

さきがけ「物質探索空間の拡大による未来材料の創製」

研究統括

陰山 洋 Hiroshi Kageyama

京都大学 大学院工学研究科



本研究領域は、令和3年度文部科学省の選定した戦略目標「元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探索空間の開拓」の下に発足し、昨年10月、若手研究者を中心に研究を開始した。われわれが直面する環境・資源・エネルギー、医療・健康等に代表される社会課題を解決するために、従来技術とは異なる非連続な概念・コンセプトを探求したシンプルかつ斬新なアイデアにより、これまでの物質探索空間の枠を超えた、革新的な新機能性材料の創出を目指している。

具体的には、異なる元素同士のシナジー効果を解明した上での元素の複合化による「多元素化」、元素の配置制御等による材料システムとしての「機能複合化」、非平衡状態や速度論的制御を利用する「準安定相」の活用等の

視点で、環境・エネルギー関連材料、エレクトロニクス材料、医用材料、構造材料等への利用に向けて夢のある材料・プロセス研究を推進していく。

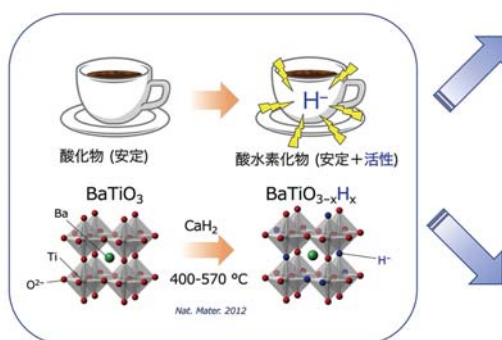
さらに、将来的な素材化、プロセス化技術の流れも意識し、物質創製技術やプロセス制御技術確立のために、計算科学や機械学習等のデータ駆動科学、最先端オペランド計測技術等との融合による原理解明、学理構築等、広い視点

を背景とした挑戦的なアプローチでの研究を行う。

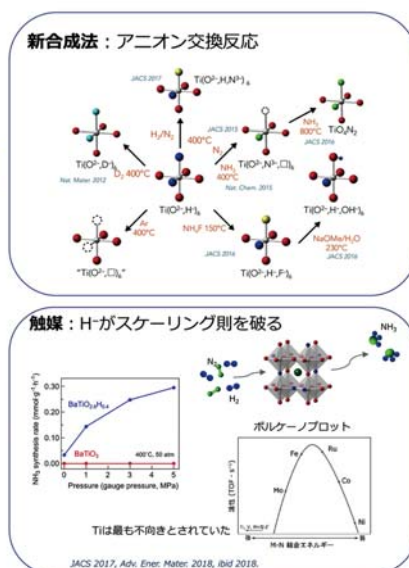
今年度は10課題を採択。採択率は7%と狭き門となったが、金属・無機系、有機系、理論計算、評価解析と幅広い研究分野からの研究課題で構成されている。

講演では、本研究領域の概要を説明させていただき、続いて、第1期研究課題を分かりやすく紹介したいと思う。

物質探索空間が広がった事例



安定な酸化物に導入した「ヒドリド」の活性を利用することによって、結晶構造探索空間の拡大 (右上) や新たな機能創成 (右下) が達成された



関連 WEB

https://www.mext.go.jp/content/20210312-mxt_kiso-000013144_6.pdf
https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunya2021-4.html