

**すいかい** [未来材料]

PRESTO

# 物質探索空間の拡大による未来材料の創製

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

陰山 洋

(京都大学 大学院工学研究科 教授)



科学技術振興機構

# 目次

- 自己紹介
- 背景
- 領域概要
- 目標
- 募集・選考の方針
- 領域運営の方針
- 領域アドバイザー
- おわりに

# 自己紹介

氏名：陰山 洋

所属：京都大学 大学院工学研究科 教授 (2010～)

高等研究院物質-細胞統合システム拠点 連携教授  
(2010～)

専門分野：固体化学、無機化学、複合アニオン科学など

略歴：東京大学 物性研究所 助手 (1998-2003)

京都大学 大学院理学研究科 助教授 (2003-2009)

さきがけ「超空間制御と革新的機能創成」領域アドバイザー  
(2013-2018)

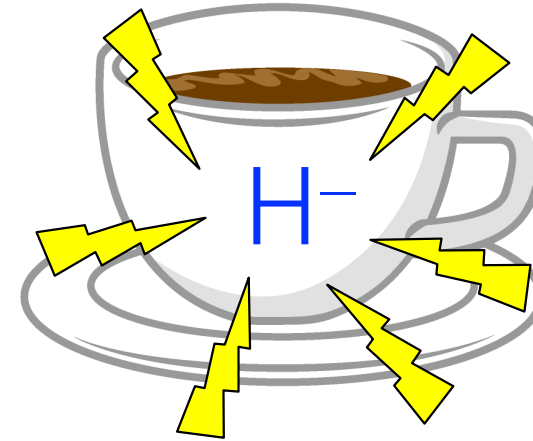
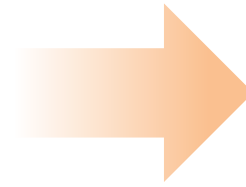
CREST「アニオン超空間を活かした無機化合物の創製  
と機能開拓」研究代表者 (2014-2019)

文部科学省・新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と  
新機能開拓」領域代表 (2016-2020)

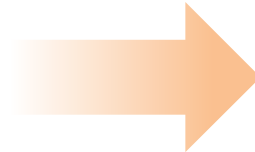
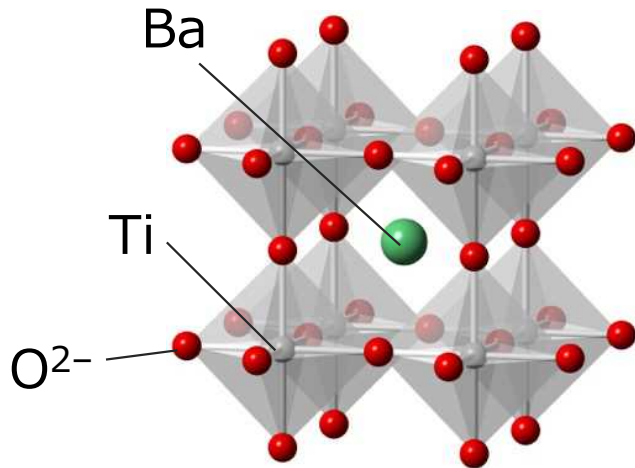
# 自己紹介（続）：物質探索空間が広がった事例



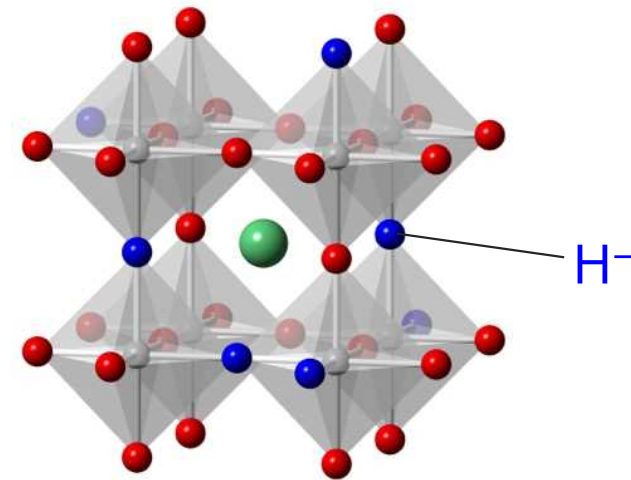
酸化物（安定）



酸水素化物（安定 + 活性）



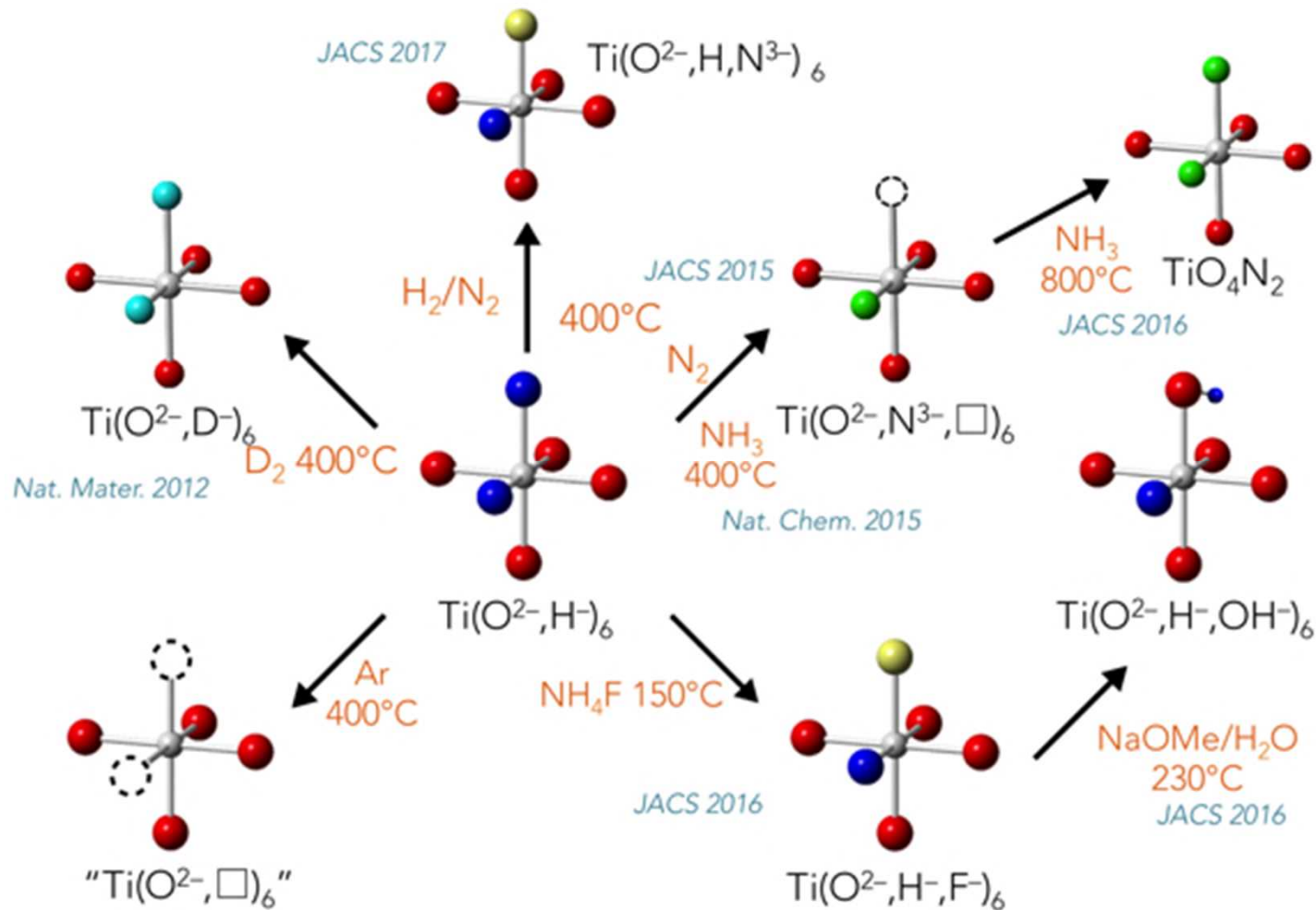
400-570 °C



*Nat. Mater.* 2012

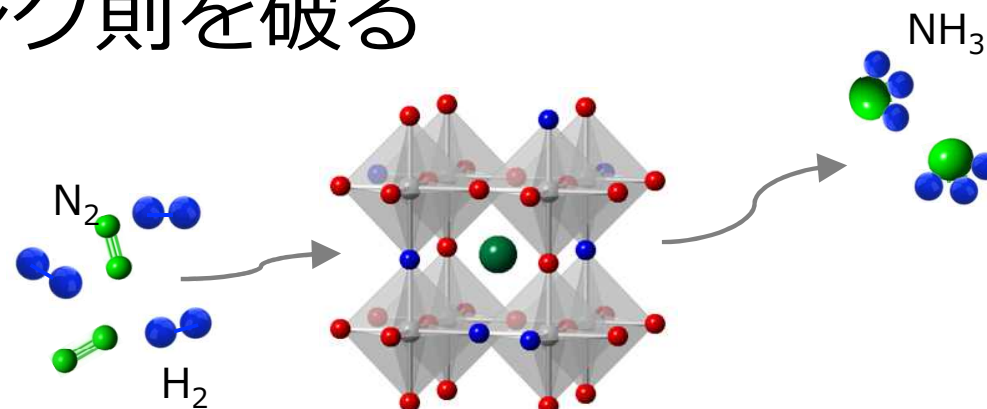
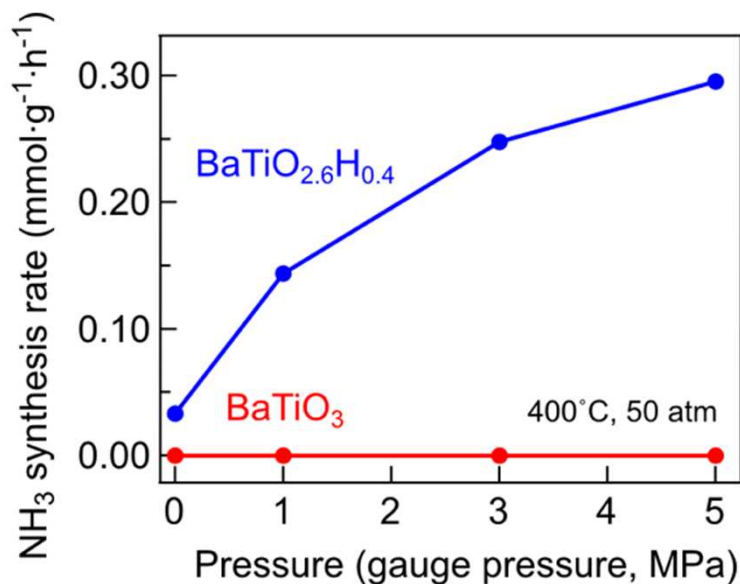
# 自己紹介（続）：物質探索空間が広がった事例

## 新合成法：アニオン交換反応

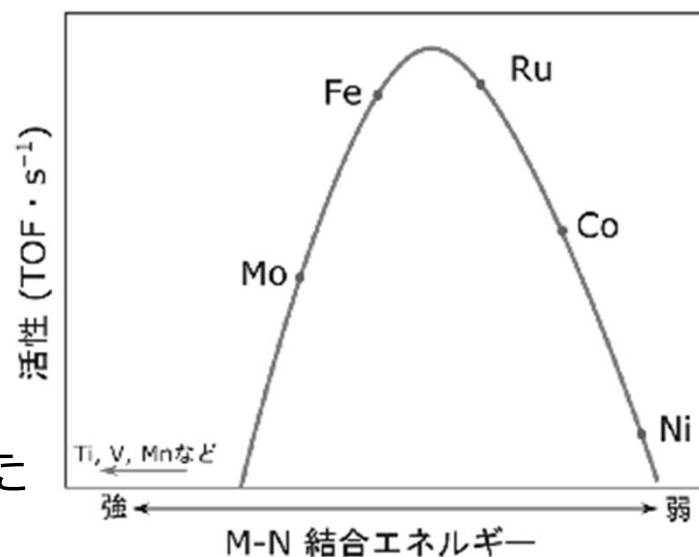


# 自己紹介（続）：物質探索空間が広がった事例

## 触媒：H-がスケーリング則を破る



ボルケーノプロット



Tiは最も不向きとされていた

*JACS 2017, Adv. Ener. Mater. 2018, ibid 2018.*

# 背景

- 知的集約型社会の進展により、材料に求められる機能や役割がより一層高度化・多様化しており、革新的機能を有する新物質・新材料を創出する研究基盤の構築が望まれている。
- 「多元素化」、「機能複合化」、「準安定相」の活用等の視点で、社会課題を解決する夢のある材料・プロセス研究が必要になっている。
- 物質創製技術やプロセス制御技術確立のために、計算科学や機械学習等のデータ駆動科学、最先端オペランド計測技術等との融合による原理解明、学理構築等、広い視点で挑戦的なアプローチでの研究が求められている。

新たな科学技術イノベーションの源泉になる先駆的な研究が、新機能性物質群の創製の未来を切り開く。

# 領域概要

## 未踏の物質探索空間開拓による新物質・新材料の創出（例）

### 【多元素化】

固体電解質  
熱電材料  
ハイエントロピー合金  
ヘテロ元素含有高分子

### 【機能複合化】

ハイドロジェノミクス  
複合アニオン  
複合触媒

### 【準安定相】

高温・高圧超伝導材料  
パワー半導体材料  
ガラス状高分子  
特異構造形成

計測・計算・AI技術の進展に伴って、広がりつつある未踏の材料探索空間に着目し  
元素間のシナジー効果とプロセス技術の高度化による新機能性材料の創製を目指す

### 【計測・評価技術】

オペランド計測  
マルチスケール/  
マルチモーダル計測  
原子分解能観察

### 【理論・計算科学】

反応経路探索・制御  
マテリアルズ・  
インフォマティクス

### 【データ科学, 高精度プロセス】

ハイスループット実験  
多元素探索システム  
プロセスシミュレーション

## 新物質、新材料の創出を支える基盤技術（例）

※上記以外の分野、材料からの提案も歓迎



# 目標

1. 未踏の物質探索空間の開拓により、**物質の本質を変える予想もしなかった新機能を発現**する未来材料の創製を目指します。
2. 論理／計算科学やデータ科学、最先端の計測／評価技術等は、**機能発現や合成プロセスの原理解明**のために必要な基盤技術と位置づけ、実験系との連携により、**新しい物質設計指針の構築**を目指します。

## 【方法】

広範囲の物質創出に関わる研究者が、**理論・計算科学・計測**などの研究者と情報交換や連携等のネットワークを形成することにより、新しい観点や発想での研究を生み出します。

# 募集・選考の方針 (1)

- 研究対象・分野は、多元素化・機能複合化・準安定相等を掲げますが、これら以外の**未踏領域の材料**も提案の対象に含めます。
- 研究者の**物質観・材料観**に裏打ちされた新しい概念やコンセプトを創出する**シンプルかつ斬新なアイデア**を求めます。  
そのため、既存材料の最適化や既存プロセスの改善等の**従来路線の延長の研究提案は対象外**とします。

# 募集・選考の方針 (2)

- すべての研究内容を一人でカバーする必要はありません。提案者が得意とする研究項目・内容と、さきがけ研究領域内外での出会いによる共同研究者の協力が必要な項目・内容を明確に分けてください。
- 共同研究については、これからスタートする研究ですので、具体的に研究者が確定されているかは問いません。
- 提案内容は、他分野の研究者にも研究内容の独創性や実現性、科学のおよび社会的インパクトが理解できるように記述してください。

# 募集・選考の方針 (3)

## 【研究期間】

- 2021年度から2024年度（3年半）以内。

## 【研究費】

- 1課題あたり3,000～4,000万円（直接経費）を上限。
- 選考にあたっては、さきがけ研究期間内だけでなく、**その後の研究の発展や新しい研究領域の創成の可能性**などを考慮します。

# 領域運営の方針

- 色々な方向や角度から物質科学の未来にチャレンジする独創的研究を行う研究者が集い、相互交流することで魅力的なサイエンスが生まれる場をつくります。
- 広範囲の物質科学に関わる研究者が、各自の得意技や持ち味を生かしながら独創的で魅力ある研究を遂行できるような環境をつくります。
- さきがけ研究期間の先にどのような展開があり、どのような新しいサイエンスを導くのかを追求するため、研究総括、アドバイザー、採択研究者間の自由で忌憚のない意見交換を十分に行います。

# 領域アドバイザー

氏名	所属	役職
有馬 孝尚	東京大学 大学院新領域創成科学研究科	教授
猪熊 泰英	北海道大学 大学院工学研究院	准教授
梅津 理恵	東北大学 金属材料研究所	教授
太田 裕道	北海道大学 電子科学研究所	教授
大谷 博司	(公) 豊田理化学研究所	フェロー
小川 周一郎	旭化成株式会社 研究・開発本部 イノベーション戦略部	シニアマネージャー
中西 和樹	名古屋大学 未来材料・システム研究所	教授
前田 和彦	東京工業大学 理学院	准教授
楊井 伸浩	九州大学 工学研究院	准教授

# 総括からのメッセージ

- 独自の物質観をもとに「未来材料」に相応しい、オリジナルが心に響く提案をしてください。
- 本さきがけは全体として「ワンチーム」体制で進めます。好奇心全開で様々な分野の研究者と交流されることを期待します。
- 将来、世界のリーダーとして分野を牽引する、新しい研究分野をつくるという決意をもって欲しいと期待しています。

# 重要な日程

さきがけ 募集  
締切 | 6月1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

## さきがけ「未来材料」 選考スケジュール (予定)

面接対象者への通知	TBD
面接選考会	TBD (8/2~8/6)
採択となる可能性が高い方への連絡	TBD
選定課題の発表	9月中旬~下旬
研究開始	10月以降