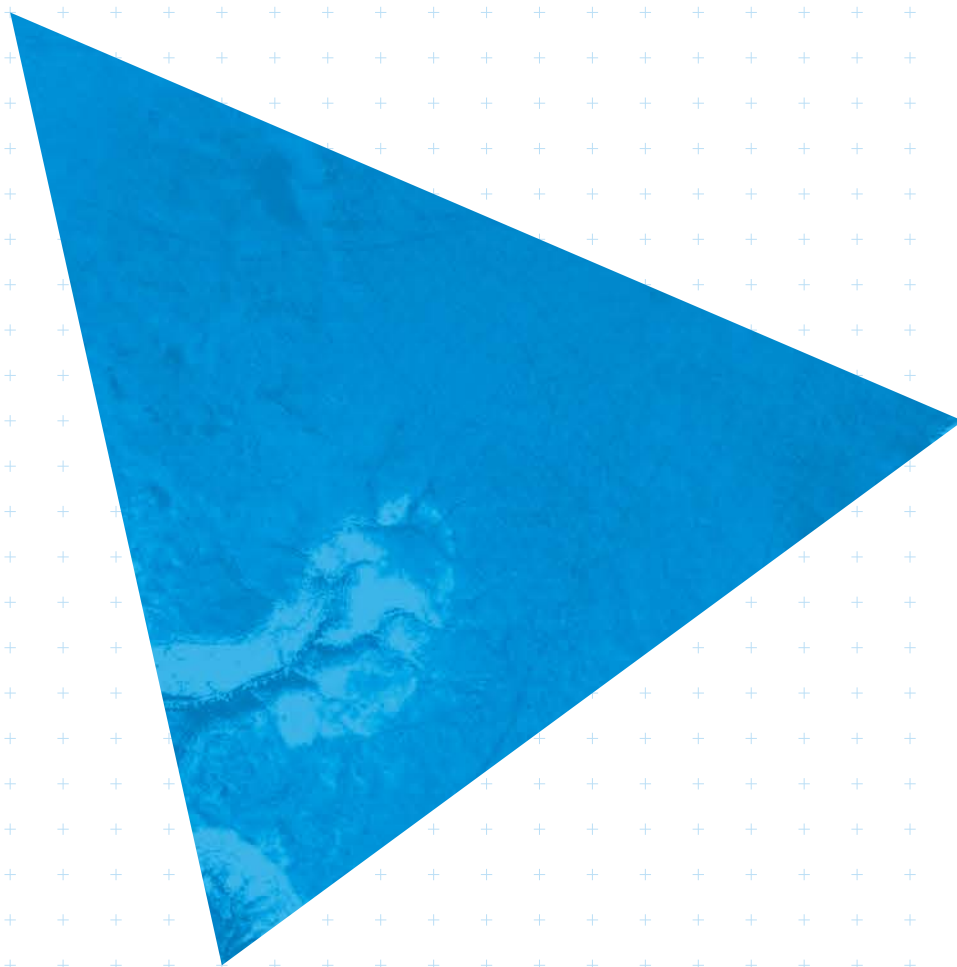


科学技術未来戦略ワークショップ報告書

未来材料開拓イニシアチブⅡ

～高機能材料の創製・分離・循環を
実現する階層構造の自在制御～

2020年6月17日（水）、20日（土）開催



エグゼクティブサマリー

本報告書は、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）が2020年6月17日、20日の2日間にわたり開催した科学技術未来戦略ワークショップ（WS）「未来材料開拓イニシアチブⅡ～高機能材料の創製・分離・循環を実現する階層構造の自在制御～」に関するものである。

我が国の貿易収支を支える製造業において、競争力の源泉は、高性能な機器や素材の製造を可能にする、材料技術・ナノテクノロジーにあると言える。資源に恵まれないというハンデを克服しながら、材料技術に関する強みを発揮し続けることを目的とした「元素戦略」は、過去10数年に及ぶ成果によって、国内だけでなく世界中に影響を与えてきた。しかしながら、近年における諸外国の資源政策に関する変化や、昨今のCOVID-19感染拡大を契機とするサプライチェーンの混乱など、脱グローバル化の流れも一部で見え始めている中、材料開発にも変革が求められている。また、製品に対する要求も、性能面だけでなく環境やエネルギー負荷の側面でも高度化する一方であり、それらの中核部品を構成する材料に対しても、時に相反関係にある機能も含め、多様な機能を同時満足することが期待されている。このような状況を受け、我が国としても「元素戦略」に次ぐ、新しい材料研究開発戦略の構築が急務となっている。

「元素戦略」の本質は、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。この本質に立ち戻り、約80種ある元素をフル活用することで、社会が求める多様な機能を満足する材料を創製し続けることが我が国産業競争力強化の観点からも重要である。CRDSでは、主に無機材料を対象として、元素・電子状態・微細構造などが機能に果たす役割を深く理解し、多元素化により材料設計の自由度を増大させ、準安定相や不安定相を含むこれまで未利用だった多様な安定相を活用することで高機能材料を設計・創製することを目指した戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ～多様な安定相のエンジニアリング～」を2019年7月に発行した。本ワークショップは、「未来材料開拓イニシアチブ」の概念を有機材料にまで拡張し、さらに新たな機能を有する材料の創製のみならず、材料の使用後の分離や循環まで考慮した材料設計指針を構築するためには材料における階層構造を自在に制御する技術が必要になるとの仮説の下、資源限界を超えた強固な材料開発基盤を構築し、技術的優位性を確保し続けるための研究開発戦略について議論する。

本ワークショップでは、「元素フル活用」「階層構造制御」に関連する我が国の材料研究の現状・課題・将来展望についての話題提供を基に、戦略的に取り組むべき重要な研究開発課題、世界をリードするための効率的・効果的なファンディングや研究実施体制および産学連携の仕組み、人材育成・社会受容などを含む社会的・経済的インパクトなどについて、第一線の研究者と議論することを目的に開催した。

ワークショップでは、まずJST-CRDSにおける調査・分析結果から得られた全体像、課題、研究開発戦略検討の仮説を提示した。その後、関連する新学術領域研究を中心とする先行研究事例の紹介、計算科学・シミュレーション技術、無機材料および有機材料における階層構造制御研究、分離・リサイクル技術それぞれの技術潮流に関する話題提供と質疑応答を行い、最後に総合討論を行った。

CRDSから今後の研究開発を推進していく方向性として、以下の3点について仮説を示し、事前アンケートで招聘者の意見を聴取した。

1. 時代が要請する多機能・高機能材料の実現には階層構造の導入がますます必要になってくる。そのため、階層構造の自在制御が重要な挑戦技術課題となる
2. 「階層構造の自在制御」によって、新たな機能を有する材料の創製のみならず、その材料の循環利用に配慮した材料設計も可能になる

3.「階層構造の自在制御」の研究開発を効果的に推進するためには、具体的なターゲットを設定する必要がある。また、その取組においては、分野の垣根を超えた研究体制を構築することが必要である

以下では、各セッションの概要、および総合討論のまとめを示す。

【セッション1：先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ】

先行事例の一つである新学術領域「ハイドロジェノミクス」においては、水素が形成する水素クラスターの組合せによって超伝導や超イオン伝導といった様々な機能が発現するといった最近の研究事例の紹介に加え、今後の方向性として、水素が持つ様々な元素との反応性を活かすことで、例えば、希土類金属-遷移金属合金から希土類金属と遷移金属を分離できる可能性があることが示唆された。また、新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」においては、複数のアニオンの存在によって物質構造の根源である配位構造から物性を変化させることができるため、これまでは遷移金属を変えることによってしか変えることができなかった物性が、アニオンを変えるという手段を通して制御できるようになったこと、複合アニオン化合物というこれまでにない物質群の創製を目的としたことで酸化物、錯体、金属などの異分野の研究者間の融合が進んだ点などについて言及された。さらに、新学術領域「融合マテリアル」においては、階層構造制御の一つであるロブスターのはさみ構造に倣ってアモルファス炭酸カルシウム/ポリアクリル酸/セルロースナノファイバー複合体の作製に成功した例を挙げ、階層構造制御の重要性や環境適合性を持つ複合材料創製の難しさなどについて指摘があった。

【セッション2：計算科学・シミュレーション技術のトレンド・課題・将来展望】

高分子材料に対するシミュレーションを実行するには必ず階層構造の考えが必要になるが、その際には構造とともに機能も階層化するためそれらの相関を理解することが非常に重要である点が指摘された。また、粗視化モデルを構築する際、実際の実験結果を考慮することで再現性が良くなることなどが紹介された。一方、二次電池を対象にした場合には、電解液・電解質、負極、正極といった複数の材料の複合化が必要であることや固液界面・固固界面など様々な界面の制御技術が重要になることが述べられた。また、電極では電子は通すが電解液・電解質ではイオンのみを通す機能を持つことが必要であるため、エレクトロニクスとイオニクスの両者の考えが必要になり、さらにイオンが動くことで構造も変化するため、平衡論に加えて速度論も考える必要があることなどが述べられた。分解に関しては、有機材料・無機材料ともシミュレーション技術は未発達であり、データ科学を活用しようとしても関連する熱力学データが不足している点が指摘された。

【セッション3：階層構造制御のトレンド・課題・将来展望】

無機材料の階層構造制御の例として、2次元ナノシートの積層構造を取り上げ、2次元ナノシート作製のための化学的剥離プロセスおよび人工的に積層する技術は発展しているものの、今後の方向性としては積層された超格子構造から再び2次元ナノシートに剥離する手法開発が必要であることが示された。また、有機材料においては高次の階層構造が機能を決めるため、階層構造の制御と理解が重要であるが現状ではできていないこと、空間的な階層構造に加えて時間的な階層構造も存在すること、分解や循環のためには階層構造の結合制御と時間制御が必要になること等の指摘がなされた。

【セッション4：分離・リサイクルのトレンド・課題・将来展望】

より高効率な物理的分離を実現するためには「価値あるもの」単位での循環が必要になることや分離したい特定の界面にエネルギーを集中させる必要があること、そのためには界面制御や分離のサイエンスの体系化が必要になることが言及された。また、化学的分離である製錬は元素分離そのものであるが、製錬反応自体は科学的に理解できていない部分が多く、計算科学との連携や製錬研究に適した観測手法や設備の充実が

必要であることが指摘された。

【総合討論】

上述の3つの仮説に対する意見として、「階層構造」という言葉には、物理的な階層だけではなく、機能の階層性や時間の階層性など様々な意味を含むため使い方には注意が必要であること、単に階層構造を高次にしていくだけではなく各階層の構造と機能の相関を理解することがより重要であること、コストの観点からはいかに機能を循環させるかという考えが必要であるとの意見が出された。一方、資源循環のために戦略的に階層構造を制御する点には新規性があり、具体的なアプリケーションや大きなビジョンを設定できれば科学技術としても大きな潮流になりうること、資源を無駄なく使うという観点からは「アップサイクルエコノミー」が共通のコンセプトになる可能性があることなどの認識を得ることができた。また、今後取り組むべき研究開発課題として、意図した階層構造を構築するためのプロセス技術、階層間の機能の連結を理解するための新しい計算科学的手法の開発、刺激応答性の分解トリガーの導入、固相に加えて気相や液相の熱力学データベースの構築およびデータ科学の活用、などが挙げられた。さらに本ワークショップの主要テーマである、「階層構造制御による高機能材料の創製・分離・循環」に関する研究開発を進めていく上では、動脈と静脈の研究者が出会う場の設定、社会実装まで持っていくためには研究者自身がTRL（Technology Readiness Levels）のどこにいるのかを意識しながら進めていくことが重要であるとの指摘がなされた。

目次

1	開会挨拶・趣旨説明	1
1.1	開会挨拶 曾根 純一 (JST-CRDS)	1
1.2	ワークショップ趣旨説明 宮下 哲 (JST-CRDS)	2
2	先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ	5
2.1	“水素科学”によるマテリアル革新力強化 －新学術ハイドロジェノミクスからの示唆－ 折茂 慎一 (東北大学)	5
2.2	複合アニオン化合物の創製と機能開拓：現状と将来展望 陰山 洋 (京都大学)	11
2.3	「分子技術」・「融合マテリアル」における 階層構造と機能発現 加藤 隆史 (東京大学)	18
3	計算科学・シミュレーション技術の トレンド・課題・将来展望	23
3.1	シミュレーション研究から考える 高分子材料における階層構造の問題 森田 裕史 (産業技術総合研究所)	23
3.2	電池・触媒の高機能化と階層構造制御に向けた計算科学 館山 佳尚 (物質・材料研究機構)	30

4	階層構造制御のトレンド・課題・将来展望	35
4.1	2次元ナノシートを用いた 階層構造の構築、設計と機能開拓 佐々木 高義（物質・材料研究機構）	35
4.2	有機材料における階層構造制御 植村 卓史（東京大学）	43
5	分離・リサイクル技術のトレンド・課題・将来展望	50
5.1	資源循環に求められる構造制御と 物理的分離技術の開発動向 所 千晴（早稲田大学）	50
5.2	材料科学に基づいた製錬反応の根本的理解 宇田 哲也（京都大学）	56
6	総合討論	64
	付録	67

1 | 開会挨拶、趣旨説明

1.1 開会挨拶

曾根 純一（JST-CRDS）

本日は「未来材料開拓イニシアチブⅡ」というタイトルの下、材料開発の根幹に関わる非常に野心的な提言候補案に対して、様々な角度から議論したい。

ご存知の通り、今、構造材料や機能材料などあらゆる材料に対する要求が高度かつ多様になってきており、単一の機能ではなく多様な機能、トレードオフの関係にある複数機能の同時満足など、非常に難しい宿題が材料開発に押しつけられている状況である。このような要求に対応するために様々な材料系が多元素化、複層化、複合化といったより複雑な材料システムに移ろうとしていると認識している。

2019年7月にCRDSが発行した戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ」では、多元素系材料のように多くの元素を使うことで元素の持つ様々なキャラクターを組み合わせ、社会のニーズに応えていくことを趣旨にしていた。今回はそれを拡張し、単層の結晶相や材料系を複数組み合わせで複層化、複合化、階層化することで、より設計の自由度を増大させ、社会が要請する材料に対する高度な機能を実現していこうという考えである。非常に野心的な考えではあるが、それを支える計算科学や計測技術などの様々なツールが目覚ましく進展しているという背景もある。ご存知の通り、様々な材料の合成過程における化学反応を可視化するオペランド計測、計算機の進化によってますます高度化が進むシミュレーション技術、さらにデータ科学といった新しいアプローチも生まれてきている。

今回はWSタイトルにもあるように、高機能材料を創製するためには階層構造を自在に制御しないといけないのではないか、という我々の仮説の検証を中心に、材料開発の先端のところで世界と競っておられる先生方にどのようなガイディング・プリンシプルや設計思想で材料開発をされているのか、そのお考えをお聞きした上で、我々の考えをまとめていきたい。

本日ご議論いただいた内容は戦略プロポーザルとして取り纏め、我が国の戦略に結びつけ、我が国の材料開発の強みを伸ばすための方策に活かしたい。

1.2 ワークショップ趣旨説明

宮下 哲 (JST-CRDS)

皆様ご存知の通り、我が国においては資源に恵まれないというハンデを克服するために過去十数年にわたって「元素戦略」という概念の下で材料開発を行ってきた。そこから生まれた様々な成果や「元素戦略」という概念そのものが国内だけではなく世界中に影響を与えてきたと言える。近年、諸外国における新しい資源政策、また昨今のCOVID-19の感染拡大を契機とするサプライチェーンの混乱など、一部で脱グローバル化の動きが見え始めている状況の中、材料に対する要求はますます高度化し、相反関係にある機能の実現をはじめ多様な機能を同時満足することが期待されている。それらに対応できる、元素戦略に次ぐ新しい材料研究開発戦略の構築が急務ではないかと感じている。

「元素戦略」というと希少資源代替や希少資源の使用量削減といったことがすぐに思い浮かぶと思うが、その本質は“元素の役割を理解して機能発現メカニズムを解明すること”である。この本質に立ち戻って元素をフル活用することで社会が求める材料を作り、それを産業競争力強化につなげていくことが必要である。

元素をフル活用するという観点から、2019年にCRDSが発行した戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ」では、多元素系材料に注目して多様な自由度を活用することで材料探索空間を拡大することが重要である、という提案を行った。その際、主に単一の組成・構造から成る安定相が生み出す多様な機能に着目した。今回の提案では異なる組成あるいは結晶構造を有する材料が混在する複合系、また、異なる相の境界（粒界相など）の制御へと拡張することで新たな機能の創出を狙いたい。そのためには階層構造を自在に制御する技術の確立が必要ではないかと考えている。さらに、循環型社会を実現するという観点からは、材料創製に加えて、材料の使用後の分解や循環まで考慮した材料設計を可能にする新たな指針の構築も必要ではないかと考えている。今回提言しようとしている骨子と方向性をまとめたものが図1-2-1である。

提言の背景と方向性



- ✓ 我が国においては、自動車、機械・精密機器・電子部品などの製造業の輸出によってエネルギー・原材料の輸入が賄われているという大局的な構造が続くなか、**その源泉たるナノテクや先端材料への期待が高い。**
- ✓ 資源小国である日本は、**継続的に技術的優位性の確保**することが必要。
- ✓ 我が国は世界に先駆けて「元素戦略」という概念を提唱して以来、希少元素代替・減量技術に関してはサイエンス面、実用化技術面とも世界をリードしていると言われるが、**昨今の欧米の新しい動き**、さらには**中国の科学技術力の躍進が顕著**になりつつある。
- ✓ これまでの取組で得られた知見・技術をベースに、次のフェーズへ移行すべき時期であり、本提言では、新しい材料開発コンセプトとして**「階層構造の自在制御」を提案。**
- ✓ これによって、資源限界を超えた強固な材料開発基盤の構築、および我が国の継続的な材料技術優位性を確保し、持続可能な社会実現を目指す。
- ✓ そのためには、「**材料創製のサイエンス**」と「**分離・製錬のサイエンス**」間のシナジー効果を**発揮する研究体制を構築**し、府省を跨がる効率的な取組を推進する必要があり、内閣府、文科省、経産省、環境省等の関連省庁が密に連携し、互いに情報共有を図りながら、同じ方向・目標を共有した推進方策が有効

図1-2-1

上記のような背景の下、本日は新しい材料開発コンセプトである「階層構造の自在制御」を提案し、これについて議論を深めたい。

CRDS

具体的な課題（案）

① **マテリアル革新力強化を見据えた戦略**

✓ **階層構造の自在制御**による魅力ある材料創製

【既存材料】

希少資源代替・減量（低コスト化、低環境負荷、省資源化）

【新規材料】

a. 全元素活用（相反物性・高機能・新機能の実現）→ 希少資源代替・減量
⇒ 多層化・多元素化・複合化による多様な安定相（含、準安定相）の活用

b. ブロック化（リサイクル性の向上、廃棄物減量化の実現）
⇒ ブロックの複雑な組合せによる機能創出
⇒ リサイクル・リユースを考慮した材料設計指針の構築
→ **階層構造の結合制御**

② **資源安全保障を見据えた戦略**

- ✓ 市場拡大が見込まれる技術領域（電池、磁石など）における希少金属の有効利用
- ✓ 経済的にペイするリサイクル技術/製錬・精製技術の高度化
- ✓ 持続性を考慮した資源調達先の多様性確保、クリティカルリティ評価
- ✓ 新規鉱山開発（国内外）、地質調査、リソースロジスティクス、新規用途開拓

図1-2-2

図1-2-2に示すように、「階層構造の自在制御」を上位概念とし、既存材料で、かつ、求める性能がある程度自明であるものに関しては、希少資源の代替・減量を目指した研究開発を進めていくべきである。しかしながら、これまでにない性能や機能を有する新しい材料を開発する際には、第一ステップとしては全元素活用の考えに立って、多層化・多元素化・複合化によって材料創製を行うべきであろう。そして、第二ステップでは、既存材料で培った知見や技術を活かして省資源化を実現する。さらに、新規材料創製に対する新しい考え方としては、ここではブロック化と表現しているが、階層構造を作る際の構成要素をブロックとして捉え、ここでブロックは原子・分子レベルから二次元物質であったり、様々な大きさのものが想定されると思うが、そのブロックを複数組み合わせることで新規材料を創製する。その際、ブロック間の結合が自在に制御できれば、その材料を使い終わった後に、その結合を弱くすることで元のブロックに分解することも可能になり、分解後のブロックを新たな材料の階層構造の要素として再利用する、すなわち、静脈を意識した材料設計が次の方向性になりうるのではないかと考えている。

そのような技術が実現されると、例えば、製錬時の物理選別の部分のエネルギーやコスト低減につなげることができる。そのためには、材料創製の動脈の研究者と分離やリサイクルといった静脈の研究者の密な連携体制を構築する必要がある、というのが我々の仮説である。これらの仮説について本日お集まりいただいた先生方を中心に議論を行いたい。

また、本日招へいの発表者およびコメンテータの先生方には事前に図1-2-3に記載の3つの仮説に対してアンケートという形式で多様なご意見を頂戴している。

仮説→検証（本日）→修正案を得たい	
仮説1	時代が要請する多機能・高機能材料の実現には階層構造の導入がますます必要になってくる。そのため、階層構造の自在制御が重要な挑戦技術課題となる。
仮説2	「階層構造の自在制御」によって、新たな機能を有する材料の創製のみならず、その材料の循環利用に配慮した材料設計も可能になる。
仮説3	「階層構造の自在制御」の研究開発を効果的に推進するためには、具体的なターゲットを設定する必要がある。また、その取組においては、分野の垣根を超えた研究体制を構築することが必要である。

図1-2-3

仮説の検証については、最後の総合討論の時間に集中的に議論できればと考えている。オブザーバーの皆さん含め、是非とも活発な意見を出していただきたい。

2 | 先行施策の状況と将来展望、社会ニーズ

2.1 “水素科学”によるマテリアル革新力強化 － 新学術ハイドロジェノミクスからの示唆 －

折茂 慎一（東北大学）

本日は「“水素科学”によるマテリアル革新力強化」というタイトルで、現在実施している新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」での最新の成果を紹介するとともに、今後の展望を述べたい。

水素は変幻自在な元素であるため、全元素と反応することが可能である。この点から、水素の研究が、本WSの主題である「全元素活用」につながると考えている。さらに、最近の研究において「高次水素機能」、すなわち複数の水素機能（材料中に水素が入った場合の振る舞い）の相乗効果が発現することが分かってきており、本WSのもう一つの主題である「階層構造」という新しい視点での研究が展開できるとも考えている。

本日の発表では、まず、新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」のごく簡単な紹介を行い、その後に水素の階層構造の事例として、水素が水素クラスターを形成し、その水素クラスターの組合せによって、超伝導や超イオン伝導といった様々な機能が発現するといった最近の研究事例を紹介する。次に、全元素活用の可能性の例として、分子レベルあるいは原子レベルで「戻す」戦略について紹介する。

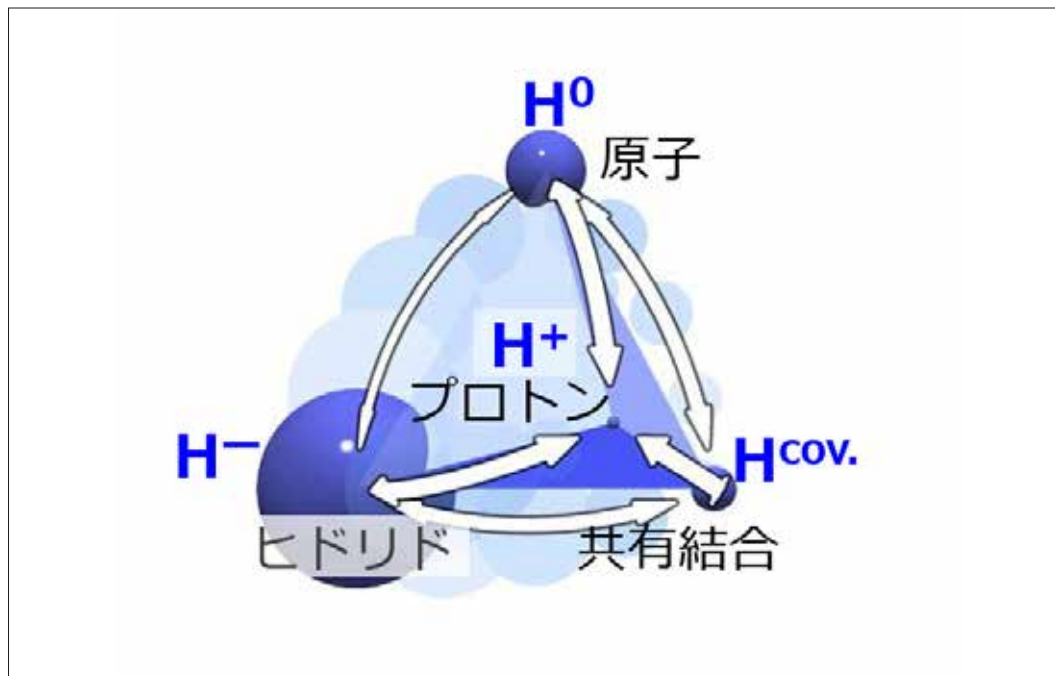


図 2-1-1

最初に水素の変幻自在性について述べる。図 2-1-1 に示すように、水素は材料中で、シンプルな原子状水素の他に、電子をもらったヒドリド、電子を失ったプロトン、周りと非常に強く結合した共有結合状態といった、様々な状態を取りうる。さらに、そういった状態が外場によって、あるいは周りの環境によって、ドラスティックかつフレキシブルに変わり得るということも重要な性質である。そのような水素の変幻自在な性質に注目し

て研究しているのがハイドロジェノミクスで、「水素＝ハイドロジェン」に対する、学術体系という接尾語、「オミクス」をつけて「ハイドロジェノミクス」と名付けた（図2-1-2）。



図2-1-2

この新学術領域では、前述の高次水素機能に特に注目している。高次水素機能とは新しい概念であり、複数の水素機能の相乗効果が表れるということを意味している。この機能を利用して、例えば様々な革新的な機能を有する材料やデバイス、あるいは高度な物質変換プロセス、そして、まさに天気予報のように材料中の水素のありようを正確に把握したり、あるいは予測したりといった水素データ同化技術、などにつながる研究をしている。まさに変幻自在な水素を使いこなすための水素科学の確立を目指している。

構成メンバーは、私が領域代表で、グループリーダーを東工大の一杉教授、山梨大学の宮武教授、東大物性研の森所長、九州大学の山内教授、東大の福谷教授、常行教授に務めていただいている。その他にも外部の先生方、第1期の公募研究の先生方、約70名の若手のメンバーがいて、現時点で、総勢120名ぐらいの大きなチームで研究を進めている。水素科学の分野は若手も含めて裾野がかなり広がってきているという状況にある。

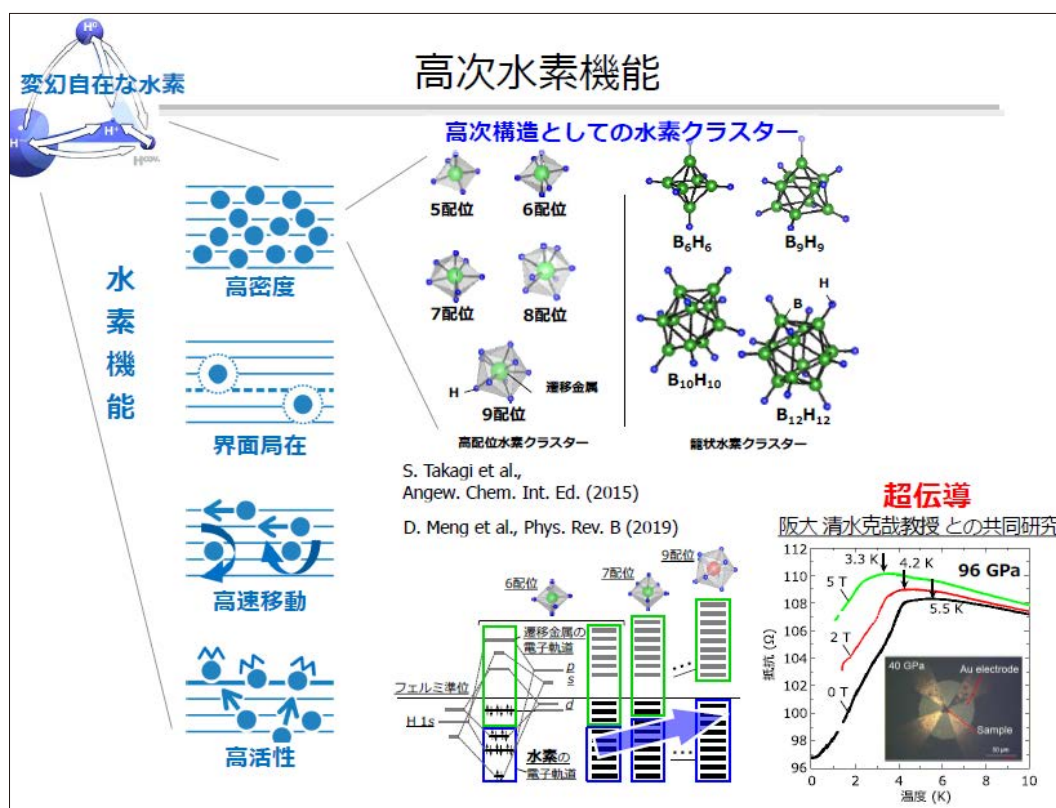


図 2-1-3

図 2-1-3 左に変幻自在な水素の個別の水素機能を示す。材料中に水素が入り込んで高密度化する、様々な界面を見つけて局在する、物質中を高速で移動する、表面に達して活性化して違う物質に変換する、といった効果が水素機能にあたる。

例えば高密度化の場合、様々な高次構造としての水素クラスターを形成することが知られている。図 2-1-3 の上中央に示す、ある金属あるいは非金属元素の周りに高配位する形でのクラスターや、右上に示す籠状のクラスターなど、様々なタイプがある。例えば、クロム、鉄、ニッケル、コバルトといったありふれた金属の周りにも多くの水素が配位することも最近分かってきた。右下の例で言えば、クロムという原子の周りに7つの水素が結合するということが示されており、それ自体高密度の水素貯蔵としての機能があると考えている。また、金属の周りについている水素の数が増えていくと、水素が持ち込む電子が徐々に増えていくことになる。最終的に9個の水素が周りにつけば、その水素が持ち込む電子が水素化物のフェルミ面付近まで達し、これに高圧をかけることで超伝導化することも実証された。この水素化物よりも転移温度が高い超伝導物質はすでに知られてはいるが、この材料が三元系の超伝導であるという点で今世界的にも注目されている。

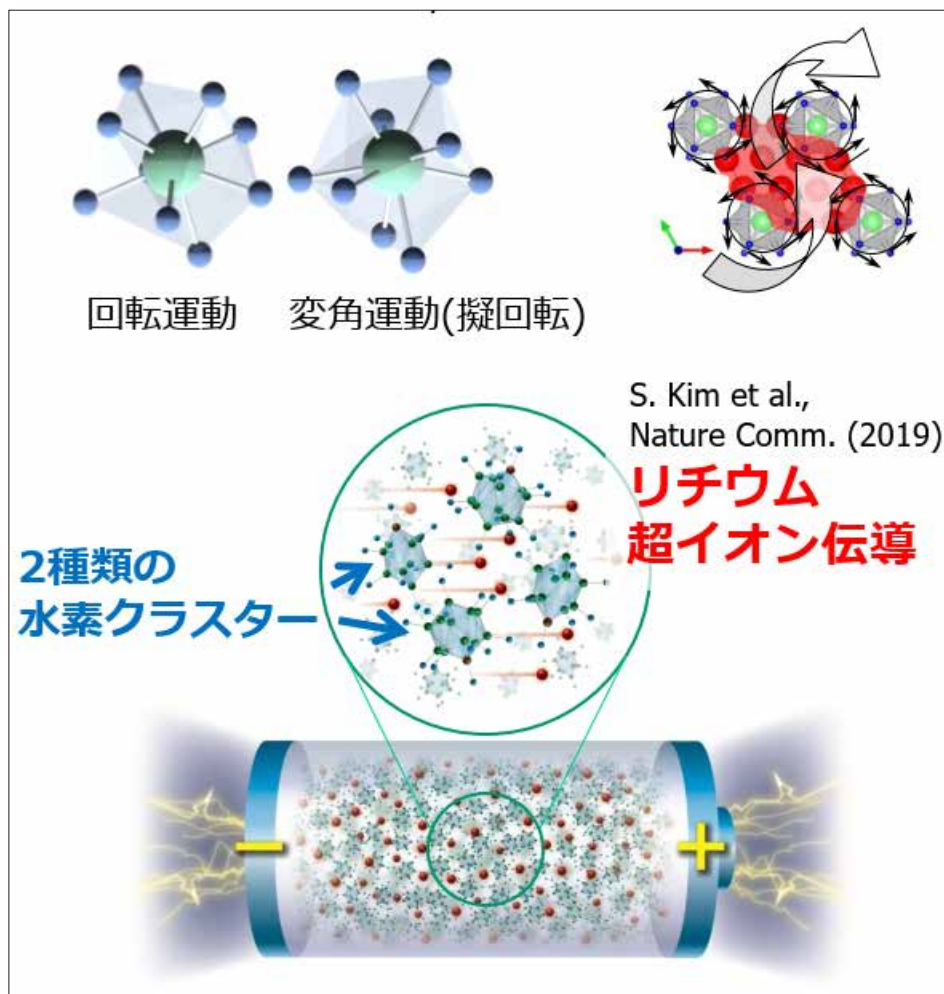


図2-1-4

また、水素は、材料中で様々な動きをする。図2-1-4上のように、ローカルな動きや振動が、うまく協調的に働くことによって分子そのものが回転する。回転の仕方に幾つかのバリエーションがあるが、この回転によって周囲にある金属イオンが非常に高速で伝導する可能性があることも分かってきた。イメージ的には、金属の周りに水素が集まって水素クラスター（＝高次構造）ができて、結晶構造が変わって動きやすいパスができ、これによって、周囲の金属イオンの伝導性が非常に高まるということである。最近になって、電子伝導がない純粋なマグネシウムイオン伝導が世界最高のイオン伝導度になるということが示されている。また、もともと、リチウム電池用途に注目していたリチウムイオンの超イオン伝導についても、下側に示す2つの籠状の水素クラスターをうまく組み合わせることによって、非常に高いリチウムイオン伝導性、リチウム超イオン伝導性が現れるということも見いだしている。これが全固体電池の新しい電解質として機能することも示されており、金属リチウム負極を用いる全固体電池としては、現時点での世界最高のエネルギー密度を持つことも分かっている。この材料がリチウム負極の負電位に対しても非常に安定であることから、海外からも大きく注目されており、海外のサイエンスポータルでよくリファアーされている。

ここまで示したように、もともと一つの元素に過ぎない水素が、その変幻自在性により、様々な水素機能を通じて高次構造を形成すること、これこそが、まさに水素の階層構造の重要な事例だと考えている。すなわち、高次構造が出来あがり、その組合せの最適化によって例えば水素貯蔵や超伝導といった全く別の機能が現れることになる。直前に示した局所的な振動や移動さえも利用可能であるという点が、水素の階層構造を考える上で非常に重要であり、それを利用した超イオン伝導、その先の全固体電池の設計に繋がっている。

水素が関与する多彩な高次構造、あるいは階層構造と、水素特有の働き、例えばいろんなところにトラップされている場を形成する、あるいはダイナミクスが多様・多彩である、非常に反応性が高いという点は、WSの趣旨説明でも述べられていた「高機能材料の設計・創製」といった動脈の観点で大変重要である。それと同時に、水素特有の機能であるあらゆる元素との反応性は、分離や循環といった“戻す”戦略を考える場合にも利用可能である。最後に、静脈側のプロセスにも水素をうまく使うことができる可能性を紹介する。

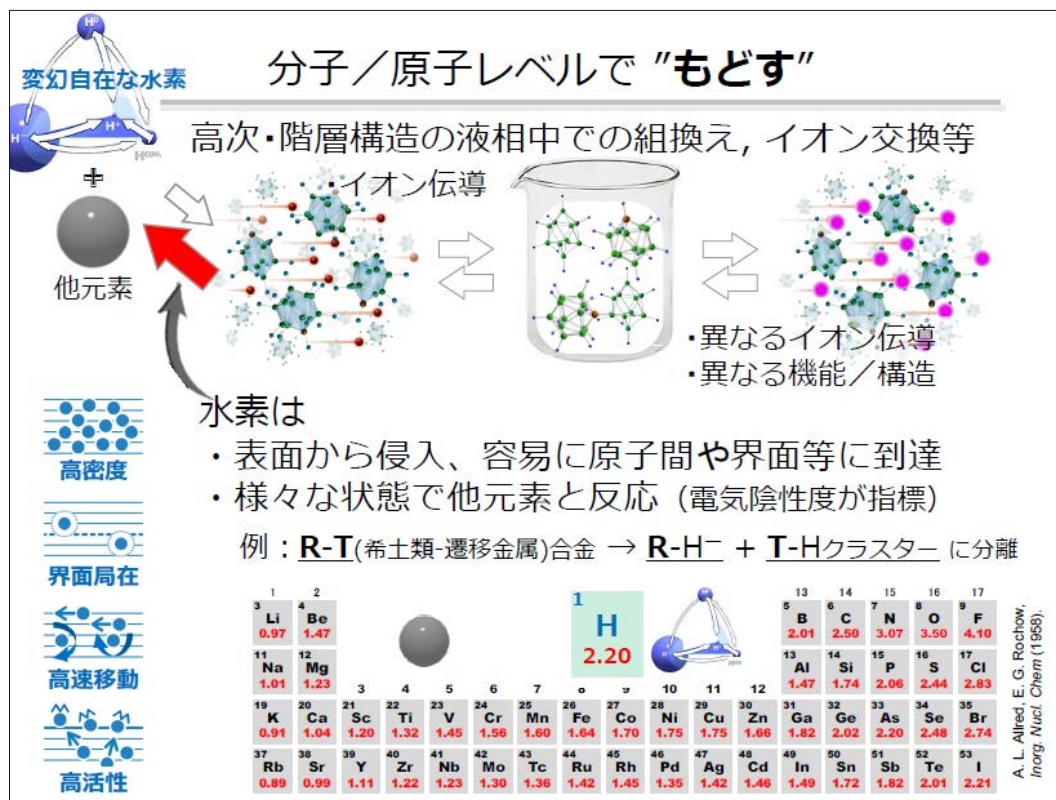


図2-1-5

ここまで、変幻自在な水素と他の元素が結合することによって高次構造や階層構造ができることは述べてきた。先ほどの例では、中に入ったイオンが非常に高速で伝導することで機能につながる効果を示したが、こうした場合は、水素は非常に安定に共有結合しており、分子構造自体が安定なため、例えば液相中でも存在できる。つまり、ある意味では溶かして様々な液相が使えることになる。その組換えによって、母材料とは異なるイオン伝導性を示す材料が合成できる、あるいは極端には、異なる機能や異なる構造の材料も、組換えにより合成できるという点が、循環という観点に、役立てることができる。

組換えや分離には様々な形があるが、究極的には元素にまで戻すということが求められるケースも考えられる。このような究極のケースにおいても、水素の機能というものは有効に活用できる。様々な方法で水素自体は非常に活性化することができ、例えば水素の打ち込みを行うことで、様々な表面から侵入することもできる。侵入した水素は容易に動くことができるため、移動の結果、原子間や界面等に到達した水素は、様々な状態で他の元素と反応することになる。ここで重要な指標となるのが、電気陰性度である。図2-1-5下に Allred-Rochowの電気陰性度を含む周期表を示す。水素の電気陰性度は2.2という非常に中庸な、中間的な値であり、それに対して、アルカリ金属、アルカリ土類金属はより小さな電気陰性度、すなわち電子を離しやすい状態であるため、これらの元素と水素が結合すると、水素はヒドリドになる。一方で、周期表右側の電気陰性度が大きい元素と結合すると、水素の電子が取られてプロトンになり、遷移金属のように比較的水素の電気陰性度と近いものと反応すると、水素は共有結合的に振る舞って水素クラスターを形成することになる。一つ

の例として、ある種の磁性材料などのように、希土類金属と遷移金属を含む合金をうまく水素と反応させると、希土類金属の水素化物と遷移金属の水素クラスターに分離することができ、希土類と遷移金属の元素レベルでの分離ができることになる。このようなアイデアは、古くから提案されてきたが、最近の水素科学研究の元、様々な水素の機能、水素を操る技術、水素を見る技術も進展してきたおかげで、改めてこういった水素の様々な原子との反応性というものに注目して分離や循環といった戻す技術、すなわち静脈側の戦略を考えても良い時が到来したと考えている。

以上をまとめると、水素は変幻自在な元素で全元素と反応が可能であり、水素の研究というのは全元素活用につながると考えている。また、高次水素機能という水素の振る舞いの重ね合わせによって、これまでなかったような機能が現れるということが分かってきた。これにより水素の階層構造という新しい視点での研究が展開できると考えている。階層構造を自在に制御するということは今後の課題になってくると考える。水素化物をつくる技術、合成する技術は、例えば成膜によってきっちりとしたエピタキシャルな水素化物の膜ができる時代になってきている。そういった高度な合成技術と、水素を見る・水素を正しく計算する、そしてそれらをつなぐデータ科学との連携が、今後重要になってくると考えている。

【質疑応答】

Q：水素の面白いキャラクターをたくさん紹介していただいたが、その中に局在というのがあった。これはある特定のレイヤー、ある特定の原子のところに、温度を加えるとか何かで水素を集めることができる、そこに局在させることが自由にできるということか。もし、そうだとすると、そういうところを起点に材料を分解するようなことは可能なのか。

A：水素と反応させて、粉末をつくるといったことは結構古くからなされている。それらをもっと進化させることによって、とある元素を取り出すとか、とあるクラスターあるいは高次構造だけを取り出すといったこともできるかと思う。そういう意味で、いろいろな粒界、あるいはいろいろな意味での相界面、そこに水素をトラップできるというのは、今後、元素の分離あるいは循環を考えたときに、これまで以上に利用価値がある機能ではないかと考えている。

Q：水素がある金属元素の周りに集まって、ベアリング効果というか、イオン伝導を促進する現象は非常に興味深い、どれぐらい安定してクラスターが存在できるのか。封じ込めて分解しないように水素圧が保たれる構造にするシステム目線の研究も必要ではないか。

A：今回説明した水素クラスターは、基本的には水素がない状態でも安定である。例えば、図1-1-3で示した籠状のクラスターは、液相中でも安定なため、水素がない状態でもしっかり機能を発現させるということが可能である。水素化物であるため、全ての材料を大気中で取り扱えるかというところではないが、基本的には安定な化合物であるといえる。

Q：発表中は計測に関する言及があまりなかったが、水素の計測についても、最近の先端技術を使うと新しいいろんなものが見えてきているのではないか。

A：「水素を見る」ことに関してはかなり進展している。中性子で水素を見ることに加え、最近では、東大・幾原グループで水素を直接透過電子顕微鏡で見ることも可能になっている。また、東大・福谷グループでは核反応によって界面に局在した水素の分布を精密に測定する技術も開発されている。一方で、水素は変幻自在であるため、その結合状態や電子をどのくらいまとめているかといった、より詳細な計測に関してはまだ難しい状況である。計算あるいはシミュレーションと融合することによって、いわゆるデータサイエンス的に水素データ同化という技術で、今より詳細に材料中の水素を見る、そして制御する研究が進むと考えている。

2.2 複合アニオン化合物の創製と機能開拓：現状と将来展望

陰山 洋（京都大学）

本日は私が代表を務めている新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」の研究の現状と、将来展望を中心にお話したい。

この新学術領域が始まったのは5年前であり、今年が最終年度ということになる。開始当初には、自分が属するセラミックス分野の中でも、「複合アニオンとは何だ？」という状況で、ほとんど知られていない概念であった。ところが、5年が経過した現在では、当初には予想できなかったほど理解が深まってきており、分野の将来は非常に明るいと考えている。本発表では、本領域の数多い成果の中から、特に興味深い成果をピックアップして紹介する。

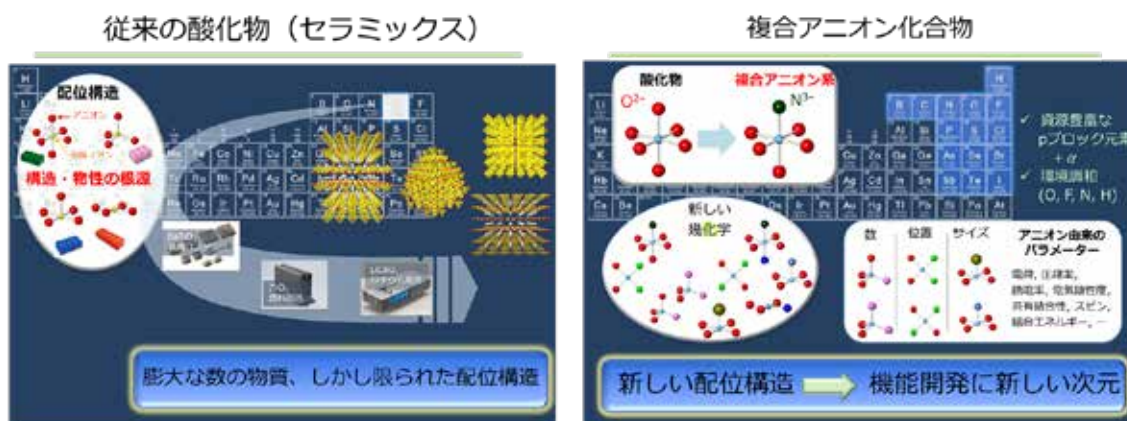


図 2-2-1

普通のセラミックス材料は、金属とアニオン種（例えば酸化物の場合なら酸素）構成されている。物性や構造の根源である「金属に対するアニオンの配位構造」の種類は限られているため、物質としてのバリエーション・発展性には限界がある。もちろん、これまで酸化物はその豊富なバリエーションから様々な用途に利用され発展してきたが、ずっと先の将来まで本WSのタイトルにある「未来材料」になりうるかという、それは難しいのではないかと（図2-2-1左図）。

一方で、複数のアニオンを含む複合アニオン化合物においては、物質構造の根源である配位構造から変化させることができるため、これまでは遷移金属を変えることによってしか変えることができなかった物性が、アニオンを変えるという手段を通して制御できるようになる（図2-2-1右図）。つまり、複合アニオン化は「材料開発に新しい次元を持たせる」とも言える。このような前提から、5年前に新学術領域に採択されたが、その当時は、物性研究、材料研究の根幹であった合成方法、解析手法、機能予測ガイドラインのすべてが確立されておらず、文字通り「分からないことだらけ」という状態であり、そこからの開拓がまず必須な状況であった。

また、領域メンバーの専門分野がばらばらだったことも一つの要因で、それぞれの分野、各材料でのエキスパートが「複合アニオン」という枠組みの中で考えようとなった瞬間にお互いが分からなくなるという状態で、これをまとめていくことが大きな苦勞でもあり、この新学術の一番の根幹となった。

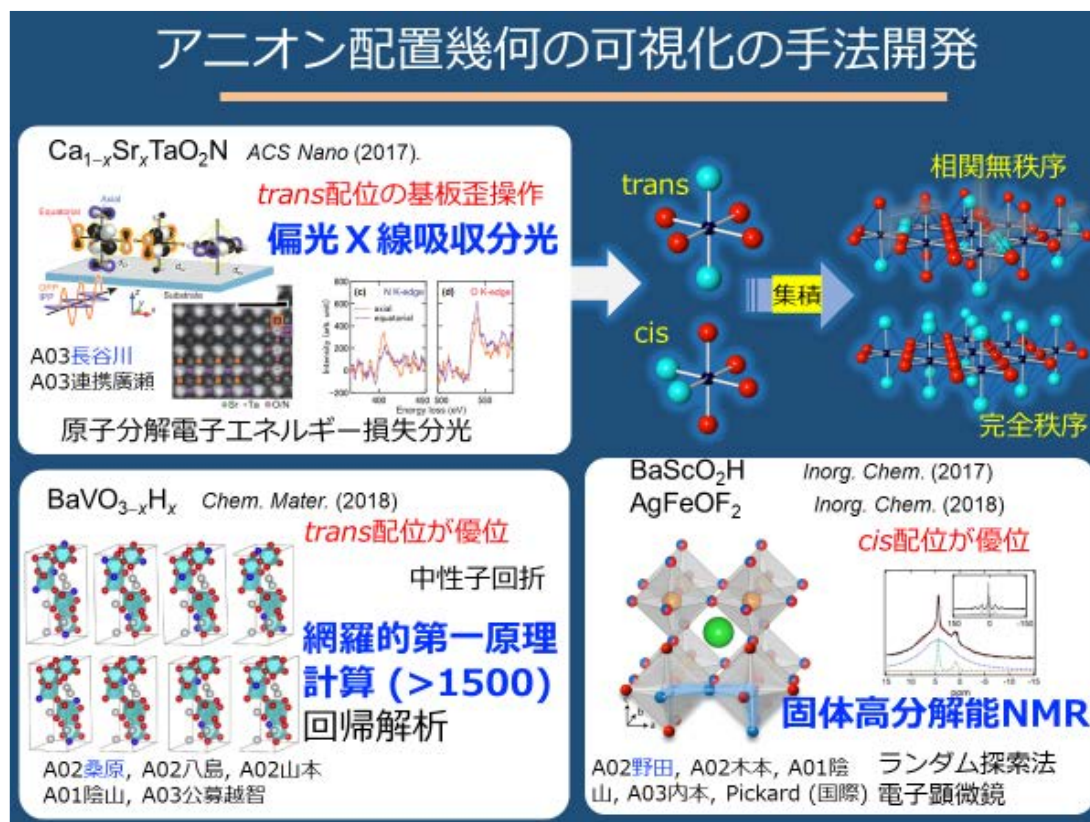


図2-2-2

「解析法が未確立」であったことに関する具体的な例を紹介する。酸化物において「八面体」と言えば配位が一種類に決まるのに対し、酸素を他のアニオンで2個置換すると、それだけで、transとcisという2種類のローカルな配位ができる。それらが繋がったものが複合アニオン化合物となるが、ここに「相関無秩序」といった新しい構造ができる。これをどうやって見るかということが難しい課題であったが、我々の新学術では新しい分光法を開発したり、第一原理計算を網羅的行ったり、高分解能NMRを用いたりして、複合アニオン化合物の新しい評価・解析手法を開発した(図2-2-2)。他にもいろいろな技術的な開発を行ってきたが、以降は新しい材料や機能についてフォーカスしてお話する。

最初に、酸化物イオンと窒化物イオンを合わせ持つ酸窒化物を取り上げる(図2-2-3)。

酸窒化物に期待できることといえば、窒素の分極率が酸素よりも大きいことから、まずは、誘電体としての可能性が考えられる。しかし、一般に酸窒化物は1,000度を超える高い温度でアンモニアガスを流すという、かなり危険な方法でしか作ることができず、さらに、高温でつくってしまうと形を制御することも困難であるという問題があった。

これに対し、我々のグループの北大の鱒淵先生が、メラニンから安く得られる固体材料 C_3N_4 を原料として用いる方法を考案し、低温で精密構造制御可能な酸窒化物が合成することを可能にした。この固体窒素源を原料に用いる方法は、その後もいろんなメンバーとの共同研究として発展しており、最近では単結晶の合成、酸窒化物における初めての強誘電性の確認、酸窒化物ナノシートの合成などに繋がっている。三次元的な構造でもナノシートを使うことによって異方的な材料をつくることができる点は、本WSの主題である階層構造の展開にもつながっていくものと思われる。

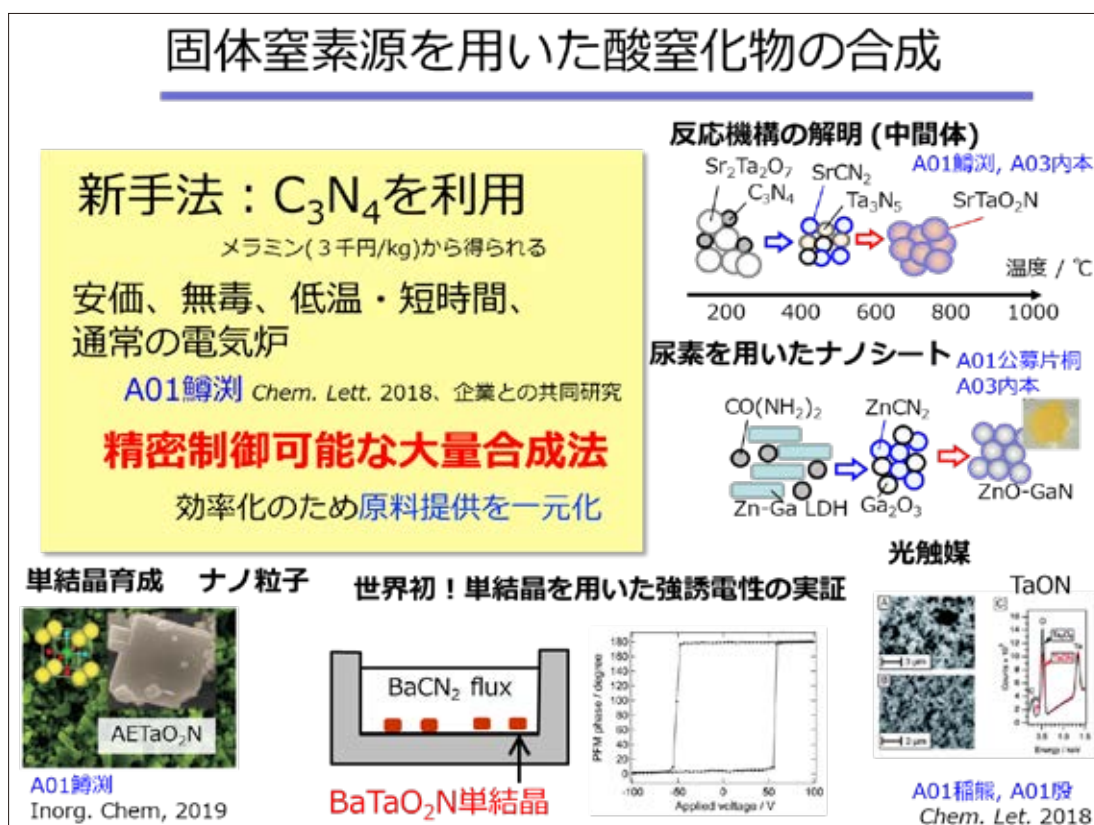


図 2-2-3

次に、三次元ペロブスカイトであるSrVO₃に対し、ある窒化処理を行って酸窒化物を作ることによって[111]方向に金属的な層と絶縁体の層が交互に積層した超格子構造ができた成果について紹介する(図2-2-4)。薄膜の場合には、このような構造は人工超格子と呼ばれるが、それと同様な超構造がケミカルにできるということが確かめられた。

この研究で興味深かったことは、バルクでは(111)面に平行な酸素欠損面ができるのに対し、薄膜では、薄膜に加わる(基板からの)応力に応じて欠損の起こる周期や欠損面ができる方位が変化するという結果である。これまでの固体物理や応用物理分野の研究では、応力が色々な相の物性を変化させる、例えば超伝導転移温度を上げるといった類の研究が多かったが、新しい物質をつくる事にも応力を使えるという点が非常に面白い。

応力あるいは電場は、エネルギースケール的には「温度にして何千度」と捉えることもできる。すなわち、自由エネルギー曲面を考えたときに、応力をかけることで非常に大きなスケールでエネルギーランドスケープを変えることができ、それによって既知物質以外の新物質を安定化できることを表している。そういった検討を、計算とともに進めると、これまでの酸化物研究で多かった「作って結果オーライ」のような物質探索法を超えた物質設計も可能になると考えている。

絶縁層+金属層の“合成”超格子

京大

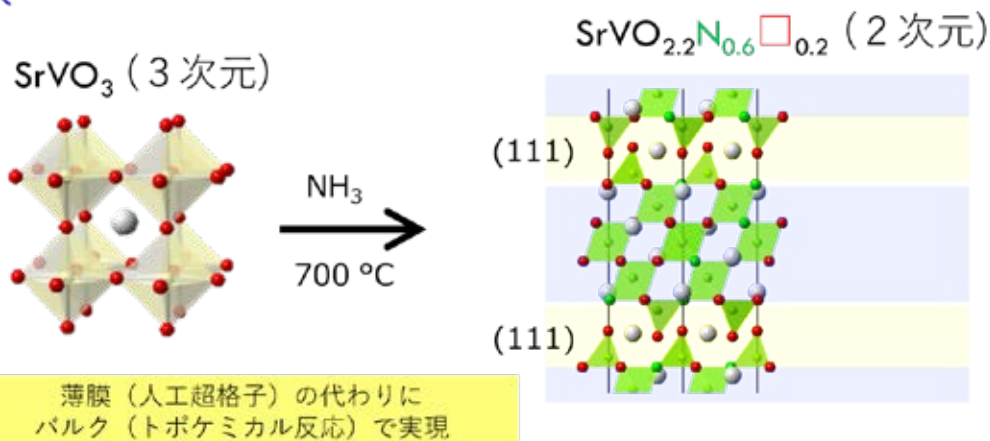


図2-2-4

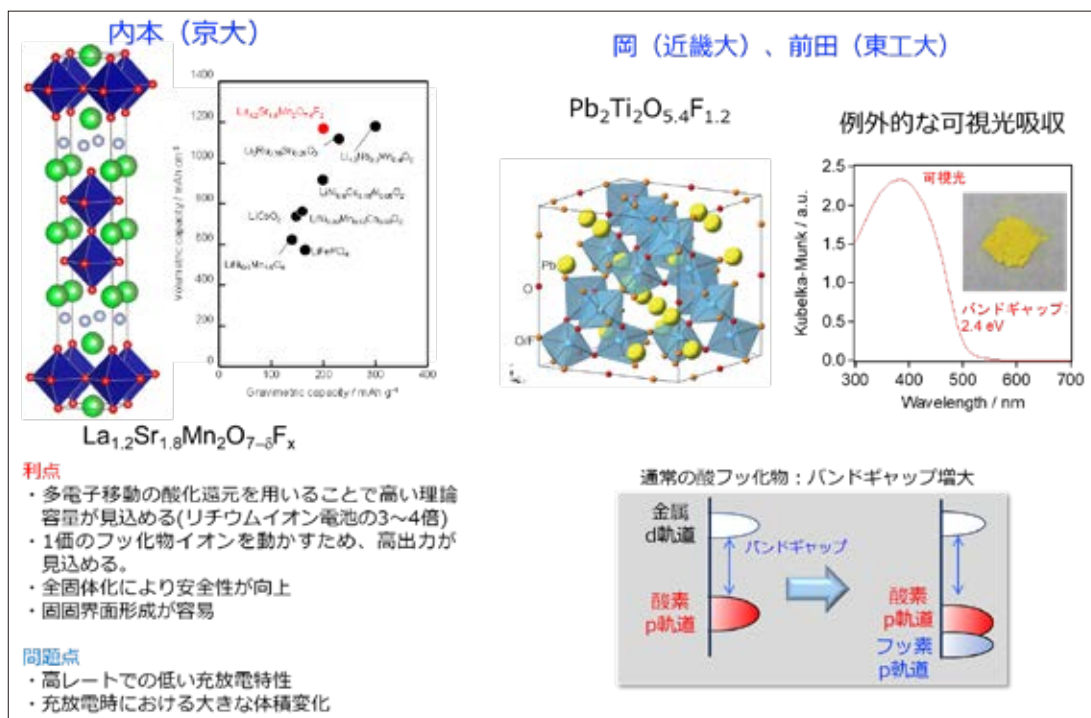


図2-2-5

次に取り上げるのは、酸素とフッ素の複合アニオン化合物、酸フッ化物についての結果である。図2-2-5左は、京大の内本先生による酸フッ化物を用いたフッ化物イオン電池への応用に関する結果である。フッ化物イオン電池は、リチウムイオン電池を置き換える可能性がある電池として注目されている。（充放電で結晶構造の異なる）コンバージョンタイプの電池では、「高容量が得られるもののサイクル特性があまりよくない」という問題がある。図1-2-5左の層状ペロブスカイト材料を使うと、コンバージョンタイプではないにも関わらず、現状のリチウムイオン二次電池正極に比べて遙かに高容量な材料が開拓できている。この高容量は、フッ化物イオンの出入りにより、マンガンイオンだけでなく酸化物イオンもレドックスしていくことに起因する。従来

のリチウム電池からフッ素電池につながるような、そういう展開も見えてきている。

また、図2-2-5右は、東工大の前田先生、近畿大学の岡先生の共同研究で得られた可視光応答光触媒に関する結果である。これまでのフッ化物を入れるとどうしてもバンドギャップが酸化物より大きくなるという常識を覆す結果である。図でも明らかなように、非常にきれいな黄色をしており、可視光吸収するのに適した材料である上に、長年、水素放出材料としてはチャンピオン物質であったルテニウムとロジウムを担持したSTOを凌駕する水素放出触媒能があることも、最近明らかになった。

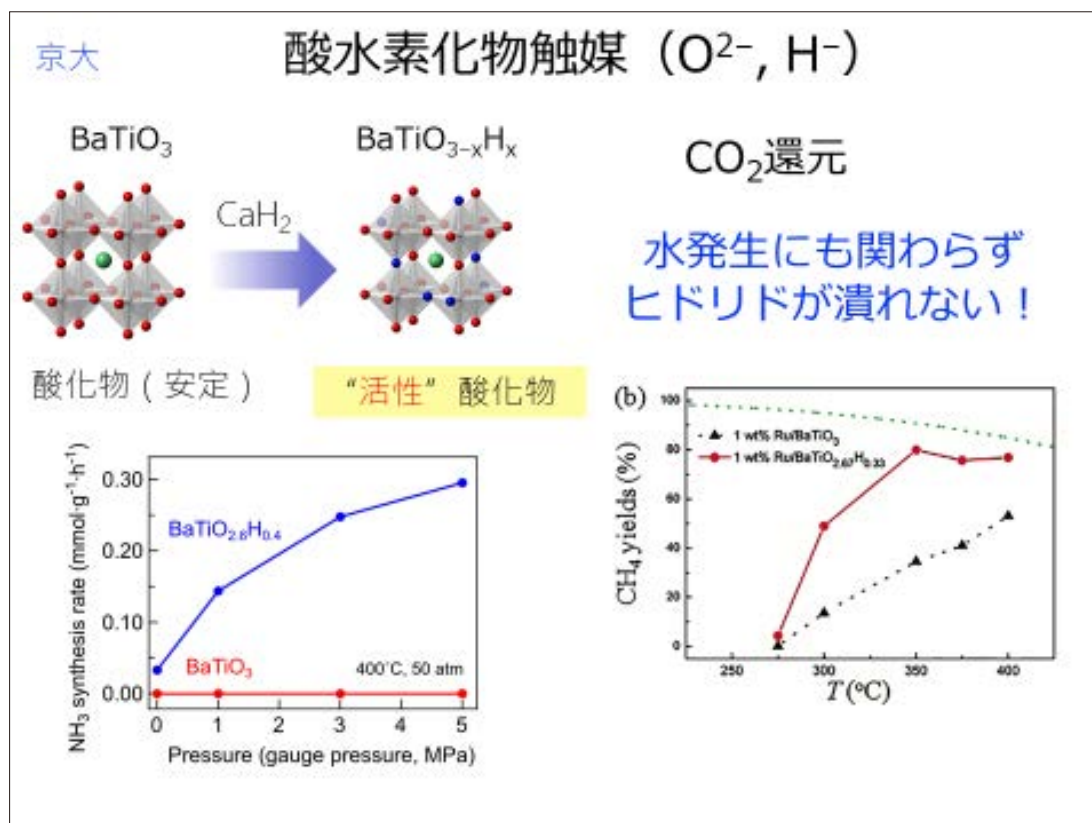


図2-2-6

図2-2-6に酸水素化物の研究例を示す。良く知られているように、酸化物は非常に安定であり、それが良い点でもあるが、これにヒドリド (H^-) をドーピングすると、あたかも「安定でありながら活性を付与する」ことができる。

図2-2-6左は、アンモニア合成触媒能の実験結果で、酸化物では全くアンモニアは出て来ないのに対し、水素を入れることで触媒活性を呈することがわかる。アンモニア合成の研究は、今世界中で行われている中で、今回の結果がファundamentalに面白いところは、チタンの化合物がアンモニア生成に活性を示した点にある。チタンの窒化物が良いコーティング材料であることから分かるように、チタンの窒化物生成エンタルピーは大変大きい。ということは、触媒能の程度を示すヴォルケーノプロットで言えば、左の裾野の遙かかなたにることになるため、本来ならば触媒能は示さないはずである。しかしながら、水素が入った瞬間に、新しい、これまでのスケーリングルールを全く覆すような発見が可能だということが示されたことになる。

酸水素化物の触媒能に関しては、興味深い点が見出されている。未発表データのため詳細は記せないが、重要な点としては、系中に水が存在するような触媒反応中においても酸水素化物が触媒として安定に機能することである。すなわち、普通なら水が存在すると潰されるヒドリドが、ここでは潰されていないという点にある。

機能だけではなく、まだファンダメンタルの部分にも面白いところが残されているのではないかと感じている。

酸水素化物のもう一つの例は、前に折茂先生が話された、ヒドリド（H⁻）を伝導する酸水素化物で、分子研の小林先生や東工大の飯田先生などにより、盛んに研究が行われており、今もイオン伝導率がどんどん上がっている状況である。さらに、私の研究室で、酸水素化物ではなく別のアニオンとヒドリドを組み合わせると、層状構造を作ってみると、活性の高い状態がずっと続き、室温に至るまでも水素が動けるそういった材料も見つかっている。

複合アニオンに関するその他の成果として、東大の長谷川先生による複合アニオン化合物の薄膜の研究もある。亜鉛の酸窒化物 ZnO_xN_y でアモルファスの薄膜を作成したところ、世界最高のキャリア移動度を示すことがわかった。酸窒化物で何故、このような高いキャリア移動度が出現するかの理由についてはまだわかっていない。また、ストロンチウムと鉄の酸フッ化物で ReRAM 特性が確認されているのも、大変面白い結果である。これも複合アニオンならではの機能ではないかと、個人的には考えている。

また、信州大学の是津先生、手嶋先生は電池関係を研究されており、電池応用に複合アニオン化を用いる研究を幅広く行っている。複合アニオン化で様々なアニオン（硫黄やフッ素）を入れてモルフォロジーを変えることによる電池特性の違いに着目し、国際共同研究や企業との共同研究を精力的に行っている。このような試みはアプリケーションを考える上で、大きな展開だと考えている。

酸化物をベースとした合成の場合、どうしてもボトムアップの設計性という意味では、難しい側面があったが、この新学術では錯体の専門家である九大の大谷先生や東北大の青山先生にも加わっていただくことで、セラミックスと錯体化学が融合するような、無機材料科学の新しい流れも生まれつつある。さらに、この新学術では、溶液化学の先生や有機化学の先生との共同研究も進めようとしており、このような分野融合が学問の進化によっては重要な要素であると感じている。

【質疑応答】

Q：錯体化学、金属材料、セラミックスなど、様々な分野の専門家と共同して、それぞれの知見を組み合わせる新しい材料を設計していく話をされたかと思うが、専門家の頭の中にある知見を組み合わせるのではなく、データ科学やシミュレーションを用いて、様々な材料やシステムを設計する手法を開発していく必要もあるのではないかとと思うが、その点についての先生のお考えをお伺いしたい。

A：もちろん計算科学もこれから非常に大事になってくると思うが、実際に使う際にどうやってプレディクションするためには適切な系を選ぶことが重要ではないか。まだ我々は、ペロブスカイトのような、ある意味一番簡単な構造の材料においても複合アニオン化合物にとっては序の口という面もあるため、今後は情報科学ともしっかりと組み合わせることで夢や可能性は広がるのではないかと感じている。

Q：化学の専門ではないため、どういうガイディング・プリンシプルで新物質を探索・合成しているのかがよく理解できなかったが、何かガイディング・プリンシプルのようなものが存在するのか。

A：ガイディング・プリンシプルは、今まさに出来つつあるところである。例えば、フッ素の系の場合、フッ素の電気陰性度、もしくはイオン性を、酸化物と組み合わせることがキーポイントになるのではないかと感じている。作り方の観点からは、酸水素化物を例にすると、酸化物からつくるのだが、酸化物を焼くような高温の電気炉に入れても酸水素化物はできず、普通は酸化物は反応しないような 500 度ぐらいの低温で反応させている。トポケミカル反応を使うことで合成が可能になる。つまり、すでに酸化物でネットワークをつくっているところを、マイルドなコンディションで酸化物イオンとヒドリドを入れ替えていくことに相当する。

Q：結局のところは、アニオンドーピングをやっているのではないかとと思うが、それに伴って電荷中性のための欠陥の導入とかが実は絡んでいるのではないかとといった議論はあるのか。

A：もちろんある。酸素を水素で置換すると電子をドーピングすることになるため、系全体にどういう影響を与えているのかという疑問が出てくるが、実は様々な可能性があることがペロブスカイト型については分かっている、インターステシシャルサイトに入る、ヒドリドではなくプロトンに変わるなどがある。違う結晶構造、例えば蛍石構造の場合なら、水素が幾つかのサイトを取り得るとか、そういうときに格子サイトに入るか、あるいはインターステシシャルに入るかというのは、例えば2つのイオンがあったときに、あるAアニオンのほうはこっちに入りやすいとか、そういったことも含めて考える必要がある。何か1個入れるときの相手の影響についても、例えば電気陰性度や分極率などが重要な役割を果たしている。イオン伝導の場合、分極率は非常に重要であるため、走らせないアニオンが別のものでも分極率をうまくコントロールするような、そういうアニオンを使うと、そうするとかなり活性が変わるなど、複雑な要素が絡むことになる。

2.3 「分子技術」・「融合マテリアル」における階層構造と機能発現

加藤 隆史（東京大学）

私は2010年から14年まで新学術領域研究「融合マテリアル」の領域代表を務め、2011年から2015年までは「さきがけ」の分子技術の研究総括を務めた。また、2019年から新学術領域研究の「水圏機能材料」というプロジェクトを始めている。本日はこれらの紹介を元に、私の考えを述べたい。

今回の主題である「高機能材料の創製・分離・循環を実現する階層構造の自在制御」は非常にいいタイトルだと思う。高機能化や構造制御は材料研究の王道である。また、分離・循環は古くて新しい課題であり、生分解性プラスチックはもう数十年間、重要なテーマとして研究されている。これらをどう融合させていくかが問題だと考えている。

最初に、新学術領域「融合マテリアル」の全体像を図2-3-1に示す。ここでも構造制御という考え方は必須であった。プラスチックなどの従来型材料は、生体に比べ単純な構造で、作るときも高エネルギー消費である。これに対して、歯や真珠といったバイオミネラルは、自然界に豊富に存在する無機元素群から常温・常圧で、かつ精密構造制御で作られる。こうした機能性と自然調和性を併せ持つ融合マテリアルを作るにはどうすればよいか課題であった。

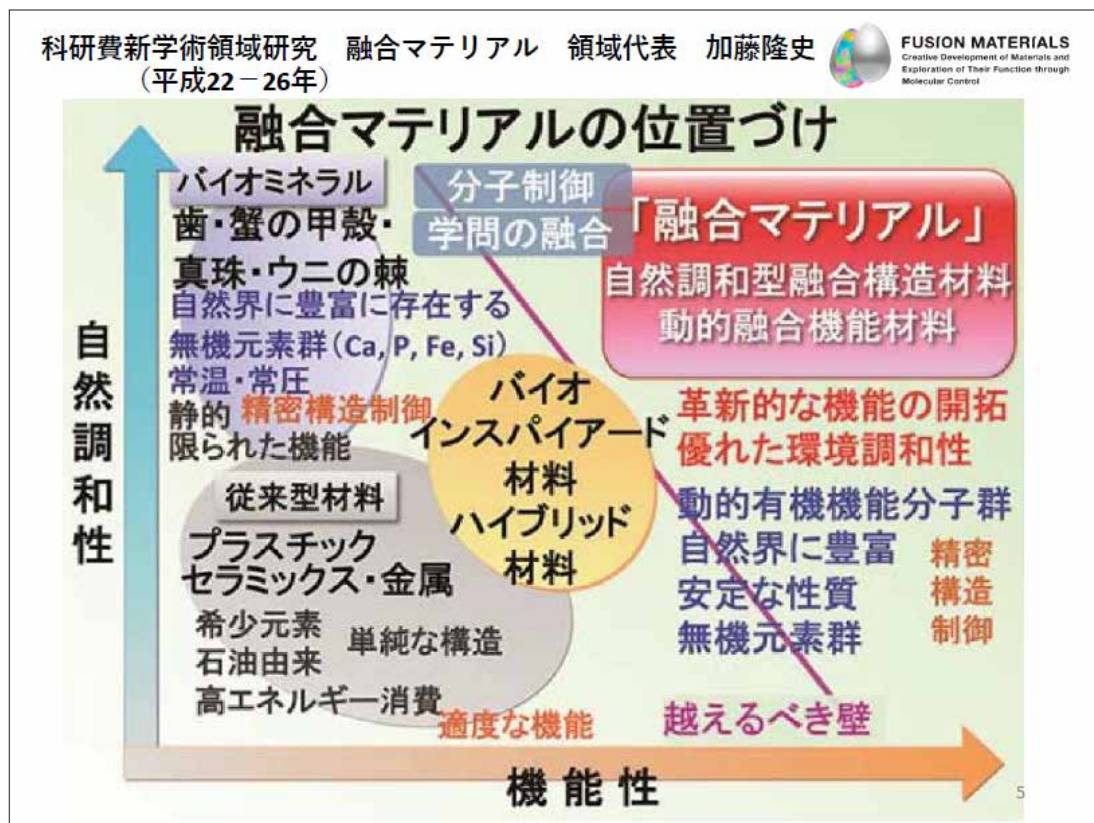


図2-3-1

階層構造は各スケールで構造が作られているということが本来の意味である。最も良い例はロブスターのはさみの構造である。ロブスターのはさみは海洋生物の中では最も強靱で、それは階層構造を持っているため

である。表層に一番硬い結晶があり、その中に層構造が配列している。上の層幅は小さく、下は大きくなっており、亀裂が広がらないようになっている。また、各層はらせん状の集合体で、さらにそのらせんの一層一層はハニカム構造になっている。ハニカム構造はキチンとタンパク質でできており、隙間に炭酸カルシウムが入っている。そのハニカム構造をつくるファイバーはナノ構造からできている。これは構造材料である。機能材料なども、こういった真の階層構造で作っていくことが必要ではないかと思っている。例えば我々のグループでは自然界に倣ったセルロースナノファイバーと炭酸カルシウムの複合体でアモルファス材料を作製することに成功した（図2-3-2）。

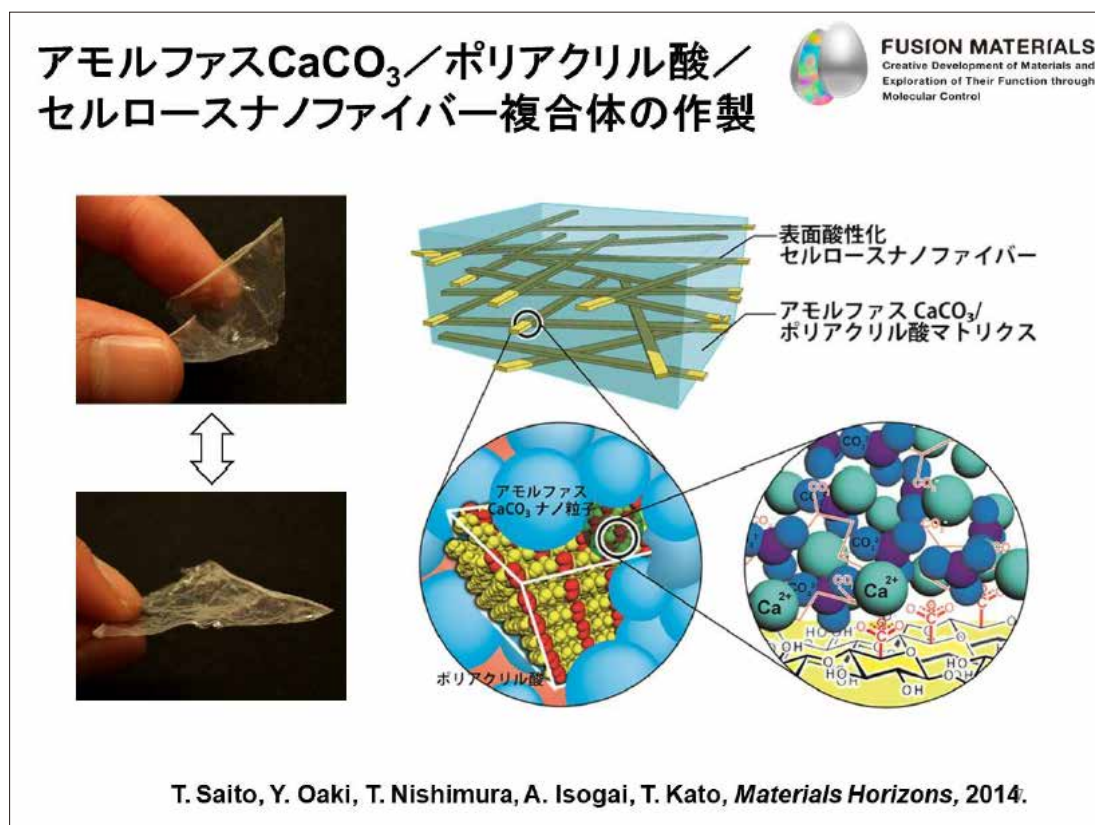


図2-3-2

先述のとおり、新材料の創製、階層構造の自在制御、分離・循環、どれも重要なキーワードで、古くて新しい課題でもある。階層構造の制御によって高機能な材料ができたとしても、作るための時間とエネルギーは多大となる。またそのような材料は安定なため、再生・分解は容易ではない。高機能なものほど分離・循環が難しくなるという常識を覆すための新しい科学技術が求められる。また、グローバルな課題としてどのレベルを目標にするかというのも重要な観点である。

単純な高分子材料のみでも、リサイクルや循環は簡単ではない。例えばペットボトルのリサイクルにしても、方法だけでなく、経済的問題、社会情勢などが関係してくる。またプロジェクトになったとき、サイエンスとしてはよい論文は出にくくなるため、推進のための工夫や意識改革が必要となる。

米国でのペットボトルのリサイクルの現状を例にとると、まず石油から原料が精製され、ペットボトルが作られる。米国では大体3割ぐらいが回収され、7割はそのままごみとして埋め立てられる。回収された3割のうち、再生ボトルになるのはわずか4%である。ほとんどは着色して使えないため、絨毯などの二次用品を経て最終的には埋め立て処理される。このように、ペットボトルのような簡単な材料でさえもリサイクルは難しい。

科学的なアプローチとしては、アップサイクリングという考え方が注目されている（図2-3-3）。これは、織

維製品など低グレードの二次用品への転換以外の方向として、部分的に分解してモノマーに戻したり、付加価値の高い別の化成品を作ったりするものである。難しいが、取り組まなければならない課題である。

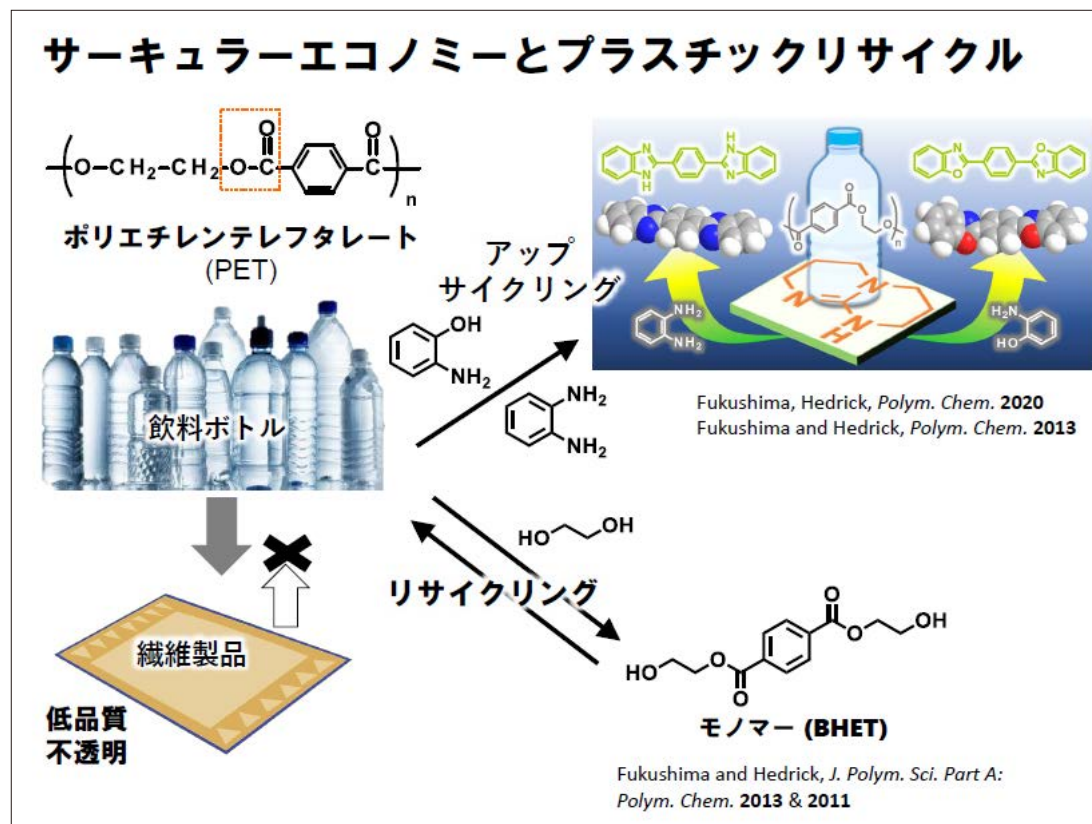


図2-3-3

熱硬化性高分子に関しては、先ほど紹介した甲殻類の外骨格は自然界の軽量高強度材料である。炭酸カルシウムとたんぱく質の中にキチン繊維が入っており、まさに繊維強化複合材料の構造になっている。一方、人工の繊維強化複合材料（Fiber-Reinforced Plastics：FRP）は、炭素繊維やガラス繊維で強化されたエポキシ樹脂である。これは極限環境で利用される非常に高性能な材料であるが、分解して循環させることができない。例えばエポキシ樹脂を熱可塑性にする等の検討はあるものの、実際に高性能かつ循環できる材料を作ること、本当に挑戦的な課題となろう。

高機能の複合材料を作ろうとする挑戦は、何千年も前から取り組まれている。古くは古代エジプトにおける日干しレンガである。これは天然繊維のわらや麻を粘土に混ぜた繊維強化複合材料であり、分解して自然に還る。しかしながら、現代のガラスや炭素の繊維強化複合材料は、非常に高性能でレーシングカーなどにも使われているが、全く分解できないという難点がある。

今後に必要な展開は、広い意味での環境適合性の複合材料をどう作っていくかということであろう。そこでは新しい仕掛け、すなわち革新的な無機・有機ハイブリッド、バイオミネラルや生体組織の構造の応用、あるいはメソポーラス、金属錯体、炭素材料などの活用が必要になってくるのではないかな。

私が研究総括を務めたさきがけ「分子技術」領域でも、構造制御は必須のコンセプトであった。物理や化学などの基礎科学を最終的に新素材、太陽電池、創薬などに転換するためには、分子を設計し、その構造を制御するという技術が不可欠になる。

図2-3-4は、日本工学アカデミーでとりまとめた「超スマート社会・持続可能社会のための分子材料の今後の展開」の概略図である。左側の材料研究の現在の体系化範囲というのが「分子技術」領域で取り組んだことであり、分子の設計からデバイス・プロセス化までを一つ流れとして考えた研究に、横断的・基盤的な研究も合わせて領域を推進した。その先には部材・部品、最終製品があり、使用、エンド・オブ・ライフを経て、再資源化して戻すプロセスも必要となる。今後は資源化を含む社会実装のような、主に企業が強みを持つ領域も含めて一体的に取り組んでいく必要があり、そのためには材料に不可欠な資源とエネルギーの学理を入れていかなければいけないと主張してきた。

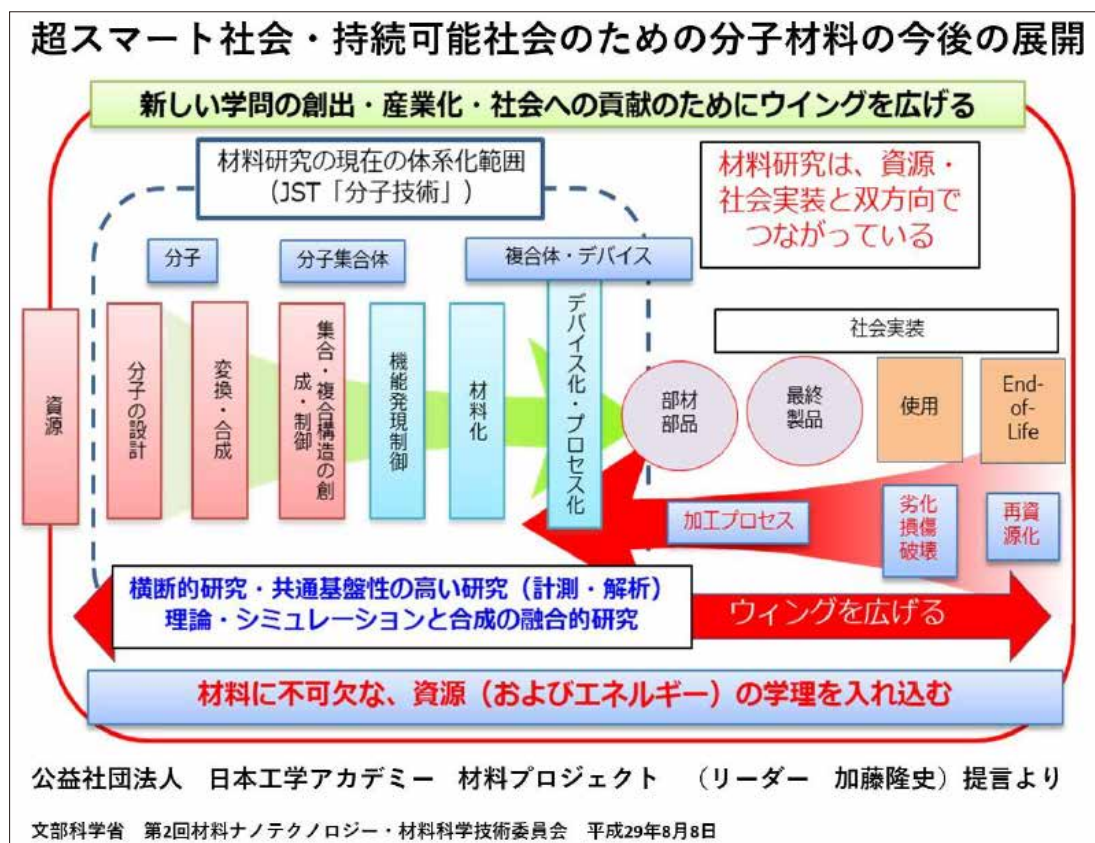


図2-3-4

その一例として、私が昨年代表を務めている新学術領域「水圏機能材料」の成果で、「さきがけ」にも参加していた岡山大学の仁科先生の仕事を紹介する。水で扱える酸化グラフェンという物質があり、日本触媒がプラントでの量産化に成功して自社ベンチャーでやっているものである。有機合成化学の理解に基づき、きちんとグラフェンを扱っているところが優れている。酸化グラフェンをブロック化して、いろんな形を作って多様な機能を出すというもので、今回のワークショップの趣旨に合った事例の一つではないか。また、京都大学の齊藤先生と筑波大学の羽田先生は、接着と剥離を自在に制御できる接着材料を開発されている。このような技術も階層構造制御では重要である。

以上述べたようなことに本格的に取り組むためには、いろいろな産業のユーザーを含め、資源・エネルギーから材料・デバイス・社会実装までを見据えた全体の議論を継続していく必要があると考える。

【質疑応答】

Q：今回紹介されたロブスターの事例のように、自然界の材料は非常に生成エネルギーも低いと思うが、

こういった材料を人工的に作れないのはなぜか。

- A：歯や甲殻の構造は、細胞がタンパク質を使って時間をかけて、すなわち熱力学的に非平衡の系で制御している。同様のことをプラントで精密に行うことはなかなか難しい。どうやって我々の科学技術で実現できるかというのが課題であるが、部分的に少しずつできているところである。
- C：階層構造で複合材料の強度を高めるほどリサイクルが難しくなるとのご指摘は、そのとおりだと思う一方、サーキュラーエコノミーとしては、リサイクルだけでなく、製品の寿命を上げることも課題の一つではないか。耐久性の高い材料を作って長期間使うことでサーキュラーエコノミーに寄与することができる。そのようなアプローチを考えてもよいのではないかと感じた。
- Q：循環や分離を考慮した材料設計という考え方については、いろいろなアイデアが出てきそうか、難しいと思われるか。印象を伺いたい。
- A：難しいことは事実だが、最初からその方針を示しておけば、それなりにアイデアは出るのではないかな。本日紹介した酸化グラフェンなどは、今世界中で研究が展開されている。ローカルな研究から世界全体での取り組みまで、どのあたりに視点を定めるのかも重要と思う。
- Q：材料の寿命を制御できれば、意図的な分解や循環にも繋がると考えられるか。
- A：そう思う。ただしポリエチレンなどは既に長寿命であり、CFRPも非常に強い材料である。恐らく今後はソフトで動的な材料で、かつ多機能で長く使えるものが必要になってくるだろう。
- Q：これからMaaSなどモビリティの使われ方そのものが変わっていく中で、材料の分解・合成の自在制御とともに、最低限必要な耐久性の見極めにも取り組むことで、より研究開発が進展するのではないかな。
- A：30年くらい前、共有結合ではなくて水素結合で分子をつなげる超分子技術を開発したとき、企業や研究者が水素結合で構造材料を作ろうとしたが、単純には進まなかった。しかし、現在はこのような非共有結合を用いたさまざまな超分子材料が報告されて発展してきており、ご指摘のように、用途とのバランスも含めて、望む機能に有効な適切な構造を見出していくことが出来れば大きな可能性のある分野であると思う。

3 | 計算科学・シミュレーション技術の トレンド・課題・将来展望

3.1 シミュレーション研究から考える高分子材料における階層構造の問題

森田 裕史（産業技術総合研究所）

本日は、まず高分子のシミュレーションと粗視化モデルと階層化、続いて、階層構造とその機能・物性、階層構造のメカニズムと制御、最後に階層構造を持つ材料の研究課題について述べる。

高分子材料をシミュレーションするときには必ず階層構造という考えが必要になり、そのためのソフトウェアが必須である。1998年から2002年にかけて、当時名古屋大学におられた土井正男先生をリーダーとして行われたNEDOプロジェクトにおいて、OCTA（Open Computational Tool for Advanced material technology）と呼ばれる高分子シミュレーションシステムが開発された。その後、2003年から2008年にJSTの予算によりバージョンアップされ、現在NEDOの超超プロジェクトにおいてマテリアルズ・インフォマティクスにOCTAシステムを適用させるための研究開発がなされている。このOCTAと呼ばれるシミュレーションシステムは、図3-1-1のように4つの階層におけるシミュレーター（CONAC, PASTA, SUSHI, MUFFIN）とそれをまとめるGourmetというプラットフォームから構成されている。ナノメートルを超えてミクロンオーダー、いわゆるメゾスケールにおけるシミュレーションを行うソフトウェアである。現在、登録ユーザー数は3,000を超え、最新版OCTAのダウンロード回数は9,700に達する。

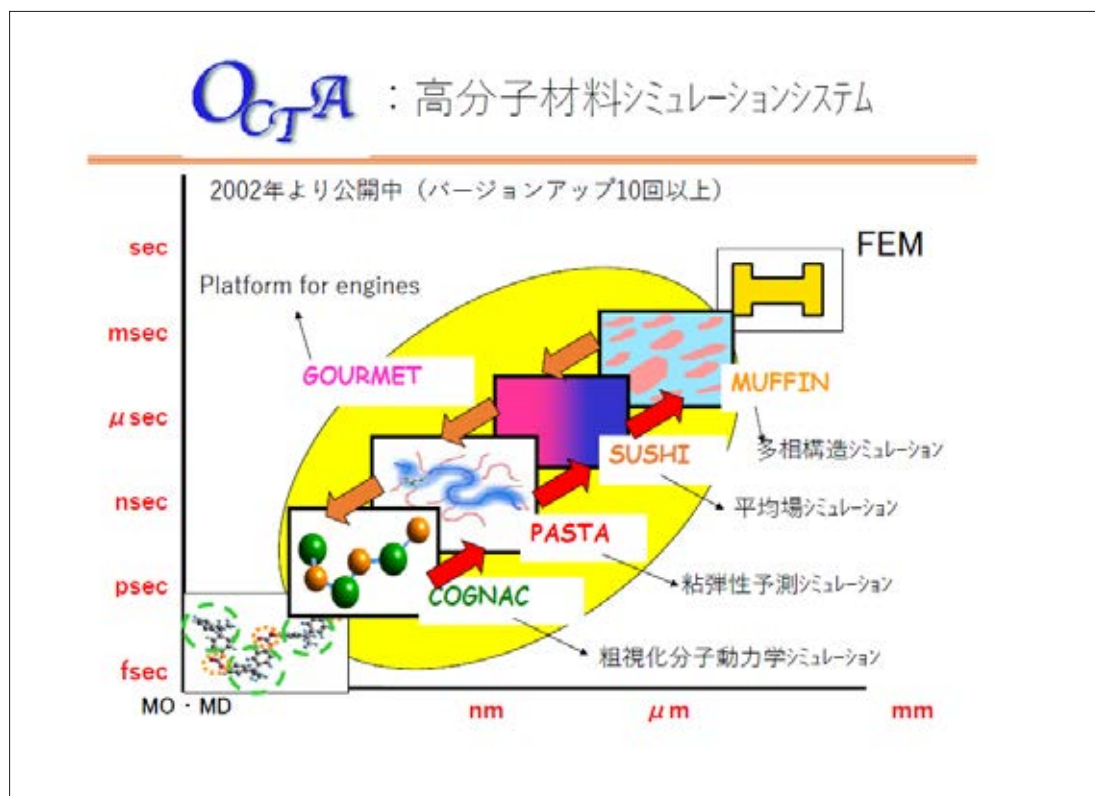


図3-1-1

高分子材料の多階層性に応じてシミュレーターがあり、一番ミクロではアトミスティックな電子状態、その上では高分子がひも状になり、その連結鎖を考える。そのひもが多くなり絡み合いが見られ、その上の階層では混合物の界面を考える。さらにもう一つ上のスケールではドメイン構造が出現する。このようにOCTAは階層的な構造に応じたそれぞれのシミュレーター（CONAC, PASTA, SUSHI, MUFFIN）を準備した構成になっている。

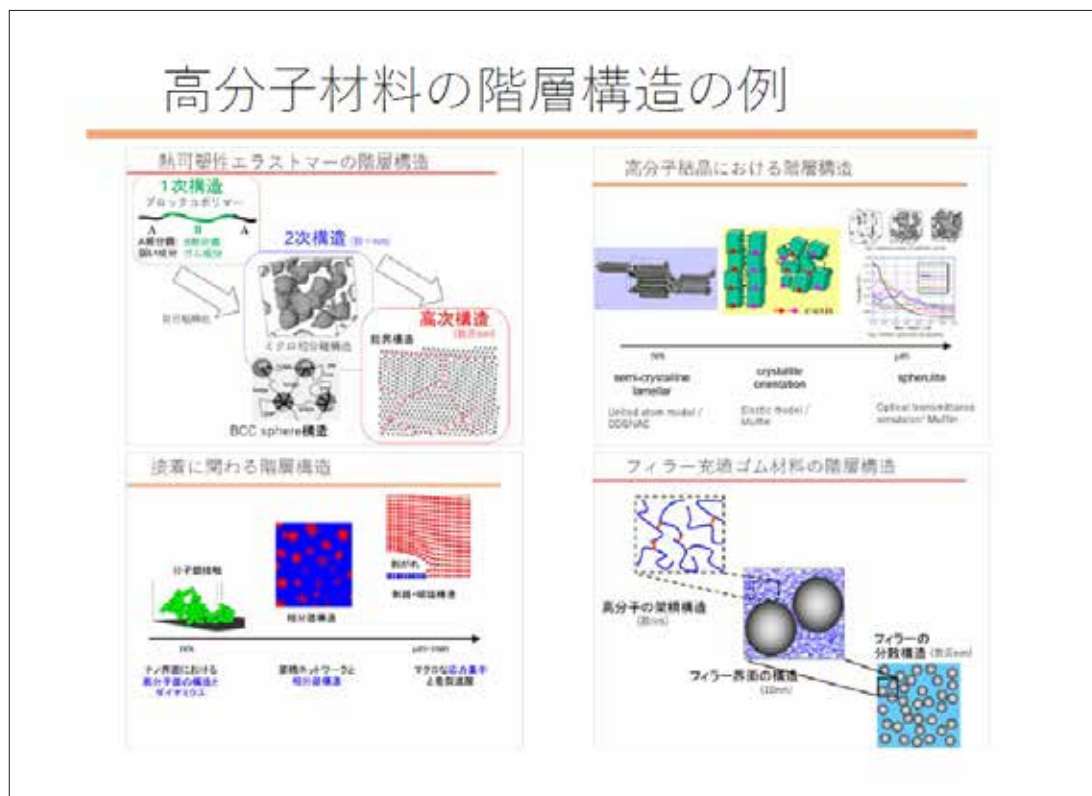


図3-1-2

様々な高分子材料においてOCTAを使用したシミュレーションによる階層構造の研究例として主に4つ示す(図3-1-2)。1例目は熱可塑性エラストマーで、一次構造はブロックコポリマーで、それが自己組織化することでドメイン構造をつくり、さらに高次になると粒界構造が見られる。2例目は高分子結晶における階層構造だが、結晶ラメラ構造から様々な配向方向をとる高分子結晶が集合した状態になり、さらに球晶になる各状態をシミュレートした。3つ目の例は接着に関する階層構造であり、硬いものに対して高分子鎖がどのように接着するかというナノ界面における高分子構造とダイナミクスの関係のシミュレーションから、架橋ネットワークと相分離構造、さらには剥がれる現象におけるマイクロオーダーのシミュレーションも行っている。最後はゴム材料の事例である。一番ミクロなスケールではゴムの高分子が架橋構造を作っている。そこにフィラーを充填させ、高分子とフィラー界面における相互作用を考慮した構造シミュレーションを行い、さらにフィラーの分散構造のスケールでのシミュレーションを行っている。

スケールの大きな階層をシミュレーションするとき、すべてを原子モデルで計算することは不可能であるため、高分子を粗く見たモデルを用いたシミュレーション技術が必要になる。それが粗視化モデルである。高分子を粗く見て必要な要素のみを抽出したモデル、いわゆる効果的なエッセンスのみを抽出する。例えば原子数がかかり多い例をたった16個の球で表すとなると、長さの単位を大きくとることができるだけでなく、時間の単位も大きくとることができる。このようにエッセンスのみ取り出すことは、今でいうマテリアルズ・インフォマティクス分野で言えば、有効な記述子のみで表現することと同じであると考えられる。

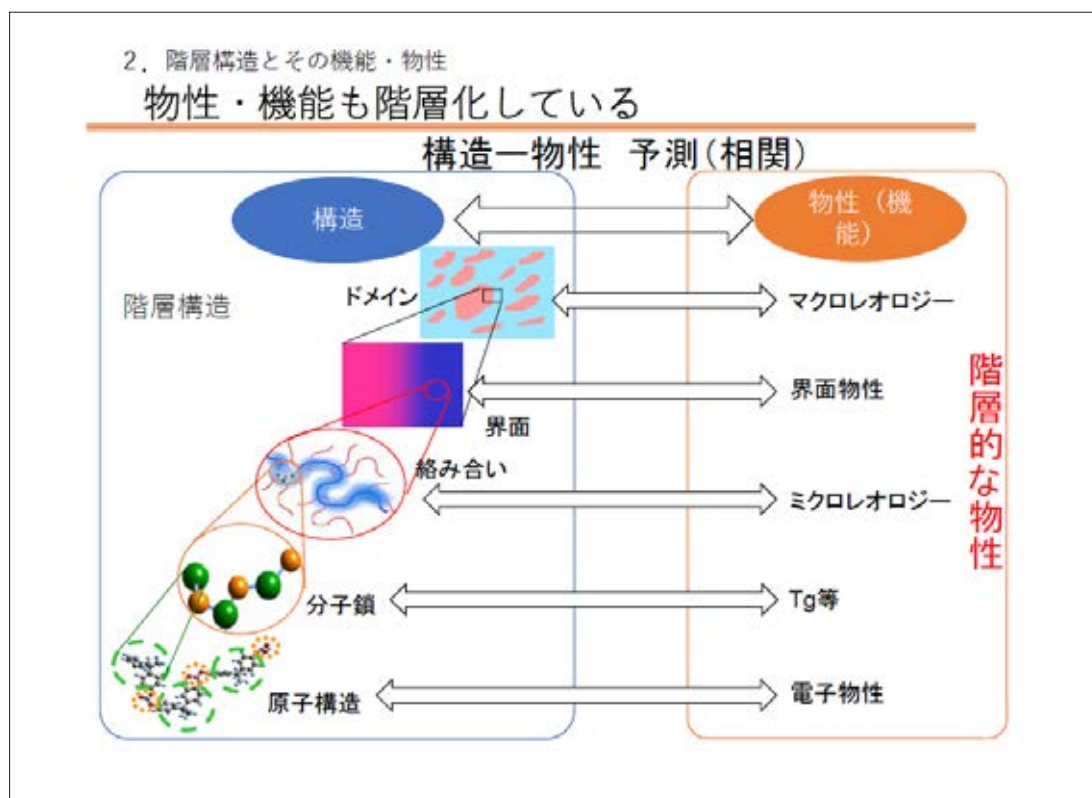


図3-1-3

構造が階層化していることと同様に、物性・機能も階層化しており、それぞれスケールでの構造がそれぞれの階層の機能と繋がっている（図3-1-3）。例えば原子構造は電子物性と関係が深く、分子鎖はガラス転移温度などの物性と、絡み合いに関してはミクロレオロジーと、界面は界面物性、ドメインはマクロレオロジーと、階層構造に応じた物性・機能の階層化も見られ、それぞれの階層のシミュレーションを行う必要がある。

タイヤの構造と機能の関係を例に挙げると、タイヤに使用されるゴムは今日非常に高機能になってきているが、例えば燃費を良くするためには転がり抵抗を低減する必要がある一方、安全性を確保するためにはグリップ特性を上げなければならないが、これらの性質はトレードオフの関係にある。タイヤメーカーの経験則ではある「損失正接（ $\tan \delta$ ）」という指標でタイヤの機能制御をしており、末端変性ポリマーに修飾シリカ粒子をフィラーとして加えたゴム材料を用いることによって、このトレードオフの機能を実現している。

次に、階層構造のメカニズムと制御のシミュレーション事例について紹介する。最初に熱可塑性エラストマーに関しては、自己組織化を利用して上の階層が作られている。ブロックコポリマーを材料として、sphere, cylinder, gyroid, lamella いうように階層化する。ここでは、2つの力、すなわちモノマー種間の反発相互作用（ χ パラメータ）と分子鎖のエントロピー由来の弾性のバランスで構造が決まる。ミクロな視点だと強い共有結合からなる高分子鎖であるものの、メソスケールから見ると自己組織化という比較的弱い力で構成されている。温度をガラス転移温度まで上昇させてアニーリングする過程で構造が形成されるが、一方で再びガラス転移温度以上に昇温すると再度溶かすことができるため、材料のリサイクルという観点から熱可塑性系のポリマー材料は注目されている。実際には熱可塑性エラストマーでもリサイクルは非常に難しいとされているが、決まった部品の同じ材料におけるリサイクルが試行されているようである。私自身は、CREST細野領域で、高次構造の記述子の探索に関する数学を用いることによって、熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御の研究を行っている。

制御の事例の2例目としては、ブロックコポリマーを用いた半導体作製プロセスについてである。Direct Self Assembly(DSA)と呼ばれるもので、ブロックコポリマーをラメラ上に並べてラインアンドスペースパターンを作成する方法である。ポリマーを自己組織化させるための外場として、決まった領域だけに一方の成分が濡れやすい下地を塗布しておき、方向性を制御するものである。

3つ目の例としては、フィラー充填ゴムの破壊である。ポリマー内のフィラーの分散をよくするためにはフィラー界面の親和性を高くする必要があるが、低いときにはポリマーとフィラーの界面で剥離が起こることがシミュレーション結果として得られている。すなわち、フィラー充填ゴムのリサイクルを考えた際、フィラー界面の相互作用で制御できる可能性が示唆される。

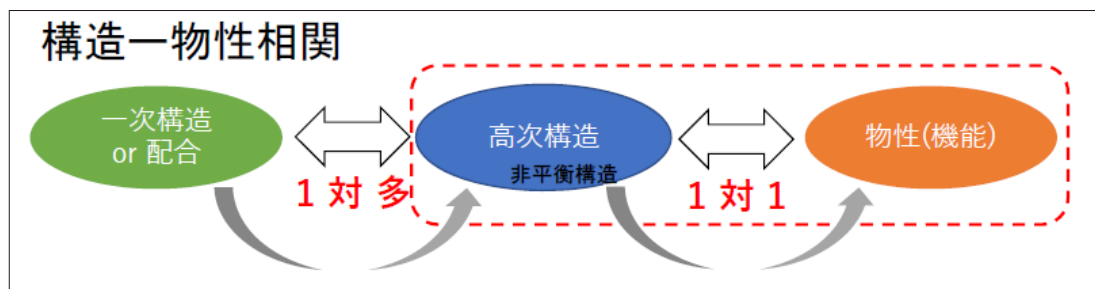


図3-1-4

高分子材料の設計の大きな課題として、構造と物性相関が挙げられる。図3-1-4に示すように、一次構造から階層構造の高い高次構造を作るとき、一次構造が1種であったとしても高次構造はいろいろと出てくる。つまり1対多の関係になっている。例えば、フィラーの分散した高分子材料では、まったく同じ構造のものはできない。一方で、高次構造の1つに対して物性（機能）は対応させることができる、つまり高次構造と物性には1対1の関係性が成り立つと考えられる。また、ある機能を持つ高次構造の状態は非平衡状態であることが多いといえる。そのため、高分子材料自体が柔軟であると言え、また常に緩和が進んでいると言える。

階層構造の研究をする上で、基本的なこととして構造をしっかりと観ることが必須である。シミュレーションでは粗視化の際に実験の構造観察の結果をもとにしている。シミュレーションの立場から階層構造の研究に必要なこととして、実験（特に構造観察）とシミュレーションの連携、高次構造の階層構造の記述子、時間域（ダイナミクス）の階層構造、などが挙げられる。

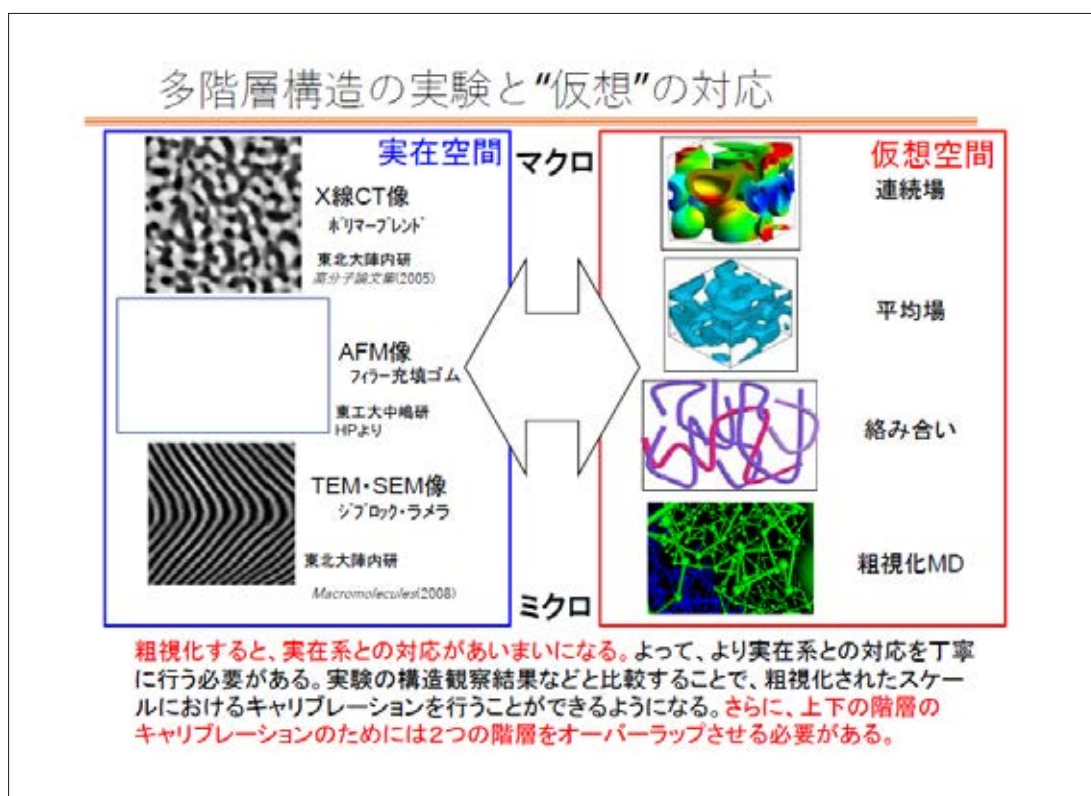


図3-1-5

図3-1-5に多階層構造の実験とシミュレーションの対応を示した。粗視化すると実在系との関係が曖昧になるため、粗視化した仮想空間と、X線CT画像やAFM像、TEM・SEM像などの実在空間との対応を丁寧に行う必要がある。実験結果と比較することで、粗視化されたスケールにおけるキャリブレーションを行うことができる。さらに、上下の階層のキャリブレーションのためには階層をオーバーラップさせる技術が非常に重要になるだろう。例えば、図3-1-6のように、粗視化MDという分子動力学におけるスケール領域と分散シミュレーションでカバーする領域の重なる部分が大規模化には重要になってくる。

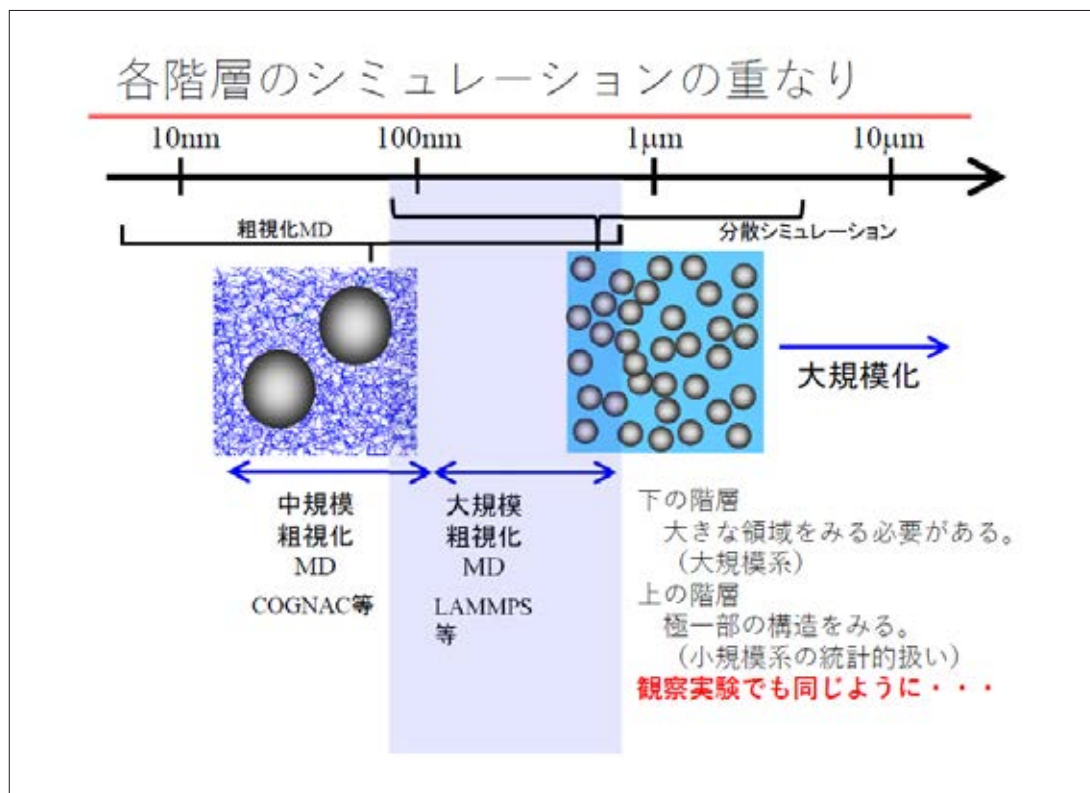


図3-1-6

最後に、高次の階層構造の記述子の問題について、機能を表す高次構造の記述子として何がよいのか、さらに、一次構造から高次構造を表す記述子は何がよいのかなど、マテリアルズ・インフォマティクスの研究で非常に難しい問題を解決すべく現在取り組んでいるところである。

【質疑応答】

- Q：構造と物性を結び付ける、そのはざまに高次構造が入ってきて、記述子をどうするか 非常に難しい問題だと感じる。ポリマーの場合の高次構造は、離散的ではなく、様々な構造が連続的な自由度をもって多様に存在するということか。
- A：その通り。様々な構造、様々な階層でそれぞれ機能がある。どこを見るかということを考えなければならない。
- Q：その構造に、各層に対応した特有の機能が生まれるということか。
- A：その通り。見たい機能によって、見なければならない階層がおそらく違ってくる。例えば、電子伝導の機能ではシミュレーションするときには電子状態計算で対応させる必要がある。
- C：無機材料の場合、結晶構造の多様性、すなわち構造の自由度ということで考えていたが、ポリマーの場合には、階層ごとの機能がそれぞれあるというストラクチャーが非常に新鮮であった。
- Q：発表内容は高次水素機能とも非常に密接に関係しているように感じた。構造と機能あるいは物性の対応関係に関して、高次構造から機能というのは1：1となっていたが、それは順問題としてある程度予測ができると考えてよいか。
- A：順問題は我々がしっかりと解かなければならないことである。高次構造の記述子を見つける段階は、順問題で考えなければならない。様々なパラメータを考えて、機能に関するパラメータは何かということを出することが重要である。
- Q：その際、機能から見た構造、すなわち逆問題への展開は可能なのか。

- A：まずは順問題が解けないとおそらく逆問題はできないのではないかと考えている。
- C：階層構造でうまく階層間をつないで製品の機能予測ができれば素晴らしい。この階層間をつなぐところを実験とシミュレーションを協奏させながら、うまく機械学習を使って繋げられないかと感じることがある。一方で、構造をつくることが意外と難しく、計測技術とうまく結びつけて、できるだけ局所情報ではない情報から適切に情報を取り出し、そこから構造を再構築するようなスキームがあってもよいのではないかと。特にダイナミックレンジが広い計測技術とのマッチングが好ましいと感じている。
- A：仰る通り、計測と連携することが重要で、シミュレーションだけではどうにもならない。一方で、高次構造の記述子を抽出することを考えたとき、例えば実験の構造観測がどれだけでできているか、ということあまりデータ数はないように思う。うまくシミュレーションで補うなど、バランスを取りながらできないか考えているところである。
- Q：発表中には詳しい説明はなかったが、「時間の階層構造」というのはどういう意味か。
- A：高分子材料には“長さ”のスケールにおいて動ける距離がある。それぞれの機能において、長さ・距離のダイナミクスが関係しているため、機能制御を考えるときには、同時に時間スケールも考える必要がある。高分子の研究にはレオロジーという物性があるが、時間の階層構造という概念に直結してくる問題だと考えている。

3.2 電池・触媒の高機能化と階層構造制御に向けた計算科学

館山 佳尚（物質・材料研究機構）

本日は、「元素フル活用」「階層構造制御」というキーワードに関連する計算科学の題材として電池を取り上げ、その中でも二次電池を中心に話をしたい。

二次電池においては、充電時に正極側から負極側に、放電時は負極側から正極側へ電子とリチウムイオンが移動する。電子は回路を通り、イオンは電解液・電解質を通る。二次電池は、電解液・電解質、負極、正極といった複数の材料で構成されるため、材料の複合化が必要である。電池の中では固液界面、固固界面など様々な界面の制御技術が重要になる。しかも、電解液・電解質は有機、無機の混合系であるため、有機と無機の知識も必要である。電極は電子を通さないといけない一方、電解液・電解質はイオンを通さないといけないため、エレクトロニクスとイオニクスの両者も考えなければならない。イオンが動くと構造も変わるため、平衡論だけでは難しく、速度論も含めて考える必要がある。このように二次電池は材料科学課題の宝庫と云うことができる（図3-2-1）。

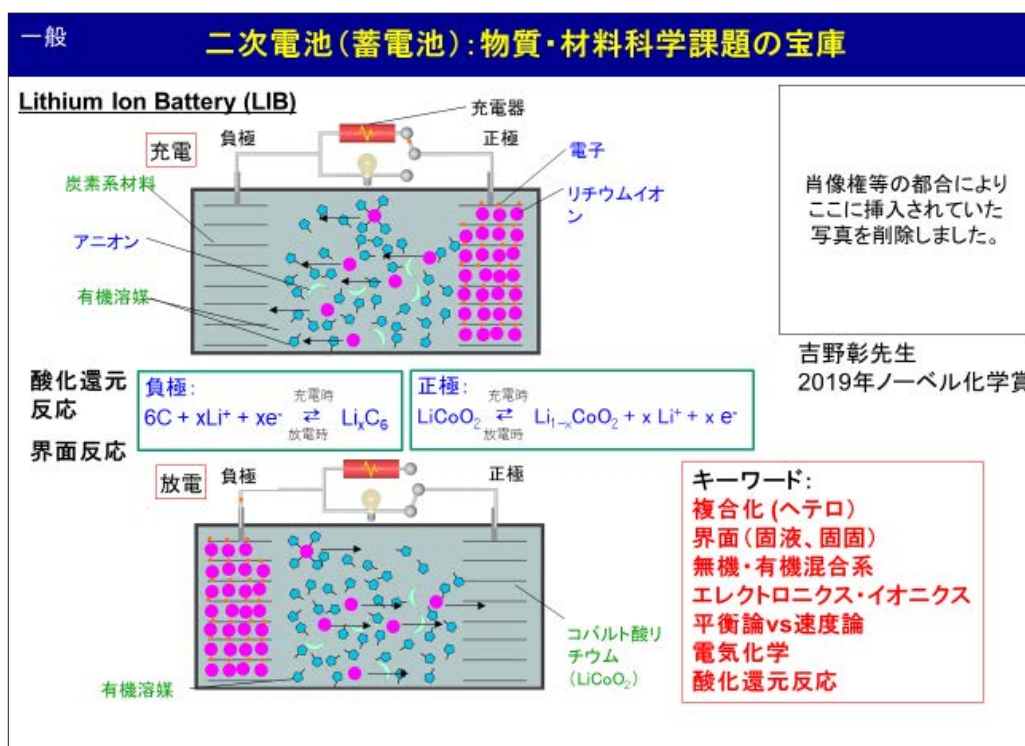


図3-2-1

この二次電池の高機能化を考える。容量、エネルギー密度は電気自動車が長距離を走るために必要な要素であり、出力密度も同様である。一方で安全性、寿命等の改善も重要である。最近の注目すべき研究として、東工大の菅野先生が新しい全固体電池用の固体電解質材料を開発した。イオン伝導度として従来材料の1～2桁高い値を示し、これが全固体電池開発の加速につながっている。電解液としては、私が東大の山田先生と共同研究している高濃度電解液に注目が集まっている。電極についても材料の複雑化や加工による性能向上が試みられている。このように俯瞰すると、「階層構造」よりも、構造ユニットのネットワーク制御や材料の複合化がよりの確な方向性であることがわかる。

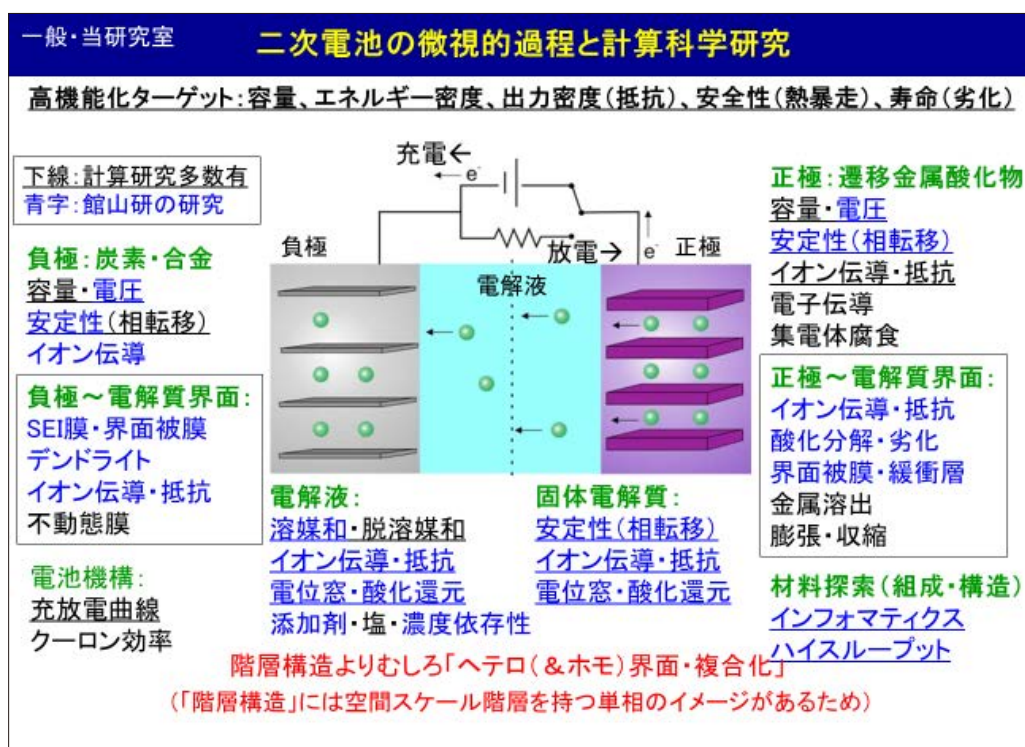


図 3-2-2

二次電池は材料科学における最も興味深いターゲットの一つであるため、様々な正極、固体電解質、電解液、負極に関する計算科学研究が世界中で行われている。特に容量、イオン伝導・抵抗、充放電曲線等に関するものが多い。階層構造に関して私が持っていたイメージは空間スケール階層を持つ単相材料であったが、上述のように高機能化のためには複数の材料のヘテロの界面に関する階層構造制御がより重要になるであろう(図 3-2-2)。

計算材料科学分野では、マクロな材料機能に向けて様々な空間スケールの計算手法が存在する。森田先生は粗視化モデルを、私は第一原理計算を用いているが、スケールを横断するマルチスケールというアプローチもある。但し、用いるパラメータの精度の問題から、材料設計や予測ができるかはいまだに課題である。第一原理計算においては、精度は高いものの、計算コストも高くなるため、大きな系には適用できない課題があった。そこで、私が所属するNIMSではMaterials Informaticsを組み合わせ材料を設計するAI側からのアプローチも進めており、私が参画している新学術領域「蓄電固体界面科学」でもマルチスケール系とインフォマティクス系の2系統での計算科学研究が並列で動いている。さらに、「富岳」の登場でスパコンによる第一原理計算の幅を広げることができる可能性がある。今後は予測能の高い第一原理計算の更なる利用が可能になり、他国に比べてアドバンテージになるのではないかと期待している。ただ、「富岳」を用いたとしても平衡論、定常論に留まってしまう点は留意する必要がある。

最も安定な相分離相や単結晶相よりも、合金相あるいは小さな粒界相のほうが機能的には高いことがしばしばある。単純な化学反応は1本のポテンシャルカーブで記述されるが、多数原子からなるユニットを考えると、それは階層とも言えると思うが、自由エネルギーランドスケープになっており、これを扱うためには、キネティクス(速度論)、平衡論、プロセス論が必要になる。従って、従来の第一原理や粒子系のシミュレーションとは別の理論計算アプローチが早々に必要になると考えられる(図 3-2-3)。

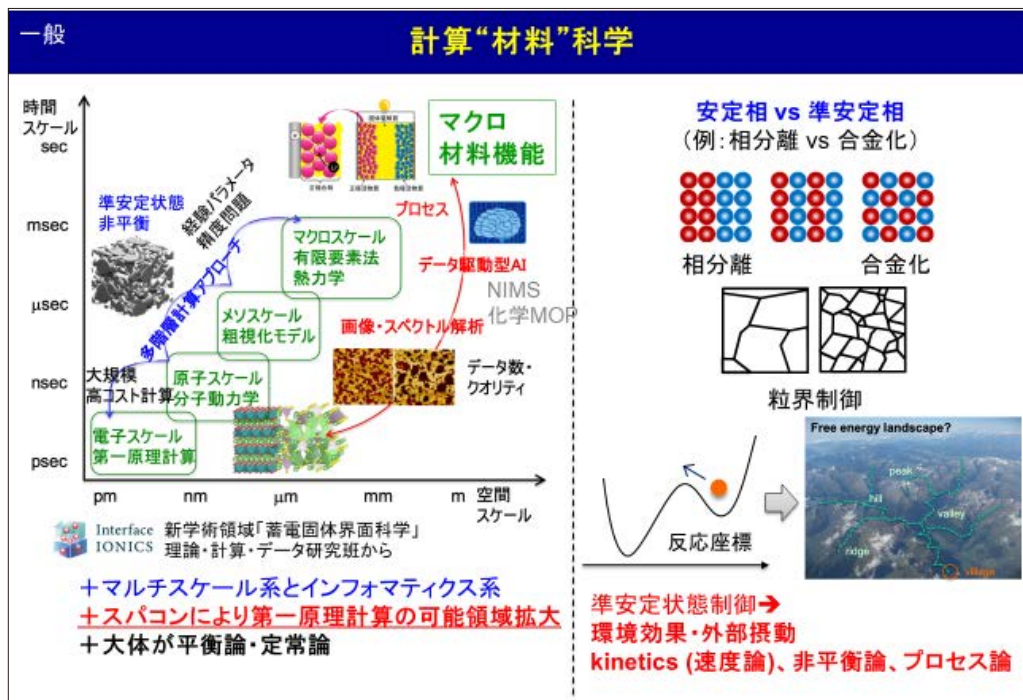


図3-2-3

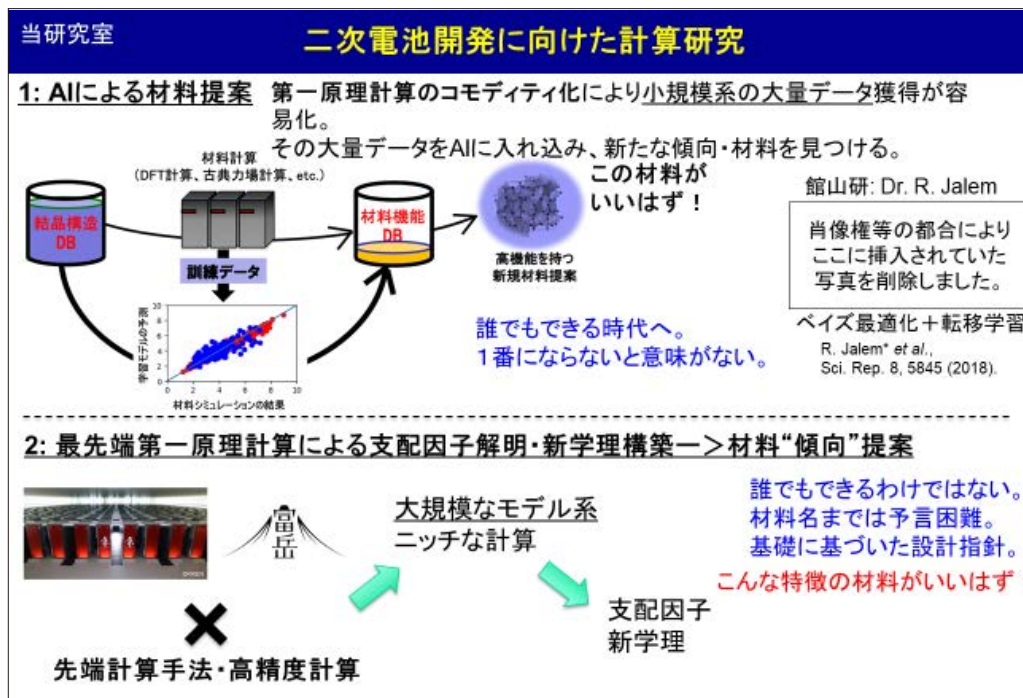


図3-2-4

二次電池に関して、我々は実際の所、速度論アプローチまでは行えていない。現状、材料提案に関しては、第一原理計算とAIを融合したアプローチを用いている。簡単な計算科学やデータ科学なら誰にでも使えるような時代になるなかで、我々はベイズ最適化、転移学習といった先端のAI技術を用いた材料探索を行っている。もう一つは、私が主に行なっている最先端第一原理計算を用いて支配因子や新学理を解明することで、こんな特徴の材料が良いという提案を行うアプローチである。但し、具体的な材料名を出してほしいという要望には答えきれていないが、実験家に着想を与えられる状況にはある（図3-2-4）。

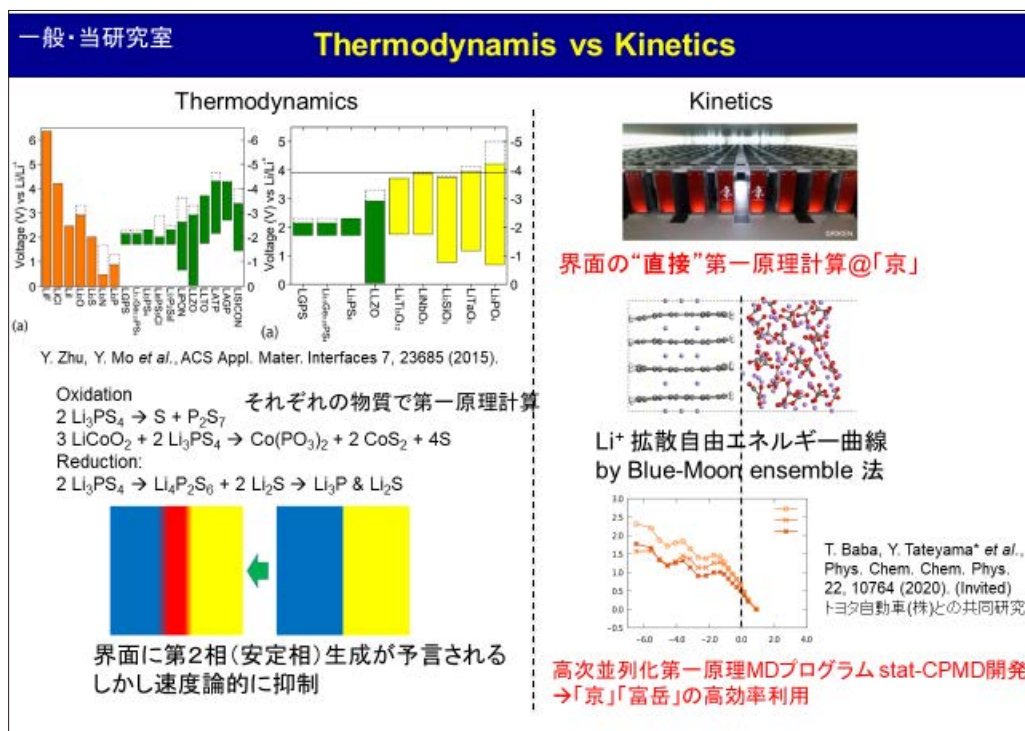


図3-2-5

世界的な二次電池の計算科学研究を熱力学と速度論の観点で俯瞰する。熱力学的計算は世界中で行われ、特に米国のCeder研、Mo研らが5年ぐらい前にあらゆる相平衡の熱力学的なエネルギー計算を行った。図3-2-5左上のグラフは、その結果として得られる電気化学の電位窓というものであるが、緑の範囲だけが物質は安定である。菅野先生が発見したLGPSの電位窓は非常に狭く、一見使えないように見えるが、実際には準安定相がキネティクスによってコントロールされており利用可能となっている。これは速度論的な扱いが重要であることを示している。速度論的に扱うためには界面の第一原理計算が必要になる。我々の最近の成果としては、被膜（Solid Electrolyte Interphase：SEI）と炭素負極の間にリチウムが入るときの拡散自由エネルギー曲線から、想像以上にエネルギー障壁が高いことが分かった（図3-2-5右図）。この成果を得るにはスパコンを高度利用可能とするプログラム開発がキーになっており、我々が開発した高次並列化第一原理MDプログラムを用いている。さらに適用条件を考える必要はあるものの、本アプローチは二次電池材料に対する新コンセプトを提案することを可能とするだろう。

さらに、高濃度電解液についても有用な示唆が得られた。高濃度電解液は希薄溶液ではなく、種々の分子、イオンが混ざっているため、実験でも構造が見えにくく、なぜこれが高精度、高性能を発揮するのか分かっていない。電子状態も扱える我々の第一原理計算の結果によると、溶媒ではなくアニオンが還元分解して安全性が向上するという機構を見いだしている。

全固体電池においては、ヘテロの固固界面の扱いが重要である。妥当な界面構造のモデルを構築する必要があり、そのための方法としてヘテロ界面のCALYPSO（Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization）法を提案した。これによりある程度実現性の高い界面群をサンプリングできるようになり、さらに様々なヘテロ界面構造に使えることが分かっている。

最近の海外動向についても紹介したい。現在、Materials Projectというデータベースが非常に充実しており、誰でも無機材料探索を行える状況にある。ただ、彼らのデータは小さなスーパーセルの計算における静的な性質に関するものが多い。我々が今回扱った欠陥系やドーピング量をパラメータとした際の構造変化を

含めたデータベースはまだ存在しない。したがって、動的な物性のデータという観点では、我々にもまだ優位性が残っている。

最近のトレンドとして古典MD(MM)計算に対するニューラルネットワークPotentialというものもある。第一原理計算をベースに、AI分野のニューラルネットワーク技術を用いて、従来よりも多数のパラメータで記述される数値的な力場を作成するというものである。従来の古典力場はもちろんのこと、QM/MM法などよりも精度が良く、反応やプロセスを扱えるケースもある。米国や欧州でも注目を集めており、今後は様々なアップスケール現象を扱えるケースもでてくることが予想される。

全固体電池については、実用化が近く国際競争が一段と激しくなっている。我が国には材料開発において非常に優位性を有しており、それに計算科学アプローチから貢献したいと考えている。

本日の発表をまとめると、電池に関しては、電子・イオンとも動くためエレクトロニクスおよびイオニクス、準安定状態の平衡論・速度論を扱える計算科学や理論科学が重要になる。そこでは、階層構造よりも構造・分子ネットワーク、ドーピングや複合化・ヘテロ界面制御などが鍵になるだろう。したがって、ネットワークやヘテロ界面制御を含む広義の階層構造制御が重要なテーマになる。リサイクルの科学に関しては、残念ながら現状の計算科学では扱いきれていないが、興味深いテーマだと感じている。

計算科学を俯瞰してみると、第一原理計算でもかなり様々なことが扱えるようになってきており、予測能も上がっている。ただし、速度論やプロセス論への適用が今後の課題であろう。

【質疑応答】

Q：Thermodynamics vs Kineticsに関して、熱平衡だと非常に電子窓が小さいという計算結果であったが、実際には様々な正極材料、負極材料との組み合わせで安定化しているということは、準安定の状態でも実質的に電子窓の非常に広い状態が実現されていると理解してよいのか。

A：その通り。界面に膜を作ること等で望まない反応が進まないような状態になっていると予想される。

Q：準安定相も含めた電子窓の計算はできないのか。

A：やるとしたら、狭い空間内でどう反応が起きるか、原子が協調してどう相変態を起こすかを計算することになるが、様々な環境や自由度を考える必要があり、速度論の技術が必要と考えている。

Q：リチウムやナトリウムなどの一価のイオンに関しては、硫化物、酸化物、水素化物といったバリエーションが増えている一方で、マグネシウムやカルシウムなどの二価のイオンに関しては、材料のバリエーションが少ないように感じる。二価のイオン伝導体あるいは電極の設計に関して、今の一価の設計指針の延長や展開が可能なのか、あるいは全く違う指針が必要になるのか、ご意見を伺いたい。

A：二価になるとクーロン力が非常に強くなってしまい、イオンがなかなか動かない。私はALCA-SPRINGではマグネシウムイオン電池を研究しているが、本当に動かない。サイエンティフィックに一価と二価を比べるというのは面白いが、二価のイオンを本当に動かしたいならばある種のネットワークをつくっておく必要があり、一価と二価では材料設計の指針を変える必要があると感じている。

4 | 階層構造制御のトレンド・課題・将来展望

4.1 2次元ナノシートを用いた階層構造の構築、設計と機能開拓

佐々木 高義（物質・材料研究機構）

我々は20年余りにわたり、2次元物質の研究を行っている。この2次元物質の研究は非常に幅広く行われているが、最近のトピックスとしては、ビルディングブロックのようにして積み重ねたり並べたりすることによって、ナノレベルで制御された構造を構築することである。その意味で、今回のワークショップの主題である階層構造制御との関連が深いこともあり、本日は2次元物質の現状と今後の方向性を中心にお話したい。

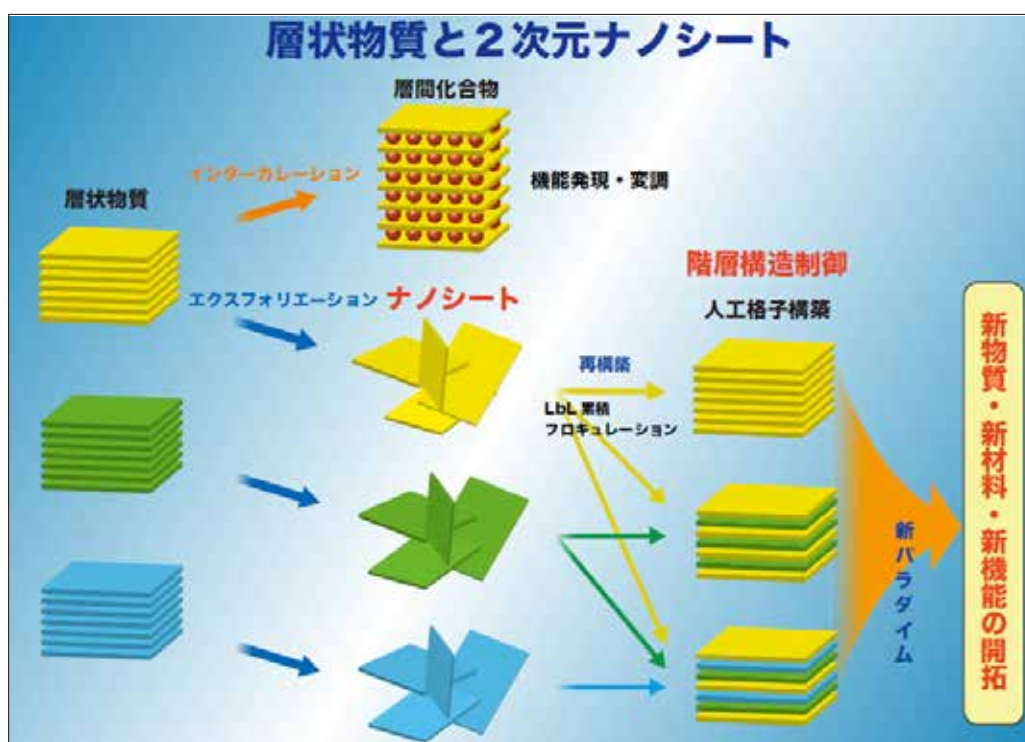


図4-1-1

2次元物質は、層状物質と非常に深く関係している。層状物質は層と層の間に、分子とかイオンといった様々なゲストを取り込むことによって新しい物性が発現するためにこれまでに多くの研究が行われてきた。そのなかで大きなブレークスルーをもたらしたのは、層状物質を1枚までばらばらに剥離できるようになったことである。これによって原子や分子レベルの厚みと究極の二次元性を持ったナノシートが得られ、斬新な機能が数多く見出されてきた。このようなナノシートは結晶ではなく分子の範疇に入るため、これを積木細工のブロックのようにして重ねたり並べたりすることで様々なナノ構造を組み上げることが可能になる。それを発展させれば、ナノシートを自在に積み重ねて、人工格子的なアプローチで新しい材料を作り出して、そして高度な機能を実現することも可能になると期待できる（図4-1-1）。

最初に、2次元ナノマテリアルのラインナップについて紹介する。これまでの研究で非常にバラエティに富ん

だ2次元物質が報告されている。グラフェン、h-BN、カルコゲン化物のシートはいわゆるファンデルワールス系の物質で電氣的に中性である。CONASHsというのは、最近、東大の西原先生のグループによって報告された新顔の配位高分子ナノシートで、大変注目を集めている。一方、酸化物、MXenesと呼ばれる炭化物、ハロゲン化物は負電荷を帯びたアニオン性、水酸化物はカチオン性で、液媒体中に単分散したコロイドとして得られる。

では、こういったナノシートはどのように作られるのか。大きく分けると、ボトムアップ法とトップダウン法の2つのプロセスが適用されている。ボトムアップ法は結晶のラテラル成長を制御するものである。例えばグラフェンやカルコゲン化物では、最近ではミリからセンチといった非常に広い範囲に単層のシートを作ることができるになっている。ただ、このボトムアップ法で作られる2次元物質はまだ少数で、大部分は層状物質から層1枚を取り出すという、いわゆるトップダウン法によって合成されている。

ファンデルワールス系の層状物質は層と層の間に働く力が小さいため、スコッチテープで剥がし取る方法や極性溶媒中で超音波処理する方法でナノシートが作られる。この方法は直接的で手軽だが、剥離というより結晶の劈開を利用したものであるため、目的の単層シートを得られる収率はあまり高くないという問題がある。

これに対し、酸化物を始めとしたその他の層状物質に適用されているのが、ソフト化学的な反応性を利用して層1枚までばらばらにする方法である。ここでは私たちが行っている層状チタン酸化物の例を示す（図4-1-2）。

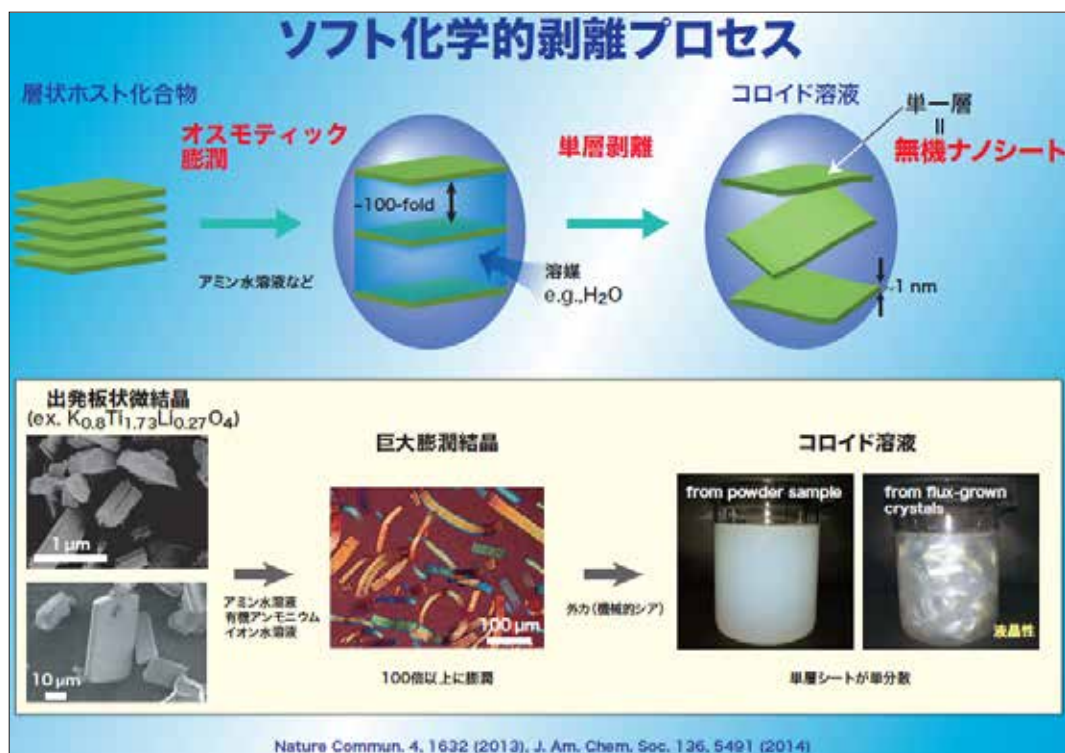


図4-1-2

板状結晶をアミン系の水溶液と反応させると、ちょうどアコーディオンのように、重なり方向に100倍以上にも膨潤する。層と層の間に大量の水溶液が浸潤したためで当然のことながら層と層の間に働く力は極端に弱くなる。適当な外力を加える、例えば溶液全体を振り混ぜるなどの処理を行うと、結晶全体が層1枚までばらばらに剥離する。すなわち大量のナノシートが分散した溶液が得られる。私たちのグループで合成した様々な酸化物および水酸化物ナノシートも、それぞれの物質固有の1～2ナノメートルの厚みを持った2次元結晶として得られ、それぞれの組成構造に依存して様々な有用な性質を示す。

次に、本題である、異種のナノシートを組み合わせるヘテロ構造を作り、いろいろな機能を探索することを目指した研究を紹介する。この考え方は2010年前後からパイオニア的な研究が始まり、どんどんと展開している状況である。

「ファンデルワールス・ヘテロ構造体」と呼ばれるアプローチのキーとなるテクニックは、メカニカルトランスファー法と呼ばれる方法である。スコッチテープ等で剥がし取ったグラフェンやカルコゲン化合物シートを光学顕微鏡で確認しながら、目的の場所に配置して、2枚のシートを重ねる方法である。コロンビア大学のHoneらによって最初に報告されたもので今は世界中に普及している。これを適用した有名な例が、BNとグラフェンを重ねた部分に電極をつけて、グラフェン特有の非常に高い電子移動度を初めて実測したというものである。さらに同グループは同じBNとグラフェンのヘテロ構造体を用い、ホフスタッター・バタフライと呼ばれる量子ホール効果に関係した現象の確認をはじめ、様々な先進的な結果を発表している。最近のトピックスとしては、Caoらによって発見されたグラフェンをある角度で重ね合わせると超伝導が発現する現象で、非常に大きな話題となっている。

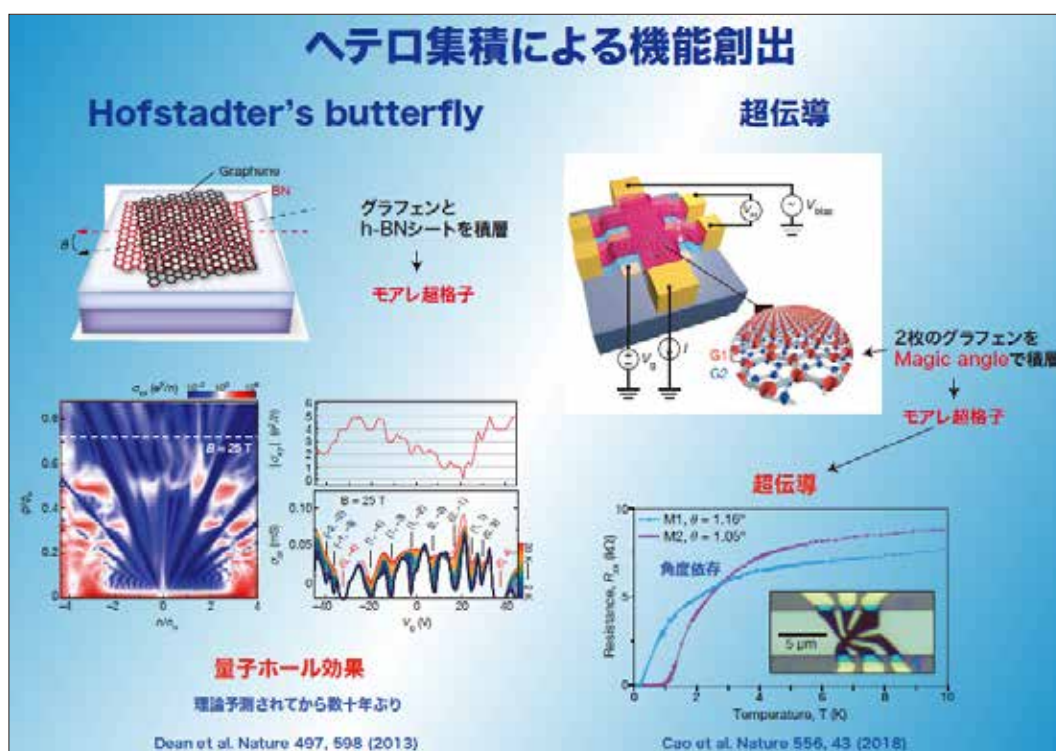


図4-1-3

カルコゲン化物シートに関しても多くの研究がある。初期の研究ではあるが、 MoS_2 が層数によって電子バンド構造が変わって、1層になると直接遷移型になって非常に強い光吸収・放出が起こることが有名である。また、カルコゲン化物シートは組成的に非常にバラエティに富み多彩なバンド構造を持つため、ヘテロに接合することで生成するキャリアの移動を制御することも可能であり、p-n ダイオードや発光素子といった機能デバイスを構築することができる。最近では、スコッチテープ法ではなくCVD法でヘテロ構造を作る研究がトレンドである。

新しい物質系もどんどん研究されている。その一例として最近注目を集めているクロムヨウ化物のナノシートがある。このナノシートは意識的に積層構造を制御しているわけではなく、現時点ではシートが折り畳まれて単層、二層、三層といった領域ができることを利用してその物性研究が行われている。詳しく調べると単層の領域では強磁性、二層のところでは反強磁性になっている。さらに、圧力等を加えることで磁性がコントロールできるため多くの論文が出て注目されている。

ここまでは電氣的に中性の2次元物質に関する研究例だが、次に、電荷を帯びたナノシート、特に我々が扱っている酸化物や水酸化物のナノシートを使った研究を紹介する。これらのナノシートは電荷を帯びているため、反対の電荷を用いるとポリイオンの交互吸着やラングミュア・プロジェクト法によってレイヤー・バイ・レイヤーで基板上に累積させることが可能である。適切な条件下で堆積させると基板の上にほとんど隙間がない形でシートを敷き詰めることもできる。これを繰り返すことで、多層構造をレイヤー・バイ・レイヤーで構築することも可能である。



図4-1-4

こういった二つの方法に加えて、最近我々はナノシートを水の中ではなくDMSO（Dimethyl sulfoxide）溶液の中に分散させて適切な条件でスピコートすることでナノシートの膜ができることを発見した（図4-1-4）。僅か1分ぐらいで様々なナノシートを稠密配列でき、それを繰り返すことで多層化もできる。このプロセスではナノシートの厚み単位で、膜がレイヤー・バイ・レイヤーで積層できるため、複数のナノシートを用いることでヘテロ積層構造を容易に生成することができる。あたかも格子エンジニアリングのように、人工材料を構築し機能開発を行うことができる。代表的なものとして、非常に高い誘電性を発揮するペロブスカイト型酸化物ナノシートを、伝導性の高い酸化ルテニウムナノシートでサンドイッチした構造を示す。この素子はナノキャパシタとして機能し、MLCC（Multilayer Ceramic Capacitor）と呼ばれるチタン酸バリウムのナノ粒子を使ったセラミックコンデンサのMIM構造（金属／誘電体／金属の積層構造）の1ユニットと比較して2,000倍の高い容量を持つことが確認できている。また、このペロブスカイト型酸化物のナノシートを酸化チタンナノシートと様々な順番で積み上げることにより、強誘電性やマルチフェロイック性を示す膜を作ることもできる。

先ほどのカルコゲン化合物シートの光キャリア制御と似た例として、熊本大学の伊田先生の成果だが、酸化チタンナノシートをユウロピウムの水酸化物シートと積層し、これに紫外光を照射すると、酸化チタンナノシート中で生成した励起電子がユウロピウム側に流れ込んでフォトルミネッセンスが非常に強く出ることが報告されている。私たちは、グラフェンや酸化マンガンナノシートと組み合わせることにより、励起電子とホールが別々のシートに分離して安定化することで、光触媒性が増強されることや、電荷蓄積が起きるを見いだし

ている。

これらの例は基板上にナノシートを累積して薄膜化することによって機能開発を図った例であるが、この2種類のナノシートを、表面電荷が反対になるように調整した後、その分散液を適当な条件で混ぜ合わせると、両者が交互に積み重なったような超格子的な複合体をバルク量、粉体サンプルの形で作ることができ、いろいろな機能を持たせることができる。

その初期の成果として、オックスフォード大学がTaS₂と水酸化物ナノシート（ニッケルアルミのナノシート）を積層することで超伝導と強磁性が共存したような材料ができることを報告している。私たちは酸化マンガンナノシートと還元型の酸化グラフェンを交互に積み重ねてこのリチウムイオン電池の活物質としての性能を調べた。その結果、これまでで最高レベルの非常に大きな容量で、安定性も非常に高いことがわかった。この大きな容量は、この酸化マンガンナノシートが金属まで還元されるコンバージョン反応に基づいていることに起因するが、ナノシートが非常に薄くて、さらにカーボンシートによりはさまれているために、大きな容量が安定に取り出されたものと考えている。

次は、水酸化物のナノシートとグラフェンの組み合わせである。酸素発生活性を調べた例であるが、貴金属に匹敵する非常に小さい過電圧で反応が進行する。このように触媒関係でも有望な結果が得られている（図4-1-5）。

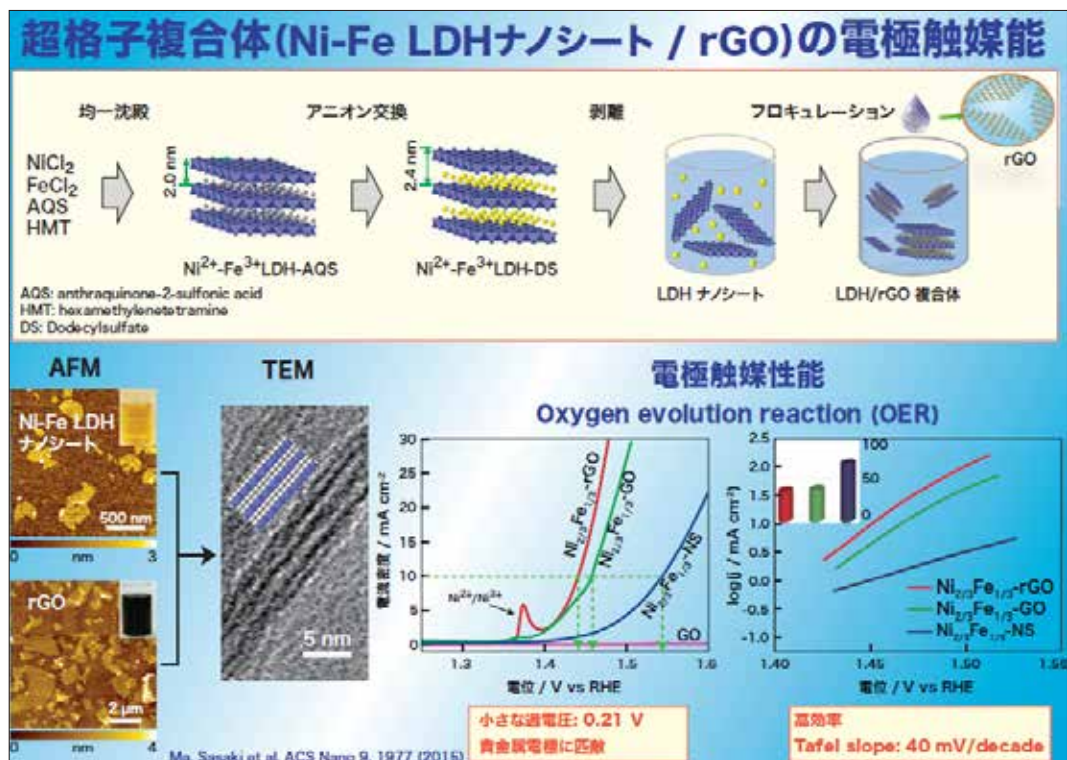


図4-1-5

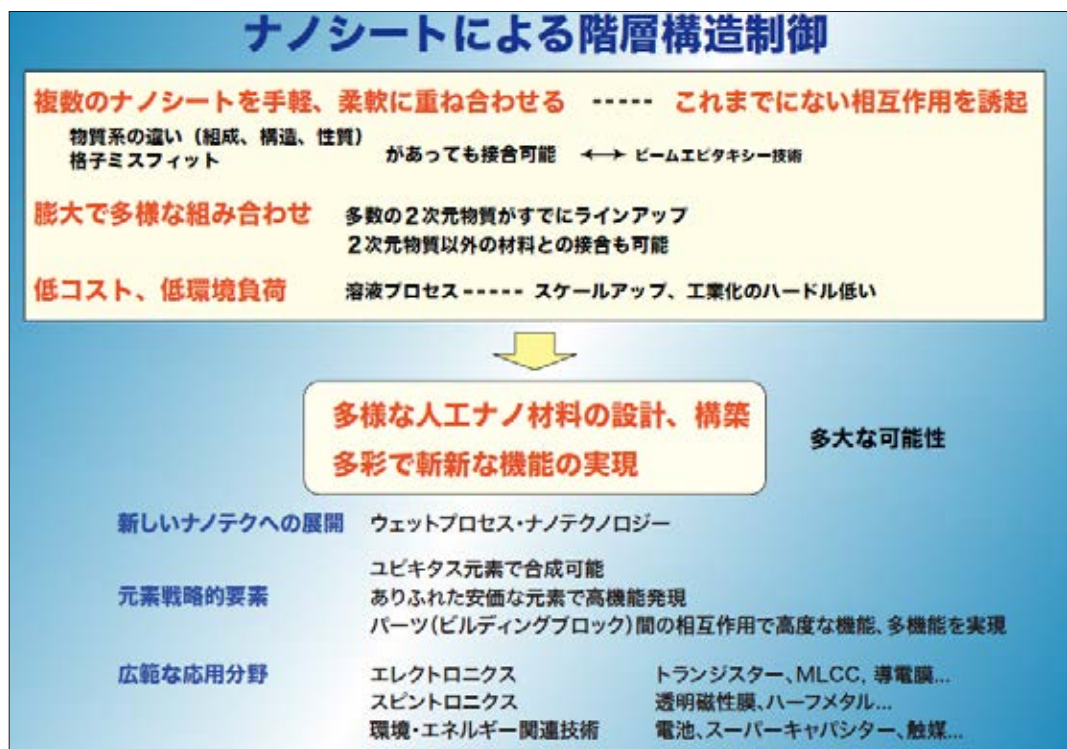


図4-1-6

最後にまとめると、バラエティに富む多くのナノシートがラインナップされ、それらを手軽、柔軟に重ね合わせることができる。ビームエピタキシーによる人工格子技術と比べることは少し乱暴かもしれないが、組成、構造、性質が異なる物質系であっても、格子のミスフィットがあっても簡単に接合できる。それによって新し

い相互作用が誘起でき、様々な機能が生まれる。ナノシートの組合せから作り出せるナノ構造は、無限に近いことから大きな可能性を持っている物質系と言えるのではないかな。

以上はナノシートをナノレベルで配列しようという技術開発である。一方、ナノレンジではなくてメソスケールで配列させることが試みられており、日本では液晶関係の先生も盛んに研究をされている。興味深いことに、条件を整えるとナノシートが数十から数百ナノメートルという間隔によって溶液中で平行に並ぶのである。それも磁場をかけると溶液の端から端まできれいに1つの方向に並ぶ。そして、数百ナノメートルまでいくと鮮やかな構造色がついてくる。そのようなレンジまでシートとシートの間隔を広げることができ、それがまた一定の間隔で積み重なっているということになる。これを適切な方法でゲル化して構造を固定化することで、驚異的な機械的特性を持った材料が得られている。大変面白い展開が生まれてきているところである。

【質疑応答】

Q：スターティングマテリアルはどう作るのか。3次元構造の積み上がった多層構造を最初に作る必要があると思うが。

A：スターティングマテリアルは、まさに層状物質です。層状物質は、酸化物にしろ、グラファイトにしろ、それぞれこれまでに確立されている方法で合成できる。酸化物なら固相合成法で原料の粉末を焼成すればよい。

Q：様々な層状材料を作り込むことができるものの、層状構造ができていれば同じような階層構造制御の手法が適用できるのか。あるいはそこには幾つか「こういう条件がないとこういう方法は使えないよ」といった条件が存在するのか。

A：全ての物質が層状物質になるわけではないことは事実。一方で、これまでの研究で数えきれないくらい多くの組成構造の層状物質が作られている。それらを次に剥離してばらばらにするためには本日お話しした方法を用いるが、その物質や物質の持っている特徴、反応性を利用してばらばらにしていくことになる。

Q：ということは、MBEなどで、GaAs系などいろいろな化合物や半導体が作れると思うが、それらにも適用できるのか。

A：原理的にはできるのではないかな。層と呼ばれるユニットに分けることは、現実的には可能といえる。ただし、私は論文としてはまだ見たことがない。

Q：階層構造制御ということで先日からいろいろな先生のお話を伺っていると、やはり有機材料と無機材料では「階層構造」という概念が違ふと感じる。佐々木先生の階層構造制御ではナノメートルのシートを積層して組み上げていく。最後にメソスケールでゲル化をやるというお話もあった。実際に我々が肉眼で見える材料に展開する場合、メソスケールからマクロスケールにしていく必要があるのか、もしくは高分子などの中にこういうナノ構造体の階層制御したものを入れていくのか。今後の展開においてどういう方向性があるのか知りたい。

A：最後の例で言うと、メソスケール構造制御は数センチ径のビーカー中で均一に起こすことができる。それ全体をゲル化して、数センチ角のマクロの構造体として取り出ししている。その中に、細かく見るとメソスケールのナノシートの配列構造が端から端まで均一に発達している。すると、そのマクロな物体全体が非常に異方的な特性を示したりする。通常ゲルの特性は等方的なはずだが、ナノシートが入っていることにより、ある一方向にだけ伸びて、片一方の方向にはほとんど圧縮できないとか、これまでのゲルにはあり得ないような特性を出すことができる。

Q：このゲルはバルク材料として使うのか。ゲルから溶媒等を飛ばしてドライな状態にして使うのか。

A：その部分はまだ完全に詰まっているわけではない。ヒドロゲルでは当然水がないと困るわけなので、乾燥させないようにして使うことになると思う。シリカゲルのほうは乾燥させて、非常に高い機械的強度

が出ることは確認している。

Q：積層構造をデバイスにして使おうと思ったときに、様々な電圧をかけたり電流を流したりすると思うが、安定性はどうか。また、中性、アニオン、カチオンなどの様々な種類のものがあると思うが、属性が違うレイヤーを組み合わせる機能を出すことは可能か。

A：積層構造の安定性については、1つの例としてキャパシタ構造を作って、それを実験室に放置して一定時間ごとに測定を繰り返し、数カ月間は容量がほとんど変わらないところまではフォローしている。地震が来て中断してしまったのだが、少なくとも数カ月はもつことを確認している。中性、カチオン、アニオンを組み合わせるのは非常に鋭い御指摘で、それぞれどのような相互作用を持たせるかを工夫していく必要がある。プラスとマイナスの反対電荷を持ったものであれば容易に超格子構造をつくることができるが、プラスとプラス、もしくはマイナスとマイナスだとすると何らかの方法で片一方の電荷を反転させる操作が必要となる。中性のシートの場合は、そもそも水の中にどこまでコロイドと呼ばれる状態で分散できるかという問題もある。今後の課題になると認識している。

4.2 有機材料における階層構造制御

植村 卓史（東京大学）

有機材料における階層構造制御に関して、ある意味で究極といえるものが生体系である。特に、タンパク質の構造の階層性は、アミノ酸の配列が一次構造であり、ペプチドがつながって α ヘリックスや β シートを作り、二次構造を形成する。さらにそれらが折り畳まれて三次元の立体構造（三次構造）を作り、最終的に幾つかのペプチドが集まって四次構造を作る。これによって様々な究極の機能が発現する。

一方、我々が実世界で使っている有機材料では、例えばタイヤの階層構造がある。これは先に森田先生が話されたとおり、サイズの階層構造と、サイズにマッチした時間的な階層構造がある。そして、グリップ機能、摩耗機能、疲労破壊といった機能がこの階層構造に対応して出てくることがよく知られている。

このような有機材料の階層構造を作るときに重要な観点が、マルチスケールでの構造制御である。一つは材料の素子設計である。原子、分子、単位格子、組成の制御がある。もう一つは、いかに階層構造をつくるかという意味で、結晶化、反応空間、外場制御、配向、欠陥制御などの合成手法の設計である。これらをうまく組み合わせることで、原子レベルからミリメートル、センチメートル、メートルといったマルチスケールで階層構造を制御することができる。

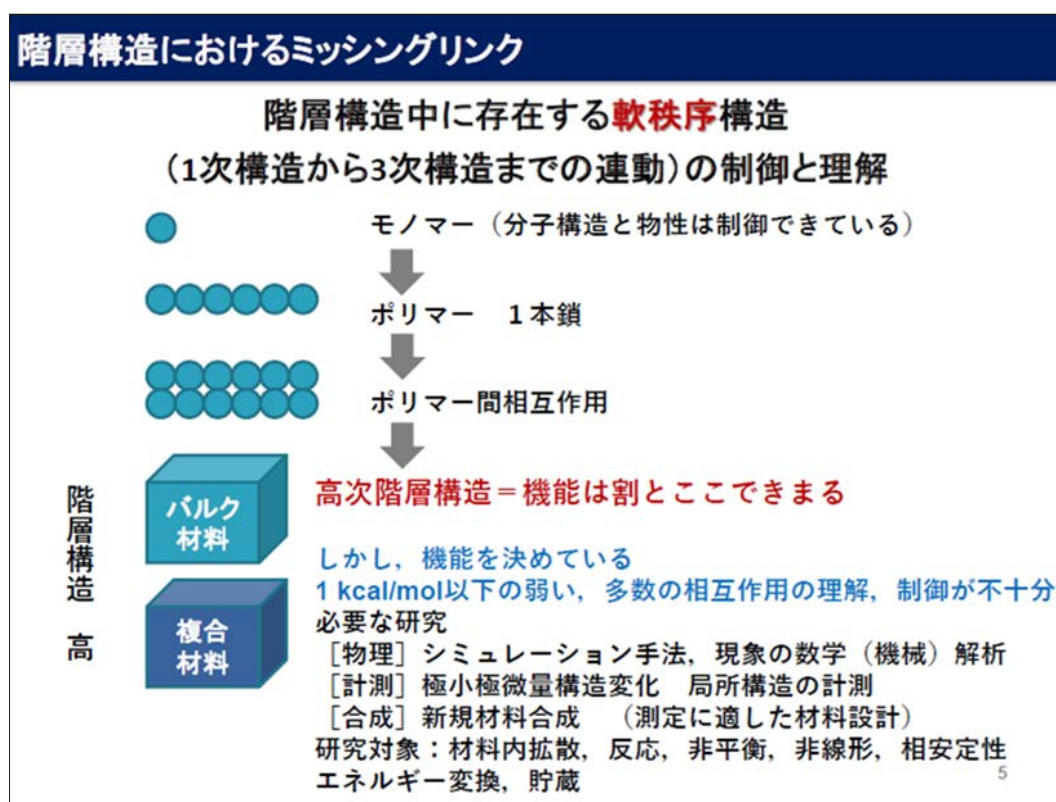


図4-2-1

その際、階層構造におけるミッシングリンクというものが存在する（図4-2-1）。階層構造中に存在する軟秩序構造、いわゆる非常に弱い秩序構造が、一次構造から三次構造まで連動しているため、この秩序構造の制御と理解が非常に重要になる。ポリマーを例として示すと、モノマーを単位としてつながってできている。

モノマーの分子構造と物性を我々は制御できるし、それらを集めて連結させたポリマーに関してももちろん制御可能である。ただ、ポリマー1本だけでは機能させられないため、これらを集める必要があるが、ここまでは大体制御できている。

ただし、さらに高次の階層構造となるとなかなか制御できず、実際に機能というものはこの辺の階層構造で決まってくる。タイヤに関しても、摩耗やグリップ機能などはこの辺の高次構造が利いている。機能を決めている1Kcal/mol以下の弱い、しかも多数の相互作用の理解や制御はまだまだ不十分であるため、先の議論でもあったシミュレーションや計測技術が大変重要になる。もちろん、合成手法の開発も必要で、研究対象も非常に多岐にわたる。

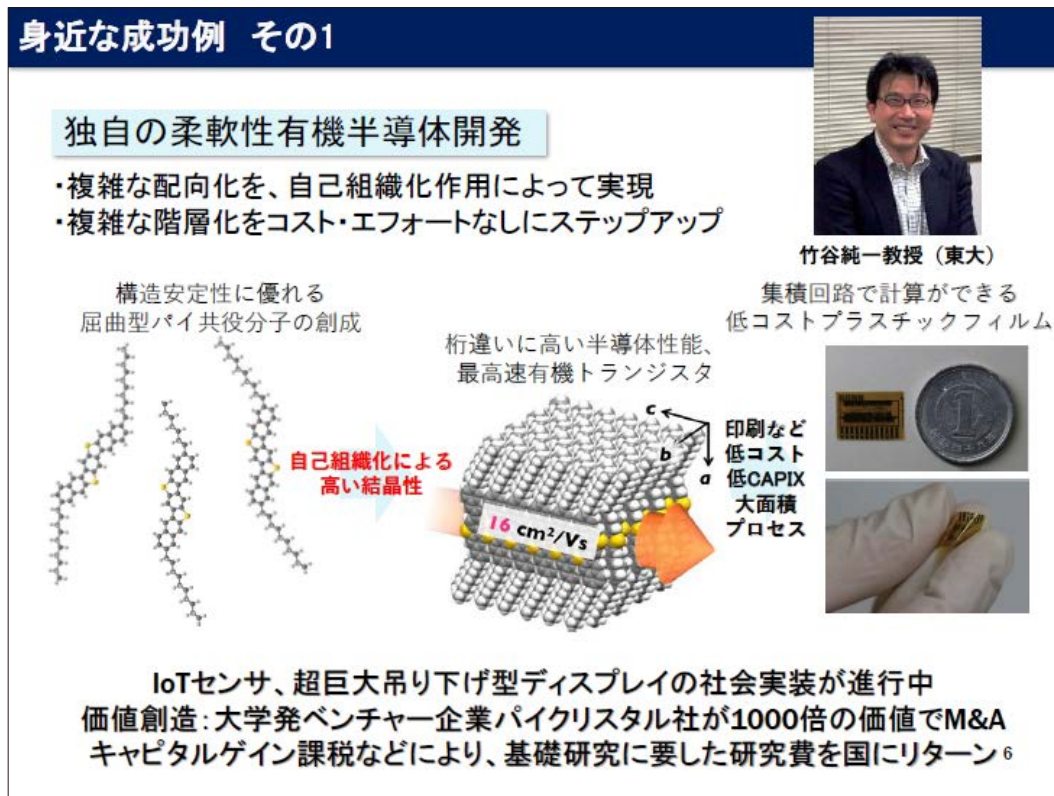


図4-2-2

高次の階層構造まで制御している例の一つを紹介したい。竹谷純一先生が独自に開発した有機半導体である(図4-2-2)。自己組織化を利用して複雑な配向化を実現し、複雑な階層化もコスト・エフォートなしにステップアップできている。非常に簡単に、かつ、非常に機能の高い物質をつくることに成功している。

竹谷先生は、まず少し折れ曲がったパイ共役分子、オリゴマー分子を開発し、これを溶液から塗布すると自己組織化で非常に結晶性の高い物質を作ることができる。この物質はパイスタックの方向に非常に高い移動度を示し、桁違いの超高速有機トランジスタとなっている。塗布のため非常に低コストで作製可能であるためベンチャー企業を立ち上げたところ、最近になって1,000倍の価値で売却できたらしい。例えば、最初は100万円が10億円になる計算であり、非常に夢のある話である。

このような非常に機能性の高い材料をつくるだけであれば様々あるものの、材料の分解や循環の制御ができるのかが問題になる。先ほどの加藤先生のご発表の中でも、共有結合からなるポリマーではなかなか難しいのではないかと、というご意見もあった。

例えば、生体材料の例としては、人工ガラス体が眼の中に入れておくと十数年後に劣化する問題、あるいは、最近話題になっているマイクロプラスチック問題も同様である。ここでは、どのように分解、破壊されているかを理解するためのサイエンスが必要である。分解生成物のサイズだけではなく、それを時間的に制御することも非常に重要な観点である。

タイヤだけではなく、自動車には3万部材があると言われており、階層構造がかなり複雑で、全てを制御することは困難である。使っているときの動的・静的環境における階層構造の結合を制御し、実効性、安全性に優れた材料を創出することが重要であり、必要なファクターとしては、使用中の動的な環境における解析や非線形領域における解析である。分解物の医学・生物学的な解析も重要である。

その他、材料設計という観点からは、分解機構に立脚した階層構造の結合制御も必要である。その際、時間的な階層設計も重要である。新陳代謝する材料、すなわち劣化した部分が分解されて新品と交換されて寿命を延ばすような材料が考えられる。環境に応じて応答する、能動的に動く動的な材料も非常に重要となる。このように、階層構造の結合制御や時間制御、動的な構造の設計が非常に重要になると思われる。



図4-2-3

もう一つ身近な成功例を紹介する（図4-2-3）。伊藤耕三先生が開発された超分子ポリロタキサンを環状構造のリングで架橋させた環動ゲルである。これは通常の化学架橋でできたゲルとは異なり、この架橋点が滑車効果で動くところに特徴がある。そのため非常にしなやかでありながら、非常に強度が高いタフなポリマーとなる。伊藤先生らはこれを自動車に社会実装したコンセプトカーを作っている。私もこの車に1回乗ったことがあるが、乗り心地がとてもよかった。この車を造るのに2億円かかったそうだが、これも非常に夢のある話の一つである。

このように材料を作るとき、既に動脈側は制御できていると言える。原料を使って合成し加工し仕事をさせるところまでできており、結構いい論文が書けるが、この先の静脈側（仕事をした後の材料を戻していく）になるとなかなか難しい。特に、静脈側でサイズを規定しながら分解させるところは非常に難しいのではないかな。サイズ感をうまく制御できると、ミクロのところまで分解させるとまた加工に戻り、ナノのところだと合成に戻る。原料まで分解させると原料リサイクルとなる。ここをうまく制御することが非常に重要になる。

そこまで制御できるようになると、材料の運命を制御するような材料生命学というものが確立されるかもしれない。そのように制御された材料系を「Fate Designed Materials」と呼ぶことにすると、究極のものは生体高分子系のシステムであろう。

皆さんご存知の通り、DNAやタンパク質、これらは酵素という階層的な構造をしたナノ空間の中で、遺伝子が持つ情報を正確に認識、転写、翻訳することで完璧に構造制御された高分子として生産、代謝されている。我々はここに近づけたいという思いから、MOFと呼ばれる多孔性金属錯体に着目して研究を行っている。

MOFは、金属イオンと有機配位子が自己組織化することによってナノ空間を持った自在配列を作ることができる。有機物と金属から構成されるため、周期表のありとあらゆる元素をフル活用することでナノ空間構造を原子レベルで制御するだけでなく、結晶粒子内の階層構造でさえも高度に制御できる。

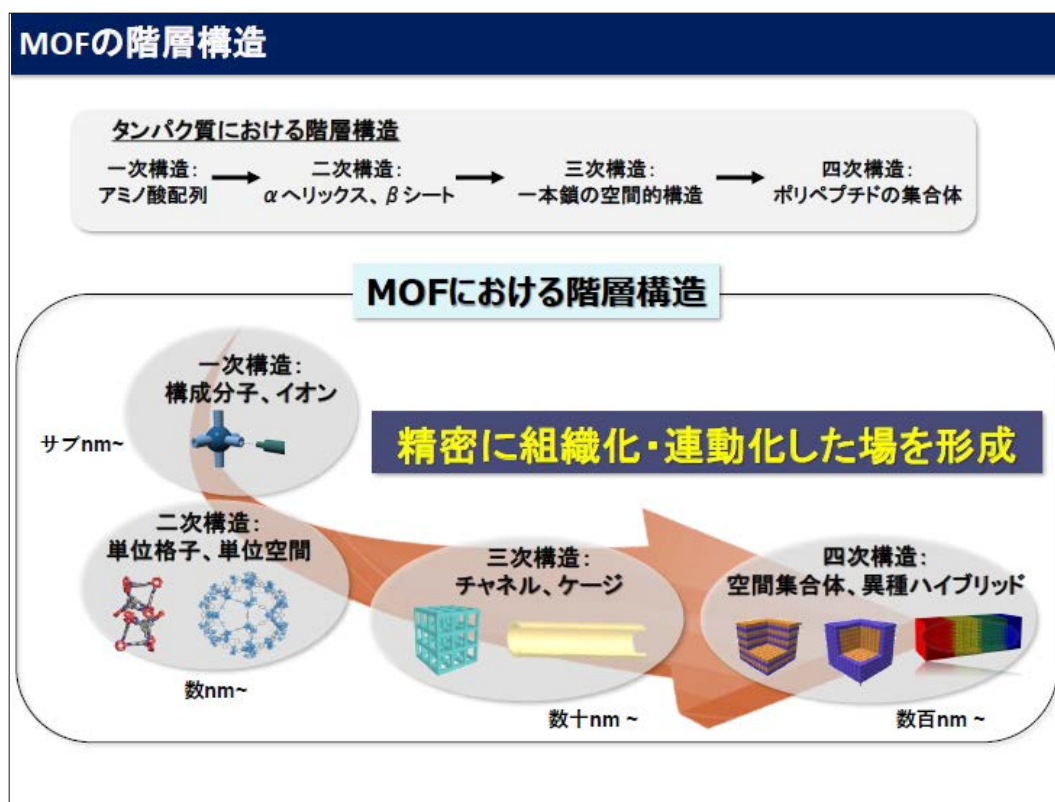


図4-2-4

図4-2-4にMOFの階層構造を示す。タンパク質の階層構造と同様に、MOFにおいても一次構造として構成分子やイオンがあり、それらが集まって二次構造の単位格子や単位空間を作る。それらがつながって三次構造のチャンネルやケージになり、固溶体、コアシェル、エピタキシャル成長などによって四次構造を形成する。

さらに、このMOFは非共有結合でできているため、酸、塩基、キレート剤などによって瞬時に分解できたり、それを回収して再形成させることも可能である。MOFでは分解や循環も可能であることから、新しい高分子化学を拓けるのではないかと考えている。

金属イオンと配位子の組合せを変えることによって、この空間構造を自在に制御することができる。我々はナノサイズのフラスコのようなものを作って、その中にモノマーを導入して重合させ、ホストの持つ構造情報を完璧に反映したような高分子を作っている。従来法では不可能な高分子の創製、集積、認識などが可能になってきている。

その一例を図4-2-5に示す。一次元チャンネルを持つMOFを作り、その中でスチレンを重合し、ポリスチレンを合成させる。そのとき架橋性の反応基を壁の中に入れておくことで、架橋しながらポリスチレンが成長する。

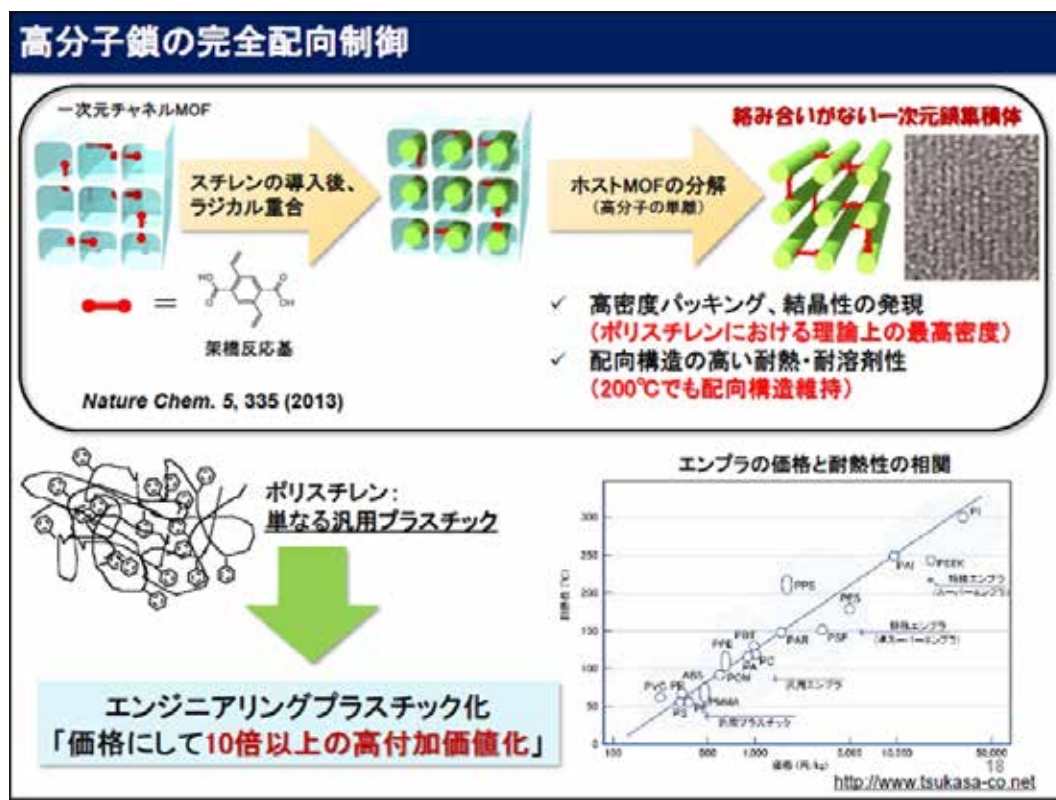


図4-2-5

MOFの中で完全に一次元に配列したポリスチレンができた後にMOFを分解させると、絡み合いがない完全に一次元で並んだ高分子を作ることができる。通常の高分子では必ず絡み合ってしまうが、ホストの階層構造を転写することで絡み合いが全くないものを作ること成功した。非常に高密度にパッキングしたポリスチレンとなる上にその構造が安定であることもわかった。単なる汎用プラスチックだったポリスチレンが10倍以上の高付加価値化するエンジニアリングプラスチックとなったのである。

この手法を使うことで、一次構造やシーケンスや立体規則性の制御、高分子の配向制御、集めるための相溶化、MOF－高分子複合体を作ることにも成功している。最近では、できた空間の中にぴたっとはまる、空間の分子配列に当てはまる構造を持った高分子のみを認識する系も作れており、超階層的に制御することも可能になっている。

ここまでは単にサイズの階層の話でそれだけでは不十分である。従来の空間構造の捉え方、静的で平均的な構造だけでは説明できない現象も出てきている。例えば空間のサイズがモノマーサイズほどに小さい径があり、モノマーがその中に入ると重合しないのではと考えていたが、実際にはかなり高効率で重合することがわかってきた。

ここでは恐らく時間的な階層というのが効いており、分子運動、拡散、非平衡等が利いていると思われる。このような時間的な階層が支配する化学はまだ未知数で、これは今後、最先端の理論と計測によって理解することが重要になってくるのではないかな。

最後にまとめとして、元素をフル活用することで階層構造の結合と時間を自在制御するFate Designed Materialsと呼べるものを作るようにするためのサイエンスやテクノロジーを充実させていく必要があるのではないかと感じている。

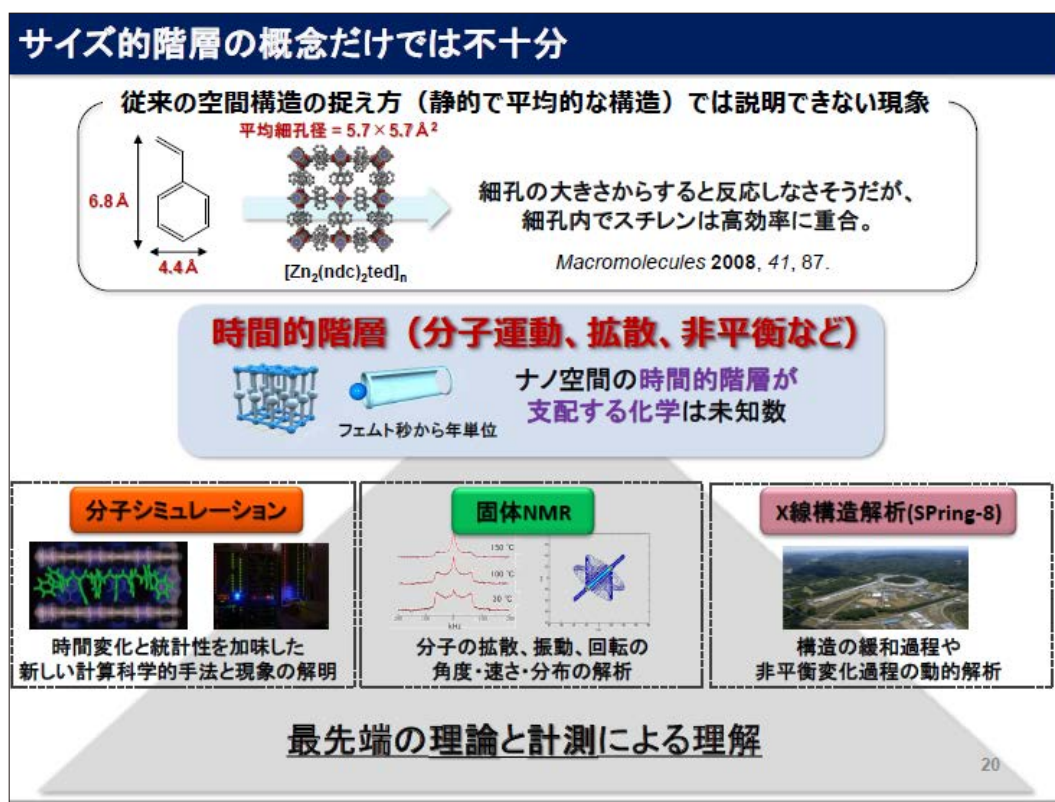


図4-2-6

【質疑応答】

Q：階層構造制御に関して、細孔の階層構造制御、例えばミリメートルぐらいの大きさの孔が高分子のフィルム上に多孔であって、その壁をよく見るとまたそこにはマイクロメートルの孔があって、その壁をまた見るとナノメートルスケールの孔があるといった階層的な制御に関する研究が最近出てきているようだが、植村先生の研究は、あくまでナノメートルスケールの孔に止まっているのか教えていただきたい。

A：研究者は多くなってきていると思う。仰る通り、大きい孔から小さい孔まであるようなものいろいろ

作られてきている。MOFだけでやっているわけではなくて、様々なものの組合せでやっているものもある。メソポーラスな空間の中でMOFを作るものもある。したがって、様々な組合せがある。実際MOFに関しても、本日お見せしたように、サイズの1ナノとか2ナノ程度の大きさのものが一般的ではあるものの、最近は同じMOFの研究でもっと大きな空間サイズを持ったもの、例えば10ナノぐらいの大きさを持ったものができていて、ウイルス等が入るといった研究もされている。MOFだけでもサイズをいろいろ変えることもできてきている。

Q：時間的階層構造制御という時間の概念を入れたものの中に、動的な、孔の大きさを柔軟に変える、あるいは変えさせるといった概念も入るのか。

A：もちろん入ると考えている。MOFとポリマーと一緒に混ぜる研究なども最近かなり増えてきている。単にMOFをフィラーとして使う系もあるが、ポリマーの空間とMOFの空間を相乗的に使うものもあり、ポリマーの柔らかさや動的な性質を使うものもある。

Q：時間的階層に関して、高分子鎖の完全配向制御の話では孔の構造の中で反応しても、孔自体には全く影響がないと理解してよいのか。

A：実際この穴のサイズは、モノマーがギリギリ入る大きさであるが、モノマーの配向などを考えると普通はこれでは重合しないのではないかと考えていた。しかし、実は結構中でモノマーが動いて重合することがわかった。それがなぜなのか。おそらくMOFの配位子が回転するときに連動してモノマーも動くことでうまく配置して重合しているのではないかと考えている。モノマー分子の回転や拡散などと、配位子の回転等の時間的なマッチングがどうなっていて、なぜうまく重合しているのかを理解する必要があり、シミュレーションや様々な計測・解析・分析が必要になるだろう。

Q：階層性を考えるときにサイズだけではなく時間スケールも考えなければいけないというお話に関して、材料や化学や物理の世界ではピコ秒やフェムト秒という時間分解がよく出てくるが、それとは異なる時間スケールの階層性も必要ではないかと感じている。動脈と静脈にもサイズだけでなく時間を入れることで、うまく若い人に面白そうだなと思わせないといけないと感じているが、先生のご意見をお聞かせいただきたい。

A：同感である。そこにサイエンスを入れようと思うと、例えば分解するときのサイズがミクロなのかナノなのか、それとも原子・分子スケールなのかというサイズも重要であるが、さらに時間スケールの観点も導入することで、単にリサイクルだけではなくて、材料のメンテナンスというか、分解や循環だけではない時間スケールを考えることができるのではないかと。サイズと時間をうまく考えることで新しいサイエンスが生まれてくると思う。

5 | 分離・リサイクル技術の トレンド・課題・将来展望

5.1 資源循環に求められる構造制御と物理的分離技術の開発動向

所 千晴（早稲田大学）

本日は、資源循環のための分離濃縮技術の観点から話題提供したい。要点は以下である。

まず、資源循環では、選択性（Selectivity）が求められるという点について俯瞰的に話す。次に、分離という操作は化学的に変化するだけではなく、化学的に変化したものが、物理的特徴が違うことで初めて相互分離が達成されるという点についても、当たり前のことではあるが、俯瞰したい。そして、何を循環させるべきかという点が非常に重要であり、つまり、価値のあるものを循環させるべきということでもある。これから材料が大きく変わっていくとすれば、その循環させるものの単位も変わることになるだろう。その達成のために、界面が一つのキーワードになると言われており、循環の立場からも100%同意である。分離させるためのエネルギーを界面にどう集中させるか、それをリサイクルプロセスで集中させるのか、製造時から集中させるような仕組みを作っておくのか、が焦点になる。分離の部分は材料創製に比べるとサイエンスが体系化されていないため、これをきちんとサイエンスにしていこうところが非常に大切である。最後に、このことがおそらく今回のワークショップの主題だと思うが、製品・材料の高機能化と、分離の高効率化が両立できるのかという点を議論したい。

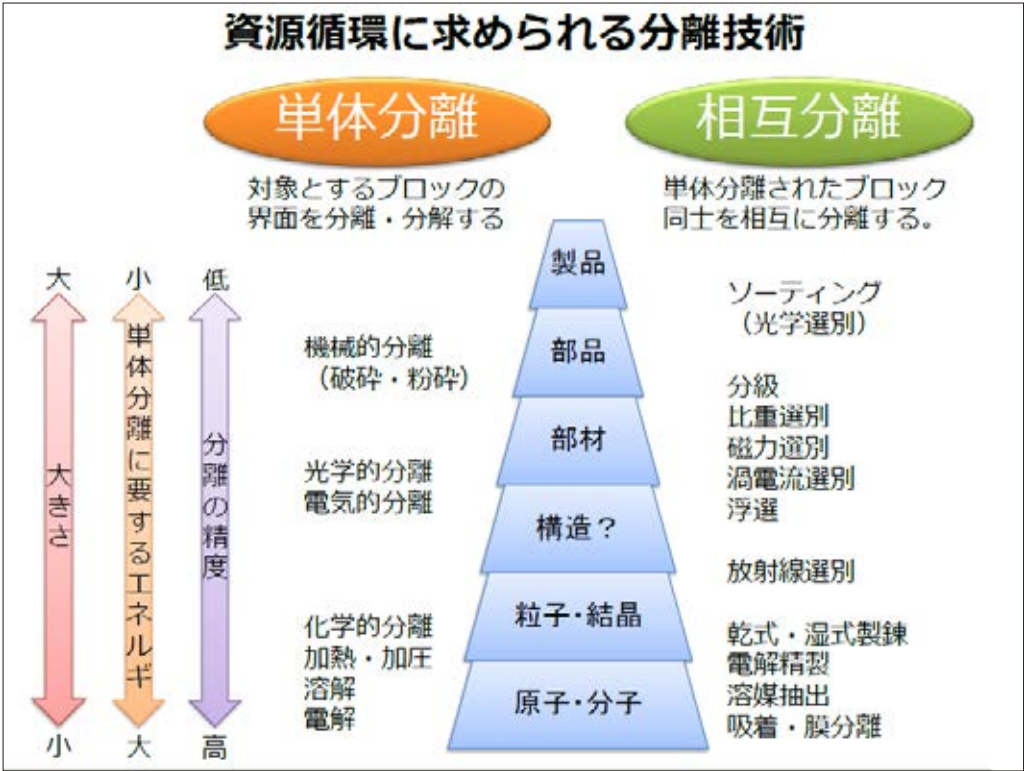


図5-1-1

図5-1-1は分離技術の俯瞰図を示すが、分離には大きく分けて2種類ある。まずは単体への分離で、界面に沿って分離し、得たいブロックの単位にばらばらにするものである。上下には製品レベルから原子・分子レベルを並べている。「構造」がこの位置に入るかどうかは定かではないが、いずれにしても様々なスケールの界面があり、これらを機械的、光学的、電気的に界面で分離する。単位が小さくなると、化学的な反応を用いて界面で分離することになる。

分離というのは単に分けるだけでは不十分で、分けられたものを相互に別々の固まりに分類しなければいけない。これが相互分離で、分離の2つ目である。相互分離も、あらゆる物理的、化学的な特性の違いを使って分けていくものである。分離技術は必ずと言っていいほど、物理的な比重の違い・粘性の違い・流れやすさの違い、化学的な反応性の違いなどを組み合わせて行っている。

スケールについて大きいものから小さいものまでであるが、一般に小さいものを分離する場合にはエネルギーも必要になる。原子・分子レベルまで分ける際、化学的に反応させることができれば分離の精度は高くなるが、機械的に分けようとする、人手かそれを模したロボット等を除くと、非常に精度を高くするのが難しい領域になる。

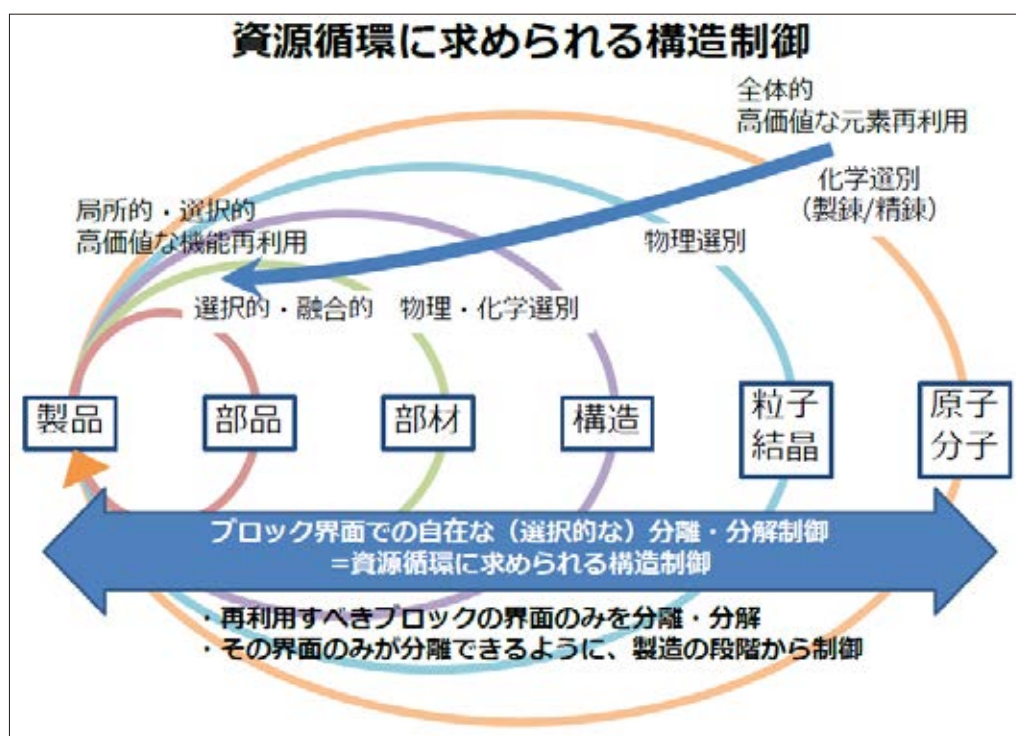


図5-1-2

図5-1-2を用いてもう一度説明すると、製品から原子・分子レベルまでいろいろな段階がある中で、右側に行けば行くほど大きなループでエネルギーをかけて全体的に循環させることになるため、これが経済的に見合うのは、エネルギーをかけてもきちんと価値を回収できるもの、例えば一部のレアメタルや貴金属、ベースメタルなどに限られる。

元素で価値を回収できない場合には、小さいループで回す必要がある。ループが小さくなればなるほど、実はよい界面での分離方法は存在しない状況である。小さいループで、例えば構造を残したまま循環しようとすると、物理的・化学的なことを融合させた新しい革新的な分離技術が必要になる。

一方で、小さいループで回すときに元素レベルでは価値がなくても構造で十分に価値がある、もしくは機能がある、というものであれば、その機能を循環させていくというコンセプトにおいて、成り立ち得る可能性も

あると考えている。つまり、今回の提言の一つの循環として、界面で分離・分解することを考慮した構造の制御が可能になれば、結局ブロックごとの価値ある機能を残した状況で分離することになり、挑戦すべき課題として興味深い。

このように機能を多重ループで回していく考え方は、ヨーロッパのサーキュラーエコノミーの中にも取り入れられており、世界の主要な考え方になってきている。

自在に界面での選択的な分離・分解ができるかどうかについては、例えば、パルス波の波長や時間・大きさ・区間・その他種々のことを制御しながら、力学的作用・熱的作用・質量作用・化学的作用等を用いて、分離・分解するためのエネルギーを総花的に反応させるのではなく界面に集中させることが必要になるのではないか（図5-1-3）。

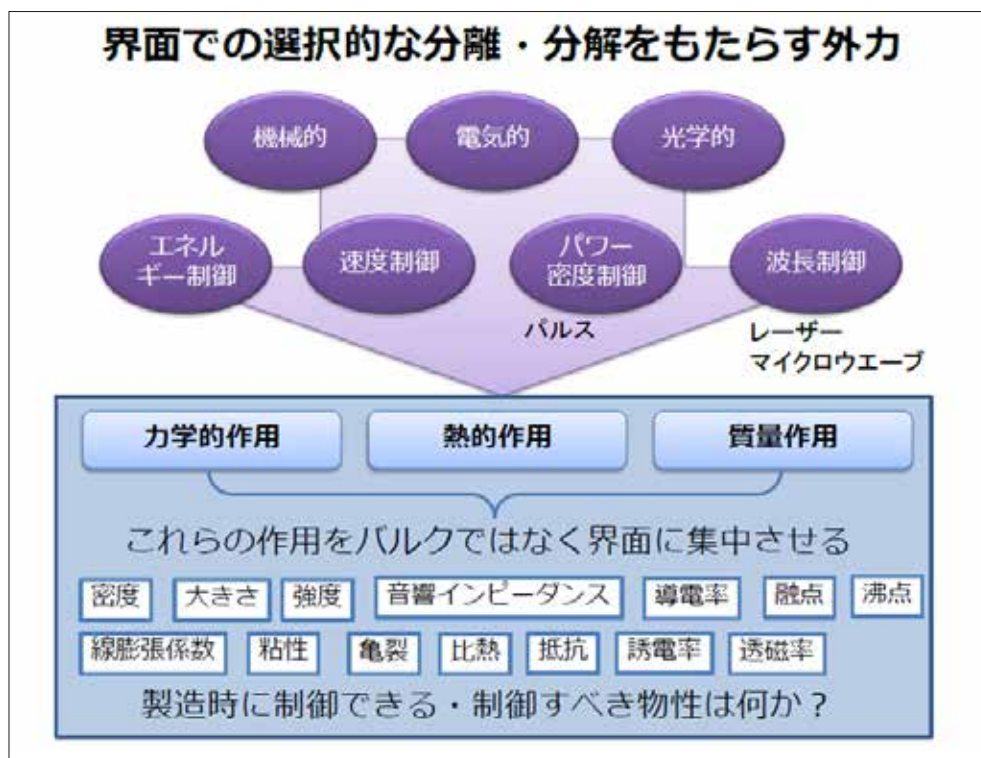


図5-1-3

このことを製造時に制御できたり、あるいは制御すべき物性というものがもしあるとすれば、分離と機能を両立できることもあるのではないかと考えている。現状は、分離側には製造時の物性は全く知らされていないため、製造時の思想や製造時の各部分の物性の情報が分離側まで提供されるだけでも、分離の世界のサイエンスが変わるのではないかなと思う。

分離の具体例として、一番古いのが、古くて新しいかもしれないし新しく古いかもしれないものとして、機械的分離を挙げる。

図5-1-4は、基板から部品を剥離するために開発した例だが、機械的な作用力を圧縮力ではなく衝撃力にすることによって、圧縮力ではなし得なかった基板と部品の界面での選択的な破壊を達成している。衝撃波を与えることで、ちょうど機械的に弱い部分であった接着あるいはハンダづけの部分のをきれいに剥離することができた。機械的な剥離というものは構造の欠損や穴の部分から応力が鎖のように伝搬していくため、そのときの変形との兼ね合いで実際に得たい部分が剥離するか破壊するかが決まっている。同図中右下の図は、衝撃波がどのように伝搬して部品剥離が達成されるかをシミュレーションした結果であり、機械的な応力伝搬と変形速度との関係を理解することができる。



図 5-1-4



図 5-1-5

図5-1-5は、機械的な分離では精度の高い分離はできないものに対して、精度を上げるために、電気的分離を用いてリチウムイオン電池の正極材を剥離させる例である。右上は断面を示しているが、集電箔に正極活物質粒子が塗布されている。箔状であるため、機械的な方法で剥離させることが非常に難しい。機械的に行うと左下のように箔がぼろぼろになってしまうが、これを界面で剥離させるために電気的なパルスを用いた。ナノ秒からマイクロ秒の電気的なパルスを一瞬当てると、アルミ集電箔に大電流が流れ、ジュール熱で抵抗の高い界面が選択的に加熱される。さらに界面に大電流が流れるためプラズマ化して、そのプラズマが界面膨張を起こし、剥離力になる。さらにローレンツ力によってアルミ箔が伸縮する。右下に剥離後のアルミ箔を示しているが、物理的な力と、界面が熱せられやすいという選択性、さらにそこで起きる特徴的な化学変化をうまく用いることで、箔と粒子をきれいに分けることができています。

剥離後の正極活物質に関しては、コバルトとニッケルの元素として回収することも可能であるが、より小さいループでの循環が可能かどうかを検討するために、剥離後の粒子の特性を調べている。界面だけでうまく剥離しているため、バルクの粒子はほとんど変質していないことがわかっている。場合によってはこのまま電池に使える可能性もあり、新しい分離技術として開発を進めている。

もう一つ、化学的作用と物理的作用を融合する分離技術の例として、メカノケミカル反応というものを用いることがある。通常、レアアースの鉱石は分離回収が困難であるが、メカノケミカル反応で機械的な強い力を与えていくと、最初は粒子が細かくすることに機械力が使われるが、徐々にその機械的な力は結晶を歪ませたり反応したりすることに使われるようになる。そのことによって、セリウムが含まれる構造だけが選択的に歪み、酸素欠損ができて、セリウムを選択的に還元することが可能になる。還元したセリウムは酸に非常に溶けやすいため、資源回収がしやすくなる。

このように機械的な力を使って、機械的に歪みやすいところだけに化学反応を起こさせて、全体を高温にしたりするのは異なる選択性を持たせて分離していくことも今後の方向性としては期待できるのではないかと考えている。

最後にまとめると、分離な化学的な変化と物理的な特徴の相違の組合せで達成されており、変化だけを起こすのではなく、変化したときの膨張、体積変化、衝撃波の伝搬、あるいは溶けた後の物質の特徴の違い、これらを組み合わせて分離することが重要であり、これまでサイエンスになりづらかった領域ではあるものの、一つ一つ紐解いていくことによって、分離に対するサイエンスが体系化できるのではないかと考えている。

分離のサイエンスの体系化によって、製品・材料の高機能化と分離の高効率化がうまく両立できるのではないかと考えている。

【質疑応答】

Q：最後に述べられた部分が非常に重要だと思うが、分離をやりやすくする製品の作り方 に対して何か具体的を示していただくことは可能か。

A：機械的な手法であれば欠損や欠陥の空間的な分布と変形と応力衝撃波伝搬との関係で決まる。電気的な手法であれば、抵抗と発熱・放熱の特性と電磁気学的な作用力とそれによる化学反応、それらの組合せで決まる。先ほどのパルス波が製品使用時には使われないものであれば、使用時には使われない力の範囲で十分に機能を発揮して、使用後はパルス波や、使用時には使われなかったであろう力の範囲で界面を分けることが可能になるのではないかと考えている。

Q：そうすると、製品の取説等に「パルス法で分解することができます」などという記述を入れることが将来は可能と思うか。

A：そこまで行けば良いが、そこまでではなくても、分離の世界は製造の情報が無いまま物を見て、どうやって分離しようかと考えている状況である。例えば、電気パルス波を使おうとしても、一つ一つの材料の電気的特性を知る必要があり、それを知るだけでも非常に時間のかかる作業になっている。製造

時の材料の情報が分離のところまでうまく伝達されるだけでも、この分野のサイエンスは随分変わるのではないかと感じている。その先に、もちろん製造時に仕込むということもあると思う。

- Q：製品・材料の高機能化に対して静脈側に配慮するということについてお聞きしたい。この製品が何でできているかといったことを記載する、例えば、ペットボトルだったら巢既に「PET」と書かれおり、そのような情報は非常に役立つと思うが、その程度であれば製造時に新しくコストがかからない。新しくコストがかかるようなこと、及び機能を少しでも損なうようなことは避けるべきではないかと思うが、いかがか。
- A：そのとおりだと思う。循環のことを先に考えて製品の高機能化のグレードを落とすことは本末転倒で、それは絶対にやるべきではない。
- C：情報が非常に大事。例えば、先ほどタイヤの話があったが、資源循環のところでは、日本製のタイヤは二次資源としても引っ張りだこであることはよく知られている。日本のタイヤは非常に性能が良いということは世界で知られているため、つつつである海外に有価でリユースされている。つまり、製品の高機能化という意味では、日本はあるレベルに達しており、それを循環のためにやめるのではなく、更なる高機能化を目指すことで循環の世界も変えられるということを申し上げておきたい。
- C：製品・材料の高機能化と分離の高効率化の両立ということに関して、発言したい。高分子の世界で、高機能化のため多層フィルムを使うことがあるが、まさに階層化の1つだと思う。最近、多層フィルム間の接着を、サーキュラーエコノミーを考えて容易に剥離できるような接着剤ができないか世界的にも開発が進んでいる。例えば、共有結合の形成と共有結合の乖離を用いた接着と剥離は、結合と乖離を光と熱、あるいは光の波長を変えて行うのであり、まさしく製品・材料の高機能化と分離の高効率化の両立と言える。所先生がおっしゃられた界面にエネルギーを集中して分離を容易にするというのは一つの良い例ではないかと思う。

5.2 材料科学に基づいた製錬反応の根本的理解

宇田 哲也（京都大学）

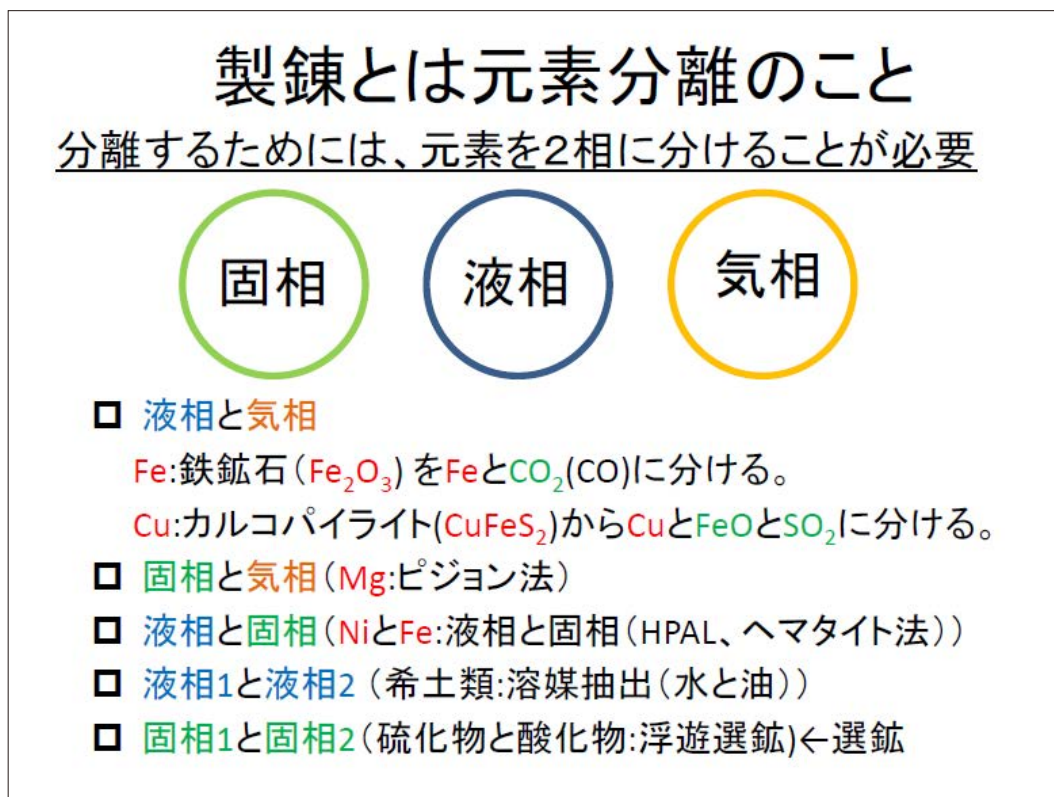


図5-2-1

製錬とは元素分離のことであり、1つずつ元素を分けていくことである（図5-2-1）。分けるためには元素を2つの相（固相と液相、液相と気相など）に分けることが必要である。例えば、銅は、銅と鉄と硫黄の3つから成っているカルコパイライトから製錬するが、まず鉄を液相で抜いて、続いて銅を液相で抜くという作業を行う。

金属工学には鉄鋼製錬と非鉄金属製錬の2つの分野があり、鉄鋼製錬は、純度の高い鉄鉱石が手に入るため、それを還元して若干のリンと硫黄を抜く作業が必要である。非鉄金属製錬は、ほとんどの非鉄金属の鉱石に入っている鉄を除くことが大きな仕事の1つになっている。また、鉄鋼製錬と比べ非鉄製錬では原料中の目的元素の純度も低い。

先ほどお話いただいた所先生の分野は、元々は選鉱から発生した分野で、鉱石をいかに物理選別して純度を上げていくかという分野である。製錬はそこから元素を99.9%、もしくは99.99%という純度の金属に仕上げていくことを目的とした分野である。ただ最近は都市鉱山やリサイクル技術が進展したため、その境界は曖昧になり、互いに協力し合って進めていく状況である。

テクノロジーフィクション（TF）という言葉をご存知だろうか。東京大学の増子昇名誉教授から教わった言葉だが、科学的にはできるだろうけれども、工学的にはできないことをTFと呼ぶそうである（図5-2-2）。

資源循環分野のTF

- Technology Fiction
- 科学的には出来るだろうけど工学的には出来ないお話(増子昇東京大学名誉教授)
- 例えば、全元素リサイクルするなんてことは、inputエネルギーを考えるとナンセンス
- 資源循環は、リサイクルして利益がでることが前提
- 資源循環の研究では、TF研究やTF提案がでやすく、最近増えています

図5-2-2

例えば、全元素のリサイクルは、言葉としては美しいが、そのインプットエネルギーを考えると、もしくはリサイクルする際に必要になる薬剤のことを考えると、非常にナンセンスであり、TFと考えられる。そもそも資源循環はリサイクルして利益が出ることが前提である一方、新しい世界を作るためには最初は利益が出なくても将来的に利益が出るようなことにチャレンジすることも重要であり、どうバランスを保つか非常に難しい。

加えて、市中リサイクルと工程内リサイクルでは難易度が全く違うことも覚えておくべき点である。小売店に回って使用されて戻ってくる、それが市中リサイクルである。工程内リサイクルは、製造時の歩留まりが悪かったために出てくるリサイクルである。この2つは純度が全く異なり、後者は国内でも比較的多くのリサイクルが進んでいるが、市中リサイクルは純度が低く、それを集めること自体が大変でもあるため、かなり難しい。そのため小さな部品や薄膜などは工程内リサイクルはできると思われるが市中リサイクルは難しいだろう。

最近ではSDGsでも資源循環の重要性が叫ばれているため、様々な分野から参入する研究者も増えているが、TF研究やTF提案も増えている点には注意が必要である。さらに、製錬は原子一個一個ではなくて、トンオーダー、少なくとも数百キロオーダーの話であることにも注意を要する。

製錬反応を理解するためにこれまで行われてきたことが2つある(図5-2-3)。一つは熱力学的な理解であり、平衡論的にその分離が進むかどうかである。もう一つは速度論的な解釈である。例えば、気体になる反応もしくは液体になる反応が、人間の時間の尺に合うような速度で進むかどうかである。

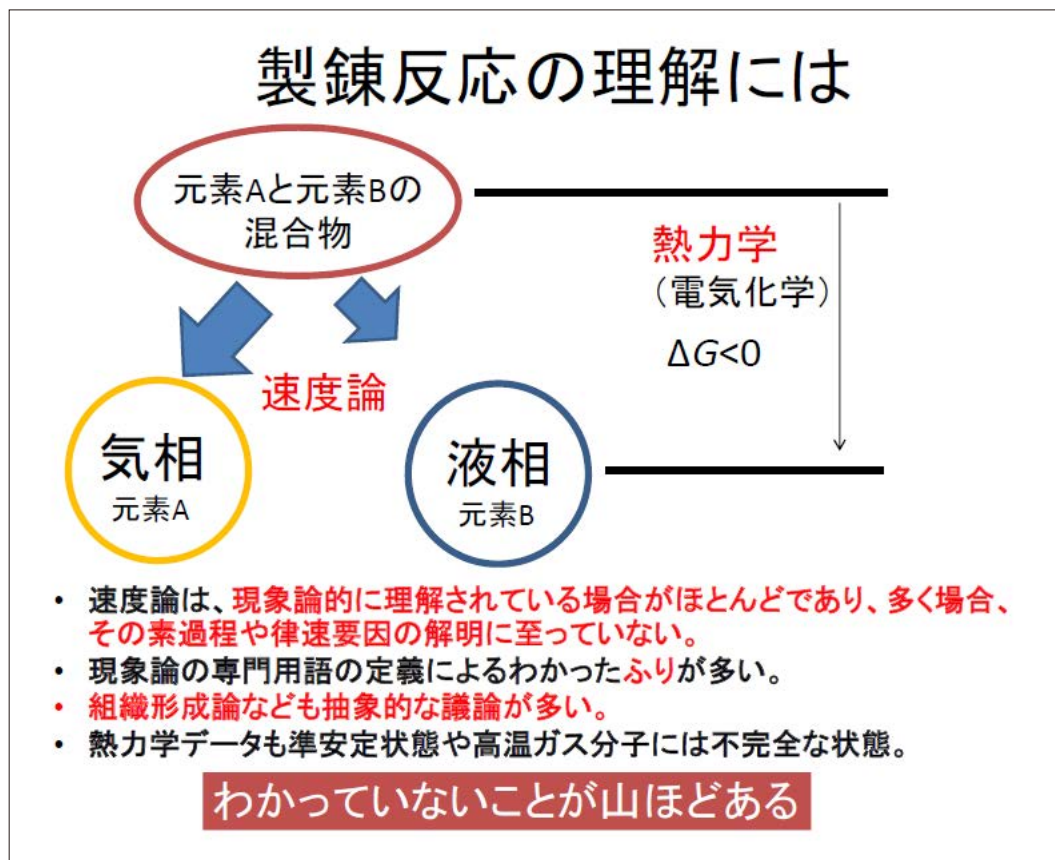


図5-2-3

熱力学的なアプローチとしては、平衡状態はかなり分かってきているものの、準安定状態や高温ガス分子に関しては熱力学データが揃っていないわけでもなく、よくわからないことが多い。特に低温領域での製錬は準安定状態を多用するが、どのような準安定状態を利用しているかのデータが不足している。また表面への吸着化学種など、遷移状態の熱力学データも必要である。

速度論に関しては、現象論的に理解されている場合がほとんどであり、素過程や律速要因の解明には至っていないのが現状である。組織形成についても抽象的な議論が多く、手つかずに近い状況である。

具体例として亜鉛を紹介する（図5-2-4）。亜鉛ボルタ電池は亜鉛板と銅板を用いて、亜鉛が溶出してプロトン（水素イオン）が還元されて水素が出ることで電気を得ている。亜鉛がプロトンを還元できるということは、イオン化傾向が亜鉛のほうが大きい性質を用いており、逆に言えば亜鉛イオンを含む水溶液に電圧を印加しても水素しかできないはずである。しかしながら、この方法で何万トン、何十万トンという亜鉛が作られている。

これはどういうことかということ、今までは、亜鉛上では水素発生電極過電圧が大きいために水素生成しないと説明されてきたが、現象を専門用語で言い換えているだけであって、実は理解を伴った説明にはなっていない。なぜこの水溶液中で亜鉛ができるのかは解明されていないのである。

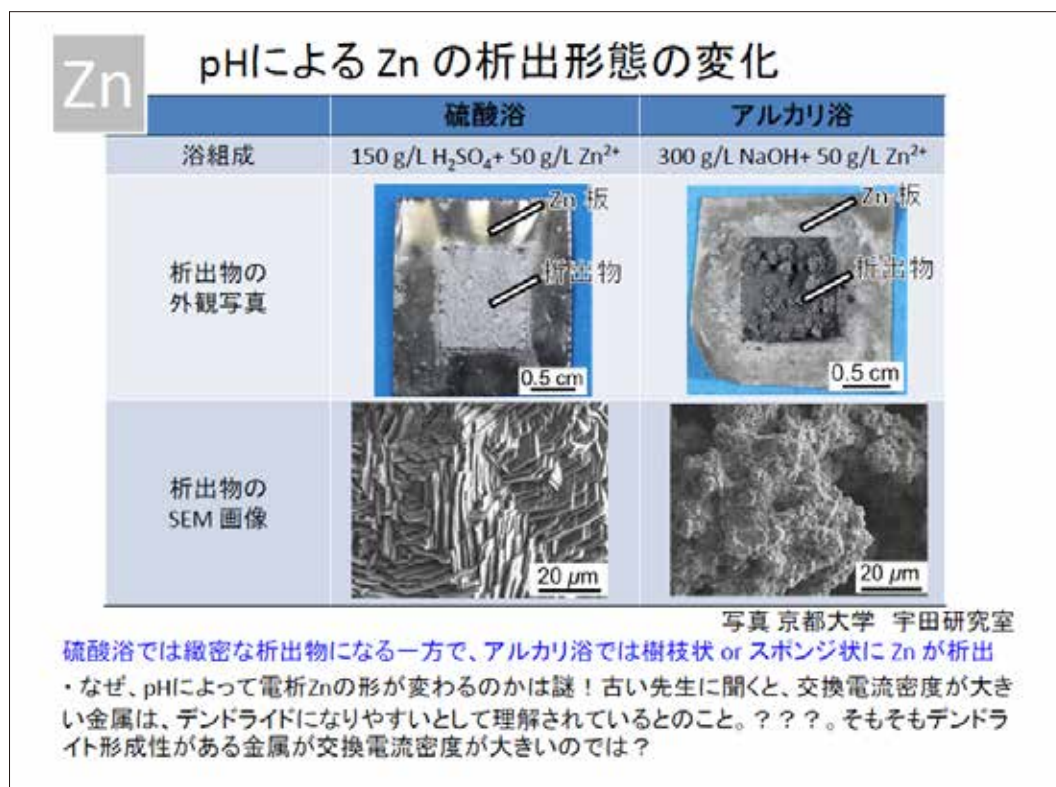


図 5-2-4

組織形成論で言うと、アルカリ中で作る亜鉛はポーラスな状態になっている。それではなかなか売り物にならないため酸性中で作るが、なぜそのpH値の違いで亜鉛の形状が違うのかは分かっていない。交換電流密度が大きい金属はデンドライド（樹枝状晶）になりやすいと言う方もいるが、それは言葉を言い換えているだけである。

銅は銅鉱石（カルコパイライト、 CuFeS_2 ）から作っているが、高温乾式製錬するルートと湿式でリーチングして銅を電荷採取するという2つの方法がある。酸浸出してリーチングしようとする際、同じ鉱石でも2年間保管するとリーチングしにくくなる。鉱山によっては非常にリーチングされやすい鉱石もある。なぜ産地や保管状態によってリーチング挙動が異なるのかはよく分かっておらず、この原因を科学的に解明すべきものの一つである。

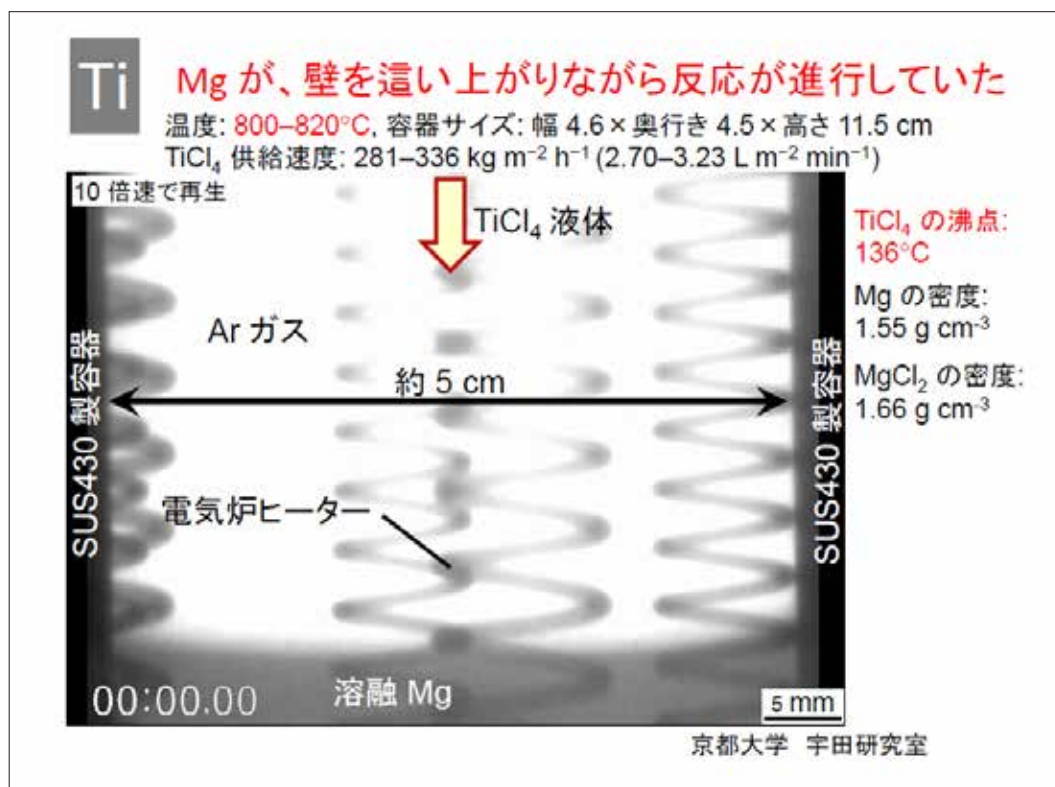


図5-2-5

図5-2-5はチタンの製錬反応であるが、800°C～1,000°C位の高温反応中で何が起きているかがよく分かっていない。四塩化チタンをマグネシウムで還元して結果としてチタンができ、塩化マグネシウムが副生成物としてできることまでは分かっているものの、反応を観察する技術が製錬分野では不足している。例えば、マイクロフォーカスX線透視観察を行うと、容器壁にチタンが析出していることが分かる。このように壁からチタンが析出していく様子を細かく観察すると、下にあったマグネシウムが上に這い上がりながら蒸発した四塩化チタンが反応していることが分かってくる。このような観察が非常に重要である。

計算科学も非常に重要なツールである。私が感じる計算科学者の傾向として、第一原理計算を厳密にやりたい気持ちが強いために、計算対象が固体であったり、できるだけ元素数が少ないものになりがちであり、液体や気体、両相共存の界面といった複雑なものを対象にする方はいらっしゃることは承知しているが多くのではないのか。

図5-2-6に光和精鉱という会社の亜鉛と鉄を分離するプロセスを示す。塩化物を入れてリサイクルするが、不思議なことは、金や銀が蒸気として飛んでいくことである。熱力学的データを見る限り、金が飛ぶようなことは起こらないはずであるが実際には起きているため高温ガスの気体の熱力学データが不足していることがうかがえる。まだ、試しの段階だが計算を行うことで、例えば、銀はアルミと分子を作って飛ぶことが分かってきた。このような現象の理解のために計算科学をもっと導入していく必要がある。

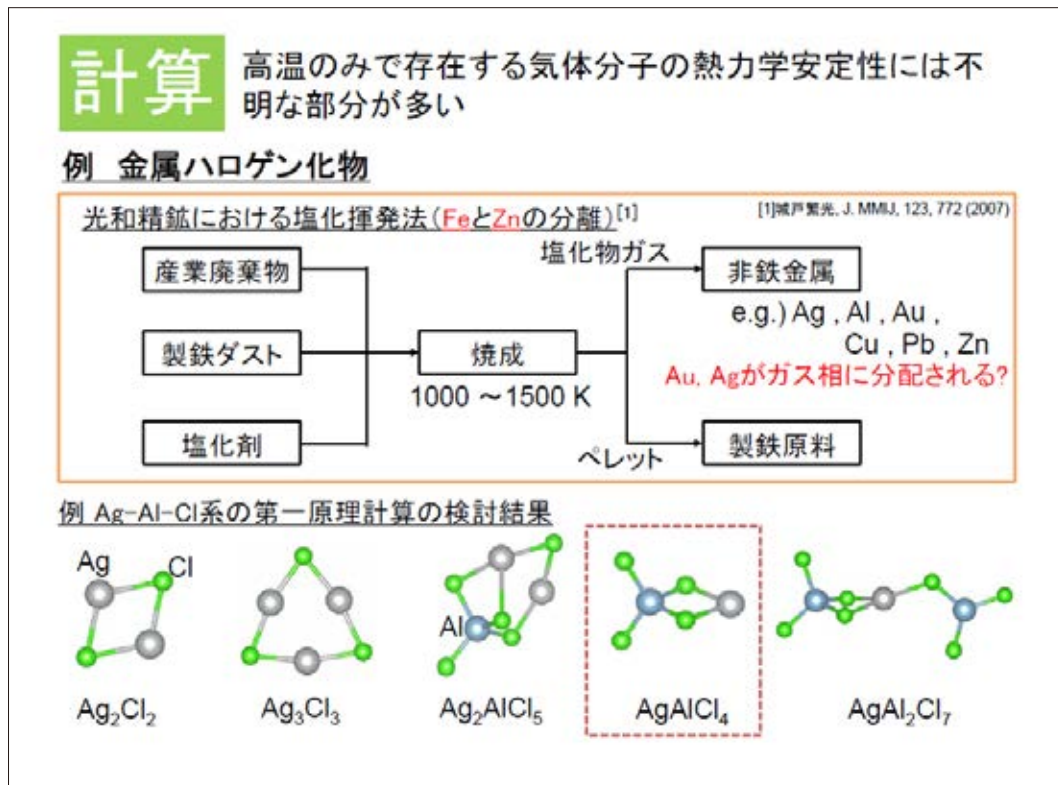


図 5-2-6

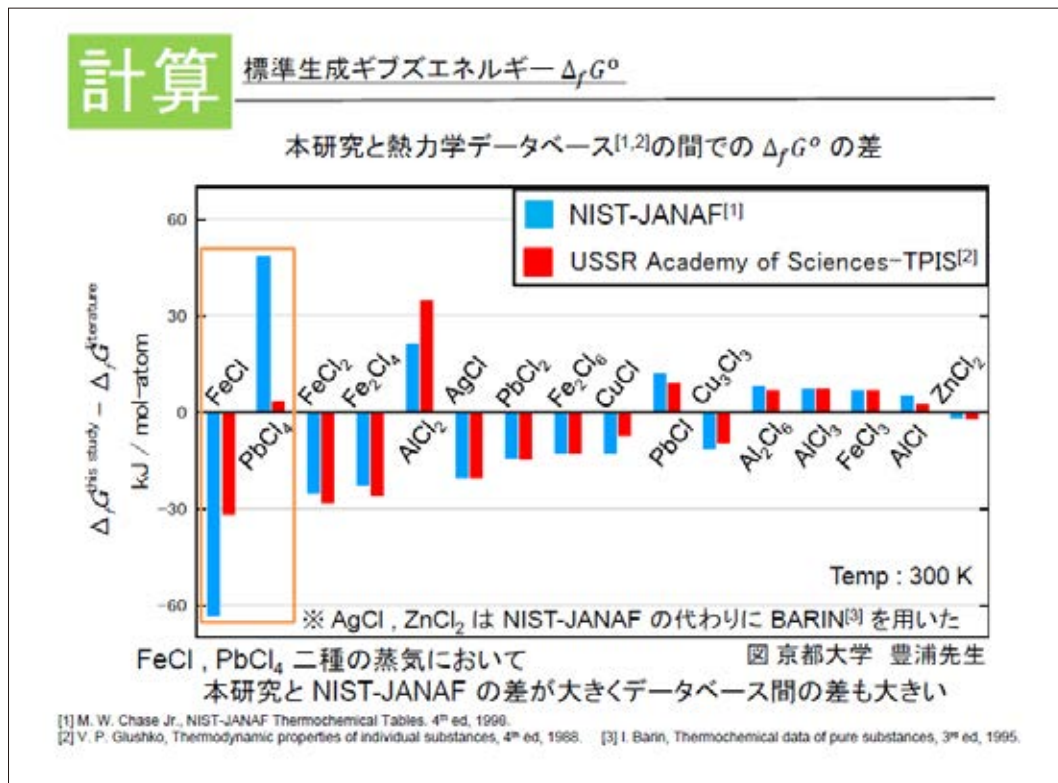


図 5-2-7

NIST-JANAFは確立された熱力学データベースであるが、そのデータと第一原理計算の結果を比べてみると、図5-2-7で示すようにいくつかの化合物に関しては報告値と大きな違いがあることが分かってきており、既存の報告値を簡単に信用してはならないということがわかる。特にFeClのような準安定な分子や非平衡な分子に関しては調べ直す必要がある。他の2元系、3元系もデータを第一原理計算で検証してみるの面白いと思う。

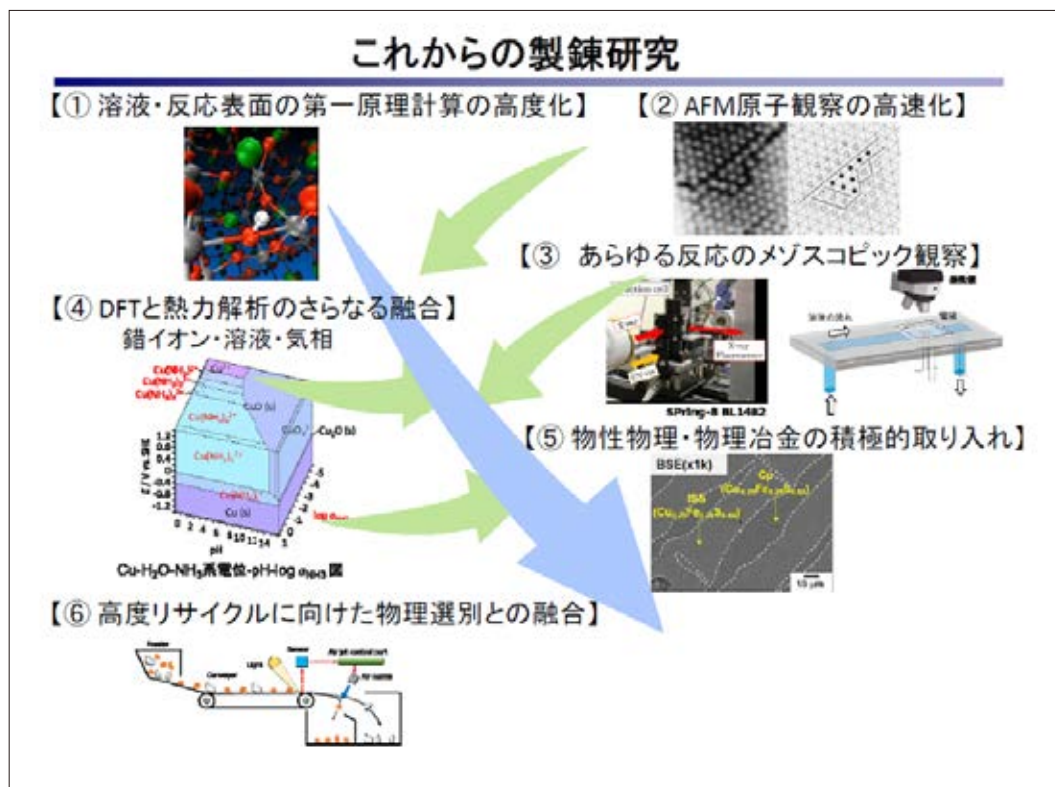


図5-2-8

最後に、これからの製錬研究について必要と思われることをまとめて紹介する（図5-2-8）。まず溶液、固体表面、気液表面、固液表面の第一原理計算を高度化していくべきである。観察については、AFM（原子間力顕微鏡）で非常に高分解能の観察ができるようになってきているが、時間分解能が不足しているため、高速化という観点からの高度化が必要である。メソスコピック観察については、チタンの例でも言ったように反応場がどこなのかといったことを観察することが重要である。

第一原理計算では錯イオン、溶液、気相の辺りの計算手法開発と熱力学データの収集が必要である。米国のMaterials Projectにおいて第一原理計算を用いた熱力学データの蓄積が進んでいるが、製錬分野で必要となる気相、液相は含まれていない。

また先ほどの銅のリーチングの話題に関しては、私の研究室では電気的特性が違うことが効いているのではないかという示唆が得られているがまだ完全な理解には繋がっていない。その観点から、物性物理や物理冶金の積極的な取り入れも必要である。もちろん、物理選別との高度な融合や、若手学生の育成も大変重要な課題である。

以上、静脈側としては、上記のような技術の進展や分野融合によってリサイクル能力の向上を図ると同時に学問を進展させることが今後の方向性ではないかと考えている。

【質疑応答】

- Q：市場に出せる回収をするためには金、銀、プラチナ、パラジウムはいずれも銅の製錬プロセスに入れないといけないと以前伺ったことがあるが、銅の中に溶け込んでいる金属を最終的にどうやって分離するのか。電気化学的に分離するのか。
- A：銅製錬における金の回収は、電解精製するときの溶け残りに金が含まれるため、その金を濃化した後に塩素で酸化して溶媒抽出する。貴金属はかなり出来ているが、現在問題となっているのは他に一緒に付随してくるものである。例えば電子基板にはスズが含まれているが、スズが混じると捨てるしかない。しかし電子基板には金もあるため、金回収のために銅製錬に入れることになるが、結果としてスズのリサイクルは犠牲になる。ニッケルも似たような状況になっている。
- Q：そこではスズは邪魔ものということか。しかし今は非鉛ハンダでスズが使われている。
- A：その通り。金回収ではスズは邪魔ものとして扱われる。ただし、スズの価格は高く、1kg当たり2,000円位するため、本当はスズも回収したいが現状では回収する術がなくて困っている状況である。
- Q：計測技術の重要性に言及された際、AFMでダイナミックな映像が得られると良いという話があったが、化学反応をin situで見ようとしても環境が液相で、さらに高温下であるため、使える道具が限られてくるのではないかと。オペランド計測という観点から計測技術への要望があれば伺いたい。
- A：高温や強酸性といった制約があるためAFM等は無理だと思う。これらの環境の厳しい測定では、メゾスコピック領域ぐらいで、できれば1ミクロンもしくはサブミクロンぐらいで観察できたらと良いと考えている。それより小さい領域は第一原理計算でシミュレーションするしかないのではないかと。我々が今一番欲しいものは、オペランド計測にしても他の計測にしても、我々が一から作ろうとすると膨大な時間がかかってしまうため、誰もがすぐに使える共用の設備である。しかし、例えばSPRING-8等を使おうと思うと四塩化チタンのような腐食性のものとか、混ぜると爆発するものを持ち込んではいけなくてと言われてしまう。腐食性の高いもの危険物が使えるような製錬を専門とする研究者が誰もが使える場所が欲しい。
- Q：小さいスケールでは取りあえず第一原理計算に任せてしまわないと仕方がないというお話だったが、一方でJANAFの熱力学データと第一原理計算が合わないという話もあった。これは実験の方がデータとしてよろしくないのか、計算が難しい系だから第一原理計算のほうがよくないのか。
- A：特に合っていなかったのはFeClとPbCl₄だが、PbCl₄は他の実験的な事実から計算のほうが正しいことが分かっていて、JANAFのデータが大きく間違っていた。他のデータを色々探してみると、USSRというソ連時代のデータと計算のデータが一致することが分かった。FeClは準安定な化合物なため他の実験手段で確かめるのは難しく、どちらが正しいのかは分かっていない。
- Q：このようなデータベースは非常に重要であることは皆が賛同する一方、データベースを作ることがなかなか評価されないという課題もある。
- A：その通り。データベースを作る研究者を評価する必要がある、ここは国の方で考えていただきたい。有機の計算は比較的確立が進んでいるが無機化合物の気体分子の計算は方法論も含めて進んでいない。研究者の仕事は方法論を検討することである。2元系はそれほど難しくないが、3元系は安定配置を見つければ大変である。その方法論を見つけれれば良いジャーナルに投稿はできると思う。さらに、その方法を利用して各元素に網羅することが難しい。モチベーションを上げられる国プロがあれば良いと思う。
- C：第一原理計算に関して、分子のデータがそこまでないというのは驚きだった。もしないのであれば、現在のスパコンの性能があればハイスループットでできるのではないかと。評価の部分はあるかと思うが、恐らくこうしたことは国研がやっていくべき部分ではないかと感じた。

6 | 総合討論

ファシリテーター：甲村 長利（JST-PM 育成・活躍推進プログラム）

これまでの各プレゼンテーション・質疑、招聘者への事前アンケート結果を踏まえて、「提言に対する仮説」「戦略的に取り組むべき研究テーマや進め方」等について議論を行った。以下にその概要をまとめる。

【仮説の妥当性や提言の方向性について】

- ・タイトル副題にある「高機能材料」は力学的機能も含め、できるだけ広く捉えるべきである。そうすることで異なる分野の参画から新しいアイデアが生まれることが期待される。
- ・多種のブロックを幾何学的に積み上げて構造をつくるという発想では狭く、界面の自在制御も重要。
- ・階層構造のうち一次構造の制御はできても、その先の高次の階層構造の予想や制御ができずに応用に結びつかないものが多い。
- ・「階層構造」という言葉には、物理的な階層だけではなく機能や物性の階層性など、様々な意味があるため、使い方には注意が必要。
- ・階層構造制御という言葉だけではありきたりで新規性に欠けるため、枕詞として資源循環やリサイクルをつけた方がいいのではないかな。ものづくりのための階層構造制御だけではなく、資源循環やリサイクルを見据えた階層構造制御とすれば新しい戦略提言になるのではないかな。
- ・分解は現時点ではマイナーな分野であり論文にはなりにくい面があることも事実。
- ・階層構造という言葉は物理選別では当てはまる言葉になると思うが、製錬のように元素レベルまで戻す分野にはそぐわないように感じる。構造という言葉は入れずに、メゾや原子や組織といった「マルチスケール階層」の方がキーワードとしては適しているのではないかな。
- ・元素だけではなく機能を循環させる、という考え方が必要ではないかな。
- ・階層構造制御は重要なコンセプトであるが、インフラのような50～100年の長寿命を考えないといけなものと、家電のように数年でリサイクルされるようなものを区別する必要があるのではないかな。
- ・循環という意味では、自己修復も範疇に入りうる。広く捉えるとなると、「時間軸を考慮した材料設計」とも言える。
- ・具体的なアプリケーションや大きなビジョンが設定できれば、大きな潮流を生み出すコンセプトになる。
- ・有機材料や無機材料、動脈や静脈に関わらず、資源を有効に無駄なく使うという観点から「アップサイクルエコノミー」がある意味で共通のコンセプトになるのではないかな。
- ・動脈と静脈の人が一堂に会して議論することは重要であるものの、動脈と静脈それぞれで本来やるべきことをおろそかにするようなことは避けるべきである。

【取り組むべき研究テーマ】

- ・階層構造制御における意義、原子レベルでのつながりの解明や、階層構造を構築するためのプロセス技術が必要。そのためには、計算科学やデータサイエンスといった新しい技術を導入し、階層間の機能の連結を図ることが重要。
- ・全ての機能は「空間的な階層性」「時間的な階層性」「エネルギー」の3軸で表現できるのではないかな。
- ・階層構造を考えるにしろ、準安定相を考えるにしろ、メゾスコピック系の物理や化学が重要になる。
- ・材料創製では、新しい材料や未知の機能を生み出すことが重要であり、そのためにどのような階層構造制御が必要かを考える必要がある。

- ・ 元素の価値は時代に応じて変わっていくが、価値が変わっていく元素をいかに有効活用するか、その突破口として階層構造制御が位置付けられることが望ましい。
- ・ コストとエネルギーは1対1ではないが、物理選別においては自己粉碎という言葉があり、自らがどこかに当たって壊れる力を使った壊し方が最もエネルギーが小さくなる。使用後に自ら崩壊していく材料を作るのは難しいとしても、少しの刺激で界面が壊れるといったことが可能になればブレークスルーになるのではないか。
- ・ 通常、固体を扱っている研究者は固体のこしか考えないが、準安定などの非平衡の相にアプローチするためには、気相や液相まで含めたプロセスを考える必要がある。プロセッシングという言葉で動脈と静脈を繋ぐことができるのではないか。
- ・ 計算科学を用いて準安定相の探索は可能になりつつあり、非平衡状態のデータの蓄積が進めばデータ科学の活用も進展するのではないか。
- ・ 固相に関しては様々なデータベースが存在するものの、気相や液相に関するデータベースはほとんど存在しない。
- ・ 準安定状態を制御することは有機材料でも必要な考え方。燐光が準安定状態から最安定状態への状態遷移に関係していることを考慮すると、準安定状態を制御することは光機能の寿命の制御にもつながる考え方とも言える。これは有機材料や無機材料といった垣根を超えた考え方である。
- ・ 無機材料では元素の多様性があり、これに階層構造制御という考え方を取り入れることで物質設計の自由度が格段に上がる。
- ・ 循環のためには界面をいかに制御するかが重要であることは確かである一方で、モノを作るときには界面の親和性をよくして結合させることを考える。界面における結合と分解を同時に実現するのは非常に困難であるように感じる。
- ・ プラスチック製品も長寿命と言えるが、寿命を予測する技術もなければ、計測する手法も存在しないため、新しい学問体系が必要。
- ・ 廃棄の段階で何かしらのトリガーによって容易に分解させる仕組みを科学的に取り入れることは不可能ではないのではないか。
- ・ ビルディングブロックを配列させるという考えの下では、非平衡的に並べることで材料を創製し、その逆プロセスを経れば、分解させることも可能になるのではないか。
- ・ 階層構造と機能の相関を解明することがまずはやるべきテーマではないか。

【研究開発の進め方について】

- ・ 他分野の人と出会う場を作ることが重要。そこで分野共通のキーワードやコンセプトにも出会うことができ、それぞれの分野に新しい概念が導入できる可能性が広がる。
- ・ 物理的な分離・分解から化学的な製錬までを考えたときに、どうすれば最も低エネルギー・低環境負荷で、かつ、高精度な分離は可能かを考えたいが、最後はコストが決定打になるため、そこをどう考えるかで進め方も変わるのではないか。
- ・ テクノロジーフィクションという言葉があるように、原理的や科学的に可能であっても産業的には難しいことは多々あり、基礎科学のための研究、社会実装のための研究など、研究者自身がTRLのどこにいるかを意識しながら進めていくことが社会実装の上でも重要ではないか。
- ・ 無機材料の研究者はどうしても固相のみを考えがちであるが、準安定や非平衡を考える際には気相や液相でのアプローチも必要になる。
- ・ 日本発で、かつ、諸外国ではまだ注目されていない技術や材料をシーズとして発展させることも一つのポイントではないか。
- ・ 循環型社会がフォーカスされるようになってきていることもあり、製錬や選鉱といった絶滅危惧学科になりそ

うなところにも光を当てることも必要ではないか。

6

総合討論

付録

付録1 開催趣旨・プログラム

開催趣旨

JST 研究開発戦略センター（CRDS）は、科学技術に求められる社会的・経済的ニーズを踏まえて国として重点的に推進すべき研究領域や課題を俯瞰の視点から系統的に抽出し、その研究開発戦略を提言する公的シンクタンクとして活動しています。活動の過程において、研究開発動向の俯瞰を目的とした「俯瞰ワークショップ」や、重要テーマの研究開発戦略を議論する「科学技術未来戦略ワークショップ」などを開催してきました。本ワークショップ「未来材料開拓イニシアチブⅡ～高機能材料の創製・分離・循環を実現する階層構造の自在制御～」は、上記科学技術未来戦略ワークショップの一つとして開催するものです。

我が国の貿易収支を支える製造業において、競争力の源泉は、高性能な機器や素材の製造を可能にする、材料技術・ナノテクノロジーにあると言えます。資源に恵まれないというハンデを克服しながら、材料技術に関する強みを発揮し続けることを目的とした「元素戦略」は、過去10数年に及ぶ成果によって、国内だけでなく世界中に影響を与えてきました。しかしながら、近年における諸外国の資源政策に関する変化や、昨今のCOVID-19感染拡大を契機とするサプライチェーンの混乱など、脱グローバル化の流れも一部で見え始めている中、材料開発にも変革が求められています。また、製品に対する要求も、性能面だけでなく環境やエネルギー負荷の側面でも高度化する一方であり、それらの中核部品を構成する材料に対しても、時に相反関係にある機能も含め、多様な機能を同時満足することが期待されています。このような状況を受け、我が国としても「元素戦略」に次ぐ、新しい材料研究開発戦略の構築が急務となっています。

「元素戦略」の本質は、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す。この本質に立ち戻り、約80種ある元素をフル活用することで、社会が求める多様な機能を満足する材料を創製し続けることが我が国産業競争力強化の観点からも重要です。CRDSでは、主に無機材料を対象として、元素・電子状態・微細構造などが機能に果たす役割を深く理解し、多元素化により材料設計の自由度を増大させ、準安定相や不安定相を含むこれまで未利用だった多様な安定相を活用することで高機能材料を設計・創製することを目指した戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ～多様な安定相のエンジニアリング～」を2019年7月に発行しました。本ワークショップは、「未来材料開拓イニシアチブ」の概念を有機材料にまで拡張し、さらに新たな機能を有する材料の創製のみならず、材料の使用後の分離や循環まで考慮した材料設計指針を構築するためには材料における階層構造を自在に制御する技術が必要になるとの仮説の下、資源限界を超えた強固な材料開発基盤を構築し、技術的優位性を確保し続けるための研究開発戦略について議論します。

本ワークショップでは、「元素フル活用」「階層構造制御」に関連する我が国の材料研究の現状・課題・将来展望についての話題提供を基に、戦略的に取り組むべき重要な研究開発課題、世界をリードするための効率的・効果的なファンディングや研究実施体制および産学連携の仕組み、人材育成・社会受容などを含む社会的・経済的インパクトについて議論します。これらの議論を通して、階層構造の自在制御を実現するための研究開発の方向性を明らかにし、取り組むべき科学技術とその推進方法の共通認識を得たいと考えています。

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

プログラム

(敬称略)

第一回

開催日時：2020年6月17日（水）9:00～12:10

開催会場：新型コロナ感染拡大防止の観点からオンライン会議（Teams）

（JST関係者+希望者）TKP市ヶ谷カンファレンスセンター バンケットホール8B

オーガナイザー
ファシリテーター
司会

曾根 純一（JST-CRDS）
甲村 長利（JST-PM育成・活躍推進プログラム）
宮下 哲（JST-CRDS）

09:00～09:15 開会挨拶、趣旨説明

曾根 純一（JST-CRDS）
宮下 哲（JST-CRDS）

先行施策の状況と将来展望

09:15～09:40 「“水素科学”によるマテリアル革新力強化－新学術ハイドロジェノミクスからの示唆－」
折茂 慎一（東大）

09:40～10:05 「複合アニオン化合物の創製と機能開拓：現状と将来展望」
陰山 洋（京大）

10:05～10:30 「「分子技術」・「融合マテリアル」における階層構造と機能発現」
加藤 隆史（東大）

計算科学・シミュレーション技術のトレンド・課題・将来展望

10:35～11:00 「シミュレーション研究から考える高分子材料における階層構造の問題」
森田 裕史（産総研）

11:00～11:25 「電池・触媒の高機能化と階層構造制御に向けた計算科学」
館山 佳尚（NIMS）

11:35～12:10 ミニ討論 （ファシリテーター 甲村 長利（JST-PM育成・活躍推進プログラム））

12:10 閉会挨拶 曾根 純一（JST-CRDS）

(敬称略)

第二回

開催日時：2020年6月20日（土）9:00～12:00

開催会場：新型コロナ感染拡大防止の観点からオンライン会議（Teams）

（JST 関係者+希望者）TKP 市ヶ谷カンファレンスセンター バンケットホール8B

オーガナイザー
ファシリテーター
司会

曾根 純一（JST-CRDS）
甲村 長利（JST-PM 育成・活躍推進プログラム）
宮下 哲（JST-CRDS）

09:00～09:15 開会挨拶、趣旨説明

曾根 純一（JST-CRDS）
宮下 哲（JST-CRDS）

09:15～09:25 第一回振り返り

眞子 隆志（JST-CRDS）

階層構造制御のトレンド・課題・将来展望

09:25～09:50 「2次元ナノシートを用いた階層構造の構築、設計と機能開拓」

佐々木 高義（NIMS）

09:50～10:15 「有機材料における階層構造制御」

植村 卓史（東大）

分離・リサイクル技術のトレンド・課題・将来展望

10:20～10:45 「資源循環に求められる構造制御と物理的分離技術の開発動向」

所 千晴（早大）

10:45～11:10 「材料科学に基づいた製錬反応の根本的理解」

宇田 哲也（京大）

11:20～12:00 ミニ討論（ファシリテーター 甲村 長利（JST-PM 育成・活躍推進プログラム））

12:00 閉会挨拶

曾根 純一（JST-CRDS）

(敬称略)

第三回

開催日時：2020年6月20日（土）14:00～16:00

開催会場：新型コロナウイルス感染拡大防止の観点からオンライン会議（Teams）

（JST関係者+希望者）TKP市ヶ谷カンファレンスセンター バンケットホール8B

オーガナイザー
ファシリテーター
司会

曽根 純一（JST-CRDS）
甲村 長利（JST-PM 育成・活躍推進プログラム）
宮下 哲（JST-CRDS）

14:00～14:25 開会挨拶、論点整理

曽根 純一（JST-CRDS）
宮下 哲（JST-CRDS）

14:25～16:00 総合討論

（ファシリテーター 甲村 長利（JST-PM 育成・活躍推進プログラム））

論点 1. 提言の骨子の仮説検証

2. 戦略的に取り組むべき研究開発課題と時間軸

3. 異分野連携・融合の方策、産学連携の課題

4. 目標とするゴール、研究開発のアウトプットとアウトカム・ビジョン

16:00～ 閉会挨拶

曽根 純一（JST-CRDS）

付録2 参加者一覧

招聘者

<発表者>

- ・植村 卓史 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 教授
- ・宇田 哲也 京都大学 大学院工学研究科 教授
- ・折茂 慎一 東北大学 材料科学高等研究所 所長／金属材料研究所 教授
- ・陰山 洋 京都大学 大学院工学研究科 教授
- ・加藤 隆史 東京大学 大学院工学系研究科 教授
- ・佐々木 高義 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 拠点長
- ・館山 佳尚 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 グループリーダー
- ・所 千晴 早稲田大学 理工学術院 教授
- ・森田 裕史 産業技術総合研究所 機能材料コンピュータシミュレーションデザイン研究センター
研究チーム長

<コメンテータ>

- ・北川 宏 京都大学 大学院理学研究科 教授
- ・君塚 信夫 九州大学 大学院工学府 教授
- ・清水 史彦 三菱ケミカル株式会社 Science & Innovation Center Polymer Laboratory 所長
- ・庄司 哲也 トヨタ自動車株式会社 先端材料技術部 チーフプロフェッショナルエンジニア

<JST-CRDS 新元素戦略チームメンバー>

- ・曾根 純一 ナノテクノロジー・材料ユニット 上席フェロー
- ・宮下 哲 ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー／チームリーダー
- ・内山 浩幹 JST 戦略研究推進部 副調査役
- ・甲村 長利 JST プログラム・マネージャー育成・活躍推進プログラム PM 研修生
- ・中村 亮二 環境・エネルギーユニット フェロー
- ・長谷川 貴之 海外動向ユニット フェロー
- ・日江井 純一郎 科学技術イノベーション政策ユニット フェロー
- ・眞子 隆志 ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・水本 邦彦 JST 研究プロジェクト推進部 主任調査員

<関係府省・機関>

- ・登内 敏夫 内閣府 政策統括官（科学技術・イノベーション担当）付 政策企画調査官
- ・木全 修一 内閣府 政策統括官（科学技術・イノベーション担当）付 上席調査員
- ・佐原 亮二 内閣府 政策統括官（科学技術・イノベーション担当）付 研修員
- ・鈴木 慎司 文部科学省 科学技術・学術政策局 企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略室
室長補佐
- ・米田 諭 文部科学省 科学技術・学術政策局 企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略室
調査員
- ・萩原 開 文部科学省 科学技術・学術政策局 企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略室
行政調査員
- ・高橋 功 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 参事官補佐
- ・吉岡 佑真 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 係員
- ・稲木 信介 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 学術調査官
- ・片山 郁文 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 学術調査官
- ・野瀬 雅文 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 文部科学調
査員
- ・中払 周 文部科学省 研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付 行政調査員
- ・亀井 肇 文部科学省 研究開発局 環境・エネルギー課 専門官
- ・中田 希衣 文部科学省 研究開発局 環境・エネルギー課 行政調査員
- ・中川 貴 経済産業省 貿易経済協力局 技術調査室 室長補佐
- ・有沢 俊一 物質・材料研究機構 経営企画部門 部門長
- ・西村 睦 物質・材料研究機構 経営企画部門 TIA推進室長
- ・藤本 辰雄 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター
ナノテクノロジー・材料ユニット ユニット長
- ・土肥 英幸 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター
環境・化学ユニット ユニット長
- ・寒川 泰紀 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター
環境・化学ユニット 研究員
- ・林 直之 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター
環境・化学ユニット 研究員
- ・小川 貴弘 新エネルギー・産業技術総合開発機構 材料・ナノテクノロジー部 主査
- ・吉岡 宏人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 材料・ナノテクノロジー部 主査

<JST>

- ・中山 智弘 CRDS 企画運営室 室長
- ・永野 智己 CRDS 企画運営室 総括ユニットリーダー/JST 研究監
- ・赤木 浩 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・荒岡 礼 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・馬場 寿夫 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・福井 弘行 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・渡邊 孝信 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
- ・伊藤 聡 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
計算科学振興財団 チーフコーディネーター
- ・岩本 敏 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
東京大学 先端科学技術研究センター 教授
- ・川合 知二 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
大阪大学 産業科学研究所 特任教授
- ・佐藤 勝昭 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/東京農工大学 名誉教授
- ・清水 敏美 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
産業技術総合研究所 名誉リサーチャー
- ・本間 格 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
東北大学 多元物質科学研究所 教授
- ・八巻 徹也 CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット 特任フェロー/
量子科学技術研究開発機構 高崎量子応用研究所 上席研究員
- ・竹内 良昭 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー
- ・長谷川 景子 CRDS 環境・エネルギーユニット フェロー
- ・岡島 博司 未来社会創造事業 探索加速型「共通基盤」領域 テーママネージャー
- ・西田 徹二 未来創造研究開発推進部 推進第2グループ 主任調査員
- ・小関 徳昭 未来創造研究開発推進部 推進第3グループ 主任調査員
- ・二挺木 克洋 未来創造研究開発推進部 推進第3グループ 主任調査員
- ・三田 雅昭 未来創造研究開発推進部 低炭素研究推進グループ 主任調査員
- ・山本 保 未来創造研究開発推進部 低炭素研究推進グループ 主任調査員
- ・中神 雄一 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 副調査役
- ・酒部 健一 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・釣田 寧 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・古川 雅士 研究プロジェクト推進部 グリーンイノベーショングループ 調査役
- ・永井 諭子 研究プロジェクト推進部 グリーンイノベーショングループ 副調査役
- ・加藤 秀之 研究プロジェクト推進部 グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・佐川 みすず 研究プロジェクト推進部 グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・佐竹 航平 研究プロジェクト推進部 ICT/ライフイノベーショングループ 係員
- ・瀧川 久美子 研究プロジェクト推進部 ICT/ライフイノベーショングループ 主任調査員
- ・千田 篤史 イノベーション拠点推進部 共創の場グループ 副調査役
- ・天野 万里 イノベーション拠点推進部 共創の場グループ 主査
- ・林 雅子 イノベーション拠点推進部 共創の場グループ 調査員
- ・空花 俊人 イノベーション拠点推進部 COI グループ 主査
- ・山中 英生 イノベーション拠点推進部 OPERA グループ 主任調査員

曾根 純一	上席フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
宮下 哲	フェロー・リーダー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
内山 浩幹	副調査役	(戦略研究推進部)
甲村 長利	研修生	(プログラム・マネージャー育成・活躍推進プログラム)
中村 亮二	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
長谷川 貴之	フェロー	(海外動向ユニット)
日江井 純一郎	フェロー	(科学技術イノベーション政策ユニット)
眞子 隆志	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
水本 邦彦	主任調査員	(研究プロジェクト推進部)

科学技術未来戦略ワークショップ報告書

CRDS-FY2020-WR-15

未来材料開拓イニシアチブⅡ

～高機能材料の創製・分離・循環を実現する階層構造の自在制御～

令和3年3月 March 2021

ISBN 978-4-88890-729-3

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

電話 03-5214-7481

E-mail crds@jst.go.jp

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

本書は著作権法等によって著作権が保護された著作物です。

著作権法で認められた場合を除き、本書の全部又は一部を許可無く複写・複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

This publication is protected by copyright law and international treaties.

No part of this publication may be copied or reproduced in any form or by any means without permission of JST, except to the extent permitted by applicable law.

Any quotations must be appropriately acknowledged.

If you wish to copy, reproduce, display or otherwise use this publication, please contact crds@jst.go.jp.

FOR THE FUTURE OF
SCIENCE AND
SOCIETY



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