

平成28年度新たに取り組むべき 課題・領域の動向(俯瞰)について

平成27年3月17日

JST研究開発戦略センター

ナノテクノロジー・材料分野の俯瞰図（2015年版）



社会実装

デバイス部素材

物質材料

共通基盤

科学

豊かな持続性社会

地球規模の課題解決

国際的な産業競争力

生活の質の向上

システム化

量産化

高機能

コスト

信頼性

環境負荷

安全

省エネ

リサイクル

エネルギー

太陽電池
人工光合成
バイオマス
燃料電池
熱電変換

パワーデバイス
エネルギーハーベスト

環境

環境浄化膜
排ガス浄化触媒

二次電池・キャパシタ
環境モニター（デバイス）
エネルギーキャリア

健康・医療

生体適合性材料
再生医療材料
人工組織・人工臓器
診断・治療デバイス
DDS（薬物送達システム）
分子イメージング

社会インフラ （水・電力・交通・通信）

超電導線材
超軽量・高強度材料
断熱材料・耐熱材料
水処理膜
モータ・高保磁力磁石
センサネットワーク

情報通信・エレクトロニクス

極限CMOS
記録媒体
光インターコネクト
スマート・インターフェース
（センサ、ロボット、ウェアラブル）
固体照明・ディスプレイ
量子コンピュータ・通信

新興・融合 領域

スピントロニクス

プラズモニクス

シリコンフォトリソ

トポロジカル絶縁体

有機エレクトロニクス

フォトリソ結晶

メタマテリアル

量子ドット

MEMS

マイクロ・ナノフルイディクス

分子ロボティクス

ナノ粒子・クラスター

ナノチューブ/CNT

ナノワイヤ・ファイバ

グラフェン/ナノシート/
二次元薄膜

多孔性配位高分子（PCP）/
金属有機構造体（MOF）

超分子

基盤領域

高温超伝導材料

強相関電子材料

金属ガラス

複合材料

イオン液体

機能性ゲル

金属材料

磁性材料

半導体材料

酸化物材料

分子・有機材料

生物材料

設計・制御

分子技術

元素戦略

ナノ界面・
ナノ空間制御

マイクロ・ナノ
トライボロジー

ナノ熱制御

バイオ・人工物
界面

バイオ
ミメティクス

マテリアルズ・
インフォマティクス

製造・加工・合成

フォトリソグラフィ
ナノインプリント
ビーム加工
インクジェット

自己組織化
結晶成長
薄膜、コーティング
付加製造（積層造形）

計測・解析・評価

電子顕微鏡
走査型プローブ顕微鏡
X線・放射光計測
中性子線計測

理論・計算

第一原理計算
分子動力学法
分子軌道法

モンテカルロ法
フェーズ・フィールド法
有限要素法

共通支援策
【システム化促進策】

教育
人材育成
研究インフラ
異分野融合
国際連携
知的財産
標準化
EHS・ELSI
産学連携
府省連携

ナノサイエンス

物質科学、光科学、生命科学、情報科学、数理科学

主要な研究開発領域（2015年版）

俯瞰区分	研究開発領域
環境・エネルギー	太陽電池 (前回2/26議題)
	人工光合成
	燃料電池
	熱電変換
	蓄電デバイス
	パワー半導体デバイス
健康・医療	グリーン触媒
	生体材料（バイオマテリアル）
	再生医療材料
	薬物送達システム（DDS）
	計測・診断デバイス
	バイオイメージング
社会インフラ	分子イメージング
	構造材料（金属）
	構造材料（複合材料）
	分離機能材料
	放射性物質除染、減容化
	高温超伝導（線材）
	センシングデバイス・システム

俯瞰区分	研究開発領域
ICT・エレクトロニクス	超低消費電力ナノエレクトロニクスデバイス
	スピントロニクス
	二次元原子薄膜
	フォトニクス
	有機エレクトロニクス
	MEMS
	異種機能三次元集積チップ

俯瞰区分	研究開発領域
設計、制御	界面制御
	空間・空隙構造制御
	バイオミメティクス
	分子技術
	分子ロボティクス
	元素戦略・希少元素代替技術 (前回2/26議題)
共通基盤／科学技術	マテリアルズ・インフォマティクス
	トップダウン型プロセス（半導体超微細加工）
	ボトムアップ型プロセス（自己組織化等）
	走査プローブ顕微鏡
	電子顕微鏡
	放射光・X線
計測	その他の主要な計測技術
	物質・材料シミュレーション
	リスク評価・リスク管理・リスクコミュニケーションと社会受容
理論、計算	
EHS, ELSI	

グローバル、国内の社会的期待や研究開発動向等を踏まえ、3章の研究開発領域として41領域を選定

（俯瞰報告書2015年版4月発刊予定）

触媒

- 2016年の世界の触媒市場は195億ドルとの予測 (2013、米Freedonia Group社)。途上国における化学薬品や精製、ポリマー産業の需要拡大、高付加価値・高効率な触媒へのニーズが市場拡大を牽引。また、日本の化学産業の出荷額は約40兆円規模で、これは輸送用機械器具に次ぐ第2位。
- 化学工業で稼動する化学プロセスの9割以上が触媒反応とされる。各社における現行プロセスは、技術的にかなりの程度最適化されている。
- 触媒は、それ自体が非常に多様である。資源、用途、触媒の形態(均一・不均一、金属・錯体・酸化物、分子触媒)等で様々に分類

触媒の主要用途による分類

資源転換・原料多様化(石油、天然ガス、バイオマス)、基礎化学品

ポリマー合成(バルクケミカル)

機能性化学品(ファインケミカル・高機能品、医農薬品)

自動車排ガス触媒

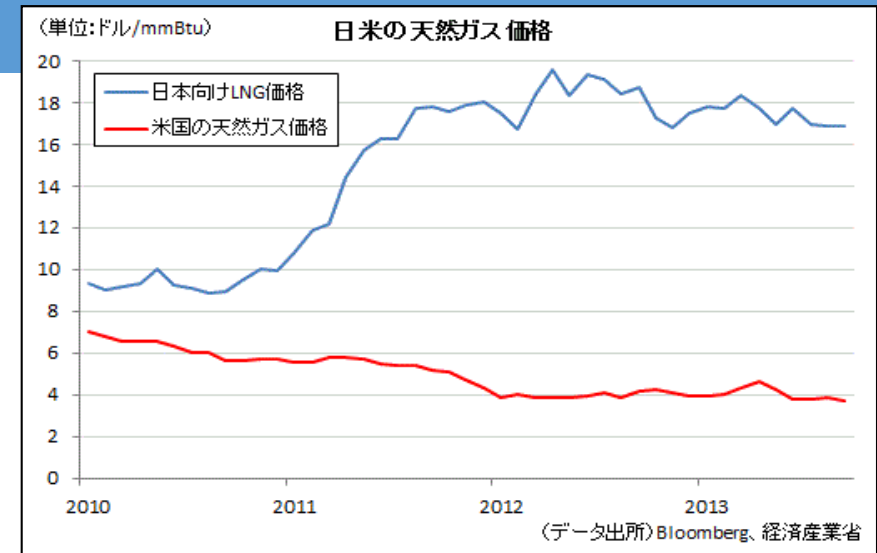
光触媒(有機物分解・浄化、人工光合成)

燃料電池用触媒

- 多様化する資源への対応の観点では今後不均一系触媒が、精密合成などファインケミカルの分野では均一系触媒が主体的と考えられる。不均一触媒の研究は泥臭く、均一触媒は大型プロセスに向かないケースが多いなど、それぞれに長短がある。
- 日本の化学メーカーの多くは、より付加価値の高いファインケミカル(高機能品)へ収益の軸足を徐々にシフトする戦略。原料系は、スケール・コストの観点で困難な競争を迫られる状況にある。
- プラント建設の進行数では、2012年まで中国が1位であったが、シェール革命に伴い米国が急増、中国を上回る。インド、ロシア、イラン、メキシコ、ブラジルも多く、シンガポールやドイツはやや減少傾向。北米のアンモニア・エチレンプラントは急増。中国では安価な石炭原料からの化成品を量産。

シェール革命の波

- シェールガスの採掘技術が普及
 - 天然ガスの価格低下
 - エネルギー・化学産業の競争環境に大きな構造変化
- シェールガスの主成分はメタン(約90%)であり、エタン・プロパン・ブタンなどの天然ガス・液も含まれる。シェールガスに含有する安価なエタンをクラッキングすることにより、安価なエチレンが生産できる。
- 米国の石油化学産業はシェールガス含有エタンやプロパンから、エチレン、プロピレンといった石油化学の基礎製品の製造を開始。今後さらにBTX(ベンゼン、トルエン、キシレン)留分の製造がターゲット。これまで米国外に生産をシフトしていたアンモニアやメタノールの製造プラントの北米回帰が始まった。
- **シェールガス含有エタンのクラッキングから合成されるエチレンの価格は、ナフサクラッカーの1/4~1/9。**米国からの安価なエチレン誘導体が拡大すれば、世界のナフサクラッカーの競争力は著しく低下する懸念がある。日本からの輸出は多大な影響を受ける。ポリエチレン、塩ビ、スチレン、酢酸ビニルなどのエチレン誘導体は、コスト差から競合することが困難になる。
- 米国は、南米、欧州、アジア向けにエチレンプラントを増設。エチレンが増産されると相対的にプロピレン、ブタジエン、ベンゼンが世界的に不足するとの予測。ナフサクラッカーの衰退傾向に伴い、新たなプロセスが求められる。Fischer-Tropsch 合成(C-C結合生成)、メタンやエタンの酸化脱水素、メタノールやエチレンからプロピレン、ブタンの酸化脱水素によるブタジエンなど、新しい合成プロセスと触媒が必要となる。現状では、日本での生産はコスト競争力の観点から困難になるとの予測。
- メタンを火力発電や都市ガスで燃焼して使うのではなく、直接変換してメタノール、オレフィン、ブタジエン、BTXを製造することができれば、極めて大きなエネルギー削減(CO₂排出削減)になるため、多くの取組みが模索されている。日本の産学官全体でのシナリオ構築が求められる。



- 基礎化学品の製造プロセスでは、資源の有効利用、省エネルギー、環境負荷低減が求められており、これらニーズに応じたさらなる高機能触媒や新しい概念の触媒の開発は、必要不可欠。
- すなわち基幹原料の多様化と、コスト・スケールメリットのある省エネルギープロセスへの転換促進、特に、**適切なタイミングでの技術導入**、などの観点が極めて重要。
- 不均一触媒の研究では、ただ単に分離・回収・再使用ができるというだけでなく、均一系触媒と同等あるいはそれらを凌駕する活性・選択性を有するものの開発につながる必要がある。そのためには、均一系触媒研究者と不均一系触媒研究者のより密な連携と、さらに触媒研究者以外からの、多様な分野間の連携が必要となる。
- 文科省、経産省、JST、NEDOの各主要プログラム・プロジェクトでは、一定の規模・期間で関連課題を推進。重要な成果も出つつある。
- しかし、基幹原料多様化への道筋や、エネルギー・CO₂削減も合わせた観点では、**産学官で大局的な戦略・シナリオを作成・共有して臨む必要**があると考えられる。
- また、**極めてハードルが高い研究である**ために、若手研究者の育成・誘導が必要。関連する研究論文は、米国の1/4程度、中国の半分程度となっている。米・中の伸びが大きいことから、相対的に研究論文のシェアは低下。

これまで日本の触媒研究は、野依(名大)、鈴木(北大)、根岸(パデュー大)らノーベル化学賞受賞者を輩出していることからわかるように、お家芸の一つといえる研究分野。ファインケミカル、バルクケミカル合成の基礎研究は、過去いずれも大きく発展。不均一系触媒(固体触媒)、均一系触媒ともに世界をリードする多くの基礎研究が成果を上げ、実用化されてきた。

資源転換・原料多様化

- ・ シェールガスなどの低級不活性アルカンの転換のために、**マイクロ波利用触媒反応や電場アシスト触媒反応が提案されているが、投入エネルギーに見合う効果が得られるかは大きな課題。**
- ・ バイオマス転換の触媒として、セルロースの選択的な触媒分解、リグニン分解によるフェノール合成、ポリオールを選択水素化分解、フルフラール類の選択合成などがある。

バルクケミカル

- ・ ポリマー合成触媒としては、オレフィン-ジオレフィンの立体特異性ランダム共重合、オレフィンブロック共重合体の触媒的合成などが研究されている。
- ・ ゼオライトを触媒とした気相ベックマン転位、金-酸化ニッケル触媒によるメタクリル酸メチル製造プロセスなどが国内企業により低環境負荷プロセスとして実用化。

環境

- ・ 元素戦略の観点から、**自動車排ガス触媒(Pt/Rh/Pd等の使用量低減や、耐久化)がターゲット。将来的には完全脱貴金属化を目指す。日本の触媒製品市場は、自動車排ガス用途が6割を占める。**

ファインケミカル

- ・ 分子構造や配位子の精密分子設計に基づいた**触媒の分子・原子レベルでの設計指針の確立や、精密有機合成に関する反応開発において、我が国の研究開発レベルは極めて高い。**
- ・ 分子デザインが容易に行える有機分子のみならず、酸化反応に有効な無機物のみからなる無機分子触媒も、高いレベルにある。

世界的に注目される基礎研究成果例：元素間融合

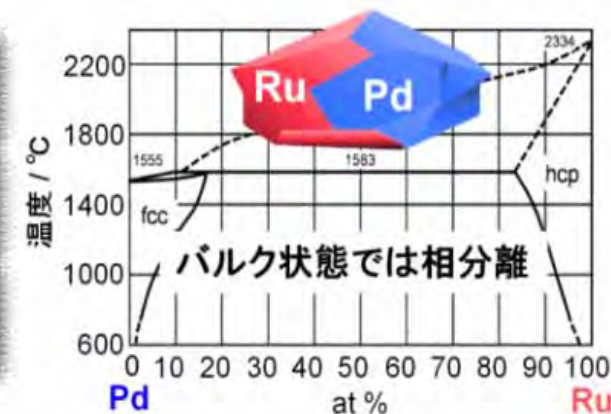
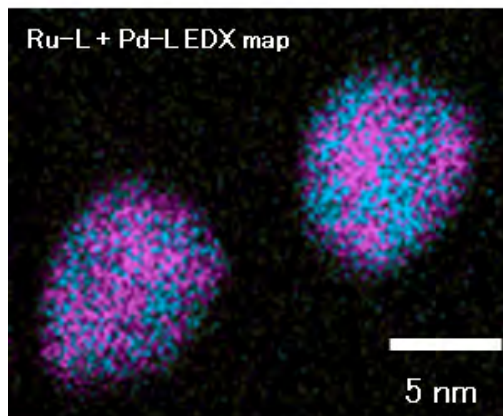
- 北川(宏)(京都大学)らはパラジウム(Pd)とルテニウム(Ru)を原子レベルで固溶した合金ナノ粒子を得ることに成功。周期表上でPdとRuの間に位置する高価なロジウム(Rh)と等価な電子状態を持つことから、ロジウムを凌ぐ高性能触媒として期待。

バルク状態では相分離する多数の金属元素の組み合わせを、原子レベルで固溶化させること(元素間融合)で、多くの新しい物質を創成すると共に、元素間融合による革新的な材料の開発を行う。

ナノサイズ化、非平衡合成、水素プロセスによる「元素間融合技術」の確立

元素周期表上の相容れない金属元素同士の徹底的な融合と物質評価

機能がロジウムと同等、価格が1/3の人工ロジウムとして期待。



六方最密格子(hcp)構造



面心立方格子(fcc)構造

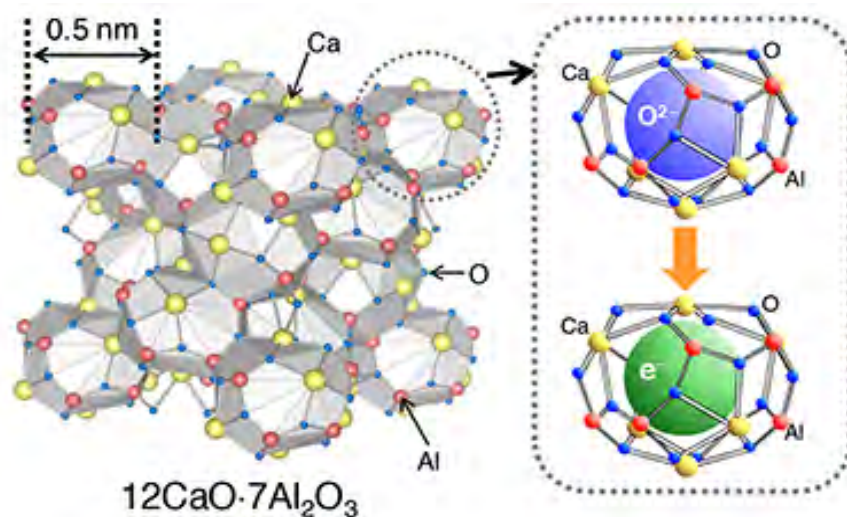
新規Pd-Ru固溶体ナノ合金触媒



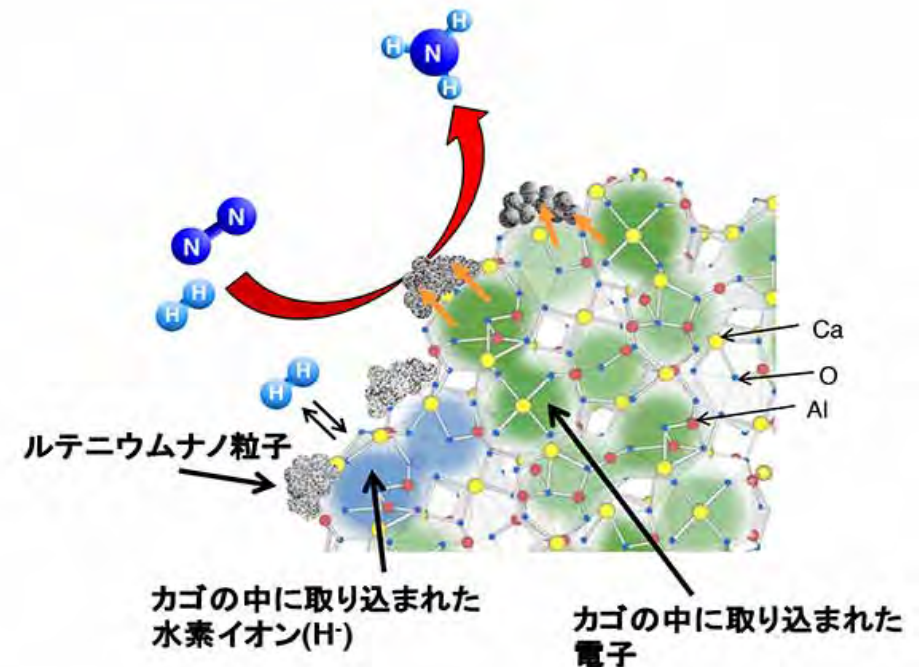
高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡(HAADF-STEM)による元素マッピング

世界的に注目される基礎研究成果例：エレクトライド

- 細野・原(東工大)らは、 $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ (以下C12A7) の構造の中に電子を取り込んだエレクトライドにルテニウムのナノ粒子を固定することで、高性能なアンモニア合成触媒を実現
- 従来のルテニウム触媒と比較すると、10倍の触媒性能を発揮し、さらにアンモニア合成の活性化エネルギーはおよそ半分になることを見出した。アンモニア合成に必要なエネルギーを大幅に低減できる可能性がある。



C12A7 の結晶構造: C12A7エレクトライドでは、カゴの内部に酸素イオンの代わりに電子(緑, e^-)が入っている。



ルテニウムを担持したC12A7エレクトライド上でのアンモニア合成のメカニズム

国	概要
	均一系触媒(銅やPd)を用いたクロスカップリングや金触媒で先駆的成果。金属錯体触媒から有機分子触媒へと元素戦略に基づく研究成果が次々と生まれリード。官能基化を伴わないC-H活性化に基づく触媒反応の発展も目覚ましい。マイクロフロー反応装置などを利用した反応制御の分野でも、小規模装置による大量合成が可能になりつつある。近年の化学工学の退潮、企業における抜本的な新規プロセス開拓意欲の低下が懸念材料。
	基礎研究、産業化の双方で先端をいく。分子触媒、特に酸塩基触媒の開発研究、官能基化を伴わないC-H活性化に基づく触媒反応の開発では顕著な成果。バイオマス転換による水素製造や金触媒を用いたアミノ化・異性化、電極触媒などでもリード。化学工学・プロセス研究はバイオマス変換、バイオマスリファイナリーを中心に発展。シェールガス革命を背景に、ガス転換プロセスが数多く立ち上がっている。
	基礎研究から産業化まで高い能力を有する。イオン液体、マイクロフローシステム分野での研究レベルは高い。金触媒、ナノポーラス金触媒、ナノポーラス銅触媒などではドイツが世界をリード。FP-7やHorizon2020をベースに多くの多国間協力型プロジェクトが進められている。また民間企業が多く、大学の研究を支えており、これがよい結果を生み出している。
	日米欧を急速に追い上げ。近年では独自の優れた触媒の研究が増加。特に有機合成分野(触媒や新反応開発)で力をつける。例えば水素製造、バイオマス転換、金触媒、Pd触媒によるタンデム反応、電極触媒で多くの成果。ゼオライトの研究で優れた不均一触媒が多数。応用研究・開発力について、他の先進国と肩を並べる水準に到達。化成品生産だけでなく、バイオマス変換、バイオマスリファイナリーを目標とした開発も大々的。
	基礎研究では、一部のリーダー的研究者の活躍がこの分野をリード。燃料電池用の触媒、水素製造触媒、石油化学触媒など、民間企業が注力。応用・開発研究は目覚ましいものがある。石油化学産業は、キシレンプラントなどでアジアをリード。化成品製造のエネルギー効率についても、日本に勝るとも劣らない状況になっている。

資源転換・原料多様化、 バルクケミカル	・ シェールガスや木質バイオマス为原料とした化学反応の体系化、多様化、高性能化（※ただしバイオマスは生産性に課題あり。重要中間体を特定した取り組みが鍵か） ・ メタン・エタン改質、メタノール合成、アンモニア合成など、平衡制約が大きく、反応条件の大幅な緩和が望まれる反応の高効率化 ・ 環境触媒（排気ガス浄化）や人工光合成（光触媒、炭素還元）の大幅な高性能化と耐久化、活性成分としての担持金属の脱貴金属化 ・ 燃料電池用途に関連して、水素製造技術と、貴金属低減化、将来の完全脱白金化
ファインケミカルズ	・ 高機能酸化触媒の開発（還元反応、酸・塩基反応に比べて酸化反応の開発が遅れ） ・ 分子触媒をリンカーを介して規則正しく配列させたり、担持金属種のサイズや構造の厳密制御、結晶性酸化物の使用など、これまでにない分子論的な観点からの触媒設計 ・ 酸素を酸化剤とした直接脱水素クロスカップリング反応のための触媒開発 ・ 医農薬品の中間体製造においては、鏡像異性体など分子式は同じでも構造が異なる分子の作り分けが高収率にできる触媒
共通事項	・ マテリアルズ・インフォマティクスを活用した触媒設計（データ科学と、合成、計測、理論・計算・シミュレーションの連携・融合によるアプローチ） ・ より高度な立体化学制御。活性点近傍のみならず、周辺構造の親・疎水性制御、3次元構造制御、特異的な基質の取り込み・識別能の付与など、反応活性「空間」の制御 ・ 均一系触媒研究者と不均一系触媒研究者のより密な連携により、両者の長所を併せ持つような触媒の開発。 ・ 特に原料系では将来プロセスを最初から見込んだ産学官の全体シナリオ・戦略の共有

資源転換・原料多様化、 バルクケミカル	• 低級炭化水素の選択的酸化のための触媒反応開発 • 再生可能資源(高酸化状態炭素化合物)の選択的還元のための触媒反応開発 → メタン・エタン(シェール、メタンハイドレート)や炭酸ガス(工場、発電所など)から省エネ・低環境負荷で基幹原料であるメタノール、エチレン、オレフィン、BTXの効率的製造。 - メタン2量化、メタン-CO₂カップリング、エタン由来で入手可能なC₈炭化水素の2量化、メタノール合成(※メタンの直接変換反応は超高難度反応。海外はエタンクラッカー)、エタンから直接反応で基礎化成品(ex,アクリロニトリル、メタクリル酸メチル)、従来の多段階ステップを短縮する画期的プロセス • 自動車排ガス触媒 →完全脱貴金属化、リーンNO_xの浄化(PdやRhを凌駕する低温活性)。 →ディーゼル・エンジン排ガスおよびPM浄化触媒(低温排ガス高活性触媒、PM連続酸化除去)
共通事項	• メソ～マクロ細孔内の物質輸送計測技術 →マイクロ～マクロ細孔の構造制御(空間制御)は、反応分子を効率的に触媒表面に到達させるための重要アプローチ。その有効性検証や、最適構造の推定・構築の為の、物質輸送を実測する技術開発。 - 触媒活性サイトで起こる反応(Å、ピコ秒)と反応器全体(メートル、秒)を繋ぐ最適な反応器構造の設計指針、運転条件制御を提示する為の技術。コアシェル型、MOF、PCPのスケール化。 • マテリアルズ・インフォマティクスを活用した触媒設計 → 触媒活性のみならず、選択性、触媒劣化、耐久性の予測。計測とシミュレーションから、活性点・活性因子の同定、触媒物質構造と反応性との相関解析、実条件下のオペランド計測。触媒は平均として何が起きているかが分かっても、局所的には未解明な部分が多い。複雑現象の「マルチフィジックス解析」と、ナノスケールの機能がマクロスケールの性能に与える影響を解明する「マルチスケール解析」が求められる(触媒はごく短時間にしか生成しない中間体が複雑な現象・経路をたどって反応系全体に影響を与えており、極めて困難)。 → 実験・合成ではハイスループットスクリーニング手法を開発し、組成の異なる触媒候補数百万個を基板上にジェットプリンターでドットとして作成し触媒機能を評価するなど、国際競争上の時短戦術も重要

機関	名称	期間
経済産業省 / NEDO	グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発(革新的触媒)	24 - 33
	二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発	26 - 33
	有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発	26 - 33
	非可食性植物由来化学品製造プロセス技術開発	25 - 31
文部科学省 / JST	元素戦略 拠点形成型(電池・触媒拠点)	24 - 33
	ACT - C(低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出)	24 - 28

その他、科研費、JST戦略的創造研究推進事業CREST・さがけ主要研究領域：

→ 「元素戦略」、「分子技術」、「超空間」の各領域において、関連するいくつかの研究課題が進行中