

ソフトマテリアル研究拠点の設立にあたって



寺内 正己 教授
東北大学多元物質科学研究所長
ソフトマテリアル研究拠点代表

ソフトマテリアル研究拠点は、ソフトマテリアルの社会実装の加速・拡大に資するため、東北大学の研究者と企業との産学連携拠点を2020年8月に設立しました。その後の企業との意見交換に基づき、計測科学と計算科学の融合をはかり企業ニーズに応えるワンストップソリューションの提供を目指す体制に拡大しました。

計測科学においては、最新鋭のソフトマテリアル電子顕微鏡や分光分析技術に加え、クライオ電子顕微鏡の導入により計測インフラの拡充を図るとともに、建設が進んでいる次世代放射光施設との連携を視野に、マルチモーダルな計測ネットワークを構築し提供します。

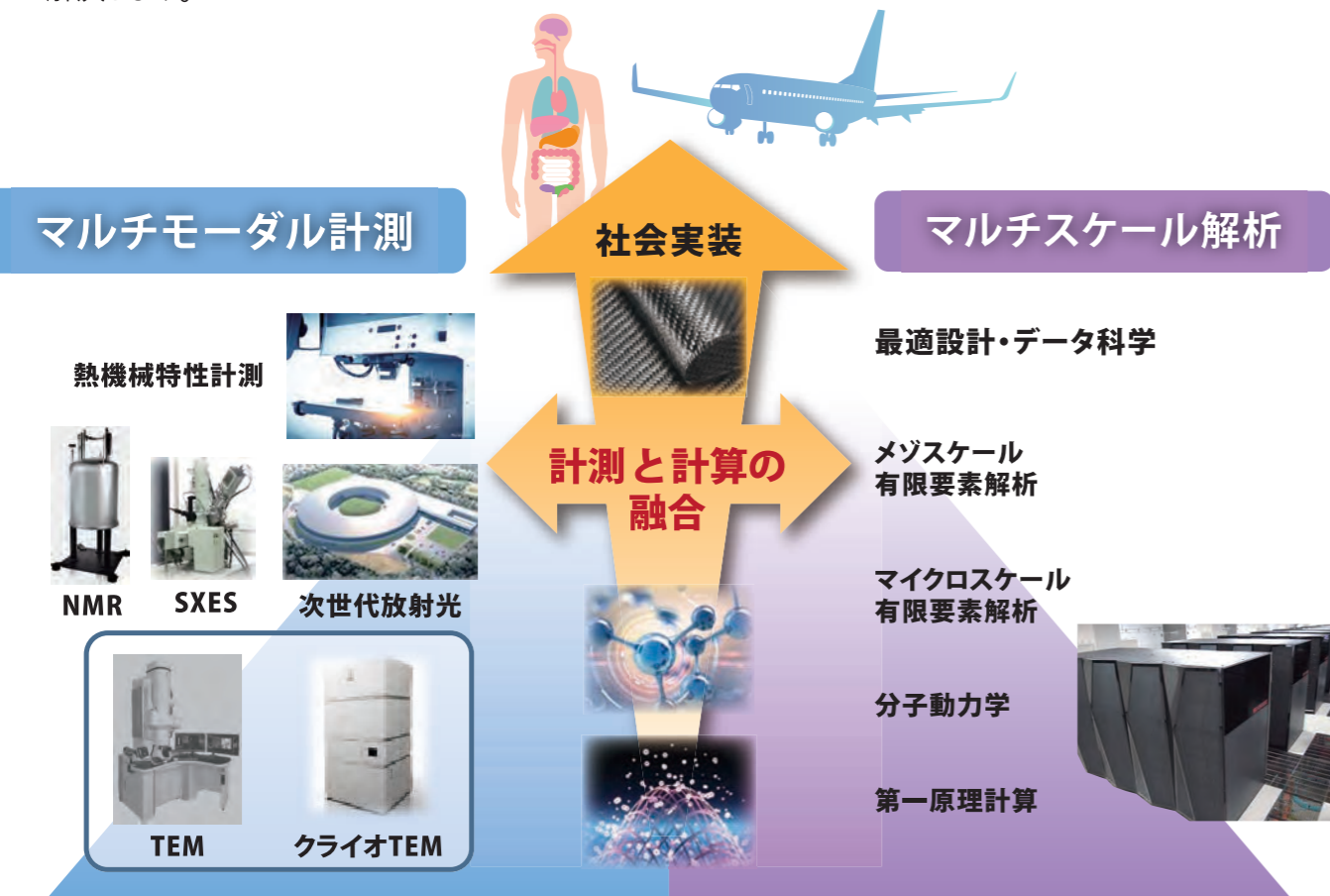
また、得られた計測データに基づき、AI技術、シミュレーション技術を用いたソフトマテリアルの機能予測や分子単位から高次構造までのマルチスケールでの反応予測などを行い、企業と共同でソフトマテリアルの社会実装に向けた共創的な活動を目指します。

東北大学は電子顕微鏡を用いた材料科学の分野において、長い歴史と実績を有しています。これに加え、本拠点がマルチモーダル計測とマルチスケール計算の融合によりソフトマテリアル材料研究開発を革新的に躍進させ、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します。

ソフトマテリアルとしては、ポリマーからバイオまで、また、それらの複合材料までを含めて広く取り扱う予定です。ソフトマテリアル研究開発においてニーズをお持ちの企業様におかれましては、是非、本拠点との共創的な研究開発を御一考いただき、お問い合わせいただければと思います。よろしくお願いいたします。

ソフトマテリアルのワンストップ・ソリューション提供

ソフトマテリアルの原子・分子レベルの姿を、最先端の電子線解析を中心とするマルチモーダル計測と、マルチスケールでの計算科学を融合することで可視化し、ソフトマテリアルの諸課題をワンストップで解決します。



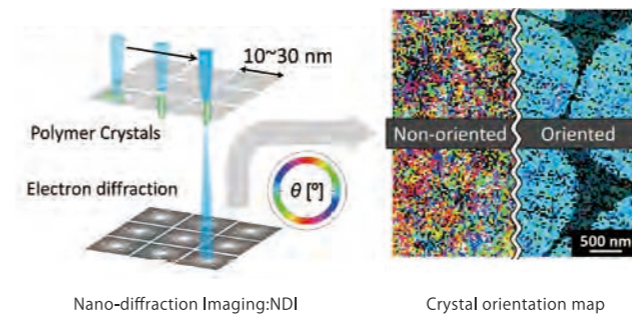
研究者紹介

先端電子顕微鏡によるソフトマテリアルの精密構造解析と物性研究



陣内 浩司 教授
東北大学
多元物質科学研究所

高分子は軽量性・柔軟性・加工性などに優れた物質であり、化学構造や分子配列の制御に加え、異種高分子や無機物質の混合などにより物性を制御することができます。私たちは最新の透過型電子顕微鏡技術を駆使することで、高分子の(自己組織化)構造、高分子結晶、ナノ粒子複合材料などの微細構造やダイナミクスを解明し、物性・機能との関係を明らかにすることを目指しています。

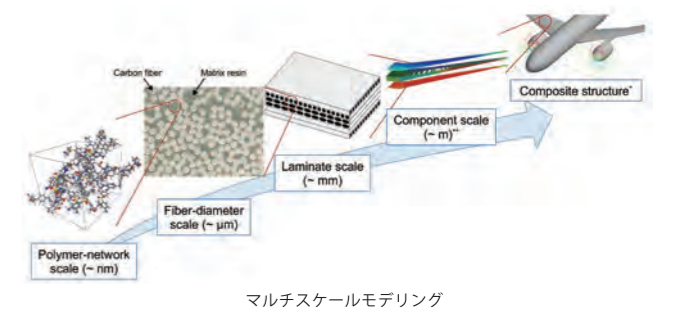


炭素繊維強化複合材料のマルチスケールモデリングとマテリアルインフォマティクスへの応用



岡部 朋永 教授
東北大学
大学院工学研究科
航宇宇宙工学専攻

計算機性能の向上に伴い、炭素繊維強化複合材料に関して、原子・分子スケールから最終製品までの階層構造を包括的に議論できるようになってきています。また、実験や計測によって測定された各種物性との定量的な比較も可能となってきており、それら階層構造を一括して議論するマルチスケールモデリング研究を推進するとともに、近年関心を集めているマテリアルインフォマティクスへの応用についても取り組んでいます。

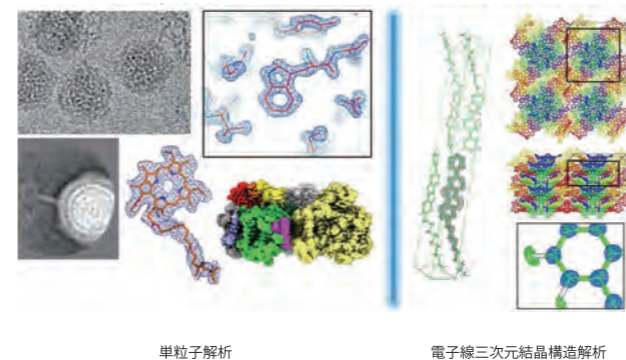


クライオ電子顕微鏡解析



米倉 功治 教授
東北大学
多元物質科学研究所

最先端のクライオ電子顕微鏡(EM)システムを運用、高度化し、分子像からの単粒子解析と微小結晶回折からの結晶解析により、生体超分子複合体、膜蛋白質、アミロイド繊維、薬剤候補物質、機能性材料分子など多岐にわたる試料の構造を高分解能かつ高精度で明らかにします。さらに、AIを利用した自動・遠隔測定や解析技術の開発を進めています。

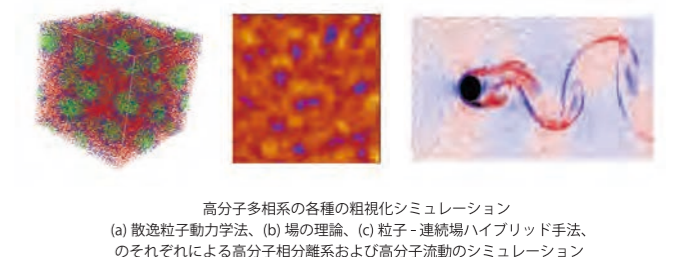


高分子多相系のマルチスケール粗視化シミュレーション



川勝 年洋 教授
東北大学
大学院理学研究科
物理学専攻

メゾスケール(1-100nm程度)での不均一構造を持つ高分子材料として、高分子の多相系やフィラーとの複合系が挙げられます。これらの系のマクロ物性や流動特性を予測するためには、メゾスケールの不均一構造の特徴をモデルに取り入れることが重要です。この目的のために、メゾスケールの粗視化シミュレーションを軸として、マイクロ-メソ-マクロの各階層でのシミュレーションモデルを有機的に結合させたマルチスケール・シミュレーション技術の開発を行っています。



高分子多相系の各種の粗視化シミュレーション
(a) 散逸粒子動力学法、(b) 場の理論、(c) 粒子-連続場ハイブリッド手法、のそれぞれによる高分子相分離および高分子流動のシミュレーション