

ソフトマテリアル研究拠点

設立の趣旨

令和3年4月1日（木）

共同代表 東北大学教授 寺内正己

東北大学教授 陣内浩司

【本研究拠点の活動目的】

材料科学の分野において、AI技術、ビッグデータ解析の応用により、材料の計測・分析データを用いて開発期間の短縮、低コスト化を目指す「データ駆動型材料開発」の取組が世界各国で加速されている。本研究拠点では、ナノからバイオまでのソフトマテリアル分野におけるデータ駆動型材料開発を、クライオ電子顕微鏡を含む電子線解析を中核に、次世代放射光とも連携するマルチモーダルな計測技術と、マルチスケールでの計算科学を高次元で融合することにより革新的に躍進させ、ソフトマテリアルの新たな設計・解析ソリューションを社会に展開することを目指す。

【本研究拠点の特徴】 “マルチモーダル計測とマルチスケール計算の融合”

東北大学は、電子顕微鏡では長い伝統を持ち、これが世界に冠たる金属材料をはじめとするマテリアル研究を支えてきた。金属材料や無機材料では、構造の最小単位となる結晶構造や電子状態のデータを従来の電子顕微鏡・放射光による計測と計算の融合によって明らかにし、AI・データ科学を駆使して材料構造の改変による機能・物性の改良をシステマティックに予測するデータ駆動型の材料開発アプローチが容易であった。一方、ソフトマテリアルは、構造単位が大きく明確な秩序性を持たないので、「階層」に合わせたマルチモーダルな計測・解析とマルチスケールでの計算の融合が必須となるので、データ駆動型アプローチが容易ではない。具体的には、ソフトマテリアルにおいては、相分離・結晶化・無機充填剤の凝集・ネットワーク形成、などの自己組織化現象が起こり、高分子鎖の形態に応じたメゾ・マクロ的な階層性が現れる。それに加え、電子状態に起因する化学反応があらゆる個所にミクロな現象として発生しうる。こういった複雑な階層構造が材料としてのマクロな性質を決めている。すなわち、ソフトマテリアルには、マルチスケールに対応したマルチフィジックな計算科学が強く求められ、これらとマルチモーダルな先端計測科学を高度に融合させることが肝要となる。つまり、計測により得られる事実に対して、計算はモデル化を通じて現象への解釈を与える一方、計算モデルで説明出来ない現象の解明に、計測と理論が一緒になって取り組む時にブレイクスルーが生じうる。生命体ソフトマターは、動的に構造を変化させる蛋白質、細胞、組織から成り立つため、ここでも計測と計算の協奏はより一層重要になっ

てゆく。

本研究拠点は、マテリアルサイエンス分野のみならず、生命科学の基礎研究、医療・創薬、感染症への対応やバイオテクノロジー等のライフサイエンス分野にわたる広範なソフトマテリアルに対して、計測科学と計算科学とが綿密に連携を取りながら、理論・計算・メカニズム解明までをトータルに扱う初めての研究拠点である。

【クライオ電子顕微鏡の特徴と次世代放射光との連携】

本研究拠点では、高い分解能を持つクライオ電子顕微鏡を新たに導入し、高輝度・高コヒーレンスな次世代放射光との連携を含むソフトマテリアル計測のマルチモーダル化を推進する。クライオ電子顕微鏡は、(1) 生体環境に近い状態の水和サンプルを測定できる、(2) 巨大なタンパク質や複合体が解析できる、(3) 構造の議論に十分な数Åの分解能を有する、(4) 極低温測定によって電子線によるダメージから生体分子を保護できる、(5) サンプルの結晶化処理が不要、そのための均質なサンプル調製の必要が無い、(6) 必要なサンプル量が少なくて済む、(7) 様々な配座・フレキシブルな領域を解析できる、などの優れた特徴を有する。ゆえに、バイオ生体材料を含む、広範なソフトマテリアル分析が可能であり、次世代放射光等と連携したマルチモーダルな解析から、計算科学シミュレーションとのデータ同化を行い、AI、ビッグデータ解析による網羅的材料探索をスマート化し、ソフトマテリアルのデータ駆動型材料開発における様々な課題の解決が可能となる。

本拠点では、ソフトマテリアルの研究開発について、計測分析科学と計算科学の融合を掲げ産学連携により進める。更には、産学のラボとクライオ電子顕微鏡、次世代放射光施設などの共用研究基盤をサイバー空間で結ぶソフトマテリアル計測・計算プラットフォームの構築と共用化を目指してゆく。

現在、世界中の主要な放射光施設で、クライオ電子顕微鏡の設置が盛んにおこなわれているが、どれも創薬研究を中心としたもので、本研究拠点のように、マテリアルサイエンスのみならずライフサイエンスを対象とし、マルチモーダル計測とマルチスケール計算を融合した研究拠点は世界に例がない。

【ソフトマテリアル研究拠点の構成】

本研究拠点では、マテリアルサイエンスとライフサイエンスの双方のソフトマターを対象に、それぞれ計測技術と計算技術の研究者からなる4つの活動グループを編成して、ソフトマテリアルのデータ駆動型材料開発のプラットフォーム構築とソリューション開発を行う。

共同代表：東北大学 多元物質科学研究所
(研究所長)

教授 寺内正己

共同代表：東北大学多元物質科学研究所

教授 陣内浩司

(計測・計算融合)

副代表：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長

(次世代放射光連携)

教授 村松淳司

副代表：東北大学 工学研究科 航空工学専攻

教授 岡部朋永

(社会連携)

研究グループ：

1) マテリアルサイエンス計測分野

PI：東北大学多元物質科学研究所

教授 陣内浩司

東北大学多元物質科学研究所

教授 寺内正己

東北大学多元物質科学研究所

教授 百生 敦

東北大学金属材料研究所

教授 津田健治

東北大学多元物質科学研究所

教授 蟹江澄志

東北大学多元物質科学研究所

准教授 佐藤庸平

東北大学工学研究科

准教授 白須圭一

東北大学多元物質科学研究所

助教 宮田智衆

2) ライフサイエンス計測分野

PI：理化学研究所グループディレクター

東北大学多元物質科学研究所共同研究部門

教授 米倉功治

東北大学多元物質科学研究所

教授 和田健彦

東北大学農学研究科

教授 原田昌彦

東北大学医学研究科

教授 権田幸祐

3) マテリアルサイエンス計算分野

PI：東北大学理学研究科

教授 川勝年洋

東北大学情報科学研究科

教授 小林広明

東北大学理学研究科

准教授 岸本直樹

東北大学工学研究科

准教授 山川優樹

東北大学サイバーサイエンスセンター

准教授 小松一彦

東北大学工学研究科

助教 川越吉晃

東北大学理学研究科

助教 村島隆浩

産業技術総合研究所

研究チーム長 森田裕史

産業技術総合研究所

統括研究主幹 青柳岳司

4) ライフサイエンス計算分野

PI：東北大学工学研究科

教授 石川拓司

東北大学工学研究科

教授 梅津光央

東北大学流体科学研究所

准教授 菊川豪太

東北大学工学研究科

助教 吉留 崇

5) 社会連携推進分野

PI：東北大学工学研究科

教授 岡部朋永

東北大学多元物質科学研究所

特任教授 竹井晴彦

東北大学オープンイノベーション推進機構

特任教授 松尾良夫

東北大学産学連携先端材料研究開発センター

特任教授 吉田栄吉

主幹部局：東北大学多元物質科学研究所