

## 持続可能な社会に求められる機能と材料～機能を発現する 物質の科学的理解～

(一社)未踏科学技術協会 エコマテリアルフォーラム幹事 醍醐 市朗

### 1. 研究の背景と目的

米国における材料ゲノムイニシアチブは、2011年に官民共同で先端素材のイノベーションを促進・開発・生産することを目標として掲げた。従来の製品開発においては、材料開発のスピードが律速となっていたとの認識の基、材料開発の効率化、スピードアップを目指すとともに、革新的イノベーションを促す策とも受け取れる。2014年には、当イニシアチブのもと、材料データ施設を設立すると表明し、個々の組織で閉じていた情報を集約することにより得られる新たな知見が期待されている。このように、現在の材料分野における技術開発の方向は、実装段階に傾倒しており、換言すれば、より有用な材料をより早く提供することを命題としているようにも見受けられる。一方で、人間社会は21世紀に入って、環境制約という大きな課題に直面している。材料科学の分野において、この課題に正面から向き合ってきたであろうか。過去には、石器時代、鉄器時代と、時代の革新的要素となってきた材料が、現在人間社会が直面している大きな課題に対して寄与できることは大きいと考えられる。本調査研究では、持続可能でなければ成り立たない社会を、少し誤解を与えかねない表現ではあるが、そのわかりやすさから「1000年先の社会」とした。その社会は、今の技術や社会システムからは想像できない将来の社会であり、現在消費している金属鉱物資源等を現在の技術と社会システムにおいて消費している限りでは現行の材料使用は実現しないであろう将来の社会である。1000年前を振り返れば明らかのように、1000年先は、今から考えるにはあまりに不確実性が高いため、その社会自体を議論することはしていない。議論の中心は、持続可能性が達成されてなければ成り立たないであろうその社会の中で材料技術はどうあるべきか、ということである。従来の議論は、現行の技術体系に比べ「より持続可能な」技術体系への移行の成否に終始しており、持続可能な社会を実現するための今の技術体系から想像もされないような可能性はほとんど議論されてきていない。この点において、本調査研究の視点は、今までにないアプローチと言えよう。

本調査研究では、6名の検討委員会委員と、それに4名加えた10名の研究会委員により、3回の検討会と4回の幹事会を実施するとともに、精力的に外部有識者との意見交換により議論を進めた。具体的には、第2回と第3回研究会にて招待した講演者、第9回SAM国際会議、電気学会のメタボリズム社会・環境システム研究会、新金属協会の協会60周年記念事業実行委員会、EcoDesign 2015での発表や参加者との議論を通して枠組みを構築した。

### 2. 材料と元素の機能の整理

社会において人間のニーズに対して機能を発現するのが材料である。その材料は、元素の組合せにより構造を持った物質から構成されている。ここでは、材料、物質、元素、機能の関係を考察した。元素、物質、材料における性質や機能の関係性は、少なくとも4つのパターンがあると考えられた。1つ目、2つ目は、当該元素が材料を構成する主要な物質であり、主機能をそれぞれ元素自体あるいは元素を含む物質が提供しているパターンである。1つ目の例として銅線の銅、2つ目の例として酸化チタンが挙げられる。3つ目は、当該元素が材料を構成する主要な物質ではなく、溶質元素などとして添加されるような物質であり、当該物質が主機能を強化したり、補助したりする追加的な機能を提供しているパターンである。例として、鋼材におけるBによる強化が挙げられる。4つ目が、当該元素が材料を構成する主要な物質ではなく、その生産プロセスにおいて機能を提供しているパターンである。例としてゴムにおける架橋剤としてのZnOが挙げられる。この整理を用いて、希土類元素の機能について考察した。希土類元素の特徴の1つである不完全充填の4f軌道の電子スピンの配列が主要な役割を果たすことは同じであっても、強磁性体、

磁気光学効果、巨大磁気抵抗効果、大きな磁気歪み等、構成される材料における他元素の組合せと構造が異なる（酸化物、アモルファス合金、金属間化合物、ペロブスカイト型複合酸化物など）ことで、その材料の発現する機能は異なる。ある材料を構成する元素の物理的役割は一意に同定できるものの、元素の有する物理的役割から、その元素を構成成分とする材料の発現する機能は、一意には関連付けられないことがわかる。つまり、材料として構成されることで、今まで考えられていなかった秀でた特性を発現する可能性があると言えよう。図1に概念図を示すように、元素の役割を基にし、それを組み込んだ他元素との組み合わせと構造によって、今までその元素を用いて発現すると認識されていなかった物質の機能を発現することにより、新たな機能を提供する材料が開発される。本研究の主題に立ち戻ると、社会で機能を発現することが望まれる材料を構成する元素やその原料は、持続可能であることが望まれる。さらに言えば、地球温暖化対策が現在そうであるように、その開発の速度は、今よりも加速されることが望まれる。もし機能から構成元素への『逆算』ができると、最も持続可能な原料を用いた最も機能の高い材料をすぐに発見できるであろう。しかしながら、同じ物理的役割であっても発現する可能性のある材料機能の全てを科学技術はいまだ解明できていない。近年の分析技術の飛躍的な進歩により、マイクロ構造がより詳しく理解されてきており、更にはin-situでの観察技術などにより、その役割の理解が進んできている。これら分析技術の進歩は1つの期待される要素であるものの、先述の『逆算』が可能な程度まで全容を解明するに至るにはまだ時間がかかると

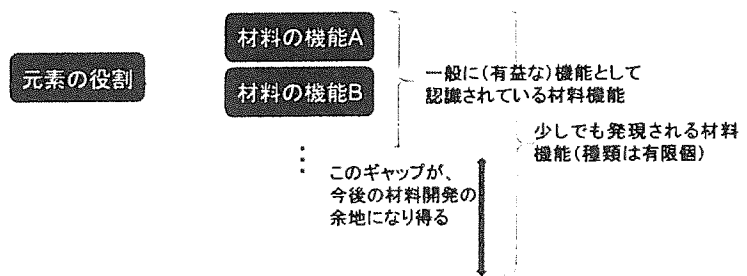


図1 元素の役割と材料の機能との関係

考えられる。現在の電子物性論や計算材料科学による材料開発のアプローチとしては、考えられる元素の組合せや材料の構造を想定し、計算により発現する機能を推計することになる。その計算の結果を蓄積することで、想定された組み合わせと構造の中で最も望ましい材料を見つけることができる。あるいは、蓄積した結果をビッグデータとしてデータマイニングすることにより、新しい関係性を発見することも考えられる。図2に可能な全ての元素の組み合わせや構造の中における最適な材料の概念図を示したように、なるべく早期に最適な材料に至る技術開発が望まれる。

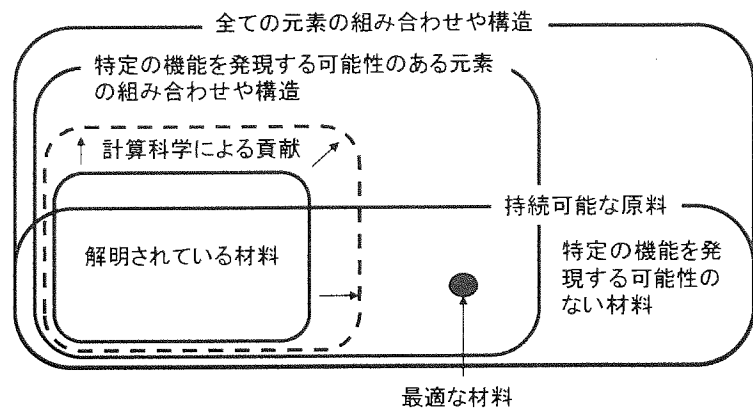


図2 可能な全ての元素の組み合わせや構造の中における最適な材料の概念図

### 3. 材料機能のエネルギーによる理解

機能は、それを享受する客体を明確にして初めて機能と認識される。特性は、材が本来的に有する特質であり、その一部が機能となると考えられる。多くの材料において、その材料が変形もせず、反応もせず、その状態のまま存在し続けることが要求される。その「そのままあり続ける」機能は、さまざまな変化を誘発する外部からの入力エネルギーに対する耐性と認識できる。反対に、深絞り性のように、外部からの入力エネルギーに対して期待する変化を示すことが、要求である場合もある。入力されたエネルギーに対する材料の感応によって整理すると、客体が材料に求める機能は、耐性（そのままあり続けること）、期待変化（期待する変化を生じること）、拡散（伝導を含む）、エネルギー変換の4つに大別できると考えられた。耐性が要求される例として構造材、エネルギー変換が要求される例として、蓄電や殺菌材料を事例として調査研究も実施した。

ここで、本調査研究の主題に立ち戻ると、望まれる機能を担保する材料を、なるべく持続可能なプロセスで生産していくことが、材料工学には期待されている。エネルギーの観点で材料機能を評価することは、その材料を生産する際の消費エネルギーと、使用時の機能としてのエネルギーとの比較によって持続可能性が明らかになる可能性があると考えられる。ただし、この比較可能性は深く考察できなかつた。単純に、4 つに分類したうちの「耐性」においては、その機能に時間の尺度が入るため、プロセスにおける消費エネルギーと同じ次元で比較できないことが容易に想像された。エクセルギーによる評価の方が妥当であることも考えられた。当然ながら、材料を生産し、使用することにより、系全体でのエントロピーは必ず増大する（エクセルギーは減少する）。地球上で生活する限りにおいて、太陽光として得られる高エクセルギーなエネルギーと、平均温度として宇宙に熱放射される低エクセルギーなエネルギーとの間で減少するエクセルギー分が、持続可能に利用できる。さらに、大気や海洋における気候システムの健全な維持に、その多くは利用されると考えられるため、人間が利用できるのは、そのうちの一部であろう。この環境容量に対し、それぞれの材料の生産と使用によって利用する量が超えてはならない。ここまでの考察によって、1000年後の持続可能な社会において求められる材料の在るべき姿は、以下のよう

に言えよう。  
材料は、持続可能な原料とプロセスによって生産されることが望まれる。原料の選択においては、その物理的原理の理解を進め、持続可能な原料を用いた材料によって、求められる機能を提供するよう努めなければならない。一方、その材料を生産するプロセスにおいては、その消費するエネルギーと果たす機能とのバランスにおいて、有効に機能としてペイバックされないエクセルギー損失がゼロに近づくように努めなければならない。

今後の研究において、マクロな現象論と物理的原理との間の関係性の考察が進めば、原料とプロセスに関して、個別ではなく統一的な理想像が描けるのではないかと期待される。

#### 4. 事例における考察

殺菌技術を事例とし、衛生を維持することは、歴史を振り返っても文明を保証する重要な視点であり、将来の持続可能な社会においても、衛生を担保するための殺菌技術は必要であろうと考えられた。材料機能を基にしなが

ら、人間のニーズとしての衛生な環境について材料機能に依らない可能性についても議論した。材料が発現すべき機能は、微生物や細菌の代謝を阻害し殺菌することにあることであつた。一方で、微生物や細菌を死滅させるための代謝の阻害について、考えられるすべての手段を使い切っていないとも考えられた。代謝を阻害しうる可能性について生化学的な理解を深めることで、新たな殺菌システムならびにそのための材料が開発される可能性があると考えられた。このことは、社会におけるニーズの対象についてより深く理解することで、新しい技術体系への示唆が得られる可能性があることが示されたとも言えよう。

事例として、蓄電材料と構造材料にも着目した。蓄電材料の性能は、電池起電力の関数である  $\Delta G$  が決定し、それは、水素の反応の他に、イオン化エネルギー、昇華エンタルピー、水和エンタルピーで構成される。それら物性値は、電子軌道、イオン半径が密接に関わることまでは理解されているものの、その最適な物質の創成（先述の『逆算』）には至っていないと考えられた。構造材料においては、いまだ強度や耐食性の本質を、原子・電子レベルでの理解で記述できていない。このような機能を追求するためには、物理的な基本原理の解明のための計算材料学や電子物性論も含め、より多くの異なる専門領域からの寄与を伴ったアプローチが有効であり、必要であると考えられる。一方で、物理的な基本原理の解明により、さらに探索の幅が広がる可能性を秘めているとも考えられた（図 3）。

#### 5. まとめ

環境制約と材料開発の間には、少し距離があるように思われる。今までの社会が、材料科学の技術開発によって大きく変革してきたように、社会における材料の役割は大きいにも関わらず、環境科学における環境制約と材料機能との関係性は明確に理解されてこなかつた。環境科学の研究により、材料開発における環境制約の境界条件を明確にすることにより（図 4）、材料開発の高速化の流れの中で、単なる高効率化や低コスト化だけでなく、低環境負荷の材料に向けた材料開発がより進むことが望まれる。最後に、持続可能な開発目標（SDGs）との関係に触れて、本報告書を締める。本プロジェクトでは、再生可能な資源を、再生可能な容量に応じて地球圏から得

て利用する材料使用システムを念頭に、持続可能な将来像を材料科学の知見から議論してきた。本調査研究での議論は、SDGsの目標6、7、9、12への貢献が期待された。地球の環境容量を満たして社会の持続可能性を高めるための科学技術イノベーションに向けては、材料研究における共通プラットフォームの構築は、知の探究と蓄積、知のクロッシングを進めることが望まれよう。

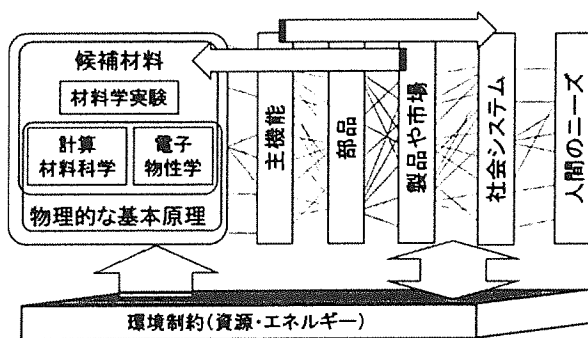
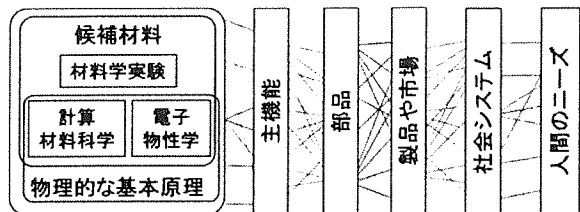


図3 材料と社会の関係性の中における材料科学における材料機能の解明と候補材料の探索

図4 望まれる環境制約と材料と社会の関係性

以上