

## CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」 研究領域中間評価報告書

### 総合所見

(コンセプトの独自性)

元素戦略のコンセプトの下、物質・材料の革新的機能の創出という目標達成のために、「元素資源問題はサイエンスで解決する」を標榜する本研究領域の基礎学理を重視した研究総括の方針は、真のイノベーションをもたらす挑戦である。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ことを目標とし、魅力的な研究課題を設定している。無機材料、有機材料、それらのハイブリッドを用い、希少元素を用いない永久磁石、元素間融合による新機能、バイオ由来金属酸化物の機能開発、導電性ダイヤモンドの環境デバイス、構造材料設計、有機強誘電体、有機二次電池、等の研究課題を提案した研究者が採択され、優れた研究成果を出している。機能発現の観点から、元素集合体の「電子状態」「原子配列」「分子構造」「磁区構造」等の制御に視点を置いており、ナノ材料作製技術法の開発や指針の体系化を図っている。

研究総括の戦略やビジョンは明確で、参画した研究者はそれらを十分に熟知している。

(各チームのアクティビティと領域マネジメント)

研究領域は、無機材料8チーム(微生物由来も含め)、有機機能材料2チーム、有機合成用機能触媒1チーム、理論1チームの全12チームで構成されている。各研究チームは、異なる研究機関に所属する3~8研究グループにより構成される。十分に優れた研究成果を有する研究代表者のもとに、アクティブな研究者が配置された適切なチーム形態となっている。個々の研究チームは中間評価段階として極めて優れたものを含め、全体として順調に進展している。今後、異分野チーム間の連携ネットワークを活発化にすることにより、従来技術の延長線上にない革新的なアイデアによる科学技術への貢献と科学技術イノベーション創出への貢献が期待される。産学官からのトップクラスの領域アドバイザーも、ほぼ選定課題をカバーする体制を整えている。

(研究成果の状況)

既に優れた研究成果を持つ研究集団を母体として本研究領域に参加しており、領域全体で論文508報、特許60件、口頭発表1,440件が報告されている。発表論文数の少ないチームもあるが、「元素資源問題をサイエンスで解決する」とのモットーで全員がまとまって研究を進めていると判断される。Angew. Chem, Int. Ed.、J. Am. Chem. Soc.、Nature Commun.、Nature Mat. 他著名なジャーナルへの論文や、研究成果を反映した数件の受賞など、優れており、更にこの状況を進めてほしい。アカデミアのみならず産業界や一般社会も矚目する「元素戦略材料」の設計提案・作製技術・デバイスを期待する。

(科学技術イノベーション)

本研究領域では、産業や社会への展開・実装の見通しなどを指向して研究を推進しており、科学技術イノベーションに寄与する成果や知的財産権取得への期待が出来る。一方で、工業化社会から知識社会へと産業構造が転換しつつある我が国の産業としては、高い利益

率を生むような独創的な元素戦略に関する材料開発が不可欠である。従来の研究の延長線上にある冶金学的・試行錯誤的手法での研究開発だけでは、世界をリードし、大きな利益を生み出すような独創的な新元素戦略の構築は難しい。従って、試行錯誤的な手法ではなく、基礎科学に立脚した原理原則に基づき、基礎研究から応用開発研究、事業化へと繋いでいく連続的なイノベーションを可能にする、新しい方向性を開拓することが不可欠である。マテリアル→デバイス→システム・ソフトウェアという 3 階層を俯瞰的に眺めて、それぞれの研究課題でインパクトのあるブレークスルーを成し遂げるため、各構成チームからなる「点」からチーム間の「線」に繋いで行き、連続的なイノベーションを可能にしていくように、研究課題を統合し先鋭化することが必要である。イノベーションを熟知した領域アドバイザーも多にいる本研究領域が、「元素資源問題をサイエンス・イノベーションで解決する」ことを期待する。

以上を総括し、本研究領域は総合的に優れていると評価できる。

## 1. 研究領域としての研究マネジメントの状況

### (研究課題の構成)

本研究領域は、資源の乏しい我が国が持続的に繁栄する上で緊急かつ不可避の天然元素資源問題に対して「元素資源問題はサイエンスで解決する」を旗印に、我が国の超一流科学者を結集して問題解決に取り組もうとするものである。「代替」、「減量」、「循環」、「規制」の 4 戦略のもと、元素の有効活用に基づく革新的機能材料の創成を目指す本研究領域の目標達成のため、研究課題はバランスよく選考されている。元素活用のための素材としては、金属材料、無機酸化物、炭素材料、有機材料、バイオ材料といった対象が網羅され、新機能の創出を目指して合成、計測、理論計算の研究者が配置されている。分野、所属等も偏りなくバランスが取れた強力な布陣となっている。

### (アドバイザー構成)

本研究領域は我が国の存続に関わる経済の根源をなす産業用機械、輸送機器、情報デバイスに不可欠の元素の中で、特に貴金属、レアメタル、希土類などが特異的に有する機能を代替する化合物の合成方法、あるいはこれらの元素の減量化や循環の効率化など、バランスよく網羅できるような領域アドバイザーを結集し、研究課題を採択している。領域アドバイザーには、産学官から多様な機関に所属するトップクラスの専門家 13 名が参画している。ただ、現時点でのアドバイザーは第 1 期採択の研究課題に対応した構成であり、第 2 期、3 期に対応するアドバイザーや、各課題の進展に即したアドバイザーの補強があつてよい。

### (研究領域マネジメント)

研究進捗状況の把握と評価のため、チーム研究進捗報告会、サイトビジット、チーム内勉強会への研究総括の主体的な出席、関連分野の領域アドバイザーへの参加呼びかけ、領域全体会議の開催、さきがけとの合同ミーティング、公開シンポジウムなどが試みられておりバーチャル・ネットワーク型研究所としての活動が十分になされている。研究費配分についても、進捗状況の把握と評価がうまく進められており、研究開始後、年度毎に研究

計画および研究費の見直し、増額要求等の提出、研究領域内の総括裁量経費からの重点配分など工夫がなされている。無機チームは、人材、チーム数も多く、また互いに理解し易く、優れた領域アドバイザーが配置されており、情報交換や新規分野開拓に大きな進展が現れている。有機合成用機能触媒チームには優れた 8 グループが参加しており、また我が国を代表する有機合成の研究者である研究総括・領域アドバイザーの下、オールジャパン体制が組まれている。有機機能材料に優れた領域アドバイザーも配置しているが、第 3 期採択の有機電池を有機材料・デバイスの面からアドバイスする人材があるとさらによい。また、微生物由来無機材料は非常に魅力的な研究課題であるので、微生物関連のアドバイザーの補強があるとよい。第 3 期採択の理論チームが他の実験チームに働きかけ、チーム間のより緊密な連携・共同研究ができる体制を作ると、「点」から「線・網」へのより一層の展開が期待できる。また、人材育成も着々と成果を蓄積している。「元素戦略」に沿って、多くの優れた研究成果が著名なジャーナルに多く報告されており、これは、優れたマネジメントの証である。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは優れていると評価できる。

## 2. 研究領域としての戦略目標の達成に資する成果

### (1) 得られた研究成果の科学技術への貢献

全体的に優れた研究成果があり、科学技術への貢献は大きい。特筆すべき研究成果は、ダイヤモンドを用いた環境改善デバイス作製、異常原子価材料でのハーフメタルやソフトケミストリーでの無機機能材料の作製、高温有機強誘電体の作製、元素間融合と水素吸蔵、高仕事関数透明導電体の開発、レアアースを使わない高性能永久磁石、Dy フリーの高保磁力ネオジム磁石などがある。優れた人材を配した有機合成用機能触媒チームから、入手容易な遷移金属（鉄族元素など）を用いた斬新な精密分子触媒設計を期待したい。一方で、世界を揺るがすようなインパクトのある独創的な研究成果という視点からは、現時点において、従来のバルクや界面での研究開発の延長線上にあり、インパクトが十分とは言えないので、理論、シミュレーション、合成、計測・評価、デザインなど異分野の力を結集してブレークスルーを実現する研究成果が今後期待される。

以上により、研究成果の科学技術への貢献については、高い水準が期待できると評価できる。

### (2) 研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献

本研究領域が発足して、研究体制も整いチーム内外の交流も活発化し、順調に成果が出ている。上記した、ダイヤモンドを用いた環境改善デバイス作製、ソフトケミストリーでの無機機能材料の作製、高温有機強誘電体、ナノ粒子/金属有機構造体(MOF)、鉄触媒、軽元素機能性電子材料、ネオジム永久磁石などが科学技術イノベーションに向けた成果としてあげられる。本研究領域で対象とする材料が科学技術イノベーションに貢献するためには、多様な材料と構造を積極的に取り込み、数値目標を立て、理論と実験チーム間の連携を一段と強化する仕組みを再構築することが望まれる。これらの成果内容において、元素集合

体の「電子状態」「原子配列」「分子構造」「磁区構造」等の制御を目指したナノ材料作製技術の開発や指針を明確化すると、今後の開発展開は容易になると期待できる。

以上により、研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献については、高い水準が期待できると評価できる。

### 3. その他

元素戦略を冠するプロジェクトは、文部科学省の研究拠点形成型プロジェクトやNEDOの希少金属代替材料開発プロジェクトなど他にも活発に行われており、本研究領域もそれらと密に連携しながら進められているようで、オールジャパン体制で元素戦略を推進することは、相乗効果を生むために肝要である。一方、他プロジェクトにはできない研究課題や研究方針を本研究領域が推進するという観点、特に、基礎学理を重視する姿勢は素晴らしく、そこからの偉大なブレークスルーの誕生を期待する。

従来型のバルクや界面での研究視点を超え、ボトムアップやトップダウンのナノサイエンスやナノテクノロジーを積極的に利用し、自己組織化ナノ超構造などの創製法の開発とサイエンスの確立が必要である。これにより、新機能や高次機能を創出するための、他の研究分野と差別化する新規性のある元素戦略の新しい研究分野を開拓することを期待する。

微生物由来の構造体や有機ラジカル材料による太陽電池、二次電池への応用は新規材料として大変興味深い。ただし、有機材料は多様な分子構造とモルフォロジーなどを持つため、それらの成果が直ぐに科学技術イノベーションに結びつくかどうかは、現時点では不明である。これらの分野に詳しい領域アドバイザーを含めることでより広範囲な科学技術イノベーションを期待する。

以上