

戦略的創造研究推進事業
－CREST(チーム型研究)－

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」

研究領域中間評価用資料

研究総括：細野 秀雄

2022 年 3 月

目 次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	1
(3) 研究総括	1
(4) 採択研究課題・研究費.....	2
2. 研究総括のねらい.....	4
3. 研究課題の選考について.....	4
4. 領域アドバイザーについて.....	8
5. 研究領域のマネジメントについて.....	11
6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について.....	16
7. 総合所見	28

1. 研究領域の概要

(1) 戦略目標

「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」

(2) 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」(2017 年度発足)

(3) 研究総括

氏名 細野 秀雄

(所属 東京工業大学 役職 栄誉教授／名誉教授／元素戦略センター長)

上記詳細は、以下 URL をご参照ください。

JST 公開資料「新規研究領域の事前評価」

<http://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/index.html>

平成 29 年度新規研究領域の事前評価

https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/hyouka_h29.pdf

(4) 採択研究課題・研究費

(百万円)

採択年度	研究代表者	所属・役職 採択時 ²	研究課題	研究費 ¹
2017 年度	宇佐美徳隆	名古屋大学・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	344.0
	大場史康	東京工業大学・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	352.4
	清水研一	北海道大学・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	327.6
	中嶋健	東京工業大学・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	306.7
	水上成美	東北大学・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	336.9
2018 年度	谷山智康	名古屋大学・教授	界面マルチフェロイク材料の創製	340.7
	長谷川達生	東京大学・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	354.0
	山崎仁丈	九州大学・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	359.4
	山本明保	東京農工大学・特任准教授 (東京農工大学・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	334.1
2019 年度	桂ゆかり	東京大学・助教 (国立研究開発法人物質・材料研究機構・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	237.9
	武田隆史	国立研究開発法	実験とデータ科学の循環による	250.0

		人物質・材料研究 機構・主幹研究員 (国立研究開発 法人物質・材料研 究機構・グループ リーダー)	蛍光体開発	
	内藤昌信	国立研究開発法 人物質・材料研究 機構・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	313.0
	能崎幸雄	慶應義塾大学・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	325.2
			総研究費	418.2

¹ 各研究課題とも研究期間の総額、進行中の課題は予定を含む(2022年2月28日現在)、十万円以下切捨

² 変更/移動のあった場合、下段に括弧つきで記載

- ・桂チーム／武田チームは、研究提案書の内容に応じ、採択時の配賦予定総額を2億円／2.5億円に設定、研究の進捗状況に応じて研究費の増額を検討することとした。
- ・その他の11チームに関しては、採択時の配賦予定総額を3億円とした。
- ・国際強化支援、出産・育児・介護支援のための予算を申請に応じ各チームに配賦した。
- ・想定外の研究機器の修理・購入等に係る予算を申請に応じ各チームに配賦した。
- ・長谷川チームの研究進捗に伴い極薄有機結晶構造解析（クライオ TEM）の技術を開発する必要が生じたため、2020年度、長谷川チームに新規の研究グループ（米倉グループ）を設置し、その研究予算を総括裁量経費より配賦した。
- ・各チームの若手研究者の研究活動を支援する予算を、審査結果に基づき総括裁量経費より配賦（継続中）。
- ・総括裁量経費より、2017年度・2018年度採択課題については課題中間評価の結果に応じ研究加速のための予算を配賦した。2019年度採択課題についても同様の措置を講ずる予定。
- ・チーム間連携を促進・支援するため、総括裁量経費より共同研究促進予算を支出（2022年度・2023年度予算に配賦）。

2. 研究総括のねらい

(1)戦略目標に対する領域設定の経緯や研究領域の位置づけを受けて、当初の領域設定を踏まえて研究総括はどのようにねらいを定めたか。

我が国の材料研究はデータ科学の活用で米国や中国等に大きく遅れを取っている一方、実験的研究に強みが残っているという認識に基づき、強い実験に理論、計算、データ科学を融合させるという方針を打ち出し、材料研究の新しいスタイルを提示すること、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開発することでその有用性を実証することに狙いを定めた。またこのようなスタイルの材料研究を担い、発展させる若手研究者を育成することも重視する。

(2)研究領域で実現をねらったこと、研究成果として目指したこと。

前記のとおり、材料研究の新しいスタイルを提示すること、革新的な材料や機能を開発することが狙いであるが、実用されてこそ「材料」である。そのため、研究成果が産業界に展開され、開発した材料・手法が実用されること、逆に、実用材料を生み出すための研究スタイルを示すことを目指す。

(3)科学技術の進歩への貢献や科学技術イノベーション創出に向けて目指したこと、等。

データ科学の活用による研究開発の加速だけでなく、従来の物質・材料研究の延長ではない革新性の要素とその基礎学理の構築を目指す。そのため各研究チームで開発される新手法を本研究領域内で共有し、異なる材料/デバイス分野での新展開も図る。

3. 研究課題の選考について

(1)研究課題の選考方針、および選考結果

[選考方針]

本研究領域では、実験科学と理論科学・計算科学・データ科学とを融合・連携させることで、新規材料の開発研究を推進する。材料系やプロセスは限定せず、無機系、有機系、金属系、機能材料、構造材料、環境材料など幅広い分野を対象とするが、材料（モノ）を生み出せる研究提案であることを求めた。

実験科学的手法だけでなく、物性理論の裏付けのある革新的な計算科学的手法、データ科

学や数学的手法などと有機的に結合した提案を積極的に評価した。理論計算では第一原理計算、数値シミュレーションなどが、またデータ科学では機械学習、ベイズ推定、スパースモデリング、データ同化等が代表的であるが、既存の手法の改良だけでなく、独自の新たな手法の開発も推奨した。

実験科学との連携で用いる物性理論、計算科学的手法、データ科学・数学的手法などについて具体的な狙いを提案書に明記した上で、連携を実施するチーム体制の独自性と強みも提案書に明記することを求めた。これまでの材料研究の体制とは一味も二味も違う、これからの材料研究のフロンティアを開拓するにふさわしいチーム編成を歓迎した。

研究チームの代表者が実験系研究者である必要はないが、研究のアウトプットは「材料（役に立つ物質）」であることが肝であるため、実験系研究者との連携は提案時から必須とした。

選考にあたっては、次の5つの観点で提案を評価した。

- (1) 提案されている材料開発手法が斬新か
- (2) 研究のアウトプットである、重要な「材料」が具体的に明記されているか
- (3) 強い実験と計算科学やデータ科学・数学的手法が有機的に連携したチーム編成か
- (4) チーム体制の独自性と強み（特に実験研究者）が、明記されているか
- (5) 研究代表者が次世代の材料開発を担うリーダーとなる人材として適切であるか

学術的に重要で興味深いものの、基礎的なレベルの物質研究にとどまっている提案は、本研究領域の趣旨に合致しない。本研究領域は重要な『材料』を対象としているので、少なくとも予備的検討を済ませていることを望んだ。また研究代表者がこのプロジェクトが終了後、材料研究のリーダーと成り得るかどうか選考基準の一つにした。

繰り返しになるが、研究代表者が実験研究者である必要はない。また本研究領域の主目的はNature、Science等に論文を掲載することではない。日本らしい材料研究の新しい方法論を、具体的材料開発を通じて社会に提示することを目指す。単に理論、計算、データ科学による研究開発の加速だけでなく、従来研究の延長とは違う革新性の要素を明確に示すことを重視した。

採択は提案の優劣を第一の基準として判断し、材料分野の古典的分類（金属、有機、無機）のバランスは優先しなかった。但し、募集の最終年度には領域全体としての課題バランスも考慮した。また、女性研究者が研究リーダーやグループリーダーなどとして参画する提案を、大いに歓迎した。

[選考結果]

上記の選考基準に沿って書類選考・面接選考を進め、第一期は応募60件から5課題（図1）を、第二期は応募42件から4課題（図2）を、第三期は応募28件から4課題（図3）を採択した。提案の優劣を原則に選考したが、第三期に限っては領域全体でのスピントロニクス関連課題の割合が過大にならないよう、材料分野も考慮した。図1～3から、概ね各課題

とも実験系と理論・計算・データ科学系の研究者を配置したチーム構成になっていることを確認できる。

図4に本領域の課題ポートフォリオを示す。採択した13課題の材料分野は無機系の割合が高めであるが、金属系・有機系を含み、応用分野は広くカバーされている。第三期(2019年度)の募集では金属系構造材での良い提案も期待したが、該当件数が少なく採択には至らなかった。同年度にスタートした力学材料系のCREST領域に募集が集中した可能性も考えられる。スピントロニクス系が3件と多めで、さらなる集中を避ける配慮を第三期の選考で行い、またこの分野に明るい領域アドバイザーを追加したことは先に述べたとおりである。

研究代表者の採択時の年齢は平均45.3歳であり、本CREST研究の終了後も材料研究のリーダーとしての活躍を期待できる。また、女性研究者が研究代表者を務める1件も採択された。

第一期		有機	半導体	無機		その他
材料		TPE タフポリマー	多結晶シリコン	新規の半導体・ 誘電体	磁気トンネル接合 材料	固体触媒
目的		ゴムを代替できるタフなTPE材料	粒界の構造・物性の理論構築を行う多結晶材料情報学を開拓、優れた特性を示す太陽電池用スマートシリコンインゴットを創製	ハイスループットスクリーニング&合成・評価・デバイス化で新材料開発を加速	室温で抵抗が桁で変わるトンネル磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の開発を行い、人工知能等に応用	データ科学的手法を駆使し触媒設計支援システムを構築、触媒分野の未解決課題を克服、企業の触媒開発を支援、革新材料を開発
手法	合成・成膜	中嶋G ポリマー作製 AFM測定	宇佐美G 結晶作製, イメージ取得, 電氣的評価	平松G・野瀬G・谷口G 物質合成, デバイス作製, 太陽電池, 誘電体	水上G 新材料開発	清水G 触媒合成・反応
	分析・評価	高原G 放射光測定	大野G 粒界構造評価		廣畑G 結晶化 プロセス評価	
	計算・数理	下川G・小谷G トポロジー解析・数理モデル	横井G 第一原理計算モンテカルロ法 焼きなまし法	大場G: 高精度・高速第一原理計算	白井G: 第一原理計算	日沼G 第一原理計算 データベース構築
	データ科学	森田G 粗視化シミュレーション	工藤G 機械学習・自動特徴抽出, 独立成分分析・ベイズ推定	田村G: 機械学習 ベイズ最適化・組み合わせ最適化 問題解法	データベース構築 ベイズ最適化	蒲池G 量子化学計算 データベース構築, ベイズ理論
チーム		中嶋T	宇佐美T	大場T	水上T	清水T

図1 第一期採択課題(60件から5件を採択、採択倍率:12倍)

第二期		有機	無機・金属		
材料		有機半導体・有機強誘電体	多結晶の超伝導体	強磁性体／強誘電体	プロトン伝導体／電極材料
目的		全塗布型の高性能デバイス・プロセスを実現	多結晶組織の制御手法を確立し、低コスト・高性能の超伝導永久磁石を開発	大きな磁気電気相関を有する・界面マルチフェロイク材料を開発、スイッチ／熱整流／マイクロ波素子に適用、革新的デバイスを実現	新規材料により中温度域(300～450℃)で高プロトン移動度を実現、それに適した電極材料を開発し、デバイス実証
手法	合成・成膜	長谷川G・堀内G 半導体／強誘電体材料・塗布プロセス・デバイス開発	山本G 多結晶組織設計・バルク合成・磁石開発 飯田G 薄膜構造／物性制御・特性評価	谷山G・浜屋G MBE/PLD・界面設計・界面形成技術・デバイス開発	山崎G 新規プロトン伝導材／電極材料開発・合成・電気化学特性評価・データベース構築・記述子開発・その場XRD 奥山G デバイス・プロセス開発・特性解析・記述子開発
	分析・評価	熊井G・米倉G 放射光・クライオTEM・精密構造解析	波多G・嶋田G TEM/SEM・粒界構造・マルチスケール構造解析・組織因子定量化	木村G 磁気電気結合係数・熱流の解析／定量化手法開発	
	計算・数理	松井G・都築G 第一原理計算・分子動力学・機械学習	山中G 機械学習・フェーズフィールド・焼結シミュレーション	合田G 第一原理計算・ベイズ推定・デバイス設計	桑原G 第一原理計算・機械学習・記述子エンジニアリング
	データ科学				
チーム		長谷川T	山本T	谷山T	山崎T

図2 第二期採択課題(42件から4件を採択、採択倍率:13倍)

米倉 G は必要に応じ中途追加。

第三期		有機	無機・金属		
材料		高分子複合材料	新規結晶の大規模探索	蛍光体	傾斜スピノ材料
目的		化学反応と高分子物性の深層学習をベースに、新規の再生可能材料・力学特性変調材料を開発する	独自の結晶シミュレーションを開発、高スループット合成/評価で新規結晶を大規模探索、新規電極技術によりデバイスを高性能化	高スループット実験、機械学習、多電子状態計算により次世代TV・照明用の狭帯域/高耐熱蛍光体を開発	組成傾斜による不均一スピン依存散乱を用いた新しいスピン/流生成技術を開発、高い材料自由度でスピンドバイスを実現
手法	合成・成膜	内藤G 材料開発 データ科学	森戸G 藤岡G 高スループット合成・新規合成プロセス 菅原G 電極形成技術・電気特性評価	武田G 高スループット合成・一粒子分析、蛍光物性ライブラリ、データ科学	能崎G ナノ構造制御・計算・スピノ物測定 介川G 傾斜スピノ材料・デバイスの作製/評価
	分析・評価	佐藤G 材料特性の自動データ収集システム開発			渡邊G スピン流の光計測と光機能開発
	計算・数理		桂G・秋山G 機械学習・フェーズフィールド・焼結シミュレーション	池野G 第一原理多体電子計算	楠木G スピン流シミュレーション開発
	データ科学	袖山G 機械学習による分子・反応開発			
チーム		内藤T	桂T	武田T	能崎T

図3 第三期採択課題(28件から4件を採択、採択倍率:7倍)

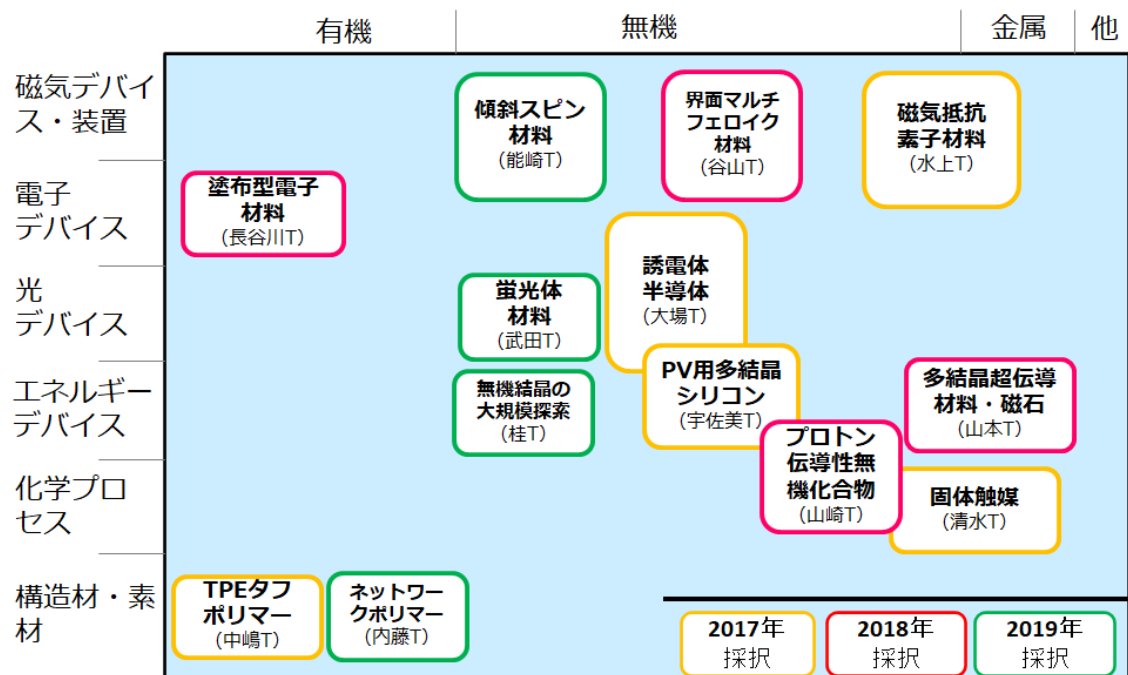


図 4 本領域の課題ポートフォリオ(横軸:材料種別、縦軸:応用分野)

(2)研究課題採択を通じ、戦略目標を達成する上で必要な研究課題、研究者の参加が適切に得られたか、等

図 1～図 3 に示したように、様々な材料分野/応用において、実験に理論・計算・データ科学を融合・連携させ、新しい研究スタイルで革新的な材料を開発しようとする課題が採択された。データ科学の活用による高スループット計算に加え、合成/分析の自動化による高スループット実験/プロセスインフォマティクスの手法を開発する研究チームもあり、開発された技術の展開により研究領域の内外に良い波及効果を生み出すことも期待できる。

また、各研究課題において実験系と理論・計算・データ科学系の研究者を配置したチーム構成が取られている。実験系研究者と連携する理論/計算/データ科学系の研究者は、数学/物理/化学/計算/データ科学分野で我が国の優れたリーダーであり、戦略目標の達成への貢献を期待できる。

4. 領域アドバイザーについて

本研究領域は材料分野を限定しないため、有機（伊藤（耕）氏、稲垣氏（途中退任）、時任氏）、無機・半導体（伊藤（聡）氏、大橋氏、楠氏、山崎氏）、金属（石田氏、中川氏）、

触媒・その他（山口氏）を広くカバーできるよう、それぞれの専門家を選定した。本研究領域では実験に融合させる研究手法としてデータ科学・計算科学（伊藤（聡）氏、津田氏、中川氏、吉田氏、寺倉氏（途中退任））、および先端分析技術（高田氏）を重視するため、それぞれの専門家を選定した。また本研究領域では産業界との連携を重視するため、企業出身の領域アドバイザー（伊藤（聡）氏、中川氏、時任氏、稲垣氏）を確保するとともに、企業において優れた材料を実用化した実績をお持ちの 3 名の方を運営アドバイザーにお迎えした（浅見氏、佐川氏、吉野氏）。3 期にわたっての採択の結果、スピントロニクスデバイス課題の割合が増したことから、この分野の指導者として 1 名を領域アドバイザーに追加した（湯浅氏）。

領域アドバイザー名 （専門分野）	着任時の所属 ¹	役職	任期
石田 清仁 （金属材料学、組織制御学）	東北大学	名誉教授	2017 年 6 月～
伊藤 耕三 （高分子材料学、超分子化学）	内閣府革新的研究開発推進プログラム （東京大学大学院新領域創成科学研究科）	プログラム・マネージャー （教授）	2017 年 6 月～
伊藤 聡 （計算物質科学）	国立研究開発法人物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点 （公益財団法人計算科学振興財団）	拠点長 （チーフコーディネーター）	2018 年 4 月～
大橋 直樹 （無機電気電子機能材料）	国立研究開発法人物質・材料研究機構機能性材料研究拠点	拠点長	2019 年 4 月～
楠 美智子 （応用物性・結晶工学、無機材料・物性、構造・機能材料）	名古屋大学未来材料・システム研究所 （名古屋大学）	教授 （名誉教授）	2017 年 6 月～
高田 昌樹 （放射光科学）	東北大学多元物質科学研究所	教授	2017 年 6 月～
津田 宏治	東京大学大学院新領域創	教授	2017 年 6 月～

(機械学習・バイオインフォマティクス)	成科学研究科		
時任 静士 (有機 EL 材料、有機トランジスタ、フレキシブルディスプレイ技術)	山形大学大学院有機材料システム研究科／有機エレクトロニクス研究センター	卓越研究教授／研究センター長	2017 年 6 月～
中川 淳一 (数理科学・逆問題、鉄鋼製造プロセスシミュレーション、金属結晶構造学)	新日鐵住金株式会社技術開発本部 (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」)	上席主幹研究員 (特任教授 (講座代表))	2017 年 6 月～
山口 周 (固体化学、欠陥化学、固体イオニクス、材料の熱力学)	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 (大学改革支援・学位授与機構研究開発部)	教授 (特任教授)	2017 年 6 月～
山崎 聡 (物理、材料科学、電子デバイス)	国立研究開発法人産業技術総合研究所先進パワーエレクトロニクス研究センター (金沢大学ナノマテリアル研究所)	招聘研究員 (特任教授)	2017 年 6 月～
吉田 博 (物性理論、計算機マテリアルデザイン)	東京大学大学院工学系研究科スピントロニクス学術連携研究教育センター	特任上席研究員	2017 年 6 月～
湯浅 新治 (磁気工学、金属薄膜、スピントロニクス)	国立研究開発法人産業技術総合研究所スピントロニクス研究センター (国立研究開発法人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 (研究センター長)	2020 年 4 月～
稲垣 伸二	株式会社豊田中央研究所	シニアフェロー	2017 年 6 月～

(多孔材料、触媒化学、吸着化学)	稲垣特別研究室	／室長	2019 年 3 月 (途中退任)
寺倉 清之 (物性理論、計算物質科学)	国立研究開発法人物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点	エグゼクティブ アドバイザー	2017 年 6 月～ 2017 年 10 月 (途中退任)

¹変更/移動のあった場合、下段に括弧つき記載

領域運営 アドバイザー名 (専門分野)	着任時の所属 ¹	役職	任期
浅見 正弘 (無機溶液化学、X 線構造解析、材料化学)	富士フイルム株式会社 (一般社団法人日本知的財産協会)	フェロー (参与)	2017 年 8 月～
佐川 真人 (永久磁石材料)	大同特殊鋼株式会社／ NDFEB 株式会社	顧問／代表取締役	2017 年 8 月～
吉野 彰 (電気化学)	旭化成株式会社	名誉フェロー	2017 年 8 月～

¹変更/移動のあった場合、下段に括弧つき記載

5. 研究領域のマネジメントについて

(1)研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく研究課題の指導(研究の把握と評価、研究課題の指導・助言、支援、研究計画の修正等が必要とされた研究課題、研究チームへの対応等の方針、およびその経過)

[サイトビジット]

採択後の翌年度上半期に研究代表者の研究場所を訪問(サイトビジット)し、CREST 研究の立ち上がり状況を確認、成果イメージ(目指す材料研究の「革新」の中身)や研究実施に係わる課題について議論した(新型コロナ禍の影響で1件(能崎チーム)は2022年1月に実施)。

[領域会議]

・領域会議を原則年2回行い、研究の進捗を確認、成果の意義、研究の方向修正等について領域アドバイザー（AD）、領域運営アドバイザーにも議論していただいた。後日、領域ADから各発表に対するレーティング結果・コメント（良い点、改善すべき点）を回収、研究総括のコメントと合わせ各研究代表者にフィードバックし、研究チームで研究計画・チーム運営の修正につき議論するよう促した。1ヶ月後を目途に研究チームからの回答を回収、レーティングの集計結果とともに領域ADに報告した。これにより、成果評価に関する領域AD間、ないし研究担当者-領域AD間の認識差異の解消を期待した。領域会議を中心にこのようなフィードバック活動を継続していく。



図5 領域会議の様子（2018年11月）

本研究領域との関連が深いさがけ「マテリアルズインフォ」の常行総括・研究者からも研究成果を紹介いただいた。

[新型コロナ禍での領域セミナー活動の開始]

・2020年に発生した新型コロナウイルス感染症の流行により、領域会議を対面で実施する

ことが困難になっている。そのためコミュニケーションを取りにくくなったという事情もあり、より軽い形式で2〜3時間のオンライン「領域セミナー」を開催することとした。研究マネジメントと材料研究に係るテーマを研究総括の提案と研究担当者の要望によって設定する。

- ・第一回（2021/2/24）のテーマは知的財産で、研究総括「アカデミアの材料研究者にとっての特許：個人的経験から」、湯浅領域AD「MTJに係わる知財取得・権利行使の実際」、JST知財部「研究成果を知財につなげる」・「JSTの知財サポートの紹介」の4講演を行った。

- ・第二回（2021/7/2）のテーマは「チーム型研究」で、研究総括「ERATO-Pj紹介/研究チームのマネジメントへの要望」、伊藤（耕三）領域AD「ImPactにおけるマトリクスマネジメント」、浅見領域運営AD「企業におけるチーム型研究開発のマネージメント」の3講演を行った。

- ・第三回（2021/10/4）のテーマは「チーム間連携」で、各研究チームの代表者に連携・共同研究のアイテム、構想を説明いただいた。材料研究に係るテーマについては講演を聴きたい研究者を随時研究担当者から募ることとしているが、まずMRS-Jの主催する国際会議MRM2021（Materials Research Meeting 2021）の中で、本研究領域が中心となって開催するシンポジウムA-4(New Methodology for Developing Innovative Materials, 2021/12/13-15)に、当該分野で先導的な研究を推進している海外の研究者5名を招待し、その講演を「領域セミナー」に替えることとした。

- ・引き続き、産業界連携等をテーマに領域セミナーを継続する予定である。

[年次研究実施報告書を介した研究総括コミュニケーション]

- ・年次研究実施報告書をチェック後、今後の期待事項等、研究総括コメントを各チームにフィードバックした。また研究チームミーティングの実施後には簡単な報告書を送付してもらい、研究総括コメントを返信することとしている。

[個別指導]

- ・個別の指導として、第一期の清水チーム（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）は研究進捗が当初計画から大きく外れていたため、3年次に総括面談を行った。未探索領域の予測への活用は不可との判断から「文献データの機械学習による触媒予測モデル/データベースの構築」を3年次までで中止することとし、新構造活性サイトのデザインにつながる理論研究に注力してもらうことにした。研究計画の変更については次回の領域会議でも説明し、その後の研究成果は領域会議（5年次）で「オリジナルな計算データベースの構築、触媒組成予測システムの構築、候補物質の推定など、一連の流れが確立しつつある。」と好ましい評価を領域ADから受けるようになった。

- ・第二期の長谷川チーム（実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発）に関しては、サイトビジット（2019年）での議論により、必要性の低下した「塗工プロセスのそ

の場観察」の比重を下げ、「極薄有機薄膜の構造解析手法開発」を優先することに方針を変更した。サイトビジットに同行した高田 AD（東北大学）から X 線だけでなくクライオ TEM も利用することを推奨され、フィージビリティスタディを行った結果、有効性が認められた。この報告を受け、総括裁量経費からの研究費配賦により、長谷川チームに有機極薄膜のクライオ TEM 分析を担う米倉グループ（理化学研究所）を 2020 年に追加した。その最初の成果として、クライオ TEM による有機半導体極薄膜の構造解明と原料分子設計への寄与について、2021 年 12 月に下記プレス発表を実施した。

「秩序と乱れが共存した高性能な液晶性有機半導体を開発 ～電子回折により液晶が凍結した分子配列構造を確認～」(<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20211223-2/index.html>)

- ・第三期の研究チームについて、成果状況をレビューすることは尚早であると考えているが、そのうち内藤チーム（データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発）に 2 年経過時も発表論文が 1 件しか無いことに懸念がある。しかし領域会議での発表・議論において内藤チームはデータ科学/AI、計測装置、実験を連携させ高分子材料合成の優れた枠組みを構築、新規物質を合成しつつあることが確認されたため、中間評価（2022 年度予定）までは、特に論文数を問題にしないで見守る方針とする。
- ・第三期の武田チーム（実験とデータ科学の循環による蛍光体開発）は研究提案段階で物質・材料研究機構の実験系・計算系研究者のみが参画する体制であったが、狭帯域蛍光体の開発に励起状態の理論的解明が必須であるとの認識から、研究グループの追加を要請し、それを考慮して初期予算を設定した。

(2)チーム型のネットワーク研究所として、研究課題間や他の研究領域、国内外の他の研究機関、異分野との融合・連携・協力の推進、新たな研究コミュニティの創成

本研究領域では、各チームの開発対象の材料/応用先が分散しているものの、材料開発の新手法を開発し活用するという点は共通している。開発した手法の他チームへの展開を、領域会議等において研究総括、領域 AD が奨励しており、自発的に下記のような連携が進められている。

- ・宇佐美チーム（第一期）と山本チーム（第三期）では、開発対象が太陽電池（半導体）と超伝導体（無機/金属）と異なるものの、多結晶の構造制御により高性能化を狙う点で共通のスキルを有する。宇佐美チームは多結晶組織の統計解析や粒界/欠陥観察の手法を先行開発している。これを超伝導体材料に展開するとともに、粒界形成のその場観察技術も開発すべく両チームで共同研究の検討を行っている。
- ・大場チーム（第一期）では Uncertainty sampling を用いた相図作成（最も不確かな点をサンプリングすることで効率的に相境界を決定）手法の機能を拡張し、複数点の同時提案や 4 元系相図の予測アルゴリズムの開発を進めている。本手法の有効活用に関し、桂チーム（第三期）の新結晶材料開発と共同研究を実施している。さらにポリマーや蛍光体の相図作成へ

の展開を、内藤チーム（第三期）、武田チーム（第三期）と計画している。

- ・大場チーム（第一期）で開発中の誘電体材料については、谷山チーム（第三期）と、磁性体との積層化による界面マルチフェロイク材料の機能向上について共同研究を実施している。

- ・中嶋チーム（第一期）は熱可塑性エラストマー内部の動的ネットワークを解明する AFM ナノメカニクス手法を開発しており、塗布型有機 TFT 材料への応用をめざし、長谷川チーム（第二期）と共同研究を行っている。

- ・桂チーム（第三期）と武田チーム（第三期）は新規結晶の大規模探索における単結晶 X 線構造解析/インフォマティクスにつき予備的な共同研究を行っている。

本研究領域も 5 年次に入り、第一期・第二期研究チームを中心に優れた手法が得られつつある。これらを領域内で融通し各課題の研究を加速させるとともに、自主的・小規模の連携から更に本格的な共同研究に踏み出せるよう、「チーム間連携」を議題に第三回領域セミナーを開催した（2021/10/4）。その後チーム間で議論をする期間を置き、共同研究テーマを募集した結果、8 件の提案を受けた。共同研究提案書の評価結果に基づき、総括裁量経費から 2022 年度・2023 年度に共同研究用の予算（共同研究促進ファンド）を配賦する予定である。

本研究領域は課題分散型であるため、このような材料開発手法をベースに置く研究チーム間の連携を促進する。他の研究領域、国内外の他の研究機関、異分野との融合・連携・協力の推進はオプションの位置づけであり、各研究チームで個別に、必要に応じ実施していただく。例えば、第一期の宇佐美チームは（公財）科学技術交流財団にて「多結晶材料情報学応用技術研究会」を発足させ、本 CREST の成果である「多結晶材料情報学」をものづくりの新展開に繋げる実践的な産学共同研究に向けた基礎検討の場としている。このような各研究チームの成果展開については、各課題の最終段階でサポートをする予定である。

(3)研究費配分上の工夫(拡大・縮小等も含め、研究領域運営上の立場から)

本研究領域は実験系と理論/計算/データ科学系（+分析評価系）の総合的なチームングを推奨しているため、研究計画（全体計画）に問題が無ければ、初期に研究費として 3 億円を配賦した。ただし、第三期ではポートフォリオを考慮して一部繰り上げ採択を行い、また研究の実施方法・体制に懸念もあったことから、桂チームへの初期配賦を 2 億円に、武田チームへの初期配賦を 2.5 億円にし、研究の進捗に応じ増額を検討していくこととした。

前述のように 2020 年度、第二期の長谷川チームにクライオ TEM の研究グループを追加した。そのため総括裁量経費から 3200 万円を配賦した。

第一期 5 課題について 2020 年度に、第二期 4 課題については 2021 年度に中間評価を行い、評価結果に基づいて研究加速のための予算（合計 5000 万円（第一期）、4000 万円（第二期））を総括裁量経費から配賦した。第三期 4 課題についても、中間評価の結果に応じて、研究加速予算を配賦する予定である。

個人型のさきがけと違い、チーム型の CREST では参画する若手研究者の意欲や研究推進（個々の研究グループの運営）の状況を把握しづらい。そこで本研究領域では領域会議にて若手発表のセッションを設け、領域運営 AD、領域 AD の目の前で各チームの若手研究者 1 名ずつに研究の進捗/研究チームでの自身の役割を説明してもらうことにした。今後の活躍を期待できる若手研究者の活動を奨励するため、若手研究支援の予算枠（1.2 億円）を総括裁量経費に設定、提案書を審査し、若手研究者が自由に使える予算として翌年度・翌々年度に配賦している。

これも前述のように、チーム間の本格的連携を促すため、2021 年度に共同研究提案を募集し、提案書の内容に応じて、2022～2023 年度予算に合計 7500 万円程度を総括裁量経費から配賦する予定である。

(4)その他マネジメントに関する特記事項(人材育成等)

本研究領域は、ポスト MI 時代の材料研究を担う若手研究者の育成を重視している。比較的若い研究者が研究代表者を務めていることはひとつの希望であるが、各研究チーム内で人材育成がなされることが重要である。それをサポートするため、領域会議に若手セッションを設け、直接 CREST の研究総括、領域 AD、領域運営 AD に報告する機会を作った。また課題中間評価の評価項目に「若手育成の状況」を加えた。

研究成果のアウトリーチについては、研究担当者の動機付けも考慮し、極力、学会に発表の場を設けたいと考えている。2021 年 3 月には日本物理学会第 76 回年次大会にて共催シンポジウム（「革新材料開発」の進展）を実施し、中間評価を終えた第一期 5 課題の成果を発表してもらった。また 2021 年 12 月には産業界へのアピールと若手研究者の発表促進も兼ね、MRM2021 のシンポジウム A-4（New Methodology for Developing Innovative Materials, 2021/12/13-15）を開催、本研究領域から 34 件の論文を発表した。

6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について

前述のように本研究領域の主目的は Nature、Science 等に論文を掲載することではないものの、掲載誌のインパクト・ファクターが高くない研究チームには注意を促している。

[チーム間共著]

本研究領域は分散課題型である一方、各研究チームは実験・合成、計算/データ科学、分析評価の機能を揃えた総合的構成になっているため、チーム内の共著論文自体が技術融合の性格を持つが、チーム間に跨る共著論文は現時点で無い。2021 年度から 2023 年度にかけて共同研究促進の予算・スキームを設定するので、それによる融合成果が本研究領域の後半に現れるものと期待する。

[国際共著]

国際共著としては、以下の論文等がある。

- [1] 宇佐美チーム（第一期） & Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems,
"3D visualization of growth interfaces in cast Si ingot using inclusions distribution",
Journal of Crystal Growth 535, 125535 (2020).
"Propagation of Crystal Defects during Directional Solidification of Silicon via Induction
of Functional Defects",
Crystals 11, 90 (2021).
- [2] 大場チーム（第一期） & Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH,
"Finite-size corrections for defect-involving vertical transitions in supercell calculations",
Phys. Rev. B 101, 020102(R) (2020).
- [3] 清水チーム（第一期） & Institute of Research on the Structure of Matter, Chinese
Academy of Sciences, Fuzhou,
"Local structure and NO adsorption/desorption property of Pd²⁺ cations at different paired Al sites
in CHA zeolite",
Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 22273-22282 (2021).
"In Situ/Operando IR and Theoretical Studies on the Mechanism of NH₃-SCR of NO/NO₂ over
H-CHA Zeolites",
J. Phys. Chem. C 125, 13889-13899 (2021).
"Mechanism of NH₃-SCR of NO/NO₂ (Fast SCR) over Cu-CHA Zeolites Studied by In
situ/Operando IR and DFT",
J. Phys. Chem. C 125, 21975-21987 (2021).
- [4] 水上チーム（第一期） & Univ. Grenoble Alpes, Imec, 他,
"Opportunities and challenges for spintronics in the microelectronics industry",
Nature Electronics 3, 446-459 (2020).
- [5] 谷山チーム（第二期） & University of York,
"Electric field tunable anisotropic magnetoresistance effect in an epitaxial Co₂FeSi/BaTiO₃
interfacial multiferroic system",
Physical Review Materials 5, 014412 (2021).
"Half-metallic nature of the low-temperature grown Co₂MnSi films on SrTiO₃",
Journal of Alloys and Compounds 854, 155571 (2021).
- [6] 谷山チーム（第二期） & Aalto University, Martin Luther University
Halle-Wittenberg,
"Electric-field control of propagating spin waves by ferroelectric domain wall motion in a
multiferroic heterostructure",

Advanced Materials 33, 2100646 (2021).

[7] 山崎チーム（第二期） & カリフォルニア工科大学 & ノースウェスタン大学,

"Oxygen Affinity: The Missing Link Enabling Prediction of Proton Conductivities in Doped Barium Zirconates",

Chem. Mater. 32, 17, 7292–7300 (2020).

[8] 山本チーム（第三期） & カールスルーエ工科大学,

"Nanoscale Texture and Microstructure in NdFeAs(O,F)/MgO Superconducting Thin Film with Superior Critical Current Properties",

ACS Appl. Electron. Mater. 3, 3158 (2021).

[9] 山本チーム（第三期） & ヴァージニア工科大学, 米国立パシフィック・ノース
ウェスト研究所,

"Five-second STEM dislocation tomography for 300 nm thick specimen assisted by deep-learning-based noise filtering",

Sci. Rep. 11, 20720 (2021).

上記のうち[1]の2件は、JST から国際強化支援を受け研究者を派遣/招聘して実施した研究の成果である。これらの他にも、水上チーム（第一期）は研究チームに英国・ヨーク大学のグループを含んでいるため、発表論文に国際共著が含まれる。また能崎チームでは柚木グループに参画している松尾氏（本務：中国科学院大学カブリ理論科学研究所）を著者に含む論文が国際共著となる。

[特許活動]

特許出願は、真に有効な内容のものを要求している。いたずらに数を奨励すると費用対効果が落ちるからである。これまでの出願は国内12件、国際4件で、多いとは言えない。特許関連費用を難点に挙げる研究グループもあり、実施許諾までに時間のかかる材料分野では致し方ない面もあるが、CREST 研究期間の後半に期待する産業連携促進の一環として、特許出願の状況もフォローする。特許関連費用に関しては、知的財産をテーマにした領域セミナー（2021/2/24）にて JST の支援等を紹介した。

[各研究チームの進捗状況]

各研究チームの主要成果を振り返る。

(1) 宇佐美チーム（図6参照）

宇佐美チーム（第一期：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）は、多結晶方位の予測・統計解析、多結晶の3次元構造モデルと応力解析、熱流体シミュレーション、ANN（人工ニューラルネットワーク）原子間ポテンシャル

ル駆動分子シミュレーション、粒界特性の機械学習モデル、核生成サイトのボロノイ図解析等、シリコンをモデル材料として結晶材料情報学による一般粒界物性理論の研究基盤を構築した。本研究チームが提案する擬単結晶シリコンインゴット製造方法を、ドイツ・フラウンホーファー太陽エネルギー研究所と連携して実用サイズに適用、セル効率で高品質化を実証し、基板大型化のコストメリットを訴求して、国内での製造技術に展開しつつある。構築した研究基盤は他の多結晶材料にも適用可能であり、本研究領域内の関連チームとも共同研究を進めつつある。JST 主催の新技术説明会（2020/9/1）では、機械学習による多結晶方位の予測に関してオンラインで技術紹介を実施し、民間企業 5 社から連携の希望を受けた。さらに（公財）科学技術交流財団にて「多結晶材料情報学応用技術研究会」を発足させ、CREST の研究成果の産業界へ応用展開を図っている。

(2) 大場チーム（図 7 参照）

大場チーム（第一期：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）は、第一原理計算による種々の物性予測、in silico スクリーニング・データベース、アクティブラーニングに基づいた相図作成効率化等の新手法を開発し、太陽電池用のリン化合物・窒化物や新規誘電体材料の開発に応用している。このような計算・データ科学の展開による新材料開発の加速を通じ、物質の再分類、材料設計・探索指針の再構築を進めることで、材料科学の新展開に貢献するものと期待される。異価数元素置換 TiO_2 のセラミックスキャパシタへの応用や第一原理計算・機械学習予測モデルによる新規誘電体の探索については、民間企業との共同研究に着手した。また、データ科学に基づいた相図・実験条件予測手法は汎用性が高く、様々な分野の材料開発に展開しつつある。

(3) 清水チーム（図 8 参照）

清水チーム（第一期：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）は、多様な触媒材料（酸化物、金属・酸化物界面）の表面の電子状態・反応性の理論計算を可能にする方法論を開発、網羅計算を実施し、 TiO_2 を例に表面と多様な分子の軌道間相互作用に関する一般則を得、理論データの機械学習からの示唆に基づき実材料を開発している。安価なシェールガスに含まれるエタン・プロパンを高効率に化学原料（エチレン・プロピレン）へ変換する触媒材料（ゼオライト担持 In ヒドリド、PtGaPb 規則性合金ナノ粒子）がその例であり、従来材料の欠点である炭素析出を回避する材料設計によりエチレン・プロピレン選択性と触媒寿命を大幅に改善させている。企業数社との共同研究を行い、「革新材料」に到達しているとは言えないが固定概念と違う気付きを与える手法である、との評価を受けるとともに、開発した個別の触媒材料は民間企業での実用化が検討されつつある。

(4) 中嶋チーム（図 9 参照）

中嶋チーム（第一期：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）

は、原子間力顕微鏡・放射光を用いた解析技術を開発、TPE（熱可塑性エラストマー）内の応力ネットワークを可視化し、永久ひずみの起源・応力下の TPE 内部のミクロ相構造変化・TPE 特有の力学物性等を解明した。また MD（分子動力学）シミュレーションによる TPE 内応力ネットワークの可視化およびグラフ理論によるその解析手法を開発、ネットワークのテンション・テンソルという新しい数学概念を提案し、ネットワークの数学的モデル化を進めた。このように、実験・計算・分析評価の連携を中心に、TPE 材料の弱さが何に起因するのかというメカニズムについては、およそその理解に達したと言える。CREST 研究の後半でさらなる数学の貢献、新規材料の合成に注力しつつあり、数学から実材料にいたる新しい研究スタイルの有用性実証が期待される。本チームは「TPE 技術研究会」の参画企業を中心に成果を展開しているが、目指す研究スタイルの有用性を実証できれば、他のポリマー材料分野への貢献も期待できる。

(5) 水上チーム（図 10 参照）

水上チーム（第一期：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）は、界面構造を考慮した TMR（トンネル磁気抵抗）ヘテロ接合の物性データベースを構築、元素探索の範囲を拡大し、ベイズ最適化による高効率の接合材料系探索・界面欠陥の詳細解析を進め、bcc 準安定相のオリジナルな二元系・三元系の磁性材料を得、低温で 1000%のオン/オフ比を達成した。同レベルの特性が確認されるのは従来 3 種（FeCoB、Co₂MnSi ホイスラー合金、マンガ酸化物）に限られ、今回これらと異なる未踏の材料系を見出したことは、今後の学理拡張に資するものと期待される。実用展開では室温でのオン/オフ比低下が課題であるが、計算/機械学習により支配因子（キュリー温度、界面スティフネス）に関する接合データベースを拡充、従来の MgO に代わる新規バリア材料も開発しつつあり、解決が期待される。

(6) 谷山チーム（図 11 参照）

谷山チーム（第二期：界面マルチフェロイク材料の創製）は、強磁性体/強誘電体の界面マルチフェロイク材料に関し磁気-電気結合係数を実験・理論により系統的に解析、有望な界面マルチフェロイク材料を探索し、Heusler 合金を強磁性体とする界面マルチフェロイク材料で世界最高の磁気-電気結合係数を達成した。電界駆動可能なトンネル磁気抵抗素子の実現につながる可能性のある成果である。界面原子層挿入が磁気-電気結合効果を増大させるメカニズムを計算で検証しており、界面マルチフェロイクスの学理形成に貢献することも期待される。また、BaTiO₃ 強誘電性ドメイン構造の電界制御により強磁性スピン波の伝播特性を制御することにも成功しており、磁気情報伝送・マイクロ波デバイスへの新たな応用の途を拓く可能性がある。

(7) 長谷川チーム（図 12 参照）

長谷川チーム（第二期：実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発）は、

データベース解析により塗布型電子材料の探索基盤を構築、それを用いて新強誘電体を発見、層状性・対称性にもとづく段階的結晶構造予測手法を開発、置換基効果による層状結晶性の高い塗布型半導体の材料設計指針を獲得、またクライオ電顕を用いた電子線回折による液晶性半導体のフル構造解析に成功し、スイッチング特性の理論限界に迫る塗布型薄膜トランジスタの性能を実証している。有機 TFT（薄膜トランジスタ）において課題であった高スイッチング電圧の問題を解決するもので、実用化へのインパクトも大きい。

(8) 山崎チーム（図 13 参照）

山崎チーム（第二期：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）は、プロトン伝導度の予測を可能にする新しい記述子（酸素空孔の酸素アフィニティ）を発見、機械学習や第一原理計算を活用した物性予測手法を開発した。「p ブロック元素ペロブスカイト化合物を用いた高濃度 Sc 置換による新規高性能プロトン伝導性酸化物の開発」、「B サイト元素 s 軌道-酸素 2p 混成と高濃度 Sc 置換による新規プロトン含有トリプル伝導性酸化物の開発」および「分極条件下第二相溶出による高性能複合カソード材料の開発」を方針に、高いプロトン伝導性と化学的安定性を兼ね備えた新規電解質材料、非ペロブスカイトの新規プロトン伝導性酸化物、新規高濃度プロトン含有トリプル伝導性酸化物等を発見、世界最高レベルの中温動作燃料電池動作を実証している。プロトン伝導度予測を可能にする記述子が置換元素に隣接した酸素空孔における酸素親和力であることを示し、プロトン伝導度を最大化するドーパントの選択指針を提案したことは、学理上、意義深い。中間温度域（300～450℃）の「Norby ギャップ」（イオン伝導性材料が不在の領域）を埋めるプロトン伝導性酸化物電解質を開発していること、効率の良い機械学習の手法を提案したことは、産業応用上もインパクトが大きいと期待される。

(9) 山本チーム（図 14 参照）

山本チーム（第二期：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）は、マルチスケール組織・組成・方位解析、データ駆動型プロセス設計や PFM（フェーズフィールドモデル）、輸送特性予測に基づく多結晶型超伝導材料の新たな研究開発手法を開発した。機能発現のメカニズムが複雑な超伝導材料分野で、有効なインフォマティクス応用を示しつつある。優れた臨界電流特性を持つナノサイズの組織構造を同定し、薄膜組織制御の指針を提案、K ドープ Ba122 薄膜で世界最高レベルの臨界電流特性を得た。深層学習を援用した高速 STEM（走査電子顕微鏡）・トモグラフィ観察等の顕微鏡技術を開発し、焼結過程をその場でモニター、シミュレーションと融合させ電気伝導特性を予測する手法や、鉄系超伝導体の臨界電流特性を大幅に向上させる粒界エンジニアリングの手法は、産業への貢献も期待でき、企業との共同研究も進めつつある。

(10) 桂チーム

桂チーム（第三期：新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発）は汎用性の高い「結晶構造シミュレーター」を開発、文献データも取り入れて大規模データベースを作成して新規結晶の候補を探索、Na フラックス法等により高スループット合成を実施し、結晶構造予測の実証を推し進めている。「結晶構造シミュレーター」の理論的裏付け、合成実験・構造/機能検証が進み、有用そうな未踏の材料群を見出せれば、学理・産業応用へのインパクトを期待できる。（以降、第三期課題の説明図は無し。）

（11）武田チーム

武田チーム（第三期：実験とデータ科学の循環による蛍光体開発）は発光中心イオンの周囲環境に着目した蛍光体の機械学習の手法等を開発、それによる予測に基づき合成/単粒子蛍光法で高スループットスクリーニングを実施し、新規の蛍光体を見出しつつある。本CRESTの第一の目標である狭発光帯域化には、励起状態の多重項等に係る量子化学的計算手法の開発が重要であり、その進展をフォローしたい。

（12）内藤チーム

内藤チーム（第三期：データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発）は現時点（2年経過時）で発表論文が1件しか無いものの、データ科学/AI、計測装置、実験を連携させた材料合成の優れた枠組みを構築、新規物質を合成しつつあり、本研究領域の趣旨に沿った成果が高分子の分野で得られるものと期待される。

（13）能崎チーム

能崎チーム（第三期：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）は、自チームが提唱する傾斜材料による高効率スピン流生成の手法につき理論的・実験的検証・シミュレーター開発を着実に進めており、オリジナリティの高いスピントロニクス材料を開発できる可能性が感じられる。



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

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)

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

本研究では、組織の複雑さと粒界の多様性により、普遍的な高性能化指針が不明確な多結晶材料に関し、「どのような結晶をどのように作ればよいか?」という根源的な問いに解を与える新たな材料開発手法の構築を目指す。シリコンをモデル材料として、マクロ実験、機械学習、理論、ミクロ実験を連携させ、一般粒界の構造・物性を解明する多結晶材料情報学を開拓する。その有用性を高品質シリコンインゴットの実現により実証するとともに、材料開発手法を他材料にも展開する。

研究成果とインパクト

- ・多結晶インゴットの組織と転位クラスターの発生・伝搬・消滅を可視化
- ・多結晶組織のランダム粒界と高次の対応粒界を識別する多結晶組織の新規解析手法を考案
- ・多結晶ウェーハの結晶方位分布の予測技術を構築し特許出願
- ・ANN原子間ポテンシャルにより一般粒界の原子構造を高速・高精度に予測
- ・機能性欠陥を利用した単結晶インゴット製造技術の有用性を実証

今後の展開等

- ・研究基盤を統合・活用した多結晶材料情報学の深化
- ・高品質シリコンインゴット実現による材料開発手法の有用性の実証と国内外企業との連携や技術移転
- ・シリコンをモデルとして構築した研究基盤の他材料への展開
- ・多様な研究基盤を活用した新たな産学連携体制の構築と共同研究への発展

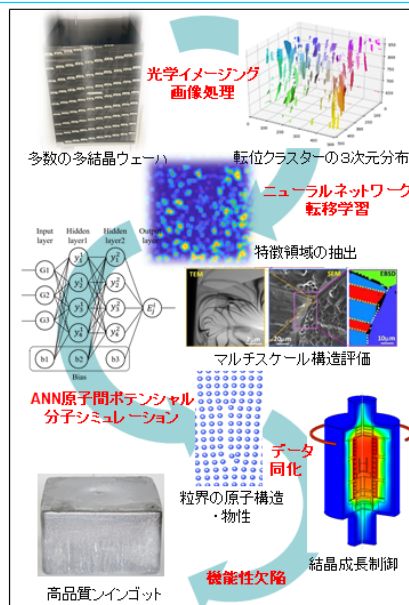


図6 宇佐美チーム(第一期) 研究進捗紹介



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

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)

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

アクティブラーニングに基づいた相図作成効率化手法を提案し、実験研究者が容易に利用できるアプリケーション(PDC.py)を開発し、Windowsで簡単に実行できるアプリケーション(PDC.exe)も一般公開している。また、この手法をリン化半導体薄膜の分子線エピタキシー(MBE)成長の条件最適化に応用することで、その有効性をデモンストレーションした。

研究成果とインパクト

通常、目的の化合物を得るための条件を探索するためには多大な数の実験を要するが、本手法を用いることにより、専門知識を有していない技術補佐員でも少ない実験回数で条件を決定できることを示した。また、当初は予見できなかった相を、たった4回の製膜実験で見出した。

今後の展開等

相図作成手法の高度化のため、NIMSの状態図を専門とするグループとの連携を開始している。また、現状時間のかかるXRDによる相同定に対して、機械学習を利用した自動化を検討している。これが実現すれば、多大な労力を要する相図作成を大幅に効率化できる。

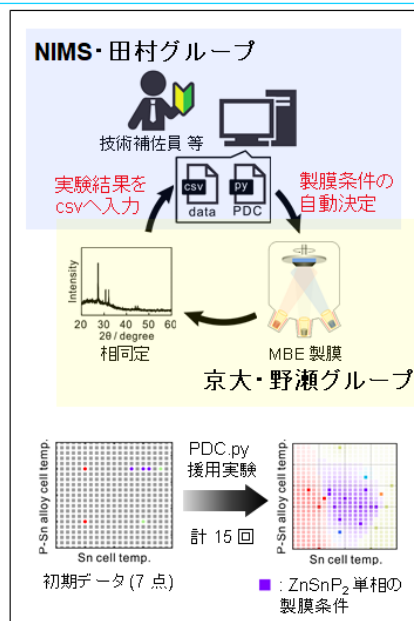


図7 大場チーム(第一期) 研究進捗紹介

研究代表者：清水 研一（北海道大学、教授）

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

多様な候補材料の理論計算データの機械学習により固体触媒における新しい「仮説」や「触媒開発コンセプト」を提案する方法論を構築した。成果物は、①酸化物表面の電子状態、欠陥生成エネルギー、分子の活性化の相関関係に関する一般則、及び、②コンセプト先導型で開発した高性能アルカン脱水素触媒である。

研究成果とインパクト

開発触媒は従来材料の欠点（炭素析出）を回避する材料設計により、従来触媒より高いアルケン選択性と触媒寿命を示す。本系は、化学品製造における省エネ（CO₂排出低減）やシェールガスの高付加価値化を達成するための必須技術である。

今後の展開等

- ・機械学習による触媒開発支援を目的に民間企業2社と、個別の触媒材料の実用化を目指して民間企業3社と共同研究中。
- ・本CREST研究を契機として、実験系の若手メンバーが各々のJST(他事業)、NEDOに採択され、個別の基礎研究・実用化志向の研究を展開中である。

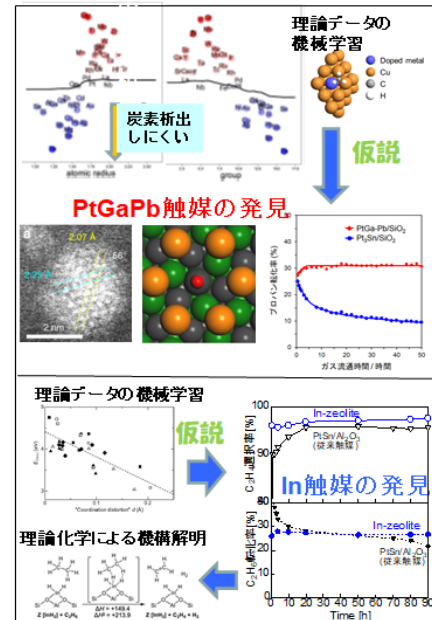


図8 清水チーム（第一期）研究進捗紹介

研究代表者：中嶋 健（東京工業大学、教授）

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

熱可塑性エラストマー（TPE）は伸長変形に際し、ハードセグメントドメインの配置が変化し（図1）、その結果、ブリッジ鎖による動的な応力ネットワーク構造が形成される（図2）。それを相視化モデルを用いたシミュレーションにより再現し（図3(a)）、その構造が「グラフ理論」を用いて可視化できることを示した（図3(b)）。さらにグラフ理論から求められるトポロジカル量を相関解析することで（図3(c)）、ネットワーク構造が破壊されているかどうかを解析できることも示された。実験とシミュレーション、そして数学が協奏できた成功事例である。

研究成果とインパクト

我々の研究は強靱なTPEを創成することが目的であるが、その必要条件として破壊されにくい材料である必要がある。それを数学の一分野であるグラフ理論に基づいて判断できる点に本研究の優位性がある。この手法の応用事例はTPEにとどまらず、フィラー充填ゴムなどさまざまな高分子材料にも応用可能であり、そこに技術の高い有用性がある。

今後の展開等

- ・ネットワーク構造をもつゴム・ゲル等の高分子材料のタフ化研究へ展開可能な技術であることから、JSTの発展的なプロジェクトでの研究やNEDOプロジェクト等への展開が考えられる。
- ・TPE、その他各種高分子材料を扱う化学メーカーとの共同研究などにも応用可能である。

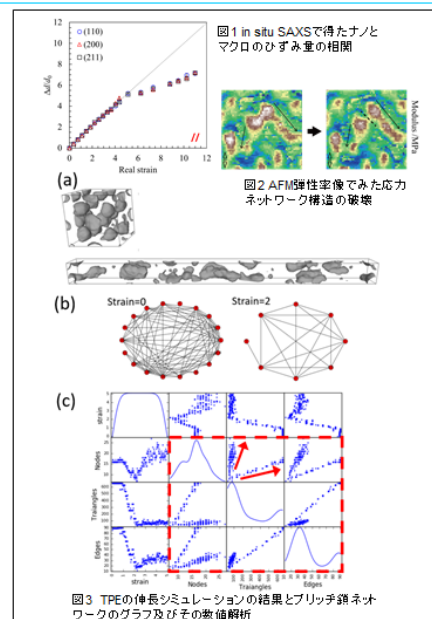


図9 中嶋チーム（第一期）研究進捗紹介

JST 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

研究代表者: 水上 成美(東北大学、教授)
戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

金属磁性体/絶縁体/金属磁性体三層構造からなる磁気トンネル接合素子で発現するトンネル磁気抵抗効果(TMR効果)を飛躍的に増大させる磁性体や絶縁体新材料を創出する。第一原理計算、機械学習、ベイズ最適化等の計算・データ科学を利用することで、産業に資する実用材料を効率的に開発する。

研究成果とインパクト

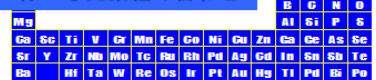
新磁性材料研究成果の一事例

- ① 低い熱処理温度で従来材料(鉄コバルトホウ素)素子と同等の特性
- ② 従来材料に固有のホウ素(B)の拡散がなく、多層化にメリット
- ③ 大量生産に適したマグネトロンスパッタ法で作製

今後の展開等

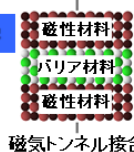
- 更なる新磁性材料や新絶縁バリア材料の研究と特許出願(一部は特許出願済)
- 他グラント・企業連携による磁気センサや不揮発性メモリへの応用展開
- 国内外研究ネットワークによる新規スピントロニクス素子への展開

様々な元素組み合わせ



実験+計算・データ科学

- 第一原理計算
- ベイズ最適化
- 機械学習



磁気トンネル接合

成果の一例

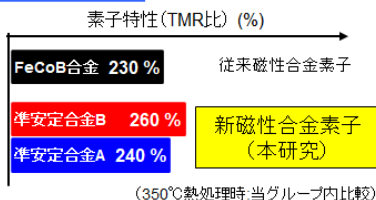


図 10 水上チーム(第一期) 研究進捗紹介

JST 界面マルチフェロイク材料の創製

研究代表者: 谷山 智康(名古屋大学、教授)
戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

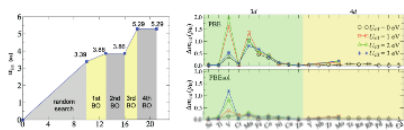
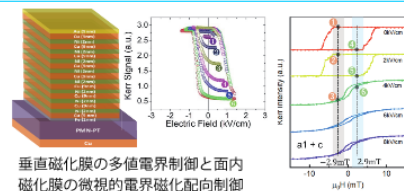
実験的・計算的アプローチに基づいて、巨大磁気-電気結合を有する界面マルチフェロイク材料を効率的に探索する新材料開発手法の開発を目標とし、強磁性体/強誘電体界面を制御した界面マルチフェロイク材料に対して、磁気-電気結合係数を実験的、理論的に評価し、有望な界面マルチフェロイク材料を創製した。磁化配向の電界制御に加え、多様なデバイス展開のための技術基盤の創出を目指した。

研究成果とインパクト

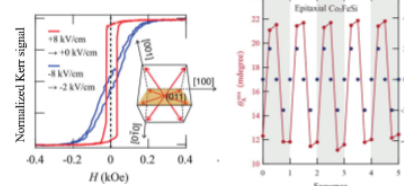
強磁性Heusler合金と強誘電体とからなる界面マルチフェロイクスにおいて、数値目標 $1.0 \times 10^{-5} \text{ s/m}$ を上回る世界最高値の磁気-電気結合係数を見出し、磁化の電界変調を実証した。本成果は、電界駆動可能な磁気メモリの実現に資する基盤技術として大きなインパクトを有している。

今後の展開等

領域内チーム間連携を通して界面マルチフェロイクメモリのデバイス動作実証を行う。さらに、JST未来社会創造事業や研究成果最適展開プログラム(A-STEP)等を活用し、企業連携により界面マルチフェロイク材料の有用性の実証試験へと展開する。また、国際連携により、多様なデバイス応用を探索する。その研究過程において、材料特許の取得を目指す。



Bayes最適化した界面磁気-電気結合係数と界面磁気モーメントの原子層挿入効果



ヘテロ構造 (FM層30nm/PMN-PT基板)	FM薄膜形態	α_1 (s/m)
$\text{Co}_2\text{Fe}_0.5\text{Mn}_{0.5}\text{Si}/\text{PMN-PT}(011)$	Polycrystalline	$1.9 \sim 2.2 \times 10^{-5}$

図 11 谷山チーム(第二期) 研究概要紹介



実験・計算・データ科学融合による 塗布型電子材料の開発

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)

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

本研究では、実験・計算・データ科学の融合により、塗布型電子材料の探索・開発を網羅的かつ系統的に行う新しい研究手法の開発と、これらによる材料高度化に取り組みます。結晶構造データベースと機械学習を駆使した材料探索・設計手法の開発、計算科学を駆使した精密構造・電子機能予測、及び実材料の合成・結晶構造解析・物性評価によるこれら設計・予測の検証と、薄膜プロセスの高度化・最適化・デバイス構築を推進します。

研究成果とインパクト

- データベース解析による塗布型電子材料の探索基盤構築と新材料の発見
- 層状性・対称性にもとづく段階的結晶構造予測の提案とその有効性の実証
- 置換効果による層状結晶性の高い塗布型半導体の材料設計指針の構築
- スイッチング特性の理論限界に迫る塗布型薄膜トランジスタの開発に成功

今後の展開等

これまでの成果を基盤に、今後は、計算科学とデータ科学により開発した新手法を、実際の塗布型電子材料の探索・設計・開発のため活用する研究手法を確立し、材料開発の加速を図っていききたい。また実用化を見据えて新規の産学連携プロジェクトの獲得、市場動向調査、展示会やスタートアップ関連イベント等への参加を通じて、産業界等との連携を図っていききたい。

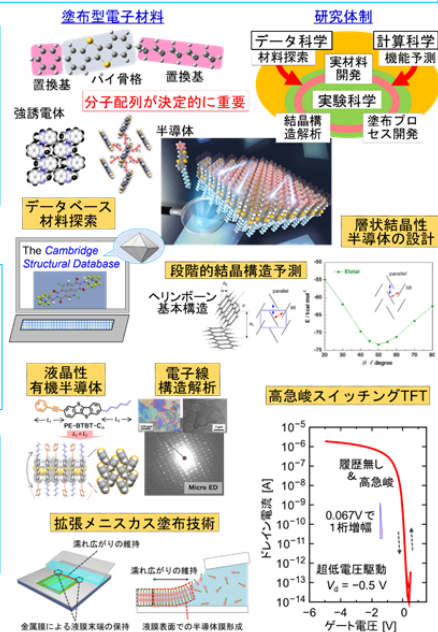


図 12 長谷川チーム(第二期) 研究進捗紹介



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

研究代表者: 山崎 仁文(九州大学、教授)

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

本研究の目的は、実験と理論・計算・データ科学を融合したプロトン伝導性無機化合物や関連材料の創製手法を開発し、中温度域(300~450°C)において0.01 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及びそれを用いた革新的プロトン伝導性デバイスを創製することである。新たな材料探索指針や材料設計指針を提案するとともに、新たな手法の開発とその活用により材料開発を加速的に進展させ、中温動作電気化学デバイス分野において新たな材料研究スタイルを提示する。

研究成果とインパクト

①400°Cにおいて世界最高伝導度と高い化学的安定性を兼ね備えたプロトン伝導性酸化物の発見、②高濃度プロトン・ホール含有新規トリプル伝導性酸化物の発見および③新規電解溶出複合カソード電極を用いた中温動作型高性能プロトン伝導性燃料電池の実証を達成した。これらの成果は、本CRESTで提案した材料探索・設計指針から生まれたものである。現在開発中の機械学習モデルや計算ツールを組み込むことで、新材料の発見やデバイスの高性能化がさらに加速できる。前人未踏、中温動作燃料電池やCO₂資源化電気化学デバイスの実証により、脱炭素サイクル社会を提案する。

今後の展開等

ERATO等、本CRESTで得られた3つの新たな材料探索・設計指針を基盤とした材料・デバイス開発へ展開したい。開発に成功した中温動作電気化学デバイス③は、本CREST領域の触媒グループ(清水T)と連携し、電気化学的オレフィン合成反応を用いた二酸化炭素の資源化研究に関する研究に展開し、余剰エネルギーを利用した高付加価値物質変換の実証を目指している。これまでに開発した材料は特許出願しており、右図表に示した新材料に関しても特許出願予定である。また、ハイスループット第一原理計算により見出した非ペロブスカイト系材料も特許出願するとともに、開発した手法が幅広い材料をカバーできることを活かし、材料系の請求範囲が広い特許取得を目指している。

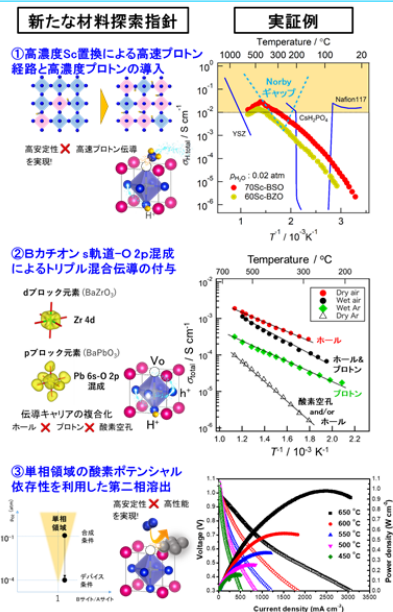


図 13 山崎チーム(第二期) 研究進捗紹介



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

研究代表者: 山本 明保(東京農工大学, 准教授)

戦略的創造研究推進事業CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」研究領域

研究概要

高温超伝導新材料に対する磁石基礎開発を例に、多結晶材料合成プロセスの新スタイルを提示することを目指している。物性、粒界、組織の3要素にフォーカスを置き、人工単一粒界を用いた粒界制御方法論の構築、先端電子顕微鏡法によるマルチスケール構造データの取得と深層学習の適用、そして、プロセスから構造、構造から特性をつなぐデータ駆動型手法、データ融合組織形成予測手法、輸送特性予測手法の開発と、合成プロセスへの適用を進めている。

研究成果とインパクト

- ・無数の小傾角粒界導入により、鉄系超伝導体で世界最高の電流輸送を実現
- ・機械学習、特性予測手法等を用いる新たな多結晶材料合成プロセスを開発
- ・深層学習アシストその場3次元STEM観察を実現、従来より100倍高速に
- ・その場観察実験とデータ融合手法で、従来より高精度な組織形成予測モデル

今後の展開等

- ・粒界性格を制御した多結晶超伝導バルク体のデザインとプロセス開発
- ・領域内外、宇佐美Tとも連携し、「多結晶材料プロセスインフォ」へと展開
- ・稀少寒剤が不要な、新強力超伝導磁石の応用へJST他事業、NEDO展開
- ・知財戦略など



図 14 山本チーム(第二期) 研究進捗紹介

7. 総合所見

(1) 研究領域のマネジメント

・本研究領域の目標を「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」、端的には「新しい研究手法による重要な材料の開発」とした。具体的にはデータ科学に限定せず、これまでの研究手法とは異なるアプローチで社会の要請が高い材料の実現や性能のジャンプを狙うこととした。

・材料分野は長い歴史と実績、そして世界的な研究者を輩出してきた日本のお家芸の一つである。しかしながら、ベテランの研究者が多く、実績だけで選ぶとシニアの研究者が中心になりやすい。本研究領域ではこれから日本の材料研究のリーダとなりうるような研究者に応募を公募説明会などで推奨した。年齢で選考の線引きをするようなことは勿論行わなかったが、類似テーマで評価が同程度だった際には、研究代表者が40歳代以下の提案を優先して採択することとした。

・これまでの経験で、採択した課題に関しても、応募時の提案書の内容には無理な事項が含まれていることが少なくない。よって、それをベースにはするが、面接選考の際の質疑で明らかになった難点や CREST 研究開始早々に行ったサイトビジットにより、各チームリーダと相談し、当初計画からの修正をお願いした。

・使われてこそ「材料」であるので、中間評価後には企業との連携を必須とした。また、それに備えるために JST 知的財産マネジメント推進部に協力を依頼、領域会議やセミナーにも同席して頂き、この連携のサポートをお願いしている。

・新型コロナウイルス感染症の急拡大により、対面での領域会議は1年以上開催できず Web による開催を余儀なくされている。これを補うため、定例の年2回の領域会議の他に、新たな取り組みとして「領域セミナー」を開設し、オンラインで年3回程度開催した。これまで、「知的財産」、「マネジメント」、「共同研究」について、研究総括、領域ADに加え外部の関係者を講師に迎え、セミナーを開催した。テーマの選定にはメンバーからのリクエストを反映している。

・若手研究者の育成を重点項目に据えている。この趣旨から、領域会議では各チームリーダの進捗報告に加え、若手メンバー（助教、博士課程学生クラス）にも研究成果を発表してもらい、優れた研究には本人に対して100-300万円程度の研究費を配賦している。

・中間評価の時期には研究成果をこれまでなじみの少ない学会（物理学会）でシンポを開催し、他流試合を行っている。

・領域発足後4年が経過し、研究の基礎固めが出来上がる段階に至ったと判断し、2021年度後半からチーム間連携を総括裁量経費などから予算を用意し、提案募集という形で共同研究を促進している。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況

発足当初は、データ科学が必須であると誤解していた研究者が多く、無理やりこじつけた感のあるテーマも少なくなかったが、サイトビジットや領域会議などで本研究領域の趣旨が良く理解され、4年目の領域会議では領域運営 AD や領域 AD から、本当の領域趣旨に沿った展開になってきたとのコメントを頂いている。これについては研究総括と領域担当とも同様の認識を持っている。

(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性

材料研究者が主導し、データサイエンスなどを取り入れた新しい材料開発を推進するという文部科学省による立案の狙いは、日本の強みである実験を主軸としてそれに世界の新しい潮流であるデータ科学などを取り入れて刷新することであり、実に時宜を得たものと思われる。

(2) に記したように、当初はぎこちなかったものの、採択された研究者も本 CREST 研究領域の意義を理解し、それに沿った展開をテーマに応じて行っている。「初めにデータ科学ありき」ではなく、新しい研究の方法論で目標を達成しようという意識統一がなされている。各研究チームはデータ科学、計算、数学、新しい計測法（例えば、有機半導体にクライオ TEM 技術を導入）などを適用し、成果に結実させつつある。

(4) 科学技術イノベーション創出に向けた、今後への期待、展望、課題

本研究領域の研究活動は、ほぼ当初の目算どおりに展開していると判断している。焦点は、世界をリードする成果が得られ、それが産業化につながるかどうかである。その観点から見ると、現時点では、AI と DFT 計算を結合させる手法で多成分の相平衡図を効率的に作成する方法の開発や、多結晶材料情報学の構築などの発展が期待される。企業連携は進みつつあるものの産業化の展望が開けたものは現時点では見えておらず、本研究領域の後半で重点的にフォローする予定である。

基礎研究から出てくる研究成果は、当初から企業が本気で飛びつくネタは殆どないのが普通である。その芽を伸ばすにはベンチャーの役割が重要であると考えます。ベンチャーキャピタルの支援を受けて設立するスタートアップにプロジェクトに参加し研究を推進した PD などが入って推進するのが、これからの方式として有効ではないかと、個人的体験から思っている。また企業はグローバルのビジネスをするし、国内のマーケットは大きな伸びは総じて期待できない。したがって、取得した知財なども許諾先を国内企業（定義があいまいだが）に限定する必要は無く、世界を視野に有効活用すべきであろうと考えている。

(5) 所感

本研究領域発足の2年前までさがけ「新物質科学と元素戦略」の研究総括を務めたが、さがけは伸び盛りの若手研究者が対象であるため、アドバイスにそれなりの効果があり、個々のジャンプに繋がったと判断できる例が少なくなかった。しかし、CREST となると、チ

ームを既に組んでおり、リーダーや参画者にはそれなりの実績を持つシニアの研究者が多い。CREST の研究総括に真に有効なことができるのか、と考えざるを得なかった。

材料の研究者は、大きな応用につながった実績を有する先達の意見を尊重する。これは自分自身に照らしてもそうである。そこで、ネオジム磁石の佐川真人氏、リチウムイオン電池の吉野彰氏と当時富士フイルムの知財担当役員であった浅見正弘氏の3名の先生方に領域運営アドバイザーをお願いし、領域会議に参加を頂き、会議の最後に忌憚のないコメントを頂戴することにした。3名の先生方はいずれも領域会議に毎回参加されて、率直なコメントを頂いており、メンバーには大変に有益な助言になっていると評価している。また、領域アドバイザーは、いずれも優れた専門性と豊富な経験を元に、領域会議等での研究者の発表に対し具体的な、時には厳しいコメントを毎回ご提供いただいている。このようなアドバイザーの地道な支援により、各研究チームのレベルアップが進んできたように思われる。

想定外の新型コロナ禍の拡大で、発足以来4年間のうち約2年間、通常の領域会議を開催できない状況が続いている。リアルで領域会議を開催できない部分を「領域セミナー」の開催で補っているが、やはり対面でないと実感できない部分もあり、気がかりである。また、対面の機会が少ないことにより、チーム間連携に遅れがでることも危惧している。そのため、総括裁量経費から予算を計上し、領域セミナーで共同研究について各研究チームから共同研究のテーマ提案をして頂き、纏まった内容を書面で提案してもらい、研究総括と領域ADで審査、共同研究促進のための予算配分を行った(2022年度の当初予算に反映)。

本研究領域が発足して4年が経過した。ようやく「革新材料開発」の領域名称にふさわしい研究成果が出始めるに至り、チーム間連携も活発化してきたので、本研究領域の後半の展開に期待している。

以上