

ナノテクノロジー・材料科学技術に関する 研究開発課題の評価結果

平成23年9月27日

研究計画・評価分科会

目次

- 第6期 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

委員名簿 . . . 2

<事前評価>

- 新・元素戦略プロジェクト 4

- ナノテクノロジープラットフォーム 8

<中間評価>

- 元素戦略プロジェクト 14

第6期 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 委員名簿

平成23年4月

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
潮田 浩作	新日本製鐵株式会社技術開発本部フェロー
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中央研究所長
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
主査 川合 知二	大阪大学産業科学研究所特任教授
北川 進	京都大学物質-細胞統合システム拠点副拠点長
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
袖岡 幹子	独立行政法人理化学研究所基幹研究所主任研究員
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
中村 栄一	東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授
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
松下 祥子	東京工業大学大学院理工学研究科准教授

新・元素戦略プロジェクトの 事前評価結果

事前評価票

(平成23年7月現在)

1. 課題名 新・元素戦略プロジェクト（仮称）
2. 開発・事業期間 平成24年度～平成33年度（10年間）
3. 課題概要 <p>世界的な需要の急増や資源国の輸出管理政策により、レアメタルやレアアース等の希少元素の深刻な供給不足に直面している中、「元素戦略（物質・材料の特性・機能を定める元素の役割を解明し利用する観点から材料研究のパラダイムを変革し、新しい材料の創製につなげる研究）」を強力に推進するため、卓越したリーダーが主導する拠点を形成し、集中的、継続的な取組を実施する。</p> <p>具体的には、我が国の産業競争力に直結する①磁石材料、②触媒・電池材料、③構造材料、④電子材料の4つの材料領域を設定し、革新的な希少元素代替材料を創出するため、各材料領域において、卓越したリーダーが、①電子論、②材料創製、③機能評価の3つのグループを率い、機能の理論的解明から、新物質の作製、特性の評価までを、各グループの密接な連携・協働の下、一体的に推進する。</p>
4. 各観点からの評価 <p>(1) 必要性</p> <p>第4期科学技術基本計画に向けた諮問第11号「科学技術に関する基本政策について」に対する答申（平成22年12月24日総合科学技術会議）において、「グリーンイノベーションの推進」における重要課題である「社会インフラのグリーン化」に向け、「資源再生技術の革新、レアメタル、レアアース等の代替材料の創出に向けた取組を推進する」ととされている。</p> <p>また、「平成24年度科学技術重要施策アクションプラン」においては、政策課題「分散エネルギーシステムの拡充」の重点的取組「革新的なエネルギー創出・蓄積技術の研究開発」として、「希少元素の大量消費が予想されており、資源の有効活用の観点から希少元素の機能・挙動解明に基づいた代替材料技術・使用量削減技術・リサイクル研究等についても積極的に取り組む」ことが明記されている。</p> <p>さらに、東日本大震災を契機に、供給網（サプライチェーン）の中核分野となる部品・素材分野において、レアアース等の調達制約に起因して、生産拠点を日本から海外に移転する危険性が高まっており、産業の空洞化への対策としても、代替材料開発を急ぐ必要がある。</p>

(2) 有効性

本事業は、平成19年度より実施している「元素戦略プロジェクト」で得られた課題や状況の変化を踏まえ、元素戦略の新たな展開として検討されてきたものである。

具体的には、「技術の革新性」と「実用可能性」という、二つの軸を徹底して追求し、新たな材料創製に結びつけることが求められている中、他国に真似のできない全く新しい切り口で突破口を開くための取組として、本事業では、①電子論、②材料創製、③機能評価の3つのグループが密接な連携・協働の下、一体的に研究を推進することとしていることから、基礎科学に立脚した根本的な「課題解決」や希少元素の機能・挙動解明に基づいた革新的な代替材料の創製が図られることが期待される。

(3) 効率性

本事業では、各学会及び産業界の有識者からなる「元素戦略運営統括会議」が事業全体の運営を管理するとともに、明確な達成目標を設定することとしており、成果の確実な創出に向け、強力な推進体制を構築するものである。

また、これまでも、文部科学省の「元素戦略プロジェクト」と、経済産業省の「希少金属代替材料開発プロジェクト」とは、共同採択や合同シンポジウムの実施などの連携を図っているところであるが、本事業は、「元素戦略」の基幹事業として、関係施策とさらに強固に連携することで、成果の共有・展開が加速されることが期待される。

5. 総合評価

必要性、有効性、効率性の観点から評価を行った結果、積極的に推進すべき課題と判断する。特に、本課題の重要性に鑑み、想定している事業期間（10年間）を通して、一貫して推進し続けるべきである。また、昨年以降、資源国による輸出枠の大幅削減により、レアアース等の輸出価格が高騰している状況を踏まえ、事業実施に向けて更に具体的な制度設計を行い、速やかに事業に着手することが必要である。

新・元素戦略プロジェクト

～「元素戦略」の基幹事業として、強固な推進体制による新たな事業展開～

平成24年度概算要求額：未定
(新規)

【背景】

・レアメタルやレアアース等の希少元素の供給を輸入に頼る我が国は、世界的な需要の急増や資源国の輸出管理政策により、深刻な供給不足に直面しており、昨年以降、資源国による輸出枠の大幅削減や輸出数量管理の強化により、輸出価格が高騰
・東日本大震災を契機に、産業基盤の中核である部品・素材分野において、レアアース等の調達制約に起因して、生産拠点を日本から海外に移転する危険性が高まっており、産業の空洞化が加速する恐れ

【概要】

・「元素戦略(物質・材料の特性・機能を定める元素の役割を解明し利用する観点から材料研究のパラダイムを変革し、新しい材料の創製につなげる研究)」を強力に推進するため、卓越したリーダーが主導する拠点を形成し、集中的、継続的な取組を実施
・我が国の産業競争力に直結する①磁石材料②触媒・電池材料③構造材料④電子材料の4つの材料領域において、希少元素の機能・挙動解明に基づいた代替材料を創出するため、「プロジェクトリーダー」が、①電子論、②材料創製、③機能評価の3つのグループを率い、機能の理論的解明から、新物質の作製、特性の評価までを密接な連携・協働の下、一体的に推進
・各学会及び産業界の有識者からなる「元素戦略運営統括会議」が事業全体の運営を管理

・経済産業省の「希少金属代替材料開発プロジェクト」等、関係施策と強固に連携し、成果の共有・展開を、柔軟かつ確実に実施

【事業内容】

- ・事業期間：10年
- ・支援額：未定(新規)
- ・材料領域：4材料領域×1拠点
(①磁石材料、②触媒・電池材料、③構造材料、④電子材料)
- ・研究グループ：各材料領域、3グループ
(①電子論グループ、②材料創成グループ、③機能評価グループ)
※「プロジェクトリーダー」
- 3つの研究グループを統括し、分野融合をもたらず計画・体制を立案し実行するとともに、目標達成に責任を持つ。
また、優れた若手研究者を集める求心力と指導力を有する者。
- ※「元素戦略運営統括会議」
各学会及び産業界の有識者により構成し、事業全体の運営を管理し、明確な達成目標に基づき評価及び資源配分を行うなど、研究活動に強く関与する。

元素戦略運営統括会議

プロジェクトリーダー

各拠点における
体制図

電子論グループ

基礎科学に立脚した、
新機能・高機能な
材料の提案

材料創製グループ

「電子論グループ」の
提案を取り入れつつ、
目的とする機能を
有する新材料の作製

機能評価グループ

新材料の特性の評価、
問題点の検討及び
更なる課題の提言

3つのグループ(齒車)
が一体的に推進

※プロジェクトリーダーの下に各グループの若手研究者が結集し、
共同で研究活動を実施する研究拠点を形成

ナノテクノロジープラットフォームの 事前評価結果

事前評価票

(平成23年7月現在)

6. 課題名 ナノテクノロジープラットフォーム（仮称）

7. 開発・事業期間 平成24年度～平成33年度（10年間）

8. 課題概要

ナノテクノロジーは、環境・エネルギー問題をはじめとした社会的課題を解決する鍵となるとともに、我が国の産業発展を牽引するイノベーション創出の推進力となるものである。イノベーション創出には、高度な研究施設及び設備を戦略的に活用し、先端技術を最適な形で組み合わせることが重要である。

本事業は、全国の大学や独立行政法人等が所有し、他の機関では整備が困難な最先端のナノテクノロジー研究設備を活用し、我が国の研究基盤の強化を図ることを目的としている。具体的には、①微細構造解析、②微細加工、③分子物質合成・解析の3つの機能分野において、大学、独立行政法人等が有する先端研究設備の強固なプラットフォーム（研究基盤）を形成することにより、若手研究者を含む産学官の利用者に対して、最先端の計測、分析、加工設備の利用機会を拡大するとともに、研究者や技術支援者等の育成及び流動性向上を図る。また、3つの機能分野のプラットフォームを横断的に結びつけるため、コーディネーターを設置し、産業界や研究現場の様々な問題に対して総合的な解決法を提供するとともに分野融合を推進する。

9. 各観点からの評価

(1) 必要性

第4期科学技術基本計画に向けた諮問第11号「科学技術に関する基本政策について」に対する答申（平成22年12月24日総合科学技術会議）において、「2. 重要課題達成のための施策の推進」を図るため、「科学技術の共通基盤の充実、強化」に向け、「科学技術に関する広範な研究開発領域や、産学官の多様な研究機関に用いられる共通的、基盤的な施設及び設備に関して、その有効利用、活用を促進するとともに、これらに係る技術の高度化を促進するための研究開発を推進する」とともに、「4. 国際水準の研究環境及び基盤の形成」を図るため、「先端研究施設及び設備の整備、共用促進」に向け、「国及び公的研究機関は、分野融合やイノベーションの促進に向けて、飛躍的な技術革新をもたらす、幅広い研究開発課題に共通して用いられる基盤技術の高度化につながる研究施設及び設備の整備を進めるとともに、相互のネットワークを強化する」こととされており、国として、本事業に代表されるような、先端研究施設及び設備の整備、共用促進を図る必要がある。

さらに、東日本大震災発生後、文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業「ナノテクノロジーネットワーク」（平成19年度～平成23年度）の枠組みを活用し、研究活動に支障をきたした研究の支援を行うなど、セーフティネットの役割を果たしており、引き続き、我が国として、研究基盤の相互補完機能を強化していくことが必要である。

(2) 有効性

本事業は、「ナノテクノロジー総合支援プロジェクト」(平成14年度～平成18年度)及び「ナノテクノロジーネットワーク」(平成19年度～平成23年度)で蓄積された設備、経験、ノウハウを効果的に活用しつつ、新たに「代表機関」及び「材料コーディネーター」を設置することにより、機能分野内の連携確保、異なる機能分野の連携促進、産業界との連携の強化を図ることとしており、本事業で整備される研究基盤の活用により、ナノテクノロジーによる我が国の科学技術力や産業競争力の強化を牽引することが期待される。

(3) 効率性

本事業では、3つの機能分野にそれぞれ設置される「代表機関」及び外部有識者等を構成員とする「プラットフォーム運営統括会議」が、事業全体の運営に責任を持つとともに、「機能分野プラットフォーム」の運営や「材料コーディネーター」の活動を含めた事業全体の進捗について評価及び評価を踏まえた資源配分を行い、事業推進のための指導及び助言を行うこととしている。

また、プラットフォーム全体の連携を促進し、調整機能を強化するため、「センター機関」が設置され、参画機関、技術支援者、利用者、企業ニーズ等の情報を集約し、「材料コーディネーター」とともに、事業全体を円滑に運営するための活動を行う予定である。

さらに、「代表機関」が、「機能分野プラットフォーム」内の運営方針を策定するなど、利用者の利便性の向上を図ることとしている。参画機関がそれぞれの与えられた役割を適切に果たすことで、プラットフォームが有機的に連携されることが期待される。

10. 総合評価

必要性、有効性、効率性の観点から評価を行った結果、積極的に推進すべき課題と判断する。

近年、先進国に加えて、中国を始めとする新興国がナノテクノロジー・材料分野の研究開発拠点や共同利用施設へ積極的に資金投入を行っている中、我が国としても、科学技術イノベーションにおける国際競争力の維持、強化を図るため、戦略的に研究基盤の強化を図るべきである。

ナノテクノロジープラットフォーム

～装置と情報：二つの共有化による研究基盤の強化～

平成24年度概算要求額：未定
平成23年度予算額：1,326百万円

【背景】

- ・近年、各国は、ナノテクノロジー・材料科学技術を核とした研究開発拠点や共同利用施設へ積極的に資金を投入
- ・我が国としても、第4期科学技術基本計画を踏まえ、広範かつ多様な研究開発に活用される共通的、基盤的な施設や設備について、より一層の充実、強化を図るとともに、相互のネットワーク化を促進していくことが必要
- ・東日本大震災のような自然災害等の影響で、先端研究施設及び設備の安定的、継続的な運用に著しい支障を生じるような場合、これらの復旧や高度化に向けて柔軟な支援が可能となるような仕組みを整備することが重要

【概要】

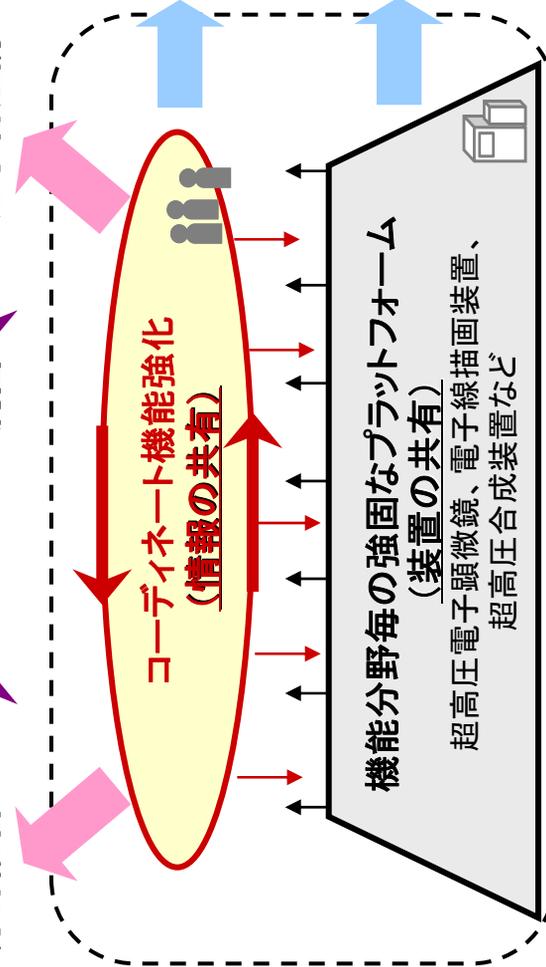
- ・全国の大学等が所有し、他の機関では整備が困難な最先端のナノテクノロジー研究設備を活用し、我が国の研究基盤を強化
- ・①微細構造解析、②微細加工、③分子物質合成・解析の3つの機能分野において、先端研究設備の強固なプラットフォーム(研究基盤)を形成することで、若手研究者を含む産学官の利用者に対して、最先端の計測、分析、加工設備の利用機会を拡大
- ・各機能分野に「代表機関」を設置し、プラットフォーム内の運営方針を策定するなど、利便性を向上
- ・3つの機能分野のプラットフォームを横断的に結びつけるため、コーディネーターを設置し、産業界や研究現場の様々な問題に対して総合的な解決法を提供し、産学官連携及び分野融合を推進

【事業内容】

- ・事業期間：10年
- ・支援額：未定(新規)
- ・機能分野：3分野 (①微細構造解析、②微細加工、③分子物質合成・解析)
- ・参画機関：各機能分野 7機関程度
- ・経費：計20機関程度(予定)
：施設・設備の共用に係る経費
：利用者支援に係る経費
：施設・設備の更新・高度化に係る経費

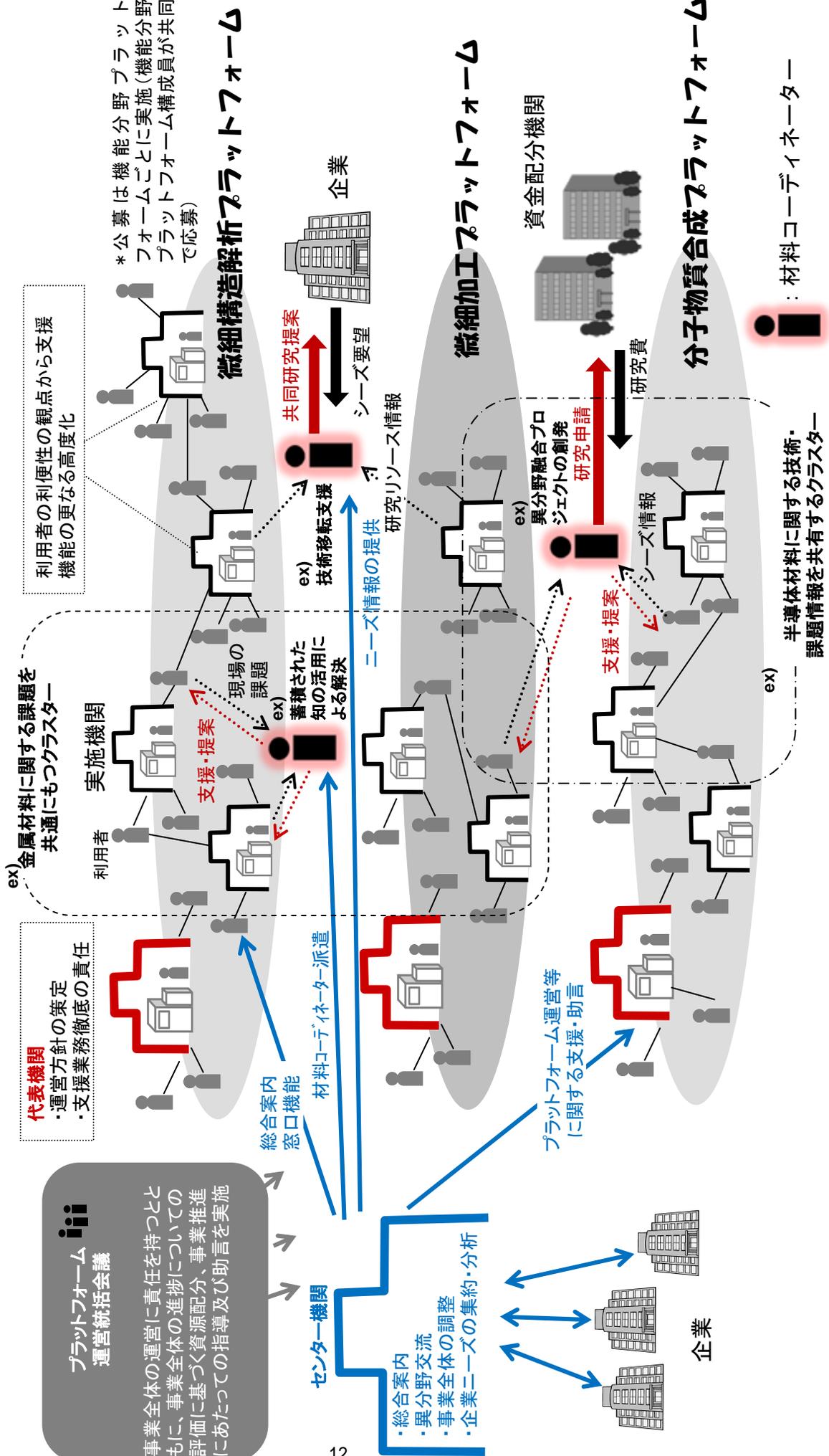
- ※「プラットフォーム運営統括会議」
事業全体の運営に責任を持つとともに、評価に基づく資源配分、事業推進にあたっての指導及び助言を実施
- ※「センター機関」
事業全体を円滑に運営するための活動を実施
- ※「代表機関」
各機能分野に設置され、各分野の運営方針を策定

分野融合 → イノベーション創出 ← 産学官連携



ナノテクノロジープラットフォームの体制

産学官連携の推進、分野融合の加速、利便性の向上、人材の流動性向上を実現するため、「プラットフォーム運営統括会議」「センター機関」「材料コーディネーター」を設置し、機能分野プラットフォームを有機的に連携することで、研究基盤を強化



元素戦略プロジェクトの 中間評価結果

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26年度を予定)

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。

中間評価までの目標は、

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

本プロジェクトに関わる 10 種程度のリン酸塩・リン化合物の生成エネルギーを系統的に計算予測し(実験値比 50 kJ/mol 以下の精度)、相安定性評価法として確立する。

②燃料電池用の新規プロトン伝導体の開発

中温型電解質に有望な2つのリン酸塩について、最適合成法構築のために生成ギブズエネルギーを実験的に決定し、また、Sr をドーブした LaP_3O_9 の伝導経路が粒内か粒界かを特定する。

③太陽電池用の新しい化合物半導体の開発

溶液成長法により 0.5 mm 厚程度の ZnSnP_2 結晶を作製し、これを用いた太陽電池の電流電圧特性を明らかにする。

④生体用セラミクス材料の高機能化

金属イオン(Zn^{2+} など 2 種類を検討)を添加したハイドロキシアパタイト材料を合成し、生体材料特性の評価を行うとともに、金属イオンの固溶機構と機能を明らかにする。

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

ない二次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

プロジェクト予算(執行額)額(単位:百万円)

年度	H21	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	30.0	28.8	28.0	57.6 (見込額)	38.6 (見込額)	183.0 (見込額)
内訳 (間接経費含)	京都大 20.4 名古屋大 9.6	京都大 21.6 名古屋大 7.2	京都大 20.7 名古屋大 7.3	京都大 46.2 名古屋大 11.4	京都大 30.3 名古屋大 8.3	京都大 139.2 名古屋大 43.8

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

研究機関:京都大学、名古屋大学

業務項目	担当機関等	研究担当者
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	京都大学大学院 工学研究科 京都大学大学院 工学研究科	○田中 功 大場 史康
② 燃料電池用の新規プロトン伝導体の開発	京都大学大学院 工学研究科 京都大学大学院 工学研究科	◎宇田 哲也 田中 督士
③ 太陽電池用の新しい化合物半導体の開発	京都大学大学院 工学研究科 京都大学大学院 工学研究科	○野瀬 嘉太郎 豊浦 和明
④ 生体用セラミックス材料の高機能化	名古屋大学大学院 工学研究科 大阪府立大学 工学研究科	○松永 克志

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

中間評価票

(平成23年7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) 課題の進捗状況

- 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 : 熱力学データが既知の LaPO_4 生成ギブス自由エネルギーの計算から精度評価、誤差目標 50 kJ/mol 以内に対し 20 ~ 50 kJ/mol を達成。ハイドロキシアパタイト中のドーパント固溶限評価も実施し、加えて、La リン酸塩中のプロトン伝導機構および ZnSnP_2 中の欠陥平衡に関する計算にも取り組み。
- ② 燃料電池用の新規プロトン伝導体の開発 : LaPO_4 ならびに LaP_3O_9 におけるプロトンの粒内伝導、 LaP_3O_9 ならびに $\text{LaP}_5\text{O}_{14}$ の生成のギブスエネルギーを第一原理計算、および実験によって決定。 LaP_3O_9 の優先伝導方位に関して計算・実験の両方の観点から研究を行い、中温域のリン酸塩においては世界最高の 600 °Cで、1.4 mS/cm の伝導度を有す LaP_3O_9 の合成に成功した。中間目標は 100%達成。最終目標に対して 70 %程度の進捗。
- ③ 太陽電池用の新しい化合物半導体の開発 : Zn-Sn-P 三元系状態図を実験的に決定し、1 mm 厚以上のバルク結晶を作製したが、キャリアであるホール濃度は低かった。太陽電池としての動作は確認。効率を改善のために、薄膜化、ドーピングを今後検討。
- ④ 生体用セラミックス材料の高機能化 : マイクロ波水熱合成法を適用することで、 Si^{4+} 添加アパタイト単相の合成に成功した。 Si^{4+} 添加系は添加量にかかわらず非毒性であり、単相である約 10at% 添加時に良好な骨類似アパタイト形成能を示すことを確認した。

査読付き論文2件、口頭発表・国内9件、国際4件、国内特許1件、関連研究での受賞1件

(2) 各観点の再評価と今後の研究開発の方向性

本課題は、新物質設計に際して必須となる熱力学を理論と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、理論と実験が極めて有効に連携できていることから、引き続きPD/POの指導のもとで着実に推進される必要がある。

プロトン伝導体研究において、理論予測にしたがって物質を創成し、さらに焼結なしでC軸方向の単結晶を合成できたことは注目に値する。理論のサポートが有効であったことは結果から理解できるが、第一原理計算とマクロな熱力学の関係をもっと良く見えるようなプレゼンテーションを期待する。

リンにこだわってその意味づけを捉えていることは評価できるが、太陽電池など狙いの特性を得ることが困難な場合、研究のウエイト付けを見直しても良いのではないかと。

順調に進展していると思われ、また若手の教育も意識して行っているため、準備中の特許、発表などを着実に進めることが望まれる。

「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26年度を予定)

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ー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。

中間評価までの目標は、

①高性能二次電池活物質の設計と合成

3V程度出力電圧を可能にすると考えられる8種類程度のTOT誘導体の有機合成を行い、分子構造／電子構造解析から、理論計算手法や分子設計指針へフィードバックする。また、電池デバイス評価から、有機物を活物質に用いた二次電池の設計指針を明確にする。

②ESRを用いた充放電機構の分子レベルでの解明

電池デバイス中の局所的な電流輸送現象とスピン物性を直接電流測定を介して行うために、電流検出型パルスESR測定系(10GHz帯)を試作する。ノウハウをLバンド(1GHz帯)装置へ展開。

③電池デバイス化、特性評価測定と電極部位の構造探索

合成したTOT誘導体を正極活物質として用いる電池デバイス(ボタン型電池)の最適材料や作成条件を検討し、電池特性との相関を明らかにする。また、電子顕微鏡等による有機物のダメージを軽減できる測定手法や技術を探索し、微視的電子状態観測手法の基礎を開拓する。

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発で生まれ、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にしている。

4. 予算(執行額)の変遷

プロジェクト予算(執行)額(単位:百万円)

年度	H21	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	30.0	40.0	40.0	50.0 (見込額)	50.0 (見込額)	210.0 (見込額)
内訳 (間接経費含)	大阪大 8.2 大阪市大 19.3 日本電子 2.5	大阪大 20.15 大阪市大 6.25 日本電子 3.6	大阪大 25.35 大阪市大 12.35 日本電子 2.3	大阪大 22.75 大阪市大 21.45 日本電子 5.8	大阪大 35.1 大阪市大 11.7 日本電子 3.2	大阪大 111.55 大阪市大 71.05 日本電子 27.4

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

研究機関:大阪大学、大阪市立大学、日本電子

業務項目	担当機関等	研究担当者
(1)高性能二次電池活物質の設計と合成	大阪大学大学院理学研究科	◎森田 靖
(2)ESRを用いた充放電機構の分子レベルでの解明	大阪市立大学大学院理学研究科	○佐藤和信
(3)電池デバイス化、特性評価測定と電極部位の構造探索	日本電子株式会社	○有福和紀

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

中間評価票

(平成23年7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) 課題の進捗状況

- ① 高性能二次電池活物質の設計と合成 : 量子化学計算を用いて設計した各種 TOT 中性ラジカル 17 個とその一電子還元体であるアニオン体 16 個の合成・単離に成功した。合成した中性ラジカルは、広範な官能基を含んでおり、いずれも空気中で安定(分解点 $170^{\circ}\text{C} \sim 300^{\circ}\text{C}$ 以上)。立体保護効果が無い誘導体や、サイクル特性向上を目指した TOT 多量体の building block も合成に成功。ラジカル前駆体ポリマー「多孔質 TOT シリカ」は、透過型電子顕微鏡(TEM)で高次構造体を確認。
- ② ESR を用いた充放電機構の分子レベルでの解明 : 合成された TOT 誘導体の一部について ESR/ENDOR スペクトルから基礎的な電子スピンおよび磁気物性を測定。計画を前倒して TOT 誘導体を活物質に用いた正極シートの ESR イメージング測定を検討、 $10\mu\text{m}$ までの空間分解能を持つ画像化に成功。
- ③ 電池デバイス化、特性評価測定と電極部位の構造探索 : ボタン型電池への評価手法をほぼ確立した。臭素置換 TOT 誘導体 (Br_3TOT) において、電流レート 1C および 2C での好結果が得られた: 初回平均出力電力 $2.56, 2.43\text{V}$ 、初回放電容量 $225, 208\text{mA h/g}$ 、 100 サイクル後の放電容量維持率 $71, 85\%$ 。また、TEM 極低温 (-182°C) 観察法により、TOT 誘導体の原子配列を反映した格子像の観察に成功。

査読付き論文2件(Nature Chemistry1件)、口頭発表・国内6件、国際3件、関連研究での受賞4件

(2) 各観点の再評価と今後の研究開発の方向性

本課題は、有機二次電池の有力候補であり、精力的な分子合成を積極展開することで、新しい現象、新しいサイエンスに挑んでいる。また企業との連携を見据え、実用研究に向かって狙いを定めており、引き続きPD/POの指導のもとで積極的に推進される必要がある。

元素戦略プロジェクトの正当性を明示する上で、有機物は希少元素を使わない典型例であり、今後更に努力を積み重ねていかれることを期待する。物質作り込みにおいては、より精力的に取り組み特に若手の修練に適している。その際、有機化学のみならず電気化学、反応工学、物理化学などをあわせた領域全体を俯瞰できる視点を育てるべき。

電池特性はボタン電池に拘ることなく、自動車向けなども視野に入れるべき。その意味で、企業との連携を積極的に推進していただきたい。

特許化できる結果が数多く見受けられる。製品特許だけでなく製法特許もあり得る。

「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26年度を予定)

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にしている。

4. 予算(執行額)の変遷

プロジェクト予算(執行)額(単位:百万円)

年度	H21	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	30.00	33.31	31.75	27.85 (見込額)	20.25 (見込額)	143.16 (見込額)
内訳 (間接経費含)	筑波大 24.6 名工大 3.2 名古屋大 1.3 関西大 0.9	筑波大 19.2 名工大 3.9 名古屋大 1.3 関西大 7.41	筑波大 17.9 名工大 3.9 名古屋大 1.3 関西大 7.15	筑波大 14 名工大 3.9 名古屋大 1.3 関西大 7.15	筑波大 6.2 名工大 3.9 名古屋大 1.3 関西大 7.15	筑波大 81.9 名工大 18.8 名古屋大 6.5 関西大 29.76

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

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

業務項目	担当機関等	研究担当者
1. 界面磁気相互作用・界面異方性制御に関する研究 (1) スパッタ法等による高品位酸化物複合磁性材料の成長方法の確立 (2) $Fe_{3-x}O_4/MgO/Fe$ 反平行結合膜の実験的機構解明 (3) 実用を目指したスパッタ反平行結合($\cdot 1 \text{ erg/cm}^2$)薄膜の作製 (4) 垂直磁気膜の評価方法の改善と磁気異方性 $3 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ の達成 (5) 80nm 級パターン形成等による次世代記録媒体への適性評価	筑波大学大学院数理物質科学研究科 名古屋工業大学大学院工学研究科 筑波大学大学院数理物質科学研究科 筑波大学大学院数理物質科学研究科 HOYA 株式会社	◎喜多教授 柳原英人准教授 ○壬生功教授 田中雅章助教 ◎喜多教授 柳原英人准教授 ◎喜多教授 柳原英人准教授 ○園部義明
2. 酸化物/合金界面における磁性に関する理論研究 (1) $Fe_{3-x}O_4/MgO/Fe$ 反平行結合膜の理論的機構解明 (2) 層間結合・垂直磁気異方性定量計算の理論モデルの確立	名古屋大学大学院工学研究科 関西大学システム理工学部	○井上順一郎教授 ○伊藤博介准教授

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

中間評価票

(平成23年7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)課題の進捗状況
①界面磁気相互作用・界面異方性制御に関する研究
(1)マグネトロン型スパッタリング法により Fe_3O_4 の成長に成功、金属 Fe ターゲットでの O_2 反応性スパッタにより MgO 単結晶上で良好なマグネタイト薄膜の育成に成功。
(2) $\text{Fe}_3\text{O}_4 / \text{Fe}$ の反平行結合の解明のため ^{57}Fe を界面1層に配置した試料のメスバウアー測定実施、マグネタイト層が B サイトを末端として金属鉄と接していることを理論予測し、実験的に検証。その結果、磁氣的結合は軽い Mn ドープで強くなり、重い Co ドープで弱くなる。
(3) Fe_3O_4 上に連続的に Fe をスパッタして $\text{Fe}_3\text{O}_4 / \text{Fe}$ 薄膜を育成し、 -0.7 erg/cm^3 の結合を達成。
(4) 計測対象が大きな磁気異方性を持つため、最大印加磁場 7T 以上の評価方法が必要。MBE 法作製した $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ 薄膜について、 $x=1.37$ で最大保磁力 $3 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ 、磁気異方性 $6 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ を観測。(物材機構 12T-VSM、学内 9Tトルク計を整備)
(5) CoFe_2O_4 膜において一様なイオン照射を行い磁化の変化を確認。(HOYA 撤退のためパターン形成による記録媒体適性評価には至らず)
②酸化物/合金界面における磁性に関する理論研究
(1)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、反平行磁気結合エネルギーが界面原子間のスピン間相互作用であることを解明。層間磁気結合に重要な Fe 層界面の磁気モーメントの方向が Fe 原子の酸化程度に依存することを見いだした。
(2)コバルトフェライト(CoFe_2O_4)薄膜における垂直磁気異方性を見積を第一原理計算と磁歪の効果を取り入れた現象論を用いて行った。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、エネルギー増加は $14 \times 10^6 \text{ erg/cm}^3$ という大きな値になった。
査読付き論文3件、査読無し論文1件、口頭発表・国内11件、国際5件、国内特許1件
(2)各観点の再評価と今後の研究開発の方向性
本課題は技術競争熾烈な分野において、次々世代記録材料を狙うものである。我が国の得意分野を維持するものであり、震災影響や参画企業の撤退などで一部成果の遅れが見受けられるものの、要素研究については確実に成果が得られており、引き続きPD/POの指導のもとで着実に推進される必要がある。
金属系記録材料が主流の中で、唯一と言って良い酸化物への取り組みである。明確な目標に向かって地道に取り組んでいる事は評価できるが、実装特性の評価の必要性を考えれば企業などの参画を呼び寄せる努力は必要で、より積極的なアピールは必要である。またその様な活動により産業界の活性化に努めても良いのではないか。
CoFe_2O_4 のスパッタ成長が未達であることについて、遅れの取り戻しが強く望まれる。界面解析においてもより強化を。

「エコフレンドリーホ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26年度を予定)

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、フィージビリティスタディーとして開始し、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LiFePO₄オリビン正極の理論エネルギー密度561 mWh/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C₉Naの理論容量を凌ぐ可逆容量250 mAh/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いだす。

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3 mS/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、フィジビリティスタディーとして技術の確実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

プロジェクト予算(執行)額(単位:百万円)

年度	H21	H22	H23	H24	H25	総額
執行額	10.0	13.4	13.4	13.4 (見込額)	13.4 (見込額)	63.6 (見込額)
内訳 (間接経費含)	九州大 4.71 山口大 4.29 住友化学 1.0	九州大 5.7 山口大 5.3 住友化学 2.4	九州大 5.7 山口大 5.3 住友化学 2.4	九州大 5.7 山口大 2.4 住友化学 5.3	九州大 5.7 山口大 2.4 住友化学 5.3	九州大 27.51 山口大 19.69 住友化学 16.4

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

研究機関:九州大学、山口大学、住友化学

業務項目	担当機関等	研究担当者
1. ナトリウムイオン電池用正極材料開発およびナトリウムイオン電池システム化 (1) レアメタルフリー硫化物・酸化物系正極材料の探索 (2) ナトリウムイオン電池システムの実証 (3) プロジェクトの総合的推進	九州大学先導物質化学研究所	◎岡田重人准教授 小林栄次 L.Plashnitsa 山木準一教授
2. ナトリウムイオン電池用負極材料開発 (1) 新規負極材料の合成に関する研究 (2) 新規負極材料の解析・設計に関する研究	住友化学筑波研究所	○山本武継主席研究員 久世 智主任研究員 牧寺雅巳研究員
3. ナトリウムイオン電池用難燃性電解液の開発および評価 (1) ナトリウム塩／ポリエーテル／イオン液体3成分電解液の組成最適化 (2) 電解液の負極界面挙動の評価 (3) 電極特性向上のための電解液／負極界面の作り込み	山口大学工学部応用化学科	○江頭港准教授

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

中間評価票

(平成23年7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)課題の進捗状況

- ①ナトリウムイオン電池用正極材料開発 : サイクル性に優れるインサージョン系正極として、ナトリウム含有鉄系層状酸化物 NaFeO_2 とチタン系層状硫化物 TiS_2 、インサージョン系負極として、スピネル酸化物型 $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ を見出した。一方、大容量コンバージョン系正極としては、頂点共有パイライト型鉄系硫化物 FeS_2 とペロブスカイト型フッ化物 FeF_3 を、コンバージョン系負極としては、スピネル酸化物型 Co_3O_4 を見出し、インサージョン系/コンバージョン系正負極すべての物質カテゴリーで長寿命系、大容量系各々の特徴をもつ活物質候補材料のラインナップを一揃い、揃えることができた。
- 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。また、懸念された熱安定性についても、DSC測定から、ナトリウム吸蔵負極炭素材料はリチウム吸蔵黒鉛より熱安定性に優れている結果を得た。
- ③ナトリウムイオン電池用電解質材料開発 : ポリエーテルを第3成分として含有するもので、室温でのイオン伝導率 1.3 mS/cm 、 250°C までの熱安定性を達成した。しかしながらこの系の中では炭素負極の充放電が進行しない点が、実用化に向けた大きな課題である。炭酸エステルを第3成分とする系では、熱安定性は目標に達していないものの伝導率は目標を達成、容量は小さいが負極の充放電可能を確認。
- ④ナトリウムイオン電池システム化 : 唯一ナトリウム源となりうる NaFeO_2 に着目し、正極活物質として各種負極候補とナトリウムイオン電池化を行った。負極には、ハードカーボン 1600°C アニール品を選定し、現状ナトリウムイオン電池としては世界最高となる 400 mAh/g (負極重量当たり)の可逆特性を実証することに成功した。

査読付き論文1件、査読無し論文1件、口頭発表・国内13件、国際6件、国内特許2件、受賞1件

(2)各観点の再評価と今後の研究開発の方向性

本課題は、フィージビリティとして始めながらも、電池研究分野で注目されるナトリウム電池において先駆的成果を得ている。採択時に課された正規課題化の条件は、十分満たしていると認められ、これまで以上に加速された取り組みが期待される。PD/POの指導の下で、積極的に推進される必要がある。

リチウム系電池の限界はすでに見えてきており、その中での競争では勝ち残ることは出来ない。ナトリウム、鉄、熱処理ハードカーボンと酸素で従来電池と同等特性の可能性が得られたことは、まさに元素戦略にふさわしい成果である。また本研究のなかで直ちに実用化研究に転用できるものは、部分的に切り分けて他プロジェクトへの移行なども検討して良い。例えば鉄以外の正極材料の活用など。

本プロジェクトに参画した学生は就職後も電池研究に従事しており、ノウハウ流出の懸念はあるものの人材育成は確実になされている証である。産業界への技術トランスファーの一形態とも言えるかも知れない。