

戦略的創造研究推進事業  
CREST・さきがけ複合領域  
研究領域事後評価用資料

「エネルギー高効率利用のための相界面  
科学」(CREST)

「エネルギー高効率利用と相界面」(さきが  
け)

研究総括 花村克悟

2019年2月



## 目次

1. 研究領域の概要 .....	1
(1) 戦略目標 .....	1
(2) 研究領域 .....	6
(3) 研究総括 .....	7
(4) 採択課題・研究費.....	8
①採択課題・研究費（CREST） .....	8
②採択課題・研究費（さきがけ） .....	9
2. 研究領域および研究総括の設定について.....	12
3. 研究総括のねらい .....	16
(1) CREST .....	16
(2) さきがけ .....	16
(3) 複合領域として .....	16
4. 研究課題の選考について.....	17
(1) CREST .....	17
(2) さきがけ .....	18
(3) 複合領域として .....	18
5. 領域アドバイザーについて.....	26
(1) CREST .....	26
(2) さきがけ .....	26
(3) 人選に当たっての考え方.....	28
6. 研究領域のマネジメントについて.....	28
(1) CREST .....	28
(2) さきがけ .....	29
(3) 複合領域として .....	31
7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について.....	35
(1) CREST .....	35
(2) さきがけ .....	44
8. 総合所見 .....	58

## 1. 研究領域の概要

### (1) 戦略目標

「エネルギー利用の飛躍的な高効率化実現のための相界面現象の解明や高機能界面創成等の基盤技術の創出」

#### [達成目標]

- エネルギー高効率利用化に向けた相界面におけるエネルギー輸送・変換機構の解明
- ナノ、メソ、マクロなどの異なるスケールの相界面現象を総合的に解析・設計するためのモデリング、シミュレーション技術の創出
- 相界面構造を制御・最適化するための数理科学的な手法などの基盤技術の創出
- 機器やデバイスの理論的最高性能を実現するための高機能界面の創成

#### [将来実現しうる重要課題の達成ビジョン]

様々なエネルギー機器等において必ず生じるエネルギー損失を極限まで減少させるためには、相界面科学に関する基礎に立ち返った研究が必要であることが、応用段階の研究開発プロジェクト等において指摘されている。相界面は多種に及ぶが、機能的には以下のように大別できる。

- ・熱流体力学的界面：流体力界面、伝熱界面、分離・吸着界面など
- ・化学界面：化学反応界面、電気化学界面、光化学界面など
- ・固体物理界面：熱電界面、光電界面、電子デバイス界面など

これら界面における現象の解明は、後述する環境エネルギー分野で研究開発目標となっている様々な新技術や既存の基盤技術において共通して現れる課題の解決に向けた重要な鍵となっている。本戦略目標により、相界面現象の基礎学理や制御・最適化技術を深化させることによって、相界面でのエネルギー損失を大幅に減少させることを可能とし、新しい相界面機能の発現機構の発見や創造への糸口を得ることを目指す。また、ナノ、メソ、マクロといった異なるスケールの現象を総合的に解析・設計するためのモデリングやシミュレーション、相界面構造を具体的に制御・最適化するための数理科学的手法などを開拓することにより、先端的な基礎研究の成果を実際の機器やシステムの設計に効果的に適用することを目指す。

このように、エネルギー輸送・変換に関わる基本的な現象の解明に向けて、既存の専門分野を越えて、あるいは異なる分野の科学的知識を融合し、総合的に取り組むことによって、機器の飛躍的性能向上、低炭素化、低コスト化を目指す。さらに、それらの広範かつ迅速な社会普及と産業振興を達成する道が拓かれることにより、グリーンイノベーションの目標実現に向けた重要課題「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」に幅広く貢献することを目指す。

なお、本戦略目標は、エネルギー輸送・変換を担うのみならず、社会の様々な生産・消

費活動にも関わる相界面科学の構築と深化を推進するものであり、その社会経済的成果は中長期的にみても多様な技術の優位性、卓越性として結実するものと言える。

研究成果の展開を目指す技術分野は以下のとおりである。なお、以下に挙げた技術分野のほか、エネルギー利用効率の抜本的改善に向けた課題の解決に貢献することが期待される。

#### ○複雑な熱流動制御による熱機関の極限的効率向上

エネルギー変換の大半を担う各種エンジンや火力発電プラント等の熱機関の不可逆損失のほとんどは、熱移動に伴う温度差と、圧縮・膨張行程の流動損失による。気体や液体の不規則な流れ（乱流）や沸騰などの気体／液体／固体相界面のマイクロからマクロまでの熱物質輸送の素過程や、固体表面と液体との接触状態（濡れ性）等の表面性状の制御により、熱交換損失や流動損失が大幅に低減され、システムの理論的限界性能への到達度が向上し、大幅な低コスト化が達成される。

#### ○輸送機器の摩擦抵抗削減による省エネルギー／二酸化炭素排出削減

大幅な二酸化炭素排出削減を課せられる運輸部門は、自動車はもちろんのこと、我が国の総排出量に無視し得ない割合を占める海運も視野に入れなければならない。乱流や、例えば気体と液体のように異なる二相が混ざりあった流れ（二相流）における気体／液体／固体界面での複雑流動を制御することで、自動車、船舶、さらには航空機等の大幅な抵抗低減を達成することが可能となり、省エネルギー、二酸化炭素排出削減、製品競争力の向上に貢献する。

#### ○燃料電池や蓄電池等の電極界面反応機構解明及び相界面形態の最適化

燃料電池や蓄電池等マイクロ多孔質電極内では、例えば、ガス、イオン、電子の拡散と電気化学界面（固体／固体／気体）における反応が性能を決定している。この電気化学界面における素過程を、高度なシミュレーションや先端計測技術に基づき解明することにより、多元系多孔質電極の相界面形態の最適化等、ブレークスルーが達成され、飛躍的な性能向上と低コスト化に貢献できる。

#### ○伝熱・物質交換・相分離技術の高度化によるヒートポンプの革新

空調機やヒートポンプでは、効率改善や機器のコンパクト化、冷媒使用量の削減などが課題である。革新的な伝熱相界面、物質交換相界面、相分離相界面における素過程の解明に基づく最適設計技術と新たな製造技術を開発し、原点に立ち戻った基礎研究を行うことで課題解決に貢献する。

#### ○分離膜の構造の詳細解析及び孔径・相界面形態の高性能化

様々な種類の分離膜における液体／固体相界面の機能と形態を最適設計するために膜構造

の精密な解析、表面性状や孔径の制御技術を開発し、飛躍的な性能向上と低コスト化に貢献する。

#### ○パワー半導体デバイスの界面制御による高効率化

半導体デバイスの多くは異なる物質の薄膜を重ねた多層膜構造で、異なる物質の間に存在する界面が多層膜の物性を左右する重要な因子である。半導体デバイスの高効率化には、表面に露出していない「埋もれた」構造である界面の基礎物理的な理解が不可欠である。異種固相界面の形成プロセスの体系的な基礎研究により、半導体界面におけるキャリア輸送損失を大幅に削減でき、SiC、GaN 等のワイドギャップ半導体素子を用いた電力制御用集積回路やLED 及び半導体レーザー等の飛躍的な性能向上と低コスト化に貢献する。

#### [具体的内容]

エネルギーを利用する様々な機器やシステムに必ず存在する相界面での熱流体力学的、電気化学的、あるいは電磁気学的な現象は、機器の機能や性能を決定している。そして、エネルギー技術の理論的最高性能（限界性能）の実現を阻むエネルギー損失の多くはこの相界面で生じている。そこで、相界面を介して移動する種々のエネルギーキャリア（原子、分子、化学種、イオン、電子、フォトン、フォノンなど）の輸送過程あるいは他のキャリアに変換される素過程の解明、相界面を最適化、制御、製造するための設計技術の開発に向けた基礎研究に取り組む。具体的には、以下に大別する研究アプローチを想定する。

##### 【アプローチ1】相界面現象のプロセスおよび素過程の解明

エネルギーキャリアのフロー：伝導、拡散、放射、蒸発、昇華、化学反応、電荷移動、溶解、凝固、析出、散乱・反射等

界面の形態：2相/3相界面、p/n接合、ショットキー接合、ヘテロ界面、量子ドット等

非理想状態：欠陥、不純物、劣化、酸化、エロージョン・コロージョン、摩耗、変形、ファウリング等

##### 【アプローチ2】相界面を最適化、制御、製造するための設計技術の開発

界面構成物質の選択、界面モルフォロジー（形状、キャビティ、微粒子、薄膜、コーティング、多孔質等）、反応過程、界面変形性能（弾性、粘弾性）などの多変数の最適化、マルチスケールのエネルギーキャリアフローの制御による損失低減

##### 【アプローチ3】前2項を支える計測技術とモデリング・シミュレーションの高度化

マイクロ、メソ、マクロの素過程現象、それらの機構を解明するための計測技術、素過程のモデリングに基づく、マルチフィジックス、マルチスケール現象の数値シミュレーション、数理科学

[政策上の位置付け（政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等）]

新成長戦略（2010年6月閣議決定）において、「グリーン・イノベーション」（環境エネルギー分野革新）を成長の原動力の一つとして、我が国のトップレベルの環境技術を普及・促進し、世界ナンバーワンの「環境・エネルギー大国」を目指すとされている。「グリーン・イノベーション」には、2020年における温室効果ガスの25%削減目標を掲げた地球温暖化対策も含まれており、成長戦略実行計画（工程表）では、低炭素化のためにエネルギー高度利用の推進が挙げられている。

「科学技術に関する基本政策について」に対する答申（2010年12月総合科学技術会議）においては「資源・エネルギーの制約（中略）等の問題は、中長期的には世界的に深刻かつ重大な課題となることが予想される。このため、これらの課題を世界に先駆けて克服」すること、また「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」として「省エネルギー技術の開発」に関する研究開発を推進することとされている。

また、「平成23年度科学・技術重要施策アクション・プラン」（2010年7月）において、「エネルギー供給・利用の低炭素化」あるいは「エネルギー利用の省エネ化」にあたっては、「多様な技術を多面的に展開すべき」であり、「これら各技術の有する温室効果ガス排出削減ポテンシャルを最大限に活かし、それぞれの特徴に応じた導入・展開を図るための研究開発と普及促進の取組が必要である」とされている。特に、太陽電池、蓄電池、燃料電池等に対して提示されている施策パッケージにおいて、基礎研究への立ち返りとその解決に向けた先端的・革新的な研究開発の重要性が指摘されている。

[他の関連施策との連携および役割分担・政策効果の違い]

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）が実施したエネルギー変換に関する研究開発プロジェクト等において、相界面科学に関する基礎研究に立ち返った取り組みの必要性が指摘されており、本戦略目標における基礎に立ち返った研究成果を活用されることが期待される。具体的には、固体酸化物型燃料電池（SOFC）の電解質膜や電極触媒等の耐久性の向上や、広い温度範囲かつ低い加湿状況に対応できる固体高分子型燃料電池（PEFC）用の非貴金属電解質膜の開発が求められており、電解質膜や電極触媒層における相界面での劣化機構解明に関する基礎研究が必要とされている。二次電池に関しても、性能、信頼性の飛躍的な向上とコストの大幅低減のためには、電極－触媒間での物質輸送・反応メカニズムをサイエンスに立ち返って解明することが必要とされている。水素製造光触媒をはじめとする触媒反応システムにおいては、その場観察等の高度な計測解析手法によって過酷な実条件下での現象解明が重要な課題とされている。その他、高効率火力発電においては、低品位燃料の改質や不純物処理等が益々困難なものとなっており、混相流－壁面－触媒等の様々な相界面での熱・物質輸送現象を解明することが必要とされている。

界面制御に関連した主な研究開発としては、2012年度に文部科学省が公募した「ナノテク

「ナノテクノロジーを活用した環境技術開発プログラム」が挙げられるが、当該プログラムは、拠点機関が企業等と協力して出口側の技術ニーズを抽出し、研究者を結集した産学官共同研究拠点を構築することにより、先端的な計算科学や計測技術を活用した課題解決に取り組むものである。また、同拠点においては、長期的視野の下、我が国のナノテク研究を担う人材育成も推進している。

本戦略目標では、相界面を構成する材料研究に加えて、相界面におけるエネルギーと物質の輸送・反応に関する速度論的観点からの理解を重視している。また、上述した NEDO の例を始め、これまで実施されたプロジェクト等の研究開発において基礎研究への立ち返りが必要となった課題等を主な対象として、エネルギー問題解決に貢献する技術を相界面現象に関するナノ、メソ、マクロのスケールをカバーする研究開発から、新技術シーズの創出を目指すものであり、上述した関連施策と目的や研究内容において相互補完関係にあり、研究成果の共有等の連携が期待される。

[科学的裏付け（国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等）]

「ナノテクノロジー・材料分野 科学技術・研究開発の国際比較 2009 年版」（2009 年 5 月 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター）によれば、「エネルギー・環境分野は材料科学の進展と直結しており、その革新的な技術開発をもたらす可能性のあるナノテクノロジー・材料技術との融合は必須と言える」としている。また、「JST ナノテク関連プロジェクトに象徴されるように、物理、化学、材料・高分子など幅広い分野に界面・表面のサイエンス・テクノロジーの基礎研究が広がり成果につながっている。（中略）基礎研究が必ずしも“真”の基礎的、基盤的研究になっておらず、新しい研究や大きな革新的技術への展開につながっていない場合も多い」としている。

国際的な動向としては、ドイツが先行して相界面科学を重要視し、2007 年 11 月、連邦政府のエクセレンス・イニシアティブの下、「国際的に競争力のある研究を行う中核的研究機関（クラスター・オブ・エクセレンス）」として「スマート・インタフェース・センター（CSI）」を設立し、化学、材料科学、数学、機械工学、物理の 5 部門の研究者の連携により、相界面の理解・設計にいち早く取り組んでいる。

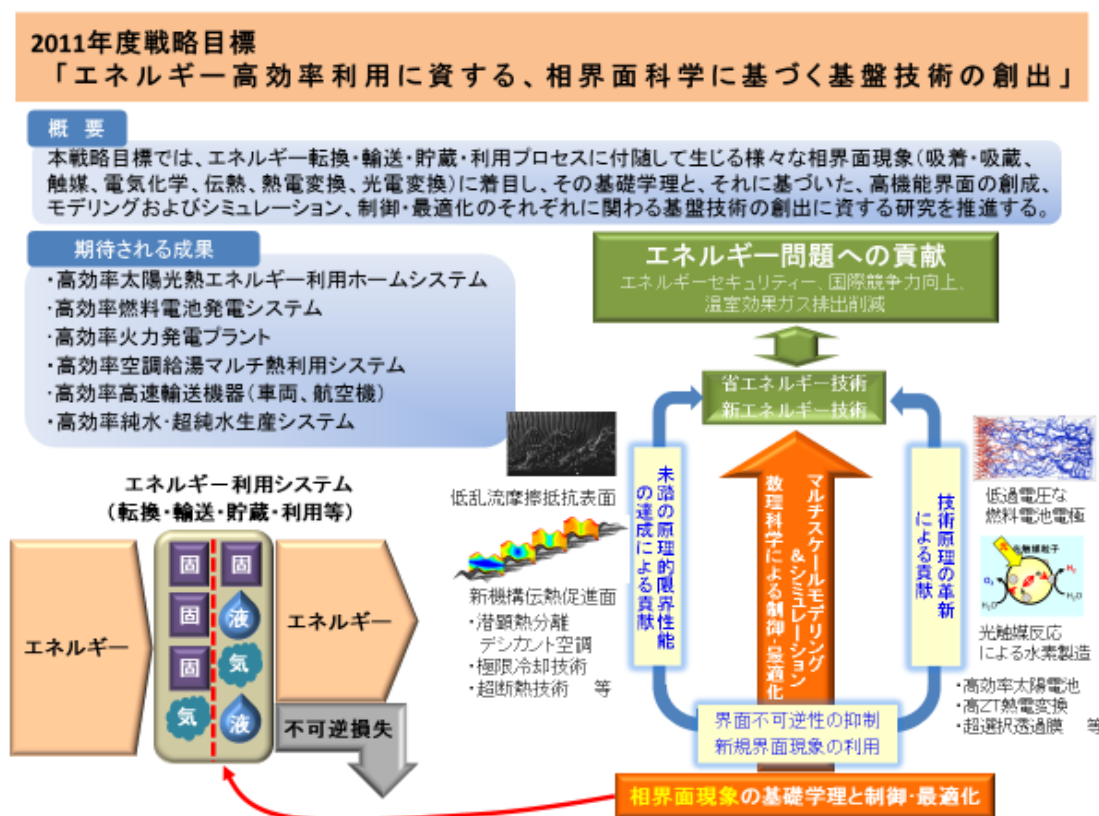
JST 研究開発戦略センターにおける「高効率エネルギー利用社会を支える相界面の科学」ワークショップ（2010 年 8 月）では、多分野の研究者により具体的な研究開発課題及び推進方策等について検討が行われ、二次電池、燃料電池、熱電変換、水素製造光触媒等の飛躍的性能向上に向けて、相界面科学研究の推進の重要性と必要性が再確認されている。また、新たなブレークスルーを生むためには、現象解明や材料開発に強い化学系研究者と、システム実現に優れた機械系研究者が、超高効率エネルギー利用を目的に結集し、密接な連携と融合を図ることが有力な方法であるとしている。

[留意点]



CREST の研究領域「ナノ界面技術の基盤構築」を始めとする分野横断的な研究領域（ナノテクノロジー、数理科学関連）など本戦略目標と関連する研究領域と連携し、事業全体として効果的・効率的に研究を推進することが必要である。

(以上、国が定めた戦略目標より引用)



## (2) 研究領域

「エネルギー高効率利用と相界面」(さきがけ) (2011年度発足)

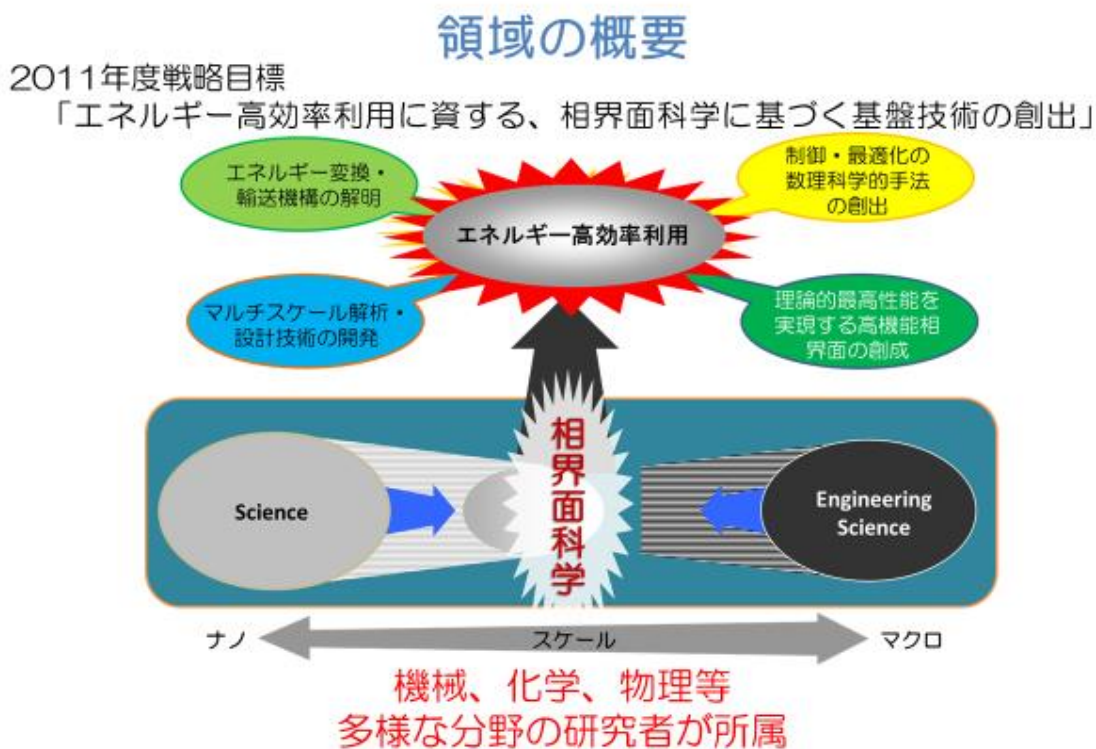
「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(CREST) (2011年度発足)

本研究領域は、豊かな持続性社会の実現に向けて、エネルギー利用の飛躍的な高効率化を実現するため、エネルギー変換・輸送に関わる相界面現象の解明や高機能相界面の創成などの基盤的科学技術の創出を目的としている。

具体的には、様々な相界面現象の基礎学理や制御・最適化技術を深化させることによって、エネルギー損失の大幅な減少を可能とする相界面、あるいは、高効率エネルギー利用のための新たな高機能相界面を創造することに挑戦する。そのためには、ナノ、メソ、マクロといった異なるスケールの現象を統合的に解析・設計するための技法、相界面構造を制御・最適化するための理論的手法などを開拓することなどが必要である。さらに、これら

の先端的な基礎研究の成果を、実際の機器やシステムの設計に効果的に適用し、それらの飛躍的性能向上、低炭素化、低コスト化に繋げることが重要である。

本研究領域では、図に示したように、機械、化学、物理等の多様な分野の研究者による専門分野を超え、あるいは異なる分野の科学的知識を融合し、Science 及び Engineering Science の両面からのアプローチを行う。それにより、エネルギーの高効率利用に向けた相界面におけるエネルギー変換・輸送機構の解明、マルチスケールの相界面現象を総合的に解析・設計するための計測、モデリング、シミュレーション技術の開発、相界面構造を制御・最適化するための数理科学的な手法などの基盤技術を創出するとともに、機器やデバイスの理論的最高性能を実現するための高機能相界面を創成することを最終目標とする。



### (3) 研究総括

「エネルギー高効率利用と相界面」(さきがけ)

橋本和仁	(東京大学大学院工学系研究科 教授	2011年12月～2013年3月)
笠木伸英	(科学技術振興機構 上級フェロー	2013年4月～2015年6月)
花村克悟	(東京工業大学工学院 教授	2015年6月～)

「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(CREST)

笠木伸英	(東京大学大学院工学系研究科 教授	2011年12月～2015年6月)
花村克悟	(東京工業大学工学院 教授	2015年6月～)

本研究領域は、CREST が笠木伸英総括、さきがけが橋本和仁総括とし、また、それぞれが相互の副研究総括として緊密に運営する体制で、2011 年 12 月に発足した。その後、2012 年 4 月に橋本和仁総括が公職に就任されたことに伴い、CREST、さきがけとも笠木伸英総括、橋本和仁総括補佐の体制に移行した。さらに、笠木伸英総括から、一身上の都合による辞任の申し出を受け、2015 年 6 月より、さきがけ領域アドバイザーであった花村克悟が、CREST 及びさきがけの研究総括をつとめている。

#### (4) 採択課題・研究費

##### ①採択課題・研究費 (CREST)

本領域では、2011 年度 5 件 (内、1 件は 3 年型)、2012 年度 4 件、2013 年度 4 件を採択し、全体としては、13 件であった。

(百万円)

採択年度	研究代表者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費
2011 年度	川田 達也	東北大学大学院環境科学研究科 教授	実環境計測に基づく高温電極の界面領域エンジニアリング	405
	古山 通久	九州大学稲盛フロンティア研究センター 教授	固体酸化物形燃料電池電極の材料・構造革新のためのマルチスケール連成解析基盤	339
	高田 保之	九州大学大学院工学研究院 教授	固気液相界面メタフルイデイクス	389
	高柳 邦夫	東京工業大学大学院理工学研究科 特任教授	【3 年型課題】 ナノとマクロの相界面と物質移動 ナノサイクル	199
	陳 明偉	東北大学原子分子材料科学高等研究機構 客員教授 同 教授	界面科学に基づく次世代エネルギーへのナノポーラス複合材料開発	330
2012 年度	安部 武志	京都大学大学院工学研究院 教授	多孔性電極中のイオン輸送現象の解明と高出力電池への展開	394
	早瀬 修二	九州工業大学大学院生命体工学研究科 教授	酸化物半導体プリカーサーを用いる相互侵入型無機・有機(無機)バルクヘテロナノ界面の一括構築と	295

			太陽電池への応用	
	宮武 健治	山梨大学クリーンエネルギー研究センター教授	革新的アニオン導電性高分子を用いた三相界面の創製とアルカリ形燃料電池への展開	372
	山下 晃一	東京大学大学院工学系研究科 教授	エネルギー変換計算科学による相界面光誘起素過程の設計	329
2013 年度	足立 幸志	東北大学大学院工学研究科 教授	超低摩擦機械システムのためのトライボ化学反応を制御したナノ界面創成	428
	小林 光	大阪大学産業科学研究所 教授	相界面制御法による極低反射率の達成と結晶シリコン太陽電池の超高効率化	360
	長尾 忠昭	物質・材料研究機構 グループリーダー	セラミックスヘテロ層における界面電磁場制御と熱エネルギー利用	326
	圓山 重直	東北大学流体科学研究所 教授 同 客員教授	海洋メタンハイドレート層のマルチスケール界面輸送現象の解明と大規模メタン生成への展開	241
			総研究費	4,412

\*研究費：2018年度上期までの実績額に2018年度下期の計画額を加算した金額

## ②採択課題・研究費（さきがけ）

本領域では、2011年度11件（内、3件は5年型課題、であり、さらに内1件は大挑戦課題）、2012年度11件（内1件は3年型大挑戦課題）、及び2013年度10件を採択し、合計では32件であった。

（百万円）

採択 年度	研究代表者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費 *
2011 年度	池田 勝佳	名古屋工業大学大学院工学研究科 教授 北海道大学大学院理学研究院 准教授	【5年型課題】構造規制相界面における重たいフォトンの利用	105
	伊藤 衡平	九州大学大学院工学研究院 教授	【5年型課題】高圧水電解三相界面における限界物質輸送の実験的探究	64
	喜多 浩之	東京大学大学院工学系研	SiC MOSFET の抵抗損失低減のため	46

		究科 准教授	の界面制御技術	
	塩見 淳一郎	東京大学大学院工学系研究科 准教授	ナノ構造界面を利用した環境親和型熱電半導体の創成	45
	柴田 直哉	東京大学大学院工学系研究科 准教授	原子分解能電磁場計測電子顕微鏡法の開発と材料相界面研究への応用	40
	関口 康爾	慶応大学理工学部 専任講師	<b>【5年型大挑戦課題】</b> 超低電力マグノンデバイスの基盤技術創出	110
	館山 佳尚	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 グループリーダー	第一原理統計力学による太陽電池・光触媒界面の動作環境下電荷移動・励起過程の解明	37
	宮崎 晃平	京都大学大学院工学研究科 助教	金属-空気二次電池可逆空気極における三相界面	40
	八代 圭司	東北大学大学院環境科学研究科 准教授 東北大学多元物質科学研究所 准教授	高効率エネルギー変換に向けた革新的イオン機能界面設計	40
	保田 諭	北海道大学大学院理学研究院 准教授 同 助教	自己組織化集合能による高触媒活性サイトのプログラマブル合成	40
	安田 琢磨	九州大学稲盛フロンティア研究センター教授 九州大学大学院工学研究院 准教授	液晶半導体のメゾスコピック超構造を活用した有機電子デバイスの開発	46
2012年度	内田 健一	物質・材料研究機構国際磁性・スピントロニクス材料拠点 グループリーダー 東北大学金属材料研究所 助教	<b>【3年型大挑戦課題】</b> スピン流を用いた革新的エネルギーデバイス技術の創出	94
	大久保 貴志	近畿大学理工学部 准教授	強誘電性配位高分子複合界面の創製と光電変換素子への応用	40
	小林 厚志	北海道大学大学院理学研究院 准教授	自己組織化を活用した超ナノ結晶人工光合成デバイスの構築	40

		同 助教		
	サン リウ エン	物質・材料研究機構国際 ナノアーキテクト研究 拠点 独立研究者 同 ICYS-MANAresearcher	高効率光電変換デバイスの実現に 向けたⅢ族窒化物のマルチバンド エンジニアリング	42
	竹中 壮	九州大学大学院工学研究 院 准教授	金属酸化物層での被覆を利用した 電極触媒の高機能化	40
	津島 将司	大阪大学大学院工学研究 院 教授 東京工業大学大学院理工 学研究科 准教授	電極相界面極限利用を実現する高 効率フロー電池	42
	戸谷 剛	北海道大学大学院工学研 究院 准教授	金属膜を持つ表面微細構造による 放射エネルギーの波長制御	40
	富岡 克広	北海道大学大学院情報科 学研究院 助教 科学技術振興機構さきが け研究者	新しい半導体固相界面による新規 グリーンデバイスの開発	40
	中山 将伸	名古屋工業大学大学院 工学研究科 教授 同 准教授	リチウムイオン電池電極材料のセ ラミックス二相境界における物質 移動の動力学	28
	二本柳 聡 史	理化学研究所研究員 同基幹研究所研究員	埋もれた材料相界面研究のための 極限的非線形顕微分光法の開発	40
	増田 卓也	物質・材料研究機構ナノ 材料科学研究拠点 主任 研究員 同 特別研究員	固液界面その場 X P S 測定による 酸素還元反応機構の解明	51
2013 年度	荒木 拓人	横浜国立大学工学研究院 准教授	界面微細センサ開発とマルチスケ ール数値解析による熱・物質輸送 - 電気化学反応の連成現象の解明 と最適界面構造設計	42
	井上 元	九州大学大学院工学研究 科 准教授 京都大学大学院工学研究 科 助教	カーボン導電剤とバインダーの構 造制御による電子物質輸送界面の 高効率化	40
	小野 倫也	筑波大学計算科学研究セ ンター 准教授	計算科学的手法による省電力・低 損失デバイス用界面のデザイン	30

		大阪大学大学院 助教		
	狩野 旬	岡山大学大学院自然科学 研究科 准教授 同 助教	金属—強誘電体界面で実現する新 形態触媒デザイン	43
	白澤 徹郎	産業総合研究所物質計測 標準研究部門 主任研究 員 東京大学物性研究所 助 教	相界面の動的構造観察のための波 長分散型表面 X線回折計の開発と 応用	38
	長津 雄一 郎	東京農工大学大学院工学 研究院 准教授	飛躍的な石油増進回収のための油 水反応レオロジー界面の創成	40
	長藤 圭介	東京大学大学院工学系研 究科 准教授 同 講師	物質輸送と界面反応を最適にする ための電極微細構造のメソスケー ル制御加工	42
	長野 方星	名古屋大学大学院工学研 究科 教授 同 准教授	多孔体内三相界面における熱流動 解析に基づく熱輸送革新	40
	平山 朋子	同志社大学理工学部 教 同 准教授	超低摩擦摺動メカニズムの解明と 新規相界面の創成	39
	松井 雅樹	神戸大学大学院工学研究 科 准教授 科学技術振興機構さきが け研究者	マグネシウムイオンを用いた電気 化学デバイス創成のための電極/ 電解質界面設計	48
			総研究費	1,512

\* 研究費：各研究期間の実績額

## 2. 研究領域および研究総括の設定について

(JST 記載)

研究領域 1 「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(CREST)

研究領域 2 「エネルギー高効率利用と相界面」(さきがけ)

本研究領域は、深刻なエネルギー・資源・環境問題に直面している我が国において強く望まれている持続可能社会を実現させるため、エネルギー変換・輸送の効率を改善する相界面の科学の獲得・構築と制御・最適化技術を創出し、様々なエネルギー機器において必ず生じるエネルギー損失を大幅に減少させ、エネルギーの高効率利用を実現する基盤的成果の創出を目指す。

研究領域 1 においては、エネルギー分野における既存の基盤技術の高度化や新技術の実

現に向けて、エネルギー高効率利用のための相界面で起こる原子・分子レベルの素過程挙動の解明や革新的な要素技術のシステム化及び制御・最適化技術の創出を目的としている。相界面で起こる現象を解明し、次世代のエネルギー制御技術を創出するためにはナノ、ミクロサイズからマクロサイズまでのマルチスケールでの多種多様な専門的観点が必要とされるため、ナノテクノロジー、化学、物理、材料といった基盤知の獲得を得意とする分野から機械工学、化学工学、システム工学といった全体最適化技術を得意とする分野までの従来行われてこなかった挑戦的なアプローチが必要である。このような分野横断的アプローチによって得られた基礎的、共通的な科学的知識を共有、展開、融合することが望まれ、本研究領域の研究を行うにあたり、CREST として選定することは適切である。

研究領域 2 においては、研究領域 1 と目的は同じであるが、個人研究者の独創的な発想による先鋭的でチャレンジングな研究を対象とする。研究者は、エネルギー高効率利用を目的に結集した様々な分野の研究者から構成されるネットワークを活用しながら、独自のアイデアの醸成を図る。最終的な目標技術への道筋を見通した上での基盤的研究を行うことで相界面現象の基礎学理を深化させ、イノベーションに繋がるエネルギー技術のシーズ創出へ期待ができるため、さきがけとして選定することは適切である。

以上の通り、上記 2 領域は、戦略目標達成に向けて適切に選定されており、2 つの研究領域の相乗効果によって、エネルギー問題の解決に資する相界面の科学技術の創出が期待される。相界面を切り口とした本研究領域は、様々なエネルギー機器において、これまでに見出されてこなかった素過程挙動の視点から利用効率の抜本的改善の糸口を与えることが期待される。我が国においては、独創的な要素技術を有した化学、物理、材料分野等の研究者層は厚く、また現実のエネルギー問題の諸課題を把握した機械工学、化学工学、システム工学等の研究者の多くが使命感を強くしており、本研究領域に対しては先見性を有する優れた研究提案が多数見込まれる。このような多岐にわたる分野の独創的な研究者が、本研究領域で、エネルギー分野におけるこれまで避けられてきた複雑かつ難解で本質的な問題の解決に向けて連携・融合を始めることにより、科学技術が社会の要請に応える潮流を加速することが期待できる。

#### 研究総括 笠木 伸英

笠木伸英氏は、機械工学、熱流体工学、エネルギーシステム工学、乱流工学等の第一線の研究者として、優れた研究成果を挙げており、日本伝熱学会学術賞、流体科学賞、日本機械学会熱工学部門国際賞、The William Begell Medal など多くの受賞歴を有している。近年においては、自身の専門とする機械工学、熱流体工学を核としながら、乱流のスマート制御、マイクロ・ガスタービンや高温燃料電池(SOFC)、マイクロ・エネルギー変換システムなどのエネルギー機器を対象に、マクロからマイクロ・ナノの領域を統合する熱流体現象の制御、創造、応用に関する研究を進めていることから、マルチスケールの相界面を研究対象とする本領域において、その幅広い知見と経験を生かし、優れた指導力を発揮す



ることが予想される。また、日本学術会議の会員であるとともに、英国王立工学アカデミー (Royal Academy of Engineering) においても国際フェローとして選出されており、その優れた研究業績が世界の工学コミュニティにおいて認められている。また、同氏は数々の学会で会長等の要職を歴任しており、関連分野の研究者から信頼され、適切な評価と公平な選考を行いうるとみられる。また、東京大学 21 世紀 COE 機械システム・イノベーション拠点リーダーを務めていたことから、人材育成にも関心が深く、積極的に取り組んでおり、研究開発のマネジメントを行うのに適した経験・能力を有していると思われる。

以上を総合すると、同氏はエンジニアリングサイエンスの視点から本研究領域を俯瞰し、広範な研究分野に及ぶ研究チームを統括する研究総括として適任と思われる。

#### 研究総括 橋本 和仁

橋本和仁氏は、光触媒、エネルギー変換材料、人工光合成、バイオエネルギー・環境技術など光エネルギー変換に関わる幅広い分野の研究について、先駆的、独創的な研究を行い、卓越した研究成果を挙げてきた。その成果は、国内外にも認められ、日本 IBM 科学賞、注目発明賞、Innovation in Real Material Award、内閣総理大臣賞（産官連携功労者）、恩賜発明賞、山崎貞一賞をはじめ数多くの賞を受賞している。これまでに 200 件を超える特許を取得している点も踏まえると、本研究領域を推進するに必要な先見性・洞察力を十分に有していると思われる。

また、同氏は、内閣府最先端研究開発支援ワーキングチーム構成員他、経済産業省や文部科学省で各種委員を務め、海外においても中国東北師範大学から名誉教授の称号を授与されるなど、関連分野の研究者から信頼も厚く、適切な評価と公平な選考を行いうると考えられる。

さらに、東京大学先端科学技術研究センター所長や NEDO 循環社会構築型光触媒産業創成プロジェクトリーダーを経験していること等から、当該分野での研究課題の効果的、効率的な推進を目指し、適切な研究マネジメントを行う経験、能力を有していると考えられる。人材育成の面では、産学連携や異分野融合を通じた若手の育成について積極的に取り組んでいる実績がある。

以上を総合すると、同氏は、エネルギー分野のサイエンスの視点から本研究領域を俯瞰し、広範な研究分野に及ぶ若手研究者をリードしていく研究総括として適任であると考えられる。

本研究領域では、様々なエネルギー機器におけるマルチスケールの相界面現象を研究対象としていることから、ナノテクノロジー、化学、物理、材料といった基盤知の獲得を得意とする研究者から機械工学、化学工学、システム工学といった全体最適化技術を得意とする研究者が協働・連携し、従来行われてこなかった挑戦的なアプローチが必要となると考えられる。そのため、実システムに優れた知見を持つ笠木 伸英氏と、エネルギー分野のサイエンスにおいて豊富な経験を持つ橋本 和仁氏をともに研究総括とすることが適切で

ある。

なお、研究領域 1 では、全体の方向性として最適化を目指す傾向が強いことからエンジニアリングサイエンスを代表とする笠木 伸英氏を研究総括としつつ、サイエンスとの共同を強くアピールする観点からエネルギー分野のサイエンスを代表する橋本 和仁氏を副研究総括として効果的な運営を図る。一方、研究領域 2 では、将来的に本領域の分野を先導していくような先鋭的でチャレンジングなアイデアをもとにした研究の推進を重要視しており、そのような研究がサイエンスの分野からも生まれることを意識し、エネルギー高効率利用の視点がありエネルギー分野のサイエンスの代表である橋本 和仁氏を研究総括と位置づけ、笠木 伸英氏を副研究総括として適切な運営を図る。

#### 研究総括 花村 克悟

花村克悟氏は、固体酸化物燃料電池や近接場光発電などを含む熱工学分野における第一線級の研究者として広く認識されている。特に、ディーゼル微粒子の触媒燃焼、バイオマスガス化、熱ふく射エネルギー変換など、二酸化炭素排出量削減を目指した幅広い研究を行っており、卓越した業績を上げてきた。これらの業績は高く評価され、日本機械学会の論文賞、同熱工学部門の業績賞や貢献表彰（複数回）を受けるなどしており、伝熱工学、燃焼工学などの研究分野について深い知識と経験を有しているといえることから、マルチスケールの相界面を研究対象とする本研究領域に関連する分野について、機械工学からの視点を中心に、先見性及び洞察力を有していると認められる。また、日本機械学会の学術誌チーフエディター、代表委員会委員や理事を務め、同学会のフェローにも認定されている他、日本伝熱学会の副会長、理事、編集部会長、論文誌チーフエディター、さらに日本燃焼学会の理事を務めてきていることから、関連分野の研究者から信頼され、公平な評価を行いうると認められる。

さらに、東京工業大学 機械制御システム専攻長、エネルギーセンターエネルギーシステム部門長、NEDO 審査委員会委員長を歴任していることなどから、本研究領域について、研究課題の効果的・効率的な推進を目指し、適切な研究マネジメントを行う経験、能力を有していると見られる。

以上より、同氏は本研究領域の研究総括として適任であると判断される。

### 3. 研究総括のねらい

#### (1) CREST

下記「(3) 複合領域として」にまとめて記載する。

#### (2) さきがけ

下記「(3) 複合領域として」にまとめて記載する。

#### (3) 複合領域として

##### ①戦略目標に対する研究領域の狙い

エネルギー技術に関連する種々の機器やシステムには、固体、液体、気体といった異なる状態や異なる物質が互いに接する境界（相界面）が必ず存在し、そこで生じる力学的、化学的、あるいは電磁気学的な現象を利用するものが多くある。一方、現実のエネルギー機器やシステムの性能は、その理論的最高性能（限界性能）に遠く及んでいない。これはエネルギーの変換、輸送、貯蔵プロセスにおける不可逆損失が主原因であり、また、それらの多くは相界面での現象に起因する。そこで、相界面での不可逆損失を大幅に削減することが、省エネルギー、すなわち、エネルギー利用効率の向上を狙うすべての技術開発において本質的に重要と考えられる。

例えば、熱エネルギーシステムにおける乱流や沸騰などの複雑な熱流動制御や輸送機器における摩擦抵抗低減による効率の向上、燃料電池や蓄電池などの電極界面反応機構の解明と相界面材料・形態の最適化、太陽光による発電や燃料生産の素過程の解析と最適化、伝熱・物質交換・相分離技術の高度化によるヒートポンプの革新、分離膜の構造の詳細解析と孔径・相界面形態の高性能化、パワー半導体デバイスの界面制御による高効率化などの課題が存在する。

これらの課題を解決するためには、共通する相界面現象の基礎学理を深化させ、そこで得られた知識を基に理想的な界面を設計し、実証することが有効となると考える。もちろん、そのような相界面を具体的に作製・制御する技術の開発は必須である。一方、相界面は、ナノ、メソ、マクロのマルチスケール構造の各階層に存在する。ナノメートルでの現象解明や材料研究の成果を、実システムに活かすためには、幅広いスケールの現象を総合的に解析・設計するための計測技術や、モデリングとシミュレーション技術のための工学や数理科学の開拓も必要である。そして、これらの分野の成果を統合することによって、機器やシステムのエネルギー損失の削減や、新たな省エネルギー機器、創エネルギー機器などの創造が可能になるとともに、関連技術の飛躍的な性能向上と低コスト化に資する成果の創出を狙った。

##### ②本領域の狙い、研究成果として目指したこと

本研究領域の狙いを達成するには、様々な学術の連携や融合が欠かせず、分野を越えた研究者の協働が必須である。つまり、基礎科学としての研究だけに留まるのではなく、あるいは個別技術の改善だけに留まるのではなく、最終的な目標技術への道程を見通した上

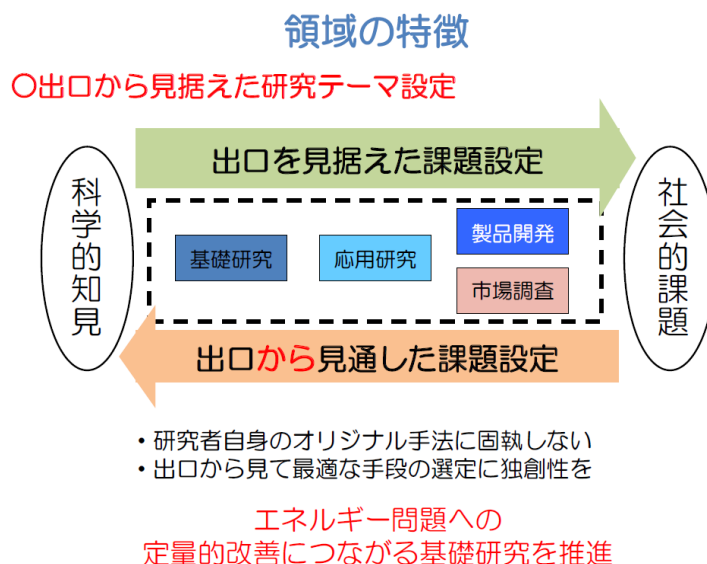
での基盤的研究課題の設定が必要である。

本領域では、材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、さらには物理系、数理系など幅広い分野からの研究者やそれらの研究者が参画する研究チームを選び、これらの研究者間の連携、融合を実現するための端緒としては、主として相界面現象や材料機能の微視的詳細を基に高効率化を目指すアプローチ、あるいは、具体的な実システム、構造やデバイスを基に高効率化を狙うアプローチといった道筋があると考え、これらのアプローチを通して、広く異分野の研究者が、エネルギー高効率利用を目的に結集し、新たなブレークスルー達成に挑戦していくことを目指す。「出口を見据えた課題設定」からさらに進めて「出口から見とおした課題設定」により、エネルギー問題の解決に資する成果の創出を目指した。

### ③科学技術の進歩への貢献、科学技術イノベーション創出に向けて目指したこと

本領域の各課題において目標とするどのようなエネルギー技術の検討においても、実際の応用においては大量のエネルギーを扱い得ること、そして低コストであることが重要となる。従って、目標技術の革新性だけでなく、量的貢献も含めた観点からの課題設定を行い、社会実装に繋がる技術の開発を目指した。

また、相界面科学は、人類のあらゆる生産・消費活動に関わっており、本研究領域推進による成果は、最終的にはエネルギー利用に限らず、広く他分野にも転用できる共通基盤的な科学・技術として構築されることを目指した。



## 4. 研究課題の選考について

### (1) CREST

下記「(3) 複合領域として」にまとめて記載する。

## (2) さきがけ

下記「(3) 複合領域として」にまとめて記載する。

## (3) 複合領域として

### ①課題選考方針

研究課題の選考にあたっては、領域の趣旨に沿った提案を選定するため、書面審査、及び面接審査の2段階方式とした。審査に際しては、応募課題の利害関係者の審査への関与を避けること、申請者の他の大型研究助成との関係を考慮し、公正、かつ厳正に行った。書面審査においては、領域アドバイザーに加えて、領域アドバイザーと同様の基準で選定した外部評価者にも加わって頂き、各応募課題に関し複数の査読者による査読・評価を行い、その結果から、面接審査の対象者を選定した。面接審査は、応募者による口頭発表及び質疑応答を行い、その評価結果から多角的な検討を行った上で採択課題を決定した。審査に当たっては、下記のJSTにおける「選考の観点」に加えて、本領域における選考の視点を加えて選定した。

【JSTにおける「選考の観点」】：JST HPより引用

CREST

(1) CRESTの各研究領域に共通の選考の基準

- a. 戦略目標の達成に貢献するものであること。
- b. 研究領域の趣旨に合致していること。
- c. 独創的であり国際的に高く評価される基礎研究であって、今後の科学技術イノベーションに大きく寄与する卓越した成果が期待できること。
- d. 以下の条件をいずれも満たしていること。
  - ・研究提案者は、研究遂行のための研究実績を有していること。
  - ・研究構想の実現に必要な手掛かりが得られていること。
  - ・研究提案書において、①研究構想の背景(研究の必要性・重要性)、②研究提案者の実績(事実)、および③研究構想・計画の3者を区別しつつ、それぞれが明確に記述されていること。
  - ・最適な研究実施体制であること。研究提案者がチーム全体を強力に統率して責任を負うとともに、主たる共同研究者を置く場合は研究提案者の研究構想実現のために必要不可欠であって、研究目的の達成に向けて大きく貢献できる十分な連携体制が構築されること。
  - ・研究提案者の研究構想を実現する上で必要十分な研究費計画であること。
  - ・研究提案者および主たる共同研究者が所属する研究機関は、当該研究分野に関する研究開発力などの技術基盤を有していること。

(2) 上記のほか、研究領域ごとに独自の選考の観点・方針や運営の方針などを設定しました。

(3) 研究費の「不合理な重複」ないし「過度の集中」にあたるかどうか、選考の要素としました。

(4) 知的財産の取得・活用に対する考え方の提示も選考の要素としました。

さきがけ

(1) さきがけの各研究領域に共通の選考の基準

- a. 戦略目標の達成に貢献するものであること。
- b. 研究領域の趣旨に合致していること。
- c. 独創的・挑戦的かつ国際的に高水準の発展が見込まれる基礎研究であって、科学技術イノベーションの源泉となる先駆的な成果が期待できること。
- d. 研究提案者は、提案研究の内容、研究姿勢や他の研究者との議論・相互触発の取り組みを通じて、当該さきがけ研究領域全体の発展ならびに関係研究分野の継続的な発展への貢献が期待できる存在であること。

(続く)

- e. 以下の条件をいずれも満たしていること。
- ・研究提案の独創性は、研究提案者本人の着想によるものであること。
  - ・研究構想の実現に必要な手掛かりが得られていること。
  - ・個人型研究として適切な実施規模であること。
- (2) 上記のほか、研究領域ごとに独自の選考の観点・方針や運営の方針などを設定しました。
- (3) 研究費の「不合理な重複」ないし「過度の集中」にあたるかどうか、選考の要素としました。

## ②当領域における「選考の視点」

### 最重要事項

- (1) エネルギー高効率利用に向けた優れた基礎研究提案を選ぶ。
- (2) 優れた若手研究者を選ぶ。(さきがけ)
- (2 ‘) 複数の学術領域の連携するチームによる挑戦的な計画となっているものが望ましい。また、将来的に異分野連携に発展できる可能性があるもの (CREST)

### 評価の基準

- (3) 多数の申請に対し、採択件数、面接審査対象とも限られた件数となる。面接審査を含めて、十分な評価を行うため、書面審査では、絶対的な評価であるが、数量的な目安も含める。  
※さきがけに関し、3年計画、5年計画の研究提案は区別せず、それぞれの提案のクオリティにおいて評価を行う。
- (4) エネルギーは社会的な期待の大きな課題、あるいは、わが国が抱える主要課題のひとつであり、それらの解決に結びつく目的基礎研究を国として集中投資して推進する事業であることに留意する。従って、研究者個人の動機だけで駆動される基礎研究、その推進制度としての科研費とは本質的に異なる。
- (5) エネルギーの量的貢献あるいは低コスト化による広い市場普及に繋がる技術目標を見据えた基礎研究であることが必要である。
- (6) 研究課題としては、①界面現象のプロセス・素過程の解明、②相界面の設計 (最適化、制御)、③計測技術とモデリング・シミュレーション、の3項目を挙げているが、①、③については、新しい科学知識の獲得や一般的な解析ツールの開発に留まる研究は対象としない。具体的な目標技術へ結実し、エネルギー高効率利用に大きく貢献する明確な道筋を有する課題であることが必要である。

## ③選考結果

本領域では、2011年度、2012年度及び2013年度の3年度にわたって公募を行い、その

応募数、採択数は、CREST は、2011 年度 119 件中 5 件採択、2012 年度 51 件中 4 件採択、2013 年度 24 件中 4 件となっており、全体としては、194 件中 13 件であった。また、さきがけでは、2011 年度 255 件中 11 件採択、2012 年度 127 件中 11 件採択、2013 年度 104 件中 10 件であり、全体としては、486 件中 32 件であった。

- ・CREST は 13 課題のうち、10 チームは、大学等により構成されており、内 8 チームでは複数の大学等を含むチーム構成となっている。また、残りの 3 チームにはそれぞれ企業が参加しており、その内訳は主たる共同研究者として 3 企業、大学研究グループへの企業メンバーの参加が 2 チームにあった。また、研究代表者に関して、外国人 1 名、女性は 0 であった。

年 度		総数
2011 年度 (第一期採択)	応募件数	119
	採択件数	5
2012 年度 (第二期採択)	応募件数	51
	採択件数	4
2013 年度 (第三期採択)	応募件数	24
	採択件数	4
合 計	応募件数	194
	採択件数	13

- ・さきがけは、採択時においては、32 名中、27 名が大学、3 名が国立研究機関（3 名ともポストク）、さきがけ専任研究者が 2 名の構成であった。また、女性研究者 2 名、外国人 1 名を含んでいる。

年 度		3 年型	5 年型	総数
2011 年度 (第一期生)	応募件数	205 (11)	50 (9)	255 (20)
	採択件数	8 (0)	3 (1)	11 (1)
2012 年度 (第二期生)	応募件数	127 (15)	0 (0)	127 (15)
	採択件数	11 (1)	0 (0)	11 (1)
2013 年度 (第三期生)	応募件数	104 (0)	0 (0)	104 (0)
	採択件数	10 (0)	0 (0)	10 (0)
合 計	応募件数	436 (26)	50 (9)	486 (35)
	採択件数	29 (1)	3 (1)	32 (2)

(括弧内：大挑戦型を内数で記載。内 2011 年度採択の 5 年型課題のうち 1 件は 3 年で終了、また 2012 年度採択の課題のうち 1 件は 5 年型に延長した。)

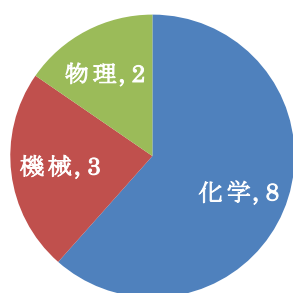


#### ④研究者の分野分類

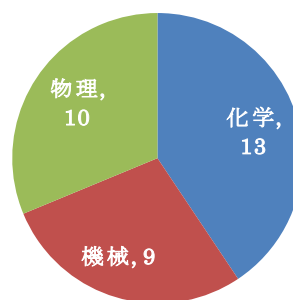
本研究領域の運営の狙いから採択した研究者の構成を図に示した。

- CREST の研究代表者は、化学系 8 名、機械系 3 名、物理系 2 名の構成であるが、多くの研究チームではチーム内に異分野の研究者を含んでいる。また、化学系の研究代表者がやや多いが、これらの研究課題のうち 2 課題には企業研究グループを含むこと、また実験的アプローチと理論・計算科学的アプローチが共存すること等で、多様性が図られている。
- さきがけの研究者は、化学系 13 名、機械系 9 名、物理系 10 名の合計 32 名であり、本領域にふさわしく、多岐にわたっている。

CREST 研究代表者の専門領域



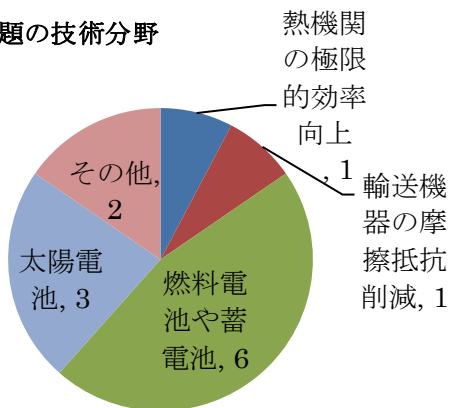
さきがけ研究者の専門領域



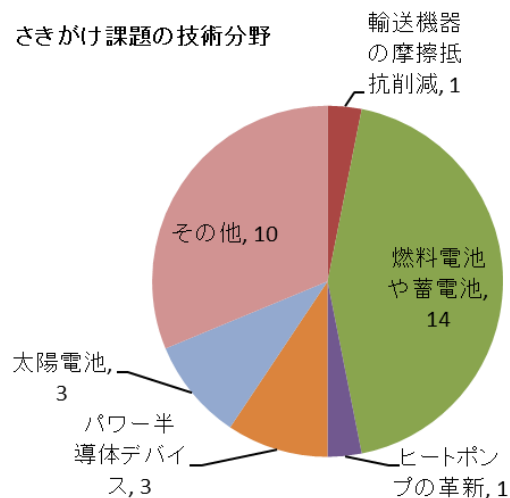
#### ⑤課題構成

CREST、及びさきがけに採択した各課題の技術分野について、「戦略目標」に挙げられている 6 つの技術分野例に「太陽電池」を加えた 7 分野で整理した図を示す。各課題には、当初の狙い通り、多くの技術領域を含めることができた。また、「その他」に分類したテーマの中には、CRSEST では、熱放射、及びエネルギー資源採掘（メタンハイドレート）に関する課題であり、さきがけ相界面では、スピン波(2件)、熱電素子、人工光合成、熱放射制御(2件)、エネルギー資源採掘(2件)等の種々の技術分野に関する課題を含んでいる。尚、戦略目標に挙げられている技術分野のうち、「分離膜」に関する直接的な研究課題は応募件数が少なかったが、その中から 1 件の研究課題について「特定課題調査」とし 1 年間の調査を実施した上で再度の審査を行ったが、採択に至らなかった。

CREST課題の技術分野



さきがけ課題の技術分野



また、次ページに各研究課題と当領域の戦略目標における達成目標との関係を整理した表を示す。

CREST 研究領域の研究課題は、機構の解明、それに関する解析、シミュレーション、さらにその結果を受けての高性能界面の設計、創生の過程を含み、単一の研究課題で複数の戦略目標の達成目標を含む。

さきがけ研究領域の研究課題は、個人研究であることから、研究費、研究期間とも限られるため、その多くは、戦略目標の達成目標に対して 1 項目、又は 2 項目での寄与に限られるが、全体としては、広く対応できている。

【CREST】研究課題と「達成目標」の関係

研究 代表者名	研究課題	戦略目標(達成目標)	○エネルギー 高効率利用化 に向けた相界 面におけるエ ネルギー輸 送・変換機構 の解明	○ナノ、メソ、マ クロなどの異な るスケールの 相界面現象を 総合的に解 析・設計するた めのモデリン グ、シミュレー ション技術の創 出	○相界面構 造を制御・最 適化するた めの数理科 学的な手法 などの基盤 技術の創出	○機器やデバ イスの理論的 最高性能を 実現するた めの 高機能界面の 創成
川田 達也	実環境計測に基づく高温電極の界面領域 エンジニアリング		○	○	○	○
古山 通久	固体酸化物形燃料電池電極の材料・構造 革新のためのマルチスケール連成解析基 盤			○	○	○
高田 保之	固気液相界面メタフレイディクス		○	○		
高柳 邦夫	ナノとマクロの相界面と物質移動ナノサイ クル			○		
陳 明偉	界面科学に基づく次世代エネルギーへのナ ノポーラス複合材料開発		○	○		○
安部 武志	多孔性電極中のイオン輸送現象の解明と 高出力電池への展開		○	○	○	○
早瀬 修二	酸化半導体プリカーサーを用いる相互侵 入型無機・有機(無機)バルクヘテロナノ界 面の一括構築と太陽電池への応用		○	○		○
宮武 健治	革新的アニオン導電性高分子を用いた三 相界面の創製とアルカリ形燃料電池への 展開		○			○
山下 晃一	エネルギー変換計算科学による相界面光 誘起素過程の設計		○	○	○	
足立 幸志	超低摩擦機械システムのためのトライボ化 学反応を制御したナノ界面創		○	○		○
小林 光	相界面制御法による極低反射率の達成と 結晶シリコン太陽電池の超高効率化		○			○
長尾 忠昭	セラミックスヘテロ層における界面電磁場 制御と熱エネルギー利用		○	○		○
圓山 重直	海洋メタンハイドレート層のマルチスケール 界面輸送現象の解明と大規模メタン生成へ の展開		○	○		

【さきがけ】研究課題と「達成目標」の関係

研究者名	研究課題	戦略目標(達成目標)			
		○エネルギー 高効率利用化 に向けた相界 面におけるエ ネルギー輸 送・変換機構 の解明	○ナノ、メソ、マ クロなどの異な るスケールの相 界面現象を総合 的に解析・設計 するためのモデ リング、シミュ レーション技術 の創出	○相界面構 造を制御・最 適化するた めの数理科 学的な手法 などの基盤 技術の創出	○機器やデバ イスの理論的 最高性能を 実現するた めの 高機能界面の 創成
池田勝佳	構造規制相界面における重たいフォトン利用	○			
伊藤衛平	高圧水電解三相界面における限界物質輸送の実験的探究	○	○		
喜多浩之	SiC MOSFETの抵抗損失低減のための界面制御技術	○			○
塩見淳一郎	ナノ構造界面を利用した環境親和型熱電半導体の創成		○	○	○
柴田直哉	原子分解能電磁場計測電子顕微鏡法の開発と材料相界面研究への応用		○		
関口康爾	超低電力マグノンデバイスの基盤技術創出	○			○
館山佳尚	第一原理統計力学による太陽電池・光触媒界面の動作環境下電荷移動・励起過程の解明		○	○	
宮崎晃平	金属-空気二次電池可逆空気極における三相界面	○			
八代圭司	高効率エネルギー変換に向けた革新的イオン機能界面設計	○			
保田 諭	自己組織化集合能による高触媒活性サイトのプログラマブル合成	○			
安田琢磨	液晶半導体のメソスコピック超構造を活用した有機電子デバイスの開発	○			○
内田健一	スピン流を用いた革新的エネルギーデバイス技術の創出	○			○
大久保貴志	強誘電性配位高分子複合界面の創製と光電変換素子への応用	○			
小林厚志	自己組織化を活用した超ナノ結晶人工光合成デバイスの構築	○			
SANG Liwen	高効率光電変換デバイスの実現に向けたIII族窒化物のマルチバンドエンジニアリング	○			
竹中 壮	金属酸化物層での被覆を利用した電極触媒の高機能化	○			○
津島将司	電極相界面極限利用を実現する高効率フロー電池	○	○	○	○
戸谷 剛	金属膜を持つ表面微細構造による放射エネルギーの波長制御	○	○		○
富岡克広	新しい半導体固相界面による新規グリーンデバイスの開発	○			○
中山将伸	リチウムイオン電池電極材料のセラミックス二相境界における物質移動の動力学		○		○
二本柳聡史	埋もれた材料相界面研究のための極限的非線形顕微分光法の開発		○		
増田卓也	固液界面その場XPS測定による酸素還元反応機構の解明		○		
荒木拓人	界面微細センサ開発とマルチスケール数値解析による熱・物質輸送 - 電気化学反応の達成現象の解明と最適界面構造設計		○	○	
井上 元	カーボン導電剤とバインダーの構造制御による電子物質輸送界面の高効率化		○	○	
小野倫也	計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン		○	○	
狩野 旬	金属-強誘電体界面で実現する新形態触媒デザイン	○			
白澤徹郎	相界面の動的構造観察のための波長分散型表面X線回折計の開発と応用		○		
長津雄一郎	飛躍的な石油増進回収のための油水分離レオロジー界面の創成	○			
長藤圭介	物質輸送と界面反応を最適にするための電極微細構造のメソスケール制御加工	○	○	○	
長野方星	多孔体内三相界面における熱流動解析に基づく熱輸送革新	○	○		
平山朋子	超低摩擦摺動メカニズムの解明と新規相界面の創成	○			○
松井雅樹	マグネシウムイオンを用いた電気化学デバイス創成のための電極/電解質界面設計	○			

## 5. 領域アドバイザーについて

### (1) CREST

領域アドバイザー氏名	2018年12月時点の所属 (又は退任時)	役職	任期
江口 浩一	京都大学大学院工学研究科	教授	2010年12月～ 2019年3月
岡崎 健	東京工業大学	特命教授	2010年12月～ 2019年3月
岡島 博司	(株)豊田中央研究所	理事	2018年4月～2019 年3月
加藤 千幸	東京大学生産技術研究所	教授	2010年12月～ 2019年3月
金村 聖	首都大学東京大学院都市環境科学研究科	教授	2018年4月～2019 年3月
栗原 和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター	教授	2010年12月～ 2019年3月
齋川 路之	電力中央研究所エネルギーソリューション創発センター	主席研究員	2010年12月～ 2019年3月
中戸 義禮	大阪大学産業科学研究所	特任教授	2010年12月～ 2015年3月
萩原 剛	東芝エネルギーソリューションシステムズ(株)原子力事業部	参事	2010年12月～ 2019年3月
宮野 健次郎	物質・材料研究機構	フェロー	2010年12月～ 2019年3月
吉田 真	京セラ(株)メディカル開発センター	所長	2010年12月～ 2019年3月
渡辺 政廣	山梨大学	特命教授	2010年12月～ 2019年3月

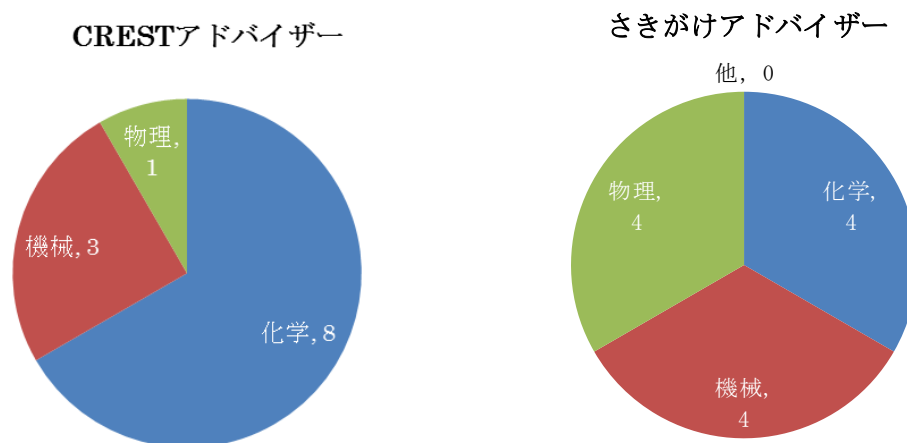
### (2) さきがけ

領域アドバイザー氏名	2018年3月時点の所属 (又は退任時)	役職	任期
魚崎 浩平	物質・材料研究機構	フェロー	2010年12月～2018年 3月31日

岡島 博司	トヨタ自動車(株)先進技術統括部	主査	2010年12月～2018年3月31日
加藤 昌子	北海道大学大学院理学研究院	教授	2010年12月～2018年3月31日
金村 聖	首都大学東京大学院都市環境科学研究科	教授	2010年12月～2018年3月31日
功刀 資彰	京都大学大学院工学研究科	教授	2010年12月～2017年3月
佐藤 勝昭	科学技術振興機構	研究広報主監	2015年7月～2018年3月31日
高木 英典	東京大学大学院理学系研究科	教授	2010年12月～2015年7月
竹中 信之	奈良女子大学男女共同参画推進室	キャリアコーディネーター	2010年12月～2016年3月
中込 秀樹	千葉大学大学院工学研究科	教授	2010年12月～2016年3月
花村 克悟	東京工業大学工学院	教授	2010年12月～2015年6月
山田 明	東京工業大学工学院	教授	2010年12月～2018年3月31日
吉田 英生	京都大学大学院工学研究科	教授	2010年12月～2017年10月

### (3) 人選に当たっての考え方

本研究領域は、材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、さらには物理系、数理系の広い領域に亘っての課題設定を想定していることから、全体として、それらの領域を包含する化学系、機械系、物理系を中心とする第一線の研究者の中から人選し、お願いした。また、合同で開催する領域会議、評価会、及び個別課題議論に際しては、専門領域、及び視点多様性の観点から、相互のアドバイザーにも参画頂き、ご協力頂いた。さらに、本領域は、エネルギーの量的貢献あるいは低コスト化による広い市場普及に繋がる技術目標を見据えた基礎研究を目指すことから、企業の研究者 5 名や企業出身の研究者 5 名に参画頂き、研究の視点に加えて産業化へのつながりの視点も含めて、アドバイス・評価を頂いた。なお、さきがけ研究が終了するにあたり、2 名のアドバイザーには、CREST に移行し、引き続きアドバイザーをお願いした。



## 6. 研究領域のマネジメントについて

### (1) CREST

#### ①研究総括の運営方針について

研究を進めるにあたっては、「出口から見通した課題設定」の考え方について徹底した指導を行った。

研究課題採択後にまず実施したキックオフミーティングは、さきがけの採択課題と併せて行うことで、さきがけのテーマを知るとともに、さきがけの領域アドバイザーからも幅広くご指導頂く機会を持った。また年間に 2 回実施する領域会議のうち、1 回は CREST 研究チームのみで開催し、密度の濃い研究議論や研究者相互の情報交換の機会とし、さらに、もう一回の領域会議は、さきがけと合同での合宿形式で開催することで、各研究チームから多数の研究参加者の出席を求め、更なる情報交換の機会としつつ、深い議論につながることを期待した。これらの領域会議では、会議中の議論、アドバイスに加えて、各領域アドバイザーからのコメントを文書で各研究者に提供することで、研究の進め方への指導を

行った。

研究総括、及び領域アドバイザーに加えて、技術参事、領域担当スタッフを同行したサイトビジットにおいて、研究の進捗状況に加え、その研究環境を施設、設備、さらに人的構成等も含めて視察し、確認することで、研究課題に関する議論や予算運営等の基本的情報を取得した。さらに、CRESTの各研究チームで開催する個別の研究会には、可能な場合には出席し、また、出席できない場合には、技術参事や領域担当スタッフの参加を促すことで、研究の進捗状況や研究環境上の課題等の把握に努めた。

## (2) さきがけ

### ①研究総括の運営方針について

さきがけ研究者に対しては、研究課題の達成はもとより、異なる専門分野に視野を広げ、人脈を形成し、サイエンスの視点に加えて「出口から見通した課題設定」の考えを併せ持った研究者への育成も重視している。以下の機会を通じて、研究課題の方向性、進め方に関する議論を行い、必要な場合にはその軌道修正を行うとともに、研究者として教育・育成することを重視した。

研究課題の採択後、まず行ったキックオフミーティングは、CRESTの採択課題と併せて行うことで、CRESTのテーマを知るとともに、CRESTの領域アドバイザーからも幅広くご指導頂く機会を持った。また年間に2回実施する合宿形式の領域会議のうち、1回はさきがけ研究者中心に開催し、密度の濃い研究議論や研究者相互の情報交換の機会とし、さらに、CREST研究チームから若手研究者の参加も促すことで、相互の情報交換を行うとともに、将来のさきがけ研究への応募を動機づけた。また、もう1回の領域会議は、CRESTと合同で開催することで、更なる情報交換の機会としつつ、深い議論につながることを期待した。これらの領域会議では、会議中の議論、アドバイスに加えて、各領域アドバイザーからのコメントを文書で各研究者に提供することで、研究の進め方への指導を行った。

また、研究総括、及び専門領域のアドバイザーに加えて、技術参事、領域担当スタッフを同行したサイトビジットにおいて、研究の進捗状況に加えて、その研究環境を施設、設備、さらに人的構成等も含めて視察の上、確認を行うことで、研究課題の指導や予算運営等の基本的情報を取得した。また併せて、所属上長への挨拶、趣旨説明を、また所属機関の事務担当への協力依頼を行うことで、円滑な運営への準備を行った。

本領域の最も特徴とすることは、月例の研究発表会（「さきがけ研究会」と呼称）である。これは、さきがけ研究者全員に出席を義務付け、毎回3名、又は4名の研究者が各50分（Q&Aを含む）の研究発表を行うことで、研究の進捗状況を把握し、研究の進め方を指導している。各研究者にとっては、領域会議と併せて、年間に4回から5回の議論の機会となり、必要な場合には、研究の目標、方向性、進め方に関する修正を指導した。併せて、参加する各研究者にとっては、他者の発表、指導に接する貴重な機会であり、また、他者の研究発表に対しても活発に質問することを強力に指導したことで、多くの研究者に「出口から



見通した課題設定」の考え方を浸透させる機会となり、32 研究課題のうち、7 割近い研究課題に関して、その研究の進め方の修正を行った。

さきがけにおける各種ミーティングの開催

	2011 年度	2012 年度	2013 年度	2014 年度	2015 年度	2016 年度	2017 年度	累計
さきがけ研究会		8	7	8	8	7	3	41
キックオフミー ティング	1	1	1					3
領域会議		2	2	2	2	2	2	12
サイトビジット	11	9	10	7	3			40
合計	12	20	20	17	13	9	5	96

例えば、館山研究者は、採択時には、第一原理計算の対象を「太陽電池・光触媒」としていたのに対し、「リチウム電池」を対象とすることに修正し、電極上の表面皮膜の生成過程を解明するという大きな成果につながった。また、戸谷研究者は、材料の表面からの熱輻射現象を冷却に利用するテーマから、加熱ヒーターのための表面ふく射に活用する研究課題に修正した。さらに同様の原理となる表面ふく射（吸収）を対象とする CREST・長尾チームとの連携を進め、さきがけ研究の終了後には、その CREST チームに加わり、実用に向けて、さらに2年間の研究を進めている。

また、継続的な指導が必要と判断した研究課題に関しては、研究者自身の自主性、発想を十分に尊重しつつ、特定のアドバイザーによる「マンツーマン」によるサポートも実施した。

さらに、さきがけ研究者による自主的な研究会、交流も奨励した。「ナレッジマイニング研究会」と称し、各研究者のバックグラウンドやさきがけ研究以外の研究テーマを紹介し合い、相互に議論することで視野を拡大し、また研究交流（情報交換、共同研究）を増やす機会とした。また、エネルギー問題のひとつの重要課題である CREST「分散協調型エネルギー管理システム構築のための理論及び基盤技術の創出と融合展開」領域若手研究者との合同ワークショップを開催し議論したことにより相互の研究の視野を広げることができたと考えている。さきがけ研究終了後にも、OB 研究会の開催や当領域の CREST 行事、国際ワークショップに参加する等により、連携を継続している。

当さきがけ研究期間中において2課題について、研究休止・延長を行った。1件は2度の

ライフイベントに伴い、もう 1 件は研究実施に必須の加速器施設の休止の伴う対応であったが、両課題とも、本対応により研究期間を有効に活用することができ、成果につなげることができた。

### (3) 複合領域として

#### ①バーチャルラボとしての研究領域のマネジメントについて

領域内での連携(情報交換、共同研究)を積極的に進めた。代表的なものは以下である。

(さきがけ研究者間での連携例)

塩見研究者・内田研究者：固体伝熱を中心とするマルチスケールシミュレーションをベースとする塩見研究者とスピン流のエネルギーへの応用をベースとする内田研究者の両者の新たな発想により、フォノンドラッグとフォノン輸送のディカップリングによる熱電変換性能の向上の検討を進めている。

安田研究者・館山研究者：安田研究者の有機半導体の合成研究と館山研究者の理論計算により新たな化合物の材料設計指針、特性予想を進めている。

井上研究者・長藤研究者・荒木研究者：さきがけ研究の終了後、さきがけ「エネルギーキャリア」の辻口研究者らと連携し、新たなプロジェクト(さきがけネットワーク)を立ち上げ、研究が進展中である。

平山研究者・白澤研究者・増田研究者：平山研究者の表面分析に関し、分析のエキスパートである増田研究者、白澤研究者が協力し、共同研究を行っている。

内田研究者・長野研究者：内田研究者を研究代表者とし、新たに CREST「熱制御」チームとして採択された。(長野研究者は、主たる共同研究者)

(CREST 研究者間での連携例)

川田チーム・古山チーム：SOFC 電極に関し、解析的・実験的アプローチを行う川田チームと理論・計算科学的アプローチを行う古山チームは採択当初より研究会を合同で開催し、双方のアプローチをすり合わせつつ、連携して進めた。なお、その後、さきがけ長藤研究者も参加している。

小林チーム・安部チーム：シリコン太陽電池にベースを置く小林チームにおいて、副生する微粉シリコンがリチウム電池負極の材料として優れた特性を持つ可能性が示された。これに対し、リチウム電池にベースを持つ安部チームがその特性評価を行うことで共同開発を進めた。

長尾チーム・圓山チーム：赤外線吸収の物理現象をベースとする長尾チームと熱放射・非接触温度計に経験を持つ圓山チームが連携し、新たな非接触・赤外線温度計の開発に向かっている。

(CREST・さきがけ研究者間での連携例)

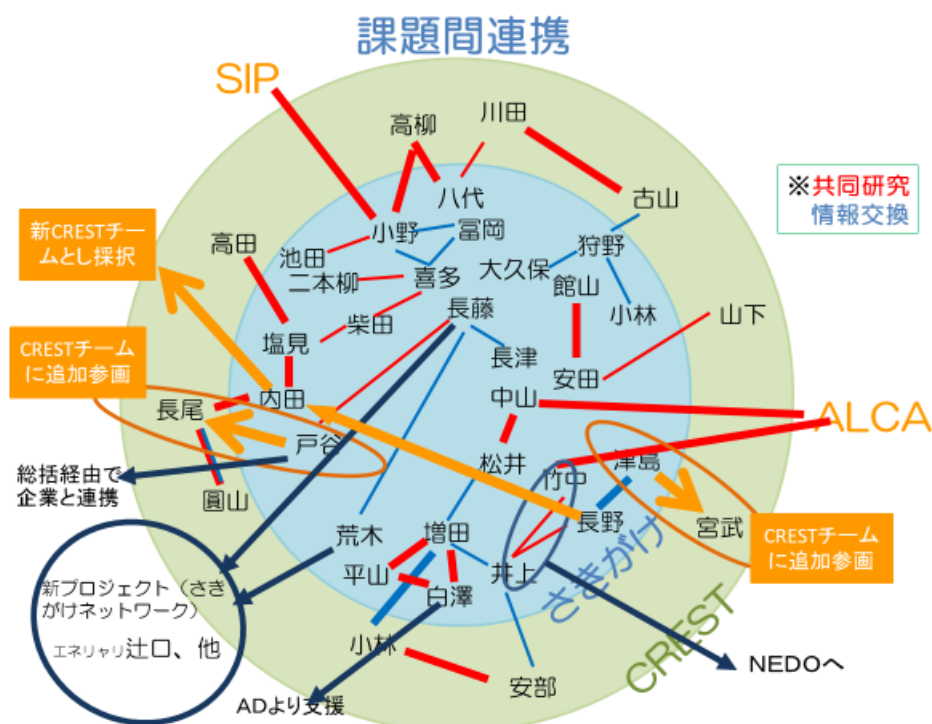
高柳チーム：高度な顕微鏡技術を持つ高柳チームが、中山研究者（リチウム電池正極材料の理論計算からの探索）、八代研究者（SOFC型燃料電池用電極触媒）、小野研究者（SiC半導体）等のサンプル測定、解析により連携した。

川田チーム・八代研究者：SOFCをテーマとするさきがけの八代研究者とCREST川田チームが広く連携した。

高田チーム・塩見研究者：プール沸騰現象をベースとする高田チームに塩見研究者が理論計算で参画した。

長尾チーム・戸谷研究者：熱放射をベースとした研究課題であるCREST・長尾チームとさきがけ・戸谷研究者は連携して研究を進めて頂いたが、さらに、さきがけ研究期間を終了した後、戸谷研究者、及び関連企業を共同研究者として、長尾チームに加えることで、さらに社会実装に向けての研究を継続している。（2年間）

宮武チーム・津島研究者：さきがけ研究を終了していた津島研究者に関し、津島研究者のもつ燃料電池セル内の観測技術が、宮武チームの研究加速に役立つことが明らかとなってきたため、最終年度に新たに加わり、現在、推進中である。



## ②人材輩出や成長の状況について

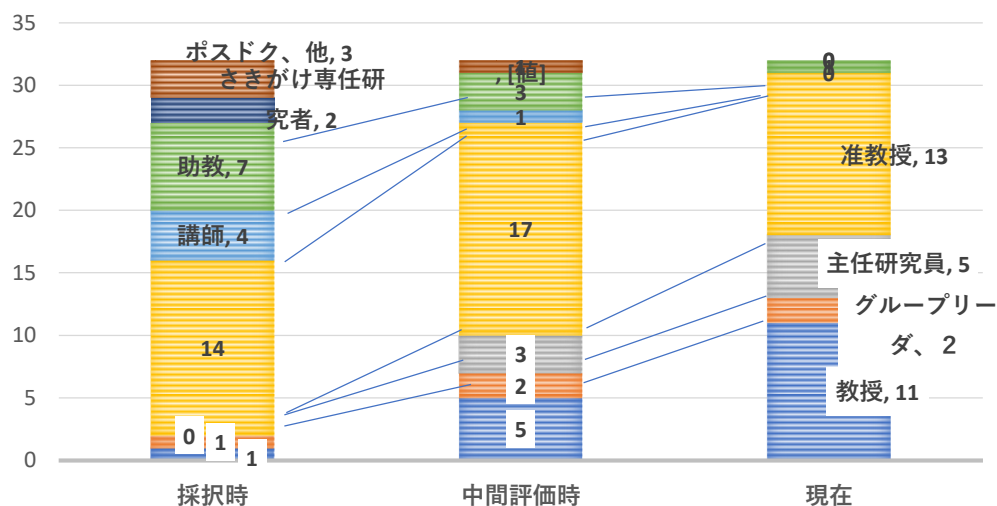
- ・CRESTでは、研究開始時点で各研究代表者は教授、グループリーダーとして活躍しており、研究代表者の昇進はない。しかしながらチーム内では、学生への教育やポストドクのキャリアパスの育成も行なわれており、CREST研究期間中に、学位取得（52名）や昇進

(助教：20名、准教授：30名、教授14名)及び国立研究法人等への就職(5名)、民間企業への就職(38名)等多数の昇進、成長がある。

・さきがけでは、採択の視点のひとつに「優れた若手研究者」を加えており、32名のさきがけ研究者について、採択時は准教授、講師、助教、さらにポスドク3名、ポスト就任前のJST さきがけ専任研究者2名という若手研究者が中心であった。その後の成長は著しく、中間評価の時点では、教授に4名が昇進する等、昇任又はポストに就任し、ポスドク研究者、さきがけ専任研究者とも0名となっていた。さらにその後も昇進が続き、現時点では、教授職が11名、国立研究所のグループリーダー・主任研究者が7名、准教授が13名となっている。

また、本さきがけ研究の成果等により、先端計測(柴田研究者)、SIP(喜多研究者)、NEDO(竹中研究者、井上研究者)、ACCELのFS(安田研究者)、ALCAへの参加(二本柳研究者、井上研究者、松井研究者)、CRESTへの採択(研究代表者として池田研究者、塩見研究者、内田研究者が、研究参加者としては戸谷研究者、津島研究者、長野研究者)、さきがけネットワークへの採択(井上・長藤・荒木研究者)等、さきがけ後のプロジェクト獲得にもつながっている。

## さきがけ研究者の成長



### ③研究費配分について領域運営上の立場から

CREST においては、領域会議、課題中間評価において研究進捗を確認し、「成果をあげているテーマを加速する」「研究目標の達成を加速する」という原則により、総括裁量経費、及びその他の予算を活用し、研究費増額を行っている。

特に課題中間評価においては、「選択と集中」の観点から、成果のあがっているテーマを加速するとともに、研究計画変更、及び研究チーム構成の見直しを行うとうにより、研究の加速を行った。

また、CREST 研究終了時点において、優れた成果を上げており、さらなる進展が期待できる 3 課題（古山 T、陳 T、宮武 T）については、1 年間の追加研究の支援を行った。それにより、CREST 研究で開発したソフトウェアの一般向けの提供、リチウム空気電池の実用サイズ（A5 判）での試作・性能検証、さらには、アニオン導電成高分子膜の量産試作技術の開発等の具体的な成果につなげることができた。

	金額(千円)
総括裁量経費による研究加速	248,697
その他の増額	110,541
内、国際化支援	21,299
内、先端計測機器	45,000
内、中間評価加速	14,242
内、1年追加支援	30,000
早期終了	0
増額	359,238
減額	0
差し引き合計	359,238

さきがけにおいては、月例の研究会、領域会議等において研究の進捗を把握、評価する中で、CREST と同様に「成果をあげているテーマを更に加速する」「研究目標の達成を加速する」という原則により、現在までに 15 件、約 72 百万円の研究費増額を行った。また、領域内の異分野の研究者間での相互の研究に対する理解も深まり、相互の特徴を生かせる共同研究の推進も奨励した結果、領域内においても、研究議論に加えて、個別の情報交換、装置・技術の相互補完等が活発に行われ、その中から具体化した共同研究テーマのうち、成果の期待できる 2 テーマに対し、それにかかわる研究費の増額（約 11 百万円）を行った。

	金額(千円)
研究加速 (15 件)	71,864
領域内共同研究、 (2 件)	1,200 9,400

大挑戦 (1件)	40,800
早期終了 (1件)	-31,096
増額	123,264
減額	-31,096
差し引き合計	92,168

#### ④中間評価結果への対応

(i) アドバイザーの専門分野が偏っており、その増員を望む、とのご指摘に対し、従来より、CREST、さきがけのアドバイザーには、相互に乗り入れて頂くことで、専門領域を補っていたが、さらに、さきがけの終了時、2名のアドバイザーにはCRESTアドバイザーに就任頂くことで、すべての課題に対応できる体制をとった。

(ii) 論文、特許が少ないさきがけ研究者がいるとのご指摘に対し、以下の状況である。

論文の投稿に関し、中間評価以降に、さきがけ研究課題に関する投稿数が増えている一方、現時点においても必ずしも投稿が進んでいない研究者もいるが、いずれも、当初の目論見とは異なる方向に発展した研究を継続していることから、時間を要しているが、近い将来の論文投稿を期待している。すなわち、1名は現在CRESTで研究を継続中であり、また1名は、課題の対象とした手法(「非線形顕微分光法」)に関する従来の解析手法が間違っていたことを見出し、そのことへの指摘、及び修正に時間を要している。また、もう1名の研究者は、粘弾性に関する挑戦的課題から発展し、大きな振幅条件下の界面粘弾性に関する新たな知見を得ており、現在展開中である。また、特許に関し、啓蒙し、推進した結果、研究課題の特性による偏りはあるが、中間評価当時から、CRESTは44件から91件に、さきがけは36件から40件に増加した。(国別出願数も含む)

## 7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について

### (1) CREST

#### ①研究総括の狙いに対する研究の状況

エネルギー利用の飛躍的な高効率化実現に向けて、ボトルネックとなる相界面現象の基礎学理を深化させ、そこで得られた知識を基に理想的な界面を設計し実証する、といったいわば出口から後方を振り返り課題を抽出することを通して、例えば相界面におけるエネルギー損失の大幅削減を可能とするなど、新しい相界面機能の発現機構の発見や創造への糸口を得ることを目指した研究が、研究チーム内部あるいは他の研究チームと合同で、さらにさきがけ研究者などと融合しながら進められている。

以下に、領域の代表的な研究成果を示す。

古山通久チーム：

本研究課題は、固体酸化物形燃料電池に関して、実験と対応した実時間・実空間スケールの解析が可能なマルチスケール連成シミュレーション手法を開発し、従来の手法では適用できなかった作製過程、雰囲気変化に伴う構造変化への適用、実験的検証の実現を目指した。本研究では、燃料極の電流-電圧特性を第一原理計算により導出されるパラメータに基づき定量的に予測することに成功し、得られた指針に基づき、実験的に高性能化を確認することができた。加えて、燃料極の焼成、還元、運用の過程における微細構造形成を予測するシミュレーション手法の開発にも成功した。従来は経験的試行錯誤に大きく依存してきた多孔構造の合理的設計への道筋が拓かれ、固体酸化物形燃料電池や関連技術に使用される多孔質材料の高機能・高耐久化への貢献が期待される。

その後、固体酸化物形燃料電池について、NEDO 事業などより実用化に向けた事例にて開発したシミュレーション手法の活用、燃料電池開発企業の意見交換等を行い、さらに蓄電池への適用など多用途展開が進められている。また、本 CREST 研究で開発したソフトウェアの一般ユーザーへの提供も行っている。

**JST** 第一原理に基づく定量的マルチスケール連成解析を電気化学分野ではじめて実現

研究代表者：古山 通久（九州大学）  
 CREST研究テーマ名：「固体酸化物形燃料電池電極の材料・構造革新のためのマルチスケール連成解析基盤」(H.23～H.29)

**研究概要**

第一原理に基づく定量的マルチスケール連成解析を実現  
 ～指針に基づく高性能化効果を実験的に検証～

マルチスケール連成解析の取り組み概要図

モリ電極の測定との比較 (H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O分圧依存)

実電極素での高性能化の実証

電極製造プロセスを計算機上で再現  
 ～粉末特性と発電特性をつなぐ Powder-to-Power の実現～

燃料極製造プロセスの構造変化を予測

粉末充填  
プロセス

前設要素法

粉末特性  
Multi-sphere法

<入力>

焼成  
プロセス

モンテカルロ法

初と発電をつなぐ Powder-to-Power  
解析技術を世界に先駆け開発

- ✓ 実験と対比可能な時空間スケール解析
- ✓ FIB-SEM検証による定量予測検証実現
- ✓ 計算機実験による設計案の提示
- ✓ 高い学術評価と産業界への貢献

還元  
プロセス

フェースフィールド法

運転  
プロセス

フェースフィールド法

過電圧特性  
格子ボルツマン法

<出力>

**CREST研究の成果**

- ・ 第一原理計算に基づく原子スケール物性に基づき燃料極特性の定量予測を初めて実現、指針に基づく高性能化を実験的にも確認
- ・ 粉体の焼成、還元、運用まで燃料極作製プロセスの定量的シミュレーションを初めて実現
- ・ 成果の一部をソフトウェアベンダーを介して一般供与を開始

**CREST研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等**

- ・ 燃料極シミュレータの超並列計算に向けた取り組みをポスト京プロジェクト（重点課題⑥サブ課題B）で推進
- ・ 成果を蓄電池技術のマルチスケール連成解析へと展開
- ・ 機械学習との連携によるパラメータ決定の効率化に向けた取り組みに着手
- ・ 多分に経験的であった多孔質電極の合理的設計支援技術により新たな科学技術の発展が期待される



山下晃一チーム

本研究課題は、光誘起過程を理論・計算科学の観点から解明することを目指すものである。本研究者らは、エキシトンの解離により生成したキャリアを有効に取り出すことが、有機系太陽電池におけるエネルギー変換技術としての要となると考え、そこでキャリアの熱的緩和寿命を予測する電子-フォノン相互作用を取り込んだ多体摂動論による新規な計算方法を開発し、エキシトン解離過程について緩和 CT 状態からの自由電荷生成 (cool process) に加え、非緩和 CT 状態からキャリアが緩和せずに超高速に自由電荷生成する過程 (hot process) を検証した結果、高効率エネルギー変換には hot process が主要であり、その観点から JSC、VOC、FF 増大の微視的機構を明らかにし、高効率化の指針を提案した。さらに、それに基づいたアクセプターのエネルギー準位の検討から、非フラーレン系の利用が可能となることの提言に至った。

本研究では、理論計算化学による光エネルギー変換素過程の解明、太陽電池特性や変換効率と相関する物性を特定しており、これらを基軸に新規太陽電池材料設計が成功すれば、「エネルギー計算科学」という新たな科学技術分野の形成が期待でき、またこれらの研究成果を具体的な新規デバイスの設計、創出に生かすことで、社会・経済に貢献することが期待される。



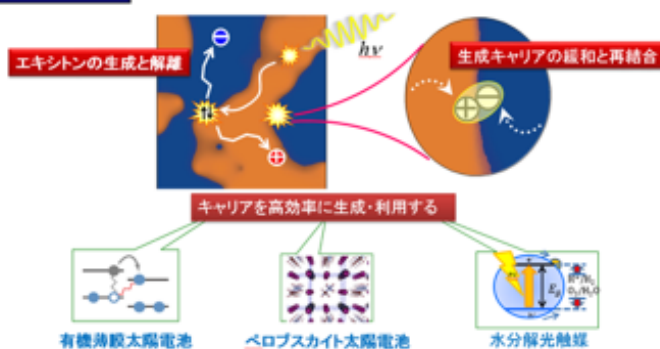
太陽光エネルギー変換の高効率化要因を相界面光誘起素過程の観点からとらえ分子レベルで明らかにした

研究代表者：山下 晃一（東京大学）

CREST研究テーマ名：「エネルギー変換計算科学による相界面光誘起素過程の設計」(H.24～H.29)



### 研究概要



太陽光エネルギーの利用拡大のカギを握る技術を“相界面光誘起素過程”の観点からとらえ、各技術で求められる相界面光誘起素過程の制御と最適化について理論化学・計算化学先導により研究を行った。相界面における光誘起素過程として『エキシトンの生成と解離』、また『生成したキャリアの緩和過程』に注目し、電子構造論・反応論に基づいた分子レベルの基礎学理を確立し、さらに超高速計算に基づく計算科学と実験実証により高効率光エネルギー変換に向けた高機能相界面を探索・創出する。

### CREST研究の成果

- ・有機薄膜太陽電池におけるエキシトン解離の主経路がhot processであることを大規模理論計算と過渡吸収実験から明らかにした。
- ・ $J_{sc}$ 、 $V_{oc}$ 、FF 増大の微視的機構を明らかにし高効率化の指針を提案した。
- ・ペロブスカイト型太陽電池の光生成キャリアの緩和メカニズムを多体摂動論による電子-フォノン相互作用の観点から明らかにした。
- ・水分解光触媒( $GaN$ )<sub>1-x</sub>-( $ZnO$ )<sub>x</sub>混晶系のエキシトン生成過程と可視光吸収機構を第一原理計算により提唱し、実験的に検証した。

### CREST研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等

- ・分子論に基づくエネルギー変換計算科学という新たな基礎研究分野の発展に貢献
- ・相界面における光エネルギー変換素過程を解明するためのモデリング、シミュレーション技術を開発
- ・高効率ノンフラーレン太陽電池材料の理論設計
- ・高効率ペロブスカイト太陽電池の機構解明と水分解光触媒材料における光生成キャリアのダイナミクス解明



宮武健治チーム：

本研究課題では、アルカリ形燃料電池の高性能化と高耐久化を実現することを目的として、安定で高アニオン導電性の高分子電解質膜の開発、高性能な卑金属系電極触媒の開発、アニオン導電性高分子と卑金属触媒からなる反応場を制御した三相界面の創製に取り組み、高分子の親水部と疎水部を精密に設計する独自の手法により、従来までのアニオン導電性高分子膜に比べて飛躍的な性能向上を達成し、またフッ素を適切な位置に導入することにより電解質膜のナノ相分離構造を制御することが可能となり、アルカリ溶液中での化学安定性も向上した。また、ナノカプセル法によるナノ粒子触媒調製法を卑金属に適用し、ヒドラジン酸化や酸素還元を高活性な触媒系を見出した。アニオン導電性電解質膜を用いたアルカリ形燃料電池は、卑金属触媒との組み合わせで世界最高レベルの性能と耐久性を実証している。

本研究課題の成果は、アニオン導電性薄膜と触媒粒子の界面の解析とその理解、制御に取り組むことにより、アルカリ形燃料電池の出力密度を大幅に改善しており、アニオン導電性薄膜の物性規制因子を解明し、水素やヒドラジンを高効率で電気エネルギーに変換する技術を可能としたものであり、従来の標準膜を凌駕する新型膜として世界的に、また産業界からも大きな注目を集めている。さらに二次電池や水電解などへの応用展開も広がってきており、エネルギー高効率利用に貢献しうる革新的技術として産学協同で定着させる試みも進められている。

## JST 独自の分子設計に基づく電解質膜による高性能・高耐久性 アルカリ形燃料電池

研究チーム：宮武 健治（山梨大学クリーンエネルギー研究センター 教授）

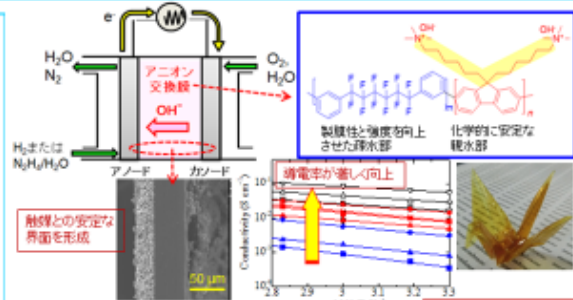
研究課題名：「革新的アニオン導電性高分子を用いた三相界面の創製と

アルカリ形燃料電池への展開」



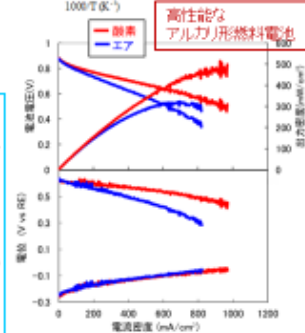
### 成果のポイント

- 従来材料に比べて導電率(>50mS/cm)と安定性(1000h)を飛躍的に向上させた新規アニオン導電性高分子薄膜の開発に成功した。
- 液体燃料を用いたアルカリ形燃料電池において、世界最高レベルの発電性能(500mW/cm<sup>2</sup>)と耐久性(1000h)を実証した。
- 非白金系触媒(Ni, Fe)と組み合わせてアルカリ形燃料電池の高性能化に成功した。



### 研究成果のインパクト、今後の展開等

- 導電性と安定性の相反関係を打破するため、親水部と疎水部をそれぞれ構築するアニオン導電性高分子膜の分子設計指針を見出した。
- アニオン導電性高分子と触媒層界面の最適化により、アルカリ形燃料電池の発電性能を大幅に向上できる知見を見出した。
- 高性能高耐久性アニオン導電性高分子は、燃料電池だけでなく水電解や二次電池など様々なエネルギー変換デバイスのゲームチェンジング技術となることが期待できる。



足立幸志チーム：

本研究課題は、機械工学、材料科学、及び理論化学の観点から、超低摩擦を発現するメカニズムを明らかにし、新たな材料を創成し、さらには実環境下への展開を目指すものである。本研究では、大気中に存在する水分及び酸素とのトライボ化学反応の積極的な利用により新規開発した窒化炭素膜が低摩擦発現界面を自己形成させ得ることを明らかにし、従来不可能であった高湿度下での超低摩擦発現に成功した。この基本原理に基づけば、特別な潤滑剤を用いることなく機械機器が稼働する環境を利用した「超低摩擦発現ナノ界面の継続的自己形成に基づく安定した低摩擦発現技術」に発展し得ることを明示したものである。また、従来経験的に扱われていたなじみ現象をケイ素系材料と水とのトライボ化学反応の視点から得られた超低摩擦を発現させるための理想的ナノ界面を解析し、それを創成するための技術の開発により水中境界潤滑下において 10000 分の 1 の極めて低い摩擦係数を発現し得るナノ界面の継続的自己形成にも成功している。

本研究は、機械工学的な視点に加えて、実験化学や第一原理シミュレーションによる理論化学の視点による総合力により進められたものであり、「超低摩擦発現ナノ界面を摩擦エネルギーにより継続的に自己形成することにより、安定した低摩擦の発現とその持続を可能にする摩擦システムが構築可能であることを実験と計算によって明示した」ことから、今後、実環境への適用に向け、さらに進展していくものと考えている。



摩擦エネルギーを利用した超低摩擦発現界面の自己形成による超低摩擦システムの実現

研究代表者：足立 幸志（東北大学）

・CREST研究テーマ名：「超低摩擦機械システムのための  
トライボ化学反応を制御したナノ界面創成」(H.25～H.30)



研究概要

トライボ化学反応の視点からの

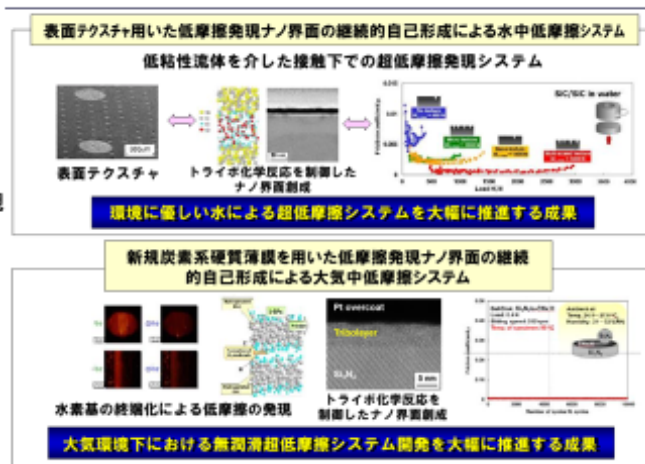
- ・なじみ現象の科学的理解
- ・定常状態時の摩擦面の形成原理の解明
- ・超低摩擦発現原理の解明
- ・その理論限界を実現するための技術開発
- ・エネルギーの利用効率を極限まで高めた機械の実現
- ・これまで実現することが不可能であった稼働条件や環境条件での超低摩擦機械システムの実現

CREST研究の成果

- ・新規炭素系硬質薄膜を用いた低摩擦発現ナノ界面の継続的自己形成による大気中低摩擦システム
- ・表面テクスチャを用いた低摩擦発現ナノ界面の継続的自己形成による水中低摩擦システム
- ・なじみの科学的理解とその制御による超低摩擦システム設計
- ・反応分子動力学法に基づく摩擦シミュレータの開発
- ・超低摩擦発現ナノ界面の継続的自己形成の実証

CREST研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等

- ・ナノ界面制御に基づく水潤滑システムの構築
- ・新規炭素系硬質薄膜を用いた水素及び窒素ガスを用いたオイルフリー潤滑システムの構築
- ・摩擦エネルギーを利用した超低摩擦発現界面の継続的自己形成による信頼性と長期耐久性を保證する超低摩擦機械システムの実現



さらに、各研究チーム毎の特筆すべき成果を記す。

川田チーム：固体酸化物形燃料電池（SOFC）の技術の鍵となる電極の設計に計測の視点からアプローチし、低温化が可能な電極の設計指針を追求するものである。本研究においては、電極内の反応場分布を世界で初めて直接測定し、従来の電極設計法の間違ひを見出し、反応経路をデザインする新しい設計法を提案した。さらに、放射光による「その場」X線吸収測定にも成功し、これまで高温電極に使われてこなかった赤外分光や昇温脱離などの手法を含む複数の測定手法を有効に活用するという総合的な評価体制の構築に成功した。これにより、従来想像されていたものとは異なる高温電極反応場の「実像」（有効反応場長、構成材料同士の相互作用など）を明らかにしたものであり、拡散係数などの基礎データを精査し、従来広く行われてきた測定方法の問題点を明らかにするなど、高温電極の評価と設計に必要な基礎科学の構築に貢献している。今後の更なる展開に期待する。

高田チーム：沸騰・蒸発および吸着過程の制御による熱・物質輸送過程の高効率化を目指し、「気液界面制御」に多面的にアプローチし、新たな学術「メタフルイディックス」を構築しつつ、エネルギー問題に寄与することを目指した。本研究では、プール沸騰における限界熱流束を大きく向上させる伝熱面を創出し、種々の新型デシカント用吸着剤（ナノポーラス多孔体）を設計・合成し、また作動圧力領域におけるエタノール有効吸着量は既存のMaxsorb IIIの約1.7倍を達成しシステムの理論性能は約1.5倍となる吸着式ヒートポンプ用の高性能吸湿材料開発等を達成するなど、工学的に幅広い利用が可能であり、社会・経済への貢献可能性の大きな成果が得られており、今後の実用に向けての展開が期待される。

高柳チーム：収差補正型超高分解能電子顕微鏡（Ro05）による“その場”観察を駆使して、ナノワイヤ型のリチウム二次電池正極材料であるマンガ酸リチウムの挙動を解明し、種々の応用へ展開することを目指した。本研究により、ナノワイヤ電池では高速充放電によっても電極破壊や容量減少が無いことを見出し、そのナノワイヤ電極（ $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$  直径 200 nm、長さ 200  $\mu\text{m}$  程）内にワイヤ軸に沿って「高濃度相・中間相・低濃度相」構造が生成され、これが充放電サイクル時のリチウムイオン濃度変化を可逆的に引き起こす原因であることを明らかとした。この成果は、今後のリチウム電池用材料開発に大きく寄与することが期待される。

陳チーム：電気自動車等に需要が高い次世代革新型リチウム 2 次電池の開発を目指し、リチウムイオン電池の 5~8 倍の理論性能値を持ち、かつ、空気を燃料とするリチウム空気電池の開発を目的とした。本研究の特筆すべき成果として、リチウム空気電池および水電解による水素製造のための 3 次元ナノポーラスグラフェン電極の開発が挙げられる。一繋がりの 3 次元ナノポーラス構造を持ちながらグラフェンの大きい比表面積と高い電気伝導性を効果的に維持することができ、これにより長年技術的な課題だったグラフェンの 3 次元

構造を有した電極としての効果的な利用を可能にした。一方で、化学的にドーブおよび担持 RuO<sub>2</sub> 触媒により、触媒活性のないグラフェンの触媒機能が劇的に改善されることも示した。3次元ナノポーラス窒素ドーブグラフェンと RuO<sub>2</sub> 複合材は再充電可能な大きい容量を持つと共に、高いエネルギー効率と長サイクル寿命を示すことを A5 判サイズの試作電池において、明らかとした。さらに化学ドーブナノポーラスグラフェンより、水電解による高効率水素発生が可能なことも示した。これらの成果が進展し、実用に繋がること期待される。

安部チーム：本研究課題の目標は高容量・高出力を両立するリチウム二次電池の合剤電極設計指針を提示することである。現行の電気自動車用途のリチウムイオン電池は電極を低密度にすることで短時間充電を可能にしているが、これはエネルギー密度を犠牲にしている。すでにリチウム二次電池の構成材料である活物質、電解液、セパレータは最適化されており、電気自動車用途で材料自身のポテンシャルを発揮できない要因は合剤内イオン輸送が高密度では低下することであり、その解明を目指した。この現象は広く認識されていたが合剤内イオン伝導を実際に調べた研究はない。本研究では、合剤電極の細孔をモデル化した陽極酸化ナノポーラスアルミナ膜を用いて細孔内のイオン輸送挙動を調べた。その結果、細孔内でのイオン輸送がバルク電解液と比べて一桁以上低下する現象を見出している。この現象のメカニズムを理論的、実験的に解明することにより、実用電池の設計に大きく寄与することが期待される。

早瀬チーム：ペロブスカイト太陽電池のヘテロ界面が効率に及ぼす影響を検討した。Pb-ペロブスカイト太陽電池のヘテロ界面の電荷再結合を抑制するために、スパイク構造のエネルギー準位を導入したところ、開放電圧の向上に伴う効率の向上を確認できた。Pb-ペロブスカイト太陽電池のヘテロ界面は効率を低下させる電荷トラップが本質的に少なかった。一方、Sn-ペロブスカイト太陽電池のヘテロ界面には多くの欠陥が存在し、それらが Sn-系ペロブスカイト太陽電池の性能を低下させていることを明らかにした。本研究により、ヘテロ界面構造が効率向上に大きく関与していることを実証できた。

小林チーム：CREST で開発した相界面制御法では、シリコンウェーハを H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>+HF 水溶液に浸漬して白金触媒媒体に接触させるだけで 3%以下の反射率のシリコン表面を瞬時に形成できる。極低反射率のため、セル製造コストの 21%を占める反射防止膜の形成の必要がない。相界面制御法で形成した極低反射単結晶シリコンを用いて反射防止膜を形成しない単純構造の太陽電池で、~20%の変換効率を達成した。また、従来技術では低反射表面が形成できない固定砥粒法で製造された多結晶シリコンを用いて、18.53%の変換効率を達成した。相界面制御法で形成したシリコンナノクリスタル層は graded band-gap 構造を持ち表面再結合を防止していることを見出した。これらの知見が実用電池に適用され、産業に貢献す

ることを期待している。

長尾チーム：本 CREST では、ある特定波長の赤外線をほぼ 100%熱に変えるデバイス、またその逆に熱を特定波長の赤外線に変える波長選択型赤外完全吸収体を開発した。このデバイスを中赤外線センサーへと応用し、3.2 $\mu\text{m}$  の中心波長において、世界最高性能である、Q 値 150 を実現した。また、Q 値 60 程度を持つセンサーを 4 波長分並べ、中赤外マルチバンドカラーセンサーのプロトタイプを開発した。このマルチバンドカラーセンサーを用いると非接触で物質の真温度と放射率とを同時に決定できる。また、開発した完全吸収体を波長制御赤外線乾燥に用いることで、省エネ、低温、高速に、溶剤の乾燥やポリマーの成型が可能であることを定量的に企業と共同で評価し、実用に着手した。これらのデバイスに適した、新しい高耐温性のセラミック系プラズモン材料の探索も進め、その有用性を実証した。

圓山チーム：メタンハイドレートを利用したエネルギーシステムを実現する上で、メタンガス生産速度を向上可能なシステムの一形態として、縦井戸式バッチシステムを考案した。また、メタンハイドレートの解離メカニズムについて、界面現象および近傍の熱物質輸送を高精度に計測し、反応律速過程であることを明らかにした。成果を統合し、縦井戸式バッチシステムの核である地層の予熱は、反応律速である解離反応の促進と、吸熱反応による氷生成の防止、氷生成阻害による地層内流路の確保などに作用し、結果としてメタンガスの生産速度増加に寄与することが示唆された。これらの知見は、将来のメタンハイドライト利用に貢献するものと期待している。

## ②科学技術の進歩への貢献

・CREST

	論文			口頭発表			特許		
	国内	国際	合計	国内	国際	合計	国内	国際	合計
2011 年度 採択課題	4	328	322	408 (84)	466 (136)	874 (220)	15	4	19
2012 年度 採択課題	2	238	230	527 (107)	346 (154)	873 (261)	16	4	20
2013 年度 採択課題	7	163	170	387 (118)	450 (130)	837 (248)	33	19	52
領域合計	13	719	732	1332 (309)	1262 (420)	2584 (729)	64	27	91

(特許は出願数、口頭発表のカッコ内は招待講演数を内数で記入)

### ③研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献

企業との情報交換や共同研究を推奨している。出口から見据えたテーマ設定を重視しており、企業に在籍する領域アドバイザーとの議論を設定するとともに、総括やアドバイザーから企業研究者の紹介も行い、連携につながった例もある。

チーム内のグループとして企業が加わっているチームとしては、小林チームと宮武チームの2チームがあるが、さらに、チーム内にとどまらず企業との連携を進めている。

例えば、小林チームにはシリコン基板メーカーが参画しており、さらにアドバイザーの助言により、太陽電池セルメーカーとの意見交換、さらには極低反射率シリコンを用いたセル試作・試験で連携することで、実用セルに適用するための技術の開発にも力を入れている。

また、山梨大学の宮武チームには、精密機械メーカー、及び自動車メーカーが入っており、開発したアニオン導電性高分子について、精密機械メーカーと共同で大量合成とその課題抽出、製膜方法の最適化、補強材による高ロバスト化、商品化に向けたコスト検討を行い、Rol to Role での製膜技術を実現した。また、自動車メーカーでは実用条件も加味した条件での試作、試験を行っている。さらに、CREST 研究で開発した高性能・高耐久性アニオン導電性高分子膜をアルカリ水電解装置に応用する検討を電気メーカーと共同で行っているほか、種々の応用用途への拡大を狙っている。

高田チームでは、国家課題対応型研究開発推進事業 原子力基礎基盤戦略研究イニシアティブのプロジェクトが立ち上がっており、ハニカム多孔質体を用いた冷却技術の実用化展開に向け、企業との連携・技術移転をすすめている。

古山チームでは、CREST の理論計算のために開発したソフトウェアを広く社会で活用頂くために市販に向けて、ソフトメーカーにライセンスした。

### ④本研究領域に続く研究資金の獲得状況

本領域の CREST 研究を終了した 2011 年度、及び 2012 年度採択研究チームに関し、それぞれ大型の研究資金の獲得に挑戦している。現時点で獲得できている大型の研究資金は、NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム、及び未来社会創造事業がある。各研究チームに参加した若手研究者もそれぞれ研究資金の獲得に努めており、今後、種々の研究資金の獲得に繋がるであろう。

### ⑤顕彰、受賞

CREST の研究代表者の特筆すべき受賞としては、高柳研究代表者の学士院賞受賞、古山研究代表者の文部科学省若手科学者賞の受賞、および本 CREST の成果による宮武研究代表者のドイツ・イノベーション・アワード「ゴットフリード・ワグネル賞」秀賞受賞が挙げられる。CREST においては研究代表者のみならず、研究チーム内の若手研究者の学会賞の受賞が目立っており、若手研究者の今後のキャリア形成にも寄与しているものと考えられる。

## ⑥今後の期待や展望

CRESTには、1つの研究ユニットとしてその研究分野のトップランナーとなることを期待している。一方で、エネルギー高効率利用を実現するためには、CREST研究により明らかとなった相界面現象や相界面科学を通して、量的にどれほど貢献できるかを明確にする必要がある。CREST研究代表者には、今後とも、多くの研究論文成果および若手研究者の育成を期待するとともに、その研究が果たす量的貢献を最大にするためのリーダーシップを大いに発揮していただきたい。

### (2) さきがけ

#### ①研究総括の狙いに対する研究の状況

エネルギー利用の飛躍的な高効率化実現に向けて、ボトルネックとなる相界面現象の基礎学理を深化させ、そこで得られた知識を基に理想的な界面を設計し実証する、といったいわば出口から後方を振り返り課題を抽出することを通して、例えば相界面におけるエネルギー損失の大幅削減を可能とするなど、新しい相界面機能の発現機構の発見や創造への糸口を得ることを目指した研究が、機械、電気化学、電気電子などの分野の垣根を越えて進められている。

以下に領域としての代表的な研究成果を示す



塩見淳一郎研究者：

本研究課題は、フォノンのシミュレーションと計測技術により、高性能な熱電変換材料の開発を目指すものである。研究においては、精緻な計算と独自の理論を用いて、シミュレーションによる物性評価手段、予測に関する解析手法を確立し、ナノ構造化材料内のフォノンや電子の選択的な散乱・透過を利用することで熱電変換効率の向上に資する開発手段を実現したものであり、今後は実際の材料スクリーニングに利用されることで、大きな成果に繋がるものと考えていた。さきがけ研究終了後には、本研究で構築したフォノンエンジニアリング手法を用いて、Si-Si 焼結界面のナノ構造によって界面熱抵抗を大幅に制御し、Si ナノ多結晶の熱伝導率を数 W/mK まで低減できることや数ナノメートルの Si ナノ粒子を原料として、酸化制御とプラズマ焼結によって、シリカが混在した高ドープのナノ多結晶を作製し、高い変換性能 ( $ZT=0.39@600^{\circ}\text{C}$ ) を得ることに成功している。

本さきがけ研究で開発したフォノン輸送解析技術は、フォノンエンジニアリング分野の活性化や拡大に貢献し、多数の企業との共同研究を行なっている。また、現在はCREST「微小エネルギー」領域の研究代表者として、熱電変換素子領域で研究を展開している。

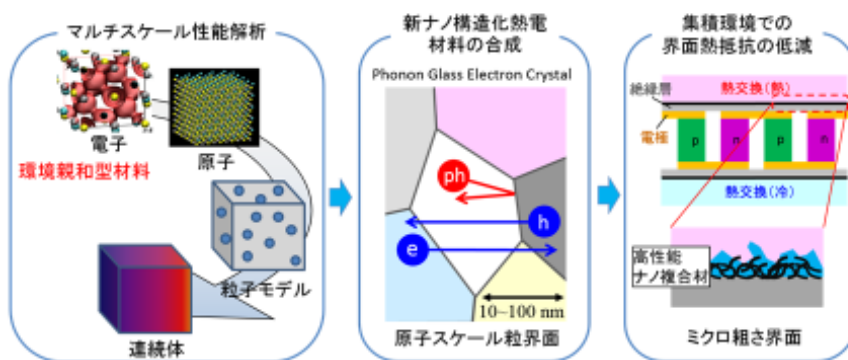
## JST 界面・ナノ構造設計によって熱電変換性能を向上させた

研究者：塩見 淳一郎（東京大学）

さきがけ研究テーマ名：「ナノ構造界面を利用した環境親和型熱電半導体の創成」(H.23～H.26)



### 研究概要



### さきがけ研究の成果

- ・原子レベルの物理から素子性能までを統一的に取り扱う熱電変換材料の性能予測ツールを構築し、原理原則に基づいた材料設計を実現した。
- ・従来の経験的な開発手法に代わって、原理原則に基づく開発手法の有用性を示すことができた。
- ・材料の探索範囲を広げ、環境親和型の材料であるシリコンを基盤とした熱電材料の性能を向上させた。

### さきがけ研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等

- ・フォノンエンジニアリング研究の活性化と拡大に貢献 (例：日本伝熱学会でナノスケール伝熱に関する特定推進研究グループ発足。応用物理学会でフォノンエンジニアリングの合同セッション発足など)
- ・ナノスケール熱機能材料のマテリアルズ・インフォマティクス研究の活性化と拡大に貢献 (JST-MI2Iなど)
- ・熱電技術開発によるエネルギーハーベスティング技術への貢献 (CRESTなど)



柴田直哉研究者：

本研究課題では、原子分解能走査型透過電子顕微鏡 (STEM) をベースとして、サブ Å レベルに絞り込んだ電子線と試料との相互作用を高精度に計測する技術を開発することにより、原子レベルの電磁場分布をダイレクトに観察する手法を開発し、材料相界面制御型のエネルギー関連材料、デバイス研究開発に応用することを目指したものである。さきがけ研究において、要素技術として原子分解能対応多分割 STEM 検出器の開発に成功し、この多分割検出器を用いて原子電場の直接観察に世界で初めて成功し、半導体 pn 接合電場直接観察や磁気スキルミオン磁場直接観察にも成功している。更に、この検出器の商用化にも成功し、2015 年秋から国内の大手電子顕微鏡メーカーから販売が開始されており、世界中で様々な分野の相界面制御型材料・デバイス開発を強力にバックアップすることが期待できる。また、本技術の発展形であるピクセル型検出器の開発も世界中で精力的に始まっており、その先鞭をつける研究開発として世界的にも認知されている。さきがけ研究終了後に採択された JST 先端計測では、これまで不可能であった無磁場条件下での原子分解能観察を可能にする新しいレンズ開発に注力しており、この技術が可能になれば、これまでの分割型検出器開発と融合することにより、原子レベルの構造と磁場構造を同時に観察することができる全く新しい電子顕微鏡が可能になると期待できる。この技術が成功すれば、磁石、スピントロニクスデバイス、トポロジカル材料、マルチフェロイクスなどの基盤解析手法となることが大いに期待でき、その波及効果は極めて大きいと考えている。



## 原子分解能電場計測電子顕微鏡法の開発

研究者：柴田直哉（東京大学大学院工学系研究科総合研究機構・教授）

さきがけ研究テーマ名：「原子分解能電磁場計測電子顕微鏡法の開発と材料相界面研究への応用」（H23～H26）



### 成果のポイント

- 原子分解能対応の分割型STEM検出器を開発し、原子レベルに絞った電子線が原子周囲の電場からの相互作用により偏向される情報を精密に計測することに成功した。
- 本結果はNature PhysicsやNature Communication誌に掲載され、電子顕微鏡の新たな地平を開く研究として世界的に非常に大きな反響を得た。(N. Shibata et al., Nature Phys., 8, 616, 2012, N. Shibata et al., Nature Comm. 8, 15631, 2017)
- 半導体pn接合界面に形成された内蔵電場を直接観察することに成功した。(N. Shibata et al., Sci. Rep., 5, 10040, 2015)。今後、半導体解析に極めて有効な手法になると考えられる。

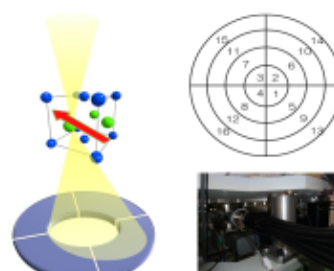


図1：原子分解能電場計測STEM法と分割型検出器の模式図

### 研究成果のインパクト、今後の展開等

- 原子分解能での電場計測に世界で初めて成功した。
- これにより、原子レベルからの局所電場解析が初めて可能になった。
- 本手法は、環境・エネルギー材料相界面における特性発現の鍵となるポテンシャル構造およびそれに伴う局所電磁場解析に有力な手法となる。本研究成果の発表後、類似開発が世界中で開始されている。

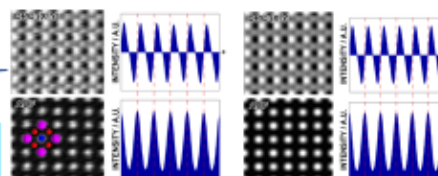


図2：原子分解能微分位相STEM法によるSrTiO<sub>3</sub>の観察結果(左)及びシミュレーション結果(右)

安田琢磨研究者：

本研究課題は、分子レベル（1 nm）から実薄膜レベル（100 nm）間に介在するメゾスコピック階層領域における有機半導体分子の集積・配向を能動的に制御するアプローチに焦点を当て、高性能・高効率な有機エレクトロニクスデバイスの開発を目指したものである。本研究では、特異的な分子間相互作用を介して精緻に分子集積・配列することにより、マイクロリボンおよびシート状構造体を形成する有機半導体材料を開発し、有機トランジスタへの適用を検討した結果、従来の有機半導体やアモルファスシリコンを凌ぐ  $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  以上の高速電荷移動度を達成し、バンド伝導機構に基づく高性能有機半導体材料の設計指針を開拓した。また、有機太陽電池の高効率化においても、分子自己組織化を利用して光電変換活性層中のメゾスケールの構造を制御する手法により、光電変換効率を飛躍的に向上できることを実証している。

本研究は、液晶材料が有するユニークな特徴、即ち三次元的自己組織能、ナノ相分離、界面形成を能動的に活用して、適切に電子構造設計した有機半導体分子を高度に集積・配列制御するボトムアップ型材料構築法により、有機トランジスタや有機太陽電池の高性能化および高効率化を達成したものであり、次世代の有機エレクトロニクスデバイスの創出に繋がるものと期待できる。



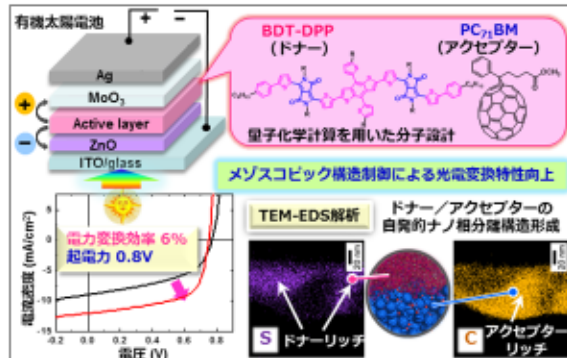
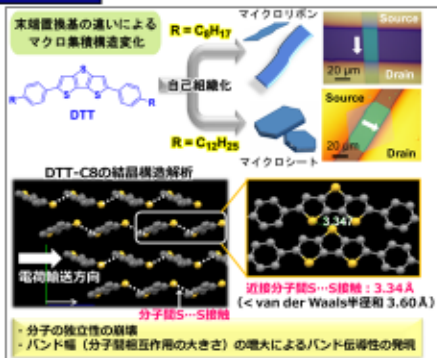
自己組織性有機半導体における高速電荷輸送の実証

研究者：安田 琢磨（九州大学）

さががけ研究テーマ名：「液晶半導体のメゾスコピック超構造を活用した有機電子デバイスの開発」(H.23～H.26)



研究概要



さががけ研究の成果

- ・精緻な集積構造を形成可能なジチエノチオフェン誘導体を開発し、従来の有機半導体やアモルファスシリコンを凌ぐ電荷移動度 ( $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上)を実現。
- ・有機液晶半導体の特異的な構造形成能を活用して光電変換活性層を活用する手法により、新たな有機太陽電池を実現。(低照度下で極めて高い光電変換効率を達成)

さががけ研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等

- ・省エネ、低コスト、フレキシブルな高性能有機トランジスタへの応用研究を展開
- ・有機光電変換を利用した新しい環境発電デバイスへの応用研究を展開


内田健一研究者：

本研究者は、熱流をスピンの流れに変換するスピントロニクス効果の発見者であり、本さきがけ研究では、スピン角運動量の流れ「スピン流」を媒介として光や熱などのエネルギーを回収利用するという新しい原理の発電・省エネデバイス技術の創出に挑戦したものである。その重要な成果の一つは、金属微細構造を組み込んだスピン流素子において表面プラズモン共鳴を励起することで、可視光照射によるスピン流生成を実現したことである。これは、本研究者が発見した「スピントロニクス効果」の原理を光エネルギーに拡張することによって実現された。さらに、スピントロニクス効果や異常ネルンスト効果によって駆動される熱電変換技術に関しても、物理原理・材料・作製プロセス・素子構造について多角的に研究し、大幅な出力増大を実現している。現状の素子を即座にエネルギー問題への量的な貢献に結び付けることは難しいが、今後、熱電性能をさらに向上させるための指針を確立できた意義は大きい。

また、本研究者が創始した熱とスピントロニクスの融合研究領域「スピントロニクス」には、国内外から次々と新規グループが参入し、その中で本研究者は基礎・応用研究で世界を先導し続け、物理的知見・測定ノウハウの蓄積に大きく貢献している。本技術領域は未だ黎明期にあり、未解明な点が多い故に予想を超えた現象が次々と見出されており、今後も飛躍的な進展が期待されており、本研究もそれを先導するものと期待している。また、現在は、CREST「熱制御」領域の研究代表者として、種々の熱制御機能の開拓を進めている。

**JST** 磁気の流れ「スピン流」を使って熱や光を電気に変換

研究者：内田 健一（物質・材料研究機構）  
 さきがけ研究テーマ名：「スピン流を用いた革新的エネルギーデバイス技術の創出」(H.24～H.29)



**研究概要** スピン角運動量の流れ「スピン流」を媒介として光・熱エネルギーを回収利用する新原理の発電・省エネデバイス技術の創出

➡

1. 絶縁体を用いたスピン流・電流生成
2. シンプルな単一デバイス構造におけるハイブリッド発電

- さきがけ研究の成果**
- ・表面プラズモン共鳴による光-スピン流変換の実現 (Nat. Commun. 2015)
  - ・スピントロニクス効果の純粋測定・定量評価手法の確立 (PRL 2013, PRB 2017他)
  - ・物質依存性測定によるスピントロニクス効果増強に向けた指針の確立 (PRB 2013他)
  - ・絶縁体/金属界面制御によるスピン流生成効率の向上 (APL 2013 & APL 2015他)
  - ・貴金属フリーなスピントロニクス熱電変換の実現 (PRB 2013他)
  - ・磁性多層膜におけるスピントロニクス効果の増強向上 (PRB 2015他)
  - ・磁性多層膜における異常ネルンスト効果の増強 (PRB 2015)
  - ・スピントロニクス効果のマグノン周波数依存性と特性長の特長 (PRB 2015他)
  - ・熱スピン変換能のイメージング計測手法の確立 (Nat. Commun. 2016他)
  - ・大面積・フレキシブルスピントロニクス素子の動作実証 (Sci. Rep. 2016)

- さきがけ研究以降の進展、今後の展開、科学技術イノベーションへの寄与等**
- ・ロックインサーモグラフィ法とコンビナトリアル成膜技術の融合による熱電・熱スピン効果のハイスループット材料探索
  - ・スピン流の特性を活かした使用用途の検討、実際の使用形態を考慮した素子設計
  - ・スピントロニクスに基づく新しいサーマルマネジメント技術の実現



図1. 本研究の概念図。

図2. 研究成果の概要。

さらに、各研究者毎の特筆すべき研究成果を記す。

池田 勝佳研究者：本研究では、金属ナノ構造の示すプラズモン共鳴を利用して、光エネルギーを電極界面で効率的に捕まえ、光機能性有機分子膜において有効活用することを目指した。プラズモン共鳴を介して光エネルギーを界面に局在できる金属ナノ構造を設計すると共に、分子レベルで精密に構造制御された機能性超薄膜をそこに組み込む手法を開発した。このような金属-有機複合ナノ構造において、「光-電気エネルギー変換」に資する 1 電子移動反応モデルと「光-化学エネルギー変換」の要である多電子移動多段階反応の両方について、効率的に光駆動する可能性を確認した。その結果、生活環境に存在する微弱光をうまく使って、省エネルギー動作するナノデバイスを作るための基本原理を確立した。

伊藤 衡平研究者：水素社会の実現には高圧水電解による効率的な高圧水素ガス製造が鍵となる。しかし高圧水電解では水素がクロスオーバーし、電流効率が低下する。そこで本研究では、対流効果によりセル内の水素ガス気泡の挙動を変化させることでクロスオーバを抑制することに挑戦した。具体的には、アノードに加え、カソードにも水を供給して集電体上に現れる水素ガス気泡の離脱を促進した。結果、最大で 5%の電流効率を向上した。更に「その場観察」にも取り組み、対流の気泡径、離脱周期への影響を定量化し、気泡力学モデルに基づいた解析とあわせて対流効果によるクロスオーバ抑制メカニズムを解明した。その後の展開として、集電体へのぬれ性付与による気泡挙動の制御も可能で、クロスオーバ抑制にぬれ性も効果的であることを見出した。

喜多 浩之研究者：SiC/MOSFET のエネルギー効率向上のため、その抵抗損失を引き起こす MOS 界面近傍の界面欠陥の削減を目指すものである。本研究では、SiC 酸化反応の熱力学と速度論に基づいて温度・酸素分圧を選択することにより、界面欠陥をもたらす主要因となる炭素由来の副生成物の影響を低減させることを試み、その結果、SiC の価電子帯から 0.1-0.4eV のエネルギー領域において界面準位密度 $<10^{11}\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$  という低欠陥密度の界面を実現した。これは世界で初めて、他元素による界面修飾を使わず、熱酸化プロセスだけで高品質な MOS 界面を SiC 上で実現したものである。

関口 康爾研究者：電気エネルギー使用量を激減させる「磁気トランジスタ」の構築のため、マグノン制御に適用できる基礎現象の発見・解明を目指すものである。本研究により、ナノメートル級（ナノは 10 億分の 1）の厚さの導電性磁性体（パーマロイ合金：NiFe）を用いて、新たな構造の「三端子素子」を考案し、スピン波を演算素子に適用する鍵となるスピン波の重ね合せを初めて実現し、さらに、この三端子素子を用いて、2つのスピン波を制御し、その波の重ね合わせの状態を観測したことは、磁気的な現象であるスピン波を用いて論理演算ができることを原理的に初めて実証したものであり、大きな成果である。

館山 佳尚研究者：イオン伝導などのエネルギーに係る輸送機構を明らかにする計算手法を緻密な分子動力学と第一原理計算から確立し、エネルギー高効率利用の具体的課題として挙げられる二次電池等の性能向上に資することを目指すものである。その結果、微視的な反応メカニズムが不明であったリチウム二次電池の負極と電解液の界面に初期充電時に形成される界面被膜（SEI 膜）の生成過程を理論的に明らかにしている。この研究は、京コンピュータを活用した大規模な第一原理化学反応計算手法を開発し、解析した結果、従来犠牲還元すると考えられていた添加剤が実は溶媒のアニオンラジカルを不動態化する役割があること、そして SEI 膜の形成機構として従来想定されてきた表面成長機構だけでなく、沖合での凝集 “near-shore aggregation mechanism” という新しい機構も主要な役割を果たすことを示した。これらの提案された新機構は、実験家にも十分受け入れられており、理論計算からの提案が具現化した一例となっている。

宮崎 晃平研究者：本研究課題は、リチウム空気二次電池の高性能化に関する。このリチウム空気電池は、エネルギー密度の高い金属負極と空気中の酸素をエネルギー媒体とするため、理論的には高い容量が見込まれるが、酸素ガスを利用する多孔質電極を空気極に使用するため、現行では充放電効率が低いという欠点がある。そこで、本研究では空気極の充放電効率を高めるために、各反応を律速する因子を抽出するためのモデル電極を作製し、解析が難しい多孔質電極内での電気化学反応の分布の観測に成功し、多孔質電極内の電解質液膜中のイオン輸送抵抗が効率低下の主要因となっていることを明らかにしたものである。

八代 圭司研究者：固体酸化物形燃料電池（SOFC）の更なる高性能化を目標に、その鍵となる電解質（イオン導電性酸化物）の新たな材料設計法を追及したものである。電極触媒材料である遷移金属酸化物では、電極反応の駆動力となる酸素の化学ポテンシャルが機械的な応力に依存して変化する Chemo-Mechanical な相関があることを実験的に明らかとし、また Maxwell の関係式から理論的な依存性を導出し、定量的に説明できることを示した。本結果を実用的に利用できれば、従来とは異なる新しい電極材料設計法となる事に加え、学術的には、電気-化学-機械の融合した新しい学問分野となることが期待できる。

保田 諭研究者：燃料電池電極の Pt 触媒と同等な高活性な酸素還元能を持つ窒素ドーピンググラフェンの創成に挑戦したものである。本研究では、分子の規定構造性と自己集合能を利用することで、高酸素還元活性な触媒サイトの選択的合成に成功した。また、高効率な電子移動を有する活性サイト-カーボン界面を構築することで、酸素還元活性が向上することを示した。これらの結果は、発展途上であるが、種々の窒素-炭素構造の中で、四電子酸素還元活性の違いを見出したこと、触媒サイトへの高効率なカーボン界面を形成し、触媒活性を向上させたことなど興味深い知見が得られており、今後の展開が期待される。



大久保 貴志研究者：電子デバイスに殆ど利用されていない配位高分子を用いた電子デバイスや光電変換材料開発を目指すという挑戦的な課題を設定し、様々な配位高分子を合成、薄膜化し、その特性評価を行った。その中で、ジチオカルバミン酸誘導体を配位子とした種々の新規混合原子価配位高分子の合成に成功した。さらに、これら配位高分子が比較的小さなバンドギャップを有する半導体であることが明らかにし、配位高分子が新たな無機・有機複合型半導体材料として展開できる可能性があることを示したものである。今後の研究分野の拡大、進展に期待する。

その後、さきがけ研究にて合成した配位高分子を有機薄膜太陽電池のホール輸送層として利用することで、従来の酸化モリブデンを超える高い変換効率が実現することを見いだしている。

小林 厚志研究者：本研究では無機・有機複合型ポリマー材料である配位高分子を用いて世界で初めての薄膜太陽電池の開発を行ってきた。無機・有機複合体である配位高分子は従来の有機半導体に比べ誘電率が大きくそのため電荷分離効率の向上による高い光電変換特性の発現が期待できるものと考えているが、これまでデバイス化がほとんど行われておらず光電子デバイスとしての有用性は未知数であった。そのような中、本研究ではこれまで可視領域での強い吸収を示す一連の無機有機複合型半導体材料の結晶構造、電子状態、キャリア輸送特性の解明、湿式法での薄膜化プロセスの開発、薄膜太陽電池の作製などを行い、いくつかの配位高分子が銅イオンの変位に起因する強誘電性を示すことや有機半導体材料に匹敵する比較的高いキャリア移動度を示すこと、GaAs などの無機半導体に匹敵する強い光吸収特性を示すことなどを見出した。ただし、実際の薄膜太陽電池の活性層へと応用したところ何れも光電変換効率は極めて低く、上述の配位高分子の特性を引き出すには至っていない。

その後、さきがけ研究にて合成した配位高分子が有機薄膜太陽電池のホール輸送層として有用であることを見いだした。この配位高分子は様々な有機薄膜太陽電池や有機ペロブスカイト太陽電池のホール輸送相としても利用できるため、今後薄膜太陽電池の高効率化に貢献することが期待される。

SANG Liwen 研究者：窒化物半導体 InGaN（窒化インジウムガリウム）界面制御による、高効率光電変換デバイス太陽電池や発光ダイオードの実現を目指している。本研究では、異なる In 組成を持つ多層 InGaN 量子井戸・ドット構造を制御し、中間バンドを形成することで、紫外から近赤外光の広い波長帯域で高効率吸収できる光電変換を成功した。界面分極ドーピング制御で高い正孔濃度を持つ p 型 InGaN 層が形成することより、太陽電池の量子効率及びダイオードの光度が飛躍的に向上することが実現した。本研究成果は、将来的には 60%以上の超高効率発電及び省エネルギー電子デバイスへの応用が期待される。

竹中 壮研究者：固体高分子形燃料電池の実用化に向けて、Pt 触媒へのシリカでの被覆により、その触媒活性を低下させることなく、耐久性を改善することを目指すものである。Pt カソード触媒は酸性、高い正電位などの厳しい条件にさらされるため、Pt の溶解-再析出、および Pt 粒子の凝集により Pt 粒子径が成長し、触媒活性が低下する。本研究においては、厚さ数 nm のシリカ層による被覆法で、シリカ層を親水性から疎水性にすることで、Pt 触媒の活性を低下させることなく、耐久性を改善することに成功した。電極触媒表面に絶縁体酸化物から構成される相界面を導入し、電極の高機能化を試みた研究例はわずかで興味深い。

津島 将司研究者：フロー電池に対する新規電極構造として「櫛歯流路構造」と「薄型多孔質炭素電極」を用いることを提案し、それを通じて、フロー電池の高性能化を目指すものである。本研究において提案された「櫛歯構造流路」と「薄型多孔質炭素電極」により、セル抵抗を従来比 35%低減できることが実証され、さらに、エネルギー変換効率向上のメカニズムを計算科学的手法により明らかにし、フロー電池の高効率化のための学術基盤を構築した上で、セル抵抗支配因子の定量的評価にもとづき設計指針を提示することに成功した。

戸谷 剛研究者：金属膜表面の微細構造の設計・実現により、特定波長のみのふく射エネルギー放射を可能とする技術の実用化を目指す課題である。爆発性の溶剤を低温で乾燥させる技術として乾燥の分野で注目されている放射加熱式乾燥炉は、溶剤の吸収帯の波長だけが透過するフィルターで大きな熱損失が発生していた。本研究では、溶剤の赤外線吸収帯だけを放射する赤外線ヒーターを開発すれば、ヒーターに投入する電力を削減できると考え、表面微細構造を用いて溶剤の赤外線吸収帯にヒーターからの放射の波長を合わせる研究や、波長制御赤外線ヒーターによる入力電力削減効果の研究などを行った結果、ヒーターへの入力電力を 25%削減できる可能性が示された。今後の研究の進展により、実用に寄与することを期待する。さきがけ研究の終了後には、さらに CREST 研究チームに加わり、実用化を目指して展開している。

富岡 克広研究者：シリコン基板上の III/V 族半導体ナノワイヤーのデバイスへの応用を目指すもので、電子機器の消費電力を 90 %以上削減できる、低消費電力・高性能型スイッチ素子の実現を目指すものである。本研究では、ナノメートルスケールの半導体選択成長技術によって、Si/III-V ヘテロ接合からなる新しい固相界面を形成し、この界面で生じるトンネル輸送を応用したトンネル FET で、理論限界の突破（サブスレッショルド係数の急峻化）を狙ったものであり、半導体ナノワイヤヘテロ接合界面による変調ドーピング構造と Si/III-V 固相界面で、新しい切り口によってトンネル電流を増大する素子構造を提案し、

これらの素子を作製することで、急峻なサブスレッショルド係数を維持したまま、電流値が大幅に増大されることを実現するという大きな成果につながった。今後の実用を目指した展開に期待する。

中山 将伸研究者：計算科学の手法で、リチウムイオン電池の新しい電極材料（セラミックス）の提案、実現を目指す挑戦的な課題であり、本研究者はリチウムイオン電池正極材料の二相共存反応のメカニズムを実験・計算の両面から解析した。その結果、正極材料の均一相内のリチウムイオン拡散能を数桁凌駕しうる相界面イオン拡散の存在を指摘することが出来た。この知見は、車載電池のような高出力形電池の正極材料開発に資する有用な知見であり、今後の実験面からの展開に期待する。

二本柳 聡史研究者：「埋もれた界面」の観察が可能な和周波数分光の手法を顕微化、高性能化することで、リチウム電池等の種々の材料表面（界面）の挙動を観察できる新たな手法の提供を目指す課題である。本研究では、分子レベルの薄さの界面領域を選択的に観測することができる振動和周波発生分光法とサブミクロンスケールの空間分解能を有する近接場赤外顕微鏡を結合させ、新しい界面選択的非線形顕微分光計測法を開発した。しかしながら、本法により、モデル電池界面の測定データを詳細に解析した結果、既報の測定方法の解釈に問題があるという大きな課題を見出した。この課題を解決することで非線形分光法の応用分野の拡大、およびそれを利用した実用相界面の観察に重要であることが明らかとなり、今後の展開に期待する。

増田 卓也研究者：二次電池および燃料電池における電極反応をその場観察するため、X線光電子分光法（XPS）を基盤とした独自の測定システムの開発を行った。厚さ 10-15 nm のシリコン薄膜製の窓を有する環境セルを構築し、液体で満たしたセルを真空槽に保持し、シリコン薄膜に X 線を照射することによって、シリコン薄膜（固体）と水（液体）の界面より放出された光電子を（薄膜を通して）真空側で検出するという配置で、世界で初めて固液界面における電気化学反応のその場 XPS 測定を実現した。この原理に基づいて、水中で電位をかけることによってシリコン表面に酸化膜が成長するという電気化学反応のその場観察に成功したほか、二次電池材料を観察するための実験室型その場 XPS 測定装置を開発した。現在は固液界面のみならず、全固体電池を対象とした固固界面における物質・電子状態分布計測への展開を図っている。

荒木拓人研究者：固体高分子形燃料電池（PEFC）はクリーンで高効率なため、次世代車両の動力源などとして期待されている。しかし、反応から生成した水が燃料電池内に滞留し水素や酸素の供給を阻害するフラッドイングという問題があり、それを防ぐためには局所温度分布の把握が重要である。しかしながら PEFC の各部材はマイクロメートルオーダーと



薄く、化学的にも機械的にも過酷な環境なため一般的な温度センサは使用できず、我々自身でマイクロ温度センサを開発し測定を行った。そこでガス拡散層（GDL）界面では液水が集中して凝縮しやすく、その場合は GDL の有効熱抵抗が急激に低下すること、そしてこの有効熱抵抗の低下はより多くの液水凝縮から、さらに熱抵抗を低下させるフィードバックを引き起こすため、わずかな部材特性の違いが発電性能の大きな違いを生み出すこともあることなどを明らかにした。

井上元研究者：リチウムイオン二次電池を対象に多孔質電極層内の反応輸送解析モデルの確立を行い、特に従来未考慮であった実際の複雑電極構造の反映、また膨張収縮の影響を反映させることが可能となった。また計算のみならず理論構築や実測評価を進め、律速因子抽出のための方法論を得た。さらに実材料物性に基づくデバイス設計手法の構築を進め、迅速設計支援技術としても有用な解析技術の構築に至った。以上の技術により材料開発とデバイス設計の高速支援技術を確立することができた。

小野倫也研究者：本課題では、省電力エレクトロニクスデバイスや低電力損失パワーデバイスの実現をめざし、半導体界面のキャリア散乱を予測できるように研究実施者が開発した第一原理伝導計算コード RSPACE を高速化し、計算科学手法による半導体デバイスの機能予測を実現すること、SiC-MOS 界面のキャリア散乱予測を行い、移動度を低下させるキラークラック欠陥を抽出すること、そしてキラークラック欠陥の減処理方法を提案することを行った。開発した計算コードを用い、SiC-MOS の移動度を低下させるキャリア散乱機構は、これまで Si-MOS で考えられていた機構とは異なり、それは SiC の特徴的な伝導帯端準位によることを明らかにした。

狩野旬研究者：金属を強誘電体に接合させることで、金属の電子構造を電気分極による電界効果で変調させ、特異な電子構造をもった金属に、新しい触媒作用を発現させることができた。電気分極の電界効果で、強誘電体には傾斜したバンド構造があることを実験的に見出すことができた。これは先に発見した、強誘電体と接合した金属に発現する特異な電子構造形成の機構を解明できたことを意味する。  
その後、傾斜したバンド構造を交流電場により振動させ、能動的な電子ポンプができる触媒の開発を行っている。

白澤徹郎研究者：本研究では、波長分散集束 X 線と 2 次元 X 線検出器を併用した、表面 X 線回折の高速測定法を新規開発し、相界面の構造変化を原子スケールでその場追跡することを目標とした。従来の単色 X 線の代わりに波長分散集束 X 線を用いることで従来比 100 倍以上の高速での測定に成功し、反応を伴う相界面の「その場観察」に活用した。TiO<sub>2</sub> 表面の光誘起超親水化現象の観察においては、超親水化に伴う原子配列変化のその場追跡に成

功し、反応メカニズムの提案に至った。また、燃料電池反応であるメタノール電気分解反応において、白金触媒電極表面の構造変化のその場追跡に成功し、CO 被毒層の生成・脱離過程を明らかにし、エネルギー輸送・変換に関わる相界面現象の解明に有効な計測法であることを示した。

長藤圭介研究者：固体酸化物形燃料電池の電極内のイオン・電子・ガスの輸送経路は、従来はランダム構造であったものを、伝導率を高めるために、アノード内の電子輸送経路材料である Ni 粒子、カソード内の電子輸送経路材料である LSM 粒子が磁気双極子モーメントを有することを利用して、磁場を用いて、伝導方向に配列する方法を提案し、その有効性を実証した。具体的には、イオン輸送経路材料であるジルコニア材料の体積分率を増加しても分極抵抗が変わらなかった。このことは、固体酸化物形燃料電池の耐久性向上につながる。また、ジルコニア材料をナノインプリントで成形する方法を開発した。

長野方星研究者：次世代熱輸送技術として期待される毛管力駆動型熱輸送デバイスに対して、性能を支配する多孔体内気液界面の相変化素過程を赤外・可視域でマイクロスケールで直接計測できる手法を確立し、未知なる多孔体内の熱流動挙動を解明し、熱伝達性能を飛躍的に向上させた。本知見に基づく独自の多孔体内相変化モデルを提案し、高性能化指針に基づく多孔体改質および構造制御により優れた多孔体相界面構造を創成した。さらに、独自の熱輸送デバイスを提案し、その設計理論を確立するとともに、実際に熱輸送デバイスを構築し、従来にはない超薄型デバイス、長距離熱輸送デバイスを実証することに成功した。

平山朋子研究者：本研究では、低摩擦摺動面の創成によるエネルギーの高効率化を目指し、固液界面における境界潤滑層のあり方に焦点を当て、研究を行った。具体的には、①トライボロジーユースに特化した固液界面分析手法の確立、②固液界面分析に基づくエンジンオイル用添加剤の最適化、の2点を目標とし、その達成に向けて研究を進めた。最終的に、①で確立した界面分析手法を用いてエンジンオイル用添加剤の最適配合を検討した結果、特定の極圧剤と油性剤を併用系すると厚く柔らかい境界潤滑層が形成され、低摩擦摺動面を創成し得ることを界面構造および力学特性の両者から証明した。本研究成果を踏まえて、企業と共同で、実エンジンでの評価を実施中である。

松井雅樹研究者：本さきがけ研究では、マグネシウム金属および金属間化合物を負極として使用した、新しい蓄電池の実現するための電極／電解液界面の材料設計を行った。その場赤外分光セルを用いて、電極表面における電解液の分解挙動を解析したところ、電解液中のアニオンの還元分解によって、電極表面に不動態被膜が生成することを確認した。一方、電気化学的な可逆性に優れる  $Mg_3Bi_2$  金属間化合物の表面は不動態化が抑制されること

を見出した。このように不動態化の起こらない電極／電解液界面を形成によって、優れた可逆性が得られることが明らかとなった。

## ②科学技術の進歩への貢献

	論文			口頭発表			特許		
	国内	国際	合計	国内	国際	合計	国内	国際	合計
2011 年度 採択課題	6	129	135	149 (69)	153 (101)	302 (170)	2 (0)	1 (0)	3 (0)
2012 年度 採択課題	4	176	180	258 (84)	174 (79)	432 (163)	15 (3)	7 (7)	22 (10)
2013 年度 採択課題	7	86	93	165 (55)	179 (56)	344 (99)	15 (0)	0 (0)	15 (0)
領域合計	17	391	408	572 (209)	506 (223)	1078 (423)	32 (3)	8 (7)	40 (10)

※カッコ内は、特許は登録数、口頭発表は招待講演数を内数で記入

## ③研究成果の社会的・経済的な視点からの貢献

科学技術イノベーション、実社会への実装へとつなげることを意図し、企業との情報交換や共同研究を推奨している。32名のさきがけ研究者のうち、12名が当さきがけ研究課題に関連して企業と共同研究を実施しており、さらにまた、共同研究にまだ至ってはいないが企業との情報交換も8名の研究者が実施しており、2/3程度の研究者が何らかの形で企業との情報交換を行っている。

特に特筆すべきは、柴田研究者は、さきがけ研究で得られた研究成果をさらに発展させ、その原理を用いた電子顕微鏡の市販を実現した。

また、本さきがけ研究の成果を広く社会に知らせ、科学技術イノベーションに繋がることを期待して、プレス発表、新技術説明会、ナノテク展等に積極的に展開し、多くの企業等との情報交換に繋がっており、今後の共同研究、さらに社会への実装に繋がることを期待している。

### 科学技術イノベーションに関するまとめ

社会実装	1 課題（市販）
企業との共同研究	12 課題
情報交換	8 課題
プレス発表	11 課題、17 件
展示会等	新技術説明会 1 課題、ナノテク展 8 課題
公開シンポジウム	4 回実施し、全課題について成果を公開

#### ④本研究領域に続く研究資金の獲得状況

当さがけ研究以降にそれぞれの研究者が獲得した研究資金の概略を示す。

	当さがけ以降に獲得した研究費(千円単位、概略)	主要なプロジェクト (科研費以外を例示)
2011 年度採択 課題 (11 課題)	366,000	・CREST「革新的反応」(特定調査) 研究 代表者 ・CREST「微小エネ」研究代表者 ・JST 関連 (AccelFS)
2012 年度採択 課題 (11 課題)	404,957	・CREST「熱制御」研究代表者 ・NEDO 固体燃料電池関連 PJ ・JST 関連 (CREST、ALCA への参画)
2013 年度採択 課題 (10 課題)	341,855	・さがけネットワーク研究代表者 ・NEDO 蓄電池関連 PJ への参画 ・JST 関連 (CREST、ALCA への参画)
合計	1,112,812	

当さがけ研究での成果等により、科研費を含めた種々の競争的資金の獲得に繋がっている。2011 年度、及び 2012 年度に採択した研究者から 2 名(塩見研究者、内田研究者)が CREST 研究代表者として採択されている。また、安田研究者は、2015 年度の ACCEL の FS 課題として採択されたが、残念ながら FS のみで終了した。喜多研究者は SIP に、NEDO には、塩見研究者、竹中研究者、荒木研究者、井上研究者らが採択されている。また、ALCA-Spring や CREST 課題には、多くの研究者が共同研究者として採択され、活動中である。今後さらに科学技術イノベーションに向けて進展することが期待される。

#### ⑤顕彰、受賞

当領域のさがけ研究者 32 名で、当さがけ研究開始以降、合計 70 件の表彰を受賞している。その中で、特筆すべきは、

- ・文部科学賞・若手科学者賞を新たに 7 人(塩見研究者、柴田研究者、関口研究者、安田研究者、内田研究者、中山研究者、富岡研究者)が受賞し、既に受賞していた津島研究者を加えて、合計では、32 名中 8 人となっている。
- ・本さがけ研究終了の翌年(2015 年)に館山研究者が、本さがけ研究に関連して、ドイツイノベーションアワード「ゴットフリード・ワグネル賞」を受賞したこと。
- ・本さがけ研究終了の翌年(2016 年)に富岡研究者が、本さがけ研究に関連して、日本学術振興会賞を受賞したこと。

であり、優れた若手研究者が採択され、また、成長していることが示されている。

#### 【進捗が思わしくない事象、懸案事項】

研究課題が提案当初の見通しとおりに進んでいない研究課題もある。

一期生の伊藤研究者は、水電解による高圧水素生成技術の開発を目指したが、高圧水素を取り扱う装置の困難さから当初の高圧での実験を含む5年計画から2 MPaでの基礎的研究を中心とする3年計画に変更した。二期生の戸谷研究者は、金属膜表面の微細構造により熱放射の特定波長への制御技術を目指すという研究課題であるが、その用途を当初の「放熱・冷却」から、特定波長を放射するヒーターによる「加熱・乾燥」に修正し、企業と連携するように指導した。さらに、さきがけ研究の終了後、当領域のCREST研究チームに追加して加え、社会実装の実現に向けての研究を推進している。また、二本柳研究者は非線形分光法の一つである、「和周波発生分光法」により、電極界面の観察を目指したが、先行研究の解析結果に間違いがあること見出し、その修正及び適応対象の可能性についての検討を続けている。

#### ⑥今後の期待や展望

毎月1回のさきがけ研究会を通して、出口から後方を振り返り、ボトルネックが何処にあるか、といった課題を抽出すること、さらにそれを説明しきることが、分野を問わず大切であることを改めて認識できたのではないかと考えている。この研究期間に、1つ、2つ上のポジションに就いたさきがけ研究者も多いが、この課題抽出の大切さを忘れずに、さらなる活躍、飛躍を期待するとともに大きく成長してほしい。

## 8. 総合所見

### (1) 研究領域のマネジメントについて

本領域では、領域目標を達成するため、材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、物理系、数理系など幅広い分野から将来性のある研究者をさきがけメンバーとして、またそのような研究者が参画する研究チームをCREST研究チームとして採択した。勢いのあるさきがけ研究者と力のあるCREST研究チームを採択できたと考えている。さきがけ研究者は、毎月1回の研究会を通して、目標を達成するためのボトルネックは何処か、を問われ続けたことや、領域アドバイザーによるマンツーマンの指導により、採択時に少々曖昧であった研究課題を極めて明確なものとするのができたと同時に、この研究期間中にその多くが1つ上のポジションに就くなど研究者としての成長が著しい。さらに毎年1回のCREST・さきがけ合同領域会議を通して、粗削りでも勢いのあるさきがけ研究者と、その研究分野の先端を走るCREST研究者との交流が、お互いに刺激し合うことはもちろんのこと、本領域初年度から研究の相互乗り入れや共同研究を展開することができた。また、領域研究期間の後半においては、アドバイザーとともにサイトビジットを頻繁に行うことにより、進捗状況の確認や、それぞれの研究テーマにおける問題点について深い相互理解に基づい

て十分な議論を行い、解決の糸口に導くことができた。

## (2) 研究領域としての研究成果

個々の研究課題については、その研究成果や達成度に大きな差があることを認めざるを得ない。特にさきがけ研究者については、自身が提案した課題について実験装置や計算コードがすでに用意できている場合には、論文発表や国際会議での口頭発表など、着実に成果を積み上げることができたが、その場計測などの測定手法を提案した研究課題については、装置の構築に時間を要し、ようやく信号をキャッチできたのは、研究期間終了近くとなってからであった。そのため、3年半の研究期間内には必ずしも十分な成果が示せない課題もあるものの、その後も継続して取り組むことで、本研究領域全体の終了までに成果を示すことができた研究課題もある。CREST 研究においても、エネルギー高効率利用に向け、その課題解決に着実に実績を上げてきた研究チーム、一方、ようやく研究期間終了近くとなって成果が出始め、全体像が理解できるようになった研究チームもあるなど、その達成度に大きな差が認められる。さらに中間評価を通して課題設定の見直しを要した研究チームについては、改めて提出頂いた課題設定を精査し、研究資金配分及び研究体制の見直しを実施することで研究目標の達成に向けた指導を行った。

エネルギー高効率利用を具現化するには、得られた研究成果を社会実装した際に、量的貢献が大きいことが必須条件となるが、これは一般的には容易なことではない。そこで、これに少しでも近づけるために、本領域の戦略目標では、1頁の達成目標の記述や6頁の図に示されるように、「相界面における、①エネルギー変換・輸送機構の解明、②モデリング、及びマルチスケール解析シミュレーション・設計手法の開発、③最適な構造制御への数理工学的手法の創出、④高機能化による理論的最高性能の実現」、といった4つの達成目標を掲げている。これらの4つの達成目標と本研究領域の各研究課題の関係を23頁及び24頁に示した。

①のエネルギー変換機器やエネルギー輸送機器における物理化学（化学反応、電気化学反応、光誘起反応、物質輸送、熱輸送、相変化、混合、吸着など）は、そのほとんどが異相間あるいは多相間、さらに同相異種間の界面において生じるため、この相界面の設計・構成がその反応速度や輸送速度を大きく左右する。一方、その界面の組合せは、ほぼ無限にあると言っても過言ではなく、一般論として総括することは至難の業であるが、本研究領域の多くの課題が取り組み、それぞれの研究課題において成果を上げている。そうした中であって、③に関し、本領域では第一原理計算に基づいてボトムアップ的に最適な構造制御への数理モデルに果敢に挑戦（山下研究代表者、古山研究代表者、館山研究者、塩見研究者、小野研究者など）し、現象論的観点からは見えてこなかった物理化学現象の発現やそれに基づいた新しい設計指針を、CREST においてもさきがけにおいても達成できたといっている。さらにそれを具現化するため、②に関し、巨視的な設計・製造指針までシームレスにマルチスケール解析としてつなげることができたこと（古山研究代表者、安部研究

代表者、長藤研究者、井上研究者など）も本領域の大きな成果であると考えられる。これを立証する支えとなるのが、②に関する原子・分子レベルあるいはその場観察といった、相界面におけるエネルギー変換・輸送機構の解明のためのモデリング・計測技術（高柳研究代表者、川田研究代表者、陳研究代表者、柴田研究者、二本柳研究者、増田研究者、白澤研究者など）である。計測手法の制約により、一部は理想的な相界面の計測に留まってはいるものの、実機レベルあるいはそれに極めて近い計測への展開につながる成果であるといえる。さらに、④の理論的最高性能の実現に関しては、この相界面における物理化学に基づいた高機能化により、従来に比べて極めて高性能な発電デバイス（宮武研究代表者、陳研究代表者、小林（光）研究代表者など）や熱輸送システム（長尾研究代表者、戸谷研究者など）、さらに超低摩擦・摩耗力学エネルギー伝達システム（足立研究代表者、平山研究者など）を達成していることは本領域において特筆すべき成果と言える。

これらの成果は、各さきがけ研究者や各 CREST 研究チームが出口を見据えつつ研究課題の相界面現象を明らかにすることに挑戦し、何がボトルネックとなっているか、を常に自問自答しながら研究してきた姿勢の賜物であると言ってよいと考えられる。さらにこれらの成果の中からすでに実装（古山研究代表者、柴田研究者）、あるいは実装に極めて近いエネルギー変換や輸送システム（長尾研究代表者、戸谷研究者、宮武研究代表者、陳研究代表者）にまで達している成果もあり、まさに JST にふさわしい研究領域であったと良いたと思われる。

### (3) 本研究領域を設定したことの意義

エネルギー変換・輸送技術に対しては、経済産業省を中心に多くの国家プロジェクトが実施され、現在も精力的に推進されている。これらのプロジェクトでは実用化への貢献が第一に問われているため、直接の貢献が見えにくい基礎研究への配慮は、その重要性が認識されつつも、必ずしも十分ではない。一方、エネルギー変換、エネルギー輸送、エネルギー貯蔵に関する基礎研究は、科学研究費補助金を中心に推進されている場合が多いが、必ずしも実用化につながるものとはなっていない。エネルギー問題は特定の画期的なブレークスルー技術のみにより全てが解決するような性格のものではなく、エネルギーに関わる様々な分野の技術による総合戦略を持って解決すべきものと位置付けることができることから、省エネ・高効率化・再生可能エネルギーなどあらゆる技術を俯瞰し、その貢献度や普及時期を見据えて研究開発を進める必要がある。

本研究領域で取り上げているように、エネルギー変換デバイスやエネルギー輸送システムにおいて、相界面での物理的、化学的、電気化学的、あるいは電磁気学的な現象は、その機能や効率を支配する共通の本質的な素過程となっていることから、様々な分野における多様な相界面の支配的な物理化学現象を解明し、設計するための基礎研究こそ、エネルギーに関わる目的基礎研究そのものと言える。すなわち、ほぼ全てのエネルギー変換・輸送システムにおいて相界面の物理化学現象がその性能を左右すると言っても過言ではない。

しかしながら、相界面が有するその多様性により、理想化された界面科学や表面科学に比べて現象が複雑であるため、その中で何が支配的因子であるのかを明確にするためのアプローチが必ずしも確立されてはいない。本領域のエネルギー相界面科学は、従来議論されてこなかった界面が持つ物理的あるいは化学的特性を中心として研究する自然科学の一分野と位置付けられ、その素過程の現象解明、およびその不可逆損失を最小化するための設計（最適化、制御）科学と言える。したがって、本研究領域設置の意義は大きかったと考えられる。また、本領域を通して、複雑に絡み合った現象を、出口を見据えて課題を抽出、あるいは出口から振り返り課題を抽出しつつ推進することの重要性もあらためて明確となったことも意義のあることだったと思われる。

なお、本領域において明らかとなった相界面現象や相界面科学はエネルギー利用に限らず、他分野にも広く転用できる共通基盤的なものでありその波及効果は目に見えない領域にまで及ぶものと期待される。

#### (4) 今後への期待や展望

本研究領域では、ここで記述されたように、材料系、化学系、機械系、電気系、システム系、物理系、数理系など多くの分野に関連する相界面現象の解明を通して不可逆損失を最小限に抑えることでエネルギーを高効率に利用することを目指す研究が推進されてきた。世界的にも高いレベルの研究成果が多く得られたと言っても過言ではない。しかしながら、異相間や多相間など相界面の組合せは、ほぼ無限に存在することから、13 チームの CREST と 32 名のさきがけメンバーが 8 年をかけても、全ての現象が明らかにできたとは思えない。上述したように、ほぼ全てのエネルギー変換・輸送システムにおいて相界面の物理化学現象がその性能を左右すると言ってもよい。それにもかかわらず、いままで真正面から取り組むことを避けてきたように思われる。それは、個々の表面科学など対象を限定したものに比べて、アプローチの方法が明確ではなかったからだと思われる。本領域のもう一つの大きな成果は、個々の成果に加えて、ここで果敢に挑戦されてきた、原子・分子レベル計測やその場観察、マルチシミュレーション、それに基づいた設計・製作手法の構築、について得られた知見をそれぞれが十分理解し合いながら進化させることによってのみ、新たな研究領域が創出できる可能性があることが分かったことだと考えている。本領域を終了したさきがけメンバーや CREST チーム内で活躍した若手研究者が新たな領域を展開してくれることを期待している。

#### (5) 感想、その他

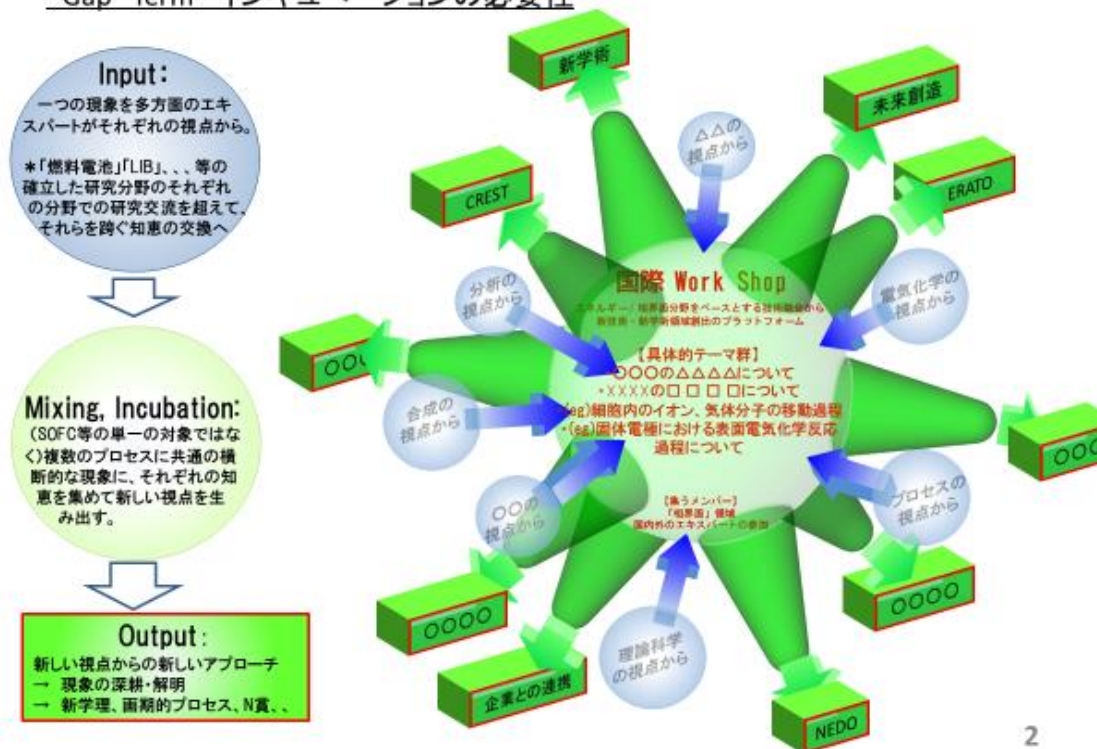
最近では周辺の研究進捗が日進月歩以上に速く、研究期間の 3 年や 5 年の間に状況が一変することもあり得る。この場合、一旦研究題目を提案すると、この研究期間中には変更できないので、申請する側も審査する側も、特定のキーワード（流行のキーワード）が含まれる研究題目には注意を要するよう思う。広義に解釈できる研究題目にすることが、



題目を研究期間中に変更できない制約を鑑みると、運用上は好ましいのかもしれない。

また、研究領域を終了するにあたり、各領域の CREST・さきがけの研究成果を融合させ、次のステップに展開することで、一層拡大させ、発展させていく方法を模索する必要性を強く感じている。すなわち、個々の研究成果は、委託研究期間の後半に積みあがってくる。しかし、その時期には、委託研究期間が残り少なく、あるいは終了し、次のステップのための重要な時期に、議論する場がなく、ともすれば内向きになる恐れがある。このタイミングで研究を大きく発展させるため、所属した研究者を中心に、しかし、限定せず、国内外の研究者を広く呼び込む場（Platform：国際 WS とか研究会とかで実現する）を用意し、そこで各研究者が自主的に研究チームを分割し、また再編し、またそれぞれの次のステップへのターゲット（共同研究、次のプロジェクト、実用化開発等）に向けて、再集結するための場（=Incubation）、さらにはその議論の成果が、JST の次の研究領域となることが是非とも必要であると考えている。この Platform として、例えば、委託研究期間を終了する、又は終了した研究総括からの応募・提案により、1～2年間、2000～3000万円規模程度での運営経費を支援する制度を創設することが望ましいと考えている。当領域では、領域予算を活用することで、領域として独自にそのトライアルとなる国際ワークショップを2017年10月、及び2018年11月開催し、成果を得た。今後、これらの国際ワークショップの成果が具体化することを期待している。

### “Gap Term インキュベーションの必要性





以上