

研究領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」

中間評価（課題評価）結果

1. 研究領域の概要

本研究領域では、これまで実施されてきた物質・材料開発の基本となる実験科学と、理論、計算、データ科学とを融合させることにより、革新的材料開発へとつながる手法の構築を目指します。具体的には、高い社会的ニーズがあるものの、未だ達成されていない材料や機能をターゲットにして、その実現に向けた研究を新しい体制で行うことで、これまで世界をリードしてきた日本の材料研究の新しいスタイルを提示します。物質科学にとどまらず、実材料への展開に不可欠な複雑系にも踏み込んだ研究を対象とします。体制として、材料に関する実験系を軸に、理論系、計算系、データ系研究者でチームを構成し、密に連携しながら研究を推進します。これらを通じて、革新的な新規材料開発手法を提示し、我が国の産業競争力の向上に貢献します。

2. 中間評価の概要

2-1. 評価の目的、方法、評価項目及び基準

戦略的創造研究推進事業・CRESTにおける中間評価の目的、方法、評価項目及び基準に沿って実施した。

2-2. 評価対象研究代表者及び研究課題

2019年度採択研究課題

- (1) 桂 ゆかり（物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 主任研究員）
新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発
- (2) 武田 隆史（物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 グループリーダー）
実験とデータ科学の循環による蛍光体開発
- (3) 内藤 昌信（物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 グループリーダー）
データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発
- (4) 能崎 幸雄（慶應義塾大学理工学部 教授）
ナノ構造制御と計算科学を融合した傾斜材料開発とスピンドバイス応用

2-3. 中間評価会の実施時期

2022年12月1日（木曜日）

2-4. 評価者

研究総括

細野 秀雄 東京工業大学 名誉教授・MDX元素戦略研究センター特命教授

領域アドバイザー

石田 清仁 東北大学 名誉教授

伊藤 耕三 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

伊藤 聡 (公財) 計算科学振興財団 チーフコーディネータ

大橋 直樹 物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 拠点長

楠 美智子 名古屋大学 名誉教授

津田 宏治 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

中川 淳一 東京大学大学院数理科学研究科社会連携講座「データサイエンスに

おける数学イノベーション」 特任教授（講座代表）
野本 和正 ソニーグループ（株）R&Dセンター テクノロジーフェロー
山崎 聡 金沢大学ナノマテリアル研究所 特任教授
湯浅 新治 産業技術総合研究所新原理コンピューティング研究センター 研究
センター長
吉田 博 大阪大学 名誉教授／東京大学工学系研究科附属スピントロニクス
学術連携研究教育センター 嘱託研究員

外部評価者

該当無し。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発
2. 研究代表者： 桂 ゆかり（物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 主任研究員）
3. 中間評価結果

本研究チームでは、研究項目のそれぞれに進捗は見られるものの、開発材料の性能目標を明確にしている段階でデバイス化技術のテーマを設定する等、時間軸を考慮した研究計画の整理が適切になされていないと判断する。Na フラックス法およびイオン導入手法で多数の新規物質を見出しているが、物性を未だほとんど評価していないため、有用性が不明である。データ科学を前面に打ち出しているが、支柱にしている「結晶構造シミュレーター」・「物質探索マップ」の方法論の詳細、競合研究に対する優位性を示す論文の出版には至っていない。よって、結晶構造シミュレーターで意味のある革新的な物質・材料に効率的に到達できるか、疑問が残されたままである。

このような経緯に鑑み、本プロジェクトの方向性の見直しは必須であると考え。ドロネー四面体の応用は、物質構造設計への適用が困難な状況にあると見受けられ、プロジェクト後半での活動の比重を下げるのが賢明であろうと考える。デバイス化技術では、バリアメタルに取り組むよりは、優先度の高い熱電特性評価に注力すべきである。

物性・構造評価を迅速に進め、その結果を予測/提案・合成にフィードバックする研究サイクルを加速し、学理に立脚した仮説を立てることで、革新的熱電材料の発見とその産業展開に繋げることを期待する。領域アドバイザーのコメントを参考にして計画を軌道修正することで、プロジェクト後半での成果進展を図っていただきたい。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 実験とデータ科学の循環による蛍光体開発
2. 研究代表者： 武田 隆史（物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 グループリーダー）
3. 中間評価結果

本研究チームは、蛍光体の組成、結晶構造情報を記述子にして発光波長と発光線幅のモデル構築を進め、モデルが提案する狭帯発光候補物質の実証実験を行い、新規の蛍光体材料を開発している。蛍光体の配位構造の類似性に着目した機械学習、および単粒子診断法という独自の実験手法を駆使して、産業展開も可能な物質の発見に至り、その実証実験を基に新種の蛍光体材料を開発しつつあることは、高く評価できる。データ科学の方法論を年ごとに進化させており、手法の妥当性と有効性も論文・特許という客観的エビデンスで裏づけられている。

一方、実験・理論グループ間の連携・研究チームとしての機動力の不足は、懸念される点である。また、狭帯域蛍光体は実現できたものの、ターゲットとする緑色狭帯域の蛍光体の実現には至っていない。

プロジェクト前半で蓄積した実験的・データ科学的手法を発展、理論研究とも融合させ、目的とする緑色狭帯域蛍光体および高輝度蛍光体の候補提案・合成実証のサイクルを加速し、真に革新的な蛍光体の開発・実用化に繋げていただきたい。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発
2. 研究代表者： 内藤 昌信 (物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 グループリーダー)
3. 中間評価結果

本プロジェクトは当初、進捗に遅れが見られたが、研究計画を機動的に見直し、良好な方向に進められつつある。高分子配列解析アルゴリズム「ポリマーシークエンサー」を開発し、高分子・有機材料の自律合成を可能とするポリマースマートラボ、およびその基本オペレーションシステムを作製するなど、データ駆動型のポリマー材料開発のためのプラットフォームを構築している点は、本領域の主眼である「新しい材料研究方法論の開発」の観点から、高く評価できる。9件の特許出願をもとに企業連携とベンチャー起業を志向し、技術イノベーションへの寄与を強く意識した研究活動を展開しており、若手研究者に活躍の場を与えていることも評価できる。

全体としてバランスとの取れた進捗となっており十分な成果が挙がりつつあると判断されるいっぽう、現時点では成果内容に比べ発表論文数が極端に少ない。また、当初の想定を超える際立った機能を示す材料が得られているわけでもない。研究開発ツールは順調に構築できているので、プロジェクト後半はそれを有効に活用して画期的な材料の創出に繋げていただきたい。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： ナノ構造制御と計算科学を融合した傾斜材料開発とスピンドバイス応用

2. 研究代表者： 能崎 幸雄（慶應義塾大学理工学部 教授）

3. 中間評価結果

本プロジェクトでは、研究代表者の強いリーダーシップのもと、優れた原子層積層技術、表面弾性波振幅の高精度定量技術等、高レベルの実験技術を土台に、理論・実験を両輪とするグループ間連携を十分にとって、物理の原理・原則に立脚したプロジェクト運営が進められている。新規の計測法・理論・モデルを構築し、定評のあるジャーナルへの多数の論文掲載を通じて、スピントロニクス分野の基礎学理の進展に貢献している。さらに機能の制御因子を導出、Si/Al 傾斜材料をはじめイノベーションに繋がりうる技術を開発し、特許出願にも前向きに取り組んでいる。

磁気回転効果の研究はほぼ目標を達成しつつあり、傾斜材料の開発も順調に進んでいると認められる。さらに大きな発展は今後の活動次第であり、磁気スイッチング特性の評価を加速して進めることが重要である。主テーマではないが、新規トンネルバリア材料の開発にも進展を期待する。

本研究領域の目的は、学理構築のみでなく、材料研究の新しい方法論の提示とそれによる革新的材料の創出である。この目的に合致する研究展開、例えば組成傾斜材料へのデータ科学の活用等にも、積極的に取り組んでいただきたい。

以 上