

戦略的創造研究推進事業  
チーム型研究(CREST)  
研究領域中間評価用資料

研究領域

「元素戦略を基軸とする  
物質・材料の革新的機能の創出」

研究総括: 玉尾 皓平

2015年2月



## 目 次

1. 研究領域の概要 .....	1
(1) 戦略目標 .....	1
(2) 研究領域 .....	4
(3) 研究総括 .....	5
(4) 採択課題・研究費.....	6
2. 研究総括のねらい.....	7
3. 研究課題の選考について.....	8
4. 領域アドバイザーについて.....	9
5. 研究領域の運営について.....	11
6. 研究の経過と所見.....	19
7. 総合所見 .....	28



## 1. 研究領域の概要

### (1) 戦略目標

「レアメタルフリー材料等の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出」

### ①具体的な達成目標・本戦略の具体的な内容

平成19年度より文部科学省が実施している元素戦略プロジェクトは、「物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効利用するという観点から従来の材料研究を再構成し、希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」ことを目的としている。プロジェクト開始から3年が経過し、順調に成果が得られつつある。上記のような元素戦略の目的に資する研究開発のアプローチとしては、大きく分けて以下のようなパターンが考えられる。

- 1) 代替型：目的機能を有する材料が既に存在しているが、希少・有害元素を含むため、経験的に同等の特性が得られると推定されるユビキタス元素を用いて目的材料を得ようとする開発。
- 2) 改良型：既にユビキタス元素を活用、もしくは希少・有害元素を削減してある程度の目的機能が得られている材料に着目してその機能の発現原理を追求し、製造プロセス等を最適化してより高い機能を有した材料を得ようとする開発。
- 3) 創成型：着手前に目的機能を発現させるナノスケールの構造要素（原子配列、磁区構造、分子構造等）が予備的に検討されており、研究開発段階で、その物質構造を材料に持たせることによって目的機能を発現させる開発。

上記の1)のケースでは、代替元素の選択肢が限られており、希少元素等を含む既存の材料の機能を越えられない場合が多い。2)のケースでは、既存の材料の機能発現原理が判明したとしても、その原理の範囲内で動かせる条件には限りがあるため、大幅な機能の向上が難しい。それに対し、3)の「創成型」のケースでは、目的とする機能の発現原理の本質を抉り出し、それを実現するためのアプローチを開発するため、既存の機能元素にとらわれることなく目標に到達できる可能性が高く、近年期待が高まっているところである。本戦略目標は、「希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」という目標達成に向け、目的とする材料機能の発現原理を検証・把握し、ナノスケールの物質構造（原子配列、磁区構造、分子構造等）を制御することによって、単なる「希少元素・有害元素の代替」にとどまらない、「革新的機能材料」の創成を目指すものである。本戦略目標においては、以下のように研究開発を進めていくことが想定される。

1. 目的とする材料機能（例：磁性、触媒機能、強度・靱性、耐食性等）を設定し、それを実現するための発現原理を、微視的観点で検討する
2. その発現原理を具現化するためのナノスケールの物質構造（例：原子配列、格子欠陥状態、結晶粒、磁区構造、分子構造、表面・界面構造等）をデザインする

3. デザインされたナノスケール構造を有する材料を創成し、その機能の発現を確認・検証する

4. 目的とした機能に達しない場合、その原因を考察して発現原理の再検討（詳細検討）を行う。以後、2.へ立ち返り、最終目的とする材料創成を目指す。

上述のようなナノスケール物質構造制御に基づいた本戦略目標から想定される成果の例としては、

- 1) 次世代自動車を支える高保磁力・高磁束密度を発揮するジスプロシウム／ネオジム完全フリー高性能磁性材料、貴金属完全フリー触媒、ユビキタス元素による二次電池等
- 2) 次世代電子機器に資するレアメタルフリー不揮発性メモリー等
- 3) エネルギーの回収・再生に資する有害元素フリー高効率熱電変換材料等
- 4) 来たる水素社会に資するユビキタス元素しか用いない水素貯蔵材料等
- 5) 構造物のメンテナンスフリー、安全性、加工等に資する各種高性能材料（ニッケルフリー表面改質型耐食材料、ユビキタス元素による耐熱構造材料、タングステン／コバルトによらない新超硬材料等）

等が考えられる。

## ②政策上の位置づけおよび社会経済上の要請

本戦略目標は、第3期科学技術基本計画の重点推進4分野の1つであるナノテクノロジー・材料分野における「True Nano」に相当する、革新的材料開発を伴わなければ解決困難な課題と国際競争の優位を確保するための課題の解決を目指すもので、同分野の戦略重点科学技術として挙げられている「資源問題解決の決定打となる希少資源・不足資源代替材料革新技術」につながる重要施策である。資源が少ない我が国が直面する資源問題という大きな課題の抜本的解決策として、社会・産業からの要請も強い。加えて、本戦略目標が目指す希少元素の代替・戦略的利用については、革新的技術戦略において「レアメタル代替材料・回収技術」として革新的技術に選定されている。さらに本戦略目標は、「新成長戦略（基本方針）」（平成21年12月30日閣議決定）の「（1）グリーン・イノベーションによる環境・エネルギー大国戦略」に掲げられた「レアメタル、レアアース等の代替材料などの技術開発」に資するものである。

なお、本戦略目標は、「物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効利用するという観点から従来の材料研究を再構成し、希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」という目標達成に向け、革新的材料の創成というアプローチを採るものであり、前出の第3期科学技術基本計画の重点4分野のナノテクノロジー・材料分野における以下の戦略重点科学技術にもつながる可能性を有する。

- クリーンなエネルギーの飛躍的なコスト削減を可能とする革新的材料技術
- イノベーション創生の中核となる革新的材料技術
- 生活の安全・安心を支える革新的ナノテクノロジー・材料技術

### ③本研究事業の位置づけ、他の関連施策との切り分け、政策効果の違い

本戦略目標は、ナノテクノロジー・材料分野における施策の中核の一つを担う。希少元素・有害元素をユビキタス元素で置き換えるという施策としては、平成19年度より実施されている文部科学省の「元素戦略プロジェクト」及び経済産業省の「希少金属代替材料開発プロジェクト」がある。前者の文部科学省の「元素戦略プロジェクト」は、「物質・材料の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効利用するという観点から従来の材料研究を再構成し、希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」ことを目標とした施策である。本事業では、産官学の連携による提案を義務づけ、基礎から実用化につなげる課題を精選して推進している。後者の経済産業省の「希少金属代替材料開発プロジェクト」は、「非鉄金属資源の代替材料及び使用量低減技術の確立」を目的として、特に、緊急な対応が求められる元素に絞って現実的な削減目標を設定し、集中的な研究開発を進めるものである。これまで、元素種としてIn、Dy、W、Pt、Eu、Tb、Ceを特定した材料開発を推進している。これら2つのプロジェクトは、主として既存の材料を活用した「代替型」及び「改良型」アプローチにより、希少元素・有害元素の代替材料研究開発を行うものである。

それに対し本戦略目標は、前出の「元素戦略プロジェクト」との共通目標達成に向け、目標とする材料機能を発現させるナノスケール物質構造（原子配列、磁区構造、分子構造等）を材料に持たせることによって革新的機能材料の創成を狙う「創成型」という新しいアプローチにより研究開発を行うものである。このようなナノスケールの物質構造の制御という視点に立った材料機能創成の必要性については、元素戦略／希少金属代替材料開発シンポジウム等でも提言されているところである。

### ④将来実現しうる成果等のイメージ

ナノテクノロジーは、科学技術の新しい世界を切り拓き、産業競争力の強化や新産業の創出に結びつく技術である。第3期科学技術基本計画の分野別推進戦略では、ナノ領域で初めて発現する特有の現象・特性を活かすナノテクノロジーの中で、特に従来の延長線上ではない不連続な進歩が期待される創造的な研究開発、大きな産業応用が見通せる研究開発を「True Nano」と定義している。本戦略目標は、ナノスケールの物質構造デザインによって革新的な高機能を作り出し、既存の物質・材料やありふれた元素に旧来考えられなかったような新しい特性を発揮させるとともに、眠っている未知の機能を引き出すこと等を行おうとするものである。すなわち、天然資源に乏しい我が国が、これまで要素的に蓄積されてきたナノテクノロジー・材料科学技術の成果に立脚し、ユビキタス元素を巧みに駆使することで有用機能を実現し、重要な社会的課題の解決を目指すものであり、いわば我が国のナノテクの真価を具体的に問うものと位置づけられる。したがって本戦略目標は「True Nano」の実践を明確に視野に入れたものであり、特定の材料や元素に固有であると経験的に考えられてきた機能を、固定観念にとらわれず、材料・物質の様々な形態を駆使

して新しい機能を見いだす研究開発を促す、ナノテクノロジー・材料分野の根幹を支える緊急性の高いものである。

## ⑤科学的裏付け

### 1) 関連研究例

近年、目標とする材料機能の発現原理となるナノスケールの物質構造の制御という視点に立った材料開発の例が見られるようになり、期待が高まっている。その典型的な開発例として、透明電極材料や鉄系超伝導材料等が挙げられる。前者は、典型的なセメント成分である  $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$  がその結晶構造中に持つ直径 0.5 ナノメートルのカゴの中にある酸素イオンを電子で置き換えることにより、金属と同じような高い電気伝導性を付与することに成功したものである。後者は、電気絶縁性の層 (LaO 層) と金属的伝導を示す層 (FeAs 層) からなり従来は超伝導性を示さなかった層状化合物 (LaOFeAs) において、絶縁性層である LaO を構成する酸素イオン (O) の格子サイトにフッ化物イオン (F) をあてることで超伝導を付与したものである。いずれも、ナノスケールでの構造制御を行い、材料に対して全く新しい機能が付与されたものである。

一方、「ナノテクノロジー・材料分野 科学技術・研究開発の国際比較 2009 年版」(JST 研究開発戦略センター)によれば、本戦略目標において取り組むナノスケールの物質構造制御に関連する研究開発としては、上記の例のほか、スピントロニクス材料を中心とした磁性材料の開発等が挙げられ、これらの分野は日本が世界の先端を進んでいるとしている。

### 2) 本研究分野の発展の可能性

文部科学省が開催する「元素戦略検討会」や、JST 研究開発戦略センターにおける新材料設計探索ワークショップ等において研究開発のコンセプト、取り組むべき課題の議論がなされており、研究者コミュニティに対する働きかけも行われた。それに応える形で、日本化学会、セラミクス協会、日本金属学会、日本鉄鋼協会、材料戦略委員会、応用物理学会等の学協会が、研究シーズの大規模な自発的調査やシンポジウム等を開催し、大きな議論が始まっている。産業界に対して優れた材料の提案が多くなされ、本研究分野が大きく発展することが見込まれる。

## (2) 研究領域

「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」(平成 22 年度発足)

本研究領域は、持続可能な社会の構築のために解決すべき資源・エネルギー・環境問題に元素戦略を共通概念とする物質科学・物性科学の観点から取り組み、既存の延長線上にない物質・材料の革新的機能の創出を目指す。

具体的には、「物質の特性・機能を決める特定元素の役割を理解し有効活用する」という元素戦略コンセプトの下、物質構造、界面、電子相関などの様々な機能発現に共通する問



題点を多角的・系統的に解明・理解し、それらを制御することにより、物質・材料の革新的な特性や機能の創出に向けた研究開発に取り組む。多様な元素の特性に着目して「電子状態」「原子配列」「分子構造」等の微視的な観点から目的機能を如何に発現させるかを検討すると共に、計測技術や計算科学も活用しつつ構造・機能・反応をデザインし、多様な課題解決に向けた物質・材料の革新的機能の創出を目指す。物理、化学、工学、材料科学といった分野の垣根にとらわれない異分野融合を強く意識した大胆かつチャレンジングな研究を推進する。

### (3) 研究総括

玉尾 皓平（独立行政法人理化学研究所 研究顧問）

## (4) 採択課題・研究費

(百万円)

採択年度	研究代表者	中間評価時 所属・役職	研究課題	研究費*
平成 22年度	栄長 泰明	慶應義塾大学・ 教授	革新的環境改善材料としての導電性ダイヤモンドの機能開発	296
	島川 祐一	京都大学・教授	異常原子価および特異配位構造を有する新物質の探索と新機能の探求	435
	杉本 諭	東北大学・教授	結晶構造制御による Fe 基新規磁性化合物の探索	247
	古原 忠	東北大学・教授	軽元素戦略に基づく鉄鋼材料のマルチスケール設計原理の創出	444
	堀内 佐智雄	産業技術総合研究所・チーム長	有機材料を用いた次世代強誘電物質科学の創成	288
平成 23年度	北川 宏	京都大学・教授	元素間融合を基軸とする新機能性物質・材料の開発	706
	永島 英夫	九州大学・教授	有機合成用鉄触媒の高機能化	446
	長谷川 哲也	東京大学・教授	軽元素を活用した機能性電子材料の創出	363
	宝野 和博	物質・材料研究機構・フェロー	ネオジム磁石の高保磁力化	445
平成 24年度	高田 潤	岡山大学・特任教授	微生物由来のナノ構造制御鉄酸化物の革新的機能創出	351
	中井 浩巳	早稲田大学・教授	相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計	299
	森田 靖	愛知工業大学・教授	安定な有機ラジカルの蓄電および光電変換材料への応用	408
			<b>総研究費</b>	4,728

\*研究費：平成26年度上期までの実績額に平成26年度下期以降の計画額を加算した金額

## 2. 研究総括のねらい

研究領域の基盤となる5つの概念を掲げた。

### 1) 物質科学が先導して課題解決にあたる

持続可能な環境調和型社会構築のために解決すべき課題が山積している。直面する課題、長期にわたって解決すべき課題、いずれもその解決には機能性物質創成研究が中心的役割を担わねばならない。物質科学が資源・エネルギー・環境分野はもとよりライフサイエンス分野や情報分野をも先導して課題解決にあたるのだ、との強い意志をもって研究に取り組む。これを第一の共通認識とする。

### 2) 課題解決に向けた確固たるサイエンス基盤

物質・材料科学の基盤を築くのが元素戦略である。元素の特性を再認識し機能性物質創成を行うサイエンス、すなわち「元素科学」に戦略性を込めて課題解決型研究に転換するのが「元素戦略」である。しっかりしたサイエンスに裏づけされた戦略研究、革新技术でなければならない。これを第二の共通認識とする。

### 3) 元素戦略の4つの戦略

元素戦略には主に次の4つの戦略が考えられる。「代替戦略」「減量戦略」「循環戦略」「規制戦略」である。既存の物質・材料の希少元素や有害元素を豊富で安全な元素で置き換える代替戦略、機能を担う戦略元素の有効機能の高度活用によって既存の機能を維持あるいはそれを超える機能をもたらす減量戦略、希少元素の回収循環システムを構築する循環戦略、希少元素や環境劣化につながる恐れのある元素に対する規制戦略である。革新的機能性物質・材料創成研究では、これらの戦略をすべて考慮する必要がある。これを第三の共通認識とする。

### 4) 従来の元素の概念を越えた元素新特性発見

物質創成科学に使える元素は80種余りである。元素は構造体となって初めて機能を発揮する。したがって、機能発現という観点からは「異常原子価」「欠陥」「表面・界面」などの構造要素も元素の範疇に入れることにする。構造体中の「電子状態」「原子配列」「分子構造」を決定する多様な元素本来の特性に着目すると共に、これらの要素も加味して、目的機能を如何に発現させるかを検討し、計測技術や計算科学も活用して構造・機能・反応をデザインすることが肝要である。

### 5) ネットワーク型バーチャル研究所としてのCREST研究領域内での分野バランス

具体的な研究対象としては、エネルギーを創る・運ぶ・貯める、そして環境を守るための物質・材料・反応設計として、たとえば、光・電子・磁性材料、超伝導材料、半導体、強相関電子材料、熱電変換材料、炭素ナノ材料、セラミックス、金属構造材料、複合材料、有機機能材料、有機構造材料、高機能触媒、など広範囲の物質・材料群と共に、新現象、新反応なども含む。物理、化学、工学、材料科学、計測技術、計算科学など分野を越えた大胆な連携・融合研究に取り組む。

本研究領域では、このような共通認識の下、既存の物質・材料の元素代替や機能改良に

取り組むだけでなく、多様な元素の特性を多角的に発掘し、斬新な発想に基づく物質・材料の革新的機能を創出する研究を推進する。

### 3. 研究課題の選考について

#### (1) 研究課題の選考方針

選考に当たっては、1) 課題解決に向けた確固たるサイエンス基盤、2) 従来の元素の概念を越えた元素新機能発見、3) 元素代替・削減・循環・規制、に加えて、4) バーチャル研究所としての CREST 研究領域内での分野バランス、などを重視する。最後の点は特に重要で、多様な分野からの参画研究者が情報交換を通じてお互いを刺激しあうことで、単独研究では思いもよらない大きな相乗効果の発現に期待する。

#### (2) 選考結果

##### ①平成 22 年度選考結果

初年度は、各方面からの挑戦的かつ意欲的な提案が 101 件あった。元素戦略研究への関心の高さをうかがい知ることができる。書類選考で面接対象提案を 13 件にしぼり、最終的には面接選考で 5 件採択した。採択課題は、完全レアメタルフリー鉄・コバルト磁性材料開発、レアメタルフリー鉄鋼材料設計原理、遷移金属の異常原子価などに着目した無機合成化学、金属を含まない有機系エレクトロニクス材料、炭素材料の新機能創出、に関するもので、革新的機能創出を目指す本研究領域の目的に合致したバランスのとれたものとなったと考えている。

第 2 期以降は、理論的な物質機能デザイン、有機合成触媒反応・プロセス開発、フォトンクス材料、バイオ系材料、などを特に強化し、エネルギーを創る・運ぶ・貯める、そして環境を守るための物質・材料・反応設計などに総合的に取り組む複合・連携研究体制を作り上げていきたいと考えている。

##### ②平成 23 年度選考結果

第 1 期に続き、第 2 期も物理、化学、工学、材料科学、計測技術、計算科学などの広い分野からの提案を募った。各方面からの挑戦的かつ意欲的な提案が 71 件あった。第 1 期の 101 件からは数では減少したが、質の高い提案が多く見られた。元素戦略のコンセプトの理解が深まったことの表れと思われる。書類選考で面接対象提案を 12 件にしぼり、最終的には面接選考で 4 件採択した。採択課題は、原子レベル元素間融合材料、有機合成用鉄触媒の高機能化、汎用元素で置換した酸化物電子材料、ジスプロシウムフリーネオジム磁石の高保磁力化、に関するものである。第 1 期採択課題と総合的にみて、革新的機能創出を目指す本領域の目的に合致したバランスのとれたものとなったと考えている。

第3期では、理論的な物質機能デザイン、フォトニクス材料、バイオ系材料、などの強化を目指し、エネルギーを創る・運ぶ・貯める、そして環境を守るための物質・材料・反応設計などに総合的に取り組む複合・連携研究体制を作り上げていきたい。

### ③平成24年度選考結果

今回は、各方面からの挑戦的かつ意欲的な提案が27件あった。昨年度の71件からは数では減少したが、より質の高い、主旨に合致した提案が多く見られた。これまで以上に元素戦略のコンセプトの理解が深まったことの表れと思われる。書類選考で面接対象提案を6件にしぼり、最終的には面接選考で3件採択した。採択課題は、安定な有機ラジカルの蓄電および光電変換材料への応用、微生物由来のナノ構造制御鉄酸化物、および相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計に関するものである。

### (3) 選考結果のまとめと運営方針

3年間にわたって、12件の多彩な課題を採択できた。脱ジスプロシウムあるいはレアアースフリー永久磁石、構造材料設計、異常構造金属酸化物、バイオ由来金属酸化物、元素間融合、軽元素構造体、導電性ダイヤモンド、有機強誘電体や有機二次電池などの炭素系材料、有機合成用鉄触媒、そして相対論的電子論、と革新的機能創出を目指す本研究領域の目的に合致した広範かつバランスのとれたものとなったと考えている。ネットワーク型バーチャル研究所としての本研究領域内で、多様な分野からの参画研究者が情報交換を通じてお互いを刺激しあうことで、単独研究では思いもよらない大きな相乗効果が発現することを期待している。さらには、さきがけ「元素戦略」研究領域の若手研究者との連携や平成24年度から始まった文科省の元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>研究者との交流・連携も進める。これによって、エネルギーを創る・運ぶ・貯める、そして環境を守るための物質・材料・反応設計などに総合的に取り組む複合・連携研究体制を作り上げ、世界で最も進んだ元素戦略研究者集団として社会からの期待に少しでも貢献したいと考えている。

## 4. 領域アドバイザーについて

領域 アドバイザー名	現在の所属	役職	任期
射場 英紀	トヨタ自動車株式会社 電池研究部	部長	平成22年11月 ～平成30年3月
潮田 浩作	新日鐵住金株式会社 技術開発本部	顧問	平成22年11月 ～平成30年3月
岡田 益男	八戸工業高等専門学校	校長	平成22年11月 ～平成30年3月

高尾 正敏	大阪大学 大型教育研究プロジェクト支援室	特任教授／シニア・リサーチ・アドミニストレーター	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
田島 節子	大阪大学 大学院理学研究科	教授	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
徳永 雅亮	明治大学 理工学部	兼任講師	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
中山 智弘	科学技術振興機構 研究開発戦略センター	エキスパート	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
細野 秀雄	東京工業大学 フロンティア研究機構/応用セラミックス研究所	教授	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
前川 禎通	日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター	センター長	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
三澤 弘明	北海道大学 電子科学研究所	教授	平成 23 年 5 月 ～平成 30 年 3 月
村井 眞二	奈良先端科学技術大学院大学	特任教授	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
村上 正紀	立命館大学	特別招聘教授・理事補佐／立命館グローバル・イノベーション研究機構長代理	平成 23 年 5 月 ～平成 30 年 3 月
森 初果	東京大学 物性研究所	教授	平成 22 年 11 月 ～平成 30 年 3 月
中村 栄一	東京大学 大学院理学系研究科	教授	平成 22 年 11 月 ～平成 23 年 9 月

採択課題 12 件は、レアアースフリー永久磁石、構造材料設計、元素間融合、遷移金属酸化物、軽元素構造体、導電性ダイヤモンド、有機強誘電体や有機二次電池などの炭素系材料、有機合成用鉄触媒、そして相対論的電子論と、広範にわたっていることから、運営に当たっては、これらの分野をカバーし適切なアドバイスができる領域アドバイザー、13 名を選定した。特に、「元素戦略」と「実用化を見据えた革新的機能の創出」の二つの観点から、アカデミアサイドの岡田（水素吸蔵合金等の構造・機能材料）、村上（薄膜半導体デバイス、電子材料）、田島（超電導、光物性、固体物理）、森（有機超伝導体、物性物理）、前

川（量子物性理論、強相関電子系）、三澤（フォトニクス、マイクロデバイス）、村井（有機合成化学、遷移金属触媒化学）の 7 名に加えて、企業経験者として、徳永（永久磁石）、潮田（鉄鋼材料）、射場（金属材料、電池開発）、高尾（ナノ構造、薄膜、物性物理、電子材料）の 4 名が参画した。さらに、さきがけ元素戦略「新物質科学と元素戦略」の細野研究総括もメンバーとして加わり、同時に、玉尾もさきがけの領域アドバイザーを務めることで、CREST とさきがけの情報交換と共同体制を構築した。また、元素戦略コンセプト提唱時からリードしてきた JST 研究開発戦略センター（CRDS）エキスパートの中山には政策面からの助言を求めている。なお、当初、アドバイザーとして参画した中村栄一（「元素戦略」提唱者、有機合成化学）は、JST 戦略的創造研究推進事業研究主監会議議長に就任した時点で、アドバイザーは退任した。有機合成分野は、研究総括の玉尾がカバーできることから、補充はしなかった。

## 5. 研究領域の運営について

### (1) 研究総括としての研究領域運営方針について

上記の 2. 研究総括のねらい、で述べた基本概念は次の一言に集約しておきたい。

「元素資源問題はサイエンスで解決する」

これを CREST 研究者と共有し、将来の科学技術イノベーション創出への貢献と並んで、新たな学問分野の創出につながる、あるいはパラダイムシフトを引き起こすようなコンセプトを生み出すようなサイエンスとしてのレベルの高い研究の推進をお願いしている。それらを通じて、元素戦略研究分野を強力に率いる次世代の育成も大きな任務であるとの認識も全メンバーで共有している。

その上で、ネットワーク型バーチャル研究所としての CREST 元素戦略研究を限られた研究期間内で推進し、これらの目標を達成するための具体的な仕組みとして、各チームの研究発表会・サイトビジットのプログラムをはじめ、研究領域内外の連携、国際連携、国家基幹技術のフル活用、産業界との連携、などを実施している。以下にそれらを概観する。

### (2) バーチャルラボとしての研究領域のマネジメント、研究進捗状況の把握と評価、研究課題の指導について

ネットワーク型バーチャル研究所としての本研究領域内で、多様な分野からの参画研究者が情報交換を通じてお互いを刺激しあうことで、単独研究では思いもよらない大きな相乗効果が発現することを期待している。さらには、元素戦略さきがけ研究の若手研究者との連携や平成 24 年度から始まった文科省の元素戦略<拠点型>プロジェクト研究者との交流・連携も進める。それらの取組みに研究総括および領域アドバイザーが参加し、研究進捗状況の把握と評価・アドバイスをを行う研究課題の指導体制を構築してきた。それらの取組みを以下にまとめる。

### ①各チームの研究進捗報告会とサイトビジット

各チームは、毎年少なくとも前期・後期1回ずつのチーム研究進捗報告会・サイトビジットを実施、さらにチーム内勉強会などを開催している。研究総括は可能な限り出席して進捗情報の把握、推進方針へのアドバイスをを行っている。さらに、領域アドバイザーにも参加を呼び掛け、毎回、関連分野の領域アドバイザーを中心に、2-5名程度の領域アドバイザーの参加を得て、専門性の高い内容の議論、研究領域内外や産業界との情報交換、連携研究、実装に向けた取り組み、など、適切なアドバイスをを行っている。サイトビジットにおいては、CREST 予算で購入した装置類の活用状況の確認も行った。

### ②領域全体会議

領域全体会議を平成24年度から毎年1回開催してきた。2年目からは、チーム間、チームメンバー間の交流、情報交換の効果を高めることを目的に、1泊2日のスケジュールで開催している。各チームの研究報告とともに、若手研究者によるポスター発表（各チーム2-3件）を行うとともに、領域アドバイザーも毎回3名程度、それぞれの専門の立場からレクチャーし、質の高い議論の場の構築に努めている。

実績は次のとおりである。第1回：平成24年9月22日（土）～23日（日）参加者約100名、第2回：平成25年9月21日（土）～22日（日）参加者約140名、第3回：平成26年7月16日（水）～17日（木）参加者約130名

### ③さきがけとの合同キックオフミーティングおよび合同公開シンポジウム

平成22年度から24年度までの3年間は同時に発足したさきがけ研究領域「元素戦略」との「CREST・さきがけ新規採択課題合同キックオフミーティング」を開催した。これらは、非公開で、CRESTとさきがけの情報交換と人的交流を主目的として開催したもので、参加者は100-140名規模で、内容の濃い議論が繰り広げられ、これらをきっかけに、5.3(2)で記載のように、さきがけ元素戦略メンバーとの共同研究やCREST元素戦略チームの若手研究員がさきがけに採択されるなどに発展した。

その後、新規採択の終了した平成25年度には、第1回JST元素戦略・CREST-さきがけ合同公開シンポジウムを東京国際フォーラムで開催し、235名の参加者を得て、活発な議論が繰り広げられた。平成26年度には、第2回合同公開シンポジウムを、下記(5)に記載の経産省との府省連携の「元素戦略/希少金属代替材料開発 第9回合同シンポジウム」と一体化して、平成27年2月24日に東京国際フォーラムで開催することとなっている。

### ④計算科学との合同シンポジウム

本CREST研究領域を含む我が国の元素科学関連の研究の更なる進展のためには、京コンピュータなどの活用を含めた理論・計算科学との連携促進が重要であるとの共通認識の下、平成24年1月24日に「理論と実験の連携強化を目指したシンポジウム」を東京で開催し、



本 CREST 全チームを含めて約 100 名が参加して情報交換を行った。本 CREST では、各チームに理論グループの参画をお願いしてきたところであるが、このシンポジウムをきっかけに、参画のなかったチームにも理論グループの参画が実現した。

#### ⑤府省連携プロジェクト

文部科学省「元素戦略プロジェクト（産学連携型）」と経済産業省「希少元素代替材料開発プロジェクト」との合同シンポジウムが平成 18 年度から毎年開催されてきた。本 CREST 研究領域「元素戦略」も、研究領域発足時から参加し、ポスター発表や研究代表者による口頭発表を行ってきた。文科省、経産省の上記プロジェクトの終了に伴い、平成 26 年度第 9 回合同シンポジウムは本 CREST とさきがけ研究領域「元素戦略」の合同シンポジウムと一体化して、平成 27 年 2 月 24 日に東京国際フォーラムで開催することとなっている。

#### ⑥特許申請やプレス発表基準

研究領域としては、権利化が必要な成果は特許申請することを推奨している。各チームは企業からの領域アドバイザーの助言などを基に、特許申請に積極的に取り組んでいる。さらに平成 26 年度から、独立行政法人工業所有権情報・研修館（INPIT）の知的財産プロデューサー派遣事業の活用を開始した。北川チームからの申請が認められ、平成 26 年 4 月から知的財産プロデューサーが京都大学に常駐している。その後、知財申請数が増えており、その効果が着実に表れている。

また、プレス発表も推奨しているが、平成 23 年度に次のような内容の「プレス発表に対する基本方針」を全チームメンバーに発信した。プレス発表資料は、研究総括のみならず、必要に応じて領域アドバイザーも内容をチェックし、それらの意見も参考にして、慎重に進めている。

##### 「プレス発表に対する基本方針」

- ・プレス発表に値する成果が出たときには積極的にプレス発表の希望を出してください。
- ・CREST は「課題達成型基礎研究」を推進するものであり、応用のことを考えることも確かに重要ですが、学理を究めるというニュアンスを伝えることがより重要です。
- ・サイエンスとして本当に価値のあるものであれば、たとえ本文で応用に触れていなくても様々なメディアからは注目されるはずです。一方で、応用に一切触れていないとメディアの目にとまりにくいことも事実ですが、研究総括としては無理をしてまで応用に触れる必要はないと考えています。また中途半端に応用について記載することで、折角の良いサイエンスが安っぽいものに見られてしまうことも懸念しています。
- ・本文で応用について触れるかどうかについて、研究者側で断固たる決意を持って判断してください。研究総括としては研究者の意思を尊重します。
- ・もちろん、応用に直結するような成果であれば、応用を強調した文面にしてください。

### (3) 共同研究の推進、国家基幹技術の活用、および人材育成

ここでは、研究領域内共同研究、研究領域間連携、国家基幹技術の活用、国際連携について述べる。産業界との共同研究に関しては、6. (3) で紹介する。

#### ① 研究領域内共同研究の推進

ネットワーク型バーチャルラボの特徴を最大限に生かすために、研究領域内各チーム間の共同研究を推奨してきた。現在進められている研究領域内共同研究の連携ネットワーク(図1)を以下にまとめた。これらの多くが、上記の領域全体会議やサイトビジット時に、研究者同士の情報交換、研究総括や領域アドバイザーからの助言によって開始されたものである。特記すべき点は、当該箇所で個々にコメントする。



図1 研究領域内共同研究の連携ネットワーク

- ① 杉本チームの主たる共同研究者の大谷は、古原チームの研究において開発したクラスター展開・変分法の適用によって、正方晶に歪んだ Fe-Ni-Co 3 元系固溶体の温度・組成・軸比を変数とした自由エネルギーなどの理論計算が可能であることを示している。
- ② 杉本チームと宝野チームは学会のセミナー等を共同開催している。また、杉本は開発した Mn 系合金の磁区構造を宝野チームの東北大村上グループに依頼し、保磁力機構を調査している。
- ③ 栄長チームの研究報告会において、ホウ素ドープダイヤモンド中のホウ素原子の分布を宝野チームの 3 次元アトムプローブ顕微鏡で観測することを研究総括らが提案し、追加予算も措置して始まった共同研究である。宝野チームで、ホウ素ドープダイヤモンド中にドープされているホウ素の分布について定量的な知見を得、電気化学特性との相関を明らかにしつつある。
- ④ 本件も上記③と同様に、研究総括らが、北川チームの九大松村晶グループに新たに導入した透過電子顕微鏡によるホウ素ドープダイヤモンドの直接観察を提案して開始された共同研究である。これまでに、ホウ素がダイヤモンド粒内の炭素結晶格子に置換固溶していること、クラックや結晶粒界に沿って炭素の  $sp^2$  結合状態が存在していることがあきらかになっており、今後、電気化学特性との相関を明らかにする。

- ⑤ 長谷川チームと島川チームは合同で研究会を開催し、無機機能性材料に関する共通の興味に関する議論を進めた。それを基に、長谷川チームの中心課題である強誘電性の発現を目指した trans 配列タンタル系酸窒化物薄膜の構造決定に向け、直線偏光 X 線吸収測定と、島川チームの小口グループの理論研究との共同研究を実施している。
- ⑥ 森田チームと長谷川チームメンバーの東大松尾豊教授との共同研究として、有機薄膜太陽電池素子作製をテーマにしたフィージビリティスタディの実験を検討中。
- ⑦ 中井チームと島川チームの小口グループとは、情報交換会「物性理論と量子化学の接点～相対論の視点を中心として」を開いている。相対論を考慮した計算理論として、中井チームは量子化学を基盤とし、小口グループは物性物理を基盤とした理論研究を双方の分野でほぼ独立に発展してきた。本研究会では主に相対論という視点から両分野における研究事例を互いに紹介し、双方における相対論研究の進展を図っている。
- ⑧ 中井チームと森田チームとの共同研究が領域全体会議などでの情報交換を基に提案され、予算措置を行って開始されたもので、開殻  $\pi$  電子系材料の電気・光学・磁気物性の理論評価と新規材料設計を行っている。中井チームは、森田チームが研究開発しているトリオキソトリアンギュレン (TOT) 誘導体の固体が示す近赤外領域の吸収を量子化学計算により解析し、長波長の吸収はモノマーの SOMO に由来するフロンティア軌道間の電子遷移であることを解明した。
- ⑨ 中井チームの北大長谷川グループは永島チームの鉄触媒反応の重要な部分構造であるジシラメタラサイクルの役割を理論的に実証している。また、白金触媒によるアミドの還元反応に関する理論的研究も行っている。

## ②研究領域間連携、拠点形成型プロジェクトとの連携

本研究領域の関係者が多数「さきがけ元素戦略」や元素戦略（拠点形成型）プロジェクト等との連携を持っており、本研究領域の活動が広く認知され、人的交流、技術交流、情報交流を通じた研究開発力強化に中心的役割を担っている。連携先を基にまとめる。

### 「さきがけ元素戦略（研究総括 細野秀雄）」

- ・杉本チームの亀川厚則東北大准教授が採択された。研究課題「革新的磁石材料の為の超高压合成法による新規磁性化合物の探索」研究を行っている。
- ・宝野チームがさきがけ元素戦略の薬師寺啓研究者の磁性多層膜の STEM 解析で共同研究を実施中
- ・長谷川チームがさきがけ元素戦略の塚崎敦教授（東北大学）と電気二重層トランジスタ構造を作製し大幅なキャリアドーピングを目指して共同研究を実施中

### 元素戦略「磁性材料研究拠点」

- ・杉本が材料創製グループリーダーを務める。
- ・宝野チームが参画、新規磁石化合物の断面 TEM による微細構造解析を行い、NdFe<sub>12</sub>N の磁化の決定に貢献した。また本プロジェクトで開発した試料をより詳細な解析のため

に元素戦略磁性材料拠点を通し SPring-8、J-PARC による解析を進めている。またマイクログラネティックシミュレーションの大規模計算については元素戦略研究拠点を通して「京」による計算を実施、他の並列手法、GPU による計算とのベンチマーク比較を行っている。

#### 元素戦略「構造材料研究拠点」

- ・古原チームの主要メンバーが参画、PI および拠点教員として参画し、拠点の活動に貢献している。また、結晶粒微細化およびナノ析出解析での量子線応用に関する拠点教員との間の共同研究を実施するとともに、計算材料科学の応用におけるスパコンの共同利用に関して拠点教員との連携を行っている。

#### 元素戦略「触媒・電池材料研究拠点」

- ・島川チームの小口グループが電池グループ岡田重人九大教授と「ナトリウムイオン二次電池の正極材料」に関して共同研究を実施している。
- ・北川チームの永岡グループリーダーが参画
- ・永島チームは、理論グループと鉄触媒の作用機構に関する共同研究を3件実施中
- ・中井は理論グループのデレゲートとして参加し、触媒及び電極の電子状態計算のための理論開発を行っている。

その他にも、栄長が CREST 研究領域「人工多能性幹細胞 (iPS 細胞) 作製・制御等の医療基盤技術」でホウ素ドーパダイヤモンド電極を用いてがんバイオマーカーであるグルタチオンの生体内測定を行った。また、島川チームの陰山グループリーダーが CREST 研究領域「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」(研究総括 瀬戸山亨) に採択され、杉本チームの山内美穂九大准教授は、CREST 研究領域「二酸化炭素排出抑制に資する革新的技術の創出」(研究総括 安井 至) おいて、研究課題「高選択的触媒反応によるカーボンニュートラルなエネルギー変換サイクルの開発」を、北川チームの古山通久九大教授は CREST 研究領域「エネルギー高効率利用のための相界面科学」(研究総括：笠木伸英) において電極の3次元立体構造の可視化に貢献しており、長谷川チームも同 CREST と透明電極材料タンタル系酸窒化物 (TaON) の水分解光触媒作用の研究を行うとともに、CREST 研究領域「ナノ科学を基盤とした革新的製造技術の創成」(研究総括 堀池靖浩) とも共同研究を実施している。また、永島チームが、研究領域「低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出」(ACT-C) の山田陽一研究グループとシリコンナノワイヤーアレイ担持パラジウム触媒に関する共同研究を実施した。

### ③国際連携

国際連携、国際共同研究の強化に向け、JST 戦略的創造研究推進事業における「国際強化支援策予算」への積極的な申請を推奨してきた。その結果、12 チームのうち、6 チームに対して「国際強化支援策予算」を頂いた。この支援策による活動を含めた国際連携・共同

研究は以下のとおりである。

栄長チームでは、国際強化支援策予算により、「International Symposium on Diamond Electrochemistry」を平成 26 年 3 月に慶應義塾大学にて開催し、企業からの参加者 30 名を含む 120 名の参加があった。

島川チームでは、海外での放射光 X 線や中性子などの利用を中心とする国際共同研究を展開しており、英国、フランス、台湾の大型実験施設を積極的に使い成果を挙げてきた。これまでに 20 報以上の国際共同研究による共著論文を発表している。また、英国 EPNET プログラムや欧州 Erasmus Mundus プログラムとも連携を行っており、国際共同研究の一環として人材交流も行ってきた。

古原チームでは、多元系の第一原理計算に必要なクラスター展開・変分法のコード開発などに関して、国際強化支援策予算によって、オランダのデルフト工科大学との連携および共同研究を行っている。またナノクラスタリングの高分解能電子顕微鏡観察についてバージニア工科大学との共同研究を行い、その成果を共著論文として発表した。今後韓国延世大学と溶質元素クラスタリングに関する討論会も開催予定である。

北川チームでは、国際強化支援策予算によって、ドイツのルール大学ボーフムの Roland Fischer 教授との国際共同研究を継続中である。平成 26 年 10 月に同大学から 2 名の大学院生が滞在研究を行い、新規固溶合金ナノ粒子の開発を行った。平成 26 年度には第 1 回日伊元素戦略会議をベネチア大学で実施し、平成 27 年度には第 1 回日西元素戦略会議をカタルーニャ化学研究所にて開催予定である。

永島チームでは、魚住グループが理研およびカナダ McGill 大学の A. Moores 博士と水素化活性を持つ鉄固定化触媒の開発を、またチーム内国際共同研究として南洋工科大吉戒グループと京大高谷グループ間で、コバルト触媒反応の中間体解析を実施している。さらに、国際強化支援策予算によって、平成 26 年 10 月、奈良で、C-H 結合活性化 20 周年記念国際シンポジウムを開催した。

長谷川チームでは、スイス連邦工科大学ローザンヌ校の Forró 教授らのグループとの共同研究によって、高屈折率透明導電体であるチタン系材料が高温での熱電変換材料として有望であることが判明し、平成 25 年に共同論文を発表した。また、フィンランド・アールト大学の Karppinen 教授らのグループとの共同研究では、チタン系高屈折率透明導電体の実用的な合成法として、より高品質でかつ大面積成膜が可能な原子層蒸着法について検討している。

宝野チームでは、ドイツ Danube University Krems の Thomas Schrefl 教授が開発したマイクロマグネティックシミュレーションコードを用いて実際の磁石を模擬した微細構造モデルの大規模計算を GPU、並列計算、さらに「京」による並列計算を実施し、これらのベンチマークを行うことにより、大規模計算に適した手法を検討している。

高田チームでは、国際強化支援策予算によって、米国南カリフォルニア大学の Moh El-Naggar 准教授との国際共同研究を実施し、走査型電子顕微鏡や光学顕微鏡技術を駆使し

て、鉄酸化細菌が形成する BIOX の鞘の元素分析とともに、鉄酸化細菌の増殖を経時的に観察することに成功し、鞘形成プロセスの一部を初めて明らかにした。

中井チームでは、米国イリノイ大学を拠点とする平田グループ (G) とチーム内共同研究として、中井 G—平田 G 間で相対論的電子相関法の自動合成、および中嶋 G—平田 G 間で相対論的モンテカルロ多体摂動法の開発を行っている。また、韓国の UNIST とも長期的な共同研究を行っている。波田 G の CP 対称性を破る電子の電気双極子モーメント (EDM) の観測に関連して、原子 EDM 理論の研究で著名な B. P. Das 教授 (Indian Institute of Astrophysics) と共同研究を行い、分子系での有効電場を高精度に計算するプログラム開発を行った。それによって、様々な元素を含む分子の有効電場計算が可能になった。長谷川 G は中国・吉林大学の Fu-Quan Bai 博士との共同研究を実施した。また、青木 G は、主として Elongation 法により非線形光学特性を計算する手法の開発における国際共同研究の成果を、Springer の単行本「Calculations on nonlinear optical properties for large systems - The elongation method」(F.L. Gu, Y. Aoki, M. Springborg, B. Kirtman, 計 93 ページ, 2015 年, ISBN: 978-3-319-11067-7) として出版するに至った。

#### ④国家基幹技術の活用

本 CREST 元素戦略研究では、SPring-8、J-PARC、京コンピュータ、ホログラフィ電子顕微鏡など、いわゆる国家基幹技術をフル活用して世界トップの成果を出すように推奨している。8 チームが SPring-8 を活用している。特に、島川チーム、北川チーム、永島チーム、長谷川チーム、高田チームにとっては、結晶構造解析、X 線光電子分光、フロー系 XAFS、蛍光 X 線ホログラフィ、直線偏光 X 線円二色性測定などが不可欠の手法となっている。また、J-PARC の中性子源 (堀内チーム、北川チーム)、フォトンファクトリー (堀内チーム)、京コンピュータ (北川チーム、宝野チーム)、ホログラフィ電子顕微鏡 (宝野チーム)、なども元素戦略研究では広く活用されている。

#### ⑤人材育成

5. (1)でも述べたように、本 CREST 研究領域は元素戦略研究分野を強力に率いる次世代の育成も大きな任務である。

内定分を含めて、既に、領域全体として、教授への昇進 3 名、准教授・講師への昇進 5 名、大学講師から理化学研究所ユニットリーダー1名、CREST 予算で雇用の博士研究員や特定助教等から正規助教ポスト等への昇進 13 名、外国人博士研究員の NIMS 定年制研究員への採用や海外の大学の教授、准教授ポストへの転出 5 名 (中国、マレーシア、米国) など、次世代育成に多くの実績を挙げている。このデータは、元素戦略研究の新たなリーダー育成、次代を担う若手にも元素戦略のコンセプトがしっかりと引き継がれていること、そして、そのすそ野が国内外に広がっていること、の 3 点を明確に示している。

#### (4) 研究費の配分

各研究課題への研究費の配分額は「1. 研究の概要 (4) 採択課題・研究費」に記載のとおりである。研究開始後、年度毎に研究計画および研究費の見直しと共に増額要求等の提出を求め、主に研究領域内の総括裁量経費から必要に応じて、重点配分などを行ってきた。主な重点配分措置の内容は以下のとおりである。なお、研究領域外からの追加措置としての国際強化支援策予算に関しては、上記の 5. (3)④国際連携で述べたとおりである。

1) 採択時に予算充足率を下げざるを得なかった北川チームに対しては、大きな成果が期待される「元素間融合」研究推進に必要な研究員の人件費に加えて、装置類として、ICP 発光分析装置、蒸気圧制御ユニット、アークプラズマ装置などを総括裁量経費で措置するとともに、研究領域外からの追加措置として、比熱測定装置、ES 描画用パターン発生装置、超小型 FTIR 装置、電子顕微鏡用雰囲気制御資料ホルダーなどの購入費に加えて、研究領域内共同使用も想定して、FIB-SEM 装置購入費などを平成 25 年度に増額した。実際、この装置は、北川チームの元素間融合物質の原子レベルでの精密解析に威力を発揮すると共に、栄長チームのホウ素ドーパダイヤモンド中のホウ素および  $sp^2$  炭素の分布の解析に成功するなど、威力を発揮している。

2) 有機合成用鉄触媒の高度化に取り組む永島チームは国内 6 グループのオールジャパン体制の強力な取組みとなっているが、各チームに研究員を配置できず、研究推進に支障をきたす状況であった。改善策として、博士研究員の雇用人件費を総括裁量経費で措置した。

3) 宝野チームに対しては、電子線ホログラム研究のための村上グループおよび理論の国際共同研究強化のための Schrefl グループの追加予算も平成 25 年度、平成 26 年度に総括裁量経費から措置した。

## 6. 研究の経過と所見

### (1) 各チームの研究経過と所見

まず、平成 22・23 年度採択課題を対象とした課題中間評価結果の概要と、平成 24 年度採択課題を含めた、平成 26 年 11 月時点における各研究課題の進捗状況と所見について述べる。

#### ①平成 22 年度採択課題

##### ・栄長泰明チーム

本研究課題では、レアメタルフリーであるホウ素ドーパダイヤモンド (BDD) 電極の応用展開と基礎物性・基本学理の追究を進めるものである。本研究課題の開始前から、既に BDD 電極の優れた電気化学特性を利用した環境汚染物質センサー (重金属分析装置として日本の企業で製品化) の開発が進められてきたが、CREST では将来の医療応用への展開を視野に入れた研究を展開してきた。具体的には、マウス内でのがんのバイオマーカー濃度や胃中

の水素イオン濃度の直接計測に成功している。また BDD 電極を用いた CO<sub>2</sub>還元による有用物質生成にも当初の期待を超える特筆すべき成果が見られ、特に電解還元により、常温常圧下において高効率でホルムアルデヒドが生成できることを示したことは高く評価できる。ここに上げた成果はいずれも今後 BDD 電極の新たな可能性を示す重要な技術シーズであると認められるので、研究の出口側との情報交換を適宜進めつつ、望まれる応用展開を講じてもらいたい。

#### ・島川祐一チーム

本研究課題は、高圧合成やエピタキシャル原子層薄膜成長、非溶液型ソフトケミストリーといった合成手法を駆使して、ありふれた 3d 遷移金属元素を中心に、異常原子価状態と特異な配位構造を持つ新物質の探索と新機能の探求を推進するものである。

現在までの研究では、異常原子価 Fe<sup>4+</sup>・Fe<sup>+</sup>・Cu<sup>3+</sup>・Mn<sup>+</sup>などの 3d 遷移金属酸化物や Ti 酸化物の酸素欠損相の合成に成功するとともに、特に Fe<sup>4+</sup>を含む A サイト秩序・ペロブスカイト型酸化物では、一見異なった電氣的・磁氣的挙動を「酸素ホールの局在化挙動の違い」で統一的に説明できることを見いだしている。また、SrRuO<sub>3</sub>/GdScO<sub>3</sub> ヘテロ構造を作製し、SrRuO<sub>3</sub> 薄膜の磁気・輸送特性が GdScO<sub>3</sub> の歪みにより生じる RuO<sub>6</sub> 八面体の回転に応じて変化することなども成果の一つである。今後もこれまでの成果や蓄積等を活用した新物質の探索、取り分け本研究課題の究極目標である「デザインされた新物質合成」には注力を傾けてもらいたい。

#### ・杉本諭チーム

本研究課題は、鉄 (Fe) やコバルト (Co) などの遷移金属をベースとした磁性物質を探索し、レアアース使用量を削減し、究極的にはレアアースフリーの新規永久磁石材料の創成を目指すものである。高磁気異方性と高保磁力のための結晶構造制御と高磁気特性のためのナノコンポジット化を研究のアプローチとし、「計算科学を用いた状態図研究」、「薄膜技術」、「粉末・微粒子技術」、「超高压技術」といった多角的な手法を採用した取り組みを進めている。

高性能永久磁石開発の観点からは極めて挑戦的な課題設定でありながらも、CREST 開始後これまでに繰り広げられた多くの試行錯誤の結果、アイデアの絞り込みと研究開発の方向性がおおよそ定まったように認められる。その中でも、希土類磁石に匹敵する保磁力を有する新規化合物 Mn-Sn-Co-N 系を見いだしたことは高く評価できる。現状では残留磁束密度は低いものの、本結果を Fe 系合金へ展開して高性能磁石化するという基盤が一つ確立できたことになる。保磁力発生の機構解明と併せて、今後の Fe 系合金への展開に期待したい。

#### ・古原忠チーム

本研究課題は、鉄鋼材料の強靱化に貢献する元素あるいは脆化などをもたらすいわゆる



不純物元素を、侵入型元素（炭素や窒素）と置換型元素（レアメタルや P など）に分類し元素機能を究明すべく元素間相互作用や格子欠陥との相互作用にフォーカスし、原子オーダーからナノオーダー、そしてサブミクロンオーダーのマルチスケールな観点から理論および実験で解析・検討し、鉄鋼材料の強度や靱性の向上を目指すものである。CREST 研究開始後、ユビキタス元素である Al-Si を活用した Ni フリー新耐候性鋼においてネックとなる溶接熱影響部の靱性を極微量のホウ素の活用で実現したこと、およびフェライト鋼に窒素を添加しナノクラスターによる著しい表面硬化が起こること等の成果が得られており、着実な進展が見られたと高く評価したい。

#### ・堀内佐智雄チーム

本研究課題は、CREST 開始前の、研究代表者らによる低分子有機化合物、炭素と酸素を主骨格とするクロコン酸の室温強誘電特性に関する成果を端緒として、有毒な鉛や希少元素に依存しない、有機化合物をベースとした強誘電体の創成を目指すものである。CREST では大きく分けて、物質探索、電子状態や結晶構造の解明、分極ドメインの観測、薄膜化という各要素に取り組んでいる。

物質探索では、将来のデバイス化にも応えられる塗布・印刷が可能な有機強誘電体物質の開発を基本とし、これまでに 20 種超の電子ドナー・アクセプター型強誘電体を見いだしている。その一つとして、炭素と窒素を主骨格とするイミダゾールやアントラニル酸が、水素結合架橋構造を基に優れた強誘電性を示すことを明らかにしたことは高く評価できる。今後はこれらの成果を核とした薄膜化・デバイス化への展開に資する物質合成（例えばオリゴマー化など）にも注力を傾けつつ、有力な物質は適宜、プロセス開発などにも取り組まれることが望まれる。

## ②平成 23 年度採択課題

#### ・北川宏チーム

本研究課題は、バルク状態では相分離する多数の金属元素の組み合わせを原子レベルで固溶化させること（「元素間融合」と命名）によって、新しい物質を創成するとともに、革新的な材料の開発を目指すものである。本研究領域での研究開始後、バルクでは 1000°C 以上の高温領域でも固溶相を形成しないパラジウム (Pd) とルテニウム (Ru) が原子レベルで固溶した新規合金ナノ粒子の創成に成功し、この新規ナノ粒子が Pd や Ru のナノ粒子よりも高い一酸化炭素酸化活性を有すること、元素周期表上で Pd と Ru の間に位置するロジウム (Rh) ナノ粒子を凌ぐ自動車排ガス浄化反応活性を有することを見出したことは特筆すべき成果である。また、銅をコア金属とする多孔性金属錯体 (MOF) で被覆した Pd ナノ粒子の水素吸蔵特性が通常裸の Pd ナノ粒子の特性を上回ること、その原因が Pd ナノ粒子と MOF との界面で起こる電荷移動にあることを示すなど注目すべき成果が得られている。

#### ・永島英夫チーム

本研究課題は有機合成化学に従来用いられてきたパラジウムや白金などの貴金属触媒を、鉄系金属触媒への代替（元素代替）、固定化触媒を用いる触媒回収・再利用（元素循環）、触媒効率の極限までの向上（元素減量）を目的として、配位子場制御に基づく鉄触媒の開発と、固定化・フロー系などの媒体反応駆動原理の確立に基づく革新的触媒プロセスの開発を行うものである。研究代表者によるリーダーシップの下、オールジャパンともいえる多くの優れた研究者が鉄触媒開発グループとプロセス開発グループの 2 グループに束ねられ、研究が進められている。

鉄触媒開発においては、シリコン工業の基幹技術であるヒドロシリル化反応を担う白金触媒の代替を目標に、産業界との密接な情報交換に基づいて触媒設計を行い、ヒドロシロキサンのアルケンへのヒドロシリル化を達成したことは特筆に値する。開発された触媒系は保存安定性、操作性に優れ、触媒回転数 (TON) が  $10^3$  レベルの活性を達成しており、今後、産学連携研究の一層の進展による実用化に期待する。一方、触媒プロセスの開発に関しては、鉄を固定化したフロー系触媒によるアルケン水素化の実現など、研究計画の前倒しによる成果が得られている。固定化触媒技術の実用面での今後の展開にも期待する。さらに、これまで不可能であった溶液中の常磁性化学種の解析に、SPring-8 での硬 X 線、軟 X 線 XAFS 用の溶液フローセルの開発によって世界で初めて成功した成果は特筆に値する。既に鉄触媒を用いたクロスカップリング反応の反応機構解析などの成果が得られているが、他の反応系の経時変化観察にも応用可能な手法であり、基盤的な技術となることが期待できる。

#### ・長谷川哲也チーム

本研究課題は、酸化物系電子材料において酸素の代わりに水素 (H)、窒素 (N)、フッ素 (F) などの軽元素を導入することにより、構造制御・電子状態制御を行い、新たな可視光応答強誘電体、透明導電体、透明電極材料を開発し、可視光応答光電変換デバイス、有機薄膜太陽電池、有機 EL などの有機デバイスへの応用を目指すものである。

可視光応答強誘電体の開発では、第一原理計算による構造・物性予測に基づき、 $\text{SrTaO}_2\text{N}$  薄膜によって酸窒化物では初めての強誘電性発現に成功した。研究チームでは、理論解析を通じてエピタキシャル歪によって窒素配列を trans 型に制御したことが要因であると予測しているが、それを裏付けるための構造解析による酸素/窒素配列決定が今後の課題である。また、新規透明導電体の開発では、低仕事関数材料としてアナターゼ型 TaON、高仕事関数材料として  $\text{InO}_x\text{F}_y$  系を開発した。TaON は  $\text{TiO}_2$  に匹敵する高い移動度を示している。

上述のように、新しい酸化物系電子材料の開発に成功していることは一定の評価に値する。しかしながら、目標に向けて開発中の物質群が限定され、今後の展開も限られている印象を受ける。トポタクティック合成法による軽元素導入などの新たなアプローチにより、

対象物質群の数を増やすことを検討すべきと考える。

#### ・宝野和博チーム

本研究課題はジスプロシウムを添加しない (Dy フリー) 高保磁力ネオジム磁石の開発を目標として、ネオジム磁石の微細組織解析や、保磁力機構解明のための薄膜によるモデル実験、界面構造の理論計算、実際の微細構造を反映したマイクロマグネティックシミュレーションを相補的に活用し研究を行うものである。研究代表者のリーダーシップの下、バルク磁石創製と微細構造解析グループ、理論グループ、薄膜実験グループ、電子線ホログラフィ解析グループから構成される、理想的かつ世界最強ともいえる研究体制で研究を推進している。

本研究課題開始時までに研究代表者らは、それまで非磁性と考えられていた焼結磁石の粒界相が強磁性である可能性を見出し世界的な関心集めていたが、その後本研究領域で研究を開始してからは、微細構造と保磁力の関連を詳細に検討し、これを実証した。また、電子線ホログラフィと高分解能電子顕微鏡による磁束解析などにより、結晶粒子間の強磁性体を介した交換結合が保磁力低下の原因であることを突き止め、高い保磁力を有するネオジム磁石の開発には結晶粒界に非磁性相を形成させて交換結合を分断する必要があることを示した。この結果に基づいて開発した手法「膨張拘束拡散法」により、4%Dy 含有焼結磁石相当以上の磁石特性を Dy フリーの熱間加工ネオジム磁石で実現しており、本研究課題の中間点における目標は達成されたと評価する。達成された Dy フリーのネオジム磁石の室温保磁力は 2.2T 程度であるが、目標である 2.5T の実現に期待する。現在、縦方向の結晶粒界層だけではなく、横方向への非磁性相の挿入によって実現することを目指している。

### ③平成 24 年度採択課題 (中間評価は未だ行われていない)

#### ・高田潤チーム

自然界に生息する鉄酸化細菌は、地下水が湧き出る場所で細胞外に鞘状やリボン状の特異な形をした酸化鉄構造体を作る。本研究では、これら微生物が作るユニークな多孔質鉄酸化物構造体 (BIOXと命名) の発見と解析、これに倣った人工合成鉄酸化物の新材料創出と新機能開拓をめざしている。培養系鉄酸化物として、単離菌OUMS1によるBIOXの化学組成を調整した新規な鉄酸化物構造体材料の創製、合成系鉄酸化物として、BIOXの特性を模した化学試薬調合によって、ナノ構造を制御した低結晶性鉄酸化物の人工合成などに取り組んできた。これによって、「高活性触媒」、「Liイオン2次電池高性能正負極材」、「ヒト細胞高親和性」、「高級赤色顔料」など新規エコ材料の創製などを目指している。既に、BIOXの鞘がなぜ中空か、という長い間の謎を超薄切片の電子顕微鏡観察による解析によって解明しつつある。また、微生物由来鉄酸化物がLiイオン電池で優れた負極特性を発見するなど、注目すべき成果を得ており、今後に大いに期待したい。

#### ・中井浩巳チーム

希少元素や規制元素の多くは重元素であり、相対論的効果が無視できない。本研究は、理論的基盤として相対論的量子化学理論を確立し、触媒活性・電磁気特性・電子機能材料・生体光機能・機能性高分子に対して、理論的手法を用いて元素の特性を理解し、革新的な機能を持つ物質・材料を設計することを目指している。特に、異種元素間の化学結合、種々のスピン状態が関与するスピントロニクスオーバー現象、同一組成であっても機能に大きな違いをもたらすナノサイズ効果に着目した研究には大いに期待したい。すでに、無限次ダグラスロール法に局所ユニタリー変換 (LUT) を適用した高精度・高効率な相対論的ハミルトニアンに対する解析的微分法を確立し、重元素を含んだ世界最大規模の分子計算を実現している。また、森田チームとの共同研究によって、安定な有機ラジカルの光吸収に関する理論的研究、 $\pi/\pi$ スタッキングと SOMO 間の結合性相互作用により安定な一次元カラム構造が形成されることなどを理論的に解明するなど、顕著な成果を得ている。本 CREST 研究領域の中の唯一の理論チームとして、期待どおりの役割を果たしていることを高く評価している。

#### ・森田靖チーム

本研究では、研究代表者らが独自に開発した空気中でも安定な有機ラジカルであるトリオキソトリアンギュレン TOT を基盤とした新たな分子を設計・合成し、基礎的な電子物性を解明するとともに、これらの分子を活用した「非レアメタル系次世代型有機二次電池」の開発と、これらの分子を用いた「近赤外光に応答する光電変換薄膜」の調製とそれを活用した「全波長領域応答ハイブリッド型太陽電池」の開発を目指している。既に、電子アクセプター性を有するジシアノメチレン基やレドックス活性置換基であるジアルキルアミノ基を導入した新しい TOT 誘導体を短段階高収率で合成・単離し、二次電池の出力電圧の向上を確認している。また、TOT の自己集合能を活用した導電性一次元  $\pi$  積層ポリマーの電気伝導度が中性ラジカル結晶の 1000 倍に達することの発見や、TOT/CNT コンポジット正極の作製などによって、高エネルギー密度有機ラジカル二次電池実現への第一歩となる成果を得ていることは高く評価できる。

なお上記各チームの中間評価において、やや進捗が思わしくないと判断された 2 チームに対して、下記のような助言を行い、後半での飛躍に期待している。

まず、島川チームでは、全体の方向性が「酸素イオン伝導材料」に集約されてきているように判断できるが、新機能イコール新現象の発見に留めるのではなく、そこから再度物質設計指針や異常原子価が果たす役割の本質的理解へと転換 (フィードバック) すること、さらに、得られた新規物質が既存の数多ある有力候補物質に比してどれほどの優位性があるのかを十分に検証した上で、応用を指向した材料開発研究に進むことを強く求めるとともに、「デザインされた新物質合成」というコンセプトの達成に向けて、今後は異常原子価

状態の新物質合成のための物性測定・機能評価の取組みを強化することを奨励した。

次に、長谷川チームでは、目標に向けて開発中の物質群が限定されていること、デバイスへの応用についてはまだ試行段階で先が見通せない状況にあることなどから、トポタクティック合成法による軽元素導入などの新たなアプローチによって対象物質群の数を増やす取り組みとともに、産業界からのニーズを積極的に採り入れる仕掛けを図るなどして、技術的課題を抽出しながら研究を推進することを強く要請した。

## (2)各チームの研究成果の国際的水準、領域全体としての国際的水準

各チームの研究成果は、既に国際誌への発表論文 500 件近く、国際会議での招待講演 40 件（内、基調講演 5 件）などとなって表れており、各チームはもとより、研究領域全体としての国際的水準は高いと判断できる。発表論文に関しては、量だけではなく、多くの論文が、Hot Paper, Best of Papers, Highlighted Papers, Highlighted Articles Viewpoint, Most Read Article などに選ばれていることから、それらの質の高さも強調しておきたい。

## (3)科学技術イノベーションに寄与する卓越した成果の見通し

### ①特許出願実績と産業界との連携

各チームからの特許出願数は既に 60 件（内、国際特許 14 件）に達しており、理論の中井チーム以外の 11 チームすべてが特許出願に高い実績を挙げている。ほぼ全てのチームが企業からの領域アドバイザーの参画を含めて、産業界からの助言を得る体制を整えていることに加え、5. (2)⑥で述べた INPIT からの知的財産プロデューサーの参画の効果も表れた結果といえよう。

このような研究体制は、産業界との連携にも効果を発揮しており、以下のように、すべてのチームが共同研究を実施中である。

「栄長チーム」ホウ素ドーパダイヤモンド電極の応用・実用化の取組みとして、電気化学センサー、特に重金属センサー、高効率オゾン発生システム、および CO<sub>2</sub>還元による有用物質創製に関する共同研究が複数企業と実施されている。

「島川チーム」「高圧合成による新物質開発」および「第一原理計算を用いた新規圧電材料の探索」の両課題で企業との共同研究を実施している。

「杉本チーム」NEDO「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」において高効率モーター用磁性材料技術研究組合（MagHEM）との共同研究により、世界で初めてサブマイクロ域の超微細 Nd-Fe-B 系ジェットミル粉末の作製に成功し、Dy フリーNd-Fe-B 系焼結磁石の高保磁力化技術として期待されている。

「古原チーム」ナノ析出を利用した高強度化原理の知見を生かして、実機で用いられている機械部品の熱処理の原理に関してメーカーとの共同研究を実施している。

「堀内チーム」開発した有機強誘電体が、幅広い種類が安く市販されている物質群でもあ

ったことから、プレス発表をきっかけに、化学メーカーから試料提供のオファーを受けるなど、共同研究実施に向けた検討が進められている。

「北川チーム」化学、触媒、自動車、電池、半導体、金属分野の企業10社と共同研究を実施中である。NEDO 先導研究「希少金属代替省エネ材料開発プロジェクト（新規希少金属プロジェクトのための事前検討）」のいわゆる「先導研究」として、NEDO 委託先のフルヤ金属の再委託先との位置づけで平成26年度に採択され、kg単位のスケールアップ合成、実機性能試験、耐久試験などの予備実験を実施中である。また、JST CREST 研究領域「ナノ界面技術の基盤構築」（平成18年度～平成23年度）の成果と併せて、分離膜・複合触媒の開発も化学企業数社と実施中である。開発の出口は多岐にわたり、ビジネスモデルによって相違はあるものの、5～7年後程度の社会実装を目指している。

「永島チーム」シリコーン製造用ヒドロシリル化白金触媒に代替しうる活性および操作性のよさを持つ鉄、コバルト触媒を開発し、平成26年7月より、共同研究契約を結んで信越化学工業と共同研究を開始した。これは早く企業と組むべきである、との領域アドバイザーからの助言によって企業との連携が具体化したものである。この共同研究は、平成27年2月に開始したA-STEP シーズ顕在化で加速し、2年程度で外国出願を含めて関連特許を押さえ、4000～5000種存在する製品のできるどころから白金代替の実用化検討に入る。また、ハイパーブランチポリマーに固定化した金属ナノ粒子触媒の機能開発および鉄触媒を用いる含窒素多環芳族化合物の合成に関して、企業との共同研究を実施中である。魚住グループと澤村グループが開発した固定化触媒が和光純薬（株）から試薬販売が開始された。

「長谷川チーム」水素・燃料電池社会の実現に不可欠である高活性の太陽光水分解用光触媒の実現を目指してパナソニックと共同研究を実施中である。

「宝野チーム」本研究課題で開発した膨張拘束拡散処理法は磁石メーカーとの共同研究で、現在実用化可能かどうかの検証実験を行っている。

「高田チーム」微生物由来酸化鉄“BIOX”を空气中、800℃で加熱することによって得られる鞘状ベンガラは、従来材料にはないナノ・ハイブリット構造を持った鮮やかな色調のベンガラ材料であり、陶磁器の新しい赤色顔料として企業と実用化を検討している。また、“BIOX”には複数の企業が興味を示している。

「中井チーム」青木グループは、住友金属鉱山と平成25年度まで、九大の組織連携の枠内で主として金属を含む錯体の計算について連携した。別途、公益財団法人九州先端科学技術研究所とは、Elongation法を単独ソフト化するための共同研究を開始している。

「森田チーム」株式会社カネカおよびトヨタ自動車株式会社の研究者が研究分担者として研究チームに加わり、強力な連携・共同研究を実施している。実装を想定した応用的観点からのアイデアや技術に関する助言も日常的に受けている。真に有効な実装のための材料開発に向けた基礎学術を深化させている段階である。

## ②産業界での実装の実例

まだ実装に至ってはいないが、近い将来の実装を目指した取り組み例として次のものがあげられる。

- ・ 栄長チームのホウ素ドーパダイヤモンド電極によるオゾン発生装置は、水道水の殺菌など環境面でのインパクトが期待される。
- ・ 古原チームのホウ素添加の高靱性耐候性用鋼は実装に近い大型インゴットの溶製を行い、特性評価が進められている。
- ・ 宝野チームの膨張拘束拡散処理法による Dy フリーネオジム磁石は、実用化の可能性の実証実験が進められている。実用化されれば、使用範囲は限定されるとしても、レアアース削減効果は少なくない。
- ・ 北川チームの元素間融合物質は、NEDO プロジェクトへの展開を含めて、分離膜や複合触媒などとしての実装が期待される。
- ・ 永島チームのヒドロシリル化用鉄触媒は、信越化学工業（株）との共同研究（A-STEP 採択）によって、実装へ取り組みが強化されている。現在は白金触媒が用いられている世界のシリコン製造業界は 2 兆円規模をもっており、それが鉄触媒に置き変われば、元素戦略・科学技術イノベーションの代表的な成果となるものと、期待が高まっている。また、試薬レベルではあるか、固定化触媒および固定化ホスフィン配位子が和光純薬から市販されるに至っている。
- ・ 高田チームの微生物由来酸化鉄の熱処理で得られる鞘状ベンガラは陶磁器の赤色顔料としての実用化が近いと期待される。

## (4)国内外の顕彰・受賞および報道など

### ①主な顕彰・受賞

- ・ マルコポーロ・イタリア科学賞（イタリア政府）：北川 宏
- ・ 国際量子科学アカデミー会員選出：平田 聡（中井チーム）
- ・ 平成 26 年度文部科学大臣表彰若手科学者賞：賀川史敬（堀内チーム）
- ・ 平成 26 年度文部科学大臣表彰科学技術賞：魚住泰広（永島チーム）
- ・ 第 10 回日本学術振興会賞：陰山 洋（島川チーム）
- ・ 日本金属学会増本量賞：宝野和博

これらのほかにも、日本金属学会、日本化学会、日本磁気学会、電気化学会などの学協会からの各種受賞者も多い。

### ②主な報道

総数 50 件（平成 26 年 11 月現在）にもおよぶ新聞や雑誌で成果が報道された。そのうち、全国紙でも、栄長チームの「CO<sub>2</sub>と海水からプラスチック原料（日経）」、北川チームの「排

ガス処理：安い合金（読売、朝日、日経）」、宝野チームの「レアアース不要の磁石（日経）」や「新たな磁石材料開発：レアアース1割削減可能に（産経）」、森田チームの「MRI感度1万倍（日経）」、など、今後の科学技術イノベーションに直結する成果が多く取り上げられた。

また、研究領域全体としては、「元素戦略」が平成16年のJSTワークショップで提案されてから、10周年を迎えた平成26年に、科学誌Newtonに特集記事が掲載され、本CREST研究領域からも、宝野チームと北川チームの成果が取り上げられたこと、および、テレビ番組「池上彰緊急スペシャル」で「元素戦略」プロジェクトの取組み、特に、レアアースフリー永久磁石開発の取組みが紹介されたことにも触れておきたい。さらに、報道ではないが、研究領域全体としては、日本化学会秋季事業の平成26年度「CSJ化学フェスタ」において、公開シンポジウムを開催し、CREST元素戦略研究の紹介も行ったことにも触れておきたい。

## 7. 総合所見

### (1) 研究領域としての研究成果の見通しおよび研究領域のマネジメントについて

本研究領域の研究総括の立場からの自己評価を下記のようにまとめておきたい。

- ①元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出を目指す領域として、分野バランスのとれた12チームを採択できた。
- ②研究領域内チーム間の連携、共同研究をはじめ、研究領域外の元素戦略拠点型プロジェクトとの連携、国際連携、国家基幹技術の活用などを通じて、また全分野をカバーした領域アドバイザーからの適切な助言を含め、全メンバーがダイナミックに活動し、目標に邁進する理想的なネットワーク型バーチャル研究所が構築できている。
- ③戦略目標である「レアメタルフリー材料等の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能」に直結する成果として、宝野チームのDyフリーネオジム磁石、古原チームのホウ素添加の高靱性耐候性用鋼の実現などが実装検討段階に入っていることを特筆しておきたい。
- ④その他のチームからも、ホウ素ドーパダイヤモンド電極によるCO<sub>2</sub>還元（栄長）、遷移金属酸化物の機能創成原理（島川）、レアアースフリーのMnSnCoN系磁石（杉本）、有機強誘電体物質探索原理（堀内）、元素間融合による高活性触媒創製（北川）、鉄触媒ヒドロシリル化によるシリコン業界の革新（永島）、高活性TaON系新規透明導電体（長谷川）、微生物由来酸化鉄（高田）、相対論量子科学理論による元素科学（中井）、有機二次電池（森田）、など他の追随を許さない、独創性の高い成果が得られており、次世代科学技術イノベーションへの貢献はもとより、それぞれの機能発現のサイエンスの確立、他分野への波及効果にも大いに期待できる。



## (2) 本研究領域を設定したことの意義

「元素戦略」のコンセプトが内外で広く認知され、新たな学問分野として各方面からの研究者の参画を促す段階に来たことが最大の意義と言えよう。

平成 16 年に「元素戦略」が提唱され、19 年度から文科省「元素戦略プロジェクト（産学連携型）」と経産省「希少元素代替材料開発プロジェクト」が初の省庁連携プロジェクトとしてスタートし、5 年間でそれぞれ 16 課題、10 課題が実施された。この文科省「元素戦略プロジェクト」は企業の参画が条件として付され、出口志向の性格の強いプロジェクトであったため、採択課題もある程度限られたものとならざるを得なかったといえよう。また、文科省の科研費の時限付き分科細目に元素戦略が採用されるも、あまり広がりを見せず、残念ながら定着しなかった。並行して、文科省、経産省が連携のもと、合同シンポジウムを開催するとともに、化学、物理学、工学、金属学などの関連学会の年会などで連携して「元素戦略シンポジウム」を開催して PR 活動に力を入れてきた。そのような中で、平成 22 年度から、本 CREST 元素戦略とさきがけ元素戦略が発足した。これによってようやく、将来の科学技術イノベーション創生を目指しつつも、研究者の自由な発想が尊重される、いわば基礎研究プロジェクトとして「元素戦略」が広く研究者の挑戦を受け入れる体制ができ上がった意義は計り知れない。その後、平成 24 年度からは元素戦略拠点形成型プロジェクトが発足し、オールジャパン体制で元素戦略研究を推進する国家プロジェクトが構築されるに至った。

「元素戦略」が旧来の学問分野を越えた新たな学問領域として広く認知され、オールジャパンの連携ネットワークが構築され、人材育成にも貢献していることも強調したい。

また、上述したように、元素戦略 10 周年を迎えて、Newton の特集記事やテレビの池上彰スペシャルでの報道などにより元素戦略が広く一般社会でも認知される段階に来たことの意義は大きい。本 CREST 研究領域の研究成果およびその発展形が、近い将来、社会実装され、元素戦略研究の恩恵が広くいきわたるよう、引き続き邁進したい。

わが国発の元素戦略は、国際的にも認知されてきている。例えば、2015 年 12 月にハワイで開催される「2015 環太平洋化学会議」において、日米合同で元素戦略シンポジウム（日本側代表：細野秀雄さきがけ研究総括）が計画されており、本 CREST 研究領域の関係者も多数参加予定である。

## (3) 今後への期待や展望

本研究領域からは、科学技術イノベーションに寄与する成果が多数生まれていることは上述のとおりであるが、いくつかの研究課題が高く評価され、他事業に接続・発展している例が少なくない。

①栄長チーム（平成 22 年度採択）は、チーム全体の研究課題の成果の発展として【ACCEL】プロジェクト「ダイヤモンド電極の物質科学と応用展開」（5 年間）に採択され、H27 年度から完全に移行。

②永島チーム（平成 23 年度採択）の魚住グループは研究の一部を発展させ、【ACCEL】プロジェクト「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」（5 年間）に移行。

③永島チーム（平成 23 年度採択）の永島グループは「ヒドロシリル化用白金代替触媒の開発と実用的触媒プロセスの構築」が【A-STEP「FS ステージ シーズ顕在化タイプ」】に採択され、H27 年 2 月より 1 年間、CREST 研究課題の成果をもとに、企業と共同で実用化を目指す。

④北川チーム（平成 23 年度採択）は、【NEDO 希少金属代替省エネ材料開発プロジェクト（新規希少金属プロジェクトのための事前検討）】のいわゆる「先導研究」として、NEDO の委託先であるフルヤ金属の再委託先との位置づけで平成 26 年 10 月に採択された。

⑤宝野チーム（平成 23 年度採択）のメンバーは、文部科学省の元素戦略プロジェクト〈拠点形成型〉元素戦略磁性材料研究拠点（ESICMM）にも参画しており、CREST 研究課題による基礎研究の成果を ESICMM における新規磁石開発にフィードバックすることが可能な体制となっている。すでに ESICMM との共同研究によってネオジム磁石よりも優れた磁気特性をもつ新規磁石化合物を発見しており、今後も連携強化による相乗効果が期待される。

このように、CREST 元素戦略研究領域の活動は、将来の科学技術イノベーション創出に資する、あるいは、持続可能社会構築にむけた物質科学を先導する成果をあげるネットワーク型バーチャルラボとして、高く評価されているといえよう。引き続き、メンバー一同、自信と矜持と希望をもって、さらなる研究活動の強化を目指したい。

#### (4) その他

本研究領域の立ち上げを含めて、元素戦略プロジェクト全体の体制構築と予算獲得のために尽力された文科省、JST などの多くの関係者に、深甚の敬意と謝意を表したい。

以上