

M

aterials & Structures Laboratory

No. **22**
OCTOBER 2026

NEWS LETTER

CONTENTS

フロンティア研最前線：

- P.2 材料データベースと機械学習を用いたスペクトル物性支配因子の解析

研究の展望：

- P.3 木造住宅の地震被害と、地震後の機能維持も見据えた今後の防災

学術賞：

- P.4 遷移金属化合物における無秩序分子状態の開拓と非平衡秩序状態の創発
P.4 地震後の継続使用性確保および早期復旧を目的とした鉄筋コンクリート部材の
損傷低減および損傷評価に関する一連の研究成果
P.5 超伝導体を利用した熱制御技術
P.5 免震装置における熱・力学連成挙動への対策

研究の周辺：

- P.6 実験のない実験
P.6 DxMT 科学大拠点におけるデータ駆動型新材料開発システム

- P.7 トピックス、受賞、国際会議・セミナー等、人事異動

文部科学省共同利用・共同研究拠点

先端無機材料共同研究拠点

東京科学大学 総合研究院

フロンティア材料研究所

Materials and Structures Laboratory, Institute of Integrated Research, Institute of Science Tokyo

材料データベースと機械学習を用いたスペクトル物性支配因子の解析

准教授 高橋 亮

近年、さまざまな科学・工学分野で機械学習が用いられており、材料分野でもマテリアルズインフォマティクスが盛んになっている。その主要な手法の一つが、大規模な実験・計算に基づく材料データベースから組成や原子配列と物性の関係を学習させ、低コストな物性予測モデルを構築することである。このようなモデルは物性予測により直接材料探索に使われるのみならず、モデル中のパラメータを解釈してデータを俯瞰的に解析し、材料開発に有用な知識を抽出する試みも行われている。こうした手法はバンドギャップなど様々な物性で行われているが、光吸収スペクトルなどのスペクトルデータに関しては出力が高次元となるため予測モデルの報告は限られ、その解釈の方法論はさらに未整備であった。本研究では、深層学習モデルからどのような物質群が有望で、それらがいかなる組成や原子配列の特徴を共有するのを読み解くモデル解釈の手法を開発した。

まず、2681種の酸化物・カルコゲナイド等について光吸収スペクトルの第一原理計算データベースを構築し、グラフニューラルネットワーク (ALIGNN) による予測モデルを作製した。このモデルから特徴抽出を行い、階層的クラスタリングを行うことで96の物質群へ分類した結果、スペクトル形状と組成・原子配列の特徴の双方が類似した物質群が得られた。例えば、孤立した VO_4/CrO_4 四面体を持つ酸化物群 (Cluster 74) は、伝導帯下端の局在したd状態を反映して急峻な吸収立ち上がりを示した。一方で同じV・Cr系でもアルカリ金属に乏しい酸化物は別の群 (Cluster 70) に分かれ、実際に伝導帯下端の電子状態が非局在化し、吸収端が低エネルギー化することも見出した (図1)。このように本手法はデータ駆動で吸収特性を支配する構成元素と配位環境を系統的に抽出することに成功した。またスペクトルデータそのものをクラスタリングした場合には、組成の全く異なる物質が混在して

共通因子の抽出が困難になることも確認しており、本手法の優位性を裏付けている。

本手法は光吸収に限らず多様なスペクトルや、温度・圧力等に対する物性の依存性にも適用可能であり、データ駆動型材料設計に物理・化学的な洞察を与える基盤になると期待される。

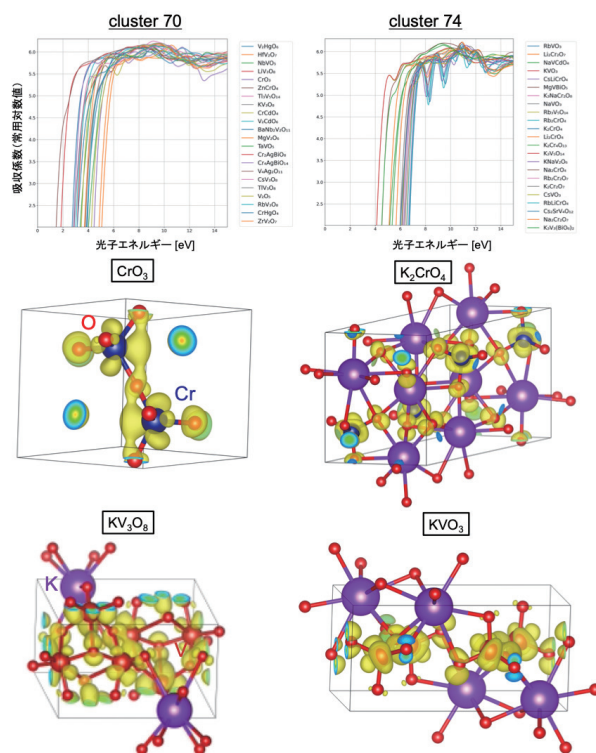


図1 機械学習により分類されたバナジウム酸・クロム酸を含む物質群 (クラスター74とクラスター70)。(上) それぞれの物質群に含まれる物質の吸収スペクトル、(下) 代表的な物質の結晶構造と伝導帯下端の電子状態。A. Takahashi et al., *Adv. Intell. Discov.*, e202600007 (2026) より転載 (CC BY 4.0)。

木造住宅の地震被害と、地震後の機能維持も見据えた今後の防災

准教授 山崎 義弘

2016 年熊本地震、2024 年能登半島地震、そして 2026 年 7 月 28 日に熊本県で発生した地震と、ここ 10 年で見ても甚大な建物被害や人命損失に繋がる地震被害が生じている。木造建築物の耐震や防災の研究を行っている一人として、繰り返される被害を目の当たりにして歯がゆさを感じる。一方で、これらの被害調査を通じてわかってきたこともある。

被害の様相

被害を受けた木造住宅は、いわゆる旧耐震基準（1981 年以前）のものが大半である。旧耐震基準では、現代の住宅に比べて求められる耐震要素（具体的には壁）の量が少なく、さらに部材同士の接合において十分な金物が用いられていないことが多い。新耐震基準とは一般に 1981 年以降の基準を指すが、木造では 2000 年にも基準が大きく変わったため、1981 年～2000 年に建てられた住宅も注意が必要である。2000 年以前に建てられた住宅にお住まいの方々は、ぜひ一度「耐震診断」を受けることをお勧めしたい。自治体による専門家の紹介や補助制度もあるので活用できる。

では、2000 年以降の住宅は被害がゼロかという、過去の大地震において僅かながら倒壊した例はある。また、構造体が健全であっても、非構造材（内壁や外壁）に割れ等の損傷が生じることもある(図 1)。このような損傷は、単に美観を損ねるだけではない。例えば外壁の割れから

雨水が進入すれば、壁体内の木材を腐朽させてしまうかもしれない。火災時には熱の進入で木材を燃焼させてしまうかもしれない。つまり、地震による損傷をきっかけに、耐久性、耐火性、環境性などにも悪影響を及ぼしかねない。

地震による損傷が住宅の各種性能に及ぼす影響の定量化

以上を踏まえ、下記の二つの検討を始めている(図 2)。

一つは、地震後の気密性能である。近年の住宅は高い省エネルギー性能が求められ、特に外壁の気密性の確保が重要である。住宅の気密性は、外壁の構成要素（下地面材、壁紙、断熱材、気密シート、サッシ等）とそれらの施工精度が影響すると考えられる。住宅を模した試験体に対し、徐々に損傷を与えることで、どれくらいの変形まで初期の気密性能が保たれるかを測定した。その結果、層間変形角 $1/200\text{rad}$ 程度でも気密性が有意に低下し始めることがわかった。ちなみに、 $1/200\text{rad}$ という変形角は、構造体にはほとんど影響がないレベルである。今後の耐震設計においては、構造体以外の部分の機能維持まで考える発想がより強く求められるだろう。

もう一つは、地震後の耐火性能である。地震後に発生する火災のリスクを考えると、構造体である木材を火災からまもる被覆材が、地震で損傷を受けないように配慮しなければならない。この課題についても、実大実験を行って検証していく予定である。



図 1 地震で倒壊した木造住宅（左）と、倒壊を免れた住宅において損傷を受けた内外装材（右）

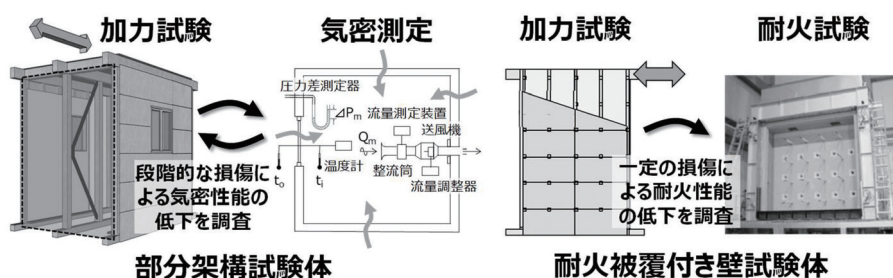


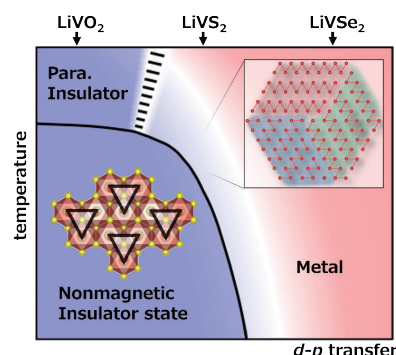
図 2 地震後の各種性能を調べる実験（左：気密性能、右：耐火性能）

研究業績部門：

遷移金属化合物における無秩序分子状態の開拓と非平衡秩序状態の創発

岡山大学 学術研究院環境生命自然科学学域 教授 片山 尚幸

固体の性質は、結晶中で原子がどのように並び、結合するかによって大きく決まる。遷移金属化合物では、複数の金属原子が二量体や三量体などの分子状単位を形成し、金属―絶縁体転移や磁性変化を引き起こす。本研究では、こうした分子秩序の「前」と「後」に着目した。LiVS₂では、低温のV三量体秩序が現れる前の高温相に、ジグザグ鎖状の局所分子が存在することを見いだした。さらに、その配向と空間分布がミリ秒～秒の時間領域で変化することを示し、高温相が静的な無秩序状態ではなく、局所分子が揺らぐ動的な「無秩序分子状態」であることを明らかにした。一方、CuIr₂S₄では、低温のIr二量体秩序に高強度X線を照射すると、秩序が単純に消失するのではなく、正方晶相や複数の立方晶相へ段階的に再編成されることを発見した。これは、光が分子秩序を破壊するだけでなく、平衡状態には現れない非平衡秩序状態を創り出す外場として働くことを示している。今後は、分子の生成・揺らぎ・崩壊・再形成を追跡し、分子状態を制御可能な自由度として利用する物質科学へ展開したい。



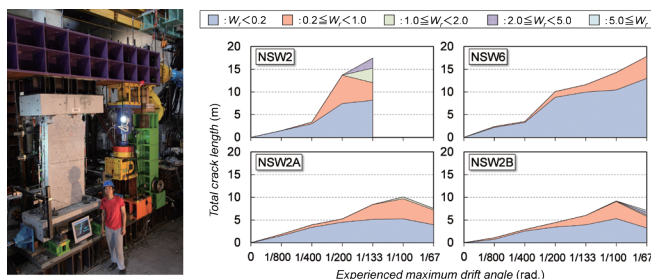
LiVS₂の高温相に現れるジグザグ鎖状局所分子とその動的ドメイン。

研究業績部門：

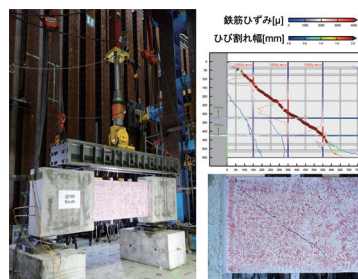
地震後の継続使用性確保および早期復旧を目的とした鉄筋コンクリート部材の損傷低減および損傷評価に関する一連の研究成果

京都大学大学院工学研究科建築学専攻 教授 谷 昌典

近年、建築物に大きな被害を生じさせる大地震が多発しており、被災した建築物が事業継続に支障をきたす事例が散見されている。地震により損傷を受けた建築物の機能低下による損失は、機能低下の度合いや機能回復の迅速さに依存する。地震によって建築物に生じる損傷を抑制し、地震による損傷および性能低下を的確かつ迅速に評価して補修・補強することで、地震後の建築物の継続使用性確保や早期復旧が可能となり、損失の軽減に繋がる。本研究では、鉄筋コンクリート(RC)部材を簡便かつ迅速に補強することを目的とした超高強度繊維補強コンクリート(UFC)パネルの接着補強工法を提案し、柱や壁部材に対する構造実験により地震時の損傷抑制効果を示した。また、ひび割れ幅やひび割れ長さといった損傷量を精緻に計測できる画像相関法を用いたひび割れ損傷量計測や、光ファイバセンサを用いた鉄筋ひずみの連続的な計測などを、壁部材を対象とした構造実験に適用し、定量化した損傷量と残存耐震性能の関連性を示した。



UFC パネル補強した RC 方立壁の損傷抑制効果



RC 壁板試験体の詳細計測結果

研究奨励部門： 超伝導体を利用した熱制御技術

東京都立大学 理学研究科 教授 水口 佳一

超伝導体は電気抵抗消失や完全反磁性など様々な性質を示すが、超伝導転移によって熱伝導特性も変化する。超伝導状態では電子がクーパー対を形成しており、電子熱伝導率が抑制される。この現象は古くから知られていたが、最近の研究で、新しい機能性の開拓が相次いでいる。例えば、相分離系超伝導合金である Sn-Pb ハンダにおいて磁気熱スイッチングの不揮発性が見出されるなど、超伝導を利用することで既存の磁気熱スイッチングでは不可能であった不揮発動作を可能とした。また、図に示すような接合無し熱ダイオードも開発された。熱ダイオードは一般的に 2 つの異なる材料の接合からなり、順方向と逆方向の熱流に対して熱伝導率差が生じる素子である。整流比 TRR の最大値は固体材料で 3 程度であった。そこで注目したのが、高純度 Pb 線の示す熱伝導率の磁場異方性 (図 a) である。磁場を長さ方向に平行または垂直に印加すると超伝導転移での熱伝導率変化が大きく異なり、図 b に示すような一部曲げた Pb 線は熱ダイオードとして動作する (図 c,d)。図 e に示す通り、曲げ率を最適化することで TRR が 2 を超える接合無し熱ダイオードを作製できる。既存の超伝導体であっても、視点を変えることで新たな超伝導応用を開拓することが可能である。

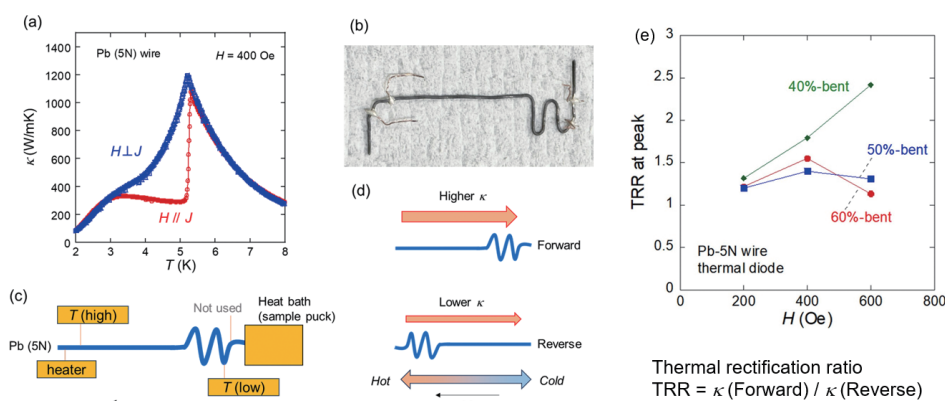


図 (a) 高純度 Pb 線の熱伝導率の温度依存性 (磁場異方性)。 (b-d) Pb 線接合無し熱ダイオードの写真と動作原理。 (e) 曲げ率を変えた場合の熱整流比 TRR の磁場依存性。

研究奨励部門： 免震装置における熱・力学連成挙動への対策

北海道大学大学院工学研究院 助教 石井 建

近年、耐震設計で想定する規模を大きく超える地震動が観測・予測されており、従来よりも高い水準での地震時安全性が要求されるようになりつつある。免震構造は通常設計レベルの地震動に対して上部建物の安全性を大きく向上させるが、そこに用いられる主要な免震装置は地震時のエネルギー吸収に応じて装置温度が上昇し減衰性能が低下するという熱・力学連成挙動を生じることが指摘されている。特に、履歴減衰による応答低減を期待する免震装置について、加力実験による熱・力学連成挙動の把握および数値解析のためのモデル化が行われている。このような背景に対して、本研究では、免震装置の熱・力学連成挙動の発生機構を詳しく分析し、地震時の性能低下を防止するための対策手法を検討した。

熱・力学連成挙動のメカニズムは、(1) 免震装置の履歴減衰による熱エネルギーの発生 (2) 熱伝導による装置各部の温度上昇 (3) 温度依存性の発揮による減衰特性の変化という三段階の挙動でそれぞれモデル化できる。たとえば装置の発熱部が一か所に集中しないように工夫することで、熱・力学連成挙動の発現は抑制可能となり、免震構造の耐震安全性の向上が期待できる。

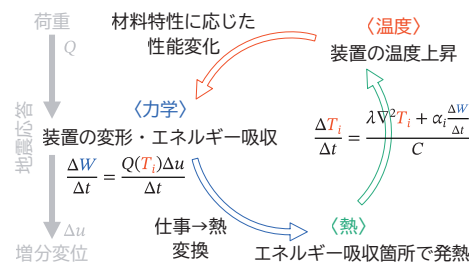


図 熱・力学連成挙動の発現メカニズム

実験のない実験

教授 稲邑 朋也

「数学は自然科学の中で唯一、実験を必要としない学問である」という言葉を聞いた時に、私は数学者とは材料学者とはまったく異なる思考をする人たちなのだろうと思っていました。

その印象が変わったのは、友人の数学者フランチェスコとの共同研究でした。彼は家業を継ぐため研究者を引退しましたが、それでも週末になると「数学者」に戻り、私たちはオンラインで議論を重ねながら約1年かけて論文を書き上げました (Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 169 (2022) , 105050)。

最も驚いたのは、彼が論理だけで考えているわけではなかったことです。「たぶんこうなる」という直観を何度も口にし、それを確かめようと、さまざまな定理や命題を組み合わせながら試行錯誤を繰り返していました。その姿は、私には「実験」をしているように見えました。彼らにとって、長い歴史の中で築かれてきた数学の体系は、未知を探るための精巧な実験装置なのだ、と感じたのです。

そして、その「実験」の途中では、ときに予想もしなかった結果が現れます。その面白さは、私たちが予想外の実験結果から新たな着想を得る瞬間とよく似ていました。実験室はなくても、そこには仮説を試し、予想外の結果から着想を得て、次の問いへ進んでいく、確かに「実験」と呼びたくなる時間が流れていました。



左端が著者、中央がフランチェスコ
2018年オックスフォードにて

DxMT科学大拠点におけるデータ駆動型新材料開発システム

教授 神谷 利夫

2022年10月より、文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト」として「智慧とデータが拓くエレクトロニクス新材料開発拠点 (D²MatE)」を遂行しています。D²MatEでは、データ駆動型で革新的な電子機能材料を開発することが目的であり、特に「智慧とデータが拓く」が語るように、実験や計算によるデータ蓄積から候補材料を抽出し、それらの合成・評価をフィードバックする研究開発ループに「研究者の知恵」を取り込むことを目指しています (図)。現在では、研究者が気づいていなかった知識を生成AIがもつ「埋もれた総合知」から発掘することができるようになってきました。

現在は、「生成AIの多数決の総合知」だけでなく、「少数意見だがブレークスルーを生み出す」独創的な発想を持つAIの構築を進めています。D²MatEではその他にも、材料探索の基盤技術を高速化・高機能化する、半導体・誘電体物性の精密計算技術、複雑な非線形解析を高速化する高速逆解析技術、計算・実験条件の最適条件探索の効率化技術などの開発を進めています。



図1 D²MatEが目指すhuman-in-the-loopの研究開発サイクル

トピックス

「2026 年度フロンティア材料研究所学術賞受賞記念講演会 および先端無機材料共同研究拠点成果報告会」

2026 年 7 月 15 日、「フロンティア材料研究所学術賞」受賞者 4 名の授賞式および記念講演会を開催しました。続いて行われた「先端無機材料共同研究拠点成果報告会」では 3 名の研究代表者により共同利用研究における成果が発表されました。



先端無機材料共同研究拠点成果報告会

「ペロブスカイト型酸化物 BiCoO_3 をベースとした巨大負熱膨張材料の開発」	酒井 雄樹 氏（総合科学研究機構 研究員）
「触媒化学のための結晶性無機材料開発」	本橋 輝樹 氏（神奈川大学 化学生命学部応用化学科 教授）
「応力関数に基づくコンクリートスラブの応力度分布算出方法の基礎的研究」	松田 頼征 氏（工学院大学 建築学部 准教授）

受賞（2026.4 ～）

受賞者	受賞	受賞内容	受賞日
山崎 義弘 准教授	日本建築学会 「2026 年日本建築学会賞（論文）」	様々な壁配置をもつ低層木質構造物の耐震性能評価と 応答制御に関する一連の研究	2026 年 4 月 15 日
大井 梓 准教授	腐食防食学会「論文賞」	亜鉛の腐食挙動におよぼす土壌含水率の影響	2026 年 5 月 21 日
大場 史康 教授	本多記念会「第 23 回本多フロンティア賞」	先進計算科学手法を駆使した無機電子材料の機能設計 と開拓	2026 年 6 月 4 日
片瀬 貴義 教授	東京科学大学 「2026 年度社会変革チャレンジ賞」	超低消費電力・高速動作を実現する新原理相変化メモ リ技術の創成	2026 年 7 月 6 日
重松 圭 特定助教	東京科学大学 「2026 年度社会変革チャレンジ賞」	電場駆動マルチフェロイック材料による超低消費電力 デバイスの実現	2026 年 7 月 6 日
YEOW Trevor Zhiqing 特任助教	日本コンクリート工学会 「第 48 回コンクリート工学講演会 年次論文奨励賞」	RC 建造物の性能設計に設計用降伏変位が与える影響 に関する研究	2026 年 7 月 10 日
陳 君怡 准教授	株式会社 資生堂 「第 19 回資生堂女性研究者サイエンスグラント」	【環境・エネルギー材料 / 電気化学 / ナノ材料化学】 二機能性ヨークシェル電極触媒による高付加価値化学 品と水素の共生成（ナノ材料触媒を用いた水素エネル ギーと高付加価値化学品の同時生成技術の開発）	2026 年 7 月 24 日

国際会議・セミナー等（2026.4 ～）

開催日	開催名	開催場所	主催・共催
2026 年 7 月 18 日	第 161 回工学地震学・地震工学談話会	横浜キャンパス	主催：東京科学大学 地震工学研究グループ 共催：フロンティア材料研究所 多元レジリエンス研究センター Resilience-Tech Society Visionary Initiative
2026 年 8 月 3 日	Science Tokyo 第 7 回 TAC-MI 最先端研究セミナー ～量子が拓く新しい物質・情報科学～	オンライン開催	主催：東京科学大学 物質・情報卓越コース 共催：フロンティア材料研究所 元素戦略 MDX 研究センター

人事異動（2026.5 ～）

異動日	氏名	異動内容	新所属	旧所属
2026 年 6 月 1 日	神田 径	昇任	構造機能設計領域 教授	構造機能設計領域 准教授
2026 年 6 月 1 日	高橋 亮	昇任	材料機能設計領域 准教授	材料機能設計領域 助教
2026 年 9 月 1 日	西久保 匠	採用	未踏材料開拓領域 助教	総合研究院 自律システム材料学研究 センター 特定助教
2026 年 9 月 1 日	Yuan JING	採用	融合機能応用領域 助教	融合機能応用領域 特任助教

フロンティア材料研究所

Materials & Structures Laboratory

NEWS LETTER

No. **22** OCTOBER 2026

発行日 令和8年10月1日

編集・発行 東京科学大学 総合研究院
フロンティア材料研究所
共同利用・研究支援室

お問い合わせ 〒226-8501 横浜市緑区長津田町4259 R3-27
TEL.045-924-5968
電子メール kenkyushien@msl.iir.isct.ac.jp
ホームページ <https://www.msl.iir.isct.ac.jp>