

CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」

研究領域事後評価報告書

総合所見

本研究領域の戦略目標は、「希少元素・有害元素の代替、戦略的利用のための技術基盤を確立する」という目標達成に向け、①目指す材料・機能の発現原理を把握し、②ナノスケールで物質構造（原子配列、磁区構造、分子構造、界面、電子相関等）を制御し、③代替に留まらない「革新的機能材料の創生」を目指すことである。

このナノサイエンス・ナノテクノロジーに立脚したコンセプトに沿い、2010年度から2017年度にわたり、延べ12の研究課題・研究者を選定した。研究参画者は教授クラス110名、准教授・助教140名、ポスドク170名、企業から40名（総計460名）の他に、大学院生350名で構成され、分野、所属等もバランスが取れた布陣であった。研究総括の上記の研究戦略やビジョンは明確であり、参画研究者にネットワーク型バーチャル研究を要請し、機関横断・分野横断的な研究ネットワーク、国際・国内連携研究、多彩なシンポジウム開催などにより、源流発掘のための研究を推進し、産学官からのトップクラスの領域アドバイザー（延べ14名）の助言を含め、元素戦略に基づくサイエンスの深化とイノベーションに集中するシステムを構築した。またこれらの研究マネジメントは、領域内のチーム間共同研究や企業との共同研究の推進や、人材育成面では教授・准教授・講師への昇進、博士研究員や特定助教からの正規助教ポスト等への昇進（50名以上）へ反映された。

研究成果の科学技術への貢献では、ダイヤモンド電極、鉄鋼材料高靱性化、元素間融合、鉄触媒、相対論電子論など優れた研究成果があり、研究領域全体では学術成果として、論文約990件、国際学会での口頭講演約1000件（うち招待講演約660件）があり、また被引用回数が100回を超える論文もあり、国際的にも高水準の研究成果が出ている。科学技術イノベーションへの貢献では、企業との共同研究が活発になされており、社会実装、実用化に向けて進展している研究課題がある。これらの研究課題ではJSTのACCEL、A-STEPやNEDOなど応用指向のプログラム/プロジェクトへ展開が進んでいる。また、多くの研究課題で特許（約130件）が出願されており、特に鉄触媒、元素間融合などで多くの出願件数があり、研究総括の特許取得の体制構築が反映されている。

上記の研究マネジメントや研究成果の状況から、研究領域の設定と研究総括の選定は適切で、研究総括の果たした役割は非常に優れ、研究総括の描いた研究達成シナリオはほぼ達成した。

以上を総括し、本研究領域は総合的に特に優れていると評価できる。

1. 研究領域としての成果について

(1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

「確固たるサイエンス基盤」「従来概念を超えた元素新機能」「代替・削減・循環・規制」

「バーチャル研究所としての分野バランス」の理念に従い、以下の多様な 12 研究課題・研究者を採択した：無機材料 7 課題（完全レアメタルフリー鉄・コバルト磁性材料、レアメタルフリー鉄鋼材料設計原理、遷移金属の異常原子価・無機合成化学、原子レベル元素間融合材料、汎用元素で置換した酸化物電子材料、ジスプロシウムフリーネオジム磁石の高保磁力化、ダイヤモンド機能材料）、有機-無機複合系機能材料 1 課題（有機合成用鉄触媒の高機能化）、有機機能材料 2 課題（有機強誘電体、有機ラジカルの蓄電・光変換材料）、生体-無機複合材料 1 課題（微生物由来ナノ構造制御鉄酸化物）、理論 1 課題（相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計）。新機能の創出を目指して、合成研究者、計測研究者、理論計算の研究者が配置され、分野、所属等も偏りなくバランスが取れた強力な布陣となっている。領域アドバイザーは、企業所属者 3 名、女性 2 名、政策研究者 1 名を含む 13 名（当初 14 名）が関係分野をカバーしており理想的である。

各チームは異なる研究機関に所属する 2~9 グループにより構成され、大学院生を含め総計約 800 名以上が参画した。研究課題に対応し、「パラダイムシフトを誘起するようなコンセプトを生み出すサイエンスとイノベーション」に適切なアドバイス・指導が研究総括や領域アドバイザーから与えられたと判断される。単独研究では思いもよらない大きな相乗効果を意図し、多彩な連携研究が企画・実行された：各チームのチーム内勉強会・研究発表会・サイトビジット（毎年 2 回、研究総括や関連分野の領域アドバイザーが出席し、研究の他、実装に向けた取り組みのアドバイス実施）、領域内連携、領域外連携、さきがけ「元素戦略」との連携、国際連携、国家基幹技術のフル活用、産業界との連携などがあげられる。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは特に優れていたと評価できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

① 研究成果の科学技術への貢献

科学技術への貢献として、栄長チームのホウ素ドーパダイヤモンド電極の実装・応用が実現している。基礎サイエンスから応用を目指すものとして、古原チームの高靱性鋼、杉本チーム・宝野チームの磁性材料、北川チームの元素間融合物質、永島チームの有機合成用鉄触媒、高田チームの微生物由来酸化鉄、堀内チーム・長谷川チームの強誘電体、島川チームの界面エンジニアリング、森田チームの有機二次電池、中井チームの物質・機能理論、理論先導による物質・機能デザインがあり、研究領域の趣旨に添いながら、新領域を切り開いた、あるいは領域を大きく発展させたと評価できる。鉄系ではないものの全く新しい MnSnCoN 系合金で高保磁力化を実現した成果（杉本チーム）や、研究総括・領域アドバイザーによる提案で鉄系触媒にシフトし高機能触媒を見出した成果は、パラダイムシフトにつながる可能性が大きい。

各チームは全て優れた研究業績（Angew. Chem. Int. Ed., J. Am. Chem. Soc, Nature 誌, Nano Lett. PRL, 等々のジャーナル）を発信している。優れた研究業績である点は、論文の被引

用回数(研究分野に依存するが)が発表から5~6年で100回以上に及ぶものがあること(宝野、堀内、北川)、また特許出願が多いこと(研究総括が特許取得の体制構築に貢献)に反映している。上述した、参画研究者の研究・人材育成・受賞など優れた成果は(具体的には事後評価の調査時点において論文989件、招待講演1007件(基調講演659件)、特許131件、教授昇進8名、准教授・講師昇進16名、博士研究員や特定助教からの正規助教ポスト等への昇進51名、国内外の受賞8件、3件のACCELプログラムへの展開)は、本研究領域が国際的に高い水準のサイエンスを達成し、さらなる発展への可能性を示している。

以上により、研究成果の科学技術への貢献については特に高い水準にあると評価できる。

② 研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献

栄長チームの、ホウ素ドーパダイヤモンド電極を用いた新反応・新分析は社会実装に進んでいる(特許12件/3年):がんバイオマーカー、CO₂と海水でホルムアルデヒドを高効率合成、オゾン水素発生装置の実用化はインパクトのある成果である。他チームはイノベーション創出に近い成果を挙げている。特許件数の多いのは、永島チーム:遷移金属触媒の研究を中間評価時点から領域アドバイザーの助言により、鉄触媒に集中し、いくつかの鉄触媒主要有機化学反応を達成した(特許34件/7年、オールジャパン体制を組織化した)、北川チーム:「元素間融合」開発法により触媒分野や水素吸蔵金属に新たな領域を開拓した(特許49件/5年)、高田チームの微生物由来鉄酸化物(特許12件/6年)、森田チームの有機二次電池開発(特許14件/6年)がある。特許件数は多くないが、宝野チーム(高保磁力ネオジム磁石の作製)、杉本チーム(新規磁性化合物の作製)、古原チーム(レアメタルフリーでの鉄鋼材料の高機能化)、堀内チーム(有機強誘電体)、島川チーム(ソフトケミストリーによる無機機能材料作製)の研究成果は、今後、技術的・社会的に大きなインパクトを期待できる成果である。本研究領域研究者の多岐にわたる国際論文(著名ジャーナルが多い)・国際講演(基調講演が多い)の内容は、これらの研究の独創性・先行性・優位性が国際的に充分あることを示している。本研究領域期間において、参画研究者は産業界との連携も出来上がりつつあり、これらの成果が将来、社会実装につながることに非常に期待が持てる。これらが社会の仕組みを変革する科学技術イノベーションの創出に寄与し、世界と戦える独創的な新産業の創成に本当に資する成果となるように、今後の研究の発展に期待したい。

以上により、研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献については、高い水準にあると評価できる。

2. 研究領域の活動・成果を踏まえた今後の展開等についての提言

「革新的機能材料の創生」に向けた本研究領域の学術的成果を、産業化・実用化に向け

て展開するには、本研究領域で進めた、産学官間連携研究、物質・機能デザインに優れた理論研究者との連携、チーム内または領域アドバイザーに当該分野の内容に熟知した産業界からの人材が不可欠である。産学官・国際連携を通して、これまでの延長に無い、全く新規な幅広い応用が可能であり、WPI プログラムでは幾つかの拠点がナノ機能材料関係で優れた成果を出しているため、これら拠点とのシンポジウムや連携は一助になる。特に、電子機能デバイス開発に必要な「ナノ状態物質の、バンドエンジニアリング、界面エンジニアリング」に優れた理論家による先導（扇動）と、応用・実装に才能ある産業界研究者との連携は今後の大きな推進力である。

また、資源に乏しい我が国を見れば、「元素戦略」は、半ば必然かつ唯一の解であろう。実際、この研究領域では、主に軽元素、分子、ナノを対象とする研究において、科学技術イノベーション創出にまで突き抜ける研究成果が得られている。その一方、単位空間中のスピン数の多さが機能を支配するような系では、f 電子系の重要性・有用性は疑いなく、これをすべて軽元素の機能で置き換えることは難しく、本領域研究の成果にも見て取れる。求める機能によっては限界もあるが、元素戦略の基本的な正しさが実証されたことは特筆に値する。「元素戦略」は一般社会へはまだ十分浸透していないと思われるので、今後は継続的なアウトリーチ活動を期待する。

現実の産業社会は、マテリアル（基礎研究）⇒デバイス（応用開発研究）⇒システム・ソフトウェア（事業化）、という3階層から構成されており、これらを全体的に俯瞰しながら、広く、高邁な視野から戦略と戦術を構築しなければ、科学技術のイノベーションを創出し、新産業の創成につながるようなレベルで、世界を相手に戦うことはできない。各階層間には、「魔の川」（基礎研究と応用開発研究の間）や「死の谷」（応用開発研究と事業化の間）と呼ばれる大きなギャップがあり、各階層をシームレスに連結するためには、われわれがどのような社会を構築したいか（システム・ソフトウェア）、その社会を実現するためにはどのような応用開発研究が必要か（デバイス）、そのデバイスを実現するためにはどのようなマテリアルが必要であるか、というように、デザイン主導により逆に遡り、これら二つのギャップをシームレス化する必要がある。そのためには広い意味での3階層を貫く統合的な基礎科学に立脚したマテリアル・デザイン研究が不可欠であり、独創的なデザイン主導による新機能物質科学の構築と真の科学技術イノベーションの創出を可能にする研究開発を期待する。