

平成 30 年 6 月 12 日現在

機関番号：14301

研究種目：国際共同研究加速基金（国際活動支援班）

研究期間：2015～2017

課題番号：15K21748

研究課題名（和文）ナノ構造情報のフロンティア開拓 - 材料科学の新展開（国際活動支援）

研究課題名（英文）Exploration of nanostructure-property relationships for materials innovation

研究代表者

田中 功（TANAKA, Isao）

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：70183861

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 38,000,000円

研究成果の概要（和文）：本国際活動支援班では、国内外での国際会議、シンポジウム、ワークショップなどの機会に、領域メンバーやポスドク研究者、大学院生などが積極的に成果発表を行うことで、国際的な研究ネットワークの構築、その場への若手研究者の参加促進と、国際的な研究のリーダーシップを取ることに努めた。また、領域での成果をまとめた英文での書籍と雑誌特集号の出版および大学院生および若手研究者の海外派遣を行った。

研究成果の概要（英文）：This group encouraged many international activities of project members. This group supported publishing an open-access international book of our research summary, publishing a special issue in an international journal and providing a series of lectures on our studies. This group also supported young researches to collaborate with foreign researchers.

研究分野：材料基礎科学

キーワード：ナノ構造情報 ナノ材料科学 インフォマティクス 材料設計・創出

1. 研究開始当初の背景

結晶の表面、界面、点欠陥等に局在した特徴的な原子配列や電子状態＝ナノ構造が、材料特性に決定的な役割を担う例は極めて多い。近年ナノ構造における個々の原子を直接観察し、その定量的情報を直接的に得るための実験および理論計算に格段の進歩があった。本領域研究の構成メンバーは、これら一連のナノ材料科学の研究において多くの先駆的な成果を上げている。本領域研究では、**ナノ材料科学のフロンティア開拓**にさらなる弾みを付けるとともに、獲得される**ナノ構造情報**を具体的な材料設計・創出に活かすべく、情報の統合化を強力に進める。このために、材料科学、応用物理、固体化学、触媒科学など様々な分野で世界に誇る成果をあげている若手・中堅研究者を中心としたメンバーが一体となって研究を進め、新しい材料科学の奔流を創り出す。

伝統的な材料技術に近代科学が適用されたのは20世紀半ばである。化学熱力学や固体物理学の材料分野への適用が進み、学問体系に基づいて実験結果を統合・整理することで、自由エネルギーや物性値の化学組成や構造への依存性といった多様な材料情報が蓄積された。これらの情報を活用することで、材料技術が大きく進展し、技術革新が科学の一層の発展を促した。この歴史の中で、結晶の表面、界面、点欠陥等に局在した特異なナノ構造が、材料特性に決定的な役割を担う例が数多く見出された。21世紀になり、このようなナノ構造についての情報を直接的に得るための実験・理論計算手法が格段に進歩しつつある。

一方で、実験や理論計算で得たナノ構造情報そのままでは、材料創出への応用範囲は極めて限定的である。個別の材料についての、いわゆるアナリシス型研究開発である。これに対し、情報の統合化＝シンセシスを進めるという研究は、諸外国にも例を見ない独創的なものである。

2. 研究の目的

ナノ材料科学のフロンティア開拓において、本領域メンバーは世界最高水準での研究をリードしている。最先端の透過型電子顕微鏡や原子間力顕微鏡により、個々の原子を直接観察・電子分光し、これらナノ機能元素の特徴的な局所構造や化学結合状態を発見した。さらに高精度第一原理計算によって、特定の構造が熱力学的に安定であることや、材料機能を強く発現させることを見出した。これらの成果は、本領域メンバーによって多くの国際会議において基調講演や招待講演されており、本申請書の第9ページ「国際活動支援の準備状況」に示したとおり、多くの国際共

同研究が展開中である。海外からのポスドク研究者も、すでに数多く領域内に受け入れている。

このような実験と理論計算に基づいた膨大な材料情報を、最先端のデータ科学と連携することで具体的な材料創製に活かすという**ナノ構造情報の活用研究**は、本領域における独創的なものであり、国内だけでなく諸外国からも大きな注目を集めている。最近、諸外国においても、材料研究にデータ科学を応用することの重要性が認識されるようになってきた。これは実験、理論、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータを駆使して、統計学習により物質・材料特性を制御する因子を探り、「設計」を可能とする系統的アプローチを構築すること、それを通して具体的に新物質、新材料の「発見」を加速し、究極として特性を支配する法則を「発見」することを目指すものである。代表的なものとして、米国の **Materials Genome Initiative (MGI)** を挙げることができる。本領域研究は、ナノ構造情報に焦点を合わせ、実績あるナノ材料科学のフロンティア開拓研究を中核に置いている点で、これら諸外国での研究展開と一線を画している。今後ともフロントランナーとして国際共同研究の中核を担い、成果を世界に向けて発信することで、リーダーシップをとり続ける国際的な責務がある。

ナノ材料科学のフロンティア開拓では、先端ナノ計測と計算科学、合成プロセス研究が密接に連携した研究を進めている。また**ナノ構造情報の活用研究**では、材料科学と情報科学との分野間横断的な融合研究の結果が大きな成果として実りつつある。本領域研究では、通常の基盤研究のような一つの研究室、あるいは自然体でも共同研究が見込まれる複数の研究室だけでは達成が困難であるような、新しい「場」を形成することを目指すという強い信念のもとで、①機能性セラミックス材料、②固体イオニクス材料、③触媒材料をコモンサブジェクト (CS) 課題と設定し、これらを対象とした連携研究を、総括班のリーダーシップのもとで、材料科学、応用物理、固体化学、触媒化学、情報科学など様々な分野で世界に誇る成果をあげている若手・中堅研究者を中心としたメンバーが一丸となって重点的に推進している。これらの研究テーマは、通常研究では達成困難な挑戦的なものばかりであり、国際活動においても、この領域における新しい「場」を活用することが不可欠である。そして、このような国際的な展開によって、研究が効率的に進むのみならず、とくに若手研究者のネットワーク形成が期待され、短期的のみならず、中長期的にもわが国の存在感を維持・向上するために効果的であると期待できる。

個々の研究者や小グループ単位ではなく、領域全体として国際活動を積極的に進める。さらに、領域研究期間が終了の後も、継続して国際共同研究の推進やネットワーク形成が進捗するために、大学院生を含む若手研究者への効果的な on the research training の仕組み構築と国際的な人的交流を進める。本国際活動支援班では、①国際的研究ネットワーク構築、とくに国際的な共同研究の場への若手研究者の参加促進と、②国際的なリーダーシップ、とくにナノ構造情報についての研究成果を、論文のみならず、英語によるレクチュアシリーズとして発信するほか、英語によるテキスト出版にも尽力する。

①国際的研究ネットワーク構築

すでに各計画研究の予算内において旅費を確保し、また日本学術振興会・二国間交流事業、特別研究員制度や、外国でのファンディング（共同研究の相手側に使用が限定される）などを活用することで、共同研究・連携研究を推進してきた。

これらの国際共同研究実績に立脚し、領域全体として国際活動を積極的に進めることを念頭に置いて、国際活動推進委員会において、領域として重点的に活動する国際共同研究課題を選択し、国際的共同研究を加速させる。そして、このような国際的な共同研究の場に大学院生を含むポスドク等の若手研究者が効果的に on the research training の形で参加促進できる仕組みを構築し、国際的な人的交流を進める。

②国際的なリーダーシップ

国際的な研究者コミュニティをリードし、国際社会におけるわが国の存在感を維持・向上するために、国際広報委員会において、英語によるレクチュアシリーズを企画・実施する。すなわち世界各国において、領域メンバーによるレクチュアを実施して成果をアピールするとともに、国際的に評価の高い研究者をわが国に招聘し、レクチュアを受ける。それによって本領域が国際的な研究者コミュニティをリードし、そしてわが国の大学院生を含む若手研究者を、分野融合の観点からの育成に貢献することを目指す。英文テキストについては、上記のレクチュアシリーズにおいて利用したうえで、受講者との質疑などを踏まえて改訂したものを、最終的に成書として出版する。すでに「nanoinformatics」という仮題で、契約を想定した打ち合わせを、国際的に広く展開している大手出版社であるシュプリンガー社と領域代表者との間で進めている。

本研究分野では、実験と理論計算に基づいて膨大なナノ構造情報を獲得し、それを最先

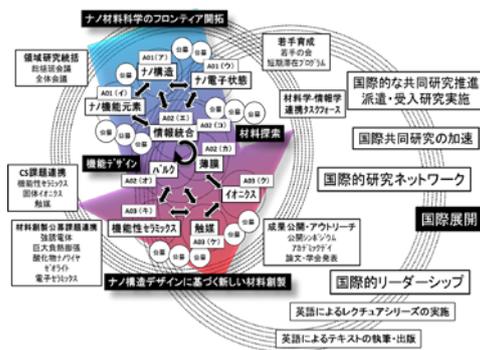


図 1 領域における連携体制と、国際活動支援班との関係

端のデータ科学と連携することで具体的な材料創製に活かすことを目指している。これは、材料科学の新展開を目指すもので、諸外国からも大きく注目されている。上記の国際活動支援は、この新興分野におけるわが国の存在感の維持・向上に大きく資するものと期待される。

3. 研究の方法

総括班のリーダーシップのもとで、積極的に実施することを計画しているが、総括班として国際活動支援のための予算は持っていないので、各計画研究の予算内において旅費を確保するほかには、日本学術振興会・二国間交流事業、特別研究員制度や、外国でのファンディング（共同研究の相手側に使用が限定される）などを活用することで、共同研究・連携研究を推進してきた。

そのほかにも、国内外での国際会議、シンポジウム、ワークショップなどの機会に、領域メンバーやポスドク研究者、大学院生などが積極的に成果発表を行うことで、国際的な研究ネットワークの構築、その場への若手研究者の参加促進と、国際的な研究のリーダーシップを取ることに努めることとした。

また、国際活動支援班を組織する研究者の役割は以下の通りである。

- ・領域代表者 田中 功 (京都大学工学研究科・教授), 専門: 材料科学, 全体の総括, A02 項目総括, 国際活動推進委員会・国際広報委員会担当
- ・計画研究代表者 松永 克志 (名古屋大学工学研究科・教授), 専門: 計算材料科学, A01 項目総括, 国際広報委員会担当
- ・計画研究代表者 柴田 直哉 (東京大学工学系研究科・准教授), 専門: 電子顕微鏡材料科学, 国際活動推進委員会担当
- ・計画研究代表者 武藤 俊介 (名古屋大学エコトピア科学研究所・教授), 専門: ナノ材料科学, 国際活動推進委員会担当

・計画研究代表予定者 津田 宏治 (東京大学新領域創成科学・教授), 専門: 機械学習, 国際活動推進委員会担当

・計画研究代表者 谷口 尚 (物質・材料研究機構・グループリーダー), 専門: 高圧材料科学, 国際広報委員会担当

・計画研究代表者 太田 裕道 (北海道大学電子科学研究所・教授), 専門: 薄膜機能材料科学, 国際活動推進委員会担当

・計画研究代表者 北岡 諭 (ファインセラミックスセンター・主席研究員), 専門: 無機化学, A03 項目総括, 国際広報委員会担当

・計画研究代表者 菅野 了次 (東京工業大学総合理工学研究科・教授), 専門: 固体化学, 国際活動推進委員会担当

・計画研究代表者 高草木 達 (北海道大学触媒化学研究センター・准教授), 専門: 界面物理化学, 国際広報委員会担当

4. 研究成果

本領域はナノ材料科学のフロンティア開拓とナノ構造情報の活用という2つのアプローチを密接連携させてナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築という材料科学の新展開を導くことを目的として実施された。領域内に設定した3つの材料課題、すなわち機能性セラミックス材料、固体イオン材料、触媒材料をコモンサブジェクト (CS 課題) と名付け、多様な材料に関わる様々な材料科学の課題に対し、領域メンバーがナノ構造情報を活用して材料開発原理を構築するという共通の志を持って融合・共同研究を行なうように工夫した。また各班の役割を具体化し、それに沿って重点的に研究を進めた。その結果、高品質かつ多様なナノ構造情報の獲得から材料開発に繋がる一貫した流れを、個別材料に留まらず多様な材料に対する普遍的な材料開発原理として構築できただけでなく、それを新材料創製として実証することができた。これを可能にするために、本領域では材料科学分野と情報学分野の強固な連携に特段の措置を講じた。具体的には期間前半に6名の情報分野の研究者を公募研究として採用し、領域代表者を中心として若手研究者によるタスクフォースを形成して活発な活動を行った。その結果、研究目標や専門用語が共有され、融合研究が活性化された。期間後半では、タスクフォースによる材料科学と情報学との融合研究をさらに強化・加速するために、研究項目 A02 に計画研究を1つ追加し、既設の計画研究と密接に協力してナノ構造情報に基づいた機能探索への適用に的を絞った新しい機械学習法の開発や応用研究を実施した。これによりナノ材料科学における研究課題の情報学的な問題設定と普遍的特徴量の導出として成果を上

げることができ、分野融合の進んだ「新学術領域」の構築に貢献できた。材料科学と情報学の融合論文は、期間前半には*報であったが、領域内研究者の相互理解が深まるにつれて、加速度的に領域内融合研究が進展し、最終的に本領域研究期間内に30報出版するに至った。このA02の強化により、A01で開拓された最先端技術によるナノ構造情報をA03における新しい材料創製につなげるという普遍的な材料開発原理としての一貫した流れが、期間後半において大きく加速された。具体的な成果としては、粒界制御した多結晶アルミナ耐環境セラミックスの創製、世界初のヒドリド伝導酸水素化物と電気化学デバイスの創製、新しい金属担持触媒材料の創製などを上げることができる。このように、ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築という領域研究の目的は、実証の段階まで到達できた。

本国際活動支援班の活動を以下に記す。

①大学院生および若手研究者の海外留学

H26年7月にはA02(エ)の協力研究者であった博士課程大学院生2人(設楽, 炭谷)が、材料情報学分野の世界的権威である米国Iowa州立大学のRajan教授のもとに1か月間の短期海外留学した。また国際活動支援班の活動の一環として、H29年4月より、特定助教1人(池田)を独国マックスプランク研究所 Neugebauer 教授のもとに1年間派遣した。これを契機に本領域との国際共同研究が開始し、本領域における成果の1つとなった。[Y. Ikeda et al. npj Comput. Mater. 4, 7 (2018)]

②領域での成果をまとめた英文での書籍と雑誌特集号の出版

英文での書籍や雑誌としては、領域代表者を編集者として本年2月にSpringer社よりNanoinformaticsという表題で出版した解説書

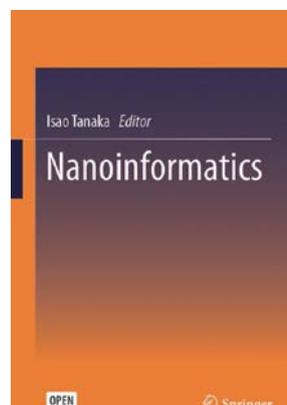


図2 Nanoinformatics: ISBN

978-981-10-7617-6

(図2)は、出版後3か月で電子版のダウンロードが2万件を超える、出版社が驚異的と言う数字をあげ、世界的なインパクトの大きさを物語っている。さらに領域代表者をGuest Editorとして、材料科学分野で国際的に広く流通する雑誌MRS Bulletinに特集号を提案したところ承認され、本年9月発刊を目指して現在編集の最終作業中である。

③レクチュアシリーズおよび国際会議での講演

国際的な情報発信として、世界各国において領域メンバーによるレクチャーを実施した。さらに領域内の多数の材料科学研究者が情報学の国際会議で、また情報学の研究者が材料科学の国際会議で招待講演を行っている。これらは、本領域での材料科学と情報学の融合研究成果への世界中からの注目度の高さを客観的に示すものである。

5. 主な発表論文等

[図書] (1件)

①Tanaka Isao, Springer, Nanoinformatics, 2018, 298

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田中 功 (TANAKA, Isao)
京都大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：70183861

(2) 研究分担者

柴田 直哉 (SHIBATA, Naoya)
東京大学・大学院工学系研究科・教授
研究者番号：10376501

太田 裕道 (OHTA, Hiromichi)
北海道大学・電子科学研究所・教授
研究者番号：80372530

(3) 研究連携者

松永 克志 (MATSUNAGA, Katsuyuki)
名古屋大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：20334310

武藤 俊介 (MUTO, Shunsuke)
名古屋大学・未来材料・システム研究所・教授
研究者番号：20209985

谷口 尚 (TANIGUCHI, Takashi)
物質・材料研究機構・先端材料プロセスユニット・グループリーダー
研究者番号：80354413

北岡 諭 (KITAOKA, Satoshi)
ファインセラミックスセンター・材料技術研

究所・主席研究員
研究者番号：80416198

菅野 了次 (KANNO, Ryoji)
東京工業大学・大学院総合理工学研究科・教授
研究者番号：90135426

高草木 達 (TAKAKUSAKI, Satoru)
北海道大学・触媒化学研究センター・准教授
研究者番号：30359484

津田 宏治 (TSUDA, Koji)
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授
研究者番号：90357517