

# 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

##### 2017年度採択研究課題

- (1) 宇佐美 徳隆（名古屋大学大学院工学研究科 教授）  
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) 大場 史康（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）  
データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓
- (3) 清水 研一（北海道大学触媒科学研究所 教授）  
触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究
- (4) 中嶋 健（東京工業大学物質理工学院 教授）  
熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御
- (5) 水上 成美（東北大学材料科学高等研究所 教授）  
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

#### 2-3. 事後評価会の実施時期

2022年12月11日（日曜日）

#### 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                          |
| 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：

|         |
|---------|
| A 優れている |
|---------|

○総合評価コメント：

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。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓

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

大場 史康（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）

主たる共同研究者

谷口 博基（名古屋大学大学院理学研究科 准教授）

田村 亮（物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主幹研究員）

野瀬 嘉太郎（京都大学大学院工学研究科 准教授）

平松 秀典（東京工業大学科学技術創成研究院 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、国内外の競合するマテリアルズ・インフォマティクス（MI）に対し精度で優位性のある第一原理計算データベースと種々のサンプリング法を駆使した機械学習法、さらには相図作成効率化の手法を開発し、新しい半導体・誘電体の探索方法論を確立したという点で、優れている。特に相図作成の効率化手法は、いち早く研究領域内の他チームにも浸透させており、材料開発方法のイノベーションの成功事例の一つに挙げることができる。また論文や知的財産権の成果も十分にある。

しかしながら、このチームから際立った特性を有する、あるいは有すると予想される材料が提唱・実現されていないこと、有力な研究者から構成されながら実験チーム間の相乗効果による成果が明確には見られなかったことは残念である。

本研究で開発した計算データベースを活用した MI による新機能物質の探索や新しい記述子の抽出などの手法は、今後の材料科学に広く展開されるものと期待している。また、能動学習の実験プロセスへの応用は実利的な効果も大きいと見込まれることから、現場への普及を具体的に計画し、進めていただきたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究

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

清水 研一（北海道大学触媒科学研究所 教授）

主たる共同研究者

蒲池 高志（福岡工業大学工学部 教授）

濱本 信次（山口東京理科大学工学部 助教）

日沼 洋陽（産業技術総合研究所エネルギー・環境領域 主任研究員）

前野 禪（工学院大学先進工学部 准教授）

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、理論データや機械学習を積極的に用いた触媒インフォマティクスの創成を目的とし、実験と機械学習のサイクルによる触媒探索方法を開発、材料設計の指針を示し、また表面欠陥サイトにおける多様な分子の活性化に関するデータ蓄積・理論モデル化手法を手掛けている。

多くの成果を挙げインパクトの高い雑誌に多数の論文を発表している点、若手研究者の育成も順調に進めた点で、本プロジェクトは高く評価することができる。

しかしながら、発見・開発された4種の新触媒が新手法によって導き出されたとは言い難く、革新的と述べている新触媒を含め、論文の発表に留まって特許を1件も出願しなかったことは、成果の真の意義に信頼性低下を生じさせ、材料研究のプロジェクト運営として適切ではない。

今後は、本プロジェクトで開発した優れた手法と発見した新触媒を有効に活用し、社会実装に繋げていっていただきたい。

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御

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

中嶋 健（東京工業大学物質理工学院 教授）

主たる共同研究者

小椎尾 謙（九州大学先端物質化学研究所 准教授）

小谷 元子（東北大学材料科学高等研究所 教授）

下川 航也（お茶の水女子大学基幹研究院 教授）

森田 裕史（産業技術総合研究所機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム長）

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、熱可塑性エラストマー（TPE）という産業上重要な材料を対象に、ナノ構造を AFM で、メソ構造を SAXS で実験的に捉え、その結果を位相幾何学でモデル化・解析し、さらにその知見を新しい TPE の合成にフィードバックするという、新しい方法論の確立を目指したものである。このアプローチは独自性が高く、TPE 内部の応力鎖のネットワークの存在を実証、数学グループでのモデル化に展開したことに、異分野融合による基礎研究への寄与が明確に認められる。また、データ同化シミュレーションと数学グループのアイデアに基づいて、従来の TPE を凌駕するブレンド試作品までに到達したことも意義深い。

成果を的確に論文として発表している一方、特許が申請準備中の 1 件のみであることは、成果内容に比べ少なすぎると言わざるを得ない。また、数学グループからの提案（エラストマーの弾塑性構成則、トポロジカルな理想格子等）が明示的に材料設計指針へ反映されるまでには至らなかったことは、残念な点である。数学との協奏による材料設計指針について、新たなプロジェクトで具体的成果につなげることで、有効性を高めていただきたい。企業連携は既に TPE 技術研究会を通じて進められており、確実に社会実装されることを期待する。

## 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）

### 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、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。

以上