

# わが国発の新材料が世界を変える 「元素戦略プロジェクト」の推進

元素戦略 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>プログラム・ディレクター 玉尾 皓平 Kohei Tamao

## 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>活動のまとめ

- ▶ 資源の乏しいわが国発のオリジナル戦略「イノベーション創出国家戦略」：元素資源リスクをサイエンスで克服し、革新的な物質・材料で持続可能な社会を目指す
- ▶ 国益をもたらすとともに、世界から尊敬される戦略：国連SDGsの課題解決に貢献
- ▶ 戦略達成に向けた5本柱：代替、減量、循環、規制、新機能
- ▶ 2004年：コンセプト提唱、2007年：国家プロジェクト開始(文科省/経産省間の戦略的府省連携)
- ▶ 2012年：文科省：元素戦略<研究拠点形成型>10年プロジェクト開始
- ▶ 5大基幹産業(化学・輸送・電機・機械・金属)競争力強化に直結する4研究拠点体制：「磁性材料」「触媒・電池材料」「電子材料」「構造材料」
- ▶ 「学理構築」から「機能材料試作」までを着実に推進：科学的成果を産業応用・社会実装までつなぐ
- ▶ 拠点内「材料創製・電子論・解析評価」3グループ間のシナジー効果+企業アドバイザーの参画
- ▶ 大規模先端研究施設群：SPring-8、J-PARC、「富岳」「京」のフル活用
- ▶ 次世代人材育成と長期戦略：世界に冠たる研究拠点 Center of Excellence (COE) の構築と活動継続

## 元素戦略プロジェクトの歩みと基本方針



## 研究体制と達成目標

<h3>磁性材料(物材機構 NIMS)</h3> <p>代表研究者 広沢 哲 (磁性・材料ユニット 特別研究員)</p> <p>2-14-1系Dyフリーネオジム磁石および 1-12系 RFe<sub>12</sub>系究極高性能磁石材料の実現</p>	<h3>触媒・電池材料(京都大学)</h3> <p>代表研究者 田中 庸裕 (工学研究科 分子工学専攻 教授)</p> <p>貴金属フリー排ガス三元触媒の実現および 二次電池のLi、Co からNa、Feなどへの代替</p>
<h3>電子材料(東工大)</h3> <p>代表研究者 細野 秀雄 (元素戦略研究センター長・ 名誉教授)</p> <p>多存元素で実用に耐える電子材料(半導体、 透明電極・伝導体、誘電体など)の実現</p>	<h3>構造材料(京都大学)</h3> <p>代表研究者 田中 功 (工学研究科 材料工学専攻 教授)</p> <p>バルクナノメタル化・プラストン概念導入による 鉄鋼など構造材料の高強度・高延性の両立</p>

大型共通基盤施設(SPring-8/SACLA、J-PARC、「富岳」「京」)のフル活用

## 元素戦略<研究拠点形成型>事業目標：目指すべき将来像

現代社会を豊かにする  
基幹材料・技術：  
(わが国の得意分野：  
多くが、わが国の研究者、  
企業によって発見、開発)

➡ 資源リスクが顕在化

- 世界最強ネオジム磁石  
Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B / Dy  
耐熱性向上にはDy必須
- リチウムイオン二次電池  
自動車排ガス三元触媒は  
Pt、Pd、Rhなど貴金属
- 透明半導体IGZOの実現  
半導体にも希少・有害元素  
(Ga、Asなど)
- 希少元素  
(Mn、Cr、Mo、Nbなど)の  
消費の大半は鉄鋼材料

理論的解明・新材料創製・特性評価までを一体化

元素戦略プロジェクト

省エネ・環境・資源リスクの克服・超越  
5大産業(化学、輸送、電機、機械、金属)の  
基盤と競争力強化  
安心・安全は持続可能社会構築

- 目標：希少元素フリー高性能モータの実現  
EV駆動や風力発電、ロボットへの応用など
- 目標：希少元素フリー高性能二次電池の実用化  
HEMS
- 目標：希少元素や毒性元素を含まない光、電子デバイスの実用化
- 目標：希少元素軽減構造材料：強度・延性両立  
【自動車・航空機】  
・軽量化による燃費向上  
・衝突安全性の向上  
【高層建築、橋梁】  
・安心、安全を担保

## プロジェクト開始時2012年からの世界情勢の変化

「EV化の世界動向：2035年～2050年までにEV化」「COP26宣言（2021年11月：石炭火力発電段階的削減、再生エネルギーへ）」「日本国政府（2020年10月）：2050年カーボンニュートラル社会（脱化石燃料社会）」「天然元素のアラートシグナル：Liの資源枯渇の心配はないが供給リスク、レアアースや貴金属の偏在、保護貿易」  
これらの状況は、本プロジェクト「強力磁石・モーター、三元触媒貴金属低減・フリー、Naイオン電池、高効率エレクトロニクス、強靱・軽量金属材料（車体軽量化）」の重要性を再認識させるものである。

## 4拠点の活動成果の概要

### 磁性材料研究拠点

希少元素を用いない究極性能磁石材料の開発

**新しい基盤学理の創出**  
磁石の性能は「組織微細化」と「結晶粒相の非磁性化」が基本（微結晶を磁的に急峻に分離）

**永久磁石は複相材料**  
Shell: 磁気硬さを強化する元素  
Core: 高磁化を担う豊富元素  
非磁性粒相

◆画像+プロセス・インフォマティクスによる「データ駆動型磁石シミュレータ」の開発  
◆保磁力の有限温度解析：マイクロマグネティックシミュレーション等による最適組成予測

◆耐熱ネオジム磁石Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B (Dy 4-8%添加)のDyフリー化に成功：熱間加工磁石を基材、ナノシェル組織形成：企業化へ

◆希土類磁石用熱力学データベース構築：添加元素の機能発現原理の解明

◆「放射光元素分析磁気顕微鏡」@ SPring-8を開発：磁石中の元素ごとの磁性計測が可能に

◆ネオジム磁石を超える1-12系Sm(Fe, Co)<sub>12</sub>薄膜、ホウ素添加効果、Sm(Fe, Co, Ti)<sub>12</sub>微粒子バルク磁石を目指す

◆Nd-Fe-B系HDDR粉末愛知製鋼と共同研究Sm<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>N<sub>4</sub>系ボンド磁石世界最高Hc、(BH)<sub>max</sub>

◆熱力学、画像、文献DBなどを集積、磁石製造各社の共通基盤研究を共同実施

NIMSのMaterials Open Platform (MOP)

### 触媒・電池材料研究拠点

貴金属フリー排ガス三元触媒と高機能Na電池システムの創製

**新しい基盤学理の創出**

(1) CO酸化/NO還元触媒  
酸素貯蔵材料系の金属酸化物の酸素欠陥を活用：Mars-van Krevelen型反応機構の一般性確立

(2) 新しい金属・金属酸化物接合/アンカー効果の実証

(3) リチウムイオン電池を凌駕するナトリウムイオン電池実現に向けて、高容量負極、正極、高濃度電解液、ハイドレートメルト、固体電解質等の基本原理の理解と方針を確立

◆触媒領域

◆【世界初】貴金属フリー/タンデム型三元触媒【理論先行】  
[MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>+Cu/CeO<sub>2</sub>]

Rh二次元ナノフィルム  
NO還元触媒：Rh70%削減

Pd/St<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (STO)  
・NO還元能、実用触媒のPd/La-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を凌駕  
・Pdが担体STO表面に固溶、表面Pdクラスターを安定化（強いアンカー効果）と共に表面PdへCT、触媒活性向上  
・新しい金属・金属酸化物接合

◆電池領域

◆ナトリウムイオン電池フルセルの試作

◆負極材料開発：  
高容量ハードカーボンHCの創製  
MgO鑄型法（ZnO鑄型で大量合成）  
Na-HC 430-480 mAh/g  
(Li-graphite 372 mAh/g を20%越え)

◆正極材料開発：  
Na<sub>2/3</sub>Ni<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/2</sub>Ti<sub>1/6</sub>O<sub>2</sub>  
電解液の選定、安全性の考察  
フルセル：コインから円筒/ラミネート型

◆Naイオン電池用高濃度電解液  
(1) 消火性高濃度電解液  
LiN(SO<sub>2</sub>F)<sub>2</sub>/(MeO)<sub>3</sub>P=O  
(2) Hydrate Melt: 超高濃度水溶液系電解質

◆Hydrate Melt では全ての水分子がLiに配位している・軟X線発光測定@SPring-8

◆高濃度電解液でのSEI膜形成の理論

◆全固体Naイオン電池用高伝導度Na固体電解質  
Na<sub>2.88</sub>Sb<sub>0.88</sub>W<sub>0.12</sub>S<sub>4</sub>の開発  
伝導度：32mScm<sup>-1</sup>@rt

◆企業にて実車エンジン試験実施中

◆オペラントXAFS@SPring-8  
触媒の酸化・還元状態と反応性リアルタイム計測：プロジェクト終了後も維持

◆炭化水素の燃焼機構を網羅的に解析し、MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>を発見：タンデム型触媒へ

◆京都大学触媒・電池拠点 / 東京大学電池拠点として活動

### 電子材料研究拠点

「多存元素」で実用に耐える電子材料を開発

**新しい基盤学理の創出**

(1) 多存元素で電子材料開発/物質の機能は元素だけでなく、構造、欠陥、電子の動きが決め手  
(2) 水素(ヒドリド)の科学、エレクトライドの科学、窒化物半導体/強誘電体などの学理究明  
(3) 前例のない新材料を提案・開発するMDXシステムを基に「複相機能開拓拠点」を提案

◆IGZOを越える、ZSO (ZnO-SiO<sub>2</sub>系)を電子輸送層に用いたハロゲン化ペロブスカイト発光素子(PeLED)の高効率・高輝度化(500,000 cd/m<sup>2</sup>@5V: スマホの1000倍超)、フレキシブル化を実現：産業界へ移転

◆計算・MI予測を実験で実現した赤色発光の窒化物半導体CaZn<sub>2</sub>N<sub>2</sub>や鉛フリーペロブスカイト青色発光材料Cs<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>Cl<sub>6</sub>I<sub>2</sub>など：白色発光も実現

◆高い移動度と安定性を有するアルムファス酸化物半導体ITZO (In,Sn,Zn,O) 薄膜トランジスタTFTを開発。初めてのp型透明アルムファス半導体Cu-Sn-I系も

◆非ペロブスカイト系高温高誘電体CTAS (Ca<sub>3</sub>TaAl<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>14</sub>) 車載用圧電材料として、バンチャーで量産開始

◆薄膜化しても特性が劣化しない強誘電体(AI<sub>0.8</sub>Sc<sub>0.2</sub>)Nを開発：多くの企業が実用化に向け検討

◆物質中の水素の役割  
◆低濃度水素の高感度(5x10<sup>-16</sup> cm<sup>-3</sup>) 定量測定装置を開発、計測器メーカーから市販  
◆IGZO中のHの存在発見、性能劣化の起源解明、技術課題解決に貢献  
◆水素置換鉄系超伝導体LaFeAsO<sub>1-x</sub>H<sub>x</sub>で超伝導の元になる磁気秩序相発見@KEK-PF, ミュオン, J-PARC中性子

◆電子論  
電子論、MI、ハイスルーブツスクリーニングなどを基にMDXシステム構築へ

◆解析評価  
偏向X線光電子分光により原子軌道固有の価電子帯の解析可能@SPring-8

◆貴金属を用いないアンモニア合成Ni/CeN 触媒：窒素欠陥で窒素活性化、Niで水素活性化【Ruに匹敵】

東工大元素戦略研究センター設立

### 構造材料研究拠点

金属構造材料の強度・延性両立の学理構築と革新的材料の創製

**新しい基盤学理の創出**

構造材料の塑性変形の素過程についての新概念【プラストン(変形子)】=  
特異応力場における原子の集団励起を提唱  
金属材料の強度(強さ)と延性(ねばさ)を両立させ、疲労破壊を抑制する学理を構築。究極の構造材料へ

◆第一原理フォノン計算世界標準プログラムPhonopyや加速分子動力学法などの新手法開発：プラストンに関する原子集団運動の再現・予測

◆プラストン過程の実験的評価・解析@SPring-8、中性子J-PARC、透過型電子顕微鏡

◆マイクロ力学特性試験法により、単結晶変形特性を評価

◆Ti合金、Mg合金、Cu合金、複合変形子鉄鋼材料などプラストン誘起延性材料を創出

◆材料創製

◆バルクナメタル化により高強度・高延性両立を達成

◆解析評価

◆N. Tsuji, S. Ogata, H. Inui, I. Tanaka et al. Scripta Mater. 2020, "The Plaston Concept", Springer, 2022年でPlastonを世界に発信  
京都大学構造材料元素戦略研究拠点/NIMS構造材料研究拠点

## プロジェクトのバトンをつなぐ

文科省 元素戦略<研究拠点形成型>10年プロジェクト  
産業競争力に直結する材料拠点【磁性・触媒電池・電子・構造材料】で多大の成果  
基盤学理創出・COE構築/データ蓄積/素材試作・産業界へ橋渡し/人材育成

物質材料研究基盤の構築へ向けた継続的取り組み

「元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探索空間の開拓」  
「CREST(研究総括 北川宏)」および「さきがけ(研究総括 陰山洋)」(2021年度～)

「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(2021年度～30年度)」

材料創製・計測・理論計算にデータサイエンスが有機的に連携  
DX化推進でマテリアル革新力を強化