

○戦略目標「ゆらぎの制御・活用による革新的マテリアルの創出」の下の研究領域

ゆらぎの理解と制御による材料革新

研究総括： 常行 真司 （東京大学 大学院 理学系研究科 教授）

研究領域の概要

本研究領域では、不均一性や欠陥などの空間的なゆらぎ、ダイナミクスや非平衡現象などの時間的なゆらぎの理解と機構の解明により、社会課題の解決や人類の幸福度向上に資する革新的な材料の創出を目指します。

近年の材料研究においては、高輝度放射光、高強度中性子ビーム、高精細な電子顕微鏡や走査型プローブ顕微鏡などを用いた計測技術の進歩、スーパーコンピュータ富岳に代表される計算機性能の飛躍的な向上と材料シミュレーション手法の進歩、およびこれらを強力にサポートする AI・データ科学的手法の発展により、これまで理解が困難であった材料のゆらぎを捉える技術が大きく向上しています。また実験やシミュレーションのデータを活用して新奇材料を探索するマテリアルズ・インフォマティクスも進展しています。これら計測技術および計算機科学技術の進歩を最大限活用し、ゆらぎの本質的な理解や制御につなげます。具体的には、構造、欠陥、組成、イオン、分子、配向などの空間的なゆらぎや時間的なゆらぎがもたらす材料特性に着目し、その原理やメカニズムの解明を通して、飛躍的な性能を有する材料の創製を図ります。またその礎となる分析計測技術、シミュレーション技術、データ解析技術、プロセス技術などの基盤技術を創成します。

募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

1. 背景と基本方針

革新的な材料の創成は、社会課題の解決や人類の幸福度向上に貢献するのみならず、新しい学理を生み出す揺籃であると言えます。昨今のマテリアル分野を取り巻く計測技術や計算科学等の急速な発展により、ゆらぎを捉える技術が大きく向上しています。大型実験施設（SPring-8、SACLA、J-PARC、NanoTerasu 等）や電子顕微鏡・走査型プローブ顕微鏡等によるオペランド計測等の分析・計測技術、解析技術が進展しているとともに、マルチスケール・マルチモーダル計測も進展してきました。また、計算機能力・計算手法の発展も目覚ましく、ゆらぎを考慮する材料のモデリング・シミュレーションも可能になりつつあります。このような技術が発展する中、機能や特性の発現において重要な因子の一つである材料中のゆらぎを応用して、革新的な材料を創製することが期待されています。

本研究領域は、ゆらぎがなぜ生じるか、ゆらぎが生じるとなぜ材料特性が変わるかなどの

原因やメカニズムを理解し、ゆらぎの制御によって新たな機能や特性を有する革新的な材料を創製することと、その礎となる基盤技術を創成することを目的とします。

先端計測、計算科学、データ駆動研究等を駆使することで、ゆらぎと材料機能と特性との関係を理解し、その知見に立脚してゆらぎを材料に設計的に導入するプロセスを確立し、革新的で飛躍的な性能を有する材料の創出を目指します。また、これらの材料創成の礎となる分析計測技術、シミュレーションやデータ駆動型の数値解析技術、プロセス技術など基盤的な材料科学技術の創成を目指します。また、これらの研究を通して、「ゆらぎ」に着目した新たな材料科学を世界に先んじて産み出すとともに、この研究分野で将来的に世界を牽引する若手研究者の輩出を目指します。

2. 想定する研究分野

本研究領域では、無機、金属、有機、高分子、無機－有機複合材料など、ハードマターとソフトマターの両方の分野で広範な材料の創成を対象とします。ゆらぎの理解と制御による材料開発を実現するために、(1) 革新的機能・特性を有する材料の創出、(2) ゆらぎを制御、活用するプロセス技術、(3) ゆらぎを理解するための分析計測技術、(4) ゆらぎの理解と応用のためのシミュレーション、データ駆動型数値解析技術に関する次の示すような提案を求めます。

(1) 革新的機能・特性を有する材料の創出

- ・ ゆらぎの材料科学的な学理構築と、ゆらぎを制御・活用した材料の設計指針の提案
- ・ 従来の材料開発の既成概念を超えた革新的機能・特性を有する材料の創出

(2) ゆらぎを制御、活用するプロセス技術

- ・ ゆらぎを高度に制御して材料中に導入する設計指針、プロセスの確立
- ・ 先進計測やシミュレーションなどとの融合によるプロセス技術

(3) ゆらぎを理解するための分析計測技術

- ・ 原子・分子などのナノサイズからマクロな素子サイズ領域までのスケール全体を捉えるマルチスケール計測技術
- ・ 材料の生成プロセス中に存在する空間的、時間的なゆらぎを捉える計測技術
- ・ 異なる材料、相状態などの界面や粒界における空間的、時間的なゆらぎを捉える計測技術

(4) ゆらぎの理解と応用のためのシミュレーション、データ駆動型数値解析技術

- ・ 第一原理計算や分子動力学計算など、電子状態や原子・分子の動力学シミュレーションから、空間的・時間的ゆらぎを考慮して物質・材料の物性を予測する計算科学技術

- ・ナノからマクロなマルチスケールと異なるサイズ間での物性を記述するマルチフィジクスを組み合わせた計算機シミュレーション
- ・ゆらぎの概念を導入したデータ駆動型研究の構築

しかしながら、これらはあくまでも一例であり、本研究領域ではこれらに縛られない自由な発想に基づいた提案を求めます。従来の技術の延長線ではない、ゆらぎの理解と制御の提案を歓迎します。最先端の材料科学を発展させるためにどのような新規性や独自性があるかをしっかりと述べてください。

3. 研究期間と研究費

当初研究費は1課題あたり、総額 4,000 万円（直接経費）を上限とします。また、研究期間は採択年度から 3 年半以内とします。

4. 運営方針

本研究領域では、個人研究者が短期的な成果に固執することなく、独創的研究に取り組めるよう、研究総括・領域アドバイザーがサポートします。また、関連する CREST、さきがけ研究領域等の異分野研究者との交流により分野横断的な研究交流を進め、分野を異にする科学技術の間からの新しい研究の創出を図ります。さらに、ワークショップやシンポジウム等の開催を通じて、同じ戦略目標の下で実施する、CREST「ゆらぎ材料」研究領域との連携や、海外研究機関との学術交流も積極的に進めます。