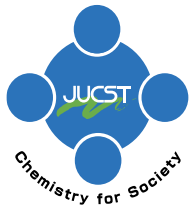


2018/01/26



文部科学省
ナノテクノロジー・材料分野の研究開発戦略検討作業部会

スペース・クロノマテリアル
ーマテリアルズインフォマティクスを活用した
異種界面の理解と制御に基づく近未来機能
の実現ー

一般社団法人日本化学連合
菊地 和也(大阪大学)



一般社団法人日本化学連合

我が国の化学と化学技術の振興を通して社会に貢献することを目的とする化学および化学技術関連学術団体の連合体
(2007年創立、2010年法人化)

正会員学協会(13学協会:アイウエオ順)

化学工学会、クロマトグラフィー科学会、高分子学会、触媒学会、石油学会、繊維学会、電気化学会、日本エネルギー学会、日本化学会、日本ゼオライト学会、日本セラミックス協会、日本地球化学会、日本薬学会

一般社団法人日本化学連合

「ナノテク・材料分野の研究開発戦略検討委員会」

日本化学会、高分子学会、日本セラミックス協会から選出された下記の委員で構成。

日本化学会: 菊地 和也(大阪大学)・山元 公寿(東京工業大学)

高分子学会: 臼杵 有光((株)豊田中央研究所)・辻井 敬亘(京都大学)

日本セラミックス協会: 菊池 正紀(物質・材料研究機構)・菅原 義之(早稲田大学)

スペースクロノマテリアルの概念

物質: 空間構造に時間的ゆらぎ

設計指針に時間軸の導入

時間・空間を精密制御した材料
= スペースクロノマテリアル

0→1, 1→10ⁿの物性発現
= 超機能

スペースクロノマテリアル

ダイナミクス

機能発現

再生
劣化

組織化

自己集合
拡散

分子反応

原子配置

電子移動
電子遷移

修復

しなやかさ

力学・強度・軽量

運搬・貯蔵

薬剤

触媒

センサー

エネルギー変換

導電性

発光

磁性

時間

空間: 構造

物質

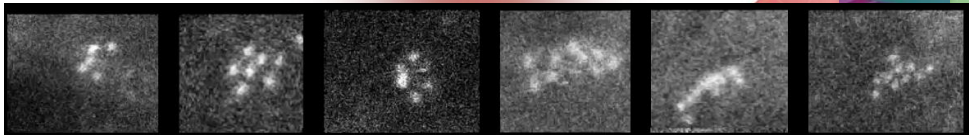
時空間精密制御による次世代ナノ材料の開発

現状: 時間的・空間的に統計分布を持つナノ構造（ゆらぎ）
⇒ 機能を十分に活用できず

故に: **原子精度の時空間構造の制御プロセス・観測技術が必要**
機能性ナノ材料の優れた探索基礎研究 >> 明確な設計指針は希
→ **マテリアルズインフォマティクスも活用した時短開発も必要**

例: ナノ粒子技術 × 時空間制御

機能性ナノ粒子・合金ナノ粒子
サブナノ粒子・金属クラスター



時空間精密制御

(原子空間配列・異種原子ハイブリッド・原子数・電荷 etc.)

既存元素を超える革新機能ナノ材料の誕生
新しいサイエンスの創出

量子機能、元素変換、超原子、多重協奏機能

スペースクロノマテリアルの実現

環境 持続可能な社会へ

低炭素/資源リサイクル/低負荷材料

社会 新素材イノベーション

低コスト化・省エネ化/資源リスク回避



医療分野におけるナノ材料研究開発コンセプト

「ナノ」構造の構築による診断薬・治療薬のデリバリーシステム

現状 薬物・診断薬の多くは機能してほしい場所に送達されず、実際の生体内で機能しない

→ デリバリー効率(少ない量での効果の実現)
機能性(人体に適合したナノマシン) } の高度化が必要

機能性ナノ材料の優れた基礎研究はあるが、生体応用を実施した事例が少ない

→ 臨床治験など実用化開発への取り組みが必要

生体分子直接臨床応用 × ナノ機能

デリバリーの確立した生物分子
(抗体・ペプチド等)

生物を超える時空間制御ナノ材料

実用化可能な生体適合性・生体内
分解性を備えたナノ材料の開発

(例) マルチモダリティ検出用ナノセンサ
(MRI/蛍光/発光)

疾患部位送達・薬物放出ナノキャリア

スペースクロノマテリアルの 臨床応用の実現

疾患に対応した多機能化

難治疾患の治療

副作用の軽減

早期診断

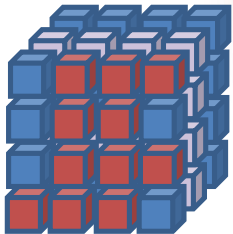
簡易迅速な診断

医療コストの削減

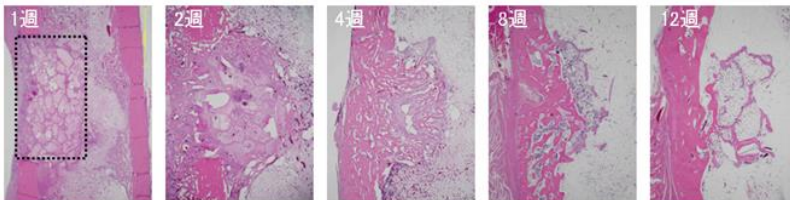
マテリアルズインフォマティクスを活用した異種界面の理解と制御に基づく近未来機能の実現

スペースクロノバイオセラミックス

ナノ～サブミクロの生体機能発現ブロック



Additive Manufacturingなどによる生体模倣・生体との界面機能向上

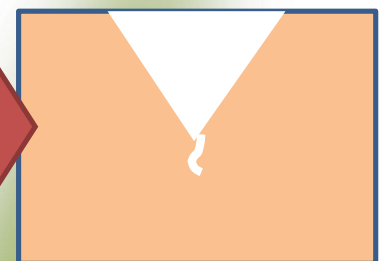


生体組織の階層ごとに必要な機能を発現し、複雑な組織を確実に修復する。

スペースクロノ強靱化セラミックス



セラミックスの破壊は亀裂の急速な進展による



塑性変形により亀裂進展を抑制し、破壊を避ける

Additive Manufacturingなどによる金属的・有機高分子的破壊機構の導入

マテリアルズインフォマティクスを活用した異種界面の理解と制御に基づく近未来機能の実現

スペースクロノセラミックス半導体

電子・正孔の材料内での移動を時間的・空間的に制御

ターゲット

- 水の光分解による水素製造
 - カーボンフリー水素
- 二酸化炭素の還元
 - 人工光合成

スペースクロノ電子セラミックス

電子・電磁波の材料内での移動を時間的・空間的に制御

ターゲット

- 電子セラミックスナノクリスタルからなるエレクトロニクスデバイス
 - 超小型・省エネ化電子機器

新規半導体ナノ粒子

半導体複合ナノ粒子

ナノクリスタル

マイクロデバイス

移動距離の短縮

↓
高速化

ナノクリスタルの接合技術

集積化

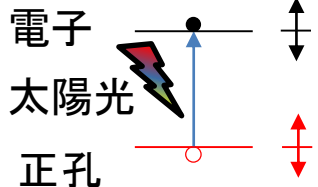
インテグレートッドデバイス

集積化

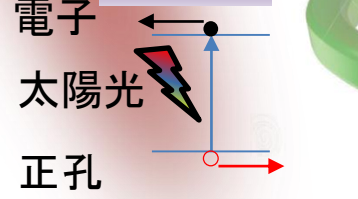
結晶構造・元素の選択
量子サイズ効果の活用
結晶性の向上・欠陥の減少

効率的電荷分離
達成のための界面設計

バンドエンジニアリング



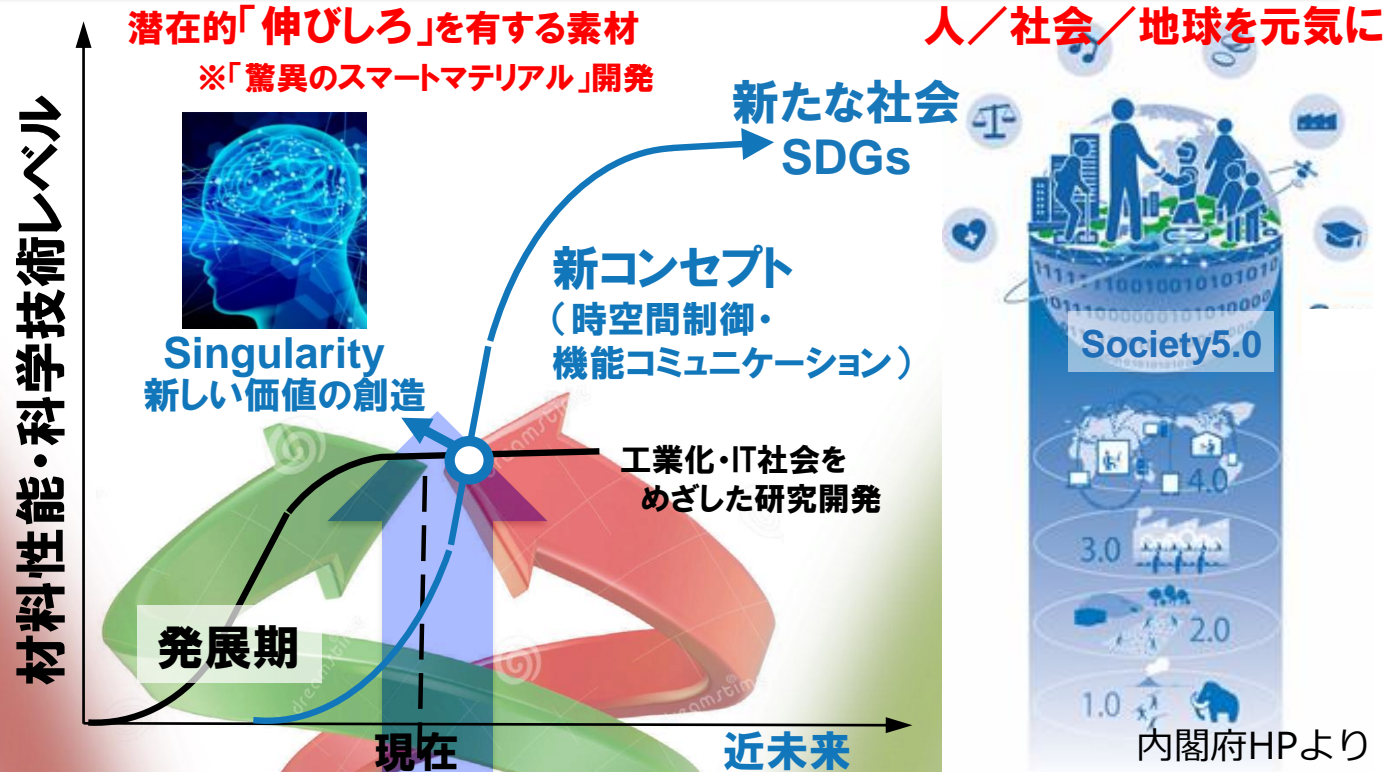
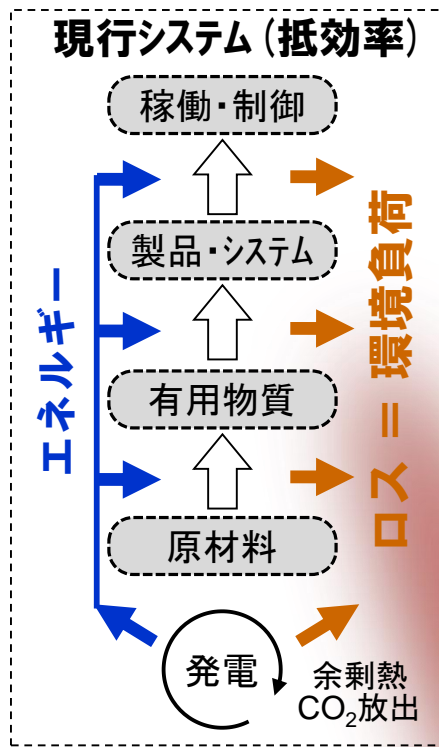
電荷分離



バンドエンジニアリング・
高品位半導体の作製・半導体の接合
→太陽光高効率利用デバイスの開発

ナノクリスタルの「テーラメード合成」・
ナノ構造体のボトムアップ集積
→マイクロデバイスの構築

スマート界面制御(時空間制御)で拓く「省エネ・低環境負荷、安全・安心」



- ① 時空間制御による材料のスマート化 (鍵は **界面の能動制御と材料間コミュニケーション**)
- ② Singularityを実現する先進材料開発 (MIを活用して設計、ナノ材料／ナノテクを基盤に「ものづくり」)
 - ・「ハード(強さ)」から「ソフト(しなやかさ)」へパラダイムシフト
 - ・「ナノ」から「マクロ」へ階層化(マルチスケール設計)
- ③ これにより「**ロス削減**」(化学・力学・熱・物質・生産的ロス)と「材料の**寿命予測**」を実現
 - ↳ **省エネ・低環境負荷**
 - ↳ **安全・安心(信頼性向上)**
- ④ ターゲット例
 - ・力学材料: “しなやかな”異種材料複合→軽量高強度材料
 - ・環境エネルギー材料: 機械摩擦摩耗低減→スマートトライボロジー

省エネ／長寿命化／安全・安心

<新コンセプトの例>

・従来型高分子複合材料

高分子材料 → フィラー補強高分子 → 成形加工 → 部品
(ポリプロピレン、ナイロンなど)

フィラー(ガラス繊維、炭素繊維、カーボン、タルク、クレイ、セルロースナノファイバーなど)と高分子との界面制御は試行錯誤(膨大なビッグデータ保有)。

・スマート界面制御による高分子複合材料

高分子材料(石油由来、植物由来)に対して、求められる機能に対して最適なフィラーを抽出、フィラー表面の変性によりスマートな界面の設計(MIの応用)

→ 材料創生の開発時間を大幅に短縮

→ 新しい機能の創生も可能

(トレードオフ物性、しなやかさ、自己修復性、寿命予測など)

国のプロジェクトでは
ImPACTがリード。
(伊藤耕三リーダー)

ImPACTしなやかタフポリマーのHPから引用

<http://www.jst.go.jp/impact/program/01.html>



まとめ

・時間・空間のナノレベルでの精密制御したマテリアル・分子システム

持続可能社会、在宅医療、高機能デバイス、ロス削減

⇒未来機能物質からのQOL向上によるSDGsの実現へ

スペースクロノマテリアル

ダイナミクス

再生
劣化

組織化

自己集合
拡散

分子反応

原子配置

電子移動
電子遷移

機能発現

修復

しなやかさ

力学・強度・軽量

運搬・貯蔵

薬剤

触媒

センサー

エネルギー変換

導電性

発光

磁性

時間

空間：構造

物質