

## 平成30年度 部局自己評価報告書 (35 : 材料科学高等研究所)

**II 特筆すべき取組 / 全学の第3期中期目標・中期計画への取組**

【平成28年度取組】

**1. 「WPIプログラム基準の完全な達成」(中期計画 No. 30 : 世界最高水準の最先端研究機構群の設置)**

AIMR は平成19年度の設立以来、世界トップレベル研究を実践し国際的頭脳循環ハブとなる研究拠点を目指し研究所全体をあげて取り組んできた。

特に WPI 拠点としてのミッションである①世界トップレベルのサイエンス、②学際的融合研究による新学術領域の創出、③国際化、④システム改革の4つのミッションへの取り組みについて心血をそそぎ、この努力の結果、世界トップレベル研究拠点プログラム委員会(委員長:野依良治科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター長・ノーベル化学賞(2001))による最終評価(H28実施)では、「AIMRは非常に高いWPIプログラム基準を完全に達成し、傑出した世界の先導的研究所となった。世界に認められているその活動によって、AIMRは材料科学の先端的な研究センターとなった。」と評価された。特に「完全に達成し」との記述は他のWPIセンターの評価には見られないものであり、WPIセンターの中でも特段高い評価を受けた事は、AIMRが本学の研究力強化を牽引してきた高い実績を裏付けるものであるとともに、本学が目指す「卓越した教育研究大学への躍進」に向け、今後とも世界トップレベル研究の推進において重要な役割を果たす高いポテンシャルを有していることを示すものである。

**2. 「AIMRの持続的発展に向けての体制構築」(中期計画 No. 20 : 世界トップレベル研究の推進)**

新たな主任研究者として、学外クロスアポイントメントにより平成28年4月からChris Picard教授(ケンブリッジ大学 計算分光学、材料構造予測(理論))、学内クロスアポイントメントにより理学研究科から福村知昭教授(固体化学、電子材料)、山下正廣教授(錯体化学、分子磁石)が着任した。

AIMRのテニユア教員としては岡山大学から水藤寛教授(数理モデリング、数値シミュレーション)、医工学研究科から平野愛弓教授(生体電子工学、ナノバイオテクノロジー、バイオセンサー)、テニユアトラック教員としては多元物質科学研究所から藪浩准教授(自己組織化によるナノ構造創製)を平成28年4月から採用した。

以上、学内外との連携により主任研究者等を配置し、WPI補助金終了後におけるAIMRの持続的発展を見据えた体制を構築することができた。

**3. 「数学-材料科学連携の領域の創出」(中期計画 No. 21 : 国際的ネットワークの構築による国際共同研究等の推進)**

前記のWPI拠点としてのミッション②の学際的融合研究による新学術領域の創出の柱として「数学-材料科学連携」を掲げ、世界に先駆けた学際融合領域の創出に邁進している。

その成果として、AIMRが主導する数学-材料科学連携のモノグラフシリーズ SpringerBriefs in the Mathematics of Materials (Editor-in-chief: M. Kotani)の第2巻 “Structural Analysis of Metallic Glasses with Computational Homology” (A. Hirata et al.)が刊行された。

このシリーズは、数学-材料科学の教科書として世界有数の国際学術出版社であるSpringer社(現Springer Nature)から発刊の提案があり、このことは数学-材料科学の学術分野が国際的に認知されていることを示している。

また、Nature Communications(1編)やProceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America(2編)に論文が掲載されるなど、確実にその評価が高まっている。

加えて、高い被引用数を維持する日本発の材料科学ジャーナル Science and Technology of

Advanced Materials (STAM)に掲載された Vision 論文 (招待) “Materials inspired by mathematics” (M.Kotani and S.Ikeda)は、ダウンロード回数は (平成 30 年 8 月) 2191 回である。

#### 4. 「数学－材料科学連携の応用研究への展開」(中期計画 No. 22 : 経済・社会的課題に応える戦略的研究の推進)

WPI プログラムで得たトップレベルの成果を社会に還元するため、産業技術総合研究所 (AIST)の運営資金により、AIST と東北大学とのジョイント研究センターであるオープンイノベーションラボラトリー (MathAM-OIL)を所内に設置した。

これまで主として基礎研究を担ってきた 2 名の主要な AIMR 准教授 (材料科学者及び数学者)を AIST とのクロスアポイントメント (AIST7:東北大 3 の負担)とし、橋渡し研究にも参画させた。

MathAM-OIL は、専任及びクロスアポイントメントの研究者のほか、AIMR 機構長 (現所長)その他の AIMR 教員、東北大学理学研究科及び情報科学研究科教員、AIST 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター研究員で構成され、数学 - 材料科学連携を基礎研究から応用研究に展開し、経済・社会的課題に応える研究体制を構築することができた。

#### 5. 「マテリアルズインフォマティクスを通じた研究の推進」(中期計画 No. 23 : イノベーション創出を實踐する研究の推進)

内閣府総合科学技術・イノベーション会議 (CSTI) が、科学技術イノベーションを実現するために創設した戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 「革新的構造材料」の「マテリアルズインテグレーション領域」(平成 27 年 10 月から研究開始)において AIMR は「数学的視点を提供できる唯一の組織」として数学－材料科学連携の進展に寄与している。

この取組の有効性が高く評価され AIMR の教員がリーダーを務める研究ユニットの予算が平成 30 年度に倍増された。

このほかマテリアルインフォマティクスを通じ、以下の事業などに貢献している。

- ・ JST 情報統合 JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型 物質・材料開発イニシアティブ」トポロジカルデータ解析グループ (平成 27 年 10 月開始。AIMR は平成 28 年度から参画)
- ・ JST さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」(平成 27 年度開始, 平成 28 年 AIMR から 2 名採択、平成 29 年 1 名採択)

## 【平成 29 年度取組】

**1. 「永続部局としての AIMR の持続的発展」(中期計画 No. 30 : 世界最高水準の最先端研究機構群の設置)**

平成 28 年度に、10 年間の WPI 補助金による支援が終了したが、競争的資金等の多様な財源確保に努めた結果、PI 数や外国人比率約 40%を維持するなど、世界トップレベル研究拠点として持続的に発展している。

このことにより、WPI 補助金の採択、評価を行っている WPI プログラム委員会により世界トップレベル研究拠点に相応しい水準にある拠点として「WPI Academy」に認定(平成 29 年 5 月)された。

## ① 数学—材料科学連携による学際融合領域の創出

前述の数学—材料科学連携モノグラフシリーズ SpringerBriefs in the Mathematics of Materials 第 3 巻「Bayesian Optimization for Materials Science」(Daniel Packwood 著元 AIMR、現京都大学 WPI-iCeMS 講師)が発刊された。

数学—材料科学連携の具体的な成果例としては、平岡裕章教授らが、オーストラリア国立大学のモハメド・サーダットファー博士との共同研究により、数学的手法を開発し、粉体の結晶化過程における新たな構造記述を発見することに成功し、Nature Communications オンライン速報版に掲載された。

## ② 応用面での具体的成果(熱電変換効率の飛躍的向上)

応用面での具体的成果例として、NEC と齊藤英治教授らの研究グループが、新しい熱電変換技術であるスピン流を用いた熱電変換デバイスの開発に、NEC が開発した“AI によって未知の材料の特性予測を行う新技術”を適用し、約 1 年で熱電変換効率を 100 倍に向上させた(平成 30 年 3 月)。(参考：[https://jpn.nec.com/press/201802/20180209\\_04.html](https://jpn.nec.com/press/201802/20180209_04.html))

## ③ 数学—材料科学連携の新たなフェーズ(次世代物質探索のための離散幾何学)

数学—材料科学連携の次のフェーズとして、数学、物質・材料科学の枠に収まらない融合領域の創成を目指した「次世代物質探索のための離散幾何学」(平成 29-33 年度(代表：小谷元子))が新学術領域研究(研究領域提型)に採択された。

**2. 「材料科学研究拠点の推進」(中期計画 No. 20 : 世界トップレベル研究の推進)**

指定国立大学法人の指定に当たり材料科学研究拠点として掲げた具体的な構想である「数理科学—マイクロ物質探求—マクロ材料創製—社会実装」を一気通貫で実現するため、材料科学関連部局で協力し、本学の材料科学分野の俯瞰図を作成した上で、5 つの研究プロジェクト(エネルギー材料、エレクトロニクス材料、バイオマテリアル、組織制御材料、高強度材料)及び 4 つの横串のプロジェクト(数理科学・計算、計測・評価、プロセス、人材育成)を設定した。

この上で国際公募により選考を行い、高い競争倍率(17.4 倍)を経て若手研究者 5 名(各研究プロジェクトに助教 1 名)を採用することを決定し、研究体制を構築した。

グローバルアライアンスの強化に向けて平成 30 年 2 月には、材料科学研究拠点、スピントロニクス研究拠点合同の Kick-off Symposium を開催し、基調講演に David Awschalom 教授(シカゴ大)、Alfio Quarteroni 教授(ミラノ大、スイス連邦工科大学ローザンヌ校(EPFL))、鶴丸哲哉氏(ルネサスエレクトロニクス)、佐川真人氏(ネオジム磁石の発明者)を迎えた中、国内外から総勢 373 名の研究者の参加を得た。

**3. 「海外 PI によるラボの構築」(中期計画 No. 21 : 国際的ネットワークの構築による国際共同研究等の推進)**

Purdue 大学の Yong Chen 教授を国際公募により選考の上、平成 29 年 4 月より同大学と AIMR

とのクロスアポイントメントによる海外 PI（主任研究者）として採用し、新たなラボを構築した。

併せて同人の国際ネットワークを生かし、ハーバード大学のポスドクを同研究室の助教として採用した（平成 30 年 3 月）。

また、同教授を平成 29 年 10 月から AIMR に雇用した准教授（文部科学省卓越研究員事業に採択）のメンター充てることにより、次世代の若手研究者を中心として国際共同研究を推進する環境を構築した。

#### 4. 「世界トップレベル研究の推進」（中期計画 No. 21 : 国際的ネットワークの構築による国際共同研究等の推進）

ソフトマテリアルグループの Kosmas Prassides 教授が、平成 30 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰（科学技術賞）を受賞した。同賞は外国籍の教員の受賞は少ないが、AIMR では、平成 28 年度にも外国籍の陳明偉教授が同賞を受けている。なお、平成 29 年度の齋藤英治教授の受賞と合わせて、AIMR としては 3 年連続の受賞である。

また、Kosmas Prassides 教授は、リバプール大学等との共同研究により「ありふれた炭化水素から特異な磁気状態「スピン液体」を発現」し、Nature Chemistry に連続する 2 つの論文として掲載された（平成 29 年 4 月）。同じ研究グループによる成果が 2 報連続して掲載されることはきわめて珍しい。

#### 5. 「国際水準の大学・研究機関等との学術ネットワークの充実」（中期計画 No. 21 : 国際的ネットワークの構築による国際共同研究等の推進）

理化学研究所との 5 年間の共同研究契約により「数理」を軸とする分野横断的手法による、物質・生命・宇宙の解明や社会における基本問題の解決を図ることを目的とする数理創造プログラム（iTHEMS）の連携ラボが AIMR に設置された。同ラボには、理化学研究所の予算で研究員 1 名を雇用している。

iTHEMS は京都大学及び UC バークレー物理学科にも連携ラボを置いており、AIMR はその一翼を担っている。