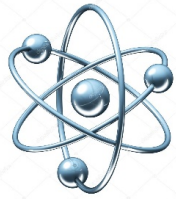


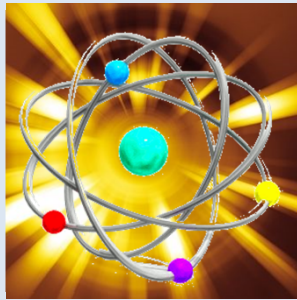
元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探査空間の開拓



元素戦略

元素の特性を理解し、各元素の特性をフル活用

- 戦略的創造研究推進事業 (H22~H30)
 - ・CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」
 - ・さきがけ「新物質科学と元素戦略」
- 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> (H24~R3)



元素科学

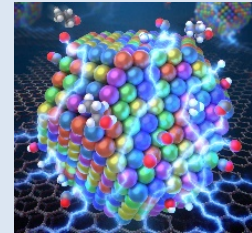
更に基盤技術が進展し、未踏の物質探査空間の開拓へ

元素間の相互作用等を活用する
元素科学を構築し、
新機能を有する新物質・新材料を創出へ

拡張しつつある未踏の物質探査空間

多元素化

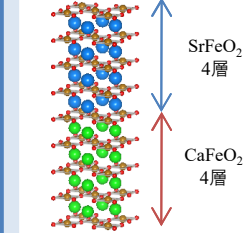
異なる原子同士のシナジーの利用



PGM合金ナノ粒子

複合化

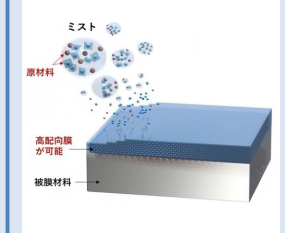
異なる分子同士のシナジーの利用



酸化物人工超格子

準安定相

プロセス環境とのシナジーの利用



準安定相単結晶半導体

近年、発展が著しい周辺基盤技術

理論/計算科学

データ科学
(ハイスループット実験、インフォマティクス)

高精度プロセス

オペランド計測技術

マルチモーダル計測/評価技術

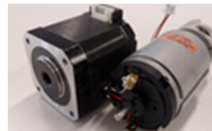
元素科学の成果が波及する社会実装領域

応用先例

蓄電デバイス



モーター



太陽電池



電子回路



センサ



エネルギー関連部材

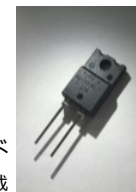
エレクトロニクス部材

先行事例

ベンチャー企業：FLOSFIA

準安定相のα酸化ガリウムがパワーデバイスとしての最高性能を発現し、社会実装へ

GaO[®]ダイオード
株式会社FLOSFIA HPより転載



日立金属

3Dプリンタ造形プロセスにより高強度・耐食なハイレートロー合金を開発



写真提供：日立金属

令和3年度戦略目標

1. 目標名

元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探査空間の開拓

2. 概要

近年、政情不安の地域に偏在する資源供給のリスクに加えて、米中貿易摩擦やパンデミックに伴うサプライチェーン断絶等の新たなリスクが顕在化しており、元素に関する科学をベースとして発展した元素戦略の概念の重要性がますます高まっている。また、知的集約型社会の進展により、材料に求められる機能や役割がより一層高度化・多様化しており、革新的機能を有する新物質・新材料を創出する研究基盤の構築が望まれている。

従来、限られた元素の組み合わせと安定相を基軸とする希少元素の使用量削減や元素代替と性能改良に重点を置いた研究は豊富に存在する。一方、材料に求められる機能や役割が高度化・多様化する中で、革新的な機能や相反する機能の両立が求められており、その実現に向けては、多元素化・複合化や準安定相等の未踏物質探査空間を開拓する必要性が高まっている。物質を構成する元素の組み合わせはほぼ無限であるため、元素に関する科学に立ち返って元素の役割・元素間の相互作用などを理解しながら、効率的に物質探査を進めて新機能性材料を創出するための戦略的な取組が重要である。

本戦略目標では、従来の元素戦略で実践してきた物質創製・計算科学・解析評価の融合に加えて、データサイエンス的手法や先端の計測技術などを積極的に取り入れることで、未踏の多元素・複合・準安定物質探査空間を効率的に開拓し、新機能性材料を創出することで、元素間の相互作用などを活用する元素科学を世界に先駆けて構築する。

3. 達成目標

本戦略目標では、物質探査空間を未踏領域に拡張し、多元素化、複合化、準安定相などを活用した未踏材料を開拓するための高度な物質創製技術やプロセス技術を通じて、革新的機能を有する新物質・新材料の創出を目指す。具体的には、以下の3つの達成を目指す。

- (1) 未踏物質探査空間の探索指針の構築
- (2) 新物質・新材料創出のための物質創製技術やプロセス制御技術の確立
- (3) 革新的機能を有する多元素・複合・準安定等の新物質・新材料の創出

4. 研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

3.「達成目標」の実現を通じ、元素の役割・元素間の相互作用を理解して未踏の物質探査空間を開拓し、従来の性能・機能を凌駕する高機能デバイス材料・量子マテリアル・ナノ材料・エネルギー変換材料・構造材料等、高度な社会ニーズに応える新機能性材料を創製し、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- ・高度な材料創製・製造プロセス技術と、それを支える計測・分析技術、加工技術を基にして、高度化する社会ニーズに応える材料を数多く生み出せる社会
- ・貿易摩擦やパンデミック等のリスクによるサプライチェーンの断絶に対し、早期の材料開発により柔軟に対応できる強靱な社会
- ・我が国の目指す Society 5.0 や安全・安心な社会の実現に対して、革新的な機能を持つ材料の開発を通して人類の Well-being に貢献する社会

5. 具体的な研究例

- (1) 多元素化・複合化における機能発現メカニズム解明と物質創製・プロセス技術の確立
 先端プロセス等により、多元素化・複合化における機能発現メカニズム解明の研究を行う。
- ・ハイスループット実験・機械学習等のデータ駆動科学を活用することによる探索可能な材料空間の拡張と機能発現メカニズムの解明に関する研究
 - ・マルチスケール・マルチモーダル計測と材料組織形成過程の理解による高機能化の指針を構築する研究
 - ・革新的機能を持つ多元素化・複合化を活用した未踏材料を創製する精密熱制御、混合制御等の先端プロセスに関する研究
- (2) 高度プロセス制御による準安定相の創製
 温度、圧力、雰囲気等の精密制御により、準安定相の創製の研究を行う。
- ・雰囲気ガスなど、プロセス環境を非平衡条件、極端反応条件などに制御することによる、新物質合成手法を確立する研究
 - ・基板からの応力などを利用し、通常プロセスでは合成できない多様な相を安定化する研究
 - ・高度なオペランド計測技術、及びプロセス中の現象を可視化するイメージング計測技術とデータ科学との融合により、材料創製プロセスを最適化し、産業化につながる革新的なプロセスを実現する研究

6. 国内外の研究動向

(国内動向)

平成 28 年度戦略目標「材料研究をはじめとする最先端研究における計測技術と高度情報処理の融合」において、主に計測技術とデータ科学の融合に取り組んでおり、平成 29 年度戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」において、主に計算科学とデータ科学の融合が行われつつある。これらの戦略目標と連携しつつ、物質・材料創製と表裏一体であるプロセス技術に取り組むことが今後必要とされている。

科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) の第 11 回科学技術予測調査によると、本戦略目標に関連する「新規構造・機能の材料と製造システムの創成」、「ICT を革新する電子・量子デバイス」、「計測と情報科学ツールを活用した原子・分子レベルの解析技術」等の領域は分野融合の

ポテンシャルが高く、推進すべき領域であるとの記述がある。

また、「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」において、電子材料・磁石材料・触媒・電池材料・構造材料の研究が推進されており、その中から新進気鋭の若手研究者や新たなシーズが生み出されつつある。科学研究費助成事業の新学術領域研究（研究領域提案型）では、平成 28 年度「複合アニオン化合物の創製と新機能」、平成 30 年度「ハイエントロピー合金」、「ハイドロジェノミクス」等の研究領域において、複雑な組成を持つ物質の利用や、新しいプロセス技術を活用した新物質相の創製などの研究シーズが蓄積されつつある。

さらに、令和元年度以降、複数の学会で多様な安定相のエンジニアリングに関するシンポジウムが開催され、コミュニティ形成が活発化している。

（国外動向）

元素戦略に類似した政策として、米国では、平成 23 年に DOE（エネルギー省）が「Critical Materials Strategy」を発表し、現在まで積極的な投資や拠点形成が行われている。

欧州では、平成 26 年～令和 2 年にかけての研究開発枠組みプログラムである「Horizon 2020」において、希少鉱物関連プロジェクトに大規模な投資が行われてきたことに加え、次期プログラムである「Horizon Europe」では、第 2 の柱（社会的課題の解決）の中の 6 つの社会的課題群の一つ「デジタル・産業・宇宙」の一部に Raw Materials を位置づけており、欧州圏の循環型経済確立に向けた取組が活発化していくと思われる。

中国は令和 2 年にレアアースを使った新材料や応用技術開発の拠点の設立許可を発表した。中国産の「戦略資源」であるレアアースを使って磁石、発光体、合金など高機能材料を開発し、自国のハイテク産業を強化しようとするもので、脱輸出依存モデルを目指す取組の一環とも指摘されている。

データ駆動型の材料探索に関する研究については、米国では Materials Genome Initiative (MGI) が平成 23 年から開始されており、今後さらなる加速が予測される。また、中国では、平成 26 年から中国版 MGI が継続している。欧州では Horizon 2020 の下で NOMAD (The Novel Materials Discovery Laboratory、平成 27～30 年) が行われてきた。

さらに、新機能材料の創製に関連した海外の動向としては、エネルギー関連材料、構造材料など応用分野を横断した多元素材料やハイエントロピー材料の国際会議が活発化している。例えば、多元素材料の国際会議として、「21st International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-21)」が開催されており、応用分野としては太陽光発電、熱電発電、電池、発光体、機能材料、超伝導体にわたり、3 元及び多元素の化合物に関連するすべてのトピックをカバーしている。平成 30 年のテーマは非平衡プロセスとなっており、材料そのものの特性だけでなく、多元素系の作製プロセスへの関心も高まっている。

7. 検討の経緯

「戦略目標の策定の指針」（令和元年 7 月科学技術・学術審議会基礎研究振興部会決定）に基

づき、以下のとおり検討を行った。

- (1) 科学研究費助成事業データベース等を用いた国内の研究動向に関する分析及び研究論文データベースの分析資料を基に、科学技術・学術政策研究所科学技術予測センターの専門家ネットワークに参画している専門家や科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CRDS)の各分野ユニット、日本医療研究開発機構(AMED)のプログラムディレクター等を対象として、注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。
- (2) 上記アンケートの結果及び平成31年度JST-CRDSの戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ ～多様な安定相のエンジニアリング～」等を参考にして分析を進めた結果、今後未来の材料を開拓する上で材料探索空間の拡張が重要であるとの認識を得て、注目すべき研究動向「未踏材料空間の開拓による新元素戦略」を特定した。
- (3) 令和2年12月に、文部科学省とJSTは共催で、当該研究動向に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、材料の多元素化、複合化、準安定相の活用の必要性に加え、意義、価値、タイミング、日本独自のインフォマティクス開発の方向性等について議論を行った。ワークショップにおける議論や有識者に対するヒアリング等を踏まえ、検討を進めた。
- (4) さらに、「イノベーション政策強化推進のための有識者会議 『マテリアル戦略』」において、フォアキャスト型で取り組むべき技術領域について議論を行い、これまでの材料開発で探索されていない多元素系、複合系、準安定相といった未踏領域を対象とし、計測、計算、プロセス、データ駆動といった技術革新を用いた新機能材料開発が重要であることとの認識を得て、本戦略目標の策定に至った。

8. 閣議決定文書等における関係記載

「第5期科学技術基本計画」(平成28年1月22日閣議決定)

第2章(3)② ii) 新たな価値創出のコアとなる強みを有する基盤技術

- ・革新的な構造材料や新機能材料など、様々なコンポーネントの高度化によりシステムの差別化につながる「素材・ナノテクノロジー」

第3章(1)③ ものづくり・コトづくりの競争力向上

- ・計算科学・データ科学を駆使した革新的な機能性材料、構造材料等の創製

「統合イノベーション戦略2020」(令和2年7月17日閣議決定)

第5章 戦略的に取り組むべき基盤技術

(4) マテリアル

- マテリアルの知が高確率でスピード感を持って実装され、A I、バイオ、量子技術、環境といった重要政府戦略の実現の加速や、国内外の重要課題の解決に貢献するとともに、我が国発のマテリアルから新しい価値、研究領域、産業領域が創出されることを実現
- 高品質なマテリアルデータを用いて優れた研究成果を創出することを目的とした、重要技術・実装領域に狙いを定めた、データ収集・活用と理論・計算・実験が融合する戦略的な研究開発プロジェクトについて、2020 年度から検討を進め、必要となる取組を速やかに実施する。

「第3回イノベーション政策強化推進のための有識者会議 『マテリアル戦略』中間論点整理
(令和2年12月18日)

＜フォアキャスト型で取り組むべき技術領域の例＞

- ✓ これまでの材料開発で探索されていない多元素系、複合系、準安定相といった未踏領域を対象とし、計測、計算、プロセス、データ駆動といった技術革新を用いた新機能材料開発

9. その他

目的とする機能を制限せず、革新的な物質創製・プロセス技術に注目した本戦略目標は、広い研究者層が関連しており、基礎研究ではあるものの、新物質・新材料の創製という意味で、産業界からの注目度が極めて高い。革新的な物質創製・プロセス技術を構築するためには、多様性の確保と継続性の維持が重要である。