

安全保障技術研究推進制度 令和5年度終了課題 終了評価結果

1. 評価対象研究課題

- (1) 研究課題名：結晶設計・格子操作技術による固体レーザーの高速探索と機能開発
- (2) 研究代表者：エスシーティー株式会社 鯉沼 秀臣
- (3) 研究期間：令和元年度～令和5年度

2. 終了評価の実施概要

実施日：令和6年10月29日

場所：TKP秋葉原カンファレンスセンター

評価委員：未来工学研究所 理事長、上席研究員／東京大学 名誉教授

平澤 洽（委員長）

長岡技術科学大学 副学長・教授

井原 郁夫

産業技術総合研究所 上級執行役員 兼 エネルギー・環境領域
領域長

小原 春彦

東京科学大学 工学院 電気電子系 教授

梶川 浩太郎

東京農工大学 名誉教授

佐藤 勝昭

国立感染症研究所 客員研究員

四ノ宮 成祥

科学技術振興機構 研究開発戦略センター 企画運営室長、
フェロー

中山 智弘

量子科学技術研究開発機構 高崎量子技術基盤研究所
先端機能材料研究部長

八巻 徹也

情報通信研究機構 電磁波研究所 総括研究員

山本 真之

（委員長以外は五十音順・敬称略）

3. 研究と成果の概要

研究の概要

本研究では、計算による最適な材料の組合せの予測とコンビナトリアル（材料の組成や反応条件を系統的に変化させる）手法を用いることにより、試料の作製・評価を効率化させ、幅広い材料群の中から様々な波長帯域において発振に適したレーザー材料の探索・評価を効率的に実施できる、新しいR & Dモデルの確立を目指す。

成果の概要

（１）新手法によるレーザー媒質の探索

コンビナトリアル材料探索に、マテリアルズインフォマティクス（MI）を加味することで、より進化した物質探索法（スマートコンビナトリアルマテリアル探索）として確立することにより、研究プロジェクトを推進してきた。

MI の成果としては、Transformer 技術をマテリアルズインフォマティクス（MI）分野に世界に先駆けて材料科学に適用し、“Combi GPT” 技術を開発したことが挙げられる。本技術は、学術的な研究及び産業応用の両面で大きな発展性を示している。この技術の応用は、新材料の探索とプロセスの最適化を飛躍的に進展させる可能性を持っており、多岐にわたる波及効果が期待される。この MI 技術を製膜技術に組み込み、探索の自動化に道筋をつけた。

（２）高出力を可能にする結晶デザイン

YAG をレーザー媒質とした高出力レーザーを実現すべく、最終的には Thin Disc タイプを選択した。これは比較的容易に抜熱が可能な構造であるため、媒質を大型化すればそれに応じて、大出力が期待できるからである。この大型化のために、結晶自体の大型化と融着による大型化の二点を狙った。本結晶を使用することで、大出力化に道筋をつけることができた。

（３）ハライドペロブスカイトを用いた電流励起レーザー

ペロブスカイトでは、プロジェクト開始初期に電流誘起の発光を確認できたが、この安定性の確保が課題であった。そこで、プロセスの最適化に Combi GPT を適用することで、安定な発光を実現したが、電流注入型のレーザーの実現には至らなかった。

（４）新規量子カスケードレーザー（QCL）材料の探索

QCL の研究課題の成否は、如何にして原子オーダーで構造・組成を制御した数百層におよぶ多層膜を実現できるかに係っていた。試作したロボットレーザー MBE 装置を用いることで、この困難を克服した。

本プロジェクトでは、MI を駆使することで材料の最適化だけでなくプロセスの最

適化も可能であることが示され、固体レーザー材料の発展に一つの足跡を残すことができた。

4. 終了評価の評点

A 相応の成果をあげた。

5. 総合コメント

データ駆動型材料プロセスにコンビナトリアルの手法を組み合わせた方法論の技術探索及び AI ブーム (Chat-GPT) の出現が採択後にあり、MI を先導するプロジェクトとして多くの波及を見通せる成果が構築され、若手研究者の努力が実り成果を生んだと評価できる。

また、高出力を可能にする結晶デザインや新規量子カスケードレーザー材料の探索及び実装に関しては実現に至っていないものの、コンビナトリアル材料開発探索の手法について、AI 利用により相応の発展が見受けられるとともに、大学と複数の企業が共同研究を経て実用性に優れるデータ予測・測定システムを構築した点は評価できる。

今後、解決すべき問題設定に対し、評価する物理特性のデータをどう取得するかを明確にした材料探索の実施を期待する。

その際、コンビナトリアル開発は必ずしも万能ではないことから、限界を見極めながら進め、設定した研究目標における未達成部分を今後の研究で解決いただきたい。

6. 評価の観点ごとの評価結果と個々の委員によるコメント

6-1. 研究開始時に設定した研究目標の達成度 (主題的成果)

(1) 新手法によるレーザー媒質の探索

目標とした固体レーザー材料における結晶薄膜のコンビナトリアルライブラリー (以下、「コンビライブラリー」という) を構築した。Sesquioxide (金属原子数と酸素原子数間比率=2:3 の酸化物化合物総称) におけるコンビ光学物性を明らかにするなど、大きな進展が見られた。固体レーザー材料における結晶薄膜のコンビナトリアル製膜について、Sesquioxide について製膜プロセスを確立し、結晶構造や物性データの高速評価から 2 次元マッピングを可能とし、そのインフォマティクス手法を確立したものの、新固体レーザー材料の同定には至らなかった。

(2) 高出力を可能にする結晶デザイン

φ 160 mm の Yb:YAG の結晶成長および無欠陥の単結晶同士の融着に成功し、更に大型の結晶への道筋をつけた。

固体結晶媒質による 1.3 kW を超える発振、固体結晶を使った多段増幅による 4.5 kW 超の増幅光、偏光合波、波長合波による 10 kW 超の出力光をそれぞれ確認し、30 kW の出力は実現できなかったものの、この実現が可能な設計を完了した。

(3) ルドルスデン・ポッパー相を包含したハライドペロブスカイト半導体単結晶 CsBr の下部層の挿入やイオン液体を用いた Tri-phase epitaxy による薄膜の結晶性の向上や、単結晶育成を行うことによるハライドペロブスカイト相の安定性を確認した。デバイス設計や薄膜プロセスの最適化までは到達したものの、有機物を含む複数の薄膜を均質にかつ精密に堆積するには至らず、最終的な試作までには到達しなかった。

発光層を高品質単結晶化した材料でレーザー発振に取り組んできたものの、光励起や電流注入の際に生じる熱により、発光層の破損が生じたため、実現には至らなかった。しかしながら、この発光層の破損が発生する熱に原因があることは解明できており、基板の選択などによる放熱構造を設計することで、現在の共振器構造を変化させることなく電流注入型のレーザーは実現可能であるといえる。

(4) 新規量子カスケードレーザー材料の探索

発振可能な構造の設計を行い、多層膜の形成、その各層のキャリア制御には成功したものの、クラッド層厚が十分に取れなかったことや導波構造の確立までには至らなかったことから、デバイス試作まで至らなかった。

【個々の委員によるコメント】(主題的成果)

- ・材料探索に挑戦するチャレンジングなプロジェクトである。
- ・中間評価時のコメントを守り、スマートコンビの適用に絞り成果をあげている。
- ・新手法によるレーザー媒質の探索という点では相応の成果が得られているが、一方で、高出力を可能にする結晶デザインや新規量子カスケードレーザー材料の探索は必ずしも所期目標は達成されていない (30 kW の出力目標をクリアしていない)。
- ・新手法による固体レーザー材料探索の目標は達成している。しかし、レーザー開発の実績については未達成であった。
- ・4つの主目的について、一部数値目標に到達しなかったものもあるが、各々概略達成できたものと評価できる。高出力レーザーの開発には至っていないが、技術的には到達地点が見えるところまできている。
- ・到達度が100%に届いていない項目がいくつか見られている。到達度のつけ方にも疑問がある。
- ・生成AIを活用したデータ予測を活用し、大型のレーザー媒質の製作における成果を得た。

6-2. 計画時に想定していなかった成果（副次的成果）

当初の計画では、既存の技術を用いてマテリアルズインフォマティクスの枠組みを強化し、新規材料の探索及び最適化手法を開発することを目的としていた。実際には、プロジェクトの進行中に、生成 AI や Transformer 技術が急速に発展し、これらを物性科学に取り入れることで、計画時には予想もしなかった高い予測精度を実現することができた。研究開始時には、生成 AI や Transformer は一部の専門家の間で知られていたものの、広くは普及しておらず、これらの技術を物性科学に応用することは計画に含まれていなかった。しかしながら、プロジェクトにこれらの最新技術を積極的に取り入れ、世界に先駆けて新たな領域に適用した結果、予想外の成功を収めることができた。特に、提案した CombiGPT では、Transformer ベースのアルゴリズムを使用して得られたデータ解析能力は、新規材料の探索とその物性予測において、従来型の neural network を基本とした方法では達成できなかった精度と効率を実現した。この技術的進展により、材料科学研究の新たな地平が開かれ、プロジェクトの成果は計画の範囲を大きく超えるものとなった。この成功は、最新技術を迅速に取り入れ、革新的なアプローチを恐れずに進めた結果である。これらの研究の特徴を活かし LD にハイブリッドする独自のナノ集積技術を新材料量子構造レーザーに展開していくと考えている。

【個々の委員によるコメント】（副次的成果）

- ・コンビナトリアル製膜による高速スクリーニングを確立した。
- ・既に論文、特許としての成果が見られており、十分と判断できる。
- ・生成 AI を活用したデータ予測・測定システムの構築に成功した。

6-3. 他の者により派生した成果（間接的成果）

本プロジェクトから資金提供を受けていないグループと共同研究を進めてきた。反射電子線回折像（RHEED 像）の機械学習により、成長中の薄膜の結晶構造をその場で同定するシステムの構築に成功した（H. Liang, R. Takahashi et al. Phys. Rev. Mater. 6, 063805 (2022)）。通常、薄膜の結晶構造を調べるには、XRD による構造解析が不可欠であるが、一般的な XRD 構造解析では、薄膜作製後に解析するため、薄膜作成中にその場で評価することはできない。成長中に結晶構造をその場観察をするためには、放射光 XRD と薄膜合成装置を融合させた大型分析評価システムが不可欠になっている。それゆえ、大学のラボレベルにおいて、薄膜の結晶構造をその場観察することは難しいと言わざるを得ない。3 グループが共同研究を進めることにより、鉄酸化物の結晶成長を例にして、サファイア基板上で成長するマグネタイト薄膜とヘマタイト薄膜において、XRD を用いた分析を行った。成膜後に取得した XRD パターンと成膜中に得られる RHEED 像を詳細に機械学習することにより、鉄酸化物薄膜のその場観察することが可能になった。この成膜中の分析技術は、鉄

酸化物以外の様々な系の薄膜合成にも有効であり、現在、他の材料系へ展開しうる成果となっている。

【個々の委員によるコメント】（間接的成果）

- ・他機関との協力により成果を拡大している。
- ・アメリカの大学との共同研究から新しい情報が得られている。
- ・RHEED 像から結晶成長中の薄膜構造を解析した論文成果は評価できる。実用上も面白い。

6-4. 科学技術上特筆すべき成果

本プロジェクトにおいて Transformer 技術をマテリアルズインフォマティクス（MI）分野に世界に先駆けて応用したことは、学術的な研究及び産業応用の両面で大きな発展性を示している。この技術の応用は、新材料の探索とプロセスの最適化を飛躍的に進展させる可能性を持っており、多岐にわたる波及効果が期待される。学術的には、Transformer を使用することで、複雑なデータセットからパターンを学習し、未知の物質特性を予測する能力が格段に向上した。この技術は、特にデータ駆動型の研究において革新的な役割を果たし、新しい材料の発見や既存材料の未知の性質を明らかにするための強力なツールとして機能している。さらに、Transformer の応用により、材料科学だけでなく、化学、生物学など他の科学分野における複雑なシステムの解析にも貢献する可能性がある。これらの進展は、新たな研究手法としての標準を確立する可能性を秘めており、次世代の貴重な技術となる。さらに、産業分野では、本プロジェクトによって得られた知見が物質探索やプロセス最適化の精度を大幅に向上させることができる。特に創薬、医療、宇宙開発など、新材料や高度な物質性能が直接的な影響を及ぼす分野において、この技術の応用は極めて有益である。例えば、創薬においては、新しい薬剤の候補となる化合物のスクリーニングプロセスが効率化され、より迅速に治療薬を発見できるようになる可能性がある。また、宇宙開発においては、極端な環境下での材料の挙動を事前に予測し、より信頼性の高い機材や構造物の開発が可能となる。これらの進展は、経済的な観点からも大きな意味を持ち、新たな商業的価値の創出や産業の競争力強化に寄与する。さらに、この技術が広く普及することで、持続可能な開発や資源効率の良い製造プロセスの実現に向けた基盤が築かれることも期待される。総じて、本プロジェクトは、学術的な理解の進展だけでなく、産業界における実用的応用の範囲を拡大し、将来の技術革新に大きな影響を与える可能性がある。

【個々の委員によるコメント】(科学技術上特筆すべき成果)

- ・データ駆動型材料プロセスにコンビナトリアルの手法を組み合わせた方法論を、いくつかの価値ある成果に基づいて提示できたことは特筆すべきである。
- ・データ予測を活用し、効率的な材料開発を達成した点が評価できる。
- ・スマートコンビ技術を確立した点が評価できる。
- ・我が国のマテリアルインフォマティクスの基盤構築に寄与したことが特に重要である。

6-5. 論文(投稿中のものも含む), 学会発表等

学術論文 9件、学会発表 73件、展示・講演 15件、雑誌・図書 4件

6-6. 特許(出願中のものも含む)

出願中: 国内9件 権利化済: 国内1件

【個々の委員によるコメント】(論文、特許、学会発表等の研究成果)

- ・論文、学会発表は積極的に行っている。相応の数、内容が発信されている。
- ・量が十分であることに加えて、各研究項目で着実に特許出願されている。とくに結晶成長に関して、よい特許が出願されている。

6-7. 科学技術への波及効果

日本大学では、プロジェクト終了後にあたる令和6年度より日本大学 SDGs 研究(研究課題名:ハライドペロブスカイト太陽電池社会実装に向けた教育エコシステム拠点の形成、代表:高橋竜太)を開始した。本プロジェクトで得られたハライドペロブスカイト薄膜の研究成果をもとに、持続可能なエネルギー開発に向け、日本大学工学部がハライドペロブスカイト太陽電池研究の福島県の拠点となるべく、SDGs 研究を推進するプログラムとなっている。県内の企業や研究所との共同研究だけでなく、県内の高校生に向けた教育活動も含んだ内容になっており、オープンキャンパスや高校生への授業において、ハライドペロブスカイトの最先端技術を知ってもらう機会を提供している。その結果、令和6年度より、日本大学工学部が中心となり、福島県内において産官学のネットワークが形成され、ハライドペロブスカイト薄膜の共同研究が進むきっかけとなった。

【個々の委員によるコメント】(発展性と波及効果)

- ・具体的な成果の実用化が期待できる。
- ・提案された技術の応用は、新材料の探索とプロセスの最適化を飛躍的に進展させる可能性を秘めており、学術的研究及び産業応用の両面で大きな発展性が期待される。

- ・マテリアルインフォマティクス の基盤を 発展させて波及させてほしい。
- ・産官学 の研究ネットワーク の形成に至っていることは評価できる。
- ・材料探索 の新しい手法はさまざまな分野への発展性が期待できる。

6-8. 効率的な研究実施体制とマネジメント

本プロジェクトでは、ピラミッド型組織の下、各レベルにおける責任体制を明確にし、PDCA サイクルを回すことでマネジメントすることが多い。しかし、セレンディピティな方向に進みがちな研究開発型プロジェクトでは、必ずしもこの型はなじまない。そこで、今回の組織立てとしては、当初よりネットワーク型研究実施を敷いた。プロジェクト当該期間当初、コロナ禍という未曾有の緊急事態に遭遇したが、ネットワーク組織がリゾーム力を発揮し、この危機を乗り越えることができた。一方、ネットワーク型組織のデメリットとして組織のメンバーがバラバラに行動してしまい、組織のまとまりがなくなることが挙げられる。この事を回避するために、ほぼ毎週一回、担当者が全員参加する企画委員会を開催し、本プロジェクトの進捗状況の確認、技術課題の確認、評価、解決方針の調整を行った。

【個々の委員によるコメント】（効率的な研究実施体制とマネジメント）

- ・複数機関との連携を行っておりマネジメントに関して問題はない。
- ・多岐にわたる研究テーマを比較的要領良くマネジメントできている。多くの共同研究者を得たことも評価できる。
- ・若手研究者等がうまく配置され、チーム編成も良かった。

6-9. 研究推進時に生じた問題への対応

(1) コロナに関する対応。

本来、スタートアップに邁進すべき令和元年度、研究が本格化する令和2年度にコロナ禍に見舞われた。これにより対面による研究者との議論・打ち合わせが、ほぼ不可能になった。これについては、直ちに Web 上での対応に切り替えた。本プロジェクトは、本来的にそれぞれの研究機関は独立に機能するように構築したネットワーク型の組織であったため、Web に移行することで、支障は最小限に抑え込むことができた。

装置・資材等の供給が滞ったことで本来の計画通りの進行が困難になった。この点に関しては、研究の進め方を実情に合ったものに提案の範囲内で策定しなすとともに、外部支援機関での測定等で対応することで、問題点の回避に努めた。

(2) レーザーを専門とする機関との連携、研究者。

本プロジェクトは材料研究者により提案されたことから、レーザー計測、レーザー応用に関わる事項はこれを専門とする研究機関との連携、レーザー研究者の新規

採用で対応することを計画に盛り込んだ。しかしながら、国内外の研究機関との交流が閉ざされがちになり、レーザー研究者数が多い海外からの研究者の採用はほぼ不可能となり、とりわけ、パワー系レーザーの推進は困難を極めた。

このことに対しては、二年度目からは、情報通信研究機構、理化学研究所に連携機関としての協力を仰ぐ方向で解決した。特にパワー系のレーザーに関しては理化学研究所の研究者にアドバイザーに就任していただき、週 2 回程度の会合を実施し、実質的な研究の方向性を定めた。その結果、三菱重工業(株)の本プロジェクト参画が実現し、最も懸案であったパワー系の研究が大きく進展できた。また、レーザーに対する経験は不十分なチームではあったが、パルスレーザーで培ってきた技術をフル回転させ対応し、ロボットレーザー MBE に代表される装置を開発してきた。

(3) 必要な材料物性・特性付けへの対応。

研究推進にあたって、想定される本プロジェクト参加者数が、当初、不足していたことから、研究提案には大幅な新規採用する方向を盛り込んだ。しかしながら、我が国における人材不足、海外交流の困難により、新規採用は至難の業であった。この事を回避するため、ルーチンな分析・測定は大学・民間分析機関に依頼することとした。この事により自主分析・測定より表面上、コストが増大することが予想されたが、これに相当する装置購入予算を充当することで、むしろ効率的な予算執行が可能となったと考えている。

(4) エキシマレーザーを使用できない状況におけるパルスレーザー堆積装置の対応策

本プロジェクトの研究グループがこれまでに開発してきたコンビナトリアルパルスレーザー堆積(Pulsed Laser Deposition : PLD) 装置では、エキシマレーザーを用いたレーザーアブレーションが使用されている。エキシマレーザーではバッファーガスとしてネオンガスを使用している。しかし、ネオンガスの約 80 %はウクライナで産出され、ロシアとの戦争によりガスの値段は高騰し、PLD 堆積にエキシマレーザーを使用することは難しい。本プロジェクトでは、エキシマレーザーの代替として Nd : YAG レーザーを用いた薄膜合成システムを立ち上げ、本プロジェクトではエキシマレーザーを使用しなくても PLD 堆積により高品質な薄膜を形成する環境を整えてきた。特に、薄膜作製中にヘリウムのバッファーガスを利用し、エキシマレーザーを使用した合成プロセスと同レベルの高品質な酸化物薄膜を作製することができる環境を作り出した。本システムのソフトウェアは本プロジェクトの分担者であるバキュームプロダクツ社によって開発され、現在、パスカ社より、装置の販売は進められ、エキシマレーザーを使用しない PLD 装置として確立されるに至った。

【個々の委員によるコメント】（研究推進時に生じた問題への対応）

- ・適宜、適切に対応している。コロナ禍という緊急事態にも、ネットワーク組織がリゾーム力を発揮し、この危機を乗り越えている。
- ・電力不足による高出力化ができなかった点、ハライドペロのレーザーに関して設計上の問題があった。
- ・コロナ対応や中心的な研究者の交代などに柔軟に対応して成果につなげた。

6-10. 経費の効率的な執行

無駄無く、適正な経費の執行を行うため、物品や外注費等の購入に関わる経費執行状況の確認、作業日報の確認及び整備、経理関係書類の確認、定期的なレビューの実施等通常のプロジェクト管理を実施したことはもちろんの事、新規開発に係る費用を抑える目的で、できる限りルーチンな分析作業等の外注化を計った。この事により、備品費・人件費等を抑えることが可能となり、さらに効率的な予算の運用が可能となった。

【個々の委員によるコメント】（経費の効率的な執行）

- ・適切に執行されていると考える。