したソフトウェアも抱負にある。 政策的にはMaterials Genome Initiativeが、「自己組織化バイオマテリアル」、「有機太陽電池」、「セラミックス」、「構造材料としての新奇高分子や合金」などへの集中投資をしている。この流れに呼応するかの様に、DOD、DOE、NSFなども物質・材料分野の基礎研究へ支援を増額している。
	応用研究・開発	◎	↗	応用研究や開発において、物質・材料シミュレーションが大きく寄与している。数多くの優れた研究者が活発に研究活動し、大きな成果を上げている。特に、実験化学者との共同研究も盛んであり、その成果が著名な雑誌にも数多く取り上げられている。これまで、主に手法開発に取り組んできた研究者が、最近は応用研究にも手を広げているケースが多い。特に、太陽電池などのエネルギー関係材料、有機ELなどの電子デバイス材料、セラミックスなどの構造材料分野においては、学会においてもシミュレーション分野が活発に発表を行っている印象である。 NISTにおける取り組みが、材料の応用分野を支えている。NISTも例外にもれず、MGI関連のPJの始動以降、マルチスケール・マルチフィジックス関連のインフラを精力的に整備している。
	産業化	○	↗	米国では物質・材料シミュレーションのソフトウェア開発自身が一つの産業として定着しており、Gaussian社、Q-Chem社など様々なソフトウェアメーカーが存在する。これらはもともと大学の研究者コミュニティや、グループが発祥になっている。一方で、製品開発にどのように役立っているか、までの詳細情報は明かされていないが、タミフルなどの薬剤設計等にシミュレーション分野が活かされていることから鑑みると、大きく貢献していることは間違いない。

欧州	基礎研究	◎	↑	欧州の特徴は、EU全体としてのプロジェクトを推進している点である。そのため、ドイツ以外は一国一国では我が国の水準に劣るものの、共同研究を通じて全体として非常に活発な印象である。特に、EU内では人材交流が盛んであり、様々な国籍の研究者がEU各地で活躍するなど、研究のグローバル化が顕著である。 分子系電子状態理論の分野では、多参照理論や高精度電子状態理論、溶媒和モデル (PCM法) など、欧州が中心となって開発してきた技術も多々ある。プログラム開発もGaussianを補完する機能を持つソフトウェアも開発され、多参照摂動法計算で定評のあるMOLCASの他、高速な大規模計算を特異とするTURBOMOL、その他、ADF、MOLPRO、ORCA、DALTON、Columbusなど商用・無償のソフトウェアが充実している。また、固体系の電子状態計算手法に関しては商用ソフトウェアであるVASPやWIEN2kが、今や標準的なソフトウェアとして定着しつつある。一方で、無償のソフトウェアであるQuantum Espresso、Octopus、ABINIT、PWscf、GPAW、BigDFT、SIESTA (商用版はATK)、CRYSTALなどが公開され、世界中で使われる様になってきている。 シミュレーション分野としては、ドイツを中心にMCTDHなどの量子ダイナミクスプログラム開発がなされている点、分子シミュレーションに関しても、第一原理分子シミュレーション法 (Carr-Parrinello (CP) MD法) を実装したプログラムである、CP2KやCPMDなどが普及している点が、他地域との大きな違いである。古典分子動力学シミュレーションについては、メタダイナミクス法などの反応サンプリングの方法などのアルゴリズム開発が活発であるが、プログラムパッケージに関しては、Gromacsなどの非常に優れたプログラムが開発され無償で公開されている。材料分野でもドイツの躍進が著しい。マルチフェーズフィールド法の開発に始まり、基礎から応用までの広範囲をカバーしている。大学・研究所の連携は秀逸であり、基礎研究の実用化の政策も、わが国としても学ぶべき点が多い。 政策的には、かつてPsi-kなどのEUにおける長期支援が定期的になされるなど、欧州においては基礎研究への投資が盛んである。また、Psi-kやCECAMなどを介した教育・普及活動 (チュートリアル、ハンズオン・ワークショップ、奨学金) が活発であり、基礎研究の底支えとなっている。
	応用研究・開発	○	↑	欧州では伝統的に基礎研究が充実しており、出口指向の応用分野に関しては、従来それほど注力してこなかったものの、近年、様々な分野において力を入れてきているようである。研究者の層は米国に比べて厚いとは言えないが、個々の研究者の研究のレベルは高い。特に、分子系および固体系共に電子状態研究やダイナミクスの研究が応用分野に活かされており、今後、一層大きな発展を示すと考えられる。 相図の分野では、Thermo-Calcがスウェーデン王立工科大 (KTH) で開発され、世界のスタンダードとなっている。フェーズフィールド法で、世界的に市販品として流通しているソフトウェアは、ドイツで開発されたMICRESSのみであり、現在、独占状態にある (もともと、ドイツ国内のACCESSプロジェクトによって開発されたシステムである)。さらに近年では、ルール大学に、The Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation (ICAMS) が設立され、当該分野を中心に、スケールブリッジングを念頭に、さらなる展開が計画的に進められている。 企業が、大学と連携して、開発研究を行っているようである。とくに、ナインシグマなど (ドイツ)、契約型の共同研究を世界各国で展開している。
	産業化	○	↑	米国と同様、欧州を中心に開発されたソフトウェアは有償で公開されているなど、ソフトウェア開発そのものが産業の一部となっている。企業における研究がどの様に産業化に繋がったかの情報はほとんど公開されていない。しかし、物質・材料シミュレーション分野への注目度は高く、将来的に産業に大きく貢献する可能性が高い。
	中国 基礎研究	△	↑	電子状態、MD、材料関連のシミュレーションいずれも、中国発の方法論開発は乏しい。しかし研究者の数に関して、特に材料系では増加の一途をたどっており論文数拡大も著しい。近年、日欧米へ留学していた研究者を引き戻す努力をしていることから、若い世代の研究力は強化されることが考えられる。

	応用研究・開発	○	↗	ここ数年で物質・材料シミュレーション分野の研究の質も向上してきており、中には非常に著名な論文雑誌に掲載されている。また、論文の数も急速に多くなってきている。しかしながら、まだまだ玉石混合という印象も拭えない。応用分野も様々で、電子・デバイス材料分野などでの進展が目覚ましい。
	産業化	△	→	産業化についても、応用研究・開発と同様の状況である。我が国に比べて、物質・材料シミュレーション分野が中国の産業に貢献しているとは思えない。一方で、比較的安い労働力を活かして、米国などからの応用計算の下請けをしている企業もある。
韓国	基礎研究	△	↗	大学・公立研究機関などでの理論・計算研究状況を見ると、分子系・固体の電子状態、分子シミュレーション双方とも、韓国発の方法論開発は乏しく、欧米や日本へ留学して帰国した研究者が引き続き海外で開発しているプログラムへ貢献している程度であり、主体的な研究開発は見られない。フェーズフィールド法関連の基礎研究に対し韓国の貢献は大きい、一部の著名な研究者に限定されている。一方で、研究所等において日本の研究者を積極的に雇用する向きもあり、研究力は強化されることが考えられる。
	応用研究・開発	○	↗	欧米などで開発され公開されている物質・材料シミュレーション手法を用いた物性予測や機構解明における応用研究が数多くなされておられる。特に、実験グループと共同でスピントロニクス、次世代ナノエレクトロニクス、エネルギー関連物質分野での応用研究においては、質の高い研究が見られる。一方で、全体的に独創性の高い研究開発はそれほど多くは無い。
	産業化	△	→	産業化についても、応用研究・開発と同様の状況である。しかしながら、一部の巨大企業を中心に、シミュレーション部門を強化している向きもあり、今後、産業化へ寄与する可能性がある。

(註 1) フェーズ

基礎研究フェーズ : 大学・国研などでの基礎研究のレベル

応用研究・開発フェーズ : 研究・技術開発 (プロトタイプの開発含む) のレベル

産業化フェーズ : 量産技術・製品展開力のレベル

(註 2) 現状

※我が国の現状を基準にした相対評価ではなく、絶対評価である。

◎ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている、○ : ある程度の活動・成果が見えている、

△ : 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない、× : 特筆すべき活動・成果が見えていない

(註 3) トレンド

↗ : 上昇傾向、→ : 現状維持、↘ : 下降傾向

(7) 引用資料

- 1) Psi-k プロジェクト、<http://www.psi-k.org>
- 2) CECAM、www.cecama.org/
- 3) 科学技術動向 2013 年 11 月号 他
- 4) 無機材料研究におけるマテリアルインフォマティクスの動向 (知京豊裕)
- 5) 計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 教育活動、<http://www.cms-initiative.jp/ja/education>
- 6) 量子化学研究協会、<http://www.qcri.or.jp>
- 7) 量子化学探索研究所、<http://iqce.jp>
- 8) 大阪大学 CMD センターワークショップ、<http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/CMD/>
- 9) 戦略的基盤ソフトウェアの開発、<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/fsis/>
- 10) 科研費新学術領域研究「コンピューティクス」、<http://computics-material.jp>
- 11) 科研費新学術領域研究「ナノ構造材料フロンティア」、<http://nanoinfo.mtl.kyoto-u.ac.jp>
- 12) 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)、<http://www.cms-initiative.jp/ja>
- 13) スーパーコンピューター2011、<http://sc11.supercomputing.org/?pg=awards.html>
- 14) Center for Hierarchical Material Design、

<http://chimad.northwestern.edu/about/index.html>

- 15) 欧州化学財団、「Computational Techniques, Methods and Materials Design」、
http://www.esf.org/fileadmin/Public_documents/Publications/ComputationalTechniquesMethods.pdf
- 16) PRACE プロジェクト、
http://www.prace-project.eu/IMG/pdf/prace_the_scientific_case_full_text_.pdf

3.5.12 ナノテクノロジーのリスク評価・リスク管理・リスクコミュニケーションと社会受容

（１）研究開発領域の簡潔な説明

ナノテクノロジー・材料科学技術の進展と、その工業化に伴って生み出される新規物質や新製品の健康・環境への影響、新規性に伴うリスクの評価・管理は、国際的課題として取り扱われている。ナノ材料に関する安全性研究は、従来の材料とは異なるナノ構造ゆえの新物性を持つものがあることから、大きなリソースを要し、必然的に国家の枠組みのもと取組まれている。リスク評価研究は公共福祉政策（環境・健康・安全面(EHS: Environment, Health and Safety)、倫理的・法的・社会的問題(ELSI: Ethical, Legal and Social Issues))としての面が強かったが、近年は産業を意識したより戦略的な取り組みが重視されている。研究開発項目そのものとしては、リスク評価手法およびリスク管理手法の確立に関する科学的再現性の担保や医学的な評価、リスク評価結果の知識基盤整備、社会への情報提供とコミュニケーションをおこなう仕組みの構築が求められており、また、それらの活用システムが重要となる。多くの国では国家計画レベルでのナノテク政策の役割を、将来の産業の要となる新市場の創出と雇用拡大と位置づけており、安全性評価・管理は社会の懸念を払拭し安寧を担保するための公共福祉政策の面があった。これが近年、欧米ではナノテクからもたらされる利益を確実に社会へ還元するために、ナノ安全性の国際標準を図り、自国利益を戦略的に最大化することが企図されている。

（２）研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

〔背景と意義〕

ナノテクノロジー・材料科学技術は、様々な分野のイノベーションを担うエンジンの技術になることを期待されている。その期待は、ナノテクノロジーを支えるナノ材料が従来の化学物質や材料とは異なる新奇で優れた特性を有していることに由来するが、このことは同時に、ナノ材料が健康や環境に対して未知の影響をもたらす可能性があることを意味している。ナノ材料のリスクが適切に評価・管理されなければ、アスベストやPCBのように、ナノ材料の普及に伴い健康や環境への悪影響が顕在化することを懸念する声がある。また、食品における遺伝子組み換え技術のように、潜在的に有用な技術であるとされているにもかかわらず、リスクへの漠然とした不安から、社会が拒絶する可能性もある。そのため、事業者、消費者、行政が、それぞれの立場からナノ材料のリスクに関心を寄せ、検討が行われてきた。

ナノ材料の安全性に関する国際的な関心が高まって以降、各国および国際的な評価機関からは様々な意見や提言が公表されている。数年前までは、技術的な背景や推定される市場から予想されるリスクの概要が述べられ、将来的な課題解決に向けて分野横断的な技術開発や安全性データの蓄積が必要であるといった一般論に終始しているものがほとんどであった。しかし、近年は、欧州や米国の規制当局から、より具体的なリスク評価に関する指針などが公開されるようになってきており、最終製品としての規制や管理がより具体化しつつある状況にある。

2013年5月に米国議会に提出された大統領連邦予算書付帯文書¹⁾および National

Nanotechnology Initiative 2014²⁾、および欧州 Nanosafety Cluster の年次報告³⁾から、欧米がナノテク安全性評価を通商において戦略的に利用する意図が明らかになりつつある。このような動きは、欧州化学品規制 REACH（学物質の登録、評価、認可及び制限に関する規則、欧州化学品規制）や RoHS 指令（特定有害物質使用制限）を発展させたものと考えられ、各国の化学物質の登録制度の中でナノ材料を扱う事例が増えてきている。そのために、まず、規制対象としての「ナノ材料」の定義の議論が先行した。これは、実社会で現実に製造・輸入・販売される材料を「ナノ材料」として取り扱う対象とするかどうかに関するもので、2010年にISO（国際標準化機構）ナノテクノロジーの技術委員会（TC229）で策定された TS 80004-1 における規定⁴⁾をベースとしている。例えば、2011年に欧州委員会は「粒子（1つ以上の次元の外寸が1 nm から 100nm の粒子が、個数として 50%以上あるもの）を、遊離した状態あるいは凝集体として含むような、天然の材料、付随してできた材料、製造された材料である。」とする定義を示した⁵⁾。その他、EU 各国、米国、カナダ、オーストラリア、中国、韓国において、各国の法制度等を想定した「ナノ材料」が定義されている。さらに、ナノ材料の定義を踏まえ、具体的な法規制での対応の動きも出てきている。例えば、フランスでは、2013年から製造、輸入、流通量、用途を毎年申告することが義務化され、既に最初の結果が報告されている⁶⁾。また、ベルギーでは、2016年から登録制度を施行することを決定した。また、REACH（学物質の登録、評価、認可及び制限に関する規則、欧州化学品規制）でもナノ材料の取り扱いについての議論が活発化している。EU では、全てのナノ材料は REACH に見合うものでなければならないとしている。

一方、米国では、TSCA（Toxic Substances Control Act）で、ナノ材料に対して、PMN（新規物質の製造前届出）を課したり、SNUR（重要新規用途ルール）を制定したりする運用を行なっている。ここでは、あるナノ材料を新規物質として扱うかどうかは、分子アイデンティティ（化学的な構造）に依拠することを原則としつつ、特に CNT については、ケースバイケースながらも、異なる製造業者やプロセスで製造されたものは異なる CNT であると見なすとされた⁷⁾。国連の GHS（化学品の分類および表示に関する世界調和システム）においても、ナノ材料への適用可能性の議論が開始された⁸⁾。

現在のナノテクはスマートフォン、ハイブリッドカーの鍵となるデバイスを生み、エネルギー資源の地図を塗り替え、食品・医薬品を始めとした工業製品を革新、消費者の便益を増すなど、より快適な暮らしを支えるに至り、すでに空気の様に日常生活に存在している。新技術とその安全性について、米国は新たに科学と社会の絆を深める橋渡し役として“Responsible Development”という概念を導入している。これは科学技術者にモノの研究開発と安全性研究を並行して行うことを課したものである。これに対して欧州は“Risk In Value Chain”という概念を導入している。これは製品のリスクをバリュー・チェーンの中で規定しようとする考え方で、RoHS 指令でも使われている。多くの企業は、安全性評価への投資に消極的で、規制強化につながる新しい安全性概念の導入には否定的であるが、これに対し、米国 NNI2014 や欧州 Nanosafety Cluster が産業と規制組織の協調による新産業の育成を提案するなど戦略的に省庁間の連携を促している。今後は貿易管理や独占禁止法などの考え方も見直される可能性がある。

日本では、毒性学を含めた安全性研究の体制は欧米に比較して脆弱であり、特に材料

研究との協力体制が不十分である。先進国と新興国が将来の発展の基礎として戦略的に位置付けるナノテクで競争優位性を維持するには、安全性研究の学術的基盤の整備が必要と考えられる。日本における安全性評価研究は、各省庁個別のプロジェクトで部分的に継続している状況であるが、行政的な活動では 2011 年に初期的な有害性および暴露調査が行われたのみで、リスク管理的な取り組みは殆ど行われていない。このような国内外の安全性管理に対する行政的な取り組みの違いは、国内外での市場を想定したナノ材料・ナノ製品の開発およびその競争力に影響を及ぼすことが想定される。

[これまでの取り組み]

ナノテクノロジーおよびナノ材料安全性評価については 2013～14 年に大きな進展があった。2005 年にスタートした ISO/TC229 では、現在、JWG1:用語・命名法、JWG2:計量・計測、WG3:健康・安全・環境、WG4:材料規格、の 4 つのワーキンググループが活動している。この中で、WG3 では、1) 作業環境での暴露管理方法、2) 有害性の相対ポテンシャルの決定方法、3) 有害性のスクリーニング方法、4) 環境に優しい使用を保証する方法、5) 安全性を保証する方法、6) 一般的な健康・安全・環境に関する規格、という 6 つの分野で、多数の規格が審議されてきており、一部は既に出版されている。

OECD は 2006 年に WPMN (Working Party on Manufactured Nanomaterials: ナノ材料作業部会) を立ち上げた。WPMN は、産業用ナノマテリアルに関するヒト健康影響と環境保護という側面について国際協力を促進させることを目的とし、9 つのステアリンググループ (SG) が運営されてきた。これまで、SG3:工業ナノ材料の代表的セットの安全性試験、SG4:工業ナノ材料とテストガイドライン、SG7:ナノ毒性学における代替試験法の役割、SG8:暴露計測と暴露抑制に関する協力、の 4 つが中心的な役割を果たしてきた。とくに、SG3 の活動は、スポンサーシッププログラムと呼ばれ、カーボンナノチューブ (CNT) などの炭素系ナノ材料、二酸化チタン (TiO₂) などの金属酸化物など、13 の代表的ナノ材料について、各国がスポンサーとなり、物理化学特性、環境挙動、生態毒性、ほ乳類毒性に関する網羅的なデータが収集されている。日本は、単層 CNT、多層 CNT、C60 の主スポンサーとしてデータ提供を実施してきた。ドシエ (情報を集約した文書) 作成の進捗は材料により様々であるが、炭素系材料についてはドシエ公開に向けての作業に入るなど、スポンサーシッププログラムはほぼ終了を迎えている。現在、その成果を踏まえ、テストガイドラインの改訂議論へ反映させること目的とした材料横断的な検討が始まっている。具体的には、吸入毒性試験⁹⁾、生態毒性と環境運命¹⁰⁾、遺伝毒性、毒性動力学、物理化学特性¹¹⁾、カテゴリー化¹²⁾に関するワークショップ/専門家会合が開催されてきた。最近、WPMN の SG は再編され、上記の SG3、4、7 は、SG-TA (Steering Group of Testing and Assessment) となり活動している。また、SG5 (ボランティア制度と規制プログラムに関する協力) と SG6 (リスク評価に関する協力) は、SG-AP (Steering Group of Risk Assessment and Regulatory Programme) となっている。この SG-AP では、パイロットプロジェクトとして、¹⁾ 人健康リスク評価における種間変動要因、²⁾ 規制のためのリスク評価における物理化学特性: 表面化学の機能としての溶解性、³⁾ 規制制度におけるナノ材料の物理化学的特性に基づいたグルーピング・同等性・類推の利用と開発に関する調査、⁴⁾ 類推のための科学とリスク評価のガイダンス

の状況、が実施されている。また、従来の吸入暴露試験方法をナノ材料の試験に適合させるための改訂など、いくつかのテストガイドラインやガイダンス文書の改訂が進められている。

日本でも、ナノ材料のリスクや社会受容に関する研究・検討がおこなわれてきた。2005年度には、科学技術振興調整費「ナノテクノロジーの社会需要促進に関する調査研究」において、経済産業省、文部科学省、環境省、厚生労働省傘下の研究機関の連携により、幅広い分野にわたる検討が行われ、政策提言という形の報告書が出された¹³⁾。また、ナノ材料のヒト健康影響に関する厚生労働科学研究は2003年度に開始され、現在まで複数の研究班により研究が進められている¹⁴⁾。さらに、NEDOでは、ナノ材料の試料調製・計測技術開発およびリスク評価の実施を目的とした「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」が、2006年から2011年まで実施された¹⁵⁾。引き続き、「低炭素社会を実現する超軽量・高強度革新的融合材料プロジェクト (NEDO 交付金以外分) ナノ材料の安全・安心確保のための国際先導的安全性評価技術の開発」で研究が進められている。国全体としては、第3期科学技術基本計画における2007年度から2010年度まで、内閣府の連携施策群「ナノテクノロジーの研究開発推進と社会受容に関する基盤開発」が省庁連携施策の枠組みで実施された。

経済産業省が開催した「ナノ物質の管理に関する検討会」で示された「ナノ物質に係る今後の対応¹⁶⁾」にもあるように、事業者による自主管理の役割は大きい。自主管理を想定した簡易・簡便な評価技術の研究開発の重要性は高いと言える。(独)産業技術総合研究所と複数の民間企業や大学から構成されている技術研究組合単層CNT融合新材料研究開発機構(TASC)はNEDOプロジェクト「低炭素化社会を実現する革新的カーボンナノチューブ複合材料開発プロジェクト」において、CNTの自主安全管理のための評価技術として、細胞試験の手順書と作業環境計測の手引きと公開した¹⁷⁾。

日米欧中において戦略的に重要なナノ材料として重点的に毒性評価が推進されているカーボンナノチューブ(CNT)について、多層CNTの腹腔内投与によって中皮腫などアスベストに類似した影響を観察したとする報告¹⁸⁾¹⁹⁾が2008年に相次いで出されると、日本では、厚生労働省通達「ナノマテリアル製造・取扱い作業現場における当面のばく露防止のための予防的対応について」の発出を始めとする行政的な対応が取られた。その後、2010・2011年頃には、CNTの有害性機序に関する仮説が提唱されるようになり²⁰⁾²¹⁾、CNTを一括りにするのではなく、太さ、長さ、形状の違いによる有害性の違いが議論されるようになった。CNTの有害性機序の解明や、他の繊維状ナノ材料の有害性の確認は、現在も研究上の大きな関心事である。CNTについては、ラットなどの齧歯類を用いた亜急性、亜慢性の吸入暴露試験の結果がいくつかあり、それらに基づいて、複数の機関から作業環境における許容暴露濃度が提案されている。例えば、NEDOにより実施された「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」プロジェクト(P06041)から時限付きの許容暴露濃度として0.03 mg/m³が提案され²²⁾、米国 National Institute for Occupational Safety & Health (NIOSH, 労働安全衛生研究所) から0.001 mg/m³が提案された²³⁾。また、現在、IARC (国際がん研究機関) では、CNTの発がん性のクラス分類について検

討されている。CNT 以外にも、複数の機関により作業環境の許容暴露濃度の提案がなされてきている。二酸化チタンについては、上記 NEDO プロジェクトにて 0.6 mg/m^3 ²⁴⁾、米国 NIOSH では 0.3 mg/m^3 (サブミクロンからミクロンサイズ粒子については、 2.4 mg/m^3)²⁵⁾、厚生労働省は二次評価値として 0.15 mg/m^3 ²⁶⁾、日本産業衛生学会では暫定値として 0.3 mg/m^3 ²⁷⁾ が提案されている。許容暴露濃度の値が、提案する機関によって異なることは、採用する動物試験の違い、許容暴露濃度の導出に際して用いる仮定・計算方法の違いによる。この許容暴露濃度導出の方法について、現在、ISO/TC229 WG3 で、ナノ材料 (ナノ物体及び凝集体) の作業環境での暴露限界の設定のための一般的枠組みに関する技術報告書が策定されつつある。

科学的知見の蓄積や国際機関での議論などを踏まえ、従来からの化学物質の枠組みに準じた形でナノ材料のリスクの規制や管理が可能であるとの合意が形成されつつある。代表的なナノ材料の一つと位置づけられる CNT の安全性について毒性学専門家の共通認識が徐々に形成され始めたことに加えて、二次電池以外で CNT の工業化技術開発が進展し始めたことが契機となり、ナノテクを確実に国家利益に結びつける手段の必要性が提唱され始めた (TechConnect 2013 の White House, Congress による基調講演、他)²³⁾。進捗の遅い OECD/ISO の枠外で、欧米間で具体的に産業化を視野に入れたナノ安全性に関する標準化を推進するプロジェクトが 2012 年より顕在化した²⁸⁾。特に米国は産業化目標を具体的に示して、原材料、加工品、成形品、最終製品、廃棄についてのナノ材料安全性評価を開始し、テーマ別に NanoXXX と称する Working Group を編成して活動している。この活動には、ナノ安全性評価という科学の枠組を超えて政策として検討を行おうという姿勢が反映されている。例えば、先進国の多くの地域で、微細粉塵の大きな割合を占めるタイヤからの粉塵を削減するためにカーボンブラックをナノ材料に転換する検討が行われている。このケースの場合、OECD/WPMN から OECD 名義で研究報告²⁹⁾が発表されたが、実際には欧州 (一部米国の参加) の産官学の連携プロジェクトの成果である。この研究報告の発展と見なされる欧米産官学連携の NanoRelease というプロジェクトでは、CNT 樹脂コンポジットとタイヤからの粉塵発生とその影響評価について検討を行っている。NanoRelease の目的は当該製品におけるナノ材料由来の Dust の安全性評価方法、およびプロトコル (評価材料、基準、手法) の標準化と規制方針の確立である。プロジェクトの成果は、米国は Environmental Protection Agency (EPA) 管轄の TSCA、欧州は化学品規制の REACH に反映される事になる (NanoMile Workshop Oct. 2013 in Birmingham, UK)。この他にも多数の政府、欧州共同体が出資している欧米産官学共同プロジェクトが 2011 年より開始され、2013 年に活動が本格化している。また、成果の公表手段として主要科学論文誌を優先活用することが議論されている (前出 NanoMile)。

以上の動向から、ナノ材料応用の各分野における評価成果を既存の化学物質管理の中に繰り入れることにより、安全性評価に関わる事項の標準化と規制を行い、通商における実質的な優位性を確立する方向へ歩を進めていることが伺える。米国では NNI2014 に記述されているように National Institute of Standards and Technology (NIST) を実行

の核として、ナノテクをほぼ総ての科学技術の基盤とした研究技術開発を進める方針を明確にし、安全性はナノテクを支える科学技術としている。また、欧州は Nanosafety Cluster²⁸⁾に記載されているように EC 主導でプロジェクトを推進している。米国、欧州とも、これまでのように毒性評価研究に留まるのではなく、毒性、バイオ、材料の研究者が協調して安全性評価を推進し、規制、通商、貿易、法務、知的財産分野と連携して国家・地域の利益を最大にすること目標として掲げている。さらに、安全性評価に関わる事項の標準化を OECD 等で国際標準にすることも目指している。このような手法の強制規格の制定は、WTO/TBT 協定（貿易の技術的生涯に関する協定）においても認められており、自由貿易における非関税障壁を導入することにもつながりうるもので、域外国の企業活動に不利になる可能性もある。このような各国・地域戦略の中核となる部分は公開文書に明確に記載されることが少なく Closed Meeting で議論されるので容易には把握できない。NNI2014, Nanosafety Cluster Compendium も全文を綿密に検討することで始めてこのような体系がおぼろげながら判る記載になっている。

2011 年以降は、それまでに国内外の安全性評価のために行われた多くのプロジェクトや研究補助金の成果が、学会や論文等に数多く発表されるようになり、知見の蓄積も進んできた。しかし、ナノ材料の生体影響という観点から最も懸念すべき慢性影響について、正面から取り組んだ研究は少ない。これは、慢性影響評価に必要な費用が高額であることだけではなく、化学物質全般に対して動物愛護等の観点から動物試験が行われにくくなっていることも影響している。しかし、過去に多くの知見の蓄積のある一般的な化学物質とは違い、新たな物質としてのナノ材料に対する知見が少ない状況で、in vitro（試験管内）試験だけで安全性を検証するのは困難であると想定される。そのため、類似の物性を持つナノ材料をカテゴリー化して、生体との反応の類似性を担保しながら、効率的に評価する手法が提唱されている。公表された研究成果は、一般的によく知られているナノ材料や、一般の化学物質として既にナノサイズであった酸化チタンや二酸化ケイ素、銀などの既存製品を対象としたものである。一方で各企業が実際に製品として市場に出すものについては、既に欧米では実質的な登録・審査システムが機能しており、それらの安全性データが欧米の規制当局に個別に提出されることとなり、公表はされない。したがって最新の物質に対する安全性データは、欧米当局だけが把握することとなり、日本は最新の安全性データを把握できない状況となっている。現に、2011 年頃までに欧米の規制当局がある程度の方針を出して以降は、規制当局からはナノ材料の評価に関するアナウンスは殆どなく、申請データが欧米の規制当局に蓄積している状況になっていると推察される。例えば、EPA と HealthCanada の規制当局の間で合同会議(RCC)において、定期的な情報交換が行われており、その中で物性等の類似性を基にしたカテゴリー化が提案されている。しかし、詳細なデータは申請データなので公表されるわけではなく、解析された結果としての評価方針が提案されるだけである。なお、この状況は米国国内でも安全性評価の透明性の問題点として指摘されている。

[今後必要となる取組み]

ナノ材料には、たとえ同じ組成であってもサイズや形状に無数にバリエーションが存

在する。また、現実には市場化・製品応用されるナノ材料の多くは、様々に表面修飾や複合化がなされている。その一つ一つについて詳細な有害性試験を実施して許容暴露濃度を設定することは現実的ではない。評価の戦略が重要となってくる。現在のところ、各機関がケースバイケースで対応しているが、合理的なナノ材料のリスク管理のためには、ナノ材料のグルーピングや有害性推定を可能にする評価技術の開発が必要となる。そのために、物理化学特性と有害性の関連性の理解、及び、細胞試験や簡易な動物試験の活用による統合試験戦略の構築、また、それらの基盤として、ナノ材料の有害性機序 (AOP: Adverse Outcome Pathways 有害転機経路) の理解を進めていく必要がある。とくに、ナノ材料の表面修飾や複合化が有害性にもたらす影響について理解を進めることが重要である。

実験動物および細胞による評価方法の動向と展望：

ナノ材料を対象とした動物実験の論文数は著しく増加する傾向にあり、この背景には開発されるナノ材料自体の増加だけでなく、実際の利用における安全データシート作成等に必要であることも挙げられる。実験動物を使用したナノ材料に対する試験の目的には、体内動態（吸入後の呼吸器から循環器を経由しての移行など）、標的臓器における特異的な反応、慢性的な影響の評価といった、細胞を用いた *in vitro* 系では困難なエンドポイントであり、また、ナノ材料の **hazard identification**（有害性同定）に欠かせない評価として実施される。さらに、動物実験を通して得られる無毒性量 (NOAEL) など量-反応関係における重要な **parameter** は、ヒトにおける知見の乏しいナノ材料において、管理濃度や環境基準の設定に直結するデータとなる点はとくに重要である。ナノ材料とその投与方法、病理組織学的評価の標準化に関する研究は、国際的な方向で進んでいくことに疑いがなく、日本がコンソーシアムに積極的参加し、役割を担う必要性があろう。

細胞を用いた評価方法は、動物を用いた方法に比べ簡便、安価で大量の検体を処理することが可能である。さらに、毒性の分子メカニズムも明らかになる場合もあり重要な評価方法である。しかし、検体の処理方法や濃度などが適性でない場合は擬陽性を示す場合があり、最終的には動物実験による検証が必要になる。動物細胞による評価方法で最も用いられている方法は細胞毒性を検出する方法である。中でも **MTT-assay**, **MTS-assay**, **WST-1-assay** が広く用いられている^{30) 31) 32) 33)}。これらの方法は簡便に細胞に対して有害かどうかを判定できる。しかし、この方法ではなぜ検体が毒性を示すのか、そのメカニズムは分からない。そこで、メカニズムに基づく評価方法が検討されている。検体が炎症を誘発するか、DNA に対して毒性を示すか、タンパク質変性を誘導するかなどである。炎症に関しては炎症性サイトカインである **IL-1b**, **IL-6**, **TNFa** を **ELISA** という抗体を用いた分析方法で検出する方法が行われている^{34) 35)}。また、あるナノ材料は DNA に対して毒性を示すことが知られている^{36) 37) 38) 39)}。そこで、**FACS** を用いて DNA に対する毒性を検出する試みがなされている⁴⁰⁾。さらに、DNA 変異を感知し修復する細胞自身が持っているシステムを使って DNA 変異を検出する方法が開発されている⁴¹⁾。また、熱ショックタンパク質の発現メカニズムを利用してタンパク質変性を高感度で検出する方法が検討されている⁴²⁾。今後は新たな分析方法の開発と共に、既存の方法のプロトコル化を行い、国際的にプロトコルを統一する必要がある。細胞を用いた評価実験は動物

実験よりも再現性は取りやすい。しかし、細胞も生き物であり、場所(国・地域)や用いた試薬、培地などによって異なった結果が出る場合がある。そこで、国際的なラウンドロビン試験が行われている。日本の貢献には、検討の余地が大いにあろう。

特に材料、分散方法、粉塵発生方法、物性評価方法、生物学的評価方法の標準化が必要である。実際に CNT 分野では、信州大学と日米欧の主要安全性評価研究機関との連携により Mitsui MWNT-7 が多層 CNT の世界標準物質となり、CNT 自体の安全性はこれと同等の生物学的物性を持つ CNT を基準にして多くの報告がなされている。従って、応用開発もこの知見を基準とする事になる。粉塵発生方法はドイツ BASF、工場等における炭素系物質環境粉塵測定技術は厚労省系の労働安全衛生研究所法、環境暴露加速試験方法は米国 NIST 法が有力な方法と考えられている。

これまでは、主に、呼吸器を経由した暴露による有害性の検討が中心に進められてきた。これは、ナノ材料を直接取り扱う作業者では吸入暴露が主要な暴露経路と考えられることから妥当ではあるが、今後、ナノ材料が多様な分野で現実に利用されるようになることを想定した場合の社会受容の観点からは、経皮暴露や経口暴露での影響の評価手法や、有害性機序の理解が重要になってくると考えられる。また、環境中の運命や生態系影響については、OECD/WPMN での議論でも取り上げられてもいるが、いまのところ日本では目立った研究の動きはない。あわせて、製品のライフサイクルを意識して、製品からの排出・暴露に関して、計測手法の開発、データの蓄積、暴露シナリオの設定の必要性も高まると考えられる。

これまで、CNT や C60 といった炭素系素材、二酸化チタンや酸化亜鉛などの金属酸化物、金や銀などの金属のナノ材料を中心に有害性が試験されてきたが、最近、ナノセルロースファイバーの研究開発が進められるようになってきており⁴³⁾、新しいナノ材料の研究開発の動向と合わせて、試験・評価を進めていくことも必要であると考えられる。

その他、より詳細な安全性評価・管理研究については、本報告書の前作となる「俯瞰報告書 2013 版」⁴⁵⁾の同項目に記載しているので参照されたい。

以下では、ナノテク・材料に関する研究を行ううえで求められる戦略的視点について記載する。欧米がナノテクの重点を研究開発から工業化・商業化にシフトするためにナノ材料安全性を梃にする戦略を踏まえて、日本でも同等の対応が今後必要になるだろう。第一に **Responsible Development** を実践することが挙げられる。これは Oberdörster ら⁴⁴⁾が唱えた方法論の実践である。即ち、材料学と毒性学の協力によりナノ材料の研究開発及び応用開発と平行して毒性学的安全性評価研究プログラムを推進することである。NNI2014 では主に 10 年後を目処に実用化される技術について、材料の安全性と応用製品の流通と使用における環境と人への安全性を評価するプログラムを策定している。全分野を網羅的に扱うことはできないので重点市場と製品を定めてプロジェクト化するなどの検討が求められる。市場の観点から二酸化チタン、CNT の樹脂コンポジットに重点が置かれているが、前者は食品添加物としても注視されている。後者は電線・ワイヤハーネス等、電気電子部品分野でも大きな市場が予測されている。このようにナノ材料の安全性は広範囲の産業に影響を与えることから、安全性評価プログラムの推進にあたっては、科学技術と産業の両方を戦略的に見渡す司令塔が必要と考えられる。また、欧米

の安全性評価の行政・研究コミュニティでは、毒性研究の性質により、研究実績以上に人的ネットワーク力が重視されており、日本でもそのようなネットワーク力は考慮すべきであろう。

各企業から出される個別の安全性データの収集は、政府における政策的管理の立ち上げが必要であるが、公開されている情報をもとに評価基準の標準化を推進していくためには、現状では OECD や ISO における活動で日本がイニシアティブを発揮していくことが必要であると考えられる。その意味では、OECD スポンサーシッププログラムで公表された安全性データの評価作業への積極的な貢献が期待される。

（３）科学技術的・政策的課題

（課題の背景）

ナノテクを他の科学技術の共通基盤、また、安全性を共通基盤の重要な礎としてとして科学技術政策を構築することは、従来、欧州が標準化で優先権を獲得してきた哲学とは異なる。この背景を理解するには国家的投資と社会への説明責任、およびバリュー・チェーン/サプライチェーンの２点を科学技術振興と組み合わせて俯瞰する必要がある。

第一に、ナノ材料の安全性評価（毒性評価）には通常の化学物質に比べて多額の費用が必要となる。理由は、ナノスケールでは１分子ともバルクとも異なる新奇な物性が現れること、微細粉塵である場合が多いナノ材料は取り扱いが容易ではないことと、吸入暴露試験を行う必要があること、CNT など繊維状物質は従来の In Vitro 試験法が適用できないことによる。なお、バルクとナノの違いは無いとする意見も出ているが⁴⁵⁾ 主流とはなっていない。主要ナノ材料のうち、ナノ酸化チタンは Degussa P25、多層 CNT では Mitsui MWNT-7 が日米欧試験用標準品となった。CNT について日本は有利なはずであるが、多くの重要な試験研究は欧米で実施されており、日本の企業が速やかに情報を入手することは容易ではない。欧米は安全性研究成果を国家アセットとして厳しい管理を行っている。このような状況の中で、Mitsui MWNT-7 の毒性評価研究だけで日米欧の費やした研究費合計は 10 億円を超えている。必然的に各国で研究プロトコルの情報交換を行い、標準化して情報の共有化を図り研究を効率化していくことでデータが積み上げられてきた²³⁾。標準物質となることはビジネス上有利であることから、主導権を握るために標準物質選定について多くの意見が表明された。もちろん、各国とも多額の費用を１種類の材料に投じることについて議論があるが、信頼できる品質、供給、使い易さ、それと日本（信州大学と三井物産）の貢献の結果として Mitsui MWNT-7 が標準品となった。尚、Mitsui MWNT-7 はビジネス撤退により現在生産されていない。

欧米ではこれからもナノ安全性評価を重視することを公表している。米国の 2014 会計年度ナノ材料安全性評価研究費用は少なくとも 45 百万ドル²⁾、欧州の NanoSafety Cluster は 2013 年（実質）から 10 年間で 10 億ユーロである²⁸⁾。欧米は、負担の大きいコストセンターであるナノ材料安全性研究を国民へのベネフィットとして還元するためにプロフィットセンターへ転換すること考えているように伺える。そのために、前述のように「国際合法的」な方法で非関税障壁を導入することで自国利益を最大化する方向へ向かうと考えられる。米国 NNI2014 は国内産業振興、特に各省庁が出口目標を示すことによって中小企業への振興策を策定し、商業化により国民へベネフィットをもたら

すということを打ち出している。当然、特許に加えて別の方法による中小企業の保護策が必要になる。また、安全性評価の各論では欧州と一致しない点を残しながらも、応用技術の安全性評価では企業の参加も含めて欧州との協力体制を構築している。これは、大企業でも採算の取れない、あるいは米国でも負担の重いナノ応用製品の安全性評価を欧米産官学共同で行いそれをツールにして利益の最大化を図る方策を戦略的に行うことである。公費が投入され、プロジェクトに参加する企業は利益を得ることになるが、協力する企業の貢献は先行者利益を認めることで補償しつつ情報公開（欧米企業を優先する）を前提とすることでバランスを取っている。なお、これらの情報は NanoXXX から得られる。

第二に、バリュー・チェーンにおける安全性の担保は欧州 REACH、RoHS 指令の考え方と同じであり、特に欧州域外の企業にとって大きな負担となる。米国も欧州 REACH 的な考え方の導入を示唆するようになってきている。米国は輸出入、製造について EPA 管轄の TSCA(化学品規制)における SNUR(重要新規利用規則)でナノ酸化チタンと CNT について細かい利用規制を設けている。一律の基準ではなく EPA と「話し合い」を行うことで決定されるので、EPA のさじ加減によりバリュー・チェーン規制（実態はサプライ・チェーン規制）を導入することは可能である（既に用途規制は申請毎に行っている）。サプライチェーンの各ステップにおける安全性規制が導入されると、原料調達、ナノ材料合成、一次・二次加工、部品、組み立て、輸送、使用、廃棄の各段階で安全性評価データが必要となるので、企業活動に大きな負担となる。米国内でも原料については企業集団で「標準的」なサンプルによる許可を求める活動が行われている⁴⁶⁾。化学物質と微細粉塵技術は兵站における人員の安全確保と能力の維持という観点から、米国と旧 NATO 諸国は政策として技術を安定継続的に維持してきた。最近の国際紛争やテロへの対応から NNI2014 や Nanosafety Cluster においても化学物質、バイオハザード検知センサは重要開発項目となっている。このように、歴史的・政治的背景から研究施設の数と規模で欧米は他の国々を圧倒している。米国ではナノ材料毒性評価を行える研究機関は少なくとも 10 カ所、同様に欧州は少なくとも 6 カ所ある。米国の場合、宇宙空間における生存環境維持研究のために NASA に継続した微細粉塵研究プログラムが存在することもポイントである。民間企業でこれらに匹敵する評価をできる会社は総て外資系である。我国では世界的に通用するデータを出せる機関は 2 カ所であるが、プロジェクト単位で運営されているので専用施設ではない。日米欧以外ではナノ粒子安全性評価を安定して行える吸入ばく露試験装置を保有していない。

欧米はナノ安全性評価を最終的には OECD および ISO で標準化しようと試みているが、前述のように実態は欧米の「ローカル・ルール」の国際化の可能性が高い。他方、日本は CNT に関していえば Mitsui MWNT-7 の供出元であり、他のナノカーボンについても信州大学から物性調整と Characterization を行ったサンプルを日米欧の主要研究機関に数々提供している。再現性と信頼性から世界的に未だ信州大学が規準となるナノカーボン材料の唯一の供給元となっている。また、ナノ毒性試験においても日本バイオアッセイ研究所 (JBAR) の多層 CNT の長期連続吸入ばく露試験、国立医薬品食品衛生研究所 (NIHS) のナノ粒子完全分散試験法 (Taquann 法)、両研究所の病理評価などは世界的に高く評価されている。このように、日本の安全性評価科学技術は欧米に比べて遅れ

ている訳ではなく、むしろ毒性・バイオと材料科学の連携としての“Responsible Development”の観点からは他に先駆けて実践していると言ってよい。

（日本の課題）

日本の課題は、戦略的科学的観点の不足から、安全性に関する議論が特定対象の安全性の有無に集中しがちで、結果として体系的取り組みとそれを支える体制が脆弱なことである。対して欧米は、安全性評価技術研究の基盤が国家安全保障戦略（軍事、産業）とも並存している。運営面でも欧米では司令塔を明確にしている。米国は NNI2014 より National Science Foundation ではなく National Science & Technology Council の基で NIST が核になっている。欧州は EC DG Research の下に 2013 年からオランダの RIVM が核になっている。いずれも、科学系に加えて法律、社会学、経済、情報収集と分析の分野が糾合されている。日本はどうしても予算とともに省庁別になってしまい、一体感がないように海外から見られている。対応組織構造の検討も必要であろう。

また、日本企業は未だに安全性評価を付随的なもの、あるいはビジネスの妨げと捉える傾向があり、特に経営層の理解が乏しい。技術サービスとして東レ、旭化成、三菱化学が毒性評価分析サービスを提供しているが、BASF や DuPont のような安全性評価で世界的リーダーになれる組織、人材、設備、戦略を持つ企業が存在しない。例えば、自動車分野では内燃機関やタイヤから排出される炭素微粒子の研究評価は大気汚染研究と規制として捉えられ、日本の産業全体から俯瞰したベネフィットとリスクという観点での検討は行われていない。対象が自動車産業に限定されるため、安全性評価の費用対効果評価が低く見積もられることから、安全性評価の進捗が阻まれ、結果的に欧州に頼る部分が多く、欧米の研究に遅れをとることになっている。今後は、通商にナノテク安全性の標準化が大きな影響を及ぼすという認識を、産業界のトップ・マネジメントは持たなくてはならないだろう。

日本には、化学・物理、生物学、医学に加えて倫理、法律、経済、社会学、政策を含めた包括的教育を行う大学や学問分野が存在していない。かろうじて日本毒性学会はその任を担っているが、予算・活動規模は十分とはいえない。対して米国 University of West Virginia、University of Montana、University of Rochester は、安全性に関する学科を有している。特に University of Rochester は世界で最大の、毒性、安全性学の学部を持ち世界的に重要な研究者を多数輩出している。

基礎研究では依然として先頭集団にいる日本のナノテクノロジー・材料科学技術からのベネフィットを社会が享受するためにも、ナノテク応用製品の通商戦略は欠かせない。しかし、上述のように材料産業としてみた場合、市場規模が小さく安全性評価費用を捻出することはビジネス合理性が無くなる。一方で、ナノの安全性評価とその標準化を全面的に海外に委ねることは、科学技術・政策的課題として諸外国と対等に交渉するすべを放棄することになる。安全性評価の基盤整備を行うことは必要であるが、特に人的リソースを考慮すると数年で質量ともに欧米の水準に達することは、容易ではない。今後、ナノテクノロジーは総ての産業分野に重要な影響を及ぼすことから、世界と伍して行くためにもナノテク材料の恩恵にあずかる産業及び社会全体へのベネフィットの観点からの政策的検討が必要であろう。また、急速に活動を展開させている新興国との協調・共

同の方策も求められる。

現在わが国では、OECD や ISO の活動を通じた標準化の戦略も現時点では実効化できる体制がない。国際的に流通する商品を開発する際には安全性の確保された商品でなければ輸出できなくなるような状況も想定されることを考慮すると、国内政策としてナノ材料の安全性確保に関する政策や管理システムを構築し、さらにこの国内基準に合った安全性データを官民が共同して積極的に蓄積していくことで、日本で適合した製品を、自信を持って国際的に流通させることができるような体制に向けた取り組みを、早急に始めることが必要と考えられる。

(国際的な課題)

OECD や ISO といった国際機関での議論の進展や、各国の規制当局によるナノ材料の評価・管理が進められつつある状況を踏まえ、研究面で急務と考えられるのは、ナノ材料をグルーピングや有害性推定の枠組みの構築である。そのためには、ナノ材料の作用機序 (AOP) の理解を深め、物理化学特性からの推定 (QSAR: 定量的構造活性相関) や、細胞試験や簡易な動物試験に基づいた推定 (統合試験戦略) の手法が必要である。グルーピング (カテゴリー化) の議論は、例えば、2014 年には、OECD/WPMN の主催の専門家会合が開催され、物理化学的特性、人健康、環境運命、生態毒性、暴露といった様々な観点からのカテゴリー化が議論された¹²⁾。そこでは、提言として、評価のための物理化学的特性評価手法の開発、カテゴリー化を支援する細胞試験や動物試験方法の開発の重要性が確認された。また、NIA (Nanotechnology Industrial Association ナノテクノロジー産業協会) は、ナノ材料のグルーピングと類推に関するシンポジウムを開催し、そこでは、ナノ材料の試験数を減らし、材料設計によって安全性を確保し、適切な材料同定情報を決定するためどのようにグルーピング (カテゴリー化) が可能なのか、どのような物理化学的パラメータが有用なのか、同じ組成のバルク材料からの類推は可能なかが議論された⁴⁷⁾。米国とカナダの規制協力協議会 (RCC: Regulatory Cooperation Council 規制協力評議会) のナノテクノロジーイニシアチブでは、主に材料の種類 (炭素系や酸化金属など) に基づく分類が提案されている⁴⁸⁾。欧州化学品庁 (ECHA) は、「ナノ材料のリスク評価における規制上の挑戦」と題する化学ワークショップにおいて、トピックの一つとして、カテゴリー化と類推の問題を掲げている⁴⁹⁾。

また、ナノ材料に関する計測技術の整備も重要である。それは、サイズやサイズ分布に基づく「ナノ材料」の定義を実際に運用するため、また、物理化学特性に基づくグルーピングや類推を行うためである。健康・環境・安全の観点からの計測の取り組みの重要性はこれまでも認識されており、OECD/WPMN は、ナノ材料の試験に際しての試料調製や計測に関するガイダンス文書を作成するとともに²⁶⁾、最近、ISO/TC229 JWG2 (計量・計測) との協力のもとに、物理化学的特性に関する専門家会合を開催した¹¹⁾。欧州では、欧州委員会の「ナノ材料」の定義を運用するにあたって、JRC (Joint Research Center) が、主に粒子サイズの計測技術に関して、入手可能な手法とその得失等について論じたレポートを作成し⁵⁰⁾、さらに、欧州第7次研究枠組み計画 (FP7) のプロジェクトとして「欧州委員会によるナノ材料の定義の実施を支援するための、有効性が確認され標準化された手法に基づく統合的アプローチの構築」(通称 NanoDefine) が開始さ

れた⁵¹⁾。日本では、必ずしも健康・環境・安全の観点からのものではないが、「ナノ材料の産業利用を支える計測ソリューション開発コンソーシアム」が発足するなどしている⁵²⁾。このようにナノ材料の計測に関する取り組みは活発化しているものの、有害性の機序の理解、物理化学特性との関連性への理解が十分でない現状では、どの物理化学特性をどのような精度で測定すべきかを定めることはできない。また、OECD/WPMN のカテゴリー化に関する専門家会合での提言でも、物理化学特性の評価手法の重要性が確認されつつ、定義・用語の明確化と一貫した使用の必要性が特記された。計測分野と有害性・リスク分野との更なる連携が必要であるといえる。

海外では食品や環境中でのナノ材料の検出技術の検討が進められているが、わが国ではほとんどこの分野の研究者がいなかったことが懸念される。NEDO プロジェクト「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」は、カーボンナノチューブ、フラーレン、二酸化チタンの暫定 OEL の導出をもって一段落した。しかし実際には、ナノ材料の粒径、表面積、長さがハザードに及ぼす影響、体内動態(ADME)などは、多くが未知であり、しかもそれらの解明には長期の研究を要するものが多い。したがって、これまで以上に大学研究者が参画すべきであろう。また、これらは必ずしもネガティブな影響の評価とは限らず、ナノ材料の医療・バイオ利用に役立つ可能性も十分にある。毒性学に限定せず、ナノ材料の生体内の挙動という、より大きな枠組みで研究開発領域を設定して、幅広い活動の検討が必要と考えられる。さらに、ナノマテリアルの健康影響に限らず、環境影響や将来のナノマニュファクチャリングの安全性などにもスコープを広げるべきであろう。

リスクコミュニケーションや ELSI の観点では、将来実現されうるナノテクノロジーに関して、その社会的影響を評価するテクノロジーアセスメントが重要である。その具体的な活動は多様なステークホルダーによる討論、市民パネルなどである。これまでの活動では、既存の課題、特に医療、バイオ、食品、環境に関連するものが多かった。国内では JST 社会技術研究開発センター(RISTEX)「先進技術の社会影響評価（テクノロジーアセスメント）手法の開発と社会への定着」の終了後は目立った活動がなく、この活動を実際に活かす施策が存在しない。ナノテクノロジーに限らず、テクノロジーアセスメント全般について、継続した施策が無いことが課題である。同時に人材（自然科学の素養も持つ社会学者）の育成が必要であり、それには彼らのキャリアパスの確立も含まれる。日本は、リスクコミュニケーションについて情報発信力が強いとはいえず、インタラクティブでもない。米国や欧州ではナノテクノロジーの社会受容の課題は、研究分野の融合によって成果をあげるという研究の性質から、早くから中核的な研究開発と並行して進められるべき分野として捉えられてきた。EHS や ELSI など関連の課題の研究が政策的に明確に位置づけられ、関連プログラムの実施により具体化されている。しかし、日本では高等教育機関における伝統的な区分がそのような形のプログラムの開発・実施にマイナスに働く。したがってナノテクノロジーの社会受容に関して継続的に取り組んでいるケースは極めて少ない。社会受容に関する人材育成を担う単位取得可能な講座として大阪大学ナノデザイン教育研究センターでの試みは注目される。また、ナノ材料を作製する事業者が自己の努力、見識でリスク評価をし、国民に伝える能力の獲

得と文化の醸成が必要である。その意味で、産総研ナノシステム研究部門の Web ジャーナル「PEN News Letter」(PEN: Public Engagement Nano-Based Emerging Technologies) は、現地情報を含めた国際情勢の質の高い分析や系統的・定期的な総括があり、ナノリスクだけでなく各国の最新の政策情報も掲載されていて日本では特徴的な情報センターと見ることができる。米国ではアリゾナ州立大学、ウィスコンシン大学、カリフォルニア大学などでナノテクノロジーの社会受容について学ぶことのできるプログラムが提供されている。また、欧州では様々なナノテクノロジーの社会受容関連のプログラムが実施されている。

(4) 注目動向

[新たな動向]

ナノテクノロジーの産業化と、これらに連動し、社会実装を行う方策の安全性評価プロジェクトは欧州 NanoSafety Cluster に網羅されている²⁸⁾。30 以上のプロジェクトが記載されているが NanoRelease など米国主導のもので記載されていないプロジェクトがある。この中で、全体を俯瞰するのは NanoMile であり OECD/WPMN プロジェクトとの連携がとられている。目標としてナノ材料安全性を毒性予測計算手法の QSAR⁵³⁾で演繹推定算出することを目指す⁵⁴⁾が、QSAR の実績はピレストロイド系農薬の一部にししか適用可能性が見いだされていない。QSAR を実用化するには膨大なデータ蓄積と ITC 処理が必要となるが、その情報とプロトコルを保有し EC 域内の企業へだけ情報提供することは通商上大きな脅威となるだろう。米国では TechConnect 2013 Exhibition において中小企業振興策として各省庁からターゲットを定めた技術開発助成策が開示され、プロジェクトが開始されている(次節参照)。

多様なナノ材料の有害性を効率的に評価するためには、物理化学特性からの推定や、細胞試験や簡便な動物試験による評価が可能になることが望まれる。しかし、ナノ材料の有害性の機序が必ずしも十分理解されていない現状においては、物理化学特性からの推定や細胞試験のみに依拠することは困難であり、簡易な動物試験も含めた階層的な評価体系(統合試験戦略)を想定することが必要である。欧州では、各種の細胞試験と簡易な動物試験を併用することで、生体反応と体内動態の知見を得て、それが更なる詳細な試験が必要かどうかを判断する枠組み⁵⁵⁾や、物理化学特性と用途(Tier 1)・基本的試験(Tier 2)・材料毎の詳細な試験(Tier 3)からなる枠組み⁵⁶⁾が提案されている。

また、我が国でも、経済産業省プロジェクト「ナノ材料の安全・安心確保のための国際先導的安全性評価技術の開発」では、Tier 0 として、既に有害性評価済みのナノ材料と同等とみなすことができるかどうかを判断、Tier 1 として、有害性のスクリーニング試験法としての気管内投与試験を実施、Tier 2 として、従来の亜急性/亜慢性の吸入暴露試験を行うことを提案している⁵⁷⁾。

上記のような評価体系を構築するには、簡易な動物試験方法の構築が重要となる。呼吸器系の暴露を想定した簡易な動物試験方法として、気管内投与試験⁵⁷⁾や 5 日間短期吸入試験⁵⁸⁾を用いるための研究開発が最近活発化している。また、吸入暴露試験をなるべく簡易に行うためのエアロゾル発生方法の開発もなされている³⁶⁾。

[注目すべきプロジェクト]

海外の大規模プロジェクトとしては、欧州の FP7 によるプロジェクトが目立つ。ナノ材料の行政的な評価での活用を想定したプロジェクトが複数進行している。米国では、ナノ材料応用製品からの排出・暴露の評価プロジェクトが進行中である。

MARINA プロジェクト： FP7 の NanoSafety Cluster は NanoValid と MARINA の主要プロジェクトを有し、その予算規模は、18.6 百万ユーロある⁵⁹⁾。MARINA (期間 2011 年～2015 年) は、主査を Lang Tran (IOM) とする EU のナノリスク評価プロジェクトであり、目的は、ナノ材料のリスクマネジメント方法の開発とその立証で、18 個の WP (Work Package) から成る。種々の EU プロジェクトと共同できるように MARINA が EU NanoSeftycluster をサポートしている。REACH の条件を満たすリスク削減戦略の検討を行っている。マテリアル、暴露、ハザード、リスクの 4 テーマを柱として、これらに関係する最先端のツールを開発し、それらを、人間と環境のための有用なリスク管理ツールとして構築することを目的としている⁶⁰⁾。リスク評価を、標準ナノマテリアルの作製、毒性評価、暴露評価、計測の標準化を柱として、EU を中心とする公的研究機関、大学、民間企業の参加によって進めるプロジェクトであり、EU から 44 機関と日本、中国、ロシアが参加している。日本は NIMS が代表機関であり、東京理科大学と相模女子大学も MARINA プロジェクトに参加している。NIMS は試験サンプルとしてフラーレンナノウィスカー(FNW)の合成を担当している。MARINA は、試験サンプルの均質化と安定化を達成し、ナノマテリアルの特性評価と分散についてのプロトコルを完成させ、標準サンプル (reference materials) とその評価方法についての論文の投稿と、標準サンプルの毒性評価研究を行った。また、NanoVALID にマテリアルと情報を供給した。今日まで、Ag、ZnO、TiO₂、SiO₂、MWCNT、C60、fullerene nanowhisker (フラーレンナノウィスカー) についての研究成果が報告されている。OECD/WPMN においては、工業ナノ材料分散プロトコルについて OECD ワークショップ (2013 年ベルリン) で発表し、環境中への工業ナノ材料の分散についてもワークショップ (Vienna, 2014) の中で発表している。また、Joint Research Centre (JRC) of the European Commission において SiO₂ の物理化学的性質について報告している。また、MWCNT と TiO₂ についてはレポートを準備中である (2014 年時点)。人間への暴露評価については、NanoREG、SUN、GuideNano などのデータベースと MARINA のデータを集めて、Exposure Scenario Database を更新した。最新の曝露評価モデルをレビューし、曝露評価サーベイプロトコルを完成。環境中でのナノマテリアルの運命(fate)と曝露においては、環境毒性関連媒体 (下水排水中や土壌中の動態) における評価を行った。顕微鏡を用いたナノマテリアルの様々な媒体中の検出技術が進み、ICP-MS を用いての単粒子のデータ新解析法について出版を行った。海水浴場における TiO₂ ナノ粒子についてのフィールド調査を行った。金属酸化物ナノ粒子一連についてのインビトロテストが終了し、MWCNT については継続中である。またインビボ、ex vivo テストについては、経口、吸入、静脈注入試験が進行中であり、最終段階にある。環境毒性学については、OECD test guidelines に沿って陸水におけるテストが求められている。システムトキシコロジーと作用機序に

について multi-omics analysis of transcriptomics, proteomics, and metabolomics data が進行中である。インビトロテスト方法についてまとめており、その結果をインビボテストの改善ガイドラインとしてまとめている。人間へのリスクアセスメントについては、工業ナノ材料の代替品の探求、*vitro*—*vivo* 試験結果に基づいた *vitro* 試験結果の応用可能性の検討をしている。さらに環境リスクアセスメント戦略との統合を検討している。そしてリスク減少戦略を進めている。以上の他に、意図しない事情によって引き起こされたリスクについての対策検討、やモニタリングシステムも対象である。定期的に電話会議を行って、EU-US との間の情報交換を進めている。

ITS-NANO⁶¹⁾: 工業ナノ材料の合理的な試験戦略 (ITS: Intelligent Testing Strategy) を構築することを目的とする。そのために、短期的には、グルーピングやランキングを可能にするために物理化学特性・暴露・有害性の間の関連性を理解すること、長期的には、試験を削減するためのモデリングアプローチの構築、さらに将来には、特定の対象については追加情報を得る試験を行いつつもモデリングと外挿に基づくリスク評価を基本とする絵姿を描いた。プロジェクトの一環として知識ギャップ解析に基づく戦略的な研究優先順位付けを行った。2012 年から 2013 年。欧州の 10 機関が参画した。

NANOSOLUTIONS⁶²⁾: ナノ材料と生体との相互作用を、材料の特性に基づいて、分子・細胞・個体レベルで理解し、有害性ポテンシャルを決定する材料特性を同定すること、ひいてはナノ材料の安全性の分類を行うことを目的としている。ナノ材料の表面化学と生体分子コロナの役割に焦点を当てている。欧州の 36 機関（公的研究機関、大学、企業）が参画している。

NANoREG⁶³⁾: 「ナノ材料の行政的な試験のための欧州の共通アプローチ」短期的には、規制当局に対してリスク評価のツールと意思決定の手段を与えること（いくつかの材料に対するデータの取得とリスク評価の試行による）、長期的には、多数のナノ材料に適用可能な新しい試験戦略の構築、さらに、当局間の協力体制や相互受け入れ可能なデータベースの構築を目指している。欧州の 59 機関（公的研究機関、大学、企業）が参画している。

NanoDefine⁵¹⁾: 「欧州委員会によるナノ材料の定義の実施を支援するための、有効性が確認され標準化された手法に基づく統合的アプローチの構築」。ナノ材料の定義を最も経済的に実施するための手法選択と物質分類のための半自動の意思決定ツール、入手可能な計測方法の技術文書、標準的操作手順、機器校正のための標準と参照物質、装置の試作品、技術移転を目的としている。2013 年から 2017 年。欧州 11 ヶ国の 29 機関が参画している。

Nano-Release⁶⁴⁾: ナノ材料応用製品からのナノ材料の排出を理解するための方法の構築、将来的には、研究ニーズの特定と研究実施及び手法の標準化を目的としている。フェーズ 1: ナノ材料の選定、フェーズ 2: 方法の評価: フェーズ 3: ラボ間比較という構成となっている。2011 に開始され、樹脂中の多層 CNT を対象として、フェーズ 2、3 の研究が進められている。米国とカナダの機関による。

TechConnect 2013 Exhibition の基礎となっている NNI2014 の内容を見ると、出口政

策の設定方法が今までと異なり、活動主体もベンチャー創出から中小企業育成にシフトしていることに加えて、科学技術政策の運営もこれまでの米国の標準とは異なっている。通常、米国では医療・バイオおよび安全関係は NIH が指令塔としてプロジェクトを束ね、それ以外は国立科学財団（NSF）が担当している。興味深いのは遺伝子治療や遺伝子改変技術などのバイオ分野をナノテクに繰り入れていることである。NNI2000 は通常通り NSF 主導であったが NNI2014 では実務中心を商務省傘下の NIST へ変更しており、既に NIST 研究所内に 2 グループを編成して活動を開始している。このことはナノテクに対する米国の姿勢を考える上で重要である。第一に、科学の中で別扱いであったバイオと医療分野を、ナノテクを軸とする体系に再編することである。ナノテクを共通基盤として異分野水平融合ではなく垂直の体系へ転換を図っているともとれる。また、NIST によって一括オペレーションにすることで活動上も安全性評価と材料研究を一体に掌握する形になっている。第二に、研究組織である NIST が司令塔になることである。NIST は研究範囲が広く、特許はいうに及ばず輸送や取引の基準（ASTM）作成にも関わる実務組織である。この運営母体の変更は、中間管理組織無しの実務直結になりプロジェクト推進がダイナミックになるだけではなく決定も早くなる。このように NNI2014 はテーマだけではなく実行手段も大きく変更されている。

その他の国・地域としては、台湾がアジアの中で最も早くナノ EHS に着手し、現在もアジアナノフォーラム（ANF）のリエゾンメンバーの立場を活かして、OECD-WPMN、ISO TC229 に関与している。台湾の經濟部工業局からの委託を受けて工業技術研究院（ITRI）が実施している「奈米製品検査体系計画」（ナノマーク制度）は、政府の進めるナノテクノロジー研究開発戦略のもとで、ナノテクノロジーの産業化を支援・促進するものである。ナノマークは所定の規格を満たしたナノ製品に対して付与される。2014 年 9 月現在で有効なナノマークが付与された企業および製品は 37 社 1257 製品である。台湾国内で 13 カ所の認定試験機関が登録されている。

韓国は、2012 年からナノ融合産業に 8 年にわたって投資し、ナノテクノロジー起業を支援し、雇用を創出するナノ融合 2020 事業を進めている。環境部と国立環境科学院は、2013 年にナノマテリアルの安全性や有害性評価等に関する詳細な情報を提供する「ナノ安全性情報システム」を公開している。韓国版の REACH と呼ばれる「化学物質の登録および評価等に関する法律（化評法）」が 2015 年に施行される。

シンガポール、タイも積極的に関与している。タイでは、国立ナノテクノロジー研究センター（NANOTEC）が中心となり、ナノテクノロジーの研究開発および EHS、ELSI 問題にも大きい関心を寄せている。最近では、NanoQ と呼ばれるナノテクノロジー製品認証システムの運用を開始した。OECD WPMN へもオブザーバとして参加している。タイ政府はナノテクノロジー研究開発を経済の成長の原動力と位置づけている。社会受容に関連の様々な課題について政策 National Nano Safety and Ethics Strategic Plan 2012-2016 を定め、研究開発と並行して取り組むこととしている。また台湾に倣ってナノテクノロジー産業化の促進のために製品への認証付与制度が設けられている。

近年特に注目されるのはイランである。イラン・ナノテクノロジー・イニシアチブ・カウンスル（INIC）を設立し、タイや台湾に倣ってナノテクノロジー製品への認証に動

き出しており、ISO における標準化活動や EHS への取り組みや国際会議を主催するなど積極的に取り組んでいる。

また、ANF ではナノ安全に関する新たな定例シンポジウム「Asia Nano Safe (ANS)」を 2013 年から開始した。

国内では、以下に限られている。

NEDO プロジェクト「低炭素化社会を実現する革新的カーボンナノチューブ複合材料開発」研究開発項目③「ナノ材料簡易自主安全管理技術の構築」(2010-2014 年度)。事業者による自主安全管理技術の構築を目的とし、CNT 等について、細胞試験による簡易な有害性評価技術や、作業環境での勘弁な暴露計測手法を開発し、これらの手法を手順書・手引きとして公開している¹⁷⁾。

経済産業省プロジェクト「ナノ材料の安全・安心確保のための国際先導的安全性評価技術の開発」(2011-2015 年度)。行政的な観点から、評価の効率化のため類似のナノ材料を集約して評価するための判断基準 (ナノ材料の同等性の判断基準を構築するとともに、初期有害性情報を取得するための低コスト・簡便な動物試験手法として気管内投与試験を位置づけるための検討が行われている⁵⁷⁾。経済産業省では 2008 年度よりナノマテリアルの製造事業者に対する調査「ナノマテリアル情報収集・発信プログラム」が継続されており、延べ 31 社が情報を提供している。欧州の REACH 規則の下で進められているナノマテリアルの届出・登録とは性質が異なるものの、国内で製造・流通するナノマテリアルについて把握することが可能である⁶⁵⁾。

(5) キーワード

ナノ材料安全性評価、ナノマテリアル、リスク評価、リスク管理、リスクマネジメント、リスクコミュニケーション、社会受容、国際標準、標準化、不確実性、毒性学、有害性、ハザード、ばく露 (暴露)、吸入ばく露試験、作業環境、体内動態、ラベリング、テクノロジーアセスメント、アウトリーチ、教育、人材育成、サイエンスコミュニケーション、ナノカーボン、カーボンナノチューブ、フラーレン、ナノファイバー、二酸化チタン、工業ナノ材料、ナノ粒子、ナノ製品、EHS、ELSI、OECD WPMN、OECD WPN、ISO/TC229、REACH、ECHA、EFSA、FDA、EPA、PMN、SNUR、FSA、WHO、FAO、Nanosafe Cluster、Responsible Development

（６）国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	取り組み水準	○	→	国内ナノ安全性プロジェクトについては既報 ^{17) 57) 66) 67)} 参照。 中央労働災害防止協会日本バイオアッセイ研究センターの多層CNT長期吸入ばく露試験が2014年6月末で動物実験終了、詳細解析に入った。この2年の全身ばく露連続吸入ばく露試験は世界で唯一の試験であり欧米が注目している。 国立医薬品食品衛生研究所の開発した吸入ばく露試験装置と方法(Taquann法)は、ナノ粒子凝集体を容易に分散できる方法である。 信州大学は多層CNTの標準品、改質品を合成、Characterizationを行い、日米欧の主要研究機関に提供している。信州大学は米国NIOSH等と共同で安全なCNTのデザイン方法を構築するための研究を進めている。 呼吸器経由の暴露による有害性に関する研究活動は一定水準にあるものの、経口や経皮といった他経路の暴露による有害性、環境運命や生態毒性、ライフサイクルでの排出・暴露などについては研究が限られていて、全体として層が薄い。 安全性評価の戦略的な施策が実施されない。学際的なため「ナノ材料安全性評価研究と情報収集」のような項目がどこにも無い。
	実効性	×	→	ナノ材料合成技術、毒性評価技術では世界をリードする技術があるが、欧米のように総合的な戦略として確立されていないので研究者間の努力に委ねられている。 各々の省庁の職掌範囲で安全性評価、国際対応が行われているのでOECD等国際会議で日本として統一した意見の表明がなされていない。この状況は研究者間では知られていて改善を求める声が出されているが、進捗がほとんど無い。OECD WPMN、ISO/TC229には積極的に関与しある程度の主導権をとっており、この点が課題である。各企業からの安全性データは欧米への流出が進んでいる。 リスク評価に不可欠のISO文書として発行されたものが無い。 ナノテクノロジーの基盤として安全性研究と政策が捉えられておらず、継続的で戦略的な安全性評価プログラムと組織が無い。 政府・政府関係組織による企業幹部（及び社会全体）への安全性についての教育プログラムが皆無で、「安心」という情緒的な感情論に陥りがちで科学的知見を社会へ還元できていない。
米国	取り組み水準	◎	↗	NNI2014で安全性を総ての科学技術の横断的基盤技術とする戦略を建策し、実行プランを示している。 プロジェクト推進の中心機関をNIOSHとNISTとすることでより迅速で効率的な安全性評価研究を推進する体制を整えている。 欧州と協調してテーマ別にプロジェクトチームを編成して産官学で産業応用のための安全性評価を開始した。重点市場分野は、ドローン（無人機）、通信、半導体、タイヤ、インフラ材料、バイオ（ナノテクでバイオを実用化する）、センサ。総ての分野でナノカーボンが関係する。 EPAが中心となりOECD等国際標準検討プロジェクトのリーダーシップを掌握することを推進している。「国際的な標準」の確立を米国規準で押し進めようとしている。 ナノ材料産業化の規制を重要ナノ材料であるCNTとナノ酸化チタンで強めている。EPAが既存の法律の枠内で実効性を持たせることを進めていて、単なる規制強化ではなく国益に規準を置いた「指導」の形を強めている。
	実効性	◎	↗	OECD WPMNでは、議論をリードする役割を果たしている。OECD WPMN主催のナノ材料のカテゴリー化に関する専門家会合を誘致 ¹¹⁾ 。今後の国際的な評価体系の作成に影響を及ぼす可能性がある。 ナノ材料のグルーピングやカテゴリー化に関心が高い。カナダの規制当局（ナノマテリアルの登録に関してはEPAとHealthCanada）との合同会議（RCC）において、物性等に基づいた評価のクラス分けスキーム（カテゴリーゼーション）が提案された ⁴⁸⁾ 。

欧州	取り組み水準	◎	→	EU全体の主要研究機関及び規制官庁の共同による、統一したNanosafety Clusterを形成してプロジェクトを推進。中心になるのはEC DG Researchだが実効推進中心機関を2013年に独Helmholtz研究所から蘭RIVMに変更した。RIVMはエンジン排気微粒子研究では世界的な権威である。 欧州の主要論文誌にNanosafety Cluster成果を優先的に論文掲載することを行っている。国際標準化作業に影響を及ぼす。 FP7に基づく多数のプロジェクト、MARINA、ITS-NANO⁶¹⁾、NANOSOLUTIONS⁶²⁾、NANoREG⁶³⁾、NanoDefine⁵¹⁾、Q-Nano、NanoValid。 動物試験に制約があるのでin vitro試験方法とITC技術を活用した毒性評価方法の開発を10年以内に確立することを目指す。具体的にはQSARを使用する。 毒性評価技術は日米と同等であるが毒性研究は旧NATOの安全保障技術の一部であったので基盤が充実していて研究所、研究者の数は圧倒。Univ. Dublinのようなバイオに強い毒性研究所、仏・スイスのように大型放射光を使った毒性研究等、材料科学、バイオ、エネルギー、物理学が共同してプロジェクトを推進する体制がある。昨年からは¹⁴Cで作成したCNT合成を行っているが日本では実施が不可能であるようなテーマを持つ。 ナノ粒子の標準品は欧州メーカーの物がほとんどであるが、ナノカーボン科学は日本が優位にあるので標準化で牽制対応する傾向がある。
	実効性	◎	↑	Horizon 2020のNMP-30-2015 “Topic: Next generation tools for risk governance of nanomaterials” は、巨額予算 (€148,370,000)。市場に投入されるナノマテリアルのリスクの評価、伝達、情報交換のためのツールを開発し、リスク管理のための基盤を構築するという明瞭な目標を設定。 Nanosafety Clusterは学際的枠を超えた組織でNNI2014同様、戦略的組織力を持つ。 FP7に基づくプロジェクトは、多くが産学官の連携によるものであり、基礎研究が行政ニーズをつなぐ役割を果たしている。BASFなどの企業の研究者の関与が大きい。 毒性評価の要である動物実験に厳しい社会状況があるのでPathologyとThreshold議論で弱みがあるが、ICTを活用した分析評価には研究者を100人以上投入して米国以上。 フランスやベルギーでの登録制度の開始の決定、REACHでのナノ材料の取り扱いの議論が活発化。 米国との協調により安全性に関する標準を確立することは、産業と貿易において、他国に影響する可能性が高い。
中国	取り組み水準	○	↑	毒性評価研究の基盤が無いので欧米に多くの研究者が派遣されているが欧米の研究所に留まる傾向。ISO等の提案と評価内容も急速に日米欧に追いつきつつある。 環境保全と安全性は中国の大きな課題なので2012年米国毒性学会に100人以上の研究者と政府関係者が参加。 欧州、日本のナノ安全性学会への参加は少ない。 台湾環境省は、ナノテクノロジーのEHSに関するデータベース (TaiNED) を公開した⁶⁸⁾。
	実効性	△	↑	ナノマテリアルの標準化、特に国家標準規格 (GB) の策定においてはNCNSTを中心に活発な活動。 しばらくの間は欧州のREACHを採用してナノ応用製品への規制を進めるものと予想される。 近い将来、米国で学んだ研究者が帰国して実績を上げていく可能性がある。 台湾の労働安全衛生研究所がナノ材料の安全な使用に関するガイドラインを公開した。

韓国	取り組み水準	△	↗	2011年に国家化学物質管理基本計画が策定されナノ材料も優先順位が高い物質として位置づけられている。また、同年策定されたナノ製品安全性総合計画において、ナノ材料の安全性データベースや有害性の分析・評価手順の標準化を進めることになっている。 ナノ材料取り扱い作業所における作業者のばく露状況、健康調査データ提供では多くの貢献をしている。 環境部と国立環境科学院は、2013年にナノマテリアルの安全性や有害性評価等に関する詳細な情報を提供する「ナノ安全性情報システム」を公開している。なお、韓国版のREACHと呼ばれる「化学物質の登録および評価等に関する法律（化評法）」が2015年1月1日より施行されるが、現在明らかにされている範囲では既存の物質のナノスケール物質について別途の登録が必要とはされていない。 ISO/OECDにおいてはナノ銀についての報告、提案が出されている。銀ナノ粒子、カーボンナノチューブなどの工業ナノマテリアルについて多くの吸入曝露実験が行われている。
	実効性	○	→	・ OECD WPMN主催の毒性動力学に関する専門家会合の誘致や、ISO/TC229への関与など、国際的議論において、一定のプレゼンス。

現状についての比較

各国の取り組みの現状についての見識による判断を記載してください。（※絶対評価）

◎ 非常に進んでいる ○ 進んでいる △遅れている × 非常に遅れている

近年のトレンド

各国の取り組みが過去と比較してどのように変化してきているかについて、見識による判断を記載してください。

↗ 上昇・積極傾向 → 現状維持 ↘ 下降傾向

（7）引用資料・参考資料

引用資料:

- 1) National Science and Technology Council, Supplement to The President's Budget for Fiscal Year 2014, The National Nanotech Initiative, May 2013.
- 2) National Science and Technology Council Committee on Technology, National Nanotechnology Initiative Strategic Plan, Feb., 2014.
- 3) Lynch, I (edit), Nanosafety Cluster, Compendium of Projects in the European Nanosafety Cluster, 2014 edition, University of Birmingham, UK., June 2014.
- 4) ISO (2010) ISO/TS 8004-1:2010 Nanotechnologies --Vocabulary -- Part 1: Core terms
- 5) What is a "nanomaterial"? European Commission breaks new ground with a common definition.
http://europa.eu/rapid/press-release_IP-11-1202_en.htm?locale=en
- 6) NIA (2013) France publishes Results from the first Round of its Mandatory Nano Reporting Scheme.
<http://www.nanotechia.org/news/news-articles/france-publishes-results-first-round-its-mandatory-nano-reporting-scheme>
- 7) EPA (2010) Multi-Walled Carbon Nanotubes and Single-Walled Carbon Nanotubes; Significant New Use Rules, Federal Register/Vol. 75, No. 180/Friday, September 17, 2010/Rules and Regulations.
- 8) NIA (2013) UN Expert Committee approves Nanomaterial Work Item.
<http://www.nanotechia.co.uk/news/news-articles/un-expert-committee-approves-nano-material-work-item>
- 9) OECD (2012) Inhalation Toxicity Testing: Expert Meeting on Potential Revisions to OECD Test Guidelines and Guidance Document. Series on the Safety of Manufactured

- Nanomaterials, No. 35, ENV/JM/MONO(2012)14.
- 10) OECD (2014) Ecotoxicology and Environmental Fate of Manufactured Nanomaterials: Test Guidelines. Expert Meeting Report. Series on the Safety of Manufactured Nanomaterials, No. 40, ENV/JM/MONO(2014)1.
 - 11) OECD (2014) Report of the OECD Expert Meeting on the Physical Chemical Properties of Manufactured Nanomaterials and Test Guidelines. Series on the Safety of Manufactured Nanomaterials, No. 41, ENV/JM/MONO(2014)15.
 - 12) 米国 EPA HP: September 17-19, 2014 OECD Expert Meeting on Categorization of Manufactured Nanomaterials. <http://www.epa.gov/oppt/nano/oecdconf.html>
 - 13) ナノテクノロジーの社会需要促進に関する調査研究：報告書・政策提言
http://unit.aist.go.jp/nri/ci/nanotech_society/Si_portal_j/doc/doc_report/summary_j.pdf
 - 14) 菅野純 (2012) 毒性試験と評価に関する新たな課題へのアプローチ:厚生労働科学ナノマテリアル研究の展開
http://www.nies.go.jp/risk/chemsympo/image/2-abstract_kanno.pdf
 - 15) 「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」 (事後評価) 分科会
http://www.nedo.go.jp/introducing/iinkai/kenkyuu_bunkakai_23h_jigo_8_1_index.html.htm
 - 16) 経済産業省 (2013) 「ナノ物質に係る今後の対応」、ナノ物質の管理に関する検討会 (第 3 回)
http://www.meti.go.jp/committee/kenkyukai/seisan/nano-material_kanri/pdf/003_04_00.pdf
 - 17) 産業技術総合研究所 HP: カーボンナノチューブの自主安全管理のための「安全性試験手順書」と「作業環境計測手引き」
http://www.aist-riss.jp/main/modules/product/nano_tasc.html
 - 18) Takagi et al. (2008) Induction of mesothelioma in p53+/- mouse by intraperitoneal application of multi-wall carbon nanotube. J Toxicol Sci 33:105-116.
 - 19) Poland et al. (2008) Carbon nanotubes introduced into the abdominal cavity of mice show asbestos-like pathogenicity in a pilot study. Nat Nanotechnol 3: 423-8.
 - 20) Donaldson et al. (2010) Asbestos, carbon nanotubes and the pleural mesothelium: a review of the hypothesis regarding the role of long fibre retention in the parietal pleura, inflammation and mesothelioma, Donaldson et al. Particle and Fibre Toxicology 2010, 7:5.
 - 21) Nagai et al. (2011) Diameter and rigidity of multiwalled carbon nanotubes are critical factors in mesothelial injury and carcinogenesis, doi/10.1073/pnas.1110013108.
 - 22) 中西準子 編 (2011) ナノ材料リスク評価書 -カーボンナノチューブ (CNT)-,最終報告版: 2011.8.17, NEDO プロジェクト (P06041) 「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」
 - 23) NIOSH (2013) Occupational Exposure to Carbon Nanotubes and Nanofibers, Current Intelligence Bulletin 65.
 - 24) 蒲生昌志 編 (2011) ナノ材料リスク評価書 -二酸化チタン(TiO2)-,最終報告版:2011.7.22, NEDO プロジェクト(P06041) 「ナノ粒子特性評価手法の研究開発」

- 25) NIOSH (2011) Occupational Exposure to Titanium Dioxide, Current Intelligence Bulletin 63.
- 26) 厚生労働省 (2013) 初期リスク評価書 No.70 酸化チタン (ナノ粒子)、化学物質のリスク評価検討会、<http://www.mhlw.go.jp/stf/shingi/2r985200000375tx.html>
- 27) 日本産業衛生学会 (2013) Recommendation of Occupational Exposure Limits, Journal of Occupational Health 55, 422-441.
- 28) NanoSafety Cluster, <http://www.nanosafetycluster.eu>.
- 29) OECD Nanotechnology and Tyres, ISBN 978-92-64-20915-2, (2014).
- 30) Tian FR, Cui DX, Schwarz H, Estrada GG, Kobayashi H. Cytotoxicity of single-wall carbon nanotubes on human fibroblasts. Toxicol In Vitro 2006; 20: 1202-1212.
- 31) Malich G, Markovic B, Winder C. The sensitivity and specificity of the MTS tetrazolium assay for detecting the in vitro cytotoxicity of 20 chemicals using human cell lines. Toxicology 1997; 124: 179-192.
- 32) Salem AK, Searson PC, Leong KW. Multifunctional nanorods for gene delivery. Nat Mater 2003; 2: 668-671.
- 33) Tominaga H, Ishiyama M, Ohseto F, Sasamoto K, Hanamoto T, Suzuki K, et al. A water-soluble tetrazolium salt useful for colorimetric cell viability assay. Anal Commun 1999; 36: 47-50.
- 34) Ley K. Physiology of Inflammation. Oxford University Press: New York, 2001.
- 35) Dinarello CA. Proinflammatory cytokines. Chest 2000; 188: 503-508.
- 36) Kostarelos K, Lacerda L, Pastorin G, Wu W, Kieckowski S, Luangsivilay J, et al. Cellular uptake of functionalized carbon nanotubes is independent of functional group and cell type. Nat Nanotech 2007; 2: 108-113.
- 37) Pantarotto D, Briand J, Prato M, Bianco A. Translocation of bioactive peptides across cell membranes by carbon nanotubes. Chem Commun 2004; 16-17.
- 38) Cui D, Tian F, Ozkan C, Wang M, Gao H. Effect of single wall carbon nanotubes on human HEK293 cells. Toxicol Lett 2005; 155: 73-85.
- 39) Kam N, Jessop T, Wender P, Dai H. Nanotube Molecular Transporters: Internalization of Carbon Nanotube-Protein Conjugates into Mammalian Cells. J Am Chem Soc 2004; 126: 6850-6851.
- 40) King MA. Detection of dead cells and measurement of cell killing by flow cytometry. J Immunol Meth 2000; 243: 155-166.
- 41) Chen P, Taniguchi A. Detection of DNA damage response by different forms of titanium dioxide nanoparticles using sensor cells. Journal of Biosensors & Bioelectronics, 3, 129 (2012).
- 42) Chen P, Kanehira K, Sonezaki S, Taniguchi A. Detection of cellular response to titanium dioxide nanoparticle agglomerates by sensor cells using heat shock protein promoter. Biotechnology and Bioengineering, 109, 3112-3118 (2012).
- 43) ナノセルロースフォーラム HP : <https://unit.aist.go.jp/brrc/ncf/index.html>
- 44) G. Oberdörster, A. Maynard, K. Donaldson, V. Castranova, J. Fitzpatrick, K. Ausman, J.

- Carter, B. Larn, W. Kreyling, D. Lai, S. Olin, N. Moteiro-Riviere, D. Warhei, and H. Yang, A report form the ILSI Research Foundation/ Risk Science Institute Nanomaterial Toxicity Screening Working Group, *Particle and Fibre Toxicology*, 2:8, doi:10.1186/1743-8977-2-8 (2005).
- 45) Donaldson, K., Poland, C.A., Nanotoxicity; challenging the myth of nano-specific toxicity, *Current Opinion in Biotechnology*, 24, 723-734 (2013).
- 46) Monica, J., ハーラン・グローバルセミナー、東京、Oct. 31, 2012.
- 47) NIA (Nanotechnology Industrial Association) HP: Report and external Coverage on NIA Symposium on Grouping and Read-Across now Available.
<http://www.nanotechia.org/node/18824>
- 48) SAFENANO HP: US and Canada develop Classification Scheme for Nanomaterials.
<http://www.iom-support.co.uk/KnowledgeBase/CurrentAwareness/ArticleView/tabid/168/ArticleId/416/US-and-Canada-develop-Classification-Scheme-for-Nanomaterials.aspx>
- 49) ECHA (European Chemicals Agency) HP: Topical Scientific Workshop – Regulatory Challenges in Risk Assessment of Nanomaterials.
http://echa.europa.eu/view-article/-/journal_content/title/topical-scientific-workshop-regulatory-challenges-in-risk-assessment-of-nanomaterials
- 50) Linsinger et al. (2012) Requirements on measurements for the implementation of the European Commission definition of the term "nanomaterial". JRC (Joint Research Center) Reference Report. ISSN 1831-9424, doi:10.2787/63490
- 51) NanoDefine project HP. <http://www.nanodefine.eu>
- 52) 産業技術総合研究所 HP : 「ナノ材料の産業利用を支える計測ソリューション開発コンソーシアム」の発足 http://www.aist.go.jp/aist_j/news/pr20130531.html
- 53) Lapenna, S., Fuart-Gatnik, M., Worth A., Review of QSAR Models and Software Tools for Predicting Acute and Chronic Systemic Toxicity, JRC Scientific and Technical Reports, EUR24639 EN (2010).
- 54) Oksel, C., Wang, X.Z., Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) Models, QualityNano, University of Leeds, Mar. 27, 2013.
- 55) Klein et al. (2012) Hazard identification of inhaled nanomaterials: making use of short-term inhalation studies, *Arch Toxicol* 86, 1137–1151.
- 56) Oomen et al. (2014) Concern-driven Integrated Approaches to Nanomaterial Testing and Assessment – Report of the NanoSafety Cluster Working Group 10, *Nanotoxicology* 8(3), 334–348.
- 57) 産業技術総合研究所 HP : ナノ材料の安全・安心確保のための国際先導的安全性評価技術の開発、<http://www.aist-riss.jp/projects/meti-nano/jp/>
- 58) Ma-Hock et al. (2014) A short-term inhalation study protocol: designed for testing of toxicity and fate of nanomaterials. *Methods Mol Biol* 1199, 207-12.
- 59) FP7 NanoValid and MARINA,
<http://www.nanovalid.eu/index.php/news-archive/5-fp7-nanovalid-and-marina>

- 60) Lang Tran, "Risk Management of Nanomaterials: The Results from FP7 MARINA", Abstracts of The Third Workshop on The Risk Management of Engineered Nanomaterials, P.4, August 22nd, 2014, National Institute for Materials Science, WPI-MANA Bil. Auditorium, Tsukuba, Japan.
- 61) ITS-NANO HP: <http://www.its-nano.eu>
- 62) NANOSOLUTIONS HP: <http://nanosolutionsfp7.com/project-aims-objectives/>
- 63) NANoREG HP: <http://nanoreg.eu>
- 64) ILSI- NanoRelease Consumer Products.
<http://www.ilsil.org/ResearchFoundation/RSIA/Pages/NanoRelease1.aspx>
- 65) 経済産業省化学物質管理課 ナノマテリアル情報収集・発信プログラム (各事業者のナノマテリアル情報提供シート)
http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/other/nano_program.html
- 66) JST-CRDS FY2013-FR-05 「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野 2013 年版」
- 67) 鶴岡秀志、ナノ炭素材料の安全性評価の現状と社会受容、50(12)(2012) (2013 年 7 月 1 日発行)
- 68) 台湾 EPA HP : Taiwan Nanotechnology EHS Database.
http://ehs.epa.gov.tw/Home/EN_F_Home_Index

参考資料

- 1) The Royal Society (2004) Nanoscience and Nanotechnologies: Opportunity and Uncertainty.
- 2) Eva Oberdörster (2004) Manufactured Nanomaterials (Fullerenes, C₆₀) Induce Oxidative Stress in the Brain of Juvenile Largemouth Bass, Environmental Health Perspectives 112, 1058-1062.
- 3) OECD (2012) Guidance on sample preparation and dosimetry for the safety testing of manufactured nanomaterials. Series on the Safety of Manufactured Nanomaterials, No. 36, ENV/JM/MONO(2012)40.
- 4) Taquahashi et al. (2013) Improved dispersion method of multi-wall carbon nanotube for inhalation toxicity studies of experimental animals. J Toxicol Sci. 38, 619-28.
- 5) National Science and Technology Council (2014) National Nanotechnology Initiative Strategic Plan.
- 6) Kasai T, Umeda Y, Ohnishi M, Kondo H, Takeuchi T, Aiso S, Nishizawa T, Matsumoto M, and Fukushima S: Thirteen-week study of toxicity of fiber-like multi-walled carbon nanotubes with whole-body inhalation exposure in rats. Nanotoxicology 2014: 1-10.
- 7) Nanosafety in Europe 2015-2025: Towards Safe and Sustainable Nanomaterials and Nanotechnology Innovations,
http://www.ttl.fi/en/publications/electronic_publications/nanosafety_in_europe_2015-2025/pages/default.aspx
- 8) 厚生労働科学研究費補助金研究報告書 化学物質リスク研究事業 「ナノマテリアルの健康

影響評価手法の総合的開発および体内動態を含む基礎的有害性情報の集積に関する研究」平成 21 年度、22 年度、23 年度 総括・分担研究報告書 研究代表者 広瀬明彦 国立医薬品食品衛生研究所

- 9) 厚生労働科学研究費補助金研究報告書 化学物質リスク研究事業 「ナノマテリアル曝露による生体毒性の慢性移行及び遅発性に関わる評価手法の開発研究」 平成 22 年度、25 年度 総括・分担研究報告書 研究代表者 広瀬明彦 国立医薬品食品衛生研究所
- 10) Nanosafety: <http://www.nanosafety.jp/oecd/11-20112oecdwpmn>
- 11) <http://www.nanovalid.eu/>
- 12) <http://ec.europa.eu/research/horizon2020/pdf/press/horizon2020-presentation.pdf>
- 13) JST-CRDS Horizon 2020 の概要
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/FU/EU20140221.pdf>
- 14) Next generation tools for risk governance of nanomaterials (NMP-30-2015)
<http://ec.europa.eu/research/participants/portal/desktop/en/opportunities/h2020/topics/2510-nmp-30-2015.html>
- 15) http://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/int/reach.html
- 16) “The Third Workshop on the Risk Management of Engineered Nanomaterials (第 3 回工業用ナノマテリアルのリスク管理研究会)”, 2014 年 8 月 22 日, NIMS, つくば
- 17) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=53375
- 18) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=57084
- 19) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=55827
- 20) http://www.iso.org/iso/home/store/catalogue_tc/catalogue_detail.htm?csnumber=63502
- 21) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=63698
- 22) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=63697
- 23) http://www.iso.org/iso/home/store/catalogue_tc/catalogue_detail.htm?csnumber=63836
- 24) http://www.iso.org/iso/catalogue_detail?csnumber=54315
- 25) ナノテク国際標準化サーキュラー(NTSC No.21、22、23、24) ナノテクノロジー標準化国内審議委員会
- 26) H.Cui, W.Wu, K.Okuhira, K.Miyazawa, T.Hattori, K.Sai, M.Naito, K.Suzuki, T. Nishimura, Y.Sakamoto, A.Ogata, T.Maeno, A.Inomata, D.Nakae, A.Hirose, T. Nishimaki-Mogami, “High-temperature calcined fullerene nanowhiskers as well as long needle-like multi-wall carbon nanotubes have abilities to induce NLRP3-mediated IL-1 β secretion”, Biochem. Biophys. Res. Commun. (2014),
<http://dx.doi.org/10.1016/j.bbrc.2014.08.118>.
- 27) Interlaboratory evaluation of rodent pulmonary responses to engineered nanomaterials: the NIEHS Nano GO Consortium. Environ Health Perspect. 2013 Jun;121(6):676-82. doi: 10.1289/ehp.1205693.
- 28) Surface charge and cellular processing of covalently functionalized multiwall carbon nanotubes determine pulmonary toxicity. ACS Nano. 2013 Mar 26;7(3):2352-68. doi: 10.1021/nn305567s.
- 29) Use of coated silver nanoparticles to understand the relationship of particle dissolution

- and bioavailability to cell and lung toxicological potential. *Small*. 2014 Jan 29;10(2):385-98. doi: 10.1002/sml.201301597.
- 30) Identifying the pulmonary hazard of high aspect ratio nanoparticles to enable their safety-by-design. *Nanomedicine (Lond)*. 2011 Jan;6(1):143-56. doi: 10.2217/nnm.10.139.
- 31) The threshold length for fiber-induced acute pleural inflammation: shedding light on the early events in asbestos-induced mesothelioma. *Toxicol Sci*. 2012 Aug;128(2):461-70. doi: 10.1093/toxsci/kfs171.
- 32) Kasai T, Umeda Y, Ohnishi M, Kondo H, Takeuchi T, Aiso S, Nishizawa T, Matsumoto M, and Fukushima S:Thirteen-week study of toxicity of fiber-like multi-walled carbon nanotubes with whole-body inhalation exposure in rats. *Nanotoxicology* 2014: 1-10.
- 33) US-Canada Regulatory Cooperation Council (RCC) のステークホルダーミーティング
<http://www.trade.gov/rcc/rcc-stakeholder-dialogue-discussion-06202013.asp>