AT A TETATAAGA ETETAAET

文部科学省 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 2018年11月29日 資料2-2

科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会 第9期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 (第7回)

ATAAGA CTC

AA TAATE

AAT A TETATAAGA ETET/

CTCGCC AATTAATA

# 海外R&D政策動向

# 「希少資源戦略」と「データ駆動型材料開発」

TCTATA

G C C AATTAATA

ATE A AAGA EE

A TCTATAAGA

AATE A AAG

CITAACT

1110 00

1 0010

A. I A TETATAAGA ETETAACT

ATTAATE A AAGA EET

GA CCTAACT CTCAGACC

宮下 哲 Satoshi Miyashita



国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター Center for Research and Development Strategy Japan Science and Technology Agency

Center for Research and Development Strategy Japan Science and Technology Agency

# 各国の動向まとめ



5		
	国·地域	概 要
X		<ul><li>■希少資源問題</li><li>→ 2012年Ames研Critical Materials Institute設立(5年間で120Mドル)、5年間の延長を決定</li><li>→ 2017年12月、トランプ大統領による希少鉱物に関する大統領令、今後の各省の動きに注視</li></ul>
		■ データ駆動型材料開発(米国Materials Genome Initiative: MGI)  > 5年間で約500Mドル。現在は各省予算で4つのセンターを中心に継続中  > CNGMD(NREL、ローレンスパークルー国立研, UCパークルーなど)、SUNCAT Center(スタンフォート、大, SLAC国立加速器研)、CHiMaD(NIST, ノースウェスタン大, シカコ、大など)、PRISMS(ミシカ、ン大)  > 2018年4月、NISTによる「MGIに対する経済分析レポート」公表
W W W	**** * * *	■ 希少資源問題  → 3年ごとに希少資源(Critical Raw Materials: CRMs)のリストを更新  → 循環型経済の観点でCRMsの確保を重要視
		<ul> <li>■ データ駆動型材料開発</li> <li>&gt; European Materials Modeling Council (EMMC)</li> <li>&gt; 材料モデリングの産業応用へ向けた取り組みが活発化</li> <li>&gt; EU-Horizon2020 NOMADプロジェクト (2015-2018:約7億円(€5M))</li> <li>&gt; スイスは独自にMARVELプロジェクト (第1フェーズ:2014-2018,約20億円(1800万スイスフラン)、第2フェーズ:2018-2022,最大25億円(2200万スイスフラン))を実施中。最大3フェーズを計画。</li> </ul>
A B B C	<b>★</b> *	■ データ駆動型材料開発(中国版MGI)  > 国(中国科学院、中国工程院)や上海市が積極的に支援  > 上海大学に「材料ゲノム研究所」(2014年)を設立。  > 上海交通大学に「材料ゲノム共同研究センター」(2016年)を設立。  > 中国科学院物理研究所・北京科技大学等が共同で「北京材料工学イノベーションアライアンス」(2016年)を設置、中国鋼研科技集団有限公司等も参加し、「北京材料ゲノム工学イノベーションセンター」を設立(2017年)。  > 国家重点研究開発計画の一つとして、「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォームを開始。1期(2016-20)約48億円(3億元)/5年、2期(2017-2020)約46億円(2.9億元)/4年、3期(2018-2021)約32億円(2億元)/4年

# 希少資源戦略 (元素戦略)



## ・「Critical Materials Strategy」発表(2011年12月、DOE)

- 希少元素には、磁性、発光性、触媒能などの特性があり、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、①確実な供給、②需要を減らす効率性の追求、③代替物質・技術の開発の必要性
- 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の堅持
- 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https://www.energy.gov/sites/prod/files/

Critical Materials
Strategy
Increase 2011

## Ames研にCritical Materials Institute設立(2012年)

- DOE Innovation Hubの1つ(他には人工光合成、電池・エネ貯蔵など)
- 5年間で120M\$
- 2018年7月より5年間延長



DOE CMS2011 FINAL Full.pdf

https://cmi.ameslab.gov/about/partner-map

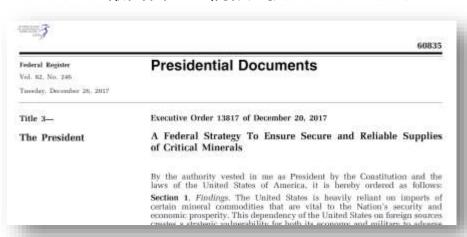


## ・2017年12月大統領令「Critical Minerals Executive Order」

- 「A Federal Strategy To Ensure Secure and Reliable Supplies of Critical Minerals」(安全かつ信頼できる希少鉱物の確保のための連邦政府戦略)
- 米国の経済と軍に対して脆弱性の要因となりうる希少鉱物の輸入依存の低減と安定供給 ルートの確保
- 内務省に対し、60日以内の希少鉱物リストの作成
- →2018年2月「希少鉱物リスト草案」、5月に「希少鉱物の最終リスト」を公表、 35鉱物を指定
- 商務省、国防総省、農務省、財務省、エネルギー省、OSTPなどの省庁に対し、希少鉱物リスト公開から180日以内に対応方針に関する報告書を大統領に提出するよう指示

→現時点で続報となる公開情報なし

トランプ政権の今後の動きに注視



https://www.whitehouse.gov/presidential-actions/presidential-executive-order-federal-strategy-ensure-secure-reliable-supplies-critical-minerals/

# 欧州の動向



- ・ 希少鉱物(Critical Raw Materials: CRMs)の指定
  - 3年ごとにCRMsリストを更新(2011年:14種、2014年20種、2017年:27種)

## International Raw Materials Observatory (INTRAW)

- 2015年2月~2018年1月の3年間
- EUの社会的課題解決に資するプロジェクトとしてHorizon2020が活動を支援
- 5つの参照国(オーストラリア、カナダ、日本、南アフリカ、米国)の希少鉱物政策に関する優良事例を俯瞰し、希少鉱物供給に対する世界的な課題へのEUの対応を促進することが目的

## ・希少鉱物と循環型経済に関するレポート(2018年1月)

- 「Report on Critical Raw Materials and the Circular Economy」
- CRMおよび循環型経済の定義、EUの一般的な政策および CRM関連のEUプロジェクト、データソース、主要セクターにおける CRM需給動向について記載
- 重要なデータソースの提供、優良事例の促進、実行可能と考えられる今後のアクションを特定することが目的
- 2018~2020年の間にCRMに関する活動に2億5000万ユーロ以上の投資が予定されており、CRM入手改善、EU圏内でのCRM回収率の増加、CRM輸入依存の減少、EU域内での専門家コミュニティの強化に寄与



https://ec.europa.eu/commission/publications/report-critical-raw-materials-and-circular-economy en

循環型経済との関連で希少資源確保に向けた活動が活発化する可能性

# Trilateral EU-US-Japan Conference on Critical Materials



レアアース等のレアメタル主要消費国である三極の技術者・研究者が、代替・削減技術及び鉱石や製品からの効率的な精製分離技術等について密接な情報交換を行うことで、当該分野の研究促進を図るとともに、レアメタル消費国間の連携を国際的に発信することを目的とする

#### 【第1回】

- 2011年10月4~5日@ワシントンDC
- レアアース代替材料の開発や国際協力等の対策の重要性を 確認

#### 【第5回】

- 2015年10月26日@東京
- リスク分析、代替材料開発、リサイクル、産学連携のテーマに 関して、新たな方向性の共有

#### 【第2回】

- 2012年3月28~29日@東京
- レアアース供給を取り巻く世界的な問題について共通理解を 深め、レアアース代替技術やリサイクル技術など将来の安定供 給を目指した戦略的な取り組みについて議論

#### 【第6回】

- 2016年11月29日@ブリュッセル
- 希少金属の代替・低減に関する研究開発やリサイクルに関して 議論
- 本協力枠組が将来的な中国のレアアース政策の変更などの供給リスクへの牽制として機能していることを三極で再認識

#### 【第3回】

- 2013年5月29~30日@ブリュッセル
- 消費国の国際連携を発信するセッションと技術セッション(リサイクル・資源有効利用・地質関連)での情報交換
- NEDOとAMES研のMOU締結、ECとJST間でのレアアースに 関する共同公募について確認

#### 【第7回】

- 2017年10月12日@ピッツバーグ
- 本協力枠組の重要性を再認識し、三極会合を継続していくことを確認
- 自動車の電動化や再生可能エネなどの環境変化に伴う材料 の供給バランスが変動する可能性があるという認識の共有

#### 【第4回】

- 2014年9月8日@エイムズ(米国)
- 希少金属の代替・低減に関する研究開発やリサイクルに関して 議論
- 希少金属に関する三極の連携継続、研究開発等の情報交流の重要性を確認

#### 【第8回】

- · 2017年12月5日@東京·秋葉原UDX
- 4つのテーマ(①クリティカリティ及びサプライチェーン分析、 ②循環経済におけるCRMs、③CRMsの需要に影響を与える材料開発、④自動車の電動化にむけたCRMsの役割)について議論



# データ駆動型材料開発(マテリアルズ・インフォマティクス)

CRDS

- Materials Genome Initiative (2011年6月)
- MGI戦略プラン策定(2014年6月)
- ・総括文書(2016年8月)
  - 最初の5年間で500Mドルを超える国費を投入(DOE, DoD, NSF, NIST,NASA等)
  - 主な成果として
    - 材料開発におけるパラダイムシフトの醸成
    - NSFにおける異分野横断型基盤的ファンドの充実
    - 次世代人材の教育
    - データベースの構築(NIST, DoEなど)
    - コンソーシアムの設立(DoD: Lightweight Innovations for Tomorrow(LIFT)、DoE: Energy Materials Networkなど)
  - 国家イニシアティブ終了後も各センターで継続して実施
  - 米国製造業に革新をもたらす可能性があり、政権交代 後も継続すべき、と言及



https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/materials\_genome\_initiative-final.pdf

トランプ政権における政策的優先事項にMGIは含まれていない





	センター		概要	ターゲット
	Center for Next Generation of Materials Design (CNGMD) \$14M (2014-2018)	DOE- EFRC(Energy Frontier Research Center) の一つ 再生可能エネルギー研究所 (NREL)、コロラド・スクール・オブ・マイン ズ、ハーバード大学、ローレンス バークレー国立研究所、MIT、オ レゴン州立大学、SLAC 国立加 速器研究所	計算材料設計が新しい機能材料を提供するための4つの科学的ギャップ(複合特性、精度と妥当性、準安定性、合成可能性)を克服することが目的	太陽光変換材料・デバイス、固体照明など
	Center for Hierarchical Materials Design (CHiMaD) \$25M(2014-2018)	NIST、ノースウェスタン大、シカゴ大	熱力学・状態図計算など、個別のニーズに合わせて速度論のシミュレーションを行い、 材料特性の予測、材料開発の支援を実施	無機材料、有機材料
	Center for Predictive Integrated Structural Materials Science (PRISMS) \$11M (2014-2018)	DOE-Software Innovation Center for Integrated Multi- Scale Modeling of Structural Metalsの一つ	先進的な実験、理論およびシミュレーションを統合した構造金属材料の予測科学を加速を可能にする独自のプラットフォームを構築 ソースコードを公開して、金属および合金の微細構造および機械的挙動をシミュレートするための高性能計算ツールを提供	金属材料
	SUNCAT Center for Interface Science and Catalysis	スタンフォード大学、SLAC国立加速器研究所	固体表面の触媒特性を調節する因子を同定し、新しい触媒を開発する試みに取り組む電子構造理論と動力学モデリングをオペランド・in-situ計測、合成、プロセスと統合すること(= キャタリストインフォマティクス)を目指す	触媒

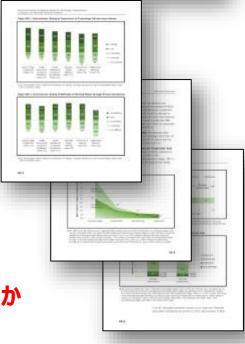


## MGIを支援する技術基盤の国家ニーズに関する経済分析(2018年4月)

- 先進材料業界の100名超の専門家へのアンケートに基づいて、 6つの重要ニーズを特定(下記)、およびそれらのニーズに対す る経済的インパクトの見積り
  - 高品質データへのアクセス (実験、計算、ソフトウェアコード)
  - ② 協働ネットワーク (材料データの共有)
  - ③ 材料設計手法(計算科学的アプローチ)
  - ④ 生産とスケールアップ手法 (試行錯誤からの脱却、高い費用対効果)
  - ⑤ 品質保証/制御とコンポーネント基準認証方法 (材料欠陥制御、製品ばらつきの予測)
  - ⑥ モデル検証と不確定性の定量化
- 特に、①高品質データへのアクセスが最重要課題であり、民間 投資のみでは対処が困難
- 上記課題に取り組むことで、年間経済利益1230億~2700億 ドル、新材料開発に伴うリスクが約50%削減、新材料開発期 間が35%短縮される、としている

トランプ政権に対して、MGIの重要性をアピールすることが目的か





# 欧州の動向



## **European Materials Modeling Council (EMMC)**

- 欧州における材料モデリングの基盤を支え、学術的イノベーションと産業応用の橋渡しを することを目的として設立
  - 材料モデリングに関連する全てのステークホルダー (Modellers, Software owners, translators, manufacturers) の相互作用とコラボレーションの強化 強固で一貫性のある統合材料モデリングの促進

  - 学術的イノベーションの産業応用への迅速な移行の促進
  - 産業界、時に中小企業における材料モデリングに対する意識向上
  - 材料モデリングの産業応用への障壁の特定とそれを克服する戦略に関するロードマップ策定

#### 6つのWGを推進

WG	目的
Modeling and Validation (モデリングと検証)	モデルギャップの特定と産業応用への妥当性の検証
Interoperability and Integration (相互運用性と統合)	異なるモデル間の相互運用性、オントロジーの開発
Repository and Marketplaces (レポジトリーとマーケットプレイス)	既存DBの共通アクセスポイントとしてのEMMC Marketplaceハブの構築 を促進
Translation and Training for Company (翻訳と企業向けトレーニング)	産と学のギャップ解消、企業ニーズの把握
Professional Software Deployment (専門ソフトウェア導入)	材料モデリングソフトウェアの産業応用と欧州の愚術革新を促進
Industrial Integration and Economic Impact (産業統合と経済的インパクト)	材料モデリングの産業応用時の障壁とコスト、経済的インパクトの明確化

### 材料モデリング(とインフォマティクス)の産業応用を促進

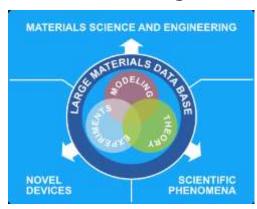
# 欧州の動向





## Horizon 2020 NOMAD (Novel Materials Discovery) Laboratory

- 物質材料科学・工学のための百科事典とビッグデータ 分析と高度なグラフィックツールの開発
- NOMAD Repositoryを構築
- 2015年11月-2018年10月: 約500万ユーロ(約7億円)
- 独、英、スペイン、フィンランド、デンマーク、アイルランドから、計8つのグループで構成
- Prof. Matthias Scheffler@Max Planckがリーダー



https://nomad-coe.eu/the-project/centre-of-excellence

## 計算材料工学(ICME)コンセプトが中心 ※米国はBig Data解析が中心



## Materials' Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials (MARVEL)

- データベース駆動型の高スループットの量子シミュレーション「材料インフォマティクスプラットフォーム」を経由した新規材料の設計や発見の加速
- スイス連邦工科大学ローザンヌ校(EPFL)が中核(代表者: Prof. Nicola Marzari) となり、研究ネットワークを構築
- AiiDA Materials Informatics Platformを構築・運用
- ターゲットはエネルギー材料、ICT材料、有機材料、医薬材料 など
- 2014年に開始。1フェーズ4年で、フェーズ毎にゲートを設け、 最大3フェーズ
- 第一フェーズ(2014-2018)は18MCHF(約20億円)
- 評価に基づき、第二フェーズでは最大22MCHF(約25億円)
- Swiss national Science Foundationのnational Centre of Competence in Research (NCCR) のプログラムによる支援



# 中国の動向



- ・国(中国科学院、中国工程院)や上海市が中国版MGIを積極的に支援
  - 上海大学に材料ゲノム研究所を設立(2014年)
  - 上海交通大学に材料ゲノムイニシアティブセンターを設立(2016年)
  - 中国科学院物理研究所・北京科技大学等が共同で「北京材料工学イノベーションアライアンス」(2016年)を設置、中国鋼研科技集団有限公司等も参加し、「北京材料ゲノム工学イノベーションセンター」を設立(2017年)
- ・国家重点研究開発計画「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」開始
  - 2016年から3回の公募で、採択課題数44(3~5年)、総額約8億元(約126億円)
- ・上海大学材料ゲノム研究所(10/25訪問)
  - 2014年設立、Shanghai Institute of Materials Genome(SiMG)の1つ
  - スタッフ38名(うち、教授8名)、教育と研究の両輪
  - 主な対象は、エネルギー材料、スマート材料、構造材料
  - 4つの部門で構成(iMaterDB, iCMS, iEnergy, iSmart)
  - 8万2000件のDB(CAS予算)



http://en.mgi.shu.edu.cn/Ce nters/SIMG.htm

### 米国MGIと同じコンセプト(中国版MGI)

# 今後の方向性



## ・希少資源問題

- 米国(経済、軍事)、欧州(循環型経済)とも希少資源確保に向けてこれまで以上に大きく舵を切りつつある
- 一方、わが国は元素戦略拠点以外のプロジェクトは終了、次の手をどうするか

## データ駆動型材料開発(マテリアルズ・インフォマティクス)

- ・米欧中で政策的な取り扱いはそれぞれだが、産業界からの期待は高い
- 学術的な成果の蓄積、産業応用への可能性の明示が必要
- 様々な材料が複雑系(多元系)へ向かう中、データ駆動型研究の重要度がま すます高まる傾向
- 材料設計(マテリアルズ・インフォマティクス)からプロセス設計(プロセスインフォマティクス)への流れ
- 1次データから得られた2次データの有効活用
- データの所有権の明確化、インセンティブの付与