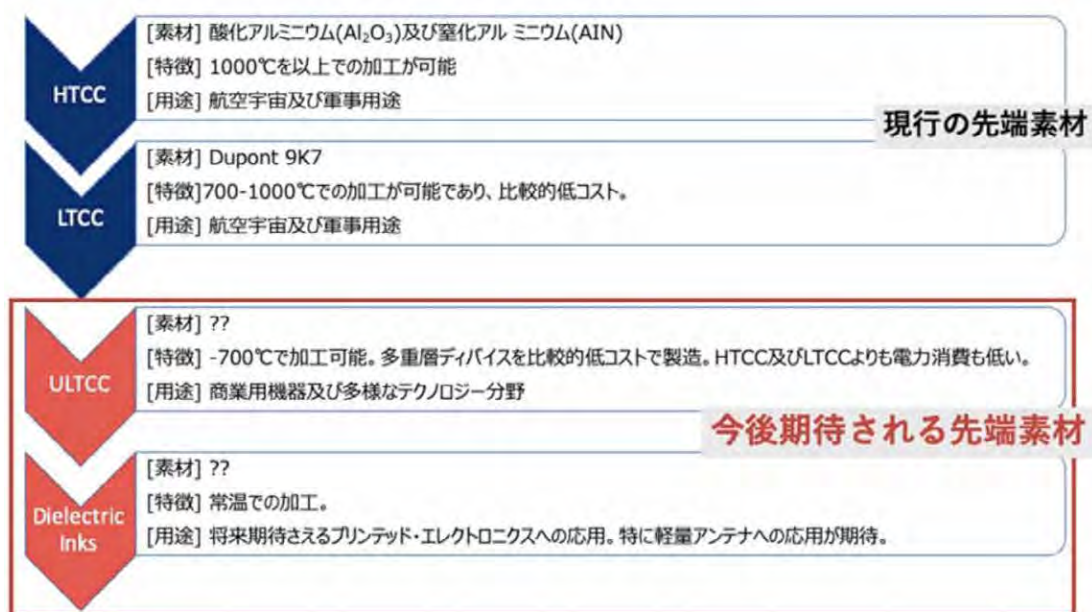


誘電インクを用いた 3D プリンティング技術の特許を取得する等⁵⁴、すでに軍事技術への応用の可能性が示唆されている。



(図 2-1 セラミック加工素材の発展⁵⁵)

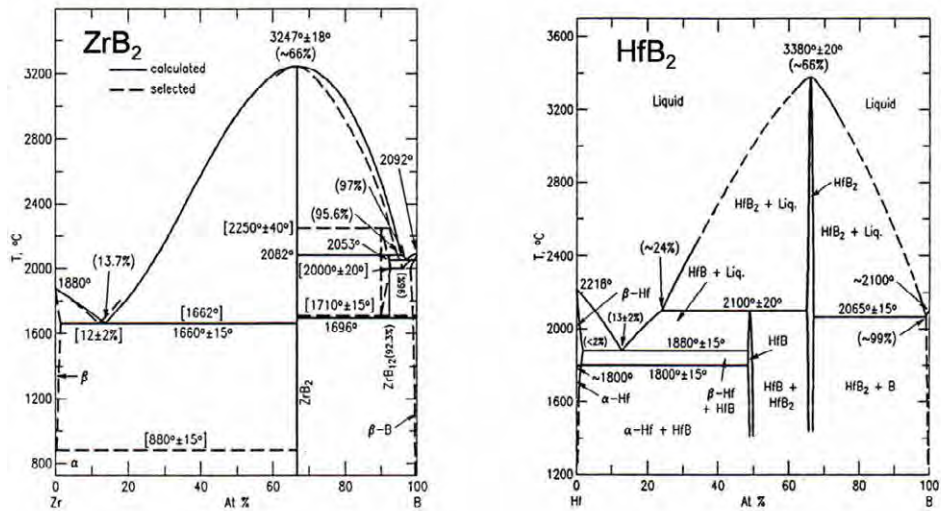
(2) 極高温同時焼成セラミック (Ultra-high Temperature Ceramics: UHTCs)

極高温に対応できるセラミック素材として、UHTCs がある。UHTCs は非酸化物素材であり、その融点は 3000℃以上と極めて高いことから、極度高温環境での素材として応用が期待されている。UHTCs は、ニホウ化ハフニウム (HfB_2) とニホウ化ジルコニウム (ZrB_2) といった融点が極めて高い元素を含む素材であり、1950 年台に原子炉の素材として研究が進められた (図 2-2)。その後、米航空宇宙局 (NASA) 及び米国空軍による研究が 1990 年代を通じて進められるようになり、弾道飛行試験等も実施された。UHTCs はその高い融点から、スペースシャトルやロケット等の先端部分に使用できる唯一の素材として期待されている (図 2-3)。また近年ではシリコンを混合させることで融点を高めることができることがわかっており、実証研究が進められている⁵⁶。UHTCs の研究は、米国やその同盟国に加えて中国でも盛んに行われてきた。

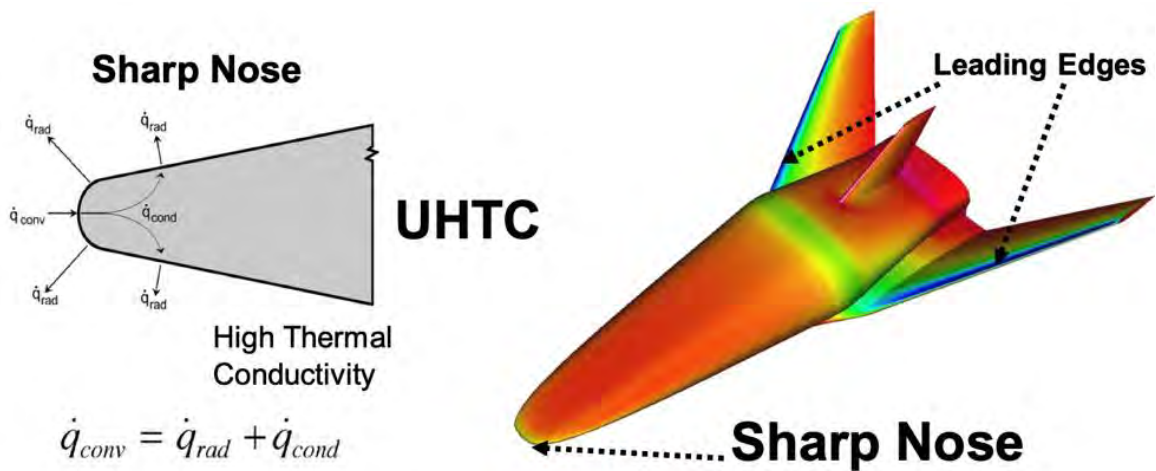
⁵⁴ Iftikhar, Umair. Nano dimension granted patent for dielectric ink. 3D Printing Industry. (February 26, 2019). Retrieved from <https://3dprintingindustry.com/news/nano-dimension-granted-patent-for-dielectric-ink-149841/>

⁵⁵ Mahajan et. al. *Handbook of Advanced Ceramics and Composites*, p.173 を元に著者作成。

⁵⁶ Thimmappa, Sravan Kumar, and Brahma Raju Golla. "Oxidation Behavior of Silicon-Based Ceramics Reinforced Diboride UHTC: a Review." *Silicon* (2022): 1-26.



(図 2-2 HfB₂ と ZrB₂ の融点⁵⁷)



(図 2-3 UHTCs の用途例⁵⁸)

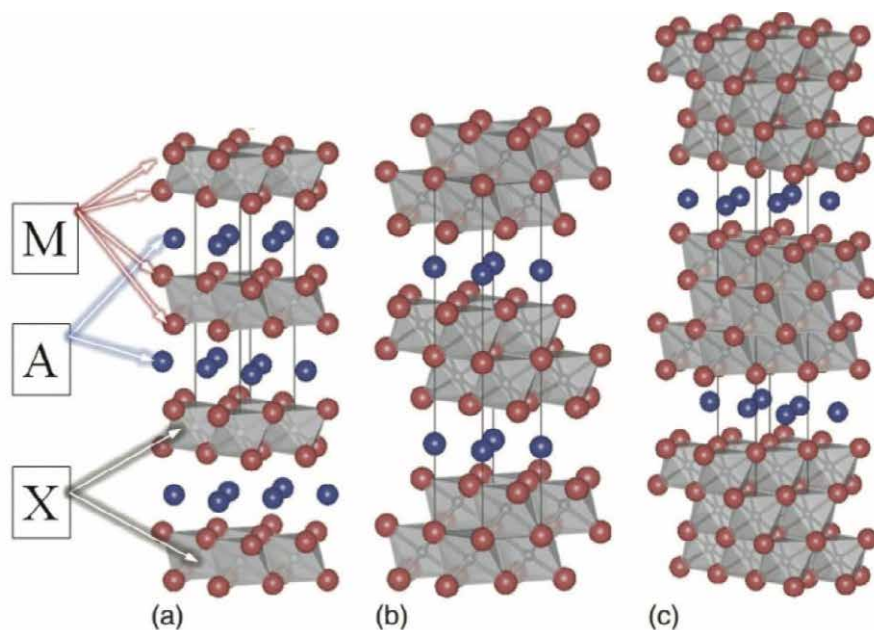
合わせて、炭化ケイ素(SiC)の複合素材(SiC-SiC, SiC-W等)も高温対応可能な素材として研究が進められている。特にガスタービンや原子力発電システムにおける有用性が認められており、極度に高温な環境に耐え得る先端素材としてエネルギー分野や航空宇宙分野での応用が期待されている⁵⁹。さらに、MAX phase materials と呼ばれる炭化物と窒化物によって六角形状の層で

⁵⁷ Sylvia M. Johnson, "Ultra High Temperature Ceramics UHTCs." Langley Research Center. (September 29-30, 2015, NASA). <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20150022996/downloads/20150022996.pdf>

⁵⁸ ibid.

⁵⁹ Chamberland, A., and Lane, J., "SiC/SiC ceramic matrix composites: A turbine engine perspective". May 14, 2014. *Engineering Conferences International ECI* (Proceedings); Naslain, R., and F. Christin. "SiC-matrix composite materials for advanced jet engines." *MRS Bulletin* 28(9) (2003): 654-658.

形成される新素材がある (図 2-4)。MAX の M は Transition Metal (遷移金属)、A は Si, Sn, Al といった IIIA や IVA エレメント、そして X は B, C, or N を意味する (図 2-5 の元素周期表を参照)。この過去 25 年間にわたりこの素材の研究が進められてきており、1400° C までの高温に耐え得るほか、他のセラミック素材と比較しても強固であり、放射線に対する耐久性も持ち合わせている等、極度環境に適した素材として研究がされてきた⁶⁰。また、1100 度で 2 時間加熱された場合に、素材そのもののキズへの自己治癒力 (self-healing) を発揮することが最新の研究で明らかになっている⁶¹。MXenes という 2 面状の無機化合物の素材も極度に高温な環境でも耐え得る素材として有力視されている (図 2-6)。2011 年に発見された新しい素材であり、MAX phase 素材同様に極度高温環境での適応が期待されている。また高度スループットコンピューティングを用いた 2017 年の研究で、100 万以上の安定した MXenes 素材がまだ未発見の状態にあることが明らかにされており、今後の更なる研究が期待されている⁶²。



(図 2-4 MAX Phase 構造のイメージ⁶³)

⁶⁰ Gonzalez-Julian, Jesus. "Processing of MAX phases: From synthesis to applications." *Journal of the American Ceramic Society* 104(2) (2021): 659-90.

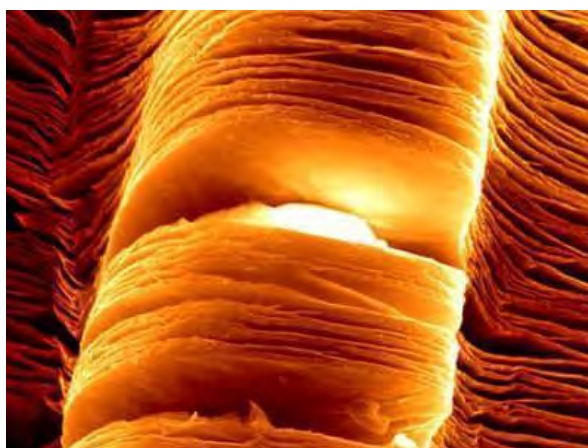
⁶¹ Ibid.

⁶² Tan, Teck Leong, et al. "High-throughput survey of ordering configurations in MXene alloys across compositions and temperatures." *ACS Nano* 11.5 (2017): 4407-18.

⁶³ Wozniak, Jaroslaw, Agnieszka Jastrzębska, and Andrzej Olszyna. "Challenges and opportunities in tailoring MAX phases as a starting materials for MXenes development." *Materials Technology* 37(11) (2022): 1639-50.

IA												VIII A								
1	H											2	He							
		Atomic number																		
		Symbol																		
		M A X																		
												5	6	7	8	9	10			
												B	C	N	O	F	Ne			
												13	14	15	16	17	18			
												Al	Si	P	S	Cl	Ar			
3	Li	4	Be																	
11	Na	12	Mg	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII B		IB	II B								
19	K	20	Ca	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
				Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
37	Rb	38	Sr	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
				Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
55	Cs	56	Ba	La	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
				Ac	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
87	Fr	88	Ra																	
Lathanide				57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
				La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
Actinide				89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
				Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

(図 2-5 MAX の構成元素⁶⁵⁾)



(図 2-6 MXenes のイメージ⁶⁶⁾)

3. 公的利用・安全保障における利用

(1) 極度高温耐久素材と極超音速ミサイル

前述の極高温同時焼成セラミック(UHTCs)は米国や英国において主に軍事技術の要素技術として研究開発が進められてきた経緯があり、近年では特に極超音速技術への応用が期待されてきた。特に、極超音速ミサイルのレーダーを保護するためのレドーム(Radome)の素材に用いられる素材は、飛行中の高温やその他の環境変化に耐え得る必要がある。極超音速巡航ミサイルの

⁶⁵ i b i d.

⁶⁶ <https://www.nanowerk.com/mxene.php>

温度は 1000° C から 1500° C に及ぶとされており、また雨や風及び急速な温度変化等々その他の外部環境にも適用できる高い仕様が求められる⁶⁷。高い温度要件と環境適応要件が求められる。しかしながら、製品化されている現行のレドーム素材では、極超音速の飛行・巡航における耐久要件を十分満たし得ない⁶⁸。

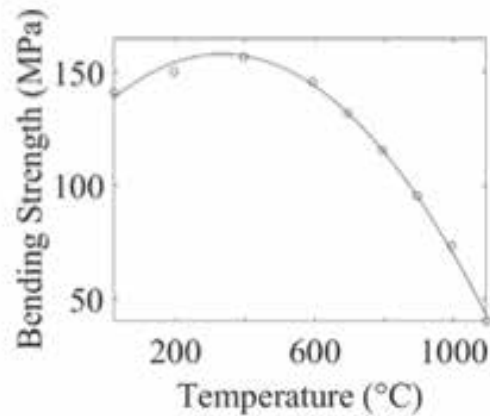
現行で商品化されているレドーム素材としては、米国 Corning 社の Pyroceram 9606 や Slip Cast Fused Silica (SCFS) や Raytheon 社の Rayceram 8 等がある。しかし、これらは高温環境で十分な曲げ強さ(Flexural Strength)を発揮できていない。例えば、米国 Corning 社が開発した Pyroceram 9606 は、1000° C を越える環境下で機能せず、1349° C で溶け出すことがわかっている。図 7 が示す通り、Pyroceram 9606 は 400° C 前後で最大の曲げ強さ(Bending Strength)を示し、600° C を超えたあたりから急激にそのパフォーマンスが落ちることがわかる。2018 年には、韓国の空軍で Pyroceram 9606 を使用したレドームで相次いで不良が発生したことが報告されている。リー(2018)らの研究によると、不良の原因は大気中の湿気への過度な露出による腐食であることわかった⁶⁹。このように現行の素材では極超音速ミサイルの外部環境に十分適応できないという課題が共有されてきた。こうした中で、1000° C を越える高温環境でも常温と変わらない強度・耐久パフォーマンスを発揮できる革新的な素材への関心が高まっている。こうした中で、様々な加工が可能なスプリットリング共振器(Split-ring Resonator: SRR)構造というメタマテリアルの構造への期待が高まっている(図 2-8)。SSR 構造が極度高温環境でどれほどのパフォーマンスを発揮するかという実験も行われており、様々な構造のメタマテリアルの有用性が科学者たちによって検証されている⁷⁰。

⁶⁷ Van Wie, David, D' Alessio, Stephen, White, Micheal, "Hypersonic airbreathing propulsion." *JHU APL Technical Digest*, 26(4) (2005).

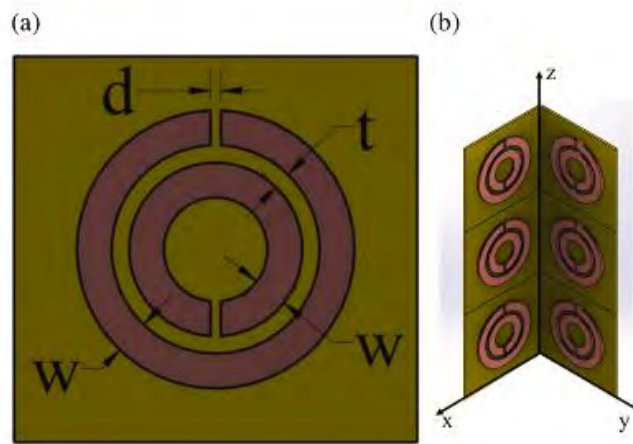
⁶⁸ Kenion, Taylor, Ni Yang, and Chengying Xu. "Dielectric and mechanical properties of hypersonic radome materials and metamaterial design: A review." *Journal of the European Ceramic Society* 42 (1) (2022): 1- 17.

⁶⁹ Lee, Changmin, Ik-Sik Kim, and Bokwon Lee. "Slow crack growth in a cordierite-based glass-ceramic missile radome due to stress corrosion." *Engineering Failure Analysis* 93 (2018): 76-86.

⁷⁰Kenion, Taylor, Ni Yang, and Chengying Xu. "Dielectric and mechanical properties of hypersonic radome materials and metamaterial design: A review." *Journal of the European Ceramic Society* 42(1) (2022): 1-17.



(図 2-7 Pyrocera 9606 の曲げ強さ⁷¹⁾)



(図 2-8 SSR の構造⁷²⁾)

(2) 半導体と素材科学

本報告書の 1 項を構成する半導体技術も先端素材の発見とその開発に大きく依存している。特に半導体素材では、その素材の極限までの純度の高さや微細な変化に対する高い感度さらには環境負荷に配慮した素材選定等が重要視される。半導体の技術開発のこうした技術要件満たすべく、これまで多数の新素材が発見されてきた(図 9)。特に高純度要件は、技術的にもチャレンジングな課題とされ、ppt (1 兆分の一)の領域に達するほどの非常に極度な純度が求められる。こうした高い純度の確保のために、品質保証及び工程管理技術としてよく用いられる PAT(Process Analytical Technology)や補完的な統計手法等が用いられている。

⁷¹ Ibid., p. 3

⁷² Ibid., p. 10

Manufacturing Process Step	Type of Processing	General Material Classes	Current Material Challenges	Related Chemical Engineering Processes
Deposition	<ul style="list-style-type: none"> • Plasma-enhanced • Chemical vapor • Atomic layer • Spin-on • Electroplating • Physical vapor 	<ul style="list-style-type: none"> • Organosilane • Silicon-containing polymers • Organometallics • Metal-containing formulations 	<ul style="list-style-type: none"> • Safe handling • Environmental and purity 	<ul style="list-style-type: none"> • Synthesis • Purification • Packaging • Chemical distribution
Etching and dopant gases	<ul style="list-style-type: none"> • Plasma-assisted etching 	<ul style="list-style-type: none"> • Inert and reactive gases • Halogenated gases • Mixed specialty gas blends 	<ul style="list-style-type: none"> • Safe handling • Environmental and purity • Packaging technology 	<ul style="list-style-type: none"> • Synthesis • Purification • Packaging
Lithography	<ul style="list-style-type: none"> • Spin coating 	<ul style="list-style-type: none"> • Formulated-polymer blends • Solvents • Metal-containing polymeric blends 	<ul style="list-style-type: none"> • Environmental and purity 	<ul style="list-style-type: none"> • Polymer synthesis • Distillation • Purification
Wet cleaning	<ul style="list-style-type: none"> • Spin coating • Immersion bath 	<ul style="list-style-type: none"> • Aqueous, semiaqueous, and solvent-based formulations • Acids, bases • Solvent 	<ul style="list-style-type: none"> • Environmental and purity 	<ul style="list-style-type: none"> • Chemical mixing • Purification • Filtration • Packaging
Chemical mechanical planarization	<ul style="list-style-type: none"> • Spin coating 	<ul style="list-style-type: none"> • Particle-containing aqueous formulations 	<ul style="list-style-type: none"> • Environmental and purity 	<ul style="list-style-type: none"> • Chemical mixing • Purification • Filtration • Packaging

(図 2-9 半導体関連素材一覧⁷³⁾)

(3) 素材技術とリチウムイオン蓄電池

リチウムイオン蓄電池における技術革新にもナノテクノロジーが重要な役割を果たしてきた。蓄電池の電極に極小のナノ材料を用いることで、蓄電時と放電時に生じるストレスを低減させ、より効率的なバッテリー技術を実現する。LiMn_{1.5}Ni_{0.5}O₄ や LiCoPO₄ が次世代リチウムイオン蓄電池の電極 素材として注目されてきた⁷⁴。米国ジョージア工科大学の研究チームは、Al₂O₃ でコーティングされた電極が従来の電極よりも 2.5 倍のエネルギーを保持することを実証している⁷⁵。またリチウムメタルを用いた陽極が従来のリチウムイオン蓄電池のパフォーマンス

⁷³ National Academies of Sciences, *Engineering, and Medicine. New Directions for Chemical Engineering.* (Washington, DC: the National Academies Press, 2022), p. 181.

⁷⁴ Venugopal, Ganesh, Andrew Hunt, and Faisal Alangir. "Nanomaterials for energy storage in lithium-ion battery applications." *Material Matters* 5, (2) (2010): 42-5.

⁷⁵ Waller, Gordon Henry, Philip D. Brooke, Ben Harris Rainwater, S. Y. Lai, Renzhong Hu, Yong Ding, Faisal M. Alangir, Kenneth H. Sandhage, and M. L. Liu. "Structure and surface chemistry of Al₂O₃

スを大きく向上させることも最新の研究で明らかになった⁷⁶。さらに MIT の研究者らは、半固体状の水銀合金が両方の電極の感覚を埋めてしまう樹状突起(Dendrite)を自ら減少させることで、バッテリーの機能低下を防止することを発見している⁷⁷。このように、先端素材による蓄電池の技術革新の研究は学術雑誌でも多く掲載されており枚挙にいとまがない。しかし、重要なことはナノテクノロジーの発展により蓄電池技術における従来の課題が克服されたり、あるいは従来のリチウムイオン蓄電池を遥かに凌駕する機能性を実証したりとその汎用性が極めて高いということだろう。

(4) 素材科学と AI 技術

最近では、マシンラーニングや AI 技術等の革新技术も素材の発見や開発や実証に盛んに用いられるようになった⁷⁸。特に AI 技術ベースにした識別モデルによって、新素材を仮説的に創り出すといった革新的な技術も台頭しつつある⁷⁹。例えば、ポーランドの科学者たちは、2020 年

coated LiMn2O4 nanostructured electrodes with improved lifetime." *Journal of Power Sources*306 (2016): 162-170.

⁷⁶ Albertus, Paul, Venkataramani Anandan, Chunmei Ban, Nitash Balsara, Ilias Belharouak, Josh Buehner-Garrett, Zonghai Chen et al. "Challenges for and pathways toward Li-metal-based all-solid-state batteries." (2021): 1399-1404.

⁷⁷ Park, Richard J.-Y., Christopher M. Eschler, Cole D. Fincher, Andres F. Badel, Pinwen Guan, Matt Pharr, Brian W. Sheldon, W. Craig Carter, Venkatasubramanian Viswanathan, and Yet-Ming Chiang. "Semi-solid alkali metal electrodes enabling high critical current densities in solid electrolyte batteries." *Nature Energy* 6 (3) (2021): 314-322.

⁷⁸ より最新の研究としては、Liu, Zhaocheng, Lakshmi Raju, Dayu Zhu, and Wenshan Cai. "A hybrid strategy for the discovery and design of photonic structures." *IEEE Journal on Emerging and Selected Topics in Circuits and Systems* 10, no. 1 (2020): 126-135; Loke, Gabriel, Tural Khudiyev, Brian Wang, Stephanie Fu, Syamantak Payra, Yorai Shaoul, Johnny Fung et al. "Digital electronics in fibres enable fabric-based machine-learning inference." *Nature communications* 12, no. 1 (2021): 1-9; Long, Xu, Ming-hui Mao, Tian-xiong Su, Yu-tai Su, and Meng-ke Tian. "Machine learning method to predict dynamic compressive response of concrete-like material at high strain rates." *Defence Technology* (2022)等を参照。

⁷⁹ Elton, D. C., Z. Boukouvalas, M. D. Fuge, and P. W. Chung, Deep learning for molecular design—a review of the state of the art. *Molecular Systems Design & Engineering* 4(4):828-849 (2019).

に Mol-CycleGAN モデルという独自のモデルに基づき、本物と類似した性質を有する擬似素材を生成することに成功している⁸⁰。こうした傾向は近い将来、素材科学の手法に大きなパラダイムシフトを起こすことになるだろう。これまでは、ラボでの実験による試行錯誤で新素材の発見や開発に挑んできた科学者たちが、原子や分子構造体のデータに基づき、最適な素材を発見あるいは人工的に開発するというのが常識になる日もそう遠くない。この意味で AI やデータ科学が素材研究に与える影響は大きく、今後もこうした分野横断的な研究動向に注目する必要がある。

4. 各国の素材戦略

ここでは米国、中国そして日本に焦点を当てて、各国の素材研究開発戦略と枠組みを分析する。

(1) 米国

米国の科学技術政策は様々な技術領域と関係を持つ先端素材研究における重要な舵取りを担ってきた。近年経済安全保障の文脈で注目を集めてきた 3D プリンティング技術や量子技術といった技術に用いられる先端素材の研究は、米国は国防省やエネルギー省等の関連省庁や国立の研究機関が政策面でのイニシアティブを発揮して、新素材の発見と開発に貢献してきた。米国の先端素材研究開発において近年重要な役割を果たしてきた政策的枠組みとして Materials Genome Initiative (MGI)がある。MGI は 2011 年のオバマ政権下で、先端素材の発見、製造そしてその応用を加速させることを目的に発足された組織であり、新素材の発見からその開発、統合、標準化そして応用に至るまでの一連のサイクルを管理・実装する仕組みを確立している⁸¹。この MGI の枠組みには、米国エネルギー省と国防省をはじめ、国立科学財団(NSF)や国立標準技術研究所(NIST)等も参画している。MGI は、先端素材の開発をその他の先端科学技術との関連性を意識しながら、広義の安全保障と社会保障の基盤として位置づけている点にその特徴が読み取れる。図 2-10 が示す通り、AI やマシンラーニングを含むコンピューター技術等が、先端素材研究における革新を後押しするインフラとして整備されており、その波及領域は国家安全保障、クリーンエネルギー、社会保障と多岐にわたる。

⁸⁰ Maziarka, Łukasz, Agnieszka Pocha, Jan Kaczmarczyk, Krzysztof Rataj, Tomasz Danel, and Michał Warchoń. "Mol-CycleGAN: a generative model for molecular optimization." *Journal of Cheminformatics* 12, no. 1 (2020): 1-18.

⁸¹ Office of Science and Technology Policy, *Materials Genome Initiative for Global Competitiveness*, (Washington, DC, June, 2011).