

文科省、ナノ材委員会  
2018年4月11日

# 「元素戦略」の意義、 これまでの取組、成果と今後

JST CREST元素戦略 研究総括（でした）  
MEXT元素戦略＜拠点形成型＞PD（になりました）  
玉尾 皓 平

理化学研究所を退職しました（客員主管研究員として所属）  
公益財団法人 豊田理化学研究所 所長（長久手市）が本務となりました

# 「元素戦略」関連の研究開発政策



2007 08 09 10 11 12 13 14 15 16 17 18

★ JST WS 「夢の材料の実現へ」(2004) いわゆる「箱根会議」

★ JST WS「元素戦略(2006)」

★ JST CRDS 戦略イニシアティブ「元素戦略」発行(2007.10)

JST 戦略的創造研究推進事業

- ・CREST「元素戦略」
- ・さきがけ「元素戦略」

JST 産学共創基礎基盤研究

- ・ヘテロ構造制御 (2010-)
- ・高性能磁石 (2011-)

JST 日本-EU国際共同 SICORP「希少元素代替材料」

文科省: 東北発素材技術先導プロジェクト

文科省: 元素戦略プロジェクト <研究拠点形成型>

文科省: 元素戦略プロジェクト <産学官連携型>

府省連携

経産省: 未来開拓型研究プロジェクト

経産省: 希少金属代替材料プロジェクト

府省連携

産業競争力の強化 & 天然資源枯渇問題の克服

「元素選択則」の発見

2000年京大化学研究所発 . . .

2003年京大化研附属「元素科学国際研究センター」開設

「**元素科学**」から

学術研究コンセプトから

2004年JST箱根会議発

「**元素戦略**」へ

イノベーション創出国家戦略へ

**元素資源問題は、  
サイエンスで解決する！**

# 「元素戦略」は「箱根会議2004」で提唱されました。

2004年

科学技術振興機構(JST)

科学技術未来戦略(物質科学)ワークショップ:夢の材料の実現へ

2004年4月17日(土)ー18日(日)箱根プリンスホテル

村井真二 JST主席フェロー主宰、玉尾皓平 議長

「物質科学が先導する持続社会」

「元素戦略」提唱: 中村栄一東大教授



「箱根会議」 2004年4月17,18日

**2007年**

## 「元素戦略」関連研究プロジェクト

文科省「元素戦略プロジェクト<産学連携型>」

2007年度開始16課題

経産省「希少金属代替材料開発プロジェクト」

2007年度開始10課題

省庁を超えた  
共同プロジェクト

**2010年** JST

CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」

研究総括 玉尾皓平

2010年～2017年度 5+4+3=12 課題採択

さきがけ「新物質科学と元素戦略」

研究総括 細野秀雄

2010年～2015年度 12+12+10=34 課題採択

**2012年～2021年度**

文科省「新・元素戦略<拠点形成型>」 2012年度 22.5億円措置

- ・ 4重点課題：「磁石材料」「触媒・電池材料」「電子材料」「構造材料」
- ・ 3つの歯車：「新物質提案」「材料構造設計と製造プロセス」「機能評価」
- ・ 国家基盤技術「京コンピューター」「SPRING-8」「XFEL:SACLA」「J-PARC」などを使いこなす

2007年

# 文科省「元素戦略」と合同プロジェクト研究展開 経産省「希少元素代替材料開発プロジェクト」

19年度

経産省の戦略元素

In



液晶ディスプレイ(透明導電膜)  
半導体材料(赤外線検出器など)  
熱線反射性の蒸着ガラス  
放射性同位体は医療診断剤

**インジウム** 114.8  
49 Indium

薄型テレビ用  
透明電極

W



白熱電球のフィラメント  
すべての金属で最も融点が高い  
ドリルなどの高速度鋼(W-Fe合金)  
X線をしゃへいするエプロン

**タングステン** 183.8  
74 Tungsten

超硬工具

Dy



ハイブリッド車用の耐熱性  
ネオジム磁石の必須添加元素  
蓄光性の蛍光塗料(Euと併用)  
メタルハライドランプ

**ジスプロシウム** 162.5  
66 Dysprosium

ハイブリッド車用  
モーター等に使用される  
希土類磁石の磁力保持

21年度

キログラム原器



Pt

キログラム原器(Pt-Ir合金)  
アクセサリや硬貨の材料  
燃料電池用の水素交換膜  
抗がん剤(シスプラチン)

**白金** 195.1  
78 Platinum

排ガス浄化用触媒

Ce



紫外線吸収ガラス・プラスチック  
カラーテレビの青色蛍光体  
自動車の排ガスをきれいにする装置

**セリウム** 140.1  
58 Cerium

液晶ディスプレイ等用  
ガラス精密研磨剤

Tb



磁気で伸び縮みする材料のおもな  
元素(電動アシスト自転車)  
カラーテレビの緑色蛍光体  
エックス線の増感剤

**テルビウム** 158.9  
65 Terbium

蛍光体

Eu



カラーテレビの赤色蛍光体  
免疫反応用の蛍光標識剤  
昼光色の蛍光灯  
ヨーロッパにちなんで名づけられた

**ユウロピウム** 152.0  
63 Europium

2007年

文科省「元素戦略」のコンセプトと研究展開(まとめ)

## 元素は特定しない

普遍的上位概念: 持続可能な社会の構築のための元素活用戦略

- ・ 元素の特性を深く理解し活用する: 「元素多様性の発掘と物質創造」
- ・ 元素に焦点を当て、**サイエンスに基づき**、新たな物質材料科学の基礎を築く戦略
- ・ 材料科学のパラダイムを変革し、新しい材料の創成につなげる研究

## 元素戦略の5要素

「減量戦略」「代替戦略」「循環戦略」「規制戦略」「新機能戦略」

研究テーマ

- (1) 豊富で無害な元素による代替材料
- ➔ (2) 戦略元素の有効機能の高度活用
- (3) 元素有効利用のための実用化材料設計技術

# 戦略的創造研究推進事業(新技術シーズ創出) CREST・さきがけ

**2010年**

## 2010年度(平成22年度) 戦略目標

レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出

「希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」という目標達成に向け、目的とする材料機能の発現原理を検証・把握し、ナノスケールの物質構造(原子配列、磁区構造、分子構造等)を制御することによって、単なる「希少元素・有害元素の代替」にとどまらない、「革新的機能材料」の創成を目指す

CREST

さきがけ  
PRESTO



### 元素戦略を基軸とする 物質・材料の革新的機能の創出

研究総括 玉尾皓平  
(独)理化学研究所 研究顧問  
グローバル研究クラスタ長

第一期(2010年度)採択 5課題  
第二期(2011年度)採択 4課題  
第三期(2012年度)採択 3課題



### 新物質科学と元素戦略

研究総括 細野秀雄  
東京工業大学  
フロンティア研究機構教授  
元素戦略研究センター長

第一期(2010年度)採択 13課題  
第二期(2011年度)採択 12課題  
第三期(2012年度)採択 10課題



# **JST さきがけ「元素戦略」**

2010年—2014年

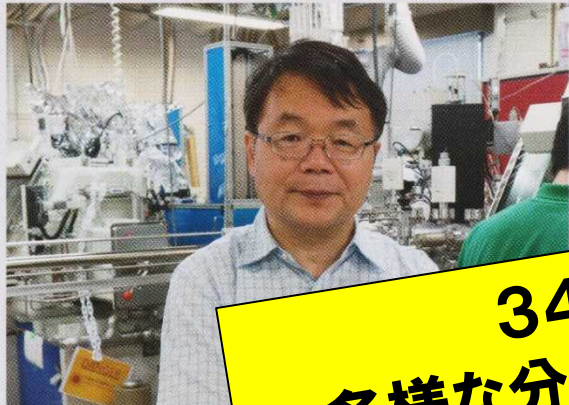
研究総括： 細野秀雄

# 未来の材料をつくる！ 期待の若手研究者

Newtonムック  
「マテリアル革命」2015より

現在、「元素戦略」をキーワードに、日本全国でさまざまな研究が進められている。中でもここでは、今年よりはじまった、JST（国立研究開発法人 科学技術振興機構）の「さきがけ」の研究課題を右にまとめた。匡める戦略目標達成に向け、さきがけでは、若手中心の個人型研究が行われている。元素戦略のさきがけプロジェクトは、自身も次々と新しい材料を生みだし、ノーベル賞候補と期待されている、東京工業大学の細野教授研究総括をつとめている。細野教授には若手研究者に期待すること、そしてさきがけメンバーを選んだ理由を伺

## 細野教授が選ぶ、“なまいき”な研究者とは？



リス、マンチェスター大学)のグラフェンの研究は、簡うと、鉛筆の芯を一枚一枚はがしたことによってわかっです。鉛筆の芯ですよ？ 若い人で「もう新しいものはないう人がいますが、そんなことはありません。探せば、“鉱脈”はやっぱりたくさんあるんです。

Newton——これを調べると大きな発見が長年の勤

**34課題(34名): “生意気な研究者”  
多様な分野の新しい芽と若手研究者のすそ野を育成**

## 採択分野

スピントロニクス、有機エレクトロニクス、イオニクス、機能性酸化物、触媒、半導体、磁性材料、電極・電解質、ガス分離材料、超伝導、太陽電池、熱電変換、超高靱性高硬度材料、計算科学、先端評価解析

## 若手人材育成

34名中、24名が昇進(教授8名、准教授10名)

すが、月に行こうとして一生懸命考えて向かったとします。結

細野——若くて、生意気な研究者を選びました。

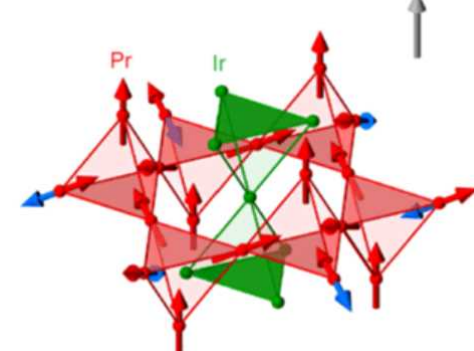
## ■さきがけ「新物質科学と元素戦略 研究課題」

研究者氏名/所属機関・役職	研究課題名/一行標語
阿部 英樹 物質・材料研究機構 主幹研究員	金属間化合物を活性点とする貴金属フリー排ガス清浄化触媒の最適化と白金族金属をつくる
有田 亮太郎 理化学研究所 チームリーダー	非バルクの環境を活用した次世代材料の理論設計 超伝導至急入浴数理論で超伝導体の理論物性設計への道を拓く
上野 和紀 東京大学 准教授	希少元素を含まない新規超伝導体の電場誘起キャリアドープ 電場誘起キャリアドープ法が拓く新物質開発
梅澤 直人 物質・材料研究機構 主任研究員	ユビキタス元素を用いた高活性光触媒の開発 理論と実験の連携によって新規光分解触媒を開発する
遠藤 恒平 東京理科大学 准教授	有機化学による擬元素創製へのアプローチ 分子状クラスターの自在制御法によりテラメド型元素機能発現に挑戦す
小西 玄一 東京工業大学 准教授	新しい電子移動パラダイムに基づく有機触媒の創製 非共有の強い有機電荷移動錯体で光レドックス触媒をつくる
佐藤 和則 大阪大学 准教授	ナノスピンドル分解による高効率太陽電池材料の設計 極小触媒量を利用して太陽電池を高効率化する
中村 芳明 大阪大学 教授	ユビキタス元素を用いた高性能熱電変換ナノ材料の創成 熱を電気に変えるシリコンをナノ技術で創る
一杉 太郎 東北大学 准教授	酸化物エレクトロニクスのパラダイム転換を目指したアト 酸化物薄膜の電子状態を原子レベルで制御する
水口 将輝 東北大学 准教授	ナノ構造を制御して炭素本来の機能を引き出す
守谷 誠 理化学研究所 チームリーダー	遷移金属フリーのアニオン二次電池の開発 炭素とイオンで創る二次電池
西山 宣正 ドイツ電子シンクロトロン(DESY) ビームラインサイエンティスト	SiO <sub>2</sub> ナノ多結晶: 超高靱性高硬度を有する新材料の開発 超高温を用いてシリカを高靱性セラミックスに変える
野呂 真一郎 北海道大学 准教授	「フェイク分子」法による多孔性金属錯体空間の超精密ポテンシャル制御と 分子構造を制御して炭素本来の機能を引き出す
畠山 琢次 関西学院大学 准教授	次世代半導体材料を目指した螺旋 π共役分子の創製 元素ドープで高効率 OLED を開発する
藤田 武志 東北大学 准教授	ユビキタス元素を用いた革新的ナノポーラス複合材料とデバ ナノポーラス金属で面期的な触媒・エネルギーデバイスを開発する
堀毛 悟史 京都大学 助教	固体イオニクス未開領域を拓く錯体集積体の創出 金属に有機物を組み込んで燃料電池の基材料を生み出す
松尾 司 近畿大学 准教授	低配位汎用元素を鍵とする機能性物質科学の開拓 ありふれた元素を従来にない形で結合させる
薬師 啓 産業技術総合研究所 チームリーダー	単原子層デザインによる希少金属フリー超強靱異方性薄膜の 超強靱な超伝導永久磁石に日本発・新材料で挑む
山本 明保 東京農工大学 特任准教授	粒界エンジニアリングで創る超高保磁力ユビキタス磁石 超強靱な超伝導永久磁石に日本発・新材料で挑む
梅津 理恵 東北大学 准教授	新規高スピントロニクス材料の探索と原子配列制御に伴う電子状態 極端な軽量の原子配列制御により電子状態をチューニングする
岡田 純平 東北大学 准教授	超過冷却液体を用いたナノスケール複合材料の創製 シリコンを浮かせて融かし、冷やしてアモルファスをつくる
亀川 厚則 聖陽工業大学 教授	革新的磁性材料の超超圧合成法による新規磁性化合物の 圧力合成法によりレアアース含有量が少ない磁性化合物を高保磁力化する
紅林 秀和 ユニバーシティ・カレッジロンドン 講師	界面電子軌道混成を利用した新物質創生と超省電力磁化反転 スピントロニクス相互作用を用いた新しいスピントロニクス材料学・材料設計
小林 玄器 自然科学研究機構分子科学研究所 准教授	ヒドリド酸化物の直接合成による新規機能性材料の探索 ヒドリド酸化物の物性を明らかにし新たな物質探検を開拓する
近藤 剛弘 筑波大学 准教授	グラファイトの電子状態制御による新規触媒の創成 グラファイトの特異な性質に着眼して新しい触媒を創成する
関 真一郎 理化学研究所 ユニットリーダー	磁気パルスメモリ刷新に向けた、スキルミオンの結晶学と電 物質の対称性を通して、スピンの渦を自由に操る
塚崎 敦 東北大学 教授	自発分極変調を機軸とする物質探索と機能開発 構造由来の電界を利用して電荷輸送を活性化させる
中辻 知 東京大学 准教授	スピンのナノ立体構造制御による革新的電子機能物質の創製 スピンの立体構造から、新しい量子輸送機能を作り出す
宮内 雅浩 東京工業大学 准教授	ユビキタス量子ドットの創製と光エネルギー変換 ナノ粒子と界面の制御により高活性な光触媒を開発する

# さががけ「元素戦略」の代表的成果

**中辻 知** 准教授(東大物性研)  
 「反強磁性隊の巨大異常ホール効果の発見」  
 ～低エネルギー消費メモリ機構の解明に向けて～

Pr<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>の結晶構造



**紅林 秀和** 研究者(ケンブリッジ大)  
 「電流で電子スピンを制御する  
 新しいメカニズムの発見」  
 ～量子位相を利用した磁化制御～

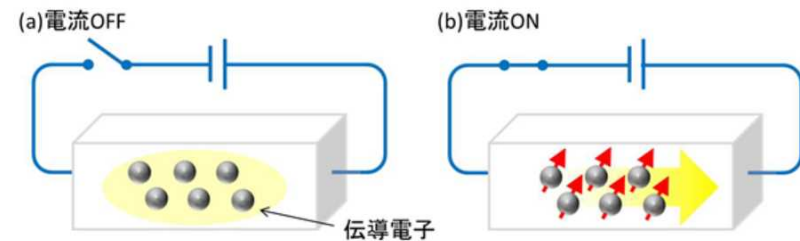
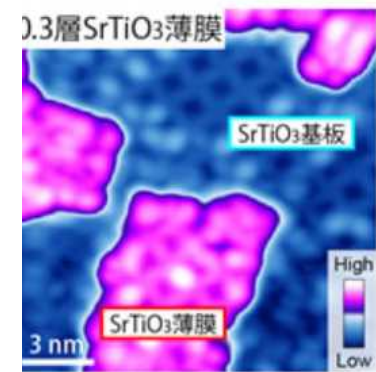
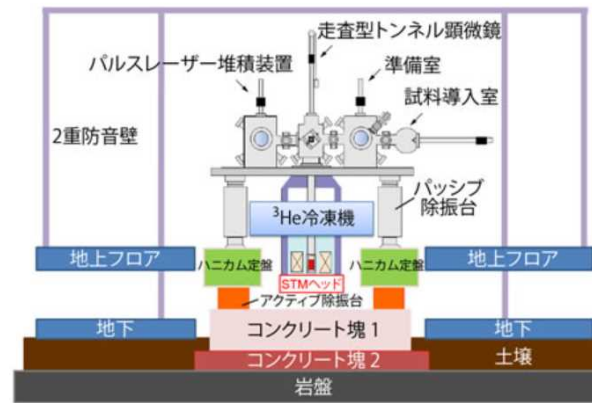


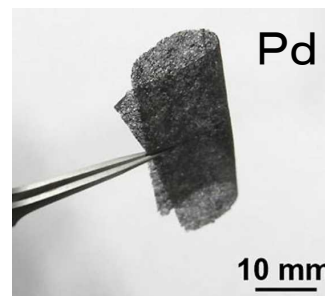
図1 スピン軌道相互作用による電子スピン生成

**一杉 太郎** 准教授(東北大)  
 「高分解能STM/STS/PLDでの  
 チタン酸ストロンチウム薄膜の  
 原子スケールでの観察に成功」



**有田 亮太郎** 准教授(東大、理研)  
 「超伝導体の物質設計に道を開く新たな理論計算手法の開発」

**藤田 武志** 准教授(東北大)  
 「三次元網目/ナノポーラス構造金属フィルムの調製と触媒機能の確認」



**岡田 純平** 助教(JAXA)  
 「ホウ素は融けても金属にならないことを初めて確認  
 ～宇宙実験技術を活用してホウ素の謎を解明～」

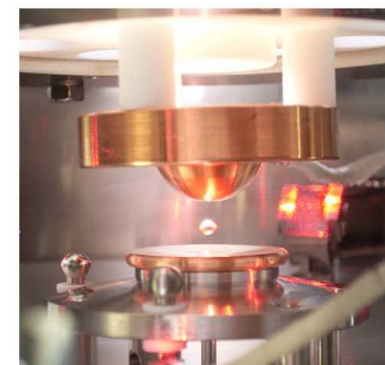
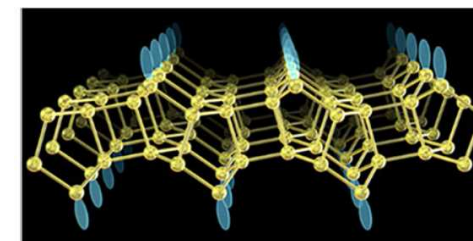
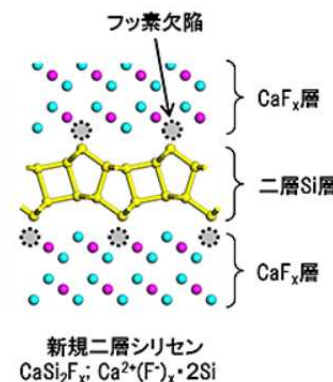
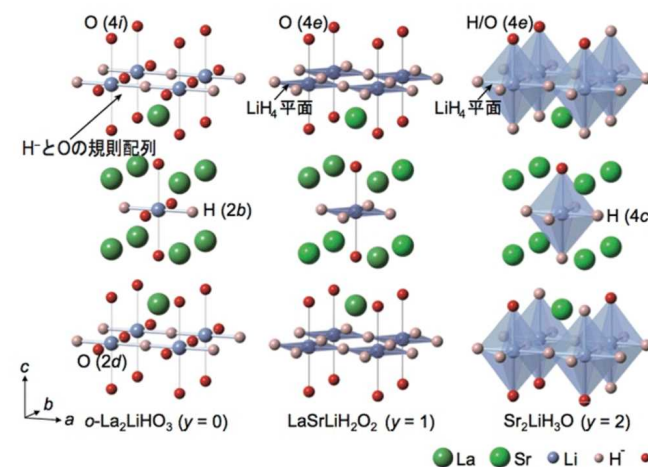


図2 静電浮遊法

**中野 秀之** 主席研究員(豊田中研)  
 「大気中で安定的に取り扱うことができる  
 二層シリセンの合成に成功  
 ～電子デバイスや二次電池電極材料への応用に期待～」



**小林 玄器** 特任准教授(分子研)  
 「ヒドライドイオン“H<sup>-</sup>”伝導体の発見  
 ～水素を利用した革新的エネルギーデバイスの開発の可能性～」



# **JST CREST「元素戦略」**

2010年—2017年

研究総括： 玉尾皓平

# CREST「元素戦略」12課題の対象物質と機能による分類

採択  
年度

2010



杉本 諭 (東北大学 大学院工学研究科)  
結晶構造制御による**Fe基新規磁性化合物**の探索

磁石 レアアースフリー

2011



宝野 和博 (物質・材料研究機構 磁性材料ユニット)  
**ネオジム磁石**の高保磁力化

磁石 Dy フリーネオジム磁石

2010



古原 忠 (東北大学 金属材料研究所)  
軽元素戦略に基づく**鉄鋼材料のマルチスケール設計原理**の創出

鉄鋼構造材料設計原理

2011



北川 宏 (京都大学 大学院理学研究科)  
**元素間融合**を基軸とする新機能性物質・材料の開発

元素間融合、現代版錬金術

2010



島川 祐一 (京都大学 化学研究所)  
**異常原子価**および**特異配位構造**を有する新物質の探索と新機能の探求

遷移金属酸化物系

2012



高田 潤 (岡山大学 大学院自然科学研究科)  
**微生物由来**のナノ構造制御**鉄酸化物**の革新的機能創出

微生物由来鉄酸化物系

2011



長谷川 哲也 (東京大学 大学院理学系研究科)  
**軽元素**を活用した機能性**電子材料**の創出

軽元素電子材料

2010



堀内 佐智雄 (産総研 フレキシブルエレクトロニクス研究センター)  
**有機材料**を用いた次世代**強誘電物質**科学の創成

炭素系 強誘電体

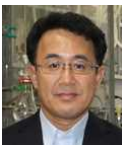
2010



栄長 泰明 (慶應義塾大学 理工学部)  
革新的環境改善材料としての**導電性ダイヤモンド**の機能開発

ホウ素ドーパダイヤモンド電極

2012



森田 靖 (大阪大学 大学院理学研究科・愛知工業大学)  
安定な**有機ラジカル**の**蓄電**および光電変換材料への応用

炭素系 有機二次電池

2011



永島 英夫 (九州大学 先端化学物質研究所)  
**有機合成用鉄触媒**の高機能化

鉄系触媒反応開発

2012



中井 浩巳 (早稲田大学 先進理工学部)  
**相対論的電子論**が拓く革新的機能材料設計

機能性材料設計 相対論的電子論

# 科学技術の進歩に資する成果

## サイエンスベースで、 次に繋がる「新しい芽やコンセプト」を残した

- 栄長：電気化学応用用途にむけたBDD電極デザインの指針の提示
- 杉本：レアアースフリーの新規高保磁力マンガン系MnSnCoN系合金の発見
- 古原：鉄中 i-s 相互作用の精密評価法の開発
- 島川：薄膜ヘテロ界面の「界面エンジニアリング」の提唱
- 堀内：DA型有機強誘電体30種類超の発見と4類型への整理
- 宝野：ネオジム磁石の結晶粒界相の組成・磁性の精密解析法の確立
- 北川：「元素間融合」法の導入と固溶型金属ナノ粒子の状態密度解析法の確立
- 長谷川：新酸化物半導体YOなどの発見
- 永島：貴金属触媒反応の鉄触媒反応への大転換の共通基盤の確立  
鉄触媒反応機構解析への放射光XAFS法の確立
- 高田：微生物由来チューブ状鉄酸化物から人工チューブ状鉄酸化物の生成法の確立
- 中井：全元素を対象とする相対論的量子化学計算プログラムRAQETの開発
- 森田：安定ラジカル分子TOTの集積特性、導電性および光学特性の発見

# 科学技術イノベーション創出への貢献(1/2)

## 「社会実装」およびその取組みの例

### 社会実装の例



栄長チーム

BDD電極による

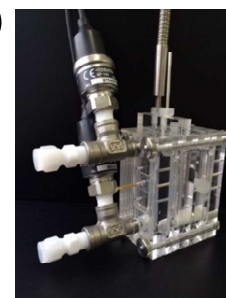
- ①「卓上型重金属分析計」
- ②「残留塩素濃度センサー」
- ③「オゾン水生成装置(手洗い用)」

の実用、製品化

①



②



③



経済効果: ①中国で2020年から販売開始

②センサ単体 10億円/年

③年間46億円(2017年)、水質浄化施設市場10%シェアで年間155億円



健康・安心安全社会へ

### 社会実装への取組みの例



北川チーム

「元素間融合物質」

「多元素高エントロピー合金の開発: より安定な人工擬ロジウム触媒」

化学、触媒、自動車、電池、半導体、金属分野の企業10社

とkg単位のスケーラップ合成、予備実験を実施中



わが国の触媒の年間出荷額(自社消費分は除く)は3000億円前後  
貴金属触媒が全体の6割、1800億円前後である。

この1割でも、本CRESTでの成果の新触媒に置き換わったら、  
年間100億円ほどの経済効果、海外への出荷増が期待される。



# 科学技術イノベーション創出への貢献(2/2)

## 社会実装への取組みの例



古原チーム

「微量ホウ素添加によるHAZボンド脆化の克服と高靱性耐候性鋼の実現」

実装に近い大型インゴットの溶製を行い、特性評価  
老朽化橋梁等の補修用厚板への適用を検討

➡ 安心安全社会へ



宝野チーム

「膨張拘束拡散処理法によるDyフリーネオジム磁石」

実用化の可能性の実証実験が進行中

➡ EV社会実現などへの効果は計り知れない



永島チーム

「白金の代替ヒドロシリル化用、鉄およびコバルト触媒の開発」

ヒドロシリル化用鉄触媒は、信越化学工業(株)との共同研究

➡ 世界のシリコン市場は約1兆5,600億円(2017年)。  
シリコン製造の鍵技術であるヒドロシリル化触媒の白金使用量は5.6トン、  
258億円に相当。実に、シリコン市場規模の1~2%が白金購入価格。  
このうち、変性シリコンオイル製造用白金のすべてを、  
鉄・コバルトに代替した場合の触媒コストの低減は10~20%、  
年間25~50億円と推定される。

# CREST「元素戦略」領域を設定したことの意義

## (1) 「元素戦略」という新たな研究領域が形成された

- 2004年:「元素戦略」提唱
- 2007年－2011年度:文科省「元素戦略<産学連携型>」16件(府省連携)
- 2010年－2014年度:JST さきがけ[元素戦略]34件
- 2010年－2017年度:JST CREST「元素戦略」12件
- 2012年－2021年度:文科省「元素戦略<拠点形成型>」4拠点



2017年度現在、CREST「元素戦略」が足掛け8年間、最長期間  
元素戦略研究活動の中核として貢献

## (2) 「元素戦略」研究領域が科学技術の進展およびイノベーション創出の源泉 であることが認識された

- ① ネットワーク型バーチャルラボ、「物質創製」「解析」「理論」グループを配置の有効性
- ② 資源問題の課題解決型プロジェクトでありながら、サイエンス基盤のレベルの高い  
基礎研究の重要性を領域内の研究者が共有するとともに、領域外にも発信
- ③ 国家基幹技術(大型施設)を広く活用する仕組み、体制が構築された



「元素戦略」研究領域は解決されるべき課題の宝庫であり、  
新たなサイエンスの源泉として、引き続き国を挙げて取り組むべき領域

## (3) 「元素戦略」の周知へのさらなる取り組みが必要(すそ野のさらなる拡大)



- 産業界へのさらなる認知度向上(成果の橋渡し)
- 若手人材育成への取り組み、オールジャパンの連携ネットワーク構築

**文科省「元素戦略」**  
**<研究拠点形成型>**

2012年—2021年

PD: 村井眞二、澤岡 昭、玉尾皓平

2012年

# 文科省 元素戦略<拠点形成型>プロジェクト

設置目標： 学理構築から「試作」まで、経産省へ橋渡し

2018年度からの各拠点の達成目標

## 磁石材料（物材機構）

代表研究者

広沢 哲

(磁性・スピントロニクス材料研究拠点  
元素戦略磁性材料研究拠点 代表研究者)



2-14-1系Dyフリーネオジム磁石  
および 1-12系  $RFe_{12}$ 系  
究極高性能磁石材料の実現

## 電子材料（東工大）

代表研究者

細野 秀雄

(科学技術創成研究院  
フロンティア材料研究所 教授)



物質の構造・化学状態の多様性と  
多存元素を活用、実用に耐える材料  
マテリアルインフォマティクスの活用

## 触媒・電池材料（京都大学）

代表研究者

田中 庸裕

(工学研究科 分子工学専攻 教授)



自動車触媒のPd, Rh, Pt の減量・代替  
二次電池のLi, Co から  
Na, Fe への代替

## 構造材料（京都大学）

代表研究者

田中 功

(工学研究科 材料工学専攻 教授)



バルクナノメタル化による  
鉄鋼、Ti、Mg、Cu構造材料の  
高強度/高延性の両立の実現



# 「磁性材料」 ESICMM



代表: 広沢

企画: 三俣

- 3 GLs
- 13PIs
- 15 Advisors



中村(SPring-8)  
放射光解析



小野(KEK)  
中性子・X線解析

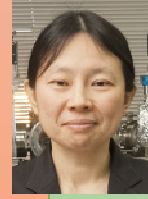


岡本(東北大)  
微視的動的磁化挙動

## 解析評価



GL:宝野(NIMS)  
ナノ解析・マイクロ  
マグネティックス



高橋(NIMS)  
粒子間磁気結合解析

NIMS  
拠点  
22研究者

## アドバイザー

- 日立製作所(榎本)
- 大同特殊鋼(佐川、入山)
- 信越化学工業(中村)
- TDK(石坂)
- トヨタ自動車(加藤)
- 日立金属(西内)
- 愛知製鋼(三嶋)

- 寺倉(NIMS)
- 赤井(東大物性研)
- 佐久間(東北大)
- 高田(東北大多元研)
- 村上(KEK)
- 鈴木(J-PARC)
- 尾崎(AIST/MagHEM)



GL:三宅(AIST)  
電子論にもとづく  
磁石理論と磁石開発

## 電子論



小山(名大)  
計算工学的組織設計  
手法



常行(東大ISSP)  
電子論共通基盤、磁気的性質  
の電子論(赤井特任教授)



阿部(NIMS)  
Calphad 熱力学計算



大久保(NIMS)  
希土類バルク磁石  
材料の創製

## 材料創製



GL:杉本(東北大)  
結晶構造制御とナノ  
複合組織材料の創製



寺西(京大化研)  
磁性ナノ粒子の  
合成



合田  
(東工大)第一原理による  
磁石材料探査

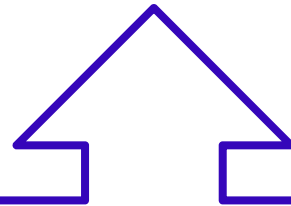


宮下  
(東大)保磁力の  
統計力学



土浦  
(東北大)保磁力の微視  
的解析

# 磁石業界の技術革新はスピードアップ!



**磁石拠点の【宝野グループによる】  
ネオジム磁石の結晶粒界相の組成・磁性の  
精密解析法の確立**

**研究拠点の貢献絶大**

2016年

## 脱Dy、脱レアアース磁石 革命の年

HVモーター冷却技術革新も

- (1) 日経 2016年7月13日  
Dyフリーなおジム磁石  
「HV部品 脱レアアース ホンダと大同特殊鋼 調達リスク減」
- (2) 日刊工業新聞 2016年11月1日  
Dyフリーネオジム磁石  
「ネオジム磁石2倍 大同特殊鋼、50万台分  
18年度 HV駆動用モーター向け」
- (3) 化学工業日報 2016年11月11日  
SmCo磁石  
「重希土類含まず 東芝 高温でも磁力衰えず」

2018年も DyフリーNd半減

- (4) 2018年2月20日発表  
重希土類フリーでネオジム使用量半減の車載モーター用磁石、トヨタが開発  
トヨタ自動車は重希土類を不使用とした上でネオジムの使用量を大幅に減らし、高温下でも使用可能な性能を実現。

町田GL  熊本大学  
Kumamoto University

岡田GL  九州大学  
KYUSHU UNIVERSITY

 東京理科大学  
TOKYO UNIVERSITY OF SCIENCE

駒場GL

  
NIMS

館山

  
AIST

大谷

  
名古屋大学

薩摩

**「触媒・電池」**

 **京都大学**  
KYOTO UNIVERSITY

 **ESTICB**  
Elements Strategy Initiative for Catalysts & Batteries

田中拠点長 

太田企画M 

佐藤 

萩原 

  
横浜国立大学

獨古

  大阪大学

森川 山下

  北海道大学

清水 武次

 **東京大学**  
THE UNIVERSITY OF TOKYO

山田副拠点長 

佃GL 

**分子科学研究所**

 National Institutes of Natural Sciences  
**Institute for Molecular Science**

江原GL 





# 二次電池用消火性電解液の開発

有機電解液 = 発火事故の原因



- 適切な塩・溶媒
- 高濃度化

消火性有機電解液



山田敦夫 (東大院工)

発火リスク最小化

- 難燃性
- 自己消火性

15カ月以上連続充放電

## 3.3 M NaFSA/TMP (消火性)

NaFSA:  $(\text{FSO}_2^-)_2\text{N}^- \text{Na}^+$   
TMP:  $(\text{MeO})_3\text{P}=\text{O}$



Li 系にも適用可能

MENU ▾ nature energy Nature Energy 2018, 3, 22-29.

Altmetric: 21 [More detail >>](#)

Article

### Fire-extinguishing organic electrolytes for safe batteries

Jianhui Wang, Yuki Yamada, Keitaro Sodeyama, Eriko Watanabe, Koji Takada, Yoshitaka Tateyama &

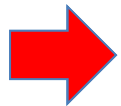
# 「燃えにくいLiイオン二次電池」

競争の激しい分野に！

2018年2月16日発表  
株式会社日立製作所  
国立大学法人東北大学

## 燃えにくい新規電解質を用いた高安全な リチウムイオン二次電池の試作に成功

容量100Whのラミネート型電池で基本性能を確認し、  
釘刺し試験においえ不燃を実証



「元素戦略」プロジェクトの更なるサポートを！

### 3.拠点運営方針: 10年を見通した若手中心のPI

## 「電子材料」 TIES

開始時 (H24)  
殆どのP.I.は  
40歳代

#### 材料創製グループ

**細野GL** 

**大友SGL**  **林**  **舟窪**  **平松** 

ZnOで世界トップ  
電荷ミスマッチ制御

初めてC12A7を  
伝導体化

最高品質の  
誘電体膜

どんな材料でも  
エピ膜化

**大橋**  **島村** 

電荷補償制御

結晶成長

#### 解析評価グループ

#### 電子論グループ

**神谷GL** 

**村上**  **斎藤** 

AOS TFT、デバイス  
複雑酸化物の理論

スピンの  
理論予測

**大場** 

酸化物半導体  
理論

ナノカーボンの  
理論予測

**真島GL**  **山浦** 

最小・最高の  
ナノギャップ制御

籠状新物質  
新超伝導機構

**木本**  **坂田**  **村上**  **小嶋**  **組頭** 

原子分解能  
TEM観察

SOR  
X線回折

軌道秩序  
の観測

μSR

薄膜の電子  
状態観測

## 多存元素を使った新半導体とその設計コンセプト

➡ 新しい物質、機能が次々に見つけ出されている！

- ZnO-SiO<sub>2</sub> (ZSO) 低仕事関数、X線アモルファス、  
易オーミック接触 Adv. Elect. Mater. (2018)、PNAS(2017)

X線のアモルファス、誘電体マトリックスで覆われたナノ結晶半導体の  
光学的に閉じ込められ、電氣的に繋がった電子

- ZrOS ワイドギャップ両極性半導体  
JACS(2017) Spot light paper

バンドの対称性を利用して電子親和力をあげ(電子ドーピングと禁制遷移)、  
アニオン-アニオン相互作用を大きくする(正孔ドーピング)

- Cu-Sn-I 溶液塗布でできる透明p型アモルファス半導体  
Adv. Mater. (2018)

空間的に広がりが大きく、 $l_p$ の小さい $5p$ 軌道を利用



# 構造材料元素戦略研究拠点

変形メカニズム  
実験

「構造材料」  
ESISM

変形メカニズム  
計算・材料設計



幾原PI

電子顕微鏡  
・原子スケール  
実験



乾GL

マイクロピラー  
力学実験



田中GL

第一原理計算



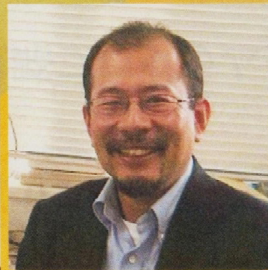
尾方PI

力学計算



津崎PI

疲労特性  
解析・制御指針



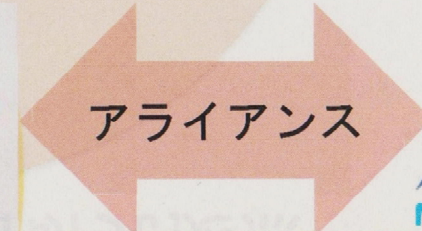
辻GL

バルクナノメタル  
創製・解析



大村PI

鉄鋼材料  
創製・解析

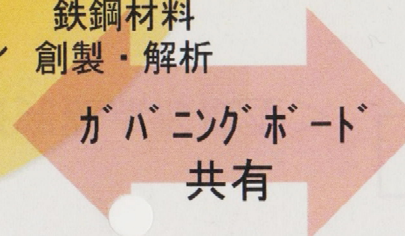


アライアンス



RCSM 構造材料研究拠点  
Research Center for Structural Materials

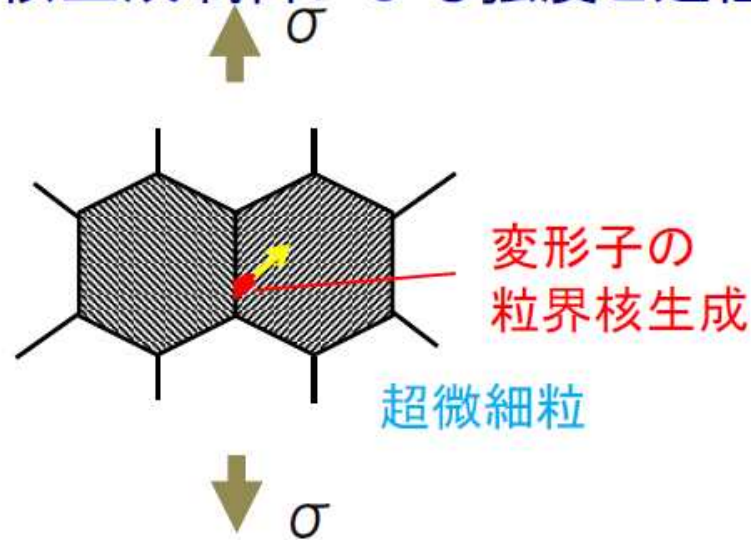
材料創製  
特性解析



ガバナングボード  
共有



結晶粒の超微細化による新たな変形子の発現  
 変形子の粒界核生成制御による強度と延性の高度両立



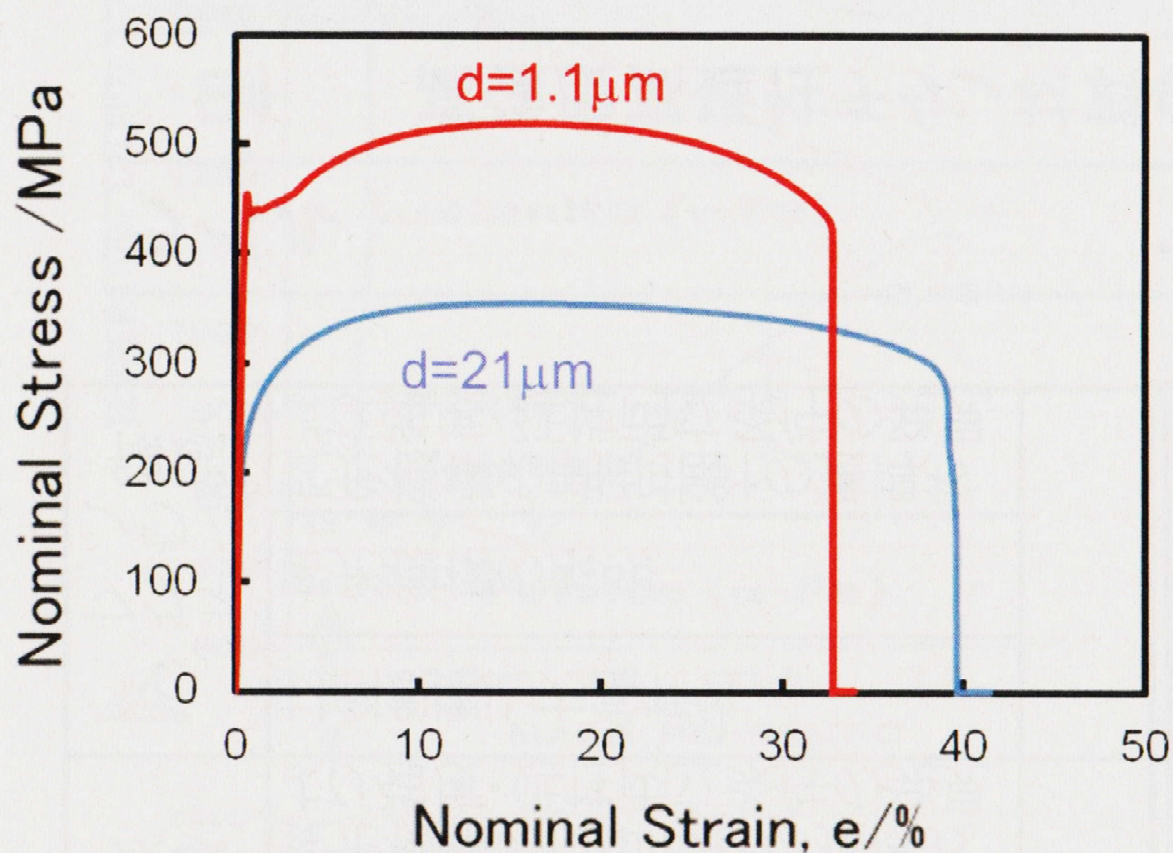
材料	変形子制御への結晶粒超微細化効果
純チタン	非柱面転位生成
低積層欠陥エネルギー銅合金	変形双晶生成
準安定オーステナイト鋼	マルテンサイト生成
高マンガン鋼	変形双晶生成
マグネシウム合金	変形双晶抑制、非底面転位生成

# バルクナノチタンにおける特異な現象の発見 ～強度と延性の両立～



辻GL

## 応力-歪曲線



大延性の起源は不明 = 転位論では説明できない

# 「元素戦略」は 国際協調から国際競争へ

2004年： 我が国発で世界に発信  
2007年：

2010年： 日米欧三極会議(毎年開催)

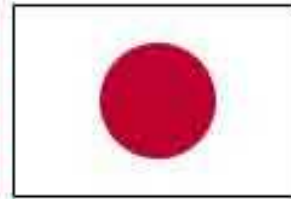
2012年： 米国DOE Innovation Hub for Critical Materials (Ames)

2017年： 米国版「元素戦略」、トランプ政権の重点政策



2010年

The ESI Japan  
has moved  
the world.



## Trilateral EU-US-Japan Conference on Critical Materials

- 1st: October 4, 2010, Washington, U.S.A.
- 2nd: March 28-29, 2012, Tokyo Japan
- 3rd: May 29-30, 2013, Brussels, Belgium
- 4th: September 9-11, 2014, Ames, IA, USA
- 5th: October 26, 2015, Tokyo, Japan
- 6th: November 29, 2016, Brussels, Belgium
- 7th: October 12, 2017, Pittsburgh, USA
- 8th: October, 2018, Japan

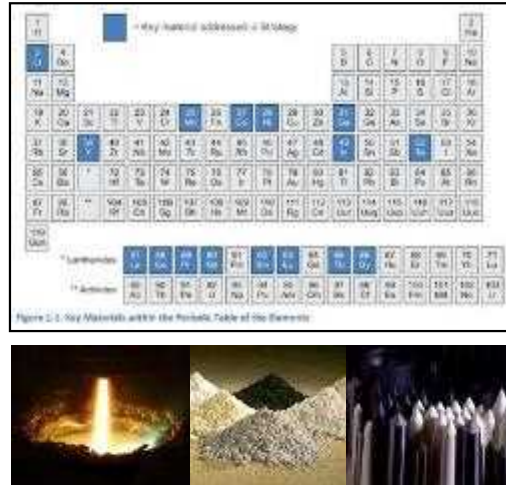
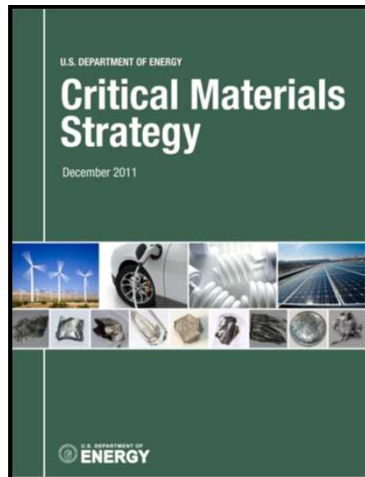
*European Commission*  
*Japanese METI*  
*US DOE*



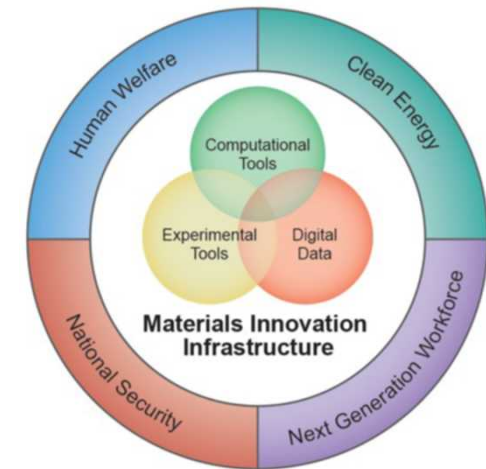
2nd Conference in Tokyo

# アメリカの2つの物質・材料研究開発戦略

## クリティカル・マテリアルズ戦略 (Critical Materials Strategy/DOE 2011年)



## マテリアル・ゲノム・イニシアティブ (Materials Genome Initiative/NSTC2011年)



### • “Innovation Hub for Critical Materials” (2012)

- 5年間で\$120Mを計画。希少元素には、磁性、触媒、および発光性などの特性があり、拡大する多くのエネルギー技術にとって重要とDOEが判断
- 国際的な供給途絶の危機に対し、確実な供給と、需要を減らす効率性や代替物質開発の探究
- 電気自動車、風力発電、省エネ照明等のエネルギー産業における米国のリーダーシップ
- 日本の元素戦略(文科省)、希少金属代替材料開発(経産省)に対応する国家戦略

- ゲノム:「設計情報を含んでいる」の意味
- 2012年予算\$110M (DOE, DOD, NSF, NIST)
- 実験室での材料発見から、開発、製造までのスピードを2倍にする野心的計画
- 材料設計、コンピュータ能力、データ共有・管理・解析の統合的アプローチ。計算科学と情報技術がkey
- 国の競争力維持、先端材料の発見に貢献する
- クリーンエネルギー、国家安全保障、生活向上、人材育成のために必須の戦略。雇用の創出も掲げる。
- 日本の材料研究を強く意識し言及(元素戦略等)。

出典: <http://www.nist.gov/mgi/>  
<http://energy.gov/articles/energy-department-announces-launch-energy-innovation-hub-critical-materials-research-0>

提供: JST・CRDS

# 米国版「元素戦略」 我が国としてどうするか

EXECUTIVE ORDERS



## Presidential Executive Order on a Federal Strategy to Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals

2017.12.20 米国大統領令  
各省庁(内務、国防、商務、農、エネ、財務、科技、他)に、希少元素対応方策のレポート作成を指示。

The United States is heavily reliant on imports of certain mineral commodities that are vital to the Nation's security and economic prosperity. ....

THE WHITE HOUSE,

December 20, 2017.



## The Importance of Minerals

March 12, 2018

Minerals are the raw materials used in nearly everything around us. They are in the automobiles we drive in and the roads we drive on—they are even in the fertilizer that makes our Nation's farms so productive. In recent years, the rapid advancement of technology has led to a significant increase in the quantity and variety of minerals we need. Cell phones, computers, spacecraft, and many other technologies rely on the unique physical and chemical properties of specific minerals that were not widely needed just a few decades ago. ....

「元素戦略」はSDGsに直結

2015年9月、国連総会で議決、2016年1月発効

# 2030年までの世界全体の開発目標 17項目

## SDGs



169 targets

誰一人取り残さない

研究者だけは取り残されている!



# 「元素戦略」

我が国の国家基盤戦略として  
引き続き、しっかりと取り組むべき領域

ご清聴、ありがとうございました。

## 參考資料

2010



杉本

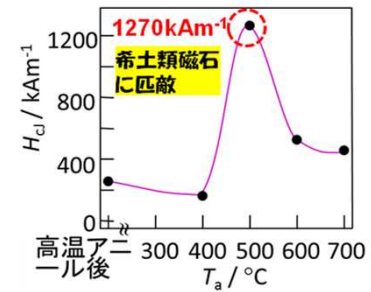
### 結晶構造制御によるFe基新規磁性化合物の探索

- (1)レアアースフリー新規高保磁力、二相分離型**MnSnCoN系合金**の発見

- ・高保磁力の発現には、双晶などの微細組織が関与
- ・高磁化のFe系合金への発展が期待される

- (2)ソフト磁性微粒子の作製法の開発

### 磁石 レアアースフリー



2011

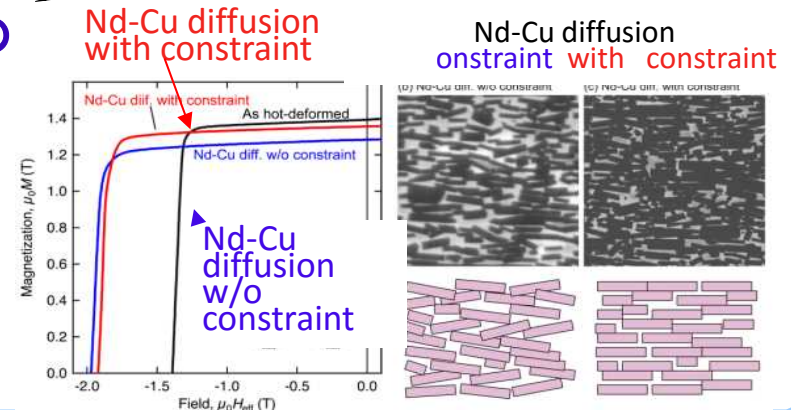


宝野

### Dyフリーネオジム磁石の高保磁力達成のための指導原理創出

- (1)ネオジム磁石の粒界層の精密解析法の確立および異方性を発見
- (2)「**膨張拘束共晶合金拡散法**」により、室温保磁力2TをDyフリーで実現

### 磁石 Dyフリーネオジム磁石



2010



古原

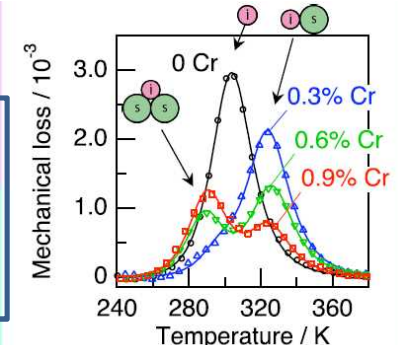
### 軽元素戦略による鉄鋼のマルチスケール設計原理の確立と高延性・高靱性の達成

- (1) **i-s相互作用**の定量評価:  
**i-s** 固溶状態を記述する クラスター展開・変分法の計算コードの開発
- (2)微量Bの粒界トラッピングで高靱性の微細HAZ組織を実現

### 鉄鋼構造材料設計原理

Fe-Cr-N 希薄固溶体におけるスヌーク緩和

**N-Cr**  
α固溶体中での高次クラスターの存在



2011

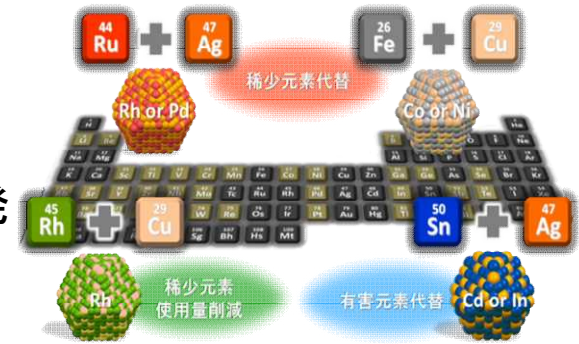


北川

### 「元素間融合」技術の開発による 固溶型ナノ合金の新分野創出

- (1) Pd/Ptコアシェル型ナノ粒子の水素処理によるPdPtナノ合金の生成
- (2) 「人工擬ロジウム触媒  $Pd_xRu_{1-x}$  ナノ粒子」の開発  
Rhを凌駕する三元触媒性能を発現
- (3) 多元素高エントロピー合金 PdRuRh  
(1000度でも相分離なし)

### 元素間融合、現代版錬金術



2010



島川

### 3d遷移金属の異常原子価および特異配位構造

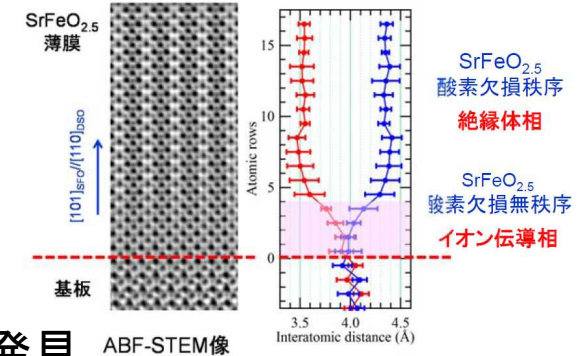
- (1) 薄膜ヘテロ構造界面の原子レベル観察

#### 「界面エンジニアリング」の提唱

- SrRuO<sub>3</sub>/GdScO<sub>3</sub>酸化物ヘテロ界面
- SrFeO<sub>2.5</sub>薄膜ヘテロ界面での「界面酸素イオン伝導」新現象の発見

- (2) 層状Ti化合物での元素選択インターカレーションの発見

### 遷移金属酸化物系



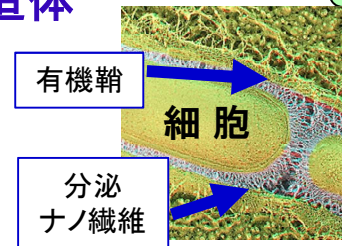
2012



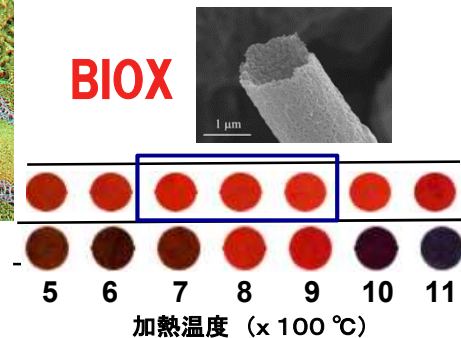
高田

### 微生物が作るチューブ状鉄酸化物構造体 BIOXの生成機構の解明と、 人工ナノ構造制御鉄酸化物の創製

- (1) Liイオン二次電池負極材への応用
- (2) 植物保護効果の発見
- (3) 人工培養による、鞘状のAl固溶ベンガラ（注：原文誤記と思われる）の創製



### 微生物由来鉄酸化物系





軽元素電子材料

2011



長谷川

軽元素を活用した機能性電子材料の創出

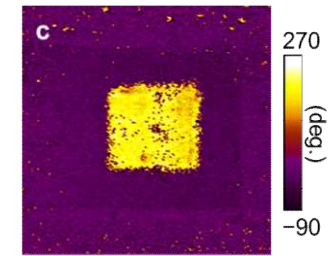
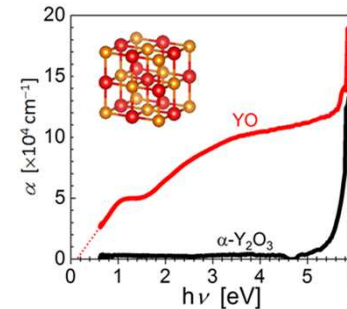
(1) 初めての酸窒化物強誘電体

$\text{Ca}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{TaO}_2\text{N}$ の開発

- ・O/Nトランス配列を決定、
- ・光電変換デバイスとしての期待

(2) 新酸化物半導体 YO の合成

室温の電気抵抗率は $\text{Y}_2\text{O}_3$ より14桁以上も小さい



圧電応答頭微鏡像

2010

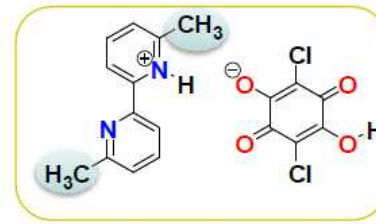
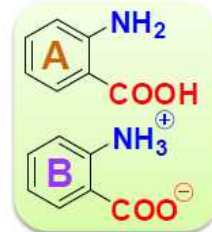
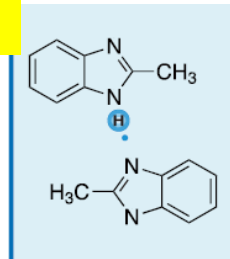


堀内

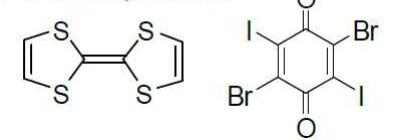
DA型有機強誘電体の4類型、30種超の発見と整理

炭素系 強誘電体

有望種



TTF-QBr<sub>2</sub>l<sub>2</sub>



2010

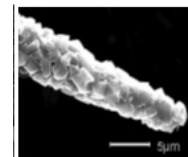


栄長

BDD電極技術による各種分析技術と物質変換技術の革新

ホウ素ドーピングダイヤモンド電極

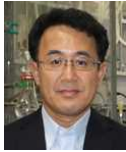
- (1)  $\text{CO}_2$ と海水でホルムアルデヒドを高効率合成
- (2) 針状ダイヤモンド電極で  
がんバイオマーカーを簡便に生体内測定
- (3) 電気化学センサー(重金属、塩素濃度)、  
オゾン水生成装置の実用化



重金属分析装置 オゾン水生成装置

炭素系 有機二次電池

2012



森田

安定な有機ラジカルTOTの新たな科学・技術分野の開拓

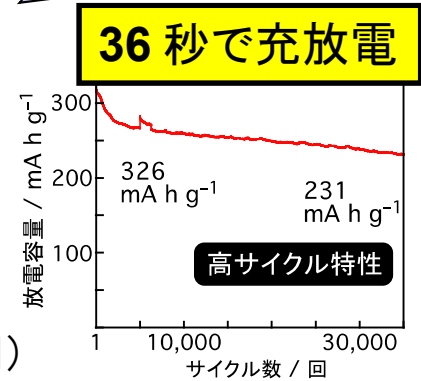
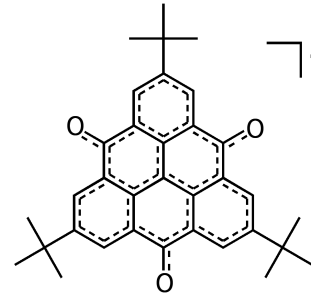
(1) リチウムイオンフルセル有機二次電池

TOTとCNTを分散させた正極  
この充放電速度は従来型の100倍

(2) リチウムイオン両極性全固体

有機二次電池の開発

(3) TOT積層カラムの近赤外吸収と量子計算(中井Tとの共同)



2011



永島

多様な分子変換における貴金属触媒から鉄触媒系への大転換を実現

(1) Ptの代替ヒドロシリル化用、Fe, Co触媒

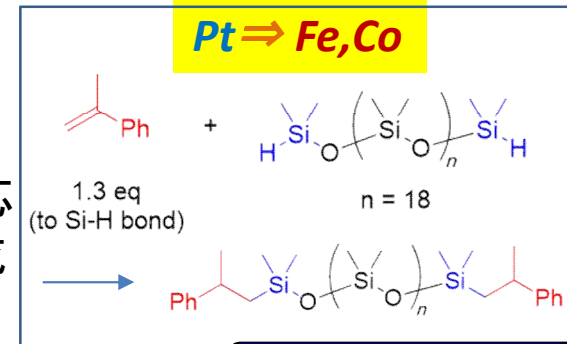
(2) Ruを超えるFe触媒C-H活性化反応

(3) Fe触媒エナンチオ選択的クロスカップリング反応

(4) Fe触媒クロスカップリング反応による医薬品合成

(5) 放射光XAFSを用いるFe触媒反応機構解析

鉄系触媒反応開発



2012



中井

全元素を対象とする相対論的量子化学計算プログラム

RAQETの開発 Relativistic And Quantum Electronic Theory

(1) 局所ユニタリー変換(LUT)法による2成分相対論法の高速度化

(2) 分割統治法(DC法)による大規模化

(3) 「京」コンピュータを利用した非鉛化ペロブスカイト  
太陽電池候補物質の探索(11,025個から51個提案)

(4) 電場印加触媒によるアンモニア合成法の機構解明

相対論的電子論

