

2. 俯瞰区分と研究開発領域

2.1 環境・エネルギー応用

有限な地球環境を鑑みて持続可能なエネルギー社会に向かうために、エネルギー、環境、経済、安全の観点での様々な取り組みが世界的に進んでいる。日本は資源に乏しいことに加え、CO₂削減の観点から、太陽光発電、風力発電、地熱発電などの再生可能エネルギーの導入の拡大を図り化石燃料の消費を抑えること、エネルギー変換や利用に伴うエネルギー損失を小さくすることが求められている。

環境・エネルギーへのナノテクノロジー・材料分野の貢献としては、再生可能エネルギーの高効率利用、効率的なエネルギー蓄積、変換、CO₂排出量の削減を可能にする材料技術、デバイス技術、プロセス技術を提供することが挙げられる。本節では重要な研究開発領域として、太陽電池、蓄電デバイス、パワー半導体、ファイン触媒、分離技術、複合材料、極限環境材料・計測技術を取り上げる。

太陽電池については、新たな物理的・化学的現象の探索や、新たな半導体材料、素子構造の革新などにより、変換効率向上や低コスト化が進められている。

蓄電デバイスは、電気エネルギーを化学エネルギーに変換する電池、あるいは物理エネルギーとして蓄えるキャパシターを挙げる。大容量、急速充電、高出力、長寿命の実現に加え、特に安全性の向上を目的とした電極活物質や電解質、電池構造の開発が進められている。

パワー半導体は電気のオン・オフ、昇圧・降圧、直流・交流変換などに用いるデバイスである。動作時の電力損失の低減や高耐久性、低コスト化を目標に新たなワイドバンドギャップ半導体材料の開発、素子構造の革新に向けた研究が進められている。

ファイン触媒は、化成品合成やファインケミカルズ合成の製造プロセスに用いる触媒と、人工光合成に用いる触媒を取り上げる。新たな触媒材料の開発により、反応の短縮、精密合成、環境負荷の低減が進んでいる。人工光合成の触媒は可視光での物質変換効率向上を目標に研究が進められている。

分離技術は、複数物質の混合状態にある混合物から目的物質だけを取り出したり、不要物を取り除くなどの分離操作を低エネルギーかつ高精度に行うことを目指す研究開発領域である。具体的にはCO₂や大気汚染物質の分離・回収、鉱物資源採掘時の金属分離、排水処理や海水淡水化、石油精製や石油化学における化学プロセスでの気体・液体の分離、水素の分離、細胞やタンパク質など生体物質の分離などがある。分離プロセスを分子レベルで理解し、気体・液体の吸着分離／膜分離／吸収分離、鉱物資源・固体のリサイクル精錬／金属精錬などにおける新手法や新材料の研究開発が進められている。

複合材料は、複数の異なる種類の材料を組み合わせることによって、個々の材料では持ち得ない機能・性能を発揮する材料である。繊維状の強化材とマトリックス材を複合化した材料は、均質材料では達成できない高比強度（引張強さ／比重）や高比剛性（剛性／比重）、高耐熱性などの特性を発揮可能であり、炭素繊維強化プラスチック（CFRP）、セラミックス基複合材料（CMC）、セルロースナノファイバーなどの開発が進んでいる。

極限環境材料・計測技術に関しては、宇宙や原子力分野への適用を念頭に置いた材料研究および計測技術を取り上げる。高温、低温、大きな温度差、強い放射線、腐食環境などの厳しい

環境下において使用可能な、高強度、高靱性そして軽量などの機能を兼備えた材料の研究開発が進められている。計測としては、軽水炉の安全性評価を目的として、原子炉材料の脆化評価方法の高度化が進められている。

2.1.1 太陽電池

(1) 研究開発領域の定義

太陽光エネルギーを高効率かつ低コストで電気エネルギーに変換するデバイスを研究開発する領域である。結晶 Si 系太陽電池に関しては、Passivated Emitter Rear Contact (PERC) 型セルの量産化が進んでおり、ポスト PERC 型の次世代高効率セル構造の明確化と早期量産化、ウェーハの高品質化・超薄型化などが課題である。化合物薄膜太陽電池に関しては、接合界面・光吸収層の高品質化に改善の余地があり、現状の 22.9% を超える高効率化が目標である。ハイブリッド型のペロブスカイト太陽電池に関しては、既に変換効率約 22% が達成されているが、今後はさらなる高効率化を目指した新材料開発と発電機構の解明、耐久性の改善が重要な課題となる。

(2) キーワード

シリコン系太陽電池、PERC 型セル、低コスト化、高効率化、有機系太陽電池、分子設計、プロセス技術、劣化機構の解明、ペロブスカイト太陽電池、タンデム化、車載太陽電池、リサイクル

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

今世紀に入り、地球環境・温暖化問題はますます顕在化している。2018年7月に閣議決定された第5次エネルギー基本計画では、再生可能エネルギーについて、2030年のエネルギーミックスにおける電源構成比率の実現とともに、確実な主力電源化への布石としての取組を早期に進めることが明記された。再生可能エネルギーの一番手である太陽光発電の大量導入が世界の潮流となる中、日本国内でも太陽光発電の普及が進んできた。この分野の研究開発の重要性が益々増大している中で、エネルギー変換分野では高効率・低コストの革新的太陽電池の開発が精力的に行われている。既に海外においては、超大規模発電所として、太陽光発電設備の建設が急激に進んでいる。日射量が豊富で大規模なシステムを安価に構築可能な中東地域では、従来型の結晶シリコン太陽電池を用いた大規模な発電所の入札において、2US¢/kWh 以下の入札事例が出てくるなど、低炭素かつ安価な電源として、世界的にその利用が進んでいる。また、今後の期待が大きいスマートグリッド構想でも、太陽電池は重要な役割を果たす。そこでは、太陽電池を含むオンサイト分散電源をネットワークで接続して、電力を有効に利用することが可能となる。さらに、従来から用いられている家庭用太陽電池、太陽電池発電用電池に加えて、農業用ソーラーシェアリング、ネット・ゼロ・エネルギー・ビル構想、環境発電という観点から、建材一体型太陽電池、室内で高効率を実現出来る太陽電池（センサーネットワーク系電源）、電気自動車（BEV）やハイブリッド自動車（HEV, PHEV）用太陽電池、飛行機用太陽電池（ソーラーインパルス）、ヒートポンプ等を活用した熱需要への電力エネルギー供給などの用途に応じた太陽電池が必要となる。これらの分野では、軽量、フレキシブル、任意形状、設置容易性、交換可能等の種々の機能を持った太陽電池が必要になっている。さらに、ゲームチェンジング・テクノロジーとなる第三世代太陽電池の研究開発も、将来の社会革新に繋がる超高効率太陽電池として、非常に重要な研究ターゲットである。具体的な第三世代太陽電池としては、量子効果を利用した中間バンド太陽電池やマルチエキシトン（MEG）太陽電池が挙げられる。

[研究開発の動向]

実用化が進んでいる、結晶 Si、薄膜 Si、CIGS [Cu(InGa)Se₂]、CdTe、GaAs 集光型の太陽電池では、より低コスト、より高効率を目指した開発が産学連携により行われている。太陽電池モジュールの価格は年々低下しており、大規模なメガソーラから中規模なシステムでは、システム価格に占めるモジュール価格の割合は 3～4 割程度にまで低下してきた。今後のさらなる普及拡大と低価格化には、最もシェアの大きい結晶 Si 系においてもセルの高効率化を含めたモジュールの高効率化により、整地・架台・配線・施工等の BOS (Balance Of System) コストあたりの設置量を増やすことが求められる。

一方、革新的太陽電池としては有機薄膜型やハイブリッド型の有機太陽電池が将来性を有する候補として考えられている。これらの分野では、劣化機構解明、接合形成技術、耐久性向上技術、界面制御技術の開発が必要になる。特に、ハイブリッド型の代表であるペロブスカイト太陽電池は急激な勢いで変換効率が上昇しており、発電機構に関する知見も得られてきた。今後の発展のためには、より詳細な発電機構の解明に基づく新材料の開発が鍵となる。

実用化が進んでいるシリコン系太陽電池や化合物半導体系太陽電池では、さらに極限まで変換効率を高めるために、材料の点欠陥・表面欠陥の低減、表面・界面パッシベーション技術、光マネジメントの最適化などの研究が盛んに行われてきた。また、集光型太陽光発電は、太陽電池の使用量が圧倒的に少量化できるため、低コスト化のための新技術として注目され始めている。

太陽光発電システム技術の研究開発は、実用化された太陽電池の技術革新を含め、主として日本、欧州、米国の 3 極で進められ、中国、韓国における研究開発は実用化された分野の開発成果の吸収・国産化に主眼が置かれていた。しかし、結晶シリコン太陽電池では、従来型の Al-BSF 構造から、裏面パッシベーション膜とポイントコンタクトを導入した PERC 型構造への転換は中国系企業が先導するなど、世界的な勢力地図が大きな変革の時期にある。

日本は Si、CIGS 共に高い技術を持つ。Si 太陽電池では、企業主体で応用研究が進められ、大学や国研が基礎研究で企業の技術開発を支えるという体制により、高い技術水準を維持している。欧州、米国も高い技術開発力を維持しており、実用技術分野では研究機関に試作生産ラインを整備し、新材料や設備開発などの周辺産業を含む技術革新に貢献している。CIGS 太陽電池では企業が高い製造技術を有し、これを支える形で大学・国立研究所が学術的知見の蓄積・提供と新たな高効率化要素技術の開発を行っており、世界最高水準の技術を有している。超高効率太陽電池などの次世代技術への研究開発も米国、日本、欧州で進められているが、先進諸国の太陽電池企業の多くは中国、韓国など新興国や CdTe 太陽電池との低コスト競争により停滞傾向にあり、産業の基幹である結晶 Si 系太陽電池の生産はすでに新興国に追い越された。ハイブリッド型であるペロブスカイト太陽電池は、急激な変換効率の上昇に伴い日本、米国、欧州、中国、韓国等、世界中で熾烈な研究開発競争が開始されている。そのため、ペロブスカイト太陽電池は日本発の革新的太陽電池にもかかわらず、研究開発では世界の後塵を拝する結果となっている。

結晶 Si 太陽電池では、変換効率を極限まで高めるために、異種材料による接合形成や局所ドーピングによるバンドエンジニアリング、表面・界面のパッシベーション技術、基板の超薄型化や超薄型基板にも対応可能な光マネジメントなどの高効率化技術が必要である。また、低コスト化に向けて高品質基板の低コスト製造技術に対して産業界からの根強い要請がある。高

効率結晶シリコン太陽電池として普及しはじめた PERC 型及びその改良版の PERL 型の太陽電池では、光照射・温度上昇による劣化現象である LeTID (Light and elevated Temperature Induced Degradation) が課題となっており、その発生メカニズムの解明と抑制手法の確立が重要となっている。また、タンデム化による超高効率化のための材料開発や、接合界面のデザインとデザインした界面を実現するプロセス技術の開発が必要である。化合物系の太陽電池に関しては、今後、さらなる効率アップと低コスト化のために、集光型太陽光発電関連技術が重要となる。近年、CIGS 太陽電池では、CIGS の光吸収層の改良、接合界面の改質、バルクのキャリア密度上昇による高効率化のブレイクスルーがあり、変換効率 22.9% を達成している。接合界面の高品質化にはまだ改善の余地があり、接合界面の欠陥密度・バンド構造の詳細な解析、透明電極・バッファ層・光吸収層を含めたバンド構造の最適設計が進められている。現在、日本の集光型太陽光発電関連技術は、世界トップレベルであるが、近年、アメリカやスペインの進展が著しい。

有機系太陽電池として期待されている有機薄膜太陽電池に関しては、現時点での光電変換効率の最大値は 1cm 角セルの認証値で 11% 程度とシリコン系太陽電池の半分であるが、論文ベースでは 14% を超える値が報告されるようになった。この進展は、新素材である非フラーレン・アクセプターと、新たな素子構造である三元ブレンド素子の開発によるところが大きい。今後さらなる変換効率の向上には、新規導電性ポリマーを用いた高効率有機太陽電池の研究、一重項エキシトン解裂を用いた革新的有機太陽電池の研究、三重項色素を用いた革新的有機太陽電池の研究に加え、エキシトン解離に必要なバンド構造 (オフセット・エネルギー) の解明が挙げられる。また量子ドット太陽電池に関しては、量子ドット・ナノワイヤーを利用したもの、異なるバンドギャップを有する量子ナノ円盤構造を利用したものなどが提案されている。最近では、新規ペロブスカイト化合物 (CsPbX_3) にて構成された量子ドットが注目されはじめ、マルチエキシトン生成を示唆する結果が報告されている。変換効率も PbS 量子ドットの記録を破り、13.4% が CsPbI_3 量子ドット太陽電池にて報告されている (NREL およびワシントン大学)。さらにペロブスカイト太陽電池に於いては、発明からわずか 7 年ほどで、22% を越える変換効率が達成されている (米国 NREL の認証値)。より一層の高効率化を目指した新規ペロブスカイト化合物やホール輸送剤の開発と発電機構の解明、高耐久化を目指した劣化機構の解明、低毒性化を目標とした非鉛系ペロブスカイト化合物の開発が重要となる。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

単結晶 Si 太陽電池

量産モジュールでは、従来の裏面全面に Al 電極を用いる AlBSF (Back Surface Field) 型セルから PERC 型セルへの転換が、中国系企業の先導により進められている。LONGI Solar では単結晶 PERC 型セルで 23.6%、ハーフカットしたセル 120 枚によるモジュールでは出力 360W を達成している。Jinko Solar では、選択エミッタやパッシベーションの最適化により 23.95% の達成と 60 直 (モジュールあたりの太陽電池セルの枚数) モジュールで出力 370W を達成している。

1999 年から 15 年間にわたり小面積も含めた結晶 Si 系太陽電池の変換効率の最高値とされてきた 25% の壁が突破された。Panasonic 社は、高品質なアモルファス Si 層により接合を

形成する「ヘテロ接合」の進化と、電極を全て裏面に形成する「バックコンタクト型」を組み合わせるにより、実用サイズ（セル面積 143.7cm^2 ）のセルで変換効率 **25.6%** を達成した。カネカ社は、さらにこの技術を進化させ世界最高効率 **26.7%** (79cm^2) を報告している。SHARP は、コンソーシアム形式のプロジェクトである NEDO 委託研究「極限シリコン結晶太陽電池の研究開発」の成果を活用することにより、フォトリソグラフィを用いない低コストプロセスにより、同様のセル構造を実用サイズで実現し、変換効率 **25%** 超えを達成している。産総研でも、低コストプロセスの基礎検討が進められるなど、ヘテロバックコンタクト型太陽電池は、日本が世界を先導しており、早期の量産化が期待される。

プロセスが煩雑なバックコンタクト型に対し、よりシンプルなプロセスで高効率を追求する新規セル構造の発表が相次いでいる。ドイツのフラウンホーファー研究所は、界面再結合速度の小さい酸化膜を介してトンネル効果により電流を収集する「トンネル酸化膜パッシベーションコンタクト構造 (TOPCON)」を提案し、両面電極型としては世界最高効率の **25.8%** を報告している。その後、世界中の研究機関で、金属酸化物やヨウ化物など新規キャリア選択性材料に対する開発競争が続いている。異種材料を接合に用いることは有機薄膜太陽電池分野の常套手段であることから、有機薄膜太陽電池の研究者の単結晶 Si 太陽電池への参入が見られる。日本では、両分野の協力が遅れているように思われる。

多結晶 Si 太陽電池

多結晶 Si 太陽電池においては、微細結晶粒により転位クラスターの発生を抑制したいわゆる「High-Performance Multi」基板が市場を席巻している。セル構造は、従来型のアルミニウム BSF 構造から PERC 型への移行が進んでおり、中国 Trina Solar が PERC セルで **21.3%** を達成するなど高効率化傾向が著しい。高い生産性で単結晶と遜色のないモジュール効率が得られることから、市場での多結晶 Si の優位性は増している。日本国内では、機能性欠陥を用いたスマート法、ノンコンタクトクルーシブル法、撥液ルツボの利用など多くのユニークな研究開発が大学を中心に行われており、産学連携研究への発展が期待される。ドイツのフラウンホーファー研究所は、n 型の High-Performance Multi 基板に TOPCON 構造を融合することで **22.3%** (3.9cm^2) を達成した。

薄膜 Si 系太陽電池

変換効率での不利を改善すべく、透明導電膜へのテクスチャ形成、透明中間層、プラズモニクス、フォトリソ構造など、光閉じ込め技術の進歩が近年著しい。市場では、バルク結晶 Si 系モジュールの低価格化に押され、苦しい状況が続いており、またその結果、大学等における基礎研究、産業界での量産技術開発とも、縮小傾向にある。しかし、今後のさらなる生産量増大が必須の太陽光発電市場において、材料の安定供給面での優位性を考えると、中長期的な研究開発の継続が重要な分野と言える。またその特徴からエナジーハーベストデバイスとしての活用も期待される。東京都市大では IoT 用エネルギーハーベストデバイス応用を目的に両面受光型薄膜 Si 多接合太陽電池を作製し、LED 照射下の 2セル直列にて **4V** 以上の開放電圧を報告している。南海大学では a-SiC:H/a-Si:H/a-SiGe:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ の 4 接合薄膜 Si 太陽電池を作製し、変換効率 **14.58%** (NREL にて測定) を達成している。非晶質 Si、微結晶 Si では産総研などにより近年世界最高効率が更新され、着実な技術の向上が見られる。2017 年に、Si

microcrystalline cell の公式最高効率が 11.9 % (1.044 cm², 産総研) に書き換えられた。薄膜結晶 Si では、2018 年に Helmholtz Zentrum Berlin (HZB) がラインレーザによる熔融・結晶化により、13μm の薄膜 Si 結晶薄膜を作製し、IBC-SHJ セルにて開放電圧 654mV、変換効率 14.2% を達成した。

CIGS 太陽電池

ソーラーフロンティア社が年産 1GW を有し、小面積セルでも 2017 年 12 月に報告した 22.9% (公式) の世界最高効率を誇り、日本が世界を牽引している。近年の CIGS 太陽電池の変換効率の向上が加速している背景にはアルカリ金属を発電層成長後に添加する PDT (post-deposition treatment) 処理がある。KF-PDT 処理をはじめとして、最近では RbF-PDT、CsF-PDT 処理などの重アルカリ金属処理が注目され、これらの処理によって pn 接合および多結晶粒界の品質が向上し、変換効率の向上を後押ししている。さらに光吸収層のワイドギャップ化の検討も進められている。CIGS の代替を目指して、レアメタルフリーの材料が大きく注目されている。その代表格は、CZTSSe であるが、その他のレアメタルフリー材料として、Cu₂SnS₃、CuSbS₂、SnS、Cu₂O、BaSi₂ などの研究開発も活発化してきている。CZTS の公式最高効率は 10.0 % (1.113 cm², UNSW) に書き換えられた。

集光型太陽光発電

集光型太陽電池の関連技術は毎年、着々と進歩しており、集光用の超高効率セルで 46%、集光型太陽電池モジュールで 35%、集光型太陽光発電システムで 30% にまで伸びてきている。これらの効率向上のラーニングカーブより、2025 年には、セルで 50% 超、モジュールで 45%、システムで 40% にまで効率が向上することが予測されており、今後のさらなる発展に期待できる。2016 年には日本の企業がモロッコに 1MW の集光型太陽光発電システムを設置し順調に稼働しており、高日照地域への今後ますますの発展が見込まれる。同システムはオーストラリアにおいても既に導入され、高い発電能力を示している。集光型太陽光発電の高効率を活かしたアプリケーションとして、太陽電池から発生した電力を用いて水を電気分解し水素を発生させるという技術が開発されている。東京大学、宮崎大学、住友電工の共同研究により、Solar to Hydrogen の効率において 24.4% の世界最高効率を達成したことが報告されている。さらに太陽光由来水素と二酸化炭素を触媒反応させることによりメタンを生成することも可能であり、開発が進んでいる。これらの技術を用い、これまで化石燃料しか輸出することができなかった高日照地域から、低環境負荷かつ安価な太陽光由来水素やメタンが生成されることが期待されており、早期の技術開発が求められている。

有機薄膜型太陽電池

2012 年に三菱化学が変換効率 11.1% の有機薄膜太陽電池を開発し、世界最高の変換効率を更新するなど進展が著しい。2018 年の Solar cell efficiency tables (version 52) に掲載されている世界最高効率は、東芝の 11.2% (セル 0.992 cm²)、9.7% (ミニモジュール 26.14 cm²)、小セルでは中国科学院高分子物理及び化学国家重点実験室 (PPC/CAS) の 12.3% である。また、PPC/CAS の Hou らの研究グループは、非フラーレン・アクセプターを用いた高分子太陽電池により 14.4% の変換効率を、タンデムセル構造の非フラーレン高分子太陽電池により

14.9%の変換効率を達成している。さらに、三元ブレンド高分子太陽電池でも、非フラーレン・アクセプターを用いた素子で12-14%が報告されている。このように、変換効率の面では着実な進展が見られている。応用面では、非フラーレン・アクセプターを用いた高分子太陽電池は、可視域の透過率を高めた半透明太陽電池としての応用研究が急速に進展している。さらに、理研と東大は共同で、洗濯可能な超薄型有機薄膜太陽電池を開発し、7.9%の変換効率を実現している。一方、発電機構の面では、励起子を解離するために必要と考えられてきたドナー・アクセプター材料のエネルギーオフセットが0.1 eV未満の系でも、効率良く電荷生成する系が報告されている。これにより、エネルギーギャップ E_g と開放電圧 V_{oc} との光エネルギー損失 $E_g - qV_{oc}$ が0.5 eVを切る系が報告されるようになった。有機薄膜太陽電池の最も大きな損失過程が低減できる可能性があるため、今後のさらなる機構解明が求められる。今後も新規な材料および素子構造の開発とともに、光エネルギー損失の低減が実現できれば、20%に迫る高効率化も視野に入ると期待できる。現在の有機薄膜型のベンチャー企業としては、米国のNanoFlex Power Corporationや独国のHeliatekが挙げられる。用途としては、ビルや自動車が考えられている。

色素増感型太陽電池

近年の最大のニュースは、色素増感型でこの分野を牽引してきた米国ベンチャー企業Konarkaの倒産である。ただ、同社のセルは変換効率が低く、製品としての完成度が不十分だったとの認識が一般的である。現在の色素増感型の主要なベンチャー企業は、G24iから発展したG24 Power (イギリス)、3GSolar (イスラエル)、Dyesol (オーストラリア)の3社である。この内、G24 PowerのセルがLogitech製iPad用外部キーボード電源に採用され(採用時はG24i)、市場投入が始まった。このような状況下、日本はより高効率化を目指した研究開発が進行中である。いずれにしても、色素増感太陽電池は実用化段階に入っており、研究者数そのものは減少傾向にある。それに伴い、ペロブスカイト系太陽電池の研究人口が増加している。色素増感太陽電池の研究は、 V_{oc} のロスがヨウ素系電解液よりも小さいCo系、Cu系電解液を用いた高効率化研究に集約されてきた。製品化では、フジクラが一般ユーザーに量販店を通じて販売を開始した。

ペロブスカイト太陽電池

特に欧米で新たな取り組みが進展している。たとえば、独Fraunhofer研究所は建材用途に大面積60 cm x 100 cmセルを作製しようとしており、英国ではベンチャー企業Oxford Photovoltaicsが上市に向けた研究開発をスタートしている。また、カナダ・サスカチオン大学ではフレキシブル太陽電池実現の可能性が明らかにされている。公式な最高効率、0.991 cm²のセルで20.9%、0.0935 cm²で22.7%であり、両者とも韓国KRICTが報告している。また、モジュールでは、16.29 cm²(6セル直列, Microquanta)で、16.0%が公式効率として報告されている。さらに、最近Graetzelらのグループは、23.2%の効率を達成したと発表した。一方、東芝はフレキシブル基板を使ったモジュールで世界最高の10.5%(5 cm x 5 cm)を報告した(新聞発表)。耐久性は2D材料の添加、混合カチオン化により急激に向上している。高効率化に関しては、1.4 eV程度のバンドギャップを持ったSnPbペロブスカイトの研究(18%効率・非公式)が増加してきた。それ以外には、Pb-freeの研究も盛んであり、

ハロゲン化 Bi 系金属化合物で 4 % 程度の効率が報告されている。Sn 系ペロブスカイト太陽電池の効率も上がってきており、非公式ではあるが 7-9 % 程度の報告が相次いでいる。高効率化を目指した研究開発では、各種タンデムセルが精力的に検討されている。シリコンとのタンデムセルでは、オーストラリア Australian National University (ANU) が 24.5% を達成している。さらに、究極のセルであるペロブスカイト・ペロブスカイト・タンデムセルでは、スタンフォード大学とオックスフォード大学が共同で 20.3% を達成している。タンデム化に於いてはシングルセルで 22% 以上が達成されているため、25% 以上の変換効率が求められ、それを目指した研究開発が世界中で精力的に実施されている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

- シリコン系太陽電池に関しては、2015 年より NEDO プロジェクトで、世界最高レベルの競争力を有する結晶 Si 太陽電池の実現を目指し、先端複合技術 Si 太陽電池の共通基盤に関するコンソーシアム型の研究開発が開始された。6 大学 (豊田工業大学、明治大学、名古屋大学、九州大学、東京工業大学、兵庫県立大学) コンソーシアム体制により、ヘテロ接合太陽電池など次世代型セルのオープンイノベーションプラットフォームの構築が進んでいる。北陸先端科学技術大学院大学は、cat-CVD によるドーピングやパッシベーション技術のヘテロ接合太陽電池への実装を目指している。産業技術総合研究所では、再生可能エネルギー研究所 (福島) において、次世代薄型結晶 Si モジュールの研究開発や高性能キャリア選択性パッシベーションコンタクトの開発が進められている。SHARP は、ヘテロ接合バックコンタクト太陽電池の量産プロセス開発を実施している。パナソニックは、低コスト・高信頼性・高効率 Super Si Hetero-junction (SSHJ) 太陽電池の開発に、カネカは、低コストヘテロ接合バックコンタクト太陽電池の小規模量産実証に NEDO の支援を受けて取り組んでいる。名古屋大学では、高品質シリコンインゴット創製に向け、実験科学・計算材料科学・データ科学を融合させた新たな研究開発の方法論の構築に取り組んでおり、インゴット中の結晶欠陥の 3 次元可視化に成功している。
- NEDO プロジェクトで、ソーラーフロンティア、産業技術総合研究所と複数の大学からなるオールジャパン体制で CIGS 太陽電池の高効率化・物性評価をより一層進める研究がスタートし、材料設計・分析・高効率セル作製を重点的に行っている。CZTS については、日本発の材料であり、JST の CREST でも研究が行われた。JST の未来社会創造事業では、Pb フリーペロブスカイト太陽電池の開発、超薄型シリコン系トリプル接合太陽電池の開発が進められている。地球規模課題である低炭素社会の実現に向けてボトルネックとなっている課題の新規募集も継続して行われている。
- 2011 年 6 月より、集光型太陽光発電に関する日欧の共同研究開発が始まり、欧米においても集光型太陽光発電システムの重要性が再認識されている。2015 年 7 月より、超高効率・低コスト III-V 化合物太陽電池モジュールの研究開発が NEDO プロジェクトとして開始されており、超高効率太陽電池モジュールの開発を実施している。このプロジェクトでは非集光でも変換効率 30% を超えるモジュールが開発されており、新しい用途が期待される。日本における一般的な自家用車の一泊あたりの走行距離は 30km 程度であり、この高効率モジュールを車載太陽電池として用いることにより、電気自動車における一日 30km 分の電力を発電することが可能となる。電気自動車に外部から給電する必要がない、自己

発電無給電型電気自動車の実現に貢献すると考えられる。

- 有機系太陽電池では、ペロブスカイト太陽電池のプロジェクトに資源を集中して研究開発が進められている。具体的には、NEDO プロジェクト『高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発』や、JST の ALCA、未来社会創造事業が挙げられる。一方、有機薄膜太陽電池のプロジェクトは大幅に減少してきている。ただ、高効率化に向けた成果が得られてきており、地道な研究開発が実を結び始めている。これらの分野に於いては、以前実施された JST さきがけ『太陽光と光電変換機能』領域の研究者がネットワークを形成し、我が国の基礎研究開発を牽引している。

（5）科学技術的課題

短期～中期的な視点では、実用太陽電池の主流である結晶 Si 太陽電池において、変換効率を極限まで高める技術開発が必要である。またポスト PERC 型の高効率セル構造では、中国系企業に遅れを取らないように容易に追いつくことのできない技術の確立と早期の量産化を行うべきである。金属酸化物などの異種材料による接合形成や局所ドーピングを駆使することにより、半導体レーザや超高速トランジスタで用いられているような「バンドエンジニアリング」の概念を実用太陽電池でも具現化する必要がある。Si をボトムセルとするタンデムセルによる超高効率化には、Si と整合性に優れたバンドギャップ 1.5 ～ 1.7eV 程度の半導体材料の開発が必要である。金属と Si 化合物であるシリサイド半導体、シリコンをベースとするナノ構造、ペロブスカイトなどがその候補として挙げられる。

長期的な視点では、自立的に太陽電池の普及し始める頃には、現在の理論限界効率を突破するような、飛躍的な変換効率の向上が可能な新概念太陽電池が必要となる。ナノワイヤや量子ドットなどの量子構造を用いた太陽電池はその一つの候補である。これらの新概念太陽電池は現在の太陽電池よりも非常に高い限界効率を有するものの、その多くは未だ基礎研究の段階である。

また、真の再生可能エネルギー源として普及させるには、単に太陽電池単体の開発だけでは不十分であり、システム技術の開発が不可欠である。例えば、太陽電池による発電量が大きくなると電力システムによる連系許容限界に近づいてくる。電力システムとの統合においては、メガソーラ、住宅用ともにビッグデータを活用した発電量予測技術の高精度化とリアルタイム発電量把握技術の確立、および蓄電池やエネルギーマネージメントを最大限利用したピーク抑制と需給バランス確保への貢献に加え、より短時間での変動や急激な出力の立ち上がり（立ち下がり）に対する系統安定化への貢献が期待される。加えて、世界的な導入量拡大が始まってから既に 10 数年が経過し、発電性能を維持するための維持管理技術、不具合等を屋外において検出する点検技術、設備更新や廃棄時のリサイクル技術等の重要性が高まっている。日本でも固定価格買取制度導入から 20 年経過移行、全量買取りの対象であった多くの発電システムから、大量の太陽電池モジュールが排出されることが予想されている。設備を更新し、長期的に主力電源として太陽光発電を利用していくためにも、これらのモジュールの適切なリサイクル技術の開発が不可欠である。

CIGS 太陽電池については、日本の企業（1 社）が世界一の製造技術を有するとともに変換効率の面でも世界トップレベルを維持している。この技術的優位性を維持するためにも、産官学の連携が必須である。特に CIGS 太陽電池では光吸収層の準安定性による欠陥密度評価の難

しき、5 元素以上にも及ぶ多元系化合物半導体の電子構造評価の難しさを克服するためにも官学による評価・分析面に関する学術面のサポートが必要である。

超高効率 III-V 化合物太陽電池については、その圧倒的な高効率が魅力である。そのため、さらなる高効率化とともに、その高効率を活かした新規用途開発が必要である。搭載可能面積の限られた車載太陽電池やモバイル型太陽電池は今後急速に発展すると考えられ、それらの新規用途をめざした研究開発が課題となる。また、III-V 化合物太陽電池を用いた集光型太陽電池は高日照地域で特に高パフォーマンスを示す。集光型太陽電池の効率や実環境下での発電特性、さらには耐久性を向上させることにより、高日照地域で太陽発電由来の水素やメタンを生成することが可能となり、これまでの化石燃料に頼るエネルギー供給の在り方を変える開発課題となる。

有機薄膜太陽電池については、非フラーレン・アクセプターに代表される新材料の開発、三元ブレンドなどの新素子構造の提案により、着実な変換効率の向上が見られ、15 % に迫る勢いである。特に、非フラーレン・アクセプターに代表される新規材料の開発では中国の勢いが目覚ましく、国家重点としての取り組みが成果を挙げている。また、米国・欧州でも継続的に研究開発が実施されている。これに対して、最近の我が国に於ける有機薄膜太陽電池への研究支援は大きく減少してきており、十分とは言えない。そのため、日本の国際競争力を維持するためには、長期的視点に立った研究支援を継続的に行うべきである。実用化に向けた技術開発も吃緊の課題であるが、民間企業にとって投資リスクが大きいため、自立的な市場参入・拡大はあまり期待できない。そのため、国が主導的な役割を果たし、資金・人材面での支援を行い、技術開発の推進を後押しすることが必要である。

ペロブスカイト太陽電池は、研究開発が始まったばかりであり、上市に向けてはさらなる高効率化、高耐久化、低毒性化等の多くの課題をクリアする必要がある。そのため、国が主導した新材料開発、発電機構解明、劣化機構解明等の基礎研究を強力に推進するとともに、産官学連携による技術開発を効果的に進めていく必要がある。

(6) その他の課題

太陽電池の研究開発を進めていく上では、基礎研究段階からプロジェクト形式で産学連携を実施することが重要である。研究内容が多岐に亘るため、単独の企業が独自に取り組むと研究投資に対する費用対効果が悪くなる。エネルギー分野では基礎は「学」、実用化は「産」という役割分担は効率的ではなく、双方の融合が必須である。政府主導で実用化研究を進めるためのプロジェクト研究拠点を構築し、共同研究（研究開発部分）と役割分担（市場化部分）を適切に進めながら、ファンディングを充実させた上で、そこに産学の研究人材を投入することも有効と考えられる。また、中長期の集中研究拠点を核とし国際的な人材獲得も視野に入れた革新的な基礎研究の強化と、その成果の迅速な応用展開に向けたネットワーク連携が重要な鍵となる。

(7) 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	◎	→	<p>個別の企業が次世代技術の基礎研究開発を実施することが、太陽電池産業が新興国との激しい価格競争にあることから困難となる中、公的支援に基づく共通基盤技術の開発、オープンイノベーションプラットフォームの構築が着実に進められている。NEDO プロジェクトを受託した6大学コンソーシアム、産総研、JAISTと企業群が緊密な連携の下で、先端技術を複合した高性能太陽電池や、Siの理論限界を超える技術についての研究が実施されている。コンソーシアムの成果として、結晶Si太陽電池では変換効率25%超のセルが実現され、薄膜Si太陽電池においては、産総研と国内企業の連携により世界最高効率13.6%が達成された。</p> <p>集光型太陽電池・化合物太陽電池の研究水準は、世界トップレベルにあるが、欧米との開発競争が激化している。ナノワイヤ・量子ドットなどの新概念太陽電池を対象とするプロジェクトが、JSTやNEDOの事業として行われている。</p> <p>有機系太陽電池においては、有機薄膜型の研究が一時期加速し、大学のみならず、三菱化学や住友化学、東レといった企業においても材料開発の基礎力を活かし、世界最高レベルの変換効率10%を達成するなど同分野を牽引していた。新しい流れとして、有機系太陽電池を人工光合成の一種として捉えた国のプロジェクトもスタートしている。一方で、ペロブスカイト太陽電池へのプロジェクトの集中により、有機薄膜型ならびに色素増感型の研究は、一時期の勢いを失いつつある。</p> <p>ペロブスカイト太陽電池は日本発の革新的太陽電池にもかかわらず、研究開発に於いては世界の後塵を拝する結果となっている。ただ、JSTやNEDOのプロジェクトを始めとした国の主導的な取り組みが始まっており、今後の成果が期待される。特に、従来に無い全く新たな試みとしては、分野横断的なさきがけ横断プロジェクトが挙げられる。</p>
	応用研究・開発	◎	↑	<p>結晶Si系の技術開発は、原料技術からモジュールに至る各要素技術、実用サイズでの効率記録などの高性能化技術において世界トップレベルにある。特に、パナソニック社が世界最高効率25.6%を報告し、15年ぶりに実用サイズのセルで更新し、さらにその記録をカネカ社が更新することで、その技術力の高さが改めて世界に示された。SHARP社は、変換効率25.1%を量産プロセスと整合性のあるプロセスにより達成している。</p> <p>有機系太陽電池の応用では、色素増感型が先行して各企業が発売に向けたセル開発を行っていた。また、有機薄膜型も室内用途などが検討されたが、十分な特性が得られず、現在はペロブスカイト太陽電池への研究開発へ各社が集結することとなった。車載用途では、有機薄膜型もペロブスカイトとともに軽量性を活かして応用が期待されているが、本格研究には至っていない。ペロブスカイト太陽電池は欧米に続き、我が国でもベンチャー企業が創設されはじめている。</p>

米国	基礎研究	○	↑	NREL, MIT, アリゾナ州立大学などで、結晶 Si の欠陥および不純物制御に関する実用太陽電池の高効率化を支援する基礎研究や、ペロブスカイトとのタンデム化など新規な取り組みが実施されている。IBM 社は、CZTS 太陽電池で構成材料の最適化により 12.6% の変換効率を報告している。First Solar 社は CdTe 太陽電池での技術革新が著しく、最近セル効率 20.4% を報告した。Dupont などの大企業も CZTS の研究を行っている。Uni-Solar 社は、小面積 3 層タンデムセルで初期変換効率 16.3% を達成しており、高い研究水準を有している。量子ドット型やプラズモン太陽電池など新しい技術への取り組みは大学を中心に活発化している。有機系太陽電池では、産官学ともにペロブスカイト太陽電池への転換が進んだが、なおミシガン大学、南カリフォルニア大学などが中心となって基礎研究を牽引している。また、色素増感型の研究は非常に少ない。最後に、ペロブスカイト太陽電池に関しては多くの大学で研究されているが、プリンストン大学、カリフォルニア大学バークレー校がその先頭を走っている。
	応用研究・開発	○	↑	SunPower 社は、裏面接合型の高効率結晶 Si 太陽電池で、Panasonic 社のヘテロ接合型太陽電池と結晶 Si 系の実用太陽電池における最高効率を競っており 25.2% を達成した。Si 基板に関連する周辺産業でも技術開発力が高いベンチャー企業が多く、融液からの直接成長やエピタキシャル基板など新しいアイデアが生まれている。化合物系太陽電池では、多数のベンチャー企業が参入しており動向が注目される。モジュールの信頼性については NREL が米国内の議論をリードし、日欧などとの国際協力の下、さらなる長期信頼性の確保に向けて様々な試験方法や規格の提案が行われている。有機系太陽電池ベンチャーの草分けとして、高分子系では Solarmer、低分子系では Global Photonic Energy Corporation (GPEC) が活躍中である。Solarmer はカリフォルニア大学ロサンゼルス校、中国科学協会・化学研究所の研究成果、GPEC はプリンストン大学、ミシガン大学などの研究成果を活用している。
欧州	基礎研究	◎	→	結晶 Si 系の要素技術についての基礎研究は、非常に高い研究水準を維持している。独 Fraunhofer 研究所、Konstanz 大、ISFH、オランダ ECN、ベルギー IMEC、仏 INES、スイス CSEM、ノルウェー NTNU など、各国の研究機関が中核的研究機関として学界・産業界をリードしている。トンネルパッシベーションコンタクトや、キャリア選択性新材料を利用したヘテロ接合セルなど新規な取り組みで多くの成果が報告されている。有機薄膜太陽電池の研究者の参入も多くみられる。Si 系薄膜においては、スイス EPFL が世界の研究開発を牽引している。CIGS 太陽電池、CZTS 太陽電池ともに、効率自体は日米に及ばないものの、基礎物性からデバイス評価まで、学術的な研究にしっかり取り組んでおり、研究水準は着実に上がっている。有機系太陽電池においては、有機薄膜型の研究が依然として盛んであるが、EPFL (グレッツェル研) に代表されるように、研究の中心をペロブスカイト太陽電池へ移行する動きも多くみられる。色素増感型ではなお、EPFL (グレッツェル研) が研究の中心である。また、有機薄膜型では Imperial College やケンブリッジ大学が基礎研究を牽引している。ペロブスカイト太陽電池では固体化セルを開発したオックスフォード大学、色素増感型太陽電池のメッカである EPFL (グレッツェル研) が世界の研究開発の中心となっている。
	応用研究・開発	◎	→	市場拡大を背景にベンチャー企業が多く設立され、製品化を目指している。企業での開発の中心は、生産技術であり、研究機関との研究コンソーシアム体制が有効に機能している。装置メーカーによるターンキー製造装置の高度化も進んでおり、Roth&Rau 社は PERC セルやヘテロ接合セルなど多様なセル構造に対するラインを提供している。ヘテロ接合セルは 24% 以上が可能としている。また、利用技術の開発や標準化、規格化では幅広い検討が行われている。また、利用技術の開発や標準化、規格化では幅広い検討が行われている。薄膜 Si ではエリコンソーラー社により、小面積 a-Si セルの安定化効率 10% 超が初めて達成されるなど、高い技術開発水準を有している。有機薄膜型では、Heliatek が 13% 以上の変換効率を達成している。集光型太陽電池・化合物太陽電池においても、高い技術開発水準を有している。研究機関の開発成果が人とともに移動して企業の技術開発を支えている。研究機関で企業の研究的な研究を展開しているので実用化は早い。

中国	基礎研究	○	↗	結晶系 Si 太陽電池は、産業として急速な発展を遂げており、国家計画の下で、公的研究機関・大学が研究開発を推進している。研究員は、先進国への留学生が戻って活躍するケースや半導体分野からの転身が多い。現時点では、海外の研究機関等の追跡研究が主体であり、独創的な研究は限定的であるが、研究水準は上昇傾向にある。薄膜 Si では 4 接合タンデムにて 15% に迫る変換効率を実現している。化合物太陽電池など、その他の太陽電池においても研究活動は見られるが、まだ研究水準は高くない。有機系太陽電池やペロブスカイト太陽電池においても留学時に培った人脈を活かし、国際共同で基礎研究を推進。潤沢な研究資金で猛烈な進歩を遂げている。特に、有機薄膜型では非フラーレンアクセプターの開発に重点を置き、15% に迫る変換効率を実現している。
	応用研究・開発	◎	↗	企業は国外の大学や研究機関、製造装置メーカー等と連携して先端技術を導入・活用することで、高性能太陽電池の実現や、低コスト化などへの取り組みをみせている。企業間での技術情報に関する障壁が低いため、導入された先端技術が、国内全体へ拡散する速度は非常に早い。Trina Solar 社は多結晶の PERC セルで 21.3% を達成したことを報告している。Jinko Solar 社は p 型単結晶セルで 23.95% を報告している。ヘテロ接合太陽電池でも GW スケールの製造ラインの建設が計画されている。有機系太陽電池においては、中国、台湾ともに多くのベンチャー企業が創立されている。
韓国	基礎研究	○	↗	韓国政府は、半導体や液晶分野に続く産業として、太陽光発電産業として育成しようと研究開発を支援している。研究開発は、現実的な技術を中心として、結晶シリコン系のシステム開発に多くの予算を投入している。セルとモジュールの研究開発は、ペロブスカイト太陽電池など次世代技術に集中している。ペロブスカイト太陽電池の研究開発では世界のトップレベルを走っており、KRICT が世界最高変換効率 22.7% (米国 NREL 認証) を達成している。
	応用研究・開発	○	↗	韓国政府による Renewable Energy 2030 戦略では、2030 年まで国内エネルギーの 20% を再生可能エネルギーで賄うことを目標としており、その中で太陽光発電は 60% を占有する予定である。Hanhwa Q Cells 社は結晶シリコンセルとモジュールの国内生産量の大幅な拡大をしている一方、LG 電子と Hyundai は、生産ラインの増加投資を中断し、事業戦略を立て直している。セルと module の生産技術は世界レベルであり、R&D 水準は着実に上昇傾向にある。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

1) 各種太陽電池の最高効率

M. Green et al., "Solar cell efficiency tables (ver.52)," *Progress in Photovoltaics* 26 (2018): 427. doi:10.1002/pip.3040

・ヘテロ接合太陽電池の 25% 超

K. Masuko et al., "Achievement of More Than 25% Conversion Efficiency With Crystalline Silicon Heterojunction Solar Cell," *IEEE J. Photovoltaics* 4 (2014) : 1433. doi:10.1109/JPHOTOV.2014.2352151

・裏面電極ヘテロ接合太陽電池の 26% 超

K. Yoshikawa et al., "Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts

for a photoconversion efficiency over 26%,” *Nature Energy* 2 (2017) . doi:10.1038/nenergy.2017.32

・裏面電極ヘテロ接合太陽電池 25.1% の量産技術

7th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, USA, 10-15 June, 2018.

・シリコンインゴット中の結晶欠陥の3次元可視化技術

Y. Hayama et al., *Solar Energy Mat. and Solar Cells* 189 (2019) : 239.

・シリサイド半導体の太陽電池応用

D. Tsukahara et al., “p-BaSi₂/n-Si heterojunction solar cells with conversion efficiency reaching 9.0%,” *Appl. Phys. Lett.* 108 (2016) . doi:10.1063/1.4945725

・ペロブスカイト シリコンタンデム

J. P. Mailoa et al., “A 2-terminal perovskite/silicon multijunction solar cell enabled by a silicon tunnel junction,” *Appl. Phys. Lett.* 106 (2015) . doi:10.1063/1.4914179

2) 14% を超える非フラーレン高分子太陽電池

S. Zhang et al., “Over 14% Efficiency in Polymer Solar Cells Enabled by a Chlorinated Polymer Donor,” *Adv. Mater.* 30 (2018) . doi:10.1002/adma.201800868

3) 14% を超えるタンデム非フラーレン高分子太陽電池

Y. Zhang et al., “Thermally Induced Bending of ReS₂ Nanowalls,” *Adv. Mater.* 30 (2018) . doi:10.1002/adma.201704585

4) 14% を超える三元ブレンド非フラーレン高分子太陽電池

H. Li et al., “Thermostable single-junction organic solar cells with a power conversion efficiency of 14.62%,” *Sci. Bull.* 63 (2018) : 340. doi:10.1016/j.scib.2018.02.015

5) 光損失エネルギーの小さな高分子太陽電池

K. Kawashima et al., “High-efficiency polymer solar cells with small photon energy loss,” *Nat. Commun.* 6 (2015) . doi:10.1038/ncomms10085

6) 14% を超える色素増感太陽電池

K. Kakiage et al., “Highly-efficient dye-sensitized solar cells with collaborative sensitization by silyl-anchor and carboxy-anchor dyes,” *Chem. Commun.* 51 (2015) : 15894. doi:10.1039/C5CC06759F

2.1.2 蓄電デバイス

(1) 研究開発領域の定義

電気エネルギーを必要とときに蓄え、必要とときに取り出すデバイス・システムにおいて、大容量、高出力、高エネルギー密度などを目指す研究開発領域である。蓄電デバイスとしては物理現象を利用したもの（フライホイール電力貯蔵、超伝導電力貯蔵など）と化学反応を利用したものがああり、また用途として自動車・輸送機器用（大型×移動型）、スマートグリッド・EMS用（大型×定置型）、ユビキタス・モバイル機器用（小型×移動型）などがあるが、ここでは今後重要になる再生可能エネルギー利用や電気自動車普及に関係の深い大型用途で化学反応を利用した蓄電デバイス（蓄電池、スーパーキャパシタ）を中心に上げる。

(2) キーワード

二次電池、蓄電池、リチウムイオン電池、ポストリチウムイオン電池、金属空気電池、リチウム空気電池、全固体電池、リチウム硫黄電池、多価イオン電池、多価カチオン電池、NAS電池、レドックスフロー電池、スーパーキャパシタ、リチウムイオンキャパシタ、エネルギー密度、出力密度、安全性

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

ノートパソコンや携帯電話、スマートフォンなどのエレクトロニクス機器において、小型の蓄電池やスーパーキャパシタは、すでに広く使われている。一方、環境保全・地球温暖化対策としての電気自動車の普及に向けた動きが活発化しており、大型で移動型の蓄電池の市場が急速に拡大し、高信頼性、高耐久性、高入出力特性などの要求に対応するための技術開発競争が世界で激化している。また、太陽光や風力など気象により変動する再生可能エネルギーの最大限の活用に向け、気象変動の吸収緩和、安定な出力制御、あるいは需要側での需要変動緩和やピークシフトの目的から、大容量・大型で定置用の蓄電デバイスのニーズも顕在化してきている。このような大型の蓄電デバイスに要求される機能や性能は小型・携帯用（移動型）のものとは異なってくるため、その用途に合った研究開発が必要である。

本領域では、近年関心が高まってきている電気自動車やスマートグリッド・EMS用途などに向けた移動型および定置型で大型の蓄電デバイスを中心に上げる。大型の蓄電デバイスとしては、蓄電池やスーパーキャパシタのような化学反応を利用したものと、フライホイール電力貯蔵や超伝導電力貯蔵のような物理現象を利用したものがああるが、ここでは車や家庭での蓄電にも使える程度の扱いやすさや大きさを考慮して、化学反応を利用した蓄電デバイスに絞る。具体的には、小型・移動型ですでに使われているリチウムイオン電池、次世代の革新電池（全固体電池、金属空気電池、リチウム硫黄電池、多価カチオン電池）、大型・定置用に特化した電池（レドックスフロー電池、NAS電池）、急速充放電可能なスーパーキャパシタについて記載する。

[研究開発の動向]

・リチウムイオン電池

リチウムイオン電池は実用レベルで最もエネルギー密度の高い電池であり、世界中で研究が

行われ、高性能化が重点的に進められている。この電池は1990年頃に携帯機器用の蓄電池として開発され、その後、電池の製造技術の進展に伴って、エネルギー密度が当初の約3倍の約200 Wh/kgに達した。また、リチウムイオン電池を大型化し定置用や電気自動車用への展開が進められてきた。大型リチウムイオン電池のエネルギー密度は、携帯機器用の電池と比較するとまだ半分強程度であるが、今後、向上が進むと考えられる。なお、携帯機器用の小型リチウムイオン電池も、ドローンなどの新しい応用のためにエネルギー密度の向上が求められている。

リチウムイオン電池の開発項目としては、①高エネルギー密度、②高入出力密度、③高い安全性、④長いサイクル寿命、⑤広い温度域での安定動作、があり、新しい材料および部材の研究が進められている。

エネルギー密度の向上は、高容量の正極および負極を使用する方法と、電極として活物質の密度を上げて実用量を増加させる手法がある。電気自動車用の負極材料ではSiあるいはSiを担持した炭素などが活発に開発されている。正極材料はLiCoO₂からLiNi_{0.5}Mn_{0.2}Co_{0.3}O₂などのNi系にシフトが進んでいる。その他の部材に関しても可能な限り薄くするなどの試みがなされている。定置用の大型リチウムイオン電池では、負極材料は携帯機器用のリチウムイオン電池と同じであるが、正極材料としては酸化物正極より安定で安全性が高いことからLiFePO₄が用いられてきた。しかし、LiFePO₄は放電電圧が3.4 V vs. Li/Li⁺であり酸化物正極よりも低いため、4.0 Vで放電できるLiMnPO₄に関する研究が行われている。電極構造は可能な限り密度を高くし、集電体も可能な限り薄くすることが試みられている。

出力に関して、電動車両の電池は携帯機器よりも大きな出力が必要である。特に、ハイブリッド自動車の場合、搭載する蓄電池の容量が小さいことから、要求される電池あたりの出力が非常に大きくなり、高出力電池としての設計が必要になる。一方、プラグインハイブリッド車や電気自動車では搭載する蓄電池の容量が大きいため、ハイブリッド自動車の電池ほどには大きな出力は求められない。しかし、急速充電を重視し、充電時間を数分レベルまで短縮しようとする場合には高入力密度が必要となり、ハイブリッド車に搭載される高出力電池と同様の設計が求められる。

安全性と寿命は、大型電池の場合には安全性が損なわれると重篤な事故につながるため、携帯機器の電池以上に重要であり、より安全な電池の設計が必要となる。例えば、ポリオレフィン系のセパレータでは安全性を担保できないため、アルミナをコートすることや、正極に酸化物のみを使用しないでリン酸塩系材料と組み合わせること（リン酸塩を30%程度複合）で安全性を強化している。電気自動車の場合には、エネルギー密度が重要であるためLiNi_{0.8}Mn_{0.1}Co_{0.1}O₂やLiNi_{0.8}Co_{0.15}Al_{0.05}O₂などの正極の開発も進められているが、安全性の確保が課題となっている。その他にも、LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O₄に代表される5 V系の正極材料の検討も進められているが、この場合には電解液の酸化分解が問題になっている。また、サイクル寿命の向上も必要である。蓄電池の容量の劣化には、活物質そのものの劣化、電極の電子伝導性の劣化、イオン伝導性の劣化など多くの要因があり、電池ごとに特定しなければならない。蓄電池に要求される15年程度のサイクル寿命を達成するためには、少なくとも活物質そのものの劣化があってはならない。セルレベルでの寿命を支配する因子として、特にハイレートでの使用の場合における電流分布があり、より均一な電流分布のための電極およびセパレータ技術が求められる。

リチウムイオン電池のエネルギー密度は改善されているが、材料由来の理論的な限界があり、

300 ~ 400 Wh/ kg である。これ以上の向上はリチウムイオン電池系では不可能であるため、革新電池に関する研究が始まっている。革新電池系としては、以下に述べる全固体電池、リチウム金属電池、金属空気電池、リチウム硫黄電池、マグネシウム電池（多価カチオン電池）などが挙げられる。これらの電池は理論的にリチウムイオン電池に比較して数倍のエネルギー密度を有するものもあるが、実用電池の作製には、材料開発、部材開発を進める上で必要な電池設計の基礎的データがまだ不足している。

・全固体電池

全固体電池は、リチウムイオン電池の有機電解液を無機固体電解質に置き換えた電池である。可燃性の有機電解液を用いないため、過熱による変形や膨張、発火事故の心配がない電池として期待されている。無機固体電解質材料としては硫化物系と酸化物系に大別される。硫化物系固体電解質のリチウムイオン伝導度は有機電解液よりも高く、日本や韓国をはじめとして開発が活発である。次世代電池の中では最も先行して実用サイズの単セル作製が可能となっており、信頼性まで含めた評価が始まっている。しかし、現時点では、有機液系リチウムイオン電池と同じ正極活物質材料を用いているため、体積当たりのエネルギー密度で有機液系リチウムイオン電池を上回れるかどうかが課題である。また、硫化物系固体電解質は、水分と反応して硫化水素を発生するため、大量生産の作製プロセスと、電池使用中に損傷したとき水分が侵入して硫化水素が発生することへの対策が課題である。さらに、現在の有機電解液系と同じ正極活物質を用いる限り、高温時に正極活物質の分解が発熱反応となり、熱暴走への懸念は皆無ではないため、全固体電池に向けた正極活物質の開発も進められている。一方、酸化物系固体電解質は、化学的に極めて安定であること、硫化水素の発生がないこと、大気中での製造が可能であることから期待が高いが、リチウムイオン伝導度が硫化物より低いこと、活物質と電解質界面のイオン伝導度がきわめて低いことなど、解決すべき課題も多い。

・金属-空気電池

金属（リチウム、アルミニウム、亜鉛など）-空気電池は、正極活物質に大気中の酸素を用いるため、電池内部の活物質は負極活物質のみで良く、高エネルギー密度を期待できる。しかし、低いエネルギー変換効率、低い出力、金属負極の可逆性の問題がある。電解質に関する研究と正極に用いる炭素材料の工夫を中心に研究開発が行われ、成果も得られているが、実用するにはまだ時間がかかる。

・リチウム硫黄電池

リチウム硫黄電池は、高エネルギー密度が期待される電池である。リチウムイオン電池の容量は正極活物質の容量で主に制約されているが、ここに高容量の硫黄を用いることで高エネルギー密度となる。硫黄は有機電解液に溶け出して正極が壊れるという問題があるが、電解質としてイオン液体を用いることにより、最大の問題である多硫化リチウム中間体の溶解が抑制される。さらに、炭素の細孔構造を制御することで、溶解をより抑制することが可能になりつつある。しかし、正極の膨張・収縮と負極のリチウム金属のサイクル特性の改善が今後の課題として残る。なお、ドイツのフラウンホーファー研究機構では、電気自動車を念頭に置いて、この電池系に注力している。

・多価カチオン電池

多価カチオン電池は、1価のリチウムに対して多価の元素（例えばマグネシウム）を用いることで高エネルギー密度を狙う電池である。反応が複雑であること、劣化が早いなど解決すべき課題が多く、電解液や正極に適した材料の探索などの基礎研究が行われている。

・レドックスフロー電池

レドックスフロー電池は、1974年にNASAが基本原理を発表したことに端を発する。現行の主な形態は、正極および負極電解液にバナジウムイオンを含む硫酸水溶液を利用し、正極と負極との間に隔膜を介在させた電池セルに外部タンクから正極電解液および負極電解液をそれぞれ供給して充放電を行うようになっている。この外部タンクに入った電解液にエネルギーを貯蔵することが特徴である。日本では住友電工が主体となって開発している。すでに大型定置用の実証評価として、経済産業省が北海道電力南早来変電所にレドックスフロー電池（出力15MW／容量60MWh）を、東北電力西仙台変電所にリチウムイオン電池（40MW／20MWh、東芝）を2014年度末までに配備し、その後3年間で系統安定化の実証試験を実施している。この電池の主な特徴としては、高い耐久性、発火に対する安全性が高いことが挙げられる。一方で、エネルギー密度が低く、電解液の循環のためにポンプが必要で、大型化せざるを得ないという問題がある。米国では、エネルギー省パシフィック・ノースウェスト国立研究所（PNNL）、中国では、中国科学院大連化学物理研究所が大型実証試験を進めている。

・NAS電池

NAS電池は、1966年に米フォード社が発表した電池である。正極に硫黄、負極にナトリウム、電解液に固体電解質のβアルミナを用いる。原材料が資源的に豊富で、量産によるコスト低減の見込みが高い。しかし、開発元の米国は信頼性の課題を解決できずに撤退した。これは、運転時に300℃程度に保持した硫黄と金属ナトリウムを活物質として用いる点が、長期の火災安全性担保の観点から問題になったことによる。現在は世界で唯一、日本ガイシだけが量産を行っている。環境省では、再生可能エネルギーの拡大のために、蓄電池（リチウムイオン、NASなど）を用いた太陽光や風力発電の変動を吸収する実証事業を、東北や九州の離島など全国8地域で、2014年度から4年間で実施している。

・スーパーキャパシタ

スーパーキャパシタは、電気二重層キャパシタ（EDLC）およびリチウムイオンキャパシタが主に研究、実用化されている。EDLCの応用は限定的であるが、充放電サイクル耐久性が特に大きいこと、使用温度範囲が広いこと、充放電が高速であること、などの特徴を生かした用途開発が始まっている。日本国内では1970年代後半に製品化され、1990年代に各種家電に採用が始まり、2000年代以降には携帯電話やデジタルカメラにもメモリーバックアップ用などとして使われるようになった。しかし、このような用途には大容量な超小型固体二次電池の採用例が出てきており、スーパーキャパシタにも容量などの性能向上が求められている。

一方、大型用途としては、高出力特性を生かして、半導体工場で電源の瞬間停電対策に用いられている。また、容量を現状の数Wh/kgから数倍～十倍程度高めると、自動車のエンジン始動用など用途が広がるとの期待があり、キャパシタ反応を界面でのイオン吸着ではなく、リ

チウムイオン電池に類似した電気化学反応を導入する検討が行われている。リチウムイオンキャパシタもその一つである。最近では正極活物質の究極的なナノ化により、高容量のキャパシタの研究も進展している。

現在、1000～2000 F (定格電圧 3.8V)、10 Wh/kg (20 Wh/L) の実用セルが製品化されている。日本では、JM エナジー (JSR グループ) がリチウムイオンキャパシタ、日本ケミコン、日立化成などが EDLC を販売中である。2011 年にマツダが乗用車用として世界で初めて、EDLC を採用した減速エネルギー回生システム i-ELOOP を実用化した。中国では、中国南車株洲電力汽車有限公司により、電気バスへの応用が試みられている。これは、繰り返し寿命が 100 万回程度と長く、充電が高速なのでバス停毎に充電できる特徴を活かしている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

・リチウムイオン電池

負極に関して、理論容量が現行の炭素負極の 10 倍である Si 系の研究が多い。リチウム金属に関する研究も、デンドライト析出抑制に向けた研究が進んでいる。電解液では、濃厚電解液の研究が行われている。濃厚な電解液のため、電池製造プロセスに課題があるが、電解液の塩濃度を高くしてフリーな溶媒を減少させることで、Li 金属の溶解・析出の可逆性が向上し、また、火災安全性も向上する結果が得られている。セパレータでは、リチウムのデンドライトを貫通させない 3DOM セパレータの開発が行われている。リチウム金属を使用しても短絡することではなく、リチウム金属の可逆性を向上させることができる。正極に関しては、5V 級スピネル $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ 系による高電圧化、ニッケル含有量を高めたリチウムニッケルマンガンコバルト酸化物 ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$, Ni: Co: Mn= 5:2:3, 6:2:2, 8:1:1, 200～230 mAh/g)、あるいはリチウム過剰固溶体系 ($\text{Li}_2\text{MnO}_3\text{-LiMO}_2$, 250～300 mAh/g) などによる高容量化が進められている。これらの材料が実用レベルに到達した場合、リチウムイオン二次電池の理論的限界と考えられている 300 Wh/kg に近いエネルギー密度が達成できる。

・全固体電池

固体電解質分野では有機電解液を凌駕するイオン伝導性が実現されており、固体電池の開発に大きな影響を与えている。固体電解質を前提とする場合は、正極に接する電解質に高電位に強い電解質、負極側に低電位に強い電解質を配置することができる。単一の電解質で広い電位範囲の電気分解耐性を持たなくても良い。これを利用すると、有機電解液では使うことの出来なかった高電位正極活物質を用いる可能性が拓け、電池のエネルギー密度が大きくなる。これにより、 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ や $\text{Li}_2\text{CoP}_2\text{O}_7$ などの現状の有機電解液では使用できない高電位動作の正極活物質開発が進んでいる。

・リチウム-硫黄電池

硫黄の還元生成物の溶解を抑制可能な溶媒和イオン液体を用いた取組みが行われており、数百回程度の充放電が可能になっている。

・レドックスフロー電池

バナジウムを含む強酸電解液から有機電解質を含む水溶液にして低コスト化を目指す研究などが行われている。アメリカ DOE パシフィック・ノースウェスト国立研究所が研究中の新しい電解液は、陽極液としてメチルピオローゲン、陰極液として 4-ヒドロキシ-2,2,6,6-テトラメチルピペリジン 1-オキシルを使用し、コストを 60%削減できるとしている。国内でも中性の電解液の研究例があり、長期の信頼性向上が期待される。

・NAS 電池

2018 年 11 月にドイツにおいて、NEDO、日立化成、日立パワーソリューションズ、日本ガイシによる実証試験が始まった。日立化成の 2.5 MWh のリチウムイオン電池と日本ガイシの 20 MWh の NAS 電池を組み合わせたハイブリッド蓄電システムであり、再生可能エネルギー導入による系統安定化の課題に対する有効性を検証する。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

アメリカでは DOE のプロジェクトが引き続き継続されている。科学局 (SC) Basic Energy Sciences (BES) のプログラムである Energy Innovation Hub では、次世代蓄電池 (車載用/定置用) の研究拠点として、Argonne 国立研究所を中心とする Joint Center for Energy Storage Research が 2012 年に発足し、非常に広範な電池系について検討している。少なくともリチウム金属の使用と全固体電池に関しては重要な研究課題となっている。5 年間で予算は 1 億 2 千万ドル、5 倍のエネルギー密度 (400 Wh/kg)、1/5 のコスト実現 (100 ドル/Wh) が目標とされ、現在までに数多くの研究成果が発表されている。また、2018 年 4 月に、DOE は超急速充電を可能にするための 1900 万ドルの支援プログラムを開始した。急速充電できる電気自動車システムの開発に焦点を当て、バッテリーパックのコストをキロワット時当たり 100 ドル以下にし、航続距離を 300 マイル以上にする、2028 年までに 15 分以内の充電を可能にすることを目的としている。MIT と DOE による Materials Project では、インフォマティクスやデータ科学をこれまでの物質・材料科学に融合させることにより、新物質・材料科学研究を加速する取組みが進行中である。

欧州では、欧州バッテリー同盟 (EBA) が 2017 年 10 月に設立され、電気自動車 (EV) 用電池など、EU 域内産業の競争力強化を目指しており、EU 域内企業による EV 用電池の生産プロジェクトが相次いで立ち上げられている。電池開発では、欧州連合の Horizon 2020 研究およびイノベーションプログラムから 790 万ユーロの資金を調達して、安全で軽量、高エネルギーな自動車用 LiS 電池のプロジェクト “LISA” が始まった。Varta Micro Battery、Renault、Fraunhofer、TU Dresden、Oxis Energy などがパートナーとして参加している。ここでは 20 Ah レベルの自動車搭載サイズのセルで、非可燃性のハイブリッド固体電解質も開発する予定である。これらの技術は既存のリチウムイオン電池にも応用可能としている。重要な点は、電池の特性向上だけではなく、生産プロセス開発、生産工場立ち上げまでをスコープに入れたプロジェクトになっていることである。

中国では「国家ハイテク研究発展計画」(863 計画)により車載用蓄電池の研究がなされている。2020 年の開発目標は、単電池でエネルギー密度 300 Wh/kg、サイクル寿命 3000 回、コスト 1 元/Wh (約 1 万 6 千円/kWh) である。また、「中国国家重点基礎研究発展計画」(973 計画)においては、300 Wh/kg 以上のエネルギー密度を目標とした革新型蓄電池の基礎研究

が行われている。ここでは $\text{LiNi}_{0.8}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{O}_2$ に関する研究と $\text{LiMn}_{0.7}\text{Fe}_{0.3}\text{PO}_4$ に対するファンディングが増えている。

韓国では、KIET（韓国産業技術評価管理院）が素材部品技術開発事業を行っている。電池生産は産業として強いが、素材が弱いために強化を目指している。韓国経済研究院は2019年1月に発表した報告書「電気自動車時代、バッテリー産業競争力強化のための政策課題」で、次世代技術の開発と制度的支援の拡大が必要であると指摘しており、電池開発の強化が予想される。現在、リチウムイオン電池への補助から革新電池への補助に切り替わりつつある。リチウム金属負極を中心に固体電池を含めた研究に国からの補助がなされている。

日本では、以下の大きな2つの動きが継続中である。NEDO・RISING（革新型電池先端科学基礎研究事業）において、京都大学に中核的研究拠点を置き、大学・独法・企業の産官学連携による基礎から応用に至るまでの革新電池開発プロジェクトが進行中である。SPRING-8、J-PARCなどの最先端大型研究施設の共同利用などを行いながら、基礎研究と革新型蓄電池のイノベーションに向けてオールジャパン体制で進めている。2016年度より引き続き第2期（RISING II）が進行中で、硫化物系全固体リチウムイオン電池の基本アーキテクチャー開発を中心として進めている。また、JSTのALCA-SPRING（先端的低炭素化技術開発一次世代蓄電池特別重点技術領域）でも物質・材料研究機構（NIMS）に研究インフラである蓄電池基盤プラットフォームを設置し、全国42機関、82研究室が4つのチームに所属し、大規模な組織的研究開発を実施している。ALCA-SPRINGは、2018年7月に成果の一部を上述のRISING IIへ移管するなど実質的連携を進めている。

（5）科学技術的課題

・リチウムイオン電池

負極については、高エネルギー密度であるSi系の研究が進んでいるが、Siは導電性が低いこと、充放電に対する体積変化が大きいことが問題となっている。導電性を高めるために導電助剤が大量添加されるが、それによって電極としてのエネルギー密度が低下し、現行の炭素負極に対する優位性は小さくなっている。バインダーの改良による体積変化の影響抑制も重要である。また、エネルギー密度を高めるために正極電位を高めていくと、電解液の分解により耐久性が落ちてしまい、これは、電池の火災安全性にも関係する問題となる。今後、大型機器にリチウムイオン電池が展開されていくと、火災安全性を担保するための負極の安定性、電解液の分解抑制、正極の安定性、正負極を隔てるセパレータの改善、安定動作温度範囲の拡大など、電池各所にそれぞれ解決すべき課題がある。また、製造プロセスの安定性維持（異物混入など）も重要である。携帯機器は単セル使用が多いが、電気自動車などの大型機器は多数を直列接続するので、電池個々のばらつきを小さくすることが求められ、製造管理も課題である。

・全固体電池

電池内部がすべて固体で流動性がなく、かつ充放電に伴い電極活物質の体積変化が生じることから、活物質と電解質界面を安定に維持することが課題となっている。酸化物系では、接触抵抗が高く、電極、電解質作製の低温プロセス化技術の開発が実用化の鍵である。また、電極活物質と固体電解質との界面におけるリチウムイオンの移動度が極端に低下して抵抗が高くなり、出力特性が低下するという問題も大きい。全固体電池は有機電解液系リチウムイオン電池

とは原料および製造方法が異なるため、素材、電池とも生産装置や設備等を含めた新たな製造プロセスの開発も求められる。

・金属-空気電池

充電時の過電圧が高いために充放電効率が低いこと、副反応による劣化や大電流を流すことが困難なこと、大気から酸素を取り込む時に同時に取り込まれる水分や二酸化炭素による劣化など、重要な基礎的課題が残されている。また、金属負極のサイクル性や利用率の向上も大きな課題である。電極材料や電解質の開発を含めた基礎研究の強化と、セル化・スタック化（システム化）に向けた広範な技術開発が求められている。

・リチウム-硫黄電池

正極活物質である硫黄電極の充放電に伴う体積変化や、硫黄の放電時に生成する多硫化リチウムの有機電解液への溶解を抑制する手法の開発が求められている。また、硫黄は導電性が低いため大量の導電助剤を用いる必要があり、それに伴う正極のエネルギー密度低下や、エネルギー密度を高めるための正極厚膜化による性能低下も解決すべき課題となっている。

・多価カチオン電池

マグネシウム金属は高い還元性を示し、電解質と反応して表面にイオン伝導性、電子伝導性を持たない不動態被膜を形成するため、反応性の小さい電解質溶液を用いる必要がある。しかし、そのような電解質溶液は比較的低い電位で酸化されるため、正極との適切な組み合わせが難しい。マグネシウムイオンが可逆的に挿入脱離可能で、3 V 以上の電圧を与える正極材料の開発が必要である。

・レドックスフロー電池

定置用途では、低コスト化とセル抵抗の低減が課題である。20 年以上と長寿命である点を考慮しても、電解液や隔壁材料が高価であり、リチウムイオン電池の数倍の Wh 単価である。現在のバナジウム溶液に対し、アントラキノンなど有機レドックス材料を用いる試みが始まっている。セル抵抗低減など将来の特性向上に向けては、様々な反応系に対して、高い反応活性と電極の耐久性、高イオン濃度と電解液の粘性低減、などのフロー電池デバイスとして動作させるときにトレードオフとなる材料特性をいかに両立させるかが課題となる。

・NAS 電池

300 °C に封止されたナトリウムと硫黄を用いる電池であるため、電池缶の封止が安定であることの長期実証が課題である。

・スーパーキャパシタ

材料面では体積エネルギー・出力密度の向上に向けた高密度炭素材料や酸化物の開発が求められている。活性炭電極はかさ密度が低く、表面利用率が低いことや無駄な細孔があることが問題であり、精密に細孔構造を制御した高比表面積な低価格材料の開発が求められている。レドックスキャパシタ材料も同様であり、表面あるいは表面近傍でのレドックスを最大限有効活

用したナノ粒子やナノシート材料及びそれらを利用した高密度多孔質電極の材料開発がキャパシタンスの増大に向けた課題である。高電圧化に向けては、デバイスレベルでのハイブリッド構成を考慮することが必須であり、高容量キャパシタ電極だけでなく、高速反応かつサイクル性を各段に向上させた電池電極（リチウムイオン二次電池技術の転用や応用など）、ならびに耐電圧が高い電解液も必要となる。

(6) その他の課題

次世代電池の全固体電池の研究は産学官連携して進められているが、材料や作製プロセスは現行の有機電解液系リチウムイオン電池と大きく異なるため生産設備など従来と互換性のない部分が多く、新たな投資競争になる点への対応が課題である。また、日本では自動車用の蓄電池研究が主体であるため、リチウムイオン電池や全固体電池が主要な研究開発対象となっているが、欧米や中国では大型定置用に最適化したリチウムイオン電池以外の電池の研究が行われている。小型から超大型まで一つの電池系でやりきれんかどうかの判断が必要である。

(7) 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	◎	↑	ALCA-SPRING、Rising II、などいくつかの電池に関するプロジェクトが積極的に連携しつつ進められている。特に全固体電池で、積極的な取り組みが見受けられる。
	応用研究・開発	○	→	応用研究はアカデミアでの活動は少ないが、電池メーカー、自動車メーカー、材料メーカーで行われており、現状では世界のトップレベルにある。
米国	基礎研究	○	→	DOE が基礎的な研究に研究費を投入しており、マテリアルゲノムとの連携による新しい成果も出ている。数多くの電池を同時並行しているが、突出した強みのある分野がない。
	応用研究・開発	△	→	エネルギー省パシフィック・ノースウェスト国立研究所 (PNNL) が電気自動車を念頭に置いた強化策として、急速充電をターゲットにファンディングを新たに開始している。
欧州	基礎研究	○	→	リチウムイオン電池の基礎研究と革新電池の基礎研究をバランスよく実施している。ドイツのハイテク戦略 2025 では、自動車電動化を念頭に電池強化が挙げられている。ドイツ連邦教育研究省が 1,600 万ユーロ規模での全固体電池研究への助成を 2018.11 に発表した。BASF、ソルベイなどの参入により基礎研究が進展している。
	応用研究・開発	○	↑	ドイツハイテク戦略 2025 では、電池の製造プロセス開発、欧州域内での生産が挙げられている。新しいリチウムイオン電池のメーカーが生産の準備を始めるなど、応用面での展開が著しい。
中国	基礎研究	△	↑	中国科学院は長寿命、北京大学は高エネルギー密度に注力している。革新電池研究は 5 年間 60 億円の規模で進行中であり、今後の実力向上が予想される。
	応用研究・開発	◎	↑	第 13 次 5 ヶ年計画／国家重点研究開発計画／新エネ車試行特別プロジェクト (2016) などで強化している。生産に関しては世界有数の企業が存在、応用・開発も進展している。電気自動車のための応用・開発が活発に行われており、素材産業も育成中である。
韓国	基礎研究	◎	↑	リチウムイオン電池に関する研究は基礎から応用まで幅広く実施されている。革新電池系はサムスン SDI が全固体電池に注力している。
	応用研究・開発	◎	↑	特に電池の生産技術者が多く、円筒型電池の低コスト生産力は世界有数となっている。韓国産業技術評価管理院は電池素材の国産化に注力し始めた。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Yan Jin et al., "Challenges and Recent Progress in the Development of Si Anodes for Lithium-Ion Battery," *Advanced Energy Materials* 7, no. 23 (2017) . doi:10.1002/aenm.201700715
- 2) Sung-Kyun Jung et al., "Understanding the Degradation Mechanisms of $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_2$ Cathode Material in Lithium Ion Batteries," *Advanced Energy Materials* 4, no. 1 (2014) . doi:10.1002/aenm.201300787
- 3) Longwei Liang et al., "Synthesis and Characterization of Concentration-gradient $\text{LiNi}_{0.6}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_2$ Cathode Material for Lithium Ion Batteries," *Journal of Alloys and Compounds* 613 (2014) : 296-305. doi:10.1016/j.jallcom.2014.05.027
- 4) Peng Yue et al., "Effect of Fluorine on the Electrochemical Performance of Spherical $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ Cathode Materials via a Low Temperature Method," *Powder Technology* 237 (2013) : 623-626. doi:10.1016/j.powtec.2012.12.061
- 5) Guohua Li, Hideto Azuma and Masayuki Tohda, " LiMnPO_4 as the Cathode for Lithium Batteries," *Electrochemical and Solid-State Letters* 5, no. 6 (2002) . doi:10.1149/1.1475195
- 6) Shoichiro Watanabe et al., "Capacity Fade of $\text{LiAl}_y\text{Ni}_{1-x-y}\text{Co}_x\text{O}_2$ Cathode for Lithium-ion Batteries during Accelerated Calendar and Cycle Life Tests (surface Analysis of $\text{LiAl}_y\text{Ni}_{1-x-y}\text{Co}_x\text{O}_2$ Cathode after Cycle Tests in Restricted Depth of Discharge Ranges)," *Journal of Power Sources* 258 (2014) : 210-217. doi:10.1016/j.jpowsour.2014.02.018
- 7) Umair Nisar et al., "Extreme Fast Charging Characteristics of Zirconia Modified $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Cathode for Lithium Ion Batteries," *Journal of Power Sources* 396 (2018) : 774-781. doi:10.1016/j.jpowsour.2018.06.065
- 8) Andrew W. Thompson, "Economic Implications of Lithium Ion Battery Degradation for Vehicle-to-Grid (V2X) Services," *Journal of Power Sources* 396 (2018) : 691-709. doi:10.1016/j.jpowsour.2018.06.053
- 9) Lorenzo Grande et al., "The Lithium/Air Battery: Still an Emerging System or a Practical Reality?" *Advanced Materials* 27, no. 5 (2015) : 784-800. doi:10.1002/adma.201403064.
- 10) Jun-Woo Park et al., "Ionic Liquid Electrolytes for Lithium-Sulfur Batteries," *The Journal of Physical Chemistry C* 117, no. 40 (2013) : 20531-20541. doi:10.1021/jp408037e
- 11) Yunya Zhang et al., "Graphene and Its Derivatives in Lithium-sulfur Batteries," *Materials Today Energy* 9 (2018) : 319-335. doi:10.1016/j.mtener.2018.06.001
- 12) Hirofumi Tsukasaki et al., "Analysis of Structural and Thermal Stability in the Positive Electrode for Sulfide-based All-solid-state Lithium Batteries," *Journal of Power*

Sources 367 (2017) : 42-48. doi:10.1016/j.jpowsour.2017.09.031

- 13) Naoya Ishida et al., "Crystal Structure Analysis and Electrochemical Properties of Chemically Delithiated $\text{Li}_{0.13}\text{Mn}_{0.54}\text{Ni}_{0.13}\text{Co}_{0.13}\text{O}_{2-\delta}$ as Cathode Material for Rechargeable Mg Batteries," *Chemistry Letters* 46, no. 10 (2017) : 1508-1511. doi:10.1246/cl.170615
- 14) Jing Zeng et al., "A Long Cycle-life Na-Mg Hybrid Battery with a Chlorine-free Electrolyte Based on $\text{Mg}(\text{TFSI})_2$," *Electrochimica Acta* 284 (2018) : 1-9. doi:10.1016/j.electacta.2018.07.111
- 15) Hirokazu Munakata, Dai Yamamoto and Kiyoshi Kanamura, "Three-dimensionally Ordered Macroporous Polyimide Composite Membrane with Controlled Pore Size for Direct Methanol Fuel Cells," *Journal of Power Sources* 178, no. 2 (2008) : 596-602. doi:10.1016/j.jpowsour.2007.08.060
- 16) Deepak P. Dubal and Pedro Gomez-Romero, "All Nanocarbon Li-Ion Capacitor with High Energy and High Power Density," *Materials Today Energy* 8 (2018) : 109-117. doi:10.1016/j.mtener.2018.03.005
- 17) Jianhui Wang et al., "Superconcentrated Electrolytes for a High-voltage Lithium-ion Battery," *Nature Communications* 7, no. 1 (2016) . doi:10.1038/ncomms12032
- 18) Yulong Sun et al., "Superionic Conductors: $\text{Li}_{10+\delta}[\text{Sn}_y\text{Si}_{1-y}]_{1+\delta}\text{P}_{2-\delta}\text{S}_{12}$ with a $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ -type Structure in the Li_3PS_4 - Li_4SnS_4 - Li_4SiS_4 Quasi-ternary System," *Chemistry of Materials* 29, no. 14 (2017) : 5858-5864. doi:10.1021/acs.chemmater.7b00886

2.1.3 パワー半導体

(1) 研究開発領域の定義

高効率の電力変換を可能にする超低損失電力制御用デバイス（パワーデバイス）を実現する研究開発領域である。SiC、GaN、Ga₂O₃、ダイヤモンドなどのワイドギャップ半導体はSiに比べて原理的に内部損失が小さく高効率化に優れるが、結晶品質向上、ウェハの大口径化、物性制御、デバイス作製プロセス、デバイス構造、性能優位性の向上、高精度の熱設計・パワーマネジメント、モジュール・実装技術、電力変換回路・制御技術、周辺部材・受動部品、長期信頼性向上などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

パワーエレクトロニクス、電力変換、パワー半導体デバイス、IGBT、MOSFET、SJ-MOSFET、JFET、HEMT、HBT、GTO、SBD、シリコン、Si、ワイドギャップ半導体、炭化ケイ素、SiC、窒化ガリウム、GaN、ダイヤモンド、酸化ガリウム、Ga₂O₃、MOCVD、HVPE、MBE、アモノサーマル法、Naフラックス法

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

地球温暖化の抑制に向けて二酸化炭素（CO₂）排出量の削減が世界的に強く求められており、エネルギー資源の乏しい日本にとっても、従来の化石燃料エネルギーから自然エネルギーへの転換を促進するとともに、エネルギー消費を大幅に削減することが必要になっている。一方、世界の全エネルギー消費に対する電気エネルギーの占める割合は年々増加しており（現在は約25%）、電気エネルギーの輸送・変換・制御・供給に関わる広範囲なパワーエレクトロニクス機器の省電力化が重要になってきている。直流電圧の変換を行うDC-DCコンバータや、直流を交流に変換するインバータなどの電気エネルギー変換には、チョップ制御やパルス幅変調などのパワースイッチングが用いられ、その基本性能はパワーデバイスの性能によって決定される。パワーエレクトロニクスの研究開発領域としては、材料・デバイス・回路だけでなく、電力変換システムまでを含むが、ここでは「パワー半導体」領域としてナノテクノロジー・材料分野と関係の深い材料・デバイス・回路を中心に述べる。

今日のパワーデバイスにはシリコン（Si）が主として用いられている。現在は、スーパージャンクション（SJ）やトレンチなどの構造上の工夫により、デバイス性能の向上が牽引されているが、Siの材料定数の限界から来るデバイス性能の限界が指摘されている。このため、将来に向けてパワーエレクトロニクス機器のさらなる省エネ化と高性能化を推進するためには、パワー半導体デバイスの基本性能を大きく向上させる技術革新が必要であり、パワー半導体デバイスの基本性能である高耐圧化と低損失化（低オン抵抗化）の両立に優れたワイドバンドギャップ半導体の研究開発が重要になっている。

[研究開発の動向]

パワー半導体の研究開発動向については、現在の製品の主流であるシリコン（Si）デバイス、実用化が開始された炭化ケイ素（SiC）、研究が活発化している窒化ガリウム（GaN）、酸化ガリウム（Ga₂O₃）を中心に記載する。

Siの低耐圧系(100V以下)および中耐圧系(100V~600V)については、現在普及しているSi-MOSFETのさらなる高性能化(低オン抵抗化)の開発が進んでおり、微細化・トレンチ構造などのMOSFETデバイス構造の改良と合わせて、Si基板抵抗の低抵抗化などによる性能向上が試みられている。また、今後の中耐圧領域の市場拡大に対応するため、Si-MOSFET、Si-IGBTの個々の性能向上と合わせて、新しいフェーズとしての量産技術開発が進められており、従来の200mm製造ラインに代わる300mmラインでの製造が欧州から発表されている。高耐圧系(1200V)は、Si-IGBTが主要パワーデバイスとして普及してきており、オン抵抗の低減、チップの小型化(高パワー密度化)を進めてきている。近年、Si-IGBTに対して新しいスケールリング則を適用することで、現在のSiC-MOSFETと同等なレベルまでさらなる性能向上が連続的に可能であることが示されている(NEDOプロジェクトの成果)。超高耐圧系(1700V以上)は、6.5kVまではSi-IGBT、それ以上ではSiサイリスタが主要パワー半導体となっており、電力グリッド、電鉄などの超高パワー応用系に用いられることが多いため、高耐圧とあわせて大電流容量、低オン抵抗が必須となっている。今後の再生可能エネルギーをはじめとする新電力エネルギーグリッドの拡大や、世界規模での高速鉄道網などに対応する需要は大きく、この領域のSiパワー半導体の技術開発は欧州と日本で競争となっている。

SiCに関しては、SiCウェハの大口径化、高品質化の取り組みや、ショットキーバリアダイオード(SBD)、MOSFETの開発が進められ、1.2kV SiC-MOSFET/SBDモジュールが実用化され、電車への応用など社会実装が進められている。SiCウェハは、4インチおよび6インチ径が市販されており、8インチも開発品が示されている。これに伴い、SiCパワー半導体メーカーはデバイス量産ラインを4インチから6インチへと移行している。量産されているバルク結晶成長技術は、ほぼ昇華法で占められており、高品質・低価格に向けた量産技術が開発されている。初期に問題となっていたマイクロパイプはかなり低減されており、課題は転位欠陥の低減に移っている。また、国内を中心に、高品質が期待される溶液法によるバルク結晶成長や、ガス原料を用いたCVDを高温で行う方法も試みられている。このようなバルク基板の高品質化と併せ、SiCデバイスの活性層を形成するエピタキシャル成長においても、少数キャリアが基板のBPD(基底面転位)に注入されることによるSF(積層欠陥)の発生を抑制するために、少数キャリアをバルク基板に到達させないようなエピ膜構造の工夫が試みられている。

SiCパワーデバイスのうち、SBDについては技術的にかなり成熟してきており、Si-IGBTとの組み合わせ(ハイブリッドモジュール)での実績も多い。MOSFETにおいては、SBD内蔵MOSFETの学会発表が増えており、最近のトレンドになっている。また、オン抵抗を下げるため、Si-MOSFETと同様にチャンネル部をプレーナ構造からトレンチ構造にする流れもあり、Siと比べて酸化膜に印加される電界が高いため、特にトレンチ底部の酸化膜を保護する構造が各社で開発されている。10kV以上のSiCパワーデバイスについては、日本では電力系統応用を目指したIGBTおよびPiNダイオードの報告があり、米国ではDARPAの支援によりIGBT、GTO(Gate Turn-Off thyristor)などのバイポーラ型デバイスに加え、MOSFETも開発されている。

GaNに関しては、ワイドギャップ半導体の中では最も活発に研究開発が行われ、掲載論文数は他の材料に比べ圧倒的に多くなっている。これまでのサファイア、SiC、Si基板上へのGaNヘテロエピタキシャル成長層を用いることに加え、光デバイス(レーザーダイオード)用に開発されたハライド気相成長法(HVPE)によるGaN自立基板を用いたデバイス開発も

行われている。

パワーデバイスとしては、高周波トランジスタの HEMT 技術を活用し、安価な Si 基板を用いることで、コストパフォーマンスに優れた GaN-on-Si 横型パワーデバイスの開発が精力的に行われている。このデバイス開発の最大の課題は熱膨張係数差によるウエハの割れであったが、GaN と Si 基板の間に AlGaIn/GaN 超格子などを導入し、成長温度において熱膨張係数差を相殺する歪みを GaN デバイス層に意図的に与える技術が進展し、製品化が可能となっている。米国の EPC、International Rectifier (IR)、Transphorm がまず製品化を行い、現在では、Panasonic、GaNsystem、On-semiconductor なども製品化している。この数年間の産業界の動きとしては、Transphorm が GaN-HEMT の製造能力を有する富士通の工場を実質的に買収して生産拠点とし、Si パワーデバイス最大手の Infineon が IR を買収して GaN-on-Si 事業を手中にし、半導体ファウンドリー最大手の TSMC が GaN-on-Si のラインを設置するなど、世界的に GaN-on-Si 横型パワーデバイス産業がいよいよ本格化してきた。また、横型 GaN デバイスを用いた製品も一部出荷が始まっており、600V 耐圧品を中心に、AC アダプター、サーバー用電源、LED 用電源、太陽光発電システム用パワーコントローラなどの製品が開発されている。

一方、縦型の GaN デバイスも最近大きく進展してきている。ヘテロエピタキシャル成長に起因する高密度の貫通転位が GaN 本来の特性を最大限に引き出すことを阻んでいるが、まだ高価であるものの比較的容易に入手できるようになったレーザー用の GaN 基板を用いてホモエピタキシャル成長による縦型 GaN パワーデバイスの作製が報告されるようになってきた。後述するように、日米欧のプロジェクトにおいて、ウエハ、エピ技術、デバイスプロセス技術、デバイス構造などの検討、デバイス試作によるデモンストレーションが進んでおり、横型 GaN パワーデバイスでは実現不可能なアバランシェ耐性や高耐圧化、大電流化、低欠陥化によるリーク電流の低減などが示されている。最終的に普及の鍵となるのは、コストパフォーマンスであるが、GaN バルク結晶の作製方法として、既にレーザー用基板で実績のある HVPE 法の技術が洗練されてきていることに加え、アモノサーマル法や Na フラックス法などスケラビリティがあり高い量産性が期待される技術が立ち上がりつつある。

Ga₂O₃ に関しては、この 2~3 年で研究者人口の大幅な増加が認められ、Ga₂O₃ を専門に扱う国際会議・シンポジウムが新設されたり、既存の化合物半導体材料・デバイス国際会議に Ga₂O₃ セッションが設けられるなど、新しい半導体研究分野として広く認知されるようになってきた。最安定結晶構造に相当する β-Ga₂O₃ のバルク単結晶融液成長技術開発に関しては、チョクラルスキー (CZ) 法、ブリッジマン法、Edge-defined Film-fed Growth (EFG) などのいくつかの手法による研究が世界中で行われている。薄膜エピタキシャル成長は、これまでの分子線エピタキシー (MBE) に加えて、ハライド気相成長法 (HVPE)、有機金属気相成長法 (MOCVD) など、多様な結晶成長法が行われている。デバイス開発も、日本や米国を中心に活発化しており、基礎的なトランジスタ、ダイオードの開発成果がこの 1~2 年で多く発表されるようになってきた。これはタムラ製作所からカーブアウトしたベンチャー企業 (ノベルクリスタルテクノロジー) が、Ga₂O₃ バルクおよびエピ基板の製造、販売を始めたことが大きな要因となっている。また、準安定構造に相当する α-Ga₂O₃ の薄膜結晶成長やデバイス開発も活発化している。α-Ga₂O₃ は、主にサファイア基板上のヘテロエピタキシャル成長で得られる結晶構造であるため、準安定構造の中では最も研究が進んでいる。その他、もう一つの準安定構造である ε-Ga₂O₃ の薄膜結晶成長研究も、国内外機関から報告され始めている。デバイ

ス特性に関する報告も増加しており、ショットキー接合型ダイオードや MOSFET（トレンチ型を含む）で優れた特性が報告されている。

高耐圧・超高耐圧領域の将来技術として、優れた熱伝導性と大きなバンドギャップを有するダイヤモンドについても半導体物性の理解とあわせて、ダイヤモンド基板、ダイオード、トランジスタ原理実証などが試みられている。日本にはダイヤモンドの CVD 合成の先導的な研究、リンによる n 型ドーピングなど当該分野での画期的な先行研究があり、最近の論文件数を見ても日本が先行している状況にある。

（４）注目動向

[新展開・技術トピックス]

Si パワーデバイスで用いられている高品質（酸素や炭素不純物が少ない）ウェハはフローティングゾーン（FZ）法によるものであるが、デバイスプロセスの大口径化に対応するために大口径化が容易な磁場印加チョクラルスキー（MCZ）法による高品質化の試みが進められている。Si パワーデバイスは、縦型構造であり基板全体を活用するため、LSI 半導体よりも品質要求が厳しく、最近は特に酸素、炭素などの軽元素濃度低減が課題となっている。また、耐圧系に対応した要求比抵抗値が固定されるため、均一なドーピング制御が要求されるが、偏析現象、MCZ 炉内輸送現象などのために、結晶成長時に比抵抗値を面内・成長方向ともに一定値におさえることは極めて困難である。これらの課題を解決し、大口径 Si ウェハの結晶成長技術を確立することが喫緊の課題となっている。

SiC パワーデバイスの価格低減のためには、SiC 基板の大口径化が重要であり、II-VI 社（米）が 8 インチウェハのサンプル出荷を始めた。デバイス関連では、Infineon（独）や富士電機がトレンチ型 MOSFET の量産を開始した。また、ベンチャー企業の Littlefuse（米）が Monolithic Semiconductor の技術を導入して 1200 V 耐圧の MOSFET を発売した。これらのデバイスを用いた SiC パワーモジュールの発表も相次いでいる。特にインバータ応用として、ダイオードとトランジスタを一体化したフルモジュールの開発・商品化が、三菱電機、日立パワーデバイス、デンソー、Infineon、Semikron Elektronik（独）、CRCC（中国）などから発表されている。さらに実機への搭載も相次いでおり、電気自動車用充電器や太陽光発電用パワーコンディショナーへの適用を目指して Infineon、Vincotech、ロームなどから試作品が発表されている。また、東海道新幹線の N700 系に SiC インバータが搭載され、2020 年の本格運転を目指して試運転が始まった。

GaN を用いたデバイス（GaN on Si 横型パワーデバイス）では、低耐圧品を中心に商品化が相次いで発表されている。Exgan（仏）は 8 インチ Si 基板を用いた GaN パワーデバイスの量産技術を確立したことを発表し、On Semiconductor（米）、EPC（米）、ルネサスエレクトロニクスが 40~100 V 品の量産を開始した。また、Nexperia（オランダ）や GaN System（カナダ）では、自動車用インバータへの搭載を目指して 600 V 耐圧品の商品化を発表した。さらにパワー半導体最大手の Infineon が Panasonic の技術を導入し、2018 年 4Q から GaN デバイスの量産を開始すると発表している。実機への搭載としては、東芝ライテックが LED ランプ点灯回路、安川電機がサーボモータ用に GaN デバイスを搭載した回路を発売した。

GaN の縦型パワーデバイスの実用化を目指したデバイス開発のためには、エピタキシャル成長技術やイオン注入技術、MOS 界面制御技術など、それぞれの要素技術をしっかり固める

ことが重要であり、これらの要素技術についての研究開発の報告が相次いでいる。特に極めて困難と考えられていた GaN の Mg イオン注入による p 型化について、複数のグループからそれぞれ独自の工夫により p 型化に成功した報告がなされており、研究開発の方向性が見えてきた。MOS 界面制御に関しては、ノーマリオフの反転チャネル MOSFET でチャンネル移動度 $100\text{cm}^2/\text{Vs}$ を超えるものが報告され、Mg イオン注入領域上への MOSFET の試作も報告されている。

Ga₂O₃ のパワーデバイスにおいては、これまで n 型 Ga₂O₃ バルクチャネルを用いる横型 Ga₂O₃ FET の開発が主であったのが、(AlGa)₂O₃、(InGa)₂O₃ などの混晶の薄膜エピタキシャル成長技術が進展し、ヘテロ構造による (AlGa)₂O₃/Ga₂O₃ 高電子移動度トランジスタ (HEMT) も報告されるようになってきた。また、縦型構造の FET の報告が国内外複数の機関から出始めており、今後縦型デバイス開発が活発化することが予想される。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

欧州では、EU 内のエネルギー融通、CO₂ 削減などを主目的に、パワーエレクトロニクス・パワー半導体関連の技術革新のために、各種プロジェクトが展開されている。パワー半導体・パッケージング・応用技術などの垂直統合で実施された eRamp (2014 年度～2016 年度) の後継として R3-Powerup が 2017 年度から開始されている。ここではスマートパワーをコンセプトに Si-300mm パイロットラインを活用し、個別半導体素子開発からロジック、アナログデバイスとパワーデバイスの統合によるシステムオンチップ、パワー IC 開発を進めている。また、将来のパワーエレクトロニクス応用を見据えた欧州パワー半導体産業競争力強化を目的に SemI40 (Power Semiconductor and Electronics Manufacturing 4.0) が 2016 年度から始まっている。SiC 関係では、SPEED (SiC Power Electronics Technology for Energy Efficient Devices)、CHALLENGE (3C-SiC Hetero-epitaxially grown on silicon compliant substrates and new 3C-SiC substrates for sustainable wide-band-gap power devices)、OSIRIS (Optimal SiC substrates for Integrated Microwave and Power CircuitS)、WInSiC4AP (Wide Band Gap Innovative SiC for Advanced Power) などが行われている。GaN 関係としては、PowerBase Project (2015 年～2018 年) などで IT 系応用を見据えた 200mm GaN パワーデバイス製造技術の開発などを進めている。ダイヤモンドのパワーデバイスについても研究が盛んになりつつあり、GreenDiamond Project が進行している。

欧州の各国においても独自のプログラムが進められており、例えばドイツでは、クラスタープロジェクトの中で、ワイドバンドギャップ半導体応用技術開発が始まっている。このプロジェクトは国際連携として、2016 年からのワイドバンドギャップ半導体応用の FS 調査を経て、2018 年から日本の NPERC-J と国際共同で SiC パワー半導体の応用技術研究が始まった。また、ドイツでは Ga₂O₃ の結晶成長、物性研究を行う GraFOX (Growth and fundamentals of oxides for electronic applications) も行われている。イギリスでは EPSRC Center for Power Electronics、フランスでは GaNEX や ReAGaN プロジェクトなどが進行している。

米国では軍からの豊富な資金がパワー半導体の研究開発を支えている。米国防総省 (DoD) の海軍研究局 (ONR : Office of Naval Research) では、MURI (Multidisciplinary University Research Initiatives Program)、NEPTUNE (Naval Enterprise Partnership Teaming with Universities for National Excellence) などの複数のプログラムが実施されてい

る。新たな材料である Ga_2O_3 に関するプロジェクト (GAME : The Gallium Oxide Materials Science and Engineering) も MURI などで行われている。ONR の他にも、AFOSR、ARO (Army Research Office)、DARPA (Defense Advanced Research Project Agency)、DTRA (Defense Threat Reduction Agency) などから資金提供されている。米エネルギー省 (DoE) のエネルギー高等研究計画局 (ARPA-E : Advanced Research Projects Agency-Energy) では SWITCHES (Strategies for Wide Bandgap, Inexpensive Transistors for Controlling High-Efficiency Systems) プログラムが実施されている。この中には 14 件のプロジェクトがあるが、SWITCHIES の拡張として 2017 年より GaN のデバイスプロセス開発を目指す PNDIODES (Power Nitride Doping Innovation Offers Devices Enabling SWITCHES) も実施されている。DoE が主導し、アメリカでのハイテク製造業の雇用創出とパワーエレクトロニクスシステムへのワイドギャップ半導体 (SiC、GaN) の大規模適用の加速による省エネルギー化をミッションとして 2015 年から 5 年の期間で 140M\$ の予算で進められている PowerAmerica もあり、ノースカロライナ州立大を中心に産官学合わせて 67 の機関が参画している。ここでは、X-Fab による 150mm ウェハを用いた SiC デバイスのファウンドリー事業も展開している。また、GE と SUNY Poly が中心となり官民パートナーシップによる NY-PEMC (New York Power Electronics Manufacturing Consortium) が 2014 年に開始されており、Albany (NY) で 200mm の SiC ウェハプロセス (ベースは GE で開発された 1.7kV SiC-MOSFET のプロセス) が可能なファウンドリーを保有し、15000 枚/年の能力を持ち、産業の成長に合わせ 50000 枚/年まで拡張が可能となっている。

中国は、最近論文の発表件数が急増していることから豊富な研究資金が各研究機関に配分されていると考えられるが、提供元 (プログラム) は限られており、「National Natural Science Foundation」、「National Key R&D Program」、「National High-Tech R&D Program」の中でパワー半導体の研究開発が進められている。例えば、2016 年から「National Key R&D Program」の中で、SiC 基板、エピタキシャル成長、パワーデバイス、応用まで一貫した開発を行っており、1200V SiC-MOSFET を用いて 1200V/200A の SiC パワーモジュールの開発や、35KV/5MW の SST (Solid-State Transformer) の開発なども行っている。

韓国では MOTIE/KEIT と呼ばれるプロジェクトや、パワーデバイス応用に向けた研究開発ファンド Development of epitaxies and power devices technologies (3 年総額 90 万ドル) などが進行している。

国内では、Si パワー半導体の産業競争力強化を目的として、Si-IGBT 開発が経済産業省「低炭素社会を実現する次世代パワーエレクトロニクスプロジェクト」で進行し、SiC-MOSFET と同性能の Si-IGBT 実証が報告されている。また、同じプロジェクト内で SiC 応用技術開発も進められてきた。内閣府では、戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) において、SiC、GaN、 Ga_2O_3 、ダイヤモンドの開発が基板、デバイス、パッケージなどを含め包括的に行われてきた。ここでは 2014 年度～2018 年度まで毎年 20 億円程度の予算が実施されているが、およそ半分は SiC 関係の研究開発に投入され、高耐圧デバイス用の多層膜ウェハやその伝導度制御、6.5kV 級の SJ-MOSFET および 20kV 級のバイポーラ (IGBT、PIN ダイオード) デバイス、小型・高温・高速動作が可能な次世代モジュールの開発が進められている。文部科学省、環境省などでも、GaN パワーデバイス関連プロジェクトが進行している。2016 年には文部科学省の「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」事業による結晶創製

拠点 (名古屋大学) や、名古屋大学と産総研との窒化物半導体先進デバイスオープンイノベーションラボラトリ (GaN-OIL) が発足し、名古屋大学を中心に GaN デバイスの研究開発が精力的に進められている。

(5) 科学技術的課題

Si パワー半導体は、すでに完成した技術と考えられることがあるが、個別半導体素子としての性能向上、個別半導体素子からモジュール化への変貌、需要拡大に対応する産業・量産化技術のそれぞれに新たな課題があり、川上にある Si 基板、デバイスプロセス技術や、川下にある回路、応用技術との連携で解決していく必要がある。例えば、材料技術では、酸素・炭素などの軽元素濃度の低減が求められているとともに、従来より低濃度の軽元素を正確に測定する評価技術の確立が求められており、軽元素に関連する欠陥などがパワーデバイスの特性におよぼす影響の物理的な解明も重要である。

SiC パワー半導体については、SiC 基板製造技術がボトルネックとなっており、大口径化・高品質化・低コスト化を満足する結晶成長技術を開発する必要がある。現状使われている昇華法は、結晶成長科学としても、結晶成長技術としても、いまだ不明な点が多く、基礎的な観点から再構築する必要がある。また、Si-IGBT の代替ととして期待される SiC-MOSFET は、酸化膜に関連する課題、内蔵ダイオードの動作時欠陥誘起など、半導体物性の課題が指摘されている。

GaN パワー半導体については、p 型制御、信頼性向上、基板作製技術が課題である。パワー半導体は理想的には、p 型、n 型の両者を利用したいため、p 型制御とその移動度の向上が重要である。アバランシェ耐量を代表例として、GaN パワー半導体の破壊物理の検討も必要である。横型デバイスを念頭にした大口径ヘテロエピタキシャル基板作製技術、縦型デバイスを念頭にしたバルク基板作製技術、いずれも結晶成長科学・欠陥物理などと合わせて、装置技術としての開発が必要である。

Ga₂O₃ については、本質的な課題として十分なホール濃度の p 型の実現が困難なことがある。Ga₂O₃ のアクセプタ準位は非常に深いため室温ではほとんどホールを発生できないことや、価電子帯構造が強い結合を有する酸素 (O) の 2p 軌道により形成されるためバンド端にほぼエネルギー分散が無く (ホールの有効質量が非常に大きく) 移動度が小さいことがある。さらに Ga₂O₃ 中のホールは格子緩和を伴って局所的にトラップされ、拡散や低電界でのホール伝導は見込めないとの理論的予測もあり、p 型 Ga₂O₃ の実現はかなり難しい。このため、Ga₂O₃ の p 型不純物ドーピング技術の研究だけでなく、デバイス構造として他の p 型材料を組み合わせるなど p 型 Ga₂O₃ を用いずにデバイスを設計するなどの検討が重要である。もう一つの大きな課題としては Ga₂O₃ デバイスの放熱性の向上がある。Ga₂O₃ の熱伝導率は、Si、SiC、GaN と比較して 1 桁程度小さいため、大電力動作時のデバイスの自己発熱が問題となる。高熱伝導率および電気伝導率を有する異種材料基板への直接接合技術や、水冷配置等の実装技術の研究開発など、応用を見据えた取り組みも必要である。

パワーエレクトロニクス機器・システムの実用化・製品化には最先端の高性能パワー半導体デバイスだけでなく、磁気部品 (変圧器、リアクトル) やキャパシタ (コンデンサ) などの受動部品、各種センサ、デジタル信号処理技術 (DSP、FPGA、A/D 変換器などを含む)、制御技術、実装技術、放熱・冷却技術なども重要である。実際の製品では、高性能パワー半導体

デバイスではなく、他の部品が機器・システム全体の性能・仕様を決定する、いわゆる「ボトルネック」が存在することが多い。このため、パワー半導体デバイスの特性（高温動作、高周波動作など）を十分に引き出せるような受動部品や制御技術、実装技術などシステム化の研究開発にも取り組んでいく必要がある。

（6）その他の課題

SiC や GaN は日本が主導的役割を果たして育ててきた技術であり、Ga₂O₃ やダイヤモンドも今のところ日本が技術的に優位な状況にあるが、欧米や中国が多額の研究資金を投入して研究開発を加速している。このような海外の動きに対抗して日本の技術力、産業競争力を維持していくためには、技術優位性の確保、技術限界の把握と次世代技術の先行研究が重要であり、材料・デバイスの研究開発拠点あるいは共通プラットフォームの整備や人材育成が重要な課題である。また、ウェハ技術からプロセス技術、デバイス技術、回路技術までを含む垂直統合型の研究課題については、産業界・国立研・大学から有能な研究者を結集させ、早期に技術課題を明らかにして取り組めるような産学官連携体制の構築が望まれる。すでに実用・普及している Si パワー半導体においても、新たな技術課題に対して新しい物理、科学、技術の導入が必要となり、国立研・大学の担うべき役割は大きく、共通プラットフォームの整備が重要である。

次世代パワーエレクトロニクスの研究開発を担う若手人材が不足していることも深刻な課題である。大学におけるパワー半導体、パワーエレクトロニクス関係の教育を充実させることや、産学官連携のプロジェクトの中で若手の学生・研究者・技術者に広い知識と高度な経験をさせることが望まれる。例えば、筑波大学での企業によるパワーエレクトロニクスの寄附講座の設置や、TIA でのパワーエレクトロニクスの夏季スクール開催などが行われているが、このような活動が広がることが期待される。

（7）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	◎	→	<p>Si-IGBT スケーリング則の発表は、世界的に IGBT 研究をリードするもので、その後欧州から追試（シミュレーション）が報告されている。</p> <p>SiC、GaN、Ga₂O₃、ダイヤモンドすべての材料で世界トップレベルにある。MOS 界面準位密度の低減、ゲートリーク電流の伝導機構などデバイス実用化に不可欠な研究が進められている。</p> <p>SiC、GaN、では基板の大口径化、欠陥密度低減、デバイスでは縦型トレンチ構造 FET の開発が進展している</p> <p>GaN 縦型パワーデバイスに関しては SIP に加え文科省プロジェクトが始まり、オールジャパンの産官学連携で基盤技術の系統的な研究が進められている。</p> <p>Ga₂O₃ のバルク・薄膜結晶成長、物性基礎研究などの材料研究、およびデバイス基盤技術開発が、大学、国研、企業で広がりつつある。ダイヤモンドでは、伝導型の制御、MOSFET の試作などで優れた結果が報告されている。</p>

日本	応用研究・開発	◎	↗	<p>Si パワー半導体は、欧米がシステム型に移行しつつあるところ、国内は個別半導体素子にとどまっている。</p> <p>企業を中心に SiC-MOSFET/SBD モジュールの応用研究・開発が活発に進展し、SiC インバータモジュールは着実に Si MOSFET の置き換えが進んでいる。また電気自動車、新幹線などで実用化試験が進展している。</p> <p>GaN は低耐压品を主として市場への投入が始まっている。低価格を指向した Si 基板と、縦型デバイスを指向した GaN 基板の 2 つの方向で応用研究が進められている。</p> <p>ベンチャー企業 (ノベルクリスタルテクノロジー) が、Ga₂O₃ バルク・およびエピ基板の製造販売をスタートしている。また、FLOSFIA がコランダム構造の Ga₂O₃ デバイス開発を進めている。</p>
米国	基礎研究	◎	↗	<p>ONR や ARPA-E をはじめ、多くの国家プロジェクトが材料・プロセス・応用技術と広範囲をカバーし、アカデミアを結集させた体制で世界トップレベルの研究開発を行っており、縦型 FET や縦型ダイオードの高耐压化など優れた成果を上げている。</p> <p>研究開発拠点が集約され、SiC は North Carolina 州立大、GaN は UCSB と MIT に集中的に資金投入されている。</p>
	応用研究・開発	◎	→	<p>新しい動きとして、パワーグリッドに関して複数のコンソーシアムが活動している。他にも目的・応用を明確にしたコンソーシアム活動が活発に進んでいる。</p> <p>SiC に関しては、軍用途の応用研究が進んでいる。Wolfspeed を中心に、ウェハからデバイスまでの開発・生産が盛んである。900V 級から超高耐压の 15kV 超級まで幅広く研究開発が行われている。フェアウズドリー X-Fab を用いて、1.2kV 級を中心とした SiC デバイスの開発・生産がおこなわれ、デバイス設計に特化した会社もある。</p> <p>SiC, GaN パワーデバイスの使いこなし技術にフォーカスした DoE の CURCITS プロジェクトが開始された。</p> <p>GaN については、横型 FET の市場投入が進行中で、縦型 FET の開発も加速している。Transphorm 社をはじめ関連のベンチャー企業から商品化が始まると考えられる。</p>
欧州	基礎研究	◎	→	<p>欧州プロジェクトにおいて、パワー半導体関係の各種のプロジェクトがあり、国立研や大学が基盤技術の役目を担っている。新材料系では産業界に先行する原理実証まで行っている。</p> <p>GaN の研究開発は EPFL や Univ. of Padua (伊) が主導しており、極めて活発である。特に電流コラプスの低減や、デバイスの故障解析などに関して優れた成果を出している。</p> <p>Ga₂O₃ については、ドイツベルリン地区で、大学・国研が一体となった材料研究プロジェクトが進められている。また、イギリス、イタリアの大学においても、デバイス評価に関する研究開発報告が出始めている。</p>
	応用研究・開発	◎	↗	<p>産業競争力強化を念頭に材料からデバイス、応用まで垂直統合的にカバーするプロジェクトが進んでおり、パイロットラインは次世代の産業に対応できるスケールで進められている。</p> <p>GaN-on-Si 横型パワーデバイスに関して Imec やフランフォーファー研究所などで産学連携のプロジェクトが進行している。</p> <p>Infineon や ST Micro などが SiC デバイスの製品化を進めている。特に Infineon は、ショットキーダイオードに加えて SiC FET の量産を開始した。また GaN に関しても 2018 年 4Q からの量産開始を発表している。これらに加えて、Semikron Elektronik や Exgan などのベンチャー企業からも各々 SiC、GaN デバイスの商品化が発表されている。</p>
中国	基礎研究	○	↗	<p>欧米日から帰国した研究者が研究をリードし、かつ重点大学制度を活用した若手育成を徹底している。その結果、パワー半導体・パワーエレクトロニクスの国際学会における発表件数が著しく増加している。</p> <p>SiC の論文発表件数は多いものの、10 以上の研究機関が関与しており、まだ拠点化の動きは見られない。</p> <p>GaN に関しては、西安電子科技大と北京大学を研究拠点と位置付けて活発な研究開発を行っている。研究内容は MOSFET の改良などが多く、新構造、新デバイスなどの報告は少ない。一方、HKUST (香港) では、新構造デバイスなどの報告が多く、最近中国と連携して研究を進めている。</p> <p>Ga₂O₃ については、この 1~2 年で、多くの大学からの研究開発が報告されるようになってきた。</p>

中国	応用研究・開発	○	↑	国内製造技術の強化を図る「中国製造 2025」には直接はパワー半導体は取り上げられていないが、IT、ロボット、航空宇宙、交通、自動車、電力など、パワー半導体を必要とする産業が網羅されており、実際にシリコン半導体結晶、LSI プロセスラインの増強が発表されている。 SiC の結晶、デバイス、システムまで一貫した研究開発体制を敷き、すべての国産化を目指している。 GaN に関しては HVPE 法による GaN 基板を作るメーカーが誕生した。創立から数年にも関わらず、ある程度の品質を実現している。ただ、GaN デバイスの市場投入の動きはまだ見られない。
韓国	基礎研究	△	↓	最近、国際学会で発表が低迷しているだけでなく、参加者（聴講者）数も低迷している。 Ga ₂ O ₃ パワーデバイスについては国のプロジェクトがスタートしている。研究開発の内容は、日本でのこれまでの開発をフォローする程度となっている。
	応用研究・開発	△	↓	これまでの財関係の新材料開発の勢いはなく、低迷している。GaN については光デバイスに注力しており、パワーデバイス応用に関しては資金援助に留まっている。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology* (Wiley, 2014) .
- 2) Tsunenobu Kimoto, "Material Science and Device Physics in SiC Technology for High-voltage Power Devices," *Japanese Journal of Applied Physics* 54, no. 4 (2015) . doi:10.7567/jjap.54.040103
- 3) Min Sun et al., "High-Performance GaN Vertical Fin Power Transistors on Bulk GaN Substrates," *IEEE Electron Device Letters* 38, no. 4 (2017) : 509. doi:10.1109/led.2017.2670925
- 4) Yuhao Zhang et al., "720-V/0.35-mΩcm² Fully Vertical GaN-on-Si Power Diodes by Selective Removal of Si Substrates and Buffer Layers," *IEEE Electron Device Letters* 39, no. 5 (2018) : 715. doi:10.1109/led.2018.2819642
- 5) Hajime Fujikura et al., "Elimination of Macrostep-induced Current Flow Nonuniformity in Vertical GaN PN Diode Using Carbon-free Drift Layer Grown by Hydride Vapor Phase Epitaxy," *Applied Physics Express* 11, no. 4 (2018) . doi:10.7567/apex.11.045502
- 6) K. Hoshikawa et al., "Growth of β-Ga₂O₃ Single Crystals Using Vertical Bridgman Method in Ambient Air," *Journal of Crystal Growth* 447 (2016) : 36-41. doi:10.1016/j.jcrysgro.2016.04.022
- 7) Akito Kuramata et al., "High-quality β-Ga₂O₃ Single Crystals Grown by Edge-defined Film-fed Growth," *Japanese Journal of Applied Physics* 55, no. 12 (2016) . doi:10.7567/jjap.55.1202a2

- 8) Zbigniew Galazka et al., "Scaling-Up of Bulk β -Ga₂O₃ Single Crystals by the Czochralski Method," *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 6, no. 2 (2017) . doi:10.1149/2.0021702jss
- 9) Kohei Sasaki et al., "Device-Quality β -Ga₂O₃ Epitaxial Films Fabricated by Ozone Molecular Beam Epitaxy," *Applied Physics Express* 5, no. 3 (2012) . doi:10.1143/apex.5.035502
- 10) Elaheh Ahmadi et al., "Demonstration of β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/ β -Ga₂O₃ Modulation Doped Field-effect Transistors with Ge as Dopant Grown via Plasma-assisted Molecular Beam Epitaxy," *Applied Physics Express* 10, no. 7 (2017) . doi:10.7567/apex.10.071101
- 11) Hisashi Murakami et al., "Homoepitaxial Growth of β -Ga₂O₃ layers by Halide Vapor Phase Epitaxy," *Applied Physics Express* 8, no. 1 (2015) . doi:10.7567/apex.8.015503
- 12) Yuichi Oshima, Encarnación G. Villora and Kiyoshi Shimamura, "Halide Vapor Phase Epitaxy of Twin-free α -Ga₂O₃ on Sapphire (0001) Substrates," *Applied Physics Express* 8, no. 5 (2015) . doi:10.7567/apex.8.055501
- 13) Michele Baldini et al., "Editors Choice—Si- and Sn-Doped Homoepitaxial β -Ga₂O₃ Layers Grown by MOVPE on (010) -Oriented Substrates," *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 6, no. 2 (2016) . doi:10.1149/2.0081702jss
- 14) Shizuo Fujita et al., "Evolution of Corundum-structured III-oxide Semiconductors: Growth, Properties, and Devices," *Japanese Journal of Applied Physics* 55, no. 12 (2016) . doi:10.7567/jjap.55.1202a3
- 15) Francesco Mezzadri et al., "Crystal Structure and Ferroelectric Properties of ε -Ga₂O₃ Films Grown on (0001) -Sapphire," *Inorganic Chemistry* 55, no. 22 (2016) : 12079. doi:10.1021/acs.inorgchem.6b02244
- 16) Daisuke Tahara et al., "Stoichiometric Control for Heteroepitaxial Growth of Smooth ε -Ga₂O₃ Thin Films on C-plane AlN Templates by Mist Chemical Vapor Deposition," *Japanese Journal of Applied Physics* 56, no. 7 (2017) . doi:10.7567/jjap.56.078004
- 17) Elaheh Ahmadi et al., "Demonstration of β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/ β -Ga₂O₃ Modulation Doped Field-effect Transistors with Ge as Dopant Grown via Plasma-assisted Molecular Beam Epitaxy," *Applied Physics Express* 10, no. 7 (2017) . doi:10.7567/apex.10.071101
- 18) Sriram Krishnamoorthy et al., "Modulation-doped β -(Al_{0.2}Ga_{0.8})₂O₃/Ga₂O₃ Field-effect Transistor," *Applied Physics Letters* 111, no. 2 (2017) : 023502. doi:10.1063/1.4993569
- 19) Kohei Sasaki et al., "Depletion-mode Vertical Ga₂O₃ Trench MOSFETs Fabricated Using Ga₂O₃ Homoepitaxial Films Grown by Halide Vapor Phase Epitaxy," *Applied Physics Express* 10, no. 12 (2017) : 124201. doi:10.7567/apex.10.124201
- 20) Man Hoi Wong et al., "All-ion-implanted Planar-gate Current Aperture Vertical Ga₂O₃ MOSFETs with Mg-doped Blocking Layer," *Applied Physics Express* 11, no. 6 (2018) : 064102. doi:10.7567/apex.11.064102
- 21) Zongyang Hu et al., "Enhancement-Mode Ga₂O₃ Vertical Transistors With Breakdown

Voltage 1 KV," *IEEE Electron Device Letters* 39, no. 6 (2018) : 869-72. doi:10.1109/led.2018.2830184

- 22) J. B. Varley et al., "Role of Self-trapping in Luminescence Andp-type Conductivity of Wide-band-gap Oxides," *Physical Review B* 85, no. 8 (2012) . doi:10.1103/physrevb.85.081109

2.1.4 ファイン触媒

(1) 研究開発領域の定義

化石資源を高効率・低環境負荷で基礎化学品へ変換するための触媒や、人工光合成により水素や炭化水素を作り出す触媒に関する研究領域である。ここでは、石炭や石油、天然ガスなどの在来型化石資源、およびシェールガスなどの非在来型化石資源を原料として、プラスチック製造などの基礎となる化学品に変換するときの触媒に関する課題、および人工光合成による水からの水素生成や、水と二酸化炭素から炭化水素、基礎化学品などの合成に用いる触媒の課題を中心に記載する。

(2) キーワード

人工光合成、C1ケミストリー、ゼオライト、水素製造、二酸化炭素還元、窒素還元、半導体光触媒、有機金属錯体、生体触媒、可視光利用、Zスキーム、エネルギーキャリア

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

近年、プラスチックなどの化学製品の製造の基礎となる化学品（基礎化学品）の需要は増大しており、石炭、石油、天然ガスなどの化石資源を高い資源利用効率で環境に配慮して基礎化学品に変換する技術が重要になってきている。また最近では、メタンを主成分とする非在来型資源であるシェールガスが大量に産出され、これを基礎化学品に利用することも重要になってきている。このような在来型／非在来型の化石資源を基礎化学品に変換するときには、ほとんど触媒反応が使われており、高効率・低環境負荷での変換を可能とする新たな触媒やそれを用いたプロセスなどの研究開発が必要である。特に、まだ歴史の浅い天然ガスやシェールガスなどの新たな資源に対する変換プロセス開発や、現行の官能基変換プロセスの高効率化、プロセスの安全性・経済性の向上などが求められており、優れた触媒（高活性、高選択性、長寿命）の開発に対する期待は大きい。

一方、化石資源の利用は二酸化炭素(CO₂)発生を伴うことや資源枯渇の恐れがあることから、植物の光合成に学び、太陽光と水、二酸化炭素から水素や炭化水素などを生成する人工光合成への期待が高まっている。人工光合成により得られる水素や炭化水素などは貯蔵できるエネルギーである化学エネルギーとしての利用とともに、基礎化学品としての利用が可能であり、変換効率の高い光触媒の開発や、目的の生成物とそれに対する酸化・還元反応の選択などが重要になる。

[研究開発の動向]

石油からの基礎化学品生産は歴史が古く、技術はほとんど確立されており、新しい技術の提案は少ない。一方、産出量が豊富で安価でCO₂生成の少ない天然ガスやシェールガスについては、まだ歴史が浅く研究開発が進められている。天然ガスやシェールガスから合成ガス（一酸化炭素と水素）を作り、その合成ガスからメタノールを合成して基幹物質とする化学が注目されるようになってきている。また、中国では石炭を原料としたC1ケミストリーが爆発的に広がっており、石炭から合成ガスを経てメタノールを合成し、このメタノールからエチレン、プロピレン、芳香族などの製造を行っている。これらに用いられるメタノール合成触媒については、

現在も基礎研究から応用研究まで広く行われており、代表的な Cu/ZnO 触媒についても活性点の構造及び反応中間体について新たな提案がある。また、メタノールの他に、合成ガスからの高級アルコール製造用触媒についての報告もあり、アルカリ金属 (Cs の例が多い) を添加した触媒に関する検討が多い。さらに、メタノールを経由せず合成ガスから直接的に基礎化学品を合成する研究も行われている。例えば、メタンを部分酸化してエチレンを直接合成するものがあり、現状は触媒の性能が不足して実用的プロセスではないが、 La_2O_3 に Sr をドーピングして効率向上させる試みなどがある。

化石資源の有効利用および環境負荷低減の観点から、化石資源から基礎化学品を作る過程や、メタンから水素を製造する過程で排出される CO_2 を活用する試みも始まっており、排出された CO_2 を利用してメタノールを合成するプロセスがアイルランドで稼働を始めた。また、再生可能エネルギー電力の電解水素と CO_2 からメタンを合成する power to gas プラントが欧州で多数稼働を始めている。これらの化学品を生産するプロセスは、ほぼ触媒反応を利用したものであり、化石資源から基礎化学品への変換方法が多様化する中、それぞれに適合する化学プロセスの開発が常に必要である。新たな触媒技術の開発はその中で中心的なものになっている。

人工光合成に関する研究では、これまでは主に水の分解 (還元) による水素製造、および二酸化炭素の還元再資源化が研究されてきたが、近年になって窒素の還元による資源化なども対象に加わってきた。いずれも最終的な還元生成物 (水素、炭化水素、アンモニア等) が持つ高い化学ポテンシャルを、化石資源に代わるエネルギー (燃料)、あるいは資源として利用することが目的となっている。これらの還元生成物を得るためには、電子源が必要である。その電子を光エネルギーを利用して高エネルギー状態へと励起し、水や二酸化炭素 (あるいは窒素) と反応させて、還元生成物を得ることが人工光合成の基本的なプロセスである。地球上にて半永久的に利用できる電子源としては、水分子以外に選択肢が無いので天然光合成と同様に水の酸化が人工光合成におけるキープロセスであり、これを効率良く進行させることが最重要課題である。これまでは基礎科学的な観点から、天然光合成と同様に水分子を 4 電子酸化して酸素を生成することが重要視されてきた。しかし、生成した酸素にはそれほど高い市場価値が見いだせないことから、代わりに 2 電子酸化を選択的に進行させて高付加価値の過酸化水素を生成し、同時に生成する水素などと合わせて高いコスト競争力を付加させる試みも近年始まっている。

人工光合成の実用化へ向けた共通かつ最大の課題は太陽光エネルギー変換効率の向上であり、太陽光に豊富に含まれる可視光の利用が一つの重要な鍵となる。水分解反応を例に取れば、単位面積に降り注いだ太陽光エネルギー (約 100 mW/cm^2) のうち、水素 (H_2) のエネルギー (237 kJ/mol) へ変換された割合を示す太陽光エネルギー変換効率 (以後、変換効率) が重要である。吸収された光子のうち、実際に反応に寄与した光子の割合を表す量子収率とは区別しておく必要がある。紫外光領域 (300~400 nm) の全光子を吸収可能な光触媒系を仮定し、これが全波長において量子収率 100 % で水を分解できるとしても、その変換効率は最大でも約 2 % にとどまる。しかし可視光領域の 600 nm まで利用波長が拡大できると、太陽光中の光子数の増加に伴って最大変換効率は約 16 % まで向上する。仮に平均の量子収率を 30 % (70 % は電荷再結合等で消失) としても、変換効率は約 5 % と計算される。このような背景から、水分解および二酸化炭素還元のいずれの研究分野においても、可視光の効率的利用が最大の課題となっており、これを実現するために可視光応答型光触媒・光電極の新規開発が精力的に進めら

れている。また、これに並行して2段階励起機構などのプロセス開発、量子収率の向上に向けた光キャリアの移動制御、表面反応促進などが重要研究課題として進められている。特に、水中において二酸化炭素を選択的に還元するための触媒（錯体を含む）設計が重要となっている。また、元素戦略の観点から、安価かつ資源的に豊富な元素からなる光触媒および触媒材料の開発も進められており、一部に天然物由来もしくは模倣型の生体触媒系を用いる試みもなされている。さらには、社会実装を鑑み、高スケーラビリティを有するシステム構築の検討も始まっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

■化石資源から基礎化学品への変換

石油の用途として、石油化学品原料としての需要が増加しているため、世界で原油 (Crude oil) から高付加価値の化学品を製造するプロセス (Crude to Chemicals、CTC) が注目されている。ExxonMobil は新たに石油化学品製造目的の石油精製プラントを2014年からシンガポールでスタートさせた。ここでは、原油を蒸留せずに直接スチームクラッカーに全量導入し、化学品原料を製造している。中国の Zhejiang Petrochemical Co. は Zhoushan、Zhejiang において UOP (Universal Oil Products) の技術を用いて原油から化学品の製造プラントの建設を行うことを決定した。サウジアラビアの SABIC とアラムコは、アラビアンライト (サウジアラビア産軽質原油) から直接化学品を製造する大規模な CTC プラントを、2025年に稼働させるプロジェクトをスタートさせた。

メタンを直接部分酸化脱水素してエタン、エチレンを生成させるメタンの酸化二量化では、以下の2つの方法が注目される。

・ナノファイバー触媒によるメタンの酸化カップリング反応 (OCM)

カルフォルニア大学の Daniel Noon らは、電界紡糸 (エレクトロスピンニング) 技術を用いて $\text{La}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2$ ナノファイバー触媒を調製した。これは直径が 50 ~ 75 nm、BET 比表面積が $26\text{m}^2/\text{g}$ と小さいが、内部に細孔はなく高密度になっている。SEM 観察ではナノファイバーの間には隙間が見え、この隙間がファイバーでの拡散を高め、シンタリングを抑制していると考えられる。

・電場中での OCM

反応中に触媒層へ電場をかけることによって、反応率が上がることが見いだされている。反応率が高いところでは効果は見られないが、低温で反応率が低いところで電場をかけると転化率が向上することから、低温度での反応が可能となる。 CeO_2 に $\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ を担持した触媒では 150 °C という低温で、メタン転化率 14.9 %、 C_2 選択率 43.4 %、 C_2 収率 6.4 % を与えている。

メタンの熱分解による化学品の合成も注目される。高温での熱分解は、次の式で表されるように、エチレン、ベンゼン、ナフタレンと水素が合成される。



触媒は熔融 Fe/SiO_2 であり、石英と Fe メタロシリケートを空气中 1700 °C で熔融後、硝酸

水溶液で洗浄し、乾燥して調製されている。調製された 0.5 %Fe/SiO₂ (BET 比表面積: <1 m²/g) を 900 °C、90 vol % (CH₄/N₂) で活性化し、固定層マイクロリアクターを用いオンラインで分析した結果、950 °Cにおけるメタン転化率は 8.1 %、1090 °Cに昇温すると転化率は 48.1 % となっている。

■ CO₂ 利用による化学品合成

従来は複合酸化物触媒 (CuZnO_x) 以外のメタノール合成触媒は知られていなかったが、チューリッヒ工科大学の Martin らは、CO₂ と H₂ からのメタノール合成に In₂O₃ が高活性で安定性に優れていることを発見した。触媒は硝酸 In を ZrO₂ に含浸担持調製した In₂O₃ (9 %In) /ZrO₂ であり、In₂O₃ 単独よりも ZrO₂ に担持した In₂O₃ は特異的に活性が高くなっている。反応温度が 260 °C を超えると Cu-Zn-Al₂O₃ より活性が高く安定性も優れている。

フィッシャー・トロプシュ法 (FT) 合成による CO₂ と水素からの化学品の合成において、大連化学物理研究所の Jian Wei らは Fe₃O₄/HZSM-5 触媒が反応中に Fe₅C₂ に転化し、ゼオライトの酸点との協働作用により FT 合成が進行し、CO₂ 転化率 22 %、C₅-C₁₁ 選択率 78%、CH₄ 選択率 4 % でオレフィンが生成することを発表した。

大気中には CO₂ が約 400 ppm 含まれているが、この CO₂ を Pentaethylenehexamine (PEHA) に常温で吸収反応させ、Ru-Macho-BH pincer 触媒を加え triglyme 溶媒を用いて 155 °C に加温し、55 bar の水素圧を掛けると、79 % の収率でメタノール、6 % の収率で HCHO が得られることを、南カルフォルニア大学の G. Olah の研究室の J. Kothandaraman らが発表した。この方法を用いると、空気中の CO₂ から再生可能エネルギーによって得られた水素を用いてメタノールを合成することができる。Ru-Macho-BH 錯体の触媒量は 0.02 mol% である。触媒と PEHA は蒸留分離再使用されるので大気中の二酸化炭素削減の究極の方法の一つと思われるが、大量の空気からの CO₂ の吸収を PEHA 溶媒で行うため、溶媒の大気中への汚染問題の解決が必要である。

メタンから CO₂ フリーの水素製造技術として、ドイツのカールスルーエ液体金属研究所 (the Karlsruhe Liquid-metal Laboratory) は Sn などの熔融金属にメタンを反応器の下部から気泡で注入し、CH₄ を C と H₂ に熱分解する方法を発見した。

■ 人工光合成

可視光利用による効率向上の研究開発が進んできている。可視光の利用には 3.0 eV (400 nm の光子に相当) より小さなバンドギャップを有する半導体 (分子系ではエネルギーギャップに相当) が必要であるが、主にバンドエネルギーと水の酸化還元ポテンシャルとの間のミスマッチから、単一の半導体材料で可視光水分解を実証することは原理的に極めて困難であり、実証例はわずか数例にとどまっている。一方、植物の光合成における 2 段階励起機構を模倣した「2 段階励起型 (Z スキーム型) 水分解系では、水素生成 (水の還元) 系と酸素生成 (水の酸化) 系にそれぞれ異なる光触媒を用い、両者の間の電子伝達を可逆的なレドックスメディエーターで行うことで、各系に必要なエネルギー的要件が低減され、結果として多種多様な可視光応答型 (低バンドギャップ) の半導体材料の適用が可能となる。また、水溶液に溶解したイオン対などをレドックスメディエーターとして用いる系では、多孔質ガラスなどを利用して 2 種の光触媒粒子を 2 室へ分離し、レドックスのみ移動させることにより、水素と酸素を分離して生成

することも可能である。これは実用化に際して水素と酸素の混合気体の爆発の危険性が懸念される従来系に比べて優位性を有する。2段階励起型（Zスキーム型）水分解系は、2001年に初めて実証されて以来、可視光利用の有効な手段として大きな注目を集めている。これまでに従来の金属酸化物半導体のみならず、金属（酸）窒化物、金属（酸）硫化物、金属酸ハロゲン化物、さらには有機色素なども各系に適用され、Zスキーム型の可視光水分解が実証されている。特にごく最近見出されたビスマス系酸ハロゲン化物は、その特異なバンド構造ゆえに、可視光照射下において高効率かつ極めて安定に水を酸化できることが示されており、可視光水分解用光触媒の新たな設計指針を示したもので、今後の進展が期待される。水溶液中にレドックスメディエーターを含む反応系では、光触媒に生じた励起電子および正孔がレドックスへの逆電子移動を起こし、反応の量子収率は数%と概して低いものであったが、ごく最近になって中国のグループにより量子収率約10%で太陽光エネルギー変換効率も0.5%程度と、従来系に比べて高効率の可視光水分解が報告された。この系で用いられている2種類の光触媒材料はいずれも我が国で開発されたものであるが、その露出結晶面の制御や適切な助触媒の開発により、上記の逆電子移動を効率的に抑制して高い水分解効率を達成している。

また最近では、水分解のみならず二酸化炭素還元においても2種の可視光応答型半導体光触媒間のZスキーム機構に基づいて、水を電子源とする二酸化炭素の一酸化炭素への還元が実証されている。この場合、一酸化炭素の生成とともに水の還元による水素生成も併発しており、今後表面修飾等による二酸化炭素還元の選択性向上が望まれる。ただし、実用化の観点からは必ずしも生成物を一酸化炭素にする必要は無く、ある程度の割合で水素と混合している場合は、そのまま合成ガスとしてメタノール合成などに用いることも可能であろう。

半導体系と分子系（金属錯体等）は相補的な性質を持っていることから、両者のハイブリッドが近年になって盛んに検討されている。例えば、可視光応答型半導体である CoO_x/TaON 光電極を Re-Ru 金属錯体とハイブリッド化することにより、水を電子源とする可視光二酸化炭素還元が初めて実証されている。これらハイブリッド系では、分子系の優れた光吸収特性および高い反応選択性と、半導体系の優れた安定性という各々の長所が協奏的に発揮され、単独では実現不可能な高い機能性が実現されている。

基礎的な観点からの研究が進む一方で、将来の社会実装に向けた研究も一部で進められている。例えば、半導体光触媒の粒子を用いる水の分解は、そのシンプルさゆえに低コストが期待される。現状の研究室レベルの実験では、光触媒粒子をマグネチックスターラーなどを用いて攪拌して懸濁状態を保って光照射が行われている。しかし、大規模展開時において、このような攪拌は困難である。そこで、光触媒粒子を安価なガラス基板などの上に、その活性を維持したまま適切に固定化した光触媒シートや光触媒パネルの開発が進められている。最近では、2種類の可視光応答型光触媒を混合したペーストなどをガラス基板上に塗布・焼成して得た光触媒パネルが、Zスキーム機構に基づく可視光水分解に活性を示すことが実証されている。当初は2種類の光触媒粒子間の接触による直接の電荷移動が用いられていたが、基板上に金を蒸着して固体電子伝達体を用いることにより効率が大幅に向上し、植物の光合成に迫る約1%の太陽光エネルギー変換効率での水素製造が実証されている。さらに、金を安価な炭素系や酸化物系の電子伝達体へ置き換えて同等レベルの効率を維持するとともに、光触媒粒子の塗布時にスクリーン印刷法を適用するなどして、高い拡張性（スケールビリティ）の実証にも成功している。

従来の人工光合成研究では、天然光合成と同じく水の4電子酸化（酸素生成）の進行が必須

と考えられてきたが、多電子過程ゆえにボトルネックとなり、反応効率の低下を招いてきた。また上述の通り、通常の水分解系では水素と酸素が同時に気相生成するため、爆発回避のためのガス分離が必須となる。この課題に対し、近年では、水の2電子光酸化により過酸化水素を高選択的に生成可能な分子系および半導体系の開発が進められている。このような系では、還元生成物の水素は気相に、一方の酸化生成物の過酸化水素は液相へと生成するため、相分離が可能となる。最近になって、Al系ポルフィリンを用いた電気化学的水酸化において、ほぼ100%の選択率で過酸化水素が生成することや、バナジン酸ビスマス半導体光電極を炭酸イオン存在下で可視光照射すると、50%を超える選択率で過酸化水素が生成することが見出されている。過酸化水素は、化学工業において漂白剤や酸化剤として大量に使用されており、付加価値が高い。

また近年、新たな人工光合成系として、窒素の直接還元によるアンモニアの合成も注目を集めている。現代社会では、アンモニアは化石資源由来の水素と空気中の窒素からハーバー・ボッシュ法を介して大量に合成されており、その際のエネルギー消費量は莫大なものとなっている。この観点から、太陽光エネルギーを利用して窒素を直接還元してアンモニアを合成できれば、そのインパクトは極めて大きい。三重結合ゆえに極めて安定な窒素分子を活性化することは容易ではない。現状ではその報告例は限定的だが、水を電子源とした窒素の還元が進行しており、人工光合成の新たな研究分野を切り拓く可能性がある。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

国内では、NEDO「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」(2009年度～2015年度)で、既存の化学品などの製造プロセス(ナフサ分解プロセスなど)のグリーン化などを目標に研究開発が進められてきた。光触媒により水分解で生成した水素と、産業界から排出され回収したCO₂から、基幹化学品を合成するための触媒開発が開始されている。また、JST CREST「多様な天然炭素資源の活用に資する革新的触媒と創出技術」、さきがけ「革新的触媒の科学と創製」(2015年度～)では、化石資源消費の中で天然ガスへの依存が進む中、天然ガスの主成分であるメタンや低級アルカンから化成品や液体燃料を直接合成する方法を開発することを目指している。従来、メタンは水蒸気改質反応を経て合成ガス(CO+H₂)を経由すれば様々な化成品に転換できることは知られているが、これを直接変換する革新的な触媒開発を目指している。

人工光合成に関連しては、新学術領域研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光-物質変換系の創製」(2017年度～2021年度)、NEDO「二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発(人工光合成プロジェクト)」(2014年度～2021年度)(人工光合成化学プロセス技術研究組合(ARPCHEM))、JST CREST「新たな生産プロセス構築のための電子やイオン等の能動的制御による革新的反応技術の創出」(2018年度～)などのプロジェクトが推進されている。

欧米では、化石資源から基礎化学品への変換や人工光合成に関するプロジェクトが数年前に終了しており、最近では目立ったプロジェクトはあまり見当たらない。その中で、欧州のpower to gasプロジェクト(HELMETH: Integrated High-Temperature Electrolysis and METHanation for Effective Power to Gas Conversion)は注目される。再生可能エネルギー由来の電力を水素に転換し、この水素と一酸化炭素または二酸化炭素を組み合わせることでメタンを

合成するものであり、化学エネルギーとしての利用と基礎化学品への利用が期待できる。約 800 °C の高温電解の SOEC (Solid Oxide Electrolysis Cells) を用いると効率 88 % を達成することができるため研究が行われており、メタンネーションの熱がまだ利用できていないが、効率 75 ~ 80 % の実証結果が得られている。

(5) 科学技術的課題

シェールガス革命によりメタンが安価に供給される。メタンをコンパクトな改質装置により合成ガスとすれば、多くの化学品の合成が可能であることから、新たな C1 ケミストリーの展開が課題となる。また、人工光合成では、半導体や金属錯体それぞれにおける変換効率の向上を目指すことが重要である。ファイン触媒に関して、今後取り組むべき研究開発課題の例を以下に示す。

課題	開発技術	備考
メタンケミストリー	コンパクトなメタンの部分酸化プロセス (改質装置)	迅速部分酸化触媒とプロセスの開発 (ATR 改質装置) CO ₂ を用いた ATR 改質プロセスの開発
C1 ケミストリー	合成ガス (CO/H ₂) からメタノールを経由しない直接化学品の合成	CO/H ₂ から軽質オレフィンの合成 CO/H ₂ から芳香族の合成 含酸素化合物の合成
	低温メタノール合成触媒	メタノール合成反応は平衡上低温高圧が有利 現状は高温反応でワンパス収率は 17% 程度。未反応ガスのリサイクルに多大な動力費。
	含酸素化合物の合成	エタノールの合成
メタノールケミストリー	MTX	メタノールから選択的にプロピレン、ブテン、芳香族 (<i>p</i> -キシレン) 他の化学品の製造技術
メタン分解	メタンの高温熱分解	エチレン、ベンゼン、ナフタレン、水素の製造
	水素製造	メタンの分解による CO ₂ フリーの水素製造技術
CO ₂ の利用 (CCU) 技術	CO ₂ と水素から化学品	CO ₂ と再生可能余剰水素からの化学品製造技術
人工光合成の効率向上	半導体や金属錯体それぞれにおける変換効率の向上	基礎研究の着実な促進

(6) その他の課題

触媒化学領域は、触媒のナノ構造を構築し機能を発現させることが、ナノテクノロジーが謳われた頃からの研究のトレンドであり、微細な構造の触媒を構築する技術は大学等に十分な蓄積がある。これらを現実的にエネルギー・環境に直接関与する触媒に応用するには、ナノ構造制御を得意とする研究者と、産業界など実用触媒の性能評価が得意な研究者が連携して研究を推進できるような枠組みが必要である。

(7) 国際比較

化石資源における用途の燃料から石油化学原料への転換

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	○	→	メタン酸化カップリングの触媒研究など水準が高い研究を進めている。
	応用研究・開発	○	→	大学中心の研究テーマが、工業化に繋がりにくい。産業界は、海外との会社との協働・協業が弱い。
米国	基礎研究	○	→	合成ガス経由での燃料油製造で優位性がある。基礎研究に対する支援がやや低調。
	応用研究・開発	◎	→	DOE が Multi-Scale Ordered Cell Structure for Cost Effective Production of Hydrogen とのプロジェクトで低コスト水素製造の開発を支援している。
欧州	基礎研究	○	→	必要な基礎研究を着実にやっている。BASF が基礎研究は海外の大学や研究機関に調査委託している。
	応用研究・開発	◎	→	「Power to Gas」プロジェクトの推進により、メタン合成の実証プラントの構築などが進められている。BASF は海外の会社を含めた応用研究を行っている。
中国	基礎研究	◎	↑	基礎研究の目的が明確で活発である。石炭の C1 とメタンを用いた研究が精力的に行われている。大連化学物理研究所や上海石化研究所が中心となりゼオライトをはじめ多くの触媒開発がなされている。
	応用研究・開発	◎	↑	国家事業として開発技術は国営のエンジニアリング会社と共同で行っているため、工業化へのスピードが極めて速い。
韓国	基礎研究	△	→	KAIST を中心として地道な研究が行われている。
	応用研究・開発	△	→	ACO プロセスの開発では KBR との共研で成功させている。触媒やプロセスの開発に海外との共同開発を積極的に進めている。燃料電池発電の導入や熱回収が進んでいる。

人工光合成

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	◎	→	再生可能エネルギーからの水素製造、特に光触媒・人工光合成の研究開発については光電気化学的なアプローチが急増し、世界をリードしている。新学術領域などのプロジェクトにおいて多くの波及効果の大きな成果が創出され続けている。
	応用研究・開発	◎	→	社会実装を見据えた光触媒パネルやリアクター、生成物分離のための要素技術開発なども進められている。
米国	基礎研究	○	↓	以前は JCAP プロジェクトにおいて人工光合成研究が精力的に進められていた。
	応用研究・開発	△	↓	以前に見られた大学教授主導のベンチャー企業の設立等が停滞しているように見受けられる。
欧州	基礎研究	○	↓	太陽電池を利用した光電気化学的な人工光合成研究が主である。
	応用研究・開発	△	↓	上述のような太陽電池ベースの燃料製造が盛んに検討されていたが、未だ実用化には至っていないようである。
中国	基礎研究	○	↑	従来はオリジナリティに欠ける感があったものの、その研究レベルの底上げが著しく、独創的な研究成果も多く見られるようになってきている。
	応用研究・開発	△	→	二酸化炭素と水からメタンを取り出す、燃料製造の研究などに積極的に取り組んでいる。
韓国	基礎研究	△	→	米国の JCAP との連携をし、韓国 KCAP 中心に研究。
	応用研究・開発	×	→	水の分解反応や二酸化炭素からメタンの直接生成などを試みているが基礎研究中心。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

1) 国際特許

VELOCYS INC. CATALYTIC REACTION PROCESS USING MICROCHANNEL TECHNOLOGY. WO/2007/008495. 2006-06-30.

2) Daniel Noon, Anusorn Seubsai and Selim Senkan, "Oxidative Coupling of Methane by Nanofiber Catalysts," *ChemCatChem* 5, no. 1 (2013) : 146-149. doi:10.1002/cctc.201200408

3) Kei Sugiura et al., "Low-temperature Catalytic Oxidative Coupling of Methane in an Electric Field over a Ce-W-O Catalyst System," *Scientific Reports* 6, no. 1 (2016) . doi:10.1038/srep25154

4) Oliver Martin et al., "Indium Oxide as a Superior Catalyst for Methanol Synthesis by CO₂ Hydrogenation," *Angewandte Chemie International Edition* 55, no. 21 (2016) : 6261-6265. doi:10.1002/anie.201600943

5) Jian Wei et al., "Directly Converting CO₂ into a Gasoline Fuel," *Nature Communications* 8 (2017) . doi:10.1038/ncomms15174

6) Jotheeswari Kothandaraman et al., "Conversion of CO₂ from Air into Methanol Using a Polyamine and a Homogeneous Ruthenium Catalyst," *Journal of the American Chemical Society* 138, no. 3 (2016) : 778-781. doi:10.1021/jacs.5b12354

7) 国際特許

科学技術振興機構．複合体、複合体の製造方法、アンモニア合成触媒及びアンモニア合成方法．WO/2016/088896. 2014-12-04.

8) D. Chester Upham et al., "Catalytic Molten Metals for the Direct Conversion of Methane to Hydrogen and Separable Carbon," *Science* 358, no. 6365 (2017) : 917-921. doi:10.1126/science.aao5023

9) 石川, 針生, 川崎, 大門 「70 MPa 差圧式高圧水電解スタックの開発」『Honda R&D Technical Review』Vol.28, No.1 (2016) .

10) ニュースリリース

新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) .

「非単結晶光触媒で世界最高の水素生成エネルギー変換効率 12.5%を達成」 https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101013.html (2019年2月12日アクセス)

11) Xinjian Shi et al., "Unassisted Photoelectrochemical Water Splitting beyond 5.7% Solar-to-hydrogen Conversion Efficiency by a Wireless Monolithic Photoanode/dye-sensitised Solar Cell Tandem Device," *Nano Energy* 13 (2015) : 182-191. doi:10.1016/j.nanoen.2015.02.018

- 12) H. Döscher et al., "Solar-to-hydrogen efficiency: shining light on photoelectrochemical device performance," *Energy Environ. Science*, no. 9 (2016) :74-80. doi:10.1039/C5EE03206G
- 13) Yiou Wang et al., "Mimicking Natural Photosynthesis: Solar to Renewable H₂ Fuel Synthesis by Z-Scheme Water Splitting Systems," *Chemical Reviews* 118, no. 10 (2018): 5201. doi:10.1021/acs.chemrev.7b00286
- 14) Hironori Fujito et al., "Layered Perovskite Oxychloride Bi₄NbO₈Cl: A Stable Visible Light Responsive Photocatalyst for Water Splitting," *Journal of the American Chemical Society* 138, no. 7 (2016) : 2082. doi:10.1021/jacs.5b11191
- 15) Yu Qi et al., "Redox-Based Visible-Light-Driven Z-Scheme Overall Water Splitting with Apparent Quantum Efficiency Exceeding 10%," *Joule* 2, no. 11 (2018) : 2393. doi:10.1016/j.joule.2018.07.029
- 16) Akihide Iwase et al., "Water Splitting and CO₂ Reduction under Visible Light Irradiation Using Z-Scheme Systems Consisting of Metal Sulfides, CoO_x-Loaded BiVO₄, and a Reduced Graphene Oxide Electron Mediator," *Journal of the American Chemical Society* 138, no. 32 (2016) : 10260. doi:10.1021/jacs.6b05304
- 17) Go Sahara et al., "Photoelectrochemical Reduction of CO₂ Coupled to Water Oxidation Using a Photocathode with a Ru (II) –Re (I) Complex Photocatalyst and a CoO_x/TaON Photoanode," *Journal of the American Chemical Society* 138, no. 42 (2016) : 14152. doi:10.1021/jacs.6b09212
- 18) Qian Wang et al., "Scalable Water Splitting on Particulate Photocatalyst Sheets with a Solar-to-hydrogen Energy Conversion Efficiency Exceeding 1%," *Nature Materials* 15, no. 6 (2016) : 611. doi:10.1038/nmat4589
- 19) ニュースリリース
新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) .
「人工光合成を実現する混合粉末型光触媒シートを開発」
https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_100533.html (2019年2月12日)
- 20) Kojiro Fuku and Kazuhiro Sayama, "Efficient Oxidative Hydrogen Peroxide Production and Accumulation in Photoelectrochemical Water Splitting Using a Tungsten Trioxide/bismuth Vanadate Photoanode," *Chemical Communications* 52, no. 31 (2016) : 5406. doi:10.1039/c6cc01605g
- 21) Tomoya Oshikiri, Kosei Ueno and Hiroaki Misawa, "Selective Dinitrogen Conversion to Ammonia Using Water and Visible Light through Plasmon-induced Charge Separation," *Angewandte Chemie International Edition* 55, no. 12 (2016) : 3942. doi:10.1002/anie.201511189

2.1.5 分離技術

(1) 研究開発領域の定義

分離技術とは、混合物から目的成分を取り出す、または不要物を除くものである。例えば、大気汚染物質の分離、工場や火力発電所から生じる CO₂ の分離、高純度水素や炭化水素の分離、海水の淡水化や廃水処理、さらには鉱物資源の選鉱、製錬・精錬も分離だが、有害物質を多く含む低品位鉱の採掘において、目的元素を低環境負荷・低エネルギーで分離する研究開発を指す。私たちは、資源から製品を生産し、消費し、その後はリサイクルで再び分離することが求められている。現代の分離要求は多岐にわたるが、化学工学や精錬学に代表される既存の学術体系によって構築されてきた分離プロセスを越えて、イノベーションの観点からより横断的な分離工学の研究開発が期待されている。以下では、気体・液体に関する分離技術と、鉱物資源からの金属分離技術を対象とする。

(2) キーワード

膜分離、蒸留、ヒートポンプ、ガス吸収、物理吸収、化学吸収、分離膜、IGCC、CCS、CCUS、ケミカルルーピング、製錬、精錬、乾式精錬、湿式精錬、選鉱、浮選、浸出、抽出、溶媒抽出、吸着、イオン交換、沈殿、凝集、都市鉱山、レアメタル、貴金属、レアアース

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

●化学プロセスにおける気体・液体の分離技術

気体、液体の分離は、平衡分離（蒸留、吸着、吸収、抽出）、速度差分離（膜分離、電気泳動、遠心分離）や晶析、イオン交換など、石油精製、石油化学、天然ガスや合成ガス精製、海水淡水化、浄水、排水処理、食品分野等で、工業的に幅広く利用され成熟したとされる分野である。石油化学産業におけるエネルギー消費は、産業分野の約 15% に相当し、そのエネルギー消費の約 40% が蒸留操作に伴う分離・精製によるものである。また、例えば分離蒸留塔でエチレンとエタンを分離する場合、その段数は 120 ~ 150 段程度、プロピレンとプロパンに至っては 250 段程度が必要とされており、省エネルギー化、高効率化、コンパクト化、低コスト化のニーズは高い。しかしながら、既存の石油精製、石油化学システムでは既存技術での最適化が図られており、また、長期信頼性・安定性・安全性（耐久性や耐汚れ性など）やメンテナンスの容易さが優先されるため、格段のエネルギー低減やコスト低減が見通せないかぎりには、新たな分離システムを導入するインセンティブはなかなか働かない状況にある。現在おこなわれているのは、蒸留操作に使用された熱エネルギーを回収し、再利用または別利用するコージェネレーションが一般的であるが、限られた高温の熱を除いては、再利用も難しい状況にある。また、蒸留に替わる省エネルギーの気体・液体の分離プロセスとして、膜分離や吸着などの新材料からのイノベーションが期待されている。気体・液体の分離は石油化学産業の他にも、様々なかたちで行われる。例えば、飲料可能な水資源が不足し、現在でも世界で 19 億人の飲料水は安全でなく、さらに、世界の廃水の 80% は未処理のまま水域に放流されている。海水淡水化や浄水における液体成分の分離技術は世界スケールの課題である。特に淡水化技術では、大きな電力を要するため、電力・コストの低減が課題となっている。

● CO₂ 分離技術

工場や火力発電所などから生じる CO₂ の分離技術が重要であることはいうまでもないが、単に CO₂ を分離するだけでなく、分離した後の CO₂ を有効利活用する CCUS (Carbon dioxide Capture, Utilization & Storage) の観点では技術評価が基本になる。例えば、次世代の火力発電所として注目されている石炭ガス化複合発電 (IGCC: Integrated coal Gasification Combined Cycle) における燃焼前ガスからの CO₂ 分離や、シェールガスをはじめとする天然ガス井戸元における CO₂ と炭化水素との分離技術など、様々な条件下での CO₂ 分離がある。いずれも対象とするガスの性状や回収率、純度などに応じて種々の技術を使い分ける必要がある。分離・回収技術を原理によって分類すると、吸収法、吸着法、膜分離法、深冷分離法などがあり、吸収法には化学吸収法と物理吸収法がある。対象ガスに応じて、燃焼後回収、燃焼前回収、酸素燃焼回収に大別される。

燃焼後回収は、石炭焚き火力発電所ボイラなどの燃焼排ガスから CO₂ を回収するもので、通常はほぼ大気圧で運転される。排ガスの圧力が低く、CO₂ 濃度も低いので、回収技術としては、通常は CO₂ との反応性が高い溶液による化学吸収法が使われている。燃焼前回収は、化学プラントなどでの水蒸気改質ガスからの CO₂ 除去や、天然ガスからの CO₂ 除去、石炭ガス化複合発電 (IGCC) など、石炭の部分酸化により生成した H₂、CO、CO₂ などからなるガスから CO₂ を分離・回収するものである。これは一般に圧力が高いガスに適用されるので、化学吸収法、物理吸収法、物理吸着法が適用される。燃焼中回収は、事前に酸素製造装置により空気中の窒素を除去し、酸素で燃焼することによって燃焼排ガス中の窒素濃度を低く抑え、CO₂ を濃縮して CO₂ 回収を容易にするシステムである。なお、燃焼排ガスから CO₂ を回収するプロセスでは、含まれる酸素、硫黄酸化物、石炭灰などの影響も十分に考慮する必要がある。ほぼ大気圧で運転される石炭や天然ガスの火力発電所や、セメント・鉄鋼プラントでは化学吸収法が適用されている。化学プラントや石炭ガス化複合発電 (IGCC) のような高圧で運転されるプラントでは物理吸収法が有利とされている。化学吸収法には使用するアミン化合物により吸収特性が異なり、高圧に適した吸収液がある。CO₂ 分離では、吸収液から高純度の CO₂ を放散させる「CO₂ の再生」に最も大きなエネルギーを消費する。再生温度は 120°C 程度であり、低品位のエネルギーである。この低品位エネルギーの、システム内での発生方法、あるいは周辺の熱が余剰のプラントからの供給方法によって、経済性に大きな影響を与える。新技術の実用化を目指すにあたっては、CO₂ の低コストで効率的な回収や固定化とともに、CO₂ を有効に利活用できるかが重要になる。

● 鉱物資源からの金属分離技術

金属資源は天然では主に鉱石として存在する。採掘された鉱石から、目的金属を多く含有する鉱石の物理選別（選鉱）を経て、製錬によって目的金属が分離回収される。自動車産業や電気電子機器産業などの我が国を支える製造業には多種多様な金属資源が欠かせず、金属資源の大半を輸入に依存する我が国にとって金属資源の確保は産業の根幹に関わる課題である。新興国の経済発展に伴い金属資源の需要は増大し、その結果、採掘される鉱石の低品位化が進んでいる。鉱石中にはヒ素などの有毒な元素が含まれており、加えて途上国では金属精製に水銀が利用されるなどして環境問題が生じている。鉱石の低品位化、環境問題、製錬の省エネルギー化・CO₂ 排出量削減などの問題に対応するため、選鉱、浸出、抽出などの技術開発が重要とな

る。資源セキュリティの面から、海底熱水鉱床、レアアース堆積物、コバルトリッチクラスト、マンガンジュールといった日本近海に賦存する海底鉱物資源を対象とした分離技術の確立も求められている。

●都市鉱山からの金属分離

小型家電等から回収した金・銀・銅で2020年東京オリンピックの入賞メダルを製作される計画が推進されるなど、都市鉱山開発は我が国でも注目のトピックスである。我が国の都市鉱山蓄積量の2008年の試算と2017年の各金属の世界の可採埋蔵量を比較すると、アンチモンは2割以上、金は約1割に相当する量が国内に蓄積しており、資源の可能性として無視できない回収量が国内にあると推算されている。このため電子廃基板等からの貴金属・レアメタルの回収が重要視されている。廃棄物からの金属リサイクルは、形態的にも金属組成からも鉱石の精錬に用いられる技術をそのまま適用できるとは限らず、都市鉱山に適した解体、物理選別技術、ならびに精製技術の開発が重要となる。

将来的な電気自動車の普及に伴って、リチウムイオン電池 (LIB) を構成するリチウムやコバルトが供給不足になることが懸念されている。廃棄される LIB を分別すれば、構成元素は比較的明確であるので、安全なリサイクルプロセスを構築できれば有望な供給源となる。他方、2010年の中国のレアアース禁輸措置に伴うレアアース問題は沈静化したかにみえるが、2016年のレアアース生産量に占める中国の割合は83%、ディスプレイなどの重金属はほぼ100%と、依然として中国からの産出・輸出動向に左右される状況にある。微量のディスプレイを含むネオジウム磁石は、パソコン、家電、電気自動車 (HV/EV) などに用いられる。電気自動車用ネオジウム磁石の需要は増大することが予想され、そのリサイクル技術の確立が望まれている。

[研究開発の動向]

●化学プロセスにおける気体・液体の分離技術

化学プロセスでは蒸留がかなりの割合の分離プロセスを担ってきた。蒸留は古くからアルコール工業において用いられ、石油工業の発展とともに体系化されてきた。蒸留分離は代表的な熱エネルギー多消費型プロセスであるが、その一方で、シンプルな装置構造を持ち連続的な分離を達成可能であることから、広く産業分野で利用されてきた。しかしながら、我が国の競争力強化の方向性として、省エネルギー化は避けられない状況にある。特に近年、米国等海外でシェールガスに随伴する炭化水素 (C2-C5) 等を化成品の原料として利用する流れがあり、競争力強化の観点から高効率かつ省エネルギーな分離プロセスの開発が急務となっている。また、Humphrey は1992年に Chem. Eng. Progress にて、分離技術の省エネルギー化のために熱統合があり、次にハイブリッドシステム (蒸留と吸着、膜、晶析など) を考え、最終的に膜分離が望ましいとの提案をしている。

我が国においては、2002年度から2005年度に実施された NEDO 「内部熱交換による省エネ蒸留技術開発」以降、内部熱交換技術を用いた省エネルギー型蒸留分離プロセスに関する研究開発がおこなわれており、2014年度に東洋エンジニアリング株式会社が SUPERHIDIC として商用機を受注・建設し、2016年度から丸善石油化学株式会社がメチルエチルケトン (MEK) 製造プロセスにて商業利用しており、現在、従来型蒸留塔に比して50%以上の高い省エネ

ギー率にて安定稼働している。

一方で、膜分離技術に関しては、これまで高分子膜やゼオライト膜の一部が溶剤回収やバイオエタノール精製プロセスに用いられたものの、化学産業における基幹となる化学品を分離するプロセスに膜分離が実用化された例はまだなく、現在、膜材料、膜モジュール、膜分離プロセスなどを対象に精力的な研究開発がおこなわれている。具体的には、2014年度に実施された NEDO 調査研究「基礎化学品製造における革新的省エネルギープロセスに関する先導的検討」および 2015年度から 2016年度に実施された NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「革新的分離技術の導入による省エネ型基幹化学品製造プロセス」において、エチレン/エタンの分離、プロピレン/プロパンの分離等に代表されるオレフィン/パラフィン系の分離、水素、窒素を含む炭化水素系の分離などを対象に開発したゼオライト、シリカ、炭素膜が高い選択性を示すことを明らかにしており、今後の展開が期待されている。

● CO₂ 分離技術

CO₂ 分離回収を主な用途とするガス吸収液の開発が、かねてより進められている。ポリエチレングリコールを主骨格に持つ Selexol 吸収液は代表的な物理吸収液である。最近、Dow Chemical 社から、既存の Selexol 吸収液より高い CO₂ 吸収能を有する次世代の物理吸収液として Selexol Max が上梓されており、UOP 社によって Selexol Max を利用した CO₂ 分離回収プロセスが提案されている。Selexol Max は、既存 Selexol 吸収液に比べて粘度が低く、ライフサイクル全体のコストが最大で 17% 削減可能であり、置き換えが進みつつある。

アミンをシリカ等の多孔質材料に担持した、固体吸収材の開発も進められている。アミンを吸収液として利用する場合に比べ、所要顕熱が低減し、溶媒に起因する潜熱損失も伴わないため、大幅な消費エネルギーの削減が期待できる。地球環境産業技術研究機構 (RITE) が開発した固体吸収材を用いて、川崎重工業との実用化研究開発が進められており、2017年までに 10m³ スケールで合成した固体吸収材を用い、1.5 GJ/ton-CO₂ での低温スチーム再生性能 (60℃) が実証されている。また、関西電力の石炭火力発電所での実ガス実証試験に向けた検討も進んでいる。

● 金属分離（湿式プロセス）

湿式プロセスで金属を精錬するにあたり、鉱石等に含まれる特定の成分を酸、アルカリ等の浸出液で溶かしだして固体と分離する操作を浸出（リーチング）という。主要な銅鉱石の 1 つである黄銅鉱は硫酸浸出することができないため、浸出技術が開発されている。鉄・硫酸酸化細菌を利用して鉱物の酸化溶解を促すバイオリーチングは 1970 年代に始まったラボスケール試験が、既に多くの国で産業化されている。ヒ素含有銅鉱物を利用するうえで低コストのバイオリーチングの適用が期待されている。

溶媒抽出法は目的金属の選択的分離と大量処理に適したプロセスであり、抽出剤の抽出能力と金属選択性がプロセスの成否を決定づけることから様々な抽出剤が開発されている。原子力分野で開発されたアミド系抽出剤が、近年、白金族金属の抽出に利用が検討されるようになった。チオグリコールアミド化合物は従来の抽出剤よりも耐酸性が高いことが明らかになっておりパラジウムの抽出剤として実用化も検討されるほか、錯体の構造解析研究も進んでいる。不揮発性・難燃性などの特徴を有するイオン液体の溶媒抽出への利用は 2000 年代頃から注目さ

れるようになり、近年非常に多くの研究がおこなわれている。トリオクチルアンモニウム型のイオン液体でのロジウムの選択的分離が報告されているほか、カチオン性抽出剤とアニオン性抽出剤の混合など、2種類の抽出剤を混合した協同抽出系の検討も多い。抽出分離性の観点からはイオン液体を用いて多くの優れた成果が得られているが、高粘性、水への漏出といった問題に加えて、低価格化が実用化への鍵を握る。

金属分離回収のための吸着剤・イオン交換体の開発もまた世界的に継続的に行われており、アジア諸国では植物等の天然物由来の吸着剤の開発が多く検討されているほか、最近ではグラフェン等の炭素材料を基体としたイオン交換体も検討されている。しかしながらこれらは製品安定性やコスト面に課題が多く、工業的な金属精製プロセスに用いられるためには多くの課題を解決しなければならない。吸着法による金属回収は本質的に大量処理には適していないため、希薄な溶液からの回収など、用途も踏まえた開発が重要と考えられる。

●都市鉱山からの金属元素分離、プラスチック分離

電子機器などから有価金属等を回収する際の最前段に位置するのは解体・破碎等の操作であるが、現状は専ら人力が利用されている。労働力不足が懸念される今後についてはIoTを活用した解体技術の自動化が進むと考えられる。Apple社はiPhoneを自動解体するロボット「Liam」、「Daisy」を開発しており、こうした製造業主体の解体技術の推進はリサイクル率の向上に大きく貢献するとみられる。

機器における異相境界面に選択的に応力が加わるような粉碎技術の開発が進められている。電気パルス粉碎、マイクロ波粉碎、圧力を利用するHPGR (High Pressure Grinding Roll)などが検討されており、難処理鉱石や都市鉱山への有用性が確認されている。HPGRは、すでにいくつかの海外の鉱山やセメント業で実用化されている。解体・破碎後の物理選別には磁力選別、うず電流選別、静電選別などの電磁氣的な力を用いる方法、風力選別や薄流選別など、流体中の粒子の運動性の差を用いた方法が挙げられる。比較的粗粒状態で高度に単体分離された塊状（現状では10 mm以上）粒子については、各種のセンシング技術を利用したSensor Based Sortingが有効であり、従来型の確率的分離である固相分離（比重選別・磁選・電氣的選別等々）では達成し得なかった（理想分離に近い）高度な分離が可能となる。例えば、アルミ合金類の相互分離は従来型の固相分離では不可能であったが、数年前より、透過X線および蛍光X線ソーティングを組み合わせることにより実用化プラントが建設され始めた。LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy) を利用したソーティング技術も世界に先駆けて日本で開発されている。また、プラスチック類の相互分離においては、近赤外線 (NIR) 吸収を利用したソーティング技術が実用化されており、日本に限らず世界中で採用されている。この分野の最新技術としては、ラマン分光やテラヘルツ波吸収特性を利用するものがある。粒子から得られる情報を基にして、センシングによる、粒子識別、選別（マニピュレーション）からなるが、技術進展が著しいAI技術との相性が非常に良い。

他方、鉱山会社ではリサイクル原料を焼却、破碎、熔融等の前処理を行った後、スケールメリットを活かし鉱石の製錬工程にリサイクル原料を組み込んだ濃縮・回収が行われている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

●化学プロセスにおける気体・液体の分離技術

上述したようなエチレン/エタン、プロピレン/プロパンのようなオレフィン/パラフィン はポリマー原料として重要であり、これまでは加圧系にて数百段にもなる蒸留塔を用いて用いた分離がなされてきた。また、このアップストリームプロセスにおいては水素やメタンの分離、ダウンストリームではベンゼン、トルエン、キシレン (BTX) や脱水プロセスなどがあり、そのほとんどすべてが蒸留塔により分離されている。もちろんこれらのプロセスは最適な熱統合がなされ、省エネルギー化が図られているが、機能性化学品製造を考えると上述したような原油資源に代表される石油化学プラントのみならず、原料多様性の観点から、シェールガス、コンデンセート、バイオマスなど様々な資源を対象とする分離技術の開発が必要になる。これまで、機能性化学品製造を対象とした気体・液体分離は汎用性の観点から蒸留が用いられてきたと考えられるが、この製造プロセスには非常に多くの反応や分離もしくは反応分離プロセスが存在しており、それに対してアップ/ダウンストリームプロセスの影響を考慮した分離技術の選定や評価はなされたことがなく、蒸留塔の比較は極めて限定的である。上述の NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「革新的分離技術の導入による省エネ型基幹化学品製造プロセス」において、膜分離に限定されるが関連する取り組みがなされており、今後の展開が期待される。

また、米国においては ALTSEP という ACS Green Chemistry Institute (米国化学会) と American Institute of Chemical Engineers (米国化学工学会) が連携し、Sustainable Separation Processes に関する取り組みを 2015 年から開始しており、膜や吸着に関する材料からそれを利用するプロセスまでを対象に産学連携体制での検討を開始している。この他、米国化学工学会では 2016 年末に The Rapid Advancement in Process Intensification Deployment (RAPID) が、Process Intensification (プロセス強化) に関する活動を活発に展開しており、この中で研究プロジェクトも展開しており、膜分離、吸着分離、反応分離やハイブリッド分離技術に関する研究が行われている。

●CO₂分離技術

常圧・室温付近で化学吸収させるアルカノールアミン水溶液だけでなく、近年では、高圧下でも駆動可能なアミン系ガス吸収液の開発が進んでいる。2015 年には、日揮と BASF 社との共同開発品であるアミン系吸収液 HiPACT を利用した CO₂ 回収を伴うガス処理・CCS 設備がセルビアのナフトナ・インダスリジヤ・サービジェ (NIS) 社において建設され、商用運転が開始されている。

既存のガス吸収液における CO₂ の分離エネルギーを削減することを目的とし、2015 年に JST・ALCA の研究プロジェクトの一環として、町田洋 (名古屋大学) らにより「相分離型省エネルギー CO₂ 吸収剤の開発」が進められた。町田らが提案する相分離型 CO₂ 吸収材は、CO₂ 吸収時に相分離を引き起こし、CO₂ 濃縮相を形成することで従来よりも大幅な省エネ化が可能となる。

また、CO₂ とメタンをはじめとする炭化水素の分離、CO₂/水素分離、CO₂/窒素分離、CO₂/硫化水素分離などを目的としたガス吸収液の開発と評価も進められている。なかでも、イオン

液体や深共融溶媒など新規物理吸収液やハイドレートを用いた分離法の開発が、国内外で盛んに実施されている。

●銅鉱石の低品位化

銅鉱石中のヒ素含有濃度が増加しており、有毒性の高いヒ素の蓄積が懸念されていることから、鉱石からヒ素を除去する技術、あるいはヒ素を溶出速度が遅い化合物として固定する技術の開発が求められている。日本に輸入されている鉱石はヒ素濃度 0.2%程度の低いものに限定されているが、チリ等の産出国では数%程度のヒ素を含有する鉱石も処理している。環境基準を満たしながらヒ素を分離・除去あるいは固定化する技術開発が今後一層重要になる見込みである。

●都市鉱山からの金属回収

JX 金属社の佐賀関精錬所では、銅精鉱に対するリサイクル原料の比率が高まっており、生産量に占めるリサイクル原料の比率は金が 25%、銀が 74%、白金、パラジウムはほぼ全量がリサイクル原料由来になっている。

スマートフォン等の小型家電の普及ならびに電気自動車の今後の発展見込みより、リチウムイオン電池 (LIB) からのレアメタル回収は今後一層重要になると予想される。世界的にもこの課題への関心は高く、欧米諸国でも中国でも LIB のリサイクル技術開発に関する研究報告が増加している。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

●化学プロセスにおける気体・液体の分離技術

・JST 未来社会創造事業

探索加速型「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域において「高効率・高性能分離技術を用いたプロセス強化技術」が設けられており、高効率・高性能な革新的分離プロセスを開発し、プロセス強化を行う必要があるとしている。現在の採択課題には下記の CO₂ 分離を除けば、化学プロセスにおける気体・液体の分離は含まれていないが、今後の展開が期待される。

・戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)

脱炭素社会実現のためのエネルギーシステムにおいて「革新的炭素資源高度利用技術」が設けられており、その中に「安価な酸素製造技術の開発」、「膜分離・精製技術の開発」、「ライフサイクルアセスメント (LCA) を考慮した CO₂ 排出量を最小化する評価手法の開発」が開発課題に上がっている。いずれの課題においても、膜分離技術が次世代の分離技術の基盤となるべく課題設定がなされており、多様な分離材料の合成から利用プロセスの開発、そして温室効果ガスの削減に資する分離技術が求められている。

●CO₂ 分離技術

・JST 未来社会創造事業

2050 年の温室効果ガスの大幅削減に向け、エネルギーの安定的な確保とエネルギー利用の効率化 (省エネルギー技術、再生可能エネルギーの高効率化、水素や蓄エネルギー等によるエネルギー利用の安定化技術) などを対象とする領域の探索加速型「地球規模課題である低炭素

社会の実現」の公募があった。重点公募テーマの『『ゲームチェンジングテクノロジー』による低炭素社会の実現』の一つとして、平成 29 年より「CO₂ 分離機能とエイジング耐性を兼備した多孔性複合膜」が、Easan SIVANIAH (京都大学) らにより実施されており、最新のポリマーと MOF との複合材料により、1,500 円 / ton-CO₂ の実現を目指している。

・ NEDO 次世代火力発電等技術開発

酸素キャリアによる石炭の酸化反応により CO₂ のみを排出させるケミカルルーピング技術を利用し、CO₂ 分離・回収装置そのものを廃止することを目指している。本技術が実現できれば、流動床燃焼を用いる中小規模の石炭火力発電に適しており、微粉炭燃焼では使いにくい低品位炭やバイオマスを使えるという特長も有している。

●金属分離

・戦略的都市鉱山研究拠点 (SURE)

産業技術総合研究所 (産総研) では戦略的都市鉱山研究拠点 (Strategic Urban mining Research base, SURE) を設立し、金属資源循環率の向上、技術向上に伴う都市鉱山市場の拡大、リサイクル装置産業の成長とリサイクルプラントの国産化等を目指した活動を行っている。関連して「高効率な資源循環システムを構築するためのリサイクル技術の研究開発事業 (H29 年度～ H34 年度)」が NEDO にて実施中であり、小型家電等の廃製品を対象に、レアメタル等も含めた多様な金属の低コスト・高効率なリサイクル技術開発が行われている。

・リチウムイオン電池 (LIB) のリサイクル

JX 金属では、リチウムイオン電池リサイクルの実証化試験工場を福井県敦賀市に建設しており、焼却、破碎/篩別して得られる電池粉の不純物除去、溶媒抽出工程を経てコバルト、ニッケルを電解回収し、マンガン、リチウムは炭酸塩として分離回収している。ドイツでは LIB リサイクルプロジェクトとして LithoRec II が進められ、基礎研究からパイロットプラントの設置までが実施されてきた。

・ JST 未来社会創造事業

2018 年度より、探索加速型「持続可能な社会の実現」領域の重点公募テーマ「新たな資源循環サイクルを可能とするものづくりプロセスの革新」において、以下の 5 つの研究課題が開始している。

- 「アルカリハイドロメタラジーによる資源循環イノベーション」(宇田哲也 京都大学)
- 「貴金属・レアメタルの革新的リサイクル技術の開発」(岡部 徹 東京大学)
- 「相転移型水系溶媒抽出によるレアメタル分離分析システムの開発」(塚原剛彦 東京工業大学)
- 「有機溶剤を用いた革新的レアメタル分離回収プロセスの創出」(三木貴博 東北大学)
- 「リチウムイオン電池完全循環システム」(渡邊 賢 東北大学)

・太陽光発電パネルのリサイクル

我が国の太陽光発電システムは再生可能エネルギー固定価格買取制度によって急速に拡大し

ており、政府の長期エネルギー需給見通しの2030年度目標に対し、既に約6割が達成されている。一方で、拡大した太陽光発電システムは将来使用済みとなり廃棄されると見込まれ、リサイクルならびに適正処分の確立が今後重要になる。NEDOでは「太陽光発電リサイクル技術開発プロジェクト（2014～2018年度）」が実施され、分解処理困難な太陽電池モジュールの低コスト分解処理技術、撤去・回収・分別・リユース関連技術などについて検討されている。有価金属のリサイクルとして、シリコン系太陽電池からの銀の回収、CIS系太陽電池からのインジウム、ガリウム等の回収が重要視されている。

・海底熱水鉱床における取り組み

JOGMECでは、海底熱水鉱床の資源量調査、採鉱技術開発、選鉱・精錬技術開発、環境影響評価等を行っている。沖縄近海において海底約1600mの海底熱水鉱床を掘削・集鉱し、海水とともに連続的に洋上に揚げる世界初の採鉱・揚鉱パイロット試験に成功している。今後、採鉱・揚鉱技術に係る商業化に向けた課題を抽出するとともに、選鉱・製錬技術も含む生産技術の検討を進める予定としている。

・銅原料からの不純物低減技術開発

銅精鉱中のヒ素が増加していることが銅製錬事業の問題となっていることから、現地の環境規則を遵守しつつ銅鉱石中のヒ素を海外鉱山で分離・処分する鉱石処理プロセスの要素技術の開発が4年計画で実施されている。銅鉱物とヒ素鉱物は性質が類似して既存技術では分別が困難なため、分析技術に加えて粉碎技術・選別技術を開発してヒ素分離プロセスを確立することを目指している。

（5）科学技術的課題

●気体・液体の分離技術（化学プロセス）

・蒸留：投入エネルギーの削減、装置サイズの縮小

蒸留分離プロセスは、塔頂蒸気再圧縮や内部熱交換のようにヒートポンプ技術を用いることで、従来に比して50-70%の省エネルギー化が可能となる新技術が社会実装されているが、その装置サイズやさらなる省エネルギー化についての検討が求められている。

・膜分離：分離可能系の明確化、多成分系分離、汚れ系対応、コストなど

機能性の化成品製造プロセスに限っても、その分離対象は多岐に渡っており、どのような膜材料でどの程度の分離をおこなえるのか、また、現状と同等の生産量を達成するためには、どの程度の透過速度、分離係数が必要になるのかといったデータベースの構築が課題である。加えて、不純物やコーキングの可能性のある系のように多成分系（含む汚れ系）の分離に関する信頼度について実績を積み上げる必要がある。

この他、膜エレメントやモジュールのコスト、制御系の構造などが不明であり、現状では高い省エネルギー性を示しつつも経済的に成立しない可能性が否めないことから、これらの検討が求められている。

膜分離技術は、蒸留のように熱力学的な平衡関係に支配されない速度差分離技術であることか、分離に要するエネルギーの大幅な省エネルギー化が期待されている。しかしながら、機能

性化学品製造の処理量は、一般的に数十から数百トンのスケールが主流となっており経済効率のためのスケールメリットの追求がおこなわれている。このようにプラントの大型化のために、精度の高い設計技術、信頼性のある装置技術、安定な運転技術が必要であるが、これを構築するためにはコンピュータによるプロセスシミュレーション技術も必須である。

● CO₂ 分離技術

・ガス吸収液

Selexol 吸収液など現行ガス吸収液では、CO₂ と他のガスとの分離選択性に劣るため、利用可能な資源を十分に回収利用できていない。したがって、CO₂ 吸収能に優れるだけでなく、炭化水素や水素、硫化水素や窒素などを含む混合ガスからの分離選択性に優れるガス吸収液の開発が重要になってくるであろう。また、ガス吸収液だけでなく、CCS プロセス全体を通じたトータルパッケージコストの低減、EOR との組合せなど CO₂ の有効利活用も見据えたプロセス設計が大切である。

・イオン液体

新規ガス吸収液として注目されているイオン液体については、国内外の多くの研究者によって、イオン液体を構成するカチオンとアニオンの組合せにより CO₂ 吸収量がどのように変化するかについて実験データの蓄積が進んできたが、精度の高い信頼性に優れるデータは限られる。データの良し悪しの判別は難しく、例えば、量子化学計算と人工知能との組合せによる分子設計などを進めることによる取捨が進むことが期待される。また、フッ素系アニオンに変わる低コストアニオンの探索、合成・精製にかかるコスト低減による安価な製造法の確立、高粘性が原因でガス吸収液として利用しにくい一部のイオン液体などを、高分子膜や無機膜に担持させた支持膜としての利用や開発、などが期待される。

●都市鉱山からの金属回収

製品の機能向上やコストダウンを目指して製品を構成する金属が複雑化した結果、リサイクルにおける分離操作が難しくなるといった問題が挙げられる。例としてハードディスクの磁性材料にルテニウムを用いた製品が普及し、そのリサイクル工程において白金との分離が困難になるといった問題が発生している。組成が変化するリサイクル原料に対する分離技術開発が今後重要になると考えられる。

LIB の正極材を構成する金属のリサイクルは世界的に注目される課題であり、国内でも実証試験が進められている。LIB は要素技術開発に加えて、廃棄される LIB の回収・集約によるリサイクル率の向上が重要になると予想される。

電子機器や電気自動車にはネオジム磁石等の希土類磁石が用いられるが、希土類金属はイオン半径などの物性が類似するために相互分離が難しく、鉱石からの製錬においても、リサイクルにおいても希土類同士の分離が課題となる。

●抽出試薬開発の戦略

溶媒抽出プロセスでは、特定の金属を抽出分離できる抽出剤を見出すことができれば分離プロセスを大幅に効率化することができる。このため世界的に多種多様な抽出剤開発が行われて

いるが、目的の金属抽出能力や金属選択性を満たしても、抽出剤が溶剤によく溶けなければ工業化できない。さらに、原料水相には漏出せず、毒性や引火性などの安全性が高いなど、様々な工業化のための要件を満たさなければ実用化は困難であり、これらの要件を満たした場合でも、化審法における毒性、蓄積性などの審査費用を含めたコストが見合わなければ実プロセスへの導入が見送られる。従って新規抽出剤は工業化に求められるこれら多くの要件を満たすことを前提とした開発が肝要となる。抽出剤開発において溶剤への溶解性が重要な課題となる一方、抽出剤の金属選択性や抽出能力が、抽出剤を溶かす溶剤によって変化する事例も最近幾つか報告されており、抽出プロセスに適した溶剤を見出すことで新たなブレイクスルーが見つかる可能性もある。

近年関心を集めてきたイオン液体を用いた溶媒抽出系に関する研究は、2000年代初頭の初期的な研究と比較して高度化・複雑化しており、イオン液体を用いた学術的な研究は成熟段階に至ったと考えられる。今後はこれらの中から優れた抽出剤が見いだされ、高濃度・大量処理に耐えうるなど実用化に向けたプロセスの開発に移行することが望まれる。

(6) その他の課題

●気体・液体の分離技術 (化学プロセス)

膜分離を対象とした材料系の研究者は多く、それに関連する学術的な論文も多く発行されているが、膜分離をプロセスとして捉えた研究者は限定的であり、材料からプロセスやシステムまでを対象とするマルチスケールな研究体制の構築が課題である。

国内における分離技術分野の研究者は限られるため、それぞれが持つ固有の技術を相互に補完しながら研究を進めていく体制が重要である。特に、分離・吸収にかかる素材開発からプロセス設計に至るまでの実用化を視野にした産官学によるプロジェクト型のチーム構築が、益々重要になってくるであろう。

●金属分離技術

小型家電リサイクル法が2013年に施行され、自治体等による使用済み小型家電の回収が進められている。2016年の回収量は約58,000トンで、解体後の電子基板や金属部分から金属資源の回収が行われ鉄が約2万7千トン、アルミニウムが約2千トン、銅が約1,500トン、銀が2,563kg、金が181kg回収されている。同法の施行以前に算定されていた、小型電子機器の年間排出量に含有される金属では銀が約50トン、金が約6トンと試算されていたことから、再資源化に至る量は現時点では当初見込みの10%にも達しておらず、今後リサイクルのさらなる推進が望まれる。資源有効利用促進法によりメーカーによる回収が促進されてきたパソコンのように、小型家電においても製造業がリサイクルのシステムに組み込まれることがリサイクル率の向上に有効と考えられる。

現行の都市鉱山開発で実質的にリサイクルされているのは構成する金属のうち経済的に採算の合う貴金属類が中心で、電子機器を構成するレアメタルの大半は回収・再利用されず捨て置かれているのが現状である。リサイクル率を向上し、再利用される金属種が増えるためには、換金性の高い金属インゴットとしてのリサイクルだけでなく、製品製造に必要な材料を調達する手段として多種の金属がリサイクルされることが重要と考えられる。その実現には、動脈産業と呼ばれる製造業を巻き込んだリサイクルシステムの構築が求められる。

(7) 国際比較

気体・液体の分離技術 (化学プロセス)

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	◎	↑	早稲田大学、産総研、広島大学、芝浦工大、山形大学、日揮、NOK による NEDO 無機膜分離プロジェクトが実施された。
	応用研究・開発	○	↑	JST や SIP による膜分離に関する大型プロジェクトが開始。
米国	基礎研究	◎	↑	ExxonMobil と Georgia Tech が連携し、炭素膜を用いてパラキシレンを高効率に分離。
	応用研究・開発	○	→	ALTSEP や RAPID など学会を中心とした産学連携体の構築が進んでいる。
欧州	基礎研究	◎	↑	Horizon2020 にて、無機分離膜の開発並びに反応分離プロセスの研究がなされている。
	応用研究・開発	△	→	FP7 の後継プロジェクトとして Horizon2020 にて、すべての膜材料を対象に大規模な研究が行われている。
中国	基礎研究	◎	↑	大連理工大学、南京工業大学などで無機分離膜 (ゼオライト) の開発が加速している。
	応用研究・開発	△	↑	上記大学からスピンアウトしたベンチャー企業などが集積化されている。
韓国	基礎研究	◎	↑	多くの大学が研究所にて膜分離技術に関する研究がおこなわれている。
	応用研究・開発	△	→	CO ₂ 分離・回収に関するプロジェクト内で分離膜の開発が行われている。

CO₂ 分離技術

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	○	→	RITE、産総研、名古屋大学、日本大学などにおいて、ガス吸収液の研究が精力的に実施されている。
	応用研究・開発	◎	→	日本 CCS 調査による CCS 実証試験が苫小牧にて実施中。IGCC や IGFC からの CO ₂ 分離回収については、大崎クールジェンにて実証試験中。RITE、三菱日立パワーシステムズ、電源開発、東芝、産総研などで精力的に研究中。
米国	基礎研究	◎	↑	DOE の NETL の他、Dupont 社とカンザス大学のグループ、テキサス大学やノートルダム大学が精力的にガス吸収液 (イオン液体) の開発と評価を進めている。一方、ハイドレートを利用した CO ₂ /CH ₄ などの分離技術について、コロラド鉱山大学で精力的に実施されている。
	応用研究・開発	○	→	Dow Chemical 社によるガス吸収液 (Selexol Max) の開発と UOP 社によるプロセス開発が進められており、CO ₂ をはじめとする酸性ガスを高効率に分離可能。
欧州	基礎研究	○	→	ポルトガルのアヴェイロ大学で、CO ₂ /CH ₄ などガス分離の研究が精力的に行われている。
	応用研究・開発	○	→	BASF 社や Linde 社、Clariant 社などによりガス吸収液とプロセスの開発が精力的に進められており、実証も進んでいる。
中国	基礎研究	◎	↑	多くの大学でガス吸収液の開発と評価が進められており、論文数も増加傾向。
	応用研究・開発	○	→	Tianjin にて、GreenGen プロジェクトによる 265 MW の IGCC 稼働中。2020 年稼働を念頭に EOR 目的の CCS が計画されている。
韓国	基礎研究	△	→	KAIST と KCRC にてガス吸収液の開発が進められている。
	応用研究・開発	△	→	2016 年末に、Taean にて、380 MW の IGCC が稼働した。CCS 設備はないがアミン吸収液による CO ₂ 分離を実施中。

金属分離

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	○	→	当該分野の研究者数の漸減は懸念されるが、リサイクル分野では先鋭的な研究が進められており、論文数等も堅調に推移している。
	応用研究・開発	○	→	NEDOで太陽光発電リサイクル技術開発は進められるなど、先進的な取り組みが進む。貴金属等のリサイクル率向上には課題が残る。
米国	基礎研究	○	→	イオン液体、金属・有機構造体 (MOF) など、最先端材料研究を牽引しているが、精錬・都市鉱山に密接な基礎研究で特筆する成果は見当たらない。
	応用研究・開発	○	→	水処理など、環境分野の研究は散見されるものの、非鉄金属探鉱費が減少するなど、活発な動きとは言い難い。
欧州	基礎研究	○	→	ドイツ・フランス・英国などでの関連分野の公的研究組織は堅調で、論文数は過去2年で増加傾向にあり、被引用数が多く質の高い基礎研究が継続的に実施されている。
	応用研究・開発	◎	↗	WEEE (Waste Electrical and Electronic Equipment) 指令に沿ったリサイクルプロセスの構築に向けた動きは世界的に最高水準にあり、各国で活発な取り組みが進められている。
中国	基礎研究	○	↗	選鉱・浸出・抽出について論文数は世界一で研究者数も多い。レアアースなど技術集積の水準が高い分野もある。
	応用研究・開発	◎	↗	LIBのリサイクルなど、今後を見据えた課題への研究開発が積極的に進められている。研究者数は最も多い。
韓国	基礎研究	○	→	LIB、レアアースなど、リサイクル分野では積極的な研究開発が行われている。
	応用研究・開発	△	↘	海外事業の縮小、リサイクル事業の停滞など、鉱業政策全般に停滞の動きが強く、研究開発も進んでいるとは言い難い。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トренд

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) J. L. Humphrey, A. F. Seibert and R. A. Koort, "Separation technologies: Advances and priorities," Technical Report, U.S. DOE, 1991.
- 2) J. L. Humphrey and A. F. Seibert, "Separation Technologies: An Opportunity for Energy Savings," *Chem. Eng. Progress*, 88 (1992) : 32-41.
- 3) Hiroshi Machida et al., "Development of phase separation solvent for CO₂ capture by aqueous (amine + ether) solution," *J. Chem. Thermodyn.*, 113 (2017) : 64-70. doi:10.1016/j.jct.2017.05.043
- 4) The 21st International Solvent Extraction Conference, programbook.
- 5) 石油天然ガス・金属鉱物資源機構 (JOGMEC) 『世界の鉱業の趨勢 2017』.
- 6) 石油天然ガス・金属鉱物資源機構 (JOGMEC) 『世界の鉱業の趨勢 2018 韓国』.
- 7) 原田幸明他 「[特集] 都市鉱山リサイクルの課題と展望」『化学工学』82 (2018) : 410-438.
- 8) 南悌二他 「[小特集] 太陽光発電に関わるリサイクル技術」『化学工学』82 (2018) : 439-454.
- 9) 谷ノ内勇樹他 「[特集] 貴金属のリサイクル関連技術の最前線」『日本金属学会誌』81 (2017) :

151-195.

- 10) 佐野正樹『季刊 資源と素材』Vol.2 No.3 (2017) : 38.
- 11) P. A. Kobielska et al., "Metal-organic frameworks for heavy metal removal from water," *Coord. Chem. Rev.*, 358 (2018) : 92-107. doi:10.1016/j.ccr.2017.12.010
- 12) X. Zheng et al., "A mini-review on metal recycling from spent lithium ion batteries," *Engineering*, 4 (2018) : 361-370. doi:10.1016/j.eng.2018.05.018
- 13) A. Kumar Awasthi and J. Li, "An overview of the potential of eco-friendly hybrid strategy for metal recycling from WEEE," *Resour. Conserv. Recycl.*, 126 (2017) : 228-2239. doi:10.1016/j.resconrec.2017.07.014
- 14) J. L. Wankowski et al., "Ionic liquid (IL) cation and anion structural effect on metal ion extraction into quaternary ammonium-based ILs," *Solv. Extr. Ion Exch.*, 34 (2016): 48-59. doi:10.1080/07366299.2015.1110410
- 15) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 太陽光発電リサイクル技術開発プロジェクト, https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100070.html (2019年2月12日アクセス)
- 16) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 高効率な資源循環システムを構築するためのリサイクル技術の研究開発事業, https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100129.html (2019年2月12日アクセス)
- 17) 産業技術総合研究所 戦略的都市鉱山研究拠点 (SURE) , <https://unit.aist.go.jp/emri/sure/> (2019年2月12日アクセス)

2.1.6 複合材料

(1) 研究開発領域の定義

金属やプラスチック、セラミックスなど二種類以上の材料を組み合わせることによって、個々の材料では持ち得ない機能・性能を有する材料の創出を目指す研究開発領域である。特に、繊維状の強化材とマトリックス材を複合化した材料は、均質材料では達成できない高比強度（引張強さ／比重）や高比剛性（剛性／比重）、高耐熱性などの特性を発揮可能であり、代表的な材料には炭素繊維強化プラスチック（CFRP）、セラミックス基複合材料（CMC）、セルロースナノファイバーなどがある。

(2) キーワード

複合材料、炭素繊維強化プラスチック、炭素繊維、熱硬化性樹脂、熱可塑性樹脂、セラミックス基複合材料、セルロースナノファイバー、CNF、高比強度、軽量化、プリプレグ、樹脂含浸成形法、RTM、CFRP、GFRP、SiC/SiC、CMC、MMC

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

複数の異なる材料の複合化によって、均質材料では達成できない特性を発揮する複合材料は、目的に応じて設計可能な材料とも言える。省エネルギー、低環境負荷（CO₂ 排出量削減）という地球的課題に対して、軽量構造材料は自動車、航空機、風車発電等、輸送・エネルギー分野への適用により、その解決に直接的に寄与する。中でも、繊維強化プラスチック（FRP）は高比強度、すなわち強くて軽い、という点で金属材料に大きく優り、さらに理想的には、構造物にかかる荷重の分布に合わせて繊維（強化材）を配置することで、より効率的な材料として機能しうる。一方、金属材料と比較して高価格であり、信頼性、加工性、生産性等にも課題が多いことから、まだ金属系構造材料ほどには普及していないのも事実である。また、セラミックス基複合材料や耐熱合金・金属間化合物に関する技術革新は、材料の耐熱性・靱性を向上させ、航空機用エンジンの高効率化に大きな期待が寄せられている。さらに、航空機分野に比べて市場規模は小さいものの、宇宙分野においても特殊環境下で高信頼性が維持された材料の候補として、複合材料への期待が高まっている。また、再生産可能な資源の有効活用および石油資源からの脱却の観点から、強化材としてセルロースナノファイバーが注目を集め、産学官での取組が活発化している。

[研究開発の動向]

一般に、複合材料は強化材としての繊維とマトリックスから構成され、前者は炭素、ガラス、セラミックス、後者は樹脂、セラミックス、金属が代表的である。実用化された複合材料の中ではFRPが最も普及しており、FRPにはガラス繊維強化プラスチック（Glass Fiber Reinforced Plastics : GFRP）と炭素繊維強化プラスチック（Carbon Fiber Reinforced Plastics : CFRP）がある。最も使われているのはGFRPであり、その用途は浴槽・浴室ユニット等の住宅機材が代表的であり、他に建設資材、輸送機器、浄化槽などがある。一方、CFRPはGFRPの数倍の比強度を有するが、高価であるため、一般的な用途はスポーツ用品等に限定されてきた。しかし近年、輸送機器への適用により、CFRPに対する注目度が高まっている。

その代表例が航空機であり、例えばボーイング 787 の機体構造重量の約半分が CFRP である。また、自動車についても、2013 年 11 月にドイツ BMW 社は、世界で初めて CFRP を車体の主要骨格に採用した電気自動車「i3」を発売した。

CFRP 技術開発は素材開発と成形技術開発に大別される。素材については、炭素繊維にアクリル繊維を使用する PAN 系、ピッチを使用するピッチ系がある。いずれも日本発の技術であり、その生産量のおよそ 6 割超を日本メーカーが占める。前述のボーイング 787 の場合も、CFRP の 70% が日本メーカーにより製造されている。

また、炭素繊維は用途・成形法により、長（連続）繊維と短繊維が使い分けられている。炭素繊維はアクリル繊維を空气中・高温で耐炎化（焼成）して製造するため、高コストかつ高 CO₂ 排出であり、その大幅改善が求められる。一方、樹脂には熱硬化性樹脂と熱可塑性樹脂があり、これも用途・成形法により使い分けられている。

成形法については、プリプレグ（強化繊維の織物に樹脂を含浸させたシート状の中間基材）をオートクレーブ（圧力釜）にかける方法が代表的であり、高強度、高剛性かつ品質安定性に優れる。一方、高価であり、成形性、生産性に難があるため、用途が限定される。例えば航空機のように高価な材料の適用が認められやすい場合でも、主翼、胴体という主構造を除く尾翼、ドア等には、新たな成形法が望まれる。その候補は脱オートクレーブ成形法であり、プリプレグを用いる方法と RTM（Resin Transfer Molding：樹脂含浸）成形法がある。RTM 成形法は繊維のみを予め積層し、その後に樹脂を含浸させるので高価なプリプレグが不要となる。これは 1970 年代に国内において確立されたが、その発展形である VaRTM 成形法（真空樹脂含浸成形法）は低温で樹脂含浸を行うもので、より低コスト化が可能となる。脱オートクレーブ成形法の最重要課題の一つはボイドの低減である。

さらに、自動車のように、安価かつ成形性、高生産性がより一層重視される生産には、プレス成形、射出成形等が適している場合が多い。以上の成形法を高性能かつ高コストの順に並べると、オートクレーブ、RTM、プレス成形、射出成形となる。このとき、最適な素材の組み合わせも成形法に依存する。繊維については、オートクレーブ、RTM には長繊維、プレス成形、射出成形には短繊維が用いられる。一方、樹脂は、オートクレーブ、RTM には熱硬化性樹脂、射出成形には熱可塑性樹脂、プレス成形には両方の樹脂が候補となり得る。なお、樹脂については、必ずしも成形性、生産性だけを考慮して使い分けることにはならない。例えば、航空機エンジンのファンに適しているのは熱可塑性樹脂と考えられているが、これはバードストライクに対する耐衝撃性が熱硬化性樹脂より優れているためである。ただし同じエンジン部品でも、圧縮機より高温部（最高でおよそ 300℃）に適用可能な CFRP 開発の場合、温度特性から熱硬化性樹脂が適当と考えられている。

FRP 以外の複合材料には、金属、セラミックスをマトリックスとする金属基複合材料（Metal Matrix Composites：MMC）、セラミックス基複合材料（Ceramic Matrix Composites：CMC）がある。中でも CMC は①酸化物系 CMC、②非酸化物系 CMC に大別され、非酸化物系 CMC である SiC/SiC CMC は Ni 基超合金を超える耐熱材料として、次世代航空機エンジンのタービン翼への適用が期待され、国内外の航空機エンジンメーカー（特に GE、IHI）が中心となり開発が進められている。

SiC/SiC CMC は、SiC 繊維の織物にマトリックスとしての SiC を含浸させたものである。SiC 繊維が開発されてからこれまでの約 30 年の間に材料そのものに関する多くの基礎的知見

が得られただけでなく、工業的プロセス技術や特性評価技術の進展など、実用材料としての地位を築きつつある。ただし、現行のNi基超合金と比べると高価であるという欠点もあり、コスト低減が求められている。さらに、破壊靱性向上の観点から、マトリックスに生じたクラックが繊維に伝播することを防ぐために、繊維表面（マトリックスとの界面）にコーティングを施すなどの処置も必要と考えられている。また、この材料は1400℃での使用にも十分な高温強度を有するが、燃焼ガスに含まれる水蒸気により高温酸化が起こる。そのため、環境遮蔽コーティング（EBC）が必要とされる場合がある。

近年、持続性という観点から再生可能かつ生物由来の有機性資源であるバイオマス素材が注目されているが、その一つとしてセルロースナノファイバー（Cellulose Nano Fiber : CNF）を強化繊維として用いる複合材料開発に向けた動きも活発化している。CNFは、木材などの植物中から得られるパルプをナノレベルまで解きほぐしたものであり、鉄の5倍の強度で1/5の軽さ、熱膨張率は石英ガラス並という特性を持っているため、樹脂などと複合化することで軽量高強度複合材料になることが期待されている。また、CNFの原料であるセルロースはあらゆる木材や植物から抽出可能であるため、資源枯渇の心配がないことも特徴である。一方、CNFは表面に水酸基が多数存在するため親水性が極めて高く、疎水性の石油由来の樹脂と複合化するためには表面を化学処理する必要があるため、製造コストが高いという課題がある。そのため、現状では機能性添加剤として親水性CNFを用いた大人用おむつや液だれ防止のボールペンインクなどでの実用化に留まっている。

（4）注目動向

[新展開・技術トピックス]

複合材料全般で注目すべき技術の一つが構造ヘルスマニタリング技術である。例えばCFRPの場合には、光ファイバセンサなどを製造時に埋め込み、製造時、使用時のひずみ、振動、温度変化、損傷などをリアルタイムで検知・診断するもので、航空機認証機関による認証取得の段階にまで達している。また、モデリング・シミュレーションの研究開発も、成形時の樹脂挙動、成形品の機械的特性等を高精度で予測するために重要である。これらは認証の際にも、試験データを補完する役割として重要度が増している。

CNFに関しては、2014年6月には、オールジャパン体制でナノセルロース（セルロースナノファイバー、セルロースナノクリスタル、およびそれらを用いた材料の総称）の研究開発、事業化、標準化を加速するためのナノセルロースフォーラムが発足し、木材、製紙、化学・樹脂、自動車、電気・電子製品など幅広い分野から200を超える企業が参画している。また、ナノセルロース研究を行っている個人会員とともに、経済産業省、環境省地球環境局、特許庁、（独）新エネルギー・産業技術総合開発機構、（株）産業革新機構、岡山県、高知県、愛媛県、京都市などの50近い公的機関が特別会員として参加している。

この動きに刺激され、東海、近畿、中国、四国などの地域においてもナノセルロースに関する研究会やコンソーシアムができていく。このような地域の動きを受けて、2015年4月にはナノセルロースフォーラム内に地域分科会が設立され、地域のナノセルロース研究開発の支援に向けて動き出している。セルロースナノファイバーの社会実装に向けた産官学のダイナミックな動きは、ますます活発化すると考えられる。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

・CFRP

日本は炭素繊維の生産では世界市場で圧倒的な強さを維持しているが、成形技術においては、米国、ドイツが日本と同等以上と見られる。主に、米国は航空、ドイツは自動車を対象としてその技術を磨いている。代表的な研究開発拠点として、米国ではデラウェア大学、ドイツではフラウンホーファーの ICT (化学技術研究所)、生産技術・応用マテリアル研究所 (IFAM) が挙げられる。また、英国のブリストル大学を中心とする NCC (国立複合材料センター) も、航空機向けに特化して、産学官コンソーシアムを形成している。一方、アジアでは中国、韓国が近年、世界の炭素繊維市場に進出しつつある。国内では、NEDO「革新的新構造材料等研究開発」(2014～2022年度)、内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)「革新的構造材料」(2014～2018年度)がある。前者が主に自動車向け、後者が航空機向けであり、成形技術等の開発が行われている。2018年度より開始された SIP 第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(2018～2022年度)においては、上記 SIP「革新的構造材料」で開発してきたマテリアルズインテグレーション (MI) の素地を活かし、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする「逆問題」に対応した次世代型 MI システムを世界に先駆けて開発するとともに、MI を活用して、競争力ある革新的な高信頼性材料の開発や設計・製造・評価技術の確立に取り組み、発電プラント用材料や航空用材料等を出口に先端的な構造材料・プロセスの事業化を目指している。また、NEDO「次世代構造部材創製・加工技術開発」(2015～2021年度)は、航空機用 CFRP 構造ヘルスマonitoring 技術の実用化や製造プロセスモニタリング技術の開発を進めている。

・SiC/SiC CMC

米国および欧州 (特にフランスとドイツ) が世界をリードしている。米国においては GE 社と P&W 社による民間航空機用エンジン材料としての用途開発が検討されている。特に、GE 社においては、社内で SiC 繊維および SiC/SiC 部材製造技術を開発し、外部からの調達が必要な段階に達している。また、米国内には CMC の製造を行うベンチャー企業も数社あり、CMC の製造と製品化を行っている。国内においては、日本カーボンと宇部興産が SiC 繊維を製造することができるが、日本カーボンと米国の GE 社およびフランスのサフラン社は 2012 年に NGS アドバンスドファイバーという合弁会社を設立し、SiC 繊維の量産製造を行っている。

・CNF

軽量・高強度・低熱膨張などの特性を示す CNF は次世代のグリーンナノ材料として注目を集め、2004 年以降、論文数や特許数が増加している。その中心となっているのは、森林資源が豊富で製紙産業が盛んな北欧、北米、日本である。近年、中国のキャッチアップも無視できない状況である。2011 年からはフィンランド、カナダ、米国の主導で国際標準化の議論も始まっている。国内における研究プロジェクトとしては、CNF を活用することで自動車の 10%軽量化を目指した環境省「NCV (Nano Cellulose Vehicle) プロジェクト」(2016～2019年度)があり、京都大学をはじめとする 21 の大学、研究機関、企業等のサプライチェーンで構成される一気通貫のコンソーシアムも設立している。また、NEDO「非可食性植物由来化学品製造プロセス技術開発」(2013～2019年度)における研究開発テーマの一つとして、セルロースナノファイバーの一環製造プロセスと部材化技術開発に取り組んでいる。その他、

個別の研究課題としては、JST 戦略的創造研究 (CREST) 「二酸化炭素資源化を目指した植物の物質生産力強化と生産物活用のための基盤技術の創出」研究領域 (研究総括: 磯貝彰) において、「新規セルロース系ナノ素材の表面構造および集積構造制御による炭素マテリアルストリームの創成」(2013 ~ 2018 年度) が実施されている。ここでは、それまで困難であった均一幅の CNF を解繊可能にする TEMPO 酸化触媒と呼ばれる化学反応と軽微な機械処理を組み合わせによって得られる TEMPO 酸化 CNF の調製方法、表面ナノ構造改質、ナノ集積構造解析等の基礎研究が行われている。TEMPO 酸化 CNF に関しては、国内 2 社 (日本製紙、第一工業製薬)、米国農務省林産物研究所、フィンランドのベンチャー企業と共同研究を実施し、既に生産を開始している。

(5) 科学技術的課題

CFRP の材料・プロセス技術の進化に伴い、その特長を最大限に活かす構造の設計技術の要望も高まっている。CFRP はブラックメタルとも呼ばれるが、それは肯定的な意味とは言えず、いまだに金属材料の代替材料という位置づけから脱していない。これまでほとんどの場合、構造設計は金属材料 (機械的特性が均一) を前提としたままで適用されてきた。部材内部で機械的特性の分布を変化できることが CFRP の強みであり、それを活かした設計・成形技術により、さらなる軽量化、ひいては省エネルギー、コスト削減が期待される。

さらに、切削等の二次加工技術の進歩も不可欠である。三次元・複雑形状に対して前述の成形技術開発が進められる一方、穴あけ等は成形時に行うことは無理である。併せて、接合技術の重要度も増している。また、CFRP が全ての特性において金属材料に優るわけではないので、鉄鋼、アルミニウム合金、チタン合金等の異種材料と組み合わせたマルチマテリアル構造が最適な場合もある。そのための異種材料接合技術がキーテクノロジーの一つとなる。例えば、金属材料と同等にボルト接合を行うことは、(一次) 部材成形に加えてさらにコスト増加の要因となる。そこで、接着剤による接着に大きな期待が寄せられる。これは既に構造物に多用されている技術ではあるが、主たる荷重を支持する部分に用いられるほどの信頼性は確保されていない。

また、CFRP をはじめとする複合材料の特長を十分に発揮するためには破壊機構の解明が不可欠であるが、まだ十分とは言えない。結果的に、CFRP においては板厚を増す、接着とボルト接合を併用するなど、軽量化を犠牲にして安全率を高くする構造を選択するケースが多い。複合材料部材の寿命等、パフォーマンスの評価方法の標準化およびその認証に関する取り組みも併せて重要である。加えて、航空機等向けの大型部材向け生産ライン、大量生産に対応した自動化技術、検査技術においても、欧米に遅れをとっており、キャッチアップが求められる。

複合材料の研究開発においては、構造設計と材料設計が一体となって行われることが多く、研究者も機械工学系が多い傾向にある。しかし、特に、破壊機構、接合の研究を通して更に進化させるためには、繊維 / 樹脂間、接合面等の界面の解析・制御をはじめとする、ナノ・ミクロスケールでのアプローチが重要であり、材料科学工学系との協働の促進が求められる。特に CFRP は炭素を主体とする材料であるため、金属系、セラミックス系と比較して、物理解析技術を適用しにくいことが障壁になっている。その進歩が CFRP の進歩に大きく寄与することは間違いない。

(6) その他の課題

航空機産業は CFRP、SiC/SiC CMC の今後の巨大ユーザーと期待されるが、機体はボーイング、エアバス、エンジンはプラット・アンド・ホイットニー、ゼネラル・エレクトリック、ロールス・ロイスと、米欧メーカーが圧倒的に強い。したがって、彼らの動向を常に注視し、彼らの開発スケジュールに合わせて新技術等を提案する必要がある。標準化についても同様である。さらに、採用までの所要時間を短くするために、日本国内に認証機関を持つことも重要である。これらは、まさに府省連携、産学官連携で取り組まなければ、目標達成は極めて困難である。その際、連携の中核となる拠点が必要であり、SIP 革新的構造材料では、JAXA がその役割を担うよう進められている。

(7) 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	○	→	<ul style="list-style-type: none"> 大学、国研による、CNT ベースのナノコンポジット、繊維/樹脂界面の解析・制御の研究開発。 大学中心の、植物由来原料による CFRP 素材、セルロースナノファイバー関連の開発。 国研中心の、耐熱 CFRP の開発。 2017 年に東京工科大学内に CMC センターを設立。 セルロースナノファイバーに関する基礎研究が東大、京大、九大を中心に活発化
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> 経産省「革新的新構造材料等技術開発」による自動車用 CFRP 成形技術開発。 「次世代構造部材創製・加工技術開発（複合材構造）」による構造ヘルスマonitoring 技術の開発。 内閣府「革新的構造材料」による、航空機用 CFRP 脱オートクレーブ成形技術、強靱性オートクレーブ CFRP 材料開発。 航空機エンジンメーカー中心の、高性能・高生産性 SiC/SiC CMC の開発。 日本カーボンと宇部興産が SiC 繊維を製造できる技術を有する。 ほぼ全ての大手製紙産業がナノセルロースの製造と応用展開を進めている 産総研のコンソーシアムである「ナノセルロースフォーラム」が、ナノセルロースの実用化を目指した情報交換の場として機能。
米国	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> Materials Genome Initiative の下での計算材料科学による材料設計。 CNT などを用いたナノコンポジットなどの基礎研究。 農務省林産物研究所においてや大学で、数種類のナノセルロースを製造し、企業にサンプル提供。
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> デラウェア大学複合材料センターによる、各種成形技術およびそれを前提とする材料設計技術、生産ライン最適化技術の開発。 エジソン溶接研究所 (EWI) による、金属-CFRP の接合・接着技術の開発。 DOE/IACMI プログラムによる CFRP 材料・成形技術、及び成形・損傷シミュレーション技術。 1m 級の酸化物系 CMC を製造できる企業が存在 GE 社および P&W 社では SiC/SiC CMC を航空機エンジン材料としての応用展開が進展 ナノセルロースの先端材料への実用化を目指したベンチャー企業が存在

欧州	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノコンポジット、ナノ繊維強化プラスチックの研究への巨額の公的投資。 ・主に北欧では、国研や大学を中心にセルロースナノファイバーの基礎研究が活発化。
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・独連邦教育研究省（BMBF）のファンディングによる「マルチマテリアルシステム」における複数構造材料の組み合わせによる車体軽量化技術開発。 ・フラウンホーファー化学技術研究所（ICT）による、各種成形技術およびそれを前提とする材料設計技術の開発。 ・フラウンホーファー生産技術・応用マテリアル研究所（IFAM）による、大型部材の生産・検査自動化技術、接合・接着技術（異種材料間含む）の開発。 ・独 CFK-Valley Stade, MAI Carbon Cluster などによる CFRP 成形技術拠点。 ・独では既に CF/SiC CMC を軽量耐摩耗材料として自動車やオートバイのブレーキローターに使用している。 ・英国溶接接合研究所（TWI）による、金属-CFRP の接合・接着技術の開発。 ・英国（EPSRC）の「高価値センター”CATAPULT”プロジェクト」による、ブリストル大学中心の産学官コンソーシアムの航空機向け CFRP 研究開発拠点、国立複合材料センター（NCC）。 ・製紙産業でナノセルロースやマイクロフィブリル化セルロースの製造・販売を開始。
中国	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・日本の ISMA、SIP に相当するような国家プロジェクトは持たないが、政府は有力大学へ個別に研究資金を提供している。特に国家支援の航空機メーカーである COMAC が関係したものが多く、豊富な資金力で、欧米からの購入により設備、ソフトを揃えている。 ・セルロースナノファイバーに関しては、学術的な論文は多数発表されている。
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・1960年に国家建材局の下に4研究所を設立、1999年に組織改革し、企業活動を開始。 ・航空機、電気自動車、風力発電用の応用開発に多額の資金投資中。紙以外の用途に対するナノセルロースの研究開発は盛んではない。
韓国	基礎研究	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・日本の ISMA、SIP に相当するような国家プロジェクトはない。個々の研究者による研究が中心。 ・ナノセルロースに関する論文は見受けられるがそれほど盛んではない。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・2006年に政府主導で本格的な炭素繊維開発に入り、2013年に商用化。 ・韓国材料科学研究所（KIMS）による、大型FRP部材（風力発電ブレードなど）の性能評価。他に韓国炭素収束技術研究所（KCTECH）による自動車向け CFRP の開発がある。 ・一部の企業がナノセルロースをサンプル提供しているようだが、用途は確立されていない。

（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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

（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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

（註3）トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

（8）参考文献

- 1) 福田博，邊吾一，末益博志 監修『新版複合材料・技術便覧』（産業技術サービスセンター，2011）。
- 2) 物質・材料研究機構 調査分析室レポート「社会インフラ材料研究の新たな展開：安全・安

- 心な持続性社会の構築へ向けて」(2012).
- 3) RIMCOF 技術研究組合 ,
<http://www.rimcof.or.jp/> (2019年2月12日アクセス)
 - 4) 武田展雄、越岡康弘「航空宇宙機複合材構造の構造ヘルスマニタリング技術の進展」『非破壊検査』第60巻3号(日本非破壊検査協会, 2013) : 157.
 - 5) Shu Minakuchi et al., "Life Cycle Monitoring and Advanced Quality Assurance of L-shaped Composite Corner Part Using Embedded Fiber-optic Sensor," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 48 (2013) : 153. doi:10.1016/j.compositesa.2013.01.009
 - 6) 新構造材料技術研究組合 (ISMA) ,
<http://isma.jp/> (2019年2月12日アクセス)
 - 7) 戦略的イノベーション創造プログラム「革新的構造材料」,
<http://www.jst.go.jp/sip/k03.html> (2019年2月12日アクセス)
 - 8) デラウェア大学複合材料センター (CCM) ,
<http://www.ccm.udel.edu/> (2019年2月12日アクセス)
 - 9) エジソン溶接研究所 (EWI) ,
<http://ewi.org/> (2019年2月12日アクセス)
 - 10) フラウンホーファー化学技術研究所 (ICT) ,
<http://www.ict.fraunhofer.de/en.html> (2019年2月12日アクセス)
 - 11) フラウンホーファー生産技術・応用マテリアル研究所 (IFAM) ,
<http://www.ifam.fraunhofer.de/en.html> (2019年2月12日アクセス)
 - 12) CFK Vallay Stade, <https://cfk-valley.com/en/> (2019年2月12日アクセス)
 - 13) MAI Carbon Cluster, <https://carbon-composites.eu/en/network/departments/mai-carbon/> (2019年2月12日アクセス)
 - 14) 英国接合溶接研究所 (TWI) ,
<http://www.theweldinginstitute.com/> (2019年2月12日アクセス)
 - 15) 韓国材料研究所 (KIMS) , <https://www.kims.re.kr/eng/> (2019年2月12日アクセス)
 - 16) ナノセルロースフォーラム ,
<https://unit.aist.go.jp/rpd-mc/ncf/index.html> (2019年2月12日アクセス)
 - 17) 磯貝明「最近の CNF 開発動向ー応用展開の新潮流ー」『化学装置』15 (33) (2018) : 601-608.
 - 18) 磯貝明「基礎研究と実用研究の両輪による核となるナノセルロース市場の形成を」『紙パルプ技術タイムス』60 (5) (2017) : 1-6.
 - 19) 磯貝明「セルロースナノファイバーの特性と応用」『ケミカルエンジニアリング』62 (6) (2018) : 1-7.
 - 20) 磯貝明「TEMPO 酸化セルロースナノファイバーの可能性」『化学経済』64 (8) (2017) : 18-23.
 - 21) 磯貝明「セルロースナノファイバーの製法と応用」『塗装工学』52 (3) (2017) : 87-93.

2.1.7 極限環境材料・計測技術

(1) 研究開発領域の定義

航空宇宙分野や原子力分野などの極限環境において使用される材料を念頭に置いた材料技術と、このための計測技術を対象とする。極限環境としては、高温、低温、大きな温度差、強い放射線、腐食環境などがあり、これらの中で使用するために材料には高強度、高靱性、軽量、耐熱、放射線耐性などが必要である。これらに対応する材料開発と、材料の損傷や機械的特性の劣化などを計測・評価する計測技術の研究開発が求められる。

(2) キーワード

炭素繊維強化プラスチック (CFRP)、チタン合金、耐熱合金、金属間化合物、セラミックス複合材料 (CMC)、積層造形、材料データベース、非破壊検査、軽水炉、高経年化、圧力容器の照射脆化、事故耐性燃料被覆管、Gen-IV (第4世代原子炉)、核融合炉、超伝導線材、ブランケット、ダイバータ、研究用原子炉 (照射炉)、加速器のターゲット材料・超伝導線材

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

航空宇宙分野や原子力分野などの極限環境で用いられる材料 (極限環境材料) には、通常の構造材料に求められる軽量、高強度の他に、高温、低温、大きな温度差、強い放射線、腐食環境などに耐える特性が求められる。また、使用されている材料が破壊された時の損害がきわめて大きいこと、材料特性の劣化の精密な評価や、高精度の劣化や寿命の予測を行い、高い信頼性を保証できなければならない。この研究開発領域は、「2.1.6 複合材料」とも関連が深い。航空機における材料技術については先の節に委ね、ここでは、主にロケットや衛星などの宇宙空間での利用、および原子力分野での利用を想定した材料技術と計測技術について取り上げる。

宇宙まで衛星を投入するロケットにおいては、高性能・高信頼・低コストのエンジンや、液体燃料用の軽量で極低温に耐える燃料タンクが重要であり、高温に耐えるエンジン周りの材料・部品や複合材料によるタンクの開発が必要である。また、衛星においては、太陽を向く面での高温、その反対側での低温、宇宙に飛び交う各種の放射線に耐える構造材料が必要である。さらに、打ち上げ頻度がそれほど多くないという特徴から、少量多品種の製造方法や信頼性確保のための設計手法、そして品質予測などが求められている。

原子力分野は、福島第一原子力発電所事故後、社会のこの分野に対する考え方は大変厳しい。この状況下で、最も重要な研究開発の1つは、現行の軽水炉の安全を科学的に担保することである。その中で、材料の健全性、特に中性子を中心とした放射線環境下での材料の健全性のメカニズムを明らかにし、それを基にした材料劣化の予測、さらには過酷事故を想定した環境での耐性の高い材料の開発が必要である。さらに今後は第4世代原子炉が検討されており、軽水炉に比べて高温、高放射線量、高腐食環境などが重畳する厳しい環境で使用できる材料の開発が必要である。また、究極の原子力エネルギーとして核融合炉への期待がある。核融合炉は、プラズマ閉じ込めに必要な機器と燃料・エネルギー生産に必要な機器等からなる複雑な複合機器の集合体であり、第4世代炉同様に様々な極限環境材料の開発が必要である。

これらの放射線照射に関連する極限環境材料は、狭い意味の原子力材料にとどまらず、例えば、加速器のターゲット材料や超伝導線材の開発にも不可欠である。また、放射線照射された

材料の微細組織の分析手法は、他の材料研究分野と比べても先を進んでいるものもあり、幅広い基礎科学への寄与が期待される。

[研究開発の動向]

・宇宙分野

宇宙用材料では、ロケット・衛星構造にはすでに幅広く複合材料が使われている。使用箇所による個別の要求に応じ、高強度、薄板・構造安定性、耐熱性、極低温用など、各種要求に特化した進化が進んでいる。固体ロケットのモータチャンバは、FW（フィラメントワインディング）-CFRP への移行がほぼ済んでいる。

複合材料による極低温燃料タンクは、再使用ロケット実現のためには必須であるが、運用機への適用は10年以上先になる見込みである。衛星構造、ロケット段間構造では、すでに主構造の複合材化が進んでいる。必要耐荷重に合わせた積層の最適化やプロセスの安定化による複合材特別係数の低減により、軽量化が進んでいる。また、Alハニカムに代わり、複合材ハニカムも使われ始めた。ここでは表皮のより一層の薄肉化による軽量化が進められている。これら複合材によりアンテナなどの精密大型構造を構築するため、熱および経年劣化に対する構造安定性確保の研究開発が、材料と構造の両面から進められている。

エンジン周りなどでは数多くの複雑形状部品が使われている。現在、それらは削り出しや鋳造などのプロセスで作られており、これらの信頼性確保とコスト削減が課題である。より信頼性の高い定量的な非破壊検査手法の開発と、プロセス管理で保証できる部分については逆に非破壊検査を省略するという工数低減の努力が続けられている。

・原子力分野

軽水炉は世界中で多くの発電炉が稼働しており、今後、稼働後40年を超える高経年化原子炉が世界的に増える。材料の健全性、特に中性子を中心とした放射線環境下での材料の健全性のメカニズムを明らかにし、それを基にした材料劣化の予測の研究が行われている。最も重要な対象の一つは、事実上交換不可能な圧力容器の照射脆化である。劣化現象は、照射脆化や照射促進応力腐食割れなど多様である。近年、高経年化原子炉の実機に装荷されている監視試験片を直接調べることによって、照射速度効果が明らかになりつつある。また、近年の3次元アトムプローブ法の発展により、微細な不純物・溶質の照射促進（誘起）析出の照射脆化への寄与が定量的に明らかにされ、原子力規制庁による安全審査基準にも反映されている。一方、多量の微小な照射欠陥集合体（転位ループ）の形成が、我が国で開発された新しい顕微鏡法（ウェークビーム(WB)-STEM法）によって明らかになり、その脆化への寄与の評価が進みつつある。

もう一つのトレンドは、福島第一原発事故を端緒とした事故耐性の高い材料の開発である。特に、現在の燃料被覆管材料であるZr合金よりも事故環境における安定性が高い材料として、酸化物粒子分散強化(ODS)鋼や炭化ケイ素(SiC)複合体材料などの開発が進められている。福島第一原子力発電所の事故においては、冷却材損失に伴いジルコニウム合金製燃料被覆管等の高温水蒸気酸化が進み、水素発生・爆発に繋がった。そこで、事故耐性燃料(ATF: Accident Tolerant Fuel)の開発が進められている。

超臨界圧水炉(SCWR)、高温ガス炉(VHTR)、ガス冷却高速炉(GFR)、ナトリウム冷却高速炉(SFR)、鉛冷却高速炉(LFR)、熔融塩炉(MSR)が第4世代原子炉(Gen-IV)として、

世界各国で開発が進められている。Gen-IVでは、従来の軽水炉よりも高温の冷却材を利用することによって、高い熱効率が得られることも特徴のひとつである。一方、高温において腐食性の高い冷却材を使用することに加え、中性子照射が重畳する環境に耐えうる構造材料の開発が必要となる。Gen-IVで用いるために開発が進められている構造材料や燃料被覆管材料の候補材として、その使用環境に応じて、Ni基超合金、酸化物分散強化合金、炭化ケイ素複合材料など、幅広い材料の開発が進められている。

核融合炉は、複合機器の集合体であり、様々な極限環境材料の開発が必要とされている。磁場閉じ込め核融合炉では、プラズマの閉じ込めに超伝導コイルで発生させた磁場を用いるため、超伝導コイルの冷却に必要な極低温環境と、熱エネルギー取り出しのために必要な高温環境が隣在する環境となる。現在フランスで建設が進む国際熱核融合実験炉 ITERにおいて、ニオブ-チタン合金やニオブ-ズ合金が超伝導線材として用いられるが、わが国独自のヘリカル型核融合炉では高温超電導材の使用が検討されている。超伝導コイルの耐照射性については、超伝導材そのものに加えて、従来の絶縁樹脂に代わるセラミックス絶縁材の開発や、コイルケースのために強度と靱性に優れた極低温構造材料の開発が必要である。ブランケット部は、核融合炉における燃料自己生産と熱エネルギーの発生を担う機器となる。ここで用いられる構造材料や機能性材料は、高エネルギー中性子の重照射を受ける。我が国で検討されている固体増殖水冷ブランケットは、低放射化フェライト鋼を構造材料、リチウム酸化物をトリチウム燃料増殖材、ベリリウム金属化合物を中性子増倍材とする構成である。一方、高い熱効率等の先進ブランケットについては、液体金属増殖方式が提案されている。構造材料については Gen-IV で検討されている材料の適用性に関する検討が進みつつあるが、基礎研究の段階である。ダイバータは、核融合反応で発生したヘリウム灰を排気するための機器であるが、高い熱流束を受けることが想定される。ITERにおいても 20 MW/m^2 という高い熱流束を定常的に受けることが想定されており、タングステンモノブロック方式と呼ばれるタングステンに銅合金配管を通した構造が使用される。炉心プラズマや周辺プラズマの制御によっては、より高い熱流束の非定常熱負荷を受けることも示唆されており、新たな材料開発や冷却概念の構築が必要である。核融合炉の制御に必要な磁場計測やプラズマ計測に用いられる材料についても、中性子照射環境下において機能する材料の開発が求められる。

原子力分野の計測手法として、照射損傷組織の分析は上記の様々な原子力材料研究に欠かせないが、その基本は透過電子顕微鏡法や走査電子顕微鏡などの電子顕微鏡である。今世紀に入ってから、収差補正技術が大きな進展を見せ、微細組織分析の高精度化が進展した。一方で、原理的に電子顕微鏡法では困難な対象も未解決問題として残っている。その一部を解決したものが、原子分解能に近い精度で元素の3次元マッピングを可能にする3次元アトムプローブ法である。これによって、微細な不純物・溶質クラスター、粒界偏析などの直接観察が可能になり、多くの照射材料の研究に適用されている。

一方、機械的特性に関しても先進的な取り組みが行われており、照射損傷組織の分析の高度化・高精度化が著しく進んでいる。照射損傷組織に対応するサイズでの機械的特性の変化を直接評価し、原子力材料の機械的特性の変化を更に高精度に予測するモデルの構築が進められている。近年、ナノインデンテーション法や集束イオンビーム加工装置を駆使することにより、マイクロからサブマイクロメートルサイズの試験片に対する機械的特性評価が可能となってきている。具体的には、マイクロピラー圧縮試験やマイクロ引張試験、ナノインデンテーション

硬さ試験等が照射材の評価に適用されており、超微小試験技術 (USTT : Ultra-Small Testing Technologies) として、照射による機械的特性変化の研究に用いられるようになっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

・宇宙分野

極低温燃料タンク用の極低温複合材料については、再使用ロケット実験機あるいは試験機での搭載が期待されている。タンクが複合材化しても、配管やエンジンは金属のままなのでこれらを接続する異材接合技術も必要になってきている。

エンジン周りの複雑な形状の部品に対する信頼性確保とコスト削減を抜本的に実現するプロセスとして、Ti 合金、SUS、Ni 基合金などで 3D 積層造形金属部材の開発が始まっており、5 年後には一部部品への適用が始まると期待される。

複合材構造および特殊工程部材の信頼性向上には、データベース構築とともに、非破壊検査技術の高度化が必須である。材料・構造の抜本的な信頼性向上のために、非破壊検査を設計段階から取り入れた統合化設計手法によりシステムとしての信頼性を高めることが行われるようになってきており、H3 ロケット開発に活用されている。この統合化設計手法は、材料技術だけでなく、設計や非破壊評価などとの連携が重要になってくる。

・原子力分野

最近の技術的なトピックスとしては、前述した WB-STEM 法の開発により、これまで困難であった微小な欠陥集合体の定量が可能になったことや、弱い歪み場を持った微小な転位ループなどを広い領域にわたって高精度で観察することができるようになったことがある。今後、本手法の当該分野での多くの適用が見込まれている。

機械的特性試験では、中性子照射試料が得られにくくなっている中で、特に重照射研究を必要とする核融合炉材や次世代原子力システムでの材料開発において、イオン照射法の活用が進められ、マイクロメートル程度の損傷領域に対応した超微小試験片による機械的特性評価法として USTT を用いた研究が進んでいる。また、計算機シミュレーションの進展により、従来は不可能だった粒界脆化の計算なども可能になり、実験結果を補う有用な知見が数多く得られている。

近年、欧米では、新しい概念の原子炉 (小型モジュラー炉等) や核融合炉について、国費や民間資金を受け入れたベンチャー企業による開発が進められている。これらの新概念のシステムに用いられる材料については、液体金属や熔融塩環境で用いられるため、耐照射性と耐環境性を併せ持つ材料の開発が必須と考えられる。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

・宇宙分野

直接的に宇宙への応用を狙ったものではないが、航空機向けの高強度・軽量材料、耐熱材料の開発を目指した戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 「革新的構造材料」(2014 年度～2018 年度) が進められている。詳細は研究開発領域「2.1.6 複合材料」に記載する。

・原子力分野

核融合分野では、世界最大のプロジェクトである ITER 計画が日、欧、米、中、韓、印、露の7極が協力して進められている。核燃焼プラズマの維持と、エネルギー取出しの実証を目的とする ITER は 2025 年頃のファーストプラズマ発生に向けて、現在フランスにおいて建設が進められている。また、ITER 後の発電実証に向けた核融合原型炉の設計と要素技術開発も各極において個別に進められている。国内では、原型炉設計合同特別チームが設置され、原型炉の設計活動を行っている。ITER 計画においても、その後の原型炉においても、核融合材料とその関連技術の開発は重要な位置付けとなっている。日欧協力の下での核融合研究開発に関する幅広いアプローチ (BA) 活動において、核融合炉材料の研究開発が進められている。この中で、国際核融合材料照射施設の工学実証・工学設計活動 (IFMIF/EVEDA) が実施されるとともに、その知見を活用して、核融合原型炉の材料開発に必要な先進核融合中性子源 (A-FNS) に係る研究開発も進められている。

国際的なファンディングの状況としては、軽水炉材料の照射劣化の研究に関しては、欧州では長年にわたり大型プロジェクトが続けられている (PERFECT プロジェクト、PERFORM-60 プロジェクトなど)。照射後実験施設への投資も活発で、フランスではルーアン大学に数十億円規模の新たな照射後実験施設が建設されている。米国では、NSF、DOE の様々なプログラムにより、基礎から実用研究まで、軽水炉から核融合炉まで、継続的に幅広いファンディングが続けられている。我が国では、文部科学省の「英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業」と「原子力システム研究開発事業」の二つがあり、その中で耐照射材料の研究が行われている。しかし、この数年で大幅な予算削減がされており、研究分野の存亡の危機に直面している。

(5) 科学技術的課題

宇宙分野における CFRP 複合材料、耐熱合金の主な科学技術的課題は構造材料全体の課題と同様であるが、材料の信頼性に関わる放射線照射下における材料劣化機構の解明と、それを考慮した劣化予測・寿命予測の手法の確立が必要である。精度の高い劣化の計測手法、予測手法の開発が期待される。また、宇宙応用では、多品種少量生産の材料・部品が多く、これらの信頼性確保とコスト低減の両立が課題であり、応用・利用範囲が拡大している 3D 積層型金属部材の開発、工法の確立が望まれる。

原子力分野では、軽水炉関連の材料研究において、構造材料の長期健全性のための材料劣化機構の研究や過酷事故耐性の強い材料開発などが重要な課題である。また、Gen-IV と核融合炉の材料技術開発の方向性に共通して、経済性に留まらない社会受容性に優れたシステムの実現に貢献することが求められる。すなわち、発電効率や設備利用率の向上という経済的な視点だけではなく、高い安全性はもとより将来のエネルギーを取り巻く社会の要請に応えられるような柔軟な設計が必要である。このような例として、一部で進められている水素社会の実現に貢献可能な原子力あるいは核融合炉による水素製造に関連する材料技術開発がある。

(6) その他の課題

欧米はメーカーや軍が主導して、大きなコンソーシアムを構築し、その中で部材や素材のメーカーが基礎データを取得してデータベースを作り、プロセス条件から組織や特性を予測するプ

プログラムを作っている。日本においても、各企業が独自のデータを取得するだけでなく、素材メーカー、重工メーカー、大学などでコンソーシアムを構築し、その中でデータを収集、活用し、予測計算ツールを作ることが課題であろう。

福島第一原子力発電所事故をきっかけに、軽水炉といえども産業界とは独立に、学术界が安全性の向上に資する研究に積極的に寄与することが重要になっている。また、中性子照射場の確保が喫緊の課題となっている。これは大学レベルの照射影響に関する基礎研究から、耐照射性材料の開発段階、そして安全性の実証段階に到るプロセスにおいて必要不可欠である。しかし、材料照射研究の可能な研究炉の再稼働や、廃炉が決まった JAEA の材料試験炉 JMTR (Japan Materials Testing Reactor) の後継などの問題があり、これらの研究炉の在り方に関しては日本学術会議より、2018年8月に提言がなされている。照射炉は世界的にも老朽化が進んでおり、照射材料研究の世界的な問題になっている。

基盤設備の消滅やファンディングの減少という厳しい状況により、人材育成は極めて危機的状況にある。文部科学省、経済産業省、原子力規制庁から人材育成用の資金が出されているが十分ではない。人材育成には、先端の研究に従事させることが本質的かつ不可欠であり、喫緊の対策が求められる。

(7) 国際比較

・宇宙分野

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	○	→	宇宙航空科学技術推進委託費の活用などで進められている。
	応用研究・開発	△	↑	産・学のコンソーシアム構築を目指した動きがある。日本政策投資銀行が2018年から宇宙関連産業支援に3000億円を投資。国内の宇宙関係ベンチャーは10社未満と少ない。宇宙専門の大手企業はない。
米国	基礎研究	◎	↑	「2017年度予算科学技術優先事項覚書」において9の重点領域が挙げられており、そのうちの「先進製造と未来の産業」において材料研究が進められている。「実験を重視しながら」も積極的に「計算機科学」を利用し、計算機上での劣化現象完全模擬というグランドチャレンジが活発になっている。
	応用研究・開発	◎	↑	2017年9月にDOEは米国産業界による極限環境下で使用する新しい材料や改良された材料の開発を加速するための新しい高性能コンピューティング(HPC4Mtls)イニシアチブを発表した。超高压、放射線、温度、腐食、化学環境、振動、疲労、ストレス状態などの極限条件に耐えることができる新しい材料や改良された材料を開発する。宇宙関係ベンチャー3000社。
欧州	基礎研究	◎	↑	「実験を重視しながら」も積極的に「計算機科学」を利用し、計算機上での劣化現象完全模擬というグランドチャレンジが進行している
	応用研究・開発	○	↑	航空機メーカーや空軍が主導して、大きなコンソーシアムを構築している(例えば、英国のNational Composite Center(NCC)とBristol大学の連携)。宇宙関係ベンチャー400社。
中国	基礎研究	○	↑	重点大学を中心に急速に論文数が増大している。
	応用研究・開発	◎	↑	23万人規模(日本は1万人弱)の大きな産業であり、大型衛星打ち上げ実績を重ねている。
韓国	基礎研究	○	→	第3次科学技術基本計画に掲げられた5大推進分野と重点国家戦略技術の中に宇宙発射体開発技術が上げられている。
	応用研究・開発	△	→	大きな動きは見られない。

・原子力分野

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	◎	→	新しい計測手法の開発、ODS 鋼開発など、我が国が世界を牽引しており、基礎研究のポテンシャルは高い。しかし、照射場の消滅やファンディングの減少などの要因が上昇トレンドを抑えている。
	応用研究・開発	○	↓	福島第一原発事故以降、特にここ数年の研究開発費の落ち込みが大きい。
米国	基礎研究	○	↓	幅広いファンディングにより高いレベルを維持しているが、人材は高齢化目立つ。特にトランプ政権では基礎研究へのサポートが減少している。
	応用研究・開発	◎	↑	新しい概念の原子炉（小型モジュラー炉等）など、国費や民間資金を受け入れたベンチャー企業による開発が進められている。
欧州	基礎研究	◎	→	核融合炉材料研究を中心に国費の投入も多く、活動は非常に活発である。
	応用研究・開発	○	↓	ドイツなどの脱原発国は衰退しているが、推進国のフランス、イギリス、ベルギーなどは高いレベルを維持している。しかし、フランス原子力庁は 2018 年 11 月に日本も参加する高速炉計画 ASTRID を凍結と発表している。
中国	基礎研究	△	↑	原子力材料を研究する優秀な大学生・大学院生が増加している。
	応用研究・開発	○	↑	まだ中国独自技術はほとんど存在しないが、発電の増加とともに、新型実用炉（AP1000 など）、試験研究炉、高速炉も建設され、急ピッチで上昇トレンドにある。固有安全性の高さから 2020 年目標に熔融塩炉（液体核燃料）の稼働を目指す。
韓国	基礎研究	△	→	第 3 次科学技術基本計画に記載は無い。
	応用研究・開発	△	→	KAERI（韓国原子力研究所）が主導しているが、国際的に顕著な活動は少ない。文在寅大統領の脱原発政策が継続中で衰退の方向にある。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

1) 第 5 次エネルギー基本計画, 2018 年 7 月 3 日,

http://www.enecho.meti.go.jp/category/others/basic_plan/pdf/180703.pdf (2019 年 2 月 12 日アクセス)

2) T. R. Allen et al., "Materials Challenges for Generation IV Nuclear Energy Systems," *Nuclear Technology* 162, no. 3 (2008) : 342-357. doi:10.13182/nt08-a3961

3) 文部科学省 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 核融合科学技術委員会 原型炉開発総合戦略タスクフォース (第 14 回) 配付資料、

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/078/shiryo/_icsFiles/fieldfile/2017/12/06/1398877_004.pdf (2019 年 2 月 12 日アクセス)

4) 浅井朋彦他「小特集 企業による核融合研究の最近の動向」『プラズマ・核融合学会誌』, Vol.93, No.1 (2107)

- http://www.jspf.or.jp/Journal/PDF_JSPF/jspf2017_01/9301SPall.pdf (2019年2月12日アクセス)
- 5) 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構「平成29年度原子力の利用状況等に関する調査(革新的原子炉の研究開発動向等に関する調査)報告書」
http://www.meti.go.jp/meti_lib/report/H29FY/000908.pdf (2019年2月12日アクセス)
 - 6) Kenta Yoshida et al., "Weak-beam Scanning Transmission Electron Microscopy for Quantitative Dislocation Density Measurement in Steels," *Microscopy* 66 (2017) : 120-130. doi:10.1093/jmicro/dfw111
 - 7) 日本学術会議 提言「研究と産業に不可欠な中性子の供給と研究用原子炉の在り方」(平成30年8月16日, 総合工学委員会 原子力安全に関する分科会)
 - 8) 谷合まどか「原子力人材育成の現状と課題」『立法と調査』2017.10 No. 393
http://www.sangiin.go.jp/japanese/annai/chousa/rippou_chousa/backnumber/2017pdf/20171002042.pdf (2019年2月12日アクセス)
 - 9) 文部科学省 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 核融合科学技術委員会(第13回)「核融合エネルギー開発の推進に向けた人材の育成・確保について(案)」(平成30年3月28日)
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/074/attach/1405147.htm (2019.2.12 アクセス)
 - 10) 経済産業省 製造産業局「航空機産業戦略策定以降の取組について」(平成28年12月26日).
 - 11) 邊吾一、石川隆司「先進複合材料工学」(東京:培風館, 2005) pp.169-174.
 - 12) Anubhav Jain et al., "Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation," *APL Materials* 1, no. 1 (2013) . doi:10.1063/1.4812323
 - 13) 小関敏彦「材料データとマテリアルズインテグレーション」『情報管理』59 (2016) : 165-171. doi:10.1241/johokanri.59.165
 - 14) 経済産業省 第1回「三次元造形技術を核としたものづくり革命プログラム(次世代型産業用3Dプリンタ等技術開発)」研究開発プロジェクト 中間評価検討会(平成28年3月29日)
 - 15) 倉谷尚志他「高信頼化に向けたロケットエンジン統合化設計手法」『日本航空宇宙学会論文集』54 (2006) : 403-412.
 - 16) 内閣府政策統括官(科学技術・イノベーション担当)「戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)革新的構造材料 研究開発計画」(平成30年4月1日)
 - 17) 中小企業庁「中小企業の航空機産業への参入のためのガイド～国際認証(Nadcap)制度の取得に向けて～」(2015年3月)

2.2.1 バイオ材料

(1) 研究開発領域の定義

生体組織や細胞、体液などの生体を構成する成分に接して利用される材料（バイオ材料）を対象とする研究開発領域である。近年の医療・健康ニーズの多様化や医療技術・機器の高機能化に伴い、バイオ材料には生体と材料の間で生じる相互作用を高度に制御することが求められている。生体/材料相互作用に起因する現象を経時的・定量的に理解するための計測・解析技術と、材料設計・合成・創製技術の進展を両輪に、生体/材料相互作用を能動的に制御するバイオ材料の研究開発が進むと期待される。

(2) キーワード

再生医療材料、人工臓器、DDS、足場材料、細胞外マトリックス、脱細胞化組織、ハイドロゲル、ナノ粒子、エクソソーム、Additive Manufacturing、3Dプリンティング、バイオプリンティング、生体適合性、分子認識、分子インプリンティング、リビングラジカル重合

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

世界に先駆けて超高齢社会に突入した我が国では、健康寿命（健康上の問題で日常生活が制限されることなく生活できる期間）と平均寿命の間にある約10年の開きが課題であり、個人々のQOL（Quality of Life）向上と、医療や介護にかかる社会保障費抑制の観点から、健康寿命をできる限り延ばすことが望まれる。健康寿命を延伸する上で必要な健康・医療技術の実現には、その基盤となるバイオ材料の研究開発が極めて重要といえる。人工臓器、再生医療、DDS（Drug Delivery System）、低侵襲治療、超早期診断、生体情報モニタリングなどの高度な健康・医療技術が提案されているが、これらの技術の実現には、いずれも生体と材料の間で生じる多様かつ複雑な現象を制御する機能をもつバイオ材料が必要である。このようなバイオ材料の創出に向けて、生体/材料相互作用のメカニズム理解に基づき、相互作用を能動的に制御する機能を持つバイオ材料を設計・創製することが求められている。

[研究開発の動向]

バイオ材料とは、細胞・タンパク質など生物由来であるか、人工物であるかに依らず、生体組織や細胞、体液などの生体を構成する成分に接して利用される材料の総称である。人工臓器など体内に埋植された状態で長期にわたり生体組織と接して使用される材料から、体外で診断に用いられる材料まで、その使用環境は幅広い。生体への侵襲度、使用環境、用途によって求められる性質・機能は異なるが、生体から異物認識されない生体適合性を有していることがバイオ材料の基本条件となっている。これまでに我が国では高分子材料を中心に優れた生体適合性材料が開発され、MPC(2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine)ポリマーやPMEA(poly(2-methoxyethyl acrylate))などのポリマー材料は人工股関節や人工肺、カテーテルのコーティング材料、化粧品など広く実用に供されている。また、近年では医療・健康ニーズの多様化や医療技術・機器の高度化に伴って、生体適合性に限らず、多様な機能がバイオ材料に求められるようになってきている。人工臓器、再生医療、DDS、低侵襲治療、超早期診断、生体情報モニタリングなどの高度な健康・医療技術を実現するためのバイオ材料が必要であり、研究開発が

進められている。

細胞の周辺環境を整え、組織・臓器の再生を誘導する再生医療材料、すなわち足場材料には、細胞の接着・増殖の促進、幹細胞の分化制御、適度な力学強度や多孔性などの性質・機能が必要である。加えて、生体組織の再生とともに分解・吸収される生体吸収性などが要求され、さまざまな機能を併せ持つ材料の研究開発がおこなわれている。足場材料の原料には、リン酸カルシウムや炭酸カルシウムなどの無機化合物、ポリ乳酸やポリグリコール酸、ポリカプロラクトン、コラーゲン、ゼラチン、キトサン、ヒアルロン酸などの生体吸収性高分子、脱細胞マトリックスなどが用いられている。これらの原料はそのまま、あるいは化学修飾によって機能を付与した後、足場材料として加工される。また、いくつかの材料を複合化し、それぞれの材料がもつ特長を相乗的に引き出すことも重要であり、有機・高分子化合物と無機化合物との複合化や、生体吸収性をもつ合成高分子と天然高分子などの複合化がおこなわれている。外部刺激への応答性や、抗菌効果、治療効果と組織再生促進効果を併せもつ高次機能足場材料も研究されている。足場材料には細胞が侵入して増殖するための空孔が必要であり、空孔の作製技術としては、ポローゲンリーチング法や相分離法、凍結乾燥法、エマルジョン凍結乾燥法、ファイバー融着法、ニードルパンチング法、エレクトロスピンニング法、3Dプリンティングなどの方法が用いられている。これらを単独ではなく複数組み合わせることにより、新しい構造や機能をもつ足場材料を創出することも試みられている。また、近年ではメカノバイオロジーが注目され、材料からの物理的な刺激が細胞の接着や遊走、分化誘導に及ぼす影響について理解が進み、足場材料を設計する上での重要な要素となっている。

高分子医薬、再生医療材料、DDS、バイオセンサーなどに用いられる材料として、生体物質と特異的に相互作用する合成高分子の研究開発が進んでいる。リガンドを結合させた高分子材料はターゲットとなるタンパク質を強く認識する分子認識能を有し、糖鎖を結合させた高分子によって、インフルエンザウイルス、志賀毒素、エボラウイルスといった感染症の病原体を認識する材料が開発されている。最近では、細胞成長因子を認識・補足する材料なども報告されている。また、抗体医薬の著しい市場拡大に伴って、抗体精製材料への需要が高まっている。抗体の精製には、抗体のFc領域（抗原結合性を持たない部分）と結合するプロテインAを固定化したアフィニティークロマトグラフィーが用いられるが、このプロテインAが高価であるために、抗体医薬やタンパク質医薬は非常に高額となっている。そこで産業界では、プロテインAの安定性を高め、安定かつ高密度に固定化することを目指して材料の改良・開発がおこなわれている。一方で、プロテインAを使用せずに精製をおこなうことが可能な合成高分子材料の基礎的検討も進められている。

リガンド無しでタンパク質を特異的に認識する機能をもつ合成高分子材料の研究開発もおこなわれている。分子インプリント法（MIP）はターゲットタンパク質を鋳型として高分子を重合し、ターゲットに合わせたナノ空間をもつ分子認識ポリマーを合成する手法である。バイオセンサーの分子認識部位や分離材料への応用が期待されている。また、タンパク質や抗体の機能を代替する材料としての検討もおこなわれており、MIPポリマーをナノ粒子化したものや、シリカ粒子と複合化したナノ材料を用いて、生体内での機能発現が検討されている。in vitro（生体外）での細胞染色の試験、in vivo（生体内）でのターゲットタンパク質の捕捉なども試みられている。

バイオ計測や診断に用いられる材料には、in vitro と in vivo の用途があり、in vitro の場合

は主にバイオセンサーとして用いられる。バイオセンサーを構成する材料の性質はセンサー部位と分子認識部位とで異なり、センサー部位では分子認識を信号化するために電気・光特性を持つ材料が使用されることが多い。汎用的なセンサー材料としては、ラテックス粒子（高分子マイクロ粒子）、金微粒子などがあり、金微粒子は光機能材料としてイムノクロマトグラフィーなどに用いられている。また、蛍光を発する量子ドットやカーボン微粒子を用いたセンサー・染色材料が研究されている。一方、*in vivo* で用いられる計測・診断用材料は、MRIなどのバイオイメージング・画像診断のためのプローブ用途が主であり、各種プローブ用材料の開発が進められている。*in vitro*、*in vivo* いずれの場合も、計測・診断用材料においては、確実な分子認識性を付与すること、非特異的な吸着を減じることが重要である。

生体内で用いられる治療用材料や人工臓器の開発には、生体の構造・機能と、そこで起こる反応の理解に基づいて、生体现象を制御する機能をもつ材料を設計する必要がある。例えば、骨の健全な再生には、生体骨の有する解剖学的部位に応じたコラーゲン/アパタイト結晶の異方性配列（骨基質配向化）などの構造と、その特性とを十分に理解した上で、材料を設計することが求められている。また近年、I型糖尿病の治療のため体内に埋植する人工膵臓の研究開発が盛んになっており、多能性幹細胞から作製したインスリン産生細胞をカプセル等に詰めたデバイスや、人工材料のみで作られた自立駆動型のインスリン供給デバイスなどが提案されているが、これらの実用化には生体と人工物の間で生じる相互作用についての更なる理解と、極めて高度な制御が必要である。なお、治療用途においては、侵襲の最小化、治療期間の短縮、治癒の質の向上など、患者のQOL向上の観点が必要であり、バイオ材料開発における重要なニーズとなっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

Additive Manufacturing (3Dプリンティング)

3Dプリンティングに代表される Additive Manufacturing が注目を集めている。特に金属材料では、鋳造、鍛造や削り出しといった従来の加工法では実現できなかった複雑な三次元構造の構築が可能になり、外部形状のみならず、内部形状や材質（金属組織や結晶方位）を制御することで高機能の発現が可能になっている。医療デバイス市場においては製品のサイズが比較的小型であること、高スループット化がそれほど求められないこと、製品の形状が患者によって異なる、いわゆるカスタム製品の潜在的需要が高いこと、生体機能の獲得に必要と考えられる複雑なマイクロ形状を実現可能であることなど様々な理由から、Additive Manufacturing は医療デバイスに革新をもたらす技術として期待されている。

バイオフィabrication、バイオプリンティング

細胞研究の進展に加え、マイクロ・ナノ加工技術およびマイクロ・ナノ流体デバイス技術の発展によって、実際の生体組織に近い3次元の構造・機能をもつ組織体の構築が可能になり、再生医療分野における応用に期待が集まっている。特に、原料と細胞を望みの位置に配置することが可能な3Dプリンティング（バイオプリンティング）の出現によって、世界的に研究者人口が急増し、2010年にはバイオフィabricationの国際学会（International Society for Biofabrication）が設立されている。バイオプリンティング法によって、卵巣や皮膚、大動脈弁、

骨と軟骨など、組織や臓器全体をプリンティングする試みが報告されている。

バイオプリンティングに用いられるバイオインクには、細胞の活性および機能に悪影響を及ぼさない原料を慎重に選択する必要がある。特に、生体親和性、粘度、可塑性、架橋などの性質が重要であり、コラーゲン、フィブリン、ゼラチン、ヒアルロン酸、アルギン酸、キトサン、ポリエチレングリコールなどが用いられている。これらのバイオインクは架橋の必要があり、アルギン酸はカルシウムイオンで、その他のバイオインクは化学架橋剤や酵素などを用いて架橋される。また、光反応性の二重結合基を導入し、紫外線照射で架橋する方法も用いられている。アルギン酸やキトサン、ポリエチレングリコールなどに細胞接着因子、細胞成長因子、脱細胞マトリックスを導入することにより、生理活性を付与したバイオインクも研究されている。

脱細胞化組織

ヒトあるいは動物由来の組織や臓器から細胞成分のみを除去し、細胞外マトリックス (ECM) を残した脱細胞化組織を足場材料として用いる研究が盛んになっている。脱細胞化組織は生体組織の構造と類似していること、細胞成長因子などの生理活性物質が豊富に存在することから、組織再生の高い促進効果が期待できる。既に製品化されているものに、脱細胞化したヒトの皮膚やブタの小腸粘膜下組織、ブタの膀胱などを用いた外科手術のパッチやシートなどがある。脱細胞化の方法には、物理的方法、化学的方法、酵素処理法に加え、脱細胞化剤を灌流して臓器ごと脱細胞化する方法が研究されており、近年、マウスやラット、ブタ、ウシ、ウマなどの動物の心臓、肝臓、肺、腎臓、食道を灌流法で脱細胞化したものを、各臓器再生の足場材料に適用した研究が報告されている。また、粉末状の脱細胞マトリックスを原料とするハイドロゲルを用いた、バイオコーティング材料、インジェクタブル材料、バイオインクなどが検討されている。

ヒト培養細胞を利用して脱細胞マトリックスを調製する研究も盛んになっている。高分子鋳型を用いて細胞を3次元培養した後、細胞成分と高分子鋳型を選択的に除去することで、脱細胞マトリックス材料が得られる。組織・臓器を用いる手法に比べ、品質管理と原料調達のしやすさにメリットがあり、患者自身の細胞に由来する自家脱細胞化材料を調製することも可能である。ヒト培養細胞由来のマトリックス材料によって、幹細胞が段階的に分化する過程や、組織発生の過程におけるマトリックスの変化を模倣した足場材料の研究が進み、ヒト骨髄由来の間葉系幹細胞の骨分化と脂肪分化におけるマトリックスの組成を同時に模倣した足場材料や、軟骨細胞への段階的な分化過程におけるマトリックス変化を模倣した足場材料などが報告されている。

複合足場材料

足場材料の機能をさらに高め、組織再生と同時に、組織・臓器の欠損の原因となる疾患の治療をおこなう材料の開発が進んでいる。例えば、足場材料に薬剤を導入することで、組織・臓器の再生促進に加えて、病気の根治、防菌、がん細胞を死滅させるなどの機能を併せ持つ材料の研究開発がおこなわれている。また、高い光熱変換効率をもつ金、銀、磁性酸化鉄などのナノ粒子を生体吸収性高分子やバイオセラミックスなどと複合化することで、光照射により発生する熱によってがん細胞を死滅させる機能をもつ足場材料の研究も進められている。ナノ粒子をがん細胞の抗体で修飾し、ターゲティング特性を付加することも試みられている。さらに、

化学治療の薬物と光熱変換のナノ粒子を同時に足場材料に導入し、化学療法・温熱療法・再生医療を一体化した複合足場材料も開発されている。

バイオ材料としての細胞外小胞

エクソソーム (exosomes) や微小小胞体 (microvesicles) などの細胞外小胞 (extracellular vesicles (EVs)) は、細胞が分泌するナノサイズの膜小胞であり、細胞間コミュニケーションや生体内のシグナル伝達を担っている。細胞外小胞に内包されている分泌細胞由来の様々なタンパク質や脂質、RNA のもつ機能の解明と、その機能をバイオマーカーや診断法、治療法に活用する研究が盛んにおこなわれている。細胞外小胞を分泌する細胞を操作することによって、ナノ粒子、レポーターシステム、ペプチド、薬物、機能性 RNA 分子を細胞外小胞に内包させることができる。また、分泌された細胞外小胞に、疎水性挿入や表面化学修飾、膜透過化処理などの方法で様々な物質や分子を導入することも可能である。最近では、iPS 細胞由来の心筋細胞が分泌する細胞外小胞を徐放するハイドロゲルパッチを作成し、ラットの心筋梗塞モデルに移植することで、不整脈の負担低減や左室駆出率の回復促進、心筋細胞アポトーシスの抑制などの効果が確認されている。バイオ材料としての細胞外小胞は新しい分野であり、細胞外小胞の有効な分離方法や組成の制御、投与方法を検討していく必要がある。

リビングラジカル重合を用いたバイオ材料の開発

リビングラジカル重合は 1990 年代に開発された高分子の精密合成法であるが、近年、その発展が一層顕著になり、バイオ材料への応用が進んでいる。リビングラジカル重合をバイオ材料に適用した研究に関する論文数は、ここ 5 年で急激に増加している。例えば、リビングラジカル重合による高分子の配列制御によって、タンパク質に対する相互作用の制御をおこなったことが報告されている。また、リビングラジカル重合では、ブロック共重合体を比較的容易に作ることができる。両親媒性のブロック共重合体は安定なミセルを形成することから、DDS 材料などへの活用が検討されている。さらに、リビングラジカル重合では、表面開始重合法などによって材料表面をポリマーで均一に修飾することが可能である。材料表面に高分子を固定化することで、細胞やタンパク質と基材の間に働く相互作用を変化させ、細胞接着などを制御する材料が開発されている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国 NIH (National Institutes of Health) においては、傘下の国立研究所 NIBIB (National Institute of Biomedical Imaging and Bioengineering) の下でバイオ材料に関する研究開発が進められている。また、将来の医療につながる新しい技術を生み出し、基礎研究から臨床研究まで広範に適用することを支援する BTRCs (Biomedical Technology Resource Centers) の枠組みで、組織工学、3D プリンティング、バイオプリンティング関連の新技术開発をおこなう CECT (Center for Engineering Complex Tissues)、ポリマー系のバイオ材料の研究開発をおこなう RESBIO (Integrated Technologies for Polymeric Biomaterials) などのセンターが置かれ、複数の研究組織によるコラボレーションが促進されている。NSF (National Science Foundation) においても生体/材料相互作用の制御に向けた基礎的な研究が進められており、主なプログラムとして、生体内の分子・細胞・組織に働く力に着目して新しい材料や

医療、農業技術を目指す CEMB (Center for Engineering MechanoBiology)、細胞と細胞の間、あるいは細胞と細胞周囲の環境に働く相互作用を理解・制御して細胞を使ったシステムを構築する CEBICS (Center for Emergent Behaviors of Integrated Cellular Systems) の2つの科学技術センター (Science and Technology Center : STCs) が挙げられる。

米国では早期から Additive Manufacturing の産業応用に関心を集めており、3D プリンティングに関して医療応用を含む複数のプロジェクトが NAMII (National Additive Manufacturing Innovation Institute、現 America Makes) により推進されている。日本でも Additive Manufacturing に関して、2014 年度より経済産業省による「三次元造形技術を核としたものづくり革命プログラム (次世代型産業用 3D プリンタ等技術開発)」が開始され、2016 年に技術研究組合次世代 3D 造形技術総合開発機構 (TRAFAM) が設立、国産 AM 装置の産業化の加速を図っている。また、2014 年から開始された内閣府主導の SIP (戦略的イノベーション創造プログラム) の課題の1つ「革新的設計生産技術」の中で、医療用 Additive Manufacturing の開発が進められている。

欧州ではバイオ材料の基礎研究から実用化までの研究戦略が Horizon 2020 のロードマップ「BIOMATERIALS FOR HEALTH ~ A Strategic Roadmap for Research and Innovation」によって提示され、これに基づいて関連分野へのファンディングが行われている。また、産学連携の促進が盛んであり、EPTN (European Technology Platform on Nanomedicine) において、ナノ材料の医療応用を推進するための産学における取り組みが支援されている。

(5) 科学技術的課題

3D プリンティングやバイオプリンティングに用いることのできる原料は、現状では種類が限られており、高次機能性と生体適合性を兼ね備えた材料の開発が望まれる。足場材料においては、高い気孔率 (材料の割合に対する空隙率) と同時に、十分な力学強度を担保する必要があるが、これまでの 3D プリンティング法で作製した足場材料では気孔率が十分ではない。高い気孔率と力学強度を兼ね備えた材料を作製するための材料技術およびプリンティング技術の改善が望まれる。また、細胞を 3 次元配置するバイオプリンティングにおける課題としては、プリンティング構造体の力学的な強度に加え、プリンティングの速度、細胞のバイアビリティの維持などが挙げられる。細い毛細血管ネットワークなどをプリンティングできるように、バイオプリンティングの精度を高める工夫も必要である。

生体との相互作用が望み通りに制御された材料や、生体の構造を適切に模倣した材料など、狙った通りの機能をもつバイオ材料を計画的に創出するためには、生体との相互作用を定量的に見積もり、材料特性を精密に制御することが必要である。例えば、臓器再生に必要なシグナル因子とその時空間的分布を明らかにした上で、臓器と材料との親和性を適切に制御し、さらにシグナルをプログラム通りに放出できるデバイスが開発されれば、体内においてその場で組織誘導的に臓器再生を行うことが可能になると考えられる。生体組織やその機能を理解した上で、それを引き起こす反応のメカニズムを経時的・定量的に理解すること、生体/材料相互作用の制御に直結する材料特性が制御可能な材料系を構築することが必要であり、これらを可能にする技術的基盤の構築が求められる。

(6) その他の課題

バイオ材料の研究開発には、さまざまな材料系の構築や計測・解析、生体分子や細胞を使った評価、小動物を使った前臨床試験、さらには臨床試験まで多くの工程が存在し、異分野・多分野の研究者が密に連携して進める必要がある。医工連携は特に重要であり、また、法規制もクリアしなければならず、研究開発には長期間を要する。異分野融合・医工連携に基づく研究開発を実施する上での課題としては、① 基礎研究段階からの連携体制の構築、② 長期にわたる共同研究開発を支える資金と、研究ステージごとの研究費の連続性の維持、③ 広範囲な設備を使用可能な環境と、その維持、④ 共通の知的好奇心・問題意識に基づく課題設定と、臨床応用に向かうまでの長期間にわたるモチベーション共有、などが挙げられる。中・長期にわたって異分野融合・医工連携に基づく共同研究チームを維持し、研究開発に注力することを可能にする枠組みの構築が求められる。

タンパク質、抗体、核酸、多糖といった生体高分子を活かした医薬品、診断薬などが新しい分野として現れ、かつ発展している。これを支える材料の開発が重要であり、生体高分子の精製プロセス、保存といった新しいニーズに対応していくことが必要である。米国では抗体医薬の導入にあたって、精製プロセスや評価法の確立などが包括的におこなわれており、現状で我が国は欧米に遅れを取ってしまっている。我が国も新しい分野に対して産学官で連携し、オールジャパンの取り組みを図ることが望まれる。

(7) 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	○	→	基礎研究のポテンシャルは世界のトップクラスを維持しているが、新規材料への挑戦が少ない。論文数でも近年、欧米、中国に水をあけられている。異分野融合・医工連携が十分でない。
	応用研究・開発	○	→	バイオ材料の基礎研究成果が実用に結びつきにくい。再生医療材料に関しては実用化研究がある程度進んでいるものの、まだ規模は小さく、研究開発を実施している企業も少ない。ただし近年、再生医療を促進するための規制と法律の整備が進んだことで、今後の加速が期待される。
米国	基礎研究	◎	→	バイオ分野への応用展開を視野に入れた材料研究が盛んである。再生医療材料の基礎研究で世界をリードし、様々なアプローチや異分野融合も図られている。新しい材料への挑戦、新しい概念の導入が常におこなわれ、研究予算も多い。
	応用研究・開発	◎	→	実用化を常に重視して、基礎研究と応用研究が密におこなわれている。基礎研究から起業・製品化につながる例が多い。大学発ベンチャーが多く存在し、応用研究を実施しやすい環境が整備されている。
欧州	基礎研究	◎	→	複数の研究機関による連携が上手くおこなわれ、種々の分野の研究者が連携してバイオ材料の基礎研究を盛んにおこなっている。高分子の先端技術のバイオ材料への応用にも成功している。
	応用研究・開発	◎	→	動物実験の敷居が比較的安く、臨床試験の受け入れも活発におこなわれ、新規材料の製品展開が早い。ただし、新しい分野を切り開くような材料や技術が多く出されているわけではない。スイスなど一部の国では、最先端に絞った研究開発、製品開発に成功している。

中国	基礎研究	○	↑	以前は欧米や日本に追従する研究が目立ったが、現在は世界トップレベルの研究が見られ、オリジナリティの高い成果も多く出されている。合成困難な材料、アッセイが困難なバイオ応用など、難易度の高い分野にも展開している。
	応用研究・開発	○	↑	基礎研究の段階から応用研究を取り込む努力がなされている。ベンチャー企業を持つ研究者が多い。製品展開をおこなうペースが早く、特に再生医療については展開が早い。製品のブランド価値は未だ低く、欧米に対して完全に対抗できていないわけではないが、大きな市場を自国内に有するという強みがある。
韓国	基礎研究	○	→	実用化志向の基礎研究が多くおこなわれている。オリジナリティのある研究成果は少ないが、近年、論文数は増加している。
	応用研究・開発	○	→	実用化を目指した応用研究が進んでいる。再生医療製品の開発に力を入れており、大学発ベンチャーも多い。製品の信頼性は高い。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Xiaohong Wang, Boaz Lloyd Rijff and Gilson Khang, "A Building-block Approach to 3D Printing a Multichannel, Organ-regenerative Scaffold," *Journal of Tissue Engineering and Regenerative Medicine* 11, no. 5 (2017) : 1403. doi:10.1002/term.2038
- 2) Monica M. Laronda et al., "A Bioprosthetic Ovary Created Using 3D Printed Microporous Scaffolds Restores Ovarian Function in Sterilized Mice," *Nature Communications* 8 (2017) . doi:10.1038/ncomms15261
- 3) Renata Kelly Da Palma et al., "Equine Lung Decellularization: A Potential Approach for in Vitro Modeling the Role of the Extracellular Matrix in Asthma," *Journal of Tissue Engineering* 9 (2018) . doi:10.1177/2041731418810164
- 4) Luca Urbani et al., "Multi-stage Bioengineering of a Layered Oesophagus with in Vitro Expanded Muscle and Epithelial Adult Progenitors," *Nature Communications* 9, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41467-018-06385-w
- 5) Elizabeth C. Stahl et al., "Evaluation of the Host Immune Response to Decellularized Lung Scaffolds Derived from α -Gal Knockout Pigs in a Non-human Primate Model," *Biomaterials* 187 (2018) : 93-104. doi:10.1016/j.biomaterials.2018.09.038
- 6) Martin T. Spang and Karen L. Christman, "Extracellular Matrix Hydrogel Therapies: In Vivo Applications and Development," *Acta Biomaterialia* 68 (2018) : 1-14. doi:10.1016/j.actbio.2017.12.019
- 7) Guoping Chen and Naoki Kawazoe, "Biomimetic Extracellular Matrices and Scaffolds Prepared from Cultured Cells," *Advances in Experimental Medicine and Biology* 1078, (2018) : 465. doi:10.1007/978-981-13-0950-2_24
- 8) Hongshi Ma et al., "3D-printed Bioceramic Scaffolds: From Bone Tissue Engineering to

- Tumor Therapy," *Acta Biomaterialia* 79 (2018) : 37-59. doi:10.1016/j.actbio.2018.08.026
- 9) Qingqing Yu et al., "Copper Silicate Hollow Microspheres-Incorporated Scaffolds for Chemo-Photothermal Therapy of Melanoma and Tissue Healing," *ACS Nano* 12, no. 3 (2018) : 2695. doi:10.1021/acsnano.7b08928
- 10) Gregor Fuhrmann et al., "Engineering Extracellular Vesicles with the Tools of Enzyme Prodrug Therapy," *Advanced Materials* 30, no. 15 (2018) . doi:10.1002/adma.201706616
- 11) James P. K. Armstrong, Margaret N. Holme and Molly M. Stevens, "Re-Engineering Extracellular Vesicles as Smart Nanoscale Therapeutics," *ACS Nano* 11, no. 1 (2017) : 69-83. doi:10.1021/acsnano.6b07607
- 12) Bohao Liu et al., "Cardiac Recovery via Extended Cell-free Delivery of Extracellular Vesicles Secreted by Cardiomyocytes Derived from Induced Pluripotent Stem Cells," *Nature Biomedical Engineering* 2, no. 5 (2018) : 293-303. doi:10.1038/s41551-018-0229-7
- 13) Lingxin Chen et al., "Molecular Imprinting: Perspectives and Applications," *Chemical Society Reviews* 45, no. 8 (2016) : 2137-2211. doi:10.1039/c6cs00061d
- 14) Maciej Cieplak et al., "Selective Electrochemical Sensing of Human Serum Albumin by Semi-covalent Molecular Imprinting," *Biosensors and Bioelectronics* 74 (2015) : 960-966. doi:10.1016/j.bios.2015.07.061
- 15) Stephanie Kunath et al., "Cell and Tissue Imaging with Molecularly Imprinted Polymers as Plastic Antibody Mimics," *Advanced Healthcare Materials* 4, no. 9 (2015) : 1322-1326
- 16) Yoshiko Miura, Yu Hoshino and Hirokazu Seto, "Glycopolymer Nanobiotechnology," *Chemical Reviews* 116, no. 4 (2015) : 1673-1692. doi:10.1021/acs.chemrev.5b00247
- 17) Qiang Zhang et al., "Sequence-Controlled Multi-Block Glycopolymers to Inhibit DC-SIGN-gp120 Binding," *Angewandte Chemie International Edition* 52, no. 16 (2013) : 4435. doi:10.1002/anie.201300068
- 18) K. Jono et al., "Controlling the Lectin Recognition of Glycopolymers via Distance Arrangement of Sugar Blocks," *Chemical Communications* 54, no. 1 (2018) : 82-85. doi:10.1039/c7cc07107h
- 19) Matthew J. Derry, Lee A. Fielding and Steven P. Armes, "Polymerization-induced Self-assembly of Block Copolymer Nanoparticles via RAFT Non-aqueous Dispersion Polymerization," *Progress in Polymer Science* 52 (2016) : 1-18. doi:10.1016/j.progpolymsci.2015.10.002
- 20) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略プロポーザル バイオ材料工学 ～生体との相互作用を能動的に制御するバイオアダプティブ材料の創出～」(CRDS-FY2018-SP-02) (2018年11月)
- 21) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「科学技術未来戦略ワークショップ報告書 生体との相互作用を自在制御するバイオ材料工学」(CRDS-FY2018-WR-04) (2018年9月)

2.2.2 ナノDDS・ナノセラノスティクス

(1) 研究開発領域の定義

ナノテクノロジーを活用して、診断用プローブや生理活性物質を患部等に選択的に送達するナノ薬物送達システム (ナノ DDS)、診断と治療を一体化・複合化した新たな医療技術であるナノセラノスティクス (nanotheranostics) の実現を目指す研究開発領域である。生体との相互作用を考慮したキャリアの設計によって、生理活性物質やプローブの時間的・空間的分布の制御、キャリアの体内動態や薬物による治療効果の可視化・評価を目指した研究開発が進められている。患部に特異的な診断・治療技術の実現が期待される。

(2) キーワード

高分子ポリマー、リポソーム、量子ドット、ナノ粒子、細胞外小胞、エクソソーム、核酸医薬、遺伝子編集、CRISPR/Cas システム、蛍光・発光イメージング、MRI、PET、ナノメディシン、EPR 効果、コンパニオン診断、ハイパーサーミア

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

DDS (Drug Delivery System) とは、薬物治療の最適化を目的に、必要な薬物を必要な量だけ、必要な時間に必要な部位で作用させるための工夫や技術のことである。特に、精密に設計されたナノ粒子やナノ構造体を用いて薬物送達をおこなうナノ DDS は、医薬品・医療技術開発におけるプラットフォームとして期待されている。近年、遺伝子編集技術をはじめ、医療に革新をもたらす可能性を秘めた多様な要素技術・材料が登場しているが、これらの新技術・材料の医療応用には、体内/細胞内動態を制御するナノ DDS の開発が必要となっている。

一方、セラノスティクス (theranostics) とは、治療と診断評価を一体化するとの概念である。中でも、セラノスティクスを実現するためにナノテクノロジーを活用したものがナノセラノスティクス (nanotheranostics) であり、ナノ DDS と密接に関係する。例えば、ナノ DDS の開発においては、動物実験で得られた成果が臨床試験での成績と対応しないことが問題となっている。特に、がんでは、動物実験とヒト臨床試験との差異の要因として、がん微小環境の多様性 (血管分布、繊維化、間質細胞の存在)、免疫反応と増殖の繰り返しによる複雑な時間的変性、血液循環時間の違いなどが指摘されており、この問題を解決するには、ヒト疾患の病巣における環境を正確に評価しながらナノ DDS による治療を進めること、すなわちナノセラノスティクスが必要である。

ナノセラノスティクスを技術的側面から見ると、体外診断 (分子・遺伝子)、高精度生体イメージングの造影剤、化学治療や核酸医薬の担体、内視鏡手術や画像下治療のマーカー、放射性同位体治療のキャリア、粒子線・ピンポイント放射線治療など、診断・治療双方における最先端技術を連携することが必要である。高度な技術の連携によって革新的技術が生み出され、薬剤や放射線治療に対する耐性化・難治化のメカニズム解明、併用療法の根拠の付与、治療のベストミックスの確立など、多くの医学研究の発展に貢献し、また、個別化医療の具体的な実施形態につながると期待される。

[研究開発の動向]

ナノ DDS は、低分子化合物から生体高分子まで、様々な生理活性物質の体内 / 細胞内動態を制御するナノテクノロジーである。がん治療においては、これまでに多様な抗がん剤が用いられてきたが、薬が正常な細胞にも作用して副作用が問題となる場合が多く、がん細胞だけに薬を作用させるナノ DDS の必要性が認識されてきた。また、最近では低分子医薬品以外に、核酸やペプチド、タンパク質などの生体高分子からなるバイオ医薬品が次世代医薬品として期待されているが、バイオ医薬品は一般に安定性が低く製剤化が難しいという課題があり、バイオ医薬品を安定に目的の部位で作用させるためのナノ DDS の開発が望まれている。さらに、近年、医療に革新をもたらす可能性を秘めた要素技術・材料が次々と登場している。例えば、遺伝子の調節を可能にする核酸分子、デザイン性に優れた遺伝子編集技術の CRISPR/Cas システム、近赤外生体イメージング / 光線力学療法を可能にするセラミックスナノ粒子、既存技術の数万倍の超高感度 MRI を実現可能な超偏極プローブなどが挙げられる。これらの技術・材料の医療応用には、標的となる臓器や組織、細胞へ到達する効率の大幅な向上が必要であり、体内 / 細胞内動態を制御するナノ DDS の開発が成否を握っている。

核酸分子や CRISPR/Cas システムを活用した将来のバイオ医薬の実現には、標的とする細胞内や、作用メカニズムによっては核内まで、効率良く導入する方法論を確立する必要がある。これまでに、リガンドコンジュゲート、脂質ナノ粒子、高分子ナノ粒子、無機ナノ粒子、さらにはウイルスなど様々なナノ DDS が報告されており、肝臓に対しては効率の良い核酸の送達達成されている。2018年8月には肝臓を標的とした世界初の siRNA 医薬 (トランスサイレチン型家族性アミロイドーシス治療薬 Patisiran, Onpatro®) が米国 FDA および欧州 EMA に承認されており、これには脂質ナノ粒子が使用されている。ただし、脂質ナノ粒子は投与後に炎症反応を惹起することから、より安全性の高いナノ DDS、例えば生体内での分解・代謝性に優れた材料の開発が今後の課題となっている。また、肝臓以外の標的組織、例えばがんや中枢神経系への指向性を有する核酸内包ナノ DDS の研究開発が今後ますます活発になると予想される。

また、核酸 (ガイド RNA) とタンパク質 (ヌクレアーゼ) の複合体 (リボヌクレオタンパク質, RNP) である CRISPR/Cas システムは、ガイド RNA の配列に応じて標的遺伝子を変えられることから、先行技術のジンクフィンガーヌクレアーゼ (ZFN) や転写活性化因子様エフェクターヌクレアーゼ (TALEN) に比べ、デザイン性に優れた革新的遺伝子編集法として注目されている。これまでに開発されたナノ DDS は、核酸もしくはタンパク質のいずれかを送達する目的で設計されたものが殆どであるが、今後は RNP を送達するナノ DDS の開発が進むと予想される。また、CRISPR/Cas システムは必ずしも RNP の形で送達する必要はなく、DNA やメッセンジャー RNA (mRNA) に遺伝子情報をコードさせて標的細胞内で発現させることが可能であり、この場合、核酸分子のみを送達すれば良いことから、現状はウイルスを用いて標的細胞内で CRISPR/Cas システムを発現させる手法が用いられている。ただし、ウイルスを用いた遺伝子編集治療は非常に高額になることが予想される上、長期間にわたる遺伝子発現によるオフターゲット効果や免疫原性による副作用などが懸念されるため、ウイルスの大量製造法や改変ウイルスの開発、さらには非ウイルス性ナノ DDS の開発が進められている。

ナノ DDS 開発における問題点に、動物実験で得られた効果と臨床試験の成績とが必ずしも一致しないことが挙げられる。その理由の一つは、疾患動物モデルと臨床におけるヒト患者で

は病理組織が異なっているためと考えられる。がんの場合、動物モデルとヒトとの差異として、がん微小環境の多様性（血管分布、繊維化、間質細胞の存在）、免疫反応と増殖の繰り返しによる複雑な時間的変性、血液循環時間の違いなどが指摘されている。また、担がんモデルマウスでは、がん組織周辺の血管およびリンパ系が未発達であることから、数十ナノメートル径のナノ粒子の腫瘍血管透過性および腫瘍組織集積性が亢進することが知られ、これは Enhanced Permeability and Retention (EPR) 効果として、これまでがんを標的とするナノ DDS 開発における重要な設計指針となってきた。しかし、モデルマウスで優れた効き目を示したナノ DDS が、臨床試験で成績が振るわなかったことから、ヒトのがんには EPR 効果が生じない可能性が指摘された。その後、PET プローブで標識されたナノ DDS を用いた体内動態評価によって、ヒトがん組織にも EPR 効果の生じることが確認されたが、ナノ DDS の腫瘍組織集積効率は患者によって、さらには同一の患者であっても腫瘍や転移の部位によって異なることが明らかになった。

ヒト患者で有効なナノ DDS を開発するには、標的とする病理組織の特徴を十分に把握した上でナノ DDS を設計すること、適切な疾患モデルを用いて機能検証をおこなうことが必要である。がん研究においては、従来のがん細胞株移植 (Cell line-Derived Xenograft, CDX) モデルではなく、がん患者由来のがん細胞移植 (Patient-Derived Xenograft, PDX) モデルを使うことで、より精度の高い治療効果の予測が得られると報告されている。また、適切な疾患モデルを評価系として利用することに加え、サイズなどの物性値を精密に調整したキャリアの開発が必要である。さらに、生理活性物質を用いて腫瘍組織の構造を改変すること、例えば一酸化窒素により腫瘍血管壁の隙間を拡張することで、ナノ DDS の集積性を高める方法も検討されている。

一方、セラノスティクスは治療 (therapy) + 診断 (diagnostics) であり、2000 年頃に医学文献データベース (PubMed) に初めて用語として登場した新しい概念である。2010 年頃から研究報告が急増し、2011 年にはその名を冠した学術誌 “Theranostics” が創刊、2017 年からは姉妹誌 “Nanotheranostics” も刊行され、世界的に活発な研究開発分野となっている。ナノセラノスティクス、すなわちナノテクノロジーを活用したセラノスティクスは、分子イメージングに代表される高精度な非侵襲的・生体イメージング技術および各種ナノ造影剤・プローブ技術の発展とともに進展している。とりわけ 100 μm 以下の空間分解能を実現する高解像度 MRI、pM 濃度を検出する高感度 PET、多様なバイオマーカーに対応する反応性を持つ蛍光・発光イメージング、超音波診断技術・光音響技術などのハードウェア技術による解像度の向上が大きく寄与している。また、ナノセラノスティクスの基本形は、ナノ粒子などのキャリアに治療要素と診断要素を同時に搭載することであるが、単に同時に搭載するだけでは各要素の至適濃度の差異、病巣に集積する時間軸の差異、排出が遅延することによる毒性リスク等の問題が生じるため、合目的な組合せの必要性が共通理解となっている。すなわち、必ずしも完全に一体化する必要はなく、共通のプラットフォームを用いて、各要素を最適化することが重要であるとの考え方が主流になりつつある。

がんの場合、近年の医療技術の進展によって初発がんは寛解に至る例が増えたが、最終的に変化・転移し、治療に対して耐性化することで治療手段が無くなってしまふ。刻一刻と姿を変え、隠れ、バリアを張るがんに対して、どのように追跡し、弱点を見つけバリアを壊して治療効果を得るかという点が核心的な問題であり、それには個々の状態に合わせた動的な観察と介

入が必要である。生体内で、隠れたがんを発見し、その難治性を分析するには、分子・細胞レベル、組織・微小循環レベルというマルチスケールを統合的に観察できる最先端の計測・分析技術と、その情報を有効に生かした治療技術が必要であり、ナノセラノスティクスによって両者が高度に連携することで、変化するがんを詳細かつ即時的に追跡し対応することが可能になると期待される。血液でのがん分析や、ナノ薬剤動態を予測する造影剤、がんの種類や特性を分析するセンサー、がんの特性に応じた最適な治療を同時に実現する複合的なプラットフォームとして、ナノセラノスティクスは期待されている。

また、診断で病変を検出し、その場で治療を行う手法として、磁性ナノ粒子を用いて MRI や MPI で早期がんを検出し、磁場を印加して温熱療法を行う磁気ハイパーサーミアを組み合わせ合わせた方法も提案されている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

コンパニオン診断造影剤・コンパニオン診断プローブ

がん臨床におけるナノ DDS の有用性に関して、個々の病巣で生じる EPR 効果や治療効果にばらつきのあることが指摘されており、「体内動態と集積性の評価 (不送達のリスク)」と「がん細胞に対する薬効の評価 (耐性化のリスク)」を合わせて実施する必要がある。治療に用いるナノ DDS とほぼ同じ組成とサイズを有するキャリアと、生体イメージングで検出可能な造影剤・プローブを組み合わせたものをコンパニオン診断造影剤またはコンパニオン診断プローブと呼び、高精度な生体イメージング法と合わせて用いることで、ナノ DDS の病巣への集積予測や薬効予測、あるいは骨髄など副作用が生じやすい部位へ集積の有無を確認できる。事前あるいは治療中に、体内動態と薬効の両方を可視化し評価することが可能なナノセラノスティクスの一形態である。高分子ミセル、酸化鉄微粒子、リポソーム、PLGA など臨床応用可能な材料を中心に、キャリアに適用可能な粒子の開発が進められている。

ナノ粒子センサー、量子技術

MRI や蛍光・発光イメージングにおいて、ナノ粒子をセンサーとして利用し、生体内の特定の環境で信号を ON/OFF 制御することが可能になっている。酸化マンガン粒子やリン酸カルシウムのナノ粒子を使って細胞内外や腫瘍内の低 pH を描出する研究、リポソームからの薬剤放出を MRI の信号強度の上昇でとらえる研究などが報告されている。また、量子技術の活用が進み、ナノダイヤモンドやナノシリカ内部の格子欠損に窒素などを注入して蛍光センサーとする技術、ナノダイヤモンドに含まれる ^{13}C を対象に、MRI の信号強度を数万倍まで引き上げる超偏極技術などが開発されている。ナノダイヤモンドは偏極寿命を延長させる効果を持つことから、放射性同位体を使わずに、高感度かつ高解像度で生体内を追跡できるプローブとして注目されている。

核酸医薬

核酸医薬の歴史はアンチセンス核酸 (ASO) が報告された 1978 年にまで遡るが、医薬品としての実用化は長年に渡り苦戦を強いられてきた。初の核酸医薬である Viravene® (CMV 性網膜炎治療薬) が 1998 年に米国で承認されて以来、2018 年 8 月までに承認された主な核酸

医薬は7品目であり、そのうち4品目が2016年以降に承認されたものである。2018年8月に米国FDAおよび欧州EMAにより承認されたOnpattro®は、世界初のsiRNA医薬であり、脂質ナノ粒子によるナノDDSが活用されている。この2～3年で核酸医薬の承認が続いた理由としては、核酸化学の進歩、新たな疾患原因遺伝子および治療メカニズムの発見、DDS技術の改良とメカニズムの解明などの複合的要因が考えられ、核酸医薬の開発は今後さらに活性化すると予想される。

CRISPR/Cas システム

ガイドRNAの配列に依存して2本鎖DNAを部位特異的に切断できるという2012年の報告以来、CRISPR/Casシステムは新たな遺伝子編集ツールとして瞬く間に世界へ広まった。現状は分子生物学用ツールとしての利用が主であるが、遺伝子治療薬としての応用が期待されている。2017年には、ヒトの着床前胚にCRISPR-Cas9を導入することで、遺伝子変異を修正可能であることが報告されている。CRISPR/Casシステムの医療応用に向けた課題は標的以外のDNAを切断してしまうオフターゲット効果の回避と、標的細胞への導入であり、これらの課題解決に向けたナノDDS開発が注目される。中でも、CRISPR/CasシステムをコードしたmRNAの送達は、安全性の面から最も期待されている。

血液脳関門 (Blood Brain Barrier, BBB)

脳と血液の間の物質移動を制限するBBBの存在によって、脳腫瘍や脳神経系の疾患部位へ薬剤を到達させることは極めて困難である。BBB通過のためのナノDDSは、特にアカデミアにおいて、がんの次の標的として大きく注目されている。現在、大きく分けて次の3つの方法論が検討されている：1) 脳血管内皮細胞内をトランスサイトシスにより通過するリガンド分子搭載ナノDDS、2) 添加物ないし外部刺激によりBBB(脳血管内皮細胞をつなぐタイトジャンクションなど)を一時的に開放する方法、3) 血流を介さずに脳へと到達させる投与方法。1)はQOLに優れる方法論であるが、効率が低いことが検討課題となっている。2)は通過する物質の選択性に乏しいことが予想され、安全性が懸念されている。3)については、肝初回通過効果を回避でき、かつ脳内へ薬物をデリバリーできる経路として鼻腔内投与が注目されているが、マウスとヒトでは明確に異なる点があるため、設計の段階で注意を払う必要がある。

OTN-NIR 蛍光イメージング

ナノDDSの体内/細胞内動態を追跡する方法として、アカデミアの研究では主に蛍光標識が用いられるが、通常の蛍光色素では皮膚透過性が低く、組織深部の観察は困難である。近年、皮膚(生体組織)透過性の高い1000nmを超える近赤外光(Over-Thousand Nanometer-Near InfraRed, OTN-NIR)を利用した蛍光イメージングが注目され、セラミックナノ粒子などを用いたOTN-NIRプローブやその検出系の開発が進んでいる。OTN-NIRプローブ開発の課題としては、より毒性の低い材料を用いること、生体から速やかに排出されるように構造設計することが挙げられる。

エクソソーム

細胞外小胞(Extracellular Vesicle, EV)の一つであるエクソソームに関する研究が世界的

に盛んになっている。エクソソームは細胞が分泌するエンドソーム由来の 30-100nm のベシクルで、特定の細胞由来の細胞膜タンパク質や核酸を有し、細胞間の長距離コミュニケーションを担っている。特定の細胞内へ核酸や糖タンパク質などを送達する機能を元来搭載していることから、ナノ DDS としての利用に関心が高まっている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国では過去 10 年以上にわたり、National Nanotechnology Initiative や NCI (National Cancer Institute) の Alliance for Nanotechnology in Cancer など様々な施策によってナノ DDS に関する研究開発が支援されている。NCI の Nanotechnology Characterization Laboratory では IND 申請 (米国における治験届け出) に必要な諸特性の解析をサポートしており、多くのナノ DDS の解析実績と National Institute of Standards and Technology との共同開発による評価技術の確立により、ナノ DDS の有用性と安全性の評価技術の進歩に大きく貢献している。また、ナノセラノスティクスに関して、NIH (National Institutes of Health) では、NIBIB (National Institute of Biomedical Imaging and Bioengineering) の分子イメージング・ナノメディシン研究室に Theranostic Nanomedicine セクションという部門があり、研究を進めている。

欧州では、2014 年から 2020 年までの科学技術イノベーション推進の枠組みである Horizon 2020 の下、ナノテクノロジーは萌芽未来技術 (Future and Emerging Technologies, FET) の 1 つと位置付けられ、ナノ DDS やナノセラノスティクスを含むナノメディシン研究を ETPN (Nanomedicine European Technology Platform) が支援し、産業化へつなぐ体制になっている。各国による取り組みもおこなわれ、例えばスペインには NanoBioAp (Nanoparticles for Bio-Applications) という政府の支援による研究クラスタが存在し、主なテーマとして磁性材料、バイオセンサー、DDS、ハイパーサーミアが掲げられている。NanoBioAp はスペイン各地の研究者をつなぐネットワークとして働き、異分野融合に基づく各研究グループが精力的に研究を推進すると共に、シンポジウムを開催して情報交換を図っている。

日本では、川崎市のナノ医療イノベーションセンター (iCONM) を拠点として、ナノ DDS やナノセラノスティクスを含むナノ医療に関する産学連携が進んでいる。中心プロジェクトとして文部科学省・革新的イノベーション創出プログラム (COI STREAM) 「スマートライフケア社会への変革を先導するものづくりオープンイノベーション拠点」が進行中であり、多くの大学、研究機関、企業が参画している。また、AMED (日本医療研究開発機構) 「革新的バイオ医薬品創出基盤技術開発事業 (2014-2018)」「次世代がん医療創生研究事業 (2016-2021)」「遺伝子・細胞治療研究開発基盤事業 (2018-2020)」などの事業においてナノ DDS やナノセラノスティクスに関連する研究開発がおこなわれている。JST では、CREST 「細胞外微粒子に起因する生命現象の解明とその制御に向けた基盤技術の創出」領域 (2017-2024) において、ナノ DDS やナノセラノスティクスの基盤となる研究が推進されている。また、2017 年に開始された JST 未来社会創造事業の探索加速型「世界一の安全・安心社会の実現」領域においてもナノセラノスティクスに関する研究が採択されている。

(5) 科学技術的課題

多くのナノ DDS は動物実験レベルで非常に優れた成果を挙げているが、臨床の現場での有

効性に関しては明らかになっていない点が多い。このギャップを埋めるための方法論として、評価と治療を同時に進めるセラノスティクス型のナノ DDS の開発、すなわちナノセラノスティクスが重要である。ただし、重要な分野でありながらも研究開発が十分に進んでいない面があり、その理由の1つとして、イメージング・診断には大型ないし高額な装置が必要であり、アカデミアの研究テーマとしてはハードルの高いことが挙げられる。また、多分野の高度な技術を活用することがナノ DDS・ナノセラノスティクスの研究開発には必要であり、アカデミア間、企業間、さらには産学をつなぐ複合的な研究開発体制が求められる。

2012年の CRISPR/Cas システムによる遺伝子編集技術の登場、2016年以降の核酸医薬の連続承認、2017年の Car-T 細胞による *ex vivo* 遺伝子治療の承認、2018年の siRNA 内包脂質ナノ粒子の承認などを受け、遺伝子・核酸治療に大きな注目が集まっている。これらを次世代の医療技術として発展させるためには、核酸 (DNA、mRNA、siRNA、ASO、RNP など) を臓器 / 組織および細胞選択的に送達する技術が必要である。肝臓に対してはある程度効率の高いデリバリー技術が得られており、次の課題は低毒性 / 低炎症性デリバリー技術の開発である。また、肝臓以外の標的臓器、とりわけ脳などの中枢神経系や心筋・骨格筋に対する送達技術の開発が求められる。

エクソソームの生物学的研究は近年急速に進展し、ナノ DDS や再生医療に向けた応用研究もここ数年の間で世界的に競争が激化しているが、生体由来で多様性のあるエクソソームの分離や不純物の除去、構造解析、機能解析など多くの技術的課題が残されている。また、エクソソームの製造技術や品質管理、標準化において、我が国が優位性を示していくことが、将来の医療応用に向けて、国際競争力強化の観点から重要である。

ナノセラノスティクスの基盤技術の一つである MRI において、臨床用の造影剤には T1 短縮効果の高い Gd 錯体が主流となっているが、Gd 製剤は近年その副作用や脳への集積、環境への影響などが問題視され、将来的に使用できなくなる可能性が高い。ナノ粒子によって感度を上昇させた造影剤など、代替造影剤の開発が望まれる。

(6) その他の課題

本研究開発領域の推進は単一のディシプリンでは困難であり、多分野の技術、多数の機材や装置が必要となるが、日本では広範囲に異分野連携をおこなう体制の不足していることがボトルネックとなっている。以前に比べれば産学の両面において連携が進んでいる部分もあるが、未だ組織内の守秘性や短期組織利益のみを考える方向性、単一学問分野での成果が重視される傾向が見られ、制度面、ファンディング面、知財面などの課題を複合的に打開する方策が求められる。例えば、ナノプローブと画像下治療、ナノテクノロジーと分子イメージング、ナノテクノロジーと放射線治療など、既に双方の研究分野が単独で確立し運営されている複数分野 (多くは所轄官庁も異なる) に対して、適切なインセンティブを与える事で連携を促すことが望まれる。異なる分野の連携、治療と診断部門の連携など、これまで交わることの無かった部門、とりわけ、それぞれが世界最先端の研究部門が交わることで、真に国際競争力を持つイノベーションが期待できる。また、複数組織における知財管理や製品化への企業連携を視野に入れ、簡便にオープンイノベーションに参加できる受け皿 (研究機関の自由連携協定のような枠組) について検討していくことが望まれる。

(7) 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	◎	→	リポソーム、高分子ミセル、ナノゲル、PLGA等のナノ粒子やエクソソーム、炭素材料、量子ドットなど多様な素材によるナノ基盤技術を持つ。核酸化学や抗体医薬の開発に関する優れた知見と技術力を有している。蛍光、MRIによるバイオイメージングのためのナノDDS、超音波などの物理学的エネルギーを利用したナノセラノスティクスなどの研究開発も進展している。イメージング技術も各モダリティにおいて国際的に優れた要素技術を有し、基礎研究は国際的に高い水準にある。
	応用研究・開発	○	↑	AMEDの設立に伴い、出口を見据えたナノDDSの研究開発が活性化しつつある。リポソーム、高分子ミセル、ナノゲルを用いたナノDDSの実用化に向けた研究開発は、着実に進んでいる。蛍光やMRIを中心とした生体イメージングへの応用例が多くあり、独自性と水準の高い研究開発が報告されている。ただし、欧米に比較して取り組む大学・研究機関や人員が小規模であり、産学連携や異分野間の融合、知財の適切で有効な活用など、総量として改善の必要がある。基礎研究を医療技術の事業化へ運ぶ上での敷居も欧米に比して高い。
米国	基礎研究	◎	↑	大学・公的機関における研究レベルは非常に高い。多数の大学や研究機関でナノ粒子の高度な要素技術が開発されており、生体イメージングへの適用例も、質・量共に優れている。最近では中核的な大学や研究機関だけでなく、地方大学へ裾野が拡大している。
	応用研究・開発	◎	↑	基礎研究から前臨床、臨床応用への道筋が明瞭で迅速に展開されている。一つの研究室に、世界中から複数分野の専門家を集めて雇用し、分業化する体制が確立している。試薬や機器メーカーも多数存在し、ベンチャー企業とそれを支えるリスクマネーが循環することで商品化までの速度が速い。NIHを中心としたサポート体制も整っている。長年にわたりナノDDS製剤の実用化に取り組んでいる。例えば抗がん剤バクリタキセル/ヒト血清アルブミン複合体であるAbraxane® (Abraxis BioScience (現在はCelgeneに買収)) は日本でも2010年に承認されている。また、核酸医薬の実用化にもいち早く注力し、Ionis Pharmaceuticalsは承認済みアンチセンス核酸医薬5品目中4品目を開発している。2001年のsiRNA報告以降すぐに設立されたベンチャーAlnylam Pharmaceuticalsは、2018年に世界初のsiRNA医薬 (siRNA内包脂質ナノ粒子) の承認を得ている。セラノスティクスという言葉はあまり使われていないものの、新しい検査方法や治療法が目覚ましく成長している。
欧州	基礎研究	◎	→	リポソーム、ナノ微粒子、高分子化薬物等の概念の多くは欧州に生まれ、古くからDDS技術の開発を世界的にリードしてきた。科学技術イノベーション推進の枠組みとして設定されたHorizon 2020において、ナノDDS技術の発展や産業振興のための研究を支援するETPNを設置するなどナノDDSを体系的に推進する体制が構築されている。ドイツを筆頭に、オランダ、英国、フランス、イタリアなどでナノ粒子の高度な要素技術が開発され、生体イメージングへ応用する研究も質・量共に優れている。アイデアが出てから実行し、結果を出すまでのスピードが早い。
	応用研究・開発	◎	↑	各国で得意分野の違いはあるが、EU全体として研究費のサポート体制が充実し、基礎研究の成果を前臨床研究に確実に移行させている。ETPNが技術を産業化へ繋ぐ役割を果たしている。スペインのプロジェクト、ポルトガルのプロジェクトに勢いがあり、研究グループ間の協力体制も積極的で医工連携が効率よく機能している。ドイツのフィリップスやブルカーをはじめとするヨーロッパの大手メーカーがイメージングや治療に関する装置開発を進めている。

中国	基礎研究	◎	↑	研究者の幅が広く、国内でのレベル差が大きい。中国科学院を始め優秀な研究者が多い。国家がナノメディシン分野に莫大な研究費を投入し、ナノ DDS に関連する多くのプロジェクトが進められている。北京に中国科学院と中国教育省が共同で設置した National Center for Nanoscience and Technology (NCNST) があり、ナノテクノロジーとナノメディシンに関するシンポジウムも多く開催されている。ナノ DDS およびナノセラノスティクスに関する非常に多くの論文が中国から発表されており、国際誌 Theranostics の掲載論文も中国によるものが圧倒的に多い。北京大学医学部の Medical Isotopes Research Center で PET/SPECT によるがん治療をターゲットとしたイメージング研究が活発に行われている。
	応用研究・開発	○	↑	多数の大学・研究機関から応用研究が報告されている。その独創性は必ずしも高くないが、研究報告数は多く、技術水準も向上している。産業化に関して体系的な動きは目立たないが、臨床研究へのハードルが低く、実施や製造販売などを迅速に進めることが可能である。ナノ DDS 製剤を国内で開発・販売している企業が複数ある。
韓国	基礎研究	○	↑	KAIST, ソウル大学、延世大学などを中心に研究水準は高い。多様なナノ粒子が開発され、欧米からの帰国者を中心に活発に研究が進んでいる。高解像度での in vivo イメージングも達成されている。また、韓国ではノーベル賞受賞者の輩出を目指して Institute for Basic Science (IBS) プログラムが実施されており、8 億円/年の研究費が無期限で 30 拠点に分配されている。このうち、2 拠点がナノ DDS やナノセラノスティクスに関連する研究領域である。IBS は将来的には 50 拠点に増加する計画である。
	応用研究・開発	○	↑	多数の応用研究が精力的に発表されている。Korea Basic Science Institute (KBSI) では海外の研究者を優遇してリクルートする体制を整備し多国籍体制での研究推進が行われている。ソウル近郊に多くの研究機関や大学、現代やサムソン等の大規模医療センターが集約化され、一定の連携体制が確立されている。KAIST が位置するテジョン付近の産業研究団地では、ベンチャー企業の発展がめざましく、工学技術のほかバイオテクノロジーも勢いを増しており、開発された成果を直接、商品化する取り組みが進んでいる。また、ナノ DDS 製剤を国内市場に出した実績のある企業が存在する。抗体医薬の開発 (バイオシミラー) に注力する会社が設立されており、今後の動向が注目される。

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Xiaoyuan Chen and Stephen Wong, ed, *Cancer Theranostics* (Elsevier, 2014) .
- 2) 杉林堅次 監修『ドラッグデリバリーシステム：- バイオ医薬品創成に向けた組織、細胞内、核内送達技術の開発 -』(シーエムシー出版, 2018) .
- 3) 落谷孝広 監修『パラダイムシフトをもたらすエクソソーム機能研究最前線：シグナル伝達からがん、免疫、神経疾患との関わり、創薬利用まで』(NTS, 2017) .
- 4) 丸山厚 編「in vivo イメージングとセラノスティクスの新展開」『Drug Delivery System』33 (3) (2018) .
- 5) Yasuhiro Matsumura and Hiroshi Maeda, “A new concept for macromolecular therapeutics in cancer chemotherapy: mechanism of tumorotropic accumulation of

- proteins and the antitumor agent Smancs," *Cancer Research* 46, (1986) : 6387.
- 6) Grant H. Petersen et al., "Meta-analysis of Clinical and Preclinical Studies Comparing the Anticancer Efficacy of Liposomal versus Conventional Non-liposomal Doxorubicin," *Journal of Controlled Release* 232 (2016) : 255. doi:10.1016/j.jconrel.2016.04.028
 - 7) Helen Lee et al., "⁶⁴Cu-MM-302 Positron Emission Tomography Quantifies Variability of Enhanced Permeability and Retention of Nanoparticles in Relation to Treatment Response in Patients with Metastatic Breast Cancer," *Clinical Cancer Research* 23, no. 15 (2017) : 4190. doi:10.1158/1078-0432.ccr-16-3193
 - 8) H. Cabral et al., "Accumulation of Sub-100 nm Polymeric Micelles in Poorly Permeable Tumours Depends on Size," *Nature Nanotechnology* 6, no. 12 (2011) : 815. doi:10.1038/nnano.2011.166
 - 9) Hak Soo Choi et al., "Renal Clearance of Quantum Dots," *Nature Biotechnology* 25, no. 10 (2007) : 1165. doi:10.1038/nbt1340
 - 10) J. A. Doudna and E. Charpentier, "The New Frontier of Genome Engineering with CRISPR-Cas9," *Science* 346, no. 6213 (2014) . doi:10.1126/science.1258096
 - 11) Sneha S. Kelkar and Theresa M. Reineke, "Theranostics: Combining Imaging and Therapy," *Bioconjugate Chemistry* 22, no. 10 (2011) : 1879-1903. doi:10.1021/bc200151q
 - 12) Daiki Shigeoka et al., "Functionalization and Magnetic Relaxation of Ferrite Nanoparticles for Theranostics," *IEEE Transactions on Magnetics* 54, no. 11 (2018) : 1-7. doi:10.1109/tmag.2018.2845132

2.2.3 バイオ計測・診断デバイス

(1) 研究開発領域の定義

生体由来物質（バイオ物質）の高感度検出・分析技術を開発し、バイオマーカ・ウイルス・病原菌・薬物などに適用して、計測・診断に用いるデバイスを創出することを目指す研究開発領域である。微量サンプルから特定のバイオ物質を迅速かつ簡便に抽出・分離・同定する技術、センシングデバイスの高速化・高感度化・高集積化・ウェアラブル化、複数ターゲットのマルチセンシング、チップ上にヒト組織・臓器の機能を再現する Organ-on-a-Chip などの研究開発が進められている。

(2) キーワード

POCT (Point-of-Care-Testing)、ウェアラブルデバイス、バイオセンサ、非侵襲計測、 μ TAS、ナノポア、 μ PAD (Microfluidic Paper-based Analytical Device)、Organ-on-a-Chip、バイオマーカー、生体ガス、揮発性成分

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

健康維持・疾病予防のための簡便な診断デバイス、センシングデバイスへのニーズや、医療の現場で、あるいは研究用途で使用される計測・診断機器に対する高感度化・高機能化への要求を背景として、さまざまなバイオ物質を対象とする高度なデバイス・センサ技術の開発が進められている。また、情報技術の急激な進展に伴って、連続的に生体情報を取得・分析することが可能な医療デバイス/IoT 機器の研究開発が世界的に活発化している。

バイオ計測・診断デバイス研究の方向性は、大まかに次の3つに分けられる。

- ①既存の装置・デバイス技術の高効率化・高性能化・小型化・低コスト化・ネットワーク化 (IoT 化)。ナノ・マイクロデバイスが有するシステム化やサンプルの微量化、高速性といった特徴を活かして POCT (Point-of-Care Testing、臨床現場即時検査) やマルチセンシング、ドラッグスクリーニングなどの技術を高度化する。
- ②現時点では実現されていない新しい性能・機能を持つ新規デバイスの開発。1分子計測に代表される超高感度計測や新しいバイオマーカーの計測、超微量・超高速計測、Organ-on-a-Chip などの実現を目指す。
- ③上記2つのハイブリッド化。既存のデバイス技術と1分子解析などの新しい技術を融合したハイブリッドデバイスを開発する。

いずれの方向性で開発されるデバイスも、生命現象解明などの基礎研究や、医療応用・産業化、さらには感染症予防のためのキーテクノロジーとして、世界中で研究開発が競争的に展開されている。また、安全・安心な社会を構築する上でも重要な研究開発領域といえる。

[研究開発の動向]

ナノ・マイクロ加工技術によって作製した微細構造・空間を利用して、核酸やタンパク質、エクソソーム、細胞、ウイルス、微生物など様々なバイオ物質を対象に計測・診断を行うデバイスの開発が進められている。DNA 相補対のハイブリダイゼーションを利用した DNA チップは既に広く実用化され、遺伝子発現解析の標準的なデバイスとして遺伝子解析サービスなど

に利用されている。最近では医療情報のみならず、食の安全や機能解析にも応用が広がっており、DNA チップの研究開発はほぼ収束している。一方、タンパク質や糖鎖に対して網羅的解析をおこなうことを目的に、プロテインチップや糖鎖チップなどが開発されているが、まだ信頼性や再現性が十分ではなく、ターゲットを捕捉する物質の開発や、捕捉物質の固定化法などの研究開発が続いている。これらのバイオチップは POCT デバイスを構成するセンサデバイスとして重要であり、前処理流路との統合・集積を可能にするため、デバイス機能・構造の最適化が進められている。

医療技術を支える基礎医学や生命科学、創薬の分野では、同じゲノムを有し、形態学的に同一に見える細胞集団であっても、細胞ごとに遺伝子発現が大きく異なっていることが指摘されており、1 細胞レベルにおいてその状態を分子レベルで解明する 1 細胞解析デバイスが求められている。例えば、がん細胞の集団の中には自己複製能と多分化能を有するがん幹細胞が存在し、がん組織の増殖や転移をコントロールしていると言われる。このがん幹細胞を死滅させることで、がんの治癒・再発防止が可能になると考えられ、多数のがん細胞の中からがん幹細胞を迅速かつ簡便に見つけ出す分析技術が求められている。また、再生医療や細胞医療の分野においては、分化誘導をかけた体性幹細胞の全てが意図した通りの細胞に分化するわけではなく、高効率の分化誘導法が求められており、分化における差異が何に起因するのか個々の細胞レベルで理解するための分析技術が必要になっている。さらに、血液 10 mL 中に数個～数十個しか存在しない血中循環がん細胞 (Circulating Tumor Cell: CTC) を解析する技術について、世界中で開発競争が繰り広げられている。従来、細胞群から計測対象細胞を 1 細胞レベルで分離・捕捉する過程には、セルソーターを用いる必要があり、分離・捕捉後に並列処理できる細胞数は数十個に過ぎなかった。しかし近年では、細胞と同程度の空間を有するナノ・マイクロデバイスによって前処理行程を全て統合し、細胞集団に対して網羅的に 1 細胞解析を行い、1 細胞レベルで細胞内に存在する DNA やマーカータンパク質などの生体分子の同定・定量を目指した研究開発が進められている。また、新しいバイオマーカー、特になんがんマーカーとしてマイクロ RNA やエクソソームなどの細胞外小胞が注目を集め、それらを低濃度、高精度、高スループットで検出できるデバイスの開発が進められている。

1 生体分子をターゲットにした診断デバイスとナノ計測法は、世界的に熾烈な開発競争の最中にある。特に、米国では、2014 年までの 10 年間にわたって NIH (National Institutes of Health) が主導した 1000 ドルゲノムプロジェクトによって、大学およびベンチャー企業における 1 分子 DNA シーケンサーの研究開発が強力に後押しされ、第 3 世代 DNA シーケンサーの実用化が実現した。さらに、ここ数年の間で、ナノポア型の第 4 世代 DNA シーケンサーの動作原理が実証され、1 分子解析技術を基盤とする診断デバイスの研究開発が加速している。特に、半導体技術で作製される固体ナノポアデバイスは、DNA のみならず、1 細菌、1 ウイルス、1 タンパク質の検出・識別デバイスへと応用され、世界で広く研究開発が展開されている。また、網羅的解析だけではなく、生体分子の定量解析を目的とする 1 分子解析デバイスの開発も進んでいる。代表的な 1 分子定量解析デバイスにはデジタル PCR 法やデジタル ELISA 法がある。

IoT 技術を活用したウェアラブルデバイスの研究開発が世界で進められ、健康管理・疾病予防に威力を発揮することが期待されている。既に日常生活での活動量 (バイタル) を評価するデバイスが市販されているが、測定項目は心拍数、動作 (歩数、活動量モニタ)、呼吸数、体温などの物理情報が大半であり、健康・疾病の状態に直結するバイオ/化学情報をリアルタイム

ムに取得する技術が望まれている。バイオ/化学情報を計測可能なウェアラブルデバイスの実用例は少ないが、Abbott社の血糖値モニタリング用デバイス FreeStyle リブレは糖尿病患者が継続的に血糖評価を行うことのできるデバイスとして、日本でも急速に普及している。また、疾病・代謝に起因する生体情報を得る方法として、「癌患者の呼気を識別する犬」や「尿中成分を認識する線虫」の報告から生体ガス等の揮発性バイオマーカーが注目され、研究開発が欧米と日本で盛んになっている。呼気ガスや皮膚ガスを利用した代謝評価や疾患由来成分の測定をおこなう機器の開発が進められている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

POCT (Point-of-Care Testing)

医療従事者が被験者に対して、その場で短時間に診断を行う POCT の研究が、世界的に大きく進展している。POCT の研究開発における大きな潮流は、スマートフォンに接続可能な小型・軽量・低価格・使い捨てデバイスの開発である。この観点から、紙を基材にした Microfluidic Paper-based Analytical Device (μ PAD) の研究開発がトレンドとなっており、このようなデバイスは、食品分析や環境分野での利用も期待される。また、3Dプリンタを用いることで、これまで機能単位で開発されてきた抽出や分離などをおこなう流路デバイスの集積・融合が可能になり、流路デバイスの1チップ化が実現されている。3Dプリンタはプロトタイプ開発の迅速化にも貢献し、中国と米国を中心に多くのベンチャー企業が生まれている。POCT 検査システムのスマートフォンへの実装は、計測結果をデータサーバーに送り、診断結果を迅速に返す Sample-to-Answer システム構築に必須である。さらに、POCT デバイスの高精度と高再現性を実現するため、低ノイズ化と高 SN 化、人工知能を用いた信号解析技術の開発が活発になっている。

POCT デバイスの研究開発を主導するのは米国、中国である。中国では国家重点研究開発計画にナノテクノロジーが選定されたことや、半導体産業への巨大投資に後押しされて、血液や唾液などの体液から特定の DNA やタンパク質を検出・識別し、健康状態や疾病診断を行う POCT デバイスの開発が進んでいる。米国では NIH と DARPA (Defense Advanced Research Projects Agency) が POCT デバイスの研究開発を推進している。NIH が健康状態計測や疾病診断によって QOL の向上を目指すのに対し、DARPA は感染症とパンデミックス対策を目的としている。また、国土が広く、人口密度の低いドイツ、カナダ、オーストラリアでは、遠隔地医療の質の向上を目的に POCT の研究開発が進められている。ドイツでは、Federal Ministry for Education and Research、カナダでは、Canadian Agency for Drugs and Technologies in Health、オーストラリアでは、ニューサウスウェールズ州政府が5年以上の長期にわたり POCT の研究開発に投資している。

Organ-on-a-chip

人体の特定臓器機能を1チップ上に集積して再現する Organ-on-a-chip (臓器チップ) が、薬物評価のハイスループット化や精密な薬物評価系の構築、病態のモデル化を実現する技術として、さらには動物実験の代替法として期待され、様々な臓器チップあるいは多臓器システムの開発が進められている。従来は単層の細胞で構成された2次元構造体が主流であったが、

3Dプリンタを用いた3次元構造体による Organ-on-a-chip の開発が大きなトレンドになっている。特に欧州では、動物実験規制に対応し、動物実験代替のための Organ-on-a-chip の開発が急速に進んでいる。

米国では NIH と DARPA が主たる資金提供機関であり、NIH と DARPA、FDA (Food and Drug Administration) の協力の下で Tissues-on-Chips プログラムが進められている。中国では National Natural Science Foundation of China (NNSFC) が資金提供機関となって Organ-on-a-chip の研究開発が進められている。欧州では ORCHID (Organ-on-Chip in development) コンソーシアムによる強力な研究体制の下で研究開発が進められており、欧州圏の著名大学、ドイツの Fraunhofer、ベルギーの半導体コンソーシアムである IMEC等の研究機関と企業が参加している。我が国においても2017年度より、Organ-on-a-chip に関する AMED プロジェクト「再生医療の産業化に向けた評価基盤技術開発事業 (再生医療技術を応用した創薬支援基盤技術の開発)」がスタートしている。

エクソソーム

細胞間コミュニケーションや生体内のシグナル伝達を担う細胞外小胞の1つであるエクソソームが、新しいバイオマーカーとして期待され、疾病診断への応用が盛んに試みられている。エクソソームは30～100nm程度の小胞で、内部にメッセンジャー RNA (mRNA) やマイクロ RNA (miRNA) が取り込まれており、他の細胞に RNA を運ぶシャトルとしての機能が見出されたことを契機に、2000年代後半から急速に研究が進展した。体液中からのエクソソームの精製・分離には超遠心分離が用いられるが、精密なサイズ分離やアフィニティー分離が困難であり、マイクロ・ナノデバイスを活用した精製・分離法の開発が世界中で進められている。中でもナノワイヤを利用したエクソソーム分離技術は分離効率が高く、注目されている。

生体ガス

近年、呼気や皮膚ガス等の生体由来のガス (生体ガス) 中に、代謝の過程で産生される成分や、疾患に特異的な成分が含まれることが報告され、生体ガス計測による疾患スクリーニングや非侵襲計測が期待されている。特に、呼気には肺でのガス交換に伴って血液中の揮発性物質が含まれ、これらを計測できれば、非侵襲かつ連続的な身体状態の把握が可能になる。高感度の気相用バイオセンサとして酵素や抗体、レセプターを用いたデバイスが研究され、実用化に向けた開発が進められている。また、小型化が可能な半導体式ガスセンサが開発され、モバイルデバイスなどとの一体化を実現している。疾患、特にがんと生体ガス種の関連について、特定の揮発性化学成分と、がんの発生部位に関する網羅的な解析が進んでいる。

生体ガスを非接触測定する研究開発は欧米と日本が主導している。欧州では、英国を中心に生体ガス計測の研究開発が盛んであり、GC/MS (Gas Chromatography・Mass spectrometry) による分析、シリコンナノワイヤ、カーボンナノチューブ、金属微粒子などのナノ材料や金属酸化物、分光法を用いたガスセンサなどが研究されている。Framework Programme 7 (FP7) において5カ国で1404人を対象に呼気中に含まれる13種の揮発性有機化合物 (VOC) の計測がおこなわれ、その結果をAIによりパターン解析し、がんやアルツハイマー病などの診断へ応用するための検討が進められている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

Pint of Care Testing: Environmental Scan (Canadian Agency for Drugs and Technologies in Health)

カナダでは2007年から、POCTデバイスを他の検査・診断手法と比較・検討しながらターゲットを絞って着実に研究開発を進め、2013年には血中の白血球の個数計測、2016年にはインフルエンザウイルス検査に適用した。2017年からは、HIVウイルス検査やグルコース検査について、POCTデバイスを使うシーン別、例えば、病院の診察室、手術室、自宅等における臨床研究を実施している。それに伴ってPOCTデバイスの実用化に向けた研究開発が加速しており、特に、低コスト化、小型化、集積化、ネットワーク化に向けた研究開発が集中的に進められている。

Point of Care Testing (Australia)

オーストラリアでは2008年から、主に血液検査用のPOCTの研究開発が実施されており、2016年からニューサウスウェールズ州において、2019年からのPOCTの社会実装を目指した研究開発とともに、サービスモデルや市場開拓の戦略立案が行われている。カナダと同様、本プロジェクトがPOCTデバイスの低コスト化、小型化、集積化、ネットワーク化の研究開発を強力に後押ししている。

Human Organ and Disease Model Technologies: hDMT (NWO Dutch Government and European Union)

2015年に発足した欧州圏のコンソーシアムであり、フローニンゲン大学、デルフト大学、ライデン大学等の欧州圏の著名大学および企業によって構成される。各大学と企業が保有するセンサ技術、マイクロ流路技術、幹細胞技術等を共有化し、脳、心臓、皮膚、脈管、腸、およびがん用のOrgan-on-a-chipの開発をおこなっている。hDMTは発足当時から、資金提供とともに、世界の研究ネットワーク形成、共同研究の推進、プロジェクトマネジメントをおこなう機能を有し、ニーズ調査からプロトタイプ開発を経て市場化までを実現する企業ネットワークを構築している。さらに、2018年からは、H2020 Future and Emerging Technologies programを受けて、Organ-on-Chip In Development (ORCHID)が発足し、hDMT、ドイツのFraunhofer、ベルギーのIMEC等が参画している。ORCHIDでは、Organ-on-a-chipの実用化を念頭に置いた研究開発を実施するとともに、ロードマップの作成や、アカデミア、研究機関、企業、規制当局、および患者団体とのネットワーク形成に総合的に取り組んでいる。

Chan Zuckerberg Science (USA)

2015年に設立されたChan Zuckerberg Initiativeの下で2016年に開始したプロジェクトであり、「すべての病気を治療、予防、管理するための科学技術の開発」に10年間で30億ドルが投資され、そのうちの6億ドルは基礎生物・医学研究と新しいテクノロジー開発を目的とするChan Zuckerberg Biohub (CZB)に投資されている。CZBはCalifornia大学 Berkeley校とSan Francisco校、Stanford大学の研究者で構成され、バイオ計測・診断デバイスの開発が含まれる。研究開発資金を提供するだけでなく、San Franciscoに研究施設が建設され、今後の展開が注目される。

Warfighter Analytics using Smartphones for Health (USA)

米国の DARPA において、スマートフォンとセンサを活用して兵士の健康状態、身体障害の状況、疾患などをリアルタイムにセンシングするための大型プロジェクトが展開されている。将来的には一般向けの早期診断デバイスとしての活用も考えられている。

(5) 科学技術的課題

バイオ計測・診断デバイスの実用化においては、検出・識別精度の向上と計測の高速化・高スループット化が課題である。いずれのデバイスも微小信号計測技術に基づいて構築されるため、高精度化にはデバイス構造の最適化による計測データの低ノイズ化と、高 SN 化が求められる。また、流体デバイスで構成されるバイオ診断デバイスの高速化・高スループット化には、低濃度の検体をセンサ部分に確実に輸送する流体デバイスの開発が必要である。特に、 $1\mu\text{m}$ 以下のマイクロ・ナノ流路における流体ダイナミクスは基礎研究が十分ではなく、流動ダイナミクスの基礎学理の構築と、シミュレーション技術の開発が求められている。流動ダイナミクスの検討には流体方程式、マクスウェル方程式、イオン輸送方程式等を連成させて解くマルチフィジックスシミュレーションが有効であることが示されており、実験との比較検討によるシミュレーション法の発展が望まれる。

POCT デバイスやウェアラブルデバイス、1 分子・1 細胞計測デバイスなどは、今後、1 チップ上に多数のセンサを集積し、多種類の検出対象を計測するマルチセンサシステムへ移行すると考えられ、それぞれのデバイスに適した集積回路の開発が技術課題といえる。また、マルチセンサシステムからは短時間に大量のデータが得られるため、データ圧縮・転送技術との融合が求められる。

バイオ分子の計測は、計測環境やサンプル調整環境等に大きく影響を受けるため、高い精度と再現性の確保が課題である。したがって計測プロトコルの確立が重要であるが、全ての条件が一致したバイオ分子を 1 分子レベルで作り出すことは極めて困難であるため、機械学習などを用いた新しい解析法の開発が求められる。ただし、機械学習による解析は結果の根拠を理解することが難しく、デバイスや計測システムへのフィードバックが困難という問題がある。マルチフィジックスシミュレーションの緻密化によって計測信号を解明し、機械学習における微量の物理・化学的解釈をおこなう必要がある。

経時変化する代謝状態などを正確に評価する手法として、連続的かつリアルタイムな生体ガス計測が期待され、それには呼気よりも皮膚ガスの計測が適すると考えられる。しかし、皮膚ガス中の VOC 濃度は呼気に比べ非常に低く、センサの高感度化が求められる。また、血液中に含まれる揮発性成分を呼気・皮膚ガス計測によって検出・分析することが期待されるが、多様な揮発性成分を含む生体ガスを対象に計測をおこなうには、高感度に加えて高い選択性が求められる。

バイオ計測デバイスのウェアラブル化においては、バッテリー寿命が大きな課題であり、高性能な二次電池の開発と、エネルギーハーベスティング技術の研究開発が急務である。また、連続的にサンプルを採取する機構の開発も重要である。

(6) その他の課題

バイオ計測・診断デバイスの応用化・実用化には、集積デバイスの構造・機能の最適化を図

る必要があり、試作量産を可能にする半導体製造ラインと先端微細加工装置を備えたファウンダリが求められる。米国の NNCI (National Nanotechnology Coordinated Infrastructure)、ベルギーの IMEC、シンガポールの IME (Institute of Microelectronics) に設置された微細加工共用施設では、集積デバイスのプロトタイプ開発を行える装置群が整備され、MEMS/NEMS とマイクロ流路の集積デバイスや、POCT デバイス、Organ-on-a-chip の開発を進めやすい環境が整っている。また、これらの共用施設は世界中の企業が利用しており、大学の基礎研究と応用研究の間を橋渡しするハブの役割も担っている。我が国においても、基礎研究から応用研究まで一貫した研究開発を実施できるプラットフォームの形成が望まれる。

我が国は個々のデバイス開発には優位性があるものの、システムとしての研究開発は十分とはいえない。診断システムの構築には、実際に使用される事例を想定した課題設定を研究開発の早期段階でおこなう必要があり、それには、ユーザである医療従事者等との密接な連携が重要である。開発した診断デバイスを社会に普及させる上でも、装置開発をおこなう研究者が医療従事者と連携することは必須であり、連携体制の下で実用化に向けた研究開発をおこなうことが可能な枠組みが求められる。

POCT デバイスやウェアラブルデバイスなどは IoT 化が必然であるが、利用者は個人情報漏えい・プライバシー侵害に対する不安に晒される恐れがある。個人情報を保護する技術やプライバシーを守るための法的な制度の整備が必要である。

(7) 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	○	→	<ul style="list-style-type: none"> これまでに蓄積されてきた計測技術や微細加工技術を駆使し、マイクロ流体デバイス、1分子計測、1細胞計測の分野で新たな研究開発が行われている。 低侵襲・非侵襲バイオデバイスの開発、ウェアラブルデバイス用の電源、センサ、材料の開発が大学および企業で積極的に進められている。 マイクロデバイス分野の重要な国際会議である μTAS や MEMS における発表採択件数はトップレベルを維持しているが、論文数では米国と中国に大きく水をあけられている。 バイオ計測の基礎研究を先導する国家的なプロジェクトが存在せず、予算規模は米・中・欧に比べてかなり小さい。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> 内閣府主導の ImPACT、JST の COI や START プログラムにおいてバイオ診断デバイスの応用研究がおこなわれている。また、AMED の医療機器開発プロジェクトや医薬品創出プロジェクトなどにおいて、大学・病院・企業などの連携による研究開発がおこなわれている。 NTT と東レが開発したウェアラブル心電計 hitoe について、藤田保健衛生大学においてリハビリテーション分野で初の実証実験が開始。F1 やインディカーレースのドライバーでの実証実験も進んでいる。 多くの企業において基礎的検討やプロトタイプ開発が行われているが、実用化に成功した例は少ない。

米国	基礎研究	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> NSF と NIH から研究資金を受け、米国に点在する共有微細加工施設と半導体ファウンドリを利用して、活発に研究開発が行われている。ただし、流動ダイナミクスの解明や新診断原理の開発などの基礎研究から、シミュレーションや人工知能を用いた解析法などの応用指向の研究へシフトしている。 政府系 (NIH、NSF、DARPA、DOE など) だけでなく、民間の財団 (ハーワード・ヒューズ医学研究所、ビル&メリンダゲイツ財団やチャン&ザッカーバーグ財団など) が豊富な研究資金を投入し、大学の研究を加速している。 Harverd、Stanford、MIT、UCB などがこの分野を牽引し、その他の主要大学においても各種生体計測用の診断デバイスが開発されている。
	応用研究・開発	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> 大学や研究機関における応用研究を基盤に多くのベンチャー企業が創業し、バイオ計測・診断デバイスの実用化を進めている。 医工連携の環境が整備され、研究開発のスピードが速い。実用化されたデバイス・技術が多数ある。積極的に製品化が進められている。 患者が装着したデバイスで簡易的な生体情報 (血圧、心拍数、血糖値などのバイタル数値) をモニタリングし、スマートフォンなどを介して医師が診察を行う mobile health(mHealth) の展開が加速している。 Wearable sensors、eHealth、Body area network、Telemedicine、Biomedical circuit and system、Energy harvesting、Mobile diagnosis など、医療とそれを支えるエレクトロニクス関連の技術を中心に、多くの国際会議・国際見本市が開催され、研究開発・商品化が活性化している。
欧州	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> 伝統的に基礎研究のレベルが高く、英国、スイス、ドイツ、オランダ、スウェーデンなどを中心にレベルの高い研究が行われている。 Organ-on-a-chip の基礎研究は、hDMT がデバイス製造から評価までを一貫してサポートしてきた。ただし、米国に比べると規模は小さい。 英国を中心に呼気ガス分析に関する研究が精力的に行われている。 ウェアラブル医療機器に必要な不可欠な、新規のフレキシブルな電極材料、薄く長期間使用可能な新規バッテリーなどの開発が盛んである。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> バイオメディカル分野に多くのベンチャー企業があり、診断デバイスの産業化を目指した研究開発が活発である。 Organ-on-a-chip の研究開発が、欧州の著名大学、ドイツの Fraunhofer、ベルギーの IMEC 等の研究機関と企業が参加した ORCHID コンソーシアムによる強力な連携体制のもとで進められている。製薬企業も Organ-on-a-Chip の実用化を目指した研究開発を行っている。 英国 Owlstone Medical 社を中心に、呼気中の VOC 計測を用いた疾病診断の実用化が進んでいる。また、Horizon2020 の下で中小企業が呼気アンモニア測定によるピロリ菌感染診断装置や、呼気成分による癌スクリーニング機器を開発している。
中国	基礎研究	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> 豊富な研究資金とマンパワーにより、研究能力が飛躍的に向上している。計測・診断デバイス分野の論文数も飛躍的に増加しており、上位 10% は世界的にもレベルが高い。 中国科学院、清華大、北京大、上海交通大など有力大学をはじめ、中堅の大学においても優れた設備、人材が研究に携わっており、更なる発展が見込まれる。 他国に比べてスーパーコンピューターを使う障壁が低く、ナノ領域のマルチフィジックスシミュレーションによる基礎研究が急速に進んでいる。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> National Natural Science Foundation of China (NSFC) が主たる資金提供元であり、バイオ診断デバイスのベンチャー企業が次々に創業している。 国家戦略によって中国のシリコンバレーに成長した深圳が、バイオ診断デバイスの試作品製造のプラットフォームになっている。 臨床サンプルを用いた研究がおこないやすい環境にあり、バイオメディカル分野の研究は質・量ともに向上・増加している。市場が大きく、各国の計測機器メーカーが進出し、大学との共同研究開発が盛んである。

韓国	基礎研究	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ Nantional Nano Fab Center (NNFC) と Korea Advanced Nanofab Center (KANC) が共用の微細加工施設を提供しており、μTAS 技術の研究開発、μTAS 技術を利用したバイオ計測・診断デバイスの研究が進められている。また、半導体の設備や技術を活用して、モバイルデバイスによる診断に関わる基礎研究が活発に進められている。 ・ ソウル大学、KAIST などの大学、研究所において POCT デバイスの研究開発が盛んである。
	応用研究・開発	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ 巨大半導体メーカーであるサムソン電子と LG を中心に、μTAS 技術を基盤技術としてバイオ計測・診断デバイスの応用研究、装置開発がおこなわれている。心疾患や肝疾患などの生体分子マーカーを 3 種類同時に血液検査できる POCT デバイスが上市段階にある。 ・ LG 社、SK Telecom 社などが医療機器とモバイル技術を融合した新たな市場を目指し、ウェアラブル端末の商品開発を進めている。

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Nisreen Shehada et al., "Silicon Nanowire Sensors Enable Diagnosis of Patients via Exhaled Breath," *ACS Nano* 10, no. 7 (2016) : 7047. doi:10.1021/acsnano.6b03127
- 2) Mohamed Karmaoui et al., " Pt-decorated In₂O₃ nanoparticles and their ability as a highly sensitive (<10ppb) acetone sensor for biomedical applications," *Sensors and Actuators B: Chemical* 230 (2016) : 697-705. doi:10.1016/j.snb.2016.02.100.
- 3) Ben Henderson et al., "Laser Spectroscopy for Breath Analysis: Towards Clinical Implementation," *Applied Physics B* 124, no. 8 (2018) . doi:10.1007/s00340-018-7030-x
- 4) Morad K. Nakhleh et al., "Diagnosis and Classification of 17 Diseases from 1404 Subjects via Pattern Analysis of Exhaled Molecules," *ACS Nano* 11, no. 1 (2017) : 112. doi:10.1021/acsnano.6b04930
- 5) Xiaohua Sun, Kang Shao and Tie Wang, "Detection of Volatile Organic Compounds (VOCs) from Exhaled Breath as Noninvasive Methods for Cancer Diagnosis," *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 408, no. 11 (2016) : 2759-2780. doi:10.1007/s00216-015-9200-6
- 6) Kenta Iitani et al., "Fluorometric Sniff-Cam (Gas-Imaging System) Utilizing Alcohol Dehydrogenase for Imaging Concentration Distribution of Acetaldehyde in Breath and Transdermal Vapor after Drinking," *Analytical Chemistry* 90, no. 4 (2018) : 2678-2685. doi:10.1021/acs.analchem.7b04474
- 7) Takao Yasui et al., "Unveiling Massive Numbers of Cancer-related Urinary-microRNA Candidates via Nanowires," *Science Advances* 3, no. 12 (2017) . doi:10.1126/sciadv.1701133
- 8) Hyun-Kyung Woo et al., "Exodisc for Rapid, Size-Selective, and Efficient Isolation and Analysis of Nanoscale Extracellular Vesicles from Biological Samples," *ACS Nano* 11,

- no. 2 (2017) : 1360. doi:10.1021/acsnano.6b06131
- 9) Wooseok Jung et al., "Point-of-care Testing (POCT) Diagnostic Systems Using Microfluidic Lab-on-a-chip Technologies," *Microelectronic Engineering* 132 (2015) : 46-57. doi:10.1016/j.mee.2014.09.024
- 10) Jie Hu et al., "Advances in Paper-based Point-of-care Diagnostics," *Biosensors and Bioelectronics* 54 (2014) : 585-597. doi:10.1016/j.bios.2013.10.075
- 11) Peter Horvath et al., "Screening out Irrelevant Cell-based Models of Disease," *Nature Reviews Drug Discovery* 15, no. 11 (2016) : 751-769. doi:10.1038/nrd.2016.175
- 12) Stephanie J. Heerema and Cees Dekker, "Graphene Nanodevices for DNA Sequencing," *Nature Nanotechnology* 11, no. 2 (2016) : 127-136. doi:10.1038/nnano.2015.307
- 13) A. Dix et al., "Use of Systems Biology to Decipher Host-pathogen Interaction Networks and Predict Biomarkers," *Clinical Microbiology and Infection* 22, no. 7 (2016) : 600-606. doi:10.1016/j.cmi.2016.04.014

2.2.4 バイオイメージング

(1) 研究開発領域の定義

バイオイメージングとは、生命現象の理解を目的として生体内の情報を可視化することである。可視化の対象は、生体を構成する物質（生体組織、細胞、細胞内のオルガネラ、核酸・タンパク質・糖・脂質などの生体分子、イオン等）の形態や大きさ、数、分布、さらには生体内局所の温度や pH など、空間と時間にまたがる多次元の情報に及ぶ。種々のイメージング手法、プローブ材料、観察装置、画像処理、機械学習によるデータ解析などを包括する研究開発領域であり、生命科学系に加え、材料、機械、計算科学など広い分野の連携が求められる。

(2) キーワード

蛍光、化学発光、ラマン散乱、近赤外光、量子ドット、透明化技術、共焦点顕微鏡、ライトシート顕微鏡、超解像、生体深部イメージング、無標識イメージング、マルチモーダルイメージング、FRET、オプトジェネティクス、画像解析

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

生体は多種多様な物質で構成され、それらの時間的・空間的な相互作用によって機能し、生命活動がもたらされる。その時間スケールはミリ秒から年単位、空間スケールは nm ~ cm にわたり、そこで起こる生命現象も多種多様であるため、一つの観察技術ですべてをカバーすることはできない。そこで、様々な時間・空間スケール、様々な生体物質、構造などの生体情報をターゲットとするイメージング技術の開発が進められている。

バイオイメージングは生命科学分野の基礎研究への貢献はもとより、疾患メカニズムの解明、病気の診断や治療効果の確認など医学分野において重要な役割を果たしている。新しい薬や医療技術の開発において、バイオイメージングはすでに不可欠の技術であり、革新的かつ国際競争力のある医療技術を創出する上で本研究開発領域は重要である。

[研究開発の動向]

生体物質の可視化には、試料を蛍光色素や蛍光タンパク質等のプローブで標識する蛍光イメージングが多く用いられる。一般的な蛍光顕微鏡では、蛍光プローブを導入した試料に励起光を照射すると、焦点面から外れた箇所においても蛍光分子が励起されて発光し、観察画像のぼけにつながる。そこで、光検出器の前にピンホールを置いて焦点外のぼけを排除し、焦点の蛍光だけを検出する共焦点顕微鏡が多く用いられるようになってきている。共焦点顕微鏡では、励起光を焦点面上で走査することで XY 像が得られ、Z 軸（光軸）方向の情報を加えることによって 3次元イメージング像を構築することが可能であり、試料内の立体的な情報を可視化する手法として、現在の蛍光バイオイメージングのスタンダードになっている。

蛍光イメージングでは、蛍光プローブからのシグナルを検出し画像化する際に、光の波動性に起因した空間分解能の限界（回折限界）が技術的なボトルネックとなるが、回折限界を超えた空間分解能を達成するための原理が 1990 年代中頃から 2000 年代中頃にかけて提案・実証され、2010 年頃には 40 ~ 100 nm の空間分解能を有する超解像顕微鏡が市販された。STED (STimulated Emission Depletion) や PALM (PhotoActiavation Localization Microscopy)

などの超解像計測法と、PALM の元になった 1 分子計測法 (ローカリゼーション法) は 2014 年度のノーベル化学賞を授賞している。その後も、超解像顕微鏡を用いた各種イメージングやプローブ開発が世界中で報告され、ハード面の開発と共に、超解像測定に適した蛍光プローブの開発が進んでいる。自発的に明滅するプローブやターゲット分子に対して迅速に結合解離を繰り返すプローブ、そして、on-off コントラスト、スイッチングサイクル耐性、スイッチング速度の改良が行われた可逆的光スイッチングプローブが開発され、各種の超解像イメージング技術に応用されている。また、従来の超解像顕微鏡では非常に強い照明光による生きた細胞・組織・生体へのダメージが問題となっているため、生体適合性の高い超解像イメージング技術の開発が行われている。

蛍光色素や蛍光タンパク質等のプローブは光照射によって容易に褪色してしまい、生体の動的变化を一定時間連続的に観察する際に問題となる。近年、蛍光褪色が起こりにくい量子ドットがプローブとして用いられるようになってきたが、量子ドットプローブは毒性を抑えるため、また化学修飾を容易にするためのコーティングが施されており、蛍光色素などに比べ 10 倍以上も大きく、標識対象への立体障害などの影響が懸念される。量子ドットのコア自体の大きさは nm オーダーであるので、コーティング層を薄くするなど、サイズを抑えるための工夫が望まれる。なお、グラフェンナノ構造を利用した低毒性で生体適合性の高い炭素量子ドットも蛍光量子収率の向上が図られ、生細胞や個体内でのイメージングに応用されており、今後のさらなる改善が期待される。また、最近では Nitrogen-Vacancy (N-V) ダイヤモンド (窒素欠陥ダイヤモンド) と呼ばれるダイヤモンドがプローブとして登場し、蛍光褪色が無いことから注目されているが、大きさや供給などに課題があり、今後の改良が望まれる。

長時間計測における蛍光プローブの褪色の問題を解決する別の手法として、近年 DNA-PAINT が普及してきている。これは、2 本鎖形成の親和性が調節された一本鎖 DNA で標識した抗体と蛍光標識した相補的 DNA を用いて 1 分子局在顕微鏡法で超解像イメージングを行う手法である。この手法では、試料内のターゲットに結合した蛍光プローブが褪色しても、未褪色の蛍光プローブと随時入れ替わることにより、継続して超解像観察をおこなうことができる。

分光分析法やラマン散乱法、第二次高調波発生、光音響効果などを利用することで、試料をプローブ標識することなく特定の生体物質をイメージングする技術も進展してきている。また、バイオイメージングのコントラストとして得られる情報が、濃度などの示量変数から、分子の反応、温度、力などの示強変数へと広がりを見せており、バイオイメージングはより直接的に生体の状態、活性、機能を可視化していく方向にある。

バイオイメージングは日本人の得意とする精細な作りこみ技術が生きる分野であり、日本が世界的に大きなシェアを持つ技術に内視鏡、顕微鏡がある。一方、蛍光プローブの開発においては、日本発の研究成果が多く見られるにもかかわらず、産業化は極めて遅い。海外を見ると、米国では比較的速い市場展開を見込んで研究開発投資が行われるのに対し、欧州、特にドイツでは、息の長い技術開発によってニッチな技術を発展させ、独自性の高いイメージング技術を市場化していく傾向にある。アジア諸国は欧米に比べると多くの国で立ち遅れているが、中国は欧米で研究成果を上げた研究開発者の本国への呼び戻しにより急速に技術レベルを上げつつある。中国製のイメージング装置は今のところ我が国では普及が進んでいないが、安価なデバイス提供が特徴的であり、今後の動向に注目する必要がある。また、シンガポールは独自の投資体制により近年急速にハイレベルなイメージングの研究成果を報告しており、ビジネス展開への意欲も高い。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

蛍光タンパク質

蛍光タンパク質の登場は、1962年の下村脩博士による緑色蛍光タンパク質 (GFP) の発見に遡るが、現在も遺伝子工学的な GFP の改変によって、CFP、YFP、mOrange、DsRed など蛍光強度や波長特性、至適温度などの異なる蛍光タンパク質の開発が続いている。これらの蛍光タンパク質は、他のタンパク質との融合タンパク質としても機能を発揮すること、発色に基質や酵素反応を必要としないことから、研究対象のタンパク質の発現局在やその時間変化を検証するためのレポーター遺伝子として生物学研究に広く使われている。

他の分子との結合による発色団形成や、酵素分解による消光を活用した機能性の蛍光タンパク質の開発も進み、蛍光タンパク質はマーカーとしての役割に留まらず、分子活性や細胞機能をモニターするバイオセンサーとしても活用されている。例えば、ニホンウナギに由来するタンパク質がビリルビンと結合して蛍光を発することが分かり、ビリルビンセンサーとして活用できることが示され、UnaG と名づけられた。また、細胞周期を蛍光波長の変化でリアルタイムに可視化することが可能な蛍光タンパク質 Fucci (Fluorescent ubiquitination-based cell cycle indicator) の開発が報告された。細胞周期は細胞の増殖、分化や死という基本的な生命現象を理解する上で重要であり、ヒト ES 細胞や iPS 細胞を用いた再生医療、薬剤スクリーニングといった幅広い研究分野での活用が期待される。

FRET

フェルスター共鳴エネルギー移動 (Förster Resonance Energy Transfer: FRET) の原理に基づくバイオセンサーは、イオン濃度や情報伝達分子の活性、糖や脂質の濃度を蛍光により可視化することで、生物のさまざまな状態をリアルタイムに観測可能な画期的ツールとなっている。FRET とは励起状態のドナー分子から近傍のアクセプター分子にエネルギーが遷移する現象であり、ドナー分子とアクセプター分子の位置関係によって生じる FRET 効率の変化が、蛍光スペクトルの変化として現れる。FRET バイオセンサーは一般的に、ドナーおよびアクセプターとなる 2 種類の蛍光タンパク質と、センサー領域とリガンド領域、これらを結合するリンカー領域からなる。センサー領域とリガンド領域に、それぞれ、ドナーとアクセプターとなる蛍光タンパク質が結合していることが FRET バイオセンサーの特徴である。センサー領域は、周囲の微小環境変化によって構造が変化し、それに伴ってリガンド領域との結合が変化するように設計されており、環境変化の結果として生じたドナーとアクセプターの間の距離や方向の違いを FRET 効率の変化、すなわち蛍光の変化として捉えることができる。その活用例としては、がん遺伝子の情報伝達を司る ERK の発現と ERK 阻害剤効果のスクリーニングや、腺管構造の形成過程におけるシグナル伝達制御のリアルタイム 3 次元イメージング、脳腫瘍細胞の浸潤過程における遺伝子発現パターンの解明、遺伝子の一塩基多型 (SNPs) の検出など多くの報告がある。なお、ルシフェラーゼなどの生物発光分子もドナーとして用いることができ、その場合は生物発光共鳴エネルギー移動 (Bioluminescence Resonance Energy Transfer: BRET) と呼ばれる。

化学発光、オプトジェネティクス

化学発光を利用したイメージングは、励起光を必要としないことから、光毒性や自家発光の影響を受けず、観察対象へのダメージが少ない。これまで発光強度の低さが課題であったが、2012年頃から開発されている化学発光タンパク質と蛍光タンパク質との融合タンパク質を利用することにより、従来の10倍～100倍まで発光強度が上昇している。生体組織の透過性に優れた600 nmを超える波長を呈する化学発光タンパク質の開発も急進している。

一方、光によってタンパク質機能を制御するオプトジェネティクスは、生体内の生理機能を低侵襲的に操作することができる技術として、特に脳科学の分野で積極的に利用されている。オプトジェネティクスでは照射光の生体透過性を常に考慮する必要があり、さらに、局所的に光刺激をするためには光学系の工夫が必要になる。この問題を解決するために、化学発光タンパク質から発せられる光をオプトジェネティクスの刺激光として応用する分野が進展している。この手法では化学発光タンパク質近傍のオプトジェネティクス分子だけを直接光刺激し、活性化することが可能であり、1細胞、1分子特異的なオプトジェネティクスが実現される。このように、化学発光はレポーターやマーカーとしてだけでなく、機能ツールとしての可能性が広がりつつある。

化学発光は基質を必要とし、基質は時間とともに代謝されるため、長時間のイメージングには持続的な基質の投与を必要とする。自ら発光基質を作り出す発光生物の発光基質合成経路を解明し、観察対象の細胞や生体中において再構築することができれば、外部からの基質投与なしに自発的に発光させることが可能になると期待される。これまでに、発光バクテリアの基質合成経路が解明され、これを応用した発光動物培養細胞や発光植物が開発されているが、その発光強度は顕微鏡観察できるほどには高くないため、バクテリア発光システムの高輝度化が求められる。また、発光キノコの基質合成経路についてロシアのグループを中心に解明が進んでおり、発光基質合成経路を構成する酵素群について報告が予定されている。いずれかの生物について化学発光システムを解明し、生体へ導入することで、長時間の安定した観察が可能になると期待される。

無標識イメージング

染色や蛍光プローブによる標識など、一般的なバイオイメージングにはコントラストを与えるための何らかの侵襲的操作を伴う。それに対して、観察対象に対して侵襲がなく、生体をありのまま観察することが可能な無標識イメージングの開発が進められている。その一つが分子ラマン散乱を利用したラマン顕微鏡で、物質の細胞内取り込みや排出過程のライブイメージング、細胞内における生理的現象の非標識かつリアルタイム観察技術が開発されている。また、細胞内において、多様な生理的現象を反映してラマンスペクトルが変化することが明らかになり、例えば胚性幹細胞(ES細胞)の分化に伴う細胞状態遷移を非標識で捉えられることが報告されている。生体試料内における分子間相互作用や、分子・材料の生分解の可視化も期待される。

また、生体高分子1分子を無染色で観察する方法として、干渉散乱顕微鏡(interferometric scattering microscopy; iSCAT)が開発されている。これは、1個1個の生体高分子を可視化するだけでなく、その像のコントラストの定量化により分子量を高精度で計測できる。

透明化、全組織イメージング

近年、固定化した生体組織を透明化する技術によって、光学的に観察可能な深度を拡張する技術が発展している。透明化の原理は、細胞膜の主要構成分子であるリン脂質に起因する屈折率界面の解消である。技術開発の初期には屈折率の高い有機溶媒に生体試料を浸漬し、生体試料全体の屈折率を細胞膜に合わせていたが、有機溶媒に浸漬すると試料の変性や蛍光の消光が生じるため、親水性の透明化試薬の開発が進められた。尿素水溶液をベースとする *Scale* の報告以降、*Clear^T*、*SeeDB*、*CLARITY*、*CUBIC* と含有成分の異なる透明化試薬の報告が相次いでいる。また、生体分子（色素）による光吸収も生体深部の観察における課題であり、ヘモグロビンによる光吸収をアミノアルコールによって抑える手法が報告されている。最近では、小動物の全身試料の透明化に効果を発揮する新しい *CUBIC* プロトコルや、糖アルコールの添加によって、蛍光および電子顕微鏡観察に耐える試料損傷の少ない *Scale* プロトコル (*ScaleS*) が報告されている。さらに、従来のプロトコルでは、臓器全体の透明化に少なくとも 24 時間を超える浸漬時間が必要であったが、60 分以内という短時間でおこなえるリン酸を含む試薬の開発が進んでいる。なお、透明化した試料の 3 次元観察においてはライトシート顕微鏡が有用なツールとなっている。

一方、透明化を行わない通常の固定化組織を用いて、イメージングと試料の切断を繰り返すことにより、全組織を観察する連続切断顕微鏡イメージング技術が開発されている。連続切断法は撮影時間が長いものの、高精細な画像が得られるという利点があり、レンズの回折限界レベルの解像度での観察が可能である。組織の前処理は一般的な固定化だけで済むことが多く、解剖学的な構造が良く保たれる点でも優れている。また、最近、透明化組織をライトシート顕微鏡で観察する場合に匹敵する高速な連続切断法 *FAST* (*block-face serial microscopy tomography*) が日本で開発され、成体マウスの全脳やヒト死後脳組織の高精細イメージングを実現し、透明化法を越える高いスケール拡張性が示されている。

近赤外光イメージング

蛍光イメージングでは一般的に可視光 (400-700 nm) が用いられるが、可視光は生体による吸収や散乱の影響を強く受けるため、深部を観察することが難しい。そこで近年、生体組織透過性の高い波長 700nm 以上の近赤外 (NIR) 光を利用した蛍光イメージング法が開発されている。さらに、生体組織内の光吸収・散乱が最も小さくなる 1000nm を超える近赤外 (*Over-Thousand Nanometer-Near InfraRed*, *OTN-NIR*) 光を用いた生体内深部のイメージングが注目されている。波長 700-900 nm 付近の「第 1 の生体の窓」(*NIR-I*) を用いる NIR 蛍光イメージングに対して、*OTN-NIR* 波長域においては 1100-1350 nm の波長域を「第 2 の生体の窓」(*NIR-II*)、1550 - 1800 nm の波長域を「第 3 の生体の窓」(*NIR-III*) と区別し、日本および米国の研究者を中心にさまざまな蛍光プローブの開発とそのイメージング応用が進められている。

示強変数イメージング

生体内局所の温度や pH など示強変数の計測が、バイオイメージング研究のトレンドになっている。例えば、温度は生命現象を支配する最も重要な物理量の一つであり、細胞内など生体の微小領域の温度分布の計測は、さまざまな生命現象の解明や、次世代の診断・治療技術につ

ながる可能性があることから、蛍光プローブの蛍光強度や蛍光ピーク波長、蛍光寿命の温度依存的な変化を利用した蛍光ナノ温度イメージングの研究が盛んになっている。また、pH は生体内の正常組織と病変部位とで異なることが知られ、骨代謝やがん細胞の浸潤などさまざまな生命現象に関与していることから、pH の変化に応答して蛍光特性が変化するプローブの開発とイメージング応用が進められている。

補償光学

補償光学は天体観測における大気の影響を解消するために開発された技術であり、同様の原理を顕微イメージングに応用して、*in vivo* イメージングにおける空間分解能向上や、超解像イメージングへの適用が進んでいる。光学システムの解像度は光波の回折により制約され、屈折率界面を有する3次元試料を観察すると、構造の複雑性や深さにより、コントラストやシグナルが下がってしまう。この収差を補償光学によって能動的に制御することで、シャープな画像取得が可能になる。例えば、半導体レーザーやベクトルビームによる生体組織深部イメージングに補償光学技術を適用し、麻酔下のマウス生体脳で深さ1.6mmの蛍光断層イメージングが実現されている。また、生体適合性の高い超解像計測法として、補償光学系と組み合わせたLattice light-sheet顕微鏡が開発されている。

質量イメージング

質量分析を用いたイメージングでは、未固定凍結試料を切片化し、イオン化補助剤を試料表面に供給した後、紫外レーザーの照射によって生成されるイオンを質量分析する。得られるマススペクトルには試料の成分情報が含まれているため、様々な分子を直接検出して分布情報を可視化することができる。イオン化した分子を直接検出することから、プローブ作製の必要がなく、また、分子構造の推定が可能であり、わずかな構造の違い、例えばリン脂質の脂肪酸の構造の違いや、構造異性体の分離もおこなうことができる。

現状、日米欧での競争が激しく、欧米は臨床検体などを用いて「見やすいものをみる（量の多さやイオン化のしやすさに関係する）」、そして、得られた大量のデータを線形・非線形の変数解析（例えばt-SNEなど）によってクラスタリングしバイオマーカー探索に用いる例が多い。これに対し、日本では「見難いものをみる」、すなわち神経伝達物質やステロイドホルモンの生体内分布（実験動物およびヒト臨床検体）をはじめ、昆虫、植物、食品、微生物などに含まれる一次および二次代謝物の可視化に質量イメージングを応用するといった独特な戦略が取られている。これらの観察対象は、サイズや物性の観点から試料作製が困難であることが多く、ノウハウが必要であるため、質量イメージング技術の拡張性という点で日本は他国をリードしていると考えられる。また、日米欧の製薬企業では新薬の評価に質量イメージングを積極的に取り入れる傾向にあり、産業的にも重要な技術となっている。

ラマンタグイメージング

蛍光プローブでは標識できない小さな分子を可視化するために、特異なラマン散乱を示す微小な官能基をタグとして結合させる技術であり、2011年に我が国の研究者らにより提案された。その後、薬剤、糖代謝、脂質代謝、タンパク質代謝、DNA/RNA合成などのイメージングに利用されており、今後さらなる応用研究が進むと期待される。

コンピュータショナルイメージング

データ処理の補助により、光学技術の物理的な限界を超える結果を与える技術の開発が進んでいる。時間分解能、空間分解能、分析能力の大幅な向上が期待できる。しかしながら、計測されていないデータをデータ処理によって補う方法であるため、信頼性に欠ける結果が与えられる場合があり、その用途や信頼性について十分な議論の必要がある。

情報科学技術との高度融合

過去 10 年の間、情報科学におけるスパースセンシングにより超解像イメージングを数理的に構成する手法が考案されてきた。現在では、計測されたデータを情報科学的手法により解析する一方向的な応用が殆どであるが、今後は解析結果を計測系にフィードバックし、オンラインで最適化する・迅速化するという双方向的な高度融合型の研究が必要になる。近年、我が国では JST-CREST、さきがけ「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用 (2016 年～)」領域や人工知能学会第 2 種研究会 計測インフォマティクス研究会が発足し、計測と情報の融合に正面から取り組む試みが始まっている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国では、NIH の下に設置された National Institute of Biomedical Imaging and Bioengineering (NIBIB) においてバイオイメージング分野の研究促進事業を行っているほか、Janelia Research Campus 等の研究所でバイオイメージングの最先端研究を行っている。また、NSF の支援の下、NeuroNex Technology Hub として Brown 大学に Bioluminescence Technology Institute が 2017 年に設立された。EU 圏では、EU の資金援助によるプロジェクトである Euro-BioImaging (EuBI) が 2010 年に発足し、EU 圏内のバイオイメージング施設や研究者の連携により、既存のバイオイメージング施設の共同利用、最先端のバイオイメージング技術のトレーニング、そしてバイオイメージングデータの相互利用と解析ツールの公開が進められている。また、EuBI が EU 内外のバイオイメージング施設と連携する Global-BioImaging (GBI) プロジェクトが European Union's Horizon 2020 research and innovation programme で採択され、2016 年にスタートしており、日本からは基礎生物学研究所が連携パートナーとして参加している。英国では、Francis Crick Institute と名付けられた大規模なバイオメディカル研究所が 2015 年にロンドンに発足した。本研究所は、生物物理学的な側面を強調した新たな生命科学研究の開拓が中心的な目標とされている。さらに英国では近年、MRC (Medical Research Council)、BBSRC (Biotechnology and Biological Sciences Research Council)、Wellcome Trust、EPSRC (Engineering and Physical Sciences Research Council) がバイオイメージング分野への研究資金提供を強化しており、各大学のバイオイメージング施設の充実化、バイオイメージング研究の振興を図っている。

米国、EU 圏、英国いずれも、大学等研究機関におけるバイオイメージング施設の整備が進み、日本はこの点で遅れをとっている。一方、日本では新学術領域研究を中心に研究開発が活発に進められている。2018 年度に発足した新学術領域「シンギュラリティ生物学」(2018～2022 年度)においては、空間的ダイナミックレンジの広い光イメージング技術の開発が計画されている。この技術は、1 個体内を細胞レベルの空間分解能で可視化し、個体各部位の細胞ひとつひとつの機能と相互作用を明らかにするという野心的なものである。この技術が完成すれば生

物理学の考え方を大きく変革する可能性がある。また、新学術領域「共鳴誘導で革新するバイオイメージング」(2015～2019年度)においては、最先端イメージング技術の創出とともに高次元情報処理をクラウドの活用によって高度化する試みが行われている。

(5) 科学技術的課題

近年のバイオイメージングは、3次元位置情報+時間の4次元情報に加え、各画素に温度、pH、特定分子濃度などの異なる特徴量、異なるイメージングモダリティによる情報を盛り込む方向にあり、高次元での情報処理が必要になっている。異なる情報をコントラストとした多様なイメージングデータを一元的に扱うためのデータフォーマットの規格化や、共通プラットフォームの整備が急務といえる。日本では国立研究所の一部でこれらの試みが見られるものの、民間も含め、マルチモーダルなデータプロセッシングシステムの構築に対するニーズは大きい。

空間スケールで nm ～ cm、分子・イオンからオルガネラ、細胞、組織、個体におよぶ約 10 桁にまたがる情報を一元的に扱うためのプラットフォームの整備が急務となっている。異なるスケールからなる階層的なデータ構造は、そのハンドリングが極めて困難であり、例えば、cm オーダーの個体や組織の形態情報を nm オーダーの精度で記述すると、スーパーコンピュータでも処理することができない膨大なデータ量になってしまう。実際、細胞サイズに相当する μm の分解能で 3 次元画像を取得するオプティカル CT システムにおいて、既にこの問題が生じている。モダリティとともにスケールの壁を自由に越えられる革新的なシステムの開発が求められる。

イメージングは試料の形態や物質の空間分布を情報として与えるが、物質のもつ情報そのものの分析は不得意である。一方、オミクス解析技術は生体分子情報を与えるが、対象の空間分布を与えず、感度も低い。この 2 つのギャップを埋める技術が望まれる。質量分析イメージング、ラマン分光イメージングはその一部を実現するが、分析能力の面で不十分な点があり、それらの感度向上と分析能力向上が求められる。イメージングと分析との融合は情報の質と量を増大させ、従来技術では検出不可能であった生命活動、生体機能の検出、理解に繋がると期待される。

カメラ画素数の増大は今後も続くことから、膨大な画像データ量に対応するデータ処理技術の開発が必要になる。特に、データ転送時間がイメージング機器活用のボトルネックになると予想され、例えば、計測画像データを十分な速度で保存すること、また保存したデータをリモートの環境に高速で送ることにフォーカスした技術開発、インフラ整備が必要である。データのオープン化・共有化の動き、データサイエンスの発展といった背景からも、画像データの効率的な移動と共有は、データ資源の有効活用の土台として重要である。

イメージング技術の発展においては、新しい光源や検出器の開発が欠かせない。今後、深紫外、近赤外/赤外の光源、検出器の開発により利用可能な波長域が増えることで、従来技術では得られなかった生体情報が得られるようになることが期待される。また、レンズ、フィルターなどの各種光学部品も深紫外、赤外域の光に対応したものが必要である。現時点ではそのような部品は選択肢が少なく、開発が望まれる。また、2次元センサーの画素数が増大し、カメラ、顕微鏡とともに従来の結像光学系では対応できないセンサーサイズ、画素サイズのものが登場している。結像光学系の新たなフォーマットを構築する必要がある。

(6) その他の課題

バイオイメーjingでは、装置開発、プローブ開発、データ処理技術開発、試料調整技術の開発等、様々な分野の融合によって最先端の研究が進展する。したがって、これらが一堂に会して研究開発をおこなうことが可能な基盤的組織の構築が求められる。我が国には現在、そのような組織は存在しないが、海外では、米国の Janelia Research Campus や欧州の EMBL (European Molecular Biology Laboratory) 等において、技術開発とアプリケーション開発とが同一施設内でおこなわれ成果を挙げている。また、独立した組織でなくとも、たとえば英国オックスフォード大学の Micron Oxford Advanced Bioimaging Unit では大学の新棟の1フロアをバイオイメーjingの研究開発に特化させており、このような例は、海外には多く存在する。顕微鏡4大メーカーのうち2社を有する我が国には、バイオイメーjing技術開発に大きなメリットがあり、これを活かした研究開発体制・組織構築の検討が望まれる。

なお、バイオイメーjingは生物学、化学、物理学、計算科学、デバイス工学などの分野における新技術の集合体であるが、アカデミックにとって意味のある研究と、企業にとって意味のある開発とはそのレベル、ステージともに異なっている。課題設定、撮像から生命現象の認識に至る一連の技術の中には、アカデミアにとっては新規性の提示が難しく、企業にとっては市場性の抽出が難しい中間的技術というものが存在し、そこを埋めるための方策が必要である。

(7) 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	◎	→	超解像顕微鏡や各種プローブ、透明化試薬などの研究が盛んに行われている。また、新学術領域やAMED、CREST、さきがけなどで、バイオイメーjing関連の領域が複数発足するなど、研究は活発に進められている。ただし、米国、欧州に比べて研究者の層が薄く、異分野間の連携も十分ではない。
	応用研究・開発	◎	→	顕微鏡メーカーが新しい技術を年々投入し、それを活かした応用研究が進んでいる。各種顕微鏡や小動物イメーjing装置など、大学・研究機関で開発された技術をベースに市販化・実用化に至ったものも多く見られる。蛍光プローブや透明化試薬についても大手試薬メーカーから市販化されたケースがある。
米国	基礎研究	◎	↑	NIHなどを中心に、多くの研究機関が潤沢な予算のもと、バイオイメーjing研究を強力に推進している。超解像イメーjing、三次元細胞イメーjing、超音響イメーjing、振動分光イメーjing、蛍光インコヒーレントホログラフィなどの新しい技術が毎年のように提案されており、研究の質も非常に高い。近年、スタンフォード大学が近赤外光イメーjingで目覚ましい研究成果を挙げている。
	応用研究・開発	◎	↑	HHMIのJanelia Research Campusをはじめとする研究機関が組織的にバイオイメーjingの応用研究をサポートしており、上手く機能している。特に、工学系研究者、各種プローブの開発者、生物学者を1カ所の研究施設に集め、基礎研究から応用研究までを非常に速いスピードで実施している。また、アカデミアの研究成果の実用化が、非常に速いスピードで推し進められている。前述のスタンフォード大学のケースでは、論文発表された蛍光プローブを市販するベンチャー企業がすぐに設立された。

欧州	基礎研究	◎	↗	全体的に質の高い研究が進められているが、新しい技術や方法論に関する研究は少ない。ドイツ Jena の Leibniz-Institut für Photonische Technologien の活動が目立つ。イメージング技術、分光技術の基礎研究から、生物学、医学応用とその実用化まで多くの成果が挙げられている。スペインのマドリード自治大学が、蛍光温度イメージングの研究を世界に先駆けて推進している。
	応用研究・開発	◎	↗	応用研究の人口が多く、多くの成果が発表されている。歴史的にも Carl Zeiss や Leica などの大手メーカーが存在し、現在も世界をリードする存在である。ドイツ Jena の Leibniz-Institut für Photonische Technologien は応用研究の面でも成果を挙げており、"www.biophotonics.world" のようなニュースサイトを立ち上げるなど、技術の普及・啓蒙にも貢献している。
中国	基礎研究	○	↗	基礎研究レベルで良い成果が増えているが、オリジナリティの高い技術開発はあまり見られない。世界各国に留学した優秀な研究者を呼び戻し、研究体制の強化を進めている。
	応用研究・開発	△	↗	レベルの向上が見られるものの、特に目立つものはない。しかし、レンズやフィルター、光学素子メーカーが多く存在し、応用開発についての基盤が着々と整っている。
韓国	基礎研究	△	↗	ホログラフィック顕微鏡による無標識イメージングやゴーストイメージング技術で新しい手法を開発しており、ここ数年、バイオイメージング研究が活発になっている。
	応用研究・開発	△	→	特に目立った動きは見られないが、ベンチャー企業による基礎研究の実用化などが一部で見受けられる。
シンガポール	基礎研究	◎	↗	シンガポール科学技術研究庁 (A*STAR) とシンガポール国立大学 (NUS) を中心に、世界中から研究者を集め、Nature、Science などの有力科学誌に多くの研究成果を発表している。バイオポリスや Singapore Bioimaging Consortium (SBIC)、NUS の Mechanobiology institute など、バイオイメージングを含むバイオ研究の環境としては世界最高レベルにある。とくに、近年のバイオ研究で重要視されているメカノバイオロジーに関して、世界最大級の研究所を設立するなど、注力する研究分野の先見性も優れているといえる。
	応用研究・開発	△	→	2000 年以降、世界中の製薬会社やバイオ関連企業が R&D 拠点をシンガポールに設立してきたが、近年は合理化を進め次々と撤退しているため、産業化という面では、バイオイメージングを含むバイオ研究は順風満帆という状況ではない。

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Akiko Kumagai et al., "A Bilirubin-Inducible Fluorescent Protein from Eel Muscle," *Cell* 153, no. 7 (2013) : 1602. doi:10.1016/j.cell.2013.05.038
- 2) Asako Sakaue-Sawano et al., "Genetically Encoded Tools for Optical Dissection of the Mammalian Cell Cycle," *Molecular Cell* 68, no. 3 (2017) : 626. doi:10.1016/j.molcel.2017.10.001
- 3) Joseph Wong, Matthew Todd and Peter Rutledge, "Recent Advances in Macrocyclic Fluorescent Probes for Ion Sensing," *Molecules* 22, no. 2 (2017) . doi:10.3390/molecules22020200

- 4) Yoshihisa Fujita et al., "Fluorescence Resonance Energy Transfer Based Quantitative Analysis of Feedforward and Feedback Loops in Epidermal Growth Factor Receptor Signaling and the Sensitivity to Molecular Targeting Drugs," *FEBS Journal* 281, no. 14 (2014) : 3177. doi:10.1111/febs.12852
- 5) Yoshifumi Wakisaka et al., "Probing the Metabolic Heterogeneity of Live *Euglena Gracilis* with Stimulated Raman Scattering Microscopy," *Nature Microbiology* 1, no. 10 (2016) . doi:10.1038/nmicrobiol.2016.124
- 6) Taro Ichimura et al., "Visualizing Cell State Transition Using Raman Spectroscopy," *PLoS ONE* 9, no. 1 (2014) . doi:10.1371/journal.pone.0084478
- 7) Meng-Tsen Ke, Satoshi Fujimoto and Takeshi Imai, "SeeDB: A Simple and Morphology-preserving Optical Clearing Agent for Neuronal Circuit Reconstruction," *Nature Neuroscience* 16, no. 8 (2013) : 1154. doi:10.1038/nn.3447
- 8) Kwanghun Chung et al., "Structural and Molecular Interrogation of Intact Biological Systems," *Nature* 497, no. 7449 (2013) : 332. doi:10.1038/nature12107
- 9) Shimpei I. Kubota et al., "Whole-Body Profiling of Cancer Metastasis with Single-Cell Resolution," *Cell Reports* 20, no. 1 (2017) : 236. doi:10.1016/j.celrep.2017.06.010
- 10) Hiroshi Hama et al., "ScaleS: An Optical Clearing Palette for Biological Imaging," *Nature Neuroscience* 18, no. 10 (2015) : 1518. doi:10.1038/nn.4107
- 11) Guosong Hong, Alexander L. Antaris and Hongjie Dai, "Near-infrared Fluorophores for Biomedical Imaging," *Nature Biomedical Engineering* 1, no. 1 (2017) . doi:10.1038/s41551-016-0010
- 12) Masao Kamimura et al., "Over-1000 nm Near-infrared Fluorescent Biodegradable Polymer Nanoparticles for Deep Tissue in Vivo Imaging in the Second Biological Window," *Polymer Journal* 49, no. 12 (2017) : 799-803. doi:10.1038/pj.2017.59
- 13) Kohki Okabe et al., "Intracellular Temperature Mapping with a Fluorescent Polymeric Thermometer and Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy," *Nature Communications* 3, no. 1 (2012) . doi:10.1038/ncomms1714
- 14) Yasuteru Urano et al., "Selective Molecular Imaging of Viable Cancer Cells with PH-activatable Fluorescence Probes," *Nature Medicine* 15, no. 1 (2009) : 104. doi:10.1038/nm.1854
- 15) Shodai Takahashi et al., "Development of a Series of Practical Fluorescent Chemical Tools To Measure PH Values in Living Samples," *Journal of the American Chemical Society* 140, no. 18 (2018) : 5925. doi:10.1021/jacs.8b00277
- 16) Ryosuke Kawakami et al., "In Vivo Two-photon Imaging of Mouse Hippocampal Neurons in Dentate Gyrus Using a Light Source Based on a High-peak Power Gain-switched Laser Diode," *Biomedical Optics Express* 6, no. 3 (2015) : 891. doi:10.1364/boe.6.000891
- 17) Cristina Rodríguez and Na Ji, "Adaptive Optical Microscopy for Neurobiology," *Current Opinion in Neurobiology* 50 (2018) : 83-91. doi:10.1016/j.conb.2018.01.011
- 18) Zhilun Zhao et al., "Applications of Vibrational Tags in Biological Imaging by Raman

- Microscopy," *The Analyst* 142, no. 21 (2017) : 4018. doi:10.1039/c7an01001j
- 19) Euan McLeod and Aydogan Ozcan, "Unconventional Methods of Imaging: Computational Microscopy and Compact Implementations," *Reports on Progress in Physics* 79, no. 7 (2016) . doi:10.1088/0034-4885/79/7/076001
- 20) Hayato Ikoma et al., "A Convex 3D Deconvolution Algorithm for Low Photon Count Fluorescence Imaging," *Scientific Reports* 8, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41598-018-29768-x
- 21) Yoshiyuki Arai et al., "Spontaneously Blinking Fluorescent Protein for Simple Single Laser Super-Resolution Live Cell Imaging," *ACS Chemical Biology* 13, no. 8 (2018) : 1938-1943. doi:10.1021/acscchembio.8b00200
- 22) Joerg Schnitzbauer et al., "Super-resolution Microscopy with DNA-PAINT," *Nature Protocols* 12, no. 6 (2017) : 1198-1228. doi:10.1038/nprot.2017.024
- 23) Satoshi Iwano et al., "Single-cell Bioluminescence Imaging of Deep Tissue in Freely Moving Animals," *Science* 359, no. 6378 (2018) : 935-939. doi:10.1126/science.aaq1067
- 24) Gavin Young et al., "Quantitative Mass Imaging of Single Biological Macromolecules," *Science* 360, no. 6387 (2018) : 423-27. doi:10.1126/science.aar5839
- 25) Kaoru Seiriki et al., "High-Speed and Scalable Whole-Brain Imaging in Rodents and Primates," *Neuron* 94, no. 6 (2017) . doi:10.1016/j.neuron.2017.05.017
- 26) Tsung-Li Liu et al., "Observing the Cell in Its Native State: Imaging Subcellular Dynamics in Multicellular Organisms," *Science* 360, no. 6386 (2018) . doi:10.1126/science.aaq1392
- 27) Shuichi Shimma et al., "Microscopic Visualization of Testosterone in Mouse Testis by Use of Imaging Mass Spectrometry," *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 408, no. 27 (2016) : 7607-7615. doi:10.1007/s00216-016-9594-9
- 28) Seitaro Ohtsu et al., "Development of a Visualization Method for Imidacloprid in *Drosophila Melanogaster* Via Imaging Mass Spectrometry," *Analytical Sciences* 34, no. 9 (2018) : 991-996. doi:10.2116/analsci.18scp04

2.3 ICT・エレクトロニクス応用

ナノテクノロジー・材料を基盤とした情報通信・ナノエレクトロニクス技術は、IoT (Internet of Things)、人工知能 (AI) 時代に代表される今後のスマート情報社会、革新的環境エネルギー社会、世界最高水準の医療・福祉社会を支える共通基盤技術と位置づけられる。これからのエレクトロニクスデバイスは、将来の様々なアプリケーションを睨みながら、さらなる高性能化・高機能化とともに、従来よりも桁違いの超低消費電力化が強く求められ、世界的に競争が激化している分野である。

現状の CMOS デバイスには、微細化の物理的限界、特性ばらつきの増大、素子の消費電力増大などが見え始めており、この限界を突破する方策として、いくつかのナノエレクトロニクスの潮流が見え始めている。一つは、現在の平面的な 2 次元デバイスである CMOS を TSV (貫通シリコンビア) や近接場磁界結合の技術を使って 3 次元化するものであり、さらには CMOS の上に、スピンドバイス、フォトニックデバイス、MEMS/NEMS、センサなど、異種機能のデバイスを 3 次元的に集積化するヘテロ集積化技術である。これにはメモリとプロセッサを積層集積化する技術も含まれる。もう一つは、従来の材料にはない新しい機能の活用を視野に入れた新規デバイス・材料開発であり、例えば既存の 3 次元的バルク材料とは異なる物性の表面・界面を有するグラフェン、遷移金属ダイカルコゲナイドやトポロジカル絶縁体のような 2 次元機能性原子薄膜などの新材料の特性を活用し、飛躍的な消費電力削減と超高速化を可能にするイノベティブなデバイス創製などを目指す流れである。三つ目の潮流は、不揮発性ロジックやニューロモルフィックコンピューティング、動的再構成プロセッサ、量子コンピューティングなどに代表される新規のアーキテクチャを取り入れて将来の超高性能かつ超低消費電力のコンピュータ技術を確立しようという流れである。これからの新しいアプリケーションやサービスを生み出す革新的なナノエレクトロニクス基盤を創成するためには、基本デバイスの改善だけのアプローチでは限界があり、集積回路レベルからシステムレベル、さらにはソフトを含めたアーキテクチャの視点からの検討も重要となる。

以上の観点から、今後の ICT・ナノエレクトロニクスの研究開発には、システムを見据えた、技術レイヤー間の融合が不可欠になると予測される。特に日本における人工知能技術の開発は、ソフト開発が中心になっており、デバイス材料と回路アーキテクチャの間に高い壁が存在する。今後は、ソフトとハードの融合によりデバイス開発を加速させるとともに、長期的視野に立った俯瞰的な研究開発が求められる。

2.3.1 超低消費電力（ナノエレクトロニクスデバイス）

（1）研究開発領域の定義

従来よりも桁違いの超低消費電力を可能とするナノエレクトロニクスデバイスを実現し、集積回路への適用を目指す。新材料の特性を理論的・実験的に確認し、システム最適設計によるデバイス試作で超低消費電力動作、超高速動作、超大容量、超長期保存などの優位性を確認するなどの研究開発が課題である。また、飛躍的な消費電力削減と超高速演算を可能にする、従来の CMOS を超える新動作原理のデバイスや新回路アーキテクチャなどのデバイスレベルからシステムレベルにまたがる研究開発課題が存在する。「Society5.0」を実現するための IoT システム、ビッグデータを利活用するクラウドサービス、トリリオンセンサー社会を実現するエッジコンピューティング、そしてそれらを支えるセキュリティ技術の社会実装と高度化に、これらの課題解決は必要不可欠のものとなっている。

（2）キーワード

低消費電力、不揮発性メモリ、不揮発性ロジック、ロジック・イン・メモリ、集積回路、More Moore、More than Moore、Beyond CMOS、抵抗変化メモリ、立体構造トランジスタ、トンネル・トランジスタ (TFET)、負性容量による急峻スロープトランジスタ (NCFET)、スピントロニクス、グラフェン、トポロジカル絶縁体、脳型コンピュータ、非ノイマン型、ニューロモルフィック、機械学習、ディープラーニング、IRDS、SCM

（3）研究開発領域の概要

[本領域の意義]

今後の持続的な社会実現には地球環境の保全とエネルギー問題を両立させることが必要であり、再生可能エネルギー利用の拡大や消費エネルギーの削減が重要になっている。エネルギーとして大きな割合を占めるようになっている電気エネルギーについては、電気機器の低消費電力化技術の開発による、さらなるエネルギー消費の低減が求められている。その中でも各分野において使用量が増加している情報通信機器の省エネルギー化はモーターや照明器具の高効率化とともに重要であり、エレクトロニクスデバイスの低消費電力化が強く求められている。

情報通信機器の心臓部に当たるのがマイクロプロセッサ、メモリ、高周波回路などの集積回路であるが、これらは市場の要求から高性能化・高機能化・高集積化が進められており、現在のトランジスタ (MOSFET) の微細化限界を超える新しい動作原理と省低消費電力化を同時に進めるためには、トランジスタの材料・構造、基本的な論理回路、メモリ回路などに対して革新的な技術を開発し、導入していく必要がある。例えば、電力の供給を切っても記憶した情報が消えない不揮発メモリや不揮発ロジック、光通信デバイスの小型・集積化、使っていない回路ブロックのきめ細かな電力供給制御、動作電圧の低い新原理のトランジスタ、人間の脳の動作に近い (エネルギー消費の少ない) 新規デバイスや量子情報処理など新規アーキテクチャなどの検討が必要である。

これらの技術が実現できれば、オフィスにおけるパソコンやサーバーの未使用時の機器停止と瞬時起動、データセンター等における大幅な電力削減、家庭における家電の待機電力削減、携帯機器の長時間使用など、消費電力化と利便性の向上につながる。

2015 年度版報告書の公開で活動を終えた国際半導体技術ロードマップ (ITRS) の資産を引

き継ぎ、International Roadmap for Devices and Systems (IRDS) 関連活動が、IEEE と応用物理学会を中核としてスタートした。2016年に白書 (White paper)、2017年度にはIRDSとしては初めての報告書 (Report) が公開されている。IRDSでは、その名に示されているように、デバイス・プロセス関連技術とシステム・アーキテクチャ関連技術の協調的な研究開発の重要性が謳われている。また、デバイスの3次元化を含むサブ10nm超微細化が継続する中、さらにここ数年の際立ったトレンドとしては、「クラウド」と「IoTエッジ」からなる「AIベースのシステムソリューション」と、AIを含む新コンピューティング・アーキテクチャを実現する新デバイス開発への要求の高まりが挙げられる。これらは、Beyond CMOSデバイス、あるいは、Emerging Researchデバイスと呼ばれている。

[研究開発の動向]

●ロジック用デバイス

米国ではNRI (ナノエレクトロニクス研究イニシアチブ) が中心になって研究開発を推進している。従来はNRI主導で4つの地域の大学で、トンネルデバイス、スピンドデバイス、グラフェンなどのテーマに対して集中的な研究を行っていたが、2013年に刷新され、3つのNRI研究センター (CNFD、INDEX、SWAN) と3つのSTARnet (Semiconductor Technology Advanced Research network) 研究センター (FAME、C-SPIN、LEAST) になった。このSTARnetが米国DARPAと協力して運営されることは注目される。これらの研究センターでは、エネルギー効率の高いナノ磁性のスイッチング素子、サブスレッショールドスロープの急峻な素子としてIII-Vのトンネルトランジスタ (TFET) を超えるデバイスなどを研究開発している。また、新デバイスのコンセプトは新たな材料が基盤となるとしている。

●不揮発性メモリ

日本における主な研究開発プロジェクトとしては、2010年経済産業省でスタートして2011年にNEDOに移管された「低炭素社会を実現する超低電圧デバイスプロジェクト (LEAP)」があった。このプロジェクトでは、LSIの配線層に集積を可能とする磁気抵抗変化デバイス、相変化デバイス、原子移動型スイッチの開発が進められていた。金属原子移動型スイッチに関しては、その後、JST CREST等に研究開発が引き継がれ、FPGAの実用化等を見据えた研究開発が継続されている [参考文献1]。これは産官連携の好例である。動作原理はConductance Bridge型のReRAM (CBRAM) のそれと同様であるが、スイッチングに適した仕様となるように工夫されている。

また、最先端研究開発支援プログラム (FIRST) の「省エネルギー・スピントロニクス論理集積回路の研究開発」において実施された、スピントロニクス素子を用いた待機時電力ゼロのロジック混載用不揮発性メモリの研究開発は、2014年度から開始された内閣府の革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) の「無充電で長期間使用できる究極のエコIT機器の実現」に引き継がれている。当該事業では、STT (Spin-Transfer-Torque) -MRAMから、スピン軌道トルク (SOT:Spin Orbit Torque) MRAM、さらには、電圧 (パルス) 駆動MRAM (Voltage Controlled MRAM: VC-MRAM) 電圧制御スピントロニクスメモリ (Voltage-Control Spintronics Memory: VoCSM) 等、超低消費電力スピントロニクスメモリの研究開発への展開がなされている [参考文献2-4]。さらに、2016年度より、実世界にある多様なデータをセンサネットワーク等で収集し、サイバー空間で大規模データ解析・処理等を行い、現実世界

を制御する次世代 IoT 基盤技術を横断的に開発することを目指した NEDO 「IoT 推進のための横断技術開発プロジェクト」が開始された。データ蓄積に関しては、IoT システム用革新的不揮発性メモリ、高速で大容量な異種メモリで構成される高速かつ低電力な分散ストレージサーバーシステムと、各種メモリの利点を引き出すヘテロジニアス分散データベースの開発等が推進されている。セキュリティに関しては、ReRAM の個体差を認証に用いる Physical Unclonable Function (PUF) 技術の開発も行われている。

また、ReRAM など各種不揮発性メモリ素子の持つメモリスタ特性を人工シナプスとして活用し、ニューロモルフィック・コンピューティングに応用する研究も活発化している。

●カーボン材料と層状物質

新たなトランジスタチャンネル材料の有力候補として考えられているカーボンナノチューブやグラフェンなどについては、Si-CMOS をベースとする従来からの集積・微細化技術開発の中に組み込まれる形で NEDO の MIRAI プロジェクトにおけるナノシリコンインテグレーション (NSI) や JST CREST の次世代エレクトロニクスデバイスなどで取り組みがなされてきた。また、2013 年より科研費新学術領域「原子層科学」、2014 年より「 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」が開始された。さらに 2013 年度からは JST で「素材・デバイス・システム融合による革新的ナノエレクトロニクスの創成」と題する CREST とさきがけが、2014 年度には、「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」と題する CREST が開始され、ナノエレクトロニクス・材料関係の国家プロジェクトが少しずつ整ってきた。

しかし、これらのプロジェクトは、その予算規模からいっても要素技術の基礎検討と一部デバイス試作による技術実証に留まっており、他の材料とは異なる物性を活かしつつ産業的なインテグレーションを見据えた研究開発にどうつなげていくかが今後の課題である。

一方米国では IBM が「C (カーボン) の生態系を構築する」との理念を掲げ、情報処理デバイスを含む様々なアプリケーションを提案し、一部は実際に試作まで行っている。世界中を回って (キャラバンして) 参画者を (資金的面も含めて) 募っている。Samsung は、Graphene spintronics を対象とした研究部署を設立している。米国 SRC/NRI はグラフェンとスピントロニクスをともに次世代ロジックデバイスの主要技術と見なしてロードマップを提案している。

●脳型演算回路

超低消費電力を目指すナノエレクトロニクスの新たなアーキテクチャの研究開発の一つである脳型演算回路においては、脳型動作をする固体素子および脳型回路を実現するアーキテクチャに関する基礎研究が盛んに行われてきていた。国内では、JST CREST [次世代デバイス] にて、不揮発性アナログ抵抗変化素子が開発されていた [参考文献 5]。国内では、NEDO 「IoT 推進のための横断技術開発プロジェクト / 超高速・低消費電力ビッグデータ処理を実現・利活用する脳型推論集積システムの研究開発 (2016 年度～)」にて、エッジデバイス応用を想定した脳型演算デバイス、回路とアーキテクチャの一体型研究開発が開始され、その動作実証と評価が進められている [参考文献 6]。その後、欧米では、国家プロジェクトを開始し、集積回路を用いた脳型情報処理の実証が進められてきた。

以下に、今後必要となる取組みを記す。

●ロジック用デバイス

トランジスタの高移動度チャンネル材料として化合物半導体やナノカーボン材料 (グラフェン、

カーボンナノチューブ) などの実用化を目指した研究開発も進めていく必要があり、さらには電源電圧を大幅に減らすことができる急峻なサブスレッショルド特性 (S 値 $<60\text{mV}/\text{dec}@RT$) を実現するトンネル・トランジスタの研究開発にも材料の視点を加えることが重要である。さらに、ロジック素子の低消費電力化と低発熱化は今まで以上に重要になるため、発熱をいかに抑制するかも鍵になる。将来の集積回路における熱の問題を解決するためには、熱伝導など熱に関するナノレベルの理解に基づいて、熱エネルギーの効率的な制御や利用の技術を創成するフォノンエンジニアリングの研究開発に取り組む必要がある。

●メモリデバイス

DRAM や NAND フラッシュメモリの微細化限界が迫っていることもあり、抵抗変化型メモリ (ReRAM)、相変化メモリ (ex. PRAM, PCM, TRAM)、スピン MRAM (ex. STT-MRAM, SOT-MRAM) など不揮発メモリの研究開発やそれらの 3 次元実装技術の開発を加速していく必要がある。また、ビッグデータの利活用を推進するために、従来の視点にはなかった、デジタルデータを 100 年、1000 年単位で安全に保存できる、超長期保存メモリデバイスの研究開発が喫緊の課題となってきた。ここでは如何に超長期信頼性を担保できるメモリを開発できるかが鍵であり、それを実現するメモリの候補としては、MONOS、ReRAM、CNT を使った RAM、現在の Flash メモリの改造などが候補に挙がっている [参考文献 7]。

超省電力の観点からは、不揮発性メモリは電流駆動から電圧駆動への流れが進展することが期待される。具体的には、電圧駆動 MRAM (VCM、VoCSM) の研究開発が盛んに進められている。一方で、熱耐性や書換回数等のメモリ特性やメモリの動作範囲他の回路設計関連技術等に、研究課題が指摘されている [参考文献 8, 9]。また、FTJ (Ferroelectric tunnel junction) や FeFET、さらには強誘電体 Hf 酸化物を用いたメモリ等も、新材料研究の観点から注目を集めている [参考文献 9]。従来、揮発性メモリが使われてきたメモリ階層への不揮発性メモリの進出も期待されている。具体的には、SRAM が多用されてきた L2 キャッシュ、L3 キャッシュへの STT-MRAM 適用の試みなどが考えられる [参考文献 10]。

DRAM と NAND フラッシュメモリの処理遅延時間 (latency) のギャップは 10^5 倍にも及び、高効率のメモリシステム構築におけるボトルネックとなっている。これを埋めるバッファメモリとして、各種不揮発性メモリを用いた SCM (ストレージクラスメモリ) の開発が必要である。PCM (Phase Change Memory) を用いた SCM が既に製品化されているが、さらなる高機能化、大容量化を目指し、ReRAM (Resistance switching RAM) 等を使った SCM の開発が期待されている。

新規不揮発性メモリの普及には、製造工程及び実使用下における信頼性の確保が喫緊の課題であり、特性劣化のメカニズム解明、劣化予想のモデル構築、劣化させない使い方の提案など、総合的なアプローチが求められる。

さらに、Embedded memory (組み込みあるいは埋め込みメモリ) の研究開発も、その重要性は増すばかりである [参考文献 11]。3D XPoint™ memory の成功は、DRAM と NAND の中間性能を持つストレージクラスメモリの有用性を実証した [参考文献 8]。これらの研究開発は、非ノイマン型コンピューティング研究開発のブースターとなっている。

●ナノカーボン材料

大面積化や結晶性・層数・配向等の制御など集積化を前提とした工学的なアプローチで、産・学の連携が必要になる。具体例としては、グラフェン関係では、原子レベルでのナノ構造制御(欠陥導入、グラフェンナノリボン [GNR] のエッジ制御など)、化学吸着による物性変化、プロ

セス誘起ダメージの回避、グラフェン内電子伝導挙動の解析、散乱の制御などが必要であり、また、デバイス構造にするためのプロセス・インテグレーションの研究開発も進めていく必要がある。さらに、層状半導体である遷移金属ダイカルコゲナイドの研究も進める必要がある。さらに広い意味での二次元機能性原子薄膜であるトポロジカル絶縁体の電子デバイスへの応用研究も今後進めていく必要があろう。

●脳型演算回路

個々の要素技術の開発（その基本的な理解を含む）、その動作を実現し得る固体素子の開発、およびその特徴を活かした回路アーキテクチャの構築が必要である。メモリデバイスの項でも記載されている通り、ストレージクラスメモリ等の研究開発が、非ノイマン型コンピューティングの研究開発のブースターとなっている一方で、我が国において、現状では、メモリストに代表される新材料・新デバイスの研究開発とシステム・アーキテクチャの研究開発を一体で行う試みは少ない。今後、これらのソフト・ハード一体型研究開発の推進が喫緊の課題となるであろう。また、これら材料・デバイス・回路関係者に加え、数学者、脳科学者などとの連携や、材料からデバイスレイヤーでは信頼性、回路からアーキテクチャレイヤーではセキュリティ、そして研究開発のガイドライン策定・標準化も重要になってくると思われる。

●センシングデバイス

振動・温度だけではなく、生活環境中に存在する微量の化学物質を検知するセンサが求められている。従来のガスセンサは化学物質の選択性が低く消費電力も大きい。選択性の向上と低電力化を実現する研究開発を進めることが重要である。

●発蓄電デバイス

エネルギー問題だけでなくモバイル製品の使い勝手を考えると、充電フリー化は必須の課題であり、低消費電力化と共に、環境発電デバイスと蓄電デバイスの集積化は強く望まれていると考えられる。環境発電では振動・熱だけでなく、環境電波や集積回路中の電荷や熱の再利用など、複数のエネルギー源を活用することが想定される。他方蓄電デバイスでは、蓄えられるエネルギー体積密度を大きくできる全固体電池などに注目が集まっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

上述の米国 NRI では、今後探求すべき研究テーマとして、①「磁化の向き」とは異なる状態変数（スピン状態、光の状態、電子の位相状態など）、②新しい物理に基づく省エネロジック（スピン波、光波、音波など）、③古典的なものと量子の境に位置するような計算（量子状態の僅かな重なりを古典的計算に取り入れたものなど）、④ブール代数とは異なる計算（有用なデータ変換を高エネルギー効率・高速に行うダイナミックなシステム：アクセラレータ的）、などを検討している。しかしながら、基本素子だけのアプローチには限界があり、集積回路レベルからの回路ネットワークの革新と情報アルゴリズムの革新との融合による新しいアプローチも今後必要となる。実際、萌芽的レベルながらこの種の研究も世界中で行われ始めている。また、アナログ的不揮発性メモリアレイを論理演算に用いる「In-memory Computing」は世界的な動向になりつつある。ロジックとデジタルメモリのデバイス・システムレベルでの協調設計を目指した「Memory on Logic」に代わり、ニューロモルフィック・コンピューティング研究が主流になりつつある。

- ロジック関係では発熱・消費電力を十分に抑える必要があるため、FinFETやナノワイヤトランジスタなどの3次元構造トランジスタの開発とともに、TFET (Tunneling FET、トンネル・トランジスタ) やネガティブキャパシタンス FET などの急峻なサブスレッショルド特性を持つデバイスの開発は引き続き盛んに行われている。
- ナノカーボン関係では、グラフェンに制御された欠陥を導入することで磁化が発現することが理論・シミュレーションにより示されている。単原子 (C) 欠陥、線状欠陥 (zigzag edge) が有効であることが示され、高密度磁気記録媒体への応用などが提案されている。また、Samsung は韓国内の多数の大学と連携し、大学側からの発表の形態でグラフェンやCNTの集積的な機能実証についての報告を始めている。グラフェンの大面積合成と転写による大面積の透明導電膜 (2010年のNature) 等の例のように、大面積化や大面積のロールベースでの転写プロセスなどのプロセス課題を含む取り組みで、ナノカーボン材料デバイスインテグレーションを意識している。
- 脳型演算回路関係では、シナプスに対する医学・生理学的理解の深耕と、抵抗変化型メモリや相変化型メモリの登場が上手くマッチしていることから、人間の脳情報処理に習った密結合型の3次元ネットワークを有する高密度メモリ技術とその集積プロセス技術、高効率な情報処理アルゴリズムとそれを具現化する回路技術などの研究開発が盛んになってきている。人間の脳では、「記憶」と「忘却」を繰り返すことで重要な情報のみ「経験」として蓄積し、新たな判断に利用しているが、この「記憶」と「忘却」を自律的に行う固体素子の動作も、国内で実証された。電荷蓄積型の不揮発性メモリに加え、PCM、ReRAM、原子スイッチ、スピントロニクス素子などにおいては、それらのアナログ抵抗変化特性等を用いたシナプス動作の研究なども進みつつあり、脳の情報処理の本質をまねたコンピュータの開発も視野に入ってきた [参考文献 12, 13]。ReRAMにおいては、その抵抗変化比が大きいことを利用して、アナログ制御を行い、積和回路等に應用する研究開発が活発に行われている。最近では、そのアナログ変化の制御性を高めるための研究開発も報告されるようになってきた [参考文献 14, 15]。IBM が、人間の脳のように同時並行的に情報処理するコンピュータチップを開発して注目を集めている。これは「ニューロシナプティック・コンピューティング・チップ」と呼ばれ、高度なアルゴリズムとシリコン電子回路を使用している。このようなチップの研究開発が極めて盛んになってきており、実用化が進んだ暁には、多くの画像や音声から特定の顔や声を識別したり、膨大な情報 (ビッグデータ) から目的の情報を精度良く見つけたりする機能を、ロボットや自動車、家電などに組み込むことが可能になる。
- 不揮発性メモリ関係では、DRAM、NAND を置き換えるといったシンプルな目標が設定された研究開発は影を潜め、適材適所で活用することを想定した研究開発が推進されている傾向が伺える。また、セレクトタの研究開発も継続的に進められている [参考文献 16]。ここでは、各種不揮発性メモリ素子特性に合ったセレクトタ設計・材料選定が必要である。ReRAM用2端子セレクトタとしては、OTS (Ovonic Threshold Switching) を有望視する報告が多い。

2018年5月に京都で開催された第10回IEEE International Memory Workshop (IMW) における主催者発表によると、技術トレンドを不揮発性メモリにて分類すれば、件数の多い順に、ReRAM (30%)、NAND・Flash (18%)、MRAM (14%)、Selctror and PCM (9%)、Embedded (9%)、DRAM (7%)、FeRAM (7%)、Neuro (7%) とのことであった。2018 Symposia on VLSI Technology において、同様に発表件数で分類すれば、ReRAM (32%)、

MRAM (21%)、NAND (14%)、SRAM (14%)、PCM (11%)、その他 (8%) となっていた。

不揮発性メモリの基礎研究では、IoT 向けアプリを前提とした超省電力化を目指して、動作原理を電流駆動から電圧駆動へ変える動きが活発化している。例えば 電圧制御スピン RAM、FeFET-RAM, FTJ などがある。強誘電体材料としては、Hf 酸化物が注目を集めている [参考文献 9]。Hf 酸化物は ReRAM としても使えるし、強誘電特性を使って FeFET や FTJ としての使い方もできる。従来の high-k ゲート絶縁膜としての用途もあり、万能材料になる可能性があることで、世界中の研究機関が研究を加速している。ただし、Hf 酸化物を強誘電体として用いた時の、不揮発性メモリ動作不良のメカニズムはまだよくわかっていないので、信頼性検討もこれからの課題である。また、ReRAM の 3D 化開発も加速している。デバイスを 3 次元的に作り上げるもので、自己選択メモリセルを 4 層重ねたクロスポイント型 3D-ReRAM や、積層膜の端面を利用した 4 層 3D 構造の ReRAM など、積層膜の端面を使えるところが ReRAM ならではの 3 次元構造といえる。さらに、ReRAM に関しては、様々な計測手法を用いて動作原理の解明が進み、メモリ動作に関する信頼性を議論できるようになってきていることがここ数年間の大きな進展である [参考文献 17, 18]。最近の傾向として、不揮発性メモリにおける混載向け、大容量向け (クロスポイント型) の境界がぼやけつつある。ReRAM を混載に使う試みや、STT-MRAM をクロスポイント型で 3 次元積層化する試みも報告されている。

PCM に関しては、従来バルク型→ナノワイヤ (ピラー) 型→結晶粒界の相変化→超格子型 (トポロジカル絶縁体) と、学術的な進化が持続的にもたらされており、ストレージクラスメモリとしての応用も進展している [参考文献 8, 19]。PCM は 3 次元積層しやすく、OTS セレクタとの相性も良いことから、SSD 向けバッファメモリとしての製品化も報告されている。

また、新規不揮発性メモリ素子のメモリ用途以外の応用検討という視点も重要と思われる。例えば、ロジック演算回路への不揮発性の付与とそれを用いたロジックセルベースの不揮発性パワーゲーティング、不揮発性メモリ素子を用いた新規論理演算回路の構築とそのためのアーキテクチャ (非ブール代数、非ノイマン)、不揮発性素子のバラツキ特性を利用した暗号生成技術 (PUF: physical unclonable function)、上記の脳型演算回路でも触れられている不揮発性メモリ素子のアナログ的抵抗変化特性を活かした人工シナプスデバイス (メモリスタ) などである。さらに、酸化物の酸化還元反応が不揮発性抵抗変化の起源であることを利用して、メモリ部分を高感度で低消費電力の水素センサとして用いる報告がなされ、注目を集めている [参考文献 20]。

各種不揮発性メモリを、デジタルメモリとしてでなく、そのアナログ特性を活かしたシナプスデバイス (メモリスタ) としてニューロモルフィック・コンピューティングに適用する発表は、近年、急激に増加している。今回調査した IEDM 2017, VLSI シンポジウム 2018, IMW 2018 にて不揮発性メモリ関係の発表は計 59 件あったが、その 20% にあたる 12 件は、ニューロモルフィック・コンピューティング (In-memory Computing) 応用であった。

なお、ニューロモルフィック・コンピューティングに用いる不揮発性メモリアレイの素子は、LRS/HRS (低抵抗状態 / 高抵抗状態) のスイッチングを行う基準抵抗値を数百 $k\Omega$ ~ $1M\Omega$ と非常に高くすることが必要で、デジタルメモリ用途の 100 ~ 1,000 倍になる。狙うアプリによって、同じ原理の不揮発性メモリであっても、設計仕様が大きく異なることに留

意されたい。

新規不揮発性メモリの信頼性に関する詳細な検討も、ここ数年の報告で目立ってきている。ReRAMにおける導電性フィラメントのナノコンタクト領域における金属イオンや酸素空孔の振舞い、それらと動作不良、特性劣化との関係が徐々に明らかにされつつある。併せて、製造工程における特性劣化、実使用下での動作信頼性の議論も行われており、それらの検討結果をデバイスや材料設計に反映する試みが活発化している。量産実用化が近づいてきている兆候とも見なせよう。

不揮発性メモリ開発の activity は、米国が依然、他地域と比べ群を抜いている。地域間の研究協業が多いものの、米国は IEDM2017 で 14 件、VLSI2018 で 6 件の発表があった。ちなみに、日本は 0 件 / 3 件、欧州は 10 件 / 1 件、中国は 5 件 / 2 件、韓国は 2 件 / 5 件、台湾は 6 件 / 1 件となる。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

EU の参加国が総力を上げて取り組む、10 億ユーロの 10 年プロジェクトが注目される。2013 年 1 月に始まった EU Flagship グラフェンプロジェクトで、「20 世紀の驚異の材料がプラスチックなら 21 世紀はグラフェンであろう」との標語の下に、このプロジェクトからは多くのグラフェン応用が生まれてくると期待される。また、特徴的なこととして、グラフェンやその他の 2 次元材料に関する国際標準化が、このグラフェン Flagship にて強力で推進されていることが挙げられる。グラフェン応用における国際標準化の必要性が強く認識されている。

米国では、新規な素子を用いたコンピューターシステムの開発に関する大型の国家プロジェクトが進んでいる。また、米国やヨーロッパではニューロモルフィックコンピューティングに関するプロジェクトが新たに立ち上がりつつある。特に米国では、既に終了した STARnet の SONIC が次世代情報処理技術研究を牽引していたようである。米国におけるマグネティック・コンピューティング研究の一環と思われる電歪と磁歪を組み合わせた磁気異方性制御手法が U.C.Berkeley から発表されている。同プログラムには DARPA、NRI、NSF などの予算がついているもようである。Stanford 大学が先導している SystemX Alliance、Non-Volatile Memory Technology Research Initiative から報告されている、DARPA 等のサポートを受けた Nano-Engineered Computing Systems Technology、あるいは N3XT と呼ばれているプロジェクトでは、新材料開発を含む、異種接合に関する研究開発を活発に推進している。例えば、シリコンベースロジック、CNT ロジック、ReRAM、CNT センサを 3 次元積層する技術とそのシステムとアーキテクチャを開発し、主に 2015 年以降に、インパクトの高い学術雑誌、国際会議での報告を続けている。

Beyond CMOS の取り組みとして、米国では Rebooting computing のコンセプトの下、国プロとして注力しており、大きく 2 つの方向性が示されている。一つは ReRAM 系コンピューティングで、アナログ的抵抗変化を示す不揮発性素子 (ex. ReRAM) を人工シナプスとして用い、人工神経回路網を構築するもの。もう一つは、スピン系コンピューティングで、スピンホール効果により MTJ の書込み (磁化反転) を行うデバイス技術を核に、Non-Boolean 領域への展開を図っている。いずれも、生物の脳の働きを模した Neuromorphic Computing を目指したもので、脳に匹敵する高効率 (超省電力) の情報処理が期待される。

日本では 2014 年から始まった革新的研究開発推進プログラム (ImpACT) の中に「無充電

で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現」というプログラムが採択され、電流を流さず、電圧のみで磁気メモリ素子を記録し、IT 機器の電力使用量を劇的に削減することを目的としている。上記プログラムは、2016 年度より、STT 及び SOT-MRAM と電圧駆動 MRAM の 2 テーマに集約して活動している（5 プロジェクト体制を 2 分科会に改組）。また、2016 年度より始まった NEDO「IoT 推進のための横断技術開発プロジェクト」においては、システムとしてデータを収集、蓄積、解析するために必要となる基盤・実装技術、それらに必要となるセキュリティ基盤技術等の研究開発が行われ、それら新技術の社会実装が進められている。超低消費電力デバイスは、それら全てのカテゴリにおいて基幹技術となっている。

（5）科学技術的課題

今後の超低消費電力ナノエレクトロニクスの目指すべき方向は、従来の考え方の延長・延命ではなく、システムレベルから新たな枠組み・方式を構築することにあると考えられ、日本でも、レイヤー（アーキテクチャ、回路、デバイス、材料）間の垣根を取り払った研究プロジェクトの実現は必須である。特に、新型メモリと新型トランジスタの両方を（3次元で）混載し、両方の特徴を生かしたアーキテクチャの実現が必要であり、システム（回路）の専門家とデバイスの専門家の協調が不可欠である。

例えば、産業界による大規模メモリの実現と長期信頼性試験、大学（公的研究機関）によるメモリ機構の研究と長期信頼性モデルの構築、産業界と大学（公的研究機関）の共同開発による新材料探索などが必要になる。ロジックについても同様な枠組みでの研究が必要である。また、可能な限り早い段階から産学連携の体制を構築し、小規模集積回路レベルで萌芽研究から推進することで、研究開発の正しい方向の選択、実用化への効率的な技術移転を目指していくことが望ましい。

デバイス試作にはファウンドリ機能の強化が必要で、このファウンドリ機能を基軸にした産学連携の仕組みについてもさらに強化していく必要がある。また、デバイス作製に関する共用設備では新規な材料やデバイスの作製が容易にできるような体制・仕組みづくりが重要である。特にナノデバイス研究の場合、微細加工プロセスのためのクリーンルームの維持や高度な装置の運転・保守が重要であり、高度な能力と経験を持った技術者の存在が必要である。

（6）その他の課題

半導体エレクトロニクス分野において日本の産業界には厚い技術・人材蓄積があるが、その蓄積は急速に散逸し失われつつあるため、これを回避し人材や設備等を有効活用する仕組みが必要である。つくばの TIA の研究環境はその先導事例として期待されるが、個別ファンディングの縦割りの運用にならないよう、注意する必要がある。また、このような産業界の人材が集まっている中で、大学の学生が加わることは人材育成の視点で大変重要であり、大学からの学生の長期派遣の仕組みづくりを行う必要がある。

まだ萌芽的段階にある人工知能や脳型コンピュータ技術の開発には、産学官で研究交流・人材交流を密に行い協同していくことが重要である。大学では特に基本原理実証や基礎物理の追究を行うとともに、若い人材を育て研究分野に供給すること、国の研究機関ではじっくり腰を据えてより発展的な研究ができる環境を研究者に提供すること、産業界ではこれまでに蓄積されてきた技術的ノウハウを新たな研究に有用に活かすことが期待される。また、長期的な視点

を持って短中期の目標を説得力のある形で作成し、確実に研究を発展させていくようなプロジェクトの提案を行うとともに、優秀な研究者の国際的な循環に食い込めるような研究拠点を国内にも確立することが期待される。

さらに、最近の IoT デバイス技術や Edge AI computing に必要とされると考えられるのは、応用毎に異なる境界条件（コストも含む）と必要条件の高度なすり合わせであり、Foundry 企業を巻き込んで実現するソリューションビジネスと類似していると理解できる。これは正に日本企業が得意とするところであり、今後の IoT/Edge AI computing 技術を牽引することができる好機である。

(7) 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	○	→	<p>ロジック関係では、Steep Subthreshold を目指したデバイス開発、新チャネル材料トランジスタの研究開発など、重要な研究領域にしっかりと投資が行われ、深い学術的理解に基づく研究開発が行われている。</p> <p>メモリ関係では、従来の電荷蓄積型に代わり、状態変化（抵抗変化、相変化など）を動作原理とする不揮発メモリの基礎研究が盛んであり、材料、プロセスなどの分野で世界をリードする結果が報告されている。産総研で研究されている超格子 PCM（トポロジカル RAM）は、次世代 PCM として研究進展が期待される。スピン磁気メモリとしては、SOT (spin-orbit torque) -MRAM（東北大）と電圧制御スピン RAM（産総研）の 2 方式が研究されている。前者は 3 端子の電流駆動、後者は 2 端子の電圧駆動。Sub-ns の高速スイッチが低電力で可能と期待。</p> <p>メモリ関係の研究領域としては次の 2 点が重要である。</p> <ul style="list-style-type: none"> Vertical RRAM の提案と 3D 積層化への応用が米国、韓国と共同で進められている。NAND 置き換えを視野に入れている。Tera-bit の 3D-RRAM 実現のカギはセクタ。2 端子クロスポイントの積層なら、多値にしなくても NAND より高密度にできると期待。 将来の AI コンピューティングを目指し、RRAM を使ったニューラルネットワーク (NN) プロセッサ、不揮発性メモリアレイを使った In-memory computing の検討が活発化している。
	応用研究・開発	○	→	<p>ロジック関係のデバイス技術が日本の差別化技術にならなくなりつつある。</p> <p>メモリ関係では、DRAM や NAND フラッシュメモリの微細化限界が迫っており、これに代わる不揮発メモリの開発が活発に行われている。また三次元積層技術も盛んに研究され実用段階に入りつつある。NAND フラッシュメモリを製造している東芝は、DRAM 代替としてスピン RAM を使うことを目指した開発を韓国の SK-Hynix と技術的な補完関係を構築しながら共同で進めている。次世代メモリ開発では海外メーカーとの共同開発が一般化している。</p> <p>ReRAM は、2013 年にパナソニックからマイコン用途で市場投入がなされ、2016 年には、富士通セミコンダクター株式会社から、4M ビット品の提供が開始された。2017 年には、パナソニック セミコンダクターソリューションズと半導体ファウンドリである台湾 UMC より、40nm 世代に向けた微細化共同開発がリリースされた。その他、long-term retention の特性劣化など、メカニズムと劣化予測を行えるモデル構築が研究されている。</p> <p>ReRAM の PUF 応用が検討されている（パナソニック）。</p> <p>HfO₂ 材は期待の NVM 用万能材料で、Y ドーピングによる endurance 向上など、応用を前提にした材料研究が進められている。STT-MRAM は、高速性、書き込み電流低減、熱揺らぎ耐性を同時に満たすべく製品化検討が精力的に進められている。MTJ の微細化は、学会発表では 10nm φ 以下まで進んでいる。</p> <p>原子移動型スイッチは実用化検討段階で、FPGA の routing switch 応用などが期待される。遷移金属酸化物を用いる他の RRAM と異なり、Cu と Ru 電極に挟まれた固体高分子電解質中に Cu イオンの導電性フィラメントを形成する。スイッチ用途の他、NVM としての設計も可能。</p>

米国	基礎研究	◎	↑	<p>トポロジカル絶縁体の研究など、新研究領域の取りかかり・立ち上がり早い。</p> <p>ロジック分野においては、新材料・新原理を組み合わせたデバイスの施策など、非常に機敏に動いている。</p> <p>メモリ分野においては、RRAM の一つである CBRAM における Active 電極材料選定の理論研究は注目に値する。試行錯誤でなく理論で、揮発 (セレクトタ向け) / 不揮発 (メモリ向け) の Active 電極材料を選定できる。シミュレーション研究が非常に進んできており、CBRAM におけるセレクトタ / メモリ設計の良きガイドとなる。</p> <p>RRAM をメモリスタとして使い、ニューロモルフィック・コンピューティングあるいは In-memory computing システムを構築するための理論研究が活発。そのアレイは NN として働き、アナログコンピュータとしてのオンライン機械学習が可能。素子の信頼性が低くても (Bit Error Rate が多少大きくても)、学習機能により NN (アナログコンピュータ) としては十分、機能するとの見解。信頼性に対する考え方が異なる。</p> <p>RRAM の混載使用が検討されている。クロスポイント型でなく 1T1R として使うことで、ロジックとの融合を図る。そのための 1T として ON 電流が大きい 2D-MoS₂ FET が検討されている。10 nm 以下のノードを目指しており、3D 化も視野に入れている。</p>
	応用研究・開発	◎	↑	<p>シリコンフォトニクスの研究開発は猛烈なスピードで進んでいる。各種 NVM 開発が精力的に行われている。米国単独でなく、他地域との共同開発が目立つ (調査した 23 件中、14 件)。</p> <p>STT-MRAM では、混載以外の用途として 3D 積層化検討が進んでいる。pMTJ (垂直磁化型 MTJ) のインテグに向けた Doped-HfOx の 2 端子 bipolar セレクトタを使い、大容量クロスポイント型をデモ。BEOL の 400℃ 処理に耐える pMTJ は昨今の大きな要請であり、材料の開発が進められている。MTJ のスケーリング (ex. 20 nm φ 以下) 検討も進む。MTJ 周縁の加工ダメージがなければフリー層の異方性磁界は MTJ サイズ減少とともに増加し、結果として磁化の熱揺らぎ耐性を維持できることが示された。MTJ スケーリングに伴う抵抗増加を抑えるため、RA (抵抗×面積) 低減も検討されている。磁化固定層の薄膜化により多層膜界面の平坦化を図り、MgO 膜の信頼性を損なわずに厚みを低減し、RA を下げた。低電圧駆動の MTJ 開発も進められており、10 nm ノード以下のロジック電圧でも動く見通しを得ている。混載用途では今後、必要性が増す。</p> <p>RRAM では、3D 積層化を実現するための vertical メモリセル構造が検討されている。従来のような縦積みではなく、メモリ素子とセレクトタを同軸円柱として形成する (同軸で半径方向に積層)。</p> <p>一方、各種 NVM の動作信頼性に限界を認め、リフレッシュもよしとする現実的使い方により DRAM 代替を狙う提案もされている。</p>

欧州	基礎研究	○	↑	<p>2014年から2020年の7年間で実施される Horizon2020 において、ICTは重要なテーマと位置づけられており、ナノエレクトロニクスやフォトニクス技術を含む技術開発が新世代システム開発として実施される。</p> <p>メモリ関係： 3D積層のニューロモルフィックコンピューティングの研究では、各種メモリスタデバイス (PCM, RRAM, FTJ) におけるアナログ的フィラメント形成のモデル作成と原子レベルのシミュレーションを通じて、最適なデバイス選定が検討されている。RRAMを用いたNN形成の研究では、2つの RRAM (w/ 1T) で1つのシナプスを形成し、各 RRAM に excitator と inhibitor を担わせる検討がシミュレーションにて行われている。</p> <p>メモリ及びセレクトタのスイッチングメカニズムの解析が、原子レベルの精密なシミュレーションにより明らかになりつつある。CBRAMでは、フィラメント先端のナノコンタクトにおける僅か数コの原子の移動 (再配置) で抵抗が6桁変わる様子が再現されている。RRAM用2端子選択デバイスとして有望なOTSセレクトタでは、a-Ge-Seの不純物準位解析等を通じて、電子/熱的な特性改善の指針が得られている。</p> <p>セレクトタレスの試みもある。メモリ膜に自己整流、セルフコンプライアンス特性を持たせる。ポイントはメモリ膜における欠陥密度を一定に保つことで、そのための制御層を導入。</p>
	応用研究・開発	○	↑	<p>各種 NVM の実用化検討が行われている。OTSセレクトタ搭載 RRAM の読み出し方法の工夫による信頼性向上、HfO₂膜への局所的 Si イオンインプラでスイッチング領域を限定することによる RRAM 特性改善、CBRAMのスイッチング特性及び信頼性を改善するカルコゲナイド材料の検討、混載向け HfO₂ベースの FeFET-RAM の開発 (32 MBit アレイを 22nm-node の FD-SOI 上で作製)、PCMを用いた Computational Memory による非ノイマン型コンピューティング、MTJのナノ・パターンニングによる STT-MRAM の高密度化、BEOLの400℃処理にも耐えられるトップピン型 pMTJ を有する STT-MRAM の開発、STT-MRAM におけるアプリを考慮した磁化フリー層の熱安定性評価など。並行して、各種メモリセル特性に合わせたセレクトタの開発も進められている。耐熱性に優れた Ge-Se 系の OTS 材料、混載 PCM を可能にするゲート付き FD-SOI ダイオード (Tr に代わる混載 unipolar NVM 向けセレクトタ)、CB型の揮発性 unipolar セレクトタの開発など。</p>
中国	基礎研究	◎	↑	<p>RRAM 関連の研究が活発。RRAM をニューロモルフィック・コンピューティングに使うためのアナログ特性発現制御の基礎研究を、米国と共同で行っている。HfO_x膜中の酸素空孔 (Vo) 分布を制御する新たなメモリ膜構成を提案し、精密なアナログ的抵抗変化を可能にしている。また、酸化膜型 RRAM のフィラメント gap 領域における Vo 挙動を RTN (random telegraph noise) の解析を通じて把握する研究が行われており、高抵抗状態における抵抗分布のメカニズム及び対策が見えてきている。</p>
	応用研究・開発	○	→	<p>RRAM 開発はこれまでもっぱら SCM 狙いだったが、混載用途にも適用範囲を拡げてきている。28 nm プロセスにて BEOL で作る。eFLASH に比べ、消費電力、コスト等の様々なパフォーマンスで有利。一方で、SCM 向けに 3D 積層化の開発も進めている。積層膜の側面を使ってメモリ bit を形成し、8層まで増やしている。HfO₂/TaO_x の2層からなる TMO (遷移金属酸化物) 型メモリ膜を採用。メモリセルに自己選択性があり、セレクトタ不要。</p> <p>不揮発性メモリのセレクトタ技術を応用した TCAM (Ternary Content Addressable Memory) の提案がある。酸素空孔フィラメント型ダイオード2コで TCAM を構成。スイッチ型メモリスタ特性と整流性を確認。10 nm 以下のスケラビリティがある。</p>

俯瞰区分と研究開発領域
ICT・エレクトロニクス応用

韓国	基礎研究	○	↗	メモリ関係では、セレクト材料の研究として、複雑な多元系でなく、2元系 Te ベース OTS や As ドープの SiO ₂ などのシンプルな材料構成で優れたセレクト特性を発現し得ることを示している。また、FE-RAM (Fe-FET RAM) に好適な Si:HfO ₂ 膜の材料・プロセス研究を米国と共同で行っている。ナノグレイン化することでスイッチング特性を向上。 シナプスデバイスを従来からある電荷蓄積型デバイスの延長で作製する研究が行われている。特殊な材料を使ったメモリスタでなくても、Si ベースのダイオードや NAND Flash など STDP 特性を発現できることをシミュレーションで示している。ニューラルネットワークとしての学習精度も遜色なく、注目に値する。
	応用研究・開発	○	↗	STT-MRAM では、混載向け 28nm FDSOI プロセスで高い動作信頼性を持つ MTJ を作製し得ること、10 nmφ以下の MTJ スケーリング、製造ばらつきを認めた上で各種特性をバランス良くまとめる駆動条件の最適化などが報告されている。
台湾	基礎研究	○	→	RRAM アレイを用いて DNN (deep neural network) のためのオンライン学習を加速する研究、In-memory computing のパフォーマンスを低下させる RRAM の抵抗ばらつきの影響を抑制する計算スキームの研究が米国と共同で行われている。RRAM の抵抗変化は完全なアナログである必要はなく、多値でも十分使うことができ、2 値のデジタル RRAM を使っても NN を構成できるという結果は、応用への障壁を下げると期待される。
	応用研究・開発	◎	↗	3D 積層クロスポイント型 PCM の開発を米国と共同で行っている。カルコゲナイドを使った OTS (Ovonic Threshold Switching) セレクト特性の改良、自己発熱により Reset 動作を容易にするナノピラー形状の工夫、製造工程における熱耐性向上 (BEOL における 400°C の thermal budget) や加工ダメージを低減するための膜構成などが検討されている。 STT-MRAM を混載用途で使う際の信頼性に関する検討が行われている。はんだリフローのプロセス温度 (260°C) や外部磁界 (ex.300 Oe) の影響など、実用化・製品化を強く意識した取り組みである。RRAM の実用化に向けた信頼性評価・解析が進められている。素子単体からメモリアレイとしての信頼性向上に重点がシフトしている。遷移金属酸化物を用いた RRAM が対象で、retention にて高抵抗状態が変動するメカニズムが明らかになりつつある。 PCM, STT-MRAM, RRAM すべてが取り込まれており、不揮発性メモリ開発に対する顕著な活動が見て取れる。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Toshitsugu Sakamoto et al., "Atom Switch with Improved Cycle Endurance Using Field Enhancement for Nonvolatile SoC," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388781
- 2) Shunsuke Fukami et al., "Magnetization Switching by Spin-orbit Torque in an Antiferromagnet-ferromagnet Bilayer System," *Nature Materials* 15, no. 5 (2016): 535. doi:10.1038/nmat4566
- 3) Hiroki Noguchi et al., "Novel Voltage Controlled MRAM (VCM) with Fast Read/write Circuits for Ultra Large Last Level Cache," *2016 IEEE International Electron Devices*

- Meeting (IEDM)*, 2016. doi:10.1109/iedm.2016.7838494
- 4) H. Yoda et al., "Voltage-control Spintronics Memory (VoCSM) Having Potentials of Ultra-low Energy-consumption and High-density," *2016 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 2016. doi:10.1109/iedm.2016.7838495
 - 5) Hisashi Shima, Ni Zhong and Hiro Akinaga, "Switchable Rectifier Built with Pt/TiO_x/Pt Trilayer," *Applied Physics Letters* 94, no. 8 (2009). doi:10.1063/1.3068754
 - 6) Reiji Mochida et al., "A 4M Synapses Integrated Analog ReRAM Based 66.5 TOPS/W Neural-Network Processor with Cell Current Controlled Writing and Flexible Network Architecture," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510676
 - 7) Senju Yamazaki et al., "Reliability Enhancement of 1Xnm TLC for Cold Flash and Millennium Memories," *2015 Symposium on VLSI Technology (VLSI Technology)*, 2015. doi:10.1109/vlsit.2015.7223642
 - 8) Scott Deboer, "Memory Technology: The Core to Enable Future Computing Systems," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510707
 - 9) Stefan Mueller, "Ferroelectric HfO₂ and Its Impact on the Memory Landscape," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388831
 - 10) Guenole Jan et al., "Demonstration of Ultra-Low Voltage and Ultra Low Power STT-MRAM Designed for Compatibility with 0x Node Embedded LLC Applications," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510672
 - 11) James Pak et al., "40nm & 22nm Embedded Charge Trap Flash for Automotive Applications," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388778
 - 12) Sung-Tae Lee et al., "Neuromorphic Technology Based on Charge Storage Memory Devices," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510667
 - 13) Hang-Ting Lue et al., "A Novel 3D AND-type NVM Architecture Capable of High-density, Low-power In-Memory Sum-of-Product Computation for Artificial Intelligence Application," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510688
 - 14) Can Li et al., "In-Memory Computing with Memristor Arrays," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388838
 - 15) Chih-Cheng Chang et al., "Mitigating Asymmetric Nonlinear Weight Update Effects in Hardware Neural Network Based on Analog Resistive Synapse," *IEEE Journal on Emerging and Selected Topics in Circuits and Systems* 8, no. 1 (2018): 116. doi:10.1109/jetcas.2017.2771529
 - 16) Kazuhiro Ohba et al., "Cross Point Cu-ReRAM with BC-Doped Selector." *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388824.
 - 17) Toshiyuki Taniuchi et al., "Direct Observation of Chemical States in ReRAM by Laser-based Photoemission Electron Microscopy," *2018 IEEE 2nd Electron Devices Technology*

-
- and Manufacturing Conference (EDTM)*, 2018. doi:10.1109/edtm.2018.8421513
- 18) Masashi Arita et al., "Oxygen Distribution around Filament in Ta-O Resistive RAM Fabricated Using 40 Nm CMOS Technology," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388844
- 19) Gabriele Navarro et al., "Phase-Change Memory: Performance, Roles and Challenges," *2018 IEEE International Memory Workshop (IMW)*, 2018. doi:10.1109/imw.2018.8388845
- 20) Zhiqiang Wei et al., "From Memory to Sensor: Ultra-Low Power and High Selectivity Hydrogen Sensor Based on ReRAM Technology," *2018 IEEE Symposium on VLSI Technology*, 2018. doi:10.1109/vlsit.2018.8510697

2.3.2 発光・表示デバイス

(1) 研究開発領域の定義

高解像度で視認性・色再現性が高く、高効率かつ低消費電力で動作する発光・表示デバイス（ディスプレイ）の実現を目指す研究開発領域である。発光材料の蛍光・燐光の高効率化や発光色制御、発光デバイスの高性能化（高速化、低消費電力化）、カラーフィルターの透過率・色再現性・耐久性の向上、空気や水などによる発光材料や発光デバイスの劣化保護、量子ドットやマイクロ LED などの新たな表示デバイスの作製プロセス開発、などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

ディスプレイ、Near-Eye Display、液晶、有機 EL、有機 LED、OLED、熱活性化遅延蛍光、TADF、第三世代発光分子、Hyperfluorescence、量子ドット、マイクロ LED、カラーフィルター、BT.2020、フレキシブル、車載、AR・VR・MR

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

現代の人々の生活の周りには様々な発光・表示デバイス（以下、ディスプレイ）が存在している。1970年代に世界で初めてカラーテレビが誕生して以来、高度情報化社会とインターネットの普及に伴い、人々の周りにはテレビ以外にモニター、ノート PC、スマートフォン、タブレットと多様なデバイスが生まれてきた。ディスプレイには様々な方式があるが、ここではナノテクノロジー・材料との関係が深く、最近注目されている有機 EL、量子ドット、マイクロ LED を中心に記載する。

これまでディスプレイの代表的な用途はテレビであり、「家で」「備え付けの大画面で」視聴するという統一の状況で使用されるものであった。しかし近年、スマートフォンを始めとするディスプレイは「屋外で」「手で持てる大きさで」「持ち運びながら」視聴する場面が増え、それぞれの用途に合わせたディスプレイの研究開発が必要である。また、今後はその使用場面がさらに多様化すると考えられる。例えば自動車の EV 化により、これまでと異なる縦横比を持つディスプレイが採用され始めている。また、エンターテインメントや業務用に活用が期待されている VR（仮想現実：Virtual Reality）・AR（拡張現実：Augmented Reality）・MR（複合現実：Mixed Reality）は、これまでのディスプレイと異なり眼からの距離が非常に近い Near-Eye Display であるため、これまでになく高解像度が求められる。さらに、フレキシブル基板上にディスプレイを搭載するフレキシブルディスプレイが実現すると、曲面を始めとするあらゆる場所にディスプレイを「貼る」ことが可能になる。

これらの実現に向けては発光材料のみならずディスプレイを構成するすべての材料の改良が求められており、今後これらの研究開発の発展により、ディスプレイに新しい価値が生まれると考えられる。例えば、有機 EL ディスプレイの発光素子である OLED（Organic Light Emitting Diode）では、現在、りん光材料が実用に用いられているが、希少資源やコストの問題から第三世代の発光分子である熱活性化遅延蛍光（TADF：Thermally Activated Delayed Fluorescence）分子への展開が進み、世界的規模で研究開発が活発化している。TADF は簡単な分子設計で 100% の電気・光変換（量子効率）を実現する究極の発光材料として期待されている。

[研究開発の動向]

現在、ディスプレイの主役となっている液晶ディスプレイは、人間が網膜で認識できる色再現領域と比べるとまだ狭い領域であり、より自然に近い色を実現するべく「色再現領域の拡大」は全てのディスプレイに共通している研究課題の一つである。液晶ディスプレイは白色バックライトに RGB（赤緑青）のカラーフィルターを通すことで色を発現しており、これらの材料のスペクトルの改良により、色再現領域の拡大が期待できる。色の規格はこれまで各種団体が提案してきており、直近の目標としては NHK が提唱する BT.2020 が挙げられる。この色規格の実現に向けて、従来の白色バックライト＋カラーフィルターの組み合わせだけでなく、有機 EL（OLED）や量子ドット、マイクロ LED といった材料も有力な候補であり、今後どの技術が主役となるのか、その材料の特性に加えて化合物の安定性や生産の安定性、コスト等を鑑みて研究開発が行われている。

また、ディスプレイに求められる一般的な研究開発の方向性として、高解像度と高輝度が挙げられる。テレビにおいては既に 4K、将来は 8K といった高解像度に向けた研究開発が進められている。また、VR・AR・MR といった Near-Eye Display においては眼に近接するため超高解像度が必要であり、2018 年 10 月にはソニーから 4000ppi を超える AR ディスプレイの販売が開始され、今後もこのようなディスプレイが増えると想定される。しかし、高解像度が実現すると同じ面積当たりのピクセル数が多くなり、その結果パネル以外の面積も増えることで開口度の低下につながる。開口度の低下はパネル輝度低下につながるため、あらかじめ個々のピクセル輝度を上げることによって、同じ輝度を保ったまま、高解像度を実現すべく、パネルの高輝度化も重要な研究課題の一つである。なお、モバイル用途では高輝度化は駆動時間とも関係することから、消費電力との関係なども考慮しておくことが求められる。

ディスプレイ開発のもう一つの大きな流れとしてはフレキシブル化が挙げられる。既にスマートフォンでは端部が曲がったディスプレイが製品化されているが、用途拡大に向けたさらなるフレキシブル化に向けて、発光材料のみならずトランジスタ材料や外部からの空気や水の侵入を防ぐバリアフィルムの開発も活発に進められている。

スマートフォンのディスプレイでは、2017 年に Samsung Galaxy シリーズに続き iPhone でも有機 EL が採用され、今後の中国メーカー（Huawei、Xiaomi、vivo など）の動向が注目される。中国ではディスプレイ工場への投資を大規模に進めており、今後のディスプレイ業界の市場や技術、需給動向を把握するには中国でのパネル生産動向に注目しておく必要がある。

（４）注目動向

[新展開・技術トピックス]

・有機 EL/TADF

有機 EL 材料は、1980 年代の C.W.Tang らによって発表された論文を端緒として開発が活発化している。有機化合物に電界をかけて赤・青・緑色を発光させることができ、液晶と比べて電力をオフにすることで完全な黒を表現できることや一部の部材が不要になることから、高コントラストとフレキシブル化、薄膜化が可能なディスプレイとして注目を集めている。既にスマートフォン向けには Samsung Display、大画面テレビ向けには LG Display が大半のシェアを有している。

その中でもここ数年は熱活性化遅延蛍光（TADF）と呼ばれる材料の開発が活発になってい

る。TADF は励起されたエネルギーの 75% の割合を占める無輻射失活のりん光に対応するエネルギーを、項間交差により残り 25% の蛍光にエネルギー移動させることで、外部から得たエネルギーを 100% 発光に転換できる現象である。緑色、黄色、赤色の発光 TADF においては、発光効率と耐久性において実用化への可能性が大きく見えてきている。難易度の高い青色発光 TADF においても、2018 年度に大幅な性能向上が報告され、実用化の可能性が見えてきた。TADF の開発に携わる九州大学発のベンチャー企業 (kyulux) には、Samsung Display、LD Display、JDI を始めとする複数のパネルメーカーが出資しており、業界全体で注目を集めている。kyulux 社のプレスリリースによると 2019 年中に量産が開始される可能性がある。

このように、今後、OLED の発光材料において、従来の蛍光・りん光材料から TADF 材料へのパラダイムシフトが加速していくと予想される。最近では、一重項分裂 (Singlet Fission) を OLED の発光層に用いることで、内部発光効率 100% を超える OLED も報告されており、赤外発光デバイス等に有用な技術になる。また、OLED 延長線上に位置する電流励起による有機半導体レーザーも、その実現も期待される。

・量子ドット

色再現領域の拡大はディスプレイの主要課題の一つであり、色再現領域を拡大させるには赤・青・緑の 3 色の発光スペクトルを狭線化・最適化することが必要である。発光スペクトルはその物質の持つエネルギー振動準位を表しており、発光スペクトルを狭線化させるには、エネルギー振動準位をできるだけ単一にする必要がある。

量子ドットは、直径が 2-10 ナノメートル (原子 10-50 個) と、非常に小さい均一な粒子サイズを持つ無機材料である。均一なサイズを持つことでエネルギー準位が単一化され、励起状態を 3 次元的に閉じ込めることで、より単一の発光スペクトルを得ることができる。その可能性については従来から注目されていたが、近年その発光特性や化合物の安定性、量産性が向上し、既にテレビへも採用されている技術となっている。

・マイクロ LED

量子ドットに次いでディスプレイ業界で注目されている技術がマイクロ LED である。マイクロ LED は文字通りマイクロサイズ (一般には $50\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$) の LED チップをバックライトに敷き詰めたものであり、そのチップサイズの小ささから高解像度のディスプレイの実現が可能である。Apple が 2014 年にマイクロ LED のベンチャー企業 (LuxVue 社) を買収したことを端緒として、ディスプレイメーカー各社がベンチャー企業への投資等を通して、マイクロ LED の技術開発に注目している。

マイクロ LED は無機結晶のエピタキシャル成長、チップ化、モジュール化という工程を経て作製されており、それぞれの工程において解決すべき課題が山積している。それらの中でも大きな課題は、ウエハー上に作製した LED チップをモジュールに組み込む際の設置作業効率である。マイクロオーダーのチップを 1 つずつ搭載するには非常に時間がかかり、特に大画面のテレビ向けには現実的ではない。そこで、ウエハー上に LED チップを一度に製造し、大量の LED チップを一度に運ぶ方式があるが、この方法では赤・青・緑の 3 色は作製できず単一色のみとなる。その場合はさらにカラーフィルター等で色変換を行う必要があり、工程の複雑化やコストアップにつながるため、最適なプロセスに向けてはまだ研究開発が必要である。

2018年時点ではSID Display Weekにおいて台湾の液晶パネルメーカー AUO が初めて 16 インチのプロトタイプを展示した程度に留まっており、実際の製品への搭載は早くても 2020 年以降であると想定される。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

欧州では、Horizon2020 を中心として、HyperOLED プロジェクト（2017 年～2019 年）など大きな研究開発チームが組織され、TADF のメカニズム解明から新材料の開発まで網羅的に研究開発が進められている (https://cordis.europa.eu/project/rcn/205938_en.html)。プロジェクトでは、メルク、Cynora 等の企業をサポートする体制が構築されている。

中国においても、2019 年度に TADF を中心とした OLED 材料に関するファンドが準備されている。

韓国においては、第 3 次科学技術基本計画に掲げられた重点国家戦略技術の一つに「超集密ディスプレイ工程および装置技術」が挙げられており、「主力輸出産業の高度化」という主要課題に対する取り組みとしてピックアップされている。

日本における次世代ディスプレイの実現に向けた研究開発としては、フレキシブル化を目的とした国家プロジェクトなどがある。NEDO では「次世代プリントドエレクトロニクス材料・プロセス基盤技術開発」（平成 22 年度～平成 30 年度）が実施されており、省エネ・大画面・軽量・薄型・フレキシブル性を実現可能なプリントドエレクトロニクスの技術開発が行われている。プラスチックフィルム基板上に TFT アレイを形成するための材料や、そのプロセス開発に取り組んでおり、電子ペーパー、デジタルサイネージ、フレキシブルディスプレイや携帯端末への展開が期待されている。JST では戦略的イノベーション創出推進プログラム(S-イノベ)において「有機材料を基礎とした新規エレクトロニクス技術の開発」があり、その中で新しい高性能ポリマー半導体材料と印刷プロセスによる AM-TFT を基盤とするフレキシブルディスプレイの開発が進められている。また、ERATO「安達分子エキシトン工学プロジェクト」（平成 25 年度～平成 30 年度）では、分子エキシトン過程の制御により新たな有機の発光材料、発光デバイスの研究開発が進められている。

（5）科学技術的課題

これまでは主要用途であったテレビ向けに色再現領域や解像度、輝度の改良を行ってきたが、その更なる改良と共に、既に出現している多種多様なディスプレイの実現に向けて以下のような課題が残されている。

・さらなる色再現領域の拡大（スペクトルの狭線化／スペクトル極大波長の最適化）

色再現領域の拡大に向けては、赤・青・緑のスペクトルの狭線化と共に、スペクトル極大波長の最適化が求められる。従来の液晶ディスプレイ＋カラーフィルターの改良と共に、量子ドットやマイクロ LED といったシャープなスペクトルを持つバックライトによる色再現領域の拡大も進められている。しかし、実用化に向けてはこれらの特性と合わせて化合物の安定性、安定な生産方法、生産コストもクリアする必要があり、それらを総合的に満たす材料系の創成が求められている。

・高解像度 (素子構成/プロセスの改良)

使用シーンの拡大が見込まれる VR・AR・MR 向けディスプレイは網膜に近接したディスプレイであり、特に VR ではディスプレイの解像度が落ちることで使用者の VR 酔いに直結するため、高解像度へのニーズが他用途と比べて大きい。ソニーが 2018 年 10 月に発売している UXGA 解像度 (1600 × 1200) のマイクロ OLED ディスプレイは、トランジスタの小型化を行い、補正回路で特性ばらつきをカバーしたうえで、トランジスタのレイアウトやプロセスを最適化し、さらにカラーフィルターの配置を変更することで、近接ディスプレイにも適用可能なディスプレイを実現している。このように高解像度に向けては材料設計のみならず、素子構成の改良を含めた研究開発が求められる。

・部材のフレキシブル性 (材料の安定性向上)

新しいディスプレイとして期待されているフレキシブルディスプレイに向けては、各種部材のフレキシブル化が求められる。発光層 (液晶+カラーフィルター、有機 EL 等)、偏光板、バックプレーン、バリアフィルムといったあらゆる部材に対してフレキシブル状態における材料の安定性と特性維持の両立は重要な開発課題になる。

・バックプレーン改良

スマートフォンに使われているディスプレイは、今後は性能面での差別化が難しくなり、従来にないデザイン性が求められる。例えば、端部が曲がった形状やディスプレイ以外の部分 (ノッチ部) 低減や、従来の四角形から丸みを帯びたデザインを始めとする形状の自由度が求められる可能性がある。それらの実現にはトランジスタを始めとするバックプレーンの改良が必須であり、今後さらに研究開発が求められる分野である。

・TADF-OLED の青色発光の高効率化と高耐久化

OLED で最大の課題は、高効率と高耐久性の両方を満足する青色発光材料の開発である。現状では、実用化が可能な安定な青色リン光材料が未だ得られていないため、主にアントラセン系の三重項-三重項励起子消滅 (Triplet-Triplet Annihilation : TTA) プロセスを用いた青色蛍光分子が実用に用いられている。TADF も安定性の高い青色材料が期待されているが、現状では、様々な課題を抱えている。例えば、発光効率に関しては EQE>20% を超える OLED も報告されているが、安定性に関しては長いものでも数 10 時間程度に留まっている。TADF では、本質的に三重項励起状態のエネルギーレベルを高くしなければならないため、TTA で積極的に用いられているアントラセン等の電気化学的に強固な分子骨格を用いることは出来ない。OLED における分子の劣化は、ラジカル状態の安定性や三重項励起子の安定性が大きく関与している。そのため、今後、劣化機構を解明するとともに、光化学的や電気化学的な視点から構成原子間の結合エネルギーの安定化、ラジカルの安定性の向上が求められる。さらには、多くの化学反応が寿命の長い励起三重項状態から生じることから、三重項励起寿命の高速化が素子の安定性の向上にとって重要なポイントになる。

(6) その他の課題

色再現領域の拡大に向けて開発が進められている量子ドットやペロブスカイト型材料には有

害な物質である Cd や Pb が含まれており、EU の RoHS 規制を始めとする各国の法規制への適用が必須である。現在は研究開発の発展に伴い、RoHS 規制をクリアする材料系も見出されてきているが、法規制の変更も起こりうるため、各国の法規制状況は常に注意を払う必要がある。

TADF のコア技術は日本で生まれた技術であり、世界をリードする立場にある。大学を中心とした基礎研究の深掘りとともに、材料開発を迅速に進めるための計算科学、AI を利用した網羅的な材料開発スキームの確立なども求められる。また、早期の実用化に向けて、大学、国研、化学メーカー、材料メーカー、デバイスメーカーなどを含む産学官連携のエコシステムの構築が望まれる。

(7) 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	◎	→	フレキシブル化に向けた基礎研究として、NEDO「次世代プリントドエレクトロニクス材料・プロセス基盤技術開発」、JST S-イノベ研究開発テーマ「有機材料を基礎とした新規エレクトロニクス技術の開発」が推進されている。 TADF の材料開発において九大 OPERA、京都大学化研、関西学院大学を中心に、材料開発から基礎的な光物理過程の解明、デバイス物性まで網羅的な研究開発が進められている。
	応用研究・開発	○	→	九大発ベンチャー Kyulux が実用化を視野に網羅的な材料開発とデバイス開発に取り組んでいる。また、出光興産、JNC、住友化学、保土谷化学、NSCC、半導体エネルギー研究所 (SEL) 等において、精力的に材料開発が進められている。 一方、デバイス開発においては、JDI、JOLED において一部開発が進められているが、韓国、中国メーカーに比較すると、人・資金などの面で劣っている。
米国	基礎研究	◎	→	ノースカロライナ大学、MIT、ハーバード大学、ジョージアテック等で主に計算科学を用いた精密な分子設計が進められており、新しいコンセプトの分子創出に繋がっている。今後、AI 等を用いたコンビナトリアルな分子設計が進む可能性が高い。
	応用研究・開発	○	→	量子ドットの最大手 Nanosys は開発加速。量産性向上のため DIC と協業シंकジェット QD インク開発に着手した。 Apple 社は次世代のディスプレイに向けに、マイクロ LED の検討にも着手している。 りん光材料で世界を席巻している Universal Display Corporation (UDC) が、ポストりん光材料として TADF 分子の開発に乗り出している。これまでのりん光材料のノウハウを生かすことで、材料純度や周辺材料とのすり合わせ技術で優位性がある。
欧州	基礎研究	◎	→	Horizon2020 でプロジェクト「Flexible and Wearable Electronics」が推進されていた (2018 年 4 月で終了)。 発光材料に関する Horizon2020 等の大型プロジェクトが主に英国、ドイツを中心に進められており、基礎的な光物性の解明からデバイスの高性能化まで、幅広い研究開発が進められている。
	応用研究・開発	○	→	Fraunhofer FEP にて次世代フレキシブルディスプレイが開発されている。 ドイツの Cynora 社が独自の Cu 錯体の開発を断念し、九大 OPERA の技術をコピーして 100 名規模の大人数で材料開発を進め、韓国、中国のパネルメーカーとの協業を進めている。
中国	基礎研究	◎	↗	精華大学、浙江大学、華南理工大学、香港大学等の有力大学において、TADF の材料からデバイス開発まで集中的に行われている。論文数の伸びが極めて著しい。
	応用研究・開発	○	↗	大型パネルの量産技術・投資が進み、2019 年にはフレキシブル有機 EL も量産開始が見込まれる。 BOE、GVO、天馬、Visionox 等の有力パネルメーカーが TADF-OLED の開発に着手している。 量子ドット (QD) ベンチャー、新型ディスプレイへ投資する企業が増加している。

韓国	基礎研究	○	→	ソウル大学、成均館大学、KAIST等の有力大学において、TADFの材料からデバイス開発まで網羅的に行われている。
	応用研究・開発	◎	→	第3次科学技術基本計画の30重点国家戦略技術として「超集密ディスプレイ工程および装置技術」が挙げられている。Samsungは量子ドットTVの開発を推進している。LGディスプレイ、Samsungエレクトロニクスにおいて、TADFのパネル化の検討が進められている。また、多くの中小化学メーカーがTADFの開発に取り組んでいる。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) C. W. Tang and S. A. Vanslyke, "Organic Electroluminescent Diodes," *Applied Physics Letters* 51, no. 12 (1987) : 913. doi:10.1063/1.98799
- 2) S. Boudin, "Phosphorescence Des Solutions Glycériques Déosine Influence Des Iodures," *Journal De Chimie Physique* 27 (1930) : 285. doi:10.1051/jcp/1930270285
- 3) C. A. Parker and C. G. Hatchard, "Triplet-Singlet Emission In Fluid Solution," *The Journal of Physical Chemistry* 66, no. 12 (1962) : 2506. doi:10.1021/j100818a043
- 4) Ayataka Endo et al., "Thermally Activated Delayed Fluorescence from Sn (4+) -Porphyrin Complexes and Their Application to Organic Light Emitting Diodes - A Novel Mechanism for Electroluminescence," *Advanced Materials* 21, no. 47 (2009) : 4802. doi:10.1002/adma.200900983
- 5) Hiroki Uoyama et al., "Highly Efficient Organic Light-emitting Diodes from Delayed Fluorescence," *Nature* 492, no. 7428 (2012) : 234. doi:10.1038/nature11687
- 6) D. Y. Kondakov, "Triplet-triplet Annihilation in Highly Efficient Fluorescent Organic Light-emitting Diodes: Current State and Future Outlook," *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 373, no. 2044 (2015) . doi:10.1098/rsta.2014.0321
- 7) Ryo Nagata et al., "Exploiting Singlet Fission in Organic Light-Emitting Diodes," *Advanced Materials* 30, no. 33 (2018) . doi:10.1002/adma.201801484
- 8) Atula S. D. Sandanayaka et al., "Toward Continuous-wave Operation of Organic Semiconductor Lasers," *Science Advances* 3, no. 4 (2017) . doi:10.1126/sciadv.1602570

2.3.3 フォトニクス

（1）研究開発領域の定義

光の持つ多様な機能を利用して、高性能／高機能なデバイスや装置・システムを開発し、情報通信、医療・バイオ、加工、分析・計測、映像、照明、発電など幅広い応用分野への適用を目指す研究開発領域である。用いる材料の高品質化、デバイス構造の最適化、デバイスの小型化・集積化、低消費電力化、超短パルス化、分解能の向上、超精密計測、光子状態の量子制御などの研究開発課題がある。

（2）キーワード

シリコンフォトニクス、インターコネク、光電子融合、光配線、光インターポーザ、光トランシーバ、光スイッチ、大規模光集積、フォトニックネットワークオンチップ、光ニューラルネット、光コンピューティング、ナノフォトニクス、フォトニック結晶、プラズモニクス、メタマテリアル、量子フォトニクス、トポロジカルフォトニクス、単一光子源

（3）研究開発領域の概要

[本領域の意義]

光技術は光通信、レーザー加工、3Dプリンティング、LED照明、太陽光発電、バイオイメージングなど幅広い応用分野ですでに利用されており、今後も新たな情報処理分野や健康・医療分野などでさらなる進展が期待されている。このように、光技術の応用範囲はかなり広いが、ここでは「フォトニクス」として電子機器や電子デバイス（エレクトロニクス）との関わりが強いコンピュータやサーバーの光通信・光配線技術、これらの高速化、大容量化、低消費電力化、小型化などを支える新たな光デバイス技術・材料技術を中心に記載する。

現代の情報社会を支えるインターネットには光ファイバーネットワークが必要不可欠であり、高機能通信用レーザーにより高速・大容量な情報通信が可能となっている。現在も、光の持つ波動としての自由度である波長・偏光・位相・空間分布を活用した多重化によりさらなる高速化・大容量化が進められている。このような波動としての光を制御する技術の完成度は高く、現在の光通信技術の基礎を支えているだけでなく、今後もコンピュータ・サーバーのラック間・ボード間・チップ間・チップ内の光配線技術（光インターコネク）へと繋がる基盤的な技術となっている。

光デバイスの小型化や高性能化に向けて期待されているのが、ミクロン以下の微細構造で光を制御するナノフォトニクス技術である。ナノフォトニクス技術は、微細加工技術の進展によって2000年頃から急激に立ち上がり、フォトニック結晶、プラズモニクス、メタマテリアル、シリコンフォトニクスなどの分野に分かれて進展し、様々なデバイスに適用されるようになり、次世代の光集積技術の有望な候補として期待されている。特に、チップ内光インターコネクや光ネットワークオンチップを実現する技術として、集積回路のプロセス技術を活用したシリコンフォトニクス技術が注目され、コンピュータの光配線応用に向けた開発が活発化している。また、ナノフォトニクスによる高密度集積を利用して、大規模なフェーズドアレイや大規模な光干渉回路など、従来技術では大規模化が難しかったものへの応用研究が活発化しており、広い範囲に波及効果が見えつつある。

一方、光は波動としての性質だけではなく量子としての性質も持つ。スクイーズド光、単一

光子、もつれ光子などの量子としての光は、ショットノイズ限界の打破、アンチバンチングや量子もつれなど、波動としての光とは質的に異なる現象をもたらすことが知られている。これら量子としての光を制御する技術は、波動としての光を制御する技術と比較すると未熟であり、光の幅広い応用分野で利用できるような状況ではないが、量子としての光が簡便に利用可能となれば、量子暗号通信など既存技術と異なる原理に基づく応用の開拓が期待される。

[研究開発の動向]

近年、様々なナノフォトニクス技術が超小型化と低消費電力化などを目的として、デバイスに応用され始めている。例えば、発光デバイスとしては、化合物半導体フォトニック結晶ナノ共振器構造を用いたレーザーで、極低閾値での室温連続電流注入発振が達成されている。また、プラズモニクス構造をレーザー共振器に適用することで波長よりもはるかに小さいサイズのレーザー発振動作が報告されている。光受光器では、フォトニック結晶やプラズモニクスをベースとした様々な超小型受光器が研究されており、プラズモニクスによる光アンテナ効果を利用した小型化も図られている。光変調器、スイッチ関連では、シリコンフォトニクスを中心に様々な電気光学変調器が開発されているが、近年プラズモニクス構造をベースとして非線形ポリマーを組み合わせた素子が開発され、性能が飛躍的に向上しつつある。光スイッチとしては、フォトニック結晶ナノ共振器を利用した素子でアトジュール領域でのスイッチング動作が達成されている。光メモリとしては、微小共振器を用いた双安定レーザー型が欧州で研究され、日本ではフォトニック結晶ナノ共振器を用いた光非線形双安定スイッチ型が研究されている。このように、ナノフォトニクス技術により、従来の技術では不可能な超小型サイズと超低消費電力動作が達成され始めているが、いずれも単一素子の性能達成にとどまっている。集積化に関する取り組みとしては、MITのシリコンフォトニクス技術による大規模な集積型フェーズドアレイの実現や、NTTの波長の異なるナノ共振器を100個以上集積することで100ビットを超える光RAMの集積に成功した例などがある。

ナノフォトニクス技術を利用した非集積型デバイスは、日本を中心に高性能なデバイスが開発されており、すでに商品化も行われている。京都大学のグループはフォトニック結晶型の大面積面発光レーザーの研究に取り組み、すでに単一デバイスで10W以上の出力を取り出すことに成功し、この技術を用いて浜松フォトニクスで商品化している。また、東北大学の積層型3次元フォトニック結晶の技術を用いて、フォトニックラティス社では偏光素子など多彩な機能光部品を開発し商品化している。このように、ナノフォトニクス技術の個別部品としての商品化では、日本が世界の中で先行している。

光インターコネクトなど光素子の集積化が必要な応用に向けてはシリコンフォトニクス技術への期待が大きい。このシリコンフォトニクス技術はかなり開発が進んでおり、シリコン細線導波路をベースにして、電気光学変調器、電気光学スイッチ、光受光器などを集積する技術が世界各地にあるファウンドリを通じて利用可能になりつつある。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

シリコンフォトニクスに関連する国際学会等での動向としては、シリコンのキャリアプラズマ効果を改善するために歪 SiGe や化合物半導体と Si をハイブリッドしたマッハツェンダ型変調器や、SiGe を用いた小型電界吸収型変調器など注目されるものもあるが、光トランシーバの基本構成要素である光変調器や受光器の基本構造や高速化に関する発表は減少している。これは、原理的に温度依存性や波長依存性の小さいマッハツェンダ型変調器やゲルマニウムの PIN 型受光器を用いた 50Gbps 程度までの 2 値振幅変調に関しては実用化レベルに達しているためと推定される。実際、複数のベンダーから 100Gbps のトランシーバの製品発表があり、標準化に向けて 400Gbps に対する研究開発が盛んに行われている。今後の開発ターゲットは 800Gbps に移ると想定されるが、100Gbps をアナログ 2 値振幅変調で行うことは主に駆動電子回路の高速化の観点で困難だと予想され、多値変調、波長多重、マルチコアファイバを用いた空間多重、フューモードファイバ (Few Mode Fiber) を用いたモード多重等の組み合わせで実現されると予想される。さらに、データセンタ間や大規模データセンタ内など比較的長距離の光インターコネクートを想定し、従来の OOK (on-off keying) を用いたアナログ通信から、長距離通信で採用されているデジタルコヒーレント技術の適用の検討も始まっている。従来のアナログ通信とデジタルコヒーレント通信との棲み分けに関しては、消費電力を含むコストパフォーマンスが重要な判断基準になると予想され、FEC (前方誤り訂正) を用いたアナログ通信が限界を迎えるポスト 400G (例えば 800G) イーサネットの規格などが検討され始めている。

シリコンフォトニクスにおいて重要課題の一つであるレーザー光源の実装技術に関しては、PETRA で行っているフリップチップ実装が主流となりつつあるが、量子ドットを Si 上に直接成長する技術が目覚ましく進歩してきており、実用レベルの光出力と閾値が達成されている。

シリコンフォトニクスは光インターコネクート以外の応用も注目される。その一つにリモートセンシング用の高精度・小型・低コストの LIDAR (Light Detection and Ranging, Laser Imaging Detection and Ranging) がある。光インターコネクート用のデバイス設計を変更することで LIDAR が実現可能なことから、米国の MIT から光回路と電気の集積回路をワンチップ化した報告がなされており、国内でもシリコンベースのフォトニック結晶を利用した高精度な LIDAR 開発が、JST の戦略的創造研究推進事業 (ACCEL) プロジェクトとして進行中である。また、シリコンフォトニクスの技術を用いた大規模なマトリックス光スイッチの研究が急速に進展している。産総研の熱光学効果によるマッハツェンダ干渉計 (MZI) 型電気光学変調器による 32×32 の光スイッチのノンブロッキング低損失動作、中国の研究機関の電流注入動作による 32×32 MZI ゲート光スイッチ、UC Berkeley の MEMS を使った 128×128 の光マトリックススイッチ、などの報告が相次いでいる。

MZI の回路で任意のユニタリ演算を表現できることが指摘され、任意の線形フィルターや行列ベクトル積演算回路への応用など、情報処理への応用も注目を集めている。2017 年に MIT の Soljacic の研究グループがシリコンフォトニクスを用いた大規模な MZI ゲート回路を光ニューラルネットに用いる提案をした。この提案は MZI マトリックス型回路を用いて、ニューラルネットの根幹であるベクトル行列積演算を行うものであり、プロトタイプによる動作を確認し、CMOS ベースのハードウェアに比べ低遅延・低消費電力化の可能性を指摘している。彼らは論文発表後に 1000 万ドルの資金を集めて光集積回路をベースにした人工知能ハー

ドウェア開発のスタートアップ企業を設立し、すでに 20-30 人程度のスタッフを集めて実用化を目指した研究開発を行っている。その他にも、Princeton 大学の Prucnal の研究グループでは、リング共振器を重み付けに用い、高速電気光学変調器をニューロンとして用いて、高速に再帰演算を行う連続時間リカーシブニューラルネット (RNN) の提案、UC Davis 校の Ben Yoo の研究グループでは、光受光器と FET を組み合わせたニューロンを用いた集積回路によりスパイク型光ニューラルネットの提案などがなされている。また、MZI ゲートを連結した回路は、ベクトル行列積演算だけでなく様々なアナログ・デジタル演算が可能であることから、様々なブリアン演算や算術演算回路を実装する提案が相次いでいる。これらはいずれもシリコンフォトニクス、フォトニック結晶、メタマテリアルなどのナノフォトニクスによる超小型光ゲートをベースとしており、CMOS の限界を打破する低遅延性能が期待されている。光コンピューティング研究は光ニューラルネットも含め 1980 年代、90 年代に活発に研究されたが、その後 CMOS に対して優位性を示すことができず衰退したという歴史がある。再びこの研究が活発化している背景には、光ゲートの大規模集積技術や高効率、低遅延の光電変換が実現しつつあることや、深層学習の進化によるニューラルネットエンジンの高速化のニーズ、高速回線に繋がった情報処理装置の低遅延化のニーズなどがあり、かつては想定されていなかった光演算方式が新たに研究され始めている。

プラズモニクスやフォトニック結晶により高性能な電気光学変調器や光電変換デバイスを実現する研究が加速している。スイス連邦工科大学 (ETH) の Leuthold の研究グループでは、MIM (金属・絶縁体・金属) 構造の導波路の 100nm 程度のギャップに電気光学ポリマーを埋め込み、短尺で超高速のマッハツェンダ型電気光学変調器を実現している。その性能は年々向上し、近年は 100GHz を超える周波数で動作するに至っている。また、NTT の研究グループは、フォトニック結晶を用いることにより、感度を 1A/W に保ちながらデバイス容量として 1fF を切るものを報告しており、光電変換の消費エネルギーを極限まで低減できる可能性が見えつつある。

メタマテリアルの一種であるメタサーフェスと呼ばれる構造が実用化に向けて研究が加速している。メタサーフェス研究の出発点は、2011 年に Harvard 大学の Capasso 等が、サブ波長の光アンテナアレイを用い、光散乱の際の位相ずれに人為的な勾配を作ることによって、数 10nm 程度の薄膜を光が通過または反射する際に任意の波面制御を可能にしたことである。その後、メタサーフェスは高効率化、低損失化、多機能化の研究が進んできたが、近年、薄膜レンズとしての研究が活発化している。特にスマートフォン等の小型携帯機器への適用を目指して、可視光で動作し波長収差が補正され広帯域な白色光に対して像を結ぶアクロマティックレンズの開発が進められている。

近年、グラフェン、h-BN、MoSe₂、MoS₂、WSe₂ 等の単原子層 2 次元物質やカーボンナノチューブ、半導体ナノワイヤなど様々な新しい性質をもつナノ材料をナノフォトニクスと組み合わせデバイス動作させる試みが増加している。特に MoSe₂ などの遷移金属カルコゲナイドは、大きな光非線形や励起子効果、強い発光などグラフェンにはない顕著な光学的性質を持つため、その特異な光学的性質のデバイス応用を目指した研究が進行している。また、相変化材料とナノフォトニクスの組合せもあり、例えば GeSbTe をシリコンフォトニクスによるナノデバイスと組み合わせることで超小型の不揮発性光メモリが報告されている。

カーボンナノチューブのフォトニクス応用研究では、導入された欠陥の光物性の理解がここ

数年で急速に進み、アリアルジアゾニウム塩による欠陥を用いた単一光子発生の高純度化・長波長化やフォトニック結晶による発光レートの増強が実現し、室温・通信波長帯における単一光子源としての応用に向けた研究が進んでいる。また、欠陥による励起子の捕捉効果を利用し、50 nm 程度の極短尺のナノチューブで発光効率の大幅な改善に成功するなど、近赤外域における超解像イメージングへの応用も進んでいる。材料面では、カイラリティ分離技術・選択合成技術の進展に加え、高密度大面積配向膜が得られるようになり、サブバンド間プラズモンの観測や荷電励起子（トリオン）とファブリ・ペロー共振器との強結合によるトリオンポラリトンの実現、太陽電池の高効率化など、物理分野および工学分野への波及が見られている。

「物質におけるトポロジカル理論」（2016年のノーベル物理学賞）の物性物理における新しい概念が光学の分野にも導入され、近年研究が活発化している。これは、ノーベル賞受賞者のHaldaneが理論予測したところから始まっている。特殊なフォトニック結晶を用いると、トポロジカル絶縁体のエッジモードと似たトポロジーによって守られた導波路モードが実現するというものである。その後、フォトニック結晶やメタマテリアルなどの人工ナノ構造を用いて、様々な興味深いトポロジカルな性質が見つかった。当初は理論研究やマイクロ波領域での原理検証実験が主であったが、近年、光学周波数における実証実験が急速に進みつつあり、光学領域における光トポロジカル絶縁体の作製や、光トポロジカル絶縁体のエッジモードによるレーザー発振などが報告されている。この分野では、特に中国の研究者の動きが活発である。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

海外では、ナノフォトニクスによるアトジュール光情報処理を目指した研究プロジェクトや、ナノフォトニクス回路を用いた光デジタル演算技術の研究プロジェクトなどが走っている。米国では、2015年7月に、AIM Photonics (American Institute for Manufacturing Integrated Photonics) というコンソーシアムが設立され、連邦政府から \$110M のファンディングを受け、主にシリコンフォトニクスの設計・製造・組み立て・パッケージング・検査等のエコシステムを確立し、シリコンフォトニクスをエレクトロニクスと同様の産業にすることを目指している。

欧州では、Horizon2020の中で、シリコンフォトニクスを含む光エレクトロニクス関連のプロジェクトとして、2015～2020年の間で42.4M € (12プロジェクト) が登録されている。imec および Eindhoven 工科大学を中心に複数のプロジェクトが進行しており、特にシリコンと化合物半導体を融合したナノフォトニクスプラットフォームに関する研究が活発になっている。STMicroelectronics をファウンドリとして利用することで、伝送容量 2Tbps、消費電力 2mW/Gbps、コスト 0.2 €/Gbps などの目標値も掲げられている。

シンガポールでは、科学技術庁がシリコンフォトニクスの将来性を見据えて、IME (Institute of Microelectronics) のシリコンフォトニクス部門を法人化することを決定し、少量・多品種生産ができるアドバンスド・マイクロ・ファウンドリ (AMF) が発足した。

日本では、技術組合光電子融合基盤技術研究所 (PETRA : Photonics Electronics Technology Research Association) をベースに、光配線や光素子の開発を行い光エレクトロニクス実装システム技術の実現を目指した NEDO プロジェクト「超低消費電力型光エレクトロニクス実装システム技術開発」(2022年まで) が進行中であり、同技術をベースにして光トランシーバの製造、販売を司る会社 (AIO Core) も設立されている。また、今年度から産総研を主体としたシリコンフォトニクス・コンソーシアムが発足し、産総研のスーパークリーンルー

ムでウェハ・プロセスが行える体制が構築されている。基礎研究としては、JSTの戦略的創造研究推進事業（ACCEL）では、ナノフォトニクス技術を利用した「スローライト構造体を利用した非機械式ハイレゾ光レーダーの開発」（横浜国立大学）の研究が進められている。平成27年より始まったJSTのCREST「新たな光機能や光物性の発現・利活用を基軸とする次世代フォトニクスの基盤技術」領域においても、ナノフォトニクス関連の複数のテーマが進められている。

（5）科学技術的課題

ナノフォトニクス分野全体でみると、引き続き新奇な現象や従来の常識を打ち破るような特性が達成され続けており、アカデミックな成果は出続けていくものと思われるが、ナノフォトニクスの根幹を支えるナノ加工技術に関しては、依然として研究室レベルの技術に頼るところが多い。今後は、大規模集積化と大量生産が可能なナノフォトニクス作製技術の開発が重要なポイントになる。この中で、シリコンフォトニクスの作製技術は非常に成熟しており、大規模化や大量生産に関しての問題点はほぼクリアされているが、既存のシリコンフォトニクス技術で作製可能なナノフォトニクス構造は非常に限られている。このため、シリコンフォトニクスの中にどれだけ他のナノフォトニクス関連の作製技術を導入できるか、また、既存のシリコンフォトニクス技術で作製可能なナノフォトニクス構造の範囲を広げていくかが重要である。さらに、光インターコネクタなどの応用では、光集積回路をCMOSベースの電気回路と低消費電力で低遅延に結合させる必要があり、光電変換素子とトランジスタを近くに集積することなどが重要になると考えられる。緻密な光電集積技術の開発に向けたナノフォトニクス技術の活用が期待される。

（6）その他の課題

シリコンフォトニクスの試作ができる施設は米国、欧州、シンガポール、日本などにあるが、世界中の人、資金、技術、情報等が集まるハブとして機能を持つことは、シリコンフォトニクスだけでなくナノフォトニクスなどの競争力を強化する上で重要である。このような施設を持続可能な形で運営していくには、施設の運転・維持費を賄える程度の多数の参加者を国内外の多様な分野から集める必要があり、産学官が協力して魅力ある共同利用の仕組みを構築していく必要がある。

(7) 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	○	→	東大、東工大、NTT を中心にシリコンと化合物半導体や磁性材料等の接合技術、京大、横国大を中心にフォトニック結晶を用いた高性能光デバイス等の研究開発で世界をリードしている。 平成 27 年より始まった JST-CREST でもナノフォトニクス関連のプロジェクトが複数スタートしている。
	応用研究・開発	○	→	PETRA (光電子融合基盤技術研究所) を中心に産学共同のプロジェクト「超低消費電力型光エレクトロニクス実装システム技術開発 (2022 年まで)」を行っている。 JST ACCEL において、フォトニック結晶のデバイス応用プロジェクトが走っている。 ナノフォトニクスの単体素子では、フォトニック結晶レーザーや偏向素子などで近年商品化が進んでおり、世界的に先行している。 PETRA の技術をベースに光トランシーバチップの生産・販売を行う会社 (AIO Core) が設立された。
米国	基礎研究	◎	→	ナノフォトニクスの基礎研究に関しては、MIT、Stanford 大などに各分野において世界をリードする研究者がおり、活発な研究を行っている。特に近年プラズモニクスやトポロジカルフォトニクスの研究が活発化している。 ナノチューブ関連では発光性欠陥導入は米国が主導している。
	応用研究・開発	◎	→	AIM Photonics で他国に先んじたシリコンフォトニクスのエコシステム構築を目指している。Luxtera 等が光トランシーバを販売中であり、Intel も製品リリースを発表した。 ナノフォトニクスのバイオ、センサーおよび太陽エネルギー応用に関しては活発な活動がある。 ナノフォトニクス技術を用いたニューラルネットやデジタル計算などの光コンピューティング関連の研究が活発化し、プロジェクトが走り始めている。 ナノフォトニクスを用いた光ニューラルネットに関しては、多額の投資を受けたスタートアップ会社が興され、産業化へ向けた開発を開始している。
欧州	基礎研究	◎	→	ベルギーの Ghent 大、imec、英国の Southampton 大、フランスの LETI 等を中心に幅広い研究が行われている。 Imperial College 等でメタマテリアル、プラズモニクス関連の純粋基礎研究に関しては伝統的に強く、理論研究者が指導的な立場を果たしている。
	応用研究・開発	○	↗	Horizon2020 の中で総額 20M €程度がシリコンフォトニクス関係。TERABOARD, ICT-STREAMS 等、ボードレベル、システムレベルの実用化を意識したものが多い。 imec、Eindhoven 工科大、CNRS/LETI 等にファウンドリ機能を含むナノファブリケーションの技術が結集されている。特にシリコンフォトニクスと化合物半導体ナノフォトニクスの融合をベースとしたデバイス応用研究が進んでいる。 ETH/KTH を中心としてプラズモニクス技術を中心とした高速電気光学変調器、光受光器の研究が急速に進展し、高速光伝送や光マイクロ波応用へ向けた研究開発が進行している。 ナノチューブフォトニクスのチップ上の集積化に向けた研究が見られる。

中国	基礎研究	○	↗	プラズモニクス、メタマテリアルを中心に大量の論文を発表している。かつてはレベル的に問題のある論文も多かったが、近年質的にも向上している。 拠点大学には最先端の加工技術装置が導入されており、作製技術も急速に立ち上がりつつある。 近年、遷移金属カルコゲナイドを用いたナノフォトニクスや、トポロジカルフォトニクスなどの新しい分野に、優秀な研究者が多数参入し、国から潤沢な資金を受けて顕著な研究成果を上げつつあり、成長が著しい。
	応用研究・開発	○	↗	近年、欧米にわたった優秀な若手中国人研究者が多数本国に帰国し、研究リーダーとして中国で研究開発を行うようになり、国からも応用を目指した研究に多額の資金援助が行われている。 特にクリーンルームや製造設備に関しては、最新の設備が導入されて進展が目覚ましい。 半導体受託生産で中国最大手の中芯国際集成电路製造 (SMIC) はシリコンフォトニクス用の製造ラインを構築中。
韓国	基礎研究	△	→	Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) を中心にナノフォトニクス、シリコンフォトニクスの基礎研究分野では複数の傑出した研究者が活躍している。特に米国帰りで優秀な研究者が目立つ。 ただし、国家として基礎研究への投資が大きく行われている様子には見えない。
	応用研究・開発	△	→	Samsung を中心にナノフォトニクスの応用研究が活発に行われている。特にディスプレイ、発光素子の分野での研究開発が活発だが、研究発表の数は多くない Samsung 社が CPU とメモリ間をシリコンフォトニクスで繋ぐ開発を行っている。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) M. Smit et al., "Moore's Law in Photonics," *Laser & Photonics Reviews* 6, no. 1 (2012) : 1-13. doi:10.1002/lpor.201100001
- 2) D. Miller, "Device Requirements for Optical Interconnects to Silicon Chips," *Proceedings of the IEEE* 97, no. 7 (2009) : 1166. doi:10.1109/jproc.2009.2014298
- 3) B. G. Lee et al., "High-Performance Modulators and Switches for Silicon Photonic Networks-on-Chip," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 16, no. 1 (2010) : 6-22. doi:10.1109/jstqe.2009.2028437
- 4) Jie Sun et al., "Large-scale Nanophotonic Phased Array," *Nature* 493, no. 7431 (2013) : 195. doi:10.1038/nature11727
- 5) Koji Takeda et al., "Few-fJ/bit Data Transmissions Using Directly Modulated Lambda-scale Embedded Active Region Photonic-crystal Lasers," *Nature Photonics* 7, no. 7 (2013) : 569. doi:10.1038/nphoton.2013.110
- 6) M. Khajavikhan et al., "Thresholdless Nanoscale Coaxial Lasers," *Nature* 482, no. 7384 (2012) : 204. doi:10.1038/nature10840

- 7) Y.-J. Lu et al., "Plasmonic Nanolaser Using Epitaxially Grown Silver Film," *Science* 337, no. 6093 (2012) : 450. doi:10.1126/science.1223504
- 8) M. W. Knight et al., "Photodetection with Active Optical Antennas," *Science* 332, no. 6030 (2011) : 702. doi:10.1126/science.1203056
- 9) Linyou Cao et al., "Resonant Germanium Nanoantenna Photodetectors," *Nano Letters* 10, no. 4 (2010) : 1229. doi:10.1021/nl9037278
- 10) A. Melikyan et al., "High-speed Plasmonic Phase Modulators," *Nature Photonics* 8, no. 3 (2014) : 229. doi:10.1038/nphoton.2014.9
- 11) Kengo Nozaki et al., "Sub-femtojoule All-optical Switching Using a Photonic-crystal Nanocavity," *Nature Photonics* 4, no. 7 (2010) : 477. doi:10.1038/nphoton.2010.89
- 12) Liu Liu et al., "An Ultra-small, Low-power, All-optical Flip-flop Memory on a Silicon Chip," *Nature Photonics* 4, no. 3 (2010) : 182. doi:10.1038/nphoton.2009.268
- 13) Kengo Nozaki et al., "Ultralow-power All-optical RAM Based on Nanocavities," *Nature Photonics* 6, no. 4 (2012) : 248. doi:10.1038/nphoton.2012.2
- 14) Eiichi Kuramochi et al., "Large-scale Integration of Wavelength-addressable All-optical Memories on a Photonic Crystal Chip," *Nature Photonics* 8, no. 6 (2014) : 474. doi:10.1038/nphoton.2014.93
- 15) Keijiro Suzuki et al., "Low Insertion Loss and Power Efficient 32×32 Silicon Photonics Switch with Extremely-High- Δ PLC Connector," *Optical Fiber Communication Conference Postdeadline Papers*, 2018. doi:10.1364/ofc.2018.th4b.5
- 16) Lei Qiao, Weijie Tang and Tao Chu, " 32×32 Silicon Electro-optic Switch with Built-in Monitors and Balanced-status Units," *Scientific Reports* 7, no. 1 (2017) . doi:10.1038/srep42306
- 17) Kyungmok Kwon et al., " 128×128 Silicon Photonic MEMS Switch with Scalable Row/Column Addressing," *Conference on Lasers and Electro-Optics*, 2018. doi:10.1364/cleo_si.2018.sf1a.4
- 18) Yichen Shen et al., "Deep Learning with Coherent Nanophotonic Circuits," *Nature Photonics* 11, no. 7 (2017) : 441-446. doi:10.1038/nphoton.2017.93
- 19) Alexander N. Tait et al., "Neuromorphic Photonic Networks Using Silicon Photonic Weight Banks," *Scientific Reports* 7, no. 1 (2017) . doi:10.1038/s41598-017-07754-z
- 20) Mohammadamin Nazirzadeh, Mohammadsadegh Shamsabardeh and S. J. Ben Yoo, "Energy-Efficient and High-Throughput Nanophotonic Neuromorphic Computing," *Conference on Lasers and Electro-Optics*, 2018. doi:10.1364/cleo_at.2018.ath3q.2
- 21) Zhoufeng Ying et al., "Silicon Microdisk-based Full Adders for Optical Computing," *Optics Letters* 43, no. 5 (2018) : 983. doi:10.1364/ol.43.000983
- 22) Tohru Ishihara et al., "An Integrated Nanophotonic Parallel Adder," *ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems* 14, no. 2 (2018) : 1-20. doi:10.1145/3178452
- 23) Christian Haffner et al., "Low-loss Plasmon-assisted Electro-optic Modulator," *Nature* 556, no. 7702 (2018) : 483. doi:10.1038/s41586-018-0031-4

- 24) Kengo Nozaki et al., "Photonic-crystal Nano-photodetector with Ultrasmall Capacitance for On-chip Light-to-voltage Conversion without an Amplifier," *Optica* 3, no. 5 (2016) : 483. doi:10.1364/optica.3.000483
- 25) N. Yu et al., "Light Propagation with Phase Discontinuities: Generalized Laws of Reflection and Refraction," *Science* 334, no. 6054 (2011) : 333. doi:10.1126/science.1210713
- 26) Shuming Wang et al., "Broadband Achromatic Optical Metasurface Devices," *Nature Communications* 8, no. 1 (2017) . doi:10.1038/s41467-017-00166-7
- 27) Wei Ting Chen et al., "A Broadband Achromatic Metalens for Focusing and Imaging in the Visible," *Nature Nanotechnology* 13, no. 3 (2018) : 220-226. doi:10.1038/s41565-017-0034-6
- 28) Sanfeng Wu et al., "Monolayer Semiconductor Nanocavity Lasers with Ultralow Thresholds," *Nature* 520, no. 7545 (2015) : 69-72. doi:10.1038/nature14290
- 29) Carlos Ríos et al., "Integrated All-photonic Non-volatile Multi-level Memory," *Nature Photonics* 9, no. 11 (2015) : 725. doi:10.1038/nphoton.2015.182
- 30) Xuedan Ma et al., "Room-temperature Single-photon Generation from Solitary Dopants of Carbon Nanotubes," *Nature Nanotechnology* 10, no. 8 (2015) : 671. doi:10.1038/nnano.2015.136
- 31) Xiaowei He et al., "Tunable Room-temperature Single-photon Emission at Telecom Wavelengths from Sp³ Defects in Carbon Nanotubes," *Nature Photonics* 11, no. 9 (2017) : 577. doi:10.1038/nphoton.2017.119
- 32) Akihiro Ishii et al., "Enhanced Single-Photon Emission from Carbon-Nanotube Dopant States Coupled to Silicon Microcavities," *Nano Letters* 18, no. 6 (2018) : 3873. doi:10.1021/acs.nanolett.8b01170
- 33) X. He et al., "Carbon Nanotubes as Emerging Quantum-light Sources," *Nature Materials* 17, no. 8 (2018) : 663. doi:10.1038/s41563-018-0109-2
- 34) Noémie Dannée et al., "Ultrashort Carbon Nanotubes That Fluoresce Brightly in the Near-Infrared," *ACS Nano* 12, no. 6 (2018) : 6059. doi:10.1021/acsnano.8b02307
- 35) F. D. M. Haldane and S. Raghu, "Possible Realization of Directional Optical Waveguides in Photonic Crystals with Broken Time-Reversal Symmetry," *Physical Review Letters* 100, no. 1 (2008) . doi:10.1103/physrevlett.100.013904
- 36) Ling Lu, John D. Joannopoulos and Marin Soljačić, "Topological Photonics," *Nature Photonics* 8, no. 11 (2014) : 821. doi:10.1038/nphoton.2014.248
- 37) Sabyasachi Barik et al., "A Topological Quantum Optics Interface," *Science* 359, no. 6376 (2018) : 666. doi:10.1126/science.aaq0327
- 38) Miguel A. Bandres et al., "Topological Insulator Laser: Experiments," *Science* 359, no. 6381 (2018). doi:10.1126/science.aar4005

2.3.4 スピントロニクス

(1) 研究開発領域の定義

固体中の電子が持つ電荷とスピンの両方を工学的に応用する分野であり、電荷の自由度のみに基づく従来のエレクトロニクスでは実現できなかった機能や性能を持つデバイス実現を目指す研究開発領域である。ハードディスクの大容量化や省電力化、不揮発性メモリの実現など、我々の生活の中で既に使われている技術もある中、デバイスの高機能化・省電力化に向けた研究開発が進められている。最近では、絶縁体中のスピン波スピン流、熱スピン流に基づく熱電変換などのスピントロニクスという新しい展開を見せている。

(2) キーワード

スピン流、スピントルク、スピン軌道相互作用、スピンホール効果、スピンゼーバック効果、不揮発性メモリ、電圧トルク、トポロジカル物質

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

電子は電荷とスピンの2つの自由度を持つことがよく知られている。従来、研究分野として電荷を主に扱う「電子工学」とスピンを主に扱う「磁気工学」の2つに分かれて発展してきたが、1990年代以降のナノテクノロジーの発展により、電子の電荷とスピンを効果的に結びつけて利用する学理体系の構築が始まり、スピントロニクスと呼ばれる研究領域の誕生へとつながった。中でも強磁性金属とその多層膜をベースとした分野が最も応用研究が進展しており、既にハードディスクの磁気ヘッドとして広く普及し、記録密度の大容量化に貢献している。さらに、スピン流を用いることで、従来の電子素子が抱えていたジュール熱によるエネルギー損失の問題の解決にもつながり、電子機器類の小型化・高性能化、画期的な省エネデバイス開発等が期待できる。

[研究開発の動向]

スピントロニクスの歴史は、1857年のKelvin卿の磁気抵抗効果の発見に遡る。当時は磁気抵抗効果の大きさを表すMR比が低く、実用化にはほど遠い状況であったが、1988年のA. FertおよびP. Grünbergらによる巨大磁気抵抗 (Giant Magneto Resistance : GMR) 効果の発見をきっかけに、GMR効果を利用したデバイス開発が世界中で進められ、1997年にGMRヘッドとして実用化された。その間、1995年に宮崎照宣とJ. S. Mooderaがそれぞれ室温における大きなトンネル磁気抵抗 (Tunnel Magneto Resistance : TMR) 効果を報告した。TMR効果は電子がトンネルできる程度の薄い絶縁体層を強磁性層で挟んだときに、強磁性層の磁化の相対的な配置によってトンネル抵抗が変化する効果である。TMR効果はGMR効果発見以前から研究が行われていたが、室温における高いMR比は報告されていなかった。GMR効果のMR比が5～15%程度であることに対して、TMR効果は20～70%と格段に高いことから、2004年に超高記録密度用TMRヘッドとして実用化され、世界初の不揮発性メモリ (MRAM) の実現にもつながっている。

1990年代には、磁化が電気伝導に与える影響が研究の中心で、かつ金属系と半導体系の2つの流れがあったが、2000年頃からは電気伝導が磁化に与える影響に興味を持たれるように

なり、スピン注入磁化反転や電流による磁壁駆動、スピンホール効果などの研究が精力的に行われるようになった。さらに、TMR やスピン注入、スピンホール効果などが、既存の材料の分類である金属・半導体・絶縁体の枠を超えて観測されており、スピン流の概念で解釈されている。スピン流とは、電子のスピン角運動量の流れであり、実験的に電流と分離して生成・検出することが可能である。スピン流は、電気的には絶縁性を示す物質であってもスピン波（マグノン）として生じるもので、スピントロニクスにおける基本的な概念の一つである。また、磁気と電気の変換（スピンホール効果、逆スピンホール効果）、磁気と熱の変換（スピンゼーベック効果、スピンペルチェ効果）など、磁気と他の物理量との変換の基礎にもなっている。さらに、近年では音や振動といった機械運動とスピン流との変換も発見されている。熱に関わる分野をスピントロニクス、力学的運動に関わる分野をスピンメカニクスと呼ばれることもある。これらの変換にはスピン軌道相互作用が大きな役割を果たしているが、界面においては結晶対称性の破れがあるため、スピン軌道相互作用が大きな効果をもたらす。スピン軌道トルクによる磁化反転はその例である。

2000年代初頭に発見されたトポロジカル物質と呼ばれる、物質がもつトポロジによって特徴づけられる新しい物質群においてもスピン軌道相互作用が大きく影響しており、ごく最近ではトポロジカル物質であるワイル磁性体をスピントロニクスへ応用するトポロジカルスピントロニクスと呼ばれる分野も形成されつつある。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

・電圧駆動 MRAM

現在、実用化が進んでいる STT-MRAM は電流が作る磁界を書き込みに使う場合に比べて非常に低消費電力となるものの、電流を用いてスピン流を発生するためにジュール熱による大きなエネルギー散逸を伴う。一方、電圧電界誘起磁気異方性変化によるトルク（電圧トルク）を書き込みに用いる新しい不揮発性メモリ「電圧駆動 MRAM」は、電流をほとんど流さずに電圧のみで書き込むため、理論的には STT-MRAM よりもさらに 2 桁程度小さなエネルギーでの書き込みが可能となる。近年、電圧パルスによる高速双方向磁気書き込みが実験的に示されたこと、 10^7 台のエラーレートが実証されたことで、実用化の可能性が高まっている。その他にも電圧による磁気異方性変化自体を大きくする必要はあるが、最近、FeIr 系などで従来の 10 倍以上の電圧効果が見いだされ実用化に着実に近づいている。

・スピン軌道トルク MRAM

スピンホール効果あるいはスピン軌道相互作用によるラッシュバトルクを用いることで STT-MRAM に比べて高効率の MRAM が作れることが期待されている。原理的に 3 端子であるため書き込みラインと読み出しラインを分離できるという回路上の利点もある一方で、素子サイズが大きくなるという問題も抱えている。近年、その高速性、高信頼性を生かした SRAM 置き換えの研究開発が進んでいる。MRAM によりキャッシュを不揮発にすることで携帯端末などの省エネルギー化も期待されている。

・VoCSM (Voltage Control Spintronics Memory)

内閣府 ImPACT 「無充電で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現」の支援の下、2016 年に東芝が提案したスピン軌道トルクと電圧による磁気異方性変化を同時に利用することによ

り低電力化と高集積度を同時に満たすことを目指した電圧書き込み方式の MRAM の新しいアーキテクチャ技術である。一つの重金属ワイヤーの上に複数の磁気トンネル接合を作ることが特徴で、このうち電圧をかけたもののみを低消費電力で書き換えることが可能になる。

- ・高感度磁場センサ

トンネル磁気抵抗素子およびマグネットインピーダンスセンサ (MI センサ) を用いた心磁計、脳磁計の研究が進んでいる。すでに、心磁・脳磁の信号測定に成功しており今後の実用化が期待される。

- ・スピン MOSFET

スピン MOSFET は、電力増幅作用をもち、出力電流やトランスコンダクタンスを磁化状態によって操作でき、不揮発で、既存の Si 集積回路で蓄積された微細加工技術や回路設計技術などの資産を使うことができるという特徴をもつ。原理的には CMOS 回路構成も可能である。スピン MOSFET からなる論理回路は、素子数の少なさと同揮発性により低消費電力動作が期待できる。まだ理想的な出力特性を得るには至っていないものの、これまでいくつかの試作と原理的な動作実証の研究が行われている。このような再構成可能な論理回路や不揮発性論理回路の実現は、今後のスピントロニクスにおける重要な目標になると考えられている。

- ・Si へのスピン注入、輸送、検出とスピン-MOSFET の試作

大阪大学・TDK グループは、スピン-MOSFET の作製とその動作実証を試み室温でスピン MOSFET を動作させたと報告した。ゲート電圧によるドレイン電流 ID の変調はある程度できているが、スピン注入と検出による磁気抵抗比は 0.01-0.04% 程度と非常に小さいものであった。最近、東京大学グループは、GaMnAs/GaAs/GaMnAs からなる強磁性半導体ヘテロ接合を用いた縦型 FET にサイドゲートを付けた独特のトランジスタ構造を作製し、低温ではあるがスピン-MOSFET の動作と大きな磁気抵抗比 60% の達成に成功した。また、東工大・NIMS・東大グループは、既存の TMR 素子と MOSFET を組み合わせるという手法により、擬似スピン MOSFET の作製と良好な特性の室温動作を示した。

- ・マグノニクスと脳型コンピューティング

スピン波やマグノンをキャリアとするデバイスの実現を目指す、マグノニクスと呼ばれる研究領域も誕生しており、ドイツや日本を中心に飛躍的な進展を遂げている。例えば、スピン波スピン流を用いた論理ゲートが提案され、動作実証が報告されている。スピン波は室温でも十分に干渉効果を得ることが可能であるため、これを利用することでデバイス構造を簡易化可能であることが指摘されている。また、スピン波やスピントルク発振の非線形性を利用して脳型コンピューティングを行おうという動きもある。スピントルク発振器とディレイラインを用いてリザーバーコンピューティングの実証が行われ注目を集めている。この他、磁性ドット間の双極子相互作用を利用した脳型計算のシミュレーションが発表されるなど近年急激に研究開発が活発になっている。

- ・トポロジカルスピントロニクス

トポロジカル絶縁体表面のスピン流やトポロジカル反強磁性体の仮想磁場などのトポロジーに起因する特性を利用することにより、素子の高密度化や高速動作、高効率なスピン流・電流変換もしくは熱電変換の実現など、新材料・新デバイス開発を目指した新しいスピントロニクス技術として期待されている。特に近年、ワイル反強磁性体である Mn_3Sn や Mn_3Ge などにおいて、反強磁性体では発現しないと考えられてきた異常ホール効果、異常ネルンスト効果、

磁気光学効果などが、電子構造のトポロジを起源として出現することが東大物性研グループにより報告され、反強磁性体を用いたスピントロニクスに新しい方向性を切り拓きつつある。また、実空間でトポロジに保護された磁気構造であるスキルミオンに関しても、レーストラックメモリ活用に向けた研究が進められている。

・スピンゼーベック・異常ネルンスト効果を含む垂直熱発電

従来型の熱電変換は熱流と電流が平行であったため、性能に限界があった。これに対しスピンゼーベック効果、異常ネルンスト効果は熱流と電流が垂直方向であるため、非常にシンプルな構造で高い変換効率が期待される。理論上はカルノー効率に達することが可能であると示された。最近の垂直熱発電の出力密度は $200\mu\text{W}/\text{cm}^2$ に達しており、あと一桁向上すれば BiTe 系の従来型熱電素子を超えるところまで達している。

・超伝導トポロジカル量子整流

第二種超伝導体 MoGe を、磁性絶縁体 $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ 基板に成膜した試料において、試料の温度を一定に保ちながらこの薄膜試料の面内方向に磁場を印加すると、ある特定の磁場値において、外部からの入力がないにもかかわらず、MoGe の面内方向に直流電圧が発生した。この直流電圧は、電磁ノイズのある測定環境では一日中安定して観測され続けた。この直流電圧は MoGe がいわゆる渦糸液体相にあるときに生じており、磁性体界面と開放側界面における渦糸のアンバランスが整流機能を生じたと考えられる。温度差ではなく環境の揺らぎを検出しており、低温動作ながらも非常に感度の高い整流素子であり、ノイズ評価や微弱信号の検出に利用できる可能性がある。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

スピントロニクスは基礎研究から応用研究まで多くの先駆的研究が日本から生まれてきた研究領域である。わが国においては、JSPS 科研費特定領域研究「スピン流の創出と制御」(領域代表者: 高梨弘毅、2007～2010年度) や JST 戦略的創造研究推進事業(さきがけ)「革新的次世代デバイスを目指す材料とプロセス(略称: 次世代デバイス)」領域(研究総括: 佐藤勝昭、2007～2013年度)において、スピン流物理に関する基盤が構築された。特に特定領域「スピン流の創出と制御」からは、巨大スピンホール効果やスピンゼーベック効果の発見、スピン起電力の実証等、スピン流の学術的基盤に関して非常に高水準な研究成果が多数報告されたことが高く評価されている。また、さきがけ「次世代デバイス」においても、磁性誘電体中のスピン流を利用した電気信号の伝達、グラフェンを介したスピン流の制御など、スピントロニクスの発展に寄与する多くの成果が生まれている。その後、スピンの角運動量変換を介して固体中の巨視的物理量が別の物理量に変換されるスピン変換物性の学理追求、物質界面のナノスケール制御による磁氣的、電氣的、光学的、熱的、機械力学的なスピン変換機能の開拓を目指す JSPS 科研費新学術領域「ナノスピン変換科学」(領域代表者: 大谷義近、2014～2018年度)が発足した。また、内閣府革新的研究開発推進プログラム(ImPACT)「無充電で長期間使用できる究極のエコ IT 機器の実現」(PM: 佐橋政司、2014～2018年度)では、AI/IoT 時代における低消費電力化への要請に応えるため、電圧で磁気メモリに情報記録する究極の不揮発性メモリや省電力スピントロニクス論理集積回路などのコンピュータにおける各メモリ/ストレージ階層の省電力を極めることに挑戦している。また、JST 戦略的創造研究推進事業における CREST「トポロジカル材料科学に基づく革新的機能を有する材料・デバイスの創出」(研

究総括：上田正仁、2018～2025年度）およびさがけ「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」（研究総括：村上修一、2018～2023年度）においても、ワイル磁性体やスキルミオンなどのトポロジカル物質をスピントロニクスに応用したトポロジカルスピントロニクスに関する研究が推進されている。

米国においては、NSF、DOE、DoDなどの支援の下、スピントロニクス関連の研究プロジェクトが多数存在し、基礎研究から応用研究まで幅広く実施されている。中でも、DOEのエネルギーフロンティア研究センター（Energy Frontier Research Centers：EFRCs）の1つであるSpins and Heat in Nanoscale Electronic Systems（SHINE、2014～2020年）では、伝導電子スピン流とマグノン流を制御するナノ電子システムを構築することを目的とし、カリフォルニア大学リバーサイド校を中核に米国におけるスピントロニクスに関係する機関（他にはジョンホプキンス大学、カリフォルニア大学ロサンゼルス校、テキサス大学オースチン校）が参画している。また、同じくEFRCの一つであるInstitute for Quantum Matter（IQM、2018～2022年）においては、量子もつれやコヒーレンスなどの量子効果が巨視的に発現する新しい量子物質や物性を開拓することを目的としている。ジョンホプキンス大学を中核機関とし、コーネル大学、ペンシルバニア州立大学、プリンストン大学、ラトガース大学が参加している。

欧州では、Horizon 2020の枠組や各国の研究資金で基礎研究を中心に実施されている。Horizon 2020においては、反強磁性スピントロニクスの実現を目指したAntiferromagnetic Spintronics（ASPIN、2017～2021年）プロジェクトや新規トポロジカル物質・トポロジカル物性の開拓を目指すTopological materials: New Fermions, Realization of Single Crystals and their Physical Properties（TOPMAT、2017～2022年）がある。また、ドイツにおいてはDFG支援の下、スピнкаロリトロニクスに関する新しい研究分野開拓を目指したSpin Caloric Transport（SpinCaT、2011年～）、スキルミオンを含む実空間でのトポロジカルスピントロニクスを用いたデバイスとアプリケーション開発に向けた基礎研究を行うSkirmionics: Topological Spin Phenomena in Real-Space for Applications（2018年～）などがある。特にSpinCaTに関しては、2008年に慶應大グループによって発見されたスピンゼーバック効果に注目した大型プロジェクトである。

（5）科学技術的課題

磁性半導体をはじめとする半導体スピントロニクス材料開発に関しては、高いTCを得るための指針を確立するため、結晶成長機構の解明、欠陥やキャリア濃度を制御方法の開発、バンド構造と強磁性発現機構の理解、さらにはそれらの理解に基づくマテリアルデザイン方法の確立が求められる。また、スピンMOSFETなどスピンデバイスの研究については、着実に進歩しているものの、室温動作、満足すべきトランジスタ性能、平行磁化と反平行磁化の違いによる十分大きな磁気抵抗比（磁気電流比）など、すべての要件を満足するデバイス作製が今後の重要な課題である。

近年、スピン軌道相互作用に関わる物理が大きな発展を見せているものの、一般的にスピン軌道相互作用の大きな元素はレアアースが多く元素戦略的な観点が必要となる。また、スピнкаロリトロニクスやスピンメカニクスにおいては、応用のためには熱/力学的運動⇔スピン流⇔電流の変換効率の桁違いの向上が必要であり、新物質の開発と原子レベルでの界面制御技術が必要

になる。さらに、スピン流やトポロジカル物質を用いたスピントロニクスに関しては、まだ基礎研究フェーズであると言えるものの、実験室レベルの基本動作実証からプロトタイプ of 作製、デバイスの安定性や信頼性を検証するレベルまでステージアップさせることが必要である。

(6) その他の課題

スピントロニクスはもともと磁性薄膜の成長と物性を得意とする研究グループに牽引されてきた経緯があり、個々の研究者がこれら広い知識を必ずしも有しているわけではない。そこで、この分野では、物理・数学・物性・結晶工学・磁気工学・半導体工学・微細加工技術・計測工学の諸分野の研究者、さらにシステム（回路）・デバイスの専門家や産業界をいかに結集し学際的かつ産学連携を誘発する土壌を豊かにしていくかが重要な課題と言える。本研究開発領域は日本が強みを有する領域であり、今後も競争力を維持していくためには若手人材の育成と確保も最重要課題の一つである。

(7) 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	◎	→	・JSPS 新学術領域、JST 戦略的創造研究推進事業、内閣府 ImPACT などを中心に基礎研究が継続的に行われている。 ・トポロジカルスピントロニクスなどの新しい概念に基づく研究開発が開始されている。
	応用研究・開発	○	→	・ImPACT など で実用化へ向けた研究開発が行われてはいるものの、企業の寄与はそれほど大きくはない。
米国	基礎研究	◎	↑	・NSF、DOE、DOE 傘下の NERSC、ONR からの手厚い支援のもと、良質な基礎研究成果を出し続けている。
	応用研究・開発	○	→	・キャッチアップが早く、電圧トルクなど多くの応用研究が始まっている。
欧州	基礎研究	◎	→	・英国では EPSRC と JSPS との共同プロジェクトとして、有機スピントロニクス等の研究が行われている ・フランスではフランス国立研究機構 ANR により、かなり広範囲にわたってスピントロニクス関連の支援が行われている。 ・ドイツでは DFG の支援のもと、スピン流・熱流変換現象を扱う大型プロジェクト SpinCaT が 2010 年に立ち上がり、多くの研究グループが参画している。 ・トポロジカル現象を用いた新しいスピントロニクス研究も積極的に行われている。
	応用研究・開発	△	→	・IMEC などが応用研究を再開したがそれほど目立った進展はない。
中国	基礎研究	◎	↑	・量子異常ホール効果の実証など、質の高い研究が行われるようになってきている。 ・潤沢な研究資金と豊富な人材を活用し、欧米を凌ぐ勢いで研究が行われ、高いポテンシャルを有する。
	応用研究・開発	△	↑	・応用研究に関する情報はそれほどないが、基礎研究の質が高くなっている中、今後国家的事業として重厚な支援なされる可能性がある。
韓国	基礎研究	○	↑	・これまで理論中心だったが、界面 DMI の研究などの実験においても良質な研究がみられるようになってきている。 ・個別研究レベルでは秀逸な研究が存在する
	応用研究・開発	○	↑	・Samsung やハイニクスが MRAM 研究に力を入れている。 ・財閥系企業などからの潤沢な資金をもとに応用研究・開発を活発に行う可能性がある。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプ of 開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 齊藤英治, 村上修一 『スピン流とトポロジカル絶縁体—量子物性とスピントロニクス的发展—』 (共立出版, 2014) .
- 2) G. Binasch et al., "Enhanced Magnetoresistance in Layered Magnetic Structures with Antiferromagnetic Interlayer Exchange," *Physical Review B* 39, no. 7 (1989) : 4828. doi:10.1103/physrevb.39.4828
- 3) M. N. Baibich et al., "Giant Magnetoresistance of (001) Fe/ (001) Cr Magnetic Superlattices," *Physical Review Letters* 61, no. 21 (1988) : 2472. doi:10.1103/physrevlett.61.2472
- 4) T. Miyazaki and N. Tezuka, "Giant Magnetic Tunneling Effect in Fe/Al₂O₃/Fe Junction," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 139, no. 3 (1995) . doi:10.1016/0304-8853 (95) 90001-2
- 5) J. S. Moodera et al., "Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions," *Physical Review Letters* 74, no. 16 (1995) : 3273. doi:10.1103/physrevlett.74.3273
- 6) Satoru Nakatsuji, Naoki Kiyohara and Tomoya Higo, "Large Anomalous Hall Effect in a Non-collinear Antiferromagnet at Room Temperature," *Nature* 527, no. 7577 (2015) : 212-15. doi:10.1038/nature15723
- 7) 科学技術振興機構 CREST 研究領域「トポロジカル材料科学に基づく革新的機能を有する材料・デバイスの創出」,
https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah30-3.html (2019年2月12日アクセス)
- 8) 科学技術振興機構 さきがけ研究領域「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」,
https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah30-3.html (2019年2月12日アクセス)

2.3.5 MEMS・センシングデバイス

(1) 研究開発領域の定義

MEMS センサに代表されるセンシングデバイスは、安心・安全なスマート社会を実現する上で重要な Internet of Things (IoT) を構成する主要な要素であり、様々な環境において多種多様な情報を取得するセンシング技術の開発が進んでいる。MEMS センサや化学センサなどセンシングデバイスの高感度化、高信頼化、低消費電力化、小型軽量化、低コスト化、MEMS プロセス技術の高度化、プリントドエレクトロニクス技術などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

MEMS (Micro Electro Mechanical Systems)、センサ、IoT (Internet of Things)、プリントドエレクトロニクス (Printed Electronics)、SAW (Surface Acoustic Wave) フィルタ、BAW (Bulk Acoustic Wave) フィルタ、慣性センサ、MEMS アクチュエータ、化学センサ、セキュリティ

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

超スマート社会 (Society 5.0) あるいは高度なサイバーフィジカルシステム (CPS) を築くためには、人工知能などの新たな情報処理技術や高速大容量ネットワーク技術と並んで、現実の世界の多種多様な情報を取得するセンシング技術が重要になっている。その応用は、IT 機器、自動運転車、ロボット、ドローン、VR・AR システム、健康・医療、インフラ保守など、社会の様々なシステムに広がっている。これらの応用のためのセンシングデバイス (センサ) としては、画像・映像を取得するイメージセンサと加速度、圧力、音などの多様な物理量を検出・測定可能な MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) が最も重要でその利用も拡大している。今後はこれらに加え、健康・医療などの応用分野で安定して使い易い化学センサの開発も期待され、物理センサや化学センサと集積回路 (IC) やプリントドエレクトロニクス (Printed Electronics) との組み合わせも重要になると考えられる。イメージセンサはすでに企業主体の開発フェーズにあるため、本領域では化学センサも含めて MEMS センサを中心に扱う。

スマート社会に関連する産業を見ると、欧米と中国のサービスプラットフォームが覇権を握り、高い利益率を確保している。一方、サービスプラットフォーム以上に高い利益率を確保しているのが、デバイス・モジュールメーカーである。DRAM の利益率は 60 ~ 70% に達していると言われるが、MEMS 最大の商品である BAW (Bulk Acoustic Wave) フィルタとそれを用いた無線フロントエンドモジュールの利益率も 50% 程度であると言われている。生み出す付加価値はデバイス・モジュールとサービスプラットフォームで高く、システムで低くなる「スマイルカーブ」を描く。この「デバイス・モジュールメーカーとサービスプラットフォームの時代」において、日本の企業が後者に食い込むことはかなり難しいと思われるが、日本には強いデバイス・モジュールメーカーが多い。また、この図式は EV 化やカーシェアリングが急速に進む自動車産業にも広がる可能性があり、日本にとって本研究開発領域の重要性は高い。

[研究開発の動向]

(a) MEMS センサ

世の中のセンサの多くが MEMS 技術によるものである。スマートフォンを例にとると、ここにはマイクロフォン、加速度センサ、ジャイロスコープ、圧力センサ（気圧センサ）など、合わせて 10 個以上の MEMS センサが用いられている。クロック発振器の一部も MEMS である。これに加えて、2～3 個のイメージセンサ、磁気センサ（電子コンパス）、タッチパネル、温度センサ、GPS、赤外線顔認識センサ、指紋センサなども搭載されている。今後、セキュリティの問題がより重要になると考えられ、指紋センサが MEMS 技術による超音波方式になる可能性がある。また、磁気センサも MEMS になり、慣性センサとモノリシック化（一体化）される可能性がある。

これらの MEMS センサの技術は継続的に革新され、その結果、低コスト化と高性能化が進んでいる。例えば、加速度センサの大きさは、最近の 5 年間でチップダイの面積にして約 1/10 になっており、これはウェハレベルパッケージングや TSV (Through Silicon Via) といった技術の高度化によるところが大きい。低コスト化による爆発的な応用の広がり、スマートフォンがそうだったように、想像を超えた大きなパラダイムシフトをもたらす。今後は、自動運転に用いるジャイロスコープ、音声認識のためのマイクロフォン、資源探索等のための重力センサ（高感度加速度センサ）、ロボットの機械学習に用いる触覚センサなどでの高性能化や高機能化が期待されている。

(b) 弾性波フィルタ

Society 5.0 では、大量のデータが無線でやり取りされ、次世代通信規格 5G では、3.5 GHz 帯と 4～5 GHz 帯、およびミリ波帯（28 GHz 帯）が新たに使えるようになる。見通せない距離の無線通信に適した周波数は数百 MHz から 6 GHz の領域であるが、この領域には新たに無線通信に割り当てられる帯域はほとんど残されていない。新しい 3.5 GHz 帯と 4～5 GHz 帯は、従来の 900 MHz～2 GHz 帯より高い周波数であるため、周波数選択フィルタ（デュプレクサ等）にはより高い技術が求められる。

現在、周波数選択フィルタには、SAW (Surface Acoustic Wave) フィルタと BAW (Bulk Acoustic Wave) フィルタが使われている。後者は、現在の MEMS における最大売上高の製品であり、Broadcom（米国）が最大手メーカーとなっている。SAW・BAW フィルタには、高周波化に加えて、挿入損失、温度安定性、カットオフ特性、線形性、パワーハンドリングなどの点でさらに高い性能が求められており、研究開発が盛んである。最近、これまでの限界を打破する新しい弾性波デバイスとして、シリコン基板や水晶基板に支持された厚さ 1 μ m 以下の薄い圧電単結晶板を用いたデバイスが開発され、極めて高い性能を示している。

(c) 化学センサ（バイオセンサ）

人の健康を体内環境として直接モニターするには生体活動に関与する微量物質を高い選択性をもって検出する必要がある。そのために、生物由来あるいは生物に関連する物質がバイオ分子受容体として開発されてきた。しかし、バイオ物質は生ものであり多くの場合センサとして常温で保存することができないという問題がある。そこで、どこでも使えるバイオセンサという観点から、生体の主要高分子であるタンパク質、炭水化物（糖鎖）、核酸を用いた微量ターゲッ

ト物質受容体技術の研究動向について示す。

酵素タンパク質は化学物質を選択的に捉えてその反応を触媒するので、反応生成・消費物質を測定することで元の化学物質を定量できる。さらに、動物の免疫が分子認識能力を持つことを利用して抗体センサが開発されたが、熱や pH の影響により比較的容易に壊れて変性しやすく、光や水・空気による変質および細菌やリソソームによる分解も起こりやすいため、常温で長期に保存することは難しい、などの課題がある。

糖鎖は各種糖がつながった化合物であり、タンパク質を修飾することでその機能に大きな影響を与え、細胞内外の分子認識や分子間情報伝達に重要な役割を持つ。また、ウイルスと細胞の相互作用にも深く関わっていることから、糖鎖チップは迅速なウイルス感染症等の検出に向くと期待されている。タンパク質とは違って熱変性を起こしにくいいため、糖鎖センサは室温で長期使用可能である。糖鎖の化学合成では遺伝子工学の手法を使うことができないため、必要なセンサ用の糖鎖を創り出すことを目的として、様々な合成法の開発が試みられている。

遺伝子の実態であるデオキシリボ核酸（DNA）などの核酸の中には、その配列によって抗体のように特定の物質を特異的に認識し結合する機能をもつ核酸アプタマーが存在する。アプタマーは抗体や糖鎖と同様に高い選択性を持つ受容体として使える上に、生物由来原料を用いずに化学合成原料によって安価に製造できること、乾燥状態で常温保存できることなど、IoT 時代のセンサ受容体として数々の優れた特徴を有している。核酸アプタマーは、特定のターゲット分子に対応する分子を創生するランダムスクリーニングにより作製可能であるが、L. Gold により開発されたその代表的製法である SELEX（systematic evolution of ligand by exponential enrichment）法の基本特許が 2011 年に失効したため、近年では様々なアプタマーが国内外で盛んに開発されている。

バイオセンサは通常は上で述べた分子（またはイオン）認識部とトランスデューサ（信号変換部）とから構成される。主要なトランスデューサとしては、電気化学デバイスと光検出デバイスがある。小型・軽量で簡便に使えるウェアラブルなセンサとしては、電気化学デバイスが優れている。しかし、電位を検出するタイプのセンサでは参照電極が必要となり多くの場合定期的にキャリブレーションを入れる必要がある。また電流検出を利用するタイプのセンサは消費電力が課題になる。このため、消費電力が少なく安定な測定が可能な電気化学デバイスの開発が望まれている。光検出型の場合は、光源および消費電力が課題である。シリコンフォトニクスや表面プラズモンなどのナノ・マイクロフォトニクス技術の利用が期待される。

（４）注目動向

[新展開・技術トピックス]

MEMS はこれまで広くセンサに用いられ、産業的にも成功を収めている。一方、MEMS 技術をアクチュエータに用いて成功した例は限られており、インクジェットプリンタヘッドが唯一の産業的成功例である。しかし、圧電材料をはじめとする技術の進歩によって、最近新しい MEMS アクチュエータの実用化の動きが出てきている。具体的には、映像プロジェクション、LIDAR（Light Detection and Ranging）、ジェスチャ認識、配光制御などのための走査型マイクロミラーデバイス、カメラまわりのアクチュエータ、薄型スピーカ（MEMS スピーカ）などである。これらの技術の多くは、大学や公的研究機関の技術をシーズにしてベンチャー企業で開発されており、本研究開発領域でもシーズ技術がベンチャー企業によってスピード感を

持って実用化される動きが顕著になっている。

常温での長期保存ができるバイオセンサ受容体である核酸アプタマーには RNA アプタマーと DNA アプタマーがあるが、RNA の方が多様な立体構造を形成しやすいことから、創薬には RNA アプタマーが適すると考えられてきた。これに対し、SELEX 法で行う核酸のスクリーニングに用いる初期ライブラリに、多様なセクションを可能にするために化学修飾した一本鎖の人工核酸を用いる検討が行われ、修飾人工核酸による唾液中コルチゾールをターゲットとした人工核酸アプタマーの開発、およびアプタマーを用いたメンタルストレス計測用電界効果トランジスタ (FET) バイオセンサなどが報告された。IoT 時代のどこでも使えるバイオセンサとしてのアプタマーおよびその利用技術の開発が期待される。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国で MEMS 技術を約 25 年にわたり強力に支援しているのは、DARPA (Defense Advanced Research Projects Agency) である。DARPA が継続的に重要視しているのは、兵器のナビゲーションに必須の慣性センシング技術である。これに関する最新のプログラムは、Precise Robust Inertial Guidance for Munitions (PRIGM) program と呼ばれる。慣性センサの 1 つであるジャイロスコープには MEMS の中核をなす重要技術が凝縮されており、その研究を行うことで MEMS 技術の本筋の研究に繋がっている。他に、干渉に強いアダプティブ高周波デバイスを研究する Signal Processing at RF (SPAR) program、超省消費電力センサを研究する Near Zero Power RF and Sensor Operations (N-ZERO) program の 2 つのプログラムが実施されている。

欧州では Horizon 2020 のもと、いくつかの MEMS 関連プロジェクトが実施されている。多くは Industrial Leadership のためのプロジェクトに整理されている。前述の MEMS スピーカ (https://cordis.europa.eu/result/rcn/198209_en.html) もそれらのプロジェクトの 1 つで開発されたものであり、事業化を目指すベンチャー企業 USound (オーストラリア) が注目を集めている。

中国では、MEMS やパワー半導体の大型研究拠点である SITRI (Shanghai Industrial μ Technology Research Institute) が 2015 年に上海に設立され、遅れていた 8 インチラインの立ち上げは昨年完了したと思われる。半導体デバイスや半導体装置の国産化に多額の投資を続ける中国政府は、MEMS 関連の国内企業にも積極的に補助をしている。最近、米国との貿易紛争で中国国内のハイテク産業が危機にさらされていることが、政府投資を活発にさせている。前述の周波数選択フィルタとそれを用いた無線フロントエンドモジュールは、米国と日本でしかほとんど作れない基幹部品であり、それがないとスマートフォンは製造できない。2018 年 7 月、四川省綿陽市政府は BAW フィルタメーカーである諾思 (天津) 微系統と戦略的協力協定を締結し、綿陽市游仙区の工場に総額 128 億元 (約 2100 億円) を投資すると発表している。

(5) 科学技術的課題

センサ・MEMS 分野の代表的な技術的挑戦は、チップ面積や消費電力を大きくせずに S/N 比を上げること、強力なアクチュエータを実現すること、および現実的な方法で異なる要素を集積化することである。例えば、S/N 比を上げるには、極めて高い Q 値、超高精度加工、超

高性能圧電膜、超高感度ピエゾ抵抗などが必要である。これらは、現実的な解があるのかどうかを含めて、原理検討や材料開発から取り組むべき中長期的な課題である。

半導体集積回路の研究開発では、LSI ファウンドリが提供する様々なプロセスプラットフォームの上で設計がなされる。MEMS については設計とプロセスとが切り離せず、そのことを言い表した” One Device, One Process, One Package ” という言葉がある。しかし、デバイスごとに製造プロセスを開発していたのでは実用化に時間とコストがかかり過ぎるため、複数のデバイスに対応する有力なプロセスプラットフォームがいくつか登場し、そのプラットフォームによるデバイスがシェアを占めるようになった。このような流れに対し、日本発の有力なプロセスプラットフォームはなく、海外企業の M&A で獲得しているだけである。

現在、スマートフォン、自動車、ヘルスマonitoring デバイス、ゲーム機器などに幅広く用いられているセンサはおおよそ物理センサであるが、バイオマーカの検出、呼気の分析、空気中汚染物質の濃度測定などを低コストで行うためには、ソリッドステート化学センサが必要である。実用的なソリッドステート化学センサとして、ISFET (Ion Sensitive FET)、触媒燃焼型ガスセンサなどがある。しかし、必要な性能を発揮するにあたっては、前者は使用前のキャリブレーションを必要とするため連続使用には向かず、後者はセンサを高温にして表面を清浄かつ活性に保たなくてはならないため低消費電力化が難しい。このような化学センサは明らかに IoT 用途に向かない。一方、論文では多くの「高感度」、あるいは「省電力」を謳った化学センサが報告されているが、そのほとんどはドリフト、戻りの応答、繰返し性能、あるいは信頼性に問題をかかえている。多くの場合、化学物質に対する結合力や吸着面積を上げれば高感度になるが、同時に前述の問題が発生する。IoT 用途に長期間安定して使えるソリッドステート化学センサの新しいアイデアが待たれる。

(6) その他の課題

センサ・MEMS の研究開発は産業に直結し、その進歩や展開は速い。このような技術分野においては、従来型の研究開発プロセス、例えば、競争的研究費によってアカデミックを支援し、生み出されたシーズが論文等を通じて企業に伝わり、企業による社内研究開発あるいはアカデミックとの共同研究を通じて実用化されるというプロセスは、速度の点からも成功確率の点からも十分な機能を果たせなくなっている。

米国においては、多くの教授や学生が起業を試みることからわかるように、アカデミックでの研究とベンチャー企業での開発とが極めて近い。事業のシーズがあると、ベンチャーキャピタルから多くの資金が投入され、例えば、普通なら 1 年かかる開発が 3 か月で終わることも少なくない。それでも DARPA は MEMS の実用化がさらに早くできる方法がないかという問題意識を持っている。欧州では、フラウンホーファー研究機構、Leti (フランス)、IMEC (ベルギー)、CSEM (スイス)、VTT (フィンランド) などの研究拠点の役割が大きい。これらの研究拠点には、先行投資して開発、蓄積された技術群を基に複数の企業が集まり、効率よく研究開発が進められている。これらの研究拠点の予算の基盤部分には、我が国で言えば運営交付金のような公的資金が充てられているが、その割合は全体の数割程度以下である。政府から見れば、税金による投資に対して数倍のレバレッジが民間からの研究資金によってもたらされていることになる。

日本では、政府投資によっておおよそ丸抱えされた研究拠点がある一方、大型プログラムに

よって順調に立ち上がったものの、その後の基盤的支援が行われずに縮小される研究拠点もある。特に、産業に直結した研究開発を行っている、あるいは行うべき研究拠点に対しては、従来の競争的資金による研究がそぐわないことから、欧州の研究拠点のように全体の3割程度の基盤部分を公的資金によって支える、という方式に変更していくような議論も必要であろう。この方式は、政府投資総額を増やすことを必要とせず、民間資金によるレバレッジによって研究の速度と成功確率を格段に上げられる。

(7) 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	○	→	主要国際会議での論文数は多いが、多くの大学研究者の興味がメインストリームや産業技術から離れつつある。この状況は韓国と似ているが、その他の国の状況とは異なる。 若手研究者の層は比較的厚い。
	応用研究・開発	○	→	日本のデバイス・モジュールメーカーの実力は高く、弾性波フィルタ、自動車用慣性センサなどに強みがある。しかし、従来の日本式の研究開発では、世界の速度に付いていけないため、M&Aで補っている。東北大学などで産学連携が強力に進められている。
米国	基礎研究	◎	→	研究者の層が厚く、研究開発のスペクトルは広く、新しい発想は米国から出てくることが多い。 実力のある有名大学、Stanford 大学、UC Berkeley/ Davis/Irvine、ミシガン大学、Georgia Tech などは、メインストリームやベンチャー起業でも高い実力を見せている。
	応用研究・開発	◎	↑	慣性センサのベンチャー企業 InvenSense は、ここ 10 年で数百億円を売り上げる主要なセンサ企業へと成長し、2017 年、TDK によって 1600 億円で買収された。その後も、有力なベンチャー企業が次々と現れている。 シリコンバレーでは、この分野への投資熱も高い。BAW フィルタの上位 2 社 (Broadcom、Qorvo) は米国企業であり、Broadcom は Robert Bosch を抜いて世界最大の MEMS メーカーとなった。
欧州	基礎研究	○	→	欧州では応用研究志向が強く、基礎研究と応用研究とは一体である。特に実力のある研究拠点は、論文発表にプライオリティを置いておらず、論文からだけでは実力を測れない。
	応用研究・開発	◎	↑	Robert Bosch は MEMS 売上高首位の座を Broadcom に譲ったが、センサでの地位はゆるぎない。同社は社内で活発な研究開発を行いつつ、シリコンバレーやフラウンホーファー研究機構とも共同研究を積極的に行っている。 STMicroelectronics はビジネスで一時的勢いはないものの (2012 年に首位を陥落)、MEMS について全方位の研究開発を実施している。Leti の研究開発も盛んである
中国	基礎研究	○	↑	数年前まで中国からの研究発表に見るべきものは少なかったが、最近では優れた研究成果が報告されている。半導体技術の 1 つとして政府投資も盛んであり、研究開発熱は高い。
	応用研究・開発	○	↑	技術的蓄積を必要とするセンサ・MEMS では、独自技術に基づく製品は見られないが、従来技術に基づく圧力センサ等はかなり製造されている。 国内に実装メーカーが多くあり、欧米製のセンサ・MEMS をパッケージングして大手スマートフォンメーカーに納入しており、存在感を増しつつある。 政府からの手厚い援助もあり、欧米企業の M&A によって一気に最新技術を立ち上げようとする活力がある。深圳や上海の周辺ではベンチャー起業が盛んである。

韓国	基礎研究	△	↘	数年前までセンサ・MEMSの研究で、論文数等から判断して上位に位置していたが、実用化の成功例に乏しいため、産業界や政府からの投資熱が冷めている。その結果、全分野に研究資金が行き渡らず、研究者層が薄くなっていると思われる。既に台湾が韓国より上位である。
	応用研究・開発	△	→	財閥系IT企業は、スマートフォン等に搭載するセンサ・MEMSをグループ内で調達するべく、研究開発を行ってきたが、技術的蓄積と高度人材が不足しており、成功例に乏しい。MEMSやセンサより桁違いに多くの利益を稼ぎ出すメモリ等があるので、本研究開発領域には日が当たりにくい。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) W. Chappell, R. H. Olsson III and R. G. Polcawich (DARPA), "Enabling the Next Generation of MEMS Technology", The 2018 Solid State Sensors, Actuators, and Microsystems Workshop, Hilton Head, South California, USA, June 3-7, 2018, pp. 1-2.
- 2) 田中秀治「欧米MEMS企業の牙城崩せ、中国勢が続々切り込む：International Conference on Commercialization of Transducer & MEMS 2017 報告」『日経テクノロジーオンライン』（2017年10月31日オンライン）。
- 3) 田中秀治「IEEE MEMS2018の論文から見える集積化センサの将来」『次世代センサ』28, 1 (2018) : 38-41.
- 4) 南部谷俊介他「糖鎖固定化電界効果トランジスタによるインフルエンザウイルスから分離したヘマグルチニンの検出」『Proceedings of the Chemical Sensor Symposium』58 (2015) : 91-93.
- 5) 栗原正靖他「キャピラリー電気泳動法を用いた修飾核酸アプタマーのセレクション」『電気泳動』59, 2 (2015) : 88-90.
- 6) Hirotaka Minagawa et al., "Selection, Characterization and Application of Artificial DNA Aptamer Containing Appended Bases with Sub-nanomolar Affinity for a Salivary Biomarker," *Scientific Reports* 7, no. 1 (2017) . doi:10.1038/srep42716

2.3.6 三次元ヘテロ集積

(1) 研究開発領域の定義

複数の異なる機能を持つエレクトロニクス回路を三次元的に集積し、LSIチップの高機能化・小型化・低消費電力化を実現し、エレクトロニクス機器への適用を目指す領域である。三次元的な集積を可能にするウェーハの薄膜化、高信頼のウェーハボンディング（接合）、熱設計などの要素レベルの研究開発課題や、低電圧駆動ロジック、各種メモリ、イメージセンサ、MEMS、シリコンフォトニクスなどの異なる機能を持つエレクトロニクス回路を三次元的に集積して特性向上の確認を行うなどの原理実証、システムレベルの研究開発課題がある。

(2) キーワード

三次元集積、異種機能集積、More than Moore、三次元実装、3D-IC 設計技術、熱設計、ロジック、メモリ、パワーデバイス、光電融合、シリコンフォトニクス、MEMS、イメージセンサ、シリコン貫通ビア（TSV）、磁界結合、高バンド幅結合、スーパーチップ、ウェーハボンディング

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

今後のスマート社会における家電製品の一層の低消費電力化、スマートフォンなど誰もが使いやすい情報端末、安全性と省燃費を両立する自動車、自動運転など、半導体集積回路の機能性と情報処理能力向上に対する要望はますます強くなっており、増え続ける用途に対応した多品種の集積回路（LSI）を適切に社会に供給していく技術の開発が重要になってくる。これまでは、ムーアの法則に代表される二次元的なスケールリングによりトランジスタの微細化、高速化、低消費電力化を実現し、LSIの高集積化・高機能化を進めてきた。しかし、近年微細加工技術の困難さが増大し、トランジスタの性能向上の物理的限界が見え始めてきている。これに対し、III-V族半導体やGeなどの新材料チャネル、三次元構造トランジスタ、ナノワイヤトランジスタなど新構造導入により性能向上を図る等価的な二次元スケールリングとともに、異なる機能をもつ半導体あるいは異種材料でできた複数のチップを複合して一つのチップ状に加工する異種機能三次元ヘテロ集積回路技術が注目されている。

異種機能・異種材料を有する複数のチップを積層する三次元集積化において、例えば、メモリとロジックを積層できれば、チップ面積が縮小するだけでなく、メモリとロジック間の通信速度を飛躍的に向上することが可能となり、低消費電力と高速性の両方が実現できる。またメモリ同士を複数積層することが出来れば、等価的にムーアの法則に則ったさらなる集積化が実現できる。

具体的な事例をあげると、メモリとプロセッサ間を10Gbpsでデータ転送するのに要する電力は、従来の実装技術で製造できる12ビットI/Oを用いた場合には2000mW必要であるのに対し、積層接続して512ビットI/Oにすることで150mW程度まで低減できる。また、高周波の通信機能やイメージセンサ、加速度センサなどの異なる機能を積層することによって、チップの小型化、携帯機器の小型化による新たな応用展開も期待できる。このように、従来技術の延長では今後の社会要求に応えることが困難と予想される中、異種機能三次元ヘテロ集積回路が今後の新しいサービスの原動力になると期待される。

[研究開発の動向]

国内では、三次元集積化の中核要素技術であるシリコンウェーハの薄膜化、貫通ビア配線 (TSV)、マイクロバンプによる相互接続技術など、技術組合超先端電子技術開発機構 (ASET) で実施した電子 SI (Silicon Integration) プロジェクト (1998 ~ 2002 年) およびドリームチッププロジェクト (2008 ~ 2012 年) で先駆的な研究が進められ、プロセスインテグレーション、デジタル・アナログ混載技術など、多くの成果を生み出した。2013 年からは、これらの成果を受けた製品開発が民間企業によって進められている。その他、九州でのコンソーシアム研究開発事業 (2005 ~ 2007 年)、民間企業を含むアライアンスによる研究、大学等による研究などが進められ、オリジナリティの高い技術が開発されてきた。例えば、東北大学が「スーパーチップ」と称する異種三次元集積のコンセプトを提案し、CMOS デバイス上に化合物半導体、フォトニックデバイス、スピンドバイスを三次元集積したチップの試作に成功している。また JST の CREST 「情報システムの超低消費電力化を目指した技術革新と統合化技術」では、慶応大学の黒田チームが、近接場磁界結合により 128 枚のチップを積層してデータ通信が出来ることを実証し、電力を従来の 1000 分の 1 程度 (10fJ/b) まで低減することに成功した。

日本を追うように米国、欧州、韓国、台湾でもプロジェクト研究が行われた。米国では、IBM や Intel がナノ材料・デバイス技術、3D IC 形成技術、LSI 設計技術、システム設計技術を手掛け、また、ベンチャー企業が積極的に投資を行っている。例えば、Maxim Integrated 社がウェーハレベルでキャパシタやオプティカルセンサを三次元集積したアナログ向けチップの試作に成功しており、高性能を実証している。また、Monolithic 3D Inc がプログラマブルロジックの開発を目的にモノリシック三次元 LSI の開発を目指してしている。欧州の IMEC や LETI などは自分自身で高い CMOS 技術を持ちながら、光-電子融合分野でも研究を行っており、次を見据えて三次元集積化に対して精力的に活動している。韓国では、Samsung が DRAM、NAND フラッシュメモリの積層に取り組んでいる他、Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) でも TSV 技術開発が進められている。シンガポールでは Institute of Microelectronics (IME) と Nanyang 工科大学でアクティビティが認められる。台湾では、Taiwan Semiconductor Manufacturing Company (TSMC) と Industrial Technology Research Institute (ITRI) にて TSV に関する技術開発が進められた他、National Nano Device Laboratories が SRAM とロジック回路のモノリシック三次元チップの試作を行った。

国内外ともにそれぞれに特徴を有する一連の要素技術を確立し、製造装置、デバイス、材料ともに競争段階に入っていると見られる。それを反映して、国際電子デバイス会議 (IEDM) などの会議での基礎研究の発表はほぼ完了した状況にあり、技術的な内容は 3D System Integration Conference (3DSIC) などの専門家会議、あるいは Electronic Components and Technology Conference (ECTC) 等の実装技術を中心テーマとする会議で討議がなされる状況にあるが、それらにおいても個別の要素技術に関わる発表数は減じている。一方、国際固体回路会議 (ISSCC) などにおいてこれらの技術を応用した先端集積回路の発表がなされる状況にある。ロジック系の製品応用では、Xilinx 社が 2011 年に学会発表した FPGA が既に事業として成長している。この FPGA はシリコンインターポーザを利用して、FPGA チップを 4 つ集積化したものである。大面積化による歩留まり低下を補って低コストで機能向上が行えるという 3D 化のメリットを活かしたものと見える。FPGA は 28nm ノードの、シリコンイン

ターポーザは 65nm ノードのテクノロジーを使って製造を開始し、さらなる微細化も進んでいる。最近では、メモリチップも同様に混載して機能向上も果たした製品も出荷している。メモリ応用では、3D化が一般化してきたと言える。社会のデジタル化が加速的に進む中、3D化技術によるメモリの高性能化が価値を増している。三次元 NAND フラッシュメモリについては、Samsung および東芝が引き続き積層数を増大している。多結晶シリコン薄膜トランジスタを積層して利用するこの三次元 NAND フラッシュは、従来のフラッシュメモリの高密度化の限界を打破するとともに、微細化に依らずにビットコストを下げられる革新的な技術である。最近では、96層を積層した 512 ギガビットメモリを東芝メモリ社が開発し、2018年2月の ISSCC で発表した。データセンターの省電力化に今後も大きく貢献するものと期待される。一方、DRAM での 3D化による応用製品も拡がりを見せている。DRAM の場合、ビットコストの低減よりは HBM (High Band Memory) や HMC (Hybrid Memory Cube) と呼ばれる TSV を使った積層により、高速化と低電力化性能の増大が価値を生み出している。これらの高速・低電力メモリは、人工知能、HPC (High Performance Computing)、高度グラフィックス、サーバーシステムなどといった広範囲な用途に用いられており、需要が急拡大している。製品例としては、Samsung 社が第二世代の HBM2 方式で 307GB/s のデータ転送速度をもつ容量 8 GB の DRAM を生産している。このデータ転送速度は、従来方式の最先端 DRAM の性能 (36GB/s) のほぼ 10 倍に匹敵する。この製品では、一つのダイ (半導体チップ) に 5000 個を超える数の TSV で接続しており、全体は 8 万個を超える TSV で接続している。また、SK hynix 社も最近、1.2V と低い動作電圧で 341GB/s の転送速度をもつ TSV 積層型の DRAM を開発し、ISSCC2018 で発表した。インテル社は、HBM2 方式の DRAM とマイクロプロセッサ、グラフィックプロセッサをシリコンインターポーザ上に集積した PC 向けエンジンの製品発表をしており、今後、エッジコンピューティングやコンシューマー向けにも利用が拡大することが期待できる。イメージセンサは、シリコンウェーハの積層による性能向上で大きな成功をおさめた例であり、機能を切り分けたウェーハの薄膜化、貼りあわせ、ドーピング等のプロセス技術の発展を先導してきたと言える。TSV 技術を応用することでウェーハサイズでのマイクロレンズまでの集積化を可能にし、カメラモジュールの小型化と低価格化を同時に実現し、携帯機器へのカメラの爆発的普及に貢献した。一方、3D集積化は高機能化にも革新的進歩をもたらしつつある。ソニー社は、センサ、アナログ機能デジタル機能を 3D化積層してピクセルごとに 14 ビットと高い分解能で AD 変換し、グローバルシャッター機能をもたせた高性能イメージセンサを ISSCC2018 で発表した。台湾 TSMC 社も高性能 CMOS イメージセンサを開発している。他にも、Olympus 社が、400 万接点の積層接続 (マイクロバンプ接続) 技術を開発し、16M ピクセルで動画の歪みを抑えたイメージセンサを開発している。化合物半導体を光検知層にしたイメージセンサの開発も InGaAs のフォトダイオードアレイとシリコン読み出し IC の積層集積化による近赤外域を中心に高解像度化技術が進展を見せている。

独 Fraunhofer 研究所は、メモリとロジックの三次元集積化による高速データプロセッシング向け回路の開発に注力している。一方、仏 CEA-LETI は More than Moore の方向を指向し、NoC (Network on Chip) と呼ぶアーキテクチャのプロセッサ、IntAct と名づけたスマートインターポーザを用いた異種機能の集積技術の開発を進めている。米国 DARPA は、COSMOS (Compound Semiconductor Materials on Silicon) Program および DAHI (Diverse Accessible Heterogeneous Integration) Program で異種材料の 3次元集積化の研究開発を推進してい

る。開発事例として、QバンドのVCO（電圧制御発信器）増幅器がある。シリコン CMOS と InP ヘテロ接合バイポーラトランジスタ発信器、および GaN パワー増幅器を積層集積化し、35GHz 帯で 2 GHz の周波数可変域を有するチップを開発している。

シリコンの三次元集積化とその成功事例の創出を受け、今後は、化合物半導体とシリコン CMOS、MEMS とシリコン CMOS などの異種基板・異種機能の集積化が新たな価値を生み出すことが期待される。車の自動運転の実現を目指し、高精度の集積化 LiDAR の開発が東芝などの国内企業はもとより、デルフト工科大などの欧州、アナログフォトンクス社などの米国企業において開発が進められているのもその一例と言えよう。異種材料の積層集積化を実現するためには、ナノ材料技術、ナノデバイス技術、ウェーハの常温接合や新たな封止材、真空封止法など基礎・基盤的な研究が装置開発も含めて必要である。そこでのキーワードは「低温でのプロセス技術」である。また、3D LSI 設計技術、システム設計技術、さらにそれらの融合分野の科学的知識を統合する必要がある。そのため、異種基板という大きなプラットフォームの中で、LSI プロセス関係、光関係、MEMS 関係、回路関係などの人が集まって技術開発を進めることが必要である。近接場磁界結合を利用したメモリの積層技術に関しては、H27 年度から JST の ACCEL プロジェクト黒田課題で本格的な研究開発がスタートした。DRAM を何層にも積層することで、消費電力の大幅な低減のみならず、大規模メモリとアクセラレータ間の高バンド幅接続が可能になると期待される。また、この積層技術は SRAM にも適用できる。これらは、いわゆるフォン・ノイマンボトルネックの解消に繋がり、究極のターゲットである人間の脳の実現に近づく、ニューラルネットワークの開発に資すると期待される。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

IEDM、VLSI Symposium に代表される電子デバイス・回路に関する主要国際会議において、三次元集積に関するセッションが設けられ、カーボンナノチューブ等を用いたチップ間配線技術、光 TSV、チップ間を容量結合や誘導結合（磁界結合）を用いて無線通信する三次元集積化技術などが発表されていたが、最近では応用研究のフェーズへ移行してきている。産業技術総合研究所グリーンナノエレクトロニクスセンタ（GNC）が III - V 族の n 型 MOSFET と Ge の p 型 MOSFET をウェーハスケールで三次元に積層した CMOS インバータの実証に成功し注目を集めている。また、バックエンドプロセス（BEOL）に埋め込まれるロジックおよびメモリ開発に進展が認められ、超低電圧デバイス技術研究組合（LEAP）が原子移動スイッチを利用した再構成可能な不揮発プログラマブルロジックの開発に成功している。この技術開発は、その後 JST のナノエレ CREST（桜井領域）の中で一つのテーマとして、引き続き研究開発が行われている。

上述したように、ロジック、メモリともに異種機能の集積にはシリコン製またはガラス製のインターポーザが大きな役割を果たしている。これは、シリコンやガラス基板を用いることで貫通配線も含めて微細で高密度の再配線を形成できるからである。樹脂基板の場合には、従来技術では貫通孔の径を数十ミクロンとするのが限界であった。一方、最近の NEDO プロジェクトの成果として、樹脂基板でも直径 5 ミクロン程度の貫通孔を形成することが可能になっており、異種機能の混載による高性能化を多くの応用に対して提供できる技術基盤が整いつつあ

ると言える。

三次元集積化技術の進展を受けて、生体の情報処理を模したニューラルネットワークによる認知コンピューティングや人工知能のハードウェア実装に関する研究が活発化してきている。日本では1990年代前半に一時研究が盛んになったが、技術的な困難性からその後は一部の研究者による研究に留まっている。その後、不揮発性メモリ材料や技術に関する知見が進み環境は変化したといえる。IBMは相変化メモリ材料をCMOS技術と組み合わせてシナプスを作製する技術を発表しており、今後の動向が注目される。

一方、製造技術の観点では、可変量生産を可能にするものとして注目されるのが、経済産業省プロジェクトして産総研で推進しているミニマルファブシステムである。ここ2年程度で後工程を実行する装置群の開発も進み、製造のデモンストレーションを行っている。三次元集積用の装置開発も進められている。このファブシステムと異種機能ヘテロ三次元集積チップは相性が良く、従来型のメガファブと連携して新たなサプライチェーンを創り出すことによって、半導体産業の新たな展開を図れる可能性がある。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

300mm ウェーハを使って三次元集積化技術の実用化開発を行える日本のGINTI（Global Integration Initiative、東北マイクロテック）が進めるチップからウェーハまでの三次元集積化技術開発と試作サービスが注目される。フランスのCEA-LETIやベルギーのIMECが進めるオープンパートナーシップによる技術・装置開発の成果も注目される。IMECではCMOREプラットフォームが整備され、200mm ウェーハの0.13 μ m CMOSプロセスを用いて、MEMSやイメージャ、フォトリソ集積のサービスを開始している。

異種機能ヘテロ集積化では今後光と電子の融合が進むと期待できることから、技術研究組合光電子融合基盤技術研究所（PETRA）が平成24年度より10年間の予定で進めている経済産業省プロジェクト「超低消費電力型光エレクトロニクス実装システム技術開発」の成果も注目される。一方、この種の技術の応用として有力なセンサ関連では、Trillion Sensor Initiativeと呼ばれるセンサ応用をオープンに議論する会議が米国主導で発足し、活動を活発化している。新たな社会サービスが発掘される可能性があり、注目すべき動きの一つである。H27年度から始まったJSTのACCELプロジェクト黒田課題では、磁界結合を利用してDRAMやSRAMなどの積層技術を開発しており、メモリとの高バンド幅結合を可能にするニューラルネットアクセラレータの新しいアーキテクチャを考案し、実際にLSI設計・試作も行っている。これらは近接場接合による広帯域メモリ接続応用を視野に入れたものである。

（5）科学技術的課題

日本における異種機能ヘテロ三次元集積チップの研究を進める上での課題としては、国内に最先端のCMOS加工技術をラインとして有しているオープンな研究開発用クリーンルームが少ないことである。欧米の協力で進んでいる「3DIC Multi-Project Wafer Service」の様な異種機能ヘテロ三次元集積化デバイスの開発を手助けするファウンドリやCEA-LETIの「Open 3D™ Initiative」にあるような研究機関の構築が日本でも要望されていたが、平成28年度からのNEDO事業「IoT技術開発加速のための設計・製造基盤開発」などで、つくばイノベーションアリーナ（TIA）のコアインフラに三次元積層を可能にするプロセス装置を備えた研究開発

環境が整備された。今後、中堅、中小あるいはスタートアップなどが利用しやすい運用体制が構築されることを期待したい。一方、産業界は、これまでに開発が進められてきた三次元実装の研究開発成果やその分野における研究開発人材を自社に抱えることなく研究開発拠点に集約し、大学あるいは国立研究開発法人等の中立的機関を中核とした体制を構築することで国際競争に勝てる体制を構築できるものと期待される。

(6) その他の課題

異種機能ヘテロ三次元集積化チップは、多様な電子機能を創り出すことが可能である。そこでは、個人の発想が大きな事業に発展することが大いに期待される。新事業の創生には優位であり、地方創生にも利用できる可能性がある。そのためには、政策的に大学や国研に小型の三次元試作ラインを構築し、誰もが利用できる環境を整備することが有効であろう。また、この分野のベンチャー育成の政策も望まれる。

(7) 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	◎	↓	異種機能ヘテロ三次元集積チップ製造の基礎技術について日本は高い技術水準にある。メッキや液体金属の埋込による TSV 埋め込み技術や触媒エッチング技術、高速ウェットエッチング技術などの新しい技術が装置メーカーやベンチャー企業および大学などから発表されてきた。自己組織化を利用した新しい位置整合技術等の話題性の高い技術が東北大等から発信されている。MEMS 等の部品技術については、大学を中心に新型センサ、製造技術に関する先端研究が続けられている。スパコンのアーキテクチャ研究者も三次元集積チップの熱問題などに取り組むなど、様々な要素についての基礎技術を築き上げており、応用・開発段階に移行している。
	応用研究・開発	◎	→	東北マイクロテックの GINTI における 300mm ウェーハを使って試作まで行える開発環境が整い、大口径シリコンウェーハを用いての応用開発が加速されつつある。TSV を使ったインターポーザ技術も民間企業を中心に開発成果の発表が増えている。ガラス製のインターポーザ技術についても国内ガラスメーカーが米国メーカーの積極的な動きを追随している。近接場磁界結合を使ったメモリチップの積層化技術開発も進んでおり、将来のスパコンや車載用 LSI への応用が期待される。 集積回路製品に関しては、東芝の三次元 NAND フラッシュメモリの事業の成長に併せて次世代技術の開発が精力的に進められている。ソニーのイメージセンサ開発も 3D 化による高機能化に挑戦的に臨んでいる。メモリについては広帯域 3 次元 DRAM などの海外半導体メーカーの動向に応じて、装置や材料供給に関する開発、実用化に進捗が認められる。

俯瞰区分と研究開発領域
ICT・エレクトロニクス応用

米国	基礎研究	◎	→	DARPA は、COSMOS (Compound Semiconductor Materials on Silicon) Program および DAHI (Diverse Accessible Heterogeneous Integration) Program で異種材料の3次元集積化の研究開発を推進している。開発事例として、QバンドのVCO(電圧制御発信器)増幅器がある。シリコンCMOSとInPヘテロ接合バイポーラトランジスタ発信器、およびGaNパワー増幅器を積層集積化し、35GHz帯で2GHzの周波数可変域を持つチップを開発している。IBMは人工知能のハードウェア実装に向けて、異種材料・機能を利用したニューラルネットワーク研究に着手している。 欧州FP7の下、Compound Semiconductors for 3D Integrationプロジェクト、通称COMPOSE3がスタートしている。IBMが主導し、STマイクロエレクトロニクス、LETI、グラスゴー大学、Tyndall National Instituteなどが参加して、シリコンに代わる新材料を3次元積層する技術を開発し、製造可能なレベルまで高める取り組みがスタートしている。
	応用研究・開発	◎	↗	XilinxやAltera社の積層型再構成型ゲートアレイ(FPGA)の成功を受け、メモリも集積化するなどして積極的な製品開発を展開している。一方、コーニング社がガラスインターポーザの開発と応用に多くの資源を投入し始めている。Xilinx社は発表から数年で積層型FPGAを事業化しており、展開が速い。メモリに関しても、Micron Technology社がバンド幅の大きなメモリを製品化するとともに、米国Tezzaron Semiconductor社がハイエンドアプリケーション向けにWafer on Wafer技術とそれを使った積層DRAMを開発した。一方で、Maxim Integrated社がウェーハレベルでアナログ向け3次元集積チップの試作に成功している他、Monolithic 3D Incがモノリシック3次元LSIを目指しており、ベンチャー企業の存在感が増している。
欧州	基礎研究	◎	→	Fraunhofer IZMやIMEC、CEA-LETIを中心として、3次元集積化要素技術の研究が引き続き活発に行われている。Fraunhoferはオーソドックスにメモリ、ロジック混載技術の研究を進めている。CEA-LETIは、異種機能集積に注力した開発を行っている。
	応用研究・開発	◎	→	IMEC、CEA-LETIでは、300mmの3次元集積化技術研究開発ラインが構築され、試作サービスも含むオープンコンソーシアムで実用化開発を加速している。IMECでは、CMOREプラットフォームの整備を終え、200mm 0.13μm CMOSプロセスを用いて、MEMSやイメージャ、フォトニクス集積のサービスを開始している。MEMSセンサなどの競争力の高い製品を保有するST Microが、健康、医療、自動車、社会システム向けに製品化意欲が旺盛である。
中国	基礎研究	×	→	北京大学などがTSVに関する研究を行っているが、オリジナルな技術発信はない。
	応用研究・開発	×	→	目立った情報はないが、国および地方政府の半導体産業推進事業でメモリを中心に大きな資金が投じられていることから、今後の動向は注視しておくべきと思われる。
韓国	基礎研究	△	↘	KAISTなどでTSV技術の研究を行っているが、オリジナリティの高い技術発信はない。Samsung社等の民間企業は基礎研究についての情報発信は最近ではほとんどない。
	応用研究・開発	◎	↗	Samsung、Hynix社ともに、TSVによる広帯域積層DRAMで事業を展開しつつ、高性能化開発によって新たな用途の開発を積極的に進めている。 Samsung社はまた、3次元NANDフラッシュメモリについても事業展開に併せて高性能化開発を積極的に進めている。
台湾	基礎研究	○	↘	ITRI (Industrial Technology Research Institute : 工業技術研究院)が3次元集積化技術の開発を精力的に行ってきたが、最近では新たな情報発信はない。
	応用研究・開発	◎	→	技術開発に関する目立った情報発信は最近無いが、TSMC社がTSVの高アスペクト化や極薄インターポーザをさらに発展させ、OSAT(後工程請負)と一体となった開発体制が強化・加速されるものと思われる。 TSMC社のTSVを入れたプロセスインテグレーション技術の完成度は高い。TSVインターポーザを製造し、FPGAウェーハと併せてXilinx社向けにファウンダリサービスを提供している。OSATの技術開発も連動している。

(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範囲

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）の範囲

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Mitsumasa Koyanagi, "Heterogeneous 3D Integration – Technology Enabler toward Future Super-chip," *2013 IEEE International Electron Devices Meeting*, 2013. doi:10.1109/iedm.2013.6724539
- 2) H. Kudo et al., "High Performance Closed-channel Cooling System Using Multi-channel Electro-osmotic Flow Pumps for 3D-ICs," *2013 IEEE International Electron Devices Meeting*, 2013. doi:10.1109/iedm.2013.6724720
- 3) S. L. Chua et al., "3D CMOS-MEMS Stacking with TSV-less and Face-to-face Direct Metal Bonding," *2014 Symposium on VLSI Technology (VLSI-Technology) : Digest of Technical Papers*, 2014. doi:10.1109/vlsit.2014.6894410
- 4) Chang-Hong Shen et al., "Monolithic 3D Chip Integrated with 500ns NVM, 3ps Logic Circuits and SRAM," *2013 IEEE International Electron Devices Meeting*, 2013. doi:10.1109/iedm.2013.6724593
- 5) T. Irisawa et al., "Demonstration of InGaAs/Ge Dual Channel CMOS Inverters with High Electron and Hole Mobility Using Staked 3D Integration," *2013 Symposium on VLSI Technology (VLSI-Technology) : Digest of Technical Papers*, 56, 2014.
- 6) T. Irisawa et al., "Demonstration of Ultimate CMOS Based on 3D Stacked InGaAs-OI/SGOI Wire Channel MOSFETs with Independent Back Gate," *2014 Symposium on VLSI Technology (VLSI-Technology) : Digest of Technical Papers*, 2014. doi:10.1109/vlsit.2014.6894395
- 7) M. Miyamura et al., "First Demonstration of Logic Mapping on Nonvolatile Programmable Cell Using Complementary Atom Switch," *2012 International Electron Devices Meeting*, 2012. doi:10.1109/iedm.2012.6479020
- 8) S. Okamoto et al., "Bidirectional TaO-Diode-selected, Complementary Atom Switch (DCAS) for Area-efficient, Nonvolatile Crossbar Switch Block," *2013 Symposium on VLSI Technology (VLSI-Technology) : Digest of Technical Papers*, 242, 2013.
- 9) Arkadii V. Samoilov et al., "3D Heterogeneous Integration for Analog," *2013 IEEE International Electron Devices Meeting*, 2013. doi:10.1109/iedm.2013.6724688
- 10) Y. Takemoto et al., "Characterization of 4 million micro bump interconnections at 7.6 um pitch for 3D stacked 16 M pixel image sensor," Proc. 2016 Asia-Pacific Workshop

- on Fundamentals and Application of Advanced Semiconductor Devices, B1-1, 2016.
- 11) Takanori Shuto et al., "Room-temperature Bonding of Heterogeneous Materials for Near-infrared Image Sensor," *Japanese Journal of Applied Physics* 53, no. 4S (2014) . doi:10.7567/jjap.53.04eb01
 - 12) Andy Heinig et al., "Current and Future 3D Activities at Fraunhofer," *2015 International 3D Systems Integration Conference (3DIC)*, 2015. doi:10.1109/3dic.2015.7334466
 - 13) Pascal Vivet et al., "3D Advanced Integration Technology for Heterogeneous Systems," *2015 International 3D Systems Integration Conference (3DIC)*, 2015. doi:10.1109/3dic.2015.7334468
 - 14) Daniel S. Green et al., "Path to 3D Heterogeneous Integration," *2015 International 3D Systems Integration Conference (3DIC)*, 2015. doi:10.1109/3dic.2015.7334469
 - 15) Chung H Lam, "Neuromorphic Semiconductor Memory," *2015 International 3D Systems Integration Conference (3DIC)*, 2015. doi:10.1109/3dic.2015.7334566 / Technical Digest of IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM) , 2012, 2014.
 - 16) Masaki Sakakibara et al., "A Back-illuminated Global-shutter CMOS Image Sensor with Pixel-parallel 14b Subthreshold ADC," *2018 IEEE International Solid - State Circuits Conference - (ISSCC)*, 2018. doi:10.1109/isscc.2018.8310193
 - 17) Augusto Ronchini Ximenes et al., "A 256×256 45/65nm 3D-stacked SPAD-based Direct TOF Image Sensor for LiDAR Applications with Optical Polar Modulation for up to 18.6dB Interference Suppression," *2018 IEEE International Solid - State Circuits Conference - (ISSCC)*, 2018. doi:10.1109/isscc.2018.8310201
 - 18) Jin Hee Cho et al., "A 1.2V 64Gb 341GB/S HBM2 Stacked DRAM with Spiral Point-to-point TSV Structure and Improved Bank Group Data Control," *2018 IEEE International Solid - State Circuits Conference - (ISSCC)*, 2018. doi:10.1109/isscc.2018.8310257
 - 19) Kodai Ueyoshi et al., "QUEST: A 7.49TOPS Multi-purpose Log-quantized DNN Inference Engine Stacked on 96MB 3D SRAM Using Inductive-coupling Technology in 40nm CMOS," *2018 IEEE International Solid - State Circuits Conference - (ISSCC)*, 2018. doi:10.1109/isscc.2018.8310261
 - 20) Kai Zoschke et al., "Development of a High Resolution Magnetic Field Position Sensor System Based on a Through Silicon Via First Integration Concept," *2018 IEEE 68th Electronic Components and Technology Conference (ECTC)*, 2018. doi:10.1109/ectc.2018.00141

2.3.7 ロボット基盤技術

(1) 研究開発領域の定義

人間が苦手な作業の代行や人間の能力を強化するように、人に寄り添いスマートな（賢い）ロボットを実現するための革新的な要素技術・基盤技術を開発する。小型・軽量・高出力のアクチュエータ、小型・軽量・低価格のセンサ、自律・協調動作を可能とする人工知能、柔軟な動作が可能なソフトロボティクス、不測の事態に対応できる新たな制御技術、基盤技術を統合したモジュール開発、などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

ロボット、ロボット技術、サービスロボット、手術支援ロボット、Surgery 4.0、アクチュエータ、センサ、自律制御、人工知能 (AI)、機械学習、陽的制御、陰的制御、身体と環境の相互作用、ソフトロボティクス、フレキシブルエレクトロニクス、高分子材料

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

産業用ロボットでは日本の技術力が高く世界をリードしているが、今後少子高齢化・労働力不足が進む中で、このロボット技術はものづくり分野だけでなく、サービス分野、医療・介護、農林水産業、社会インフラ保守管理、災害救助などへの活用が期待される。これらサービス分野も含めたロボット産業全体の市場規模は、2035年には10兆円となることが予想されている。例えば、手術支援ロボットだけでもその市場が、2014年の4000億円から2021年には2.5兆円に達するとの予想がある。最近の産業用ロボットでも人との協働を前提に安全性に配慮したものが開発されているが、今後のサービス分野などの新たな応用分野では人間とより密接に関わることから、安全性とともに人とのコミュニケーションができるなど、ロボットには高度な機能が要求されるようになる。これまでも、様々な応用分野へのロボット技術の導入を目指して国家プロジェクトが推進されているが、これらの活動を要素技術・基盤技術の立場から後押し、今後発展が期待される分野で要求される性能・機能を満足する材料・デバイス、部品、モジュールを世界に先駆けて研究開発することは、ロボット技術で引き続き日本がリードしていくためにも重要である。

ロボットの要素技術・基盤技術としては大きく分けると、動力系技術（アクチュエータ）、センシング技術（センサ）、制御技術になるが、今後のサービス分野などで利用されるロボットは人間と共生することが前提となるため、高性能化・高機能化、低価格化などとともに、小型軽量化、安全性向上、スマート化などが求められる。これらを考慮した柔らかい材料の利用や柔軟な動作を可能とするソフトロボティクスや、環境変化へのリアルタイムの自律的応答が可能な新たな制御手法が求められる。このような要求への対応には、ロボットの主要分野であるメカニクスと、進展の大きな情報通信（IT）やナノテクノロジー・材料など異分野間の技術の融合・統合による新たな要素技術・基盤技術の開発が不可欠である。

[研究開発の動向]

産業用ロボットの開発では、ハードウェアの構成方法が成熟し、人型ロボットのように複雑な多関節ロボットも実現できるようになっており、先端的研究は大量のセンサ情報を利用した

知的な制御に移りつつある。また、人との共同作業における安全性の確保から、ロボット本体の軽量・小型化が重要になってきている。一方、サービス分野などでの利用が期待されるソフトロボティクスの開発については、ハードウェアの構成法についての課題がまだ多く、人工筋肉のような新たなアクチュエータの開発、柔軟な体の位置や変形の検出、外部との接触の検知、外部環境の把握などのためのセンサ開発、柔らかい体や腕を精度良く制御するための制御技術などの研究が活発に行われている。

電磁モータや油圧・空圧シリンダとは異なる柔らかい駆動源（ソフトアクチュエータ）の研究は、やわらかさが必要とされる介護福祉機器への強い期待や、機能性ソフトマテリアルの開発研究の裾野の広さから、日本で活発に進められている。代表的な例として、空気圧駆動（マッキベン型空気圧人工筋肉、Flexible Microactuator など）や形状記憶合金ワイヤによるものがある。この他に、イオン導電性高分子アクチュエータや、誘電エラストマーアクチュエータなどのソフトアクチュエータの研究も進んでいるが、取り出せる変位や力が小さいため、ロボットへの応用はまだ限定的である。

柔軟体の変形や外界との接触を検出するセンサの開発は、フレキシブルエレクトロニクス分野において、薄型・柔軟・伸縮可能といった特性を持つ有機半導体やカーボンナノチューブなどのナノ材料を用いた電子デバイスの開発が進んでいる。

現在、典型的なソフトロボットはシリコンラバーで製作されている。その他、風船のように内圧で支えられた膜構造を用いるインフレータブルロボットや、生きた細胞やハイドロゲルなどを使ったロボットもある。このような柔軟材料の利用は、そのモデル化や制御について新しい問題を提起する。ソフトロボットの物理シミュレーションや運動制御は、情報科学技術の観点からも興味深い対象となっている。この運動制御では、連続体の変形や、無数の接触を扱う必要があり、従来の制御の理論体系が適用できないという根本的な課題がある。制御入力と運動の関係を正確に記述することが難しいことから、多数の試行にもとづいて運動制御を行う機械学習の手法は有望なアプローチのひとつである。

さらに進んだ自律制御研究の重要な点として、これまで研究開発が進められてきた技術の応用手法の確立と、その技術の適応範囲限界がはっきりとしてきたことが挙げられる。これまでの自律制御研究の技術が実利用可能なのは、依然として環境が完全に既知である“閉じた環境”に限られている。産業用ロボットは閉じた環境において生産性の向上に役立っているが、最近では複数のロボットが相互にコミュニケーションをとりながらタスクを行う自律制御も可能になってきた。自動車やドローンの自動運転技術も、現在のトレンドは高精度3次元地図を作成し、走行環境を可能な限り閉じた世界に落とし込むという手法である。一方、環境に煩雑さの残るいわゆる“開かれた環境”に対しては、Amazon Picking Challenge や DARPA Robotics Challenge (2015年) などでチャレンジが行われているが、いまだ自律ロボットは実用段階に至っていない。

サービスロボットの重要な応用分野ですでに市場がある手術支援ロボットの動向も注目される。これまで、米国 Intuitive 社 da Vinci に代表される手術支援ロボットは、手術室内において単独での使用がほとんどであった。これは Surgery3.0 と位置づけられているが、da Vinci の主な特許が 2019 年で切れることから、次世代の開発競争が各国で活発となっている。また、Surgery 4.0 (the enabling of a digital surgical platform coupled with robots.) の標語の下、デジタル化とクラウド化を促進し、人工知能による診断支援などを実装する次世代システムの

研究開発が加速している。また、手術支援ロボット分野では、米国を中心に自動化、自律化の研究開発が進んでいる。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

産業用ロボット用の要素技術として、金属材料から高分子材料への転換が進んできている。ロボットをポリウレタン材料で被覆して緩衝材として利用したり、CFRP (Carbon Fiber Reinforced Plastics : 炭素繊維強化プラスチック) とアルミを接合させて軽量飛行ロボットに役立てたりしている。

2014年にソフトロボティクスを扱う初の学術雑誌 (Journal of Soft Robotics) が創刊されたが、2016年に発表されたこの Soft Robotics のインパクトファクターは、他の全てのロボット関連ジャーナルを上回るトップのスコアであった。Science 誌の姉妹誌として Science Robotics が 2016年に創刊されたが、この中でもソフトロボティクス研究は一定数を占めている。2018年4月には、RoboSoft という国際会議がイタリアで初めて開催され、今後も開催国を変えながら継続的に開催される予定になっている。

開かれた環境での完全自律制御の実現をするための前段階として、部分自律制御が積極的に研究されて成果を挙げている。例えば、手術者が体内に針を挿入する際に、最適な経路を自律的に判断して術者のサポートをしている。また、前腕電動義手の手首の回旋動作を残存する肩の運動から人の運動意図を推定することで、自律的に制御し効率的な動作を実現している。このような足りない部分を補い合う相互自律協調が実現できるようになった背景には、人の運動制御系に対する理解が進んだことが挙げられる。一方、近年急速に発展している機械学習を取り入れた研究は、煩雑な環境における物体認知において極めて大きな発展を見せており、ロボットの煩雑環境での認知への大きな貢献が期待される。

医療用ロボットにおいては、Nature 誌の姉妹誌として、2017年1月に Nature Biomedical Engineering が発刊され、ロボット、医用工学、AI への注目の高まりを象徴して 2019年より Nature Machine Intelligence が発刊予定である。手術支援ロボットとしては、韓国において da Vinci と同様のマスタスレーブ型手術支援ロボット (Revo-I) が 2017年に実用化され、日本 (メディカロイド社、リバーフィールド社)、米国 (Auris surgical robotics 社)、シンガポール (EndoMaster 社)、英国 (CMR Surgical 社)、オランダ (Preceyes 社) などで、開発が進められている。また、米国の J&J と Google が設立した Verb surgical において Surgery4.0 に向けた新しい手術支援ロボットのプラットフォームが開発中である。

2015年に政府によって策定された「ロボット新戦略」に基づき、2020年に World Robot Summit (ロボット国際大会) が開催される。競技種目は、ものづくり、サービス、インフラ・災害対応などであり、2018年10月にはプレ大会が開催された。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国では、NSF で National Robotics Initiative 2.0: Ubiquitous Collaborative Robots (NRI-2.0)、Disability and Rehabilitation Engineering (DARE)、Information and Intelligent Systems (IIS) などのプログラムが行われている。また、2018年に Continuum, Compliant, and Configurable Soft Robotics Engineering (C3 SoRo) という領域を設定して研究提案を募

集している。

EUでは、Horizon 2020により多くのロボット研究が支援されており、SoMa - Soft-bodied intelligence for Manipulation（ソフトロボティクス、2015年～）、EDEN2020（低侵襲脳神経手術のための統合技術プラットフォーム、2016～2020年）、SoftPro（義手・リハビリテーションのためのシナジーベースのオープンソース基盤・技術、2016～2020年）、SMARTsurg（ウェアラブル操作デバイスによるロボット遠隔手術、2017～2019年）、CYBERLEGS++（ロボット義足・外骨格、2017～2020年）、SARAS（AIによるロボット手術支援、2018～2020年）、MyLeg（埋め込み型の筋電ロボット義足、2018～2021年）などがある。

中国では2015年に「中国製造2025計画」を発表し、ロボットやAIの研究開発に注力している。KUKAに代表されるように、中国企業による海外のロボット関連企業の買収や投資が活発である。

韓国では、Bioeconomy戦略の一環として、AIやロボティクスを応用した次世代型医療デバイスの開発を行う9つの研究チームに対し、5年間で420億ウォン（3679万ドル）を投資している。

日本では、ロボット技術の研究開発と社会展開に向けた各府省の様々なプロジェクトが立ち上がっている。その中で、要素技術開発を目的としたものとして、経産省の「次世代人工知能・ロボット中核技術開発」（2015年～2022年）がある。また、科研費新学術領域「ソフトロボットの創成：機電・物質・生体情報の有機的融合（代表：鈴木康一）（2018年～2022年）」が発足し、5年間のソフトロボティクス関連研究が推進される。その他、特定の応用に取り組むものとしては、内閣府のImPACT（2014年～2018年）における「タフ・ロボティクス・チャレンジ」、「重介護ゼロ社会を実現する革新的サイバニックシステム」、「バイオニックヒューマノイドが拓く新産業革命」、JSTのERATO「石炭共生ヒューマンロボットインタラクションプロジェクト（2014年～2019年）」、「稲見自在化身体プロジェクト（2017年～2022年）」、CREST「環境を友とする制御法の創成（2014年～2019年）」、AMEDの「ロボット介護機器開発・導入促進事業」、「ロボット介護機器開発・標準化事業や未来医療を実現する医療機器・システム研究開発事業」、などがある。

（5）科学技術的課題

人と協働するロボットの実現には、安全性やエネルギー効率を高めるためにもアクチュエータを含めた動力部の軽量化が重要であり、高性能な磁石材料の開発による電磁モータのさらなる小型・軽量化が望まれる。また、軽量化に適する新たなアクチュエータの開発については、高出力化が大きな技術的課題となっている。空気圧アクチュエータはコンプレッサなど周辺機器が大型になりがちであり、システム全体としての小型・軽量化が期待される。形状記憶合金ワイヤによるアクチュエータ、イオン導電性高分子アクチュエータ、誘電エラストマーアクチュエータなどについても、高出力化、高速動作、動作範囲の拡大などに取り組む必要がある。

ソフトロボットの運動探索、運動創発、運動制御は大きな課題である。変形や接触に関する膨大な感覚情報をどのように取り込み、運動指令をどのように生成するかについては、大自由度システムに適用できる学習手法の開発や、分散的・階層的に運動制御を行なう取り組みが望まれる。また、従来からの明示的な知能（脳神経系や高機能計算機に実現された高度な制御則：陽的知〔表脳〕）だけでなく、身体と環境との相互作用に埋め込まれている非明示的な制御機

能（陰的知 [裏脳]）を理解することも重要である。

自律制御の範囲を拡大するには、煩雑な開かれた環境に適応する技術と環境情報処理法の確立が不可欠である。開かれた環境への適応は、深層学習のようなデータドリブンのトップダウン的な行動学習と、環境とロボットの相互作用の中で未知の状態へ適応していくボトムアップ学習の融合が求められる。

現状のソフトロボティクス研究は、柔軟材料を用いた様々な形態の実験的な探索にとどまっており、設計手法が確立されていない。3Dプリンタなどのデジタルファブリケーション技術と組み合わせた自動設計技術や、ソフトロボットの振る舞いの予測ができるシミュレーション技術の開発が求められる。柔軟材料に対応した3Dプリンタを用いたロボットの自動製造が有望視されるが、現状ではまだ材料の選択肢が少なく、強度や耐久性について材料の改良が不可欠である。計算機内で柔軟ロボットの動作を扱うには、非線形な大変形や、接触・衝突のモデル化と高速なシミュレーションが必要となる。柔軟物のモデリングと制御の視点では有限要素法は適していない場合が多く、実時間制御に適し計算手法が容易で全体の見通しも利くモデルと理論の構築が必要である。

（6）その他の課題

日本国内でソフトロボティクスに関する先駆的な研究例があったにも関わらず、現状では北米やヨーロッパが主な先端的研究の発信源となっている。これは、先進的ロボティクス研究に、北米では DARPA、ヨーロッパでは EU などから継続的な大型研究費の支援が背景となっている。我が国ではソフトロボティクスのような萌芽的分野への先行的かつ継続的な取り組みが課題といえる。

2017年5月に欧州での医療機器に関する規制、欧州医療機器規則 MDR の新たなガイドラインが発行された。従来、医療機器は欧州での承認が速いとの認識であったが、約20年ぶりの大幅改編で規制が非常に厳しくなっている。また、ロボット関連技術における倫理的問題に関する議論が盛んになっている。ロボットの倫理的問題に関するプロジェクト REELER (<http://reeler.eu>) が Horizon 2020 により支援されている。2017年には、ブレインマシンインターフェース (BMI) の研究で知られるドイツのテュービンゲン大学の研究者らを中心としたメンバー（スイス、米国、カナダ、日本の研究者を含む）により、BMI の倫理綱領に関する声明が Science 誌に発表された。これらの動向には注意する必要がある。

（7）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	○	→	日本ロボット学会、日本機械学会、計測自動制御学会などの学術講演会でソフトロボティクスのセッションが作られており、ソフトアクチュエーターの開発や、フレキシブルエレクトロニクスの研究、柔軟高分子材料の開発など、広範な研究が行われている。強力集束超音波とロボットを組み合わせた治療システムの開発が行われている。
	応用研究・開発	○	→	介護福祉機器の開発が盛んである。ソフトアクチュエーターを使ったリハビリロボットや、ウェアラブルデバイスの開発が行われている。外骨格ロボット等を利用し、部分自律を利用したリハビリテーションへの応用が進められている。各国で様々な手術支援ロボットが実用化あるいは実用段階に近づいている中で、我が国の動きはやや弱い。

米国	基礎研究	◎	↗	実用化を目指す大学、企業間の共同研究は活発である。 ハーバード大学 WYSS Institute でシリコンラバーを使った軟体ロボットの研究が行われ、継続的に成果が発表されている。また、MIT、タフツ大学、スタンフォード大学、カリフォルニア大学サンディエゴ校でも関連研究が活発である。 マイクロロボット、ソフトロボットの開発が活発。また、医療ロボットや AI などこれまで通り多数の研究発表がある。
	応用研究・開発	◎	→	現状の産業用ロボットの問題解決意識を持ったベンチャー企業の活動が活発である。 Amazon picking challenge のように、ユーザー側からのロボット技術改良の力が作用し、応用研究開発が進展している。 ソフトグripperやウェアラブルデバイスで応用研究が進んでおり、スタートアップの新陳代謝も盛んである。 単孔式手術支援ロボット da Vinci Sp が実用化された。また、ベンチャー AURIS 社での軟性内視鏡手術支援ロボットの開発などがある。
欧州	基礎研究	○	→	EU によるファンディングシステムがよく機能し、ソフトロボティクスをはじめ、応用と結びついた基礎研究が積極的・継続的に進められている。また、RoboSoft という名称で、複数の組織をまたがったコミュニティがある。 タコ型ロボットのような生物規範型ロボットや、柔らかい身体に根ざした知能に関する研究が行われている。
	応用研究・開発	○	→	ドイツのスタートアップ KBee 社の 7 軸の協調ロボット「FRANKA EMIKA」が本格的に販売されようとしている。 タコ型ロボットから派生した医療用ロボットアームの開発などが行われている。また、医療・リハビリへの応用が積極的に進められており、EU 内での協力関係がよく機能し、倫理的問題の検討も継続して行われている。 Preceyes 社が眼科手術支援ロボットの治験に成功し、2019 年の実用化を目指している。
中国	基礎研究	△	→	地方政府が多額の研究開発費をロボットに投入している。 西安交通大学や清華大学において、高分子材料を用いたソフトアクチュエーターの開発が行われている AI を活用したコンピュータビジョンや、運動計画、新型アクチュエータなどの研究成果の発表が盛んである。
	応用研究・開発	△	→	ロボットと AI の市場規模が急速に成長しており、これに伴い手術支援ロボット、産業用ロボットやサービスロボットなどの応用研究・製品化が推進されている。
韓国	基礎研究	○	↗	ARPA Robotics Challenge でも見られるように自律制御の基礎的な部分から応用につなげる研究をきちんと行っている。 Seoul National University において、人工筋肉や、フレキシブルセンサ、おりがみロボットなどに関する研究が活発である。 複数の大学が参加するソフトロボティクス研究センターが設立された。 KAIST において、単孔式手術用の軟性内視鏡用ロボット K-Flex の研究開発が行われている。
	応用研究・開発	○	→	制御においては従来技術を利用した応用を目指している。 ウェアラブルデバイスの研究開発が行われている。 マスタスレーブ型手術支援ロボットシステム Revo I が実用化された。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※我が国の現状を基準にした評価ではなく、絶対評価である。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) *Surgical Robots Market Shares, Strategies, and Forecasts, Worldwide, 2015-2021* (WinterGreen Research Inc., 2015) .
- 2) K. Suzumori, S. Iikura and H. Tanaka, "Development of Flexible Microactuator and Its Applications to Robotic Mechanisms," *Proceedings. 1991 IEEE International Conference on Robotics and Automation, April* (1991) : 1622–27.
- 3) R. F. Shepherd et al., "Multigait Soft Robot," *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, no. 51 (2011) : 20400. doi:10.1073/pnas.1116564108
- 4) Hubertus Feußner and Adrian Park, "Surgery 4.0: The Natural Culmination of the Industrial Revolution?" *Innovative Surgical Sciences* 2, no. 3 (2017) : 105-108. doi:10.1515/iss-2017-0036
- 5) Guang-Zhong Yang et al., "Medical Robotics—Regulatory, Ethical, and Legal Considerations for Increasing Levels of Autonomy," *Science Robotics* 2, no. 4 (2017) . doi:10.1126/scirobotics.aam8638
- 6) Alberto Favaro et al., "Automatic Optimized 3D Path Planner for Steerable Catheters with Heuristic Search and Uncertainty Tolerance," *IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)*, 2018. doi:10.1109/icra.2018.8461262
- 7) Shintaro Oyama et al., "Biomechanical Reconstruction Using the Tacit Learning System: Intuitive Control of Prosthetic Hand Rotation," *Frontiers in Neurobotics* 10 (2016) . doi:10.3389/fnbot.2016.00019
- 8) Jens Clausen et al., "Help, Hope, and Hype: Ethical Dimensions of Neuroprosthetics," *Science* 356, no. 6345 (2017) : 1338-1339. doi:10.1126/science.aam7731

2.4 物質と機能の設計・制御

物質もしくは機能を設計・制御する概念や技術はナノテクノロジー・材料分野全体に関与するものであり、わが国においては長年の技術蓄積に基づく強みを有する。進化したナノテクノロジーを駆使することで所望の物質・機能を実現させるための構造の設計・制御を可能とし、サイエンスの新局面を拓き、社会・産業に貢献しうる領域である。以下では、本節で取り上げた8つの研究開発領域の概略を示す。

[空間・空隙設計制御]

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ことを目指したものである。空間・空隙構造制御材料の代表格としては、ゼオライト、メソポーラス材料、多孔性金属錯体、ポーラスカーボン、などがある。

[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を指す日本発の新しい概念である。「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、それぞれで連携しながら研究開発を推進することを目的とする。

[元素戦略]

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発することを目的とする。

[データ駆動型物質・材料開発 (マテリアルズ・インフォマティクス)]

計算科学による物性予測とそれを実証するハイスループット材料合成・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することで物質・材料探索・設計を実現することを目的とする。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。

[フォノンエンジニアリング]

ナノスケールの微小空間、微小時間で熱(フォノン)の振る舞いを理解し制御することにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現することを目的とする。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノン/電子/フォトン/スピンなどの量子系の統一的理解、革新的な材料・デバイス技術などに関する研究開発を推進する。

[量子技術]

量子力学が記述する電子や光子などの性質(量子性)を積極的に活かして、古典系では実現できない制御技術や情報処理技術を実現することを目指したものである。具体的には、超伝導量子ビットを筆頭にさまざまな物理系において研究開発がすすめられている量子コンピュータ、冷却原子系で実現される量子シミュレータ、ダイヤモンドNVセンターなどを用いた量子計測・センシング技術、量子暗号や量子中継・量子ネットワークを含む量子通信技術を取り上げる。

[二次元機能性原子薄膜]

従来のバルク材料や単なる薄膜材料とは異なる特性・構造を持ち、新しい機能や従来材料の特性を凌駕する機能を発現することが可能な、原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面・界面などに有する機能性を持った原子薄膜材料を研究開発の対象とする。次世代の電子デバイス・システムに求められる大幅な低消費電力化、小型化およびそこに付加される新機能の創出などが期待される。

[生物機能インスパイアード材料・システム]

生物が持つセンシング、エネルギー変換、情報処理、自己修復、自己組織化などの優れた機能の発現メカニズムを解明し、それを人工物で再現あるいは生物そのものの機能を工学的に利用することを指向して、新しい材料やデバイス・システムを創出することを目的とする。コンピュータの援用による DNA 配列設計やペプチド・タンパク質設計に基づく機能創出なども含まれる。

2.4.1 空間空隙設計制御

(1) 研究開発領域の定義

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やデバイスを開発する研究開発領域である。空間・空隙構造制御材料の代表格としては、ゼオライト、メソポーラス材料、多孔性金属錯体 (MOF: metal-organic framework、PCP: porous coordination polymer)、ポーラスカーボン、などがある。

(2) キーワード

空間空隙、超空間、ナノ空間、メソ孔、超分子、ゼオライト、メソポーラス、メソポーラスシリカ、多孔性金属錯体 (MOF: metal-organic framework、PCP: porous coordination polymer)、共有結合性有機構造体 (COF: covalent Organic Framework)、ポーラスカーボン

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

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。新機能・性能の追求や、シェール革命や地球温暖化への対応といった大きな流れが、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ている。世界的にはゼオライトやメソポーラス材料の研究に加えて近年の多孔性金属錯体の研究の増加が目立つが、現時点で、産業で活躍しているのはゼオライトである。国際学会として、ゼオライトは1967年以来、International Zeolite Conference (IZC)、メソポーラス材料は1998年以来 International Mesoporous Materials Symposium を、多孔性金属錯体は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年以降は Metal Organic Frameworks の委員会が設置された。

[研究開発の動向]

以下では材料系ごとに分けて記載するが、後述するようにメソポーラスゼオライトやメソポーラス MOF、ポーラスリキッドなど従来の材料系では分類できない物質群が現れてきており、多孔質体の分類自体も再考の必要がある。

●ゼオライト、メソポーラス材料

1756年にスウェーデンの鉱物学者 Axel F. Cronstedt により、自然界でゼオライトが見出された (天然ゼオライト)。それ以来、様々な角度からゼオライトの利用が検討されてきたが、とりわけ 20 世紀半ば以降の英国の Richard M. Barrer によるモルデナイトの合成、1972年の Mobil グループの構造規定剤 (SDA) を用いた ZSM-5 合成、1988年の黒田一幸 (早稲田大学) によるメソポーラスシリカの発見を経て、展開は大きく加速した。今日では 200 種を

超えるゼオライト構造が国際ゼオライト機関で認定され、吸着剤、イオン交換剤、触媒として様々な分野で利用されている。二酸化ケイ素を主骨格とする多孔性物質という点ではゼオライトもメソポーラスシリカも同じだが、ゼオライトは細孔径が主に 0.3–1 nm 程度であるのに対し、メソポーラスシリカはそれよりもやや大きい 2–10 nm 程の細孔径をもつ。ゼオライトによる分子を識別できる機能「分子ふるい」を利用した吸着分離は当初、直鎖と分岐を有する炭化水素分子を分離できることで注目を集めた。三種類のキシレンの異性体間分離は、沸点差が小さく蒸留が適用できないが、工業的に有用な p-キシレンの選択的製造にはゼオライトを用いた擬似移動層吸着装置が世界中で用いられている。Al を含むゼオライトの骨格は負に帯電しているため、電荷補償体として交換可能なカチオンを内包している。カチオンを Li^+ に交換した X 型ゼオライトは空気中の酸素分子よりも窒素分子と相互作用が大きい。この特徴をいかして、空気から酸素/窒素を製造する装置としてゼオライトが幅広く用いられている。圧カスイング吸着法は工業的な利用に加え、酸素吸入が必要な患者のための移動可能な酸素供給装置として日本でも広く利用されている。

イオン交換能は、よく知られたゼオライトの特性である。1970-80 年代に、洗剤にビルダー(洗浄助剤)として加えられていたリン酸塩の環境中への排出が、赤潮の発生に代表される公害(湖沼・河川の富栄養化)を引き起こした。そのためリン酸塩に代わるイオン交換剤の開発が進められた。今日に至るまで利用されているビルダーは A 型ゼオライトである。A 型ゼオライトのイオン交換能により、水中で界面活性剤の働きを阻害するカルシウムやマグネシウムイオンがナトリウムイオンに交換され、使用後は環境中に放出されている。世界中で大量の A 型ゼオライトが環境中に放出されているが、その構成成分は Si、Al、O であるため、大きな環境問題を起こすことなく利用が続いている。

ゼオライトの触媒としての利用は、石油精製、石油化学の歴史とともに発展した。石油精製において蒸留と共にその根幹をなすプロセスは、重油留分を触媒作用によって分解し、低沸点の炭化水素に変換するプロセスである。この技術には流動層が用いられているため、流動接触分解 (Fluid Catalytic Cracking: FCC) と呼ばれている。本技術を支えている FCC 触媒の主成分は、固体酸性を有するプロトン交換 Y 型ゼオライトである。さらに石油化学分野における低分子炭化水素の機能化にも Y 型ゼオライト、ZSM-5、モルデナイトをはじめとする様々なゼオライトが利用されている。工業的な利用は、ビルダーに関してはドイツの Henkel 社、石油関連技術に関しては、米国の Union Carbide 社 (現、UOP 社) や Mobil 社 (現、ExxonMobil 社) をはじめとする石油メジャーの貢献が大きい。

メソポーラス材料の代表格であるメソポーラスシリカは、上述の早大の黒田らの合成報告以降、1992 年の Mobil R&D のグループから、六方及び立方構造のメソポーラスシリカ (MCM-41, MCM-48) の合成が発表された。そして 1993 年には、豊田中央研究所と早稲田大学との共同で、六方構造のメソポーラスシリカ (FSM-16) の合成が報告された。これらをきっかけにして、メソポーラス物質の研究は世界中に拡がり、関連する論文数は急増した。当初は、合成面での進展が目覚ましく、様々な骨格組成、細孔構造、形態 (粒子、薄膜、モノリス等) のメソポーラス物質が合成された。特に骨格組成はシリカだけでなく、遷移金属酸化物、カーボン、そして金属と無機物質全般に拡張され、更に有機シリカハイブリッド系にも拡張された。応用も多岐に渡っており、当初は触媒担体や吸着剤が主であったが、最近では、触媒に加えてドラッグデリバリーシステム (DDS) や二次電池への応用に関する論文数が急増している。応用面か

ら見たメソポーラス物質の特徴は、次の通りである。(i) 大きな細孔直径、(ii) 細孔容量が大きい、(iii) 多様な骨格組成、(iv) 共有結合の安定な骨格構造。メソポーラス物質の最も大きな構造的特徴は、名前についている通り細孔直径が“メソポア”領域 (2 nm ~ 50 nm) にあることである。ゼオライトの細孔直径は、すべてマイクロポア (2 nm 以下) である。MOF や COF も、多くはマイクロポアが主体であるが、最近ではメソポア領域の大きな細孔径を有するものが報告されている。応用面からメソポアのメリットを考えると、細孔内での物質の拡散が有利な点を挙げることができる。これは触媒への応用を考えた場合には、大きな利点となり、細孔内部まで有効に活用できることになる。一方、マイクロポアでは、拡散律速となり、細孔の入り口付近のみしか利用されない。また、細孔容積が大きい特徴は、多くの薬剤を保持する必要がある DDS への応用には大きなメリットとなる。また、多様な骨格組成をとり得ることから、応用分野も多岐に渡っている。特に、導電性のあるカーボンや遷移金属酸化物のメソポーラス物質は、電池材料として活発に研究がなされている。更に、共有結合の安定な骨格構造を有することは、応用面では大きなメリットとなる。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、吸着物の徐放用に販売している。大手架装メーカーでは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大量合成プラントを建設し、調湿材料、Low-k 材料、触媒材料へと展開している。最近の例では、2013年に北大の福岡淳らが報告したメソポーラスシリカ担持白金は、エチレンを 0°C 以下の低温で完全酸化 ($C_2H_4 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$) する特異な触媒特性がある。エチレンは、野菜や果物の保管中に発生し、そのまま放置すると腐食を促進することが知られている。2015年に日立アプライアンス株式会社は、メソポーラスシリカ担持白金触媒を、鮮度保持機能付きの新型家庭用冷蔵庫に搭載して実用化した。この特異な触媒特性に対するメソポーラスシリカの役割はまだ分かっていないが、他の担体 (シリカ、アルミナ、チタニア、ジルコニア等) と比較して顕著なエチレン除去効果が見られている。今後、業務用冷蔵庫や流過程 (トラック、船、飛行機等) での鮮度保持への利用拡大が期待されている。

海外では、欧州の FP7 のもと進められた 3 つのプロジェクト、ECO-ZEO (266 万ユーロ)、ZEOMORPH (152 万ユーロ)、ERC-SG (152 万ユーロ) を経て、現在は Horizon2020 のもとでオランダを中心としたバイオ原料からの基幹化学品製造触媒プロジェクト (ZeBioApp, 1,800 万 Euro) や、スペインを中心とした CO₂ 分解光触媒プロジェクト (ZESMO, 1,600 万ユーロ) が実施されている。米国ではバイオマス原料を用いた化学品製造に関する研究プロジェクトが DOE の支援で発展し、University of Delaware を中心に研究が進められている。2009年に同大に Catalysis Center for Energy Innovation が設立され、とりわけ糖を起点として様々な機能性化学品の製造が検討され、多くのプロセスでゼオライト触媒が利用されている。様々なゼオライト触媒の組み合わせのみで、糖からペットボトル原料が合成できることが示されている。

ゼオライトの特異な応用例として、銀イオンを担持したゼオライトを用いた抗菌技術がある。シナネンゼオミック社はある種の金属イオンが抗菌性を有することに着目し、銀イオンを放出する担体としてゼオライトに着目した。Al を多く含むゼオライトを合成し、これに銀イオンをイオン交換担持することで、抗菌剤として商品化することに成功した。銀イオン交換ゼオライトは、様々な日用品の抗菌化に貢献している。コンクリートに添加することで抗菌化し、下

水道施設の腐食防止に活かす等の成果が得られている。

その他、環境中に流出した放射性同位体元素の濃縮・回収にゼオライトを用いたイオン交換法が検討されている。福島第一原子力発電所より放出された放射性セシウムイオンを、共存するアルカリ金属イオンから濃縮・回収するため、複数種のゼオライトならびにゼオライトと類似のマイクロ多孔性を有する結晶性シリコチタネートがイオン交換剤として用いられている。

自動車排ガス規制のひとつである EURO6/Tier2 での窒素酸化物規制対策として、欧米では尿素による触媒還元除去法 (Urea-SCR: Selective Catalytic Reduction) が実装され、適用に資する触媒の開発が産官学通じて広く行われている。なかでも UOP の SAPO-34、Chevron の SSZ-13 と、いずれも CHA (チャバサイト) 型構造を有する、酸素 8 員環の小細孔ゼオライトが利用されている。そこには、Cu や Fe などがイオン交換担持されている。当初は ZSM-5、MOR などが研究対象となっており、一部では Fe-beta 型ゼオライトが搭載されていたが、排ガスに共存する炭化水素による被毒、燃焼発熱による構造崩壊などが原因となり、より構造安定性の高いゼオライトが求められていた。CHA はそのような過酷な水熱条件下において比較的構造安定性に優れていることが報告されている。また、特に SCR に活性の高い Cu イオン種が反応物であるアンモニアと錯形成し、移動性の高い Cu 種が反応中に形成されていることが明らかとなった。このことによる Cu 種凝集などが懸念されていたが、この活性錯体は酸素 8 員環を通過しづらいために、小細孔ゼオライトの適用が凝集抑制にもつながった可能性が高い。Fe イオン交換ゼオライトについても Cu と比較検討されており、高温側で NH₃ 酸素酸化を起こさず高い NO_x 浄化率を示すことや、N₂O の副生がほとんどないこと、NO_x 中の NO₂ の濃度が低くても (NO₂/NO_x = 0.5 の場合を fast SCR と呼ぶ) NO_x 浄化率が高いことなどが特筆すべき SCR 特性としてまとめられている。

このような形で NH₃ (Urea) -SCR については、日本は欧米の後塵を拝す形で研究を進めている。一方、内燃機関の熱効率向上の施策として、大規模な国家プロジェクト (SIP) が展開された。自動車用内燃機関では燃焼効率 50% を目標としたエンジン開発が託され、ガソリンエンジンよりも熱効率の高いディーゼルエンジンに再注目が集まった。ガソリン自動車よりも排ガス後処理対策が遅れるディーゼル自動車の後処理技術開発も並行して行われる形で、経済産業省からの支援を受け、自動車用内燃機関技術研究組合 (AICE) が 2014 年度より設立され、主にクリーンディーゼル対象後処理技術開発に尽力することとなった。2014 ~ 2016 年の第 1 期 3 年間では、DPF (PM フィルター) 再生、EGR、白煙対策などといった 7 つのプロジェクトの一つとして、Urea (NH₃) SCR ゼオライト触媒プロジェクトが開始された。そこでは、日本の優れたゼオライト合成研究者よりゼオライトサンプルの提供を受け、SCR 触媒特性を同条件下で比較したスクリーニングに留まらず、SCR 用ゼオライトとしての必要不可欠なパラメータ抽出が行われた。現在、第 2 期目の研究開発プロジェクトにおいて、CHA に匹敵する次世代ゼオライトの開発が展開している。

●多孔性金属錯体

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あり、1959 年に世界で初めて銅 (I) アジポニトリル錯体の骨格構造が示された。その後 Omar M. Yaghi (UC Berkeley) が MOF と名付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、室温で多孔性をもつ安定なフレー

ムワークを発表し、多孔性金属錯体 (PCP) の概念が提唱された。その後現在までに 6,000 以上もの構造が発表されている。

吸着・分離材料への応用は引き続き研究課題として大きなテーマではあるが、最近ではその他の機能性として導電性、反応場、センサ、エネルギー捕集、医療応用などにも注目が集まってきており、応用範囲は拡大しつつある。MOF と同様の分子性多孔性結晶として共有結合性有機構造体 (Covalent Organic Framework: COF) に関する研究開発も世界中で活発に行われている。COF は MOF と異なり、骨格中に金属を含まず、有機元素のみから構築された結晶性ネットワーク型構造を有しており、アメリカの Omar M. Yaghi らにより 2005 年に最初に報告された。MOF と同様に高い設計性を有しているため、世界中で多くの研究者がこの材料の開発に参入しており、日本では北陸先端大 (現国立シンガポール大学) の江東林 (Donglin Jiang) らが積極的に研究を展開している。江らは特に COF の電子的特性に着目し、精密に機能性部位を配置できる結晶性構造を利用して、新たな電荷輸送材料などの開発を進めている。

MOF/PCP の応用面では多孔性金属錯体の試薬販売を除くと、米国の NuMat 社の産業ガスの貯蔵ボンベへの利用がある。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ドラ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らず、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。仏石油企業の TOTAL は 2009 年～2013 年のプロジェクト、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た。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 の回収に取り組んでいる。

米国では DOE や NSF を通じて、欧州では Horizon2020 を通じて、いずれも多数且つ多様なテーマ・切り口からの、多孔性金属錯体関連のプログラム・プロジェクトが進行している。相当数のためにここでは書き切れないが、例として NSF のプロジェクトをいくつか挙げると、“A Novel MOF Material for the Separation and Recovery of Unprocessed Natural Gas During Oil and Gas Production” や、“Hierarchical MOF Assemblies for Solar Energy Harvesting and Storage”、など、環境・エネルギー関連のテーマが目立つ。他にも計算科学を用いた材料設計を指向した “High-throughput Computational Discovery of New Nanoporous Materials for Energy Storage” や、触媒応用を指向した “Engineering MOF Catalysts using Advance Functionalization Techniques” など、多様な構成で実施されている。米国は NSF を中心として大学研究者の参画プロジェクトが特に充実しているが、欧州では産業界やベンチャーが参画するプロジェクトが目立つ。

アジアでは、中国の研究規模が際立っている。米国や日本での研究・留学経験のある MOF/PCP 関連の研究者が多数活躍しており、政府によるプロジェクトも充実している。日本では、JST 戦略的創造研究推進事業の CREST およびさきがけの「超空間制御」領域、ACCEL の多孔性金属錯体を基盤とした二つの課題 (PCP ナノ空間による分子制御科学と応用展開、自己

組織化技術に立脚した革新的分子構造解析)、さらに 2018 年度より戦略的国際共同研究プログラム (SICORP) の EIG CONCERT-Japan 「超空間制御による機能材料」が進行している。また、2016 年度からは新学術領域研究「配位アシンメトリー」がスタートし、多くの研究者が参画している。

●多孔性ケージ型分子と多孔性高分子

従来型多孔性材料はゼオライトや MOF のように、細孔空間が結晶内で連結したネットワーク型骨格構造を有しているものがほとんどであり、ネットワークを組まない多孔性分子の例は少なかった。しかし、ここ数年でイギリスのリバプール大学の Andrew I. Cooper らを中心として、細孔空間が互いに独立した多孔性有機ケージ化合物の開発が精力的に行われるようになっており、日本でも金沢大学の生越友樹らが独自の化合物 (ピラーアレン系) を使って研究を進めている。2008 年に生越が報告した環状分子ピラーアレンは自己集合により二次元的に敷き詰めることができ、これを焼成することで環のサイズに応じたマイクロ孔を有するカーボンナノシートが 2015 年に報告されている。ピラーアレンのもつ空孔自体もゲスト種を導入する空間として活用することができ、2018 年には 6 員環のものを用いることでイソオクタンを特異的に吸収・濃縮できることが報告されている。原料を混合するだけで簡単に合成することができることから、新しいマイクロポラス材料として注目されており、関連論文数も 800 本以上に及んでいる。

このような材料は分子内部の空間と分子同士のパッキングにより生じる外部の空隙がつながることで多孔性構造を構築しており、そのパッキング構造の変化により動的に空間構造を変化しうる材料となっている。また、ネットワーク型の材料と異なり、様々な溶媒に可溶なものが多いことから、溶液中のプロセスが可能になる。様々な溶媒を用いることで、有機ケージのパッキング構造を変化させることや、数種類の有機ケージを混合することが可能であり、通常のネットワーク型多孔性物質にはないアモルファス状態での高いポロシティなどが報告されている。置換基の改変により様々な機能の発現 (吸着、分離、キラル認識など) が可能になり、ポーラスリキッド (Porous Liquids) として分子性空間材料の新しい可能性を示している。

多孔性構造を有する有機高分子材料の開発は従前から行われており、基本的には高分子鎖の架橋により空隙構造を作り出すものがほとんどであった。しかし、このような手法を用いると、高分子の溶媒への溶解性は低く、成形加工性に優れた材料とはいえない。これに対して、溶媒に可溶でプロセスが容易な多孔性材料として Polymers of Intrinsic Microporosity (PIM) と呼ばれる物質群が 2000 年代に入って研究されている。イギリスの Peter M. Budd らは効率よくパッキングできないひずみ構造を持った一次元鎖高分子を用いて、固体状態で多孔性を示す材料の開発を行っている。規則的な細孔形状を持たないアモルファスな材料ではあるが、高いプロセス性を有し、フィルムなどへの加工が容易であるため、機能性多孔性材料としての展開が期待されている。加工性と機能性の観点から、多孔性材料と高分子材料とのハイブリッドである Mixed Matrix Membrane (MMM) が注目を集めており、上述の MOF や COF、有機ケージ材料との複合体形成の報告がここ数年で非常に増えている。実際、MOF や COF などの材料のモルフォロジーは結晶性粒子であり、高い分子認識能や吸着能を有していたとしても、ガス分離技術に使うには障壁が高い。様々な有機高分子との MMM を構築することで、結晶間隙をすり抜けるガス漏れの影響を低減させることができ、実用的なポーラスフィルム材料開発へ

の取り組みが世界中で精力的に行われている。さきがけ「超空間制御」研究者であった Easan Sivaniah (京都大学) らは、PIM に特殊な熱処理を施し架橋構造を形成することで、世界最高性能のガス分離膜材料を作成することに成功している。このガス分離膜は、従来用いられているガス分離ポリマー膜に比べて、ガス透過速度が約 100 倍、ガス選択分離度も約 2 倍という極めて優れた性能を示している。また、この PIM 材料に MOF やシリカなどを複合させた MMM を作成することも可能であり、ガス選択分離率をさらに上昇させることにも成功している。

●ポラスカーボン

ポラスカーボンの特徴は、構造中の様々な大きさの細孔と、それに起因する大きな表面積である。特に、ミクロ孔とメソ孔の存在が吸着作用の源である。高性能化・新機能を発現させるためにはミクロ孔とメソ孔の制御が第一に重要となる。しかし、ゼオライトや多孔性金属錯体のような規則的な結晶構造に由来する均一な細孔とは違い、炭素構造そのものが乱雑であるため本質的に不均一である。そのため、炭素の細孔構造を自在に制御することは簡単ではない。たとえば、典型的なポラスカーボンである活性炭は、ガス賦活あるいは薬品賦活のどちらかの方法で炭素構造を化学的に酸化消耗させることで細孔を作り出しているが、炭素構造が乱雑なので生成してくる細孔のサイズは均一にはならない。もちろん、細孔サイズだけでなく細孔の形状や次元の制御も不可能である。つまり、従来の賦活法で作製する活性炭は、空間・空隙構造制御材料とはならない。活性炭は、精製、分離、触媒といった用途はもちろん、エネルギー貯蔵や環境浄化、医療の分野で活躍している材料である。現在も活性炭のさらなる高性能化は産業界において強く求められており、空間・空隙構造を精密に制御することが課題である。以下では空間・空隙構造制御をミクロ孔、メソ孔、マクロ孔の制御という観点で順に記載する。

ミクロ孔の制御：ミクロ孔は径が 2 nm 以下の細孔で、孔の径や形状を制御するには分子レベルの制御技術が要求される。したがって、このサイズの空間・空隙構造制御は難度が高く、成功例も多くない。ミクロ孔の中でも 0.7 nm 以下のウルトラミクロ孔を分子設計し自在に制御することは実現していない。しかし、0.7 nm 以上のスーパーミクロ孔になると空間・空隙構造制御が可能となってくる。従来の賦活法でも、賦活の程度を制御することでミクロ孔のみの活性炭を作製することができる。しかし、表面積は 1000 m²/g 程度と低く、ミクロ孔のサイズも制御されているとは言えない。また、2006 年頃より米国 Y. Gogotsi らのグループがカーバイドを高温の塩素ガスに暴露して金属を脱離させることで調製できる、細孔径がある程度揃ったミクロポラスカーボン (カーバイド由来炭素、CDC) を利用した研究を展開しており (*Science*, 313, 1760, 2006)、以降 10 年ほど欧米を中心に 700 を超える論文が出版されている。しかし大きな応用には繋がらず、近年では CDC 材料研究は下火になりつつある。2000 年に東北大学の京谷隆らは Y 型ゼオライトを鋳型として利用することで、ゼオライトの規則性を転写した大表面積のミクロポラスカーボンを合成した。このポラスカーボンは径 1.2 nm のミクロ孔しかない極めて特異なポラスカーボンであり、合成法を最適化すると表面積は 4000 m²/g に達する。さらに、生成したミクロ孔はゼオライトの 3 次元チャンネルのように規則的に相互に貫通している。ミクロ孔は水素や天然ガスの吸蔵や電気化学キャパシタにおける電解質イオンの貯蔵サイトになる。そのため、活性炭はガス貯蔵材料の有力候補であり、電気化学キャパシタ用電極として実際に使用されている。しかし、これらの用途における飛躍的な性能向上を目指すとなると活性炭では難しくなり、空間・空隙構造制御によりミクロ孔が制

御されたポーラスカーボンが必要となる。たとえば、水素吸蔵ではゼオライト鑄型から作製したゼオライト鑄型炭素が 30 °C で水素圧 35 MPa において 2.2 wt% の水素吸蔵能を示しており、ポーラスカーボンでは世界最大の値である。NEDO 委託事業「燃料電池自動車用 水素貯蔵材料に関する研究開発 (2013-2017 年度)」においては貯蔵容器も含めた水素貯蔵量として 6 mass%、体積貯蔵密度は 5kg/100 L が求められており、まだ現状と目標値のギャップは大きい。天然ガス吸蔵では多孔性金属錯体が有望視され、ポーラスカーボンの研究は低調のようである。一方、電気化学キャパシタ用電極では、表面科学が制御された多種多様のポーラスカーボンが評価されており、報告例も極めて多い。マイクロ孔の次元制御は、カーボンが sp² 炭素原子からなる巨大な平面状の多環芳香族分子の集合体である限り、カーボン中で生成するマイクロ孔はスリット状にならざるを得ない。したがって、マイクロ孔の次元制御は本質的に不可能と思われる。有賀克彦 (NIMS) らは、2012 年に MOF を炭素化することでポーラスカーボンが得られることを報告しており (*J. Am. Chem. Soc.*, 134, 2864, (2011))、それ以降、MOF や COF など錯体系および有機系の結晶性マイクロ多孔体の炭素化によるマイクロポーラスカーボン調製およびポーラスカーボンと金属もしくは金属ナノ粒子との複合体調製の動きが世界中に広がっている (*Sci. Adv.*, eaap252, 2017 doi:10.1126/sciadv.aap9252)。しかし、炭素化の過程で元の結晶構造は完全にアモルファス化してしまい、分子レベルでカーボンの構造制御をするには至っていない。

メソ孔の制御：径が 2 ~ 50 nm のメソ孔の領域になってくると空間・空隙構造制御の難度は下がってくる。賦活法においてもメソポーラスな活性炭を作製することは可能だが、メソ孔とともに相当量のマイクロ孔も生成する。しかしこの方法でメソ孔のサイズを精密に制御することは困難である。賦活法と異なる方法としてゾルゲル法と鑄型法があり、メソ孔制御で最も頻繁に利用されているのは鑄型法である。1981 年に J. H. Knox (英 University of Edinburgh) がシリカゲルや多孔質ガラスを鑄型としてポーラスカーボンを合成した。1995 年に京谷隆 (東北大学) らは直線状細孔をもつアルミニウム陽極酸化皮膜を鑄型とすることで均一な径と長さをもつカーボンナノチューブを合成できることや、1997 年にゼオライト鑄型からメソポーラスカーボンが生成することを示し、鑄型法の有用性が認識されるようになった。その後、多くの研究者が様々な無機鑄型を用いるようになった。2004 年に稲垣道夫 (愛知工業大学) らは弱酸に可溶性 MgO やその前駆体となる Mg 塩を鑄型とすることでメソポーラスカーボンを作製することに成功、この方法で作製されたメソポーラスカーボンは東洋炭素 (株) からクノーベル® として商品化されている。無機鑄型の代わりに有機鑄型を利用すれば、炭素化中に有機鑄型は熱分解していくので、鑄型除去のためのフッ酸やアルカリ処理が不要になる。しかしこの方法は、細孔構造の均一性や、炭素前駆体が高度に架橋した熱硬化性樹脂に限られてしまうなどの欠点がある。これら種々の方法を組み合わせることなどによって、それぞれの持つ欠点を克服する研究開発が進められている。例えば、M. Antonietti (Max Planck Institute) らのグループはイオン液体に無機塩を溶解させ熱処理をすると、イオン液体の分解・炭素化と同時に無機塩がナノ粒子として析出して鑄型となり、洗浄後にはメソポーラスカーボンが得られることを報告している (*Adv. Mater.*, 25, 75, 2013)。イオン液体は窒素やホウ素など異元素を含むため異元素ドーパカーボンの原料としても注目されており、欧州を中心に特に近年多くの論文が出版されている。しかし、カーボンの原料としてイオン液体の値段が高いことが大きな問題である。

マクロ孔の制御：径が 50 nm 以上の細孔はマクロ孔とよばれる。一般にマクロ孔は吸着分子の移動や拡散を促進するには重要だが吸着のサイトにはならない。とくに電池や電気化学

キャパシタ、ガス吸蔵などのエネルギー貯蔵材としての用途ではマクロ孔の存在は体積当たりのエネルギー密度を低下させるので、できるだけマクロ孔の生成は避けたい。しかし、マクロ孔が多いと非常に軽い炭素多孔体ができる。1987年に Pekala (米国 Lawrence Livermore National Laboratory) らは岩塩を鋳型として低密度カーボンフォームを作製している。その後、疎水性の高いマクロポーラスカーボンである膨張黒鉛が海水に流失した重油や水中の有機溶媒の収着に高い性能を示すことがわかり、重油の収着を主な目的にして様々なマクロポーラスカーボンが作製されてきた。グラフェンやカーボンナノチューブを基本単位としてマクロポーラスカーボンを合成しようとした試みが多い。どの場合もグラフェンの原料としてグラフェンオキシドを用い、そのゲル化能を利用してマクロ孔を形成させている。例えば、2013年に C. Gao (中国 浙江大学) らはグラフェンオキシドとカーボンナノチューブの混合物を水中でゲル化させ、それを凍結乾燥、さらにグラフェンオキシドを還元することで超軽量カーボンエアロゲルを合成している。この物質は超軽量性ととも広い温度範囲で弾性を示し、重油の収着材以外にも材料として応用の可能性がある。しかし、グラフェンオキシドを還元して得たグラフェンは欠陥が多く、なおかつ積層が不可避であるため CVD 法等で得られる高品質のグラフェンには及ばない。折角のグラフェンの特徴を活かすことができず、本当の意味で3次元グラフェンとは言えない。そこで Ni メッシュや Ni ナノ粒子といった金属のナノ構造体に CVD をしてグラフェンを3次的に成長させる試みも 2011 年頃から活発化している (*Nat. Mater.*, 10, 424, 2011; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 126, 4922, 2014)。欠陥の少ない高品質なグラフェン構造体が得られるが、金属は高温で焼結するためマクロポーラスな構造体しか得られず、ミクロポーラス、メソポーラスな3次元グラフェンの調製は困難である。

(4) 注目動向

●イオン性の空間・空隙材料

新しいタイプの材料として、分子性のイオン結晶でありながら階層的な空間・空隙構造を持つ物質が近年研究されている。イオン結晶は、クーロン力により組み上がるため多孔体のモチーフとしては不向きであると考えられてきたが、単核イオンの代わりにナノサイズの分子性イオンを構成ブロックとすると、イオン間の隙間がサブナノサイズの細孔になり、階層性を持つ構造の構築が可能であることが見出されている。このイオン性物質はゼオライトや MOF と比べると、結晶格子内に働く電場がゲスト分子やイオンの吸着状態に影響を及ぼすことや、構成ブロック間に強力な共有結合がないため、予め構成ブロックに構築した吸着点や反応活性点を結晶化後も活用できるなど、結晶構造の柔軟性に特徴がある。内田さやか (東京大学) らは、ポリオキソメタレートアニオンを設計し、分子性カチオンとの自己組織化によるナノ多孔体の創製に成功している。新物質開拓の余地があり、イオン結晶に特有な機能、ガスやイオンの吸着分離、イオン・電子伝導、触媒、光学特性などの機能発揮が今後期待される。

●ゼオライト、メソポーラス材料

ゼオライトを吸着剤として、ガソリンエンジン車から排出される hidrocarbon の回収 (HC Trap) へ応用する研究開発が依然として活発である。HC は主としてエンジン始動時に排出されるため、一時的に吸着剤でトラップし、排ガス温度が高温になった段階で脱着させることができれば、三元触媒における NO_x の還元剤として利用することが可能になる。このよ

うなコンセプトのもとで当初は ZSM-5 が利用されたが、HC の分子サイズの関係でより細孔が大きい β 型ゼオライトが利用されてきた。初期は β 型ゼオライトの耐久性に問題があり、一時 HC Trap に頼らずに対応する方向に舵が切られたが、エネルギー効率の面からリーンバーン条件の適用が検討される中で、新規なゼオライトの開発もあり、三元触媒に HC Trap 技術を組み合わせる方法が改めて注目されている。

ゼオライトの触媒利用で注目される技術は、ディーゼル車からの排出される NO_x の選択還元法 (SCR) である。ディーゼル排ガスはガソリンに比べ、温度が低く、また共存する酸素濃度が高いため、三元触媒を利用することができない。そこで固定源で NO_x 除去に用いられているアンモニアを用いた選択還元法 (アンモニア SCR) の利用が検討された。アンモニアそのものを自動車に搭載することはリスクが高いため、高温下で分解しアンモニアを発生する尿素水溶液を還元剤に用いた NO_x 還元法 (尿素 SCR) が開発され、その触媒としてゼオライトが注目を集めている。当初、ドイツ BASF 社が開発した銅イオン交換した CHA 型ゼオライト (Cu SSZ-13) が有効と考えられていた。しかし最近の検討から、CHA 以外の八員環ゼオライトでも期待される触媒が見出されている。

海外では、触媒メーカーよりゼオライトを用いた SCR 触媒関連の特許の出願が増加している。CHA 構造を有するアルミノシリケートである SSZ-13、同構造の SAPO-34、AEI 型、RHO 型等の構造を有する触媒の開発が進んでいる。アジアにおけるモータリゼーション、化学触媒の性能的飽和状態、環境規制、温暖化抑制機運の高まりを背景として、電気自動車の普及促進が予想される近未来においても、自動車排ガス触媒市場は拡大基調にあると考えてよいだろう。

日本では、内燃機関に関する基盤技術の強化と次世代を担う産学双方の研究開発人材育成を理念に掲げ、自動車会社 9 社が学官と連携し、自動車内燃機関技術研究組合 (AICE) を立ち上げている。その大きな柱の一つが尿素 SCR に関する触媒の開発である。わが国の自動車工業界においてこのような共同の取り組みは初めてのものととして注目される。

東大の大久保らは、従来ハイシリカのゼオライトの合成には必須と考えられていた有機構造規定剤 (OSDA) を用いずに、数々のゼオライトが合成可能であることを示した。その中で開発された β 型ゼオライトは、従来品に比べて Al を骨格中に多く含むためイオン交換容量が大きく、かつ欠陥が少なく耐久性が高いというこれまでにない特徴を有している。また NO_x に対する特異な吸着特性や触媒反応特性を有している。これらを背景に、OSDA フリー合成技術による β 型ゼオライトの量産に向けた検討が進んでいる。

その他、ゼオライトの薄膜化による分離膜の開発があげられる。ゼオライト分離膜の開発は 1990 年頃より進められてきた。三井造船株式会社が世界に先駆けて A 型ゼオライト膜を上市したが、A 型ゼオライトは耐久性に限界があるため、主としてアルコールからの脱水に適用対象が限られてきた。最近ではよりハイシリカ型のゼオライトを用いたゼオライト膜の開発が注目される。松方正彦 (早稲田大学) が代表をつとめた NEDO の「GSC / 規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」プロジェクトと共同で、三菱化学は 2010 年に CHA 構造のアルミノシリケートゼオライト膜の開発に成功した。この膜は高い配向性を有し、ほぼ無欠陥であることから、高い分離選択性、また大きな分離速度が得られる。JX 社における実証実験を通して、ゼオライト膜分離技術が省エネルギーに大きく貢献することを明らかにした。プロジェクトに参画した三菱化学、日立造船、ノリタケカンパニーリミテドはこれらの技術の実用化に向けた検討を進めている。ガス分離については、UOP 社の高分子膜が東南アジアで天然ガス

と CO₂ の分離において実用化されているが、CH₄/CO₂ のガス分離性能ではゼオライト膜が圧倒的に優れており、三菱化学と千代田化工のグループが JOGMEC のプロジェクトにおいてこの課題に取り組んでいる。CO₂ の排出削減法として CCS が提唱されているが、安価な捕集法が求められている。アミン類を含有したヒドロゲルを支持体に固定した促進輸送膜については、国内で住友化学が RITE を核とする技術組合を通じて検討している。

メソポーラス材料に関しては、メソポーラスシリカナノ粒子のドラッグデリバリーシステム (DDS) への応用に関する論文が年々増加傾向にあり、Nature 姉妹誌に掲載されるなど高い関心を集めている。2018 年半ばには関連論文数はおよそ 1500 報に上っているが、この数は MOF の DDS への応用に関する論文数の約 600 報を大きく上回る。これは、メソポーラスシリカの大きな細孔容積 (多くの薬剤を保持できる)、無毒で生体適合性がある、表面修飾が容易 (薬剤保持・放出の制御が可能) という特長に基づいている。刺激 (pH, 光など) に応答した薬剤の放出制御に加え、ナノ構造の精密制御により生分解挙動の調節など、薬剤徐放の高度な設計が報告されている。また、電池材料へ応用する論文が急増している。メソポーラスカーボンや窒素ドーピングメソポーラスカーボンを利用したスーパーキャパシタ、Li イオン電池、Li-S 電池への応用、メソポーラス金属酸化物を利用した、Li イオン電池、Li-S 電池への応用、そして窒素ドーピングメソポーラスカーボンを利用した燃料電池の電極触媒 (水の還元反応) への応用が多数報告されている。これらの応用は、電子活性なカーボンや遷移金属酸化物にメソポーラス構造を形成することで、表面積を大きくしたり (キャパシタ容量の向上)、物質拡散を容易にする (リチウムイオン電池の充放電レート向上) などを狙ったものである。触媒関係では、分子触媒の固定担体としての利用が増えている。メソポーラスシリカは細孔径が大きいいため、分子触媒を細孔内に固定しても、細孔が閉塞することなく、嵩高い基質もスムーズに拡散できる。また、脇・稲垣 (豊田中央研究所) らにより、リンカーを使わずに金属錯体を細孔表面に直接固定できる方法が開発され、均一系の錯体触媒と同等の触媒活性の発現に成功している。錯体触媒の固定化により、触媒の回収・再利用が可能となり、医薬品や化成品の製造コスト低減や環境負荷低減への貢献が期待される。

メソポーラス材料は骨格の組成・結晶性に関わらずメソ孔を有する材料全般を指すものと捉えることができ、骨格が多孔性を有する場合を包含する上位概念であるともいえる。注目すべき発展として、メソポーラスゼオライト、メソポーラス MOF が挙げられる。細孔径が比較的大きく結晶構造中にメソ孔を有するケースもあるが、ここではゼオライトや MOF が有する結晶構造に由来するマイクロ孔の他に、階層的にメソ孔を有する材料に注目する。メソ孔の存在に由来するゲスト分子のアクセス性・拡散性の増大によるゼオライトや MOF の特性向上や、触媒担体としての応用が期待される。メソポーラスゼオライトはカーボンを鋳型とした構造の転写、あるいは塩基によるエッチングで作製され、その後コロイド結晶に類似の構造を有する三次元規則性多孔体の作製も報告されている。近年ではメソポーラスシリカのようにミセルを鋳型とする手法が発展してきており、設計された構造制御剤を自己集合させてゼオライトを合成することで、メソ孔を有するゼオライトの合成に成功している。メソポーラス MOF の作製も多様な手法によって開拓が進んでいる。現時点ではマクロポーラスに限られるものの、ポリスチレンコロイド結晶を鋳型とした逆オパール構造を有する単結晶性 MOF の合成も報告されており、結晶成長の制御によるナノ多孔体化の精密設計が進展しつつある。

メソポーラスシリカの合成に関する進展として、従来は細孔壁が非晶質のものが主であっ

たが、結晶性シリカからなるものが報告されている。超高压下での合成あるいは融剤を活用した合成がある。高压合成法ではメソポーラスシリカを結晶化させることでメソ孔を有する quartz、coesite、stishovite 作製の報告がある。融剤を用いた手法では骨格の結晶性は quartz に限定されているが、結晶性メソポーラスシリカの作製が報告されている。

●多孔性金属錯体

Mircea Dincă (MIT) らは、2,3,6,7,10,11-ヘキサイミノトリフェニレンを配位子として用い、高電気伝導性と多孔性を併せ持つ伝導性 MOF を開発し、電極触媒、電気化学キャパシタ等のエネルギー変換へ展開している。さらに伝導性 MOF の電気伝導性が吸着分子によって変化することを利用し、アンモニア分子等のガスセンサーへと応用できることも見出している。Mark Allendorf (Sandia 国立研究所) らは伝導性 MOF の薄膜試料の合成にも成功しており、今後、FET 等のデバイス応用が加速されると期待される。

藤田誠 (東京大学) らが開発した細孔性錯体結晶を用いた「結晶スポンジ法」による分子構造解析は飛躍的な進化を遂げており、ナノグラム量の液状サンプルの測定や通常は困難なキラ化合物の絶対構造解析などを可能にしている。NMR などと組み合わせることで、複雑な構造を持つ生体分子の構造解析をも可能にし、未知試料の構造解析を可能にする汎用的手法となりつつある。

William R. Dichtel (Northwestern 大学) ら、および Wei Wang (蘭州大学) らは COF の単結晶の合成に成功している。従来 COF は微結晶粉末としてしか得ることができなかったが、反応原料の導入速度・濃度の精密制御 (Dichtel ら) や、動的共有結合の活用 (Wang ら) によって、COF 結晶の結晶核形成を抑制し、結晶成長を促進することにより、単結晶試料の作製が達成されている。

植村卓史 (東京大学) らは MOF が有するナノ空間内にモノマー分子を周期的に配置・固定し、連結させることにより、モノマー分子の配列繰り返し構造が精密に制御された高分子材料を人工的に作り出すことに成功している。この手法を用いれば、モノマー分子の並び方を狙い通りに制御できるため、エレクトロニクスや医療分野に応用可能な機能性高分子材料の開発につながると期待される。

近年、MOF のガス分離技術に加えて、触媒機能を付与した物質変換やエネルギー変換を指向した複合触媒の研究が展開されている。ドイツの Johannes A. Lercher らは MOF 骨格中に触媒となる Cu イオンを導入することで、メタンの部分酸化によるメタノール生成触媒を開発している。また、金属ナノ粒子とのハイブリッド化により高効率・高選択な反応やカスケード反応などが達成されており、二酸化炭素の水素化反応触媒においては、Wenbin Lin (University of Chicago)、Omar M. Yaghi (University of California-Berkeley)、北川 宏 (京都大学) らが研究を展開している。

●ポーラスカーボン

ミクロ孔の制御：ガス分離や透過に使用されるカーボン膜では、その厚さが薄いほど透過流量が増えるので、薄くてかつ丈夫な膜が望まれる。その意味で究極の薄さを誇る単層グラフェンが分離あるいは透過膜として利用できれば理想であるが、グラフェンにはガス透過能はない。しかし、2014年に A. K. Geim (The University of Manchester) らは単層グラフェンに

電圧を印加すればプロトンが透過することを発見した。さらにグラフェンに Pt ナノ粒子を担持するとその透過能が促進されるとしている。一方、2015年に F. M. Geiger (Northwestern University) らは水中で単層グラフェンがプロトンの透過能を持つことを発見した。グラフェン表面にある原子レベルの欠陥に水酸基があり、それによって Grotthuss 機構でプロトン伝導が生じていると報告している。どちらにしても単層グラフェンが透過膜として機能すれば、従来のウルトラマイクロ孔を通じて透過能を発現していたカーボン膜とは全く異なる新しい原理のカーボン透過膜となる。マイクロポーラスのゼオライトを鋳型として利用すれば均一な細孔をもつマイクロポーラスカーボンが生成するが、2016年に R. Ryoo (韓 KAIST) らはランタンをイオン交換したゼオライトを用いれば、ゼオライトのナノチャンネル中への炭素導入がさらに容易になることを示した。この研究によりゼオライト鋳型法によるマイクロポーラスカーボンの作製が今後さらに拡がり、一般化すると期待される。さらに2018年には、Smit らのグループが様々なゼオライト細孔を利用することで、グラフェンから成る最小曲面構造体「carbon schwarzites」を形成可能であることを計算化学で予想している (PANS, in press)。ゼオライトを鋳型としたグラフェン構造体の研究は世界でにわかに活発化しつつある。

メソ孔の制御：単層カーボンナノチューブが密集して成長したものを押しつけるとナノチューブ同士がお互い凝集して薄いシートになる。産業技術総合研究所が開発したスーパージア CVD 法を用いてシリコン基板上に垂直に成長した単層カーボンナノチューブも基板から取り出してシート状にすることができる。カーボンナノチューブシートは表面積 $1300 \text{ m}^2/\text{g}$ 程度であるが、最大細孔径 10 nm のメソポーラスカーボンであった。このカーボンは単層カーボンナノチューブからできているので活性の高いエッジサイトもなく電気伝導性も極めて高い。4 V の高電圧下でも電極として作動し、極めて高いエネルギー密度を示した。2009年に西信之 (分子研) らは銀アセチリドを炭素前駆体としてデンドライド状のメソポーラスカーボンを合成した。このカーボンの表面積は $1610 \text{ m}^2/\text{g}$ であり、その骨組みは主に単層グラフェンからなっており、極めてユニークな構造をしている。そのため、活性の高いエッジサイトも少なく、耐酸化性の高い多孔質炭素電極として新日鐵住金化学からエスカーボン®として製品化されている。現在、車載用の燃料電池の炭素担体として実用化のための試験が進んでいる。2016年に西原、京谷ら (東北大学) はアルミナナノ粒子を鋳型としてメソポーラスな 3D グラフェンを合成した。この炭素の表面積は $2000 \text{ m}^2/\text{g}$ 近くあり、平均細孔径は 5.8 nm である。また、その骨組みはほぼ単層グラフェンからなっており、電気化学的な耐酸化性が高く、4 V の高電圧下でも電気化学キャパシタ用電極として作動する。さらに骨組みがグラフェンからできているので、機械的柔軟性が極めて高く、 500 MPa という高圧で圧縮して細孔径を 0.7 nm まで縮めても、力を取り除くと完全に元の形に戻る。

●ポーラスリキッド

内部空間を有する液体の概念は 2007 年頃に登場したもので、当初はマイクロ孔を有するものが想定されていた。S. L. James (The Queen's University Belfast) らは 3 タイプのポーラスリキッドを提唱している。1) 空隙を有する分子からなる液体、2) 空隙を有する分子を溶媒に溶解した液体、3) ゼオライトのようなマイクロ孔を有する多孔体を溶媒に分散させた液体、である。1) が細孔を最も高い割合で含み細孔容積が大きくなるため望ましい物質であるといえるが、実際に分子を合成して多孔性を証明することは達成されていなかった。その後 2015

年に *Nature* に掲載された同著者らの論文では、簡便に合成できる常温常圧で液体の分子内に空間が存在し、メタンなどの低分子がトラップされること、および交換反応が進行することを示している。分子構造レベルで非常に良く規定された均一細孔を有することが選択性を生みだしており、分子が崩壊しなければ永続的に細孔が存在し続けられるという持続性も含めて、今後の活用が期待される。また、2014年に S. Dai (Oak Ridge National Laboratory) らはメソ孔を有する液体を報告しており、比較的細孔径の大きいところまで概念が拡張されてきている。メソ孔を有するポーラスリキッドは分子ではなく、ナノ粒子液体と同様の手法で作製される。中空ナノ粒子表面にポリマーを修飾し、無溶媒下でも液体で存在できるように設計されたものである。現時点では内部空間を有効に活用できていないため、今後の発展が期待される。

(5) 科学技術的課題

●ゼオライト、メソポーラス材料

ビルダー（洗浄助剤）として利用されている A 型ゼオライトを除き、ゼオライトは競合する無機材料（シリカ、アルミノシリケート、種々の金属酸化物など）に比べて高額であることが課題である。1990 年頃からゼオライト合成における有機構造規定剤 (OSDA) の理解と利用が進み、それに伴い様々な新規なゼオライトが見出されてきた。今世紀に入り OSDA の多様化に加え、Al 以外の金属とフッ素の鉍化剤としての利用を組み合わせ、数多くの新しいゼオライトが合成され、*Nature* や *Science* 誌の表紙を飾った。この点でゼオライト科学は大きく進展したが、その一方で、合成に用いた金属や鉍化剤は工業生産にはコスト的にも環境的にも難しく、利用された OSDA は構造的に複雑で高コストのものあり、実用化に対する距離はむしろ大きくなってしまった。また大学では、合成に特殊なオートクレーブが必要となることから、原料のハンドリングに工夫を要するゼオライトよりは、メソポーラスシリカや多孔性金属錯体といった新しい多孔性材料に研究の中心を置くグループが増えてきた。そのような中、東大の大久保らは上述の OSDA フリー合成法や超高速合成法を開発するなどの取り組みを進め、ゼオライトを安価に生産する技術開発を進めている。メソポーラス材料に関しては、構造の多様性が飽和に達しつつあるため、各応用分野での技術的・工学的課題の解決に焦点が移ってきている。

●多孔性金属錯体

PCP/MOF 材料は通常の合成法では粒子状の結晶性化合物として得られ、その成型加工性が低いことが課題である。Tomas D. Bennett (ケンブリッジ大) らは融解挙動を示す MOF を作り出し、アモルファス化したガラス状態での多孔性構造の解析を可能にした。この研究によって、結晶性の MOF を薄膜にすることやファイバー状に加工することが進展する。日本でも堀毛悟史 (京都大学) らが MOF のアモルファス化をすることで、イオン伝導性などの物性が向上することを発見しており、MOF 材料の応用における新たな可能性を引き出されつつあるのではないかと期待される。

また、PCP/MOF は結晶性制御が課題である。Roland A. Fischer (ミュンヘン工科大) らは、欠陥構造を制御することで、機能のチューニングすることを行っている。無機酸化物の系にはよく見受けられるコンセプトだが、最近 MOF の構造内にも積極的に欠陥を導入することが行われ、その量や位置、分布に応じた吸着挙動や触媒機能が見出されている。北川宏 (京都大学)、Christof Wöll (Karlsruhe Institute of Technology) や Paolo Falcaro (Graz University of

Technology) らは MOF の薄膜化に関する研究を行っており、ガス分子に対する応答性を精密に調節可能なセンサ材料や、ガス分離膜等への応用につながることを期待される。

●ポラスカーボン

ポラスカーボンの高性能化のために様々な方法で空間・空隙構造制御が行われている。しかし、どの方法においても、炭素前駆体から炭素化する過程を人工的に精密制御することは実現していない。炭素化過程を分子レベルで制御することが求められている。フラーレン(0次元)やカーボンナノチューブ(1次元)、グラフェン(2次元)を基本単位として規則的で整然とした分子構造のポラスカーボンをもし合成できれば、ポラスカーボンもゼオライトや多孔性金属錯体と同レベルの空間・空隙構造制御材料となる。分子レベルで大きさやサイズが制御された積み木を化学結合で繋いでいく技術である。そのためには、ベンゼン環(5員環、7員環、8員環も含めて)を有機化学の手法で縮合させて炭素構造体を合成していく、「炭素構造合成化学」とも言えるアプローチが模索される。その意味で、Max Planck 研究所の K. Müllen らのグループらの低分子からグラフェンナノリボンを作製する合成法、また、2013年から開始された JST・ERATO の「伊丹分子ナノカーボンプロジェクト」と「磯部縮退 π 集積プロジェクト」でも新しい展開が見られた。しかし、このような「炭素構造合成化学」のアプローチから合成された構造体はまだ有機化合物の域は出ておらず、実際のポラスカーボンとのギャップは大きい。高温で進む複雑な化学反応である炭素化過程の積極的な制御が課題である。一方、東北大の西原らはポルフィリン系の有機結晶を熱処理すると、元の結晶の規則構造を保ったカーボン材料が得られることを最近見出しており (*Nat. Commun.*, 8, 109, 2017)、ポラスカーボン研究は分子構造設計という新たなフェーズに進みつつある。平成 30 年に開始された JST・CREST 「革新的反応」領域においては、金沢大の生越友樹を代表者として『新物質群「3次元カーボン構造体」と革新的触媒反応』が採択されており、表題には空間は記されていないが、この分野は今後日本が先導し大きく発展する可能性がある。西原、生越ともに JST・さきがけ「超空間制御」を通じた研究成果を基に大きく展開している。

計算科学、マテリアルズインフォマティクスと実験家との協同による研究推進については今後の課題となっており、従来の多孔体分類を超えて統一的にこの物質群をとらえ、所望機能発現を目指した新多孔体合成に関する新たな枠組みの創造が今後求められる。

(6) その他の課題

全般的傾向として、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。一方で日本のプロジェクトは、基礎と応用が、プロジェクト毎にどうしても乖離しがちである。本来、両者の活動には現場レベルでも相当の重なりが必要となり、両者の往来・浸み出しが国際競争上は肝要になる。基礎的な研究および開発が必要な技術要素は個々の研究者が取り組みやすい一方で、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」などが求められる。これら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することが重要であろう。それによって、要素の

学術的深掘基礎研究であっても、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可能になる。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課題である。

2016年に、日本学術振興会に「ナノ多孔性材料とその産業応用」に関する先導的研究開発委員会が設立された。様々な多孔性材料（ゼオライト、シリカ、MOF/PCP、カーボン）に関する産学の研究者・技術者が参画しており、新しい産業応用への展開に向けて議論が進んでいる。

(7) 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	◎	→	大学の研究グループ数は限られているものの、個々のアクティビティは非常に高い。JSPSに「ナノ多孔性材料とその産業応用」に関する委員会が設立(2016)。ゼオライトに関しては、有機構造規定剤(OSDA)を用いずに、数々のゼオライトが合成可能であることを、東大の大久保らが示した。このβ型ゼオライトは、従来に比べてイオン交換容量が大きく、欠陥が少なく耐久性が高いという特徴をもつ。ポーラスカーボンに関しては、東北大・京谷らの鑄型炭素化法や、JST ERATO「伊丹分子ナノカーボンPJ」「磯部縮退π集積PJ」など革新的合成技術を開拓。MOFでは、第一線級の研究者が基礎研究をリード。MOFの認知度は広がりを見せ、研究者数は着実に増加。主要プロジェクト(ACCEL、CREST、さきがけ)の関連採択は終了しているが、新学術領域研究などでさらに一部の研究者をカバーしている。
	応用研究・開発	○	↗	ゼオライトに関しては、応用・製造とも層が厚い。上述のβ型ゼオライトは量産検討が進んでいる。NEDO「GSC/規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」PJと共同で、三菱化学は2010年にCHA構造のアルミノシリケートゼオライト膜の開発に成功。日立造船、ノリタケカンパニーリミテドとともに実用化を検討。また、自動車会社9社が学官と連携し、自動車内燃機関技術研究組合(AICE)を設立。天然ガス/CO ₂ の分離では、三菱化学と千代田化工がJOGMECのプロジェクトで取り組んでいる。ポーラスカーボンに関しては、稲垣らや西らの大学発の研究が東洋炭素や新日鐵住金化学から商品化されている。MOFに関しては、多くの企業がその魅力を認識するものの、開発コストの問題などから、基礎研究に留まっているケースが多く、まだ大きな進展は見せていない。
米国	基礎研究	◎	↗	ゼオライトに関しては、バイオマスを用いた化学品製造に関するプロジェクトがDOEの支援で発展し、University of Delawareを中心に研究。2009年に同大にCatalysis Center for Energy Innovationが設立、糖を起点として機能性化学品の製造が検討され、ゼオライト触媒を利用。糖からペットボトル原料が合成できることが示されている。メソポーラス材料の基礎研究も盛んであり、U. Wiesnerらによって細孔配列が長周期的な規則性を有するメソポーラス準結晶や十二面体のシリカケージが合成されている。カーボン系に関しては、Gogotsi(Drexel大)らによるカーバイド由来カーボン、F. M. Geiger(Northwestern大)らが発見した水中で単層グラフェンがプロトン透過能を持つことなどオリジナルの研究が多い。MOFでは、創始者の一人であるOmar Yaghiらを中心としたレベルの高い基礎研究、ScienceやNatureへの掲載数も多い。NSFのプロジェクトが充実しており、環境・エネルギー関連が目立つ。計算科学を用いた材料設計を指向したPJや、触媒応用を指向したPJなど、多様な構成で実施。
	応用研究・開発	◎	↗	ExxonMobil、Chevron、UOP社などゼオライト関係は石油メジャーでの研究開発力が高い。カーボン系では、上記のようなオリジナルの基礎研究とともに応用研究も多い。MOFに関しては、ノースウェスタン大学発のベンチャー企業であるNuMATが精力的に応用・開発を進め、多くの企業や国の支援を受け材料開発を行っている。

欧州	基礎研究	◎	↗	<p>独創的な研究開発を行っているグループが各国にある。ゼオライトでは、Horizon2020のもとオランダを中心としたバイオマスからの化学品製造触媒 PJ (ZeBioApp, 1800 万 Euro) や、スペインを中心とした CO₂ 分解光触媒 PJ (ZESMO, 1600 万ユーロ) を実施。カーボン系では、石炭由来の活性炭の研究が盛んだったので、賦活法や炭素表面化学の基礎研究が未だ多い。ポーラスカーボンでは J. H. Knox (英) による鋳型炭素化の研究がある。K. Müllen (独) らによるグラフェンのボトムアップ合成の研究は注目に値。MOF に関しては、多孔性有機ケージ状材料などの開発も精力的に進め、幅広く進展。Tomas D. Bennett (ケンブリッジ大) らは融解挙動を示す MOF を作り出し、アモルファス化したガラス状態での多孔性構造の解析を可能にした。</p>
	応用研究・開発	◎	→	<p>BASF 社が群をぬいた存在。各国から多様なベンチャー企業も生まれている。ポーラスカーボンに関して、M. Titirici (Max-Planck) によるバイオマス由来多糖類の水熱炭素化の研究などがある。J. H. Clark (英 York 大) はデンプンからメソポーラスカーボンを合成し、大学発ベンチャーで商品化。BASF は MOF 材料の量産・販売を行っている。仏石油企業の TOTAL は MACADEMIA-PJ で、MOF による窒素/プロピレンの分離を研究。PSA による CO₂/硫化水素、プロパン/プロピレン、フィシャートロブシュ反応、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 の回収に取り組んでいる。産業ガスの世界シェア一位である Air Liquide 社 (フランス) も積極的に MOF 材料の開発に乗り出し、日本にも研究拠点を設けている。</p>
中国	基礎研究	◎	↗	<p>米国や日本での研究・留学経験のある MOF/PCP 関連の研究者が多数活躍。政府によるプロジェクトも充実。研究者数・論文数ともに極めて多く、資金が潤沢、知見は膨大なものとなっている。ポーラスカーボンに関しては、Zhao らの soft templating 法の研究等があるが、オリジナルの基礎研究例は多くない。しかし、中国に 3 つあった炭素関係の学会が合併して大きな炭素材料学会になるという動きがあり、今後早い時期に成果が出てくることは間違いない。Che らによるメソポーラスゼオライトの精密合成が報告されるなど、メソポーラス材料に関する基礎研究においても進展があった。MOF 材料に関する論文数は世界でトップであり、最近ではその研究内容のレベルも上がっている。特に Nature 姉妹誌などへの論文掲載数は飛躍的に上昇しており、独創性と先進性のある研究が着実に増えてきている。</p>
	応用研究・開発	◎	↗	<p>積極的な展開を図っている。潤沢な資金により、挑戦的な課題を大規模に展開。応用研究も極めて多く、その数は他の国を圧倒。MOF や COF 材料の開発に関するベンチャー企業が現れてきており、試薬などで購入できる機会が増えている。</p>
韓国	基礎研究	○	→	<p>メソポーラス材料は、R. Ryoo (KAIST) を中心に基礎から応用研究に到るまで開発が活発に進められている。2016 年に R. Ryoo らはランタンをイオン交換したゼオライトを用いれば、ゼオライトのナノチャンネル中への炭素導入がさらに容易になることを示した。この研究によりゼオライト鋳型法によるマイクロポーラスカーボンの作製が今後さらに拡がり、一般化すると期待される。MOF 材料の開発を基礎レベルで行っている研究者の数は増えておらず、革新的な研究結果も顕在化していない。</p>
	応用研究・開発	△	→	<p>実用・製品化につながる企業での研究・開発は少なく、顕著な動きは見せていない。ポーラスカーボンに関しては、鋳型炭素化法による応用研究が多い。国家プロジェクト「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。</p>

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗: 上昇傾向、→: 現状維持、↘: 下降傾向

(8) 参考文献

- 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」(2014) / 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) 科学研究費助成事業 新学術領域研究「配位アシンメトリー」
- 3) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)「水素利用技術研究開発事業」事業方針: 平成 28 年度版
- 4) 新日鉄住金化学株式会社「新規多孔質炭素材料「エスカーボン® / ESCARBON® - MCND」の開発と市場展開について」, <http://www.nssc.nssmc.com/news/download/130620.pdf> (2019年2月12日アクセス)
- 5) 株式会社エヌ・ティー・エス『ナノ空間ハンドブック』
- 6) 科学技術振興機構 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」
- 7) 科学技術振興機構 さきがけ「超空間制御と革新的機能創成」
- 8) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略プロポーザル 空間空隙制御材料の設計利用技術」(CRDS-FY2009-SP-05) (2010年3月)
- 9) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「ワークショップ報告書 空間空隙制御・利用技術」(CRDS-FY2009-WR-05) (2010年2月)

2.4.2 分子技術

(1) 研究開発領域の定義

「分子技術」は、日本発の課題解決型の研究開発領域であり、目的を持って分子を設計・合成・操作・制御・集積することにより、分子レベルで所望の物理的・化学的・生物学的機能を創出し、応用に供するための一連の技術を指す。分子技術の集積と体系化により、従前の科学技術では成しえなかった新物質、新材料、新デバイス、新プロセス等の創出が期待できる。これらは、課題解決に対するブレークスルーの提供に留まらず、イノベーションを通して新産業の創出にも繋がりうる。本分子技術は、分子設計から所望の機能創出に至るプロセスにおいて必要な技術を、「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つの横断的技術に分類され、各技術の研究開発が推進されている。これらは互いに密接な関係を持ち続ける必要がある。

(2) キーワード

分子科学、ソフトマテリアル、医薬品設計、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

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

分子技術には、環境・エネルギー・資源や医療・健康などに関わる社会的・産業的課題の解決に貢献し、持続可能な社会の実現に資することが期待されている。これらの分野の現在の課題は顕在化していることが多く、SDGsはその好例である。一方、世界における課題は人口増加、都市化、高齢化、地球温暖化などのメガトレンドから読み解くことができるが、グローバルに市場や顧客との接点を持つ企業からの情報が、研究開発推進のうえでは重要になる。

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て、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を新たに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て、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・集積することにより、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場合には国際的にも圧倒的な競争力の獲得につながる。

分子技術の基盤をなすのは化学である。従前の化学は自然の神秘を解き明かすことに挑戦し続けてきた。しかし、本研究開発領域は、社会や産業の重要課題の解決を目的とするため、物理学、生物学、薬学、数学、情報学等の科学的知見を融合するとともに、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も取り入れなければならない。従って、従前の自然の神秘を解き明かす化学から、課題を解決する化学へと、大きなパラダイムシフトが要求される。このパラダイムシフトが分子技術獲得の原動力となる。

[研究開発の動向]

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が行われることは稀であり、一定の機能が得られた段階で商品開発のフェーズに移るのが普通である。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全く新規な分子の設計まで行うことは珍しい。次善の分子でも十分な収益があげられるビジネスとして成り立ち、極端に言えば試行錯誤の創薬でしかなかった。しかし、一方では従来の小分子医薬品の時代は終わり、中分子医薬品の時代に入っており、ますます、試行錯誤からの脱却と予想可能な創薬の時代に適応しなければならない。今後の医薬品開発は、急激な投資額の増加により、肌理(きめ)細かな開発が難しくなり、その結果、緻密な分子技術の創出に至ることが一層難しくなると予想される。

最適・最善である新規な分子の設計と合成に至らない段階で商品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あるため、その模倣は比較的容易である。また、未成熟ゆえに、特許による技術の保護も十分とはいえないので、市場での成功が明らかになった段階で、開発途上国において、様々な後発品が上市されると考えられる。オンリーワン分子の設計と合成を進めるためには、破壊的イノベーションを生み出す高い分子技術力が必要となるが、この基盤技術の育成に必要な基礎科学を持ち、且つ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持つことから、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繋がらない。従って、国際的な比較を行うのは困難な面がある。言い換えれば、試行錯誤の科学技術から予測可能な科学技術へ方向転換し、それによって真の破壊的イノベーションを我が国に定着させなければならないが、こうした流れを定量的に把握することは極めて難しい。

本領域では、分子技術を、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」、分子レベルでの精密な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・イオンの輸送に関係する「輸送・移動制御の分子技術」からなる6つの横断的技術に分類している。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が目的であるため、今後さらに社会の要請する課題に沿って新しい技術課題が出現してくると予想される。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

前述の通り、分子技術には、環境・エネルギー・資源や医療・健康などに関わる社会的・産業的課題の解決に貢献し、持続可能な社会の実現に資することが期待されている。例えば、環

境・エネルギー・資源の分野においては、二酸化炭素の資源化（人工光合成）が人類の将来を握る未来技術の1つと言われている。この研究開発は先進国を中心として、世界中で活発に行われているが、これまで部分的な成功に留まっていた。石谷治（東京工業大学）は、従来は独立して研究開発が行われていた金属錯体光触媒と半導体光触媒を見事に融合したZスキーム型触媒を開発し、可視光をエネルギー、水を電子源とする二酸化炭素の還元成功した。人工光合成の研究開発に新しいページを加える成果である。また、医療・健康の分野では、横田隆徳（東京医科歯科大学）は、医学、化学、薬学、工学の知見と理解を融合することにより、有効性・安全性の両面において従来の核酸医薬を凌駕するヘテロ2本鎖核酸の開発に成功した。国民病と言われるアルツハイマー病の分子標的治療薬としての応用が期待されている。一方、計算科学の分野では、前田理（北海道大学）は、自ら考案した人工力誘起反応法をベースとして画期的な反応経路自動探索法を開発し、網羅的な反応経路の探索を可能とした。本法は、反応機構や構造を推定して、その妥当性を評価する従来法とは一線を画するものであり、量子化学計算で未知の素反応、未知の化合物、未知の物性を系統的に自動探索することが可能になってきている。この分野は年々発展しており、今後とも大きな成果を上げることが期待されている。特に特筆すべきは計算分野での従来の「わかっていることを説明する計算科学」から、「わからないことを予測する計算科学」への変化を実現したことにある。その成果の今後を占うと、以下の分野でのイノベーション誕生が期待される。

- 1) 医薬品分野：今後の創薬のカギを握ると考えられている中分子医薬品に向けた、計算化学を駆使した論理的分子設計技術に基づく創薬イノベーション
- 2) マテリアル：従来の様々な機能物質合成技術を革新し、計算化学を基盤とした、必要な新機能を分子設計できる論理的なマテリアルイノベーション
- 3) 触媒：従来の試行錯誤型の触媒設計を改めて、計算化学を基盤とした、必要な触媒機能を分子設計できるイノベーション

このように、分子科学の知見や理解をベースとして、異種材料や異種分野の知見・理解の融合、常識にとらわれない発想やアプローチによりユニークな分子技術が生まれつつある。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

上述のトピックスは、いずれも2012年にスタートしたJST・CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」からの成果であり、社会や産業の課題解決のブレークスルーになる可能性を秘めている。また、同じくJST・さきがけ「分子技術と新機能創出」でも6つの技術領域全体にわたって多数の研究テーマが展開され2017年度に終了。一部の成果は新たな研究開発プロジェクトへと力強く発展している。さらに、2018年度には文部科学省の世界トップレベル研究拠点プログラム（WPI）に、北海道大学「化学反応創成研究拠点」が採択され、10年間の拠点型研究が開始された。本拠点は上述の前田理による「人工力誘起反応法」を基盤とし、本法を進化させることを掲げている。他、同じく2018年度にJST・ERATO「ニューロ分子技術」が浜地格（京都大学）を研究総括として開始された。

（5）科学技術的課題

分子技術を開発する目的は、社会や産業の重要課題に対する効果的な解決法の提供にある。今後さらに複雑化、高度化すると予想される諸課題に対して、既存の科学技術の延長で対応す

ることは困難である。従って、研究開発テーマには、現在の科学技術では到達できない「夢の目標」と従前の研究開発の延長ではない新規な研究開発プランが必須である。さらに、プランを進め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。そのためには、研究開発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、分子レベルからの課題解決を目指し、化学を基盤として物理学、生物学、薬学、数学、工学などに加えて各種の技術も融合し「最適・最善の解」を得ることが求められる。成功には、基礎科学者、工学者および企業技術者が、分子技術という共通の土台に立ち、協働することが重要となる。一方、本研究開発領域においては、研究者の意識変革もまた重要である。研究者は、自らの研究開発により社会や産業の重要課題を解決するという強い意思を持たなければならない。「やれることをしっかりやる」、「より良いモノを作る」から「やるべきことをやる」、「一番良いモノを創る」という転換も求められる。

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¹。

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* キャラクター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

¹ CRDS 戦略イニシアティブ「分子技術」(CRDS-FY2009-SP-06)

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られている²。

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・オリゴメリ化〉

- ・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
- ・非担持錯体触媒を用いる重合での結晶性ポリオレフィンのモルフォロジー制御
- ・ポリマーからモノマーへの完全分解触媒反応 (P)
- ・エチレンから C10 以上の α -オレフィンの自在選択製造 (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)
- ・二酸化炭素と水素から単段で C2 以上の炭化水素化合物の製造
- ・人工光合成による水への溶解性が小さい C2 以上の化合物の製造

² CREST 革新的分子技術リスト <http://mt.jst.go.jp/outline/list.html> より引用

- ・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・低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

〈改質・水素製造〉

- ・メタンの水蒸気改質反応、ドライ改質反応の低温化 (200°C以下)
- ・低温でのメタン分解による水素の製造

〈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〉

- ・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〉

- ・同一炭素数のアルカンとアルケンを分離できる膜 (P)
- ・原油からガソリン、ナフサ、灯油が分離できる膜
- ・高温 (500°C以上) で水素を選択的に分離できる膜
- ・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太陽電池：大幅に変換効率を向上させた人工光合成
- ・超高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ー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）
- ・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）
- ・狙う化学反応の最高性能触媒と最低コスト触媒の両方の提示
- ・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
- ・反応の遷移状態の計算を目標とする計算化学から脱却し、遷移状態の予測が可能な計算化学の誕生を目標とする計算化学の推進。
- ・さらには、所望の物性を期待できる化学構造の予測を目標とする日本発の新しい計算化学

の誕生に向けての積極的支援。

【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イス）
- ・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
- ・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。

(6) その他の課題

分子技術は、これまでにはなかった新しい技術体系であるため、中長期的視点に立った技術の開発と集積を戦略的に進める必要がある。6つの横断的技術に分類されることから分かる通り、分子技術は多様であるため、その構築には継続的な戦略・投資なしには実現しない。社会や産業の課題には終わりが無いなかで、新しい挑戦的な目標を掲げた研究開発チームを適時に立ち上げ続けるというのが、分子技術推進のあるべき姿である。分子技術には、新物質、新材料、新デバイス、新プロセス等のブレークスルーの創出が期待されている。しかし、これらは、分野単独の科学技術から生み出すことは一般に困難であり、多様な分野の科学技術の融合により初めて可能となる。従って、高い志を持った分野融合型の研究開発チームが容易に組織され、また効率的に活動できる仕組みや仕掛けが要る。分子技術は、基礎科学をスタートとして、その応用により課題解決の解を提供するとともに、イノベーションを通して新産業の創出も期待

する研究開発領域である。今後は、文部科学省・JSTだけでなく、経済産業省・NEDOとの緊密な連携が求められる。

(7) 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	◎	↑	分子技術の重要性が世界で初めて日本で明確に認識されたことは極めて重要な点。日本は、高いレベルの分子科学を持っており、これは競争力ある分子技術の開発基盤となる。今後、化学を始め物理学、生物学、数学などの研究者の連携がさらに進めば、この分野を世界的に牽引することが期待できる。また、分子技術の獲得を目的とする日仏の二国間国際共同研究プロジェクトが既に開始されている。
	応用研究・開発	◎	→	環境・エネルギー・資源、医療・健康、水・食料など分子技術が鍵となりうる応用分野は多い。日本は、それぞれの分野における末端技術には、強弱があるものの、分子技術の基盤となる部分は非常に高いレベルにある。産業化については、上述分野への応用展開を志向した、先端材料で優位にある。しかし、米国に比べると、全体として必ずしも十分な競争力はなく、さらに、韓国、中国などに追い上げられつつある。どちらかといえば、持続的イノベーションを志向した研究開発が多い。
米国	基礎研究	◎	↓	米国でも、近年、分子工学の重要性が認識され始めている。しかし、バイオやマテリアルなど応用末端の分野にその研究が集中しており、化学というよりも工学が前面に出ている。従って、分子レベルまで掘り下げた設計、合成や制御を目指す研究は少ない。
	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。特に資金が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。産業化については、ベンチャーが中心となって諸課題への対応を図っており、特にライフサイエンスの分野が活発である。巨大製薬企業は、成功したベンチャーの買収により投資リスクの分散をはかるとともに、高収益が期待できるビジネスシーズを獲得している。
欧州	基礎研究	◎	→	ドイツでは、大学改革に成功し、分子科学の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分野の分子技術は進んでいるが、これは米国の影響と思われる。フランスはフッ素化学などの限定された分野では優れているが、全体としては低調である。しかし日本との二国間国際共同研究プロジェクトにより新しい分子技術が誕生しつつある。
	応用研究・開発	○	→	ドイツ、英国のライフサイエンス分野の応用研究は、非常に優れている。他の国は平均的レベルにある。産業化については、一般に、ライフサイエンス分野が堅調である。産業化を促進する制度的バックアップは優れているが、分子技術という面からはすこし手薄い。
中国	基礎研究	○	↑	現時点では欧米の後追い研究が中心である。しかし、ウミガメ政策により欧米で成功した研究者が本国に招聘されており、潤沢な資金と相まって、成果をあげ始めている。一方、中国国内では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限られるのはハンディであるが、この状況は近年中に変わる可能性がある。
	応用研究・開発	○	↑	多くの研究費が大学や研究所に流れ、応用研究が急速に進展している。産業化については、米国と似た制度の下でベンチャー企業が誕生しやすい環境にある。
韓国	基礎研究	△	→	米国型の研究スタイルであるが、最近、大学や政府研究機関で外国人研究者が十分な処遇・雇用を得られないケースがみられる。欧米からの帰国者を優遇し、こ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遅れている。
	応用研究・開発	○	→	応用研究が進み始めており、今後の発展が見込まれる。比較的ダイナミックに産業化を進めているが、現時点では、分子技術そのものではなく製品開発に強い。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Institute for Molecular Engineering, The University of Chicago,
<http://molecularengineering.uchicago.edu/> (2019年2月12日アクセス)
- 2) 文部科学省 (平成24年度戦略目標)「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 (2019年2月12日アクセス)
- 3) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略プロポーザル 分子技術 “分子レベルからの新機能創出”～異分野融合による持続可能社会への貢献～」(CRDS-FY2009-SP-06) (2010年3月),
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/SP/CRDS-FY2009-SP-06.pdf> (2019年2月12日アクセス)
- 4) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「ワークショップ報告書 分子技術」(CRDS-FY2009-WR-07) (2010年3月),
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2009/WR/CRDS-FY2009-WR-07.pdf> (2019年2月12日アクセス)
- 5) 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> (2019年2月12日アクセス)
- 6) 科学技術振興機構 CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」
<http://mt.jst.go.jp/> (2019年2月12日アクセス)
- 7) 科学技術振興機構 さきがけ「分子技術と新機能創出」
<http://www.jst.go.jp/presto/moltech/> (2019年2月12日アクセス)
- 8) 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> (2019年2月12日アクセス)

2.4.3 元素戦略・希少元素代替技術

(1) 研究開発領域の定義

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発する研究開発領域である。近年、重希土類元素であるジスプロシウムを一切使わない永久磁石をハイブリッド車用駆動モーターに実用化するなど、社会実装への動きも活発化している。

(2) キーワード

元素戦略、Critical Materials、Critical Raw Materials、Critical Minerals、希少元素、希土類元素、循環、減量、代替、材料設計、構造制御

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

ハイブリッド自動車やスマートフォンなど、我々の日常生活を支えてい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。希少元素とは地球上で採掘可能な量が少ない上に産出国が偏在している元素群（わが国ではレアメタルとも呼ばれる）であり、年々需要が増加傾向にある。そのため希少元素を用いる製品開発を行う各国においては、世界的な供給量不安定化や価格高騰を含めた資源問題が潜在的に存在し、その対応方針が求められている。特に工業製品の輸出を主軸とし、資源に乏しいわが国にとっては喫緊の課題である。1980年代には、少生産量で市場の動きが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31鉱種が「レアメタル」の呼称で経済産業省により指定され、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インジウム (In) や永久磁石に必要なジスプロシウム (Dy) の価格高騰・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さが顕著になり、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、占有化、国家資本の積極的参入が続く最中に、中国の希土類金属輸出制限に端を発した30倍以上の希土類金属価格の暴騰が世界を襲った。これにより資源問題は一過性のもので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り、日米欧を中心に資源問題に対して政策的な取り組みが開始され、日本発の「元素戦略」が持続可能社会実現に向けて取り組むべき重要課題として世界中で認知されることとなった。

[研究開発の動向]

・日本

我が国においては、資源は供給されうるものという従来の考え方から脱して、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ための研究コンセプト「元素戦略」を、2004年に諸外国に先駆けて提唱した。

「元素戦略」とは、上述の通り、「代替」「減量」「循環」「規制」「新機能」の5つの柱によっ

て構成される物質材料科学の基盤を構築する戦略である。

- ①代替：特定の元素に依存することなく、豊富で無害な元素により目的機能を代替する
- ②減量：希少元素・有害元素の使用量を極限まで低減する
- ③循環：希少元素の循環利用や再生を推進する
- ④規制：有害物質に対する各国の使用量規制や基準を乗り越える高い技術を戦略的に開発する
- ⑤新機能：元素の秘められた力を引き出すことで新たな機能を生み出す

この概念の特徴としては、化学、物理、金属、セラミックスや磁石など、多彩な学界が共通して取り組めるという点にある。

元素戦略・希少元素代替材料技術に関する研究開発は、2007年に文部科学省による「元素戦略プロジェクト<産学官連携型>」、および密な連携を行う経済産業省による「希少金属代替材料開発プロジェクト」に始まる。前者が長期的視点からの基礎研究を実施し学術的基盤の構築を目標としたことに対し、後者は5年を目処として実用化のステップに乗せうる短期的テーマを推進することを目的とした。後の府省連携施策の原型となる極めて先進的な国家プロジェクトであり、内閣府を積極的に巻き込み、共同での公募や、役割分担に沿った審査の相互乗り入れを行うなど、従来になかった協力体制で取り組まれた。

その後、2010年にはJST戦略的創造研究推進事業CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」（玉尾皓平研究総括）およびさがけ「新物質科学と元素戦略」（細野秀雄研究総括）が発足した（CRESTは2017年度、さがけは2016年度でそれぞれ終了）。さらに2012年から10年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」においては、磁性材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料を各研究開発テーマとする4つの研究拠点が形成され、「材料創製」「解析評価」「理論」が三位一体となった研究体制が構築されている。

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」を進めてきた。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（In）、希土類磁石向けジスプロシウム（Dy）、超硬工具向けタングステン（W）、排ガス浄化向け白金族・セリウム（Ce）、精密研磨向けセリウム（Ce）、蛍光体向けテルビウム（Tb）・ユーロピウム（Eu）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た。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た。これらの研究開発を推進するとともに、関連する研究開発動向の調査、事前検討、中長期戦略立案に関する事業など幅広い取り組みを行っている。

2012年からは経済産業省による未来開拓研究プロジェクトの中で「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」を開始し、その後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ている。

他にも、JSPS科研費の新学術領域研究、内閣府のSIP「革新的構造材料」（2014～2018年度）およびSIP第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」（2018～2022年

度)、文部科学省の「東北発素材技術先導プロジェクト」(2012～2016年度)、JSTの「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」、「革新的次世代高性能磁石創製の指針構築」、日EU共同研究「希少元素代替材料」などの多くの関連プロジェクトも推進されてきた。また、レアメタルに係る安定したマテリアルフローを実現したサプライチェーンの確立を目指した東北大学レアメタル・グリーンイノベーション研究開発センター(2014年1月設立)などの研究開発拠点も整備されつつある。

・米国

米国では日本に追随する形で、2010年にエネルギー省(Department of Energy: DOE)が“Critical Materials Strategy”を発表し、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、循環技術を確立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、Ames研究所にCritical Materials Institute(CMI)が設立された。CMIでは5年間で約120百万ドルの資金が導入され、2018年7月に5年間の延長が認められている。また、同時期に日本の元素戦略を意識した取り組みとしてMaterials Genome Initiativeも開始された。これは理論やデータが材料研究を牽引するとした内容であるが、元素戦略が先導した「理論」「材料創製」「解析評価」が三位一体となった研究開発は時代の趨勢となりつつある。

さらに2017年12月、トランプ大統領は米国の経済と安全保障に対して脆弱性の要因となりうる希少鉱物の輸入依存の低減と安定供給ルートの確保を目的に、「A Federal Strategy To Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals(安全かつ信頼できる希少鉱物の確保のための連邦政府戦略)」という大統領令(Critical Mineral Executive Order)を発令した。ここでは、内務省に対して60日以内に希少鉱物リストの作成を指示、加えて商務省、国防総省、農務省、財務省、エネルギー省、科学技術政策局などの関連省庁に対して、希少鉱物リスト公開から180日以内に対応方針に関する報告書を大統領に提出するよう求めている。これを受けて、内務省は翌2018年2月に「希少鉱物リスト草案」を公表し、パブリックコメントを実施した上で、同年5月に「希少鉱物の最終リスト」を発表し、希少鉱物35種を特定している。2018年12月時点で、関連省庁の報告書は未公開であり、引き続き、米国の動きには注視すべきである。

・欧州

欧州では重要な元素群を「Critical Raw Materials(CRMs)」と命名し、2011年に14種、2014年に20種、2017年に27種と3年ごとにCRMsリストを更新している。2014年より開始されたHorizon 2020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探索を進めている。特に2015年2月より欧州の社会的課題解決プログラム(European Innovation Partnerships: EIPs)の一つとして、Horizon 2020支援の下、International Raw Materials Observatory(INTRAW)の活動が開始されている(2018年1月までの3年間)。INTRAWでは、原材料資源に関する技術先進国もしくは鉱物資源保有国である米国、カナダ、オーストラリア、南アフリカ、日本等との国際協力の促進、共通に抱え

る資源問題を解決するためのベストプラクティスの俯瞰、欧州における原材料資源に関する戦略策定や政策提言、およびファンディングを実施する国際機関設立を目指している。さらに、2018年1月には「Report on Critical Raw Materials and Circular Economy（希少原材料と循環型経済に関する報告書）」が公開されている。ここでは、循環型経済の一環として希少資源確保に向けたデータソースの提供、ベストプラクティスの促進、実行可能なアクションプランを特定することを目的として、欧州における関連政策やプロジェクト、CRMの需要動向について記載している。2018～2022年の間にCRMに関する活動（CRMの入手改善、欧州圏内のCRMの回収率向上、CRMの輸入依存の低減、欧州圏内での専門家コミュニティの強化など）に2億5000万ユーロ以上の投資が予定されている。

・アジア

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。

なお、2011年から毎年、Trilateral U.S. - EU - Japan Conference on Critical Materials 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ている。ここでは、レアアース等のレアメタル主要消費国である三極の技術者・研究者が、代替・削減技術および鉱石や製品からの効率的な精製分離技術等について密接な情報交換を行うことで、当外分野の研究促進を図るとともに、レアメタル消費国間の連携状況を国際的に発信することを目的としている。

（4）注目動向

[新展開・技術トピックス]

最近特に米国と欧州において、希少資源に関するデータソースの拡充、安定供給ルート確保に向けた取り組みが活発化しようとしている。

米国においては、2017年12月、トランプ大統領は米国の経済と安全保障に対して脆弱性の要因となりうる希少鉱物の輸入依存の低減と安定供給ルートの確保を目的に、「A Federal Strategy To Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals（安全かつ信頼できる希少鉱物の確保のための連邦政府戦略）」という大統領令（Critical Mineral Executive Order）を発令した。ここでは、内務省に対して60日以内に希少鉱物リストの作成を指示、加えて商務省、国防総省、農務省、財務省、エネルギー省、科学技術政策局などの関連省庁に対して、希少鉱物リスト公開から180日以内に対応方針に関する報告書を大統領に提出するよう求めている。これを受けて、内務省は翌2018年2月に「希少鉱物リスト草案」を公表し、パブリックコメントを実施した上で、同年5月に「希少鉱物の最終リスト」を発表し、希少鉱物35種を特定している。2018年12月時点で、関連省庁の報告書は未公開であり、引き続き、米国の動きには注視すべきである。

また、欧州においては、2018年1月に「Report on Critical Raw Materials and Circular Economy（希少原材料と循環型経済に関する報告書）」が公開されている。ここでは、循環型経済の一環として希少資源確保に向けたデータソースの提供、ベストプラクティスの促進、実行可能なアクションプランを特定することを目的として、欧州における関連政策やプロジェク

ト、CRM の需要動向について記載している。2018～2022 年の間に CRM に関する活動(CRM の入手改善、欧州圏内の CMR の回収率向上、CRM の輸入依存の低減、欧州圏内での専門家コミュニティの強化など)に 2 億 5000 万ユーロ以上の投資が予定されている。

一方で、我が国においては、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研究開発により、元素戦略の 5 つの柱の中の「代替」「減量」に関する取り組み、および、ありふれた元素 (earth-abundant elements) で従来を凌駕するあるいは新規の機能発現を目指す創成型の研究開発が主に行われている。特に、特定元素がなぜその機能を発揮しているのかについて科学的に解明し、その機能発現原理をナノスケールの物質構造 (原子配列、格子欠陥、結晶粒、磁区構造、分子構造、表面・界面構造など) からデザインすることによって、希少元素・有害元素の代替に留まらない、「新機能」に関する取り組みを推進することが重要である。そこで文部科学省は 2010 年の戦略目標として「レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出」を掲げた。これを受けて JST において前述の CREST 「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」およびさきがけ「新物質科学と元素戦略」を発足させた。CREST においては、物質の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、既存の延長線上にはない物質・材料の革新的な特性や機能の創出を目指した研究開発が行われた (2017 年度末に終了)。さきがけでは、クラーク数上位の元素を駆使して、ナノ構造や界面・表面、欠陥などの制御と活用による革新的な機能物質や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・材料科学の確立を目指した研究開発が行われた (2016 年度末に終了)。京都大学の北川宏らによる元素間融合による新規ナノ合金の開発、九州大学の永島らによるアルケンのヒドロシリル化用鉄・コバルト触媒の開発などの実用化に繋がる成果や、さらなる発展を目指して新たな研究プロジェクトに採択される多くの興味深い基礎的な成果が創出された。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

2012 年から 10 年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」における 4 つの研究拠点の目的を以下に示す。

・磁性材料研究拠点

磁石の性能に与える元素の役割を基礎物理に遡って解明することにより、ハイブリッド自動車の駆動モーター等に用いられている現在の最高性能を有する希土類永久磁石と同等の性能を有する磁石を、希少元素を用いることなく作成することを目指す。

・触媒・電池研究拠点

今日の環境産業やエネルギー産業に欠かせない触媒及び二次電池の部材について、固体及び気体/液体との間での元素の複雑系反応を基礎科学と実験科学の緊密な連携を通じて解明することにより、触媒及び二次電池に対する元素の機能を予測し、貴金属や希少元素を用いない代替材料の開発を目指す。

・電子材料研究拠点

エレクトロニクス産業を支える電子部材 (半導体、透明電極・伝導体、誘電体等) を中心として、幅広い材料分野に有効な新しい材料科学を、基礎物理、計算科学、先端解析技術の協働により構築して、希少元素や環境負荷の高い元素を用いない代替材料の開発を目指す。

・構造材料研究拠点

材料の「強度」(変形への抵抗)と「延性」(破壊への抵抗)といった相反する性質を基礎科学の段階から解明することで、社会基盤を支え、安全・安心な社会に不可欠な構造材料において、現在大量に使用されている希少元素を抜本的に削減した代替材料の開発を目指す。

本プロジェクトでは、2015、2018年度にそれぞれ中間評価を行い、2021年度に事後評価を行うこととしている。2018年度の第2回目の中間評価においては、「事業開始時に設定した目標達成に向け、事業開始後約6年間の取組として概ね良好に進捗している」と評価されつつも、「出口戦略や性能目標も具体化されているが、その一方で、「磁石材料拠点」や「触媒・電池拠点」では、ターゲットを限定しすぎたことにより、元素戦略の展開に制約が出ていないか留意する必要がある」とされている。また「今後は成果の取り纏めの時期に入ることから、知財戦略の策定や、産業応用の可能性がある成果については積極的に特許化を進めること等の対応が必要である」とされ、残りの研究期間の間に基礎研究を早期に社会実装へ繋げる仕組みを構築し、国が主導する研究開発事業のモデルケースとなることを期待されている。

経済産業省からNEDOに移管した「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」(2014～2021年度)において、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っている。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が目的である。

これら一連の取り組みの顕著な成果として、2016年7月に大同特殊製鋼と本田技術工業から、重希土類元素を使わないネオジム磁石の開発に成功したことが共同発表され、2016年秋発売のハイブリッド自動車に既に採用されている。さらに、同年11月には東芝と東芝マテリアルから、重希土類フリー高鉄濃度サマリウムコバルト磁石の開発に成功し、サンプル出荷を開始したことが共同発表された。また、2018年2月には、トヨタ自動車がネオジム使用量を最大で50%削減可能なモーター用新型磁石「省ネオジム耐熱磁石」の開発に成功したことを発表した。

(5) 科学技術的課題

材料開発が原子レベルで行われるようになり、材料の分析手段も原子レベルで行われる必要が出てきており、放射光施設や高性能な電子顕微鏡を用いることで材料の静的な構造などは詳しく解析されるようになっている。しかし、例えば触媒材料開発に注目すると、実際の反応場で材料(触媒)がどのように振舞っているかの多くは未だ解明されておらず、例えば、鉄触媒研究においては鉄触媒活性種が不安定かつ常磁性状態が安定になりやすいため、溶液中での反応機構の解析手法、それに基づく合理的な触媒設計や触媒反応設計が確立していない。鉄触媒反応に限らず、様々なメカニズムの解明は材料開発にとって不可欠であり、新たな指針を与えるものである。そのためにはその場観察(オペランド)実験手法の確立が必要となる。中でも高分解能電子顕微鏡のオペランド観察は、反応場における原子の動きを実際に観測することが出来、非常に強力な手段と考えられる。日本では最先端の電子顕微鏡があまり普及していないが、欧州では国立研究所(Ernst Ruska-Centre)と電子顕微鏡メーカー(FEI)などが共同開

発を行い、実際の反応条件と同等の環境で観察を行える環境制御型電子顕微鏡の開発が盛んに行われており、材料開発を促進している。

（6）その他の課題

元素機能の発現機構は、物理、化学、金属などの既存の学問領域が単独で解明できるものではないため、異分野の力を結集することが重要である。異分野連携・融合によって様々な学問領域の視点から機能発現機構を解明することが材料挙動の原理解明に直結し、材料の革新につながる可能性が高いと考えられる。しかし、この異分野連携・融合が自然発生的に生まれることは一般的には期待できず、政策的な誘導が効果的である。JST-CRESTにおいては、各研究チームに理論グループの参画を必須とする等、トップダウンによって異分野連携を促進したが、そのCRESTも2017年度末で終了している。元素戦略プロジェクトやNEDOプロジェクトを補完、またはサポートする戦略の在り方が問われている。

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。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が含まれており、科学技術行政のみならず、環境、総務行政との連携も必要である。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る。

（7）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	◎	→	文部科学省、経済産業省、JST、NEDOなどにおける各プロジェクトの推進により基礎学理の構築および研究コミュニティが形成されている。CRESTやさきがけなどの大半のプロジェクトが終了し、今後研究コミュニティをどう維持していくかに課題がある。
	応用研究・開発	◎	↗	上記のプロジェクトで開発された成果をもとに新物質・新材料の実用化が進みつつある。特にジスプロシウムやネオジムなどの希土類元素の使用量を大幅に削減した永久磁石の開発に成功し、一部は既に市販車に導入されている。
米国	基礎研究	○	↗	Critical Materials Instituteの継続が決まり、さらにトランプ大統領による「Critical Mineral Executive Order」が発令されるなど、今後研究開発が活発化される可能性がある
	応用研究・開発	○	↗	上述の大統領令により、各省庁が希少鉱物の安定供給ルート確保に向けた対応策を討議中であり、今後産業応用へ向けた取組が活発化する可能性がある。
欧州	基礎研究	○	↗	循環型経済（Circular Economy）の観点で、欧州圏内の希少鉱物の埋蔵量、偏在性の把握に関する活動が活発化している。
	応用研究・開発	○	↗	希少鉱物の安定供給に対する意識が上がってきている。Horizon2020において産業化を目指した研究開発プロジェクトが多数存在し、今後産業化へ向けた取組が活発化する可能性がある。

中国	基礎研究	○	→	貴金属代替 (削減) 材料開発に関する論文が急増している。積極的に先端技術を導入して基礎研究が進められている。
	応用研究・開発	○	→	特許出願数は多いが、大半が大学からであり、産業界との連携状況は不明。資源保有国の強みを有し、ネオジム磁石は他国の追随を許さない生産量を誇っている。
韓国	基礎研究	△	→	米国の Materials Genome や日本の元素戦略にならった成果が出ているものの、独自性ある成果は見られない。
	応用研究・開発	×	→	特に目立った動きは見られない。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略イニシアティブ『元素戦略』」(CRDS-FY2007-SP-04) (2007年10月),
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2007/SP/CRDS-FY2007-SP-04.pdf> (2019年2月12日アクセス)
- 2) Eiichi Nakamura and Kentaro Sato, "Managing the Scarcity of Chemical Elements," *Nature Materials* 10, no. 3 (2011) : 158-161. doi:10.1038/nmat2969
- 3) 中山智弘『元素戦略：科学と産業に革命を起こす現代の錬金術』(ダイヤモンド社, 2013).
- 4) 日本化学会『未来を拓く元素戦略：持続可能な社会を実現する化学』(化学同人, 2013).
- 5) 『マテリアル革命 (ニュートンムック Newton 別冊)』(ニュートンプレス, 2015) 128-157.
- 6) U.S. Department of Energy, *Critical Materials Strategy* (December 2011),
http://energy.gov/sites/prod/files/DOE_CMS2011_FINAL_Full.pdf (2019年2月12日アクセス)
- 7) The White House, *Presidential Executive Order on a Federal Strategy to Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals* (December 20, 2017),
<https://www.whitehouse.gov/presidential-actions/presidential-executive-order-federal-strategy-ensure-secure-reliable-supplies-critical-minerals/> (2019年2月12日アクセス)
- 8) International Raw Materials Observatory, *INTRAW Project*,
<http://intraw.eu/> (2019年2月12日アクセス)
- 9) European Commission, *Report: critical raw materials and the circular economy* (January 16, 2018),
<https://ec.europa.eu/commission/publications/report-critical-raw-materials-and->

circular-economy_en (2019年2月12日アクセス)

- 10) 大同特殊鋼株式会社「重希土類完全フリー磁石をハイブリッド車用モーターに世界で初めて採用 ～今秋発表予定の新型「FREED (フリード)」に採用～」(2016年7月12日), https://www.daido.co.jp/about/release/2016/0712_freemag_hevmotor.html (2019年2月12日アクセス)
- 11) 本田技研工業株式会社「重希土類完全フリー磁石をハイブリッド車用モーターに世界で初めて採用 ～今秋発表予定の新型「FREED (フリード)」に採用～」(2016年7月12日), <http://www.honda.co.jp/news/2016/4160712.html> (2019年2月12日アクセス)
- 12) 株式会社東芝, 東芝マテリアル株式会社「世界初、重希土類フリーで高い磁力と優れた減磁耐性をあわせ持つモータ用磁石を開発」(2016年11月10日), https://www.toshiba.co.jp/about/press/2016_11/pr_j1001.htm (2019年2月12日アクセス)
- 13) 新エネルギー・産業技術総合開発機構, 高効率モーター用磁性材料技術研究組合「世界初、ジスプロシウム不使用の省ネオジム耐熱磁石を開発 ―耐熱性能を保持し、ネオジム使用量を最大50%削減―」(2018年2月20日), https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_100921.html (2019年2月12日アクセス)

2.4.4 データ駆動型物質・材料開発 (マテリアルズ・インフォマティクス)

(1) 研究開発領域の定義

計算科学による物性予測とそれを実証するハイスループット材料合成・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・設計の取組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、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の構築を目指す。

(2) キーワード

データ駆動型、Materials Genome Initiative、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、機械学習、深層学習、データベース

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

計算科学に基づいたデータ駆動型物質・材料開発 (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、当時は計算機で取り扱える原子数や精度が不十分であった。また、大量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った。しかし、近年の計算機能力の著しい向上と大量データを取り扱える環境が整ったことで、状況は劇的に変わりつつある。2011年に米国が「Materials Genome Initiative (MGI)」を発表したことをきっかけに、計算科学とデータ科学を融合させたデータ駆動型材料設計が注目され、世界中で精力的な研究がなされている。かつて、理論、実験に次ぐ「第3の科学」として計算科学が物質・材料研究における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ことと同様に、特に最近になって「第4の科学」としてデータ科学の重要性が指摘されるようになってきている。

第5期科学技術基本計画 (2016年1月22日閣議決定) においては、超スマート社会「Society 5.0」の実現に貢献する11のシステムの1つである「統合型材料開発システム」として表現され、「計算科学・データ科学を駆使した革新的な機能性材料、構造材料等の創製を進めるとともに、その開発期間の大幅な短縮を期待する」と記載されている。将来的には開発期間・コストの短縮・削減だけではなく、人工知能が新規な物質を予測・予言したり、材料化のレシピを示したり、新たな物理法則を発見することができるのではないかと期待されている。

[研究開発の動向]

・日本

我が国では、2013年8月にJST研究開発戦略センターが戦略プロポーザル「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) ~物質・材料研究を飛躍的に発展させるための新たなパラダイムシフト~」を発行し、データ駆動型物質・材料開発の重要性について政府に提言を行ったことをきっかけに、2015年にNIMSを中核機関とする「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (“Materials research by Information Integration” Initiative: MI²I) (PL:伊藤聡、2015~2019年度) が発足した。

それ以前の2014年に開始した内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program : SIP)「革新的構造材料」(PD: 岸輝雄、2014～2018年度)の中の研究開発項目の一つ「マテリアルズインテグレーション」(領域長: 小関敏彦)、2016年に開始した経済産業省/NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)」(PL: 村山宣光、2016～2021年度)の3つのプロジェクトが補完的に研究開発を実施している。また、内閣府における統合型材料開発システムとして、上記の3プロジェクト(MI²I、マテリアルズインテグレーション、超超プロジェクト)の間で、実施者を加えた3府省連絡会議等を適宜開催し、各事業の進捗や成果の共有を図ることとしている。2018年にはSIP(第2期)として、「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(PD: 岸輝雄、2018～2022年度)が開始されている。

JST 戦略的創造研究推進事業においては、2015年にさきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」(研究総括: 常行真司、2015～2020年度)、2016年よりCREST・さきがけ複合領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(研究総括: 雨宮慶幸、副研究総括: 北川源四郎、CREST: 2016～2023年度、さきがけ: 2016～2021年度)、2017年よりCREST研究領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」(研究総括: 細野秀雄、2017～2024年度)が相次いで発足し、マテリアルズ・インフォマティクスが材料開発の重要なツールとして定着化しつつある。

・米国

米国では、2012年より国家的な取り組みとしてMGIが開始され、材料開発に要する期間を2分の1に短縮するという目標を掲げ、「計算ツール」「実験ツール」「デジタル・データ」を材料イノベーション基盤として整備するべきであるとしている。この背景としては、計算機を使った物質・材料に関する研究活動についての数千件のヒアリングが行われた結果、大規模数値計算に対する期待よりも、大量データをどう活用するかという問題の解決に対する期待の方がはるかに大きかったということがある。具体的な取り組みとして、以下の3つに分類される。

まず1つ目としては、第一原理計算を主体として物質の構造や物性に関するデータを作り出し、所望の性能や機能を持つ物質・材料を見つけ出そうとする流れであり、実験と計算科学に基づくデータベースとデータ科学に基づく各種分析ツールを融合させて、物質の網羅的スクリーニングを行おうとするものである。例えば、マサチューセッツ工科大学(MIT)のグループ(現在はUC Berkeley)とローレンス・バークレー国立研究所による“Materials Project”では、無機結晶構造データベース(Inorganic Crystal Structure Database: ICSD)に収録された結晶構造データをもとに網羅的に第一原理計算を行った結果と国立標準技術研究所(National Institute of Standards and Technology: NIST)の熱力学データベースをリンクさせて、状態図や構造予測、化学反応予測などを収録したデータベースを公開しており、知りたい化合物名を入力す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。さらに、これらのデータを活用できる各種アプリケーションソフトウェアも公開しており、リチウムイオン電池の正極材料の探索などに用いられている。同様のデータベースはデューク大学のCenter for Materials Genomicsが主導するコンソーシアム“afloplib.org”からも公開されており、結晶構造、電子特性、熱電特性な

どを見ることができる。また、Northwestern 大学でも、後述する CHiMaD センターの活動の一つとして、OQMD と呼ばれる同様のデータベースが構築され、設計者の一人が Citrine Informatics 社を立ち上げた経緯がある。米国ではこれらのグループが、第一原理計算から得られたデータの高度な共有と利用を牽引している。触媒分野では、スタンフォード大学と SLAC 国立加速器研究所が共同で The SUNCAT Center を設立し、キャタリスト・インフォマティクスという形で、固体表面の触媒特性を調節する因子を同定し、新しい触媒を開発する試みが取り組まれている。また、米国立スーパーコンピュータ応用研究所 (National Center for Supercomputing Applications : NCSA) とアルゴンヌ国立研究所が連携して Materials Data Facility を運営している。

2 つ目の流れとしては、コンビナトリアル合成・計測であり、実験家を中心に、ハイスループットに物質を合成し、物性を計測し、データベース化するとともに、視覚化ツール、分析ツールを用いて最適物質、構造を予測するというサイクルを構築するものである。放射光を利用したコンビナトリアル X 線回折実験の手法なども開発されている。こうしたコミュニティの活動は、エネルギー省傘下の国立研究所ネットワークのもとで、High-Throughput Experimental Materials Collaboratoly (HTE-MC) のプログラム推進に結実している。

3 つ目としては、統合計算材料工学 (Integrated Computational Materials Engineering : ICME) の流れであり、構造材料を中心に、結晶構造 (第一原理計算) から材料組織までのマルチスケールをプロセス、材料組織との関係も含め、データから相関を統合していくものである。2014 年、NIST が、ノースウェスタン大学、シカゴ大学を中心とした Center for Hierarchical Materials Design (CHiMaD) を立ち上げた。熱力学・状態図計算など、個別のニーズに合わせて速度論のシミュレーションを行い材料特性の予測、材料開発の支援を実施している。同様の ICME 拠点として、ミシガン大学が中心となって材料のマルチスケール・マルチフィジックスの課題を解くための様々なツールを開発している Predictive Integrated Structural Materials Science (PRISMS) が挙げられる。

MGI が掲げるイノベーション基盤を整備する上で、鍵となるのが汎用データプラットフォームである。例えば、上述したミシガン大学 PRISMS では、Materials Commons というデータプラットフォームを構築して、様々な実験・計算の出力を統合的に管理する環境が整えられている。同じく、空軍研究所では Integrated Collaborative Environment (ICE) と呼ばれる汎用データプラットフォームが構築されている。NIST においても、Materials Data Curation System (MDCS) と呼ばれるデータプラットフォーム基盤ソフトウェアが開発され、データレジストリ、スキーマ DB、CHiMaD の高分子研究の共通データプラットフォームなどに応用されている他、上述した HTE-MC の分散型のデータ管理基盤としても用いられている。さらに、米国は後述する上海大学の Materials Genome Institute とも連携しており、データ管理基盤として MDCS の活用が進んでいる。

また、米国における汎用データプラットフォームに関連したベンチャー企業としては Citrine Informatics 社、Materials Research LLC が注目されている。さらに、Globus 社における材料科学分野向けのデータレポジトリ Materials Data Facilities も存在感を増している。

・欧州

欧州においては、Horizon2020 の支援の下、European Materials Modeling Council (EMMC)

の中に組織されている European Multiscale Modeling Cluster において、LED、太陽光発電、発泡ポリウレタン、二酸化炭素回収・貯留、マイクロ流体デバイスをターゲットにした計 5 つのプロジェクトが推進されており、全てのプロジェクトで固有のデータマネジメント（ワークフロー）を自動化するための汎用データプラットフォームが構築された。さらに、これらのプロジェクト間の連携およびシミュレーションソフト間の相互利用性（interoperability）の確保を目的に Integrated Computational Materials Engineering Expert Group (ICMEg) というネットワークングのプロジェクトが推進されていた。これらのネットワークングプロジェクトも含め、材料分野におけるデータ管理のプロジェクトが EMMC の活動に統合され、2018 年度秋にポータルサイトも刷新された。例えば、研究プロジェクトとして、インフォマティクスも活用しながらナノ構造体のデザインを行う FORCE というプロジェクトが 2018 年度にスタートしている。EMMC の活動は、欧州標準委員会（CEN）における材料試験データの標準策定の取り組みとも連動しており、2018 年秋からは、ナノインデンテーションの試験データおよびデータ形式の標準化について議論が進められている。この他、スイス科学財団（Swiss National Science Foundation）が推進している MARVEL プロジェクトのデータプラットフォームとして運用されている AiiDA、マックスプランク協会フリッツ・ハーバー研究所が中心になって進める NoMaD Repository の活動が顕在化している。

・中国

中国においては、2014 年に上海市と上海大学が共同で進める Shanghai Materials Genome Institute を設立し、最近、急速にデータ科学を活用した材料開発研究を進めている。また、2016 年に中国科学院物理研究所と北京科技大学が共同で北京マテリアルズゲノム工学イノベーション連盟を設立している。さらに同年、上海交通大学においてもマテリアルズゲノム連合研究センターを設立するなど、国を挙げてマテリアルゲノム研究に力を入れ始めていると同時に欧米の研究者との連携を強くしている。2016 年 3 月に発表された科学技術イノベーション第 13 次五ヵ年計画においても、中国産業の国際競争力向上のための重点技術の一つ「新素材技術」の中に「マテリアルズゲノム工学（目標：新材料の開発期間・コストの半減）」と明記されている。さらに、国家重点研究開発計画の一つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」（2016～2018 年の 3 年間に計 44 課題、総額約 8 億元）が推進されている。

・韓国

2015 年から 10 年計画で Creative Materials Discovery Project が開始している。また、最近、韓国科学技術研究所（Korea Institute of Science and Technology : KIST）において計算科学を中心とした Materials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS) が設置された。

以上のように、米国 MGI の開始以降、データ駆動型物質・材料開発は世界的な潮流となり、過去 10 年で第一原理計算や分子動力学などの計算科学が研究開発に浸透したことと同様に、データ科学を用いた新たな手法が研究開発に浸透しつつある。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

米国が2016年8月に公表したMGIの総括文書によると、DOEやDoD、NSF、NIST、NASA等の機関に5年間で総額500百万ドルを超える国費を投入した結果、得られた主な成果として

- ・材料開発におけるパラダイムシフトの醸成
- ・NSFによる異分野横断型基盤的ファンドの充実
- ・次世代人材の育成
- ・データベースの構築
- ・コンソーシアムの設立

が挙げられ、ホワイトハウスで「米国製造業に革新をもたらす可能性があるため、政権交代後も引き続き支援すべき」とされている。しかしながら、トランプ政権下ではMGIは優先事項には含まれておらず、目下のところ、CNGMD、CHiMaD、PRISMS、SUNCATの4つのセンターを中心に各省の予算の中で自主的に研究開発が継続されている。このような状況に対して、NISTは調査会社RTIに依頼し、「Economic Analysis of National Needs for Technology Infrastructure to Support the Materials Genome Initiative (MGIを支持する技術基盤に対する国家的ニーズの経済分析)」というレポートを2018年4月に発行している。ここでは、米国材料業界の100名を超える専門家へのアンケート結果に基づいて、下記の6つの重要ニーズの特定、およびそれらに対する経済的インパクトの見積りを行っている。

● 6つの重要ニーズ

- ・実験、計算、ソフトウェアコードなどの高品質データへの容易なアクセス
- ・材料データ共有などの協働ネットワークの構築
- ・計算科学的アプローチを含む材料設計手法の開発
- ・試行錯誤から脱却し、高い費用対効果を産み出す生産とスケールアップ手法の開発
- ・材料欠陥制御や製品ばらつき予測を可能とする品質保証制御とコンポーネント基準認証方法の確立
- ・モデル検証と不確定性の定量化

● 上記重要ニーズを満足することで得られる経済的インパクト

- ・年間経済利益 1230 億～ 2700 億ドル
- ・新材料開発に伴うリスクが約 50%削減
- ・新材料開発期間が約 35%短縮

[注目すべき国内外のプロジェクト]

[日本]

- ・情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)

MI²IはJST「国立研究開発法人を中核としたイノベーションハブの構築支援事業」の2015年度の採択課題であり、NIMSを中核拠点として、最大5年度、4.5億円/年の規模で実施されている。ここでは、データ科学と物質・材料科学の融合によって新物質・材料科学研究を加速する取り組みの場として、Matnaviを中心とするデータベースの開発・整備、物質・材料から情報・数理科学にわたる産学官の協働作業の体制の構築、より広範な企業の参画を促進し、

オープンイノベーションに繋がるハブ拠点化を目指している。具体的課題としては、画期的な蓄電材料、磁性材料、伝熱制御材料を開発し社会実装へ繋げると同時に、新しい物質・材料科学手法の開発・蓄積を進め情報統合型物質・材料開発手法のパッケージ化・システム化を目的としている。2016年4月からMI²Iコンソーシアムが設立され、法人会員、個人会員の受付を随時行っている(2016年7月末時点で参加企業31社)。コンソーシアム会員には、各会員が関心を持つテーマに対して情報統合型の研究手法を確立する取り組みを行う一方で、国家的課題である情報統合型物質・材料開発の研究手法を早期に実現するため、オープンイノベーションを体現する場の創成に積極的に関わることが求められている。

なお、NIMSには2017年4月に統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)が発足し、MI²Iを推進する情報統合型物質・材料研究拠点とSIP「革新的構造材料」マテリアルズインテグレーションを推進するSIP-MIラボに加えて、新たに材料データプラットフォームセンターが設置された。材料データプラットフォームセンターが構築と運用を担う物質・材料データプラットフォームは、MI²Iと密接に連携し、またNIMSが形成を目指している研究基盤MRB(マテリアルズ・リサーチバンク)の柱のひとつになっている。

データベース整備に関しては、世界最大級の物質・材料データベース「MatNavi」を有するものの、データ解析を前提として作られていなかったため、データ駆動型物質・材料開発に適したデータベースに再構築する必要があり、MI²Iの中にデータプラットフォーム委員会を設けて、今後のグランドデザインについて検討を始めている。

・SIPマテリアルズインテグレーション

マテリアルズインテグレーションとは、材料の組織や特性、構造体としての性能、寿命を決定する時間依存の性能などに関して、理論、計算、実験データ、経験則を融合(Integration)して予測する手法である。組成などの材料条件および製造や利用加工などの材料プロセス条件を元にして材料内のマクロ/ミクロな組織や残留応力、負荷応力や温度などの使用条件や使用環境における材料・部材・構造体の信頼性や寿命に関わる時間依存の使用性能(疲労、クリープ、腐食、脆化による性能劣化や破壊など)を予測することによって、材料開発を加速することを目的としている。材料の組織形成、特性の発現、性能劣化、破壊の素過程に関する理論や計算、組織や性能に関する様々な蓄積された実験データ、それらの記述や予測の理論や経験則などをモジュール化し、それらを柔軟に組み合わせて連結することで組織や性能を一貫して予測するシステムの構築を目指している。このシステムは、Society 5.0で提示された統合型材料開発システムを具現化したものであり、個々のモジュールの高度化とともに、実験データとの融合により、理論やシミュレーションに必要な物性値やパラメータの予測やシミュレーションとの同化を可能にし、さらに、蓄積されたデータを用いた機械学習の活用もあわせて、組織や性能の予測をより現実的にできる。またシステムとしては、時間・空間スケールやデータ構造の異なる様々なモジュールを自由に接続可能にすることによって、材料組成やプロセスから性能までの一貫した性能予測のフロー(ワークフロー)を設計し、実際に計算させることが可能である。ワークフローの蓄積や学習によって、目標性能から最適材料を逆問題解析的に示唆できるようになることが期待されており、2018年秋からスタートした第2期SIPの中で「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」プロジェクトのターゲットにも設定されている。

・超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

MI²I、マテリアルズインテグレーションでは計算や実験などのビッグデータが存在するとい

う前提を持つ。そしてデータベースの構築と活用に重きを置き、人間の洞察の助けを借りて、機械学習等を用いるデータ解析を行う。これにより、機能と強く相関する因子（記述子）を見つけ出し、それを手がかりにして物質予測を行うというスキームが採用されている。一方で、産業分野で用いられる複雑で不均質な機能材料に関しては、マイクロ構造や不均質な組成分布が非常に重要な影響を及ぼしていることから、情報のデータベース化は困難である。また、産業分野で用いられる材料に対しては相反する機能の最大化が要求されるのが常であり、こういった相反問題に対して記述子を人的に洞察することは困難である。こういった産業用の機能性有機材料を想定し、深層学習等の人工知能（AI）技術を積極的に利用する試みが超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトで実施されている。すなわち、深層学習においては、基本アルゴリズムによって、機械学習において必要である記述子が自動的に決められるという点が大きな違いである。しかしながら、機能性有機材料分野においては材料設計 AI（深層学習）の“教育”用の学習用データに適した大量の実験結果は存在しないため、計算シミュレーションによりこれを補う必要がある。計算シミュレーションによる材料機能の順方向（組成・構造→機能）の予測性能を向上すると同時に複雑構造材料の数理モデリング技法を構築する。これにより質の高い学習用データを AI に供給する一連のスキームを構築する。このスキームで、計算シミュレーションにより学習用ビッグデータを生み出し、それを活用して AI による材料の逆予測（機能→組成・構造）技術を確立することが期待されている。そのような方向性で立案されている研究プロジェクトは世界においても類を見ず現時点では本取り組みが唯一の試みであると言える。

・さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」研究領域

本研究領域は、2015 年度に発足した。目的は二つである。①実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合によって、それぞれの手法の強みを活かし、得られた知見を相互に活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの確立、②それを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出である。

・CREST / さきがけ「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」研究領域

2016 年度に発足した本研究領域では、多様な計測・解析技術に最先端の情報科学・統計数理の研究の融合によって、これまで捉えられなかった物理量・物質状態やその変化あるいは潜在要因等の検出、これまでは困難であった実動作下のリアルタイム計測等を実現するインテリジェント計測・解析手法の開発とその応用を目指している。

・CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

本研究領域は 2017 年度に発足し、高い社会ニーズがあるものの未だ達成されていない材料や機能をターゲットにし、物質・材料開発の基本である実験科学と、理論・計算・データ科学を融合させることで革新的な材料開発手法を提示し、わが国の産業競争力の向上に貢献することを目的としている。

[米国]

・Materials Genome Initiative (MGI)

2014 年、NSTC の MGI 分科会より戦略プランが公表され、「計算、データ、実験の各手法を連携させた統合アプローチを主流にするための研究者意識の醸成」「実験・計算・理論の各

研究者の統合」「データへの容易なアクセス環境の整備」「世界水準の人材育成」とし、計算科学・データベース・機械学習・深層学習を用いた材料開発の高効率化が進められている。ここで特に重要な点は機械学習や深層学習に使う実データの蓄積であり、データ蓄積のための Web サイトの準備が進められており、今後は全米からボランティアによる材料合成とその結果の投稿が進むと期待されている。それと並行して、合成条件や組成変化、計測結果を系統的に調べるコンビナトリアル材料合成が再注目され、国立標準研究所 (National Institute of Standards and Technology : NIST) においてコンビナトリアル材料合成を含む高速材料合成と評価に関する研究が進められている。

MGI で特徴的な点は、系統的なキュレーションが材料開発に適用されつつあることである。これによって盲目的に材料データを収集するのではなく、次にどのようなデータを集めればいいのかを判断することとなり、その過程で機械学習において重要な記述子の蓄積も可能となる。

本イニシアティブ自体は 2016 年に終了したが、各省の予算で 4 つのセンター (Center for Next Generation of Materials Design : CNGMD、Center for Hierarchical Materials Design : CHiMaD、Center for Predictive Integrated Structural Materials Science : PRISMS、SUNCAT Center for Interface Science and Catalysis) を中心に研究開発が継続して推進されている。

・Materials Project

2011 年、当時マサチューセッツ工科大学の Ceder (現・カリフォルニア大学バークレー校) らはエネルギー省 (Department of Energy : DOE) の支援を受け、ローレンス・バークレー国立研究所と共同で革新的なオンラインツール「Materials Project」を立ち上げた。2018 年 12 月時点で「Inorganic Compounds」「Band Structures」「Molecules」「Nanoporous Materials」「Elastic Tensors」「Piezoelectric Tensors」「Intercalation Electrodes」「Conversion Electrodes」の 8 つの項目のデータ数は総計約 73 万件である。

・Integrated Computational Materials Engineering (ICME)

ICME のコンセプトは、材料が実際に適用されるまでの期間短縮のために、データを相互利用可能にし、コンピュータ上でシミュレーション・実験・データベース等の様々なツールを組み合わせ、適用する部材に応じた材料の最適化まで行うものであり、2000 ~ 2003 年の DARPA プロジェクト「Advanced Insertion of Materials」などの活動の延長線上にある。ICME については 2008 年に米国科学アカデミーにおいて議論がなされ、ミシガン大学、アイオワ州立大学、マサチューセッツ工科大学などの大学関係者や DOE のサンディア国立研究所、空軍研究所などの公的研究所の関係者のみならず、Lockheed Martin 社、Pratt & Whitney 社、GE Aviation 社、Ford 社、Microsoft 社などの産業界関係者を委員として報告書が公表されている。2011 年の MGI 公表後、ICME の実装に向けた議論が継続的になされ、2013 年には自動車・船舶・航空機産業への実装について、2015 年にはマルチスケールモデリングへの実装について、さらに 2016 年には、材料分野におけるデータプラットフォームの実装¹について、The Mineral, Metals and Materials Society (TMS) から報告書が発行されている。また、TMS においては ICME を主題とする国際会議を 2011 年から隔年開催している。

¹ TMS ウェブサイト : Building a Materials Data Infrastructure:
https://www.tms.org/Publications/Studies/Materials_Data_Infrastructure/Materials_Data_Infrastructure.aspx?hkey=d228f86c-e269-49a2-a638-395285b760e4

[欧州]

• European Multiscale Modeling Council (EMMC)

EMMC は、欧州における材料モデリングの基盤を支え、学術的なイノベーションを産業応用へ橋渡しすることを目的に設立された。具体的な役割としては下記の5つが挙げられている。

- 材料モデリングに関連するステークホルダー間のコラボレーションの強化
- 強固で一貫性のある統合材料モデリングの促進
- 学術的なイノベーションの産業応用への迅速移行の促進
- 産業界、特に中小企業における材料モデリングに対する意識向上
- 材料モデリングの産業応用への障壁の特定およびそれを克服する戦略ロードマップの策定
具体的には下記6つのワーキンググループを推進している。

WG	活動内容
モデリングと検証	モデルギャップの特定と産業応用への妥当性の検証
相互運用性と統合	異なるモデル間の相互運用性、オントロジーの開発
レポジトリとマーケットプレイス	既存データベースの共有アクセスポイントとしての EMMC マーケットプレイスハブの構築
翻訳と企業向けトレーニング	産と学のギャップ解消、企業ニーズの把握
専門ソフトウェアの導入	材料モデリングソフトウェアの産業応用と欧州の技術革新の促進
産業統合と経済的インパクト	材料モデリングの産業応用時の障壁、コスト、経済的インパクトの明確化

[中国]

• 北京マテリアルズ・ゲノム・エンジニアリング・イノベーション連盟

2016年1月、中国科学院物理研究所において設立式典および第1回全体会員大会が開催された。本同盟は、中国科学院物理研究所と北京科技大学によって共同創設された。創設の趣旨は関連分野において優位性を有する大学、科学研究所（所）および企業など計36の機関によって構成されており、マテリアルズ・ゲノムに関する研究を行うことで北京および中国全体の新材料の研究開発プロセスの加速、開発周期およびコストの半減、新材料の産業体系の構築・完備、製造業の復興、イノベーション駆動型発展戦略の実施を支援することを目的としている。

• 国家重点研究開発計画「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」

2016年から中国国内の研究開発の強化を目的とした国家重点研究開発計画が開始され、その一つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」を指定。2016年に14課題、2017年に19件、2018年に11課題を採択し、総額約8億元が投資されている。

(5) 科学技術的課題

データ駆動型物質・材料開発を進める上で主要な科学技術的課題として物質から材料に至るまでの特性や性能のデータに関する課題がある。

物質から材料へ至るにはナノ、マイクロ、マクロの各スケールで多くの構造や組織の因子が関係する。例えば、構造材料においては、ナノスケールでは転位を含む欠陥の密度や分布、溶質原子の配列や分布、粒界や界面の構造、ミクロスケールでは、結晶粒のサイズや形状、応力やひずみの分布、マクロスケールでは欠陥や溶質偏析、残留応力など極めて多様な因子が相互に

関係している。それらの因子を如何にデータベース化するか、またこれらの因子は製造や加工のプロセス条件によって変化しうるものであるため、そのようなメタデータをどのように付与するのか、さらに各因子の空間分布や時間変化などの情報をどのように付与するか等、課題は山積している。さらに、問題とする材料特性ごとに、その特性を司るクリティカルな因子はそれぞれ異なるのが普通であり、どの程度まで網羅的なデータベースを構築すればよいか、理想的なデータベースが構築できたとしてもデータから元の物質・材料が再現可能であるのか等についても検討が必要である。

（6）その他の課題

材料は全ての産業の基盤であり、そのデータは広く共有されるべきであるが、現時点で材料データは我が国では MatNavi や各種便覧で閲覧できるに留まり、その数が不足している状況である。特に材料合成時のプロセスデータは皆無に等しく、企業が持っているデータのシェアが必要となる。しかしながら、企業においては一つの材料を開発するのに数十年もの試行錯誤を経ることもあり、データを囲いこむことで競争力を保持している例が多々ある。そもそも材料分野は競争的性格の強い分野であるため、他者とのデータシェアリングが歓迎されない文化が醸成されている。そのことによって、データの相互利用を礎とするデータ駆動型物質・材料開発を推進する上で、材料分野における競争的性格が最も大きな障壁になっていると言えるため、オープン&クローズド戦略をどう構築するかが重要である。

また、データ提供のインセンティブを促進することも重要であり、例えばデータを提供することによって研究者の評価につながる新たな研究評価システムを構築する必要がある。同時に、この新たな融合分野を世界的に牽引する産学それぞれにおける人材育成が急務である。

（7）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	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ NIMS の MI²I、SIP のマテリアルズインテグレーション、JST の さきがけなど、様々な取り組みがなされている。 ・ データプラットフォーム構築へ向けた取り組みが始まっている。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ SIP に産業界の関与があるものの、応用展開はこれから。 ・ 経産省／NEDO の超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトで研究開発が開始されている。
米国	基礎研究	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ MGI は終了したが、広範囲な基礎研究支援体制が充実している。また、NIST では 24 の部門が Materials Genome Initiative に関係し、計算科学、材料合成、評価などに機械学習を併用する試みが進んでいる。 ・ 産官学それぞれで ICME ツールの基盤研究が行われおり、汎用データプラットフォームのプロトタイプ開発および利活用が始まっている。 ・ 材料分野のデータ関連活動における国際連携を取りまとめている。
	応用研究・開発	○	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ MGI で構築された基盤への期待は高く、実際に応用例も出始めている。 ・ Citrine Informatics、Globus 社の Materials Data Facility、Materials Resource LLC などにおける汎用データプラットフォームの運営が始まっている。

欧州	基礎研究	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ドイツをはじめとして各国で ICME の基礎研究、ツール開発、連結の動きがある。 ・人工知能、数学、計算シミュレーションのどの分野でも顕著な活動・成果が見えておりポテンシャルは高い。 ・ICMEg の活動実績があり、施策継続の決定がなされている。 ・NoMAD や Marvel などの汎用データプラットフォームが顕在化している。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒開発のための装置ベンダーが複数あり、それらがドイツのインダストリー 4.0 に対応した高効率化のためのシステム開発を進めている。 ・英国 GRANTA 社の活動が顕著である。 ・スウェーデン Thermo-Calc 社、オーストリアの工科大学発の材料特性解析ソフトウェア MatCalc、ドイツ発の多元系 Phase Field ソルバー MICRESS、ダッソー社の CAE ソリューションなどソフトウェアベンダーを中心とした Interoperability の確立に向けた連携が始まっている。
中国	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・北京や上海を中心に中国版 MGI が進展している。 ・特に上海では計算科学や機械学習、さらにデータリポジトリのシステムを構築するなど短期間で目覚ましい進歩を見せている。 ・国家重点研究計画などの多額の投資がなされ、人材育成も進んでいる。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・企業を巻き込んだ DB の構築が始まっており、着実に応用研究が展開され始めている。
韓国	基礎研究	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・2015 年から Creative Materials Discovery Project が始まり、KIST には MIDAS が設置され、計算科学とデータ科学を使った材料研究へ移行しつつある。
	応用研究・開発	×	→	<ul style="list-style-type: none"> ・特にこれといった動きは見られない。

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「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)」(CRDS-FY2013-SP-01) (2013 年 8 月) .
- 2) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「ワークショップ報告書 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)」(CRDS-FY2013-WR-03) (2013 年 8 月) .
- 3) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野 (2015 年)」(CRDS-FY2015-FR-05) (2015 年 4 月) .
- 4) 物質・材料研究機構「NIMS NOW」2016・Vol.16 No.2 <2-3 月号>.
- 5) Materials Genome Initiative, <https://www.mgi.gov/> (2019 年 2 月 12 日アクセス)
- 6) 小関敏彦「材料データとマテリアルズインテグレーション」『情報管理』vol. 59, no. 3 (2016) : 165.
- 7) 戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 革新的構造材料, 領域「マテリアルズインテグレーション (MI)」,

- <http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d1.html> (2019年2月12日アクセス)
- 8) Center for Hierarchical Materials Design (CHiMaD),
<http://chimad.northwestern.edu/> (2019年2月12日アクセス)
- 9) PRISMS, <http://www.prisms-center.org/#/home> (2019年2月12日アクセス)
- 10) U.S. National Institute of Standard and Technology / Materials Data Curation System,
<https://github.com/usnistgov/MDCS> (2019年2月12日アクセス)
- 11) Integrated Computational Materials Engineering Group (ICMEg),
<http://www.icmeg.euproject.info/> (2019年2月12日アクセス)
- 12) Materials Project, <https://materialsproject.org/> (2019年2月12日アクセス)
- 13) The European Materials Modelling Council,
<https://emmc.info/> (2019年2月12日アクセス)
- 14) Automatic - FLOW for Materials Discovery (AFLOW),
<http://www.aflowlib.org/> (2019年2月12日アクセス)
- 15) NCCR MARVEL, <http://nccr-marvel.ch/> (2018年2月12日アクセス)
- 16) 中華人民共和国科学技術部,
http://www.most.gov.cn/kjbgz/201602/t20160205_124052.htm (2019年2月12日アクセス)
上海大学材料基因组工程研究院, <http://www.mgi.shu.edu.cn> (2019年2月12日アクセス)

2.4.5 フォノンエンジニアリング

(1) 研究開発領域の定義

ナノスケールの微小空間、微小時間で熱の振る舞いを理解し制御することにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現する。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノン/電子/フォトン/スピンなどの量子系の統一的理解、高度な熱伝導制御による高性能熱電変換素子などの革新的な材料・デバイス技術、などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

フォノン、電子、フォトン、スピン、フォノン輸送、フォノンクス、フォノンニック結晶、ナノスケール熱伝導、第一原理計算、分子動力学計算、モンテカルロ・シミュレーション、ナノスケール熱計測、時間分解サーモリフレクタンス法、TDTR、ナノ構造制御、熱電変換、スピンゼーベック効果、スピнкаロリトロニクス、界面熱抵抗、Thermal Interface Material、TIM、エネルギーハーベスティング、廃熱利用、半導体集積回路、ハードディスク、センサー

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

Society 5.0の目指すビッグデータやAI、IoTの高度な活用に向けては、今後も情報処理やデータストレージの大幅な高性能化・省電力化に向けた技術革新が不可欠である。しかし、トランジスタの微細化・高性能化に伴う集積回路での局所的な発熱・放熱の問題や、ハードディスクにおける微小磁区の熱揺らぎの問題が顕在化している。一方、発電所、工場などから排出される未利用の熱（廃熱）からのエネルギーの回収や、IoTのエッジ側のセンサーノードで重要となるエネルギーハーベスティングに向けては、高性能な熱電変換素子の実用化が期待されている。しかし、この熱電変換素子の性能向上のためには、高電気伝導度で低熱伝導度の半導体材料が必要であり、この相反するような課題をマイクロなレベルでの熱制御により克服する必要がある。このような課題に対し、ナノスケールでの熱発生、熱伝導（フォノン輸送）、フォノンと他の物理量（電子、フォトン、スピンなど）との相互作用などナノスケールにおける熱の振る舞いを実際に観察してナノサイエンスの立場で理解を深め、新たな制御手法の開発を進めていくことが重要である。さらに、ナノスケールでの熱の振る舞いを積極的に活用した新たな動作原理の機能性材料や新デバイスの開発が望まれる。

[研究開発の動向]

フォノンエンジニアリングに関する研究開発は、1990年代中頃から熱電変換材料の分野で、アメリカを中心に欧州、中国など世界中で活発に行われており、日本においても多くのグループが取り組んでいる。熱電変換材料においては、高性能化のためには電子（または正孔）の伝導度を大きくし、熱伝導（フォノン輸送）は小さくする必要があり、フォノンの選択散乱という高度な熱制御技術が精力的に開拓されてきた。例えば、電子とフォノンの平均自由行程の差を利用して、フォノンの長さスケールに対応する種々のナノ・マイクロ構造を材料に作り込むことでフォノンを選択的に散乱させ、電気伝導率をそれほど損なわずに熱伝導率を低減させることで、熱電特性の高性能化が得られてきた。また、カゴ状結晶構造を有するスキュッテルダイト

やクラスレートにおいて、内包する原子のラトリング現象により、音響フォノンが効果的に散乱され、2000年代から新規な高性能熱電材料が見出されてきた。2000年代中盤以降になると、米欧中韓で大型予算が投入され、熱電変換の研究が活発化した。

フォノンに対する人工的な周期構造であるフォノンニック結晶を用いたフォノン輸送制御については、波動的な性質を利用する手法と弾道性を利用する2つの手法があるが、主に前者は比較的狭い周波数スペクトルをもつ音響波や弾性波を対象にバンドエンジニアリングで制御し、後者は熱フォノンのような広いスペクトルをもち周波数が高いフォノンを対象にしてきた。歴史的には比較的大きな寸法でフォノンニック結晶が作製可能な前者に関する研究が多いが、ナノ構造形成技術の進展に伴い後者の研究が増加している。欧米中にシミュレーションを中心とした研究グループが多く存在し、国内では北海道大学や東京大学などで研究が進められている。フォノンニック結晶のバンドエンジニアリングでは、トップダウンプロセスで作製可能な系で低温での熱伝導制御が実証され、超格子構造では室温でも実証されている。弾道性を利用する場合は、周期をフォノンの平均自由行程よりも短くし、フォノン散乱レートを上げることで熱伝導を低下させるため、必ずしも周期性は重要ではなく、自己組織化材料などを用いた安価な作製方法の開発が行われており、熱電変換材料の高性能化などへの応用が進められている。

スピンを利用した熱電変換技術は2008年のスピンゼーベック効果の発見から、日本・米国・欧州を中心に、多くの物性物理・磁性分野の研究者がスピントロニクスと熱効果の融合研究分野「スピнкаロリトロニクス」の研究を開始し、国内外の大規模な物性物理・磁性分野の学会で関連のセッションが設けられるなど盛んになってきている。特に、ドイツで2010年に大型プロジェクト「SpinCaT」が立ち上がったことを皮切りに、スピнкаロリトロニクス分野の研究者人口が爆発的に増加し、ここ10年間の基礎研究によりスピン流-熱流変換現象に関する物理的理解は大きく進展した。近年では、微細加工技術や光学・高周波測定技術などを駆使して、熱-スピン変換現象のより微視的な原理解明が進められている。スピンゼーベック効果の熱電変換応用を目指した材料探索・開発も進められてきており、スピン流-熱流変換はあらゆる磁性材料中に存在し得る普遍的な現象であることが示された。トポロジカル物質やホイスラー合金をスピнкаロリトロニクス研究に利用する取り組みも始まっており、典型的な強磁性金属材料よりも一桁以上大きな異常ネルンスト効果が見出されるなど、顕著な成果が得られ始めている。さらに、スピン駆動熱電素子の熱流センサー応用を目指して、素子の大面積化・フレキシブル化などが日本の企業で進められている。

ナノスケールの熱計測では、薄膜、多層膜、膜界面での熱輸送特性の計測や、局所的な熱物性測定が重要であり、それぞれに対して時間領域サーモフレクタンス法 (Time-Domain Thermoreflectance; TDTR) や走査型熱顕微鏡 (SThM) などが開発されているが、ここでは広く使われている TDTR の動向を示す。TDTR の特色は、薄膜などの2次元材料に対する厚さ方向の熱移動計測をピコ秒~ナノ秒レベルの時間分解能で行えることである。ピコ秒パルスレーザをサーモフレクタンス測定に初めて用いたのは1980年代における Eesley と Paddock であり、その後、主に米国の様々な研究者により初期の研究が進められた。国内においては、産総研が1990年代後半から TDTR 法の研究開発を進め、2000年代に ISO17025 準拠の国家標準として計測技術を立ち上げるとともに、JIS 標準化や認証標準物質の配布によって国内における TDTR 計測の信頼性が担保されている。また、2008年に TDTR 装置を販売するベンチャーが起業し、その装置を利用した研究発表がなされるようになってきている。一方で、サーモ

リフレクタンس信号の解析技術の研究は続いており、2004年にIllinois大のCahillが周波数解析にもとづくTDTR法の解法を示し、2014年にMITのGang ChengグループがTDTR測定における時間依存解析と周波数依存解析が本質的に等価であることを示した。また、国内では産総研グループが2014年にTDTR信号をパルス繰り返しと変調の方法に沿って再構築する手法を開発し、これらの解析技術の進展によってもTDTR計測の精度が格段に向上した。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

国内では、学会活動において新しい展開があり、2016年に応用物理学会の学術講演会において合同セッション「フォノンエンジニアリング」が設立されるとともに、2017年には同学会にフォノンエンジニアリング研究グループが発足し、約250名規模で活発な活動が行われている。また、2017年度に文部科学省の戦略目標に「ナノスケール熱動態の理解と制御技術による革新的材料・デバイス技術の開発」が設定され、CREST・さきがけのプログラムが開始されている。このような研究者の交流の場とそれをサポートするプログラムが用意されたことで、各情報共有、共同研究の促進、長期的視点で人材育成を行う体制が整い、この研究領域の研究力の強化に繋がることが期待される。

熱制御技術に関しては、近年、フォノンの弾道性を利用して半導体中で熱流に指向性を与え集熱できることが示されるなど、新しい技術が開発されている。フォノン結晶に関しては、フォノンの波動的性質に基づいて結晶の短距離秩序を変化させることで、熱伝導が制御できることが示された。二次元層状物質を用いた超格子において極めて低い熱伝導率が実現できるとの理論的研究が出始めており、今後、原子スケールの周期構造により、室温でも機能する熱フォノンクスに基づいた断熱材料の開発なども期待される。トポロジカルフォノンクスを用いたフォノン輸送制御も論文が出始めており、新展開が期待される。

熱電材料関係では、フォノンの選択散乱に関するスペクトル学的な理解がかなり深まってきた。欠陥の種類（点欠陥、ライン欠陥、粒界、ナノ析出物など）に対するフォノンの緩和率の周波数依存性が明らかになり、フォノンエンジニアリングが高度なレベルで臨めるようになった。また、多孔材料に関して、ナノ多孔のサイズと分布により効果的にフォノンを選択散乱して、熱電性能を大幅に向上できることが示された。一方、電気伝導率とゼーベック係数がトレードオフの関係にあるために、パワーファクターの増強は一般的には難しいが、有効質量が軽いバンドの縮退（バンドの収束：band convergence）や磁気相互作用の活用など、いくつかの有効な原理が示されている。複合材料における増強も数多く報告され、変調ドーピングやenergy filteringなどが提唱されている。理論的な取り組みとしては、東京理科大学と東京大学において、現象論的なボルツマン方程式ではなく、久保の線形応答理論からの熱電現象の根源的な理解の深化と、それを活用した制御・材料開発に挑戦している。マテリアルインフォマティクスの活用も増えてきており、結晶構造由来の記述子(descriptor)を用いていくつかの高性能な硫化物の発掘や、バンドの収束の原理を取り入れ縮退度も記述子として用いて探索し、資源豊富な高性能材料も見出されている。さらに、ハイエントロピー合金(High Entropy Alloys)の概念を熱電材料の高性能化に生かそうとする取り組みも始まっている。ハイエントロピーの混合系は、bccやfccの結晶構造を取り易く、バンドの縮退のためにゼーベック係数が大きくなる傾向があることや、大きな単位胞の影響、同一サイトに異種元素が入る乱れのために熱伝

導率が低くなる傾向にあることなどにより、熱電材料の開発戦略とも重なっている。実用化に向けた研究も盛んに行われるようになっており、 Bi_2Te_3 、 PbTe 、 SiGe などの従来の熱電材料だけでなく、最近では、硫化物、ホイスラー材料など新規な熱電材料の機械的特性評価、接合実験、生産プロセスの検討などが加速している。例えば、NASA JPLは、スクッテルダイトの長時間の耐久性テストなどを完了し、スクッテルダイト熱電モジュールを次世代の原子力電池 (RTG : Radioisotope Thermoelectric Generator) として探査機に搭載する準備を進めている。

スピントロニクス関係では、マグノンとフォノンとの相互作用 (磁気弾性相互作用) を介した熱流-スピン流変換の実現や、マグノンの熱ホール効果に関する実験・理論研究の進展など、スピントロニクスとフォノンエンジニアリングの融合の種となり得る研究が多数報告されている。また、トポロジカル物質を用いた熱電変換・スピントロニクス研究も、継続して大きなトレンドとなると思われる。さらに、2018年に報告された量子熱ホール効果によるマヨラナ準粒子の観測を皮切りに、熱エネルギー輸送から量子力学的な物性を探ることが研究ツールとして認知されていく可能性がある。これに伴って、量子物質・二次元物質などを中心に、ナノスケールでの熱・フォノン輸送やスピンとフォノンの相互作用に関する研究も加速していくことが予想される。

ナノスケールの熱計測関係では、TDTR計測のビームオフセットによる微小片の熱伝導異方性評価、および弾道フォノンとフォノンスペクトル計測の進展が挙げられる。2014年にIllinois大のグループがTDTR法の加熱と測温の微小ビームスポットをオフセットし、熱伝導をテンソルに分解して解析する手法を考案していたが、2017年に本技術を用いて ReS_2 片 (厚さ: 60-450nm、面積: $20 \times 60\mu\text{m}$) を計測し、 ReS_2 の積層をまたぐ厚さ方向において0.55 W/mK、面内のRe結合が連続する方向で70 W/mK、同面内でRe結合を横切る方向で50 W/mKの3次元的な熱伝導異方性を決定した。弾道フォノン計測については主に2つのアプローチで進められている。MITやCaltechのグループは、サブ μm 幅の2次元グレーティングをサンプル表面に施し、TDTRのトランスデューサーとしても働くグレーティングの幅によりフォノン自由行程 (クヌーセン数) を制御する手法により、Si単結晶のフォノン長に対する累積熱伝導率スペクトル計測を実現した。もう一つの手法は、周波数依存加熱 (FDTR) を高速化することで熱拡散長によりクヌーセン数を制御する方法であり、2013年にFreedmanらがGaAs等の半導体の熱伝導スペクトルを報告している。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

米国では、2000年中盤にDoEのEnergy Frontier Research Center (EFRC) として S^3TEC (The Solid-State Solar-Thermal Energy Conversion Center) などナノスケールの熱制御に関する3つのセンターが作られたが、この中で唯一更新されたMITのプロジェクト S^3TEC は、実用化への研究を加速させている。また、Northwestern大にも熱電の大きなグループが2つある。さらに、NASA JPLは、熱電材料の実用化に長年の実績があり、新規材料のスクッテルダイトの熱電発電実装のプロジェクトは、このような材料の民生応用への知見を与えるものとして注目される。

欧州では、THERMOMAG、NANOHIGHTECHなど複数の大型プロジェクトが2000年代後半から始まり、今では大型で包括的な材料開発などのプロジェクトがいくつか終了しているが、よりフォーカスした実用化研究の動きが活発になっている。Horizon2020プログラムで、フランス、英国、スウェーデン、ノルウェー、イタリア、オランダ、ドイツ、スペインの8か

国、13 組織で実用化を見据えた支援がスタートしており、自動車、工場からの質の低い廃熱の回収を具体的な目標に掲げている。フランスでは、CRISMAT 研究所を中心とした新規シリサイド材料のモジュール作製や実用化課題に取り組む大きな熱電のプロジェクトが French National Research Agency (ANR) に採択されている。また、ドイツでは、フラウンホーファー研究所を中心として車載熱電発電のためのデバイスの大量生産技術が自動車企業と共同で水面下に進められている。

中国では、例えば SICCAS (Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences) と Tongji 大などの Cu 系熱電材料開発など、複数の数億円規模の熱電プロジェクトが開始されたばかりであり、上海大学などではインフォマティクスとデータベースの構築にかなり力を入れた取り組みをしている。

韓国では、室温近傍の熱電実用化にフォーカスした大型プロジェクトが早くから走っており、熱電冷却やウェアラブル熱電発電デバイスの研究開発を進めている。対象材料は主に Bi_2Te_3 系と有機材料が多い。Yonsei 大、Kyung Hee 大、Seoul 大や KICET (Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology)、KERI (Korea Electrotechnology Research Institute)、KAIST など、多数の機関で研究が盛んに行われ、特に、ウェアラブルデバイス (バイオセンサーや心電図の動作電源) 開発の応用研究が目立っている。

日中韓の熱電学会が起点となり、地理的に近いアジアの国々の連携や若手育成の促進のために 2016 年にアジア熱電連盟 (AAT) が発足し、毎年 Summer School およびアジア熱電国際会議 (ACT) が開催されている。タイ、台湾、マレーシャも熱電学会を形成してメンバーに加わり、インドなども加入準備をしており、熱電研究の将来発展や人材育成への貢献が目される取り組みである。

日本においては、JST の「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」において、熱電のエネルギーハーベスティングの実用化に向けて新規な高性能材料など有望な成果が得られており、今後の実用化への道筋をつなげる研究が期待される。また、CREST「ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出」、さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」の熱制御関連の研究領域が立ち上がり、広範囲にフォノンエンジニアリングの技術躍進が期待される。科研費の新学術領域研究「ハイブリッド量子科学」(2015 年度～2019 年度)において、主たる 4 領域のうちの 1 つがフォノンとなっており基礎研究が進められている。また、新学術領域研究「ナノスピン変換科学」(2014 年度～2018 年度)において、スピンと電気・熱・電磁波・光など様々なエネルギーとの関わりを調べる基礎研究が精力的に進められている。経産省では未利用熱を削減する大型の NEDO プロジェクト「未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究開発」(2015 年度～2022 年度) が産総研と企業中心に走っており、モジュール関連技術などの開発を進めている。

(5) 科学技術的課題

ナノスケールにおけるフォノン輸送と熱伝導の物理は、様々な材料、ナノ構造での系統的な実験結果の蓄積やシミュレーション技術の進展によって着実に理解が深まっている。しかし、まだ解釈やシミュレーションによる再現が困難な実験データが得られる場合も少なくない。ナノ構造では、構造パラメータに加えて界面や表面の性質、形状などに依存する散乱がフォノン輸送特性に大きな影響を与えることが知られており、フォノンエンジニアリングにおいて表面

状態の制御技術が重要な技術的課題のひとつになってくる。また、熱電素子のように、高電気伝導／低熱伝導の特性を持つ材料を実現するためには、所望のナノ構造や欠陥を材料に実際につくり込む方法も開発する必要がある。電気的な性質にも影響するいわゆる欠陥エンジニアリングなどの材料技術の高度化が望まれる。

理論・シミュレーション技術もさらなる高度化が必要である。材料の表面／界面／不純物／構造欠陥や、二次元物質、一次元細線など低次元系の構造などを考慮したナノスケールでの熱伝導の理論の構築およびシミュレーション手法の開発も求められる。また、フォノンと電子、スピン、マグノン、フォトン（光）など他の量子との相互作用を取り込んだ手法の開発も必要になる。

インフォマティクスを活用した高性能材料の発掘の成功例も出てきているが、より強力なツールとなり得るための戦略が必要である。簡単なバンド構造計算を元にした探索は早いですが、緩和時間や電子相関などが正確でなく、予測精度が低くなる可能性がある。熱電特性の高性能化などをよく反映する記述子の抽出や、実験データや論文データに対する機械学習の活用なども重要になる。

ナノスケールの熱計測関係では、フォノンとエレクトロンの分離制御やスピン熱流などにみられるように、熱伝導をその他の諸物性との関係性をもとに動的に制御・利用することが重要となってきたため、このような要請に対応する技術開発が必要である。TDTR法は高い時間分解能を誇るが、加熱パルスによる能動的な温度励起を利用した繰り返し測定を行っているために、内実は実測定時間に数分から数時間を要する“遅い測定”である。他の諸物性をトリガーとした早い熱移動現象(理想的には単発)を捉えるためのブレイクスルーが望まれる。また、より感度の高い検出手法の検討も必要である。例えば、Kimilingらは、サーモフレクタンスの代わりに、厚さ 10nm 以下の Co/Pt 層の Kerr 効果による時間分解測定を実証している。

(6) その他の課題

フォノンエンジニアリングにおける基礎研究を応用につなげるためには、異分野連携や産学官連携などの連携体制の構築が重要であるが、国内外を含めてまだ進んでいない。本分野の基礎研究や物理現象の解明は進んできたものの、実用的課題を解決するような制御性を獲得するには至っていない。フォノンエンジニアリングは、応用研究の飛躍が期待されるフェーズにあると思われるため、基礎研究と応用の橋渡しの研究を増やすことが望まれる。また、応用分野の一つである熱電関係の大きな課題はコストである。材料開発担当の研究者だけでなく、熱管理シミュレーション、先端的なデバイス作製技術を有するモジュール担当の専門家など、企業を含めた幅広い連携の仕組みや機会が必要である。

(7) 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	◎	↗	<p>日本物理学会、日本伝熱学会、日本熱電学会、応用物理学会などで、フォノンエンジニアリングに関するシンポジウムが開催され、応用物理学会では新たな合同セッション、研究グループが設立され、分野横断の活動が活発化している。</p> <p>ファンディングにおいても、JSTのCREST・さきがけで2015年後半から熱電に関連する「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」、2017年からナノスケール熱制御関係の研究領域が立ち上がっている。</p> <p>元素戦略的な新規材料に関する研究や、スピンゼーベックなどの磁性研究で世界をリードしている。</p> <p>JST-ERATO、CREST、科研費新学術領域「ナノスピン変換科学」を中心にスピン熱電・熱制御を含む研究が多数展開され、熱-スピン変換現象の基礎原理解明や熱電変換効率の向上に向けた物質探索が進んだ。また、スピンペルチェ効果や異方性磁気ペルチェ効果など、新しい熱制御機能の実現を目指した研究も活発化している。</p>
	応用研究・開発	○	↗	<p>環境庁やNEDOを通じた産学連携プロジェクトが進行している。</p> <p>経産省の未利用熱を削減する大型プロが産総研と企業中心に推進されており、モジュール作製や評価などに関する実用化技術の開発が進んでいる。</p> <p>薄膜の熱電性能評価の標準化の取り組みも始まっている。</p> <p>物材機構、理研、大学においてIoTセンサー用の自立電源などを開発する具体的な取り組みが増えている。</p> <p>熱流センサー・分散型電源用途を想定したフレキシブル・スピン熱電変換素子の研究開発などが進展した。</p>
米国	基礎研究	◎	↘	<p>ナノワイヤー一本の熱電特性測定、透過型電子顕微鏡観察、数値解析、理論解析など、全方位的に高い基礎研究力を持つ。</p> <p>新規な原理（低次元量子効果、フォノンの選択散乱、共鳴準位、変調ドーピング、バンドの収束など）などを提唱してリードしてきた。</p> <p>MIT以外の熱電関連EFRCやCERC-CVCなどの大型プロジェクトが終了した後で、それらに代わる大型プロジェクトは立ち上がっていない。NSFなどの個別のプロジェクトはあるが、他国に比べ基礎研究が相対的に鈍化する可能性がある。</p>
	応用研究・開発	◎	→	<p>探査機の原子力電池（RTG）で長年の実装研究開発実績を誇るNASA JPLは、スクッテルダイトやYbMn系などの新規材料のモジュール作製技術、長時間の性能試験、信頼性試験と総合的な応用研究の開発能力を持っている。</p> <p>DoEの大型プロジェクト終了後も、GMは車載熱電発電の検討を続けており、Alphabet Energyのように比較的大きな規模で新しい材料やデバイスの応用開発を行う熱電ベンチャー企業もある。</p> <p>AROのMURIプログラムによりオハイオ州立大学を中心とした4大学により、熱スピン変換材料のバルク化やスピン自由度による熱電効果の出力向上を目指した研究などの共同プロジェクトが立ち上がっている。</p>

欧州	基礎研究	○	→	<p>QUANTHEAT 終了後は、ナノスケール熱計測関係の大型プロジェクトは推進されていないが、個別の研究が継続的に行われている。フランスでは CRISMAT 研究所、ドイツでは材料開発研究で Max Planck 研究所、実用化研究で Fraunhofer 研究所、イギリスでは、Manchester 大や Queen Mary U. London など、熱電研究を進めている。日本と同様に、硫化物やシリサイドやスキテルダイトなど、比較的資源豊富で元素戦略にかなった材料を対象にしている研究が多い傾向にある。</p> <p>シリサイド、酸化物、スキテルダイトで地道な材料開発が継続している。</p> <p>FP7 における INSPIN や、ドイツ研究振興協会 (DFG) による Priority Programme SpinCaT を中心に、スピン熱電・熱物性に関するプロジェクトが多数行われたが、いずれも 2017 年に終了した。新たに始まった HORIZON2020 にはスピン熱物性を主にしたプロジェクトがあるが、スピнкаロリトロンクスから THz スピンドイナミクスに研究がシフトしつつある。</p>
	応用研究・開発	◎	→	<p>実用化を見据えた、機械的性質、モジュールの接合や作製に関わる技術、モジュールのシミュレーションや評価技術などによりフォーカスしたプロジェクトに移行している。</p> <p>ドイツの Fraunhofer 研究所は、実装技術だけでなく、実環境下の発電評価機器の開発を進めたりして、実用化研究を強力に推進している。</p> <p>ドイツや北欧などで車載熱電発電のためのデバイスの大量生産技術の開発が自動車企業と共同で進められている。</p>
中国	基礎研究	◎	↑	<p>政府系予算の増額及び博士号取得者数の増加により、研究者の数が増加し論文数も伸びている。また、米国、欧州、日本からの帰国研究者による高いレベルの研究発表となっており、全方位的な強みがある。</p> <p>Wuhan 工科大、SICCAS、精華大などで熱電研究が盛んに行われ、2010 年前後から 5 機関の大型国プロや役割分担した 3 つの NSFC の大型プロジェクト (新規材料、複合材料、熱電デバイス) が推進された。現在は形を変え、Cu 系熱電材料の開発などの数億円級の熱電プロジェクトが新規に開始されている。インフォマティクスとデータベースの構築にもかなり力を入れている。</p>
	応用研究・開発	○	↑	<p>大学などは基礎研究の方が多く印象であるが、機械的性質などモジュール開発の研究も増えており、応用に必要な最適化研究も行えるマンパワーも備えている。</p> <p>新規に立ち上がった熱電冷却デバイスを対象とする企業も多く、性能や信頼性が十分でなくとも安い価格のデバイスを早く製品化している。</p>
韓国	基礎研究	○	→	<p>室温近傍の熱電実用化にフォーカスした大型プロジェクトが推進されており、熱電冷却や IoT ウェアラブル熱電発電デバイスの研究開発が進められている。対象材料は Bi₂Te₃ 系と有機材料が多い。</p> <p>Yonsei 大、Kyung Hee 大、Seoul 大など数多くの大学、KICET, KERI, KAIST などの国研などで研究が盛んに行われている。</p>
	応用研究・開発	○	↑	<p>フレキシブルでウェアラブルなデバイス (例えばバイオセンサーや EKG の動作電源など) の研究開発が大学から活発に発表されている。KERI などでは、材料開発からモジュール作製、発電評価の一環とした研究開発ができる体制を有している。KICET では軍の携帯電源としてのデバイスも開発している。</p> <p>企業に関しては、LG 系のイノテックが冷却デバイス、LG 化学が中高温を見据えたスキテルダイト材料の開発を行っており、産学の連携研究も盛んである。</p> <p>LG など企業における熱電変換材料開発に関する商品化が進み、研究資金も増えている。</p> <p>エネルギーハーベスティング技術の国際標準化作業に参画している。</p>

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗: 上昇傾向、→: 現状維持、↘: 下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Takao Mori and Shashank Priya, "Materials for Energy Harvesting: At the Forefront of a New Wave," *MRS Bulletin* 43, no. 3 (2018) : 176. doi:10.1557/mrs.2018.32
- 2) Kanishka Biswas et al., "High-performance Bulk Thermoelectrics with All-scale Hierarchical Architectures," *Nature* 489, no. 7416 (2012) : 414. doi:10.1038/nature11439
- 3) "Thermoelectric Nanomaterials," *Springer Series in Materials Science*, 2013. doi:10.1007/978-3-642-37537-8
- 4) Li-Dong Zhao, Vinayak P. Dravid and Mercouri G. Kanatzidis, "The Panoscopic Approach to High Performance Thermoelectrics," *Energy Environ. Sci.* 7, no. 1 (2014) : 251-268. doi:10.1039/c3ee43099e
- 5) Li-Dong Zhao et al., "Ultralow Thermal Conductivity and High Thermoelectric Figure of Merit in SnSe Crystals," *Nature* 508, no. 7496 (2014) : 373. doi:10.1038/nature13184
- 6) M. Puyet et al., "High Temperature Transport Properties of Partially Filled $\text{Ca}_x\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ Skutterudites," *Journal of Applied Physics* 95, no. 9 (2004) : 4852-4855. doi:10.1063/1.1688463
- 7) Carolyn A. Paddock and Gary L. Eesley, "Transient Thermoreflectance from Thin Metal Films," *Journal of Applied Physics* 60, no. 1 (1986) : 285-290. doi:10.1063/1.337642
- 8) David G. Cahill, "Analysis of Heat Flow in Layered Structures for Time-domain Thermoreflectance," *Review of Scientific Instruments* 75, no. 12 (2004) : 5119-5122. doi:10.1063/1.1819431
- 9) Kimberlee C. Collins et al., "Examining Thermal Transport through a Frequency-domain Representation of Time-domain Thermoreflectance Data," *Review of Scientific Instruments* 85, no. 12 (2014) . doi:10.1063/1.4903463
- 10) Roman Anufriev et al., "Heat Guiding and Focusing Using Ballistic Phonon Transport in Phononic Nanostructures," *Nature Communications* 8 (2017) . doi:10.1038/ncomms15505
- 11) Zihang Liu et al., "Nano-microstructural Control of Phonon Engineering for Thermoelectric Energy Harvesting," *MRS Bulletin* 43, no. 3 (2018) : 181. doi:10.1557/mrs.2018.7
- 12) Atta U. Khan et al., "Nano-micro-porous Skutterudites with 100% Enhancement in ZT for High Performance Thermoelectricity," *Nano Energy* 31 (2017) : 152. doi:10.1016/j.nanoen.2016.11.016
- 13) Takao Mori, "Novel Principles and Nanostructuring Methods for Enhanced Thermoelectrics," *Small* 13, no. 45 (2017) . doi:10.1002/sml.201702013
- 14) Yanzhong Pei et al., "Convergence of Electronic Bands for High Performance Bulk Thermoelectrics," *Nature* 473, no. 7345 (2011) : 66-69. doi:10.1038/nature09996

- 15) Fahim Ahmed, Naohito Tsujii and Takao Mori, "Thermoelectric Properties of $\text{CuGa}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}_2$: Power Factor Enhancement by Incorporation of Magnetic Ions," *Journal of Materials Chemistry A* 5, no. 16 (2017) : 7545. doi:10.1039/c6ta11120c
- 16) Masao Ogata and Hidetoshi Fukuyama, "Theory of Spin Seebeck Effects in a Quantum Wire," *Journal of the Physical Society of Japan* 86, no. 9 (2017) . doi:10.7566/jpsj.86.094703
- 17) Hiromasa Tamaki, Hiroki K. Sato and Tsutomu Kanno, "Isotropic Conduction Network and Defect Chemistry in $\text{Mg}_{3+\delta}\text{Sb}_2$ -Based Layered Zintl Compounds with High Thermoelectric Performance," *Advanced Materials* 28, no. 46 (2016) : 10182. doi:10.1002/adma.201603955
- 18) Joseph P. Feser, Jun Liu and David G. Cahill, "Pump-probe Measurements of the Thermal Conductivity Tensor for Materials Lacking In-plane Symmetry," *Review of Scientific Instruments* 85, no. 10 (2014) . doi:10.1063/1.4897622
- 19) Hyejin Jang et al., "3D Anisotropic Thermal Conductivity of Exfoliated Rhenium Disulfide," *Advanced Materials* 29, no. 35 (2017) . doi:10.1002/adma.201700650
- 20) Lingping Zeng et al., "Measuring Phonon Mean Free Path Distributions by Probing Quasiballistic Phonon Transport in Grating Nanostructures," *Scientific Reports* 5, no. 1 (2015) . doi:10.1038/srep17131
- 21) Takafumi Oyake, Masanori Sakata and Junichiro Shiomi, "Nanoscale Thermal Conductivity Spectroscopy by Using Gold Nano-islands Heat Absorbers," *Applied Physics Letters* 106, no. 7 (2015) . doi:10.1063/1.4913311
- 22) G. Chen, "Nonlocal and Nonequilibrium Heat Conduction in the Vicinity of Nanoparticles," *Journal of Heat Transfer* 118, no. 3 (1996) : 539. doi:10.1115/1.2822665
- 23) Judith Kimling et al., "Thermal Conductance of Interfaces with Amorphous SiO_2 Measured by Time-resolved Magneto-optic Kerr-effect Thermometry," *Physical Review B* 95, no. 18 (2017) . doi:10.1103/physrevb.95.184305

2.4.6 量子技術

(1) 研究開発領域の定義

量子力学が記述する電子や光子などの性質（量子性）を積極的に活かして、古典系では実現できない制御技術や情報処理技術を実現するための研究開発領域である。超伝導量子ビットを筆頭にさまざまな物理系において研究開発が進められている量子コンピュータ、主に冷却原子系で実現される量子シミュレータ、ダイヤモンド NV センターなどを用いた量子計測・センシング技術や、量子暗号や量子中継・量子ネットワークを含む量子通信技術など、量子技術全般の現状、注目動向、課題、将来展望と科学技術・政策的課題等について記述する。

(2) キーワード

量子情報、量子コンピュータ、量子アルゴリズム、Noisy Intermediate Scale Quantum computing (NISQ)、量子シミュレータ、量子計測、量子センシング、量子通信、量子暗号、量子鍵配送、量子中継、量子ネットワーク、超伝導量子ビット、冷却原子、ダイヤモンド NV センター、イオントラップ、半導体量子ビット、光量子ビット、スピン量子ビット、トポロジカル量子計算、光格子時計、核磁気共鳴 (NMR)、量子乱数生成、量子メモリ、波長変換

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

量子力学は、20 世紀において半導体、レーザーなどの技術的基礎となった学問で、我々の生活を陰ながら支えてきた。21 世紀に入り個々の量子系を精密に制御する技術が発展してきたことによって、量子力学を科学の表舞台で積極利用した学問の探究と応用が進められている。その代表例は、古典的ロジックに基づく情報処理の従来原理を量子力学へと拡張した量子情報科学である。計算原理に量子力学を利用する量子コンピュータや、実際の物質系と同じモデルを人工的に作り出す量子シミュレータは、従来の古典コンピュータでは効率よく解けない問題を、容易に解くことができると期待されている。また、量子性は計算速度だけではなく、量子暗号や量子セキュアクラウド計算のように、通信や委託計算におけるプライバシーについても古典情報処理では未到の安全性を担保できる。従って、これらの技術の実装とともに、広域化や諸分野への波及効果を狙う量子中継、量子インターネットなどの基礎研究を含む量子通信の分野が注目される。さらに、量子性の積極利用や量子限界に迫る精密制御によって、従来手法よりも感度が高いセンシング、計測も可能となる。

量子情報科学はこれまで考えられてきた種々の問題に新たな基礎的視点を与える。例えば、従来の情報科学における定理が簡単に証明されたり新たな古典アルゴリズムの発見につながったりするなど、従来の情報科学へのフィードバックが期待される。また、新奇物性を持つ物質の発見や、ブラックホールなどの基礎物理への多大な貢献につながりつつある。このように、20 世紀においてその基礎が確立された量子力学に対し、その主役である電子や光子が有する量子性の活用により広大なテクノロジーのフロンティアを探索する時代となった。量子技術やそれを支える量子情報科学は、未来のテクノロジーや基礎学理に大きく影響を与える研究開発領域であり、我々の日常生活を根底から変えうる可能性を秘めている。

[研究開発の動向]

①量子コンピュータ・量子シミュレーション

2010年代に入り Google が量子コンピュータに興味を示して以来、量子技術への研究開発の投資は加速してきた。これが1990年代中頃のいわゆる第1次量子コンピュータブームに続く2回目のブームを形成しており、2018年に入っても国家プロジェクトによる新たな研究拠点の形成や従来拠点の強化が各国で進められている。企業における研究開発も活発で、超伝導量子ビット方式を用いた量子コンピュータに対し、大手の Google と IBM、ベンチャー企業の Rigetti Computing が開発競争を繰り広げている。Intel はデルフト工科大 (Delft) の量子技術研究機関である QuTech とともに、超伝導量子ビット方式及び半導体量子ビット方式で参戦している。また、それ以外の方式による量子コンピュータを目指すベンチャー企業として、イオントラップ方式の IonQ や、光量子方式の Xanadu なども登場している。Microsoft は、量子コンピュータのためのソフトウェア、量子アルゴリズムの研究開発や、マヨラナ粒子と呼ばれるトポロジカルに保護された新方式量子ビットの開発を行う複数の大学を支援している。

現状、量子コンピュータや量子シミュレータのハードウェアとして、超伝導量子ビット方式で20量子ビットのチップが動作確認済、50～70量子ビットのチップが完成 (Google、Intel + QuTech、IBM)、評価中とのことで、この数年の間には100量子ビットが達成されると期待されている。ただし、量子ビットの数が増えても演算精度が低いと性能を発揮することができないので、演算精度にも注目していく必要がある。一方、量子シミュレーションにおいては、これまで物理系のシミュレーションにターゲットを絞ることによって比較的大きな系の複雑なダイナミクス、例えば光格子上の冷却原子における量子相転移現象の観測が実現している。また最近では、イオントラップ方式と冷却原子方式の両方において個別操作、個別サイトの観測、散逸の制御ができるようになるなど、量子シミュレーションでもより高度な制御が実現されつつある。

実際の量子コンピュータは、一つ一つの量子ビットに生じる誤りはわずかであっても、計算を長く続けるとそれが積み重なって間違った計算結果を生んでしまう。従って、大規模な量子コンピュータの実現には、量子誤り訂正によるノイズ耐性のある量子コンピュータの実現が必須課題である。この課題の達成には、上記の量子ビット数はまだまだ少なく、より多くの量子ビットを集積化するための研究開発が続くものと思われる。一方で、現状における量子ビット数のチップ上で精度99%程度の演算が実現すれば、量子誤り訂正の原理実証実験が近い将来できることになる。また、従来のコンピュータでは困難であった現象を詳細に調べることが量子シミュレーションによりできるようになりつつある。

ここまでに説明したのは、量子力学のルールで動き、かつあらゆる量子系のダイナミクスを含んだ任意の物理系と互換性のあるマシンであり、ゲート型量子コンピュータ (万能量子コンピュータ) と呼ばれる。その高速性の保証されたゲート型量子コンピュータ以外にも、超伝導量子ビットを用いてイジング問題の最適化に特化した専用量子マシン、いわゆる量子アニーラの研究開発がカナダのベンチャー企業 D-Wave を中心に進められている。高速性の証明はないが、実際にある程度の規模で動くマシンがあるので、速度やコスト面において従来コンピュータに比べ優位性があるかどうか、実機を利用した性能評価が進められている。また、スピングラス模型などのシミュレータとして学術的に利用され始めている。海外では、イジング専用マシンへの国家プロジェクトの支援はゲート型量子コンピュータに比べると圧倒的に少ないのが

現状である。デバイスへの要求、可能となるタスクや応用へのタイムスケール、といった側面から、量子加速による潜在能力が約束され波及効果の大きいゲート型量子コンピュータの長期プロジェクトとは切り分けられているようである。

②量子計測・センシング

一般に、量子状態は温度や磁場といった環境からの雑音に対して非常に弱く、すぐに崩壊してしまう。これは量子コンピューティングや量子シミュレーションの実現を困難にしている主要因であるが、そのことを逆手にとって量子状態で環境を敏感に計測・センシングしようというのが本研究分野である。量子系コヒーレンスと量子もつれを利用したものが検討され、より強い量子性を利用する後者はまだ基礎研究が中心である一方、前者はかなり研究が進みその応用分野に興味が移っている。最近の総説では、量子コヒーレンスの対象量子系の例として、原子気体（冷却中性原子、イオントラップ）、NMR アンサンブルセンサー、NV センター、極低温電子回路（超伝導回路、SET）、ハイブリッド量子系（オプトメカ）、光子が挙げられている。

単一のダイヤモンド NV センターに対して光検出磁気共鳴（Optically Detected Magnetic Resonance, ODMR）に成功してから 20 年にわたり、ドイツとアメリカを中心に、政府投資による基礎研究が強力に進められ、温度、pH、磁気などのセンシングにおいて従来技術（蛍光分子イメージング、高速 AFM、SQUID 磁気センサー等）を凌ぐ可能性が見いだされた。また最近、NV センター近傍に置かれた単一分子の NMR 分光にも成功しており、マイクロ領域での分子構造化学を開拓する基礎分析ツールになると期待されている。NVision、SQUTEC、QNAMI、QZABRE、Quantum Diamond Technologies Inc. など、基礎的な知財をおさえた上で当該分野の先駆者を擁するスタートアップが多数立ち上がっており、今後数年のうちに市場が確立されていくと考えられる。中国は 10 年近く前から NV センターの研究を本格的に実施し、市場浸透を目指した技術的追随を進めた。日本では、筑波大や産業技術総合研究所が材料面において、当該分野の発展に大きく貢献してきた。2018 年度より光・量子飛躍フラッグシップ（Q-LEAP）プロジェクトが開始され、東京工業大を代表機関とした NV センターの研究によりセンシング市場への巻き返しを図る。

また、冷却原子による原子干渉計を用いた重力加速度計やジャイロスコープなどの量子慣性センサ、レーザーを用いた原子時計である光格子時計の研究も進んでいる。原子干渉計型の重力計は、原子 1 個の挙動を用いるため、より高い精度で絶対重力を計測できる。米国のスタンフォード大は、目標精度 $\Delta g/g < 10^{-15}$ 、高さ 10 メートルの原子落下タワーによって等価原理の検証や万有引力定数の精密測定への応用を進めるなど、欧米及び中国を含む世界中で基礎物理学実験が行われている。原子干渉計を用いたジャイロスコープについては、非常に高い精度を目指す研究が安全保障との関連で大きく進展するとともに、レーザーを用いたジャイロスコープを超える安定度が報告されている。一方、日本発の光格子時計は、次世代原子時計の新たな潮流となり、日本をはじめ米国、欧州、中国など世界で 20 以上のグループが研究を進めている。我が国における光格子時計の精度は世界をリードしており、将来に控えている国際単位系の「秒」の再定義に対し積極的な国際貢献が期待される。

量子もつれセンシングでは、古典技術で不可能なセンシング能力が約束されていることが重要で、米国の国防省陸軍研究局（DOD）、陸軍研究局（ARO）、高等研究計画局（DARPA）がこの点に着目して集中的な投資をしてきた。光あるいは物質の量子もつれによるセンシング機

構があり、前者では連続波 (CW) 光源で生成される NOON 状態を利用した先駆的実験が北海道大で、後者はスクイーズドスピン状態を利用した提案が NTT 基礎研究所でそれぞれ行われた (詳細は (4) 注目動向にて説明)。他にも、センシングの制御誤差や不要な環境との相互作用に対して鈍感にするために、量子誤り訂正符号の技術を量子センサーに用いる提案や分配された量子センサーを量子通信でつなぐ量子センサーネットワークの提案など、最近いくつかの先進的研究がある。さらに、2018年に発表された DARPA Challenge の一つとして、量子コンピュータに接続された多数の量子センサーによって何が可能になるかを模索する取り組みが挙げられた。今後の動向に注目したい。

③量子通信 (量子暗号、量子中継・量子ネットワーク)

量子通信には、実装に向けた開発が進む量子暗号、将来への基礎研究が主である量子中継・量子ネットワークの技術などがある。量子暗号には量子乱数生成や量子公開鍵暗号等のさまざまな技術が含まれるが、中でも量子鍵配送 (QKD) は従来の計算アルゴリズムに基づく暗号技術では不可能な、(量子コンピュータを含む) いかなる計算機でも解読不可能ことが保証されている暗号鍵の配送を可能にする技術であり、ゲノム・医療情報、国家機密、重要インフラ情報などを守る新しい手段として期待されている。

一方、QKD は一度に鍵を伝送できる距離、速度に限界がある。このため現状では、安全性の保証された局舎 (trusted node) を介したネットワーク化が行われている。これに対し、安全な局舎を必要とせず任意の超長距離 QKD を可能とするのが、信号の量子状態を破壊せずに中継する量子中継技術である。量子中継はまだ基礎研究段階にあるが、多数の量子中継で構成された量子ネットワークが実現できれば、QKD の広域化だけでなく、安全な委託量子計算、従来限界を超える精密時刻同期や高感度長基線望遠鏡、分散量子計算など、さまざまな分野への波及効果が予想される。

QKD に関しては、新プロトコルの研究開発や装置改良などに加え、種々の実証実験が進んでいる。光ファイバを用いた QKD では、安全な局舎を介した QKD ネットワークのフィールド実証が世界各地で行われ、長期運転試験、異なる QKD 装置間の相互接続、ネットワーク制御の研究アプリケーションの開発などが進んでいる。また、衛星・空間通信を用いた QKD の開発、実証がここ数年で急速に進展している。装置の不完全性、サイドチャンネル攻撃等に対する評価手法の研究も進められており、それに基づく QKD 装置の国際規格の制定も進められている。

量子中継・量子ネットワーク技術に関しては、量子メモリの各種候補の研究開発やそれらと通信波長帯の光を繋ぐ波長変換技術の高度化が必要であるとともに、並行してネットワークの実証研究も行われつつある。量子ネットワークに関しては、原理的な理論研究が進んでおり、今後はより実用的なネットワークの設計・制御の研究も盛んになると考えられる。本分野の基礎研究は欧州が先行しており、最近立ち上がった Quantum Internet Alliance によって量子中継のネットワーク制御の手法やプログラム、標準化の議論が組織的に進んでいくと考えられる。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

・超伝導量子ビット 2次元配列及び3次元配線の実装

現在、動作結果が報告されている量子ビットはほぼすべて擬2次元的な接続になっており、量子誤り訂正のための表面符号の実装に必須である真の2次元配列の実現にむけた研究開発が進められている。フリップチップボンディングによる多層配線 (Google、IBM) や超伝導シリコン貫通ビア (QuTech + Intel、東大先端研) によって、2次元配列された量子ビットへの配線が実装されようとしている。

・NISQ時代の到来と技術的課題

第2次量子コンピュータブームの一つのきっかけは、量子誤り訂正が実行可能なレベルにまで量子演算の精度が向上したことであり、量子誤り訂正の実装とそれに十分な量子ビットの集積化が最優先課題であった。誤り訂正機能を搭載した量子コンピュータの実現にはあと20年はかかると考えられる中で、最近、演算精度がある程度低く量子ビット数も数十から数百といった近未来的に実現可能な規模の量子コンピュータを有効活用しようという動きが出てきている。このような量子計算は Noisy Intermediate Scale Quantum computing (NISQ) と呼ばれている。

NISQ技術の主なターゲットは、(i) 量子による計算加速を科学的に示す量子超越性の実証、(ii) 大規模な量子コンピュータに発展させる要素技術の実証基盤の確立、(iii) 古典コンピュータと合わせてその性能を最大限に引き出す古典・量子ハイブリッドアルゴリズムの開発、の3つである。(i)については、現在の最高性能のスーパーコンピュータで量子コンピュータの挙動をシミュレーションできるのが50~100量子ビットくらいまでであると考えられており、それより大きな量子コンピュータが登場することによって、量子超越性が検証できると期待されている。

長期的な視点に立ち、大規模な量子コンピュータを実現するためには、量子誤り訂正が必須であることは依然として変わっていない。NISQ時代の研究開発では、ノイズを含む実機と小規模であるが理想的な量子コンピュータの従来コンピュータ上でのシミュレーションを比較しつつ研究が進められることが予想される。

・スクイーズドスピン状態量子もつれセンシングの進展

物質の量子もつれセンシングでは、スクイーズドスピン状態を利用することがNTT基礎研究所により提案された後、原子気体系での高度な量子制御が可能となってきたことによってここ数年で大きな発展がある。例えば、2016年に米国の国立標準技術研究所 (NIST) やスタンフォード大でそれぞれBeイオン、Rb原子のある程度大規模なスピンスクイージングに成功している。スピンスクイージングは、精密測定だけでなく、より大規模化、汎用化して量子標準への応用も盛んに研究されている。関連技術は、環境雑音による影響の抑制や大規模量子ビット系の精密制御が必要で、量子コンピューティング、量子シミュレーションと共有される部分が多く、今後の実応用に向けた研究開発や投資が一気に加速すると考えられる。

・QKDの実証と標準化活動

QKDの研究開発においては、2018年に英国の東芝欧州研究所 (東芝欧州研) が、量子メモリを使わずに量子中継1回分の長距離化を実現可能なTwin-field QKD方式を提案し、実証に成功した。また、一本の光ファイバ中でのQKD多重化や通常の光通信回線との共存は実用上

の重要課題であり、国内の学習院大と情報通信研究機構(NICT)、国外では東芝欧州研、デンマーク工科大などで研究開発が進められている。フィールド実証では、中国における進展が著しく、2017年には世界最大の地上 QKD ネットワークの運用開始や、世界初の衛星-地上間 QKD 実証などを発表している。一方、NICT は実用的な超小型衛星による世界初の量子通信基礎実験に成功しており、これらをきっかけに世界各国でさまざまなプロジェクトが立ち上がりつつある。また、単に情報伝送の暗号化を行うだけでなく、QKD を秘密分散等の既存セキュリティ技術と融合することにより、コンピュータで解読不可能なデータストレージネットワークを構築する試みが NICT-東京工業大により提案、フィールド実証され、QKD の応用分野として注目されている。

一方、QKD 標準化はこれまで欧州電気通信標準化機構 (ETSI) でのみ議論されていたが、最近では国際電気通信連合の電気通信標準化部門 (ITU-T)、国際標準化機構 / 国際電気標準会議の第一合同技術委員会 (ISO/IEC) などの国際標準化団体でも検討され始め、今後はこれらの活動の連携、課題分担などが進むものと予想される。ETSI、ITU-T には日本からの積極的な寄与がなされている一方、中国は国内の中国通信標準化協会 (CCSA) において、量子通信全体を包括した議論を行っている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

[日本]

JST では、2016 年に ERATO 中村巨視的機械プロジェクト、CREST 「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出」、さきがけ「量子の状態制御と機能化」が発足した。文部科学省は 2018 年から、量子科学技術 (光・量子技術) を駆使して非連続的な解決 (quantum leap) を目指す「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」を開始している。プログラムディレクター (PD) の研究開発マネジメントの下、量子情報処理 (主に量子シミュレータ・量子コンピュータ)、量子計測・センシング、次世代レーザーの 3 領域でそれぞれネットワーク型研究拠点を形成し、領域毎に Flagship プロジェクトと基礎基盤研究が 10 年の予定で実施されている。超伝導量子コンピュータの研究開発、固体量子センサーの高度制御による革新的センサーシステムの創出、先端レーザーイノベーション拠点の 3 課題が Flagship プロジェクトとして採択されているものの、海外の研究拠点に比べると予算規模が一桁少ないのが現状である。また、JST の未来社会創造事業によって、高性能ジャイロスコープの開発 (2017 年～)、クラウド光格子時計の応用 (2018 年～) が進められている。

一方、イジング専用量子マシン、量子アニーラの研究開発については逆転現象が起きており、従来の半導体・光量子エレクトロニクス技術を用いたものを含めると、NEDO プロジェクトや内閣府 ImPACT プロジェクトなど、海外より一桁多い投資が行われている。

量子通信の分野でも、2018 年度から、内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 第 2 期「光・量子を活用した Society5.0 実現化技術」、総務省の「衛星通信における量子暗号技術の研究開発」などの大型プロジェクトが開始された。特徴的な課題として、QKD を用いた分散秘密ストレージ技術を中心とし認証や計算の機能も取り込んだ量子セキュアクラウドや衛星 QKD の研究がある。

[北米]

米国では、2018 年になって、科学技術政策局 (OSTP) 及び国家技術科学会議 (NSTC) 科

学委員会の量子情報科学小委員会（SCQIS）が「国家量子情報科学戦略の展望（National Strategic Overview for Quantum Information Science）」と題する報告書を公開すると同時に、エネルギー省（DOE）及び全米科学財団（NSF）がそれぞれ量子情報科学（QIS）研究開発プロジェクトへの資金提供を発表した。国家戦略は基礎研究の支援を強調する「サイエンス・ファースト」のアプローチを標榜しており、DOEは最先端量子試験用プラットホームの構築、運用による大学や国立研究所の85課題に対して、今後2～5年間で2億1800万ドルを投入する。一方、NSFは、量子センシングやコンピューティング、量子通信などの分野に3100万ドルを拠出する予定である。

また、2018年12月に、国家量子イニシアチブ法（National Quantum Initiative Act）が成立し、2019年からの5年間で12億5000万ドルが量子技術研究に投じられる。この分野を強化している中国や欧州を念頭に、OSTPの下に設置する国家量子調整室（National Quantum Coordination Office）が研究成果、ノウハウの集約や人材育成までを含めた包括的な戦略、基本計画をまとめる予定である。

カナダでは、ペリメータ理論物理研究所とウォータールー大が量子技術研究を主導しており、2016年に世界的に優れた研究を促進するための基金から1800万ドルの資金を得てプロジェクトが進められている。

[中国]

安徽省合肥市の37ヘクタール（およそ400万平方フィート）もの土地に、100億ドル規模の量子情報科学国家実験室を建設中である（2020年開設予定）。量子計測学と量子コンピュータの構築という2つの大きな研究目標を掲げており、どちらも国防・軍事的活動と民間のイノベーターの双方を支援するための取り組みである。

中国科学院と中国IT大手のアリババ（阿里巴巴）グループは、共同で量子計算実験室を設立し量子情報科学の先進的研究、量子コンピュータの開発に取り組むことで合意した。約5億円/年の予算で、両社の技術的強みを活かし以下の研究計画を定めている。

- ・2025年までに、量子シミュレーションを2015年時点における世界最速スパコンの水準にまで高める。
- ・2030年までに50～100量子ビットの万能な量子コンピュータ（試作機）を開発し、量子コンピュータ用チップの大量生産技術を把握する。物理層の設計・製造から、アルゴリズム実行の独自開発に至るまで、万能な量子計算機能を全面的に実現し、ビッグデータ処理などの重大かつ実質的な問題に応用する。

[欧州]

EUでは、2016年にEU Quantum Flagshipプロジェクトのロードマップが公表され、量子通信、量子シミュレーション、量子コンピューティング、そして量子センシングの重点領域のほか、欧州が独自に注目する2つの新興領域（量子ソフトウェアと量子コントロール）が定められた。2018年秋にEU Quantum Flagshipに採択された20課題が発表され、翌年より10年間で10億ユーロが投じられることになっている。

EU各国では、ドイツ政府がQuantentechnologienという2018年からの5年プロジェクトに約6億5000万ユーロ、オランダDelft + QuTechによる2015年からの10年プロジェクトにIntelとMicrosoftがそれぞれ約5000万ドル投資している。イギリスでは、2014年から進められているThe UK National Quantum Technologies Programme（5年で2億7000万ポ

ンド)の下、UK National Network of Quantum Technology Hubs が開始されている。

[その他]

オーストラリアの Center for Quantum Computing and Communication Technology (CQC2T)、シンガポール国立大の量子情報研究所 (CQT) のプロジェクトなどが注目される。

(5) 科学技術的課題

量子ビットの集積化には技術的な課題が多く残る。量子ビットの材料、設計、加工方法、配線技術、結合方式、制御方法、制御システム、アーキテクチャなど、さまざまな分野にまたがった分業体制を敷いて、量子コンピュータ工学を醸成していくことが必須である。NISQ 技術については、従来コンピュータに対して優位性のあるアプリケーションを見出せるかはまだ明らかではない。その性能、すなわち量子の有する特長を最大限に引き出すための知恵とともに、有用な応用先 (量子化学計算、機械学習など) に関する専門知識やハードウェアとの連携も必要となる。量子技術・量子情報科学分野の実験-理論間はもちろんのこと、量子化学、機械学習などの分野との連携により、量子コンピュータの応用方法を見出していかなければならない。

量子暗号の研究においては、装置不完全性やサイドチャンネル攻撃への理解と対策を進めシステム全体での安全性を担保する枠組みを構築するほか、ネットワークとして効率的に動作させる仕組みや既存ネットワークとの融合、アプリケーション開発も進めていくことが重要である。量子中継の研究においては、各種量子メモリの系におけるコヒーレンス時間や操作精度の向上が引き続き求められるだけでなく、量子メモリの量子状態と光ファイバ中の通信波長帯にある光の量子状態との高効率な変換技術を成熟させていく必要がある。

(6) その他の課題

量子技術への国家プロジェクトや産業界からの投資がなされ、研究開発拠点が形成される中、世界的に量子技術の人材が不足していくことが予想される。特に、我が国に注目すると、時限的拠点による人材育成以前に、その基盤となる大学の教育体制や指導側で安定的地位についての人材が圧倒的に不足している。安定的地位の拡充など既存の研究者が研究と教育に専念できる環境や制度の構築、待遇改善による海外研究者の取り込みによって長期的に持続可能な教育体制を敷かなければ、量子技術の分野で世界と競争し存在感を示すことは難しいだろう。また、量子技術及び量子情報科学を専門とし分野全体を統合するような公的研究所が国内になく、科学技術上の問題を他の分野と共有し連携の輪を広げていくことも簡単ではない。

量子技術、量子情報科学に興味をもつ学生は増えているにもかかわらず、大学での体系的教育は既存のカリキュラムでは必ずしも対応できていない。情報処理推進機構が実施している未踏ターゲット事業などで突出した量子コンピュータ人材の育成が支援されているが、大学学部レベルでの教育を充実させてボトムアップを図ることも重要であろう。

(7) 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	○	→	阪大の量子情報・量子生命研究部門、慶応大の量子コンピューティングセンターに加えて、Q-LEAPのFlagshipプロジェクトにより理化学研究所でも拠点形成が進んでいる。Q-LEAPにおける複数の基礎基盤研究や、JSTのERATO、CREST、さがけなどのプロジェクトにおいて幅広く支援されている。しかし、加速度的に増えている海外の投資に比べると十分とは言えない。一方、日本発の光格子時計に関する研究では世界をリード。 量子通信の基礎理論（東大、名大、慶應大、富山大、玉川大、NTT、NII、三菱電機）、実験（阪大、横国大）の研究は着実に進められている。 QKD実装技術の開発拠点（NEC、東芝、北大、学習院大、NICT、玉川大）も少なくない。
	応用研究・開発	○	→	Q-LEAP量子情報処理領域のFlagshipプロジェクトでは、超伝導量子ビットを用いた量子計算プラットフォーム拠点の構築や3次元パッケージング技術の提案、100量子ビット以上の実装などを目指す。QunaSys社等、量子コンピュータのベンチャー企業も立ち上がった。イジング専用マシンについては、NEDOプロジェクトにおいて量子デバイスを用いたハードウェア、統合ソフトウェア環境整備、従来半導体デバイスを用いた専用マシンの研究開発が進められている。停滞期に比べると上昇傾向にあるものの、海外に比べると投資は多くない。 QKD実用化研究については、2010年にNICTらで構築された東京QKDネットワークによって、実証実験、長期安定性試験などが進められ、その成果をもとにNECと東芝で自社内QKD運用が始まっている。衛星量子暗号では、NICTが超小型衛星による微弱光信号伝送基礎実験に成功した。
米国	基礎研究	○	↑	国立研究所や大学において古くから量子技術、量子情報科学の基礎研究が続けられてきた。2018年末に成立した国家量子イニシアチブ法により、5年間で12億5000万ドルが投じられる。基礎研究、インフラ整備、成果とノウハウの集約、人材育成を重視。量子技術による完全秘匿ネットワークの重要性についても同法で言及され、今後の進展が期待。
	応用研究・開発	◎	↑	IT企業のGoogle、IBM、Intel（欧州と連携）、Microsoft（世界各国と連携）や、Rigetti computingやIonQなどに代表されるベンチャー企業で開発競争を繰り広げている。特にIonQは、イオントラップ方式で、2018年12月に160量子ビットを備え79量子ビットの演算を達成できる量子コンピュータの開発に市場で初めて成功した。Quantum Xchange社がId Quantique社と協業し、QKDネットワークサービスを開始した。ボストン-ワシントンDC間のQKDネットワーク化の計画を発表。
欧州	基礎研究	◎	↑	国立研究所や大学において古くから量子技術・量子情報科学の基礎研究が続けられてきた。2019年から10年で10億ユーロを超えるEU Quantum Technology Flagshipプロジェクトの20課題が開始予定。英国では、National Network of Quantum Technology Hubsの下、5年で1億2000万ポンドの国家プロジェクトが2014年から始まっている。その他、ドイツのマックス・プランク研究所における大気中（地上、衛星）でのQKD実験をはじめ、オランダQuTechを中心としたQuantum Internet Allianceやスイスのジュネーブ大による量子通信の研究もある。
	応用研究・開発	◎	↑	オランダQuTechがIntelやMicrosoftと量子コンピュータの実現や応用に向けた研究を進めている。英国では、東芝欧州研、British Telecom、ブリストル大などが中心となりケンブリッジ-ロンドン-ブリストルをつないだQKDネットワークUK Quantum Networkを建設（一部は稼働中）。ドイツにおけるQUARTZコンソーシアムの結成など、イタリア、スペイン、スイス、フランスの各国で進展が見られる。ETSIのワーキンググループでQKD標準化の準備活動が継続。

中国	基礎研究	○	↗	第13次五カ年計画の下、中国科学院を中心として、量子情報科学の拠点が形成されている。安徽省合肥市に1兆円規模の量子情報科学国家実験室が2020年の開設を目指して建設中。清華大、北京大などを中心として海外留学組の帰国や海外の研究者をクロスアポイントメントなどで招集し研究力の底上げが図られており、今後の飛躍は計り知れない。量子通信の分野では、中国科学技術大を中心に行われている量子暗号の研究、原子集団系を用いた量子中継の研究に注目。
	応用研究・開発	○	↗	アリババが中国科学院と共同で量子計算実験室を設置して超伝導量子ビットを用いた量子コンピュータの開発、クラウドでの提供を進めている。通信機器メーカーのファーウェイはクラウドの量子コンピュータシミュレーション環境を提供開始。 北京-上海間2000kmにQKDネットワーク Quantum Backbone Networkを敷設し2017年から新華社通信、中国工商銀行等が運用を開始。衛星-地上間のQKDによる秘密鍵生成、欧州との大陸間量子もつれ配送に成功。2017年から、国内の標準機関CCSA-ST7でQKDネットワークの標準化活動を活発に進めている。
韓国	基礎研究	×	→	量子暗号の研究が一部で見られるものの活発ではない。
	応用研究・開発	△	→	国内最大の携帯電話会社SKテレコムによる国際投資、国際標準化団体への寄与は見られるが、自国独自の動きは活発でない。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Immanuel Bloch, Jean Dalibard and Sylvain Nascimbène, "Quantum Simulations with Ultracold Quantum Gases," *Nature Physics* 8, no. 4 (2012) : 267-276. doi:10.1038/nphys2259
- 2) J. Zhang et al., "Observation of a Many-body Dynamical Phase Transition with a 53-qubit Quantum Simulator," *Nature* 551, no. 7682 (2017) : 601-604. doi:10.1038/nature24654
- 3) Hannes Bernien et al., "Probing Many-body Dynamics on a 51-atom Quantum Simulator," *Nature* 551, no. 7682 (2017) : 579-584. doi:10.1038/nature24622
- 4) R. Harris et al., "Phase Transitions in a Programmable Quantum Spin Glass Simulator," *Science* 361, no. 6398 (2018) : 162-165. doi:10.1126/science.aat2025
- 5) C. L. Degen, F. Reinhard and P. Cappellaro, "Quantum Sensing," *Reviews of Modern Physics* 89, no. 3 (2017) . doi:10.1103/revmodphys.89.035002
- 6) F. Jelezko and J. Wrachtrup, "Single Defect Centres in Diamond: A Review," *Physica Status Solidi (a)* 203, no. 13 (2006) : 3207-3225. doi:10.1002/pssa.200671403
- 7) Marcus W. Doherty et al., "The Nitrogen-vacancy Colour Centre in Diamond," *Physics Reports* 528, no. 1 (2013) : 1-45. doi:10.1016/j.physrep.2013.02.001
- 8) Romana Schirhagl et al., "Nitrogen-Vacancy Centers in Diamond: Nanoscale Sensors for Physics and Biology," *Annual Review of Physical Chemistry* 65, no. 1 (2014) : 83-105. doi:10.1146/annurev-physchem-040513-103659

- 9) I. Lovchinsky et al., "Nuclear Magnetic Resonance Detection and Spectroscopy of Single Proteins Using Quantum Logic," *Science* 351, no. 6275 (2016) : 836-841. doi:10.1126/science.aad8022
- 10) F. Shi et al., "Single-protein Spin Resonance Spectroscopy under Ambient Conditions," *Science* 347, no. 6226 (2015) : 1135-1138. doi:10.1126/science.aaa2253
- 11) Xing Rong et al., "Searching for an Exotic Spin-dependent Interaction with a Single Electron-spin Quantum Sensor," *Nature Communications* 9, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41467-018-03152-9
- 12) T. Nagata et al., "Beating the Standard Quantum Limit with Four-Entangled Photons," *Science* 316, no. 5825 (2007) : 726-729. doi:10.1126/science.1138007
- 13) Masahiro Kitagawa and Masahito Ueda, "Squeezed Spin States," *Physical Review A* 47, no. 6 (1993) : 5138. doi:10.1103/physreva.47.5138

2.4.7 二次元機能性原子薄膜

(1) 研究開発領域の定義

従来のバルク材料や単なる薄膜材料とは異なる特性・構造を持ち、新しい機能や従来材料の特性を凌駕する機能を発現することが可能な、原子の二次元的結合構造、あるいは、それと等価な二次元的電子状態を表面・界面などに有する機能性を持った原子薄膜材料を研究開発の対象とする領域である。次世代の電子デバイス・システムに求められる大幅な低消費電力化、小型化およびそこに付加される新機能の創出などが期待される。

(2) キーワード

グラフェン、二次元機能性原子薄膜、相対論的 Dirac 電子、h-BN、遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD)、トポロジカル絶縁体、機能デバイス、エレクトロニクス/スピントロニクスデバイス、二次元積層、透明電極、力学材料

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

1947年のトランジスタの誕生以来、半導体集積デバイス (LSI) の低消費電力化・高速化はスケールリング則に従う微細化・高集積化により達成されてきた。しかし、近年、物理的並びに経済的に微細化の限界が近づき、新材料・新原理に基づく新規デバイス、あるいはデバイスの三次元化や超並列化へと研究開発の指向性はより多面的な広がりを見せている。一方、光通信産業を中心とするナノフォトニクスデバイス分野では化合物半導体からシリコンフォトニクスへの代替が、また、ディスプレイ、太陽電池、燃料電池、蓄電池等の分野では、レアメタルフリー化が大きな潮流となっている。グラフェンを中心とする二次元機能性原子薄膜は、それらいずれの分野においても新材料、新原理の導入をもたらさう大きなポテンシャルを秘めている。

グラフェンは、2004年、Manchester大学のA. GeimとK. Novoselovが炭素一原子層のシートであるグラフェンの単離に成功し、その電子構造が質量のない相対論的 Dirac 電子としての特徴を有することを解明したことで急速に脚光を浴びた。この歴史的な研究成果により、両氏は2010年ノーベル物理学賞を受賞した。グラフェンのもつ質量の無い電子、究極の二次元機能性原子薄膜、炭素原子間の強い結合力、エッジの電子的・化学的活性といった特徴は、基礎科学の興味深い研究対象であるとともに、高速電子、スピン自由度、格子自由度はエレクトロニクス/スピントロニクスデバイスへの応用、力学的に強い二次元原子薄膜は力学材料、透明電極材料として、化学的活性は触媒応用へと、様々な応用への発展の可能性を秘めており、多くの産業応用が期待されている。このような背景のもと、EU、米国、韓国、シンガポール、中国等、世界各国では基礎科学から応用研究、産業実用化までを目指す大型プロジェクトや産業界での実用化に向けた展開が行われている。また、研究交流の場として、欧州を中心に Graphene 20XX、Graphene Week、アジア太平洋地域を中心として、International Conference on Recent Progress in Graphene Research (RPGR 20XX) 等の大きな国際会議が開催されている。

また、グラフェンや関連 2次元原子膜の活発な研究活動を反映して、2014年にイギリス物理学会が出版をスタートしたジャーナル 2D Materials は2015年度にインパクトファクター (IF) が初めて公表されて以降、高い水準 (IF = 9.6 in 2015, 6.2 in 2016, and 7.0 in 2017 @ JCR) を保っている。

[研究開発の動向]

日本でのグラフェンや関連二次元原子膜系の研究は、従来、科学研究費等による個人研究への財政的支援が主体であり、その中で多様な研究が物理、化学、材料科学の分野で展開されてきた。この中で、一部、JSTのCRESTや科学研究費特別推進研究等の大型研究の推進も行われてきた。

産業界では、世界的なグラフェン研究の展開のなかで、その応用と産業化での関心が高まり、2010年、化学技術戦略推進機構で企業の情報交換の場としてのグラフェン研究会が設けられた。その後、2011年には技術研究組合単層CNT融合新材料研究開発機構(TASC)グラフェン事業部が企業5社と産業技術総合研究所により設立された。現在、電気、化学関連企業を中心に研究開発が行われている。また、産総研グラフェンコンソーシアムが2013年に立ち上げられ、企業、行政、大学・研究機関の情報交換、連携の場として機能を果たしている。

グラフェンや原子膜の政府主体のプロジェクトは、2011年、NEDOの「希少金属代替材料開発」(H23年度)が最初であり、その後、2012年、NEDO「革新的ナノカーボン材料先導研究開発」(H24年度)、NEDO「低炭素社会を実現する革新的カーボンナノチューブ複合材料開発プロジェクト/グラフェン基盤研究開発」(H24-H26年度)、2013年文部科学省科学研究費新学術領域「原子層科学」(H25-29年度)、2014年NEDO「低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト」(H26-H28年度)、JSTのCRESTプロジェクトとして、「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」(H26-33年度)が推進されてきており、2013年以降、組織的で大きな取り組みが展開され始めている。

一方、海外に目を向けると、世界の主要国では、EUがGraphene Flagship(10億ユーロ)、韓国が350億円、シンガポールが150億円、イギリス100億円、アメリカが50億円/年と競って、グラフェンと関連物質の産業化を目指して大型の研究プロジェクトを走らせている。グラフェン製膜技術では、韓国Samsung ElectronicsとSung Kyunkwan大の共同による大面積グラフェンシートのRoll-to-Roll製膜技術の開発(2012年)は透明電極材料としてITOを駆逐するポテンシャルを示した1つの画期的な成果であった。しかし、透明性と低抵抗性(高導電率性)を性能指標として、現状ではITOを凌駕するには至っていない。グラフェン製膜技術の改良はCVD法においては米国テキサス大、SiC熱分解法では米国ジョージア工科大等の外国勢が先導してきたが、我が国の技術水準は高く、CVD法およびSiCの熱分解法によるエピタキシャルグラフェン製膜(九大、東北大)を実現し、それらの高い結晶品質は他の追随を許していない。また、Si基板上ヘテロエピタキシャルグラフェン製膜(東北大)でも先導している。グラフェンを中心とする二次元機能性原子薄膜のテラヘルツデバイス応用は、ノーベル賞受賞のマンチェスター大K.Novoselovらのプラズモニック応用に関する論文[A.N. Grigorenko et al., Nature Photon. 6, 749 (2012)]を1つの契機として、世界的に研究が過熱している。

表面・界面しか存在しない二次元物質グラフェンを導入して機能性デバイスを構成するためには絶縁体、半導体、金属との接合が不可欠であり、h-BN(ヘキサゴナルボロンナイトライド)やDLC(ダイヤモンドライクカーボン)などの絶縁材料と、MoS₂やWS₂をはじめとする遷移金属ダイカルコゲナイド系(TMD)半導体材料が半金属のグラフェンとのヘテロ接合に適する相補的二次元材料として注目され、シリコン二次元原子膜シリセンやトポロジカル絶縁体を含めて、グラフェン単体の研究からBeyond Grapheneの研究へと世の中の潮流がシフトしている状況にある。

我が国のファンデルワールス二次元原子薄膜材料製成技術の水準は高く、特に、NIMSの谷

口、渡辺らによる独自の超高压製成法による高品質バルク h-BN は、その高い結晶品質で他の追随を許さず、世界中の研究者に提供され、二次元原子薄膜ヘテロ接合デバイスの作製に欠かせない材料となっている。現在、CVD (化学気相成長) 法や MBE (分子線エピタキシー) 法等の技術によって h-BN や TMD 材料の高品質ヘテロエピタキシャル成長技術研究が加速している。我が国は、CVD 法による多層 h-BN の均質・大面積製膜の実現 (九大, ACS Nano 17, 5595-99 (2018)) や、MBE 法による WSe₂ の layer-by-layer でのサファイヤ基板上製膜の実現 (東大, Nano Lett. 17, 5595-99 (2017)) などで先導している。

デバイスへの応用としての具体的な取り組みとしては、ポスト Si CMOS 技術として 2000 年代にグラフェンが究極の短チャネルフリーかつ極限高速トランジスタ実現の材料候補として検討されたが、安定な不純物ドーピング技術や低オーミック接合技術の困難性によってその研究は下火となった。二次元材料のトランジスタ応用に関しては、2010 年代後半から MoS₂ をはじめとする TMD 材料をチャネル材料として導入した FET デバイスプロセス研究が大きく進展している。当該分野での我が国の国際競争力の低下が懸念される。一方、グラフェンの特異な光電子物性を活用したバイオセンサー応用やテラヘルツフォトンクス・プラズモニクスデバイスへの応用研究が大きく進展しており、それらの分野では我が国の競争力は高い。

二次元材料のデバイス応用研究に関する我が国の国際競争力は、当該分野で世界的権威のある IEDM (International Electron Devices Meeting) や新材料・新構造・新原理デバイス誕生のメッカとして長い歴史を誇る DRC (Device Research Conference) への論文採択実績を見る限りでは、相対的に地位低下を来しており、中国の台頭がめざましい。新規な物理現象、化学現象を信号処理機能としてデバイスに応用するための基礎基盤研究の強化、二次元原子・分子薄膜ヘテロ接合材料としての超高品質ヘテロエピタキシー製膜技術および工業的量产化高品質製膜技術、In-Situ およびデバイス実動作状態下での材料・界面の物性評価解析技術、デバイスプロセス技術、Si-CMOS や Si フォトニクスの延長線上にある集積デバイス・集積回路技術、デバイス応用に関する研究開発力向上のための人材育成、研究開発施策などが重要である。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

従来の絶縁体、半金属、超伝導体になかった電子機能の宝庫として、トポロジカルな電子状態をもつ物質に注目が集まっている。中身は絶縁体で、表面にはグラフェンに類似した質量ゼロで高移動度の 2 次元金属状態をもつトポロジカル絶縁体は、応用に向けた研究のフェーズに入ってきている。低いバルク絶縁性のために表面だけにある特殊金属状態の利用が妨げられるという大きな問題があったが、これを克服できる「高絶縁性トポロジカル絶縁体」の組成が確立しつつある。また、量子ホール効果を外部磁場無しで実現できる「強磁性トポロジカル絶縁体」の薄膜作製技術も進展しており、この量子異常ホール効果が観測される温度は 1 桁向上した。トポロジカル絶縁体と従来絶縁体の電子構造をつなぐ境界には、バルク全体でバンドギャップの閉じた 3 次元グラフェンと見なせる電子状態の出現が予想されている。通常はスピン縮退した「3 次元ディラック半金属」と呼ばれる電子状態を持つが、結晶構造の空間反転対称性の破れや強磁性による時間反転対称性の破れが重畳すると、スピン縮退の解けたディラック電子分散がキラルな対として現れ、これは「3 次元ワイル半金属」と呼ばれる。これらの電子状態をもつ数種類の化合物が発見され、非磁性物質にも関わらず異常に大きな磁気抵抗 (10 テス

ラの磁場で約 100,000%) を示すことなどからも大きな注目を集めている。「トポロジカル超伝導体」では、新原理の量子計算を可能にするマヨラナ粒子 (自身と反粒子が一緒に従来にない統計性をもつ未発見の準粒子) を表面にもつとして、実験実証を目指した研究競争が活発化している。最近日本からも有力な候補物質の発見が報告された。

2011 年頃まで加速度的に拡大・進展したグラフェンのトランジスタチャンネル材料応用研究は、今や完全に MoS_2 や WSe_2 等の遷移金属ダイカルコゲナイド系原子薄膜をチャンネル材料とする FET デバイス研究にシフトしている (2018 年 6 月米国開催の第 76 回 Device Research Conference では全 55 件のオーラル講演のうち 11 件が二次元原子薄膜デバイス関連で全体の 20% を占めた)。

素材の産業応用としては、大面積量産化グラフェン製膜技術によるグリーンエネルギー応用のタッチパネル・太陽電池用透明電極、および蓄電池応用が先行し、 MoS_2 や WS_2 等の二次元ダイカルコゲナイド半導体によるフレキシブル TFT の量産化がさらに続くであろう。

機能デバイス応用研究では、グラフェンの特異な光電子物性を活用したバイオセンサー応用やテラヘルツフォトンクス・プラズモニクスデバイスへの応用研究が大きく進展しており、それらの分野では我が国の競争力は高い。バイオセンサー応用では、グラフェントランジスタ構造によってインフルエンザウィルスの選択的な高感検出に成功 (阪大, Jpn. J. Appl. Phys. 56, 030302 (2017)) しており、産学連携による商用化への今後の展開が期待される。

グラフェン単体の各種物性応用から、グラフェン (G) /h-BN/ グラフェン (G) ヘテロ接合を介した共鳴トンネリングやスピン注入など、二次元機能性原子薄膜ヘテロ接合に発現する物性機能応用へと研究動向が進化している。また、単層のみならず、多層の h-BN が、グラフェンおよび二次元材料を利用した実デバイスで必要となる誘電体層、原子レベルで平坦でダングリングボンドがない基材として望まれている。そのような中で、多層 h-BN の CVD による大面積合成技術の開発も精力的に進められている。2015 年以降、韓国・米国による (韓国 Dongguk 大、Sungkyunkwan 大、米国 MIT など) 発表が相次いでいるが、膜の均質性に課題があった。2017 年九大・吾郷教授 G によって、大面積かつ高均質な多層 h-BN の製膜が実現されるに至った。半導体集積デバイスに関連する最大・最高権威の国際会議として認知されている第 63 回 IEEE International Electron Devices Meeting 2017 (2017/11/26-12/1, 米国サンフランシスコ開催) では、240 件に上るオーラル発表のうち、約 9% の 22 件が二次元原子薄膜材料デバイスに関する内容であり、特に MoS_2 等遷移金属ダイカルコゲナイドの FET チャンネル応用の研究が加速しており、ポスト Si-CMOS テクノロジーとしての議論が活発化している。研究動向は、単体デバイスから集積デバイスへの展開が広がりを見せている。それら 22 件の関連論文の国別分布は米国 (全て大学) 10 件、中国 (全て大学) 5 件、スイス (全て大学) 3 件、日本・韓国・シンガポール・サウジアラビア各 1 件であった。中国の台頭がめざましいとともに、我が国のプレゼンスが低下している。

超高周波ミリ波・テラヘルツ波・光波領域の光電子デバイス分野では、光検出器・変調器・フィルタ・ミキサ等のメタマテリアル・フォトリック結晶を含むプラズモニクスデバイス開発が進展し、その後増幅器、レーザー光源、スピントロニクス等の能動デバイス開発が続く。

利得媒質としてのテラヘルツレーザー応用は日本発の理論提案で、電流注入によるテラヘルツレーザー発振およびテラヘルツ広帯域増幅自然放出を実現 (東北大, Nanophotonics 7, 741-752 (2018)) するなど、我が国が実験検証も先行している。一方、物性としての非平衡キャリ

アダイナミクスの実験研究で先行する独 Max Plank Institute, ベルリン工科大、米 Columbia 大、Cornell 大等が、デバイス研究開発に本格参入し、国際競争が過熱してきている。

また、上述したアジア太平洋地域における最大規模のグラフェン関連の重要な国際会議 RPGR が 2013 年に日本で開催され、世界各国から 420 名の参加者があった。RPGR 2013 は日本で最初のグラフェンに関する大型国際会議であったが、それを契機として我が国の当該学術分野におけるプレゼンスが高まっている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

2013 年以降、日本においてもグラフェンと関連分野の研究での急速な進展が出てきている。2013 年度にグラフェン関連領域：文部科学省科学研究費新学術領域「原子層科学」(H25-29 年度) が採択され、さらに、2014 年度に NEDO の「低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト」(H26-28 年度)、JST の CREST 新領域として、「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」(H26-33 年度) が発足するに至り、ようやく国家規模での研究開発投資体制が整ってきた。

2013 年に企業、行政、大学・研究機関の情報交換、連携の場として産総研グラフェンコンソーシアムが設立された。また、日本と EU (Graphene Flagship) との情報交換の場、Japan-EU Workshop on Graphene and Related 2D Materials は 2015 年に第 1 回が東京、2017 年に Barcelona で開催され、2018 年に仙台で開催された。日欧双方の第一線研究者が一堂に会しての情報の共有を踏まえて、日本、EU のそれぞれの得意分野を基礎に共同研究、研究者交流の推進を計画している。

EU では Graphene Flagship (2013 年 10 月発足、10 億ユーロ、74 研究機関、17 ヶ国) の他、グラフェンの CVD 合成技術開発での遅れを取り戻すべく GLADIATOR(2013.11.15 ~、3.5 年、173 億円、民間企業 8、大学・研究機関 6) で大面積合成、製造コスト低減、デバイス開発に取り組み、さらに GRAFOL (2011.10.1- 2015.9.30、15 億円) で CVD の合成温度の低温化、ロール・ツー・ロール合成技術、デバイス開発などに取り組んでいる。また、関連するプロジェクトとして、FLAGERA が基礎科学への支援 (10M € /2 年) を行っている。

Flagship では、16 分野中 1 分野が beyond graphene を含む基礎科学、5 分野がデバイスに関連 (高周波 / 光電子 / スピントロニクス / センサー / フレキシブルエレクトロニクス / エネルギーデバイス) している。デバイス研究では、beyond graphene ヘテロ接合デバイス応用のマンチェスター大、オプトエレクトロニックデバイス応用のケンブリッジ大等が先導している。

さらにヨーロッパではグラフェンの工業利用を促進するため、Graphene Flagship とは独立に、新たなプロジェクト “Graphene & 2D Materials” EUREKA Cluster が立ち上がっており、参画機関 190 (うち企業 125 社) が参加している。このプロジェクトはヨーロッパ以外からも韓国、カナダ等が興味を示しており、国際的な連携を進めている。

シンガポールでは、Graphene Research Centre を活動の中心として、US\$ 150 M の研究費が支援されていたが、2014 年には、新たに US\$ 50 M (10 年間) が支援され、Graphene Research Centre は、多様化した 2 次元膜の研究展開を踏まえ、Centre for Advanced 2D Materials (CA2DM) と改名され、beyond graphene の研究を展開している。

韓国では Korea Graphene Hub project (2012 ~、6 年、210 億円) でタッチパネル、有機 LED、エレクトロクロミック窓、2 次電池、スーパーキャパシタ、コンポジット、などの開発を

実施中である。2014年には、Graphene Commercialization Technology Roadmapを立上げ、CVD グラフェン、グラフェンフレック材料を用いた6の戦略分野（透明電極、ガスバリアー、エネルギー、熱放射材料、コンポジット材料、エレクトロプリンティングインク）の応用技術の展開を進めている。

中国は2013年12月に「重慶グラフェン産業パーク」建設の計画を発表した。さらに2016年6月のnature materialsには、下記のような中国でのグラフェンの研究開発状況のレポートが掲載された：中国国立科学財団（NSFC）は2014年までに6,000万ドル以上をグラフェンプロジェクトに投資した。2015年8月末までにグラフェンに関する論文の34%は中国からで、米国の19%を越えている。また中国からのグラフェン技術に関する特許は世界のグラフェン関連特許の38%を占めている。科学技術省がオーナーとなり、工業界・大学・研究機関によるグラフェンの商品化をサポートする目的の研究共同組合、China Innovation Alliance of the Graphene Industry (CGIA)が2013年に設立された。世界最大の情報通信装置メーカーHuawei Technologies Co. Ltd.も参画している。中国最大のChangzhou（常州市）グラフェン工業パーク（面積6km²）が2013年に設立された。現在70社以上が集まって地域グラフェン工業クラスターを形成している。ここにはSixth Element社（グラフェンパウダー100トン/年）や2D Carbon社（グラフェンフィルム50,000m²/年）が含まれる。同様のグラフェン工業パークがWuxi（無錫）およびQingdao（青島）にもある。また2017年にはBeijing Graphene Instituteが設立され、工業用途に資するCVDグラフェン製造技術、ウェアラブルエレクトロニクスなどの開発を推進している。

米国からは上記のような大規模プロジェクトの話は聞こえてこないが、Beyond CMOS (2013/5/8発表、5年間、5MUSD、SUNY' S College of Nanoscale Science, the University of Nebraska-Lincoln、University of Texas at Austinの3大学に配分、マルチ大学ネットワーク（34大学、17州が参画）、

NRI (Nanoelectronics Research Initiative: 半導体、ナノテク関連の連携組織でGLOBAL FOUNDRIES, IBM, Intel, Micron Technology and Texas Instrumentsが参画)、など大きくはないが的をしぼった公的資金による応用開発を実施中である。さらにNRIが主導するプロジェクトとしては、AFOSR (Air Force Office of Scientific Research)が支援する基礎科学研究10課題の1つとして”2D Materials and Devices beyond Graphene” (代表 Prof. Ajayan, at Rice Univ.)を10億円規模で推進中である。CVDによるMoS₂原子膜のSiO₂/Si基板上直接成膜やグラフェン/h-BN/グラフェンナノキャパシタの製膜・解析を報告するなど、二次元原子薄膜ヘテロ接合構造体の製膜とデバイス応用で先導している。また、EUのGraphene Flagshipと類似なNSFのプロジェクトTwo-Dimensional Crystal Consortium Materials Innovation Platform (2DCC-MIP) (2016-2021, \$15M)がPennsylvania State Universityをセンターとして活動している。

IPから見た実用化動向は、2015年の調査資料によると、特許出願件数のランキングは中国(11,316件)、米国(5,330件)、韓国(3,810件)、英国(80件)である。企業別にはSamsung Electronics(422件)、KAIST(168件)、IBM(167件)となっている(日本の企業、研究機関はトップ10に入っていない)。

CVDで製造するグラフェン原子層膜の商業ベースの供給は、用途開発に供する大面積とい

う観点では世界的にもまだまだ不十分な状況である。英国の BGT Materials 社は可視光透過率 97% 以上 (ほぼ単層グラフェン) でシート抵抗 300 ~ 600 Ω (ドーピングなし) のグラフェンを販売している。CVD の基材である銅箔から転写してドーピングなしの状態では移動度 2000 ~ 4000 cm^2/Vs を保証している。同社の HP では、24 インチ \times 300 インチの銅箔基材に積層したグラフェンを 55,000 £ GBP で販売している。日本では 2017 年に大面積の CVD グラフェンの供給と用途開発を目的とする株式会社エアメンブレンが創立した。同社は単層および 2 層グラフェンによる最大 A4 サイズまでのグラフェン透明導電フィルムを販売している。

また 2015 年 7 月 31 日に (株) カネカは技術研究組合単層 CNT 融合新材料研究開発機構および NEDO と共同で、樹脂フィルムの高温処理で作製する厚さ 1 μm の多層グラフェン膜を高エネルギー加速器のビームセンサー用材料として販売を開始する旨、発表した。さらに 2016 年 7 月 14 日に日立マクセル(株)はグラフェンコート振動板を採用したハイレゾリューション・オーディオ対応ヘッドフォンの発売を発表した。

(5) 科学技術的課題

今日、グラフェン・二次元機能性原子膜の研究は多岐にわたっており、基礎科学から応用技術、実用化等には様々な科学技術的課題ある。グラフェンを用いたエレクトロニクスデバイス、スピントロニクスデバイスに関しては、電子線リソグラフィを用いたトップダウン型のナノ加工技術を用いた研究に加え、前駆体分子を目的に合わせてデザインし、基板上での触媒反応による高分子化や CVD 法を用いて、原子レベルで精密な構造を持ち、再現性のあるグラフェンナノリボン、Y ジャンクション等のナノ構造を作成するボトムアップ型の手法が大きな注目を浴びつつあり、ドイツ、アメリカ、日本等で精力的な研究が進められている。原子レベルで正確な構造を作れること、ヘテロ原子を位置選択的に導入できること等で、目的とする機能に合わせて作成できることから、将来のエレクトロニクス/スピントロニクスデバイスや単分子素子の観点からも重要な基礎科学と応用技術となるものである。

また、二次元積層や二次元膜の接合によるヘテロ構造についても注目が集まっており、イギリス、アメリカ、日本他、世界各国で広範な研究が展開されている。グラフェン、遷移金属カルコゲナイド、黒リン等の二次元原子膜を積層することにより、それぞれの膜固有の電子構造を複合し、様々な機能が検討されている。また、遷移金属錯体を二次元原子膜とするヘテロ構造も作成されている。ここで注目すべきことは、ロボットを用い、正確に層数、種類の異なる膜の順番、二次元面内での方向を決めて、積層ヘテロ構造を作成する技術が開発されてきていることである。異なる二次元膜を接合した単一原子層膜についても注目が集まっている。

二次元原子薄膜およびそのヘテロ積層構造のミリ波・テラヘルツ波機能応用に関しても、グラフェン、遷移金属カルコゲナイド、黒リン等の二次元原子膜を積層することにより、それぞれの膜固有の電子状態の複合によって得られる新しい機能応用の探索研究が広がりを見せている。WSe₂ や黒燐をチャネルとする MOSFET による高スイッチング比の CMOS 論理 IC や RF アナログ IC の性能向上が米国、ドイツを中心に活発化している。テラヘルツレーザー応用としては、グラフェンを利得媒質とするグラフェンチャネルトランジスタレーザーの発振動作が我が国によって初めて実現されたが (Nanophotonics 7, 741-752 (2018))、100K での動作実証であり、今後の高温動作化に期待がかかる。遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) 材料や BixSe_y 等のトポロジカル絶縁体材料などの二次元材料のテラヘルツ時間分解分光計測に

よる超高速非平衡キャリアダイナミクス、特に新しい動向としては、高強度レーザーパルス照射によって縮退が解けてできる電子の量子準位: Dressed state の機能性応用にも注目が集まっている (CLEO 2018 ではテラヘルツ科学技術関連のセッション・発表が大盛況であったが、二次元材料関連の発表は少なかった)。

透明導電フィルムは有機 EL、各種ディスプレイ、タッチセンサー、ウェアラブルデバイス、色素増感太陽光発電など原子層グラフェンの適用が期待されている最大のマーケットである。しかし現行の ITO 透明導電フィルムと競合する分野が多いため、難航している。キャリア数の少ないグラフェンは導電性の点で ITO に対して劣勢にある。グラフェンの屈曲性・耐腐食性・高温耐性・薄さなどの特長を如何にして生かすかがポイントである。グラフェンは硝酸、塩化金溶液などを用いた湿式ドーピングにより大幅な低抵抗化が可能であるが、長期安定性に課題があり、この解決が実用化のポイントの一つである。コスト低減のための量産性に関しては、ロール・ツー・ロール方式の CVD 合成技術開発が、AIXTRON (ドイツ)、MTI (アメリカ)、産総研 (日本)、Beijing Graphene Institute (中国) などで精力的に進行中である。韓国では ETRI を中心としてグラフェン透明電極を利用したフレキシブルグラフェン OLED パネルの開発が進んでおり、2018 年 6 月の Graphene2018 国際会議 (ドレスデン) で展示を行った。

酸化グラフェンは大量生産ができるグラフェン関連物質であり、その電子機能、化学活性機能等から電子材料、化学機能材料としての注目が集まっている。また、バイオ技術への応用として、グラフェンを用いたシークエンサーについても興味を持たれ、研究が展開されている。

(6) その他の課題

日本のグラフェン・二次元機能性原子膜の研究開発については、研究への関心、予算規模、また、産業界の活動等、世界の先端からは大きく水をあけられている。文部科学省科学研究費新学術領域「原子層科学」(H25-29 年度) では、基礎研究において一定の成果を生み出したが、H29 年度には終了しており、グラフェン・二次元機能性原子膜への新たなプロジェクトの計画もない。世界各国では、例えば、EU の Graphene Flagship 等、基礎研究から応用研究、実用化研究への技術移転の流れが加速しており、大学・研究機関と産業界の連携が密接となってきた。一方、日本では従来から裾野の広い物質科学の研究が行われており、グラフェンと関連物質の研究開発には大きなポテンシャルを有するとともに新たな研究成果も多く生まれ、国際的にも学術的優位性を維持している。にもかかわらず、大学・研究機関と産業界の連携は十分には行われていない。日本の基礎科学での強みを生かして、研究の組織的な展開を促すと同時に、産業界との強い連携をより一層推進する取り組みが求められる。

新材料創製、デバイス学理創造には、基礎物理、基礎化学に立ち帰った基礎基盤研究の推進が欠かせない。二次元機能性原子薄膜材料を科学技術イノベーションとして将来の新産業創出に結実させ、我が国がこれを主導するためには、デバイスからシステム応用までを俯瞰した目的志向型の材料・プロセス技術の革新が求められる。これらを相補的に推進するためには、省庁の垣根を越えた柔軟な産学官連携研究の推進体制・制度の構築が不可欠である。

(7) 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	○	↗	従来から日本はグラフェンや二次元薄膜の研究では、先導的な多くの業績があった。グラフェンの電子構造理論の先駆的研究、現在、エレクトロニクス・スピントロニクスへの発展から世界的に大きな注目を集めているナノグラフェンについては日本からの研究がその端緒となっている。電子物性理論・実験、物質合成等でも幅広い研究がある。電子顕微鏡を始め原子オーダーの構造解析では世界最先端と言える。h-BN は日本のオリジナルであり、世界の研究者のグラフェンや2次元原子層物質の研究の基礎を支える重要な役を担っている。また、シリセンでもエピ製膜で最先端の位置を確保している。2013年に科学研究費新学術領域「原子層科学」プロジェクト、2014年にJST-CREST「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」研究領域がスタートし、化学、物理、材料科学、デバイス工学分野の研究者が連携して研究を推進する体制の強化が進んだ。しかしながら、「原子層科学」プロジェクトは2017年度に終了し、プロジェクトによって培われた研究のアクティビティや成果、更なる展開を行うための受け皿、研究予算は現状ではない。
	応用研究・開発	○	→	TMD材料導入によるポストSi CMOSデバイス研究では欧米に水を空けられ、中国の台頭を許している。一方、グラフェンの特異な光電子物性を活用したスピン注入制御とその応用、バイオセンサー応用、テラヘルツプラズモニクス・フォトニクス応用、グラフェン金属の界面化学・物理と電子デバイス応用等の分野で日本は世界のトップレベルである。Beyond Graphene材料のデバイス応用も層が厚く、国内最大の会議：応用物理学会2018春季講演会では関連論文の発表件数は70件にのぼる。しかしながら、権威ある国際会議(IEDM, DRC, MRS)でのプレゼンスが低下している。2014年、JSTのCRESTプロジェクトとして、「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」がスタートし、基礎的研究から応用研究への展開が推進されてきている。また2014年からNEDO「低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト」(H26-H28年度)も開始され、実用化に向けたプロジェクトが軌道に乗り、その成果が出はじめている。2013年、産総研グラフェンコンソーシアムが立ち上げられ、企業、行政、大学・研究機関の情報交換、連携の場として機能を果たしている。
米国	基礎研究	◎	↗	2D原子層物質の新規開拓、2Dインターカレーションヘテロ構造、グラフェンナノ構造、グラフェン・2次元原子膜ヘテロ構造、2D超伝導体、2D強磁性体、表面プラズモン・ポラリトン、2D Bose-Einstein凝縮、光電子量子スピン基礎物性、非平衡キャリア緩和等と多岐にわたり、欧州とならんで基礎研究に強い。グラフェン、二次元原子膜の物理、化学、材料科学等で伝統的に優れた研究成果を生み出しており、裾野は広い。個人研究が主体であり、プロジェクト的な研究は余り行われていない。ファンドの主体はDARPA, NSFで、研究費総額は基礎、応用を含めて、およそ50億円/年程度である。
	応用研究・開発	◎	↗	応用研究でも研究の活発な展開が行われており、優れた研究成果を生み出している。研究費総額は基礎、応用を含めて、およそ50億円/年程度である。トランジスタデバイス応用は当初、IBMが先駆的成果を上げ、その後多くの大学・民間研究機関が世界を先導している。NRI(Nanoelectronics Research Initiative)が主導する半導体・ナノテク関連のFunding AgencyとしてAFOSR(Air Force Office of Scientific Research)が支援する基礎科学研究10課題の1つとして”2D Materials and Devices beyond Graphene”を10億円規模で推進中である。MoS ₂ 等遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)半導体二次元製膜技術とそのトランジスタ応用、G/h-BN/Gナノキャパシタを中心とする二次元原子膜ヘテロ接合形成でも最先端を走っている。2D超格子を用いたバンドエンジニアリング、エネルギーストレージ、2D原子膜での欠陥・不純物制御、2Dインターカレーション系を用いた次世代interconnectsへのチャレンジも行われている。また、TMDをチャネル材料とするFETデバイス応用研究が加速しており、ポストSi-CMOSテクノロジーとしての議論が活発化している。研究動向は、単体デバイスから集積デバイスへの展開が広がりを見せている。

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

欧州	基礎研究	◎	↑	基礎物性ではノーベル物理学賞受賞者を輩出した英国、光電子物性、プローブ顕微鏡を用いた電子物性研究、グラフェンナノ構造のボトムアップ合成ではドイツ、スイス、スピントロニクス・製膜ではフランス、プラズモニクスでは英国・スペインと世界トップの実績を出している。各国が特色ある強みを持っている。Graphene Flagshipのプロジェクトは、基礎研究を応用展開に結びつける役割を果たすと期待され、その流れも進んできている。
	応用研究・開発	◎	↑	2013年にEUでの大型プロジェクトGraphene Flagship (2013-2022、総額10億ユーロ)がスタートし、多くの大学、研究機関の参加のもと応用に向けた様々な分野での研究が展開されており、独自の研究開発でリーダーシップをとりつつある。Flagshipでは16分野中1分野がbeyond grapheneを含む基礎科学、5分野がデバイスに関連している。これら6分野を毎年50億円規模で10年間に亘り支援する。Graphene FlagshipにはAirbus、NOKIA等、様々な企業が参加、参加予定をしており、応用研究での成果の産業化、商品化への展開が進んでいる。特に、独アーヘン工科大学とそのベンチャー企業AMO GmbHは大口径Si基板上へのCVDグラフェン製膜・転写技術およびインクジェットグラフェン印刷製膜、トランジスタ集積加工プロセス・高速グラフェンフォトディテクタの実用化で進展著しい。Manchester大からのSpinoutによるGraphene Research Com.や2-DTECHをはじめ、ベンチャー企業化も継続して活発である。
中国	基礎研究	○	↑	応用研究に比較すると基礎研究力は低いが、基礎研究も急速に大きくなってきおり、固体物性実験・理論、材料科学領域でも大きな存在感のある展開をしている。2011年より第12次5か年計画において、戦略的振興産業(全7産業)として「新素材」を指定。重大科学研究計画で「ナノ研究」を指定。基礎研究も規模・質ともに向上している。
	応用研究・開発	○	↑	グラフェンの産業化も活発に進められており、特許登録数も世界でトップとなっている。The Sixth Element社およびNingbo Marsh社がグラフェン材料製膜・サプライヤとして主要企業とされるが品質は欧米日に劣るとの評価。グラフェンの商品化をサポートする目的の研究共同組合、CGIAが2013年に設立され、70社以上が集積して地域グラフェン工業クラスターを形成している。
韓国	基礎研究	○	→	各大学、研究機関で材料科学、物理等のグラフェン研究が盛んに行われており、KIASで2009年アジア最初の大規模なグラフェンの国際会議が開催され、アジアのグラフェン研究の中心的役割を果たし、アジアのコミュニティーでの情報交換の場、International Conference on Recent Progress in Graphene Research (RPGR)をリードしている。Institute of basic science program (2013-2022、総額90億円)がスタートし、この中では、外国の著名な研究者も参加している。
	応用研究・開発	◎	↑	Global Frontier Program : Soft electronics (2011-2020、総額81億円)のプロジェクトがスタートし、約30の研究グループが参加し、新しいプロセス、デバイス等、フレキシブルエレクトロニクスを目指した研究が展開されている。2012年のSamsungとSung Kyunkwan大の共同による30インチのグラフェンシートのRoll-to-roll製膜はディスプレイ応用に特化した先導的成果として有名である。KAIST, National Seoul大もグラフェン・二次元薄膜デバイス応用の研究拠点になっている。R&D strategic program (2013~2019、総額110億円)のプロジェクトが行われ、タッチパネル、OLED、エネルギーデバイス等のグラフェン応用の商品化に向けた研究が行われている。

(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範囲

応用研究・開発フェーズ：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(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。

◎：特に顕著な活動・成果が見えている、○：顕著な活動・成果が見えている、

△：顕著な活動・成果が見えていない、×：活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Technical Digest of the 76th Annual Device Research Conference (2018)
- 2) Xiao, Xiaoyue, Yichun Li and Zhaoping Liu, "Graphene Commercialization," *Nature Materials* 15, no. 7 (2016) : 697-698. doi:10.1038/nmat4665

2.4.8 生物機能インスパイアード材料・システム

(1) 研究開発領域の定義

自然界に存在する生物の構造や機能から着想を得て、新しい材料やデバイス・システムの創出を目指す研究開発領域である。生物のもつセンシング、エネルギー変換、情報処理、自己修復、自己組織化などの優れた機能の発現メカニズムについて理解し、それを人工物で再現すること、あるいは生物そのものの機能を工学的に利用することを指向して研究開発が進められている。コンピュータの援用による DNA 配列設計やペプチド・タンパク質設計に基づく機能創出などもおこなわれている。

(2) キーワード

バイオインスパイアード、バイオミメティクス、生体模倣、ソフトロボティクス、バイオハイブリッド、分子ロボティクス、人工細胞、Organ-on-a-chip、バイオ電池、匂いセンサ、DNA ナノテクノロジー、DNA コンピュータ、ゲノム合成

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

自然界に存在する生物は、高度に最適化されたシステムとして我々に多くの知見を与える。生物の構造・機能を参考に開発された材料・デバイス、それらを用いたシステムは、省エネルギー、感度、効率等の面で大きな性能向上が期待される。また、近年では、機能性分子や機能性ナノ粒子の化学合成とその自己組織化技術が進展し、生物機能にインスパイアされた高効率の触媒、刺激応答性材料、高エネルギー効率材料、生体親和性材料などの開発が可能になりつつある。生物システムが持つ複雑・高機能な特徴を人工的に実現することは、さまざまな分野への応用が期待されるのみならず、生命システムのメカニズムを構成論的に解明するという観点から学術的にも意義がある。

一方、現状では、自己修復や自己増幅、高効率の代謝機能や高感度センシングなど、生命特有の高次機能を人工物だけで完全に実現するには至っていない。よって、生物あるいは生物を構成する物質を用いて、生物そのもののもつ機能を工学的に利用することも重要な課題であり、そのための構成論、制御論などの追求、体系化が求められている。生物や生体物質の利用には不安定性や不均一性などの課題があるが、最近のゲノム編集や iPS 細胞技術などの進展により、細胞を自在に操り制御する技術の実現が間近に迫っており、これらの技術とナノテク・材料・デバイス技術の融合によって、生物機能を直接利用したデバイス・システム創出への期待が高まっている。

[研究開発の動向]

生物が有するユニークな構造・機能、高度に最適化されたシステムにインスパイアされて開発された材料やデバイスは、動力源の高効率化、軽量化による省エネルギー化、センサの高密度化など優れた特性の実現につながるとして期待されている。蓮の葉、蝶の羽、イモリの足などを模倣したナノ・マイクロ構造によるバイオインスパイアード材料は、今世紀入った頃から研究開発が活発になり、特に 2010 年頃から論文数の増加が顕著になった。その後、研究の中心は材料分野や物理化学分野から電気・電子工学、計算機科学、ロボティクスの分野へシフト

する傾向が見られ、センサ、アクチュエータ、およびロボティクスに関する研究が盛んになっている。特に近年では、ロボットを柔軟で変形しやすい構造でデザインするソフトロボティクスの分野が世界的に活発化している。また、生物そのものの機能を活用するために、生物や生体物質を人工の材料・デバイスと融合する研究も米国を中心に盛んになっている。特徴的な研究として、心筋細胞で動くエイ型ロボットや、心筋細胞とセンサをハイブリッドした心臓チップが挙げられる。今後は DNA や膜タンパク質、細胞、組織などに見られるシグナル増幅や高効率エネルギー変換、センシングなどの機能を人工の材料デバイスと融合し、システム統合するための研究開発が進展していくと予想される。

また、近年における新しい方向性として、DNA やペプチドをコンピュータなどの援用によって設計・合成し、分子の自己組織化によって機能性のシステムを構築する「分子ロボティクス」および「人工細胞工学」の分野の進展があり、細胞のように刺激応答する感覚機能や、知的な動作を持つ分子デバイス・システムの実現が期待されている。分子ロボティクスは、1994 年に Adleman によって発表された DNA 会合反応によって計算を実現する DNA コンピューティングと、DNA 会合反応によって自己組織化したナノメートルサイズの構造 (DNA ナノ構造、DNA タイル、DNA オリガミ) が起源であり、当初は個々の DNA デバイス、DNA ナノ構造の構築を目指した研究がそれぞれ別個におこなわれていた。その後、技術の高度化に伴って複数の機能を融合 (システム化) することが可能になり、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作り上げる分子ロボティクスという概念が日本の研究グループによって提唱された。一方、人工細胞工学は、生命の起源を探るための化学や物理学の分野として勃興したが、単純な化学物質のレベルから、DNA 導入やタンパク質発現など実際の細胞を模倣できるレベルにまで技術が進み、近年では細胞を構成的な手法によって解明することを目標とする生命科学の分野へと研究領域が拡大している。分子ロボティクスが情報デバイスとしての特徴を持つ微小なロボットの構築を目指し、医薬分野・材料工学を含む広範囲な分野での応用が見込まれるのに対して、人工細胞工学は細胞を模倣した小胞型システムの構築と、細胞の機能改変をベースに、再生医療等の医療応用を中心に期待されている。技術的には、分子ロボット・人工細胞ともに、マイクロ流体技術・MEMS 技術など電気・機械デバイスとのハイブリッド技術が模索されている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

ソフトロボティクス

ロボットを柔軟で変形しやすい構造でデザインするソフトロボティクスの分野が世界的に活発化している。IEEE Robotics and Automation Society に Technical Committee on Soft Robotics が設立され、2018 年 4 月には、The 1st IEEE International Conference on Soft Robotics – RoboSoft 2018 が開催された。論文誌は 2014 年に Soft Robotics (SoRo) , (Mary Ann Liebert, Inc., publishers) が創刊、また、Science 誌からロボティクスに関して独立した論文誌の Science Robotics が 2016 年に創刊され、ソフトロボティクスやバイオロボティクスなどの話題も多く取り上げられている。日本では 2018 年に新学術領域「ソフトロボット学」(2018 年度～2022 年度) が立ち上がり、生物の特長を備えた「生体システムの価値観に基づいた自律する人工物」を企図した研究開発が進められている。

バイオハイブリッドデバイス

生物あるいは生物を構成する物質を、人工材料からなるデバイスと融合することで、人工物だけでは実現が難しい生物特有の高度な機能を活用する研究が進んでいる。生物機能を直接利用する考え方は古くからあり、イヌやウマ、伝書鳩、ミツバチ、ウシなどの動物を駆動源、エネルギー源として利用する段階（生物機能利用 1.0）、微生物や酵母などをリアクタとして用いて、食品や医薬品を製造する段階（生物機能利用 2.0）、DNA やタンパク質をバイオセンサ、バイオ材料として利用する段階（生物機能利用 3.0）を経て、現在は、DNA や膜タンパク質、細胞、組織などに見られるシグナル増幅機能や高効率エネルギー変換能を活用したバイオハイブリッドデバイスが創出可能な段階（生物機能利用 4.0）に突入している。細胞や膜タンパク質を使った匂いセンサ、膜タンパク質を使ったナノポア DNA シーケンサなどのセンシングデバイス、骨格筋を使った指ロボット、心筋をつかったエイロボット、昆虫の筋肉を使ったピンセットなどのアクチュエータ、デンキウナギの組織を使った発電機、バクテリアを使った自己修復壁、微生物発電、Organ-on-a-chip などのリアクタ、再構築神経ネットワークをプロセスサとして駆動するロボット、などの研究開発がおこなわれている。

アメーバ型分子ロボット

新学術領域「分子ロボティクス」（2012 年度～2016 年度）において、光刺激に応答して挙動を変えるアメーバ型分子ロボットが分子ロボットのプロトタイプとして実証され、リボソーム内に様々な分子デバイスを入れて統合化する技術が確立されつつある。今後、リボソームベースの分子システムの応用と、複数の分子ロボットを集合させた多細胞化による高度な機能化の技術へ発展することが期待される。アメーバ型分子ロボットの実証を契機に、NEDO「分子人工筋肉プロジェクト」（2016 年～）が開始している。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

バイオハイブリッドデバイスに関して、米国では、DARPA による **Engineered living materials** プログラムが 2016 年に開始し、生きた材料と人工物の融合によって、自己修復や自己組織化、環境適応などの生物システムを材料の中に組み込むことを目指した研究開発が進められている。また、NSF では 2010 年から **EBICS (Emergent Behaviors of Integrated Cellular Systems)** において、細胞と細胞、あるいは細胞と周囲の環境に働く相互作用を理解・制御し、生きた細胞からなる機能システムの設計と創出に取り組んでいる。

分子ロボティクスに関して、欧州では **Horizon 2020** の枠組みの下、**DNA-Robotics** プロジェクトが 2018 年に開始している。DNA ナノテクノロジーをさらに発展させてデバイスを構築するという点で、日本の分子ロボティクスと同じ方向性を持ち、オランダの Aarhus 大をコーディネータとして、Ludwig-Maximilians 大学（ドイツ）、ミュンヘン工科大学（ドイツ）、オックスフォード大学（英国）、マイクロソフト社等の企業が参画している。米国ではハーバード大学の Wyss 研究所やマサチューセッツ工科大学、カルフォルニア工科大学などのグループにおいて、合成生物学との融合を考慮に入れた **Molecular Robotics** の研究領域を立ち上げようとする動きが見られる。日本では、2018 年に自然科学研究機構・生命創成探求センターが発足し、本分野に関連する国内外の有力研究者の集結が期待される。産業技術総合研究所では 2017 年に **SMACTIVE (= Smart Active)** マテリアルのプロジェクトが立ち上がっており、分

子ロボティクス概念と合わせて発展が見込まれる。

人工細胞工学に関して、日本では2007年に「細胞を創る」研究会が立ち上げられ、我が国における本研究分野の発展を促してきた。また、人工細胞を応用に耐える技術にするための研究開発プロジェクトとしてImPACT「豊かで安全な社会と新しいバイオものづくりを実現する人工細胞リアクタ」（2013年度～2018年度）が実施されている。海外では、英国において2017年にロンドン周辺の化学者を中心としたバーチャルな研究センター fabriCELLが立ち上げられ、30を越える研究グループによって、生物由来の要素と人工物を組み合わせた人工細胞に関する研究が進められている。環境センシングや複製など実際の細胞と同じ機能をもつ人工細胞を作り出し、センサやリアクタに応用することを目指している。

研究プロジェクトではないが、ハーバード大学およびカリフォルニア大学サンフランシスコ校（UCSF）が主催する国際分子デザインコンペティション BIOMOD（International Biomolecular Design Competition）（2011年～）は、本研究領域の今後を担う若手研究者（学生）を育成する試みとして注目に値する。BIOMODでは学部生がチームを作りDNAを中心とした生体分子をコンピュータでデザインし、実際にナノテクノロジーの実験技術を習得して、成果を出し、その成果をプレゼンテーションし順位を競うものである。日本では、その本大会に先立ち、BIOMOD Japanが毎年開催されており、中国のチームなども参加するBIOMOD公式のアジアイベントとなっている。

（5）科学技術的課題

エネルギー変換、自己組織化、センシングなどの機能をもつ個々の材料・デバイスの研究開発のみならず、それらの機能の統合化・システム化が本研究開発領域全体を貫く課題である。また、生物の構造や機能に着想を得た材料やデバイスには、数多くの業界（医療、製造、建設、繊維、通信）から応用への期待が寄せられており、既存のシステムとの統合化も重要といえる。

バイオハイブリッドデバイスについては、生体機能を直接利用するための科学技術基盤の体系化が重要である。生物や生体物質の利用には不安定性や不均一性などの課題があり、生体と同様の機能発現と制御、機能の維持に集中的に取り組む必要がある

分子ロボティクスにおいては、リアルタイム性・多細胞化・高知能化などが課題である。感覚（センサ）と知能（コンピュータ）を持ち、自律駆動する知的な分子システムの構築を目指した研究開発が進められているが、現時点では全てを統合したシステムを容易に作れる段階にはない。プロトタイプであるアメーバ型分子ロボットにおいても、センサは光に限られ、知能もセンシングを判断してのスイッチのON/OFFに留まる。より多様な刺激（分子や光や電磁場など）を感じる事が可能な分子センサの開発や、走化性・走光性のような知的な運動機能の実現が求められる。また、分子コンピュータの速度が十分ではなく、高速な運動の制御ができないため、分子計算の速度を上げること、さらには単に判断するだけではなく、学習する分子コンピュータの開発が必要である。

（6）その他の課題

生物機能インスパイアード材料・システムの研究開発は、化学、生物物理学、制御工学、情報科学など広い範囲を含む領域の融合と、高度な知識・技術の集積が必要であり、研究コミュニティを束ねて醸成する中核的な研究拠点を形成し、中長期的に維持することが求められる。

海外で実績のあるグループは、早期から研究拠点を形成して優秀な研究者を集め、新しいアイデアの実践を進めている。日本では新学術領域がある程度、同様の役割を果たしてきたが、5年という短期間で解散してしまうため、中長期的な拠点形成には至っていない。

生物あるいは生物を構成する物質を直接利用するバイオハイブリッドデバイスや、細胞のような自律的なシステムを構築する分子ロボティクス、人工細胞工学などの分野においては、研究者だけではなく社会一般との関わりにおいて倫理的な議論をおこなうことが必要である。「細胞を創る」研究会では、この点に早くから着目し、毎年、年次大会にて社会・倫理のセッションを設けて、研究会参加者との議論を行い、倫理的・法的な課題の解決に取り組んでいる。分子ロボティクス分野においても、分子ロボットに関する Ethical, Legal and Social Issues (ELSI) の研究プロジェクトが立ち上がっており、今後、合成生物学や人工細胞工学の ELSI と合わせて議論が進められると考えられる。

(7) 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が世界的に高く評価されてきた。近年では融合化・システム化に関する研究へと発展する傾向にある。ソフトロボティクスやバイオハイブリッドデバイス、分子ロボティクス、人工細胞工学などの分野に関連して、新学術領域、ERATO、CREST、さきがけ等のプロジェクトにおいて活発に研究開発が進められている。
	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、エレクトロニクス、建築など多岐にわたる。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る。分子ロボティクスに基づく分子人工筋肉やバイオハイブリッドデバイスによるセンサなどに関して、産学連携のNEDOプロジェクトが進められている。
米国	基礎研究	◎	↑	多くの大学、研究機関において活発に研究開発が進められている。ソフトロボティクスに関して、NSFのEmerging Frontiers in Research and Innovation program (EFRI):Continuum, Compliant, and Configurable Soft Robotics Engineering (C3 SoRo)が2018年に開始された。バイオハイブリッドデバイスに関しては、DARPAによるEngineered living materials (ELM)、NSFのEmergent Behaviors of Integrated Cellular Systems (EBICS)などのプログラムが進められている。分子ロボティクスについては、ハーバード大学・カリフォルニア工科大学を始めとした著名大学で研究が盛んに行われ、2018年にはハーバード大学Wyss InstituteでMolecular Roboticsの国際シンポジウムが開催された。人工細胞工学に関しては、ボトムアップ型のみならず、Craig Venter研究所による人工ゲノム合成と細胞への導入による人工細胞構築が進んでおり、世界の最先端を行く。
	応用研究・開発	◎	→	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。ELMなどの研究プロジェクトには企業も参画している。

欧州	基礎研究	◎	↗	従来から生体模倣材料に関する研究開発が盛んであり、現在でも英国、ドイツ、フランスをはじめとする各国で、多くの基礎研究がおこなわれている。英国では2017年にロンドン周辺の化学者を中心としたバーチャルな研究センター fabriCELL が立ち上げられ、生物由来の要素と人工物を組み合わせた人工細胞に関する研究が進められている。フランスの CNRS・ESPCI・ENS では DNA computing およびマイクロ流体工学の技術を用いた人工細胞研究および分子ロボティクス研究が展開されており、日本の大学との交流が盛んにおこなわれている。IEEE Robotics and Automation Society に Technical Committee on Soft Robotics が設立され、最初の国際会議はイタリアで開催された。
	応用研究・開発	◎	→	生体模倣技術（バイオミメティクス）の産業化において国際標準化を先導しており、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、欧州を中心に活動が進められている。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、各種製品が開発、販売されている。また、基礎研究から産業化への橋渡しが着実に進められている。DNA-Robotics プロジェクトは企業が参画して立ち上げられた。
中国	基礎研究	◎	↗	撥水材料に関して中国科学院の江雷教授のグループが論文発表数および被引用数で世界トップレベルにある。吉林大学は英国の Nottingham 大学と UK-China biomimetics research initiative を締結している。また、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 International 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。DNA ナノテクノロジーに関して米国の著名研究室で実績を上げた研究者が帰国して研究室を立ち上げている。
	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。中国科学院化学研究所、吉林大学などを中心に、応用研究・開発が積極的に行われている。撥水加工技術は衣料や印刷製版へ応用されている。
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年以降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、ハスの葉模倣のはっ水、昆虫模倣のナノセンサなどの基礎研究がおこなわれている。
	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が、まだ産業化は進んでいない。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) S.-J. Park et al., "Phototactic Guidance of a Tissue-engineered Soft-robotic Ray," *Science* 353, no. 6295 (2016) : 158-162. doi:10.1126/science.aaf4292
- 2) Su Ryon Shin et al., "Electrically Driven Microengineered Bioinspired Soft Robots," *Advanced Materials* 30, Issue10 (2018) . doi:10.1002/adma.201704189
- 3) Johan U. Lind et al., "Instrumented Cardiac Microphysiological Devices via Multimaterial Three-dimensional Printing," *Nature Materials* 16, no. 3 (2017) : 303-308. doi:10.1038/nmat4782

- 4) Leonardo Ricotti et al., "Biohybrid Actuators for Robotics: A Review of Devices Actuated by Living Cells," *Science Robotics* 2, no. 12 (2017) . doi:10.1126/scirobotics.aaq0495
- 5) Masami Hagiya et al., "Molecular Robots with Sensors and Intelligence," *Accounts of Chemical Research* 47, no. 6 (2014) : 1681-1690. doi:10.1021/ar400318d
- 6) Satoshi Murata et al., "Molecular Robotics: A New Paradigm for Artifacts," *New Generation Computing* 31, no. 1 (2013) : 27-45. doi:10.1007/s00354-012-0121-z
- 7) 瀧ノ上正浩 「生体内で働く分子ロボットの実現へ：情報媒体としての DNA 分子と DNA コンピューティング」『情報管理』60 (2017) : 629-640. doi:10.1241/johokanri.60.629
- 8) Ryuji Kawano, "Synthetic Ion Channels and DNA Logic Gates as Components of Molecular Robots," *ChemPhysChem* 19, no. 4 (2017) : 359-366. doi:10.1002/cphc.201700982
- 9) Yusuke Sato, Masahiro Takinoue, and Shin-Ichiro M. Nomura, "BIOMOD: Road to Molecular Robotics," *Seibutsu Butsuri* 56, no. 5 (2016) : 290. doi:10.2142/biophys.56.290
- 10) Masahito Hayashi et al., "Reversible Morphological Control of Tubulin-Encapsulating Giant Liposomes by Hydrostatic Pressure," *Langmuir* 32, no. 15 (2016) : 3794-3802. doi:10.1021/acs.langmuir.6b00799
- 11) Hiroshi Inaba et al., "Light-induced Propulsion of a Giant Liposome Driven by Peptide Nanofibre Growth," *Scientific Reports* 8, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41598-018-24675-7
- 12) Jakia Jannat Keya et al., "DNA-assisted Swarm Control in a Biomolecular Motor System," *Nature Communications* 9, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41467-017-02778-5
- 13) Tomonori Shibata et al., "Protein-driven RNA Nanostructured Devices That Function in Vitro and Control Mammalian Cell Fate," *Nature Communications* 8, no. 1 (2017) . doi:10.1038/s41467-017-00459-x
- 14) S. M. Hossein Tabatabaei Yazdi et al., "DNA-Based Storage: Trends and Methods," *IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications* 1, no. 3 (2015) : 230-248. doi:10.1109/tmbmc.2016.2537305
- 15) Yaniv Erlich and Dina Zielinski, "DNA Fountain Enables a Robust and Efficient Storage Architecture," *Science* 355, no. 6328 (2017) : 950-954. doi:10.1126/science.aaj2038
- 16) Sami Nummelin et al., "Evolution of Structural DNA Nanotechnology," *Advanced Materials* 30, no. 24 (2018) . doi:10.1002/adma.201703721
- 17) Yusuke Sato et al., "Micrometer-sized Molecular Robot Changes Its Shape in Response to Signal Molecules," *Science Robotics* 2, no. 4 (2017) . doi:10.1126/scirobotics.aal3735
- 18) Liliana Wroblewska et al., "Mammalian Synthetic Circuits with RNA Binding Proteins for RNA-only Delivery," *Nature Biotechnology* 33, no. 8 (2015) : 839-841. doi:10.1038/nbt.3301
- 19) A. J. Genot et al., "High-resolution Mapping of Bifurcations in Nonlinear Biochemical

- Circuits," *Nature Chemistry* 8, no. 8 (2016) : 760-767. doi:10.1038/nchem.2544
- 20) Kevin M. Cherry and Lulu Qian, "Scaling up Molecular Pattern Recognition with DNA-based Winner-take-all Neural Networks," *Nature* 559, no. 7714 (2018) : 370-376. doi:10.1038/s41586-018-0289-6
- 21) Francesca Bomboi et al., "Re-entrant DNA Gels," *Nature Communications* 7, no. 1 (2016) . doi:10.1038/ncomms13191
- 22) Shay Mailloux et al., "Bridging the Two Worlds: A Universal Interface between Enzymatic and DNA Computing Systems," *Angewandte Chemie* 127, no. 22 (2015) : 6662-6666. doi:10.1002/ange.201411148
- 23) Masahiro Takinoue and Shoji Takeuchi, "Droplet Microfluidics for the Study of Artificial Cells," *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 400, no. 6 (2011) : 1705-1716. doi:10.1007/s00216-011-4984-5
- 24) E. Karzbrun et al., "Programmable On-chip DNA Compartments as Artificial Cells," *Science* 345, no. 6198 (2014) : 829-832. doi:10.1126/science.1255550
- 25) Haruka Sugiura et al., "Pulse-density Modulation Control of Chemical Oscillation Far from Equilibrium in a Droplet Open-reactor System," *Nature Communications* 7, no. 1 (2016) . doi:10.1038/ncomms10212
- 26) G. Villar, A. D. Graham and H. Bayley, "A Tissue-Like Printed Material," *Science* 340, no. 6128 (2013) : 48-52. doi:10.1126/science.1229495
- 27) Yoshiaki Moriizumi et al., "Hybrid Cell Reactor System from Escherichia Coli Protoplast Cells and Arrayed Lipid Bilayer Chamber Device," *Scientific Reports* 8, no. 1 (2018) . doi:10.1038/s41598-018-30231-0
- 28) Masayuki Su' Etsugu et al., "Exponential Propagation of Large Circular DNA by Reconstitution of a Chromosome-replication Cycle," *Nucleic Acids Research* 45, no. 20 (2017) : 11525-11534. doi:10.1093/nar/gkx822
- 29) D. G. Gibson et al., "Creation of a Bacterial Cell Controlled by a Chemically Synthesized Genome," *Science* 329, no. 5987 (2010) : 52-56. doi:10.1126/science.1190719
- 30) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 「技術戦略研究センターレポート 生物機能を利用したデバイス分野の技術戦略策定に向けて」 (2017年11月)

2.5 共通基盤科学技術

ナノテクノロジー・材料分野の基礎および応用を支える「共通基盤科学技術」区分には、「加工・プロセス」(微細加工プロセス、積層造形・レーザー加工、接着)、「計測・分析」(ナノ・オペランド計測)、および「理論・計算科学」(物質・材料シミュレーション)が含まれる。

「加工・プロセス」の中でも微細加工プロセスはナノメートルレベルの加工を可能とするナノテクノロジー・材料分野を支える重要な技術領域である。半導体デバイス領域で発展したこの微細加工プロセスは、半導体分野にとどまらず、ナノメカニクス、スピントロニクス、バイオナノテクノロジーなどへの波及が進んでいる。微細化を牽引してきた「Mooreの法則」の限界が叫ばれるようになって、微細化・高集積化に向けた歩みはややテンポを遅くしているものの、10nm以下のシングルナノメートル領域に向けた微細化の技術開発として、極端紫外線(EUV)露光技術、ナノインプリント技術、自己組織化技術(DSA: Directed Self Assembly)が行われている。このように次世代の微細加工技術は研究開発が精力的に進められているが、まだ技術的課題が多く、実用化研究と合わせて、ナノレベルの欠陥の発生機構などの現象解明に繋がる基礎的な研究も重要になっている。

積層造形・レーザー加工は高付加価値の多品種少量生産やカスタムメイド生産のための技術開発領域である。積層造形は付加製造(Additive Manufacturing)、3Dプリンティングとも呼ばれ、立体物を水平に輪切りにした断面データをもとに、樹脂や金属粉などをレーザーまたは電子線で熔融させて薄い層を積み上げ、プラスチックや金属の立体物を製作する技術である。レーザー加工は、金属、セラミックス、ガラス、樹脂等の材料に対し、除去(切削・切断)、穴開け、曲げ、溶接・接合加工や表面改質を施すものである。近年は、ファイバーレーザー等の近赤外域レーザーの普及によって、レーザー加工だけでなくレーザー方式の積層造形も広がりを見せており、プロセスコスト、加工スピード、部品品質の改善が課題になっている。また、品質向上のためプロセスモニタリング、プロセスシミュレーションなどの技術も重要になっている。

接着は航空機や自動車などの輸送機器におけるCO₂排出量削減を目的として、マルチマテリアル化による軽量化を実現するための重要な技術であり、実験と計算の両面アプローチにもとづくナノ～メゾ～マイクロメートルスケールでの接着メカニズムの解明と信頼性の確保、接着界面のリアルタイム計測評価手法の構築、接着や剥離が制御できる新規機能材料の開発などが求められる。これらの課題には、プロセス設計、力学的特性評価や界面分析、非破壊検査、表面処理、接着剤の設計など多様な要素があるため、機械や物理、化学等幅広い分野の専門家の連携による解決が不可欠である。

「計測・分析」では、今回は特に、材料やデバイスに対する実使用下でのナノスケール計測、すなわち機能発現中に刻々と変化する現象を直接観察することで、測定対象と機能との相関を見出すことを目的としたナノ・オペランド計測を取り上げている。この研究領域では、先端計測に向けた高い時間・空間分解能の達成、使用場に相当するモデル環境の実現、膨大な観測データからの有用情報の効率的抽出などの課題がある。最近では、「オペランド」という用語が初めて使われた触媒分野にとどまらず、生きた細胞、生体組織や半導体メモリー、太陽電池などの実デバイスにまで測定対象は急速な広がりを見せ、学界と産業界の両方において不可欠な研究手段となりつつある。

「理論・計算科学」の物質・材料シミュレーションは、物質・材料科学の基礎を支える重要

な科学技術で、量子力学や統計力学の諸知見を活かし、物質の構造、物性、材料組織、化学反応機構などを高精度に解析・予測する技術の確立を目指す研究領域である。計算の分野としては、分子系電子状態計算、固体系電子状態計算、分子シミュレーション、モンテカルロシミュレーション、統計力学に基づく積分方程式、連続体モデルなどがある。近年の計算機環境の大幅な向上と、計算プログラムの高度化により、計算物質科学、計算生命科学の分野は10年前と比較して格段に進展しており、実験結果の解釈ばかりではなく、実験の設計をする段階でのスクリーニング、スクリーニングによって得られた構造に対する物性予測などに用いられている。また、マテリアルズ・インフォマティクスや量子コンピュータへの応用に向けた研究開発が大きな流れになっている。

2.5.1 微細加工プロセス

(1) 研究開発領域の定義

シングルナノメートルレベルまでのシリコンの微細加工プロセスの高度化を実現する。現状の ArF 液浸露光技術とマルチプルパターンニング技術の組合せの高度化に加え、EUV リソグラフィ技術、ナノインプリント技術、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) キーワード

微細加工、シングルナノ、リソグラフィ技術、露光装置、ArF 液浸、極端紫外線、EUV、ナノインプリント、NIL、DSA、マルチパターンニング、電子線欠陥検査装置、ペリクル膜、モールド、複製テンプレート、光硬化樹脂、高分子レジスト、無機レジスト、金属酸化物系レジスト、ナノディフェクトマネージメント、高 NA 光学系、アナモルフィック光学系、Stochastic 欠陥、ショットノイズ、欠陥検査装置、自由電子レーザー EUV 光源

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

近年、スマートフォン、パソコン、液晶テレビ、掃除ロボットなどの情報通信機器・エレクトロニクス機器の高機能化、高性能化、低消費電力化が進んでいるが、これを支えているのが半導体の大規模集積回路 (LSI) の性能向上である。この性能向上は、基本的には半導体素子 (トランジスタ) の微細化によってもたらされており、リソグラフィ技術、プロセス技術の高度化、デバイス構造の改革 (3次元化)、材料技術の革新を含む微細加工技術の継続的な進展が牽引してきた。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)、ダブルパターンニング技術など様々な技術を取り入れてきており、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、10nm 台の回路パターンを持つ LSI が実現されている。

しかしここ数年、次世代のリソグラフィ技術開発の困難さや、マスクコストの増大などから、微細化を牽引してきた「Moore の法則」の限界が叫ばれるようになってきた。一方で、ビッグデータ処理、自動運転、人工知能 (AI)、IoT などの情報処理能力のさらなる向上や低消費電力化の要求が高まってきており、半導体集積回路の微細化・高集積化に向けた歩みはややテンポを遅くしているものの、シングルナノメートル領域に向けた微細化の要求は大きい。

[研究開発の動向]

10nm テクノロジーノード等の先端 LSI の製造には、ArF 液浸露光技術とマルチパターンニング技術を併用した加工技術が採用されており、今後もこの方式での微細化の技術開発が続けられる。しかし、マルチパターンニングに伴う加工コストの高騰から、次世代の極端紫外線 (EUV) 露光技術の採用へ向けた研究開発が、急務となっている。

ArF 液浸露光技術に関しては、装置技術、光源技術等の装置に特化した研究開発はほぼ一段

落しているが、マルチパターンニングにおける高精度化や、下地基板への転写に伴う材料・プロセス技術の研究開発が続いている。

一方、EUV 露光技術に関する研究開発は、装置技術開発、マスク技術開発、マスク利用技術開発、レジスト材料技術開発と、これに伴う各種検査評価技術開発等からなり、微細化、高精度化だけでなく、実用化を見据えた、信頼性、量産性、低欠陥密度化といった観点での研究開発が注力されている。さらに、高解像度化を目的に、露光光学系の NA を 0.55 まで向上させる高 NA 光学系の開発が Carl Zeiss SMT 社 (Zeiss の露光光学系開発部門が 2016 年度に ASML 社の傘下に吸収され、EUV 露光装置の開発を推進) を中心に活発に進められている。この高 NA-EUV 露光装置では、高 NA 化により、マスクへの EUV 光の入射角度が大きくなり、マスク吸収体の影が、解像特性に影響することが予測される。このため、ASML 社は、スキャン方向の倍率を現在の 4 倍から 8 倍に拡大することによりマスクへの EUV 光の入射角度を低減し、この問題を解決する方針である。スキャン方向に垂直な方向は、マスク吸収体の影が影響しないため、従来通りの 4 倍としている。この結果、スキャン方向とそれに垂直な方向で、縮小率が 8 倍と 4 倍に変化する。これはアナモルフィック光学系と呼ばれ、ワイド型のシネマスクリーンなどの投影光学系で採用されている方式である。マスクサイズは従来のままの大きさにすることが求められているので、露光される面積は、従来のは半分になる。すなわち、1 回のスキャンで露光される面積が半分になるため、スループットを大きく低下させる要因になる。このため、マスクやウエハステージのスキャン速度を大幅に向上させるなど、スループットの低下を出来るだけ抑制する技術開発に注力しているが、必ずしも十分ではない。

マスク側からも、吸収体の影の影響を減らすため、従来の TiN 系吸収体より、EUV 光の吸収が大きい材料を選択しようという動きが急である。Co や Ni がその候補として検討されているが、加工性に問題があり今後の課題となっている。ユーザー側からの問題は、スキャンフィールドが小さくなるため、大きなチップの露光に支障を来すことである。現在、一般のメモリやロジックのチップサイズは、スキャンフィールドに比べて十分に小さい。しかし、一部の GPU (Graphics Processing Unit) 等のチップでは、スキャンフィールド全体を用いるような大きなものも開発されており、今後こういった大フィールドチップに対応するため、複数の露光フィールドをつなぐ、フィールドスティッチングといった機能も必要となると考えられる。

ナノインプリント技術に関しては、量産性の向上、欠陥密度の低減を中心に、低コスト化を目的としたマスクの製造方法の改良などが進められている。欠陥密度低減に関しては、露光装置内の発塵低減や、レジスト材料中のパーティクルの低減、インプリント時の発泡抑制技術など、様々な欠陥密度低減策の開発が進められている。この結果、メモリ作製に耐えうるレベルの欠陥密度まで低減できる見込みになっている。この他、マスクとウエハの離型性制御技術やマスクの洗浄技術などの開発も進んでいる。一方、マスクは、1 対 1 の超微細高精度なものが要求され、長時間の電子線描画時間が問題となる。この問題を解決するため、電子線描画で作製したマスターマスクからインプリント技術で子マスクを作製するマスクレプリカ形成用インプリント装置の開発も行われ、マスクコストの低減が図られている。

ナノインプリント技術の国内外の動向としては以下のようになっている。韓国はナノインプリントの国際会議 Nanoimprint and Nanoprint Technology (NNT 2017) において大学からの発表が非常に多く、以前に比べて裾野が広がっている。例えば、韓国機械技術研究院 (KIMM) や Korea 大が積極的に研究開発を行っている他、Seoul 大、Pusan 大、浦項大 (POSTEC)

など多くの大学で研究が行われている。企業ではSKエレクトロニクスが東芝メモリと協力して半導体製造に向けた研究を行っている。中国ではまだ研究の初期段階のものが多く、以前から研究を行っている香港大に加え、南方科技大、南京大、西安交通大でも研究が行われるようになっている。米国ではミシガン大、テキサス大、マサチューセッツ大などで新しい電子素子に向けた研究などが活発に行われており、キャノンナノテクノロジーズが半導体製造向けの装置を精力的に開発している。欧州では光学応用やバイオ応用に関する研究が多いが、Wuppertal大などが引き続き基礎研究を行っており、EVGとLetiが200mm一括の製造プロセスの研究を行っている。日本では、大阪府立大、東北大、産業技術総合研究所が基礎から応用にかけて研究を進めている。また、実用化を目指して、キャノンが半導体向けのナノインプリント装置、大日本印刷がそのためのテンプレート開発、東芝メモリがナノインプリント製造のプロセス開発を精力的に行っている。

ブロックコポリマーを用いた、Directed Self Assembly (DSA) 技術に関しては、欠陥低減が最大の課題であり、材料・プロセスの両面から研究開発が進められている。さらに微細性の向上を狙った相互作用パラメータ (X) の大きな新しい高X材料の開発や、像形成シミュレーション技術の高度化、形成された像の評価・検査技術の高度化などが、実用化に向けた重要な技術課題となっている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

EUUV露光においては、Stochastic欠陥が非常に注目されている。これは、EUUV露光の対象が7nmノード以降の超微細な領域に達したことにより、実際のパターン寸法も10nmレベルまたはそれ以下の寸法の実現が要求され、しかも非常に高い集積度でこれを実現する必要があることで顕在化したものである。専門家間では以前から議論されてきた課題ではあるが、実際に1つのチップ上に10nmレベルのパターンを数十億個以上形成すると、統計的ゆらぎ(Stochastic effect)に伴う欠陥が顕在化してくる。これをStochastic欠陥と呼び、何が原因でどう対策するか大きな議論となっている。最大の原因はEUUV光の入射フォトンのゆらぎ、すなわちショットノイズであるが、それとともにレジスト材料自体の不均一性や現像時の不均一性など、様々な要因が複合化していると考えられる。解決策としては露光量を増大しレジスト材料を均質化することなどが考えられるが、スループットの低下など実用的には対策が難しいのが現状である。

非常に微細で統計的な揺らぎに伴う、すなわち頻度の極端に低い欠陥を検査・評価するためには、超微細で高速な欠陥検査装置の開発が必要である。しかし現状ではこれを可能にする欠陥検査装置は無い。従来の光学式検査装置では解像度が不足し、電子線を用いる欠陥検査装置では検査速度が低すぎるという状況である。これを解決する技術として注目されているのが、マルチビームを用いた電子線欠陥検査装置である。マスク描画装置としてはマルチビーム型が実用化されつつあるが、欠陥検査装置としては未だ開発段階にあり、実用化が待たれている。この複数ビームを用いた検査装置として、ASML社の傘下に入った台湾のHMI社がマルチコラム型を開発し実用化しているとの情報もある。マルチコラム型では数本のビームを用いるが、本格的な検査装置としてはマスク描画装置と同様のマルチビーム型の開発が待たれるところである。HMI社は2018年のSPIEでマルチビーム型装置の基本となる技術開発の成果を発表し

ている。

ステップアンドリピート型のナノインプリントでは、NANDフラッシュ製造向けのナノインプリント装置が東芝メモリの四日市工場に納入され、製造プロセスへの導入が開始されようとしている。同装置では、これまでに開発したテンプレートを機械的に変形させる倍率補正の他に、テンプレートを通して光によりウエハを局所加熱して高次の歪補正を行うシステムが搭載され、光リソグラフィに匹敵する補正が可能になった点が注目に値する。また、これらの装置に用いるテンプレート複製装置の開発も進んでいる。その他、マスターテンプレートの作製においてはマルチビームの電子ビーム描画装置が実用化され、複雑で微細なパターンが非常に高速に描画できるようになった点も重要である。

ウエハー括型のナノインプリントでは、EVGの開発した200 mm ウエハ用高速インプリント装置がLetiに導入され、光リソグラフィや電子ビームリソグラフィとのミックスアンドマッチのリソグラフィの評価が進められている。国内では、ウエハー括のナノインプリント用のモールドを低コストで作製する超高速のポイントビーム型電子ビーム描画装置の開発が進んでいる。また、インプリントにおいてバブル抑止用ガスとして使用されるペンタフルオロプロパン（PFP）よりも転写性能が良く低環境負荷のガスの利用が提案された。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

EUVに関して、米国では2016年より5年間で5億ドル支出し、Global Foundries社とニューヨーク州立大Albany校（SUNY）でEUVリソグラフィ技術の開発を行っている。また、ローレンスバークレー国立研究所内に、Intel、Samsung、TSMC、inpriaが出資し、EUREKAと呼ぶ研究センターが形成されている。ベルギーのimecやフランスのLeti等のコンソーシアムでは、シングルナノメートルの微細加工プロセス技術開発を継続中であり、EUV露光やEB露光技術の開発を精力的に進めている。

ナノインプリント技術においては、LetiとEVGによるINSPIRE（2015.7-）プログラムが進められている。国内においては、戦略的基盤技術高度化支援事業（プロジェクト委託型）において、エリオニクスと産業技術総合研究所による「ウエハーサイズ3次元ナノインプリントモールド用超高速電子ビーム加工装置の研究開発」（2016.9-2019.3）が進められている。

（5）科学技術的課題

EUV露光技術については、Stochastic欠陥への対策が実用化とともに重要な課題となっている。基本的な原因としては、EUV光の入射フォトン数の揺らぎが考えられるが、これに対しては、光源強度の向上が最大の課題となる。また、レジスト材料自体の吸光度の増大も重要である。現状では入射フォトンの数分の1しかレジストの光化学反応に寄与していない。このためEUV光の吸収が大きい重金属等の導入が候補として検討されている。

レジスト材料自体の均質性が問題となっている。加工寸法がナノメートルオーダーであるのに対し、レジストの分子サイズが同じ寸法オーダーであることや、酸発生剤、クエンチャーの分布が、必ずしも均質でないことが問題となる。現在主流の化学増幅系材料では、まず入射するEUV光が92eV程度のエネルギーを持っており、これがレジスト材料をイオン化し、発生した2次電子が酸発生剤に作用して酸を発生させ、この酸がレジストの反応基に作用して各種の反応を引き起こし、これによって現像液への溶解性を変化させることで像が形成される。こ

のように多段の非常に複雑な反応過程を利用しているところにも、様々な揺らぎを生じさせる原因がある。このため、もっと単純な化学反応を使うことが求められる。

化学増幅系材料とともに、金属酸化物を利用したレジスト材料に注目が集まっている。反応メカニズムは未解明な点も多いが、ドライエッチ耐性が高いという特徴とともに、非化学増幅系で反応メカニズムが単純という利点が見込まれるので注目されている。これまでに解像度は高いが感度が低い材料や、感度は非常に高いが解像性やラフネスが大きいといった材料が提案されていたが、最近では解像度が高いままで、化学増幅型に匹敵する高感度な材料も開発されており、実用化が進むことが期待される。この他の新しいレジスト材料としては、Multi-Triger 型レジストや PS-CAR という提案がなされており、高感度化と低 LWR (Line Width Roughness) 化を同時に達成しようという動きも活発である。しかし、本質的な解決策を得るまでには至っていない。

EUV 光源の高出力化という観点からは、自由電子レーザー (FEL) 光を用いた、EUV 光源の開発がある。この方式により、kW 級の高出力化の可能性もでてきた。課題としては、パルス幅がフェムト秒レベルで輝度が非常に高く、レジストのアブレーションや多層膜へのダメージが問題となると予想される。今後、SAKURA 等の実験設備を用いた検討が進められることが期待される。

DSA 技術に関しては、高 X 材料の開発と欠陥低減が重要となる。高 X 材料は、本質的な高解像力化に必要である。一方、欠陥低減に関しては材料自体の欠陥低減だけでなく、欠陥検査技術に関する観点が必要である。半導体集積回路のリソグラフィ技術としては、パターンの形成後に所望のパターン形状や寸法に形成されているか検査・評価することが求められる。ここでは、非破壊の検査が必要であり、パターン形成後の形状や寸法をトップダウンで評価できることが重要となる。このため、表面では所望の形状に成形されていても、レジスト層内部で所望の形状に成形されない可能性を如何に排除するかが DSA 技術では重要となる。ガイドパターンの形状・寸法や DSA 材料とそのプロセス処理条件が最終的に形成される DSA パターンに対し 3 次元的にどのように関係するかを、正確にシミュレーションする技術が重要となる。

ナノインプリント技術については、サブ 20nm になるとモールド側のホールパターンへの樹脂の充填が難しくなる現象があり、充填機構の解明が必要である。また、残膜厚を薄くしていくと 10nm あたりから急に樹脂の粘度が高くなる現象がある。つまり、残膜厚が極端に薄い条件では、樹脂の充填に非常に時間を要し、スループットの低下につながる。より低残膜にするには、この高粘度化機構を理解し、樹脂およびモールド表面処理の工夫が必要になる。また、高粘度化しない範囲でのプロセスが必要になる。

半導体応用ではアライメントに関してはかなり改善が見られたが、モールドの耐久性に関してはまだ改善が必要である。耐久性の低下はモールドがインプリント中に微粒子を噛み込むことが原因と考えられ、インプリント環境の更なる清浄化が必要である。また、離型は常に課題である。

(6) その他の課題

EUV 技術の実用化に伴う課題として、高透過率 EUV 露光用保護膜 (ペリクル膜) の開発が挙げられる。パーティクルなどの欠陥発生の要因をできる限り排除しようという装置側の動きも盛んであるが、ウエハの露光中に増加する欠陥 (Adder Defects) の発生が無視できない

ため、従来の光リソグラフィで利用しているマスクのペリクル膜の開発が盛んに検討されている。ASML社は、EUV露光の実用化を進めるため、ペリクル膜自体の開発だけでなく、欠陥発生に非常に少ないペリクルのマスクへの脱着装置の開発も進めている。ペリクル膜自体は、将来的には専門のサプライヤーが開発・製造することになると思われるが、現状ではASML社が開発したPoly Si膜をベースとした材料が広く利用されている。現状のASML社のペリクル膜は基材が50nm程度の厚さを持つPoly Si薄膜で、表面と裏面にSiN膜がコーティングされており、EUV光の透過率は85%程度である。しかし、この吸収率では、250WレベルのEUV光出力にさらされると、1000℃を越える温度になってしまう。このため、実用時までには透過率を90%以上まで向上させて、温度上昇を数百度以下に抑えることが望まれている。Poly Si膜以外の材料に関しても、様々な研究開発機関で開発が行われている。代表的な材料としては、SiN系の材料やカーボンナノチューブやグラフェンがあり、imecや、韓国のHanyan大学等多くの研究機関で研究が進められている。特にカーボンナノチューブなどのカーボン系の材料はEUV光の吸収率が小さく耐熱性にも優れているので注目される。

ナノインプリントの重要な課題はモールドの低コスト化である。インプリントは低コストの微細加工技術であるが、微細パターンを有するモールドは高価である。低コストでマスターモールドを作製し、その複製モールドを使用する必要がある。半導体製造用のナノインプリントではマルチビームの電子ビーム描画装置や高性能のモールド複製装置が開発されており、課題への対応が図られている。また、インプリント環境が清浄化されることでモールドの寿命も延びるので、複製モールドのコストが多少高くても許容されるかもしれない。この半導体用ナノインプリント装置はステップアンドリピート型であり、数cm角のモールドを使用する。一方で、ウエハー括のナノインプリント装置では、マスターモールドの寸法は200mmウエハーの場合には約40倍の面積であり、この大面積に低コストで微細パターンを形成する必要があるが、これまでは利用できるパターンに大きな制約があった。このようなウエハー括のインプリントにおいて、低コストでの大面積モールドの作製とその複製技術がナノインプリントの更なる普及のための課題である。

10nmノード以降の微細加工プロセスを有している半導体メーカーが、Intel、Samsung、TSMCなどの海外企業に限られてきている中で、日本としてどのようにして微細加工プロセス技術の開発を進めて行くのか、難しい状況にある。EUVのマスク関係の技術開発やDSA技術の開発を行っていた民間コンソーシアム「EUVL基盤開発センター（EIDEC）」が2016年度より「(株)先端ナノプロセス基盤開発センター（EIDEC）」に名称を変更し、ナノレベル欠陥の改善・制御や次世代デバイスの研究開発を進めてきたが、このNDM（Nano Defect Management）プロジェクトも2018年度で終了する。今後どのような体制で先端の微細加工プロセス技術を保有し人材育成を図っていくのか、レジスト材料技術や欠陥評価技術などの優位性も考慮し、IMECなど世界のコンソーシアムとの差別化や連携も含めて検討していく必要がある。

(7) 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	◎	→	従来レジストプロセスの改良や、PS-CAR 等、新規アイデアの創出に関する動きも活発である。 ナノインプリント技術に関して、大阪府立大学、東北大学、産業技術総合研究所などで各種基礎検討を続けている。極限ナノ造形・構造物性研究会ではシングルナノ領域のナノインプリントに取り組んでいる。
	応用研究・開発	○	↘	超微細レジスト材料の開発や、プロセス技術の高度化で優位を保ってきたが、無機レジスト等では、米国勢の勢いにやや押されている。マルチビーム描画装置の開発では、欧州勢にやや遅れている。 東芝メモリ、キャノン、大日本印刷が NAND フラッシュメモリの生産に向け精力的に開発を行っている。
米国	基礎研究	◎	→	無機材料を中心とした、新しいレジスト材料の開発と、そのメカニズム解析に、材料メーカーだけでなく、大学や研究機関が積極的に取り組んでいる。 ナノインプリント技術が Michigan 大、Texas 大、Massachusetts 大で精力的に研究されている。
	応用研究・開発	◎	→	マルチパターンング技術の高度化に積極的に取り組み、EUV 露光技術の実用化を着実に進めている。 Canon Nanotechnologies が引き続き米国を拠点として精力的にナノインプリントの研究開発を進めている。
欧州	基礎研究	○	→	スイスの PSI における放射光を用いた干渉露光や、Carl Zeiss SMT での高 NA 化開発等、微細化の最前線を牽引している。材料面でも Multi Triger 型など提案している。 ナノインプリント技術は Wuppertal 大、PSI、Leti などで研究しているが、NaPaNIL の後は大きなプロジェクトは走っていない。
	応用研究・開発	◎	↗	imec での微細加工技術の研究開発と、ASML での露光装置開発が、半導体の微細化技術の中心として君臨している。マルチビーム型描画装置や検査装置なども、積極的に開発を進めている。 EVG および Leti がウエハー一括ナノインプリントの実用化に力を入れている。
中国	基礎研究	○	↗	微細加工技術の研究開発の観点では、未だ日本や欧米を追いかけている状況は変わらないが、研究者の数や研究費の面で近い将来強敵となり得る力を秘めている。 これまではあまりなかった中国本土の大学からの研究発表が見られるようになった。
	応用研究・開発	○	↗	各種微細加工関連装置開発、プロセス技術開発、材料開発を積極的に進めている。
台湾	基礎研究	△	→	リソグラフィ技術の先端的研究は必ずしも活発ではない。
	応用研究・開発	◎	↗	集積回路の高集積化、微細化という意味では、TSMC が世界の Foundry のトップを走っており、微細化研究をリードしている。
韓国	基礎研究	○	→	各種研究機関、大学等での活動が活発であり、例えば、Hanyan 大学で EUV 用ペリクル膜の研究をしている。 KIMM が力を入れてナノインプリントを推進しており、大学からの研究発表も盛んである。
	応用研究・開発	◎	↗	EUV 技術の実用化では、Samsung 社が世界の最先端を走っており、微細加工分野をリードしている。 SK Hynix が東芝メモリとナノインプリントの共同研究を行っている。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3)トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Alberto Pirati et al., "The Future of EUV Lithography: Enabling Moores Law in the next Decade," *Proceedings of SPIE* 10143 (2017) . doi:10.1117/12.2261079
- 2) Eelco van Setten et al, "EUV High NA anamorphic imaging," *International Symposium on Extreme Ultraviolet Lithography* (2016) .
- 3) Vicky Philipsen et al., "Reducing Extreme Ultraviolet Mask Three-dimensional Effects by Alternative Metal Absorbers," *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 16, no. 4 (2017) . doi:10.1117/1.jmm.16.4.041002
- 4) Peter De Bisschop, "Stochastic Effects in EUV Lithography: Random, Local CD Variability, and Printing Failures," *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 16, no. 04 (2017) . doi:10.1117/1.jmm.16.4.041013
- 5) Peter De Bisschop and E. Hendrickx, "Stochastic effects in EUV lithography," *Proceedings of SPIE* 10583 (2018) . doi:10.1117/12.2300541
- 6) Hiroshi Matsumoto et al, "Multi-beam mask writer MBM-1000," *Proceedings of SPIE* 10584 (2018) . doi:10.1117/12.2299885
- 7) Yannick Vesters et al, "Sensitizers in EUV Chemically Amplified Resist: Mechanism of sensitivity improvement," *Proceedings of SPIE* 10583 (2018) . doi:10.1117/12.2297627
- 8) Christopher K. Ober et al, "EUV Photolithography: resist progress and challenges," *Proceedings of SPIE* 10583 (2018) . doi:10.1117/12.2302759
- 9) C. Popescu et al, "Sensitivity Enhancement of the high-resolution xMT multi-trigger resist for EUV lithography," *Proceedings of SPIE* 10143 (2017) . doi:10.1117/12.2258098
- 10) Erik R. Hosler, Obert R. Wood and William A. Barletta, "Free-electron Laser Emission Architecture Impact on Extreme Ultraviolet Lithography," *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS* 16, no. 04 (2017) : 1. doi:10.1117/1.jmm.16.4.041009
- 11) Shunya Ito et al., "Nanometer-Resolved Fluidity of an Oleophilic Monomer between Silica Surfaces Modified with Fluorinated Monolayers for Nanoimprinting," *ACS Applied Materials & Interfaces* 9, no. 7 (2017) : 6591-6598. doi:10.1021/acsami.6b15139
- 12) Takahiro Nakayama et al., "Improved Defectivity and Particle Control for Nanoimprint Lithography High-volume Semiconductor Manufacturing," *Emerging Patterning Technologies*, 2017. doi:10.1117/12.2257647
- 13) Dario L. Goldfarb, Max O. Bloomfield and Matthew Colburn, "Thermomechanical Behavior of EUV Pellicle under Dynamic Exposure Conditions," *Proceedings of SPIE* 9776 (2016) . doi:10.1117/12.2218453
- 14) Ivan Pollentier et al, "Novel membrane solutions for the EUV pellicle: better or not?," *Proceedings of SPIE* 10143 (2017) . doi:10.1117/12.2257891

2.5.2 積層造形・レーザー加工

(1) 研究開発領域の定義

大量生産を追求する製造業の大半が海外へ流出した日本が生き残っていくために、高付加価値の多品種少量生産やカスタムメイド生産に対する重要性が高まっており、そのための技術開発領域である。積層造形は、立体物を水平に輪切りにした断面データをもとに、樹脂や金属粉などを用いて薄い層を積み上げて立体物を作製する技術であり、3Dプリンティングとも呼ばれる。一方、レーザー加工は、金属、セラミックス、ガラス、樹脂、生体等の材料に対し、除去（切削・切断）、塑性（曲げ）加工、接合加工や表面加工（改質）を施すものである。近年、ファイバーレーザー等の近赤外域レーザーの普及によって、レーザー方式の積層造形も広がりを見せており、プロセスコスト、加工スピード、部品品質の改善と保証が課題になっている。

(2) キーワード

3Dプリンティング、粉末床溶融結合法、指向性エネルギー堆積法、溶融・凝固現象、プロセスモニタリング、シミュレーション、ファイバーレーザー、青色半導体レーザー、連続波（CW）レーザー、短パルスレーザー、除去（切削・切断）加工、塑性（曲げ）加工、接合加工、表面加工（改質）、異材接合、マルチ・マテリアル、純銅、品質保証、その場計測、表面微細構造、サイバー・フィジカルシステム（CPS）、人工知能（AI）

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

学術用語としての積層造形は、2009年にASTM F42委員会においてAdditive Manufacturing（以下ではAMと呼ぶ、和訳は付加製造）と呼ばれることになり、7つの手法に分類された。その7つとは、材料押出法（Materials Extrusion）、液槽光重合法（Vat Photo-Polymerization）、材料噴射法（Material Jetting）、結合剤噴射法（Binder Jetting）、粉末床溶融結合法（Powder Bed Fusion）、シート積層法（Sheet Lamination）、指向性エネルギー堆積法（Directed Energy Deposition）である。米国オバマ大統領が2013年の一般教書演説において、「革新的製造技術になる可能性を秘める」と言及したことで一気に一般普及が進み、今では世界的な研究開発のトレンドになっている。

従来、AMにおける原料の多くは樹脂であったが、最近では金属やセラミックスまで多彩な原料が対象になっている。設計の自由度が大きくカスタマイズしやすい、金型（鋳型）を使わない造形ができるなどの特長から、特に金属によるAMのメリットが大きい。非平衡状態の利用で鋳造材より力学特性を向上させたり、逆に複雑な鋳造用金型を製造したりする研究が発表されている。最終的な造形物はそのまま部品に使用できるため、航空機や医療分野が応用分野として先行しており、エンジンのタービンやインプラントなどへ適用され始めている。

一方のレーザー加工については、近年、レーザー発振器の高出力化・高性能化に加えて、加工用の光学系やロボット、加工装置などの周辺機器の開発も大きく進歩し、各種技術への適用が拡大している。高品質、短時間処理、多品種への対応などの産業ニーズに対して優れた解決策を提供しており、例えば、最近のスマートフォンの製造ラインにはレーザーによる微細加工技術は必須である。また、試作の加工用途から始まったパワーレーザーについても、加工用レーザーシステム市場の成長に伴い、今日では量産用途に適用されてきている。

レーザーには、固体レーザー、半導体レーザー、ファイバーレーザー、CO₂レーザーをはじめとする気体レーザーなどがあり、このうち近赤外域レーザーの普及によってレーザー方式のAMが広がった。また、樹脂および金属とも、AM技術に対応した材料開発、とりわけ合金設計が重要となってきている。加えて、本技術はデジタル・マニュファクチャリング技術であることから、IoTやAIとの整合性が極めて良く、将来のものづくりにおける重要な加工技術の一つとして認識されてきている。米国のAmerica Makes、中国におけるMade in China 2025などのプロジェクトをはじめとして海外で巨額の投資がなされ、研究開発が精力的に進められていることから、我が国における次世代“ものづくり”を考える上で、本技術の研究開発の意義は非常に大きいといえる。

[研究開発の動向]

AMは名古屋市工業研究所から1980年に出願された特許がもとになったと言われているが、その市販装置は1987年に米国で開発された。初期の開発では、米国で1980年後半から主に樹脂を使用したAMが進展し、2012年には現在のAmerica Makesに相当する国立AMイノベーション機構(NAMII)がいち早く開設された。このような進捗と同時に、ドイツ、英国を初めとする欧州、イスラエルなどでも活発に研究され、製造技術ではこれらの国々が主導してきた。樹脂を用いたAMは、数万円の安価な装置が販売されるなど幅広く認知されているが、金属製品も同じようにAMが可能になってきた。金属のAMにおいて用いられる代表的な方法は、上述した手法の中でも粉末床熔融結合法と指向性エネルギー堆積法である。どちらも原料として金属粉末を用いるが、その供給の仕方が異なる。

粉末床熔融結合法では、台上に金属粉末を薄く一定厚で敷き詰め、熱源となるレーザーや電子ビームで必要部位の粉末を熔融後に凝固させることで固化成形部を得る。続いて、その一定厚分だけ台を下げ、また再び同じように敷き詰めた粉末の熔融・凝固を繰り返して造形する。ここでは、最後に、固化していない粉末を取り除いて造形物を取り出す必要がある。この方式は、原料としてスーパーエンブラや高弾性樹脂などを用いた製品開発に応用されるとともに、金属へと適用範囲が広がったことでインプラントなどの医療部品から、最近では航空・宇宙分野やエネルギー・産業機器分野の部品製造技術として利用されてきている。

AMの熱源としての電子ビームは、真空チャンバーが必要となる点でレーザーより扱いにくい。また、金属粉末によるスモークを抑えるために比較的粒径の大きいものを使用する必要があり、得られる製品の面粗さが大きく不利である。一方、レーザー熱源は、AM装置の種類も豊富で選択の幅が広く、粒子径の小さい金属粉を扱うことが出来るため比較的面粗さが小さい製品を作ることができる。したがって、レーザー熱源によるAM技術はナノテクノロジーへの高い応用性を有する。

金属材料への適用が可能となったのは、光源がCO₂レーザーからファイバーレーザーとなったことが非常に大きいといえる。2005年頃から高出力のファイバーレーザーが実用化され始め、低価格化が進んできたことにより、現在における装置の光源は波長1030～1070 nm、出力400～500 Wのシングルモードのイッテルビウム(Yb)・ファイバーレーザーが主流となってきている。ファイバーレーザーの高出力化により、CO₂レーザーでは困難であった安定で高精度の造形が可能となるとともに、鋳造用アルミニウム合金をはじめとして多くの金属材料の造形も可能となった。

一方、指向性エネルギー堆積法は、粉末をノズルから直接必要部位に供給、かつ同時に供給点に熱源を照射することで微小領域の熔融・凝固を行い、コンピュータ支援設計 (CAD) データに基づきノズル側を立体的に移動させることで固化成形部を積み上げ造形する。ここで、熱源は主にレーザービームであるが、合金ワイヤーを材料として電子ビームやアーク放電も用いられる。本手法は、金属材料への適用が主であり、その製法の特徴から単純形状で大型製品への適用が試みられている。

指向性エネルギー堆積法については、米国サンディア国立研究所 (SNL)、ドイツのフラウンホーファー研究機構傘下であるレーザー技術研究所 (ILT)、材料・ビーム技術研究所 (IWS) において、ノズルとその制御や 5 軸制御用コンピュータ支援製造 (CAM) に係る基本的な主要技術が開発された。日本では、次世代型産業用 3D プリント技術と超精密三次元造形システム技術の開発を目的として、2014 年に設立された技術研究組合次世代 3D 積層造形技術総合開発機構 (TRAFAM) が技術開発を進めている。TRAFAM では、指向性エネルギー堆積法の装置 2 機種が開発されており、500 cc/h での高速造形も可能となっており、メルトプールの形状や温度測定結果から欠陥発生との関連が検討されている。また、指向性エネルギー堆積法と切削を組合せたハイブリッド型の装置が我が国の工作機械メーカー 3 社において開発されている。

金属、セラミックス、ガラス、樹脂等を対象にしたレーザー加工は、AM に限らず、除去 (切削・切断) 加工、塑性 (曲げ) 加工、接合加工、表面加工 (改質) を施すための非常に広範な技術領域である。東西冷戦と米ソ宇宙開発戦争の最中であった 1960 年に米国でルビーレーザーが発明され、当初は宇宙・軍事産業が主導する形で材料加工分野へのレーザー応用が進められたが、1970 年代に入ってレーザー応用の裾野が民生用に広がり始めた。初期のころは、CO₂ レーザーで機械加工できない領域、例えば微細な穴開け、切断に主として使われ、特殊加工として位置づけられた。CO₂ レーザーは樹脂やガラスには吸収率が高くプリント基板の穴開けに有効であった。それに対して金属では非常に吸収率が低かったが、周辺技術を高度化することにより高品質な切断加工が実現した。

1980 年代に、紫外域のエキシマレーザーの登場により、リソグラフィに代表される超微細加工ができるようになった。CO₂ レーザーもエキシマレーザーもガスレーザーであるが、1990 年代になると YAG レーザーに代表される固体レーザーが市場に投入されることになった。YAG レーザーの波長は 1064 nm であり、金属への吸収率が格段に上昇する。また、光ファイバー伝送が可能になったことにより、レーザー加工の適用範囲が広がることとなった。

世界におけるレーザー加工の現場では、CO₂ レーザーから安価で使いやすいファイバーレーザーによる加工機への置き換えが進んでいる。そのシェアは欧米が中心であったが、近年では安価な中国メーカーのファイバーレーザー装置が市場のシェアを拡大させた。こうしてレーザー加工応用は、軽量化・低燃費化という社会的要求に直面する自動車、航空機などの輸送機器産業や、精密・超小型化要求のある医療機器産業などで多くの成果を挙げてきた。CW のファイバーレーザーは高出力化が容易であることから、原子炉コンクリート解体に向けた 100 kW 級ファイバーレーザーによる加工技術の開発も日本の独自技術として進められている。

このような近赤外域レーザーは、エネルギー吸収率の高さから、上記のとおり AM にも応用され、AM は新しいレーザー加工技術として位置づけられるようになった。レーザー方式 AM 装置の開発では、高速化と大型化、さらには高精度化、高品質化への対応が求められている。高精度化にはレーザー出力の制御や造形パターン、高速化と大型化に対しては 4 台のレーザー

を搭載するなどの多光源化により対応してきている。また、航空・宇宙分野において絶対的に安定した高品質部品の製造が求められており、プロセスモニタリングとフィードバック制御による品質保証技術が重要である。このため、プロセスモニタリングに関しては、テストベンチや市販品の改良装置に装着した高速度カメラやサーモビューワを用いてメルトプール形状のその場観察あるいは温度測定を行い、欠陥発生との関連を検討しているが、フィードバック制御までには至っていない。加えて、造形品の品質管理においては、非破壊検査手法の確立が求められているが、X線CTによる従来の検査手法で対応されているのが現状で、今後の開発が待たれる。

また一般に、レーザー性能に対する製造条件の最適範囲が小さいため、ビームや走査のパラメータのごくわずかな位置的变化が著しく加工品質に影響する。日本はファイバーレーザーの開発に遅れたが、2016年からNEDO「高輝度・高効率次世代レーザー技術開発」、2014年から戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)／革新的設計生産技術が開始され、各プロジェクトで強みを活かしたプロジェクトが進められている。その進展状況について、レーザー装置の高度化、特にマルチビーム、短波長レーザー、短パルスによる加工技術開発を紹介する。

高速で高精度のAMを目指す一つの方策は、複数のレーザーを搭載し同時に照射することで金属粉末を効率良く熔融し積層するものである。大阪大学を中心とする産学官の研究グループでは、6台の近赤外域半導体レーザーを用いたマルチレーザービーム加工ヘッドを製品化、複合加工機に搭載され、第28回日本国際工作機械見本市(JIMTOF2016)にて動態展示された。また、近赤外域レーザーに比べ、短波長の青色レーザーは金属の吸収率が高く、特に難加工材料の純銅に対して高効率・高品質加工が期待される。そこで、同グループは、並行して青色半導体レーザーマルチビーム加工ヘッドの開発にも取り組み、2016年までに出力20Wの青色半導体レーザーを6台搭載し、試料(加工対象物)上で6ビームを重畳できる100W級のAM装置を世界で初めて開発した。青色半導体レーザーによる多彩な純銅加工を実現するためには、高出力化・高輝度化が必要で、そのための試みも急ピッチで進んでいる。青色半導体レーザーは純銅加工だけでなくレーザー加工全体を変える可能性を有していることから、その開発競争がますます激化すると予測される。

一方、短パルスレーザーを用いた加工では、パルス幅が短くなるほど加工面への熱的影響が抑制されるため、切削面の仕上がり品質が高くなるが、パルスパワーが低く厚い材料の切断や穴あけに時間がかかる欠点がある。そのため、短パルスレーザーによる非熱的加工は、表面の加工研磨や切り出し、微細構造加工技術(表層加工)に適用され、医療等産業への応用展開が幅広い分野で進められている。また、破壊閾値を越えた飛散・剥離(アブレーション)現象を応用した加工技術が開発され、穴あけ、溶接や切断の技術から三次元微細加工、非熱加工の技術、金属ナノ粒子の生成手法にいたるまで、すでに産業ベースの利用が盛んに進んでいる。

Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)、International Conference on Laser Ablation (COLA) や国際光工学会(SPIE) Photonics Westなどの主要な国際会議・展示会では、欧州(特にオーストリア、スイス、ドイツ)、米国や日本を中心にダブルパルスや多波長光の照射による材料加工の高効率化や表面微細化に関する研究成果が報告されている。これらの次世代加工技術は生体適合性の向上や軽量化材料とのマルチ・マテリアル化による異種接合のための表面処理技術として期待され、研究が加速している。また、加工を制御するためには、短パルスレーザーと物質との相互作用を理解し、その後のアブレーション現象を明らかにする短

パルスレーザーアブレーションの学理解明に関する基礎研究が鍵を握っている。本分野は現在まで地道に継続してきた日本が世界を主導しており、その重要性は広く認識されている。

例えば、短パルスレーザーにより金属等の表面におけるナノスケールの微細周期構造の形成が確認された1999年以降、その機構解明に関する研究が行われてきたが、レーザー照射された表面状態変化を高速に実時間計測（その場計測）する手段がなく、基礎物理の観点からの研究は非常に困難であった。しかし、最近になって、プラズマ相互作用の寄与が大きいことが示唆されるとともに、この周期構造をレーザービームの照射条件（照射方式、波長、遅延時間、パルス幅、偏光、フルエンス等）、固体材料の種類や表面形状によって制御できることがわかってきた。最小で波長の25分の1程度まで構造を微細化する実験も行われ、回折限界以下の加工技術への展開も期待される。

レーザー加工は実験パラメータが多いために、サイバー・フィジカルシステム（CPS）を取り入れた新しい技術開発への挑戦も行われている。Society5.0実現に向けた自動走行車開発に代表されるように、高信頼性の半導体デバイスによる品質保証、電動モーターの小型・高性能化、車体の軽量化へのマルチ・マテリアル化が求められ、それらを実現するために不可欠な研究開発の方向性である。

（４）注目動向

[新展開・技術トピックス]

・品質保証技術としてのプロセスモニタリングとシミュレーション

プロセスモニタリングとシミュレーションによる品質保証技術の確立が重要な研究開発課題で、装置・計測機器・ソフトウェアメーカーと大学、国立研究所がプロジェクトを組んで実施している。溶融・凝固現象の解明に向け、米国の国立標準技術研究所（NIST）やローレンス・リバモア国立研究所（LLNL）や日本のTRAFAMがテストベンチを開発して、高速度カメラやサーモビューワによりメルトプールのその場計測を詳細に行うことで欠陥発生機構の研究を進めている。最近では、米国のアルゴンヌ国立研究所（ANL）、オークリッジ国立研究所（ORNL）、SNLなども、高出力X線による計測でわかったメルトプール内部の溶融・凝固現象から、大きな課題となっている空隙やスパッタの発生機構を一部の金属に対して明らかにしているが、全材料に対する体系的解明は未達である。また、非常に複雑な物質-光相互作用の物理については、レーザープラズマやX線自由電子レーザー等の超短パルスX線による表面や内部の構造変化が実時間計測され、国内外で検討が進んでいる。

シミュレーションに関しては、溶融・凝固現象にとどまらず、組織、熱変形予測に対してマルチスケール、マルチフィジックスをベースとした研究が行われている。現状では、このように多種多様なシミュレーションを体系化したソフトウェアはまだ存在しないが、日本原子力研究開発機構が2018年に開発したSPLICEコードはそれを指向する先駆的な成果として注目される。今後、材料物性値の大量取得や計算速度の向上を進め、製品の品質向上だけでなく将来の“Digital Twin”を目指す方向性である。一方、相互作用、特にレーザーアブレーション学理の解明には、分子動力学（MD）法、時間依存密度汎関数（TDDFT）法、電磁粒子コード（Particle in Cell: PIC）によるシミュレーションが用いられている。実験との横断的連携研究により、さまざまな課題を克服し、短パルスレーザーによる効率的な超微細表層加工を早期に実現することが産業界からも望まれている。

・CPS化による効率的加工技術の急速な進展

米国の General Electric (GE) 社は、航空機産業に CPS の概念を取り入れた先駆者である。部品のデジタル設計データをクラウドに送信し、それを基に細部にまで造形された構造物を製作することができる。同社は 2016 年に 10 億ドル以上の投資を行い、AM 装置メーカーであるスウェーデンのアーカム社、ドイツのコンセプトレーザー社の買収を行い、低コストな効率的加工技術の開発を加速させた。

GE 社以外に、AM 事業において多くの産業部品を手がけてきた米国のストラタシス社も航空機部品のデジタル製造に乗り出している。同社はこれまでに米国国防総省の航空・宇宙分野におけるあらゆる部品の製造を担当し、そのコストを 380 万ドル以上削減することに成功した。ドイツのシーメンス社はグループ全体で、トポロジー最適化技術を用いた 3D データの作成から、シミュレーション技術による金属や複合材料を用いた最適な積層造形プロセスの構築、AM を実際に行う機器やソフトウェア、業務提携企業が加盟するエコシステムなどを一つのプラットフォームで利用できるサービスの提供を目指している。

日本でも同様の動きが見られる。NEDO「高輝度・高効率次世代レーザー技術開発」の一環として、三菱電機株式会社やパナソニック株式会社、東京大学など 23 の機関は機械部品や精密部品に使うレーザー加工を人工知能 (AI) によって自動化する連携組織、「TACMI (Technological Approaches toward Cool laser Manufacturing with Intelligence) コンソーシアム」を 2017 年に立ち上げた。これまで職人の勘や経験に頼ってきた加工に関するデータを協力して収集、最適な条件を AI に学習させ、3 年以内にデータベースの整備と人手不足を補う AI 開発を目指すという。このように、レーザー加工技術の CPS 化は、これまでの大量生産加工ではなく、多様なニーズを背景にした高付加価値の多品種少量生産に重要な基礎技術につながっている。

・短波長レーザーによる加工技術の実用化

青色半導体レーザーは、日本人 3 人がノーベル賞を受賞した青色発光ダイオードを発展させた技術がもとになっており、日本の強みがある技術をレーザー加工、AM へ応用するものである。NEDO「高輝度・高効率次世代レーザー技術開発」では、2016 年からの高出力・高輝度化を目標にした取り組みにより 100 W 級青色半導体レーザーを製品化し、2018 年 1 月からは販売開始に至った。また、第 29 回日本国際工作機械見本市 (JIMTOF2018) では、この高出力・高輝度青色半導体レーザー 3 台を含むマルチレーザービーム加工ヘッドが搭載された複合加工機が世界で初めて稼働、披露されている。青色半導体レーザー加工は、難加工材料の AM から異材 (例えば金属と樹脂) の接合加工まで幅広い応用が期待されている。

ドイツのフラウンホーファー研究機構 ILT では、2017 年から、ドイツ産業研究協会連合 (AiF) 助成のプロジェクトとして波長 515 nm の緑色レーザー熱源を開発している。銅合金や純銅の AM 加工機への適用を目指しているが、それだけでなく非鉄および宝石業界で扱う貴金属にも適用可能としている。トルンプ社は、基本波 1030 nm からの波長変換による CW 緑色レーザーを開発し、出力 1 kW の熱源として粉末床溶融結合法の AM 装置に搭載した。2018 年 11 月にドイツで開催の AM・次世代製造技術国際見本市 (Formnext 2018) において、新装置による純銅の AM が動態展示された。

・難加工材料への展開

純銅に加え、ガラスや自動車・航空機部品の軽量化につながる炭素繊維強化プラスチック (CFRP) なども難加工材料である。最近では、これらの材料を対象に、短波長の超短パルスレー

ザーを用いることにより、加工時間（パルス数）は必要であるものの高品質な加工面の生成が可能になっている。軟 X 線自由電子レーザーによるガラスへの切削（除去）加工では、赤外光を用いた場合よりも一桁以上低いエネルギー（正確には照射フルエンスの閾値）で、切削面での割れやヒビのない加工面が生成されることがわかってきた。上記の TACMI コンソーシアムでは、非熱的現象に対する学理解明や CPS 型加工システムの構築、短波長・短パルスレーザー光源の開発などの課題に取り組んでいる。CFRP は軽量であることから、金属とのマルチ・マテリアル化を目指す異材接合も将来の重要技術と予想される。

AM 装置による世界初の成果としては、2015 年に、MIT メディアラボの研究チームが、原料の貯蔵容器から射出ノズルまでを約 1000℃の温度で維持できる構造とし、溶けたガラスをノズルから排出できるようにすることによってガラス対応機を開発している。この技術で作られたガラスは低温整形のため透明度が低く、衝撃にも弱いという問題があったが、2017 年にドイツのカールスルーエ工科大学と半導体関連企業アプライド・マテリアルズ社が透明性と耐久性の向上に成功している。熱処理によって高品質な石英ガラスに変換される光硬化性シリカナノ複合材料を原料に、一般の AM 装置を利用して作成できるため、スマートフォンのカメラレンズなどにも向いているという。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

国内においては、経済産業省からの受託により TRAFAM が実施している「三次元造形技術を核としたものづくり革命プログラム（次世代型産業用 3D プリント技術開発および超精密三次元造形システム技術開発プログラム）」が 5 年のプロジェクトで 2014 年度より進んでいる。2017～2018 年度は、NEDO の「次世代型産業用 3D プリントの造形技術開発・実用化事業」として進められ、高付加価値な製品・部品の製造に適し、製造業へのインパクトが大きい金属用の 3D プリント技術の基盤、装置、材料の開発、および鋳造用砂型 3D プリント技術の装置、材料の開発を目指す大型プロジェクトになっている。

内閣府 SIP「革新的設計生産技術」で実施中（2014～2018 年度）の 24 課題のうち、大阪大学接合科学研究所を中心とした青色半導体レーザーによる AM 装置開発と純銅加工への展開や、横浜国立大学を中心とした 2 光子マイクロ光造形技術に関する研究が注目される。また、NEDO「高輝度・高効率次世代レーザー技術開発」（2016～2020 年度）では、素材の特性に合わせた高品位で効率的なレーザー加工の実現に向け、光源技術や加工プロセス技術、加工システム技術、シミュレーション技術、センシング・評価技術などを産学官連携で体系的に開発することを目的としている。

2018 年度からは、文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム（Q-LEAP）の下、光量子科学によるものづくり CPS 化拠点のフラッグシッププロジェクトが東京大学を中心として開始された。これにより、超短パルスレーザーによる除去加工の学理解明と CPS 型レーザー加工シミュレータ開発が 10 年間の大型プロジェクトで行われることになった。同時に、SIP 第 2 期「光・量子を活用した Society5.0 実現化技術」も 2022 年度までの 5 年プロジェクトで始まり、こちらでは CPS 型レーザー加工機の開発を目標に掲げている。

米国では、2012 年に始まった先進製造の取組みとして NAMII が設立され、政府からの予算 3000 万ドルと参加組織（企業 40 社、9 大学など）からのマッチングファンド 4000 万ドルで研究開発が進められた。2014 年以降は、America Makes を中心に、ロードマップに即して

設計、装置開発、材料開発、モニタリング技術開発、シミュレーション開発と多くのプロジェクトが体系的に実施されており、多くの成果が出てきている。AM分野で最も歴史ある Solid Freeform Fabrication (SFF) シンポジウムでは、2017年、2018年に500件以上の講演発表がなされ、米国機械学会 (ASME)、米国金属学会 (ASM) などの年次大会においても非常に多くの研究成果が発表されている。これらは America Makes による成果でもある。America Makes では、2018年のプロジェクトとして、大型装置の開発と後加工に関するプロジェクトを実施することとしており、実用段階での研究開発が本格化している。また、企業の動きとして、金属 AM 技術の牽引役を務める GE 社は、2017年に GE Additive 社を立ち上げ、装置と原料粉末の開発を行っている。2017年に世界最大の造形面積を有する指向性エネルギー堆積法の装置が開発されるとともに、2018年にはマルチ・マテリアルのための粉末床溶融結合法による装置開発が検討されている。

欧州では、1984年からの研究開発支援プログラム (FP1～8) によって、高分子のレーザー स्क्यान技術に始まり、その後も AM 技術に対する投資が継続している。2007～2013年の FP7 においては、60を超える課題に1億6000万ユーロの予算配賦があったのに加え、現在の FP8 (Horizon2020) では重要基盤技術 (Key Enabling Technology) の一つとして先進的な造形技術 (Advanced Manufacturing and Processing) が挙げられ、2013～2016年発足の20課題に9500万ユーロが投資されている。また、ドイツ、英国、フランス、イタリア、スペイン各国においても、着実に AM 技術に関する研究プロジェクトが実施されている。粉末床溶融結合法、指向性エネルギー堆積法とも装置メーカーが多く、フラウンホーファー研究機構などとの連携の中で、装置の改良等に関する研究やモニタリング技術やマルチ・マテリアル装置の開発などが実施されている。

3次元造形装置の市場と傾向を記した Wholers Report 2018によると、中国では AM が Made in China 2025 におけるキーテクノロジーとして位置付けられている。2017年には16億ドル、2020年までに32億ドルに及ぶ多額の投資が行われる計画で、粉末床溶融結合法、指向性エネルギー堆積法とも AM 装置の開発から販売まで進んでいる。多くの海外製装置が導入されるとともに、大学をはじめとする多くの研究拠点から論文発表が行われていることから、既に AM の技術情報が蓄積されていると推察できる。

シンガポールでは、2016年から2020年にかけて、24億ドルを研究開発に投資することが決定しており、シンガポール科学技術研究所 (A*STAR) を中心に、幅広い分野における AM の研究開発が始まっている。

(5) 科学技術的課題

AM 技術は、デジタル・マニュファクチャリングで将来的には “Digital Twin” を成し遂げる技術として有望視されているが、上述したように課題は山積していることから、欧米を中心に基礎的研究が活発に行われている。

モニタリング技術に関しては、粉末床や造形体におけるその場観察での欠陥検出技術、高精度・高速処理可能な画像処理技術、これに伴うフィードバック技術の開発が依然として課題となっている。一方、シミュレーションに関しては、粉体レベルにおけるマイクロ溶融・凝固シミュレーション、組織予測シミュレーションおよび熱変形予測シミュレーションを体系的に開発することと併せて、高速・高精度加工のためにシミュレーションに使用する材料物性値の大量取

得が大きな課題である。また、AMによる合金材料の作製に向けて、原子・分子レベルの設計技術をこれらのシミュレーションに組み込んで開発を進めなければならない。その現場においては、生産試験に入る前に不可欠な条件出しに、シミュレーション速度・精度の向上も重要である。

日本は、ファイバーレーザーの技術開発に出遅れたが、加工技術と組み合わせることで巻き返しつつある。最近、日酸TANAKA株式会社が国産12 kWファイバーレーザーの搭載を可能にしており、空間・時間制御性の向上による高品質溶接が課題である。レーザー加工において材料への光吸収率は最重要因子の一つであり、青色半導体レーザーによるAM装置が注目を集める理由でもある。今後、試料の温度上昇による光吸収率変化について実験、理論の両面から明らかにするとともに、レーザー自体のさらなる高出力・高輝度化を実現することが重要である。一方、高平均出力を有する加工用の短パルスレーザーについては、ピコ秒が市販化、さらに短いフェムト秒の超短パルスレーザーが研究開発の段階にある。加工のためのフォトンコストを下げるための世界的な開発競争は激しく、加工最適化アプリケーションとの組み合わせによる装置化が鍵であろう。

2018年度からのQ-LEAP、SIP第2期ではアブレーション等のレーザー除去加工を主眼としており、以上の課題への資金投資によってAM技術を含む接合加工技術を重点化することも求められる。AM技術はあらゆる分野における成形技術として今後の利用が拡大していくと予測される。海外では航空・宇宙分野の部品にとどまらず、ナノテク、医療、建築、デザイン分野へ幅広い応用が検討されているのに対し、我が国ではそのような傾向がほとんど見られない。今後、自動車や電機製品における金型および最終製品を中心にして、装置開発に基づく新たな展開が重要である。

(6) その他の課題

AM技術分野の研究開発者が不足しており、喫緊の世界的課題が人材育成である。とりわけ、金属AMにおいては、3D-CAD技術だけでなく、トポロジー最適化のような新しい設計技術、溶融・凝固現象を取り扱うのに要する材料学の知識や計測評価技術といった幅広い素養が必要となることから、実習を伴った教育が必須であろう。このため、GE社が大学に金属AM装置を導入したり、欧米の大学院が当該分野の教育プログラムを開設したりするなど、人材育成への積極的な取り組みが顕著である。また、中国においては、多くの大学に装置導入がなされるとともに、大学発のベンチャー企業も設立されることで、人材育成が進んでいる。これに対して、日本では、装置を有する大学や企業が限られることから、人材育成のための実習が非常に難しい環境にあり、体系的な方策を検討することが望ましい。

AM技術は粉末を使用しており、安全に関する法規制の下で研究開発が行われている。これから装置導入が増えるにつれて、体系的な制度確立が必要となる。

(7) 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	◎	↗	TRAFAM や NEDO、SIP プロジェクトなどにより、溶融凝固現象の解析やシミュレーション技術の開発など、学理解明により高品質レーザー加工に必要な条件を特定するための基礎研究が実施され、成果として現れ始めている。レーザー除去加工（表層加工）については、複合レーザー照射によって回折限界以下の構造物ができるようになっている。また、2018年より Q-LEAP が開始され、超短パルスレーザーによる除去加工の学理解明と CPS 型レーザー加工シミュレータ開発で進展が期待される。
	応用研究・開発	○	↗	数社の工作機械メーカーにより、指向性エネルギー堆積法および粉末床溶融結合合法と、切削とのハイブリッド型の装置開発が行われてきた。また、TRAFAM プロジェクトにおいて、指向性エネルギー堆積法による装置 2 機種が開発され上市に至っている。純銅等のレーザー加工に優位性を有する青色半導体レーザーの開発で世界をリードする。CPS 型レーザー加工の応用が 2018 年からの SIP 第 2 期で進められている。
米国	基礎研究	○	→	LLNL、ANL、ORNL、SNL や NIST などの国立研究所が、大学や企業との連携により、テストベンチを利用した溶融・凝固現象の解明、計測評価技術の開発、シミュレーション技術の開発などを実施している。持続的な推進によって多くの成果が出てきており、活性度が高い。短パルスレーザーを用いた表面微細構造については、CLEO、COLA、SPIE Photonics West など で発表はあるものの、以前と比べて目新しい成果が少ない。
	応用研究・開発	◎	→	国立研究所、大学、企業による新たな製品開発プロジェクトを実施して大きな成果が継続的に出ている。また、GE 社が新たな装置開発を実施するなど、多くの応用研究・開発が積極的に行われている。粉末床溶融結合合法と指向性エネルギー堆積法以外の結合剤噴射法、材料押出法による装置開発も行われている。
欧州	基礎研究	○	→	特に、スイス、オーストリア、ドイツの大学と研究機関が着実、持続的に高効率化、微細化を目指した研究開発を行っているが、以前と比べて目新しい研究成果が少ない。学理解明に向けた研究は日本と同様の傾向にあり、高繰り返し超短パルスレーザーを用いた高次高調波光源による加工技術開発は注目される。
	応用研究・開発	◎	↗	レーザー熱源の AM 装置については、高速化のための装置開発や専用機械のための技術開発を着実に実施しており、金属 AM の分野で世界をリードしている。また、ドイツのフラウンホーファー研究機構 ILT、トルンプ社による緑色レーザー利用の試みや、新たな装置開発メーカーの誕生など動きは活発である。また、ドイツで、純銅等のレーザー加工に適した青色半導体レーザー開発、実用化のための産学連携プロジェクトが推進。
中国	基礎研究	◎	↗	AM、レーザー加工分野ともに巨額の投資が行われている。大学を中心に装置が導入されるとともに、多くの論文発表が行われている。
	応用研究・開発	○	↗	粉末床溶融結合合法、指向性エネルギー堆積法とも、AM 装置開発が積極的に行われており、多くの企業が設立されている。航空・宇宙分野に加えて、金型作製に特化した研究拠点も大学に設置されている。レーザー切断加工に対し応用指向が強い。
韓国	基礎研究	△	→	日本と同様に人材も少ないことから、顕著な研究成果は見られない。
	応用研究・開発	△	→	装置開発企業も少なく、応用研究・開発の顕著な成果は見られない。

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Nicholas P. Calta et al., "An Instrument for in Situ Time-resolved X-ray Imaging and Diffraction of Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing Processes," *Review of Scientific Instruments* 89, no. 5 (2018) . doi:10.1063/1.5017236
- 2) Sarah K. Everton et al., "Review of In-situ Process Monitoring and In-situ Metrology for Metal Additive Manufacturing," *Materials & Design* 95 (2016) : 431-445. doi:10.1016/j.matdes.2016.01.099
- 3) David L. Bourell, "Solid Freeform Fabrication," *Jom* 70, no. 3 (2018) : 370-371. doi:10.1007/s11837-017-2715-x
- 4) Manuela Galati and Luca Iuliano, "A Literature Review of Powder-based Electron Beam Melting Focusing on Numerical Simulations," *Additive Manufacturing* 19 (2018) : 1-20. doi:10.1016/j.addma.2017.11.001
- 5) Toshi-Taka Ikeshoji et al., "Selective Laser Melting of Pure Copper," *Jom* 70, no. 3 (2018) : 396-400. doi:10.1007/s11837-017-2695-x
- 6) Tatsunori Shibuya et al., "Deep-hole Drilling of Amorphous Silica Glass by Extreme Ultraviolet Femtosecond Pulses," *Applied Physics Letters* 113, no. 17 (2018) . doi:10.1063/1.5046125

2.5.3 接着技術

(1) 研究開発領域の定義

輸送機器、土木・建築、電機・電子・精密機器、医療などをはじめ、様々な分野において要素技術となっている接着技術に関する研究開発領域である。特に、近年は航空機や自動車などの輸送機器におけるCO₂排出量削減を目的として、マルチマテリアル化による軽量化を実現するためのキーテクノロジーである異種材料接合技術に注目が集まっている。実験と計算の両面アプローチにもとづくナノ～メゾ～マイクロメートルスケールでの接着メカニズムの解明と信頼性の確保、接着界面のリアルタイム計測評価手法の構築、種々の外部刺激や特異なマイクロ形状によって接着や剥離が制御できる新規機能材料の開発などが主な研究開発課題となる。

(2) キーワード

構造接着、機能接着、異種材料接合、マルチマテリアル化、キッキング・ボンド

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

省エネ化、低環境負荷、低消費電力化を目的として、自動車や航空機、情報機器、家電などの様々な製品に対して軽量化が進められている。たとえば自動車においては、これまでの鉄鋼に代わってアルミニウムや炭素繊維強化プラスチック (CFRP)、超ハイテンなどを組み合わせたマルチマテリアル構造の適用が検討されている。特にCFRPと異種材料の接合では、溶接などの接合方法の適用が困難なことから、機械的な締結や、接着による接合技術が用いられている。接着による接合は、接着面で応力を分散することで応力集中を回避できることや、異材の接触による電食を回避できることなどの理由から、異種材料間の接合方法としての利用が拡大することが期待されており、接着技術が将来の製造産業を支える基盤的な重要技術となる可能性が示唆されている。

上記の構造接着の他、導電性・熱伝導・難燃性などの接着以外の機能を付与し高付加価値化する機能接着に対する産業界からの期待も大きくなっている。機能接着に興味をもつユーザー企業は多種多様であり、自動車、車載機器、ディスプレイ、半導体、ジェルネイル、衛生材料、衣服や瓶のラベルなど、その出口は多岐に渡る。また、化学メーカーにおいても機能接着は競争力を維持するためのキーテクノロジーの一つとして注目されており、特に軽量で機能性を付与しやすい有機接着材料は耐環境性の向上が進むにつれ、さらにその市場規模を伸ばしていくことが予想されている。

[研究開発の動向]

接着接合では、被着体の表面と接着剤が密接に接触しているにも関わらず「キッキング・ボンド」(KBs)と呼ばれる弱い結合状態の影響や長期使用等による接合部の劣化によって破壊強度が大幅に低下する場合がある。しかしながら、接着接合部の状況を外から直接観測することが困難なため信頼性を担保できないという大きな課題を抱えている。したがって、接着接合の信頼性をいかに担保するかに注目が集まっている。具体的には、界面欠陥またはキッキング・ボンドは、製造中の表面の汚染、化学反応不良、様々な環境因子またはこれらの任意の組み合わせから生じると考えられ、接着前の被着体の検査や接着後の実際接合部に生じた接着不良の

非破壊検査手法を確立することが求められている。また、衝撃や長期劣化による影響の評価手法や、これらを予測する手法の確立、信頼性を担保するための接着メカニズム解明、強度低下を引き起こす劣化のメカニズム解明などが期待されている。

一方で、生体からヒントを得た構造構築、外部刺激応答性を付与した有機接着材料の合成、3D プリンターの設計自由度などを活かした新しい機能接着技術に関する研究開発が急速に成長している。

近年、アカデミアを中心にホットとなっていた接着トピックとして、Biomimetics や Bio-inspired と呼ばれる可逆接着・吸着技術が挙げられる。これら生体模倣接着のトレンドとして、以下の3つが代表的である。

- 1) ムール貝の接着タンパク部分構造であるカテコールを使ったコーティングと接着
- 2) ヤモリの足の表面に生えた毛の密集したマイクロピラー構造を模した接着材料設計
- 3) ハスの葉の表面に見られるダブルラフネス階層構造を模した液滴吸着挙動の制御

中でも特にカテコールアミン骨格をもつドーパミン緩衝溶液を用いたコーティングは、被着体の材質に依らずポリドーパミン薄膜が形成できることから、2007年に報告されて以来、現在に到るまで注目を集めている。実際、Au、Ag、Cuなどの金属や、TiO₂、Al₂O₃などの金属酸化物、GaAs、Si₃N₄などの半導体、ガラス、ハイドロキシアパタイトなどのセラミック、ポリエチレン、PTFE (テフロン)、PDMSなどの汎用高分子の全てにおいてポリドーパミンコートが有効であり、接着性の低い材料の表面改質に用いることができる。また、カテコール骨格を高分子鎖に導入した人工の機能接着剤が続々と開発されており、耐水接着性も注目を浴びる要因となっている。カテコール骨格が上記のようなユニバーサルな接着を発現するメカニズムとして、カテコール骨格が多種多様の相互作用（共有結合形成反応、水素結合、 π スタッキング、カチオン- π 相互作用、金属配位など）を実現しうる点が指摘されており、AFM（原子間力顕微鏡）を用いた分子レベルでの相互作用解析、SFA（表面力測定装置）を用いた μm スケールでの接着力解析も進展している。

一方、有機化合物の高いデザイン性を活かして、従来の接着材料にはなかった新しい機能を付与する研究も国際的に活発化しており、特に最近では、刺激応答接着剥離技術が注目を集めている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

接着メカニズムとしては従来からアンカーリング効果、化学結合、物理的な相互作用、界面での絡み合いの効果などがあると提唱されてきたが、実際になにが効いているかは明からにされていなかった。しかし近年、界面分析の手法が発達してきたため、徐々にこれらの分析ができるようになってきている。この分野では、日本が先行している状況にある。接着に特化した非破壊検査の手法についても積極的に研究が進められている。またこれまで検出がむずかしいとされてきたキッシング・ボンドについても、応力発光や、Acoustic Emission (AE) を使った手法で検出が試みられている。さらに、被着体の表面処理について、ドライプロセスである大気圧プラズマ処理やレーザー処理が広く研究されている。

機能接着材料に関して、最近急速に報告数が増加している研究トピックスとして、従来の光

硬化樹脂とは異なる形での「接着技術における光の利用」が挙げられる。その材料は以下のよう
に、①光反応骨格を利用したもの、②共有結合よりも比較的弱い可逆形成が可能な非共有
結合を利用したもの、に整理できる。

- ①アゾベンゼン、スピロピラン、アントラセン、光酸発生剤などの光反応骨格を導入した高
分子・超分子・液晶材料の開発と、光照射や加熱による接着（吸着を含む）と剥離の可逆
制御（リワーク）およびガラス転移温度（ T_g ）の可逆制御
- ②水素結合、 π スタッキング相互作用、金属配位結合などによってネットワーク構造を形成
するいわゆる超分子ポリマーの開発と、限定された範囲での光熱効果（紫外可視・近赤外
の光照射による温度上昇）をもちいた材料の局所軟化と局所接着

さらに、まだ報告例は少ないものの、塩水・イオンや電流などの外部刺激で接着剥離を制御
する機能接着材料の開発や、界面のマイクロ構造の形を工夫することで接着力に異方性を付与す
る試みもあり、今後、ナノレベルでの分子設計の最適化が進めば、さらなる進展が期待できる。
また、接着技術は界面相互作用の探求と不可分の関係にあることから、湿った臓器の表面でも
接着できる医療材料の開発や、細胞培養基板の界面における幹細胞と基板の相互作用の制御な
ど、医療・バイオテクノロジーへの展開も始まっている。

近年、計算アプローチによる接着科学の進展にも期待がかかっている。スーパーコンピュー
ターの普及により大規模な MD（分子動力学）シミュレーションを実施できるようになったた
め、これまでより大きな空間範囲（ $\sim \mu\text{m}$ ）で長い時間範囲（ \sim ミリ秒）を対象とした界面現
象の計算ができるようになった。計算コストを下げするために分子構造を抽象化した粗視化モデ
ルと、分子構造を精密にありのまま計算する全原子モデルの両方を相補的に活用することで、
実際の接着実験の結果と比較できるスケールの大規模シミュレーションが可能になりつつあ
る。計算科学の強みは、実験的な分析法では評価が難しい「ナノ～メゾ～マイクロスケールを
またぐ力の伝達情報」が一挙に入手できることである。しかし現状では、計算科学者は膨大な
計算結果をもっているものの、そこから統計学的に意味のある情報を抽出し、実験化学者がも
っている実験データとの擦り合わせを進めることができていないため、今後の課題となっている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

[日本]

国内では、企業、大学、国研が産学官で連携した接着に関する共同研究開発が複数走って
おり、中でもこれから国内の接着技術コミュニティで中心的役割を果たすと期待される拠点が、
2015年に産総研に設立された「接着・接合界面現象研究ラボ」、および同じく産総研に2016
年に設立された「接着・接合技術コンソーシアム」である。大規模なプロジェクトとしては、
NEDO が新構造材料技術研究組合（ISMA）へ委託する形で進行している「革新的新構造材料
等技術開発」（2014～2022年度）において、継続的に構造材料の接合・接着の強度と耐久性
を向上させる試みが行われている。また、JST 未来社会創造事業においては、大規模プロジェ
クト型として2018年より「Society5.0の実現をもたらす革新的接着技術の開発」が開始され、
産学官の垣根を超えた接着研究の一大ムーブメントが生まれつつある。NEDO が産業応用に
特化したプロジェクトを進めているのに対して、JST の未来社会創造事業は、接着メカニズム
の解明などの基礎科学の追及を研究範囲に含んでいる点が特徴的である。加えて、接着に関連

したプロジェクトとして、内閣府の革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) 「超薄膜化・強靱化『しなやかなタフポリマー』の実現」(2014～2018年度)においては、高分子材料の飛躍的な機能向上を目指し、数多くの大学と化学企業の参画のもとで進行しており、高機能有機材料の発展に大きく貢献している。

[米国]

米国の製造科学センター (National Center for Manufacturing Sciences : NCMS) では、陸軍研究所と連携し、米国の産業基盤の競争力を向上させることを目的とした技術開発コンソーシアムに参加しており、可逆性接着の研究を行っている。また、この枠組みで、PPG インダストリーズは、オークランド大学 (OU) と提携して、アルミニウム、マグネシウム、および炭素繊維の複合接合部を接合するため、熱膨張、低温での硬化、クラッシュなどに耐性があり、長期間のストレスに耐える構造接着剤の開発を進めている。

[欧州]

2014年度から Horizon 2020 の中で、ComBoNDT プロジェクトが実施されている。航空用途において、CFRP を主材料としたマルチマテリアル設計のための接着技術が対象である。具体的には、被着体表面および接着接合部の接着前および接着後検査に適した拡張非破壊試験 (ENDT) 法の開発および強化によって、接着品質の予測評価の困難さを克服することを目的としている。これにより、生産で最大 70% の時間短縮と 50% のコスト削減、15% の軽量化、20% の燃費改善を目指している。

(5) 科学技術的課題

接着メカニズムの体系づくりの取り組みが必要である。これには、化学的な分子論 (nm スケール) と機械工学的なバルクの連続体理論 (μm 以上のスケール) を橋渡しできる接着の力学理論、統一的で公正な力学的特性評価手法、可能な限り微小領域までの界面分析技術、計算機によるシミュレーション技術が必要となる。同様に長期の信頼性を担保するため、劣化を短期間で評価する手法を確立する必要がある。そのため、接着接合部の劣化にもっとも影響を与える因子を明らかにして加速的に劣化が起こる環境下での試験法を確立する必要がある。また非破壊検査では、接着前と後での高速検査技術が必要となる。これらについても、同時に接着強度に影響を与える因子を調べる必要があり、接着メカニズム解析と一体での検討が望まれる。そのためには、これらの問題意識を共有できる研究者たちが分野の垣根を超えて協働する必要がある。具体的には、接着剤の精密設計ができる有機合成化学者、界面科学に精通し、AFM (原子間力顕微鏡)、SFA (表面力測定装置)、引張試験などのマルチスケールな力の計測ができる分析科学者、電子構造を踏まえた精密な DFT 計算から大規模な全原子および粗視化 MD (分子動力学) シミュレーション、CAE (Computer-aided engineering) を利用した応力集中解析まで、幅広い時空間現象を対象として扱える計算科学者などが同一のプラットフォームで密接な共同研究を進めることが期待される。

(6) その他の課題

接着技術の課題には、プロセス設計、力学的特性評価や界面分析、非破壊検査、表面処理、

接着剤の設計など多様な要素があり、課題の解決には、機械や物理、化学等幅広い分野の専門家の連携が不可欠である。また長年の実用実績によって支えられて発展してきた技術であるため、実経験のある研究者の協力も不可欠である。これらを取りまとめられる横断的な知見を有する優れたリーダーと、受け皿となる連携促進するための組織が必要である。

この他、薬品規制への対応の問題がある。接着剤には多くの反応性物質が含まれているが、このうちエポキシの硬化剤である多価アミンのいくつかが2018年に劇物指定され、一部の接着が管理された環境でしか使用できなくなった。また、同じく接着剤で広くつかわれているビスフェノールAもREACHの規制対象となった。加えてウレタンの接着剤の主成分の一つであるジイソシアネート類にも規制が広がっており、接着剤成分については、規制の対象になっていないものを選択する必要性が生じている。

接着信頼性を確保するために、研究開発という視点以外にプロセス管理という考え方もあり、ヨーロッパではこれが進んでいる。人材教育もその一つである。前記のとおり、欧州特にドイツが中心となって接着業務作業者の資格取得を義務化する動きがあり、日本国内でも対応を検討する必要がある。

（7）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	◎	↑	東工大や九大において、力学的な評価や接着メカニズム解明などの基礎的な研究が行われている。 SIPやNEDOプロジェクトの枠組みで航空機向け複合材に関し接着剤接合技術を含む研究が行われている。またJST未来社会創造事業においても大規模プロジェクトが開始されている。
	応用研究・開発	○	↑	産総研の接着・界面現象研究ラボにおいて、基礎からアプリケーションにいたるまで産学官の連携を図りつつ研究開発が進められている。 三菱重工が中心となって、防衛装備庁安全保障研究の枠組みで、航空機用接着技術の信頼性のため、分子結合に着目したメカニズム解明を展開している。 技術研究組合ISMAが主体となって実施している新構造部材に関するNEDOプロジェクトの中で、産総研他7機関が参加して自動車車体向け接着技術の研究が行われている。 総合的な接着剤メーカーはないが、小規模な接着剤メーカーが多くあり、接着剤種類や用途で得意分野が異なる。ユーザーサイドである国内主要自動車メーカー、重工メーカーにおいても、自動車向けや航空機向けの接着技術の調査および開発が行われている。
米国	基礎研究	◎	→	接着現象の解析、接着剤の開発などの基礎研究が大学や化学メーカーを中心に行われている。 3Mなどの本分野のリーディングカンパニーを有していることが高い競争力の源泉となっている。 生体模倣材料の研究が盛んに行われている。
	応用研究・開発	○	→	接着剤メーカーとしては、3MやPPGなど。ユーザー側では、GMやフォード、ボーイングで研究開発が行われている。 フォードはダウと共同で接着技術の開発を行っている。

欧州	基礎研究	◎	→	ドイツ・フラウンホーファー生産技術・応用マテリアル研究所 (IFAM) において、評価法、表面処理や検査法、接着剤、教育など接着技術全般に関する研究を実施している。 ドイツでは国および州のサポートによって、VWAG とブラウンシュバイク工科大学とが中心となり自動車の軽量化を目指した官民共同研究実施機関オープンハイブリッドラボを設立し、国内外の連携を推進している。 オランダのデルフト工科大の接着研究所では航空宇宙向けの構造接着技術が研究されている。
	応用研究・開発	◎	→	ヘンケル (ドイツ)、ダウオートモーディブ (研究所、スイス)、シーカ (スイス)、ボスチック (フランスのアルケマの接着部門)、ノバケム (UK) などの接着剤メーカーを中心に実用化研究が進んでいる。 エアバスや、VW、BMW、ルノーなどのユーザーサイドとの共同研究も精力的に行われている。
中国	基礎研究	○	↗	主に大学や国立研究所からの論文発表数が増えている。 潤沢な研究費によって研究レベルも向上している。
	応用研究・開発	○	↗	電気自動車の軽量化を目的として、精華大学の研究開発拠点を中心に重点的な研究開発が行われている。
韓国	基礎研究	○	→	日米欧のレベルには達しないものの、ソウル大や KAIST において基礎研究が実施されている。
	応用研究・開発	○	→	主にユーザー企業で応用研究・開発が行われているが、欧米と比べるとレベルはそれほど高くない。 接着のユーザー企業は接着および周辺技術を諸外国から導入して活用しており、製品への適用も進んでいる。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) U.S. National Center for Manufacturing Sciences (NCMS) ,
<https://www.ncms.org/reversible-adhesive-system-improve-maintenance-sustainment/>
(2019年2月12日アクセス)
- 2) 「接着剤工業の市場動向」『月刊機能材料』2017年9月号 (シーエムシー出版, 2017) .
- 3) Marleen Kamperman and Alla Synytska, "Switchable Adhesion by Chemical Functionality and Topography," *Journal of Materials Chemistry* 22, no. 37 (2012) : 19390. doi:10.1039/c2jm31747h
- 4) H. Lee et al., "Mussel-Inspired Surface Chemistry for Multifunctional Coatings," *Science* 318, no. 5849 (2007) : 426-430. doi:10.1126/science.1147241
- 5) B. Kollbe Ahn et al., "High-performance Mussel-inspired Adhesives of Reduced Complexity," *Nature Communications* 6, no. 1 (2015) . doi:10.1038/ncomms9663
- 6) G. P. Maier et al., "Adaptive Synergy between Catechol and Lysine Promotes Wet Adhesion by Surface Salt Displacement," *Science* 349, no. 6248 (2015) : 628-632. doi:10.1126/science.aab0556
- 7) H. Lee, N. F. Scherer and P. B. Messersmith, "Single-molecule Mechanics of Mussel

- Adhesion," *Proceedings of the National Academy of Sciences* 103, no. 35 (2006) : 12999-13003. doi:10.1073/pnas.0605552103
- 8) B. Kollbe Ahn et al., "Surface-initiated Self-healing of Polymers in Aqueous Media," *Nature Materials* 13, no. 9 (2014) : 867-872. doi:10.1038/nmat4037
 - 9) Shotaro Ito et al., "Light-Induced Reworkable Adhesives Based on ABA-type Triblock Copolymers with Azopolymer Termini," *ACS Applied Materials & Interfaces* 10, no. 38 (2018) : 32649-32658. doi:10.1021/acsami.8b09319
 - 10) Hongwei Zhou et al., "Photoswitching of Glass Transition Temperatures of Azobenzene-containing Polymers Induces Reversible Solid-to-liquid Transitions," *Nature Chemistry* 9, no. 2 (2017) : 145-151. doi:10.1038/nchem.2625
 - 11) Shohei Saito et al., "Light-melt Adhesive Based on Dynamic Carbon Frameworks in a Columnar Liquid-crystal Phase," *Nature Communications* 7, no. 1 (2016) . doi:10.1038/ncomms12094
 - 12) Amir Mahmoud Asadirad et al., "Controlling a Polymer Adhesive Using Light and a Molecular Switch," *Journal of the American Chemical Society* 136, no. 8 (2014) : 3024-3027. doi:10.1021/ja500496n
 - 13) Tadashi Inui, Eriko Sato and Akikazu Matsumoto, "Pressure-Sensitive Adhesion System Using Acrylate Block Copolymers in Response to Photoirradiation and Postbaking as the Dual External Stimuli for On-Demand Dismantling," *ACS Applied Materials & Interfaces* 4, no. 4 (2012) : 2124-2132. doi:10.1021/am300103c
 - 14) Christian Heinzmann et al., "Light-Induced Bonding and Debonding with Supramolecular Adhesives," *ACS Applied Materials & Interfaces* 6, no. 7 (2014) : 4713-4719. doi:10.1021/am405302z
 - 15) Yanfei Ma et al, "Remote Control over Underwater Dynamic Attachment/Detachment and Locomotion," *Advanced Materials* 30, no. 30 (2018) . doi:10.1002/adma.201801595
 - 16) Mark Burnworth et al., "Optically Healable Supramolecular Polymers," *Nature* 472, no. 7343 (2011) : 334-337. doi:10.1038/nature09963
 - 17) Motoyasu Kobayashi, Masami Terada and Atsushi Takahara, "Reversible Adhesive-free Nanoscale Adhesion Utilizing Oppositely Charged Polyelectrolyte Brushes," *Soft Matter* 7, no. 12 (2011) : 5717. doi:10.1039/c1sm05132f
 - 18) Donald Haydon, "ElectRelease – Electrically Disbonding Epoxy Adhesive," *Assembly Automation* 22, no. 4 (2002) : 326-329. doi:10.1108/01445150210446175
 - 19) Michael P. Murphy, Burak Aksak and Metin Sitti, "Gecko-Inspired Directional and Controllable Adhesion," *Small* 5, no. 2 (2009) : 170-175. doi:10.1002/smll.200801161
 - 20) J. Li et al., "Tough Adhesives for Diverse Wet Surfaces," *Science* 357, no. 6349 (2017) : 378-381. doi:10.1126/science.aah6362
 - 21) Andre E. Nel et al., "Understanding Biophysicochemical Interactions at the Nano-bio Interface," *Nature Materials* 8, no. 7 (2009) : 543-557. doi:10.1038/nmat2442
 - 22) 島津彰 「産業用高分子のバルクおよび接着界面に関する分子シミュレーション」 (第4回 SPring-8 材料構造の解析に役立つ計算科学研究会 – 高分子材料開発における計算物

- 質科学とインフォマティクスの技術動向一, 2017年9月11日) .
23) ComBoNDT, <https://combondt.eu/> (2019年2月12日アクセス)

2.5.4 ナノ・オペランド計測技術

(1) 研究開発領域の定義

材料やデバイスに対する実使用下のナノスケール計測、すなわち機能発現中に刻々と変化し続ける現象、構造の直接観察によって、測定対象と機能との相関を見出すことを目的とした研究開発領域である。狭義では「時間変化」、「動作環境」、「その場」の3要素が揃う必要があるが、実際には「その場」と「オペランド」の違いは曖昧であることが多く、「オペランド」は材料分野における「その場」の代替語という広義で考えた方が実用的である。先端計測に向けた高い時間・空間分解能の達成、使用場に相当するモデル環境の実現、膨大な観測データからの有用情報の効率的抽出などの課題がある。最近では、「オペランド」という用語が初めて使われた触媒分野にとどまらず、生きた細胞、生体組織や半導体メモリー、太陽電池などの実デバイスにまで測定対象は急速な広がりを見せ、学界と産業界の両方において不可欠な研究手段となりつつある。

(2) キーワード

オペランド計測、「その場」(in situ) 測定、走査型透過電子顕微鏡 (STEM)、分割型検出器、ピクセル検出器、電場・磁場観察、「その場」専用ホルダー、環境セル、液中セル、原子・分子計測、エネルギー分散型 X 線分析 (EDS)、電子エネルギー損失分光 (EELS)、表面・界面観察、原子分解能観察、無磁場対物レンズ、量子ビーム分析、放射光 X 線、X 線吸収分光 (XAFS)、中性子線、回折法、小角散乱法、X 線顕微鏡、コヒーレント回折イメージング (CDI)、トモグラフィ、タイコグラフィ、X 線光子相関分光法、蛍光 X 線分析 (XRF)、X 線光電子分光 (XPS)、メカノオペランド分析

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

多くの材料研究では、ある特異な機能が見出されたとき、その発現に至った原因が何かを究明するために、材料の構造や電子状態を計測する。ところが、そのような計測は多くの場合、機能の発現時と別環境の (いわゆる ex situ) 測定であるため、真の原因を決定できないことがままある。それを克服するために、雰囲気、温度、圧力等を制御して、実際の「動作環境」と似た状態に保って計測するのが、「その場」(いわゆる in situ) 測定である。

「その場」測定概念をより一歩進めたものが「オペランド」測定である。「オペランド」測定は材料をその機能が発現する実際の「動作環境」に置きながら、構造、電子状態、分光特性等の「時間変化」を観測する。元来、「オペランド」という用語は分光特性と機能との相関を調べる研究で用いられた経緯があるが、今日では回折法のような非分光的手法まで含め、「動作環境」での測定を広く指すときに用いられている。

実際の「動作環境」であるか否かとの意味で、「その場」と「オペランド」は包含関係にあっても、研究の意義的に上下関係にある概念ではない。すなわち、「オペランド」ができれば「その場」は必要ない、ということではない。例えば、反応より吸着の過程が律速であるような速い触媒反応を対象にすると、「オペランド」計測しても触媒周囲には何の変化も得られない。対象材料のある特性に対して意味のある (真の) 計測を行う場合、必ずしも「オペランド」である必要はない。この例で言えば、反応物の濃度を変化させ吸着を制御するなど、条件に制約をかけ

た方が有効である。

ナノスケール計測の観点では、位置分解能の向上を目指す絶え間ない努力によって、究極の原子・分子計測が可能になりつつある。尖鋭な突端を有する探針を走査することにより、レンズを使わずに形状や物性を測定する走査プローブ顕微鏡（SPM）がよく知られ、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）などの例がある。また、電子顕微鏡についても、電磁レンズ系の球面収差や色収差を補正する技術が実用レベルに達するとともに、制御系の高度な安定性が実現したことにより起因して、技術進展が大きい。特に、材料内部に存在する界面、粒界、点欠陥、表面などの欠陥構造を原子レベルで観察することが可能となり、世界中の学術・産業分野において広く利用されている。

量子ビームを用いた計測は、加速器、原子炉等の大型施設を用いることにより実験室の装置では到底得られない情報を取得できる。特に、放射光を含む X 線や中性子線を用いたオペランド測定は、多くのビームラインで簡便に実施できるほど一般的になってきており、自動車に用いられている排ガス浄化触媒、二次電池をはじめとして、各種の金属、半導体、樹脂材料まで、ありとあらゆるものが対象となっている。オペランド計測において重要な量子ビームの特徴は、特定元素の電子・化学状態、結晶構造、表面～内部構造を非破壊で計測できる能力であり、これにより材料の 3 次元情報もオペランド計測で取得できる。このような量子ビームの有用性ととも、より先端的な測定や実用製品そのものの計測に対するニーズが高まってくると期待される。

[研究開発の動向]

①走査型透過電子顕微鏡（STEM）

STEM は、原子レベルに絞った電子線を走査して像を形成する電子顕微鏡であり、現在では従来からの高分解能透過型電子顕微鏡（HRTEM）よりもサブナノスケールの解析で重要な役割を担っている。最近では、信号検出系の進展が目覚ましく、組成分析、電子状態解析、電磁場観察、歪場解析などが原子レベルで行えるようになるなど、急速な発展を遂げている。その結果、今や欠くことのできない解析手法として、世界中の大学、研究所、企業に導入されている。STEM の優れた分析能力を活かして材料における特性発現の本質に踏み込むためには、現行の静的構造観察からオペランド計測へと大きく飛躍させることが極めて重要である。

注目すべき世界動向としては、日本のグループによる分割型検出器の開発に端を発した原子レベルの位相イメージング手法の進展が挙げられる。試料各点で透過、散乱された電子を検出するための検出器として、検出面を複数の領域に分割した分割型検出器を用い、微分位相コントラスト（DPC）法により半導体 pn 接合界面や磁気スキルミオンの直接可視化、さらには原子内部電場の直接観察までもが可能となっている。また、このような背景により、検出器の分割数を極限まで小さくしたピクセル検出器の開発が欧米を中心に活況を帯びている。ピクセル検出器を用いることで電磁場計測の定量化が実現し、またタイコグラフィーなどの位相再生法の適用も可能になるため、本分野における注目度は極めて高い。現状、分割型検出器に比べ検出時間、データ量に難があるものの、今後は日進月歩に改善していく可能性が高い。

ピクセル検出器からのビッグデータと機械学習などの情報科学的手法とを融合する研究も始まっており、STEM とスパコンを繋いで大量データを高速解析するプロジェクトも立ち上が

り始めている。この分野は現在 4D STEM と総称されるようになり、学会等でも関連セッションが数多く立ち上がり、参入する若手研究者も世界的に増加している。さらに、従来の EDS、EELS 検出器にも格段の進歩があり、原子レベルの組成分析や状態解析が一般的になっている。このように検出系の性能が向上したことは、測定時間の短縮を可能にするため、オペランド計測への応用展開にも有利に働くと考えられる。

STEM でオペランド計測を実現するためには、試料を実際に近い「動作環境」に置くための専用ホルダーの導入が必須である。昨今、欧米のベンチャー企業を中心に、さまざまな試料ホルダーの開発が進展しており、液中、ガス雰囲気、通電、加熱、冷却、磁場印加、インデンテーションの下での STEM オペランド計測が可能になりつつある。また、集束イオンビーム (FIB) による加工技術も格段の進歩を遂げており、専用ホルダーに最適な形状、サイズで観察試料の作製が可能になっている。今後は、上述の STEM 観察・分析手法とオペランド手法を如何に融合して、材料・デバイス現象の本質解明に繋げるのかが重要な方向性となるであろう。

②放射光 X 線

粒子線である電子線、イオンビーム、中性子線や、赤外～可視・紫外、 γ 線領域の電磁波と比較して、放射光 X 線はオペランド計測のプロブとして最もニーズの高い量子ビームである。光が照射され物質と相互作用した後の透過・散乱・回折光を計測するのがオペランド計測では基本であることから、フォトンイン/フォトンアウトという言葉で括られる。

透過 X 線を検出する、もしくは吸収後の二次過程である蛍光 X 線やオージェ電子、光電子を検出する X 線吸収分光 (XAFS) は、放射光 X 線のオペランド測定として最も幅広く使用されている手法である。XAFS は元素選択性と局所構造敏感という 2 つの特徴があり、それらは特に不均一系触媒の解析と相性が良く、オペランド XAFS が決定的な情報を与える場合が多い。

初期のオペランド XAFS は、主に自動車触媒のような気体-固体界面反応の観測に使われた。その中でマイルストーンと言えるべき成果を挙げたのがフランスの欧州シンクロトロン放射光研究所 (ESRF) のグループである。その後、燃料電池の電極触媒や二次電池の電極材料に対するオペランド XAFS の報告が次々と出された。特に、電極触媒の反応は気体-液体-固体の三相界面で起こり測定対象として複雑であるが、電池開発が盛んになるにつれて電極材料のオペランド XAFS は進化を遂げてきた。初期の頃は Pt/C 電極触媒に対して欧州や米国の成果が多かったのに対し、日本の大型放射光施設 SPring-8 (Super Photon ring · 8 GeV) においても「その場」かつ「実時間分割」測定を実現したという研究報告が注目されている。

特定の蛍光 X 線の収量を測定すること (部分蛍光収量法) により高いエネルギー分解能で XAFS スペクトルを取得できるが、この手法をオペランド計測に適用するという観点からも挑戦がなされ、米国のスタンフォード・シンクロトロン放射光施設 (SSRL) のグループによる表面 XAFS、SPring-8 での高分解能 XAFS の成果がある。また、通常の Pt-XAFS で用いられる硬 X 線 (およそ 4000 eV 以上) でなく、透過能力が低くオペランド測定への適用が難しかった軟 X 線 (200 ~ 4000 eV) を利用した研究も最近では発表されている。もともと軟 X 線は、そのエネルギー領域に C、N、O といった重要元素の K 吸収端だけでなく、3d 遷移金属の性質を司る 3d 軌道への 2p 軌道からの励起エネルギーも位置することから、潜在的な材料研究へのニーズが極めて高かった。SiC や Si₃N₄ を軟 X 線用の窓材として用いることで、SPring-8 や極端紫外光研究施設 (UVSOR) で Fe や Mn などの「その場」XAFS の成功例がある。

X 線回折法 (XRD、より厳密には広角 X 線回折 (WAXD)) は X 線分析法の中で最も使わ

れる手法である。放射光 X 線においては、主にイメージングプレートや半導体二次元検出器が使われ、検出器を動かすことなく短時間で幅広い回折角の情報を得ることができることから、条件を細かく変更しつつ連続的に「その場」XRD を行うことが容易である。二次電池の電極材料を対象にした例が数多くあり、代表的な論文は引用回数が 1000 回を超える。環境制御下の「その場」XRD や、二体分布関数法により XRD パターンから局所構造の実空間情報を得る研究が SPring-8 で行われている。

このように X 線によるオペランド計測では電池・触媒材料の例が最も多いが、最近では高分子材料、生体材料、細胞などの新しい測定対象や機械工学等の新分野への応用も出てきており、それと同時にイメージング/顕微法への研究展開が見られる。原子や分子の空間配置を調べるための顕微法として、走査型透過 X 線顕微鏡 (STXM) やコヒーレント回折イメージング (CDI) などが知られている。局所的な構造情報が選択的に得られるという利点から、日本、米国、欧州の放射光施設では、高分解能観察に必要なコヒーレント光を扱える専用ビームラインを用いて、ナノ・イメージングや各種分光法との組み合わせによる組成マッピングの研究が進められている。応用段階への進展も見られるものの、現状では測定に時間がかかることが多く、実デバイス内の現象を時間の関数として捉える計測の実現には、もう少し時間を要するだろう。

位置選択性やデータ解釈のしやすさでは劣るものの、空間・時間分解能や試料が置かれるモデル環境の自由度が高い散乱法を主に用いるオペランド計測も継続的に行われている。例えば、小角 X 線散乱 (SAXS) 装置に紡糸装置や延伸装置などを持ち込み、高分子材料の成形過程でのナノ構造変化を観察する研究などが挙げられる。また、ダイナミクス計測においては、X 線光子相関分光法 (XPCS) の時間分解能が年々高くなってきており、可視光における同等の手法である動的散乱では見ることのできない微小な構造の速いダイナミクスや不透明試料におけるダイナミクスの「その場」観察が一般的になりつつある。

③中性子線

中性子線は、電子線やイオンビームと同じ粒子線であるが、オペランド計測のための性質としてはその逆で、多くの材質に対して透過能力は高く窓が問題となることは少ない。この意味では、ほぼ原子核としか反応しないことにより断面積が低く (すなわち相互作用が小さく)、実用的な現在の中性子源では低感度でスループットが悪くなる場合が多いという本質的な問題はあるものの、量子ビームプローブとしては適しており、広く研究が行われている。

オペランド計測では、広角中性子回折法 (WANS)、小角中性子散乱法 (SANS) が主に用いられている。中性子の散乱、回折は、得られたパターンを解析することで物質内部の原子の配列を調べる手法であり、これによって結晶構造の解析、金属部材の残留応力の測定やバルク材料中のナノ析出物の同定が可能となる。日本、世界問わず活発な研究分野の一つは二次電池電極の実電池計測である。例えば、充放電状態にある Li イオン実電池、車載用電池の内部を非破壊的に解析し、電極活物質における不均一性の時間変化から電池仕様の改良や電池制御システムの開発に役立てられようとしている。イメージング技術の応用分野としては、他に医療診断やヒートパイプ内の熱流体移送現象、水素貯蔵合金における水素可視化の研究があり、米国の標準技術研究所 (NIST) などで盛んである。

また、磁性研究に中性子磁気散乱法、表面と界面の観察に中性子反射率法などが開発され利用されている。さらに最近では、中性子による回折とイメージングの原理を組み合わせたブラッグエッジイメージングが新しい解析手法として期待されている。これにより、中性子イメージ

ングに基づく電池充電量の空間分布から劣化度の測定が可能となり、自動車メーカーを中心に産業界から注目が集まっている。国内では、J-PARC 物質・生命科学実験施設 (MLF) のエネルギー分析型中性子イメージング装置 RADEN が知られている。

注目すべき動向としてトライボロジー (摩擦学) への展開もある。工学的見地からのトライボロジーの研究は、機械システムにおけるエネルギー損失と環境負荷の低減に期待が寄せられた背景から、主として機械分野で行われてきた。引張や圧縮を含む機械的操作の下で現象のダイナミクスを追うオペランド計測は「メカノオペランド分析」と呼称される。国内では、文部科学省の「光・量子融合連携研究開発プログラム」(2013～2017年度)により、このような「摩擦」に加えて「潤滑」の本質的理解を目指す研究が推進された。詳細は(4)注目動向において説明する。

世界で稼働している代表的な中性子線の施設は発生源別に原子炉と加速器に分けられる。中性子の計測利用のための研究炉としては、フランスのグルノーブルにあるラウエ・ランジュヴァン研究所 (ILL) が最も強い中性子線を発生できる施設であり (2015年時点)、世界を主導している研究機関である。また、米国 NIST も、中性子研究センター (NCNR) に 20 MW の研究用原子炉を持ち、中性子線の高精度化と固体物理から生物、材料科学に関する研究を活発に進めている。一方、イギリスのラザフォードアップルトン研究所 (RAL) とスイスのポール・シェラー研究所 (PSI) が世界に先駆けて中性子源 (それぞれ ISIS と SINQ) を研究炉から加速器へと移行した後、ドイツや米国、日本、中国 (例えば中国科学院 (CAS) 傘下の CSNS) などでも加速器中性子源の研究開発が盛んになっている。加速器中性子源のうち、加速器からの陽子等の高エネルギー粒子を原子核に衝突させて、大量の中性子を発生させる核破砕反応に基づく中性子源の代表例が J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex) である。2008年に運用が開始された後、2015年には 500 kW 出力を達成し、世界でも最高クラスの大強度パルス中性子源である (将来的に 1 MW まで増強予定)。一方、J-PARC のような大型施設だけでなく、使い勝手のよい小型中性子源が望まれるようになり米国インディアナ大学の LENS (Low Energy Neutron Source) や、北海道大学の HUNS (Hokkaido University Neutron Source)、理化学研究所の RANS (RIKEN Accelerator Neutron Source) など、TOF 測定のできるラボ中性子源が近年脚光を浴びている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

・STEM 関連技術の高度化

STEM 分割型検出器に関しては、日本において光電子増倍管 (PMT) 方式、欧米で半導体検出器を用いた方式が開発、既に商用装置が販売され実用化に至っている。この分割型検出器を用いた DPC 法による応用研究が盛んに進められている一方、欧米を中心にしてピクセル型検出器も商用化が既に始まっており、FEI 社、Gatan 社、Direct Electron 社、Medipix 社、Quantum Detectros 社、日本電子株式会社 (JEOL) などから次々と市場導入が行われている。検出器の検出スピードを現行の 100 倍以上向上させる開発プロジェクトが米国のローレンス・バークレー国立研究所 (LBNL) で展開している。オペランド計測に必要な他の関連技術として、電子線走査システムの改善と情報科学的手法の応用による STEM 高速化や、磁性材料の観察を目指す無磁場対物レンズの開発などが注目される。また、SDD 検出器を用いた EDS、CMOS 技術を応用した EELS 検出器を STEM に組み込みオペランド化する試みは未だ

黎明期であるが、注目しておくべきであろう。

・オペランド STEM 専用試料ホルダーの開発

STEM 内でオペランド計測を実現するためには、専用試料ホルダーの導入が必須である。近年、欧米のベンチャー企業を中心に、さまざまなオペランド計測用試料ホルダーが開発されている。具体的には、Protochip、DENS solutions、Hysitron (現 Bruker)、Gatan、Hummingbird Scientific など各社から通電、加熱、冷却、液中、ガス雰囲気、インデンテーション用の試料ホルダーが市場投入されている。日本では、株式会社メルビルのホルダー開発が健闘している。TEM によるオペランド計測に関しては、日本は長い伝統と実績を有してきたが、最近のオペランド用試料ホルダーの開発では欧米の後塵を拝する状況は否めない。

・新規の放射光 X 線オペランド計測

これまでオペランドに不向きと思われていた手法、例えば軟 X 線を使った XAFS や発光分析でオペランド計測を行おうとする動きがある。フォトンイン/フォトンアウトが研究の主流であることに変わりはないが、それ以外で最近新しく見えてきた XPS と共鳴 X 線非弾性散乱法によるオペランド計測について記述する。

XPS は、X 線照射で放出される電子 (光電子) の検出により元素選択的な電子状態が取得できる。通常は高真空中の試料を測定対象とするのに対し、窓の材質を SiO_2 とし厚さを 15 nm まで薄くすることで、固液界面や大気圧下の「その場」測定が実現している。分析対象を広げるための長年の取り組みが、いよいよオペランド XPS を可能なものにしてきている。

一方、XAFS は元素選択的で敏感な手法だが、電子状態に関しては非占有状態の情報しか得られず、スペクトルとして観測されるのは真の電子状態密度ではなく基底状態への射影状態密度であるという制約があった。そこで、より正確で精密な電子状態を観測可能な手法として、対象元素における価電子帯の電子励起を観測する共鳴 X 線非弾性 (ラマン) 散乱法があるが、断面積が小さく測定時間がかかることから、オペランドへの適用は進展していなかった。米国の Advanced Light Source (ALS) のグループは、散乱光の検出方法を工夫することによって、Li イオン電池の正極材料である $\text{Li}(\text{Ni}, \text{Co}, \text{Mn})\text{O}_2$ でオペランド計測を実現しつつある。

・分光・散乱法と顕微法との組み合わせ

さまざまな X 線顕微法と分光法、あるいは散乱法を組み合わせた新規計測技術が次々と報告されている。例えば、SPring-8 ではタイコグラフィと XAFS を組み合わせて従来の顕微 XAFS を凌駕する分光イメージングに成功している。米国 ALS でタイコグラフィと XAFS を組み合わせて Li イオン電池中の高分解組成マッピングを行った例、欧州 ESRF ではクラッキング触媒を対象とした同様の報告がある。また、散乱法と顕微法の組み合わせとして、散乱像を用いた高分解能化手法としてのタイコグラフィなども研究されている。さらに、ESRF のオペランド計測専用ビームラインからは、XRD とトモグラフィの組み合わせによって、リン陽極を有するナトリウムイオン電池中で特定部位の対分布関数 (PDF) を得るユニークな研究が報告されている。これらの計測法はまだリアルタイム観察に使える段階にはないが、光源の性能が向上すれば将来は実デバイス中の構造変化を実空間・時分解で観察できるようになると予想される。

・メカノオペランド分析の進展

メカノオペランド分析は、有機的な分野間融合体制の構築と推進、量子ビームプローブの高度化、ビームラインの産業利用への開放の 3 点によって活発化している。J-PARC 等に高強度ビームラインが設立され、高強度でしか実現し得ない分析にも手が届くようになったことから、

2015年以降になって研究の進展が顕著になってきた。当然ながら、動力源の飛躍的な高効率化を図りたいという各機械メーカーからのニーズの高まりにも呼応した流れであり、今後はより大きな潮流となることが見込まれる。

材料工学、トライボロジー、加工学を基礎とするメカノオペランド分析の事例として、中性子線斜入射小角散乱法を用いたトライボ環境下における摺動表面の研究がある。二面を擦り合わせながらその摺動界面に中性子線を斜入射することで得られる非弾性散乱情報から、金属材料界面のナノスケール構造変化を捉えようとする試みである。まだ開発途上の感はあるが、未摺動時との散乱プロファイルの差異は見られており、今後の展開が期待される。これは欧州でのメカノオペランド分析の一例である。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

国内においては、光・量子ビーム技術の連携と施設、設備の横断的活用を目指した文部科学省の「光・量子融合連携研究開発プログラム」で、放射光 X 線、中性子線や他の光・量子ビーム技術との融合によるオペランド計測のプロジェクトが 2017 年まで進められた。これと並行し、小型中性子源として理化学研究所の RANS 開発が戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)「インフラ維持管理・更新・マネジメント技術」のプロジェクトで進展した。現在、ナノ・オペランド計測のみに注力する大型プロジェクトは見当たらないが、JST の研究成果展開事業「先端計測分析技術・機器開発プログラム」や戦略的創造研究推進事業 ERATO 百生量子ビーム位相イメージングプロジェクト、さきがけ「エネルギー高効率利用と相界面」、科学研究費補助金の新学術領域研究「ナノ構造情報のフロンティア開拓・材料科学の新展開」、特別推進研究「原子・イオンダイナミクスの超高分解能直接観察に基づく新材料創成」の一部課題として、STEM、X 線顕微法・イメージング技術関連のプロジェクトがある。無磁場、あるいは高速化 STEM が、実際の装置開発メーカーである JEOL と東京大学との共同研究により開発中であることは注目される。また、放射光 X 線のオペランド観測については、NEDO の「固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業」、「革新型蓄電池実用化促進基盤技術開発」、文部科学省が実施している「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」が深く関わっている。

諸外国でも、ナノ・オペランド計測のみに注力するプロジェクトへの大規模な政府投資は見られないが、米国 LBNL における STEM 用ピクセル検出器の開発、フランス CRNS のカソードルミネッセンス (CL) 技術開発 (Attolight 社で装置市販)、ドイツの SALVE プロジェクト、英国の SuperSTEM3 などが注目に値する。欧米では、ピクセル検出器とビッグデータ解析の融合を目指すプロジェクトも動き始めており、米国の LBNL とコーネル大学、英国のオックスフォード大学とグラスゴー大学、ドイツのユーリッヒ研究所エルンスト・ルスカセンターにおける開発状況を常に注視する必要がある。また、中国が巨額な研究投資を背景として、ハイエンド STEM を精力的に導入しており、急速に実力を伸ばしている。

中国における放射光 X 線のオペランド計測は、装置開発よりも導入装置による分析応用に重点が置かれており、例えば Li イオン電池の計測などが精力的に展開中である。今後、本格的な装置開発に参入する可能性もあり、注視する必要がある。

(5) 科学技術的課題

STEM におけるピクセル検出器の開発は、欧米が先行している。高速かつ高感度のカメラ

はSTEM 検出器としての利用に留まらず、クライオ電子顕微鏡やオペランドTEMにも応用可能で、汎用性も極めて高い。STEMを用いたオペランド計測に関しては未だその端緒についたところであり、観察の超高速化、安定化や自動補正、像解析などのソフトウェアの充実も重要な開発要素となる。

放射光X線を利用したオペランド計測は、高い空間・時間分解能と実デバイスに近い「動作環境」の再現が求められ、光源、光学系、検出器等の性能向上とモデル環境の高度化の両輪で臨むべき対象である。また、より高いスループットを求め光源からのプローブ光子密度を増加させると、X線による試料損傷が顕在化し問題になってくるであろう。偏向電磁石光源から得られる光子密度 (1×10^{10} ph/s/mm²) のレベルにおいては、電池・触媒材料のほとんどがX線の損傷を受けることなくオペランド測定が可能であるが、挿入光源から得られる光子密度 ($> 1 \times 10^{13}$ ph/s/mm²) では一部の試料に照射損傷が既に観測されている。タンパク質の結晶構造解析では試料を冷却することで照射損傷を低減させている例が多いが、「オペランド」と名の付く限り、試料温度は動作範囲内に限られてしまい、解決が困難になっている。

また、STEM、放射光X線、中性子線によるオペランド計測すべてに共通の課題であるが、専用の試料ホルダー開発に関しても欧米の後塵を拝しており、今後の重点化が必須であると考えられる。特に、極めて難しい高圧下でのオペランド計測については、透過能力が高く窓材を容易に厚くできる中性子の技術から学ぶことも有効であろう。現状、各実験グループが個々に開発しているが、相互の情報共有により汎化した試料ホルダーの開発が求められる。

（6）その他の課題

日本の電子顕微鏡技術は伝統があり、国内メーカーの製品は世界市場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で国を挙げて取り組んできた成果であると考えられる。しかし近年、電子顕微鏡の新分野、新技術を切り開く研究者層が薄いことが問題である。

人材不足の問題は、STEMだけでなく放射光X線、中性子線によるオペランド計測を含む本研究領域の全体に当てはまる。そもそも、計測の研究者は、材料・デバイス開発などの出口に直結する応用研究のサポートとしての位置づけで働くことが多く、純粋な計測研究だけを継続していくことは難しい環境にある。このような状況では次世代の顕微鏡開発・計測を担う若手研究者が育ちにくいと危惧される。

また、オペランド計測を行う上で、実デバイスの「動作環境」を再現することが計測手法・技術の研究と同程度に重要である。「動作環境」と計測が要請する実験条件とのすり合わせは、対象の材料やデバイスで行う各実験で必要になると考えられることから、今後の人的、資金的負担は増加すると予想される。しかし、最先端ナノスケール計測は、ハードウェア開発、オペレーションとともに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、確保することは非常に難しい。長期的な視点に立った対策を講じなければならない。

多くのユーザーが手軽に放射光施設に立ち寄ることのできる環境作り、例えば海外の多くの施設と同様に、実験ホールを放射線管理区域から除外することも検討の価値がある。中性子線とX線との相補的利用が魅力的であることに疑いはないが、技術開発、人材育成の観点で日本原子力研究開発機構の研究用原子炉JRR-3が8年以上に渡り停止している現状をどのようにしていくのかが、課題である。

(7) 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	○	↑	STEM：像形成理論や分割型検出器、DPC法の研究開発に関し世界の先鞭をつけている。また、無磁場対物レンズや収差補正装置などのプロジェクトも進行。しかし、オペランド専用試料ホルダーの開発では遅れをとっている。 放射光X線：SPring-8、SACLA、PF、UVSORなどを中心に研究が進められている。世界初の大気圧XPS測定や50nm位置分解能でのタイコグラフィックXAFSなどは顕著な成果である。 中性子線：オペランド分析に必要な高度化（集光精度向上による高強度・高精度化）技術、小型中性子源の開発が理研、京大などで進んでいる。メカノオペランド分析の例がJ-PARCで見られ始めた。
	応用研究・開発	○	→	STEM：DPC法の材料・デバイス応用に関して、世界を先導する成果を報告。また、装置に関してはJEOL、日立など国内メーカーが国際競争力の高い製品を販売しており、今後も付加価値を高めるための開発を継続することが望まれる。しかし、ピクセル検出器、EELSやオペランド専用試料ホルダーの開発では欧米に遅れを取っている。 放射光X線：SPring-8においては、(株)豊田中研専用ビームライン(BL33XU)から新手法に関するプレスリリースやフロンティアソフトマター開発専用ビームラインでの製造工程計測の例などがあり、吸収法、散乱法ともに、実用化につながる研究開発が進行している。顕微法と分光法の組み合わせによる実空間計測も期待される。 中性子線：実電池内部におけるイオン（特にLiイオン）挙動や電極界面構造の把握を目指すイメージング研究が企業による専用ビームラインで進んでいる。
米国	基礎研究	◎	↑	STEM：ピクセル検出器を応用した4DSTEMという分野を確立し先導。特にLBNLが新規位相イメージングやピクセル検出器の開発、ビッグデータ解析など重要な結果を発表。コーネル大の開発したピクセル検出器がFEI社から販売され、同社のハイエンドSTEMに急速に導入され始めている。 放射光X線：APS、NSLS-II、SSRL、ALSなどが中心。2018年XAFS国際会議でのKeynote lectureを米国研究者が務め、関連書籍の発行もあるなど、引き続き高レベルにある。XPCSでナノ秒オーダーの時間分解能を実現した研究は価値が高い。 中性子線：NIST・NCNRを中心に、中性子ビームの高精度化に関する研究が活発に行われている。
	応用研究・開発	○	↑	STEM：ベンチャー企業がオペランド専用ホルダーの開発を先導しており、液中観察や電池反応観察など画期的な成果がある。EELSに関してはGatan社の独壇場である。Nion社はモノクロメーター搭載のSTEM専用機開発で異彩を放つ。 放射光X線：化学電池、水分解用光触媒、燃料電池などのエネルギー関連材料への応用が目立つ他、多様な測定対象への展開が本格化。 中性子線：電池以外に、医療診断やヒートパイプ内の熱流体移送現象、水素貯蔵合金における水素挙動の可視化等の研究にイメージング技術が利用されている。

欧州	基礎研究	◎	↗	<p>STEM：ドイツは長い電子顕微鏡開発の歴史に根ざして、収差補正技術などの基幹技術の開発において引き続き世界を先導（ウルム大学の低加速電圧 TEM など）。フランスは STEM-EELS や STEM-CL 開発を先導。英国は DPC、タイコグラフィーなど STEM 位相イメージングにおいて長い研究開発の歴史を有しており、近年のピクセル検出器の急速な進展とともに、再び存在感を増している。</p> <p>放射光 X 線：ドイツ電子シンクロトロン (DESY) の PETRA III、欧州 X 線自由電子レーザー (European XFEL) 施設の FLASH や ESRF、英国ダイヤモンド放射光施設 (DLS)、スイス放射光施設 (SLS) などを中心に進められている。他にも本格稼働を待つスウェーデンの MAX IV などがある。特に、ESRF はオペランド計測に特化した、あるいはマイクロビーム専用のビームラインを備えており、早くから力を入れている。最近も関連総説が発表されるなど引き続き高レベルにある。</p> <p>中性子線：ILL は世界最高強度の中性子ビームラインを有し、回折法、小角散乱法、非弾性散乱法の高度化で世界を主導する。日本と同様、メカノオペランド分析の例が見られ始めた。</p>
	応用研究・開発	○	→	<p>STEM：オペランド専用の試料ホルダーを用いてさまざまな応用研究が進展している。既存技術の高度化や新技術の応用も堅実な展開を見せる。</p> <p>放射光 X 線：米国と同様に、エネルギー関連分野への応用が顕著である。また、回転軸受の動作中心ずれをオペランド XRD で計測した DLS の例などユニークな応用も見られる。</p> <p>中性子線：ILL に加えて、PSI-SINQ を中心にイメージング応用が進んでいる。</p>
中国	基礎研究	△	→	<p>STEM：急速にハイエンド装置の導入が進められており、今後もさらなる研究投資が行われる見込み。海外で活躍する若手研究者を自国に呼び戻し、短期間で技術的追従を達成する国内体制を構築している。</p> <p>放射光 X 線：SSRF、NSRL、BSRF で進められている。2018 年 XAFS 国際会議で NSRL の研究者が Plenary lecture を行っており、存在感が今後高まる可能性。</p> <p>中性子線：2018 年に CAS-CSNS が実運転を開始。</p>
	応用研究・開発	△	→	<p>STEM：欧米や日本から帰国した若手研究者に最新装置を提供することで活況を呈している。豊富な資金的・人的リソースにより、世界トップレベルの応用研究が進みつつある。</p> <p>放射光 X 線：関連論文に企業からの著者が入っている例は限定的である。</p> <p>中性子線：CSNS が実運転を開始し始めたばかりで顕著な成果はまだ見当たらない。</p>
韓国	基礎研究	△	→	<p>STEM：中国と同様、主軸は応用研究にあるため、基礎的な装置開発や理論研究に関しては目立った報告はない。</p> <p>放射光 X 線：POSTECH に放射光源 PLS-II、PAL-XFEL を有するが、関連の技術開発は日米欧と比較して遅れている。触媒のオペランド計測で成果はある。</p> <p>中性子線：韓国原子力研究所 (KAERI) に中性子源 HANARO を有するが、低強度でオペランド計測に適さない。</p>
	応用研究・開発	△	→	<p>STEM：ハイエンド STEM の導入は着実に行われているが、予算及び人的リソースは中国に劣る。</p> <p>放射光 X 線：触媒対象であっても関連論文に企業からの著者が入っている例は限定的である。</p> <p>中性子線：オペランド計測に適当な高強度の中性子源がなく、顕著な成果は挙がっていない。</p>

(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

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Yi Jiang et al., "Electron Ptychography of 2D Materials to Deep Sub-ångström Resolution," *Nature* 559, no. 7714 (2018) : 343-349. doi:10.1038/s41586-018-0298-5
- 2) Naoya Shibata et al., "Electric Field Imaging of Single Atoms," *Nature Communications* 8 (2017) . doi:10.1038/ncomms15631
- 3) Naoya Shibata et al., "Direct Visualization of Local Electromagnetic Field Structures by Scanning Transmission Electron Microscopy," *Accounts of Chemical Research* 50, no. 7 (2017) : 1502-1512. doi:10.1021/acs.accounts.7b00123
- 4) Miguel A. Bañares et al., "Raman Spectroscopy during Catalytic Operations with On-line Activity Measurement (operando Spectroscopy) : A Method for Understanding the Active Centres of Cations Supported on Porous Materials," *Journal of Materials Chemistry* 12, no. 11 (2002) : 3337-3342. doi:10.1039/b204494c
- 5) Miguel A. Bañares, "Operando Methodology: Combination of in Situ Spectroscopy and Simultaneous Activity Measurements under Catalytic Reaction Conditions," *Catalysis Today* 100, no. 1-2 (2005) : 71-77. doi:10.1016/j.cattod.2004.12.017
- 6) Nozomu Ishiguro et al., "Operando Time-Resolved X-ray Absorption Fine Structure Study for Surface Events on a Pt3Co/C Cathode Catalyst in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during Voltage-Operating Processes," *ACS Catalysis* 2, no. 7 (2012) : 1319-1330. doi:10.1021/cs300228p
- 7) Shogo Kusano et al., "Study of Catalytic Reaction at Electrode-Electrolyte Interfaces by a CV-XAFS Method," *Journal of Electronic Materials* 46, no. 6 (2017) : 3634-3638. doi:10.1007/s11664-016-5259-x
- 8) Daniel Franke, Cy M. Jeffries, and Dmitri I. Svergun. "Machine Learning Methods for X-Ray Scattering Data Analysis from Biomacromolecular Solutions," *Biophysical Journal* 114, no. 11 (2018) : 2485-2492. doi:10.1016/j.bpj.2018.04.018
- 9) Makoto Hirose et al., "Visualization of Heterogeneous Oxygen Storage Behavior in Platinum-Supported Cerium-Zirconium Oxide Three-Way Catalyst Particles by Hard X-ray Spectro-Ptychography," *Angewandte Chemie International Edition* 57, no. 6 (2018) : 1474-1479. doi:10.1002/anie.201710798
- 10) Hao Liu et al., "Intergranular Cracking as a Major Cause of Long-Term Capacity Fading of Layered Cathodes," *Nano Letters* 17, no. 6 (2017) : 3452-3457. doi:10.1021/acs.nanolett.7b00379
- 11) P. Villanueva-Perez, S. Bajt, and H. N. Chapman, "Dose Efficient Compton X-ray Microscopy," *Optica* 5, no. 4 (2018) : 450. doi:10.1364/optica.5.000450
- 12) H. Frielinghaus et al., "New Tools for Grazing Incidence Neutron Scattering Experiments Open Perspectives to Study Nano-scale Tribology Mechanisms," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 871 (2017): 72-76. doi:10.1016/j.nima.2017.07.064

2.5.5 物質・材料シミュレーション

(1) 研究開発領域の定義

量子力学や統計力学の諸知見を活かし、物質の構造、物性、材料組織、化学反応機構などを高精度に解析・予測する技術の確立を目指す研究開発領域である。原子・電子レベルの現象の解明に加えて、それらがミクロな組織や物性にどのような影響を与えているのか、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な特性・反応と関係しているのか等のマルチスケールな解析を行うことによって、諸現象の制御方法を明らかにし、新たな材料の設計指標を提供する。また、極限環境下など実験的手段による解析が難しい場合に、非経験的で予言能力の高いシミュレーション技術が大きな役割を果たすことが期待される。近年、マテリアルズ・インフォマティクスや量子コンピュータへの応用に向けた研究開発が大きな流れになっている。

(2) キーワード

計算物質探索・材料設計 (コンピュータシミュレーションマテリアルデザイン: CMD)、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、マテリアルズ・インフォマティクス、量子コンピュータ

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

物質の性質はその電子状態の制御と大きく関わっており、結晶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が、新規機能性物質を開発する上で極めて重要である。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 μm) 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いかに正しく理解して制御するかが、多くの材料開発・設計の現場における最重要項目となっている。

近年の計算機環境の大幅な向上と、計算プログラムの高度化により、計算物質科学、計算生命科学の分野は10年前と比較して格段に進展しており、今や実験結果の解釈ばかりではなく、実験の設計をする段階でのスクリーニング、および、スクリーニングによって得られた構造に対する物性予測に用いられている。特に、その信頼度の向上、および、成功事例の蓄積に伴い、若手の実験家が自分自身で計算機を用いたモデリングを行うようになっており、計算物質科学の専門家と実験研究者の距離は以前にも増して近づいている。したがって、計算物質科学者の目指す研究の方向性は、新規の現象の解析、実験研究者の取り扱うサイズよりもさらに大規模な系、実験研究者が手に負えない複雑な現象をはらむ系、解析に多大なる時間と労力を要する系など、取り扱う問題の複雑化が進んでいる。そのような問題を解決するためには、従来よりも計算機や計算プログラムを高度化する必要がある、計算機分野と物性研究者の間で密な共同研究が数多く進められている。現在、それらを支えているのは、主に多くのプロジェクト型研究、および、科学研究費であり、それらが結実することで計算物質科学の技術基盤がより強固になり、高信頼性の物質・材料シミュレーションへとつながっていくものと考えられる。

[研究開発の動向]

計算物質科学においては、様々なプログラムが開発され、実際にそれらを用いて数々の応用計算がなされている。以下では個々の分野においてスタンダードに使われるプログラム、およびその分野での特に優れた進展を示す。なお、人名、所属が明記してあるものは、日本の研究者によるものである。

●分子系電子状態計算分野

一般的によく用いられているプログラムに Gaussian (有償) があるが、他の有償プログラムとして、Spartan、Jaguar、Q-Chem、molpro、molcas、Aces III、TURBOMOLE、ADF などがある。一方、無償のプログラムとして Gamess、NWChem、Orca、Columbus、Firefly、NTChem (中嶋:理化学研究所)、Smash (石村:分子科学研究所)、Bagle などがある。各々のプログラムには得意とする計算手法、物性計算があることから、どのプログラムを使うのかは、どういった計算を志向するかに依存する。他には、SAC-CI (中辻:量子化学研究協会)、モデル空間量子モンテカルロ法および F12 (天能:神戸大学)、Divide&Conquer (DC) 法、および DC 法と密度汎関数強結合近似 (DFTB) を融合した大規模半経験的分子動力学計算手法 (中井:早稲田大学)、Fragment Molecular Orbital (FMO) 法 (北浦:理化学研究所、望月:立教大学、石川:鹿児島大学)、Matrix Product State (MPS) 波動関数法を用いた密度行列繰り込み群 (DMRG) 法 (柳井:名古屋大、倉重:京都大学) など、理論手法開発における日本の貢献度は大きい。

●固体系電子状態計算分野

有償ソフトウェア VASP が最もよく使われているが、他には Wein2K、Siesta、Castep、Crystal14、Phase などよく用いられる。一方で無償のプログラムとして、Quantum Espresso、CPMD、CP2K、exciting、xTAPP (山内:慶応大学、吉本:東京大学)、RSDFT (岩田:Advance Soft)、OPEN-MX (尾崎、東京大学)、R-SPACE (筑波大学)、State (森川、大阪大学)、QMAS (石橋、産業技術総合研究所)、Conquest (宮崎、物質・材料研究機構) などかなり充実している。最近では、実空間密度汎関数法をベースとした電子ダイナミクスの計算手法である Salmon (矢花:筑波大学) を用いた応用計算が注目されている。また、有田・明石 (東京大学) らによって開発されている超伝導に対する密度汎関数手法が高圧下における硫化水素の超伝導状態の解析に貢献したことが記憶に新しい。

●分子シミュレーション分野

数々の有償 (Amber, Charmm) や無償 (LAMPSS, Gromacs, NAMD, MODYLAS (岡崎:名古屋大学)、myPrest (中村:大阪大学)、GENESIS (杉田:理化学研究所)、Cafemol (高田:京都大学)、Marble (池口:横浜市立大学)) のソフトウェアの開発が進められている。分子動力学計算 (MD) においては、汎用グラフィカルボード (General purpose graphical processing unit; GPGPU) や Intel Xeon Phi などのメニーコア型演算加速器向けプログラムの開発が進められている。これらの中でも、LAMPSS は無機材料や金属などの固体や表面などの計算によく用いられるようになってきている。

●モンテカルロシミュレーション分野

格子系に関しては無償ソフトウェア DSQSS (川島:東京大学) があるが、実装の容易さや特定系に対するカスタマイズの必要性などの観点で考えた場合には定番のソフトウェアは多くない。一方で、ALPS プロジェクト (藤堂:東京大学) などモンテカルロ計算に関する様々な

ライブラリを提供する取り組みもある。また、材料科学においては、結晶成長やアモルファス構造の生成のために、動的モンテカルロ法と第一原理計算を組み合わせた研究手法が開発されるなど、構造が不規則な系に対するアプローチとして、今後も有望な方法であると考えられる。

●統計力学に基づく積分方程式

溶液中の溶質の溶媒和の問題に関しては RISM-SCF や 3D-RISM (吉田:九州大学) などのプログラム開発が行なわれている。また、エネルギー表示法に基づく ERmod (松林:大阪大学) は、従来、MD 計算では時間が非常にかかる溶媒和自由エネルギーの計算を簡便に求められ、しかも、小分子から高分子まで取り扱い可能であり適用範囲は広い。さらに、固体の電子状態計算との融合により、第一原理の電気化学界面シミュレーション法が開発が進められている (大谷:産業技術総合研究所、西原:Advance Soft)。また、Boltzmann 方程式は気体などの問題ばかりでなく、電導体中の電子の運動の解析にも用いられるなど、材料科学分野でスタンダードな手法として定着している。最近ではモンテカルロ法などとの併用により、量子論効果まで含めた電導理論が開発されつつある。

●連続体モデル

Micress、MMSP、OpenPhase、OCTA (土井:北京航空航天大学) などが挙げられる。主に固体などの混晶構造の解析や、ソフトマターの構造転移などの問題に適用されている。特に OCTA はミクロスケールからメゾスケールまで様々な系を取り扱うことができるソフトウェアプラットフォームであり、物質のマルチスケールシミュレーションの草分け的プログラムである。流体力学計算を用いる OpenForm は、化学反応、燃焼、熱伝導、乱流などの化学プロセスが関与する計算分野において、広く用いられるようになってきている。最近の進展として、望月・土井らにより、高分子に対して第一原理計算 (前述、FMO) 法を用いて非経験的にパラメータを決定し、そのデータを連続体モデルと接続する試みがなされており、マルチスケールシミュレーションの高度化がなされている。

●その他

第一原理計算や分子動力学計算を併用する方法として、構造探索問題 (GRRM および AFIR) (前田:北海道大学)、マルチカノニカル分子動力学法 (岡本:名古屋大)、カスケード型分子動力学法 (原田:筑波大) や分子振動・フォノン分散の解析 (分子に対しては Sindo (八木:理化学研究所)、固体に対しては Phonopy (東後:京都大学) や ALAMODE (只野:東京大学)) があげられる。また、励起状態間の遷移を取り扱う surface hopping (SH) 法などの非断熱ダイナミクスに関しても、MCTDH、Newton X、PIMD、CPMD などの無償の汎用ソフトウェアが入手可能であり、様々な電子状態計算ソフトウェアと結合することにより光化学反応の解析などが実行可能である。SH 法に関しては台湾交通大の Zhu らによって開発された方法を用いることで、従来は計算時間のかかっていた非断熱結合定数が不要になるなど、光化学分野のダイナミクスに道がつけられつつある。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

ここ数年、物質・材料シミュレーション分野におけるマテリアルズ・インフォマティクスへの関心が急激に高まっており、例えば、カナダの A. Aspuru-Guzik、スウェーデンの R. Lindh、スイスの M. Reiher などの量子化学の第一線級の研究者が「The Matter Simulation

(R) evolution」というマテリアルズ・インフォマティクスの将来展望について記載した総説記事を ACS Central Science に寄稿している。マテリアルズ・インフォマティクスにおけるシミュレーションの役割は次の3つに大別される。

- 1) 構造や計算シミュレーション等から得られる物理量を記述子として実験データを機械学習 (深層学習、ランダムフォレスト、ガウス過程等) させることにより、未知化合物の物性や反応性を予測する。
- 2) 与えられた組成や構造に対して、Kohn-Sham 密度汎関数法のエネルギー汎関数を電子密度や構造を記述子として機械学習し、Hohenberg-Kohn 型のモデル関数を構築することで、計算時間的にネックになっていた第一原理計算のコストを削減する。
- 3) 自動有機合成機械と計測データ・計算データを融合し、リアルタイムに機械学習を行うことで、教科書に掲載されているような基本的な有機化学反応をデータセットとして、自動的に未知反応を予測する。

また、もう一つの新しい展開として、量子コンピュータへの応用がある。特に、ここ1～2年の間に50～100量子ビット程度の小中規模の量子コンピュータ (一般に Noisy Intermediate-Scale Quantum computer : NISQ と呼ばれ、ノイズがありスケールしない量子コンピュータ) の恩恵を受けられる問題・用途の探索・発見、そのためのアルゴリズム開発、概念実証が世界的に望まれている中で、NISQ コンピュータで計算するにふさわしいキラーアプリケーション候補の一つとして、量子化学計算に注目が集まっている。NISQ コンピュータで量子化学計算を実行するために完全配置間相互作用法 (FCI 法) に位相推定アルゴリズムや変分量子固有値ソルバーなどを組み合わせた手法開発が進んでいる。

今後も物質・材料シミュレーションを活用したマテリアルズ・インフォマティクスや量子コンピュータの研究がますます盛んになり、実用化に向けて産業界も巻き込むムーブメントとなること予測される。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

[日本]

日本における大型プロジェクトとしては、京コンピュータの開発と同時に行われた文部科学省の革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラストラクチャー (HPCI、2011～2016年度) があり、5つの戦略プログラム (分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」、分野2「新物質・エネルギー創成」、分野3「防災・減災に資する地球変動予測」、分野4「次世代ものづくり」、分野5「物質と宇宙の起源と構造」) から構成されていた。これらの戦略プログラムは、京コンピュータを中心とした HPCI を活用し、画期的な成果の創出、計算科学技術の飛躍的な発展を目指すものであった。

特に本研究開発領域と関係の深い分野2においては、計算材料科学、計算物性物理学、計算化学などが集結し、計算手法開発並びに応用計算をベースとする研究者による数多くの共同研究がなされ、大きな成果が挙げられている。

HPCI 戦略プログラムと重複する形で、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発を目的とした文部科学省のポスト「京」開発

事業（フラグシップ 2020 プロジェクト）が 2014 年度から開始されている。ここでは、5つのカテゴリ、9つの重点課題を設定している（下表）。

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	(1) 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築
	(2) 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学
防災・環境問題	(3) 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築
	(4) 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化
エネルギー問題	(5) エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
	(6) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化
産業競争力の強化	(7) 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成
	(8) 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発
基礎科学の発展	(9) 宇宙の基本法則と進化の解明

HPCI の戦略プログラムにおける分野 1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」が重点課題 (1) と (2) に、分野 2「新物質・エネルギー創成」は重点課題 (5) と (7) に、分野 3「防災・減災に資する地球変動予測」は重点課題 (3) と (4) に、分野 4「次世代ものづくり」は重点課題 (6) と (8) に、分野 5「物質と宇宙の起源と構造」の一部は重点課題 (9) に引き継がれた形となっており、HPCI 戦略プログラムに属していた研究者が、引き続きポスト「京」に向けたプログラム開発と革新的な応用研究に向けて、研究を進めている。

このフラグシップ 2020 プロジェクトの特徴は、計算機やシステム作成段階から、計算科学（計算物性科学）と計算機科学（システム設計、OS・コンパイラ設計など）の間での共同設計（Co-design）が実施され、計算プログラムの最適化と計算機の選定などにおいて、両者が密に議論して設計を行っている点にある。そのため、計算機が完成した際には、速やかにそのアプリケーションが実行できる環境の提供とその維持体制がおかれており、他国には見られない日本独特の研究スタイルが実現している。

2015 年度より JST による支援の下、NIMS に情報統合型物質・材料開発研究拠点（拠点長：伊藤聡）が設立され、また、それと連携する形で戦略的創造研究推進事業のさきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」および、CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」の研究領域が発足し、情報科学の研究手法を物質設計に活用し、データベースの構築や機械学習により新規物質、高性能化のための物質設計指針の導出、自動探索に向けた取り組みを牽引している。特に、さきがけの支援により、化学、物性物理、材料科学の各分野で若手の育成が重点的に行われ、成果が挙がってきており今後の進展が期待できる。また、有機材料を対象としたマテリアルズ・インフォマティクスとしては、NEDO の超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトが立ち上がり、産業技術総合研究所を中心に化学メーカー企業も参画した産学連携研究が推進されている。

その他、文部科学省の元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞（2012～2021 年度）においては、磁石材料（拠点長：広澤哲、NIMS）、触媒・電池材料（拠点長：田中庸裕、京都大学）、電子材料（拠点長：細野秀雄、東京工業大学）、構造材料（拠点長：田中功、京都大学）の各拠点において、様々な実験・計測、および計算・理論研究が有機的に連携した取り組みが精力的になされている。

[米国]

2011年に発表された「Materials Genome Initiative (MGI)」をきっかけに、米国ではこの期間に物質・材料分野へ5年間で500百万ドルもの巨額な資金が投入され、また、経済界からも物質デザインの分野への積極的投資が行われている。MGIは2016年度で終了したが、4つのセンター(CNGMD、SUNCAT Center、CHiMaD、PRISMS)を中心に、各省の予算で研究開発が継続され、有機結晶構造探索や電子デバイス設計をマテリアルズ・インフォマティクス手法で行った研究などで本分野を世界的に牽引している。また、各国立研究所(オークリッジ、ローレンス・リバモア、アルゴンヌ、DOEなど)においては、超並列計算機の導入(Top10中4基がアメリカに設置)やその代替機の計画が進行しており、エクサフロップス級(京コンピュータの100倍の演算性能)の計算機に向けて着々と研究が進行している。それに伴い、計算物質科学分野においてもGPUやIntel Xeon Phiに対するプログラム実装の論文がかなり増えてきており、すでに計算機の本格稼働にむけて研究のシーズが芽生えつつある状況である。

[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(WG4)としてComputational Techniques, Methods and Materials Designが選定されている。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、当該分野における重点課題として「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。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。

[アジア諸国]

中国においては、計算物質科学研究に関する論文が格段に増加しており、質の高さでも日本を凌駕している。これは、論文に対しての給与外の金銭的なインセンティブがあることに起因していると考えられ、今後もこの勢いは益々顕著になっていく傾向にあると考えられる。超並列計算機環境も、世界のTop2と3を占めており、応用計算に多くの資源が供給されている。一方、プログラム開発に関してはまだまだ途上であり、計算物質科学分野においては中国発のプログラムは多くはないが、千人計画によって欧米から戻ってきた研究者も増加し、また、欧米でリタイアした研究者を研究室ごと引き抜くなど、大胆な政策を行っており、計算物質科学分野における中国の存在感はますます高まることが予想される。

シンガポールに関しては、国外の研究者にインセンティブを与えることで積極的に誘致し、また、アジアでいち早く大学のグローバル化を進めてきた効果もあり、研究力がここ数年で格段にレベルが上がっている。

韓国、台湾においても当該分野への関心が高まっており、中国やシンガポールと同様に海外

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と考えられる。特に韓国では電気・電子材料に、台湾では基礎研究への投資が多くなされている。

中央アジアにおいては、サウジアラビアが海外の研究者の積極的誘致や計算機環境の向上に勤めており、質の高い論文も出始めている。今後のさらなる発展に期待が持てる。

(5) 科学技術的課題

近年の計算機環境、計測・分析機器の進展および理論・計算手法の向上により、ナノ、メゾ、マクロといったそれぞれのスケールにおける物質・材料の組織や特性の詳細が明らかになってきている。第一原理に基づく分子シミュレーションや統計力学理論（溶液論、フェイズフィールド法）との融合によって、より高度なマルチスケールモデリング計算手法を開発し、より現実の系に則したナノ構造体における反応や物性の制御がシミュレートできる環境を整えることが重要である。そのためには、物理・化学・材料科学の諸分野の力を結集するだけでなく、数学・化学工学・機械工学などの分野、さらには情報科学技術分野とも融合する必要がある。特に、マテリアルズ・インフォマティクスに関しては、まだまだ米国の技術に遅れをとっている中で、フォロワーとして同じ方向を進むのか、あるいは独自路線を開拓するのかの岐路に立たされている。日本の強みである基礎理論・計算プログラム開発、および材料開発・合成技術の融合を目指した研究体制を構築する必要がある。

計算物質科学の裾野は広がっており、宇宙・惑星科学、地球科学、海洋科学領域などにおける極限環境下での特異な物質・物性に関して、その基礎研究に計算物質科学の研究手法をもっと適用していくべきである。他にも、分子生物学、構造生物学、薬学、医学などの生命科学の諸分野でも計算物質科学との共同研究は可能である。これらの分野においては、従来の研究領域とは異なる条件や要請があり、それらを解決するための手法開発が必要となるであろう。

(6) その他の課題

計算物質科学の分野における「個々」の日本の研究者の層は非常に厚く、研究の独自性やプログラムの機能も欧米に引けを取らない一方で、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施策と、国際共同研究への支援策が課題である。特に、計算物質科学コミュニティと実験コミュニティとの強固な結びつきを支援する研究プロジェクトを継続することで、実験側のニーズに即した課題解決が可能になると考えられる。

一方で、発想を大きく転換し、海外の主要オープンソースの開発に積極的に参入する、という戦略も取りうる。欧米においては、コード開発のための研究会が頻繁に開催されており、その場に積極的に参加し、パッケージのある部分だけでも我が国が主導権をとることができれば、欧米諸国から日本で研究を行うことを希望する研究者が増えると期待され、それによって日本の計算物質科学分野の底上げが期待される。そもそも海外の主要なオープンソースは多国籍で開発されており、その中に日本が入り込むことは十分に可能である。

そのためには、グローバルで活躍できる人材育成・活用体制の構築が必要である。特にイノベーションの本質は人であることから、グローバルな視点を備えた計算物質科学のエキスパートが、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と考えられる。

(7) 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	◎	↑	従来から電子状態計算法の開発が盛んであり、高い独自性を発揮している。特に近年では、京コンピュータ開発に関連して超並列電子状態プログラムの開発でも世界をけん引している。量子化学計算においては反応経路自動探索プログラム GRRM が注目を集め、電子状態計算と化学反応とを結びつける理論開発において世界に先駆けている。一方、GPGPU などの演算加速器へのプログラム対応については諸外国から完全に立ち後れていると言える。機械学習による物質探査を行う、マテリアルズ・インフォマティクスが大きく発展している。
	応用研究・開発	○	↑	国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な応用研究が増えつつある。理論と実験、さらに産官学が合同でチームを作ることが一般的になりつつある。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が高く認識され、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や、計算物質科学者の雇用が増えつつある。超超プロジェクトなど、産官連携のプログラムにより、出口を見ずえた応用研究の取り組みがスタートしている。
米国	基礎研究	◎	↑	商用のプログラム、無償プログラムが充実し、新理論の導入やバージョンアップが盛んに進められている。優秀な研究者が世界中から集まり、新しい理論開発が極めて活発である。固体系の第一原理計算に関する新しい計算理論の開発の最前線であり、ソフトウェアはいくつか開発されている。ただし、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。分子シミュレーション専用計算機 ANTON により様々なタンパク質の機能解析が進められている。マテリアルズ・インフォマティクス分野について、様々な研究がなされており、世界を大きくリードしている。
	応用研究・開発	◎	↑	GPU 化への対応を含めてプログラム開発および公開などが活発である。主に手法開発に取り組んできた研究者が、最近ではエネルギー材料や電子デバイスなどの応用研究も手がけている。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、様々な高機能ソフトウェアメーカーが存在する。タミフルの薬剤設計の例に見るように、産業界においてシミュレーション分野の貢献が大きくなっている。材料組織のデータベースの分野で、材料組織の三次元解析ソフトの DREAM.3D が定番ソフトの地位を確立しつつある。
欧州	基礎研究	◎	↑	EU 全体としてのプロジェクトを推進し、活発な研究開発が行われている。計算の高速化や高精度化を目指した電子状態計算ソフトウェアが充実している。反応解析ソフトウェア開発も進んでいる。機械学習による物質探査を行う、マテリアルズ・インフォマティクスが欧米を中心に大きく発展している。
	応用研究・開発	◎	↑	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。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においては、企業内での注目度も高く、将来的に産業に大きく貢献する可能性が高い。状態図分野では、スウェーデン王立工科大で開発した Thermo-Calc が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のソフト開発では、ドイツが大きく先行している。物質・材料シミュレーション分野のソフトウェア開発への注目度は大きい。

中国	基礎研究	○	↑	一般的な中国発の方法論および計算プログラムは、現状はそれほど多くはない。一方、日欧米へ留学していた研究者が本国へ戻り活躍し始めており、今後は方法論およびプログラムの開発力が向上していく可能性がある。 マテリアルズ・インフォマティクス分野の研究も盛んになってきている。
	応用研究・開発	○	↑	海外から呼び戻した研究者を中心に質の高い論文を次々と発表し始めており、今後は応用研究へシフトしていく可能性がある。
韓国	基礎研究	△	→	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る。 フェーズフィールド法関連の基礎研究に対する韓国の貢献度は大きい、一部の著名な研究者に限定されている。
	応用研究・開発	△	→	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様子も見受けられ、将来的には産業化へ寄与する可能性が高い。

(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

(註2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註3) トレンド

↑：上昇傾向、→：現状維持、↓：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) 物質科学シミュレーションのポータルサイト,
<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/> (2019年2月12日アクセス)
- 2) 理化学研究所 計算科学研究センター 量子系分子科学研究チーム,
<https://www.r-ccs.riken.jp/jp/overview/lab/cmsrt.html> (2019年2月12日アクセス)
- 3) Scalable Molecular Analysis Solver for High-performance computing systems (SMASH),
<http://smash-qc.sourceforge.net> (2019年2月12日アクセス)
- 4) 認定NPO 法人量子化学研究協会研究所,
<http://www.qcri.or.jp> (2019年2月12日アクセス)
- 5) アドバンスソフト株式会社, <http://www.advancesoft.jp> (2019年2月12日アクセス)
- 6) HPCI 戦略プログラム 分野「予測する生命科学・医療および創薬基盤」ソフトウェア一覧,
<http://www.scls.riken.jp/scruise/software.html> (2019年2月12日アクセス)
- 7) ALPS プロジェクト,
http://alps.comp-physics.org/mediawiki/index.php/Main_Page/ja (2019年2月12日アクセス)
- 8) OCTA, http://octa.jp/index_jp.html (2019年2月12日アクセス)
- 9) NPO 法人量子化学探索研究所, <http://iqce.jp> (2019年2月12日アクセス)
- 10) High performance computer infrastructure (HPCI),
<http://www.hpci-office.jp> (2019年2月12日アクセス)
- 11) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト,
https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html (2019年2月12日アクセス)
- 12) 科学技術振興機構 さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」,
https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html (2019

年 2 月 12 日アクセス)

- 13) 科学技術振興機構 CREST 研究領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」,
https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah29-3.html (2019 年 2 月 12 日アクセス)
- 14) "Information Science for Materials Discovery and Design," Springer Series in Materials Science, 2016. doi:10.1007/978-3-319-23871-5 / 『翻訳 マテリアルズインフォマティクス：～探索と設計～』 ((株) エヌ・ティー・エス, 2017) .

2.6 共通支援策

2.6.1 ナノテクノロジーのELSI/EHS、国際標準

(1) 研究開発領域の定義

ナノテクノロジー・材料科学技術の進展と、その実用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、倫理面の取扱い、リスクの評価・管理、そして標準化は、国際的課題である。新規なナノ材料は、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、未知のものとして適切な評価をおこなうことが求められている。しかし、従来の化学物質のように組成だけで分類することができず、サイズ、形状、表面状態など多岐にわたることから、科学的評価には膨大な時間・資金・設備等リソースを要する。したがって、国家主導や国際協調の枠組みのもと、世界の産官学で取り組まれている。リスク評価手法・管理手法の確立に関する科学的再現性の担保や、医学・疫学的評価、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の仕組み構築、産業界や社会における情報の活用システム、合意形成と意思決定の在り方など、多様な課題が存在する。倫理的・法的・社会的側面 (ELSI: Ethical, Legal and Social Issues) からと、環境・健康・安全 (EHS: Environment, Health and Safety) の科学的側面からの取り組みがあるが、近年特にナノ材料を使用した製品の実用化が進むにつれ、各国・地域単位で規制・制度面の整備が顕在化してきた。ナノ材料とその関連製品のリスクを低減し、恩恵を社会が広く享受するためには、健全な国際市場での流通が欠かせない。そこでは、固有の用語、評価試験方法、リスク評価法などの多方面にわたる国際標準化が重要となる。

(2) キーワード

科学技術のガバナンス、ナノ材料、ナノマテリアル、ナノ粒子、ナノ安全、ナノ EHS、ナノ ELSI、ナノ RRI、リスク評価、リスク管理、リスクコミュニケーション、国際標準化、ナノ規制、暴露、有害性、毒性、体内動態、試験法、ガイドライン、カテゴリー化、グルーピング、リードアクロス、ラベリング、カーボンナノチューブ、フラーレン、二酸化チタン、銀ナノ粒子、ナノセルロース、REACH、TSCA、ECHA、OECD-WPMN、ISO/TC229、IEC、AOP、QSAR、PMN、SNUR、LCA

(3) 領域の概要

[本領域の意義]

ナノテクノロジー・材料科学技術への期待の一つに、ナノ材料が従来の化学物質やバルク材料とは異なる新奇で優れた特性を有していることがある。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も意味している。ナノ材料の有用面だけでなく、リスクが適切に評価・管理されることが重要となる。人類が公害問題で経験した化学物質や、農産物における遺伝子組み換え技術のように、適切な利用に限れば有用な技術であっても、不確実性・リスクへの懸念や不安から、社会が判断を下すことが難しくなる、または拒絶する可能性がある。社会への周知やコンセンサス形成が十分でないままに、効用・効率のみを追い求めて大規模にナノ材料を環境へ暴露してしまう懸念もあるだろう。例えば近年、マイクロプラスチック (およびナノプラスチック) による海洋汚染の影響がクローズアップされているが、原料から製造・使用・廃棄・リサイクルまでの循環を考慮し、科学的評価を踏まえ、

持続可能な使用を実現することが求められている。そのためには、科学者、技術者、事業者、消費者・市民、行政が、ナノ材料の未知の側面に関心を寄せるとともに、適切な役割分担で取り組み、ルール形成や意思決定に反映していくことが肝要となる。最近、欧州各国を中心に、ナノ材料の登録規制や評価基準の規定が進んできた。このことは、事業者がナノ材料を活用したサービスをおこなうに際し、事業推進の可否に決定的な影響を及ぼすことになる。ナノ材料の定義、分類、測定方法、評価方法、評価結果の解釈は国際協調が進むが、関連データの共有は十分に進んでおらず、また、対象範囲やバラつきも多いことから、あらゆるナノ材料種に完全に対応するような取り組みは現実的でなく、不可能と考えられている。一方、現時点において「ナノであるがゆえに特有」の負の健康影響や環境影響は、科学的には確定していない。近年はどちらかといえば「ナノであるがゆえに特有」の生体作用機序は存在しないのではないかという認識が科学者の中で徐々に増えており、従来型の化学物質のガイドライン類が、基本的にはナノ材料の評価にも適当であるとする考え方が広がってきている。このことを踏まえ、世界的にナノ材料を含む化学物質の規制当局は、ナノ材料の登録制度を開始するなどしながら、それぞれの規制枠組みの中で実際にどのようにナノ材料のリスク評価を行うのかという観点で議論するようになってきた。

このような状況において、当該領域の意義は、近年二つに大別できるようになってきた。一つは、個々のナノ材料についてのリスクを明らかにするものである。これらは、ナノ材料一般の代表というよりも、個々のナノ材料としての関心の高さによるものであり、従来の化学物質におけるリスク評価研究と同様のスタンスとあってよい。もう一つは、ナノ材料に特有の状況に由来するものである。すなわち、ナノ材料は同一の化学組成であってもサイズや形状の違いが多岐にわたるため、効率的な評価を行うための手法が必要となる。これはすなわち、規制枠組みを支える試験方法の整備に関係する。従来の化学物質の評価においても、カテゴリー化・グルーピング（類似の物質を括って評価する）、リードアクロス（評価対象物質の特性を、類似物質の既評価物質の特性から類推する）、QSAR（Quantitative Structure Activity Relationship/ 定量的構造活性相関：物質の構造や基本的な物理化学特性値から有害性等を推定する）が行われてきた。ナノ材料において、評価の効率化が求められていることは、単なる試験コスト削減に留まらず、最近強まっている動物試験削減の動きや、ナノ材料の活用によるイノベーションへの期待を背景にしている。

研究者と社会の多様なステークホルダーによる、相互作用的なプロセスを経て科学技術研究の成果を社会へ還元させるべきであるという「責任ある研究とイノベーション（RRI）」の考え方が、2000年代の前半から欧州やアメリカで研究開発の現場に取り入れられるようになり、日本でも2007年には経済産業省産業構造審議会産業技術分科会答申「イノベーションの創出の鍵とエコイノベーションの推進」において、「レスポンシブルイノベーション」との表現でこの考え方が紹介され、第5期科学技術基本計画において「社会と共創する科学技術」が掲げられた。世界的に、科学技術と社会とのかかわり方が変化し、より密接になってきていることがこのような政策の背景にある。不確実性やリスクを科学的に払拭することが難しい新興科学技術であるナノテクノロジーの研究開発では、社会とこのような新しい関係を築くことはより一層重要になっている。

ナノ材料を用いた消費者製品が増加するにつれて、製品の輸送、保管、販売、使用、さらには使用済み製品の廃棄やリサイクルなど、ナノマテリアルの全ライフサイクルを対象にしたヒ

トや環境への影響を明らかにする研究が関心を集めるようになってきている。EU の FP7 の枠組みで実施されたプロジェクト NANoREG では、ライフサイクルアセスメントを含む 500 を超える様々なナノマテリアルの安全性評価アプローチを収録したインベントリ NANoREG Toolbox が公開されている。NANoREG プロジェクトは 2017 年に終了しているが、この Toolbox は引き続き利用が可能となっている。

製品応用の進展を背景に、安全性について特に関心を集める代表的なナノ材料は、カーボンナノチューブである。繊維状で高アスペクト比という形状が、アスベストに似ているのではないかとされるが、両者の使用環境におけるサイズには相違があり、生体影響に関する相違は科学的に十分に明らかになっていない。そのため各国の関心も高く、例えばドイツでは両者を比較する研究成果だけを集めたシンポジウムが開催されるなどしている。2017 年には、アスベストとカーボンナノチューブを比較し、両者によるがんや中皮腫等の発症にいたるメカニズムの解明を目指した研究が注目された。また、ナノスケールの銀、酸化チタン、酸化亜鉛についても、高い殺菌効果や紫外線からの保護性能等に注目した製品、たとえば日焼け止め、抗菌防臭剤、食品添加物などへの応用が増える一方で、有害性やリスクを評価するためのデータはいまだ十分ではなく、さらなる研究が必要であると指摘されている。ナノスケールの銀、酸化チタン、酸化亜鉛は、すでに市場に流通する製品も多く、消費者からの関心は高い。各国政府や環境保護団体などから消費者に向けたファクトレポートや、材料の安全性や製品の安全な使用方法についての説明を含む FAQ などが公開されている。

[動向]

米国 National Nanotechnology Initiative、および EU Nanosafety Cluster の各種報告から、欧米は単に ELSI, EHS だけではなく、ナノテクのリスク評価を通商政策や国家安全保障政策において戦略的に利用する方針を掲げている。このような動きは、欧州化学品規制 REACH (化学物質の登録、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の規制に関する事例が増えてきている。元々はナノ材料の安全性に関する懸念の国際的な高まりを受けて、国際機関や各国の規制機関などが様々なプロジェクトを開始したが、すでに 10 数年が経過している。その間に、当初はリスク評価の必要性や基盤的な技術開発が必要であったといった一般論であった提言等が、2010 以降は欧州を中心にリスク評価手法や各種の登録制度等に向けたガイダンスが公表されるようになってきた。ここ数年、REACH 登録や食品関連規制、消費者製品に関する具体的な評価ガイダンスが公表されるようになってきており、さらに、登録制度に必要な各種評価試験法のガイドラインをナノ材料に対応させるプロジェクトが、急ピッチで進んでいる。欧州では実際の規制 (登録) を年々具体化させてきているが、これらの政策を支えるために、数多くのプロジェクトが推進されており、その成果が今後の政策の基盤になっていくものと想定される。

しかし、その科学的な成果は必ずしも以前に比べて進展してきたと言えない面があり、最終的な結論はナノ材料に対応した物性の測定と、それをグルーピング化することにより、多種多様なナノマテリアル生体影響や環境影響を効率的に評価することが重要であるといったことは変わっていない。もちろん、様々な研究成果や具体的なデータは蓄積しているが、酸化銀や酸化チタン、二酸化ケイ素など比較的扱い易い物質についての具体例であり、産業界からもそれ

以外の物質に展開できるようなものでないという批判もある。また、動物愛護の観点から *in vitro* の研究が多く、最終的なリスク評価に必要な *in vivo* 試験のデータは不足している。

2014年ごろまでは、規制対象を明確にするために「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判断する基準を定めるもので、2010年にISO（国際標準化機構）のナノテクノロジー技術委員会（TC229）で策定されたTS 80004-1における規定をベースとしているが、EU独自の定義、ISO/TC229に基づいた米国の考察など、各国・地域で独自の解釈を有している。2011年に欧州委員会はナノ材料の定義を、「粒子の1つ以上の次元の外寸が1nmから100nmで、それが個数濃度として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」とした。しかし、この時点においてこの定義通りに任意の材料がナノ材料であるかどうかを判別する計測技術が確立していないという技術的な課題が生じた。これに対応すべく日本では、産業技術総合研究所と複数の分析機器メーカーを中心としたコンソーシアムCOMS-NANO（Consortium for Measurement Solutions for Industrial Use of Nanomaterials）が組織され、欧州のナノ材料定義に、その材料が当たるかどうかの判定をおこなう計測技術開発・方法の確立を進めている。この取り組みは、いくつかの材料種に応じた技術開発で重要な成果を挙げている。

世界的には、上市するナノ材料の登録制度の整備が進んでいる。欧州では、フランス、ベルギー、デンマーク、スウェーデン、ノルウェーにおいて、登録制度が実施されている状況であり、ECHA（欧州化学品庁）は、ナノ材料をREACH登録するにあたってのデータ要求についてガイダンスの整備が進んでいる。例えば、フランスにおける規制は、100g以上の工業ナノ材料を扱う業者、研究所、特定使用者が対象であり、量、サイズ、サイズ分布と、使用目的に関して届け出ることが義務付けられた。届け出を怠った際は罰則金を支払わなければならないことが規定されている。

EUでは、製品にナノ材料を使用していることを明示するラベルの貼付が、一部製品に義務付けられている。欧州化粧品規則（EC）No 1223/2009では、化粧品にナノ材料が含まれる場合に、事業者はCosmetic Products Notification Portal（CPNP）に登録し、成分表示の際に「(nano)」と記載することが義務づけられている。EUでは食品に関しても、ナノ材料が含まれる場合は成分表示に記載することが、2016年12月に施行された消費者への食品情報の提供に関する欧州規則（（EU）No.1169/2011）および2018年1月に施行された改正新規食品規則（（EU）2015/2283）によって事業者に義務づけられている。

一方、このような規制とは別に、ナノテク・ナノ材料製品の認証制度によって、製品の高性能・高機能を保証するためのラベリング制度が、台湾、タイ、イラン、マレーシアで導入されている。台湾の工業技術研究院（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、ナノテクの産業化を戦略的に支援・促進するものである。イランやマレーシアもこれに倣ったナノテク認証制度を導入している。

OECD

OECDは化学物質評価のための各種テストガイドラインを出版している。2017年に化学物質の吸入毒性（呼吸により暴露した化学物質による毒性影響）を評価するためのテストガイドラインTG412（亜急性）とTG413（亜慢性）について、ナノ材料の評価をするための改訂を

行い、それらに対応したガイダンス文書 GD39 の改訂も行った。また、ナノ材料の評価に特化した新たなガイドラインとして、模擬環境水中でのナノ材料の分散安定性の評価にかかる TG318 も出版された。こうした動きはさらに加速しており、欧州ではナノ材料の評価に特化して、OECD のテストガイドラインまたはガイダンス文書の改訂または新規作成を目的とした“Malta Project”を 2017 年に開始した。OECD-WPMN (Working Party on Manufactured Nanomaterials) の場でも、それら文書の改訂または新規作成の事案が活発に議論されるようになった。

OECD-WPMN で 2007 年より実施されたナノ材料の試験プログラムは、13 種のナノ材料を対象として、各国が「スポンサー」となり、それぞれの材料の基本情報、物理化学特性、環境動態、環境生物への毒性、ほ乳類への毒性、安全性、に関する情報を取得するものであった。試験結果は、ドシエと呼ばれる報告書とその要約としてまとめられている。2018 年 10 月時点で、11 種のナノ材料全てのドシエと、そのうち 6 種のナノ材料の要約が公開されている。また、2016 年後半以降、OECD-WPMN から発行された文書には、様々な種類のリスク評価に関する調査、生体内分解性と表面配位子の評価方法、OECD 試験プログラムにおけるヒト健康影響評価のための *in vitro* 試験方法の評価、消費者と環境暴露に関する調査、作業環境空気中の濃度測定方法、代替試験方法に関する戦略、カーボンナノチューブのトレーサーとしての金属不純物の利用、金ナノ粒子の作業環境暴露評価などがある。

ISO

ナノテクに関する国際標準化は、ISO/TC229 (ナノテクノロジー) において主導的に進められており、英国が幹事国である。ISO/TC229 は、ナノ材料の用語・命名法 (WG1)、計測と特性評価 (WG2)、環境・健康・安全 (WG3)、材料規格 (WG4)、製品と応用 (WG5) の 5 つのワーキンググループにより構成される。これらのうち、用語・命名法ならびに計測と特性評価のワーキンググループは IEC (国際電気標準会議) /TC113 (ナノエレクトロニクス) と合同ワーキンググループ (JWG : Joint Working Group) を形成している。ISO/TC229 は 2018 年現在で P-メンバー (Participating member) が 33 か国、O-メンバー (Observing member) 19 か国が参加し、これまでに 65 の規格文書を出版している。TC229 は、ISO のなかでも最も活発に活動が展開している技術委員会の一つである。TC229 の発足時に設置された 3 つの WG である用語・命名法はカナダが、計測と特性評価は日本が、環境・健康・安全は米国がコンビナーを務める。一方、その後に設置された二つの WG である材料規格 (2008 年設置) は中国が、製品と応用 (2016 年設置) は韓国が、各々提案してコンビナーを獲得している。中国や韓国が積極的にナノテクの主導的立場の確保に動いていることが見て取れる。

用語・命名法 WG のスコープは、ナノ材料における一義的かつ一貫した用語及び命名法を定義し、開発することであり、新技術の普及には不可欠なものである。ISO は、ナノ材料を「外形寸法のいずれかが 1 nm から 100nm のナノスケール、または内部構造あるいは表面構造がナノスケールの材料」と定義している。これまでに、共通的に重要なコア用語、ナノ粒子やナノファイバーなどのナノ物質に関する用語、カーボンナノチューブなどの主に炭素から成るナノ物質に関する用語、ナノ物質のキャラクタリゼーションと計測方法に関する用語、医療応用に関する用語、加工製造に関する用語などの多数の規格を出版してきた。今後は、グラフェンやナノ構造材料などの、ナノテク応用分野における新規用語へのニーズに対応することになる。

計測と特性評価 WG のスコープは、ナノテクに関する計量、計測と試験方法の国際標準を開発することである。計測手法の統一化や標準化は、ナノテクノロジーの基盤整備や市場安定化に不可欠である。これまでは単層及び多層カーボンナノチューブ、量子ドット、セルロースナノクリスタル、グラフェンなどのナノ材料のみが存在する状態での、固有の計測標準、規格開発を行ってきた。今後はナノ材料と非ナノ材料とが混在した状態での計測標準、規格の開発に対応することになる。

環境・健康・安全 WG のスコープは、ナノ材料の EHS に関する科学に基づいた標準の開発である。市場に流通するナノ材料が適切に使用され、環境・健康・安全に問題が起きないようにすることを目指している。これまでは、ナノ材料への職業暴露管理方法、ナノ材料の毒性評価方法、ナノ材料の環境中での使用、ナノ材料の製品安全保証の方法などに関する規格化が進められてきた。また、ナノ材料のリスク管理においては、ナノ材料の有する材料特性や物理化学的特性をナノ毒性と関連付けながら、特徴付けが可能なナノ材料計測 (Nanomaterial Characterization) 手法の開発と標準化も必要となる。今後、EU の規制に活用されるものも含めて、上記分類に関する具体的な項目ごとに規格化を進めるとしている。

材料規格 WG のスコープは、製造ナノ材料の成分、性質および特性を規定する標準を開発することである。ナノ材料の規定には、成分や粒径などの材料特性とナノスケール化により創発されるナノ機能 (光学的、電気的、磁氣的など) が必要となる。これまでは、応用範囲に関わるナノ機能を特定せず、主に材料特性に関わる規格化が進められてきた。一方、応用範囲を特定した材料規格が増えるにつれて、特性や機能の定量的な基準を規定した標準化を進めることになる。

欧州

欧州連合 (EU) のナノテクノロジーの取り組みは、2004 年に採択されたナノテクノロジー戦略 (Towards a European Strategy for Nanotechnology) が基本となる。公共の健康・安全・環境と消費者保護ならびに国際協力の推進に力点が置かれている点に特徴がある。特にナノ材料の規制の観点からは常に重視され、ナノ EHS は継続的に取り組むべき重要項目とされている。Horizon 2020 (2014 年度～2020 年度) では、「卓越した科学」、「産業界のリーダーシップ確保」、「社会的課題への取り組み」の 3 つのプライオリティが設定されている。このうち「産業界のリーダーシップ確保」において、「実現可能かつ産業的な技術でのリーダーシップ」(Leadership in Enabling and Industrial Technologies, LEIT) のなかに ICT、バイオテクノロジー、先進製造プロセス (Advanced Manufacturing and Processing)、宇宙と並んでナノテクノロジー、先進材料 (Advanced Materials) が位置付けられている。特にナノテクノロジーと先進材料は、先進製造プロセスとバイオテクノロジーと合わせて、LEIT-NMBP (Nanotechnologies, advanced Materials, Biotechnology, advanced manufacturing and Processing) として推進されている。Horizon 2020 LEIT-NMBP の 2018 年度から 2020 年度のワークプログラムでは、「オープンイノベーション・テストベッド」としてナノ材料に関する多くのテーマが含まれている。また、ナノ EHS に関しては、「ガバナンス、科学に基づくリスク評価と規制面」として、「ナノテクノロジーのリスクガバナンス (Risk Governance of Nanotechnology)」、「ナノインフォマティクス：材料モデルから予測的毒性学・生態毒性学へ (Nanoinformatics: from materials model to predictive toxicology and ecotoxicology)」、多成分系ナノ材料の振舞い：デザインに

よる安全、科学から規制へ (Safe by design, from science to regulation: behavior of multi-component nanomaterials) など、引き続きナノ EHS に関するテーマが強力に推進されている。

欧州には、“NanoSafety Cluster” という巨大なプラットフォームが存在する。ナノマテリアルのリスク評価、伝達、情報交換のツールを開発し、リスク管理の基盤を構築するという明瞭な目標を設定している。EU 全体の主要研究機関及び規制官庁の共同で Cluster を形成しプログラムを推進している。この枠組み・傘下に多数の新プロジェクトを発進させる構造が確立されている。Cluster を傘にして、規制当局や国研だけでなく、大学、NGO、NPO、産業界、シンクタンクなど、多様なステークホルダーがプロジェクトに参画している。OECD の項で記載した “Malta Project” (2017 年-) や、規制当局によるリスク評価やナノマテリアルの製品設計のための安全性評価を促進するためにグルーピングおよびリードアクロス法を用いた評価手法のためのフレームワークを開発し提供することを目的とした “GRACIOUS Project” が 2018 年に開始された。さらに 2019 年からは、“RiskGONE”、“NANORIGO”、“Gov4Nano”、“NanoSolveIT”、“NanoInformaTIX” といった略称の、様々な新規プロジェクトがスタートする。このことから、本領域は今後も欧州が世界の流れをリードし形成していくことが予想される。

EC の REACH 委員会は 2018 年 4 月、ナノ材料登録必要条件を明確にする REACH 規則付属書を改定することを決定した。ECHA (欧州化学品庁) によればこの改定案は、REACH 規則の下でナノ材料として登録され市場に導入される物質とその量に関する理解のギャップを埋めようとするものである。この改定案によって企業や当局は、ナノ材料の特性、利用方法、処理方法、健康と環境に対するリスクの可能性、リスク管理方法について、一層の把握が可能になると ECHA は述べている。改定されるのは付属書 I、III、VI、VII、VIII、IX、X、XI、XII であり、2020 年 1 月より全事業者に義務付けられることが予定されている。改定内容の骨子では、ナノ材料の定義は「欧州委員会によるナノ材料の定義に関する勧告 (2011 年)」に従うとしている。ナノ材料のグルーピングとしてハザード評価、暴露評価、リスク評価結果が同じものはグルーピングし、グループとして評価する。ただし根拠が正当化されていることが求められる。各ナノ材料/各ナノ材料のグループについて、「粒子サイズ」、「形状」、「表面特性」、「製造」、「使用」、「暴露」の各情報について報告する。遺伝毒性試験として Ames 試験が適用できない場合は、1 つ以上の哺乳類細胞を用いた *in vitro* 変異原性試験/国際的に認識されている他の *in vitro* 試験にて代用する。人への暴露の可能性がある場合を除き、急性毒性試験は吸入経路とする。吸入経路での、短期反復投与及び亜慢性毒性情報を作成することや、毒物動態学的挙動の評価等である。

上記のような改定内容に対して、日本の企業もその対応を余儀なくされる。具体的にどう対応すればよいのか、例えばグルーピングをどのようにするのか等不明な点もまだ多く、対応方針を見極めるのに苦慮しているのが現状である。毒性評価には多大なコストを要するという問題があることから、これらに関連した国内業界団体等 (7 団体) が集い、対応に関しての情報交換がおこなわれている。このような状況下では、産業界だけでなく、日本の産官学が連携して国際対応をおこなう必要性が高まっているといえる。

米国

国家ナノテクノロジーイニシアティブ (National Nanotechnology Initiative, NNI) は

2019年度予算要求においてほぼ14億ドルを維持し、2001年のNNI開始以来の累計が270億ドルに達した。NNIプログラムコンポーネント領域(Program Component Area PCA)の5領域の一つに「環境・健康・安全」領域がある。NSF, NIOSH, DODなどの機関がナノテクに関する環境・健康・安全(nanoEHS)の知識ベースを拡大する基礎研究を継続的に行っている。NIHのNanoEHS研究はNIEHS(国立環境衛生科学研究所)が主導しており、工業ナノ材料への応答の仲介に関与する分子および病理学的経路の基本的理解を得ることを目指している。

米国当局は、明示的で包括的な規制は示しておらず、EPA(環境保護庁)が多層カーボンナノチューブに対する個別の重要新規利用規則(Snur)を行った以外は、業界向けにはナノ材料の特性に応じた物性が引き起こす生体影響を個別に評価するべきであるというガイダンスを示すにとどまっている。2017年より新たに、製造ナノ材料の基本情報、暴露、有害性に関する情報を報告することを求めることとなった。技術的な試験法などの開発研究においては、欧州と相互の評価機関で連携した評価ストラテジーの提言をおこなうなど、政策レベルも含めて欧州との連携が進んでいる。

また、NNIの4つのゴールの一つである「商業的および公共の利益のための新技術の製品への移転の促進」において、「標準開発機関との協力(Working with standards developing organizations)」と題して、国際標準化団体(ASTM International, IEC, ISO)との協働を挙げている。特にISO/TC229に対しては、米国国立標準技術研究所(National Institute of Standards and Technology, NIST)を中心として積極的にナノテクの国際標準化に貢献している。具体的には、ナノ材料とナノテクの安全性に対する信頼を高める上で重要な国際標準規格を開発し、貿易と商取引を支援することにより、ナノテクの技術的な成長と商業化に貢献している。そのような標準化の例には、ナノ製造プロセスの用語、粒子サイズ分布の計測方法、およびナノ材料含有ポリマー複合材料から製造されたナノ材料の遊離評価方法などが含まれている。

米国では化学物質管理の基本的な枠組みである有害物質規制法TSCA(Toxic Substances Control Act)の46年ぶりとなる全面的な改訂が、数年の議論を経て2016年に成立している。TSCAにおいてPMN(新規物質の製造前届出)を課しており、ある程度リスクが懸念される場合にはSNUR(重要新規用途ルール)が制定されるような運用を行っている。TSCAにおけるセクション8(a)の下に、ナノ材料の製造者及び加工者に対して「報告・記録保管を義務付ける規則」を提案した(2015年3月)。その後米国官報で最終規則(ナノスケールで製造または加工される特定の化学物質に関する報告及び記録保持の義務を定める、TSCAに基づくもの)を公開し(2017年1月)、最終的に2017年8月14日発効。同時に最終ガイダンスも発行された。

この規則内容骨子は、ナノ材料の定義として「一次粒子、強凝集体(aggregate)、弱凝集体(agglomerate)が1~100nmのサイズの範囲内であって、そのサイズゆえにユニークで新しい特性や性質を示すような形態(form)で製造又は加工されている、25℃及び大気圧で固体である化学物質」に適用される。報告すべき情報が明記され、1回限りの電子報告が義務化された。また記録保管のために報告者は、報告書及び報告したデータの復元に必要な資料を3年間保管する義務がある。報告内容の一部又は全部を営業(企業)秘密情報として指定できる。ナノ材料定義の特徴として、寸法に加えて、「そのサイズゆえにユニークで新しい特性や性質

を示すような形態」を謳っており、欧州の定義とは異なるということが着目点であろう。また、報告すべき情報は、特定の化学的アイデンティティ、生産量、製造と加工の方法、使用・暴露及び放出の情報、利用可能な健康及び安全性のデータを含む特定の情報、である。

アジア

アジア圏では、中国、台湾、韓国、シンガポール、マレーシア、タイ、イランなどで安全性評価に関する研究開発と、標準化への取り組みが活発である。例えば、中国政府は2001年以来、ナノテクに関する公的予算の7%をナノ安全に継続的に配分している。特に近年の大幅な研究予算増を考慮すると、非常に大きな予算が配分されていると考えられる。環境・健康へのリスクを定量化するための標準プロトコル開発や、食品や医療行為を通じて取り込まれる可能性のあるナノ栄養物質を規制するガイドライン作成をサポートするなどしている。中国科学院の国家ナノ科学・ナノテクセンターに、ナノ材料生体影響評価・ナノ安全ラボが設置されている。

韓国では、2018年に新たに関連10省庁の合同で作成した「第3次国家ナノテクノロジー指導(2018-2027)」を発表した。ナノテク6大分野の一つとしてナノ安全を指定している。K-REACH施行令(2018年1月施行)のもとナノ材料を定義し、「有害性評価が必要であると認められる化学物質」にナノ材料を追加した。

極めて活発な活動を展開しているのはイランである。イランはアジア・ナノ・フォーラム(ANF)を通じてEU圏と連携し、“EU-Asia Dialogue on NanoSafety”を開催するなど、ナノ安全や標準化を国際的に情報共有することや国際連携を模索して取り組んでいる。また、世界で最初に台湾が始めた「奈米製品検査体系計画」(ナノマーク制度)は、ナノテクの産業化を支援・促進するものだが、イランやマレーシアもこれに倣った認証制度を導入している。マレーシアはナノテク認証プログラムNANOVerifiedを運営している。

日本

我が国におけるナノテクのELSI/EHSに関する取り組みは、経産省やNEDO等の大型プロジェクトが2016年頃までに終了したところである。国全体としては、第3期科学技術基本計画においておこなわれた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(2007-2010年)。この以降は、包括的な政策・取り組みはおこなわれていないが、現在も引き続き産業技術総合研究所の安全科学研究部門における戦略課題として「新規技術体系のリスク評価・管理手法の研究ーナノ材料のリスク評価」プロジェクトが推進されている。ナノ物質の有害性評価手法に関する国際標準化に関しては2016年にISO/TS19337(ナノ物質固有の毒性を評価するin vitro試験のための、ナノ物質の作業懸濁液の特性)が発行された。カーボンナノチューブの有害性評価においても適用できることから、ナノ炭素材料の自主安全管理試験方法を手順書として取りまとめられるなど、ナノ材料の安全性評価は一步一步進められてきた。

日本では2018年現在、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」(化審法)において、ナノ材料であるということによる届け出義務等の規制は課せられていない。ただし、ナノ材料情報収集・発信プログラムとして、カーボンナノチューブ、カーボンブラック、二酸化チタンなどのナノ材料を製造している事業者に対して、自主的な情報提供を呼びかけ、情報提供シートを公開・適宜更新している。厚生労働省は2016年に、ある特定タイプのカーボンナノチュー

ブ（MWNT-7）をがん原性指針の対象物質に追加し、労働暴露に関する指針を示している。IARC（国際がん研究機関）の評価では、多層 CNT の一種である MWNT-7 をグループ 2B（ヒトに対する発がん性が疑われる）、その他の多層 CNT と単層 CNT についてはグループ 3（ヒトに対する発がん性が分類できない）とされた。当該多層カーボンナノチューブ MWNT-7 は、日本バイオアッセイ研究センターにおいて実施されていた吸入暴露（全身暴露）による 2 年間の発がん性試験の結果、がん原性が確認されたものである。また、MWNT-7 とは異なるタイプの多層 CNT を用いたラット気管内投与試験（投与後 2 年間観察）において、中皮腫と肺がんの発生が観察されたとする報告がなされた。ただし、これらはいずれも特定タイプの多層 CNT であり、あらゆる多層 CNT に対するものではないことには留意が要る。これらのことから、多様な CNT の発がん性の懸念やその実態を明らかにすることの重要性は高まっているが、がん原性試験は一般に 5 年程の期間と数億円規模の費用を要するため、企業が独自に実施することは実現していない。公的な第三者機関による評価とその評価データの蓄積が重要であろう。なお、CNT の比較となる「アスベスト」がクラス 1（人に対して発がん性がある、他にはアフラトキシンやタバコ煙などがこのクラス）に分類されていることに比べて、ある程度差別化されたということを受け、少しずつであるが社会の受容が進みつつあるという産業界の判断も加わったためか、近年徐々に CNT 応用製品が上市されている。

これまで日本は、CNT を中心としたナノ炭素材料を対象として、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）、およびその継続として「低炭素化社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト」②-1-2「ナノ炭素材料及びその応用製品の排出・暴露評価技術の確立」（2014-2016 年）が実施された。事業者による自主安全管理技術の構築を目的とし、細胞試験による簡易な有害性評価技術を開発し、さらにこれを補完する動物実験の評価手法と実施例を加えた手順書が公開された。また、作業環境での簡便な暴露計測手法やナノ炭素材料が用いられた製品からの排出や暴露の評価手法を開発し、これらの手法と具体的な計測事例をまとめた手引きが公開された。また、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）では、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（同等性判断基準）の構築のため、二酸化チタン、酸化ニッケル、二酸化ケイ素のナノ材料を対象としたケーススタディの結果がまとめられた。そこでは、同一化学組成ながらも、サイズ、形状、表面処理の異なるナノ材料を用いたラット気管内投与試験を実施して、代表的な物理化学特性と生体反応との関係が解析された。ナノ材料への吸入暴露による有害性をスクリーニングする方法として気管内投与試験の手法の開発を行い、吸入暴露試験と気管内投与試験とを比較した技術解説書と、投与手技の標準の手順とをまとめた手順書とが公開されている。これらの成果を OECD へ発信するため、経済産業省によるフォローアップ事業「2016、2017 年度化学物質安全対策（ナノ材料気管内投与試験法等の国際標準化に関する調査）」が実施され、気管内投与試験の国内ラボ間の比較試験が行われた。

このようなプロジェクトの終了後、産業技術総合研究所の安全科学研究部門が引き継いで、2017 年 2 月よりウェブサイトにて「リスク評価書」として公開（後に改訂版や英語版の公開も追加）していることは大きい。同安全科学研究部門は「Nano Safety Web Site」としてナノ炭素材料の安全性に関する研究成果等をワンストップで発信すると共に、世界各国・各機関の

工業ナノ材料に関する法規制やガイドラインについての最新動向も集約・公開している。さらに、産業技術総合研究所のナノチューブ実用化研究センターのホームページ上でも、2017年12月より「リスクマネジメント関連情報」を発信するなど、実用化橋渡しの公的研究機関がELSI/EHSに向き合っている。同様に、ナノテクノロジービジネス推進協議会 (NBCI) も、「ナノカーボン FAQ」の一部として「ナノ材料の法規制及び標準化」に関するFAQを2018年6月より同ホームページ上から情報発信している。これらは日本の活動として、国際的にも国内的にも重要な意義を持つものである。

銀ナノ粒子も日本で関心の高いナノ材料である。上述のOECD-WPMN試験プログラムの対象ナノ材料の一つであった。米国NIOSH (労働安全衛生研究所) は、銀ナノ粒子の職業暴露による健康影響を評価し、2018年10月現在、パブリックコメントが実施されている。一次粒子径が100 nm以下の銀ナノ粒子について、推奨暴露限度 = $0.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (8時間加重平均値) が提案されるとともに、従来の銀ダスト、ヒューム及び溶解性の銀化合物を含む総銀に対する値として $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ も合わせて提案されている。

日本では、「吸入」されるナノ材料のがん原性に関心が高く、厚生労働省により、がん原性試験対象物質の候補として、酸化チタン (ルチル形)、フラーレン、カーボンブラックとともに、銀ナノ粒子が挙げられている。酸化チタンについては、日本バイオアッセイ研究センターにおいて、2017年から2018年にかけて、アナターゼ型の酸化チタンナノ粒子を対象とし、ラット及びマウスを用いた2年間の吸入暴露試験が実施されている。試験結果は2020年以降に公表されることとされている。

2018年現在において日本で実施されているのは、ナノセルロースに関するプロジェクトである。上記のOECD-WPMNの試験プログラムが開始された時点では主要なナノ材料として認識されていなかったが、近年の材料開発と応用製品開発が活発である状況を受けて、リスク評価 (安全性確認) への関心が高まっている。セルロースナノファイバー (CNF) を対象とし、NEDOプロジェクト「CNF安全性評価手法の開発」(2017-2019年度) が実施されている。これはCNFの生体への取り込みの把握に必要な検出・定量手法などからなる有害性試験手法と、粉体及び応用製品の製造・使用・廃棄プロセスなどにおける排出・曝露可能性の評価手法の開発とを目的としたプロジェクトであり、産業技術総合研究所と国内の主要なCNF事業者4社の共同により実施されている。他にも、農林水産省事業 革新的技術創造促進事業 (異分野融合共同研究) において、「物理処理と酵素処理を併用した木質材料由来ナノファイバーの食品等への応用」(森林総合研究所)、「セルロースナノファイバーを基材としたQOL向上のための食品・化粧品ソフトマターの開発 (ナノセルロースに対する生物学的応答と安全性の評価)」(京都大学) が行われている。

このように、今後も毒性学的関心のみならず、産業化の進行との兼ね合いにおいて、有害性評価・リスク評価の関心を集める新たなナノ材料は登場する可能性がある。規制枠組みを支える試験方法の整備に関する研究としては、気管内投与試験方法の投与手技に関するラボ間比較試験が、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) に対するフォローアップ事業として実施された。産業技術総合研究所が取りまとめ機関となり、気管内投与試験が実施可能な大学や受託試験機関など5機関により実施されたもので、その結果に基づいて、気管内投与手技のラボ間・ラボ内のバラツキの大きさが把握され、経済産業省プロジェクトの成果としてまとめられた気管内投与試験の

標準的手順の改良が行われた。気管内投与試験方法については、ドイツの BAuA（労働安全衛生研究所）から、粒子状の生体持続性材料のキャラクタリゼーションにおける吸入暴露試験と気管内投与試験の比較に関する報告書が出版された。材料によっては気管内投与試験において影響が強く観察されるため、気管内投与試験の結果からは「不活性でない」という評価を下すことができないという問題点が指摘された。

政策レベルの検討としては、内閣府総合科学技術・イノベーション会議のワーキンググループが主導して、2016・2017年度にかけて「ナノ材料安全問題実務者連絡会」さらに「ナノ材料安全問題府省横断有識者ワーキンググループ」が組織されて検討が進められた。ナノ材料に関する安心安全の担保のため、産業界等に対する適切な安全指針・規制の提示と認可等の仕組みづくりが必要であるとされた。また、安全基準の標準化において世界をリードする機能も同時に担うことで、日本における研究開発から社会実装が加速し、国際市場で安全に使用されるナノ材料と製品を生み出すことが可能になるという方向性が共有された。ワーキンググループにおける検討を経て、CNT 評価の簡易プロトコル開発の方向性がまとめられたものの、2018年現在においてその開発は実行には移されていない。

過去、厚生労働省は「化学物質のリスク評価検討会（2011年12月）」で「ナノマテリアルのリスク評価の方針」を示した。リスク評価の対象候補物質として、酸化チタン、カーボンブラック、カーボンナノチューブ、フラーレン及び銀、その他のナノ材料が挙げられた。酸化チタンに関しては、IARC 分類が 2B であることから有害性が高いとの前提でリスク評価の対象になり、2010年、2011年および2016年にナノ以外の酸化チタン、そして2012年、2013年にナノ酸化チタンの個人暴露測定が行われた。その結果、個人暴露測定値が、産業衛生学会が提唱した許容濃度（二次評価値）を越えたことからリスク評価検討会でリスクが高い物質との結論に至り、2017年には化学物質による労働者の健康障害防止措置検討に係わる検討会（以下措置検討会）に議論の場が移った。2017年度には4回のヒアリング（述べ9団体がヒアリング実施）と3回のリスクコミュニケーションを通して、検討すべき課題が明らかにされた。そこでは、暴露に関しては本来測定すべき（有害性が高いとされる）酸化チタンを測定していないということ、有害性に関しては、日本バイオアッセイ研究センターで実施中のナノアナタース形酸化チタンの吸入暴露試験結果も考慮すべきこと、欧州ではラットの発がんは酸化チタン固有の問題では無く、難溶性低毒性（PSLT: poorly soluble low toxicity）粒子（いわゆる粉じん）としての対処が必要であるとの認識が進んでいること、およびその上で今後の議論の進展等の最新知見を参考にし、慎重な措置検討会の運営及び行政判断を行うこと、これらが措置検討会の結論を得る前に検討すべき課題であるとした。そして2018年第1回の措置検討会でこれら検討課題に対して、酸化チタンの措置検討はいったん中断し、リスク評価を再度実施することになった。当面の対応として、(1) 未処理酸化チタンを取り扱う事業場を対象とした暴露実態調査、(2) 樹脂等と混合された酸化チタンの再発じんの可能性に係る調査、(3) EUにおける議論に係る情報収集、(4) 酸化チタンに係る新たな知見の収集及び酸化チタン関係業界に対する改めての注意喚起、が盛り込まれた。また、カーボンブラックに関しては、労働環境中の測定方法の検討や実際の暴露環境の実態調査が進められている。カーボンナノチューブに関しては、MWNT-7 のがん性試験結果及び IARC 評価結果を基に議論され、MWCNT 及び SWCNT のリスク評価は当面実施しないこととされた。MWNT-7 の流通量が少ないことや、MWNT-7 以外の CNT の有害性が明確になっていないことがその理由である。CNT を使用した複合材料

やデバイスに関して実用製品の芽が多数出てきている現状から、そのリスク評価を早い段階で実施することが必要と考えられる。フラーレン及び銀に関しては、2018年時点では活動着手に至っておらず、当初の予定されたスケジュール(2013年度開始)に対して大幅に遅れている。全体計画の見直しも含めた体制の再構築が必要な時期に来ていると考えられる。

(4) 注目動向

[新展開・トピックス・注目すべき国内外のプロジェクト]

・欧州では、ナノ材料の評価手法についてのOECDテストガイドラインの新規策定や改定作業の活動が本格化してきている。REACH登録制度におけるナノ材料の審査を行うための評価試験法をEU内で整備するためには、OECDのガイドラインになっている必要があることによるもので、まず、OECDの試験法ガイドラインをナノ材料の評価に適用するための活動を促進するプログラムとして“Malta Project”が2017年に発足した。これに先立つものとして、すでに吸入曝露試験法の改定と環境毒性評価のための試料の分散性を評価する試験法がすでに改定されている。また、規制当局によるリスク評価やナノマテリアルの製品設計のための安全性評価を促進するためにグルーピングおよびリードアクロス法を用いた評価手法のためのフレームワークを開発し提供することを目的とした“GRACIOUS Project”を2018年より開始した。ナノ材料が行政的枠組みにおいて評価・管理されるようになるには、効率的な評価枠組みが必要となる。その中で議論が活発なのが、カテゴリー化・グルーピング、リードアクロスの手法である。従来の化学物質については、OECDのガイダンスも策定されており、考え方や方法はある程度確立している。ただしこのガイダンスでは、ナノ材料をグルーピングするための原則やガイダンスは発展途上であるとされている。OECDでは、2013年時点の各国状況の調査として「規制制度でのナノ材料のヒト健康・生態系有害性評価のための物理化学的特性に基づいたグルーピング・同等性・類推(GERA-PC)の概念の使用・開発に関する調査」プロジェクトが実施された。そこでは、一部、当該概念の開発や使用が始まっている状況が確認されるとともに、研究開発上の問題点として、信頼できるデータセットや有害性機序の理解、試料調製やキャラクタリゼーションの重要性が提起された。OECDは、2014年9月にカテゴリー化に関するワークショップを開催したが、再び、2018年9月に欧州の研究開発プロジェクトNanoReg2および上述のGRACIOUSと共同でグルーピングとリードアクロスに関するワークショップを開催した。

・ECHA(欧州化学品庁)は、REACHでの安全性評価と情報要求に関するガイダンスの一つである「QSARと化学物質のグルーピング(Chapter R.6)」について、ナノ材料に特有な情報をまとめた付属文書を公開した。段階的なアプローチを採用しており、まず物理化学特性にもとづいて初期的なグルーピングを行い、必要に応じて試験を行うなどして有害性、環境動態、体内動態のデータを集めて検証を行う。

・米国では、平均粒子サイズやゼータポテンシャル等の物理化学特性が測定値の7標準偏差以上異なるようなナノ材料で、サイズや特性の変化をもたらす異なる製造プロセスで作られているものは、TSCAでのナノ材料の届け出に際して異なる材料として扱うこととされた。言い換えると、その範囲の材料であれば個別のナノ材料として届け出る必要はなく、ある種のグルーピン

グであるといえる。たとえば、製造バッチ間の変動による意図しないサイズ等の変動があった場合や、ナノ材料の変更を意図しないような製造プロセスの変更があった場合には、個別の届け出は必要ないとされている。その他、最近出版された論文や報告書等としては、二酸化チタンナノ材料の遺伝毒性に関するグルーピングとリードアクロスのケーススタディ、欧州の化学物質規制におけるグルーピングとリードアクロスの可能性に関する考察、ナノ材料をグルーピングするための仮説の構築を支援するフレームワーク(草案)などがある。また、米国はセルロースナノクリスタル、セルロースナノファイバーのリスク評価を系統的かつ網羅的に進めており、リスク評価の評価手法の国際標準化へ向けた動きがある。さらに、米国やカナダで商業生産が行われているセルロースナノクリスタルのリスク評価のデータを積極的に公表している。

・日本では現在、上述の経済産業省・NEDOプロジェクトなど、国内の大きな研究開発国家プロジェクトは終了している。しかし、これらのプロジェクト成果をもとに、産業技術総合研究所では特にCNTについて、関連企業と「CNTアライアンス・コンソーシアム」を組んで技術相談・共同研究を行う仕組みを2017年2月から開始した。例えば、その中のオープンプラットフォーム共同研究の第一号であるCNT複合材料研究拠点では開発品の製品化に成功し、2018年10月に共同研究先企業から「SGOINT-Oリング」の販売を開始するに至っている。

・ナノ計測に関して、日本では欧州や北米におけるナノ材料規制、特にサイズとサイズ分布評価に対応して、産業技術総合研究所と複数の分析機器メーカーを中心としたコンソーシアムCOMS-NANOの活動が目される(再掲)。分級システムによりあらかじめ粒径分布をいくつかに分画し、分画された試料に対して複数の計測評価法により粒径分布を計測し、データを合成するなど一連の作業をシステム化することにより正確な測定結果を導き出す計測手法を提案する活動も展開されている。さらにこれに呼応する形で日本学術振興会・研究専門委員会「イノベーション創出に向けたプラットフォーム戦略の構築」(2018年度より計測分析プラットフォーム第193委員会)が設置され、プラットフォーム構築と国際標準化の戦略展開が進展している。電子顕微鏡や分球法を利用した粒径分布計測のISO/TC229国際規格(IS)化が進められ、投票や出版に向けての調整が行われている。走査型電子顕微鏡(SEM)は企業のナノ材料製造時の工程管理や品質保証に利用できるものとして、産業界の関心も高い。ナノテクノロジービジネス推進協議会(NBCI)が、SEM計測に関心のある企業10社程度が参加する作業部会を設け、共通試料を用いたラウンドロビン試験を実施し、粒径分布計測の精度向上のためのプロトコル作成を進め、上記IS規格にその骨子を盛り込んだ。

・厚生労働省では、厚生労働科学研究制度による化学物質リスク研究事業が進められている。この中で、CNTの発がんリスクの新規高効率評価手法が検討されている。長期吸入暴露試験を補充し得る、低コストで簡便なCNTの慢性毒性、発がん性の評価法の開発を目指すものである。2018年時点では検討段階であるが、2週間の短期気管内噴霧投与(TIPS)後に観察するという方法が提案されており、今後、評価法として確立するとともに、吸入暴露法との比較等を通して、国際標準として規格化されることが期待されるものである。

・NBCIは、ナノ材料安全分科会(30社強の企業の集まり)を2017年10月に設立した。産

業界におけるナノ材料の安全性問題に対する関心の高さがうかがえる。大きく三つの主課題が設定され、①ナノ材料の有害性評価に関する主課題、②ナノ材料のリスク評価に関する主課題、③ナノ材料等に係る各国の規制動向等の調査（情報収集と必要に応じ提言）、として活動が進められている。官民で情報共有しながら、運用基準の設定や事業形態のあり方等の検討が進むことが期待されている。

・ナノテク・ナノ材料製品の世界市場は成長している。一例を挙げれば、米国のウッドロー・ウィルソン国際学術センターのナノテク製品インベントリが、その掲載数を着実に増やしているという事実からも伺える。このインベントリによれば、現在 1,600 点を超える消費者製品が市場に流通し、店頭に並べられているという。このようなインベントリは網羅性には欠けるであろうが、市場に流通する製品の種類や量を把握することは、社会のニーズに応えるかたちでナノテク研究開発とその応用を進めるために重要である。米国では、NNI が市場における製品化にどのように寄与しているかを明らかにし、今後の政策立案に活かすために、科学技術政策局 (OSTP) と国家ナノテクノロジー調整局 (NNCO) がナノテクノロジーの製品化に関する情報の収集と解析を行っている。一方、日本にはこのような稼働中のインベントリはなく、どの程度の種類・数のナノテク製品が市場に出回っているのかは不明である。ナノテクに関する統計・情報を提供している StatNano.com が運営する Nanotechnology Products Database には、322 件の日本製品が登録されているが (2018 年時点)、これが全てとはいえないだろう。日本では、ナノカーボン材料の研究開発・製品化の現状を俯瞰することのできるデータとして、業界マップが 2018 年 9 月にナノテクノロジービジネス推進協議会 (NBCI) より公開されている。

・教育プログラムに関して、米国や台湾の取り組みが初期のころから継続的におこなわれている。米国 NNI では、大学・大学院生を対象とするプログラムだけでなく、小学生から社会人までの幅広い年齢層を対象とした学習用教材やプログラムが開発されている。たとえばフロリダのウォルト・ディズニー・ワールド・リゾートの展示 **Take a Nanooze Break** は、ナノスケールのサイズ感やナノテクの一端について映像で楽しみつつ学ぶことができるようになっている。また、ナノテク教育を行う教員に向けた授業のモデルプランの提案、あるいは教材の開発が盛んに行われている。

台湾は、米国に倣ったナノテク教育プログラムを 2002 年より実施している。小学生～高校生 (K-12)、大学・大学院生、教員に向けてナノテクノロジー学習・教育を支援するプログラムである。プログラムの中心は学生と教師であるが、社会人・市民なども対象とされている。たとえば広く一般にナノテクノロジーについて知ってもらうため博物館と連携してアメリカのプログラム同様にバスで全国を巡回する **Mobile Museum** という展示プログラムも実施された。このプログラムでは、低学年からナノテクに親しんでもらうための工夫としてアニメーション映画やコミックブックを作成するなどしており、日本で開催される世界最大の国際ナノテク展示会 “nano tech” でも、本プログラムで開発された学習用教材が毎年展示されている。また、教員向けには研修プログラムの開発、授業計画のモデルプランやマニュアルの開発などが行われている。各地の教育機関を繋いで学習用の教材データの共有や e ラーニングの提供などがおこなわれている。同時に、米国、台湾ともナノテク教育プログラムには、ナノテク・ナノ材料の ELSI/EHS も含まれている。たとえば台湾の K-12 向けの e ラーニングには「奈米安

全興科技倫理 (ナノ安全と技術倫理)」という項目が設けられ、有害性評価や製品認証システム (nanoMark) について紹介されている。

欧州では、フランス (CEA) における NanoSmile というナノテク研究開発と社会をつなぐ試みがあり、これは一時的な取り組みで終わらずに、継続的におこなわれている。また、ELSI/EHS の様々な課題に関わる活動を支える新たなプログラムとして、EC により ObservatoryNano (EUON) の提供が開始されている。EUON は、ウェブ上に設けられたポータル兼データベースである。スウェーデンの SWETOX も、ナノ材料の安全性に関する情報の共有とコミュニケーションを促進するウェブサービスであり、ナノ材料がどのように規制されているのかについての情報を提供している。

一方、中南米諸国や南アフリカなどの、近年新たにナノテクを国家的に推進している国々での取り組みにも、進展がみられる。これらの国々では、国連訓練調査研究所 (UNITAR) あるいは日本や米国といった国々との二国間協力による支援を軸に、研究開発計画や規制策の策定と実施、人材育成、教育などが行われている。特に UNITAR はナノ材料の安全な取り扱いに関するキャパシティビルディングの取り組みを OECD と連携して行っており、これまでにコロンビアなどの中南米、アルメニアなどの中東欧、タイなどの東南アジアの国々を対象にワークショップなどを実施している。UNITAR は、e ラーニングコースの開発、政策および研究開発プログラム策定のためのガイダンスの提供なども行っている。

(5) 科学技術的課題

これまで欧州を中心に行われた様々な安全性評価関連のプロジェクトでは、多くの知見が蓄えられてはいる。しかし上述したように、すでに当初から提言されてきた物理化学的性状に応じたグルーピングやカテゴリー評価が有用であるという一般的概念に対して、技術的に新しい進展があったわけでは無く、酸化金属などの特定のナノ材料に対する知見が蓄えられたに過ぎない状況にもかかわらず、欧州ではフレームワークを作り、ガイドラインも整備して、REACH 登録制度などの様々な規制・登録制度に取り込んでいこうとしている。このことは結局、様々なナノ材料・関連製品の安全性に関わる情報は、個々の企業が実際に試験を行うことで作成し、それを欧州当局が吸い上げるという構図になっていくことを示し、そのようなスキーム・制度を持たない国では、官民ともにナノ材料に関する安全性情報が手に入らなくなる。さらに、欧州では動物実験が実施しにくい流れになっているが、安全性を基本的に評価する OECD 試験法の多くは *in vivo* 試験であり、現に欧米主導で *in vivo* 吸入試験の改定が行われた。このことは、依然として現時点では欧米当局でも安全性評価のためには動物試験を必要としていることを示しており、将来的に欧米の規制当局で開発されると予想される物理化学性状に応じたグルーピングやカテゴリー評価手法開発のための基本的な *in vivo* 試験情報は、企業から申請された企業秘密データとして公開されることはなく、対応するスキーム・制度を持たない日本を含む国々では、ナノ材料の安全性情報の収集にとり残される懸念がある。少なくとも、事業者の独自の蓄積・取り組みには限界があり、公的に、第三者が利用可能なかたちで適切に安全性情報をデータベース化し、そのデータを活用することで、新たな学術的な研究や、新規材料への評価対応、輸出入されるナノ材料の安全性をチェックし適切に規制・認可の判断をすることなどが求められる。

カテゴリー化・グルーピング、リードアクロス、QSAR といった手法の開発の基盤となるの

は、物理化学的特性と有害性の関連性に対する理解である。条件の統一や対象ナノ材料の範囲といった点で、個別ナノ材料について実施された有害性評価研究のデータを収集・整理して解析するアプローチには限界がある。カテゴリー化等の開発を念頭に、被験ナノ材料の選択や試験条件の設定を行ったナノ材料の比較試験に基づいて、作用機序や AOP（Adverse Outcome Pathway：有害転帰経路）の解析を実施することが必要である。

また、個々のナノ材料のリスク評価・管理にせよ、カテゴリー化・グルーピング、リードアクロスの枠組み構築や実施にせよ、基盤として、ナノ材料の計測方法の裏付けが必要であることは言うまでもない。OECD-WPMN では、2016 年に「ナノ材料の物理化学特性：試験プログラムにおいて適用された手法の評価」、「物理化学パラメータ：ナノ材料の規制のための測定と手法」という二つの文書が公開されたが、その後のステップとして、現在、何をいつどの方法で計測するかに関する「ナノ材料の物理化学特性のキャラクタリゼーションに関する意思決定フレームワーク」というプロジェクトと、如何にして計り、何を報告するかに関する「ナノ材料の計測と報告の為のガイドとなる原則」というプロジェクトが実施されている。

既に述べたように、ナノ材料のリスク評価に関する研究開発は、個々のナノ材料のリスクを明らかにするための研究と、規制枠組みを支える試験方法の整備に関する研究、特に効率的な評価枠組みを構築するための研究、に大別されるようになってきている。日本では、個々のナノ材料について、たとえば多層 CNT の MWNT-7 をがん原性指針に追加するなどの対応は行われているが、ナノ材料に対する全体的な規制制度が存在していないこともあり、効率的な評価枠組み検討の方向性が明確になっていないことが問題である。ナノ材料製造・応用開発と同時に安全性研究を行い、安全性研究の結果をフィードバックすることで、より有害性が低く、より暴露可能性が低い製品の開発に貢献することができる。また、作業現場の適切な安全管理を支援することができる。

一方、欧米各国の規制当局は、それぞれの国や地域の化学物質管理枠組みやナノ材料の産業化の状況を前提に、届け出の際に要求するデータ項目を決定するとともに、カテゴリー化等の考え方を構築しつつある。日本の関連産業や社会が諸外国の規制に遅れることによる不利益を被らないためには、単に諸外国の規制制度の状況を踏まえるだけでなく、また、単に学術的な関心からの試験・研究だけではなく、自国の置かれた状況に即したリスク評価技術の研究開発を産学官連携の体制により進めることが必要と考えられる。研究開発の段階から安全性研究を行うことで、安全性に懸念のある粗悪品を扱う事業者を線引きしながら、国際競争に臨むことが重要であろう。特に日本で開発が先行する材料について、グローバル市場に出る際には、各国・地域の規制を前にしても科学的な安全性評価データをしっかり蓄積し、公表・発信していくことが重要である。

（6）その他の課題

・新技術とその安全性について、米国では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。欧州では“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。しかし、産業界の多くは、安全性評価はコストセンターと考えるため投資には消極的で、規制強化につながりかねない新しい安全性概念の導入には否定的で

ある。一方で、欧州 Nanosafety Cluster や米国 NNI は、産業と規制組織の連携・協調による新産業基盤の健全な育成を提案するなど、戦略的に官民の連携を促している。

・2006年に日本で開催された 2nd International Dialogue on Responsible Research and Development of Nanotechnology (国際対話) の際に、会議の参加国間でナノテク研究開発予算のおおよそ 5～7% 程度を ELSI/EHS に措置することが、責任あるナノテク研究開発を進めるうえで理想的であるとされた。その後、EU は FP7 と、続く Horizon 2020 で、また米国は NNI の毎年度の予算でその配分率が概ね達成されている。たとえば、政権発足当初は科学技術への関心が薄いと議論を巻き起こしたトランプ政権下にあっても、2019年度の NNI 予算要求で、EHS 関連は NNI 全体の 5% となっている。翻って日本は、国際対話の後に一時的に増加傾向にあったものの、現在の状況はかけ離れた状況にある。EU の Horizon 2020 では、社会との新しい関係のもとに研究開発を進める責任ある研究とイノベーション (RRI) が、分野横断的に取り組むべき課題とされており、ナノテク研究開発においても他の課題と一体で取り組みがなされている。たとえば、NANO2ALL プロジェクトでは、社会の価値、ニーズ、期待に合う研究・イノベーションの実施と、ナノテクに対する社会からの信頼を醸成することを主要目標として掲げ、この目標の実現のためにコミュニケーション手法の設計を行い、レポートを取りまとめている。また、2018年秋に公募が締め切られた COMPASS プロジェクトでは、RRI の考え方を取り入れて製品開発に取り組もうとする中小企業に対する戦略の立案や実践のためのコンサルタント業務、アドバイスなどの支援が予定されている。日本ではこのようなナノテク研究開発と社会とをつなぐ取り組みは活発でないが、社会の要請や諸外国の状況を把握したうえで、日本に合った政策的な判断・取り組みをしていくことが求められるだろう。

・日本では、毒性学を含めた安全性研究やリスク評価の体制は欧米に比較して脆弱であり、特に材料開発研究との協力体制が弱い。日本の毒性学の専門家人材は、近年、減少の一途を辿っている。開発段階の材料については、試料の入手性の観点からもナノ材料製造・応用開発側との連携が必要となる。連携により物性や特性 (材料のサイズ、濃度、表面修飾等) を多数に振った材料を準備することで、各物性や特性が安全性に与える影響などを詳細に評価できるようになるためである。各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の競争優位性は、安全性研究の学術的基盤の整備と一体で行われなければならず、なし得ないだろう。日本における安全性評価研究は、個別プロジェクト課題としてごく部分的に継続している状況ではあるものの、第三期科学技術基本計画期間以降、産学官が連携した戦略的体制は継続できていない。このような取り組みの差は、国際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、次第に影響を及ぼすようになると考えられる。さらに、今後は製品の廃棄時やリサイクル時における評価と対策手法も重要になってくる。このような背景から、産業界、特にベンチャー・スタートアップとして新規ナノ材料の事業化をおこなおうとする際などに、第三者的な評価をおこなうにも多額のコストと長期間を要する。このことが起業家のアントレプレナーシップにネガティブな影響を与え、体力的にも事業化を躊躇させる要因となってしまうことに課題がある。大企業であっても、特に日本では経営層レベルで科学技術面の ELSI に関する認識不足があり、評価への十分な投資が難しく、開発がとん挫してしまうことがある。

・現在、OECD や ISO、IEC における様々なナノ国際標準化においても、高度に科学に立脚しつつ、国際的な合意形成を目指すことが基本となっている。科学的背景を十分に有する研究者が、国際的な合意形成の場において十分な議論を行えるコミュニケーション能力が必須となる。これは従来型の日本人研究者に不足しがちであった能力である。標準化に対応できる専門人材の育成は、これまで経済産業省と産業界が取り組んできた課題ではあるが、厚生労働省（医薬関係）や文部科学省（大学関係）の専門家人材がそれぞれの立場から連携・協力する体制がなければ、ままならない課題でもある。また最近では、横断的な性格を有するナノテク標準化母体（TC229）と、産業縦割りの性格を有する他の標準化母体との連携・調整が必要な案件が生じ始めている。日本では国際標準化に係わる人的リソースが特に限られているため、連携・調整を積極的に推進する国内母体（審議の場）を醸成する必要性が高まっている。例えば、国内産業界の状況・意向を汲んだ戦略的な国際標準化提案や審議対応を強化するために、ナノテクに関係する国内審議委員会等が横断的に連携・調整する場をつくることや、そのような場がナノテクに関連する標準化動向を俯瞰し、関連標準化資源の最大活用を図ることなどが考えられるだろう。近年、国際標準化経験が必ずしも豊富ではなかった国から積極的な提案が始まっている。それぞれの国に固有の産業課題を積極的に取り上げて規格化を進めている傾向がある。インド、イラン、南アフリカ、シンガポール等だが、例えばイランからは「ナノクレイ材料」、シンガポールからは「水中の金属汚染」に関する提案が行われている。

・ナノリスクの評価手法の開発はすでに記載したようにいくつかの国家プロジェクトとして進められてきたが、ナノ材料に限らず今後も創出され続ける新規材料のリスク評価全体を、公的研究機関が、産学と連携して定常的に担っていく必要がある。欧米にみられるように、関連する公的研究機関の研究者が「組織の壁を越えて連携する（バーチャルな）組織」を構築し、それを支える定常的な財源の検討が必要な時期に来ている。特に、高度なリスク評価技術を身につけた技術者が、プロジェクト期間の終了とともに現場を離れざるを得ない状況は好ましくない。このような体制づくりは、各研究者の効率的な役割分担・負担の均等化につながるものであり、また、それぞれ得意とする評価試験を適材適所で行うことで、負担の大きい評価プロセスの投資効率を最大化することが可能になる。

・日本ではナノテクの研究者を志す人に向けた優れたカリキュラムを提供する大学・大学院は多いが、その一方で、学生が RRI の文脈に触れる機会は極めて少ない。現在の日本の大学・大学院教育のなかではそのような機会を得ることは難しいと言わざるを得ない。日本では、大阪大学のナノサイエンスデザイン教育研究センターが、ナノテクの社会受容に関わる課題をテーマとし、ナノテク・ナノ材料研究開発に携わる研究者・学生が様々な課題の最新の動向に触れる機会を提供する「特別集中講座「ナノテクノロジーデザイン特論 A」」を継続して開講している。2018 年の時点では、ナノテクの社会的な課題について包括的に学ぶことができるカリキュラムを提供している大学は、大阪大学だけである。

・ナノテクの RRI に関連する施策としては、日本では 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」（2007-2011 年度）の終了後は目立った取り組みがなく、この成果を具体的に活かすような施策も実

施されていない。ナノテク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といえる。同時に人材（自然科学の素養も持つ社会科学者）の育成も課題であり、それには彼らのキャリアパスの確立も含まれる。また、ナノ材料を作製する事業者が、官と連携してリスク評価を行い、社会に伝える機能と、社会と共に歩む研究開発文化の醸成が課題である。

(7) 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	△	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ材料の安全性に対する取り組みは国家プロジェクトの多くが終了して、現在も顕在化する国家的な取り組みはほとんど見られない。 ・ナノ EHS に対する体制は脆弱であり、再構築が必要だが、できていない。 ・多層カーボンナノチューブの有害性評価研究など、個別のナノマテリアルに関して一定の成果が見られる。また、成果の活用についても、個別のナノマテリアル、例えばカーボンナノマテリアルなど、に関しては実施されており、活かすべき蓄積・専門家の光明はある。国際標準化の体制も継続して維持され、これらの活動は世界で善戦している。 ・ナノ EHS や標準化において主導的役割を果たすには国際的なコミュニケーション能力を具備するエキスパート人材育成が急務だが、対応できていない。 ・ELSI に関しては自発的・限定的な活動に限られている。 ・政策的には、内閣府がナノ安全に係る府省横断検討会を立ち上げたが、1年間ほどでその後は継続されず、有識者 WG を通じてまとめられたリスク評価に関する方向性は、実行に至らないままとなっている。
	実効性	×	→	<ul style="list-style-type: none"> ・現状は国家レベルでの基本施策が欠如しており、予算的な措置も縮小され、国研の研究者や企業技術者の自発的な貢献に依存する状況にある。 ・中長期的な実効性ある組織的取り組みが困難になりつつある。 ・特に、評価データや経験によって得られた成果の活用に関して、データ共有の仕組み構築など、改善の余地が大きいと考えられる。
米国	取り組み水準	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> ・NNI など国家レベルの推進体制は堅持されている。 ・ナノ EHS に対する取り組みも、戦略的な体制と予算が継続されている。NNI2019 年予算においても 5% となっている。 ・国際標準化においてもナノ EHS を中心に全分野で主導的役割を継続。 ・欧州との積極的な連携など、産官学の協調と国際連携が重視されている。
	実効性	○	→	<ul style="list-style-type: none"> ・近年の届け出規制は現実的であり、事業者と十分なコミュニケーションのもと戦略的にルールづくりが進められている。 ・環境保護庁の取り組みなど、EHS の課題に関して確実に実施されている。
欧州	取り組み水準	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ ELSI/EHS に関して旺盛な研究開発体制と潤沢な予算措置が継続中。 ・標準化に関しても主導的かつ積極的 ・REACH 附属書が改訂され、ナノ形状物質が評価の対象として明記された。 ・次期フレームワーク PG の Horizon Europe へ向けても、現在までの体制と蓄積を活かした準備が着々と進められている。
	実効性	◎	↑	<ul style="list-style-type: none"> ・欧州連合として研究開発体制が構築されており、多数のエキスパートが参加、産業界との連携も十分に図られており、実効性は極めて高い。 ・規制・登録の対象として EU や各国でナノ形状物質のルール整備が進む。製造・輸入されるトン数に応じ情報が要求されることになってきた。 ・コミュニケーションや情報の共有に関して、利用可能なツールの開発と公開（活用）がしっかりと行われている。

中国	取り組み水準	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ EHS への投資は 15 年以上にわたってナノテク予算の 7% を継続確保。 ・国際標準化を国家レベルで重要施策に位置付けている。ナノテクの国際標準化においても材料規格において主導的に活動 ・国際標準化に関するデジュール標準戦略が極めて明確
	実効性	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ EHS に関する研究体制ならびに人材は欧米から戻った研究者が今後重要な役割を担うと予想される。
韓国	取り組み水準	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ EHS に対する取り組みは活発に国家主導で行われている。 ・ナノテクの国際標準化においても WG4 のコンビナーを獲得するなど、活発化
	実効性	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノエレクトロニクスに関連する世界有数の産業を有しており、産業界と連携、国際標準化においても積極的

(註 1) フェーズ

取り組み水準：政策／制度／体制面の充実度合いや具体的活動の水準

実効性：上記取り組みの実効性に関する見解・事柄

(註 2) 現状 ※わが国の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価である。

◎ 特に顕著な活動・成果が見えている、○ 顕著な活動・成果が見えている

△ 顕著な活動・成果が見えていない、× 活動・成果がほとんど見えていない

(註 3) トレンド

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

(8) 参考文献

- 1) Environment Directorate OECD, “Developments in Delegations on the Safety of Manufactured Nanomaterials - Tour de Table,” *Series on the Safety of Manufactured Nanomaterials* No. 87 (2018) .
- 2) Environment Directorate OECD, “Case Study on Grouping and Read -Across for Nanomaterials -Genotoxicity of Nano TiO₂,” *Series on Testing and Assessment* No. 292 (2018) .
- 3) K. Moss, “OECD WPMN Expoert Meeting on Physico-Chemical Parameters Framework for the risk Assessment of Nanomaterials,” (2018) .
- 4) WHO/IARC, “IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans,” *Some Nanomaterials and Some Fibres* Volume 111 (2017)
- 5) ECHA, REACH Guidance for nanomaterials published, 24 May 2017.
- 6) ECHA, “Appendix R.6-1 for nanomaterials applicable to the Guidance on QSARs and Grouping of Chemicals,” Version 1.0, May 2017, Guidance on information requirements and chemical safety assessment.
- 7) Horizon 2020 Work Programme 2018-2020, “5.ii Nanotechnologies, Advanced Materials, Biotechnology and Advanced Manufacturing and Processing,” European Commision Decision C (2018) 4708 of 24 July 2018
- 8) NanoReg2, “Nanotechnology experts from across the globe join forces to advance nanomaterials safety testing through Grouping and Read Across,” OECD joint meeting, Sept 12-13, 2018.
- 9) GRACIOUS Project, “Draft GRACIOUS Framework for Grouping and Read-Across of Nanomaterials for Regulatory Risk Assessment and Safe-by Design,” (2018) .
- 10) O. Creutzenberg et al., *Comparison of Inhalation and Intratracheal Instillation as Testing*

Methods for Characterisation of Granular Biopersistent Particles (GBP) (Dortmund: Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin 2018) . doi: 10.21934/baua:bericht20180823

- 11) A. Mech et al., “Insights into possibilities for grouping and read-across for nanomaterials in EU chemicals legislation,” *Nanotoxicology*, 05 Sep (2018) . doi: 10.1080/17435390.2018.1513092
- 12) U. S. Environmental Protection Agency (EPA) , “Chemical Substances When Manufactured or Processed as Nanoscale Materials; TSCA Reporting and Recordkeeping Requirements,” *Federal Register*/Vol. 82, No. 8/Thursday, January 12, 2017/Rules and Regulations.
- 13) U. S. National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH) , “Current Intelligence Bulletin: Health Effects of Occupational Exposure to Silver Nanomaterials,” Revised External Review Draft (2018) .
- 14) U. S. Environmental Protection Agency (EPA) , “Control of Nanoscale Materials under the Toxic Substances Control Act.”
- 15) 経済産業省 ナノマテリアル情報収集・発信プログラム .
- 16) 厚生労働省 化学物質のリスク評価に関する各種公開情報 .
- 17) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) ナノ材料の安全性に関する各種公開情報 .
- 18) 産業技術総合研究所 ナノ材料の安全性に関する各種評価書 .
- 19) 「ナノテク国際標準化ニューズレター特別号」(ナノテクノロジー標準化国内審議委員会事務局, 2017) .
- 20) 「ナノカーボン業界マップ」(一般社団法人ナノテクノロジービジネス推進協議会, 2018) .