

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グロース 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 材料は通常の方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を有する。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った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。世の中に充滿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きている。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ライト

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

リフレクタンズ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 70W/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нда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模型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た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基板上へ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ニクス・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・フォトンニック結晶を含むプラズモニック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、ナノテック関連の連携組織でGLOBALFOUNDRIES, 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 cm²/Vs を保証している。同社の HP では、24 インチ × 300 インチの銅箔基材に積層したグラフェンを 55,000 英鎊 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ともに、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材料のデバイスの応用も層が厚く、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をチャンネル材料とする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リ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) Yoshiki 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)