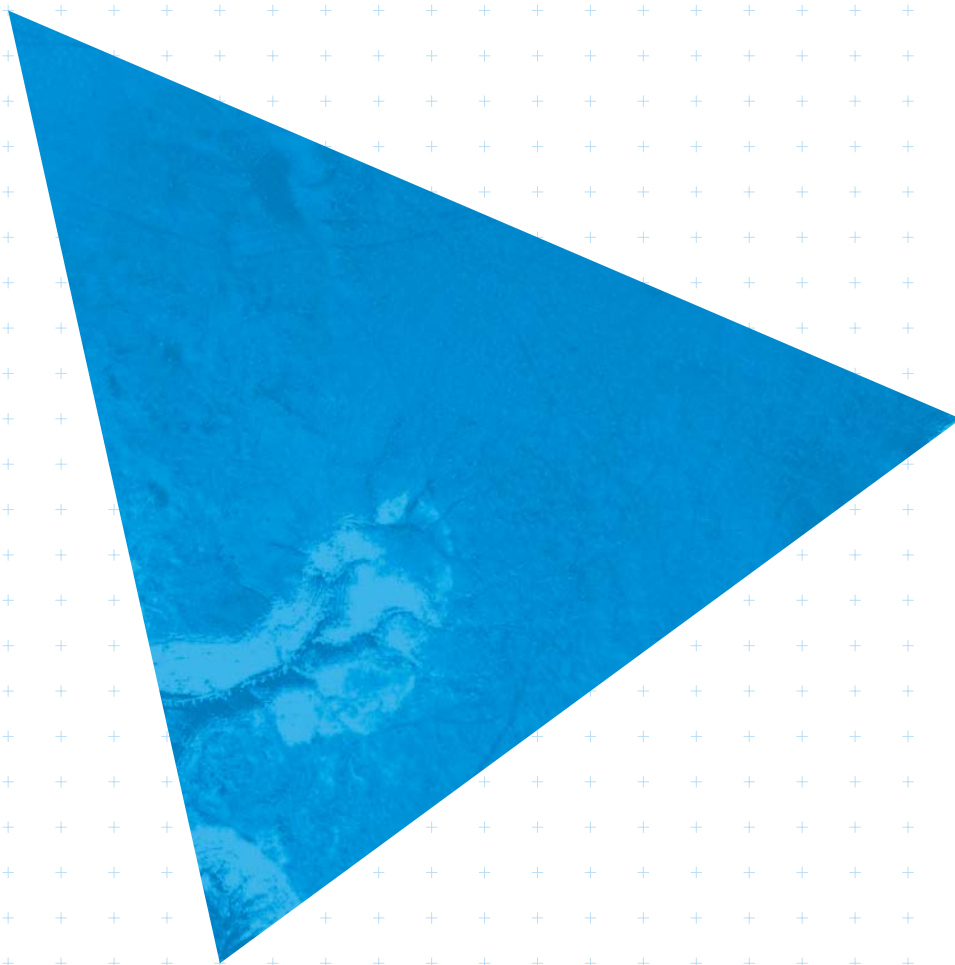


俯瞰ワークショップ報告書

# マテリアル設計の未来戦略



# 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2023年2月12日、13日に開催した『俯瞰ワークショップナノテクノロジー・材料分野「マテリアル設計の未来戦略」』に関するものである。

わが国および世界が抱える様々な社会課題を克服し、Society5.0、カーボンニュートラル、安全・安心社会を実現するには材料・マテリアルのイノベーションが不可欠であるとの認識のもと政府は2021年に「マテリアル革新力強化戦略」を発表し、基礎研究力の強化、データ駆動型マテリアル研究開発の強化、研究エコシステムの構築、人材育成の強化に向けて、現在具体的な取り組みを進めている。

当該戦略の中では今後重要となるマテリアルの技術領域例が紹介されているが、そのようなマテリアルをどのように実現するかの道筋、つまりマテリアルの所望の機能を開拓させるための材料科学的な設計指針・制御手法は必ずしも明らかではない。「マテリアル設計」に関するサイエンスの新局面を切り拓き、日本発の大きな研究コンセプトを世界に発信することは、今後材料科学における日本の存在感を高めるのに引き続き重要であると考えている。

このような経緯から、CRDSでは「機能と物質の設計・制御」という観点から今後の研究の展望を検討するワークショップを計画した。本ワークショップでは、5つの分科会を設置して、日本で生まれつつある萌芽的な研究開発動向を俯瞰し、そのような研究開発動向の融合や上位概念の構築により、材料科学や材料設計指針の新潮流を生み出すことを目的とした。

本ワークショップでの議論の結果、大きく分けて以下の3つの材料開発の方向性が得られた。

- (1) 材料機能の発現状態の把握・定量化や材料合成プロセスの可視化によるマテリアルズ・インフォマティクスやプロセス・インフォマティクスの深化
- (2) 複雑物質中のみだれの体系化や非理想界面の理解にもとづく材料設計
- (3) 未踏の極限環境（ラストフロンティア）材料を実現するための機能の時空間制御

これらの方向性を実現するためには、材料開発を支える計測技術、データ科学、理論・計算、合成技術の進展を欠くことはできない。さらに、そのような先端的な研究インフラへと容易にアクセスできるような体制整備も併せて求められる。

以上の方向性は、みだれの制御、界面設計など材料科学の王道的なアプローチも含まれているが、計測技術やシミュレーション技術などの進化によって今後ますます精緻化し、材料科学に新たな局面をもたらすことが期待される。

これらの結果は、CRDSでさらに検討を加えて、今後国として重点的に推進すべき研究領域、具体的な研究開発課題の検討に活用していく予定である。



## 目次

---

<b>1</b>	<b>趣旨説明</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>分科会討議結果報告</b> .....	<b>3</b>
2.1	みだれでつくる「理想マテリアル」 ～みだれを制するものは機能を制する～.....	3
2.2	Hidden Parameters! ～隠れたプロセスパラメータの定量化に基づく 材料・デバイス開発.....	9
2.3	遷移マテリアル.....	14
2.4	動的非理想界面の理解・制御と利活用～未踏界面戦略～.....	18
2.5	ラストフロンティア開拓のための多変数制御マテリアル戦略.....	23
<b>3</b>	<b>討議結果を受けての今後の展望</b> .....	<b>26</b>
<b>付録</b>		
付録 1	開催趣旨・プログラム.....	29
付録 2	参加者一覧.....	30



# 1 | 趣旨説明

沼澤 修平 (JST-CRDS)

本ワークショップでは、CRDSが作成する俯瞰報告書ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰図における「機能と物質の設計・制御」領域の国内外の研究状況・動向を把握するとともに、今後国として材料科学をどのように推進していくべきか、新しいコンセプトやテーマを生み出すことを目的としている。

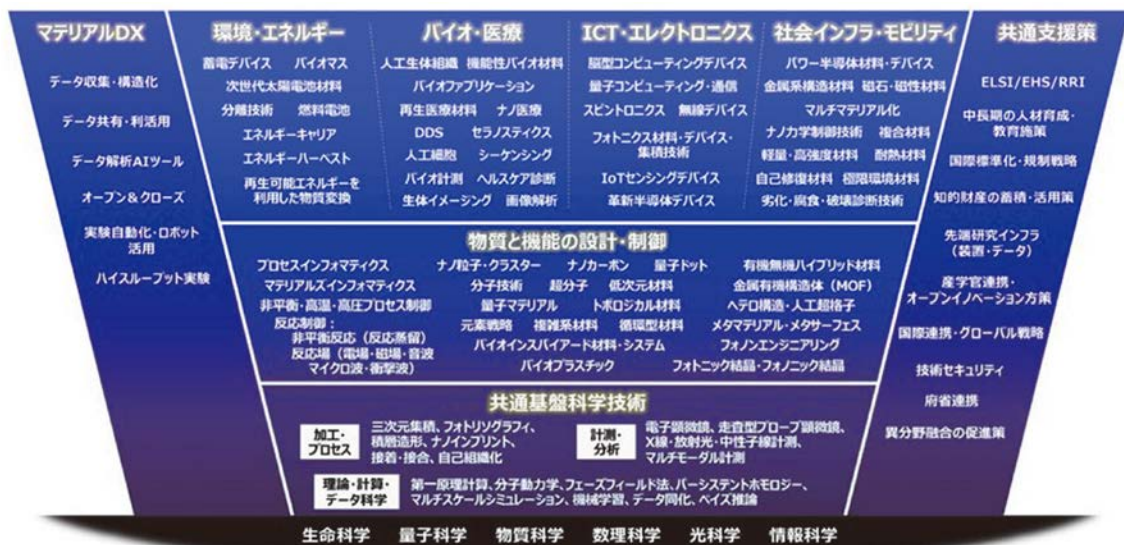


図 1-1 ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰図 (2023年版)

図 1-1 は俯瞰報告書 2023 に掲載している俯瞰図であり、CRDS がナノテクノロジー・材料分野をどのような構造で把握しているのか、ということを一枚の図に表したものである。一番下に基盤となるサイエンスや基盤技術があり、上位には環境・エネルギー、バイオ・医療、ICT・エレクトロニクス、社会インフラ・モビリティと、各応用領域で重要な材料・デバイスを挙げている。その中間層として、「物質と機能の設計・制御」という領域を掲げ、物質・材料に所望の機能を発現させるための設計指針や材料科学として新規性や重要性の高い特徴的な物質群を挙げている。この領域は、材料科学のサイエンスとしての新局面を切り拓き、将来的にわが国の産業に貢献しうる領域として重要であり、継続的にわが国発のコンセプトを発出していくことが必要であると考えている。

2021年に政府から「マテリアル革新力強化戦略」が発表された。当該戦略では、①産学官共創による迅速な社会実装、②データ駆動型研究開発基盤の整備、③持続的発展性の確保、を基本理念に掲げ、その実現に向けた各種施策が推進されている。特に、基礎研究フェーズとしては、データ駆動型材料開発の基盤整備としてのマテリアルDXプラットフォームの構築や、社会的・経済的インパクトの大きい応用技術領域での研究開発の強化において具体的アクションが進められている。

一方で、データ駆動型材料開発をより実りあるものにするためにも、多数の重要な応用領域での材料創出を加速するためにも、「物質と機能の設計・制御」の役割はより高まっていると考える。他国と比較して、必ずしも研究者人口の伸びが大きいなかで、むしろ個別の応用領域での最適化研究ではなく、各応用領域

に波及効果をもたらす新たな材料設計指針の構築こそが日本のマテリアル革新力強化に重要であると考えている。

そこで、本ワークショップでは、「物質と機能の設計・制御」という観点を中心に、ナノテクノロジー・材料分野の研究開発に広くインパクトを与える新たなコンセプトや今後取り組むべき研究課題について議論を行う。そのために、ご参加の先生方には5つのグループに分かれてグループ討議を行っていただく。各グループはできるだけ異なる専門性を持つメンバーから構成されるようにした。異分野での議論を通じて、共通のボトルネック課題の抽出やバックキャスト議論の中から、あまり近視眼的にならずに長期的に取り組むべきようなアイデアを期待したい。

## 2 | 分科会討議結果報告

### 2.1 みだれでつくる「理想マテリアル」 ～みだれを制するものは機能を制する～

Aグループ

三浦 正志 (成蹊大学)

石割 文崇 (大阪大学)

中島 祐 (北海道大学)

名村 今日子 (京都大学)

我々は、理想的な特性をもつ材料を「理想マテリアル」と名付け、理想マテリアルを実現する手段として「みだれ」に着目した。みだれを制御することで、本来の物性を超えることができると考えている。まさに、みだれを制するものは機能を制する、というコンセプトである。

このコンセプトにたどり着く前には、いろいろとブレインストーミングを重ねた。最初は界面に着目してみたもののありきたりすぎるのではないかといった紆余曲折を経ている。みだれの制御という観点は、過去のCRDSのワークショップで議論されていたようであるが、そこではどちらかといえばみだれや欠陥をなくす方向での議論が中心であったようであり<sup>1</sup>、今回は、みだれを利用して積極的に機能を生み出すという方向で議論を行った。

みだれの制御が必要な背景をいくつかの材料系を例に紹介する(図2-1-1)。1つ目は超伝導材料である。超伝導材料においては、臨界温度と呼ばれる超伝導状態になる転移温度がよく議論される。ただ、実用的には超伝導状態を保ったまま流せる電流量の上限である臨界電流密度を高めることが必要である。しかしながら、現状では多くの材料系において、臨界電流密度は、臨界電流密度の上限値である対破壊電流密度の10%程度にとどまっている。この原因の1つとしては、例えば外部磁場や実効磁場が存在する場合に、超伝導状態中に存在する量子化磁束が電流と磁場によるローレンツ力で運動してしまうため、超伝導状態が破壊されるといった機構が知られている。したがって、超伝導材料を理想的な状態に持っていくには、量子化磁束がローレンツ力で動くのを制御する必要がある。

1 CRDS俯瞰ワークショップ報告書ナノテクノロジー・材料分野 区分別分科会「機能と物質の設計・制御～材料科学の未来戦略」4.2節 (<https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2019/WR/CRDS-FY2019-WR-01.pdf>)



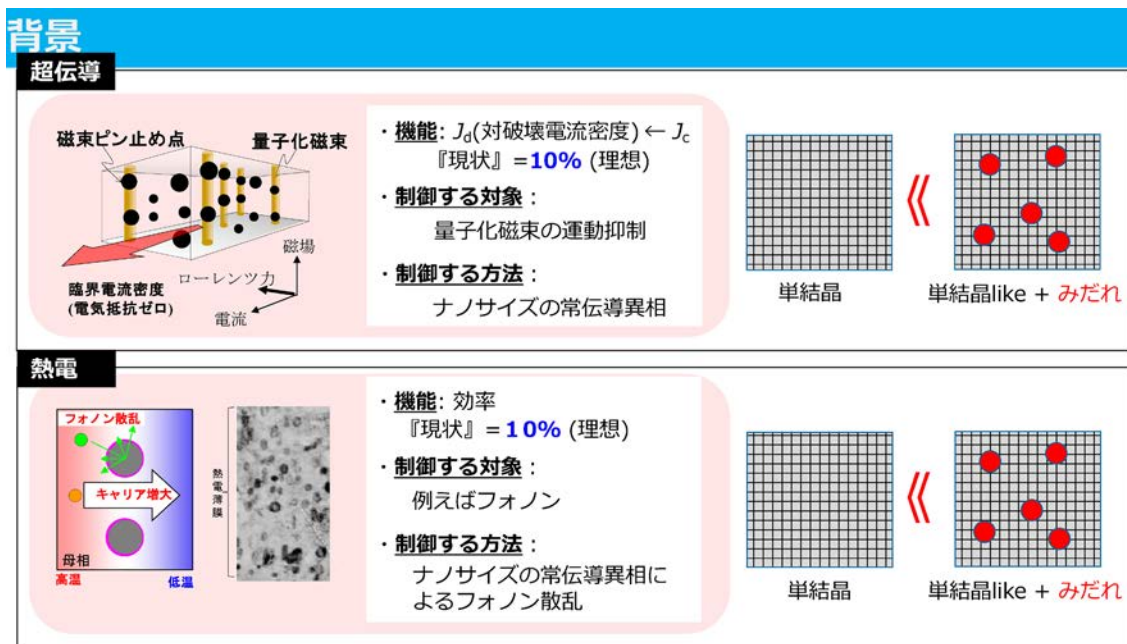


図 2-1-1 理想マテリアルが求められる背景

その制御手法として、これまでではできるだけ理想的な結晶構造や単結晶状態をめざす、つまり欠陥をなくせばよいという方向で研究が進展してきたが、近年ではある種の乱れを導入することによって機能が高まることが知られている。つまり、第1フェーズとしては単結晶的な状態に近づける必要があるが、その先の理想的な機能を追求するには、第2フェーズとしてみだれを利用する必要があると考えられる。

熱電材料についても同様のことがいえる。変換効率の高い材料をつくるには、ある温度差を与えたときに、電荷キャリアは流さず（電気抵抗が高く）、フォノンは散乱させなくてはならない（熱伝導率を低くする）。熱電材料の場合には、粒界を制御することによってこのような要求を満たすことが多いようであるが、こちらの例でも理論上限と実効的な変換効率には大きな乖離がある。熱電材料の場合にも、粒界というある種のみだれをうまく制御することが求められている。

ここまでみたように、我々はみだれをうまく制御することが求められている。改めてみだれとは何かについて考えると、厳密な定義を与えることは難しいが、材料の不均一性、ひずみ、ディスオーダー、界面、非平衡性、時間的な乱れ、といったキーワードがあげられるだろう。むしろ、このようなキーワードから改めてみだれとは何かを体系化し、良いみだれと悪い乱れを選択するための「みだれ学」が必要だと考える。そして、良いみだれを積極的に使って理想マテリアルをめざしていきたいと考えている。

図 2-1-2 に示すようにみだれ学の構築にあたっては、先ほども述べたように第1フェーズとしては、新材料があったときにできるだけみだれをなくし、その特性を十分知ることが必要だと考える。その過程で良いみだれと悪いみだれの素性がみえてくるだろう。そのうえで、第2フェーズとして、良いみだれを積極的に取り込んでいくのが賢い戦略だと考える。

## 『理想マテリアル』に向けたアプローチ

### 「みだれ」の制御

- ・「みだれ」とは何か。均一の「仮想的」な材料以外には全て「みだれ」が存在。  
= 不均一性、ひずみ、ディスオーダー、界面、非平衡、時空間的乱れ、など。
- ・「良いみだれ」と「悪いみだれ」の分類および、共存、体系化 → 「みだれ学」の整備
- ・「悪いみだれ」をなくし、良い「みだれ」をつくることで、素材本来の物性を実現（理想物性の実現）、もしくは本来の物性を超越

**First Stage :** 新規物質に関しては「悪い（とされている）みだれ」無くつくること。

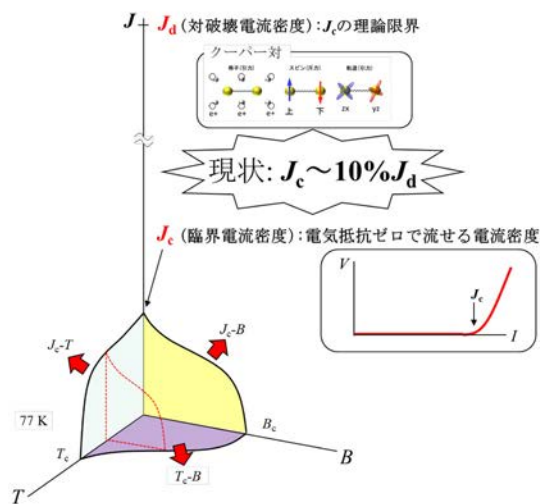
**Second Stage :** Establishされた物質に関しては「良いみだれ」をあえてつくり込むことで、それぞれの材料の持つ物性の超越を目指す。

図 2-1-2 理想マテリアルに向けたみだれの活用

ここからは、いくつかの材料系に対して具体的なアプローチを述べる。

まずは超伝導材料である（図 2-1-3）。超伝導材料においては臨界電流密度を高め、それには量子磁束の動きを抑制する必要があると述べた。ここでの戦略は、理想的な母相に対して人工欠陥のようなみだれを入れていくことである。母相中に常伝導状態のみだれを入れることによって量子化磁束をピン止めすることができる。さらに、伝導面へのキャリア注入によって機能を向上させることができる。

## 理想マテリアル(超伝導): 本来の「臨界電流特性」を実現し、超える



### 「みだれ」による理想超伝導マテリアル戦略

主成分(超伝導母相) + 人工欠陥(量子化磁束運動抑制)

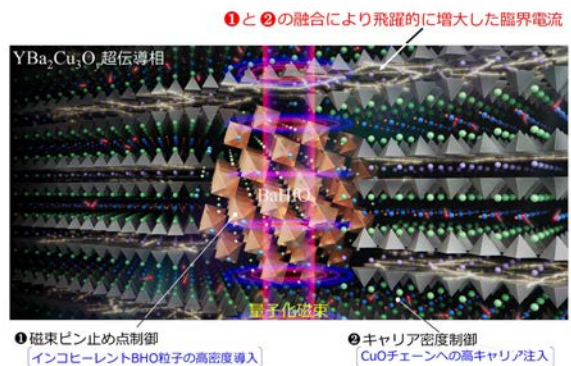


図 2-1-3 超伝導材料を例にした理想マテリアルへのアプローチ

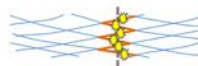
次は構造材料の観点からである(図2-1-4)。材料が強くなるというのは非常によいことで、強い材料があれば車など様々なものをもっと軽くすることが可能である。基本的には材料に対して理想強度というものがある。たとえば高分子網目の理想強度は、ひも1本の強度×密度というように評価できて、実際に計算すると非常に強いことが知られている。ゲルにおいても理想強度は金属と同程度と言われている。しかしながら、実際の材料では理想強度の1,000分の1ぐらいの強さしか得られていない。

**理想マテリアル(構造材料編): 素材の本来の「力学特性」を実現し, 超える**

材料の強度向上 ⇒ 高信頼性、省材料化(薄肉化) 社会的インパクト絶大

素材の理想強度(均一材料の強度) : 計算によって算出可能

実在バルク材料の強度 : 理想強度よりはるかに低い(例えば1/1000)  
これは高分子網目のみならず、多様な構造材料に共通の問題



cf. 高分子網目の理想強度 : 1本の強度×面密度

なぜなら、材料には必ず欠陥が存在し、そこから破断(表面、材料内の不純物・ゴミ、不均一性、転位(結晶の場合)…)

**「みだれ」による理想構造マテリアル戦略**

硬い主成分 + 伸長する(破壊を止める)第2成分

硬い主成分の欠陥からの破壊を、第2成分が抑える  
⇒硬い成分の理想強度に近づく!

(DNゲルの場合: 0.1%⇒4%)  
⇒さらに破壊靱性は、素材本来の特性を超える!  
(DNゲルの場合: 10-100 J/m<sup>2</sup>⇒5000 J/m<sup>2</sup>)

この話は、金属からゲルまで  
様々な材料で適用可能であることを見出しつつある  
(さきがけ ナノカ学内の研究会で議論中)

- 課題:
- ・各素材において、どのような第2成分が効果的か?
  - ・第2成分が破壊を抑えるメカニズムは?

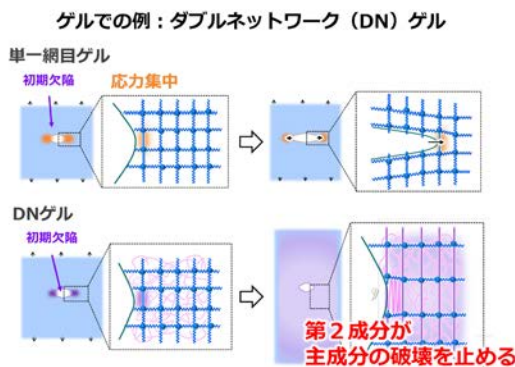


図2-1-4 構造材料を例にした理想マテリアルへのアプローチ

なぜこのようなことが起こるかという、材料には必ず欠陥があり、これは理想から少し外れた状態である。材料内や表面の不純物・ごみ、不均一性といったものが知られており、そういうところに力がかかってしまうことが原因である。では、それに対してどう対処するか。完璧なものとはできないので、あえてみだれを入れて、この限界理想値に近づけるというアプローチがある。そのために、硬い主成分にあえて、みだれとして柔らかい2成分目を入れる。これによって、硬い材料が欠陥から壊れることを防いでくれるという効果が得られる。このような効果を取り入れたダブルネットワークゲルでは、強度が硬い成分の理想強度の4%ぐらいにまで向上している。

このような方法論はゲルだけにとどまらず、金属など様々な材料系に展開できそうな感触を得ている。しかし、どういうみだれがよいのか、どのような第2成分をどれだけどのように入れればよいのか、あるいはなぜ強くなるかという点についての知見が不足しており、分野を超えて議論していく必要があると考えられる。



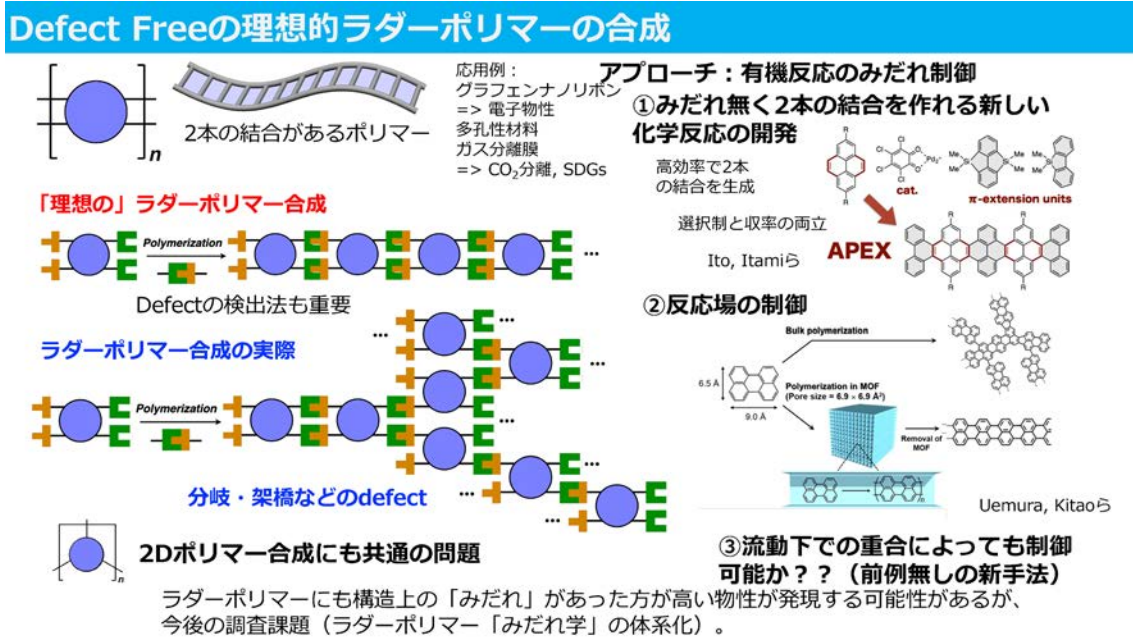


図2-1-5 高分子材料を例にした理想マテリアルへのアプローチ

もう1つ高分子材料の観点からラダーポリマーの事例を紹介する (図2-1-5)。ラダーポリマーとは、通常のポリマーにおいてモノマー間が1本の結合でつながっているのに対し、2本以上の結合でつなげた材料である。これにより、例えば通常の高分子よりも硬いといった性質が得られる。また、 $\pi$ 共役系のモノマー同士をつなげるため、高い電子物性やガス分離機能を発揮できると期待されている。理想的には2本の結合がはしご上につながるとよいが、合成の都合で分岐してしまうというのが現状である。ラダーポリマーは非常に新規な材料なので、まずは理想状態に近づけていくことが求められる。

有機反応のみだれ制御という観点ではいくつかのアプローチが考えられる。1つ目は、みだれなく2本の結合を作るとような新規反応の開発である。2つ目は、反応場の制御であり、近年MOFという多孔質材料を反応場として高分子材料を作るという手法が注目されている。3つ目は、流動場の下で作るなど、より革新的なプロセス開発もありえるだろう。これらの手法によって、理想的なラダーポリマーをまず作り、それに対してみだれによる機能向上を体系的に図っていく。

最後は流体の観点からである (図2-1-6)。流体はそもそも非常にみだれた構造を伴うことが多く、例えば流体を使った冷却などでは混相流が使われており、水や泡が入り乱れることによって熱を運んでいる。このような熱伝達の理論限界は古くから調べられており、みだれを秩序化することで達成されると言われている。蒸発という現象を考えると、温かい面があってそこからぶくぶく泡が出るというよりも、蒸気の噴流が一定間隔で並ぶような構造を作ることによって理論限界が高まると言われている。流体についていえば、みだれが常用されている上で、どうやって秩序を作っていくかという観点が重要となる。ではこのみだれの秩序化をどう行うのか。1つのアプローチとして、流体の中に撥水性のワイヤやナノワイヤを設置することで気液界面を設計すると、界面での物質の動きやすさなどを利用して既存の限界を突破できるのではないかと考えている。このような材料やデバイスのデザインによって理想状態へと近づいていけるだろう。

## 限界熱流束とみだれ

### 流体はみだれとともにある

流体を使った冷却では元々混相流が扱われている。  
→次空間的なみだれを活用して熱を運んでいる。

### 限界はみだれの秩序化で記述される

秩序化された理想的な気相構造があるときに運ぶことのできる限界の熱量

→Zuberモデル( $\sim 10^6$  W/m<sup>2</sup>)

沸騰熱伝達には蒸気流の安定性に関する限界が存在する。  
これが流体で熱を取り去ることによる限界を決めている。

### みだれの秩序化を制するものは熱流体を制する

流体中のみだれを制御することで限界を突破する。  
( $> 10^7$  W/m<sup>2</sup>)

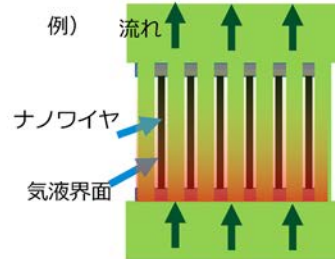
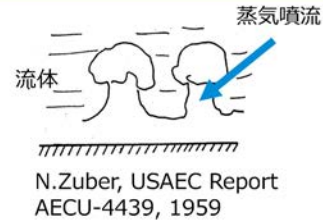


図2-1-6 流体と例とした理想マテリアルへのアプローチ

最後にここまでの議論をまとめる。図2-1-7は我々のみだれ学のロードマップである。従来の限界を突破したいという意気込みで、下から上に進む図とした。みだれ学には、2つのステージがあって、第1の壁、第2の壁がある。そして、その壁を越えたところにある真の理想マテリアルに到達したい。

現状は、みだれの無い理想的な状態を作れないので、我々は本来到達できるはずの目標からかなり下に位置している。それをまず一旦超えて、みだれの無い状態や理想物性に近いところまで到達する、これが第1段階である。さらに、その後、みだれをうまく設計することで、第2の壁を超えて、当初描いていた理想を超えた材料を作っていこう、というのが理想マテリアルである。このコンセプトは様々な分野で共有できるはずなので、多くの皆さんとみだれ学を展開していきたい。

## みだれでつくる理想マテリアルが魅せる未来

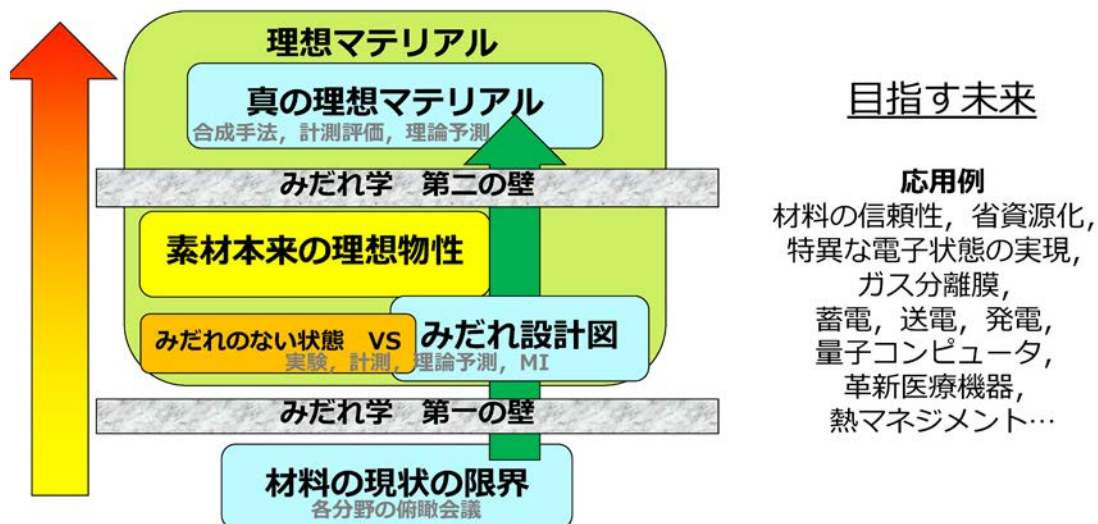


図2-1-7 理想マテリアルとみだれ学の構築

## 2.2 Hidden Parameters!

### ～隠れたプロセスパラメータの定量化に基づく材料・デバイス開発

Bグループ

藤井 幹也 (奈良先端科学技術大学院大学)

富永 依里子 (広島大学)

小林 玄器 (理化学研究所)

仁科 勇太 (岡山大学)

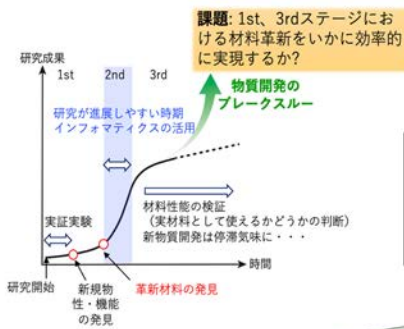
横田 紘子 (千葉大学)

我々はキャッチコピーを「Hiddenパラメータズ」とした。2.3の発表とは、多少の見方の違いや表現の仕方の違いはあるものの、共通部分も大きいと感じる。我々が日々抱える問題意識や手が届かないなど思っているところに共通する部分があることの現れだろう。我々は、材料そのものも大事であるが、プロセスパラメータ、つまりプロセスとしてどうやって材料を作るかに議論が行くことが多く、このコンセプトにたどりついた。

### 課題

#### 顕在化している材料開発の課題

##### □ 革新材料の創出に要する時間と手間



##### □ 基礎研究と実用・量産の乖離

- ・新物質の発見
  - ・デバイス性能の革新
- ? -----> 実用化
- スケールアップ  
製造プロセスの刷新  
環境調和、コスト

- ・反応物と生成物は特定できるが、その途中がわからない (合成過程を制御できていると思いつているが、実はできていない)
- ・デバイス製造における材料・プロセス変更の影響が不明
- ・データの定義が未開拓 → データ科学を活用できない

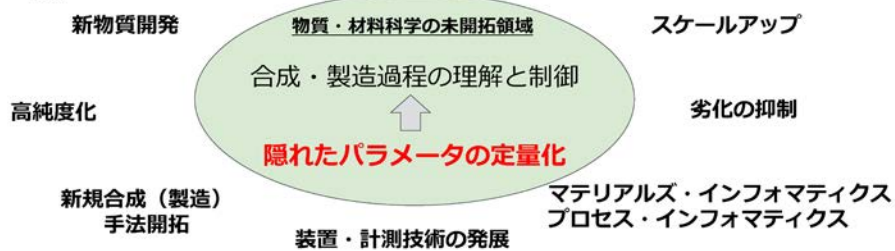


図 2-2-1 顕在化する材料開発の課題

今、我々が直面している材料開発の課題というのは、やはり時間がかかることだと考えている (図 2-2-1)。材料の探索範囲の広さもあるし、実用化にたどりつくまでにも時間がかかる。ラボスケールで作っているときも、なかなか成果が上がらない時期があるし、仮にすごく新しい材料が発見されたとしても、スケールアップ等の段階でもやはり停滞の時期があるというのが我々の感覚である。近年インフォマティクスの活用が進もうとしているが、本質的に理解しきれていないところではあまり革新的な成果はうまれないのではないかというのが問題意識である。

具体的に述べると、我々は材料合成における反応物と生成物の静的な関係はデータも入手しやすいので、



それらのデータについては解析が進みつつある。一方で、合成の過程の物質の状態については、まだまだよく理解できていない点が多いと感じている。合成過程を制御できていると思っているようで、不十分な点が多いと考える。

これは材料だけではなくてデバイス製造でも同じで、デバイス製造のプロセスを変更しようとか、材料を変えようとしたときに、その影響が分かり切らない。したがって、プロセス開発、プロセスの効率化がなかなか進まない。分からないので、データ科学を使ってみようとするわけだが、どのデータを使えばよいかなど、データの定義ができないという問題が現場で生じていると感じる。

この問題を解決するには、何か隠れたパラメータを定量化する必要がでてくる。隠れたパラメータというのを見つけるだけではなくて、それを定量化するからこそインフォマティクスにも活用ができる。それによって、新物質開発やスケールアップにつながっていくと考える。この定量化に必要なのは、合成装置と計測技術の発展だと考えている。

これは隠れたパラメータの具体例である（図2-2-2）。たとえば、ラボレベルである生成物が100ミリグラムほど既知のパラメータを基に合成できているとする。ただ、スケールを大きくしたときに既知のパラメータだけだと、何か違うものができてしまうという状況がしばしば起きる。これはスケールが変わった時に実際の合成過程が何か違うことを表している。例えば温度を同じに設定しているはずなのに、実際に起きていることは違っており、そこに隠されたパラメータがあるはずである。生成物を解析してただけでは、この隠されたパラメータは簡単には想像ができないため、その探索には人間の知識、理解の仕方をアップデートしなければいけない。そのために必要なのが、合成過程の計測であろうと考える。

ここに参加している多くの研究者が、同じ合成条件のはずなのに生成物が異なる、あるいは実験者が異なると生成物が異なるということを多く経験されているだろう。このような事象に対して、機械学習として既知のパラメータを入れて、どんな目的関数を持ってこようとも、生成物の予測はできない。今のインフォマティクスの限界があると感じている。そこで、隠れたパラメータを入れることによって、インフォマティクスの生成物の予測もしやすくなるし、逆解析と呼ばれる技術を使えば、既知のパラメータと隠れたパラメータ両方の条件の最適化ができるようになるだろうと考えている。ここからはいくつかの材料系において例をあげていく。

## 隠れたパラメータ

スケール	合成条件	合成過程計測	生成物
小 (100 mg)	既知パラメータ		
中 (100 g)	既知パラメータ		
中 (100 g)	既知パラメータ 隠れたパラメータ		

生成物解析のみでは隠れた合成パラメータの存在が不明  
 同じ合成のはずだが生成物が異なる  
 実験者が異なると生成物が異なる



生成物=F(既知パラメータ)  
**生成物予測不可**  
 今のインフォマティクスの限界

生成物=F(既知パラメータ、**隠れたパラメータ**)  
**生成物予測可能**  
 合成条件=F<sup>-1</sup>(生成物)  
**合成条件最適化**

図2-2-2 隠れたパラメータ (図版提供：名古屋大学 小橋 眞 教授)

まずは有機系を考える(図2-2-3)。有機系において典型的に制御が可能なパラメータというのは、原料、溶媒、触媒、開始剤の量・種類、反応時間・反応温度といったものがある。このようなプロセスパラメータを中スケールで制御し、小スケールの場合とどのような違いが生じるかを確認する。合成過程にどのような違いが生じているかを理解したいため、in-situ分析や放射光による先端分析を活用することが求められる。このような合成過程の理解が進むと、隠れたパラメータの発掘につながるだろう。反応の開始点はいつなのか、副反応はどのタイミングで生じ、さらにはどのように暴走や反応停止に至るのか、という理解に役立つであろう。

中スケールと小スケールの違いを理解するのに必要なパラメータは必ずしも当初想定していたものだったり、簡単に操作できたり測定可能なものとは限らない。例えば露点が必要なのかかもしれないし、合成途中のプロセスとプロセスの間の時間だったりするのかもしれない。実はこのような時間が見えない劣化を引き起こしている場合もあるし、そういう現象を見える化する技術を作る必要があるだろう。

さらにはこれを大スケールにも持っていきたい。大スケールに持っていくときは、装置を新しく作る必要がある。防爆設備であったり、大量のセンサーを導入するなど、スケールを変えるとやはり装置も変わってくる。最近ソフトセンサーという技術が注目されているが、そのようなAI技術との連携も必要となってくるだろう。

無機材料についても、同様の不自由が存在するのではないだろうか。例えば、固体を固相法で作るとしたときに、本当に混ざっているのか、いつ固体と固体が熔融を開始するのかなどわからないことが多い。電気炉の中の熱分布等をシミュレーションすることはできるが、それが本当にリアルなのかどうかは分からない。実際に見られないから、シミュレーションしようというサイエンスの流れだったわけだが、ここでもう一度計測のほうに引き戻してあげないといけないと考える。これは、単結晶成長、粉碎過程、デバイス製造過程、色々なものに共通するだろう。

## 技術：溶液系（有機・高分子材料の合成）

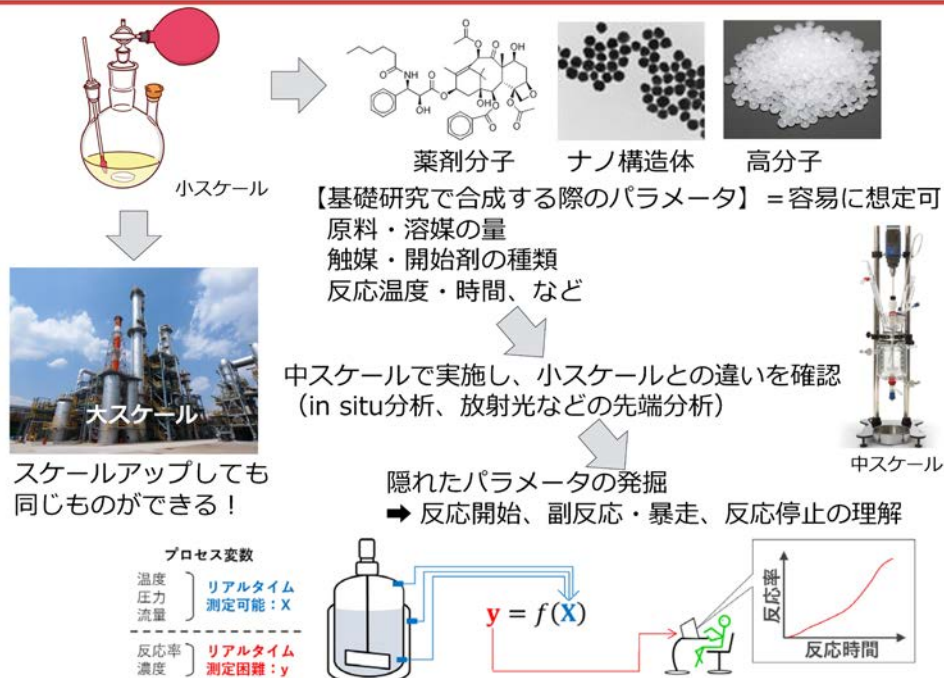


図2-2-3 有機系における隠れたパラメータ



## 波及効果

同じものを作るにも作り方は複数あり、それぞれの作り方で生成物や機能が異なる

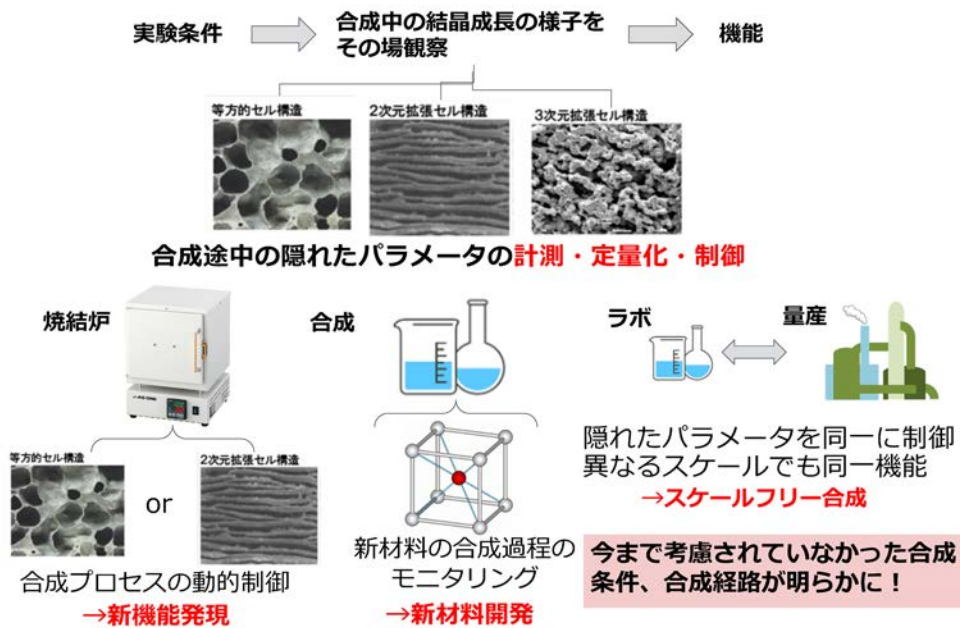


図 2-2-4 波及効果 (図版提供：名古屋大学 小橋 眞 教授)

したがって、今後重点的に開発すべきはオペランド計測を行える装置開発ではないだろうか。それによって、計測過程のシミュレーションと実験が一体化して進めるようになる。それによって、どういうことが起きるようになるかということ、例えば焼成炉の中で何が起きているかが見えるようになるので、その過程をダイナミックに制御して、生成物の作り分けができるようになる。また、新材料発見においても、結晶成長が始まっていく様子であるとか、分子の反応の進行過程がモニタリングできることによって、材料開発が促進されるだろう (図 2-2-4)。

ラボスケールと量産スケールをつなぐという観点でも、隠れたパラメータを見つける、隠れたパラメータを同一に制御するということ、異なったスケールでも同一機能が出るようなスケールフリーの合成ができるようになるというのを考えている。

このようなことを実行するのにどういう体制が必要かという点であるが、材料、計測、計算科学の研究者たちが力を合わせる必要があるだろう (図 2-2-5)。ただ、やはり我々は材料科学者として、材料開発を早くしたいとか、スケールフリーに予測が可能な機械学習技術を使いたい、といったニーズが高いと考えると、シーズ段階で産学マッチングをより強化する機会がもっとあってもよいと考える。

合成・計測を同時にやるような装置が重要になるという観点では、装置メーカーとの連携が必要になる。インフォマティクスに携わってきた経験としては、計測装置、計測制御ソフトの自動化は本当に重要な要素で、装置メーカーとの協働が求められる。今まで人が行ってきたタスクをできるだけ機械ができるようにし、人が本当に取り組むべきところは何かを戦略的に切り分けていくことが今後は求められるだろう。

では人は何に取り組むべきか、どういうキャリアパスを進めば良いのだろうか。例えば計測をやりたいと思っている人がいたとしても、現在は大学や国研に運用や保守をしてくれる体制が充実しているとは言い難いところがあり、プロジェクトが終わると装置が使われなくなってしまうという状況も見受けられる。せっかく新しい合成手法や計測手法と併せて装置を開発したとしても、このような状況になってしまうことは大きな損失である。

そこで、大学の技術職員の方々がもっと活躍できるキャリアパスをきちんと考えていく必要がある。たとえ

ばシニアの技術職員としてキャリアを磨けるとか、さらにはマネジャーになっていくといったキャリアを整備すべきだろう。

また、研究環境としては、合成とデバイスの共同利用体制を構築したい。つまり、手軽に合成やデバイス作成を可能な組織があると研究が進むだろうという構想である。計算は共用の計算センターが整備されたことによって非常に民主化した。計測もナノテクプラットフォームやARIMで非常に使いやすくなった。合成に関しては、計算、計測に比べるとまだまだ共用施設が少ないという印象である。合成に関して共用施設が整備され、気軽にアイデアを試せる環境があると研究が加速するだろうと考える。

## 組織



図 2-2-5 今後必要な組織・推進体制

## 2.3 遷移マテリアル

Cグループ

星野 友 (九州大学)

桂 ゆかり (NIMS)

牧浦 理恵 (大阪公立大学)

鈴木 康介 (東京大学)

矢野 隆章 (徳島大学)

我々は「遷移マテリアル」というタイトルで発表する。

まず我々がこのテーマを選んだ背景を述べる (図2-3-1)。近年計算速度の飛躍的な向上、機械学習技術の発展、さらに計測技術の進歩によって、材料開発のスピードが飛躍的に向上している。今日このワークショップに参加している方の中にも、マテリアルDXであるとか、データ駆動型材料開発関連のプロジェクトに参画されている方も多いただろう。

### 背景

計算速度の飛躍的向上や機械学習技術の発展、計測技術の進歩により材料開発のスピードが飛躍的に向上している。しかしながら、材料が本質的に有する時空間的な不均一性のため材料が機能を発現する瞬間『遷移状態』を正確に計測ことは現時点では不可能である。そのため、計算科学や機械学習にて得られる結果は、実験的な裏付けが不十分で、結局は人海戦術による材料合成と実験的な機能スクリーニングが材料開発の律速となっている。

我が国が材料分野で世界をリードし続けるためには、材料が機能する瞬間『遷移状態』を正確に実測し、これを説明する新たな理論を構築した上で、計算科学や合成技術、分子技術を駆使して高速に材料を設計・合成・操作する戦略が必要となる。

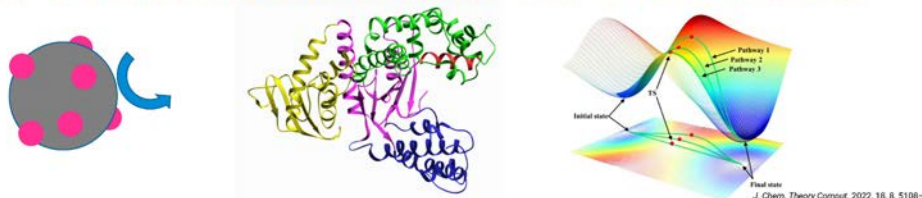


図2-3-1 遷移マテリアルの必要性

しかし、材料は本質的に時空間的な不均一性を有しており、これが存在するがために、材料が機能する瞬間を正確に捉え切れていない。我々はこの材料が機能する瞬間を「遷移状態」と呼ぶこととする。遷移状態を正確に捉えて計測することは、現在、技術的にできていない。技術的にできていないため、データも存在しない。データが存在しないため、計算科学や機械学習にも限界があるという現状である。今様々なプロジェクトでマテリアルインフォマティクスが進行しつつあるが、まだ人海戦術による材料合成と実験的な機能スクリーニング、この繰り返しによって材料を開発しようというのが現状だと認識している。

こういった人海戦術に頼った戦略は、今後我が国が取るべき戦略ではないと我々のグループは考えている。日本がこれまで築いてきた材料分野の技術開発で世界をリードし続けるためには、材料が機能する瞬間である遷移状態をまず正確に実測する技術を開発し、この実測データに基づいた理論構築を行い、さらには計算科学や合成技術を駆使して、高速かつ高効率に材料を設計して、さらにそれを操作することが必要になると考える。



図2-3-2に幾つかのイメージを示しているが、左はたとえば触媒材料、光触媒をイメージしている。ある組成で混ぜるとこのような構造ができ、そのときの機能はこうであるという説明がたくさんなされてきた。しかし、不均一な材料の中のどの場所で反応が起きてるかというのは、まだ実測できていない。さらに、反応が起きる瞬間に、その場所で材料がどのように変化してるのか、電子状態、空間的な構造、そのあたりも未解明のままである。我々はきっとこうなっているだろうという仮説を提示しているが必ずしもそれを検証できてはいない。

また、図中央は生体触媒であるたんぱく質を示している。たんぱく質は反応の過程で構造がどのように変化するか、かなりの解像度で観察できるようになっている。ただ、それでも、A構造とB構造という静的な構造は完全に観察できるが、その間に一瞬現れる遷移状態は見ることができていない。したがって、構造が変化している間の一番大事な部分はわかっていない。

このような不完全なデータに基づいて、我々は理論化学を駆使して、おそらくこのルートで反応は起きるだろうとか、この構造を経由してるんだろうというのを推測しているにすぎないというのが現状である。データが存在しないと、この計算や推測が正しいかがわからないため、我々は計測技術をどんどん進化させて、正確に、なるべく遷移状態に近い瞬間を捉えることで、この計算の精度を上げていく。さらに、最先端の合成技術を駆使して、最も効率よく反応や遷移状態を経由させるようなマテリアルを設計、合成していくといったことを考えている。

このような遷移状態をきちんと理解・制御したマテリアルは、持続可能な社会の実現など色々な価値を創出するためのキーマテリアルになると考えている。例えば、先ほどの光触媒や燃料電池用の触媒は不均一であり、どの場所でどんな遷移状態を経て反応が起きてるかというのを分からないまま、材料を混ぜて合成してスクリーニングするという現状である。それに対して、遷移状態をきちんととらえこの場所でこのような変化が起きることが重要であるといった情報に基づいて材料設計、合成することができれば、エネルギー変換の高効率化が得られるだろう。

また、電池においても同様で、電池の特性にはキャリアの貯蔵速度、脱着速度、放出速度が大事となるが、その速度を支配するのは、やはり遷移状態である。どの過程が律速であるか、その律速段階の構造、状態はどのようなものかを観察し、その障壁を下げるための材料開発が求められる。これによって高効率なエネルギー貯蔵マテリアルが実現できる。

また、CO<sub>2</sub>分離などが注目されていることもあり、分離技術の重要性も高まっている。分離においても同様に、効率的な分離には選択性だけではなく、速度が大事となる。速度を支配する遷移状態、一瞬しか現れない状態をきっちりと捉えて観察していくことが求められる。

## 社会的・経済的インパクト

### 持続可能な社会を実現する遷移マテリアル

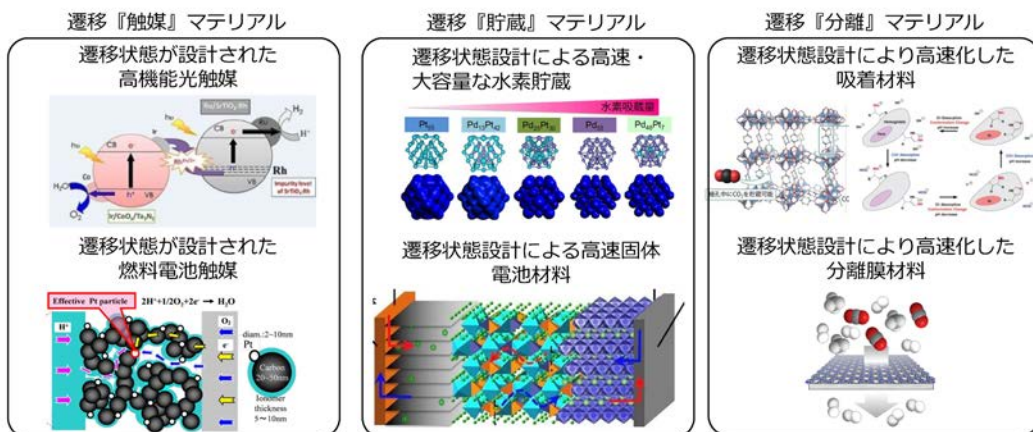


図2-3-2 遷移マテリアルの例

このコンセプトの実現のために必要な研究課題ということで、今回は2つにフォーカスして紹介する。

1つ目はもちろん計測技術である（図2-3-3）。近年、計測技術が飛躍的に進歩しており、ここでは3つの例を示している。1つは超時間分解X線結晶分光法である。これは、1フェムト秒の時間分解能でのX線イメージングで、極めて優れた技術であるが、空間分解能は1マイクロメートル程度と原子レベルを解像しようとするとは不十分である。したがって、この辺りの技術でより空間分解能を高めていく必要がある。

もう1つはたんぱく質の構造解析によく使われるクライオ電子顕微鏡である。こちらは空間分解能はナノメートルレベルに達しており、原子レベルの挙動をとらえるのにはかなり優れている。現在時間分解能を高めていく研究開発がさかに行われているが、遷移状態をとらえるにはまだまだ不十分である。

3つ目は振動分光であり、オングストローム程度の空間分解能を得るレベルの技術が報告されるようになっている。このような優れた技術がどんどん発展しているが、まだまだ開発の余地がある。超時間分解能、高空間分解能の計測技術を発展させ、広い時空間ダイナミックレンジでの計測手法の確立が、遷移マテリアル実現のためにキーになってくると考えられる。

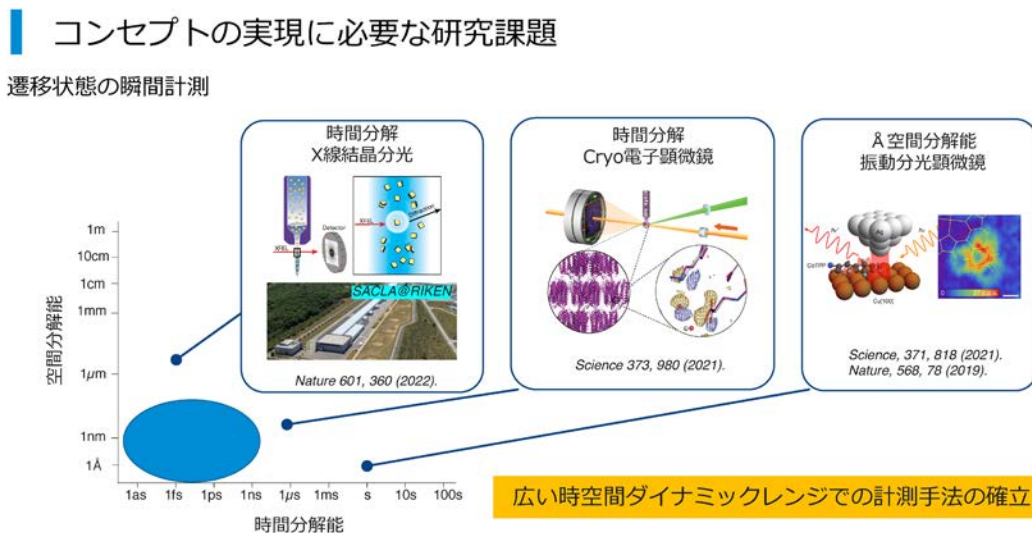


図2-3-3 遷移マテリアルの実現に必要な計測技術

計測技術の次に重要になってくるのは、計算科学である（図2-3-4）。「富岳」など非常に高性能な並列計算環境が整ってきている。また、機械学習によって分子動力学計算を高速化して精度を上げるという成果がどんどん発表されてきている。ほかにも北海道大学の前田らのグループでは、様々な反応経路を人為的に設定することで、その反応がどのようなエネルギーランドスケープで起こりそうかを網羅的にスクリーニングするようなシミュレーション手法もどんどん開発されてきている。

このような計算科学の手法に、先ほどの遷移状態の観測結果、実験データを組み合わせることができれば、それぞれの反応経路の分光スペクトルのシミュレーションを計算できるので、そのシミュレーション結果と実験データがどう整合するかを瞬時に見分けることができる。逆に、実際起きている反応のランドスケープを正確に理解したり、この反応経路の中で最も速い反応、つまり活性化エネルギーが低い反応を実現するための経路を設計できるようになる。このような機械学習から導かれる最適な反応経路を通るマテリアルの設計がこのようにして可能になるというふうに考えている。

最後に、このような戦略を実現するためにどのような体制やプレイヤーが必要かについて述べる（図2-3-5）。もちろんマテリアル開発なので、遷移マテリアルを効率的に合成、開発するチームというのは必要不可欠である。既に、我が国には各材料分野で優れた研究者がいるので、そういった方々には、とにかく高効率な



## コンセプトの実現に必要な研究課題

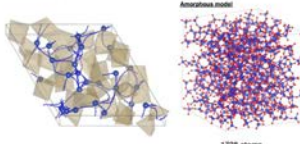
遷移状態データを使った理論構築・大規模計算科学

スバコンによる大規模並列計算環境



機械学習による分子動力学計算の高速化

安藤 康伸, 「分子動力学計算の拡張に向けた機械学習応用の動向」

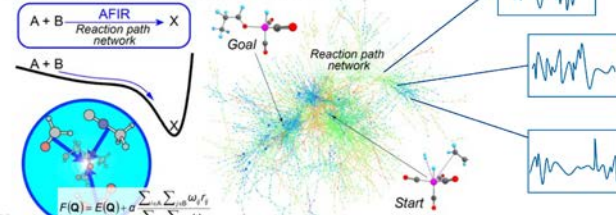


W. Li, Y. Ando, and S. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 104004 (2017).

1728 atoms  
W. Li, and Y. Ando, Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 30006 (2018).

反応経路自動探索: 人工力誘起反応(AFIR)法

前田理, 化学反応創成研究拠点 (ICReDD) ホームページ



数百~数千種類の遷移状態について  
分光スペクトルをシミュレーション  
↓  
機械学習によって分光スペクトルから  
遷移状態を逆算する技術を開発  
↓  
分光スペクトルから原子レベルで  
遷移マテリアルを設計できるようになる

図 2-3-4 遷移マテリアルの実現に必要な理論・計算・データ科学

材料をどんどん開発していただく。初めは、人海戦術になるのかもしれない。

同時に、こういった高効率なマテリアルに対して高速な分光技術や放射光を駆使して、遷移状態を観察する計測技術開発をする方が必要不可欠である。先ほど述べたように遷移状態は、計測が非常に難しいため、なるべくそこに近い空間分解能、時間分解能で反応なり現象を観察する技術開発が求められる。

これらの実験と並列に重要になるのが、計算科学チームである。先ほども示したように様々な反応経路を高速かつ網羅的にスクリーニングして、効率のよい反応経路、遷移状態を探索していくことになる。この探索結果を実験データと照合しながら、最適な材料というのをスクリーニングしていく。現在データベース作成やその大規模化が進んでいるので、このデータベースをどんどん強化していくことで指数関数的に研究が加速することが期待される。

以上のように、材料が機能を発揮する瞬間を捉え、それを制御する遷移マテリアルの実現が今後必要になると考えている。

## 役割・体制 究極的な計測・計算・合成技術開発による遷移マテリアルの実現

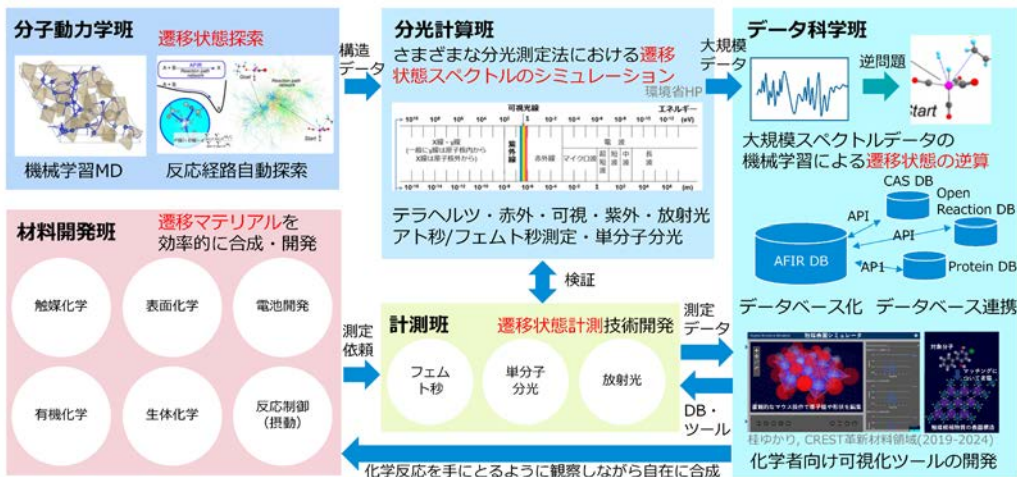


図 2-3-5 コンセプトの実現に必要な体制

## 2.4 動的非理想界面の理解・制御と利活用～未踏界面戦略～

Dグループ

杉本 敏樹 (分子科学研究所)

打田 正輝 (東京工業大学)

徳 悠葵 (名古屋大学)

筈居 高明 (東北大学)

我々のグループは「動的非理想界面の理解・制御と利活用」というコンセプトに着目した。

「パウリの排他律」で有名なノーベル物理学賞受賞者のヴォルフガング・パウリの有名な言葉に、“God made solids, but surfaces were the work of the Devil”という言葉がある。これは一般的に固体(バルク)が非常に美しい周期条件を有しており、神が示したかのように理想的な状況下であるのに対し、表面・界面というのは非常に破天荒で周期性も破れており、まるで悪魔が作ったようなものでなかなか学理が構築できないといった意味が込められている。この言葉を改めて考えてみると、これまでの材料開発というのは固体もしくは物質そのものを使いこなしていくという概念が中心だったのではないかと考えられる(図2-4-1)。

一方で、悪魔と言われる表面・界面はまだ高度な利活用できていない現状がある。表面・界面の重要性は従来から認識されており、さまざまな取り組みが進んできたものの、結局のところ難攻不落のままで表面・界面が深く関わる諸分野において本質的なイノベーションに到達していないのではないかと問題意識を抱いている。その原因としては、実材料・実物質の表面界面系が本質的に不均一、ダイナミック、非平衡、非理想的という性質を帯びているため、上手に定義できない(ill-defined)ところにあるだろう(図2-4-1)。

### 動的非理想界面の理解・制御と利活用 ～未踏界面戦略～

God made solids, but surfaces were the work of the Devil.



Prof. Wolfgang Ernst Pauli  
(c)ETH Library Zurich, Image Archive

**神の創造物の固体**

⇒これまでの元素戦略の主戦場

**悪魔の創造物へのこれまでのアプローチ**

⇒単結晶など理想的な周期系の表面・界面を主戦場としてきた(実質的には神の創造物に近い表面)

**これまで難攻不落の『真の悪魔の創造物』**

⇒Ill-defined・不均一・ダイナミック・非平衡・非理想的な埋没界面系

マテリアル革新力強化でも取り込めていない難攻不落の本質的概念・挑戦的課題

【近年の進展】

規則性・周期性に乏しく不均一性を有し、特に顕著な分子形状等が無いような複雑・複合系界面をAll-optical非破壊界面観測で攻略する機運が近年高まってきた!

⇒物理学等との融合をさらに進めることで、界面を最大限に利活用する「界面戦略」が今後重要となる。

図2-4-1 未踏界面戦略の必要性

ではなぜ今このようなコンセプトに着目するかというと、後で詳しく紹介するが、周期性に乏しく不均一性が本質的な表面・界面、特に、顕著な分子形状がないような複雑・複合系であっても、非破壊で構造観測や分子情報観測ができる機運が高まってきていることが大きな要因である。現在の最先端の界面計測技術を援用することで、マテリアルの特性をさらに引き出す機能性界面を設計するという高度な界面戦略に根差した研

究開発の方向性が期待できる。

ここからは各分野における界面の制御・利活用の必要性和アプローチについて述べる。

まずは物性物理の観点において、スピントロニクスを例に挙げる。スピントロニクスは、スピンを使った新たな情報処理など様々なデバイスの実現のためのキーテクノロジーとして期待されている。そのなかでも、近年はトポロジカル材料や二次元材料を機能化させていくことが非常に重要だと考えられている。磁性の発現という観点では磁気転移温度が重要なパラメーターであるが、大体数十～数百ケルビンというオーダーの物質がよく知られている。一方で、トポロジカル絶縁体が発現するような量子化温度は数ケルビン程度となっており、理論上限とはすさまじいギャップがあるのが現状である（図2-4-2）。

実デバイス材料として実際に利活用できる温度領域に高めていくのに加えて、集積化や微細化といった要素も考慮していくと、物質の本質的な不均一性や非理想性が顕在化してくる。特に界面で薄膜成長させエピタキシャル成長によって材料を作る場合に、界面での格子の不整合性や欠陥構造といったものが完全には制御できていない現状がある。このような界面制御に関する精度の不十分さが理論上限にいたらない、物質の機能を引き出せていないことに通じている。

したがって、薄膜成長のような比較的ルールベースの界面においても、その動的な界面の状況や非平衡な状況を正確に制御し高度化することがスピントロニクス分野のイノベーションにつながると考えられる。

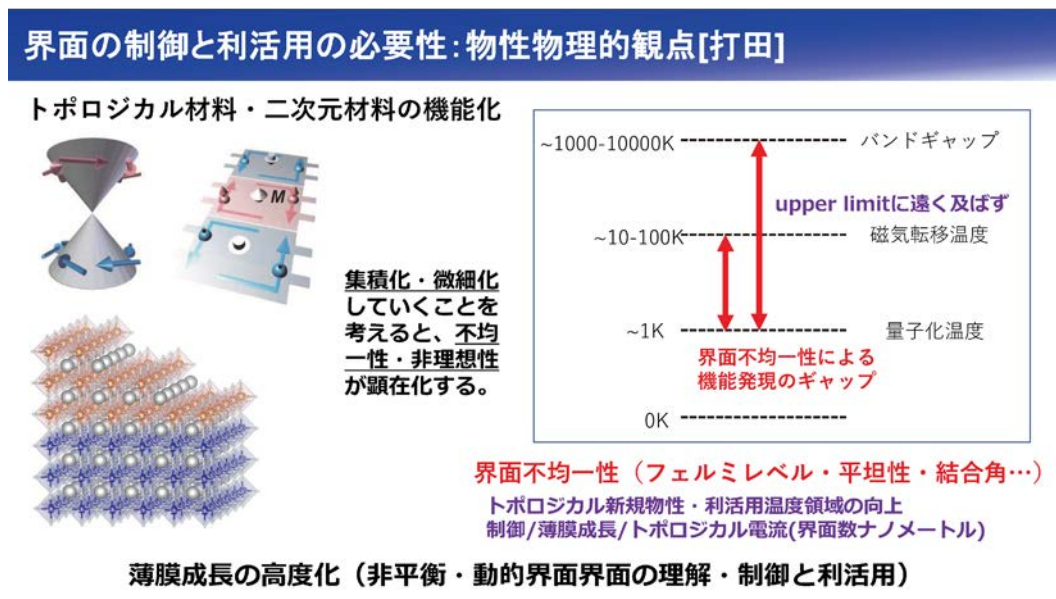


図2-4-2 界面戦略の重要性。物性物理の観点から

次は化学分野における非理想的な界面系の例を挙げる。近年、有機無機ハイブリッド材料のような系が注目を集めている。これは、単一元素だけから構成されるような金属ではなく、まさに無機材料と有機材料がナノレベルで複合化した材料で、非常に重要な物質群が近年登場してきている。

有機無機ハイブリッド材料は、例えば熱伝導材料としても大きな注目を集めている。これは六方晶ボロンナイトライドとボックスポリマーの複合体でできた材料であるが、TEM像を見ると分かるように、非常に複雑な構造をしている。粒界などが凸凹しており、どのように熱伝導が起こっているのか、これらの材料間で接着はきちんとしているのかなどの実像がよくわからず、性能向上のための指針が得られないという現状がある（図2-4-3）。

化学分野における他の事例としては、動的な結晶成長の制御は非常に重要で、単一の材料であっても固液



界面における材料の面安定性などを制御し任意の結晶面を自在に表出することができれば、同じ材料、同じ元素であっても大幅な機能向上を図ることも期待できる。一方で、液中でのプロセスを原子・分子レベルでその場観測して、結晶化の実像を正確に把握するのはまだまだ技術的に難しい。

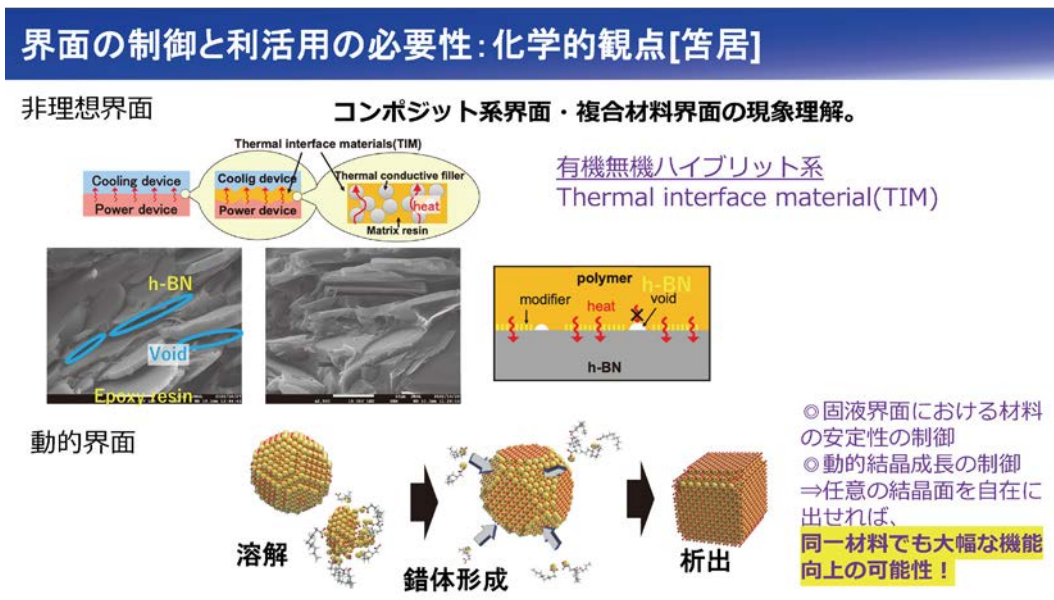


図 2-4-3 界面戦略の重要性。化学の観点から

次の重要な事例としては、力学あるいは工学の観点である。例として、金属材料を用いたマジックテープを紹介する（図2-4-4）。マジックテープはついたり剥がしたりが非常に容易で、とても便利である。これを多くのマテリアルにおいても実現したい。もし金属で実現できれば、熱伝導性も優れた材料として新たな価値を提供できるだろう。ここではナノワイヤ群を利用した接続技術を考えているが、実際にこのような材料をマジックテープのように押しつけてみたときに、どのような構造をとっているのか実態がわからないという問題がある。

さらに、この接断面の埋没した界面において、どのような力でくっついているのか、単に引っかかりで機械的にくっついているのか、あるいは固体・固体間の分子間力のようなものが本質的なのか、あるいは物質を覆う水酸基の影響による水素結合が本質的なのか、といった実像を計測し理解することが極めて困難である。接着力や熱伝導特性の理解や制御に必要なコンタクトや力の素性をとらえていくことが求められている。

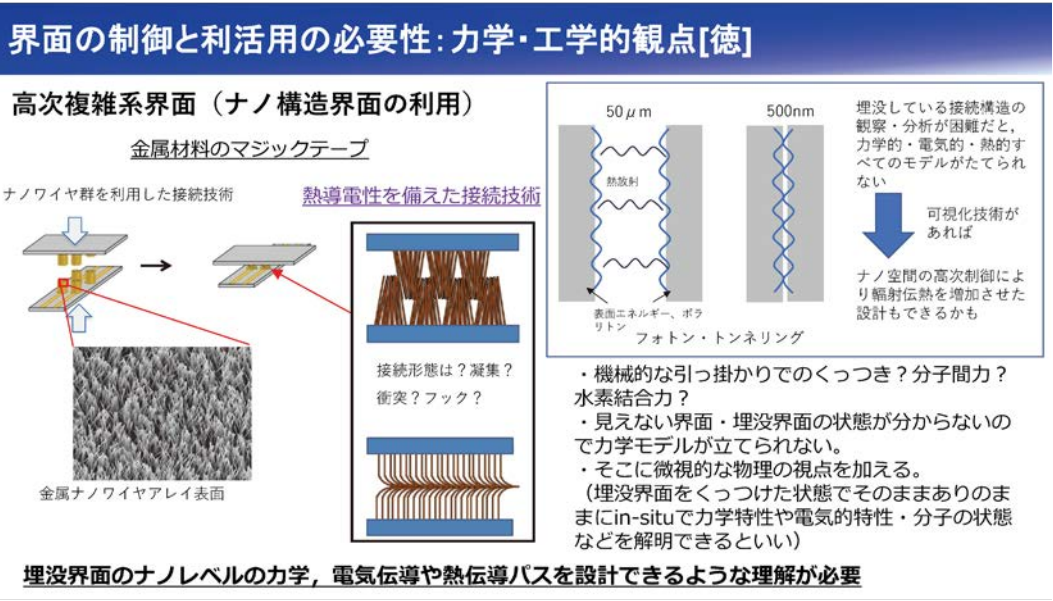


図2-4-4 界面戦略の重要性。力学・工学の観点から

これまでの事例で述べたように、非理想的な界面、非平衡で動的な界面、埋没した界面を理解し、それによって材料設計への結びつけるような研究が今後さらに求められていこう。では、そのような表面・界面をどのように観測するのかということについて、近年の取り組みを紹介する。分光計測はこれまでも材料科学において大きな貢献を果たしてきているが、より表面界面に対して選択的な技術として発展させる機運が高まっている。

赤外吸収分光やラマン分光といった従来の分子観測法は、いわゆる線形光学に基づいている。それに対して複数の光子を利用した非線形分光法が近年急速に進展してきている。

これまで、二次の非線形光学過程を利用した和周波発生 (SFG) 分光法が発展してきており、表面選択的に諸現象を観測することに有効であるという知見が生み出されてきている。一方で、和周波分光法では、分子系やフォノン系の観測に赤外もしくはテラヘルツ域の光子を用いる必要があるため、対象とする試料・物質のバルクに光が吸収されてしまい、物質間に埋没した界面領域を観測するには様々な問題を抱えていた。

この問題を克服するアプローチとして、より高次の偶数次非線形光学過程を利用するという方法論に期待が集まっている (図2-4-5)。ポイントとしては、2つの光子の差周波数をうまく設計することによって、個々の光子は物質に吸収されずかつそれらの差周波は界面で分子振動・フォノンに共鳴させて分光観測を行うことである。このような高次非線形過程に立脚したアプローチはまさしく計測技術分野の最先端となっており、様々な分野における物質・材料群の未踏界面系の観測に有効に応用していくための高い汎用性を追求する分光技術開発も今後ますます重要になっていくと考えている。

このような先端的な計測技術が高い汎用性を持って発展すれば、液中の埋没固液界面や、固体物質に囲まれた埋没固固界面で起きる様々な物理・化学・工学・生命科学的なプロセスにおける微視的な情報の獲得や界面諸現象の原子分子レベルでのリアルタイム可視化が可能となる。また、こういった技術を他の計測手法、例えば顕微計測による3Dプロービングやパルスレーザーを使った高時間分解計測とも組み合わせることで、四次元時空間界面顕微イメージング技術の発展も期待できる。そのような手法や得られた知見に基づいて界面を能動的に設計・制御し高機能化をすすめていく『界面戦略』により、界面を必ずしもうまく使いこなせていない現在の諸分野の限界が力強く突破され、新たな技術革新がもたらされていくであろう。

## 実物質・実プロセス下の埋没界面in-situ観測の挑戦[杉本]

### 表面・界面選択的な振動分光法の展開 → 偶数次数非線形振動分光

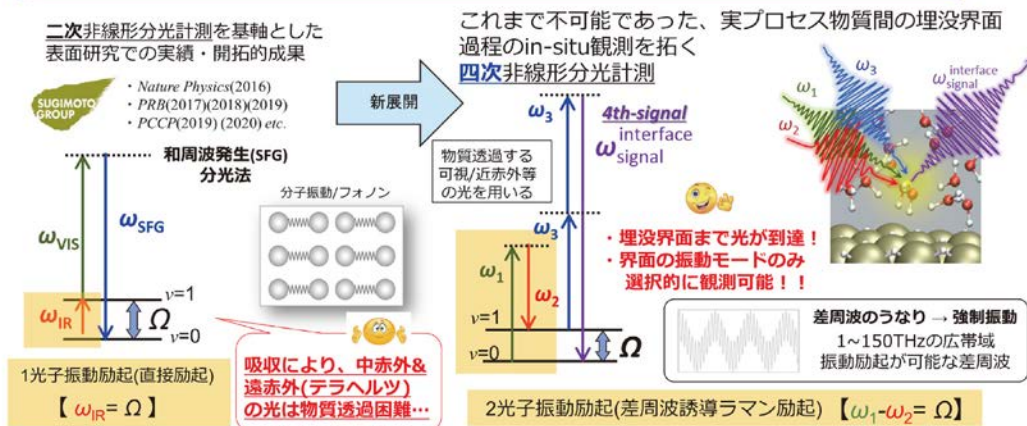


図2-4-5 未踏界面計測の新たな展開

以上をまとめると、今まさにパウリが述べたような悪魔の表面・界面の中でも、特に難攻不落であった不均一・ダイナミック・非平衡・ill-definedな表面界面系（真に悪魔の創造物）に本質的に迫る計測技術の発展の機運が高まっており、そのような技術の発展（ゲームチェンジ）を通じて未踏の界面を微視的に理解し活用していくことが可能になってきていると考えている。その実現に向けた直近の研究課題としては、固固界面や固液界面の未踏物質系の実像に迫る計測技術の開発加速、さらなる高度化が求められる。それには、最先端計測を支える物理化学的基盤を与える高度な理論やシミュレーション手法の開発も併せて求められる。さらに、計測や計算の技術革新を支えるプラットフォームとしての先鋭的なレーザー光源の開発や、コンピューター性能のさらなる飛躍的向上も求められるだろう。今回のワークショップは材料開発が主眼にあるが、このような周辺技術の向上も怠ってはならないと強く考える。

またこのようなことを可能にする研究開発体制としては、真に最先端の計測技術や計算技術をコアとした研究者たちが、物理、化学、工学、生命科学といった様々な界面を共通項として集まり、学際的な研究を推進していくことが望ましい。それによって、環境・エネルギー、デバイス、バイオ等、界面が関与するあらゆるマテリアルの科学・技術の革新につながっていくと期待できる。



## 2.5 ラストフロンティア開拓のための多変数制御マテリアル戦略

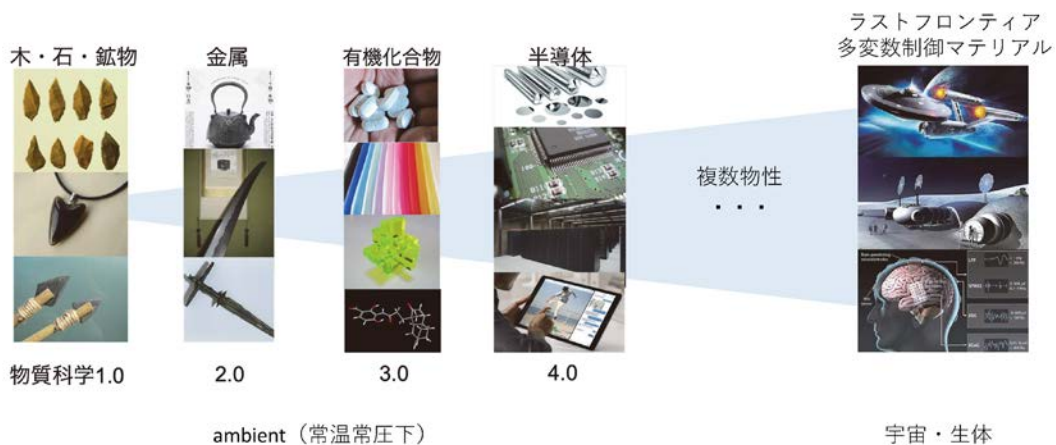
Eグループ

杉原 加織 (東京大学)  
江目 宏樹 (山形大学)  
村岡 貴博 (東京農工大学)  
渡邊 峻一郎 (東京大学)

我々のグループは「ラストフロンティア開拓のための多変数制御マテリアル戦略」というタイトルで発表する。我々のグループは2名がバイオ系、2名が物理系で専門性が遠く、自身の専門性から共通のボトルネックを抽出するというボトムアップ的なアプローチが難しかったため、トップダウン的なアプローチでコンセプトの抽出を進めていった。

我々の生活は、木、金属、ポリマー、半導体というように、様々なマテリアルのブレイクスルーによって繁栄してきている。それでは、この先の未来を拓く夢のマテリアルとは何だろう、そこから我々の議論は出発した。例えば石器時代を考えると、石器時代には動物を食べたい、捕まえたいという欲求から、弓の先ややりの先にとがったものが必要だった。そういうニーズから、石を加工し使うというマテリアルが開発されてきた。このような歴史から学ぶと、今我々が開発するべきマテリアルを考えたいならば、数十年後の未来に人間がどんな生活をしたのか、その生活に対して必要なマテリアルとは何なのかから逆算するべきであろう (図2-5-1)。

### ラストフロンティア開拓のための多変数制御マテリアル戦略



ラストフロンティア極限環境における物質の供給・輸送・変換・検出の学理は未解明

図2-5-1 将来求められるラストフロンティア極限環境

多くの観点がありうるが、我々のグループでは次の2つの側面に着目した。第1に、健康で長生きしたいというのは未来においても多くの方が抱く願望だろう。第2に、地球よりも快適な環境として人々が月や宇宙に住み始める、そのような未来が訪れているのではないかと想起した。

では、このような未来を実現するのに必要なマテリアルとは何であろうか。図中でambientと表現したが、今我々が活用できるマテリアルというのは、多くの場合、地球上のありふれた環境の中で作成し、使うことを基本にしている。一方で、宇宙とか生体という我々がラストフロンティアと呼ぶ環境は、非常に特殊な環境で

あり、これまでとは異なる物性が求められる可能性が高い。

例えば、月に家を建てたいと思った場合、どのマテリアルを選ぶだろうか。木で造るかベシカ、鉄で造るかベシカ、紙で造るベシカ、柔らかいほうがいいのか、硬いほうがいいのか、すぐに答えられる人は多くないだろう。しかし、我々はこのような問いに対し、材料科学の観点からより真剣に向き合う必要が高まっていると考える。

ラストフロンティア、極限環境における物質の供給、輸送、変換、検出の学理はまだ未解明な部分が多いと考えている。それでは、ラストフロンティアで機能する材料をどのようにして見つけられるかについて検討した。

いろいろアイデアを出し合っているうちにたどりついたのは、「物性×4D（空間・時間）」の制御の重要性であろう。空間的なサイズの制御は当然として、時間方向に対する制御が求められる。例えば、時間方向に対して構造が変わらないという耐久性が求められる場合もあれば、時間方向に対して構造が変化することで生み出される機能の両方がある。このような2つの側面を極限環境でコントロールするという事に尽きると考えている（図2-5-2）。

以下成功例をもとにイメージを示す。例えば人工衛星にはエネルギーを取り出すための太陽パネルが必要である。この太陽パネルには、変換効率というパネルとしての物性はもちろんのこと、打ち上げのコスト低減のために軽くて小さくないといけない、さらに軌道に乗ったら表面積を大きくしできるだけ集光できるようにしなくてはならないという要件があり、大きさも時間に対して変化する必要がある。さらには、放射線がたくさん降る環境中であるため、耐放射線という時間的な耐久性も満たす必要がある。これは別に目新しいものではないが、このような技術は、まさに、物性と4Dをうまくコントロールしたものとして改めて捉え直すことができるのではないだろうか。

### 物性 + 4D（空間 + 時間）を極限環境でコントロール

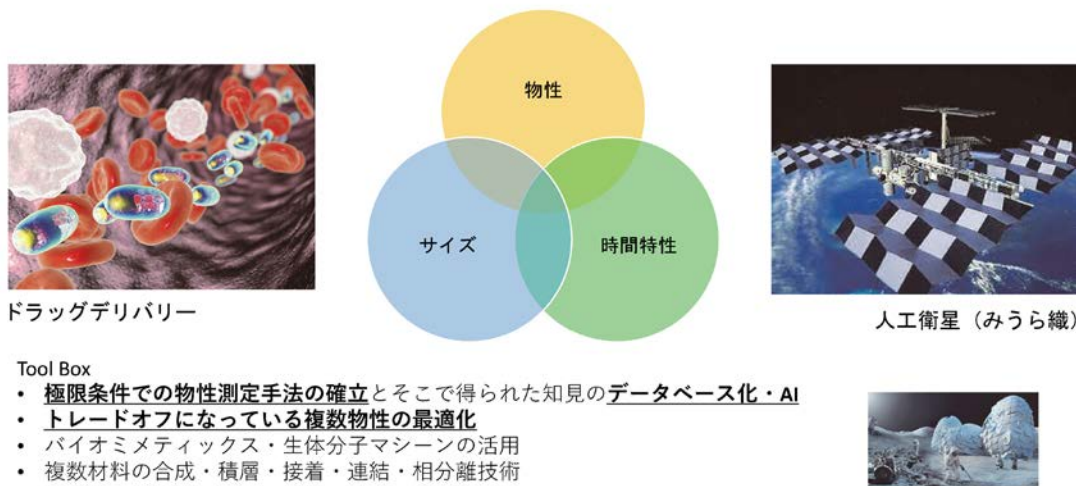


図2-5-2 ラストフロンティア極限環境で求められる材料設計

最近臨床で使われ始めたドラッグデリバリーもこのような観点で捉え直すことができる。

まず、体の中に何かを注入するという事はそのマテリアルの生体適合性を考えなくてはならない。かつ、その注入物質は、小さ過ぎるとすぐに尿などで体外に排出されてしまうし、大き過ぎれば臓器等に悪影響を及ぼすため、サイズのコントロールも不可欠である。さらに、体内にある程度とどまり、数時間のオーダーでドラッグをリリースさせるため、時間変化に応じて構造が変わる機能も必要である。したがって、この事例もま

さにラストフロンティアに到達するためのマテリアルの機能を物性×4Dによってうまくコントロールした事例ととらえられるだろう。

このような概念の再構築にもとづき、我々が提案したいのは、我々が現在持っている材料科学や科学的知見を、それらでは到達できない極限状態へ拡張してみる、ということである。

先の月の上の家の例でいえば、耐熱性、放射線耐性、小型・軽量性、体積可変性といった様々な物性の制約が考えられるが、これらの組み合わせは地球上で我々が必要とし、模擬できるものとは異なっているかもしれない。物性×4Dを完全に制御した複合材料を探そうとしても、少し環境を変えただけで全く違う問題になってしまう可能性がある。

では、ラストフロンティアで機能する材料をどのように生み出すか、具体的な研究内容について紹介する。まず、マテリアルが宇宙空間においてどのような放射線耐性を持つかといったことについては、ほとんどの物質で調べられていない。例えば、携帯電話のタッチパネルに使われるような導電性透明パネルであるITOを宇宙に持って行ったとき、宇宙の数ケルビンという環境下でどのような挙動を示すかは明らかではない。つまり、極限環境における物性は十分に調べられていないため、まずは今ある物質を極限環境で測定するためのシステムや手法開発が求められる。そして、そのような測定から得られた知見をデータベース化し、AIとの組み合わせによって候補材料を絞っていくというアプローチが鍵を握るだろう。また、このようなアプローチはトレードオフの関係にある複数物性の同時最適化にも効果を発揮するであろう。

次は、ラストフロンティアとしての生体環境という視点からにはなるが、例えばCRISPR-Cas9のようなゲノム編集技術を体内でロボットに操作させようとしたら非常にハードルが高い。一方で、そういう操作をできる分子がすでに自然界には発見されている。したがって、そのような天然の分子の力を借りるバイオメティックスや分子マシンの活用というのは今後とも重要になってくると考えている。

さらに、必ずしも全ての物性を1つの材料で作出す必要がない場合も存在するであろう。従来からのアプローチかもしれないが、放射線に強い材料と断熱性が高い材料を組み合わせ、両方の特性を兼ね備える、そのようなエンジニアリングの発展も重要である。

最後に、本コンセプトがもたらす科学的・社会的インパクトについて述べたい。まず科学的には、生体系は、熱力学的に非平衡かつ超開放系であり、さらに化学的に難制御環境と位置づけられる。また宇宙環境は、熱力学平衡かつ超孤立系であり、さらに物理的に非制御環境と位置づけられる。この2つはラストフロンティアの典型事例として取り扱ったが、このような極限環境で効率的に機能を発揮するマテリアル設計の方法論や学理は新機軸であると考えている。このような研究開発を通じ、20年後、30年後の未来に必要な材料を日本が先駆けて開発することで、病気の早期診断、長寿長命の実現、宇宙空間に無限にあるレアメタル回収やエネルギーの超高効率変換を可能にし、地上という閉鎖系から開放された物質科学を展開していくことにつながると期待している。

他のチームとの議論の中で、SF的であるといったコメントも受けたが、我々としては非常に現実的に考えて検討を重ねた。20年後に月に最初に居住するのはおそらく日本人ではないだろう。しかしながら、その時に住居に使われたマテリアルは日本で開発されたものである、ということはとても現実的な未来ではないかと考えている。それは今の半導体においても同じで、携帯電話自体は日本製ではないが、携帯電話の中に入っている部素材や半導体製造用の部素材は日本が世界でトップのシェアを誇る。未来を見据えながら、部素材で世界をリードする日本という戦略には、日本らしさや現実味があると我々は考えており、そのための基礎研究を期待したい。



# 3 | 討議結果を受けての今後の展望

沼澤 修平 (JST-CRDS)

本ワークショップでは、「物質と機能の設計・制御」という観点を中心に、ナノテクノロジー・材料分野の研究開発に広くインパクトを与える新たなコンセプトや今後取り組むべき研究課題について、5つのグループに分かれて議論を行った。以下では、まず各グループからの発表に対する参加者からの主なコメントを示す。さらに、各グループの討議結果を受けての今後の展望を述べる。

## 1. 各グループの討議結果に対する参加者からのコメント

### ●みだれでつくる「理想マテリアル」～みだれを制するものは機能を制する～ (Aグループ)

- ・“みだれ”と“理想”の相反する概念を包括して研究者のチャレンジ心を掻き立てる提案である。“みだれがあるのは悪い”という常識を再考するきっかけになるのではないかと認識しており今後の発展が必要だと思ふ。
- ・関連する動きとして、新学術領域「特異構造の結晶科学」、学術変革領域(A)「超秩序構造科学」がある。コンセプトは近いと思ふが、このような学術界の取り組みがあるということはそれだけ研究者の問題意識をとらえたものである証左だろう。
- ・MOFなどのきれいな構造を作りたいような系においても、積極的に欠陥やみだれを導入するような研究領域はホットピックとなっている。欠陥利用、準安定状態の取り出しといった従来の材料科学的な知見を新規性の高い物質群に活用できる形に展開できるような学理が構築できると非常に有意義だと感じる。

### ●Hidden Parameters! ～隠れたプロセスパラメータの定量化に基づく材料・デバイス開発 (Bグループ)

- ・現在研究が進んでいるマテリアルズ・インフォマティクス (MI)、プロセス・インフォマティクス (PI) の次のフェーズの課題設定である。現在のMIやPIは限られた合成プロセスにしか適用できないと感じており、インフォマティクスの基盤としての合成プロセスの科学の推進が必要だろう。
- ・材料合成の時空間プロセス情報の完全掌握は材料開発における究極の目標であろう。プロセスデータの取得がさらに精緻になっていったとしても全ての情報が取り切れるようになるわけではないので、インフォマティクスから隠れたパラメータを推論するという方法論とともに研究が進んでいく必要があると感じた。
- ・ラボと実用化をつなぐ極めて重要なコンセプトであると感じる。文科省プロセスサイエンス構築事業が類似の取り組みとして存在するが、その事業で得られた知見も含めより多くの研究者や材料系を巻き込む構想へと展開していくと良いのではないかと。

### ●遷移マテリアル (Cグループ)

- ・低分子系の遷移状態はある程度確立されてきた概念であると思ふ。一方で、複雑なマテリアルのような多自由度系においては低分子系と同じ扱いをするべきではないという感覚は多くの研究者が抱いていると思ふ、重要なコンセプトであると感じる。
- ・材料が機能を発揮する瞬間を適切にとらえ、その情報をもとに材料設計を行うというコンセプトは非常に大切な考え方であるが、現在でも十分にできていないことの1つである。最先端計測の重要性は十分に理解できるが、最先端計測技術と材料開発が乖離している部分もあるため、その乖離を埋めるための研究も重要だろう。

### ●動的非理想界面の理解・制御と利活用～未踏界面戦略～（Dグループ）

- ・界面設計が材料開発において重要であるのは言わずもがなであるが、動的界面、埋没界面というこれまでに以上に難解な界面に取り組むことの重要性やコンセプトは興味深いと感じた。
- ・界面のどのような側面や定量情報に着目すると良いのかといった点について新たな進展があると、グループBやグループCの見えない情報の可視化からの材料設計の獲得といった観点と組み合わせて、より有意義なコンセプトに発展すると考える。
- ・界面の効果だけで元素代替的な機能を発揮させたりと、今後色々なアイデアが生まれると感じた。

### ●ラストフロンティア開拓のための多変数制御マテリアル戦略（Eグループ）

- ・極限環境や生体内など人間のコントロールが及ばない環境での物質合成や機能発現については、研究の余地が多く残っており、重要な研究領域になる。
- ・極限環境で機能を発揮するという要素にとどまらず、その環境にどのように到達させるかというパスまでも設計対象に含めるというコンセプトは新しい。
- ・今後重要となるラストフロンティアはどこなのかについて、具体的な議論が深まっていくことを期待する。
- ・ラストフロンティアでの部素材で日本は勝ち残るといった戦略を描いていたが、より大きな影響力を及ぼせる研究展開も構想できると良いと感じた。

## 2. 今後の展望・まとめ

本ワークショップで検討された5つのコンセプトはそれぞれが独立ではなく、互いに連関している。それらの関係を図示したものが、図3-1である。

遷移状態の高次理解にもとづく材料設計や隠れたプロセスパラメータの定量化にもとづく材料設計というコンセプトは、マテリアルズ・インフォマティクスやプロセス・インフォマティクスの高度化という観点で非常に関係性が深い。これらのコンセプトは、材料の機能が発現する瞬間の特性やその際のプロセス条件を適切に計測し定量化することの重要性を掲げており、これらの取り組みによって現在のMIやPIが抱える限界を超えていくことが期待される。

材料にかならず存在するみだれの体系化と活用、未踏界面の理解と活用というコンセプトは、実材料や複雑材料の機能創出の高度な理解を可能にするための重要な研究課題である。みだれ、界面という材料科学上の伝統的な問題意識に対して2つのグループがアプローチしたのは、この問題が引き続き本質的な課題であることの現れであろう。

ラストフロンティア（極限環境）開拓のための多変数制御マテリアルというコンセプトは、未来社会を想定し極限環境での材料の重要性を述べるだけでなく、極限環境にいたるまでの環境の変遷も含めた機能の時空間制御や最適化の必要性も提案している。そのような多様な環境を想定した材料開発や設計指針の獲得は極限環境にとどまらず広い波及効果をもたらすと期待できる。

一方で、今回のいずれのコンセプトを実現するにも、材料開発を支える計測技術、データ科学、理論・計算、合成技術の進展を欠くことはできない。また今回の参加者の多くが、そのような先端的な研究インフラに容易にアクセスできるようになることを希望していた。特に材料合成については、作りたい材料や利用する材料プロセスによってなかなか共用化が難しい側面があり、実際共用が進んでいない点は参加者の大きな問題意識であった。今後一定の汎用性がありかつ重要度の高い材料合成装置に関して、共用化等を推進していくことも材料開発の加速という観点からは重要だと考える。



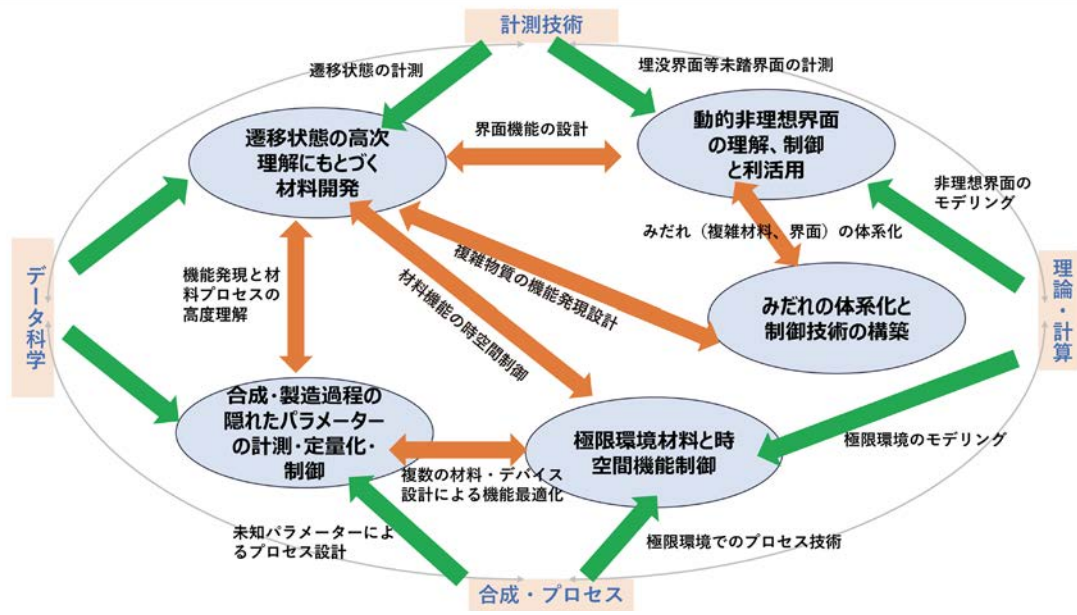


図3-1 本ワークショップでの検討テーマの相関図

# 付録

## 付録1: 開催趣旨・プログラム

### 開催趣旨

わが国および世界が抱える様々な社会課題を克服し、Society5.0、カーボンニュートラル、安全・安心社会を実現するには材料・マテリアルのイノベーションが不可欠である。政府は2021年に「マテリアル革新力強化戦略」を発表し、基礎研究力の強化、データを基軸としたマテリアル研究開発の強化、研究エコシステムの構築、人材強化に向けて、現在具体的な取り組みを進めている。

当該戦略の中では今後重要となるマテリアルの技術領域例が紹介されているが、そのようなマテリアルをどのように実現するのか、マテリアルの所望の機能を開拓させるための材料科学的な設計指針・制御手法は必ずしも明らかではない。「マテリアル設計」のサイエンスの新局面を切り拓き、日本発の大きな研究コンセプトを世界に発信することが、今後材料科学における日本の存在感を高めるのに重要であろう。

本ワークショップでは、日本で生まれつつある萌芽的な研究開発動向を俯瞰し、そのような研究開発動向の融合や上位概念の探索により、材料科学や材料設計指針の新潮流を生み出すことを目的とする。まだ国際的なトレンド等としてはまだ注目されていない先駆的な取り組みや構想をグループワーク等の議論を通じて研究コンセプトへと束ねていくことを狙っている。

ワークショップの進め方としては、分科会（グループワーク）形式による集中討論、参加者全員による総合討論を実施する。

### プログラム

開催日時：2023年2月12日（日）～13日（月）

開催場所：L stay&grow 南砂町

#### 2月12日

- 10:00～10:15 趣旨説明（JST-CRDS）
- 10:15～12:30 参加者による研究紹介
- 13:30～17:30 グループ討議①
- 19:00～21:00 グループ討議②

#### 2月13日

- 9:00～10:45 グループ討議③
- 10:45～11:55 総合討論

## 付録2: 参加者一覧 (ワークショップ開催時点の所属)

### ○招聘識者

#### グループA

三浦 正志	成蹊大学 理工学部 教授
石割 文崇	大阪大学 大学院工学研究科 講師
中島 祐	北海道大学 大学院先端生命科学研究院 准教授
名村 今日子	京都大学 大学院工学研究科 准教授

#### グループB

藤井 幹也	奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授
小林 玄器	理化学研究所 開拓研究本部 小林固体化学研究室 主任研究員
富永 依里子	広島大学 大学院先進理工系科学研究科 准教授
仁科 勇太	岡山大学 異分野融合先端研究コア 研究教授
横田 紘子	千葉大学 大学院理学研究院 准教授

#### グループC

星野 友	九州大学 大学院工学研究院 教授
桂 ゆかり	NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門 主任研究員
鈴木 康介	東京大学 大学院工学系研究科 准教授
牧浦 理恵	大阪公立大学 大学院工学研究科 准教授
矢野 隆章	徳島大学 ポストLEDフォトンクス研究所 教授

#### グループD

杉本 敏樹	分子科学研究所 物質分子科学研究領域 准教授
打田 正輝	東京工業大学 理学院物理学系 准教授
徳 悠葵	名古屋大学 大学院工学研究科 講師
筈居 高明	東北大学 多元物質科学研究所 准教授

#### グループE

杉原 加織	東京大学 生産技術研究所 講師
江目 宏樹	山形大学 大学院理工学研究科 准教授
村岡 貴博	東京農工大学 グローバルイノベーション研究院 教授
渡邊 峻一郎	東京大学 大学院新領域創成科学研究科 准教授

### ○JST関係者

曾根 純一	ナノテクノロジー・材料ユニット 上席フェロー
眞子 隆志	ナノテクノロジー・材料ユニット ユニットリーダー
高村 彩里	ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
佐藤 隆博	ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
永野 智己	統括ユニットリーダー/JST 研究監
沼澤 修平	ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
福井 弘行	ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー
馬場 寿夫	ナノテクノロジー・材料ユニット 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
酒部 健一	JST 創発的研究支援事業推進室 主任専門員

## ワークショップ企画・報告書編纂メンバー

総括責任者	曾根 純一	上席フェロー	ナノテクノロジー・材料ユニット
メンバー	眞子 隆志	ユニットリーダー	ナノテクノロジー・材料ユニット
	佐藤 隆博	フェロー	ナノテクノロジー・材料ユニット
	高村 彩里	フェロー	ナノテクノロジー・材料ユニット
	永野 智己	統括ユニットリーダー/JST研究監	
	沼澤 修平	フェロー	ナノテクノロジー・材料ユニット
	馬場 寿夫	フェロー	ナノテクノロジー・材料ユニット
	福井 弘行	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	ナノテクノロジー・材料ユニット

(ワークショップ開催時点のメンバー)

## 俯瞰ワークショップ報告書

CRDS-FY2023-WR-07

# マテリアル設計の未来戦略

令和 6 年 3 月 March 2024

ISBN 978-4-88890-904-4

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。  
なお、本報告書の参考文献としてインターネット上の情報が掲載されている場合には、本報告書の発行日の1ヶ月前の日付で入手しているものです。  
上記日付以降の情報の更新は行わないものとします。

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.  
Please note that all web references in this report were last checked one month prior to publication.  
CRDS is not responsible for any changes in content after this date.

FOR THE FUTURE OF  
SCIENCE AND  
SOCIETY



CRDS

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

