

【産業技術】 ナノテク

エネルギーのためのナノサイエンス探求(1/2) (米国)

- 国家ナノテクノロジーイニシアティブ・グランドチャレンジ
・ワークショップ報告書 (第2版、2005年6月発行) 概要 -

はじめに

世界のエネルギー需要は、2050年までに2倍の28テラワットになると予想されている。エネルギー効率を増加させ、クリーンなエネルギー源を開発し、我々の環境を維持するために、この難問の解決が必要となりつつある。これらは確かに地球規模の難題であり、また、その解決は、我々のエネルギー安全保障のために不可欠である。

"確かな将来のエネルギーを保証させるために必要な基礎研究"(エネルギー省(DOE)基礎エネルギー科学諮問委員会)、および、"水素経済のために必要な基礎研究"(DOE 基礎エネルギー科学局)の最近の報告書は、エネルギーの解決策には科学的ブレークスルーならびに真に画期的な展開が必要であるということを確認している。この背景で、ナノサイエンスとナノテクノロジーはこれらの挑戦の取り組みに大胆で不可欠なアプローチを提起する。

報告書の構成

ワークショップ報告書は、ナノサイエンスが重要なインパクトを持つと予想されるエネルギー関連科学技術の9テーマの研究目標の概観を第2章で報告し、これらの研究目標の達成に不可欠と認識された6項目の基本的分野横断ナノサイエンス研究テーマに関して、その展望、最先端重要技術の挑戦、必要なインフラストラクチャーおよび各々の研究テーマの研究予測と共に、個々のテーマに取り組む戦略が第3章に詳述されている。

この報告書概要では、今回はワークショップに関する説明と参加者が識別したエネルギー関連科学技術の9件の研究目標テーマ名を示し、6つの基本的分野横断ナノサイエンス研究テーマの概要を述べる。エネルギー関連科学技術の研究目標テーマの概要は次回に報告する予定である。以降、基本的分野横断ナノサイエンス研究のテーマの概要を順次個別記事でお送りする予定である。

ワークショップに関して

このワークショップの目標は、次の10年間のエネルギー関連研究の機会と目標を定義し、ナノサイエンスの分野がエネルギー研究に与える特別の機会を決定することである。国家ナノテクノロジーイニシアティブ・グランドチャレンジ展開の基礎をなす、エネルギー関連科学技術分野の研究者のための10年以上の長期的な先を見通した挑戦を識別する

ためにこのタスクがこのワークショップに課された。

米国の将来のエネルギーへのナノスケール科学技術のかかわりを識別し明確化するための政府諸機関のワークショップは、2004年3月16日-18日に、ヴァージニア州アーリントンで開催された。この会合は、エネルギー省と、国家ナノテクノロジー調整事務局を通じた全米科学技術会議(NSTC)技術委員会のナノスケール科学・工学・技術小委員会のメンバー機関との共同で開催された。

ワークショップには、大学から32名、国立研究所から26名および産業界からの5名からなる、63名の招待講演者が参加した。このワークショップは、21世紀ナノテクノロジー研究開発法が求めているように、2004年12月に議会にNSTCが提出する国家ナノテクノロジーイニシアティブ(NNI)戦略の次期計画に関して、研究界からのアドバイスをもたらすことを意図した一連のものである。

我々のエネルギー安全保障を高めるためにナノサイエンスによってもたらされる可能性の根底には、例えば電荷の移動、分子の再配置、化学反応などのエネルギー変換のすべての素過程が、ナノスケールで起きているという事実がある。したがって、新しいナノスケール材料の開発は、それらを明確にし、操作し、また組み立てる方法と同様に、新しく革命的なエネルギー技術の開発のためのまったく新しいパラダイムを作り出す。

エネルギー関連科学技術テーマ

このワークショップの主要な結果は、ナノサイエンスが最も大きな影響を持つと予想される、エネルギー関連科学技術の以下の9テーマの研究目標の識別であった。

1. 水素生産に向けた拡張可能な太陽光による水の分解方法
2. クリーンでエネルギー効率の良い生産のための非常に選択性の高い触媒
3. 20%の出力効率で100分の1以下の低価格での太陽エネルギーの収穫
4. 現在の50%の電力消費量の固体素子照明
5. 自動車、航空機等の効率を向上させる非常に強靱で軽量な材料
6. 大気の中で作動する可逆的な水素貯蔵材料
7. 1ギガワットの送電が可能な電力伝送路
8. 廉価な燃料電池、バッテリー、熱電気、および、ナノ構造化材料から構築された超キャパシター
9. 生物の効率的・選択的なメカニズムに基づく材料合成およびエネルギー収穫

基本的分野横断ナノサイエンス研究テーマ

エネルギー関連科学技術 9 テーマの研究目標の成功裡な達成のために、以下の 6 項目の基本的で重要な分野横断ナノサイエンス研究テーマが確認された。

1. ナノスケール材料による触媒
2. エネルギー担体を操作する界面の利用
3. ナノスケールの構造と機能のリンク
4. ナノスケール構造の組み立てと構造様式
5. エネルギーナノサイエンスの理論、モデル化およびシミュレーション
6. 拡張可能な合成方法

以下にその概要を記述する。

- ナノスケール材料による触媒

触媒は、化学結合を形成・切断する割合をコントロールする手段を提供し、エネルギー変換や化学薬品の製造や輸送手段における環境保護の鍵である。触媒に依存する石油、化学薬品および医薬品工業は、米国の国民総生産に毎年 5000 億ドル貢献している。ナノ構造化材料は、触媒の性能を劇的に改善する特別な可能性を提供する。例えば、バルク形式の金は化学的に不活性であると知られている。しかしながら、チタニア基質上の金のナノ粒子は、環境上有害な 2 酸化硫黄ガスを分解する能力のような注目すべき触媒特性を示す。この材料の触媒効率は、今日使用されている商用触媒より 10 倍以上も高い。

触媒のナノサイエンスによる研究挑戦は、ナノ構造化触媒材料と相互作用する時の化学反応物のエネルギーの状態を調整することである。生物学の教訓から引き出せば、ナノ構造化材料は反応物の構造形態を希望する製品へ一致させることと、その反応経路を制御することの両方を目指さなければならない。これを成し遂げるために、その場特性化による新しく効率的な方法および触媒特性の迅速な処理速度が必要となる。材料、構造指数および実験計画の選択は、ナノ構造化触媒の構造機能依存性について継続的に進展する根本的な理解により、導かれなければならない。

- エネルギー担体を操作する界面の利用

界面での設計ナノ構造の利用は、効率的なエネルギーの取り扱い、低電力エレクトロニクス、エネルギー収穫、および照明での効率的な電力利用などの進展に基づいたエネルギー安全保障の進展において、有無を言わせない可能性を実証している。これらの問題を扱うのに必要とされる最も重要な研究の問題は、電子、フォノン、光子、励起子など、多くの形式のエネルギー輸送を最適化するためにナノスケールで調整された界面を作ること

である。その可能性は、ナノメートル寸法でパターン化された界面に加えて、種々様々の材料と化合物の組み合わせを使用した界面を作り上げることを含んでいる。分野横断的な研究の挑戦は、電子輸送(電気伝達、損失、小型装置)、電子およびフォノン輸送(熱電気)、光子収集および電子や励起子の輸送(太陽光発電)、また電子およびホール再結合(照明)のための界面機能を調整するためにこの可変性を利用することである。このことを成し遂げるために、トップ・ダウン・リソグラフィから自己集合材料による成長、湿式化学処理ならびに生物学的組み立てまでに及ぶ多くの多様性を持った合成法が、斬新な構造を作るために組み合わせなければならない。平行して、構造と機能を関連づけるためにナノスケール特性化の実験技術が開発され使用されなければならない。

- ナノスケール構造と機能のリンク

ナノサイエンスの中心に、ナノメートル寸法で材料を構築する時に出現する新しい現象と特性がある。これらの特性は、僅か 100 - 10,000 個の原子から成る個々の構築ブロックによるナノスケール材料が、日常的に使用しているバルク材料の理解からは推定できない、ユニークな構造や振る舞いを持っているという事実から生じている。斬新なナノ材料を設計する際に、我々が直面する包括的な研究の挑戦は、ナノメートル寸法で出現する機能性を決定する物理的・化学的原理を確立し、また進んだエネルギー安全保障のためのこの機能性を活用する。ナノサイエンスの発端以来、量子閉じ込め効果、バルクの自由エネルギーを越える界面の自由エネルギーの強化、ならびに表面エネルギー準位の重要性がすべて認識された。さらに、ナノ構造の機械的性質や、電気二重層が細孔の寸法より小さなナノポラス構造での流体の流れのように、探究され始めたばかりのナノスケール構造の多くの効果が存在する。この問題への対応は、探索的合成に関連する分野を越えた研究である、機能性の特徴づけ、そして理論、モデル化およびシミュレーションなどを含む。

- ナノスケール構造の組み立てと構造様式

個々のナノ構造の斬新な特性の開発には、一般にナノ構造を希望する機能性を強化あるいは修正するために注意深く設計され制御された構造体へ組み立てることを含む。主な研究の挑戦は、ナノ構造の組み立て特性を予測し、最初は少量であるが最終的にはバルクで、これらの構造体の組み立てのための斬新な戦略を考案することである。

短期・長期両面で、ナノスケール構造をエネルギー応用に利用する目標に到達させるために、かなりの技術的障壁を克服する必要がある。次の 10 年間にわたり、ナノ構造化材料特性の基礎研究、およびこれらの材料を組み立てる方法に関する投資は、可能性ある方法の開発を促進するであろう。

- ・ エネルギー応用の特別で斬新な材料特性を達成するナノスケール構造の予測
- ・ 望ましい機能を表すと予測される構造の組立てを可能にするナノスケール構造の制御
- ・ 予測された機能性を持つ構造のコスト効率の良い組立てを実行するプログラム化された組立工程の開発

この投資の最終目標は、エネルギー応用とその必要性に取り組むマイクロ規模およびマ

クロ規模システムヘナノスケールの可能性を統合する構造を設計することである。

- エネルギー・ナノサイエンスの理論、モデル化およびシミュレーション

ナノサイエンスとナノテクノロジーの可能性は、固体素子、分子材料、化学合成、界面配置およびシステム構造を組み合わせた大きな範囲を包含する。望ましい機能的性質を生ずる、構造、組成および構造様式の予測は、大きな研究挑戦であり、理論、モデル化およびシミュレーション(TMS)の力の利用によってのみ達成できる。TMSの応用は、エネルギー応用のためのナノサイエンス研究の挑戦のすべてに影響し、実験計画と解釈の指標となる特別な可能性を持って、ダイナミクスと摂動の影響を予測し、自己集合方法の開発を先導し、触媒活性とエネルギー輸送機構を含む機能的性質を予測して、新素材の探索および合成を先導する。

今日、これらのニーズを満たす TMS の能力は、ナノサイエンス研究の挑戦に必要とされる幅広い可能性を開発するための実証された能力と共に、様々な成熟の度合いで存在する。理論、シミュレーション、方法論および様々な分野のアルゴリズムの基礎研究は、国の将来のエネルギー安全保障を前進させるために必要である重要な TMS と確認された。これらは以下を含んでいる、

- ・ 時間と空間の規模に橋をわたす方法
- ・ 多体電子構造計算
- ・ 界面を含んだ電子輸送
- ・ 光学的性質のため電子的構造化法

- 拡張可能な合成方法

究極の研究挑戦は、制御可能なやり方であつて実用的な生産レベルで機能的ナノ材料を合成することである。この挑戦の達成は、米国が現在直面する大きなエネルギーの挑戦に対応するために必要であり、真に革命的で継続した開発のために本質的なものである。

ナノ材料の合成は、品質、量、種類、統合設計と組み立ての挑戦に関係している。品質の挑戦は、十分に高純度で欠陥の無い有望なナノ材料を合成することを必要とし、その最終特性が確実に測定され精密に解らなければならない。量の挑戦は、ナノ材料の経済的な大規模生産のための合成方法の開発、理解、最適化を要求する。十分に高品質のナノ材料を大量に生産するための容易に拡張可能で廉価な方法が必要である。多くの挑戦が、潜在的に利用可能な強化されたナノ材料特性を持つ構築ブロックのライブラリーを効率的に探究し拡張するための方法の研究開発を必要とする。統合設計の挑戦は、マクロスケールで表現される非常に強化された特性を可能とするシステムまたは構造へのナノ材料の連続的あるいは並列的組み立てと互換性のある合成方法を開発することを必要とする。

つづく

(出典 : Nanoscience Research for Energy Needs, Report of the March 2004 National Nanotechnology Initiative Grand Challenge Workshop, 2nd Edition, June 2005
http://www.nano.gov/nni_energy_rpt.pdf)