

# CONVERGENCE



No.28 | March | 2021

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

International Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA)

Leader's Voice

青柳 克信

異分野・異専門融合は  
新しいアイデアを生み出す

FEATURE  
TOPIC

計算科学 × 材料科学

「イメージ」と「リアル」をつなぐ  
化学者の力

北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)

前田 理 拠点長 小野 ゆり子 特任助教

国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 (WPI-MANA)

中西 尚志 グループリーダー 中田 彩子 主任研究員



# 「イメージ」と「リアル」をつなぐ化学者の力

北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD) **Fe** 前田 理 拠点長  
 小野 ゆり子 特任助教  
 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 (WPI-MANA) 中西 尚志 グループリーダー  
 中田 彩子 主任研究員

ライター：清水 修 (Academic Groove)

## イメージから始まる、化学を通じた材料開発

一 材料開発において、研究者は思い描いた「イメージ」から実験や計算を繰り返して「リアル」に新しい材料を生み出していくのだと思います。まず、研究現場においてこれがどのようにして行われていくのかを、それぞれのお立場からご紹介いただけますか？

**中西**：今日は、お三方が計算化学者で私だけが実験化学者。ですから、「実験によってものをつくる材料科学（化学）者」としてどのようにリアルを作り出していくか、私の考えをお話します。そこには二つのアプローチがあります。ひとつは社会の要請に応える問題解決型のスタイル。今、必要な機能の材料を作り出していくこと。もうひとつは科学的な興味から材料を調べ開発する新物質探求型のスタイル。たとえば、グラフェンのような新しい物質が登場してきたら、その素性を知りたいという好奇心から始まる研究ですね。MANAは「ナノアーキテクトニクス（ナノ建築学）」という考え方を提唱していますが、分子、原子、その他のナノ物質を組み合わせることで問題を解決する機能を産み出すのは、まさにナノ建築学そのものですね。時には計算科学のサポートで予想を立てたイメージをリアルに実現していきます。

**前田**：私は、「理論化学の計算手法をつくる」ということを主として研究を進めています。今の中西先生のお話で言うならば、現在は問題解決型の研究が多いです。しかし、昔はとても基礎的な研究をやっていました。「化学反応の経路探索」をテーマに、見落としが絶対のない緻密な理論をつくることに注力していたのです。そういう理論はある程度、達成して、次に実験に展開するフェーズに入りました。実験で取り扱う対象に即したモデルを組み立てて計算するのですが、その際、近似をいくつか入れます。こういう近似を入れても大丈夫かな、ああいう近似を入れても大丈夫かな、という試行錯誤を繰り返しながら、イメージがリアルの再現となるようにするわけですね。

**中田**：私も計算科学が専門です。計算科学は「第三の科学」と言われることがあるのですが、第一の科学は実験科学です。これはまさにリアル。第二の科学は理論科学。運動方程式のような。これはイメージですね。そして、第三の科学と言われる計算科学は計算による「シミュレーション」です。これもイメージなのです。

ね。現実で起こっていることが非常に複雑で紙に鉛筆で数式を書いていっても解ききれない場合は、スーパーコンピュータなどを使ってシミュレーションをします。解明しようとしても厳密に解明しきれない時には前田先生がおっしゃったように、近似をたくさん入れます。分子の組み合わせとか、化学反応が起こる環境とか、考慮しなければならない要素、パラメータがとてもたくさんあるので、それらの要素をどうやって近似して、量子力学計算に取り入れていくかがイメージ作りの鍵になります。



前田 理  
Satoshi Maeda

北海道大学  
化学反応創成研究拠点  
(WPI-ICReDD)  
拠点長



北海道大学  
化学反応創成研究拠点 (ICReDD) 

化学反応創成研究拠点 (ICReDD / アイクレッド) では、計算科学、情報科学、実験科学の3分野を融合させることにより、新しい化学反応をより深く理解し効率的に開発することを目指しています。ICReDDは、世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI) の新たな研究拠点として、2018年10月に北海道大学に設立されました。

コロナ禍によって誰もが「バーチャルとリアルの融合空間」で暮らすことが求められる昨今、「化学」にはどんな未来像が待っているのでしょうか。元々、「化学」は研究者が思い描いたイメージ（バーチャル）を実験によってリアルに導いていく学問でした。今では計算科学と実験科学との融合によって、より明確にイメージを描くことが可能になってきています。この座談会では、計算化学者と実験化学者両者の視点から「イメージとリアルの間にはどんな営為があるのか」、「計算と実験の間にはどんな融合空間があるのか」を語ります。

**小野**：私は最初から計算科学を目指して大学院に入ったわけではなく、所属研究室は実験主体でした。ある時、指導教員（東京工業大学 藤井靖彦名誉教授）から「実験には時間がかかるので、あらかじめ計算からある程度実験結果を予測できないだろうか」と提案していただき計算を始めました。過去の実験データをベースに計算を行いました。実験値と計算値は簡単には一致しませんでした。問題を試行錯誤しながら追求しているうちに、本題にもその周辺にもいろいろなことが見えてきました。「仮説（イメージ）がどのように現実（リアル）になるか」に関してですが、近似を上手に入れて、どのように広大な反応空間の解析を進めるべきか、というところはまさに計算化学者の腕の見せ所とも言えます。計算科学はリアルを解析して、イメージの精度を上げる研究と言っても良いかも知れません。

## 計算との遭遇。分子化学の最新事情

一 かつて、化学といえば白衣を着た化学者が実験を繰り返して新しい物質をつくり出していくというイメージがありましたが、現在の分子化学では計算科学やデータ科学からのサポートが欠かせないようになってきています。

**中西**：化学系材料開発の現場においても計算科学の比重はどんどん増えています。現象や機能を見ただけで100%説明できることは少なく、実験結果と計算結果を総合的に捉えて、理解に至るケースが多いです。また、分子をつくる作業は相当な時間と労力がかかるのですが、つくる前に計算をして「このような機能の物質をつくるならば、こんな骨格の分子が必要。その分子にはこんな相互作用が欲しい。」ということを明確にして、分子をつくります。さらに、論文執筆の際には、シミュレーションを加えたイメージ図をつくって、我々が想定しているイメージはこのようものだを示すこともよくあります。

**中田**：理論計算の目的の一つは「分かる（メカニズムを理解する）」ということ。ですから、「実験で起きていることはどういうことなのか」を計算からサポートするのは私の大きな役目です。メカニズムが分かれば、新しい分子や物質の設計がぐっとしやすくなります。理論化学の側から計算によって物質をデザインして「こう

いうものを作ってはどうでしょう？」と提案できれば、とてもうれしいですね。そのような計算では、近似をどのように入れていくかなどのテクニックが私たち計算化学者の腕の見せどころ。いろいろな工夫を凝らすのはとても楽しいです。

**前田**：10年くらい前は「量子化学計算によって化学反応を予測できる」と言われてもそれを信じる研究者は少なかったと思います。しかし、最近は計算手法の改善やコンピュータの大規模化もあり、研究現場において計算の需要は高まってきています。ただし、計算のみでゼロから予測すると、間違った答え、つまり現実にそぐわない答えが出てくることもあるので、実験的な実証が不可欠です。計算によって新しい化学変換を見出して、それを実験化学者と協力して実証していくことに、現在は取り組んでいます。それから、誤解を避けるために言いますと、我々がやっている計算科学はデータ科学とは違います。過去の実験データの膨大な集積から新しい組み合わせを見出していくのがデータ科学だと思いますが、量子化学計算では、事前情報一切なしでゼロから第一原理的に化学反応を予測します。データ科学の流行によって、社会ではデータ科学と計算科学が混同されやすい状況になっていますね。



小野 ゆり子  
Yuriko Ono

北海道大学  
化学反応創成研究拠点  
(WPI-ICReDD)  
特任助教

**中西**：そうですね。過去のデータを元にしてるのでデータ科学は新しいことが苦手ですね。内挿的な予測は得意だけど、外挿的な予測は苦手だと言われています。

**中田**：そのお話におけるデータは実験データを指すと思いますが、最近では、計算結果をデータとして扱い、それを使ってデータ科



学や機械学習をやろうという取り組みもあります。計算でデータをつくることの良い点は、条件さえ決めておけば常に均一の精度が保証でき、質の高いデータを揃えられるのです。計算からだ、まだ現実的につくられていない物質に関するデータを出すこともできますね。

## セレンディピティとチームワーク

— 研究者は何らかのひらめきやセレンディピティによって新しい着想を得て独自の研究を進めていくことも多いと思います。実験化学者と計算化学者では、セレンディピティの起こり方は違うのでしょうか。

前田：まさに、ICReDDでは「ひらめきみたいなものを計算から出せないか」ということをひとつのミッションにしています。2年間くらい、この拠点でやってきて思うことは「(精度が良い) 計算は実験よりも遅い」ということです。つまり、人間が思いついたアイデアを、計算で検証するよりも実験をしてしまうほうが早いということがよくあります。それから、反応条件や触媒などの最適化に実験化学者と計算化学者が協働して取り組む場合には、計算結果からアイデアを抽出する際にも、実験化学者の経験による知恵がとても重要になります。ですから、人間が一生かけて知恵を絞っても出てこない、アイデア(ひらめき)そのものを導き出すところに、計算を使えるようにしたいと思っています。

中西：ひらめきやセレンディピティに関しては、私の場合、「実験をやりながら気づく」ということが多いですね。実験結果に理解できない現象が現れて、一生懸命にそれを理解しようとする過程でひらめくことが多い。しかも理解し終わった後で「ああ、あれがセレンディピティだったのだ」と気づいたりします。昔と比べると、現在は計算化学者と実験化学者の距離がかなり近づいてきていると感ずります。だから、その協働の場において、ひらめきが起こることもあると思います。

— ひらめきの現れ方ひとつとっても計算化学者と実験化学者は違いがありますね。おそらくカルチャーや思考様式においても両者にはかなりの違いがあるのだと思います。その両者が協働する研究現場ではどのように研究が進んでいくのでしょうか。

小野：計算化学者と実験化学者の共同の現場では様々なプロセスが最短距離で進んでいくことを実感しています。ICReDDでは、まず、実験の先生がチャレンジングな目標を掲げてくれます。この目標に向かって、計算初動で予測を立て、議論を重ねて良い系があれば実験して実現するプロセスに進みます。初動の計算結果の吟味においては計算の知識だけではなく選別が難しいので、実験化学者の意見を聞きながら、選別していきます。計算化学者と実験化学者の知識を総動員して、目標まで最短距離で走ろうと

しています。一般的に、実験化学者は「計算にとっても期待するタイプ」と「計算よりも実験結果を重視するタイプ」がいると思うのですが、私の指導教員は前者のタイプでした。私もその影響を受け、実験から計算に進んできました。しかし、必ずしも計算が万能というわけではありません。融合研究の場においては、「実験だけでは見えない情報を計算から示す」ことが重要だと考えています。

中田：昔は「理論(計算)は理論(計算)。実験は実験」というふうに別々に研究をしていましたが、今では両者がどんどん融合されていく状況です。計算で出てくる結果は理想的なものというか、イメージみたいなもので、実験化学者と話すことで初めて現実がついていくという感じ。小野先生がおっしゃるように、実験化学者が与えてくれる現実的な情報がとても大切ですね。

中西：我々のような研究の現場で今後必要になってくる人材は「計算科学のこ、データ科学のこ、実験のこを、ある程度理解していて、それぞれの専門家の間に入って繋いでいくコーディネーター的な人」なのではないかな。そういう人がいると、プロジェクトが円滑に進んでいくと思いますね。



中西 尚志  
Takashi Nakanishi

物質・材料研究機構  
国際ナノアーキテクト  
ニクス研究拠点  
(WPI-MANA)  
グループリーダー

## 化学の未来は実験ロボットにあるのか

— 国は Society 5.0 を提唱して「バーチャルとリアルが理想的に融合した未来社会」をビジョンとして示しています。そんな時代において、化学はどのように変わっていくと思われますか。

小野：あまり先のことは分からないのですが、あらかじめ、計算で精度良く予測して「これが良い」と実験化学者に提案し、それが実現するという形で全体の開発速度が上がっていく未来はイメージできます。そのためには実験と計算の密接な連携が必要だと思います。

中田：データ科学ではたくさんの選択肢が提案されます。しかし、「なぜそれが良いのか」という理由は、今のデータ科学では深くは分からないことも多いです。計算科学は「分かる」ということが強みなので、データ科学により提案されたたくさんの選択肢の中から「これが良い」と理論づけて絞ることができます。つまり、データ科学によるバーチャルな選択肢の絞り込みが計算科学によって実現されていくのではないのでしょうか。



中田 彩子  
Ayako Nakata

物質・材料研究機構  
国際ナノアーキテクト  
ニクス研究拠点  
(WPI-MANA)  
主任研究員

中西：現在の「データ科学と実験を融合した材料開発」の流れは、実験データを貯めて、予測して、また実験に戻るといったサイクルです。ただ、これだとしても実験のところスピードが落ちます。実験化学者の私としては、「つくる能力を究めておく」ということが大切だと思っています。将来、どんなに計算科学やデータ科学が発達しても「分子や材料をつくるスキル」がなければ実現できないだろうということですね。

前田：今、中西先生がおっしゃった問題の解決案として「ロボット」の存在があるのではないかと考えています。計算で予測したものをロボットによる実験で実現する。そんな未来です。実は、ICReDDは実験ロボット導入を決めました。実験はスキルフルな部分がたくさんあるので、その複雑な行為をどこまでロボットで実現できるかという問題はあるのですが、未来に向けた試みとして、その可能性を追求していきたいと考えています。

— ここで少し、素朴な疑問を……。数学におけるABC予想やリーマン予想のような「ずっと解けない難問」って化学の分野にもあるのでしょうか。

中田：反応パターンが膨大にある時にそれをすべて解明するのはどうすれば良いか。これなどは「ずっと解けない難問」の一つなのではないのでしょうか。

小野：前田先生が開発された計算手法がまさにそれなのではないかと思いますが。

前田：いや、それはまだ人がやっていなかった時代に、少し先にやったというくらいの話だと思います(笑)。考えてみると、化学の未解決問題の多くは、「程度問題」なんですね。物理や数学などでは「まったくできていなかったことができた」という話が多いですが、化学の場合は「できてはいるが、実用上使い物にならない。もっと効率的に、あるいは、工業的に実装できるようにしたい」というのが化学における未解決問題に相当するのではないのでしょうか。

— 「解きたい難問」は「工業的実装の問題」というわけですね。そうすると、実験ロボットの導入も自然な選択肢に思えてきます。

## 今後の展望。イメージが導くリアルへ

— そろそろ時間も残り少なくなってきました。最後に、みなさんそれぞれの今後の展望を話していただけませんか。

中西：世の中で役に立つ製品のパーツとなる素材や材料を一つは作りたいですね。それから、教科書に載るような物質や機能の発見など、社会に貢献できるものを何かしら後世に残したいと思っています。

中田：今まで使われてきた材料が、ちょっとした変化で大きく変わる(性能が大きく向上したり、新しい機能が生まれる)という現象は面白いと思っています。そういったものを、理論から提案して現実につなげていけたらいいと思います。

前田：組織(ICReDD)としての展望を言おうとすると、ちょっと負いいますが(笑)。計算と情報が先導していく化学、理解と予測が先導する化学をつくりたいですね。そのために、さまざまな複雑さの階層において、計算と情報が貢献できる戦略を立案していきたい。

小野：専門の異なる人、たとえば有機化学の研究者と話すと、すぐには理解し合えなかつたりします。意思疎通がなかなか難しい。計算化学者と実験化学者の距離が近づいたとはいえ、やはりまだまだ距離はあります。その垣根を少しでも低くする努力を続けていきたいですね。



座談会は、ウイルス感染症対策のため、オンライン会議システムを使って安全に行われました。



# 異分野・異専門融合は 新しいアイデアを生み出す

青柳 克信

東京工業大学名誉教授、理化学研究所名誉研究員

## 次世代の科学技術を生み出すために 基礎研究を欠かしてはならない

私の専門分野である応用物理学の立場から見ても基礎研究が未来の科学技術を支えることは、疑問の余地がないことです。

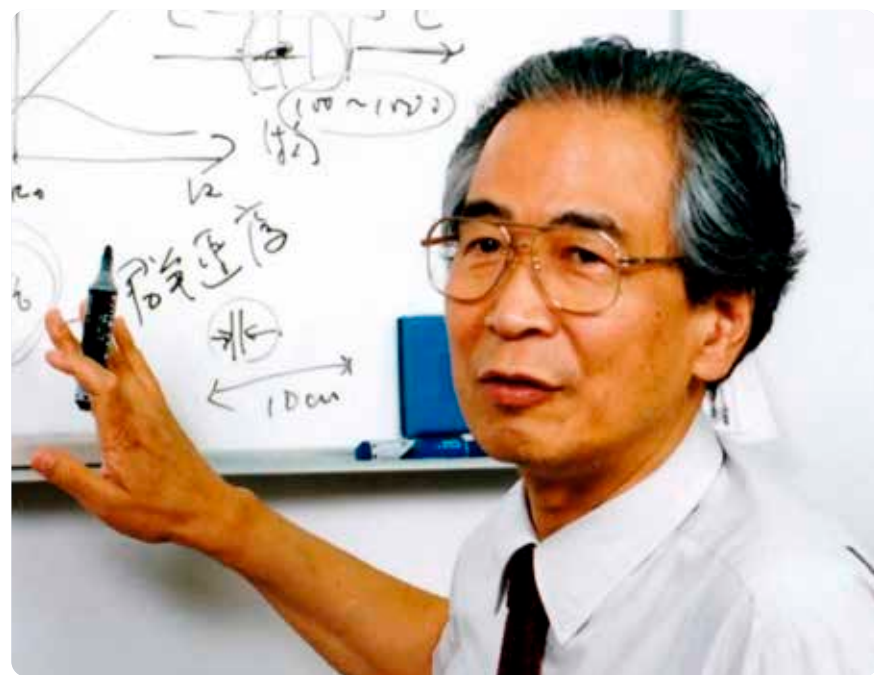
ここ数年、日本の科学者が多くのノーベル賞を受賞していますが、これは過去の基礎研究の成果であると考えべきです。例えば2014年にノーベル物理学賞を受賞した青色LEDの開発は、赤崎勇先生が1979年頃に行われた、青色発光材料である窒化ガリウム(GaN)の有機金属結晶成長法の草の根的基礎研究が先駆け

です。この研究においては、GaNは丈夫でよく光るが、結晶を成長させる良い基板がないこと、したがって良質な結晶ができないこと、ダイオードに必要なn型やp型のGaNができないことなど、数々の克服すべき問題点がありました。一方、青色発光素子材料としてセレン化亜鉛(ZnSe)が1990年代に青色発光素子の本命として研究されましたが、次第に寿命が短く実用にはならないことが解ってきました。この様な状況の中で赤崎先生は、長寿命が期待できるGaNを使って青色で発光するLEDができれば「エジソン以来の照明革命が起こるかもしれない」と、根気よく研究を続けられ実を結びました。この様に草の根的な基礎研究は、将来大きな実がなるかもしれないシード研究としてきわめて大切です。芽がなくては新たな実は出来ません。キュリオシティ・トリブンの草の根的基礎研究では、自分の強い科学的・技術的興味の追求が最も大切で、それを深めて行けば新たな、あるいは予期もしない結果が出てきてそこから新しい分野が出来上がっていく可能性

があります。しかし草の根的基礎研究で注意しなければならないことは、始めるときに一旦立ち止まって「それが上手くいった時にどのようなすばらしい世界が開けるか、そのための問題点は何か」というビジョンが明確に認識されていなければいけないと思います。また、研究を進める中で予期せぬ方向の現象が、あるいは結果が見出される場合がしばしばあります。その現象や結果を分析し、深い洞察の中でそれをゴミとみるか本物とみるか、的確に見極める力が必要とされます。的確に見極めるためにビジョンが明らかである必要があります。

## 日本が目指すべき科学技術立国

日本は資源も少なく、科学技術を通してしか生き延びていけない国です。「科学技術では、もう大きな、新しくやれることはなくなった」という人もいますが、それは間違いです。材料科学も、エレクトロニクスも情報科学もエネルギー科学もバイオ科学も医学も化学も、日本が得意なやるべき大きな課題は山ほどあります。自然はもともと分野に分かれているのではないですから、それぞれの科学分野がある一定程度成熟した現在、分野間の融合で挑戦的で新しい研究が芽生えるのは当たり前と言えるでしょう。



## 挑戦的な研究でなければ面白くない

挑戦的研究テーマとしては面白い提案になっているかどうか大切です。では「挑戦的」とは何を指すのでしょうか。いくつかのフレーズがあると思いますが、私は、新しい研究提案を行うときあるいは審査するとき「何が新しいのか?何の問題に対して何が解決できるのか?この研究がすべてうまくいったときに、世界はどう変わるのか?どのような素晴らしい世界が開けるのか?」と必ず問いかけます。それは自分に対しても学生に対しても同じです。その結果が人

類や社会に貢献し、局所的であっても世界的であっても、最終的には必ず誰かの役に立つものであることが最も重要であると考えます。誰かの役に立つという意味は直接生産的な意味ばかりでなく、あらたな自然の法則、現象の認識、すなわち人類の英知への貢献も含まれます。挑戦的研究は失敗も多いですが研究者は頑固な意思と柔軟な思考を持って、世界が変わるほどの研究結果を追い求めていく必要があるのです。



リングベルク城(ドイツ)で行われた国際会議後のパーティ  
世界から著名な研究者が集まった

また、面白い研究を見つけるためには、広い視野といろいろな専門家たちと深く議論することが大切です。私は世界にいろいろな研究者の友人を「戦略的」に持ち、多くの研究者たちと議論を交わし、異専門家の物の見方や世界を学んできました。

## 異専門融合で魅力的な研究テーマを 発見する

最近話題になっている異分野融合と言うと何か自分の分野と大きく離れた分野を想像しがちですが、自分の専門以外の分野(異専門)と考え直すと、異専門家との共同研究すなわち「異専門融合」となり、研究の幅が飛躍的に大きくなります。いくつかの異専門融合研究をかさね、発展していくのが理想だと思います。そのためには、自分が世界で認識されるような良い仕事をしている事(相手に一緒にやると得だと思わせる事)と、異専門家と出来るだけ多くの親しい人間関係を「戦略的」に構築しておくことが必要です。職場・国内・海外を問わず、良い仕事をしているたくさんの人たちと友人になることです。その結果、良い仕事ができれば、周りからは自ずと寄ってきます。

異専門融合の研究課題の優位性は、新規性が高く面白い研



M. Stuke教授(マックス・プランク研究所)との夕食会(ドイツにて)

究課題を設定し易いことだと思います。例えばMANAで成功したAtom SwitchデバイスはSTMの基礎研究の専門家とエレクトロニクスの専門家の異専門融合によって生まれた素晴らしい果実と言えます。この様に自分の研究と異専門分野の人の共同で新しい研究の「異専門融合」研究課題を見つけることが出来れば、挑戦的な面白い研究が生まれます。若い人が研究室を移った時、本人の持つ専門性とその研究室が持つ異なった専門性を融合できれば、本人にとっても移った研究室にとっても魅力的な研究課題が形成できます。新しい研究室の装置、人、研究課題を知り、自分の研究との異専門融合テーマを提案するべきです。

## 壁に立ち向かうための心構え

異分野・異専門融合は、日本人の最も不得意とするところかも知れません。他者と違うことや、失敗を恐れる人が多いからかもしれません。先日スタンフォード大学を卒業したアメリカ人がメディアで、「もし今失敗してすべてのものを失ってしまっても、全く違う分野で私は必ず今の生活以上のものを手に入れる自信がある」と言っていました。失敗ではなく成功を重要視する、なんて力強い言葉でしょうか!異分野・異専門融合は、この様な力強い自信とそれを支える環境が必要です。成功すれば評価されるのであれば、いくらでもチャレンジできると思いませんか?

また、新しい分野で自分を見つけるには、後押ししてくれる、相談にのってくれる人物も必要です。「立っている者は親でも使え」という話があります。要は「結果」です。知恵と技術でこの科学技術立国日本を作ってきた経験豊富な専門家が、その親の役目を担う事ができるのでは無いかと思っています。



ナノ国際会議が行われたスイス・ポントレジーナにて  
青柳克信(左から2人目)、青野正和 前MANA拠点長(右から2人目)

### PROFILE

青柳 克信 (あおやぎ よしのぶ)

東京工業大学名誉教授、理化学研究所名誉研究員  
立命館大学上席研究員

1965年3月大阪大学卒業、工学博士(1972);立命館大学総合科学技術研究機構上席研究員、理化学研究所名誉研究員、東京工業大学名誉教授;ナノテクノロジー、深紫外発光素子の開発研究に従事;大河内記念技術賞、市村学術賞特別賞、全国発明表彰特別賞弁理士会長賞、応用物理学会賞、科学技術長官賞、マイクロプロセス国際学会Best Paper Award、応用物理学会フェロー表彰、応用物理学会論文賞、マイクロナノプロセス国際会議賞



# MANA RESEARCH TOPICS

MANAの最新のナノテクノロジー研究・プロジェクトを紹介します。

## 01

### 量子マテリアル 基礎基盤研究プロジェクト

Quantum Material Project

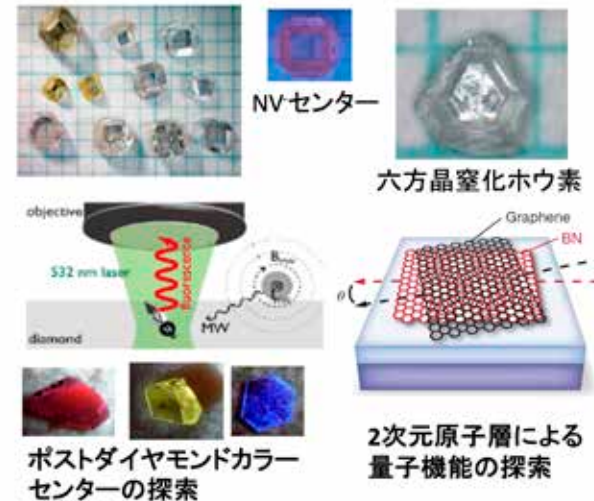
量子科学の利用を目指した、量子技術イノベーション戦略が国策として取り上げられています。この戦略では、量子計算、計測、通信などの技術開発と併に、それらの基礎となる量子マテリアルの開発が重要です。NIMSにおいても、古くから量子技術開発、材料創製、物性観測等の研究が進められていましたが、今年度この政策に貢献することを目的として、MANAにおいて「量子マテリアル基礎基盤研究プロジェクト」がスタートしました。Q-bit

(量子ビット)を実現するための物質的基礎の開拓と新たな高品位量子光源開発等を目指します。



谷口 尚 (たにぐち たかし)  
NIMSフェロー  
量子マテリアルプロジェクト  
プロジェクトリーダー

#### ダイヤモンドによる磁気センシング



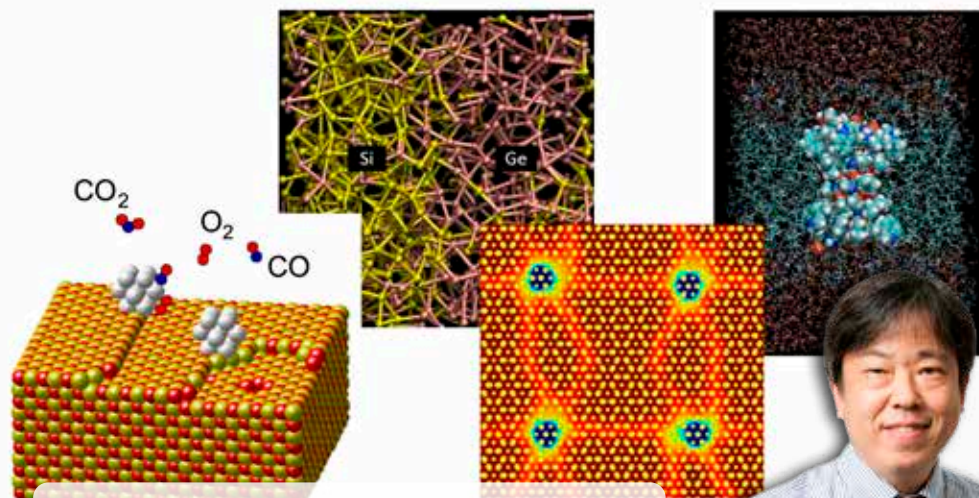
ダイヤモンド単結晶による量子センシング  
と2次元原子層による量子機能探索

## CONQUEST (コンクエスト)

100万原子を扱える第一原理計算プログラムの開発と公開

## 03

第一原理電子状態計算は物質の原子スケールの構造と性質を明らかにできる強力な手法です。しかし、計算量が膨大であり、界面やナノ構造物質、生体系などの数多くの原子を含んだ複雑な物質の計算ができないという問題がありました。我々は、局在軌道法、オーダーN法という新しい計算手法を駆使して、百万原子を含むような超大規模系に対しても第一原理計算を可能とする画期的なプログラムを開発し、多くの研究者が使えるように無償で公開しました。



CONQUESTが研究対象とする物質の例。左から、金属ナノ微粒子触媒、Si/Ge界面、強誘電体酸化物のボルテックス構造、イオンチャネルの構造モデルを示しています。



宮崎 剛 (みやざき つよし)  
MANA主任研究者  
量子物性シミュレーション  
グループ  
グループリーダー

## 02

### 超高性能実用熱電材料

新しい学理による熱電池開発



### 磁性およびナノ構造を活用した 革新的熱電材料・デバイスの開発

JST 未来社会創造事業

我々のグループでは、熱電高性能化の新原理発掘などにより、熱電発電の200年来の実用化の夢への挑戦を進めています。電子物性および熱物性における熱電的性質の従来のトレードオフを凌駕するような、ナノ構造制御や、磁性の活用による熱電効果の増強を見出し、高性能磁性半導体熱電材料という新領域を開拓してきました。国際共同研究により関連材料を薄膜化することで超高性能も見出されました。

一方で、産業に合致したプロセスによる発電モジュールおよび熱管理技術の開発も進めています。



森 孝雄 (もり たかお)  
MANA主任研究者  
熱エネルギー変換材料グループ  
グループリーダー

まなちゃんねる

## 「ナノカーレース2」

Nanocar Race 2

## NANOCAR RACE II

ナノカーレースは、ナノカーと呼ばれる分子マシンによる世界最小の国際レースです。ナノカーは大きさが数ナノメートル(髪の毛の太さの約10万分の1)で、最先端の科学技術を駆使して操作されます。2017年開催の第1回に出場したNIMS-MANAチームは、トラブルに見舞われるも真摯にレースに向かう姿勢を讃えられ、フェアプレイ賞を獲得しました。そんなナノカーレースの第2回大会(Nanocar Race 2)が2022年春にフランスで開催予定です。新メンバーで構成された新しいNIMS-MANAチームは、今大会優勝を目指し、日々新しい分子マシンの設計や合成、性能評価を行っています。レース本番でチームが目一杯活躍できるよう、皆様応援よろしくお願いします!

NIMS-MANAチーム公式Twitterアカウントでは、チームの最新情報を随時お知らせします。MANA公式・非公式つぶやきアカウント(まなちゃんねる)と合わせて、是非覗いてみてください。

#ナノカーレース2 #分子マシン #今度こそ優勝  
#SNSフォローしてね



Twitterアカウント まなちゃんねる NIMS-MANA チーム MANA公式チャンネル



## 光機能分子材料グループ ナノマテリアル

クロモフォア (Chromophore) は、発色の原因となる要素のため、機能性を持つと考えられている分子です。光機能分子材料グループは、ナノ分子材料を研究し、発色性だけでなく、詳細な分子構造に基づいた機能性を明らかにします。潜在的な応用例として、センシング、触媒、医療、さらには環境問題の解決につながる用途が考えられます。



ジョナサン・ヒルグループリーダー (左から1人目)、ヤン・ラプタ主任研究員 (右から2人目)、アニルバン・バンディオパダヤイ主任研究員 (別枠)

## 量子物質特性グループ ナノシステム

私たちは昨年4月にMANAに加わった新しいグループで、超伝導とトポロジカル物質の実験的、理論的研究を行っています。超伝導は巨視的スケールで発現する量子現象です。一方、トポロジカル物質は量子力学的波動関数のトポロジカルな性質に基づく物質分類です。一見曖昧に思える私たちのグループ名ですが、名は体を表しています。



寺嶋 太一グループリーダー (左から3人目)、河野 昌仙 主席研究員 (同2人目)、山瀬 博之 主幹研究員 (同1人目)、立木 実 主幹研究員 (右から2人目)、大井 修一 主任研究員 (同1人目)

## New People & New Groups

新しくMANAに加わった研究者、新グループを紹介します (2020年度)

## 量子物質創製グループ ナノマテリアル

先端量子技術に資する物質開発を目的として、主に酸化物に着目した研究を進めています。量子性を顕著に増強する手法や優れた量子性を備えた新物質の開発に取り組んでいます。また高温超伝導体とトポロジカル物質の新規接合を実現してトポロジカル量子情報処理に資する研究にMANA内外の研究者と協力して取り組んでいます。



山浦 一成グループリーダー (右から4人目)、アレクセイ・ベリック 主幹研究員 (同3人目)、辻本 吉廣 主任研究員 (左から2人目)

## ナノ粒子グループ ナノマテリアル

私たちは、安全で健康な社会の実現と継承に資する「画期的なエネルギー変換材料」を創製するために研究しています。材料のコアとなる物質はナノクリスタルです。ナノ構造に顕在化する「量子性」の制御・活用・応用に取り組み、フォトニクス、医用熱フォノンクス、オプトエレクトロニクスへ研究を展開しています。



白幡 直人 グループリーダー  
孫 洪涛 主幹研究員

### 独立研究者



原田 尚之  
岩崎 拓哉

### ICYS WPI-MANA



アドリアン・ディアス・アルバラス

### MANA研究者



後藤 真宏 主席研究員  
橋 信 主任研究員  
寺嶋 健成 主任研究員  
鄧 驍 研究員

### NIMSフェロー・NIMS特別フェロー・NIMS特別研究員



谷口 尚 NIMSフェロー  
細野 秀雄 NIMS特別フェロー 電子活性材料チーム  
溝口 拓 NIMS特別研究員 電子活性材料チーム



## MANA国際シンポジウム2021

2021/3/2-3 @オンライン開催



2021年3月2日(火)および3日(水)、MANA国際シンポジウム2021『MANA INTERNATIONAL SYMPOSIUM 2021 jointly with ICYS』がオンライン開催されました。MANA国際シンポジウムは、MANAの研究成果を国内外にアピールするために毎年開催しているもので、今回で第14回目となります。MANAの最新の研究成果発表だけでなく、国内外の著名な研究者による招待講演も行われました。

## 第3回 ICYS & MANA Reunion Workshop

2021/3/4-5 @オンライン開催

MANA国際シンポジウム2021に続き、2021年3月4日(木)および5日(金)、ICYS & MANAアルムナイによるワークショップ『The 3rd ICYS & MANA Reunion Workshop』がオンライン開催されました。



## 2020年の高被引用著者にMANAから9名の研究者が選出されました

2020/11/24

クラリベイト・アナリティクス「2020年の高被引用著者 (Highly Cited Researchers 2020)」にMANAから9名の研究者が選出されました。Highly Cited Researchers は、クラリベイト・アナリティクスが毎年発表する、被引用数が世界の上位1%に入る論文の著者を研究分野別に選定したものです。



## 企業様向けMANAパンフレットを発行しました

2020/11/25

NIMS WEEK 2020 (オンライン開催) に向け、企業様向けのMANAパンフレット「Nano Revolution for the Future」を発行しました。MANAの基礎研究が応用に結びついた事例を紹介し、カーボンニュートラル社会やSociety 5.0等、多様な可能性を秘めたMANAのナノテクノロジー研究を提案しています。



## オンラインセミナー「とどけ! WPIの最新研究」

2020/12/5

2020年12月5日(土)、WPI 4拠点合同で主催する、中高生の教員を対象としたオンラインセミナー「とどけ! WPIの最新研究」を開催しました。MANAからは川本直幸 主幹研究員が登壇し、自身の研究活動の紹介や、教育関係者との活発な意見交換が行われました。



## 訃報: Françoise Winnik 先生

2021/2/18



Françoise Winnik 先生 (フィンランド・ヘルシンキ大学教授) が、2月13日にご逝去されました。Winnik 先生は、2011年よりMANAサテライト主任研究者として、数多くのMANA研究者、ポスドク、学生と交流を持ち、その卓越した知識と経験に基づいた指導や激励を送り続けて下さいました。先生のMANAへの偉大な貢献に深く感謝し、心から哀悼の意を表します。

## 「オンライン座談会」

思いも寄らない新型コロナウイルスの世界的大流行により、オンライン元年とも言われた2020年。外出自粛に伴い、様々なオンラインサービスを利用する機会が格段に増えています。中でもオンライン会議システムは、MVP級の活躍を見せているスーパーユーザーリティアプレイヤーなのではないでしょうか。というのも、今号の座談会記事もこのオンライン会議システムのおかげで、無事に開催、収録することができたのです。巷ではワークショップやイベント (MANAも鋭意利用中) のみならず、オンライン飲み会や同窓会といったプライベートな集まりでも活用されていて、リモート環境と切り離せないツールになっているようです。必要だから使っていたものが、今では進んで使うツールになっているのです。そこには、興味のあるイベントにどこからでも参加できる自由や喜び、会えない環境だからこそ生まれる新しい出会いがあるのかもしれない。コロナ禍を乗り越えた先も、世界中の人が享受できるこのオンライン会議システムで、MANAはみなさんと繋がりたいと思います。(KT)

## 編集後記



デニ・アンドレアス (Andreas Doenni)

MANA 事務部門 企画・アウトリーチチーム チームリーダー



**Q1. 研究活動について教えてください**

スイスのチューリッヒ工科大学 (ETH Zürich) の物理学部博士課程では、大型研究施設に勤務し、外部ユーザーから提供された材料の中性子散乱実験を行っていました。その後、日本でポストドクのポジションを獲得し、今度は自らが外部ユーザーになりました。大型研究施設での測定に向けて、新しい材料を準備したり、特性評価を始めたのです。特にNIMSには、例えば高圧環境下の実験等の高品質な物質を生成するための素晴らしい設備が整っています。これまでに100報以上の論文を発表しましたが、その多くは国際共著論文です。

**Q2. NIMSで働き始めたのはいつですか？**

2006年に研究員としてNIMSに入りました。1年後、NIMSでWPI-MANAプロジェクトがスタートし、チームリーダーとして中間管理職のポストを得ました。私はその環境下で異文化間の架け橋となり、外国人研究者と日本人研究者を繋ぐ接着剤のような役割を担ってきました。

外国人研究者と日本人研究者を繋ぐ  
接着剤のような役割を担ってきました

**Q3. WPI-MANAプロジェクトはNIMSをどのように変えていったのでしょうか？**

初代理事長の岸輝雄先生はNIMSの国際化を強力に推し進めました。ICYS (若手国際研究センター、2003～2007年度)とWPI-MANA (国際ノーアーキテクトニクス研究拠点、2007～2016年度)の2つのプロジェクトの成功により、NIMSは日本で最も国際化された研究機関として認められるようになったと感じています。また、青野正和MANA初代拠点長のもと、



2017年4月のNIMS一般公開にて。スイス・ラクレットの屋台は毎年大人気です。料理長は、もちろん、私です！

MANAを国際的に通用するブランドにするための運営陣の尽力に、私は非常に感銘を受けました。

**Q4. WPI-MANAでは、国際的な職場環境をどのように実現していますか？**

WPI-MANAは、研究者の約半数が日本から、約半数が海外からという多文化な職場環境です。このような刺激的かつ爽り多い環境の中で働けることに、日々感謝しています。佐々木高義MANA拠点長のもと、現在のMANA (親機関NIMSの研究拠点のひとつであり、WPIアカデミー拠点でもある)が、この大きな成果を末永く享受し続けてくれることを願っています。2020年は新型コロナウイルスのパンデミックが進行しており、課題と困難が山積していますが、強く健康的な心身を保ち、前向きな気持ちで共に乗り越えましょう。



MANA NEWS LETTER

# CONVERGENCE



No.28 2021年 3月発行

発行 国際ノーアーキテクトニクス研究拠点 (WPI-MANA) 企画・アウトリーチチーム 〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1 国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)  
電話 029-860-4710 (代)  
FAX 029-860-4706  
Eメール mana-pr@ml.nims.go.jp  
WEB https://www.nims.go.jp/mana/jp

**CONVERGENCE :**  
世界の優秀な研究者をMANAのメルティングポット研究環境に集結・収れんさせ、新材料の創製・イノベーションに向けて、ノーアーキテクトニクスのキーテクノロジーを統合 (CONVERGENCE) していくというMANA全体を表すキーワードです。  
© 2021 National Institute for Materials Science

**CONTENTS**

- 2 FEATURE TOPIC  
「イメージ」と「リアル」をつなぐ化学者の力  
前田 理、小野 ゆり子、中西 尚志、中田 彩子
- 6 Leader's Voice  
異分野・異専門融合は新しいアイデアを生み出す  
青柳 克信
- 8 MANA RESEARCH TOPICS
- 9 まなちゃんねる
- 10 New People & New Groups
- 11 News & Events  
編集後記
- 12 MANAのひと  
デニ・アンドレアス