

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。

2.5.1 分子技術

(1) 研究開発領域の定義

「分子技術」は、日本発の課題解決型の研究開発領域であり、目的を持って分子を設計・合成・操作・制御・集積することにより、分子レベルで所望の物理的・化学的・生物学的機能を創出し、応用に供するための一連の技術を指す。分子技術の集積と体系化により、従前の科学技術では成しえなかった新物質、新材料、新デバイス、新プロセス等の創出が期待できる。これらは、課題解決に対するブレークスルーの提供に留まらず、イノベーションを通して新産業の創出にも繋がりうる。「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」からなる6つの横断的技術分野に分類され各技術の研究開発が推進されている。これらは互いに密接な関係を持ち続ける必要がある。

(2) キーワード

分子科学、分子設計、精密合成、高機能触媒、先端材料、ソフトマテリアル、創薬、人工光合成、マイクロフロー技術、先端分析、計算科学

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

分子技術は、環境・エネルギー・資源や医療・健康などに関わる社会的・産業的課題の抜本的解決に貢献し、持続可能な社会の実現に資することが期待されている。これらの分野の現在の課題は、国連の提案するSDGsはその好例である。こうした世界的な課題は人口増加、都市化、高齢化、地球温暖化などのメガトレンドから読み解くことができるが、グローバルに市場や顧客との接点を持つ企業からの情報が、研究開発推進のうえでは重要になる。

分子科学が、分子および分子集合体の構造や物性を解明し、化学反応や分子の相互作用およびその本質を、理論と実験の両面から理解することを目的とする学問であるのに対して、わが国において誕生した技術概念/研究開発領域である分子技術は、分子科学がもたらす知見・理解を基盤として所望の機能を新たに創出することを明確な目的とする工学的な技術概念である。

革新的かつ精密な分子や分子集合体を創出できれば、効果的で、しかも最終的な課題解決が可能になるので、分子技術の開発により産業化された場合には国際的な競争力の獲得につながる。今後、材料に対する要求がますます高度化されることが予想され、したがって、分子技術は、今後重要性が増すと考えられる。

分子技術の基盤を成すのは化学である。従前の化学は分子科学に代表されるように、自然の神秘を解き明かすことに挑戦し続けてきた。しかし、本研究開発領域は、社会や産業の重要課題の解決を目的とするため、物理学、生物学、薬学、数学、情報学等の科学的知見を融合するとともに、最近大きく進展している計算化学なども取り入れ、制限された条件の下に最終的であると同時に最適・最善の解を求めるという工学の手法も取り入れなければならない。このためには、自然の神秘を解き明かす化学から、課題を解決する化学へと、大きなパラダイムシフトが要求される。このパラダイムシフトこそが分子技術獲得の原動力となる。

[研究開発の動向]

従来、さまざまな分野で分子の設計・合成が行われてきたが、普遍的な技術として分子技術が明確に意識

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

されることはほとんどなかった。すなわち、化学的に構造式レベルでは解明されていても、その構造式によってその化合物が作り出すさまざまな物性についての論理的説明は稀であり、まして、その構造がベストであるという保証はほとんどなかった。すなわち、従来の科学技術は最適な唯一の分子を探し出し、それを合成するというスタンスはほとんどみられなかったため、ある意味では、たとえ素晴らしい物質が見出されても、それは偶然の発見に留まっていた。

最適・最善である新規な分子の設計と合成にいたらない段階で製品化が進んでしまった場合には、その製品はベストである保証はなく、未成熟であるため、その模倣は比較的容易である。また、未成熟ゆえに、特許による技術の保護も十分とはいえないので、市場での成功が明らかになった段階で、開発途上国において、さまざまな後発品が上市されると考えられる。オンリーワン分子の設計と合成を進めるためには、圧倒的に高い水準の分子技術力が必要となるが、この基盤技術の育成に必要な基礎科学を持ち、かつ十分な資金を継続的に提供できる国・企業は世界的に少ない。

なお、分子技術は日本発の研究開発領域ではあるが、フランスなど日本との分子技術に関する共同研究を実施し重要性を理解している国も出てきており、その重要性に対する認識が浸透し始めている。今後、世界的にさらに発展することが想定される。分子技術は多岐にわたる応用分野を持つことため、表面的な工業化の結果だけで、国際的な比較を行うのは適当ではない。言い換えれば、分子科学は、試行錯誤の科学技術から予測可能な科学技術へ方向転換し、それによって真の破壊的イノベーションを定着させることをめざすものであるが、こうした流れを定量的に把握することは極めて難しい。

本領域では、分子技術は、精密合成技術と理論・計算科学との協働により新機能物質を自在に設計・創成する「設計・創成の分子技術」、分子の形状構造を厳密に制御することにより新たな機能の創出につなげる「形状・構造制御の分子技術」、分子レベルでの精密な構造設計にもとづく新たな触媒・システム開発につなげる「変換・プロセスの分子技術」、分子の電子状態を自在に制御する「電子状態制御の分子技術」、分子集合体・複合体の形成や機能解析・化学制御に関連する「集合体・複合体制御の分子技術」、膜物質を介した分子・イオンの輸送速度や選択性向上などの分子・イオンの輸送に関する「輸送・移動制御の分子技術」からなる6つの横断的技術に分類される。さらには、人間には考えつかなかった究極の分子構造を探索するために計算科学などを活用することも重要な要素である。分子技術は分子のレベルで根源的な物質の性質を創ることが目的であるため、今後、さらに社会の要請に沿って新しい技術課題の解決が要請されると予想される。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

最近の分子技術開発の成功事例は、差別化技術の組み合わせや融合（同時/逐次）を起点としているものが多い。実用化の例として、抗体医薬技術と有機合成技術の融合による優れた抗体薬物複合体（ADC）[抗がん剤]の創出（第一三共）、オレフィン重合触媒技術と金属コロイド触媒技術の組み合わせによるポリオレフィン-シリコンブロック共重合体の創製（三井化学）をあげることができる。

また、アカデミアにおいては、Rh/Alハイブリッド型錯体触媒を用いる、ピリジンの2位選択的シリル化反応（C-H活性化）、フッ素化アリル化合物のアリルマグネシウム化合物への変換（C-F活性化）が達成された（京大・中尾佳亮ら）。一方、ポリマー合成の分野では、リビングラジカル重合とリビングカチオン重合の組み合わせにより、ポリアクリレートとポリビニルエーテルのマルチブロック共重合体が創製されている（名大・上垣外正己ら）。これらはいずれも差別化技術の組み合わせ・融合をベースとする成果である。

東工大・石谷治らは、精密な分子設計によりCu二核錯体光増感剤を開発し、Mn錯体触媒と組み合わせ

ることにより、貴金属および希少金属錯体で構成された従来の光触媒系に匹敵する触媒耐久性と反応効率を実現した。人工光合成分野の新しい可能性を示すものとして注目される。

有機エレクトロニクスは、分子技術の活用が期待される応用分野の1つである。新規有機半導体分子の開発においては、有機低分子あるいはポリマー分子の高次構造や物性を制御することが重要であり、従来、分子科学者と合成化学者が知識と経験をもとに予測しながら開発してきたが、近年では、人工ニューラルネットワークを用いた粗視化によって、膨大な量子科学計算を繰り返すことなく有機半導体の電子構造が求められるという研究成果が発表されている。このような新手法によって高速化していく可能性がある。東大・岡本敏宏らはバンド伝導モデルにもとづいた独自の分子設計を展開し、高キャリア移動度に加えて、実用化に必要な環境ストレス耐性を併せ持つp型半導体分子を開発した。さらに、同様の性能を示すn型半導体分子の開発にも成功した。

バイオ関係においては、東大・酒井崇匡らは、ハイドロゲルのゲル化の物理的な理解を進め、人工硝子体として機能する材料を構築し、網膜剥離を治療する可能性を示している。理研・田中克典らは、独自の糖鎖クラスターと触媒を組み合わせることにより、効率的な生体内合成化学を行うドラッグデリバリーシステムを創成した。

分子技術を支える分析・解析に関する研究もあげられる。東大・中村栄一らは、従来膜や固体に限られてきた電子顕微鏡観察の限界を打ち破り、個々の分子の動的挙動を原子分解能のビデオ記録する手法を開発した。刻一刻と起きる化学反事象の「その場」撮影や極微量反応中間体の構造決定など、分子電子顕微鏡学とも呼ぶべき新分野を開拓した。分子科学と分子技術をつなぐ新技術として注目される。さらに、NIMS・川井茂樹らは、独自に原子間力顕微鏡による測定手法を開発して、分子骨格を直接観察することを行い、単に固体の表面を観察するだけでなく、分子の凝集や化学反応の様子をその場観察した。筑波大・羽田真毅らは、分子集合体の動きをピコ秒時間分解でとらえることに成功した。これらの先端計測技術は、分子技術および、それによる先進分子材料の開発に大きく寄与していくものと考えられる。

また、ものづくりという視点からは、京大・前一廣らのマイクロフロー技術の進展にも注目すべきものがある。

【注目すべき国内外のプロジェクト】

2012年にスタートしたJST-CREST「新機能創出を目指した分子技術の構築」(研究総括：山本尚)からは上記を含め多くの成果が得られており、社会や産業の課題解決のブレークスルーにつながる可能性を秘めている。また、同じくJSTさきがけ「分子技術と新機能創出」(研究総括：加藤隆史)でも6技術領域全体にわたって多数の研究テーマが展開され、2017年度に終了したが、一部の成果は新たな研究開発プロジェクトへと発展している。分子技術(Molecular Technology)は、国際的な広がりもみせている。2014年からは、JST-SICORP(戦略的国際共同研究プログラム)日本-フランス共同研究「分子技術」分野(研究主幹：山本尚、副研究主幹：加藤隆史)もスタートして、触媒・ケミカルバイオロジー、エネルギー、材料、センシング、界面制御などに関する研究が展開された。

さらに、2018年度には文部科学省の世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)に、北海道大学「化学反応創成研究拠点」が採択され、10年間の拠点型研究が開始された。本拠点は前田理(北海道大学)による「人工力誘起反応法」を基盤とし、本法を進化させることを掲げている。他、同じく2018年度にJST-ERATO「ニューロ分子技術」が浜地格(京都大学)を研究総括として開始された。さらには、2019年にはJST-ERATO「化学反応創製知能」が前田理(北海道大学)を研究総括として発足している。

また、新学術領域研究「ハイブリッド触媒」(2017~2021年度)は触媒分野の分子技術開発といえる。

さらに、新学術領域研究「水圏機能材料」(2019～2024年度)と2020年にスタートしたJST-CREST「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」(研究総括：君塚信夫)は、分子技術の材料分野版ともいべきものである。これらは日本が優位性を持つ、触媒および材料分野であり、成果が期待される。

(5) 科学技術的課題

分子技術を開発する目的は、社会や産業の重要課題に対する効果的かつ最終的な解決法の提供にある。今後さらに複雑化、高度化すると予想される諸課題に対して、既存の科学技術の延長で対応することは困難である。従って、研究開発テーマには、現在の科学技術では到達できない「夢の目標」と、従前の研究開発の延長ではない新規な研究開発プランが必須である。さらに、プランを進めるための明確で独創的な分子技術の「イメージ・ストーリー」を描き、それを実現することが求められる。そのためには、研究開発に対する姿勢を根本的に変えていく必要がある。すなわち、分子レベルからの課題解決をめざし、化学を基盤として物理学、生物学、薬学、数学、工学などに加えて各種の技術も融合し「最適・最善の解」を得ることが求められる。成功には、基礎科学者、工学者および企業技術者が、分子技術という共通の土台に立ち、協働することが重要となる。一方、本研究開発領域においては、研究者の意識変革もまた重要である。研究者は、自らの研究開発により社会や産業の重要課題を解決するという強い意志を持たなければならない。「やれることをしっかりやる」、「より良いモノを作る」から「やるべきことをやる」、「一番良いモノを創る」という転換も求められる。これらの目標は一朝一夕に解決するものではないが、その目標は従来のトライアルアンドエラーの世界から、論理的にベスト分子を探索するという、アナリシスからシンセシスへの飛翔が要求される。

各技術概念について、今後必要となる研究課題は以下の通りである。

a) 分子の設計・創成技術

- ・機能から分子を創出するための計算化学にもとづく理論創成とシミュレーション技術の開発
- ・機能設計・予測にもとづく最終目的物をめざす精密合成法の開発
- ・分子性物質の高純度精製法の開発

b) 変換・プロセスの分子技術

- ・酵素インスパイアードモレキュラーインプリンティング触媒の開発・多酵素の配列による高度な分子設計手法の開発・金属フリー有機合成触媒の開発
- ・触媒・生成物の in situ キャラクターゼーション法の開発
- ・マイクロ反応装置などによるフロー型システムケミストリーの開拓
- ・原料転換プロセスの開発 (未利用化石資源、バイオマスなどの利用)
- ・室温稼働化学プロセスの開発

c) 分子の電子状態制御技術

- ・電極-有機分子間 (電荷注入)、有機分子同士 (電荷輸送) の電荷授受の機構解明
- ・高純度化によるキャリアトラップの解消
- ・分子性物質の純度測定評価技術の開発
- ・デバイス上での分子配列技術・階層性構築制御技術の確立
- ・液体半導体などによる自己修復可能なデバイスの開発
- ・分子性物質・分子材料の劣化機構の解明

d) 分子の形状・構造制御技術

- ・自己組織化など、ビルドアップおよびトップダウン手法による空間空隙構造形成技術

- ・ ナノからマクロ構造への規模拡大技術、高強度化、高速合成、低コスト化
- ・ マクロ構造を持つ材料における物理的諸現象（貯蔵、物質・エネルギー変換など）の観測・解析技術
- ・ 計算機シミュレーションによるマクロ構造の合成および構造・機能の設計・解析

e) 分子集合体・複合体の制御技術

- ・ 電子デバイス表面における分子集合体の精密配置技術の開発
- ・ 創薬開発を目指した分子集合体の動的構造変化と機能制御の解析
- ・ タンパク質への非天然アミノ酸導入による人工酵素の構築
- ・ 液体分子の構造と機能制御の解析とシミュレーション

f) 分子・イオンの輸送・移動制御技術

- ・ 電極への効率的なイオンの挿入・移動を可能にする有機蓄電材料の開発
- ・ 不純物の選択的移送と捕捉を目指した超高性能分離膜の開発
- ・ 高効率の薬物輸送を実現する高度 DDS の開発

(6) その他の課題

分子技術は、新しい技術体系であるため、今後はさらに中長期的視点に立った次世代の分子技術の開発と集積を戦略的に進める必要がある。6つの横断的技術に分類されることから分かる通り、分子技術は多様であるため、その構築は継続的な戦略・投資なしには実現しない。社会や産業の課題には終わりがなく、新しい挑戦的な目標を掲げた研究開発チームを適時に立ち上げ続けるのが、分子技術推進に必要な姿である。分子技術には、新物質、新材料、新デバイス、新プロセス等のブレークスルーの創出が期待されている。しかし、これらは、分野単独の科学技術から生み出すことは一般に困難であり、多様な分野の科学技術の融合により初めて可能となる。したがって、高い志を持った分野融合型の研究開発チームが容易に組織され、また効率的に活動できる仕組みや仕掛けが要る。分子技術は、基礎科学をスタートとして、その応用により課題解決の解を提供するとともに、イノベーションを通して新産業の創出も期待する研究開発領域である。今後は、文部科学省・JSTだけでなく、経済産業省・NEDOとのさらなる緊密な連携が求められる。

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|---|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | 分子技術の重要性が世界で初めて日本で明確に認識されたことは極めて重要な点。日本は、高いレベルの分子科学を持っており、これは競争力ある分子技術の開発基盤となる。今後、化学をはじめ物理学、生物学、数学などの研究者の連携がさらに進めば、この分野を世界的に牽引することが期待できる。創薬、高機能触媒、人工光合成、電子顕微鏡分野などで世界をリードする成果が生まれつつある。分子技術の材料分野版ともいべきCREST「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」が2020年にスタートした。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | → | 環境・エネルギー・資源、医療・健康、水・食料など分子技術が鍵となる応用分野は多い。日本は、それぞれの分野における末端技術には、強弱があるものの、分子技術の基盤となる部分は非常に高いレベルにある。産業化については、持続的イノベーションを志向した研究開発が多く、上述分野への応用展開を企図した、先端材料で優位にある。しかし、米国に比べると、全体として必ずしも十分な競争力はなく、さらに、中国、韓国などに追い上げられつつある。 |
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↘ | 米国でも、近年、分子工学の重要性が認識され始めている。しかし、バイオやマテリアルなど応用末端の分野にその研究が集中しており、化学というよりも工学が前面に出ている。従って、分子レベルまで掘り下げた設計、合成や制御をめざす研究は多くない。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | 応用研究は非常に強い。特に資金が集中しているライフサイエンスは圧倒的なレベルにあり、今なお向上し続けている。新型コロナウイルス対応でも力を見せている。産業化については、ベンチャーが中心となって諸課題への対応を図っており、特にライフサイエンスの分野が活発である。巨大製薬企業は、成功したベンチャーの買収により投資リスクの分散を図るとともに、高収益が期待できるビジネスシーズを獲得している。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | → | ドイツでは、大学改革に成功し、分子科学の基礎研究は高いレベルにあり、分子技術においても世界的にトップクラスである。一方、英国はライフサイエンス分野の分子技術が進んでいる。フランスはフッ素化学などの限定された分野では優れているが、全体としては低調である。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | → | ドイツ、英国のライフサイエンス分野の応用研究は非常に優れている。両国は、新型コロナウイルス対応でも力をみせている。他の国は平均的レベルにある。ライフサイエンス以外の分野においてもドイツ、英国が一步抜けている。産業化については、一般に、ライフサイエンス分野が堅調である。産業化を促進する制度的バックアップは優れているが、分子技術という視点では若干手薄い。 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | 現時点では米欧の後追い研究が中心である。しかし、政府主導の人材循環政策により米欧で成功した研究者が本国に招聘されており、潤沢な資金と相まって、成果をあげ始めている。大学のシステムは米国のシステムの導入に成功している。米国との関係悪化により、今後基礎研究の源を日欧にシフトさせる可能性がある。中国国内では製薬系の大企業が育っていないため、若い研究者の就職先が限られるのはハンディキャップであるが、この状況は国の政策により近年中に変わる可能性がある。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 大学や公的研究機関に多くの研究費が投入され、応用研究が急速に進展している。米国と似た制度の下で、ベンチャー企業が誕生しやすい環境にある。産業化についても、今後ベンチャーが重きをなす可能性がある。 |

| | | | | |
|----|---------|---|---|---|
| 韓国 | 基礎研究 | △ | → | 米国型の研究スタイルであるが、最近、大学や政府研究機関で外国人研究者が十分な雇用・処遇を得られないケースがみられる。欧米からの帰国者を優遇し、この点では中国と状況は似ているが、研究レベルは中国に若干遅れている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | → | 応用研究が進み始めており、今後の発展が見込まれる。比較的ダイナミックに産業化を進めているが、現時点では、分子技術そのものではなく製品設計や開発に強みをもっている。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

参考・引用文献

- 1) National Institute of Standards and Technology (NIST), “Flexible and Printed Electronics”, <https://www.nist.gov/programs-projects/flexible-and-printed-electronics> (2020年12月29日アクセス).
- 2) Office of Naval Research (ONR) : One Liberty Center, “Functional Polymeric and Organic Materials”, <https://www.onr.navy.mil/en/Science-Technology/Departments/Code-33/All-Programs/332-naval-materials/functional-polymeric-and-organic-materials> (2020年12月29日アクセス).
- 3) JST CRDS 戦略イニシアティブ「分子技術：“分子レベルからの新機能創出”～異分野融合による持続可能社会への貢献～」(CRDS-FY2009-SP-06) (2010年3月). <https://www.jst.go.jp/crds/report/report01/CRDS-FY2009-SP-06.html>
- 4) JST CREST 「新機能創出を目指した分子技術の構築」, <https://www.jst.go.jp/crest/mt/> (2020年12月29日アクセス).
- 5) H. Yamamoto and T. Kato, Molecular Technology, vol. 1-4 (Weinheim : Wiley-VCH, 2018-2019), <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527823987>.
- 6) JST CREST 「分子技術 シンポジウム：～未来に続く、極限のものづくり～」, <https://www.jst.go.jp/crest/mt/info/20191115.html> (2020年12月29日アクセス).
- 7) 東京大学大学院薬学系研究科有機合成化学教室「分子合成オンデマンドを実現するハイブリッド触媒系の創製：Hybrid Catalysis」東京大学大学院薬学系研究科有機合成化学教室, <http://hybridcatalysis.jp> (2020年12月29日アクセス).
- 8) 加藤隆史他「水圏機能材料：環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成」水圏機能材料総括班, <https://www.aquatic-functional-materials.org/> (2020年12月29日アクセス).
- 9) JST CREST 「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」, <https://www.jst.go.jp/>

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

- kisoken/crest/research_area/ongoing/bunya2020-2.html (2020年12月29日アクセス).
- 10) JST さきがけ「原子・分子の自在配列と特性・機能」,
https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunya2020-3.html (2020年12月29日アクセス).

2.5.2 元素戦略・希少元素代替技術

(1) 研究開発領域の定義

物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用することで、物質・材料の特性・機能の発現機構を明らかにし、希少元素や有害元素に依存することなく高い機能を持った物質・材料を開発する研究開発領域である。近年、重希土類元素であるジスプロシウムを一切使わない永久磁石をハイブリッド車用駆動モータに実用化するなど、社会実装への動きも活発化している。

(2) キーワード

元素戦略、Critical Materials、Critical Raw Materials、Critical Minerals、希少元素、希土類元素、循環、減量、代替、材料設計、構造制御

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

ハイブリッド自動車やスマートフォンなど、私たちの日常生活を支えている製品の中には希少元素が使用されているものが数多く存在する。希少元素とは地球上で採掘可能な量が少なくないうえに産出国が偏在している元素群（わが国ではレアメタルとも呼ばれる）である。そのため希少元素を用いる製品開発を行う各国においては、世界的な供給量不安定化や価格高騰を含めた資源問題が潜在的に存在する。特に工業製品を輸出の主軸としつつも天然資源に乏しいわが国にとっては死活的な問題になりかねない。2010年に起こったレアアースショック以降、資源問題は一過性のものでなく構造的な問題として国際的に協調して対処すべきとの風潮が一気に強まり、日米欧を中心に資源問題に対して政策的な取り組みが開始され、日本発の「元素戦略」が持続可能社会実現に向けて取り組むべき重要課題として世界中で認知されることとなった。

[研究開発の動向]

【日本】

わが国においては、資源は供給されうるものという従来の考え方から脱して、資源をデバイス・部材の中でいかに効率よく使うか、いかに新たな機能を引き出して材料の選択肢を広げるかという視点に立ち、資源の持続可能な利用や高付加価値製品の安定生産をめざすための研究コンセプト「元素戦略」を、2004年に諸外国に先駆けて提唱した。

「元素戦略」は以下の5つの柱によって構成される物質材料科学の基盤を構築する戦略である。

- ① 代替：特定の元素に依存することなく、豊富で無害な元素により目的機能を代替する
- ② 減量：希少元素・有害元素の使用量を極限まで低減する
- ③ 循環：希少元素の循環利用や再生を推進する
- ④ 規制：有害物質の使用量規制や基準を乗り越える高い技術を戦略的に開発する
- ⑤ 新機能：元素の秘められた力を引き出すことで新たな機能を生み出す

一般に「元素戦略=希少元素や有害元素を無害かつありふれた元素に置き換えること」と解釈されがちであるが、それは上記①にすぎない。本質は「物質・材料における各元素の役割を理解し、機能発現メカニズムを解明すること」であることに注意が必要である。また、この概念の特徴としては、化学、物理、金属、セ

ラミックスや磁石など、多彩な学界が共通して取り組めるという点にある。

元素戦略・希少元素代替材料技術に関する研究開発は、2007年に文部科学省による「元素戦略プロジェクト<産学官連携型>」、および密な連携を行う経済産業省による「希少金属代替材料開発プロジェクト」に始まる。前者は元素を特定せず、元素の特性を深く理解することで物質・材料科学のパラダイムシフトを実現し、新しい物質・材料の創製につなげる基礎研究を長期的視点で実施することを目標とした。一方、後者は産業上重要となるいくつかの希少元素を特定し、5年を目処としてそれらの使用量に対する削減目標値（30～50%）を達成するための短期的テーマを推進した。後の府省連携施策の原型となる極めて先進的な国家プロジェクトであり、内閣府を積極的に巻き込みつつ、共同での公募や、役割分担に沿った審査の相互乗り入れを行うなど、従来になかった協力体制で取り組まれた。

その後、2010年にはJST戦略的創造研究推進事業CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」（研究総括：玉尾皓平・理化学研究所顧問（当時）、2010～2017年度）およびさががけ「新物質科学と元素戦略」（研究総括：細野秀雄・東京工業大学教授、2010～2016年度）が発足した。さらに2012年から10年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」においては、磁性材料、電子材料、触媒・電池材料、構造材料を各研究開発テーマとする4つの研究拠点が形成され、「材料創製」「解析評価」「理論」が三位一体となった研究体制が構築されている。

一方、経済産業省・NEDOは比較的短期間での実用化をめざす「希少金属代替材料開発プロジェクト」を進めてきた。2008～2013年度は委託事業として、元素ごとのリスク評価に加えて、リスクの増大が懸念される透明電極向けインジウム（In）、希土類磁石向けジスプロシウム（Dy）、超硬工具向けタングステン（W）、排ガス浄化向け白金族（PGM）・セリウム（Ce）、精密研磨向けセリウム（Ce）、蛍光体向けテルビウム（Tb）・ユーロピウム（Eu）等を対象元素とした代替材料の開発や使用量低減技術の開発を行った。2012～2015年度には産業界での希少金属の使用量低減を促進するため、民間企業から広くテーマを公募し、早期の活用が期待される研究開発として、鉛フリーはんだ（Bi）、樹脂難燃剤（Sb）、ランガサイト型圧電素子（La, Ga, Ta）、レアアースレスモータ（Nd, Dy）、レアアースレス蛍光体（Eu, Ce, Y）、排ガス浄化触媒（Pt, Pd, Rh）、超硬工具（W）、太陽電池波長変換膜（Y）等に対して助成を行った。これらの研究開発を推進するとともに、関連する研究開発動向の調査、事前検討、中長期戦略立案に関する事業など幅広い取り組みを行っている。さらに、2012年からは経済産業省による未来開拓研究プロジェクトのなかで「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」を開始し、その後NEDOが引き継ぎ形で2014～2021年度の8年間という長期プロジェクトが推進されている。

他にも、JSPS科研費の新学術領域研究、内閣府のSIP「革新的構造材料」（2014～2018年度）およびSIP第2期「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」（2018～2022年度）、文部科学省の「東北発素材技術先導プロジェクト」（2012～2016年度）、JSTの「先端的低炭素化技術開発（ALCA）」、「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」、「革新的次世代高性能磁石創製の指針構築」、日-EU共同研究「希少元素代替材料」などの多くの関連プロジェクトも推進されてきた。また、レアメタルにかかる安定したマテリアルフローを実現したサプライチェーンの確立をめざした東北大学レアメタル・グリーンイノベーション研究開発センター（2014年1月設立）などの研究開発拠点も整備されつつある。

【米国】

米国では日本に追随する形で、2010年にエネルギー省（Department of Energy：DOE）が「Critical Materials Strategy」を発表し、Li、Mn、Co、Ni、Ga、Y、In、Te、La、Ce、Pr、Nd、Sm、Eu、Tb、

Dyをキーマテリアルとして、電気自動車、太陽光発電、風力タービンなどのエネルギー産業において米国がリーダーシップをとるためにも希少元素の確実な供給と、需要を減らす代替技術、循環技術を確認すべき対象としたうえで、研究プロジェクトの組織化や国際協力の提案を行っている。また、2012年からInnovation Hub for Critical Materials Researchという拠点形成も進め、Ames研究所にCritical Materials Institute (CMI) が設立された。CMIでは5年間で約1億2000万ドルの資金が導入され、2018年7月に5年間の延長が認められている。

さらに2017年12月、トランプ政権から大統領令「A Federal Strategy To Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals (安全かつ信頼できる希少鉱物の確保のための連邦政府戦略)」が発令された。ここでは、内務省に対して60日以内の希少鉱物リストの作成、さらには商務省、国防総省、農務省、財務省、エネルギー省などに対して、希少鉱物リスト公開から180日以内に対応方針に関する報告書を提出するよう求めている。内務省は2018年2月に「希少鉱物リスト草案」を公表し、パブリックコメントを実施したうえで、同年5月に「希少鉱物の最終リスト」として希少鉱物35種を特定している。2019年6月には、商務省が政府機関全体の行動計画を含む希少鉱物の供給確保戦略を発表し、リサイクルや代替技術の開発、サプライチェーン強化など希少鉱物の対外依存度低減に向けた方策を打ち出している。

加えて、2020年9月には再びトランプ政権から大統領令「Addressing the Threat to the Domestic Supply Chain from Reliance on Critical Minerals from Foreign Adversaries (希少鉱物を外国の敵対勢力に依存することによる、国内サプライチェーンへの脅威への対処)」を発令している。内務長官に対して「関係機関長と協議のうえ、希少鉱物に関する米国の敵対国への依存状況の調査および必要な行政措置を提言する報告書を提出すること」、および内務長官、エネルギー長官はじめ関係機関の長に対し、「ガイダンスの発行、規制の改正、許認可の迅速化など希少鉱物の米国内サプライチェーンの保護および拡大のための措置をとること」を指示している。

【欧州】

欧州では2008年に公表された「Raw Materials Initiative」の下、重要な元素群を「Critical Raw Materials (CRMs)」と命名し、2011年に14種、2014年に20種、2017年に27種、2020年に30種、と3年ごとにCRMsリストを更新している。2014～2020年にかけての研究開発枠組みプログラム (Framework Program: FP) であるHorizon 2020において、希少鉱物関連プロジェクトに総額10億ユーロを投じて、専門家ネットワーク形成プログラムや、リサイクル、マイニング等に関するプロジェクトを実施している。次期FPであるHorizon Europe (2021～2027年) では、全体予算案955億ユーロのうち、第2の柱 (社会的課題の解決) の中の6つの社会的課題群 (クラスター) の1つ「デジタル・産業・宇宙」(総額155億ユーロ) の一部にRaw Materialsを位置づけており、欧州圏の循環型経済確立に向けた取り組みが活発化していくものと思われる。

【中国】

中国は2020年4月にレアアースを使った新材料や応用技術開発の拠点となる「国家レアアース機能材料イノベーションセンター」の設立許可を発表した。中国産の「戦略資源」であるレアアースを使って磁石、発光体、合金など高機能材料を開発し、自国のハイテク産業を強化しようとするもので、脱輸出依存モデルをめざす取り組みの一環である。

【その他】

鉱物資源国として、オーストラリアが2019年に「オーストラリア希少鉱物戦略 (Australia's Critical Minerals Strategy)」、カナダも2019年に「カナダ鉱物・金属計画 (The Canadian Minerals and Metals Plan)」を発表しており、それぞれ自国の鉱工業を保護・育成しつつ、戦略的に資源を活用したイノベーションを推進している。

国際協調という観点からは、2011年から毎年「Trilateral EU-US-Japan Conference on Critical Materials」という施策上重要な物質に関する日米欧三極会議が行われている。ここでは、レアアース等の希少元素主要消費国である三極の技術者・研究者が、代替・削減技術および鉱石や製品からの効率的な精製分離技術等について密接な情報交換を行うことで、当該分野の研究促進を図るとともに、希少元素消費国間の連携状況を国際的に発信することを目的としている。

(4) 注目動向**【新展開・技術トピックス】**

最近特に米国と欧州において、希少資源に関するデータソースの拡充、安定供給ルート確保に向けた取り組みが活発化しようとしている。

前述の通り、米国においてはトランプ大統領による2つの大統領令に象徴される。1つは米国の経済と安全保障に対して脆弱性の要因となりうる希少鉱物の輸入依存の低減と安定供給ルートの確保を目的とした大統領令「A Federal Strategy To Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals (安全かつ信頼できる希少鉱物の確保のための連邦政府戦略)」である(2017年12月に発令)。もう1つは、希少鉱物を外国の敵対勢力に依存している状況の解消を目的とした「Addressing the Threat to the Domestic Supply Chain from Reliance on Critical Minerals from Foreign Adversaries (希少鉱物を外国の敵対勢力に依存することによる、国内サプライチェーンへの脅威への対処)」(2020年9月に発令)である。特に2つ目の大統領令では、今後取りうる行政処置として輸入制限を明示しており、今後の米国の動きを注視しておく必要がある。

また、欧州においては、2018年1月に「Report on Critical Raw Materials and Circular Economy (希少原材料と循環型経済に関する報告書)」が公開されている。ここでは、循環型経済の一環として希少資源確保に向けたデータソースの提供、ベストプラクティスの促進、実行可能なアクションプランを特定することを目的として、欧州における関連政策やプロジェクト、CRMsの需要動向について記載している。2018～2022年の間にCRMsに関する活動(CRMsの入手改善、欧州圏内のCRMsの回収率向上、CRMsの輸入依存の低減、欧州圏内での専門家コミュニティの強化など)に2億5000万ユーロ以上の投資が予定されている。さらに、2020年9月に「Action Plan on Critical Raw Materials (希少鉱物に対する行動計画)」を発表した。ここでは、CRMsが幅広い産業において必要不可欠であり、その調達にEUが推進する欧州グリーンディールにおいても戦略上の重要性を持つこと、新型コロナウイルス感染拡大による世界的なサプライチェーンの脆弱性の露呈に対応するため、CRMsのより安定的かつ持続可能な供給のための基盤整備を含む行動計画を示した。

一方、わが国においては、対象を絞りそこに技術と知識を集約して解決する集中型の研究開発により、元素戦略の5つの柱の中の「代替」「減量」に関する取り組み、および、ありふれた元素(earth-abundant elements)で従来を凌駕するあるいは新規の機能発現をめざす創成型の研究開発が主に行われている。特

に、特定元素がなぜその機能を発揮しているのかについて科学的に解明し、その機能発現原理をナノスケールの物質構造（原子配列、格子欠陥、結晶粒、磁区構造、分子構造、表面・界面構造など）からデザインすることによって、希少元素・有害元素の代替に留まらない、「新機能」に関する取り組みを推進することが重視されている。前述のCRESTにおいては、物質の特性・機能を定める特定元素の役割を理解し有効活用することで、既存の延長線上にはない物質・材料の革新的な特性や機能の創出をめざした研究開発が行われた。さきがけでは、クラーク数上位の元素を駆使して、ナノ構造や界面・表面、欠陥などの制御と活用による革新的な機能物質や材料の創成と計算科学や先端計測に立脚した新しい物質・材料科学の確立をめざした研究開発が行われた。元素間融合による新規ナノ合金の開発、アルケンのヒドロシリル化用鉄・コバルト触媒の開発、反強磁性スピントロニクスにつながる新たな磁性体の発見など、さらなる発展をめざして新たな研究プロジェクトに採択される多くの興味深い基礎的な成果が創出された。

国内外に共通する新しい展開として、近年の計算科学・シミュレーション技術や計測評価技術、マテリアルズ・インフォマティクス進展によって、これまでは複雑すぎて人間が扱えなかった領域の解析や予測が可能になりつつあることがあげられる。実際にマテリアルズ・インフォマティクスによって新規電池材料の発見をはじめとする新規機能性材料の予測・発見、実験装置の自動化による研究環境のDX化など、元素戦略を含む多くの材料開発の手法が大きく変わりつつある。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

2012年から10年間の事業として開始された文部科学省「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」における4つの研究拠点の目的を以下に示す。

- **磁性材料研究拠点 (Elements Strategy Initiative Center for Magnetic Materials : ESICMM)**

磁石の性能に与える元素の役割を基礎物理に遡って解明することにより、ハイブリッド自動車の駆動モーター等に用いられている現在の最高性能を有する希土類永久磁石と同等の性能を有する磁石を、希少元素を用いることなく作成することをめざす。

- **電子材料研究拠点 (Tokodai Institute for Element Strategy : TIES)**

エレクトロニクス産業を支える電子部材（半導体、透明電極・伝導体、誘電体等）を中心として、幅広い材料分野に有効な新しい材料科学を、基礎物理、計算科学、先端解析技術の協働により構築して、希少元素や環境負荷の高い元素を用いない代替材料の開発をめざす。

- **触媒・電池材料研究拠点 (Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries : ESICB)**

今日の環境産業やエネルギー産業に欠かせない触媒および二次電池の部材について、固体及び気体/液体との間での元素の複雑系反応を基礎科学と実験科学の緊密な連携を通じて解明することにより、触媒及び二次電池に対する元素の機能を予測し、貴金属や希少元素を用いない代替材料の開発をめざす。

- **構造材料研究拠点 (Elements Strategy Initiative for Structural Materials : ESISM)**

材料の「強度」(変形への抵抗)と「延性」(破壊への抵抗)といった相反する性質を基礎科学の段階から解明することで、社会基盤を支え、安全・安心な社会に不可欠な構造材料において、現在大量に使用されている希少元素を抜本的に削減した代替材料の開発をめざす。

本プロジェクトでは、2015、2018年度にそれぞれ中間評価を行い、2021年度に事後評価を行うこととしている。2018年度の第2回目の中間評価においては、「事業開始時に設定した目標達成に向け、事業開始後

約6年間の取り組みとして概ね良好に進捗している」と評価されつつも、「出口戦略や性能目標も具体化されているが、その一方で、「磁石材料拠点」や「触媒・電池材料拠点」では、ターゲットを限定しすぎたことにより、元素戦略の展開に制約が出ていないか留意する必要がある」とされている。また「今後は成果の取り纏めの時期に入ることから、知財戦略の策定や、産業応用の可能性がある成果については積極的に特許化を進めること等の対応が必要である」とされ、残りの研究期間の間に基礎研究を早期に社会実装へつなげる仕組みを構築し、国が主導する研究開発事業のモデルケースとなることを期待されている。さらに、2019年12月に開催された国際評価会議 Element Strategy Initiative Advisory Council (ESIAC) において、国際委員から、人材の多様性の確保、若手研究者育成のための拠点横断型取り組みの必要性、スタートアップ企業化に向けた活動の推奨などについてコメントがあった。

経済産業省からNEDOに移管した「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」(2014～2021年度)において、レアアースに依存しない革新的高性能磁石の開発、モータを駆動するためのエネルギーの損失を少なくする高性能軟磁性材料の開発ならびに新規磁石、新規軟磁性材料の性能を最大限に生かして更なる高効率を達成できるモータ設計の開発を行っている。次世代自動車や家電、産業機械の心臓部であるモータの省エネ化を図り、競争力を確保し、わが国産業全体の活性化に寄与することが目的である。

これら一連の取り組みの顕著な成果として、2016年7月に大同特殊製鋼と本田技術工業から、重希土類元素を使わないネオジム磁石の開発に成功したことが共同発表され、2016年秋発売のハイブリッド自動車に採用された。さらに、同年11月には東芝と東芝マテリアルから、重希土類フリー高鉄濃度サマリウムコバルト磁石の開発に成功し、サンプル出荷を開始したことが共同発表された。また、2018年2月には、トヨタ自動車がネオジムのランタンやセリウムに置き換えても磁力・耐熱性の悪化を制御できる新技術を生み出し、これによりネオジム使用量を最大50%削減しても従来のネオジム磁石と同等レベルの耐熱性能を持つ磁石「省ネオジム耐熱磁石」の開発に成功したことを発表した。

米国DOEの傘下、Critical Materials Instituteは2020年6月、産業化に焦点を当て、希少鉱物に対する国内サプライチェーン確立をめざし、総額400万ドルの「CMI Open Innovation Project」を公表した。

(5) 科学技術的課題

材料開発が原子レベルで行われるようになり、材料の分析手段も原子レベルで行われる必要が出てきており、放射光施設や高性能な電子顕微鏡を用いることで材料の静的な構造などは詳しく解析されるようになっている。しかし、例えば触媒材料開発に注目すると、実際の反応場で材料(触媒)がどのように振る舞っているかの多くは未だ解明されておらず、例えば、鉄触媒研究においては鉄触媒活性種が不安定かつ常磁性状態が安定になりやすいため、溶液中での反応機構の解析手法、それにもとづく合理的な触媒設計や触媒反応設計が確立していない。鉄触媒反応に限らず、さまざまなメカニズムの解明は材料開発にとって不可欠であり、新たな指針を与えるものである。そのためにはその場観察(オペランド)実験手法の確立が必要となる。なかでも高分解能電子顕微鏡のオペランド観察は、反応場における原子の動きを実際に観測することができ、非常に強力な手段と考えられる。日本では最先端の電子顕微鏡があまり普及していないが、欧州では国立研究所(Ernst Ruska-Centre)と電子顕微鏡メーカー(FEI)などが共同開発を行い、実際の反応条件と同等の環境で観察を行える環境制御型電子顕微鏡の開発がさかんに行われており、材料開発を促進している。

(6) その他の課題

元素機能の発現機構は、物理、化学、金属などの既存の学問領域が単独で解明できるものではないため、

異分野の力を結集することが重要である。異分野連携・融合によってさまざまな学問領域の視点から機能発現機構を解明することが材料挙動の原理解明に直結し、材料の革新につながる可能性が高いと考えられる。しかし、この異分野連携・融合が自然発生的に生まれることは一般的には期待できず、政策的な誘導が必要である。JST-CRESTにおいては、各研究チームに理論グループの参画を必須とする等、トップダウンによって異分野連携を促進したが、そのCRESTも2017年度末で終了している。元素戦略プロジェクトやNEDOプロジェクトを補完、またはサポートする新たな方策が必要であると考えられる。

1つの方向性として、これまで主に希少元素や有害元素を対象として元素単体の役割を解明し代替技術、使用量削減技術開発を行ってきたが、今後は複数元素の組み合わせによる機能創出をめざした新たな元素戦略を推進することが期待される。近年、社会ニーズの高度化に伴い、材料が多元素化・複合化もしくは準安定状態の利活用へと向かっている潮流とも合致する。さらに、マイクロプラスチックによる海洋汚染などの社会的問題がクローズアップされるなか、材料循環の意識を高めることも重要である。つまり、材料に求められる機能が「使用時」の機能だけに留まらず、「使用後」の分解・分離といった循環機能にまで拡大しているため、材料のライフサイクル全体を最適化する材料科学の構築が求められる。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|--|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | 文部科学省、経済産業省、JST、NEDOなどにおける各プロジェクトの推進により基礎学理の構築および研究コミュニティが形成されている。政府が策定予定の「マテリアル戦略」において、レアメタルの安定供給に関する検討が始まっている。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | 上記のプロジェクトで開発された成果をもとに新物質・新材料の実用化が進みつつある。特にジスプロシウムやネオジムなどの希土類元素の使用量を大幅に削減した永久磁石の開発に成功し、一部は既に市販車に導入されている。 |
| 米国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | Critical Materials Instituteの第2フェーズの開始、希少鉱物に関する2つの大統領令が発令されるなど、今後研究開発が活発化される可能性がある。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 上述の大統領令により、各省庁が希少鉱物の安定供給ルート確保、敵対国に対する依存度解消に向けた対応策を討議中であり、今後産業応用へ向けた取り組みが活発化する可能性がある。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ○ | ↗ | 循環型経済（Circular Economy）の観点で、欧州圏内の希少鉱物の埋蔵量、偏在性の把握に関する活動が活発化している。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 希少鉱物の安定供給に対する意識が上がってきている。Horizon 2020に引き続き、Horizon Europeにおいても産業化をめざした研究開発プロジェクトが推進される模様。「希少鉱物に対する行動計画」が発表されるなど、今後産業化へ向けた取り組みが活発化する可能性がある。 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | → | 貴金属代替（削減）材料開発に関する論文が急増している。積極的に先端技術を導入して基礎研究が進められている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | レアアースを使った新材料や応用技術開発を目的とした「国家レアアース機能材料イノベーションセンター」の設立許可が出されるなど、レアアースを使って自国のハイテク産業の強化をめざす動きをみせている。今後、応用研究・開発が活発化する可能性がある。資源保有国の強みを有し、ネオジム磁石は他国の追随を許さない生産量を誇っている。 |

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

| | | | | |
|----|---------|---|---|--|
| 韓国 | 基礎研究 | △ | → | 米国のMaterials Genome Initiativeや日本の元素戦略にならった成果が出ているものの、独自性ある成果はみられない。 |
| | 応用研究・開発 | × | → | 特に目立った動きはみられない。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

- ・分離技術（ナノテク・材料分野 2.1.5）
- ・マテリアルズ・インフォマティクス（ナノテク・材料分野 2.5.3）
- ・複雑系材料の設計・プロセス（ナノテク・材料分野 2.5.7）
- ・ナノ・オペランド計測技術（ナノテク・材料分野 2.6.3）
- ・物質・材料シミュレーション（ナノテク・材料分野 2.6.4）

参考・引用文献

- 1) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略イニシアティブ『元素戦略』」(CRDS-FY2007-SP-04) (2007年10月), <http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2007/SP/CRDS-FY2007-SP-04.pdf>(2021年2月17日アクセス)
- 2) Eiichi Nakamura and Kentaro Sato, "Managing the Scarcity of Chemical Elements", *Nature Materials* 10, no. 3 (2011) : 158-161. doi : 10.1038/nmat2969
- 3) 中山智弘『元素戦略：科学と産業に革命を起こす現代の錬金術』(ダイヤモンド社, 2013) .
- 4) 『日本発、科学で元素資源問題に挑む“元素戦略” 革新的な物質・材料で持続可能な社会を構築する』(2020年12月), https://elements-strategy.jp/images/esi_2020/pdf/elements-strategy.pdf (2021年2月17日アクセス)
- 5) U.S. Department of Energy, *Critical Materials Strategy* (December 2011), http://energy.gov/sites/prod/files/DOE_CMS2011_FINAL_Full.pdf(2021年2月17日アクセス)
- 6) Critical Materials Institute, <https://www.ameslab.gov/cmi> (2021年2月17日アクセス)
- 7) The White House, *Executive Order on Addressing the Threat to the Domestic Supply Chain from Reliance on Critical Minerals from Foreign Adversaries* (September 30, 2020), <https://www.federalregister.gov/documents/2020/10/05/2020-22064/addressing-the-threat-to-the-domestic-supply-chain-from-reliance-on-critical-minerals-from-foreign>(2021

年2月17日アクセス)

- 8) The White House, *Presidential Executive Order on a Federal Strategy to Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals* (December 20, 2017),
<https://www.federalregister.gov/documents/2017/12/26/2017-27899/a-federal-strategy-to-ensure-secure-and-reliable-supplies-of-critical-minerals>(2021年2月17日アクセス)
- 9) European Commission, *Report : critical raw materials and the circular economy* (January 16, 2018) ,
https://ec.europa.eu/commission/publications/report-critical-raw-materials-and-circular-economy_en(2020年2月17日アクセス)
- 10) European Commission, *Commission announces actions to make Europe's raw materials supply more secure and sustainable*(September 3, 2020),
https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip_20_1542(2021年2月17日アクセス)

2.5.3 マテリアルズ・インフォマティクス

(1) 研究開発領域の定義

計算科学やデータ科学を用いた物性予測、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技術分野である。従来、交わることが少なかった、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/リポジトリなどの分野から、研究者が集まっており、学術分野自体が異分野融合になっていることに特徴がある。究極的には、材料特性を支配する究極の関係性を発見し、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。

(2) キーワード

データ駆動型、Materials Genome Initiative、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルズ・インテグレーション、機械学習、深層学習、データベース、データ同化、転移学習、回帰、ベイズ推定、ハイスループット合成、ハイスループット計測、プロセスインフォマティクス

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

2011年に米国が「Materials Genome Initiative (MGI)」を発表してから約10年が経過した。この間に、実験科学、理論科学、計算科学に続く第4の科学として、データ科学 (Informatics) が材料研究において非常に有力な手法であることはさまざまな研究事例をもって実証され、もはや材料研究にデータ科学を活用することは、当たり前となりつつある。特に、さまざまな材料データ (画像、スペクトル、結晶構造、物理量、文章 など) を記述子としてデータ科学により“新規材料を予測”する技術は確立されつつあり、あらゆる材料開発においてその技術は使われている。

一方、近年では新規材料の予測だけでなく、“新規材料の合成”まで行うことができるマテリアルズ・インフォマティクスが求められ始めている。実験科学、理論科学、計算科学、データ科学に加え、ロボティクス、プラットフォーム、通信、IoT、セキュリティなど、あらゆる技術を発展・融合させることにより“新規材料の合成”までのプロセスを最適化する技術を確立することができれば、材料研究分野における日本の国際競争力の強化に大きく貢献できると期待される。

[研究開発の動向]

• 日本

2015年に発足したNIMSを中核機関とする「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (“Materials research by Information Integration” Initiative: MI²)」(PL: 伊藤聡、2015～2019年度)、2014年に開始した内閣府戦略的イノベーション創造プログラム (Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program: SIP)「革新的構造材料」(PD: 岸輝雄、2014～2018年度)のなかの研究開発項目の1つ「マテリアルズインテグレーション」(領域長: 小関敏彦)、2016年に開始した経済産業省/NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超超プロジェクト)」(PL: 村山宣光、2016～2021年度)の3つのプロジェクトにより、補完的に研究開発が遂行されてきた。また、内閣府における統合型材料開発システムとして、上記の3プロジェクト (MI²、マテリアルズインテグレーション、超超プロジェクト)の間で、

実施者を加えた3府省連絡会議等を適宜開催し、各事業の進捗や成果の共有が図られた。2018年にはSIP(第2期)として、「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(PD:三島良直、2018~2022年度)が開始されている。

なお、NIMSにおいては材料データの収集が以前から行われてきたが、2017年度より従来の材料データベースMatNaviを包含し、実験データのリポジトリや解析ツールの提供も含めたデータプラットフォーム構築事業が行われている。

マテリアルズ・インフォマティクスを推進する研究開発事業として、JST 戦略的創造研究推進事業においては、さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」(研究総括:常行真司、2015~2020年度)、CREST・さきがけ複合領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(研究総括:雨宮慶幸、副研究総括:北川源四郎、CREST:2016~2023年度、さきがけ:2016~2021年度)、CREST 研究領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」(研究総括:細野秀雄、2017~2024年度)が相次いで発足し、マテリアルズ・インフォマティクスが材料開発の重要なツールであることを示し続けている。

・米国

2011年より国家的な取り組みとして開始されたMGIは、材料開発に要する期間を2分の1に短縮するという目標を掲げ、「計算ツール」「実験ツール」「デジタル・データ」を材料イノベーション基盤として整備するべきであるとするものであった。このプロジェクトでは、以下にあげる3つの方向で研究が開始された。

1つ目は、第一原理計算を主体として物質の構造や物性に関するデータを作り出し、所望の性能や機能を持つ物質・材料を見つけ出そうとする流れであり、実験と計算科学にもとづくデータベースとデータ科学にもとづく各種分析ツールを融合した物質の網羅的スクリーニングを行うものである。その例として、マサチューセッツ工科大学(MIT)のグループ(現在はUC Berkeley)とローレンス・バークレー国立研究所による“Materials Project”がある。ここでは、無機結晶構造データベースに収録された結晶構造データをもとに、網羅的に第一原理計算を行った結果を、熱力学データベースをリンクさせて、状態図や構造予測、化学反応予測などを収録したデータベースを公開している。さらに、これらのデータを活用できる各種アプリケーションソフトウェアも公開しており、リチウムイオン電池の正極材料の探索などに用いられている。同様のデータベースの構築と公開は、デューク大学、ノースウェスタン大学をはじめとする、大学・国研で行われている。

2つ目は、コンビナトリアル合成・計測によるハイスループットデータ収集であり、実験家を中心に、高速に物質を合成し、物性を計測し、データベース化するとともに、視覚化ツール、分析ツールを用いて最適物質、構造を予測するというサイクルを構築するものである。こうしたコミュニティの活動は、エネルギー省傘下の国立研究所ネットワークのもとで、High-Throughput Experimental Materials Collaboratoly (HTE-MC) のプログラム推進に結実している。

3つ目は、統合計算材料工学(Integrated Computational Materials Engineering: ICME)の流れであり、構造材料を中心に、結晶構造(第一原理計算)から高次構造までさまざまなスケールのモデリングをリンクさせ、また、加工プロセスと組織構造の相関もデータにより統合していくものである。2014年、NISTが立ち上げたCenter for Hierarchical Materials Design (CHiMaD)は、ノースウェスタン大学、シカゴ大学を中心としたもので、熱力学・状態図計算など、個別のニーズに合わせて速度論のシミュレーションを行って材料特性の予測、材料開発の支援を実施している。

MGIに関する最近の注意すべき動きとしてあげられるのが、「Materials Research Data Council

(MaRDaC)」の動きである。この評議会は、2019年11月にスタートし、オープン・アクセス可能・相互運用可能な材料データを実現することを目的として設立された「材料研究データアライアンス (MaRDa)」の運営委員会として位置づけられている。

具体的な動きとして、最初の会合である「Materials Data Summit」がシカゴで開催されたほか、NSFから研究コミュニティに向けて2019年10月に発信されたCSSI Dear Colleague Letter「データ集約型の科学・工学研究をサポートするサイバーインフラストラクチャに関する情報のリクエスト」に呼応して、材料コミュニティからの返答書を2019年12月に返信している。この返信に記述された内容は、(1) サイバーインフラストラクチャ、(2) データベース技術、(3) 相互運用可能システムとユーザビリティ、(4) 自動データキャプチャ、(5) 機械学習、(6) コミュニティ (文化、持続可能性、人材、トレーニング) に関する材料コミュニティからの現状の説明となっている。

もう1つ特筆される取り組みは、NIST-CoE プログラムの1つとして推進されていたCHiMaDの継続である。前述のように2014年からノースウェスタン大学を中心とする研究チームの5年プログラムのファンディングが開始し、NISTのMGI研究チームとの密接なコラボレーションのもとシカゴ地区でのデータ活用型材料研究を牽引してきたが、2019年にさらに5年間にわたるファンディングの継続が決定された。研究チームの中心人物であるOlson教授は2019年12月にMITに移籍しており、CHiMaDセンターとの今後の関係が注目される。

データインフラストラクチャに関しては、MGIの黎明期から国家プロジェクトにおいて開発が進められてきた米国におけるデータプラットフォームシステムのいくつかにおいては、データ公開のサービス運用が開始されている。

Materials Data Facility (MDF) は、CHiMaDのデータツールの1つとしてアルゴンヌ国立研究所を中心に開発が進められてきたものであり、登録されるデータにDOIを付与し、グローバルな学術コミュニケーションの中でデータを流通させることができるほか、組織、登録年、キーワード、関連する元素などに注目した検索機能を有している。

その他としては、ミシガン大学のPRISMSセンターが開発したMaterials Commonsも、同じようなデータ公開機能を有するほか、民間ではCitrine informaticsが旧来からのプラットフォームサービスを継続し、AI活用可能なデータ管理機能を強みとして、製造業との連携を強めている。

• 欧州

FAIR原則 (Findable, Accessible, Interoperable, Re-purposable/Reusable) の重要性が材料科学分野においても認識されつつあるなかで、2018年9月に「FAIR Data Infrastructure for Physics, Chemistry, Materials Science, and Astronomy e.V. (FAIR-DI)」がドイツ・オランダを中心とする研究機関連携の母体として発足している。この団体は、Horizon 2020で2015年からファンディングされているNOMAD-CoEを主軸に置すが、材料分野にとどまらずバイオ分野・天文学分野とも横串を刺す形でFAIR原則に従うデータ管理の実現と、そのための世界的なデータインフラストラクチャを構築することを目的としている。NOMADにおけるインフラストラクチャの整備は系統的に進んでおり、生データを登録・管理するリポジトリサービスのほか、解析ツール、可視化、知識ベース、メタデータの統合と合わせて合計5つのサービスを柱として発展している。2020年3月に3年間の追加ファンディングが決定し、2020年6月には材料分野におけるFAIRデータ管理を主題とした国際ワークショップを開催している。

FAIR-DIがデータインフラストラクチャに焦点を当てている一方で、エクサスケールのHigh Performance Computingのためのインフラストラクチャに焦点を当てるのが「MATERIALS design at the eXascale (MAX)

a European centre of excellence」である。このセンターでは、5カ所のHPCリソースをネットワークし、それらの上で動くコード開発をテクノロジーパートナーとともにサポート、さらにはHPCリソースを必要とするコミュニティとの連携などを主な活動項目としている。

このセンターのデータ管理プラットフォームとして機能するのが、Materials Cloudである。このシステムはPythonをベースとするオープンなインフラストラクチャシステムであるAiiDAをベースとして動作するもので、特に、計算データの生成ワークフローを管理し、これに伴うデータ来歴 (provenance) の管理も行えることが特色となっている。AiiDA、Materials CloudのいずれもスイスEPFLにおいて開発が進められてきたものであり、必然的にEPFLはMAXの中心的な推進機関でもある。

データの標準化に関しては、European Materials Modeling Council (EMMC) がHorizon 2020ファンディングを得て進めてきたオントロジーを中心としたものになっている。EMMCはその目標として、材料分野において産業界、とくに中小企業をカスタマーとするデータ市場の立ち上げを掲げており、市場でデータを流通させるために必要な共通記述様式の策定を進めてきた。2018年にロードマップをまとめ上げてHorizon 2020プロジェクトを終了したが、2019年7月に非営利法人化してその後も活動を継続している。データ市場実現に向けたプロジェクトは2つ並行して走っており、いずれもMODAと呼ばれる材料モデリングにおけるデータ記述のための標準規格に準拠した標準オントロジーを基礎においてデータ構造化を進めている。

一方、入出力するデータの形式を揃える別の手段として、入出力結果へのアクセスを全てAPI化し、そのAPIの仕様を標準化するという方法がある。この方式のもと、コミュニティ主導で進められている活動が「OPTIMADE」である。OPTIMADEは、2018年から一年に一度のワークショップを毎年主催し、材料分野におけるデータ入出力をREST API化することについて議論を進めてきた。現在、バージョン1.0.0として仕様が公開されており、さまざまなプログラムが入出力をその仕様に合わせるように調整を行い始めている。その先鋒となっているのが、NOMADおよびMaterials Cloudの両リポジトリである。加えて、米国の代表的な第一原理計算データベースを運営するAFLOW、Materials Project、OQMDはいずれもこの取り組みに関与しており、現在、16のAPIプロバイダーがOPTIMADEに準拠するとしている。今後、第一原理計算コミュニティにおいて、OPTIMADEはデータ入出力のデファクト標準になる可能性があり、注視する必要がある。

• 中国

中国においては、2014年に上海市と上海大学が共同で進めるShanghai Materials Genome Instituteを設立し、最近、急速にデータ科学を活用した材料開発研究を進めている。また、2016年に中国科学院物理研究所と北京科技大学が共同で北京マテリアルズゲノム工学イノベーション連盟を設立している。さらに同年、上海交通大学においてもマテリアルズゲノム連合研究センターを設立するなど、国を挙げてマテリアルゲノム研究に力を入れ始めていると同時に欧米の研究者との連携を強くしている。2016年3月に発表された科学技術イノベーション第13次五カ年計画においても、中国産業の国際競争力向上のための重点技術の1つ「新素材技術」のなかに「マテリアルズゲノム工学 (目標: 新材料の開発期間・コストの半減)」と明記されている。さらに、国家重点研究開発計画の1つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」(2016~2018年の3年間に計44課題、総額約8億元)が推進されている。

• 韓国

2015年から10年計画でCreative Materials Discovery Projectが開始している。また、最近、韓国科学技術研究所 (Korea Institute of Science and Technology: KIST) において計算科学を中心とした

Materials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS) が設置された。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

新型コロナウイルス感染症の流行の影響もあり、国内外において研究者がラボに行くことができない状況が多発した。そのため、研究者がラボに出向くことなく材料研究を進めることができる材料開発システムの需要が増大している。また近年、マテリアルズ・インフォマティクスの領域において、『自律的 (Autonomous)』という単語が1つのキーワードとなっている。人間が介在することなく、コンピュータ自身が状況に応じてルールを生み出し、自律的に材料開発を進める材料開発システムの構築が、本領域におけるチャレンジングな課題の1つとして考えられる。自律的に材料探索を行うことができる材料開発システムは、大きく分けてバーチャル (仮想空間) での自律的材料探索システムと、リアル (実空間) での自律材料探索システムの2種類に分けて考えることができる。仮想空間での自律的材料探索システムとしては、材料シミュレーション (e.g 第一原理計算) と機械学習を組み合わせた手法の開発が進められている。仮想空間で材料創製および材料特性評価を行う材料シミュレーションを、ベイズ最適化や強化学習などの機械学習を用いて逐次的に実行し続けることによって、仮想材料空間にて自律的に材料を探索することができる。一方、実空間での自律材料探索システムとしては、ロボティクスと機械学習を組み合わせた手法の開発が進められている。簡単な実験系 (例えば、材料合成の条件出し) であれば自律的に探索を進めることができるため、人間の工数を削減することができつつある。

機械学習モデルの『解釈性 (Interpretability)』も、マテリアルズ・インフォマティクスの領域において大きく取り上げられている。深層学習のようなブラックボックス型の機械学習モデルは、高い予測性能を誇る一方、モデル内部の詳細な情報を抽出することが難しい。そこで近年、高い予測性能を保ちつつ高いモデル解釈性を持つ機械学習手法の開発が進められている。機械学習モデルの解釈性に関しては、材料研究領域だけではなく機械学習 (AI) 研究領域全体においても非常にホットなトピックであり、“Interpretable machine learning” や “Explainable AI (XAI)” といったカテゴリとして急速に研究が進められている。解釈性の高い機械学習を用いると、物理/化学/材料学の知見をベースとして人間が機械学習モデル内部を解析することができるため、材料研究にかかわる多くの知見や新たな物理法則の導出につなげることができる。そのため、解釈性の高い機械学習技術は、物理/化学/材料学の知見を持った人間とAIが協奏して材料研究を推進するためのキーテクノロジーの1つとして考えられる。機械学習モデルの解釈性を活用し、AIと人間が協創しつつ材料開発を成功させた事例もいくつか報告されている。当然、機械学習のみを使い盲目的にマテリアルズ・インフォマティクスを進めるよりも、研究者が所有する物理/化学/材料学の知見を有効活用しながらマテリアルズ・インフォマティクスを推進した方が効率的であるため、機械学習モデルの解釈性の重要さは、材料研究領域においても認識されつつある。

2017年、Iwasakiらは、3元コンビナトリアル試料の構造評価に機械学習を導入することで特定の箇所の計測だけで全点計測した結果とほぼ同じ結果を得ることが可能であることを示した。材料開発に共通して行われるX線構造解析を短時間化したインパクトは大きかった。評価の効率化により、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料予測からハイスループット合成・評価までのワークフローが同じペースで実行できプロセスデータを含む材料データセットの作成がほぼ、同じペースで可能となった。教師データの蓄積にも貢献し、バーチャルスクリーニングの精度を向上させることになると期待される。

実験データを共有化する試みも始まっている。National Renewable Energy Laboratories (NREL) では、

これまで蓄積してきたハイスループット実験のデータをプロセス条件も含めて公開している。これらの実験結果は機械学習における教師データとして利用され材料設計の予測精度の向上に寄与すると期待されている。

最近、実験室内を移動ロボットが動き、自動で合成から評価まで行う「ロボット化学者」が登場した。これはリバプール大学にある“Materials Innovation Factory”で行われた試みであるが、今後はハイスループット合成・評価とロボティクスとの融合が進むと考えられる。

【注目すべき国内外のプロジェクト】

■ JST-さきがけ、CREST / 計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用 (2016年～)

計測・解析技術の深化による新たな科学の開拓や社会的課題の解決のために、多様な計測・解析技術に最先端の情報科学・統計数理の研究を高度に融合させることによって、これまではとらえられなかった物理量・物質状態やその変化あるいは潜在要因等の検出、これまでは困難であった測定対象が実際に動作・機能している条件下でのリアルタイム計測等を実現するインテリジェント計測・解析手法の開発とその応用をめざしている。

■ JST-CREST / 実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新 (2017年～)

これまで実施されてきた物質・材料開発の基本となる実験科学と、理論、計算、データ科学とを融合させることにより、革新的材料開発へとつながる手法の構築をめざしている。

■ SIP第2期 / 統合型材料開発システムによるマテリアル革命 (2018年～)

第1期SIP「革新的構造材料」後継プロジェクトとして発足し、マテリアルズインテグレーション (MI) の技術基盤を生かし、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする逆問題MIに対応した統合型材料開発システムの開発をめざしている。

■ 新学術領域研究 / ハイパーマテリアルのインフォマティクスとhidden orderの探索 (2019年～)

ハイパーマテリアル (準結晶・近似結晶等、補空間を含む高次元空間で統一的に記述される物質群) を対象とするマテリアルズ・インフォマティクス (MI) の学術基盤の構築をめざしている。

■ JST未来社会創造事業 / Materials Foundryのための材料開発システム構築とデータライブラリ作成 (2018年～)

データ科学を使ったバーチャルスクリーニング、ハイスループット材料合成・評価を使った材料データライブラリを作成し、新材料開発のワークフローの開発をめざしている。

■ JST未来社会創造事業 / マテリアルズロボティクスによる新材料開発 (2019年～)

人工知能とロボット、そして、研究者の知識・経験・勘を統合した研究開発共通基盤技術 (人工科学者) の確立をめざしている。

【海外】

■ Materials Genome Initiative : MGI (2011～2016年)

「計算、データ、実験の各手法を連携させた統合アプローチを主流にするための研究者意識の醸成」「実験・計算・理論の各研究者の統合」「データへの容易なアクセス環境の整備」「世界水準の人材育成」を目標として掲げ、計算科学・データベース・機械学習・深層学習を用いた材料開発の高効率化が進められている。本イニシアティブ自体は、2016年に終了したが、各省4つのセンター (CNGMD、CHiMaD、SUNCAT、PRISMS) を中心にマテリアルズ・インフォマティクスにかかわる研究開発が活発に継続されている。

■ Materials Project (2011年～)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

材料シミュレーションによるデータ蓄積や機械学習など用いてオンラインツールとして材料スクリーニングを可能とすることを目指している。現在、開発されたオンラインツールやデータベースは、その利便性から世界中で広く使用されている

■中国 国家重点研究開発計画 / 材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム (2016年～)

2016年から中国国内の研究開発の強化を目的とした国家重点研究開発計画が開始され、その1つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」を指定。2016年に14課題、2017年に19件、2018年に11課題を採択し、総額約8億元が投資されている。

(5) 科学技術的課題

現状、日本のマテリアルズ・インフォマティクスは、物質・材料設計にかかわる3つの基礎技術「実験科学」「理論科学」「計算科学」に、第4の科学「データ科学（機械学習）」を加えた合計4つの技術の強化およびその融合に注力している。しかし今後は、これら4技術に加え、新たな技術領域の強化およびその融合にも注力すべきと考えられる。具体的には、実空間での自律的材料探索システムで重要な技術となる「ロボティクス技術」、データを効率的に管理・共有するための「プラットフォーム技術」や「クラウド技術」、遠隔操作（リモート制御）でのリアルタイム材料実験を実現するための「通信技術」、材料やプロセスのビッグデータを効率的に取得するための「IoT技術」、安全なデータ共有およびデータ融通を実現するための「セキュリティ技術」などがあげられる。これらの技術を材料研究へ積極的に取り込み、“新規材料の予測”だけでなく“新規材料の合成”までを一貫して効率的に行うことができる次世代のマテリアルズ・インフォマティクスに向けて材料研究を推進するべきと考えられる。

(6) その他の課題

昨今のマテリアルズ・インフォマティクスの進展によって、材料開発分野とデータ科学（機械学習）分野の技術連携は強化された。しかし、上記したその他の技術分野（ロボティクス、通信、プラットフォーム、IoT、セキュリティ）との連携はいまだ希薄なままである。

インフォマティクスを行うためのデータが少ない点は引き続き大きな問題となっている。元来インフォマティクスはビッグデータを扱うための方法論である。良質の材料データを大量に集めていくことが必要となるが、2020年6月に文部科学省、経済産業省合同の戦略準備委員会から「マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けて」という取り纏め文書が発表された。そのなかで日本として戦略的にデータを創出し、活用するための基盤、マテリアルDXプラットフォーム構想が打ち出されており、今後の動向が注目される。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|--|
| 日本 | 基礎研究 | ○ | ↗ | ・ MI 技術にかかわる論文数は増加 ・ 数多くの国家プロジェクトにMIにかかわる記載あり |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | ・ 産業界からSIP等の国プロへ参加している事例が増大 ・ MIのベンチャー企業も登場 |

| | | | | |
|----|---------|---|---|--|
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | ・ MGI 終了後も、広範囲で MI に関する基礎研究支援体制は継続 ・ MI 技術にかかわる論文数は増加 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | ・ MI のベンチャー企業の 1 つである Citrine 社が健闘 (SBIR フェーズ 2) |
| 欧州 | 基礎研究 | ○ | ↗ | ・ MI 技術にかかわる論文数は増加 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | ・ GRANTA 社の MI にかかわる活動が顕著 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | ・ MI 技術にかかわる論文数は増加 ・ 中国 MGI が進展 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | ・ MI 関連特許多数 |
| 韓国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | ・ MI 技術にかかわる論文数は増加 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | ・ ChemEssen Inc. から MI 関連特許多数 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

参考・引用文献

- 1) E. Gianchandani and M. Parashar, “Dear Colleague Letter : Request for Information on Data-Focused Cyberinfrastructure Needed to Support Future Data-Intensive Science and Engineering Research”, National Science Foundation, <https://www.nsf.gov/pubs/2020/nsf20015/nsf20015.jsp> (2020年12月21日アクセス)
- 2) Material Resource Centers, “Materials Genome Initiative”, NIST, <https://www.nist.gov/mgi> (2020年12月21日アクセス)
- 3) M. Wilkinson et al., “The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship”, *Sci Data* 3 (2016) : 160018. doi : 10.1038/sdata.2016.18
- 4) CHiMaD, “Center for Hierarchical Materials Design”, NIST, <https://chimad.northwestern.edu/> (2020年12月21日アクセス)
- 5) Cynthia Rudin, “Stop explaining black box machine learning models for high stakes decisions and use interpretable models instead”, *Nat. Mach. Intell.* 1 (2019) : 206-215. <https://arxiv.org/abs/1811.10154> (2020年12月21日アクセス)
- 6) R. Guidotti et al., “A survey of methods for explaining black box models”, *ACM Comput. Surv.* 51, no. 5 (2018). doi : 10.1145/3236009
- 7) J. Chen et al., “Learning to explain : an information-theoretic perspective on model interpretation”, *Proceedings of International Conference on Machine Learning (ICML) . PMLR* 80 (2018) : 883-892. <http://proceedings.mlr.press/v80/chen18j.html> (2020年12月)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

- 21日アクセス)
- 8) R. Sawada, Y. Iwasaki and M. Ishida, “Boosting material modeling using game tree search”, *Phys. Rev. Mater.* 2, no. 10 (2018) : 103802. doi : 10.1103/PhysRevMaterials.2.103802
 - 9) Materials Data Facility, “The Materials Data Facility (MDF)”, NIST, <https://materialsdatafacility.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 10) Materials Commons, “A site for Material Scientists to collaborate, store and publish research”, Univ. Michigan, <https://materialscommons.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 11) Globus, “10 Years of Connecting the Research Universe : Research data management simplified”, Univ. Chicago, <https://www.globus.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 12) Citrine Informatics, “The AI Platform for Materials Development”, Citrine Informatics, <https://citrine.io/> (2020年12月22日アクセス)
 - 13) FAIR-DI, “WELCOME”, FAIR-DI, <https://www.fair-di.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 14) NOMAD, “NOMAD Center of Excellence”, NOMAD, <https://nomad-coe.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 15) CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE, “MAterials design at the eXascale, European Centre of Excellence in materials modelling, simulations and design”, CORDIS, <http://www.max-centre.eu/project/id/824143> (2020年12月22日アクセス)
 - 16) Z. D. Szotek, “Ab initio (from electronic structure) calculation of complex processes in materials”, Psi-k, <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.434.8016&rep=rep1&type=pdf> (2020年12月22日アクセス)
 - 17) CECAM, “Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire”, CECAM, <https://www.cecama.org/> (2020年12月22日アクセス)
 - 18) CORDIS, “European Materials Modelling Council”, European Commission, <https://cordis.europa.eu/project/id/723867> (2020年12月22日アクセス)
 - 19) 21) EMMC, “The European Materials Modelling Council”, EMMC ASBL, <https://emmc.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 20) EMMC, “EMMO : an Ontology for Applied Sciences”, The European Materials Modelling Council, <https://emmc.info/emmo-info/> (2020年12月22日アクセス)
 - 21) Materials-Consortia/OPTIMADE, “OPTIMADE v1.0.0”, Materials-Consortia/OPTIMADE, <https://github.com/Materials-Consortia/OPTIMADE/releases/tag/v1.0.0> (2020年12月22日アクセス)
 - 22) aiidateam/aiida-optimade, “OPTIMADE RESTful API implementation for AiiDA”, aiidateam/aiida-optimade, <https://github.com/aiidateam/aiida-optimade> (2020年12月22日アクセス)
 - 23) NOMAD, “NOMAD's OPTiMaDe API implementation”, NOMAD, <https://nomad-lab.eu/prod/rae/optimade/> (2020年12月22日)
 - 24) AFLOW, “Aflow - Automatic - FLOW for Materials Discovery”, Duke Univ., <http://www.aflow.org/> (2020年12月22日アクセス)
 - 25) The Materials API, “The Materials Project”, materialsproject/docs, <https://materialsproject.org/> (2020年12月22日アクセス)

- 26) 材料データプラットフォームセンター「材料データプラットフォームセンター」国立研究開発法人物質・材料研究機構, <https://www.nims.go.jp/research/materials-data-pf/>, (2020年12月22日アクセス)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

2.5.4 フォノンエンジニアリング

(1) 研究開発領域の定義

ナノスケールの微小空間、微小時間で熱の振る舞いを理解し制御することにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現する。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノン/電子/フォトン/スピンなどの量子系の統一的理解と制御、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、などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

フォノン、電子、フォトン、スピン、マグノン、フォノン輸送、フォノンクス、フォノンニック結晶、ナノ材料、ナノスケール熱伝導、ナノスケール熱計測、時間分解サーモリフレクタンス法、TDTR、ナノ構造制御、熱電変換、熱スピン効果、スピнкаロリトロニクス、スピンゼーベック効果、スピンペルチェ効果、トポロジカルフォノンクス、熱環境発電、エネルギーハーベスティング

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

Society 5.0の実現に向けて、大規模情報処理・データストレージやハイパフォーマンスコンピューティングの需要が伸び続け、デバイスやシステムに対するミクロスケール・ナノスケールでの熱マネジメントの重要性が増してきている。デバイスレベルでは、バルク材料中の熱拡散を記述するフーリエ則が成立しない寸法の構造で構成されることが多いため、熱伝導を担う熱フォノンの弾道的輸送特性や異種材料間の界面熱抵抗を考慮して熱伝導を議論することが必須となる。また、熱電変換材料開発においても、フォノンエンジニアリングは90年代に始まった構造設計論的アプローチの中核技術となっており、熱フォノンスペクトルを考慮したマルチスケールデザインによって高性能化を実現している。フォノンエンジニアリングは、このようなメソスケールにおける特殊な熱伝導を理解し、ナノ構造化によって制御を可能にする。そのため、放熱問題の緩和に留まらず固体中のより高度な熱流制御技術や熱マネジメント技術、熱電変換応用などを実現することにより、現代および将来のスマート社会を支えると期待できる。その期待に応えるためにも、理論・計測技術・実験・インフォマティクスの連携により、新たな物理・機能探索、材料開発、制御手法開発を進めていくことが重要になっている。このように、フォノンエンジニアリングはナノスケールの熱伝導理解・熱制御にかかわる様々な技術領域にまたがるが、ここでは、フォノン伝導の制御技術、ゼーベック効果やスピンゼーベック効果などを用いた熱電変換材料・デバイス技術、熱伝導計測技術を中心に紹介する。

[研究開発の動向]

熱電材料の高性能化を実現するためには、電気を流すが熱をできるだけ遮蔽することと、高い出力因子の実現（高電気伝導かつ高ゼーベック係数）が必要である。前者については、ナノスケールでの熱伝導の理解と制御が大きな鍵となることが、1990年代後半以降広く理解されるようになった。電気伝導を損なわずに熱伝導を低減するためには、フォノンの選択的な散乱が必要である。例えば、電荷キャリアとフォノンの平均自由行程の差を利用して、フォノンの長さスケールに対応する種々のナノ・マイクロ構造を材料に作り込むことでフォノンエンジニアリングを実現し、2000年代の中盤以降、熱電性能の高性能化が図られてきた。また、ナ

ノ・ミクロ構造制御のほかにも、カゴ状結晶構造を有するスクッテルダイトやクラスレートなどにおいて、内包する原子のラトリング現象により、音響フォノンが効果的に散乱され、2000年代から新規な高性能熱電材料が見出されてきた。一方、後者の高い出力因子の実現に向けては、フォノンエンジニアリングほど広範囲に有効な出力因子の高性能化原理は最近まで見出されておらず、重要な課題として残されている。熱電材料の研究開発に関しては、指標として論文数などの推移を見ても、高性能材料開発、新原理提案などで、1990年代から2000年代中盤まで、米国と日本が筆頭で世界の熱電研究を先導し、日本も独自の低環境負荷の酸化物熱電材料開発などでリードしていたが、2000年代中盤以降、米国を先頭に欧中韓も追って国家プロジェクトレベルの大型予算が投入され、それらの国での研究人口が大幅に増大し、研究活動のレベルアップが達成されている。

フォノン結晶は、フォノンに対する人工的な周期構造であり、この構造を用いたフォノン輸送制御を行う場合、波動的な性質を利用する手法と弾道性を利用する手法がある。多くの場合、前者は比較的狭い周波数スペクトルを持つ音響波や弾性波にバンドエンジニアリングを用い、後者は熱フォノンのような広いスペクトルを持ち、周波数が高いフォノンに対して微細構造による散乱で輸送特性の制御が行われてきた。フォノン結晶の本来の特性を生かしたフォノンクス分野では、歴史的には比較的大きな寸法でフォノン結晶が作製可能な前者に関する研究が多かったが、近年では、量子情報キャリアとしてのフォノンの活用が検討されている。また、熱を扱うような熱フォノンクスでは、厚さ数nmの超格子構造であれば室温でも熱伝導の低減が可能であることが示されており、フォノンクスは熱制御にも活躍の場を広げつつある。弾道性を用いる場合は、コヒーレンスを必要としないため、活用できる温度帯域や構造寸法が広く低コストで作製できることから、実用的な熱マネジメント技術への期待に応える研究が増加している。欧米中にシミュレーションを中心とした研究グループが多く存在し、国内では北海道大学と東京大学などが研究を進めている。フォノン結晶によるバンドエンジニアリングは、室温における効果の発現に超微細周期構造が要求されるが、現在主流であるフォノンの弾道性を用いた手法では成しえない新機能や性能を実現する可能性を秘めており、酸化物半導体や二次元層状物質を用いた超格子構造や、トポロジカルフォノンクスを用いたフォノン輸送制御も研究が進展している。

スピンゼーベック効果の発見以降、日本・米国・欧州を中心に、多くの物性物理・磁性分野の研究者がスピнкаロリトロニクスに関する研究を開始した。特に、ドイツで2010年に大型プロジェクト「SpinCaT」が立ち上がったことを皮切りに、スピнкаロリトロニクス分野の研究者人口が爆発的に増加した。初期の研究の大半はスピンゼーベック効果の発現メカニズムの解明をめざしたものであり、ここ10数年間の基礎研究により、スピン流-熱流変換現象に関する物理的理解は大きく進展した。近年では、微細加工技術や光学・高周波測定技術などを駆使した、熱-スピン変換現象のより微視的な原理解明が進められている。スピンペルチェ効果やスピネルンスト効果（2017年に初観測）などの相次ぐ新現象の発見に伴って研究対象も広がりを見せており、物理としてのスピнкаロリトロニクスは成熟期に入りつつある。スピンゼーベック効果の熱電変換応用をめざした材料探索・開発もさかんに進められてきた。磁性絶縁体材料を用いたスピンゼーベック効果の物質依存性測定により、スピン流-熱流変換はあらゆる磁性材料中に存在しうる普遍的な現象であることが示された。近年では、トポロジカル物質（ワイル磁性体）・ホイスラー合金・永久磁石などさまざまな物質・材料においてスピнкаロリトロニクス現象の開拓が進められており、典型的な強磁性金属材料よりも1桁以上大きな異常ネルンスト効果が相次いで見出されるなど、顕著な成果が得られている。スピン自由度を利用した新原理熱電変換素子のパワーファクター向上に向けた取り組みとしては、材料探索のみならず、ナノ～マイクロメートルスケールで緩和して消失してしまうスピン流の効果をマクロスケールで発現させるためのバルクコン

ポジット材料の試作なども報告されている。日本の企業では、スピン駆動熱電素子の熱流センサ応用をめざして、素子の大面積化・フレキシブル化などが進められている。「熱エネルギー制御」や熱電変換をめざした取り組みとして、日本でJSTのERATO、CREST・さががけ、未来社会創造事業や、NEDOの先導研究プログラム「未踏チャレンジ2050」、「エネルギー・環境新技術先導研究プログラム」などで研究が進められているが、基礎原理実証が始まった段階である。

時間領域サーモフレクタンス法 (Time-Domain-Thermoreflectance: TDTR) は、ナノスケールの材料や界面における熱物性の計測において、デファクトスタンダード的な位置を占め、材料開発や物性研究において欠かすことのできないツールとなっている。米国に比べて国内における普及は遅れていたが、ここ数年来の国内におけるフォノンエンジニアリング分野の活性化と歩調を合わせて大学や研究機関が導入を進めた結果、TDTR法が関係する研究発表は、その数と質の両面において充実してきた。「Thermoreflectance」をトピックに含む全世界の学術論文数の推移をみると、2000年以前は年間10報程度で推移していたものが、以後は直線的な増加に転じ2018年には120報/年まで増加した。これは2000年前後を境に、世界的な潮流としてTDTR法の基礎開発フェーズが完了し、TDTR法を利用した応用研究 (物性値評価等) フェーズへと移行したと推測される。国別の関連論文数 (1990~2020年間) では、TDTR発祥の地である米国が800報近くとトップを走り、日本は2番手 (約180報) として存在感を有するが、中国 (約110報) に追い上げられている状況である。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

国内のアカデミアの動きとして、2016年に応用物理学会に新設された「フォノンエンジニアリング」セッションが定着し、フォノンエンジニアリング研究グループも3年間の活動を高く評価され研究会に昇格した。毎年、研究会が開催され、優秀な発表を行った学生を表彰するなど、人材育成とネットワークが活発に行われており、本研究領域の研究力強化につながっている。また、2018年に応用物理学会に設立された「エネルギーハーベスティング研究グループ」も、フォノンエンジニアリングを利用した熱電発電をカバーし、産学連携によるスマート社会化を支える環境発電システムの構築に貢献が期待される。日中韓の熱電学会が起点となり、地理的に近いアジアの国々の連携や若手育成の促進のために2016年に発足したアジア熱電連盟 (AAT) は、毎年サマースクールおよびアジア熱電国際会議 (ACT) を開催し、タイ、台湾、マレーシア、インドも熱電学会を形成してメンバーに加わり、熱電研究が特に活発なアジアの研究者の交流や人材育成への貢献が注目される取り組みである。

熱電材料の高性能化のためにフォノンの選択的な散乱を実現するための理解がかなり深まってきており、実験的に欠陥・ナノ構造をより精緻に効果的に制御する技術の進展がある。欠陥・ナノ構造に関して理論的な計算を実験に活用する例も増えている。例えば、自己補償効果による空孔の形成の制御、置換ドーピングによる欠陥の形成エネルギーの制御、原子間サイトへのドーピングによる動的なフォノン散乱機構の創出などにより、効果的なフォノン散乱が実現し、熱電材料の高性能化が図られている。電荷キャリアの散乱機構をより詳細に解明して制御しようとする試みも増えている。温度域により、不純物イオン散乱、極性光学フォノン散乱、粒界散乱、音響フォノン散乱、の諸機構を分析し、当該材料の高性能化を実現するために、ドーピングや粒径制御などによる散乱機構の最適化などが行われている。また、多孔材料は熱電性能が低いと思われてきたが、複数の異なる材料系において、多孔生成による高性能化が得られるようになってきている。融点の低い析出物や構成元素によって、比較的容易に多孔を生成させることが可能なために、今後さらに幅広く活用

されることが期待される。ナノコンポジット化による高性能化に関しても、以前より変調ドーピングやenergy filteringなどが提唱されていたが、特に後者の高性能化の例が最近数多く見受けられる。

出力因子の増強（電気伝導率とゼーベック係数のトレードオフの凌駕）に関しては、バンド構造の制御に進展があった。有効質量が軽く移動度が高いキャリアのバンドの縮重度が大きくなればゼーベック係数が増強され、高い出力因子が得られることが提唱されていたが、最近ではドーピングなどによりバンドの縮重度の増大を促し、高性能化が実現した例（GeTe、 Mg_3Sb_2 など）が増えてきており、「バンドエンジニアリング」によって熱電材料の高性能化を進められるようになってきた。

より斬新な高性能化の新原理を発掘しようとする研究においても最近顕著な成果があらわれた。1つには、磁性を活用して熱電材料を高性能化する試みである。以前からマグノンドラッグなどが知られているが、磁気秩序に依存し低温でのみ有効であったりした。そこで、新規な試みとして、磁気秩序に直接依存しない、室温など比較的高温でも有効な電荷と磁性イオン間の磁気相互作用を活用して熱電性能を向上させた、新規な高性能磁性半導体熱電材料が得られている。非常に顕著な展開として、 Fe_2VAl 系ホイスラー合金において、ある条件下での薄膜化によって、室温近傍で従来のチャンピオン材料である Bi_2Te_3 系材料の10倍という極めて巨大な熱電出力因子が発生することが示された。超高性能の詳細な起源は解明中であるが、バルクで存在しえない準安定状態の電子状態によると考えられている。磁性も誘起されており、その役割の解明も急がれているが、準安定状態を活用する潜在能力の高さが示され、今後の研究開発が期待される。本質的に低熱伝導率を有する系や機構の発掘が進んでおり、不对電子や共鳴ボンディングによる非調和性の強い系のほか、液的（liquid-like）で低熱伝導率を発現する Cu_2Se などの超イオン伝導体の研究が活発に行われている。応用には致命的と思われていたエレクトロマイグレーションについても、モジュールの設計やイオンを遮蔽する界面の活用などの対策が提案されている。

理論的な取り組みに関しては、現象論的なボルツマン方程式を超えるべく、久保の線形応答理論からの熱電現象の微視的な理解が進み、電子フォノン相互作用、電子相関などのゼーベック係数への影響をモデル的に解析できる理論的体系の構築が進んでいる。一方で、マテリアルズ・インフォマティクスの活用も増えて、有効な記述子（descriptor）の発掘や高性能な熱電材料の予測だけでなく、キャリア濃度の最適化に重要なドーピングの許容具合などの予測を取り入れている例もある。

全体的な熱電材料の研究動向として、以前に比べて応用をより意識した動きが目立つ。例えば、材料開発の論文において平均ZT（使用すると想定される温度域の温度差にわたってZTの平均を取ったものであり、実効的なZT）の値や1対でも試作の熱電素子の性能評価の報告を含める論文が数多くなった。熱電物性だけでなく、実用化への道筋を示すことの重要性が浸透してきている。ウェアラブルなどIoT動作電源をめざしたフレキシブルな熱電材料・デバイスの研究開発が非常に増えてきた。無機材料で Ag_2S など材料自体がフレキシブルなものも見つかっているが、ポリマー系熱電材料、無機・有機ハイブリッド熱電材料の研究開発に拍車がかかっている。また、冷却を含めて、室温近傍の応用をめざして、無機熱電材料のピーク性能温度を中高温からより低温にバンド構造制御でシフトさせようとする研究も増えている。

マグノンとフォノンの相互作用（磁気弾性相互作用）を介した熱流-スピン流変換の実現や、マグノンの熱ホール効果に関する実験・理論研究の進展など、スピントロニクスとフォノンエンジニアリングの融合の種となりうる研究は多数報告されている。また、トポロジカル物質を用いた熱電変換・熱スピン変換研究は、日本のみならず世界的に研究されており、物性物理学における1つのトレンドとなっている。これらの研究により異常ネルンスト効果の発現機構や材料設計指針が明らかになり、基礎物性開拓から応用研究に今後数年間かけてシフトしていくことが予想される。2018年に報告された量子熱ホール効果によるマヨラナ準粒子の観測を

皮切りとして、熱エネルギー輸送から量子力学的な物性を探る研究も進められている。これに伴って、量子物質・二次元物質などを中心に、ナノスケールでの熱・フォノン輸送やスピンとフォノンの相互作用に関する研究が加速していくと期待される。

ナノスケール熱物性の評価のためのTDTR法の基礎技術は洗練が進み、単純に薄膜の熱物性値（熱伝導率、熱拡散率）を計測することに対しては高い信頼性を有するようになってきている。さらに利用範囲を拡大していくための最近の新たな試みを以下に示す。磁気光学特性の熱応答性をKerr効果として利用したTR-MOKE (Time-Resolved Magneto-Optic Kerr Effect) 法は、TDTR法のトランスデューサ膜（レーザによる加熱と計測を行うために試料膜上に施される金属膜）の代わりに、極薄の磁性膜を用いて過渡的な熱応答を測定する。レーザ等の構成はTDTRとほぼ同一であるが、測定は磁性膜での反射後のプローブレザの偏光回転（Kerr効果）により行う。厚さ20 nm以下の磁性膜を用いることができ、トランスデューサ膜（～70 nm）を用いるTDTRに比べて感度を向上させることができる。TDTR法による熱伝導率と比熱の同時決定の試みも一定の成功を見ている。TDTR法では、加熱パルス列に周期変調が加えられており、周期加熱による温度応答も信号に内包している。この変調周波数を変えることで、TDTR計測時の熱浸透率、熱拡散率、比熱容量の各感度を調整することが可能であり、これを積極的に用いることで熱伝導率と比熱容量を同時決定することができる。無機有機多層構造体やポリマー膜など比熱の予測が困難な物質に対して高い効果を示した。TDTR法を用いた熱伝導の異方性計測について、複数の提案がなされた。大別すると、①ポンプに可変の照射スポット径を用いるもの（深さ方向と面内方向との異方性）、②ポンプとプローブのビーム照射位置をオフセットするもの（面内の方位に対する異方性）、③ポンプのスポットを高比率の楕円形状とするもの（面内の方位と深さ方向の双方の異方性）がある。ただし、いずれも解析が複雑化することや、極小のレーザスポットのサイズと位置、形状の制御が必要となるため、これら装置要因に起因する不確かさには十分注意する必要がある。

【注目すべき国内外のプロジェクト】

米国では、エネルギー材料研究に関する政策的な変遷も関連している可能性があるが、2000年中盤から走っていたDOEのEnergy Frontier Research Center (EFRC) の3つのプロジェクトは、第2期まで更新されたMITのプロジェクトS3TECも含めて全て終了する。このため、大規模な拠点的な新規プログラムは無いと思われるが、Northwestern大、Houston大など多くのアクティビティーの高い研究室があることから、今後も多くの成果が出されると考えられる。最近の傾向として、中高温のターゲットから（自動車応用の大型のDOEプログラムも終わっており）、冷却応用を含めて、室温近傍のIoT用の熱電材料研究開発に研究がシフトしており、本分野での激しい競争が続くと考えられる。フレキシブルなどのIoT用の熱電材料・デバイス開発に関して、特に、Georgia TechやVirginia Techなどで、実用化をめざした大型の取り組みが行われている。NASA JPLは、次世代のRTGに使用する材料としてスクッテルダイトの長時間の耐久性テストなどを完了しており、スクッテルダイト熱電モジュールを探査機に搭載する準備を進めている。

欧州では、各国政府や自治体の大きな予算に加え、THERMOMAG、NANOHIGHTECHなどEUの複数の大型熱電プロジェクトが2000年代後半から走り、熱電研究人口と活動の大幅増をもたらした。2019年にCNRSのNAME (Nanomaterials for Energy Applications) という5年プロジェクトが始動し、ERC (European Research Council) のファンディングも継続している。大型で包括的な材料開発などのプロジェクトがいくつか終了したが、現在でも、ERCから数億円規模の熱電予算のプロジェクトが複数ある（ドイツのトポロジカル熱電材料プロジェクトなど）。Horizon 2020では、熱電変換に関する多数のプロジェクトがあり、数年前は材料開発など基礎的なプロジェクトが多かったが、応用志向のプロジェクトが増加してきた。

HarvestALLやFAST-SMARTなどの環境発電プロジェクト、HYTECやHYPERTHERMなどの有機材料を用いた熱電プロジェクト、モデリングからデバイスまでをめざすHYTECプロジェクトがある。目新しいプロジェクトとしては、二次元材料を用いた量子熱電プロジェクトQTherm-2Dが始動した。

ドイツにおいては、EU関連の大型熱電プロジェクトのほかに、独自に2011～2015年の約30億円規模のプロジェクト「Industrieorientierte Fördermaßnahme ThermoPower」を筆頭に、現在でもそれより小規模であるが、German Science foundation (DFG)やGerman Ministry of Science Education (BMBF)から熱電研究にかなり潤沢な予算が配分されている。フランス固有の大型のプロジェクトとしては、高温熱電材料のHIGHTHERMなどがあり、複数のFrench National Research Agency (ANR)の大型熱電プロジェクトが走っている。英国では、The Engineering and Physical Sciences Research Councilにおいて、熱電関連の個別のプロジェクトが現在約50走っている。

中国においては、総額で極めて大きな熱電予算が投入されており、研究者数では世界トップになったと考えられる。例えば、基礎熱電材料開発には2千人以上の国研・大学の研究者がおり、中国材料学会 (Chinese Materials Research Society) の中で、中国熱電学会 (Chinese thermoelectric society) がもっとも大きな組織になっている。大きい研究拠点としては、Wuhan工科大、SICCAS、精華大、Beihang大、SUSTEC、上海大、Zhejiang大などがあり、熱電研究がさかんに行われている。予算に関しては、材料開発の基礎研究はMinistry of Science and Technology (MOST) やNational Natural Science Foundation of China (NSFC)、実用化研究は、National Key Research and Development Program of China で毎年大型の予算が熱電に充てられている。公表されているMOSTの最近の比較的大きなプロジェクトは3億円～5億円の規模で、例えば、マテリアルズ・インフォマティクスを活用して新規構造、新規材料を探索する非常に基礎的なプロジェクト (Thermoelectrics based on materials genome [2017-2021])、室温近傍の高性能材料の探索研究 (Room-temperature TE (targeting ZT=2.0) [2019-2023])、磁性熱電材料の開発研究 (Research on high-efficient, all-solid-energy-conversion, thermoelectromagnetic novel materials and devices [2020-2024]) などがある。NSFCにおいても、「Thermoelectrics and energy materials」の領域で、さらに大型のプロジェクトが走っている。この他に、フレキシブル熱電材料やマイクロ冷却デバイスなどについても重点的な開発が行われている。また、National Key Research and Development Program of Chinaは、～8億円 (5年以内) の大型の熱電実用化プロジェクトを複数走らせている。

韓国においては、基礎の材料開発に比べて、実用化研究に比重がある。研究機関としては、Yonsei大、Kyung Hee大、Seoul大など数多くの大学、KICET、KERI、KAISTなどの国研で熱電研究がさかんに行われている。アカデミア向けの公的な競争的資金では、大小約80件の熱電プロジェクトがある。直近の1年間の集計で総額約24億円/年、2年半の集計で総額約70億円の予算となっており、国の人口を考えると熱電予算規模が非常に大きい。約7割がモジュール関連の研究で材料開発が約3割である。室温近傍の熱電材料・デバイス開発が主流であり、ナノ構造材料を含めて約3分の2のプロジェクトがそこにフォーカスされている (全体の約3分の1のプロジェクトはBi₂Te₃系材料・デバイスに関連)。また、企業が関係した予算プロジェクトはこの数倍の予算であり、産学官の連携が活発である。

日本においては、スピンと電気・熱・電磁波・光などさまざまなエネルギーとの関わりを調べる基礎研究が、2014年度から2019年度まで科学研究費補助金・新学術領域研究「ナノスピン変換科学」において精力的に進められた。2015年からJSTのCREST・さきがけ複合領域「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」において、複数の熱電関連の課題があり、熱電のエネルギーハーベスティングの実用化に向けた高性能材料・デバイスで有望な成果が得られている。また、複数のCREST SU (ステップアップ) 課題が、

2019年から選定されて並行して進められている。2017年からのCREST「ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出」、さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」においては、フォノンエンジニアリングに関する課題が多数進められている。また、2019年の年末から、センサ用独立電源として活用可能な革新的熱電変換技術の課題が、未来社会創造事業の大型プロジェクトで動き出している。高性能熱電材料開発の先端的な技術だけでなく、産業・大量生産に合致したプロセスによる発電モジュールの開発、モジュール関連の要素技術や熱管理技術の開発を進めて、熱電発電の広範囲実用化をめざしている。経産省では未利用熱を削減する大型プロジェクトが産総研と企業中心に走っており、モジュール関連技術などの開発を進めている。

(5) 科学技術的課題

ナノスケールにおけるフォノン輸送と熱伝導の物理探求および制御技術は、さまざまな材料、ナノ構造での系統的な実験結果の蓄積とシミュレーション技術の進展に加え、インフォマティクスの活用によって、着実に進展している。しかし、解釈やシミュレーションによる再現が困難な実験データが得られる場合は少なくない。ナノ構造では、構造パラメータに加えて界面や表面の性質、形状、欠陥などに依存する散乱がフォノン輸送特性に大きな影響を与えることが知られており、フォノンエンジニアリングにおいて表面状態や欠陥の制御技術が重要な技術的課題の1つである。

熱電材料の材料開発側面に関しては、ホイスラー系薄膜の準安定状態やCu₂Se系などの超イオン伝導体やイオン化ゲルなど、広くとらえると非平衡的な状態を活用して、熱電の超高性能、高性能を発現させる新規な試みで最近顕著な成果が出ており、こうした準安定や非平衡的な系を系統的に開発する研究開発の仕組みや理論的なツール・方法論などの構築が望まれる。ナノコンポジット材料も、単一の材料の熱電物性を凌駕する方法として、変調ドーピング、energy filtering、粒界に金属相を入れ込んだナノコンポジット化などで熱電性能の高性能化が示されているが、このような熱電ナノコンポジット材料の開発をマテリアルデザインへ昇格させることが重要である。すなわち、より高い制御性で精緻なナノコンポジット構造の作製手法の開発、マルチスケールな第2相が存在する場合の計算手法の開発などが必要である。また、熱電高性能化の簡易なフォノンエンジニアリング手法としてナノ多孔を導入する方法がある。例えば、Bi₂Te₃系材料の代替材料として研究が進んでいるMg₃Sb₂系においてMgに起因すると思われる多孔が散見され、これが高性能の要因の1つと考えられているが、十分な理解や制御ができていない。上記のナノコンポジット同様、ナノ多孔のより精緻な作製手法、およびシミュレーション方法の開発が待たれる。

スピнкаロリトロニクスは毎年のように新現象が発見されている稀有な分野であり、領域誕生以来10数年でその学理形成は大きく進展した。しかし、熱-スピン変換現象のメカニズムの本質は解明されてきたものの、実験結果と定量的に比較・検証できる理論モデルが未だ構築されていない点が課題である。ゼーベック効果にもとづく熱電変換能を高めるための原理として、長らく量子効果や低次元化が主要な研究トピックとなり成功を収めているが、スピнкаロリトロニクスにおいてはこのような実験報告は見当たらない。各種スピнкаロリトロニクス現象の量子効果・低次元化の影響を明らかにすることは、基礎物理・工学応用の両面において重要であろう。実験技術が成熟しているスピンゼーベック効果、異常ネルンスト効果に関しては、性能指数・熱電発電効率の評価基盤が確立されてきたものの、モジュールに対する適用や、実際の利用形態における性能評価にはいたっていない。熱エネルギー制御技術としての応用をめざすためには、熱エネルギー輸送効率の評価基盤や熱設計指針も必要となる。

TDTR法に関しては、コロラド大のJianらが2018年に著したTDTR法のチュートリアルで、以下の5項

目の課題があげられている。1) 粗面の測定 (TDTR法ではサンプル表面が光学的に平滑である必要があり、表面RMSとして15nm以下であることが基準)、2) 高周波TDTR法 (深さ分解能の大幅な向上、非常に薄い薄膜の熱伝導率測定、さらに高い値の界面熱伝導率の測定、およびより広い範囲にわたるフォノンダイナミクスの計測に利点)、3) トランスデューサ膜の問題 (金属トランスデューサを使用しない直接TDTR測定について大幅な進歩が必要)、4) フォノン熱輸送による解析 (より厳密な方法として、フォノンボルツマン輸送方程式にもとづいてTDTRデータを解析)、5) 温度範囲の拡大 (およそ30~600 Kに制限されているTDTR法の適応温度範囲を拡大)。

(6) その他の課題

これまでの国内のさまざまな研究開発施策により、熱電材料・デバイスやフォノンエンジニアリングの研究側面における取り組みが充実しており、2000年代中盤以降一時期バブル的な資金投与された米欧中韓と対抗、リードできる競争力を日本が有するようになってきた。フォノンエンジニアリングや熱電環境発電が普及し産業や社会に貢献するためには、キラーアプリの探索に一層の努力が必要である。研究者のボトムアップ的視点に加え、企業だけでなく自治体や起業家などを巻き込んだ異業種、異分野の幅広い人材を交えたオープンイノベーションの仕組みや機会が望まれる。スピнкаロリトロニクス研究を例にとると、磁性・スピントロニクス分野だけでなく、エレクトロニクス・材料・伝熱工学などさまざまな分野の専門家、および産業界が結集・連携して、その応用対象やデバイス・システムの設計指針から検討を進めていく必要がある。一方、熱電発電の広範囲な実用化のためには、初期フェーズでコスト側面の圧力を緩和することで、企業の積極的な参画を促したり、新興マーケットの創出を促したりするような適切な政策の支援も重要と考えらえる。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|--|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> ・ Society 5.0の実現へ向けたIoT熱環境発電開発の必要性により、異分野からの研究者の新規参入で熱電の研究者は増えている。 ・ ファundingにおいても、2015年後半からJSTやNEDOでさまざまなプロジェクトが推進されている。 ・ 元素戦略的な材料に関する基礎研究や、磁性 (磁気相互作用、スピンゆらぎ、スピンゼーベック、異常ネルンスト等) などを活用する日本発の新原理、顕著な成果・発展がみられる。 ・ 応用物理学会などで、フォノンエンジニアリングやエネルギーハーベスティングの活動が活発化し、ネットワーク、人材育成が加速している。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> ・ 経産省の未利用熱を削減する大型プロジェクトが産総研と企業中心に走っており、モジュール作製や評価などに関する実用化技術の開発が進んでいる。 ・ 薄膜の熱電性能評価の標準化の取り組みも始まっている。 ・ NEDO先導研究プログラム「未踏チャレンジ2050」、「エネルギー・環境新技術先導研究プログラム」でスピンを利用した熱電変換に関する研究が開始された。 ・ JSTにおいて、IoTセンサ用の自立電源を開発する未来社会創造事業大型熱電プロジェクトがスタートしている。 ・ エネルギーハーベスティングをキーワードに販売開始する動きもあり、コンソーシアム活動なども活発である。 |

2.5 俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

| | | | | |
|----|---------|---|---|---|
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↘ | <ul style="list-style-type: none"> 研究者人口が多く、材料開発、計測技術、理論・数値解析など幅広くカバーしており、二次元材料の作製・熱計測で新展開がみられる。 新規な原理（低次元量子効果、フォノンの選択散乱、共鳴準位、変調ドーピング、バンドの縮重度増強など）などを提唱してリードしてきた側面があるが、エネルギー政策的な変遷もあり、熱電関連EFRCなどの大型プロジェクトが終了する。 複数の拠点形成型事業により、スピнкаロリトロニクスの研究が大学を中心に精力的に進められてきた。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> 探査機のRTGで長年の実装研究開発実績を誇るNASA JPLは、次世代機へ向けたスクッテルダイトやYb₁₄MnSb₁₁系などの新規材料のモジュール作製技術、長時間の性能試験、信頼性試験と総合的な応用研究の開発能力を持っている。 Georgia TechやVirginia TechなどでフレキシブルなどIoT用の熱電発電デバイス開発の比較的大きな取り組みがある。 Marlow、Gentherm (元Amerigon) など、主に熱電冷却用で歴史的に市場を確保した企業があり、熱電ベンチャー企業も建ちやすい土壌がある。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> EUからのERC、Horizon 2020の大型予算プロジェクトのほかに各国の個別の熱電プロジェクト予算（ドイツDFG、BMBFやフランスANRなど）がある。例えばスピнкаロリトロニクス関係では、ERC Synergy Grants（研究費 約10Mユーロ）でのスピン流-電流変換とスピнкаロリトロニクスを主軸とした大型プロジェクト（2014～2020年）や、SPINBEYOND（2017～2022年）などがある。 ナノスケール熱伝導においては、S_{Th}M、IR SNOM、ラマンなどの計測技術が高度化し、理論研究も発展がみられる。 eMRS内のセッションとEurothermおよびワークショップ、スクールが高頻度で開催されており、活発である。 フランスでは大きな国研のラボ3つ、CRISMAT、Grenoble (CEA)、Montpellierを筆頭にかなり機関数が多く、材料開発研究が特に活発である。 ドイツでは、材料開発研究では複数のMax Planck研究所やLeibniz研究所などが先導している。 英国では、Manchester大やQueen Mary U. London、Reading大を中心に数多くの大学で研究を進めており、熱電関連予算プロジェクトが約50個走っている。 イタリアでも熱電学会を立ち上げ、熱電研究に従事する大学・国研が活発に増えている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> Horizon 2020で応用研究に関するプロジェクトが多数採択されている。 ETCやTHERMINICといった応用をカバーする国際会議やCNRSの熱電ネットワークが活動を継続している。 熱電環境発電では、ERC 予算配分があり、スタートアップ企業も存在する。 モジュール開発に関しては、例えば、フラウンホーファー研究所やGerman Aerospace Center (DLR) で国研ならではの基盤的な研究開発が引き続き行われている。 中高温の自動車応用メインから、実用化ターゲットがIoT用発電など多岐に渡りはじめ、さまざまな業態の大企業（例えばフランスTotalやSolvayなど）における熱電研究が始まっている。 英国では InnovateUK の大規模なプロジェクトで、大型の工場廃熱発電と小型のウェアラブル熱電発電の両極端にフォーカスしている。 |

| | | | | |
|----|---------|---|---|---|
| 中国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> • MOST、NSFCなどから大きな熱電予算投下がされており、研究者数も世界トップとなっている。 • Wuhan工科大、SICCAS、上海大、精華大、Beihang大、SUSTEC、Zhejiang大などで大型プロジェクトの下で熱電研究がさかんに行われている。 • フォノンエンジニアリング、バンドエンジニアリング、などを活用して材料最適化して高性能化するスピードが随一であり、Ag₂Sなどのフレキシブル無機材料や超イオン伝導体熱電材料など新規な話題も多く出されている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> • 実用化研究に関しては、National Key Research and Development Program of Chinaが、～8億円（5年以内）の大型熱電プロジェクトを複数走らせている。 • 国研・大学での機械的性質や電極コンタクト、モジュール作製・評価などのモジュール開発の研究も増えており、応用に必要な最適化研究も迅速に行える大きなマンパワーも備えている。 • 中国の熱電専門企業は、FerroTecを筆頭にペルチェの熱電冷却の企業の数は非常に多いが、最近、Thermonamicなどのように熱電発電のモジュールやシステムも提供する企業が増えている。 |
| 韓国 | 基礎研究 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> • 大学・国研向けの熱電関係の予算は直近で約80件で総額約24億円/年（直近2.5年で総額約70億円）と潤沢にある。 • 室温近傍の用途で、熱電冷却やIoT用熱電発電材料・デバイスの研究開発に大きな重点がある。 • Yonsei大、Kyung Hee大、Seoul大など数多くの大学、KICET、KERI、KAISTなどの国研などで研究がさかんに行われている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> • 基礎の材料開発に比べて、応用研究に比重がある。企業が関係した研究プロジェクトの資金も潤沢にある。 • 大学のみならず、KERIやKRISSなどで研究が継続している。 • LG Innotek などから熱電変換モジュールが販売され、ThermorealがVRエンタテインメント分野にフレキシブル熱電変換デバイスを採用するなど、新しい市場を開拓する動きがみられる。 • 大学発ではフレキシブルでウェアラブルな発電デバイスの研究開発が活発に発表されており、KERIなどの国研では、材料開発からモジュール作製、発電評価の一環とした研究開発をできる体制を有している。 • 産学官の連携研究が活発。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

・複雑系材料の設計・プロセス (ナノテク・材料分野 2.5.7)

参考・引用文献

- 1) T. Mori and S. Priya, “Materials for energy harvesting : At the forefront of a new wave”, *MRS Bulletin* 43, no. 3 (2018) : 176-180. doi : <https://doi.org/10.1557/mrs.2018.32>
- 2) K. Biswas et al., “High-performance bulk thermoelectrics with all-scale hierarchical architectures”, *Nature* 489, no. 7416 (2012) : 414-418. doi : [10.1038/nature11439](https://doi.org/10.1038/nature11439)
- 3) K. Koumoto and T. Mori, *Thermoelectric Nanomaterials : Material Design and Applications*, Springer Series in Materials Science (Heidelberg : Springer, 2013).
- 4) Z. Liu et al., “Nano-microstructural control of phonon engineering for thermoelectric energy harvesting”, *MRS Bulletin* 43, no. 3 (2018) : 181-186. doi : <https://doi.org/10.1557/mrs.2018.7>
- 5) J. Qiao et al., “Tailoring Nanoporous Structures in Bi₂Te₃ Thin Films for Improved Thermoelectric Performance”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 11, no. 41 (2019) : 38075-38083. doi : <https://doi.org/10.1021/acsami.9b13920>
- 6) T. Mori, “Novel Principles and Nanostructuring Methods for Enhanced Thermoelectrics”, *Small* 13, no. 45 (2017) : 1702013. doi : <https://doi.org/10.1002/small.201702013>
- 7) J. -B. Vaney et al., “Magnetism-mediated thermoelectric performance of the Cr-doped bismuth telluride tetradymite”, *Mater. Today Phys.* 9 (2019) : 100090. doi : <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2019.03.004>
- 8) 森孝雄, 辻井直人 「磁性元素を用いた新規熱電材料の開発」『応用物理』88巻4号(2019) : 252-256. doi : https://doi.org/10.11470/oubutsu.88.4_252
- 9) B. Hinterleitner et al., “Thermoelectric performance of a metastable thin-film Heusler alloy”, *Nature* 576 (2019) : 85-90. doi : [10.1038/s41586-019-1751-9](https://doi.org/10.1038/s41586-019-1751-9)
- 10) M. Ogata and H. Fukuyama, “Range of Validity of Sommerfeld-Bethe Relation Associated with Seebeck Coefficient and Phonon Drag Contribution”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 88, no. 7 (2019) : 074703. doi : <https://doi.org/10.7566/JPSJ.88.074703>
- 11) X. Song et al., “Grain Boundary Phase Segregation for Dramatic Improvement of the Thermoelectric Performance of Oxide Ceramics”, *ACS Applied Materials & Interfaces* 45 (2018) : 39018-39024. doi; <https://doi.org/10.1021/acsami.8b12710>
- 12) I. Petsagkourakis et al., “Thermoelectric materials and applications for energy harvesting power generation”, *Sci. Tech. Adv. Mater.* 19, no. 1 (2018) : 836-862. doi : <https://doi.org/10.1080/14686996.2018.1530938>
- 13) J. Mao et al., “High thermoelectric cooling performance of n-type Mg₃Bi₂-based materials”, *Science* 365, no. 6452 (2019) : 495-498. doi : [10.1126/science.aax7792](https://doi.org/10.1126/science.aax7792)
- 14) Run Hu et al., “Machine-learning-optimized aperiodic superlattice minimizes coherent phonon heat conduction”, *Physical Review X* 10, no. 2 : 021050. doi : [10.1103/PhysRevX.10.021050](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.021050)
- 15) Puqing Jiang, Xin Qian and Ronggui Yang, “Tutorial : Time-domain thermoreflectance (TDTR) for thermal property characterization of bulk and thin film materials”, *J. Appl. Phys.* 124, no. 16 (2018) : 161103. doi : <https://doi.org/10.1063/1.5046944>

2.5.5 トポロジカル材料

(1) 研究開発領域の定義

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す研究開発領域である。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ている。

(2) キーワード

トポロジカル絶縁体、トポロジカル物性、ワイル磁性体、スキルミオン、量子異常ホール効果、量子スピンホール効果、スピン運動量ロッキング、マヨラナ準粒子、トポロジカル量子コンピューティング、トポロジカルスピントロニクス、トポロジカルフォトリクス

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

トポロジーは位相幾何学という数学の分野で発展してきた学問体系であるが、2000年以降、それ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。トポロジカル物質の代表例であるトポロジカル絶縁体においては、物質の内部は絶縁体状態であるにもかかわらず、物質の表面、つまり外部との境界（3次元系であれば表面、2次元系であれば端）にトポロジーに特徴づけられた特異な金属状態が実現している。その金属状態を流れる電子は質量がほぼゼロで、かつスピンの向きを揃えていること（スピン運動量ロッキング）が特徴である。また、トポロジカル絶縁体の派生物質であるトポロジカル超伝導体の中にマヨラナ粒子が存在しうること、トポロジカル半金属の1種であるワイル半金属の中にワイル粒子が存在することなどが相次いで発見されている。これらの準粒子はトポロジカル物質の特異な物性の起源となっている。通常の物質とは異なり、トポロジカル物質には非磁性の欠陥や不純物に対して堅牢（ロバスト）な性質を持つ電子が存在するため、スピントロニクスや量子コンピューティングへの応用に大きな期待が寄せられている。さらに、実空間のトポロジーに起因したスキルミオンは、高密度高速メモリへの応用に向けた精力的な研究が行われている。

[研究開発の動向]

本領域では、物質の有する電子構造の成り立ちを基礎的に理解することから始まり、空間群と電子構造を繋ぐ新たな分類を確立しつつある。理論的な観点から、元素を選択するだけで物質の対称性と電子構造の計算結果を表示し、トポロジカルな構造を有するかどうかを示してくれる“Topological Materials Database”もweb上で利用できるようになっている。トポロジカルな電子構造の示す各種物性を基礎的観点から理解することに加えて、それらの制御指針の確立に向けた取り組みが行われている。こうした物質の探索に加えて、薄膜や界面を用いたデバイス化技術の構築も行われつつある。トポロジカルな電子状態に起因する巨大な信号生成や高効率なエネルギー変換、信頼性の高い量子計算技術など高度な情報処理に貢献する技術開発を行っている。最近では、薄膜や界面を精密に合成することで電子構造の制御を通じた物性制御の基礎的応用研究も進んでいる。また、表面状態の示す高効率スピン運動量ロッキングを介した強磁性スピン状態の制御や量子異常ホール状態に生じる非散逸エッジ状態の電子伝導方向制御、マヨラナ準粒子の検証実験が広く行

われ、基礎と応用の両面で着実に研究が進んでいる。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

• 量子異常ホール効果

二次元トポロジカル物質系に生じる1次元のエッジチャネルは非散逸な伝導チャネルとして活用できることが期待される。従来の量子ホール効果では、エッジ状態を形成させるために強い磁場を印加する必要があるため、標準抵抗の応用以外には、電子素子などへの展開を検討することが困難であった。一方、磁性トポロジカル絶縁体では、磁化でエッジチャネルが形成されるため、小さな外部磁場印加によって磁化の方向を制御して、エッジチャネルの伝導を連動させて制御することが可能になる。すでに、磁化と伝導方位の制御技術は低温で実証されている。強磁性転移温度の上昇やさらなる精緻な伝導性制御が実現されることで、低消費電力素子への基礎技術に発展する可能性がある。

量子異常ホール効果のエッジ状態とs波超伝導体との近接効果によって、マヨラナ準粒子を保持することが理論的に示唆されており、実験的にも観測を主張する報告がなされた。再現の報告が待たれる状況ではあるが、マヨラナ準粒子を制御するためのいくつかの手法の1つとして高い注目を集めている。

量子異常ホール効果は2013年の観測以来、表面状態を保持する三次元トポロジカル絶縁体をベースに磁性不純物を添加することで磁氣的相互作用を発現させてギャップを形成し、量子化を実現してきた。この手法では精密なフェルミ準位制御を必要とするため、現象が発現する材料系は薄膜や積層構造に限定されている。加えて、最近では、強磁性体とのヘテロ接合により近接効果を誘起してギャップ形成を行う手法も開発されている。

量子異常ホール効果を実現する方法の開発が進むとともに、新たな物質開拓も成果を挙げている。それら量子異常ホール状態をベースとするトポロジカル物性の制御技術開発としても、エッジ流の制御、巨大な電気磁気効果、マヨラナ粒子の形成など、着実に開発が進められている。

• ワイル半金属、ワイル磁性体

ワイル半金属では、物質の結晶構造に由来した偶数個のワイル点を有しており、それぞれがスピンの湧き出しと吸い込みの関係にある。特に、物質の磁性によって創出されるワイル点を持つワイル磁性体は、電子構造と物性の関連について検証が進められている。これらの物質では、ワイル点を持つトポロジカルな電子構造に起因する仮想磁場を利用することで、巨大な異常ホール効果や異常ネルンスト効果が発現する。従来の強磁性体と比較した場合、数十～数百倍程度大きな値を示すことが報告されており、これらの巨大な効果を用いた磁気センサや熱電変換素子の実証研究が進められている。こうした電子素子に加えて、3次元で線形な電子構造に由来する高い電子移動度を利用すべく、触媒反応や水分解反応にワイル半金属を適用する研究も複数報告されている。表面にはワイル点を投影した特徴的なバンド状態（フェルミアーク）も存在するため、化学的な側面での研究も今後増える可能性がある。

• スピン流生成と磁化反転

トポロジカル物質群の有する線形な電子状態がもたらすスピン運動量ロッキングを活用したスピン流生成と電流印加による強磁性スピン状態の制御研究が進められている。従来の物質中のスピンホール効果によるスピン流生成に比べて、スピン運動量ロッキングでは高効率にスピン流を生成できることが報告されている。実

際に、強磁性体との接合作製では、三次元トポロジカル絶縁体のみならず、ディラック半金属などでも研究がなされており、低電流密度での磁化反転の実証実験が様々な物質の組み合わせで実現されている。また、磁性を持つワイル半金属中のスピン流生成や磁化反転を伴う制御についての報告も増えている。

• スキルミオンメモリ制御

実空間でトポロジーに保護された磁気構造としてスキルミオンが注目されている。B20型構造におけるスキルミオン格子の直接観察以来、結晶構造の対称性から物質探索が進み、スキルミオン格子を実現する物質系がおおいに拡張された。特に、外部磁場ゼロで室温においてスキルミオン格子を安定に保持する物質（Co-Zn-Mn合金など）が発見されたことは、実用化に向けて重要な進展と言える。トポロジカルなスピン構造の開拓としても、新たに3次元構造であるヘッジホック構造が見出され、物質の対称性や磁氣的性質との相関によって、サイズや安定性の理解について議論が進められている。評価技術においても、ローレンツ顕微鏡を用いた直接観察や中性子散乱、動的安定性の評価など、詳細な検討が進められている。さらに、金属積層構造や各種の積層構造においても、界面のジャロシンスキー守谷相互作用を活用した磁気スキルミオンの形成が世界中から報告されている。特に、電流印加や熱などの外部刺激を用いて、スキルミオンを動作させる研究が急速に進展している。

• シフトカレント、非相反現象

波数空間の電子構造に由来して、実空間で絶縁体でも光照射によって効率的に電流を生成する現象がシフトカレントである。空間反転対称性の破れた強誘電体などを中心に研究されている。半導体を用いた光電効果は、pn接合で電荷制御された界面における光吸収と電荷分離を原理としており、太陽電池への応用が考えられる。一方、シフトカレントは物質中に電荷分布の必要はなく、光吸収によって生成された電荷は波数空間での要請から、実空間で電荷を運ぶことに寄与するため、高速な電荷移動による高効率な光電変換現象として期待されている。

空間反転対称性の破れた界面などにおいて、右向きと左向きの電流や光伝搬の度合いが異なるいくつかの現象が報告されている。ある種のダイオード現象であり、単純な試料構造であるにもかかわらず、信号制御などに利用できる可能性もあり、進展が注目されている。

• マヨラナ準粒子探索

マヨラナ準粒子が持つ非可換統計性を用いることで、誤り訂正を大幅に低減したトポロジカル量子コンピューティングが実現できるとして、世界中の研究者がマヨラナ準粒子の探索を進めている。まだ実証はされていないものの、現状では、超伝導とナノワイヤのヘテロ接合系、分数量子ホール系、量子スピン液体、鉄系超伝導の量子渦などでマヨラナ準粒子が存在するのではないかと示唆がなされている。

• トポロジカルフォトンクス

電子系のトポロジーの概念をフォトンクスに適用することで、無散乱走行可能な光導波路による低損失かつ高速通信や、伝搬する光の分散関係を制御することで光の遅延回路や光メモリへの応用が進められている。特に最近では、半導体ナノフォトンクスのプラットフォームでの研究がさかんになっている。例えば、半導体ナノフォトンクスを用いたバレーフォニック結晶導波路、蜂の巣構造フォニック結晶やバレーフォニック結晶エッジ状態を用いたレーザ開発、高次トポロジカル状態に対応するコーナー状態を利用した光ナノ共振

器の実現、トポロジカルスローライト導波路の提案などがなされている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

• 日本

2010年から科学研究費助成事業の新学術領域研究において、トポロジーをキーワードとした新しい物理現象の発見および普遍概念の創出をめざした「対称性の破れた凝縮系におけるトポロジカル量子研究」(領域代表者:前野悦輝・京都大学教授、2010～2014年度)が開始された。5年間の研究によって、「トポロジカル量子現象」が世界的にも広く認知されるものとなり、特に超伝導体・絶縁体だけではなく、超流動体・冷却原子系も含めた世界的にも他に例を見ない分野融合型プロジェクトをわが国が世界に先駆けて推進した。さらに2015年度からは、上記新学術領域研究の格段の発展と、トポロジカル物質科学の基礎学理構築をめざして新学術領域研究「トポロジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」(領域代表者:川上則雄・京都大学教授、2015～2019年度)が発足した。他には、東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR、拠点長:小谷元子・東北大学教授)における3つのターゲットプロジェクトの1つとして「トポロジカル機能性材料」が取り上げられ、数学者と材料科学者の共同研究が推進された。また、最先端研究開発支援プログラム(FIRST)「強相関量子科学」(中心研究者:十倉好紀・理化学研究所センター長、研究期間:2009～2013年度)や最先端・次世代研究開発支援プログラム(NEXT)「トポロジカル絶縁体による革新的デバイスの創出」(研究代表者:安藤陽一・大阪大学教授(当時)、研究期間:2010～2013年度)においても世界を牽引する研究成果が創出されている。さらに、2018年にはこれまで蓄積された基礎研究成果を元にデバイス応用へ向けた研究を加速することを目的として文部科学省の戦略目標「トポロジカル材料科学の構築による革新的材料・デバイスの創出」が設定された。それを受けて、JSTにおいては戦略的創造研究推進事業CREST「トポロジカル材料科学に基づく革新的機能を有する材料・デバイスの創出」領域(2018～2025年度、研究総括:上田正仁・東京大学教授)およびさきがけ「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」領域(2018～2023年度、村上修一・東京工業大学教授)が発足し、トポロジーの概念によって基礎学理からシーズ育成研究、応用研究までを通して統合し、新たな機能を持つトポロジカル材料の開発や小型化、高速化、低消費電力化、耐傷・伸縮性向上などに資する革新的材料およびデバイスの創出をめざした研究開発を推進している。

• 米国

Microsoft Station Q

Microsoftは、カリフォルニア大学サンタバーバラ校キャンパスにStation Q Santa Barbaraという研究施設を開設し、トポロジカル量子コンピューティングに関する先導的な基礎研究を行ってきた。Station Q Santa Barbaraを率いるのが数学者のMichael Freedmanであり、トポロジーにおいて難問とされるポアンカレ予想が4次元において成立することを証明し1986年にフィールズ賞を受賞した人物である。Station Qでは、数学者、物理学者、コンピュータ科学者、工学者が共同で、物質のトポロジカル相がどのように、頑強でスケラブルな量子コンピュータ・アーキテクチャの構築に使えるかを理解することを目的として、世界中の大学の研究者とも協力しながら基礎研究を進めている。また、Microsoft レドモンド本社のあるStation Q Redmondでは、量子アーキテクチャと量子計算に関する研究を行っており、量子アルゴリズムの開発とそれらの意味を理解することに専念するとともに、スケラブルで誤り耐性のある量子コンピュータのアルゴリズムやプログラムを作るための包括的なソフトウェア・アーキテクチャをデザインすることに打ち込ん

でいる。さらに、世界中の共同研究者と一緒に量子コンピュータを構築するための取り組みを積極的に行っている。例えば、オランダのデルフト工科大学 Leo Kouwenhoven 教授、デンマークのコペンハーゲン大学 ニールス・ボーア研究所 Charles Marcus 教授、スイスのチューリッヒ工科大学 Matthias Troyer 教授、オーストラリアのシドニー大学 David Reilly 教授の 4 氏が、各大学の教授の立場を維持したまま Microsoft にも雇用される形態をとっている。Microsoft は、各大学にそれぞれ Station Q Delft、Station Q Copenhagen、Station Q Zurich、Station Q Sydney を開設し、プロジェクト最高責任者 Todd Holmdahl のもと、トポロジカル量子コンピュータ研究開発に Station Q の総力をあげて研究開発を実施している。

Gordon and Betty Moore Foundation

米国 Gordon and Betty Moore 財団は、Emergent Phenomena in Quantum Systems (EPiQS) Initiative として、量子物質における創発現象（電子多体系での高温超伝導、重い電子状態、トポロジカル物性、新しい準粒子の出現など）に関する基礎研究を対象に、第 1 ステージ（2014～2019 年）では実験研究者 19 名（約 2.2 億円/人・5 年）、物質合成専門家 12 名（約 2.0 億円/人・5 年）、理論センターとして 6 大学（ハーバード大学、マサチューセッツ工科大学、スタンフォード大学、UCバークレー校、UCサンタバーバラ校、イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校）に約 10 億円/5 年、さらに第 2 ステージ（2020～2025 年）では実験研究者 20 名（約 1.6 億円/人・5 年）、物質合成専門家 13 名（約 1.7 億円/人・5 年）、理論センターとして 8 大学（カリフォルニア工科大学、ハーバード大学、マサチューセッツ工科大学、プリンストン大学、スタンフォード大学、UCバークレー校、UCサンタバーバラ校、イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校）に約 9.4 億円/5 年を投資している。プログラムディレクターは Dusan Pejakovic 氏であり、米国内の物性物理学分野の強化とともに若手を含む質の高い研究者の育成を図っている。

エネルギー省 (DOE)

米国 DOE が実施する 41 の「Energy Frontier Research Center: EFRC」(約 2.1～4.2 億円/センター・年)のうち、エイムズ研究所の Center for the Advancement of Topological Semimetals (CATS) およびジョンズホプキンス大学の Institute for Quantum Matter (IQM) では、新規トポロジカル材料開発を実施している。

・欧州

ドイツにおいては、ビュルツブルグ大学の Laurens W. Molenkamp 教授、マックスプランク物理学研究所の高木英典教授、および同じくマックスプランク固体化学物理学研究所の Andrew Mackenzie 教授、ケルン大学の安藤陽一教授を中心に、トポロジカル絶縁体、量子スピン液体、トポロジカル超伝導などの研究がさかんに行われている。特に DFG のエクセレンス戦略におけるエクセレンスクラスターの 1 つとして、2019 年よりケルン大学を中心とした「Matter and Light for Quantum Computing: ML4Q」が開始され、トポロジカル量子コンピューティング実現へ向けた研究開発が開始されている（第 1 期は 2025 年まで）。また、英国では工学物理科学研究会議（Engineering and Physical Sciences Research Council: EPSRC）の支援の下、セントアンドルーズ大学、エジンバラ大学、オックスフォード大学、ユニバーシティ・カレッジ・ロンドンが共同し、2011 年から 6 年間、総額 680 万ポンドの研究プログラム TOPNES (Topological Protection and NonEquilibrium States in Strongly Correlated Electron Systems) が推進された。イタリアの CNR-SPIN やロシアのモスクワ物理工科大学 Superconducting TQP lab などでもトポロジカル物質関連の研究が行われている。また、上述の通り、オランダのデルフト工科大学では、Microsoft Station Q の支援の下、トポロジカル量子コンピューティング実現に向けた研究開発を実施している。

• 中国

上海交通大学の SCCP (Shanghai Center for Complex Physics) においては、2003年にノーベル物理学賞を受賞した Anthony J. Leggett 教授をディレクターに招聘し、100人以上の教職員を抱えて、超高強度レーザー物理、トポロジカル量子物質、高温超伝導、宇宙論、ダークマターなどを対象とした研究開発を推進している。また、1988年の F. D. M. Haldane 氏による理論提唱以降、実験的な観測がなされていなかった量子異常ホール効果を2013年に世界で初めて実証した精華大学 Qi-Kun Xue 教授に2016年9月、第1回未来科学大賞 (中国版ノーベル賞、賞金100万ドル) が授与された。さらに、Qi-Kun Xue 教授を院長とする北京量子情報科学研究院 (Beijing Academy of Quantum Information Sciences: BAQIS) を2017年12月24日に設立した。研究者および技術者合わせて約1200名 (うち、主任研究者 (PI) が約50名) の大所帯であり、4つの研究部 (量子物質科学研究部、量子計算・通信研究部、量子材料・デバイス研究部、量子精密測定研究部) と2つの技術支援プラットフォーム (先端微細加工プラットフォーム、総合計測・評価プラットフォーム)、技術移転・産業化センター、管理部から構成されている。近年の中国の本研究分野に対する研究アクティビティは質・量ともに非常に高くなっていることは注目に値する。

(5) 科学技術的課題

トポロジカル物質群の示す特徴的な性質は、従来の半導体や絶縁体、磁石にはない機能をもたらす可能性がある。これまでは、電子構造と物性との関わりを体系的に理解することが進められてきた。これらは、特に、物理学分野や物質科学分野での研究者が中心となって推進されている。こうした基礎学術の分野では、実験技術の高度化や複合的な検証が世界的な潮流となっており、計算と実験、合成と評価、合成とデバイスなどの融合研究が必須である。国内では、新学術領域がこうした分野融合や共同研究を推進する役割を果たしてきた。今後、基礎と応用、理学と工学の観点で橋渡しして世界に伍する研究発展を加速させる必要がある。基礎の観点では、demand-drivenの研究展開を模索することも重要と思われる。例えば、物理の分野ではあまり研究されていない、省エネや創エネ、水分解などの触媒、電池などの化学的性質に関連した物質適用の研究があげられる。国内においても、独自の新しい物質や薄膜、界面は多く開発されて合成もされているため、それらの物質の有効性を多方面から検証することが新たな機能開発をもたらす可能性があると考えられる。

物性の応用については、工学分野との連携をより一層推進することが今後の課題である。例えば、スピントロニクス分野でのスキルミオンやワイル磁性体を用いた磁気メモリの開発、量子計算分野でのトポロジカル超伝導素子やマヨラナ粒子制御に関する素子、光学素子分野でのトポロジカル光開発などがあげられる。量子計算技術にトポロジカル物質群を用いることが大きなメリットを有することは自明であるものの、段階的な研究開発を長期的な視野に立って持続する必要がある。そうした技術発展を進めることが困難な要因は、基礎研究における検証から、工学応用に向けた制御技術の確立、単一素子から多数素子への工学発展、などの技術的要点があまりに異なっているためである。1人の研究者が統括して、スタートからゴールまでを牽引することは困難であることが多いため、個々のポイントで強いグループをいかにチームとして連携できる体制を作れるか、が課題と考えられる。

(6) その他の課題

これまで、内閣府の最先端研究や科研費の新学術領域、JSTのCRESTやさきがけによる主導的研究が行われてきたため、これら技術を企業へと技術移転していくためにも新たな仕組みを検討する段階に来ていると思われる。海外では、マヨラナ粒子を利用する量子計算技術の確立に複数の企業が積極的に乗り出している

一方、日本企業は手つかずといえる状況である。米国では、量子物質や量子計測の基礎研究や技術開発の支援に対して、Gordon and Betty Moore FoundationのEPIQS (Emerging Phenomena in Quantum Systems) プロジェクトの継続が決定されている。一方、国内ではJSTにおけるCREST、さががけが継続しているものの、JSPS新学術領域が終了し、これまでの優位を継続することが困難になる可能性がある。

研究課題の推進に合わせて、人材育成も現在の日本における重要な課題の1つである。新学術領域の推進を通して、当該分野で活躍する博士課程学生や若手研究者を多数育成できており、彼らの研究能力をより一層発揮させる制度設計が求められる。特に、技術の発展をめざす場合には、研究者自身に視野を広げさせ、分野を超えた共同研究を活発に推進させることが必要となる。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|--|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> ワイル半金属・ワイル磁性体の開発がさかん。ネルンスト効果を用いた創エネ研究の基礎に強み。 2010年以降、新学術領域が分野を牽引している。特に、トポロジカル超伝導体に関する理論と実験に強み。シフトカレントやスキルミオンについても国内に先駆的な研究推進グループが存在。最近では、トポロジカル光のグループも増加。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> スピン運動量ロッキングを活用した高効率スピン流生成とその活用方法の検討。ワイル磁性体などを用いたセンサやメモリの応用向け基礎研究が発展途上。 マヨラナ粒子を用いたトポロジカル量子コンピューティングが提唱されているが、技術的にはまだ遠い。スキルミオンを用いたメモリなどのデバイス展開が模索。 |
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> 物質開発に強み。ARPESやSTMの先端計測のリーディンググループも分野を牽引。 スピン運動量ロッキングの活用についても積極的。スピントロニクス分野の研究者が多く参入して、スピン流生成やスキルミオン駆動の研究を牽引。トポロジカル超伝導の実験は企業を含めて強力に推進。政府系、財団系問わず、量子物質や量子技術の開発に積極的なサポート。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> Microsoft Station Qを中心にトポロジカル量子コンピュータ開発に向けた研究開発が活発である。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> エッジ伝導の制御と応用への可能性を検討。ドイツのMolenkampグループの試料を用いた共同研究が進行。 MPIのFelserグループが理論を牽引。物質合成と精密計測を加速させている印象。特にワイル半金属を中心に開拓が進む。 Molenkampグループの薄膜試料を用いたマヨラナ粒子検出やエッジ伝導制御の研究が進行。Fertグループを中心に、金属積層薄膜に生成されるスキルミオンの電流駆動など、制御技術開発が進められている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> オランダのデルフト工科大学、ドイツのケルン大学などで、トポロジカル量子コンピュータ開発に向けた研究開発がさかんに行われている。 |
| 中国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 若手研究者らの積極的な分野参入。大型の複合研究機器の導入により、理論家との共同研究を通して、合成と計測が加速的に進められている印象。 一旦理論が生まれると、合成から物性計測までスピーディに行える体制が整っている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 実用化に向けた大きな動きは見られないが、基礎研究所内に技術移転・産業化センターを設置するなど、今後の活発化していく可能性がある。 |

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

| | | | | |
|----|---------|---|---|-----------------|
| 韓国 | 基礎研究 | ○ | → | ・特に顕著な動きは見られない。 |
| | 応用研究・開発 | △ | → | ・特に顕著な動きは見られない。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

- ・新機能ナノエレクトロニクスデバイス (ナノテク・材料分野 2.3.1)
- ・集積フォトニクス (ナノテク・材料分野 2.3.2)
- ・スピントロニクス (ナノテク・材料分野 2.3.3)
- ・量子情報・通信 (ナノテク・材料分野 2.3.6)
- ・量子計測・センシング (ナノテク・材料分野 2.3.7)
- ・マテリアルズ・インフォマティクス (ナノテク・材料分野 2.5.3)
- ・低次元材料 (ナノテク・材料分野 2.5.6)

参考・引用文献

- 1) トポロジカル絶縁体入門 安藤陽一著 講談社
- 2) スピン流とトポロジカル絶縁体 齊藤英治・村上修一著 共立出版
- 3) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター「戦略プロポーザル『トポロジカル量子戦略～量子力学の新展開がもたらすデバイスイノベーション』」(CRDS-FY2016-SP-02) (2017年3月), <http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2016/SP/CRDS-FY2016-SP-02.pdf> (2021年2月17日アクセス)
- 4) M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium : Topological insulators”, *Review of Modern Physics* 82, no.4(2010) : 3045-3068. doi : org/10.1103/RevModPhys.82.3045.
- 5) O. Vafek and A. Vishwanath, “Dirac Fermions in Solids - from High Tc cuprates and Graphene to Topological Insulators and Weyl Semimetals”, *Annu. Rev. Mat. Sci.* 5 : 83-112 (2014). doi : 10.1146/annurev-conmatphys-031113-133841.
- 6) N. P. Armitage, E. J. Mele and A. Vishwanath, “Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids”, *Review of Modern Physics* 90(2018) : 015001. doi : 10.1103/RevModPhys.90.015001.
- 7) N. Nagaosa, T. Morimoto and Y. Tokura, “Transport, magnetic and optical properties of Weyl materials”, *Nature Reviews Materials* 5 (2020) : 621-635, doi : 10.1038/s41578-020-0208-y.
- 8) Y. Tokura, K. Yasuda and A. Tsukazaki, “Magnetic topological insulators”, *Nature Reviews Physics* 1 (2019) : 126-143. doi : 10.1038/s42254-018-0011-5.

- 9) N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nature Nanotechnology* 8, 899 (2013).
- 10) K. E. Sitte, J. Masell, R. M. Reeve and M. Klaui “Perspective : Magnetic skyrmions—Overview of recent progress in an active research field”, *J. Appl. Phys.* 124 (2018) : 240901. doi : 10.1063/1.5048972.
- 11) X. Zhang et al., “Skyrmion-electronics : writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications”, *J. Phys. : Condens. Matter.* 32, no.14 (2020) : 143001. doi : 10.1088/1361-648X/ab5488.
- 12) Database, <https://www.topologicalquantumchemistry.com/#/> (2021年2月17日アクセス)
- 13) B. Lian, J. Wang and S. C. Zhang, “Edge-state-induced Andreev oscillation in quantum anomalous Hall insulator-superconductor junctions”, *Phys. Rev. B* 93 : 161401 (2016). doi : 10.1103/PhysRevB.93.161401.
- 14) Q. L. He et al., “Chiral Majorana fermion modes in a quantum anomalous Hall insulator-superconductor structure”, *Science* 357 (2017) : 294-299. doi : 10.1126/science.aag2792.
- 15) M. M. Otrokov et al., “Prediction and observation of an antiferromagnetic topological insulator”, *Nature* 576 (2019) : 416-422, doi : 10.1038/s41586-019-1840-9.
- 16) Y. Deng et al., “Quantum anomalous Hall effect in intrinsic magnetic topological insulator MnBi₂Te₄”, *Science* 367, no. 6480 (2020) : 895-900. doi : 10.1126/science.aax8156.
- 17) E. Liu et al., “Giant anomalous Hall effect in a ferromagnetic Kagomé-lattice semimetal”, *Nature Physics* 14, no.11 (2018) : 1125-1131. doi : 10.1038/s41567-018-0234-5.
- 18) L. Ye et al., “Massive Dirac fermions in a ferromagnetic kagome metal”, *Nature* 555, no.7698 (2018) : 638-642. doi : 10.1038/nature25987.
- 19) S. N. Guin et al., “Zero - Field Nernst Effect in a Ferromagnetic Kagome - Lattice Weyl - Semimetal Co₃Sn₂S₂”, *Advanced Materials* 31, no. 25 (2019) : 1806622. doi : 10.1002/adma.201806622.
- 20) A. Sakai et al., “Giant anomalous Nernst effect and quantum-critical scaling in a ferromagnetic semimetal”, *Nature Physics* 14 (2018) : 1119-1124, doi : 10.1038/s41567-018-0225-6.
- 21) K. Kuroda et. al., “Evidence for magnetic Weyl fermions in a correlated metal”, *Nature Materials* 16 (2017) : 1090-1095, doi : 10.1038/nmat4987.
- 22) C. R. Rajamathi et al., “Weyl Semimetals as Hydrogen Evolution Catalysts”, *Advanced Materials* 29 (2017) : 1606202. doi : 10.1002/adma.201606202.
- 23) G. Li et al., “Surface states in bulk single crystal of topological semimetal Co₃Sn₂S₂ toward water oxidation”, *Science Advances* 5 (2019), no.8 : 9867. doi : 10.1126/sciadv.aaw9867.
- 24) A. Soumyanarayanan, N. Reyren, A. Fert and C. Panagopoulos, “ Emergent phenomena induced by spin-orbit coupling at surfaces and interfaces”, *Nature* 539, no.7630 (2016) : 509-517. doi : 10.1038/nature19820.
- 25) Y. Fan and K. L. Wang, “Spintronics Based on Topological Insulators”, *SPIN* 6, no.2 (2016) : 164001. doi : 10.1142/S2010324716400014.
- 26) Z. -K. Shao et al., “A high-performance topological bulk laser based on band-inversion-

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

induced reflection”, *Nat. Nanotechnol.* 15(2020) : 67-72, doi : 10.1038/s41565-019-0584-x .
27) H. Yoshimi et al., “Slow light waveguides in topological valley photonic crystals”, *Opt. Lett.* 45, no.9 (2020) : 2648-2651. doi : 10.1364/OL.391764.

2.5.6 低次元材料

(1) 研究開発領域の定義

低次元材料は、材料の空間的な構造に着目した際にその性質が通常バルク材料（3次元材料）と異なり、2辺（幅と長さ）もしくは1辺（長さ）だけで決まる材料であり、それぞれ二次元、一次元材料と呼ばれる。低次元材料の概念は20世紀から広くあったが、1991年のカーボンナノチューブ（一次元）また2004年のグラフェン（二次元）の発見により、具体的に存在する物質として実用を視野においた研究が開始された。グラフェンの発見に触発されるように、金属カルコゲナイド、カーバイドなどの多くの種類の二次元物質が発見されてきたが、それらの多くはバルクではみられない特徴的な電子状態を持ち、新しい物理構築だけでなく、エレクトロニクス、センシング、エネルギー変換・貯蔵などの応用に期待が持たれている。この項では、こうした、低次元化によって3次元バルク材料からは得ることのできない特異な性質を持つことになる材料に注目する。特に最近の進展が著しい二次元材料を中心に記載する。

(2) キーワード

グラフェン、遷移金属ダイカルコゲナイド（TMD）、金属モノカルコゲナイド、h-BN、ポロフェン、シリセン、六方晶窒化ホウ素、原子層、二次元ナノシート、ヘテロ超格子、Van der Waals heterostructures、層状物質、単層剥離、ビルディングブロック、レイヤーバイレイヤー積層、階層構造制御、モアレ構造、ツイスト積層界面、トポロジー、バレートロンクス、スピントロンクス、ツイストロンクス、エッジトロンクス、二次元超伝導、二次元磁性、相対論的Dirac電子、Weyl電子

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

低次元材料の研究開発を行う意義は、大きく分けて2つある。1つは、「原子～分子レベルでの薄さ、細さ」という構造的特徴を持った物質が示す特異な物性やその応用の探求である。グラフェン、カルコゲン化合物（カルコゲナイド）シートなどにみられる、特徴的な電子状態（層数に依存した電子バンド構造の変調、Dirac電子系の出現、非常に高い易動度など）とそれをういたエレクトロニクスデバイス、遷移金属酸化物や水酸化物ナノシートの優れたエネルギー貯蔵、変換機能（電極活物質、電極触媒）とそれを利用したエネルギーデバイス、低次元物質特有の光学特性や磁気・スピン特性などを利用した、オプトエレクトロニクスやスピントロニクスデバイスなどが、その例である。現在に至っても、組成、構造を精密に制御した新規二次元材料の合成が行われていることを考えると、さらなる掘り下げにより新しい発見、成果に期待が持てる。

もう1つは、複数の二次元物質をビルディングブロックとした新たな材料の創生や、二次元物質の積層界面を作ることによって生じる新たな機能の探求である。前者には二次元ナノシートを1枚1枚操作して基板表面の望みの場所に配置した例や、基板上に隙間や重なりがほとんどない形（稠密配列）で単層膜として堆積させ、これをレイヤーバイレイヤーで反復して多層ナノ構造や超格子構造を構築することを可能とした例がある。また、後者では、結晶格子の大きさや対称性の異なる異種の二次元物質を積層して母相にはないトポジカルな性質を発現させた例や、同種の二次元物質を捻って積層することで母物質では現れない物性を発現させた例などがある。二次元結晶の組み合わせは実質無限に存在し、適切な組み合わせを選ぶことで有用な機能性を出すことが可能であると同時に、界面の超構造等に注目することで、元々の低次元物質からは想像もしなかったような物性が発現することが分かってきている。

このように大きなポテンシャルを秘めた低次元物質の研究領域は、今後も固体物理学における1つの中心的な物質系であることは疑いようがない。

[研究開発の動向]

新規二次元材料の創製研究については、多くの物質系で精力的な研究が約20年にわたって展開されてきており、それらにおいては組成や構造をチューニングすることによる機能制御、サイズ、形状の精密制御による品質向上に研究に力点がシフトしてきている。一方で新規二次元系物質の探索もいまださかんであり、フォスフォレン（黒リンの単層）、炭窒化物（MXenes）や二次元金属錯体ナノシート（Coordination nanosheet：CONASH）の発見のように様々な成果があがっている。

半導体であるフォスフォレンや、化学組成、結晶構造に応じて金属から半導体まで幅広い物性を示す遷移金属ダイカルコゲナイドは、どちらも剥片化により、バンドギャップの拡大、間接遷移型から直遷移型半導体への変化という特徴が一般的にみられ、on/off比に優れたトランジスタや発光素子等、様々なデバイス応用が追究されている。トランジスタ応用としては、2011年にKisらが最初に単層MoS₂をチャンネル層に用いた電界効果型トランジスタ（Field Effect Transistor：FET）について報告した後、WSe₂、InSe等、種々の遷移金属カルコゲナイドについての半導体応用が進み、優れた半導体性が見出されるとともに、光センサ等、関連応用技術の開発についても研究が進んでいる。また、FeSeを単層化すると、バルクでは8 Kの超伝導転移温度（ T_c ）が100 Kに達する可能性があることが報告され、高 T_c 発現メカニズムの解明、 T_c 制御への研究が継続されている。一方化学分野では、金属伝導性を示すMoS₂（1T相）やNbS₂が、優れた電気化学触媒活性を示すことが見出され、貴金属フリーH₂O分解触媒（H₂生成）の実現に向けた研究が活発に行われている。

剥離した二次元結晶を再び積層させることで実現される、van der Waals結晶界面の研究も飛躍的に進展してきた。このvan der Waals結晶界面の研究には、主に3つの方向性があげられる。第1に、表面が原子レベルで平坦であることを利用して、良質な基板材料として用いる利用方法がある。例えば、グラフェン等の二次元物質をh-BNで挟んだ界面では、従来の酸化物基板への剥離では得ることが難しかった、試料劣化に対して強く、原子レベルで平坦な二次元界面を実現でき、飛躍的に移動度等を向上させることで、容易に量子輸送現象へアプローチすることが可能となった。このような、h-BNを試料劣化防止のためのキャップや原子平坦性を実現するための基板として用いる方法は、現在では二次元物質研究のスタンダードとなっており、NIMSの谷口、渡邊らによる超高压合成法によって得られた高品質h-BNは世界中の研究グループが使用するところとなっている。また、第2の方向性として、さまざまなvan der Waals結晶を組み合わせることでヘテロ界面を作製し、特徴的機能性を創出するという取り組みも積極的に行われている。当初、このvan der Waals結晶ヘテロ界面の研究は、界面を構成する各々の二次元物質の特徴を上手く生かした機能性の開拓が積極的に行われてきた。例えば、p型およびn型の半導体二次元結晶を組み合わせることで、特徴的な発光・光電流特性が実現したり、電子・ホールが層間に分離された層間励起子と呼ばれる、安定かつユニークな二次元励起子物性が発見されることが知られている。また、絶縁体超薄膜を挟んでトンネル接合機能を持たせるといった例が挙げられる。さらに最近では、第3の方向性として、前述したような界面を構成する物質の性質の組み合わせによる物性開拓だけでなく、モアレ構造等の界面の長周期構造や対称性を詳細に反映した物性も発見されてきている。この第3の潮流は、van der Waals積層構造研究のパラダイムシフトともとらえられ、後述するように、h-BN/グラフェンの研究を発端として、ツイスト積層させたグラフェンやTMD、グラフェンと黒リン界面等、現在世界中で極めて多彩な研究が進捗中であり、単層の結晶からは

想像もできないような物性が続々と実現されてきている。

以上であげた、個々の二次元物質やvan der Waals界面の物性研究において、特に最近、顕著にみられる傾向は、固体物理学の他分野（ナノ物質研究以外の分野）で提唱されたり、発展したりしてきた概念・コンセプトを積極的に輸入し、融合させていく研究の方向性である。遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレー物性の理解の進展や最近の磁性van der Waals結晶の発見に伴う、電気磁気物性やスピントロニクス機能の探索、ツイスト二層グラフェンにおける強相関絶縁体層や超伝導相と高温超伝導との類似性の指摘、 WTe_2 やツイスト二層グラフェン磁性相でみられるようなトポロジカル物性、ツイスト界面における準結晶的構造等が良い例である。

酸化物、水酸化物、炭窒化物等のナノシートはグラフェン、カルコゲナイドシートでは現れない物性（誘電性、強誘電性、光触媒性、酸化・還元反応性など）を示すことから、その活用をめざした研究展開が進められている。特に遷移金属酸化物および水酸化物ナノシートの多くは優れたレドックス性を示すことから電極活物質や触媒として期待される。事実これらナノシートの母相となる層状化合物では $LiCoO_2$ に代表されるように正極活物質として実用化されているものも少なくないことは周知の事実である。これらの材料では陽イオン（Liイオンなど）が層間を長距離拡散してレドックスサイトに行きつく必要があるのに対して、これを剥離して得られるナノシートではすべてが表面と表現できるユニークな構造を有しているため、レドックスサイトが大きく露出していることに加えて、イオンの拡散距離も短く済むため、高い電池性能を実現できることが報告されている。このようにこれら遷移金属層状化合物およびそのナノシートは電極活物質として有望な性能を発揮するものの、骨格となる酸化物、水酸化物の大半は絶縁性であるため、特に充放電レート特性などにおいて改善すべき余地も多い。そこで遷移金属酸化物または水酸化物ナノシートを酸化グラフェン（graphene oxide : GO）または還元型酸化グラフェン（reduced GO : rGO）と交互に積み重ねた超格子複合体を合成することにより、優れた電極性能が実現された。さらにこれらの超格子複合体は水分解反応における酸素および水素発生活性においても、貴金属電極触媒と匹敵する極めて高い性能を示すことから注目を集めている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

- ・グラフェンでは回転角という新しいパラメータが見出され、モアレ超格子が物性発現の新しい設計指針となっている。その中のハイライトがグラフェンモアレ超格子による超伝導発現である。カルコゲン化物シートでも $MoSe_2/WS_2$ ヘテロ構造において構成結晶の面内方位のずれに依存し、バンド構造が変調される現象が観察されており、今後、van der Waalsヘテロ構造体において面内結晶方向の整合性を新たな構造設計指針とした物性制御、機能発現について研究が進むと予想される。
- ・カルコゲン化物ナノシートでは上述した負性抵抗、トンネル素子、多値論理演算素子などの研究発表が相次いでいる。さらにはカルコゲン化物シートが様々な電子バンド構造を有することに着目して、異種シートをヘテロ接合することにより光励起キャリアの移動を制御し、p-nダイオードや発光素子などの開発が報告されている。いずれも高品質なヘテロ界面だからこそその成果といえる。
- ・新材料に関しては、絶縁体である $CrGeTe_3$ および CrI_3 が単層にしても磁気秩序を持つことが明らかにされ、二次元物質を用いた磁性の研究やスピントロニクス機能の開拓への道が開けた。特に、 CrI_3 は層数によって磁性が変化するという特徴を持ち、二層 CrI_3 では特徴的対称性と磁気構造による電気磁気効果およびそれを用いた電場による磁性制御や巨大な磁気トンネル効果といった、これまで特殊な三次元磁性体や磁性薄膜試料で研究されてきたエキゾチックな現象が超巨大応答として報告されている。また、静電的な応答

だけでなく、キャリアをドーピングしてトランジスタ動作させると同時に磁性を制御できるといった報告もなされてきており、強磁性トランジスタといった新しい応用へのポテンシャルも見出されている。他の二次元物質とのヘテロ界面の研究もさかんで、二次元磁性体と遷移金属ダイカルコゲナイドのヘテロ界面はスピンとバレーが結合したユニークな系として認知されるようになってきている。

- ・ 金属的性質を持つ二次元磁性体 Fe_3GeTe_2 や VSe_2 、量子異常ホール効果を示す二次元磁性トポロジカル絶縁体 MnBi_2Te_4 等、新規二次元強磁性体が次々と見つかってきている。二次元反強磁性体の研究も進んでおり、元々劈開可能性等が検証されていた MPX_3 ($\text{M}=\text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ni}, \text{X}=\text{S}, \text{Se}$) において磁性の層数依存が報告されたり、遷移金属ダイカルコゲナイド界面での光特性も報告されてきている。
- ・ トポロジカル物性を持つ二次元物質の物性研究にも顕著な進展が見られる。 WTe_2 は二次元トポロジカル絶縁体 (量子スピンホール絶縁体) であることが示されていたが、電界効果によって超伝導が発現することが発見され、トポロジカル超伝導との関連性や二次元超伝導の性質が調べられるようになってきた。また、数層 WTe_2 は、波動関数のトポロジーや幾何学に起因した特徴的バンド構造を持っていることが知られているが、それを反映した新規輸送現象、特に異常光電流効果や非線形ホール効果といった、非線形輸送現象の発見も相次いでいる。
- ・ その他のヘテロ接合体として、グラフェンと h-BN 等、2種の原子層を面内で接合した面内ヘテロ構造についても研究が行われており、この場合でも一次元界面を介した p/n 接合等が実現している。
- ・ 酸化・還元特性に優れた遷移金属酸化物または水酸化物ナノシートを高伝導性のグラフェンと交互に積み重ねた超格子複合体は、これまでで最高レベルの性能を発揮する電極材料、触媒として働くことが最近明らかにされた。例えば MnO_2 ナノシート/ rGO 超格子複合体はこれまでで最高レベルの容量、優れた出力特性、サイクル安定性を示すことが報告されている。また電極触媒能に関しては NiFe 水酸化物/ rGO 超格子複合体が非常に小さな過電圧で酸素発生反応が進行することなどが報告されている。これらの特性は貴金属電極のそれに匹敵あるいは上回るものであることから、さらなる性能向上に向けてナノシートの組成チューニング、グラフェンとの複合ナノ構造のデザインなどに関する多数の研究が進められている。
- ・ 酸化物をはじめとした多くの二次元材料が水溶液中に単分散したコロイドであり、その極めて大きなアスペクト比に由来して、顕著な液晶性を示すことを利用したさまざまな展開が最近さかんになってきている。これらの系では、電解質濃度を制御することによりナノシートの間隔を数十~数百 nm のメソスケールレンジに制御することが可能である。特に酸化チタンナノシートが強磁場印加により数センチメートルサイズの容器内で一方向に配列し、鮮やかな構造色を呈するといった興味深い結果が示されている。さらにこの液晶全体をヒドロゲルやシリカゲルに変換すると、これまでのゲルでは実現できなかった異方的な特性やトップレベルの機械的強度を実現できるといった興味深い結果が得られており、本トピックスにおいては今後大きな飛躍が予感される。
- ・ 種々の金属と有機配位子を液液もしくは気液界面で合成することにより、CONASH (二次元金属錯体ナノシート) が二次元材料の新顔として報告された。金属イオンと配位子との組み合わせが多様であるためより広範なデザインが可能であり、大きな発展が期待できる。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

EU、米国、韓国、シンガポール、中国等、世界各国では基礎科学から応用研究、産業実用化までをめざす大型プロジェクトや産業界での実用化に向けた展開が行われている。特に、グラフェンの2010年度ノーベル物理学賞受賞を契機として欧州に設立された研究イニシアチブ: Graphene Flagshipは10億ユーロの巨

額な競争的資金を10年計画で研究開発投資中であり、欧州の当該分野の科学技術水準の向上と産業応用の加速化を推進する原動力として機能している。

EUから独立した英国は、Graphene Flagship 中興の祖として継続して研究投資対象国であるが、英国独自の大規模かつ多面的な研究振興施策を講じている。National Graphene Research Center in Univ. Manchester (Director: Prof. V. Falco、2015年設立、6100万ポンド)、EPSRC (英国工学物理科学研究評議会)によるvan der Waalsヘテロ二次元材料やフレキシブル光電子材料開拓など(総額3700万ポンド)をはじめとする総額1.4億ポンド規模の研究投資を行っている。

以下各国の研究開発プロジェクトの概要を述べる。

ドイツでは、基礎から応用にいたる二次元材料とそのデバイス応用研究をMax Planck Institute、大学、Fraunhofer Institute、が相互に役割分担し切れ目のない強固な研究開発体制を構築している。特に、Graphene FlagshipとパートナーのRWTH (アーヘン工科大学)とAMO GmbH (産学連携オープンイノベーションを促進する非営利団体)とが共同で、Aachen Graphene & 2D-Materials Centerを2017年に設立し、CVDによるウェアスケールでのグラフェンおよび遷移金属カルコゲナイド等の二次元材料による大規模集積デバイス・回路・システムの先端研究を国家的に推進している。Graphene Flagship Work Package 6: Sensor (主幹: デルフト工科大学、オランダ)、7: Electronic Devices (主幹: AMO GmbH)、10: Wafer Scale Integration (主幹: CNIT、イタリア)の3本のプロジェクト、European CommissionのFlagship-Era (FETデバイスシステムの先端研究推進プロジェクト)によるTUGRACO - Towards Ubiquitous Graphene based RF Communicationsプログラムを中心として2014~2020年の7年間で100億円規模の研究投資を行っている。

中国では、泰州巨納新能源有限公司が中国初のグラフェン国家基準「ナノテク 専門用語 第13部分: グラフェン及び関連二次元材料」(GB/T 30544.13-2018)を2018年に制定し、グラフェン、CNT、および関連二次元材料の基礎から産業応用にいたる全領域を対象として35億円/年規模の研究投資を行っている。韓国では、韓国政府主導のKorean Graphene Hubが2013~2018年の6年間で約200億円の研究投資を行っている。また、わが国のNEDOに相当するとみられる半官半民のGraphene Materials and Components Commercialization Projectが産業応用に重点を置いて2013~2018年の6年間で230億円規模の研究投資を行っている。シンガポールにおいても二次元材料の研究開発に80億円規模の研究投資を行っていると思われる。

日本におけるグラフェンや原子膜の政府主体のプロジェクトは、2011年NEDOの「希少金属代替材料開発」が最初であり、その後、2012年、NEDO「革新的ナノカーボン材料先導研究開発」、NEDO「低炭素社会を実現する革新的カーボンナノチューブ複合材料開発プロジェクト/グラフェン基盤研究開発」(2012~2014年度)、2013年文部科学省科学研究費新学術領域「原子層科学」(2013~2017年度、10億円規模)、2014年NEDO「低炭素社会を実現するナノ炭素材料実用化プロジェクト」(2014~2016年度、120億円規模)、JSTのCRESTプロジェクトとして、「二次元機能性原子・分子薄膜の創製と利用に資する基盤技術の創出」(2014~2021年度、50億円規模)が推進されてきており、2013年以降、組織的で大きな取り組みが展開されてきた。また低次元材料のトポロジカルな性質をさらに発展させるべくJST-CREST「トポロジカル材料科学に基づく革新的機能を有する材料・デバイスの創出」領域(2018~2028年度、50億円、研究総括: 上田正仁(東大教授))が新設されたことは、組織的な大型研究推進プログラムの継続推進の観点で望ましいといえる。

産業界では、世界的なグラフェン研究の展開のなかで、その応用と産業化での関心が高まり、2010年、化学技術戦略推進機構(現新化学技術推進協会)で企業の情報交換の場としてのグラフェン研究会が設けられた。その後、2011年には技術研究組合単層CNT融合新材料研究開発機構(TASC)グラフェン事業部が企業5社と産業技術総合研究所により設立された。現在、電気、化学関連企業を中心に研究開発が行われ

ている。また、産総研グラフェンコンソーシアムが2013年に立ち上げられ、企業、行政、大学・研究機関の情報交換、連携の場として機能を果たしている。

(5) 科学技術的課題

Van der Waals系層状二次元物質に関する技術的な課題は、大面積で高品質の薄膜成長技術を確立することである。いつまでもスコッチテープで切り貼りしては、そう遠くない将来にこの分野は行き詰まると思われる。これまでの研究はテープにより層状結晶を劈開させ、多数の劈開片の中から単層部分を探し出し、これにマイクロ電極を取り付けて物性測定を行うという形で行われてきており、その中で驚異的といえる物性値が発見されている。これらはある意味、理想的な場合の最高値を示すものであるが、歩留まり、サイズなどからデバイス開発に向けては大きな谷間が存在すると言わざるをえない。その解決をめざして、化学気相蒸着法(CVD)を中心として大面積で高品質の薄膜成長の精力的な検討が行われてきている。その結果、ミリスケールの単層単結晶や、均一膜の作製が達成されている。しかしながら最高物性値を達成するための膜質という面では多くの問題が未解決であり、スコッチテープ法により得られる二次元物質とのギャップは10年以上埋まっていない。

二次元物質界面の作製にも未だ課題が多い。マジック角度ツイスト二層グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドツイスト界面を作製するためには、0.1度以上の精度での積層角度制御が必要である上に、転写作業後に試料の角度がずれてしまう可能性がある。そのため、作製した界面の質は研究グループや作業者によってかなりばらつきがあるのが現状である。このようなエキゾチックな物性まで探索が可能な、良質な界面を容易にかつ高確率で作製できる技術革新が求められる。

また、二次元物質の中には不安定な物質も多々存在し、試料の劣化は大きな問題である。例えば、遷移金属ダイカルコゲナイドに次ぐ二次元半導体材料として注目を集めている黒リンや二次元磁性体 CrI_3 、 Fe_3GeTe_2 等は大気中で不安定であり、グローブボックス中での劈開・転写作業が必須であり、かつ、h-BN等でキャップすることにより表面や界面を保護する必要がある。このような作業を簡略化するプロセスの開発や新しいデバイス作製手法の開拓が望まれる。

酸化物、炭化物などの二次元ナノシートについても、サイズ、形状を制御した合成が重要な課題である。層状物質の劈開、剥離により得られるナノシートは一辺の長さが1 μm 前後で無秩序な外形を有するものが多い。このサイズを大きくすることができれば、これをビルディングブロックとした材料の構造秩序性が高まり、機能性も向上することが期待でき、理想的には同じ形状、同じサイズのシートが合成できれば、基板上に自己組織化的にタイルを並べるような形で秩序配列させることも可能と予想され、ナノシートの機能をより効果的に取り出すことにつながると期待される。さらにナノメートル領域でのナノシートの配列にとどまらず、上記のメソスケールの配列制御技術が発達すれば、材料科学的な幅が大きく拡大すると期待できる。現在までのところ、層状物質の剥離ナノシート化プロセスの学術的理解は十分とはいえず、サイズ、形状を制御したナノシート合成のためには詳細な基礎研究が今後求められる。

(6) その他の課題

日本のグラフェン・二次元機能性原子膜の研究開発については、研究への関心、予算規模、また、産業界の活動等、世界の先端からは大きく水をあけられている。文部科学省科学研究費新学術領域「原子層科学」(2013～2017年度)では、基礎研究において一定の成果を生み出したが、2017年度には終了しており、JSPS関連でのグラフェン・二次元機能性原子膜への新たなプロジェクトの計画もない。世界各国では、例え

ば、EUのGraphene Flagship等、基礎研究から応用研究、実用化研究への技術移転の流れが加速しており、大学・研究機関と産業界の連携が密接となってきた。一方、日本では従来から裾野の広い物質科学の研究が行われており、グラフェンと関連物質の研究開発には大きなポテンシャルを有するとともに新たな研究成果も多く生まれており、国際的にも学術的優位性を維持している。にもかかわらず、大学・研究機関と産業界の連携は十分には行われていない。日本の基礎科学での強みを生かして、研究の組織的な展開を促すとともに、産業界との強い連携をより一層推進する取り組みが求められる。

新材料創製、デバイス学理創造には、基礎物理、基礎化学に立ち帰った基礎基盤研究の推進が欠かせない。二次元機能性原子薄膜材料を科学技術イノベーションとして将来の新産業創出に結実させ、わが国がこれを主導するためには、デバイスからシステム応用までを俯瞰した目的志向型の材料・プロセス技術の革新が求められる。これらを相補的に推進するためには、省庁の垣根を越えた柔軟な産学官連携研究の推進体制・制度の構築が不可欠である。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|---|
| 日本 | 基礎研究 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 酸化物および水酸化物ナノシート、二次元金属配位高分子は日本発の二次元ナノシートであり、先行的位置を確保している。 高品質h-BNはグラフェンやカルコゲン化物の物性研究にとって必要不可欠な素材であり、世界標準になっている。ただ物性研究自体では米国、英国、シンガポールに先行を許している状況にある。 二次元超伝導体の研究や非線形伝導等の物性開拓、単層SnSや高品質h-BNの合成等、ユニークな業績を出している。ロボット制御による転写・界面作製といったオリジナリティーのある技術の構築・デモンストレーションも報告された。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↘ | <ul style="list-style-type: none"> 企業などは、二次元物質を本格的に応用研究に着手する、緊急性の高い課題を見出していないことと、経済状態から大きな投資をすることはできない。 カルコゲン化物ナノシートの応用研究では研究者人口が圧倒的に少ない。 |
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 二次元磁性体の発見やその機能開拓、ツイスト積層界面における物性探索に至るまで二次元物質研究を主導しており、トレンドの発信地として確固たる存在感を示している。 莫大な研究予算と、アジア諸国からの留学生などの人材によって、依然として高い基礎研究の成果を出している。 最近のハイライトであるツイスト積層2層グラフェンにおける超伝導の発見(マジック角)研究に関してはMIT、Caltechなどが中心。 MXenesはDrexel大がパイオニアであり、先導している。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> 応用研究でも研究の活発な展開が行われており、優れた研究成果を生み出している。 TMDをチャネル材料とするFETデバイス応用研究が加速しており、ポストSi-CMOSテクノロジーとしての議論が活発化している。デバイス応用研究の動向は、エナジーハーベスターへの重点化が目立つ。 カルコゲン化物ナノシートを使った応用研究では多くの先進的成果をあげている。 |

2.5 俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

| | | | | |
|----|---------|---|---|---|
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | → | <p>【EU】</p> <ul style="list-style-type: none"> グラフェンが発見された欧州では、依然として二次元物質の研究がさかんである。二次元磁性体を用いた機能性開拓等で、米国と同様に、二次元物質研究の潮流を作っており、高いプレゼンスを見せると同時に、励起子の電場による駆動・制御といったユニークな研究成果も報告している。巨額の予算を持つ Graphene Flagship が継続中であり、基礎研究に大きな投資が行われている。 <p>【ドイツ】</p> <ul style="list-style-type: none"> Max Planck Institute、大学、Fraunhofer Institute、が相互に役割分担し切れ目のない強固な研究開発体制を構築している。 <p>【フランス】</p> <ul style="list-style-type: none"> スピントロニクス・製膜に特色ある強みを持っている。 <p>【英国】</p> <ul style="list-style-type: none"> 独自の研究所をマンチェスター大学に設置して、研究を進めている。 <p>【スイス】</p> <ul style="list-style-type: none"> 光電子物性、スピントロニクスの分野が強い。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | <p>【EU】</p> <ul style="list-style-type: none"> 2013年にEUでの大型プロジェクト Graphene Flagship (2013～2022、総額10億ユーロ) がスタートし、多くの大学、研究機関の参加のもと応用に向けた様々な分野での研究が展開されており、独自の研究開発でリーダーシップをとりつつある。 <p>【ドイツ】</p> <ul style="list-style-type: none"> Graphene Flagship とパートナーの RWTH (アーヘン工科大学) と AMO GmbH (産学連携オープンイノベーションを促進する非営利団体) とが共同で、Aachen Graphene & 2D-Materials Center を2017年に設立し、CVDによるウェハスケールでのグラフェンおよびTMD等の二次元材料による大規模集積デバイス・回路・システムの先端研究を国家的に推進している。 <p>【英国】</p> <ul style="list-style-type: none"> National Graphene Research Center in Univ. Manchester (Director: Prof. V. Falco、2015年設立、6100万ポンド)、EPSRC (英国工学物理科学研究評議会) による van der Waals ヘテロ二次元材料やフレキシブル光電子材料開拓など総額3700万ポンドをはじめとする総額200億円規模の研究投資を行っている。 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> 応用研究に比較すると基礎研究力は低いが、基礎研究への取り組みも急速に拡大してきており、固体物性実験・理論、材料科学領域でも大きな存在感のある展開をしている。 かつては、国として基礎研究に興味がなく、実用的な研究には多くの予算が与えられるが、予算を与えられない研究者が、お金のかからない基礎研究をするというような様子を感じられた。近年では、米国で有名な成果をあげた研究者が中国の大学で研究室を持ち、基礎研究を主導しているように見受けられる。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> グラフェンの産業化を活発に進めており、特許登録数も世界でトップとなっている。 グラフェンの電池応用、カルコゲン化物ナノシート積層界面を使った素子開発が活発。有望だと狙いを定めたら一斉に集中して類似テーマに取り組む勢いは大きい。 カルコゲン化物ナノシート積層界面を使った素子開発が活発。 |

| | | | | |
|--------|---------|---|---|---|
| 韓国 | 基礎研究 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> 各大学、研究機関で材料科学、物理等のグラフェン研究がさかんに進められていて、二次元強磁性体・反強磁性体の研究や準結晶的構造を持つ30度ツイスト積層2層グラフェンの報告等、独自の研究成果を創出している。 基礎研究が歴史的に重要視されてこなかったが、メディアなどで批判を受け、基礎科学を積極的に推進するための、IBS (Institute of Basic Science) を設立。他の分野同様グラフェンに関する基礎研究の中核を支えている。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> CVD製膜技術が強く、それを活かしたタッチパネル、透明電極関連研究が多い。 Global Frontier Program : Soft electronics (2011～2020、総額81億円) のプロジェクトが行われ、約30の研究グループが参加し、新しいプロセス、デバイス等、フレキシブルエレクトロニクスをめざした研究が展開されている。2012年のSamsungとSung Kyunkwan大の共同による30インチのグラフェンシートのRoll-to-roll製膜はディスプレイ応用に特化した先導的成果として有名である。 |
| シンガポール | 基礎研究 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> グラフェン研究の世界三大センターの1つが存在する。現在はグラフェンからそれ以外 (beyond graphene : カルコゲン化合物ほか) にシフトしている。 有望な研究者が集まってきており、非線形輸送や新しい二次元バレー物質の理論予測と実証、二次元強磁性体のトランジスタ動作と磁性制御等、いくつかの注目すべき成果をあげている。 |
| | 応用研究・開発 | △ | → | 特記事項なし |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

・トポロジカル材料 (ナノテク・材料分野 2.5.5)

参考・引用文献

- 1) L. Li et al., "Black phosphorus field-effect transistors", *Nature Nanotech.* 9 (2014) : 372-377. doi : 10.1038/nnano.2014.35
- 2) M. Naguib et al., "Two - Dimensional Materials : 25th Anniversary Article : MXenes : A New Family of Two - Dimensional Materials", *Adv. Mater.* 26, no. 7 (2014) : 982-982. doi : 10.1002/adma.201470041
- 3) H. Maeda, R. Sakamoto and H. Nishihara, "Coordination Programming of Two-Dimensional Metal Complex Frameworks", *Langmuir* 32, no. 11 (2016) : 2527-2532. doi : 10.1021/acs.langmuir.6b00156

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

- 4) B. Radisavljevic et al., “Single-layer MoS₂ transistors”, *Nature Nanotech.* 6 (2011) : 147-150. doi : 10.1038/nnano.2010.279
- 5) J.-F. Ge et al., “Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃”, *Nature Mater.* 14 (2015) : 285–289. doi : 10.1038/nmat4153
- 6) M. A. Lukowski et al., “Enhanced Hydrogen Evolution Catalysis from Chemically Exfoliated Metallic MoS₂ Nanosheets”, *J. Am. Chem. Soc.* 135, no. 28 (2013) : 10274-10277. doi : 10.1021/ja404523s
- 7) Y. Cao et al., “Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices”, *Nature* 556, no. 7699 (2018) : 43-50. doi : 10.1038/nature26160
- 8) K. L. Seyler et al., “Signatures of moiré-trapped valley excitons in MoSe₂/WSe₂ heterobilayers”, *Nature* 567 (2019) : 66-70. doi : 10.1038/s41586-019-0957-1
- 9) J. C. W. Song and N. M. Gobor, “Electron quantum metamaterials in van der Waals heterostructures”, *Nature Nanotech.* 13 (2018) : 986–993. doi : 10.1038/s41565-018-0294-9
- 10) Nitin Samarth, “Magnetism in flatland”, *Nature* 546 (2017) : 216-217. doi : 10.1038/546216a
- 11) Cheng Gong et al., “Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals”, *Nature* 546 (2017) : 265-269. doi : 10.1038/nature22060
- 12) S. Jiang, J. Shan and K. F. Mak, “Electric-field switching of two-dimensional van der Waals magnets”, *Nature Mater.* 17 (2018) : 406-410. doi : 10.1038/s41563-018-0040-6
- 13) Bevin Huang et al., “Electrical control of 2D magnetism in bilayer CrI₃”, *Nature Nanotech.* 13 (2018) : 544–548. doi : 10.1038/s41565-018-0121-3
- 14) Tiancheng Song et al., “Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures”, *Science* 360, no. 6394 (2018) : 1214-1218. doi : 10.1126/science.aar4851
- 15) Ding Zhong et al., “Layer-resolved magnetic proximity effect in van der Waals heterostructures”, *Nature Nanotech.* 15 (2020) : 187–191. doi : 10.1038/s41565-019-0629-1
- 16) Zaiyao Fei et al., “Two-dimensional itinerant ferromagnetism in atomically thin Fe₃GeTe₂”, *Nature Mater.* 17 (2018) : 778–782. doi : 10.1038/s41563-018-0149-7
- 17) M. Bonilla et al., “Strong room-temperature ferromagnetism in VSe₂ monolayers on van der Waals substrates” *Nature Nanotech.* 13 (2018) : 289–293. doi : 10.1038/s41565-018-0063-9
- 18) Y. Deng et al. “Quantum anomalous Hall effect in intrinsic magnetic topological insulator MnBi₂Te₄”, *Science* 367 (2020) : 895-900. doi : 10.1126/science.aax8156
- 19) Zaiyao Fei et al., “Ferroelectric switching of a two-dimensional metal”, *Nature* 560 (2018) : 336-339. doi : 10.1038/s41586-018-0336-3
- 20) M. P. Levendorf et al., “Graphene and boron nitride lateral heterostructures for atomically thin circuitry”, *Nature* 488 (2012) : 627-632. doi : 10.1038/nature11408
- 21) P. Xiong et al., “Genuine Unilamellar Metal Oxide Nanosheets Confined in a Superlattice like Structure for Superior Energy Storage”, *ACS Nano* 12, NO. 2 (2018) : 1768-1777. doi : 10.1021/acsnano.7b08522

- 22) W. Ma et al., “A Superlattice of Alternately Stacked Ni–Fe Hydroxide Nanosheets and Graphene for Efficient Splitting of Water”, *ACS Nano* 9, NO. 2 (2015) : 1977-1984. doi : 10.1021/nn5069836
- 23) M. Liu et al., “An anisotropic hydrogel with electrostatic repulsion between cofacially aligned nanosheets”, *Nature* 517 (2015) : 68-72. doi : 10.1038/nature14060
- 24) K. Sano et al., “Photonic water dynamically responsive to external stimuli”, *Nature Commun.* 7 (2016) : 12559. doi : 10.1038/ncomms12559
- 25) Y. S. Kim et al., “Thermoresponsive actuation enabled by permittivity switching in an electrostatically anisotropic hydrogel” *Nature Mater.* 14 (2015) : 1002–1007. doi : 10.1038/nmat4363
- 26) K. Sano et al., “Extra - Large Mechanical Anisotropy of a Hydrogel with Maximized Electrostatic Repulsion between Cofacially Aligned 2D Electrolytes”, *Angew. Chem.* 57, no. 38 (2018) : 12508-12513. doi : 10.1002/anie.201807240

2.5.7 複雑系材料の設計・プロセス

(1) 研究開発領域の定義

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。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オペランド観測、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の研究開発課題がある。

(2) キーワード

多元素化、ハイエントロピー、ハイエントロピー合金、準安定相、カクテル効果、触媒、ナノ粒子、ハイスループット材料創製、ハイスループット計測、コンビナトリアル、データ科学、機械学習、能動学習、第一原理計算、量子化学計算、数値流体力学、化学気相成長、オペランド計測、マテリアルズ・インフォマティクス、計測インフォマティクス、プロセス・インフォマティクス、マルチスケールシミュレーション、ロボット科学者、多元系化合物半導体、カルコゲナイド、化合物薄膜太陽電池

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

近年、自動運転に代表される快適なモビリティやIoT/AIなどの利用によるSociety 5.0の実現、SDGs (Sustainable Development Goals、持続可能な開発目標)のもと、CO₂削減に向けた再生可能エネルギーの大量導入や高度なエネルギーマネジメント、製品の製造・使用過程における環境負荷の低減などの様々な社会的要請に応えるべく、材料・デバイスの高性能化・高機能化に対する要求や期待がますます高まってきている。例えば、超軽量素材では高強度かつ高靱性、熱電材料では高電気伝導かつ低熱伝導、といった複数の機能の共存や相反する機能の両立などが、さらなる高性能化とともに要求されるようになってきている。これらの機能材料開発に対する高度な要求に対し、それぞれの応用分野における単純な元素構成、実現容易な安定相（結晶構造）の利用など従来の材料探索範囲での新材料開発は困難になってきている。このため、未知なる可能性を秘めている複雑な組成や未利用安定相の活用など未開拓の材料群へ対象を広げていくことが必要である。また、材料開発競争の激化から、新材料の探索から実際の材料作製に至る材料設計や作製プロセス設計も含めた開発期間の短縮も求められており、応用分野を越えた新材料創製の新たな指針の構築が必要になってきている。このような研究を進めるためには、従来型の専門家の経験や勘に頼った材料探索では、これらの複雑系材料を短時間で探索することは不可能であると考えられ、データ科学を利用した材料設計、プロセス設計、オペランド計測、ハイスループット実験などの新たな研究手法が必要である。また、革新的な複雑系材料開発のためには、原子レベルで物質の結晶構造や局所構造をミクロに設計し作り込むだけでなく、多種多様な安定相を含んだ微細組織や界面などメゾスケールの構造の制御、さらにはバルクの材料（素材）としてのマクロスケールにいたる、階層的な不均一構造について、それらの構造情報や特性の要因を明らかにし、材料設計・プロセス設計へとフィードバックすることが極めて重要となる。

複数機能の共存や相反する機能の両立など、従来の材料にはない高い付加価値を持つ複雑系材料の研究開発は、わが国の産業を支える基盤として、あるいは複雑系材料創製自身がわが国の新しい産業となりうる可能性を秘めており、今後戦略的に推進していくことが重要である。この研究開発領域では、材料探索空間を広げ

るための材料の多元素化やハイエントロピー合金、準安定相の利用、材料作製・評価を効率的に進めるハイスループット実験、作製プロセス中の現象を把握するオペランド計測、適切な製造プロセスを探索するプロセス・インフォマティクス、などを中心に記載する。この領域は、マテリアルズ・インフォマティクス、ナノ・オペランド計測などの技術とも深くかかわってくるが、これらの詳細についてはそれぞれの研究開発領域を参照されたい。

【研究開発の動向】

高性能化や相反する機能の両立など材料に対する高度化した要求は、半導体材料、蓄電池、磁石、構造材料、熱電材料、触媒材料などさまざまな分野にあるが、ここでは多元素化の例として多元系太陽電池材料、ハイエントロピー合金の例として触媒材料、準安定相の利用としてパワーエレクトロニクス用のワイドバンドギャップ半導体について研究開発動向を説明する。

多元系材料を利用することで、太陽電池における高効率化、長寿命化・高信頼化、資源制約回避などのさまざまな要求を同時に満たすことができると考えられる。バンドギャップの異なる複数の層を重ねるタンデム型の太陽電池は変換効率向上が大きく期待されている。現在普及している単結晶・多結晶シリコン (Si) との組み合わせを考えると、結晶構造としてIII-V化合物半導体やCIS(CuInSe)系が有望であるが、一方で希少資源を含むため資源問題がある。このため、新たな化合物半導体の研究開発が必要であり、これまで主に検討されてきたカルコゲナイド(硫化物、セレン化物、テルル化物)に加え、近年、CZTS(Cu₂ZnSnS₄、Cu₂ZnSnSe₄)系材料、CZTSからの派生材料系、新規カルコゲナイド材料、無機ペロブスカイト材料などが研究されている。一例として、CZTS系化合物半導体太陽電池がある。これは日本発の太陽電池であり、CIS系太陽電池のCuInSe₂の派生構造であるが、InのサイトをZnおよびSnが占有する構造のため、希少金属を利用しない材料系である。ただし、変換効率は最高でも12.6%とCIS系太陽電池に比べてかなり低く、深い準位などの制御も含めた4元系の結晶成長・結晶構造の制御法の確立が望まれる。

5種以上の構成元素がおおむね等しい量において原子レベルで混合したハイエントロピー合金が近年注目を集めている。これは2004年に台湾国立清華大の葉均蔚(Jien-Wei Yeh)教授らによって提案された新しいカテゴリーの合金であり、従来の合金に比べて多種の原子が結晶格子内の原子位置において乱雑に配置されることで(配置のエントロピーが大きい)、機械的特性や高温特性に優れ、良い耐腐食性を示すため、高温ガスタービンやエンジン部品などの高温構造材料等の候補として研究が行われている。ハイエントロピーナノ合金の開発および触媒としての利用は歴史が浅く、2018年Science誌に掲載された米メリーランド大学のLiangbing(Bing)Hu教授らによるCarbothermal shock合成法を用いたものが初めての報告例とみられる。この方法では、PtNiやAuCuといった2元系、PtPdNiやAuCuSnといった3元系、PtPdCoNiFeといった5元系、PtPdCoNiFeCuAuSnの8元系ナノ粒子などが報告されている。合成法やその触媒利用に関する報告はここ2、3年で活発化している。触媒としての利用に関しては、高い熱安定性に着目したものやこれまでPtなどの貴金属が使用されてきた反応に利用したものなど多岐にわたるが、単金属触媒の論文に比べて、そのメカニズムを深く議論しているものや、系統的に組成を変化させた研究は少ない。現在の潮流としては、実験ではハイスループット装置を用いて実験数を増やすこと、第一原理計算などでは単金属の吸着エネルギーをもとに、インフォマティクスを利用した組成最適化のアプローチなどが考案されている。京都大学北川宏らのグループでは白金族6元素全てを含んだ白金族ハイエントロピー合金触媒を簡便な液相還元法で合成し、従来の触媒ではほとんど例のない、12電子反応の電気化学的エタノール完全酸化を達成しており、複雑な高難度反応に対して良い触媒が得られる可能性を示唆している。世界的には米国のグループからハイイン

パクトな論文がもっとも多く発表されており、次いでドイツなどの欧州、中国が続く形である。

準安定相の利用の例として、パワー半導体用のワイドバンドギャップ半導体の1つである Ga_2O_3 の研究開発動向について記載する。これまではワイドバンドギャップ半導体としてSiCとGaNが主に研究開発されてきたが、さらに大きなバンドギャップを有し基板の作製が容易ということから酸化ガリウム (Ga_2O_3) が最近注目されるようになってきた。この Ga_2O_3 はさまざまな結晶の形を持っており、コランダム構造 (菱面体晶) の α 型、斜方晶構造の β 型、立方晶の γ 型、 δ 型、六方晶の ε 型がある。このなかで最安定相は β 型であり、単結晶基板が製品化されており、この上でパワーデバイス開発が世界中で活発に行われている。パワー半導体の詳細については研究開発領域「パワー半導体材料・デバイス」を参照されたい。 β 型以外の結晶構造は準安定相であり作製が難しいと考えられてきたが、デバイス構造の視点からは他の半導体とのヘテロ構造が作りやすい α 型が注目される。 Ga_2O_3 とヘテロ構造を作製できる半導体として Al_2O_3 、 Ga_2O_3 、 In_2O_3 が考えられるが、これらの安定相は菱面体晶 (α 型)、斜方晶 (β 型)、立方晶 (δ 型) と、3つとも結晶構造が異なるため、このままの安定相を利用することはできない。しかし、もしコランダム構造 (α 型) の Ga_2O_3 と In_2O_3 が実現できれば、全てコランダム構造を持つ混晶系ができ、GaN系と同様なバンドギャップのエンジニアリングによって、さまざまなデバイスへの展開が期待される。通常MOCVDやMBEを用いた結晶成長ではサファイヤ基板上への α 型 Ga_2O_3 の形成は困難であるが、ミストCVD法により可能となっており、すでにショットキーダイオードなどのデバイスが製品化されている。また、p型の α - In_2O_3 (準安定相) とn型の α - Ga_2O_3 とのヘテロ構造の作製などの研究も進められており、新たなデバイス機能の実現をめざしてこのような準安定相を積極的に利用していくことが行われている。

ハイスループット材料合成については、大きな流れとして2つの方向性があげられる。1つは、コンビナトリアル合成手法を用いて、事前に絞り込んだ探索空間に存在する材料をハイスループットで作製し、同時にハイスループットで特性評価を行う方法である。もう1つは、全自動で自律的に新材料を探索していくclosed loop手法であり、「実験計画策定→合成→評価→実験計画策定」のサイクルを研究者が関与することなく行うことを特徴としている。最近ではデータ科学/人工知能技術の進展もあり、このclosed loop手法が注目されるようになってきている。特に複雑系材料探索においては、元素の組み合わせに加え多くのパラメータ (物質設計やプロセス設計など) を同時に最適化する必要があり組み合わせ数が膨大になるため、非常に有用になると考えられる。一例として、リチウムイオン電池の電池寿命を最大化する材料選定、セル製造、プロセスと制御の最適化を考える場合、寿命を評価するための実験が1回あたり数力月から数年かかる。そのため、必要とする実験の数を減らして効率的に探索空間を絞り込むために、ベイズ最適化などの最適化手法が重要となる。多次元探索空間での探索は、人間には想像しづらく、人間の能力を超えてしまうが、コンピュータは数的手法により多次元空間を最適化することが可能である。このため、複雑系材料探索ではclosed loop手法は不可欠となり、自律的に動作するロボット技術が極めて重要である。すでに、主に欧州を中心にロボット科学者 (Robot Scientist) と呼ばれる自動材料合成ロボットと特性評価、材料予測とを組み合わせた研究が進展をみせている。しかし、欧米では製薬や有機系に特化しており、機能性材料についてはこれからの発展が期待される。

結晶成長過程の準安定構造や発生する結晶歪をオペランド観察する表面X線回折は、これまで有機金属気相成長法 (MOCVD) や分子線エピタキシー法 (MBE) を用いた半導体薄膜や金属薄膜の成長過程の研究で使われることが主流であったが、ここ数年、パルスレーザー堆積法 (PLD) やスパッタ法など成長方法が多様化している。それに伴って材料も強誘電体や有機半導体などにも応用範囲が拡大している。測定方法も、従来のCTR (Crystal Truncation Rods) 散乱や反射率測定から、集光ビームを用いた局所構造解析やX

線光子相関分光法 (XPCS) による表面構造ゆらぎのその場観察にまで発展している。積極的に準安定構造を探索するという立場から、高温高压合成法が注目されている。常圧下では準安定な構造相を、その相が最安定となる高温高压下で合成して急冷し、室温以下の低温で減圧するなどの方法により、常圧相への逆転移を抑制できれば、高压相を準安定状態で回収可能である。ダイヤモンドをはじめとする超硬材料では古くから実績が豊富であり、他の材料系への展開が期待されている。放射光X線を用いると高温高压下のその場X線回折測定が可能であり、反応の進行の様子をその場で観察できるため、高温高压法と放射光その場観察を組み合わせた物質探索研究が精力的に進められている。固相-気相反応により固相が生成するような合成反応は、原理的に高温高压合成法が有利であり、新規酸化物や水素化物、酸水素化物などが実現されている。特に、水素化物分野では新しいクラスの水素化物が多数合成されており、「水素化物ルネッサンス」とも呼べる潮流が生まれている。高温高压合成技術の進歩の一方、その場観察技術に関しては従来の白色X線回折法を利用してきたが、近年、粗大粒観察のための新しい測定手法の開発が求められている。

材料開発におけるプロセス・インフォマティクスは、蓄積したプロセスのデータを活用して目的とする材料作製の適切な製造プロセスを探索する技術であるが、その手法・アプローチは応用・アプリケーションに応じて使用するデータベースの選択によって3つに分類される。1番目は実際の試験や実験、半経験的パラメータを用いた数値流体力学計算 (Computational Fluid Dynamics: CFD) などで得られたデータを使用して製造プロセスの最適化を行うものである。材料開発の事例として、機械学習を活用したSrRuO₃開発があげられる。ある程度のデータ蓄積・実績のある研究を加速する目的であればこのアプローチは有用である。2番目はマテリアルズ・インフォマティクスの延長で行われているプロセス・インフォマティクスであり、量子論にもとづく第一原理計算 (密度汎関数理論、Density Functional Theory: DFT) を用いて仮想空間において所望の物性を持つマテリアル構造・組成を予測し、得られた知見を現実空間にフィードバックする手法である。未知の材料を開拓する目的であればこのアプローチが必要であるが、第一原理計算により得られる物性値は原則として絶対零度 (0 K) における値であるため、その延長で行われるプロセス・インフォマティクスは現実空間と乖離していることを注意せねばならない。3番目が仮想空間と現実空間を結ぶマルチフィジックスシミュレーションにより得られるデータと機械学習を融合させて、製造プロセスのモデル化・定量予測を行うものである。ここで取り組む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の設計を具現化するには、材料製造プロセスの真のモデル化と定量予測が不可欠であり、このアプローチの進展が期待されている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

国際動向として、エネルギー関連材料、構造材料など応用分野を横断した多元素材料やハイエントロピー材料の国際会議が活発化している。例えば、多元素材料の国際会議として、「21st International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-21)」[September 9-13, 2018 in Boulder, Colorado, USA] が開催されており、応用分野としては太陽光発電、熱電発電、電池、発光体、機能材料、超伝導体にわたり、3元および多元素の化合物に関連するトピックをカバーしている。また、ハイエントロピー合金に関するシンポジウムとして、TMS (The Minerals, Metals & Materials Society) やMRS (Material Research Society) などの定期大会だけでなく、「International Conference on High-Entropy Materials (ICHEM 2018)」[February 19-20, 2018 in Paris, France] など独立した国際会議としても多数開催されている。国内でも複雑系材料の設計・プロセスに関する学会活動が活発に

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

なっている。2019年10月の第48回結晶成長国内会議 (JCCG-48) においてシンポジウム「多様な安定相の成長技術と応用」、2020年3月の応用物理学会シンポジウム「多様な安定相のエンジニアリングによる多元系材料の新展開」、2020年9月の応用物理学会シンポジウム「多様な安定相のエンジニアリングの新展開～環境・エネルギーデバイスと材料の未来～」などが開催された。また、2021年3月のThe 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-8) でジョイントセッション「Application of Diverse Stable Phases」が開催予定であり、従来の専門領域の枠を越えたコミュニティ形成が進んでいる。

多元系の太陽電池として近年注目を集めているカルコゲナイドを利用した太陽電池に、3元系のCuSbSe₂化合物および2元系のSb₂Se₃(Sb₂S₃)がある。いずれもSbを利用した化合物でありその結晶構造および原子の配列や結合に大きな特徴がある。その結晶構造は直方晶系であり、ClSeとは異なり2種類の配位構造を有する疑似2次元構造をとる。また、孤立電子対を含みダングリングボンドを形成しないため、多結晶薄膜ではしばしば問題となる粒界での再結合低減が期待されている。また、有機基を含まない完全に無機材料からなるペロブスカイト化合物群は、シリコン太陽電池に迫る高い変換効率を持つ有機・無機ペロブスカイト太陽電池の安定性の問題を解決するものとして期待され、研究が活発になっている。代表的な、有機・無機ペロブスカイトのMAPbI₃のMA基を1族元素で置換したCsPbI₃では、15.7%の変換効率が報告されている。ただし、この系においても重金属のPbが含まれているため、有機・無機ペロブスカイト系と同様に同族のSnによる置換を進める研究も活発に進められている。

米国で毎年開催されている材料学会のイベントであるMRS fall meetingでは、2019年も2018年に引き続きハイエントロピー合金のセッションが開催されており、その他にも、World Congress on High Entropy Alloys (HEA 2019) (November 17-20, 2019, Seattle, Washington, USA) などがあり、米国や欧州でハイエントロピー合金を中心とした学会が多くなっている。多くはバルクのハイエントロピー合金に関する研究であるが、MRSなどでは数件のハイエントロピーナノ合金とその触媒利用についての講演があった。

Closed loopのハイスループット材料合成に関しては、国内外でロボットを活用した実験システムの構築が進められている。国内では、東京工業大学でTiO₂薄膜の電気抵抗を全自動で自律的に最小化する無機材料合成実験を行うシステムが構築され、従来の10倍の実験効率化を実証している。カナダのプリティッシュコロンビア大学では、人工知能 (AI) アルゴリズムによって制御されたロボット「Ada」を開発している。導電性フィルム開発を対象として、溶液の混合、フィルムのキャスト、熱処理などの材料合成や、フィルムの導電性テスト、微細構造評価を自動で行い、さらに実験結果の自動解釈と次の合成条件の決定という自律的なサイクルを可能にすることで、以前は9カ月かかっていた材料開発期間を5日間に短縮可能にしている。また、英国のグラスゴー大学では、IoTに用いられる安価な機器を用いて、手頃な価格 (500ドル未満) で化学実験が可能なロボットを開発し、インターネット接続された2台のロボットで複数の化学合成プロセスを共同で行うことが可能にしている。また、リバプール大では、mobile robotic chemist と呼ばれる可搬型で自律的に実験機器間を移動し実験を行うロボットを開発した。実験装置を自動化するのではなく、自由に動くことのできるロボットで研究者・作業者の代わりに務めさせるというモジュール型のアプローチであり、今後の展開が期待される。

先にも述べたが、第一原理計算により得られる物性値は原則として絶対零度 (0 K) における値であるため、その延長で行われるプロセス・インフォマティクス (マテリアル製造プロセスの探索) は現実空間 (実際の実験) と乖離している。この仮想空間と現実空間の乖離を補正するために、例えば、遷移状態理論を用いた化学気相成長 (CVD) のプロセス解析が行われている。しかし、複雑な気相反応を伴うCVDプロセスを遷移

状態理論で網羅的に解析することは困難であるため、2001年に気相の自由エネルギーを考慮した第一原理計算が提案され、近年、その理論が体系化されてきている。その理論を用いてCVDにおける表面反応を第一原理的に議論し、意図しない不純物取込みのプロセス解明もなされている。

作製プロセス中のオペランド計測においては、固体/液体界面の秩序構造や成長表面の局所的なゆらぎの観察などができるようになってきている。これまで、結晶成長条件下での界面の原子配列をその場観察した報告はなかったが、フランスのESRF (European Synchrotron Radiation Facility) のグループは窒化ガリウム (GaN) のバルク成長においてCTR散乱 (X-ray crystal truncation rod scattering) をその場測定し、固体/液体界面で形成される原子の秩序構造を決定することに成功している。また、従来の表面X線回折はミリ～サブミクロンスケールの入射X線を用いることでブラッグ反射やCTR散乱をその場測定し、入射X線の照射領域に対応する結晶成長表面の平均的な構造変化を観測することが主流であったが、入射X線に位相のそろったコヒーレントX線を利用し、X線光子相関分光法 (XPCS) によって結晶成長表面の局所的な構造ゆらぎをその場観察する手法を報告している。高温高压合成法においては、高エネルギー対応の2次元検出器を用いた粗大粒の観察が可能になりつつある。高温高压法による水素吸蔵合金の開発では、最近、アルミニウムと3d遷移金属を組み合わせた合金が水素化物になることが複数発見され、従来は水素化物にはならないと考えられていた金属も水素化物を形成することが分かってきた。

【注目すべき国内外のプロジェクト】

先に述べたように、国内外において、多元化合物やハイエントロピー合金など複雑系材料に関しては応用分野を越えて学会の活動が活発化しているが、複雑系材料の設計・制御による未開拓の材料創製空間への展開といった視点で、複雑系材料の設計、作製プロセス制御、オペランド計測、ハイスループット実験、プロセス・インフォマティクスなどの研究開発を統合的に含むような施策・プロジェクトはまだ存在しない。国内でこの領域に関連するものとしては、ハイエントロピー合金に関する新学術領域研究「ハイエントロピー合金～元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理～」が2018年より立ち上がり、ナノ粒子、ナノポーラス材料としての研究が進められている。また、オペランド計測に関しては、新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」、「ハイパーマテリアル」等で、計測班といえるものが立ち上がっており、これらのなかで「その場測定」は主要なキーワードになっている。プロセス・インフォマティクスに関しては、文部科学省の「材料の社会実装に向けたプロセスサイエンス構築事業」、「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発～中核拠点 (主課題c) : インテリジェント・マニュファクチャリング実現のための結晶成長過程コンピュータシミュレーション技術の構築～」、「スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム～省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション～」、新学術領域研究「特異構造の結晶科学 完全性と不完全性の協奏で拓く新機能エレクトロニクス ～計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計～」などにおいて部分的に研究開発が始動している。

新材料創出にかかわる文部科学省の「元素戦略プロジェクト」(2007年～) は産学官連携型、CREST・さきがけ (JST)、研究拠点形成型と発展して継続的に推進され、希少元素代替など多くの成果をあげてきている。一方、本研究領域は未踏材料空間の拡大をめざして、元素の多様な組み合わせや構造、結晶相まで活用していくものであり、元素戦略の発展形とみることもでき、日本の材料技術のさらなる強化に向けて、早期の施策・プロジェクト化が望まれる。なお、米国では、オバマ政権が2011年に発表した「Materials Genome Initiative (MGI)」においてマテリアルズ・インフォマティクスの推進を打ち出し、日本をはじめ世界中でマテリアルズ・インフォマティクスの取り組みが活発になった。このイニシアティブは5年間で終了し、政策上は

後継が顕在化していなかったが、NISTや大学での活動は大変活発で継続されており、米国大統領科学技術諮問会議（PCAST）が2020年6月に発出したレポートにおいて、ポストMGIとして強化すべきことが指摘されており、施策化の動きなどに注意しておく必要がある。

（5）科学技術的課題

多元系化合物薄膜太陽電池のような多元素系材料・デバイスの開発においては、性能を支配している要因を科学的に解明し、その知見にもとづき普遍的な開発指針を確立することが望まれるが、その際の重要な技術の1つが熱力学的な相の制御技術であろう。準安定相などの多種多様な安定相の設計と制御を行う指針、および実際にそれらを実現するための作製プロセス技術の創出が必須であり、マテリアルズ・インフォマティクス、プロセス中のオペランド計測、プロセス・インフォマティクス、それらにもとづく高度なプロセス制御技術の開発を進めていくことが不可欠である。

ハイエントロピー合金のナノ粒子化および触媒利用における課題としては、効率的な材料探索であり、インフォマティクスの利用や、新しい理論的な方法論、ハイスループット合成装置の利用などが必要となると考えられる。また、理論的モデルの検証には実際の構造を原子レベルで同定することも必要になると考えられる。しかし、ナノサイズと多元素ということがハードルとなり、電子顕微鏡やX線などを用いた各元素の状態を調べることは困難になると考えられる。これを乗り越えるには、材料開発の方法論だけではなく、微量の原子を正確に同定する技術の開発や検出器の性能向上などハード面での進歩も必須となると考えられる。

新たな準安定相などの新物質探索・創製に有効な高温高压合成においては、高エネルギー対応の2次元検出器を利用した高温高压その場観察技術の開発が重要になる。高温高压水素化合物探索研究は水素貯蔵やイオン伝導、高温超伝導など、インパクトが多方面にわたり、世界的にみても日本の競争力が高い分野であるので、今後も取組を強化すべきである。

複雑系材料の結晶成長プロセスは基本的には反応炉の中で、(1) 気相反応、(2) 表面反応、(3) 固相拡散などの素過程を経て進行する。これまで、個々の素過程に焦点を絞った理論解析は行われているが、それらを統合したマルチフィジックスシミュレーションはまだ完成の域に達していない。すでに要素技術は開発されているので、それらを統合した物理モデル構築が望まれる。また、反応炉内の正確なガス組成分析技術が開発されているので、マルチフィジックスシミュレーションを実装したCFD（Computational Fluid Dynamics）計算との直接比較により物理モデルの妥当性の検証および改良が期待される。これによりプロセス・インフォマティクスのフレームワークを構築し、複雑系材料への応用展開が進むと考えられる。

インフォマティクスとロボットの統合による実験の自動化に加え、コモディティ（汎用）化された計測（放射光実験であればX線回折やXAFSなど）の自動化だけでなく、先端的な計測を自動化するための必要技術について検討し開発する必要がある。物質合成・試料加工・マクロ物性測定（輸送特性、磁気特性など）・ミクロ物性測定（X線構造解析、光電子分光、XAFSなどによる電子状態解析）を一気通貫かつ自動で行うためのclosed loop統合システムの実現や、このようなシステムを用いた新物質・材料開発の加速も重要である。また、物質・材料データベースと材料合成システム、計測システムの統合も重要であり、これまで実験者のノウハウとして暗黙的に取り入れられてきた知見・知識を材料合成、計測に明示的に導入することで、実験を効率化することが可能になると期待される。

（6）その他の課題

近年、欧米においては、先端的な分光研究者と材料・デバイス研究者の連携が活発化しており、これが関

連分野における欧米の優位性の向上につながっている。一方、これまでの日本国内における放射光計測技術の利用は、計測技術の開発を行っている研究者やその周辺に限定されることが多く、材料・デバイス研究者との密接な協力体制の整備は進んでいない。現場のニーズをくみ取る仕掛けや複眼的なアプローチで議論できる仕掛け（コミュニティの形成）を作り、政策的にもこのような連携を加速することが必要である。また、材料系、情報系の専門性を持つ人材が不足しており、企業側の人材需要に対して大学側の人材供給が追いついていない状況である。複雑系材料の設計・プロセスに関する大型プロジェクトや産学共同研究などを通して材料・情報に専門性を持つ若手・博士人材を育成していくことが必要である。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|---|
| 日本 | 基礎研究 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> ・新学術領域研究をはじめ、ハイエントロピー合金という領域が表に出てきてはいるが、その触媒応用は徐々に始まった状況である。 ・その場観察についてはSPring-8、PF、UVSORなど8つの放射光施設で研究が進められている。 ・応用物理学会などで多元素化、準安定相、ハイエントロピー合金などに関する複数のシンポジウムが開催され、活動が活発化している。 ・マテリアルズ・インフォマティクスやハイスループット実験が、基礎研究にはあまり取り入れられていない。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> ・触媒への応用に興味を示す企業が散見されるが、実際に表に出てきている状況は少ない。 ・伝統的に産業界の寄与が強い。計測分野でもSPring-8のFSBL、サンビーム、産業利用BL、豊田BLのほか、あいちシンクロトロン光センター等において産業界の利用がある他、その効率化等において企業の参画が見られる。 ・ソーラーフロンティアがNEDO事業も活用してCIS系太陽電池開発をしており、1GWスケールの量産に世界で唯一成功している。 ・主に産業界でマテリアルズ・インフォマティクスやハイスループット実験への期待が大きく、他国と比べても、これらの分野への集中的な人員配置などが行われている。 |
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | → | <ul style="list-style-type: none"> ・研究成果がトップジャーナルで確認できる。特殊な方法でも製造法も量産化を狙った技術もあり、もっとも進んでいるといえる。 ・APS、ALS、NSLSIIなどを中心に計測分野の研究が進められている。米国発の技術は多数あり、Bragg-CDI法のin-operando/in-situへの投入など質の高い研究を継続的に輩出している。 ・CdTe太陽電池についてはサンショットイニシアチブの下で、基礎研究も含めて研究開発が継続して続けられている。 ・マテリアルズ・インフォマティクスやハイスループット実験についてはMGIによるアドバンテージが大きい。基礎的な領域の研究に強みがある。ロボット科学者に関する研究はあまり行われていない。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | → | <ul style="list-style-type: none"> ・主要な研究グループには多数の企業から資金提供があるようで、応用研究も進んでいると見受けられる。 ・APSやALS、NSLS II等で産業利用プログラムが準備されている。 ・ファーストソーラー社がCdTeの太陽電池の量産に世界で唯一成功している。 ・圧倒的なAI技術と組み合わせMI分野で世界をリードしている。 |

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

| | | | | |
|----|---------|---|---|--|
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 理論をはじめ、触媒としての応用の基礎学理の構築がドイツ、デンマークを中心に進んでいる。 ESRF、Diamond、SLSなどを中心に計測分野の研究が進められている。 欧州では化合物太陽電池関係の国際会議が数多く開催されている。 ロボット科学者による自律的な科学実験や材料探索について英国が圧倒的に強い。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 米国同様、企業との連携があるように思われる。 ESRFのhighlightではセラミック燃料電池や触媒等、エネルギー分野における産業利用例が紹介された。産業利用事業収入(300 M ユーロ)との記述もある (FY2018版)。 Horizon 2020においては、CIS系太陽電池およびCZTS太陽電池の研究開発が進められた。とくに、CZTS太陽電池についてはいくつかのプロジェクトが同時に実施され現在にいたっている。 材料分野では、産業界が積極的にロボット科学者やマテリアルズ・インフォマティクスを活用する方向性が見えていない。 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 米・欧に次いで、学術論文が多く見られる。トップジャーナルも散見される。 SSRFを中心に計測分野の研究が進められおり、エネルギー、高分子分野で成果が見られる。 化合物薄膜太陽電池に関してPVSEC、IEEE-PVSC、EU-PVSECなどでも積極的に発表しており、基礎研究の実力も高まっている。 マテリアルズ・インフォマティクスについては、非常にさかんに研究が行われており、論文数も圧倒的に多い。中国国内でのAI技術も強い。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 特別目立った動きは見られないが、米国で最先端の研究を行っているグループは中国系であることを考えると、様々な連携があると予想される。 関連論文に企業からの著者が入っている例は限定的である。 シリコン太陽電池はほぼ中国で生産されており、化合物薄膜太陽電池についても生産地の中心という特徴を生かして中国企業が欧米の企業を傘下に入れ、研究開発を加速させている。 ロボット技術の進展のスピードが他国を圧倒している。 |
| 韓国 | 基礎研究 | △ | ↗ | <ul style="list-style-type: none"> 論文ではほとんど目立った成果は見えていない。 PLSにoperandoのプラットフォームとなるビームラインの整備が進められている。 近年はCZTS太陽電池についても研究開発が急速に進み世界をリードしている。 AI利用 (特に深層学習) に集中している。 |
| | 応用研究・開発 | △ | → | <ul style="list-style-type: none"> 論文同様目立った成果は見えていない。 関連論文に企業からの著者が入っている例は限定的である。 スタートアップ企業も含め化合物薄膜太陽電池そのものを生産する企業は存在しない。 基礎研究同様に深層学習に集中している。マテリアルズ・インフォマティクスのベンチャーを立ち上げる動きはある。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発 (プロトタイプの開発含む) の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

- ・データに基づく問題解決 (システム・情報分野 2.1.6)
- ・パワー半導体材料・デバイス (ナノテク・材料分野 2.1.3)
- ・元素戦略・希少元素代替技術 (ナノテク・材料分野 2.5.2)
- ・マテリアルズ・インフォマティクス (ナノテク・材料分野 2.5.3)
- ・フォノンエンジニアリング (ナノテク・材料分野 2.5.4)
- ・ナノ・オペランド計測技術 (ナノテク・材料分野 2.6.3)

参考・引用文献

- 1) J.-W. Yeh et al., "Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements : Novel Alloy Design Concepts and Outcomes", *Advanced Engineering Materials* 6, no. 5 (2004) : 299-303. doi : <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
- 2) Y. Yao et al., "Carbothermal shock synthesis of high-entropy-alloy nanoparticles", *Science* 359, no. 6383 (2018) : 1489-1494. doi : [10.1126/science.aan5412](https://doi.org/10.1126/science.aan5412)
- 3) Yonggang Yao et al., "High-throughput, combinatorial synthesis of multimetallic nanoclusters", *PNAS*, 117, no. 12 (2020) : 6316-6322. doi : <https://doi.org/10.1073/pnas.1903721117>
- 4) Dongshuang Wu et al., "Platinum-Group-Metal High-Entropy-Alloy Nanoparticles", *J. Am. Chem. Soc.* 142, no. 32 (2020) : 13833-13838. doi : [10.1021/jacs.0c04807](https://doi.org/10.1021/jacs.0c04807)
- 5) P. M. Attia et al., "Closed-loop optimization of fast-charging protocols for batteries with machine learning", *Nature* 578 (2020) : 397-402. doi : <https://doi.org/10.1038/s41586-020-1994-5>
- 6) H. Suzuki et al., "Coherent strain evolution at the initial growth stage of AlN on SiC(0001) proved by in-situ synchrotron X-ray diffraction", *Appl. Phys. Express* 13, no. 5 (2020) : 055501. doi : <https://doi.org/10.35848/1882-0786/ab84bf>
- 7) R. Mohtadi and S.I. Orimo, "The renaissance of hydrides as energy materials", *Nat. Rev. Mater.* 2, no. 3 (2017) : 16091. doi : [10.1038/natrevmats.2016.91](https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.91)
- 8) Y. K. Wakabayashi et al., "Machine-learning-assisted thin-film growth : Bayesian optimization in molecular beam epitaxy of SrRuO₃ thin films", *APL Materials* 7 (2019) : 101114. doi : [10.1063/1.5123019](https://doi.org/10.1063/1.5123019)
- 9) S. Kajita et al., "A universal 3d voxel descriptor for solid-state material informatics with deep convolutional neural networks", *Scientific Reports* 7, no. 1 (2017) : 16991. doi : [10.1038/s41598-017-17299-w](https://doi.org/10.1038/s41598-017-17299-w)
- 10) Daisuke Sinohara and Shizuo Fujita, "Heteroepitaxy of Corundum-Structured α -Ga₂O₃ Thin Films on α -Al₂O₃ Substrates by Ultrasonic Mist Chemical Vapor Deposition", *Jpn. J. Appl. Phys.* 47, no. 9R (2008) : 7311. doi : <https://doi.org/10.1143/JJAP.47.7311>
- 11) B. P. MacLeod et al., "Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials", *Science Advances* 6, no. 20 (2020) : eaaz8867. doi : [10.1126/sciadv.aaz8867](https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

- 12) D. Caramelli et al. “Networking chemical robots for reaction multitasking”, *Nature Commun.* 9, no. 1 (2018) : 3406. doi : 10.1038/s41467-018-05828-8
- 13) *Epitaxial Growth of III-Nitride Compounds : Computational Approach*, T. Matsuoka and Y. Kangawa ed., vol. 269, Springer Series in Materials Science (Switzerland : Springer International Publishing, 2018).
- 14) A. E. F. de Jong et al., “Complex geometric structure of a simple solid-liquid interface : GaN(0001)-Ga”, *Phys. Rev. Lett.* 124 (2020) : 086101. doi : <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.08610115>
- 15) G. Ju, D. Xu et al., “Coherent X-ray spectroscopy reveals the persistence of island arrangements during layer-by-layer growth”, *Nat. Phys.* 15, no. 6 (2019) : 589-594. doi : <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0448-1>

2.5.8 ナノ力学制御技術

(1) 研究開発領域の定義

材料が本来持つ力学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。マクロな材料力学特性に関して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」の3つを取り上げる。ナノスケールでのその場計測下の力学実験技術、力学解析法、シミュレーション技術、そこを起点としてマクロスケールにおける力学特性の理解への橋渡しなどの研究開発課題がある。

(2) キーワード

マルチスケール解析、ナノ構造、ナノ界面、オペランド計測、ナノ計測、接着界面、分子接着技術、マルチマテリアル化、キッキング・ボンド、トライボ化学反応、表面テクスチャ、コーティング、固液界面、超低摩擦、自己修復、水素結合、動的架橋、超分子

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

材料が本来持つ力学機能を最大限まで引き出すためには、従来行われてきた現象論・経験則によるアプローチから脱し、ナノスケールにおける力学的な相互作用にまで立ち戻り、それを出発点としてマクロな力学特性の発現メカニズムを体系的に理解することが重要である。それによって、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ことができるようになる。ナノスケールにおける非平衡・散逸・非定常状態も含めた現象メカニズムの解析結果を起点とし、ナノスケール～メソスケール～マクロスケールの各階層構造の枠を超えたトランススケールな解析を行うことが重要である。本章では、マクロな材料力学特性に関して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」の3つを取り上げる。

• 接着

次世代型の自動車や航空機などの輸送機器におけるCO₂排出量の削減を目的として、マルチマテリアル化による軽量化を実現するためのキーテクノロジーとなる異種材料接着に注目が集まっている。しかし、現状では信頼性の観点から、ボルト・リベット等を併用せざるをえず、軽量化効果が不十分である。界面の直接評価法の確立や、官能基レベルから巨視的なサイズまでの空間スケールに時間を考慮した4次元マルチスケール解析にもとづく、材料の寿命評価と信頼性確保が実現されると軽量化が実現し、燃費向上による省エネ化、低炭素化への貢献が大きい。

また、次世代接着技術として、タフネス性、自己修復性や易解体性等の新しい機能の付与、さらには、接着剤の脱石油化をめざした研究開発も必要とされる。接着技術に関連するユーザー企業は多種多様であり、自動車、車載機器、ディスプレイ、ジェルネイル、衛生材料、衣服や瓶のラベルなど、その出口は多岐に渡る。

• 摩擦・摩耗

機械システムがその機能を実現するために動く箇所には必ず「摩擦」が発生し、それはエネルギー損失の

大きな要因となる。現在の自動車において、燃料の約1/3はエンジンや変速機、タイヤなどにおける摩擦損失によって消費されている。摩擦制御技術は、自動車、家電、情報機器、産業用ロボットなど機械産業機器、生活環境におけるエネルギー高効率化の鍵を握る。一方、機械システムの故障や寿命の原因の75%は摩擦により引き起こされる「摩耗」に起因しており、耐摩耗技術は、コスト損失や時に重大事故の抑制など機械システムの信頼性と耐久性の鍵を握る。

しかし、摩擦と摩耗は、個別の材料の特性ではなく、接触条件や環境など多様な因子に敏感に左右されるシステムの応答特性であり動的変化を伴う複雑系の現象であるため、ナノスケールでの構造や挙動に関する科学的知見とマクロな摩擦摩耗現象を制御する技術開発の間には大きな乖離がある。マクロスケールの現象をナノスケールでの現象まで立ち戻っての理解を基盤とする合理的な設計論による開発の加速が重要となる。

• 自己修復

材料の自己修復が可能になれば、メンテナンスの費用が大幅に削減できるだけでなく、材料の長寿命化を通じてCO₂の削減にも大きな効果が期待される。また、宇宙空間や深海など、通常のメンテナンスが困難な応用先では特に重要な技術と考えられる。

自己修復現象はマクロな力学特性であるが、それを実現するためには、ナノおよびマイクロスケールの原子・分子の構造または高次構造と、そのダイナミクスが決定的な役割を果たす。したがって自己修復現象を科学的に理解し、その修復の程度や速度を制御するためには、ナノとマクロをつなぐ時空間の階層構造に関する学理、それぞれの時空間スケールをカバーする測定手法の開発、マルチスケールシミュレーションなどの基礎研究が必要となる。

[研究開発の動向]

持続可能社会を実現するためには、素材産業や機械産業に対するCO₂排出量削減や低消費電力化などの環境低負荷に向けた要求がますます高まり、素材が持つ性能を極限まで引き出す機械機器設計が求められている。いわゆる「限界設計」の時代に突入しつつある今、社会的な要求を満たすためには、高性能な材料開発はもちろんのこと、それらの機能発現メカニズムの本質的な理解を通じた材料の余寿命予測技術の確立、さらに最終製品の信頼性や耐久性を担保できる新しいサイエンスが求められている。そのため、現象論的なマクロ特性の解析のみならず、ナノスケールにまで掘り下げた詳細な機能発現の原理解明が必要となり、機械工学や流体工学などのマクロスケール現象を取り扱う研究者・研究分野と、化学や物理などのナノスケール現象を取り扱う研究者・研究分野の協働が重要になってきている。個々の研究分野においては、データ科学やシミュレーション技術も駆使してナノとマクロの両方からのアプローチをすることによって革新材料の創製をめざす動きが徐々に始まっている。

• 接着

接着では、被着体の表面と接着剤が密接に接触しているにもかかわらず「キッシング・ボンド」と呼ばれる弱い結合状態の影響や長期使用等による接着界面の劣化によって破壊強度が大幅に低下する場合がある。しかしながら、接着界面の状況を外から直接観測することが困難なため信頼性を担保できないという大きな課題を抱えている。また、接着界面を分子からマクロまでのマルチスケール、さらには、時間を考慮した4次元で解析する技術も達成されていない。これらの状況が、接着界面での破壊挙動はもちろん、接着機構すら理解できていない状況を生んでいる。人命にかかわるモビリティ分野をはじめ、幅広い分野に接着技術を導入

するには、学理にもとづく強度や耐久性の保証およびそれらにもとづいた健全性や信頼性が求められる。具体的には、接着現象を、分子中の官能基の配向状態から巨視的な力学強度までのマルチスケールな空間で、かつ、時間変化で包括的に解析し、その発現機構を明らかにする必要がある。これらを分子設計に活かすことで、これまで達成できなかったレベルの接着が可能となる。さらには、高強度や高耐熱性はもちろん、全く新しい機能、例えば、タフネス性、自己修復性、易解体性なども接着技術に導入されることが期待される。これらの新しい知見を、これまで蓄積してきた構造接着分野のさまざまな知見と融合させることで基盤技術として体系化し、社会実装に応用することが望まれる。

・摩擦・摩耗

1980年代末頃の磁気記憶装置の急速な発展時の小さな接触面でのゼロ摩耗の要求が、マイクロおよびナノスケールでの摩擦・摩耗制御技術と原子・分子レベルでの摩擦・摩耗メカニズムの科学的解明に取り組むきっかけとなっている。ものづくりとして実用化される表面では、均質な表面であることはなく、また取り巻く環境はさまざまであり、さらに、摩擦エネルギーにより表面は常に変化するため、実際の表面では科学と技術のギャップは大きい。特に、摩擦および摩耗過程では、環境の影響も相まってさまざまな化学反応（トライボケミカル反応）が発生する。その結果として形成されるナノメートルオーダーの表面層の理解が、摩擦・摩耗解明のためには不可欠となる。また、摩擦と摩耗の動的な現象を真に理解するためには、in situ 観察技術が必要であり、光干渉法、分光法、TEM、振動分光法、その場放射XRD等の最先端の表面評価装置と摩擦摺動部を組み合わせた摩擦界面のin situ 観察技術の開発が国内外で進んでいる。

摩擦がゼロに近づく現象およびそのアプローチを超潤滑（Superlubricity）と呼び、マイクロ・ナノスケールにおいて多くの注目を集め数多くの研究が推進されてきた。その発現機構については科学的な解明が進む一方で、超潤滑の最終的な目的である超低摩擦と超低摩耗を備えた有望な機械システムの設計への展開は依然として困難な状況であり、課題となっている。

・自己修復

自己修復材料の対象は、有機・高分子材料と無機材料に大別できる。有機・高分子材料の自己修復としては、もっとも大きな応用分野が自動車などの自己修復コーティングである。すでに各自動車メーカーからトップコートのオプションとして高級車に導入されており、最近では携帯電話などにも展開している。このような自己修復コーティングのほぼ全ては、軽微な擦り傷が時間とともに修復するものであり、変形した高分子の形状が自然に元に戻る物理的な自己修復である。ヤング率が低い柔らかい高分子では当然のことであるが、比較的硬いコーティング用の高分子材料で実現することに意義がある。しかし、硬い高分子材料で高い復元性と速い復元速度を低温で両立することは今でも困難であり、架橋密度の制御、水素結合の部分的導入、トポロジカル超分子の利用など新しい技術を導入しながら現在もさかんに研究されている。これに加えて最近では化学的な自己修復が注目されている。化学的な自己修復のなかには、水素結合、疎水性相互作用、結晶化、ホストゲスト相互作用などのさまざまな非共有性相互作用を用いるものや、エステル交換反応、Diels-Alder反応などの動的結合を利用するものなどさまざまな研究成果が報告されている。典型的な例として、完全に切断した後、切断面を密着すると、比較的短い時間と室温程度のマイルドな条件で元の強度まで修復する材料が多数、報告され大きな注目を集めている。

無機材料分野である自己治癒セラミックスの研究開発については、おおむね3世代に分けることができる。第1世代は、亀裂の入ったセラミックスを再焼結することによる亀裂の再接合の現象解析を中心に研究開発が

行われた。この段階は自己治癒性を積極的に活用した材料設計がなされたわけではない。第2世代は、SiC粒子の高温酸化を利用した自己治癒セラミックスなどであり、粒子分散材と分散質の化学反応を活用した亀裂の再接合現象を中心に研究開発が行われている。第3世代は想定される用途に合わせて自己治癒機能を発現する最適な化学反応を選定し材料設計を実施するものであり、長繊維強化自己治癒セラミックスが代表例である。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

• 接着

接着現象においてその理論強度は、界面における接着剤と被着体の分子間相互作用に帰属するが、接着剤の架橋反応によって誘起されるメゾスケールでの不均一構造による応力集中は接着強度を低下させる。また、剥離過程での亀裂の進展速度は、接着界面の破壊靱性に影響を与える。このように、接着メカニズムを理解するためにはマルチスケール解析が必要になる。

原子・官能基スケールでは、イオンスパッタリングを併用したX線光電子分光 (XPS) および放射光を用いたXPS測定による接着界面の化学状態とその空間分布の分析や和周波発生 (SFG) 分光測定による官能基の配向状態分析が実施されている。また、理論接着強度は第一原理計算にもとづく検討が始まっており、密度汎関数 (DFT) 計算による接着界面の構造最適化や反応の遷移状態解析、接着界面の結合エネルギーなどによる金属やフィラーと高分子あるいは高分子同士等の異種・同種材料間での理論接着強度が明らかにされている。

ナノスケールでは、化学状態の面内分布を非破壊で評価するための新しいX線イメージング法や共焦点レーザーラマン分光等の解析技術を動的過程にも適用することで、劣化や破断等による接着界面の変化をその場観察する試みが始まっている。また、全原子分子動力学 (MD) により、分子配向の面内分布を評価し、計算結果と実験結果を比較検討することで、接着界面における現実的な化学状態が明らかになりつつある。

メゾスケールでは、接着剤の架橋反応により生じた界面不均一構造は、量子ビーム (放射光・中性子) を用いた散乱・反射率測定による逆空間観測、走査・透過電子顕微鏡 (SEM、TEM) を用いた実空間観察、および粗視化MD計算による評価が始まっている。

マクロスケールにおいては、電子顕微鏡内に力学試験機を導入し、マイクロビームX線などにより界面剥離のその場観察を行うことで、亀裂進展と構造変化の関係が検討され始めている。また、ミクロスケールの力学応答を与えるシミュレーション手法も開発し、これに有限要素解析 (FEM) を適用することで、破壊過程の再現が試みられている。

接着現象の本質的理解にもとづく、さらなる耐熱化・高強度化のための接着剤の分子設計も進んでいる。また、しなやか・タフネス性や自己修復性は、耐熱サイクルや振動外乱対策における新たな設計概念であり、マルチマテリアル化を加速させるために重要である。易解体性の実現は、部材組立時の歩留まり向上や使用後部材のリサイクル化の意味で重要である。また、バイオベース接着剤の開発は、エネルギーアクセスや環境問題に直結する。

• 摩擦・摩耗

中性子測定とミュン粒子測定を組み合わせることによって摩擦現象の解明をめざす研究や、摩擦下での化学反応ダイナミクスを解明可能な反応力場分子動力学シミュレータにより摩擦下で発生するトライボエミッション現象のメカニズムを明らかにする研究が実施されている。

また、超低摩擦現象については、摺動面の直接観察にもとづき相界面の構造、機構を解明し制御すること

によりマクロな摩擦特性の制御を試みた研究や、摩擦によって自己形成されるナノ界面に着目した研究が実施されている。後者では、機械、材料、計測、計算分野の融合による摩擦現象の解明による低摩擦の合理的な設計が推進されている。

材料としては、濃厚ポリマーブラシやイオン液体による潤滑効果の研究が進められている。濃厚ポリマーブラシは、固体表面の表面修飾、低摩擦化材料ならびに生体内潤滑モデルとして世界的に大学を中心に研究されてきているが、耐荷重性に乏しく実用化には限界があるものであった。これに対し、京都大学の辻井敬亘らのグループは濃厚ポリマーブラシの厚膜化に成功し、膨潤溶媒にイオン液体や潤滑油を利用することも可能になり、実用化に向かって進展している。

• 自己修復

有機・高分子材料の自己修復としては、動的結合を利用したものがさかんに研究されている。LeiblerらフランスCNRSのグループのエステル交換反応で自己修復するヴィトリマーと呼ばれる熱硬化樹脂や、東京工業大学の太塚英幸らのグループのジアリールビベンゾフラノンの動的結合を利用した例などがあげられる。また、水素結合を利用した自己修復材料では、理化学研究所の相田卓三らのグループが、ガラス状の硬い自己修復材料の合成に成功した。従来の有機・高分子の自己修復材料は、弾性率が低い柔らかい材料に限定されていたが、ポリエーテルにチオ尿素を導入することで、硬い材料でありながら、室温で数時間圧着するだけで強度が元に戻ることができる。ちなみに水素結合を用いた自己修復材料としては、Leiblerらと共同しながらアルケマ社が「Reverlink®」という製品を実用化している。

一方、超分子の包接錯体やロタキサンを利用した自己修復材料が大阪大学の原田明らのグループによって開発されている。ゲルやエラストマーで完全に切断した状態で、切断面に少量の水分を与えると瞬時に接合し、ほとんど元の強度を回復する。その他、理化学研究所の侯召民らのグループでは、希土類金属触媒を用いた極性オレフィンとエチレンとの精密共重合によりランダムブロックコポリマーを用いた自己修復材料の合成に成功した。これは水中でも自己修復する点に特徴があり、耐環境性に優れていることから、様々な分野での応用展開が期待されている。

無機材料系自己治癒材料の研究開発において注目される動向として、自己治癒材料の微構造制御を積極的に取り入れるアプローチがある。横浜国立大学の中尾航らが発表した長繊維強化自己治癒セラミックスは、自己治癒エージェントを強化材であるセラミックス繊維束と母材との界面に偏在化させることにより、強度、破壊靱性と自己治癒機能との共生を可能としている。また、サーキュラーエコノミーに対応する材料技術として、外因的刺激を受けて自己治癒機能を発現する材料が再注目されている。特定の外因的刺激（高電圧負荷やマイクロ波照射）などを行うことで、部材を再度健全な状態に戻すことが可能であるため、再利用が可能になる。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

• 接着

[日本] CO₂削減の重要性が世界規模で取り上げられ、自動車や航空機など輸送機器の軽量化のために「接着」にかかわる取り組みがさかんである。

NEDOの「革新的新構造材料等研究開発」(2011～2022年度)では、新構造材料技術研究組合(ISMA)において接着関連技術の研究開発が行われている。特に、異種材料接合のための構造材料用接着技術の開発を進め、2023年以降の事業化をめざしている。

内閣府戦略的イノベーションプログラム (SIP) では、「革新構造材料」(2013～2019年度) や「革新的設計生産技術」(2014～2018年度) の取り組みが行われており、軽量で耐熱・耐環境性に優れた材料の開発と航空機等への実機適用が検討されている。さらに、産総研に接着・界面現象研究ラボを設立し、接着・接合技術コンソーシアム (T-CAB) が動き出し、接着界面の分析や強度・信頼性評価への取り組みが行われている。

JST未来社会創造事業における「Society 5.0の実現をもたらす革新的接着技術の開発」(2018年度～) では、接着界面における分子描像を明らかにしてマルチスケールかつ時間軸を含めた4次元で接着機構の原理解明に取り組んでいる。

その他、産総研を中心としたNEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(2016～2021年度) やJST-CREST「革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明」(2019～2026年度)、さきがけ「力学機能のナノエンジニアリング」(2019～2024年度) における接着・破壊機構の解明に向けた取り組みがある。

[海外] 米国では、オークリッジ国立研究所 (ORNL) に低コスト炭素繊維の開発・製造を目的としたコンソーシアム (2009～2022年) やミシガン州立大に類似・異種材料接合技術の実現に向けたイノベーションセンター (2013～2016年) が設立されている。

欧州では、ドイツが接着分野における研究開発を先導している。フラウンホーファー研究機構は欧州企業を含む10社が参画するプロジェクトFlexHyJoin (2015～2030年) を主導し、鋼板とプラスチックの接合技術に関し、軽量化、コストと時間の効率化、接合強度向上に取り組んでいる。同じくフラウンホーファー研究機構が中心となり、欧州の自動車企業が参画したプロジェクトENLIGHTにおいて自動車の軽量化に取り組んでいる。

中国では、中国製造2025の10の重点分野の中の素材テーマにおいて接着に関する研究が行われている。韓国では世界市場先占十大中核素材開発事業 (WPM) で、接着剤・複合材のテーマが設定されている。

• 摩擦・摩耗

[日本] マイクロ・ナノスケールにおける現象解明にもとづく摩擦摩耗の理論的設計をめざすプロジェクトとして以下のものをあげることができる。

JST「光・量子融合連携研究開発プログラム」(2013～2017年度) において、中性子測定とミュオン粒子測定を組み合わせることによる「摩擦」と「潤滑」の本質的理解をめざす研究が行われた。また、JSTさきがけ「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(2013～2018年度) では中性子反射率計や赤外分光計などを導入した独自の測定技術による摺動面の直接観察にもとづく超低摩擦特性を発現する相界面の構造、機構を解明し制御することによりマクロな摩擦特性の制御を試みた研究が実施された。さらに、JST-CREST「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(2013～2018年度) では、炭素系硬質薄膜やセラミックス等の硬質材料において、摩擦によって自己形成されるナノ界面に着目し、機械のみならず材料、化学、物理の視点から摩擦により誘起されるトライボ化学反応を解明し制御することにより、マクロな摩擦特性の制御を試みた研究が実施された。機械、材料、計測、計算分野の融合による摩擦現象の解明にもとづく低摩擦の合理的な設計が推進されている。

また、JST-ACCELでは「濃厚ポリマーブラシのレジリエンシー強化とトライボロジー応用」(2015～2019年度) が実施され、濃厚ポリマーブラシの厚膜化に成功し、膨潤溶媒も水に加えイオン液体や潤滑油が可能になり、実用化の可能性のある日本独自の技術展開につながっている。

[海外] EUでは、リーズ大学 (英国) でのイオン液体 (IL) の潤滑剤としての応用やボローニャ大学 (イタリア) でのエンジンオイル用の環境に優しい添加剤に関する研究があげられるが、どちらも界面における固

体表面と潤滑剤分子の相互作用のメカニズム解明にもとづく合理的な設計をめざすものである。

中国では、清華大学摩擦学国家重点実験室で、数十人規模の博士課程学生によりマイクロ・ナノスケールのトライボロジー現象の科学的解明のための研究が推進されている。韓国では、延世大学 Center for Nano-Wearにおいて、実験的なアプローチに加えて、理論的解釈とシミュレーションなどを活用した幅広い研究がなされている。

• 自己修復

[日本] 内閣府「革新的研究開発推進プログラム (ImPACT)」の「超薄膜化・強靱化『しなやかなタフポリマー』の実現」(2014～2018年度)において、有機・高分子の自己修復材料が取り上げられ、画期的な成果が得られている。また、2019年度より始まったJST-CREST「革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明」およびさがけ「力学機能のナノエンジニアリング」においても、自己修復材料は力学機能の1つとして有力な対象となっている。

[海外] 自己修復材料を集中的に研究している組織として、米国のイリノイ大学アーバナ・シャンペーン校 (UIUC)、オランダのデルフト工科大学、ドイツのフラウンホーファー IFAM、ライプニッツ高分子研究所などが良く知られている。それぞれ中心としている研究対象は異なり、イリノイ大学では接着剤入りの微粒子を用いた高分子の自己修復樹脂、デルフト工科大学は自己修復コンクリート、フラウンホーファーはコーティング材料、ライプニッツ高分子研究所はタイヤを含むエラストマーなどに注力している。国際会議としては、International Conference on Self-healing Materials という国際会議が2年おきに開催されており、2019年は横浜で開催された。

(5) 科学技術的課題

接着現象の機構が理解できていないことに起因して、強度の支配因子が不明、環境劣化の理由不明、品質保証・健全性の指針がないなどの問題がある。これら問題を解決するための課題には、接着剤となる分子の設計・配合、接着界面解析、硬化樹脂の構造・物性解析と力学特性評価、さらには、プロセス設計など多様な要素があり、その解決には、化学、物理、数学や機械を代表とする工学等幅広い専門分野の連携が必要である。また、接着現象を正しく理解するためには、実試料での界面計測とシミュレーションをマルチスケール、かつ、時間を含めた4次元で行う必要がある。得られる情報を数理統計解析、また、データ科学を活用して包括的に解釈して、分子接着と構造接着を統合できる接着機構を解明する必要がある。

摩擦・摩耗に関しては、マイクロ・ナノスケールでの科学的な解明が進む一方で、それらの理解にもとづくマクロな摩擦摩耗の制御システムの合理的な設計と創成には未だ繋がっていない。今後は、これらの理解にもとづく実用機械システムへの発展とそのためのマイクロ・ナノスケールでの摩擦面の変化の理解を機械システム設計につなげる新しいアプローチが求められる。また摩耗機構にもとづいた低摩擦の信頼性と耐久性の評価が重要となる。

自己修復材料においても、修復の分子機構については、未だにほとんど理解が進んでいない。具体的には、自己修復の速度や回復率を決める要因が明らかになっていない。たとえば接着剤入りの微粒子を用いた自己修復性樹脂については、修復に時間を必要とし、また、元の強度までには完全に回復しないという問題があり、より高速で完全に強度が回復する技術開発が求められている。また、物理的な自己修復コーティング材料については、擦り傷程度は回復するが、材料の切断を伴うような大きな傷は回復できないことから、より強い負荷に対する自己修復性が求められている。さらに、動的結合や水素結合を用いた化学的な自己修復

高分子材料の場合には、完全に切断しても、切断面を接合するだけで元の強度まで回復するが、回復に時間がかかるなどの問題を抱えている。今後は、自己修復メカニズムをナノスケールで集中的に研究することが重要であり、それによって、飛躍的な性能の向上や修復機能の制御、耐環境性の改善などが期待される。

ナノスケールでのその場計測下の力学実験技術、力学解析法、シミュレーション技術により、機能発現のメカニズムの理解を進める必要があること、そこを起点としてマクロスケールにおける設計へと繋がる技術体系とする必要があることなどが、接着、摩擦・摩耗、自己修復のいずれの領域にも共通する技術課題である。

(6) その他の課題

ナノ力学制御技術は、力学的特性評価や界面分析、非破壊検査、表面処理、分子設計、プロセス設計など多様な要素があり、課題の解決には、機械や物理、化学等幅広い分野の専門家の連携が不可欠である。また長年の実用実績によって支えられて発展してきた技術であるため、実経験のある研究者の協力も不可欠である。これらを取りまとめられる横断的な知見を有する優れたリーダーと、受け皿となる連携促進するための組織が求められる。

また、エネルギーの高効率利用による温室効果ガス排出削減、省エネルギー・省資源としての低炭素化社会構築、安全安心な機械システム・社会構築、そしてその経済効果等、昨今の社会要請に応える鍵を握る基礎科学技術の1つでありながら、その意義があまり注目されていない研究領域であり、その重要性和その成果を世の中に訴求する必要がある。

この他、接着剤では薬品規制への対応の課題がある。接着剤には多くの反応性物質が含まれているが、多価アミンやビスフェノールA、ジイソシアネートなど、最近の規制強化により使用が制限された成分もあり、これらの代替研究も必要になっている。また、接着信頼性を確保するために、接着工程のプロセス管理という考え方もあり、欧州では接着業務作業者の資格取得を義務化する動きがあり、日本国内でも対応が必要となる可能性がある。

自己修復材料については、機械部品や構造材料として設計する指針が存在しないという課題もあげられる。従来、機械部品や構造材料は、十分な強度・耐久性を維持するように設計される。しかし、自己修復機能は、損傷が発生した後に効果が現れるため、現在の設計指針には考慮されていない機能である。重要部材に応用するためには、損傷が始まって最終破壊までの猶予を確保しているという新たな安全性指針を構築する必要がある。自己修復機能を活用した新たな強度基準を提唱、実証し、法規制することが必要になっている。

(7) 国際比較

| 国・地域 | フェーズ | 現状 | トレンド | 各国の状況、評価の際に参考にした根拠など |
|------|---------|----|------|--|
| 日本 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | 接着については、JST未来社会創造事業において、接着界面における分子描像を明らかにして接着機構の原理解明に向けた研究が加速している。摩擦についても、近年、化学、計測、計算分野の研究者の参画が増加したことにより、マイクロ・ナノスケールの現象の解明が進んでいる。また、濃厚ポリマーブラシ、トライボ化学反応を制御した低摩擦ナノ界面創成などの研究も進んでいる。自己修復材料では、有機・高分子材料、無機材料ともに高いレベルにあり、新しいコンセプトを提示している。ただし、個々の研究者が行っている状況で、研究拠点あるいは自己修復材料に特化したプロジェクトは存在しない。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | ↗ | SIPやNEDOのプロジェクトにおいて、接着・接合技術の向上と信頼性の担保に向けた研究が進められている。自己修復材料の主用途である耐傷性コーティングは自動車メーカーや化学メーカーを中心に研究開発がさかんに行われている。 |

| | | | | |
|----|---------|---|---|--|
| 米国 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | Materials Genome Initiative (MGI) の波及効果として接着・接合技術の研究環境が整備されている (オークリッジ国立研究所、ミシガン州立大など)。Carpickら (ペンシルベニア大学) が最新の研究成果を加えた摩擦・摩耗に関するテキストを出版。自己修復材料では、特に有機・高分子材料の分野で高いレベルにあり、新しいコンセプトを提示し、世界をリードしている。接着剤入りの微粒子を用いた自己修復材料では、イリノイ大学が世界的な拠点になっている。 |
| | 応用研究・開発 | ◎ | → | 接着分野では、MGIの成果の企業への移転が行われている。米アルゴンヌ国立研究所は、低摩擦機構解明とともに低摩擦技術のための数多くの特許を取得している。自己修復材料では、接着剤入りの微粒子を用いた自己修復材料の実用化に向けた研究が進んでいる。 |
| 欧州 | 基礎研究 | ◎ | ↗ | [EU] 摩擦・摩耗に関してERC (European Research Council) および Horizon 2020により計算の側面から優れた基礎研究が推進されている。 [ドイツ] フラウンホーファー研究機構が推進するFlexHyJoinプロジェクトが接着分野をリードしている。 [フランス] Ecole Centrale de Lyonのトライボロジー研究グループでは、先端的解析・分析装置が継続的に開発されており、質の高い基礎研究を支えている。CNRSにおける動的架橋を用いた新規な自己修復材料など自己修復材料の研究をリードしている。 [オランダ] デルフト工科大学で10年間、自己修復コンクリートのプロジェクトが実施された。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 接着技術の自動車の軽量化への応用が盛ん。EUCARの下のENLIGHTやALIVEプロジェクトやBMWで研究が進められている。自己修復材料については、フラウンホーファーやアルケマ社での研究がさかん。 |
| 中国 | 基礎研究 | ○ | ↗ | 国家政策としての中国製造2025の下、研究拠点が設立されている。清華大学摩擦学国家重点実験室を軸に、マイクロ・ナノスケールのトライボロジー現象の科学的解明が急速に進んでいる。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | ↗ | 新エネルギー車などの重点分野が設定され、軽量化のため接着分野の応用研究が加速されている。 Institute of Superlubricity Technology, Shenzhen, China (超潤滑技術研究センター、深圳、中国) の設立が2019年10月に発表されている。 |
| 韓国 | 基礎研究 | ○ | → | MGIの韓国版、クリエイティブ・マテリアルズ・ディスカバリー・プロジェクトが進められている。 |
| | 応用研究・開発 | ○ | → | 韓国政府の主導で、接着剤・複合材の研究が加速している。 |

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発 (プロトタイプの開発含む) の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1~2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

| |
|---------------------------|
| ・トライボロジー (環境・エネ分野 2.1.16) |
|---------------------------|

参考・引用文献

- 1) JST CRDS 戦略プロポーザル「トランススケール力学制御による材料イノベーション」(CRDS-FY2018-SP-05) <https://www.jst.go.jp/crds/report/report01/CRDS-FY2018-SP-05.html>
- 2) 森誠之「せん断場におけるマイクロ・ナノ薄膜のその場観察」『トライボロジスト』51巻9号(2006) : 621-626. <https://ci.nii.ac.jp/lognavi?name=web&lang=ja&tourl=8096691&naid=10018266641>
- 3) 三宅晃司他「特集：摩擦界面のその場観察技術の進展」『表面科学』38巻3号(2017) : 104-134. doi : 10.1380/jssj.38.104
- 4) C. A. Volkert et al., "In Situ Tribology", *MRS Bulletin* 33, no. 12 (2008) : 1132-1208. doi : 10.1557/mrs2008.233
- 5) J. Xu and J. Li, "New Achievements in Superlubricity from International Workshop on Superlubricity : Fundamental and Applications", *Friction* 3, no. 4 (2015) : 344-351. doi : 10.1007/s40544-015-0100-8
- 6) P. Cordier et al., "Self-healing and thermoreversible rubber from supramolecular self-assembly", *Nature* 451, no. 7181 (2008) : 977-980. doi : 10.1038/nature06669
- 7) M. Damien, "Silica-like malleable materials from permanent organic networks", *Science* 334, no. 6058 (2011) : 965-968. doi : 10.1126/science.1212648
- 8) T. L. Sun et al., "Physical hydrogels composed of polyampholytes demonstrate high toughness and viscoelasticity", *Nature Materials* 12, no. 10 (2013) : 932-937. doi : 10.1038/nmat3713
- 9) T. Kakuta et al., "Preorganized hydrogel : self-healing properties of supramolecular hydrogels formed by polymerization of host-guest-monomers that contain cyclodextrins and hydrophobic guest groups", *Advanced Materials* 25, no. 20 (2013) : 2849. doi : 10.1002/adma.201205321
- 10) M. Burnworth et al., "Optically healable supramolecular polymers", *Nature* 472, no. 7343 (2011) : 334-337. doi : 10.1038/nature09963
- 11) X. Chen et al., "A thermally re-mendable cross-linked polymeric material", *Science* 295, no. 5560 (2002) : 1698-1702. doi : 10.1126/science.1065879
- 12) K. Imato et al., "Self - Healing of Chemical Gels Cross - Linked by Diarylbibenzofuranone - Based Trigger - Free Dynamic Covalent Bonds at Room Temperature", *Angewandte Chemie International Edition* 51, no. 5 (2012) : 1138-1142. doi : 10.1002/anie.201104069
- 13) Y. Chen et al., "Multiphase design of autonomic self-healing thermoplastic elastomers", *Nature Communication* 4, no. 6 (2012) : 467-472. doi : 10.1038/nchem.1314
- 14) Y. Yanagisawa et al., "Mechanically robust, readily repairable polymers via tailored noncovalent cross-linking", *Science* 359, no. 6371 (2018) : 72-76. doi : 10.1126/science.

aam7588

- 15) H. Wang et al., "Synthesis of Self-Healing Polymers by Scandium-Catalyzed Copolymerization of Ethylene and Anisylpropylenes", *Journal of American Chemical Society* 141, no. 7 (2019) : 3249-3257. doi : 10.1021/jacs.8b13316
- 16) Yang Wang et al., "Triboemission of Hydrocarbon Molecules from Diamond-like Carbon Friction Interface induces Atomic-Scale Wear", *Science Advances* 5, no. 11 (2019) : eaax9301. doi : 10.1126/sciadv.aax9301
- 17) Mika Aoki et al., "Segregation of an Amine Component in a Model Epoxy Resin at Copper Interface", *Polymer Journal* 51, no. 3 (2019) : 359-363. doi : 10.1038/s41428-018-0129-4
- 18) Manabu Inutsuka et al., "Adhesion Control of Elastomer Sheet on the Basis of Interfacial Segregation of Hyperbranched Polymer", *ACS Macro Letters* 8, no. 3 (2019) : 267-271. doi : 10.1021/acsmacrolett.8b00971
- 19) Yuta Tsuji et al., "Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite", *ACS Omega* 4, no. 3 (2019) : 4491-4504. doi : 10.1021/acsomega.9b00129
- 20) Mika Aoki et al., "Mesoscopic Heterogeneity in the Curing Process of an Epoxy-Amine System", *Macromolecules* 52, no. 5 (2019) : 2075-2082. doi : 10.1021/acs.macromol.8b02416
- 21) Ayuko Tsuruoka et al., "Fusion of Different Crosslinked Polymers Based on Dynamic Disulfide Exchange", *Angewandte Chemie International Edition* 59, no. 11 (2020) : 4294-4298. doi : 10.1002/anie.201913430
- 22) Eriko Sato et al., "Thermal Latent Reductants for Controlled Degradation of Polyperoxides and Their Application to High Performance Dismantlable Adhesives", *ACS Applied Polymer Materials* 1, no. 8 (2019) : 2140-2148. doi : 10.1021/acsapm.9b00422
- 23) C. Mathew Mate and Robert W. Carpick, *Tribology on the Small Scale : A Modern Textbook on Friction, Lubrication and wear*, Second Edition (Oxford : Oxford University Press, 2019).