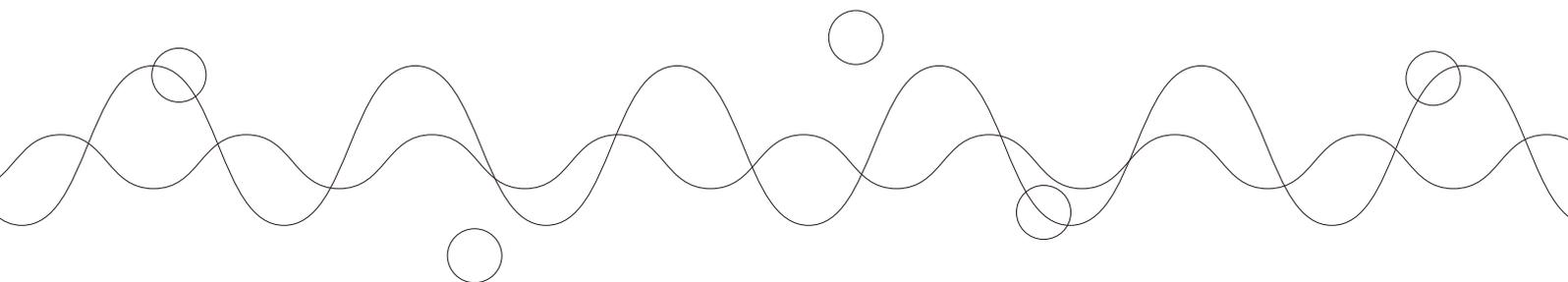


俯瞰ワークショップ報告書

ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会  
「機能と物質の設計・制御～材料科学の未来戦略～」

2018年9月22日(土)、23日(日)開催



## 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2018年9月22日、23日に開催した『俯瞰ワークショップ（WS） ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会「機能と物質の設計・制御～材料科学の未来戦略～」』に関するものである。

ナノテクノロジー・材料分野は物理学、化学、生物学を横断し、原子分子レベルでの観測や構造形成・機能発現などを通して、物質科学や材料技術、デバイス技術などを進展させ、さらには異分野の融合を促進しつつ進化する技術分野である。CRDSでは、2017年3月に、ナノテクノロジー・材料分野における世界各国の国家計画、投資戦略、研究ポテンシャル、技術進化、産業動向、重要な研究開発領域を含む俯瞰報告書（CRDS-FY2016-FR-06）を発行した。この俯瞰報告書は、CRDSが政策立案コミュニティおよび研究開発コミュニティとの継続的な対話を通じて把握した研究開発の大きな流れを、研究開発戦略立案の基礎資料とすることを目的として、CRDSの視点からまとめたものである。各分野における研究開発の方向性や主要な研究開発領域、さらに国際的なわが国のポジションを把握するのに役立つものとして、また、複数分野にまたがる新しい切り口からの研究開発戦略を立案するにも役立つことを期待している。当該分野の動向を深く知りたいと考える政策決定者、行政官、企業人、大学・独法関係者、また、研究者にとっても、自身の専門分野を超えた範囲の状況を知る上で有益な資料となることを期待している。

既発行のナノテクノロジー・材料分野の俯瞰報告書では、37の重要領域について研究開発状況や国際比較を取り纏めているが、さらなる調査・検討が必要な領域がまだ多数あると認識している。そのため、2017年度と2018年度の2年にわたっていくつかの領域に注目し本分野の俯瞰をさらに充実させたいと考えている。こうした経緯から、CRDSでは2018年度、「機能と物質の設計・制御」領域に関するワークショップを計画した。

本領域は、ナノテクノロジー・材料分野全体に関与するもので、所望の機能を実現させるための構造の設計・制御手法を用いて、サイエンスの新局面を拓き、社会・産業に貢献しうる技術領域である。

本ワークショップでは、4つの分科会を設置して、「機能と物質の設計・制御」領域に関する国内外の研究動向を俯瞰するとともに、「持続可能社会実現のために解決すべき課題は何か？」「その課題を解決するために必要な材料は何か？」「その材料を実現するために必要な新しい材料科学（現状の材料科学では欠けていること）は何か？」の観点から、国として取り組むべき材料科学における将来の研究目標や方向性等について議論することを目的とした。ワークショップの進め方としては、3件の基調講演により参加者全員の意識の共有を図った後、分科会形式による集中討論、参加者全員による総合討論を実施した。また、ワークショップ開催に先立ち、招聘の識者には下記3項目に関するアンケートを実施した。

### 【項目1】

最近10年間程度の期間に見られた重要な発展

### 【項目2】

今後10年あるいはもう少し先の将来において重要となるであろう研究分野もしくは方向性

### 【項目3】

“New Materials Science for Sustainable Society”をキャッチフレーズとして、「水」「食料」「貧困」「環境」「エネルギー」「医療」などの地球規模の諸課題に対して

- ① どういう具体的な課題に取り組む必要があるのか
  - ② それを解決するためにはどのようなアプローチがあるのか
- について、「これからの材料科学」の視点（現状の材料科学では対処できていない点も含め）からの具体的な考え

上記の一連の検討・議論の結果得られた 2 つの研究開発の方向性および材料科学の観点から見た「機能と物質の設計・制御」領域の俯瞰図を示す。

## 1. 研究開発の方向性

- ① ナノレベルの特性をマクロ物性に表出させる材料科学
- ② 秩序性の乱れと時間発展を活用した材料創成
  - ・ 材料においては、原子・分子といったナノスケールの基本構造が集まってより大きなスケールの高次構造を作っており、多くの場合は、さらにその高次構造が集まったより高次の構造を作るといった階層性が現れる。ある階層の集合体が上位の階層構造を作る際には、欠陥、転位、粒界に代表されるような「乱れ」が生じ、この「乱れ」が材料物性を支配することが多い。また、材料の分解性の違いも「乱れ」が大きく影響すると考えられるため、「マルチスケール階層制御」および「乱れの理解と制御」は今後の材料開発においては不可欠な要素である。
  - ・ 材料の階層制御におけるターゲットの主要なものには、強結合、弱結合の制御がある。バルク材料のなかには、分子や無機結晶内の共有結合に代表される強結合から、van der Waals 結合のような弱結合まで、様々な強さの結合が含まれており、これら強結合性、弱結合性を材料の階層ごとに自在に制御することができれば「リサイクル自在の材料」「寿命をコントロールできる材料」などを設計して生み出せるようになる。その際にもカギとなるのは強結合性や弱結合性を左右する、階層間の「乱れ」の理解と言える。
  - ・ 材料の階層構造は静的なものばかりではない。界面の乱れなどは空間的に不均質、かつ、時間的にも変化していく性質を有しており、その複雑さゆえに、精密な理解や学理の構築は行われていない。「動的不均質制御」の概念も重要である。
  - ・ 「不均質」という言葉は、「乱れ」と同様に材料の組成や構造が空間的に不均一であることのほかに、最安定状態、平衡状態にないことなども含む。また、こうした不均質状態が、時間的に変化していくことを「動的」という単語で表しており、これら「動的」な「不均質」性を制御することで、望む物性をもつ材料合成につながると期待される。
  - ・ 実用材料において動的な不均質性が利用されている例として、コンクリートの強度が、硬化後、時間が経つほど増していくことはよく知られている。また、冶金学においても、金属材料内部で異相析出が常温で起こることにより材料物性が向上する時効処理などが一部の合金で古くから利用されている。
  - ・ しかし、このような効果を最初から意図して新規材料が設計された例はこれまでにない。その理由として、こうした現象が「不均質≒乱れ」の時間発展によって起こることを正確に理解・制御することがこれまでできていなかったことが挙げられる。
  - ・ 材料の構造の特徴量の平均値だけでマクロな物性が理解できる場合はそれほどの難しい課題ではないが、平均値ではなく特徴量の分布・相関・時間変化などのすべてが物性に効く

場合には、均質系・定常系を対象とした従来のモデル化や学理は役に立たない。

- ・ 「動的不均質制御」では、今までできていなかった「乱れ」の時間発展を精密に観察し、それらの挙動を理解するとともに、その人為制御までも目指している。

2. 材料科学の観点から見た「機能と物質の設計・制御」領域の俯瞰図

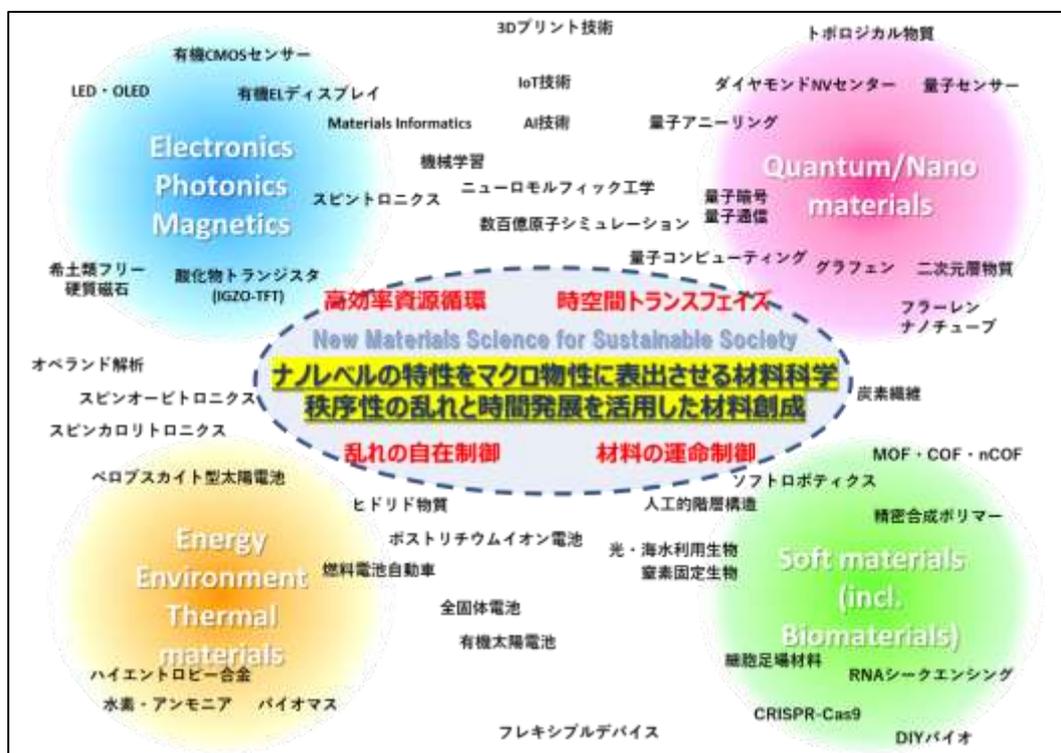


図 1

これらの結果は、CRDS でさらに検討を加えて、2018 年度末に発行を予定している「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野 (2019 年)」に反映させるとともに、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の検討に活用していく予定である。



## 目 次

### エグゼクティブサマリー

|                |    |
|----------------|----|
| 1. 開会挨拶・趣旨説明   | 1  |
| 2. コーディネーター挨拶  | 5  |
| 3. 基調講演        | 11 |
| 4. 分科会検討結果報告   | 32 |
| 5. 総合討論        | 43 |
| 付 録            | 46 |
| 付録1：開催趣旨・プログラム | 46 |
| 付録2：参加者一覧      | 49 |
| 付録3：分科会メンバー表   | 51 |



## 1. 開会挨拶・趣旨説明

### 1.1 開会挨拶

曾根 純一（JST-CRDS）

本日と明日の2日間にわたり、ワークショップタイトルにもあるように、材料科学の未来戦略について徹底的に議論したい。ここで言う未来戦略というのは、5年後とかの短期的なスケールではなく、10年、20年、30年といった中長期的なスケールで材料科学がどういう方向に進むのか、進ませるべきなのかを議論したい。その意味で、将来の材料科学を引っ張っていくであろう若手研究者を中心にお集まりいただいている。

存知の通り、物質科学や材料科学は産業を支えるという意味でもわが国の生命線であると考えている。先日、ある講演を聞いて改めて認識したところであるが、日本にとって自動車産業は大きいですが、素材産業と化学産業も合わせるとGDPの35%を占め、その割合は年々増加傾向にあるという。一方で、エレクトロニクス産業はここ10～20年ほど元気がなかったが、昨今復活してきている。これは時代が変わってきていることを意味し、実際に電子産業や半導体、部材、装置産業が絶好調になっている。原因としては、明らかにPCやスマホが牽引してきたIT時代からビッグデータに代表されるIoT時代が変わってきたことであろう。IoTの世界は日本が得意な領域であり、ハードウェアやセンサ、電子部品が非常に重要になってきている。それを支える部材や材料科学が重要であることは明白である。

ところが、デジタル化の急速な流れの中でGAF（Google、Amazon、Facebook、Apple）といったIT企業が世界を席卷し、さらに政治の世界だけではなく科学技術の世界にも中国が台頭し始め、近い将来、確実に米中激突の時代に突入するだろう。その意味で先が見えなくなっている。

そのような中、10年、20年先を考えたときにやはり物質科学、材料科学では日本が世界のリーダーになっていなければならないと考える。そのために重要な視点は、今回のテーマに挙げた「持続可能性」だろう。この想いは今回コーディネーターを引き受けてくれた細野先生と同じである。持続可能性とは長期的な視点で考えたときに世界中が必要とするコンセプトであり、それを実現するための新しい産業が必ず生まれてくる。それを日本が先導したい。

それを牽引するためには、やはりモノ、すなわち、材料やハードウェアが必要であり、それらなくして解決はできないだろう。将来の材料科学を引っ張っていく皆さんとともにこの2日間で様々なアイデアを出し合い、上記の思いを具現化していきたい。

## 1.2 趣旨説明

宮下 哲 (JST-CRDS)

本ワークショップでは、CRDSが2017年に作成した俯瞰図における「機能と物質の設計・制御」領域の国内外の研究状況・動向を把握するとともに、今後国として材料科学をどのように推進していくべきか、新しい理念・概念を生み出すことを目的としている。ワークショップの結果については、まずエッセンスを今年度末発行の俯瞰報告書2019年版に掲載する予定である。また、今回得られた研究コンセプト、理念、テーマに関しては、今後我々が提言化を検討する際のテーマ候補として活用させていただきたい。



図 1-2-1 ナノテクノロジー・材料分野の研究開発俯瞰図 (2017年)

図 1-2-1 は俯瞰報告書 2017 に掲載している俯瞰図であり、CRDS としてはナノテクノロジー・材料分野をこういう構造で見えています、ということを一枚の図に表したものである。一番下に基盤となるサイエンスがあり、上位には環境・エネルギー、ライフ・ヘルスケア、社会インフラ、ICT・エレクトロニクスと、各応用領域で重要な材料・デバイスを挙げている。その中間層として、所望の機能を実現させるための結晶構造の設計・手法として、サイエンスの新局面を切り拓き、わが国の将来社会を支え、産業に貢献しうる領域として、「機能と物質の設計・制御」領域を位置づけている。今回のワークショップでは、この領域を中心に、持続可能社会を実現するために必要な材料科学の将来像について是非活発なご議論をお願いしたい。

招聘の先生方にはお忙しい中、事前アンケートという形で図 1-2-2 にあるような質問をさせていただいた。

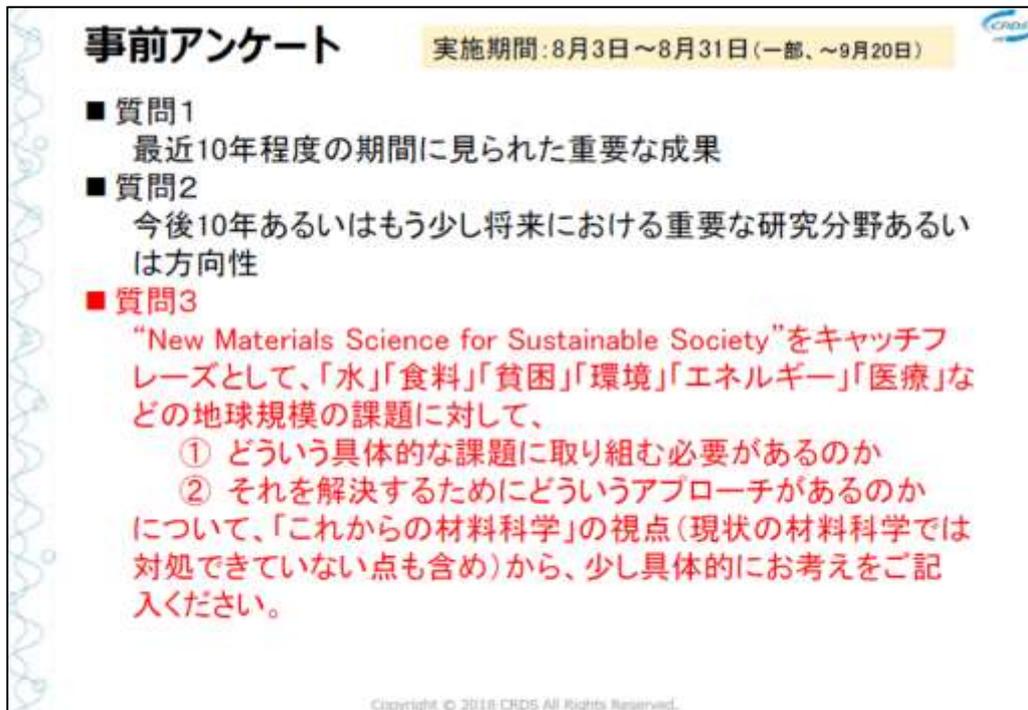


図 1-2-2 事前アンケート質問項目

質問項目 1 と 2 に関して、招聘の先生方からの回答をもとに、CRDS で俯瞰図のようなものを作らせていただいた(図 1-2-3)。この後の 4 つの分科会に該当する領域(青: Electronics/Photonics/Magnetics、黄: Energy/Environment/Thermal materials、赤: Quantum/Nano materials、緑: Soft materials (including Biomaterials)) を四隅に配置し、各領域に関わりの強い単語ほど円の中心に、領域間に跨がる分野融合に関わりがある単語ほど円の中心から離れた位置に置くようにしている。本日と明日の議論を踏まえて、4 つの領域に共通となるような新しいコンセプトやテーマを図の中心部分の「New Materials Science for Sustainable Society」というところに書き加えたい。

図 2-3 はあくまでたたき台であり、今回のワークショップの中で先生方からのご意見もお伺いしながら良くするための検討を行いたい。

質問項目 3 に関しては、基調講演後の各分科会において、一人 3 分程度で説明いただく予定にしている。

コーディネーターの細野先生からの挨拶、3 名の先生からの基調講演、4 名の分科会リーダーの先生方の挨拶の後、早速分科会に入りたい。2 日間の長丁場となるが、是非宜しく願いたい。



## 2. コーディネーター挨拶

細野 秀雄（東京工業大学）

本ワークショップを開催するに当たって自分が考えてきたこと、ワークショップの背景と構成について説明する。今、日本の材料系の学会は大変に危うい状況にある。あまり意識されていないかも知れないが、まずはこの事実を共有認識としたい。ただ、そのようなネガティブな話だけではなく、困った時には非常に大きな力を出せるという歴史的な例をお示ししようと思う。

まず、材料は物質とは異なり、世の中に直接に役に立たないものは材料ではない。物理や数学といった学問には発展のドライビングフォースが内在するが、材料科学は人間がいないと成立しない学問であり、ドライビングフォースは人間の社会である。したがって、その時代に応じた束縛条件というものが存在し、今の言葉ではSDGsがそれに当たる。SDGs自体は簡単な文言で書かれているが、問題はそれをどうやって具体化するかであり、我々はサイエンスで何ができるかを考えていかなければならない。

材料研究のテーマには2つの視点がある。一つは、世界の潮流から遅れないための視点。その典型がナノテクであり、世界的な学問の方向、共通の基盤となっている。もう一つは、世界に日本が勝つための視点。国家戦略とも言えるが、国家戦略は対外的に公開すべきものではなく、関係者の頭の中だけできちんと共有されている必要がある。今日と明日の2日間のワークショップで議論するにあたり研究テーマにこの2つの方向性があることは認識しておいて欲しい。本ワークショップの目的は、社会的に重要な課題を取り上げて、それを実現するにはどのような材料が必要か、その材料を実現するためにはどのようなサイエンスが要るのかを抽出することにある。

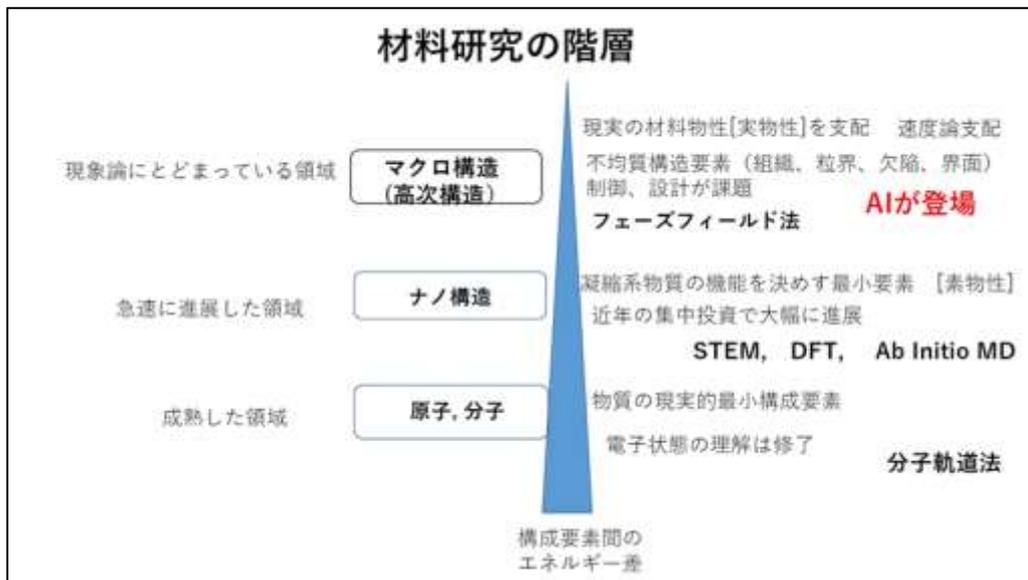


図 2-1 材料の階層

図 2-1 に示すように、材料研究には3つの階層があるであろう。一つ目は原子、分子の領域で、構成する要素間のエネルギー差が非常に大きく、答を一義的に導き出すことができる。ここは、非常に大雑把に言うと、もう大枠では終了した領域といえる。その次の階層はナノの領域で、ここ 10 数年にわたって集中投資されてきた。ナノの領域がなぜ重要かという、材料は単原子・

分子ではなく凝縮系であり、凝縮系の性質を決める最小単位がナノレベルの構造だからである。この領域は各種の顕微鏡、バンド計算、Ab-Initio Molecular Dynamics などの重要なツールの開発によって、非常に大きな進展があった。そして、その上にある階層が、一番難しいマクロ構造、いわゆる高次構造である。ナノレベルまでは構造がほぼ一義的に、内部エネルギーで決まると考えられるが、高次構造はローカルミニマムがたくさんあるため、どこに落ち着くかはパズル、すなわち速度論が支配的にある。材料の最終的な物性を決めるのはマクロ構造であり、組織や粒界といったマクロ構造は物性に直結するが、例えば小傾角粒界を第一原理で計算しようとするとならば莫大な計算量が必要になってしまい、この階層を扱うのに有効な方法というのは、実は存在しない。セラミックスの分野というのは進展が遅れているといわれるが、その理由は粒界を扱うことの難しさにあると言える。

ところが最近では、例えば最初と終わりが分かっているならば、その間がブラックボックスであったとしても、解を出すことが可能な方法が出てきた。いわゆる人工知能 (AI) を使ったニューラルネットワーク、あるいは機械学習と呼ばれるもので、これを上手く使えば最終的な答の候補が得られる。このような方法をどのように導入して、一番上の階層を攻めていくか。高次構造をどのようにしてやるか。ここがマテリアルチャレンジであり、今の材料研究は確実にこのフェーズに来ている。

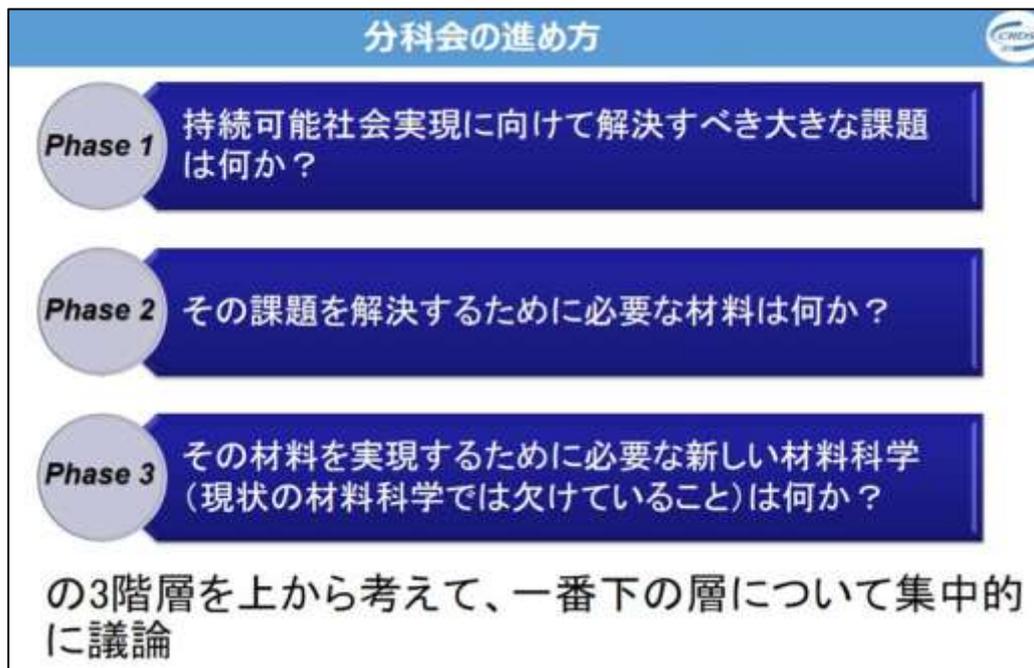


図 2-2 分科会の進め方

本ワークショップの分科会の進め方を図 2-2 に示した。最初に「持続可能な社会の実現に向けて解決すべき大きな課題は何か」について、2 番目に「その課題を解決するために必要な材料は何か」について議論する。そして 3 番目に「その材料を実現するために必要な材料科学」について議論し、現状の材料科学に欠けているものが何であるか抽出したい。最近では、論文のインパクトファクターの高い分野に極めて多くの人が集まる、いわば研究者のオストワルド熟成が起きてしまっているが、材料の研究で本当に大事なところには、まだそんなに人がいないのではないかと

と感じている。

本ワークショップではまず3件の基調講演によって意識の共有化を図り、その後、分科会に進む。基調講演の1人目は物性理論の福山秀敏先生。日本の材料科学の強さは、古くは本多光太郎先生の金属の研究、そして1980年代の高温超伝導とアモルファスシリコンの研究によって培われたが、それには物理学と化学の間の垣根が取り払われたことが大きく寄与した。そのときの代表的な研究者の一人が福山先生であり、有機から金属、半導体、超伝導とほとんどの領域を研究対象とされている。広範な物質について俯瞰できる極めてまれな物性理論の研究者で、実験家とのコミュニケーションが非常に上手い方でもある。基調講演の2人目は安井至先生で、新しい材料科学を目指す上で考慮すべき環境面での制約と、解決すべき課題についてお話しいただく。日本という国は世界的に合意されつつある環境の制約というものを、まだあまり意識していないようで、このままでは10年くらい後に大きなしっぺ返しを食らうのではないかと危惧している。環境科学の専門家には材料のことを知らない人が多いが、安井先生はもともと材料科学が専門で、両方について精通されている。基調講演の3番目は気鋭のAI研究者の津田宏治先生で、材料研究の新しい手法としてのAIについてお話しいただく。AIで全ての片が付くというわけではないが、材料の研究者としてはAIをしっかりと手中に収めておかなければならない。

一方、分科会のメンバーには主に40代の「生意気」な方を選んだ。ここで言う生意気な方とは、「前の世代のやったことは大したことない。その研究をひっくり返して、自分が塗り替えてやる」と心の中で思いながら、表立ってはとても丁寧な対応をされる方のことである。または、独自の考えで力強い研究を推進しようとする意思を持っている方。このどちらか、あるいは両方を備えていると思われる方を全国からJSTの担当と相談して選んだ。各分科会では議論の後で結果をまとめた資料を作成するが、その際には政策立案者に向けた提案だけでなく、科学者コミュニティに向けたもの、科学者が読んだ時にどんな研究分野なのか中身が分かるものを作って欲しい。粗削りで構わないので、旬の科学者の息吹が明確に感じられる内容を。

さて、日本学術会議の材料工学委員会で、現状の材料系学会の問題点について議論したところ、様々な問題が浮かび上がった(図2-3)。その一つは学会の小規模化・細分化である。日本の材料関係の学会は31団体もあり、その大半が会員数1,000人を切っている。このままでは、とても生き残れない。例えば、米国のMRS (Materials Research Society) の会員数は15,000人で、その半分以上が海外会員である。学会専従の職員が30人以上いて、自分のビルも持っている。米国の学会は会費を取っているが、もし会費収入がなかったとしても、シンポジウム開催と出版だけでやっていける。それに対して、日本の学会の専従職員は数人程度であり、会費収入無しではとてもやっていけない。また、日本は低グローバル指向で、ほとんど海外会員がいない。加えて、会員の構成が非常にいびつになっており、若手会員がどんどん減っている。ある学会の5年前の年齢構成を見ると、51歳～55歳にピークがあり、その後、ずっと減少している。この人達が65歳で定年になって一気に抜けてしまうと、学会が現在のアクティビティを物理的に維持できなくなる。どの学会も同じような状況にあるにもかかわらず、新しい動きをしようとはせず、自浄作用が外に見えないコミュニティになってしまっているようだ。学会活動のクオリティーにも問題がある。学会の年会在ほとんど修士論文の発表会になってしまっていて、これでは企業の人から相手にされない。ジャーナルの低調さは言わずもがなであり、ほとんど救いようがないのが現状だ。

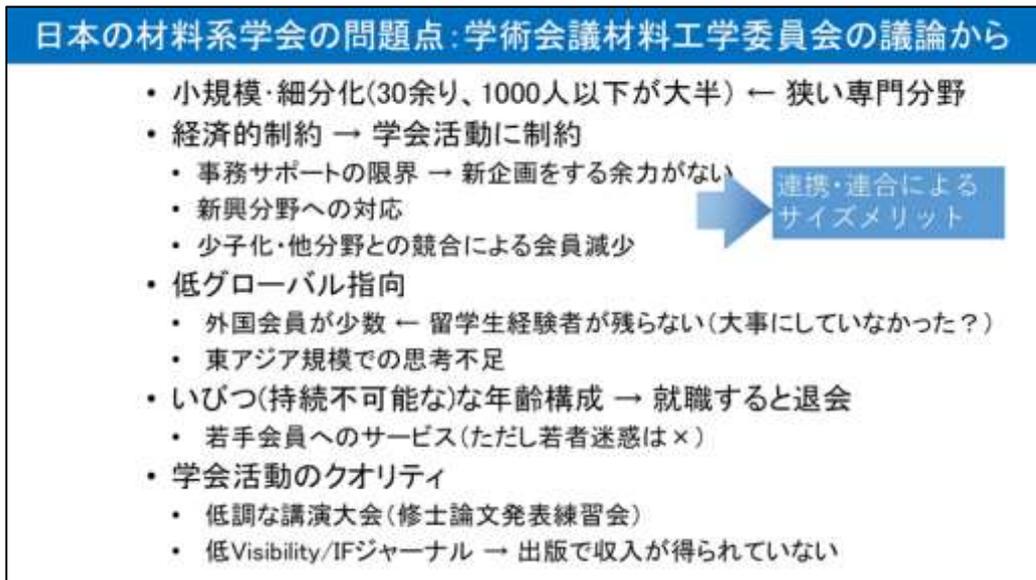


図 2-3 日本の材料系学会の問題点

元気の出ない話をしてしまったが、最近、ようやく歴史に学ぶということの意味が分かってきたように感じている。私自身の研究に関係した話としては、今から 130 年ぐらい前に、このままいくと人類は飢餓に直面するであろうという非常にショッキングな予測が示された。英国科学アカデミーの会長に就任したクルックスの会長就任演説によるもので、肥料の原料となるチリ硝石などの鉱物が遠からず枯渇し、食糧危機に陥ることが警告された(図 2-4)。ところが当時、英国やスペイン、オランダなど強い海軍を持つ国は植民地を持ち、そこから資源を獲得することができたため、切実でなかった。それに対して、国の統一が遅れ制海権を持たなかったドイツは、空中の窒素の固定に国を挙げて本気で取り組んだ。それに成功したのがフリッツ・ハーバーとカール・ボッシュによるハーバー・ボッシュ法であった。

2013 年に開催されたハーバー・ボッシュ法工業化 100 周年のシンポジウムには私も招待されて参加したが、そのときに BASF が *Future Loves History* という標語を示した。世界の人口は 1900 年代に急激に増えたが、もしハーバー・ボッシュ法がなかったら増加分の人達は食べられなかったという。間違いなく、ハーバー・ボッシュ法は未来の人類を救ったといえる(図 2-5)。

アンモニア合成の歴史

食糧危機の警鐘

社会的背景: 食糧危機が大きな社会問題  
 > 産業革命(18世紀後半から19世紀)による社会の大きな変化  
 → 食物増産の必要性  
 → 硝石などの鉱物の枯渇は時間の問題

**Sir William Crookes** 英国科学アカデミー会長  
(物理、化学者)

1898年  
「イギリスをはじめとする全ての文明国家は、いま死ぬか生きるかの危機に直面している。」

「食糧危機を救うには空気中の窒素分子を植物が利用できる形に変換する空気中窒素の固定化以外にない」



William Crookes

Fixation of atmospheric nitrogen is one of the great discoveries awaiting the ingenuity of chemists

図 2-4 アンモニア合成の歴史

アンモニア: 食糧生産と水素エネルギー社会のキー

**ハーバー・ボッシュ法 (1910)**  
(化学者、大学) + (技術者、BASF)  
産学連携ならではの大成果

$N_2$  (空気)



+

$H_2$



高温・高圧



触媒

$NH_3$





化学製品の  
中間体  
分解



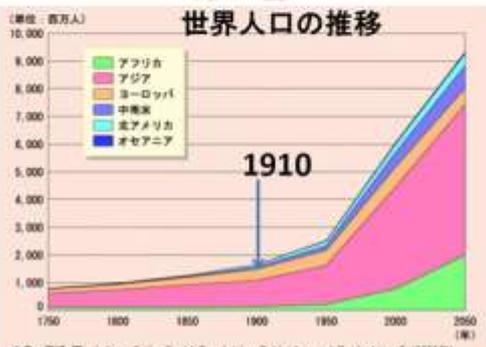
肥料



水素キャリア

燃料電池など

**世界人口の推移**



出典: 国連『Revision of the World Population Estimates and Projections』(1988年)

図 2-5 アンモニア: 食糧生産と水素エネルギー社会のキー

ハーバー・ボッシュ法は、現在の目で見ると、産学連携ならではの大成果である (図 2-6)。フリッツ・ハーバーは当時、工業大学でオスミウムを使って僅かの液体アンモニアを合成すること

に成功したが、高温・高圧の水素が必要であるため、皆が産業化は無理だと諦めていた。その時に、自分がやると手を挙げたのが、当時 BASF にいた 27 歳のエンジニアであったカール・ボッシュであり、その後大変な苦勞の末、プラント化に成功した。一方で、ハーバー・ボッシュ法には、熱力学の重要性を実証したという意義がある。どのような平衡状態でどのくらいの濃度にアンモニアができるかというのを、実践の場で、数値として出すことができた。さらに、高圧反応技術を確立したことの意義も大きい。スウェージロックという技術があるが、この技術もアンモニア合成のプラントの中から出てきたもので、高圧化学やプラント技術というものがハーバー・ボッシュ法とともに確立された。もちろん触媒・表面科学も非常に進展した。このように、本当の学問、骨太の科学といえるものは、社会からの強い要請に対して、それに応えられる科学、あるいはエンジニアリングの中から生まれてくる場合が往々にしてある。困難に真正面から立ち向かい、それを科学と工学で克服して、大きな産業と骨太の学問をつくった、これがハーバー・ボッシュ法であり、歴史に学ぶということの一つの例である。

## HBアンモニア合成法の意義

- 産学連携ならでの大成果
  - ハーバー(KUT): プロトタイプで実証
  - ボッシュ(BASF): プラント化
- 熱力学の重要性
  - 学理の有効性の実証
- 高圧反応技術の確立
  - エンジニアリングのフロンティア
- 触媒合成・表面科学の理解
  - 学問分野の飛躍的進展

**困難(飢餓の危機)に真正面から立ち向かい、  
それを科学と工学で克服した大きな産業と骨太の学問を創った**

図 2-6 HB アンモニア合成法の意義

数か月前に、3 年に一度開催される超伝導の国際会議に参加したが、この領域は日本が極めて強かったが、現在では中国に圧倒されている。研究者の人数が一桁多いうえに、海外で修業した優秀な若い世代が育ってきているからだ。しかし、勝つことが容易ではなくとも、日本の若い人達にはオリンピックのように巻き返して欲しい。オリンピックを見るたびに思うが、水泳も陸上も卓球も、10 年前の日本は悲惨な状況だった。しかしその後、若い時から人材を育てたことで、今の状況がある。われわれも、少し時間をかけて、世界に勝てる領域を創り出していけるはずだ。

### 3. 基調講演

#### 3.1 物質科学材料科学と社会

福山 秀敏（東京理科大学）

「Science and Technology」という言葉がある。米国が20年近く前に「ナノテクノロジー」と言い始めたが、最初にナノサイエンスと言うべきだったのではないか。本来はナノサイエンスと言ってからテクノロジーが来ないと成り立たないはずである。歴史を振り返ってみると、日本では見事な経過を辿っている。東北大学の金属材料研究所創設者の本多光太郎先生は高い機能を持つ磁石であるKS綱、新KS綱をつくった。その伝統は茅誠司先生らに引き継がれ、今ではNdFeB磁石の時代になっている。本多先生は多くの良い言葉を残されており、その一つに「産業は学問の道場」がある。これは、本当に大事な学問の種は産業や社会のニーズがあるところに隠れている、ということだと理解している。

また、私の恩師である久保亮五先生が非常に良い言葉を残されていたことを数年前に知った。久保先生は物性理論の基本的な枠組みである線形応答理論を構築した人であり、この久保公式がなかったらミクロな物性の理解ができなかった。久保先生は「基礎と応用の違いはない」とおっしゃっている。基礎、応用という区別はなく、研究で区別をつけるとすると、それは本質的か本質的でないかがキーポイントだと言われている。実際、久保先生は20代の若い時に、ゴム弾性の基礎理論をつくり、それが応用上も重要な高分子科学の発展に繋がっている。久保先生は非常に抽象的なことを扱う統計力学の専門家であるが、その背後にある現象を絶えず直視していた。社会あるいは現場のニーズと学術的なシーズとの間をスムーズにつなげることの大切さを意識していた。

私は文科省のやることは的外しているのではないかと思うことが多かったが、7～8年前に文科省が元素戦略拠点プロジェクトを始めたことには驚いた。そこに見事なビジョンがあったからである。電子材料、磁石、電池／触媒、構造材料という社会的要請の強いテーマについてそれぞれで拠点をつくった。各拠点での目標達成のために要求されている学問を、分野に関係なく総力を挙げて理解しようという仕組みになっており、私も共感して協力した。

繰り返しになるが、図3-1-1に示すように、社会的ニーズと学術的シーズとの間を行ったり来たりするような連携協力体制が研究を進める上で非常に重要であると思っている。蝸壺に落ちるなどという言い方をする人も多いが、絶えず意見交換をして、自分自身の研究の位置付けを相手に分かり易く話し理解してもらうことが大切である。そして、意思疎通することから様々な共同研究に発展する。分野が違う人同士で本当の共同研究をする方が、ユニークなものになり、場合によっては大発見・大発明につながる。そのような典型的な例として、量子力学の確立に繋がった第5回ソルベー会議がある。この会議は化学会社がサポーターになり、その時代での基本的な問題（Key Issue）に関して、様々な人が集まって議論するものであった。量子力学ができつつある時の会議であり、参加者27人の中にはアインシュタイン、キュリー夫人など、19人のノーベル賞受賞者がいた。このような人たちが激しい議論をして、初めて量子力学が明確になった。量子力学のように、単に今までのものを延長して結論を出すのではなく、本当に新しいものを出す時には、このような作業が必要だったのである。プランク定数の発見は、どの材料をどれだけ

混ぜたら、どういう素材ができるかという溶鉱炉の温度測定（輻射）というニーズの結果であると理解している。

**社会（現場）的ニーズと学術的シーズ間の創造的連携**

\* 絶えず意見交換を（蛸壺に落ちるな）

研究の位置づけについての簡潔な説明が必須

=> 好奇心 => 質問

=> 意思疎通 => 共同研究

=> 大発見、大発明 ！

\* 歴史的な例 「量子力学」の発見

第5回ソルベー会議（1927）

図 3-1-1 社会（現象）的ニーズと学術的シーズ間の創造的連携

このプランク定数について、朝永先生の「量子力学」によれば、エネルギーが高いところと低いところに対応する Rayleigh-Jeans の式と Wien の公式を内挿する式としてプランクの公式ができたが、「もしプランクがこれだけで満足してしまったら、彼の仕事は単なる幸運な思い付きにすぎなかったかもしれない」と書いてある。またその次に、「彼はしかしこの公式の深い根をつきとめることに心を砕いた。不眠不休の数週間後に彼はついにエネルギー量子という考えに到達した」とある。信頼できる良い実験家が出した実験事実をよく見て、現象が理解できたら、徹底してその意味を考え、世紀の大発見になったということになる。

プランク定数は、実は我々の日常の生活を支えている。その典型が半導体である。ジョン・ガートナー（Jon Gartner）が書いた本『THE IDEA FACTORY – Bell Labs and the Great Age of American Innovation –』を要約する機会があったが、ここにはベル研究所でトランジスタがどうやって生まれてきたかが生々しく書いてある。1945年10月にベル研に加わったバーディーンがキーパーソンである。最初の段階では半導体のデバイスが理想的に動かずに困ってしまったが、1946年春の毎週定期的に行われる集中議論の中で、バーディーンが今で言う界面状態の存在についてボソボソと言った。理解した人がどれだけいたかはわからないが、ショックレーの実験が思うようにいかなかったことの背後にあるものを見抜いたのである。その後、ベル研究所の中でのショックレーとバーディーン、その他様々な人とのやりとりが書いてある。1956年にはバーディーン、ブラッテン、ショックレーがノーベル賞の受賞者になっている。

## 半導体：金属と絶縁体の境目が面白い！



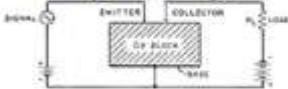
絶縁体 + 不純物(P,B)

→ 電子(キャリア)の注入  
→ 電気が少し流れる

半導体

制御しやすい → スイッチ

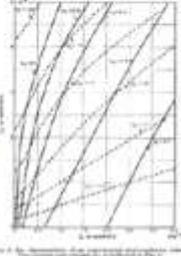
半導体トランジスタ



J. Bardeen and W. H. Brattain: Phys. Rev. 74, 230




Bardeen      Brattain  
(1956 ノーベル物理学賞)



キャリアドーピングによる絶縁体の金属化



Shockley

20

図 3-1-2 半導体：金属と絶縁体の境目が面白い

あらためて半導体を考えてみる。「半導体」とは変な言葉である。物質には金属と絶縁体がある。金属は絶対零度の低温極限まで電気伝導がある。一方、絶縁体は電気が流れない。「半導体」という言葉は、その途中のもやもやした領域ということになる。人によって受け止め方が異なると思うが、絶縁体ではなく、ほどほど電気が流れるが、金属とも違うものである。この金属と絶縁体の境目は様々な可能性を持っている。図 3-1-2 に示すように半導体デバイスは、まさにその境目を外力で制御することで機能を引き出している。初期の半導体では、絶縁体に不純物をドーピングすることで金属化して電流が流れる。これが機能の根源になっている。その後、MOS トランジスタのように電界でキャリアを導入するという方向に進んでいった。その一つの行き着く先が、図 3-1-3 に示す量子ホール効果である。デバイス開発現場の先端にある高い電子移動度を持つトランジスタに磁場を垂直にかけて、ホール抵抗を測定した。その結果ホール抵抗が量子化され、しかもその抵抗値がプランク定数  $h$  と電気素量  $e$  という物理定数で決まっている。開発現場のデバイスを使って、このような新学理の発見は驚くべきことではないか。このように、半導体は現在我々が頼るサイエンスの様々な概念が生まれたところでもある。

量子ホール効果に加えて、アンダーソン局在もその一つである。電子波は散乱がないときは、波数  $k$  で表される運動量で動くが、散乱体があると、入射波と反射波が干渉して局在する、というものである。電圧をかけても散乱波のために電子が局在して電流が流れなくなる。現実の系では乱れがあるため、電子輸送を考えるとこの効果について必ず注意しておく必要がある。アンダーソンによると局在の機構解明は大変数学的であり、理解しにくいところがあったが、1980 年の夏にスケーリング理論が出てきて、明快かつ系統的研究が進むようになった。

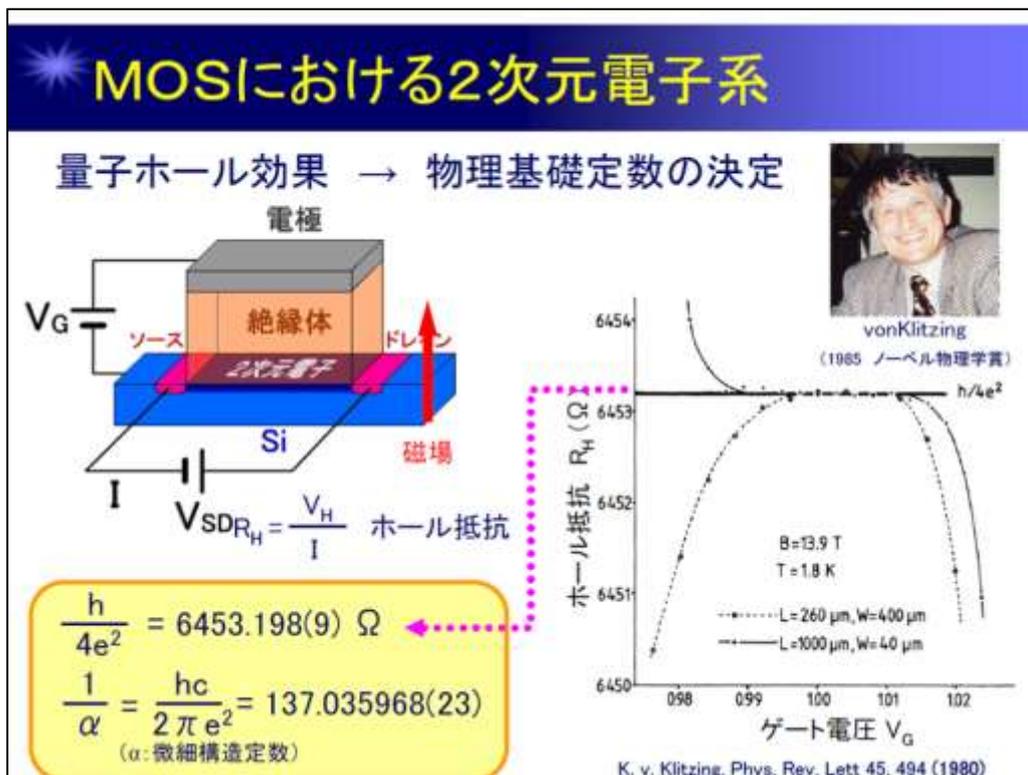


図 3-1-3 MOS における 2 次元電子系

サイエンス（科学）とテクノロジー（技術）は区別してはいけない。サイエンスとして重要なテーマは現場にあることが多い。先に述べたプランクの公式のことはその一つの例である。細野先生の「役に立つ」は、個人的にはグサリとくる言葉である。大学院で久保研究室にいた時に、久保先生から「そんなことやって役に立ちますかね」とよく言われた。当時、私は若かったので、「役に立つ」なんて下品なことはせず、学理の究明のために大学院で勉強しているんだ」と猛烈に反発したが、「役に立つ」の意味を私は誤解していた。久保先生の「役に立つか」というのは、身近なところですぐに役に立つということではなく、将来の人類の発展につながるような学理の追究をしているか、という問い掛けであった。久保先生と同僚でもあった高橋秀俊先生も、「真理は役に立つものである」という言い方をしており、意味は全く同じである。基礎研究ほど役に立つものはないということで、本多光太郎先生の「産業は学問の道場」と一緒である。

このような経験を踏まえて、最近取り組んでいるのが熱電効果である。この現象はゼーベック効果として大昔から知られており、温度差に伴って電圧が発生するという現象である。その逆の効果はペルチェ効果である。化石燃料からエネルギーを取り出す際に、半分以上が熱として無駄に放出されている。これは物性科学研究者としては放っておけない。開発された熱電材料・物質は多くあるが、その背後にある学理を電子状態をもとにきちんと議論したというのは、私が調べた範囲では皆無に近い。今の社会ニーズの中での重要課題である熱電に関して、物質材料科学として挑戦すべきであり、そうしないと社会に対して申し訳ないと思う。

Linear response theory with respect to  $E$  and  $\nabla T$

$E$ : Kubo formula

$\nabla T$ : J.M. Luttinger, Phys. Rev. **135** (1964) A1505.  
M. Jonson, G.D. Mahan, Phys. Rev. **B42** (1990) 9350.

$$J = \sigma E + \alpha \nabla T = L_{11}E + L_{12} \left( -\frac{\nabla T}{T} \right) \quad \text{Onsager's reciprocity}$$

$$L_{11} \Leftarrow \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau J_e(\tau) J_e \rangle e^{i\omega\lambda\tau} \quad \text{electric conductivity}$$

$$L_{12} \Leftarrow \int_0^\beta d\tau \langle T_\tau J_e(\tau) J^Q \rangle e^{i\omega\lambda\tau} \quad \text{thermoelectric conductivity}$$

$J_e$ : electric current,  $J^Q$ = energy current

$$S = L_{12}/TL_{11}$$

$\Rightarrow L_{11}, L_{12}$ : **microscopic assessment needed.**  
**thermal Green function**

図 3-1-4 線形応答理論

熱電効果における電流の式は線形応答理論（久保理論）と根は一緒である。ただし、久保理論は磁場や電場のように力学的な摂動があるときの線形応答であり、熱電の場合は温度という熱力学的な摂動に関しての応答も必要となるため、かなり違ってくる。久保公式の 10 年近く後になって、ラッティンジャーが基本的な理論の枠組みをつくっている。図 3-1-4 に示すように、電流  $J$  が電界  $E$  に比例する部分と温度勾配に比例する部分からなる。ゼーベック係数  $S$  は、一つの決まった物理量ではなく、2 つの物理量の比を取ったものになっている。このため、 $L_{12}$  と  $L_{11}$  を別々に計算し、比を取って初めて学理になるが、これをきちんとやっている論文は極めて少ない。Jonson と Mahan は Boltzmann transport の中でこの関係を議論している。問題は、大きな熱電係数を出そうとするときに、Boltzmann transport の範囲にとどまっていたは駄目ということであり、Beyond Boltzmann がキーポイントである。そのためには理論のツールとして温度グリーン関数を扱う必要がある。東京理科大の山本貴博先生と一緒にこれを実行した。

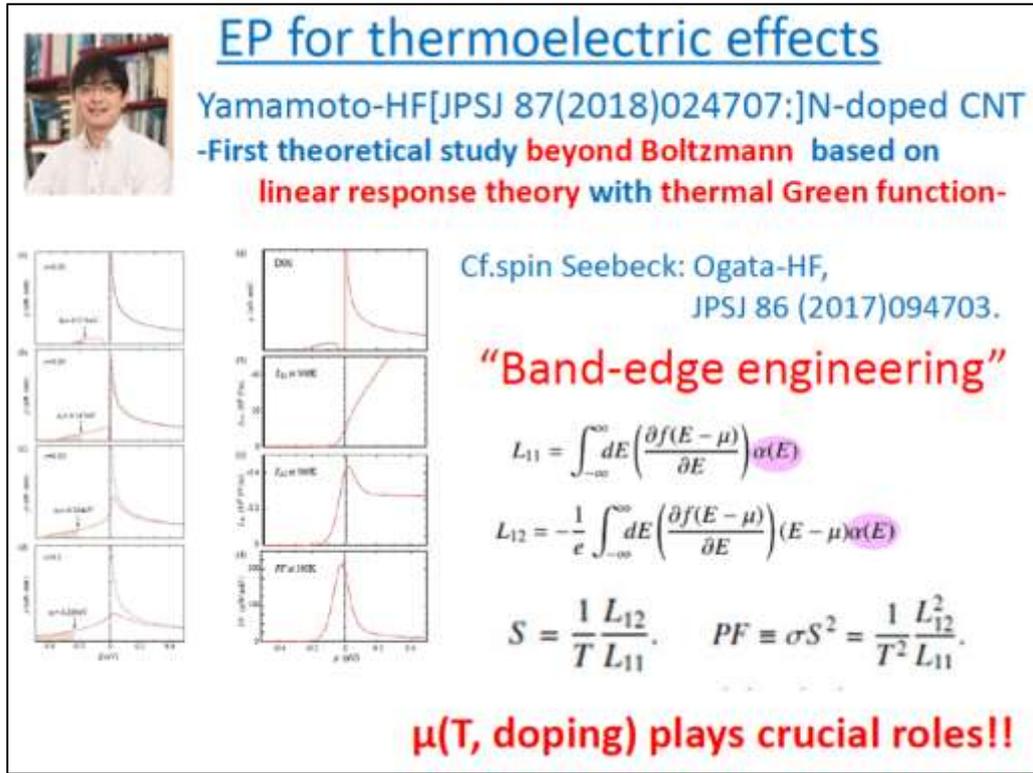


図 3-1-5 熱電効果に対する電子特性

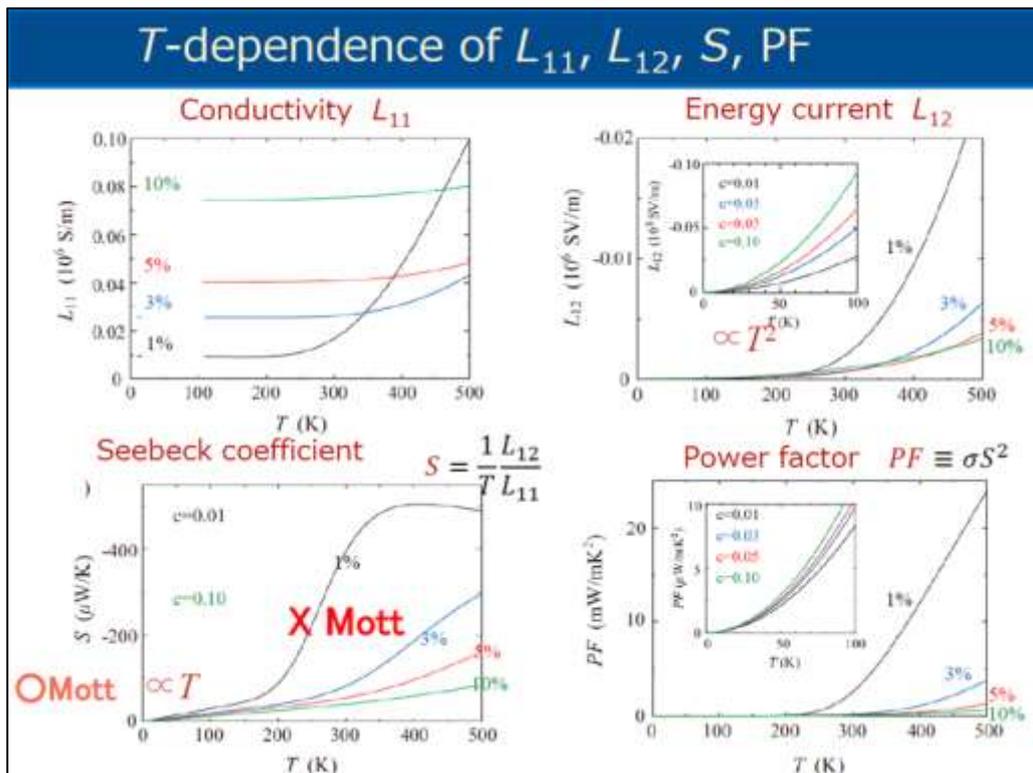


図 3-1-6  $L_{11}$ ,  $L_{12}$ ,  $S$ ,  $PF$ の温度依存性

図 3-1-5 に示すように典型的な例として、カーボンナノチューブに窒素ドープしたものを取り上げている。それぞれの定義に従って、パワーファクター  $PF$ 、ゼーベック係数  $S$  などを調べ、図 3-1-6 に示す結果から、次のようなことがわかった。ゼーベック係数を Mott の公式で議論することがある。確かに低温の極限では温度に比例し Mott 公式が妥当であるが、温度が高くなると合わなくなってくる。むしろ外れたところで大きなゼーベックの値が出てくる。これは、 $S$  の式には電気伝導度が分母に入っているためであり、電気伝導度が小さいほうが大きくなる。また、パワーファクターにも興味深い傾向が見られている。

さらに、首都大の柳和宏先生たちはカーボンナノチューブの P 型と N 型でゼーベック係数が、確かに符号が変わるという見事な報告をしておられる。その実験で電気伝導度とパワーファクターで面白いスケール則が成り立っていることもわかった。

実際の試料ではナノチューブが一方方向に揃っているのではなく、バラバラである。実験でのこのような状況と、理想的に考えた時の理論と、どこまで比べて良いのか、どこを問題にすべきか考える必要がある。実は、ゼーベック係数については、実験値は理論値と近いものが出ている。ただし、電気伝導度の値は全く違う。これは、シリコンのようなきれいな単結晶ではなく、試料の非一様性の効果が出ているのではないかと考えている。

材料科学に関しては、新しい視点が必要になってきている。サイエンスとして考える場合の多くは理想的な状況を仮定している。しかし、材料は必ずしもそうではない。シリコンデバイスの場合は結晶を用いているが、カーボンナノチューブの場合は、単結晶ではない。そのときにサイエンスをどう展開するかは非常に重要かつ基本的な問題である。構造材料の場合も、単結晶を使う人はなく、Texture のあるものを使う。Texture を構成している個々の物質の個性と、その集まりである全体がどう関係しているかということについては、サイエンスとしての学理がまだできていない。これについては、構造材料元素戦略拠点のテーマの一つでもあり、その中でクローズアップしている。同じ問題が磁石にもある。使っている磁石は単結晶ではなく、多結晶である。ミクロの morphology とマクロの物性をどうつなげるか、新しい考え方が必要である。その際に、データサイエンスの位置付けをうまくすることが、物質と材料をつなげるときに重要になると考えられる。

### 【質疑応答】

Q: 数式を理解しているわけではないが、熱が電気に変わるのはどのような理由によるのか。

A: 温度勾配があると電子の流れが生じる。温度を変えると化学ポテンシャルが変わり、基本となる熱力学的なエネルギーの原点が変わる。そうすると、必然的に電気を持っている粒子である電子の流れが生じ、その電圧が発生する。

Q: 前半の半導体の話ともつながりがあるのか。

A: 半導体であることが重要であり、メタルや絶縁体では駄目である。これらの境目にある半導体をうまく制御すると熱電効果も大きくなる。マテリアルデザインが重要であり、計算結果と実験結果を絶えず見比べ、電子状態の情報とゼーベック係数を比べながら研究開発を進める必要がある。

### 3.2 パリ協定が要求する材料革命 ～Net Zero Emission を実現する条件～

安井 至（持続性推進機構）

2015年12月に合意されたパリ協定は、人間の生き方を変えようという重大なものであった。日本人の多くはそれが認識できていなかったが、ようやく政府、特に内閣府、官邸が気付いて、2018年8月に「パリ協定に基づく成長戦略としての長期戦略策定に向けた懇談会」を立ち上げた。この会の狙いは、どうやって本当のイノベーションを起こすのか、ということである。パリ協定が作られるとき、日本はCO<sub>2</sub>排出量を2030年で26%削減するという約束草案を提出した。また、長期目標として2050年には80%削減することが閣議決定されている。しかし、CO<sub>2</sub>排出量80%削減というのは途方もない目標であり、材料・プロセスが相当に変わらなければ実現できない。これは極めて難しいことで、イノベーションが必須である。

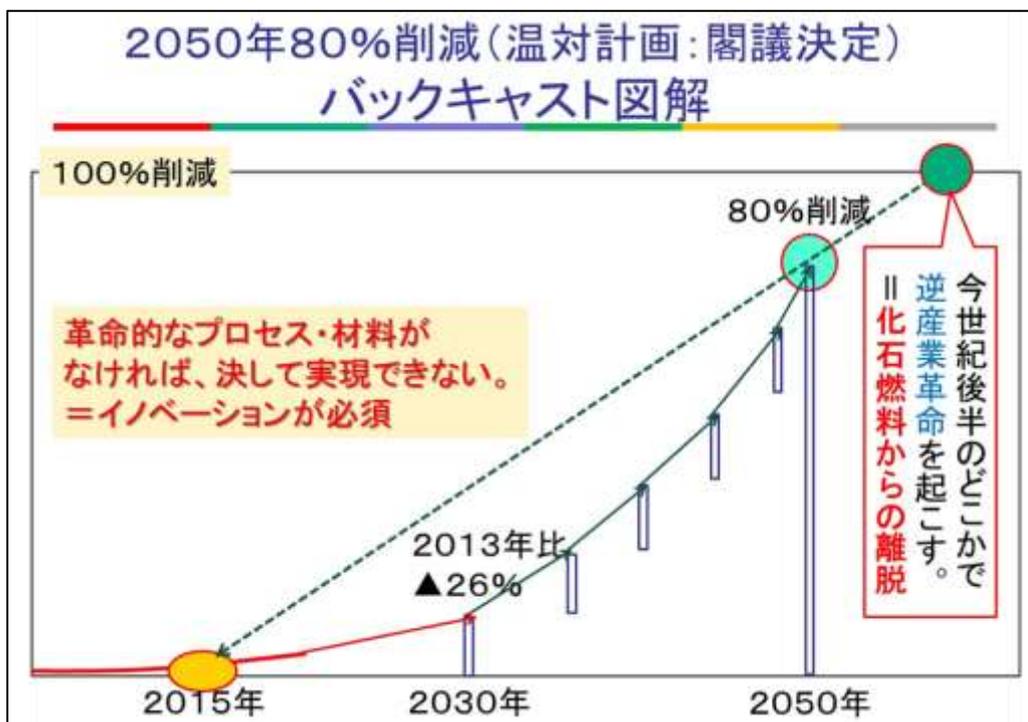


図 3-2-1 2050 年 80%削減 バックキャスト図解

パリ協定には climate justice (気候正義) という原理が書かれている。justice という言葉には、西欧では宗教的に明確な意味があるが、特定の宗教を持たない日本人には justice の意味を理解することは難しい。なお、中国も日本と同様の問題を抱えており、日本が climate justice を早く、正しく理解することができれば、中国に対して勝ち目が出てくるかも知れない。しかし、日本は残念ながら、破綻しそうな気配である (図 3-2-2)。2015年のパリ協定合意から2050年のゴールに向けてトラックを1年に1周回るとすると、日本は既に2周半くらい遅れてしまっている。今、世界の企業は、CDP、RE100、SBT という略語が何を指すか理解し、その内容を説明できると同時に、climate justice について説明できればひとまず合格、という状況にある。これを引っ張っているのは金融、すなわち ESG 投資というものであり、投資先の企業を選択する際の判断材

料になっている。このように企業の世界は変わってきているが、おそらく研究者のコミュニティはそういったことを認識できていない。

### 日本企業の新破綻パターン

- 日本の現状は？＝恐らく、世界の状況から2周半遅れた。
- 現在の“競争”は、 $14000m = 400m \times 35$ 周(1年に1周)のトラック長距離と似ている。
- 2015年のSDGsとパリ協定が号砲だった。
- 1年間にトラック1周がノルマ。
- しかし、日本企業で走り出したのは、まだ、100社足らず。残りの企業は、まだ、スタートラインの後ろに。
- 評価基準は、
  - 「CDP、RE100、SBTなど」に真剣に取り組んでいるか。
  - ESG投資(Environment, Society, Governance)の現状を理解しているか。
  - 最難関:パリ協定の「気候正義」を説明できるか。

図 3-2-2 日本企業の新破綻パターン

日本の破綻とはどういうことか、図 3-2-3 に例を示した。RE100 というのは Renewable Energy 100 のことで、100%再生可能エネルギーでやるという意味である。Apple はそのリーダーのようなところがあり、自社内で使用する電力について RE100 を実現した。Apple は自社内でおこなっているのが設計くらいなので、それが可能であった。そして、その次はハード、すなわちサプライチェーンに対して RE100 を求めている。日本には Apple に納めているメーカーがいくつかあり、そこは Apple に納める部品は RE100 で作っているとしているが、その実態は分からない。このように、Apple は自社の製品は全て再生エネルギーだけで作るというポリシーを持っており、世界的なグローバル企業は皆そうなっている。しかし、日本は違っており、随分遅れてしまった。なぜそんなことになったかという、日本には再生エネルギーで自給できる能力がない。努力すれば必要な電力の 50%は再生エネルギーで賄えるかも知れないが、残りの 50%はどうすれば良いか、誰も解を持っていない。

## 日本破綻のパターンの説明

---

- RE100の企業、例えば、Appleは、自社の電力を再エネに切り替えた。
- 次の段階では、当然、**サプライチェーン全体の電力も再エネに切り替える**だろう。
- **「自社の製品は、再エネだけで作られている」と主張**をするため。
- 日本国内には、再エネの供給能力が元々ない上に、送電網の使用コストが高すぎる。加えて、北海道では、風力発電にNaS電池の設置が求められる。
- となると、Appleからの要求を受けた日本企業の対応は、**「日本から出ていく」**以外にない。

図 3-2-3 日本破綻のパターンの説明

## 企業によるSDGs対応の根本(心)

---

- **SDGsの構造**
  - 大もとの文書は、国連の**合意文書**である、
  - **Transforming our world: the 2030 Agenda for Sustainable Development** 2015年9月
  - この文書は、6Psでスタート、17Goals、169Targets
    - **Preamble + People + Planet + Prosperity + Peace + Partnership**
    - 17Goals: これは**ゴール**なので**究極の行き着く先**
    - 169Targets: **当面解決すべき課題**
  - 全体的に取るべき**基本姿勢**などは、**Preamble**に。  
 =最重要課題は依然として、**“貧困の解消”**である。  
 =それには**“Transform your company”**

図 3-2-4 企業による SDGs 対応の根本 (心)

また、パリ協定と同じ年にできた SDGs について、日本はその心を知ろうとしていない (図 3-2-4)。SDGs は 17 の Goals の下に 169 の Targets があるが、日本の企業はその中から自分た

ちにできるものだけを拾い上げて、表面的な対応をしている。しかし、SDGs の大本は国連の合意文書「Transforming our world」であって、我々の世界をどう変えていくかという話である。そこで重要になるのが 6 つの P であり、Preamble (序文) はしゃれみたいなものだが、残りの People、Planet、Prosperity、Peace、Partnership の 5 つ、これらの問題をどうやって解決するかが SDGs の心である。もし SDGs に研究者が取り組むとしたら、このようなマインドを持つ必要があるが、残念ながら、日本ではそうになっていない。そもそも、SDGs の基本思想として、貧困の解消が最重要課題であることを知っている人が殆どいないだろう。SDGs には 2 つの重要な言葉があり、一つは上で述べた、世界をどう変えるかという Transforming。もう一つは Inclusive という言葉で、これは Preamble に書かれている「We pledge that no one will be left behind : 誰一人取り残さない」を指す。この 2 つを踏まえた上で、自ら SDGs に取り組もうとしない限り殆ど意味がないが、日本でそこまでやっている人はいない。

### パリ協定の意味を理解するために 一次エネルギーが3種類しかない理由

- ヒトが使える一次エネルギーは、次の3種
  - **化石燃料** = 石油、石炭、天然ガス
    - 樹林、植物、藻類などが起源
    - 数1000万年から数億年前か
    - 元は、かつて地球に降り注いでいた太陽エネルギー
  - **核燃料** = もともと宇宙起源
    - 質量とエネルギーの変換
    - $E=mc^2$  (アインシュタインの式)
  - **自然エネルギー**
    - 基本的に現時点の太陽エネルギーの利用
    - 他の二種がストック型に対し、フロー型

今世紀後半に CCS付き以外はゼロに！

億年レベルで蓄積。人類それを数100年で使い切る勢い。  
=江戸時代の放蕩息子

図 3-2-5 一次エネルギーが 3 種類しかない理由

パリ協定に話を戻す。ヒトが使える一次エネルギーのうち、化石燃料というのは非常に便利で、過去 300 年くらいの間、我々は使ってきた (図 3-2-5)。地球が数億年かけて地下にため込んできた化石燃料を 300 年で使い切ってしまったらどうなるか。大気中の CO<sub>2</sub> 濃度が、恐竜がばっこしていた時代に戻ってしまう。あのような巨大な生物が生きていたのは、気温が高かったことと、高い CO<sub>2</sub> 濃度によって植物の成長が大きく、餌が豊富にあったことによる。したがって、この先、化石燃料を使い続けることには×がつく。では、どうすれば良いか。CCS (Carbon dioxide Capture and Storage) をやるという手はあるが、結局、一次エネルギーとして使えるものは核燃料と自然エネルギーの他にはない。しかし、核への拒否感が強い日本でどうすればよいか。例えば核融合などの研究をしっかりとっていく必要があるが、今の日本ではその辺りが欠けてしま

っている。

## ICEFのTop10 Innovations

- 日本のイノベーションの特徴
  - Sharp・Kaneka 太陽電池の変換効率で世界最高達成
- SCANIA/Siemensのイノベーション 今回ランク外
  - トロリートラック 日本で有力なのは、水素燃料電池トラック



- Siemensのイノベーション 今回ランク外
  - 風力発電などでの余剰電力を岩石を媒体とした蓄熱トンネルに蓄熱(600℃)
  - 電力不足のときには、通常の水蒸気タービンで発電

図 3-2-6 ICEF の Top10 Innovations

ICEF (Innovation for Cool Earth Forum) という日本政府主導の会議があり、今年、5回目が開催された。ダボス会議のエネルギー版を目指して作られたもので、私は運営委員を務めている。さまざまな企業に講演してもらっているが、例えば Shell は、自分たちの重要な役割は CO<sub>2</sub> 排出量の少ないエネルギーをより多くの人々に供給するための新たな方法を見いだすことである、と言っている。これには、自分たちは変わる、という Shell の意思表示が含まれており、それによって説得力を増そうとしている。

ICEF では、その年の Top 10 Innovations を参加者の投票によって決定するというイベントをおこなっている (図 3-2-6)。参加者の 6 割が日本人であるため、日本人による投票が過半数を占め、日本からのイノベーションとして、シャープやカネカの太陽電池の変換効率が世界最高を達成したことがランクインした。これは確かにインパクトの大きな話ではあるものの、例えばインジウムのような元素を大量に使う技術ではだめで、世の中にいくらでもある元素を使うのでない限り意味がない。一方、ランク外のスウェーデンの SCANIA とドイツの Siemens によるトロリートラックは、何も新しいことはなく昔からある技術を使っているが、それが蘇ったということ、それこそがイノベーションといえる。新しいかどうかではなく、使えるかどうかが重要である。Siemens にはもう一つ、風力発電の余剰電力を熱で貯蔵するという話もある。どうやらイノベーションには 2 種類あり、例えば Siemens のイノベーションは転換をすることである。新しいかどうかではなく、今あることをやめて別のことをやるのがイノベーションであり、古いものでも良いものを使えばイノベーションといえる。一方、日本のイノベーションは改善、すなわち、少

しずつ性能を上げて世界最高のデータを出すことがイノベーションになってしまっている。未来社会にどのように貢献するかということが考えられていない。この違いは、何が正義か、ということによる。パリ協定の正義は、自分たちは変わる、ということである。

Siemens の余剰電力貯蔵は、岩石で多孔質の丘を作り、風力発電で余った電力を熱として貯めるというもので、これで1週間くらい貯められるという。多孔質なので中を空気が通るようになっており、電力が必要なときには外から冷たい空気を入れ、熱い空気を取り出して蒸気タービンを回す。これには何も新しい技術は使われていないが、イノベーションである。一方で、日本では電力貯蔵というと、最も貯蔵効率の高い揚水発電が一番で、その次が電池となる。コストが高くて現実的ではなくても、日本では効率が低いこと、新しいことがイノベーションと考えられている。そもそもシュンペーターが定義したイノベーションというのは、新結合であって、最先端のことではない。新結合というのは、今まで組み合わせることがないものを組み合わせることである。苦労して新しいものを作る必要はなく、既にあるものを組み合わせれば良い。パリ協定以降、イノベーションの定義が、そこへ戻ってきたように思う。インパクトファクターの高い成果がイノベーションにつながるという方向ではない。したがって、研究者には、自分とは全く専門の違う人と話をする事、そして新しいアイデアを得ることを強く勧めたい。

### Climate Intelligenceのゴール

- 2080年頃のNet Zero Emissionの実現と各企業の経済活動との整合性
- その実現には、どのような国を作れば良いか、これが大前提となる:これを政治家に理解させよう。
- その前に、宇宙限界、地球限界、自国限界を理解。
- 宇宙限界とは
  - ビッグ・バンによって生まれた宇宙。
  - 素粒子からなるが、その組み合わせは、どこでも同じ。
  - 元素は、宇宙レベルで決っている。
  - エネルギーは結局、核融合で得るのが普通で、核分裂も可能ではあるが例外的。
  - 化石燃料も、太陽の過去の核融合のエネルギー。
- 地球限界≒資源限界

図 3-2-7 Climate Intelligence のゴール

今、世界中で自動車は、ガソリン・ディーゼルだけといった、ハイブリッドではないものは廃止して EV 化しようという競争がおこなわれている。例えばノルウェーは 2025 年までにガソリン・ディーゼル車の販売を終了するとしているが、これはおそらく実現されるだろう。ノルウェー

一は人口が非常に少ない上、高速道路も少なく、冬は道路の除雪があまりにも大変なので長距離移動に飛行機が使われる。街中だけであればEVでなんとかなる。一方、2030年を目標に掲げているスウェーデンは、既に高速道路網ができあがっているため、実現は難しいだろう。このように、どこの国がどのような戦略を持ってパリ協定に取り組むのか、そのような情報を集めて共有し、解析することをClimate Intelligenceといい、これが日本は不足している。Climate Intelligenceを実施するには、宇宙限界、地球限界、それから自国限界というものを理解しなければならない(図3-2-7)。

日本のイノベーションをどうすれば良いか、考えなければならないことは多い。例えば欧州はアフリカまで海底に高圧DCケーブルを敷き、アフリカで太陽電池によって発電した電力を使用するという戦略である。これはアフリカの貧困の解消、すなわちSDGsにも関わっている。一方、日本は高圧のDCケーブルは国内に2カ所くらいしかなく、しかも日本は国内で50Hzと60Hzの2地域に分かれてしまっている。こんな国は世界で他に殆どない。また、前述の通り、日本は再生可能エネルギーでは自給率50%くらいまでしかいけそうにない。どうすれば現在の東京電力による供給範囲を再生可能エネルギーでカバーできるか計算してみたが、茨城から房総半島にかけての海岸線に洋上風力発電を3列くらい設置し、八王子から浦安の間の建物を全て取り払って太陽電池を取り付ければ、なんとか供給できるという結果になった。日本は地熱発電もあまりよくない。なぜかという、もし影響で温泉が出なくなってしまった場合に、それを補償するだけの儲けが出ないからである。原子力に関しては、最も厄介なのはプルトニウムの問題である。原子力発電で兵器級のプルトニウムができるわけではないが、プルトニウムはもはや不正義を表すものとなっている。気候変動の不正義というラベルを貼り付けられた上に、プルトニウムというゼッケンを着せられたら、もはや日本は立ち行かなくなってしまう。

最後に、製造業に待ち受ける課題を示す(図3-2-8)。鉄鋼業では、水素で鉄を作ることはできるか。電炉だけで鉄の供給を満たすことはできるか。非鉄金属のリサイクルをCO<sub>2</sub>ゼロでできるか。極めて困難な、様々な課題があるが、材料研究者はこれらを見向きもせずインパクトファクターを追求していて良いのか。日本をどうしたら良いか、皆で考えて欲しい。

## Net Zero Emission時代の製造業 今世紀中後半に、様々な困難が待ち受ける

- **鉄鋼業**: 鉄鉱石の還元を水素だけでできるか
- **電炉のみ**で鉄の供給量を満たせるか
- **非鉄金属のリサイクル**: CO2ゼロで可能か
- **セメント製造**: 石灰岩を使わない方法はあるか
- **石油化学による製品**: 燃やすとCO2がでるので焼却ができなくなるか
- **石化製品のすべてをバイオ原料**で作れるか 生分解性プラは重要ではない
- **ガラス製造**: 再エネの電力のみで製造できるか
- **都市ガス**: 水素のみで供給するのか。鉄パイプは使えるのか⇒ ガス湯沸かし器が使用不可なら、やはりヨーロッパ流の**熱供給**にするのか。

図 3-2-8 Net Zero Emission 時代の製造業

### 【質疑応答】

Q: 核融合に関しては、核融合状態を維持するのが非常に難しく、一瞬にして消えてしまうと聞いている。そのあたりを、例えば新しい材料や核燃料など、新しい物質で解決できる余地はあるか。前半の半導体の話ともつながりがあるのか。

A: 専門的な個別の議論は私には分からない。ただ、現在の核分裂反応を用いた原子力発電は、欠陥品だと考えている。なぜかというと、自動車でいえばエンジンの中に燃料があるようなものであり、何かあったときに燃料を取り出すことができない。しかし、核融合であれば外から燃料を供給するので、明らかに安全性は核融合炉の方が高い。そのようなことを踏まえて、皆でもっと真剣に核融合に取り組むべきではないかと考えている。

### 3.3 新たな研究手法について

津田 宏治（東京大学）

## 講演の概要

- 海外の研究
  - Leroy Cronin (Glasgow)
  - Alan Aspuru-Guzik (Toronto)
- 深層学習とモンテカルロ木探索を用いた有機分子設計
  - 望みの吸収波長を持つ分子を設計
- AI支援タンパク質工学プラットフォーム
  - 緑色蛍光タンパク質(GFP)にAIで設計した変異を導入して黄色にする

図 3-3-1 本講演の概要

本日は、図 3-3-1 の概要にしたがって、「AI と実験機器を直結せよ」ということを述べたい。最初に海外の研究例を 2 つ紹介する。一つはグラスゴー大の Leroy Cronin、もう一つはトロント大の Aspuru-Guzik の成果である。続いて、我々の関わった研究として、深層学習とモンテカルロ木探索を用いた有機分子の設計、具体的には好みの物性を持つ分子が AI で自動設計できるという話をする。そして最後に、AI 支援タンパク質工学プラットフォームについて話したい。これは、緑色蛍光タンパク質 (GFP) に AI が設計した変異を導入して、その色を黄色に変化させることに成功したという話である。

最初に紹介したいのが 2018 年 7 月に Leroy Cronin のグループから出た論文で、タイトルは“Controlling an organic synthesis robot with machine learning to search for new reactivity”である。この論文の趣旨は、試薬を混ぜ合わせる、反応させる、スペクトルを計測する、という過程をロボットで繰り返すことにより、18 種類の分子から新物質が合成できるかどうかを検討したというものである。ここでは、Support Vector Machine (SVM) と呼ばれる機械学習法を利用し、自動で試薬の混ぜ方を変えたり実験計画を立てたりすることによって、4 つの新規反応を発見した。機械学習を利用するのに加えてロボットが実際の実験も行ってくれるため、従来は科学者のやっていたような作業が不要になるということである。

もう一つの例が Aspuru-Guzik のグループから発表された ChemOS に関する論文で、タイトルは“ChemOS: an orchestration software to democratize autonomous discovery”である。

現時点で ChemRxiv に掲載されているプレプリントである。“meta-lab” と彼らが呼ぶ全自動化実験室をロボットと AI で作りたいというとき、最も重要なのは当然コストであり、気軽に作れるくらいまでコスト削減が必要である。本論文では、“meta-lab” の管理と制御に必要なソフトウェアを一から作らず、ChemOS という共通パッケージを使うことが提案されている。さまざまな分野の研究で汎用的に使えるシステムは実現できなくとも、それぞれに共通する部分（例えば AI、計測装置の部分や実験機器の予約機能など）の制御には有効な方法論ではないか、という発想である。

本論文の内容を紹介すると、赤・青・黄色の異なる有機顔料を自動混合することでターゲット色（緑色）にしていく作業に対して、データ最適化の手法を用いる試みである。最初は、混合の仕方をランダムに変えていくので、得られる結果とターゲット色の差 (Loss) が大きく変動する。データが蓄積されるとともに、自動的なパラメータ設定により Loss が減少し始め、最後には最適解を導くことができる。この自動混合の実験でも自作の小型ロボットが使われている。

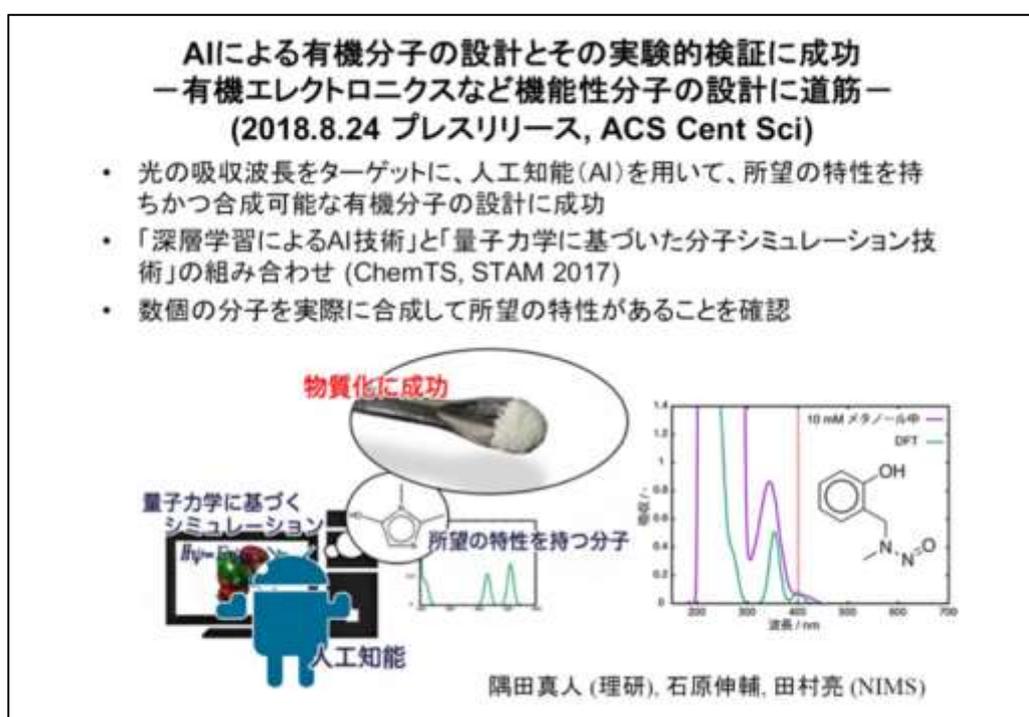


図 3-3-2 AI による有機分子の設計と実験的検証

次に、我々が 2018 年 8 月にプレスリリースした成果「AI による有機分子の設計とその実験的検証に成功」を紹介する。その概要を図 3-3-2 に示す。ここでは、AI を利用すると、所望する波長の光を吸収し、かつ合成可能な有機単分子を自動で設計可能であることを示した。用いる制御プログラムとして、深層学習による AI だけでは不十分で、入力データを取得するためのシミュレータも必要である。本研究の鍵は、量子化学で有名な Gaussian というソフトをシミュレータとして導入し、AI に入力される実験データを取得することができたことである。

続いて、研究手法について説明したい。分子の化学構造を表記する方法に、グラフ理論に基づく SMILES 記法が知られる。ここでは、化学構造を 1 行の文字列で表し、それを探索すること

で新規に分子が生成される。探索木で言うと、1列目が1文字目、2列目が2文字目となるので、この探索木を最後まで作ると1分子になる。我々は、モンテカルロ木探索 (MCTS) という、囲碁やチェスなどのゲームプレイで使われるアルゴリズムを使った分子探索と、Recurrent Neural Network (RNN) と呼ばれる深層学習の手法を応用する新しい設計手法を開発した。MCTS による探索分子を後述のシミュレータにかけ、その光吸収波長を計算し所望の波長 (ターゲット) との差を Merit という点数で導く。Merit をパラメータとして RNN で学習が繰り返されることで、最初は大きいばらつきが最適化され次第に小さくなっていく。この方法論は、関連する総合論文が Science 誌に発表されるなど、最近における研究の重要な方向性となっている。

我々は、python 言語のライブラリーである ChemTS を独自に開発し、これにより探索対象の新規分子を生成している。MCTS で探索された分子から RNN への入力データを取得するシミュレータとして、時間依存密度汎関数法 (TD-DFT) に基づく Gaussian という量子化学計算ソフトウェアを用い、分子の吸収スペクトル、すなわち光吸収波長が計算できる。本研究では、200、300、400、500、600 nm を所望の吸収波長に設定し、それぞれを満足するターゲット分子を探索、設計した。各計算には、12 コアサーバーを有する通常のパソコンで2日を要した。吸収波長 200 nm の結果を例に挙げると、ChemTS ライブラリーで生成、RNN と MCTS により探索された分子が計 646 個で、そのうちの 34 個が TD-DFT で吸収波長  $\pm 20$  nm の範囲にあると予測された。さらにその中で合成経路が既知の2分子を外注で合成し、NIMS で吸収スペクトルを測定したところ、1分子は推測どおりであった。研究全体では、吸収波長 600 nm の分子だけが合成まで至らなかったものの、それ以外の波長で5分子が所望どおりに合成できた。AI が化学合成に役立つということを示せた成果と思っている。

ChemTS ライブラリーを用いると、例えば1日で1000個とか、どんどん分子が生成できるが、これらが実際に合成できるか、合成できたとしても安定かどうかは別問題である。その意味では、目的物を化学合成で得るための設計指針を見出したいという本来の目標に対して、有機分子が山ほどあっても合成経路の探索ができないという問題は残っている。一つ一つ有機化学者が検討するというのでは数が多くて仕方がないので、従来のやり方を変えてロボットが担当できたら最高と思う。

この研究以外にもう一つ、最近のプレスリリース成果「人工知能でタンパク質を自動設計」を紹介したい。図 3-3-3 がその概要である。コンセプトは前の例と近いが、対象物質が単分子でなく高分子のタンパク質である点が異なる。タンパク質はアミノ酸から構成されるので、その一部を自動的に改変することで目的の蛍光タンパク質を設計できたという話である。

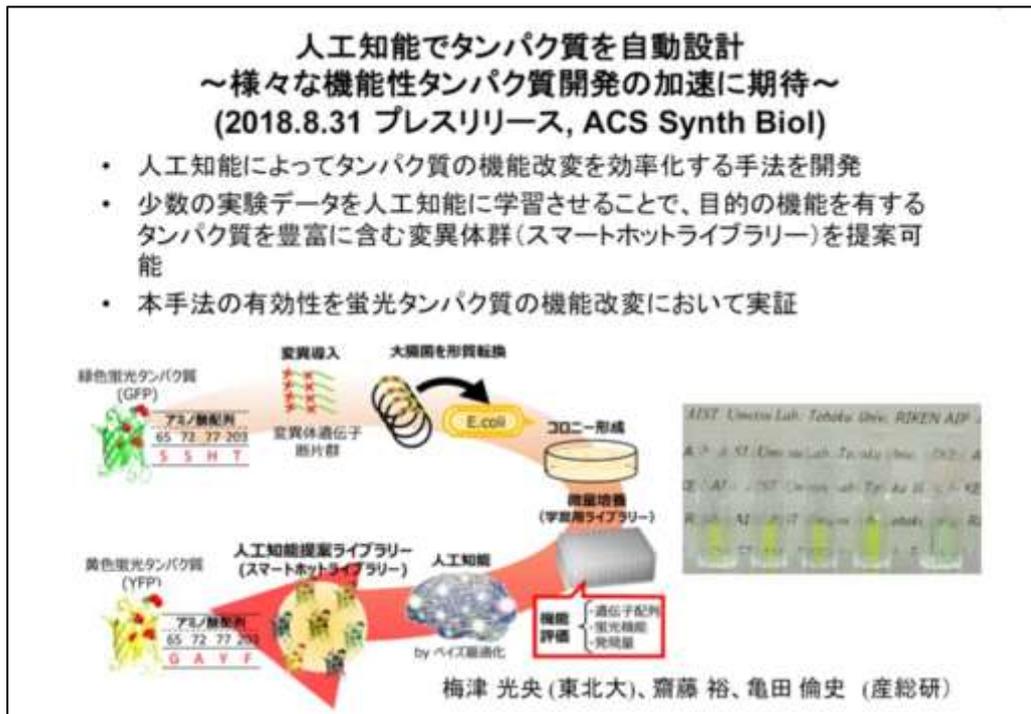


図 3-3-3 人工知能でタンパク質を自動設計

このようなタンパク質工学の分野では、オプジーボ等の抗体医薬や酵素などの例でわかるとおり、さまざまな産業で応用検討が進められている。タンパク質は 20 種類のアミノ酸から構成される鎖であるので、その一部に変異を導入することで機能の改変や強化が可能である。しかし、その可能性探索には、変異導入の箇所が K 個のときで理論上 20 の K 乗個、例えば 4 個でも 20 の 4 乗=16 万もの多くの数があり、すべての検証実験を行うのは到底無理である。

そこで通常は、指向性進化法 (Directed Evolution) を利用する。この方法では、既存の酵素にランダムに変異を導入することと、それにより新たに作られた酵素から目的の機能に最適なものを選抜 (スクリーニング) することを繰り返すことによって、最終的な変異体を得る。このとき、変異導入とスクリーニングのサイクルで取得した機能特性と遺伝子情報は莫大な量であるため、ここに機械学習を利用して効率化を図ろうというのが我々の発想である。機能特性と遺伝子情報を訓練データとして学習させ、それによって新たな変異が設計される、つまりランダムでなく機械学習の注文どおりに変異酵素が作られることと、その特性データを取得することが繰り返されることで、目的の変異体が得られる。

ここでは GFP の研究例を挙げる。GFP は、対象とするタンパク質を標識し生体内における挙動を追跡できるだけでなく、その蛍光量を利用した定量実験にも広く使われている。我々は、GFP 中の 4 カ所、具体的には 65、72、77、203 番目のアミノ酸残基に対する変異導入によって、より長波長の黄色に近い蛍光を発するように改変することを試みた。先ほど示したように理論上の組み合わせ数は 16 万にも達し、その実験的検証は従来まで無理であったが、図 3-3-4 のような AI 支援プラットフォームを用いることで可能になった。本研究では、アミノ酸残基の説明変数として既報の T-scale を用いるとともに、その評価のために波長と蛍光強度を統合した特性値を定義した。有機単分子を対象にした前の設計と違うのは、TD-DFT のようなシミュレータがなく実験と機械学習だけなので、データ量が限られてしまうことである。

まず、ランダムに変異を導入したときの結果は、黄色度を表す蛍光変化率を横軸、蛍光強度を縦軸にしたプロットで元の GFP の周囲に分散し、大きな蛍光変化は確認されなかった。目標の黄色度はもっと高く、このようにランダムな変異導入では実現できなかったが、得られた結果は機械学習の訓練データとして利用できた。機械学習により 100 個の候補分子が見出され、そのうち可能性の高い 10 個を見ると、興味深いことに 65 番目のアミノ酸残基が全部グアニン (G) であるなど、結果はかなり類似していた。

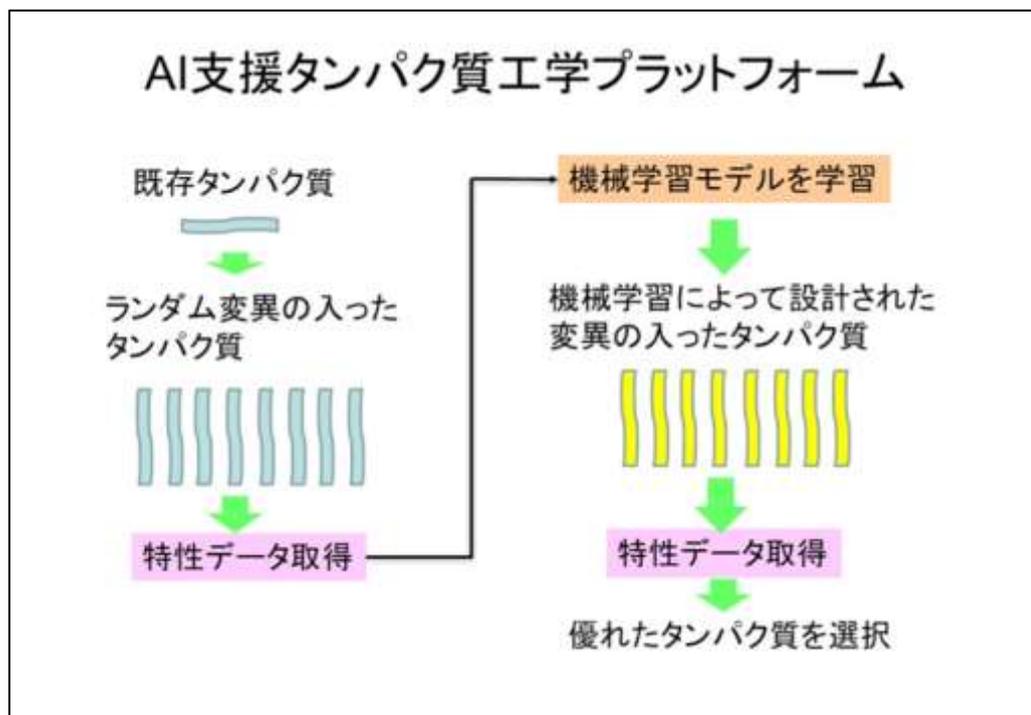


図 3-3-4 AI 支援タンパク質工学プラットフォーム

候補分子の結果をもとに東北大学で GFP を改変した結果、100 個のうち本当に黄色くて蛍光が強いものが 12 個含まれており、そのうちの一つは理研で 2001 年に発見された黄色タンパク質 Venus とほぼ一致した。実際に写真を見ても、緑色の GFP と比べてだいぶ黄色いのが明らかである。

最後にまとめると、情報系の研究者である私としては、データ最適化などの情報学的手法を利用して実際に所望の機能を有するものが得られたことは非常にうれしい。これまで述べたように、機械学習にはデータが必要で、それを作るのは実験かシミュレーションしかない。したがって、材料科学への応用を考えたときに最も大事なものは、データ生成と機械学習のサイクルを如何に速くするかということであり、そうすると必然的に AI の使用が見えてくる。この意味で、機械学習の手法だけを研究しても状況は大きく改善しない。一方、実験機器には大きな改善の可能性があると考えており、例えば AI を組み合わせることで効率化が図れるのではないかと考えており、効率的なデータ生成法の確立を目指し、「AI と実験機器を直結せよ」と申し上げたい。そうすれば、我々のような情報系研究者の出番となり材料系研究者との共同研究も可能になる。

**【質疑応答】**

Q: 「AI と実験機器を直結せよ」という主題だったが、どこにサイエンスがあるのか。

A: 例えば、ある物性値をもつ有機分子がほしいと思ったときに人間は設計原理のようなものを持っており、それを基に達成することができるが、AI を使えば原理なしでもできるというところがチャレンジングなところである。ただ、今の AI でできていることはまだまだ限られた範囲でしかない。

Q: AI を使って、人間が到達不可能な結果を出してほしい。

A: 今の AI は人間でいうところのよちよち歩きの状況であり、これからどんどん発展していくと思う。

Q: 例えば、複雑な多結晶体の組織と物性の関係などは、おそらく AI を使わないと理解は進まないと考えている。そういう本当に困っているところにチャレンジすべきではないか。

A: 多結晶になると、学習すべきパラメータが何なのかといったところから考えていく必要があり、非常に難しいがいずれは挑戦したい。

## 4. 分科会検討結果報告

### 4.1 分科会 1

分科会リーダー：関谷 毅（大阪大学）

最初に、我々のグループ検討の中心的概念である「RINNE Materials」というキーワードを提案する(図 4-1-1)。これは、輪廻転生に掛けており、「Recycling INitiative NEtworking Materials」もしくは「Recycling INitiative Never-ending Materials」の略である。資源のない日本の中で永続的に材料を作り続けてサステナブルな社会を構築するためには、作るだけで終わるわけにはいかないという意味が込められている。

また、もう一つの重要な概念として、産業の動脈プロセス、静脈プロセスの概念も提起する。IoT 産業を例にとれば、素材から IoT 機器が生まれる過程は動脈プロセスであり、より安全で便利で豊かな社会を作るという目標を持つ。次世代 IoT 産業を形成するために、大量の資源、材料、エネルギーを消費するわけであるが、地下から資源を掘り続けるわけにはいかないため、社会はリサイクルまでを考えた戻りプロセス＝静脈プロセスを備える必要がある。RINNE Materials とは SDGs へ貢献するための材料戦略と位置付けられる。



図 4-1-1 RINNE Materials の概念

この静脈プロセスは、一見するとすでに行われている通常のリサイクルのように見えるが、後述のように、単なる構造材料の再利用にとどまらず、電氣的な性能、機能まで含めてのリサイクル性を高度に実現するために、あえて異なる名前で呼んでいる。

RINNE Materials の概念をマテリアルサイエンスに落とし込むと、「弱結合・強結合の自在

制御」が本質であることがわかる。「弱結合・強結合」とは、たとえば、IoT 機器のシリコン部分は強結合の代表で、原子間の強い共有結合により安定な構造と高い電気的性能、信頼性を持っているが、反面、その分解や再生には、高い温度、大きなエネルギーといった環境負荷の大きなプロセスが必要となる。一方で、弱結合の代表である、弱いファンデルワールス力で結びついた有機材料では、安定性・信頼性が強結合材料に比べて低い代わりに、環境へのダメージの少ない低エネルギーでの回生ができる。つまり、安定性とリサイクル性は、一般には、相反する性質であり、これを両立できる材料、分子間力（結合性）を桁違いに大きく可変できる材料が、我々が提案する RINNE Materials である（図 4-1-2）。



図 4-1-2 RINNE Materials の特徴

RINNE Materials の静脈プロセスがどのようにしてリサイクル容易性を実現するのかについて、現状のリサイクルの例から考えてみる。図 4-1-3 は、現在リサイクルがなされている代表的なマテリアルである紙と PET のリサイクルプロセスを示している。

紙に関しては、自治体やメーカーによる回収プロセスが高度に発達していることと、非再生紙 120 円/kg に対して再生紙 140 円/kg とコスト差があまり大きくないことから、リサイクル率も高く、環境負荷低減に大きく貢献している。一方、PET の場合、石油原料から作る PET が 700~1000 円/kg に対し、リサイクル PET が 3300 円/kg と非常に高く、このコスト差がリサイクル率向上を妨げている。

リサイクル PET の高コストは、プラスチック素材が互いによく似ているため、その分別に人手をかけなければならないことに起因している。図 4-1-4 に示すように、RINNE Materials では、分子間力を劇的に変化させることで分解が容易となり、分離コストを飛躍的に低減できると期待できる。これにより、IoT 機器などのリサイクル率を向上させ、機器の性能に制限をかけることなく、静脈プロセスを実現することが出来る。

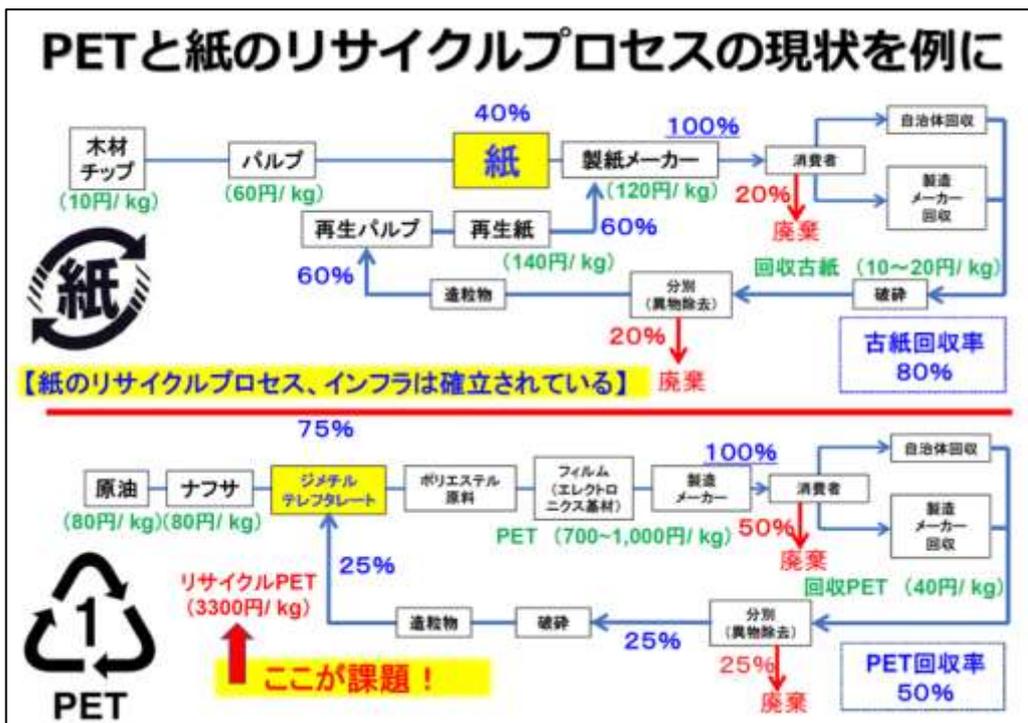


図 4-1-3 現状のリサイクルプロセスの比較



図 4-1-4 従来と RINNE Materials の動脈・静脈サイクルの比較

以上をまとめると、この提案では動脈である次世代 IoT と静脈である高度なリサイクルを行う。そこでは、動脈プロセスの間は、強結合的であるため安定に動作し、静脈プロセスに入ると弱結合化してリサイクルが容易となる RINNE Materials が活躍する。背景となる研究分野としては、結合性を極端に変化させる物質である触媒材料のほか、強結合・弱結合・その中間状態の制御をマルチスケールで制御する学問体系の構築が不可欠となってくる。また、粒界、転位レベルでの乱れなどの複雑系の体系化が必要となるため、マクロ状態の確率的挙動を扱えるマテリアルズ・インフォマティクスなどの活用も望まれる。さらには、複雑な無機有機界面の弱結合・強結合を決める電子状態理解とその制御、電気化学的手法での弱結合形成といった検討も行う。これらにより、資源の乏しい日本においても、永続的に材料を作り続けて持続可能な社会を構築することを目指す。

## 4.2 分科会2

### 分科会リーダー：久保 百司（東北大学）

本分科会からは、「乱れの材料科学と制御」によってスケーラブルかつ高機能な材料開発を行うプロジェクトを提案する。このプロジェクトは、「ナノ構造の機能が、マクロな材料物性に反映しない」という長年抱えてきた課題に対して、ナノ構造の集合体に現れる「乱れ」を制御することで克服し、それによりマクロな高機能材料の開発を実現しようとするものである。

構造材料を例にとると、粒界を含むマクロな材料には、図 4-2-1 に示すような、変形、歪み、亀裂の生成、偏析、腐食といった様々な現象があるため、たとえミクロな領域においては高い材料機能を有することが示されていたとしても、その機能をマクロな構造材料で実現することができない。こうした問題が、多くの材料開発のシーンで見られる原因は、ナノの理論をスケーラブルにマクロへと繋ぐことができていないことにあり、その課題を、「乱れ」を理解し、それを「制御」することで解決していこうとするのがこの提案の骨子となる。

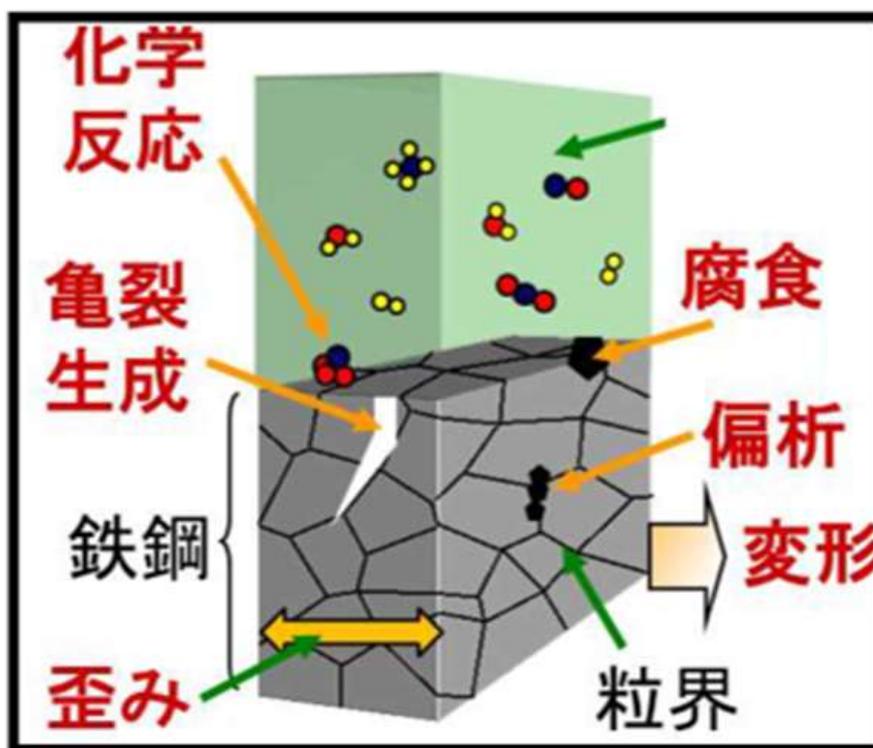


図 4-2-1 マクロ材料に生じる「乱れ」

開拓する必要がある材料科学テーマの一番目としては、ナノメソマクロの各階層において、「乱れを制御する学問体系」が挙げられる。これは、金属における粒界・欠陥・亀裂・偏析・応力・歪み、金属やセラミックスにおけるアモルファス構造、ポリマーにおけるラメラ構造や球晶、結晶とアモルファスの混合、金属／セラミックスやセラミックス／ポリマーなどの複合材料、ドーパント・水素侵入・腐食・変形・雰囲気の影響といった、動的、静的な乱れがある状況をきちんと記述し、それを制御できるような学問体系を構築することを意味しており、明らかに既存の材

料科学領域内では十分に遂行することは不可能である。統計学・幾何学・データサイエンスといった数理科学的知見を材料科学と融合することによって、ナノからマクロまでの「乱れ」を系統的に理解する新たな学問体系が構築できると考えている。

一番目の学問体系構築が成功し、マルチスケールな「乱れ」の理解・人工的制御が可能になれば、今度はそれを積極的に利用した二番目のテーマとして、時間軸によって変化する「乱れ」を活用した材料開発の道が拓ける。その一つの例としては、外場に応答して時間的に変化するような「乱れ」を材料に導入しておき、この「乱れ」が反応場に応答して準安定状態に遷移することで、「通常合成できないものが合成できる」「低エネルギーで合成できる」といった新たな材料合成の可能性が拓かれるというものである。

「乱れの材料科学と制御」の学問体系が深まってくれば、新規な材料合成法だけでなく、さらに夢のような応用先も考えられるようになる。コンクリートや木材の強度が、内部ネットワークの変化で経年的に向上していく現象や、SEI (Solid Electrolyte Interphase) の生成によりリチウムイオン二次電池の充放電性能が製造直後よりも向上していく現象などがよく知られているが、これらの現象も、本提案で述べてきたマルチスケールの「乱れ」の時間変化の一種ととらえることができる。つまり、本提案が目指す「乱れの材料科学」が十分に発達した暁には、こうした「単に経時劣化するだけではなく、ある条件で成長したり別の機能を発現したりするようになる材料」をさらに多く作り出すことが出来るようになることと期待される。さらに 外界からの刺激によって自己強化や自己修復する材料、突発的な環境変化にも内部構造を変えて耐える材料、といった夢の材料を生み出せるかもしれない。そして、こうした材料を、現在、経時劣化や保守コストの増大が社会問題となっている社会インフラに適用していくことで、自然災害に対してもロバストな社会構築にもつながる。



図 4-2-2 インフラ点検は大きな社会コストとなっている。(出典：国土交通省、社会インフラのモニタリング技術活用推進検討委員会（第1回）、資料2）

### 4.3 分科会3

#### 分科会リーダー：柳田 剛（九州大学）

この分科会では、まずナノからバルクへの架け橋を与える要素「トランスフェイズ」の概念を提唱し、ナノスケールの優れた機能をマクロスケールに展開する際の本質的な問題を解決することによりグリーンな社会に貢献する「時空間トランスマテリアル」プロジェクトを提案する。

この提案に至るきっかけは、全く異なるバックグラウンド（酸化物界面制御/電池材料、有機化学/森林化学産業、ナノダイヤモンド/NV センター、分子認識、エレクトロニクス、固体触媒）を持った研究者達が、自由に自分の研究の話をしたことにある。はじめのうちは、あまりにも専門分野が異なるために、互いの話が全く噛み合わない状態であったが、議論を続けているうちに「ナノマテリアルがなぜバルクで機能しなくなるのか？」という点に関しては、全員に共感できる体験があることがわかってきた。ナノマテリアルがひとつひとつばらばらに存在するときには、非常に際立った良い性質を示しているにも拘わらず、これらが集合してバルク、塊となってしまうと、そのような性質が薄まり、消えてしまうのである。このような傾向は、マテリアルがCNT、ナノダイヤモンドセンサー、固体触媒、電池電極、ナノセルロース、ナノワイヤと大きく異なっても、いずれにも共通していた。

こうした「ナノ」と「バルク」の性質の違いを説明する際に、従来の発想ならばそれを「界面の問題」として捉えるのが普通である。従来の枠組みでは、まず物質A、Bそれぞれ単独の電子状態を考えて、次にそれらを接合するとどうなるかを考えることで界面を構成することになる。しかし、我々の議論の結果、「そのような従来のやり方には限界があるだろう」との結論に達した。理由は、図4-3-1に示すように、現実の試料では、界面とされている領域にAともBとも関係ない新しい状態ができ、またその状態がイオンや分子の移動などによって時間的に変動しているからである。酸化物のSTO/LAO界面などの場合、非常にきれいな電子系で説明できているように見えるが、実際のところは、原子が動いていると思われる界面近傍の正確な情報を我々はほとんど持っていない。我々は、この有限の幅を持つよくわからない領域を「トランスフェイズ」と名付け、その状態を理解・制御することが重要ではないかと考えた。

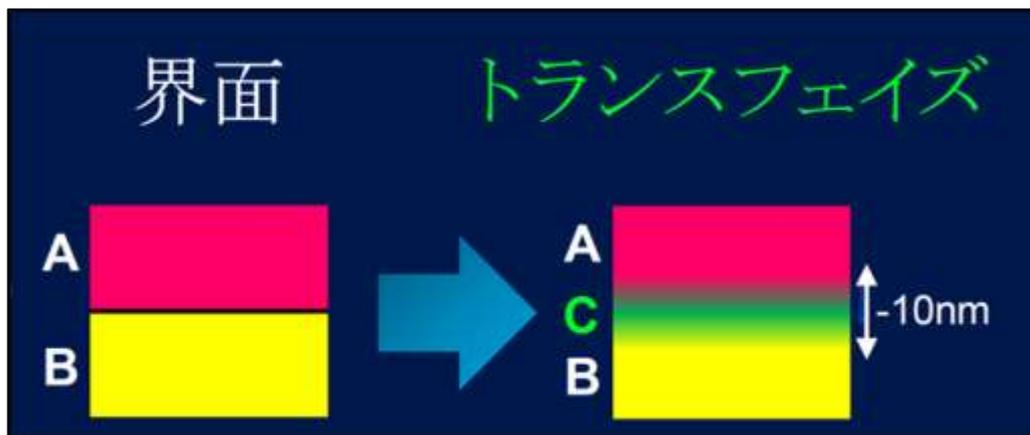


図 4-3-1 トランスフェイズは界面と異なり有限の幅に構造を持つ

この提案における研究目標は、エネルギー創製、環境浄化、IoT 社会に資する種々のナノマテリアルの根源的な問題である「結晶でもアモルファスでもないトランス空間(有限の幅を有する)」を時空間的に測定・理解・設計するということになる。ここでいうトランス空間には、マテリアル表面・界面近傍で発現する新たな弱い相互作用、複雑な構造(準安定状態)、原子混合、多種多様なフェーズなどの大変な複雑さが含まれている。

トランスフェイズを理解するためには、従来のやり方のように「複雑な状況から、綺麗なものを切り出してきて、綺麗な環境で調べる」のではなく“複雑なものは複雑なまま”で捉えることが重要である。具体的には、図 4-3-2 に示すように、(1) ナノマテリアルを作製する、(2) そのナノマテリアルのトランス空間に対してオペランド計測なども駆使した精密な測定を行うことで、非常に多次元のデジタル情報として収集・モデル化・データベース化する、(3) そのデータを用いて、マテリアルズ・インフォマティクスなどを駆使してトランスフェイズの設計を行う、(4) 設計に基づいて改良されたナノマテリアルの作製を行う、というループを回すことでトランスフェイズに関する理解とナノマテリアルの性能を向上させていく。これにより、従来、偶然や勘に頼っていた界面の設計、ナノマテリアルの設計というものを、一段階上にあげることが出来ないかというのが、我々の期待である。この際、多次元デジタルデータ化したトランスフェイズの情報は、論文等に載せずに、日本固有の財産とすることも重要とも考える。



図 4-3-2 時空間トランスマテリアルの概念

トランスフェイズの理解・設計が可能になれば、多くのナノマテリアルからその性能を 100% 引き出し、様々な分野に貢献できる。我々のグループメンバーの中で出てきた例としては、

- ・ ナノダイヤモンド NV センターの働きが表面の影響で妨げられる現象がなくなり、量子コンピューティングや超小型 NMR への応用が可能になる。
- ・ 酸化還元が同時に進む排ガス処理触媒には酸化セリウムなどが使われているが、トランスフェイズの制御によって、より効率の良い新しい材料系の発見・提案、資源・環境問題に貢献する。

- ・ ナノ構造と水界面における潜熱による熱移動を用いて、新たな学理・アプリを構築しようとしているが、その設計の指針となる。
  - ・ 酸素を含む過酷な環境で使われる IoT センサを、トランスフェイズ設計することにより安定で低消費電力なデバイスが得られる。
- などがあった。また、これら以外にも、現時点では想像できないような機能を持つ材料系がトランスフェイズを設計することで新たに見つかる可能性もある。

### 4.4 分科会 4

分科会リーダー：植村 卓史（東京大学）

この分科会はソフトマテリアルを中心に、「材料の運命制御」について議論した。メンバの共通認識となったのは、「材料の劣化・分解を制御できていない」という課題が存在する点である。世界的に話題のマイクロプラスチックによる海洋汚染だけでなく、医療材料、自動車用材料として使用されているソフトマテリアルの分野でも、材料の劣化・分解の制御が重要課題となっている。そこで、今後は「材料がどのように“出生”し、どのように“成長”し、どのように“成仏”するか」を制御する「Fate Designed Materials」というサイエンスが必要となると考えた。

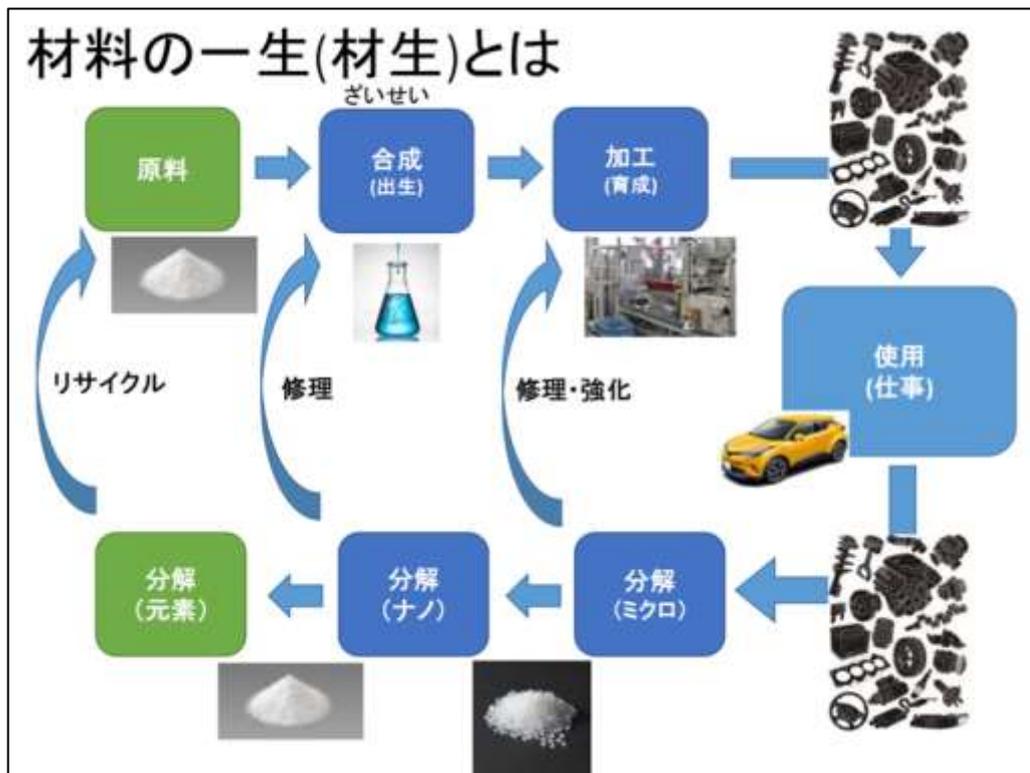


図 4-4-1 材料の生涯模式図

図 4-4-1 は、材料の生涯を模式的に示したものである。出生に相当するのが原料からの合成であり、それを構造材料等に加工するプロセスが育成といえる。材料が使用される時期を仕事、つまりこの時期を人間で言う働き盛りとすれば、その仕事を終えて、マイクロレベル、ナノレベルへの分解を経て最終的に元素レベルまでに分解されるまでが材料の一生となる。働く期間は材料の種類や用途によって、1年、10年、100年のものもあれば、もっと速やかに分解してほしいものもあり、用途ごとの寿命制御を行うことが求められる。一見すると分科会 1 の材料のリサイクル（輪廻）と重なっているようにも見えるが、このグループでは、リサイクルに特に重点を置いているわけではなく、いかに劣化・分解を制御するかに力点を置いている点で異なっている。



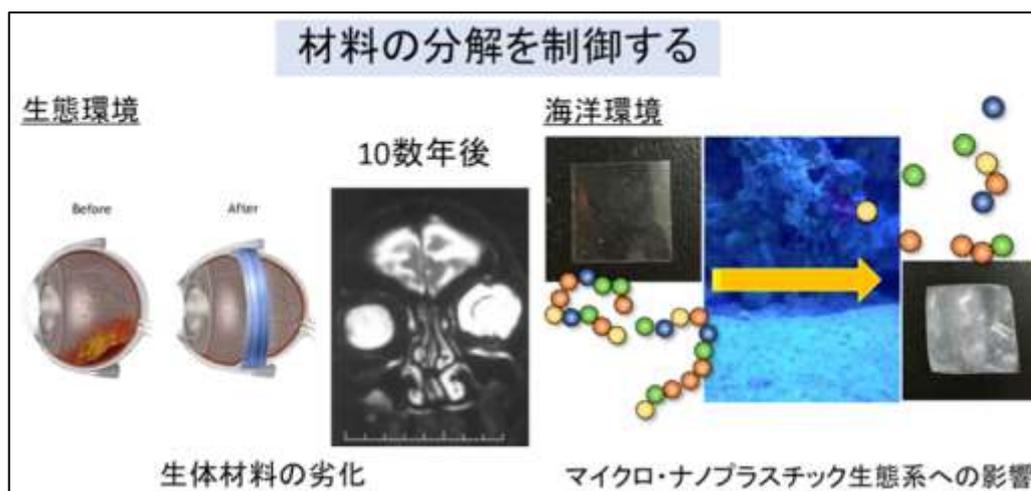


図 4-4-3 材料の分解問題

もっとも重要なフェーズが、材料の成仏である。図 4-4-3 の海洋のマイクロ・ナノプラスチックは、海に置かれたプラスチック構造物がどんどん砕かれていって大量に溜まっているもので、非常に深刻なごみ問題となっている。また、網膜剥離の治療で使われたソフトマテリアルが体内で劣化膨潤し 10 数年後に失明を引き起こす大きな問題にもなっている。

このような問題に対して、現在、分解・破壊の部分を制御するサイエンスはほとんど進んでいない。前述のように、材料の寿命への要請は用途によって異なるため、分解までの時間、分解生成物のサイズ、レベルなどを用途ごとに使い分ける技術とその基盤となるサイエンスの構築が求められている。従来行われてきたようなマクロな破壊試験だけでなく、量子ビーム等を用いた *in situ* マルチスケール構造評価などを駆使して、破壊機構の解明を行う必要がある。

## 5. 総合討論

### コーディネーター：細野 秀雄（東京工業大学）

事前アンケート結果、各プレゼンテーション・質疑応答、および2日間にわたり、4つの分科会に分かれて行った検討結果を踏まえて、材料科学における将来の研究目標や方向性に関して全参加者での総合討論を行った。以下では、それらから抽出された二つの主要な研究課題とそれに関連した主な議論を紹介するとともに、本ワークショップで得られた材料科学の全体像（俯瞰図）を示す。

#### 1. 主な議論

- ・ 4つの分科会はそれぞれに異なった観点から検討を行ったが、そのどれにも共通する重要課題が二つあることがわかる。
- ・ ひとつは「マルチスケール階層制御」という概念で、分科会2、分科会3の「ナノ構造で発現する機能がマクロになると発現しなくなる」という課題認識の中で露わに現れるとともに、分科会1、分科会4の提案にも「材料の分解性を支配する高次構造の制御が必要」という点に含まれている。
- ・ 材料においては、原子・分子といったナノスケールの基本構造が集まってより大きなスケールの高次構造を作っており、多くの場合は、さらにその高次構造が集まったより高次の構造を作るといった階層性が現れる。ある階層の集合体が上位の階層構造を作る際には、欠陥、転位、粒界に代表されるような「乱れ」が生じており、これらが材料としての物性の多くを支配している。「ナノの特性とマクロ物性に表出しなくなる」現象は、まさにこのような「乱れ」によって生じており、また、材料の分解性の違いも「乱れ」が大きく効いていると考えられるため、「乱れ」の理解と制御は今後の材料開発においては不可欠な要素となる。
- ・ 注意すべきは、スケールを一切指定せずに、材料内の「乱れの制御」を行うといった場合には、不必要に広い概念を含んでしまう点にある。例えば、通常の半導体中のドーパントも、母結晶から見ればサイトの不純物置換という「乱れ」であるといえるが、そうしたアトムスケールの乱れまでを研究課題として含めてしまうことは、現時点においては適切ではないと考えられる。今回取り上げるマルチスケール階層制御が対象とする「乱れ」のスケールからは、アトムスケールの「一様な乱れ」は除き、ナノスケールからマクロスケール、通常のX線回折ではなく小角X線散乱で検知されるスケール以上のものを対象とすることにする。
- ・ そのようなスケールの乱れとしては、バルク構造組織の欠陥、転位、粒界、強磁性体や強誘電体のドメイン構造などの古くから知られていたものに加え、二次電池の電極-電解質界面構造などの比較的最近注目されるようになってきたもの含まれる。
- ・ 材料の階層制御におけるターゲットの主要なものには、強結合、弱結合の制御がある。バルク材料のなかには、分子や無機結晶内の共有結合に代表される強結合から、最近注目を集めている2次元物質において重要な van der Waals 結合のような弱結合まで、様々な強さの結合が含まれており、そうした強結合性、弱結合性を材料の階層ごとに自在に制御

できるようになれば、分科会 1、分科会 4 の提案にあった「リサイクル自在の材料」「寿命をコントロールできる材料」などを設計して生み出せるようになる。その際にもカギとなるのは強結合性や弱結合性を左右する、階層間の「乱れ」の理解ということになる。

- ・ このように、材料の中にあるマルチスケール階層構造を理解し制御するための、これまでにない測定解析技術、シミュレーション技術、材料合成技術の構築が望まれる。
- ・ 材料の階層構造は静的なものばかりではない。界面の乱れなどは空間的な不均質性だけではなく、時間的にも変化していく性質を有しており、その複雑さゆえに、精密な理解や学理の構築は行われていない。そこで、二つ目の重要課題として挙げる概念が「**動的不均質制御（材料）**」である。
- ・ 「不均質」という言葉は、「乱れ」と同様に材料の組成や構造が空間的に不均一であることのほかに、最安定状態、平衡状態にないことなども含んでいる。また、こうした不均質状態が、時間的に変化していくことを「動的」という単語で表しており、これら「動的」な「不均質」性を制御することで、望む物性をもつ材料合成につなげようという構想である。
- ・ 分科会 3 の 時空間トランスフェイズが、ここで述べた「動的不均質」相そのものであるのは言うまでもないが、それ以外に、分科会 2 の乱れの制御、分科会 1 の動脈プロセスから静脈プロセスへの遷移、分科会 4 の材料の生涯の各フェーズ、のすべてに材料内の不均質性の時間変化が重要な要素となっていることが見て取れる。
- ・ これまでに、実用材料において動的な不均質性が利用されている例が存在しないわけではない。コンクリートの強度が、硬化後、時間が経つほど増していくことはよく知られており、冶金学においても、金属材料内部で異相析出が常温で起こることにより材料物性が向上する時効処理などが一部の合金で古くから利用されている。
- ・ しかし、このような効果を最初から意図して新規材料が設計された例はこれまでにない。こうした現象が正確には観測・理解されていない「不均質≒乱れ」が、時間発展することによって起こり、それを理解・制御することがこれまでできていなかったことがその理由である。
- ・ 材料の構造の特徴量を測ったときに、その平均値だけでマクロな物性が理解できる場合はそれほど難しさはない。問題となるのは、平均値ではなく全体のそれぞれの分布・相関・時間変化などのすべてが物性に効くケースであり、そのような場合には、均質系・定常系を対象とした従来のモデル化や学理が役に立たないことになる。
- ・ 「動的不均質制御」では、今までできていなかった「乱れ」の時間発展を精密に観察し、それらの挙動を理解するとともに、その人為制御までも目指している。これは広い意味での核生成（nucleation）を人為的にコントロールすることにも通じる。結晶成長の分野では「結晶成長は人間の領域、nucleation は神の領域」とも言われていることを考えると、この課題設定は「神のみぞ知る」領域にサイエンスが踏み込むという野心的な宣言でもある。これが可能になれば、分科会 4 が提案するような材料の生涯を設計することや、分科会 1 が提案する非常に効率的な材料のサイクルの実現につながる。
- ・ これまでこうした理解や制御ができていなかった理由としては、
  - 光学顕微鏡でも見える階層上位の大きな欠陥の制御は、欠陥を生成消滅させるエネルギーが大きいために電顕レベルの小さな欠陥を制御するのに比べて遥かに困難である。

- ▶ 界面付近の欠陥の構造をある程度以上の時間分解能をもって精密に観測する方法がこれまでにあまりなかった。
- ▶ 対象とする構造が大きすぎるために、計算機シミュレーションを行うことができない。といった困難があった。こうした困難に対し、発展するオペランド計測技術、不均質系を扱うことで爆発的に増加する計測データを取り扱うためのインフォマティクス技術と歩調を合わせるように、これまで以上に精密な合成技術を確立することで、これを乗り越えていこうというのが、第2の概念の骨子となる。

2. 全体像（俯瞰図）

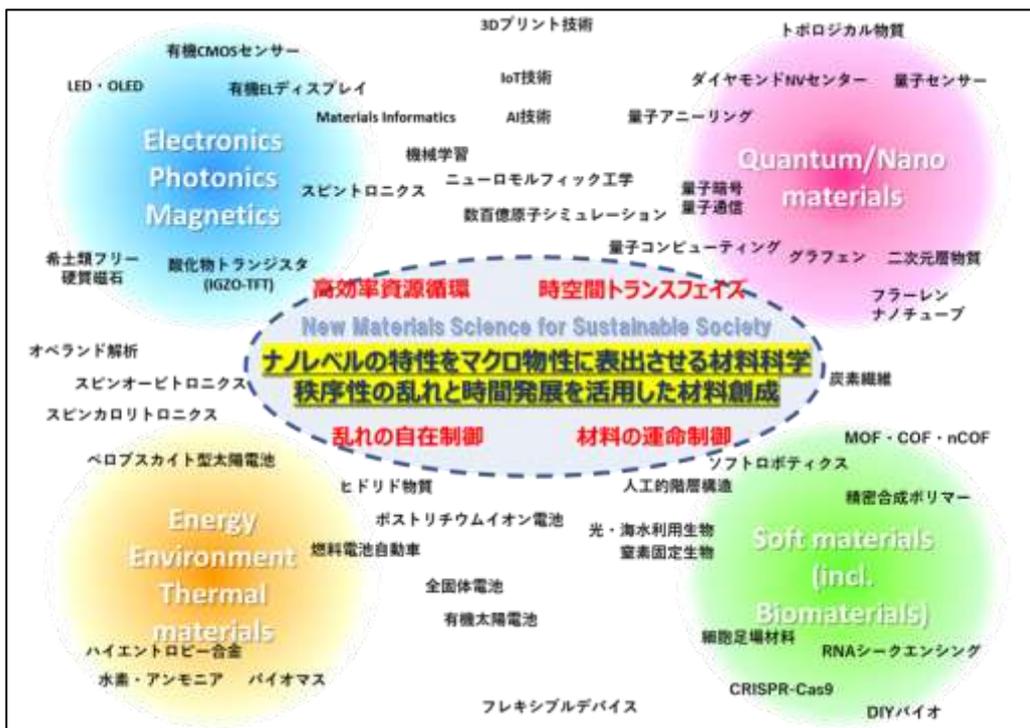


図 5-1 俯瞰図

- ・ 以上の議論をまとめた今回のワークショップの全体像（俯瞰図）を図 5-1 に示す。
- ・ マルチスケール階層制御によって、ナノレベルの特性をマクロ物性につなげること、動的不均質制御により、乱れの時間発展を活用して、新たな材料機能を創出することが中心課題となる。
- ・ これら中心課題に向けた、大規模シミュレーション、先端計測技術、精密合成技術、インフォマティクスの研究が必要である。

## 付 録

### 付録1：開催趣旨・プログラム

#### 開催趣旨

ナノテクノロジー・材料分野は物理学、化学、生物学を横断し、原子分子レベルでの観測や構造形成・機能発現などを通して、物質科学や材料技術、デバイス技術などを進展させ、さらには異分野の融合を促進しつつ進化する技術分野です。CRDS では昨春、ナノテクノロジー・材料分野における世界各国の国家計画、投資戦略、研究ポテンシャル、技術進化、産業動向、重要な研究開発領域を含む俯瞰報告書(CRDS-FY2016-FR-05)を発行しました。この俯瞰報告書は、CRDS が政策立案コミュニティおよび研究開発コミュニティとの継続的な対話を通じて把握した研究開発の大きな流れを、研究開発戦略立案の基礎資料とすることを目的として、CRDS の視点からまとめたものになります。各分野における研究開発の方向性や主要な研究開発領域、さらに国際的なわが国のポジションを把握するのに役立つものとして、また、複数分野にまたがる新しい切り口からの研究開発戦略を立案することにも役立つことを期待しています。当該分野の動向を深く知りたいと考える政策決定者、行政官、企業人、大学・独法関係者、また、研究者にとっても、自身の専門分野を超えた範囲の状況を知る上で有益な資料となることを期待しています。

発行済のナノテクノロジー・材料分野の俯瞰報告書では、37 の重要領域について研究開発状況や国際比較を取り纏めています。さらなる調査・検討が必要な領域がまだ多数あると認識しています。そのため、昨年度と今年度の2年にわたっていくつかの領域に注目し本分野の俯瞰をさらに充実させたいと考えています。こうした経緯から、CRDS では今年度、「機能と物質の設計・制御」領域に関するワークショップを計画しました。

本領域は、ナノテクノロジー・材料分野全体に関与するもので、所望の物質・機能を実現させるための構造の設計・制御手法として、サイエンスの新局面を拓き、社会・産業に貢献しうる領域です。今回のワークショップでは、国内外の研究開発動向を広く俯瞰するとともに、「持続可能社会実現のために解決すべき課題は何か?」「その課題を解決するために必要な材料は何か?」「その材料を実現するために必要な新しい材料科学(現状の材料科学では欠けていること)は何か?」の観点から材料科学分野における将来の研究目標や明確な方向性を設定するための戦略を立案することを試みます。短期的には文部科学省の戦略目標や種々の競争的資金制度への反映を目的とし、将来的には新しい産業を興すようなインパクトのある研究コンセプトの発掘を目指します。中長期的には各省庁の科学技術政策への反映を目指し、第6期科学技術基本計画策定を見据えた課題の抽出や合意形成に資することを目的とします。

なお、本ワークショップは非公開(クローズド)としますが、議論の内容は俯瞰ワークショップ報告書として纏め、CRDS の web サイト上で一般公開するとともに、俯瞰報告書ナノテクノロジー・材料分野(2019年版)への反映や今後の提言書作成の参考にいたします。

プログラム（敬称略）

開催日時：2018年9月22日（土）14:00～23日（日）14:30

開催会場：ロイヤルホテル八ヶ岳

|          |       |            |
|----------|-------|------------|
| オーガナイザー  | 曾根 純一 | (JST-CRDS) |
| コーディネーター | 細野 秀雄 | (東京工業大学)   |
| 分科会リーダー  | 植村 卓史 | (東京大学)     |
|          | 久保 百司 | (東北大学)     |
|          | 関谷 毅  | (大阪大学)     |
|          | 柳田 剛  | (九州大学)     |
| 司会       | 宮下 哲  | (JST-CRDS) |

9月22日（土）

|             |            |       |            |
|-------------|------------|-------|------------|
| 14:00～14:05 | 開会挨拶       | 曾根 純一 | (JST-CRDS) |
| 14:05～14:20 | 趣旨説明、事務連絡  | 宮下 哲  | (JST-CRDS) |
| 14:20～14:40 | コーディネーター挨拶 | 細野 秀雄 | (東京工業大学)   |

14:40～16:30 基調講演

|             |   |       |           |
|-------------|---|-------|-----------|
| 14:40～15:10 | 物質材料科学と社会                                 | 福山 秀敏 | (東京理科大学)  |
| 15:10～15:40 | パリ協定が要求する材料革命 ～Net Zero Emission を実現する条件～ | 安井 至  | (持続性推進機構) |
| 15:40～16:10 | 新しい研究開発手法について                             | 津田 宏治 | (東京大学)    |
| 16:10～16:30 | 質疑応答                                      |       |           |

|             |           |       |        |
|-------------|-----------|-------|--------|
| 16:30～16:50 | 分科会リーダー挨拶 | 植村 卓史 | (東京大学) |
|             |           | 久保 百司 | (東北大学) |
|             |           | 関谷 毅  | (大阪大学) |
|             |           | 柳田 剛  | (九州大学) |

17:00～19:00 分科会①（分科会リーダー：植村卓史、久保百司、関谷毅、柳田剛）

- ・ ”New materials Science for Sustainable Society”をキャッチフレーズとして、「水」「食料」「貧困」「エネルギー」「環境」「資源」「医療」などの地球規模の諸課題に対して、
  - ・ どのような具体的な課題に取り組む必要があるのか？
  - ・ その課題を解決するために必要な材料は何か？
  - ・ その材料を実現するために必要な新しい材料科学は何か？

の視点で議論

20:30～22:30 分科会②（分科会リーダー：植村卓史、久保百司、関谷毅、柳田剛）

- ・ 分科会①の続き、途中経過報告資料作成

9月23日(日)

09:00～10:00 全体会議 (前日の議論内容の共有、各発表 15分)

植村 卓史 (東京大学)

久保 百司 (東北大学)

関谷 毅 (大阪大学)

柳田 剛 (九州大学)

10:00～12:00 分科会③ (分科会リーダー：植村卓史、久保百司、関谷毅、柳田剛)

・ 全体会議を踏まえて分科会②の続き、まとめ資料作成

13:00～14:30 総合討論、まとめ (コーディネーター：細野秀雄)

14:30 閉会挨拶 曾根 純一 (JST-CRDS)

**付録2：参加者一覧** （敬称略、所属・役職はワークショップ参加時のもの）

招聘識者

- ・阿部 竜 京都大学 大学院工学研究科 教授
- ・飯村 壮史 東京工業大学 科学技術創成研究院 助教
- ・植村 卓史 東京大学 大学院新領域創成研究院 教授
- ・内田 健一 物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点  
グループリーダー
- ・大谷 優介 東北大学 金属材料研究所 助教
- ・大場 史康 東京工業大学 科学技術創成研究院 教授
- ・加藤 秀実 東北大学 金属材料研究所 教授
- ・北尾 岳史 東京大学 大学院新領域創成科学研究院 助教
- ・久保 百司 東北大学 金属材料研究所 教授
- ・小林 正治 東京大学生産技術研究所 教授
- ・酒井 崇匡 東京大学 大学院工学系研究科 准教授
- ・塩見 淳一郎 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・関谷 毅 大阪大学 産業科学研究所 教授
- ・高橋 綱己 九州大学 先導物質化学研究所 特任准教授
- ・田中 敬二 九州大学 大学院工学研究院 教授
- ・千葉 大地 東京大学 大学院工学系研究科 准教授
- ・塚田 祐貴 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授
- ・津田 宏治 東京大学 大学院新領域創成科学研究院 教授
- ・富岡 克広 北海道大学 量子集積エレクトロニクス研究センター 准教授
- ・中西 和嘉 物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点 主任研究員
- ・中村 正治 京都大学 化学研究所 教授
- ・沼田 圭司 理化学研究所 環境資源科学研究センター チームリーダー
- ・一杉 太郎 東京工業大学 物質理工学院 教授
- ・平山 雅章 東京工業大学 物質理工学院 准教授
- ・深川 弘彦 NHK 放送技術研究所 新機能デバイス研究部 研究員
- ・福山 秀敏 東京理科大学 理学部 教授
- ・古川 英光 山形大学 大学院理工学研究科 教授
- ・細野 秀雄 東京工業大学 科学技術創成研究院 教授
- ・水落 憲和 京都大学 化学研究所 教授
- ・安井 至 持続性推進機構 理事長
- ・安田 琢磨 九州大学 稲盛フロンティア研究センター 教授
- ・山内 美穂 九州大学 カーボンニューラル・エネルギー国際研究所 教授
- ・柳田 剛 九州大学 先導物質化学研究所 教授

JST-CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット

- ・曾根 純一 上席フェロー

- ・宮下 哲 フェロー・ユニットリーダー
- ・荒岡 礼 フェロー
- ・小名木 伸晃 フェロー
- ・永野 智己 フェロー、JST 研究監
- ・馬場 寿夫 フェロー
- ・八巻 徹也 フェロー
- ・伊藤 聡 特任フェロー、物質・材料研究機構 MI2I 拠点長
- ・清水 敏美 特任フェロー、産業技術総合研究所 名誉リサーチャー
- ・佐藤 勝昭 特任フェロー、JST 広報主監
- ・玉野井 冬彦 特任フェロー、京都大学 教授
- ・本間 格 特任フェロー、東北大学多元物質科学研究所 教授

関係府省・機関

- ・菅野 晋 内閣府 政策統括官（科学技術・イノベーション担当）付  
上席政策調査員
- ・鈴木 慎司 文部科学省 科学技術・学術政策局 企画評価課  
新興・融合領域研究開発調査戦略室 室長補佐
- ・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
- ・北澤 英明 物質・材料研究機構 経営企画部門 経営企画室 調査役

JST

- ・中山 智弘 CRDS 企画運営室 室長
- ・小林 恵 プログラム戦略推進室 主査
- ・杉浦 晃一 未来創造研究開発推進部 調査員
- ・橋山 富樹 研究プロジェクト推進部 主任調査員
- ・伊藤 哲也 イノベーション拠点推進部 調査役

### 付録3：分科会メンバー表

#### 分科会1

|       |       |          |       |          |
|-------|-------|----------|-------|----------|
| ・リーダー | 関谷 毅  | (大阪大学)   |       |          |
| ・メンバー | 大場 史康 | (東京工業大学) | 小林 正治 | (東京大学)   |
|       | 千葉 大地 | (東京大学)   | 深川 弘彦 | (NHK 技研) |
|       | 安田 琢磨 | (九州大学)   | 鈴木 慎司 | (文科省)    |
|       | 曾根 純一 | (JST)    | 中山 智弘 | (JST)    |
|       | 橋山 富樹 | (JST)    | 馬場 寿夫 | (JST)    |

#### 分科会2

|       |        |          |       |            |
|-------|--------|----------|-------|------------|
| ・リーダー | 久保 百司  | (東北大学)   |       |            |
| ・補佐   | 大谷 優介  | (東北大学)   |       |            |
| ・メンバー | 阿部 竜   | (京都大学)   | 内田 健一 | (NIMS)     |
|       | 加藤 秀実  | (東北大学)   | 塚田 祐貴 | (名古屋大学)    |
|       | 平山 雅章  | (東京工業大学) | 伊藤 聡  | (JST、NIMS) |
|       | 小名木 伸昭 | (JST)    | 澤 英明  | (NIMS)     |
|       | 杉浦 晃一  | (JST)    | 本間 格  | (JST、東北大学) |

#### 分科会3

|       |        |        |       |          |
|-------|--------|--------|-------|----------|
| ・リーダー | 柳田 剛   | (九州大学) |       |          |
| ・補佐   | 高橋 綱己  | (九州大学) |       |          |
| ・メンバー | 塩見 淳一郎 | (東京大学) | 富岡 克弘 | (北海道大学)  |
|       | 中村 正治  | (京都大学) | 一杉 太郎 | (東京工業大学) |
|       | 水落 憲和  | (京都大学) | 山内 美穂 | (九州大学)   |
|       | 小林 恵   | (JST)  | 坂元 亮介 | (文科省)    |
|       | 宮下 哲   | (JST)  | 八巻 徹也 | (JST)    |

#### 分科会4

|       |        |            |       |           |
|-------|--------|------------|-------|-----------|
| ・リーダー | 植村 卓史  | (東京大学)     |       |           |
| ・補佐   | 北尾 岳史  | (東京大学)     |       |           |
| ・メンバー | 酒井 崇匡  | (東京大学)     | 田中 敬二 | (九州大学)    |
|       | 中西 和嘉  | (NIMS)     | 沼田 圭司 | (理化学研究所)  |
|       | 古川 英光  | (山形大学)     | 荒岡 礼  | (JST)     |
|       | 伊藤 哲也  | (JST)      | 清水 敏美 | (JST、産総研) |
|       | 玉野井 冬彦 | (JST、京都大学) | 永野 智己 | (JST)     |



## ■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

|       |                   |
|-------|-------------------|
| 曾根 純一 | 上席フェロー            |
| 宮下 哲  | フェロー／ユニットリーダー     |
| 荒岡 礼  | フェロー              |
| 小名木伸昭 | フェロー (～2019年3月)   |
| 河村誠一郎 | フェロー／エキスパート       |
| 永野 智己 | フェロー              |
| 馬場 寿夫 | フェロー              |
| 眞子 隆志 | フェロー (2019年4月～)   |
| 八巻 徹也 | フェロー              |
| 伊藤 聡  | 特任フェロー            |
| 岩本 敏  | 特任フェロー (2019年4月～) |
| 川合 知二 | 特任フェロー (2019年4月～) |
| 清水 敏美 | 特任フェロー            |
| 田中 一宜 | 特任フェロー            |
| 玉野井冬彦 | 特任フェロー            |
| 馬場 嘉信 | 特任フェロー (～2018年9月) |
| 本間 格  | 特任フェロー            |
| 村井 眞二 | 特任フェロー            |

CRDS-FY2019-WR-01

### 俯瞰ワークショップ報告書

## ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会 「機能と物質の設計・制御～材料科学の未 来戦略～」

令和元年 9月 September 2019

ISBN 978-4-88890-650-0

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 K's 五番町

電話 03-5214-7481

E-mail crds@jst.go.jp

<https://www.jst.go.jp/crds/>

©2019 JST/CRDS

許可無く複製／複製を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.

