



東北大学

【新規】NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー

研究テーマ：データ駆動科学・計算科学に基づく炭素繊維強化複合材料の構造形成と特性発現機構の解明



責任者

中核研究者：岡部 朋永 東北大学大学院 工学研究科 教授(総長特別補佐)



中核研究者：内藤 公喜 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点・グループリーダー

研究計画の強み

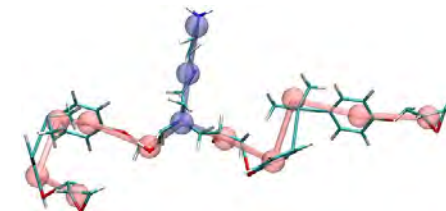
複合材料研究において、東北大学はマルチスケールモデリングに基づくデータ駆動・計算科学に、NIMSには新素材開発、実験的評価に強みがある。両機関が連携することで、今後期待がかかる多成分系ポリマー複合材料を対象とする研究・開発においてデジタルツインが形成され、国際的にリーディングな地位を構築できる。

■ 東北大学が得る強み: 挑戦的な材料探索、高品質な実験データベースの利活用

■ NIMSが得る強み: データ駆動科学による材料探索手法の導入、理論・計算によるデータへの理論的裏付け

両機関が協力することで期待される成果

1. ネットワークポリマーアロイにおける構造形成メカニズム解明
2. 計算科学・実験計測を併用したネットワークポリマーアロイの特性評価
3. データ駆動科学・先端計測を用いた複合材料内部構造と物性・特性の体系的理解
4. マルチスケールモデリングによる複合材料特性の評価と発現機構の解明



計算科学によるネットワークポリマーアロイ物性の評価

研究期間終了後の発展・展開計画

今後、複合材料は軽量の構造材料として、航空機以外にも適用範囲が広がると考えられている。特に洋上風力発電、水素エンジン、水素タンクといったグリーンイノベーションへの展開に期待がかけられており、期間終了後は、これらへの発展・展開が期待できる。また、これらに加え、放射光あるいは電顕といった観察情報と、実験データ・シミュレーションデータを組み合わせ活用したデータ駆動型の研究が推進できる。



自己組織化マップ (SOM) による物性・特性のクラスタリング



東北大学

【新規】NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー 研究テーマ：分子性ハイブリッド機能材料の開発



責任者 芥川智行 東北大学多元物質科学研究所
中核研究者：マテリアル・計測ハイブリッド研究センター 教授

中核研究者： 竹内正之 物質・材料研究機構
機能性材料研究拠点 グループリーダー



研究計画の強み

有機材料の最大の特徴は分子設計自由度の高さにあるが、これは過去から蓄積された研究者の経験と勘に大きく依存している。本提案では、低分子から高分子、結晶から柔粘性結晶・薄膜・液晶に至る多彩な分子集合体を研究対象とし、伝導性・磁性・発光性・強誘電性・メカニカル応答などの多岐におよぶ材料機能のハイブリッド化を試みる。

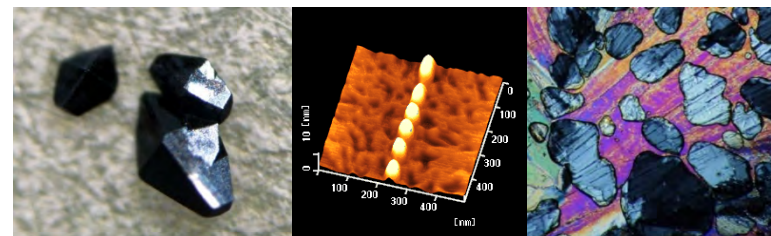
両機関が協力することで期待される成果

東北大・芥川グループの多様な有機材料に対する物性計測技術とNIMS・竹内グループの高度な有機合成化学の手法を連携させ、MANA・田村によるデータ駆動型の材料設計・機能予測の手法を横串的に連携させる事で、真の意味での材料科学の世界的な拠点が形成できる。

研究期間終了後の発展・展開計画

材料設計の多様性に富む有機材料において、AIを用いた材料設計と機能予測による材料開発の視点を実現することで、ハイブリッド機能材料の研究開発に対する世界的なイニシアチブを取ることができる。ハードマテリアルに、機能性有機材料やハイブリッド機能材料を次世代の研究開発の新機軸として加え、ソフトマテリアル材料研究をNIMSとの連携体制で実施する。

ハイブリッド機能材料創製



ソフトマテリアル(有機結晶・ポリマー・液晶・ナノ界面)

有機合成化学+有機物性化学+データ駆動予測



責任者 内田健一 物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点
 中核研究者： スピンエネルギーグループ グループリーダー

中核研究者： 関 剛斎 東北大学 金属材料研究所 磁性材料学研究部門 准教授



研究計画の強み

NIMSが得る強み：

- 新原理・新現象開拓における理論的支援&競争力強化
- 磁性・スピントロニクス材料研究への波及効果
- 利用材料の多様化

東北大学が得る強み：

- 実験との密な連携による理論研究・新原理実証
- 独自性の高い熱スピン物性計測技術や磁性材料作製設備の利用

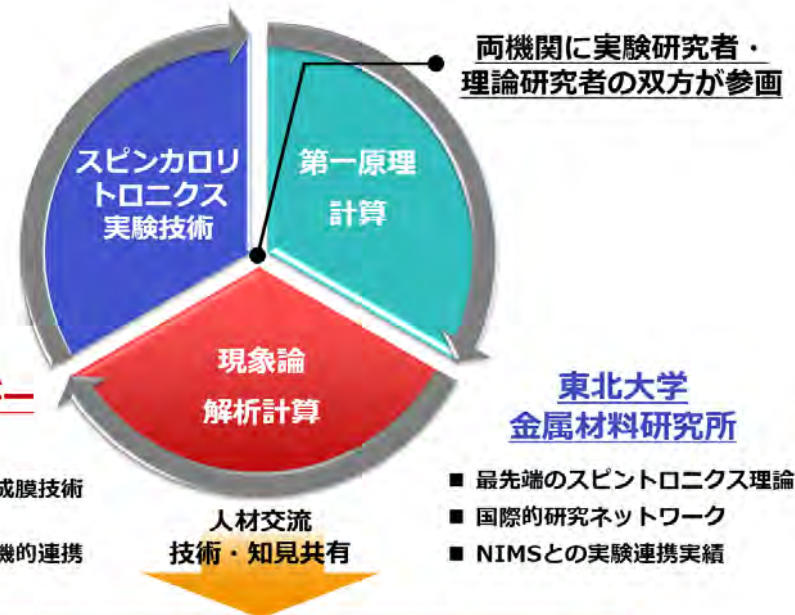
両機関が協力することで期待される成果

世界をリードする**実験研究者**・**理論研究者**の連携により
 スピントロニクスとフォノニクスの融合研究領域
「スピントロニクス」の基礎学理と応用機能を開拓

➡ 新しい熱スピン・熱電変換原理やエネルギー制御機能の開拓

研究期間終了後の発展・展開計画

- スピントロニクスの枠組みを超えた研究ネットワーク・新しい学術領域の形成
- スピントロニクス国際ワークショップのつくば/仙台での開催 など



「スピントロニクス」の基礎学理・応用機能の開拓



責任者 高橋有紀子 物質・材料研究機構 磁性スピントロニクス材料研究拠点
中核研究者： 磁気記録材料グループ グループリーダー

中核研究者：岡本 聡 東北大学 多元物質科学研究所 無機材料部門
ナノスケール磁気デバイス分野 教授



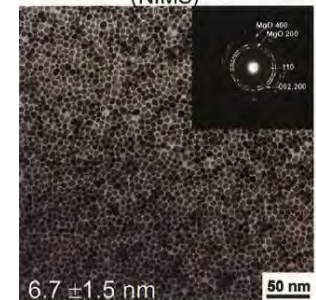
研究計画の強み

高磁気異方性を有する硬質磁性材料は、情報ストレージや高性能永久磁石として現在の社会を支えるキーマテリアルの一つである。高性能硬質磁性材料の開発は、IT技術や高効率エネルギー技術等のより一層の進展に直結し、社会的なインパクトが非常に大きい。本研究では、硬質磁性材料に関して、NIMSと東北大学がそれぞれ、これまで培ってきた組織制御と磁化反転制御をコア技術とし、高性能硬質磁性材料の創成を目的とする。



HDD

FePtグラニューラー薄膜 (NIMS)



6.7 ± 1.5 nm 50 nm

A. Perumal et al, APEX. 1 101301 (2008)

両機関が協力することで期待される成果

NIMSは組織観察を通じた高度な組織制御に長けており、東北大学は超高感度計測を基礎とした磁化解析を専門とし、互いに情報ストレージや永久磁石分野で研究を進めてきた。本研究では、これらを車の両輪とすることで、加速的に研究を推進できる。両機関の協力は互いの強みを生かし弱点を補い合うベストマッチングであり、情報ストレージおよび永久磁石分野で高特性化に向けて大きな貢献が期待される。

研究期間終了後の発展・展開計画

情報ストレージ分野においては、FePtグラニューラー膜を媒体材料とする次世代磁気記録技術の実用化が目前に迫っており、本研究で得られる成果は速やかに実用化が期待される。永久磁石分野においても、電動自動車時代の本格化を控えて希土類元素受給のひっ迫度が深刻化しているため、 RFe_{12} 系希土類磁石に対して非常に大きな期待度は非常に高いものとなっている。本研究終了後は、磁石メーカーと協業しながらバルク磁石の開発フェーズへと移行する。



責任者 佐原 亮二 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点
 中核研究者： 計算構造材料設計グループ グループリーダー



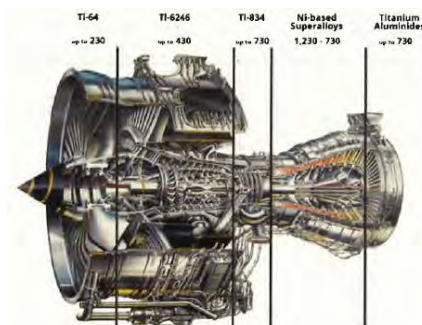
中核研究者： 成島 尚之 東北大学 工学研究科 材料システム工学専攻 教授

研究計画の強み

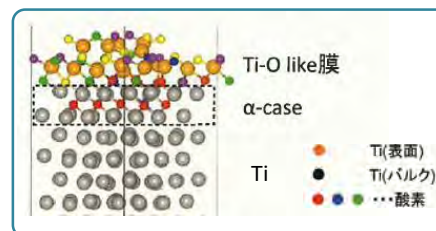
高温酸化・耐熱材料(成島グループ)、第一原理計算(佐原グループ)とそれぞれ実績のあるグループ間の綿密な連携により、酸化機構・耐熱材料・計算手法の観点からの検討を融合させることで、高温酸化反応プロセス分野の深化と材料設計が期待できる。

両機関が協力することで期待される成果

- (1) 耐酸化性向上因子(外部条件、酸化生成物や材料、界面や材料組織の情報)を分析することで、耐熱材料開発の有効な指針を得て、それを基にした材料設計の効率化が図れる。
- (2) 高温反応を含めたプロセスシミュレーション分野への幅広い展開が期待される。



Courtesy: Mercedes-AMG GmbH



研究期間終了後の発展・展開計画

- (1) 環境問題の解決に向け、長寿命化、軽量化、より高温での使用を目的とした耐熱材料設計の効率化を図る。
- (2) 環境やバイオ分野への応用を念頭に、TiO₂の欠陥構造の検討を通して、TiO₂の光触媒活性に関連した特性(バンドギャップ予測など)のシミュレーションへフィードバックを行う。



東北大学

【継続】 NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー

研究テーマ：構造材料の水素脆化とその抑制



責任者 秋山英二
中核研究者： 東北大学金属材料研究所 耐環境材料学研究部門 教授

中核研究者： 廣本祥子
物質・材料研究機構 構造材料研究拠点 グループリーダー



研究計画の強み

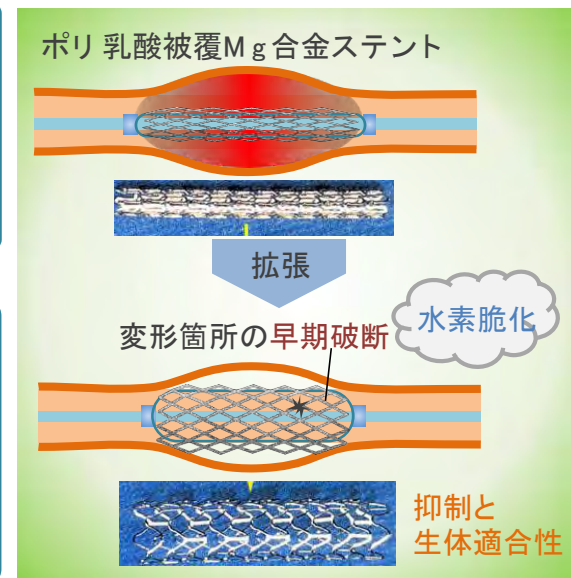
東北大では鉄鋼材料を主とする金属材料の水素脆化の機構解明に必要な測定・解析技術と知見、評価法などの蓄積があり、一方NIMSには生体用Mg合金をはじめとする金属材料の腐食挙動および腐食を制御する表面被覆の技術がある。これらの相補的な融合が、水素脆化の理解とその抑制の駆動力となる。

両機関が協力することで期待される成果

東北大の金属組織中の水素の効果からのアプローチと、NIMSの環境中の腐食による水素侵入のアプローチの両面を融合させて研究を推進することにより、生体内に埋入されたMg合金の水素脆化挙動および腐食による水素侵入の役割を理解し、急激な強度低下を抑制する表面の設計指針を得ることをはじめ、各種金属構造材料の水素脆化抑制の指針を得ることが期待できる。

研究期間終了後の発展・展開計画

1. 水素脆化抑制効果と生体内溶解性／吸収性を両立する、自己修復性を有するアパタイト・生分解性ポリマー複合被膜の創成による、医療用生体機能性材料の開発。
2. Mg合金、Al合金の水素脆化特性評価法の標準化。
3. 鉄鋼やAl合金に適用できる、耐水素脆化特性を改善するための水素侵入抑制被膜形成法・表面処理方法の創出。





東北大学

【継続】NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー

研究テーマ：AIと次世代放射光計測の融合による グリーン磁性材料の創発学理の構築



責任者 中村哲也 東北大学 多元物質科学研究所
中核研究者：放射光次世代計測科学連携研究部門 教授



中核研究者：Hossein Sepehri-Amin 物質・材料研究機構
磁性・スピントロニクス材料研究拠点 主幹研究員

研究計画の強み

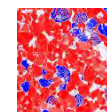
東北大学キャンパスに建設中の次世代放射光施設の活用を見据え、東北大学が先端放射光(SPring-8)の利活用により開発する新しい可視化技術と、NIMSの材料創製技術およびデータ科学駆動材料研究との戦略的融合

両機関が協力することで期待される成果

- 高性能永久磁石材料や磁気冷凍材料などグリーン磁性材料における磁気機能発現原理の放射光による解明と材料開発指針の構築
- 放射光解析による材料データベースの充実によるマテリアルインフォマティクス支援
- 次世代放射光におけるAIスマート計測技術の確立



構造モデリングと機能シミュレーション



放射光による物質機能可視化



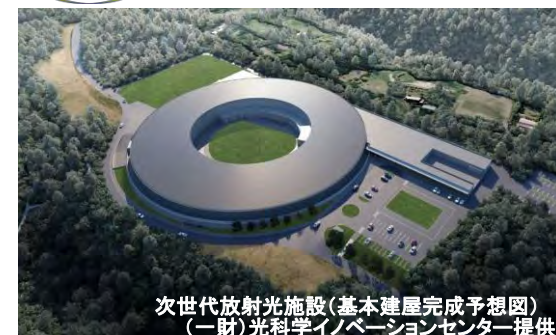
物質・材料創製



材料創製、計測等の課題を共有

研究期間終了後の発展・展開計画

- グリーン磁性材料の機能発現機構の学理に基づく新材料創製開始
- 次世代放射光施設におけるAIスマート計測技術の基盤整備
- 次世代放射光を核としたNIMSと東北大の包括的連携研究への発展



次世代放射光施設(基本建屋完成予想図)
(一財)光科学イノベーションセンター提供



東北大学

【継続】 NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー

研究テーマ：**2D量子材料の機能創発のための電気化学分析と素子化**



責任者 熊谷明哉 東北大学 材料科学高等研究所 (WPI-AIMR)
中核研究者: 准教授 (卓越研究員)

中核研究者: 塚越一仁 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス (WPI-MANA) MANA主任研究者



研究計画の強み

両研究者の特徴的な研究技術: ナノ電気化学分析技術 (熊谷グループ) と 2D量子材料素子化技術 (塚越グループ) を融合させ、2D量子材料の機能性創発を導き出す研究環境を構築させる。

東北大学が得る強み:

- 電子・イオンのナノスケール制御の高精度化
- 量子材料の欠陥密度や端面効果の観測・評価
- ナノスケール電気化学分析技術の新規応用領域の開拓

NIMSが得る強み:

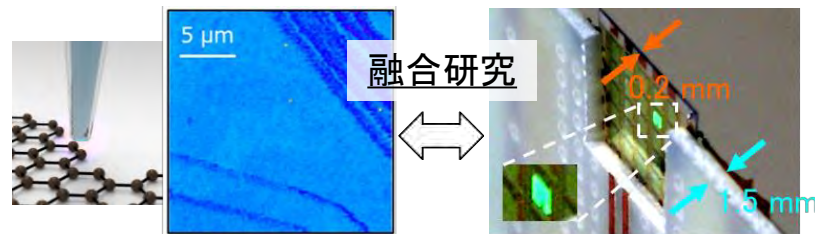
- 2D量子材料の開発と基礎特性評価
- 材料機能化 (光応答、エネルギー変換) への展開
- 2D量子材料の機能強化

両機関が協力することで期待される成果

低次元量子材料による量子化を新たな視点で最大限に引き出す要因を各原子・ナノスケール領域・構造で高度分析を行うものであり、独創性と新規性の高い量子材料の太陽電池やエネルギー分野への応用研究が期待される。

研究期間終了後の発展・展開計画

- 光応答性制御やエネルギー変換・創出・蓄電への応用展開
- ナノ電気化学分析を基盤とする革新的な材料設計の確立
- 低次元量子材料を起点とした大型プロジェクト申請や共創的研究が可能な国際先端研究拠点の構築



ナノ電気化学分析技術

材料素子化技術

2D量子材料の特異機能性の創発

材料科学の発展が自発的に起こる研究環境の構築

人材派遣・技術共有・知見共有
人材の流れを意識した国際ネットワーク