

独立行政法人日本学術振興会 先端研究拠点事業 - 拠点形成促進型 -
平成16年度 実施計画調書 (採用番号 16007)

1 **研究交流課題名** コンビナトリアル手法による新材料開発とその情報化に関する
国際協力体制の構築

研究交流課題に

係るホームページ: <http://combi.jp>

2 **経費支給期間** 平成16年 4月 1日 ~ 平成 18年 3月 31日(24ヶ月)

3 実施組織

日本側

日 本	研究拠点機関名	独立行政法人 物質・材料研究機構
	コーディネーター 職・氏名(フリガナ)	ディレクター 知京豊裕 (チキョウ トヨヒロ)
	協力機関名 (機関数)	東京工業大学、東京大学、東北大学 (3 機関)

相手国側

米 国	研究拠点機関名	ワシントン大学
	コーディネーター 職・氏名(フリガナ)	教授 大内 二三夫 (オオウチ フミオ)
	協力機関名 (機関数)	NIST, メリーランド大学 ノースカロライナ大学 (3 機関)

ド イ ッ	研究拠点機関名	マックスプランク金属研究所 (シュツットガルト)
	コーディネーター 職・氏名(フリガナ)	研究員 Thomas Wagner (トマス ワグナー)
	協力機関名 (機関数)	 (0 機関)

4 全期間（経費終了後5年間を含む）を通じた交流目標

創薬の分野で広く普及したコンビナトリアル手法（材料を系統的に組み合わせて合成する手法）は材料分野に応用されつつある。しかし、コンビナトリアル材料研究に求められる本質はこれらの合成・評価によって生まれた成果から、新しい材料、特性を予測する「イオンフォーマティクス」の構築である。これは材料科学の世界と情報科学との融合を目指す新しい試みでもある。この研究事業では、多様化し高速化する材料開発のための「材料データベース」の作成を国際協力の下に進め、国際的な「イオンフォーマティクス」の基本構造の構築を我が国が中心となって進める。

5 前年度までの交流活動による目標達成状況（平成15年度採用のみ記入）

--

6 本年度の交流計画の概要

（共同研究）:ここではアメリカ合衆国とヨーロッパの研究機関との間でイオンフォーマティクス作成に関する共同研究を進める。

アメリカ合衆国：ワシントン大学、メリーランド大学、アメリカ標準研究所(NIST)との間で、磁性、誘電材料、熱伝材料など幅広い特性を持つ酸化物材料と関連する材料の薄膜データベースの作製を行う。また、特に NIST とは物質・材料研究機構との包括協定に基づき金属/酸化物界面の構造と電気的特性に関するデータベース化を作成する。

ヨーロッパ：マックスプランク研究所との研究協力は3種類の金属薄膜材料を系統的に合成して、それぞれの組成でどのような構造を持つかを調べる。まこれまでの3種類の合金との違いを薄膜特有な内部の歪などの観点から議論したデータベースの作成を目指す。

（セミナー）:イオンフォーマティクス（材料データベースから新材料の設計や予測を目指したソフトウェア）に関する意見交換をわが国が中心になって進める観点から、平成16年度にセミナー、「第3回コンビナトリアル材料科学とその応用に関する国際会議」を国内で開催し、材料合成、高速評価、イオンフォーマティクスの関連を世界各国からの参加者との意見交換を行う。

（研究者交流）:イオンフォーマティクスに関係する国内外の研究者間の交流を進める。国内では東京工業大学での材料合成、東北大学での構造解析、東京大学でのデータベース化、物質・材料研究機構での異種材料合成を行い、得られた結果をイオンフォーマティクスに反映させる。また、関連する研究内容を応用物理学会で発表する。国外ではアメリカ材料学会やアメリカ真空学会にてコンビナトリアル材料化学やイオンフォーマティクスに関する発表を行い、連携する機関へも研究者、大学院生を派遣し、意見交換を進める。