

特集 元素戦略プロジェクト

「ぶんせき」元素戦略プロジェクト特集によせて

本 間 穂 高

1 諸 言

文部科学省委託事業である「元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉」が開始した¹⁾²⁾。我が国における材料科学の国際的な優位性を持って社会が抱える資源確保リスクに備え、さらにはそのポテンシャルを深化拡張することで世界に対する存在感を高めるための国家施策である。対象とする材料領域は、磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の四つとしている。この4領域は、現在、わが国が強みとできている材料分野であり、希少元素が機能発現の本質を担っていること、一方で現状のままでは他国の追従が激しく優位性が損なわれる懸念が強く、これを突き放すために新たな学理の構築を持って科学技術のイノベーションをもたらすことが極めて有効であると期待されること、以上の基準で決められている。

日本には、材料科学の飛躍的發展につながりうる基盤の素地がすでに備わっている。ノーベル賞に輝くような先端的な分析機器開発群の実績の上に、大型放射光施設、中性子施設、スーパーコンピュータなどが整備されており、基礎学理の立場から新たな課題を発掘し、産業界との対話を重ねることによって新規な材料創製につなげる活動が始まっている。

平成19年度に開始した「元素戦略プロジェクト〈産学官連携型〉」は、小規模ながらも経済産業省・NEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）が主管する「希少金属代替技術開発プロジェクト」と連携し、また民間企業を参画機関に加えるなどして、産業界のニーズに直結した目的志向型の研究体制を推進してきた³⁾。ジスプロシウムの使用量を抜本的に削減した永久磁石の性能発現の実証や、遷移金属をベース組成にした透明電極材料の創製など、実用化に展開できる段階までの研究成果に着実に到達することができた。〈研究拠点形成型〉においても、両省連携をこれまで以上に密接なものとし、基礎学理の深化から革新的な新規実用材料の創製までを一貫通貫で実施する研究体制を整えている。

2 事業設計

材料研究においても、昨今の諸外国からのキャッチ

アップは速く、わが国の優位性が持続する期間はどんどん短くなっている。今日迎えている激しい科学技術競争の中で常に最先端を走り続けるために、新たな研究スキームが必要である。例えば、現状の技術体系が既存の学理の上に構築されているなら、新たな学理の領域を広げることによってより大きな技術体系を構築できるようになるはずである。これを積み重ねていくことで、絶えず他国に先じる新規材料創製を生み出す土壌をもたらすことができる、という考え方もできる。

しかるに今日、各々の学問分野が深化していく中で細分化が生じ、分野間の対話が減っているのではないかと言われることがある。理論研究と実験研究の隔たりも指摘されている。計算科学の大幅な進展に伴い理論研究の新しいスタイルが生まれつつあることも、そういった印象を与える一因かもしれない。それぞれの認識の乖離^{かいり}を埋めてつなぎ直すものが高度な分析手法を駆使した検証研究である。大型施設であるSPring-8（大型放射光施設）、J-PARC（大強度陽子加速器施設）、KEK（高エネルギー加速器研究機構）などとともに、最先端技術を搭載した電子顕微鏡や、様々な高分解能、高感度分析機器をプラットフォーム化して各材料領域を支える体制としている。

以上に述べた、新たに発展してきた理論研究の枠組みを象徴的に「電子論チーム」と称し、最先端の分析研究に関しては「評価・解析チーム」を形成し、「材料創製チーム」とともにそれぞれが主体的に活動しながら密接に連携する、いわば三つの歯車を力強く回していくための拠点を設け、これを中心に連携する研究グループの共同組織を形成していく。

諸言で述べたように、元素戦略は材料科学の基礎学理を追及することで社会における課題の解決を導くものである。それゆえ拠点は社会との対話の窓口を多面的に備える必要があり、また様々な研究者が絶えず行き交う場となるべきである。平成24年には、物理学会、化学会、金属学会など、多くの学会でそれぞれが相互乗り入れた元素戦略シンポジウムを開催していただき学問分野の連携・融合のきっかけができた。平成25年に入ってから、引き続き活発に活動していただいております。今回、分析化学会では会誌上にて元素戦略特集を組んでい

いただいた。幅広いコミュニティとの対話を通じて、新たな研究課題を汲み上げると同時に、学術成果がどのように社会還元できるのかについての情報発信に努めた。拠点および連携機関を含めた共同研究組織は、その推進役となることもミッションとしている。

経済産業省とは、行政のレベルで公式に連携会議体を設置し、双方のプロジェクトの成果交換、課題設定に対する相互乗り入れも視野に入れた協議を行うこととしている。現時点において、磁石材料、触媒材料について発足しており、構造材料、電池材料についても逐次設置されていく予定である。

このような対外的な活動も含めて、プロジェクト全体の運営方針を議決していく機能を、「運営統括会議」として体制化している。ここには各学会、産業界におけるそれぞれの分野を俯瞰し、分野融合を先導できる有識者や各分野のスペシャリストとして研究実務のアドバイスにまで踏み込める専門家が名を連ねている。文部科学省の行政官も参画し、科学技術に対するニーズを研究課題にブレークダウンしたり、また研究成果を確実に社会に還元するプロセスを施策化する機能も担うこととしている。

3 四つの材料領域と代表研究者

以下にそれぞれの材料領域における、研究目標と実施者の概略を述べる。詳細については、本特集におけるそれぞれの稿をご参照いただきたい。

3・1 磁石材料領域⁴⁾

磁石は言うまでもなく我が国が世界を圧倒的にリードしてきた学問分野である。ネオジム磁石がその世界最高特性を維持し続け、応用分野においても社会インフラからハイブリッド自動車まで産業技術の中核を牽引してきた。2011年の資源問題で世界中から最も注目を集めた材料でもある。高度化してきた応用技術からの特性要求が多岐にわたっている一方で、新規材料開発へのモチベーションが上がりにくい状況という現状も否めない。

磁力の根源である磁気モーメントの理論解析は、計算科学の発達とも相まって、相当の精度に達している。元素戦略プロジェクトでは、スーパーコンピューター「京」を大いに活用することとしており、まさにこの分野での物性研究には飛躍的な発展が期待できる。永久磁石としての本質的機能である保磁力について、材料特性としてたゆまず改良されてきたものの、結晶磁気異方性の物性理論や、磁区のメソスコピック解析などは旧来知見から大幅に進展しているとは言い難い。またハイブリッド自動車などの応用上極めて重要となる温度特性に関して、キュリー温度の理論などは準古典論にパラメーター適用するといった旧来のアプローチから脱していない。基礎科学者に対して、社会的な材料特性への要請が十分に伝

わっていないことも想定される。このような課題を抽出し、元素戦略の視点で取り組んでいただくことが、本プロジェクトの主眼である。

拠点は、物質・材料研究機構におかれ、東京大学、東北大学、産業技術総合研究所などが連携機関に連なっている。広沢 哲博士が代表研究者である。物質・材料研究機構は、これまでも民間企業と密接に連携しながら、高度な冶金学的解析技術を駆使して、保磁力発生機構についての考察を深め、ネオジム磁石の性能向上に貢献してきた。これに、産業技術総合研究所、東京大学、大阪大学が中心となる理論、計算科学グループが前述の物性課題の解決に取り組み、東北大学を中心とする材料創製グループにつないで新規磁石の開発に結び付ける体制となっている。大型放射光施設からも研究実施者が参画し、従来では測定され得なかった材料内部の磁区構造や結晶、粒界組織の分析などに取り組む。

3・2 触媒・電池材料領域⁵⁾

我が国の化学工業は裾野が広く、また産業界が基礎科学の知見を活用しながら絶えず新しい事業展開を図り続けているという特徴がある。触媒も電池も、そのような技術分野の代表格と言えよう。世界的にも有力な成果が創出されていて、触媒であればノーベル化学賞受賞者を輩出する領域であり、その応用展開も積極的である。二次電池は我が国のお家芸と言ってもよく、モバイル機器などに多用され、エネルギー戦略の中核を担うデバイスとして学会、産業界が精力的に研究開発に取り組んでいる。

その中であって、元素戦略プロジェクトでは「元素機能を徹底的に解明する」立場に立ち、固相と分子の電子結合反応が材料機能の本質と捉えて、その視点から二つの材料領域で新たに開拓すべき学理は共通との認識を持っている。まず取り組むべき課題は、バンド理論などを基軸に構築されてきた固体物理の体系と、孤立系として取り扱われてきた分子を記述する量子化学の連成である。そこでは、バルク表面の電子状態及び分子との反応の空間分布の取り扱いや、反応頻度の定式化などが課題となる。このような反応の電子論を基軸として、それを実現する物質系、材料系を創製するために、物理、化学だけでなく冶金学や連続体力学などを連携させ、実際の触媒機能、電池機能を現実化させていくことが求められている。

拠点は京都大学におかれ、田中庸裕教授が代表研究者を務める。東京大学、分子科学研究所が連携機関となるが、実際には全国各地の大学や国研の有力な研究者が京都大学の拠点教員を兼務し、プロジェクトに参画する。京都大学は、化学の分野で基礎を重視する伝統があり、大型共用施設の活用においても主導的な役割を果たしている。分子科学研究所は言うまでもなく計算科学の分野

において理論化学のメッカであり、スーパーコンピューター「京」の運用においてもその中核を担っている。東京大学は産業界との連携に根を張りながらバラエティー豊かな研究課題を創出してきており、若い人材が多く行き交う場所でもある。

3・3 電子材料領域⁶⁾

かつて産業のコメと言われたエレクトロニクス産業は、国際的サプライチェーンのボーダーレス化が徹底的に進んだ結果、各国間での利潤確保が複雑化し、国策としてのプロジェクト立案が見通しにくくなっている。その中でかつての素材開発は比較的地味で研究投資が小ぶりの傾向があったが、その分これからの開発ポテンシャルが潜んでいる分野とも言える。例えばシステム化あるいはデバイス開発側には、素材特性の本質まで踏み込んだ設計がなかなか具現化できておらず、素材側が新たな機能を見いだしながらシステム提案につなげることに有効性を見いだすことができるはずである。

バンド理論は、金属の電子状態を記述する学問として発展し、自由電子状態からの乖離を機能創出の源泉として捉えることで、様々な材料創製を実現してきた。一方で欠陥や界面、格子の乱れや変位などに伴う電子物性に関しては、定量記述が一般化されているとは言い切れない。例えば酸化物などはイオン結晶であることが多く、その物性の本質がアニオン-カチオンのペアによる電気陰性度による記述が有効な場合もあるし、格子欠陥の易動度などが材料機能を担うときの物性記述は、現行のバンド理論では不十分であるかもしれない。それがまた物性研究の新しい分野を切り開ききっかけにもなり得よう。

電子材料領域の拠点は東京工業大学に置かれる。代表研究者は細野秀雄教授である。ユビキタス元素戦略と銘打った、身近な材料にエキゾチックな機能を付加する研究アプローチは、社会の注目を受ける際立った研究成果を生み出している。連携機関は物質・材料研究機構と高エネルギー加速器研究機構が参画している。物質・材料研究機構は、例えば単結晶などのモデル試料の作成技術に優れており、基礎物理からの予測性能の検証などが大いに期待できる。高エネルギー加速器研究機構は、単なる施設側としてではなく、まさに材料研究の立場から実務参画することとしている。理論と現象の間をつなぐ解析研究によって、材料設計の有効性を示せるものとなる。

3・4 構造材料領域⁷⁾

国土強^{きょうじん}靱化に向け、従来以上に強度と靱性を高めた構造材料の重要性はますます高まっている。主力である鉄鋼材料に加えて、Ti, Alなどの非鉄金属材料、構造用セラミックス、また炭素繊維に至るまで、我が国の産業技術は常に世界をリードしてきた。これらの材料の特徴

を活かし、社会や産業界からのニーズに対してベストミックスで応えられれば、国際社会に対して今後も大きな強みを発揮できる。また構造材料は使用量が膨大なため、我が国が消費するレアメタルの9割程度が吸収されてしまっている。不純物として回収できないまま投入されている分も相当量含まれているが、それらの元素を有効活用する工夫も求められる。

一方で研究の歴史が長いことから、伝統的な知見の蓄積や産業界のニーズに直接応える形の成果が多く、普遍的な視点で材料領域全体を議論する機会が少なかった。例えば材料を構成する原子同士の電子論的な結合状態から得られる「理想強度」が実現されていることは稀である。その原因となっているのは、様々な長さスケールの「欠陥」である。金属やセラミックスなどの結晶材料であれば、転位などの格子欠陥がその主役であるし、炭素繊維なら、原子構造上の単位となるグラファイト構造の乱れた部分が材料特性を支配している。しかし、格子欠陥の学理は、近年は最先端の基礎科学との連携が希薄である。ニーズ主導で発展してきた構造材料に、現在の計算科学や高度解析手法を適用することで、革新的な機能の創出を導き出すことが研究目標である。

研究拠点は京都大学に置かれる。田中 功教授が代表研究者である。伝統的な冶金学と物性理論の研究風土が混在し、その融合のポテンシャルが大いに潜んでいると言える。格子欠陥に関する、有力な研究成果も多い。ここでは、まず初めの段階に、旧来の幾何モデルに基づいた検討に加えて、格子欠陥を囲む電子状態と動的挙動の研究に取り組む。鉄鋼材料で強みを持つ物質・材料研究機構や、セラミックス、炭素繊維の基礎研究が盛んな東京大学などが連携機関に入ると同時に、全国主要大学、国研の構造材料研究者と幅広いネットワークが形成されている。

4 結 言

「元素戦略」研究は、「元素のもつ特性を深く理解し活用する、元素多様性の発掘と物質創造」と定義されている⁸⁾。戦略である以上、目標とそれに至るプロセスの必然性が明示されていなければならない。今日の社会・経済における課題解決や国際貢献などに照らし合わせれば、まずは近年の資源危機に対応するための代替材料開発戦略に参画して、これを達成するための学理を徹底的に追及し、その研究成果を持って我が国の産業競争力の強化に資することが求められる。加えて資源循環なども視野に加えた環境、エネルギー負荷の小さな社会の構築に貢献できなければならない。

国際社会の目覚ましい発展につれて、我が国の置かれる環境は激しく揺れ動いており、世の中から求められる学術成果も絶えず変化している。その中で基礎を極めた学理はあらゆる情勢変化に対して普遍的でなければなら

ない。元素戦略プロジェクト〈研究拠点形成型〉で比較的緩く設定した四つの材料領域は相互に柔軟に連携し、常に新たな課題を汲み上げて研究目標に反映させるべきである。

我が国が独自の視点で生み出した「元素戦略」というコンセプトは、活動が具体化してくるにつれて内外の耳目を集めることとなり、他の施策との交流の場が設けられたり国際協力の対話の糸口になることもある。我が国の存在感を高めるために科学の深化が大いに貢献できる場が設けられつつあると言えよう。まさにこのナショナルプロジェクトによるナショナルプライドを維持し発展させるために、我が国の材料科学コミュニティーをより一層集結させ連携させていくことが重要である。分析化学は、希少元素にかかわる新物質創成において、ありとあらゆる多彩な手法を駆使することが前提となるものである。とりわけエキゾチックな元素や物質構造を究極まで突き詰めねばならず、その大きなポテンシャルに期待するところは大きい。またこれらの活動を通じて、これまでになかった革新的な分析技術を見いだしていただくこともぜひお願いしたい。材料科学の進化は常に分析化学の

進化とともにある。今後ますますの元素戦略へのご参画を、重ねて申し上げます。

文 献

- 1) 坂本修一：工業材料, **60**, No. 5, p. 1 (2012).
- 2) 本間徳高, 馬場大輔, 金井沙織, 永井雅規：日本磁気学会第185回研究会資料, P1 (2012).
- 3) <http://element.epl.jp/> (筆者2013年3月29日最終確認, URLの確認日は, 以下同)
- 4) <http://www.nims.go.jp/ESICMM/>
- 5) <http://www.esicb.kyoto-u.ac.jp/>
- 6) <http://www.ties.titech.ac.jp/>
- 7) <http://esism.kyoto-u.ac.jp/>
- 8) 玉尾皓平：化学経済, **55**, No. 3, p. 40 (2008)



本間徳高 (Hotaka HOMMA)

文部科学省研究振興局基盤研究課 ナノテクノロジー・材料開発推進室 (〒100-8959 東京都千代田区霞が関3-2-2)。東京大学大学院工学系研究科金属材料学専攻修士課程修了。工学博士 (金属材料学)。《現在の研究テーマ》元素戦略および希少元素確保に関わる国家施策の企画, 立案及び実施。《趣味》登山, スキー。
E-mail : homma@mext.go.jp

原 稿 募 集

ロータリー欄の原稿を募集しています

内 容

談話室：分析化学, 分析方法・技術, 本会事業 (会誌, 各種会合など) に関する提案, 意見, 質問などを自由な立場で記述したもの。

インフォメーション：支部関係行事, 研究懇談会, 国際会議, 分析化学に関連する各種会合の報告, 分析化学に関するニュースなどを簡潔にまとめたもの。

掲示板：分析化学に関連する他学協会, 国公立機関の主催する講習会, シンポジウムなどの予告・お知らせを要約したもの。

執筆上の注意

1) 原稿量は1200~2400字 (但し, 掲示板は

400字) とします。2) 図・文献は, 原則として使用しないでください。3) 表は, 必要最小限にとどめてください。4) インフォメーションは要点のみを記述してください。5) 談話室は, 自由投稿欄です, 積極的発言を大いに歓迎します。

◇採用の可否は編集委員会にご一任ください。原稿の送付および問い合わせは下記をお願いします。

〒141-0031 東京都品川区西五反田1-26-2
五反田サンハイツ 304号
(公社)日本分析化学会「ぶんせき」編集委員会
〔電話：03-3490-3537〕