



東北大学

【R6採択】NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー
 研究テーマ：時分割スピニメージング計測とデータ同化解析による
 機能因子の可視化



責任者 山崎裕一 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター
 中核研究者：放射光イメージングチーム・チームリーダー



中核研究者：野村光 東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター
 准教授

研究計画の強み

NIMS 次世代放射光による高時空間分解能のスピンドイナミクス顕微鏡

TOHOKU スピンドイナミクスを高速計算するオリジナルスピシミュレータ

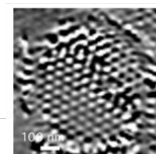
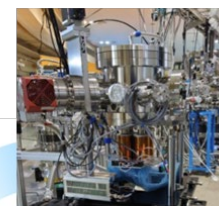
両機関が協力することで期待される成果

スピンの構造を高い時間と空間の分解能で可視化するためには、計測装置の高度化だけでは計測限界に近い。放射光計測データとスピシミュレーションと統合するデータ同化解析を構築することで、計測限界の突破を目指す。さらに計測だけでは直接可視化できない機能決定因子の情報を抽出し可視化する解析技術が期待される。

研究期間終了後の発展・展開計画

本研究ではスピントロニクス材料をベースとして放射光計測データとシミュレーションを統合するデータ同化技術を開発するが、本計測・解析統合のフレームワークは、他の物質・材料研究にも展開できる。電子材料や量子材料など様々な材料研究へと展開していく。

高時空間分解能
軟X線顕微鏡



磁気スキルミオン



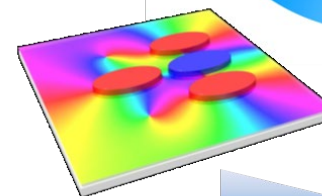
NanoTerasu

機能可視化



高時空間分解能
磁気イメージング

スピンAIデバイス



高速スピシミュレータ
データ同化解析

先端計測とシミュレーションを高度に融合した
材料研究を加速する放射光DX計測・解析システム構築



東北大学

【R6採択】NIMS-TOHOKU戦略的共同研究パートナー 研究テーマ：先端オペランド計測とデータ科学の融合による材料創成 コア基盤の構築



責任者

中核研究者：志賀元紀 東北大学未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授

中核研究者：矢治 光一郎 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター
・グループリーダー



研究計画の強み

最先端の「計測技術」と「データ科学」の融合による技術開発

- 高分解能かつマルチモーダルなオペランド計測
- 高度な情報抽出、自動かつ定量的な評価法
- AI(人工知能)の援用に基づく計測の高効率化

両機関が協力することで期待される成果

NanoTerasuにおいて、

- 高分解能ARPESのハイスループット計測・解析技術の構築
- 材料特性に関する機能電子の可視化を通じた物性の理解
- 次世代材料の動作環境下での機能評価

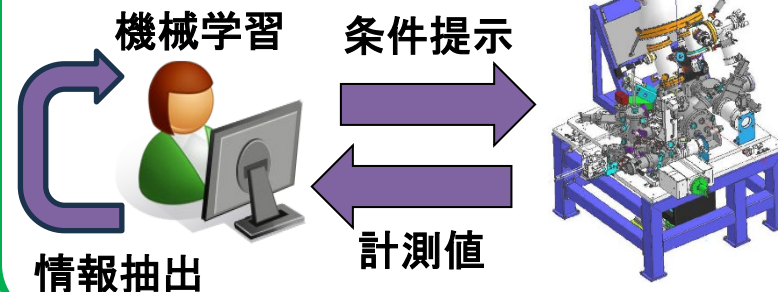
研究期間終了後の発展・展開計画

- 動作環境下において、
量子・半導体・スピントロニクス材料の定量評価
→次世代材料の設計・探索に貢献
- 計測技術・解析ソフトウェアをNanoTerasuユーザー等と共有
→幅広い研究者・開発者の材料開発の促進

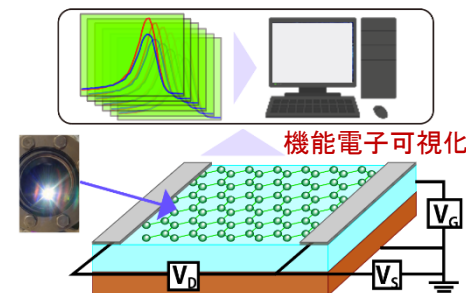


NanoTerasu (BL07U) にて開発・実装

AI-ARPES



オペランド計測による機能電子の可視化



機能発現の
起源を解明

デバイス試料の
オペランド
計測



東北大学

【R3採択】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 構造材料研究センター・グループリーダー



研究計画の強み

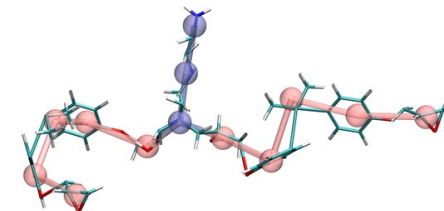
複合材料研究において、東北大学はマルチスケールモデリングに基づくデータ駆動・計算科学に、NIMSには新素材開発、実験的評価に強みがある。両機関が連携することで、今後期待がかかる多成分系ポリマー複合材料を対象とする研究・開発においてデジタルツインが形成され、国際的にリーディングな地位を構築できる。

■ 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

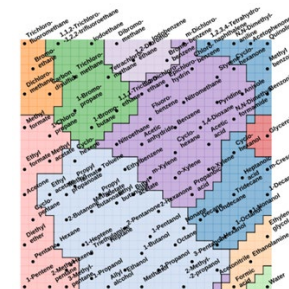
1. ネットワークポリマーアロイにおける構造形成メカニズム解明
2. 計算科学・実験計測を併用したネットワークポリマーアロイの特性評価
3. データ駆動科学・先端計測を用いた複合材料内部構造と物性・特性の体系的理解
4. マルチスケールモデリングによる複合材料特性の評価と発現機構の解明



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

【R3採択】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
高分子・バイオ材料研究センター・センター長



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。

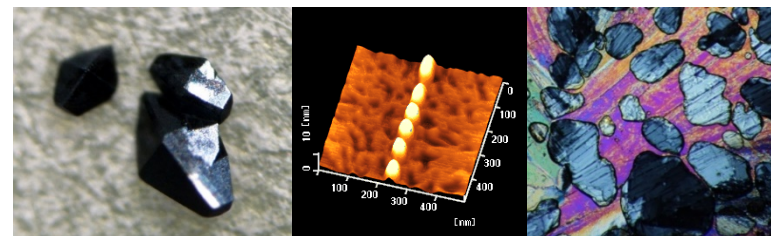
両機関が協力することで期待される成果

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形成ができる。

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



東北大学

【R2採択】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 構造材料研究センター・グループリーダー



研究計画の強み

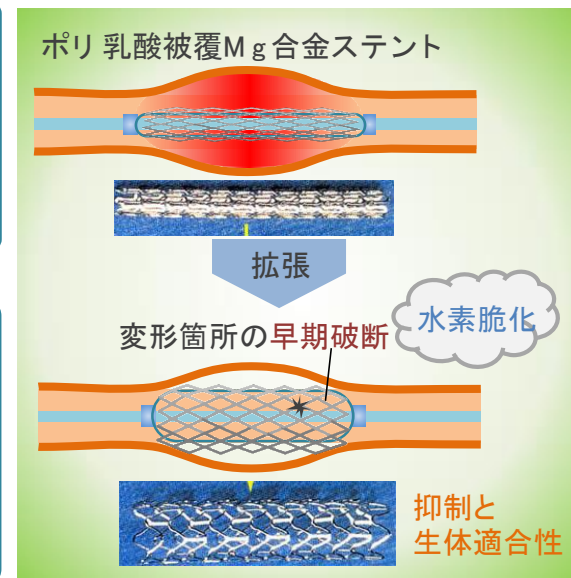
東北大では鉄鋼材料を主とする金属材料の水素脆化の機構解明に必要な測定・解析技術と知見、評価法などの蓄積があり、一方NIMSには生体用Mg合金をはじめとする金属材料の腐食挙動および腐食を制御する表面被覆の技術がある。これらの相補的な融合が、水素脆化の理解とその抑制の駆動力となる。

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

【R2採択】 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 東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター
中核研究者： 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センター・グループリーダー



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SPring-8の先端放射光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

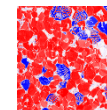
- 高性能永久磁石材料や磁気冷凍材料などグリーン磁性材料における磁気機能発現原理の放射光による解明と材料開発指針の構築。
- 放射光解析による材料データベースの充実によるマテリアルインフォマティクス支援。
- 次世代放射光におけるAIスマート計測技術の確立

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



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



東北大
グループ

材料創製、計測等の課題を共有



3GeV高輝度放射光施設NanoTerasu