

○戦略目標「元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探索空間の開拓」の下の研究領域

未踏探索空間における革新的物質の開発（略称：未踏物質探索）

研究総括：北川 宏（京都大学 大学院理学研究科 教授）

研究領域の概要

本研究領域は、元素の潜在能力を最大限に引き出すと共に、元素の組み合わせがもたらす膨大な物質探索空間を開拓することにより、複数元素のシナジー効果による革新的な機能・物性を有する新材料を創出することを目的とします。具体的には、無機物質、有機物質を問わず、物質探索空間を複合化・多元素化・準安定相等の未踏の領域に拡大し、効率的に物質探索を進める戦略的な取り組みを重視します。

複合化では、未開拓な元素の組み合わせによる新規な分子や固体、異種材料接合からなるナノシステム等の革新的機能・物性発現が期待されます。多元素化では、様々な相（結晶相、アモルファス相、電子相、スピン相など）の発見や、多様な欠陥種を利用した材料設計等が期待されます。準安定相では、速度論的制御法である非平衡合成による新物質相の発見や所望の結晶相や物性の実現、イオン拡散や電池容量、触媒能の促進、可逆的な相制御等が期待されます。また単純な系であっても、ダイヤモンドやフラーレンのような新たな同素体の発見があるかもしれません。これら以外に新たな材料設計の概念、例えば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を打ち出すことも歓迎します。

各研究チームのゴールとして期待することは、元素の高度利用を基軸に新材料を効率的に探索するため、計算科学/データ科学/高スループット評価/非平衡プロセス/プロセス・インフォマティクスに直結させたその場計測などを含む材料創製手法を開発し、新機能の発見や、信頼性・耐久性の飛躍的な向上を実証することです。それにより本研究領域は元素高度利用の科学と新機能材料創製の開発基盤を構築します。

募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

1. 基本方針

本研究領域は、元素の持つ潜在能力を最大限に利用・活用することにより、深刻化する社会的課題の解決に資する革新的機能ないし飛躍的な性能を有する新材料を創出することを目的とします。希少元素の代替・使用量削減を主眼に展開されてきた元素戦略を基軸にしつつも、令和以降深刻化する社会課題の解決に貢献するため、物質探索空間を、無機物質、有機物質を問わず、複合化・多元素化・準安定相等の未踏の領域に拡大し、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。従って本研究領域では、従来法の改良型研究の提案は期待しません。

未踏領域において新規の機能や飛躍的な性能を有する新材料を開発するには、解決を目指す社会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持つことが不可欠です。複合化・多元素化・準安定相をはじめとして、様々な概念や独自の構想を元にアイデアを提示する場合でも、その新規性・裏付けとなる理論/予測を示してください。そうしたアイデアを起点として、未踏の材料空間を探索するための方法論を開拓し、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までの研究戦略を論理的に策定することが重要です。

2. 想定する研究分野

元素の高度活用による革新的機能の実現のアイデアを実証していく上で、(1) 新材料を未踏領域で効率的に探索するための手法と (2) 新材料を合成するための新規のプロセス技術が研究事項となります。

[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・光学特性・磁性・誘電性・化学反応性/触媒能・分離/吸着能・蓄電容量等の複数の物性/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。

[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
- ・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。

さらに、エネルギー・電子/通信デバイス・化学・建築/土木・モビリティ・ヘルスケア・農業に実用可能な材料を提供するには、

- ・寿命、高耐久化、準安定相の安定化
- 等も考慮に入れる必要があります。

本領域では無機/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。またカテゴリーとして複合化・多元素化・準安定相を掲げますが、これら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。但し、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とします。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とそれを実現する戦略を明確にして、研究課題を提案してください。

3. 研究実施体制

元素の有効活用や高度利用の立場から、物質探索空間を未踏領域まで広く拡大し、新材料や新機能の創出を目指すために、本領域では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します。従来のトライアル・アンド・エラー法や改良型研究手法とは一線を画する新しい材料探索の手法を、強い連携で生み出すよう努めてください。チーム内に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ですが、応募要件として必須にはせず、アイデアを実現していく上で必要となった場合に領域内/外との連携を検討していただきます。研究予算の計画では、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、適切に設定してください。なお、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省力化を主たる開発内容とする提案は対象外とします。

4. 研究費と研究期間

当初研究費は1課題あたり総額3億円（直接経費）を上限とします。但し、計算科学/データ科学/高スループット評価/非平衡プロセス/データ科学に直結させたその場計測など多岐にわたる提案でかつ真に必要なと認められる場合は、当初研究費は1課題あたり総額4億円（直接経費）を上限とします。

また、研究期間は2021年度から2026年度（5年半以内）とします。

5. 運営方針

- ・課題採択後1.5年以内を目途にサイトビジットを行い、研究環境と研究チームの立ち上げ状況を確認し、研究計画/具体的な成果イメージを共有します。
- ・年1~2回領域会議を開催し、研究の進捗状況を確認し、必要に応じて研究計画/体制を随時修正していただきます。また、失敗例でも別の目的・観点で他チームの興味を引く場合がありますので、領域会議で積極的に発表してください。
- ・研究開始3年経過後に課題中間評価を行い、未踏領域での物質・材料探索に如何に挑戦したのかについて評価します。また、プロジェクト後半での研究成果の拡大、論文等公表の

促進、特許の獲得、産業界との連携を加速するための措置等について議論します。また公開シンポジウム等を開催し、外部・産業界の研究者/技術者に成果を報告、成果拡大の方針等について議論していただきます。

- 研究最終年度に課題事後評価を行い、研究期間終了後の成果展開の方針等を議論します。また公開シンポジウム等を開催し、CREST 研究の成果を外部や産業界にアピールしていただきます。
- 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」との連携を検討していただきます。
- 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」にも展開していただきます。