

2.6 共通基盤科学技術

ナノテクノロジー・材料分野の基礎および応用を支える「共通基盤科学技術」区分には、「加工・プロセス」（微細加工・三次元集積）、「計測・分析」（ナノ・オペランド計測）、および「理論・計算・データ科学」（物質・材料シミュレーション）が含まれる。

「加工・プロセス」の微細加工・三次元集積は、シングルナノメートルレベルまでのシリコンの微細加工プロセスの高度化および3次元集積を実現する研究開発領域である。半導体集積回路の従来の2次元的な微細化は物理的な限界を迎えつつあるが、ウエハーレベルで同じまたは異なる機能回路を積層して3次元構造を作ったり、複数のチップ（チップレット）を2次元（2D）/2.5次元（2.5D）/3次元（3D）実装したりする技術が登場し、トランジスタレベルにおいても複数のチャンネルを積層して3次元構造化する研究開発が進められている。

「計測・分析」のナノ・オペランド計測は、材料やデバイス等の機能発現中に刻々と変化する現象の実時間または経時観測によって、観測対象のナノスケール構造と実環境中の機能との相関を見出すことを目的とした研究開発領域である。手法としては、透過型電子顕微鏡（TEM）、走査プローブ顕微鏡（SPM）、ラマン散乱顕微鏡、放射光X線イメージング、中性子イメージング、等がある。プローブとしては、電子線、レーザー、放射光X線、中性子線、等が利用されている。近年では、オペランド計測という用語が初めて使われた触媒分野にとどまらず、バイオ分野、太陽光発電デバイス、さらには量子マテリアルにまで対象が急拡大し、学术界と産業界の両方において不可欠になりつつある。

「理論・計算科学」の物質・材料シミュレーションは、量子力学や統計力学の諸知見を元に、物質の構造、物性、材料組織、化学反応機構などを高精度に解析・予測する技術の確立をめざす研究開発領域である。手法としては、分子系電子状態計算、固体系電子状態計算、分子シミュレーション、モンテカルロシミュレーション、統計力学にもとづく積分方程式、連続体モデルなどがある。化学反応や電子移動などの原子・電子レベルの現象の解明に加えて、それらがミクロな組織や物性に与える影響、メソスコピックレベルの非線形現象とマクロな性能・機能との関係性など、マルチスケールの階層構造、さらには異なったスケールにおける多様な物理・化学現象が絡みあうマルチフィジックスプロセスを明らかにすることで諸現象の制御方法を見出し、新材料の設計指針を提供する。近年では、極限環境下の現象予測においても、非経験的で予言能力の高いシミュレーション技術が大きな役割を果たしている。また、マテリアルズ・インフォマティクス等のデータ駆動型材料創製にも大きな係わりを持つ。ナノテクノロジー・材料分野におけるグローバルな研究開発競争が激化するなか、シミュレーション・データ科学を駆使したハイスループットな材料開発に大きな期待が寄せられている。

2.6

俯瞰区分と研究開発領域 共通基盤科学技術