

中間評価（ステージゲート審査）結果

1. 研究課題名： 多様な非晶性固体の構造抽出スキームの開発
2. 研究代表者： 川崎 猛史（大阪大学 D3 センター 准教授）
3. 中間評価（ステージゲート審査）コメント

本課題は、物理学と情報科学の知見を融合し、非晶性固体(広い意味でのガラス)に適用可能な、新たな構造解析スキームを開発し、多様な非晶性固体における不均一な粒子運動を支配する特徴構造を抽出し、これらを記述する秩序変数を数学的に同定することを目指した研究である。さらには、本スキームを発展させ、ガラス転移現象の解明、細胞動態予測、機能材料設計等までの実現を目指す。

フェーズ1では、深層学習と Grad-CAM 法を用いて、秩序変数が未知であるガラス系における構造探索スキームを開発した。抽出した構造指標と実際の粒子変位との間に高い相関（最低温時にて約 0.9）を見出し、ガラス転移が熱力学転移である可能性を示唆する重要な成果を上げた。

フェーズ2では、非線形変換の解析による秩序変数の数理構造の解明、がん細胞や創傷治癒などの生体システムへの応用、固体蓄電材料におけるイオン伝導への展開等があげられており、異分野への展開をも目指す意欲的研究計画になっている。ガラス転移や生態現象を記述・説明する動的方程式の導出にも期待する。

以上