

CREST

[未踏物質探索]

未踏探索空間における革新的物質の開発

募集・選考・領域運営にあたっての
研究総括の方針

研究総括

北川 宏

京都大学 大学院理学研究科 教授

背景

- 元素の特性を理解し利用する材料開発は、**従来、希少元素の代替・使用量削減を主眼とする元素戦略**に基づいて展開されてきた。
 - 人工知能・高速無線といった情報通信技術が社会全体に真の恩恵を及ぼせるようになるためにも、**一層の材料の技術革新が必要**。
 - 各元素の潜在能力を最大限に引き出すことから、**複数元素間のシナジー（掛算）効果を最大限に引き出すことへ**。
- ⇒ **探査空間を複合化・多元素・準安定相等の未踏領域に拡大、新機能材料を開発し、課題解決に貢献。**

領域概要

- **未踏空間**における**元素高度利用のアイデア**（複合/多元素/準安定、他）
- **卓越した研究実績**に基づく**実証戦略**
- **出口定義**（仮説で良い）

- **合成/計算/計測の連携・融合運営**
- **新概念検証**
- **新概念形成・アイデア修正**

- ・ **データ科学**
- ・ **高スループット合成/分析**
- ・ **オペランド計測**
等を活用

新物質/新機能を実現

元素戦略を未踏材料空間に拡大・深化

「元素高度利用の科学」を構築

令和以降の社会的課題の解決に貢献する新材料を開発

本領域が求める研究

- ▼ 解決を目指す社会的課題を設定した上で
 - ▼ **元素を高度に利用するためのアイデア**を起点に
 - ▼ **未踏の材料空間を探索するための方法論**を開拓
 - ▼ **様々な物質の合成技術や探索技術を適用、ないし新規に開発し**
 - ▼ **革新的機能を実証する、戦略的な研究**
- ・ 探索空間を、複合化・多元素化・準安定相等の未踏の領域に拡大、**新たな材料設計の概念や方法論を打ち出すことを奨励**します。
 - ・ アイデアの新規性・裏付けとなる理論/予測を示してください。
 - ・ **従来法の改良型研究の提案は期待しません。**

想定する研究項目①

■ 新材料を未踏領域で効率的に探索するための手法

- ・ ダイヤモンドや金属ガラスに代表されるような**非平衡物質**や多元素材料で特異的に高機能を示しうる物質を**予測・発見するための計算科学・データ科学、高スループットスクリーニング方法**
- ・ ナノレベル構造の元素・環境構成や異種ナノレベル構造の複合配置/積層/界面等により機能を発現させる材料システムの設計手法
- ・ **電子/イオン輸送特性・超伝導性・熱電特性・光物性・磁性・誘電性・化学反応性/触媒能・分離/吸着能・蓄電特性・構造材料/力学特性等の複数の物性/機能を同時に満たす材料の設計手法**
- ・ 温度・圧力以外のエンジニアリング可能な要素を取り込んだ相図や有限温度での状態図を効率的に作成する技術
- ・ **人間のひらめきや直感、感性を取り入れたプロセス・インフォマティクスの開発、等。**

想定する研究項目②

■ 新材料を合成するための新規のプロセス技術

- 圧力/温度/雰囲気条件の時間プロファイルの精密制御、プラズマ・イオン・電磁波・溶液等を用いた新規の非平衡・低温・極端条件下プロセス（**バッチ合成などの平衡合成には限界がある**）
- 複数のナノレベル構造を近接配置させるための局所的反応性制御、凝集化の手法
- 薄膜結晶作製における基板由来応力制御方法の高度化
- 合成/成膜フロントの構造・物性を局所的に評価するオペランド/その場測定とデータ科学的手法の連携、等。

加えて、

- **寿命、高耐久化、準安定相の安定化（或いはそれらに資するインフォマティクス）**

選考方針

- 無機/有機/金属といった材料分野は問わず、結晶/非結晶/固溶体/フレキシブル/ソフトマテリアルといった材料の性状も限定しません。総括の経験（ペロブスカイト・有機伝導体・金属錯体・低次元電子系・ナノ合金）から、元素は余すこと無く、全て有効活用するべきと考えている。
- 複合化・多元素化・準安定相以外の未踏領域の材料や材料探索手法も研究開発の対象に含めます。
- 既存材料の従来法による改良型研究や、これまでの研究の単なる延長線上にある提案は対象外。
- 時としてHTSは必要だが、非従来型の材料探索手法に繋がらない、ロボット工学による単なる省力化を主たる開発内容とする提案は対象外。

従来の元素戦略や常識にとらわれない自由な発想で、**元素の高度活用のアイデアの新規性**（+裏付けとなる理論/予測）とそれを**実現する戦略**を明確にして、提案してください。

研究実施体制について

- **材料合成グループに加えて、計算科学・データ科学・最先端計測の機能を担うグループからなるチーム構成を推奨。研究代表者は全責任を取る覚悟で申請して欲しい。**
 - **データ科学に直結するオペランド計測や高スループット実験の専門的グループを含めることが望ましいが、必須とはしない。**
 - **各グループに一律の定額を配分するようなことはせず、研究代表者がプロジェクト全体の成果責任を負えるよう、適切に予算を設定してください。**
- ※ 研究期間は5.5年、研究費は1チームあたり総額3億円（直接経費）を上限とします。**多岐の技術にわたる提案で真に必要と認められる場合は、総額4億円までの引上げを考慮します。**

採択後/研究領域運営にあたっての方針

- 未踏領域での物質・材料探索に如何に挑戦しているかを重視。トップサイエンティストが難課題にチャレンジするといったイメージ。
- 領域内/外との連携、特に同じ戦略目標のもとに設定されるさきがけ研究領域「物質探索空間の拡大による未来材料の創製」と連携。
- 新規プロセス開発への貢献を期待されるオペランド/その場計測等の優れた基盤技術は、領域内の他チームや上記さきがけ研究領域にも展開。
- 元素間の新しいシナジー効果（元素の掛け算）を重視。

重要な日程

CREST 募集
締切 | 6月8日(火)正午(厳守)

本領域独自の提案書フォーマットを使用のこと

CREST「未踏物質探索」 選考スケジュール (予定)

面接対象者への通知	7月19日 (月曜)
面接選考会	7月27日 (火曜)
採択となる可能性が高い 方への連絡	8月下旬
選定課題の発表	9月中旬
研究開始	10月以降