

元素戦略プロジェクト〈産学官連携型〉
(平成21年度採択課題)
事後評価結果
(案)

平成27年1月

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会委員

	氏名	所属・職名
主査	川合 知二	大阪大学産業科学研究所特任教授
	五十嵐 正晃	新日鐵住金株式会社技術開発本部フェロー・先端技術研究所長
	伊丹 敬之	東京理科大学大学院イノベーション研究科教授
	射場 英紀	トヨタ自動車株式会社電池研究部長
	大林 元太郎	東レ株式会社研究本部顧問
	岡野 光夫	東京女子医科大学先端生命医科学研究所長・教授
	長我部 信行	株式会社日立製作所ヘルスケア社理事
	片岡 一則	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻教授
	北川 進	京都大学物質－細胞統合システム拠点長
	栗原 和枝	東北大学原子分子材料科学高等研究機構教授
	小池 康博	慶應大学理工学部教授
	小長井 誠	東京工業大学大学院理工学研究科電子物理工学専攻教授
	小林 昭子	日本大学文理学部化学科教授
	榊 裕之	豊田工業大学学長
	曾根 純一	独立行政法人物質・材料研究機構理事
	田中 一宜	独立行政法人科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー
	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科教授
	橋本 和仁	東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授
	福島 伸	東芝株式会社研究開発センター首席技監
	松下 祥子	東京工業大学大学院理工学研究科准教授
	三島 良直	東京工業大学学長

評価課題（平成21年度採択課題）

- ・ 化学ポテンシャル図に立脚した多元系機能材料の精密制御
(宇田哲也 京都大学)
- ・ 有機分子を活物質に用いた二次電池の高性能化と充放電機構の解明
(森田靖 大阪大学)
- ・ 複合界面制御による白金族元素フリー機能性磁性材料の開発
(喜多英治 筑波大学)
- ・ エコフレンドリーポストリチウム二次電池の創成
(岡田重人 九州大学)

「化学ポテンシャル図に立脚した多元系機能材料の精密制御」

1. 課題実施期間及び評価時期

平成21年度～平成25年度

中間評価:平成23年度、事後評価:平成27年1月

2. 研究開発概要・目的

化学熱力学の考え方と第一原理によるエネルギー計算を強固に連携させ、燃料電池用固体電解質、太陽電池用化合物半導体、生体用セラミクスについて、3元系以上における汎用元素からなる物質の探索と機能発現に関する研究を実行する。特に汎用元素として「リン」を意識し、リン化合物に関する基礎知見を得る。この目的を達成するために以下の①～④に取り組む

- ① 多元系における第一原理計算と化学熱力学を融合させる計算手法の確立
- ② 燃料電池用の新規プロトン伝導体の開発
- ③ 太陽電池用の新しい化合物半導体の開発
- ④ 生体用セラミックス材料の高機能化

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

希少元素を用いず従来にない新物質を創成するには多元系からなる材料を狙う必要があり、そのためには、材料の機能設計、製造プロセス設計上、最も基盤となる必須技術である化学熱力学の考え方に、第一原理などの異分野理論との融合を図る必要がある。汎用元素であるリンで希少金属代替することに新たな設計指針を適用し、これを確立することは、他の汎用元素の適用へも展開できる。多大なる波及効果をもたらすことが期待でき、必要性が極めて高い課題である。

【有効性】

プロトン伝導体に関して、理論、実験の両面から伝導機構を精査し、極めて大きな結晶異方性を持ちかつ実用特性なども確度高く予測できるリン酸塩の設計・開発を行うことで、安価で資源リスクの少ない燃料電池開発が可能となる。太陽電池、生体用セラミクスについても、幅広い分野の研究者が同様の手法を駆使して、物質創成の有効性を検証する。

【効率性】

多元系熱力学に基づく化学ポテンシャル計算の高精度化は、新物質創成プロセスを確立する上で必須の重要技術のひとつであるが、理論予測と物質創成が常に相互検証を重ねる事によって、実用性の高い設計ツールを効率的に構築できる。電池分野では住友電工、生体材料分野では大阪府大をアドバイザーに迎え、また専門的知見を有する専門家を、プログラムディレクター (PD)、プログラムオフィサー (PO) として、計画の妥当性や進捗状況について指導を得る体制を取ることとしている。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	H21(初年度)	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	0.3億	0.3億	0.3億	0.3億	0.3億	1.4億

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 京都大学大学院工学研究科 宇田 哲也 准教授

主管研究機関 京都大学、名古屋大学

事後評価票

(平成27年1月現在)

1. 課題名 化学ポテンシャル図に立脚した多元系機能材料の精密制御

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

本課題は、新物質設計に際して必須となる化学ポテンシャル図を理論と実験の融合をもって構築するという新たな手法の提案であり、課題の達成に向けて以下の①～④に対する取組をPD/POの指導のもとで実施し、以下の達成状況となった。

① 多元系における第一原理計算と化学熱力学を融合させる計算手法の確立

化学熱力学データを第一原理計算から求め、実験データと関係させることで、燃料電池用固体電解質、太陽電池用化合物半導体について、「リン」を基軸にした汎用元素からなる多元系高特性物質を探索する手法を確立した。

② 燃料電池用の新規プロトン伝導体の開発

プロトン伝導体に関して、 LaP_3O_9 に Ca, Sr, Ba を同時添加する事で高特性化することを確立した手法で発掘し、実際に合成し高い特性を発現することが確認できた。

③ 太陽電池用の新しい化合物半導体の開発

太陽電池に関して、In や Ga 等のレアメタルを含む CIGS 化合物と同等の電気的特性を亜鉛、硫黄、リンの化合物で実現できることを理論計算で予測し、合成・評価により検証に成功した。

④ 生体用セラミックス材料の高機能化

中間評価を踏まえ②・③に集中するという事で中止した。

必要性：上記①のとおり、多元系における第一原理計算と化学熱力学を融合させる手法を確立し、様々な材料開発へ適用できる基盤技術を確立した。また、上記②③のとおり元素戦略という観点から「リン」を基軸とし汎用元素からなる材料創製に成功し、本項目を満足している。

有効性：プロトン伝導体、太陽電池に応用できる材料探索で高特性の材料を①で確立した手法を用いて見出し、②③のように実際に物質を創製し特性を評価することで得られた手法の有効性を実証すると同時に高特性の物質及びその製法を得ることに成功しており、本課題は有効に機能したといえる。

効率性：理論計算による予測と物質創成による実証を行うことで、効率的に研究を遂行することができた。

(2) 成果

- ・理論予測にしたがって物質を創成し、理論・実験のデータを駆使し、化学ポテンシャル図を構築、物質探索を行い高特性の物質を見出すことができた。これは、本課題で提案した物質探索手法の有効性を示すものであり、その手法を確立したという意味で評価が高い。
- ・元素戦略という観点で見たとき、「汎用的なリンを使いこなし、新たな機能を見出す」という意味で採択しており、リンを含んだ化合物で中温型燃料電池に用いるプロトン伝導体、及び、太陽電池の物質探索を行い、以下の1)、2)の成果を得た。
 - 1) プロトン伝導体に関して、確立した物質探索手法を用いて LaP_3O_9 に Ca, Sr, Ba を同時添加する事で高特性化することを発掘・合成した。
 - 2) 太陽電池に関して、In や Ga 等のレアメタルを含む CIGS 化合物と同等の電気的特性を Zn 亜鉛、S 硫黄、P リンの化合物で実現できることを理論計算で予測し、合成・評価により検証した。また、開発した物質探索手法の有効性を実証した
- ・人材育成面については、本プロジェクトを通して、助教1名が准教授へ昇格、ポスドク1名が助教ポストを獲得、2名の博士課程の学生が学位取得し、さらには宇田氏本人が教授へ昇格ということで、多くの参画研究者がプロモートされている。

論文：12件、特許：2件（国内2件・海外1件）、表彰：国内2件・海外1件

(3) 今後の展望

- ・本課題で確立した化学ポテンシャル図を構築する手法は、新たな物質探索手法であるマテリアルズインフォマティクスに応用できるので、手法研究の成果を広く展開することが望まれる。
- ・本研究で見出したプロトン伝導体、太陽電池の物質については、材料開発だけでなくシステム面の研究開発を進めることで実用化を目指した研究開発（例えば NEDO プロジェクト等）へ移行することを期待する。

「有機分子を活物質に用いた二次電池の高性能化と充放電機構の解明」

1. 課題実施期間及び評価時期

平成21年度～平成25年度

中間評価:平成23年度、事後評価:平成27年1月

2. 研究開発概要・目的

有機分子を活物質として用いた「分子結晶性二次電池」の性能の大幅な向上を目的とする。 π 電子構造のトポロジ的対称性に起因した「軌道エンジニアリング」に従い、トリオキソトリアンギュレン (TOT) を設計、合成し、①その各種置換基誘導体の有機合成を行うとともに、有機活物質として新型二次電池である「分子スピン電池」へ展開する。②電子スピン共鳴 (ESR) 法により活物質の酸化還元反応や電子状態変化を明らかにする。③TOT 誘導体を正極活物質とした電池デバイス化、充放電特性評価および活物質の電子顕微鏡による構造解析を行う。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

有機物を電池活物質に用いるという発想およびその原理実証データは新たに提案された研究シーズである。これが機能として確立されれば全く新しい電池のコンセプトが我が国で生まれ、かつそれは資源リスクを伴わない技術である。更には有機化学の中に「軌道エンジニアリング」という新たな学問分野を創成することが期待でき、必要性が極めて高い課題である。

【有効性】

極めて高度な有機物質合成技術を駆使し、電池特性のみならず熱的安定性など、要求特性に応じた物質創成の体系を構築し、機能検証との連携でその有効性の開拓が大いに期待できる。あわせて新物質に対する機能、構造解析技術を確立し、その進展にも期待ができる。透過電子顕微鏡による有機物観察も実現すれば他分野へ応用展開可能である。

【効率性】

有機合成の実力で極めて優位に立つ大学と、解析、評価力で実績の高い企業などの連携により、集中した研究体制を期待できる。また実用化に向けた市場調査などでカネカをアドバイザーに迎えている。若手の訓練の場としても適切であり、更に専門的知見を有する専門家を、プログラムディレクター (PD)、プログラムオフィサー (PO) として、計画の妥当性や進捗状況について指導を得る体制を取ることとしている。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	H2 1 (初年度)	H2 2	H2 3	H2 4	H2 5	総額
執行額	0. 3 億	0. 3 億	0. 3 億	0. 4 億	0. 3 億	1. 6 億

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 大阪大学大学院理学研究科 森田 靖 准教授
主管研究機関 大阪大学、大阪市立大学、日本電子株式会社

事後評価票

(平成27年1月現在)

1. 課題名 有機分子を活物質に用いた二次電池の高性能化と充放電機構の解明

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

本課題は、レアメタルを用いない有機分子を活物質として活用し二次電池を創製するという意味で全く新しい観点からの先鋭的な研究であり、課題の達成に向けた取組をP/D/P/Oの指導のもとで実施してきた。

研究目標①～③について以下のとおり全て達成している。

- ① R_3TOT 化合物をベースにRに関して電子吸引性や分子間力などを考慮し、候補物質を分子軌道法に基づく電子論計算からBr(臭素)が電池特性的観点で最適であることを見出し、合成に成功。その結果、活物質として有望な物質であることを確認。
- ② 電子スピン共鳴法(ESR法)を用いて、充放電過程においてTOT化合物の多段階酸化・還元反応が充放電過程に関与していることを直接的に観測することに成功し、充放電メカニズムの明確化も達成。
- ③ 本課題の中で発見、合成した Br_3TOT 化合物を用いて電池デバイスを試作。試作電池で100回以上の充放電できることが確認でき、高い充放電特性を持つことを実証。

必要性：元素戦略的側面から見て、有機物による電池活物質創製の可能性を切り開き、調達リスクのない二次電池の開発可能性を示したという意味で必要性を満足している。また、軌道エンジニアリングを活用した材料開発を確立したという意味でも本項目を満足している。

有効性：軌道エンジニアリングにより有機物の電子的な構造に関わる特性を予測する手法を確立し、それを物質合成により実証し有効性を検証している。本手法は他の有機物系への展開も期待でき、分野として有効性の高い研究が行われている。

効率性：有機合成に強い学术界の力と、応用・展開へつなげる産業界の力を合わせて研究を遂行する体制の下で推進し、途中で産業界側のパートナーの撤退等のアクシデントはあったが、すぐに次のパートナーと連携を開始し電池のデバイス試作と充放電特性の実証まで繋げており、効率性の良い推進体制で実施ができた。

(2) 成果

- ・本研究は有機分子を二次電池活物質への応用の可能性を提案した世界初の取組である。さらに、Nature Chemistry、Nature Material に掲載された論文は被引用文献 TOP1%

にランクされているとおり、画期的な発表を行っている。

- ・プロジェクトの推進期間中に当初の産業界のパートナーが撤退する事態もあったが、新たな産業界パートナーと連携を開始でき、得られた研究成果を応用に展開する道筋を失うことなく課題を推進できたという意味でも評価できる。また、新たな産業界パートナーとの連携においては早期の段階で2件の特許出願が実現しており着実な成果に繋がっている。
- ・中間評価で指摘があった製法特許に関しては、ノウハウの流出等のリスクを伴うことから、出願を行わないという判断を行い、物質特許に絞った特許出願にとどめる方針を取るなどリスク評価を考慮した特許活動を推進できたことも評価できる。

論文：6件、特許：1件（国内1件）、表彰：国内5件

（3）今後の展望

- ・この課題が開いた独創性の高い研究領域であり、日本の強みとして研究が継続されるよう仕掛けるべきである。
- ・産業界との連携で研究が加速した好事例であり、成果が製品に繋がるよう連携を継続することが期待される。

「複合界面制御による白金族元素フリー機能性磁性材料の開発」

1. 課題実施期間及び評価時期

平成21年度～平成25年度

中間評価:平成23年度、事後評価:平成27年1月

2. 研究開発概要・目的

大容量ハードディスク媒体に欠かせない白金族の Pt と Ru を代替するために、身近に存在する鉄、コバルト、マンガンなどの金属とその酸化物の間の界面に生じる磁氣的相互作用に注目し、新たな機能性磁性材料を開発する。

中間評価までの目標は、

①界面磁気相互作用・界面異方性制御に関する研究

- 1) 酸化物複合磁性材料探索のためにスパッタ薄膜成長装置の整備を行い、適切な酸化方法を決定する。加えてパルスレーザー法の有効性を検討する。
- 2) 実用を目指したスパッタ反平行結合薄膜の作製を行い、必要な結合定数 (1 erg/cm^2 以上) を実現できる材料を探す。
- 3) 鉄酸化物 (Fe_3O_4)/MgO/Fe 複合界面の反平行結合についてメスバウアー効果等の局所磁性計測を行い、発現機構を実験的に明らかにする。
- 4) 垂直磁気異方性 $3 \times 10^6 \text{ erg / cm}^3$ 以上を有する Co フェライト薄膜を作製するためのスパッタ条件を確立する。ここで得られた材料の次世代記録媒体への適性を評価するため、90nm 級パターン形成による磁気特性評価を行う。

②酸化物/合金界面における磁性に関する理論研究

- 1) 鉄酸化物/MgO/Fe 膜の反平行結合について理論的モデルを構築し、第一原理計算によるフェライト/遷移金属界面での電子状態計算の手法を確立して機構解明を行う。
- 2) スピン軌道相互作用を取り入れた第一原理計算による垂直磁気異方性の定量計算法を整える。さらにスピネル系化合物の元素依存性等の検討から異方性発現機構を議論する。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

記録材料技術の国際競争は熾烈を極めており、欧米においても研究を中断してしまった国は少なくない。我が国においても企業の合従連衡著しく、技術開発はその影響を被らざるを得ない。その中で、現在主流の貴金属系材料の使用を脱却し、身近な酸化物系で高密度垂直磁気記録を実現することは、国内の技術優位性および事業性確保の上で極めて重要であり緊急性も高い。

【有効性】

物質として大きな反平行層間結合を持つ鉄系酸化物および巨大な磁気異方性を持つ鉄-コバルト系酸化物が見いだされている。これらの物性を有効に結びつける記録媒体構造を実現できれば、現行技術を遙かに上回る次々世代材料が実現できる。それだけに、プロセス開発、実装技術開発を含めた高い技術ハードルを乗り越えるチームマネジメントが期待される。

【効率性】

理論設計、物質創成、電子物性評価および企業による実装評価がバランス良く連携できている。実装技術開発に関し、HOYA をアドバイザーに迎えている。若手の訓練の場としても適切であり、更に専門的知見を有する専門家を、プログラムディレクター (PD)、プログラムオフィサー (PO) として、計画の妥当性や進捗状況について指導を得る体制を取ることとしている。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	H2 1 (初年度)	H2 2	H2 3	H2 4	H2 5	総額
執行額	0. 3 億	0. 3 億	0. 3 億	0. 3 億	0. 3 億	1. 4 億

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 筑波大学大学院数理物質科学研究科 喜多 英治 教授
 主管研究機関 筑波大学、名古屋工業大学、名古屋大学、関西大学、HOYA 株式会社

事後評価票

(平成27年1月現在)

1. 課題名 複合界面制御による白金族元素フリー機能性磁性材料の開発

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

本課題で目標としているPt族フリー機能性磁性材料の開発に関して達成状況は以下のとおり

① 界面磁気相互作用・界面異方性制御に関する研究

- ・ α -Fe/Fe₂O₃・Fe₃O₄ のナノレベルで結晶が一方向に整列した複合構造の磁性膜を選択的に創製するプロセスの開発に成功した。
- ・ Fe₃O₄の一部をCoに置換した高磁気特性のCoフェライトでも同様の構造を得ることができ、従来の磁気記録媒体に必要な磁気特性である磁気異方性 $15 \times 10^6 \text{erg/cm}^3$ を達成した。また、熱アシスト記録に対応できる磁気異方性の温度依存性と結晶構造の熱安定性も確認し、磁気記録媒体への適用できることも確認した。

② 酸化物/合金界面における磁性に関する理論研究

- ・ フェライト/強磁性Fe界面について電子状態の計算を行ない、Feの原子位置によりスピ間相互作用が平行から反平行へ変化するを見出した。さらに、添加元素の効果により層間磁気結合が増加する可能性があることを示した。
- ・ コバルトフェライト(CoFe₂O₄)薄膜における垂直磁気異方性を第一原理計算と磁歪から磁気異方性エネルギーを見積もる手法を用いて実施した。薄膜では磁気異方性に対する磁歪の効果がバルクより大きくなり、磁気異方性エネルギーの増分は $14 \times 10^6 \text{erg/cm}^3$ という大きな値になることが予測され、実験的にも検証された(①参照)。

必要性：Pt族元素フリーな磁気記録媒体に適用できる機能性磁性材料をFe、Co、Oで実現することは、元素戦略的視点から必要性が高かった。本研究の結果、Pt族元素フリーの磁気記録媒体の創製が可能であることを示すことができた。

有効性：理論的な予測により、材料として達成すべき構造を見出し、物質創成のプロセス開発の方向性を決めた上で、理論的な予測とほぼ等しい特性の発現に成功している。得られた特性は、製品化に十分なレベルの磁気特性を有しており、有効性が認められる。

効率性：物質創成を担当するチームと理論計算を担当するチームが連携し、理論予測に基づき物質創成の方向性を決定し、実際に予測された物性が確認でき、目標としていた性能レベルの達成に繋がった。このことから、チーム間のつながりを重視した運営できた点で効率の高い研究推進ができたと認められる。

(2) 成果

- ・ Pt を用いず Fe・Co・O だけで磁気記録媒体に必要な磁気特性を発現する高特性の高配向磁性薄膜を得る技術を世界で初めて確立したという意味で高く評価できる。
- ・ プロジェクトで連携していた企業が磁気記録媒体部門から撤退（事業期間の5年間に磁気記録媒体を生産する企業が6社から3社に半減）したため、記録メディアとしてのデバイス評価まで繋がらなかった点が惜しまれる。
- ・ 確立した技術のレベルが極めて高いため、基本特許を押えたうえで、海外の産業界も含めて連携先を検討するべきであった。
- ・ 内閣府の革新的研究開発推進プログラム (ImPACT)、及び、JSTの産学共創基礎基盤研究プログラムに研究成果が発展したことは成果の質が高いことを示している。
論文25件、特許2件（国内2件）、表彰：1件（海外1件）

(3) 今後の展開

- ・ 本課題の成果の一部は ImPACT「無充電で長期間使用できる究極のエコIT機器の実現」に引き継がれ磁気記録媒体への応用に向けた研究開発を継続
- ・ 本課題の成果の一部は JSTの産学共創基礎基盤研究プログラムの「革新的次世代高性能磁石創製の指針構築」に研究成果が引き継がれ、バルク磁石への展開を見据えた研究を推進中

「エコフレンドリーポストリチウム二次電池の創成」

1. 課題実施期間及び評価時期

平成21年度～平成25年度

中間評価:平成23年度、事後評価:平成27年1月

2. 研究開発概要・目的

現在考え得る最も安価な可逆レドックス電池系として、リチウムより1桁安価でリサイクルの必要のないナトリウムをゲスト（負極）とし、レアメタルフリー化合物をインターカレーションホスト（正極）にする組み合わせで、環境負荷の少ないレアメタルフリーナトリウムイオン二次電池を創製し、これをサステナブル社会のキーデバイスとする。

本課題は、その実現性を見極めを踏まえて、フィージビリティとして開始し、中間段階で成果進捗を評価して、一般課題化あるいは中断の判断を行う。

中間評価までの目標は、

①ナトリウムイオン電池用正極材料開発

EV用として最有力視されているLiイオン電池用 LiFePO_4 オリビン正極の理論エネルギー密度 561mWh/g を凌ぐ値を、ナトリウムに対して示し得る新規正極活物質を非酸化物系、非辺・面共有骨格系、非インターカレーション系物質群の中から見いだす。

②ナトリウムイオン電池用負極材料開発

ナトリウムに対して C_8Na の理論容量を凌ぐ可逆容量 250mAh/g 以上の負極活物質を非黒鉛系炭素、合金、化合物系物質群の中から見出す。

③ナトリウムイオン電池用電解質材料開発

ナトリウムのイオン伝導率が室温で 3mS/cm 以上で、 250°C まで自己発熱反応のないナトリウムイオン電池用電解液最適組成をイオン液体ベースの組成から探索する。

④ナトリウムイオン電池システム化

上記、正負極、電解質3要素からなるNaイオン電池を組み、その室温可逆動作を実証する。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

現在二次電池で多用されるリチウムやコバルトは資源上のリスクが認識されている。特にリチウムは豊富にあると言われつつも我が国の電力備蓄に足る量ではなく、コバルトも電気自動車の普及を見据えれば全く不足する資源である。これをそれぞれ豊富な汎用元素に代替することは極めて重要かつ緊急性の高い課題である。

【有効性】

極めて斬新なアイデアで、長く求められていた室温で稼働するナトリウム電池の実現に挑んでいる。正極材料としてナトリウムと鉄を用いることは資源戦略上極めて魅力的であり、

また実現できれば我が国の技術優位性を誇示するものになる。一方でその物質としてのコンセプトは十分固まっておらず、フィジビリティースタディーとして技術の确实性を早急に検証する必要がある。

【効率性】

極めて困難と言われる課題に挑む体制として、新規正極、負極、電解質材料開発の相互連携を図っており、ナトリウムの可能性を常に見据えたそれぞれの物性開発を進めることとなっている。更に専門的知見を有する専門家を、プログラムディレクター（PD）、プログラムオフィサー（PO）として、計画の妥当性や進捗状況について指導を得る体制を取ることにしている。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	H21(初年度)	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	0.1億	0.1億	0.2億	0.3億	0.4億	1.1億

5. 課題実施機関・体制

研究代表者 九州大学先導物質科学研究所 准教授 岡田 重人

主管研究機関 九州大学、山口大学、住友化学株式会社

事後評価票

(平成27年1月現在)

1. 課題名 エコフレンドリーポストリチウム二次電池の創成
2. 評価結果
(1) 課題の達成状況
<p>本課題ではポストリチウム電池として有望視されているナトリウム電池を、レアメタルを用いず実現するための技術開発を行った。正極材・負極材・電解質の要素研究を各研究機関で分担推進し、以下のような課題の達成状況となった。</p> <p>① ナトリウムイオン電池用正極材料開発 : Fe系材料に固執することなく、広く正極材料の候補物質を探索した結果、脱Co正極材料としてバナジウムフッ素化ポリアニオン系の $(\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3)$ を、メタルフリー正極材としてロジソン酸2ナトリウム $(\text{Na}_2\text{C}_6\text{O}_6)$ を見出した。$\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$はLiイオン電池と互換性がある4V級の起電力を期待できることがわかった。$\text{Na}_2\text{C}_6\text{O}_6$はNa電池で動作する有機系正極材としてトップデータとなる可逆容量を示し、メカニズムとしてC=O二重結合が可逆特性を維持するうえで重要であることも明らかにできた。</p> <p>② ナトリウムイオン電池用負極材料開発 : 2800°Cでの熱処理が可能な超高温熱処理炉を導入し、Ar雰囲気下1600°C熱処理したハードカーボンでナトリウムの吸蔵量をリチウムより引き上げることに成功した。その結果、世界最高容量である320mAh/gの可逆容量を得ることができた。</p> <p>③ ナトリウムイオン電池用電解質材料開発 : アンモニウム系イオン液体であるDEMETFSlとプロピレンカーボネート(PC)とナトリウムイミド塩であるNaTFSIポリエーテルを混合し、電解質材料の難燃化を行い、NaTFSIを5wt%/DEMETFSlを40wt%/55wt%PCで最も燃えにくくなることが分かった。また、得られた電解質材料で可逆的な充放電反応が生じることを確認した。</p> <p>④ ナトリウムイオン電池システム化 : ①~③で得られた材料を組み合わせ、60mAh/gの容量のフルセル電池を試作し、充放電可能な電池となることを確認。電解質と正極活物質を前述のものよりやや不安定な材料に変更した高容量フルセル電池(600mAh)を試作し、200%過充電試験を実施しLiイオン電池並みの安全性を確認でき、Na電池の安全性はLi電池並みであることを実証した。</p> <p>必要性：次世代自動車（プラグインハイブリッドや電気自動車等）、住宅用定置型高容量電池の普及に伴い、炭酸リチウムが不足する予測が出ており汎用元素であるナトリウム</p>

に置き換えた電池を実現することは社会動向・技術動向の面からみて必要性が高い。本プログラムでは Na 電池で Li 電池と互換性のある 4 V 級の電池が創製可能であることが明確化できた。

有効性：室温で稼働するナトリウム電池の実現の可能性を開始から 2 年間でフィージビリティスタディーとして検証し、可能性を確認したのちに本格検討移行し室温で駆動する電池の開発につなげることができたという意味で本課題の有効性の高さが認められる。

効率性：課題着手から 2 年間で少額でフィージビリティスタディーとして推進し、実現可能性のあるシーズ技術が示された後に本格検討に移行するなど予算執行上も効率性の良い研究推進ができた。また、正極材・負極材・電解質とそれぞれ得意分野を持つ研究機関が連携することで最大の成果を上げられた点も研究の効率性を高められた点として評価できる。

(2) 成果

- ・本課題は、室温で駆動するナトリウム電池の先駆的取組であり、本課題が牽引する形でナトリウム電池の研究コミュニティが急激に拡大している。また、取組内容について、電池を構成する要素技術ごとにそれぞれの強みを持つ研究機関が熱意をもって研究開発に取り組み、フルセル電池を駆動させるに至ったという意味で高く評価できる。
- ・リチウムやコバルトを一切用いず常温駆動電池を成立させた点は、元素戦略的側面からも評価が高い。本課題で開発したナトリウム電池は、リチウム電池の後継としての位置付けだけでなく、補完的な関係の材料として位置付けることも技術の優位性を示す上で重要である。
- ・負極用のハードカーボン材について常識を超えたところに答えがあったこと、合成するための原料・プロセスを常識にとらわれずに開拓できたことは技術的に大きな意味がある。
- ・特許出願件数も 8 件と多くの発明に繋がっており、研究活動の成果を着実に知的財産として積み上げられている。
論文 2 3 件、特許 8 件（国内 7 件・海外 1 件）、表彰：6 件（国内 5 件・海外 1 件）

(3) 今後の展開

- ・本課題の成果は元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>の触媒・電池拠点の研究課題として引き継がれ、継続されている。継続した研究活動を国がサポートすることでナトリウム電池研究の優位性を維持してだけでなく、実用化まで繋げていくことが求められる。
- ・本研究の成果は、Mg 電池等新たな電池研究のフィールドの開拓につながったという意味で、電池研究の領域拡大に大きく波及している。

「元素戦略プロジェクト<産学官連携型>」（平成21年度採択課題）に
係る事後評価について

外部有識者からなる事後評価検討会を設置し、研究代表者が作成した事後評価報告書に
基づくヒアリング（平成26年11月6日）等を実施。

<事後評価検討会構成員>

主査	村井 眞二	奈良先端科学技術大学院大学	特任教授
	玉尾 皓平	理化学研究所	研究顧問
	射場 英紀	トヨタ自動車株式会社電池研究部	部長
	瀬戸山 亨	三菱化学株式会社	執行役員
	高尾 正敏	大阪大学	特任教授
	新原 皓一	長岡技術科学大学	学長