

# ゆらぎの制御・活用による革新的マテリアルの創出

## 趣旨

- 材料に内在するゆらぎを捉える技術が大きく進展している。計測・計算、プロセス技術、データ駆動研究等を融合することで、**ゆらぎを制御・活用し、多様な社会課題に貢献する革新的マテリアルの創出**を目指す。



## 達成目標



①

### 革新的機能・特性を有する材料とデバイスの創出

ゆらぎの材料科学的な基礎学理の構築



②

### 先進計測や計算機シミュレーション等の高度化

ゆらぎの理解、設計指針獲得



③

### 高度プロセス技術の確立

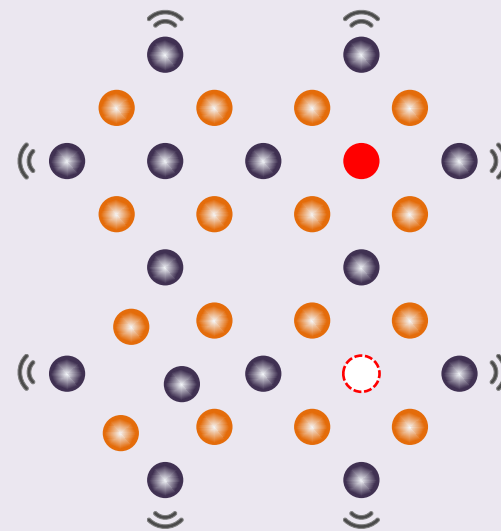
ゆらぎを制御・活用した材料設計



④

### データ科学・計算科学におけるゆらぎの概念の導入とモデル化

材料開発、データ駆動型研究の進化



空間的ゆらぎ



時間的ゆらぎ

イメージ例

構造、欠陥、組成、イオン、分子、配向の不均一、非平衡、ダイナミクス

## 将来像

ゆらぎの制御と活用による革新的マテリアルの創出により、**持続可能な社会や経済安全保障、人類のWell-beingなど、多様な社会課題に貢献する。**



## 令和7年度戦略目標

### 1. 目標名

ゆらぎの制御・活用による革新的マテリアルの創出

### 2. 概要

材料における空間的・時間的なゆらぎは、機能・特性を決定付ける重要な因子の一つである。近年の材料科学を取り巻く計測技術、計算科学等の急速な発展により、従来、困難であったゆらぎを捉えることが可能になりつつある。本戦略目標では、計測・計算、プロセス技術、データ駆動研究等を融合することで、ゆらぎを制御・活用した革新的なマテリアルの創出を目指す。従来の延長線上にあるゆらぎの理解を超えた、ゆらぎの材料科学的な学理を構築し、ゆらぎを用いた材料設計指針を進化させることで、多様な社会課題解決に貢献する革新的マテリアルの創出を目指す。

### 3. 趣旨

持続可能な社会の実現に向けて、資源制約や環境規制への対処が求められている。また、経済安全保障の重要性が高まる中、原料の特定少数国・地域への依存を克服したものづくりも必要である。このような社会的背景において、材料に要求される機能や役割は急速に高度化・多様化しており、これらの課題に対応する新たな材料・デバイスが求められている。

材料の機能・特性を決定付ける重要因子の一つとして、「ゆらぎ」がある。本目標においては、材料におけるゆらぎとして、空間的ゆらぎ及び時間的ゆらぎを対象とする。

【補足】本戦略目標では上記のゆらぎとして、構造、欠陥、組成、イオン、分子、配向等の不均一、非平衡、ダイナミクス等を想定する。例えば、有機材料では、分子の構造や配向等が対象。また、無機材料では、原子変位や点欠陥等が対象。金属材料では、相分解や転位等の結晶欠陥等が対象。

従来、有機・無機・金属等様々な材料において内在するゆらぎを利用し機能・特性の向上が行われてきた。また、限られた元素からなる材料においてもゆらぎを利用することで、資源・環境制約に捉われず、社会が求める性能を持つ材料・デバイスの創出が見込まれる。

一方で、ゆらぎは材料全体の平均として捉えられることやゆらぎの導入、プロセス（ダイナミクス）が不明確であること、計算科学においてはゆらぎが考慮されていないことなど、十分な学理がない中で材料の設計に利用されてきた側面もある。

昨今のマテリアル分野を取り巻く計測技術や計算科学等の急速な発展により、ゆらぎを捉える技術が大きく向上している。大型実験施設（SPring-8、SACLA、J-PARC等）や電子顕微鏡・走査型プローブ顕微鏡等によるオペランド計測等の分析・計測技術、解析技術が進展しているとともに、マルチスケール・マルチモーダル計測も進展してきた。また、計算機能力・計算手法の発展も目覚ましく、均一体・完全結晶を対象にした材料研究も世界各国で競争的に取り組まれ

ていることに加え、ゆらぎを加味した材料のモデリング・シミュレーションも可能になりつつある。このように各種技術が発展しつつある今こそ、ゆらぎの材料科学的な学理を構築し、世界に先んじたゆらぎの制御・活用基盤を構築する必要がある。加えて、これらの制御・活用基盤を活用し、ゆらぎを材料・デバイスに組み込むためには、設計・プロセス技術の確立も必要である。

以上より、本戦略目標では多様な社会課題にいち早く対応できる材料・デバイスの創出に向け、ゆらぎによる機能・特性の発現メカニズムを解明し、ゆらぎの材料科学的な学理構築につなげる。また、世界に先んじてゆらぎを材料・デバイスに活用するための計測・計算、プロセス技術の確立、データ駆動の進化など、材料の設計指針を進化させるとともに、従来の機能・特性を超越した多様な社会課題に貢献する革新的マテリアルの創出を目指す。

#### 4. 達成目標

本戦略目標では、計測技術や計算科学など、ゆらぎを捉える技術が発展する中で、機能・特性発現において重要な因子の一つである材料中のゆらぎを理解し、ゆらぎの材料科学的な学理構築につなげるとともに、材料設計指針を進化させ、革新的なマテリアルの創出を目指す。具体的には、以下の達成を目指す。

##### (1) ゆらぎを制御・活用した革新的機能・特性を有する材料とデバイスの創出

ゆらぎの材料科学的な学理を構築し、ゆらぎを制御・活用した材料の設計指針の確立を目指す。また、従来の材料開発の既成概念を超えた革新的機能・特性を有する材料とデバイスの創出を目指す。これを達成する上では、後述の(2)(3)(4)の活用も必要である。

##### (2) 先進計測や計算機シミュレーション等の高度化

材料に内在するゆらぎを捉え理解するための、様々な環境下でのその場観察や動作中のデバイスでのオペランド計測技術の更なる発展を目指す。また、ゆらぎが材料に及ぼす影響を正確に捉えるための、原子・分子から実材料スケールまでのマルチスケールでの計測技術に加え、マルチモーダル計測技術の発展を目指す。加えて、計算機シミュレーションにおいて、第一原理計算や大規模分子動力学計算など、計算科学の手法にゆらぎを導入するための技術開発を目指す。

##### (3) 高度プロセス技術の確立

ゆらぎを制御・活用し、材料設計をするための、先端計測や計算機シミュレーションから予測された機能・特性を再現するプロセス技術の開発、ゆらぎを導入するプロセス技術の開発(先進計測や計算シミュレーションとの融合も含む)を目指す。

##### (4) データ科学・計算科学におけるゆらぎの概念の導入とモデル化

材料開発の進化に向けてゆらぎを特徴量として導入したデータ駆動型研究を確立するため、

材料・デバイス中におけるゆらぎを特徴量として導入したデータ蓄積、数理科学との融合等によるゆらぎのモデリング技術の確立や機械学習モデルの構築を目指す。

## 5. 見据えるべき将来の社会像

4. 「達成目標」の実現を通じて、最先端の材料・デバイス設計に展開可能なゆらぎの基礎学理の構築、ゆらぎを取り入れた設計指針に基づいた革新的機能・特性を有する材料とデバイスの創出、ゆらぎを取り入れたデータ蓄積・モデル化によるデータ駆動型研究の確立、ゆらぎの先進計測技術の高度化、大規模シミュレーション手法の進化、ゆらぎを制御する材料創成プロセスの進化等が期待される。このような要素技術の開発とその連携により、ゆらぎを制御・活用したマテリアルの開発基盤が確立される。また、マテリアル分野の研究開発の進展にとどまらず、我が国の強みであるマテリアル産業の更なる活性化にも貢献し得る。さらに、ゆらぎの制御・活用により、多様な社会課題（持続可能社会、経済安全保障、人類の Well-being 等）に貢献する革新的マテリアルの開発・社会実装を加速し、我が国独自のマテリアル調達や、希少資源の代替、環境への負荷が小さい従来の機能・特性を超越した材料の開発と生産の基盤構築に貢献する。

## 6. 参考

### 6-1. 国内外の研究動向

ノーベル賞受賞にもつながった革新的なマテリアルを多数創出してきたマテリアル分野、最先端の大型研究施設をはじめとした計測技術等は我が国の強みである。一方、マテリアル分野におけるデータ駆動型研究開発をはじめとして、マテリアルの研究開発が人材を含めた投資規模と比例する状況にある。国外では、関連分野への大規模な投資が実行され、研究開発が活発化していることを踏まえると、我が国でも戦略的に取り組む必要がある。

#### （国内動向）

関連事業として、科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業 CREST「ナノスケール動的挙動の理解に基づく力学特性発現機構の解明」（令和元年度～令和 8 年度）、さきがけ「自在配列と機能」（令和 2 年度～令和 7 年度）、CREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」（令和 3 年度～令和 10 年度）、日本学術振興会（JSPS）科学研究費助成事業（科研費）新学術領域（A）「超秩序構造が創造する物性科学」（令和 2 年度～令和 6 年度）「散乱・揺らぎ場の包括的理解と透視の科学」（令和 2 年度～令和 6 年度）等があり、ゆらぎの制御・活用に係る研究の土壌ができつつある。また、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（DxMT）」等によって、均一系材料や完全結晶に関するデータの蓄積・活用が進められている。

#### （国外動向）

米国では、National Science Foundation（NSF）プログラムである「Condensed Matter and Materials Theory（CMMT）」において、マテリアル分野のデータ駆動型研究における予測理論とモデリングの開発に取り組んでおり、ゆらぎに関連する分野（非平衡、欠陥、転移、ゲル、ガ

ラス、ゆらぎ材料)が一部含まれている。

## 6-2. 検討の経緯

「戦略目標の策定の指針」(令和元年7月科学技術・学術審議会基礎研究振興部会決定)に基づき、以下のとおり検討を行った。

1. 科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CRDS)の有する知見、科学技術・学術政策研究所(NISTEP)の各種調査結果、各種政策文書を収集・蓄積し、研究動向を俯瞰した。
2. 上記の結果及びJST-CRDS研究開発の俯瞰報告書「ナノテクノロジー・材料分野(2024年)」、JST-CRDS俯瞰ワークショップ報告書「マテリアル設計の未来戦略」、有識者ヒアリング等を参考にして分析を進めた結果、近年の材料科学を取り巻く計測技術、計算科学等の急速な発展により、従来まで困難であったゆらぎを捉えることが可能になりつつあることが分かった。また、持続可能社会、経済安全保障、人類のWell-being等多様な社会課題の対応にあたって、ゆらぎを制御・活用することで革新的なマテリアルの創出を目指すことが必要であるとの認識を得て、注目すべき研究動向「ゆらぎの制御・活用による革新的マテリアルの創出」を特定した。
3. 令和6年11月に、文部科学省は、注目すべき研究動向「ゆらぎの制御・活用による革新的マテリアルの創出」に関する産学官の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、強化すべき研究分野や追及する学理、国内・国外の動向、想定される研究内容・成果のイメージやそれらの学術的・社会的インパクトや波及効果等について議論を行い、ワークショップにおける議論や有識者へのインタビュー等を踏まえ、本戦略目標を作成した。

## 6-3. 閣議決定文書等における関係記載

「第6期科学技術・イノベーション基本計画」(令和3年3月26日閣議決定)(抄)

### 第3章 科学技術・イノベーション政策の推進体制の強化

#### 2. 官民連携による分野別戦略の推進

##### ④マテリアル

(略)

第6期計画期間中は、「マテリアル革新力強化戦略」に基づき、国内に多様な研究者や企業が数多く存在し、世界最高レベルの研究開発基盤を有している強みを生かし、産学官の共有ビジョンの下、産学官共創による迅速な社会実装、データ駆動型研究開発基盤の整備と物事の本質の追及による新たな価値の創出、人事材育成等の持続発展性の確保等、戦略に掲げられた取組を強力に推進する。

「マテリアル革新力強化戦略」(令和3年4月27日統合イノベーション戦略推進会議決定)(抄)  
第5章. アクションプラン

1. 革新的マテリアルの開発と迅速な社会実装

【目標】 重要なマテリアル技術・実装領域での戦略的研究開発の推進

(2) 具体的取組

- ✓ マテリアルが社会課題解決や産業競争力強化に資する重要な技術領域において、新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）や科学技術振興機構（JST）等を通じた、国内外・産学官の英知を結集したプロジェクトを推進
- ✓ 中長期的な観点から、基礎基盤研究・実装領域での戦略的研究を支援。競争的研究費改革や資金配分機関間の連携を適切に進め、戦略型研究と創発型研究の双方を充実
- ✓ サイエンスに基づくボトルネック課題のブレークスルーをもたらす新たな手法や技術シーズの創出、革新的マテリアルと既存技術の組み合わせによる飛躍的な性能向上、次世代スピントロニクス技術等の新たな原理・発想に基づく革新的技術の創出等、脱炭素化に向けた革新的技術シーズ創出のための研究開発を加速

(略)

② フォアキャスト型研究で取り組むべき技術領域の例

- ✓ 研究開発手法の革新のための、表面・界面・粒界制御、反応制御、原子・分子の自在制御等の「物質と機能の設計・制御技術」や、マテリアルデータの構造化、ハイスループット技術、高度な計測、分析、加工、精密プロセス技術、スマートラボラトリ化、安全性・信頼性・リスク評価等の「マテリアルの共通基盤技術」

7. その他

本戦略目標では、多様な材料・デバイスにおけるゆらぎの材料科学的な学理を構築し、社会課題の解決に貢献する革新的マテリアルを創出することを目的としている。ゆらぎに関する研究は基礎物理や生物化学分野等で学理構築が先行しているものもある。また、ゆらぎを理解して材料研究に適用するためには数理科学や情報科学等といった材料科学以外の分野との連携も重要である。以上より、本戦略目標を強力に推進する際には材料研究者に加えて異分野の知見・技術を融合させることが必要不可欠である。

領域設定の留意点として、上記 4.（達成目標）の（2）～（4）の各要素の研究者が緊密に連携しつつ、（1）の「ゆらぎを制御・活用した革新的機能・特性を有する材料とデバイスの創出」を各研究課題共通の目標とする構造とすること、さらに領域として材料種を超えたゆらぎに対する新たな学理の構築することを期待する。また、「非連続な技術革新を目指す量子マテリアル研究」の戦略目標も設定されることから、2つの領域の成果によるシナジーが期待される。加えて、本戦略目標の実現においては、上記 6.（国内動向）に示したナノテクノロジー・材料関係の関連した研究や各関連学会と密接に連携・情報共有することにより、新たな研究進展や成果創出の加速を促すことが望まれる。