

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。
 - 環境・エネルギー問題や持続可能な社会実現のためにも、**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という従来の考えから、**複数元素間のシナジー（掛算）効果を最大限に引き出す考えへ**。
- ⇒ **物質・材料探査空間を、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、**
或いは 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強く奨励**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。**
 - **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。**

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イメージ。
- 元素間の新しいシナジー効果（**元素の掛け算**）を重視。
- デバイスが先導するのではなく、あくまでも「**新物質科学**」が**先導**して、資源・エネルギー・環境分野からライフサイエンス分野や情報分野にわたる社会課題の解決にあたる。
- **外部公表**（トップジャーナルへの掲載や特許の申請）の状況を**重視**。
- 国内研究者との共同研究では実施不可能なテーマについては、**国際共同研究**を実施し、国際共著論文として公表することを強く**推奨**。

第一期採択課題（2021年）

応募59課題から
6課題を採択

第一期-1		有機		有機/無機
チーム		竹谷T	山口T	塩見T
課題		電子閉じ込め分子の二次元結晶と汎用量子デバイスの開発	励起ダイナミクス制御に基づく光機能性ヘテロn電子系の創製	巨大連続空間探索による不秩序熱機能材料の革新
目的		結晶構造予測アルゴリズムと第一原理電子状態計算の手法を活用して多様な量子井戸空間を探索し、室温共鳴トンネル素子・超伝導量子ビット・高速集積回路に応用、無線給電・高速通信・量子デバイス等の用途を開拓する。	多環n骨格に種々のヘテロ元素を組み込んだヘテロn電子系に関し励起状態の素過程に対する量子ダイナミクス計算と元素修飾のスクリーニングを進め、有機光エレクトロニクスと蛍光イメージングを革新する新たな分子性光技術を創出する。	量子計算・協働ロボティクス・固体/ウェットプロセスの自動コンビナトリアル合成・評価を連動させ、準安定・不秩序系やプロセスパラメータも含めた巨大空間を探索、高密度断熱材料および高性能な熱放射膜を開発する。
チーム構成	合成成膜	岡本G 分子設計・合成・デバイス作製	山口G 多環リード骨格の開発/機能検証-1 安田G 多環リード骨格の開発/機能検証-2	塩見G ウェットQRループ/不秩序系熱科学 後藤G 固体QRループ/フィラー探索
	分析評価	竹谷G 物性解明		
	計算	小林G 結晶/電子状態・輸送特性シミュレーション	藤本G 遷移速度計算手法の開発	
	データ科学			津田G 量子計算/巨大空間探索手法

第一期採択課題（2021年）

応募59課題から
6課題を採択

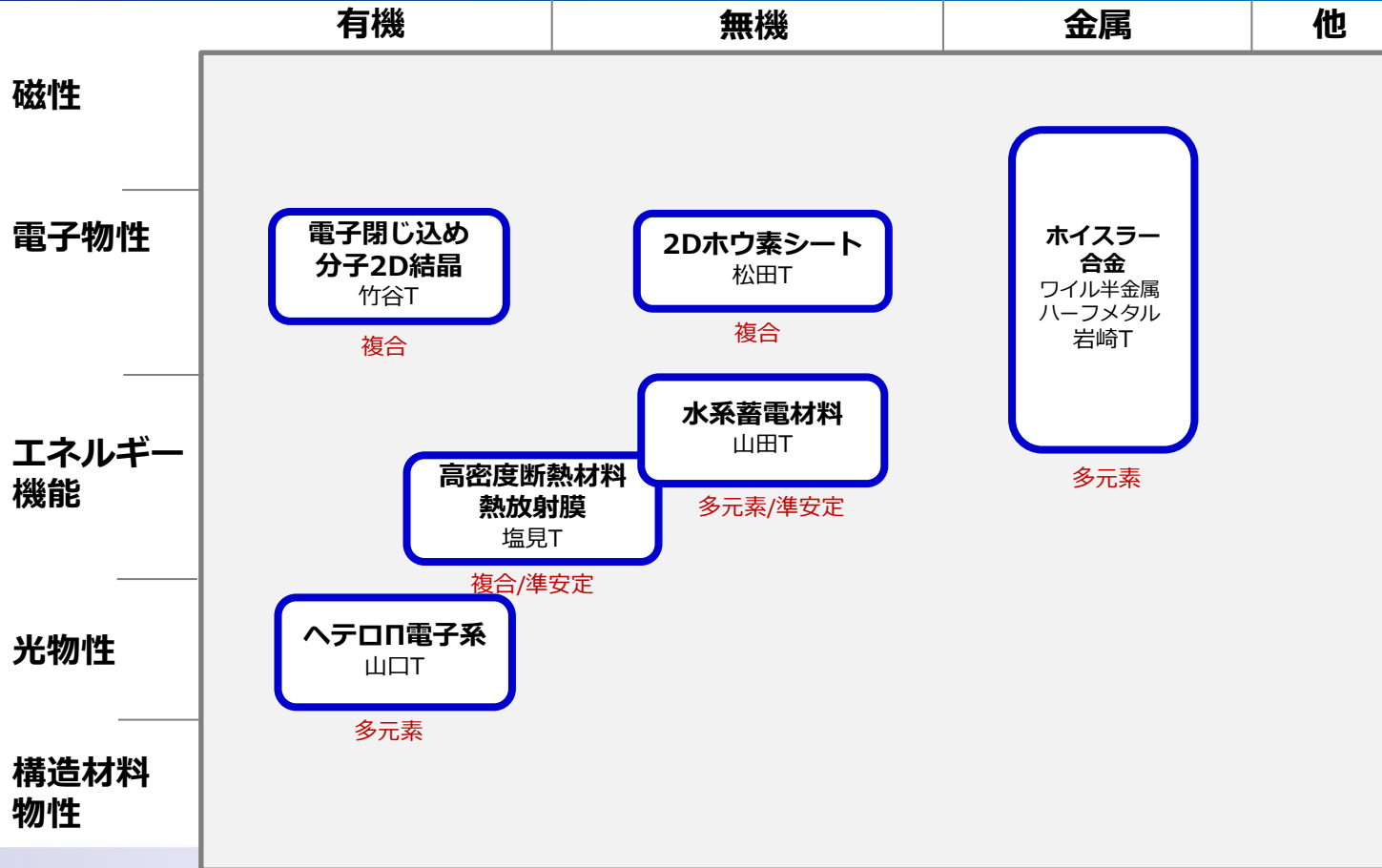
第一期-2		無機		金属
チーム		山田T	松田T	岩崎T
課題		水を基軸とする未踏蓄電機能材料の開拓	2次元ホウ素未踏マテリアルの創製と機能開拓	科学者の能力を拡張する階層的自律探索手法による新材料の創製
目的		実験、理論、計測およびデータ科学を融合し、アルカリ金属融水合物およびホストゲスト反応系新規固体電極材料を広く探索、新しい蓄電メカニズムを発掘して、高エネルギー密度/高速性を有する水溶液系蓄電材料システムを創製する。	オペランド実験とプロセスインフォマティクスを融合したホウ素系原子層物質の合成開発システムを構築、多次元物質データを取得し、機械学習処理することで高機能複合材料を開拓する。	コンビナトリアル実験・材料シミュレーション・データ科学・ロボティクス等を統合した「階層的自律探索システム」により、材料科学者の能力を拡張させつつ新材料を創製する。
チーム構成	合成成膜	山田G 融水合物開発・界面最適化 駒場G 電極開発・材料地図作成 藪内G 界面・欠陥制御/準安定電極材料	松田G 原子層設計・合成法開発 近藤G フロー型原子層合成法開発	桜庭G 実空間自律探索AI
	分析評価	大久保G X線タイコグラフィー	小嗣G 計測インフォマティクス 吹留G デバイス作製・機能検証	小嗣G マルチスケール/モーダル解析
	計算			岩崎G 仮想空間自律探索AI
	データ科学	中山G 蓄電池材料記述子開発 MI/PI	安藤G PI/MI・原子層ライブラリ作成	五十嵐G 科学者能力拡張AI

課題ポートフォリオ

2023年度
採択

2022年度
採択

2021年度
採択



2022年度応募者への期待

未踏の物質・材料空間を高速に高効率に探索するための方法論開拓の提案を期待します。

- **未知の革新的物質の発見に繋がる提案を期待しています。**
- **デバイス開発が主目的ではない。**
- **既存材料の改良型研究は期待しません。**
- **高分子材料、構造材料、金属錯体、触媒などの提案を歓迎します。**
- **合成や膜生成のプロセス最適化は対象外です。あくまでも新物質相探索を目指した提案を期待します。**
- **女性研究者が代表者として参画する課題提案も大いに歓迎します。**
- **仲良し倶楽部ではなく、真にベストな研究者構成で！**

重要な日程

CREST 募集締切 | 6月7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18日 (月曜)
面接選考会	8月1日 (月曜)
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月下旬
研究開始	10月以降

JST-ANR 日仏共同提案の募集について

- 今年度、本領域は日仏共同提案を受け付けます。

https://www.jst.go.jp/kisoken/boshuu/teian/top/info/info_220221.html

- 日本側の研究代表者は、e-Rad「応募情報ファイル」の項目にて、フランスANRに提出された日仏共同提案書と同一の提案書をアップロードしてください。

- また、日仏共同提案書と併せて「CREST-ANR日仏共同提案 要旨」を作成し、PDFファイル化してアップロードしてください。