

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6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」、「分子の変換・プロセス技術」、「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、それぞれで連携しながら研究開発が推進されている。分子技術は広範な技術分野に関連するものであるが、技術トピックスとしては、有機合成・触媒、有機エレクトロニクス、高分子・分子配向について重点的に取り上げる。

• 次世代元素戦略

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、有害元素や海外依存度の高い希少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している。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。最近では、単一性能の向上だけでなく複数機能の同時実現のために、複数の元素を用いることによ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）の設計技術や、材料の使用後の劣化・分解性能まで含めた元素間の結合分解制御技術の重要性が高まっている。

• データ駆動型物質・材料開発

4つの科学（実験科学、理論科学、計算科学、データ科学）を統合的に活用して、新物質・新材料開発を効果的に推進することを目的としている。新規物質・材料の設計・探索・発見を飛躍的に加速するマテリアルズ・インフォマティクスが一定の成果を示しており、今後は材料製造プロセスを最適化するプロセス・インフォマティクスや、計測・解析を効率化する計測インフォマティクスとの連携の重要性が増している。また、それらを支えるロボットによるハイスループット実験や、AI技術を活用した自律的最適化実験（Closed-Loop）など実験DXも重要な技術要素である。国内では、2022年よりデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業が開始されている。米国では、2011年開始のMGIが終了後は後継の大型プロジェクトは顕在していなかったが、2021年11月に今後5年間を想定した戦略目標 MGI Strategic Plan 2021 が発表された。その他の国々も積極的な取り組みを継続している。

• フォノンエンジニアリング

ナノスケールの微小空間、微小時間でのフォノンおよび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ことを目的としている。スピントロニクスと熱利用技術の融合分野であるスピントロニクス、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、フォノン結晶、半導体デバイス中の熱マネジメントなどが重要な研究テーマである。また、それらを支える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、熱伝導計測技術などに関する

研究が推進されている。

• 量子マテリアル

量子マテリアルは、電子やスピンの量子状態を人為的に制御することで新たな量子力学的な機能を発現する物質・材料である。グラフェンや遷移金属カルコゲナイドなどの2次元物質（原子層物質）や、キタエフ模型に代表される量子スピン液体、トポロジカル絶縁体をはじめとするトポロジカル量子物質、ナノチューブやリボン状構造の1次元材料、自己集合分子などの0次元材料も含む。ムーアの法則の限界を克服する次世代半導体の実現や、センシング及びエネルギー変換・貯蔵への応用のため、シリコンを凌駕する電荷移動度を持つ2次元物質や、非磁性の欠陥や不純物に対して電子が堅牢な輸送特性を持つトポロジカル物質が注目されている。また、2次元物質の単層シートを特定のツイスト角度で積層することによって新奇物性を開拓する研究が大きな流れになっている。

• 有機無機ハイブリッド材料

無機材料と有機材料を融合（ハイブリッド化）することで、無機材料の結晶性や頑健性にもとづく機能発現と、有機材料の柔らかさ・分子選択性にもとづく機能発現とを両立させ新たな機能を創出することを目的としている。有機無機ハイブリッドの考え方は古くから存在しその範囲は広いが、当初の「有機物と無機物を混ぜ合わせたもの」という考えから、単相物質として概念に変革され、新物質科学の機運が高まっている。無機材料、有機材料それぞれでは実現が難しい特性や材料機能が見いだされ、成形加工性や作動温度などにも注目されている。有機無機ハイブリッドペロブスカイト材料や金属-有機構造体（MOF/PCP）の研究が特に活発である。透過・分離・吸着・変換・貯蔵材料、触媒・反応性制御、構造材料、電池材料、エネルギー変換材料、ドラッグデリバリーシステム、生体適合材料、分子認識材料、電子材料などの多様な応用分野への適応が期待されている。