

ナノテクノロジー・材料科学技術に関する 研究開発課題の事後評価結果

令和5年1月

科学技術・学術審議会

研究計画・評価分科会

研究計画・評価分科会委員名簿

◎岸本	喜久雄	国立教育政策研究所フェロー、東京工業大学名誉教授
●高梨	弘毅※	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター長、東北大学名誉教授
春日	文子※	国立研究開発法人国立環境研究所特任フェロー
濱口	道成※	国立研究開発法人科学技術振興機構顧問、国立研究開発法人日本医療研究開発機構先進的研究開発戦略センター長
明和	政子	京都大学大学院教育学研究科教授
村山	裕三	同志社大学名誉教授
安浦	寛人	九州大学名誉教授、国立情報学研究所副所長学術基盤チームディレクター・特任教授
五十嵐	道子	フリージャーナリスト
出光	一哉	九州大学大学院工学研究院教授
上田	正仁	東京大学大学院理学系研究科教授
上田	良夫	大阪大学大学院工学研究科教授
上村	靖司	長岡技術科学大学工学研究院教授
佐々木	久美子	株式会社グルーヴノーツ代表取締役会長
高梨	千賀子	東洋大学経営学部教授
田中	隆章	京セラコミュニケーションシステム株式会社コンサルティング事業本部・理念・教育コンサルティング部・責任者
塚本	恵	J, S. Held, LLC 上席顧問、一般社団法人デジタルソサエティフォーラム代表理事
長谷山	美紀	北海道大学副学長、大学院情報科学研究院長
林	隆之	政策研究大学院大学教授
原澤	英夫	元国立研究開発法人国立環境研究所理事
水澤	英洋※	国立研究開発法人国立精神・神経医療研究センター理事長特任補佐・名誉理事長
宮園	浩平	国立研究開発法人理化学研究所理事／東京大学大学院医学系研究科卓越教授
李家	賢一	東京大学大学院工学系研究科教授

◎：分科会長、●分科会長代理

※本評価には参加していない。

第11期 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 委員名簿

五十嵐正晃	新報国マテリアル株式会社 技監
上杉志成	京都大学化学研究所 教授、物質－細胞統合システム拠点連携 教授・副拠点長
大久保達也	東京大学大学院工学系研究科 教授、理事・副学長
尾崎泰助	東京大学物性研究所 物質設計評価施設 教授
加藤隆史	東京大学大学院工学系研究科 教授
菅野了次	東京工業大学科学技術創成研究院 教授
関谷毅	大阪大学産業科学研究所 教授、総長補佐、栄誉教授
瀬戸山亨	三菱ケミカル株式会社 エグゼクティブフェロー
◎高梨弘毅	日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター長
高橋真理子	科学ジャーナリスト
高村由起子	北陸先端科学技術大学院大学 教授
武田志津	株式会社日立製作所 専門理事 研究開発グループ技師長、 基礎研究センター日立神戸ラボ長
中山智弘	科学技術振興機構 研究開発戦略センター 企画運営室長・フェロー
納富雅也	東京工業大学理学院物理学系 教授
長谷川美貴	青山学院大学理工学部 教授
平田裕人	トヨタ自動車株式会社先端材料技術部 部長
宝野和博	物質・材料研究機構 理事長
馬場嘉信	名古屋大学大学院工学研究科 教授
前田裕子	九州大学 理事
湯浅新治	産業技術総合研究所 新原理コンピューティング研究センター 研究センター長
吉江尚子	東京大学生産技術研究所 教授
萬伸一	理化学研究所 量子コンピュータ研究センター 副センター長

(◎：主査、敬称略、五十音順)

元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉事後評価検討会 委員名簿

(五十音順)

青木雅博	日立製作所 グローバル環境統括本部 (日本) デジタルグリッド プロジェクトリーダー
阿部英司	東京大学大学院 工学系研究科マテリアル工学専攻 教授
雨宮慶幸	高輝度光科学研究センター理事長
菅野了次	東京工業大学 科学技術創成研究院 全固体電池研究センター長
※ 高梨弘毅	日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター長
中川淳一	東京大学大学院 数理科学研究科数理科学専攻 特任教授
平田裕人	トヨタ自動車 先端材料技術部 部長
◎ 宮野健次郎	物質・材料研究機構 フェロー
湯浅新治	産業総合研究所 新原理コンピューティング研究センター 研究センター長
萬伸一	理化学研究所 量子コンピュータ研究センター 副センター長

◎：主査

※：磁性材料拠点にて PI (Principal Investigator) として 2012～2015 年度まで研究活動、その後 2019 年度まで PI 以外の参画者・協力者として関係あり。ナノ材委員の立場から材料分野を俯瞰した視点から助言していただくため、事後評価委員を依頼した。

「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」の概要

1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成 24 年度～令和 3 年度

中間評価：平成 27 年 10 月及び平成 31 年 2 月、事後評価：令和 5 年 1 月

2. 研究開発目的・概要

我が国の資源制約を克服し、産業競争力を強化するため、希少元素を用いない全く新しい代替材料を創製する。そのため、産業競争力に直結する 4 つの材料領域を特定し、トップレベルの研究者集団により元素の機能の理論的解明から新材料の創製、特性評価までを一体的に推進する研究拠点を形成する。（※ポンチ絵を参照）

3. 研究開発の必要性等（平成 30 年度実施の中間評価結果概要）

(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、「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」とこととされている等、代替材料開発を急ぐ必要性がある。

(2) 有効性

本事業は、元素戦略の新たな展開として「技術の革新性」と「実用可能性」という 2 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を目標とする。さらに、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り組みとして、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。これにより、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（平成 28 年度よりプログラム運営委員会へ移行）」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が構築・実施されている。また、文部科学省の「元素戦略プロジェクト」と内閣府及び経済産業省の関連事業は、ガバニングボードの設置や合同シンポジウムの開催などの連携を図っている。「元素戦略」の基幹事業である本事業がこれらの関係施策とさらに強固に連携することで、その成果の共有・展開が加速すると期待される。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	H24 (初年度)	H25	H26	H27	H28	H29	H30	H31 /R1	R2	R3	総額
予算額	39.5	22.6	20.2	20.0	20.4	20.0	20.0	19.0	18.8	16.8	217.5
執行額	39.5	22.6	20.2	20.0	20.4	20.0	20.0	18.9	18.7	16.8	217.3

(単位：億円)

5. 課題実施機関・体制

磁性材料研究領域

代表研究者 国立研究開発法人物質・材料研究機構 拠点長 広沢哲
 主管研究機関 国立研究開発法人物質・材料研究機構
 共同研究機関 東北大学、産業技術総合研究所、東京大学、高輝度光科学研究センター、京都大学、高エネルギー加速器研究機構、名古屋大学、北陸先端科学技術大学院大学、東京工業大学、東北学院大学、九州大学、兵庫県立大学

触媒・電池材料研究領域

代表研究者 国立大学法人京都大学 教授 田中庸裕
 主管研究機関 国立大学法人京都大学
 共同研究機関 東京大学、自然科学研究機構、九州大学、熊本大学、東京理科大学

電子材料研究領域

代表研究者 国立大学法人東京工業大学 教授 細野秀雄
 主管研究機関 国立大学法人東京工業大学
 共同研究機関 物質・材料研究機構、高エネルギー加速器研究機構、東京大学

構造材料研究領域

代表研究者 国立大学法人京都大学 教授 田中功
 主管研究機関 国立大学法人京都大学
 共同研究機関 東京大学、大阪大学、物質・材料研究機構、九州大学

6. その他

● プログラム運営委員会メンバー（令和4年3月現在）

PD 玉尾皓平 豊田理化学研究所 所長
 PO 中山智弘 科学技術振興機構 研究開発戦略センター企画運営室長 フェロー
 村上正紀 立命館大学 学長特別補佐 理事補佐
 専門委員 射場英紀 トヨタ自動車株式会社 基盤材料技術部電池材料技術 研究部担当部長

魚崎浩平 物質・材料研究機構フェロー 理事長・特別参与
潮田浩作 日鉄住金総研株式会社 シニアアドバイザー
瀬戸山亨 三菱ケミカル株式会社 エグゼクティブフェロー、
Science & Innovation Center 瀬戸山研究所長
田中裕久 関西学院大学 理工学部先進エネルギーナノ工学科 教授
徳永雅亮 元日立金属株式会社 副技師長
福山秀敏 東京理科大学 理事長補佐・学長補佐
宮内昭浩 東京医科歯科大学 生体材料工学研究所 特任教授
結城正記 AGC株式会社 事業開拓部シニアパートナー
江頭基 文部科学省 研究振興局参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）

- 関係省庁との連携

事業開始当初よりガバニングボードが設置され、内閣府及び経済産業省が実施する関連事業と一体的な運用がなされる体制であった。磁石材料・高効率モータ、蓄電池及び構造材料の3分野において定期的に開催されるとともに合同シンポジウムも開催された。

- 研究データの管理・利活用に関する取組

特になし

元素戦略プロジェクト（※令和3年度終了事業）

（前年度予算額：1,686百万円）



背景

○レアース等の希少元素は高機能材料に必須※であり、世界的な需要急増や資源国の輸出管理政策による深刻な供給不足を経験した我が国では、**資源リスクを克服・超越するための「元素戦略」が必要不可欠である。**

※電気自動車(xEV)の駆動モーター用高性能磁石やモバイル機器の大容量Liイオン電池など、あらゆる先端産業製品に利用されている。

○ナノレベル(原子・分子レベル)での理論・解析・制御により**元素の秘めた機能を自在に活用することが、未知なる高機能材料の創製、ひいては産業競争力向上の鍵となる。**

概要

・我が国の資源制約を克服し、産業競争力を強化するため、**希少元素を用いない全く新しい代替材料を創製する。**

・産業競争力に直結する4つの材料領域を特定し、トップレベルの研究者集団により、**元素の機能的理論的解明から新材料の創製、特性評価までを一体的に推進する研究拠点を形成する。**

・令和3年度は、これまでの研究開発を仕上げて**拠点の自立化・自律化を進めるため、構築した学理は、総論レビューや書籍等を通じて成果発信し、有望な新材料については、産業界呼び込みに必要な試作と性能実証を推進する。**

【推進体制】

～**理論と実験、理学と工学、物理と化学の徹底的な融合**～

分野の壁を打破

電子論グループ

基礎科学に立脚した、**新機能・高機能材料の提案**

3グループを一体的に推進

材料創製グループ
目的とする機能を有する**新材料の作製**

解析評価グループ
新材料の**特性の評価**、**問題点の抽出**

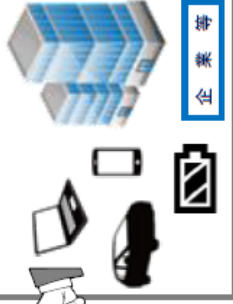
GB開催

省庁の壁を打破

成果の速やかな実用化に向け、内閣府・経済産業省との連携体制を構築

・内閣府(SIP)

・経済産業省/NEDO



・材料領域（拠点設置機関）:

- ①磁石材料（物質・材料研究機構）
- ②触媒・電池材料（京都大学）
- ③電子材料（東京工業大学）
- ④構造材料（京都大学）

・**事業期間**:10年（2012年度～2021年度）

令和3年度のポイント

- 学理構築:フオーカス領域の研究開発を総仕上げし、公開シンポジウム・総論レビュー・書籍等を通じて成果を発信
- 産学連携:有望な材料の大量合成と試作・評価によりPoCに必要な性能データを蓄積し、産業界への連携呼び込みと知財権利化を並行して推進

事後評価票

(令和 4 年 10 月現在)

1. 課題名 元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉

2. 関係する分野別研究開発プラン等名と上位施策との関係

プラン名	ナノテクノロジー・材料科学技術分野研究開発プラン
プランを推進するにあたっての大目標	「未来社会を見据えた先端基盤技術の強化」(施策目標 9-1) 概要：我が国の未来社会における経済成長とイノベーションの創出、ひいては Society 5.0 の実現に向けて、幅広い分野での活用の可能性を秘める先端計測、光・量子技術、ナノテクノロジー・材料科学技術等の共通基盤技術の研究開発等を推進する。
プログラム名	ナノテクノロジー・材料科学技術分野研究開発プログラム 概要：ナノテクノロジー・材料科学技術は、他分野の研究開発を支える基盤となる重要な分野であり、幅広い応用が期待される。望ましい未来社会の実現に向けた中長期的視点での研究開発の戦略的な推進や実用化を展望した技術シーズの展開、最先端の研究基盤の整備強化等に取り組むことにより、ナノテクノロジー・材料科学技術分野の強化を図り、革新的な材料の創製や研究人材の育成、社会実装等につなげる。
上位施策	第 6 期科学技術・イノベーション基本計画 (令和 3 年 3 月 26 日閣議決定) マテリアル革新力強化戦略 (令和 3 年 4 月 27 日統合イノベーション戦略推進会議決定)

プログラム全体に関連する アウトプット指標	過去 3 年程度の状況		
	令和元年	令和 2 年	令和 3 年
研究発表数	1957	832	1285
参画機関数	28	28	28

プログラム全体に関連する アウトカム指標	過去 3 年程度の状況		
	令和元年	令和 2 年	令和 3 年
査読付き論文数	633	712	805
5 つのフォーカス領域の対象材料に関する特許出願数	22	25	19

3. 評価結果

(1) 課題の達成状況

本事業では、産業競争力に直結する「磁性材料」、「触媒・電池材料」、「電子材料」及び「構造材料」の4つの材料領域を設定した。各領域のトップレベルの研究者集団により、電子論グループ、材料創成グループ及び解析評価グループを一体的に推進する研究拠点を形成することを目指した。電子論グループでは基礎科学に基づいた新材料の提案、材料創製グループではその作製、解析評価グループでは新材料の特性評価を行った。このように1つの拠点内に3つのグループが一体となって研究を進める体制は、当時としては革新的な試みであった。さらに、省庁の壁を打破すべく、内閣府SIP、経産省・NEDOとのガバニングボードを開催し、連携体制が構築されたことも付記しておく。

本事業において各拠点が事業開始時に設定した目標は、それぞれ達成された。また3グループが一体となる拠点の形成についても概ね成功した。具体的には以下の通りである。

《磁性材料研究拠点》

当時から産業界には電気自動車の駆動モータなどに使う高性能磁石をジスプロシウム (Dy) フリーで実現しなければならないという課題があり、それを実現する材料科学が必要とされていた。そこで、

- ・ 希少元素によらず大量生産可能な次世代永久磁石材料の創製
- ・ 産業界が必要とする基礎学理と技術基盤の構築
- ・ 次世代の磁性材料研究を担う人材の育成

を目標に拠点の研究活動を行い、10年間で以下の成果を挙げた。

① Dy フリー磁石及び究極的高性能ネオジム (Nd) 磁石への指針導出

Nd 磁石の粒界相が強磁性であることを初めて解明して高保磁力のヒントを見出した。さらに、計測技術及び理論計算面で、それぞれ世界初となる研究成果に基づき、粒界近傍の組織を制御する指針を確立した。これにより、高保磁力かつ高磁化の究極の高性能磁石、Dy フリー磁石、さらに、基材のNdを豊富で安価なセリウムで希釈しても高性能を維持する磁石を実証した。

② レアアース濃度の低い新規磁石化合物の開発

レアアース濃度がNd磁石の約65%となる $\text{Sm}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{12}$ に代表される高温特性に優れた新物質群(1-12型)を初めて作製し、35年間破られなかった $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ を超える高い磁気物性値を実証。さらに、焼結磁石及び微粒子粉末の作製に成功し、1T以上の大きな保磁力を発現させ、磁石物質としての可能性を明らかにした。

③ 永久磁石研究開発の基盤(特に有限温度)構築と学理の創出

保磁力の温度依存性や結晶配向度依存性などを支配する組織要因をすべて整理した。発足時には希薄だったレアアースを含む多元系磁石合金の熱力学情報について、CALPHAD計算状態図の作成が可能なデータベースを構築し拠点内で共有化した。また、磁石の研究に必須の

有限温度の磁性や熱揺動効果を含む保磁力を理論計算する新手法を開発した。

- ④ 拠点終了後の産学連携研究の仕組みとして、磁石 MOP (Materials Open Platform) を設立し、国内主要磁石メーカー4社と令和4年4月1日に活動を開始した。

磁性材料において、微細構造の制御による特性向上を実証したことは重要な成果である。

人材育成に当たっても、異分野の研究者に対して自らの研究を理解させることができ、社会のニーズに応じていく研究者を育成することを念頭に置いた。ポスドク、助教等の博士研究者のうち、任期終了後に国内に就職した者は、大学又は公的研究機関に12名(うち5名が定年制職員)、民間企業が9名であった。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
発表論文数	5	24	31	31	58	39	65	51	60	69
特許出願数	0	0	1	0	1	1	4	0	1	3

《触媒・電池材料研究拠点》

環境・エネルギー問題の解決に欠かせない触媒及び二次電池の部材について、以下を目標に研究を進めた。

- ・ 希少元素を節減あるいは代替した高性能触媒・二次電池の開発
- ・ 触媒・電池の作用機序の詳細な記述・指導原理の解明
- ・ 次世代研究者の育成

その結果、触媒分野において以下に代表される成果が得られた。

- ・ 自動車排ガス浄化触媒のパラジウムの含有量を最大9割削減した触媒を発見し、活性もベンチマークを上回った。より耐熱性が高く、活性種構造が同じ Pd/h-YbMnO₃ が現在実用試験に供された。
- ・ (111)面配向ロジウム (Rh) ナノフィルム触媒により、Rh 使用量を 1/3 に節減。粒子サイズの小さな Rh ナノ粒子が高活性であると考えられていた従来の常識を覆した。
- ・ 世界で最初の PGM フリー三元触媒を理論先行で開発。二種の触媒 (MnFe₂O₄ 及び CuCo₂O₄) をタンデム配置し、活性は Rh ベンチマーク触媒と同等で、世界初の卑金属のみで構成された三元触媒となった。
- ・ 新しい金属-金属酸化物接合：新アンカー効果の発見。三元触媒として作用する Pd/Sr₃Ti₂O₇ は、非常に強いアンカー効果を示し、かつ、エイジングによる活性の低下がほとんどない。しかも、担体-金属相互作用により一酸化窒素の解離能力が高まった。

電池分野においては、

- ・ ナトリウム (Na) イオン電池フルセルの試作に成功。安定正極、マグネシウム鋳型ハードカーボンを用いることにより、従来のリチウムイオン電池と同等な性能のコイン型電池 (1000 回以上の充放電が可能) を作成した。
- ・ 濃厚電解液による電池の安定化・高性能化を実現。特殊な溶液構造に対して、電子状態から「長寿命」「高レート」「化学安定性が高い」「耐高電圧」「難燃性」等の諸性質を明らかにした。現在、リチウムイオン電池の電解液として利用され、BtoB で上市されている。

- 全固体ナトリウム電池用高伝導固体電解質 ($\text{Na}_{2.88}\text{Sb}_{0.88}\text{W}_{0.12}\text{S}_4$) を開発。32mS/cm の伝導度を達成した。

人材育成においては、京大拠点を核、連携機関をハブとした全国ネットワークを築き、若手研究者に異分野間の共同研究を体験させた。さらには、若手による研究会などの開催を通して次世代の研究者の育成を重要視し、次世代の拠点後継者を養成した。また、多くの発表を奨励し関連分野でのプレゼンスを高めた。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
発表論文数	27	97	262	256	205	245	258	263	304	340
特許出願数	1	6	6	10	7	12	8	1	11	6

《電子材料研究拠点》

エレクトロニクス産業を支える電子部材を中心とした幅広い分野において、

- 多存元素を使用した材料設計コンセプトの創出、材料科学の確立と新機能電子材料の開発
 - フラットパネルディスプレイ用半導体材料や、パワーエレクトロニクス用高安定高誘電体材料を産業界へ移転
 - 元素戦略研究センターを中心とする電子材料拠点の全学的発展（新・元素戦略）
- を目指した。拠点長の強いリーダーシップの下、従来にない物質群を開拓した。例えば下記のような社会実装につながる成果があり、産学に影響のある優れた研究拠点となった。
- 薄膜化しても特性の劣化がない強誘電体：従来のペロブスカイト系物質を置換し得る／凌ぐキュリー温度と自発分極・残留分極を持つ蛍石構造 ($\text{HfO}_2\text{:Y}$ 、 $\text{HfO}_2\text{:Zr}$) およびウルツ鉱型 ($(\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x)\text{N}$ 、 $(\text{Ga}_{1-x}\text{Sc}_x)\text{N}$) の強誘電体を開発した。
 - 車載用規格を満たす珪酸塩系誘電体の開発： Bi_2SiO_5 が珪酸塩化合物で初めて強誘電性を示すことを実証。理論計算で強誘電性の起源を解明し、ランタン置換で常誘電化して、車載用コンデンサ高温規格 EIA X8R をクリアした。
 - 新物質 CaZn_2N_2 と系列の三元系窒化物群をマテリアルズインフォマティクスで予測、高压合成し、直接遷移型の赤色発光半導体であることを実証した。
 - ポリシリコン TFT（薄膜トランジスタ）に匹敵するアモルファス酸化物半導体（ITZO）：高移動度の代償として負バイアス印加時の不安定性により実用化が阻まれていた ITZO について、高移動度材料の不安定性の起源を解明し、炭素由来の不純物を除去することで解決した。
 - 高効率の青色発光（発光量子収率 > 90%）を持つ新物質 $\text{Cs}_5\text{Cu}_3\text{Cl}_6\text{I}_2$ を創製し、革新的な自発光型 FPD デバイスとなることが期待される。

また、物質中の水素の挙動に着目するなど、当初の元素戦略の想定をはるかに超える研究も展開した。

非公式な会合も含めて研究参加者間の自由な交流・組織間の往来を推進したことにより、特に若手研究者のネットワークが多く形成され、相互育成に貢献した。ポスドク研究員として参加した若手のほとんどは助教職相当以上に転身した。また、参加した研究者の中で9名の助教職相当は准教授職相当へ、24名の准教授職相当が教授職相当へと昇進した。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
発表論文数	40	105	159	159	168	225	238	261	283	324
特許出願数	7	6	4	8	6	4	6	5	13	10

《構造材料研究拠点》

社会基盤を支える安心・安全な社会に不可欠な構造材料において、現在大量に使用されている希少元素を抜本的に削減した代替材料の開発を目指し、以下の課題が設定された。

- ・ 理論に裏打ちされた合理的な設計指針による革新的な材料創製
- ・ 強度と延性が両立する材料の開発に必要な学理構築と産業応用への貢献
- ・ 次世代を担う若手人材の育成と基礎研究ネットワークの中核拠点の構築

そして、構造欠陥（ミクロ）と機械的強度（マクロ）の関係の学理を追究するに当たり、データ駆動型研究と最新の解析装置を組み合わせ、次のような成果が得られた。

- ・ 新概念「プラストン」の提案：構造材料分野で 60 年来の転位論の上位概念であり、固体材料における塑性変形の素過程を示した。プラストンの総説は国際的な一流雑誌の 2020 年度の Top 10% 引用論文となった (Scopus SciVal による)。また、2022 年 1 月に Springer 社よりオープンアクセス出版した英文著書は、出版後約半年で世界中から約 1 万回ダウンロードされた。
- ・ 新概念「プラストン」の制御による元素添加に頼らない材料開発の実現：微細粒化により多様なプラストンを逐次複合的に活動させ、強度と延性が両立（強度 2000Pa かつ延性 > 70%）する複合変形子鉄鋼材料、及びアルミニウム合金に匹敵する大延性マグネシウム合金延伸材を創出した。さらにはデータとメッキ層厚膜化の設計指針を鉄鋼メーカーに提供した。
- ・ マルチスケール・シミュレーション（加速分子動力学計算法、第一原理フォノン計算法 phonopy など）を駆使し、従来とは一線を画した強度と延性が両立する材料の設計を実証した。なお、phonopy 及び phono3py が 40 万回ダウンロードを超え、世界のデファクトスタンダードになったと言える。
- ・ 構造材料分野のオールジャパン体制での基礎研究ネットワークの中核拠点を形成した。

当初採用の若手の特定研究員については、2 年間の研究実績を審査し、京都大学、拠点教員の本務機関において、テニユア職、あるいは特定教員（特定助教、特定准教授など）へのステップアップ策を講じた。その後に採用した特定研究員・特定教員も、国内外の研究機関や産業界において職を得て、構造材料研究の第一線で活躍している。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
発表論文数	26	58	70	51	55	48	59	58	65	72
特許出願数	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0

<必要性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
事業目標の妥当性（研究開発・拠点形成）	定性的	元素戦略のコンセプトに基づき、我が国の資源制約を克服し産業競争力を強化するための事業目標となっているか	前・中・後

希少な元素資源を用いない革新的な物質・材料で持続可能な社会を構築するという元素戦略のコンセプトは、資源の制約を受けやすい我が国にとって必要なものである。各拠点の事業目標はこれに沿って設定され、それぞれの研究内容は世界的に見て独創的かつ優位性があったと言える。また、2010年代後半から見られるカーボンニュートラル、EV化の流れへの対応も概ねなされ、産業ニーズを適切に目標に反映させたと言える。

なお、個別に見てみると、国研である磁性材料拠点の知財面での優位性はやや限定的に見えるが、分野の性質上に依るものと考えられる。また、触媒・電池材料拠点は、その計画・アプローチの面で領域が絞られており、共通目標の設定に苦慮したように見えた。

<有効性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
事業目標の達成度（研究開発・拠点形成）、対外発信	定性的	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ているか、また、その成果が対外発信されているか	前・中・後

拠点ごとに濃淡がありつつも計画通り進捗し、全体としては十分に事業目標が達成できた。特性の優れた物質の発見など、事業の目標とする短期の成果の達成は概ね計画通り進捗した。ただ、拠点によっては、新概念の定着、産業応用については今後期待する面もある。

また、研究論文が5000報以上であったため、学术界への発信も充分であったと言える。特に電子材料拠点と触媒・電池材料拠点は、分野の性質もあるが、多くの特許出願があった。論文発表や特許出願以外では、国内向けへの発信はよく行われた（5回のシンポジウムや4回の経済産業省「希少金属代替材料開発プロジェクト」合同シンポジウム）が、海外向けについては国際評価会議 ESIAC2019のみであった。これは安全保障貿易管理の観点から、海外発信に過度に慎重になった可能性も否定できない。海外に対して、我が国の科学技術の立ち位置を明確にする情報発信の戦略が必要であった。ただし、同時期に日米欧クリティカルマテリアルの三極会合が起

上がり、その中で元素戦略のプレゼンスを示すことはできた。

政策研究大学院大学の林教授が発表論文を解析したところ、本事業の論文には、科研費の論文では見られなかった化学・物理分野と材料工学の共著が多いことが判明した。これにより、拠点形成目標であった3つのグループ機能（電子論、材料創製、解析評価）の融合が成功したことが示唆された。また、大規模研究施設（SPring-8、J-PARC、KEK-PF、京、富岳）とも密な連携を取り、多数の論文が発表された。

< 効率性 >

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
実施体制及び運営の妥当性	定性的	効率的な実施体制になっているか、また、適切に運営されているか	前・中・後

明確な事業運営の基本方針のもとに、事業運営組織と研究拠点の関係が整理され、効率的な運営体制が築かれた。PD ペーパーなどを通じて必要な指示がなされていた。プログラム運営委員の半数以上が企業出身であることから、プログラム運営委員会を通じ社会や産業界のニーズを取り込めたと言える。ただし、各拠点の成果を産業界に展開し、社会全体の成果とするためには、よりオープンな仕組みを作る必要がある。

研究グループの組み換えなど体制の最適化を進め、情報伝達の一本化を図るなど適切であった。中間評価を通じ、各拠点が研究シーズの選択と集中を行っており、第3期の成果に繋がっていることから、適切な指示が出されていたと考える。ただし、第2回中間評価後のPD ペーパーにて指摘があった研究成果の特許性の判断及び知財化について、拠点によってはその遂行状況が明確ではなかった。

(2) 科学技術・イノベーション基本計画等の上位施策への貢献状況

本事業の目標である希少元素の使用量削減・代替の実現は、科学技術・イノベーション基本計画の「国民の安全と安心を確保する持続可能で強靱な社会」における持続可能性・強靱性の両方に貢献する。例えば、ナトリウムイオン電池は安定的なエネルギー確保に使われる。Society 5.0 については、Beyond 5G 通信にとっての強誘電体など、電子材料の原料確保は必須である。構造材において希少元素の添加に頼らないことは、安定なインフラ維持に欠かせない。レアアース濃度の低い磁性材料は、高性能モータの継続的な生産につながる。貴金属を用いない自動車排ガス触媒は、地球環境の保全に貢献する。また、後者の二つは、マテリアル革新力強化戦略のアクションプランである「革新的マテリアルの開発と迅速な社会実装」とも、重要なマテリアル技術・実装領域での戦略的研究開発の推進の点で、よく整合する。

(3) 中間評価結果時の指摘事項とその対応状況

<主たる指摘事項>

事業全体

1. 出口の議論も必要であるが、元素戦略の学理構築がより重要である
2. 事業終了後も人が集まる拠点を残してほしい
3. ニーズの取り込みや実用化に関しては、選択と集中を今以上に進める必要がある
4. 自立的な拠点運営には企業の協力も必要となる
5. 知財の活用について、拠点方針の確認検討を行い、特許化価値のあるものは特許化を進めていただきたい
6. 協調領域のみでの成果を問うのか、競争領域に踏み込むのか運営メンバーで議論すべき。知財の評価など、競争領域に踏み込むシステムが見られない
7. 関連する産業分野の変化は非常にスピーディーになっており、成果の実用化に際してはできるだけ早急な対応ができる体制づくりも必要だ

<対応状況>

(対応する指摘事項を [] 内に番号で示す)

磁性材料拠点

- 前半期に有望な新規物質として見いだされた化合物(鉄基希土類系 Sm-Fe-Co 系の 1-12 型)を主対象として、鉄系希土類 (R-Fe-X) 系において究極的高性能磁石の実現を目標とする計画とした。また、保磁力の理論構築では磁石使用温度で重要となる熱揺動効果を顕に取り入れる理論手法の開拓を後半期の目標とした。[1]
- 学理構築型の研究拠点として産業界での成果の展開を目指すため、NIMS 磁石パートナーシップを設立して研究会を通して研究成果の普及と啓蒙に努め、産学連携研究のための準備を行った。[7]
- NIMS の MOP に磁石分野を新設することを第 3 期の目標に定め、2019 年度には「磁石 MOP プロトタイプ」プログラムを ESICMM に新設して磁石メーカーとの連携研究を試験運用した。[4、7]

触媒・電池材料拠点

- PGM フリー触媒の開発、Na イオン電池試作の研究を加速した。[3]
- 自動車触媒研究成果実現を加速させるため、産学協同研究をより強化した。[5、7]

電子材料拠点

- 新規開発の極微量水素解析装置による機構解明への応用と装置商品化を推進した。[1、5、7]
- マテリアルズインフォマティクスの常用と独自の部分データベースの整備、回折実験データと計算機シミュレーションによるデータ同化構造探索手法を開発した。[1]

など。

構造材料拠点

- ・ 拠点において新しく開発した計算手法によるプラストンの核形成・成長過程のシミュレーションを実施。並行して透過型電子顕微鏡や中性子、放射光その場実験により、プラストン成長過程を実験的に追究した。これらの結果を併せて、その素過程についての詳細な議論を行い、プラストン概念が明確化できた。[1]
- ・ プラストン概念に基づく材料開発チームを強化した。その結果、強度・延性を両立させた複合変形子鉄鋼材料、熱処理型展伸用マグネシウム合金、脆性を改善した金属間化合物など有望な材料の創出に成功した。[7]
- ・ プラストン概念の発信のため、国際シンポジウムやワークショップの開催及び民間企業に向けたリエゾン活動を強化した。さらにプラストン概念についての世界初の成書(英文)をオープンアクセス出版した。この書籍は、出版後約半年で世界中から約1万回のダウンロードを受け、国際的に大きな科学的インパクトを与えた。[2]

全体

- ・ 最後の3年間の特許出願件数を平均すると、それ以前の7年間の平均を上回っている(ただし、コロナ禍により研究が滞り、知財戦略推進の機会が増えたことも要因の一つと推察する)。[5]

(4) 総合評価

① 総合評価

何より、世界で起きていた物質科学におけるパラダイムシフトを先頭に立って我が国に導入し、成功事例を残した功績は大きい。

事業目標は妥当であった。いずれの拠点の事業目標も、希少な元素資源を用いない革新的な物質・材料で持続可能な社会を構築するという元素戦略のコンセプトに沿っていた。さらに、カーボンニュートラルの流れへの対応も概ねなされていた。

拠点ごとに達成度の高低はあるが、事業目標は全体として達成された。また、特性の優れた物質の発見など、事業の目標とする短期の成果の達成は概ね計画通り進捗した。対外発信については、研究論文が5000報以上であったため、学术界については十分なされたと言える。ただ、一般には国内向けの発信はよく行われていたが、海外向けには国際シンポジウム1回のみであった。

人材育成面においては、参画時はポストクや若手のグループリーダーであったが、後に各機関の指導的立場に就任するケースが各拠点に複数あった。また、本事業終了後、新規事業の拠点長となった研究者も見られた。

実施体制・資源配分については概ね妥当であった。さらに、プログラム運営委員の半数以上が企業出身であることから、同委員会を通じ社会や産業界のニーズを取り込めたといえる。ただし、各拠点の成果を産業界に展開し、社会全体の成果とするためには、成果を拠点内で閉じぬようにすべきであった。

拠点運営については、運営メンバーから各拠点に適切な指示が行われていた。その結果、研究グループの組み換えなど体制の最適化を進め、情報伝達の一本化を図るなどの対応が取られていた。ただし、知財戦略の遂行においては、論文の多さに比べて特許出願数が少ない拠点もあるとの指摘があった。なお、特許数の多寡が単純に事業の成否を反映するものではないことは、評価委員も承知している。したがって、この指摘は、知財性判断基準および結果が明確に示されなかったことにも起因すると推察される。

② 評価概要

いずれの拠点の事業目標も元素戦略のコンセプトに沿っていた。各目標は、拠点ごとに達成度の高低はあるが、全体としては達成された。また、短期の成果の達成は概ね計画通り進捗した。対外発信については、国内の学术界においては十分なされたと言える。実施体制・資源配分については概ね妥当であった。若手研究者の活躍、リーダーが育成された。さらに、半数以上が企業出身者から成るプログラム運営委員会を通じ、社会や産業界のニーズを取り込めた。拠点運営については、運営メンバーから各拠点に適切な指示があり、体制の最適化も行われた。拠点によって特許出願数に差があったが、これは分野の性質に応じた特許戦略の違いのためと考えられる。

③ 指摘事項

- ・ 知財戦略、すなわち研究成果の何を特許化すべきか、あるいはオープン/クローズ戦略につい

での議論が拠点内でどのように行われてきたかが不明瞭であった（ただし、特許化するとなれば、取得費・事業終了後の維持費などの面で国の支援も必要である。日本版バイドール法施行後、JSTの支援のハードルが上がっている）。

- 元素戦略というキーワードは定着したが、この概念の真の実現にはかなり長い時間が必要である。今回の成果も、短期的なものから長期的なものまで様々であった。特に、長期的なテーマの成果については、定着に向けて今後どのようなサポートができるかが大きな検討課題となる。

（5）今後の展望

- 高性能な材料が多数得られたので、一日も早い社会実装が期待される。例えば、本事業を通じて生み出された材料そのものを部品に使うアプローチだけでなく、（ナノ領域の学理と製品のマクロな特性をつなぐ）階層構造や用途を加味した上で材料カタログとして公開し、ユーザ側に材料を選ばせる等の仕組みもありうる。
- 材料構造（結晶構造）の電子状態、特性・性能がセットとなった材料データが多く蓄積されていると推定されるので、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトへの引き継ぎ、そこでの発展を期待する。
- 拠点の成果を事業外にオープンにするための共通した方策が望まれる。研究成果を上げるのみならず、研究手法や概念を広げ、社会ニーズを作る出すことは、今後他のプロジェクトを運営する上でも課題となろう。