

さきがけ「新物質科学と元素戦略」

研究領域事後評価報告書

総合所見

本研究領域では、“目的とする材料機能の発現原理を検証・把握し、ナノスケールの物質構造（原子配列、磁区構造、分子構造等）を制御し、「希少元素・有害元素の代替」にとどまらない「革新的機能材料」の創成”を目標としている。我が国の産業振興という社会的な重要性に鑑み、元素戦略を念頭に置いた新たな社会的価値につながる新物質科学の研究を、ナノスケール構造制御の視点から進める、という選択は優れた視点である。また、ねらいとして、従来の元素のイメージの刷新により新領域の開拓というブレイクスルーを目指すことが設定されているため、本研究領域は、ナノテクノロジー・材料分野の先端として、学術及び今後の応用の面で世界をリードできる領域であり、研究領域の設定は適切である。無機、有機、無機 - 有機複合、ナノ（孔、粒子、ワイヤー等）、触媒、磁性体、超伝導体、高移動度材料、熱電材料、超高靱性高硬度材料、スピントロニクス材料など、将来のデバイスを見据えた学術的に重要な物質材料開発を行っている。また多くの研究課題では、更に“分子配列、電子構造、バンド構造、金属 - 有機分子の連結性”などを制御しており、個性豊かな開発視点が加わっている。

課題の選考では、本研究領域における研究総括の明確な方向性に沿って行っている。特に、選考基準にある「伸びしろの大きさ」「生意気な研究者は世界トップになろうという旺盛な意欲を示す」に注目した若手研究者の選考はすばらしい。①発現原理の解明、②原子配列制御などナノスケールの物質構造をデザイン、③材料創成、革新的機能創出、④発現原理の再検討、という各フェーズにおいてバランスよく優秀な若手研究者を選出し、合計 34 名を採択した。「改良ではなく革新」を目指すこと、研究領域内のコラボレーションを積極的に進めること、さらに具体的な個別指導によって最初の構想を柔軟に変更すること、が大きな成果をあげた理由であると思われる。領域アドバイザーの選定についても明確な視点で 18 名を選んでおり、バランスが良い。各研究課題の成果を十分把握した課題評価を実施し、今後の飛躍に向けた適切な指導を与えており、若手育成の面で優れている。本研究領域において、若手研究者は上記コラボレーションをはじめ、革新的材料の創成に欠かせない融合型研究を経験し、今後の研究展開により各分野での世界の先駆者として成長することを期待している。

レアメタルフリー材料を目指す元素戦略を踏まえ、将来の科学技術イノベーションの基盤となる革新的機能材料の創成を軸に、物質・材料科学の進展を図るという目的に照らし、本研究領域では画期的成果が多数得られている。その客観的なエビデンスとして、Nature/Science 系学術誌への 20 編以上の論文掲載、そして、研究課題終了後に CREST へ 4 課題採択されメンバーの 3 割が CREST の研究者となるなど次ステップへの展開をあげることができる。研究総括の革新的機能材料にかける意気込みと力強い指導、そして個々への対応がこれらの

優れた成果を導いたといえるであろう。成果を具体的に見ると、電極材料、電解質、スピントロニクス物性解析等で優れた結果を得ている一方、これらと比較すると光触媒、半導体分野の成果はもう一歩という感が残るが、我が国の物質・材料科学の発展のためにも、この分野で新たな視点の研究が今後望まれる。

上記の研究成果やマネジメントの状況から、研究領域の設定と研究総括の選定は適切であったといえる。

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。

I. 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

(1) 研究課題の構成

革新的材料創成に不可欠な i) 発現原理の解明、ii) ナノスケールの物質構造デザイン、iii) 材料創成、革新的機能創出、iv) 発現原理の再検討、を融合的に進めるため、多分野にまたがる交流を可能とし、かつ相乗的な効果が得られる研究課題構成となっている。具体的には、スピントロニクス、有機エレクトロニクス、イオニクス、機能性酸化物、触媒、半導体、磁性材料、電極・電解質、ガス分離材料、超伝導、太陽電池、熱電変換、超高靱性高硬度材料などバランス良く幅広く選考し、また、計算科学、高圧合成、先端評価解析の研究者を8~9名採択して研究領域内における共同研究のハブの役割を果たす仕組みとなっている。これらバランスがよい研究者構成を得るにあたり、本研究領域が対象とする分野・機能材料等を公募に明記するなどの工夫がされており、それが功を奏したと思われる。研究者の専門分野の多様性は確保されていたが、選考時の所属として東京大学(7名)、東北大学(6名)にやや集中しており、もう少し多くの他大学、他機関にわたっていてもよかったかもしれない。

(2) 領域アドバイザーの構成

オリジナルな研究推進者で俯瞰的視野を持った人物、という観点で18名を選び、ほぼ研究課題の範囲をカバーし、バランスが良い。採用者の分野をカバーできない際には領域アドバイザーを追加するなどの対応が適切にとられたようである。アカデミック分野からの領域アドバイザーが多数を占めているが、研究成果の躍進を図るうえで、i) デバイス化に不可欠な産業界からの複数の領域アドバイザー、ii) 物質材料開発に関する物質理論関係(触媒、スピントロニクスや有機エレクトロニクスに優れた)に複数の領域アドバイザーが含まれているとよかった。

(3) 研究領域のマネジメント

若手研究者に、研究における飛躍、挑戦をしっかりと意識づけ、これまでで一番良い内容の論文を出させる指導は、若手研究者を世界のリーダーとして育成する上で優れたマネ

ジメントである。研究領域内のコラボレーションを促す仕組みの構築と奨励は、物質開発における異分野融合として重要な取り組みである。サイトビジットにおける研究者との対話、それに伴う、研究方針・方向のフレキシブルな検討は、短期間における集中した研究の遂行に極めて重要である（インキュベーションタイムを短くし、スタートダッシュの速度・方向を明確にする）。全般的には、H22年度採択→H23年度採択→H24年度採択、と進むにつれて優れた成果が増えており、また研究の進捗が滞るテーマも順次減少しており、マネジメントが大変優れたものであったことを示している。また研究費の配分については、研究の遂行に必要な経費を勘案し、重要なテーマを促進するため、もう少しメリハリのある配分を行なってもよかった。

(4) 特筆事項

アカデミックポジションでのプロモーション、受賞業績、論文業績、招待講演などに関して、9割に及ぶ研究者が十分な成果を挙げ、確実な成長を示している。論文業績ではNature系、Science系、Phys. Rev. Lett.、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Edなど高インパクトファクター論文が多数生まれている。34名のメンバーから4名がCRESTに発展し、研究領域内のコラボレーションにより領域メンバーの3割が参画するという結果を得たことは、革新技术創出に欠かせない融合型研究の積極的推進がメンバーに浸透した結果といえる。

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

研究成果が、独創的・挑戦的・先駆的であり、かつ国内外の類似研究と比較して国際的に高い水準の発展が見込まれるか、また科学技術的に大きなインパクトを期待できるかという視点で見て、本研究領域から多くの優れた具体的研究成果が得られた。以下に独創性、挑戦性、先駆性が十分高いと判断する課題を列挙する（敬称略）。

(1) 新物質科学として独創的かつ先駆的な成果

1期生の守谷誠「Liイオンチャンネルを有する新規分子結晶電解質の合成」、水口将輝「スピリン注入型熱電素子の開発」、2期生の中野秀之「層状ポリシラン電極アニオン二次電池の動作原理の確認」、野呂真一郎「Mg、Ca錯体での新規多孔性CO₂分離材料の合成」、堀毛悟史「Zn、イミダゾール、リン酸で高プロトン伝導性錯化合物を合成」、松尾司「ゲルマノン合成」（ただし、松尾の課題は有機合成化学の世界的成果であり、今後有機合成化学の反応に多用され得るが、Geはレアメタルに分類されており、将来的にレアメタルフリーを目指るとよい。）、3期生の小林玄器「層状ペロブスカイトの新規水素化物でのヒドリド伝導の実現」があげられる。

(2) 新規材料創成に今後の展開が期待できるもの

2 期生の畠山琢次「ヘテロ原子 B、P を有する螺旋不斉ヘリセンの合成と特異なキャリア輸送性能の解明」、3 期生の紅林秀和「反転対称性が破れた結晶系での、スピン軌道相互作用を用いた磁化制御機構の微視的解明」（特記事項参照）、中辻知「反強磁性体の巨大異常ホール効果の発見」（特記事項参照）、近藤剛弘「ピリジン型窒素ドーピンググラファイトの触媒機能」があげられる。

(3) 具体的な実用素材への応用が期待できる成果

2 期生の西山宜正「ナノ結晶ステーションバイトの高韌性化機構の解明」、藤田武志「3 次元網目/ナノポーラス構造金属フィルム調製の調製と触媒機能の確認」、山本明保「ナノ多結晶超伝導体の開発」、竹内恒博「室温以上での熱整流材料の開発」があげられる。

(4) 材料物性研究の基礎として重要な成果、理論、観測

1 期生の有田亮太郎「超伝導密度汎関数理論による高精度 T_c 予測と高温超伝導体の理論的予測」、一杉太郎「高分解能 STM/STS/PLD での酸化物薄膜の原子レベル観察」、2 期生の石坂香子「空間反転対称性の破れを内包する半導体表面の ARPES」、3 期生の梅津理恵「Mn 系合金の精密な平衡状態図の作成と新規ハーフメタル型強磁性体の探索」があげられる。

上記の研究者による研究成果は、いずれも、本研究領域「新物質科学と元素戦略」の目標、成果への期待に十分応えたものであり、期間中の成果のみならず、今後も各分野での研究の発展が強く期待される。

また、非常に面白いテーマであるが「希少元素・有害元素」（Nb, Ga, Ge, Pt, Cr, La, Y など）を用いた成果がある（1 期生 阿部英樹、梅沢直人、小西玄一、水口将輝、山田幾也、2 期生 松尾司、薬師寺啓、3 期生 梅津理恵、亀川厚則、小林玄器、中辻知）。これら研究者は、研究報告書冒頭（「研究のねらい」の中）にそれらがなにゆえに不可避免のかを学術的に言及し、今後の課題として「レアメタルフリー材料」とするための設計原理の構築を期待する。

(5) 特記事項：紅林、中辻の研究に関して

電荷のみならず電子スピンの自由度を活用するスピンエレクトロニクスには、従来の電荷自由度のみを活用したデバイスが微細化限界とこれに伴う消費電力の限界を迎える中、今後の IoT 社会を支える極低消費電力・超小型の情報処理デバイスとしての実現が期待されている。その実現に欠かせない重要技術は、電子スピンの制御と電子スピン状態の検出である。それらに対する挑戦的かつ先駆的な成果として次の 2 例を挙げたい。

電子スピンの制御について、旧来はマクロな磁場による制御、近年では電流や電圧など

による微視的領域の電子スピン制御方法がいくつも提案されている。スピン軌道相互作用を用いた磁化制御はそのうちの一つであり、他のプロジェクト（例えば、JST の ImPACT、<http://www.jst.go.jp/pr/announce/20160216-2/>等）でも検討が進められているが、そのメカニズムまでの議論は少なかった。今回、紅林は、反転対称性が破れた結晶系におけるスピン軌道相互作用に着目し、その磁化制御機構の一つがベリー位相に基づくことを世界で始めて実証した。微視的視点での今回の理解は、今後の物質デザインによる次の新しい材料創成へ繋がると期待できる。

一方、カイラル磁性体構造をもつ反強磁性物質で大きなホール効果が発現することが中辻により発見された。その発現温度が室温以上の物質（ Mn_3Sn や Mn_3Ge ）も存在し、インパクトが非常に大きい。また、ドメインの反転によるメモリ効果も示された。センサーやメモリ等の応用展開が期待されるとともに、従来の常識では発現しないと考えられていた反強磁性体でのホール効果発現の起源が、ホール効果に留まらない新規な現象発現にも繋がると考えられることから、今回の成果に基づいた物質科学での新たな領域形成が期待される。

科学技術イノベーションの源泉となる成果創出やその萌芽の観点で見ると、上記の各成果が示すように、既に用途が明確なものは、実用化の方向性が見えており、新たな特性を有する新規材料を予見させるものも多い。本研究領域の成果では、特に、電解質、電極材料関連で優れた結果を得ており、新型電池の開発を見据えた場合、その社会的インパクトは十分大きいといえる。また、スピントロニクス物性解析等でも基礎的に重要な成果があがっており、新規機能の発現に向けた今後の展開が期待される。一方で、(光)触媒、半導体、超伝導材料関連は、提案されたテーマ数が多かったものの、先端素材の開拓につながる成果は必ずしも多くないように見受けられる。この分野も社会的な重要性は高いため、本事業の成果を基に、新たな着想、切口の研究が開始されることを期待する。

科学技術イノベーションが期待される重要な課題・材料・理論として、液体 He を使用しない超伝導材料、プラズモンが媒介する超伝導体、巨大ホール効果を用いたメモリ/スピントロニクス、Hイオン伝導体、Si ナノドットによる高性能熱電材料、多孔性金属触媒、ボロフェンシートがあげられる。

当該さきがけ研究総括者・領域アドバイザーの評価用資料中の「研究領域のねらいに対する成果達成状況」で特記された 14 研究者の成果は特段に優れたものと判断される。また、本評価報告書で優れた研究と評価された 19 研究者、研究成果での昇進者（24 研究者）、「さきがけ」研究に対する表彰・受賞を受けた研究者（25 名）を総合すると、本「さきがけ」研究者の 9 割程度が独創性、挑戦性、先駆性に卓越した研究業績を上げている。

以上により、研究領域としての戦略目標の達成状況は特に高い水準にあると評価できる。

II. 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

1. 本研究領域の活動や成果を、科学技術の進歩へと展開させるための方策

(1) 段階的プロジェクト推進の構築

資源・エネルギー問題は日本における最大の課題であり、これを克服するには科学技術しかない。しかし、真に資源・エネルギー問題を解決するには、以下に示すような 3 段階のプロジェクトに国家予算を投入するようなことを考えてもよいのではなかろうか。すなわち、第 1 段階として、本プロジェクトのような独創的研究者を育てる「さきがけ研究」、革新的機能創出を目指した萌芽的研究プロジェクトを継続すること（3 年間で十分）、そして第 2 段階として組織的に新物質科学・機能創出研究を行う「CREST 研究」を継続すること（5 年間 + α が必要）、第 3 段階として産業界の研究者を Program Manager とする産学連携プロジェクトの推進が不可欠である（7 年間 + α が必要）。「産業はサイエンスの道場」ということが言われて久しいが、人材交流はなかなか進まず、産業界の研究開発投資も思ったように伸びていない状況では、思い切った国の投資、ガイドが必要になっている。1970 年代の「電子立国日本」のような大型プロジェクトの成功事例を「資源・エネルギー問題」のプロジェクトでも達成することが求められている。

(2) 融合 (fusion)

本事業を通じて、得られた成果もさることながら、若手研究者の成長や相互連携の機会も多かったと推察する。科学技術の進歩には、多面的な発想からの健全な討議が欠かせないので、今後も同様の事業で、関連分野の研究を活性化し、助成していくことが重要だと考える。本事業の成果を基盤として、新たな研究構想を募集し、新規物質・材料科学の戦略的創造研究を継続・発展させていくことを提案する。

2. 本研究領域の活動や成果を、社会還元や産業化・実用化に向けて実現させるための方策

第 1 段階に相当する本事業の成果を、企業研究者に広く知ってもらい、新たな視点も含めて実用化（開発）研究をスタートさせる（第 2 段階）ことを提案したい。そうした活動の中で、今回の成果に実用面からの発想を加えることで、また新たな材料創成につながる着想も生まれることを期待する。

第 2 段階から第 3 段階の研究開発プロジェクトをシームレスに繋ぐ必要もある。特に第 3 段階の産学連携プロジェクトでは、JST プロジェクトと NEDO プロジェクトとを上手く繋げる余地があるように思われる。産業界では短期的成果を求める傾向が強くなっているため、資源問題のように地道に進めなければならない分野においては国の主導による長期的な大型プロジェクトで技術を培う必要がある。その意味では、2 期生の中野秀之による「層状シリコン結晶を陰極とする BF_4 アニオン 2 次電池」について企業との協業が開始され、同じく 2 期生の竹内恒博と企業との連携による「超高性能バルク熱電材料 ($ZT \geq 2.0$) の創製」が NEDO プロジェクト（1.5 億円/2 年）として採択されたのは、今後の展開につながる活動として注目される。

3. その他の提言

本事業のように、最終的な目的は社会で有用な新規材料の実用化、開発であっても、それらを実現するための物質科学、材料科学の研究は、学術研究としてのサイエンスの基盤がしっかりしていることが極めて重要と考える（大きい飛躍には強固な基盤が必要）。そのため、成果としての社会実装が強く求められる状況の中にあっても、研究マネジメントにおいては、サイエンスの探究を重視した指導をこれからもお願いしたい。