

CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」
研究領域中間評価報告書

1. 研究領域としての成果について

(1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

本研究領域は、戦略目標「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」の下、強い実験に理論、計算、データ科学を融合させるという方針を打ち出し、材料研究の新しいスタイルを提示し、社会的ニーズが高いながら未だに達成されていない材料や機能を開発することで、その有用性を実証することに狙いを定めた。加えて、実用化されてこそ「材料」との信念の下、研究成果が産業界に展開され、開発した材料・手法が実用に供されること、逆に実用材料を生み出すための研究スタイルを明示することを目指すと同時に、日本の将来を担う若手研究者の力を引き出すチャレンジングな試みを行って若手育成をも重視した。

以下に、本研究領域のマネジメントの状況に関して、評価コメントを述べる。

① 研究課題の選考方針

研究総括が掲げる選考方針に関する5つの観点は、材料（モノ）を生み出せる研究スタイルとして、旧態依然の材料研究の変革を促すものであり、戦略目標を達成するための方針として高く評価できる。実験に理論・計算・データ科学を融合・連携させ、新しい研究スタイルで革新的な材料を開発しようとする研究課題が採択され、当該分野の大きな変革を促すものとして期待できる。また、使われてこそ「材料」である、との認識で、従来の延長でない「革新材料」を「実用材料」として使える展望のあるものを生み出す観点からの選考となっていることは「材料」に対する研究総括のコンセプトが反映されていて近い将来の実用化が期待される。採択された13研究課題のポートフォリオは、＜有機、半導体、金属などの材料分野＞と＜合成、分析、計算、データ科学の手法＞のマトリクスを上手くカバーしており、総合的なシナジー効果が十分期待できる。所属大学・研究機関も多岐に亘っており、年齢構成などダイバーシティにも配慮されている。特に平均年齢が採択時45.3歳とCRESTとしてはかなり若く、次世代の材料開発のリーダー育成という研究総括の意図に沿っている点も非常に興味深く、高く評価できる。

② 研究者の専門分野

研究領域の各サブグループに関しては、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の専門家と実験・合成・評価の専門家が相互に連携して研究課題を遂行しており、適切に研究者が割り当てられている。同じ学会で議論される狭い専門分野やターゲットに閉じず、得られた研究成果を課題間で共有・交換しながらそれぞれの研究課題を追求できるようバランスよく採択そして実施されている。ただし、本研究領域には高分子材料の課題や界面化学の課題等も選ばれてはいるものの、無機材料の研究課題が占める割合が多く、もう少し有機材料系へもバランスをとっても良かったのではないかと印象は受ける。

③領域アドバイザーの構成

領域アドバイザー(AD)については固体材料、ソフトマテリアル等の各種材料、エレクトロニクス、データサイエンスの専門家が揃い、革新材料創出のための方法論構築という目標に対して適切な意見・アドバイス・成果のチェックが望める領域ADの布陣になっている。企業出身の領域ADが3名、ベンチャー企業を経営する領域ADが1名含まれ、実用化までを見据える場合に考慮すべき材料コスト・量産性・知財等の視点も配慮されているが、例えばこれら領域ADと研究者の直接的な意見交換の機会を増やす、企業関係者を研究セミナーに招待する、企業との共同研究を促すなど、今後の研究期間の後半に向けて考慮頂けることを期待する。

一方で、領域運営アドバイザーとして、革新材料の発明や開発で起業化、収益化に大きな貢献をされた佐川氏と吉野氏、加えて知的財産分野のプロである浅見氏の3名を参画させるなど、産業に資する革新材料の創成に向けて様々な配慮が感じられる。新しい研究スタイルを涵養し、共創活動を促すためと考えられ、また上記成果実用化の促進の上でも、この領域運営アドバイザー制は、13研究課題の研究代表者への意識付けとして大変有意義であり、研究総括の強いリーダーシップが適切に機能していると高く評価できる。

④運営方針

研究領域の運営については、全体計画の確認と修正はサイトビジットにおいて、研究領域のフォローは領域会議、個別指導、課題中間評価において、さらに若手育成は若手発表の奨励と若手ファンドにより適切に行われている。サイトビジットではCREST研究の立ち上がり状況を確認するだけでなく、目指す材料研究の「革新」の中身である成果イメージを研究総括と共有するなど細やかな配慮がなされている。年2回の領域会議では、領域ADから各発表に対するレーティング結果・コメントと研究総括のコメントを数回にわたって研究代表者にフィードバックし、研究成果の評価に関する領域AD間、研究担当者-領域AD間の認識差異が生じないような工夫がなされている。個別指導では、実際に、第一期のあるチームの研究進捗を勘案・憂慮し、研究計画の一部を中止し、より研究成果が期待できる理論研究に注力させるなど、実質的に踏み込む形で深く関わることで、大きな研究成果が得られている。

⑤指導・推進

研究の進め方への指導という視点では、サイトビジットでの領域ADとの活発な議論で、新しい評価手法が提案され、フィージビリティスタディを行った結果、有効性が認められたことから、総括裁量経費からの支援で新グループを追加するなど、戦略目標の達成に向けて適切かつ活力あるマネジメントと手厚い支援がなされている。例えば、採択直後に計画変更の相談の場が持たれており、課題の中間評価では、戦略目標へのより具体的な方向も提示されている。これらにより、世界中で多く見られる従来型研究の単なる加速化に留まる単純連携とは一線を画し、トライ&エラーによる従来型の研究からの飛躍を可能にする方策が採られていることは、今後期待できる。また、開発された材料の実用化に向けて、JST知的

財産マネジメント推進部との連携を強化するなど細かな配慮もなされている。

一方、異分野との融合について、現時点ではまだ目に見える連携は少ないが、物理学会でのシンポジウム企画や新たな研究コミュニティの創成に繋がる試みが行われており、今後とも継続されることを望む。

⑥研究費配分

総括裁量経費として目的を明確にした追加配分や、若手研究者への研究費配分が為されている。第三期ではポートフォリオを考慮して一部繰り上げ採択が行われ、また研究の進捗に応じて研究費の（減額ではなく）増額を実施するなど実態に即した encouraging な運営がなされている。2021 年度後半からチーム間連携を総括裁量経費などから予算を用意し、提案募集という形で共同研究を促進するなど、戦略目標達成に向けて様々な効果的な取り組みがなされていることは評価できる。

⑦人材育成

若手研究支援の予算枠を総括裁量経費の中に設定し、申請された提案書を審査し、若手研究者が自由に使える予算を配賦し、課題中間評価時の評価項目に「若手育成の状況」を加えるなど、次世代のリーダー育成にも非常に意義のある取り組みを実施しており、高く評価できる。こうした取り組みの結果として、若手研究者による寄与が研究総括のコメントに明確に現れているケースも多く、また論文を見れば各研究課題が若手研究者の尽力により可能になっている部分も少なくない。従って人材育成という面では、研究代表者だけでなく若手研究者の飛躍に関しても、研究期間中はもとより、本研究領域終了後においても大いに期待できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況

①科学的・技術的な観点からの貢献

単に理論、計算、データ科学による研究開発の加速だけでなく、日本の強みである実験を主軸としてそれに世界の新しい潮流であるデータ科学などを取り入れて研究スタイルの変革を促すという本研究領域の斬新な取り組みは、時宜を得たものであり、日本の科学技術への貢献は極めて大きい。特に、データ科学の活用による高スループット計算や合成/分析の自動化による高スループット実験/プロセス・インフォマティクスの手法は、研究領域の内外に良い波及効果を生み出すことが期待できる。

中間評価の時点で、国際論文 238 報のうち、著名な雑誌にも多数発表されてきており、以下に示すようないくつかの注目される研究成果が具体的に得られている。

- ・宇佐美チームは、粒界特性の機械学習モデルなど多結晶材料情報学を用いた一般粒界物性理論の研究基盤を構築し、擬単結晶シリコンインゴットの高品質化を実証した。
- ・大場チームは、もっとも不確かな点をサンプリングすることで、効率的に相境界を決定する手法・実験提案アプリを開発しており、太陽電池用 ZnSiP_2 の成膜条件・相図作成を実現している。

- ・清水チームは、多様な触媒材料の表面の電子状態・反応性の理論計算を可能にする方法論を開発、従来材料の欠点である炭素析出を回避する材料設計により、エチレン・プロピレン選択性と触媒寿命を大幅に改善させ、実用化が検討されつつある。
- ・中嶋チームは、熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御の解析に必須であるネットワークのテンション・テンソルという新しい数学概念を提出し、半導体の後工程で重要な革新的高分子材料の開発に新たな期待が生まれた。この事例などは、異分野交流の顕著な例といえる。
- ・水上チームは、界面構造を考慮したトンネル磁気抵抗ヘテロ接合の物性データベースを構築し、元素探索の範囲を拡大することで、オリジナルな二元系・三元系の未踏の磁性材料を提案している。
- ・谷山チームは、強磁性体/強誘電体の界面マルチフェロイク材料に関し磁気-電気結合係数を実験および第一原理計算とベイズ最適化により系統的に解析し、Heusler 合金を強磁性体とする界面マルチフェロイク材料系で世界最高の磁気-電気結合係数を達成した。
- ・長谷川チームは、クライオ TEM と機械学習を活用した段階的結晶構造予測の新手法を開発し、10nm レベルの有機半導体薄膜の構造解析を実現するとともに、新しい塗布製膜技術による有機半導体塗布型 TFT で高急峻スイッチングを実現している。
- ・山崎チームは、プロトン伝導度の予測を可能にする新しい記述子を発見、機械学習や第一原理計算を活用した物性予測手法を開発し、プロトン伝導度を最大化するドーパントの選択指針を提案した。効率の良い機械学習の手法を提案したことは、産業応用上もインパクトが大きい。
- ・能崎チームは、傾斜材料を用いて新原理「電流渦によるスピン流生成」を実現しており、Al/Si 系で Pt の 10 倍以上のスピントルクスイッチングを実証した成果は高く評価される。

これらの研究に関しては、引き続き研究期間の後半戦に向けて、一層の拍車がかかることを期待したい。また、本研究領域内における共同研究がやや低調、という印象を受けたが、これについても研究総括の強い指導で現在 8 件の共同研究にまで広がっているとのことである。ポートフォリオを考慮してさらに共同研究を拡大し、実質的に成果向上をめざして頂きたい。

一方で、研究総括が言われているように、本当に革新的材料開発に結び付いたか、産業実装が進んでいるかが今後益々重要となる。適切な研究領域のマネジメントにより、科学技術イノベーションの創出への敷居が下げられている。学会発表や領域内・課題内の各種ミーティングが積極的になされており、遅滞なく国際的にも高い水準のイノベーション創出にもつながると期待できる。

しかしながら、新手法・新材料の開発成功を立証するのは論文であり、特許である。真に革新材料が実現すればおのずと高インパクトの雑誌に掲載される論文となるはずである。

すでに多くの論文を著名学術誌に投稿しているチームもあるが、現状では、各チームの規模から考えると少し物足りない研究チームがいくつかある。特に 3 期生で論文発表が出遅れているチームがかなり見受けられるが、研究総括からはすでに対策を講じてある、とのことであり、今後の展開・巻き返しを大いに期待している。また、国際共同研究がやや少ない印象がある。MRM2021 でシンポジウム A-4 を開催している点は評価できるが、国際的に認知されるためには、積極的に国際共同研究を行い、合同で国際シンポジウムを開催するなどのグローバル戦略を示して頂きたい。

一方で、若手研究者に対して積極的に領域会議にて発表の機会を与えることや、優れた若手研究者への追加配分により、ともすれば顔が見えない若手研究者の活躍の場が広がっていることは極めて重要な研究環境の創出である。データ科学との融合を目指したこの領域はまさに若手が実力を発揮できる絶好の舞台である。今後の CREST や後継事業の芽を育て、更なる科学技術イノベーションに繋がることを大いに期待する。

②社会的・経済的な観点からの貢献

研究領域の目的として学術的な目的に加えて、材料・デバイスの実用化が明確に掲げられ、それらをシームレスに繋ぐように各採択課題の実施内容の修正が適宜行われている。単なる材料特性の向上に留まらず量産化へ繋げるための各採択課題の選択肢や提言も適宜与えられており、学術論文などでの発表を見ても一流なものが多い。

13 の研究課題はいずれも社会的・経済的価値の創造に繋がるものであると考えており、上述したように本研究領域の主目的が社会実装を目指す革新的実用材料であることを考えると、特許出願が国内 12 件、国際 4 件と特許出願活動の出遅れが気になる。この中間評価の時点においては、真に革新的で社会実装も視野に入る「材料」の発見にはまだ至っていないように見える。また、一部に企業連携が進んでいるチームもあるが、産業化への展望が開けたものも見えておらず、やや懸念される。

研究総括による企業連携促進や知的財産取得の奨励などは理解できるが、中間評価後は、産業界との連携を重視して、本研究領域から生まれた科学技術イノベーション創成が、社会的・経済的な価値に繋がることを期待する。そのためには、例えば、粒界と電気特性の相関などの機能向上など、新機能創出をアピールして企業が飛びつくような努力が必要である。産業界からの領域アドバイザーを招聘・活用して、知的財産取得と産業や社会への展開についても具体的に進めて頂きたい。

加えて、ベンチャーキャピタルの支援を受けて設立するスタートアップにプロジェクトとして参画し研究成果の実用化をさらに推進させた経験を有する人を研究者セミナーや領域会議に招聘することなども研究領域の運営の一つのあり方として念頭に入れて頂き、鋭意推進されることを期待している。

全体として、目先の業績に捕らわれることを良しとしない、革新的材料研究の新スタイルの構築をまっすぐに目指した領域運営の姿勢には好感が持てる。事実、AI と DFT 計算を結合させるマテリアルズ・インフォマティクス、多結晶材料情報学、およびポリマー化学のト

ポロジーやナノ機械物性における新しい数学的取り扱いなどは、今後多くの分野での利用が期待でき、日本のお家芸である材料研究の革新的発展に寄与できる種が育ってきているので、後半に向けては更なる飛躍を切に期待する。

以上より、本研究領域は戦略目標の達成に資する成果の創出に十分な貢献が期待できると評価できる。

以上。