



Element
Strategy Initiative:
To Form Core
Research Centers

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

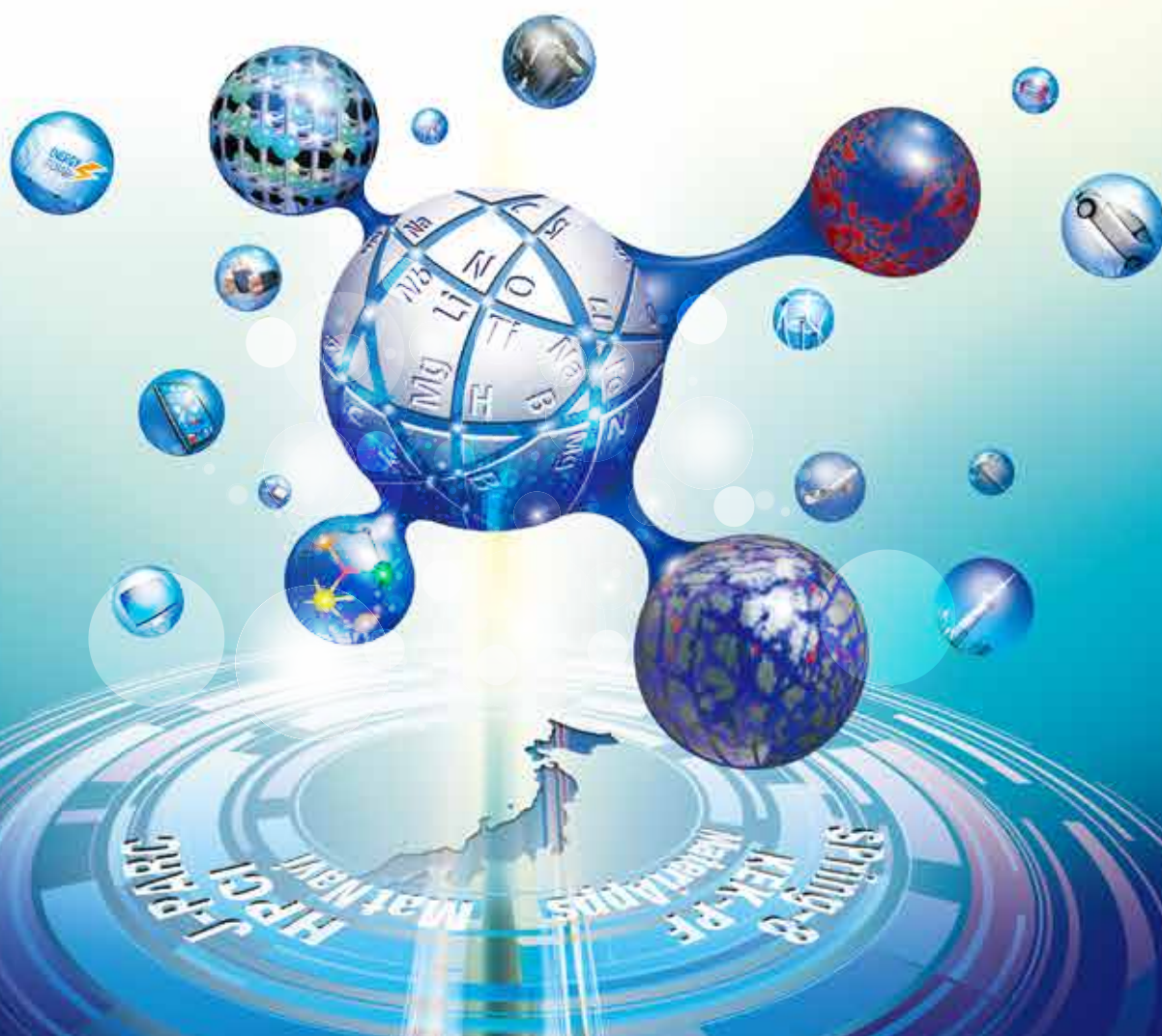
地球を

お も て な し
O Mo Te Na Si

「元素戦略プロジェクト」は2012年に発足。材料の機能や特性を決めている元素のサイエンスを追究し、イノベーションの創出と産業応用を促進しています。

Omotenashi (O Mo Te Na Si): Being Hospitable Hosts to the Earth

The Earth is a collection of diverse elements. Our existence is made possible by countless materials produced from these elements. In order to build a sustainable future, we need an “element strategy” for developing superior materials from the limited element resources on Earth. The Element Strategy Initiative was launched in 2012 to pursue the science of elements that determine material functions and properties and for encouraging innovation and industrial applications.



基礎から応用に直結する研究開発を 4拠点で進めています。

Working to develop practical applications directly
from basic research at four research centers.

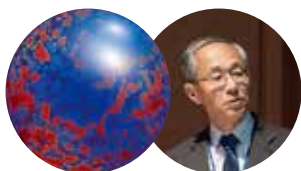


元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>
プログラム・ディレクター (PD)
玉尾 皓平

Kohei Tamao
Program Director, Element Strategy Initiative :
To Form Core Research Centers

磁性材料研究拠点

The Elements Strategy Initiative Center for Magnetic Materials (ESICMM)



設置機関：物質・材料研究機構 (NIMS) Core: National Institute for Materials Science (NIMS)

代表研究者：広沢 哲 Satoshi Hirose, Director General

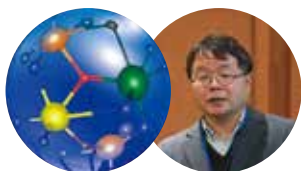
連携機関：東北大学、産業技術総合研究所、東京大学、東京大学物性研究所、京都大学、
高エネルギー加速器研究機構、高輝度光科学研究センター、名古屋大学、
北陸先端科学技術大学院大学、東京工業大学、九州大学、東北学院大学、兵庫県立大学
Collaborating institutes: Tohoku University, the National Institute of Advanced Industrial
Science and Technology, the University of Tokyo, the Institute for Solid State Physics at
the University of Tokyo, Kyoto University, the High Energy Accelerator Research
Organization (KEK), the Japan Synchrotron Radiation Research Institute, Nagoya
University, the Japan Advanced Institute of Science and Technology, the Tokyo Institute
of Technology, Kyushu University, Tohoku Gakuin University, and the University of Hyogo

開発対象：電気エネルギーと機械エネルギーの変換に適用されているバルク永久磁石材料

開発目標：希少元素フリーの新規高性能永久磁石材料の創製

電子材料研究拠点

Tokodai Institute for Element Strategy (TIES)



設置機関：東京工業大学 Core: Tokyo Institute of Technology

代表研究者：細野秀雄 Hideo Hosono, Representative

連携機関：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
Collaborating institutes: National Institute for Materials Science, High Energy Accelerator
Research Organization (KEK), and the University of Tokyo

開発対象：半導体、透明電極をはじめとする電子材料全般

開発目標：多存元素を使って革新的な機能を実現

触媒・電池材料研究拠点

Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries (ESICB)



設置機関：京都大学 Core: Department of Molecular Engineering, Kyoto University

代表研究者：田中庸裕 Tsunehiro Tanaka, Director

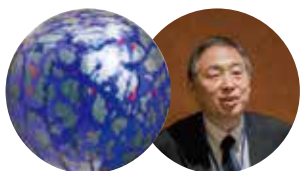
連携機関：東京大学、自然科学研究機構分子科学研究所、九州大学、熊本大学、東京理科大学
Collaborating institutes: The University of Tokyo, the Institute for Molecular Science of the
National Institutes of Natural Sciences, Kyushu University, Kumamoto University, and the
Tokyo University of Science

開発対象：固体触媒と二次電池材料

開発目標：希少元素フリーの新規高性能触媒と二次電池を実現

構造材料研究拠点

Elements Strategy Initiative for Structural Materials (ESISM)



設置機関：京都大学 Core: Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University

代表研究者：田中 功 Isao Tanaka, Director

連携機関：東京大学、大阪大学、物質・材料研究機構、九州大学、経産省ISMA、内閣府SIP
Collaborating institutes: The University of Tokyo, Osaka University, the National Institute
for Materials Science, Kyushu University, the Innovative Structural Materials Association
(METI), and the Strategic Innovation Promotion Program (the Cabinet Office)

開発対象：実用材料として適用している金属材料、高靱性セラミックス材料、それらの複合材料

開発目標：強度と靱性が両立する究極材料の実現



希少元素に頼らない 永久磁石の開発

磁性材料研究拠点



GL: 三宅 隆
産業技術総合研究所



研究の背景

- 高性能磁石材料の市場の拡大
- ネオジム磁石の特性を超える新材料が待望
- 希少元素に頼らない新材料への期待

研究のポイント

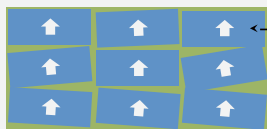
- 電子論に基づいた高飽和磁化と高結晶磁気異方性の解明へ向けた理論構築
- 計算、データ駆動、理論を組み合わせた効率的な新物質探索
- 高鉄濃度希土類化合物 NdFe_{12}N の高磁気特性の計算予測と見える化

研究概要

1

高性能磁石に求められる条件

微細構造



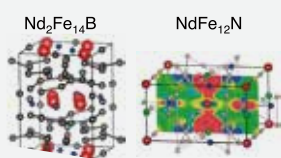
↑ 副相化合物

- ・Nd酸化物等
- ・アモルファス相

<副相の要件>

- ・高保磁力を発現する微細組織 (磁化反転抑制など)

主相化合物



<主相の要件>

- ・高飽和磁化
- ・高結晶磁気異方性
- ・高キュリー温度

図1 高性能永久磁石の主相には、高飽和磁化、高結晶磁気異方性、高キュリー温度が、副相には、主相間磁気結合を分離して磁化反転を抑制する効果が求められる。

研究概要

2

希土類磁石化合物の磁性の発現機構

遷移金属

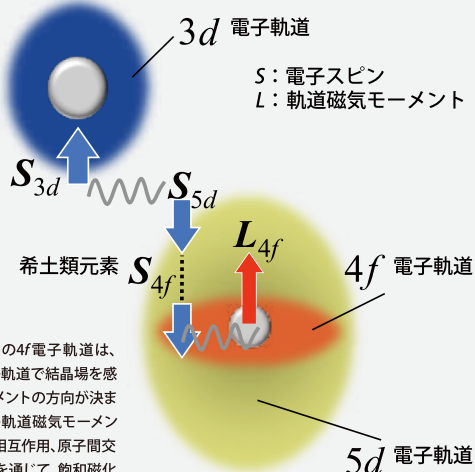


図2 希土類元素の4f電子軌道は、周囲にある5d電子軌道で結晶場を感じ、軌道磁気モーメントの方向が決まる。この4f電子の軌道磁気モーメントが、スピン軌道相互作用、原子間交換結合、軌道混成を通じて、飽和磁化やキュリー温度と関連する遷移金属の3dスピンの影響を与えている。

研究概要

3

第一原理計算データで探る 磁化とキュリー温度の最大値

材料予測手順

ハイスループット計算で数百点のデータを可視化
→ピーク近傍の条件を満たす材料を探索し、結晶構造の安定性を計算して候補物質を絞る
→合成の可能性がある範囲のものを抽出し詳細な特性を計算
→実際に化合物を合成し特性評価

破線より左側では強磁性が不安定

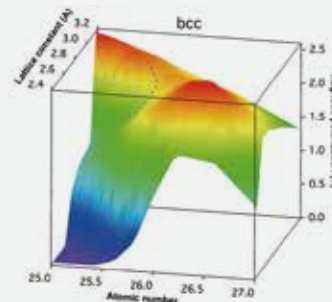


図3 bcc構造を仮定し、格子定数と仮想的な原子の原子番号の関数として計算された磁化の値。磁化は $a=2.65 \text{ \AA}$ 、 $Z=26.4$ のあたりでドームのような構造のピークを持っており、最大値は $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ よりもはるかに大きい2.66 Tを示す。

研究概要

4

磁性発現機構の見える化

- ・磁石特性に影響を与える電子スピン密度だけを可視化
- ・透明樹脂の中に結晶構造と電子を描写する3Dプリント技術を開発
→理解や議論が深まり、新しいアイデア創出をサポート

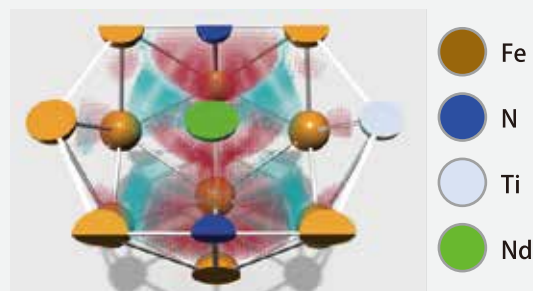


図4 $\text{NdFe}_{11}\text{TiN}$ と $\text{NdFe}_{11}\text{Ti}$ の電子スピン磁気モーメントの差は、窒素原子に近いところより顕著であることが可視化されている。

ロードマップ

- ・機械学習・AIによる新磁石化合物探索と組成最適化
- ・保磁力機構の解明

応用分野

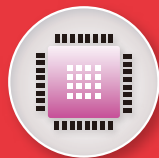
- ・電動車用駆動モーター
- ・産業用ロボット
- ・風力発電機
- ・ドローン等
- ・家電

問い合わせ先

物質・材料研究機構
元素戦略磁性材料研究拠点 企画室
esicmm-info@ml.nims.go.jp



元素戦略
Element Strategy Initiative:
To Form Core Research Centers



新しい材料設計指針と 新機能高性能電子材料

電子材料研究拠点



GL: 細野秀雄
東工大元素戦略拠点代表



研究の背景

- GDPへの寄与の大きい電機・電子産業を支える電子材料の大型国家プロジェクトは多数
- 旧来の材料設計指針は半導体ならダイヤモンド構造、誘電体ならペロブスカイトと固定化
- 従来の成功体験に拠る固定化した攻め方から意図的に離れた多存元素の新しい視点が必要

研究のポイント

- 物性論、電子論、計算化学、インフォマティクス等を駆使して新材料候補と合成法を探索
- 超高圧や超高真空等の極限環境を含む材料合成で迅速な試料試作
- 放射光 (KEK-PF, SPring-8)、中性子線、ミュオン (J-PARC) を駆使する先端解析で迅速なフィードバック

研究概要

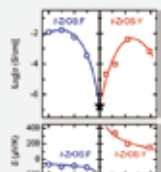
1

M.I.や分子軌道等の 新コンセプトによる 新しい直接遷移型両極性半導体



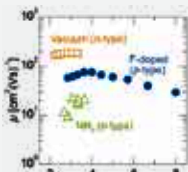
理論予測通りの
赤色発光

図1 M.I.で発見し高圧合成した窒化物半導体新物質 CaZn_2N_2



両極性ドーピング

図2 分子軌道の観点で設計した前周期遷移金属の硫酸化物半導体



ホール移動度

図3 格子間フッ素によりp型ドーピングした太陽電池応用を狙う窒化物半導体 Cu_3N

研究概要

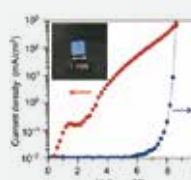
2

次世代自発光平面ディスプレイ用 半導体新材料



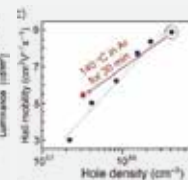
半値幅16 nm、
最高輝度
 $180,000 \text{ cd/m}^2$ の
緑色エレクトロ
ルミネッセンス

図4 新酸化物半導体 Zn-Si-O を電子輸送層に用いる低電圧高輝度ペロブスカイトハロゲン化合物半導体LED



Zn-Si-Oからの
電流注入による
エレクトロ
ルミネッセンス

図5 0次元電子構造の高効率青色発光鉛フリー無機窒化物半導体: $\text{Cs}_2\text{Cu}_2\text{I}_3$



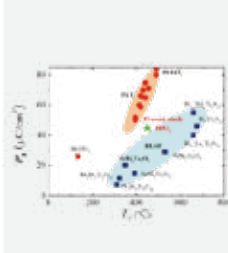
ホール移動度

図6 低温塗布形成可能な高移動度p型透明アモルファス半導体: Cu-Sn-I

研究概要

3

パワーエレクトロニクス用 高温安定高誘電率 非ペロブスカイト系誘電体



従来材料より
高 T_c で高 P_5

図7 高い T_c と P_5 を示す蛍石構造強誘電体: $\text{HfO}_2\text{:Y}$

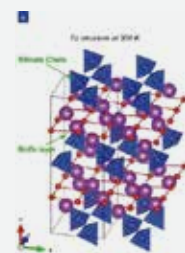


図8 車載用安定性規格を満たすケイ酸塩系強誘電体: $(\text{Bi,La})_2\text{SiO}_5$



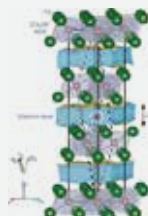
2インチ単結晶と
センサーモジュール

図9 車載用圧電素子用ランガサイト材料: CTAS ($\text{Ca}_3\text{TaAl}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$)

研究概要

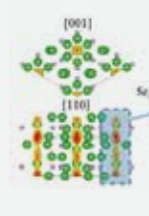
4

低温低圧アンモニア合成触媒への 実用が近い 無機固体エレクトライド材料



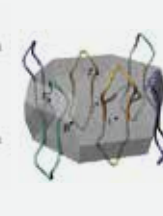
Ca_2N の結晶構造

図10 実用化検討が進む材料系の基となった2次元エレクトライド



結晶構造と
電子密度分布

図11 遺伝的アルゴリズムで探索した金属間化合物の新物質1次元エレクトライド: Sr_3P_3



2次元
エレクトライド Y_2C の
ノードライン

図12 トポロジカルエレクトライドの概念の創出と候補物質の提案

ロードマップ

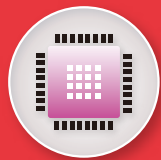
- 新コンセプトと新材料創出頻度の定常化
- 産業界への技術移転
- ポスト元素戦略へのコンセプト提案

応用分野

- 平面ディスプレイ用高効率・低コスト半導体材料
- 車載等パワーエレクトロニクス用高温安定高誘電率誘電体
- 触媒応用エレクトライド材料

問い合わせ先
東工大元素戦略拠点
ties@mces.titech.ac.jp





水素の役割・機能・状態の 解明と高感度定量

電子材料研究拠点



GL: 細野秀雄
東工大元素戦略拠点代表



研究の背景

- 酸化物中に $\geq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ も含まれるにも関わらずその存在が無視されてきた水素
- 水素が物質の局所状態や電子状態を大きく左右することが実験的、理論的に示唆
- 水素の定量と状態特定、役割と機能の解明により機能性元素としての積極利用が重要

研究のポイント

- 極限参照試料として超低水素濃度薄膜とその濃度を測定する超高感度定量法・装置を開発
- NMR、赤外吸収、中性子、ミュオン等の水素敏感プローブによる分析と第一原理計算を駆使
- 半導体薄膜中の水素量と状態とその薄膜を活性層とする電子素子の安定性の関係を調査

研究概要

1

水素の超高感度定量法と 測定装置の開発

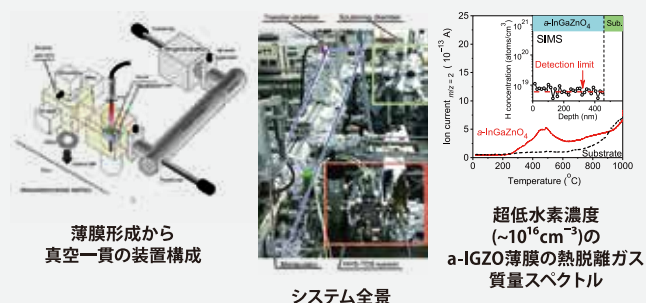


図1 SIMSを2桁以上回る高感度 ($\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) を実現した水素の超高感度定量法と測定装置と超低水素濃度 a-IGZO 薄膜での性能実証

- 超高真空システム全体の徹底した低脱ガス
- 成膜装置からの真空一貫システム、高精度イオン注入と極微量ガス導入による較正法、により実現。
- 極限低濃度参照試料の作成に活用

研究概要

2

固体酸化物中の 水酸化物に隠された水素化物 (ヒドリド、水素負イオン) の発見

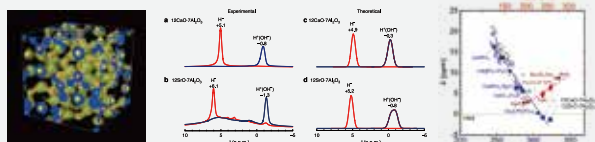


図2 固体酸化物中の水素化物(ヒドリド)の存在証明

- マイエナイトやアバタイト結晶の ^1H NMR スペクトルの分裂を観測
- 水素含有結晶構造モデルの DFT 計算は従来の常識とは異なる H^- と H^+ の化学シフト逆転の可能性を理論予測

研究概要

3

アモルファス酸化物半導体中の 水素負イオンの発見と 電子デバイス不安定性の起源の解明

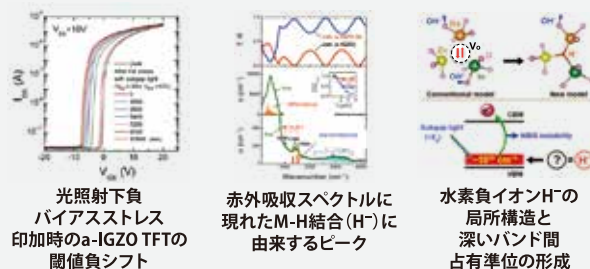


図3 a-IGZO 薄膜中の水素負イオンと TFT 不安定性の起源

- a-IGZO をはじめとするアモルファス酸化物半導体 TFT は照射下負バイアス印加時に閾値の大きな負シフトを起こす
- 赤外吸収スペクトルと水素含有モデルの DFT 計算で金属カチオンと水素が結合したヒドリド (水素は負イオン H^-) を観測
- 酸素欠損 V_O の位置に取り込まれた水素原子が周囲の金属カチオンと結合し水素負イオン H^- を形成し、これが NBIS 不安定性の起源となる価電子帯直上の深い占有準位を形成

研究概要

4

鉄系超伝導体に超伝導相を発現させる 水素による電子ドーピング

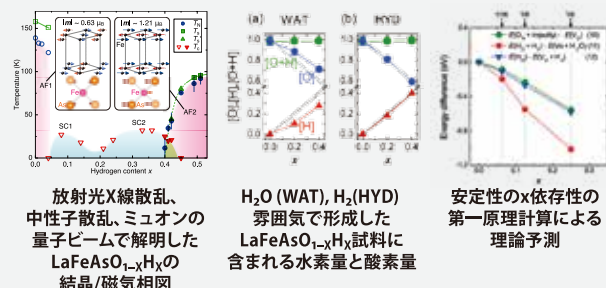


図4 鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ の水素ドーピングによる超伝導相発現と酸素を置換しない水素の状態

- 鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ はドーピング水素量に応じて二つの反強磁性の母相 (AF1, AF2) を基にした二つの超伝導相 (SC1, SC2) を有する
- 実験的に水素量と酸素量は相補的であることが判明
- 第一原理計算では酸素空孔の位置を水素負イオン H^- が占める場合が最も安定で、酸素欠損は H^- で安定化する描像の一般性を示唆

ロードマップ

- 材料機能やデバイス特性との相関解明の促進
- 誘電体材料への展開
- 水素機能性電子材料への展開

応用分野

- 電子材料・電子デバイスの性能向上や安定化
- 水素化物を含む水素機能材料
- 微量水素量分析

問い合わせ先
東工大元素戦略拠点
ties@mc.es.titech.ac.jp



元素戦略
Element Strategy Initiative
To Form Core Research Centers



貴金属を減量した 新規自動車触媒の開発

触媒・電池材料研究拠点



GL: 田中 庸裕
京都大学大学院工学系研究科



研究の背景

- 自動車触媒に用いる白金族元素 (PGM) の使用量節減
- 高活性な触媒ナノ粒子ほどシンタリングしやすく触媒寿命と二律背反する
- 触媒活性サイトは主に貴金属微粒子表面と考えられている

研究のポイント

- プラズマ法によって調製した金属Rhナノ薄膜からなる高密度メタルハニカムを開発
- ナノ薄膜構造によりRhの触媒活性が飛躍的に向上
- サポート材の機能を利用した触媒の高機能化

研究概要

1

触媒調製のパラダイムシフト

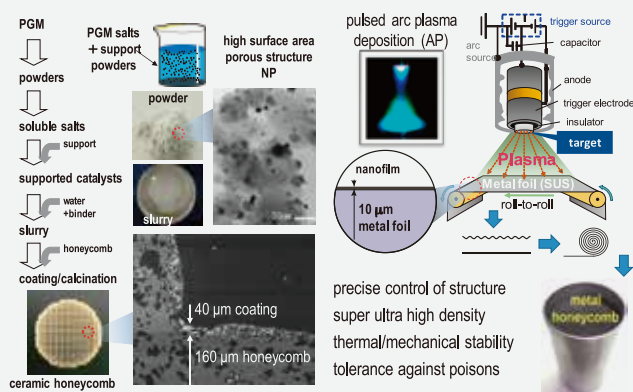


図1 (左)従来の湿式触媒調製法。金属ナノ粒子を含む触媒粉末からなるスラリーをセラミックハニカムにコーティングして得られる。(右)本研究で開発した乾式触媒調製法。金属をプラズマ化して金属箔上にナノ薄膜を形成後、ハニカム形状に成型する。

研究概要

2

Rhナノ薄膜型ハニカム触媒の触媒特性

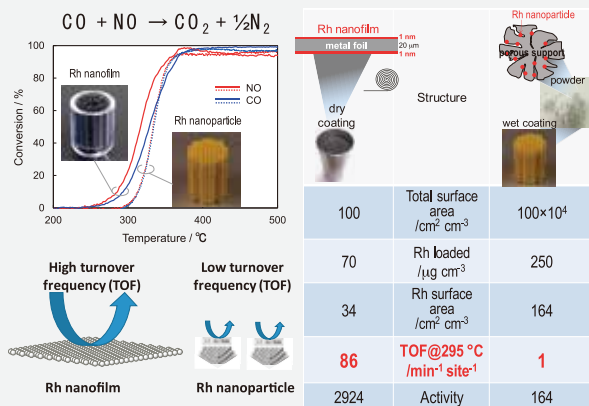


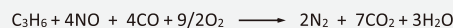
図2 Rh薄膜型メタルハニカムと従来型ハニカムの触媒性能。0.1% NO、0.1% CO、N₂ balance。GHSV = 1.2×10⁵ h⁻¹。

研究概要

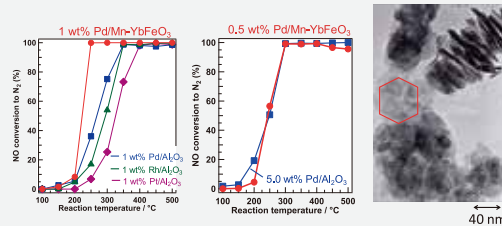
3

触媒担体の高機能化による Pd使用量低減型触媒

Model Reaction for purifying automotive exhaust gas



C₃H₈: residual component due to gasoline, CO: component formed by incomplete combustion of gasoline
NO: component formed under high temperature (> 1000 °C) in engine



The catalytic activity of 0.5 wt% Pd/Mn-YbFeO₃ is comparable to that of 5.0 wt% Pd/Al₂O₃.

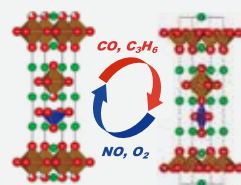
図3 (左) Mn修飾六方晶YbFeO₃保持Pd触媒のNO還元活性(右)六角板状ナノ結晶の形態を有するMn-YbFeO₃のTEM像

研究概要

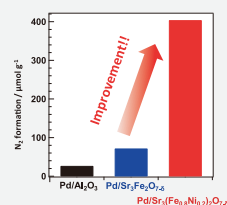
4

新規酸素吸蔵放出型触媒担体の開発

Redox behavior of Sr₃(Fe_{0.8}Ni_{0.2})₂O_{7-δ}



Efficiency of NO reduction



Mechanism for NO reduction on Sr₃(Fe_{0.8}Ni_{0.2})₂O_{7-δ}

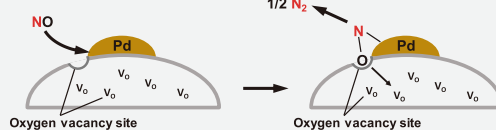


図4 (左上) 自動車排ガス浄化反応時のSr₃(Fe_{0.8}Ni_{0.2})₂O_{7-δ}の構造変化(右上) Sr₃(Fe_{0.8}Ni_{0.2})₂O_{7-δ}中に存在する酸素欠陥サイトのNO還元効率(下) Pd/Sr₃(Fe_{0.8}Ni_{0.2})₂O_{7-δ} 上でのNO還元メカニズム

ロードマップ

- ナノ薄膜構造によって高活性が発現するメカニズムの解明
- 多様な化学反応に有効なナノ薄膜触媒の開発
- 触媒担体の結晶構造を利用した新規触媒材料の開発

応用分野

- 自動車排気浄化触媒
- 超小型触媒およびスマートリアクタ

問い合わせ先
京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点
admin@esicb.kyoto-u.ac.jp





火を消してくれる安全な 二次電池用電解液

触媒・電池材料研究拠点



GL: 山田 淳夫
東京大学大学院工学系研究科



研究背景

- 二次電池には発火・爆発のリスクがある
- 電解液に難燃剤を加えると電池の充放電サイクル特性が大きく低下
- 難燃性と電池性能の両立を目標にした

研究のポイント

- 一般的な消火剤リン酸トリメチル (TMP) に通常の3倍濃度の特殊な電解質を溶かすと、負極に非常に安定な被膜ができる。
- これにより、充放電を1000回以上行ってもほぼ劣化ゼロの特性を達成
- 「京」コンピュータを用いた電子状態計算により、安定被膜形成メカニズムを解明

研究概要

1

難燃性と反応可逆性の両立へ

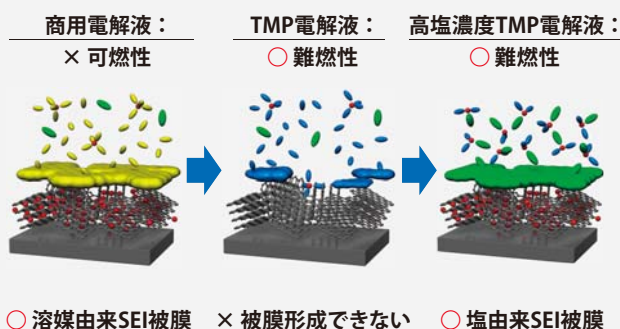


図1 安全な蓄電池電解液の設計概念。電解質塩を高濃度化するだけで、界面の性質が劇的に変化し、安定動作が可能となる。これまで使えなかった溶媒が機能する(今回は消火性TMP)。

研究概要

2

電池用ハードカーボン負極の サイクル特性

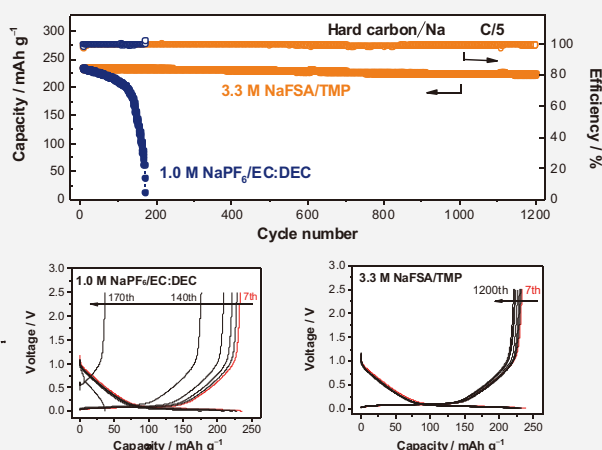


図2 Na-ion電池用ハードカーボン負極の繰り返しサイクルでの容量保持: 本研究で開発された有機電解液は1200回以上(1年半以上)の安定な充放電サイクルを達成

研究概要

3

燃焼性の比較



図3 (左) 従来の1.0 M NaPF₆/EC:DEC (1:1 by vol) 電解液、(右) 研究室で作製した3.3 M NaFSA/TMP電解液の燃焼テスト

研究概要

4

高濃度電解液の電子状態

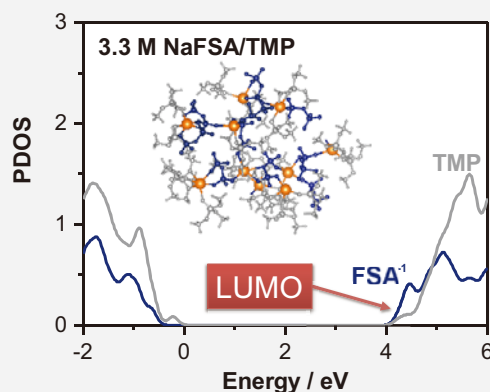


図4 DFT-MDシミュレーションで得られた3.3 M NaFSA/TMP溶液の電子状態と配位構造(挿入図)。Na⁺カチオン、FSA⁻アニオン、TMP溶液はそれぞれオレンジ色、青色、灰色で示す。射影状態密度(pDOS)は、LUMOがFSA⁻に局在しており、最初にFSAが還元された結果、NaFSA塩由来の不動態被膜が形成されていることを示している。

ロードマップ

- 電解質に対する既成概念の打破
- 低コスト化と産業展開
- 量産に向けた最適化

応用分野

- 民生用電池
- 自動車用電池
- 大型定置用電池

問い合わせ先

京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点
admin@esicb.kyoto-u.ac.jp





高強度と高延性を具備する バルクナノ六方晶金属材料

構造材料研究拠点



GL: 辻 伸泰

京都大学大学院工学研究科

研究の背景

- ・安心・安全な社会を支える構造材料は、強度(つよさ)と延性(ねばさ)を具備することが不可欠である。
- ・チタンやマグネシウム合金は軽量で高い強度を有するが、六方結晶構造に起因して延性に乏しいため用途が限定される。
- ・合金元素の添加ではなく、バルクナノ組織化による強度と延性両立を目標とした。

研究のポイント

- ・サブミクロンまでの様々な平均粒径を有する完全再結晶チタンおよびマグネシウム合金の作製に成功した。
- ・バルクナノメタル化することで、高強度と高延性を両立させることに成功した。
- ・バルクナノメタル材料における延性向上メカニズムを、電子顕微鏡、中性子回折実験と計算科学によって原子レベルから解明した。

研究概要

1

様々な平均粒径を有する 完全再結晶材料

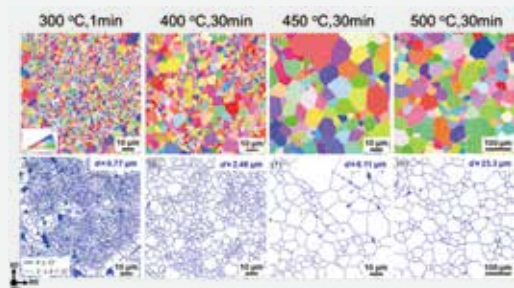


図1 高圧ねじり(HPT)法と焼鈍により作製した、種々の平均粒径を有する完全再結晶マグネシウム合金の電子線後方散乱回折(EBSD)法による微細構造。(上)逆局点図(IPF)マップ。結晶粒の結晶方位を色で識別している。(下)粒界(GB)マップ。青と緑の線は、それぞれ大角粒界および小角粒界を表す。

研究概要

2

バルクナノ材料において強度と 延性の両立に成功

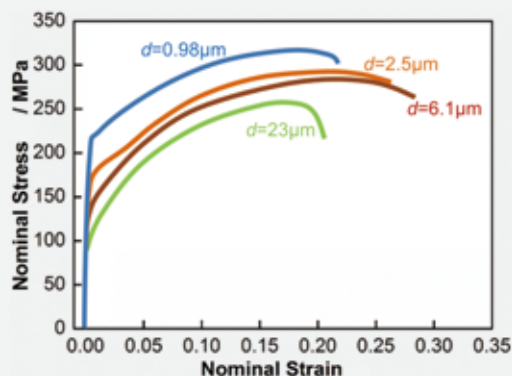


図2 4種の異なる結晶粒径dを有するマグネシウム合金の応力-ひずみ曲線。

研究概要

3

バルクナノ材料における 延性向上機構の解明

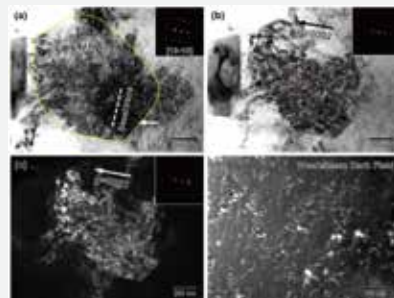


図3 平均粒径 $d=0.98\mu\text{m}$ の超微細粒マグネシウム合金試料をひずみ0.095まで引張変形させた後の透過電子顕微鏡観察結果。(a) [10-10]晶帯軸から観察した明視野像、(b)(c)回折ベクトル $g=(0002)$ での二波条件での明視野および暗視野像。(d) (b)図に示した領域を拡大しウィークビーム法で観察した結果。マグネシウムでは通常活動しない成分を持つ転位が多数観察された。このような特異な転位は、応力レベルが高くなった時に粒界で核形成したものと考えられる。

研究概要

4

バルクナノメタルにおける 延性向上機構の新しい変形子概念 による包括的な理解

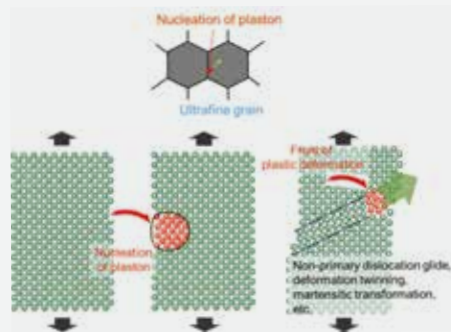


図4 バルクナノ材料では、非主すべり転位、変形双晶、変形誘起マルテンサイト変態のような特異な塑性変形機構が実験的に観察される。これらは、変形子という新しい概念により包括的に説明することが可能である。すなわち、十分に高い応力が印加されると、表面や粒界のように結晶格子が不完全な部分で集団的な原子の励起が起こり、変形子の核形成が生じる。塑性変形フロントにおいても、同様の現象が起こっていると考えられる。

ロードマップ

- ・新しい変形子概念に基づく高強度と高延性を具備する鉄鋼材料の創製
- ・多様な化学結合を有する構造材料における変形子解明と脆性克服への指針獲得

応用分野

- ・輸送用機器
- ・建造物
- ・生体材料

問い合わせ先

京都大学 構造材料元素戦略研究拠点
admin@esism.kyoto-u.ac.jp



元素戦略

Element Strategy Initiative:
To Form Core Research Centers