

## 2.5 物質と機能の設計・制御

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

### [分子技術]

分子を設計・合成・制御・集積することによって、分子の特性を活かして所望の機能を創出し、応用に供するために必要な一連の技術を指す日本発の概念である。「分子の設計・創成技術」、「変換・プロセスの分子技術」、「分子の電子状態制御技術」、「分子の形状・構造制御技術」、「分子集合体・複合体の制御技術」、「分子・イオンの輸送・移動制御技術」から成る6つの横断的技術分野に分類され、それぞれで連携しながら研究開発が推進されている。

### [元素戦略・希少元素代替技術]

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発することを目的とする。元素戦略は日本発の概念であるが、構造的な資源問題に対処し、持続可能社会を実現するために取り組むべき重要課題として世界中で認知されている。

### [マテリアルズ・インフォマティクス]

計算科学やデータ科学を用いた物性予測と、ハイスループット材料合成・評価、データマイニングによる特徴抽出などにより、新材料の設計、探索、発見を飛躍的に加速することを可能にする取り組みを総称した研究開発領域である。材料合成/化学、第一原理計算/物理、データ科学/数学、データベース/リポジトリなどの多分野からの研究者による異分野融合で進められている。究極的には、材料特性を支配する関係性を発見し、自由自在に材料開発を進めると同時にその背景にある原理を見出そうとするものである。

### [フォノンエンジニアリング]

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

### [トポロジカル材料]

数学の分野で発展してきたトポロジー（位相幾何学）を物質系に適用することで、従来の金属・半導体・絶縁体の分類では記述できない新たなタイプの物質相としてトポロジカル物質が登場した。この領域では、トポロジーにもとづく新たな物質観によって導かれる物質群の創出とその基礎学理の構築およびトポロジカル材料を応用した革新的デバイス創出をめざしている。原理的にその性能向上の限界が顕在化しているエレクトロニクスデバイス分野等において新たなパラダイムを築き、Society 5.0を支える基盤強化等への貢献が期待される。

### [低次元材料]

低次元材料には、グラフェンなどの二次元材料、カーボンナノチューブなどの一次元材料を含み、従来の

バルク材料や単なる薄膜材料とは異なる特性・構造を持つ。低次元材料に特徴的な特性発現の機構を理解するための新しい物理を構築することとともに、エレクトロニクス、センシング、エネルギー変換・貯蔵などの応用分野において、新しい機能や従来材料の特性を凌駕する機能を発現することが期待されている。

#### [複雑系材料の設計・プロセス]

材料創製の探索範囲をこれまで扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立などを実現する複雑な組成や構造を有する材料の設計技術とプロセス技術を開発することをめざす研究開発領域である。材料の多元素化やハイエントロピー化、準安定相などの多種多様な安定相（準安定相も含む広義の意味）の設計、高効率な材料探索実験手法、プロセス中反応過程のその場観測、プロセス・インフォマティクス、プロセス制御による熱力学的には不安定な構造の安定化などに取り組んでいる。

#### [ナノ力学制御技術]

材料が本来持つ機能を最大限まで引き出し、これまで実現できなかった高性能・高機能な材料開発および新しい材料設計技術を構築するため、力学特性の発現機構をナノスケールまで立ち戻って理解し制御することを目的とした研究開発領域である。社会的要請が強い応用技術領域を代表するものとして「接着」「摩擦・摩耗」「自己修復」があげられ、「接着」では、マルチマテリアル化による軽量化を実現するための異種材料接着に注目が集まっている。「摩擦・摩耗」においては、マイクロ・ナノスケールでの科学的な解明が進んでおり、それらの理解にもとづいてマクロな摩擦摩耗の制御システムの合理的な設計・創成が期待される。「自己修復」では、動的結合や水素結合を利用した新材料の研究がさかんである。