

国立研究開発法人物質・材料研究機構

令和3年度 年度計画

令和3年3月

令和4年2月改正

目 次

I 研究開発の成果の最大化その他の業務の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置	1
1. 物質・材料科学技術に関する基礎研究及び基盤的研究開発	1
1. 1 重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発	1
1. 1. 1 機能性材料領域における研究開発	1
1. 1. 2 エネルギー・環境材料領域における研究開発	2
1. 1. 3 磁性・スピントロニクス材料領域における研究開発	2
1. 1. 4 構造材料領域における研究開発	2
1. 1. 5 ナノ材料領域における研究開発	3
1. 1. 6 先端材料解析技術領域における研究開発	3
1. 1. 7 情報統合型物質・材料研究領域における研究開発	3
2. 研究成果の情報発信及び活用促進	4
2. 1 広報・アウトリーチ活動及び情報発信	4
2. 1. 1 広報・アウトリーチ活動の推進	4
2. 1. 2 研究成果等の情報発信	4
2. 2 知的財産の活用促進	5
3. 中核的機関としての活動	5
3. 1 施設及び設備の共用	5
3. 2 研究者・技術者の養成と資質の向上	6
3. 3 物質・材料研究に係る学術連携の構築	6
3. 4 物質・材料研究に係る産業界との連携構築	7
3. 5 物質・材料研究に係る分析・戦略企画及び情報発信	7
3. 6 その他の中核的機関としての活動	7
II 業務運営の効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置	8
1. 組織編成の基本方針	8
2. 業務運営の基本方針	8
III 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置	10
1. 予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画	10
2. 短期借入金の限度額	10
3. 不要財産又は不要財産となることが見込まれる財産がある場合には、その処分に関する計画	10
4. 前号に規定する財産以外の重要な財産を譲渡し、又は担保に供しようとするときは、その計画	10
5. 剰余金の使途	10
IV その他主務省令で定める業務運営に関する事項	10
1. 施設及び設備に関する計画	10
2. 人事に関する計画	10
3. 中長期目標期間を超える債務負担	11
4. 積立金の使途	11
【別紙1】重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発の研究プロジェクトの内容等	12
【別紙2】予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画	18

独立行政法人通則法（平成十一年法律第百三十三号）第三十五条の八により準用する第三十一条の規定により、国立研究開発法人物質・材料研究機構中長期計画（平成28年10月7日文部科学大臣認可）に基づき、令和3年度の業務運営に関する計画（国立研究開発法人物質・材料研究機構令和3年度計画）を定める。

I 研究開発の成果の最大化その他の業務の質の向上に関する目標を達成するためにとるべき措置

国立研究開発法人物質・材料研究機構（以下「機構」という。）は、物質・材料科学技術に関する基礎研究及び基盤的研究開発等の業務を総合的に行う我が国唯一の研究開発機関として、また、イノベーションを強力に牽引する中核機関である特定国立研究開発法人として、科学技術の進展及び社会の要請に的確に対応しつつ、人材の育成並びに研究開発及びその成果の普及等に努め、我が国総体としての物質・材料研究の成果の最大化等の質の向上に向けて事業を実施する。

具体的には、世界最高水準の研究開発成果を創出するため、以下のとおり基礎研究及び基盤的研究開発を行い、シーズ創出・育成機能を強化するとともに、研究情報の蓄積・発信体制の強化による研究成果の情報発信及び活用促進、更には、物質・材料研究の中核的機関として先端研究基盤及びデータ基盤の整備・運営による最先端研究インフラの共用促進、人材交流・人材育成の強化による研究者・技術者の養成と資質の向上等に取り組む。加えて、特定国立研究開発法人による研究開発等の促進に関する特別措置法（平成二十八年法律第四十三号）第七条に基づく主務大臣からの措置要求があった場合には、当該要求に迅速に対応する。機構は、これらの業務を遂行するため、個々の研究プロジェクトの目的、目指すべき成果、達成時期等を定め、公表になじまないものを除き公表するとともに、研究マネジメント機能の強化を図る。

特に、研究開発の推進にあつては、科学技術・イノベーション基本計画等の国の政策を踏まえるとともに、物質・材料研究分野における現状の把握に努め、機構に求められる役割を常に確認しつつ、長期ビジョンを踏まえた研究内容の重点化を図る。また、昨今の感染症拡大等に伴い、デジタルトランスフォーメーションの流れが加速している状況を踏まえて、研究環境等のデジタル化、リモート化を図り、スマートラボラトリ化を推進する。加えて、カーボンニュートラルの実現に向けた研究開発にも注力する。

また、適切なPDCAサイクルの実現に努め、研究の進め方や目標設定の妥当性等について不断の見直しを行うとともに、成果事例集のような形で研究進捗状況を適宜公表する。さらに、責任階層毎の業務進捗報告を徹底し、理事長による戦略的な資源配分を行う。

1. 物質・材料科学技術に関する基礎研究及び基盤的研究開発

1. 1 重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発

1. 1. 1 機能性材料領域における研究開発

本領域では、経済・社会的課題の解決や新たな産業のコアとなる技術の創出を目指し、電子機器や光学機器に用いられる電子材料や光学材料から、溶液中のイオンや分子の分離・選別、生体内での細胞との相互作用まで、広く「外場に対して物理的、化学的な応答を示す材料一般」を機能性材料と定義し、それらの研究開発を総合的に推進する。

具体的には、省エネルギーのための高出力半導体や高輝度発光材料、自動運転や安全確保のためのセンサ材料、省資源のための物質分離膜や高性能吸着材、再生医療のための生体接着剤や骨折治癒材料等、幅広い材料において、その機能性のさらなる顕在化を目指す。また、これらの機能を持った材料を開発し、さらに社会実装へと繋げるため、機能最大化に向けた化学組成・構造の最適化と並行して、材料開発のための合成手法、さらには、スマート生産システムへの対応や経済合理性等を考慮した製造技術の開発等にも注力する。

これらの開発を一体で推進することにより、機能発現の本質と製造プロセスに用いられる要素反応・要素過程の理解を同時に進め、その知見に基づき、製造プロセスや経済合理性までを考慮した高機能材料を開発する。これらの開発を一体で推進することにより、機能発現の本質と製造プロセスに用いられる要素反応・要素過程の理解を同時に進め、その知見に基づき、製造プロセスや経済合理性までを考慮した高機能材料を開発する。さらに、センサ・アクチュエータ研究開発センターの研究活動を通じて、自立型フレキシブルモジュールに向けたセンサ、アクチュエータやその作動機能のための材料・デバイスの高度化を行い、これらの研究要素から、世界を牽引する Society 5.0 の実現に貢献する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・機能性材料のシーズ顕在化に向けたプロセス技術の創出
- ・結晶・界面の階層的構造制御による機能顕在化のための研究
- ・機能性材料創出のための基礎・基盤技術
に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 2 エネルギー・環境材料領域における研究開発

本領域では、エネルギーバリューチェーンの最適化に向け、多様なエネルギー利用を実現するためのネットワークシステムの構築に向けたエネルギー・環境材料の開発を行う。具体的には、太陽電池、全固体二次電池、空気電池、燃料電池、水素製造システム、水素液化システム、熱電デバイス等に関わる材料を開発し、そのシステム化やデバイス化の実現を目指す。また、エネルギー変換・貯蔵の基盤としての電極触媒を開発するほか、理論計算科学による機構解明・材料設計やマテリアルズ・インフォマティクスの活用等により、エネルギー・環境材料の開発を加速する。

次世代蓄電池研究開発支援のために設置された設備群である蓄電池基盤プラットフォーム（蓄電PF）の活用、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）の共創の場形成支援プログラムにおける「先進蓄電池研究開発拠点」の構築など、他機関や産業界と連携しつつ、エネルギー・環境材料の開発に必要な基盤研究を推進する。また、蓄電PFの技術支援を充実させることで、人材育成を含めた拠点機能及び橋渡し機能を強化し、社会実装につなげる。さらに、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）の未来社会創造事業である「磁気冷凍技術による革新的水素液化システムの開発」の実施など、液体水素材料研究センターの運営を通じて、水素液化技術の開発を行い、水素利用の拡大に貢献する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・エネルギー変換・貯蔵システム用材料の基盤研究
に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 3 磁性・スピントロニクス材料領域における研究開発

本領域では、クリーンで経済的なエネルギーシステムの実現に貢献する磁性材料の開発と情報通信技術分野の省エネに繋がる大容量メモリ、ストレージ、磁気センサ技術に不可欠なスピントロニクス素子を開発する。磁石、メモリ、ストレージデバイス、センサでは、原子レベルで構造を制御した強磁性体と非磁性体の複相構造を大量生産に向く手法で作り込まなければならないため、そのためのナノ構造制御技術、成膜技術、微細加工技術を発展させる。材料・デバイスの構造をマイクロ・ナノ・原子レベルのマルチスケールで評価し、強磁性／非磁性複合構造から得られる磁気特性・伝導特性を理論的に予測し、それを指針としつつ、材料のポテンシャルを最大限に生かした磁気・伝導特性を発現する磁石、メモリ、ストレージデバイス、磁気センサを開発する。

元素戦略磁性材料研究拠点（ESICMM）の運営を通して、次世代永久磁石開発に必要な基盤研究を他機関ならびに産業界と連携しつつ推進する。また、次世代省エネメモリとして注目されている磁気メモリや磁気ストレージ技術を実現させる磁気抵抗素子開発の基盤研究では、他法人・産業界と連携するオープンイノベーション活動により社会実装を促進する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・省エネデバイスのための磁性・スピントロニクス材料の基盤研究
に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 4 構造材料領域における研究開発

本領域では、社会インフラ材料、輸送機器材料、エネルギーインフラ材料等、国土強靱化や我が国の国際的産業競争力の強化に資する高性能構造材料開発と構造材料周辺技術の研究開発を行う。構造材料は長期に渡って安定に性能を発揮することが求められることから、精緻な特性評価技術や組織解析技術等を活用して材料の劣化機構の解明を進めるとともに、その知見に基づいた材料の高信頼性化を進める。また、省エネルギー・低環境負荷の実現のため、輸送機器材料の軽量化・高強度化、エネルギーインフラ材料の耐熱性向上に取り組む。

一方、輸送機器からインフラ構造体まであらゆる分野でのマルチマテリアル化の急速な進展に対応するた

め、金属と樹脂等の異種材料を構造体化するための高信頼性接合・接着技術の開発を進める。さらに、信頼性を担保するためにかかる材料開発期間・コストを大幅に短縮するため、先端材料解析やマテリアルズ・インフォマティクス等とも連携しつつ、計算科学の活用による性能予測・寿命予測手法、製造プロセスも含めた統合的材料設計手法の開発を推進する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・界面制御による構造材料・構造体の高信頼性化
 - ・グリーンプロセスを用いた高性能構造材料の創製
- に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 5 ナノ材料領域における研究開発

本領域では、「文部科学省世界トップレベル研究拠点育成プログラム（WPIプログラム）」により設置、育成された「国際ナノアーキテクトニクス研究拠点（WPI-MANA）」の成果を最大限に活かし、極微世界における物質・材料の構造や組織の設計・制御を能動的に行う「ナノアーキテクトニクス Nanoarchitectonics」を駆使して、新物質、新材料、新機能を発掘し、人類社会の持続的発展に貢献するシーズの創出を目指したボトムアップ型基礎研究を推進する。具体的には、無機から有機にわたる広範な物質・材料系において、組成、構造、形状等が高度に制御されたナノマテリアルを合成し、それらをナノレンジで集積化、組織化、複合化することにより、新しいナノ構造やナノシステムを設計・構築して、そこに画期的な新機能を発現せしめる。さらに、これまでに蓄積してきた広範な物質・材料に関する知見、技術、ノウハウを活用し、量子技術に資する革新的量子マテリアル創出を目指して令和2年度より開始した研究開発を発展、実施する。

このために、広範な分野の研究者、すなわち物理、化学、無機材料、有機材料、電子デバイス、理論計算科学などの分野の研究者を結集し、異分野間の連携と融合を積極的に促進して研究を推進する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・ケミカルナノ・メソアーキテクトニクスによる機能創出
 - ・システムナノアーキテクトニクスによる機能開発
- に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 6 先端材料解析技術領域における研究開発

本領域では、物質・材料研究において横断的かつ基盤的な役割を果たし、超スマート社会の実現や先進材料のイノベーションを加速するための鍵となる先端材料解析技術の研究開発を行う。先進的な材料において有用な機能を担うのは、表界面や表層又はバルク内部における特徴的な構造、組成の変調、配向や組織、原子欠陥、電子状態・スピン状態等であり、機能の発現機構の根源的かつ効率的な解明には、これらの構造・特性を様々なスケール・環境下で的確に把握するための計測解析技術が必須となる。

このため、サブ原子レベルからマクロな系にいたるマルチスケール計測技術、多様な環境場におけるオペランド（実動環境下）観測技術、さらには、計算科学・データ科学との融合による計測インフォマティクス等の最先端の材料計測解析技術を開発し、それらを適切に組み合わせることで、包括的かつ相補的な世界最先端の材料解析技術を実現する。また、その材料解析技術を機構内外で開発された先進的な材料へ展開し、イノベーションの加速に貢献する。

具体的なプロジェクトとしては

- ・先進材料イノベーションを加速する最先端計測基盤技術の開発
- に取り組み、令和3年度においては別紙1の研究を実施する。

1. 1. 7 情報統合型物質・材料研究領域における研究開発

本領域では、我が国の物質・材料研究開発力の更なる向上に貢献するため、データ科学、計算科学、理論、実験を計算機上で融合させた統合型材料開発システムの構築を目指し、データ駆動型の新しい物質・材料研究開発手法を確立する。具体的には、マテリアルズ・インフォマティクス手法の物質・材料科学への適用を進めることに加え、計算機上で、求める性能から特性・組織を提案し、これを実現する材料・プロセスを最適化する逆問題マテリアルズインテグレーション技術に基づいた研究開発を実施する。

このために、内閣府戦略的イノベーション創造プログラム「マテリアル革命」などの受託事業を推進す

る。加えて、これまでにJSTイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」を通して構築してきた当該領域における産学官の人的なネットワークを活用する。

さらに、自然言語処理を活用したテキストデータマイニング、データ科学手法による計測データ解析等の材料データ創出や高度化に資する研究を推進し、マテリアルズ・リサーチバンク（以下「MRB」という。）の取り組みによって整備される世界最大級の物質・材料データプラットフォームの構築を支援する。

これらの取組が連携することで、我が国の物質・材料研究を加速させる統合型材料開発システムの構築を目指す。

2. 研究成果の情報発信及び活用促進

機構は、得られた研究成果を新たな価値創造に結びつけるため、成果の社会における認知度を高め、社会還元につなげていく。また、産学官連携による研究情報の蓄積・発信体制の強化を図り、我が国における研究情報の好循環と戦略的な社会実装を促す。具体的な活動は以下のとおりである。

2. 1 広報・アウトリーチ活動及び情報発信

2. 1. 1 広報・アウトリーチ活動の推進

機構の活動や研究成果等に対する国民の理解、支持及び信頼を獲得するため、前中長期目標期間中の活動で訴求力の大きさが確認できた「広報ビジュアル化戦略」をより一層展開する。具体的には、難解な物質・材料研究分野の研究成果等について、国民目線で親しみやすく、興味を持ちやすいビジュアル素材（科学映像の動画配信やビジュアル系Webサイト等）を主軸として効果的に訴求していくとともに、取組の効果、すなわち機構の活動や研究成果等に対する認知度の向上に繋がっているか等を確認しながら、広報手法を柔軟に変化させ、多様な手段によって幅広い層の理解が得られる活動を行う。また、広報ツールを豊富に取り揃え、研究者一人一人が物質・材料科学技術のインタープリターとして国民と双方向コミュニケーション活動を行えるよう、環境を整備する。

また、機構の研究成果等を普及させ、広く国民各層から理解が得られるよう、多様な媒体を組み合わせた情報発信活動に取り組む。具体的には、広報誌、プレス発表、研究者総覧サイト、専門書の刊行等を通じた研究成果等の公開、テレビや新聞だけでなく、成長著しいWebを主体に独自記事を配信するメディア媒体を使った情報発信を推進するほか、一般市民を対象としたシンポジウム、博覧会や展示場での研究成果の説明、メールマガジン等により、市民との間で直接コミュニケーション活動を行うとともに、機構の施設・設備等を適切な機会に公開し、国民各層の見学等を受け入れる。

さらに、科学技術リテラシーの向上に貢献するため、引き続き、小・中・高等学校の理科授業での出前授業等を通じて物質・材料科学技術に関する知識の普及を積極的に進める。これらのアウトリーチ活動の推進により、高校生を始めとする次世代層への好奇心を喚起し、ひいては我が国全体としての将来有望な科学技術人材の確保に貢献する。

2. 1. 2 研究成果の情報発信

機構で得られた研究成果を広く普及させるため、国際シンポジウムや研究成果発表会を開催するとともに、国内外における学協会等においても積極的に発表する。特に、科学的知見の国際的な発信レベルの維持・向上のため、国際的に注目度の高い学術誌等に対し、積極的に投稿・発表する。その際、機構の論文訴求力を高め、3.3で取り組む国際的なネットワーク構築等の活動を具体的な研究成果に結実させることの重要性に鑑み、国際共著による論文発表を重視する。これらの結果として、物質・材料研究分野における論文の被引用総数については、国内トップを堅持する。

一方、論文の多面的な価値を認める観点から、新しい研究領域を開拓する分野横断的な課題への挑戦に対しても適切に評価する。査読付論文発表数は、機構全体として毎年平均で1,200件程度を維持しつつ、論文の質の向上にも努める。また、多くの研究者が創出してきた材料開発等における分野毎の研究成果を精査し、評価・解析を行い、現在までの知見をまとめるとともに、今後目指すべき研究方向を示唆する論文（レビュー論文）数は、機構全体として毎年平均で40件程度を維持する。

研究情報の蓄積・発信体制の強化の一環として、機構の研究成果は材料データリポジトリに蓄積し、適切な閲覧設定の下で公開することにより、我が国全体のオープンサイエンスに向けた積極的な情報発信を展開

していくとともに、国のガイドラインや機構のデータポリシーに従って、全国の物質・材料開発のネットワーク化により得られる知見の集約やデータの提供を行う機能の構築に取り組むなど、研究成果等に対する理解増進や利活用の促進に取り組む。

2. 2 知的財産の活用促進

知的財産の活用促進にあつては、機構で創出した研究成果を、基本技術のみならず、周辺技術も含めた形で出願・権利化を行うなど、実用化を視野に入れて取り組む。また、知的財産の維持管理にあつては、維持管理コストを意識しつつも、将来性のある特許については、外国特許取得など戦略的な運用を行う。

以上を踏まえ、得られた研究開発の成果の実用化及びこれによるイノベーションの創出を図るための優れた知的財産を創出するとともに、権利化を図り、様々な連携スキームを活用して組織的かつ積極的に技術移転に取り組む。さらに、「科学技術・イノベーション創出の活性化に関する法律」(平成二十年法律第六十三号)に基づき、機構の研究開発の成果に係る成果活用事業者等に対する出資並びに人的及び技術的援助を検討する。なお、成果事業者等に対する出資に際しては、各事業者の事業計画を適切に評価し、成果の実用化及び経営状況の把握に努める。また、これらの取組を通じ、自己収入の増加に努める。技術移転にあつては、効果的に社会への還元を行うべく、個別の技術動向や市場規模・ニーズ等を考慮し、将来の実施料収入に繋がるような質の高い実施許諾を行うこととし、新規・継続を合わせた実施許諾契約総数を最低限90件程度維持するとともに、さらなる契約数の増加を目指す。

企業連携を実施するに当たっては、我が国の産業界の国際競争力の強化に資することを目的とし、機構と相手企業が相互にメリットを追求可能な特許の取り扱いができるよう、技術分野や市場の状況、様々な連携スキーム等に応じて柔軟に対応する。さらに、重要な技術については、共有特許を第三者への実施許諾自由とすることにより、機構主導の下で特許ポートフォリオ（機構が出願・保有する特許網）の構築を行う。

実用化される製品は日本市場のみならず、世界市場での販売が想定されるため、外国特許を積極的に出願することとする。ただし、外国特許は出願費用及びその後の維持管理費用が高額であるため、特許性や市場性等を考慮しつつ、必要と認められるものを厳選して100件程度を目途に外国出願を行い、常に費用対効果を意識して対応する。

3. 中核的機関としての活動

機構は、物質・材料研究を総合的に行う我が国唯一の研究開発機関として、また、世界最高水準の研究成果の創出とその普及・活用の促進により、イノベーションを強力に牽引する中核的機関として、政府の施策等に積極的に参画するとともに、先端研究基盤及びデータ基盤の整備・運営による最先端研究インフラの共用促進、国際的に卓越した研究者の積極的採用・確保、グローバルに活躍できる人材育成等の活動を計画的かつ着実に進める。

これらの取組に当たっては、各参画機関との連携の下、様々な枠組みを活用しつつ推進する。

さらに、機構において、①産業界とのオープンイノベーションを推進するために、各民間企業の持つ基礎研究所の一部機能を機構に誘致し、機構を中核に産業界と大学等を競合したオープンプラットフォームを形成するマテリアルズ・オープンプラットフォーム（以下「MOP」という。）、②国内外から優れた若手研究者を招聘・育成するプログラムを通じて、世界中の連携機関から「ヒト」・「モノ」・「資金」が機構に集まるグローバルな研究拠点を構築するマテリアルズ・グローバルセンター（以下「MGC」という。）、③MOPやMGCを支援するために、AI・ロボット技術等を研究開発の現場に導入するスマートラボトリ化を図りつつ、世界最大級の物質・材料データプラットフォームや世界最先端の計測機器など世界最高水準の研究基盤を構築、地域に存在する優秀な研究人材との共同研究を通じた知のネットワークを構築するとともに、それらを活用した新たな材料開発の提案を行うマテリアルズ・リサーチバンク（以下「MRB」という。）からなる「革新的材料開発力強化プログラム～M3（M-cube）プログラム」を実施し、我が国全体の材料開発力の強化を推進する。

具体的な活動は以下のとおりである。

3. 1 施設及び設備並びにデータ基盤の共用

機構は、我が国の物質・材料科学技術全般の水準向上に貢献するため、産学独の幅広い研究コミュニテイ

に対し一般の機関では導入が難しい先端的な研究施設及び設備を広く共用するとともに、共用設備等を有する研究機関のネットワークのコーディネイト役（ハブ機能）を担う。具体的には、利用者が必要とする支援の多様化を図るため、共用機関ネットワークを強化し、各種の支援技術の更なる向上と共用機関間での共有化を行う。また、施設共用の視点のみにとどまらず、研究施設及び設備を共用する際の多様な支援形態に対応可能な研究者及び技術者の育成やイノベーション創出に寄与する次世代の若手利用者の育成にも貢献する。このため、座学及び実習から成る短期スクールや物質及び材料の評価、分析、解析、加工、造形等のテーマに沿ったセミナー等を開催する。

さらに、MRBでは、高品質で高い信頼性を有するデータの収集及び最先端の計測機器など世界最高水準の研究基盤の整備に取り組むとともに、創出したマテリアルデータを機構内外から持続的・効果的に集約し、利用者が広く活用できる材料開発のためのデータ基盤を整備する。

特に、情報統合型物質・材料研究領域における研究開発と連動して、我が国の物質・材料研究開発力の更なる向上に貢献するため、データ科学、計算科学、理論及び実験を計算機上で融合させた統合型材料開発システムの実現に必要なデータ基盤を構築する。

具体的には、材料データベースの網羅性や機能性を高めるための自然言語処理や機械学習的なアプローチ、実験・計測データの収集・語彙解析による高付加価値化などデータ収集を効率化するための最先端の手法を開発する。さらに、これら開発した要素を統合し、材料開発の加速と展開に資するサービスを加え、収集データの信頼性や利用の安全性を確保したデータプラットフォームを構築する。

これらの機構内の取組に加えて、政府戦略として掲げられるマテリアルDXプラットフォーム構想下で先端設備共用事業に参画する研究機関と連携し、共用設備の利用により創出されたマテリアルデータを収集・蓄積するための基盤整備を進める。さらに、蓄積するデータの利活用を促進するために、データ構造化を行う。これにより、世界最大級の物質・材料データプラットフォームとしての機能を強化し、我が国におけるマテリアルズ・インフォマティクスを活用した研究開発力の向上を図る。

共用に供する研究施設及び設備は、強磁場NMR施設、高性能透過電子顕微鏡施設、ナノレベルでの物質・材料の創製・加工・造形・評価・解析等のための最先端の研究設備、量子計測設備や低温応用設備等であり、研究開発成果の最大化に資するよう戦略的な運営等を行う。これらの共用化の促進を図るために、引き続き積極的な広報活動等を実施するとともに、外部機関の利用機会の増加及び利便性の向上を図る。これらの共用にあっては、設備の特殊性や利用実績等の運営実態に照らした選定、利用実績や得られた成果に係る把握・分析の実施やその成果を踏まえた方策の検討など、常に資産の有効活用を意識した運用を行う。これらの共用の活動を通じて、我が国の物質・材料研究の成果最大化に資する。機構の共用設備等の利用実績に関わる把握及び分析を行うため、成果報告集を作成する。

3. 2 研究者・技術者の養成と資質の向上

国際的に通用する若手研究者の養成に引き続き注力するため、機構研究者を海外長期派遣する在外研究員派遣制度の維持、海外の研究拠点を活用したグローバル人材育成、ICYS、MANAで培った国際化ノウハウの普及活動、研究資金の積極的配分（スタートアップファンド等）、外国人研究者への日本語研修を通して日本社会への適応力を一層高める取組等を行う。その他、研究者・技術者向けに英語でのプレゼンテーションや論文作成の能力向上を目的とした英語研修を引き続き開催する。

機構で有している優れた国際的研究環境を有効活用し、若手気鋭の研究者が国際的な雰囲気の中で挑戦的研究に取り組める環境を整備することはグローバル人材を育成する上で極めて有効であり、かかる認識の下、ICYSにおける高度研究人材の育成、NIMS連携大学院を始めとする連携大学院制度及びインターンシップ制度の活用等による大学院生等の受入れ、各種研究支援制度の活用等によるポストドクの受入れなど国際的頭脳循環の推進に関わる活動を積極的に行う。

高度な分析、加工等の専門能力を有する職員及び科学技術情報の調査・分析・発信や研究企画を行う職員の採用と育成は、多様化する物質・材料科学技術の研究活動を支える上で極めて重要であるという認識から、クロスアポイントメント制度等を積極的に活用しつつ、必要に応じ広く公募して優秀かつ必要な人材を発掘することと、各種、実習や研修会への積極的な参加を促し、技術の養成と能力開発等に取り組む。

3. 3 物質・材料研究に係る学術連携の構築

物質・材料研究分野における優秀な人材と最先端の研究施設を備えた世界的研究拠点としての強みを生かしつつ、世界トップレベルにある国内外の学術機関・人材との継続的な連携・交流を通じて我が国の物質・材料研究分野での学術的活力を更に高める役割を果たす。

具体的には、機構の中核的ハブ拠点機能を強化するために、①NIMS連携拠点推進制度、高等専門学校からの派遣研究員制度、大学との組織的クロスアポイントメント制度の活用等を通じて、地方大学が保有する技術シーズの発展と人材育成を推進するプラットフォーム（ハブ機能）を拡充させる、②グローバル拠点推進制度により、海外からの研究者や学生の招聘及び海外への機構の研究者の派遣を支援し、機構の中核的ハブ機能の強化と人材育成を図る、③海外先端研究機関との国際連携研究センターの活動を更に充実・活用するために、ワークショップ開催を含む人材交流、日本企業を巻き込んだ三者間による共同研究の推進及び研究資金の獲得を図る、④機関間MOUや連携大学院協定の締結を通して世界的に一流の材料研究機関との交流を広げる、などの諸制度の整備・運営を行う。

また、NIMS Awardの授与及び学術シンポジウムの開催等を通じて、機構のブランド力の向上に取り組む。

3. 4 物質・材料研究に係る産業界との連携構築

機構で創出した研究成果を実用化に繋げるため、機構は産業界との連携構築に向けた取組を積極的に行う。

具体的には、従来の取組に加えて新たに基礎研究と民間企業ニーズの融合による未来を見据えた非連続な革新材料の創出に向けたオープンプラットフォームを形成し、企業との共同研究としては、グローバル企業と二者間の組織的大規模連携を推進するための企業連携センターや、特定研究領域において複数の企業や大学、公的機関等が参画する多者間での水平連携型や垂直連携型の領域連携センターなど、新たなセンターの設立や既存センターの発展に取り組む。

特に、平成29年度に構築した同一業界の複数社による水平連携型のオープンプラットフォームであるMOPにおいて、産学官総掛かりで将来の我が国の産業競争力強化に資する「基礎研究所」機能や中長期的な研究開発の実施等を引き続き行う。令和3年度は化学業界と構築するMOPにおいて、蓄積した実験データを活用し、インフォマティクスに関連した研究開発を進める。

また、機構がこれまでですそ野を広げてこなかった新たな企業との連携構築も視野に幅広い技術移転に向けて取り組むこととし、民間企業からの共同研究費等の資金を10億円程度獲得することを目指す。

さらに、産業界との意見交換ができる場を設け、機構の仕組みを紹介するとともに、産業界からの意見や要望をできる限り取り入れ、円滑な連携の推進を行う。

3. 5 物質・材料研究に係る分析・戦略企画及び情報発信

機構は、物質・材料に関する科学技術について、研究動向、社会的ニーズ、さらにはその背景にある国家戦略や国際情勢を掘り下げて分析し、その結果を、外部との連携を含む機構の研究戦略の企画やプロジェクトの実施計画の立案等につなげる。具体的には、国内外における物質・材料研究の動向の把握に努めるとともに、機構が注力すべき課題等について考察する。これにより、各プロジェクト研究の目標を国家戦略に直接結びつけたものとする。また、主要研究機関の論文や特許出願等の成果公開情報を活用して、ベンチマーキングを実施することによって、機構の強みや弱み及びポジショニング等の分析に取り組む。

また物質・材料分野における国内外の機関との連携、リーダー的研究者ネットワークを通じ、国際学術誌「Science and Technology of Advanced Materials (STAM)」及びその姉妹誌として創刊した「Science and Technology of Advanced Materials: Methods (STAM Methods)」や専門書「NIMS Monographs」の編集・刊行を継続し、物質・材料研究の中核的ハブ機関ならではの高い質をもった研究成果の普及と、グローバルな研究コミュニティを支えるプラットフォーム機能を提供する。

3. 6 その他の中核的機関としての活動

機構は、社会的ニーズ等への対応として、公的機関からの依頼等に応じて、機構のポテンシャルを活用し、事故等調査への協力を適切に行う。また、民間企業等とも連携しつつ、機構の研究活動から得られた新物質・新材料等の成果物の標準化を目指す。機構に設置された国際標準化委員会では、機構の研究活動から得られた新物質・新材料等の成果物の一元的把握を行う。また、新材料の特性に係る信頼性の高い計測・評価方法等についての国際共同研究を行うなどにより、国際標準化活動に貢献する。

II 業務運営の改善及び効率化に関する目標を達成するためにとるべき措置

理事長のリーダーシップの下、以下の組織編成及び業務運営の基本方針に基づいて、業務運営に係るPDCAサイクルを循環させ、機構の業務を効果的・効率的に実施する。また、特定国立研究開発法人として、研究力の向上のため、国際的に卓越した人材の適切な処遇、研究環境の整備・研究支援者等の確保と育成等に資するための体制構築と業務フローの改善に取り組む。さらに、独立行政法人や特定国立研究開発法人を対象とした横断的な見直し等については、随時適切に対応を進める。

なお、業務運営に当たっては、業務や組織の合理化・効率化が、研究開発能力を損なうものとならないよう、十分に配慮する。

1. 組織編成の基本方針

第4期中長期目標期間においては、国立研究開発法人の第一目的である研究開発成果の最大化ともう一つの運営理念である業務運営の効率化を両立させるような組織編成を行うこととしている。令和3年度は、引き続き、理事長のリーダーシップが存分に発揮され、かつ、最適な経営判断が得られるよう多角的な視点から業務運営を支えるため、研究不正対応やリスク管理を含む内部統制を一元的に推進するとともに、適切な責任・権限の分担の下で適正、効果的かつ効率的に機構のマネジメント体制を強化する。

研究運営においては、第4期中長期計画の「1.1重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発」の項目で掲げる研究領域における研究開発を迅速かつ効率的に進めるため、それぞれの研究領域に適切に対応した組織体制、各拠点長等のイニシアティブの発揮や拠点内外の融合研究の促進を阻害しないような柔軟な組織構造とする。

一方、研究テーマの細分化による組織の縦割りに繋がらないよう、研究分野間の協働、情報交換が日常的に行われるような体制を構築する必要がある。その際、有望なシーズ発掘、民間企業等のニーズ、適切な研究環境の構築などへの機動的な対応に留意し、重点研究開発領域の下で実施されるプロジェクトは、専門分野別の研究部署を横断して研究活動を展開できる柔軟な体制を整備する。

また、国の政策方針、社会的ニーズの変化等に臨機応変に対応するため、分野が異なる多数の専門家間の組織的連携が必要な場合には、研究組織の設置や新たな組織横断型の研究公募を実施するなどして、柔軟かつ機動的に対応する。

なお、組織の新設に当たっては、既存の組織の見直しを徹底することとする。当年度は、放射光を利用した研究開発を効果的、効率的に進められるよう、運営体制の見直しに着手する。

さらに、令和5年度からの次期中長期計画の策定に向けて、機構において実施すべき研究分野を精査するとともに、研究開発成果を最大化し、より効率的な組織運営を行える体制を確立するための検討を行う。

2. 業務運営の基本方針

(1) 内部統制の充実・強化

内部統制の推進に当たっては、研究活動や研究費の使用における不正の防止、安全保障貿易管理の徹底、機構に存するリスクの把握とマネジメント、利益相反の適切な管理、ハラスメントの防止等をはじめとするコンプライアンスの課題も包含する形で、PDCAサイクルによる検討・見直しを進め、必要に応じて諸規程の見直しを行う。また、中長期的な視点での監査計画に基づき、監事との緊密な連携のもとで組織的かつ効率的な内部監査を着実に実施し、監査結果を効率的に活用する。

特に研究活動等における不正行為及び研究費の不正使用の防止については、国のガイドライン等の遵守を徹底し、内部監査等とも連携した効果的なチェック体制を推進するとともに、内部統制推進体制の実効性を高めるため、定期的研修やe-Learning等による教育研修の充実とメールマガジン発行等による職員のコンプライアンスに関する意識醸成を図る。加えて、研究不正等の発生時又は当該リスク顕在時においては、理事長のリーダーシップの下、機構で定めた対応方針等に即して適切な対応を行う。

また、機構の情報ネットワークにおいて、政府統一基準に準拠したセキュリティ関連規程や対策基準に基づき、機密情報漏えいやこれを誘発する情報端末ウィルスの感染予防や標的型攻撃への対策を行う。具体的

には、従来からの対策の見直し、政府組織や外部の機関との情報共有を活用した注意喚起、職員対象の疑似サイバー攻撃訓練(疑似フィッシングメール訓練等)やサイバーセキュリティセミナーの実施などを通して、情報セキュリティ意識の底上げを図る。また、万が一のサイバー事案発生に備えるための“CSIRT”においては、訓練の実施や所外の対策事例等の情報を共有し、更なる対応力強化に努める。

上記リスクの他、機構の運営に関わる重大な問題が発生しないようチェック体制を整備するとともに、リスクが顕在化した場合若しくはその可能性がある場合には、文部科学省所管部署等と緊密に連絡を取りながら適切に対応する。

(2) 機構の業務運営等に係る第三者評価・助言の活用

機構の業務運営等について多様な視点から助言を受けるため、個別具体的な課題に焦点を当てた分野別アドバイザリーミーティングを開催し、世界各国の著名な有識者による専門的視点からの助言を法人評価等と合わせて随時活用するとともに、特定研究課題のピアレビューを実施し、内外の学識経験者等による助言についても研究課題のより適切な推進に向けて適宜活用していく。

(3) 効果的な職員の業務実績評価の実施

機構は、研究職、エンジニア職、事務職のそれぞれの職務の特性と多様性に十分配慮した効果的な職員の業務実績評価を引き続き実施する。研究職については、引き続きより研究者一人一人の力を最大限に発揮し、物質・材料科学技術の研究成果最大化に繋げる評価を行う。エンジニア職及び事務職については、目標管理評価をより適正かつ客観的に行う。

(4) 業務全体での改善及び効率化

① 経費の合理化・効率化

機構は、管理部門の組織の見直し、調達合理化、効率的な運営体制の確保等に取り組むことにより、業務経費及び一般管理費の効率化を図る。

② 人件費の合理化・効率化

機構職員の給与水準については、適切な人件費の確保に努めることにより優れた研究人材及び研究支援人材を養成・確保するべく、国家公務員の給与水準も十分考慮し、手当を含め役職員給与の在り方について厳しく検証した上で、機構の業務の特殊性を踏まえ、給与水準の適正化に取り組み、国家公務員と同程度の水準を維持するとともに、検証結果や取組状況を公表する。

③ 契約の適正化

契約については、「独立行政法人における調達等合理化の取組の推進について」(平成27年5月25日総務大臣決定)を踏まえ、毎年度策定する調達等合理化計画に基づくPDCAサイクルにより公正性・透明性を確保しつつ、研究開発等の特性を踏まえた迅速かつ効果的な調達にも留意した上で、自律的かつ継続的に調達等の合理化に関する取組を行う。

以上のほか、文部科学省所管の8国立研究開発法人間における調達実績情報の共有に引き続き取り組むとともに、茨城県内8機関共同調達に引き続き参加し、さらなる経費削減や業務効率化を推進する。

④ 保有資産の見直し

保有資産の必要性について適宜検証を行い、必要性がないと認められる資産については、独立行政法人通則法の手続きに従って適切に処分する。

(5) その他の業務運営面での対応

機構の諸活動の社会への説明責任を果たすため、保有する情報の提供のための措置を充実するとともに、開示請求への適切かつ迅速な対応を行う。個人の権利、利益を保護するため、機構における個人情報の適切な取扱いを徹底するとともに、苦情処理への適切かつ迅速な対応等を行う。

また、政府の施策等を踏まえつつ、環境への配慮促進、男女共同参画や次世代育成支援等に適切に対応す

る。

Ⅲ 財務内容の改善に関する目標を達成するためにとるべき措置

1. 予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画

別紙2を参照

2. 短期借入金の限度額

短期借入金の限度額は20億円とする。短期借入が想定される理由としては、年度当初における国からの運営費交付金の受入れの遅延、受託業務に係る経費の暫時立替等が生じた場合である。

3. 不要財産又は不要財産となることが見込まれる財産がある場合には、その処分に関する計画

重要な財産を譲渡、処分する計画はない。

4. 前号に規定する財産以外の重要な財産を譲渡し、又は担保に供しようとするときは、その計画

重要な財産の譲渡、又は担保に供する計画はない。

5. 剰余金の使途

機構の決算において剰余金が発生した場合の使途は、重点研究開発業務や中核的機関としての活動に必要とされる業務への充当、研究環境の整備や知的財産管理・技術移転に係る経費、職員教育の充実、業務の情報化、機関として行う広報の充実に充てる。

Ⅳ その他主務省令で定める業務運営に関する事項

1. 施設及び設備に関する計画

本年度中に取得または整備を実施する施設・設備は以下の通り。

施設・整備の内容	予定額（百万円）	財源
老朽化施設の改修・更新	1,483	施設整備費補助金
共用設備の改修・更新	356	施設整備費補助金
データ中核拠点の構築に資する設備の整備	2,600	設備整備費補助金
グリーン社会実現に資するマテリアル開発のためのデータ創出設備整備	571	設備整備費補助金

上記は、いずれも令和3年度補正予算の施設整備費補助金及び設備整備費補助金の金額である。

2. 人事に関する計画

国内外から優秀な研究者を採用するため、国際公募の実施等により職員の採用プロセスを更に透明化するとともに、外国人研究者の採用と受入れを円滑かつ効率的に進めるために事務部門をはじめ外国人研究者の支援体制を維持する。また、若手・女性研究者の活用及び国際的に卓越した研究者の積極的採用・確保・育成等を進めるとともに、研究活動を効率化するため、必要な研究支援者や技術者を確保する。さらに、新たなイノベーション創出を目指し、クロスアポイントメント制度の活用等により、企業や大学等の研究者を受け入れる。

職員一人一人が機構の使命を十分に認識し、やりがいを持って業務に従事できるよう、良好な職場環境の構築、職員のメンタルケアの充実、経営層と職員とのコミュニケーションの機会を確保するとともに、様々な研修機会を活用した長期的視野に立った職員の能力開発など、人材マネジメントを継続的に改善する。

また、機構の研究者や技術者の技術やノウハウが、組織として適切に伝承されるよう、若手研究者等の組

織的な指導教育、転出時における引継ぎの徹底などにより、データ管理と活用等の観点から適切な方策を講じる。

なお、計画的かつ戦略的に優秀な人材を確保するとともに確保した職員の資質を向上させるため、「科学技術・イノベーション創出の活性化に関する法律」（平成二十年法律第六十三号）第二十四条に基づき策定された「人材活用等に関する方針」に基づいて取組を進める。

3. 中長期目標期間を超える債務負担

中長期目標期間を超える債務負担については、研究基盤の整備等が中長期目標期間を超える場合で、当該債務負担行為の必要性及び資金計画への影響を勘案し合理的と判断されるものについて行う。

4. 積立金の使途

前中長期目標期間の最終年度において、独立行政法人通則法第44条の処理を行ってなお積立金があるときは、その額に相当する金額のうち文部科学大臣の承認を受けた金額について、以下のものに充てる。

- ・ 中長期計画の剰余金の使途に規定されている、重点研究開発業務や中核的機関としての活動に必要とされる業務に係る経費、研究環境の整備に係る経費、知的財産管理・技術移転に係る経費、職員教育に係る経費、業務の情報化に係る経費、広報に係る経費
- ・ 自己収入により取得した固定資産の未償却残高相当額等に係る会計処理

【別紙1】重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発の研究プロジェクトの内容等

1. 1 重点研究開発領域における基礎研究及び基盤的研究開発

1. 1. 1 機能性材料領域における研究開発

・機能性材料のシース顕在化に向けたプロセス技術の創出

分離機能材料の作製技術に関しては、高分子オイル吸着材の低温領域での高性能化を検討するとともに、CO₂を含めた温室効果ガスの除去システムとしての吸着特性の評価を行う。また、有機溶媒耐性かつ熱安定性に優れた高分子非対称膜の表面に、溶解性ポリマーの犠牲層を形成させ、プラズマCVD法により数10ナノメートルの硬質カーボン膜を連続蒸着し、ナフサ精製のためのナノ濾過膜としての性能を向上させる。

電気泳動堆積法を用いたナノ粒子やマイクロ粒子の積層化技術に関しては、ペロブスカイト系酸化物イオン-電子混合伝導体のマイクロ構造を制御し、実用化レベルの酸素の選択分離特性を目指す。コロイド結晶の高速成膜では、高品質膜の形成機構を解明し、その大型化を目指す。水酸アパタイト/コラーゲン骨類似ナノ複合粒子のコーティングでは、歯科矯正用デバイスに向けた細胞培養試験を継続して実施する。

Nb₃Sn多芯線材の作製技術に関しては、世界最高Sn濃度ブロンズを用いて性能改善とスケールアップを目指す。長尺細線が安定的に製造できる量産条件の確立を行う。また、Nb₃Sn及びNb₃Al等の化合物系超伝導線を外径30ミクロン以下へ超極細化することを試みる。さらに超極細線を複数本撚った集合導体を試作し、4.2~10Kでの臨界電流測定を実施しつつ、新しい可とう性に富む化合物系超伝導体の開発を進める。

なお、上記の研究成果やスピナウト可能な関連技術を、企業に積極的に技術指導していく。

・結晶・界面の階層的構造制御による機能顕在化のための研究

局所的0次元構造では、酸化物等の化合物半導体表面への化学吸着に起因する化学ガスセンシングメカニズム解明を継続し、素子設計指針の構築につなげる。単粒子診断法における単粒子光学測定の高度化をさらに推進し、新規結晶（緑色蛍光体）等単粒子診断法によって企業に提供可能なシース発掘を継続する。

2次元構造については、化合物半導体の薄膜成膜技術やナノ粒子等の合成技術の高度化を進め、開発したイオンビーム技術等により合成した薄膜・ナノ構造の表面・界面評価を継続する。高品位CVDダイヤモンド合成技術に関する研究においては、高品位なスピン形成や原子レベルで平坦なCVD単結晶成長層を用いたダイヤモンドMEMS共振子の作製を行い、高感度高信頼性磁気センシングへの応用展開を進める。同時に高濃度n型層成長とそれを用いた高品質pn（pin）接合構造による放射線検出器形成及びダイヤモンドpn接合ベータボルタ電池の高性能化、さらには各種FETを形成し高性能パワーデバイスの動作検証を行う。結晶品質の定量的評価のために、深紫外発光の時間分解測定、励起波長可変によるラマンマッピング評価の高度化を目指し、高純度低欠陥h-BN結晶の育成を進める。

3次元構造形成に関しては、粉末状単結晶蛍光体のバインダーフリー固体化プロセスの最適化による蛍光特性のさらなる改善、実用化を目指した従来の直径1.5インチから2.0インチへの大型Ce:YAG単結晶蛍光体の開発を行う。焼結緻密化手法の開発として、モデル材としてのジルコニア粉体における緻密化挙動の全過程が再現・予測できる解析手法の開発を継続する。獲得した焼結技術を、実用化を視野に入れた高品位透光性セラミックス開発に展開し、異方性セラミックスでのレーザー発振の高品質化を継続する。

高密度窒化物硬質相合成と硬質材料特性の評価では、高圧下複分解反応による5d遷移金属窒化物を中心とした高密度硬質相の探索・材料化を進め、切削工具特性などの超硬質材料としての特性を企業との連携により明らかにする等、実用化研究への展開を継続する。III-V及び疑似III-V族窒化物結晶の合成と半導体特性評価では、継続して窒化ホウ素系、カルコパイライト系高品質単結晶の高圧合成とその基礎物性評価、光・電子デバイス応用研究との連携強化を進める。高イオン（酸素）導電体では、マイエナイト型化合物、タングステン複酸化物等への高圧下置換ドーピングによるキャリア制御することで新機能の開拓を行う。水素イオン導電体においても、水素化物の高圧相を中心とした新物質探索を継続し、その材料化を目指す。

有機・無機複合界面の制御が重要な生体応用において、外科用接着剤については、生体組織との接着メカニズムの解明に加え、ブタ摘出肺に形成した欠損部に対し40 cmH₂O以上の耐圧強度を実現するための材料組成の最適化を継続する。骨補填剤については、椎体圧迫骨折に対する適用を見据え、海綿骨より高く、皮質骨より低い圧縮強度である10—50 MPaとなる材料組成の最適化を継続すると共に、in vitroでの骨芽細胞接着性と材料組成の関係を明らかにする。三次元マイクロパターン化材料においては、培養した細胞の組織化

について明らかにする。確立した高品位接着剤のがん治療への応用展開を進める。

・機能性材料創出のための基礎・基盤研究

超伝導機能材料では、電子ネマチック、スピン軌道相互作用、局在スピンとの結合、磁場応答、様々な揺らぎの影響などに注目し、非従来型超伝導の舞台となる特異な電子状態の性質を明らかにする。また、超伝導体の探索・物性評価および薄膜デバイスの作製を行うとともに、単結晶育成、磁束量子観察、スピン角度分解光電子分光、界面の高品質化など、超伝導研究の基盤技術の更なる高度化を進める。

強相関材料では、強相関機能に明確な特徴を持つペロブスカイト型、デラフォサイト型、Aサイト柱状秩序型四重ペロブスカイト型構造などの酸化物系材料の研究を進展させ、熱電変換材料として有望な新規遷移金属カルコゲナイドや硫化物系遷移金属化合物などの非酸化物系材料の研究をさらに推し進め、高品質結晶育成や新物質合成、機能向上、物性開拓等を行う。

分子性材料では、優れた電気的、光学的特性、刺激応答性を示す分子性機能材料開発を高度化し、分子構造と物性・機能相関の精査を推進する。多次元緻密集積化及び薄膜化応用については、金属伝導性有機単結晶の剥離プロセスによって得られる薄膜の物性評価、分子・高分子材料の集積化を行う。有機物質の精緻なプロセス制御法の開発や、有機デバイスの特性寿命を引き続き評価し高性能化を狙う。

ナノ構造材料では、量子ナノ構造形成基盤技術の開発およびナノ構造における新規現象の探索を継続するとともに、新規ナノ構造機能材料の素子応用を推進する。量子ドット光子源に関しては、通信波長帯もつれ光子対LED実現に向けた取り組みを継続し、高品質もつれ光子対発生可能な量子ドット作製条件を探索する。メタ表面赤外検出器に関しては、光起電力型など新しい量子井戸構造の導入とガス計測分野への応用をさらに推進する。

1. 1. 2 エネルギー・環境材料領域

・エネルギー変換・貯蔵システム用材料の基盤研究

太陽電池分野では、ペロブスカイト太陽電池の効率・耐久性の向上、物理・化学アプローチによるイオン拡散現象の詳細理解、光閉じ込め技術の開発、および用途拡大に向けた要素技術の開発などを行う。特に非鉛系ペロブスカイト太陽電池の研究では、低ピンホール・低トラップ密度で均一なペロブスカイト薄膜の作製、バンドミスマッチの少ないインターフェース材料の開発、 Sn^{2+} 酸化の抑制などに取り組み、 Sn や Bi を用いたセルの性能および安定性の向上を目指す。III-V族化合物太陽電池研究では、 InGaN 薄膜の輸送特性による材料評価と作製技術の高度化を進めるとともに、メカニカルスタック太陽電池作製のための要素技術を開発する。

水素製造用触媒では、小型メタン転換反応器の大型化と性能評価を行う。根留触媒技術のプラント試験へに向けたFSを展開するとともに、低温DRMの究極の高効率化・低 CO_2 排出実現に向け、メタン部分酸化 ($\text{CH}_4 + 1/2\text{O}_2 = \text{CO} + 2\text{H}_2$) とDRMを組み合わせることで外部からの熱供与を極小化する「熱補償型DRM」に向けた根留触媒の材料設計と機能評価を開始する。また、多孔質 Ni 基金膜触媒の合成方法および条件の最適化を行い、多孔質合金膜と水素分離膜 (Pd 合金膜および V 合金膜) との組合せにより、水素製造反応効率の向上および反応温度の低下の実現を目指す。水電解では、再現性ある高温水電解デバイスを構築し、 150°C における 400 mA cm^{-2} の電流密度を目指す。

蓄電池材料の研究では、リチウム空気電池における電解質組成の探索と負極保護層の導入を進め、高容量動作時のサイクル特性を向上させ、 500 Wh kg^{-1} 級のリチウム空気電池の長期安定サイクルの実現を目指す。全固体電池に関しては、シリコン負極に関する成果をさらに発展させ、デバイス化可能な負極を開発するとともに、固体電解質のイオン伝導性を向上させる界面設計指針を得る。グラフェン・キャパシタの開発では、電極キャパシタの性能と実用性を評価し、実用化に向けた高性能化と量産化のための基盤技術を確立する。また、性能向上と安全性の両立に向けて、グラフェン垂直配列電極の開発、最適化及び新規電極用材料の研究開発を行う。

熱電材料の研究では、 Fe-Al-Si 系新規材料 (FAST材) に特化し、各種マッピング計測 (ゼーベック係数、熱伝導率、電子状態等)、バンドエンジニアリング、他元素置換や組織制御により高出力化および低熱伝導率化を行い、現状の有効最大出力モデルによる出力密度 (室温からの温度差 5°C で $100\text{ }\mu\text{W cm}^{-2}$) を上回る材料特性を達成する。素子化技術開発として、素子の低コスト化に向けた基板の選定および素子に温度差を保

つためのヒートシンクや放射冷却機構を検討し、素子の長時間駆動に資する熱制御技術を構築する。また、低界面抵抗の多対発電素子の開発を進めるとともに、金属電極接合技術として固相拡散接合の適用可能性を明らかにする。

電極触媒関係では、高効率な新規非白金触媒の合成、電気化学特性などの基盤的研究を引き続き行い、触媒活性のメカニズムをその場計測で探る。炭素系触媒における微視的反応機構を実験によって理解することで、律速過程や活性の起源などの反応機構をより詳細に理解するとともに特性電流密度改善の方法を探る。微生物電極触媒については、全く新規なアンモニア酸化反応を媒介する細菌遺伝子を特定することで非白金触媒としての利用・開発を進める。また、実際の燃料電池に即した系への展開を図り、燃料電池のさらなる普及拡大に向けた重要課題である、被毒種の吸着・分解・脱離過程を明らかにし、被毒を予防・回復するための技術開発にも着手する。界面計測の分野では、電極界面の分子構造のみならず、界面電子構造についてもその場で観測する新規分光法の確立を目指す。

理論計算の分野では、計算・データ科学研究の理論・手法開発において第一原理計算とマクロな理論（電気化学定式、有限要素法など）との連結を深化させて実験観測のより高度な解析を発展させる。またより現実的な材料探索を可能とするインフォマティクス手法の拡張にも取り組み、これらとスーパーコンピュータ「富岳」の利用を連動させていく。これらに加えて、蓄電池・触媒の重要出口課題に対して原理解明から材料設計にまで踏み込んだ応用計算研究も実行し、実験・開発に貢献していく。

1. 1. 3 磁性・スピントロニクス領域

・省エネデバイスのための磁性・スピントロニクス材料の基盤研究

ネオジム磁石の特性向上、渦電流低減のために組成、創製プロセス、粒界改質プロセスの最適化を検討する。またバルクSmFe₁₂系磁石創製に向けて添加元素、微細粒化プロセス、バルク化プロセスの最適化を行う。高スピン偏極・低磁気緩和・低飽和磁化・高磁気異方性等、スピントロニクスデバイスで要求される様々な磁気物性を持つ新材料を探索し、新材料を用いた磁気抵抗素子で100%以上の磁気抵抗比の実現を目指す。エネルギーアシスト磁気記録媒体において、複数の非磁性マトリックス材料を混合または積層させることによりFePt微粒子の高規則化を行う。

省エネコンピューティングに寄与するSTT-MRAMやストレージクラスメモリの基盤技術となる垂直磁気トンネル接合のための垂直磁気異方性を持つ材料を開発し、大きな界面垂直磁気異方性と高いMR比を実現する。巨大スピン軌道トルクが期待されるトポロジカル物質等を作製し新たな材料開発指針の確立を行う。

動的熱画像解析技術を駆使し様々な熱電・熱スピン変換現象の温度・物質依存性を測定する。さらに高電場や歪を入力としたロックインサーモグラフィ計測により新規熱制御現象を探索する。

これらの実験研究を効率良く進めるための、理論計算による物性予測と実験結果の理論的解釈を行う。特に、デバイス応用上の実用的な特性評価のために、有限温度でのフォノン励起、磁気ダンピング、伝導特性を理論的に明らかにする。理論計算をもとに室温下TMR比の向上に向けた物質探索指針の提案を行う。

試作材料・素子の構造を3次元アトムプローブ、透過型電子顕微鏡(TEM)、走査型電子顕微鏡(SEM)/集積イオンビーム(FIB)を補完的に用いてマルチスケール解析を進めるとともに、有限要素マイクロマグネティクスシミュレーション手法の高度化に取り組む。

1. 1. 4 構造材料領域

・界面制御による構造材料・構造体の高信頼性化

令和2年度までに得られた強度-延性バランスに優れる組織知見に基づき、特性向上の原理解明をさらに進める。低合金鋼の複層組織材では、延性、破壊及び耐水素脆化特性に寄与する組織因子制御の有効性を検証する。高Mnオーステナイト鋼の強度・疲労特性改善を達成した材料において、疲労き裂進展挙動を組織制御に展開する。チタン系材料では双晶内部の構造、特にオメガ相の形態に着目して新たなヘテロ構造の構築やその機械的性質の調査を行う。マグネシウム合金は、粒界偏析する二元系・三元系合金群を対象に変形応答と粒界偏析元素の関係について整理する。

エポキシ・アクリル・ポリウレタン接着剤を用いた力学特性試験において、今年度は特に、変形/破壊挙動の把握と下限界値の取得に焦点を当てた取り組みを行う。抵抗スポット溶接部の強度データベースの作成と、機械学習により抵抗スポット溶接条件-継手強度関係予測モデルの構築を行う。さらに、マルチマテリ

アルとして複合鉄鋼材料を取り上げ、複合鉄鋼材料の機械的特性発現メカニズムを明らかにする。ミクロスケールの接合技術の高度化のために、放射光X線を利用したアーク溶接中での鉄鋼材料の凝固割れのその場観察により、凝固割れの発生、伝播に及ぼす微細組織の影響について定量的に明らかにする。

クリープ特性に関して、前年度までに検討したフェライト系のGr. 91鋼、Gr. 92鋼およびオーステナイト系の火SUS304J1HTB鋼の偏析の強い領域と弱い領域におけるクリープ変形後の組織や破面の解析を行う。疲労については、A系介在物の影響および浸炭材のギガサイクル疲労特性、突き合わせ溶接接手の疲労特性、高Mn鋼の極低サイクル疲労特性、水素ガス環境・低温で破壊した試料のき裂と組織の対応を評価する。腐食特性に関して、各種条件でレーザー熱処理を施したマルテンサイト系ステンレス鋼に対して実験室内および実環境による腐食挙動を行い、その実用性を評価する。

粒界近傍における元素分布をSEMおよびTEMを用いて測定する手法について、定量精度をさらに高める。広範囲の元素分布状態について、高速SDDを利用してSEMでの3D-EDS取得方法の検討によって元素種、空間分解能、濃度分解能などに関する検討を継続する。Fe-C合金などにおいて、粒界偏析の時効処理を施した材料などにおける変形抵抗を評価・解析する。また、粒径が混在する材料において、異なる粒界に対する解析手法を開発する。有限要素解析において、弾性問題を対象に開発した界面特性を扱うための数値モデルを高度化し、弾塑性、連続体損傷および異方特性へ拡張する。

・グリーンプロセスを用いた高性能構造材料の創製

今後より一層重要になると考えられるジェットエンジンコンプレッサーに関わる新材料創製、およびタービンに関わる新材料創製の2つに絞った研究を令和元年度より推進してきたが、令和3年度はこれを更に発展させていく。コンプレッサーに関わる新材料創製では、 $(\alpha+\beta)$ 型Ti合金に対して3次元積層造形プロセスを適用し、鋳造や鍛造など従来のプロセスでは創造できない新たな組織形成により、強度と延性など相反傾向にある特性について高いレベルでバランスのとれた材料創製を目指す。機械学習と画像解析により微視組織の特徴量を抽出し、さらに抽出した特徴量と強度や延性などの力学特性との相関を人工ニューラルネットワークなどのインフォマティクスを活用することにより予測する技術の開発を進める。蓄積したデータを活用するとともに、予測モデルの改良により予測精度の向上を図る。また、これら特徴量のより広範な制御を可能とするプロセス条件の探索を進めるとともに、組織形成を支配する造形プロセス中の温度場について構築してきたモニタリング技術を活用し、組織形成メカニズムの解明を進める。これらに加え、令和3年度は特に3D造形チタン合金の疲労特性およびクリープ特性の向上に注力する。疲労特性データを蓄積し、支配的な組織因子についての分析を進め、機械学習による予測技術の構築を図るとともに、レーザー出力やスキャン速度、スキャンストラテジーなどの最適化や、熱処理最適化、DLC膜などによる表面保護技術の適用など、新たな試みにより疲労特性の向上を図る。さらに、難加工であることから鍛造に適していないが、優れたクリープ性能が期待できる材料組成に着目して、令和2年度に独自開発した合金粉末について、3D造形材の力学特性およびクリープ特性評価を進め、既存鍛造材に匹敵するクリープ特性の実現を図る。一方で、3D造形プロセスの大きな利点である複雑構造部材製造に着目した新しいトラス構造体の開発を引き続き進める。負のポアソン比を有するオーセンティック構造について、トラス構造を傾斜させた新しい構造体の製造とその特性最適化を進める。実性能として重要となる準静的および衝撃荷重での変形挙動、エネルギー散逸能力の定量的評価を進める。理論モデルとの併用によりオーセンティック構造の最適化を図る。

タービンに関わる新材料創製では、現在注目されているSiC/SiC複合材料を超える次世代の複合材料創製のためのプロセス開発を行う。酸化物セラミックスに着目し、高温強度に優れた酸化物繊維と酸化物マトリックスを探索、選定し、複合体創製のためのプロセス開発を行い、1500°Cで優れた引張強度を有する材料創製を目指す。令和2年度に実現した酸化物長繊維製造プロセスを発展させ、焼成繊維での繊維間の溶着、融着防止技術の開発、連続繊維量産化のための紡糸技術の開発を行う。また、マトリックス材料探索では、サイロン系およびアルミネート系複合酸化物について、高温安定性や高温力学特性の調査を進める。開発した長繊維との複合化プロセス条件を調査し、令和3年度は複合体の実現を図る。その際、繊維、マトリックス間の界面層の制御が重要となることから、特殊なハイブリッド界面層を導入し、複合体プロセスの最適化を図る。一方で、繊維、マトリックス、複合体の各種物性データの蓄積を進めるとともに、デジタル画像関連法を用いた高温ひずみ場計測法の更なる高度化や、SPring-8を用いた繊維、マトリックス中の微細欠陥3D解析、耐水蒸気酸化特性などの評価を進め、性能最大化のための複合体組織を解明していく。

1. 1. 5 ナノ材料領域

・ケミカルナノ・メソアーキテクトニクスによる機能創出

前年度までに得られたナノマテリアルの精密合成に関する成果を踏まえて、Si/Ge系コア・シェルナノワイヤを用いたFETの構築を行うと共に、各種金属酸化物及び水酸化物2次元ナノシートを高次集積して高容量・高出力蓄電素子や高効率電極触媒の開発を試みる。またSiをはじめとした高品位半導体ナノ粒子を用いて高効率発光ダイオードの試作、癌細胞やウィルスの識別と殺傷機能を併せ持つ医療用材料の開発を目指す。複雑合金系ナノ多孔体の合成とハイブリッド化を試みると共に、 π 共役液体のナノクラスター化、 π 共役ブロック共重合体の相分離構造を制御する方法を確立し、エレクトレット性能や光電子機能の向上を目指す。さらにこれまでに蓄積した知見をもとに、様々な材料のナノ～メソ構造の設計、構築を行い、熱電機能、光触媒機能をはじめとした様々な機能の増強、高度化を目指す。熱電機能に関しては最近新たに見出した熱電増強機構(磁気相互作用とスピン揺らぎや、薄膜効果(界面効果、準安定状態発現))をさらに探究するとともに、無機・有機ハイブリッドにおける異種界面制御を試み、高性能熱電薄膜を開発する。光触媒機能に関しては生物模倣ナノ・メソ高次構造体の構築により触媒性能の高度化、増強を試みる。また界面を利用して形成したフラーレン集合体超薄膜やDNA超薄膜を用いた超高感度センサーの開発に挑む。一方、本研究で開発したSTAM法(STEM-based Thermal Analytical Microscopy)で得られるデータから、比熱などの熱物性値を導き出す解析手法を確立するとともに電気-光、電気-機械TEM内その場測定システムを電極触媒、イオン伝導体などに適用する。また、グラフェン・MXene類似物質の構造、電子状態を計算科学的に明らかにして新規ナノ材料を探索する。さらに、第一原理計算と量子情報科学を含む先進的な計算・理論手法を駆使して、有用な機能を有するナノ物質の特定、その集積化による新規物性の予測を目指す。

・システムナノアーキテクトニクスによる機能開発

システムナノアーキテクトニクスを通じた機能開発のベースとなる前年度までの探索研究から、ナノデバイス応用を念頭に置いた原子・分子・量子が主役となるナノ現象や機能性開拓では、イオン移動を利用した脳型機能デバイス創製、分子起動を介したスピン偏極トンネル電流制御、トポロジカル超伝導、プラズモンアシスト型光熱変換の機能開拓を重点的に推進する。また、原子スケール薄膜制御と合わせて分子膜を対象とした積層型ヘテロ構造構築技術を深化し、接合界面制御による発光・受光素子の高効率化を図るとともに、電気二重層デバイスへの強力な電界印加・物性計測技術の構築を推進し、ナノアーキテクニックデバイス構築技術を活用した試作デバイスの検証を開始する。ナノアーキテクニック・システムの解析に必要な多探針SPMによる非接触ナノスケール電気伝導特性計測手法や機能創発の理論解析ツールの本格活用による様々な材料・構造に創発される機能の検証を進めるとともに、ケモメカニカル材料の力学特性計測を支援し、細胞群にもみられる複雑系の挙動を扱うシミュレータ開発を行う。ナノアーキテクニック有機分子システムによる病態解析モデル及びバイオマーカーの探索並びに細胞機能を制御しうる機能表面の開発を継続するとともに、生体内医療応用を視野にいれたナノ粒子複合材料の高機能化、ケモメカニカルな粘弾性材料を活用した幹細胞の培養分化制御に必要となる特徴量を予測するためのデータ取得を進める。

以上の中でも、本年度は、特にイオニクス活用、ネットワーク構造活用、さらにはポリマー分子の外界応答特性活用などにみられる動的現象を利用する研究を推進し、複雑な半導体回路やソフトウェアAI技術に依存する従来型AIとは一線を画した「脳型情報処理手法の確立」を目指す。また、2次元ナノ薄膜の中でも原子膜、有機分子膜、生体分子膜など既存のリソグラフィ技術では取り入れる事が出来なかったナノ材料のデバイス化技術の確立、そしてメカノバイオロジーの観点から生体細胞への接触による細胞活性や分化を制御する技術の確立を通じた次世代医療技術創出を中心的課題に据え、異種・同種材料間の接点や界面における機能発現に着目したより重点的な研究開発を推進する。

1. 1. 6 先端材料解析技術領域

・先進材料イノベーションを加速する最先端計測基盤技術の開発

世界最先端のオペランド・マルチスケール計測技術の開発、先進計測インフォマティクスを展開する横断的活動を実施するとともに、先端計測を核とする国内外連携と社会貢献を推進する。さらにオープンイノベーションのための共用化と国際標準化における主導的役割を果たす。表面敏感オペランドナノ計測では、イ

ンフォマティクスを駆使したデータ解析融合技術や表面分子化学計測技術、高分解能水素顕微鏡の開発を行い、実用材料研究に展開する。表層化学状態計測では、世界最先端の情報深さ定量評価技術をベースに、オペランド表層計測技術及び表層計測情報分離のためのアルゴリズムを開発し、これを実用材料に展開しながら、時空間分解された構造・物性情報の抽出を行い、特性との相関を見出し、材料開発に役立てる。

高感度高精度電子顕微鏡計測では、低損傷高感度計測の開発とエネルギー・環境材料への展開を進め、さらに、実働環境での高分解能位相計測法と電圧印加界面電場計測法を開発し、各種実用材料に展開する。固体NMR計測では、高温用プローブの温度領域の拡大と実用化を進めるほか、磁場勾配パルスプローブを開発して、電池材料、磁気冷凍材料などの特性評価に展開する。

量子ビーム計測では、世界最高圧での中性子3次元偏極解析の完全非磁性ハイブリッドアンビルセルを開発し、オペランド光電子分光技術、レーザー非線形光学分散定量評価技術、パルス中性子磁気ブラッグエッジイメージング技術等を応用し、水素・量子マテリアルなどに展開する。

【別紙2】 予算（人件費の見積もりを含む。）、収支計画及び資金計画

1. 令和3年度予算

（単位：百万円）

	物質・材料科学技術に関する基礎研究 及び基盤的研究開発	研究成果の情報発信及び活用 促進、中核的機関としての活動	法人共通	計
収入				
運営費交付金	8,740	4,675	939	14,354
施設整備費補助金	1,287	528	24	1,839
自己収入	39	22	4	65
受託等事業収入	3,450	943	45	4,437
補助金等収入	0	0	0	0
設備整備費補助金	571	2,600	0	3,172
計	14,087	8,767	1,013	23,867
支出				
運営費事業	8,779	4,697	943	14,419
一般管理費	0	0	943	943
うち、人件費(事務部門)	0	0	542	542
物件費	0	0	402	402
業務経費	8,779	4,697	0	13,476
うち、人件費(事業部門)	4,598	1,272	0	5,870
物件費	4,181	3,424	0	7,605
施設整備費	1,287	528	24	1,839
受託等事業費(間接経費含む)	3,450	943	45	4,437
補助金等事業費(間接経費含む)	0	0	0	0
設備整備費	571	2,600	0	3,172
計	14,087	8,767	1,013	23,867

【注釈】 各欄積算と合計欄の数字は四捨五入の関係で一致しないことがある。

2. 令和3年度収支計画

(単位：百万円)

区分	物質・材料科学技術に関する基礎研究 及び基盤的研究開発	研究成果の情報発信及び活用 促進、中核的機関としての活動	法人共通	計
費用の部	13,168	6,696	994	20,857
経常経費	13,168	6,690	994	20,851
一般管理費	0	0	920	920
うち、人件費(事務部門)	0	0	563	563
うち、物件費	0	0	357	357
業務経費	7,863	4,316	0	12,179
うち、人件費(事業部門)	4,653	1,274	0	5,926
うち、物件費	3,210	3,042	0	6,252
受託等事業費(間接経費含む)	3,450	943	45	4,437
補助金等事業費(間接経費含む)	0	0	0	0
減価償却費	1,855	1,431	29	3,315
財務費用	0	6	0	7
臨時損失	0	0	0	0
収益の部	13,168	6,696	994	20,857
運営費交付金収益	7,244	4,159	850	12,252
受託等事業収益	3,450	943	45	4,437
補助金等収益	0	0	0	0
その他の収益	39	22	4	65
賞与引当金見返に係る収益	312	76	36	424
退職給付引当金見返に係る収益	268	65	31	364
資産見返運営費交付金戻入等	1,855	1,431	29	3,315
臨時利益	0	0	0	0
純利益	0	0	0	0
目的積立金取崩額	0	0	0	0
総利益	0	0	0	0

【注釈】 各欄積算と合計欄の数字は四捨五入の関係で一致しないことがある。

3. 令和3年度資金計画

(単位：百万円)

区分	物質・材料科学技術に関する基礎研究 及び基盤的研究開発	研究成果の情報発信及び活用 促進、中核的機関としての活動	法人共通	計
資金支出	14,087	8,767	1,013	23,867
業務活動による支出	11,258	5,041	924	17,223
投資活動による支出	2,830	3,504	69	6,402
財務活動による支出	0	222	20	242
次期中期目標期間への繰越金	0	0	0	0
資金収入	14,087	8,767	1,013	23,867
業務活動による収入	12,228	5,639	988	18,856
運営費交付金による収入	8,740	4,675	939	14,354
受託等事業収入	3,450	943	45	4,437
補助金等収入	0	0	0	0
自己収入(その他の収入)	39	22	4	65
投資活動による収入	1,859	3,128	24	5,011
施設整備費による収入	1,287	528	24	1,839
設備整備費による収入	571	2,600	0	3,172
財務活動による収入	0	0	0	0
無利子借入金による収入	0	0	0	0
前期中期目標の期間よりの繰越金	0	0	0	0

【注釈】 各欄積算と合計欄の数字は四捨五入の関係で一致しないことがある。