

○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

## 物質探索空間の拡大による未来材料の創製

研究総括：陰山 洋（京都大学 大学院工学研究科 教授）

### 研究領域の概要

本研究領域は、我々が直面する環境・資源・エネルギー、医療・健康等に代表される社会課題を解決するために、従来技術とは異なる非連続な概念・コンセプトを探求したシンプルかつ斬新なアイデアにより、これまでの物質探索空間の枠を超えた、革新的な新機能性材料の創出を目指します。

具体的には、異なる元素同士のシナジー効果を解明した上での元素の複合化による「多元素化」、元素の配置制御等による材料システムとしての「機能複合化」、非平衡状態や速度論的制御を利用する「準安定相」の活用等の視点で、環境・エネルギー関連材料、エレクトロニクス材料、医用材料、構造材料等への利用に向けて夢のある材料・プロセス研究を推進します。

さらに、将来的な素材化、プロセス化技術の流れも意識し、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、広い視点を背景とした挑戦的なアプローチでの研究を目指します。

### 募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

#### 1. 背景と基本方針

本研究領域では、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狙い、未踏の物質探索空間の開拓と、それらを支える基盤技術を対象とします。材料創製の探索範囲をこれまで積極的に扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立等、高度化した材料への要求に応えうる未来材料の創製が期待されます。また、論理／計算科学やデータ科学、最先端の計測／評価技術等は、それらの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して、実験系へのフィードバックや新しい物質設計指針の提唱につながることを望んでいます。

対象とする研究領域はエレクトロニクス、環境・エネルギー、医療等をはじめとする社会の様々なニーズと深く関わる材料の創製とし、従来技術とは異なる非連続な概念・コンセプト

トを探究しシンプルかつ斬新なアイデアの実現に挑戦する好奇心が詰まった提案を求めます。夢のある独創性の高い研究を歓迎しますが、どのような着想、洞察、理論的考察をもとにしているか、物質観・材料観についても、しっかり明示してほしいと思います。

## 2. 想定する研究分野と募集選考の方針

本領域の方針として、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ています。そのため、単なる材料の最適化や既存プロセスの改善等、従来路線の延長の研究提案は対象外とします。

提案内容は、無機・有機・金属・複合材等の材料分野、結晶・非結晶等の性状は限定せず、またカテゴリーとして多元素化・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。また、材料合成プロセスについても、気相・液相・固相に限定するものではありません。予想もしなかった新機能を発現する未来材料の創製により、社会課題解決へ貢献を目指した提案を広く歓迎します。

具体的な研究課題を例として示します。

- 1) 異なる元素同士のシナジー効果を解明した上での元素の複合化による、多元素化・機能複合化、準安定相等を活用した新物質・新材料の創出
  - ・従来の単元系、二元系、三元系を超えた多元系元素からなる材料開発  
多元系合金、固体電解質、熱電、ハイエントロピー合金、ヘテロ元素含有高分子、等
  - ・異種の元素や構造の複合化による界面の制御により機能発現する材料開発  
ハイドロジェノミクス、複合アニオン、複合触媒、等
  - ・熱力学的に不安定な準安定相などを活用する材料開発  
高压超伝導、パワー半導体、ガラス状高分子、等
- 2) 新物質、新材料創出を支える基盤技術の構築
  - ・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、等
  - ・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 (AI ロボット)、プロセスシミュレーション、等
  - ・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、等

## 3. 応募にあたっての留意点

応募にあたっては、さきがけ研究期間内での計画達成は前提としつつ、近未来の社会課題解決に資する応用につながるような、新たなサイエンスの源流を開拓する意欲的な研究提案を期待します。さきがけ研究は個人型研究ですが、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。必要に応じて、共同研究のイメージを記述してください。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。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分野創成の可能性なども考慮します。

なお、さきがけは、研究タイプ「個人型」、研究費総額「3～4千万円（直接経費）」、研究期間「3.5年以内」を予定しています。

#### 4. 領域運営の方針

本研究領域では、各研究者が得意技や持ち味を生かしながら、好奇心にあふれた独創的・先進的なアイデアで魅力ある研究を遂行できるような環境を構築していきます。研究はその目標や内容によって、成果に到達するまでの時間が異なります。さきがけ研究期間での到達目標の設定とその遂行は必要ですが、その先にどのような展開があり、どのような新しい材料の創製を導くのかを追求することも重要です。そのために本研究領域では、原則年2回の領域会議や研究実施場所へのサイトビジット等を通して、研究総括、領域アドバイザー、また、採択研究者間の自由で忌憚のない意見交換を積極的に行っていきます。研究機関・地域・ジェンダーなど多様性を尊重して研究者、研究課題の魅力が最大限に引き出され、“夢”で繋がる研究者同士のシナジー効果を大切にし、新しい観点や柔軟な発想での研究が生み出され、研究者自身が将来を描けるよう、研究領域全体でサポートします。この研究領域の推進を通して、次世代の物質創製のリーダーを育成したいと考えています。

また、ワークショップやシンポジウム等の開催を通じて、同じ戦略目標の下で実施するCREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」との連携や、海外研究機関との学術交流も積極的に進めます。本研究領域での研究が、色々な分野へ波及しながら、想定を超えた新機能を発現する新物質・新材料を創製につながることを期待しています。