

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」
研究領域事後評価報告書

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

本研究領域は、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」の下、材料研究において日本が強みを持つ実験的研究に、他国に後れをとっているデータ科学の活用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し、社会的ニーズが高いものの未だ実現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を狙いとして推進された。さらに、データ科学の活用による研究開発の加速だけではなく、従来の物質・材料研究の延長ではない革新性の要素と基礎学理の構築を目指すとする研究総括の意欲的な方針と強力な指導の下、若手育成も重視した領域運営が進められた。

研究課題の選考方針や領域アドバイザーの構成については、領域中間評価時においても高く評価されている。すなわち、選考方針に関する5つの観点は、材料（役に立つ物質）を生み出せる研究スタイルとして旧態依然の材料研究の変革を促すものであり、その結果、提案者の過去の実績にとらわれることなく、革新性と実用材料への指針のある提案が重視された。また、若手育成の観点にも考慮された選考が行われ、平均年齢が約45歳とCRESTの研究代表者としては若い研究者が採択され、若手が活躍できる場を提供した。研究分野の観点においても、有機、無機、金属等の材料分野と、合成、分析、計算、データ科学等の手法がバランスよくカバーされてシナジー効果も期待できる構成となった。領域アドバイザーは各分野の専門家が適切に選任された。また、実用材料を生み出す観点から革新材料の実用化の実際の経験や顕著な実績をもつ企業関係アドバイザーが多く参画したことは、本研究領域内の研究者の意識づけにも有効に働いたものと評価できる。

サイトビジットや研究進捗報告等を活用し、きめ細かい情報収集に基づいて研究代表者への個別指導やチーム内の若手研究者の支援、チーム間連携の促進を指導する等、研究総括の強力なリーダーシップの下、領域全体の研究を牽引した。一例として、第三期に採択された研究チームにおいて、領域中間評価時点では論文や特許出願件数が少なかったものの、研究総括の個別指導により、その後の論文や出願件数が飛躍的に増加した事例もあり、研究総括の指導の効果を示すものとして大変興味深い。

使われてこそ「材料」との方針の下、領域中間評価後には企業との連携を必須とする等のマネジメントの結果、新技術のシーズとなる多くの成果も得られた。

人材育成については、若手研究者へ追加予算を配分する等の工夫されたマネジメントの結果、若手研究者が育ってきている。人材育成の成果として、今後、チーム内研究者のより一層のステップアップについても期待する。

このように、本研究領域の研究マネジメントは的確に行われたと評価できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

当初より本研究領域の主目的を、ブランドジャーナルに論文発表することではなく、材料研究の新たな方法論を、材料開発を通じて社会に提示することとして研究が推進された。結果的には、各分野のトップジャーナルにも論文が多数掲載され、原著論文数も領域中間評価以降、249 報から 521 報に倍増する等、この方針で十分な成果が上がったものと評価できる。チーム間共著（9 報）は現時点では一部のチーム間に偏っており、今後、他のチーム間の共同研究成果が出てくることを期待する。また、一般的に、無機・金属分野と有機分野のような異分野間の融合に対するハードルは高いが、これらの分野を広くカバーした本研究領域での取り組みが、今後このような異分野融合にも発展することを期待する。

新技術のシーズとなる成果として、領域中間評価以降、特許出願件数が16件から83件（その内、国際出願が4件から26件）に大幅に増加しており、着実な進展が認められる。また、複数の研究チームがスタートアップ企業の設立を準備中もしくは設立済みであることや企業との共同研究に進展する等、領域中間評価時点で期待された社会実装に向けた取り組みにも進展が見られた点も高く評価できる。本研究領域で開発した技術の社会実装に向け、国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)のA-STEPや国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)プロジェクト等の競争的資金の獲得や上記のスタートアップの設立等に繋がっていることは、革新的技術のシーズが得られている証左と言える。その他にも、大場チームの情報科学を生かした多成分系相図の効率的作成法のウェブアプリ公開、宇佐美チームの「多結晶材料情報学応用技術研究会」の発足による産学共同研究の基礎検討の場づくり等も産業や社会への展開に向けた取り組みとして評価できる。社会実装に結び付けるには仮説実証やプロトタイプ構築を行いながらその芽を育てるスタートアップ企業の重要性が増しており、本研究領域で設立されたスタートアップの今後の発展状況についても非常に期待される。

以上を総括し、本研究領域は非常に優れていたと評価する。

以上