CRDS-FY2018-WR-14

科学技術未来戦略ワークショップ報告書

メカノファンクショナルマテリアル

2017年12月21日（木）開催

国立研究開発法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

エグゼクティブサマリー

本報告書は、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）が平成 29 年 12 月 21 日に開催した科学技術未来戦略ワークショップ（WS）「メカノファンクショナルマテリアル」に関するものである。

近年、素材産業においては、軽量・高強度、柔軟・高靭性、小型・高出力など一般にトレードオフとされる物性・機能を克服する材料へのニーズが高まり、世界的な市場拡大傾向にある。求められる材料機能を実現するためには、物質における力に起因する機能発現・現象のメカニズムを原子・分子レベルで取り扱い／解明する必要があり、さらにナノスケールにおける原子・分子の力学挙動がマクロな現象にどのように作用しているのか、またマクロな刺激がナノスケールの動力学的挙動にどう影響するかを明らかにすることが重要である。それによって、新しい材料設計指針を得て、既存材料では実現されていない高機能・新機能を持つ革新的材料の開発へとつながることが期待される。

そこで、物質に作用する機械的な力が起源となって機能を発揮する材料、例えば、接着･接合･剥離、低摩擦、自己修復・破断などに関与する材料や、発光性メカノクロミズムや超弾性などのマクロな機械的刺激によって応答・機能発現する材料系全般を「メカノファンクショナルマテリアル」と定義した。本ワークショップでは、メカノファンクショナルマテリアルの研究開発の現状の把握、今後取り組むべき研究開発課題の抽出、ナノスケール側の研究者とマクロスケール側の研究者を融合・連携させるための仕組みなどについて、第一線の研究者と議論することを目的に開催した。

ワークショップでは、まず JST-CRDS における調査・分析結果から得られた全体像、課題、研究開発戦略検討の仮説を提示した。その後、メカノファンクショナルマテリアルの先行研究事例や産業界の期待、さらには「接着・接合・剥離」「摩擦・摩耗」「自己修復」などへの応用展開に関する話題提供と質疑応答を行い、最後に総合討論を行った。

CRDS からメカノファンクショナルマテリアルに関する研究開発を推進していく方向性として、以下の 3 点について仮説を示し、事前アンケートで招聘者の意見を聴取した。

1. 今後国が公的研究開発費を投資すべき新しい材料研究開発の対象として、「メカノファンクショナルマテリアル」が有望である
2. 求められる材料機能を実現するためには、物質における力に起因する機能発現・現象のメカニズムを非平衡状態や散逸プロセスも含めて原子・分子レベルで取り扱い／解明すること（ナノ動力学の確立）が重要である
3. 材料の力学特性の観点では、化学･物理などのナノスケールでの物性の理解と、機械工学･流体工学などのマクロスケールでの現象の理解が必ずしも繋がっておらず、マルチスケールな学術体系・技術体系とも未発達であり、これらの構築が不可欠である

メカノファンクショナルマテリアルの先行事例の一つであるImPACT「しなやかタフポリマー」においては、薄くても破れない、硬くても脆くない高分子を目指して、高靭性や自己修復性に着目した研究開発が行われており、高分子の物性と構造の相関を理解するためには空間・時間ともナノからミクロ、ミクロからマクロといった階層構造の間をつなぐことが重要である、との指摘があった。同じく先行事例の一つである新学術領域「ソフトクリスタル」では、発光性メカノクロミズムや有機超弾性など、力学的刺激による新しい機能相創出を目的の一つとしており、マクロな力学的刺激が分子にどのような影響を与えているかのメカニズムを解明することが課題となっている。産業界からの期待として、自動車は電動化・知能化・軽量化へ向かって開発が進んでいる中、特に軽量化に関しては炭素繊維強化プラスチック（CFRP）などの軽量材料の強度や信頼性を裏付けるサイエンスの確立、さらにマルチマテリアル化を実現するための接着接合といった力学特性に関連した機能が重要となることが言及された。また、実装の観点からは半導体集積化の将来として三次元積層技術が注目を集め、金属や半導体同士の接合技術がキーテクノロジーであることや、常温接合や低温接合の実現がポイントになることが指摘された。

メカノファンクショナルマテリアルのトレンドの一つである高分子を用いた複合材料においては、性能向上を実現するためにはフィラーとマトリックスの界面を理解した上で精密制御を行うことが重要であること、そのためにはナノ・メソ・ミクロ・マクロの各階層のシームレスな理解につながる放射光や中性子などの計測技術や計算シミュレーション技術の高度化が重要であることが言及された。また、最近注目を集めている光剥離を可能にする液晶分子を用いた接着材料では、界面の接着力と液晶分子内の内部凝集力（分子間力）をいかに制御よく設計するかが重要な課題となること、また、高分子を用いた易解体性接着材料に関しては接着時には十分強度を保ちつつ、容易に剥離するというトレードオフの性質を両立させるためには刺激応答性のある反応性高分子の開発が必要であることが述べられた。加えて、接着技術全般の課題として、接着力の定量化や接着メカニズム解明が挙げられた。

メカノファンクションマテリアルの力学機能の発現メカニズムを解明し、設計指針を得るためには、計算シミュレーションが重要な役割を担うことが期待されている。例えば構造材料においては強度や靭性といった力学特性だけではなく、腐食や疲労、摩耗といった化学反応や電気的な特性などのマルチフィジクス現象を取り入れたシミュレーションを行うこと、マルチスケールを考慮する際には空間スケールだけではなく時間スケールも含めて自在に扱える手法を構築することが重要である点が指摘された。計算機能力の向上により、最近ではナノスケールの化学反応とマクロスケールの力学現象を同時に扱える手法も構築されつつあるものの、モデリングの際の初期状態をいかに設定するかが重要なキーポイントになるとの指摘もあった。マルチスケールシミュレーションの最近の成果としては、これまでは実験結果と大きなギャップがあった摩擦現象に対して、ナノスケールの化学反応を考慮することで定性的な理解が進んだことなどが挙げられる。特に、なじみ現象においては摩擦界面において摩擦熱による化学反応が起こることで超低摩擦状態を実現していることが理論的にも実験的にも確認されている。

自己修復に関しては、自己修復性高分子材料では架橋点に動的結合を導入することで強靭性が実現できるようになっているが、今後は自己修復後の強度回復メカニズム解明や室温で自己修復する機能を持たせることなどが課題であると報告された。一方、自己治癒セラミックスにおいて、

航空機用タービンなどに実際に適用するためには自己修復温度領域の設定や、亀裂をうまく誘導して自己修復させる機能を持たせることが重要であること、自己修復材料の信頼性を担保する新たな強度基準が必要であることが指摘された。

総合討論においては、上述の 3 つの仮説に対する意見として、「メカノファンクショナルマテリアル」という言葉は機能性材料でもあり構造材料でもある点をうまく表現できているのではないかとの意見があった一方、「マテリアル」となっているため接着や摩擦などの力学現象を主に扱っている研究者から見たときには、材料開発が必ずしも最終目標ではないなどの指摘がなされた。また、ナノスケールの動的な性質の解明だけでは不十分であり、それをどうやってメソスケール、マクロスケールへ繋げていくか、つまり「トランススケール」の解析手法を持つことが重要であるとの認識を得た。その際、シミュレーションが強力なツールとなることは共有認識であるものの、信頼性あるシミュレーション結果を得るためには、実際の系においてキーとなるパラメータをどのように抽出し、モデリングに落とし込めるかが重要なポイントになるとの意見があった。また、今後取り組むべき研究開発課題として、製品が使用されている間の経年劣化やリサイクルも含めた材料設計、これまで経験則やノウハウで担保されていた信頼性に関する学理の構築、などが挙げられた。さらにメカノファンクショナルマテリアルの研究開発を進めていく上では、化学と機械工学などのナノからマクロまでのスケールを超えた連携、計測技術やシミュレーションなどの分野を超えた共同研究体制の構築、産学連携のフレームワークが必要である。そのためには異なる分野間の研究者が議論できる場を設定し、たとえアプローチは異なっても共通の目的を持つことで新しい考え方を生み出す仕組みを構築することが重要であるとの指摘がなされた。

ワークショップでの議論を踏まえ、CRDS では今後国として重点的に推進すべき研究領域、具体的な研究開発課題を検討し、研究開発の推進方法も含めて戦略プロポーザルを策定し、関係府省や関連する産業界・学界等へ提案する予定である。

目　　次

エグゼクティブサマリー…… i

１．　開会挨拶　　曽根　純一（JST-CRDS）…… 1

２．　ワークショップ趣旨説明　　宮下　哲（JST-CRDS）…… 2

３．　先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ …… 6

３．１　ImPACT タフポリマーから見えてきた発展の方向性
伊藤　耕三（東京大学）…… 6

３．２　ソフトクリスタル力学特性の課題と方向性　伊藤　肇（北海道大学）…… 12

３．３　次世代自動車における材料技術への期待　齋藤　平（トヨタ自動車）…… 17

３．４　半導体実装で求められる材料機能ー接合界面創成技術ー
須賀　唯知（東京大学）…… 22

４．　メカノファンクショナルマテリアルのトレンド・課題・将来展望 …… 29

４．１　高分子機能材料の精密制御と新機能付加の可能性
田中　敬二（九州大学）…… 29

４．２　分子を使った機能接着と分子レベルでの力の理解
齊藤　尚平（京都大学）…… 36

４．３　高分子材料開発と刺激応答の新しい方向性－易解体性接着材料を中心に－
佐藤　絵理子（大阪市立大学）… 45

４．４　非線形マルチスケールマルチフィジクス現象モデルからの材料設計
尾方　成信（大阪大学）…… 53

４．５　マルチスケールシミュレーションが拓く材料現象
久保　百司（東北大学）…… 58

４．６　物質材料トライボロジーのマルチスケール制御
－高機能機械システムのための低摩擦発現ナノ界面創成－
足立　幸志（東北大学）…… 64

４．７　動的結合・自己修復性高分子の課題と可能性　吉江　尚子（東京大学）…… 70

４．８　自己治癒セラミックス材料の最新研究動向と課題
中尾　航（横浜国立大学）…… 74

５．　総合討論　　ファシリテーター：清水　敏美（JST-CRDS、産総研）…… 79

６．　閉会挨拶　　曽根　純一（JST-CRDS）…… 83

付　録…… 84

付録１：開催趣旨・プログラム…… 84

付録２：参加者一覧…… 87

1. 開会挨拶

曽根　純一（JST-CRDS）

本日はCRDSが独自に命名した「メカノファンクショナルマテリアル」という内容につき、いろいろとご議論いただきたい。

現在、接着・接合あるいは剥離という機能は、産業的に非常に重要な技術になっている。例えば、自動車における車体の軽量高強度化や半導体の三次元実装を実現するうえで、接着や接合などの技術が重要であり、最近の技術開発の進展も著しい。安価で高熱伝導の基板上にパワーエレクトロニクスの半導体素子を張り付ける、あるいは高効率化を目指して多接合の太陽電池を張り合わせて実現するなどの新しい動きが生まれて来ている。そのような状況に触発され、様々な材料のマクロな力学特性をナノスケールの世界から見た時に何が潜んでいるのか調べたいというモチベーションで今回の提案内容の調査を始めた。この半年の調査を通じて、この分野に広がっている未開拓の世界が浮かび上がってきた。力学特性を支配しているであろう動力学が、通常の物理の世界ではあまり積極的に扱ってこなかった非平衡や非線形、散逸プロセスなどを多分に含まんでいる。

また、この分野は機能材料的な要素と構造材料的な要素が融合する領域であり、ナノスケールの現象を対象にしてきた物理や化学の研究者と、マクロスケールの現象を扱ってきた機械系の研究者が連携して攻めるべき領域であり、その融合領域に我々の知らないリッチな世界が広がっているのではないかとの期待感を与えてくれる。

通常、このようなワークショップをする際には我々のアイデアも相応に固まっていて、その検証作業のような意味合いがあるが、今回のテーマに関してはこれからどんな新しいものが生まれてくるのか、皆様のお話を伺いながら、一緒に議論し、頭の中を整理していきたいと考えている。様々な観点からの議論をお願いしたい。

2. ワークショップ趣旨説明

宮下　哲（JST-CRDS）

「メカノファンクショナルマテリアル」とは、物質に作用する機械的な力が起源となって機能を発現する材料全般を指す言葉として、我々が造った言語である。本日はこのネーミングでいいのかどうかも含めて、様々なご議論をいただきたい。

「メカノファンクショナルマテリアル」は、例えば接着・接合・剥離、摩擦・摩耗、自己修復・破断などのマクロな力学特性を有する材料、メカノクロミズムや超弾性といった機械的刺激によって機能発現する材料系一般を指す、と現時点では定義している。このような力に起因する様々な現象に対して、その機能発現メカニズムを原子分子レベルで取り扱って解明すること（ここではナノ動力学と呼ぶことにする）が重要であると感じている。さらに、ナノスケールでの理解とマクロスケールの現象を繋ぐことができれば、力に立脚した新しい材料設計指針が得られるのではないかと考えている。

本日のワークショップでは、メカノファンクショナルマテリアルを研究開発するに当たって解決すべき科学的・技術的課題とは何か、社会・経済的ニーズに応えるためにどういう中長期戦略が必要か等について一緒に議論していただきたい。

まずは本日の主題である「メカノファンクショナルマテリアル」のこれまでの検討状況について説明したい。最近、日本は様々な場面で他国に比べて競争力が落ちてきているという話を耳にする。しかし、輸出品目を見れば、材料は依然として世界の中で重要な位置を占めており、我が国の強みとして今後も伸ばしていくべき分野であると考えられる。例えば、複合材料においては今後も世界市場予測が上昇しつづけるとされている。従来からの異種材料の複合ももちろん重要な観点であるが、今後は機能の複合という観点がより重要になるのではないか。軽量・高強度、小型・高出力などの一般にはトレードオフとされている機能を同時に実現する材料に対するニーズがあるのではないか。さらに、接着・接合・剥離、摩擦・摩耗、自己修復などの力に起因した機能の発現メカニズムに対してしっかりとナノスケールからマクロスケールまで理解すべきではないかと考えている。

実際に、航空機や自動車などの輸送機器では、CO_2 排出量削減の要請から軽量・高強度材料が求められている。また、半導体三次元実装においては簡便な接合・剥離技術へのニーズが高い。ソフトロボットでは軽量かつ大出力のアクチュエータが必要である。このような様々な応用領域に対して力学特性の観点から共通のボトルネックを見いだして、新しい材料開発のコンセプトや基盤技術を構築することが求められているのではないか。そのためにはナノスケールの力学特性とマクロスケールの力学挙動をしっかりと繋げ、社会的なニーズに応えていくことが重要と考える。

それを実現するために、従来の分野縦割りの壁を突破して、ナノスケールとマクロスケールのそれぞれの分野の研究者の融合・連携が必須であり、ハード材料・ソフト材料など材料の種類によらない研究コミュニティの形成が必要であると考えているが、そのためにはどのような仕組みが必要なのかについても本日議論したい。

提言の背景と骨子案

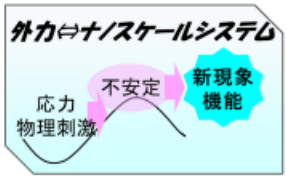
- 近年、「軽量・高強度」「柔軟・高靭性」「小型・高出力」など一般にトレードオフとされる物性・機能を克服する材料へのニーズが高まり、世界的に市場も拡大の傾向・予測
- 求められる材料機能を実現するためには、異種材料接合界面における「接着・接合・剥離」はじめ、「摩擦・摩耗」「自己修復・破断」「高靭性」などの“力”に起因する機能発現メカニズムをミクロな視点から解明すること（ナノ動力学の確立）が特に重要
- 最近、マクロな物理刺激によって応答・機能発現する材料系（メカノファンクショナルマテリアル）など、新しい研究動向に着目
- ナノスケールの力学的な作用がマクロな現象にどのように結びつくのかを明らかにすることで、新材料設計指針を確立し、既存材料では実現できていない機能を持つ超複合材料や新規メカノファンクショナルマテリアル創成を指向
- そのためには、様々な分野の知の糾合および技術の融合、マルチスケールを結び付ける連携・仕組みが必要

図 2-1

用語説明

「ナノ動力学」

- 物質における“力”に起因する機能発現・現象のメカニズムを原子・分子レベルで取り扱い／解明するための学問領域
- 平衡状態（安定状態）だけでなく非平衡状態（不安定状態）を扱うことから、複雑かつ未解明の部分が多く、新現象・新機能発現が期待される



新しい機能材料創出メカニズム

「超複合材料」

- 既存の複合材料では実現できない、“機能の複合”や新機能を実現する材料であり、複合材料の概念を拡張。一般にトレードオフとされる相反物性の克服や、異種・異相材料間の分子レベルの複合などによる新材料を指して用いる。
- ナノ動力学の理解により、これまで実現不可能だった複合や多様な特性が生み出されることが期待される

「メカノファンクショナルマテリアル」

- 物理刺激によって応答・機能発現する材料系

図 2-2

図 2-1 がこれまで述べてきた提案の背景と骨子案をまとめたものであり、図 2-2 は今回我々が用いている 3 つのキーワードの説明である。

これまでの複合材料では実現できなかった複合機能を持つ材料系を超複合材料と呼んでいるが、今回の提案ではナノ動力学を基盤としたメカノファンクショナルマテリアルという材料系にフォーカスしたい。先に述べた輸送機器における軽量・高強度材料、半導体三次元実装における接着・剥離、ソフトロボティクスにおける小型・軽量・大出力アクチュエータなどのニーズに応えうる新しい材料開発を推進することが重要であり、ナノスケールでの力学挙動がどのようにマクロな力学特性に繋がるのかをしっかりと理解する必要があると考えている。さらにそれらを解明することで、新しい材料設計指針が得られるという期待感を持っている。

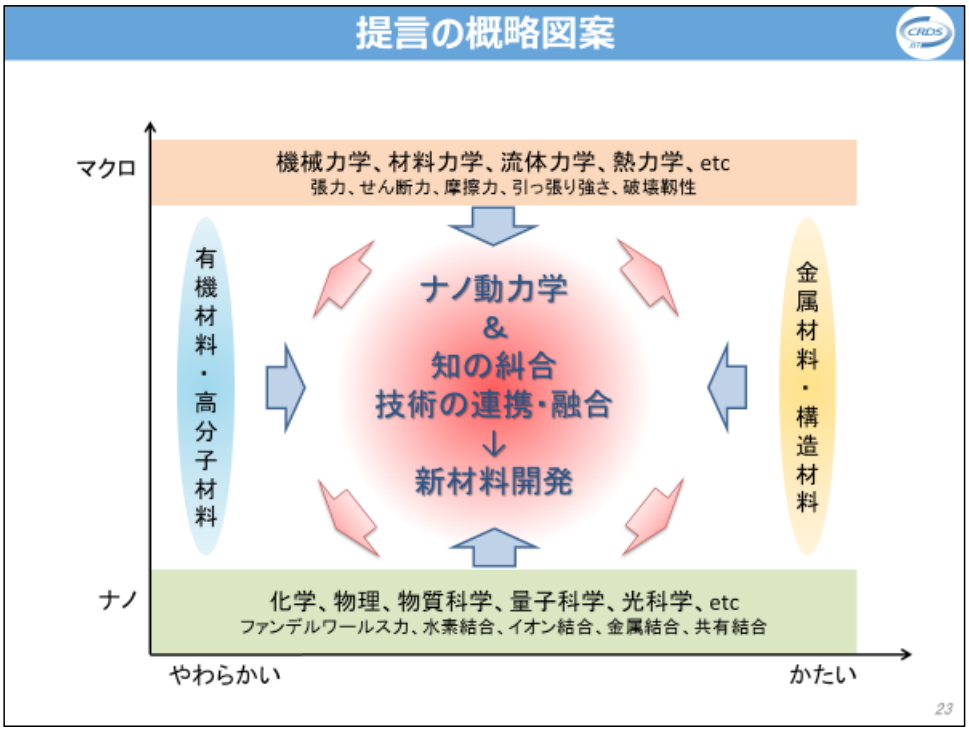
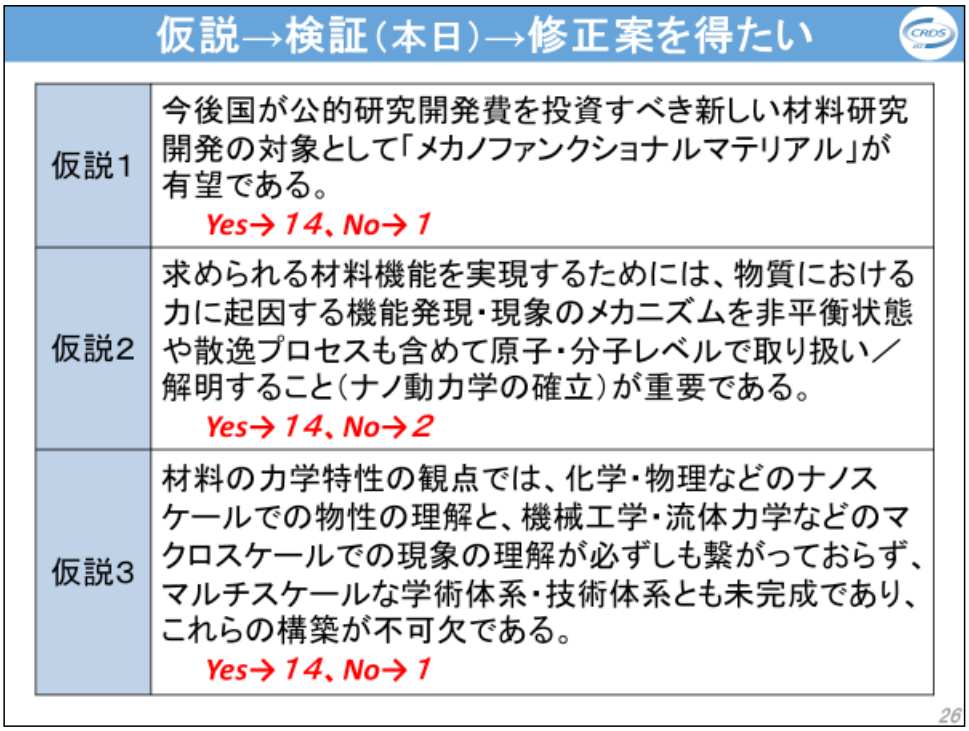


図 2-3

図 2-3 は今回の提言の概略図である。縦軸にナノからマクロまでの長さスケール、横軸にはやわらかい、かたいといった材料の種類を示している。図 2-3 で示すように、メカノファンクショナルマテリアル研究開発のためには、化学や物理といった量子力学を中心としたナノスケールの原理解明を得意とする分野と、機械力学や流体力学といったマクロスケールの現象の理解を得意とする分野がどう相互接続するか、また材料系に対しても有機材料や高分子材料などのソフト材料と金属材料や構造材料といったハード材料のそれぞれの材料分野で培われた知見および技術を融合・連携することが重要であると考える。

諸外国の動きを見た場合、例えば米国材料科学会（MRS）では個別には関連するセッションや講演が見受けられるが、メカノファンクショナルマテリアルのように力に立脚した材料系全般を包括したような研究プロジェクトは存在していない。日本が先導を切って打ち出す良い機会ではないかと感じている。

最後に本日招聘している発表者とコメンテーターの方々に事前に実施したアンケート結果を図2-4に示す。仮説の妥当性や今後の方向性に関しては総合討論でじっくりと議論させていただきたい。



仮説→検証（本日）→修正案を得たい

仮説1	今後国が公的研究開発費を投資すべき新しい材料研究開発の対象として「メカノファンクショナルマテリアル」が有望である。 Yes→14、No→1
仮説2	求められる材料機能を実現するためには、物質における力に起因する機能発現・現象のメカニズムを非平衡状態や散逸プロセスも含めて原子・分子レベルで取り扱い／解明すること（ナノ動力学の確立）が重要である。 Yes→14、No→2
仮説3	材料の力学特性の観点では、化学・物理などのナノスケールでの物性の理解と、機械工学・流体力学などのマクロスケールでの現象の理解が必ずしも繋がっておらず、マルチスケールな学術体系・技術体系とも未完成であり、これらの構築が不可欠である。 Yes→14、No→1

26

図 2-4

本日一日、長丁場ではあるが、是非とも活発なご議論をお願いしたい。

3. 先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ

3.1 ImPACT タフポリマーから見えてきた発展の方向性

伊藤　耕三（東京大学）

産業で様々に使われているポリマーには、輸送機器や電子機器、ロボット、医療、農業とあるが、利点として軽量、柔軟、省エネルギー、易加工性などがある。課題としては強度、信頼性、耐衝撃性、耐熱性などがあり、これらの相反する性質をどうやって満たしていくかが非常に大きなチャレンジとなっている（図 3-1-1）。ポリマーの世界で状況が変わってきたのは、プラスチックが自動車に使われるようになってきたことである。これまでは実際に使われている部分は非構造部分が多かった。軽いのは良いが、やはり本当に信頼性が必要なところにはなかなか使えないというのが常識だった。ところが、2011 年からボーイング 787 が登場し、機体の主要部分にポリマーが使われるようになった。そして自動車でも BMW の構造材料に採用された。一番大事な信頼性を要求される構造部分についても、ポリマーが使えることがわかれば、他の産業でも例えば風車など、使いたいというニーズがどんどん出てきた。そういう点でポリマーに関する要求性能は高まり、状況がかなり変わってきていると認識している。

様々な課題を解決する材料：ポリマー

3大材料：金属、セラミック、ポリマー
ポリマー：プラスチックやゴム、繊維、複合材料、ゲル

ポリマーの特徴 ＝ 薄く、軽く、柔軟

産業応用として、自動車だけでなく、電子機器、ロボット、医療、農業をはじめ広範な分野の課題を一挙に解決

応用分野	利点	課題
輸送機器	軽量、省エネルギー、易加工性	強度、信頼性、耐衝撃性、耐久性、耐熱性
電子機器	軽量、柔軟性、絶縁性、易加工性	放熱、劣化
ロボット（アクチュエータ）	軽量、フレキシブル、易加工性	強度、信頼性、耐衝撃性
医療	生体適合性、刺激応答性	生体適合性？
農業	軽量、易加工性	劣化、コスト

将来の、安心・安全・低環境負荷の社会ニーズに資する

図 3-1-1

三大材料（金属、セラミック、ポリマー）の一つであるポリマーの物性は、ナノレベルだけで決まらない。一般的な結晶部と非晶部からなるポリマーの構造は非常に複雑で、ナノからサブミクロンのオーダーの構造制御が重要だが、まだ確立していない。ナノレベルでは全原子シミュレーションも可能だが、マイクロレベルまでやろうとすると粗視化の手法についての課題などがあり、現実の系を再現することは難しい。まさにこのマイクロ領域とナノ領域をつなぐようなサイエン

ス・テクノロジーが未成熟である。ポリマーは空間的にも時間的にも階層構造をとっていて、側鎖の運動から主鎖の運動、セグメントの運動などの多様なダイナミクスが、動的物性の支配要因となっている。この全体を理解しなければ、構造から物性を予測したり、相反する性能を満たすようなものは、作ることができない。このような階層構造をどうやって科学的に理解し、自在に実現するかということが非常に大きなターゲットである。もしそれができれば、我が国の素材産業にものすごく大きなインパクトを与える（図 3-1-2）。

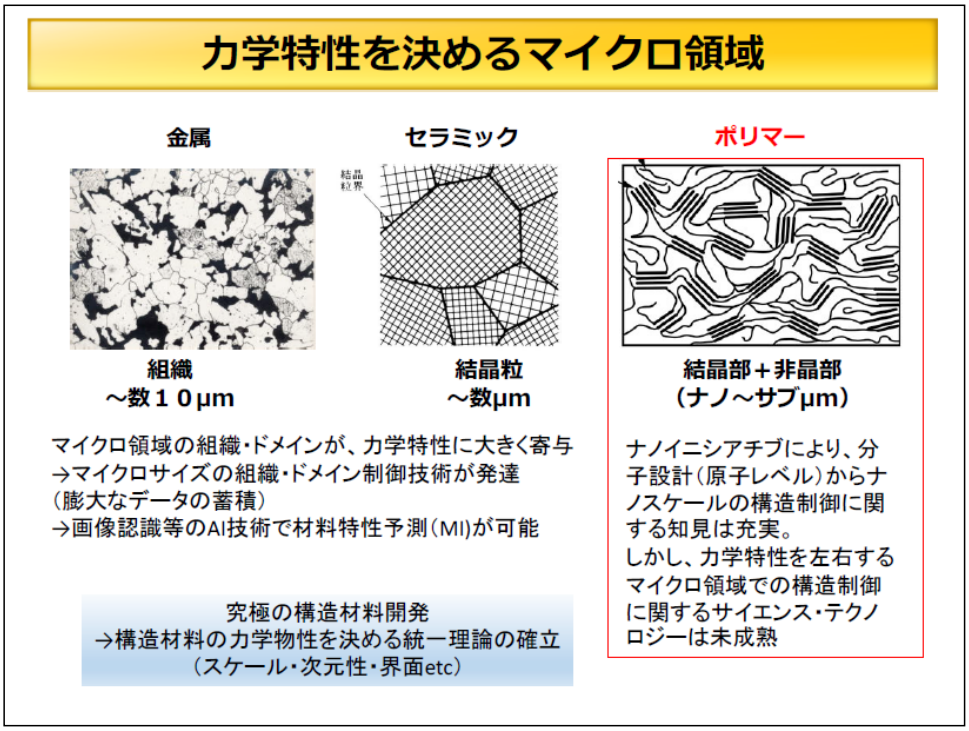


図 3-1-2

ポリマーは基本的に非平衡であるため、使った後しばらくすると変化したり、アニールするとまた変わってくる。シミュレーション技術や構造解析技術が今どんどん発達しており、非平衡な材料をどうやって制御して、非平衡状態を固定して使える材料とするかなど、マルチスケールのプロセス制御を実現することが重要である（図 3-1-3）。

ImPACT で進行中の「しなやかタフポリマー」では、薄くても破れない、硬くても脆くないようなポリマーを目指して、靭性を上げることや柔軟性をもたらすこと、自己修復性をもたらすことによって壊れにくいポリマーをつくる研究開発をしている。解析に放射光施設やスーパーコンピュータを用い、最先端化学を駆使して実現しようとしている。クローズドで研究開発している部分と共通課題としてオープンにやっている部分とが共存しており、上記のような研究は共通課題としてアカデミアを中心に取り組んでいる。

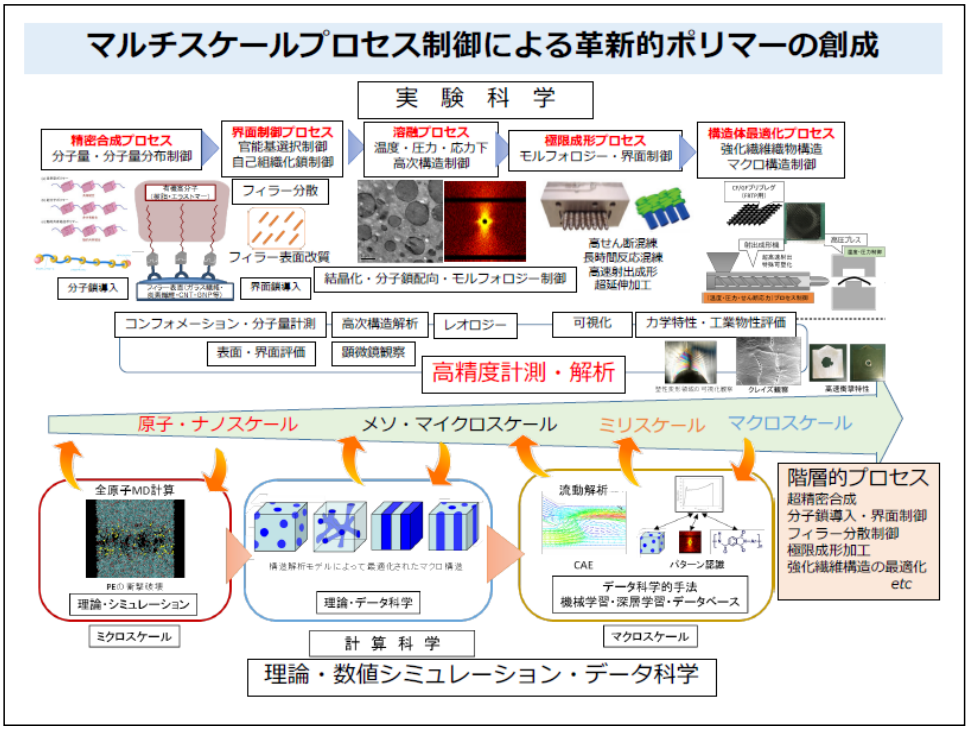


図 3-1-3

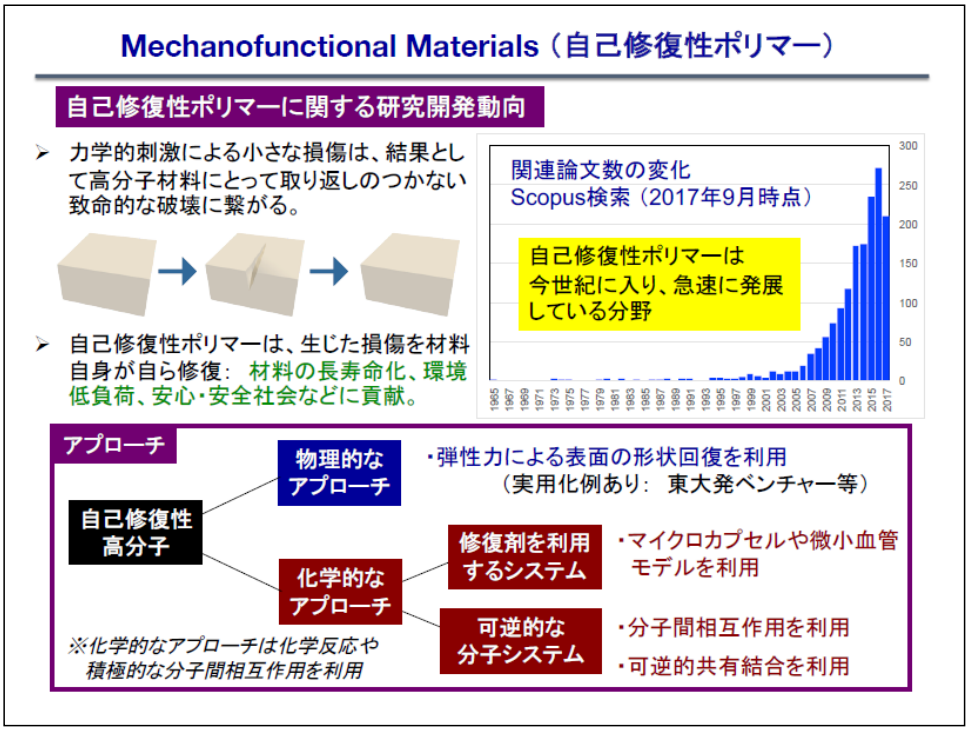


図 3-1-4

今、自己修復性ポリマーが世界的に非常にホットな研究課題になっている。ポリマーに対して力学的刺激による小さな損傷が起こると、致命的な破壊につながる恐れがあり、信頼性が必要な部品では特に期待されている。自己修復が実現されれば、メンテナンスコストも低減され、材料の長寿命化、環境低負荷、安心・安全社会に貢献する。図 3-1-4 に示すように、自己修復性高分子には二つのアプローチがある。一つは物理的なアプローチで、弾性力による表面の形状回復を

利用するもの。他方は化学的なアプローチで、さらに修復剤を利用するシステムと可逆的な分子システムとに分けることができる。

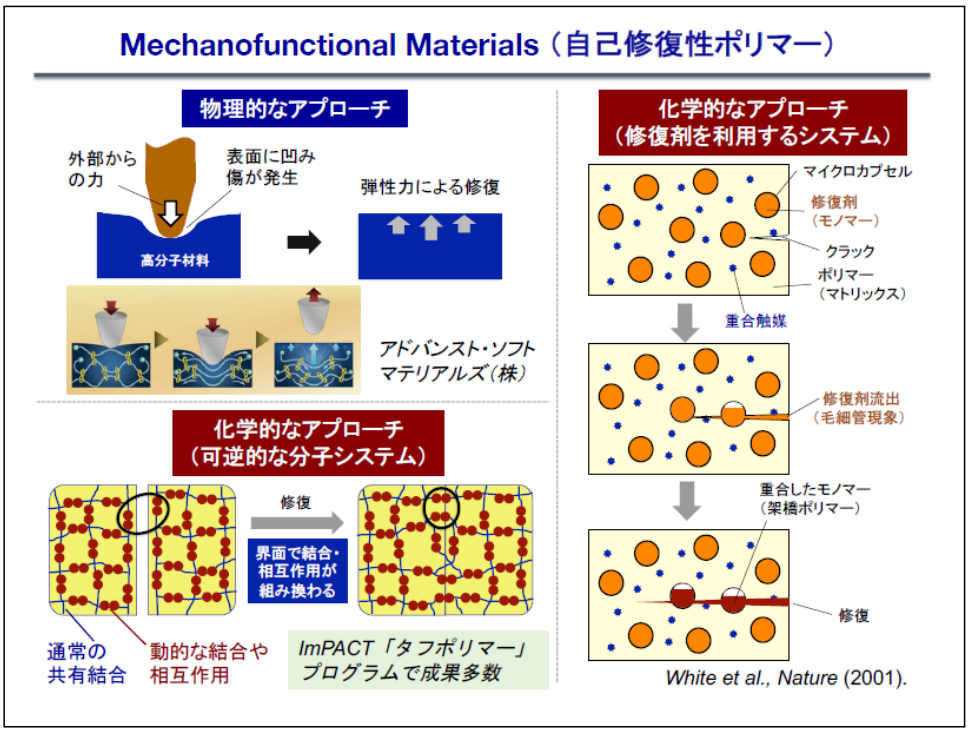


図 3-1-5

最近特に研究が活発で論文が増加しているのは、可逆的な分子結合により自己修復をもたらすものである（図 3-1-5）。ImPACT では、分子に新しい分子結合を導入することで修復を起こすタイプで、多数の成果が出ている。今後大事なのはゲルのような柔らかい材料だけでなく、硬いプラスチックの材料で、しかも速く修復するものができれば産業応用に大きなインパクトをもたらすことができる。

もう一つ重要視しているのは、疲労や破壊の可視化である。もし亀裂が生じるところを捉えて見ることができれば、あるいは見えた段階で、外から刺激を加えて自己修復すればメンテナンスが非常に楽になる。例えばメカノクロミズムという力学刺激によって色彩変化を起こすような性質を利用することが考えられる（図 3-1-6）。まさに今回のメカノファンクショナルマテリアルに深く関係する材料を開発しようとしている。力学刺激を受けた場所を色の変化によって視覚的に示し、どのくらい劣化したかをわかるようにしたい。これにより応力の分布や不均一性が評価できるようになるだろう。さらに損傷を初期の段階で検知できれば、寿命予測にも貢献する。構造材料として使われるようなポリマーで最も重要なことは信頼性であり、そこを担保するのに可視化は有効だと考えている。アプローチにはいくつかあり、構造色を使う、蛍光色素の分散系を使う、化学反応の異性化に伴って色が変わるようなものを使う、結合の開裂によりラジカルが発生して色が変わるなど、このようにいろいろな手法が考えられ、ImPACT の研究者が各手法に挑戦している。

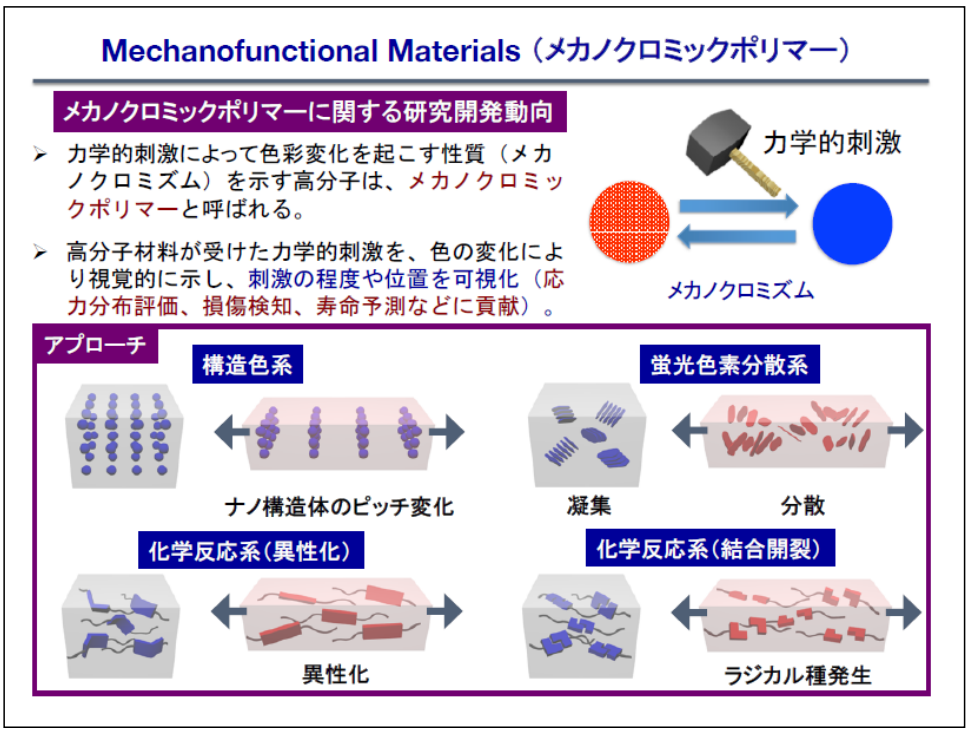


図 3-1-6

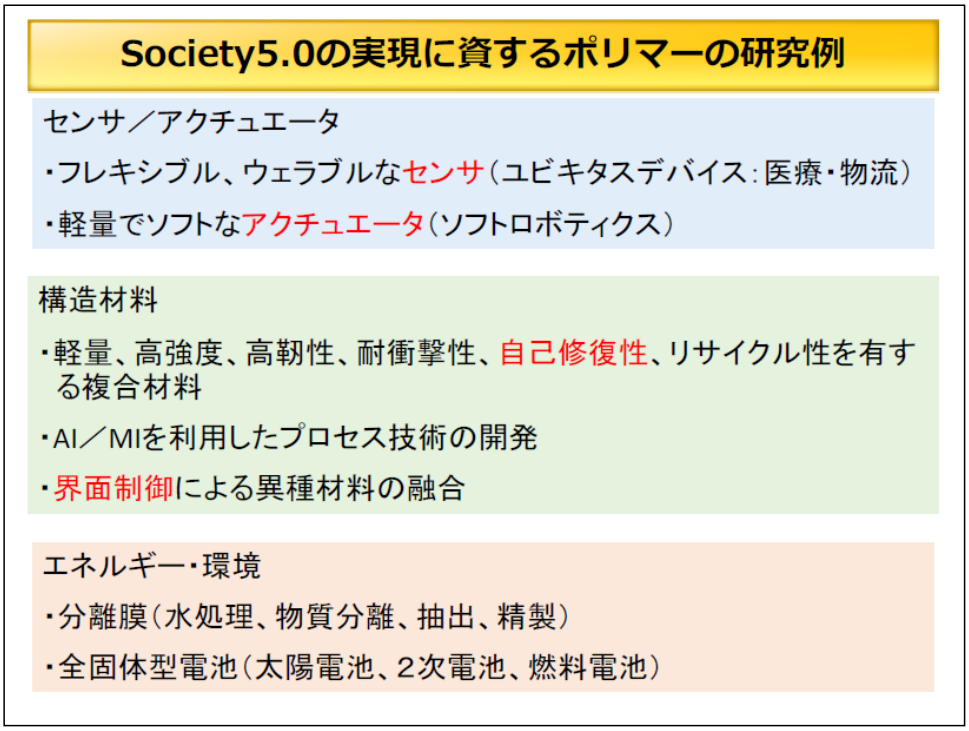


図 3-1-7

まとめると、Society5.0 の実現に資するポリマーの研究例として、センサ／アクチュエータや構造材料、エネルギー・環境用途が注目されている。ポリマーはそのような材料として大きく貢献できると考えられており、図 3-1-7 のような分野で中心的役割を果たすことが期待される。なかでも自己修復性や高靭性、界面を制御して異種材料を接着するといった点は重要課題であり、まさにメカノファンクショナルマテリアルの方向性で実現されていくものだろう。

【質疑応答】

Q：応力発光では、遷移金属を物質にドープをすると強い発光が出る。高分子は柔らかいという特性があり、硬い物質のときとは異なる。強度や性能に着目した場合、高分子の発光というのは一般的な遷移金属ドープの材料に比べてどうか。

A：強度という点では動的共有結合の部分が応力を担うため、単なる添加をしている場合とは力学応答が異なるだろう。実際に応力がかかっていることが発光に結びつくため、力がかかっていることの検証が可能。おそらく後から導入した遷移金属でも発光すると思われるが、そこに力がかかっているのかどうかという点では、ネットワークの中に力が実際にかかっているという検証に使える。

Q：界面の研究では接合が大事だが、接合強度以外に、界面と力とが関連して起こす機能のようなものはどう考えているか。

A：材料が複合材料の場合、壊れるのはやはり界面のところに力が集中するというところがある。ある程度以上の応力がかかったところで滑らせたほうが良い場合もある。例えば、異種材料の界面接合の場合、金属とプラスチックでは熱膨張率が異なる。そういう違いも破壊の起点になるため、力を逃がす機能が異種材料の接着には必要だろう。そうした部分の界面設計はまだできておらず、重要な研究対象になる。

Q：ポリマーをリサイクルする場合に関して、モノマーまで戻ることを想定できるのか、それともどのような段階までを考えればよいのか。

A：一般に、リサイクルするとポリマーは特性が落ちてくる。モノマーまで還元するようなプロセスもあるにはあるが、その場合はリサイクルに伴うコストとの見合いになる。理想的にはモノマーまでちゃんと分解し、もう一回ちゃんと重合できて、しかも強度が回復するということだろう。そういう新しいプロセス技術が開発できるとインパクトが大きい。特に複合材料のリサイクル性が重要ではないか。自動車への今後の普及では、本質的な課題だと考えている。

3．2　ソフトクリスタル力学特性の課題と方向性

伊藤　肇（北海道大学）

私は科研費・新学術領域研究「ソフトクリスタル」（H29-33 年度）において、「ソフトクリスタルの構造開拓」班の班長として参加している。ソフトクリスタルは新しい用語であるため、まずその中身について紹介する。いろいろな材料に関して、縦軸を秩序性、横軸を構造変化の活性化エネルギーとして並べた場合（図 3-2-1）、結晶は固くてもろく、秩序性が高いが、液晶、生体・ゲル、液体の順に材料の柔らかさが特徴となる。結晶や液晶を研究している多くの研究者が、これまでの研究結果から、その中間の性質を持つ興味深い物質群があるのではないかと洞察・着想することでこの新学術領域研究はスタートした。結晶とソフトクリスタルの違いは、結晶は相転移の際の構造変化の活性化エネルギー$\Delta G^{\ddagger}$が大きいのに対して、ソフトクリスタルでは$\Delta G^{\ddagger}$が小さく、弱い刺激に対して構造変化が非常に起こりやすいことである。ソフトクリスタルでは、結晶に対する外部刺激の中でも、これまで研究対象になることが少なかった「力学的刺激」に特に注目している。ナノレベルの非常に小さなオブジェクトである「分子」をマクロな刺激である力学的な力によってコントロールする、あるいは力学的な力で分子や分子の並び方がどう変化するのかを理解・観察したいというのが、この新学術領域のモチベーションの一つとなっている。

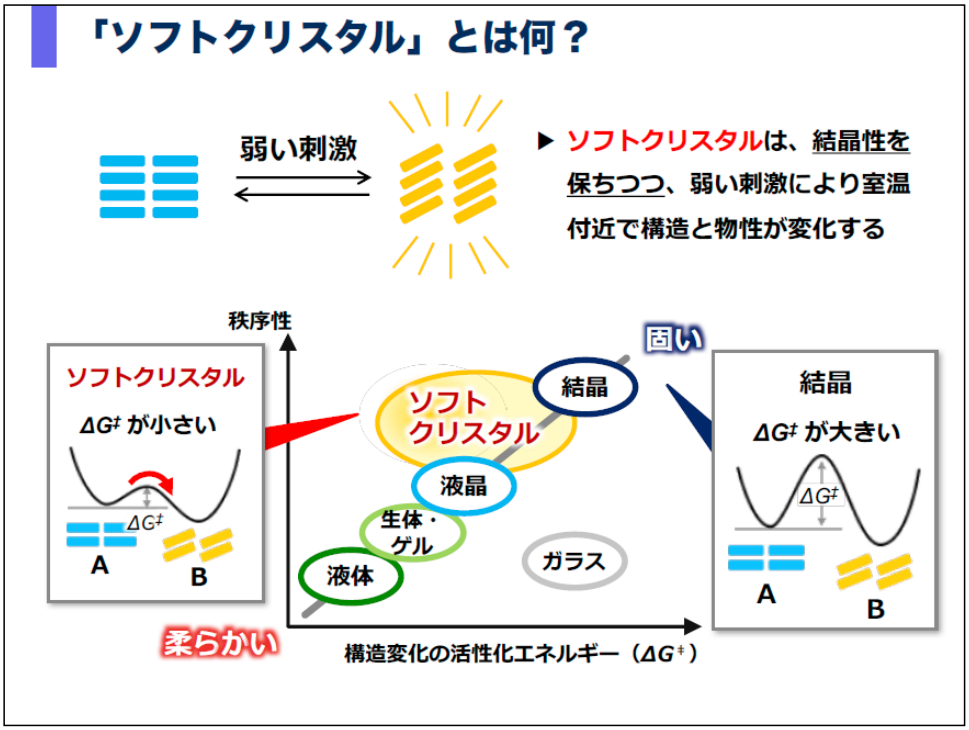


図 3-2-1

このような研究を始めるきっかけとして 2008 年に我々のグループは、「可逆的な発光性メカノクロミズム」を有する物質を発見した（図 3-2-2）。この化合物は、室内光では白色の粉体（錯体の結晶）であるが、UV 照射をすると青い発光（リン光）が観察される。この粉体にほんの少し力学的な刺激を加えると、この結晶がアモルファスに変化し、同時に発光色が青から黄色へと

敏感に変わる。僅かな力学的刺激で非常にドラスティックに色が変わることが特徴である。これは分子の化学反応による変化ではなく、結晶構造における分子の並びの変化に対応して色が変わっている。黄色に変化した後に溶媒（ジクロロメタン）を加えると、元の青色発光に迅速に戻る。溶媒を使って分子を一部溶解、再結晶させることで、分子の並び方が変化して元に戻るということがわかった。この発光色の変化は UV 照射下でのみ観測することができるが、構造変化そのものには UV 照射は必要ではない。またこれらの操作は繰り返し起こすことができる。通常の化学反応では共有結合の組み換えが必要であるため、こういう変化は起きにくく、繰り返すことも難しいが、この物質は分子間相互作用の組み換えによるため、安定に繰り返し実施することができる。

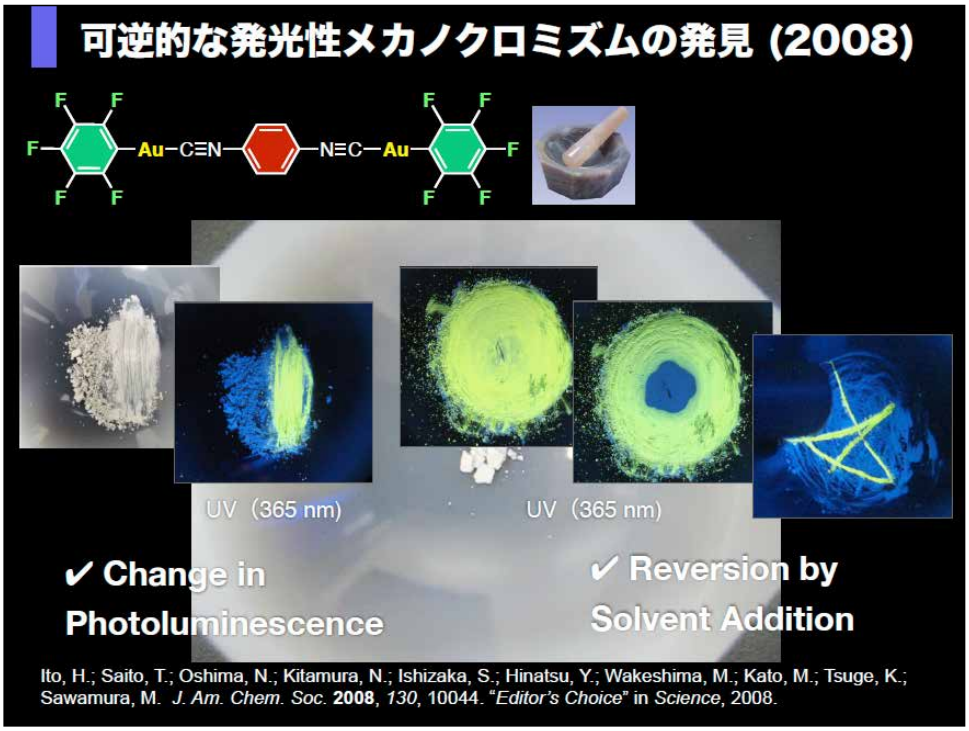


図 3-2-2

こうした機械的刺激に対する物質の発光色の変化は、メカノクロミックルミネッセンスなどと言われ世界中でブームになっており、多数の論文（500 報超）が報告されている。機械的刺激に対する化学的な変化は、高分子では昔から知られている。高分子では、超音波照射により高分子主鎖の炭素 - 炭素結合がラジカルを生じながら切断される。最近では切断時に生じるラジカルを活用するような研究も報告されている。また、その高分子に対する機械的刺激を利用して、特徴ある化学反応を起こさせようという研究も盛んになってきている。

メカノクロミズムを示す錯体は分子がベースになっているため、その分子構造を変えることで発光物性をある程度合理的に設計することは一つの特徴である。刺激を与えた直後の変化が自発的に元に戻せる機能を付与したり、刺激の与え方に対する変化のバリエーションも分子構造を制御することによって自由に調整することができる。分子デザインにより発光色もコントロールすることができる、例えば刺激の程度に対応して 4 色の異なる発光色を出すような物質開発にも成功している（図 3-2-3、3-2-4）。

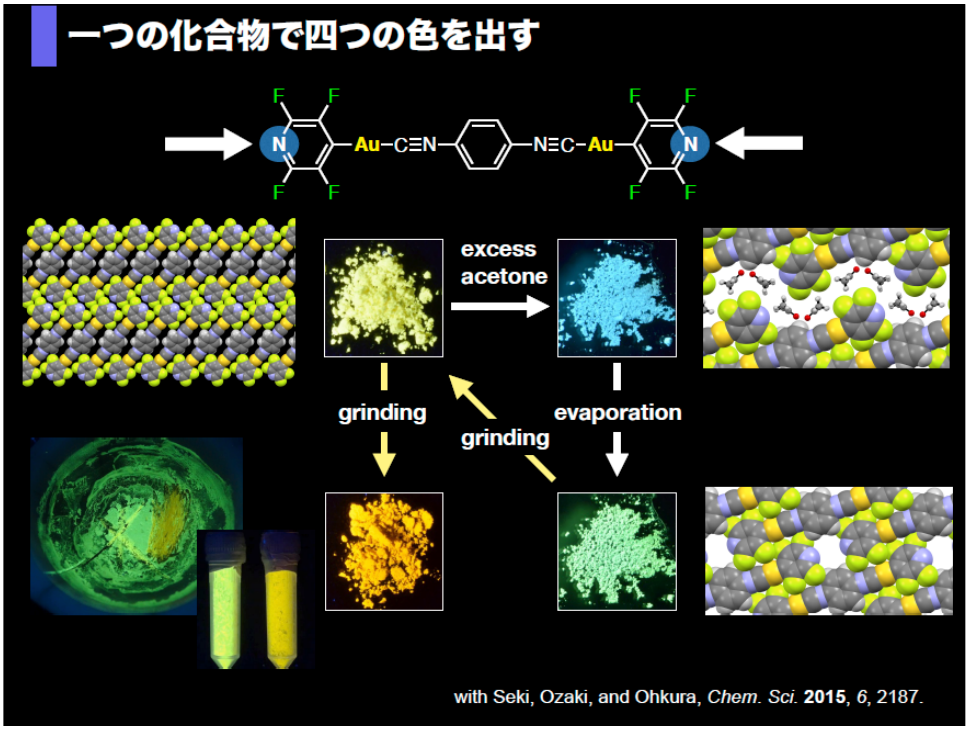


図 3-2-3

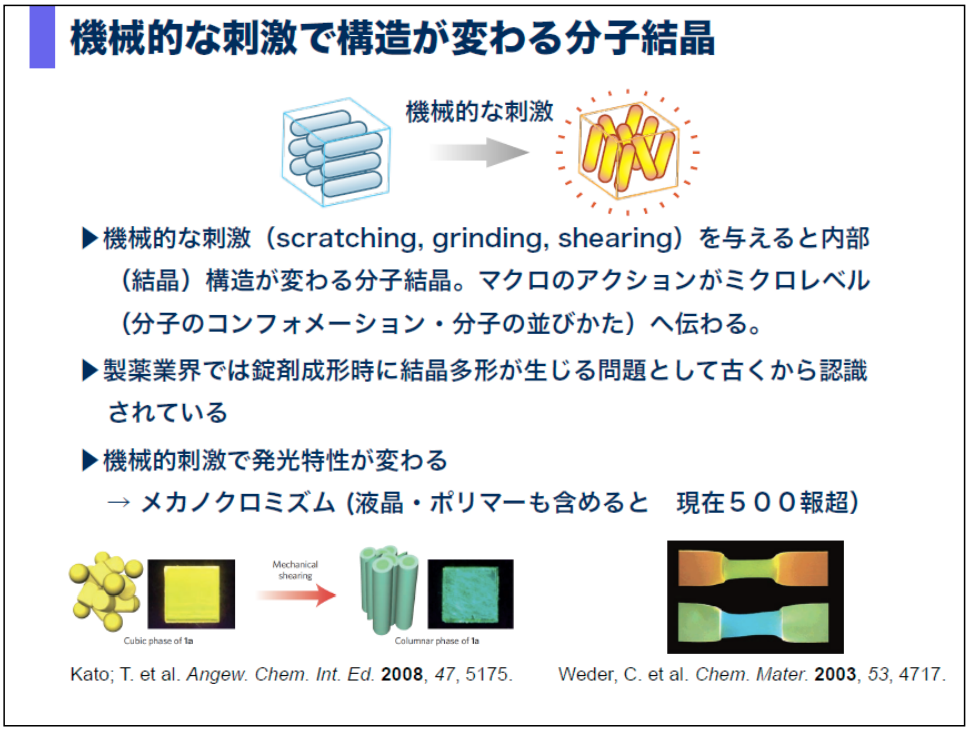


図 3-2-4

有機結晶の力学的な挙動・応答性の研究は、ソフトクリスタルの大きなテーマの一つである。高見澤聡先生（横浜市立大）らは最近、超弾性・強弾性・形状記憶を示す有機結晶を初めて見出した（図 3-2-5）。超弾性は、機械的な力を異方的に加えた際に、結晶内の分子の並び方が変わる相転移が起こり、それに対応する機械的な応答が見られるが、機械的刺激を取り除くと元に戻る。また強弾性では、結晶内の分子の方向が刺激によって対応して変わり、超弾性とは異なって、力

を取り除いても元には戻らないが、相転移した後の構造が熱的な刺激によって再び元の構造に戻る。これは金属ではよく知られている形状記憶の機能に相当する。金属材料や高分子材料では形状記憶が知られているが、材料の種類が限られている。一方、有機物に関しては今後様々な化合物が発見され続ける可能性があり、欲しい力学特性を持った超弾性・形状記憶を示す結晶を自在に開発できる可能性が非常に高い。

図 3-2-5

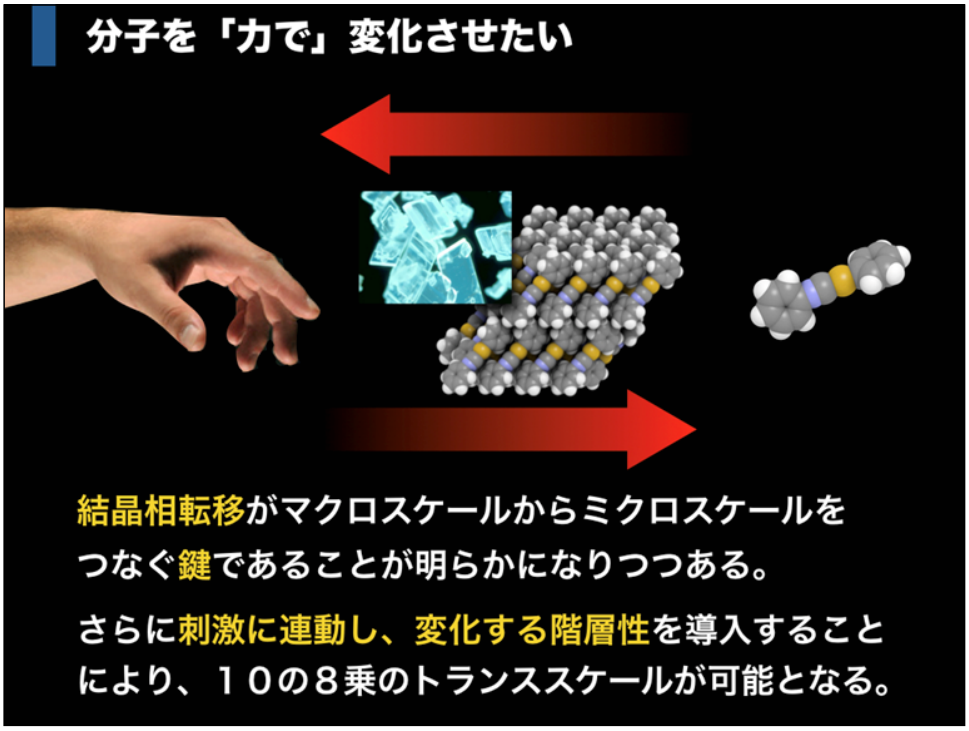


図 3-2-6

また我々は、上述のメカノクロミズム結晶の発展系として、非常に小さな刺激に対して、構造変化が内部で自己増幅され、最終的に結晶全体が反応する例を見出している。微小な針を使ったわずかな刺激をトリガーとして、結晶全体に構造変化を伝搬させるというこの現象を、我々は分子ドミノ型相転移と呼んでいる。

機械的な力はマクロな刺激であるが、一方で分子はナノメーターサイズのミクロな存在である。これまでこの両者をつないで、機械的な力を分子に伝える合理的な方法はなかったが、上述の研究のように、有機結晶の構造相転移を利用すると、力学的刺激あるいは接触に対する刺激に対して自発的に変化するというような物質、すなわち 10 の 8 乗のスケール差を超えるトランススケール力学材料が開発可能であることがわかってきた。(図 3-2-6)。

最後に今後の課題を述べる。分子を機能の最小パッケージと考えることができるが、例えば発光・磁性・電気・触媒・キラルというような機能を分子の中に埋め込んでおき、機械的刺激による相転移を組み合わせることで、様々な機能材料を創出することが期待できる（図 3-2-7)。また、階層性について考えると、現状の結晶は単純な周期性しかないが、もう少し段階的で異方的な階層性を作ることができれば、より高度な機能の設計が期待できる。例えば、筋肉では分子が集まってファイバーができ、さらにファイバーが集まって最終的には段階的に筋肉になる。分子もこういうような段階性を持たせると、さらなる機能化が可能になるのではないかと考えている。また、まだ想像の段階の話だが、曲げるとその部分の色や強度が変化したり、ガン細胞に触れると硬くなって内部を切り裂くような材料、化学反応によるミクロアクチュエータなどの開発が期待できる。世界の研究は大きく動いており、遅れないように我々も 5 年後にはいい研究成果を皆さんへご報告できるようにしたい。

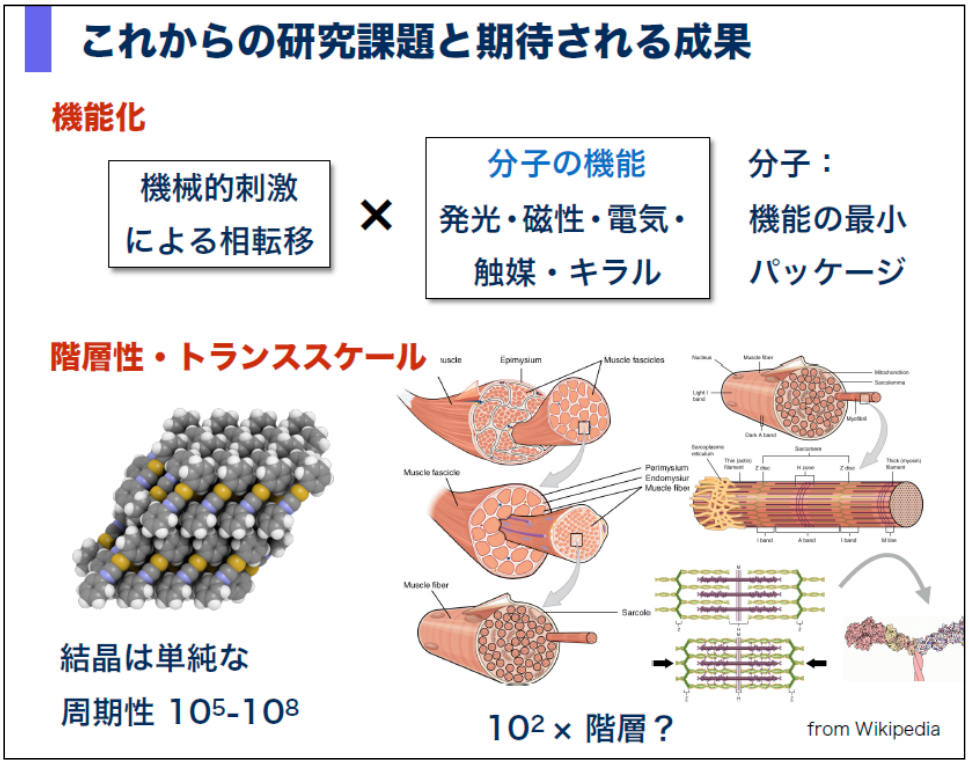


図 3-2-7

3.3　次世代自動車における材料技術への期待

齋藤　平（トヨタ自動車）

本日は自動車における材料技術への期待についてお話したい。

トヨタ自動車では、環境チャレンジ 2050 を掲げて、新車 CO_2 ゼロ、ライフサイクル CO_2 ゼロ、工場 CO_2 ゼロに向けた研究開発を行っている。特に新車 CO_2 ゼロでは、「2050 年までに 2010 年比 90％低減」に向けて挑戦しており、電動化と軽量化が重要となる。また、自動車産業を取り巻く環境が急激に変化しており、コネクティッドや自動運転、さらには車の所有から利用への動きが加速している。この点は異業種参入を含めた形で、情報化、知能化が進み、データ活用に基づく新たな競争が発生している。

図 3-3-1 に電動化に関わる材料開発を示す。電動化は、トヨタ自動車では THS（トヨタハイブリッドシステム）をもとにそれぞれのパーツを開発しているが、その中でも燃料電池、モーター、インバーター、蓄電池は材料技術の塊である。

図 3-3-1

次に、蓄電池と燃料電池について説明する。新型プリウス PHV の電池は、従来型の液系リチウムイオン電池を使っている。今後、性能を飛躍的に高めていく必要があり、将来に向けて全固体電池に取り組んでいる。蓄電池は固体界面や固液界面、あるいは電極材料の構造の制御が大変重要である。

燃料電池に関する材料で特に重要なものは、FC スタックと水素タンクの２つである。

FC スタックは燃料電池の心臓部であり、カーボンに白金触媒を担持させて空孔を設けることでイオンの授受と水の排出を実現している。今後、さらに高性能化、低コストを進めるためには触媒をより効果的に使う必要がある。触媒としての白金の使用量削減や効率的な活用が必要である。そのため、触媒の構造をミクロな状態から制御して材料を作り込むところが大切ではないか

と考えている。

水素タンクに関して、現在は CFRP を使っている。信頼性を重視し、余裕を持った設計をしており、低コスト化に向けた取り組みが重要であると考えている。

図 3-3-2

車の知能化について述べる。図 3-3-2 に示す、自動運転を意識したときのコックピットの姿で説明する。図 3-3-2 は CES などで展示した icar と呼ばれる車のコックピットである。シンプルなコックピットにすることに加え、顧客に新たな価値や機能を提供することで一人一人に合ったサービスの提供を目指している。これまでは基本的には車の性能重視の作り方だったが、今後は安全・安心、快適空間、運転者支援、癒やし・健康というような領域の技術を加え、顧客に対する付加価値を上げていかなければならない。具体的には、透明材料、電磁波などの制御、自己修復、防臭・除菌、生体センシングなどが必要だと考えている。

別の観点からは、嗅覚、触覚、視覚、聴覚などと同等の機能を発現する材料として、嗅覚は吸着材料、触覚は人工筋肉、聴覚は遮音材、視覚はメタマテリアルやクロミック材料が必要であると考えている。その他にもエネルギー吸収材、変形材料などさまざまな材料が必要である。

軽量化について述べる。長年、車のボディには鉄を主に使ってきたが、軽量化のために鉄以外の材料の活用が進んでいる。これまでは材料置換が主流であり、車両の構造は維持したまま鉄をハイテン化（高張力鋼板化）して高強度化を実現したり、アルミニウムや CFRP に置き換えて軽量化を図る、というのが基本的な考え方であった。最近では、車両の構造自体を見直して、新しい材料を使いこなすために必要な車体構造を作るべく設計自体が変わってきている。図 3-3-3 は Lexus の LC の場合のマルチマテリアルボディを示すが、従来の鉄に加えてアルミニウムや SMC（Sheet Molding Compound）などを構造材として一部使い始めている。

図 3-3-3

マルチマテリアルボディを実現するための必要な技術として、異材接合、リサイクル、コスト低減が挙げられる。さらに、異材接合の中の重要な要素の一つに接着剤があり、異材間の接着による軽量化のメリットは非常に大きい。課題としては、生産工程における硬化時間の確保や車の分解あるいはリサイクル時の解体のしやすさが十分かといったことがある。最も大切な点は、接着剤としての性能を長期間担保できるかということで、接着剤の信頼性という観点で、走行による劣化を把握したい。今後、何十年先まで性能がしっかり維持できるのかいう点が重要である。そのためにも、ミクロ視点から接着を制御できるようにしたい。

リサイクルに関しては、走行時の CO_2 の発生以外に、ものづくりの部分での CO_2 の発生も低減していくことを考えないといけない。リサイクルまで含めた全工程を考慮した CO_2 排出量削減が重要である。

近年、自動車産業への異業種参入が話題になっており、IT 企業のスピード感に遅れないように開発をしていく必要があると感じている。そこで材料開発もスピード感をもって進められないかとの課題意識から計算科学を取り入れることを考えている。また、従来の材料開発ではアイディアが飽和しているとの問題意識もあり、新たな気づきを得るためにも計算科学が役に立つと考えている。

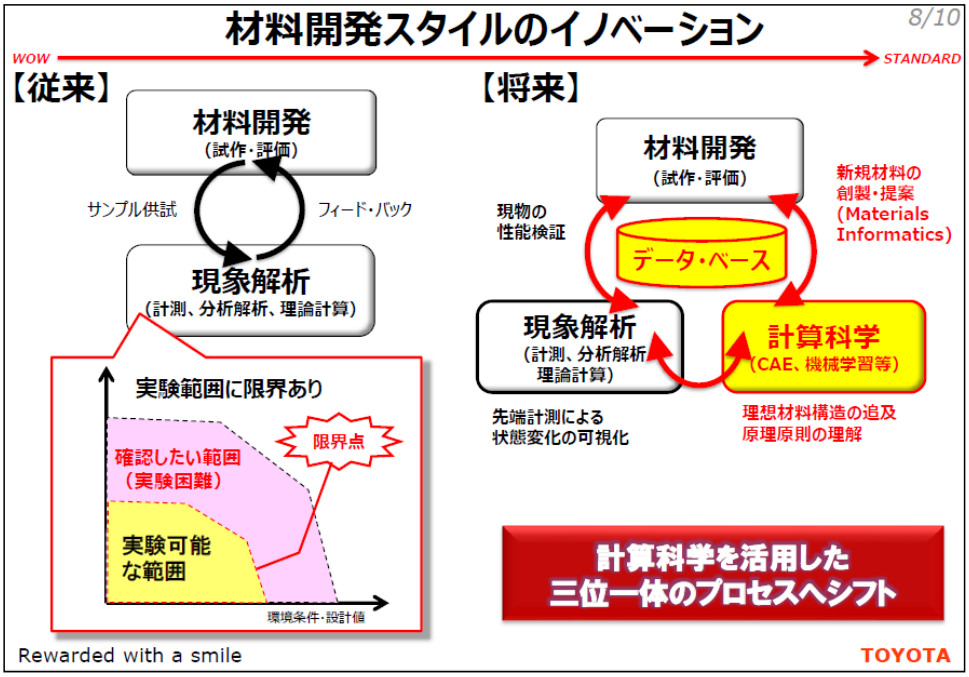


図 3-3-4

図 3-3-4 に示すように、従来は材料開発と現象解析を繰り返すスタイルが一般的であったが、今後は、計算やシミュレーションを駆使して大量のデータを解析することによって材料の試験データをビッグデータ化し、そこにインフォマティクスを導入した材料開発を促進していくことで、スピードアップと新材料創生にトライしていきたい。

しかしながら、現状では非構造なデータや非公開の閉じたデータが大半である。そのような使いにくい状態から、データのフォーマット化などしっかりと整理をして社内に限らず様々な方面からデータを集め、使えるデータを蓄積していく必要がある。一方で、非構造なままであるものの、そのようなデータを使いこなすことで、新しい材料を見つけていこうとする取り組みもある。計算科学に対しては様々な期待を持っている。

最近、ニーズ起点のバックキャスト的思考だけではあっと驚くようなことが出来ないのではないかとの危機感を持ち始めている。そこで、現在ある技術を育て上げ、フォアキャスト的思考回路に基づいて開発を進めることで新たな価値を生み出すことも重要ではないかと考えている。その一例として、最適なナノ構造設計を実現することで、新規機能や性能・信頼性の向上を実現できないかという検討を開始している。

最後に、これまでの顧客ニーズや技術の壁を超える高付加価値の新しい車を実現したいと考える中で、車を構成している主なパーツはほとんどが材料技術で成り立っており、材料技術のブレークスルーこそが新たな価値を生み出す源泉ではないかと感じている。

【質疑応答】

Q：接着剤の性能保証が一つのキーとのことだったが、多くの破壊は溶接部の疲労が原因である。溶接部の疲労特性は何年も評価をし続けないといけない。この時間的な問題は、接着でも同様ではないかと想像するが、時間を加速する方法や考え方はあるのか。

A：その問題に関して社内では接着メカニズムも含めて検討している。メカニズムをしっかりと理解した上で、リスクをどれだけとれるかをきちんと説明することが重要だと考えている。

Q：接着の長期間の特性に関して、ビッグデータを使いながらデータ科学で予測することは可能なのか。

A:シミュレーションの活用は積極的にやっているが、どこまで信用していいのか、現状でははっきりとした答は出ていない。いまは地道に積み上げている段階。

Q：フォアキャストというメッセージの意味、どういう期待を持っているか教えてほしい。

A：変化が大きい時代になり、新しいことをスピーディーにやらざるをえなくなったことが背景にある。自動車関連の人だけではバックキャスト側からの新たな発想を出しにくくなっており、フォアキャスト側からのアプローチで新たな方向性が見えてくるのではないかと考えている。

3．4　半導体実装で求められる材料機能―接合界面創成技術―

須賀　唯知（東京大学）

本日は、半導体実装で求められる材料特性というタイトルで、なかでも特に重要となる接合についてお話したい。

実装というとはんだ付けと思われがちであるが、それは違う。実装とは、様々なコンポーネントを機能的に組み合わせる、あるいは最適化する実体化の指標である。また、最適化の中には、空間的・機能的な最適化に加えて、時間的な最適化が含まれる。これは、リサイクルあるいはライフサイクルというような製品の時間を考えた様々な機能の変化まで考慮した組み立てであり、今後ますます重要になるであろう。

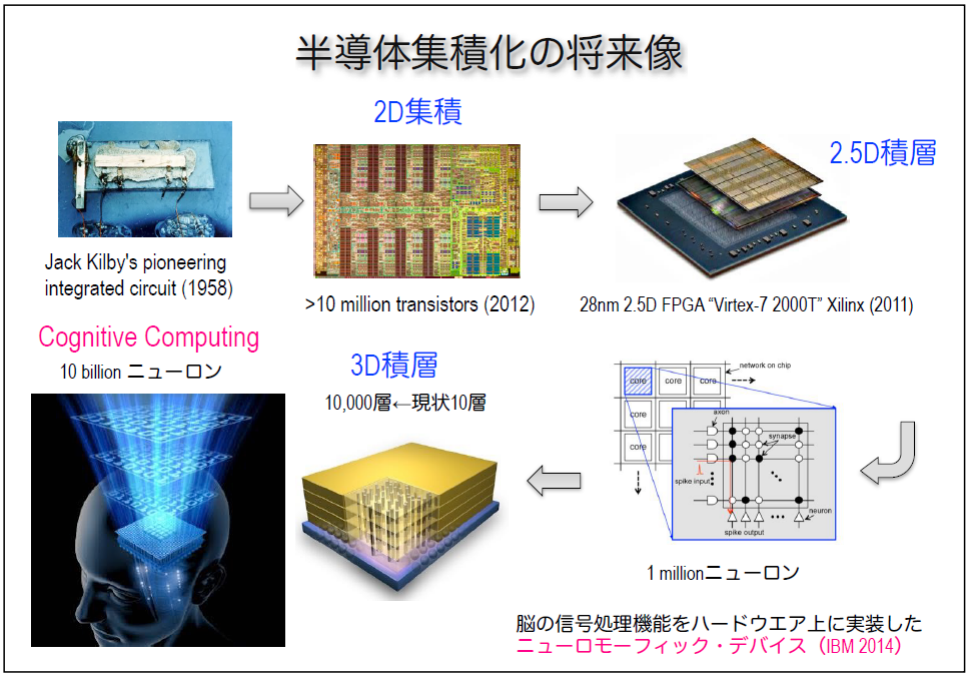


図 3-4-1　半導体の将来像

図 3-4-1 に半導体の将来像を示す。半導体は、1958 年、Jack Kilby のトランジスタができて、それが 2012 年には 10 million の集積化まで二次元的には実現された。限界が見え始めた領域まで来たため、最近は三次元化に進もうとしている。しかし、ここにはコストの壁が存在し、モバイル関係ではハイエンドも全部 2.5 次元(2.5D)という中途半端な積層で動いている。IBM も言っていることだが、認識と計算と自律が共生した Cognitive Computing が将来的には重要となろう。つまり、人間の頭脳を目指すということである。そのためのニューロモーフィック・デバイスも開発が進められており、現状では 1 million ニューロン相当を想定したデバイスが試作されている。しかしながら、実際には人間の脳は 10 billion の集積が必要であり、実用にはまだ遠いと言わざるをえない。

現在、二次元的な集積は行き詰まっているため、三次元方向に進むしかないが、そのためには 1 万レイヤーを積む必要がある。企業で実現している技術は 10 層積むレベルであり、その 3 桁上の積層を実現しなくてはならないことを考えると、将来的には非常に微細かつ信頼性の高い接合技術がどうしても必要になる。

半導体実装に限ると、世の中の状況はIoTの機器が増えていき、もうすぐ5Gの通信も始まり、そして4K、8Kの映像ストリーミングも始まることが想定され、必ずビッグデータ処理が必要である。自動運転を考えると高速のイメージング処理も必要になるであろう。ネットワークの高速化で60 GHzに対応する超高速デバイスや、SiCやGaNなどのパワー半導体も必要になる。スマホもサーバも端末が高速になることで、これらを含んだIoT機器をさらに使いやすくするためにはMEMSのようなセンサーやマイコン、さらに電源系もすべて集積した非常に小さなデバイスへのニーズが高まるのではないか。そのような状況に対して、現状では技術が追いついていないのである。

2.5Dと言われているものの実態は、積層できるところは間にシリコンのインターポーザーを入れて、メモリやDRAMなどは積層してロジックと組み合わせている。これでハイエンドパフォーマンスの高速のパッケージをつくるというのが今のトレンドである。既にもうこのインターポーザーがコスト高であることや十分な信頼性が得られないという課題が顕在化しており、2.1Dというインターポーザーを外して何とかつなぐということや、ビルドアップで有機物の基板あるいはガラス基板の上につなぐことが行われている。また、間にシリコンのミニインターポーザーをはさんで二次元的に並べるということが現在行われている。

その中の一番キーとなる接続部分は、実ははんだ構造である。一番小さいものは、パッドピッチ40μmで、Cuのピラーをチップ側に立てて、SnAgのはんだを乗せ、反対側がCuの配線になっており、拡散を防ぐためのメッキ等を施して溶かしている。溶かして反応させるためどうしても変形してしまうという課題があり、限界に近づきつつある。

接合技術が最も進んでいるのは、ソニーのイメージセンサーである。ウエハの張り合わせでつくられているが、ウエハにはSiO_2の絶縁膜とCuの電気的な接続部分が1平面上になっている。非常に進んだ技術と言えるが、実は親水化結合というオーソドックスな手法を用いている。Cuをつける必要があるため、350 ℃くらいの加熱をしてウエハを積層している。

パワーエレクトロニクスは、独自のモジュール構造がキーになっている。モジュールとは、半導体とその周辺の回路と入れ物までひっくるめたものである。たとえば富士電機の最新のモジュールでは、シリコンベースからAll-SiCのモジュールに変わっており、接続構造もどんどん変わっている。基本的には高温で動作するパワー素子で集積化が進んでジャンクション温度も高くなる。そこで材料もどんどん変わる。従来の低温のはんだから、温度が高くなるということで高温はんだに進み、高温はんだでも難しくなったため、銀のナノペーストあるいはシンタリングつまり焼結材料のほうに移りつつある。この技術に関してはドイツが先行しており、日本のメーカーはいかにキャッチアップするか、あるいはこれを乗り越えていくかという局面を迎えている。

我々は、チップのボンディング部分を溶かしたり、あるいはウエハのボンディングで加熱していることが全ての問題のネックではないかと考えた。つまり、もともとは単にチップから外側へインターコネクションするだけの機能であるため、全て銅でつないでしまえば何も起きないということを常に念頭においている。

接合方法には、はんだ、熱圧着やウエハの親水化処理、プラズマ活性化処理などいろいろある。基本的には全部加熱する必要があるため、加熱しないと接着しないという思い込みがある。しかし、加熱をすると金属間化合物が生成してしまい、そこを基点にして脆くなり壊れてしまう。また、熱膨張係数が違う場合は、加熱してボンディングしても冷やすと収縮して割れてしまうとい

う問題も起こりうる。

携帯電話の中には 10 個や 20 個どころではない数の表面弾性波フィルター（SAW フィルター）が入っているが、これらは温度補償をしなくてはならず、ニオブ酸リチウムとシリコンの張り合わせ積層構造になっている。この 2 つは熱膨張係数が大きく異なり、高温での普通の張り合わせでは割れてしまうため、常温接合が使われ始めている。これが界面創製技術の一つのコアである。

はんだでボンディングすれば必ず金属間化合物ができることと、接合部が微細化しているためはんだでは繋ぐときにはみ出すという課題がある。接合部が大きくなると、この金属間化合物の脆い部分も大きくなる。その課題を克服するために、焼結や液相拡散接合というものが出てきた。しかし、固体のままでの接合へ変わっていくのであれば、間にものをはさむのではなく、ダイレクトに直接接合しようという考えが出てきた。

固体と固体をダイレクトに接合することが出来ることを示すため、図 3-4-2 に簡単なシミュレーションの結果を示す。ダイヤモンドの 001、100 面に対して、近づけていくとダイヤモンド構造が壊れて自然に結合する。

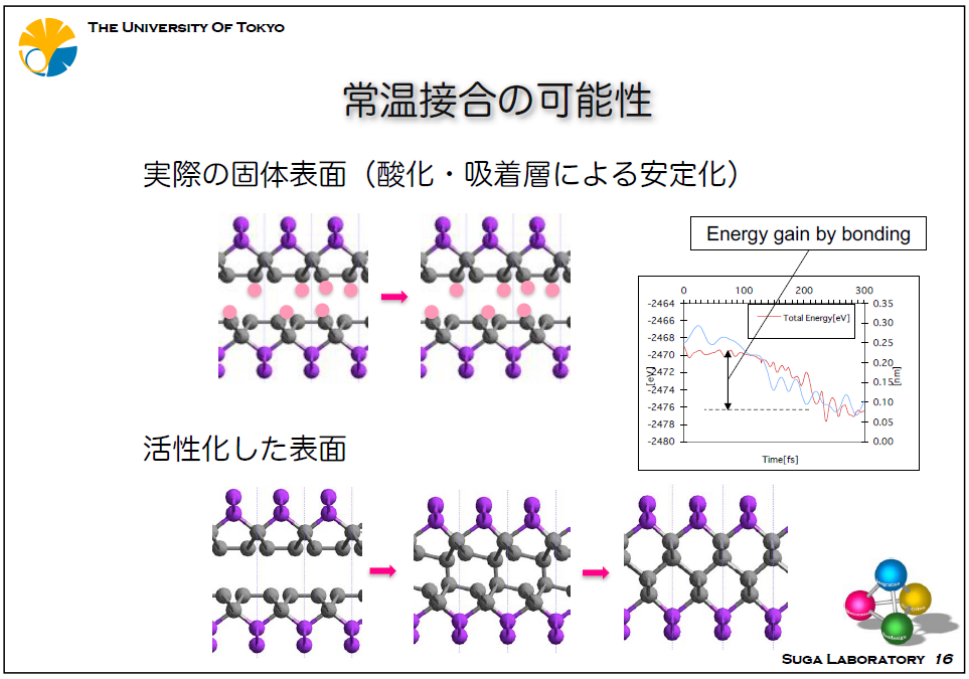


図 3-4-2

つまり、２つのダイヤモンド構造が離れているよりも、結合した方がエネルギーが低いため、自然にくっつくのである。実際にどれぐらいの活性化エネルギーが必要かは詳細な解析を行わないとわからないが、近づけるだけのエネルギーで十分と考えられる。固体というものは非常に高い表面エネルギーを持っているため、少なくとも金属とか半導体のようにダングリングボンドが出るものは直接接合が可能なはずである。ただ、実際には表面を様々な形で吸着したり安定化したりしている。酸化もするため、とにかく活性化させる必要がある。安定な表面層を除去して非常に活性な面を出すことを出発点にして、非常に活性な面を接触させて接合する。これが室温のプロセスであり、熱を加えずに直接接合することができる。

これまでにさまざまな金属や、金属とセラミックス・ガラス、金属と半導体、あるいはヘテロ

半導体の組み合わせを用いて、実際に常温での接合が実現している。常温でやるプロセスは加熱冷却の必要がないため高いスループットが期待できる。あるいは位置決め精度が期待できたり、反応生成物がなかったり、歪みが生じず、省エネにもおそらく貢献できる。変な化合物ができないことから比較的容易に分離も可能ではないかと感じているが、分離の話は後述する。

このような新しい常温接合の発見は、ものを挟まないで表面活性化をしてくっつけるため、信頼性が高く、歪みも生じず、材料の選択性も高い。ただ、表面を平らにする必要がある。界面をうまく設計すれば耐熱性の剥離も可能である。

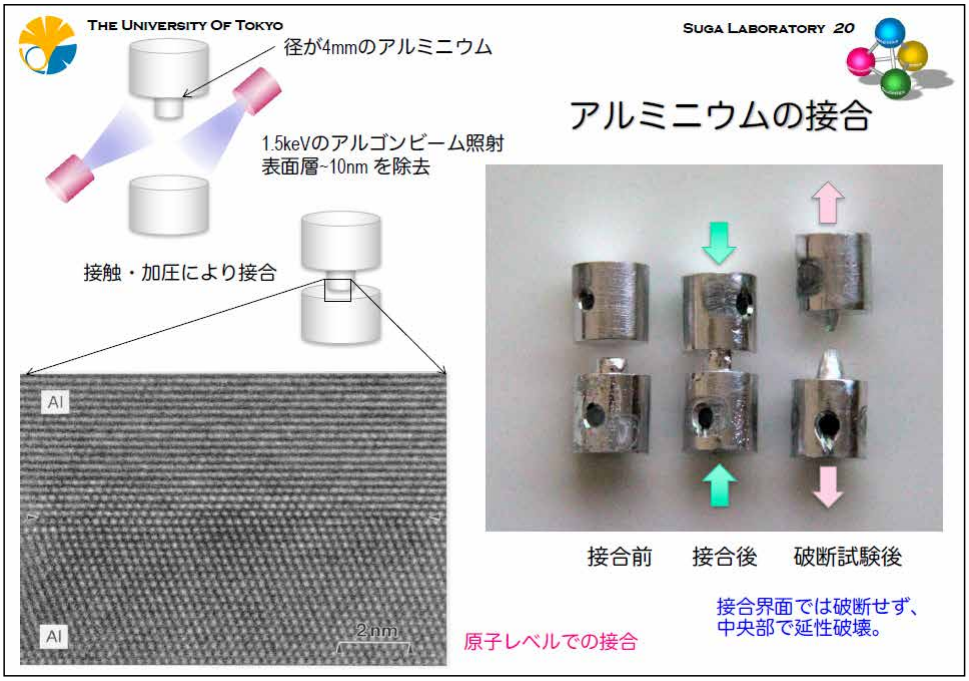


図 3-4-3

実際に、図 3-4-3 に示すようなアルミの接合、さらには銅の常温接合、シリコンの常温接合において、従来のものと遜色ない強度が室温の接合で得られている。

共通のプロセスはイオン衝撃であり、イオンと表面の相互作用、そしてナノメータスケールでの表面の平坦化や改質をきちんと実行する必要がある。この結果生じる表面での欠陥や局所的な拡散、電気的な特性変化を考えれば、欠陥の準位の制御等が課題になる。

既にクラウド材の製造や SAW デバイスのためのウエハ貼合わせ、高温超伝導材料の貼合わせ、そして銅 - 銅間のチップ間接合、MEMS センサーなどには数年以上前から使われている技術である。集光型の積層型太陽電池も同じ手法で積層されている。この積層タイプの太陽電池では界面抵抗を下げることがかなり大変であり、日欧で競争になっている。イオン種を変えたりガスクラスターイオンビームを使うことを提案しているところである。

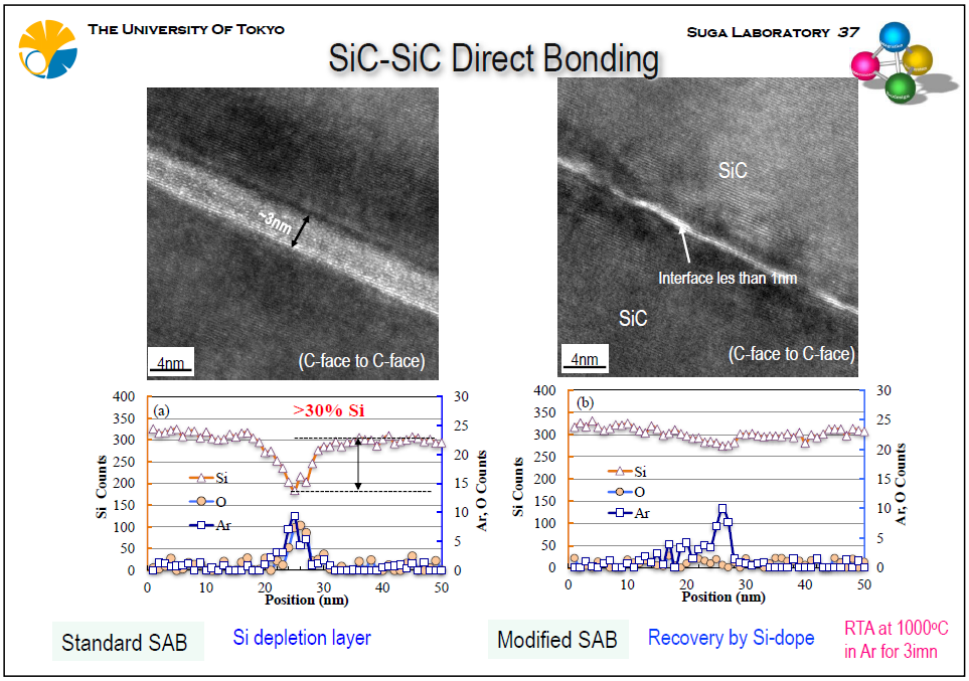


図 3-4-4

金属や半導体は比較的表面エネルギーが高いため活性化しやすい特徴があるが、ポリマーには全く適用できない。また、ガラスは安定なネットワーク構造を持っているため、イオン衝撃を行っても活性表面の寿命が非常に短く、すぐに再構成してしまうため接合はうまくいかない。そのため、薄い金属を表面に 1 層（1 nm あるいは 1 nm 以下）を介在させて接合するという試みをしている。ポリマーの間に、10nm のシリコンをつけてボンディングするという工夫を施すことで、様々なポリマーの接合ができるようになる。

イオンを当てる際、例えば表面を SiC にしておくと、どうしてもシリコンが優先的に除去され、表面にカーボンが露出して強度が落ちてしまうが、図 3-4-4 に示すように、シリコンをドープしながらボンディングするということでリカバリーすることが可能になる。また、ポリマーは接着剤を使わずに積層できるため、フレキシブルなデバイスを積層する際にダイレクトに積層できる。もし接着剤を使って積層したとすると、接着剤層がミクロンの厚みになってしまうため、フレキシブルな基板がミクロン単位で薄いのにもかかわらず厚みがましてリジットになってしまう。したがって、直接接合が必要になるという流れである。また、フレキシブルなデバイスの封止を接着剤で行うことで水やガスが侵入しやすくなるため、やはり直接接合を利用したいという期待がある。

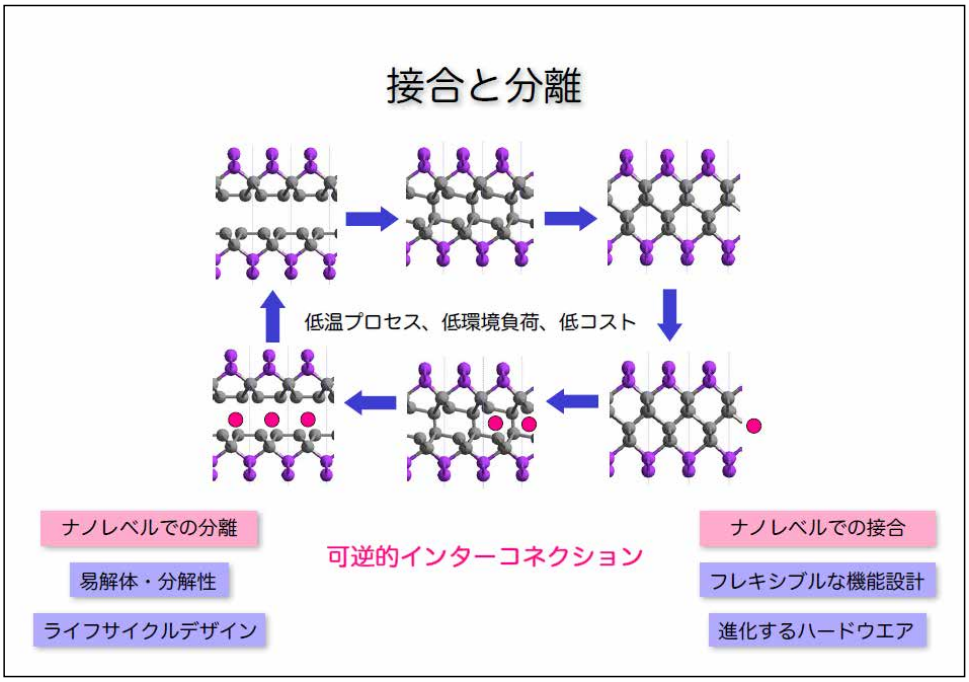


図 3-4-5

ここで、分離について少し述べたい（図 3-4-5）。接合は自然の摂理に従って素直に進めることができる一方で、分離は自然の摂理に逆らう作業であるため、すんなりとはいかない。最近では接着剤や有機材料を使った分離の技術が非常に活発に開発されており、工業的にも使われているものもあるが、無機材料の分離に対してはなかなか良いアイデアがない。無機材料の場合には、高温で何かのプロセスをしてから剥離する事例が多い。例えばリジットな基板の上に薄型ガラスを貼っておいて何かのプロセス後に剥離しようしても、通常は過熱するとくっついてしまって剥がれない。これをどうやって剥がすかというときのアイデアの一つとして、先ほどのシリコンを使うような手法を提案している。他にはポリマーをガラス基板の上に貼っておいて、プロセス後に剥離するというような方法も実現している。

最後に、Cryogenic Bonding と新しい接合方法について紹介したい。室温以下の低温、極低温で接合することである。試みている理由は、室温以下で接合する方法がないからである。例えば、接着剤が使えない、溶接も使えないという状況があった場合に、固体と固体を接合しようとするとその物質が持っている活性の表面を使うしかない。では、どこまで温度を下げられるのであろうか、ということに興味がある。既に液体窒素温度ではしっかりと付くことは確認できている。

この手法をどこで使うのかというと、低温で動作するようなデバイス、例えばカミオカンデの中にある部材は、サファイヤを接合して作られている。通常は高温でしか接合できないため、実際に使う極低温との間には大きな温度差がある。接合の際に結晶の方向が異なると、それだけで温度差によって歪みが生じてしまうため、ここでは、結晶の方位をきれいに合わせて大変な苦労をしながら高温接合をしている。ここに低温接合が適用できればどういう結晶方位でも、どんな材料が組み合わされていても歪まないように作ることが可能になる。また、ジョセフソンコンピュータや次の世代のコンピュータで低温動作というものが最近よく議論されているが、そこでも実装構造にはんだを使うと極低温では信頼性自体が確保できなくなるため、低温接合が必要になるのではないかと感じている。

【質疑応答】

Q：同じ材料で常温接合をするときには、接合面が固くなるというイメージがある。今回の技術では残留応力が残らないというのもあると思うが、柔らかい接合面をつくって破壊することを避けるという技術としても使えるものなのか。

A：使える技術である。特に異種金属の場合には間に必ず化合物ができているため、極端に曲げるとその接合面で大体破断するが、常温接合ではそのような問題も起こらない。

4. メカノファンクショナルマテリアルのトレンド・課題・将来展望

4.1 高分子機能材料の精密制御と新機能付加の可能性

田中　敬二（九州大学）

複合材料の性能を上げるには界面がキーになる。高分子の複合材料の歴史を振り返ると、Dunlop によるゴムのタイヤの開発から始まり、ガラス繊維の強化ポリエステル、そして PAN 系の炭素繊維、それを航空材料に応用してきた歴史がある（図 4-1-1）。また、分子複合材料という、樹脂の中にアラミド繊維といった剛直な分子を分散させるという概念がうまれ、10 年程経って自動車へ使われてきたという経緯がある。先の伊藤耕三先生のお話でもあったが、最近では北大のグン先生がつくられている、ゲルの中に繊維を入れて強度を上げたようなタフな新しい材料が出てきており、輸送機器にも使われるようになっている。

図 4-1-1

自動車にも複合材料が多く使われ始め、BMW の i3 という電気自動車ではボディに使われている。世界的に燃費規制が強化されているが、軽量化はその 1 つの解決策である。ここをカバーするためにマルチマテリアル化、特にポリマー、樹脂のタフな材料を使っていきたいというのが世の中の流れである。図 4-1-2 は自動車の中に樹脂がどれだけ使われているかを示している。時代とともに増えており、2030 年にはかなりの部分になることが予測されている。

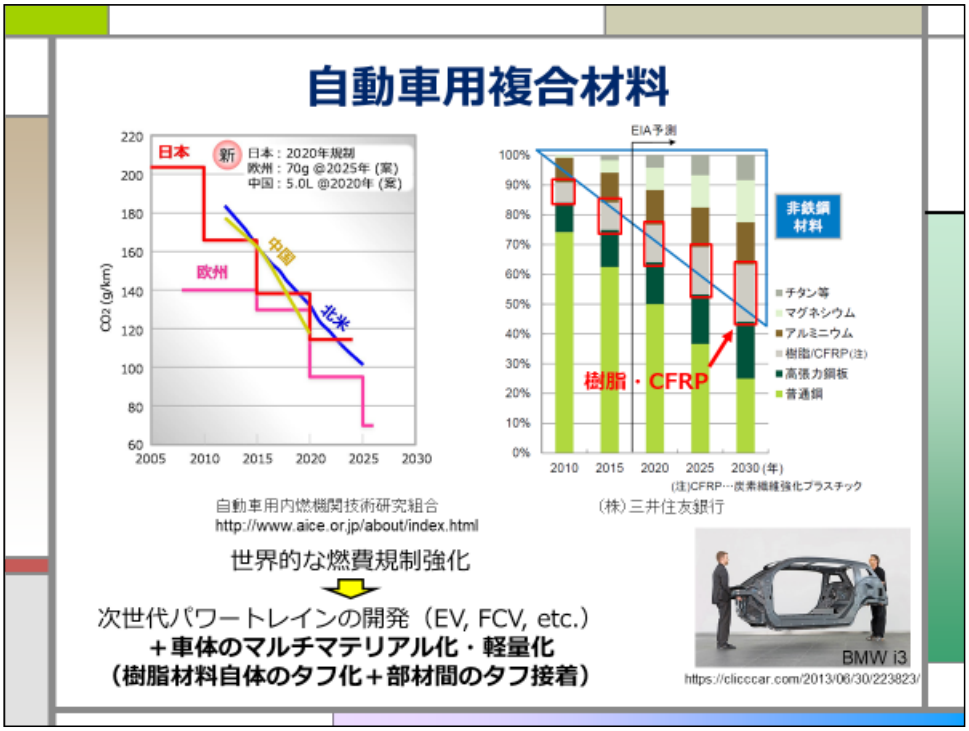


図 4-1-2

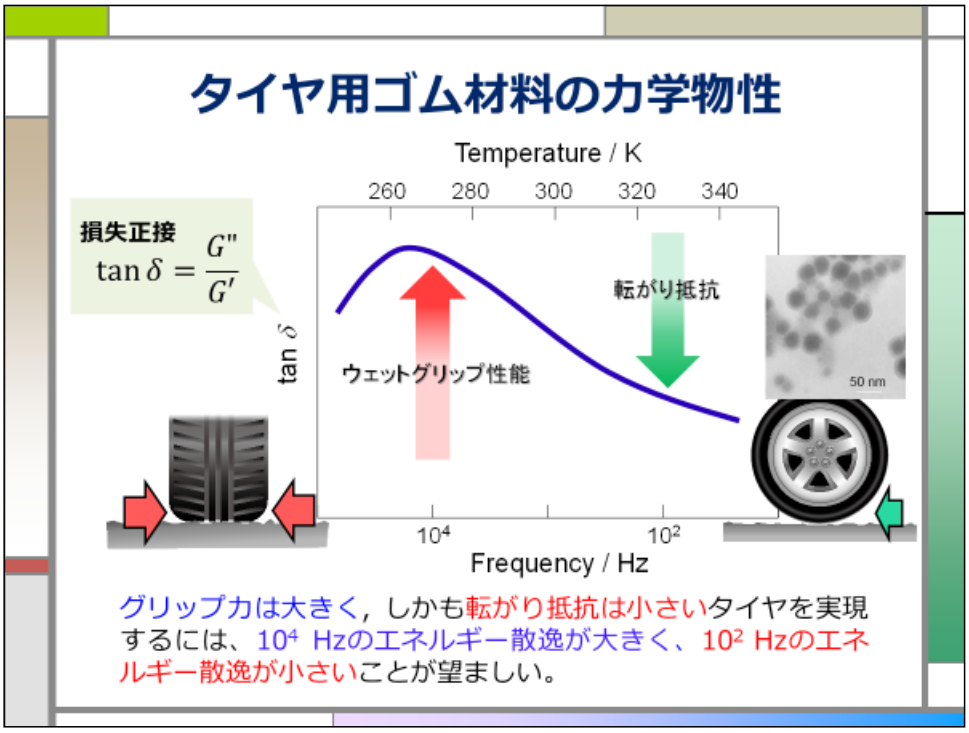


図 4-1-3

燃費を考える上でタイヤは非常に効いている。自転車に乗るときに空気が入ってなかったらどれだけ力が必要になるか想像できると思うが、実際にタイヤの性能は燃費の 17%まで影響を及ぼすと言われている。タイヤが地面に接している面積は葉書１枚分である。この葉書１枚分が４つあって、全部の重量を支えている。通常、摩擦が高ければ当然グリップ性能はよくなる。また、

燃費を上げるためにはエネルギーロスがない方が良い。したがって、我々はタイヤに無理難題を要求していることになる（図 4-1-3）。

タイヤの中では、樹脂の中にカーボンブラックが分散している、あるいはシリカの微粒子を混ぜている。図 4-1-3 の写真でフィラーの周りに若干色が違うところがある。これが界面層であり、ネットワークを形成して力を保持あるいは性能を出している。

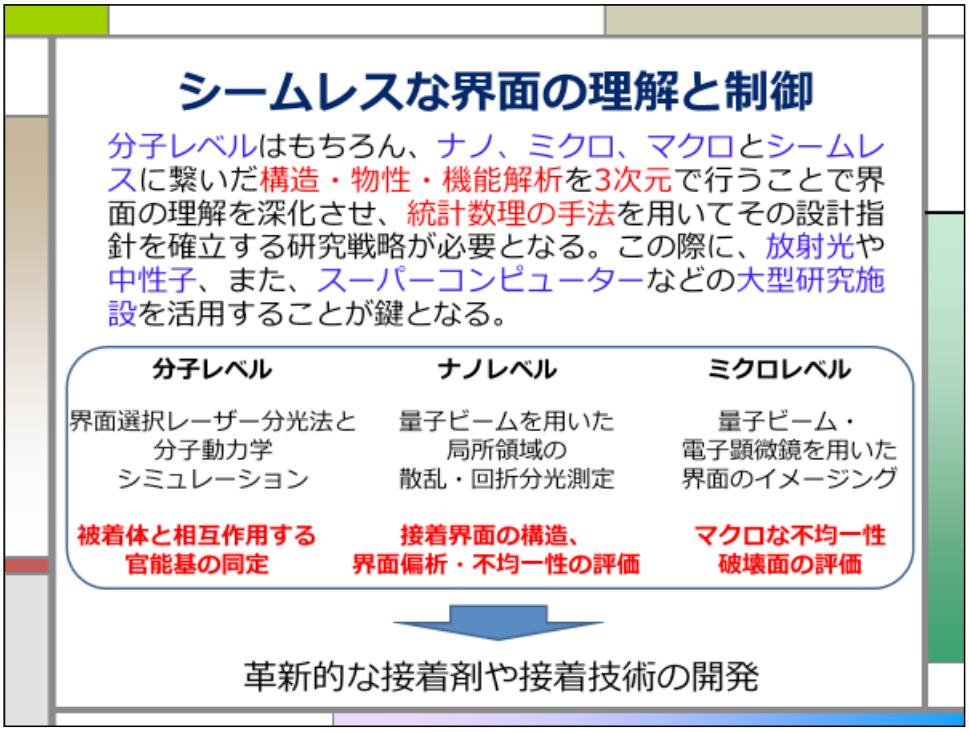


図 4-1-4

複合材料の性能をさらに飛躍的に伸ばすためには、界面を理解して制御することが非常に重要である（図 4-1-4）。

界面では、分子レベルはもちろん、メゾスコピック、ミクロ、マクロとシームレスにつないでいき、構造・物性・機能を三次元で考える必要がある。当然膨大な量のデータになるため、統計数理の手法などを使って考えていくことになる。界面には見えないところがあるが、これを見る１つの方策として放射光や中性子、またスーパーコンピュータ等を使った新しい手法が提案されている。分子スケールのところでは、我々は材料の中に埋もれた界面をレーザー分光で直接見るということをやっている。また、ナノレベル、ミクロレベルでは、様々な方法があるが、量子ビームが用いられる。昨今イメージングは非常に有力なツールになってきている。

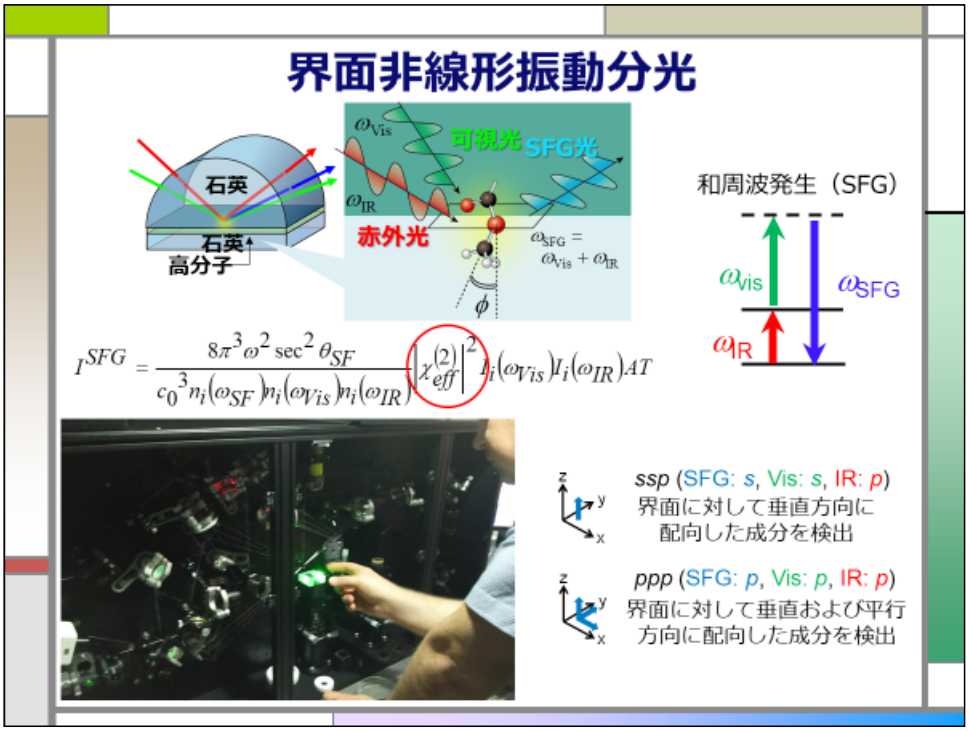


図 4-1-5

界面計測について、我々の分子領域の結果を示す（図 4-1-5）。複合材料において、フィラーにポリマーが付着したときに分子がどう動くかを考えている。非線形の分光法を用いるが、２つの光を入れて、出てきた光を見て分子がどっちに向いているかを解析している。光が３つあるため、偏光を使うと見たい官能基が界面でどっち向きに何度傾いているということがわかる。このような測定をナノ、ミクロ、それからマクロにつないでいき、最終的な材料のパフォーマンスがどうなるかというようなことを考えていきたい。

モデル高分子での例を示すと（図 4-1-6）、輪ゴムの主成分であるポリイソプレンというポリマーのメチル基がどっち側にどの程度傾いているのかを調べている。スペクトルが 5 つあるが、それぞれつくり方が違うサンプルである。１つはソルベントキャストというポリマーの溶液をつくって基板の上に落として固める方法である。もう一つはスピンコートという基板を回して溶媒を飛ばす方法で、それぞれスペクトルの形が違う。スピンコートの回転数（rpm）を上げていくと大きくなるピークがあるが、これはメチル基が回転により、面内で並んでいくということを示している。どちらに何度向いているかもシミュレーションと実験結果を合わせて決めることができ、つくり方によって無機フィラーの界面でポリマー鎖のコンフォメーションを制御できることになる。

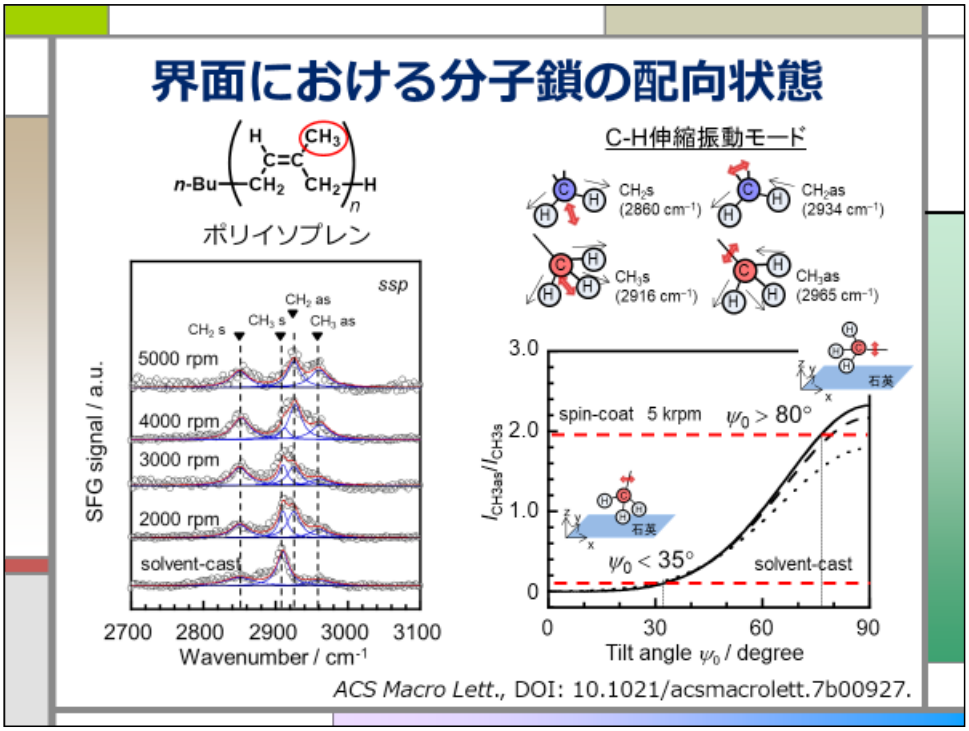


図 4-1-6

一方で、ポリマーがどのように動くのかということも重要な情報である。温度を上げながらこの実験を行うと、どこかの温度で配向がなくなる。図 4-1-7 では、335K 付近で強度が低下していることがわかる。ゴムであるポリイソプレンが柔らかくなる温度（ガラス転移温度）は 211K であるが、これが無機のフィラーと接すると 100 度以上も高くなっていることになる。

図 4-1-8 のグラフは、シリカ微粒子をポリイソプレンに分散させた試料を力学的に引っ張って弾性率を測定した際の結果である。温度を上げていったとき、界面が動く温度で貯蔵弾性率 G’ の挙動が劇的に変わっている。右の模式図で青いところがポリマー、白い丸がフィラーであるが、フィラーの周りに拘束された分子鎖があり、これらがくっついてネットワークをつくる。このネットワークが応力を支えていると考えると、この青の濃いところが動き始めると、ネットワーク構造が変わり、最終的にはマクロな物性が変わるということをこの結果は示している。

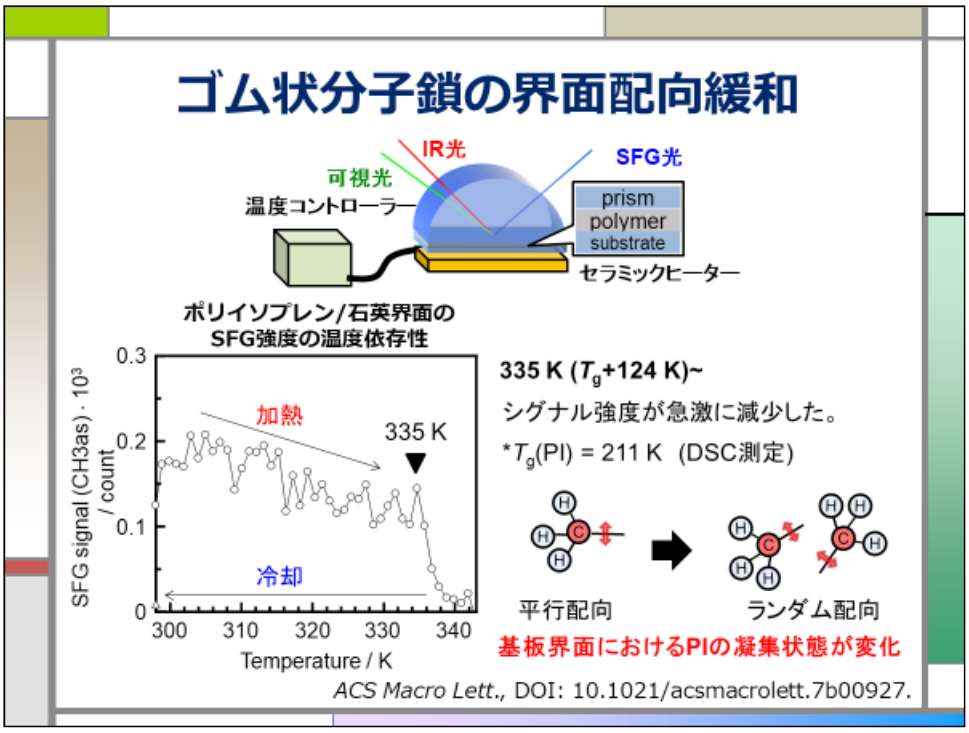

ゴム状分子鎖の界面配向緩和
IR光
SFG光
可視光
温度コントローラー
prism
polymer
substrate
セラミックヒーター
ポリイソプレン/石英界面の
SFG強度の温度依存性
SFG signal (CH3as) · 10³ / count
加熱
335 K
冷却
Temperature / K
335 K (Tg+124 K)~
シグナル強度が急激に減少した。
*Tg(PI) = 211 K (DSC測定)
平行配向
ランダム配向
基板界面におけるPIの凝集状態が変化
ACS Macro Lett., DOI: 10.1021/acsmacrolett.7b00927.

図 4-1-7

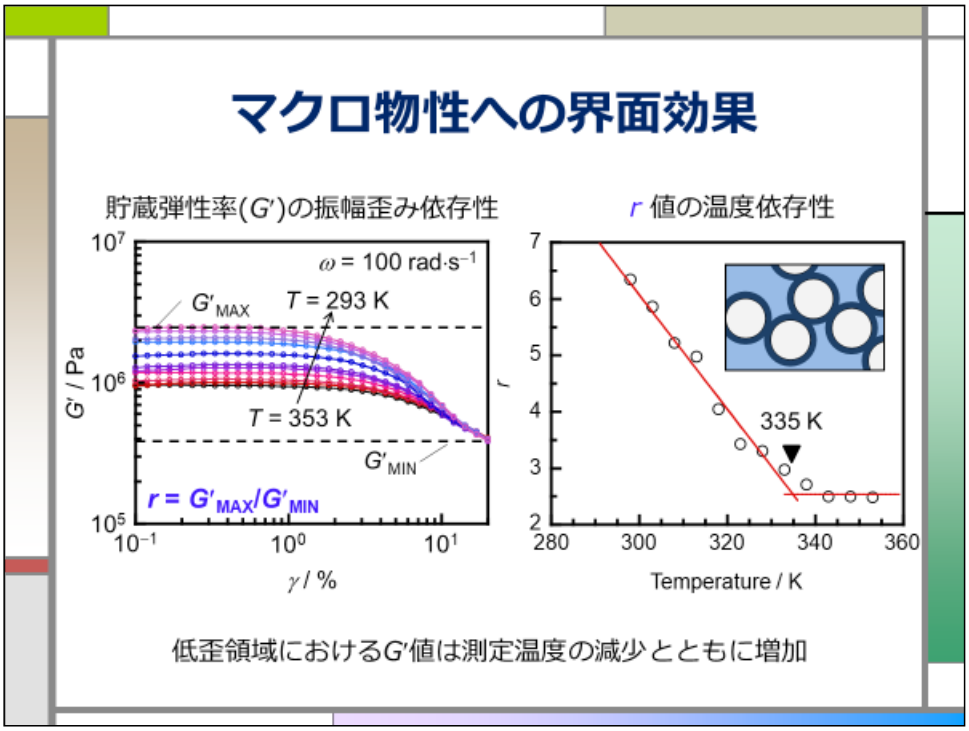

マクロ物性への界面効果
貯蔵弾性率(G′)の振幅歪み依存性
ω = 100 rad·s⁻¹
G′MAX
T = 293 K
T = 353 K
G′MIN
r = G′MAX/G′MIN
G′ / Pa
γ / %
r 値の温度依存性
335 K
r
Temperature / K
低歪領域におけるG′値は測定温度の減少とともに増加

図 4-1-8

先に分子の配向について示したが、実際にはメチル基が上を向いているか下を向いているかは現状ではわからない。いろいろな状況証拠から上向きか下向きかを言っているが、界面の配向状態を絶対的に決めるために、光学系を変えたり数学処理やMDの計算をやって界面近傍の配向を見ている。大型放射光施設や、J-PARCの中性子の利用、それらから得られた結果に対してスーパーコンピュータを用いて解析する必要がある。放射光に関しては現在、企業が集まった連合体を組んでおり、ビームを使った解析を進めている。データはたくさん出ているが、マテリアルズ・インフォマティクスはポリマーでは非常に難しい。なぜなら、常に非平衡であり、複雑な高次構造、階層的な構造・物性をもつため、第一原理計算が使えないということがある。したがってスパース推定などの多変量解析により重要な変数をある程度見積もり、それからマテリアルズ・インフォマティクスへと展開することを考えている。

今後の展望だが、これまでの複合材料は高分子にフィラーをいれた構造材料という、いわゆるパッシブなイメージである。これを将来的にはフィラーを分子性の機能を持ったもの、例えば日本が強いと言われているナノカーボンや、半導体高分子といったものを使って、構造材料にさらに機能を持たせる、界面に機能を持たせる、ということを考え、さらに自己修復性、環境応答性、といったいわゆるスマートとかインテリジェンス性を材料に入れ込んでいきたい。超工学高分子という言い方をしているが、イメージとしてはエンジニアリングプラスチック、スーパーエンジニアリングプラスチックの複合材料版という意味である。

【質疑応答】

Q：フィラーの分散性やそれによって現れる材料の性能を考えると、界面が大事であることはもちろんだが、一方でゴム末端の官能基がどのくらいシリカと反応しているか、については界面だけなく色々な要素が効いているのではないか。最終的に先生の研究を進めていったときに、トータルの解釈ができて、設計指針のところまで持っていけるような議論になるのか。あるいは、なかなかそうはいかない、ある側面だけなのか。その辺のところの展望、考えを聞きたい。

A：今まではパーツ毎の研究だった。これを全部まとめて考える時代にきている。その中では界面を解析していくことが重要だと考えている。これは膨大な量になるので、多変量解析で重要な変数を絞り、マテリアルズ・インフォマティクスへ展開することが必要である。粒子同士がどのように集まり、それがさらに大きなネットワークをつくり、さらにどうなっていくのかは、分光だけではわからず、散乱も見なくてはいけない。この散乱も非常に広い範囲のデータをとる必要がある。その全部をとって見たときにどうかという議論はこれからの話と考えている。

Q：界面の状態は今どこまで見えているのか。例えばセラミックスとポリマーがくっついているときに、本当にSiOCのような結合ができているのか、CHで単にファンデルワールスでくっついているのか、見える状態なのか。

A：無機の表面と反応するようなグループの官能基がどうなっているのかを知るにはどこを見ればいい、というようなことはわかっている。ただし、それがまだ断片的な情報なので、これをつないでいきたい。

4．2　分子を使った機能接着と分子レベルでの力の理解

齊藤　尚平（京都大学）

工業接着は産業的に非常に重要であり、今後も接着は市場が拡大傾向である。特に機能接着が競争力の強化の鍵を握っていると言われている。

機能接着といっても用途によって求められる接着機能は非常に様々である。例えば硬いだけではなくて、耐衝撃性が必要である、あるいは異種材料接着や剥離性、易解体性、リワーク性など、多くの接着機能がある。すべてを同時に満たす材料は作れないため、用途に合わせた接着技術が必要になる。

一方で、アカデミアからは新しいシーズとして光技術が出てきた（図 4-2-1）。これは光軟化あるいは光流動化と言われる技術で、日本、ドイツ、アメリカなどで取り組まれている。

注目すべきは、光で固いものを柔らかくすることによって接着を剥がすという発想が意識されるようになったことである。ダイシングテープのように光硬化で剥がすものがもともとあったが、全く剥離の機構が異なり、より幅広い用途に期待がある。

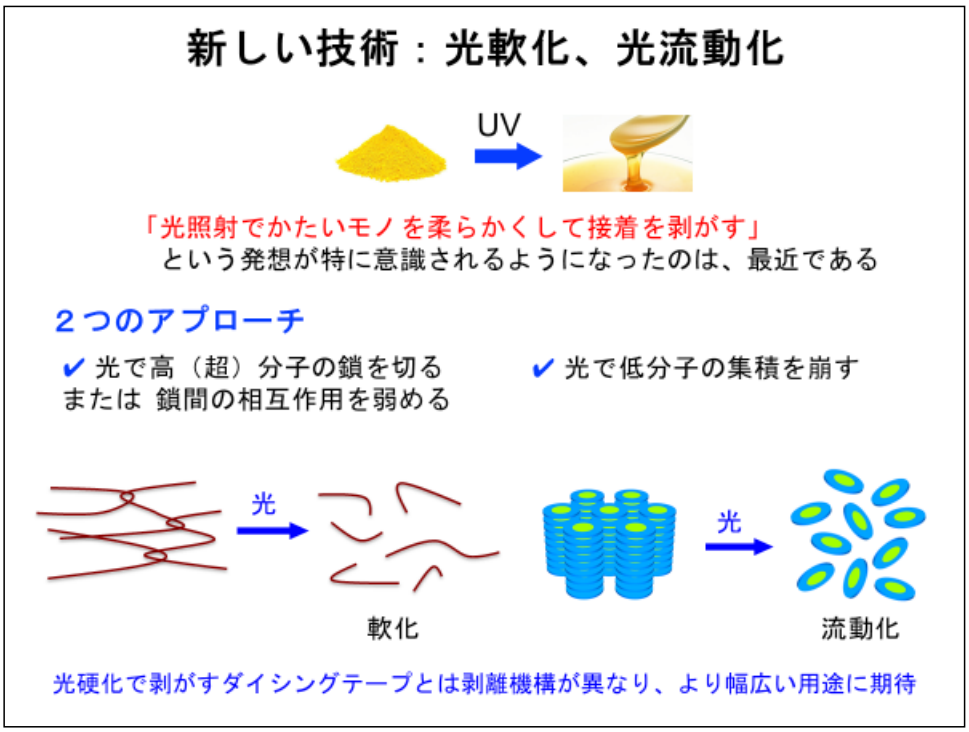


図 4-2-1

研究開発には主に２つのアプローチがあると考えている。接着は今までは高分子接着が常識だったため、いかに高分子に機能をつけていくかという発想になる。例えば光で切断されていくような高分子の鎖をつくると光を当てると軟化する。もう一方で低分子を接着に使えないかという考え方がある。もともとバラバラなので、光を当ててバラバラに崩すのは簡単だが、今度は逆に凝集力を高くして破壊しづらくするところに課題が出てくる。

そこで我々がつくったのが図 4-2-2 に示す液晶化合物である。耐熱接着性が高く、ドライヤーで 100℃以上まで加熱しても 1MPa 以上の接着力を持つ。一方で剥がしたいときは LED ランプを当てると数秒で剥がすことができる。

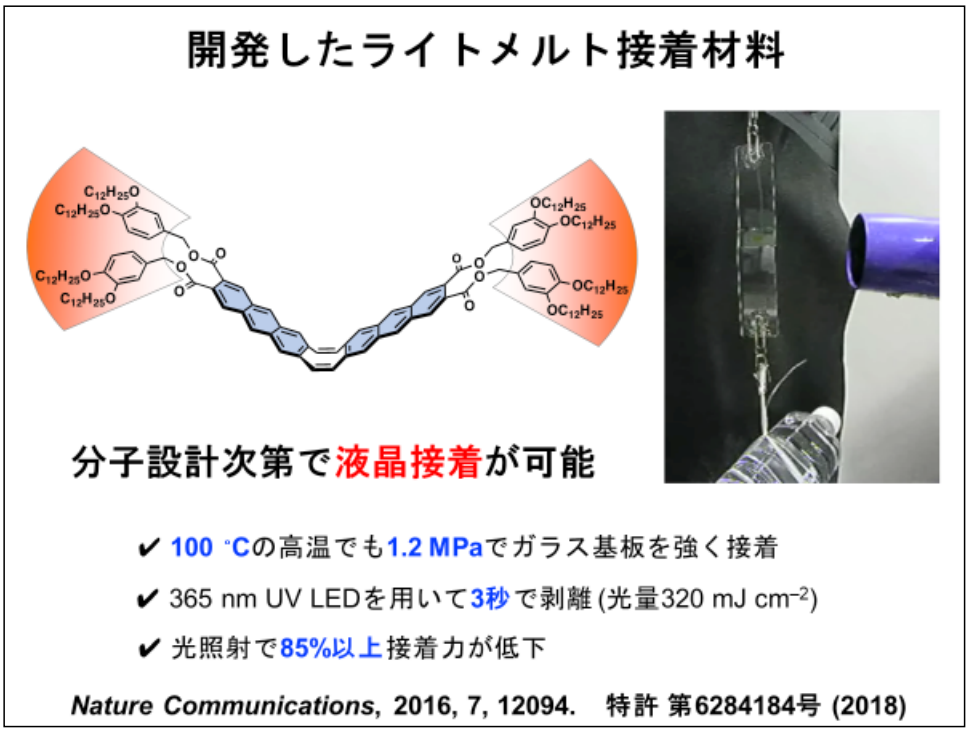


図 4-2-2

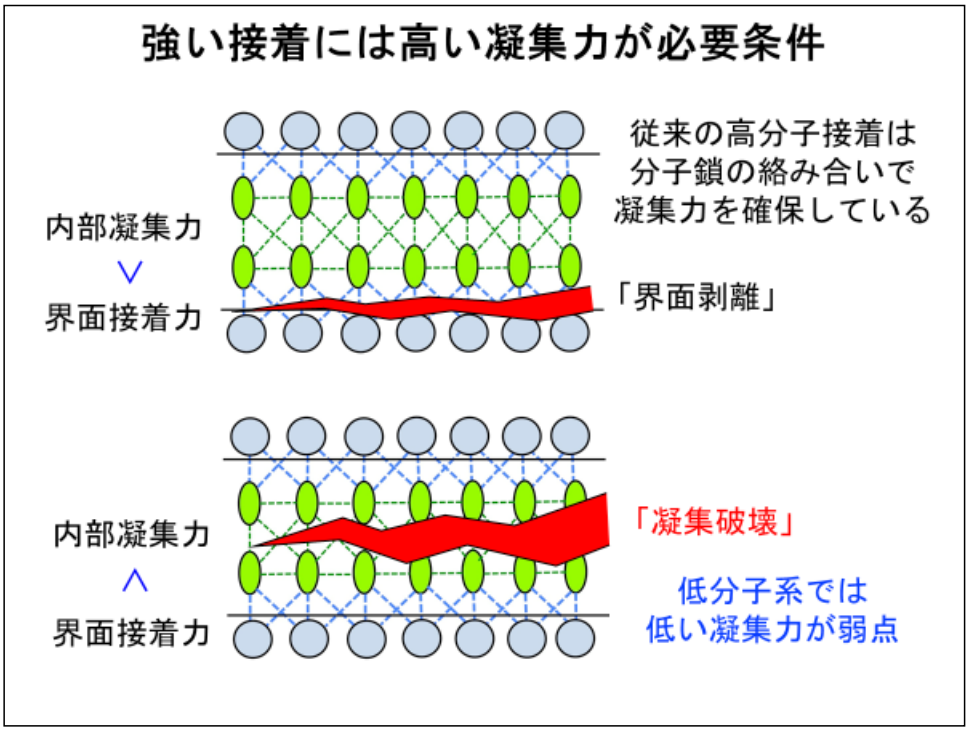


図 4-2-3

特筆すべきは、高分子ではなくて液晶の低分子を接着材料として用いたことである。接着と一言で言っても、界面の接着力だけではなく、内部凝集力も高くする必要がある（図 4-2-3）。従来の高分子接着は分子の鎖同士の絡み合いによって内部凝集力を高くしているため、うまくつくれば界面剥離が起きる。一方で、低分子を接着に使おうとしても鎖の絡み合いがないため、分子間相互作用をいかに強くするかということが非常にネックになる。低分子では弱い凝集力が弱点だったが、それをどうやって克服するか、いかに分子間相互作用を強くするかが課題であった。

この材料の接着のメカニズムは次のように考えられる。V 字型のいわゆるπ共役分子骨格と柔軟な長いアルキル鎖の部分を組み合わせた分子設計でカラムナー液晶をつくる。すると、加熱してカラムナー液晶相が発現しているときは柔軟なアルキル鎖は熱揺らぎで激しく動く。中央の V 字型の骨格はユラユラとは動くが、カラムナーパッキングは保たれているため、これが高い凝集力につながっている。一方で、光を当てるとこの分子は平面型に構造を変えた後に光 2 量化することがわかっている。光 2 量化体の形が丸みを帯びており V 字型のカラムナーパッキングにそぐわないため、分子集積構造がバラバラと崩れて材料自体が流動化し、バルク材料としての接着力は落ちる。つまり、ここでやっていることは分子、しかもパッキングのπスタッキングの距離などを 0.01 nm スケールで設計することで、光剥離というバルク機能を出していることになる。

見てきたかのように説明したが、本当にそれは見えるのかということは課題である。いろいろな技術が発展してきており、例えば時間分解電子線回折、あるいは時間分解 X 線回折という方法が急速に発展している。これによって回折像をピコ秒オーダーで撮っていき、それを最後動画に起こす「分子動画」という技術がある。実際にこれによって液晶中で平面化して、さらにそれが回転する様子が 1nm 分解能オーダーで観察できている。

先ほどの材料では、アントラセンの光 2 量化という昔からよく知られている反応をうまく使っているが、加熱すると元のモノマーに戻るので、1MPa 以上の接着力の状態を何回か繰り返し復元することができる（図 4-2-4）。初めはリサイクルと言って紹介していたが、企業の方たちと話すと、むしろリワーク性という言葉がフィットすると言われた。つまり、1 回失敗した接着をやり直す、それによって接着しようとしていた部材を捨てずに済むということである。

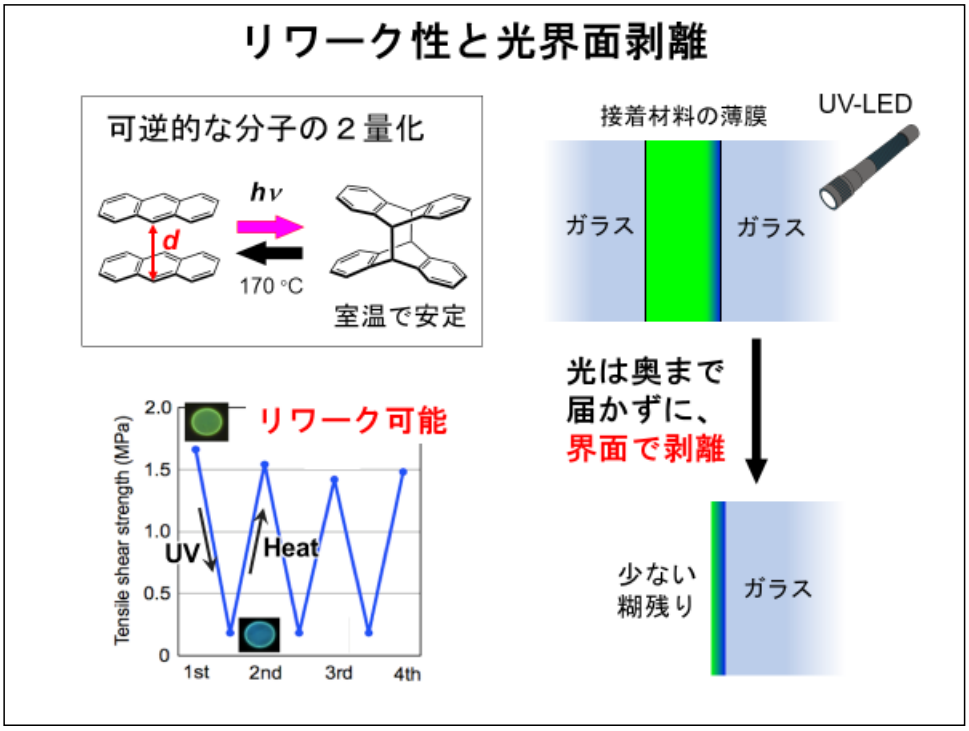


図 4-2-4

この光剥離の興味深いところは、光は材料の中までは通っていないということである。光硬化樹脂の場合には、中まで固まらないという問題になるが、光で剥がすことを考える上ではむしろ界面さえ溶けてしまえばすぐに剥がれる、しかも剥がれた後に糊残りも少なくなるため、むしろ好ましいということが特長がある。

分子間相互作用と凝集力の話をしたが、一方で、界面はどうなっているのかと必ず質問される。凝集力のほうが弱かったのでそこにフォーカスしたが、界面の話になるとやはり難しい。いまだに高分子の基礎科学、高分子の教科書では界面の接着の原理はわかっていないと明記されている。そこを研究している人はたくさん存在し、最先端の知識があると思うが、余り共有されていない。今後は分子間力と接着力の乖離というところについて考えないといけない。

力を見るということは、伊藤先生のお話にもあったように、破壊予測とか安全性の診断に必須の技術であるため報告は多い（図 4-2-5）。構造色変化を使って引っ張れば色が変わるフィルムは以前からあるし、歪みゲージもある。コンピュータシミュレーションでものの形と固さを与えてやればどこにどのぐらい力がかかるか大体わかる。しかし、その知見を生かして強靭な材料をつくるときには、どうしても化学構造を考える必要があり、そこではナノスケールの分子化学的な力の理解が必要になる。

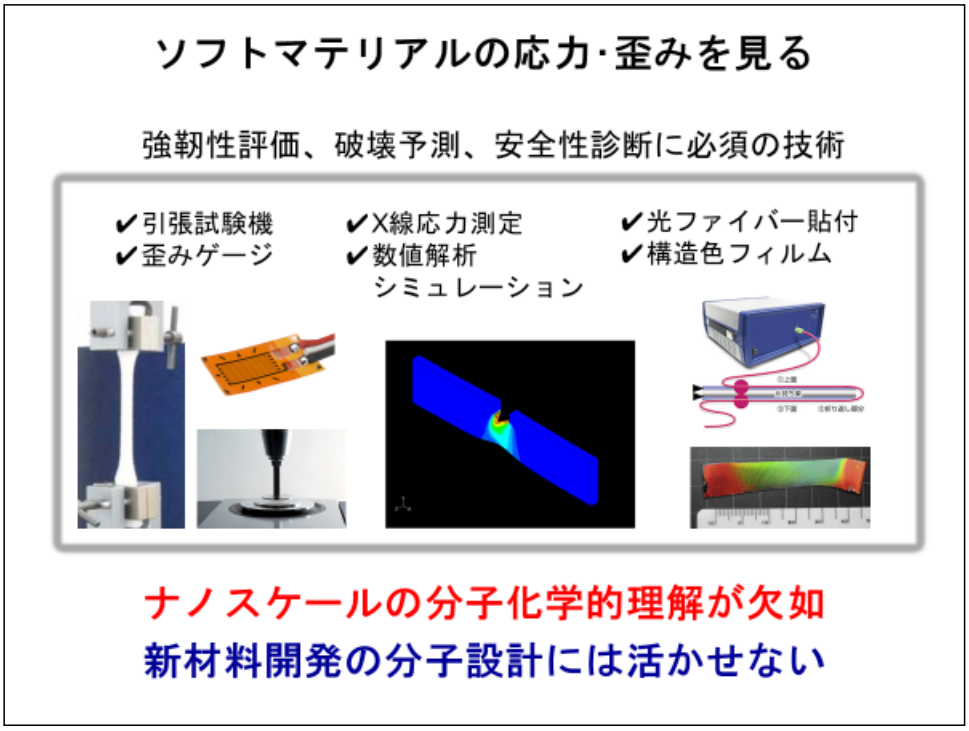

ソフトマテリアルの応力･歪みを見る
強靭性評価、破壊予測、安全性診断に必須の技術
✔引張試験機
✔歪みゲージ
✔X線応力測定
✔数値解析
シミュレーション
✔光ファイバー貼付
✔構造色フィルム
ナノスケールの分子化学的理解が欠如
新材料開発の分子設計には活かせない

図 4-2-5

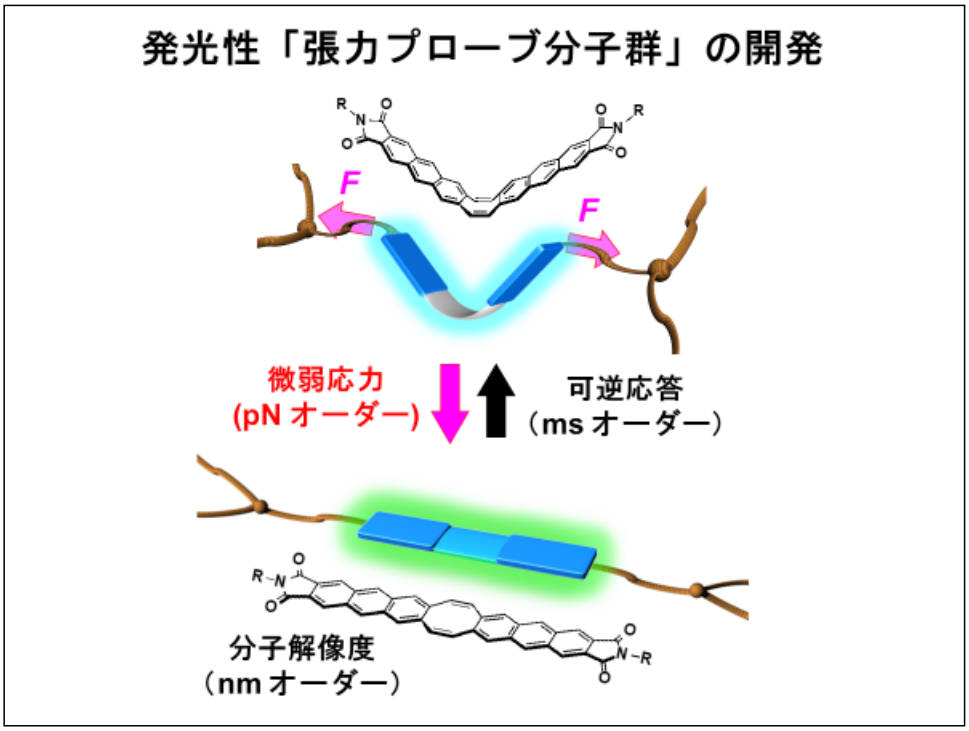

発光性「張力プローブ分子群」の開発
F
F
微弱応力
(pN オーダー)
可逆応答
（ms オーダー）
分子解像度
（nm オーダー）

図 4-2-6

分子レベルで１点１点に働く力というのを見たいというのは１つの夢である。

これに使えそうなのが、特に発光性をもちいたメカノプローブである（図 4-2-6）。分子分解能まで空間分解能を上げようとすると吸収変化ではなくて蛍光変化を使う必要がある。蛍光によって可逆応答が見える、そのようなメカノプローブをつくれないかと考えた。

実際につくって高分子の中に入れると、引っ張る前は青く発光し、引っ張ると緑に発光色が変化するフィルムができる。この種のフィルムができること自体が大事なのではなく、応力集中を理解することにつながることが大事である。つまり、引っ張った部分は平面型になって発光色が緑になるが、切れるまで引っ張っても実はリラックスした状態の V 字型由来の発光帯はなくならない。引っ張った応力がある一部の架橋点にだけ集中していることを意味するのではないかと考えている。

この話は光化学としては新しいところで、今までは光励起状態で分子が動けるかどうかで局所の粘度を議論するという話だったが、こちらの場合は基底状態で分子を無理やり引っ張っている、つまり外側から仕事をかけることによって新しく“励起”した状態をつくることになる。では見たい力のオーダーはどのくらいかというと、共有結合はナノニュートンオーダーで切れるが、見たいのはピコニュートンオーダーとなる。ビニール袋が切れるときの化学結合の切断がナノニュートンオーダーであって、見たいのは切れる前の現象である。

これを考えていくと、究極的には１分子を引っ張るのに必要な力はどのぐらいになるのかという話になる。１分子を 4Å 引っ張るのに必要なエネルギーは計算できる。ラフに計算すると、1 つの V 字型分子を平面型へとコンフォメーション変化させるのに 100pN オーダーで済む。これは結合を切る必要がないので弱い力に可逆応答できるというわけである（図 4-2-7）。

このように、この分子は 100pN、また別の分子は 200pN に応答するといった、分子ライブラリをつくることによって、力の分布をイメージングする技術ができると考えている。究極的には単一分子発光である（図 4-2-8）。実際この輝点１点１点がメカノプローブに対応するが、このスペクトルがもし高分子フィルムを引っ張ったときにシフトすれば、ここの架橋点には力がかかっている、こっちはかかってないと、そういった完全な応力集中の理解ができると考えている。

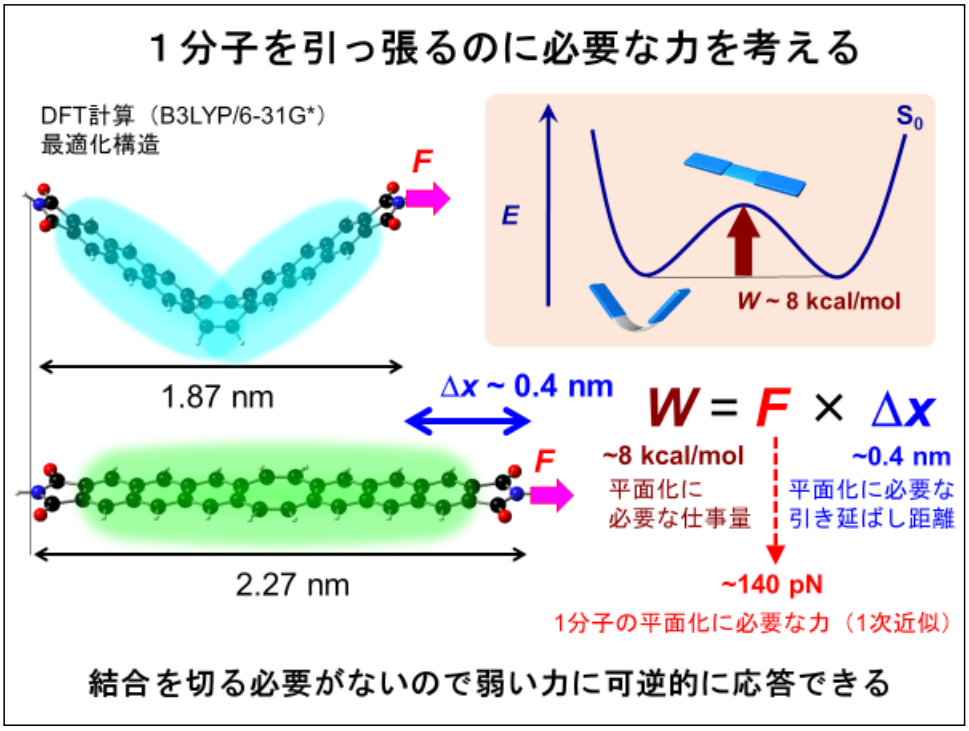

1分子を引っ張るのに必要な力を考える
DFT計算（B3LYP/6-31G*）
最適化構造
F
1.87 nm
Δx ~ 0.4 nm
F
2.27 nm
E
S0
W ~ 8 kcal/mol
W = F × Δx
~8 kcal/mol
平面化に
必要な仕事量
~0.4 nm
平面化に必要な
引き延ばし距離
~140 pN
1分子の平面化に必要な力（1次近似）
結合を切る必要がないので弱い力に可逆的に応答できる

図 4-2-7

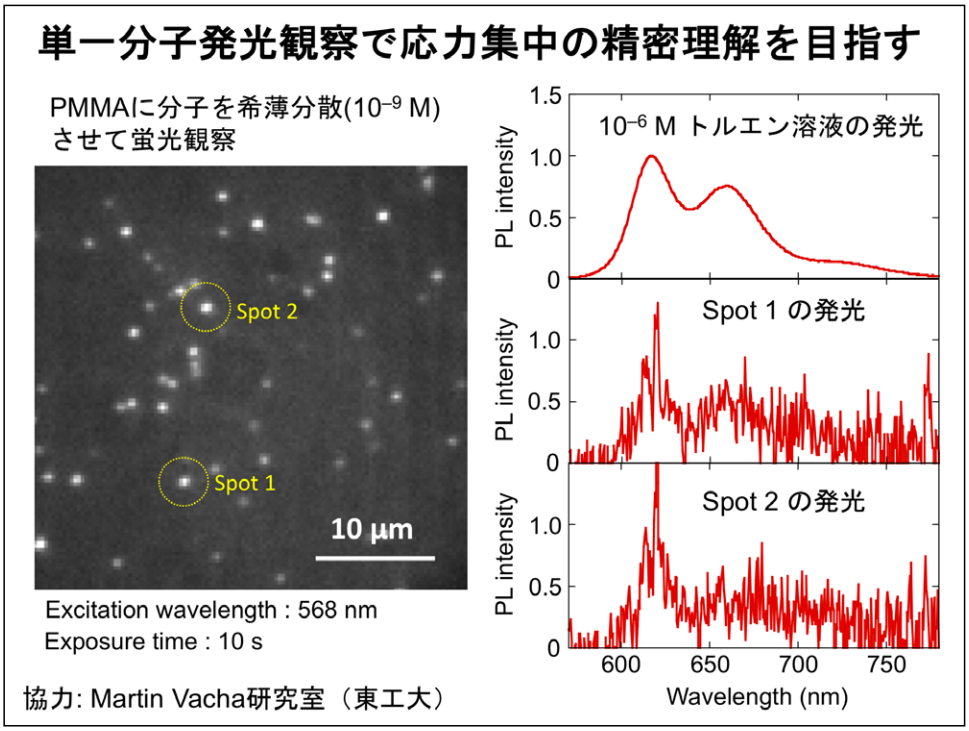

単一分子発光観察で応力集中の精密理解を目指す
PMMAに分子を希薄分散(10⁻⁹ M)
させて蛍光観察
Spot 2
Spot 1
10 µm
Excitation wavelength : 568 nm
Exposure time : 10 s
協力: Martin Vacha研究室（東工大）
10⁻⁶ M トルエン溶液の発光
Spot 1 の発光
Spot 2 の発光
PL intensity
1.5
1.0
0.5
0
600
650
700
750
Wavelength (nm)

図 4-2-8

応力イメージング技術にはまだまだ限界があり、AFM や光ピンセットでできないことが蛍光メカノプローブでできるかもしれない。それを定量化して学問にできないかということを考えている。

興味深い現象というだけで終わらせないためには定量化が大事であり、空間スケールはもちろん、力のスケールでピコニュートンを議論するのかナノニュートンを議論するのか、あるいは圧力であれば何パスカルを議論するのか、空間・時間・エネルギーの観点から定量的に追及して、知識を共有し、各現象の位置づけを整理するといいのではないか。

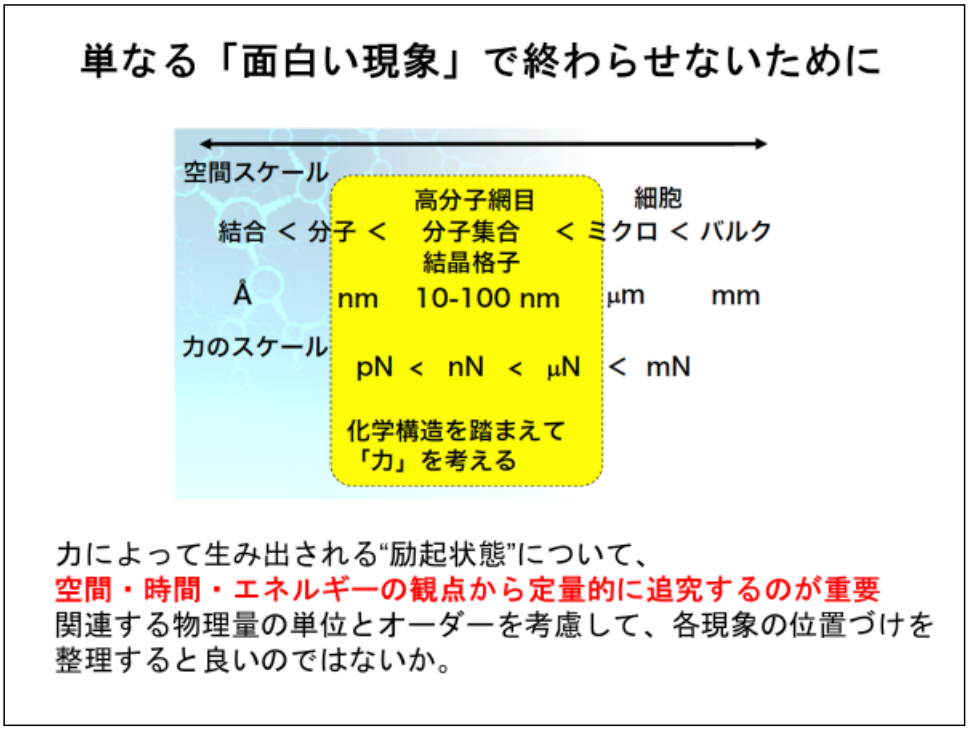


図 4-2-9

【質疑応答】

Q：高分子系では力が出るというのは分子間の絡み合いの話で、絡み合い転換分子量から考えるとその空間サイズはおよそ 10 ナノ前後ではないか。蛍光は広がってしまうので、海の中にある 1 点を見る分にはいいが、材料の中で本当に応力分布を見るとしたときに、もう一つ何か切り口が必要ではないか。

A：発光分子を非常に薄めて、かなり薄い状態で撮ることによって 1 点 1 点の蛍光を分離している。架橋点同士の距離は大体 10nm だが、それが光の回折限界より下であるという指摘か。

C：すぐに答えは出ないかもしれないが、長期的に考えてほしい。

Q：高分子系のものをスパゲッティの中から 1 本取り出すことを考えたときに、その力は時間に依存するはず。最初は抜け出せないが、後半になってくると抜け出してきて力を弱くする。そのときに時間依存のものは、この系ではブリンキングタイムのほうがはるかに短い。そこをどうやってマッチさせるのか。

A：ブリンキングはトリプレットクエンチャーを近くに共有結合でつなぐことによって抑えられ

るという話がある。ナノスケールの話であれば分子設計で超えられる部分が大きいと思っている。先ほどの回折限界の話になると、超解像顕微鏡や、あるいは単一分子発光の方法がある。

Q：高分子が抜けていくのは、最長緩和時間という非常に長い時間である。すると、この発光のタイムスケールとはマッチしないのではないか、そこにまたもう一つ仕掛けが必要ではないか。

A：発光のタイムスケールはものすごく短いため、励起光をずっと当てている状態である。

Q：そうすると、どこで見ているかわからなくならないか。その力が最初のケースと終わりのケースで違う、空間的にも分布がある。時間分布と空間分布があるものをどうやって見るのかというのがまた 1 つ問題になるのではないか。

Q：完全に安定なコーホメーションと伸びきった山の上の間というのが連続的にいるのか、それともいろいろな伸び方をするものを混ぜておいてという話なのか。

A：この分子の場合は基底状態で伸ばしているが、光らせているときは光を当てて励起している。励起状態でローカルミニマムが 2 つあるため、連続的にレッドシフトしていかずに、生え変わるようになっている。分子によっては基底状態が連続的な分子設計というのができると思う。

Q：1 個 1 個とってみると、連続的に何種類も力によっていろいろなものがいるのではなく、ローカルミニマムに応じた何種類かしか、例えば青と緑しか見えないということか。

A：アイデア段階だが、例えばこれとは別に 200pN で黄色と赤をスイッチする分子を作り、片方を主鎖に入れて、片方は架橋点に入れる。そうすると、1 つのスペクトルで短波長側を見れば架橋点の情報が得られて、長波長側を見れば主鎖の情報が同時に得られる、そのようなことを考えている。

4．3　高分子材料開発と刺激応答の新しい方向性－易解体性接着材料を中心に－

佐藤　絵理子（大阪市立大学）

本日は易解体性接着材料を中心にお話する。物性の異なる高分子が欲しいという要求はいろいろな場面であるが、物性発現という意味では、違うモノマーを設計し、違う合成方法を選択して目的の高分子を合成するという、用途に応じたテーラーメイドの合成方法をとることが一番有効である。しかし、材料の物性を変換することに着目すると、テーラーメイドの合成ではなく、高分子反応を使って、既に合成した高分子を何らかの方法で別の種類の高分子に変換することで物性を変換する方法が有効である。一般に高分子反応は溶液中で行われるが、高分子材料はほとんどが固体あるいはゲルなどの半固体状態で使われるため、材料として使われているそのままの状態、つまり、固体や半固体状態で効率的に進行するような高分子反応を選択することで材料物性の変換、刺激に応答するような高分子材料の設計が可能になる。

このような材料の用途として、剥がせる接着材料がある。使っているときは十分高い接着力を保持し、必要なときには剥がしたい。この相反する要求をいかに両立させるかというときに、Aがくっつく高分子で、A’が解体性にすぐれた性質を持つというふうに材料の性質を変換することで所望の材料設計が可能になる（図 4-3-1）。

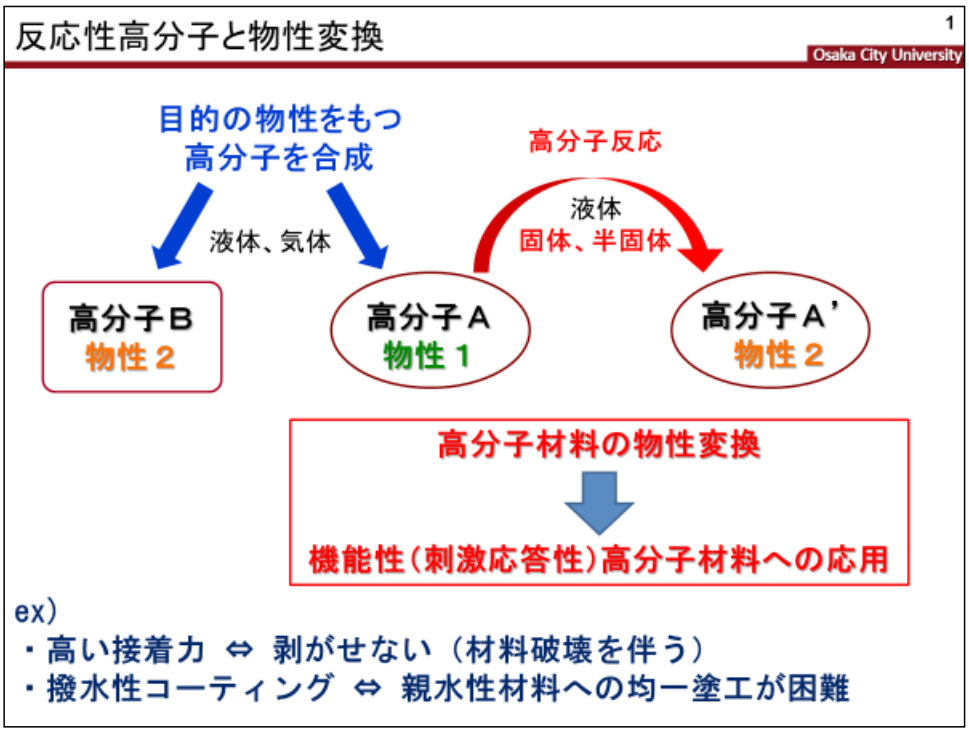


図 4-3-1

我々が注目しているのは反応性高分子である。側鎖変換や主鎖分解、架橋など高分子反応で物性を変える手段は様々あり、さらにこれらの反応性高分子を特殊構造ポリマー、例えばブロック共重合体やハイパーブランチポリマーと組み合わせて利用することで、より高度な物性制御・変換が期待できる。

高分子反応を物性制御・変換に利用する際、反応速度の制御が要になるが、一般的な化学反応はアレニウス型の温度依存性を示すため、温度上昇によって徐々に反応が加速され、反応の On と Off の切り替えは困難である。光反応の場合、熱的に進行しない反応を選択すると、完全に On-Off を制御することができる。ただし、光反応を利用する場合、透過率の問題から薄膜や表面の物性変換に限られる場合が多い。熱的に進行する反応の On-Off 比を上げる手段として、反応の活性化エネルギーを反応系中で低下させる方法がある。不活性化した触媒をあらかじめ添加しておき、それを外部刺激によって活性化させることによって活性化エネルギーが低くなると、光反応の On-Off に近いような、反応速度比を大きく変えることが可能になる。例えば、触媒が不活性で活性化エネルギーが大きい状態では反応速度は非常に遅いため、高分子反応はほとんど起こらず、実際に解体したいときには触媒を活性化させ活性化エネルギーを低下させることで反応速度を不連続に増大させるといった設計が可能になる（図 4-3-2）。

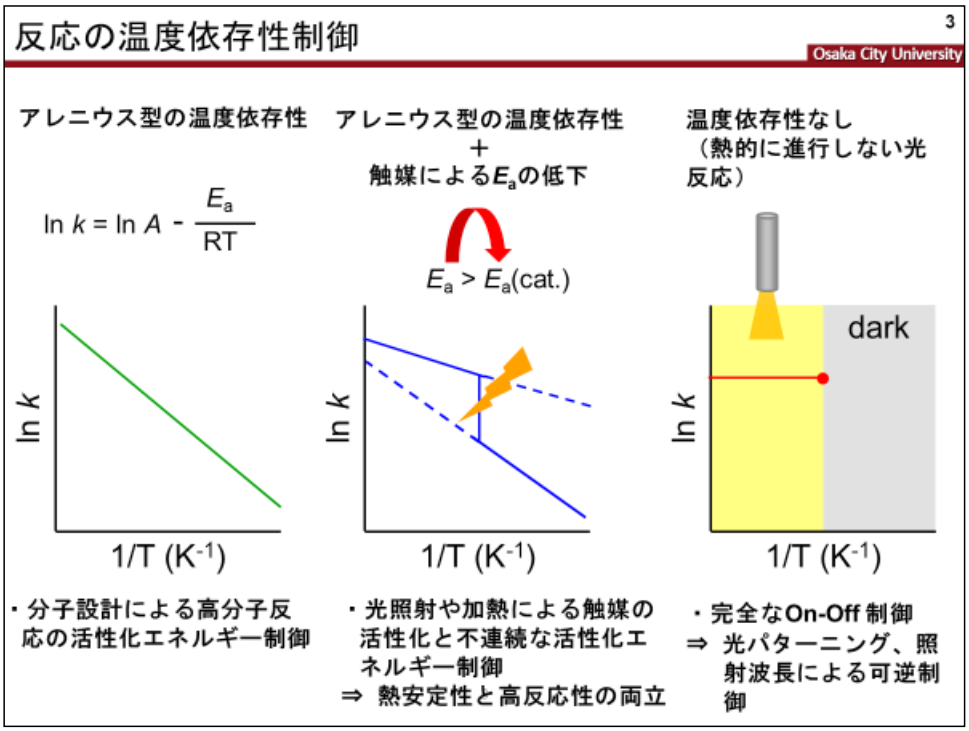


図 4-3-2

齊藤先生のお話にもあったが、接着技術が使われている分野は非常に広範で、年間の出荷量は 100 万 t 程度、数千億円の非常に大きなマーケットがある（図 4-3-3）。長所は多くあるが、その反面短所としては解体が非常に困難で、材料の破壊や材料の糊残りを生じさせる。このため長所は生かしたまま簡単に剥がせる易解体接着材料への要求が非常に高まっている。易解体性のメリットは、リワークやリペア、部品のリユースや材料のリサイクルがあるほか、製造工程の仮接着として利用すると、その製造プロセス自体のエネルギーを削減することにも貢献できる。

図 4-3-3

易解体性接着材料には強い強度で十分くっついているという性質と、一度くっつけたものを剥がすという、完全にトレードオフの性質が要求されるため、これらをいかにバランスよく両立させるかが材料開発のポイントである。

接着の基本的な話となるが、接着と粘着の２通りに分かれる。接着の場合は液状の接着剤を被着体に塗布し、接着体を十分に濡らした後、硬化や乾燥で固まって固体になると十分な強度を発現する。粘着の場合は、このような反応は何も起こらずに、もともと粘性のあるゲル状態のものを押しつけるとそのまま使用に十分な強度を発現する。これが一般的な接着力、粘着力の発現過程である。易解体性を付与するには、一度くっついたものの接着力を再び下げる必要がある。ここで何らかの高分子反応を起こして物性を変えることが必要になる。

このような２つの性質、使用時は十分な強度を持っているが、解体すると強度が低下するといった材料開発のポイントとしては、まず接着力にすぐれて、かつ刺激応答性のある反応性高分子を開発することになる。高分子反応による物性変化が接着力低下に効くものであること、さらにこの高分子反応が使用時に起こると困るため、安定性は保ちつつ、かつ解体はなるべく迅速にという、これも相反する性質、安定性と迅速な反応性の２つを両立する必要がある（図 4-3-4）。

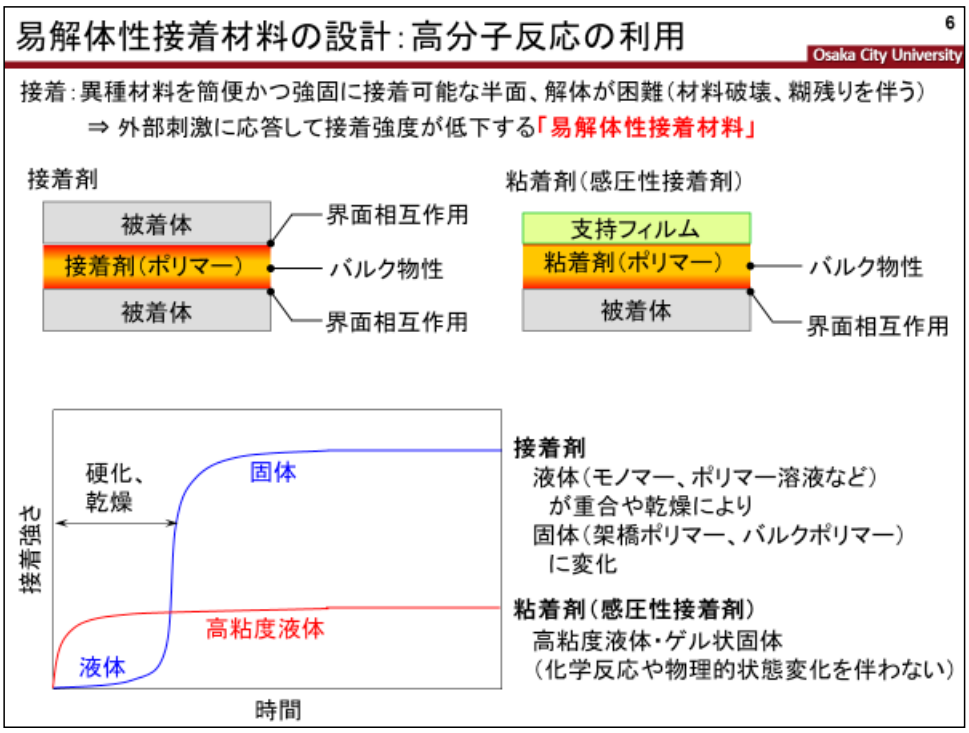


図 4-3-4

どのような仕掛けを組み込めば解体と使用時の接着力を制御できるかを考えるにあたり、最初になぜくっつくかということを考える（図 4-3-5）。接着・粘着どちらの場合も接着剤として用いるポリマー自体のバルクの性質と、被着体との界面相互作用によって接着力は決まる。界面相互作用は物理的に作用するアンカー効果や化学結合ができる場合もあるが、これらは材料と接着剤の組み合わせによっては働かない場合がある。例えばガラスのように平滑な材料ではアンカー効果はほとんど働かないため、ほとんどの接着には分子間力が一番効いている。

バルクの物性はポリマーの機械強度や弾性率があり、ポリマー構造に依存して決まる。

この２つでどのように接着強度が決まるかだが、例えばせん断力の場合、界面相互作用のほうが十分強くて、バルク物性のほうが弱い場合を考えると、この場合はポリマーの弾性率が上がるとせん断強さも上がる。

剥離はもう少し複雑で、ポリマーが弱すぎる場合は当然ポリマーのバルク物性、凝集力が足りないため、凝集力が上がるほど剥離強さも上がる。剥離の場合はポリマーが変形することで剥離エネルギーを消費するため、硬くなりすぎると変形できずパラッと剥がれ、弾性率が上がりすぎると逆に剥離強度は低下することになる。したがって、くっついているときはこの接着力が高いところの状態で、剥がしたいときに高分子反応によってこのどちらかに持っていけばいい。

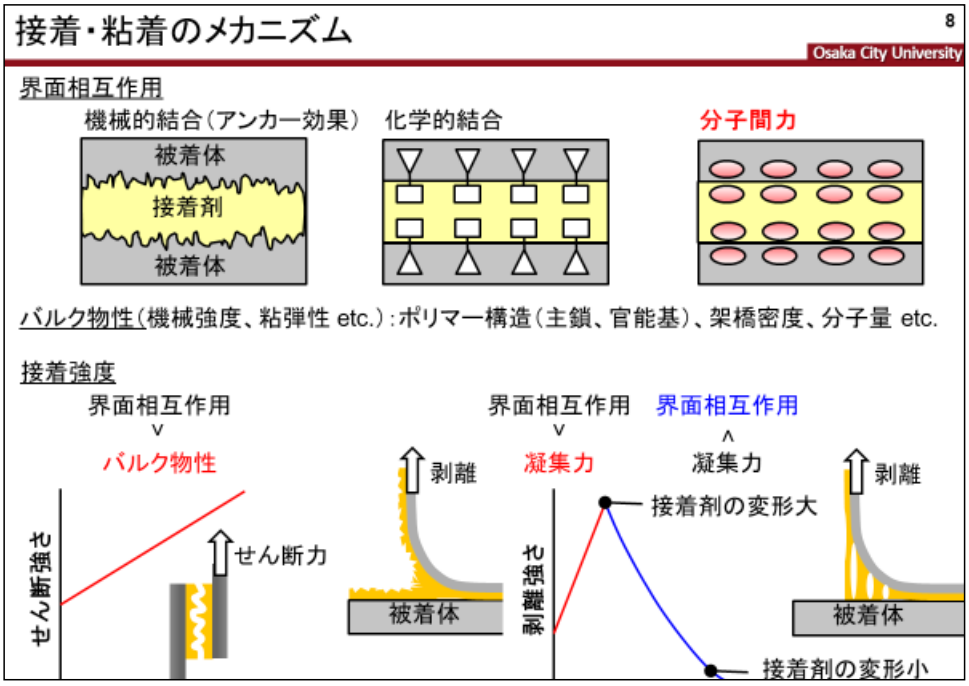


図 4-3-5

代表的な設計の例を紹介すると、一番単純にはポリマーを分解させて弾性率を下げる方法がある。種々の分解性ポリマーが報告されているおり、初期の接着力を発現できれば、分解による剥離強度やせん断接着強度の低下は比較的容易に達成できる（図 4-3-6 の 1）。しかし問題点として、ポリマーの凝集力を下げることで強度を低下させるため、どうしても被着体に糊残りが生じてしまうことが挙げられる。被着体の再利用を考えると、当然糊残りはないほうが好ましい。解決する方法としては、架橋などにより弾性率を上げることで凝集力を低下させずにむしろ上げた状態で剥離強度を低下させることが可能になり、界面剥離を達成しやすい（図 4-3-6 の 2）。

他には接着界面の分子間力を下げるという設計もある。ポリマーの脱保護や官能基変換で極性を変え、相互作用を変えるという方法がある（図 4-3-6 の 3）。

弾性率を上げる易解体性接着材料の代表的な例はとして、ダイシングテープのような UV 硬化型のものが報告されている。我々は、弾性率が上がる効果とガス発生が起こって有効接着面積が低下する効果の 2 つの作用を相乗的に利用して効率的に剥離強度を低下させる粘着型の易解体性接着材料の開発を行っている（図 4-3-7）。この反応は架橋もガス発生も酸触媒反応であるため、光酸発生剤のような不活性化した酸触媒を添加すると、光を当てた後に加熱した場合にのみ高分子反応が進行し剥離強度の低下が起こるため、例えば 100℃の加熱だけでは強度低下は起こらず、光照射後に 100℃に加熱すると強度低下が起こる、というような耐熱性と迅速解体性を両立することも可能である。

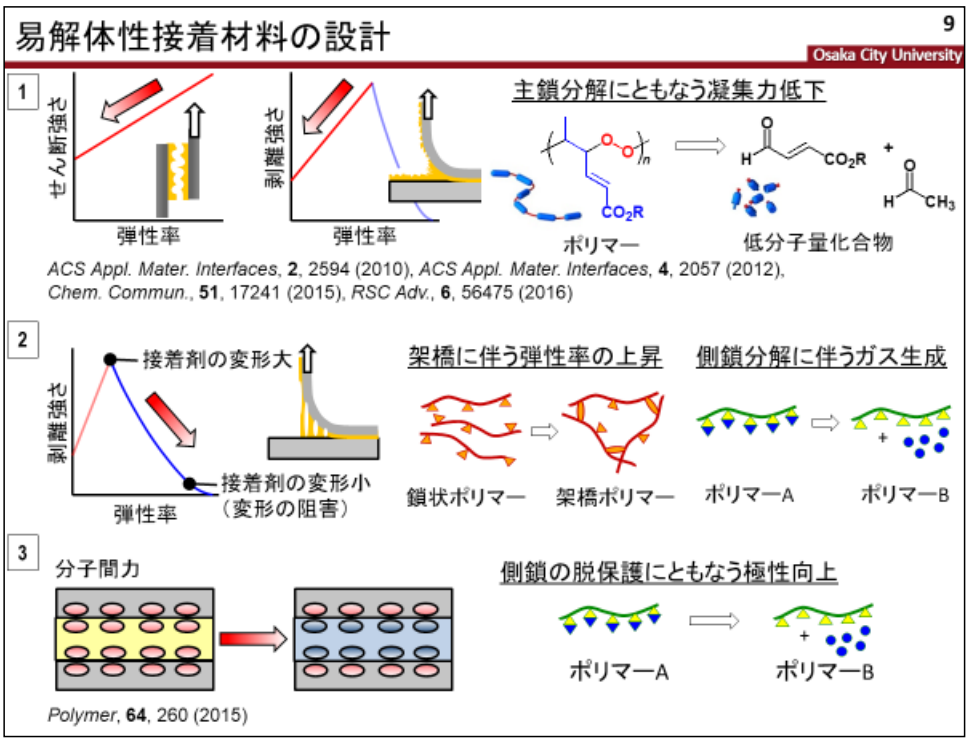

易解体性接着材料の設計
9
Osaka City University
1
せん断強さ
弾性率
剥離強さ
弾性率
主鎖分解にともなう凝集力低下
ポリマー
低分子量化合物
ACS Appl. Mater. Interfaces, 2, 2594 (2010), ACS Appl. Mater. Interfaces, 4, 2057 (2012),
Chem. Commun., 51, 17241 (2015), RSC Adv., 6, 56475 (2016)
2
剥離強さ
接着剤の変形大
接着剤の変形小
（変形の阻害）
弾性率
架橋に伴う弾性率の上昇
側鎖分解に伴うガス生成
鎖状ポリマー
架橋ポリマー
ポリマーA
ポリマーB
3
分子間力
側鎖の脱保護にともなう極性向上
ポリマーA
ポリマーB
Polymer, 64, 260 (2015)

図 4-3-6

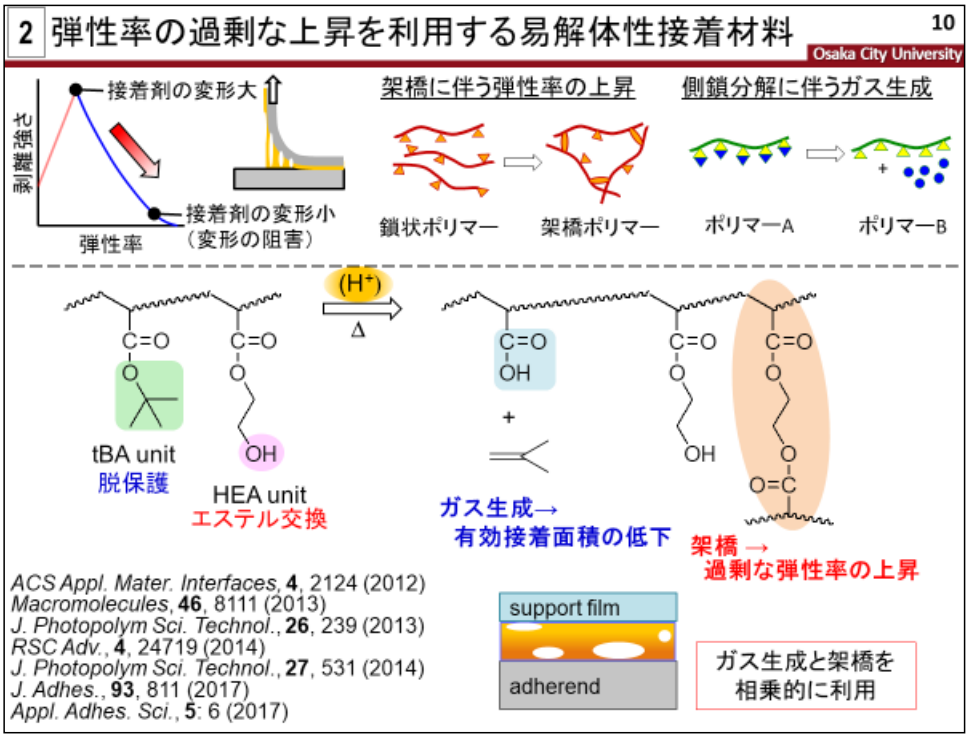

2 弾性率の過剰な上昇を利用する易解体性接着材料
10
Osaka City University
剥離強さ
接着剤の変形大
接着剤の変形小
（変形の阻害）
弾性率
架橋に伴う弾性率の上昇
側鎖分解に伴うガス生成
鎖状ポリマー
架橋ポリマー
ポリマーA
ポリマーB
(H+)
Δ
tBA unit
脱保護
HEA unit
エステル交換
ガス生成→
有効接着面積の低下
架橋 →
過剰な弾性率の上昇
ACS Appl. Mater. Interfaces, 4, 2124 (2012)
Macromolecules, 46, 8111 (2013)
J. Photopolym Sci. Technol., 26, 239 (2013)
RSC Adv., 4, 24719 (2014)
J. Photopolym Sci. Technol., 27, 531 (2014)
J. Adhes., 93, 811 (2017)
Appl. Adhes. Sci., 5: 6 (2017)
support film
adherend
ガス生成と架橋を
相乗的に利用

図 4-3-7

特殊構造ポリマーを用いることによる優位性についても確認している。例えば、分子量が25万程度で類似組成のランダム共重合体とブロック共重合体を用いると、ブロック共重合体では界面剥離を達成できる一方で、ランダム共重合体では凝集破壊、糊残りが生じる。ブロック共重合体のミクロ層分離構造に由来してこのような機能が発現していることを確認しており、構造制御された高分子を用いることでより高性能な解体性を発現できることがわかっている。

最後に、現在、易解体性接着材料が実際に使われている場面を紹介すると、製造時の仮固定で生産性を上げる、あるいは意匠性が求められるような容器のガラスと樹脂を分別回収する、あるいは自動車のヘッドライトのシーリング材のリペア用途など、仮接着や直接強い力がかからないような場面での利用が主である。

従来金属材料が用いられていた部分が高分子複合材料に変わっている、あるいは今まで溶接していた部分が接着に変わっているなど、金属から高分子への置き換えが進められているが、その次の段階として、これまで“剥がせない”接着材料を用いていた多くの場面でその接着を剥がしたい、解体性を付与したいという要求が高まってくるであろう。従来は仮接着などが主だったが、今後はより高強度の材料や構造接着などへの応用が求められる。

課題は多いが、解体メカニズムを解明し、それに基づく分子設計で新しい高分子材料設計を行うことが重要である。

【質疑応答】

Q：接着力を分子設計するのに使った指標が弾性率ということだが、簡単に言うと硬いものをつくれば接着力が上がるということか。

A：バルクの物性としてはその通り。

Q：測定可能な物性指標と分子設計と材料をどのようにひも付けたのか知りたい。

A：非常に簡略化して弾性率という１つの指標だけで表したが、実際はたとえ同じ弾性率であっても構造が変われば分子間力が変わるため密着性も変わる。また剥がすときの速度などの動的なパラメータも入ってくる。このように複雑な要因が絡むため、単純に１つのパラメータを上げたから剥がせるということではなく、硬くしたからいいということでもない。

Q：接着に関して、どのようなパラメータがあり、どれが支配的かといったことはコミュニティでどの程度共有されているのか。

A：新しい材料設計あるいは性能をアップするには、学術的な観点のほかに産業界で蓄積されているノウハウの利用が必要不可欠だと考えている。経験則に依存している部分が強いため、完全に予測できない部分がある。傾向としてパラメータの影響は把握できているが、最後の部分は経験則が加わってくる部分があるので、２つで進めていくことが必要ではないか。

Q：化学系の会社の方と話していると、そこに産業界からのアカデミアに対するニーズが非常に強くあるように感じる。

A：大学の仕事としては０を１にするようなアイデアを出して、そこを製品までブラッシュアップすることを企業が行うとうまくいくのではないか。

C：接着に関しては自動車や情報エレクトロニクス関係の話が多いが、今日の話に出てきたように社会インフラ関係もニーズが非常に多い。今後、リニューアルの市場が大きく広がり、センシング技術が発達するとともに更新需要が増える。その中で接着材料が使われてくる可能性が非常に高いと認識している。道路だけではなく、橋、トンネルも含め、様々な高分子材料が使われてきており、そこに接着剤が使われるケースは増えている。その中で大きな課題

は、もちろん機能を上げることも大事だが、社会的要請として、人手も足りないため、いかに速く塗って速く剥がせるかというところも１つのキーワードではないか。

4．4　非線形マルチスケールマルチフィジクス現象モデルからの材料設計

尾方　成信（大阪大学）

私の専門は機械材料で、金属材料や構造材料に対して計算科学を用いた研究を行ってきた。一般に機械材料の計算ではマクロな解析が主であるが、私自身は電子状態も含めたマルチスケールの計算材料科学を専門に行っている。本日のワークショップのタイトルにもあるメカノファンクショナルをターゲットとした場合、マルチスケール・マルチフィジクスが重要なキーワードになるかと思うが、計算科学の観点から今後解決しなければならない課題などをご紹介したい。

図 4-4-1　構造材料に求められる機能

図 4-4-1 に示すのは、力学特性を主とする構造材料に求められる機能や性能である。理想的な構造材料に求められる性能は、ねばさ、強さ、耐久性などの様々な機能を高次元で兼備することである構造材料は使用量が膨大であり、わずかな性能向上であっても社会的にも大きなインパクトがある。

求められる機能についてもう少し詳しく説明する。例えば、構造材料に主に求められる「ねばさ」と「強さ」は基本的にはトレードオフの関係になっている。１つの挑戦としては、図 4-4-2 に示すように、このトレードオフを打破して「ねばさ」と「強さ」の両方を兼備するような材料を作りたいということである。しかしながら、一体どういうふうに設計すればいいかという設計指針については、試行錯誤に頼っているのが実情である。このため、もう一度原点に返って、原子、分子、場合によっては電子といったナノ動力学のところから考え直す必要がある。

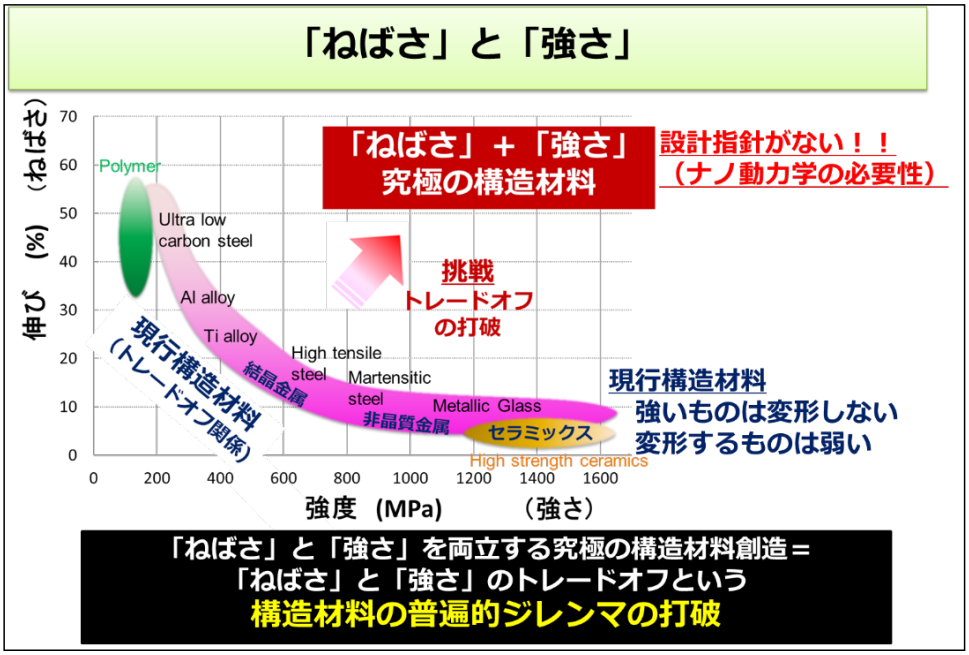


図 4-4-2　トレードオフの関係にある「ねばさ」と「強さ」

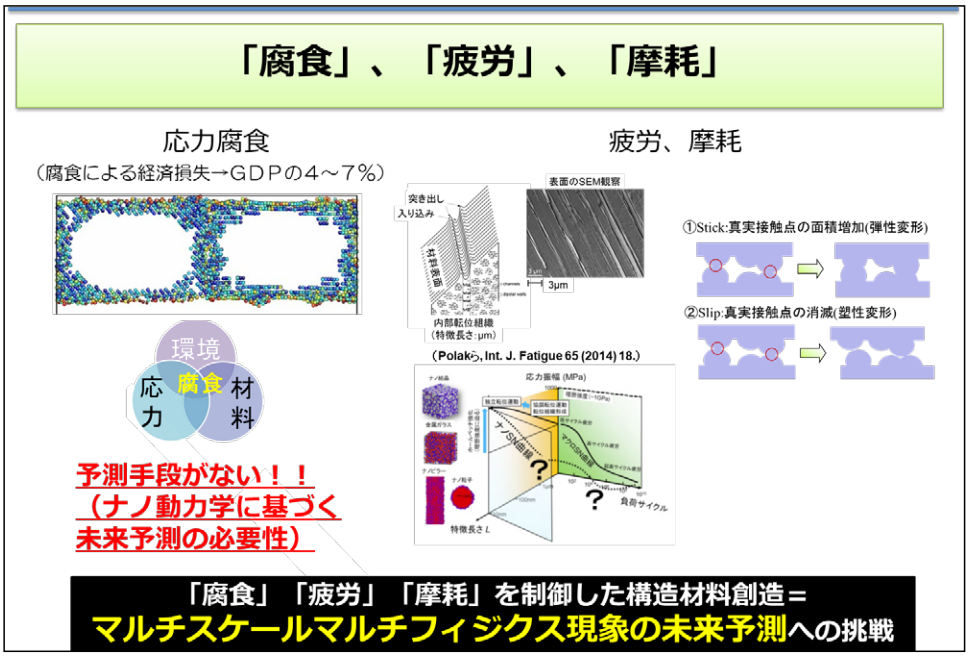


図 4-4-3　腐食・疲労・摩耗など長時間の現象には予測手段がない

ねばさや強さに加えて耐腐食、耐疲労、耐摩耗性も構造材料にとって重要な特性である。腐食、疲労、摩耗はネガティブなイメージがする現象で、またまた現象が複雑なため、サイエンスの題材としてあまり取り上げられていないが、構造材料は長時間にわたって健全にその機能を維持しなければならない。そのため、むしろこれらの特性は、一時的な特性である「ねばさ」や「強さ」よりも重要であり、真正面から取り組み、根本的に解明すべきものである。これまでに工学的に長く取り組まれてきた多くの知見があるものの、根本的に理解されたとは言い難く、これらの特性を予測するのはまだ難しい。

構造材料というものは基本的には力を受ける材料である。力を受けた状態の中で腐食や疲労、あるいは摩耗をうまく制御する、つまり、外力を嫌うのではなく、むしろそれをうまく利用することで非常に優れた構造材料になる可能性がある。こういった力をうまく利用した設計を実現するためには、構造材料の各種特性が様々な物理の現象が絡み合いかつ長時間かかって実現するマルチスケール・マルチフィジクス現象であることを踏まえて、マルチスケール・マルチフィジクス現象を解析し、それを根本から理解することで構造材料の特性の未来予測ができるようになることがまず必要である（図 4-4-3）。

構造材料の特徴とは、このマルチスケール・マルチフィジクス性にあると考えている。もう少し詳しく述べると、通常、構造材料に求められる特性はマクロ特性になること多いが、当然それはナノスケールから起こってきている。これらのスケール間には様々なスケールで重要な事象が起こっており、それらはスケール間の非線形な相互作用でつながっているため、どこかのスケールだけ計算や観測して理解すればいいというものではなく、広範なスケール全体で理解しないといけない。マルチスケール性は我々が考えるべき最も重要な要素であることは間違いない。

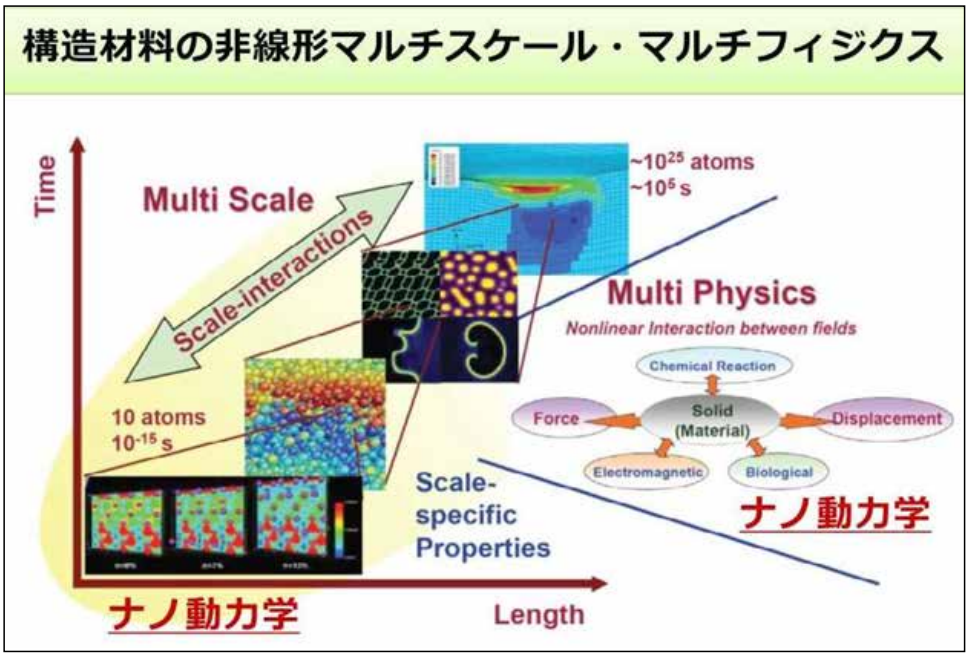


図 4-4-4　構造材料におけるスケール間の関係性

さらに、メカノファンクションを考えるに当たってはマルチフィジクスを考慮する必要がある。構造材料に関しては、これまで応力と変形との関係が主に議論されてきたが、腐食や摩耗、劣化などの現象には、応力や変形に加えて化学反応など、様々なフィジクスが関連してくる。そのようなマルチフィジクス現象を考えていくには、まずは電子・原子論的な部分の解析から、つまり、ナノ動力学が扱えるマルチフィジクス解析からスタートする必要がある。そして、図 4-4-4 の右側に示すように、材料に力が作用したとき、変形だけでなく化学反応など様々なスケールの様々な物理に力が作用し影響を及ぼす。材料力学応答はこのように様々な物理と現象の非線形相互作用の結果として生じるものである。つまり、力を加えるとどう変形するかだけではなく、様々なフィジクスにも力が展開されることも考慮することが重要である。作用と応答は 1 対 1 対応ではなく、1 対多、多対多の対応であり、それがマルチフィジクスということである。

計算科学の観点から構造材料に対して今後どのような方向性で研究していくべきかを考える場として、Multiscale Materials Modeling という国際会議がある。この会議は約 20 年前に発足し、それ以来我々は材料におけるマルチスケール・マルチフィジクス問題をいかに解くかを世界的に考えてきた。第 9 回となる 2018 年の会議では私がチェアマンの一人となって初めて日本で開催することになっている。実験や様々な計測技術の発展に加えて、計算材料科学がマルチスケール・マルチフィジクスの 1 つの研究手段の大きな柱として重要であるという認識の下、世界中で精力的な研究が行われている。

今後、計算材料科学で取り組むべき課題を 4 つ挙げる。1 つ目は、マルチフィジクスへの挑戦である。2 つ目と 3 つ目は、空間と時間それぞれのマルチスケールへの挑戦である。最後、4 つ目は材料探索・設計への挑戦である。

マルチフィジクスへの挑戦では、全てのフィジクス現象が取り扱える可能性がある電子・原子論を基本とすることになる。現在では、電子論・原子論計算が盛んに行われるようになり、精度も向上し、様々な物理量を解析できるようになっている。

空間マルチスケールへの挑戦では、先ほど紹介した国際会議で過去 20 年間議論されてきた経緯もあり、既に様々な手法が提案されている。注意すべきことは、ここでの空間マルチスケールというものは基本的には時間と連動しているという点である。つまり、時間も粗視化できるが、同時に空間も粗視化されてしまう。例えば、空間スケールが原子レベルでかつ時間が長い問題は、空間マルチスケールだけでは解けないことに注意が必要である。

空間マルチスケール粗視化解析の一例として、鉄の材料に何か不純物元素を添加して、鉄がどれくらい強くなるかという問題に対する我々の解析例を紹介する。原子レベルの問題に対して第一原理計算をまず実行し、得られたデータを用いて様々な上位スケールでのモデルを用いて計算を行い、最終的に鉄の合金の強度を予測することができる（図 4-4-5）。結果としては、添加する元素を周期表からいろいろと選んで、どの元素を加えるとどれぐらい強くなるかということがほぼ予測できるようになっている。

一番難しいものが、時間マルチスケールの問題である。先ほども少し触れたが、メカノファンクショナルマテリアルの開発や実用化には、マイクロ秒から年のスケールの現象を考え、予測する必要があるため、様々な時間スケールでの実験や解析が必要となる。しかしながら、現状ではマルチフィジクスを扱える原子・電子レベルの計算では、どうしてもピコ秒やナノ秒などの短い時間しか解析できないため、こういった長い時間スケールの現象を対象とすることはできない。これらの広がった時間スケールをとうしてブリッジするかが現在の大きな課題であり、我々の取り組みである。

最後に、課題 4 の材料探索・設計への挑戦であるが、上述したマルチスケール・マルチフィジックス解析が発達し、根源から構造材料の特性の現在と未来を予測できるようになれば、今後はデータ科学を援用し、求める機能から材料を設計するという逆問題を解くことが今後の大きな課題になるのではないかと考えている。

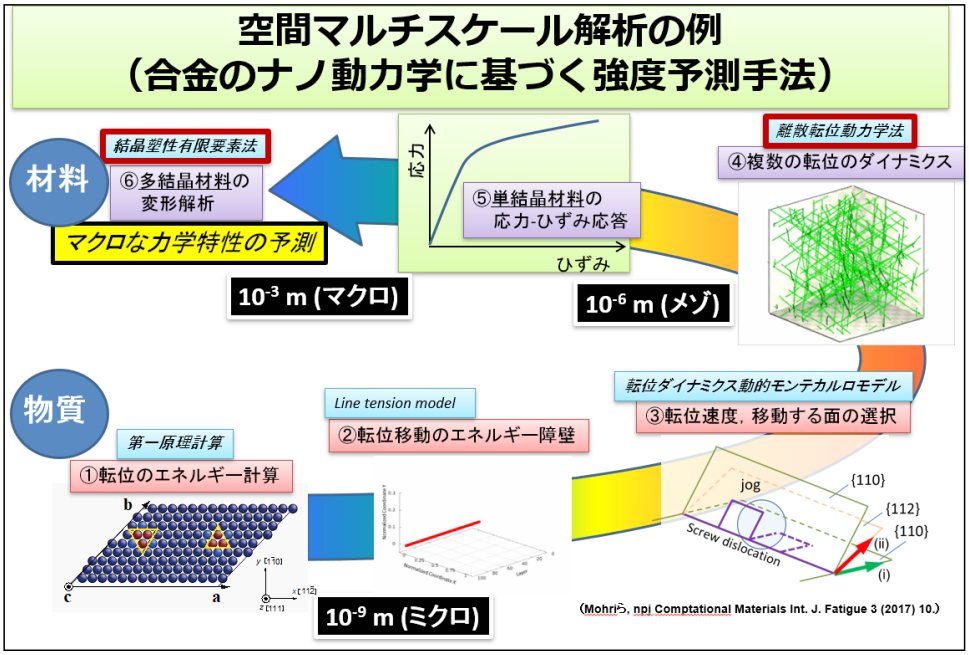


図 4-4-5　空間マルチスケール解析の例（譯田、尾方ら（2016））

【質疑応答】

Q：時間と空間を独立に扱うためには、従来の動力学とは異なる新しいアルゴリズムが必要になるのではないか。

A：時間スケールもフェムト秒から秒までかなりスケールが異なるため、統計力学などを駆使してスケール間をつないでいく新しいアプローチが必要であり、原理的に新しい概念が必要となる。現在それに対して取り組んでおり、成果が出始めている。

Q：高分子の場合にはエルゴード性が成り立たないケースというものもあるように感じるが、先生のシミュレーション技術はどの程度扱えるのか。

A：これから高分子に展開しようと考えており、エルゴード性についても考慮する必要があるが、高分子の場合でも基本的には同じ概念が適用可能ではないかと考えている。最終的には確率論や統計論に立脚しているため、高分子に対して特に問題になることはないと感じている。

4.5　マルチスケールシミュレーションが拓く材料現象

久保　百司（東北大学）

私は学生時代から量子化学を使った触媒や燃料電池などの研究をやってきたが、2008 年に化学系から機械系に異動したのを機に、本日お話する化学反応を制御した機械システムに関する研究を始めるようになった。重厚長大な機械システムにおいて、ナノスケールの化学反応がマクロスケールの機械性能や機械設計開発にどういう影響を与えるかということをきちんと学問にしていきたいと考えている。

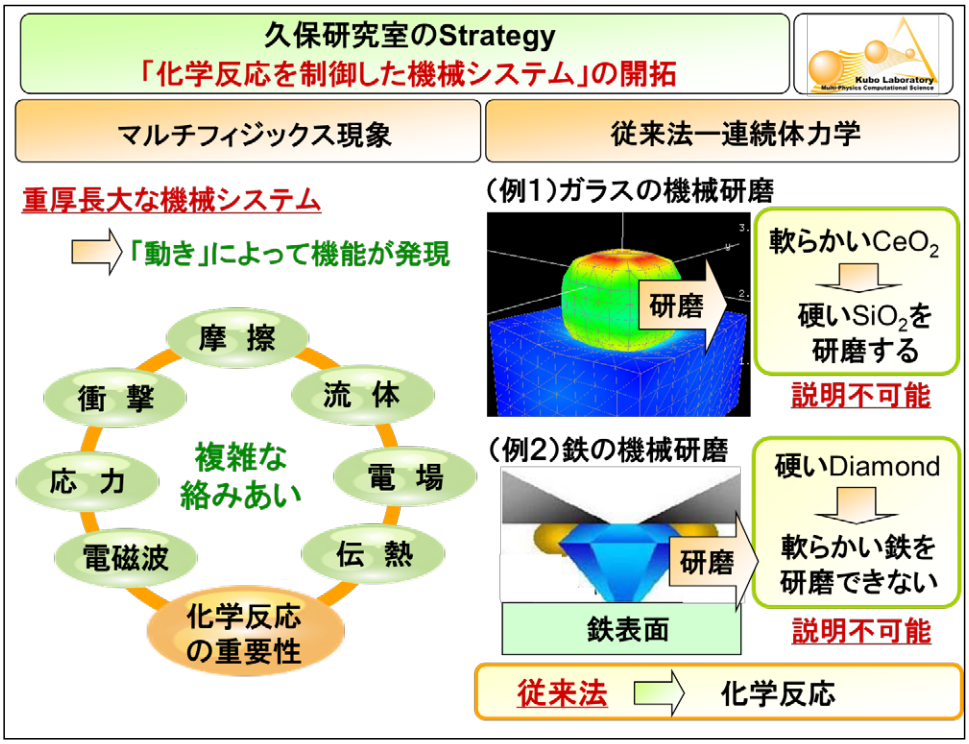


図 4-5-1

重厚長大な機械システムは、基本的にはすべて動きによって機能が発現する。摩擦、衝撃、応力、流体、電場、伝熱などが非常に複雑な絡み合いをしている（図 4-5-1）。今まで本分野は主に連続体力学を使って解かれており、化学反応は考慮されていなかった。実際には硬い SiO_2 を柔らかい CeO_2 で研磨するということが実験的に行われているが、連続体力学の範囲では硬さのパラメータしか入っていないため、硬いものを柔らかいもので研磨するという現象を解明できない。しかしながら、実在系では摩擦界面において水によって SiO_2 が化学反応を起こして、水ガラスになり、より柔らかくなることによって研磨が実現される。このように、機械システムのシミュレーションにおいても、きちんと化学反応を取り入れていく必要がある。

私が最初に興味を持ったのは摩擦現象である。摩擦における化学反応を理解して制御しようという狙いがある。自動車エンジンの出力エネルギーの約 30%が摩擦によって無駄に消費されており、摩擦を減らすことが強く求められている。通常はエンジンオイルを使うことで摩擦を減らすことが可能であるが、より低摩擦を実現するために、エンジンにおける摩擦化学反応を制御することが求められている。そのために、量子分子動力学法という量子論を使ったシミュレーショ

ン手法を活用し、摩擦化学反応ダイナミクスの解明を実現した。

最近、ダイヤモンドライクカーボンが低摩擦を実現できる固体潤滑剤として注目されている。そこで、水素終端したダイヤモンドライクカーボンに対して圧力を加えて摩擦させたときに何が起こるのかについてシミュレーションを行った。電子を考慮した計算手法を用いることで、摩擦によって界面で化学反応が起こる現象をシミュレーションすることが可能である。摩擦係数の計算も可能であり、初期段階では水素と水素が反発して摩擦係数は大体 0.08 ぐらいであるが、その後、摩擦化学反応によって H_2 分子が生成することがわかった。さらに、H_2 分子ができた後には基板間の距離が離れていく。つまり、真空だった部分が化学反応による H_2 生成によって真空ではなくなることにより、基板間の距離が離れ、摩擦係数 0.03 というより低摩擦が実現される。つまり、水素と水素が反発する以外に水素分子が生成するという化学反応が低摩擦実現のキーとなっている（図 4-5-2）。

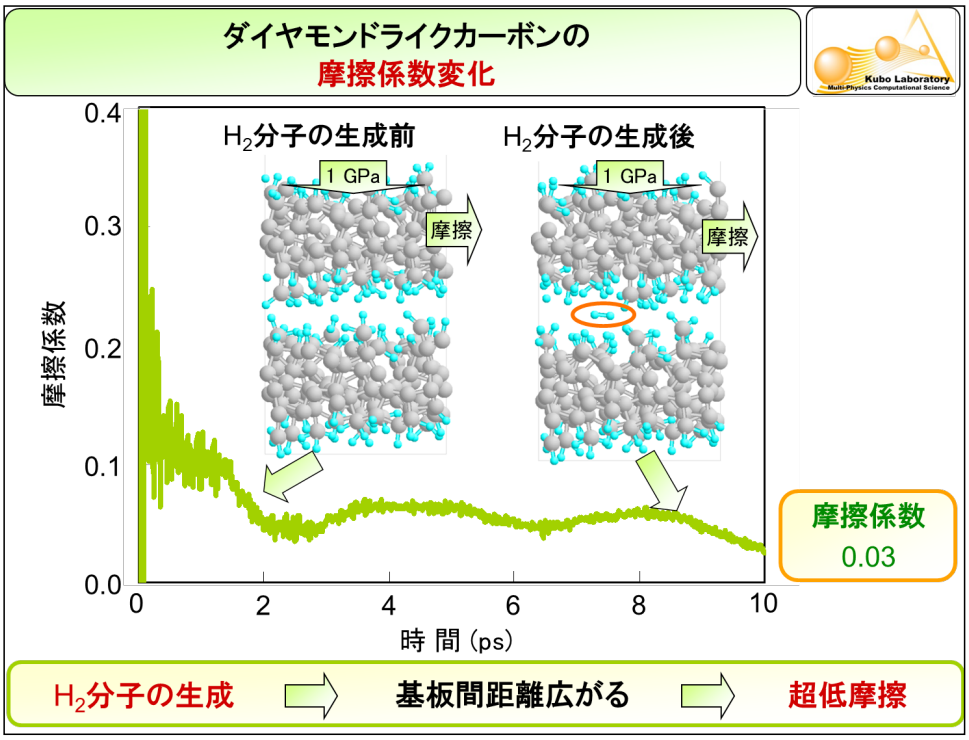


図 4-5-2

以上をまとめると、摩擦化学反応によって H_2 ができることによって基板間の距離が離れ、これにより摩擦係数が下がるという、非常に複雑なプロセスが起こっていることが明らかとなった。次に、1GPa の荷重条件を 7GPa に上げて計算をすると、今度は全く違う化学反応が起こって、摩擦界面において炭素原子同士が結合し始めた。つまり、荷重を増加させると摩擦界面に C-C 結合が形成され、摩擦係数が大きくなることがわかった。

図 4-5-3 のように、横軸に時間、縦軸に摩擦係数のグラフを書くと、時間の経過とともに 1GPa のときには H_2 分子の生成により摩擦係数はだんだん低くなるのに対して、7GPa になると C-C 結合の生成により摩擦係数がだんだん上がっていることがわかる。このことは高校の物理の教科書に記載されている「摩擦係数は荷重に依存しない」という法則に反する結果である。

これは、高校の物理の教科書で考えているのは物理現象のみであって、化学反応は考慮されていないためである。つまり、摩擦は物理現象のみではなく、実際の現実系では摩擦現象によって化学反応が起こるために、高校の教科書に書いてある法則が現実の複雑系では覆される。

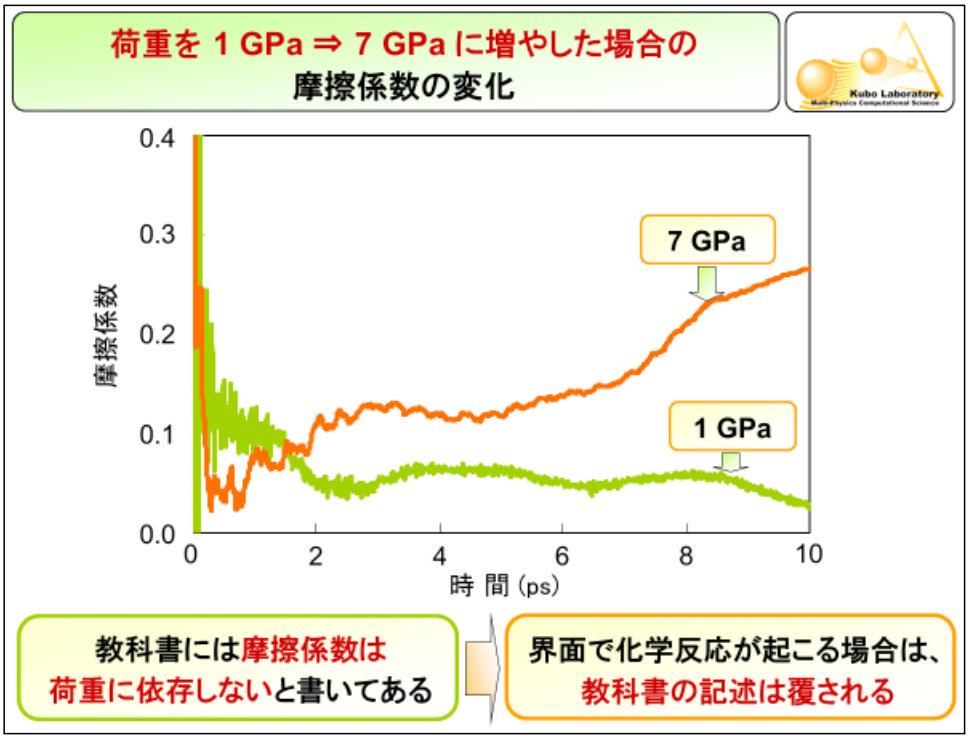


図 4-5-3

実際に実験で摩擦特性を測定すると、摩擦係数がだんだん下がり、その後、急激な摩擦上昇が起こった上述のシミュレーション結果により、この現象は以下のように理解することができる。最初に H_2 が生成することで摩擦係数がだんだん下がり、H_2 が発生しすぎると表面の水素終端がなくなってしまい、摩擦界面に C-C 結合が形成されるため、急激な摩擦係数の上昇が起こる。この摩擦係数の急激な上昇は、エンジンの急なストップを意味し、重大事故に結びつく大変危険な状態である。そこで低摩擦を維持するためにどうするかという理論的なシミュレーションとそれに基づく設計が必要になるが、その結果については時間の関係上、別の機会に報告したい。

次に、燃料電池における大規模計算の結果についてお話したい。固体酸化物形燃料電池の燃料極というのはニッケルとイットリア安定化ジルコニア (YSZ) のポーラス材料でできている。ニッケル粒子が凝集すると触媒活性点のニッケル表面が減ってしまうため、なるべく凝集（シンタリング）を避けたいという要望がある。大規模分子動力学シミュレータを開発することで、300 万原子系のシンタリングシミュレーションが可能になり、初めて多孔質構造内でニッケルが凝集する様子を見ることができた。

これまでの計算手法では不可能であった、多孔度の影響はどうか、ニッケル／YSZ 組成比を変えたらどうなるか、粒子サイズを変えたらどうなるか、などが解析できるようになった。つまり、大規模計算で今まで計算できなかったものを計算できるようになったことで、計算対象の範囲が大きく広がっている。

化学反応を含む構造材料の積層欠陥プロセスのシミュレーションでは、真空状態と水蒸気下の両ケースで、粒界を含む 200 万原子系の大規模計算を可能とした。これにより H_2O があることによって表面で化学反応が起こり、表面上のニッケルが酸化されることによって積層欠陥が早く入るようになるという、化学反応を含む積層欠陥生成のシミュレーションが実現できた。

上記以外に、結晶性ポリマーの計算もできるようになっている。以前の小さな計算規模では、結晶層とアモルファス層が積層したラメラ構造を全く再現できなかったが、現在、100 万モノマー、600 万モノマーという大規模計算ができるようになったことでラメラ構造を考慮した引っ張り強度の計算が可能になっている。100 万モノマーの場合には引っ張り過程において空孔ができないという問題が残ったが、600 万モノマーの場合にはこの問題も解決され空孔の生成も観察された（図 4-5-4）。大規模計算によって今までできなかったラメラ構造を初めて再現することで、現実的な結晶性ポリマーの破壊シミュレーションを実現することができるようになった。

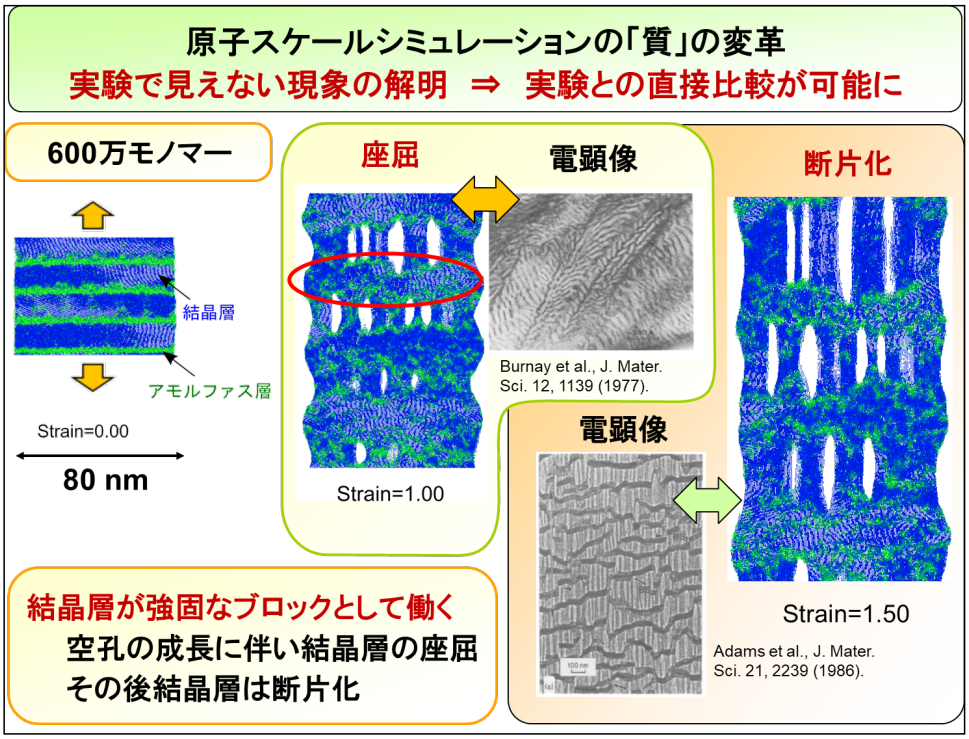


図 4-5-4

このように大規模計算が可能になったことで、マイクロメーターの領域スケールを扱う解析ができ、電子顕微鏡などの実験結果と直接比較ができるようになっている。実験で見えるサイズのものをシミュレーションで直接的に解析、比較できるようになってきたことは、原子スケールシミュレーションの質の変革として、大変興味深い。

超大規模計算の今後の課題としては、化学反応と力学現象が複雑に絡み合ったプロセスの解明である。その一例は、燃料電池の劣化過程の現象解明である。ニッケルと YSZ の性能劣化に関しては、ニッケル表面が水によって酸化して体積膨張することによって力学が働き YSZ に亀裂が発生する。このような化学反応と力学現象が複雑に絡み合った現象を解明したいというのが一つの夢である。

最近では分子動力学法を活用して 2 億原子の大規模シミュレーションができるようになってきている。「京」を使った 1 万 Core の並列計算により、1 μm スケールの全原子シミュレーションが可能になってきた。ここまで大規模になるとビッグデータへの対応が非常に重要になり、インターネットで「京」から計算データを転送しようとすると 3 日弱かかってしまう。つまり、ハードディスクごと新幹線で運んだほうが速いというような時代が来ている。データ伝送がかなり重要な問題となってきている。

図 4-5-5 はナノスケールの化学反応とマクロな力学現象を制御した重厚長大システムの概念図である。大規模な重厚長大システムの設計において、ナノスケールの化学反応とマクロスケールの力学現象が複雑に絡み合ったマルチスケール現象を積極的に活用して、新しい大規模な機械システムを開発していきたいと考えている。

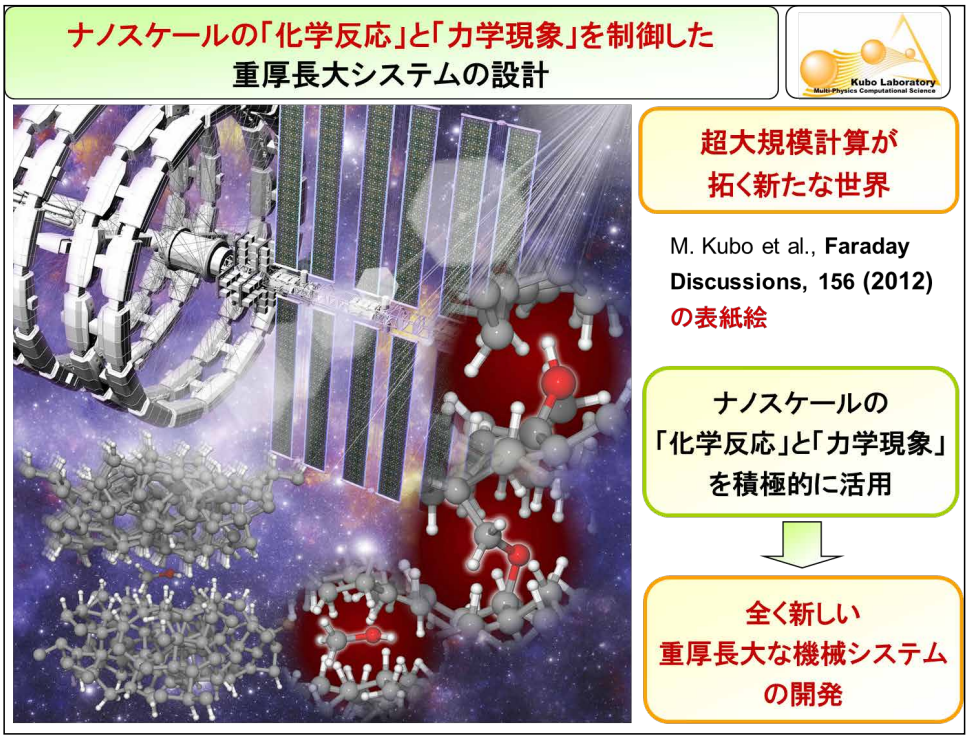


図 4-5-5

【質疑応答】

Q：実験とシミュレーションを合わせるという話がとても魅力的であった一方で、初期構造をつくるのが非常に難しそうなイメージがある。初期構造はどうやって作っているのか。

A：実際には計算時間よりも初期構造をつくる方が 10 倍以上時間がかかっている。ポリエチレンの大規模モデルでは、最初に作成した構造のあるところに引っ張りをかけて、別のところ

は引っ張りをかけないというようなことを工夫しながらラメラ構造を有する計算モデルをつくるのが一番大変である。

Q：ダイヤモンドライクカーボンから H_2 や C-C 結合ができるという話に関連して、有機反応というのは基本的には光反応か熱反応と理解されているが、圧力をかけることで反応するというのはどのように理解したらいいか。

A：摩擦によって原子が衝突するが、原子が強制的に近寄ることによって発生する力学的な作用と、摩擦によって発生する熱による界面温度上昇の 2 つの効果が入り混じって化学反応が起こっていると考えている。

Q：溶液中の化学反応では、原子や分子がランダムに衝突し、その頻度が上がるとたまたまいいところで反応が進むという理解であるが、機械的な場合には方向性を固定して決め打ちで衝突させて速く反応させるという理解か。

A：決め打ちというわけではないが、方向性を固定して強制的に原子が衝突することによって反応が進んでいる。

Q：摩擦によって局所的に非常に温度が上がるとのことだが、分子動力学の計算は温度のファクターというのはどのような形で入れているか。原子の揺らぎのところに入れているのか。

A：原子の速度を v として、$mv^2/2$ の和を求め、それが 3NKT/2 と等しいという式から温度 T を導いている。例えば摩擦の計算だと、計算対象系の上端部分と下端部分は必ず 300K に固定されるように速度を制御して、それ以外の部分は温度を制御しない。この方法により、摩擦によって、端以外の界面部分の温度が上がる現象を再現できることになる。

4.6　物質材料トライボロジーのマルチスケール制御
－高機能機械システムのための低摩擦発現ナノ界面創成－

足立　幸志（東北大学）

本日は、ナノレベルの反応制御によるマクロな機械機能の制御に関してお話する。

私の専門は機械であり、最終ターゲットは大きな機械の信頼性、耐久性を実現することである。様々な機械が損傷したり劣化したりする原因の 75%は、表面と接触面における摩擦・摩耗であると言われている。つまり、界面での摩擦・摩耗が寿命や性能を決める非常に重要な因子であると言える。また、実際に自動車を動かしたときの全エネルギーの 35%は摩擦によって損失しているという調査報告もある。動かせば動かすほど摩擦の損失が大きくなり、エネルギーをロスすることになる。摩擦にともなう性能の劣化やエネルギー損失等、摩擦と摩耗に起因する経済効果は GNP の 2%程度になるとも言われている。したがって、低摩擦という技術はエネルギー利用の飛躍的な高効率化だけではなく、安全・安心かつ省資源・省エネルギーを実現する機械機器をつくることに直結する課題である。

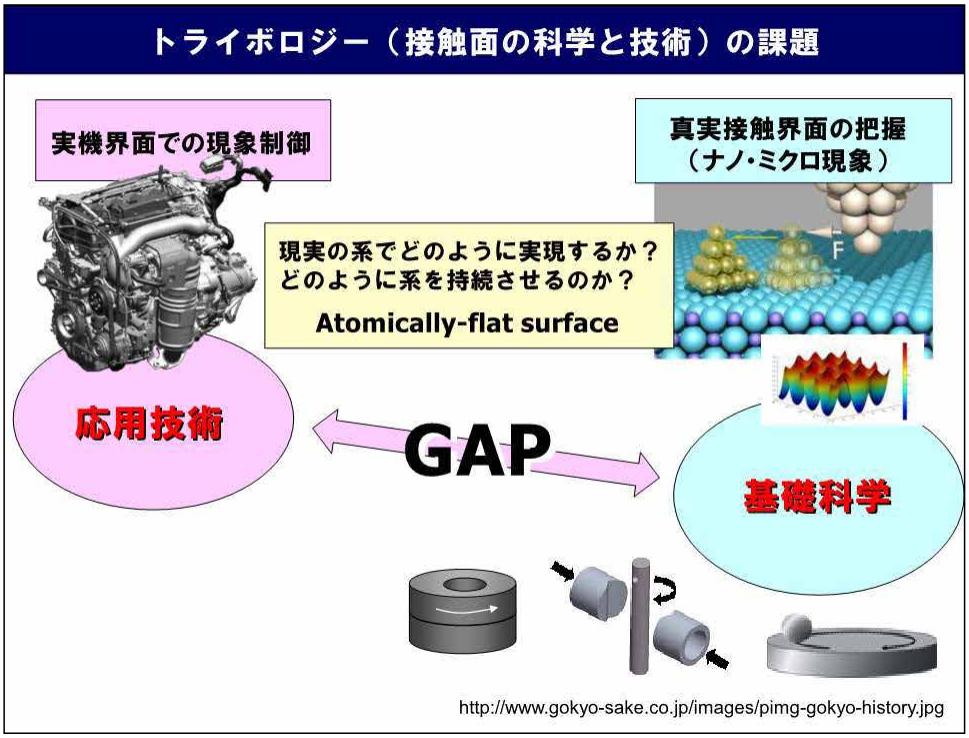


図 4-6-1

最初に、トライボロジーの課題について述べる（図 4-6-1）。基礎科学に基づく理論計算から、ゼロ摩擦の可能性が示唆されているが、それを実現するためには接触面が原子レベルで平らになることが必要であり、実際の機械において接触面を原子レベルで平らにすることはほとんど不可能である。このように基礎と応用が結び付かずギャップが生じていることがトライボロジーの大きな課題である。このギャップを解消するというのが我々のアプローチである。

また、同じ材料であっても荷重や速度、温度などの実験条件の違いによって摩耗率が 6 桁以上異なることがある。このことは仮に摩耗率が 10^{-3}mm^3/Nm くらいのとき 1 分で寿命がくるとい

う機械を仮定すると、摩耗率が 10^{-9} になれば30年もつことに相当する。すなわち、同じ材料であっても、使い方によっては寿命が1分であったり、30年であったりと大きく異なるのである。

ここで言いたいことは、摩擦・摩耗は材料の特性ではなくシステムの応答特性だということである。力学的な設計条件、材料因子、環境因子、さらに潤滑油や、様々な因子を含めて初めて特性が決まるものであり、材料だけでは制御できない。

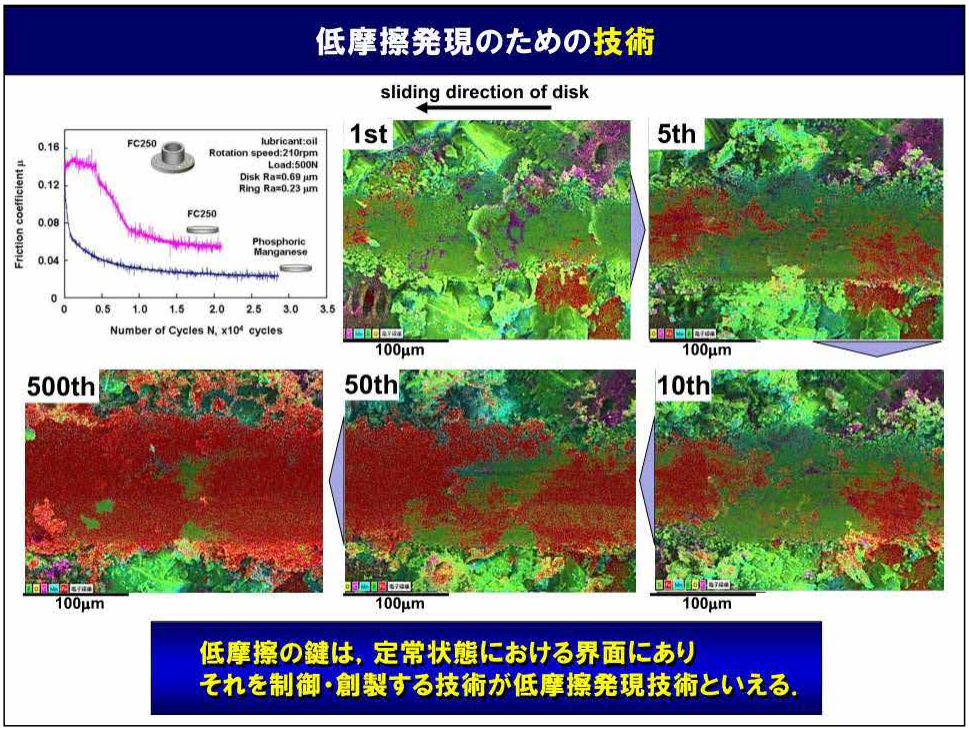


図 4-6-2

次に摩擦面の観察・分析結果について述べる。図4-6-2はSEM（走査電子顕微鏡）で見たときの摩擦面である。摩擦を繰り返していく（図中の1th、5th、10th、50th、500thは繰り返し回数を表す）と、摩擦の低下にともない色が変わっていることがわかる。ここで色は分析による化学的な成分を表しており、徐々に色が変わっているということは摩擦によって成分が変化していることを意味する。これが「なじみ」と言われる現象であり、摩擦運動を繰り返して行くうちに、機械が安定してくる現象である。つまり、初期状態として良い材料を使って良い表面を作っていたとしても、最終的に良い摩擦特性を出している表面は初期とは全く違う状態になっているということである。まさに機械的な刺激によって、機械的な作用、化学的な作用、電気的な作用、熱的な作用などが起きながら、常に形成されている「なじみ」面が摩擦を支配している。摩擦を制御するためには、面がどうなるように材料を準備するかということが重要な要素となる。摩擦エネルギーによって材料がどう変わるのか、さらに摩擦を下げるということはどういう技術に転換されるのか、そのような話の例を次に紹介したい。

ここでは、潤滑剤として水を使うことを考える。水は粘性が小さいため非常に低い摩擦を実現することができる。ただし、低い粘性の流体を使うと許容荷重が低いため、荷重を上げるとすぐ焼き付いてしまうという弱点がある。これをいかに克服するかが大きな課題であるが、着目するのは初期の「なじみ」である。

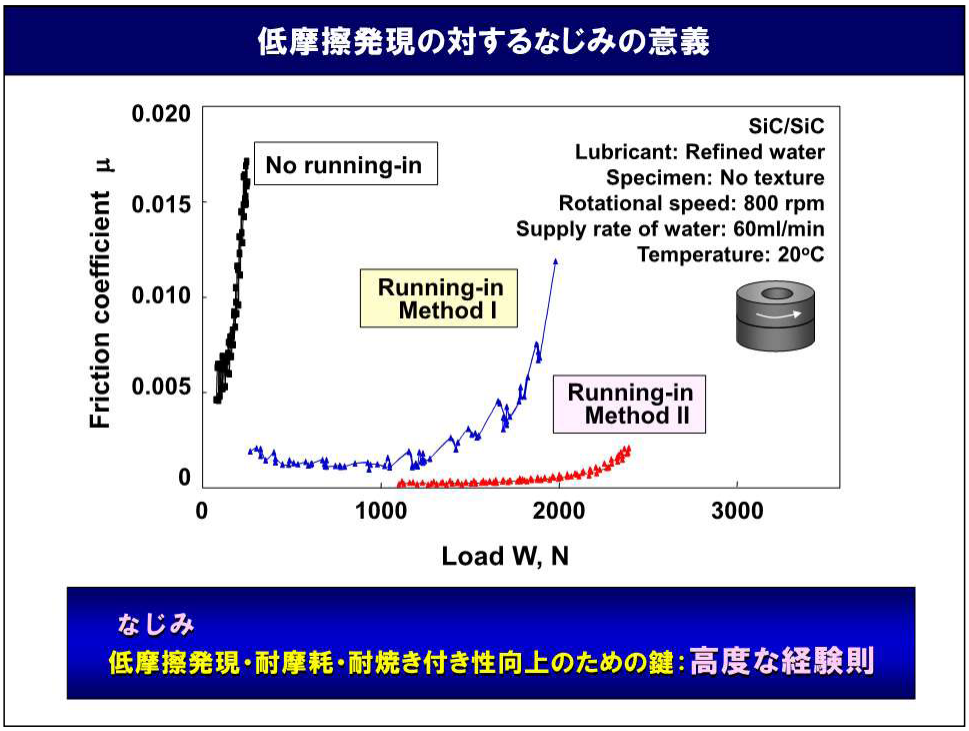


図 4-6-3

図 4-6-3 は、ステップ状に荷重をかけていく「能動的なじみ実験」の結果である。ステップの間隔を固定して、一定の時間が経ったら荷重を上げていく場合（Method-Ⅰ、青線）と、一定の荷重をかけたときに摩擦がこれ以上下がらないというところまで保ってから荷重を上げる場合（Method-Ⅱ、赤線）の 2 種類の試験片を用意する。結果として、何もしなかった場合（黒線）には初めは低い値が出るものの、荷重をかけるとあっと言う間に摩擦係数が上がってしまう。Method-Ⅰの場合（青線）と Method-Ⅱの場合（赤）では、許容荷重に 2 倍以上の違いが見られることがわかった。

次に、図 4-6-4 に示すように、何もしない面とテクスチャーを付けた面をこすった場合の違いを観察した。黒は何もしなかった面、赤はマクロスコピックな溝に加え、最表面にサブミクロンレベルの凸凹をつけた場合の試験片（図 4-6-4 右下図）を使ったときの「なじみ」後の摩擦係数である。テクスチャーをつけることで摩擦係数が黒線から赤線のところまで下がることがわかる。興味深い点は、なじませた後の表面の粗さは、何もしなかった場合の表面とほとんど変わらなくなる。なじませることによって最初の凸凹は全部消え去るが、結果として良い摩擦特性が出る。何が起こっているのだろうか。実はこのことが化学の入口である。

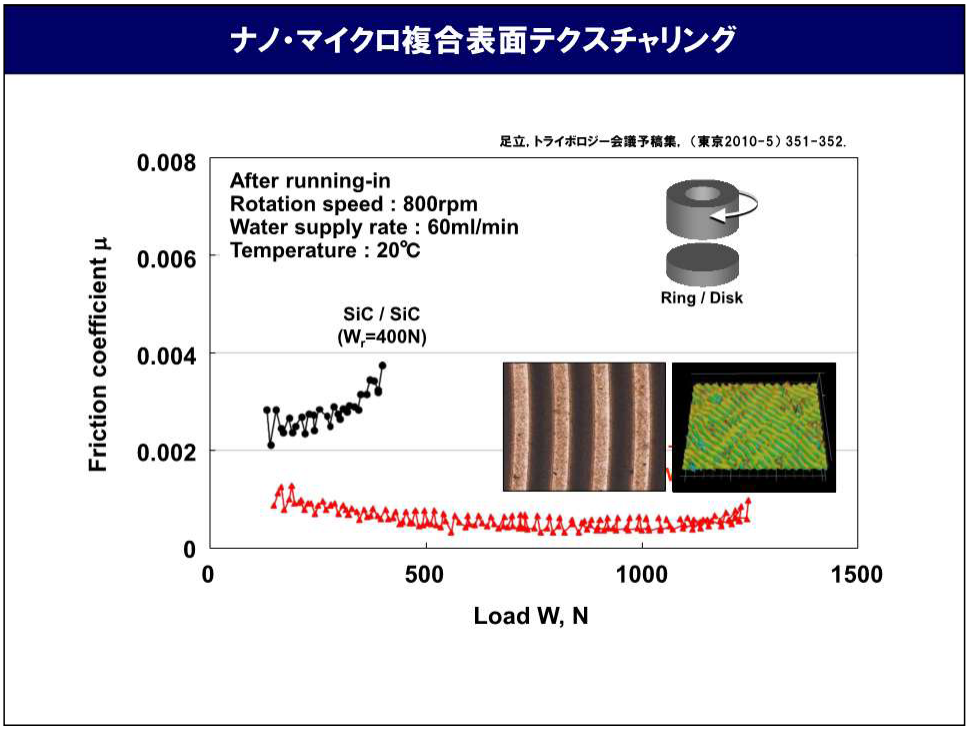


図 4-6-4

図 4-6-5 は炭素系硬質膜の摩擦試験の結果である。100℃（赤）でこすった場合非常に低い摩擦が発生する。そのときの相手（ボール）の面は何もついてないでツルツルのように見えが、ボールの表面には摩擦によってできたカーボン系の膜がある。その膜はラマン分析すると全面にカーボン系のピークが出ており、厚さ 5nm の膜が全面にコーティングされたかのように、覆っているのが分かる。

ここで摩擦が低下した時の摩耗痕を観察した後、再び摩擦を開始すると低摩擦が継続的に維持される。この際、摩耗痕は、大体数 100 nm オーダーで減っていることがわかる。しかし表面には最後まで炭素系の 5nm 程度の層が常に残っている。

これをモデルで考えると、なじみが終わったときには 5nm ぐらいの新しい層ができ、これが低摩擦を発現していることがわかるが、その後 100nm ぐらいこすれてもやはりこの 5nm の層が存在する。さらにこすれても同じく 5nm の層がある。すなわち、なじみ過程においてできたこのナノ界面がずっと継続的にでき続け、定常時における低摩擦発現はナノ界面の継続的な自己形成を意味するものと思われる。このような新しいファンクショナルな層がずっと摩擦中に形成し続けることによって低摩擦を同時に発現するという系が生まれることになる。

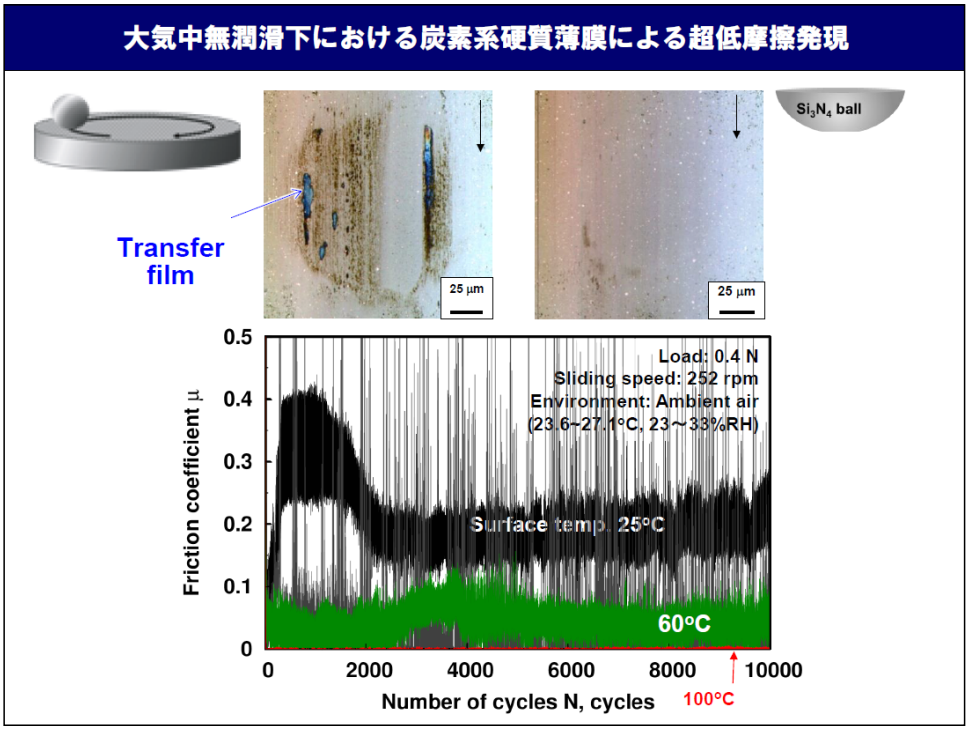


図 4-6-5

以上まとめると、摩擦刺激による超低摩擦発現のためのナノ界面を継続的に自己形成できるということが我々にとってはトライボロジーの科学と工学の橋渡しの一つの方法である。将来的には低摩擦の実現と半永久寿命という設計論につながっていくのではないかと期待している。つまり、ナノという視点からマクロな機械の性能を制御するという一つの道であると考えている。

【質疑応答】

Q：すばらしい実験データをたくさん見せていただいたが、なじみの面の寿命が決まるロジックはどのように考えればよいのか。

A：寿命に関しては、化学反応が一切起きなくなったときである。化学反応が起きるということは良い面ができているということである。化学反応によって摩耗するという理解であり、極端に言うと摩耗し続けることが長寿命化には重要であると言える。ただ、摩耗は化学反応であるため実用上では非常に少なく、摩耗しなくなったときが寿命である。別の観点からは、化学反応を起こす元の材料がなくなったときは当然寿命になる。

Q：大きなラフネスの中に小さいラフネスを入れると摩擦係数が変わるというお話があったが、材料の濡れ性にも似たような話があり、大きな周期的なラフネスの中に小さなナノのラフネスを入れると濡れ性が変わるとか、滑落性が変わるとかあって、その起源が生体のものに由来しているというようなお話がある。摩擦の話というのは濡れ性の話と連動している話なのか、それとも全く違うコンセプトなのか。

A：実際にテクスチャーをつけない場合、ちょっと大きい溝をつけた場合、2 つをつけた場合などそれぞれの場合で濡れ性は変わる。もともと濡れ性が高いほうが高い荷重に耐えられる理屈はある。ただ、実際にはこのテクスチャーは摩擦によって全部なくなってしまうため、濡

れ性はなじみ過程においては有効ではないか。ただ、結果としては新しくできる表面層の濡れ性をどう制御するかということであるが、この場合、テクスチャーはほとんど意味を持たない。

Q：先ほどの 5nm の自己形成層に関して、構造などはどこまでわかっているのか。そういう構造をいつも出すような仕組みを金太郎飴みたいに切っても切っても出てくるような面にしておけば、摩擦などの外部刺激に対して抵抗できるものになると思うが、どこまでわかっているのか。

A：金太郎飴がいいわけではない。例えば潤滑剤が入っているとき、DLC の中にナノメートルで含有した膜をつくっているが、その表面にそれが出てくるのでいいということは考えられるが、その出たものがいかなる膜をその場でつくるかがキーワードになる。

C：金太郎飴であるということは１つの必要条件であると思うが、それが我々の実験でやると本当に二硫化モリブデン１層だけスッときれいになるということが低摩擦の原因なので、それを導くような金太郎飴になっていればそれは同じかもしれないということかと思う。

4.7　動的結合・自己修復性高分子の課題と可能性

吉江　尚子（東京大学）

本日は、動的結合を持っている高分子に何ができるかという視点でお話する。

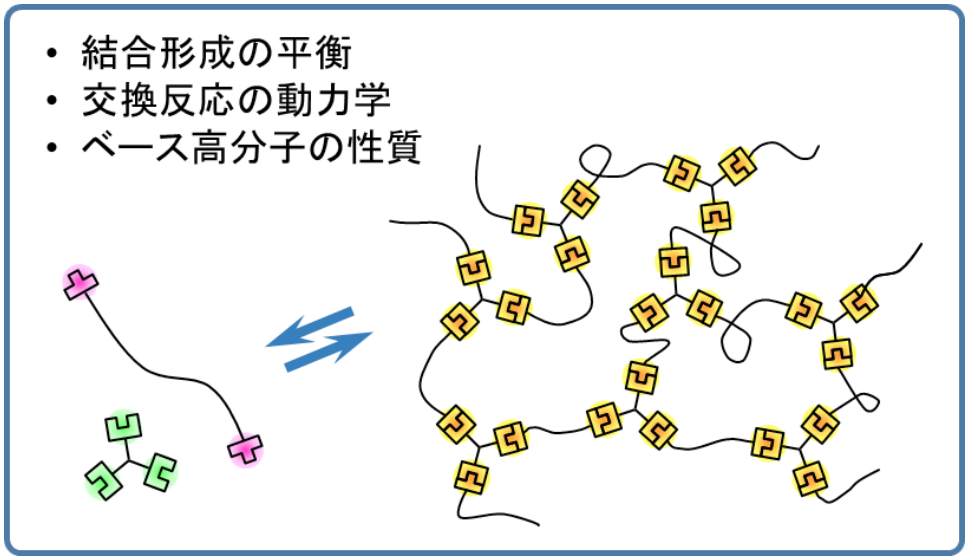


図 4-7-1

つまり、図 4-7-1 に示すように、分子量が数千ぐらいのプレポリマーを動的結合でつないだ、ひもでつながったレゴブロックを組み合わせていくようなイメージで分子を組み上げることを研究コンセプトとした研究についてである。図 4-7-1 はプレポリマーとリンカーをつなぐイメージ図であるが、もちろん架橋だけを動的結合でつなぐことや、リニアポリマーを動的結合でつなぐことも可能である。

ここで重要な観点は動的結合自身の化学平衡である。熱力学的な平衡定数、および交換の速度がこのようなポリマー材料の機能デザインに対して大事な鍵となる。また、本日のワークショップの中でも、ポリマーは非平衡な状態であるとか階層構造性があるなど、様々なキーワードが出ているが、このようなベースポリマーの特性もまた、最終的な機能や物性を決めていく上で非常に重要な要素になると考えられる。

動的結合を使うと、架橋自体を制御したり、架橋の速度をコントロールすることができる。それによって、例えば同じ原料から、機械的な特性が異なるものを簡単につくり分けることが可能となる。図 4-7-2 は、架橋と結晶化の順番を入れ替えただけで、出発物質は同じであるにも関わらず、最終的に全く異なる材料を得た例である。プレポリマーとリンカーを架橋した後に結晶化すると、架橋が邪魔して小さい結晶しかできず、弾性的な材料となるが、先に結晶化してから架橋するとプレポリマー結晶は大きく成長するため、結果として比較的硬いプラスチックを得ることができる。

これらの違いは結晶サイズのみによるため、図 4-7-2 の赤い矢印で示すように硬質材料の架橋を壊さずに結晶を融解することで、軟質材料に遷移させることも可能である。このことは熱的な応答によって機械特性を変えられることを意味する。

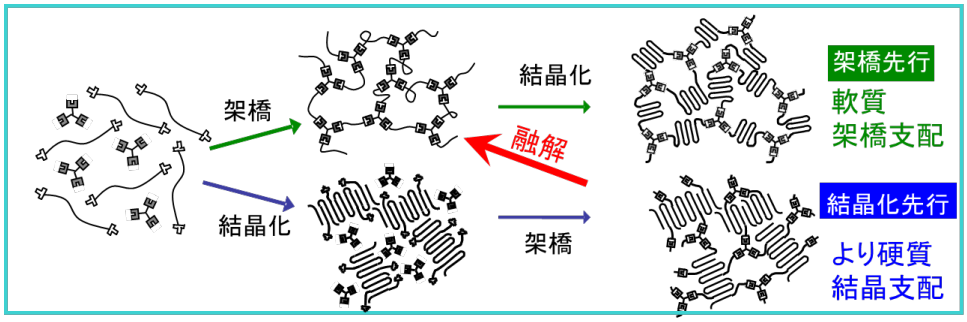


図 4-7-2

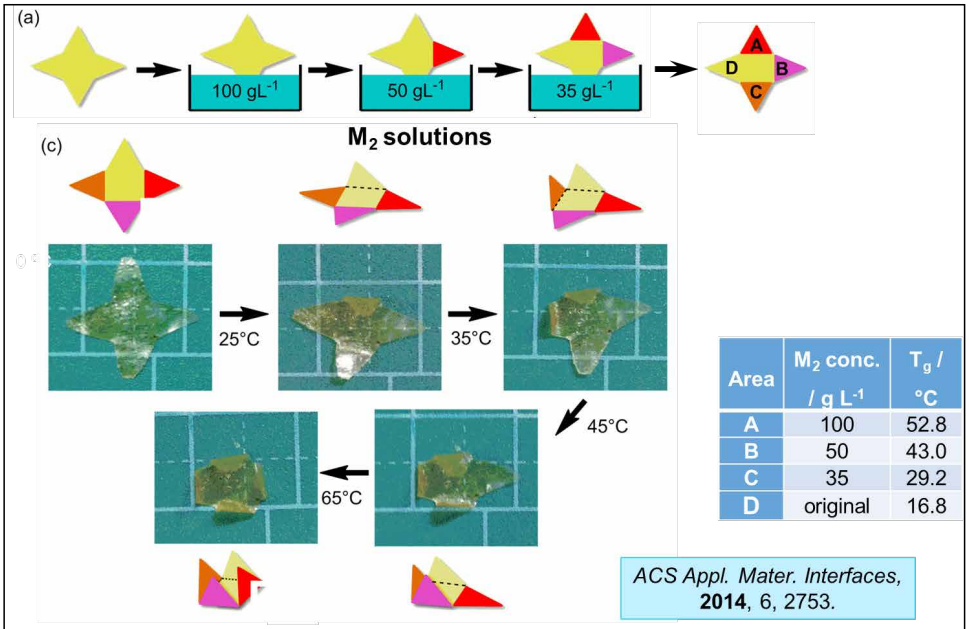


Figure. Sequential shape recovery of a quintuple-shape memory PFS/M by stepwise heating.

図 4-7-3

もう一つの応用に形状記憶がある。高分子の場合には形状をとどめるための転移や架橋が 2 種以上あれば必ず形状記憶の機能を持つ。また、動的架橋ポリマーでは架橋度を簡単に変えられる。このため、例えば図 4-7-3 のような星形のフィルムの羽を 1 枚ずつ、濃度の異なる架橋剤に浸して架橋密度を変えることで、温度上昇とともに羽を 1 枚ずつ段階的に永久形状を回復する物質を簡単に作製することができる。このとき 65℃のホットプレートの上に置くと、羽が 1 枚ずつアニメーションでも見るかのように折れていく様子を見ることもできる。架橋を制御して分子の一次構造を自在に変えることで、その上位にある高次構造も変えることができるため実現される機能の例である。次に、本題となる自己修復の話をする（図 4-7-4）。

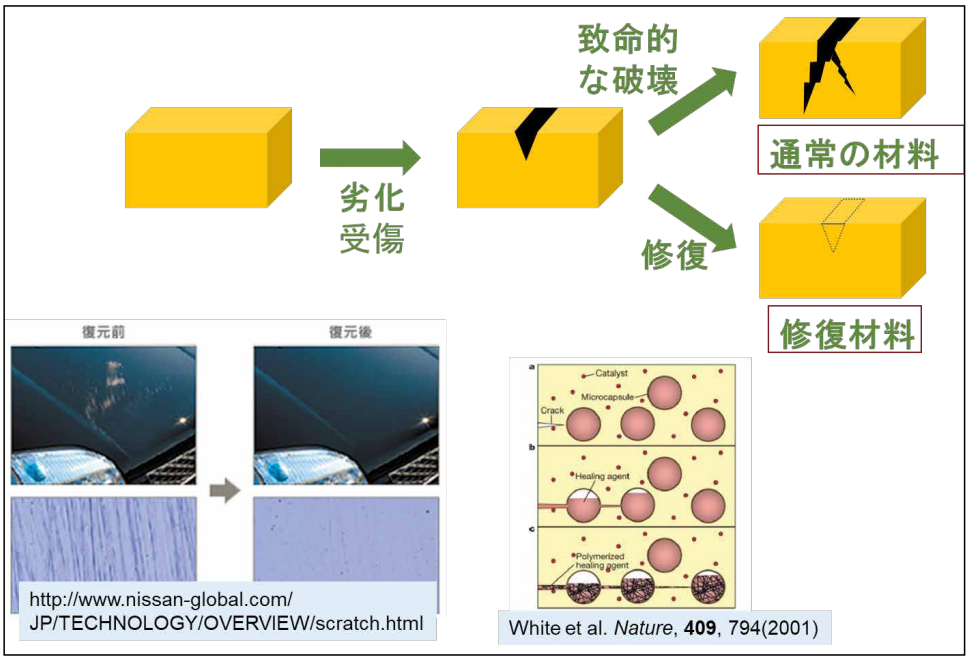


図 4-7-4

小さな傷が致命的な破壊につながる前に修復することが修復材料のコンセプトである。ここでは主に動的結合により架橋されているポリマーを考える。通常の共有結合と、先ほどレゴブロックと申し上げた動的な結合を比較すると、明らかに動的結合のほうが結合力が弱いため、破壊の際には動的結合が優先的に離れて、共有結合は残る。もちろん共有結合が絶対に切れないとまでは言わないが、優先的に動的結合が切れることが容易に想定される。動的結合は可逆反応であるため、放置しておけば結合が再形成されるというのが基本的な修復の仕組みである。このため、動的結合で架橋されたポリマー材料は、基本的には必ず修復するポテンシャルを持っているが、できれば室温で自発的に修復してほしいという期待がある。

実際、東工大の大塚先生のグループでは、ゲル材料を対象に室温で自発的な自己修復を実現している。他にも、室温自発修復をしている例がいろいろ報告がされているが、今のところ、ほぼほとんどの例で修復後の破断強度が 1 MPa 以下である。つまり、修復後も高強度を回復する工夫が今後の課題である。ちなみに、これまで修復後に 1 MPa を超えている例が 4 例報告されており、そのうちの 1 つが我々のグループの成果である。アモルファス状態のポリマーを用いてガラス転移点を十分に低くすることで 25MPa の強度を持つポリマー材料を開発したところ、自己修復後の強度が 3.5 MPa 程度あった。修復率としては低い数字ではあるが、修復後の強度としては非常に高い値になっている。さらに、室温では自己修復が難しくても、容易に手に入る刺激

応答を用いて自己修復させることも重要であろう。例えば瞬間的に加熱した後に室温で放置しても修復する、光や架橋剤を用いて修復する、水や溶媒を用いて修復する、などが挙げられる。特に「水」に関しては、我々は空気中の湿度を刺激剤として修復する材料を開発したが、一種の室温自発修復としてポテンシャルがあると感じている。

その他、「強靭化」や「疲労回復」というキーワードも今後ますます重要になるであろう。強靭化に関しては「なるべく均一な構造の分子をつくって応力集中を防ぐ方法」と「犠牲結合を用いて、分子の中にわざと弱い結合を入れておき、外部刺激に対して弱い結合が犠牲的に切れて全体を保つ方法」の 2 つの戦略があり得る（図 4-7-5）。また材料内部にできてしまった疲労をどう回復するかも重要な課題になっていくのではないかと感じている。

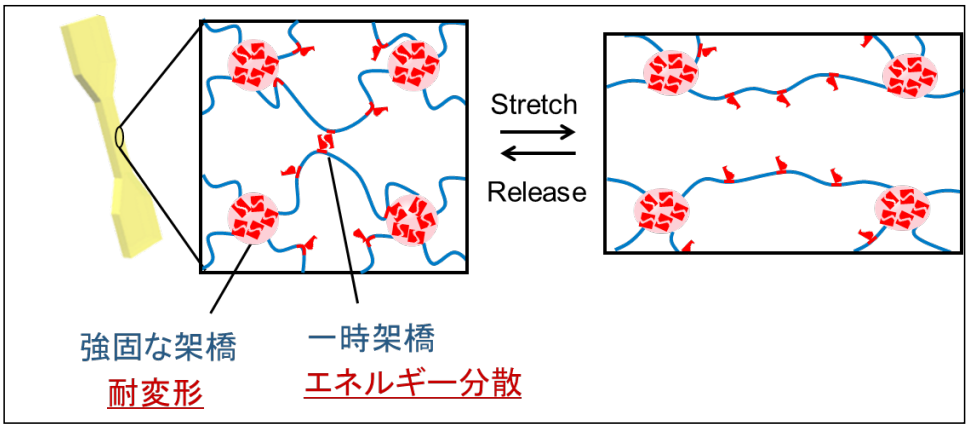


図 4-7-5

【質疑応答】

Q：修復後の強度が 1 MPa を超えた理由として、大塚先生の例はラジカルペアができる結合が弱く結合長が大きかったことに起因するのではないか。吉江先生の例は、C-C ボンドを 2 本つくっていることが関係するのではないかと感じているが、いかがか。

A：今のところ、強度を決めているのはダイナミックボンドの強さではないと考えている。というのも、1 MPa を超えた例の 1 つにダイナミックボンド自体は弱い水素結合を用いたものがあるからである。

Q：修復した後に強度が戻るというデモをよく見せてもらうが、たとえば結合数がどの程度回復したというのは直接見ることはできるのか。

A：間接的な証拠になるが、強度がどれくらい回復しているかが、結合数に比例しているのではないかと考えている。ただし、切断した後もとに戻すときにどうしても試料片間にずれが生じてしまう。したがって、強度がもともとの 90%を超えたら実質的には 100%修復されたと同等とみなしていいのではないかと考えている。

４．８　自己治癒セラミックス材料の最新研究動向と課題

中尾　航（横浜国立大学）

本日は「自己治癒セラミックス材料の最新研究動向と課題」というタイトルにしているが、「自己修復」という言葉を使うこととする。

我々は、ナノのオーダーで自己修復性を発現させるという観点ではなく、機械材料として自己修復性をどうやって活用するかという観点で研究を進めている。マクロにどうやって複合させればよい特性が出るかということである。研究対象は自動車パワートレインや航空機エンジン用高耐熱材料などであり、強度を 100% 以上回復しないと実用材料として全く使われない。我々が開発した材料は強度が 100% 以上回復するため、メンテナンスフリー、超長寿命といった特性を持つ。一般的な材料は、異物が衝突すると強度が下がるが、我々の材料では、初期の強度やパフォーマンスが例え低くても、1 回損傷を受けても 100% 自己修復する。自己修復性が良好である限り、同じレベルで強度が保てる特性を持つことが強みである。

さらに言えば、材料は強度が一番低いところから壊れるが、自己修復すると元の強度より上がる、つまり、使っているうちにだんだんとなじんで強度が上がっていくという特徴を持つ材料になる。実際に機械材料として使う場合、周りの材料が、初期状態が最も強度が高く、だんだん劣化していく中で、自己修復材料だけは強度が上がっていく。こういう状況の中でシステム全体としてどのように使うべきかがいつも課題になる。

高分子材料も含めて、自己修復材料は多く報告されている。化学反応を使うという点に注目すると大きく 3 つに分類されると考えている。1 つ目は、反応物をすべて材料中に人工的に入れて複合するものである。材料の中に自己修復する化学反応材料を人工的に仕込んでおくことで亀裂などが入ったときに化学反応を起こして自己修復するというものである。2 つ目は、周囲の物質（例えば酸素）を自己修復する反応の反応物に使うものである。反応する相方の物質だけを材料中に複合しておくと、損傷が出来たときに、その周囲の物質が侵入してくることで化学反応が起きて自己修復する。3 つ目は、反応物を選択的に収集して修復する材料である。例えば、コンクリート工学分野で報告されたものとして、バクテリアを入れておいて、材料に傷がついたときにそのバクテリアが周辺から自己修復に必要な材料を集めて修復するといったものである。反応形態で言うと触媒のように振る舞う自己修復材料であり、化学反応を使って生体の動的機能を模倣した材料と捉えることもできる。

京大の高木先生が提案したインテリジェント材料は、磁性や電気的な特性で生体の動的機能を模倣しようという概念であった。実際には我々の生体の機能は、適切なところに化学反応物質を送り込んで、化学反応が起きることによって自分で傷が治ったり成長したりしている。したがって、実際に生体の動的機能を模倣するためには化学反応をうまく使いこなすことが非常に重要なポイントになる。これまで実際の機械材料における化学反応は、例えば鉄鋼材料での腐食のように起きてはいけないものとして取り扱われていたが、最近では化学反応がアドバンテージに転ずるのであればどんどん活用して自己修復材料にしようという考え方がでてきている。

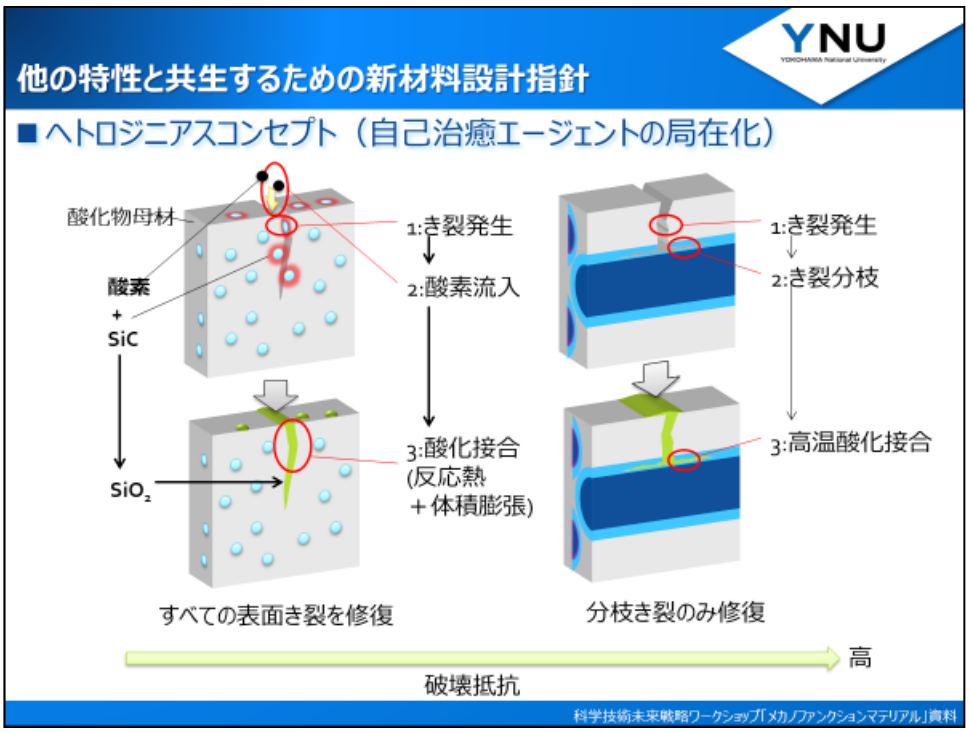


図 4-8-1

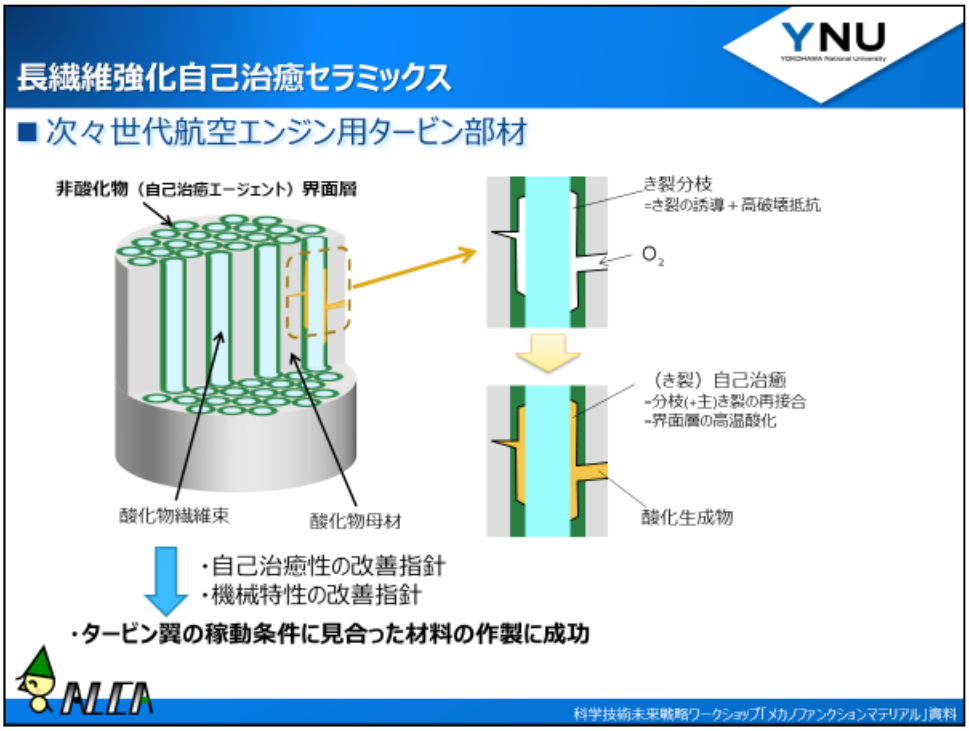


図 4-8-2

自己修復性と他の機能を共生させることで力学機能材料をきちんと実現していく必要があり、そのためのコンセプトが図 4-8-1 に示す「ヘテロジニアスコンセプト」である。

一般的に自己修復材料では、どこで傷が起きても修復されるように、材料中にその自己修復する物質を均質に入れている。しかし、この方法では他の機能とのバランスをとることが難しい。

そこで我々は自己修復する物質を局在化させることを考えた。亀裂、クラックを局在化した自己修復物質に誘導できれば、どんな損傷であっても必ず直るようになり、様々な特性とのバランスをとりながら実用材料を目指すことが可能になる。例えば､今 ALCA 実用技術化プロジェクトで、次々世代のジェットエンジン用のタービン翼を開発しているが、傷が入っても完全に修復する材料の作製に成功している。この材料を実際にジェットエンジンに使うと約 600℃で使っている間に傷が入っても自己修復する材料になる。

図 4-8-2 の緑の部分が繊維強化剤であり、亀裂が入っても脆性破壊する前に亀裂を止めることができる。この状態で応力ひずみセンサで検査すると、止めたところまで亀裂が向かっていき、そこからまた亀裂が伸びるという現象を起こしていることがわかる。しかし、自己修復させることで剛性が 100%回復し、一番弱かったところが壊れて修復されるため最大強度も高くなる。

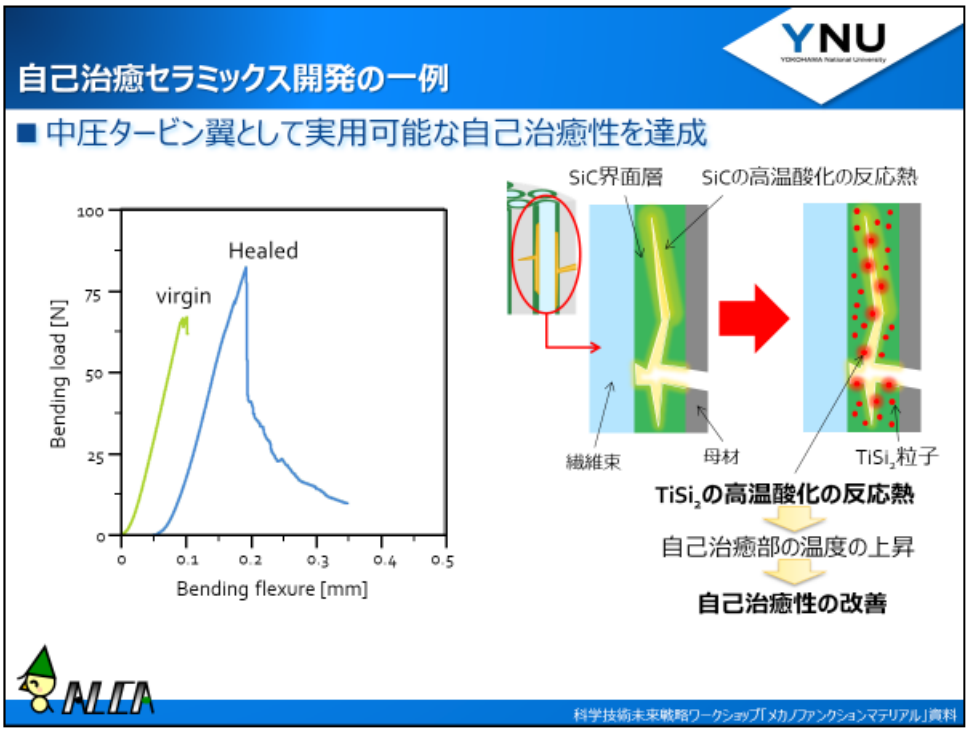


図 4-8-3

亀裂を局在化させるというアイデアを使うと、例えば動的結合のように 1 つの結合の種類だけではなく、複数種の材質の化学反応のコンビネーションでその自己修復性を改善することも可能になる。我々の方法は高温酸化を使っているため、実際には SiC の酸化で修復されるが、実際には高温反応の酸化熱で自己加熱され反応が加速されている。したがって、高い反応熱を出す粒子を共分散しておくと、反応熱によって自己修復時だけ一気に温度が上がって自己修復性が加速されることになる。それを図示しているものが図 4-8-3 であり、これまでは 1,150℃～ 1,200℃という非常に限られた温度域でしか自己修復できなかったが、現状では 400℃といった、自動車用のエンジンや排気部材にも使える温度域でも自己修復するようになった。

最近、MnO を混ぜることで、酸化物を溶けやすくすることで自己修復性を上げた材料も開発しており、注目されている。

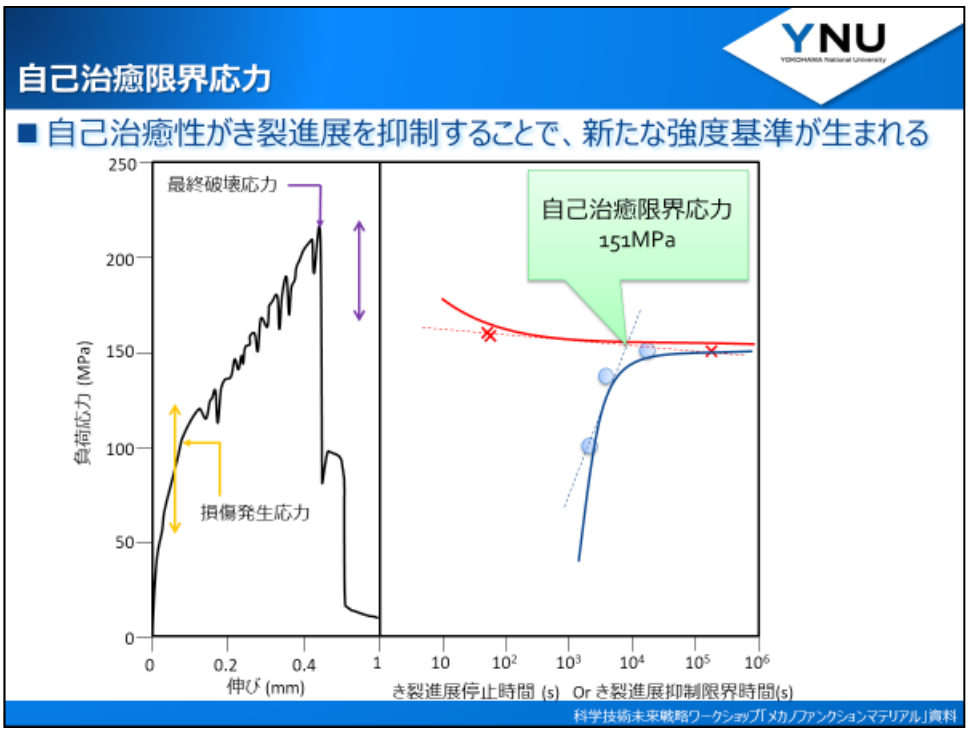


図 4-8-4

また、強度に関しても、ヘテロにしているためコントロールパラメーターが様々あり、数年前までは 30MPa ぐらいだった強度が、最近では 300MPa 程度まで上げることに成功している。つまり、コントロールする成分を多くすることによって、耐性温度や強度などの特性が共生できる材料を作ることが可能になる。

自己修復性とは破壊後の機能である。一方、機械材料の設計は壊れないところで行うため、「面白いね」と言われて終わらないように、自己修復性を力学機能に昇華させる必要があると考えている。つまり、亀裂進展が起こったとしても最後に破壊に至る前に止めることである。そこで、図 4-8-4 に示すように、自己治癒限界応力というものを測定する方法を確立した。この手法はセラミックスだけではなく、高分子系の自己修復材料でも力学機能について議論するときには使えると考えおり、今後、国際共同研究を通じて国際規格にしたいと考えている。

この自己治癒のセラミックスの開発に関しては、いわゆる技術成熟度（TRL）１というのを目指してやっと今の手法が確立し、現在２が達成できたというレベルで、まだまだ萌芽的な段階である。したがって、さらなる基礎研究を通じて発展させなければならず、新素材の開発は技術成熟度というものをどうやって意識しながら開発していくかというのが重要ではないかと感じている。

一方、損傷が起きたら化学反応がすぐ起きるというだけでは使い道が限られる。特にインフラ用の材料などは数十年、数百年その材質がもたなければいけないため、材料が壊れた瞬間に化学反応が起きてしまうと、化学反応の寿命のほうが先になくなってしまう。そこで、何らかの化学反応に対して、熱や化学ポテンシャルのエネルギー場だけではなく、電磁エネルギーや他のエネルギーをトリガーとすることである。インフラ用の材料には修復してほしいときだけ修復してほしいという期待があるため、自己修復ではなくて、例えば保守点検時に発見したひび割れをその

場で直せるような素材を使うことができれば、より高度なインフラ材料というものがありえるのではないか。

逆の発想をすれば、これはもはや自己修復とは言えないかもしれないが、化学反応が常に起こって自己修復され、もうこれ以上は自己修復のための化学反応が起こらないという状況になると色が変わるような反応を入れておく。変色したら寿命だということがわかるため、取り替えるべき場所が容易に発見でき、我々の身の回りにある材料の保全性や信頼性を大幅に高めることが可能になる。

最後に、我が国のこれからの素材産業において、もしくは機械システムを作っていくにあたり、空間の三次元だけではなく時間軸も含めた四次元空間で材料設計をしていけば、日本の技術力をもっと高いブランドにできるのではないか。既に微細構造から機能を生み出すという点に関しては中国やインドでもできる技術になっている中で、今回のテーマであるメカノファクションが時間経過とともにパフォーマンスが上がるとか、使っている間に修復できるといった時間軸を取り入れた機能を実現させることが重要ではないか。それによって日本の素材メーカーもさらに強くなり、国際競争力のある産業として復興できるのではないかということを提案したい。

【質疑応答】

Q：繊維複合材に亀裂が入ると変形が残ると思うが、自己修復後に変形は逆応力をかけて戻すような思想なのか。

A：現状としては、長さ的には 10 ミリぐらいのものまで直すことができており、実際には部材全体の変形は亀裂の幅が効くが数ミクロン程度であるため部材全体が変形することまでは想定していない。

Q：硬い材料に関しては亀裂を止める必要があるが、亀裂を止めるということと自己修復をどう組み合わせるのか。つまり、本当の硬い構造材料をつくるときにどうやって自己修復機能を入れていくかということが一番ポイントになるのではないか。

A：亀裂が進展する方向で止めるのは非常に難しいため、いかに横に逃がすかがポイントである。つまり、破壊力学で言うところのモードⅠからモードⅡに移行させることによって亀裂進展抵抗を大幅に上げることが可能になる。重要なポイントは、亀裂を曲げたいところで弾性率差の階段をつくることである。これで大体モードを変更することができる。

Q：通常の構造材料では力学的には応力拡大係数などが設計上の指針となるが、自己修復材料では応力拡大係数は設計指針として、さほど意味を持たなくなるということか。

A：その通りである。応力拡大係数で評価を行うことは基本的にはモードⅡでもできるが、モードⅡに転身した瞬間に応力拡大係数の中にさまざまな相互作用が入ってきて、評価が困難になる。したがって、実際に CFRP やセラミックス系の複合材料がそうであるように、応力基準では設計ができない。しかしながら、自己修復性が非常に高い材料の場合には、限界応力において亀裂進展の抵抗が応力に依存しない自己修復性で補われてしまうため、応力基準で考え直せるようになる。この点が自己修復材料の機械用途においての一番のメリットになる。

5. 総合討論

ファシリテーター：清水　敏美（JST-CRDS、産総研）

これまでの各プレゼンテーション・質疑、招聘者への事前アンケート結果を踏まえて、以下の4つの論点について議論を行った。

1. 提言の骨子の仮説検証
2. 取り組むべき研究開発課題と時間軸
3. ナノからマクロまでを相互に接続させる連携・融合の方策、産学連携の課題
4. 目標とするゴール、研究開発のアウトプット

以下では総合討論において挙がった主要な議論に関して、項目ごとに要約して記載する。

1. 提言の骨子の仮説検証

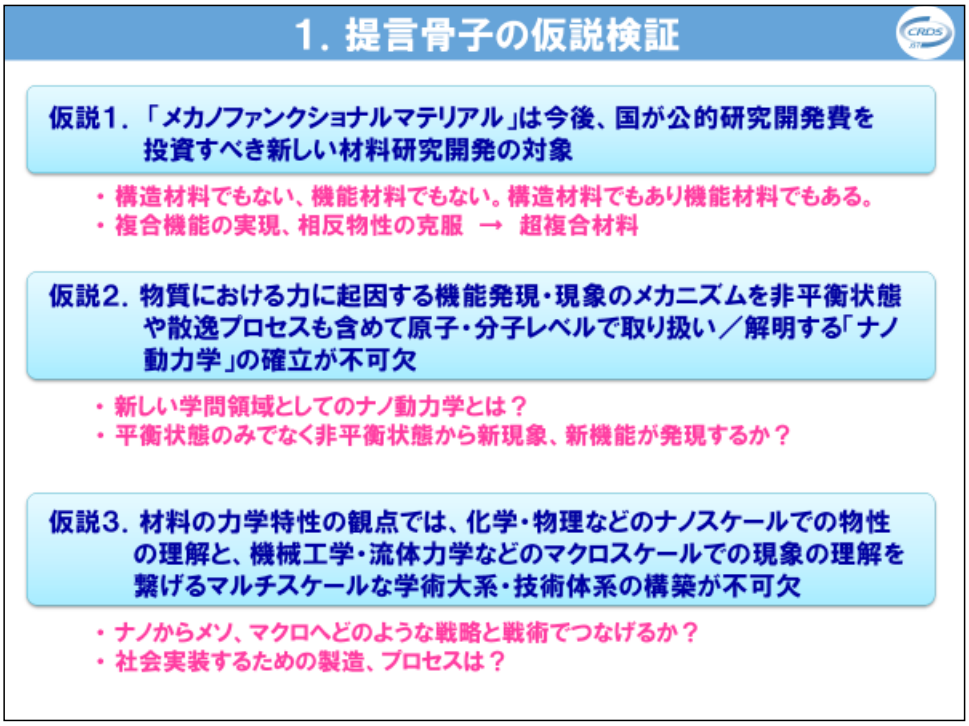


図 5-1 プレゼンテーションから得られた主な意見

仮説1に関する主な意見

- メカノファンクショナルマテリアルとは構造材料でもあり機能性材料でもある新しい枠組として捉えられるのではないか。
- 以前から化学反応と力学場との相互作用について考えていたため、メカノファンクショナルマテリアルという言葉に違和感はない。構造材料といってもタフネスや強さというのも機能と考えるとマルチフィジックスになりメカノファンクションの範疇に入る。
- 「メカノファンクショナルマテリアル」という言葉は、材料を作っていない人（トライボロジーなど）からは直接の関係がない領域と感じられるかもしれない。

・メカノファンクショナルマテリアルと聞くと、かつてのインテリジェント材料やスマート材料のイメージがあったが、もっと広く、力学的なものを使った機能性材料と捉えた方がいいのではないか。その意味では、インテリジェント材料ともスマート材料とも異なる概念ではないか。
・メカノファンクショナルマテリアルには、分子レベルの構造変化がバルクの性質を決める、もしくはバルクの刺激が分子レベルにまで達して何かを変化させる、といった概念も含まれるのではないか。
・ネーミングに関して、構造材料との違いを明確にするためにも、アクティブに機能を付与するようなイメージがほしい。
・メカノファンクションというときに、人によってファンクションにかける想いが異なり、アクティブな機能をイメージする人もいれば、静的な力学特性をイメージする人もいる。無理して規定する必要もないようにも感じる一方で、広すぎるような気もしている。
・化学や物理ではナノスケールになじみがあるが、機械系から見たときに本当にナノスケール解析の必要性をどれくらい感じているか。またそれらを繋ぐ際にはシミュレーションの役割が非常に大きいのではないか。
・破壊現象とは亀裂の進展であり、亀裂も最初は原子レベルから始まる。亀裂は非常にマルチスケール性が高い現象であり、まだ計算では解くことができない古くからある課題であり、ここにチャレンジする意義がある。
・トライボロジー分野においては、シビアな接触状態の中で機械を動かす必要があり、接触状態における耐久性を極限まで上げようとするとどうしても化学反応まで理解する必要がある。つまり、ナノスケールのことは考えなくても機械設計できた時代から、ナノスケールでの理解なくして設計できない時代になりつつあり、この傾向は今後も続くと思われるため、この領域はますます重要になると感じる。
・セラミックス分野も従来のように応力拡大係数だけで破壊を記述できない材料が増えている。
・力学機能と化学反応の相互作用に着目すると、無機材料にも高分子材料にも共通の議論になるのではないか。
・社会ニーズから考えると信頼性や安定性をどう担保するのかということが重要な課題であり、その両方を一緒に議論すると混乱するため分けて考えた方が良い。
・機械的刺激を与えたときにのみ到達できる機能相があり、新物質合成に機械的刺激を用いるのもおもしろいテーマになると感じている。
・自動車業界においても、力学現象のメカニズム解明は重要な課題と認識している。そこを解明することで、刺激応答によって自由に取り外しができたり（リサイクルの観点）、劣化しない、もしくは寿命がわかる材料というものにつなげていきたい。

仮説２、仮説３に関する主な意見
・力学というときには、ナノだけではなくマクロまで繋ぐ学理が必ず必要になる。
・ナノからマクロ、マクロからナノといったスケール間の相互接続が重要になると思われるため、「トランススケールマテリアル」という言葉でもいいかもしれない。
・分子動力学や第一原理計算などのナノスケールの計算手法や、計測でもナノスケールや非常に短い時間の観測が可能になっている中で今後はそこから得られたナノスケールにおける知見を元にいかに学理に高めていくか、メソやマクロへ繋げていくことこそチャレンジすべき

である。

・機械工学の立場から見た場合、ナノレベルでの現象を見ることでサイエンスを高めていることは事実であるものの、実際には外乱などの影響が無視できないため、ナノだけでマクロ現象を説明することはできないはずである。ただ、ナノで起こっていることを踏まえてマクロを理解することは可能ではないか。
・マルチスケールシミュレーションでは、ある特定の状況を仮定した上で、実際の系がどういう応答をするかを調べているに過ぎないため、実際に材料の中でキーとなっているところを如何に抽出してモデリングするかがシミュレーション結果を左右する。
・計算手法は確立されたものがあるため誰でも使うことができるが、重要なキーポイントを見つけ、どうやって実際の系に見合ったモデルを構築するかは個人の力量が問われるところである。正しくモデリングするためにもナノとマクロ、理論・計算と実験のコラボレーションが重要になる。
・界面は z 軸方向には原子・分子レベルだが、xy 方向はマクロスケールであり、マルチスケール解析を実践する良いモデルケースになるのではないか。
・力の単位についてナノからマクロまでをもっと定量的に考えるべきではないか。
・プラスチックを例にすると、ガラス転移温度以上に加温してプラスチックが溶ける際に高分子がどの程度動いたら形が崩れるかというと、ちょうど 1nm ～ 2nm 程度である。つまり、ナノスケールを理解するということは、樹脂材料や複合材料でも必ず必要になる。
・ナノとマクロはおそらくつながっていると思うが、その相関がはっきりしていない。現状ではナノ、メソ、マクロとそれぞれのスケールでの知見がようやく得られるようになってきている状況であるため、これらの情報をシミュレーションとうまく協働して進めていくことが重要ではないか。
・ナノ動力学だけが必要とは思わないが、そこを確立しないと単なるトライアンドエラーの性能追求だけになってしまう恐れもあるのではないか。
・熱や光はスカラー量であるのに対し、力はベクトル量で必ず方向性が入ってくる。ここに何か面白いことが眠っているのではないか。

2．取り組むべき研究開発課題と時間軸

・サステイナビリティという観点は非常に重要であり、単にある機能が優れているというだけではなく、10 年先や 20 年先、リサイクルも含めて非常に注目される時代になっている。
・そのため、従来のように売って終わりのビジネスではなく、製品を使用している間の経年劣化やリサイクルも含めて設計していくことが必要。
・世界の自動車産業を見た場合、日本とドイツの車は壊れにくく、信頼性がきちんと確保されていることが世界標準になっているが、学理がない。
・トライボロジーに関しても経験則やノウハウがものすごく蓄積されているが、ここにも学理が必要である。また、時間軸を考慮した設計も重要な概念である。

３．ナノからマクロまでを相互に接続させる連携・融合の方策、産学連携の課題

・ナノからマクロまでを繋げて理解するためには、1 つの大学では不可能で、放射光や中性子などの計測技術や大型コンピュータとの連携が必須である。そのため、分野を超えた共同研究体制、産学官連携のフレームワークが必要。研究期間も 10 年くらいが必要。
・違う分野間の人たちが議論する場が必要である。例えば亀裂の進展に関しては、セラミックスや高分子の研究者が一緒になって議論できるテーマであり、異分野融合・産学連携がうまく進むテーマになりえるのではないか。
・CREST のような仕組みで異なる分野の研究者が同じ領域の中で集まって議論し、交流することも有効な手段である。たとえアプローチの仕方が異なっていても力学特性を上げるという共通目的を持つことで新しい考え方が生まれる可能性が高い。
・複数の関連学会を横断する研究会のようなものを作って、そこに企業も巻き込んで産学で将来の方向性を議論する、という形も有効ではないか。

４．目標とするゴール、研究開発のアウトプット

・宇宙や海底など、人間が住めなかったところに住むためのインフラ材料
・劣化しない材料、疲労しない材料
・無限寿命を持つ機械
・自己修復過程を完全にシミュレートできる手法
・材料レシピ提案ロボット
・壊れない材料、壊れても 100%リサイクル可能な廃棄物ゼロ材料
・全ての力学特性メカニズムの完全理解、力の自在制御技術
・オーダーメイドマテリアル
・完全循環材料
・多機能性分子
・生き物に近く、情報とコネクトする材料

５．その他

・ 材料開発をする際には、産業にどの程度使えるかの視点、大きな経済の流れやトレンドに合致しているのかどうかの視点を持つことも重要。
・ アカデミアサイドにおいても耐久性や安定性が実用ベースで本当にどこまで使えるのかについて研究することも今後は必要になってくるのではないか。
・ 材料を力学機能に対する評価解析手法や製造プロセスについてもしっかりと検討する必要がある。また、力学材料の定量的な指標が何なのかをはっきりさせないと学理にまで昇華していかないのではないかという懸念もある。
・ 製品開発・設計という観点からは、如何にロバスト性を高め、かつ、ばらつきなく大量生産するかということも重要な要素ではあるが、最終的にはコストのみで評価されてしまう。性能や耐久性がいくら高くてもコストが高くては市場に出ていかないという観点も必要。

6. 閉会挨拶

曽根　純一（JST-CRDS）

本日、皆様と一緒に議論させていただいてわかったことは、化学や機械、高分子やセラミックスといった一見異なる分野であっても、共通した問題意識に昇華できるのではという点である。メカノファンクショナルマテリアルという我々が作った造語に対しても様々な意見を頂戴した。特に、材料の力学的特性というと構造材料特有の問題ではとの先入観を持っていたのだが、構造の変化が新たな化学反応を引き起こすとの意味で、電子論的な世界ともつながっていく点は大変興味深く、改めて新しい学術領域を拓くことができるのではないかという想いをもった。

接着・接合、軽量・高強度といった機能は産業的にも重要なキーワードになっていて、既にエンジニアリングの世界で盛んに研究開発がなされているが、将来を考えたときにはやはり原子・分子スケールの現象解明が必要になってくるのではないかと考えている。

そのためにもやはり新しい学理が必要であることが明確になったように感じた。今日議論したテーマはほとんど全てと言っていいほど、非平衡状態が関与しており、時に化学反応も考慮したうえで摩耗や摩擦などの動的解析をすることが現象の理解には必要となっている。また、総合討論でも議論がなされたように、力はベクトル量であって、これまでとは異なる学問体系が必要になる可能性もある。そこを明らかにすることで、新しい産業を作るだけではなく、既存のエンジニアリングの世界にも強力なフィードバックを生みだすことができるのではないかと感じた。

今後、我々の中でさらに検討を進めた上で、提言書を作っていくことになるが、引き続き、一緒にご議論いただけると有難い。

本日の有意義な議論に感謝したい。

付　録

付録１：開催趣旨・プログラム

開催趣旨

JST 研究開発戦略センター（CRDS）は、科学技術に求められる社会的・経済的ニーズを踏まえて国として重点的に推進すべき研究領域や課題を俯瞰の視点から系統的に抽出し、その研究開発戦略を提言する公的シンクタンクとして活動しています。活動の過程において、研究開発動向の俯瞰を目的とした「俯瞰ワークショップ」や、重要テーマの研究開発戦略を議論する「科学技術未来戦略ワークショップ」などを開催してきました。本ワークショップ「メカノファンクショナルマテリアル」は、上記科学技術未来戦略ワークショップの一つとして開催するものです。

メカノファンクショナルマテリアルとは、物質に作用する機械的な力との関係において機能を発揮する材料を指す語として用いる造語です。例えば、接着・接合・剥離、低摩擦、自己修復・破断などに関する材料や、発光性メカノクロミズムや超弾性などのマクロな機械的刺激によって応答・機能発現する材料系全般を指しています。近年、素材産業では、軽量・高強度、柔軟・高靭性、小型・高出力など一般にトレードオフとされる物性・機能を克服する材料へのニーズが高まり、世界的な市場拡大傾向にあります。求められる材料機能を実現するためには、物質における力に起因する機能発現・現象のメカニズムを原子・分子レベルで取り扱い／解明する「ナノ動力学」の確立が重要であると考えられます。さらにナノスケールにおける原子・分子の力学挙動がマクロな現象にどのように作用しているのか、またはマクロな刺激がナノスケールの動力学的挙動にどう影響するかをマルチスケールでつなげ明らかにすることで、新材料設計指針を得て、既存材料では実現されていない高機能・新機能を持つ革新的材料の開発を企図しています。

本ワークショップでは、メカノファンクショナルマテリアルの先行研究事例に関する話題提供を中心に、ImPACT タフポリマーから見えてきた新たな発展の方向性や、産業界の材料研究開発へのニーズ、今後の課題などを基に、中長期的な研究開発戦略を議論します。メカノファンクショナルマテリアルの新しい研究開発の方向性を、わが国がどう戦略的に進めていくべきかについて、現状認識や問題点を含めた総合的な議論から共通認識を得たいと考えています。

なお、本ワークショップは非公開とさせていただきますが、ワークショップ開催後に CRDS では、ワークショップ報告書と、さらに研究開発戦略を提言書として取りまとめた戦略プロポーザルを発行する予定であり、いずれも CRDS の web サイト上で公開する予定です。

プログラム　（敬称略）
開催日時：2017 年 12 月 21 日（木）10:00 ～ 17:50
開催会場：JST 東京本部別館 2 階セミナー室

オーガナイザー　曽根　純一（JST-CRDS）
ファシリテーター　清水　敏美（JST-CRDS、産総研）
司会　宮下　哲　（JST-CRDS）

10:00 ～ 10:05　開会挨拶　曽根　純一（JST-CRDS）
10:05 ～ 10:20　ワークショップ趣旨説明　宮下　哲　（JST-CRDS）

先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ
10:20 ～ 10:40　「ImPACT タフポリマーから見えてきた発展の方向性」
伊藤　耕三（東大／ JST）
10:40 ～ 11:00　「ソフトクリスタル力学特性の課題と方向性」
伊藤　肇　（北大）
11:00 ～ 11:20　「次世代自動車における材料技術への期待」
齋藤　平　（トヨタ自動車）
11:20 ～ 11:40　「半導体実装で求められる材料機能－接合界面創成技術－」
須賀　唯知（東大）

メカノファンクショナルマテリアルのトレンド・課題・将来展望
13:00 ～ 13:20　「高分子機能材料の精密制御と新機能付加の可能性」
田中　敬二（九大）
13:20 ～ 13:40　「分子を使った機能接着と分子レベルでの力の理解」
齊藤　尚平（京大）
13:40 ～ 14:00　「高分子材料開発と刺激応答の新しい方向性－易解体性接着材料を中心に－」
佐藤　絵理子（大阪市大）
14:00 ～ 14:20　「非線形マルチスケールマルチフィジクス現象モデルからの材料設計」
尾方　成信（大阪大）
14:20 ～ 14:40　「マルチスケールシミュレーションが拓く材料現象」
久保　百司（東北大）
14:40 ～ 15:00　「物質材料トライボロジーのマルチスケール制御
－高機能機械システムのための低摩擦発現ナノ界面創成－」
足立　幸志（東北大）
15:10 ～ 15:30　「動的結合・自己修復性高分子の課題と可能性」
吉江　尚子（東大）
15:30 ～ 15:50　「自己治癒セラミックス材料の最新研究動向と課題」
中尾　航　（横国大）
15:50 ～ 17:50　総合討論　ファシリテーター：清水　敏美（JST-CRDS、産総研）

論点　１．提言の骨子の仮説検証
　　２．取り組むべき研究開発課題と時間軸
　　３．ナノからマクロまでの相互に接続させる連携・融合の方策、産学連携の課題
　　４．目標とするゴール、研究開発のアウトプットとアウトカム・ビジョン

17:50 ～　　閉会挨拶　　曽根　純一（JST-CRDS）

付録２：参加者一覧

招聘識者

（発表者）

・足立　幸志　　東北大学トライボベーストデザイン研究センター　センター長／大学院工学研究科　教授
・伊藤　耕三　　東京大学大学院新領域創成科学研究科　教授／内閣府 革新的研究開発推進プログラム（ImPACT）　プログラム・マネージャー
・伊藤　肇　　北海道大学大学院工学研究院　教授
・尾方　成信　　大阪大学大学院基礎工学研究科　教授
・久保　百司　　東北大学金属材料研究所　教授
・齊藤　尚平　　京都大学大学院理学研究科　准教授
・齋藤　平　　トヨタ自動車株式会社 基盤材料技術部　グループ長
・佐藤　絵理子　大阪市立大学大学院工学研究科　准教授
・須賀　唯知　　東京大学大学院工学研究科　教授
・田中　敬二　　九州大学未来化学創造センター　センター長／大学院工学研究院　教授
・中尾　航　　横浜国立大学大学院工学研究院　教授
・吉江　尚子　　東京大学生産技術研究所

（コメンテーター）

・大村　孝仁　　物質・材料研究機構 構造材料研究拠点　副拠点長
・加藤　仁一郎　旭化成株式会社　上席理事／研究・開発本部　研究開発センター長
・宍戸　厚　　東京工業大学科学技術創成研究院　教授
・日向　秀樹　　産業技術総合研究所 構造材料研究部門　研究グループ長
・古川　英光　　山形大学大学院理工学研究科　教授／ライフ・3D プリンタ創成センター　センター長
・古川　裕一　　昭和電工株式会社 小山事業所 技術統括部
・宮田　博之　　宇部興産株式会社 研究開発本部 企画管理部　部長

JST-CRDS 動力学制御新材料チームメンバー

・曽根　純一　　ナノテクノロジー・材料ユニット 上席フェロー
・清水　敏美　　ナノテクノロジー・材料ユニット　特任フェロー／国立研究開発法人産業技術総合研究所　フェロー
・宮下　哲　　ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー／チームリーダー
・伊藤　哲也　　ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
・大平　竜也　　環境・エネルギーユニット フェロー
・小名木伸晃　　ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
・佐藤　勝昭　　ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー／ JST 研究広報主監
・永野　智己　　ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー・ユニットリーダー /JST 研究監

関係府省・機関

・平山　雅章　　内閣府 政策統括官（科学技術・イノベーション担当）付 産業技術・ナノテクノロジーグループ　上席フェロー
・田村　泰嗣　　文部科学省研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付　係長
・坂元　亮介　　文部科学省研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付
・石田　一郎　　経済産業省製造産業局 製造産業技術戦略室　重要技術管理専門職
・西村　睦　　国立研究開発法人物質・材料研究機構 経営企画部門　部門長
・岡田　明彦　　国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター 研究員
・北川　和也　　国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 材料・ナノテクノロジー部 主任
・加藤　隆史　　東京大学大学院工学系研究科　教授／ JST さきがけ「分子技術」研究総括
・汐月　大志　　トヨタ自動車株式会社 基盤材料技術部　主任
・塚本　建次　　昭和電工株式会社　特別顧問
・吉村　正文　　宇部興産株式会社 研究開発本部 企画管理部　主席部員

JST

・中山　智弘　　CRDS 企画運営室　室長
・伊藤　聡　　CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット　特任フェロー／国立研究開発法人物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点　拠点長
・田中　一宜　　CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット　特任フェロー／国立研究開発法人産業技術総合研究所　名誉リサーチャー
・中村　亮二　　CRDS 環境・エネルギーユニット　フェロー
・黒沢　努　　JST 研究開発改革推進部 調査役
・浅野　佳那　　JST 研究開発改革推進部 副調査役
・相田　俊一　　JST 研究開発改革推進部 主任調査員
・藤枝　信次　　JST 戦略研究推進部 主任調査員
・瀧川　久美子　JST 研究プロジェクト推進部 主任調査員
・水本　邦彦　　JST 研究プロジェクト推進部 主任調査員
・小嶋　格　　JST 産学共同開発部 主任調査員

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

曽根　純一	上席フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット）
宮下　哲	フェロー・リーダー	（ナノテクノロジー・材料ユニット）
伊藤　哲也	フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット）～平成 30 年 3 月
	調査役	（イノベーション拠点推進部）平成 30 年 4 月～
大平　竜也	フェロー	（環境・エネルギーユニット）
小名木伸昭	フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット）
佐藤　勝昭	フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット) ～平成 30 年 3 月
	特任フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット) 平成 30 年 4 月～
永野　智己	フェロー	（ナノテクノロジー・材料ユニット）
前野　仁典	主任調査員	（戦略研究推進部）～平成 30 年 12 月

※お問い合せ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2018-WR-14
科学技術未来戦略ワークショップ報告書
メカノファンクショナルマテリアル

平成 31 年 3 月
ISBN 978-4-88890-632-6

国立研究開発法人科学技術振興機構　研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット
Nanotechnology/Materials Unit,
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒 102-0076　東京都千代田区五番町 7 番地
電　　話　03-5214-7481
ファックス　03-5214-7385
https://www.jst.go.jp/crds
© 2018　JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。
No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.
Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.