

【戦略的創造研究推進事業チーム型研究（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

研究総括：細野 秀雄

令和4年3月1日

# 目次

- 1 研究領域の概要：戦略目標
- 2 研究総括のねらい
- 3 研究課題の選考／研究費の配賦
- 4 領域アドバイザー／運営アドバイザー
- 5 研究領域の運営
- 6 研究の進捗状況
- 7 今後の期待・展望／所感

# 1. 研究領域の概要：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」

[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/houdou/29/03/attach/1383122.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/29/03/attach/1383122.htm)

### ■ 達成目標

有機・無機問わず様々な材料を対象とし、物質合成や材料組織制御における実験を基盤に、データ科学等との融合を図ることで、革新的材料開発へとつながる手法の構築を目的とする。

- 実在物質の挙動予測モデル構築とそれを用いた物質の合成
- 材料の組織制御モデル構築とそれを用いた材料の開発

# 日本の材料研究に対する現状認識

- 日本の産業競争力の強みである製造業を支えてきたのは「材料研究」の強さ。しかし、近年その優位性が急速に失われつつある。
- 我が国は、材料分野で際立った業績を有する研究者を数多く輩出してきたが、人材の伸び悩みが顕在化
- インフォマティクス技術や計算機シミュレーションなどが急速に進展
- 米国Materials Genome Initiativeなど、海外の材料開発プロジェクトが先行
- 各国の研究開発投資額や研究人材が増大する中、我が国らしい研究開発手法自体の革新が必要

## 2. 研究総括の狙い

- **強い実験科学**と、理論科学・計算科学・データ科学などと有機的に融合・連携させた**新しいスタイル**の革新的な材料の開発研究手法を生み出す。
- 物質科学にとどまらず、**社会的インパクトのある「材料」**をターゲットとし、中間評価後には**産業界と連携**する。
- 材料系、プロセスは限定しない。無機系、有機系、金属系、機能材料、構造材料、など幅広い分野を対象とする。
- 理論、計算、データ科学による研究開発の**加速だけでなく**、従来研究の延長と違う**革新性の要素**を明確に打ち出す。
- 材料研究の**フロンティア**を開拓するに**ふさわしいチーム**を編成し**有効な協働の形**を示す。
- **材料分野のリーダー**と**若手研究者**の育成を促進する。

# 3. 研究課題の選考・研究費の配賦

採択年度	応募件数	書類選考 採択件数	面接選考 採択件数	採択倍率
① 2017年度	60	12	5	12.0
② 2018年度	42	9	4	10.5
③ 2019年度	28	8	4	7.0
<b>合計</b>	<b>130</b>	<b>36</b>	<b>13</b>	<b>10.0</b>

## ○選考方針（領域要件評価の観点）

- (1) 提案されている材料開発手法は斬新か
- (2) 研究のアウトプットである重要な「材料」が具体的に明記されているか
- (3) 強い実験と計算科学やデータ科学・数学的手法が有機的に連携したチーム編成か
- (4) チーム体制の独自性と強み（特に実験研究者）が、明記されているか
- (5) 研究代表者が次世代の材料開発を担うリーダーとなる人材として適切であるか

# 課題ポートフォリオ

2017年  
採択

2018年  
採択

2019年  
採択

有機

無機

金属

他

磁気デバイス・装置

傾斜スピン材料  
(能崎T)

界面マルチフェロイク材料  
(谷山T)

磁気抵抗素子材料  
(水上T)

電子デバイス

塗布型電子材料  
(長谷川T)

光デバイス

蛍光体材料  
(武田T)

誘電体半導体  
(大場T)

エネルギーデバイス

無機結晶の大規模探索  
(桂T)

PV用多結晶シリコン  
(宇佐美T)

多結晶超伝導材料・磁石  
(山本T)

化学プロセス

プロトン伝導性無機化合物  
(山崎T)

固体触媒  
(清水T)


構造材・素材

TPEタブポリマー  
(中嶋T)

ネットワークポリマー  
(内藤T)





- ・材料分野は無機・金属系が大半、応用分野は広くカバー
- ・スピン3件は多; 金属系の構造材は無し。
- ・13チーム、51グループ、200名の構成
- ・研究代表者年齢(採択時): 平均45.3歳

# 研究費① 2017年度採択課題 (5件)





研究代表者	所属・役職 (中間評価時)	研究課題名	研究費 (百万円)
宇佐美徳隆 	名古屋大学 教授	多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立とスマートシリコンインゴットの創製	344
大場史康 	東京工業大学 教授	データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓	352
清水研一 	北海道大学 教授	触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究	327
中嶋健 	東京工業大学 教授	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	306
水上成美 	東北大学 教授	計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出	336



# 研究費② 2018年度採択課題 (4件)

研究代表者	所属・役職 (中間評価時)	研究課題名	研究費 (百万円)
谷山智康 	名古屋大学 教授	界面マルチフェロイク材料の創製	340
長谷川達生 	東京大学 教授	実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発	354
山崎仁丈 	九州大学 教授	実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製	359
山本明保 	東京農工大学 准教授	超伝導インフォマティクスに基づく多結晶型超伝導材料・磁石の開発	334

# 研究費③ 2019年度採択課題 (4件)

研究代表者	所属・役職 (中間評価時)	研究課題名	研究費 (百万円)
桂ゆかり 	物質・材料研究機構 主任研究員	新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発	237
武田隆史 	物質・材料研究機構 グループリーダー	実験とデータ科学の循環による蛍光体開発	250
内藤昌信 	物質・材料研究機構 グループリーダー	データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発	313
能崎幸雄 	慶應義塾大学 教授	ナノ構造制御と計算科学を融合した傾斜材料開発とスピンデバイス応用	325

# 研究費配賦のマネジメント

- 採択時の配賦予定総額を（当時）標準の2.7億円ではなく**3億円**とした（採択チーム数を調整して対応）。
- ただし桂チーム／武田チームは、研究提案書の内容に応じ、採択時の配賦予定総額を2億円／2.5億円に設定、研究の進捗状況に応じて研究費の増額を検討することとした。
- 国際強化支援、出産・育児・介護支援のための予算を申請に応じ各チームに配賦した。
- 想定外の研究機器の修理・購入等に係る予算を申請に応じ各チームに配賦した。
- 長谷川チームのサイトビジットでの議論を基に**極薄有機結晶構造解析（クライオTEM）の技術の必要性**を認識。2020年度、長谷川チームに新規の研究グループ（米倉グループ）を設置し、その研究予算を総括裁量経費より配賦した。
- 各チームの**若手研究者の研究活動を支援する予算**を、領域会議での発表などの審査結果に基づき総括裁量経費より配賦（継続中）。
- 総括裁量経費より、2017年度採択課題・2018年度については課題中間評価の結果に応じ研究加速のための予算を配賦した。2019年度採択課題についても同様の措置を講ずる予定。
- チーム間連携を促進・支援するため、総括裁量経費より**共同研究促進予算**を支出（2022年度・2023年度予算に配賦）。

# 4. 領域アドバイザー/運営アドバイザー

## ■ 領域アドバイザー (13名:(元)産業界3名、女性1名)

氏名	現所属・職位	専門
石田 清仁	東北大学・名誉教授	金属材料学、組織制御学
伊藤 耕三	東京大学・教授	高分子材料学、超分子化学
伊藤 聡	計算科学振興財団・チーフコーディネータ	計算物質科学
大橋 直樹	物質・材料研究機構・拠点長	無機電子機能材料
楠 美智子	名古屋大学・名誉教授	応用物性・結晶工学、無機材料・物性、構造・機能材料
高田 昌樹	東北大学・教授	放射光科学
津田 宏治	東京大学・教授	機械学習・バイオインフォマティクス
時任 静士	山形大学・卓越研究教授	有機EL材料、有機トランジスタ、フレキシブルディスプレイ技術
中川 淳一	東京大学・特任教授	数理科学/逆問題、鉄鋼製造プロセスシミュレーション、金属結晶構造学

山口 周	大学改革支援・学位授与機構・ 特任教授	固体化学、欠陥化学、固体イオニクス、 材料の熱力学
山崎 聡	金沢大学・特任教授（産総研）	物理、材料科学、電子デバイス
吉田 博	東京大学・特任研究員 （阪大名誉教授）	物性理論、計算機マテリアルデザイン
湯浅 新治	産業技術総合研究所・ 研究センター長	磁気工学、金属薄膜、スピントロニクス

退任： 稲垣伸二（豊田中研）、寺倉清之（NIMS）

## ■ 運営アドバイザー（産業界3名）

氏名	所属・職位	専門
浅見 正弘	日本知的財産協会・参与	無機溶液化学、X線構造解析、 材料化学、知財
佐川 真人	大同特殊鋼(株)・顧問	永久磁石材料
吉野 彰	旭化成(株)・名誉フェロー	電気化学、LIB

# アドバイザー構成と方針

- 本研究領域は材料分野を限定しないため、有機（伊藤（耕）氏、稲垣氏（途中退任）、時任氏）、無機・半導体（伊藤（聡）氏、大橋氏、楠氏、山崎氏）、金属（石田氏、中川氏）、触媒・イオニクス（山口氏）を広くカバーできるように、それぞれの専門家を選定。
- 実験に融合させる研究手法としてデータ科学・計算科学（伊藤（聡）氏、津田氏、中川氏、吉田氏、寺倉氏（途中退任））、および先端分析技術（高田氏）を重視するため、それぞれの専門家を選定。
- 産業界との連携を重視するため、企業出身の領域アドバイザー（伊藤（聡）氏、中川氏、時任氏、稲垣氏(途中退任)）を確保。
- 企業でインパクトのある材料を実用化した実績を有する方を運営アドバイザーにお迎えした（浅見氏、佐川氏、吉野氏）。
- 三期にわたる採択の結果、スピントロニクスのデバイス課題の割合が増したことから、この分野の指導者として1名を領域アドバイザーに追加した（湯浅氏）。

# 5. 研究領域の運営

## ■ 概要

目的	手段	内容
全体計画の確認・修正	サイトビジット	採択翌年度の上期に研究代表者を関係ADと訪問。研究の立上がり状況を確認、成果イメージ・課題を共有、必要に応じ計画修正を依頼。
研究進捗のフォロー	領域会議	基本、年2回実施。当日の議論に加えADコメントをフィードバック、研究チームで議論してもらい回答を回収。レーティング結果は総括/ADで共有。
	個別指導	進捗/ニーズの変化により研究項目を見直し、必要に応じ研究グループを追加。年次計画書につき、総括コメント（期待）を送付。
	課題中間評価	<ul style="list-style-type: none"><li>・ Pj後半の課題/成果拡大の方策を議論。</li><li>・ Pj加速ファンドを配賦。</li></ul>
若手の育成	若手発表 若手ファンド	領域会議にて各チーム1名ずつ若手に研究紹介をしてもらい、優れた提案には若手ファンド（期間2年まで）を提供。

目的	手段	内容
新型コロナ禍でのコミュニケーション確保	領域セミナーの開催	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 2～3時間程度のオンライン会議を開催。</li> <li>・ 基本的にテーマは、研究チームの要望に応じて設定。</li> </ul>
チーム間連携による成果拡大	共同研究ファンド	2022年度に提案を募集・審査し、2023～2024年度（領域6・7年次）の研究費に配賦。
アウトリーチ	学会/展示会での報告	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ 日本物理学会、MRM2021でシンポジウム開催</li> <li>・ CEATEC展示</li> </ul>
産業界連携の促進	領域セミナー/個別ミーティング	JST産連・NEDO-Pjの紹介 最終年度課題のフォロー (2023/2024/2025年度)



# 領域会議



- 原則年2回開催。
- 研究の進捗を確認、成果の発展方向、チーム連携、計画修正等を議論。
- AD講演、若手発表も含める。
- 研究代表者/主たる共同研究者/若手研究者が参加。JST知財部/産連部からも出席。直近（2021年11月）で120名規模。
- 事後ADコメントをフィードバック、研究チームで対応を検討してもらい、回答を回収・ADへ報告。

## 領域会議の様子（2018年11月）

本領域と関連の深いさきがけ「マテリアルズインフォ」の常行総括・研究者からの領域概要/研究成果紹介も合わせて実施。

# サイトビジット

## ■ サイトビジット

- ・ 原則、採択翌年度の上期に実施。
- ・ CREST研究の立上がり状況を確認、成果イメージ/問題点を共有。
- ・ 場合によりチームリーダーの合意をもとに計画変更を要請。

## ■ 個別指導

- 清水チーム（第一期「触媒イノヴェティクス創成のための実験・理論・データ科学研究」）
  - ・ 研究進捗が当初計画から大きく外れたため、3年次に総括面談を実施。
  - ・ 未探索領域の予測への活用は不可との判断から「文献データの機械学習による触媒予測モデル/データベースの構築」を中止、新構造活性サイトのデザインにつながる理論研究に注力に変更
- 長谷川チーム（第二期「実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発」）
  - ・ 必要性の低下した「塗布プロセスのその場観察」の比重を下げ、「極薄有機薄膜の構造解析手法開発」を優先することに方針変更。
  - ・ X線に加えクライオTEMの利用を推奨。総括裁量経費を充当し、有機極薄膜のクライオTEM分析を担う米倉グループ（理化学研究所）を2020年に追加。
- 武田チーム（第三期「実験とデータ科学の循環による蛍光体開発」）
  - ・ 狭帯域蛍光体の開発に励起状態の理論的解明が必須であるとの認識から、初期段階で研究グループを追加。
- 内藤チーム（第三期「データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発」）
  - ・ 現時点で論文発表の少ないことが懸念点であるものの、領域会議にてデータ科学/AI、計測装置、実験を連携させ高分子材料合成の優れた枠組みを構築、新規物質を合成しつつあることを確認。
  - ・ 課題中間評価まで見守る方針。

# 領域セミナー

- 新型コロナ禍でのコミュニケーション不足を緩和するために開催。
- 2～3時間程度のオンライン会議。
- テーマは、研究チームからの要望/総括からの提案に基づき設定。
- 材料テーマでの外部講師依頼もOK（MRM2021のシンポの招待講演者に）。

#	テーマ	内容
第一回 2021/2/24	知財	<ul style="list-style-type: none"><li>・ 総括「アカデミアの材料研究者にとっての特許：個人的経験から」</li><li>・ 湯浅AD「MTJに係わる知財取得・権利行使の実際」</li><li>・ JST知財部「研究成果を知財につなげる」・「JST知財サポートの紹介」</li></ul>
第二回 2021/7/2	チーム型研究	<ul style="list-style-type: none"><li>・ 総括「ERATO-Pj紹介/研究チームのマネジメントへの要望」</li><li>・ 伊藤（耕三）AD「ImPactにおけるマトリクスマネジメント」</li><li>・ 浅見AD「企業におけるチーム型研究開発のマネージメント」</li></ul>
第三回 2021/10/4	チーム間連携	<ul style="list-style-type: none"><li>・ 各チームから連携の構想/アイテムを発表</li><li>・ 事後、共同研究計画をチーム間で議論/提案してもらう。</li></ul>
第四回 (4Q~1Q)	産業界連携	(計画中)

# 若手発表/若手研究促進ファンド

- 領域会議にて総括・AD・他チームの前で発表・議論してもらう機会を設定。
- レーティング結果に基づき2年度内で研究費（目安200～400万円/人）を提供。概ね40歳以下を対象。
- 採択倍率～2.2。2022年度以降も継続予定。下記は採択例。

発表年度	対象者	目的
2019	<宇佐美T・工藤G> 小島拓人	省略
	<宇佐美T・横井G> 横井達矢	
	<大場T・田村G> 田村亮	
	<清水T・蒲池G> 濱本信次	
	<長谷川T・長谷川G> 北原暁	
2020	<大場T/野瀬G> 勝部涼司	
	<山本T/飯田G> 畑野敬史	

# 共同研究の推奨

- 本領域はターゲット材料分散型 → 材料開発手法をベースに置く連携を推奨。
- 連携本格化のため「共同研究促進ファンド」を設定、8件に配賦。下記はうち4件。

#	1	2	3	4
テーマ名	多結晶の組織制御に向けた双晶ネットワーク解析の拡張と粒界形成プロセスの原子レベル解明	結晶構造のドロネー四面体分割に基づく触媒表面シミュレータの開発	機械学習型推定状態図に基づく新規多元系化合物探索	プロトン伝導性膜型反応セルと触媒の融合によるCO <sub>2</sub> 還元およびC <sub>3</sub> H <sub>8</sub> 脱水素化反応の脱平衡収率化
連携チーム	山本T (第三期) 宇佐美T (第一期)	桂T (第三期) 清水T (第一期)	桂T (第三期) 大場T (第一期)	山崎T (第二期) 清水T (第三期)
成果目標	省略			

# シンポジウムの開催

## ■ 日本物理学会共催シンポジウム＜「革新材料開発」の進展＞

第76回年次大会（2021/3/13）にて研究領域と第一期課題（中間評価後）の成果を紹介。他流試合の位置づけ。

1. 細野「材料研究のジャンプを目指して」
2. 宇佐美「高性能多結晶材料創製に向けた多結晶材料情報学の開拓」
3. 大場「新規半導体・誘電体の開拓に向けたデータ駆動型材料探索」
4. 水上「計算・データ科学を用いた磁気抵抗素子新材料の創出」
5. 中嶋「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解析」
6. 清水「理論化学・データ科学を利用した固体触媒の研究・開発を目指して」

## ■ MRM2021 シンポジウムA-4 : New Methodology for Developing Innovative Materials (2021/12/13-15)

第二期課題（中間評価後）の成果紹介、若手発表の促進、産業界へのアピールを目的にMRM2021にシンポジウムを設置。本領域から34件を発表。

## ■ CEATECへの出展

産業界へのアピールのため、2022年度に領域全体での出展を計画中（2021年度に1件を出展、味見）。

# 6. 研究の進捗状況

---

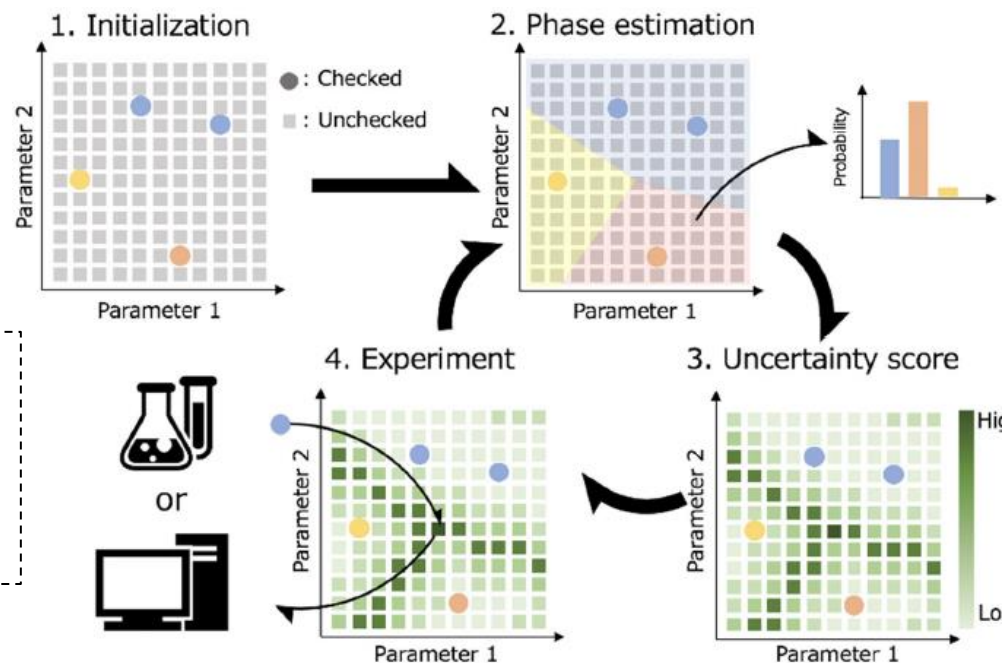
以下、代表的な研究の進捗5件を紹介。

# 成果紹介-1：大場T（第一期）

## Uncertainty samplingを用いた相図作成

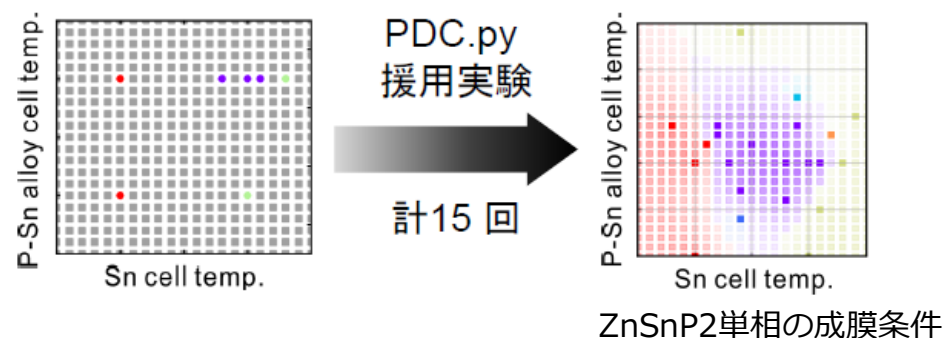
もっとも不確かな点をサンプリングすることで、効率的に相境界を決定

- サンプル数を1/5程度に低減
- 安定組成領域の狭い相も高速に発見
- 誰でも手軽に使える実験提案アプリ (PDC.py) を開発



## 太陽電池用ZnSiP<sub>2</sub>の成膜条件・相図作成に應用

- ・ 初期7データから出発し、4回で新しい相を発見
- ・ さらに7回で相図を完成



## 今後の展開

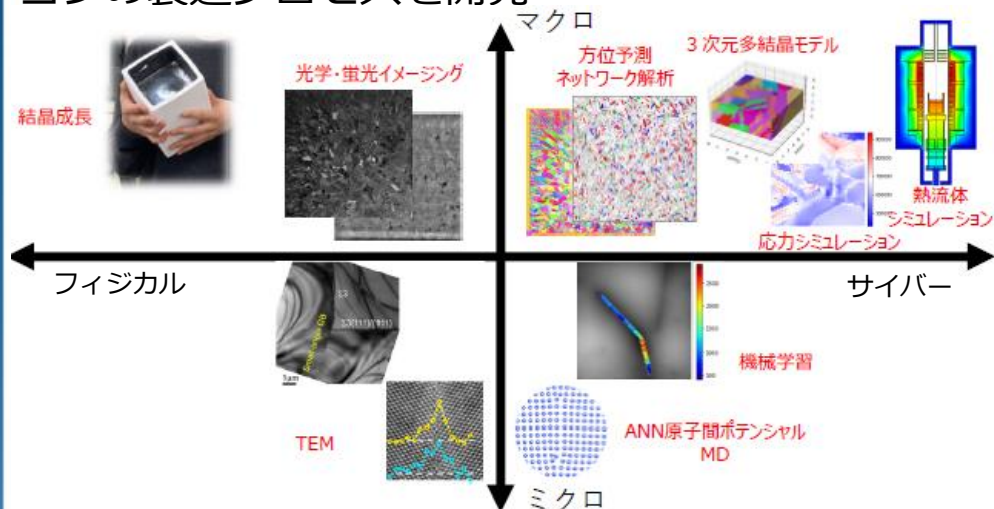
- ・ 相律/共存相情報を取入れ更に効率化
- ・ 相図を学習し未知相図を予測する手法の開発
- ・ 新規多元系化合物への展開（領域内共同研究）



# 成果紹介-2：宇佐美T（第一期）

## サイバー/実空間をマルチスケールで融合させた多結晶材料の開発手法

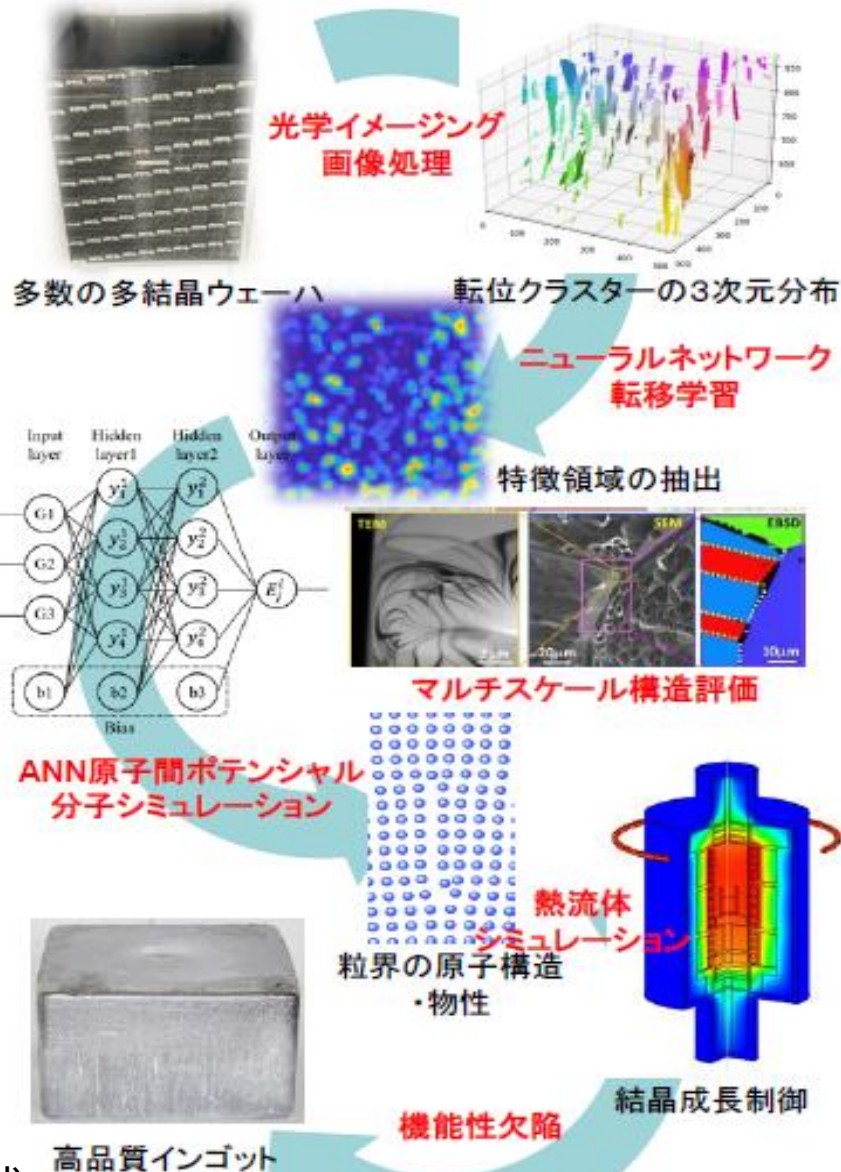
原子～マクロスケールで実験・理論・データ科学を連携させ、太陽電池用の高品位多結晶シリコンの製造プロセスを開発



- 「多結晶材料情報学」の学理を構築
- 産業界連携により量産レベルの擬単結晶インゴット成長プロセスの最適化に応用

## 今後の展開

- ・ 他材料への適用性拡大
- ・ 「多結晶材料情報学応用技術研究会」発足、実践
- ・ 多結晶超伝導材料にも手法を展開（領域内共同研究）



# 成果紹介-3 : 山崎T (第二期)

## 新規プロトン伝導性材料の効率的探索

水和実験データ-機械学習-物理化学的知識により、広大な探索空間から新規のプロトン伝導性酸化物を効率的に発掘

- 信頼性の高い訓練データベースを準備
- 構成元素情報に係わる記述子および「金属酸化物中におけるプロトン濃度はアクセプター濃度に比例する」という物理化学的知見とともに学習
- プロトン濃度の温度依存性を予測するAIモデルを作成、構造-特性マップ (水和エンタルピー $\Delta H_{hyd}$  vs. 記述子) を描く。
- プロトン伝導性が発現する可能性が高い $\Delta H_{hyd} = 100 \pm 5$  kJ/molの未知材料を合成して検証。→  $SrSn_{0.8}Sc_{0.2}O_{3-\delta}$  に到達。

## 今後の展開

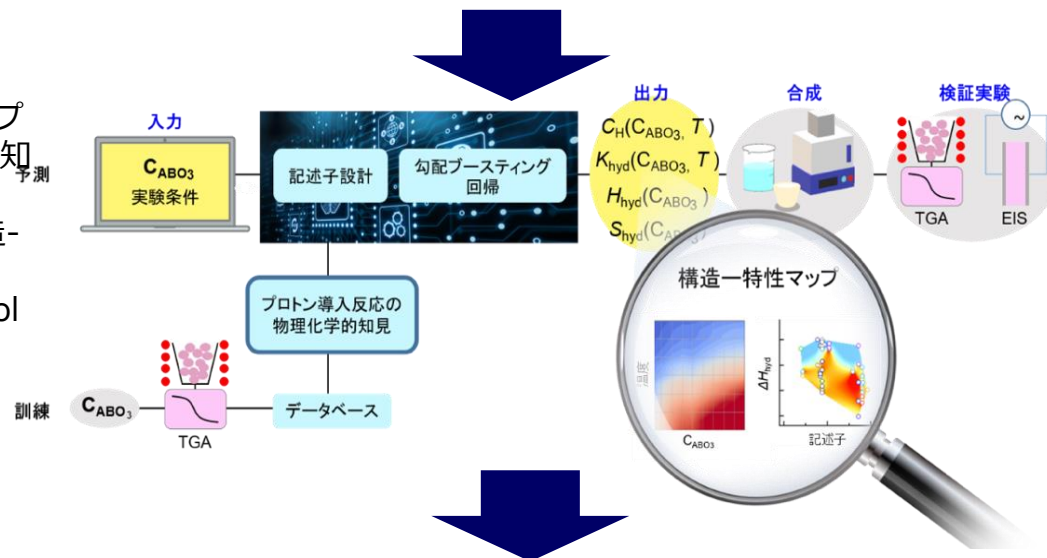
高性能電極材料を開発しデバイスとして仕上げる。

- トリプル伝導性高性能カソード電極材料、界面機能層
- 実働条件で活性化する材料の高速探索手法
- CO<sub>2</sub>資源化、C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>脱水素化への応用 (領域内共同研究)

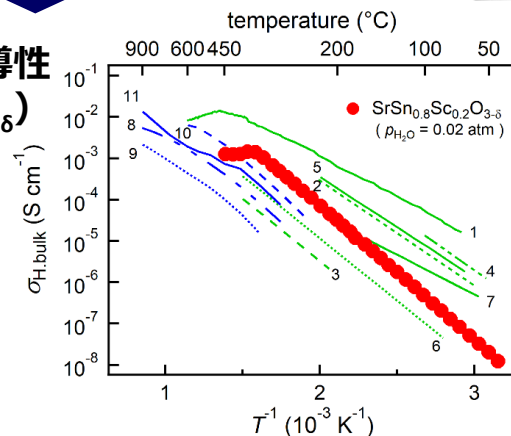


▲ 不明な材料探索指針

▲ 無限のホスト-ドーパント組合せ



● 試行 1 回で高プロトン伝導性  
の新規材料 ( $SrSn_{0.8}Sc_{0.2}O_{3-\delta}$ )  
に到達

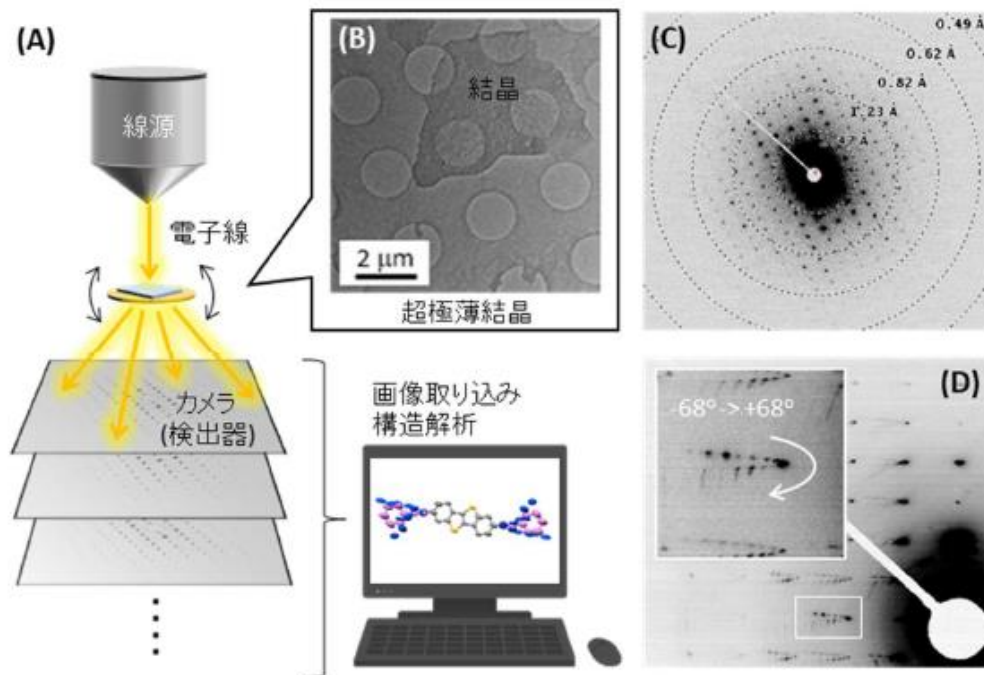


# 成果紹介-4：長谷川T（第二期）

## クライオ電子顕微鏡を用いた極薄有機半導体膜のフル構造解析

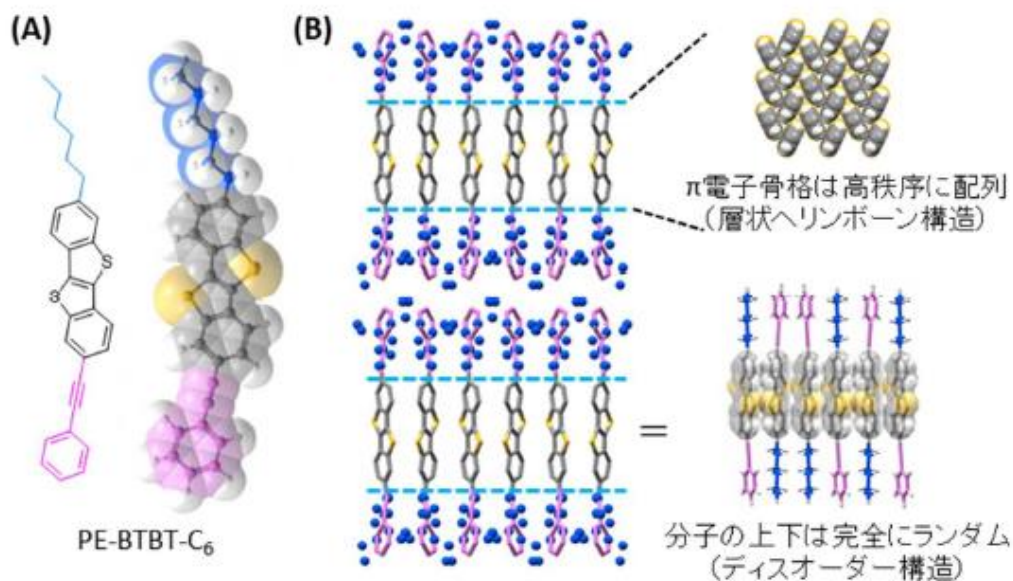
従来のX線回折法では困難であった**厚さ10nmレベルの有機半導体薄膜の構造解析**をクライオ電子線回折により実現。

- ・ 極薄結晶（今回は液晶性）を様々な方位から観測した回折像を連続的に撮影し、画像を解析して結晶構造を解析。
- ・ BTBTは高配向である一方、上下分子はランダムに位置していることが判明（→ 高いキャリア移動度に寄与、と推定）。



## 今後の展開

- ・ ミッシングコーン領域の補完技術、XFEL-2D スキャン法も取入れ、極薄有機薄膜の高精度構造解析手法を構築。
- ・ 有機半導体極薄膜の構造データを分子設計/プロセス構築に活用。

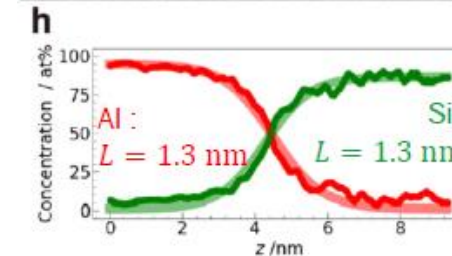
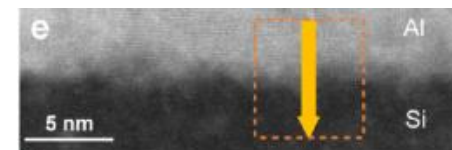
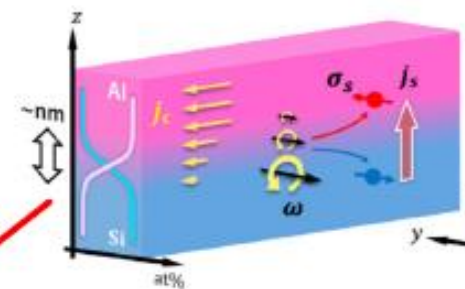
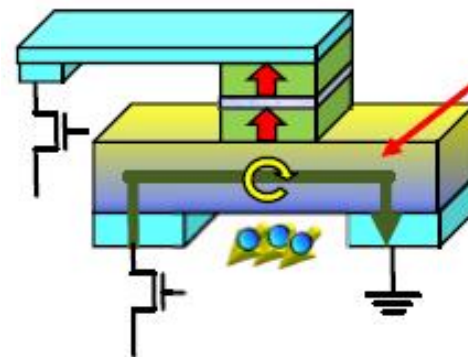


# 成果紹介-5 : 能崎T (第三期)

## 傾斜材料によるスピントルクスイッチングの効率化

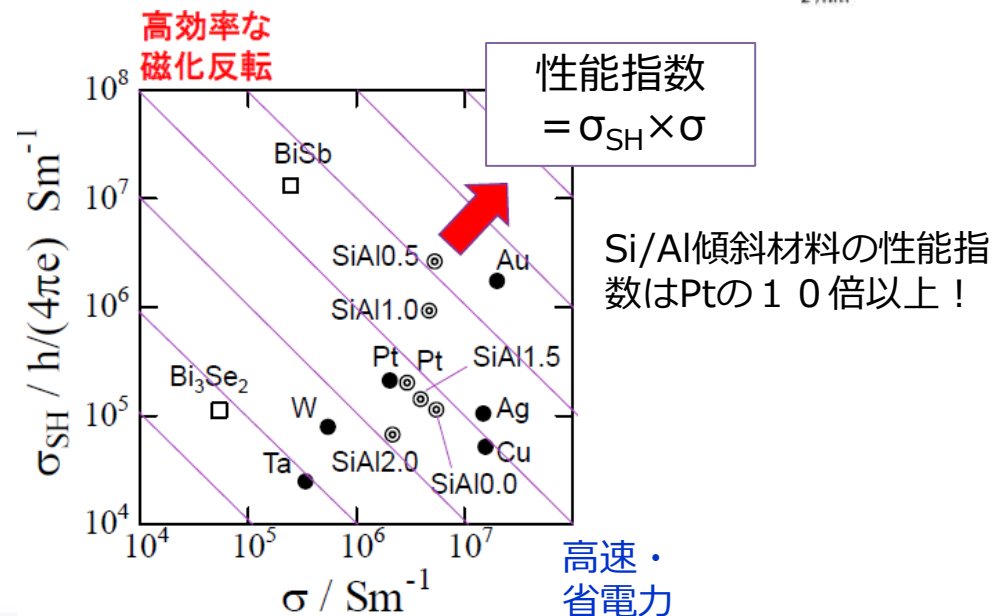
**新原理**「電流渦によるスピン流生成」を傾斜材料で実現

- 組成傾斜により電気抵抗の傾斜を作り付け、電流を流すことでスピン流を生成
- 傾斜材料を構成する元素に自由度がある
- Al/SiでPtを超えるスピントルクスイッチングが可能であることを示した。



## 今後の展開

- 傾斜材料/傾斜幅等を検討し、性能を向上。
- トンネル接合デバイスの動作をデモ。
- 現象の詳細を解明、スピン流シミュレーターを開発、傾斜材料デザインの指針を示す。



# 7. 今後の期待・展望／所感

- 本研究領域が発足して4年が経過した。ようやく「革新材料開発」の目指すものが浸透し、領域名称にふさわしい研究成果が出始めている。チーム間連携も活発化してきたので、本研究領域の後半の展開に期待している。
- 今後の焦点は、世界をリードする成果が得られ、それが産業につながるかどうか。現時点ではA IとDFT計算を結合させる手法で、多成分の相平衡図の効率的作成法の開発や、多結晶材料情報学の構築などの発展が期待される。
- 企業連携は進んでいるものの産業化の展望が開けたものは現時点では見えておらず、本研究領域の後半で重点的にフォローする予定である。
- CRESTの採択チーム当たりの配分予算が、実質的に減少してきている。分野ごとに予算規模が異なるのは合理的だが、大型装置を購入できる大学の予算が殆ど無くなっているため、CREST制度にはこの点も考慮頂きたい。

以下は補足

# 成果数値（論文・特許・口頭発表）

	論文			特許			口頭発表 括弧内は招待講演		
	合計	国内	国際	合計	国内	国際	合計	国内	国際
第一期採択 5課題	129	3	126	4	3	1	437 (217)	275 (121)	162 (96)
第二期採択 4課題	101	6	95	24	8	2	352 (104)	250 (58)	102 (46)
第三期採択 4課題	19	2	17	2	1	1	325 (115)	54 (17)	14 (8)
領域合計	249	11	238	16	12	4	857 (346)	579 (196)	278 (150)

- 本研究領域の主目的はNature、Science等に論文を掲載することではないが、ACS関連（22報）の他 Adv.Mater.、JACS、Chem.Sci.、Phys.Rev.Lett.等に各4～5報発表されており、掲載誌のIFが高くない研究チームには注意を促している。
- 特許は真に有効な内容のものを要求しているが、出願数が十分とは言えず、Pj後期の産業連携とともに引続きフォローする。

# 第一期採択課題 (2017年)

応募60課題から5課題を採択

第一期		有機	半導体	無機		その他
材料		TPE タフポリマー	多結晶シリコン	新規の半導体・ 誘電体	磁気トンネル接合 材料	固体触媒
目的		ゴムを代替できるタフなTPE材料	粒界の構造・物性の理論構築を行う多結晶材料情報学を開拓、優れた特性を示す太陽電池用スマートシリコンインゴットを創製	ハイスループットスクリーニング&合成・評価・デバイス化で新材料開発を加速	室温で抵抗が桁で変わるトンネル磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の開発を行い、人工知能等に応用	データ科学的手法を駆使し触媒設計支援システムを構築、触媒分野の未解決課題を克服、企業の触媒開発を支援、革新材料を開発
手法	合成・成膜	中嶋G ポリマー作製 AFM測定	宇佐美G 結晶作製, イメージ取得, 電気的評価	平松G・野瀬G・谷口G 物質合成, デバイス作製, 太陽電池, 誘電体	水上G 新材料開発	清水G 触媒合成・反応
	分析・評価	高原G 放射光測定	大野G 粒界構造評価	廣畑G 結晶化 プロセス評価		
	計算・数理	下川G・小谷G トポロジー解析・数理モデル	横井G 第一原理計算モンテカルロ法 焼きなまし法	大場G: 高精度・高速第一原理計算	白井G: 第一原理計算	日沼G 第一原理計算 データベース構築
	データ科学	森田G 粗視化シミュレーション	工藤G 機械学習・自動特徴抽出, 独立成分分析・ベイズ推定	田村G: 機械学習 ベイズ最適化・組み合わせ最適化 問題解法	データベース構築 ベイズ最適化	蒲池G 量子化学計算 データベース構築, ベイズ理論
チーム		中嶋T	宇佐美T	大場T	水上T	清水T



# 第二期採択課題 (2018年) 応募42課題から4課題を採択

第二期		有機	無機・金属		
材料		有機半導体・有機強誘電体	多結晶の超伝導体	強磁性体／強誘電体	プロトン伝導体／電極材料
目的		全塗布型の高性能デバイス・プロセスを実現	多結晶組織の制御手法を確立し、低コスト高性能の超伝導永久磁石を開発	大きな磁気電気相関を有する 界面マルチフェロイク材料を開発、スイッチ／熱整流／マイクロ波素子に適用、革新的デバイスを実現	新規材料により中温度域(300～450℃)で高プロトン移動度を実現、それに適した電極材料を開発し、デバイス実証
手法	合成・成膜	長谷川G・堀内G 半導体／強誘電体材料・塗布プロセス・デバイス開発	山本G 多結晶組織設計・バルク合成・磁石開発  飯田G 薄膜構造／物性制御・特性評価	谷山G・浜屋G MBE/PLD・界面設計・界面形成技術・デバイス開発	山崎G 新規プロトン伝導材／電極材料開発・合成・電気化学特性評価・データベース構築・記述子開発・その場XRD  奥山G デバイス・プロセス開発・特性解析・記述子開発
	分析・評価	熊井G・米倉G 放射光・クライオTEM・精密構造解析	波多G・嶋田G TEM/SEM・粒界構造・マルチスケール構造解析・組織因子定量化	木村G 磁気電気結合係数・熱流の解析／定量化手法開発	
	計算・数理	松井G・都築G 第一原理計算・分子動力学・機械学習	山中G 機械学習・フェーズフィールド・焼結シミュレーション	合田G 第一原理計算・ベイズ推定・デバイス設計	桑原G: 第一原理計算・機械学習・記述子エンジニアリング
	データ科学				
チーム		長谷川T	山本T	谷山T	山崎T

# 第三期採択課題 (2019年)

応募28課題から4課題を採択

第三期		有機	無機・金属			
材料		高分子複合材料	新規結晶の大規模探索	蛍光体	傾斜スピン材料	
目的		化学反応と高分子物性の深層学習をベースに、新規の再生可能材料・力学特性変調材料を開発する	独自の結晶シミュレータを開発、高スループット合成/評価で新規結晶を大規模探索、新規電極技術でデバイスを高性能化	高スループット実験、機械学習、多電子状態計算により次世代TV・照明用の狭帯域/高耐熱蛍光体を開発	組成傾斜による不均一スピ依存散乱を用いた新しいスピン流生成技術を開発、高い材料自由度でスピンデバイスを実現	
手法	合成・成膜	内藤G 材料開発 データ科学	森戸G 藤岡G 高スループット合成・新規合成プロセス	武田G 高スループット合成・一粒子分析、蛍光物性ライブラリ、データ科学	能崎G ナノ構造制御・計算・市ピン物測定	介川G 傾斜スピン材料・デバイスの作製/評価
	分析・評価	佐藤G 材料特性の自動データ収集システム開発	菅原G 電極形成技術、電気特性評価		渡邊G スピン流の光計測と光機能開発	柚木G スピン流シミュレータ開発
	計算・数理	袖山G 機械学習による分子・反応開発	桂G・秋山G 機械学習・フェーズフィールド・焼結シミュレーション		池野G 第一原理多体電子計算	
	データ科学					
チーム		内藤T	桂T	武田T	能崎T	

# 若手研究の推奨（続）

発表年度	対象者	目的
2020 (続き)	<山崎T/桑原G> 笠松秀輔	省略
	<長谷川T/長谷川G> 井上悟	
2021	<清水T/清水G> 古川森也	
	<水上T/白井G> 新屋ひかり	
	<能崎T/介川G> Zhenchao Wen	
	<谷山T/浜屋G> 宇佐美喬政	
	<山崎T/桑原G> 藤井進	

- 2019～2021年度での領域会議で若手から31件を発表、うち上記14件に若手ファンドを賦与。

# 共同研究の推奨（続）

#	5	6	7	8
テーマ名	巨大磁気回転効果の実現に向けた単結晶スピ ンメカトロニクスの研究	次世代磁気トンネル接 合における高性能界面 マルチフェロイク構造 を用いた低電圧磁化制 御	MI 駆動による相反機 能を有する高分子材料 の合目的探索手法の確 立 ～水中・解体性接 着剤の開発加速の実証 ～	ナノ工学マッピング法 で支援する絶縁ポリ マーブレンド法による 実用的塗布型電子デバ イスプロセス開発
連携チーム	谷山T（第二期） 能崎T（第三期）	谷山T（第二期） 水上T（第一期）	内藤T（第三期） 大場T（第一期）	長谷川T（第二期） 中嶋T（第一期）
成果目標	省略			