

【令和5年度実績】

1. WPI アカデミー拠点として世界最高水準の研究を推進

「研究」

No.01 (1)-1「高等研究機構」を頂点とした横断的分野融合研究を戦略的に推進するための三階層「研究イノベーションシステム」の一層の充実

実績報告

東北大学材料科学高等研究所(AIMR)は2007年に始まった文部科学省の事業「世界トップレベル研究拠点プログラム(WPIプログラム)」によって設立されたWPI拠点の一つである。第一線の研究者が世界から多数集まってくるような優れた研究環境ときわめて高い研究水準を誇る「世界から目に見える研究拠点」を日本国内に形成することを目指すWPI拠点は、①トップレベルサイエンス、②異分野融合研究、③システム改革、④国際化の推進、をミッションとしている。AIMRは、2016年度までWPIプログラムにより支援を受け、研究所レベルで数学－材料科学連携を推進する革新的な研究所として認識されるに至った。

WPI事業終了後の2017年度からは「WPIアカデミー拠点」に認定され、引き続きWPI全国17拠点の1つとしてのステータスを保っている。WPI拠点で確立した数学－材料科学連携を将来にわたり長期的に加速して材料創製に繋げるために、本所は2019年度に3つの「発展ターゲットプロジェクト(ATP)」を設定し、これを、AIMRの全研究者が連携するとともに異分野融合研究による研究成果が目に見える形となるよう年ごとに進化させてきた(資料1-1.pptx)。2023年度には、スピントロニクス・量子デバイス分野に限っても、スピン波を用いたリザバー・コンピューティングによるカオス的振る舞いの予測(資料1-2.pptx)、確率論的スピンダイナミクスをデバイス応用したAI計算機の実証(資料1-2.pptx)、先端電子分光による超微細粉末試料の分析技術の確立(資料1-3.pptx)やトポロジカル状態の数理物理の深化(資料1-3.pptx、資料1-4.pptx)等の成果を上げ、基礎研究からデバイス応用まで、技術基盤の高度化を伴う研究開発を推進した。これらの研究成果はWPIプログラムのAcademy Director(AD)、Academy Officer(AO)によるAIMR訪問で報告し高い評価をいただいた。

2022年度に国際公募によって採用したジュニアPI、ならびに海外PIとして新たに招聘した世界トップレベル研究者の研究環境を整備し、こうした取り組みによって、論文KPIであるTop10%論文割合＝約15%、Field-weighted Citation Impact(FWCI)＝約1.5と引き続き上昇傾向を維持するとともに、国際共著論文割合は約68%(AIMRにおける最高値)を記録した。またTop10%論文割合が重要なKPIとなっていることを認識し、広報戦略室(戦略性を目指す広報部署として2020年4月に所内改組)にて出版後3年未満の論文の中からトップ9～13%の位置にある論文を抽出・厳選し、これを専門サイエンスライターの手によるハイライト記事(AIMResearch - Research Highlight)としてAIMRウェブサイトに掲載する試みを開始した。これらの論文は出版後3年時点で確定するTop10%論文の予備軍として重要な位置にあるため、国際的視点での認知度向上をAIMRとして支援している。

AIMRの数理科学オープンイノベーションセンター(OIC)では、数理科学を基盤として材料科学を含む幅広い分野での様々な連携を推進している。中でもトポロジカルデータ解析(TDA)技術は、これまで困難であった顕微画像データを定量化してマイクロ構造とマクロ物性をつなぐ数理的枠組みを与えるものとして産業界からのニーズが伸びている。OIC内に事務局を置くTDAコミュニティへの企業参加は2020年度発足当時の15社28名から2023年度56社100名まで増加した。うち1社とは共同研究も実施している。学内にも技術展開しており、2023年度は工学研究科教員からの依頼に応じて修士課程学生にも技術指導の幅を広げている。

2024年4月に運用開始のナノテラスについても貢献している。AIMRでは先端計測とりわけナノ計測を積極的に活用した物質・材料開発を推進している。この分野の研究ネットワークの形成を目的として主催したシンポジウムでは40人を超える参加者があり、ナノテラスで展開可能な新しいサイエンスの方向性が議論されるとともに、国内ネットワークの枠組みが形成された。またAIMR所属のPIが管轄するナノ先端計測装置をビームラインに導入した。

こうした上記の研究成果はWPIプログラムのAcademy Director(AD)、Academy Officer(AO)によるAIMR訪問で報告され、AOから「成果、ポリシー、戦略いずれも国内外で群を抜いており、存在感は随一であり立派な拠点」と高く評価された。

 [資料 1-1.pptx](#),  [資料 1-2.pptx](#),  [資料 1-3.pptx](#),  [資料 1-4.pptx](#)

2. AIMRにおける海外トップ研究者との戦略的連携

「研究」

No.02 (1)-2 卓越した研究を基盤とした国際共同教育の深化

実績報告

WPIプログラムでは、そのミッション④の国際化に関連して海外研究機関にサテライトを置く。AIMRは現在、ケンブリッジ大学(英国)、シカゴ大学(米国)、清華大学(中国)の3大学に部局間協定に基づくジョイント・リサーチ・センター(JRC)を設置し、ポスドクを現地雇用・配置して実質的な国際共同研究を推進できる仕組みを構築している([資料 2-1.pptx](#))。ケンブリッジ大学 JRCではトポロジカルデータ解析(TDA)等の数理科学的手法を用いた新材料構造探索および機能予見を、シカゴ大学 JRCではスピントロニクスに立脚した量子材料開発を、また清華大学 JRC(JRT)では角度分解光電子分光(ARPES)等、AIMRの強みである計測技術を活用した共同研究によりトポロジカル物質の探究を進めている。11月に開催されたAIMR Workshop(参加86名)ではこれらJRC3拠点から3人のポスドクと5名の海外PIを招き、AIMR研究員と対面で交流をはかりつつ将来の融合研究について深く議論した([資料 2-2.pptx](#))。

ケンブリッジ大学との連携では、AIMR海外PIであるChris Pickard教授とJRCポスドクのLewis Conway博士を招き、様々な研究打ち合わせを行なった(2023年4月)。その滞在の総括として、データ駆動型の材料科学をテーマとしたAIMR-Cambridge Joint Workshopを開催した(2023年4月26日、27日)。7月には所長と副研究支援部門長・事務スタッフの3名でケンブリッジ大学の大学本部および材料科学・冶金学科を訪問し、将来構想の共有と現地スタッフとの連携を深めた。また、後述のGlobal Intellectual Incubation and Integration Laboratory(GI³ Lab)プログラムを活用して気鋭の若手研究者であるChuck Witt博士がAIMRに1か月滞在し、機械学習ポテンシャルの手法を軸に様々な研究テーマを検討し継続的な連携の芽を見出した(2024年1月)。シカゴ大学との連携では、連携先の主要研究者であるDavid Awschalom教授の訪問を機に、スピントロニクスと量子デバイスをテーマとしたChicago-Tohoku Workshopを開催した(2023年10月5日、6日)。これに合わせ、シカゴ大学側からAIMRへの訪問団と密な情報交換を行なった。清華大学では、空席であったJRCポスドクとしてHongyun Zhang博士の採用が決まり、量子材料をテーマとした共同研究が始まった。また、Collaborative Research Agreementを2027年度まで更新した。

国際共同研究の推進のため、CRCMSの海外業務委託制度を活用し、Jens K. Nørskov教授(デンマーク工科大学)、Astrid Pundt教授(カールスルーエ工科大学)とそれぞれ業務委託を行った。本制度に関連するオンラインワークショップにはのべ300名近い参加があり、研究者交流

が深まった。また、所長がカールスルーエ工科大学を訪問して今後のさらなる連携の準備を進めた。

東北大学の特徴ある国際インターンシップ G-RIPS-Sendai プログラムに対しては、2023 年度も強力なサポートを行った。2023 年度(資料 2-3.pptx)は三菱電機の 2 つの研究所と富士通、NEC、IHI から提供された計 5 課題に、日米アフリカの学生 11 名が取り組んだ。このプログラムは UCLA の数学研究所 IPAM との緊密な国際連携のもとに実施しており、2023 年度は規模の拡大(4 グループから 5 グループへ)に加えて、過去の米国人参加者の日本側パートナー企業への就職、プロジェクト課題から発展しての当該企業と東北大学の共同研究契約締結など、多様なアウトカムを実現することができた。

所内研究スペースの効率的利用を目的に再配置と整備を行い、新たに着任した海外 PI の AIMR 内での新規研究室立ち上げを支援することでも実質的な国際共同研究を促進した。

 [資料 2-1.pptx](#),  [資料 2-2.pptx](#),  [資料 2-3.pptx](#)

3. 数学－材料科学連携の実績を生かした波及効果と産学連携

「研究」

No.03 (2)-1 戦略的産学共創の展開

実績報告

AIMR ではトップサイエンスとしての材料科学を社会的課題の解決に繋げることを目指した産学連携の取り組みを推進している。以下に 2023 年度の事例を示す。

発展ターゲットプロジェクト(ATP)ではナノ多孔質の炭素材料グラフェンメソスポンジ(GMS)の触媒応用と離散幾何解析による構造の特徴付けの取り組み(資料 3-1.pptx)や固体電解質の材料設計に資するデータベースの生成と AI を活用した新材料探索(資料 3-2.pptx)、デザインした高分子相分離構造に抗体を担持した高感度のインフルエンザウィルス検出試薬の開発(資料 3-3.pptx)や金属酸化物ナノ粒子の分散凝集特性を数理的に記述する手法の開発(資料 3-3.pptx)といった、産学共創のシーズとその科学的基盤を創生した。

研究者が持つシーズを内外の社会的なニーズに照らして共創研究所の設置と運営を推進した。2022 年に最初に開設した「住友金属鉱山×東北大学 GX 材料科学 共創研究所」では、循環型社会を見据えた水素活用材料の開発テーマを探求しつつ運営のノウハウを蓄積した。また、本学発のスタートアップである 3DC 社との連携により「3DC×東北大学 カーボン新素材 GMS で『世界を変える』共創研究ラボ」を設置し、カーボン新素材であるグラフェンメソスポンジ(GMS)の社会実装(電極材料など)に取り組んだ。同じく本学発スタートアップである AZUL Energy 社とは、新素材「AZUL」を筆頭に、JST 未来社会創造推進事業や NEDO 官民若手支援事業、科研費基盤(A)などの公的課題での取り組みと AZUL Energy 社をハブとした国内外の企業との実用化の取り組みを並行して進め、「AZUL Energy×東北大学 バイオ創発 GX 共創研究所」を 2024 年 4 月から設置する準備を整えた。今後、我が国の GX に貢献する次世代材料を共創する研究開発および人材育成を目指す。

数学分野では、様々な分野の課題への解決策をデータと AI によって発見する「発見数理技術」の研究開発を目的として数理科学共創社会センターが設置した「富士通×東北大学 発見知能共創研究所」においても、AIMR から応用分野の全 5 テーマのうち 3 テーマについて協力している。数学における重要な方法論のひとつである因果推論は AI の説明可能性向上の意味からも期待

されており、AIMRにおける数学－材料科学連携の新しい切り口としても有望なものとなっている。さらに AIMR 数理科学オープンイノベーションセンターでは、産業界と数学界の連携を目的とする経団連数理活用産学連携イニシアティブを定期的に開催した。これまでに 10 回開催しており、2023 年度は3回開催した。「データ利活用、AI、スマートデザイン」をテーマとし、各回 40～60 名の産業界からの聴講者が参加して、産業課題に関する数学的アプローチについて活発な議論やネットワーキングが行われた。産業界における数理活用の事例紹介では、数学界への課題共有もなされた。

大型プロジェクトに基づく産学共創としては、GX の政府戦略に沿って課題解決を旨とする JST-GteX(革新的 GX 技術創出事業)・水素領域が AIMR の研究者を中心に採択された。そこでは DX やマテリアルズインフォマティクス、トポロジカルデータ解析などの数理科学を駆使した研究イノベーションにより従来の延長線上にない新たな開発指針を与え、将来の産学連携の基盤となる革新水素貯蔵材料・システムの開発・構築を目指している。

これらの活動により、AIMRにおける共同研究・受託研究等の受入金額は、2019 年度から 2023 年度の 4 年間に 4.9 億円から 11.8 億円へと 2.4 倍に増加した。

 [資料 3-1.pptx](#),  [資料 3-2.pptx](#),  [資料 3-3.pptx](#)

4. 研究環境及び研究支援体制の推進

「業務運営の改善等」

No.22 (3)-1 優秀な若手研究者の活躍促進

実績報告

Global Intellectual Incubation and Integration Laboratory (GI³ Lab)プログラムを利用して海外の優秀な研究者を招き、数週間から数ヶ月の AIMR 滞在を通して AIMR の若手研究者との交流を促進した。また、若手研究者海外派遣プログラムによって、海外の有力な研究室への短期滞在や国際会議での成果発表をサポートした。2023 年度は、GI³、海外派遣プログラムを各4件ずつ実施した([資料 4-1.pptx](#))。こうした世界のトップレベルの大学との学術交流(シンポジウム及び新規事業の企画立案等)を推進するために国際連携コーディネーターを公募し、外国人教員を特任准教授(研究)として採用した。また、AIMR が主導的な立場で参画している CRCMS では、2022 年度に引き続き 2023 年度にも若手独立教員の国際公募を行い、応募者 85 名(外国人 72 名を含む)から外国人 2 名(女性研究者 1 名を含む)を採用した。2022 年度に確定した 3 名とあわせて 5 名(准教授 2 名、助教 3 名)のうち 3 名が 2023 年度に着任した。工学部で研究活動を行う助教 1 名を除き 4 名について AIMR 内に受け入れることとし、職位に応じた研究スペースと居室スペースなど環境を整備している。また、CRCMS 担当 URA と事務補佐員によるサポートを行い、若手独立教員が新天地での研究活動を速やかに開始して成長できるように配慮し、研究者育成に努めている。

所内若手研究者のスタートアップ支援としては、若手研究者同士の異分野融合研究を推進するフュージョンリサーチプログラムを継続実施し、2023 年度は 11 件の申請を採択した。また若手研究者支援パッケージとして、①急な要望にも対応できる研究整備費用等の補助、②共通機器室の装置利用費用の免除(フュージョンリサーチプログラム採択研究)、及び③論文投稿や発表用スライド作成時の英文校正費用の補助、を行っている。また、若手や外国人研究者の科研費等の外部資金獲得を目的とした申請書のブラッシュアップ支援を継続的に実施し、科研費については 2023 年度に 9 件の支援を実施した。

2023年度の若手教員(40歳未満)比率は53%、外国人研究者比率は54%と、共に高い数値を維持している。

 [資料 4-1.pptx](#)

5. 材料技術でグリーン未来社会の実現に貢献

「研究」

No.27 (1)-2 持続可能でレジリエントなグリーン未来社会構築への貢献

実績報告

AIMRでは、材料探索からデバイスとしての実装まで幅広くグリーン未来社会に資する研究開発を推進している。本年度はエネルギー関連分野で顕著な進展があった。

内外の社会的なニーズを踏まえて「水素関連の基礎科学(以下、水素科学)」の視点で学理を構築し、その水素科学を広義のグリーン転換(GX)関連研究に展開するために AIMR 内に設置した「水素科学 GX オープンイノベーションセンター」の活動を本格的に開始した。国内外のトップ研究者と共に、研究(および研究インフラ)ネットワークの強化、産業界との包括的な連携体制の構築を目的として、国内・国際ワークショップを開催するとともに、センター構成員の最新成果をウェブで発信した。これらの取り組みが評価され、複数の構成員が参画する JST-GteX(革新的 GX 技術創出事業)・水素領域などの研究プロジェクトの採択に至った。この JST-GteX プロジェクトでは、材料・解析・DX の3つの観点から研究イノベーションを推進し、多様な材料群を俯瞰した水素貯蔵メカニズムの理解を深めることで従来の延長線上にない革新水素貯蔵材料の開発などを進めている。所長がチームリーダーを務めて国内の研究機関を束ねることで、前述の発展ターゲットプロジェクト(ATP)のような所内プロジェクトとも連携しつつ、水素材料の基礎科学の発展を通して持続可能でレジリエントなグリーン未来社会の構築を主導している([資料 5-1.pptx](#))。

水素以外の取り組みとしては、環境負荷の高いレアメタルを使わない触媒の開発とその社会実装に向けた取り組みを行い、金属錯体青色顔料と安価なカーボン材料を原料に白金触媒を性能とコストで超える新素材「AZUL」を中心に、AIMR が得意とする理論と実験の協働によって触媒のデザインに成功し、次世代のエネルギーデバイスとして期待される高性能な金属空気電池やウェアラブルデバイス・スマートライフジャケットなどを駆動できる紙電池などの社会実装成果に結実した。

一方、SIP 第3期「スマートエネルギーマネジメントの構築」および「スマートモビリティプラットフォームの構築」課題においては、カーボンニュートラルモビリティシステムの取り組みが採択された(代表者は AIMR 教授)。スマート東北大学グリーンキャンパス構想を実現するための産官学の連携体制を整え、IHI や東北電力などの企業からグリーン未来社会に向けた技術体系を構築するための知見を得た。また、EV などによる学内の交通利便性向上に向けてモビリティサービス企業 WILLER 社との連携を進めた。さらに、仙台市との連携に関する協議も開始した([資料 5-2.pptx](#))。

 [資料 5-1.pptx](#),  [資料 5-2.pptx](#)

6. 研究支援活動による研究専念時間の確保に係る取組

「教員の研究時間確保」

実績報告

研究支援部門の強化

WPI 拠点では、拠点長(所長)とは別に研究支援部門長の設置が必須である。研究支援部門長の役割は研究者が研究に専念できる環境の整備であり、研究者目線でのシステム改革の推進が求められる。2019 年度に着任した現研究支援部門長は、所長交代に伴う戦略的人事の円滑な実施や新型コロナの流行下での研究者のケアといった大役を果たして勇退することとなり、国際卓越研究大学に資する施策を担う次期研究支援部門長候補を全国公募した。その結果、優れた研究実績を有しながら事務組織における統括的業務にも長けた人材を採用できた。次期研究支援部門長は東北大学学際科学フロンティア研究所(FRIS)での経験を活かして若手研究者の研究力強化や国際連携の推進などの将来戦略において所長を強力にサポートし、研究者が高いモチベーションを持って研究に専念するための取り組みに着手している。

本年度は研究者の研究時間確保に資する研究支援部門スタッフの強化策を講じた。新型コロナの規制撤廃に伴う研究者の海外連携を加速する目的で、所長直轄の国際連携コーディネーターを新たに採用した。採用者は研究者としての経験を有する外国人であり、独自の情報分析を加えつつ海外連携先との調整に取り組んでいる。また、広報戦略室に新たにサブマネージャーを採用し、研究者に代わって研究成果の発信や論文の被引用の向上を担う体制を拡充した。研究支援部門長自らも研究者目線での研究力分析・業績評価・研究スペース整備といった研究者支援業務に取り組んだ。

広報戦略と外国人研究者への支援

広報戦略室では、研究者に向けて効果的な英文プレスリリースに関する啓蒙と支援を行い、27 件(前年度比 3 倍)の実施を達成した。並行して公式 Web ページや SNS での研究成果発信を拡充し、複数の TV 局からプログラム取材を受けるなど、研究者の負担を抑えつつ国際ブランディングの強化を図ることができた(資料 6-1.pptx)。

AIMR における外国人研究者への支援体制(IAC)が国際サポートセンター(ISC)として全学に横展開された後も、外国人比率が高い AIMR 特有のサポートのあり方を工夫している。特に、来日直後の研究者が円滑に研究を開始できるような視点での共通機器室や安全管理室との連携や、英語対応が可能な職員の継続的配置や文化的宗教的な習慣を考慮した環境整備など、IAC ならではの細やかさで研究専念時間の確保に取り組んだ(資料 6-2.pptx)。

研究環境の整備の個別サポート

研究者に対するシミュレーションやデータ解析環境のサポートにも引き続き取り組んだ。計算支援ユニットが基幹インフラと運用ノウハウを提供し、研究者が計算機環境の導入や維持管理に費やす時間を減らした。また、トポロジカル材料分野で顕著な業績の伸びを示している Jr.主任研究者が使用する計算機の仕様策定・調達・ソフトウェア環境の設定を包括的にサポートし、海外から招聘した Jr.主任研究者の政府調達案件に係る仕様策定を行なった。

教員評価の DX

年次教員評価は AIMR の現状を把握する上で重要であるが、研究者にとっては評価資料作成が、研究支援部門にとっては資料の整理とスコアリングが、相応の業務負担となっている。そこで、新しい大学情報データベース(RefDBx)に収録された成果データに加えて人事給与データや

予算データから評価に必要な情報を抽出し、研究者毎にスコアリングするプログラムを作成して運用を始めた。これにより、研究者・研究支援部門それぞれの業務負担を軽減し、前者にとっては研究専念時間の確保に貢献した。

 [資料 6-1.pptx](#),  [資料 6-2.pptx](#)