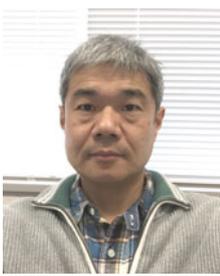


【特別推進研究】

理工系（数物系科学）



研究課題名 星間塵表面における分子進化の解明：素過程からのアプローチ

北海道大学・低温科学研究所・教授 わたなべ なおき
渡部 直樹

研究課題番号： 17H06087 研究者番号： 50271531

研究分野： 数物系科学、地球惑星科学

キーワード： 地球外物質科学、星間化学物理、星間塵表面反応、表面化学

【研究の背景・目的】

太陽系に存在する多種多様な分子は、大量のガスと固体微粒子（星間塵）からなる、分子雲と呼ばれる極低温領域を起源に持つ。そこには原子や簡単な分子から生成・進化（分子進化）した、複雑有機分子を含む多種多様な分子が存在する。宇宙の真空・極低温環境で、分子がいかに進化を遂げたかを知ることが本研究の大きな目標である。

分子進化に重要な役割を果たす始原的な星間分子（ H_2 , H_2O , CO_2 等）や多くの有機分子の生成には、極低温の星間塵上での表面反応が不可欠である。表面反応は表面の化学組成や構造に大きく依存し、それが分子雲の化学的多様性にも繋がると考えられるが、その詳細は分かっていない。本研究では、星間塵表面物質である、ケイ酸塩鉱物、炭素質物質、氷表面それぞれにおける化学物理素過程を実験で明らかにし、分子雲における分子進化の解明を目指す。

【研究の方法】

本研究では、有機分子を含む多くの分子生成に関与し、極低温表面で化学反応を可能にする量子効果が顕著に現れる、水素が関わる以下の素過程の情報を実験により獲得する。

- (1) 分子生成プロセス
- (2) 重水素濃集プロセス
- (3) 分子の原子核スピン転換機構

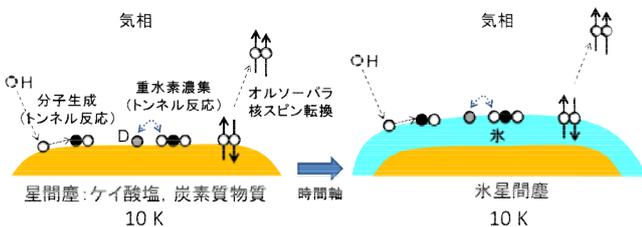


図 1：分子進化を理解する鍵となる星間塵表面過程（分子生成、重水素濃集、核スピン転換）。分子雲では、ケイ酸塩・炭素質物質微粒子上に時間とともに水分子などが生成・蓄積して氷星間塵となるため、それぞれの表面物質における素過程を定量的に調べる必要がある。

実験では、超高真空槽中の極低温基板上に各種試料表面を作製し、擬似的な星間塵表面を再現する。試料表面は電子顕微鏡や原子間力顕微鏡を用いて評価する。(1)、(2)に関しては、赤外吸収分光法、共鳴多光子イオン化 (REMPI) 法、高感度質量分析器を用いて行い、(3)については、和周波発生分光

法、REMPI 法を用いる。実験で求めるものは、極低温表面における原子・ラジカルの表面拡散係数、表面反応速度、核スピン転換のメカニズムとその速度、およびそれらの温度依存性である。

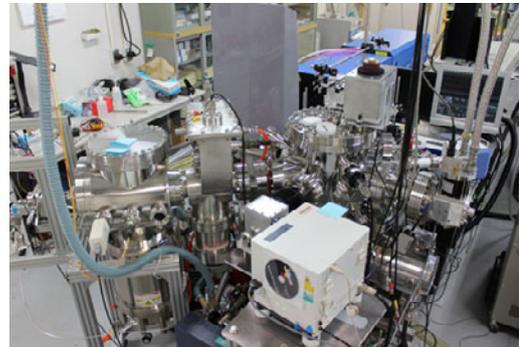


図 2：本研究で用いる実験装置の一部

【期待される成果と意義】

星間塵表面での化学物理プロセスは分子雲における初期分子生成・重水素濃集の鍵を握っているが、その理解には推測による部分が多く残されている。本研究で、さまざまな表面物質や表面構造、温度で系統的な実験を行うことにより、その理解を格段に深めることができる。これまでブラックボックスであった分子雲における初期分子進化の全容解明に、初めて迫ることができる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ T. Hama, N. Watanabe, “Surface Processes on Interstellar Amorphous Solid Water: Adsorption, Diffusion, Tunneling Reactions, and Nuclear Spin Conversion”, Chem. Rev. 113, 8783 (2013)
- ・ H. Ueta, N. Watanabe, T. Hama, A. Kouchi, “Surface Temperature Dependence of Hydrogen Ortho-Para Conversion on Amorphous Solid Water”, Phys. Rev. Lett. 116, 253201 (2016)

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度
433,900 千円

【ホームページ等】

<http://www.lowtem.hokudai.ac.jp/astro/>

【特別推進研究】

理工系（数物系科学）



研究課題名 サブサイクル時間分解走査トンネル顕微鏡法の開発と応用

筑波大学・数理物質系・教授

しげかわ ひでみ
重川 秀実

研究課題番号：17H06088 研究者番号：20134489

研究分野：数物系科学

キーワード：走査トンネル顕微鏡法、CEP制御、サブサイクル分光

【研究の背景・目的】

原子レベルの空間分解能を持つ走査トンネル顕微鏡（STM）とフェムト秒領域の時間分解能を持つ超短パルスレーザー技術を融合することにより、（1）STM（原子レベル）の空間分解能で局所構造や電子状態を確認しながら、（2）フェムト秒（光学的パルス幅）の時間分解能で分光を行うことが可能な新しい分光技術の研究を進め、世界に先駆けて同手法の開発に成功すると共に局所スピンの超高速ダイナミックスの計測などを可能にしてきた。本研究では、こうした技術を基盤とし、CEP(carrier envelope phase)と呼ばれるパルス光内の電場の位相の直接制御など、量子光学の先端技術を導入することにより、サブサイクル(電場一周期)の現象を制御して STMの空間分解能でプローブすることを可能にする極限計測法を開発し、新たな科学領域の開拓を試みる。

【研究の方法】

開発を進めてきた時間分解 STM は、光学的ポンププローブ法を STM と融合することにより誕生したが、パルス光には数周期の電場が含まれ、その位相も制御されてはいなかった。本研究では、新光源や位相制御などの先端技術を導入し、励起光の位相変動など微弱信号を取り出す為の新たな工夫を凝らすことにより、サブサイクルのダイナミックスを STM の分解能で顕わにする測定法を実現する。STM 探針直下の電場は 10^6 倍程の大きさに増幅される為、STM で周囲の環境を確認しながら、目的とする局所構造を選択的に励起できる。従って、モノサイクルのパルス光を用い CEP 制御することで、局所物性を励起電場で制御しながらダイナミックスをサブサイクルでとらえる仕組みが可能になる。

【期待される成果と意義】

図 1 に分子を対象とした場合の例を示す。通常の超高速分光では物性を励起した後の緩和過程を観察するが、本手法では物性を制御しながらサブサイクルで時間分解測定を行う。こうした情報は分子機能を最大限に引き出すだけでなく、全く新しい機能を発現させ活用する為の基礎となる可能性を持ち、分子マシン、触媒、薬剤開発など幅広い応用が拓ける。また測定対象は分子に限らず半導体素子内のキャリアや相転移のダイナミックスなど多岐に亘り、新しい学術領域の創出が期待される。

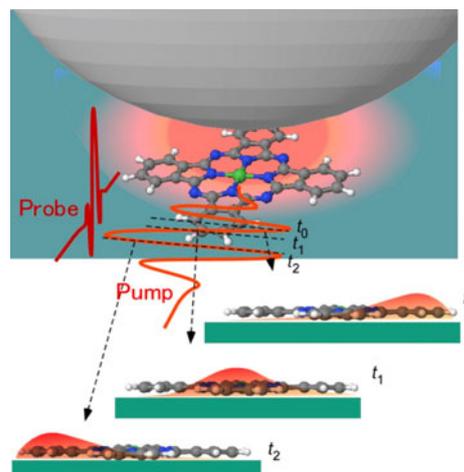


図 1 モノサイクルの外場により単一分子内の電荷移動や遷移、分子構造などを制御し、それらダイナミックスを STM を用いて計測し可視化する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Y. Terada et al., Real space imaging of transient carrier dynamics by nanoscale pump-probe microscopy, *Nature Photon.* 4, 869-874 (2010).
- S. Yoshida et al., Probing ultrafast spin dynamics with optical pump-probe STM, *Nature Nanotech.* 9, 588-593 (2014).
- S. Yoshida et al., Revealing conformational dynamics in single-molecule junction by site- and angle-resolved dynamics probe method, *ACS Nano* 10, 11211-11218 (2016).
- K. Yoshioka et al., Real-space coherent manipulation of electrons in a single tunnel junction by single-cycle terahertz electric fields, *Nature Photon.*, 10, 762-765 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度
453,600 千円

【ホームページ等】

<http://dora.bk.tsukuba.ac.jp/>
hidemi@ims.tsukuba.ac.jp

【特別推進研究】

理工系（数物系科学）


研究課題名 統合観測システムで解き明かす乱流プラズマの構造形成原理と機能発現機構

九州大学・応用力学研究所・教授

ふじさわ あきひで
藤澤 彰英

研究課題番号：17H06089 研究者番号 60222262

研究分野：理工系

キーワード：プラズマ、乱流、構造形成、機能発現、トモグラフィー、スケール間結合、乱流偏在

【研究の背景・目的】

自然界において観測にかかる対象の99%はプラズマ状態にあると言われるように、プラズマは自然界の至る所に存在します。そのプラズマの構造やダイナミクスを決定しているのが乱流です。特に、核融合を目指したプラズマの磁場閉じ込めの研究では乱流は特性を決めるものとして半世紀以上にわたって国際的に研究されてきました。その結果、今、プラズマ乱流の新しい見方が提案され革新的な時代を迎えています。それは、乱流プラズマ中に存在するスケールの違った揺らぎの結合が大域相関を生み局所的な揺らぎを同調させ、プラズマの特性を決めているとするものです。本研究の目的は、このパラダイムに基づいて、乱流プラズマの本質に迫り、その構造形成や機能発現の原理を解明することです。

【研究の方法】

本研究では、プラズマ乱流研究に特化した新装置「プラズマ乱流統合観測システム」を製作し（図1参照）、乱流の理解を目指し実験を行います。ミクロな揺らぎの時空間スケールでプラズマ乱流場全域を局所精密に観測（大域局所精密観測）できる世界初の装置で、スケール間結合の実態や乱流の偏在を計測することで理論・シミュレーションと協働し実験的に乱流プラズマの構造形成や機能発現原理を探求します。

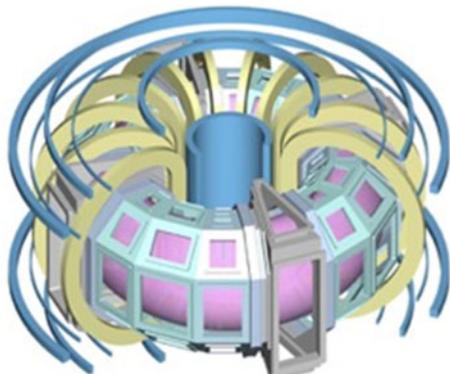


図1. プラズマ乱流の理解を目指した装置 PLATO

その主役となる計測は、プラズマの発光を利用し無摂動な多波長超多点乱流トモグラフィーです。この方法は、この課題の前身となる科研費（基盤研究A 23246162）のプロジェクトにより直線プラズマを

対象としたプロトタイプを製作し原理実証されています（図2参照）。さらに、この新しい計測システムに加え、局所的な精密計測に優れた重イオンビームプローブやマイクロ波計測などの無摂動計測装置を相補的に用います。また、重イオンビームプローブは電場、磁場、密度を同時に観測できる卓越した能力を有しており、これらの先進的な観測法を総合的に用いて乱流研究を進めます。

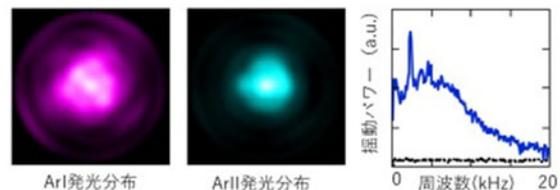


図2. 乱流トモグラフィーのプロトタイプで得られた直線アルゴンプラズマの発光と揺らぎのスペクトル

【期待される成果と意義】

トラス型の磁場は自然界に普遍的に現れる構造で、その中に閉じ込められた乱流プラズマの研究は自然界で起こる諸々の現象の本質的理解に重要です。例えば、太陽内部の速度不連続面、アクリションディスク周りの輸送、ダイナモ磁場生成機構などの理解にも大きく貢献できます。さらに、非平衡非線形系において揺らぎが構造を形成し機能を発現することは物理、化学、生物、社会科学など広い分野の共通課題です。本課題は、自然認識の柱「究極の物質」と相補的な「万物流転の法則」を探求することで、核融合など技術応用の基礎を与える遠非平衡系物理学として多くの分野に波及効果をもつ意義のある研究です。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ A. Fujisawa, Nuclear Fusion **49** (2009) 013001.
- ・ A. Fujisawa, Y. Nagashima, S. Inagaki et al., Plasma Phys. Control. Fusion **58** (2016) 025005

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度
448,600 千円

【ホームページ等】

http://tokusui.riam.kyushu-u.ac.jp/PLATO_project/index.html

【特別推進研究】

理工系（数物系科学）



研究課題名 革新的質量分光器を用いた重元素の起源の研究

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・教授

わだ みちはる
和田 道治

研究課題番号：17H06090 研究者番号：50240560

研究分野：原子核物理学

キーワード：質量測定、 r 過程、超重元素、MRTOF、イオントラップ

【研究の背景・目的】

原子の質量はその構成要素である陽子・中性子・電子の総和に比べて極僅か軽い。この「質量欠損」は原子の全結合エネルギーに相当し、原子核研究において最も重要な原子の特性である。系統的な質量値の比較は、原子核の崩壊様式、変形、殻効果等の核構造研究に加えて、重元素の起源の解明に繋がる。

今日の原子核物理学の重要課題の一つは白金やウランなどの重元素の起源である。Fowler らによる「速い中性子捕獲過程 (r 過程)」によって爆発的天体現象で生成されたという仮説が有力であるが、この過程に関与する原子核は安定線から遠く離れた中性子過剰核であり、質量・半減期等の実験データは極めて乏しく、その拡充が強く求められている。

r 過程の終端でもある超重元素領域では、最近 Nh($Z=113$)から Og($Z=118$)まで新元素が命名されたが、熱い融合反応による新元素はより確実な原子番号と質量数の同定が求められている。精密質量は原子核にユニークな指紋であり、質量値から確実な同定が可能であると同時に、現在の超重元素の先にあると予測される「安定の島」へ到達する里標を築くものである。

本研究では、新しく開発した高能率・高精度・高確度の質量分光器を、現在世界一多種類の原子核を生成できる施設に複数台展開して、超重元素から中重核に至る広い範囲の多数の原子核の質量を系統的に精密測定して元素の起源の研究を圧倒的に進歩させる計画である。

【研究の方法】

理化学研究所の加速器施設 RI ビームファクトリには、超重元素生成に適した GARIS、中性子過剰核生成に特化した KISS、満遍なく広範囲の短寿命核を生成する BigRIPS+SLOWRI という 3 箇所短寿命核を提供する施設がある。この施設で得られる様々なエネルギーの短寿命核ビームは、高周波イオンガイドガスセルを用いてイオントラップに捕集され、多重反射型飛行時間測定式質量分光器(MRTOF-MS)によって質量分析される。

MRTOF-MS は、一対の静電ミラーからなる飛行管からなる単純な構造の測定器で、イオントラップで冷却されたイオンバンチをパルス入射し、百回程度往復させた数 ms の飛行時間後引き出して検出し、この総飛行時間から質量を決定する。静電ミラーを

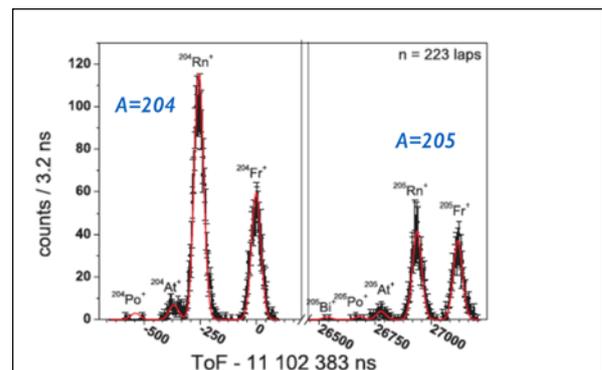


図1 質量数 204, 205 同重体の ToF スペクトル

用いることで多少の初期エネルギー広がりによらずに質量分解能 200,000 が達成できる。この質量分光器は、同重体と近傍の質量数核の同時測定が可能な高能率な測定器であり、常に同重体を参照（校正）イオンにする独自の手法（特許出願中）により長時間の測定でも高精度・高確度を維持できる。さらに半減期 10ms の短寿命核でも特段の損失無く 10^{-7} の高精度で測定できる唯一の直接質量測定法である。

【期待される成果と意義】

重元素の起源研究には超重元素から中重核まで数百核種の精密質量測定が必要であるが、あらゆる元素の短寿命核をイオントラップする技術と高能率・高精度・高確度の質量分光器を組み合わせる事で、それが達成できる予定である。さらに超重元素の精密質量測定が可能な唯一の装置として、原子核物理学の夢の一つである安定の島への道筋を示すことが期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- P. Schury et al., Phys. Rev. C95 (2017) 11305(R)
- S. Kimura et al., arXiv:1706.00186 (2017)
- M. Wada, Nucl. Inst. Meth. B317 (2014) 450

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度
427,100 千円

【ホームページ等】

<http://research.kek.jp/group/wnsc/>
michiharu.wada@kek.jp

【特別推進研究】

理工系（化学）



研究課題名 分子活性化を基軸とする次世代型触媒反応の開発

大阪大学・大学院工学研究科・教授

ちやたに なおと
茶谷 直人

研究課題番号：17H06091 研究者番号：30171953

研究分野：化学

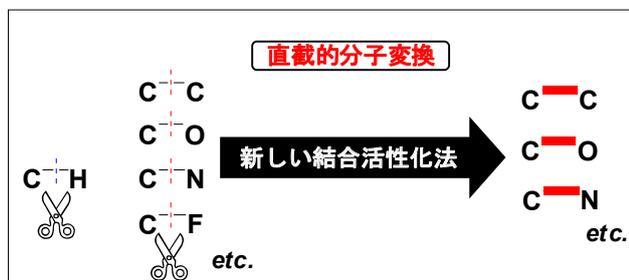
キーワード：有機合成化学、選択的合成、錯体・有機金属触媒

【研究の背景・目的】

有機合成反応とは、有機分子中の化学結合を切断し、新たに別の化学結合に置き換える反応である。有機分子は多種多様の化学結合を含んでいるが、そのすべての化学結合を有機合成反応に利用してきたわけではない。反応性が高く、そして入手容易な化学結合のみを利用してきた。これらの化学結合は、一般的に官能基と呼ばれている。つまり、現代の有機合成反応は、結合の高い反応性に大きく依存してきた。もし、今まで有機合成反応にほとんど利用されてこなかった不活性な化学結合を有機合成化学に使うことができれば、有機合成化学における方法論を多様化させることが期待される。本研究の目的は、結合の反応性に大きく依存している現在の有機合成手法を多様化することで直截的分子変換反応を開発することにある。

【研究の方法】

不活性な化学結合の代表が、炭素-水素結合である。今までの多くの研究がなされてきたが、反応形式の数が少ない、反応性・位置選択性が配向基に依存しているなど解決すべき問題が多く残っている。さらに、炭素-水素結合以外にも、炭素-炭素、炭素-酸素、炭素-窒素、炭素-フッ素、炭素-ケイ素、炭素-硫黄結合など、不活性な結合は他にも数多くあるにもかかわらず、それらの触媒的変換反応の開発は、炭素-水素結合の変換反応に比べ、大きく立ち遅れている。



分子活性化・結合活性化を利用して、より安価で単純な原料から安全・高効率・経済的・直截的に物質合成を行う

われわれのグループでは、様々な不活性結合の活性化を並行して行っていることが、大きな特徴であり、また強みである。したがって、他の研究グループではなし得ない、相乗的に革新的な成果を挙げる

ことが期待できる。

【期待される成果と意義】

新規で画期的な汎用性のある分子活性化あるいは結合活性化の方法論が創成されれば、有機合成化学の手法そのものが代わることが期待される。多くの研究者がその分野に参入し、その結果、さらに新しい発見があり、研究分野の流れを大きく変えることが期待される。本研究で、われわれがめざしているのは、そのような分野創成に貢献できる方法論の開発である。

特に、飽和の炭素-水素結合活性化で配向基に頼らない炭素-水素結合活性化反応の開発を目指していきたい。今までの有機合成化学は、結合の反応性に大きく依存していたので、目的物を合成するために多段階を必要とした。しかし、今まで利用することができなかった様々な結合を直接、有機合成反応に利用することができれば、短縮合成も可能となり、廃棄物が少なく、環境に優しい有機合成化学が可能となる。結合の反応性に大きく依存している現在の有機合成手法を変革することが期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Nickel-Catalyzed Direct Arylation of C(sp³)-H Bonds in Aliphatic Amides via Bidentate-Chelation Assistance, Y. Aihara and N. Chatani, *J. Am. Chem. Soc.*, **136** (3), 898-901 (2014).
- M. Tobisu, T. Takahira, T. Morioka, and N. Chatani, Nickel-Catalyzed Alkylative Cross-Coupling of Anisoles with Grignard Reagents via C-O Bond Activation, *J. Am. Chem. Soc.*, **138** (21), 6711-6714 (2016).
- T. Morioka, A. Nishizawa, T. Furukawa, M. Tobisu, and N. Chatani, Nickel-Mediated Decarbonylation of Simple Unstrained Ketones through the Cleavage of Carbon-Carbon Bonds, *J. Am. Chem. Soc.*, **139** (4), 1416-1419 (2017).

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度 - 33 年度
427,300 千円

【ホームページ等】

<http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~chatani-lab/>



研究課題名 炭素—水素活性化の化学の深化による有機合成技術の革新

大阪大学・大学院工学研究科・教授 みうら まさひろ
三浦 雅博

研究課題番号：17H06092 研究者番号：20183626

研究分野：化学、複合化学、合成化学

キーワード：炭素—水素結合活性化、クロスカップリング、有機機能性材料

【研究の背景・目的】

近年、炭素—水素結合の触媒的活性化の化学は、新しい効率的な次世代型分子変換法の開発基盤として注目を集め、国内外を問わず最も活発に研究が行われている分野の一つである。本課題では、研究代表者らがこれまでに蓄積してきた当該分野に関する知見を基に、炭素—水素結合活性化の化学を確固たる学問領域として確立し、真に有用な有機合成化学の技術として体系化するための礎となる研究を推進する。具体的には、(1) 概念的に新規な炭素—水素結合活性化触媒の創出と高難度分子変換手法の開発、(2) 実践的かつ標的指向型の直接クロスカップリング反応の開発による高性能機能性分子の創製、(3) 炭素—水素結合活性化・切断の機構解明、の三点を研究の中心に据える。これにより「直接クロスカップリングの真の価値」の創造に資することを目標とする。

【研究の方法】

上記の目標の達成に向けて、以下の課題(1)～(3)を実施する。

(1) 新規遷移金属錯体触媒と酸化剤の協働機能による芳香族化合物の酸化カップリング:研究代表者らが炭素—水素結合活性化のために独自開発したロジウム触媒系からの発展的新概念による新規錯体触媒系の設計と高難分子変換反応法の開発を目指す。

電子的ならびに構造的に柔軟な配位子を触媒中心に組み込み、触媒と外部酸化剤が協働的に機能する特異な反応場を構築することで、従来必須とされていた配向性官能基を持たない、ベンゼンをはじめとする単純な芳香族化合物の直接的かつ高度な分子変換手法を開発する。

(2) 直接クロスカップリングによる高度縮環(ヘテロ)芳香族化合物の合成と機能創出: 二つの異なる炭素—水素結合を選択的に活性化し、複数の炭素—炭素結合を一挙に形成する多重脱水素環化反応や、アルキンとの酸化的多重縮環反応を促進する触媒反応を開発する。これを応用することで平面ならびに非平面型の高度縮環炭素環およびヘテロ環化合物を合成する。これらはホール及び電子輸送材料や強発光材料、またキラリティーに基づく円偏光発光材料の創製へと展開する。

(3) 炭素—水素結合活性化のメカニズム解明: これまでに国内外での活発な研究によって、炭素—水素結合活性化のための多種多様な触媒系が開発されてきた。しかし、その反応機構の多くは詳細が明らかになっておらず、このことが新たな反応や触媒の理論的設計を阻んでいる。本研究では、第二周期とともに第一周期の遷移金属種の分子機構の解明も視野に入れ、錯体化学を中心としたアプローチを展開する。また、計算化学的アプローチも組み込み、炭素—水素結合活性化の学理の確立に寄与する。

【期待される成果と意義】

上記のように、本研究では「直接クロスカップリングの真の価値」の創造に向けて、新規高性触媒の創出とそれに基づく高難度分子変換法の開発、新規機能性材料創製法の開発、炭素—水素結合活性化のメカニズム解明を目指すものである。これにより、当該先端学問領域を深化させるとともに、環境調和性の高い新しい分子変換技術と機能性分子の創製法を生み出し、物質供給面から現代社会の持続可能な発展に対して貢献することが期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Development of Direct Aromatic Coupling Reactions by Transition Metal Catalysis, M. Miura, T. Satoh, K. Hirano, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2014**, *87*, 751-764.
- Recent Advances in Copper-Mediated Direct Biaryl Coupling, K. Hirano, M. Miura, *Chem. Lett.* **2015**, *44*, 868-873.

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度—33 年度
388,800 千円

【ホームページ等】

<http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~miura-lab/miura@chem.eng.osaka-u.ac.jp>

【特別推進研究】

理工系（工学）



研究課題名 スピントロニクスを用いた人工知能ハードウェア
パラダイムの創成

東北大学・電気通信研究所・教授 **おおの ひでお**
大野 英男

研究課題番号：17H06093 研究者番号：00152215

研究分野：工学

キーワード：スピントロニクス、電子デバイス・集積回路

【研究の背景・目的】

CMOS 集積回路ハードウェアと人工知能（AI）ソフトウェアの高度化により、従来は難しかった認識や判断といった高度な情報処理を計算機で実行することが可能となってきた。しかし一般の AI は膨大な計算機リソース、電力供給、及びビッグデータへのアクセス手段が前提となっており、これが今後の多様な社会実装への拡大を妨げる大きな壁となっている。このような壁を乗り越えて、AI システムを一層進展させるためには、ハードウェアの高度化と低消費電力化、そして小型化により、ウェアラブルあるいは身近な家電や携帯機器に組み込まれ、学習により使用者や環境に適応する“エッジ”AI ハードウェアを実現することが不可欠となる。このような要求を従来の CMOS 集積回路技術だけで満たすのは難しく、新たなテクノロジーによる AI システムの実現（パラダイムの創成）が喫緊の課題となる。本研究はこのような背景のもと、スピントロニクス素子の省電力性、高速性、及び無限回の書き換え耐性を活かし CMOS 集積回路に融合・集積することで初めて実現できる AI システムにおけるハードウェアに関して新たなパラダイムの創成を目指すものである（図1）。

計実現する。加えて、スピン系が備えるアナログ性や確率性を支配する物理、材料科学を深耕して AI 用スピントロニクス素子を実現し、またその効果を最大化するスピントロニクス集積回路の設計基盤を構築する。このために本研究は以下の3つの主要課題、①AI コンピューティングハードウェア向けスピントロニクス素子の開拓、②ノイマン型 AI コンピューティングハードウェアの実現、③非ノイマン型 AI コンピューティングハードウェアの実現、から構成する。

【期待される成果と意義】

CMOS 集積回路とスピントロニクス、さらに脳型処理の融合により新しいパラダイムを創成することは AI 分野全体、及び関連分野における新しい学理の構築につながる。例えば分散学習や情報選択、分散記憶などのハードウェアに対応した新しい AI の概念が創出・確立され、自律分散処理 AI の基礎が構築される。また生体の脳で見られるような素子ばらつきを許容して知能処理を行う脳型計算機構とスピントロニクスの融合は、ハードウェア効率を飛躍的に高める可能性を含んでおり、IoT 社会への普及が期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ S. Fukami, C. Zhang, S. DuttaGupta, A. Kurenkov, and H. Ohno, “Magnetization switching by spin-orbit torque in an antiferromagnet-ferromagnet bilayer system,” Nature Materials, vol. 15, pp. 535-541 (2016).
- ・ W. A. Borders, H. Akima, S. Fukami, S. Moriya, S. Kurihara, Y. Horio, S. Sato, and H. Ohno, “Analogue spin-orbit torque device for artificial-neural-network-based associative memory operation,” Applied Physics Express, vol. 10, 013007 (2017).

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－平成 33 年度
447,300 千円

【ホームページ等】

<http://www.ohno.riec.tohoku.ac.jp/>
ohno@riec.tohoku.ac.jp

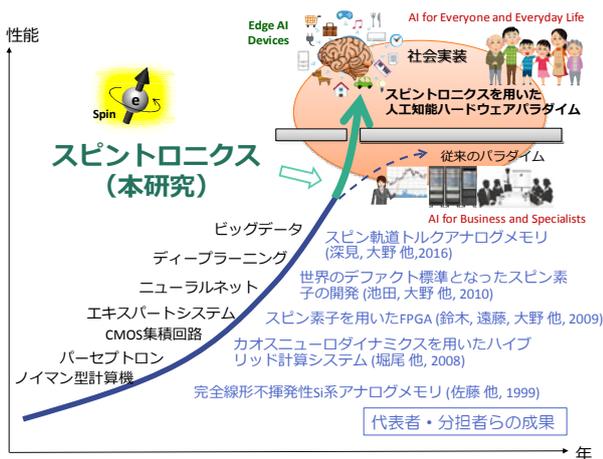


図1 人工知能の発展と本研究の位置づけ

【研究の方法】

本研究では、スピントロニクスを用いた AI ハードウェアパラダイムの創成を念頭に、不揮発性スピン素子を用いた AI ハードウェアとしての集積回路を設

【特別推進研究】

理工系（工学）



研究課題名 原子・イオンダイナミクスの超高分解能直接観察に基づく新材料創成

東京大学・大学院工学系研究科・教授

いくはら ゆういち
幾原 雄一

研究課題番号：17H06094 研究者番号：70192474

研究分野：工学

キーワード：原子・電子構造評価

【研究の背景・目的】

材料・デバイスのマクロな特性は、その内部に形成された界面、表面、点欠陥などのナノレベルの微細構造（ナノ構造）と密接に関連している。したがって、革新的な高機能・高性能材料を創出するためには、ナノ構造と機能発現の本質的メカニズムを解明し、その知見に立脚した材料設計を行う必要がある。材料内部に局在するナノ構造を解明するためには、原子分解能走査透過型電子顕微鏡（STEM）が非常に有効であるが、現状は静的な観察に留まっており、各種機能が発現するダイナミックな環境下での直接観察までには至っていない。

そこで本研究では、最先端原子分解能STEM法を、材料内部の超マイクロ現象の動的観察手法へと大きく進化させ、材料ナノ構造形成、機能発現の原子・イオンダイナミクスを可視化することを目指す。具体的には、構造材料、機能セラミックス、触媒、電池など、材料内部のナノ構造とそれに伴う原子・イオンダイナミクスが機能特性発現の鍵となる材料群を対象とする。これより、原子・イオンダイナミクスの超高分解能直接観察に基づくナノ構造設計・制御指針を確立し、新物質・新材料開発の基礎・基盤学理を構築することを最終的な目的とする。

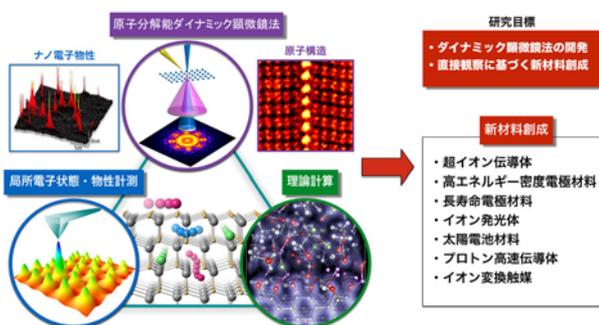


図1 本プロジェクトの概要

【研究の方法】

原子・イオンダイナミクスの直接観察を行うためには、原子分解能STEMの時間分解能を飛躍的に向上させる必要がある。このため、電子プローブ高速スキャンシステムおよび高速電子検出システムを開発し、高速観察手法の確立を図る。また、実環境下にて発現する原子・イオンダイナミクスをSTEM内において再現するため、温度や荷重、電位といった試料環境が高度に制御できるその場観察用特殊試料

ホルダーの開発を進める。開発の完了した装置を順次投入し、高空間・高時間分解能での原子・イオンダイナミクス観察を実施する。観察結果に基づいて、STEM分光法やプローブ顕微鏡を用いた局所物性測定、理論計算等を行い、原子・イオンダイナミクスと材料物性との相関性を明らかとする。上記手法を様々な材料系へ適用することにより、材料ナノ構造の原子・イオンダイナミクスの超高分解能直接観察に基づく物質・材料創成を目指す。

【期待される成果と意義】

材料ナノ構造における原子・イオンダイナミクスの直接観察が可能となれば、材料内部でどのようにナノ構造が形成され、機能を発現するのかに関する本質的な理解が可能となり、これまでブラックボックスであった材料開発領域に画期的な指針をもたらすことが期待できる。具体的には、材料ナノ構造のダイナミクスを利用した超高速イオン伝導体、高性能電池電極材料、超高強度セラミックス、高性能電子デバイスなど様々な材料分野に大きな波及効果を有すると考えられる。また、材料中の原子・イオンダイナミクスは、材料原料から部材、製品に至るあらゆるプロセスにおいて材料を本質的に支配する現象であり、その根本的理解を可能にする新たな計測手法が確立できれば、材料科学全般の広い分野に多大な波及効果をもたらすことが期待でき、学術上の意義も非常に高いと考えられる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ N. Shibata, S. D. Findlay, Y. Kohno, H. Sawada, Y. Kondo, Y. Ikuhara, "Differential Phase-contrast Microscopy at Atomic Resolution", *Nature Phys.* **8**, 611–615 (2012).
- ・ S. Kondo, T. Mitsuma, N. Shibata, Y. Ikuhara, "Direct observation of individual dislocation interaction processes with grain boundaries", *Sci. Adv.* **2**, e1501926-1-7 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成29年度～33年度
454,000千円

【ホームページ等】

<http://interface.t.u-tokyo.ac.jp/japanese/ikuhara@sigma.t.u-tokyo.ac.jp>