

# 【新学術領域研究（研究領域提案型）】

## 理工系



### 研究領域名 ナノ構造情報のフロンティア開拓—材料科学の新展開

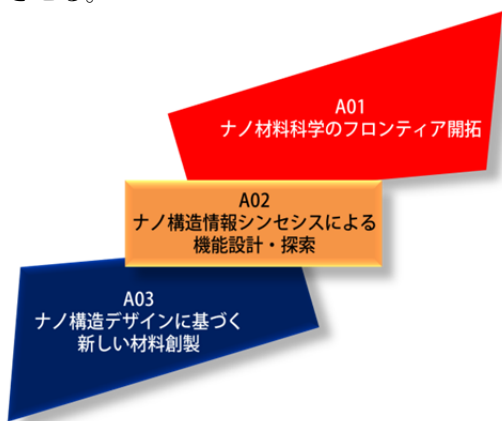
京都大学・大学院工学研究科・教授 田中 功

#### 【本領域の目的】

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。そして、材料科学、応用物理、固体化学、触媒化学など様々な分野の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。

#### 【本領域の内容】

本領域は、次の2つの研究戦略に基づく。  
①ナノ材料科学の未踏フロンティアを世界最高水準で開拓する。そのために、ナノビルトイン実験、ナノ計測実験と高精度第一原理計算を密接に連携させた研究を進め、これまで未知であったナノ構造情報を系統的に獲得する。  
②獲得される新たなナノ構造情報を、具体的な材料設計・創出に活かすべく、情報の統合化を、理論計算と実験の連携によって進め、この手法の有用性を実証するとともに、新しい学術領域として確立させる。



領域研究の骨子

本領域の研究項目および計画研究を以下に示す。とくに実験と理論計算の研究者が一体となって活動できるよう工夫し、各計画研究班長が実験と理論の融合研究に責任を持つ体制を構築した。これに領域全体を統括する総括班と公募研究を加えた体制により、有機的な連携研究を推進する。

#### A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓

- (ア) ナノ構造解析のフロンティア開拓
- (イ) ナノ機能元素解析のフロンティア開拓
- (ウ) ナノ電子状態解析のフロンティア開拓

#### A02 ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索

- (エ) ナノ構造情報に基づいた機能探索
- (オ) 高圧・高温プロセスを利用した新しい構造—機能関連の探求

- (カ) 原子層制御による新しい材料機能探索

#### A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製

- (キ) 耐環境性セラミックス材料のナノ構造制御と材料創製
- (ク) ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオンクス材料の創出
- (ケ) 規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出

本領域研究によりナノ材料科学を深化させ、その応用の方途を確立し、各研究者が専門分野の境界を超えて共同研究できる共通概念・基盤を創出する。そしてこれを継承する若手人材を育成するとともに、学会活動などを通して、国内・外の多くの研究者と学問的基盤を共有できる仕組みを作る。

#### 【期待される成果と意義】

科学の進歩と技術の進歩は、ニーズとシーズが糾える縄のごとく一体となって進んできた。現代社会は、エネルギー問題、安心・安全の確保、環境保全、情報通信などの各分野において、革新的な材料開発の新しい概念や発展が待望されている状況にある。本領域で構築を目指すナノ構造情報に立脚した新材料・機能の創出という潮流が定着すれば、材料科学が材料技術に対して多くのシーズを提供できることになり、格段の進歩を産み出すと期待される。

#### 【キーワード】

ナノ構造情報：材料のナノ構造と機能の関連性についての定量的知見

#### 【研究期間と研究経費】

平成25年度—29年度  
1,028,300千円