

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」

研究領域事後評価用資料

研究総括：細野 秀雄

2025 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	2
2. 研究総括のねらい	4
(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。	4
(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。	4
(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。	4
3. 研究課題の選考について	4
(1) 研究課題の選考方針、および選考結果	4
[選考方針]	4
[選考結果]	5
(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	8
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
(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）	11
[サイトビジット]	11
[領域会議]	11
[新型コロナ禍での領域セミナー活動の開始]	12
[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]	13
[個別指導]	13
(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	14
(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）	15
(4) その他マネジメントに関する特記事項（人材育成等）	16
[人材育成]	16
[研究成果のアウトリーチ]	16
6. 研究領域としての戦略目標の達成状況について	16
[論文の状況]	16

[チーム間共著]	17
[特許活動]	18
[新規の競争的資金受給とスタートアップ設立等の社会実装に向けた状況]	18
[各研究チームの主要成果]	18
(1) 宇佐美チーム (図 6 参照)	18
(2) 大場チーム (図 7 参照)	19
(3) 清水チーム (図 8 参照)	19
(4) 中嶋チーム (図 9 参照)	19
(5) 水上チーム (図 10 参照)	19
(6) 谷山チーム (図 11 参照)	20
(7) 長谷川チーム (図 12 参照)	20
(8) 山崎チーム (図 13 参照)	20
(9) 山本チーム (図 14 参照)	21
(10) 桂チーム (図 15 参照)	21
(11) 武田チーム (図 16 参照)	21
(12) 内藤チーム (図 17 参照)	22
(13) 能崎チーム (図 18 参照)	22
7. 総合所見	30
(1) 研究領域のマネジメント	30
(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況	31
(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性	31
(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	31
(5) 所感	32

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

細野 秀雄

(所属 東京科学大学 役職 栄誉教授／元素戦略 MDX 研究センター特命教授)

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」

<https://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

採択年度	研究代表者	所属・役職 採択時 ¹	研究課題
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
	大場 史康	東京工業大学・教授 (東京科学大学・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
	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
	中嶋 健	東京工業大学・教授 (東京科学大学・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
	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
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
	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
	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
	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
2019 年度	桂 ゆかり	東京大学・助教 (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
	武田 隆史	物質・材料研究機構・主幹研究員 (物質・材料研究機構・グループリーダー)	実験とデータ科学の循環による蛍光体開発
	内藤 昌信	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
	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

¹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した。
- ・課題中間評価の結果に応じ研究加速のための予算を、総括裁量経費より配賦した。
- ・チーム間連携を促進・支援するため、審査結果に基づき、2022 年度・2023 年度予算に総括裁量経費より配賦した。

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も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等のいわゆるブランドジャーナル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に本研究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) の募集では構造材料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(詳細は、「4. 領域アドバイザーについて」に後述)。

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・その他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（52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 楠木G スピン流シミュレーション開発
	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	
	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）

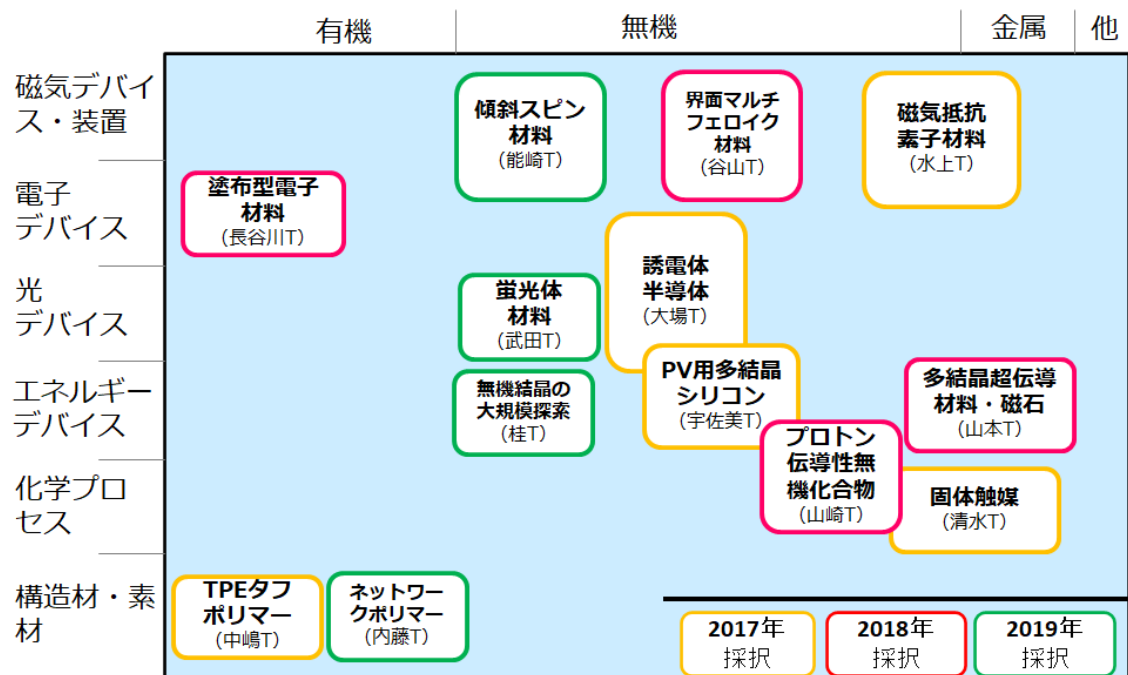


図4 本研究領域の課題ポートフォリオ（横軸：材料種別、縦軸：応用分野）

(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（耕三）氏、稲垣氏（途中退任）、時任氏（途中退任））、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。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（中川氏、稲垣氏）を確保するとともに、途中退任の時任氏の後任には同じ有機エレクトロニクスの専門家で且つ企業にて現役の経営者である野本氏を追加した。3期にわたっての採択の結果、スピントロニクスのデバイス課題の割合が増したことから、この分野の専門家である湯浅氏を領域アドバイザーに追加した。

また、本研究領域の当初からの狙い「実用されてこそ材料」を領域運営の点でアドバイスいただくため、企業において長年優れた材料を実用化した実績をお持ちの、富士フイルム株式会社知財担当役員の浅見氏、強力磁石の佐川氏、リチウムイオン電池の吉野氏の3名を運営アドバイザーにお迎えした。個々の研究課題の評価はお願いせず、領域会議にてコメントや講評をいただいた。

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)	物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 ((公財) 計算科学振興財団)	拠点長 (チーフコーディネータ)	2018 年 4 月～
大橋 直樹 (無機電子機能材料)	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 (機械学習・バイオインフォマティクス)	東京大学・大学院新領域創成科学研究科	教授	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～ 2024 年 3 月 (途中退任)
野本 和正 (有機エレクトロニクス、フレキシブルディスプレイ技術)	ソニーグループ株式会社 テクノロジープラットフォーム	テクノロジーフェロー	2022 年 7 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)	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)	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)	産業技術総合研究所・スピントロニクス研究センター (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 (多孔材料、触媒化学、吸着化学)	株式会社豊田中央研究所 稲垣特別研究室	シニアフェロー／室長	2017 年 6 月～ 2019 年 3 月 (途中退任)
寺倉 清之 (物性理論、計算物質科学)	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)

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～ 2022年4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、知財)	富士フイルム株式会社 (（一社）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、LIB)	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（第三期：能崎チーム）は2021年度下期に延期）

[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た。



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た。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した。

- ・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」、国立研究開発法人科学技術振興機構（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たが、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のシンポジウム 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。
- ・以降は新型コロナが落ちつき、また全課題の研究成果も出始めたため、後述の「研究成果のアウトリーチ活動」に移行した。

[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した。

[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年次に研究総括面談を行った。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」を優先することの方針を変更した。サイトビジットに同行した高田領域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>)
また得られた知見を基にドメイン壁を可視化する複屈折電界変調イメージング法を開発し、これを用いて柔軟性強誘電体による多軸性薄膜のドメイン壁間の交差と運動挙動可視化に成功した。
- ・第三期の内藤チーム（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った。しかし領域会議での発表・議論において、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、その成果を論文と特許に纏める様、指導した。その結果、最終的に論文は41報、特許出願数は35件となった。詳細は、後述の「6. 研究領域としての戦略目標の達成状況について」をご参照されたい。
- ・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た。

- ・宇佐美チーム（第一期）と山本チーム（第二期）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た。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を行った。

- ・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た。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た。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、実行した。
- ・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（第二期）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た。
- ・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）と共同研究を行った。
- ・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た。

各研究チームが開発したこれらの優れた手法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、総括裁量経費から共同研究促進ファンドを配賦した。

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した。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いた。例えば、第一期の宇佐美チームは公益財団法人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。

(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）の総合的なチーミ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。

個人型のさきがけと違い、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に配賦するようにした。

これも前述のように、チーム間の本格的連携を促すため、2019 年度から共同研究提案を募集し、提案書の内容に応じて 2020 年度に 2800 万円、以降 2024 年度までに累計 1.3 億円を総括裁量経費から配賦した。

(4) その他マネジメントに関する特記事項（人材育成等）

〔人材育成〕

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この方針に沿うものであるが、各研究チーム内で人材育成がなされることが現実的に重要である。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〕

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るようにした。

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た。

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。

2021 年 12 月には成果の国際発信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 件を発表した。

領域中間評価にてシンポジウム企画と開催については評価いただいていたこともあり、京都にて開催された国際会議：MRM2023 においても同様のシンポジウム A-1（New Methodology for Developing Innovative Materials, 2023/12/12-14）を開催し、終了した第一期 5 課題からを含め本研究領域から 24 件を発表した。

領域最終年度の 2024 年には、第 34 回日本 MRS 年次大会（2024/12/16-18）にてシンポジウム A-1（革新材料開発のための新アプローチ）を開催し、終了した第一期・第二期の 9 課題を含め、口頭 14 件、ポスター 12 件を発表した。このシンポは、文部科学省の MDX プロジェクトとの合同で企画した。かなりレベルの高い発表と討論が行え、双方にとって有益であったと捉えている。

6. 研究領域としての戦略目標の達成状況について

〔論文の状況〕

科学技術的な観点の成果として、本研究領域期間中の原著論文 511 報（領域中間評価時点
で、249 報）であった。そのうち、102 報（約 20%）が国際共著論文となっている。また、
各課題の最終報告書内容とその後の進展を総括した原稿を、英文論文誌：Science and
Technology of Advanced Materials (STAM) に 15 件投稿を依頼した。STAM 誌の論文採択率
は～30%であるが、内外の審査員による厳しい審査を経て、全件受理・出版された。

[チーム間共著]

チーム間共同研究を 8 件実施したことは前述の通りである。領域中間評価時点では研究
論文としての成果は未だ無かったが、現時点では以下 9 報の原著論文が出版されている。

- ・大場チーム（第一期）－桂チーム（第三期）

“Categorization of inorganic crystal structures by Delaunay tetrahedralization
“, STAM Methods (<https://doi.org/10.1080/27660400.2022.2059336>)

- ・大場チーム（第一期）－桂チーム（第三期）－内藤チーム（第三期）

“Machine-learning-based phase diagram construction for high-throughput batch
experiments “, STAM Methods (<https://doi.org/10.1080/27660400.2022.2076548>)

- ・大場チーム（第一期）－桂チーム（第三期）－内藤チーム（第三期）

“AIPHAD, an active learning web application for visual understanding of phase
diagrams “, Communications Materials (<https://doi.org/10.1038/s43246-024-00580-7>)

- ・大場チーム（第一期）－内藤チーム（第三期）

“Topological alternation from structurally adaptable to mechanically stable
crosslinked polymer “, STAM (<https://doi.org/10.1080/14686996.2021.2025426>)

- ・大場チーム（第一期）－内藤チーム（第三期）

“Understanding the evolution of a de novo molecule generator via characteristic
functional group monitoring “, STAM (<https://doi.org/10.1080/14686996.2022.2075240>)

- ・大場チーム（第一期）－内藤チーム（第三期）

“Koopmans’ Theorem-Compliant Long-Range Corrected (KTLC) Density Functional
Mediated by Black-Box Optimization and Data-Driven Prediction for Organic Molecules “,
Journal of Chemical Theory and Computation (<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00764>)

- ・大場チーム（第一期）－内藤チーム（第三期）

“Revealing factors influencing polymer degradation with rank-based machine
learning “, Patterns (<https://doi.org/10.1016/j.patter.2023.100846>)

- ・中嶋チーム（第一期）－長谷川チーム（第二期）

“Insulating Polymer Blend Organic Thin-Film Transistors Based on Bilayer-Type
Alkylated Benzothieno[3,2-b]naphtho[2,3-b]thiophene “, ACS Applied Materials &
Interfaces (<https://doi.org/10.1021/acsami.2c01676>)

- ・中嶋チーム（第一期）－長谷川チーム（第二期）

“Friction Force Mapping of Molecular Ordering and Mesoscopic Phase Transformations in Layered-Crystalline Organic Semiconductor Films “, ACS Applied Materials & Interfaces (<https://doi.org/10.1021/acsami.4c05169>)

[特許活動]

特許に関しては、83 件（国内 57 件、国際 26 件）出願されている。領域中間評価時点での件数は、国内 12 件、国際 4 件であり、大幅に増加した。特筆すべきは内藤チーム（第三期）であり、領域中間評価時点ではゼロ件であったものの、前述の個別指導により 35 件（国内 20 件、国際 15 件）となった。

[新規の競争的資金受給とスタートアップ設立等の社会実装に向けた状況]

CREST 研究開始後、新たに研究担当者（研究代表者と主たる共同研究者）が 500 万円以上受給している競争的研究資金は、42 件となっており、個々の課題で次の展開が計られている。

また、研究チーム毎に、本研究領域で開発した技術の社会実装に向け、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企業との共同研究に向けた取り組みを進めている。具体的内容については、図 6～18 の「今後の展開等」の項を参照されたい。

特筆すべき点としては、武田チーム（第三期）は CREST 研究参画の主要メンバーにてスタートアップである株式会社サイアロンが設立された。内藤チーム（第三期）もスタートアップの設立準備中である。

[各研究チームの主要成果]

以降、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、成果に結びついている。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性を、実例をもって提示したものである。

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た。

(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、競合する MI 手法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。特に相図作成の効率化手法は、他チーム(武田・内藤チーム)との領域内連携で成果も出ており、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。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される。

(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、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は、大きな成果である。

(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、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。

(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、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た。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。また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。

(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、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。磁気-電気結合係数の目標値を達成し、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 50 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。

(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、「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。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。

(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、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 0.01Scm^{-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したものである。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、社会実装に繋がる重要な成果である。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。

(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、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。微細構造画像からの輸送特性予測手法、3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 I_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。また宇佐美チーム(第一期)との領域内共同研究は、「多結晶情報材料学」の構築に新たな展開を見せつつある。

(10) 桂チーム (図 15 参照)

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、結晶構造シミュレーターや大規模論文データ収集などのMIツール群の開発、新物質探索マップの拡充に努め、大量の合成実験を実行することにより新物質を見出す手法を確立した。また、領域内の共同研究で電極触媒材料の探索を行い、新しい酸素発生触媒材料を見出していることも重要な成果である。

(11) 武田チーム (図 16 参照)

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、無機蛍光体に関する発光中心の局所構造の類似性に注目した新規データベースと発光モデルの構築を行い、データ主導による蛍光体開発手法を構築した。特に発光モデルや発光中心の局所構造類似性を起点に、データ科学を駆使した新蛍光体開発手法は、独自の実験手法である単粒子診断法と組合すことで効率的探索が実現し、半値幅 0.20eV 以下の狭い発光帯を与える 12 種類の蛍光体を発見している。これは、実験とデータ科学の融合によって革新材料の創出を目指した本研究領域の狙いに正に合致する成果といえる。また、スタートアップである株式会社サイアロンも設立した。

(12) 内藤チーム (図 17 参照)

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、熱分解を利用して開発したポリマーシーケンサーと機械学習を組み合わせた自律実験システムを構築しており、本研究領域の目指す「研究の方法論の革新」に合致した成果である。また特許も国内・国際合せて 35 件出願されており、スタートアップの設立も予定されている。

また、当初は予想していなかった音響分野での新規材料を機械学習で創出するなどの成果も挙げており、若手研究者にも優れた人材が育っている。

(13) 能崎チーム (図 18 参照)

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、非磁性材料から構成されるナノ超構造やナノ傾斜材料によるスピンドバイスに実現を目指した研究で、理論計算に基づいた電子や原子の巨視的回転によるスピン流生成の機構解明とこれらを可能にするナノ超構造やナノ傾斜材料の創製について、トップジャーナルに多く掲載されるなど、優れた研究成果をあげている。SAW とスピン波の結合を用いた格子回転運動によるスピン流生成メカニズム検証、並びに Si/Al 傾斜材料で生成された電流渦によるスピン生成の原理検証は科学的にも価値の高い成果である。



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 教授）

主たる共同研究者：工藤 博章（名古屋大学）、横井 達矢（名古屋大学）、大野 裕（東北大学）

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

研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 名誉教授／元素戦略センター長）

研究概要

多結晶材料は、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でした。本研究では、大量の実用多結晶ウェーハに対するデータ収集・機械学習・理論計算の連携により、一般粒界の構造・物性の理論構築を行う多結晶材料情報学を開拓します。その有用性を、データ科学によって設計され、理論に裏付けされた多結晶組織を有し、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の創製により実証します。また、シリコンで構築した研究手法を多様な多結晶材料の高性能化研究に展開します。

研究成果とインパクト

- ・実材料から収集したデータに基づく3次元多結晶モデル、結晶成長シミュレーションやその代理モデル、マルチスケール構造解析、ANNポテンシャルによる粒界原子構造の高速・高精度計算などを高度に連携させ、複雑な多結晶中の研究を体系化しました。
- ・機能性粒界を活用した高品質擬単結晶シリコンインゴット製造技術を考案し、量産レベルの大型インゴット製造に適用可能であることを実証しました。
- ・超伝導体、酸化物、シリサイド半導体など多様な材料の研究開発に展開しました。

今後の展開等

- ・本プロジェクトの成果に基づき開始した多様な多結晶材料の共同研究を進展させます。
- ・擬単結晶ウェーハの実用化に向けたNEDOプロジェクト、擬単結晶インゴットの量産化に向けた国際産学連携に展開します。
- ・JST 共創の場形成支援プログラムを産学連携研究推進や技術実証に活用します
- ・研究基盤を取り組めた教科書を出版して成果の普及に努めます。

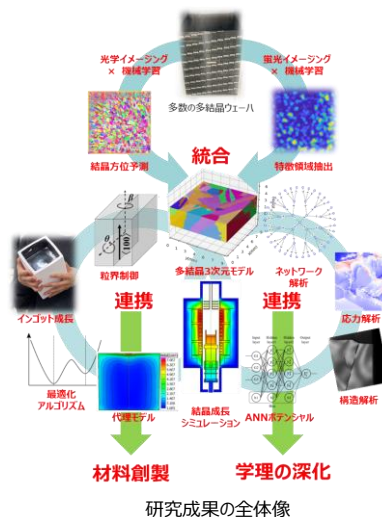


図6 宇佐美チーム（第一期） 研究進捗紹介



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）

主たる共同研究者：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）、平松 秀典（東京工業大学科学技術創成研究院）、野瀬 嘉太郎（京都大学大学院工学研究科）、谷口 博基（名古屋大学大学院理学研究科）

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

研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 名誉教授／元素戦略センター長）

研究概要

高精度と高速を両立した第一原理計算による基礎物性から格子欠陥特性までの多角的な評価と多様なデータ科学的手法の連携により、信頼性の高い物性・相図予測手法や*in silico*ハイスループットスクリーニング手法を確立した。実験グループとの連携による半導体と誘電体のケーススタディを通じて、本アプローチによる効率的な新材料開拓をデモンストレーションした。

研究成果とインパクト

理論計算グループとデータ科学グループの密接な連携により、無機材料の様々な物性や相図等の高精度・高速予測手法を確立・応用し、実験グループとの連携により種々の多元系窒化物・オキシカルコゲナイド半導体、多元系リン化合物光吸収半導体、層状ペロブスカイト酸化物強誘電体、酸化物高誘電率誘電体の開拓や特性発現メカニズムの解明につなげることで、本アプローチの有効性を示した。また、右図の相図作成効率化手法のウェブアプリケーションの例のように、開発した手法を一般公開した。

今後の展開等

- ・開発した手法・プログラムの更なる高度化・汎用化と一般公開による普及
- ・本アプローチによる材料開発に関する国内外の共同研究の拡大
- ・本研究で開拓した材料群の更なる知財化と企業との共同研究への発展

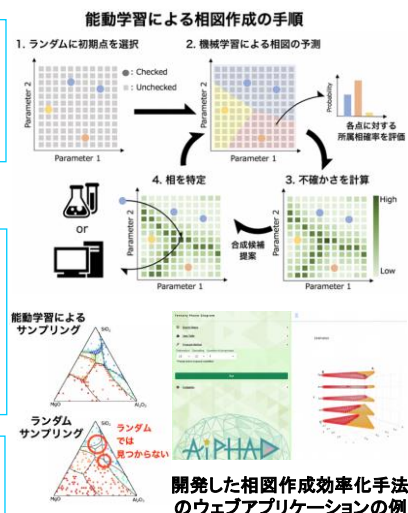


図7 大場チーム（第一期） 研究進捗紹介



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

研究代表者：清水研一（北海道大学）

主たる共同研究者：蒲池高志（福岡工業）、日沼洋陽（産業技術総合研究所）、前野禪（工学院大学）、濱本信次（山口東京理科大学）

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

研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 栄誉教授／元素戦略センター長）

研究概要

理論データや機械学習を用いた触媒科学（触媒インフォマティクス）の創成と本手法を活用した革新的固体触媒の開発を目的とした。①多様な固体表面の理論データを機械学習して得た設計指針に基づいて、水素化物触媒や規則性合金触媒を開発した。②外挿的触媒探索が可能な機械学習手法、③反応経路自動探索による触媒・反応探索法を開発し、革新触媒、革新反応を発見した。

研究成果とインパクト

- ・発見した触媒は、アルカン脱水素、低温CO₂還元、メタン浄化の各反応に対し、世界最高レベルの活性・触媒耐久性を示す。
- ・上記①～③の方法論は固体触媒分野において理論先導で材料開発するための標準法となるであろう。

今後の展開等

- ・超高速化学反応計算（Matlantis）を用いた超高速な革新触媒開発に挑戦中であり、JST、NEDOに予算申請する。
- ・領域内の山崎T（九大）、桂T（NIMS）と、デルフト工科大学の浦河教授との共同研究が進行中であり、今後も継続する。
- ・CO₂還元、メタン浄化、アルカン脱水素の成果を知財化する。

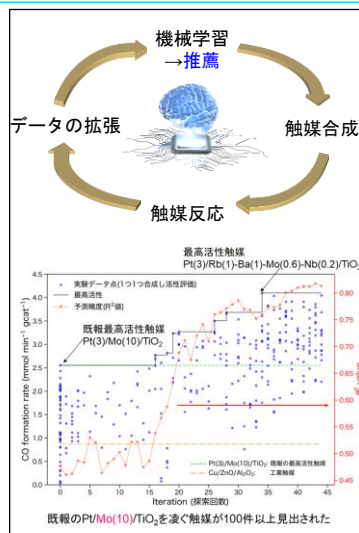


図8 清水チーム（第一期） 研究進捗紹介



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

研究代表者：中嶋 健（東京工業大学 教授）

主たる共同研究者：小椎尾謙（九州大学）、森田裕史（産業技術総合研究所）、下川航也（お茶の水女子大学）、小谷元子（東北大学）

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

研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 栄誉教授／元素戦略センター長）

研究概要

ナノ触診原子間力顕微鏡（AFM）、放射光小角X線散乱（SAXS）などの先端計測技術とデータ同化粗視化分子動力学（MD）シミュレーションを駆使し、変形化にある熱可塑性エラストマー（TPE）の変形挙動を解明します。また数学の離散幾何解析を組み合わせることで、革新的な高性能TPE創成のための設計指針を提供します。実験とシミュレーション、数学が協奏する新しい材料研究・開発の形を創出します。

研究成果とインパクト

ナノ触診AFMとMDシミュレーションのデータ同化による、TPE材料内部の変形挙動の解明が行えるようになりました。MDシミュレーションと数学を融合することで、求める性能を発現する材料開発に必要な記述子を提供できるようになりました。

今後の展開等

- ・JST他事業、NEDO事業に貢献する先端計測技術、シミュレーション技術
- ・TPE以外の高分子材料（フィラー充填ゴムなど）への応用展開
- ・従来のTPEを凌駕する高性能TPEの特許化

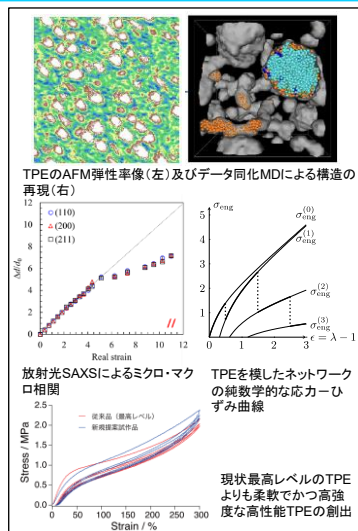


図9 中嶋チーム（第一期） 研究進捗紹介



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)

主たる共同研究者: 廣畑 貴文(英国ヨーク大学)、白井 正文(東北大学)

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

研究総括: 細野 秀雄(東京工業大学 栄誉教授/元素戦略センター長)

研究概要

磁性材料/絶縁バリア材料/磁性材料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新磁性材料や絶縁バリア新材料を創出する。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

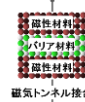
- ① 磁性材料: 大量生産に適したプロセスで従来材料(鉄コバルトホウ素と酸化マグネシウムバリア)に匹敵する新準安定磁性材料素子を開発。大容量磁気メモリへ展開。
- ② 絶縁バリア材料: 大量生産に適したプロセスで新準安定ワイドギャップ半導体窒化物バリア素子を開発。大容量磁気メモリへ展開。
- ③ バルク及び界面仮想スクリーニングの手法により高特性を発現しうる新ホイスラー合金素子開発を実証。

今後の展開等

- 新磁性材料(米国特許出願中)、新絶縁バリア材料(特許出願準備中)
- 企業連携による実用化展開と大容量磁気メモリ新産業創出への貢献
- 他グラントに基づくワイドギャップ窒化物半導体磁気素子への展開

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



本成果

素子特性(TMR比) (%)

FeCoB合金 ~230 % (350°C熱処理時: チーム内比較)

新準安定磁性合金 ~320 %

米国特許出願中 (絶縁バリア材料は特許出願準備中)

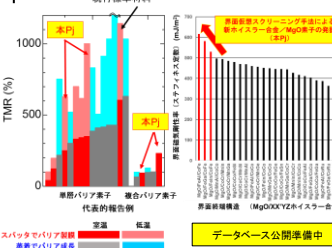


図10 水上チーム(第一期) 研究進捗紹介



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)

主たる共同研究者: 合田 義弘(東京工業大学)、浜屋 宏平(大阪大学)、木村 崇(九州大学)

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

研究総括: 細野 秀雄(東京工業大学 栄誉教授/元素戦略MDX研究センター特命教授)

研究概要

実験的・計算的研究手法を有機的に融合することで、界面マルチフェロイク材料における磁気-電気結合の巨大化と、磁化配向の電界スイッチング機能の実証、スピン波伝播の電界スイッチングの実証、熱流・スピン流の電界制御の実証、界面マルチフェロイクトンネル磁気抵抗素子の実証に成功した。以上の研究を通して原著論文59報(内6報は投稿中)、学会発表213件として成果発表を行なった。

研究成果とインパクト

磁化配向の電界制御などの界面マルチフェロイク材料の性能を特徴づける磁気-電気結合係数として世界最高値の $\sim 2 \times 10^{-5}$ s/mを持つ界面マルチフェロイク材料の創製に成功した。さらに界面マルチフェロイク材料を用いてトンネル磁気抵抗、スピン波、熱流、スピン流の電界制御の実証にも成功した。

今後の展開等

- ・企業連携の強化に向けたA-STEP 産学共同(育成型)(本格型)などのプロジェクトによる実証実験への展開
- ・界面マルチフェロイク材料に関する海外研究機関との連携の強化
- ・界面マルチフェロイクメモリなどの単品デバイスとしての知財の取得

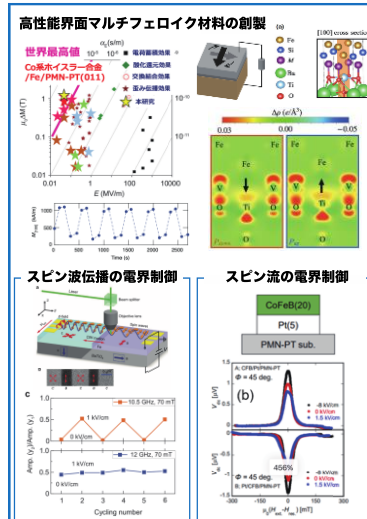


図11 谷山チーム(第二期) 研究進捗紹介



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）
 主たる共同研究者：堀内 佐智雄（産総研）、松井 弘之（山形大）、熊井 玲児（高エネ研）、米倉 功治（理研／東北大）
 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
 研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授）

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んだ。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た。

研究成果とインパクト

①結晶構造DBによる新材料発掘、②段階的構造予測等を独自開発し、③MDシミュレーションによる分子秩序化過程解明に成功した。実験では、④ π 骨格-アルキル連結系にもとづく層状有機半導体の系統的開発を進め、⑤高撥水表面への塗布製膜技術開発により、⑥TFTの超高急峻スイッチング実現に成功した。また ⑦電子線回折・放射光による極微試料の構造解析を進化させた。

今後の展開等

① 結晶構造予測法に関して、知財を強化しつつパッケージ化を進める。② 特に優れた有機半導体について、知財を強化しつつ試業化し普及を図る。③ 材料・デバイスの格段の進化と超高精細銀配線印刷を組み合わせた高性能な全塗布型デバイス製造の実用化を産業界と連携し進める。④ 一連の材料の際立って高い層状結晶性を基盤に、さらに革新的な新材料開発に繋げる。



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：桑原 彰秀（JFCC）、奥山 勇治（宮崎大学）
 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
 研究総括：細野 秀雄（東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授）

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℃）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

①新手法：水と実験データと機械学習の融合による新たなデータ駆動型材料探索手法の開発、②新手法：第一原理計算主導による合成可否を考慮した非ペロブスカイト系新規プロトン伝導性無機化合物探索手法の開発、③革新材料：7つの新規プロトン伝導性酸化物材料の発見、④新規カソード電極高活性化記述子の発見および⑤300℃動作燃料電池コンセプトの実証を達成した。これらを活用することにより、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水電解素製造デバイスの実証により、脱炭素サイクル社会の提案に貢献する。

今後の展開等

ERATO等、本CRESTで得られた3つの新手法、7つの革新材料および3つの根源的理解を基盤として、300℃動作固体酸化物形燃料電池や水電解素製造セルの加速的開発へと展開したい。これまでに開発した材料や手法は特許出願しており、これらを活用することで、企業との共同研究も推進していく。化石燃料を使わず、カーボンニュートラルな社会を目指すためには、持続可能なエネルギー源由来の安価な水素は必要不可欠であり、電気化学セルを用いた水電解は現時点で最も有力な方法である。これらを加速的に開発することにより、日本の国家戦略やカーボンニュートラル目標の達成に大きく貢献したい。

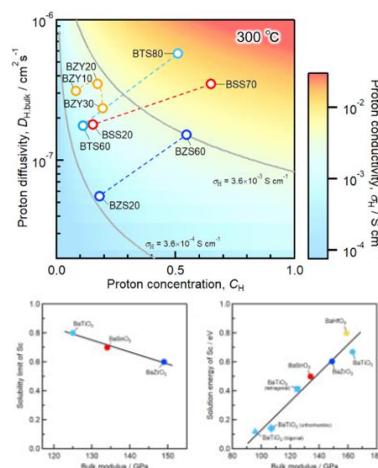


図1. 従来の常識を打ち破る300℃での高いプロトン伝導度と材料探索記述子。

図 13 山崎チーム（第二期） 研究進捗紹介

ここから
@1206



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)

主たる共同研究者: 飯田 和昌(日本大学)、波多 聡(九州大学)、山中 晃徳(東京農工大学)、嶋田 雄介(九州大学)

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

研究総括: 細野 秀雄(東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授)

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、多結晶材料プロセス研究開発の新スタイルを提示する。物性、粒界、組織の3要素にフォーカスを置き、単一人工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、データ同化組織形成予測手法、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

- ・研究者/データ協奏駆動型プロセスにより強力多結晶型超伝導磁石を創出
- ・粒界ネットワーク設計により鉄系高温超伝導で世界最高電流性能を達成
- ・深層学習を導入し、材料の微細構造の「画像」から「輸送特性」を予測
- ・3次元STEMその場観察を実現、データ同化PFMIによる組織形成予測モデル

今後の展開等

- ・国内外グループとも連携した多結晶材料プロセスインフォマティクスの深化
- ・稀少元素を必須とせず低コストで製造可能な多結晶型超伝導磁石の応用
- ・プロジェクト発の手法、知財を活用した産業界との連携、技術移転
- ・マルチスケール/ディメンジョン最先端電子顕微鏡法他材料への展開



図 14 山本チーム (第二期) 研究進捗紹介



新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発

研究代表者: 桂 ゆかり(国立研究開発法人物質・材料研究機構 主任研究員)

主たる共同研究者: 森戸 春彦(東北大学)、秋山 正和(富山大学)、菅原 徹(京都工芸繊維大学)、藤岡 正弥(産業技術総合研究所)

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

研究総括: 細野 秀雄(東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授)

研究概要

- Materials Informatics (MI)によって新規無機材料の実験的探索を加速する研究を行った。
- ・ドローネ四面体に基づき結晶構造を直観的に設計できる結晶構造シミュレータを開発した。
 - ・結晶構造データと大規模論文データの解析と機械学習によって、新規材料や高特性材料が見つかる可能性の高い元素の組を予測する新物質探索マップなどのMI技術を開発した。
 - ・独自の合成技術群(大規模合成実験、固体中イオン制御技術など)で多数の新規物質を合成し、そこから有望な機能を持った材料を探す、化学主導型の探索アプローチを採用した。
 - ・電極元素の反応性予測と自動接触抵抗測定装置の開発によってデバイス化を加速した。

研究成果とインパクト

- ・新物質探索マップや結晶構造シミュレータ、大規模論文データ収集などの新規MI技術群を開発し、データセットやWebシステムとして提供しながら解析することで、MIから得られる知見を実験系研究者に提供して、多数の新物質の発見につなげる研究スタイルを開拓した。
- ・NaAlB₁₄等からのNa除去により新しい酸素発生触媒群を発見した。ホウ素クラスタ化合物へのホールドープが高活性化の起源であり、従来と異なる水分分解メカニズムと、一般に用いられるCo₃O₄を凌駕する活性を示し、構成元素の普遍性、安全性、耐久性でも優れている。

今後の展開等

- ・論文データ収集システム(Starrydata)を生成AIで加速することで、企業連携などで産業界のニーズに合わせた大規模論文データ収集を行い、オープンデータとして世界に共有する。
- ・ホウ素リッチ化合物は多様なホウ素クラスタから形成される複雑な物質群であるため、結晶構造シミュレータによる設計を交えながら、これらの化合物へのホールドープを行うことで新たな酸素発生触媒を創出して、関連化合物の特許を獲得して企業連携への展開を狙う。

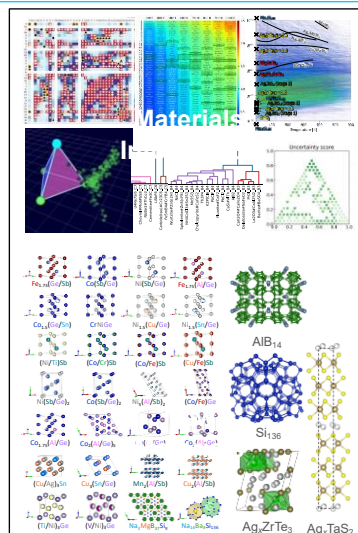


図 15 桂チーム (第三期) 研究進捗紹介



実験とデータ科学の循環による蛍光体開発

研究代表者: 武田 隆史 (物質・材料研究機構 グループリーダー)
 主たる共同研究者 池野 豪一 (大阪公立大学)、小笠原 一禎 (関西学院大学)、松石 聡 (物質・材料研究機構)
 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
 研究総括: 細野 秀雄 (東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授)

研究概要

発光波長や発光半値幅の機械学習モデル、局所構造の類似性の機械学習がデータベースから提案する候補物質を、単粒子診断による高速実験で合成・評価することで、発光半値幅の狭い蛍光体と温度特性に優れた蛍光体の開発を行った。励起状態計算や熱振動効果を取り入れる計算手法開発も行い開発蛍光体の発光スペクトルの理論的な検証も進めた。

研究成果とインパクト

産業用白色LED光源用の高効率な紫発光蛍光体、自動運転表示灯の青緑発光蛍光体、ディスプレイ色域拡大や視感度対応の高効率照明用の赤色の狭帯域蛍光体など、様々な発光波長域で狭帯域発光の蛍光体を発見した。

今後の展開等

開発した狭帯域蛍光体について、有望な蛍光体は特許出願を行う。すでに特許出願済みの蛍光体は、実用化に向けた企業との共同研究を推進する。高輝度照明は有望なデバイスであり、本成果を元にNEDO、ATLAなどの事業に展開する。

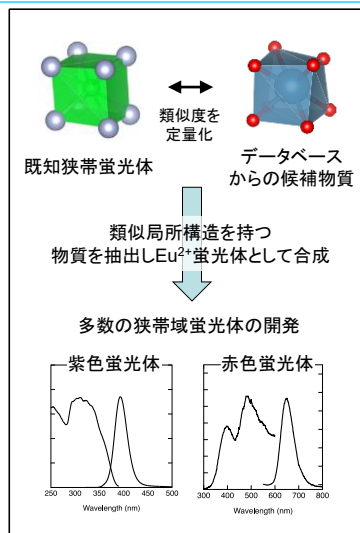


図 16 武田チーム (第三期) 研究進捗紹介



データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発

研究代表者: 内藤 昌信 (物質・材料研究機構 高分子・バイオ材料研究センター 副センター長)
 主たる共同研究者 佐藤 千明 (東京科学大)、袖山慶太郎 (物質・材料研究機構)
 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
 研究総括: 細野 秀雄 (東京工業大学 栄誉教授・元素戦略MDX研究センター特命教授)

研究概要

ランダム共重合中に確率的に生成される、数量体程度の短い特定配列が鍵となって発現する高分子機能に注目が集まっている。本研究では、熱分解質量分析のAI解析により、ランダム共重合体の配列を、短配列の組成比で記述する高分子の新たな表現方法を提唱した。さらに、微量検出を駆使して、高分子材料の化学劣化の定義について提唱した。さらに、自動合成やデータベースを駆使して、データ駆動型による高分子材料開発を推進した。

研究成果とインパクト

- 本研究で開発した「Polymer Sequencer」により、不溶・不融の高分子の配列解析やppmオーダーの微量不純物分析が可能となった。
- 樹脂の劣化評価や接着剤の性能評価など、実用材料の物性・機能評価法として強力なツールとなる。
- 開発したスマートラボを用いて、CO₂分離膜や触媒重合の探索に展開した。

今後の展開等

- 文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」に、データ活用促進グループとして参画
- 共創の場形成支援プログラム(COI-NEXT) (代表: 金沢大学)に高分子インフォマティクス・機械学習として、2023年度から採択内定
- NIMS発ベンチャー設立予定

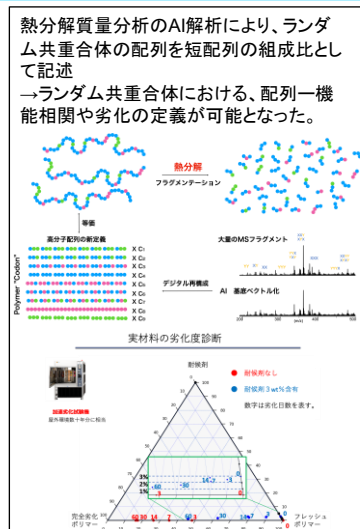


図 17 内藤チーム (第三期) 研究進捗紹介



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ndeバイス応用

研究代表者: 能崎 幸雄 (慶應義塾大学 教授)

主たる共同研究者: 介川 裕章 (物質・材料研究機構)、渡邊 紳一 (慶應義塾大学)、柚木 清司 (理化学研究所)

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

研究総括: 細野 秀雄 (東京工業大学 栄誉教授/元素戦略センター長)

研究概要

物質中のマクロな回転運動とミクロな電子スピンのマルチスケール角運動量変換 (磁気回転効果) を微視的立場から理解し、希少金属に頼ることなく、結晶格子の回転運動や電流の渦から磁気の流れ (スピン流) を生み出す原理を解明した。さらに、ナノスケールで制御した傾斜界面を用いた従来にはない新しいスピン流生成法を開発し、スピndeバイスが抱える材料問題の解決と磁気メモリデバイスの大容量化を目指した。

研究成果とインパクト

開発した傾斜材料は、Ptなどの希少金属に比べて高い電気伝導度を持ちながら、Ptに匹敵するスピントルクを発生し、磁気メモリ (MRAM) の省電力化に貢献する。さらに、電気伝導度の空間勾配に由来する電流渦からスピン流を生成する方法は、スピndeバイスの材料選択自由度を飛躍的に広げる可能性を秘めており、持続可能な電子デバイス開発の実現に大きく貢献する。

今後の展開等

NDAを締結したMRAM開発ベンチャー企業と連携しながら、磁化スイッチング性能の高い傾斜材料 (特許出願中) やナノ積層膜をデバイス実装技術に昇華させる。また、チームとして新たな研究費を獲得し、引き続き半導体傾斜材料の研究開発を進め、ゲート電圧や光による制御が可能なスピン流生成材料などこれまでにない全く新しい機能性材料の実現を目指す。

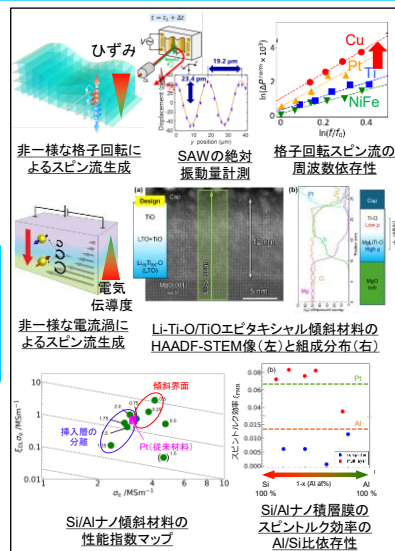


図 18 能崎チーム (第三期) 研究進捗紹介

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ー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した。
- ・これまでの研究総括の経験から、採択した課題に関しても、応募時の提案書の内容には実施が無理な事項が含まれているケースが少なくない。よって、提案書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、各チームリーダーと相談し、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た。
- ・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た。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、「知財」、「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た。
- ・若手研究者の育成を重点項目に据えた。この趣旨から、領域会議では各チームリーダーの進捗報告に加え、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直接本人に配賦した。中間評価後にはこの取り組みをさらに強化し、優れた研究成果を挙げた若手には200～600万円の研究費を配分した。
- ・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（日本物理学会）でシンポジウムを開催し、他流試合を行った。中間評価後には、成果の国際発信に力を入れた。具体的には、日本発の材料の大規模国際会議Materials Research Meeting (MRM) に国際シンポジウムを開催した。また、本研究領域の研究成果を総合総説として、Science and Technology for Advanced Materials (STAM) (IF=7.4) の特集号として出版した。STAM誌

の論文採択率は～30%であるが、各チームから投稿された原稿は、内外の審査委員の査読を経て、いずれも掲載可となった。

- ・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た。その結果、8 件の共同研究論文が現時点で出版になっている。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

発足当初は、データ科学が必須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顧問（領域運営 AD）や領域 AD の方から、本当の領域趣旨に沿った展開になってきたと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も同様の印象を持っている。3 年間ではなく 5 年強の研究期間であったことが有効に機能したと判断している。データ科学は新しいツールとして有効な場合が多いが、本当に革新的な材料の創出には原理的に困難なのが現実だ。この CREST 期間中にはその有効性と限界を参画者が実感できたのは大きな収穫だと思う。

(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。

上記（2）に記したように、当初はざこちなかったが、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、新しい計測法の適用（例えば、有機半導体にクライオ TEM 技術を導入）などし、成果に結実させつつある。

データ科学の活用は、この CREST 期間中に加速度的に進展した。使えそうな場合はどんどん活用し、有効ではないと判断された場合は別のアプローチに切り替えることで成果に結集した例が少なくない。

(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たと判断している。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。その観点からみると、AI と DFT 計算を結合させる手法で、多成分の相平衡図の効率的作成法の開発が、独自の実験手法と AI をうまく組み合わせることで実現した。多結晶材料情報学の構築やポリマーシーケンサーの開発、狭帯域発光材料の発見が実現した。企業連携は進んでいるものの

産業化の展望が開けたものは中間評価時点では未だ見えていなかったが、本研究領域の後半で内藤チーム、武田チームの成果が特許実施やスタートアップである株式会社サイアロンの設立に繋がった。能崎チームの磁気スイッチングがあと一歩で実現しそうな段階に至っている。これが実現すれば新たなデバイス応用が可能となるので期待しているところである。

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。

(5) 所感

この領域の立案者（文部科学省の担当者）は、材料研究者が主導してデータサイエンスなどを取り込んだ材料研究の推進を目指し、研究総括には JST が当初想定していた情報科学の専門家ではなく材料研究者を据えたい、という強い意向で、何度も当方を来訪された。さきがけ「新物質科学と元素戦略」の研究総括を 2 年前に終了し、もはや研究総括の仕事は卒業して研究に専念するつもりだったので、お断りした。しかし、何回も来訪され熱心に意義を説かれた。遂に根負けして引き受けたというのが、本研究領域の研究総括を務めることになった経緯である。

さきがけの研究総括は、伸び盛りの若手研究者が対象なので、アドバイスもそれなりに効果があり、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、自分の場合を含め、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。そこで、ネオジム磁石の発明者の佐川真人氏、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 名の先生方に顧問（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。特にこの CREST 期間中に吉野氏のノーベル化学賞、佐川氏のエリザベス女王工学賞の受賞があり、参画者に大きな刺激となったことは間違いない。

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生じた。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、気がかりであった。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た。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。

本研究領域が発足して 4 年が経過した時期に、待望であった対面の領域会議が泊りがけで実施でき、メンバー間の連携が目に見えて進展した。やはり、泊りがけの対面の領域会議こそが、CREST プロジェクトの最も重要な要素であることを再認識した。

募集時から Nature、Science（以下 NS）などのブランドの Journal への論文の掲載は特に目的としないと明記した。NS 信仰が過剰になっており、これに固執すると流行のテーマへの集中が生じ、本来の材料研究になりにくいと考えたからである。そこで、各専門分野における世界トップクラスへの学会誌への掲載と有効な特許申請（国内特許の件数ではなく、PCT 出願）を重視するとした。結果としては、各分野のトップ Journal への掲載の数は全体としてはそれなりの数にのぼったが、投入した資金と期間に対して十分といえるかどうか微妙なレベルに留まったというのが自己評価である。これは本 PJ のみの問題ではなく、CREST の全体会合でも共通の課題として挙げられている。研究者が自分たちの研究を世界トップクラスでの位置づけを明確に意識していない（あるいはやや避けている）のではないかと感じることも少なくなかった。CREST のレベルがこれでいいのか気になる。取得した特許の効果に関してはもう少し時間を置かないとその有効性については判断できない段階だ。

本研究領域テーマは、国際的にもこの期間中に物凄い勢いで研究が進展している。この CREST が立ち上がったことで、世界のトップ集団になんとか離されずについていけないかを感じている。本研究領域を立ち上げられた文部科学省の担当者の慧眼に改めて感謝する次第である。「材料研究は最低 10 年」といわれるほど成果が表出するまで時間を要する。AI は有力なツールだがそれだけで革新的材料が生み出せるものではない。これはそもそも自明なことだが、この CREST 研究で関係者は実感としてそれを体験したはずである。世界が同じような protocol を使って研究を進めているので、勝負はデータの質と量、その際には研究者の独自の物質観と鋭い観察力、大胆な仮説の設定がキーとなるはずである。「学問に王道はない」ということだろう。また、ここに日本が世界に勝てる戦略があるのではないかと感じている。

以上