

## 報公賞受賞者 略歴

氏名： たなか いさお 田中 功  
京都大学大学院 工学研究科 教授  
生年月日：昭和 34 年 10 月 25 日



### 学歴・職歴

|               |                              |
|---------------|------------------------------|
| 1982 年 3 月    | 京都大学工学部金属系学科 卒業              |
| 1984 年 3 月    | 京都大学大学院工学研究科修士課程金属加工学専攻 修了   |
| 1987 年 3 月    | 大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程物理系専攻 修了 |
| 1987 年 6 月    | 大阪大学助手 (産業科学研究所)             |
| 1993 年 4 月    | 京都大学工学部 助手 (冶金学教室)           |
| 2003 年 12 月より | 京都大学大学院工学研究科・教授 (材料工学専攻)     |
| その間           |                              |
| 1992-1993 年   | ドイツ マックスプランク金属研究所・フンボルト研究員   |
| 2007 年より      | (一財)ファインセラミックスセンター・主幹研究員 兼任  |
| 2008 年より      | 米国セラミックス学会・フェロー              |
| 2008 年より      | 世界セラミックスアカデミー 第 12 期会員       |
| 2010-2012 年   | 京都大学福井謙一記念研究センター・センター長       |
| 2012 年より      | 京都大学構造材料元素戦略研究拠点・拠点長         |
| 2013-2018 年   | 科学研究費 新学術領域研究「ナノ構造情報」領域代表    |

### 受賞歴

|         |          |                                |
|---------|----------|--------------------------------|
| 平成 3 年  | (1991 年) | 日本金属学会 奨励賞                     |
| 平成 16 年 | (2004 年) | 米国セラミックス学会 リチャード・M・フルラス賞       |
| 平成 17 年 | (2005 年) | 日本金属学会 功績賞                     |
| 平成 17 年 | (2005 年) | ルーマニア科学アカデミー ドラゴミール・フルムゼスコ賞    |
| 平成 20 年 | (2008 年) | ドイツ連邦共和国 フィリップ・フランツ・フォン・ジーボルト賞 |
| 平成 24 年 | (2012 年) | 中国科学院金属研究所 リー・シュ レクチャー賞        |
| 平成 28 年 | (2016 年) | 日本セラミックス協会 学術賞                 |
| 平成 29 年 | (2017 年) | 文部科学大臣表彰 科学技術賞                 |
| 平成 30 年 | (2018 年) | 日本金属学会 増本量賞                    |
| 平成 30 年 | (2018 年) | 本多記念会 本多フロンティア賞                |
| 令和 2 年  | (2020 年) | 日本金属学会 谷川・ハリス賞                 |

## 報公賞 研究業績

### [第一原理計算に基づいた新材料探索技術の開発]

革新的な新材料の探索は、これまで経験的な知見を基に、試行錯誤的に行われてきた。これには非常に大きな労力と時間を要する。田中氏は、この材料探索に、最先端の計算科学、とくに量子力学に基づいた「第一原理計算」と、先進的な「データ科学」を取り入れ、「材料インフォマティクス」を構築して、科学的、合理的かつ効率的な材料探索工程を実現させた。

田中氏は、まず材料研究に幅広く適用可能な第一原理計算手法を開拓した。従来の計算は、絶対零度の基底状態における理想構造を対象としたものであり、材料研究への適用は限定的であった。ここに温度、化学ポテンシャル、格子欠陥など材料特性に大きな影響を持つ要素を取り込んだ。特筆されるのは第一原理計算を基にした格子振動計算を行い、統計熱力学に基づいて、自由エネルギーなどの温度依存性を定量的に評価する「第一原理熱力学」を構築したことである。これにより、新時代の材料探索に道を拓いた。開発・公開したプログラムやデータベースは世界的に広く活用されており、関連論文の被引用件数は5000件にも及ぶ。

一方で、このような第一原理的アプローチ（電子状態計算＋統計力学計算）には限界もある。与えられた現象のメカニズム解明には有用でも、現象を与えるための具体的な条件を予測することはできない。つまり、ある現象や機能の発現要因は特定できても、欲しい性能を得るための化学組成や材料組織の予測には十分ではない。これを実現するには、第一原理的アプローチに加えて、機械学習に代表されるようなデータ科学的なアプローチが必要になる。田中氏はいち早くこの必要性に気づき、わが国の材料科学界において「材料インフォマティクス」と呼ばれるデータ駆動型の材料開発を推進してきた。そして、実験データだけではなく、多数の計算データをも活用することで、たとえば、充放電時の体積変化が小さい正極材料の発見によるリチウム電池の長寿命化、超低格子熱伝導物質の探索、長時間時効で劣化しない酸化ビスマス系超イオン伝導材料、新しい光触媒材料、窒化物半導体材料等の提案と実証など、数々の新材料の探索と発見に成功してきている。

田中氏は科学研究費補助金・新学術領域研究（研究領域提案型）「ナノ構造情報のフロンティア開拓―材料科学の新展開」（2013-2017年度）の領域代表を務めたほか、文部科学省の構造材料元素戦略研究拠点長（2012-2021年度）として材料工学分野の発展のためにも貢献している。また、ドイツ政府からフィリップ・フランツ・フォン・ジーボルト賞、アメリカセラミックス学会からはリチャード・フルラス賞、公益財団法人本多記念会からは本多フロンティア賞を受賞するなど、権威ある表彰を受けてきている。

以上のような研究業績と顕彰は、田中氏のパイオニア性と新材料探索分野における貢献が世界的に極めて高く評価されている証と考えられる。