

令和2年度「学術変革領域研究（A）」新規採択研究領域  
に係る研究概要・審査結果の所見

領域番号	20A206	領域略称名	超秩序構造科学
研究領域名	超秩序構造が創造する物性科学		
領域代表者名 (所属等)	林 好一 (名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・教授)		

(応募領域の研究概要)

本学術変革領域研究の対象である「超秩序構造」とは、ドーパントや空孔によって形成される特異ナノ構造体を指し、様々な材料に高機能性を付与する重要な新物質相である。誘電体や機能性ガラス、ゼオライト等の幅広い材料群に潜む「超秩序構造」を、サイト選択的な最先端の量子ビーム技術によって計測し、大規模第一原理計算などを駆使した理論的アプローチによって機能性解明と新規「超秩序構造」の設計に取り組む。また、トポロジー解析などの数学的手法を活用し、「超秩序構造」等、これまで着手されなかった「非周期構造」の記述子の作成についても取り組む。さらに、これらの知見を基に、単なる置換サイトドーピングのような発想を超えた、トポロジー制御による高機能な材料創製への道筋を切り拓く。

(審査結果の所見)

本研究領域は、ドーパントや空孔が起点となって現れる結晶中の局所三次元構造やアモルファス中のネットワーク的秩序構造を「超秩序構造」と呼び、これらを統一的に理解する学理構築を行い、高機能な材料創製への道筋を切り拓くことを目的としており、材料科学研究として新規性ある視点を有している。それぞれの構造を計測するための先端的量子ビーム計測技術を擁しており、対象とする物質としては、金属含有タンパク質への言及もあり、かなり広範に及ぶことにも特徴がある。前身である新学術領域研究「3D活性サイト科学」で、蛍光X線ホログラフィや光電子ホログラフィなどの先端計測技術で結晶中の超秩序構造を見出したことが端緒となり、本研究領域提案において発展・飛躍的に展開している。アモルファスにおける超秩序構造をトポロジーで描像するアプローチを新たに加え、全体としての共通学理創成を、大規模第一原理計算やデータ駆動科学の手法に基づいて実現する領域構成を構築している。

ただし、その実効性については必ずしも明確でなく、また、各計画研究の具体的内容が領域代表者の上記方針に十分に沿ったものであるのかどうかについてやや不安があり、コンセプトの深化と適切な研究領域運営が求められる。