



文部科学省  
元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉

第5回 シンポジウム

# 革新的な材料で カーボンニュートラルな 社会を構築

2022年2月3日(木)・4日(金)

東京大学 伊藤学術研究センター 謝恩ホール/  
オンラインハイブリッド開催



# 文部科学省 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> 第5回シンポジウム開催にあたって



## 玉尾 皓平 Kohei Tamao

文部科学省 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

資源の乏しいわが国発のオリジナル戦略「元素戦略」は、元素資源リスクをサイエンスで克服し、安心・安全な持続社会を目指すイノベーション創出国家戦略です。

「元素戦略」は2004年のJSTの研究集会で提唱されるや否や、文科省では、ナノテクノロジーに次ぐ戦略目標に位置づけられ、2007年には経産省との戦略的府省連携の下で研究プロジェクト<産官学連携型>を開始、2010年にはJSTのCRESTとさきがけ研究が展開されました。これらの取り組みは、新しい「元素戦略」コンセプトの周知と共に、研究者および研究シーズ/ニーズの発掘、人材育成といった、いわば「元素戦略」の育成期間の取り組みと位置付けられるものです。これらの経験を踏まえ、2012年にわが国の5大基幹産業に直結す

る「磁性材料」「触媒・電池材料」「電子材料」「構造材料」4拠点体制の元素戦略<研究拠点形成型>10年プロジェクトを開始、産業競争力の強化と共に安心・安全な持続社会の構築を目指して取り組んできました。

科学技術の進歩は日進月歩、それにも増して、この10年間で「元素戦略」に関わる世界情勢は大きく変わってきました。「2015年パリ協定」「国連のSDGs」「世界各国による2050年までのEV化」、「COP26宣言：石炭火力発電の段階的削減、再生エネルギーへの転換」、「日本国政府Society 5.0および2050年カーボンニュートラル社会(脱化石燃料社会)」、「リチウムの供給リスク、レアアースや貴金属の偏在・米中の保護貿易」、などなど枚挙にいとまがありません。

本プロジェクトはこれらの状況変化にもしっかりと対応しつつ進めてきました。地道な研究による独自の基礎学理の創出による世界に冠たるCOE (Center of Excellence) の構築とともに、イノベーション創出につながる成果を多数挙げております。すでに社会実装に繋がっているものも少なくありません。

この10年プロジェクトは本年度をもって締めくくりますが、これまでに培った科学的知見・ノウハウ、膨大な情報、4拠点をコアとする全国規模の研究体制、研究人材という貴重な財産を活かし、DX化推進によるマテリアル革新力強化という国の新たな方針とも呼応しつつ、「元素戦略」を基幹概念とする多様な戦略研究を産学官一体となって強化・発展的に推進すべきものと考えます。

これらのことを内外にアピールすべく「第5回シンポジウム」を開催することとした次第です。忌憚のないご意見、ご支援・ご鞭撻のほどを、よろしくご願ひ申し上げます。

## 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>の運営関係者

本プロジェクトは下記のメンバーを中心に運営されてきたものです(敬称略、所属は就任当時のもの)。ここに記して謝意を表します。

### 1) 歴代 PD

村井眞二 (2012～2015年度)  
澤岡 昭 (2012～2017年度)  
玉尾皓平 (2018～2021年度)

### 2) 2012～2015年度「運営統括会議」

#### 【構成員】

主査：村井眞二 (奈良先端科学技術大学院大学)

副査：澤岡 昭 (大同大学)

射場英紀 (トヨタ自動車株式会社)  
長我部信行 (株式会社日立製作所)  
鈴木茂樹 (トヨタ自動車株式会社)\*  
高尾正敏 (大阪大学)\*\*  
田中一宜 (科学技術振興機構)\*  
玉尾皓平 (理化学研究所)  
福山秀敏 (東京理科大学)  
村上正紀 (立命館大学)  
前田正史 (東京大学)  
三島良直 (東京工業大学)

#### 【専門委員】

魚崎浩平 (物質・材料研究機構)  
加藤雅治 (東京工業大学)  
北岡康夫 (大阪大学)  
新庄博文 (株式会社豊田中央研究所)  
瀬戸山 亨 (三菱化学株式会社)  
寺倉清之 (産業技術総合研究所)  
友田 陽 (茨城大学)  
宮内昭浩 (株式会社日立製作所)

### 3) 2016年度以降「プログラム運営委員会」

PD 澤岡 昭 (2012～2017年度)  
PD 玉尾皓平 (2018～2021年度)  
PO 中山智弘 (科学技術振興機構)  
PO 林 善夫 (科学技術振興機構)\*  
PO 村上正紀 (立命館大学)  
射場英紀 (トヨタ自動車株式会社)  
魚崎浩平 (物質・材料研究機構)  
潮田浩作 (日鉄住金総研株式会社)  
梅村 晋 (トヨタ自動車株式会社)\*  
瀬戸山 亨 (三菱ケミカル株式会社)  
高尾正敏 (大阪大学)\*\*  
田中裕久 (関西学院大学)  
堂坂健児 (本田技研工業株式会社)\*  
徳永雅亮 (元日立金属株式会社)  
福山秀敏 (東京理科大学)  
宮内昭浩 (東京医科歯科大学)  
結城正記 (旭硝子株式会社)

### 4) プロジェクト所管「文部科学省研究振興局」

#### ●研究振興局長(2012年度以降のリスト)

吉田大輔 2012年 1月 6日 - 2014年 1月17日  
小松親次郎 2014年 1月17日 - 2014年 7月25日  
常盤 豊 2014年 7月25日 - 2015年 8月 4日  
小松弥生 2015年 8月 4日 - 2016年12月 6日  
関 靖直 2016年12月 6日 - 2018年 1月16日  
磯谷桂介 2018年 1月16日 - 2019年 7月 9日  
村田善則 2019年 7月 9日 - 2020年 7月28日  
杉野 剛 2020年 7月28日 - 2021年 9月21日  
池田貴城 2021年 9月21日 -

#### ●ナノテクノロジー・材料開発推進室長

坂本修一 2010年7月30日 - 2012年3月31日  
永井雅規 2012年4月 1日 - 2013年3月31日  
前田 豊 2013年4月 1日 - 2014年7月24日

#### ●参事官(ナノテクノロジー・物質・材料担当)

長野裕子 2014年7月25日 - 2015年8月 3日  
西條正明 2015年8月 4日 - 2017年1月12日  
岡村直子 2017年1月13日 - 2017年7月10日  
渡辺正実 2017年7月11日 - 2017年7月17日  
齊藤康志 2017年7月18日 - 2019年3月31日  
黒澤弘義 2019年4月 1日 - 2021年3月31日  
江頭 基 2021年4月 1日 -

#### ●参事官(ナノテクノロジー・物質・材料担当)付 文部科学省調査員

初 代 本間穂高 (新日鉄株式会社)  
2 代目 庄司哲也 (トヨタ自動車株式会社)  
3 代目 西村慎也 (三菱電機株式会社)  
4 代目 佐伯友之 (旭化成株式会社)  
5 代目 野瀬雅文 (トヨタ自動車株式会社)

\* 途中で退任

\*\* 2021年9月21日ご逝去：多大なるご貢献への謝意と共に謹んで哀悼の意を表します。

1 日目 2022年2月3日(木) 司会 野瀬 雅文 文部科学省

<挨拶>

講演開始 時間		本誌掲載 ページ
10:00	末松 信介 文部科学大臣 松尾泰樹 内閣府科学技術・イノベーション推進事務局長 大竹真貴 経済産業省 製造産業局金属課 金属技術室長	

基調講演 座長 射場英紀 (トヨタ自動車)

10:10	元素資源問題：金属資源の世界動向から見る元素戦略の将来展望	07
	加留部 淳 豊田通商	
10:30	自分の力で世界を変える：世界最強ネオジム磁石の開発	08
	佐川 真人 大同特殊鋼(元)住友特殊金属	

国家基盤「元素戦略」の創出と推進 座長 射場英紀 (トヨタ自動車)

10:50	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	09
	玉尾 皓平 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	

元素戦略プロジェクトの社会インパクト 座長 射場英紀 (トヨタ自動車)

11:10	戦略的取組みによる自動車モーター用重希土類元素フリー磁石開発	13
	尾崎 公洋 産業技術総合研究所	
11:25	元素戦略から生まれたユニークな物性をもつ透明酸化半導体ZSO	14
	中村 伸宏 AGC	
11:40	自動車排ガス触媒の低貴金属化は不要か？	15
	堂坂 健児 本田技研工業	
11:55	金属の強さとねばさを高度に両立させる新原理ープラストンー	16
	潮田 浩作 日鉄総研	
12:10	展示・昼食休憩	

プロジェクト拠点のおおいなる成果 座長 村上 正紀 (立命館大学)

13:30	磁性材料研究拠点	17
	広沢 哲 物質・材料研究機構	
14:15	触媒・電池材料研究拠点	21
	田中 庸裕 京都大学	
15:00	電子材料研究拠点	25
	細野 秀雄 東京工業大学	
15:45	休憩/展示	
16:00	構造材料研究拠点	29
	田中 功 京都大学	

大型研究施設を利用した元素戦略プロジェクトの顕著な成果 座長 魚崎 浩平 (物質・材料研究機構)

16:45	高性能永久磁石の放射光解析	33
	中村 哲也 東北大学	
17:00	「京」・「富岳」を用いた蓄電池内現象の見える化	35
	館山 佳尚 物質・材料研究機構	
17:15	量子ビームの協奏と先端利用で電子材料の機能の本質に迫る	37
	門野 良典 高エネルギー加速器研究機構	
17:30	J-PARCでの高温加工熱処理シミュレータを用いた動的相変態に関する研究	39
	柴田 暁伸 物質・材料研究機構	

元素戦略プロジェクトの大型研究施設へのインパクト 座長 魚崎 浩平 (NIMS)

17:45	SPring-8/SACLAから見た元素戦略のインパクト	41
	雨宮 慶幸 高輝度光科学研究センター	
18:00	J-PARC物質・生命科学実験施設における中性子およびミュオン利用	42
	大友 季哉 高エネルギー加速器研究機構/J-PARCセンター	
18:15	「京」・「富岳」	43
	常行 真司 東京大学/HPCIコンソーシアム	

歴代プログラム・ディレクターからのメッセージ 進行 野瀬 雅文 (文部科学省)

18:30	元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>初代PD(2012-2015)	44
	村井 真二 奈良先端科学技術大学院大学	
18:35	元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>初代PD(2012-2017)	44
	澤岡 昭 大同大学	

<意見交換会> 進行 古宇田 光 (東京大学)

18:40-19:30 多目的ホールで実施(伊藤謝恩ホール横)

新たな元素戦略の取り組みと、情報科学を活用した物質・材料研究の展開 座長 中山 智弘 (科学技術振興機構)

10:00	CREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」	45
	北川 宏 京都大学	
10:20	さきがけ「物質探索空間の拡大による未来材料の創製」	46
	陰山 洋 京都大学	
10:40	CREST「情報計測」(1)「ベイズ統計スペクトル分解」	47
	赤井 一郎 熊本大学	
11:00	CREST「情報計測」(2)「機械学習アプローチによる量子多体状態探求」	48
	遠山 貴巳 東京理科大学	
11:20	元素戦略Pj(1)「計算科学・マテリアルズインフォマティクスが開拓した材料と材料科学」	49
	神谷 利夫 東京工業大学	
11:40	元素戦略Pj(2)「スパコン「京」・「富岳」を用いた磁性材料研究」	50
	三宅 隆 産業技術総合研究所	
12:00	昼食休憩	

総合討論「マテリアル研究のこれから」：デジタルトランスフォーメーション(DX)を利用した材料開発 座長 福山 秀敏 (東京理科大学)

(基調講演)		
13:30	日本発、材料科学の国際会議	52
	細野 秀雄 東京工業大学	
14:00	材料データプラットフォーム計画	52
	橋本 和仁 物質・材料研究機構	
14:30	元素戦略からマテリアルDX、そして研究DXへの進化に向けて	53
	坂本 修一 文部科学省 大臣官房審議官	
15:00	休憩	
(ポジショントーク)		
15:10	SPring-8/SACLA：データ創出・活用戦略	53
	石川 哲也 理化学研究所	
15:20	次世代放射光施設：新たなデータ創出拠点としての展望	54
	高田 昌樹 東北大学	
15:30	サステナブルモビリティ実現のためのMDXの活用	54
	射場 英紀 トヨタ自動車	
(パネルディスカッション)		
15:40	パネリスト 細野 秀雄・橋本 和仁・坂本 修一・石川 哲也・高田 昌樹・射場 英紀・常行 真司 モデレータ 福山 秀敏 東京理科大学	

総括

17:10	玉尾 皓平 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	
17:20	終了	
付録 データで見る元素戦略プロジェクトの10年 55		
数字で見る研究成果 56		
連携の力 57		
大型研究施設群のフル活用 58		
人を育てる 59		
社会実装による経済効果予想 61		

■ 活動報告の変遷



第1回シンポジウム

CMSI(「京」・HPCI)、SPring-8、J-PARC、KEK-PFを利用した  
物質・材料研究の課題共有と共創



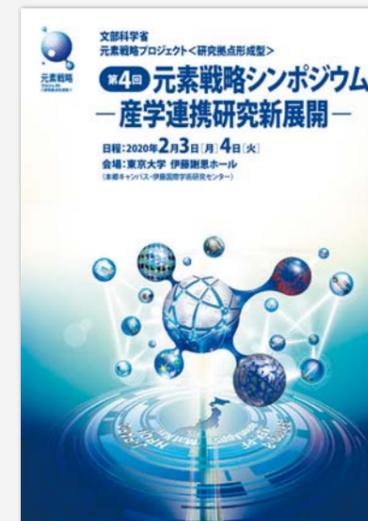
第2回シンポジウム

局所構造制御で物質から材料へ



第3回シンポジウム

新学理が牽引する物質・材料機能発現  
メカニズムの理解と産業応用



第4回シンポジウム

産学連携研究新展開



研究ダイジェスト2012-2015

物質から材料へ



研究ダイジェスト2016-2017

物質から材料へ

## 元素資源問題： 金属資源の世界動向から見る 元素戦略の将来展望

加留部 淳 Jun Karube  
豊田通商株式会社 取締役会長



昨今の世界的なカーボンニュートラル実現に向けた取り組み強化により、再生可能エネルギーの導入や電動車をはじめとした次世代自動車へのシフトが、かつてない速度と規模感で進んでいる。

かかる状況下において次世代のモビリティに不可欠な金属資源の確保と安定供給の必要性は日増しに高まっている一方で、持続可能な社会実現のためのリサイクル要請などサーキュラーエコノミーへの移行に向けた課題も表面化しており、その対応が急務となっている。

本講演では、トヨタグループの商社として市場草創期から電池・モーターに必要となるリチウム・レアアースの開発事業に参画している豊田通商の経営トップが、同社が展開する非鉄資源および資

源循環分野の事業の現状について説明するとともに、資源開発や資源確保、安定供給体制確立の重要性、リチウムイオン電池リサイクルにおける課題について現場の最前線の観点を交えて解説する。



関連 WEB

[https://www.toyota-tsusho.com/press/detail/211104\\_004921.html](https://www.toyota-tsusho.com/press/detail/211104_004921.html)  
<https://www.toyota-tsusho.com/about/project/04/>

## 自分の力で世界を変える： 世界最強ネオジム磁石の開発

佐川 真人 Masato Sagawa  
大同特殊鋼株式会社 ((元)住友特殊金属株式会社) 顧問



### 1. ネオジム(Nd)磁石の開発

私は、会社の研究者として、サマリウム(Sm)・コバルト(Co)磁石の開発に従事していたときに、なぜ希土類(Rという)・鉄(Fe)磁石が存在しないのか疑問をもった。R-Fe磁石ができれば世界のためになると思った。それからずっと、Sm-Co磁石の研究を正規のテーマとして進めながら、R-Fe磁石の研究を勤務時間外に続けてきた。そして、Sm-Co磁石の研究が成功して目標を達成したので、R-Fe磁石の研究を正規のテーマとして進めたいと申請したが認められなかった。R-Fe磁石は社会の強いニーズである。私はそう確信して、住友特殊金属(住特金)に支援を求め、その会社から全面的な支援を得て、世界最強Nd-Fe-B(ホウ素)焼結磁石に到達した(1982年)。

### 2. 自分の力で世界を変える

講演題目の「自分の力で世界を変える」とは、研究者として、社会のニーズを見つけ、それを達成するための研究を成功させて、世界に貢献することである。私は、住特金の仲間と一緒に、Nd-Fe-B焼結磁石の出現はまさに世界を変えた。それはハードディスク装置の超小型化、エアコン、洗濯機、冷蔵庫、電気自動車(EV)の省エネルギー化を実現した。

### 3. 元素戦略磁性材料研究拠点

Nd-Fe-B焼結磁石と、J. CroatによるNd-Fe-B超急冷磁石の出現(1982年)後、世界中の材料研究者が、R-Fe磁石の研究を開始した。省希少元素化のための科学技術を目指して2012年に始まった元素戦略磁性材料研究拠点は、①Nd-Fe-B焼結磁石を超える新

R-Fe磁石探索、②R-Fe磁石の微細構造解析、③R-Fe磁石の微細構造と保磁力の関係解明、④R-Fe磁石の微細構造と磁化反転の見える化、⑤R-Fe磁石の金相学、⑥R-Fe磁石の電子論、⑦R-Fe磁石高性能化のための生産技術開発等、それぞれの研究分野で世界を大きくリードしている。今後もこれらの研究のリードを保ち、かつR-Fe磁石の産業を支え、発展させていくために、本事業の活動は存続させなければならない。

### 4. 若手材料研究者へ

いつも、世界はどんな材料を必要としているか考えよう。材料研究者は自分の力で世界を変えることができる。それを実現するためには、考えて、考え抜くことが一番大事。頭の中で研究を進め、頭の中で実験してみる。人間の頭脳はすごい!

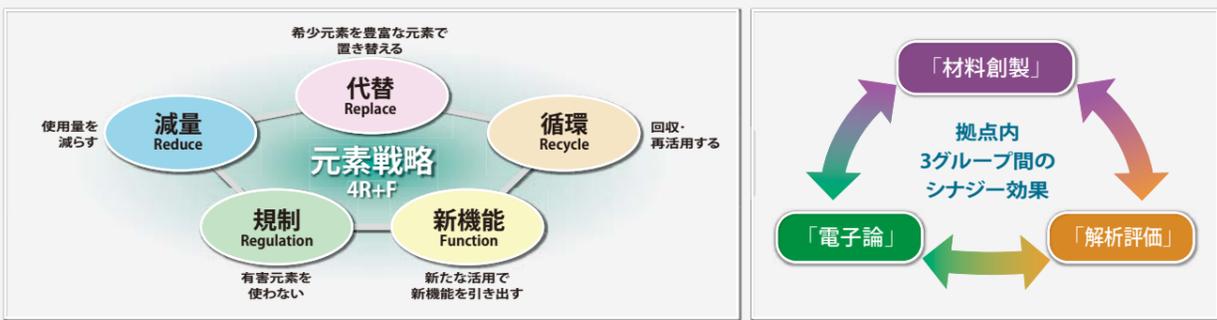
# わが国発の新材料が世界を変える 「元素戦略プロジェクト」の推進

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

<p><b>磁性材料 (物材機構 NIMS)</b></p> <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>	<p><b>触媒・電池材料 (京都大学)</b></p> <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>
<p><b>電子材料 (東工大)</b></p> <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>	<p><b>構造材料 (京都大学)</b></p> <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

**元素戦略プロジェクト**  
希少元素を用いない(軽減した)革新的な機能材料の創製  
理論的解明・新材料創製・特性評価までを一体化

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

<p>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</p>	<p>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</p>	<p>透明半導体IGZOの実現 半導体にも希少・有害元素 (Ga, Asなど)</p>	<p>希少元素 (Mn, Cr, Mo, Nbなど)の 消費の大半は鉄鋼材料</p>
---	--	---	--

**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)
- 希少元素フリー高性能二次電池の実用化 (HEMS)
- 希少元素フリー浄化フィルタ実現
- 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
- 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

◆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

**材料創製**  
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

◆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>

経産省「高効率モーター用磁性材料技術研究会 (MagHEM)」との連携

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  
酸素欠陥によるNO還元触媒Pd/Mn-YbFeO<sub>3</sub>  
Pd(助触媒)使用量を最大90%削減  
企業にて実車エンジン試験実施中

◆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

**【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>]  
NO CO C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> O<sub>2</sub> MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> NO CO O<sub>2</sub> CuCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> N<sub>2</sub> CO<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O H<sub>2</sub>O CO<sub>2</sub> or Cu/CeO<sub>2</sub>

Rh二次元ナノフィルムNO還元触媒：Rh70%削減

**電子論**  
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

**材料創製**  
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

**解析評価**  
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

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

解析評価  
電子論

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

**新半導体材料**  
◆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

**エレクトライドの物質科学**  
理論予測2次元エレクトライドY<sub>2</sub>Cを合成、角度分解光電子分光で確認

**材料創製**  
◆計算・MI予測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

**高誘電体**  
◆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

**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

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

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動起を提唱  
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

**電子論**  
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

**解析評価**  
マイクロ力学特性試験法により、単結晶変形特性を評価

マニウム合金 1.8倍  
チタン合金 2.6倍  
高マンガン鋼 1.3倍  
二相鋼 1.8倍

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

**バルクナメタル化により高強度・高延性両立を達成**  
バルクナメタル < 数μm  
大きな延性を引き出す未知の機構  
通常転位の運動・増殖  
【純チタン】  
ひずみ ε / %  
応力 σ / MPa

**プラストンの提唱**  
超常細粒の粒界でプラストン核生成

## 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



## 自動車排ガス触媒の低貴金属化は必要か？

堂坂 健児 Kenji Dosaka

本田技研工業株式会社 日本本部 地域事業企画部 地域環境戦略課



ESICBの触媒研究領域は自動車用排ガス浄化触媒の低貴金属化、究極的には貴金属フリー触媒を目指して多岐にわたる基礎研究を推進してきた結果、貴金属を担持する金属酸化物担体材料および反応メカニズム解明に目覚ましい成果を挙げた。

一方、元素戦略プロジェクトがスタートした2012年から現在までの間に、自動車を取り巻く環境は激変したといっても過言ではない。特に、2015年のパリ協定採択を機に、世界中でCO<sub>2</sub>削減・脱炭素の動きが加速し、さまざまな国や地域が2050年カーボンニュートラル(1.5°Cシナリオ)達成を宣言し、ガソリン車・ディーゼル車の販売禁止に向けた動きも加速[1]している。自動車メーカー各社は次々と電動化の加速、電気自動車(BEV)の市場投入を表明し、今や自動車といえばBEVの話題ばかりが目につく状況である。

では、もうガソリンエンジンやディーゼルエンジンは市場から締め出されてしまうのか？とえば、そうではない。ガソリン車・ディー

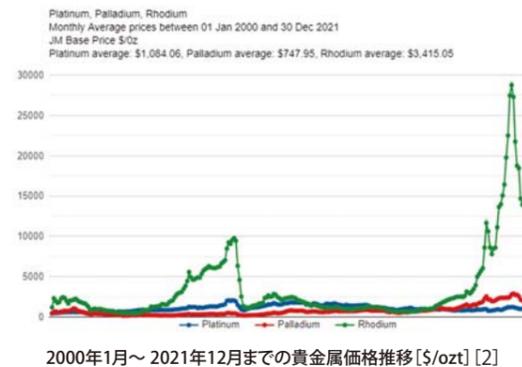
ゼル車の販売禁止は早くとも2035年以降のことであり、エンジンとモーターを組み合わせたハイブリッド車(HEV・PHEV)は販売を容認する国(例えば、日本・米国・中国)もある。また、これから経済発展を遂げようとしている途上国においては、自国内の発電・送電インフラの発達状況や安定した物流の確保、消費者のより安価な購買指向からガソリン車・ディーゼル車の需要は底堅いと思われることから、世界中からエンジンが消えることは当面ないだろう、と筆者は考える。

したがって、エンジンが無くならないければ、その排ガスを浄化する触媒は無くならないことは自明である。むしろ、欧州や米国ではさらなる排ガス規制強化も議論されており、排ガス浄化触媒はより高機能に進化する必要に迫られている。

また、足下を見ると資源価格が軒並み高騰しており、一時期の異常な状態は

脱したように見えるが、いまだに高水準で価格は推移している。勿論、貴金属も例外ではなく、特にRhは11万円/gを超える[2]など、とても自動車の一部品に使える資源と言えない状況にある。

こうした背景を踏まえると、ESICBが目指してきた自動車用排ガス浄化触媒の低貴金属化やフリー化の研究成果は自動車業界にとっては大きなインパクトを持つものであり、特に、ESICBが基礎研究で解明してきた三元触媒の貴金属と酸化物担体間の相互作用メカニズムの解明[3][4](新しい金属-金属酸化物接合など)は、今後の自動車用排ガス浄化触媒の進化に大きく寄与するものと考えられる。



### 参考文献

- [3] DXAFS法を利用した自動車触媒用酸素貯蔵材料の動的挙動観察、細川三郎、別府孝介、加藤和男、田中庸裕、SPRING-8/SACLA利用者情報、25, 211-216 (2020)。
- [4] Sr-Fe系複合酸化物の自動車触媒材料への応用と形態制御、細川三郎、別府孝介、玉井和樹、田中庸裕、セラミックス、55, 399-403 (2020)。

### 関連 WEB

- [1] COP President daily media statement and latest announcements - 10 November - UN Climate Change Conference (COP26) at the SEC - Glasgow 2021 (ukcop26.org)
- [2] Price charts - PMM (matthey.com)

## 金属の強さとねばさを高度に両立させる新原理 - プラストン -

潮田 浩作 Kohsaku Ushioda

日鉄総研株式会社



### 1. 緒言

金属材料は多くの産業を基盤から支える役割を果たし、その需要は世界レベルで大きく拡大している。しかし、われわれは金属材料の持つ潜在能力のごく一部しか活用できておらず、さらなる高強度化には解決すべき技術課題も多い。たとえば、強度を上げるとねばさが低下するため、その克服は長年の課題となっている。構造材料研究拠点では、強度とねばさを高度に両立する汎用的な新指導原理の獲得に挑戦し、プラストンという魅力ある新概念を提案した。これはまさに産業界がアカデミアに期待するところである。

### 2. 新概念「プラストン」

従来の転位のみが変形を担うとする概念では、高強度化するには転位の動きを抑制しなければならないため、強度とねばさの両立は根本的に困難であった。また、変形機構についても、材料ごとに理解されてきた。構造材料研究拠点では、変形の本質を統一的に解明することに取り組み、新概念プラストンを導き出した[1,2]。プラストンとは高応力下

で集団励起された原子集団であり、それが変形モードを選択して核生成し、新規な転位、変形双晶、相変態などが変形を担うことにより、強度とねばさを両立するという新指導原理である。

### 3. プラストンを指導原理とした応用例

Bcc構造の二相鋼(0.1C-2Mn (mass%))におけるプラストンによる強度と伸びを両立した例[2]について紹介する。加工と熱処理により二相組織を4μm程度まで細粒化すると、両特性の高度な両立が達成される(図1)。微細マルテンサイトが軟質フェライトに囲まれる環境下では、脆いマルテンサイトに新規な転位が核生成し塑性変形できる。この指導原理は、高強度鋼板のさらなる適用拡大と機能向上に高度に応用され、自動車の環境負荷低減と安全性確保の両立に貢献すると考える。講演では、Fe-31Mn-3Al-3Si鋼(fcc)の微細化による粒界プラストン(変形双

晶)制御、および純Ti(hcp)の微細化による粒界プラストン(新規な(a+c)転位)制御により強度と伸びを両立させる原理[2]と、産業界へのインパクトについても述べる。さらに、鋼に高頻度で存在するFe<sub>3</sub>Cは一般的にきわめて脆く難加工であるが、その薄肉化によるプラストン(転位)制御で加工性を向上させる原理[2]と応用についても触れる。

### 4. 今後の期待

変形に関する統一的新概念プラストンは、材料の潜在能力を引き出す新原理として魅力的である。広範な社会実装、学理の深化と人材育成に向け、継続した産学連携研究拠点活動を強く期待したい。

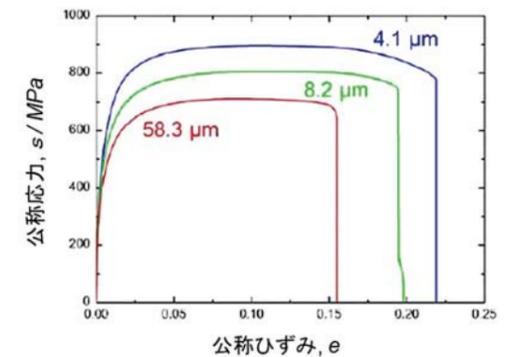


図1 二相鋼(0.1C-2Mn (mass%))の細粒化により核生成したプラストン(新規転位)が強度と伸びの両立を達成した例[2]。

### 参考文献

- [1] N. Tsuji, S. Ogata, H. Inui, I. Tanaka, K. Kishida, S. Gao, W. Mao, Y. Bai, R. Zeng and J-P Du: Scr. Mater., 181(2020), 35-42.
- [2] The Plaston Concept: Plastic Deformation in Structural Materials, Ed. by I. Tanaka, N. Tsuji and H. Inui, Springer (2022).



# 磁性材料研究拠点

(ESICMM: 物質・材料研究機構)

代表研究者 広沢 哲 Satoshi Hiroswa

## ESICMMの到達目標

- ▶ 希少元素によらずに大量生産可能な次世代永久磁石材料の創製
- ▶ 産業界での開発研究および生産技術に必要な基礎学理と技術基盤の構築
- ▶ 次世代につなぐ磁性材料研究を担う人材の育成

## 研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

<p><b>統括・企画運営</b></p> <p>代表研究者 広沢 哲</p> <p>企画マネージャー 三俣千春</p>	<p><b>電子論グループ</b></p> <p>GL:三宅 隆 (AIST) 新材料理論予測</p> <p>常行真司 (物性研) 共通基盤、理論構築</p> <p>小倉昌子 (大阪大) 磁性理論計算 (2012FY)</p> <p>古月 暁 (NIMS) 新規磁気現象磁石機能 (2012-2013FY)</p> <p>合田義弘 (東工大) 大規模構造解析</p> <p>土浦宏紀 (東工大) 保磁力理論の祖視化</p> <p>宮下精二 (物性研) 保磁力の熱統計力学</p> <p>只野央将 (NIMS) 第一原理格子ダイナミクス (2019FY~)</p>	<p><b>解析評価グループ</b></p> <p>GL:宝野和博 (NIMS) ナノ組織解析</p> <p>中村哲也 (東北大SRIS) 放射光解析</p> <p>小野寛太 (KEK) 中性子・X線解析</p> <p>岡本 聡 (東北大多研) 微視的・動的磁化挙動の解析</p> <p>袖山慶太郎 (NIMS) 画像インフォマティクス (2019FY~)</p>	<p><b>材料創製グループ</b></p> <p>GL:杉本 諭 (東北大) 複合組織材料の創製</p> <p>高梨弘毅 (東工大) 非希土類磁石 (2012-2015FY)</p> <p>寺西利治 (京大化研) 磁性ナノ粒子の合成</p> <p>高橋有紀子 (NIMS) 薄膜による新材料探索</p> <p>大久保忠勝 (NIMS) パルク磁石材料の創製</p> <p>中村裕之 (京大・工) 酸化物磁石物質 (2019FY~)</p>
--	---	--	--

## ロードマップ

永久磁石の基盤学理を創出し、サイエンスに基づく究極性能永久磁石の開発を先導してきた。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
A.課題解決(材料開発)	"2-14-1系Dy-フリーNd-Fe-B磁石"					"R-Fe-X系究極高性能磁石の実現"				
B.物質探索、実験検証	新磁石物質探索					新磁石物質および副相物質探索				
C.基盤研究	保磁力機構実験解析					保磁力理論の実験検証				
産学連携準備	学振147委員会(磁石分科会)					NIMS磁石パートナーシップ				

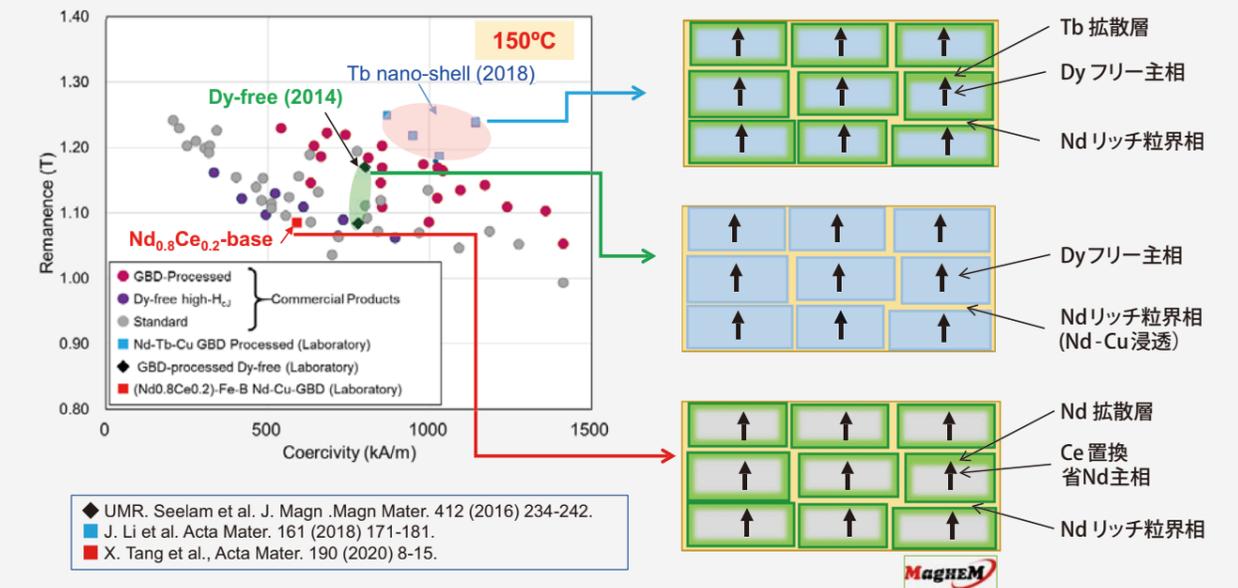
世界最高の磁石研究拠点

## 新しい基盤学理の創出

究極の高性能磁石を実現させた多面的組織解析と理論から汎用的な指針を導出

Nd-Fe-B磁石の高性能化は粒界の組成および磁性の解明と低融点Nd合金の粒界拡散を用いた新しい手

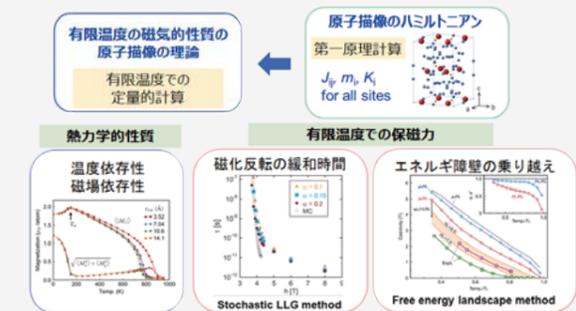
法の開発により実現した。この解析過程を基に導いた汎用的な指針は、省ネオジウム磁石や1-12型などの新規磁石の高性能化指針として企業における研究開発の中でも用いられている。



基盤的研究から導出した材料組織設計のコンセプト(右)と、ESICMMの高性能Nd-Fe-B系磁石例(角型記号)の150°Cでの磁気特性(左)

## マイクロマグネティクスの新展開

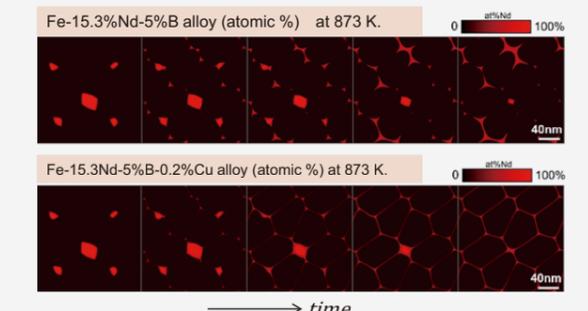
保磁力理論における温度効果のサイエンスを明確にした。これにより、材料組織に基づいたシミュレーションと実測を用いてシミュレータを学習させる、データ駆動型マイクロマグネティクスによる磁石開発への道を開いた。



結晶構造と元素種の情報だけを使って熱ゆらぎのある有限温度の保磁力を計算する種々の手法を開発し、温度効果のサイエンスを明確にした。S. Miyashita et al., STAM 22 (2021) 658

## 永久磁石材料の熱力学データベースを構築

熱力学データが凝集されたCALPHADデータベースをNIMSに構築。10年前にはできなかった多元系ネオジウム磁石や新規な1-12型磁石の組成設計や、フェーズフィールド法による組織形成過程の解析に威力を発揮している。

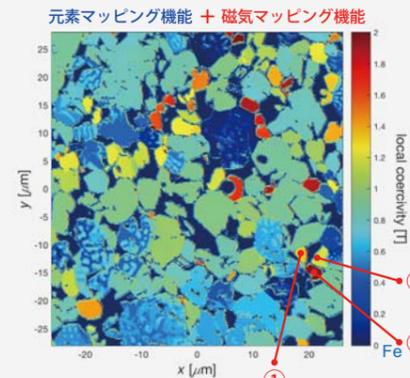


整備された熱力学データを使って、Nd-Fe-B磁石における必須微量元素 Cu の粒界相形成機能を明らかにした。T. Koyama et al., STAM 22 (2021) 1

## 社会実装につながる成果

### 中性子や放射光磁気顕微鏡による磁石内部の粒界副相の元素分析磁気構造解析技術の開発

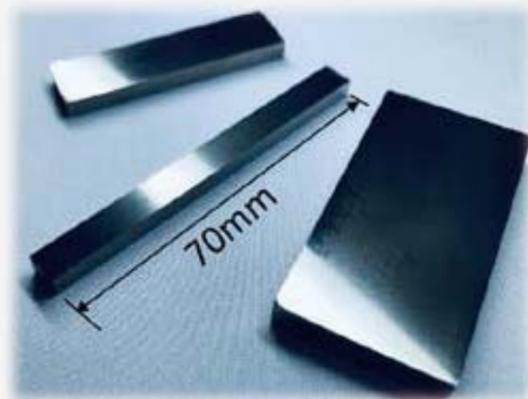
アトムプローブなどの3次元元素マッピングと結晶粒ごとの磁化過程との対照が可能となり、機能発現原理の解析が飛躍的に進歩した。これらの技術は磁石材料の研究開発に有用であり、企業からの利用も進んでいる。



Nd<sub>13.7</sub>Pr<sub>0.02</sub>Fe<sub>77.9</sub>B<sub>5.97</sub>Al<sub>0.12</sub>Cu<sub>0.09</sub> (at%) 焼結磁石中の結晶粒子ごとの保磁力分布カラーマップ (放射光磁気顕微鏡: JASRI)  
D. Billington et al. Phys. Rev. Mat. 2, 104413 (2018)

### 耐熱Nd-Fe-B磁石(Dyを4から8%添加)のDyフリー化に成功

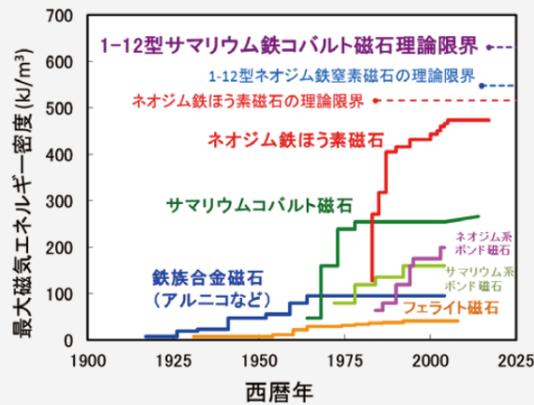
熱間加工磁石を基材として粒界相ナノ組織を制御し機能発現元素を局所配置。その指針に基づいて企業が実用化研究を進めている。



NIMSの熱間押し出しNd-Fe-B磁石  
MI活用により高性能化達成。Dyフリー基材として用い、粒界拡散処理を用いてナノ組織を形成することにより、世界最高レベルの高性能を実現した。

### Nd-Fe-B磁石を超えるSm(Fe-Co)<sub>12</sub>を創出

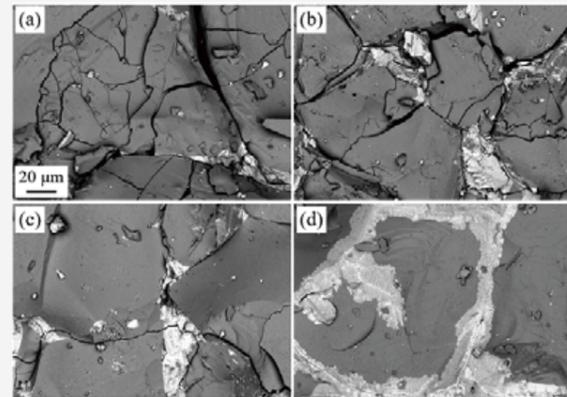
薄膜技術により創製した1-12型化合物はNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bを超える理論限界を示していた。組成改良により安定化し、磁石粉末と焼結磁石の開発が企業でも進められている。



永久磁石の発展史における1-12型新化合物の位置づけ  
Nd-Fe-B系磁石はすでに理論限界近くに到達しているが、新規な1-12型化合物はさらに高い理論限界を持っている。

### 粉末磁石の高性能化に成功

プロセス原理の解明に基づいて原料工程にさかのぼってプロセスを改良し、Nd-Fe-B系異方性磁石粉末、および、Sm<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>N/Zn複合磁石で世界最高性能を実現した。



Nd-Fe-B系HDDR粉末(東北大-愛知製鋼)  
原料粉末のクラック低減と副相分布最適化により高性能化を達成。高性能異方性ボンド磁石としての展開が期待されている。  
T. Horikawa et al. STAM 22 (2021) 729

## プロジェクトのバトンをつなぐ

### 新しい産学連携プラットフォーム

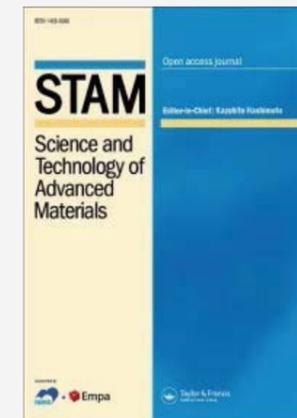
ESICMMの成果である基盤的学理と多分野にわたる研究ネットワークをプロジェクト終了後も継続していくことが産業界からも求められている。

磁石製造各社の共通基盤研究を共同実施する枠組みとして、NIMSのマテリアルズオープンプラットフォームに「磁石MOP」を設置する構想をたて、発足に向けた準備を進めている。

### 磁石産業界の実情に沿った学術成果の発信

ESICMM成果を中心とする論文特集をオープンアクセス誌STAMに企画掲載した。

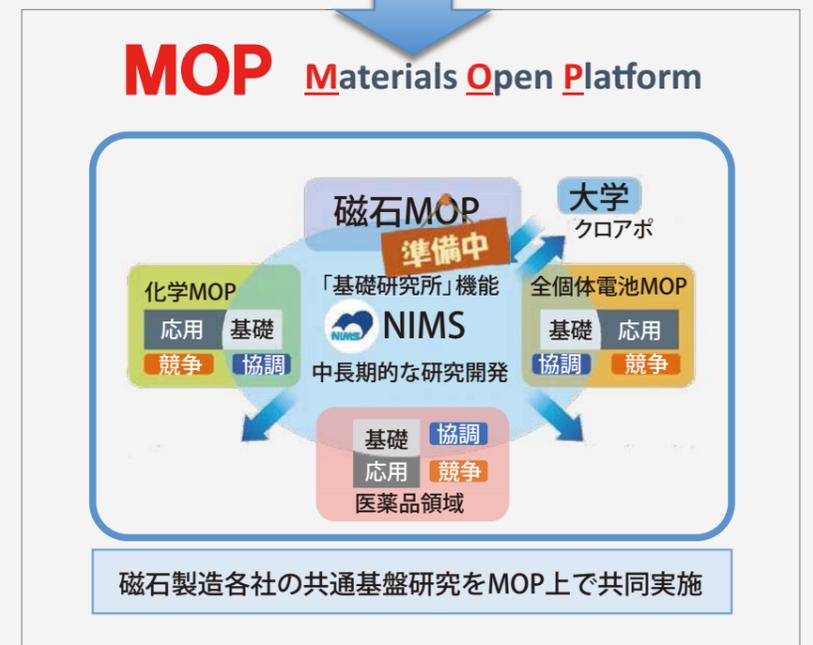
また、磁石関連企業を会員とするNIMS磁石パートナーシップを設置し、最新の研究成果を定期的にわかりやすく発信することを考えている。



NIMSとEmpaが共同主催するオープンアクセス誌STAM (IF値 8.090)



磁石パートナーシップ研究会風景 (2019年4月)



磁石製造各社の共通基盤研究をMOP上で共同実施

# ESICB 触媒・電池材料研究拠点

(ESICB:京都大学)

代表研究者 田中 庸裕 Tsunehiro Tanaka

## ESICBの到達目標

- ▶希少元素使用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・電池の詳細な記述・指導原理の解明
- ▶次世代研究者の育成

## 研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

アドバイザー 塚田 捷 (東大) 小久見善八 (京大) 榊 茂好 (京大) 魚崎浩平 (NIMS) 武田保雄 (三重大) 辰巳 敬 (東工大) 堂免一成 (東大) 小沢文幸 (京大) 堂坂健児 (本田技研) 堀 正雄 (ユミコア日産)	企画・マネージメント 田中庸裕 (京大) 拠点長 (触媒) 代表研究者 山田淳夫 (東大) 副拠点長 (電池) 太田浩二 (京大) 企画マネージャー	触 媒		電池	
		PGM減量触媒 田中庸裕 (京大) GL 酸素貯蔵材 清水研一 (北大) ナノ粒子	PGMフリー触媒 町田正人 (熊大) GL 三元触媒 薩摩篤 (名大) タンデム触媒 山下弘巳 (阪大) DPF	革新的電解液 山田淳夫 (東大) GL 電解液 萩原理加 (京大) イオン液体 獨古薫 (横国大) ゲスト包摂	将来型電池 岡田重人 (九大) GL 水系Na電池 全固体Na電池
基盤研究 電子論グループ 江原正博 (分子研) 表面反応 森川良忠 (阪大) 表面界面シミュレーション 武次徹也 (北大) GRRM		材料創製グループ 館山佳尚 (NIMS) Informatics・DFT-MD 佐藤啓文 (京大) 分子系・溶液系 統計力学 大谷実 (筑波大) 固液界面 シミュレーション		解析評価グループ 佃達哉 (東大) GL オペラント XAS・in-situ INS 山田淳夫 (東大) 放射光解析	

## ロードマップ

PGMフリー自動車触媒およびNaイオン電池の実現に向けて、基盤学理に基づく研究を展開、先導している。

年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
PGM節減触媒	酸素欠陥によるNO還元		MvK型NO還元 Pd/Mn-YbFeO <sub>3</sub>		含PGMナノアロイ		PGMナノフィルム		YbMnO <sub>3</sub> 実用触媒開発	
PGMフリー触媒	材料探索		NO-CO 触媒		PGMフリー三元触媒の実現		ヘロブスカイト系NOx酸化貯蔵触媒		PGMフリー三元触媒の実現	
電 極	層状化合物・ポリアニオン系正極の探索と性能向上		高容量ハードカーボンの合成・設計		新規機構高電圧高容量正極		Na電池力価実証		Na電池力価実証	
電 解 質	熔融塩		濃厚電解液の多機能性		融塩濃厚電解液		融塩濃厚電解液		融塩濃厚電解液	
	水系電解液の探索		ハイドロレートメルト		固体電解質		固体電解質		固体電解質	

ゼロエミッションの科学を先導する触媒・電池の研究拠点

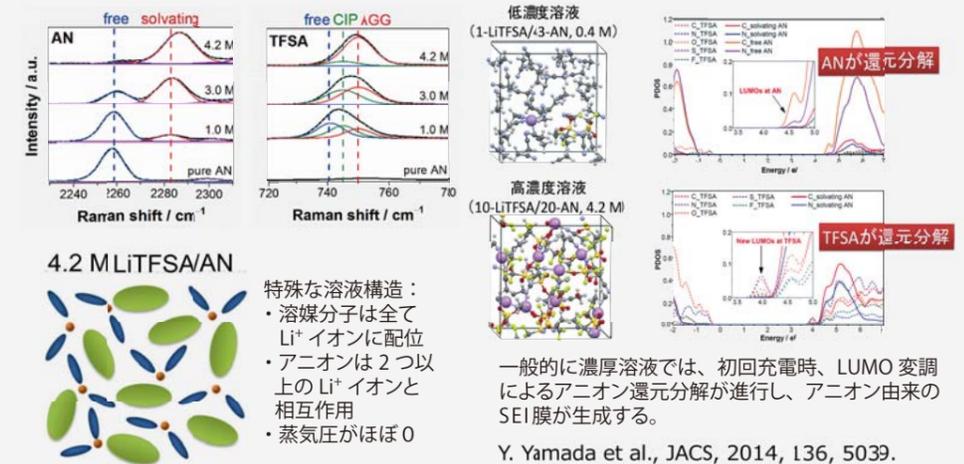
## 新しい基盤学理の創出

高性能蓄電池につながる濃厚電解液の一般的な溶液構造・電子状態の検証と解明

塩濃度の増加により電解液の伝導度は向上するが、粘度の上昇により再び低下するため、濃度は最大値が得られる1mol/L 付近に設定される。一方、従来使えなかった電解質塩と溶媒を組み合わせた濃厚電解液 (2-5 mol/L) では伝導度の向上だけでなく、良質なSEI膜の生成、耐腐食性等の特性があることが、当拠点において見いだされた。その溶液構造や電子構

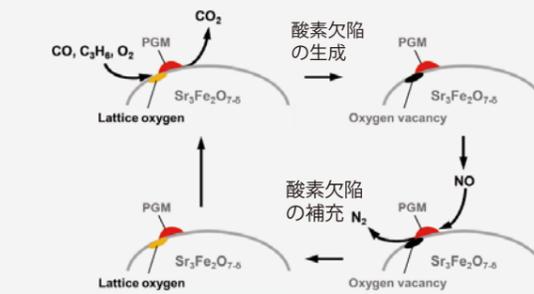
造が、分光解析や第一原理シミュレーションにより解明された。

すべての溶媒分子がカチオンに配位し、アニオンが複数のカチオンと相互作用をもつという特殊な溶液構造や高濃度化することにより、アニオンに由来する変調LUMOが生ずるとい電子構造の変化が、カチオン (Li, Na等) によらず一般的なものであることが示され、高性能電池の創出に対する有望技術として注目を浴びている。



## MvK型NO還元メカニズム

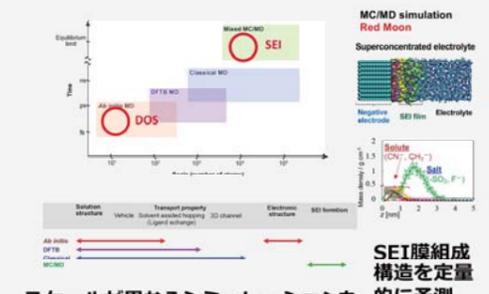
Mars-van-Krevelen (MvK) 機構では、HCやCOが格子酸素により酸化され、その結果生じた酸素欠陥は、O<sub>2</sub>分子により補充される。MvK型NO還元機構とは、この補充をNOに担わせてNOを還元するというメカニズムである。酸素貯蔵材料などにごく少量のPGMを加えることにより、PGM近傍の格子酸素を活性化させ、低温NO還元を実現できる。



K. Beppu et al., CS&T, 2018, 8, 147

## 電解液のマルチスケールシミュレーション

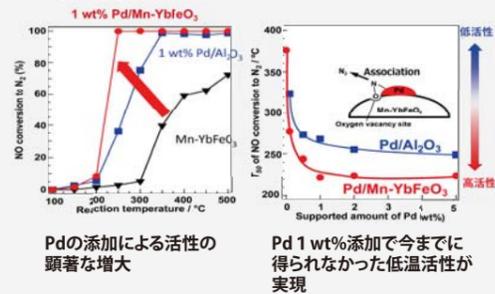
時間スケール、原子数スケールが異なる4種類のシミュレーションを開発・改良し、これらをシームレスにつないで、電解液で起こる諸現象を解明することができる。短時間で生じる電子状態の変化や、長時間が必要な安定構造体形成などを予測することが可能である。特に、SEI膜形成の生成過程、膜組成を定量的に予測することができる。



## 社会実装につながる成果

### 低温最高活性により貴金属使用量を大きく節減— Pd/Mn-YbFeO<sub>3</sub>

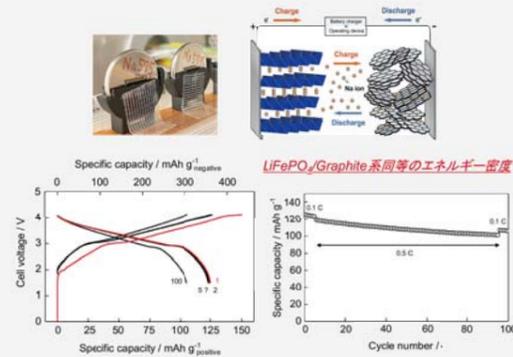
(001)面に配向した六方晶YbFeO<sub>3</sub>六角板状結晶にエピタキシャル成長したMnO(111)は、微量のPd添加により、MvK型NO還元を低温で駆動することができ、Pd触媒の低温活性を増大させ、結果的に、従来のPd使用量を1/5~1/10まで節減することができる。本触媒を改良した耐熱性Pd/YbMnO<sub>3</sub>は、企業との共同研究により開発され、現在、実用化試験が実施されている。



Pd/Mn-YbFeO<sub>3</sub>の三元触媒パフォーマンス

### ナトリウムイオン電池フルセル

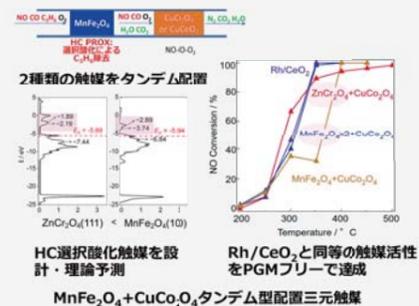
これまで、Naイオン電池実現のボトルネックは負極の容量と大量合成法であった。2019年に容量は480 mAh g<sup>-1</sup>まで最適化でき大量合成法も2020年に見出すことができた。当拠点の豊富な正極材料リストから最も安定作動が可能なものを組み合わせコイン型電池を作製し、現在その評価の途中(500 cycles)だが、LiFePO<sub>4</sub>/graphite系と同等のエネルギー密度のものが実現できている。



コイン型ナトリウムイオン電池フルセル試作

### 世界で最初のPGMフリー三元触媒の実現— 2種類の触媒をタンデム型に配置— MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>+CuCo<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

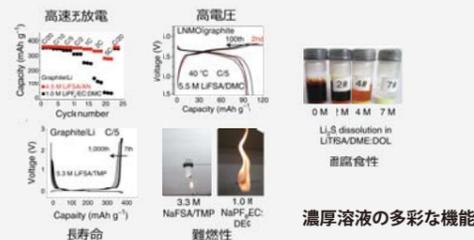
Cu系触媒では、NO-CO反応に限って、MvK型NO還元が低温で進行するものがある。一方で、炭化水素HCを反応系に加えた模擬排ガスとすると、HCの部分酸化物の蓄積により、強い活性劣化が起こる。そこで、触媒を2段階に分けて、上流にCOとは反応せずHCのみを燃焼除去する触媒を、下流にCu系触媒を配置したタンデム型触媒システムを発明した。これによって、初めて、Rhベンチマーク触媒に匹敵するPGMフリー三元触媒が実現した。



MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>+CuCo<sub>2</sub>O<sub>3</sub>タンデム型配置三元触媒

### 革新的電解液—濃厚電解液の実用化

当拠点では、濃厚電解液の性質として、高レート(高速充放電)、高サイクル性(長寿命)、広い電位窓による高電圧作動(耐還元性、耐酸化性)、溶媒の低活性(不揮発難燃性)、耐腐食性、高い伝導度、金属負極の可能性(デンドリマー形成の抑制)、SEI膜形成剤添加不要等々の機能があることを示してきた。とりわけ、Naイオン電池のために開発された消火性濃厚電解液(リン酸トリメチル溶媒)は、上記の多くの性質を兼ね備えており、濃厚電解液のカチオンに依存しない一般性があり、リチウムイオン電池にも適用が可能である。これらの性質を必要とする電池に関しては、現在、BtoBでの商業化がすでに行われている。



濃厚溶液の多彩な機能

## プロジェクトのバトンをつなぐ

ESICBの培ってきた成果のさらなる発展や研究コミュニティの継続は、プロジェクト終了後も引き続き求められている。今後、ESICBは、京都大学触媒・電池拠点と東京大学電池拠点に再配置され、互いに連携を続けていく。

・京都大学触媒・電池拠点では、これまでの研究に加え、二酸化炭素の資源化をテーマの一つに掲げ、「触

媒・電池元素戦略拠点 ESICB」としてレガシーを受け継ぎ、さらに研究分野を拡大していく。

・東京大学電池拠点では、「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」の蓄電池チームとしてESICB電池部門の成果のさらなる発展と新規シーズの創出を推進し、世界をリードしていく。

触媒電池材料研究拠点  
京都大学 実験と理論計算科学のインタープレイによる  
触媒・電池の元素戦略研究拠点 ESICB



京都大学 触媒・電池拠点  
触媒・電池元素戦略研究拠点  
ESICB  
CO<sub>2</sub> 資源化・VOCs 含窒素化合物浄化・  
元素戦略型電池



東京大学 電池拠点  
再生可能エネルギー最大導入に向けた  
電気化学材料研究拠点 蓄電池チーム  
汎用元素 機能最大型蓄電池



# 電子材料研究拠点

(TIES: 東京工業大学)

代表研究者 細野 秀雄 Hideo Hosono

## TIESの到達目標

- ▶多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
- ▶FPD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)

## 研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

統括・企画	材料創製グループ	電子論グループ	解析評価グループ
代表研究者 材料創製GL 細野 秀雄	材料創製SGL 半導体/超伝導体 東工大 大友 明	電子論GL 半導体/計算 東工大 神谷 利夫	解析評価GL 量子デバイス 東工大 真島 豊
NIMS拠点長 材料創製GL 大橋 直樹	高・強誘電体 東工大 舟窪 浩	スピノ物性理論 東工大 村上 修一	精密構造解析 東工大 山浦 淳一
KEK拠点長 解析評価GL (2019) 村上 洋一	高・強誘電体 東工大 (2013-20) 伊藤 満	2次元物性理論 東工大 高藤 晋	放射光回折 NIMS 坂田 修身
KEK拠点長 解析評価GL (2020-) 門野 良典	高・強誘電体 山梨大 (2013-) 和田 智志	エレクトロイド/触媒 東工大 北野 政明	光電子分光 KEK→東北大 組頭 広志
企画マネージャー 雲見 日出也	高・強誘電体 名古屋大 (2013-) 谷口 博基	2次元原子層物質 筑波大 (2016-) 近藤 剛弘	半導体分光 京大→東工大 (2019-) 金光 義彦
バルク単結晶育成 NIMS 島村 清史	高・強誘電体 名古屋大 (2019-) 山田 智明	エレクトロイド 反応系計算 東工大→九州大 多田 朋史	μSR KEK (2018) 小嶋 健児
	バルク超伝導体 東京農工大 (2016-) 山本 明保	理論/計算手法 東京大 常行 真司	表面X線回折 東北大 (2019-) 若林 裕助

## ロードマップ

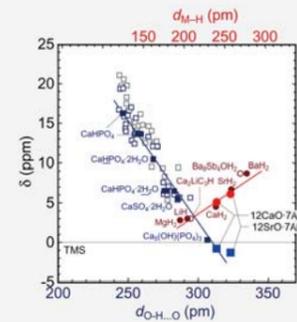
3期にわたり継続する基礎研究から、元素戦略材料への展開とデバイス応用に移行



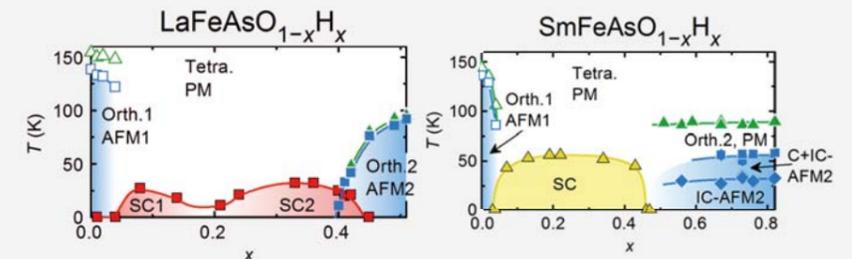
## 新しい基盤学理の創出

### 電子材料中の水素の科学

水素は広範な電子材料に含まれる最も普遍的な不純物だが、その存在状態や物性との関係はほとんど解明されていなかった。本プロジェクトでは、ミュオン、中性子などの量子ビームによる計測と計算によって、この問題に取り組んだ。その結果、酸化物半導体中(特に薄膜)にはかなり高い濃度の水素が存在し、その状態はOH(水素の電荷は+)だけでなく、ヒドリドイオン(電荷は-1)として取り込まれていることがわかった。これらはキャリア電子の生成や光による特性劣化など特性と深く関係していることが分かった。



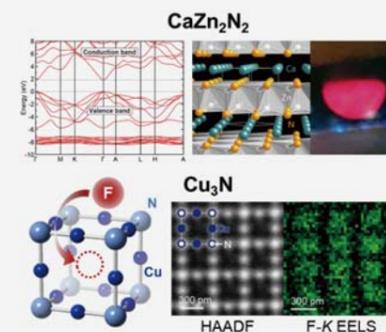
H核NMRの化学シフトとH+/H-の関係。化学シフトとは1:1に対応しない。Nat. Commun.(2014)



明らかになった水素ドーピング系超伝導体の電子相図。Nat. Commun.(2014), PNAS(2017)

### 第一原理計算による新規窒化物半導体の設計・探索と実験による実証

第一原理計算に基づいたハイスループットスクリーニングにより、希少元素を含まず、赤色発光する新規窒化物半導体CaZn<sub>2</sub>N<sub>2</sub>の存在を予測し、実験で実証した。また、格子間F添加によるCu<sub>3</sub>Nのp型ドーピング法を提案し、これも実験により実証できた。

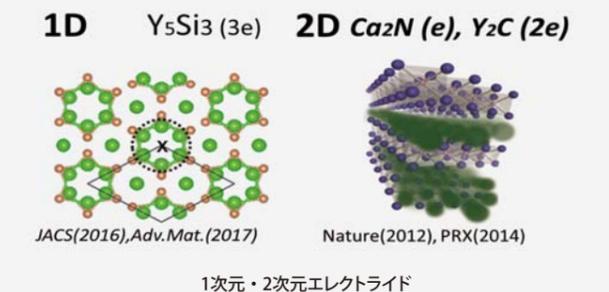


計算と実験で実現した赤色発光半導体とp型Cu<sub>3</sub>N  
Nat. Commun.(2016)  
Adv. Mater.(2018)

### エレクトロイドの物質科学の進展

アニオン電子が存在する空間はこれまで0次元に限られていたが、1次元および2次元の物質を計算と実験から見いだした。

Y<sub>2</sub>Cのアニオン電子のバンドが、角度分解光電子分光による実測とDFT計算の結果に矛盾がなかったことから、2Dエレクトロイドであることが実証された。また、Y<sub>2</sub>Cはトポロジカル物質であることが明らかとなった。



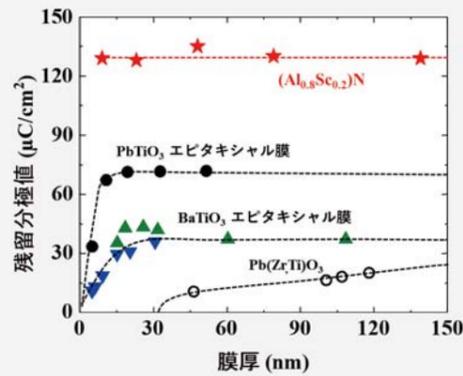
1次元・2次元エレクトロイド



## 社会実装につながる成果

### 極薄膜でも高性能が維持できる強誘電体

従来のペロブスカイト型強誘電体では、5 nm以下になると分極が顕著に低下してしまうことが問題だった。本PJは、薄膜化しても特性の劣化がない、強誘電体( $\text{Al}_{0.5}\text{Sc}_{0.5}\text{N}$ )を開発した。超低消費電力で駆動可能なメモリや高温でも動作可能なメモリ素子としての応用が期待されている。多くの企業が実用化に向けた検討を行っている。

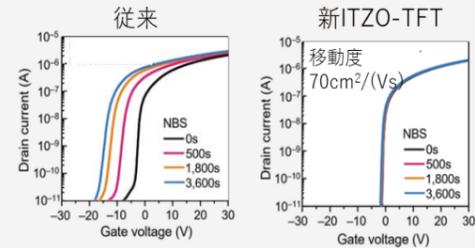


強誘電体薄膜の特性と厚さ。Appl. Phys. Exp. (2021)

### ポリシリコンに匹敵するアモルファス酸化物薄膜トランジスタ(TFT)

約20年前に発表したIGZO-TFTは、アモルファスシリコンよりも電子の移動度が一桁ほど高く、作製が容易なので、各種ディスプレイの駆動に広く実用化されている。

この研究では、移動度と安定性のトレードオフ関係(経験則)を解明することで、多結晶シリコンに匹敵する高い移動度と電圧印加で劣化しないアモルファス酸化物半導体(ITZO) TFTを実現した。これにより次世代ディスプレイだけでなく、論理回路など新しい応用が期待される。

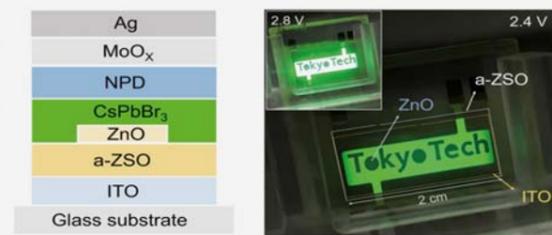


新ITZO-TFTの安定性(NBS:ゲートに負バイアスを印加したときの安定性) Nat. Elec. (2021)

### 低電圧で高輝度のペロブスカイトLED

ハライド系ペロブスカイトは塗布で作製しても高い量子効率で発光する。これを使った高性能LEDには、電極からこの層に電子を速やかに注入でき、しかも生成した正孔と電子を閉じ込めて励起子を高効率で生成させる電子注入層が必要となる。

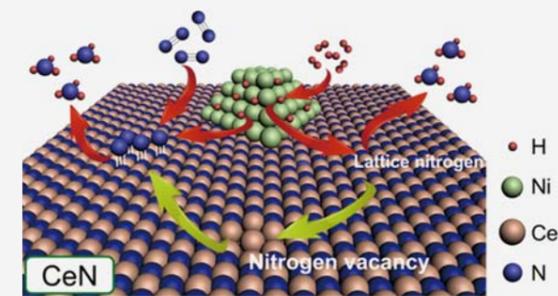
これらの両方を満たすアモルファス(a)  $\text{ZnO-SiO}_2$  (ZSO) 薄膜を用いることで、2.9 Vで10,000  $\text{cd}/\text{m}^2$ 、5 Vで500,000  $\text{cd}/\text{m}^2$ の輝度(通常のスマートフォンの最大輝度は400  $\text{cd}/\text{m}^2$ 程度)を達成した。



LED素子の構成と発光。Appl. Phys. Rev. (2019)

### 貴金属を使わないアンモニア合成触媒

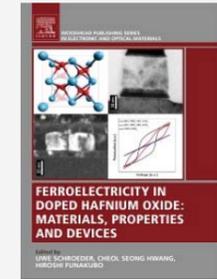
低圧・低温下でも高濃度のアンモニアを合成できる触媒が求められている。この目的には律速となる窒素分子の活性化に効果的なルテニウムがもっぱら用いられてきた。窒素の活性化をセリウム窒化物の表面に高濃度で生成する窒素欠陥で行い、担持する金属には水素の解離だけを担わせるという発想で、これまで着目されてなかったニッケルの担持でルテニウムに匹敵する活性を実現した。



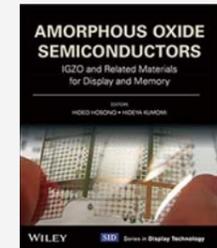
ニッケル担持窒化物触媒とその機構。Nature (2020)

## プロジェクトのバトンをつなぐ

### 本プロジェクトの成果に関する成著と総説



ハフニウム酸化物系強誘電体



アモルファス酸化物半導体



エレクトライドの物質科学

東工大元素戦略拠点では、新型エレクトライド、エレクトライド電子によるトポロジカル電子状態、非ペロブスカイト型強・高誘電体、ペロブスカイト型無機発光半導体、金属間化合物触媒など、前例のない構造・概念の新機能材料群の開発に成功してきた。また、電子論グループでは高精度・高スループット第一原理計算法を開発し、網羅的な探索計算により新しい半導体や高効率ドーピング手法を材料創製グループに提案し、理論計算の予測を実証してきた。

上記のような成果は、ロードマップのない研究課題にあえて挑戦する気概と、前例のない新材料を設計・創製する知識とセンスをもつ人材を育成し、材料創製-電子論-解析-評価の異グループ間で忌憚のない意見交換を行う研究風土を醸成してきた結果である。

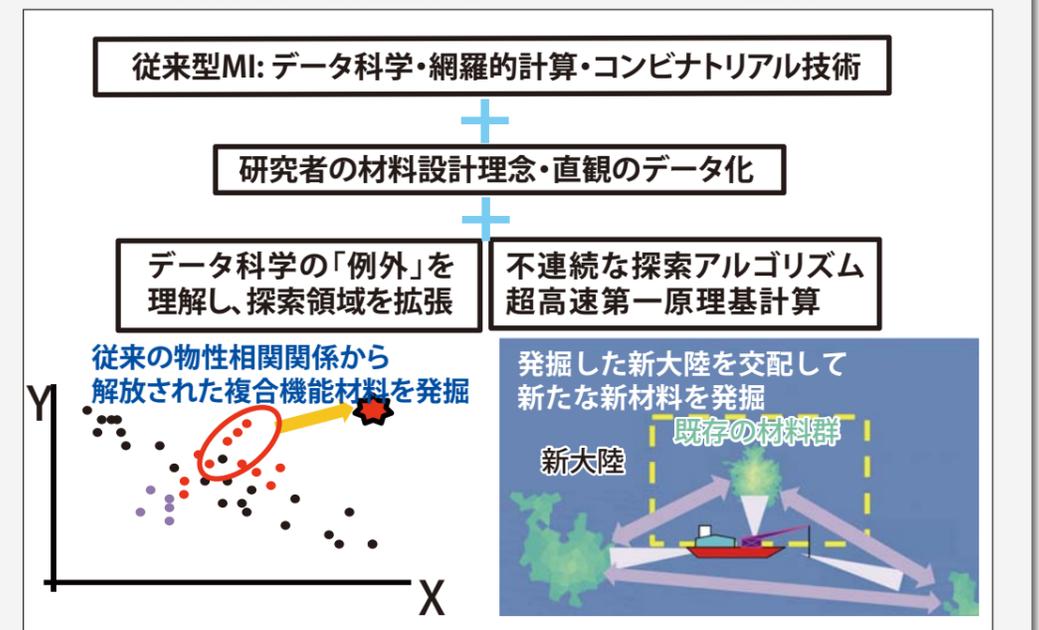
また、従来は別々の学術ソサイエティで研究・議論が行われていた、半導体-誘電体-イオン伝導体-触媒という異分野材料の研究をunder the one roofの拠点内で実施した結果、分野間の材料設計指針・研究手法が交配され、上記のような新材料群を開発する土壌が形成された。

これらの多様な電子材料群の設計指針、研究データは、データ科学を基盤として統合・交配することで、本拠点の研究者ですら思い至らなかった、さらに新しい材料を発掘することができる。

一方、従来のマテリアルズインフォマティクスとビッグデータ型の機械学習による材料探索には、すでに得られているデータベースや学習データの内部にある「内挿データ」の範囲でしか新材料が提案されないという問題がある。この点については、遺伝的アルゴリズムなどの「不連続構造の交配」により、未知結晶構造を探索することが可能であることが実証されてきており、本拠点でも新型エレクトライドの発掘に成功した。

私たちは、本拠点で培ってきた新材料設計指針・データと、従来の機械学習の「例外」を手掛かりとして、不連続な構造を探索して「前例のない新材料を提案する」マテリアルDXシステムを構築し、さらに多くの実用に資する新材料群を開発していく、「複相機能開拓拠点」を提案している。

### 未知材料を発見するMDXシステムの構築へ



# ESISM 構造材料研究拠点

(ESISM: 京都大学)

代表研究者 田中 功 Isao Tanaka

## ESISMの到達目標

- ▶ 元素添加ではなく微構造制御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

## 研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

<b>統括・企画運営</b> 代表研究者 <b>田中 功</b> 企画マネージャー 落合 庄治郎 企画マネージャー補佐 大石 毅一郎 (-2019FY) 橋爪 寛 (2019FY) 川口 利奈 (2019FY)	<b>電子論グループ</b> GL 田中 功 京都大学 第一原理計算 尾方 成信 大阪大学 力学計算 常行 真司 東京大学 第一原理計算 (-2015FY) 香山 正憲 AIST 第一原理計算 (-2015FY) 山口 正剛 JAEA 第一原理計算 (-2015FY)	<b>解析評価グループ</b> GL 乾 晴行 京都大学 マイクロビラー 力学実験 幾原 雄一 東京大学 電子顕微鏡・ 原子スケール実験 公募研究 星 健夫 鳥取大学 第一原理計算 (2013FY-2014FY) 鶴田 健二 岡山大学 第一原理計算 (2013FY-2015FY)	<b>材料創製グループ</b> GL 辻 伸泰 京都大学 ハルクナノメタル 田中 将己 九州大学 破壊制御 (2020FY-) 大村 孝仁 NIMS 鉄鋼材料 (2016FY-) 松原 秀彰 JFCC・東北大学 セラミクス (-2015FY) 佐々木 泰祐 NIMS マグネシウム合金 (2019FY-) 津崎 兼彰 九州大学・NIMS 疲労特性 ESISM国際・産学連携室@NIMS アドバイザー (50音順、*退任) 磯部 毅 (三菱マテリアル) 潮田 浩作* (新日鐵住金・日鉄総研) 岡田 郁生 (三菱重工業) 黒光 祥郎* (三菱マテリアル) 阪井 博明* (日本ガイシ) 中川 成人 (超高温材料研究センター) 山村 武民* (超高温材料研究センター) 掛下 知行 (大阪大学・福井工業大学) 後藤 孝 (東北大学) 平尾 一之* (京都大学) 堀田 善治 (九州大学・九州工業大学) 毛利 哲夫 (北海道大学・東北大学)
---	--	---	--

## ロードマップ

高強度で延性に富む構造材料を実現するための学理構築と材料開発を先導してきた。

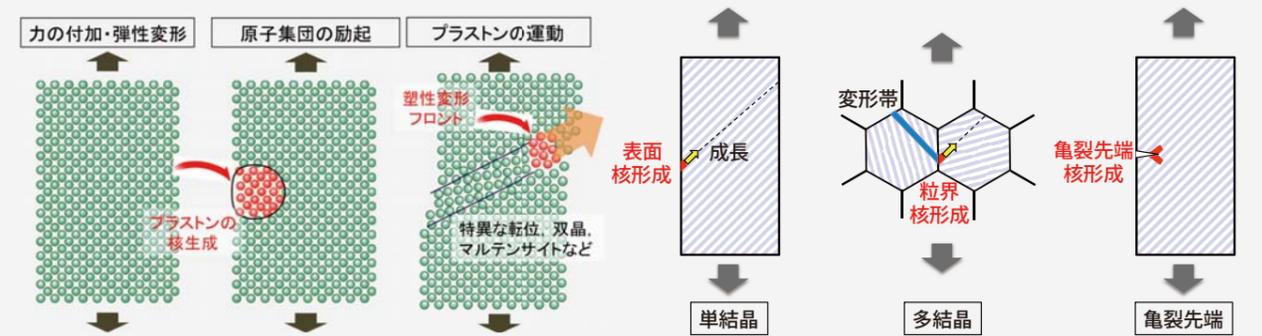
年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
課題解決・材料開発	バルクナノメタル化による強度と延性両立機構の解明 材料設計の基本指針の構築					新概念に基づく強度・延性両立新材料の実現 鉄鋼、マグネシウム合金、チタン合金				
	マイクロビラー力学特性試験技術の開発					新概念プラストンの追究・学理構築				
						金属間化合物、セラミクス材料の変形機構解明				
基礎研究	中性子、放射光、電子顕微鏡を活用した新しい実験技術の開発・応用研究									
	第一原理フォノン計算技術の開発・応用研究とデータベース構築									
	加速分子動力学シミュレーション法の開発・応用研究									
産学連携	京都大学拠点研究員制度と国際・産学連携室@NIMSを構築して積極的に活用									
府省連携	内閣府SIPおよび経済産業省ISMAとガバナリングボードを共有して密接に連携									

若手人材育成と基礎研究  
ネットワークの中核拠点

## 新しい基盤学理の創出

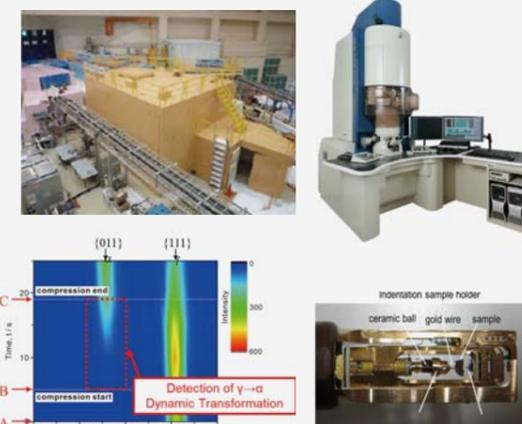
ESISMでは変形子=プラストンという構造材料研究における新しい概念を提示した。プラストンとは固体材料における塑性変形の素過程である。応力下で集団励起された原子集団が核形成し、その運動により塑性変形が起こる。プラストンは、結晶表面(単結晶)や結晶粒界(多結晶)、亀裂先端

端で優先的に核形成し、結晶方位、応力レベル、変形速度・温度などに応じて、種々の転位、双晶やマルテンサイトなどに進展する。したがって、プラストンを制御することで高強度材料に延性を付与することや、脆性破壊を抑制することが可能になる。



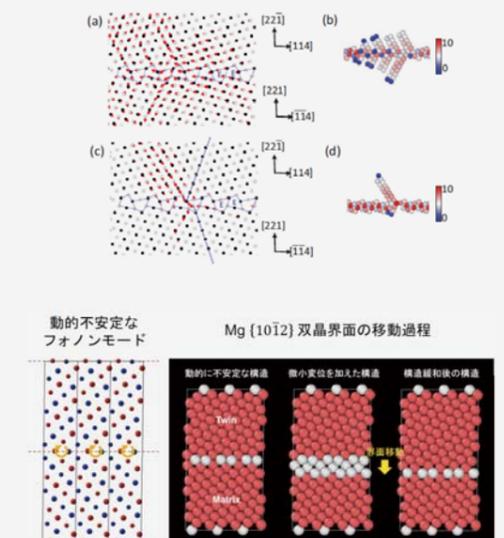
## 新しい実験技術の開発と活用

新しい研究ツールが出現することで、サイエンスは飛躍的に進歩する。ESISMでは材料組織や格子欠陥を解析するために、中性子や放射光、透過型電子顕微鏡などを利用したさまざまな実験技術を開発・活用した。



## 新しい計算技術の開発と活用

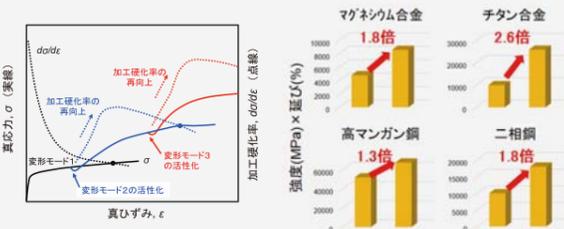
計算機シミュレーションは、実験結果を解釈するだけでなく、的確な実験をデザインするために不可欠である。ESISMでは加速分子動力学法や第一原理フォノン計算技術を開発・活用した。



## 社会実装につながる成果

### 新概念に基づく材料開発

プラストンを制御することで、多結晶材料が塑性変形する際に、種々の転位、双晶やマルテンサイトなどさまざまな変形モードを活性化し、延性を大幅に向上させることができる。これを多くの材料系で実証し、従来の常識を凌駕する革新的材料の創製に成功した。

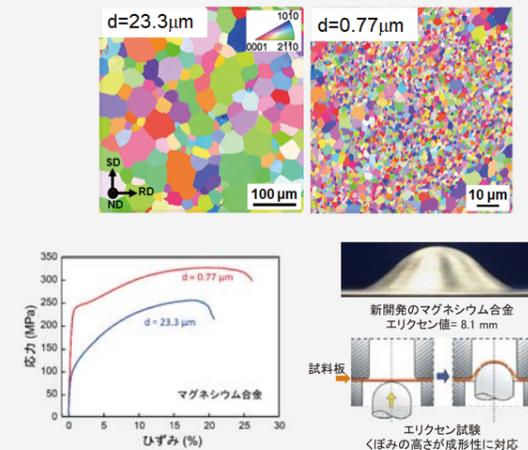


プラストン誘起塑性変形が確認された完全再結晶バルクナノメタル

材料	活性化された変形モード
マグネシウム合金	c + a 転位
チタン合金	転位
高マンガン鋼	転位
鋼合金	変形双晶
ハイエントロピー合金 (FCC)	変形双晶
単安定オーステナイト鋼	マルテンサイト

### 展伸用マグネシウム合金の開発に成功

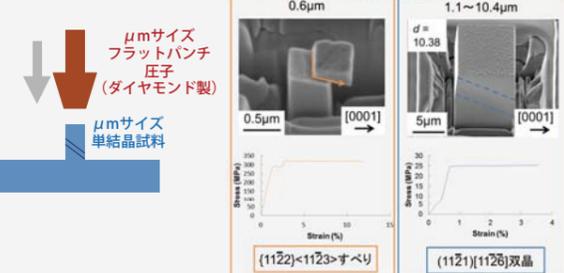
プラストン概念に基づき、マグネシウム合金では、これまで皆無であった産業利用できる展伸用合金の開発に成功した。これは商用アルミニウム合金(6000系)に匹敵する強度と成形性を有し、アルミニウムに比べて35%軽量になる。



### 多様な化学結合を有する材料での力学特性の解明

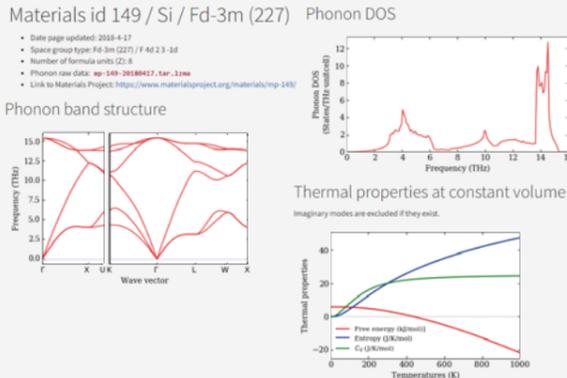
ESISMではマイクロピラー単結晶を用いた力学試験技術を開発した。その結果、これまで不明であった金属間化合物やセラミックス材料についての変形モードの臨界せん断応力の評価に成功し、定量的な材料設計に道を開いた。

#### マイクロピラー力学特性試験



### 第一原理フォノン計算コードとデータベースの構築

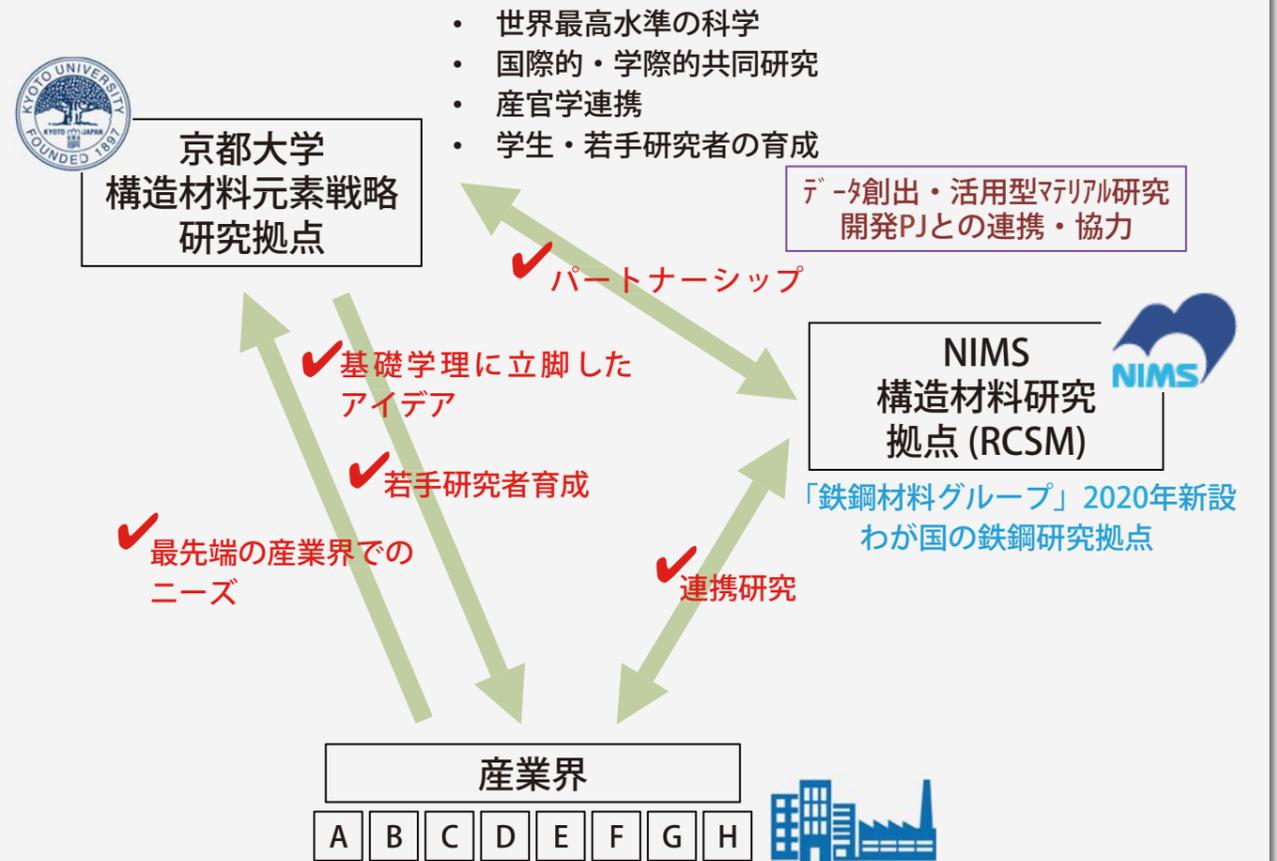
ESISMで開発した第一原理フォノン計算コード phonopy および phono3py は、世界中で事実上の標準として広く利用されている。また、約1万種類の物質についてデータベース phonondb を構築し公開している。これは人工知能 (AI) による材料開発に貢献している。



## プロジェクトのバトンをつなぐ

ESISMで挙げられた基礎研究の成果と多分野にわたる研究ネットワークは、プロジェクトの終了後も継続していくことが産業界からも求められている。その

ためにNIMS構造材料研究拠点 (RCSM)、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとの連携・協力を進めていく。



### 新概念プラストンについての書籍を出版

ESISMでは、プラストン概念についての英文での解説書を、世界で初めてSpringer社から2022年1月にオープンアクセスとして出版した。



講演の  
ポイント

- ネオジム磁石の破断面における磁区観察により保磁力機構を解明
- 磁気トモグラフィー法の開発で磁石内部の三次元磁区を可視化
- 高温in-situ X線回折による熱処理中の磁石相図の決定

# 高性能永久磁石の放射光解析

中村 哲也 Tetsuya Nakamura

東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター  
高輝度光科学研究センター 研究プロジェクト推進室



高性能永久磁石における希少元素問題に対して「放射光がどのように貢献できるか」という問いへの挑戦は、Nd-Fe-B焼結磁石の軟X線磁気円二色性(MCD)測定に関する磁石メーカーとの共同研究として2010年に始まった。

当初得られたFe、Nd、Oの各吸収端での軟X線MCDから、Feの磁気モーメント値がNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bの文献値よりも有意に小さいことが判明した。原因が試料の破断面に露出した粒界相にあるらしいことは焼結体試料に関する過去の測定経験から想像がしたが、共同研究者から「粒界相の磁性が直接的に決定できれば磁石の保磁力向上に役立つ」と助言いただき、粒界相の磁性評価を軟X線MCD測定で取り組むべきテーマとした。一方、Nd-Fe-B焼結磁石が数μm以下の微細な組織構造を有するため、当時の軟X線ビーム径(約φ0.3mm)では粒界破断面だけでな

くNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B粒内破断面や粒界三重点などを含む平均情報しか得られないこと、および、印加磁場(最大1.9 T)が磁石試料の飽和には不十分であったことが計測技術の課題として露呈した。そこで、2012年度より元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>に参画する機会を得て、軟X線ナノビームによる強

磁場下MCD測定の実験装置を開発した。

軟X線ナノビームにより結晶粒(粒径0.2~5 μm)を選択して局所磁気特性を評価するためには、単に軟X線ビームを集光するだけでなく、ビームライン光学系と実験装置の高い安定性を確保することが不可欠である。そのた

め、SPring-8施設側(理研、JASRI)の支援を得て、2014年にBL25SUの全面的なアップグレードを実施した。これと並行して、走査型軟X線MCD顕微鏡の開発を進め、アップグレードしたBL25SUに設置した。軟X線顕微鏡としては、STXM (Scanning transmission X-ray microscope; 走査透過型X線顕微鏡)がよく知られている。しかしSTXMで観察可能な試料は、軟X線を透過することのできる厚さ100nm程度以下の薄片試料に限られる。また、数テスラの強磁場下での測定が行える装置は海外を含めて皆無であった。そこで、本装置では従来のSTXMとは設計コンセプトを変え、永久磁石の破断面に対する強磁場(最大8 T)での測定技術を実現した。

図1(左)に走査型軟X線顕微鏡装置の概観、および、Nd-Fe-B焼結磁石の破断面における磁区像の例を示す。磁区像の磁場依存性から磁石粒子ごとの磁化過程を得ることに成功し、特定の粒子とその隣接粒子の磁気特性の相関から保磁力機構を考察すること

が可能となった[1]。また、図1(右)に示したように、透過能に優れた硬X線領域において、X線CT (Computed Tomography) にXMCDを組み合わせた磁気CT技術をNd-Fe-B焼結磁石から採りだした微小粒子試料に適用した。その結果、磁石粒子内部の磁区を三次元的に可視化することに成功した[2]。今後は、二次元、三次元の磁化反転挙動像にデータ科学の手法を適用し、保磁力発現機構の理解を深化する研究に発展させる。

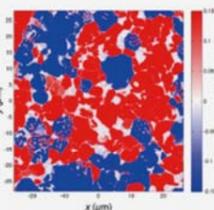
上記に加えて、産業界における磁石製造プロセス改良への貢献を目的として、焼結磁石熱処理中の

相変化を高温in-situ X線回折(XRD)によって明らかにする研究に取り組んだ。XRD用の高温炉や、高温下での意図しない試料の酸化・変質を防ぐための技術開発により、Nd-Fe-B焼結磁石試料について1100℃までのX線回折プロフィールを取得した。図2に示すように、リートベルト解析による信頼性の高い相図を得るとともに、局所平衡の概念を導入することにより、磁石構成相の体積分率の変化の熱力学計算による定量的な説明に成功した。[3]。今後は、DX測定や自動解析に対応し、産業界の解析ニーズに応える技術の高度化を進めていく。

磁区観察技術を新規開発

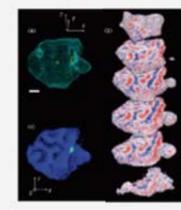
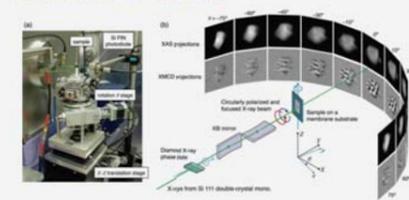


破断面にも適用可能な軟X線MCD磁区観察技術をSPring-8で開発



磁気特性が劣化した研削面を観察する従来法では見えなかった磁石内部の磁化反転過程を推定することに成功 [1]。

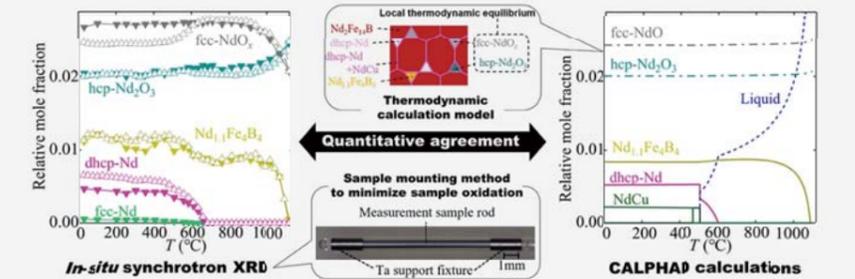
磁気トモグラフィー法を開発



SPring-8のBL39XUにおいて磁気トモグラフィー法を開発。Nd-Fe-B磁石粒子内部の磁区を3次元的可視化に成功 [2]

図1 (左上)SPring-8のBL25SUに設置した開発した走査型軟X線MCD顕微鏡装置の外観、(左下)同装置を用いて取得したNd-Fe-B焼結磁石試料の破断面の磁区像、(右上)BL39XUに設置した磁気トモグラフィー測定セットアップの様子、および、実験装置の概略図、(右下)磁気トモグラフィー実験結果の例。

Thermodynamic equilibrium in a Nd-Fe-B-Cu sintered magnet determined by XRD and calculation



高温 in-situ X線回折実験により、磁石製造プロセスにおける熱処理中の相変化を直接的に把握することが可能になった。最近、試料を石英キャピラリーに非接触で保持する手法を開発し、高温での試料劣化を大幅に抑制し、高信頼の相図が得られるように改良された。また、熱力学計算に局所平衡を採り入れ、実験で得た相変化温度を定量的に説明することに成功した[3]

連名者・連携機関

鈴木基寛・関西学院大学、小谷佳範・高輝度光科学研究センター、小林慎太郎・高輝度光科学研究センター

参考文献

- [1] D. Billington et al., Phys. Rev. Mater. 2, 104413 (2018).
- [2] M. Suzuki et al., Synchrotron Radiation News 33, 4 (2020).
- [3] S. Kobayashi et al., J. Alloys Compd. 892 162188 (2021).

# 「京」・「富岳」を用いた蓄電池内現象の見える化

館山 佳尚 Yoshitaka Tateyama

物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点



## 1. はじめに

蓄電池の大型化、安全性向上はカーボンニュートラルおよびSociety 5.0実現の中心課題とあって過言ではないだろう。その核心は安全で高性能な電解液・電解質の開発、および電極-電解質界面の制御と言える。しかし、二次電池内の電子・イオンの動きは複雑なため、実験的に全貌を明らかにすることはいまだに困難である。そこで、われわれはスパコン「京」「富岳」の高効率利用を念頭に、先進的計算手法開発とそれらを高精度第一原理計算と組み合わせることにより蓄電池内の微視的現象の理論的予言・提案に取り組んできた。その事例について紹介する。

## 2. 計算について

未知現象を取扱う場合、計算側にも相応の精度が求められる。われわれは実験家・産業界への予言性を担保すべく、計算コスト

は高いが精度も高い第一原理計算を基軸として採用している。さらに「京」「富岳」の多数ノード環境を有効利用するために、反応自由エネルギー計算(熱力学的積分法)の高次並列化を実装したstat-CPMDや、ヘテロな固固界面の構造を高効率(並列)サンプリング可能なヘテロ界面CALYPSO法などを開発した。これにより数千ノードを一度に用いた大規模第一原理計算ベースのハイスループットサンプリングが可能となり、材料探索や界面微視的過程の見える化が格段に進んだ。このように大型研究施設と先進計算が連携することで、世界初となるようなインパクトのある研究成果創出が可能となった。

## 3. 研究成果

われわれは「京」「富岳」を用いて、さまざまな理論的予言を行ってきた。

(1) 最近注目を集めている高濃度

電解液が持つ異常な電気化学安定性の起源について、第一原理MD計算から、Li<sup>+</sup>第一溶媒和圏に存在するアニオンが犠牲的に還元分解し、それが良好な被膜形成につながるという現在の標準的な考え方を、世界に先駆けて理論的に提起した。(JACS(2014), JPCC(2014)他)。

(2) 負極界面におけるSEI被膜形成機構、界面Li<sup>+</sup>移動についても、さまざまな新概念を提起している。例えば第一原理MDとBlue-moon ensemble法の組み合わせにより、EC溶媒電解液へのVC添加剤の効果として、Li<sup>+</sup>に配位したECの還元分解生成物をVCが不動化する過程があることを見いだした。またSEI被膜形成時には負極界面に分解生成物が単純に堆積するのではなく、少し沖合で凝集するNear-shore aggregationというメカニズムを実証した。さらに、FEC添加剤の

## 講演のポイント

- 先進的手法開発(熱力学的積分並列化、ヘテロ界面CALYPSO法)
- 高精度計算による蓄電池内現象の理論的予言

分解過程とSEI被膜内におけるLi<sub>x</sub>Fクラスター構造形成という概念を提起した。最近では、SEI被膜-黒鉛負極界面におけるLi<sup>+</sup>移動挙動に関する世界初の第一原理計算自由エネルギー解析を実行した。これらの新規な概念は現代の電解液探索においても利用されている。(JACS(2013), JES(2015), PCCP(2016), PCCP(2020))

(3) 全固体電池実用化への重要課題の一つ、正極-硫化物固体電解質界面における界面抵抗や劣化傾向の増加に関して、充電時に固体電解質の酸化をもたらす界面の電子移動性が主要因であ

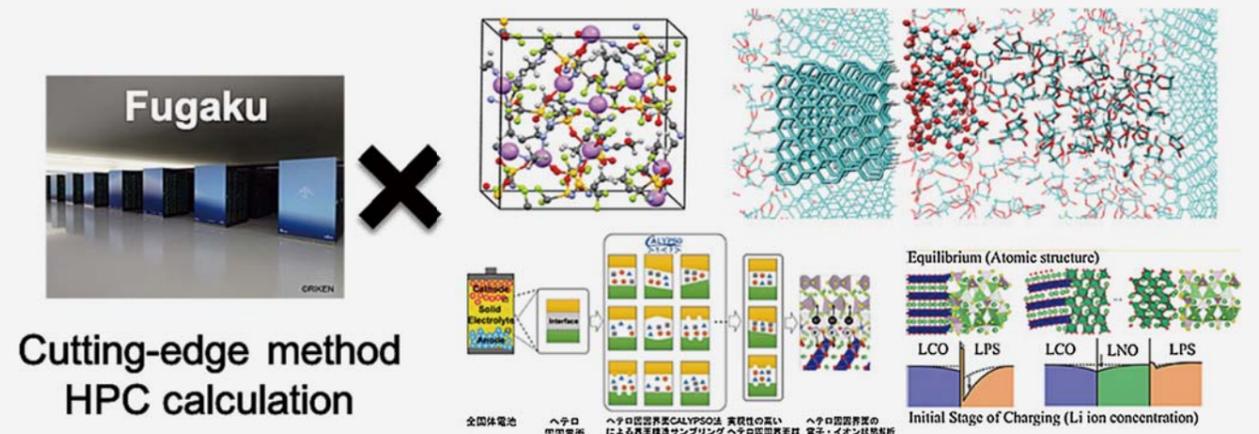
り、これが従来モデルの空間電荷層や反応層形成両者につながっていくことを理論的に示した。さらに抵抗上昇を抑制するコート層の主要な役割が界面電子移動の抑制であることも実証した。これらの問題では安定なヘテロ固固界面のサンプリングが必須であり、われわれが行ったヘテロ界面CALYPSO法開発とスパコンの高効率利用によって初めて高精度解析が可能となった。(CM(2014), ACS-AMI(2017), CM(2020), ACS-AMI(2021))

(4) われわれは「富岳」の多数ノード環境を利用した、機械学習ベー

スの固体電解質材料探索も行っている。すでに、逆ペロブスカイト構造固体電解質に対して安定性と高イオン伝導性を有する有力組成の提案を行い、それが実際に実験合成されるという事例が得られている。(CM(2021), CM(2021))

## 4. おわりに

このように「京」「富岳」の多ノード環境と高精度第一原理計算をベースとする先進的計算手法の組み合わせにより、次世代蓄電池開発に資する蓄電池内現象のさまざまな理論的予言が可能な時代に突入してきた。



## 連名者・連携機関

山田淳夫、山田裕貴/東京大学 奥野幸洋、後瀧敬介/富士フイルム 河村芳海、馬場健/トヨタ自動車 袖山慶太郎、JALEM Randy, JANG Seonghoon, BAO Bo/物質・材料研究機構、京都大学ESICB

## 参考文献

[1] 館山研究室研究成果 <https://www.nims.go.jp/group/cs/research/papers.html>

## 関連 WEB

館山研究室 <https://www.nims.go.jp/group/cs/>  
富岳百景 <https://fugaku100kei.jp/mag/05/>

# 量子ビームの協奏と先端利用で 電子材料の機能の本質に迫る

**門野 良典 Ryosuke Kadono**

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所



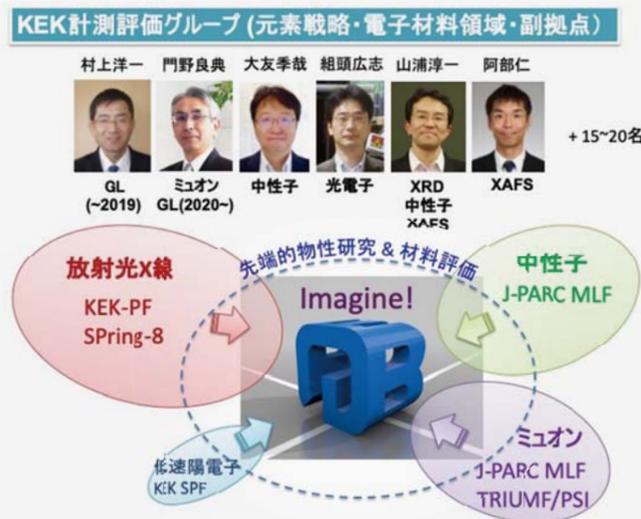
電子材料研究では、量子ビーム利用研究の専門家集団からなる高エネ機構・物構研に副拠点が置かれ、材料創製グループが合成した電子材料について、東工大拠点の解析評価グループとも緊密に協議しながら、拠点では実施できない大型研究施設での放射光・中性子・ミュオンという量子ビームを用いた物性材料評価が実施された。具体的には、放射光X線回折による精密構造解析(KEK-PF、SPring-8利用)、先端光電子分光による表面・界面の電子状態の評価、および微小試料領域(数 $\mu\text{m}$ )分析装置開発(KEK-PF利用)、中性子回折による結晶・磁気・局所構造解析および準弾性・非弾性散乱によるダイナミクス解析(J-PARC MLF中性子利用)、ミュオンスピン回転( $\mu\text{SR}$ )による磁性・超伝導の評価、物質中の水素電子状態の同定、さらに大強度ミュオンビーム利用のための $\mu\text{SR}$ 分光器の開発(J-PARC MLFミュオン利用)など

である。さらに、これらの量子ビームを相補的・協奏的に駆使する「マルチプローブ解析」プラットフォーム体制が構築されたことにより、電子材料の精密解析・評価の結果が材料創製グループへ迅速にフィードバックされ、物質開発速度の向上に貢献した。また、並行して行われた装置の高度化により、量子ビームによる解析・評価の精度、および解析速度の向

上を実現した。具体的な成果のハイライトとしては以下の3点が挙げられる。

### 1) 鉄系超伝導体における新たな反強磁性母相の発見：

鉄はありふれた元素であるが、その磁性ゆえに超伝導とは縁遠い元素とみなされており、2008年のLaFeAsO(1111系)高温超伝導の発見は銅酸化物に比すべきインパクトをもたらした。その後、



### 講演のポイント

- 鉄系超伝導体における新たな反強磁性母相の発見
- エレクトライド電子の確立と触媒応用における機能発現の機構解明
- 電子材料中の水素の電子状態とダイナミクスの評価

東工大拠点では1111系物質で酸素-水素置換という新しいキャリアドーピング法を開発し、これまでにない高濃度で電子ドーピングが可能になった結果、すでに知られていた低電子ドーピング領域で発現する超伝導相(第1)に加え、高電子ドーピング領域で新たな超伝導相(第2)、およびその母相とみなされる第2の反強磁性秩序相の発見に至るとともに、量子ビーム解析により数多くの大変興味深い知見が得られた。

中でも第2母相の発見は重要

で、マルチプローブによる迅速な物性評価が行われた結果、多軌道電子系の高濃度超伝導における磁性と超伝導の競合・協奏という、単バンド系の銅酸化物に代わる新たな物性研究のパラダイムへの契機となった。

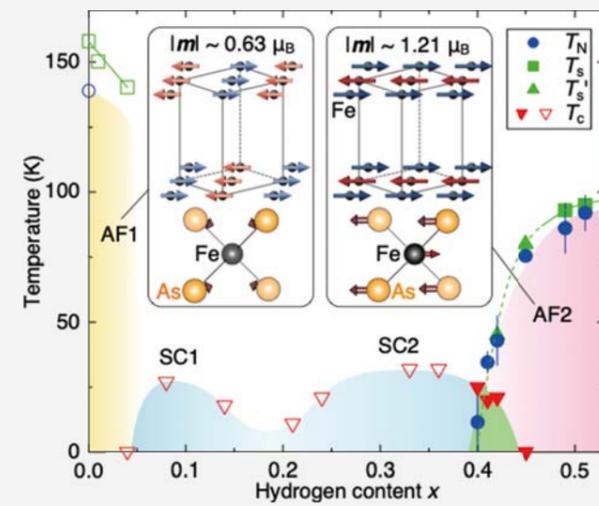
### 2) エレクトライド電子の確立と物性評価、およびその触媒応用における機能発現の機構解明：

固体エレクトライドは、「原子核に束縛されない電子を陰イオンとして固体結晶に配することで仕事関数を下げる」という新

媒の担持体として驚異的な性能を示すなど、応用上の大きなインパクトをもたらしている。マルチプローブ研究では、その後も続々と合成されたエレクトライド候補物質について「エレクトライド電子」の存在が立証されるとともに、触媒機能に重要な遷移金属や水素との相互作用に関する微視的な情報、さらにはエレクトライド電子そのものが持つ特異な性質が明らかにされた。

### 3) 酸化物半導体・誘電体の機能に関わるナノ構造、水素の電子状態とダイナミクスの評価：

安定かつ豊富に存在する酸化物は、現代の電子機器を支える基幹的な電子材料として常にその性能向上が求められている。東工大拠点でもさまざまな新機材料の開発が行われたが、中でも量子ビーム解析が威力を発揮したのがこれらの材料中の水素に関する研究であり、IGZOをはじめとする透明半導体の性能を左右する微量水素の役割解明、ヒドリド伝導体における水素位置の決定とダイナミクスの解明などの成果が挙げられている。



### 連名者・連携機関

村上洋一、細野秀雄

### 参考文献

- [1] M. Hiraishi, S. Iimura, K. M. Kojima, J. Yamaura, H. Hiraka, K. Ikeda, P. Miao, Y. Ishikawa, S. Torii, M. Miyazaki, I. Yamauchi, A. Koda, K. Ishii, M. Yoshida, J. Mizuki, R. Kadono, R. Kumai, T. Kamiyama, T. Otomo, Y. Murakami, S. Matuishi, and H. Hosono, Nat. Phys. 10, 300 (2014).
- [2] K. Horiba, R. Yukawa, T. Mitsuhashi, M. Kitamura, T. Inoshita, N. Hamada, S. Otani, N. Ohashi, S. Maki, J. Yamaura, H. Hosono, Y. Murakami, and H. Kumigashira, Phys. Rev. B 96, 045101 (2017).
- [3] K. M. Kojima, M. Hiraishi, H. Okabe, A. Koda, R. Kadono, K. Ide, S. Matsuishi, H. Kumomi, T. Kamiya, and H. Hosono, Appl. Phys. Lett. 115, 122104 (2019).

### 関連 WEB

<https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/2014031710000/>

講演の  
ポイント

- 高温加工熱処理シミュレータによるその場中性子線解析
- 動的フェライト変態におけるマイクロ組織形成メカニズムの解明
- 加工熱処理中のオーステナイトの格子欠陥密度変化の定量評価

# J-PARCでの高温加工熱処理シミュレータを用いた動的相変態に関する研究

柴田 暁伸 Akinobu Shibata

物質・材料研究機構



輸送機器の燃費向上や国土強靱化に資する建築材開発を実現するためには、鉄鋼材料に代表される構造用金属材料のさらなる高強度化・高性能化が必要不可欠である。500℃～1000℃のような高温での加工と熱処理を組み合わせた「加工熱処理」は、1000年以上前の刀鍛冶から現在の自動車用鋼板や建築材などの鉄鋼材料製造にも引続き適用されている製造プロセスである。しかし、高温度域での加工熱処理中にどのようにマイクロ組織が形成されるかを直接観察することは困難であるため、現行の加工熱処理は依然として経験的な側面に大きく依存しているのが現状である。

鉄鋼材料の高強度化・高性能化を実現していくためには、加工熱処理中のマイクロ組織形成過程を明らかにし、メカニズムに基づいた加工熱処理によってマイクロ組織を制御していくことが必要である。われわれは、J-PARCのMLFビームライン19 (匠) に、実際の鉄

鋼材料製造プロセスを模擬した加工熱処理中のその場中性子回折実験が可能で高温加工熱処理シミュレータを導入した。本研究では、「動的フェライト変態」と呼ばれる、今後の加工熱処理の基礎となる新しいメタラジーとして注目されている相変態を研究対象にした。動的フェライト変態は母

相オーステナイトの加工中に生じる相変態であり、動的フェライト変態を含む加工熱処理によって結晶粒径が1μm以下の超微細粒マイクロ組織が得られることがわかっている。通常、超微細粒マイクロ組織の形成は、繰り返し重ね合わせ圧延に代表されるような巨大ひずみ加工が必要である。しかし動的

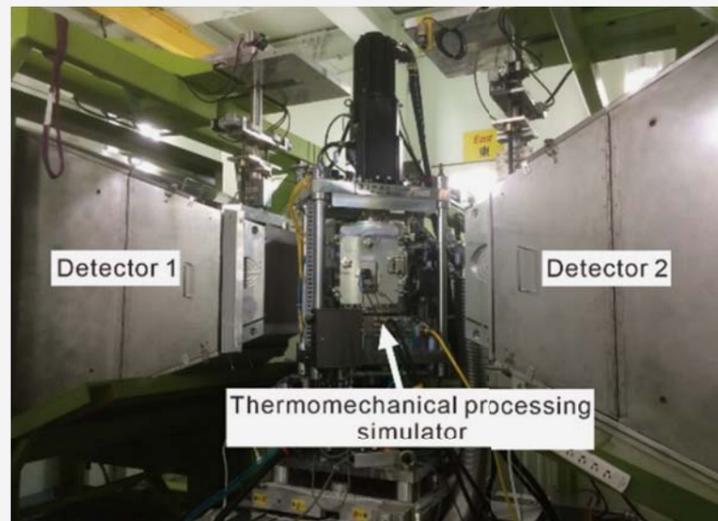


図1 その場中性子回折実験用高温加工熱処理シミュレータ

フェライト変態を含む加工熱処理では比較的小さなひずみ量で超微細粒マイクロ組織を得ることが可能であることが大きな特徴である[1]。しかし、その変態メカニズムや超微細粒マイクロ組織形成メカニズムは不明のままであり、そもそも変形中に相変態が生じているかどうか議論の対象となっている。そこで本研究では、その場中性子回折実験によって動的フェライト変態におけるマイクロ組織形成過程を明らかにすることを目的として実験を行った。

加工熱処理中に得られたその場中性子回折プロファイルを解析した結果、圧縮加工を始めてからフェライトに対応する回折ピークが現れていることが明らかとなった[2]。これは動的フェライト変態が母相オーステナイト中の加工中に生じていることを実証した非常に重要な成果である。また、中性子回折プロファイルからフェライト相とオーステナイト相の格子定数変化を解析し、変態に伴って生成した動的フェライト相の格子定数が減少していくことを

明らかにした。これは、変態中に平衡モードがパラ平衡からオルソ平衡へと遷移することに起因すると考えられる。

これまで動的フェライト変態の変態機構については、「せん断型変態」、「マッシュ変態」、「拡散型変態」など種々の変態機構が提案されてきているが[3]、上述の変態中の格子定数変化は拡散型変態を仮定しないと説明できないため、本研究によって動的フェライト変態は拡散型変態であることを明確に示すことができた。さらに加工熱処理中の母相オーステナイトの格子欠陥密度(転位密度)変化を定量評価することに成功した[2]。通常、母相オーステナイトは室温への冷却中にフェライトもしくはマルテンサイトに変態して消失してしまうた

め、バルク材において高温度域でのオーステナイトの加工状態を直接評価することはほぼ不可能であった。しかし、本研究で用いたその場中性子回折実験用加工熱処理シミュレータは、高温状態での加工状態を直接評価することが可能である。母相オーステナイトの転位密度変化の結果から、動的フェライト変態を含む加工熱処理によって得られる超微細粒マイクロ組織は、動的再結晶によって生じていることが明らかとなった。

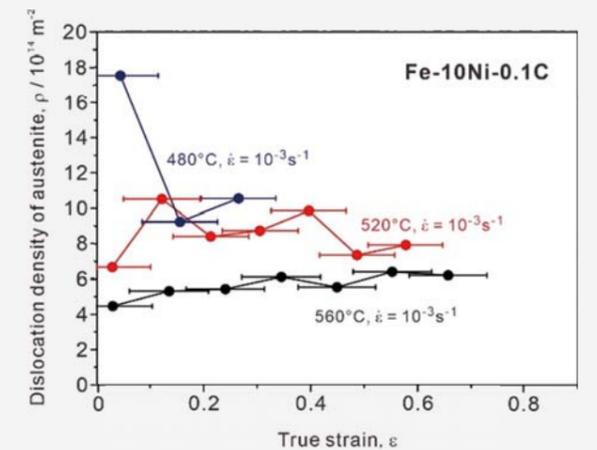


図2 動的フェライト変態に伴う母相オーステナイト中の転位密度変化

連名者・連携機関

竹田泰成・京都大学、Nokeun Park・Yeungnam University、Lijia Zhao・Colorado School of Mines、Stefanus Harjo・J-PARC Center、川崎卓郎・J-PARC Center、Wu Gong・京都大学、辻伸泰・京都大学

参考文献

- [1] 牧正志ら: 鉄と鋼, 100 (2014), 1062-1075.
- [2] A. Shibata et al.: Scripta Mater., 165 (2019) 44-49.
- [3] L. Zhao et al.: Adv. Eng. Mater., 20 (2018) 1701016.

関連 WEB

[http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research\\_results/2018/190216\\_1.html](http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2018/190216_1.html)

## SPring-8/SACLAから見た 元素戦略のインパクト

雨宮 慶幸 Yoshiyuki Amemiya  
高輝度光科学研究センター 理事長



供用開始から25年が経過したSPring-8では、施設のアップグレードに向けて共用ビームライン再編や利用制度の見直し等の改革が行われている。元素戦略プロジェクト(以後、本プロジェクト)は、SPring-8のこれらの改革に対して少なからぬ影響を与えた。

本講演では、本プロジェクトがSPring-8に与えたインパクトを概観したのち、今後の材料科学に関わる研究プロジェクトへの期待を述べる。

本プロジェクトにより、放射光計測技術において、実材料の特徴である複雑系・不均一系への対応が促進された。具体的には、SPring-8の計測技術の高分解能化(空間、時間、エネルギー)および、ナノスケールからマイクロスケールにいたるマルチスケールの計測技術の飛躍的な発展につながった。これと並行して、材料製造プロセスや反応状態のその場観察手法やデバイス材料のオペランド計測技術の発展にも影響を与えた。これらの発展した計測技術は、現在のSPring-8の光源

性能を使い尽くしたレベルに到達したと考えている。

元素戦略プロジェクトの先駆性のひとつは、マルチプローブの利活用(複数手法の利活用)にあった。本プロジェクト以前の大規模プロジェクトは専用ビームラインの建設を伴って行われたが、本プロジェクトは共用ビームラインの各種の計測装置群を最大限に利活用して研究を推進するスタイルをとった。結果として、SPring-8共用ビームライン再編のもとで、現在進行しているプロダクション・ビームライン群の整備へとつながったと見ている。これに加えて、産学連携を推進する本プロジェクトは、必然的に、共用ビームライン全体における産学連携研究を推進する方向へ影響を与えた。結果として、学術利用と産業利用の間の垣根を低くし、共用ビームラインと産業用ビームラインの相互乗り入れを行いやすい利用制度の改革に推進力を与えた。

このように、本プロジェクトのSPring-8利活用は、現在のSPring-8動向に大きな影響を与えたと考えている。

今後の材料科学に関わる研究プロジェクトへの期待を述べたい。グローバルな課題解決に向けたSDGsの目標達成やそれに伴うわが国における2050年カーボンニュートラルの実現に向けて、今後の科学技術に対する期待、とりわけ放射光科学に対する期待は大きいと考えている。このような状況下、SPring-8/SACLAは、昨年8月に「グリーンファシリティ宣言」<sup>1)</sup>を行い、地球規模での課題解決に貢献することの意思表明をした。この宣言の下、SPring-8/SACLAは今後さらなる研究成果の創出に向けて、施設のアップグレードを目指していきたいと考えている。材料科学における研究成果の創出にSPring-8/SACLAはさらにパワフルなツールとして、大きな貢献をしたいと考えている。今後の材料科学に関わる研究プロジェクトでは、SPring-8/SACLAが研究基盤施設として、より積極的に利活用されることを期待している。

1) [http://www.spring8.or.jp/ja/news\\_publications/press\\_release/2021/210823/](http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2021/210823/)

## J-PARC物質・生命科学実験施設における 中性子およびミュオン利用

大友 季哉 Toshiya Otomo

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 副所長  
J-PARC センター 物質・生命科学実験施設 ディビジョン長



大型陽子加速器施設(J-PARC)物質・生命科学実験施設(MLF)では、400 MeV線形加速器、3GeVシンクロトロン加速器(RSC Rapid Cycle Synchrotron)により加速された陽子を用い、パルス状の中性子およびミュオンを発生させ、21本の中性子ビームラインと3本のミュオンビームラインにおいて、基礎的研究から産業利用まで幅広い分野での利用研究が行われている。2021年4月からは、700 kWの陽子を安定的に利用することができるようになった。海外からも多くの申請があり、世界的な研究拠点の一つとなっている。また、MLFが重視する産業利用の分野においても、企業との共同研究、産学連携コンソーシアムやNEDOプロジェクトなどの産学連携アプローチにより多くの成果が挙げられている。

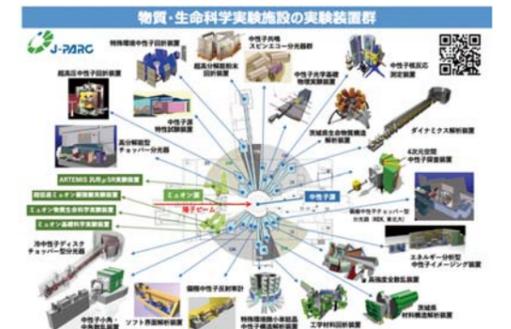
J-PARC MLFが一般利用を開始したのは2008年であり、元素戦略プロジェクトが開始された2012年の段階では、東日本大震災による9か

月の停止からの復旧を果たした直後で、中性子やミュオンビームラインの整備も不十分であり、陽子加速器のパワーもようやく200 kWに達したところであった。その後、加速器のパワーも上昇し、おのおのビームラインの整備が進む中、MLFも順調に運転され、安定的な成果の創出が可能となった。

元素戦略プロジェクトは、そのようなJ-PARC MLFの建設期から運用期の転換期に実施されたものであり、中性子やミュオンの軽元素(とくに水素)の観測能力、磁気構造観測能力、物質透過能を生かしたユニークな成果が多く創出された。例えば、鉄系超伝導体における新たな反強磁性母相の発見<sup>[1]</sup>、金属触媒における水素の振動状態の解析<sup>[2]</sup>、加工熱処理中のミクロ組織形成過程を研究するため導入された高温加工熱処理シミュレータ(サーメックマスター)を

用いたフェライトの動的変態の性質<sup>[3]</sup>などである。

MLFにおける元素戦略プロジェクトの重要な点は、建設期から運用期への転換期において、MLF施設とユーザーという立場にとどまらず、専門性を生かした役割分担とともに相互関与の関係にあったことであると考えている。元素戦略プロジェクトが関わることで、MLFが持つハードウェアの高度化が進み、世界の中でMLFのみがなしえた多くのオリジナルな実験も行われた。今後も、世界トップレベルの成果創出には、このような関係性をより深めていくことが重要であると考えている。



### 連名者・連携機関

J-PARCセンター 総合科学研究機構(CROSS)中性子科学センター

### 参考文献

- [1] M. Hiraiishi, S. Iimura, K. M. Kojima, J. Yamaura, H. Hiraka, K. Ikeda, P. Miao, Y. Ishikawa, S. Torii, M. Miyazaki, I. Yamauchi, A. Koda, K. Ishii, M. Yoshida, J. Mizuki, R. Kadono, R. Kumai, T. Kamiyama, T. Otomo, Y. Murakami, S. Matsuishi and H. Hosono, Nat. Phys. 10, 300 (2014)
- [2] H. Yoshida, A. Yamamoto, S. Hosokawa, S. Yamazoe, S. Kikkawa, K. Hara, M. Nakamura, K. Kamazawa, and T. Tanaka, Topics in Catalysis 64 660-671 (2021)
- [3] Akinobu Shibata, Yasunari Takeda, Nokeun Park, Lijia Zhao, Stefanus Harjo, Takuro Kawasaki, Wu Gong, Nobuhiro Tsuji, Scripta Materialia 165 44-49 (2019)

### 関連 WEB

<https://mlfinfo.jp/ja/>

「京」・「富岳」

常行 真司 Shinji Tsuneyuki

東京大学/HPCI コンソーシアム 理事  
「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括



元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>が始まる少し前に、「京」のアプリ開発と分野振興を図るプロジェクト「HPCI戦略プログラム」の中で、物性研、分子研、金研を中心として計算物質科学イニシアティブ(CMSI)が設立された。CMSIでは研究のパートナーとして元素戦略各拠点のメンバーとなる方々との繋がりをつくるイベントを開催し、これにより実験(計測)・計算連携の礎が築かれ、CMSIのメンバーも各拠点に組み込まれて、実験と計算が一体となった元素戦略研究拠点が提案された。

以来、CMSIやその後継プロジェクトである「ポスト「京」重点課題」

が元素戦略プロジェクトと連携する中で、材料研究者のニーズに応える形で、「京」や「富岳」を利用するための大規模計算技術や、材料研究に役立つ基盤的なアプリの開発が進展した。「京」ではこれまでにない大規模計算が可能になり、材料らしい複雑な界面や化学反応などの第一原理計算が行われるようになった。また「富岳」では大規模計算に加え、データ科学的手法により大量の計算データを活用する研究スタイル、いわゆるマテリアルズインフォマティクスが急速に進展しつつある。

一方、開発されたアプリは、計算物質科学ポータルサイトMateriApps

や初心者向けのパッケージ化されたソフトウェア環境MateriApps Live!、また多数のアプリ講習会を通じて、その普及が進められた。この動きは、国の予算を投入して開発されたアプリの活用という観点で意味があっただけでなく、アプリがより多くのユーザに使われ、ユーザニーズのフィードバックを受けて改良され、その結果としてアプリ開発者が評価されるという、ポジティブフィードバックをもたらすものであり、計算物質科学振興につながったと考える。これらの活動は、プロジェクト終了後も物性研を中心とする計算物質科学コミュニティにより継続される予定である。



関連 WEB

HPCI 広報サイト 富岳百景 <https://fugaku100kei.jp/>  
物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>

元素戦略プロジェクト  
<研究拠点形成型>  
初代PD(2012-2015)



村井 真二 Shinji Murai

奈良先端科学技術大学院大学 特任教授

元素戦略(拠点形成型)は、文科省担当部署とJST担当部署の緊密な連携のもとスタートしたものであり、いくつかの際立った特長を持つ。すなわち、複数の研究目標のシャープさ、グループ横断的な研究手法とグループ内組織の共通性、内外との強い連携、加えて若い研究者の養成などである。大きな成果と波及効果が期待されるプロジェクトであり、現在成功裏に展開されつつある。元素戦略は、わが国に端を発し今や世界を先導するコンセプトである。今後も、元素戦略としての広い発展とともに、物質系研究開発への大きな寄与、さらには、「経済安全保障」ばかりでなく「地球安全保障」の基盤となることを期待したい。

元素戦略プロジェクト  
<研究拠点形成型>  
初代PD(2012-2017)



澤岡 昭 Akira Sawaoka

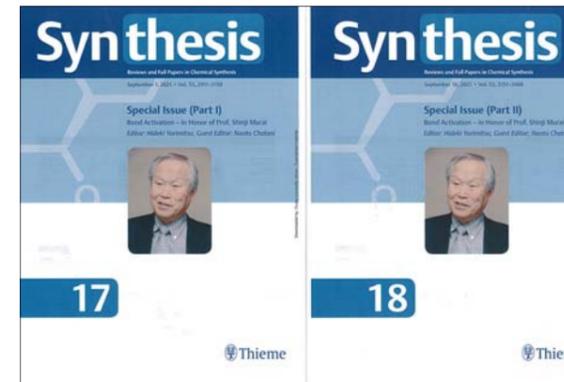
大同大学 名誉学長

元PDのつぶやき

今年度で終了する研究拠点形成型元素戦略プロジェクトの前に産官学連携型16課題が実施され、PDを7年間務めた。1課題5年間のプロジェクトであり、2年間重複して現在の拠点形成型が始まり、PDを6年間務めた。このプログラム立ち上げの会合で、一人の研究代表者から「プログラム終了時にあなたは80歳を越えている、最後まで続けるつもりか?」とのきつい発言があり、「折り返し点の5年間でバトンタッチしたい」と答えた。私と同年齢の村井先生は4年でPDを辞退され、私は6年で玉尾PDと交代した。79歳であった。

1999年に名古屋の私立大学長に就任するとき、研究をやめて大学経営に専念する覚悟であったが、徐々に元素戦略プロジェクトに引き込まれ、PDは悪役に徹しなければ務まらない仕事であることを痛感した。元素戦略プロジェクトは文科省の委託業務である。特に苦労したのは、科研費補助金と受託研究の区別が付かない研究者とのやりとりであった。文科省担当者は2~3年で交代するので、クールでドライなPDの存在はプロジェクト遂行上不可欠である。

学長職と元素戦略PDの仕事をはほぼ同時期に終了した頃、路上でばったりと会った元学園理事長から、顔つきが良くなったと褒められた。二つの悪役から解放されたからだと思った。11年間、二足の草鞋の仕事ができたのは中山智弘PO(プログラムオフィサー)の支えがあったからです。感謝します。



氏の功績に敬意を表する『Synthesis』特別号2冊(2021)

## CREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」

研究統括

北川 宏 Hiroshi Kitagawa

京都大学 大学院理学研究科



世の中には、水と油の関係のように、どう工夫しても混ざらない組み合わせがある。例えば、鉄と銅は原子レベルでは混じり合わない元素同士である。実は社会で使用されている合金触媒の大部分は混じり合わない元素同士で構成されており、異なる金属元素間の相乗効果を最大限には引き出していない。安定な金属元素は60種程度あるため、その組み合わせは2元系合金で1,700程度存在する。そのうち任意の割合で原子レベルで混ぜられるのは(全率固溶合金)3割以下であり、実は7割以上の合金の組み合わせを人類はまだ活用できていないことになる。

水と油の関係にある金属元素同士を原子レベルで混ぜ合わせ、新しい物質をつくり出す研究を推進している。

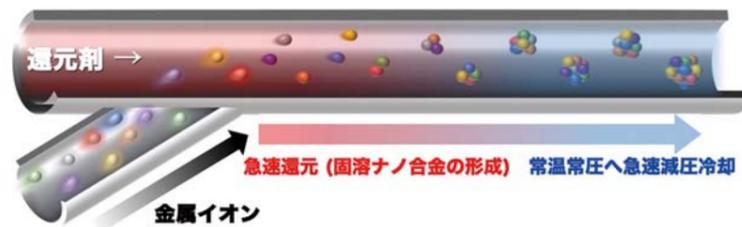
その研究戦略には、構成元素が原子レベルでランダムに一樣に混じりあう合金(固溶合金)では、その組成比により連続的に電子状態、つまり、機能・物性を連続的に

制御することが可能なことがあげられる。そのため、あらゆる元素を自在に混合して操る技術を構築できれば、目的の元素を他の元素の組み合わせで既存の元素を凌駕する新しい元素を生み出すことが可能となる。最近では、独自に開発した連続フロー型ソルボサーマル非平衡ナノ合金ブ

ロセスにより、任意の元素を任意の割合で混ぜる多元素ナノ合金(図参照)の開発が実現化されようとしている。当該科学技術を基盤に、材料創製インフォマティクスとハイスループットスクリーニング(HTS)により、未踏探索空間における革新的物質の開発が可能になりつつある。

### 連続フロー型亜臨界/超臨界ソルボサーマル法の開発

瞬間的に非平衡状態を生成し、瞬時に常温・常圧へ



- 世界初のナノ合金作製法 → 固溶合金作製に威力を発揮
- 非平衡合成法 (瞬時に高温・高圧へ加熱・加圧、瞬時に室温へ冷却)
- 亜臨界、超臨界までの加圧・加熱可能 (50 MPa、500 °C)
- 低沸点溶媒でも高温まで還元剤として使用可
- 安価で安定な量産化プロセス

特開2018-031138 (京大単願)  
特開2019-118840 (企業共願)  
J. Phys. Chem. C, 2020 (Invited)

### 参考文献

- [1] K. Kusada & H. Kitagawa, Continuous-Flow Syntheses of Alloy Nanoparticles, Materials Horizon, in press.  
[2] K. Kusada et al., Highly Stable and Active Solid-Solution-Alloy Three-Way Catalyst by Utilizing Configurational-Entropy Effect, Advanced Materials, 33, 2005206 (2021).  
[3] D. Wu, et al., Platinum-Group-Metal High-Entropy-Alloy Nanoparticles, J. Am. Chem. Soc., 142, 13833-13838 (2020).

### 関連 WEB

[https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research\\_area/ongoing/bunya2021-4.html](https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunya2021-4.html)  
<http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/osscc/index.html>

## さきがけ「物質探索空間の拡大による未来材料の創製」

研究統括

陰山 洋 Hiroshi Kageyama

京都大学 大学院工学研究科



本研究領域は、令和3年度文部科学省の選定した戦略目標「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」の下に発足し、昨年10月、若手研究者を中心に研究を開始した。われわれが直面する環境・資源・エネルギー、医療・健康等に代表される社会課題を解決するために、従来技術とは異なる非連続な概念・コンセプトを探索したシンプルかつ斬新なアイデアにより、これまでの物質探索空間の枠を超えた、革新的な新機能性材料の創出を目指している。

具体的には、異なる元素同士のシナジー効果を解明した上での元素の複合化による「多元素化」、元素の配置制御等による材料システムとしての「機能複合化」、非平衡状態や速度論的制御を利用する「準安定相」の活用等の

視点で、環境・エネルギー関連材料、エレクトロニクス材料、医用材料、構造材料等への利用に向けて夢のある材料・プロセス研究を推進していく。

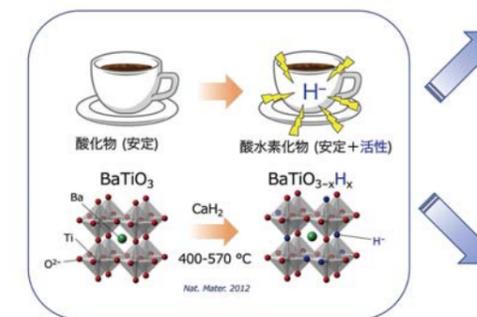
さらに、将来的な素材化、プロセス化技術の流れも意識し、物質創製技術やプロセス制御技術確立のために、計算科学や機械学習等のデータ駆動科学、最先端オペランド計測技術等との融合による原理解明、学理構築等、広い視点

を背景とした挑戦的なアプローチでの研究を行う。

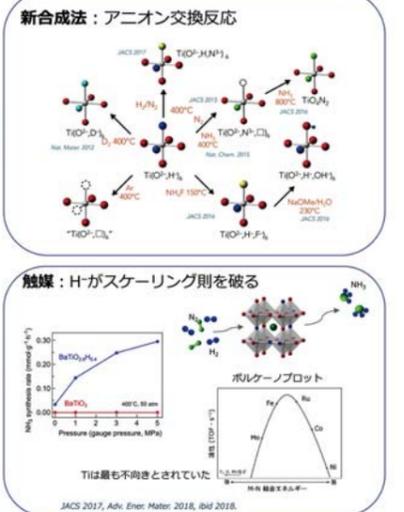
今年度は10課題を採択。採択率は7%と狭き門となったが、金属・無機系、有機系、理論計算、評価解析と幅広い研究分野からの研究課題で構成されている。

講演では、本研究領域の概要を説明させていただき、続いて、第1期研究課題を分かりやすく紹介したいと思う。

### 物質探索空間が広がった事例



安定な酸化物に導入した「ヒドリド」の活性を利用することによって、結晶構造探索空間の拡大(右上)や新たな機能創成(右下)が達成された



## CREST「情報計測」(1) 「ベイズ統計スペクトル分解」

赤井 一郎 Ichiro Akai  
熊本大学 産業ナノマテリアル研究所



マイクロ物性を解明する物性研究と、デバイス開発と最適化を行う材料研究の両輪によって、材料のデバイス応用研究が進められる。マイクロ物性研究では、電子・スピン状態や原子スケールの近距離構造を捉えるために放射光を用いたスペクトル計測がなされ、そのスペクトル分解はマイクロ物性解明の重要な方法である。一方、放射光計測法の発展に伴いデバイスのメゾ構造を捉える顕微計測やオペランド計測が実現され、スペクトル軸に加えて空間や時間軸を含む高次元ビッグデータの計測も可能となっている。

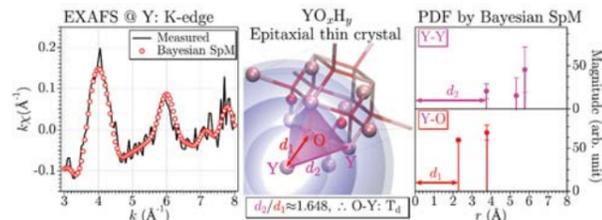
ベイズ統計スペクトル分解法(ベイズ分光法)は、ベイズ推定の枠組みを組み込んだスペクトル解析法で、因果律の原因と結果の同時確率を考え、ベイズの定理に基づいて結果である計測データを起点として因果律を遡り、原因であるマイクロ物性の統計情報を得る新しいスペクトル解析法で、材料研究においてさまざまな課題を解決し、新たな発見を導くことができる。

スペクトル分解で用いられるモデル関数には、物性を特徴づけるパラメータが非線形に含まれるため、パラメータ空間内で誤差関数は多数の局所極小解を持つ。そのため最小二乗法で得られる解は、パラメータ空間探索の初期値に依存してしまう本質的な問題がある。ベイズ分光法ではレプリカ交換モンテカルロ法を用いて大域的最適解の高速探索を実現して、全ての推定パラメータの統計分布(事後確率分布)を評価し、事後確率最大化に基づいてモデル関数の選択も可能である。

講演では、ベイズ分光法の概要と、材料のマイクロ構造解析のために計測される広域X線吸収微細構造(EXAFS)の解析にスパースモデリングとベイズ推定を融合させた新解析法や、高次元ビッグデータである顕微X線吸収スペクトルイメージ(2D-XAS)

から、デバイス機能を担うマイクロ電子状態の空間分布を評価する方法について紹介する。EXAFSの新解析法では、配位原子の元素種を識別した上で、正しい原子間距離で、最近接以遠の長距離構造を高いノイズ耐性で解析することが可能となり、X線吸収量が少ない薄膜材料においてもマイクロ構造の解析が可能となる。2D-XASの解析では、微弱なスペクトル変化も分解可能な片側直交非負値行列因子分解法とベイズ分光法を融合し、リチウムイオン電池モデル電極においてイオン伝導に寄与するマイクロ電子状態の空間分布の評価が可能となった。

本講演の成果は、JST、CREST、JPMJCR1861の支援を受けた研究に基づく。



### 連名者・連携機関

岡島敏浩・あいち SR、水牧仁一朗・JASRI、青西亨・東工大、山崎裕一・物材機構 NIMS

### 参考文献

[1] AIP Adv. 11, 125013 (2021). [2] J. Phys. Commun. 5, 115005 (2021). [3] STAM: Method 1, 75 (2021).

### 関連 WEB

<https://www.kumamoto-u.ac.jp/whatsnew/sizen/20211210>  
<https://www.kumamoto-u.ac.jp/whatsnew/sizen/20210709>

## CREST「情報計測」(2) 「機械学習アプローチによる量子多体状態探求」

遠山 貴巳 Takami Tohyama  
東京理科大学 理学部 応用物理学科



量子力学の下では電子波動関数がマイクロ物性を決めているため、波動関数自体を予測できれば物質・材料の物性予測が可能となる。電子の波動関数は場所の関数なので、結晶中の格子点に値をもつ「画像」として波動関数をとらえれば機械学習のアプローチが適用できる。しかし、そのような単純なアプローチが可能なのは電子間に相互作用がない系に限られる。もし電子間に強い相互作用が働くと、各格子点に複素数をもつ画像として表現することは不可能で、スレーター行列式の重ね合わせとして記述しなければならない。そのときの、基底の個数は16格子点の半充填(ハーフフィールド)ハバード模型であっても、 $10^8$ という膨大な値になるため、量子多体状態の予測に機械学習を使おうとすると、波動関数を表現可能な少数の情報量が必要となる。もしそのような情報量が得られれば、基底状態だけでなく、例えば光励起による非平衡状態の特徴を明らかにすることが可能となる。われわれは計測と情報を結び付ける研究の中で、波動関数の絡み合いの指標となるエンタ

ングルメント・スペクトルと呼ばれる量が、膨大な基底からなる波動関数の情報をたかだか数百のデータで記述できる最適な「画像」となっていることを突き止めた。その適用例として次元ハーフフィールド拡張ハバードモデルの量子相判別を紹介する。密度行列繰り込み群法と呼ばれる数値計算手法によってエンタングルメント・スペクトルを得たのち、ニューラルネットワークを構築することで、模型の二つのパラメータ空間(オンサイトクーロン相互作用 $U$ と次近接相互作用 $V$ )からなる量子相図を再現した[1]。さらに、光励起されたときのような量子相が出現可能か調べるため、照射後のエンタングルメント・スペクトルを入力することで、量子状態を判別させた。ボンド電荷密度波状態にポンプ光を照射すると、ボンドスピン密度波状態と呼ばれる状態が出現することを予測し、実際、

計算により確認した[2]。また、教師なし機械学習を用いた光励起状態の解析にも取り組んでいる。相互情報量を最大化するようにニューラルネットワークを構成する手法により、ポンプ光照射前(時間 $t=0$ )を三つの領域に区別した(図参照)。黄色は電荷密度波状態、赤色はスピン密度波状態、それらの間の青色はボンド秩序波状態に対応している。次にポンプ光照射後( $t=8.6$ )も三つの領域に分けた結果、電荷密度波状態の領域が小さな $V$ まで張り出してきていることがわかった[3]。これは、過去の研究と整合する結果である。現在は、光誘起による超伝導相の予測を進めている。

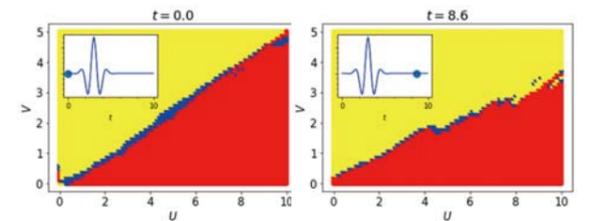


図 教師なし機械学習手法による20サイト次元拡張ハバードモデルのV-U相図。(左)ポンプ光照射前( $t=0$ )、(右)ポンプ光照射後( $t=8.6$ )。挿入図はポンプ光の波形を示しており、それぞれ●で示した時刻での相図となっている。

### 参考文献

[1] K. Shinjo, K. Sasaki, S. Hase, S. Sota, S. Ejima, S. Yunoki, and T. Tohyama, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 065001 (2019).  
[2] K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, Phys. Rev. B 101, 195136 (2020).  
[3] T. Nonomura, K. Shinjo, and T. Tohyama, in preparation.

### 関連 WEB

<https://mlfinfo.jp/ja/>

## 元素戦略Pj(1)「計算科学・マテリアルズ インフォマティクスが開拓した材料と材料科学」

電子材料研究拠点

神谷 利夫 Toshio Kamiya

東京工業大学 科学技術創成研究院



東工大元素戦略拠点の電子論グループでは、半導体物性を支配するバンドダイアグラム、欠陥計算の高精度・高スループット計算法の開発を進め、網羅的第一原理計算、遺伝的アルゴリズムなどによる新材料・構造の発掘を行い、材料創成グループとの連携により、実際に新材料の合成と予測された物性の実証などに成功してきた。また、解析・評価グループとともに、計測データの解析、理解を進めてきた。以下に、代表的な成果の概略を述べる。

●高速H<sup>-</sup>イオン伝導体の機構解明：本拠点で、酸素ドーパLaH<sub>3-2x</sub>O<sub>x</sub>が2.6×10<sup>-2</sup> S/cmに達する高いイオン伝導率を示すことを見いだした。イオン伝導体のシミュレーションは多数のイオンと長時間にわたる動的シミュレーションが必要であり、量子分子動力学計算では困難であった。ニューラルネットワークポテンシャルを導入し、力場分子動力学計算を行うことで、2種類のH<sup>-</sup>イオンの協奏的ホッピングにより高いイオン伝導性を実現してい

ることが示された[1]。

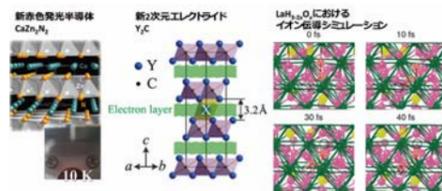
●新しい2次元エレクトライドの探索：2次元エレクトライドCa<sub>2</sub>Nをベースに、浮遊電子状態を含む結晶構造をスクリーニングし、第一原理による網羅的計算により8種類の候補物質を見いだした。Y<sub>2</sub>Cで合成に成功し、角度分解高電子分光により2次元エレクトライドであることを実証した。さらに、Y<sub>2</sub>Cはトポロジカル物質であることを見だし、トポロジカルエレクトライドという新しい物質群を提唱した[2]。

●新赤色発光半導体の開発：豊富な元素のみからなる新しい発光半導体の探索を目的として窒化物に着目した。その結果、CaZn<sub>2</sub>N<sub>2</sub>を候補物質として見だし、高圧合成により窒素の化学ポテンシャルを上げることによって合成に成功するとともに、直接遷移による赤色発光を確認した[3]。

●Cu<sub>3</sub>Nにおける高効率p型ドーパントの探索：Cu<sub>3</sub>Nは環境親和性が高い元素のみから構成される新半導体であるが、効率的なドーパントが見つかってい

なかった。第一原理計算による網羅的な探索により、Cu<sub>2</sub>Nの結晶構造に内因的に存在するアニオンの空隙にFをドーピングすることが提案され、実験により実証した。

●半導体中の水素：半導体では不純物水素が物性に大きな影響を与える。本拠点では実験、理論の両面から、多様な物質中の水素の振る舞いを調べてきた。a-In-Ga-Zn-Oでは水素は、-O<sup>2-</sup>H<sup>+</sup>とH<sup>-</sup>@カチオンの両方の状態を安定して取りシングルドナーとして働くが、カチオンサイトではH<sub>2</sub>の状態も安定であり、この場合はドーピングに寄与しないことを明らかにした。μSRの測定・解析と合わせて、a-In-Ga-Zn-Oでは水素濃度が高くなるとH<sup>-</sup>-H<sup>-</sup>複合体を作ることが示唆され、実験によるドーピングリミット10<sup>20</sup> cm<sup>-3</sup>を説明した。



### 参考文献

- [1] Characteristic fast H<sup>-</sup> ion conduction in oxygen-substituted lanthanum hydride Keiga Fukui, Soshi Iimura, Tomofumi Tada, Satoru Fujitsu, Masato Sasase, Hiromu Tamatsukuri, Takashi Honda, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, Hideo Hosono, Nat. Comm. 10 (2019) 2578.
- [2] Exploration for Two-Dimensional Electrides via Database Screening and Ab Initio Calculation Takeshi Inoshita, Sehoon Jeong, Noriaki Hamada, and Hideo Hosono, Phys. Rev. X 4 (2014) 031023
- [3] Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis Yoyo Hinuma, Taisuke Hatakeyama, Yu Kumagai, Lee A. Burton, Hikaru Sato, Yoshinori Muraba, Soshi Iimura, Hidenori Hiramatsu, Isao Tanaka, Hideo Hosono, and Fumiyasu Oba Nat. Comm. 7 (2016) 11962

### 関連 WEB

<https://www.ties.titech.ac.jp/>

## 元素戦略Pj(2)「スパコン「京」・「富岳」を用いた磁性材料研究」

磁性材料研究拠点

三宅 隆 Takashi Miyake

産業技術総合研究所 機能材料コンピュータシミュレーションデザイン研究センター

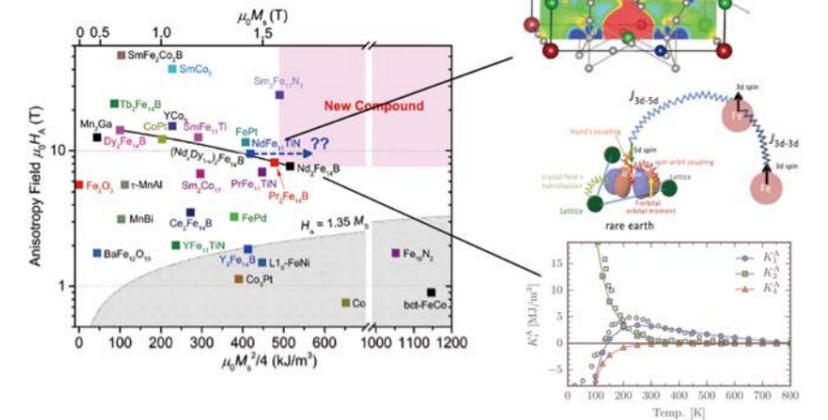


永久磁石は主相と副相からなる複相材料である。主相には、高磁化、高結晶磁気異方性、高キュリー温度が求められ、3d遷移金属(Fe, Coなど)と希土類(Nd, Smなど)を主成分とする物質探索に期待がかけられてきた。われわれは、ThMn<sub>12</sub>型構造の高鉄濃度化合物(1-12系)に注目し、第一原理計算によりNdFe<sub>12</sub>Nが優れた磁気物性を有することを示した。これと連携してESICMM実験グループにより薄膜が合成され、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B(ネオジム磁石の主相化合物)よりも高い磁化、異方性磁場、キュリー温度を持つことが報告された。NdFe<sub>12</sub>Nは準安定で、鉄の一部を他の元素で置換することで安定相を形成することが知られている。そこで、鉄サイト、希土類サイトの置換に対する系統的な第一原理計算を実行し、安定化元素や希土類の検討を行った。さらに機械学習も活用し、複数サイトの同時置換まで考慮した組成最適化を実行した。計算データと実験データを統合的に利用する「データ同化」手法と併せて、広い組成空間に対するデー

タ科学手法について議論する。

磁石材料の最も重要な特性である保磁力の制御には、外部磁場に対する磁化反転機構の解明が欠かせない。われわれは、第一原理計算を出発点としてNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>Bに対する有効スピンモデルを導出し、モンテカルロシミュレーションにより有限温度の磁気物性を再現することに成功した。この模型に基づいてNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B結晶粒の保磁力の温度依存性を算出した。その結果、原子スケールの磁気モーメントの熱ゆらぎ、特に粒界近傍の磁性が保磁力に大きな影響を与えることを見いだした。現実的な磁石粒界での磁気物性値に対する大規模第一原理計算と合わせて報告する。保磁

力の発現には、最終的には、副相の微細組織の作り込みが重要になる。そこで、第一原理計算と各種実験を用いた熱力学データベースを構築した。これを用いると、磁石材料の主要な元素の組み合わせに対する計算状態図を作成することができる。また、フェーズフィールド法により組織形成のシミュレーションも可能となる。1-12系磁石の副相制御のための3元状態図の作成や、ネオジム磁石粒界相に対する微量添加元素の影響のシミュレーションなどの実例を含めてESICMM熱力学グループの成果を最後に紹介する。



### 参考文献

- [1] T. Miyake and H. Akai, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 041009 (2018)
- [2] T. Miyake, Y. Harashima, T. Fukazawa and H. Akai, STAM 22, 543 (2021)

### 関連 WEB

<https://www.nims.go.jp/ESICMM/>

## 開催にあたって



**福山 秀敏** Hidetoshi Fukuyama

東京理科大学 総合研究院  
元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>専門委員

物質・材料探索において、従来「複雑さ」ゆえに立ちだかっていた困難な壁がDXの利用によって克服され、その結果として研究に飛躍的な発展がもたらされることが期待されているが、この期待を現実とするための具体像は対象によってさまざまであり、それぞれ個別に模索が続いている。

折しも文科省は『元素戦略で構築された学問分野の再構成、融合のアプローチをベースに、マテリアルをユースケースとした研究 DX プラットフォームの開発

を加速』中とのことである。

この総合討論ではまず「基調講演」「ポジショントーク」でマテリアル DX への期待と具体的活動目標、およびその際の課題、について個人（あるいは組織）としてビジョンの紹介、次いで「パネルディスカッション」ではそれら相互間、更に参加者全体で課題の共有とその克服に向けての連携・協力体制（人材育成・研究評価等を含めて）のあり方等、コミュニティ全体に関わる事項について意見交換する。

## 日本発、材料科学の国際会議



**細野 秀雄** Hideo Hosono

東京工業大学 元素戦略研究センター センター長  
Material Research Meeting Chair

日本の材料研究の優位性が急速に失われつつある。学術会議材料工学委員会では、国内の材料系学会の現状と課題について検討した結果、正会員数の急激な減少、論文誌で国際的に通用するものがほとんどないなど、多くの問題点が明らかになった。できるところから着手しようということになり、国内で開催する大規模で広い材料分野を網羅した国際会議がないので、これを立ち上げようということになった。そこで、分野横断型の材料研究を標榜している日本MRSの賛同をいただき、Material Research Meeting (MRM)を開催することになった。MRMは、プロの研究者や技術者が参加したくなるトピックスについて、ハイレベルの内容を発表し、しっかり議論できる場を提供することを目指している。会議の形式はシンポジウム形式で、オーガナイザーは半数以上を海外の方とすることを応募条件にしている。

初回となったMRM2019では、公募で集まったシンポジウムは36。これを分野横断型になるように9つのクラスターに分類し、クラスター内で自由に合同の企画ができるようにした。参加者は~1800名であった。第2回となるMRM2021は、ハイブリッド開催であったが、前回と同規模で昨年12月に開催された。次回はIUMRSの会議と合同で2023年に京都で開催予定。詳しくはMRS-JのHPを<https://www.mrs-j.org/>参照。

## 材料データプラットフォーム計画



**橋本 和仁** Kazuhito Hashimoto

物質・材料研究機構 理事長

材料研究においてマテリアルインフォマティクス(MI)が注目されている。ここで重要になるのが材料データベースである。今、世界中で材料データを集めるプラットフォーム競争がなされている。この競争は大きく分けて、AIに強みを持つ企業が使しやすいプラットフォームやAIソフトを提供することにより企業や研究者が持つデータを集めようとしているものと、学術出版社などが学術誌や公開特許データなどをデータベース化しているものとの大別できる。

一方、NIMSでは、過去20年以上にわたり学術誌からのデータベース構築を行ってきたが、最近それに加えて、日々実験で作られだされる電子顕微鏡やXPSなどのさまざまなデータを自動的にMIに使える形のデータに翻訳し、データサーバーに転送、蓄積できるシステムを構築し、すでに140台以上の装置に整備した。さらに、これらのデータを使うためのさまざまなAIソフトの開発も併せて進めている。

このような材料データ収集システムを全国の大学、研究機関に展開すべく、文部科学省ではナノテクプラットフォーム事業の後継の位置づけで本年よりマテリアル先端リサーチインフラ事業を開始している。講演においては、これらの計画、進捗状況について解説する。

**Digital transformation**

## 元素戦略からマテリアルDX、そして研究DXへの進化に向けて



**坂本 修一** Shuichi Sakamoto

文部科学省 大臣官房審議官  
(研究振興局及び高等教育政策連携担当)

第5期科学技術基本計画においては、狩猟社会、農耕社会、工業社会、情報社会に続く未来社会の姿としてSociety 5.0が提唱され、第6期科学技術・イノベーション基本計画に引き継がれている。それはサイバー空間(仮想空間)とフィジカル空間(現実空間)が高度に融合することにより、持続可能性や、経済的、質的な豊かさをもたらす社会像とされている。

Society 5.0の実現に向けて、知識・データは社会、産業の基盤を支える極めて重要な資源となり、大学が取り組む学問についても新たな役割が求められる。その役割の主要な要素として、新たな知識・技術および人材を生み出すことを軸に、学問が社会的側面を含めた幅広いイノベーション・エコシステム形成において中核的役割を果たすことがある。

このような状況の中で、学問分野の再構成を通じたデータ駆動型研究、それによる新しいサイエンス、イノベーションの方法論開拓の重要性は急速に高まりつつある。文部科学省においては、元素戦略で構築された学問分野の再構成、融合のアプローチをベースに、マテリアルをユースケースとした研究DXプラットフォームの開発を加速している。このプラットフォーム開発について、分野特性による最適化、インセンティブ設計、持続可能なマネジメントモデル構築など、行政とアカデミア、産業界が共同で解決すべき課題は多い。

本講演では、このような学問に求められる新たな役割と文部科学省が進める研究DX政策の方向性、課題について概観する。

## SPring-8/SACLA : データ創出・活用戦略



**石川 哲也** Tetsuya Ishikawa

理化学研究所 放射光科学研究センター 理事長

SPring-8/SACLAでは、光源性能、光学系性能、検出器性能の向上によって、データ収集時に利用できる試料上の光子数密度が増大し、単位時間当たりを取得可能なデータ点数は飛躍的に増大しつつある。また、ロボットの活用やネットワーク越しのリモート操作の導入などを含むDX化も、取得可能データ量の増大に寄与している。光子数密度の向上によって可能になってきた新しいタイプの計測手法もすくなくない。データ量の増大には、(a)試料あたりのデータ量は大きくないが、ビームタイム当たりの試料数が増大する場合と、(b)マルチモーダルなイメージング計測のような、新しいタイプの計測手法で、ビームタイム当たりの試料数は少ないが、試料当たりのデータ量が膨大になる場合の二つが当面对応を必要とする課題である。

SACLAでは稼働当初から大データ量に対応するデータセンターの構築を進めてきた。SPring-8ではビームラインごとに小規模データストレージを設けるなどの対応がとられてきたが、今般、SPring-8にもデータセンターを設置することとなった。上記(a)、(b)の課題に対応するとともに、ユーザーコミュニティと連携して、データの利活用に関して検討していきたい。

## 次世代放射光施設：新たなデータ創出拠点としての展望



**高田 昌樹** Masaki Takata

東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター (一財)光科学イノベーションセンター 理事長

次世代放射光施設では、その高い輝度・コヒーレント性で、ナノでの「モノの見え方(可視化)」を変えられるとされている。この可視化の展開が、AI・データ科学と融合し、学術・産業分野のさまざまな課題を止揚し、放射光による課題解決の多様化・DX化を加速すると期待されている。



東北大学の青葉山キャンパスに建設中の次世代放射光施設  
提供：(一財)光科学イノベーションセンター

## サステナブルモビリティ実現のためのMDXの活用



**射場 英紀** Hideki Iba

トヨタ自動車株式会社 先端材料技術部  
チーフプロフェッショナルエンジニア

元素戦略プロジェクトで研究されてきた磁石、半導体、触媒・電池材料、構造材などは、モビリティの持続可能性を向上させるためのキーマテリアルである。カーボンニュートラルや資源の有効利用などが強く求められる現状の中で、さらなる材料革新の必要性と、その研究開発手法としてのMDXの活用について、いくつかの事例を紹介する。

多くの材料の構造解析に用いられるX線回折法は、これまでは結晶構造の特定や格子定数の測定に用いられてきた。この測定データのプロファイルには、材料の構造因子に基づく多くの情報が含まれるため、これらを次元削減して分類した事例を示す。さらに、これらと材料特性との相関を示し、性能向上の研究開発のためのツールとしての可能性について議論したい。

付録

# データで見る 元素戦略プロジェクトの 10年

- 数字で見る研究成果
- 連携の力
- 大型研究施設群のフル活用
- 人を育てる
- 社会実装による経済効果予想

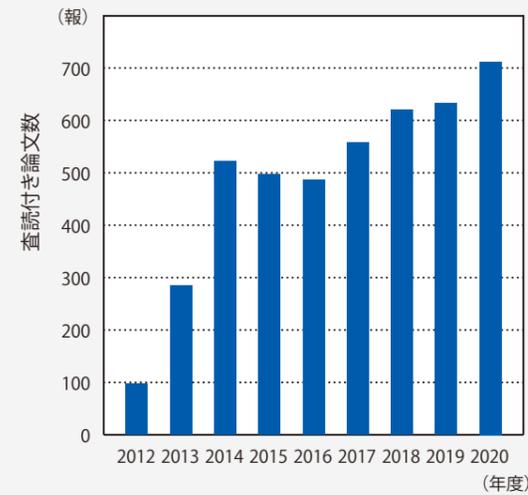


出典：国際周期表年2019に向けてEuropean Chemical Society (EuChemS)によって出版された周期表、<https://www.euchems.eu/euchems-periodic-table/>を基に作成  
 謝辞(情報提供)：Professor David J. Cole-Hamilton, University of St. Andrews, UK

## 数字で見る研究成果

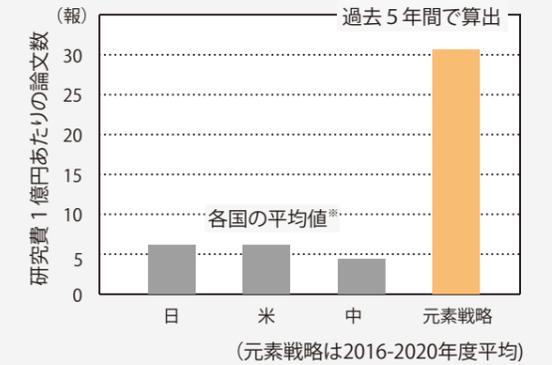
### 査読付き論文数

プロジェクト後期には企業との共同研究が増加し、論文投稿数が増加している。



### 研究費1億円あたりの論文数

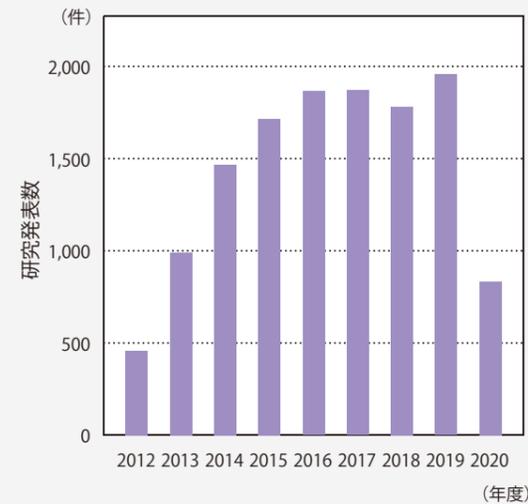
国内外の研究機関と比較すると、論文数の突出に研究の著しい進展が表れている。



※「科学技術指標2018」収録の2016年データより、公的機関の研究費1億円あたりの論文数を算出

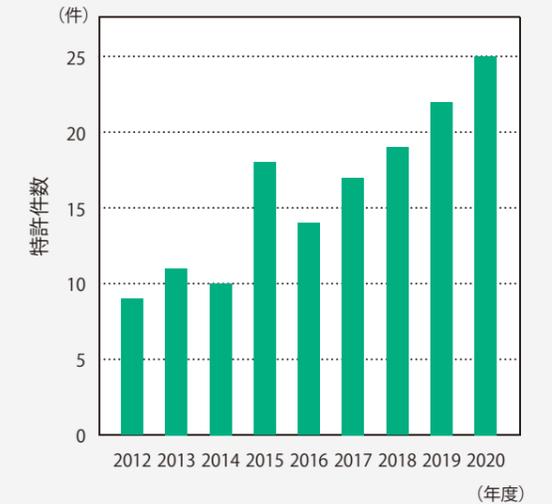
### 研究発表数

高水準で推移し、産業界への連携促進に貢献している。



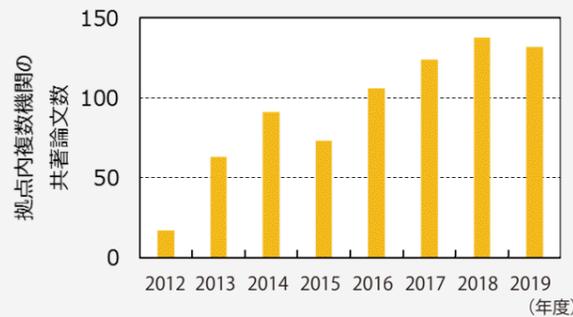
### 特許出願件数

有望な材料が続々と創出されており、それに伴って特許出願数も増加している。

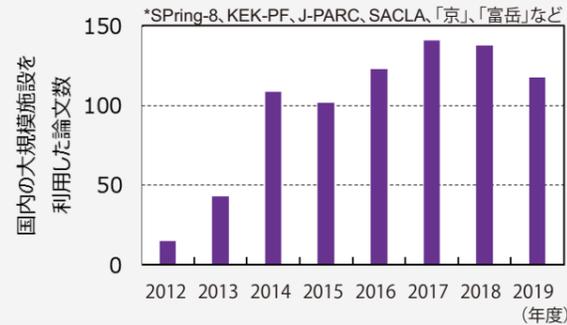


## 連携の力

### 研究拠点内の連携実績



### 大型研究施設との連携実績



研究拠点内の複数機関との共著論文の増加と並行して、大型研究施設を利用した論文が増加。プロジェクトの連携体制が研究の推進力になっていることを実証している。

### 元素戦略プロジェクトの研究拠点と連携体制

各拠点内に設置した「解析評価」「電子論」「材料創製」の3グループが、国策として設置された文部科学省所管の大型研究施設、SPring-8、J-PARC、KEK-PF、「京」・「富岳」を中核とするHPCI、また、NIMSに設置された情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>) (2015-2020年度)との課題共有と共創を打ち出して研究開発を推進。



## 大型研究施設群のフル活用

### SPring-8

- |              |  |             |  |
|--------------|--|-------------|--|
| <b>磁性材料</b>  | <b>強磁場印加XMCD測定装置</b><br>機械研磨不要で結晶粒表面の磁区観察が可能           | <b>電子材料</b> | <b>偏光X線光源を用いた光電子分光測定</b><br>ダイヤモンド素子により、縦・横直線偏光、円偏光の入射を実現。偏光によりs,p,d,f各軌道の内の特定の軌道の光電子放出強度を強調 |
| <b>触媒・電池</b> | <b>Operando XAFS装置</b><br>X線吸収分光法による触媒構造変化のその場観察       | <b>構造材料</b> | <b>2次元検出器PILATUS</b><br>高時間分解能での引張変形中のIn-situ XRD/SAXS測定                                     |
| <b>電子材料</b>  | <b>薄膜材料のその場薄膜多軸X線回折装置</b><br>電界下測定や高温下による回折測定、時間分解測定   |             |  |
| <b>電子材料</b>  | <b>粉末回折計に設置の高感度・高速X線検出器</b><br>損傷しやすい材料等の迅速測定・温度依存測定など |             |  |

### J-PARC

- |              |  |             |   |
|--------------|--|-------------|---|
| <b>磁性材料</b>  | <b>高分解能チョッパー型分光器</b><br>中性子プリリルアン散乱：多結晶永久磁石の磁気測定、磁気異方性エネルギーと交換結合定数の同時決定          | <b>電子材料</b> | <b>KEK-PF MUSASHI</b><br>角度分解光電子分光法によるエレクトライドバンドの直接観測         |
| <b>触媒・電池</b> | <b>中性子非弾性散乱による活性水素種の同定</b><br>触媒反応の「その場」観察が初めて可能に                                | <b>電子材料</b> | <b>J-PARC ARTEMIS</b><br>新開発の陽電子検出器Kalliopeによる水素の電子状態や磁気特性の解析 |
| <b>電子材料</b>  | <b>KEK-PF, J-PARC中性子・ミュオンの量子ビーム協奏</b><br>兆速実験サイクルで、通常見えない電子ドープ域で超伝導の元になる磁気秩序相を発見 | <b>構造材料</b> | <b>高温加工熱処理シミュレータ</b><br>鉄鋼材料の高温加工熱処理中のその場中性子回折実験              |

### スパコン「京」「富岳」

- |              |  |             |   |
|--------------|--|-------------|---|
| <b>磁性材料</b>  | <b>「京」による磁石材料組織界面の第一原理計算</b><br>Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B磁石の主相/粒界相界面における磁気異方性および交換エネルギーを算出、局所磁気特性の定量化に初めて成功                               | <b>構造材料</b> | <b>「京」を活用した鉄鋼材料の強度向上への合理的指針</b><br>固溶元素とらせん転位との相互作用の支配因子が、固溶原子とホストFe原子のサイズミスフィットではなく、固溶原子と結晶の積層欠陥との化学結合であることを解明 |
| <b>触媒・電池</b> | <b>「京」を用いた触媒材料および電池材料研究</b><br><b>触媒分野</b> ：コアシェル型金属クラスターおよび微粒子表面における触媒反応の理論解析<br><b>電池分野</b> ：高効率第一原理MD計算プログラムstat-CPMDを開発し、二次電池電解液における微視的反応機構を解明 | <b>電子材料</b> | <b>物質・材料探索レベルでは、東工大、NIMS、物性研のコンピューターを活用</b>   |

## 人を育てる

### 栄えある受賞

元素戦略プロジェクトの功績に対して、海外から83件、国内で139件(国内の論文賞・ポスター賞を除く)を受賞している。その中から代表的な受賞を紹介する。

#### 【磁性材料研究拠点】

- 第7回ドイツ・イノベーション・アワード「ゴットフリード・ワグネル賞」: Hossein Sepehri Amin・秋屋 貴博(2015)  
受賞研究: 「粒界エンジニアリングによるジスプロシウムフリー高特性ネオジム磁石の開発」(写真左2人が受賞者)



- 日本金属学会 増分量賞: 杉本 諭(2015)
- 第61回本多記念賞: 宝野 和博(2020)

#### 【触媒・電池材料研究拠点】

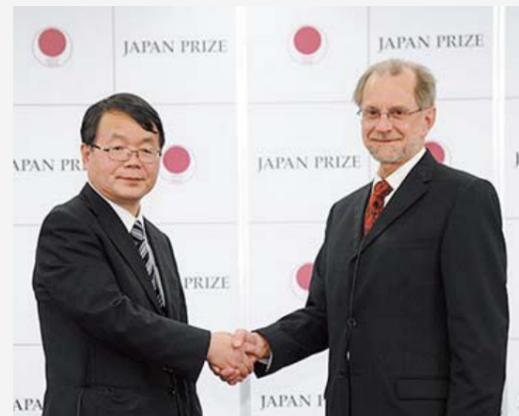
- 第7回ドイツ・イノベーション・アワード「ゴットフリード・ワグネル賞」: 駒場慎一、館山佳尚・袖山慶太郎(2015)  
受賞研究:  
駒場慎一「次世代蓄電池用新材料の開発」  
館山佳尚・袖山慶太郎「スパコンの高効率利用によるリチウムイオン電池電解質界面反応の理論的機構解明」  
(右上の写真は第7回の同賞受賞者。前列左から順に袖山、館山、駒場)



- IBA (International Battery Association) Research Award: 山田淳夫(2015)
- 触媒学会賞: 山下弘巳(2014)、田中庸裕(2017)
- 石油学会2019年度学会賞: 山下弘巳(2019)

#### 【電子材料拠点】

- 恩賜賞・日本学士院賞、日本国際賞、Von Hippel Award: 細野 秀雄(2015～2016)  
受賞研究: 「ナノ構造を活用した画期的な無機電子機能物質・材料の創製」  
(写真は日本国際賞2016の授与。左が受賞者)



- 2015 SID Special Recognition Award: 神谷 利夫(2015)
- 第75回日本金属学会功績賞: 大場 史康(2016)
- 応用物理学会賞フェロー表彰: 舟窪 浩(2019)

#### 【構造材料研究拠点】

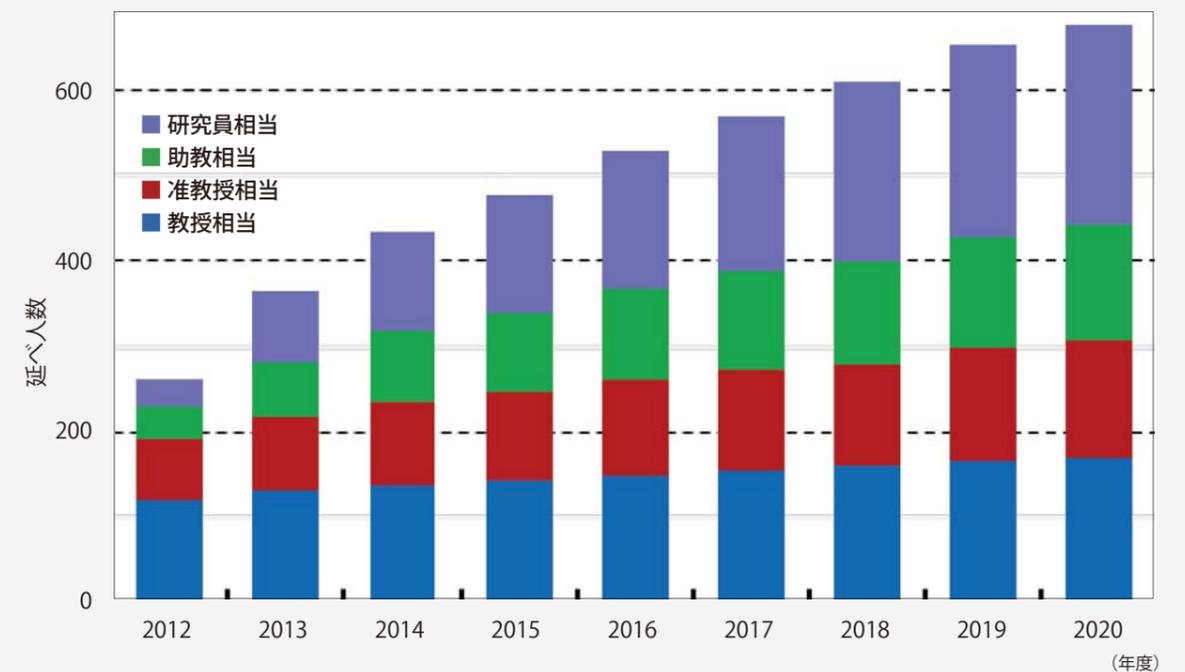
- The 2018 Hatsujiro Hashimoto Medal: 幾原雄一(2018)
- 本多記念会本多フロンティア賞: 津崎兼彰(2014)、田中功(2018)、乾晴行(2019)
- 服部報公会 報公賞: 幾原雄一(2017)、田中功(2020)
- サー・マーティン・ウッド賞: 東後篤史(2021)  
受賞研究: 「材料科学に資するフォノン物性予測のためのオープンソースソフトウェアの開発」(写真右が受賞者)



#### 新リーダーを育てる

プロジェクトに参画した研究者数は年々増加し600名を越えた。その中から教授相当・准教授相当へ昇格した研究者は80名以上になる。

プロジェクトに参画した研究者の延べ人数推移



## 社会実装による経済効果予想

### 【磁性材料研究拠点】

重希土類元素 (Dy) を用いない高耐熱性ネオジウム磁石を開発

車載用モーターの課題である高温での保持力低下を抑制できる金属組織の制御技術を構築

1. ネオジウム磁石の2030年の需要：年間9万トン、市場規模：3.6兆円。そのうち、高耐熱性が要求される自動車用・風力発電用途は50%を占めると予測(三菱化学テクノリサーチより)
2. 現在の国内シェア15%で換算した需要予測：年間2,700億円に到達
3. 永久磁石モーター効率(1%改善による省エネ効果)：国内市場だけでも1.2兆円規模に到達



### 【触媒・電池材料研究拠点】

#### <触媒>

希少元素のロジウム(Rh)・パラジウム(Pd)を大幅節減、あるいは、まったく使用しないで排気ガスを高効率で浄化できる触媒を続々と開発

1. Mn-YbFeO<sub>3</sub>触媒：Pd90%節減に成功し、現在、自動車業界と実用化に向けた共同開発中
2. MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>触媒：Pd、Rhフリー材料でも高効率な浄化機能を実現

3. 排ガス触媒原料に使用される希少元素の世界市場規模：Rhが9,300億円(28トン)、Pdが2兆2,100億円(274トン)に到達

参考) Johnson Matthey PGM Market Resear 2019

4. 国内生産台数の10%(世界生産台数の1%に相当)の排ガス触媒が、Pd90%節減で200億円/年、Rh・Pdフリーで300億円/年の削減効果



#### <電池>

ナトリウムイオン電池に用いるハードカーボン負極の容量が2倍に到達

リチウムイオン電池より低コスト化の実現に向けて、材料合成・電池試作と性能実証を産学連携で推進中

1. リチウムイオン電池の世界市場規模：年間約4兆8,000億円(国内が約4,100億円)
2. そのうち原材料費は約56%の約2兆7,000億円(国内換算で約2,300億円に相当)
3. 次世代ナトリウムイオン電池の目標である原材料費10%減(国内で年間230億円の削減効果)の達成に向けて、電解液に・正極材料の開発を推進中

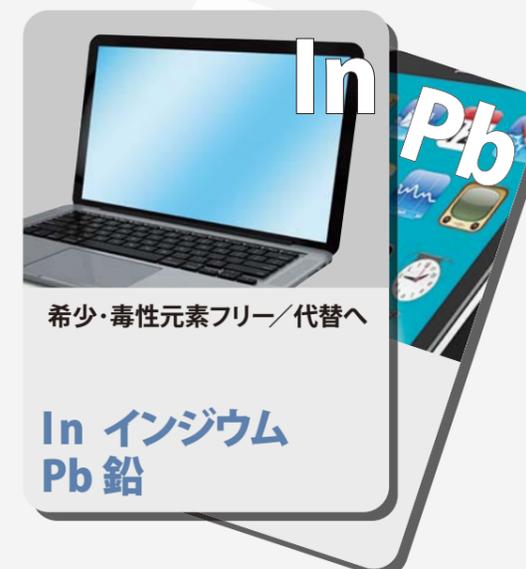
参考) リチウム(Li)イオン電池の世界の市場規模(年間)、原材料費が占める金額(年間)(富士経済調査)

リチウム(Li)イオン電池の国内の市場規模(年間)(電池工業会)



### 【電子材料研究拠点】

新しい半導体材料 a-ZSO。万能なオーミック性・低仕事関数・高移動度で高輝度・高効率・低消費電力のペロブスカイト発光ダイオードを実現



1. フラットパネルディスプレイ(FPD)をスマホ、タブレット、TV、車載等に応用
2. 現行スマホの500倍の輝度・効率と200%広い8K規格の広色域を実現

3. 2030年のFPDパネル世界市場規模：強気の予測で26兆円
4. 2028年から製品を上市し、2030年には40%のシェア(10兆円)を獲得
5. 製造コスト比率を勘案した0.1%のライセンスフィーを想定すると、年間特許収益：1,000億円

### 【構造材料研究拠点】

元素添加ではなく微構造制御により高強度・高延性両立を実現するための指導原理を構築  
高強度鋼板(ハイテン)のさらなる高強度化による自動車の軽量化と省エネルギー化に貢献

1. 1,500MPa超級ハイテンのピラー部品4点が日本の自動車メーカーに採用されると、日本生産乗用車(833万台)に限定しても経済規模670億円の見込み
2. 世界生産(約6,715万台)に発展すると、経済規模は5,370億円に到達
3. 自動車フレームに限らず足回り部品等についても貢献するため、獲得する市場規模はさらに増大へ



文部科学省  
元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

## 第5回 シンポジウム

革新的な材料でカーボンニュートラルな社会を構築

### ■主催

文部科学省 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

- 磁性材料研究拠点 (国立研究開発法人物質・材料研究機構)
- 触媒・電池材料研究拠点 (国立大学法人京都大学)
- 電子材料研究拠点 (国立大学法人東京工業大学)
- 構造材料研究拠点 (国立大学法人京都大学)

### ■協賛

#### ● SPring-8

国立研究開発法人理化学研究所放射光科学研究センター (RSC)  
公益財団法人高輝度光科学研究センター (JASRI)

#### ● J-PARC/MLF

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所  
国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 (JAEA)  
一般財団法人総合科学研究機構 (CROSS)  
茨城県 (後援) (いばらき量子ビーム研究センター (IQBRC))

#### ● 次世代放射光

一般財団法人 光科学イノベーションセンター (PhoSIC)  
東北放射光施設推進協議会

#### ● HPCI (「富岳」)

国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター (R-CCS)  
一般財団法人高度情報科学技術研究機構 (RIST)  
計算物質科学協議会 (CMSF)

国立大学法人東北大学 金属材料研究所計算材料学センター  
国立大学法人東京大学 物性研究所計算物質科学研究センター  
自然科学研究機構 分子科学研究所・計算科学研究センター  
国立大学法人大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター

### ■企画委員

玉尾 皓平 企画委員長 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>PD  
中山 智弘 科学技術振興機構  
村上 正紀 立命館大学  
魚崎 浩平 物質・材料研究機構  
潮田 浩作 日鉄総研 (株)  
徳永 雅亮 元 日立金属 (株)  
福山 秀敏 東京理科大学  
結城 正記 AGC (株)

### ■アドバイザー

三俣 千春 物質・材料研究機構  
太田 浩二 京都大学  
大谷 裕子 京都大学  
雲見 日出也 東京工業大学  
落合 庄治郎 京都大学  
川口 利奈 京都大学

### ■事務局

野瀬 雅文 文部科学省  
古宇田 光 東京大学



MEXT

MINISTRY OF EDUCATION,  
CULTURE, SPORTS,  
SCIENCE AND TECHNOLOGY-JAPAN

All rights reserved

2022年2月1日発行

発行者：文部科学省 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

お問い合わせ先：文部科学省 研究振興局/元素戦略プロジェクト広報室

<https://elements-strategy.jp/>

制作協力：サイテック・コミュニケーションズ デザイン：高田事務所