

# (A-1) 空間空隙構造における構造および相互作用の設計と機能発現

課題 A (技術シーズ創出型)	空間空隙制御材料における構造および相互作用の設計と機能発現	(短中期課題)	(中長期課題)
	①空間空隙形状の制御による機能発現	分子クラスターの反応場 (結晶クラスコガス貯蔵、ガス選択透過 (分子ふるい) など) 軽量化、低誘電率化	分子クラスター、人工酵素、人工タンパク質の反応場、ガス高濃度貯蔵、低濃度不純物ガスの吸着・除去
②ホスト/ゲストスキームにおけるゲストの多様化による機能発現	アルカリ金属イオンによる強磁性電気伝導および電子放出、 $O_2$ 、 $H_2$ 、電子をゲストとした酸化・還元触媒機能、プロトン、酸素イオン伝導など、空間空隙のイオン・光子による格子振動散乱	強磁性転移温度および超伝導転移温度の高量化、異方性イオン伝導、高速金属イオン ( $Li$ イオン、 $Na$ イオン、 $Ag$ イオン) 伝導、ゼーベック係数増加と高効率発電素子	
③フレームワーク組成の多様化および化学修飾による機能の発現	親水性/疎水性の制御、触媒活性点の追加、電気伝導の付与、イオン伝導およびエネルギー伝達の付与、エネルギー捕集	親水性/疎水性制御による水分子透過性の向上、触媒活性点の選択的追加、電気伝導付与による超伝導転移点の高量化、高速イオン伝導および高効率エネルギー伝導、低消費エネルギーの機能	
④フレームワークとセルの相互作用による機能の発現	フォノン散乱制御 (低熱伝導度)、イオン伝導、選択的ガス吸収・透過、高輝度発光体	エネルギー集光太陽電池システム、センシング機能付加 DDS、革新的熱電変換材料	
⑤量子効果に基づく機能の発現	超伝導、強磁性、低仕事関数、トンネル効果	超イオン伝導、高圧効果 (高濃度ガス貯蔵)、高温・低消費 (高速イオン伝導、高速化学反応)	
空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓			
①結晶、エピタキシャル成長技術	ゼオライトなど空間空隙化合物の育成、クラスレート、スクワラルダイト、アバタイト、 $C12A7$ の合成、各種下地基板上のエピタキシャル成長、ヘテロ成長、アモルファス状態の電子構造の解明	新規ゼオライトの合成、超微粒子、ヘテロ原子導入、クラスレート、 $C12A7$ 、アバタイトの合成制御、準結晶育成、融液状態の解明、表面・界面状態の解明	
②自己組織化による複合多孔構造の合成	超分子、遷移金属錯体の自己組織化構造の探索、Porous Coordination Polymer (PCP)、Metal Organic Framework (MOF)、メソポーラス構造作成手法の探索	メソポーラス構造作成手法の高効率化、複合多孔構造の制御、実用技術開発、新規単位構造分子の探索	
③分子プログラミング技術	DNA タイル、DNA リボン、人工金属原子配列、人工タンパク質の合成	DNA などのゲノム・スキームによる空間空隙制御材料の設計と合成	
④トップダウン手法によるナノ・メソスコピック空間空隙構造の作成技術	溶解縮径法 (炭素金属など)、ゾルゲル法 (ポーラスガラスなど)、架橋高分子重合法 (RO 膜など)、ガス発泡 (マクロポーラスメタル、発泡コンクリート)、電機反応 (アルマイト)、化学エッチング (ポーラスアルミ)、リソグラフィ (フォトリソグラフィ、ファイバーなど)	溶解縮径法 (炭素金属など)、ゾルゲル法、架橋高分子重合法 (プロトン伝導膜など)、微粒子の集合、電機反応 (アルマイト)、化学エッチング (ポーラスシリコン)、リソグラフィ (フォトリソグラフィ、ファイバーなど)	

# (A-2) 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓 空間空隙制御材料の合成手法

手法	原理・考え方		作製方法	機能物質/材料
ビルドアップ法	結晶成長	原子・イオンの組織化	気相・液相・固相成長、焼結、堆積、析出、縮合重合反応、有機化学合成、高分子合成	クラスレート、スクワラルダイト、ナノチューブ、規則化グラフェン、ゼオライト、有機/無機ハイブリッド、組織化超分子金属錯体、多孔性規則化ポリマー
		結合と解離の制御		
	化学合成	錯体、超分子などの組織化、		
分子プログラミング	非周期配列設計	DNA などの分子選択的結合	分子生物学的方法、DNA 増幅	DNA タイル、リボン、DNA 配列金属
エッチング法	化学エッチング、物理エッチング	物質「除去」による空隙構造形成	陽極酸化、溶解、ガス・プラズマエッチング、選択エッチング、発泡 (多孔性金属)	ポーラスシリコン、ポーラスアルミナ、ポーラス金属、
テンプレート	ビルドアップまたはエッチングの位置制御	鋳型、マスクによる選択性	ミセル凝集、分子鋳型、メソポーラス鋳型、選択マスク	メソポーラスシリカ、メソポーラスカーボン、ゼオライト

(B) 空間空隙インプリメンテーション技術

課題B (グローバル社会ニーズとインプリメンテーション技術)	空間空隙構造の物質・エネルギーの輸送・変換・貯蔵など諸機能の規模拡大とその利用技術	(短中期課題)	(中長期課題)
	① エネルギー分野: 太陽エネルギー発電  EV車および電力貯蔵用電池 EV車用および定置型燃料電池  電力貯蔵システム  新型発電システム  送電システム	化合物半導体太陽電池、色素太陽電池、タンデム型太陽電池(エネルギー密度・効率及び発電量の拡大、低コスト化)  プロトン、酸素イオン、金属イオン伝導体、活性炭素イオンラジカル包接化合物、PL担持ポーラスシリカ(カチオン二次電池、固体高分子型燃料電池)  空間空隙超伝導化合物、超電導コイル(超電導電力貯蔵)  排熱利用熱電システム(高効率熱電変換材料)  スマートグリッド(二次電池、超伝導ケーブル、電力制御素子)	機能インテグレーション型光電池システム 太陽光/熱複合発電システム  多価イオン伝導体、空間空隙酸化触媒化合物(多価イオン二次電池、SOFC)  電力用熱電システム  高温超伝導化合物、高臨界電流超電導ケーブル(超電導送電)
② 情報通信、エレクトロニクス分野: 光通信  エレクトロニクス	フォトニックファイバー(100 Gbps/チャンネル級システム) Low-k 材料(高集積・高速CMOS)	フォトニック結晶(1Tbps/チャンネル級伝送システム) ターロンプロンケット素子、単電子トランジスタ(ポストCMOS)	
③ 交通輸送分野: 自動車  鉄道	二次電池(プラグインハイブリッド自動車)酸化触媒(低公害ジーゼルエンジン車) 軽量金属、無放射ガラス(高燃費・安全自動車)	多価カチオン電池、SOFC (EV車)  高磁場発生超電導コイル(超電導リニアモーター)	
④ 医療・創薬・健康分野: 創薬・送薬・医療材料  診断医療機器	選択イオン・超分子包接機能(DDS) ポーラス金属、ポーラスシリカ、アパタイト(人工骨、人工歯根)  超電導コイル、高感度X線センサー(NMR-CT、ポジトロンCT、赤外線CT)	選択イオン・超分子包接機能、高感度センシング機能(DDS)	
⑤ 構造・インフラ分野: 建築物	軽量コンクリート、免震材料(免震建築)	耐震材料(耐震建築) 炭素無消費住宅(炭素建築)	

(C) 空間空隙制御材料の共通基盤技術

課題C (共通基盤技術)	空間空隙制御材料における物理的諸現象の観測・解析技術	(短中期課題)	(中長期課題)
	① ゲスト原子、イオンの包接構造、反応点の電子状態の観察	電子線回折、X線回折およびリードベルグ解析、MEM解析による空間空隙ゲストイオン、原子、およびホスト構造、電子状態の観察	電界電子放出顕微鏡、中性子回折、X線回折MEM解析による空間空隙ゲストイオン、原子、およびホスト構造、電子状態の観察
② 空間空隙化合物の表面・界面の観察	原子分解能STM、AFMによる空間空隙化合物の表面・界面の観察	空間空隙における物理的・化学的現象の時間分解動力学解析、反応ダイナミクス解析	
計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセスおよび構造と機能の設計・解析技術			
① ゲスト原子、イオンの包接構造、電子状態の観察	平均場埋め込み量子クラスターモデル、周期モデルを境界条件とした第一原理計算による空間空隙構造(分子動力学法)および電子構造のシミュレーション	新しい境界条件を用いた第一原理計算による量子力学的分子動力学法および電子構造シミュレーション	
② 空間空隙構造ユニット機能のモデルリングとそれら機能のインテグレーションモデル	空間空隙構造ユニット機能のモデルリング	空間空隙構造ユニット機能インテグレーションのモデルリング	