

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 元素間融合を基軸とする新機能性物質・材料の開発

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

北川 宏(京都大学 大学院理学研究科 教授)

主たる共同研究者

松村 晶(九州大学 大学院工学研究院 教授)

永岡 勝俊(大分大学 工学部 准教授)

古山 通久(九州大学 稲盛フロンティア研究センター 教授)

山室 修(東京大学 物性研究所 准教授)

3. 事後評価結果

○評点:

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント:

本研究課題は、バルク状態では相分離する金属元素の組み合わせを非平衡合成、ナノサイズ化、水素プロセス法などの手法により、原子レベルで固溶化させること(元素間融合)で新しい物質を創成するとともに、その機能発現のメカニズムを金属ナノ粒子の持つ特異な結晶状態や電子状態を用いて解明し、革新的な材料の開発を目指してきた。

本研究課題を通して噴霧スプレー法、CVD法、水素プロセスによる固溶型合金ナノ粒子の合成手法を開発し、固溶ナノ粒子の触媒機能発現に関する基礎科学研究とともに、各種解析手段と理論化学を駆使して、固溶ナノ粒子の生成機構の解明および状態密度解析法により、フェルミ準位近傍の電子状態が機能・特性に寄与することを明確化するなど、学理解明に迫ったことで、当初の研究目標の達成はもとより、期待以上の成果を多々生み出し、新たな研究分野のさらなる発展に繋がる礎を築いたものと、高く評価できる。

中でも特筆すべき成果として以下の3件をあげることができる。まず、Pd/Ru固溶ナノ粒子は最も高価なRhより排ガス浄化触媒機能に優れることとその電子状態がRhに酷似していることを発見した。第二に、水素の吸蔵・放出の繰り返しによりPd/Ptコアシェル構造が固溶型へ遷移することを発見し、理論的アプローチによって独自性の高い汎用的な機構を提案した。第三に、多孔性金属(Cu)錯体に被覆されたPdナノ粒子の水素吸蔵量、吸蔵・放出速度の向上現象を発見し、それが多孔性金属錯体との界面での電荷移動に起因することを提案した。

本研究から、各種の元素間融合によって元素代替および希少元素削減効果につながる成果が得られており、元素戦略の優れた例示とも言える成果である。これらの成果は、120件以上の国際学術誌への掲載、80件にも及ぶ国際会議での招待講演など、その学術面での顕著な国際的な外部発表の実績に加え、40件近い特許出願も行われており、大きな社会的波及効果があるものと高く評価される、

本研究課題はH28年度末に終了予定であったが、研究代表者がH27年度途中にJST-ACCELに採択されたことでCREST研究課題としてはH27年度末をもって早期終了し、H28年度よりACCELへ移行した。これまで

のCREST成果に続き、ACCELでも更なる応用展開と新産業創出につながることを大いに期待する。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：有機合成用鉄触媒の高機能化
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

永島 英夫(九州大学先導物質化学研究所 教授)

主たる共同研究者

魚住 泰広(分子科学研究所 錯体触媒研究部門 教授)

高谷 光(京都大学 化学研究所 准教授)

國信 洋一郎(東京大学 大学院薬学系研究科 特任研究員(准教授相当))

吉戒 直彦(Nanyang Technological University Assistant Professor)

澤村 正也(北海道大学 大学院理学研究院 教授)

笹井 宏明(大阪大学 産業科学研究所 教授)

垣内 史敏(慶應義塾大学 理工学部 教授)

砂田 祐輔(東京大学生産技術研究所 准教授)

3. 事後評価結果

○評点:

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント:

本研究課題では有機合成に用いられてきた白金、パラジウム、ロジウム、ルテニウムなどの貴金属触媒の鉄系触媒への代替(元素代替)、固定化触媒を用いる触媒回収・再利用(元素循環)、触媒効率の向上(元素減量)を目的として、オールジャパンともいえる多くの優れた研究者を2グループに束ね、配位子場制御に基づく鉄触媒の開発(鉄触媒開発グループ)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(プロセス開発グループ)が進められてきた。

まず、アルケンのヒドロシリル化反応に鉄系/コバルト系触媒を開発し、シリコーン化学工業の長年の懸案であった脱白金化に道を開いたことは画期的な成果といえる。また、アルケン水素化への鉄-コバルト触媒の適用、従来のパラジウム触媒では不可能であったクロスカップリングを実現するC-C, C-N結合生成鉄触媒反応の開発、分離回収・再利用可能な原子移動型ラジカル重合用鉄触媒の開発等、種々の反応で鉄触媒の適用可能性を実証するなど、多くの技術ストックを蓄積できた。触媒固定系においては、多点制御配位子を開発し、マトリックス内部での反応基質・反応剤の自己濃縮を鍵とする反応システムを適用することで種々の反応の高性能化に成功しており、特にフロー系での鉄触媒によるアルケンの水素化反応の開発が評価される。さらに、従来の方法では解析が困難であった、溶液中における常磁性鉄系均一触媒の構造決定に重要な役割を果たす、溶液XAFS手法を確立したことは、鉄触媒研究の進展に寄与する、特筆すべき優れた成果である。

これらの数々の成果は、基礎科学の視点からも、また科学技術イノベーションの視点からもきわめて優れており、高く評価するとともに、CRESTとしては比較的大きなユニークなチームに理論化学者、企業アドバイザー、特許専門家が参画する理想的な体制を組織し率いてきた研究代表者のリーダーシップも特筆に値する。多くのレベルの高い原著論文や国際会議での発表、知財戦略に基づいた特許出願、国際シンポジウムの開催や国

際連携に向けた取り組みも高く評価でき、これらの活動は、若手研究者の育成にも大きく寄与しているものと考ええる。

今後は鉄触媒の理論基盤の構築に加え、貴金属触媒の代替を越えた鉄触媒でのみ進む反応の開拓を目指すなど、世界を先導する鉄触媒研究拠点としての今後のさらなる進展に期待する。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 軽元素を活用した機能性電子材料の創出
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

長谷川 哲也 (東京大学 大学院理学系研究科 教授)

主たる共同研究者

島田 敏宏 (北海道大学 大学院工学研究院 教授)

中尾 祥一郎 (神奈川科学技術アカデミー イノベーションセンター 常勤準研究員)

福村 知昭 (東北大学 大学院理学研究科 教授)

3. 事後評価結果

○評点:

B やや劣っている

○総合評価コメント:

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、構造や電子状態の制御を行い、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などの有機電子デバイスへの応用を目指すものである。

パルスレーザーデポジション法に加えて、トポクティック反応による種々の材料合成に取り組んだ結果、可視光応答強誘電体では、 SrTaO_2N にエピタキシャル歪みを用いたO/N配列制御で窒素の50%トランス配置を実現して強誘電特性を発現させたこと、透明導電体では、当初計画には無かったアモルファス亜鉛酸窒化物で $200 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ を超える高い移動度をもつ材料、アナターゼ型TaON単層薄膜合成に成功し、リチウムドーブによる高伝導性の実現や TiO_2 の固溶体薄膜による光学特性制御を実現した。さらに、超伝導体としては、新物質YOの合成と、 Bi^2 正方格子を持つ2次元超伝導体 $\text{Y}_2\text{O}_x\text{Bi}$ を発見したこと等、基礎研究の発展に貢献したと評価できる。しかしながら、成果がいわば散発的な印象がぬぐえず、軽元素導入によるバンドエンジニアリングの系統的なアプローチによる機能性電子材料設計の指導原理創出にまでは至らなかったのが残念である。今後は、検討されてきた薄膜に関する多くの要素技術を集約し、軽元素効果を系統的に整理した上で更に発展させることや、応用に結びつけていくことを期待する。そのため、産業界との連携や国内外の研究者とのネットワーク形成をよりいっそう強化することを勧めたい。例えば、新規に開発した透明導電体は、有機薄膜太陽電池用材料への応用等の可能性があり、これらのデバイス化を太陽電池や有機ELを専門とする研究者と共同で発展させることにより新たな展開に繋がれることが期待できる。本研究により得られた研究成果は着実に論文化(原著論文91件)され、また特許出願も6件なされている。今後は、国際ワークショップ開催等も含めてさらなる成果展開への取り組みを期待する。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ネオジム磁石の高保磁力化
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名 (研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

宝野 和博(物質・材料研究機構 磁性材料ユニット フェロー)

主たる共同研究者

佐久間 昭正(東北大学 大学院工学研究科 教授)

嶋 敏之(東北学院大学 工学総合研究所 教授)

村上 恭和(九州大学 大学院工学研究院 教授)

Thomas Schrefl (Professor, Danube University Krems)

3. 事後評価結果

○評点:

A 優れている

○総合評価コメント:

本研究課題は希少元素であるジスプロシウムを使わずに(Dyフリー)高保磁力のネオジム磁石を開発することを目標に、その微細組織解析、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、および実際の微細組織を反映したマイクロマグネティクスシミュレーションを相補的に活用し研究を進めてきた。研究チームは、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、電子ホログラフィー解析グループから構成されており、多角的に高性能磁石の研究を推進できる世界的に見てもトップレベルの強力な布陣を構築した。

本研究開始前に、従来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すでに見出しており、本研究開始後には、組成分析、モデル実験、理論計算など多角的な研究を進め、その微細構造と保磁力との関連性から、この粒界層の特性を明らかにした。すなわち、主相のcおよびab面に接する粒界層が異なることを見出し、さらに高保磁力を実現するためにはab面に接する粒界層を非磁性化する必要があることを提案した。この高保磁力を実現できる粒界層構造を見出したことは、原著論文(55件)として公表された学術的に大きな発見であると同時に実用につながるものであり、高く評価する。なかでも、本研究で3nmの粒界相の磁化を電子線ホログラフィー法により初めて実測した解析技術の貢献が大きい。

なお、本課題の研究成果である膨張拘束粒界拡散によって微細構造を実現させた熱間加工磁石では、Dyフリー条件では従来のDy4wt%含有焼結磁石のレベルにまで到達し、また、研究開始時にあげた目標値[室温保磁力 30kOe(約2.4MA/m), 最大エネルギー積 40MGOe(約320kJ/m³), 200°Cでの保磁力 10kOe(約0.8MA/m)]に対しては、実験結果から推定すると、Dy量を1wt%程度まで低減させた熱間加工磁石で実現可能と考えられる。本研究成果によるDy量削減の効果は大きく、ほぼ期待通りの成果が得られていると判断するとともに、今後の更なる進展があるものと期待する。

今後はJST産学共創型基礎基盤研究技術テーマ「革新的次世代高性能磁石創製の指針構築」、及び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)において、引き続き、これらの研究が進展することを期待する。