

平成 30 年 6 月 22 日現在

機関番号：14301

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2013～2017

課題番号：25106001

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

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） 21,900,000 円

研究成果の概要（和文）：総括班では、領域の全体的な研究方針の策定、企画調整、研究成果の適正評価、研究連携の円滑化・促進、公募による新テーマ発掘、若手育成プログラムの推進、公開講演会・シンポジウム等の企画・実行、海外のトップグループとの情報交換・協力体制構築、国民との科学・技術対話推進、産業界への情報発信などを行った。
また、個別の成果を統合し、新しい学術基盤の創成に貢献するために、領域代表者を編集者として、書籍 "Nanoinformatics" を出版した。

研究成果の概要（英文）：This group mainly encouraged the collaboration between project members. This group organized international symposiums for publishing our studies, organized many small workshops for accelerating the communication between researchers with different backgrounds, published an international book of our research summary, and encouraged many activities of young researchers. In addition, this group supported the building of a web site and publication of a booklet.

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。

本領域研究は、研究項目 A01：ナノ材料科学のフロンティア開拓の3班、研究項目 A02：ナノ構造情報センセンスによる機能設計・探索の3班、研究項目 A03：ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製の3班から構成される。各班の研究代表者9名、および外部有識者による評価委員4名から構成される総括班を設置し、この領域研究を効率的に運営し、個々の研究活動の内容と全体の方向性を策定し、各研究項目の取り纏めと評価を行う。4名の評価担当者は、それぞれの専門分野において学会の指導的役割を長年担った研究者であり、本領域分野の研究内容に精通しているのみならず、我が国の学術研究分野のオピニオンリーダーでもあることから、広い視野に立った的確な判断が期待できる。

2. 研究の目的

(1) 研究領域の全体的な研究方針の策定、企画調整

全体的な研究方針を議論し、研究進捗状況を監督するために、評価委員を含む総括班会議を企画実行する。研究を推進する上で困難な問題が生じた場合にリーダーシップを発揮する。さらに国内外における情報収集を行い、領域内で共有する。公募による研究発掘に努める。領域全体で材料創製への意識を共有し、その成功に向けてのアイデアを結集させるために、個別の材料テーマについての領域内での定期的な研究会(年2-3回程度)や集中的な勉強会(年5回程度)を企画実行する。

(2) WEB 情報交換と TV 会議システムの構築と円滑利用

領域内での連携の円滑化のため、班を超えたナノ構造情報の確実な集約と共有を WEB 上で可能とするためのシステムの構築と管理を行う。また TV 会議システムを導入し、積極的に利用する。

(3) 若手育成プログラムの推進(図1)

領域内短期滞在制度の構築と積極的な活

用、若手研究者や大学院生が主催する「若手の会」を定期的実施するために、総括班においてプログラムを策定・管理する(年1回程度)。

(4) 公開講演会、シンポジウム等について
総括班主導で、公開講演会を年1回、学会を利用した特定セッションの設置を年1-2回開催し、3年次および最終年次には国際ワークショップ、国際シンポジウムを企画する。また海外のトップグループとの迅速かつシステマティックな情報交換・協力体制を構築する。さらに成果発表の場として、3年次および最終年次に国際誌の特集号として論文誌を作成する。

(5) 国民との科学・技術対話推進、産業界への情報発信

国民との科学・技術対話推進を積極的に進めるための手法を策定し、実施する。また本領域は、産業界からの関心も高い分野であるので、研究成果を広く応用分野の関連研究者に配信する。

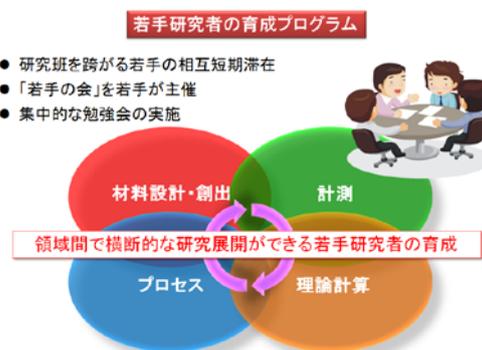


図1 若手育成プログラムを総括班で策定・管理

3. 研究の方法

総括班では、領域の全体的な研究方針の策定、企画調整、研究成果の適正評価、研究連携の円滑化・促進、公募による新テーマ発掘、若手育成プログラムの推進、公開講演会・シンポジウム等の企画・実行、海外のトップグループとの情報交換・協力体制構築、国民との科学・技術対話推進、産業界への情報発信などを行う。

また、研究班の連携効率化のための WEB 情報交換と TV 会議システムの構築を行う。さらに、国内外でこれまでに得られた研究成果を広く調査・分析し、本領域の世界における位置づけや進捗状況を常にモニターする。同時に世界に向かっての成果の発信と領域としての海外連携を、常に積極的に進める。

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合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。

本総括班の活動を以下に記す。

①領域代表者と総括班が密接に意思疎通を取りリーダーシップを発揮する体制を構築
領域代表者と総括班メンバーとが密接な意思疎通をとり、連携・融合研究、国際活動、若手育成、成果公表、アウトリーチ活動の諸項目についての司令塔となり、それを領域全体で共有する体制を構築した。さらに評価委員を含む総括班会議を年2回企画実行し、領

域の方向性への評価・助言を得ることで、方針の軌道修正を可能とした。

②研究センター設置による共同研究の推進

総括班において領域内で特徴的な評価・プロセス装置と技術を有する5つのグループを研究センターと命名して組織化することを決め、その設備を活用した共同研究を推進した。具体的には、STEMセンター（東大）、ハイパー電子顕微鏡センター（名大）、AFMセンター（名大→阪大）、高圧・高温プロセスセンター（NIMS）、原子層制御プロセスセンター（北大）である。これにより、計画研究相互のみならず、公募研究班との共同研究の見通しが良くなり、センターを核とした多くの共同研究が行われた。

③材料科学—情報学融合研究タスクフォースの活動

材料科学と情報学分野で、研究目標や専門用語を共有したうえで、高度な連携共同研究に発展させるために、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、月に1回以上の定期的な会合を平成24年度より5年間、欠かさず実施した。これにより加速度的にナノ材料科学と情報学の融合研究が進展し、本領域研究期間内に融合論文を30報出版するに至った。

④融合分野を担う若手人材育成への注力

領域間で共同研究を実施するだけでなく、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領域研究の共通の志を受け継ぐ若手人材を育成することに、総括班主導で注力した。研究の着眼点や方法論における異文化を共有・経験するために、年一回の「若手の会」では、大学院生・若手研究者が合宿形式にて個々の研究ポスターを活用して深夜まで徹底的に議論した。また大学院生・若手研究者の領域内他班への相互訪問を奨励し、その延長線上として、1年程度の大学院生・若手研究者の領域内他班への長期滞在プログラムを4件実施した。このような活動を通して分野横断的な大きな若手人材ネットワークが構築でき、それが研究者相互の有機的連携の強化に大きな作用をもたらした。

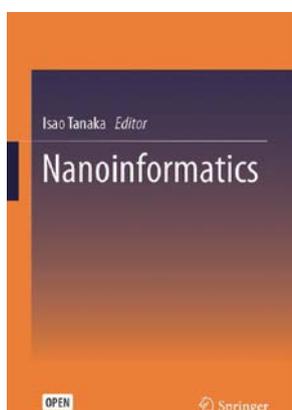
⑤公開シンポジウムの開催

学会等での成果発表は活発に行い、領域内の多数の材料科学研究者が情報学の国際会議、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た。国内の関連する学協会のシンポジウムや講演会では本領域の研究者が企画、あるいは基調・招待講演を行い、各イベントをリードした。たとえば日本金属学会の平成25年から5年間の公募シンポジ

ウム，日本物理学会での平成 30 年共催シンポジウムなどである。

⑥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（右図上）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．



Nanoinformatics: ISBN 978-981-10-7617-6

⑦ホームページ

領域全体のホームページ（URL: <http://nanoinfo.mtl.kyoto-u.ac.jp>）において，研究目的，研究体制，研究成果，ニュースレターを公開していた．領域設定期間終了後，より詳細な内容を含めるためにホームページを再構築し，研究成果の発信に努めている．

⑧領域紹介パンフレット

領域研究の成果のうち，学術上の価値の高いもの，社会にインパクトが大きいものなど特筆すべきものを纏めカラー刷りのパンフレットとした．これを学会や講演会の機会に配布し，研究成果の発信に努めた．

⑨一般向けのアウトリーチ活動

一般市民を対象としたアウトリーチ活動として，京都大学アカデミックデイに 5 年連続で参加し，「ナノ構造情報のフロンティア開拓：材料科学の新展開」に関するポスターを掲げて研究紹介を行った．その説明要員として，領域代表者のほかに，各計画研究班から大学院生に参加させた．学会発表とは異なり，

一般市民を対象とした説明をすることは大学院生にとっては大きな教育効果があり，研究の社会的意義について再確認する良い機会となった．

また，主催シンポジウム等，主要な活動は以下の通りである．

平成25年度	
2013 年 10 月 11 日	【公開】新学術領域 公募研究説明会(名古屋) (新学術領域「疎性モデリング(代表者岡田真人)」)と共催
2013 年 11 月 10～ 13 日	【公開】国際会議 EMMM2013(京都)共催
2014 年 1 月 6～9 日	【公開】シンポジウム「計算材料科学と数学の協働による スマート材料デザイン手法の探索」(東北大学 WPI-AIMR 等と共催)
2014 年 3 月 5 日	【公開】第1回公開シンポジウム，第2回総括 班会議(東京)
平成26年度	
2014 年 5 月 7～10 日	【公開】国際会議 AMTC4(JFCC ナノ構造研 究所と共催)(浜松)
2014 年 7 月 24 日	【公開】講演会 ～3 次元アトムプローブ法の 構造材料研究への応用～ (構造材料元素戦略研究拠点と共催)
2014 年 9 月 24～26 日	【公開】金属学会公募シンポジウム(名古屋) S1 ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料 科学の新展開 S7 マテリアルズインフォマティクス
2015 年 3 月 11 日	【公開】第2回公開シンポジウム，第4回総括 班会議(名古屋)
平成27年度	
2015 年 9 月 16 日～ 18 日	【公開】金属学会公募シンポジウム(九州大 学) ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学 の新展開
2015 年 9 月 28 日	【公開】新学術領域 合同 公募研究説明会 (名古屋大学) (スパースモデリング岡田真人代表)と共催
2016 年 3 月 8 日	【公開】第3回公開シンポジウム，第6回総括 班会議(東京)
平成28年度	
2016 年 5 月 11 日～ 13 日	【公開】国際会議 AMTC5(JFCC ナノ構造研 究所と共催)(名古屋)
2016 年 9 月 21 日～ 23 日	【公開】金属学会公募シンポジウム(大阪大 学) ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学 の新展開
2017 年 3 月 24 日	【公開】第4回公開シンポジウム，第8回総括 班会議(京都)
平成29年度	
2017 年 9 月 6 日～8 日	【公開】金属学会公募シンポジウム(北海道大 学) ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学 の新展開
2018 年 3 月 7 日	【公開】第5回公開シンポジウム，第10回総括 班会議(京都)
2018 年 3 月 25 日	【公開】日本物理学会 2018 年年次大会 共 催シンポジウム 「インフォマティクスを活用した材料科学の新 展開」(東京理科大学，野田キャンパス)

5. 主な発表論文等

[図書] (1件)

① Tanaka 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

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

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

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

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

足立 裕彦 (ADACHI, Hirohiko)
京都大学・工学研究科・名誉教授
研究者番号：60029105

佐久間 健人 (SAKUMA, Taketo)
高知工科大学・工学部・教授
研究者番号：50005500

高野 幹夫 (TAKANO, Mikio)
生産開発科学研究所・機能性酸化物研究室・研究員
研究者番号：70068138

森 博太郎 (MORI, Hirotarō)
大阪大学・超高压電子顕微鏡センター・特任教授
研究者番号：10024366

樋口 知之 (HIGUCHI, Tomoyuki)
統計数理研究所・所長
研究者番号：70202273