

# 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」 事後評価（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. 事後評価の概要

### 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における事後評価の目的、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

#### 2018年度採択研究課題

- (1) 谷山 智康（名古屋大学大学院理学研究科 教授）  
界面マルチフェロイク材料の創製
- (2) 長谷川 達生（東京大学大学院工学系研究科 教授）  
実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発
- (3) 山崎 仁丈（九州大学エネルギー研究教育機構 教授）  
実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製
- (4) 山本 明保（東京農工大学大学院工学研究院 准教授）  
超伝導インフォマティクスに基づく多結晶型超伝導材料・磁石の開発

### 2-3. 事後評価会の実施時期

2023年11月23日（木曜）

### 2-4. 評価者

#### 研究総括

細野 秀雄 東京工業大学 名誉教授・元素戦略MDX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 電子・光機能材料研究センター センター長

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 日鉄総研（株） 客員研究員

野本 和正	ソニーグループ（株）テクノロジープラットフォーム 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  
該当なし。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 界面マルチフェロイク材料の創製
2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

谷山 智康（名古屋大学大学院理学研究科 教授）

主たる共同研究者

木村 崇（九州大学大学院理学研究院 教授）

合田 義弘（東京工業大学物質理工学院 准教授）

浜屋 宏平（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている
---------

○総合評価コメント：

本プロジェクトは、実験的アプローチに加え、ベイズ最適化による「逆問題解法」に立脚した材料・界面の設計とスクリーニングを基盤として、巨大磁気-電気相関を有する界面マルチフェロイク材料を効率的に探索することを目的としたものである。

本チームは磁気-電気結合係数の目標値を達成し、性能は満足とは言えないもののトンネル磁気抵抗や熱流・スピン波の電界変調を実証するなど、ほぼ期待通りの成果を得ている。Advanced Materials等、高インパクトファクターのジャーナルでの掲載を含む60件超の原著論文を公表し、9件の学会賞等も授与されるなど、基礎研究として優れた成果を達成している。世界最高の磁気-電気結合係数をもつ界面マルチフェロイク材料を創製したことに加え、特にCo系Heusler合金/強誘電体界面構造における巨大磁気-電気結合係数の起源を解明し、界面原子層の挿入により磁気-電気結合効果を巨大化させた、という成果も興味深い。若手研究者の育成ではアカデミックポストに採用・昇任（6名）、JSPS特別研究員に採用（4名）、博士学位の取得（6名）という実績を残している。また知的財産では、社会実装に繋がるかどうかは現時点では不明であるものの、国内3件、外国1件の特許を出願している。以上により、本プロジェクトは優れた成果を挙げたものと評価できる。

伝統的なペロブスカイト系強誘電体はサイズ効果や疲労の点で限界が明確になりつつあるが、これらの欠点を補う物性を持つHfO<sub>2</sub>等の新しい薄膜強誘電材料を組み込んでメモリ効果を実証できれば、微細化・高信頼化への道も開かれると考えられる。本プロジェクトで蓄積した手法や成果を基に、新規の強誘電体を界面フェロイク材料に取り込む果敢な挑戦により、大きく飛躍していくことを期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

長谷川 達生 （東京大学大学院工学系研究科 教授）

主たる共同研究者

熊井 玲児 （高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 教授）

堀内 佐智雄 （産業技術総合研究所電子光基礎技術研究部門 上級主任研究員）

松井 弘之 （山形大学大学院有機材料システム研究科 教授）

米倉 功治 （理化学研究所放射光科学研究センター グループディレクター/  
東北大学多元物質科学研究所 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本プロジェクトは、「塗布」により高性能・高精細・大面積の電子デバイスを製造する基盤となる、塗布型電子材料の探索手法の開発、塗布プロセスの高度化を目的としたものである。

本チームは有機半導体・強誘電体の結晶構造予測・分子設計の手法と有機薄膜の構造解析法を開発し、塗布型強誘電体の新物質を発見、高性能二次元結晶性有機半導体を実現、また分子動力学計算により二次元半導体の秩序化過程を解明するなど確かな成果を挙げ、定評のあるジャーナルに多数の論文を発表している。開発した革新材料創出の方法論は高レベルにあり、ほぼ完成しつつある。特にクライオTEMとX線自由電子レーザーを併せて駆使する構造解析手法は、有機薄膜材料の新規評価法の創出という点で独自性の高い成果である。若手研究者育成では、博士号取得3名、博士課程進学10名と、次世代を担う研究者を輩出しており、プロジェクト運営の成功事例であると言える。

一方、知的財産に関して、高均質塗布製膜法をはじめ2件のPCTを含め特許出願8件を行っているものの侵害確認が困難な製法・解析手法に留まり、企業との共同開発、共同特許出願等により実用化への道を拓くに至っていないことは、残念な点である。有機薄膜の強誘電体とトランジスタを用いた柔軟でセンサー機能を有するin-memory computingなど、本チームならではの新展開も可能と考えられ、これからの新展開に期待する。クライオTEMとX線自由電子レーザーを用いた有機薄膜の構造解析手法は本チームが先鞭を付けたもので、新しい方法論として世界に認知されるよう、引き続き研究を継続していただきたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

山崎 仁丈（九州大学エネルギー研究教育機構 教授）

主たる共同研究者

奥山 勇治（宮崎大学工学教育研究部 教授）

桑原 彰秀（(一財) ファインセラミックスセンターナノ構造研究所 主席研究員）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

本プロジェクトは、実験と理論・計算・データ科学の融合によるプロトン伝導性無機化合物と電極材料の創製手法を開発し、中温度域（300～450℃）において $0.01\text{Scm}^{-1}$ 以上の高いプロトン伝導度と高い安定性を兼ね備えた革新的プロトン伝導性無機化合物を開発、それを用いた革新的プロトン伝導性デバイスの動作を実証することを目的とするものである。

本チームは水和実験と機械学習の融合によるデータ駆動型材料探索手法、解釈可能な非ペロブスカイト系プロトン伝導性無機化合物の探索機械学習モデル、有限温度・高濃度欠陥導入試料における欠陥分布計算手法等を開発した。これらを活用し300℃にて高いプロトン伝導性と化学的安定性を兼ね備えた新電解質材料を発見、300℃で動作する燃料電池デバイスを実現したことは、技術分野においても重要な成果である。PCT 出願2件を含め6件の特許を出願、開発した高プロトン伝導体の燃料電池応用が企業と連携したNEDOのプロジェクトに採択され、実用化に向けた取り組みを進めていることも、高く評価できる。複雑な組成を有する金属酸化物の膨大なデータとの格闘と徹底した実験との連携、飛躍した組成の合成への果敢な挑戦により大きな成果を得ており、研究代表者の優れたマネジメントによる研究チームが有機的に機能したものとも評価する。

一方、電解質に組み合わせる電極については研究が進展しなかったこと、プロジェクト後半で非ペロブスカイト酸化物に物質探索空間を広げたものの、まだ成果に繋がっていないことは、残念な点である。しかしながら、このような挑戦こそが次の大きな飛躍に繋がりが得るものであり、継続して挑戦を続ける努力を期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 超伝導インフォマティクスに基づく多結晶型超伝導材料・磁石の開発

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

山本 明保 （東京農工大学大学院工学研究院 准教授）

主たる共同研究者

飯田 和昌 （日本大学 生産工学部 教授）

嶋田 雄介 （九州大学 大学院総合理工学研究院 准教授）

波多 聡 （九州大学 大学院総合理工学研究院 教授）

山中 晃徳 （東京農工大学 大学院工学研究院 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

本プロジェクトは、鉄ニクタイト系等の新高温超伝導物質に関し、計算・データ科学と実験の有機的融合により、多結晶組織(プロセス)制御→物性制御→磁石性能実証の3フェーズで材料・デバイスを開発することを目的としている。

本チームは微細構造画像からの輸送特性予測手法、4次元STEM観察に基づく粒界形成シミュレーション手法等を開発した。計算・データ科学を導入したマルチスケール構造解析および計算シミュレーション、データ駆動のプロセス設計の手法により、超伝導多結晶の焼結プロセス・生成する多結晶の構造・超伝導特性の関係を把握し、研究期間内に世界記録の約3倍の多結晶型超伝導永久磁石を創出できたことは、高く評価できる。単一人工粒界を実現、単一粒界の輸送特性を測定し、鉄系の中でも高角粒界特性、磁場中 $J_c$ （臨界電流）が特異的に高い材料を提示したことも、優れた成果である。本チームは本研究領域の宇佐美チームと共同研究を実施し、「多結晶情報材料学」の構築に新たな展開を見せつつある。多結晶情報材料学は大きな可能性を秘めた新領域であることから、さらに共同研究を進め、世界で広く認められるレベルにまで高めていただきたい。本チームは人材育成においてもアカデミックポストへの5名の昇任、6名の博士課程への進学、学生の海外派遣等、成果を挙げている。研究代表者が多岐の分野に渡る気鋭の研究者を有機的に繋ぐ優れた研究マネジメントが実施したものと評価する。

多結晶超伝導磁石は、大きな期待を受けつつも乗り越える課題が未だ多い。本研究チームの中心的メンバーは気鋭の研究者であることから、成果を社会実装に繋げるべく産業界と連携した活動を推進するよう、期待する。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立とスマートシリコンインゴットの創製

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

宇佐美 徳隆（名古屋大学大学院工学研究科 教授）

主たる共同研究者

大野 裕（東北大学金属材料研究所 学術研究員）

工藤 博章（名古屋大学大学院情報学研究科 准教授）

横井 達矢（名古屋大学大学院工学研究科 講師）

3. 事後評価結果

○評点（2022年度事後評価時）：

A 優れている
---------

○総合評価コメント：

（以下、2022年度課題事後評価時のコメント）

本プロジェクトは多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立を目的としたもので、太陽電池用の多結晶シリコンを主な研究対象としている。AI技術による3次元の粒界構造解析やニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを利用した大規模計算を取り入れることで、物性と組織との関係を明らかにしている。それらの成果を実験にフィードバックし、製造プロセスの最適化や製品の歩留まりを向上させるプロセスの提案も行っている。また、開発した手法を他チームとの共同研究テーマに展開し、成果に結びつきそうな段階に至っている。論文発表、企業との共同研究も確り行われている。これらの成果は、これまで粒界の存在のため研究の進展が遅れていた多結晶材料の研究のスタイルを刷新する方向を、実例をもって示したのものとして高く評価できる。

一方、世界トップレベルのジャーナルでの論文掲載が少なかったこと、研究期間内の対象材料が主としてシリコンに留まったことは残念である。

粒界が多結晶の機能に大きく作用する複雑な材料系はセラミックス等に数多く存在する。本研究で開発した手法をそれらにも適用できるよう注力して、「多結晶材情報学」を確立していただきたい。

（2024年1月追記）

本チームは、これまでに構築した独自の研究手法を活用して多結晶材料中の転位クラスター発生に関する研究を進展させ、多結晶体に固有な粒界の曲がり起因するナノファセットの形成によって転位クラスターが発生するというモデルを提唱するに至っている。これは本プロジェクトらしい成果と評価でき、Advanced Materials誌に掲載された。また、本研究領域の山本チームや関連企業などと連携し、開発した各手法を多様な多結晶材料の解析や製造プロセス開発へ展開するとともに、粒界構造と熱物性の関係の解明など、新規の研究にも着手しており、さらなる展開の足場も築いている。AI関係では人工ニューラルネットワーク原子間相互ポテンシャル（ANNポテンシャル）の更なる予測能力の向上に取り組み、記述子として従来用いられてきた解析関数を2体間および3体間のANNに置き換え、さらにANNの出力を原子間ポテンシャル部分に対応する別のANNの入力にして3つのANNを同時に学習させることで、最適な記述子および原子間ポテンシャルを構築、精度の向上に成功している。

以上の成果は、本チームが標榜する「多結晶材料情報学」の構築に資するところが大きく、研究延長の顕著な効果であると評価する。



## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出
2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

水上 成美（東北大学材料科学高等研究所 教授）

主たる共同研究者

白井 正文（東北大学電気通信研究所 教授）

廣畑 貴文（ヨーク大学（イギリス）電子工学科 教授）※

※2024年1月時点：東北大学先端スピントロニクス研究開発センター 教授）

3. 事後評価結果

○評点（2022年度事後評価時）：

A+ 非常に優れている
-------------

○総合評価コメント：

（以下、2022年度課題事後評価時のコメント）

本プロジェクトは、計算科学を用いたトンネル磁気抵抗素子基盤材料の創出を目指したもので、トンネル磁気抵抗比（TMR、室温）1000%以上を目標に掲げている。研究期間中の結果として TMR 値が最終目標に達していないものの、ポテンシャルの高い新物質を見出し、あとは界面・組成の最適化をすれば良いと思われるレベルにまで追い込むことはできている。TMR 比を目的変数としてベイズ最適化を行い、磁気スティフネス係数をパラメータとした機械学習で、従来のモデルベースの材料探索空間を超えた広範囲で材料探索・検証を進め、MI の有効性を高めている。従来の酸化物系バリア膜から探索範囲を広げ、準安定窒化物バリアの有効性を見出している。論文発表と併せ、外国出願 2 件を含む十分な特許申請がなされている。また、チーム間の有機的連携を成果に上手く繋げており、CREST らしいチーム型の研究活動を展開したと判断される。

準安定磁性合金と準安定窒化物バリアという本プロジェクトで開発した新材料の組み合わせにより、優れた MRAM 特性に到達できるかどうか、今後の進展に注目し、トンネル磁気抵抗素子のブレークスルーに繋げることを期待する。

（2024年1月追記）

本チームは、研究期間を1年延長して磁気抵抗メモリ向けの实用特性を目指した研究に取り組み、準安定磁性合金/MgOバリア素子において垂直磁化を実証した。また、準安定立方晶窒化物半導体をバリア層に用いて、室温で100%を超えるトンネル磁気抵抗比と低抵抗を持つ素子を実現した。性能は未だ MgO系に及ばないものの、酸化物よりバンドギャップの小さい窒化物系で新バリア材料を見出し、特許のPCT出願まで至ったことは、重要な進展と評価できる。研究手法に関しては、有限温度における素子界面の磁気物性値の予測を第一原理計算で可能にした。これは、実用上重要な有限温度における素子界面仮想スクリーニング手法の確立に資する成果である。成果の社会実装に関しても、企業のアドバイスを得ながら取り組みを開始しており、今後の結実に期待する。

以上により、本プロジェクトは1年間の延長により今後のイノベーションに向けた展開を一層後押しする成果を得たものと評価する。

