

領域略称名：ナノ構造情報  
領域番号：2505

平成30年度科学研究費補助金「新学術領域研究  
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学の新展開」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成30年6月

領域代表者 (京都大学・工学研究科・教授・田中 功)

# 目 次

1. 研究領域の目的及び概要	6
2. 研究領域の設定目的の達成度	8
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	11
4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況	12
5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	14
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	17
7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況	22
8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	28
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	29
11. 総括班評価者による評価	30

**研究組織** (総：総括班, 支：国際活動支援班, 計：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総	25106001 ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開	平成25年度～平成29年度	田中 功	京都大学・工学研究科・教授	10
Y00 支	15K21748 ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開 (国際活動支援)	平成27年度～平成29年度	田中 功	京都大学・工学研究科・教授	10
A01 計	25106002 ナノ構造解析のフロンティア開拓	平成25年度～平成29年度	松永 克志	名古屋大学・工学研究科・教授	4
A01 計	25106003 ナノ機能元素解析のフロンティア開拓	平成25年度～平成29年度	柴田 直哉	東京大学・工学系研究科・教授	6
A01 計	25106004 ナノ電子状態解析のフロンティア開拓	平成25年度～平成29年度	武藤 俊介	名古屋大学・未来材料・システム研究所・教授	4
A02 計	25106005 ナノ構造情報に基づいた機能探索	平成25年度～平成29年度	田中 功	京都大学・工学研究科・教授	5
A02 計	25106006 高圧・高温プロセスを利用した新しい構造ー機能関連の探求	平成25年度～平成29年度	谷口 尚	物質・材料研究機構・先端材料プロセスユニット・グループリーダー	5
A02 計	25106007 原子層制御による新しい材料機能探索	平成25年度～平成29年度	太田 裕道	北海道大学・電子科学研究所・教授	4
A03 計	25106008 耐環境性セラミックス材料のナノ構造制御と材料創製	平成25年度～平成29年度	北岡 諭	ファインセラミックスセンター・材料技術研究所・主席研究員	7
A03 計	25106009 ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオンクス材料の創出	平成25年度～平成29年度	菅野 了次	東京工業大学・総合理工学研究科・教授	6

A03 計	25106010 規整ナノ反応場の構築 と新しい触媒機能の創 出	平成25年度～ 平成29年度	高草木 達	北海道大学・触媒科学研究所・准教 授	5
A02 計	16H00736 材料インフォマティク スに適した機械学習法 の開拓	平成28年度～ 平成29年度	津田 宏治	東京大学・大学院新領域創成科学研 究科・教授	3
統括・支援・計画研究 計12件					
A01 公	26106502 酸化物表面における特 異なナノ構造の超高分 解能STM測定	平成26年度～ 平成27年度	一杉 太郎	東北大学・原子分子材料科学高等研 究機構・准教授	1
A01 公	26106503 転位配列制御による局 在量子構造の材料設計 と大容量化	平成26年度～ 平成27年度	王 中長	東北大学・原子分子材料科学高等研 究機構・准教授	3
A01 公	26106515 スペクトロスコーピック X線回折イメージング によるナノスケールX 線吸収分光	平成26年度～ 平成27年度	高橋 幸生	大阪大学・工学研究科・准教授	1
A02 公	26106504 ナノ構造情報解明のた めのデータ駆動型アル ゴリズム開発	平成26年度～ 平成27年度	永田 賢二	東京大学・新領域創成科学研究科・ 助教	1
A02 公	26106505 機械学習に基づく材料 探索技術の開発	平成26年度～ 平成27年度	鹿島 久嗣	京都大学・情報学研究科・教授	1
A02 公	26106506 効率的な材料探索のた めの実験計画法の開発	平成26年度～ 平成27年度	本多 淳也	東京大学・新領域創成科学研究科・ 助教	2
A02 公	26106510 材料設計における効率 的スクリーニングのた めの機械学習法	平成26年度～ 平成27年度	志賀 元紀	岐阜大学・工学部・助教	2
A02 公	26106513 統計的機械学習と第一 原理計算に基づくプロ トン伝導体の効率的探 索	平成26年度～ 平成27年度	竹内 一郎	名古屋工業大学・工学研究科・教授	3
A02 公	26106518 インフォマティクスに 基づく固体光学結晶材 料の設計	平成26年度～ 平成27年度	池野 豪一	大阪府立大学・21世紀科学研究機 構・講師	1

A03 公	26106507 圧力誘起体積収縮を用いた巨大負熱膨張物質の開発	平成26年度～平成27年度	東 正樹	東京工業大学・応用セラミックス研究所・教授	1
A03 公	26106514 配位の特異性を活用した機能性酸化物の創製	平成26年度～平成27年度	藤田 晃司	京都大学・工学研究科・准教授	3
A03 公	26106508 ゼオライト骨格の原子配列制御による高選択的反応場の構築	平成26年度～平成27年度	横井 俊之	東京工業大学・資源化学研究所・助教	1
A03 公	26106509 蛍石構造を有する薄膜の強誘電性発現機構の解明と新規強誘電体物質群の創出	平成26年度～平成27年度	舟窪 浩	東京工業大学・総合理工学研究科・教授	1
A03 公	26106516 ナノ構造情報に基づく単結晶酸化物ナノワイヤの材料創製	平成26年度～平成27年度	柳田 剛	九州大学・先導物質化学研究所・教授	1
A01 公	16H00885 ナノ電気化学セル顕微鏡による界面反応計測	平成28年度～平成29年度	高橋 康史	金沢大学・電子情報学系・准教授	1
A01 公	16H00889 スペクトロX線タイコグラフィによるナノ構造情報の可視化	平成28年度～平成29年度	高橋 幸生	大阪大学・工学系研・准教授	1
A01 公	16H00890 高エントロピー合金における原子空孔の構造と低拡散能の解明	平成28年度～平成29年度	水野 正隆	大阪大学・工学系研・准教授	1
A02 公	16H00879 「ベイズ最適化を活用した」分子自己組織化によるナノ構造制御	平成28年度～平成29年度	Packwood Daniel	京都大学・iCeMS・講師	2
A02 公	16H00881 確率モデルに基づいた結晶構造の学習および推定法の確立	平成28年度～平成29年度	本多 淳也	東京大学・新領域研・講師	2
A02 公	16H00886 (廃止) データ科学に基づくポテンシャルエネルギー関数の効率的推定とプロトン伝導体への応用	平成28年度	竹内 一郎	名古屋工業大学・工学系研・教授	1
A02 公	16H00888 構造安定化予測に基づく新規機能性酸化物の創製	平成28年度～平成29年度	島川 祐一	京都大学・化学研究所・教授	1

A02 公	16H00892 化学的／物理的剥離プロセスによるカチオン／アニオン型ナノシート合成とナノ構造解析	平成28年度～ 平成29年度	中平 敦	大阪府立大学・工学系研・教授	1
A02 公	16H00893 新規蛍光体材料のデータ駆動型開発に向けた予測モデルの構築	平成28年度～ 平成29年度	池野 豪一	大阪府立大学・大学院工学研究科・准教授	1
A03 公	16H00882 蛍石構造酸化物のアニオン制御による“直接特性制御型強誘電体”の創成	平成28年度～ 平成29年度	舟窪 浩	東京工業大学・総合理研・教授	1
A03 公	16H00883 ナノ構造制御による巨大負熱膨張物質の開発	平成28年度～ 平成29年度	北條 元	九州大学・大学院総合理工学研究院・准教授	3
A03 公	16H00884 構造設計に基づく新構造型の酸化物イオン伝導体開発	平成28年度～ 平成29年度	藤井 孝太郎	東京工業大学・理工学研究科・助教	1
A03 公	16H00891 ジルコン酸バリウム薄膜におけるナノ構造制御とプロトン輸送	平成28年度～ 平成29年度	山崎 仁丈	九州大学・稲盛フロンティア研究センター・教授	3
A03 公	16H00887 アトムプローブと走査トンネル顕微鏡による材料内部の原子配列の完全な決定	平成28年度～ 平成29年度	黒川 修	京都大学・工学研究科・准教授	1
公募研究 計28件					

## 1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

### 【我が国の学術水準の向上・強化】

本領域研究は、我が国が世界の優位にある材料科学分野をさらに強化するために立案された。材料特性において、結晶の表面、界面、点欠陥等に局在した特徴的な原子配列や電子状態＝ナノ構造が決定的な役割を担う例は極めて多い。近年になりナノ構造における個々の原子を直接観察し、その定量的情報を直接的に得るための実験および理論計算に格段の進歩があり、我が国において世界を先導する成果が数多く上げられた。本領域研究は、このナノ材料科学分野の最先端の開拓にさらなる弾みを付けるとともに、獲得されるナノ構造情報を具体的な材料設計・創出に活かすべく情報の統合化を強力に進めること、すなわちナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築を目的とする。そのために、材料科学、情報学、応用物理、固体化学、触媒化学など様々な分野で世界に誇る成果をあげている若手・中堅研究者を中心としたメンバーが結集し、一体となって研究が進め、新しい材料科学の奔流を創り出す。

本領域研究には、ナノ材料科学のフロンティア開拓とナノ構造情報の活用という2つの明確なアプローチがある。これらを密接連携させ、領域の目的を達成するために、図1に示す3つの研究項目を設けた。

**研究項目 A01：ナノ材料科学のフロンティア開拓**においては、高品質かつ多様なナノ構造情報を獲得し、領域内での融合・共同研究に供するために実験および理論計算の最先端技術の開拓を進める。具体的には最先端の透過型電子顕微鏡や原子間力顕微鏡により、ナノ構造における原子配列や元素分布、状態解析を定量的

に行うとともに、高精度第一原理計算を実施する。

**研究項目 A02：ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索**では、研究項目 A01 において獲得されたナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすべく、情報の統合化を、統計熱力学および情報学の学問体系に立脚して強力に進める。そして、高圧・高温プロセスおよび原子層制御によってナノ構造をビルトインしたモデル材料を創製する。

**研究項目 A03：ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製**では、研究項目 A01 と A02 の成果をもとに獲得されたナノ構造デザインの結果を、新しい材料創製を合理的・効率的に行うことを通じて実証する。具体的には、領域内で3つの材料課題、すなわち機能性セラミックス材料、固体イオニクス材料、触媒材料を設定し、それぞれについて、領域全体で一丸となって研究を進める。

具体的に重要な材料創製に結実させるために、3つの課題それぞれについて材料創製のエキスパートを、研究項目 A03 における計画研究代表者として配置する。このようにナノ構造情報を積極的に活用した材料開発の流れを3つの異なる材料分野において構築することにより、普遍的な材料開発原理が導かれ、材料科学への新展開が産まれると期待される。

### 【研究の学術的背景：応募領域の着想に至った経緯】

伝統的な材料技術に近代科学が適用されたのは20世紀半ばである。化学熱力学や固体物理学の材料分野への適用が進み、学問体系に基づいて実験結果を統合・整理することで、自由エネルギーや物性値の化学組成や構造への依存性といった多様な材料情報が蓄積された。これらの情報を活用することで、材料技術が大きく進展し、技術革新が科学の一層の発展を促した。

この歴史の中で、結晶の表面、界面、点欠陥等に局在した特異なナノ構造が、材料特性に決定的な役割を担う例が数多く見出された。21世紀になり、このようなナノ構造についての情報を直接的に得るための実験・理論計算手法が格段に進歩しつつある。これらの研究進展により、これまで未知であったナノ構造と機能の関係＝ナノ構造情報を直接かつ定量的に獲得する方が拓かれた。その結果として構築されつつあるのがナノ材料科学と呼ばれる分野であり、今後のさらなる発展が期待されている。材料設計・創出

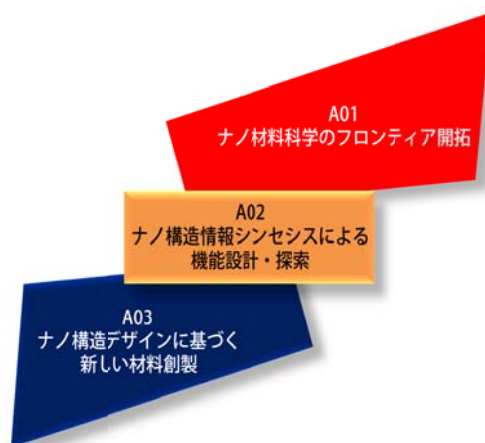


図1 ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築のための領域の構成

という観点に立つと、ナノ材料科学の応用分野の重要性は明確である。すなわちナノ構造情報についての普遍的な原理をもとに、デザインされた材料創出を合理的・効率的に行うことである。これは、従来の「勘と経験」に基づいて行われてきた材料研究に革新的な進歩をもたらすものと期待される。

一方で、実験や理論計算で得たナノ構造情報そのままでは、材料創出への応用範囲は極めて限定的である。個別の材料についての、いわゆるアナリシス型研究開発である。これに対し、普遍的な材料開発原理を導き出すためには、情報の統合化＝シンセシスを、統計熱力学および情報学という学問体系に立脚して強力に進めるという研究が不可欠である。本領域研究の目標はまさにその点にあり、それは諸外国にも例を見ない独創的なものである。

最近、米国を中心に大容量計算機を利用して膨大な材料情報を整理し、材料開発に役立てようという大型プロジェクトが開始している。たとえば米国の *Materials Genome* と呼ぶ研究展開である。このような米国での研究展開と本領域研究とは、以下の 2 点において決定的に異なる。第一は、本領域研究がナノ構造情報に焦点を合わせている点である。本領域代表者らは、新材料設計・創出に情報学手法を適用することによって生じるパラダイムシフトは、精確なナノ構造情報抜きには達成できないと考えている。第二は、本提案が実績あるナノ材料科学のフロンティア開拓研究を中核に置いている点である。これにより最新の成果を直ちに機能設計・探索に応用することが可能となっている。

**【研究の学術的背景：応募時までの研究成果を発展させる場合にはその内容等】**

多様な材料系において、その特徴的な機能は、純物質単結晶の性質ではなく、結晶内部あるいは、表面、粒界、格子欠陥などに局在する特定元素＝**ナノ機能元素**によって発現したものである。このナノ機能元素を対象にナノ計測実験、ナノプロセス実験、そして第一原理計算の3つのグループが、2007～2011 年度に実施された特定領域研究「機能元素のナノ材料科学」において密接な共同研究を行った。その結果、この3分野連携の重要性が強く認識され、材料のナノ構造と機能の関連性についての定量的知見＝**ナノ構造情報**を獲得するための確固たる礎が築かれた。この特定領域研究は、事後評価として、**A+**（研究領域の設定目的に照らして、期待以上の研究の成果があった）という極めて高い評価を得た。

今回の新学術領域研究は、この特定領域研究の成功体験と大きな研究成果に立脚し、その中で育成された若手・中堅研究者が中心メンバーとなり、材料創製や情報学などの分野から新しい研究者を招き入れて計画立案された。すでに高い実績を持つナノ材料科学のフロンティア開拓を、さらに弾みを付けて強化するとともに、獲得されるナノ構造情報を材料設計に活用するという材料科学の新展開を目指すものである。特定領域研究と本領域研究との発展的な関係については、図2に模式的に示したとおりである。また本領域研究における**ナノ材料科学のフロンティア開拓**と**ナノ構造情報の活用**という2つのアプローチが、新しく参加した材料創製や情報学の研究者によって1つに束ねられ、それが新学術の展開を構成するという本研究の狙いも、図2に表現されている。



図2 本領域における新学術創出のアプローチ



## 2. 研究領域の設定目的の達成度（3ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記述してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

### 研究領域全体としての達成度

#### 1. 設定目的の達成度

本領域はナノ材料科学のフロンティア開拓とナノ構造情報の活用という2つのアプローチを密接連携させてナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築という材料科学の新展開を導くことを目的として実施された。領域内に設定した3つの材料課題、すなわち機能性セラミックス材料、固体イオンス材料、触媒材料をコモンサブジェクト（CS 課題）と名付け、多様な材料に関わる様々な材料科学の課題に対し、領域メンバーがナノ構造情報を活用して材料開発原理を構築するという**共通の志**を持って融合・共同研究を行なうように工夫した。また各班の役割を後述の①から⑤の研究目的に具体化し、それに沿って重点的に研究を進めた。その結果、高品質かつ多様なナノ構造情報の獲得から材料開発に繋がる一貫した流れを、個別材料に留まらず多様な材料に対する普遍的な材料開発原理として構築できただけでなく、それを新材料創製として実証することができた。これを可能にするために、本領域では**材料科学分野と情報学分野の強固な連携**に特段の措置を講じた。具体的には期間前半に6名の情報分野の研究者を公募研究として採用し、領域代表者を中心として若手研究者によるタスクフォースを形成して活発な活動を行った。その結果、研究目標や専門用語が共有され、融合研究が活性化された。期間後半では、タスクフォースによる材料科学と情報学との融合研究をさらに強化・加速するために、研究項目 A02 に計画研究を1つ追加し、既設の計画研究と密接に協力してナノ構造情報に基づいた機能探索への適用に的を絞った新しい機械学習法の開発や応用研究を実施した。これによりナノ材料科学における研究課題の情報学的な問題設定と普遍的特徴量の導出として成果を上げることができ、分野融合の進んだ「**新学術領域**」の構築に貢献できた。**材料科学と情報学の融合論文**は、期間前半には8報であったが、領域内研究者の相互理解が深まるにつれて、加速度的に領域内融合研究が進展し、最終的に本領域研究期間内に**33報**出版するに至った。このA02の強化により、A01で開拓された最先端技術によるナノ構造情報をA03における新しい材料創製につなげるという普遍的な材料開発原理としての一貫した流れが、期間後半において大きく加速された。具体的な成果としては、**粒界制御した多結晶アルミナ耐環境セラミックスの創製**、**世界初のヒドリド（水素化物）イオン伝導酸水素化物と電気化学デバイスの創製**、**新しい金属担持触媒材料の創製**などを上げることができる。このように、ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築という領域研究の目的は、実証の段階まで到達でき、当初計画が100%以上に達成できただけでなく、様々な新材料創製に成功という期待以上の成果があったと自己評価している。

#### 2. 領域運営の達成度

##### 2-1 融合領域の将来を担う若手人材の育成

計画研究班と公募研究班が融合・共同研究を実施するだけでなく、協力して将来を担う若手人材の育成に力を注いだ。毎年、合宿形式で『若手の会』を開催したほか、領域内他班への若手人材の相互訪問を奨励し、その延長線上として、1年程度の大学院生・若手研究者の領域内他班への長期滞在プログラムを4件実施した。この活動を通して、個々の専門性が深まるだけでなく、異分野の理解や交流が進み、**若手の人的ネットワーク**が創出できた。また**情報学の専門家の補助なしに材料科学と情報学を融合した研究を推進できる人材が輩出**できた。本領域研究は平成25年に開始し、平成27年と29年に開始した材料インフォマティクス関連のJST事業においては、本領域の若手メンバーが研究代表者として**CREST**が2名、さきがけが8名採択され活躍している。当初計画は100%以上に達成できただけでなく、融合領域研究を次世代に確実に継承できたと自己評価している。

##### 2-2 国際活動

総括班を司令塔として国際活動を積極的に進めた。平成27年度から3年間は国際活動支援経費を受け、総括班の国際活動推進委員会において選抜した研究者の長期海外派遣と領域内への受入を実施した。国際的な情報発信として、世界各国において領域メンバーによるレクチャーを実施したが、その成果を領域代表者が編集者となってまとめ、平成30年2月にSpringer社より**Nanoinformatics**という表題で印刷版と電子版を同時にオープンアクセス出版した。同社では、出版後20か月で2万ダウンロードが企画成功の

判断基準となっているが、同書は出版後 3 か月で目標を達成した。さらに領域内の多数の材料科学研究者が情報学の国際会議で、また情報学の研究者が材料科学の国際会議で招待講演を行っている。これらは、本領域での材料科学と情報学の融合研究成果への世界中からの注目度の高さを客観的に示すものである。これらの事実に基づき、国際活動についても 当初計画は 100%以上に達成できた と自己評価している。

### 2-3 国内活動・アウトリーチ活動

専門分野の研究者に向けて毎年 1 回公開シンポジウムを開催し、最新の研究内容を **News Letter** として配布した。そのほか、国内の学協会でのシンポジウムや講演会、基礎講座、特集雑誌の刊行を積極的に行った。アウトリーチ活動としては、一般市民や中高生を対象とした領域研究内容の紹介を「京都大学アカデミックデイ」において毎年実施した。当日の説明やポスター作成は、本領域参加機関の大学院生が担当した。これは説明する側にとっても、研究の社会的意義を再確認する良い機会となった。これら国内活動・アウトリーチ活動についても、当初計画は 100%以上に達成できた と自己評価している。

### 研究項目ごとの達成度

#### 研究項目 A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓（計画 3 班，公募 1 期 3 班，2 期 3 班）

目標：最先端の電子顕微鏡，回折・分光並びに第一原理計算を駆使した原子・電子スケールでのナノ構造評価・解析手法のフロンティアを世界に先駆けて深く広く開拓し，獲得した多様な高品質ナノ構造情報データを融合・共同研究に供する。

##### ①高品質なナノ構造情報の取得技術の開拓

表面，界面，添加元素などのナノ構造の解析手法やナノ電子分光における情報処理技法の開発と応用などの多くの革新的成果が得られた。具体的には，1 Å以下の空間分解能を有する走査型透過電子顕微鏡（STEM）を用いて粒界の原子構造やそこに濃化する不純物・溶質原子の存在を実空間で直接観察する手法を確立し，これと第一原理計算を併用することにより，セラミックス粒界における溶質偏析挙動を原子レベルで解明することに成功した。そして獲得したナノ構造情報データに基づき，CS 課題である粒界制御した耐環境セラミックスの創製に成功した。また酸化チタン表面に担持した金および白金の単原子吸着構造を直接観察し，その構造の起源を第一原理計算により解析する手法を確立した。このナノ構造情報データを情報学の観点から解析した結果，CS 課題である新しい金属担持触媒材料の創製が導かれた。

##### ②情報学・統計学を活用したハイパー電子顕微鏡分光法の開発

ナノ構造に対し，サブナノメートルサイズの電子プローブを用いた走査イメージ（STEM 像）と電子エネルギー損失分光（EELS）などの分光分析データを同時測定し，情報学との融合研究を行って非負値テンソル分解（NTF）分解法を開発した。これは得られた三次元以上の数値列（テンソル）としてのビッグデータから先験的情報なしに構成する少数の特徴量を見出すことを目的としたものである。本研究の結果，異相界面で化学状態を示すスペクトルが重なっているものを分離表示したり，信号／ノイズ比の小さいデータから重要な情報を抽出することが可能となった。この手法を CS 課題である生体親和性の高いセラミックス材料の表面解析や磁性材料における格子欠陥の磁性解析に適用し，獲得したナノ構造情報をもとに，新材料創製の設計指針が導かれた。

#### 研究項目 A02 ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索（計画 4 班，公募 1 期 6 班，2 期 4 班）

目標：研究項目 A01 において獲得された高品質なナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすために，情報の統合化を，統計熱力学および情報学の学問体系に立脚して強力に進める。そして，高圧・高温プロセスおよび原子層制御によってナノ構造をビルトインしたモデル材料を創製する。

##### ③ナノ材料科学における研究課題の情報学的問題設定と普遍的特徴量の導出

ナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすためには，ナノ材料科学における研究課題を情報学の言葉で表現して問題設定すること，そしてナノ構造を表現する普遍的特徴量を導出することが最重要であるという認識を得た。これらの認識のもと，総括班主導により形成した**タスクフォース**において，材料科学と情報学の研究者が高い頻度で議論を重ねることで，種々の材料科学の現象を情報学の問題として設定することに成功した。またナノ構造情報を記述する特徴量の導出にも取り組み，ナノ構造の特徴量として，粒界構造，点欠陥・伝導イオンや表面構造を記述する幾つかの普遍的な特徴量を提案した。さらに構造のみならず，ナノ構造に含まれる元素の記述方法，元素および構造を同時に記述する特徴量を提案するに至った。これらの成果は世界的にも類のない，いわば本領域メンバーの独創的な融合研究成果である。具体的には，セラミックス粒界構造の高効率探索，第一原理計算とベイズ最適化による複雑なイオン伝導経路の高効率

探索、仮想スクリーニング法・推薦システムによる高効率な新物質・新機能の発見、材料科学者をサポートする機械学習ソフトウェアの開発などを実現した。これらは、それぞれ CS 課題である耐環境性セラミックス、固体イオニクス材料、触媒材料創製に活用され、大きな成果に繋がった。

#### ④ナノ構造をビルトインしたモデル材料創製

ナノ構造情報をもとに具体的な材料創製を進めるためには、ナノ構造をビルトインするための適切なプロセスを選択することが不可欠である。このミッションを効果的・効率的に実行するために、総括班主導で領域内に高圧・高温プロセスセンター（NIMS）と原子層制御プロセスセンター（北大）を構成し、共同・融合研究を実施した。具体的な成果として、高圧合成法によるダイヤモンドと立方晶窒化ホウ素ヘテロ接合界面の形成と発光機能発見、高圧相凍結による新しい酸化チタン光触媒材料の発見、パルスレーザー堆積（PLD）法や電界変調法による超精密薄膜合成技術の開発、酸化物二次元系熱電材料の創製などが挙げられる。これらは CS 課題の一環として、ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製に繋がる成果となった。

#### 研究項目 A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製（計画3班、公募1期5班、2期6班）

目標：研究項目 A01 で獲得したナノ構造情報に基づき、A02 において創出されたナノ構造デザイン技術、すなわち情報学的方法論やモデル材料創製技術を活用し、本研究項目において材料創製のエキスパートのもとで各々の CS 課題をターゲットとした新しい材料創製に繋げ、普遍的な材料開発原理を実証する。

#### ⑤ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製

##### CS1:機能性セラミックス材料

耐熱合金上に形成した遮熱コーティング材の寿命を支配する酸化アルミニウム膜を高性能化するために、まず研究項目 A01 において、単一モデル界面を用いて STEM 法によりナノ構造情報を獲得した。次に研究項目 A02 において開発したベイズ最適化による高効率の界面構造探索法を適用し、抽出された構造に対して第一原理計算を実施することで、粒界における物質移動を制御するためのナノ構造デザインを施した。これに従って、研究項目 A03 で合成とイオン伝導度評価実験を行ない、設計指針が正しいことを実証した。同様に生体活性の酸化チタンセラミックスについて、表面近傍のナノ構造情報をハイパースペクトルイメージ解析により獲得し、特性向上の合理的な設計指針を得ることに成功した。

##### CS2:固体イオニクス材料

研究項目 A03 において蓄積したリチウム、酸素、プロトン、ヒドリドといった多様な固体イオニクス材料についての巨視的な実験データに立脚し、研究項目 A02 で開発したテンソル分解法による推薦システムを活用して実験計画を立て、A03 において新規物質の合成実験を進めた。また系統的な第一原理計算のよって得られた伝導イオンに関するナノ構造情報を活用し、複雑なイオン伝導メカニズムを解明するための新たなベイズ最適化手法を開発した。その結果、従来比 30 倍の高効率でイオン伝導経路を定量化することに成功した。これらの成果に基づいて、世界で初めてヒドリドイオン伝導性酸水素化物を発見し、電気化学デバイスとして作動することを実証した。またリチウムイオン二次電池の  $\text{LiFePO}_4$  正極については、超長サイクル寿命材料の開発に成功したほか、充放電履歴現象の起源を研究項目 A01 でのハイパースペクトルイメージ解析によって解明し、特性向上の合理的な設計指針を得ることに成功した。

##### CS3:触媒材料

研究項目 A01 で開発した高空間分解能ナノ構造解析実験と第一原理計算により、酸化チタンに担持した金および白金の単原子吸着の安定サイトと、起源となる表面酸素空孔の存在を解明した。得られたナノ構造情報をもとに研究項目 A03 で様々な組み合わせの担持触媒金属で炭素酸還元反応を行い、触媒活性を機械学習法によってモデル化した。また担持触媒金属における活性序列の予測と最適化モデルの作製に成功した。光触媒に関しては、研究項目 A02 との共同研究により、高圧相の結晶構造を凍結させた酸化チタン新材料や、高い活性を示す新物質  $\text{SnMoO}_4$  を発見した。このように、ナノ構造デザインに基づく新材料創製に数多く成功し、設計指針を実証できた。

上述のように、すべての研究項目において、CS 課題の 3 つの材料分野における多様な材料を対象に、ナノ材料科学のフロンティア開拓とナノ構造情報の活用という 2 つのアプローチを密接連携させ、ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理を構築するという材料科学の新展開を導くことに成功した。当初計画が 100%以上に達成できただけでなく、様々な新材料創製に成功という期待以上の成果があったと自己評価している。

### 3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1 ページ以内）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

#### 研究推進時の問題点

審査結果の所見と中間評価の所見を真摯にとらえ、研究代表者を中心に総括班において検討を重ねた結果、次ページに詳述するような対応を取った。中間評価以降の期間後半には、特記すべき問題点はなかった。

#### 組織変更と、その効果について

申請時の審査結果の所見を受け、材料科学分野と情報学分野の連携を強化するために、期間後半の平成 28 年度より、以下の組織変更を行った。

①研究項目 A02 内に情報学分野の研究者から構成される計画研究 A02(コ)を新設

②総括班メンバーと外部評価委員に情報分野の研究者が参加

この組織変更に先立ち、期間前半の平成 26 年度より、多くの情報分野の研究者を公募研究として採用し、情報分野と材料科学分野で、研究目標や専門用語を共有したうえで、高度な融合研究に発展させるために、領域代表者を中心として若手研究者による**タスクフォース**を形成して活発な活動を行った。メンバーは領域代表者のほかに、**材料科学**：A01(ア)豊浦, A01(イ)溝口, A01(ウ)武藤, 巽, A02(エ)世古, 林, A02(オ)村田, A02(カ)片瀬, A03(キ)森分, 桑原, A03(ク)小林, A03(ケ)高草木, **情報学**：A02(コ)津田, 鹿島, 志賀, 竹内, A03(ケ)瀧川, A02(公募)本多, 池野である。

平成 28 年度からは、情報分野を公募研究だけに頼るのではなく、計画研究の一つとして強化するために上記の組織変更を行った。新設の計画研究 A02(コ)では、期間前半に A02(エ)の研究分担者であった津田宏治（東大）を研究代表者とし、公募研究代表者であった鹿島久嗣と志賀元紀を分担研究者に、竹内一郎を連携研究者とした。この A02(コ)では、ナノ構造情報に基づいた機能探索への適用を目的とした新しい機械学習法の開発や応用を行い、そして領域の共通課題やその他の重要な材料課題に関して情報学の立場から横串を刺し、ナノ材料科学における研究課題の情報学的問題設定と普遍的特徴量の導出として成果を上げることができた。

さらに総括班に新設の A02(コ)代表者である津田宏治を参加させ、また情報学の視点からの外部評価委員として新しく樋口知之が参加し、領域研究の指針について情報学の視点を取り入れる仕組みを構築した。

これらの組織変更が功を奏して加速度的に領域内の連携が進展した。**材料科学と情報学の融合論文**は、期間前半には 8 報であったが、領域内研究者の相互理解が深まるにつれて、加速度的に領域内融合研究が進展し、最終的に本領域研究期間内に 33 報出版するに至った。新設の A02(コ)班とタスクフォースの融合論文への貢献は大きい。組織変更した平成 28 年以降に出版された代表的な融合論文は以下のとおりである。太字は A02(コ)班、下線はタスクフォース参加研究者。

- A. Seko, H. Hayashi, **H. Kashima** and I. Tanaka, Phys. Rev. Materials 2, 013805 (2018).
- K. Kanamori, K. Toyoura, J. Honda, K. Hattori, A. Seko, M. Karasuyama, K. Shitara, **M. Shiga**, A. Kuwabara, and **I. Takeuchi**, Phys. Rev. B 97, 125124 (2018).
- H. Akita, Y. Baba, **H. Kashima** and A. Seko, International Conference on Neural Information Processing, 526 (2017).
- K. Toyoura, D. Hirano, A. Seko, **M. Shiga**, A. Kuwabara, M. Karasuyama, K. Shitara and **I. Takeuchi**, Phys. Rev. B 93, 054112 (2016).
- **M. Shiga**, K. Tatsumi, S. Muto, **K. Tsuda**, Y. Yamamoto, T. Mori and T. Tanji, Ultramicroscopy 170, 43-59 (2016).
- I. Takigawa, K. Shimizu, **K. Tsuda**, S. Takakusagi, Machine-learning prediction of the d-band center for metals and bimetals, RSC Adv., 6, 52587 (2016).
- H. Oda, S. Kiyohara, **K. Tsuda** and T. Mizoguchi, J. Phys. Soc. Japan 86, 123601 (2017).

このように領域内で材料科学者と情報学者の相互理解が加速度的に進み、それがナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理の構築への駆動力となった。

#### 4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況（2ページ以内）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

##### <審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況>

**（指摘事項1）情報学の知見を積極的に取り入れるために、情報分野の研究者を加えて研究項目 A02 を強化することを検討すべきである。**

対応：情報分野研究者の参加による体制強化と融合研究タスクフォースの形成・実施

所見を真摯にとらえ、また世界的に材料インフォマティクス分野勃興の機運が急速に高まったことを踏まえ、本領域でも情報分野の研究者との密接連携を加速させた。具体的な方策は以下のとおりである。

①情報分野の公募研究を第1期に6件、第2期に3件採択した。

情報分野の研究者をターゲットとした公募説明会や情報発信を積極的に行い、多数の公募研究への応募を得ることができた。厳正な審査を経て、多くの情報分野の公募研究を採択できた。

②平成28年度より情報分野との連携を強化するため、情報分野の計画研究を新設した。

領域の共通課題やその他の重要な課題に関して、情報学と材料科学の融合研究を多数実施した。

③融合研究タスクフォースの形成・実施

平成24年度より情報分野と材料科学分野で領域代表者を中心とした若手研究者によるタスクフォースを形成、月に1回以上の定期的会合を実施し、研究目標や専門用語の共有や融合研究に努めた。

④平成28年度より総括班メンバーと外部評価委員にそれぞれ情報分野の専門家を参加させた。

領域研究の方針について、情報学の視点を取り入れる仕組みを構築した。

##### **（指摘事項2）**

・対象とする材料や物性値の達成目標が示されていないため、具体的な材料と研究の道筋をはっきりさせて、普遍的な材料開発原理への到達を目指す必要がある。

・各計画研究間の相互連携に基づきつつも、本研究領域を分野横断的に展開することが望まれる。

対応：普遍性を担保することと総花的にならないことのバランスのもとで、コモンサブジェクト(CS)課題を重点的に推進することにし、ナノ構造に的を絞った共同・融合研究を推進した。

本領域研究は特定材料の物性値に数値目標を持って達成を目指すような性格ではなく、普遍的な材料開発原理への到達を目指すものである。したがって分野横断的な多様な材料を対象にしなければならない一方で、研究が総花的とならないための工夫が重要である。このため、領域メンバーが一丸となり重点的に推進するCS課題を設定し、多様な材料で機能発現の共通項となるナノ構造、すなわち結晶の表面、界面、点欠陥等に局在した特徴的な原子配列や電子状態に着目するという意識を強く共有したうえで、既存の分野に対して横断的となる共同・融合研究を特に推進した。

##### **（指摘事項3）領域組織全体として、研究経費の効率的な使用に留意されたい。**

対応：各班の所有する装置や機器等について情報共有し、効率的活用に努めた。

装置・機器等についての情報共有と共同利用に特に留意し、研究経費の効率的な活用に努めた。

##### <中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況>

**（指摘事項1）各研究者によって創出された個別の成果に対して領域の方向性が未だ不明瞭であり、どのような学理の創出を目指していくのか、総括班を中心に再度検討する必要がある。**

対応：総括班を中心に領域の具体的な方向性を再度検討して明確化し、領域内で共有した。

ナノ材料科学のフロンティア開拓とナノ構造情報の活用という2つのアプローチを密接連携させ、ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理を構築することが領域の目標であること、そして具体的にCS課題の3つの材料分野における多様な材料において、特性向上の合理的な設計指針を得ることや、実際に新材料創製を通して設計指針を実証するという領域の方向性を計画研究と公募研究のメンバー全員で再確認した。研究を進め、総括班を中心に深い議論を重ねていくことにより、個別材料の各論に留まらないナノ構造情報に基づいた普遍的な材料開発原理が明確になり、それが領域内で共有できた。そして、それが更なる新材料創製や融合研究に展開するという理想的な正のスパイラル効果が生み出された。

**（指摘事項2）どの程度多様な材料に対して、どの程度の普遍的な材料開発原理への到達を目指すのか、達成目標が明確でなく、研究領域の方向性や普遍的原理の創出に関する展望にやや乏しい。**

対応：審査結果の所見の指摘事項2と対応は同じであり、研究の方向性をさらに明確にするために、総括班において右図の①から⑤と具体化した研究目標の分類を明示して領域内で共有し、研究推進の指針とした。

**(指摘事項3) 情報学と材料科学の融合によって、どのような有機的な効果が生まれるのかをより明確にすべきである。**

対応：融合による効果が有機的であることを示すには、ナノ構造情報の活用を材料創製にまで繋げる流れを確立し、多様な材料分野に通用することを研究期間内に実証することが必要と認識し、これを研究推進の方針とした。

領域研究の開始時には、世界的に見ても材料科学と情報学との融合研究は黎明期にあったため、融合研究すること自身が、成果としてアピールできるものであった。しかし本領域は、それに止まることなく、ナノ構造情報の活用を材料創製にまで繋げる一貫した流れ

として確立するとともに、多様な材料分野で通用することを研究期間内に実証すべしとの方針のもと、研究推進した。その結果として、各CS課題での多くの研究成果が得られたことは、本領域での情報学と材料科学の融合が真に有機的に機能したためであると考えている。

**(指摘事項4) 広い材料科学分野において、ナノ構造情報の活用によって、どの程度の普遍的な材料開発原理が提示できるのかが明確でない。**

対応：広い材料科学分野における普遍性を担保するために、ナノ構造が重要な役割を果たす典型例をCS課題においてカバーするように工夫した。

CS1では粒界・界面における高品質なナノ構造情報を獲得し、それを活用して耐環境セラミックス創製の開発原理を提示し、それを実証した。CS2では伝導イオンについてのナノ構造情報をもとに、新しいヒドリドイオン伝導性酸水素化物を発見し、電気化学デバイスとして実証した。CS3では、金属表面の担持原子のナノ構造情報に基づいて材料開発の指針を提示した。これらは、本領域のナノ構造情報の活用が、特定の材料の研究成果に留まらず、多様な材料に展開できることを示している。つまり、広い材料科学分野における普遍的な材料開発原理を提示できることの証左といえる。

**(指摘事項5) デザインされた材料創製を合理的かつ効率的に行うための学術基盤の創成のためには、個別の成果を統合し、新しい学理の創出につなげる努力が必要である。**

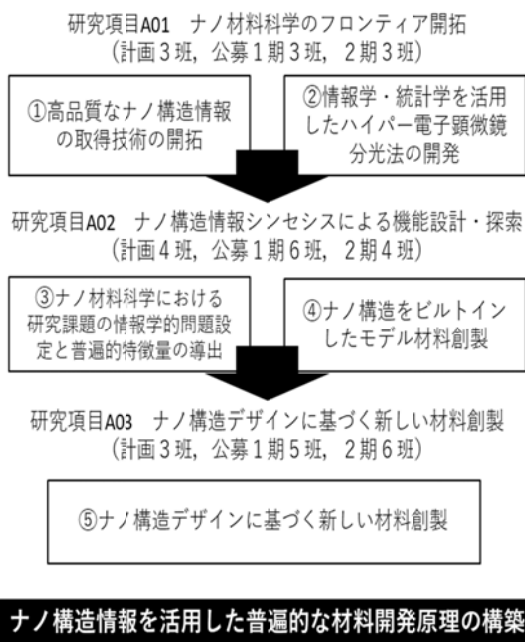
対応：国際水準での新学術基盤の創成に貢献するため、英文での書籍および雑誌の特集号を出版した。

総括班のリーダーシップのもと、材料科学と情報学の融合論文を33編発表した。また個別の成果を統合し、新学術基盤の創成に貢献するために、領域代表者を編集者として、2018年2月にSpringer社より洋書Nanoinformaticsをオープンアクセス出版した。さらに領域代表者をGuest Editorとして、雑誌MRS Bulletinに特集号を提案したところ承認され、2018年9月発刊を目指して現在編集の最終作業中である。このように国際水準での新学術基盤の創成が世界的に高く評価される処まで到達したと判断できる。

**(指摘事項6) 設備備品購入の計画の十分な検討と効率的な経費使用が求められる。効率的な研究経費執行のためにも、研究領域全体において利用可能な既存設備を事前調査し、新たに導入予定の設備備品の確認・検討を行った上で、計画を着実に遂行することが求められる。**

対応：領域内での情報共有および各センター設置による設備共同利用の推進と研究経費の効率化

領域の全体会議や若手の会などの機会に、計画研究班および公募研究班の研究発表・議論だけでなく、所有する装置・機器等について情報共有することを促した。また各計画研究を新たにSTEMセンター(東大)、ハイパー電子顕微鏡センター(名大)、AFMセンター(名大→阪大(研究者の異動による))、高圧・高温プロセスセンター(NIMS)、原子層制御プロセスセンター(北大)と命名して組織化することで、CS課題における試料作製や構造・物性評価に必要な設備の共同利用を促進し、研究経費の効率的な活用に努めた。さらに、大規模な計算クラスターについては遠隔操作が可能であるため活発に共同利用した。



## 5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

(3 ページ以内)

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

### 研究項目 A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓

#### A01(ア) ナノ構造解析のフロンティア開拓

##### ● 第一原理計算とベイズ最適化による複雑なイオン伝導経路の探索 (領域内融合研究, 工学と情報学)

第一原理計算とベイズ最適化を組み合わせることで、高速かつ高精度でポテンシャルエネルギー表面 (PES) を評価する方法論を構築した (図 1)。イオン伝導を支配する領域が結晶全体の一部であることに着目し、その支配領域のみを選択的に評価する方法である。この PES 評価手法を用いることにより、膨大な多元系材料を高速かつ高精度でスクリーニングでき、CS2 の固体イオニクス材料探索に貢献した。[K. Kanamori *et al.*, Phys. Rev. B 97 (2018) 125124]

##### ● 機能性酸化物表面上の機能元素の局所構造解明 (領域内共同研究)

第一原理計算と電子顕微鏡解析実験との密接な共同研究により、ルチル型酸化チタン(110)表面に担持した金および白金の単原子吸着構造と結合状態を解明した (図 2)。長い歴史をもつ酸化チタン表面研究でも、ほとんど注目されなかった底面酸素空孔への吸着メカニズムが重要となることを見出し、CS3 の触媒材料研究に指針を与えた。[K. Matsunaga *et al.* J. Phys. Condens. Matter 28 (2016) 175002]

#### A01(イ) ナノ機能元素解析のフロンティア開拓

##### ● セラミックス粒界の解析・粒界インフォマティクス (領域内融合研究, 工学と情報学)

1 Å 以下の空間分解能を有する走査型透過電子顕微鏡(STEM)とエネルギー分散型 X 線分光法(EDS)を併用し、セラミックス粒界の原子構造やそこに濃化する不純物・溶質原子の存在を実空間で直接観察するナノ計測技術を確立した (図 3)。これに機械学習手法を適用することにより、粒界の安定構造を高効率に予測して機能との相関を知る手法、すなわち粒界インフォマティクスという分野を創出した (図 4)。これにより従来は定性的な理解に留まっていたアルミナやジルコニア粒界における溶質偏析挙動を原子レベルで定量的に解明することに成功した。これにより CS1 の機能性セラミックスの高温特性向上の合理的な設計指針が得られた。[B. Feng *et al.* Nature Comm. 7 (2016) 11079, S. Kiyohara *et al.* Sci. Adv. 2(2016) e1600746.]

#### A01(ウ) ナノ電子状態解析のフロンティア開拓

##### ● 非負値テンソル分解法によるハイパースペクトルイメージ解析 (領域内融合研究, 工学と情報学)

ナノ構造から得られる STEM-EELS スペクトラムイメージのビッグデータを解析するために、非負値テンソル分解法によるハイパースペクトルイメージ法を開発した (図 5)。これにより、先験的情報なしに構成する小数の特徴量を見出し、ノイズの除去と構成成分スペクトル抽出/画像回復や重畳情報の分離とその空間マッピングが可能となった。これを CS1 の生体活性セラミックスや強磁性体に適用し、従来は実測が困難であった表面や界面近傍の化学結合状態や局所磁気角運動量を定量的に測定することに成功した。[T. Thersleff, S. Muto *et al.* Sci. Rep. 7 (2017) 44802, J. Rusz, S. Muto *et al.* Nature. Commun. 7 (2016) 12672]

#### A01 公募研究 1 期 (一杉, 高橋, 王) (領域内共同研究)

原子間力顕微鏡複合装置を開発し、ペロブスカイト酸化物最表面における d 電子状態の高分解能測定に成功した (一杉)。ダイヤモンドと立方晶窒化ホウ素の接合界面の原子構造、結合メカニズムを決定した (王)。ホーレント X 線回折イメージング法によるナノ空間分解能を有する XAFS 法の可能性について検討した (高橋)。

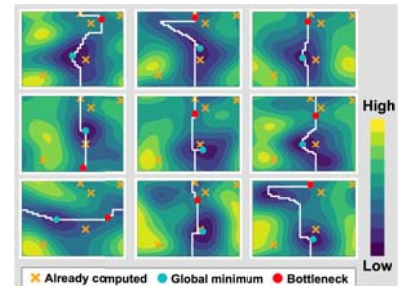


図 1 ベイズ最適化によるイオン伝導経路の探索

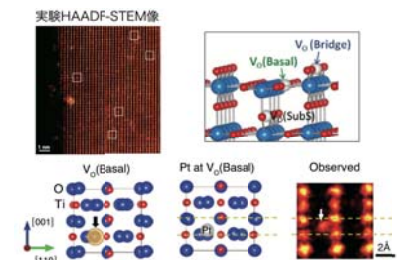


図 2 TiO<sub>2</sub>(110)表面上に吸着した白金単原子の局所構造

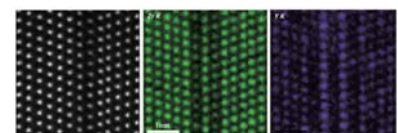


図 3 ジルコニア粒界の STEM 像・EDS マッピング

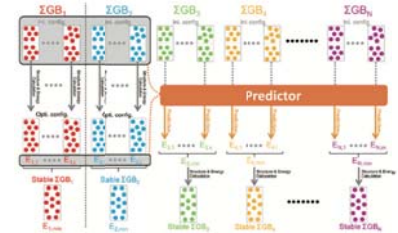


図 4 機械学習による粒界構造予測 (粒界インフォマティクス)

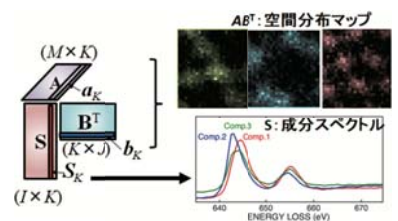


図 5 ハイパースペクトルイメージ解析

### A01 公募研究 2 期 (高橋康, 高橋幸, 水野) (領域内共同研究)

MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub> ヘテロ接合における水素発生反応活性について走査型電気化学セル顕微鏡による電気化学イメージングを行った (高橋康). Ce<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>x</sub>(CZ) 粒子の三次元価数イメージング実験の価数分布像から CZ 粒子内部で価数が不均一に分布している様子を明らかにした (高橋幸). 第一原理計算により, 高エントロピー合金における原子空孔の構造と低拡散能の解析を行った (水野).

### 研究項目 A02 ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索

#### A02(エ) ナノ構造情報に基づいた機能探索

##### ● 仮想スクリーニング法・推薦システムによる高効率な新物質・新機能の発見 (領域内融合研究, 工学と情報学)

無機物質データベースをベイズ最適化に基づいて高効率に仮想スクリーニングする方法を開発した (図 6). この方法に化合物の普遍的特徴量を導入することにより, 全無機物質 55,000 件の中から既知の低熱伝導度物質に比べて 1 桁以上熱伝導度が低い物質を効率的に多数見つけ出すことに成功した. これは CS1 の新しい熱電変換セラミックス材料の開発において, 選択肢を大幅に広げるものとなった. また CS2 の固体イオニクス材料における新物質発見を対象に情報学的問題設定を行い, 推薦システムを応用する手法を開拓した. これにより, 合成可能性の高い新規化合物の化学組成を提案できた. [A. Seko *et al.*, Phys. Rev. Mater. 2 (2018) 013805, A. Seko *et al.* Phys. Rev. Lett. 115 (2015) 205901]

#### A02(オ) 高圧・高温プロセスを利用した新しい構造—機能相関の探求

##### ● 高圧合成による新規機能性材料の創製 (領域内共同研究)

先端電子顕微鏡によるナノ構造解析チーム, 第一原理計算チームとの連携のもと, モデル材料において的確なナノ構造を材料にビルトインし, 機能発現の基礎を抽出するための物質・材料創製技術として, 高圧・高温プロセスを展開した. 具体的な成果として, CS1 での高圧合成法によるダイヤモンドと立方晶窒化ホウ素ヘテロ接合界面の形成と発光機能発現 (図 7), CS3 での高圧相凍結による新しい酸化チタン光触媒材料の発見などが挙げられる. また減圧中の相変化メカニズムに関する研究も進め, 高圧相の回収指針の提案を行った. これらの成果は, ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製に大きく貢献した. [C.Chen *et al.* Nat. Comm. 6 (2015) 6327]

#### A02(カ) 原子層制御による新しい材料機能探索

##### ● 酸化物二次元電子系熱電材料の創製 (領域内共同研究)

ナノ構造を原子層制御でビルトインするために超精密薄膜合成技術を開発し, 領域内共同研究を進めた. CS1 として酸化物人工超格子において二次元性を高めることで, 熱電特性の大幅な向上を目指した. SrTiO<sub>3</sub>-SrNbO<sub>3</sub> 固溶体の熱電特性を実験・計算から調査したうえで, パルスレーザー堆積法により実際に数多くの人工超格子を作製し, バルクの 2 倍に相当する出力因子を達成した (図 8). これは, 二次元性を高めることが熱電材料の高性能化に有効であることを明確に示した初めての結果であり, ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製に大きく貢献した. [Y. Zhang *et al.* J. Appl. Phys. 121 (2017)185102]

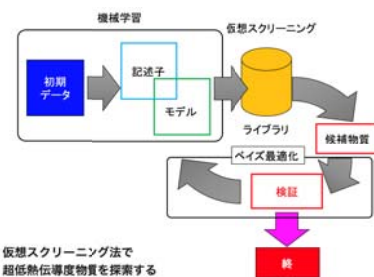
#### A02(コ) 材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓

##### ● 材料科学者をサポートする機械学習ソフトウェアの開発 (領域内融合研究, 工学と情報学)

物質探索に不可欠なベイズ最適化アルゴリズムのソフトウェア COMBO を開発し, 領域内での融合研究に供した. 材料研究者が深い専門知識なしに利用できるように, パラメータのチューニングが不要となる工夫を取り入れた. またコンピュータ囲碁で採用されているモンテカルロ木探索 (MCTS) プログラムを開発し (図 9), CS1 における粒界インフォマティクスに活用した. その結果, 界面の原子配列を, 網羅的探索に比べて 100 倍以上に高効率に発見することに成功した. これらのソフトウェアは, 一般公開され, 国際的に領域研究以外にも広く活用されている. [Ueno *et al.* Materials Discovery 4 (2016) 18]

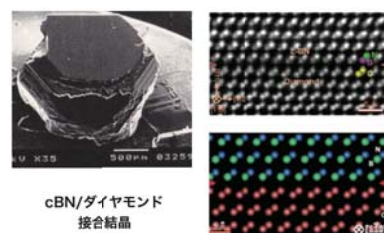
#### A02 公募研究 1 期 (永田, 鹿島, 本多, 志賀, 竹内, 池野) (領域内共同研究)

統計熱力学計算のためのデータ駆動型アルゴリズム開発を行った (永田). マルチタスク学習によるリチウムイオン伝導体の材料探索を行った (鹿島). 線形モデルにより効率良い材料探索が可能であることを示した (本多). 情報学に基づいたスペクトラムイメージ解析法を開発した (志賀). 情報科学手法によるプロトン伝導体におけるエネルギー曲面の評価を行った (竹内). 化学組成の巨大なバラエティのなかからの情報



仮想スクリーニング法で超低熱伝導度物質を探索する

図 6 仮想スクリーニング法



cBN/ダイヤモンド  
接合結晶

図 7 立方晶窒化ホウ素(cBN)/  
ダイヤモンド単結晶のヘテロ  
接合界面

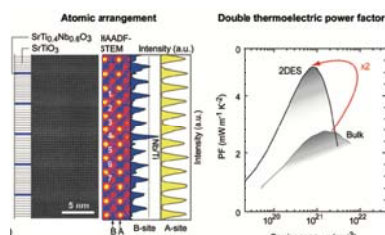


図 8 酸化物二次元電子系熱  
電材料の創製

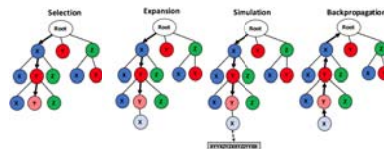


図 9 モンテカルロ木探索



学的手法を用いた酸素化物蛍光体の材料設計を行った (池野).

### A02 公募研究 2 期 (Packwood, 本多, 島川, 中平, 池野) (領域内共同研究)

ベイズ最適化による分子配置の効率的予測に成功した (Packwood). 線形モデル上のバンディット問題において, 最適候補を識別するための特徴量を適切に絞り込み探索するアルゴリズムを構築した (本多). 複合酸化物において異常高原子価  $\text{Fe}^{3+}$  が電荷不均化とサイト間電荷移動の逐次相転移を示すことを解明した (島川). 有機溶媒を用いた水溶液系プロセスで剥離型ナノシート作製法を開発した (中平). 圧縮センシング法を用いたナノ構造からのスペクトル解析法を開発した (池野).

### 研究項目 A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製

#### A03(キ) 耐環境性セラミックス材料のナノ構造制御と材料創製

##### ● 多結晶アルミナの粒界特性を利用した物質移動制御 (領域内融合研究, 工学と情報学)

アルミナ焼結体を用いて酸素ポテンシャル勾配下における膜中の物質移動機構を評価・解析した (図 10). また第一原理計算や電子エネルギー損失分光 (EELS) を用いて, 粒界構造と物質移動の相関解明に取り組んだ. その結果, 多結晶粒界のような整合性の低い粒界では半導体的な特性が増すことと, そのような粒界における電子状態変化が酸素拡散の起源であることを明らかにした. また, 高温に曝された膜中の酸素の粒界拡散係数が自己拡散に比べて約 1/10 に低下することを発見した. この特性を利用することで, 電気伝導特性の大きく異なる酸化物からなる多相積層膜中の物質移動を効果的に制御できることを見出した. [T. Ogawa *et al.* Acta Mater. 69 (2014) 365]

#### A03(ク) ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出

##### ● 新しい固体イオニクス材料の創製 (領域内融合研究, 工学と情報学)

純粋にヒドリドイオンだけが固体内を拡散する酸水素化物を発見し, 第一原理計算チームとの領域内共同研究によって, イオン伝導機構を解明するとともに, 組成を制御することによるイオン伝導率の調整に成功した (図 11). また全固体型のデバイスを作製し, ヒドリドイオンを電荷担体とした電気化学デバイスの作動に世界で初めて成功した. さらに本グループで蓄積した実験データをもとに, 情報学的問題設定を行い, テンソル分解法による推薦システムを構築し, それに基づいた実験計画により, 高効率に新規リチウムイオン固体電解質を探索する手法を開拓した. [G. Kobayashi *et al.* Science, 351 (2016) 1314.]

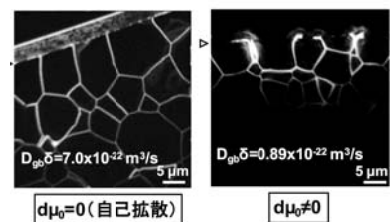


図 10 多結晶アルミナ膜の断面表面近傍の酸素トレーサー ( $^{18}\text{O}$ )-SIMS マップ

#### A03(ケ) 規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出

##### ● 担持金属触媒における活性秩序の予測と最適化 (領域内融合研究, 工学と情報学)

DFT による 121 種類の金属・合金の d-バンド中心のデータに関して, 各金属の周期表における族や密度, イオン化エネルギー等の入手容易なパラメータを特徴量とした回帰モデルの構築と機械学習による高速予測を試み, 個々の値をすべて DFT 計算により求めた場合と比べて, 遙かに高速での予測が可能であることを実証した (図 12). 本手法を応用することで, 理論計算により求めた一部の金属・合金の d-バンド中心の値を用いて, 他のさまざまな金属・合金系の d-バンド中心を予測し, 活性序列に関する情報や最大活性を示す材料の候補を効率的に見つけることが可能になった. [I. Takigawa *et al.* RSC. Adv. 6 (2016) 52587.]

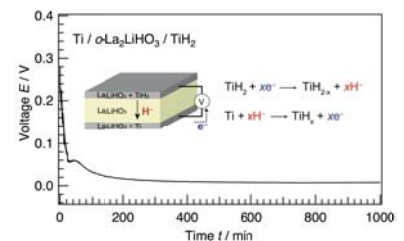


図 11 Ti/La-Sr-Li-H-O 系電解質/TiH<sub>2</sub> の放電曲線

### A03 公募研究 1 期 (東, 藤田, 横井, 舟窪, 柳田) (領域内共同研究)

ペロブスカイト非鉛圧電材料の設計を行い, 高压合成法により単斜晶相を得る事に成功した (東). 希土類複合酸化物等の電子構造, 格子振動, 磁性および対称性の破れについて明らかにした (藤田). ゼオライト骨格内原子分布が触媒活性に与える影響を検討した (横井). HfO<sub>2</sub> 基強誘電体を熱膨張率の異なる基板上に作製し, 膜の歪が強誘電性に大きな影響を及ぼしていることを確認した (舟窪). ナノ構造情報に基づき, 新しい金属酸化物単結晶ナノワイヤ設計を進めた (柳田).

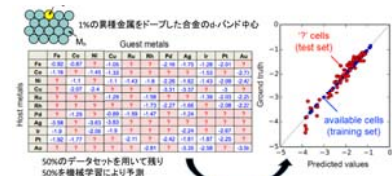


図 12 担持金属触媒における活性秩序の予測と最適化

### A03 公募研究 2 期 (舟窪, 北條, 藤井, 山崎, 黒川) (領域内共同研究)

HfO<sub>2</sub> 基強誘電相の安定化指針を獲得した (舟窪). 複合酸化物薄膜において強誘電と強磁性ドメインの競合を観察した (北條). 純酸化物イオン伝導体の新物質 SrYbInO<sub>4</sub> を発見した (藤井). プロトン伝導体ジルコン酸バリウムにおける会合エネルギー決定因子を明らかにした (山崎). STM 観察による 3 次元アトムプローブ (3DAP) 試料の形状と 3DAP 測定時のイオン検出密度パターンとの相関を見出した (黒川).

## 6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に\*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したもののについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

### 1. 主な論文

領域設定期間に発表された論文は総計 735 報（本研究課題に限定）であり、そのうち高インパクト誌である **Nature ファミリー誌は 20 報**、**Science ファミリー誌は 5 報**である。ここでは 111 報を抜粋して示す。論文は特記しない限りすべて査読有。領域内共同研究の論文は代表的な著者が所属する班の箇所にのみ記入した。非公開部分はない。

#### 研究項目 A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓

##### A01(ア)計画研究 ナノ構造解析のフロンティア開拓

- ◎▲K. Kanamori, \*K. Toyoura, J. Honda, K. Hattori, A. Seko, M. Karasuyama, K. Shitara, M. Shiga, A. Kuwabara, \*I. Takeuchi, Exploring a potential energy surface by machine learning for characterizing atomic transport, Phys. Rev. B 97, 125124 (2018).
- ▲Y. Furushima, \*A. Nakamura, E. Tochigi, Y. Ikuhara, K. Toyoura and K. Matsunaga, <10-10> Dislocation at a {2-1-10} low-angle grain boundary in LiNbO<sub>3</sub>, Journal of Mater. Sci. 53, 333-344, (2018).
- ▲Y. Furushima, Y. Arakawa, \*A. Nakamura, E. Tochigi and K. Matsunaga, Nonstoichiometric [012] dislocation in strontium titanate, Acta Mater. 135, 103-111, (2017).
- ▲\*A. Nakamura, K. Matsunaga, E. Tochigi, N. Shibata, Y. Ikuhara and K.P.D. Lagerlöf, Another origin of yield drop behavior in sapphire deformed via basal slip: Recombination of climb-dissociated partial dislocations, Scripta Mater. 38, 109-113, (2017).
- ◎▲\*K. Toyoura, D. Hirano, A. Seko, M. Shiga, A. Kuwabara, M. Karasuyama, K. Shitara, \*I. Takeuchi, Machine-learning-based selective sampling procedure for identifying the low-energy region in a potential energy surface: A case study on proton conduction in oxides, Phys. Rev. B 93, 054112 (2016).
- ▲Y. Furushima, \*A. Nakamura, E. Tochigi, Y. Ikuhara, K. Toyoura and K. Matsunaga, Dislocation structures and electrical conduction properties of low angle tilt grain boundaries in LiNbO<sub>3</sub>, Journal of Appl. Phys. 120, 142107, (2016).
- ▲K. Matsunaga\*, T.Y. Chang, R. Ishikawa, Q. Dong, K. Toyoura, A. Nakamura, Y. Ikuhara and N. Shibata, Adsorption sites of single noble metal atoms on the rutile TiO<sub>2</sub> (110) surface influenced by different surface oxygen vacancies, J. Phys.: Condensed Matter 28, 175002, (2016).
- ▲D. F. Torre, \*A. Yurtsever, J. Onoda, M. Abe, S. Morita, Y. Sugimoto and R. Pérez, Pt atoms adsorbed on TiO<sub>2</sub>(110)-(1×1) studied with non-contact atomic force microscopy and first-principles simulations, Phys. Rev. B 91, 075401, (2015).
- ▲\*K. Matsunaga, Y. Tanaka, K. Toyoura, A. Nakamura, Y. Ikuhara and N. Shibata, Existence of basal oxygen vacancies on the rutile TiO<sub>2</sub> (110) surface, Phys. Rev. B 90, 195303, (2014).
- ▲T.Y. Chang, Y. Tanaka, R. Ishikawa, K. Toyoura, K. Matsunaga, Y. Ikuhara and \*N. Shibata, Direct imaging of Pt single atoms adsorbed on TiO<sub>2</sub> (110) surfaces, Nano Letters 14, 134-138, (2014).

##### A01(イ)計画研究 ナノ機能元素解析のフロンティア開拓

- ▲\*N. Shibata, T. Seki, G. Sanchez-Santolino, S. D. Findlay, Y. Kohno, T. Matsumoto, R. Ishikawa and Y. Ikuhara, Electric field imaging of single atoms, Nature Communications 8, 15631 (2017).
- ▲\*E. Tochigi, Y. Kezuka, A. Nakamura, A. Nakamura, N. Shibata and Y. Ikuhara, Direct Observation of Impurity Segregation at Dislocation Cores in an Ionic Crystal, Nano Letters 17, 2908-2912 (2017).
- ▲S. Kondo, T. Mitsuma, N. Shibata and \*Y. Ikuhara, Direct observation of individual dislocation interaction processes with grain boundaries, Science Advances 2, e1501926 (2016).
- ◎▲S. Kiyohara, H. Oda, T. Miyata and \*T. Mizoguchi, Prediction of interface structures and energies via virtual screening, Science Advances 2, e1600746 (2016).
- ▲B. Feng, I. Sugiyama, H. Hojo, H. Ohta, N. Shibata and \*Y. Ikuhara, Atomic structures and oxygen dynamics of CeO<sub>2</sub> grain boundaries, Scientific Reports 6, 20288 (2016).
- ▲B. Feng, T. Yokoi, A. Kumamoto, M. Yoshiya, Y. Ikuhara and \*N. Shibata, Atomically ordered solute segregation behavior in an oxide grain boundary, Nature Communications 7, 11079 (2016).
- ▲R. Sun, \*Z. Wang, M. Saito, N. Shibata and \*Y. Ikuhara, Atomistic mechanisms of nonstoichiometry-induced twin boundary structural transformation in titanium dioxide, Nature Communications 6, 7120 (2015).
- ▲C. Chen, \*Z. Wang, T. Kato, N. Shibata, T. Taniguchi and \*Y. Ikuhara, Misfit accommodation mechanism at the heterointerface between diamond and cubic boron nitride, Nature Communications 6, 6327 (2015).
- ▲\*R. Ishikawa, A. R. Lupini, F. Oba, S. D. Findlay, N. Shibata, T. Taniguchi, K. Watanabe, H. Hayashi, T. Sakai, I. Tanaka, Y. Ikuhara and S. J. Pennycook, Atomic Structure of Luminescent Centers in High-Efficiency Ce-doped w-AlN Single Crystal, Scientific Reports 4, 3778 (2014).
- ▲T.-Y. Chang, Y. Tanaka, R. Ishikawa, K. Toyoura, K. Matsunaga, Y. Ikuhara and \*N. Shibata, Direct Imaging of Pt Single Atoms Adsorbed on TiO<sub>2</sub> (110) Surfaces, Nano Letters 14, 134-138 (2014).

##### A01(ウ)計画研究 ナノ電子状態解析のフロンティア開拓

- ▲\*S. Muto, K. Tatsumi, Detection of local chemical states of lithium and their spatial mapping by scanning transmission electron microscopy, electron energy-loss spectroscopy and hyperspectral image analysis, Microscopy, 66, 39-49 (2017)
- ▲\*H. Inoue, S. Muto, S. Arai, H. Wasada and N. Umehara, Microscopic origin of ultra-low friction coefficient between the wear track formed on carbon nitride coating and transfer layer on sliding ball in friction tests under dry N<sub>2</sub>, Surface & Coating Technology, 313, 31-39 (2017).

23. ▲\*H. Yoshida, K. Morita, BN. Kim, Y. Sakka and T. Yamamoto, Reduction in sintering temperature for flash-sintering of yttria by nickel cation-doping, *Acta Materialia*, 106, 344-352 (2016).
24. ▲\*H. Inoue, S. Muto, X. Deng, S. Arai and N. Umehara, Structure analysis of topmost Layer of CN<sub>x</sub> after repeated sliding using scanning transmission electron microscopy electron energy-loss spectroscopy, *Thin Solid Films*, 616, 134-140 (2016).
25. ▲\*I. Maruyama, S. Muto, Change in Relative Density of Natural Rock Minerals Due to Electron Irradiation, *Journal of Advanced Concrete Technology*, 14, 706-716 (2016).
26. ◎▲\*J. Rusz, S. Muto, J. Spiegelberg, R. Adam, K. Tatsumi, D. E. Burgler, P. M. Oppeneer and C. M. Schneider, Magnetic measurements with atomic-plane resolution, *Nature Communications*, 7, 12672 (2016).
27. ▲\*M. Ohtsuka, S. Muto, K. Tatsumi, Y. Kobayashi, T. Kawata, Quantitative determination of occupation sites trace CO substituted for multiple Fe sites in M-type hexagonal ferrite using statistical beam-rocking TEM-EDXS analysis, *Microscopy*, 65, 127-137 (2016)
28. ▲ J. Senga, \*K. Tatsumi, S. Muto, T. Yoshida, Effects of nitrogen-related defects on visible light photocatalytic response in N+ implanted TiO<sub>2</sub>: A first-principles study, *Journal of Applied Physics*, 118, 115702 (2015)
29. ▲Y. Honda, \*S. Muto, K. Tatsumi, H. Kondo, K. Horibuchi, T. Kobayashi and T. Sasaki, Microscopic mechanism of path-dependence on charge-discharge history in lithium iron phosphate cathode analysis using scanning spectroscopy spectral imaging, *J. Power Sources*, 291, 85-94 (2015).
30. ▲\*S. Muto, J. Rusz, K. Tatsumi, R. Adam, S. Arai, V. Kocovski, P. M. Oppeneer, D. E. Burgler and C. M. Schneider, Quantitative characterization of nanoscale polycrystalline magnets with electron magnetic circular dichroism, *Nature Commun.*, 5, 3138 (2014).

#### A01 公募研究 1 期 (一杉, 高橋, 王)

31. Ikutaro Hamada, Ryota Shimizu, Takeo Ohsawa, Katsuya Iwaya, Tomihiro Hashizume, Masaru Tsukada, Kazuto Akagi, and \*Taro Hitosugi, "Imaging the evolution of d-states at a strontium titanate surface", *J. Am. Chem. Soc.* 136, 17201-17206 (2014).
32. R. Xu, H. Jiang, C. Song, J. A. Rodriguez, Z. Huang, C.-C. Chen, D. Nam, J. Park, M. Gallagher-Jones, S. Kim, S. Kim, A. Suzuki, Y. Takayama, T. Oroguchi, Y. Takahashi, J. Fan, Y. Zou, T. Hatsui, Y. Inubushi, T. Kameshima, K. Yonekura, K. Tono, T. Togashi, T. Sato, M. Yamamoto, M. Nakasako, M. Yabashi, T. Ishikawa, \*J. Miao, "Single-shot 3D structure determination of nanocrystals with femtosecond X-ray free-electron laser pulses," *Nature Commun.*, 5 14061 (2014).
33. \*Z. C. Wang, M. Saito, K. P. McKenna, and Y. Ikuhara, "Polymorphism of Dislocation Core Structures at the Atomic Scale", *Nature Communications* 5, 3239-1-7 (2014)

#### A01 公募研究 2 期 (高橋康, 高橋幸, 水野)

34. Y. Takahashi, A. Kumatani, H. Shiku, T. Matsue, "Scanning Probe Microscopy for Nanoscale Electrochemical Imaging". *Analytical Chemistry*, 89, 342-357 (2017).
35. ▲M. Hirose, N. Ishiguro, K. Shimomura, N. Burdet, H. Matsui, \*M. Tada, \*Y. Takahashi, Visualization of heterogeneous oxygen storage behavior in platinum-supported cerium-zirconium oxide three-way catalyst particles by hard x-ray spectro-ptychography, *Angewandte Chemie International Edition* 130, 1490-1495 (2018).
36. ▲\*M. Mizuno, H. Y. Yasuda, H. Araki, Origin of pseudoelasticity by twinning in D0<sub>3</sub>-type Fe<sub>3</sub>Ga, *Comput. Mater. Sci.* 145, 154 (2018).

#### 研究項目 A02 ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索

##### A02(エ)計画研究 ナノ構造情報に基づいた機能探索

37. ◎▲\*A. Seko, H. Hayashi, H. Kashima and I. Tanaka, Matrix- and tensor-based recommender systems for the discovery of currently unknown inorganic compounds, *Phys. Rev. Materials* 2, 013805 (2018).
38. ◎▲\*A. Seko, H. Hayashi, and I. Tanaka, Compositional descriptor-based recommender system for the materials discovery, *J. Chem. Phys.* 148, 241719 (2018).
39. ◎▲\*A. Seko, H. Hayashi, K. Nakayama, A. Takahashi, I. Tanaka, Representation of compounds for machine-learning prediction of physical properties, *Phys. Rev. B* 95, 144110 (2017).
40. ◎▲A. Takahashi, \*A. Seko and I. Tanaka, Conceptual and practical bases for the high accuracy of machine learning interatomic potentials: Application to elemental titanium, *Phys. Rev. Materials* 1, 063801 (2017).
41. ◎▲\*J. Lee, A. Seko, K. Shitara, K. Nakayama and I. Tanaka, Prediction model of band gap for inorganic compounds by combination of density functional theory calculations and machine learning techniques, *Phys. Rev. B* 93, 115104 (2016).
42. ◎▲Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Iimura, \*H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono and \*F. Oba, Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis, *Nature Commun.* 7, 11962 (2016).
43. ◎▲A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, K. Tsuda, L. Chaput and \*I. Tanaka, Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and Bayesian optimization, *Phys. Rev. Lett.* 115, 205901 (2015).
44. ◎▲\*A. Seko, A. Takahashi and I. Tanaka, First-principles interatomic potentials for ten elemental metals via compressed sensing, *Phys. Rev. B* 92, 054113 (2015).
45. ◎▲\*A. Seko, T. Maekawa, K. Tsuda and I. Tanaka, Machine learning with systematic density-functional theory calculations: Application to melting temperatures of single- and binary-component solids, *Phys. Rev. B* 89, 054303 (2014).
46. ◎\*M. Nishijima, T. Ootani, Y. Kamimura, T. Sueki, S. Esaki, S. Murai, K. Fujita, K. Tanaka, K. Ohira, Y. Koyama and \*I. Tanaka, Accelerated discovery of cathode materials with prolonged cycle life for lithium-ion battery, *Nature Commun.*, 5, 4553 (2014).

##### A02(オ)計画研究 高圧・高温プロセスを利用した新しい構造—機能相関の探求

47. ▲F. Kawamura, \*H. Yusa, T. Taniguchi, Synthesis of hexagonal phases of WN and W<sub>2.25</sub>N<sub>3</sub> by high-pressure metathesis reaction, 101, 949-956 (2018).
48. ▲\*M. Miyakawa, K. Kobayashi and T. Taniguchi, High-pressure synthesis of a 12CaO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-12SrO·7Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> solid solution, *J. Am. Ceram. Soc.* 100, 1285-1289 (2017).
49. ▲\*H. Yoshida, P. Biswas, R. Johnson, M.K. Mohan, Flash-sintering of magnesium aluminate spinel (MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) ceramics, *J. Am. Ceram. Soc.*, 100 554 (2017).
50. ▲\*H. Hiramatsu, \*H. Yusa, R. Igarashi, Y. Ohishi, T. Kamiya, and H. Hosono, An exceptionally narrow band-gap (~4 eV) silicate predicted in the cubic perovskite structure: BaSiO<sub>3</sub>, *Inorg. Chem.* 56, 10535-10542 (2017).
51. ▲\*M. Miyakawa and T. Taniguchi "Homogeneous heating of a sample space by a modified heating assembly in a belt-type high-pressure apparatus" *Review of Sci. Instrum.*, **86**, 101 (2015).
52. \*R. Ishikawa R. Mishra A.R. Lupini, S.D. Findlay, T. Taniguchi, S.T. Pantelides, S.J. Pennycook, "Direct Observation of Dopant

Atom Diffusion in a Bulk Semiconductor Crystal Enhanced by a Large Size Mismatch” Phys. Rev. Lett., **113**, (2014).

53. ▲\*H. Yusa, F. Kawamura, T. Taniguchi, N. Hirao, Y. Ohishi, T. Kikegawa, High-pressure synthesis and compressive behavior of tantalum nitrides, J. Appl. Phys., 115, 103520 (2014).
54. ▲\*H. Yoshida, Y. Sakka, T. Yamamoto, J.-M. Lebrun, R. Raj, Densification behavior and microstructural development in undoped yttria prepared by flash-sintering, J. Eur. Ceram. Soc., 34 991 (2014).
55. ▲\*H. Murata, Y. Kataoka, T. Kawamoto, I. Tanaka and T. Taniguchi, Photocatalytic activity of  $\alpha$ -PbO<sub>2</sub>-type TiO<sub>2</sub>, Phys. Stat. Solidi RRL, 8, 822-826 (2014).

#### A02(カ) 計画研究 原子層制御による新しい材料機能探索

56. ▲Y. Zhang, B. Feng, H. Hayashi, C-P. Chang, Y-M. Sheu, I. Tanaka, Y. Ikuhara, and \*H. Ohta, “Double thermoelectric power factor of a 2D electron system”, Nature Commun. (in press)
57. ▲\*H. Ohta, S-W. Kim, S. Kaneki, A. Yamamoto, and \*T. Hashizume, High thermoelectric power factor of high-mobility two-dimensional electron gas, Adv. Sci. 4, 1700696 (2017).
58. ▲\*A.V. Sanchela, T. Onozato, B. Feng, Y. Ikuhara, and \*H. Ohta, Thermopower modulation clarification of the intrinsic effective mass in a transparent oxide semiconductor, BaSnO<sub>3</sub>, Phys. Rev. Materials 1, 034603 (2017).
59. ▲Y. Zhang, B. Feng, H. Hayashi, T. Tohei, I. Tanaka, Y. Ikuhara, and \*H. Ohta, Thermoelectric phase diagram of the SrTiO<sub>3</sub>-SrNbO<sub>3</sub> solid solution system, J. Appl. Phys. 121, 185102 (2017).
60. ▲\*H. Hiramatsu, \*H. Yusa, R. Igarashi, Y. Ohishi, T. Kamiya, and H. Hosono, An exceptionally narrow band-gap (~4 eV) silicate predicted in the cubic perovskite structure: BaSiO<sub>3</sub>, Inorg. Chem. 56, 10535 (2017).
61. ▲K. Hanzawa, H. Sato, \*H. Hiramatsu, T. Kamiya, and \*H. Hosono, Electric field-induced superconducting transition of insulating FeSe thin film at 35 K, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 113, 3986-3990 (2016).
62. ▲\*T. Katase, Y. Suzuki, and \*H. Ohta, Reversibly switchable electromagnetic device with leakage-free electrolyte, Adv. Electron. Mater. 2, 1600044 (2016).
63. ▲\*T. Katase, K. Endo, T. Tohei, Y. Ikuhara, and \*H. Ohta, Room-temperature-protonation-driven on-demand metal-insulator conversion of a transition metal oxide, Adv. Electron. Mater. 1, 1500063 (2015).
64. ▲\*T. Katase, H. Takahashi, T. Tohei, Y. Suzuki, M. Yamanouchi, Y. Ikuhara, I. Terasaki, and \*H. Ohta, Solid-phase epitaxial growth of A-site-ordered perovskite Sr<sub>4-x</sub>Er<sub>x</sub>Co<sub>4</sub>O<sub>12-δ</sub>: A room temperature ferrimagnetic p-type semiconductor, Adv. Electron. Mater. 1, 1500199 (2015).

#### A02(コ) 計画研究 材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓

65. ◎▲\*H. Wang, H. Zhang, B. Da, M. Shiga, H. Kitazawa, \*D. Fujita, Informatics-Aided Raman Microscopy for Nanometric 3D Stress Characterization, Journal of Physical Chemistry C, 122, 7187-7193 (2018)
66. ◎▲X. Yang, J. Zhang, K. Yoshizoe, K. Terayama and \*K. Tsuda, ChemTS: an efficient python library for de novo molecular generation, Science and Technology of Advanced Materials, 18, 972-976, (2017).
67. ◎▲H. Oda, S. Kiyohara, K. Tsuda and \*T. Mizoguchi, Transfer Learning to Accelerate Interface Structure Searches, Journal of the Physical Society of Japan, 86, 123601, (2017).
68. ◎▲T.M. Dieb, S. Ju, K. Yoshizoe, Z. Hou, J. Shiomi, \*K. Tsuda, MDTS: automatic complex materials design using Monte Carlo tree search, Science and Technology of Advanced Materials, 18, 498-503, (2017).
69. ◎▲H. Akita, Y. Baba, \*H. Kashima and A. Seko, Atomic Distance Kernel for Material Property Prediction, International Conference on Neural Information Processing, 526 (2017).
70. ◎▲\*M. Shiga, K. Tatsumi, S. Muto, K. Tsuda, Y. Yamamoto, T. Mori and T. Tanji, Sparse Modeling of EELS and EDX Spectral Imaging Data by Nonnegative Matrix Factorization, Ultramicroscopy, 170, 43-59 (2016).
71. ◎▲T. Ueno, T.D. Rhone, Z. Hou, T. Mizoguchi and \*K. Tsuda, COMBO: An Efficient Bayesian Optimization Library for Materials Science, Materials Discovery, 4, 18-21 (2016).

#### A02 公募研究 1期 (永田, 鹿島, 本多, 志賀, 竹内, 池野)

72. ◎▲J. Duan, A. Seko and \*H. Kashima, Quantum Energy Prediction using Graph Kernel, Proceedings of the 2015 IEEE SMC (2015).
73. ▲\*H. Ikeno, “Ab-initio Multiplet Calculations of Fe-L<sub>2,3</sub> X-ray Absorption Spectra in LiFePO<sub>4</sub> and FePO<sub>4</sub>”, Mater. Trans. 56, 1448-1451 (2015).
74. ◎▲岩瀬智亮, 世古敦人, \*鹿島久嗣, “マルチタスク学習を用いた複数物性値の同時予測”, 信学技報 113, 9-13 (2014). [査読なし]

#### A02 公募研究 2期 (Packwood, 本多, 島川, 中平, 池野)

75. ◎▲\*D. M. Packwood and T. Hitosugi, Rapid prediction of molecule arrangements on metal surfaces *via* Bayesian optimization. Appl. Phys. Express. 10, 065502 (2017)
76. ▲\*J. Komiyama, J. Honda, A. Takeda, Position-based Multiple-play Multi-armed Bandit Problem with Unknown Position Bias. Advances in Neural Information Processing Systems 30, 4998-5008 (2017).
77. ▲\*F. D. Romero, Y. Hosaka, N. Ichikawa, T. Saito, G. McNally, J. P. Attfield, and \*Y. Shimakawa, Charge and spin order in Ca<sub>0.5</sub>Bi<sub>0.5</sub>FeO<sub>3</sub>: Idle spins in the charge disproportionated state, Phys. Rev. B, 96, 064434 (2017).
78. ▲\*H. Ikeno, “Spherical Bessel transform via exponential sum approximation of spherical Bessel function”, J. Comput. Phys. 355, 426-435 (2018).

#### 研究項目 A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製

##### A03(キ) 計画研究 耐環境性セラミックス材料のナノ構造制御と材料創製

79. ▲\*T. Matsudaira, S. Kitaoka, N. Shibata, Y. Ikuhara, M. Takeuchi, and T. Ogawa, Effects of an oxygen potential gradient and water vapor on mass transfer in polycrystalline alumina at high temperatures, Acta Materialia 151, 21-30 (2018).
80. ▲\*M. Hashimoto, S. Kitaoka, S. Muto, K. Tasumi, Y. Obata, The microstructure of scale formed by oxynitriding of Ti and exhibiting significant apatite-forming ability, J. Mater. Res., 31, 1004-1011 (2016).
81. ▲\*S. Kitaoka, Mass transfer in polycrystalline alumina under oxygen potential gradients at high temperatures, J. Ceram. Soc., Jpn., 124, 1100-1109 (2016).
82. ▲\*H. Moriwake, A. Konishi, C. A. J. Fisher, T. Ogawa, A. Kuwabara, and D. Fu, The electric field induced ferroelectric phase transition of AgNbO<sub>3</sub>, J. Appl. Phys., 119, 064102, (2016).
83. ▲\*T. Ogawa, S. Kitaoka, A. Kuwabara, C.A.J. Fisher, and H. Moriwake, An alternative description of mass transfer through thick oxide films, Scripta Materialia, 100, 66-69 (2015).

84. ▲\*T. Ogawa, A. Kuwabara, C.A.J. Fisher, H. Moriwake, K. Matsunaga, K. Tsuruta, and S. Kitaoka, A density functional study of vacancy formation in grain boundaries of undoped alpha-alumina, *Acta Materialia*, 69, 365–371 (2014).
85. ▲\*S. Kitaoka, T. Matsudaira, M. Wada, T. Saito, M. Tanaka, and Y. Kagawa, Control of oxygen permeability in alumina under oxygen potential gradients at high temperature by dopant configurations, *J. Am. Ceram. Soc.*, 97, 2314–2322 (2014).
86. ▲\*H. Moriwake, A. Konishi, T. Ogawa, K. Fujimura, C. A. J. Fisher, A. Kuwabara, T. Shimizu, S. Yasui, M. Itoh, Ferroelectricity in Wurtzite Structure Simple Chalcogenide, *Appl. Phys. Lett.*, 104, 242909 (2014).

#### A03(ク)計画研究 ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出

87. ▲T. Phraewphiphat, M. Iqbal, K. Suzuki, M. Hirayama, \*R. Kanno, Synthesis and Lithium-Ion Conductivity of  $\text{LiSrB}_2\text{O}_6\text{F}$  ( $B = \text{Nb}^{5+}, \text{Ta}^{5+}$ ) with a Pyrochlore Structure. *粉体および粉末冶金*, 65 (1), 26-33 (2018).
88. M. Abe, H. Iba, K. Suzuki, H. Minamishima, M. Hirayama, K. Tamura, J. Mizuki, T. Saito, Y. Ikuhara, \*R. Kanno, Study on the deterioration mechanism of layered rock-salt electrodes using epitaxial thin films –  $\text{Li}(\text{Ni}, \text{Co}, \text{Mn})\text{O}_2$  and their Zr-O surface modified electrodes. *J. Power Sources*, 345, 108-119 (2017).
89. ▲A. Watanabe, G. Kobayashi, N. Matsui, M. Yonemura, A. Kubota, K. Suzuki, M. Hirayama, \*R. Kanno, Ambient Pressure Synthesis and  $\text{H}^+$  Conductivity of  $\text{LaSrLiH}_2\text{O H}_2$ . *Electrochemistry*, 85 (2), 88-92 (2017).
90. ▲G. Zhao, I. Muhammad, K. Suzuki, M. Hirayama, \*R. Kanno, Synthesis, Crystal Structure, and the Ionic Conductivity of New Lithium Ion Conductors,  $M$ -Doped  $\text{LiScO}_2$  ( $M = \text{Zr}, \text{Nb}, \text{Ta}$ ). *Mater Trans*, 57 (8), 1370-1373 (2016).
91. ▲G. Kobayashi, Y. Hinuma, S. Matsuoka, A. Watanabe, M. Iqbal, M. Hirayama, M. Yonemura, T. Kamiyama, I. Tanaka, \*R. Kanno, Pure  $\text{H}^+$  conduction in oxyhydrides. *Science*, 351 (6279), 1314-1317 (2016).
92. ▲M. Iqbal, K. Suzuki, G. Kobayashi, G. Zhao, M. Hirayama, \*R. Kanno, Lithium ion conduction in doped  $\text{LaLiO}_2$  system. *Solid State Ionics*, 285, 33-37 (2016).
93. ▲K. Suzuki, M. Hirayama, K. Kim, S. Taminato, K. Tamura, J.-Y. Son, J. i. Mizuki, \*R. Kanno, Interfacial Analysis of Surface-Coated  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  Epitaxial Thin Film Electrode for Lithium Batteries. *J. Electrochem. Soc.*, 162 (13), A7083-A7090 (2015).
94. ▲J. Lim, S. Lee, K. Suzuki, K. Kim, S. Kim, S. Taminato, M. Hirayama, Y. Oshima, K. Takayanagi, \*R. Kanno, Synthesis, structure and electrochemical properties of novel  $\text{Li-Co-Mn-O}$  epitaxial thin-film electrode using layer-by-layer deposition process. *J. Power Sources*, 279 (0), 502-509 (2015).
95. ▲S. Taminato, M. Hirayama, K. Suzuki, K. Kim, Y. Zheng, K. Tamura, J. i. Mizuki, \*R. Kanno, Mechanistic studies on lithium intercalation in a lithium-rich layered material using  $\text{Li}_2\text{RuO}_3$  epitaxial film electrodes and in situ surface X-ray analysis. *J. Mater. Chem. A*, 2 (42), 17875-17882 (2014).
96. ▲Y. Matsuda, M. Yonemura, H. Koga, C. Pitteloud, M. Nagao, M. Hirayama, \*R. Kanno, Synthesis, crystal structure, and ionic conductivity of tunnel structure phosphates,  $\text{RbMg}_{1-x}\text{H}_2\text{x}(\text{PO}_3)_3 \cdot y(\text{H}_2\text{O})$ . *Journal of Materials Chemistry A*, 1 (48), 15544-15551 (2013).

#### A03(ケ)計画研究 規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出

97. ◎▲\*T. Toyao, K. Suzuk, S. Kikuchi, S. Takakusagi, K. Shimizu, \*I. Takigawa, Toward Effective Utilization of Methane: Machine Learning Prediction of Adsorption Energies on Metal Alloys, *J. Phys. Chem. C*, 122, 8315 (2018).
98. ▲K. Kon, T. Toyao, W. Onodera, S. M. A. H. Siddiki, \*K. Shimizu, Hydrodeoxygenation of Fatty Acids, Triglycerides, and Ketones to Liquid Alkanes by a  $\text{Pt-MoO}_x/\text{TiO}_2$  Catalyst, *ChemCatChem*, 9, 2822 (2017).
99. V. Sable, K. Maindan, \*A. R. Kapdi, P. S. Shejwalkar and K. Hara, Active Palladium Colloids via Palladacycle Degradation as Efficient Catalysts for Oxidative Homocoupling and Cross-Coupling of Aryl Boronic Acids, *ACS Omega* 2, 204-217 (2017).
100. ▲\*S. Takakusagi, A. Kunimoto, N. Sirisit, H. Uehara, T. Ohba, Y. Uemuara, T. Wada, H. Ariga, W.-J. Chun, Y. Iwasawa, \*K. Asakura, A new indicator for single metal dispersion on a  $\text{TiO}_2(110)$  surface premodified with a mercapto compound, *J. Phys. Chem. C*, 120, 15785 (2016).
101. ◎▲\*I. Takigawa, K. Shimizu, K. Tsuda, S. Takakusagi, Machine-learning prediction of the d-band center for metals and bimetal, *RSC Adv.*, 6, 52587 (2016).
102. ▲\*Y. Watanabe, Y. F. Nishimura, R. Suzuki, H. Uehara, T. Nimura, A. Beniya, N. Isomura, K. Asakura, S. Takakusagi, Portable ultrahigh-vacuum sample storage system for polarization-dependent total-reflection fluorescence x-ray absorption fine structure spectroscopy”, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 34, 023201 (2016).
103. Y. Uemura, D. Kido, Y. Wakisaka, H. Uehara, T. Ohba, Y. Niwa, S. Nozawa, T. Sato, K. Ichyanagi, R. Fukaya, S. Adachi, T. Katayama, T. Togashi, S. Owada, K. Ogawa, M. Yabashi, K. Hatada, S. Takakusagi, T. Yokoyama, B. Ohtani, \*K. Asakura, Dynamics of photoelectrons and structural changes of tungsten trioxide observed by femtosecond transient XAFS, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 1364-1367(2016).
104. J. I. B. Janairo, T. Sakaguchi, K. Hara, A. Fukuoka and \*K. Sakaguchi, Effects of Biomineralization Peptide Topology on the Structure and Catalytic Activity of Pd Nanomaterials, *Chem. Commun.*, 50, 9259 (2014).
105. ▲K. Kon, W. Onodera, S. Takakusagi, \*K. Shimizu, Hydrodeoxygenation of Fatty Acids and Triglyceride by Pt-loaded  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  Catalysts, *Catal. Sci. Technol.* 4, 3705 (2014).
106. ▲\*S. Takakusagi, T. Ogawa, H. Uehara, H. Ariga, K. Shimizu, \*K. Asakura, Electrodeposition Study on a  $\text{TiO}_2$  Single Crystal Electrode: Pt on a Nb-doped  $\text{TiO}_2(110)$ ”, *Chem. Lett.*, 43, 1797 (2014).

#### A03公募研究1期(東, 藤田, 横井, 舟窪, 柳田)

107. \*R. Yu, H. Hojo, K. Oka, T. Watanuki, A. Machida, K. Shimizu, K. Nakano, and M. Azuma, New  $\text{PbTiO}_3$ -Type Giant Tetragonal Compound  $\text{Bi}_2\text{ZnVO}_6$  and Its Stability under Pressure, *Chem. Mater.*, 27[6] 2012-2017 (2015).
108. ▲\*H. Akamatsu, \*K. Fujita, T. Kuge, A. S. Gupta, A. Togo, S. Lei, F. Xue, G. Stone, J. M. Rondinelli, Long-Qing Chen, I. Tanaka, V. Gopalan, and K. Tanaka, Inversion symmetry breaking by oxygen octahedral rotations in the Ruddlesden-Popper  $\text{NaRTiO}_4$  family, *Phys. Rev. Lett.*, 112 [18] 187602-(1-5) (2014).

#### A03公募研究2期(舟窪, 北條, 藤井, 山崎, 黒川)

109. ▲Takao Shimizu, Kiliha Katayama, and \*Hiroshi Funakubo, Epitaxial growth of  $\text{YO}_{1.5}$  doped  $\text{HfO}_2$  films on (100) YSZ substrates with various concentrations, *Ferroelectrics* 512, 105-110 (2017).
110. ▲Y. Sakai, J. Yang, H. Hojo, I. Yamada, P. Miao, S. Lee, S. Torii, T. Kamiyama, M. Lezaic, G. Bihlmayer, M. Mizumaki, J. Komiyama, T. Mizokawa, H. Yamamoto, T. Nishikubo, Y. Hattori, K. Oka, Y. Yin, J. Dai, W. Li, S. Ueda, A. Aimi, D. Mori, Y. Inaguma, Z. Hu, T. Uozumi, C. Jin, Y. Long, and \*M. Azuma, A-site and B-site charge orderings in an  $s-d$  level controlled perovskite oxide  $\text{PbCoO}_3$ , *J. Am. Chem. Soc.* 139, 4574-4581 (2017).
111. ▲K. Fujii, M. Yashima, K. Hibino, M. Shiraiwa, K. Fukuda, S. Nakayama et al., High oxide-ion conductivity by the overbonded channel oxygens in Si-deficient  $\text{La}_{9.565}(\text{Si}_{5.826}\square_{0.174})\text{O}_{26}$  apatite without interstitial oxygens, *J. Mater. Chem. A*, in press, (2018).

## 2. 領域での成果をまとめた英文での書籍と雑誌特集号の出版

Nanoinformatics (Edited by Isao Tanaka, Springer, ISBN: 9789811076169) 印刷版と電子版(オープンアクセス)を本年2月に同時刊行した。本年5月現在のダウンロード数は21,000件と極めて多い。さらに領域代表者をGuest Editorとして、材料科学分野で広く流通する雑誌MRS Bulletinに特集号を提案・採択され、本年9月発刊を目指して現在編集の最終作業中である。

## 3. ホームページ・新聞等

領域全体のホームページ(URL: <http://nanoinfo.mtl.kyoto-u.ac.jp>)において、研究目的、研究体制、研究成果、ニュースレターを公開していた。領域設定期間終了後、より詳細な内容を含めるためにホームページを再構築し、研究成果の発信に努めている。また、本領域の成果は日本経済新聞(2016年8月15日付)をはじめ合計57件、新聞に掲載された。

## 4. 主催シンポジウム

平成25年度	
2013年10月11日	【公開】新学術領域 公募研究説明会(名古屋) (新学術領域「疎性モデリング(代表者岡田真人)」)と共催(参加者数:約50名)
2013年11月10~13日	【公開】国際会議 EMMM2013(京都)共催(参加者数:約100名)
2014年1月6~9日	【公開】シンポジウム「計算材料科学と数学の協働による スマート材料デザイン手法の探索」(東北大学 WPI-AIMR 等と共催) (参加者数:約100名)
2014年3月5日	【公開】第1回公開シンポジウム, 第2回総括班会議(東京)(参加者数:約70名)
平成26年度	
2014年5月7~10日	【公開】国際会議 AMTC4(JFCC ナノ構造研究所と共催)(浜松)(参加者数:約200名)
2014年7月24日	【公開】講演会 ~3次元アトムプローブ法の構造材料研究への応用~ (構造材料元素戦略研究拠点と共催)(参加者数:約50名)
2014年9月24~26日	【公開】金属学会公募シンポジウム(名古屋) S1 ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開(参加者数:約80名) S7 マテリアルズインフォマティクス(参加者数:約60名)
2015年3月11日	【公開】第2回公開シンポジウム, 第4回総括班会議(名古屋)(参加者数:約80名)
平成27年度	
2015年9月16日~18日	【公開】金属学会公募シンポジウム(九州大学) ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開(参加者数:約90名)
2015年9月28日	【公開】新学術領域 合同 公募研究説明会(名古屋大学) (スパースモデリング岡田真人代表)と共催(参加者数:約50名)
2016年3月8日	【公開】第3回公開シンポジウム, 第6回総括班会議(東京)(参加者数:約80名)
平成28年度	
2016年5月11日~13日	【公開】国際会議 AMTC5(JFCC ナノ構造研究所と共催)(名古屋)(参加者数:約250名)
2016年9月21日~23日	【公開】金属学会公募シンポジウム(大阪大学) ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開(参加者数:約80名)
2017年3月24日	【公開】第4回公開シンポジウム, 第8回総括班会議(京都)(参加者数:約70名)
平成29年度	
2017年9月6日~8日	【公開】金属学会公募シンポジウム(北海道大学) ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開(参加者数:約90名)
2018年3月7日	【公開】第5回公開シンポジウム, 第10回総括班会議(京都)(参加者数:約80名)
2018年3月25日	【公開】日本物理学会 2018年年次大会 共催シンポジウム(参加者数:約150名) 「インフォマティクスを活用した材料科学の新展開」(東京理科大学, 野田キャンパス)

## 5. 一般向けのアウトリーチ活動

一般市民を対象としたアウトリーチ活動として、京都大学アカデミックデイに5年連続で参加し、「ナノ構造情報のフロンティア開拓：材料科学の新展開」に関するポスターを掲げて研究紹介を行った。

## 6. 領域紹介パンフレット

領域研究の成果のうち、学術上の価値の高いもの、社会にインパクトが大きいものなど特筆すべきものを纏めカラー刷りのパンフレット(1,000部発行)とした。これを学会や講演会の機会に配布し、研究成果の発信に努めた。

## 7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、総括班研究課題の活動状況も含め、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

**【研究組織】** 本領域では連携・融合研究を有機的かつ効率的に推進するため、領域を A01, A02, A03 の 3 つの研究項目にグループ分けし、研究項目内外の速やかな連携に関してリーダーシップをとるための責任者(◎)を各研究項目に置いた。平成 26 年度に計 14 件、平成 28 年度に計 13 件の公募研究を各研究項目に加え、研究組織を強化した。H28 年度からは情報学分野の研究者により構成される A02(コ)班を新設し、当該分野を増強することで、ナノ材料科学と情報学の融合研究を加速させた。

**総括班 X00 ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開** 領域研究の司令塔として共同・融合研究を監督、評価・助言、若手育成、成果公表、アウトリーチ活動に注力

代表者 田中、 連携研究者 松永（事務担当）、柴田（共同研究、研究集会企画担当）、武藤（海外連携担当）、谷口（連携担当）、太田（連携担当）、北岡（国民との科学・技術対話推進担当）、菅野（連携担当）、高草木（連携担当）、津田（連携担当、H28 から）

評価委員 佐久間 健人（東京大学・名誉教授、高知工科大学・前学長：材料科学）、足立 裕彦（京都大学・名誉教授：量子化学）、高野 幹夫（京都大学・名誉教授：固体化学）、森 博太郎（大阪大学・特任教授、大阪大学・名誉教授：材料科学）、樋口 知之（統計数理研究所・所長：情報学、H28 から）

**国際活動支援班 Y00 ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開（国際活動支援）** 国際共同研究の企画・支援、研究成果の国際広報活動、若手人材海外派遣・受入の監督

代表者 田中、国際広報委員会担当 松永、谷口、北岡、高草木、国際活動推進委員会担当、柴田、武藤、津田、太田、菅野

### 計画研究・公募研究

**研究項目 A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓** 最先端の電子顕微鏡、回折・分光並びに第一原理計算を駆使したナノ構造評価・解析手法のフロンティアを開拓し、多様な高品質ナノ構造情報データを融合・共同研究に供する。公募研究は超高分解能 STEM、ナノ電気化学セル顕微鏡、スペクトロ X 線タイコグラフィなど計画研究でカバーできないナノ構造情報獲得手法による研究を実施し、共同研究に貢献。

計画研究 (ア) ◎松永 ナノ構造解析のフロンティア開拓  
(イ) 柴田 ナノ機能元素解析のフロンティア開拓  
(ウ) 武藤 ナノ電子状態解析のフロンティア開拓

公募研究 (1期) 一杉, 王, 高橋 (幸)  
(2期) 高橋 (康), 高橋 (幸), 水野

**研究項目 A02 ナノ構造情報シンセシスによる機能設計・探索** ナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすために、情報の統合化を進める。そして高圧・高温プロセスおよび原子層制御によりナノ構造をビルトインしたモデル材料を創製する。公募研究は、材料科学と情報学の融合研究を実施するために、タスクフォースに参加するなど、材料科学の課題を情報学の問題と設定することに貢献。

計画研究 (エ) ◎田中 ナノ構造情報に基づいた機能探索  
(オ) 谷口 高圧・高温プロセスを利用した新しい構造ー機能関連の探求  
(カ) 太田 原子層制御による新しい材料機能探索  
(コ) 津田 材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓 (H28 年度から)

公募研究 (1期) 永田, 鹿島, 本多, 志賀, 竹内, 池野  
(2期) Packwood, 本多, 島川, 中平, 池野

**研究項目 A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製** 材料創製のエキスパートのもとで、ナノ構造情報に基づき各々の CS 課題をターゲットとした新しい材料創製に繋げ、普遍的な材料開発原理を実証する。公募研究は、ナノ構造情報を活用した材料開発原理を CS 課題において計画研究ではカバーできていない多様な材料について実証し、普遍的な展開を深めることに貢献。

計画研究 (キ) ◎北岡 耐環境性セラミックス材料のナノ構造制御と材料創製  
(ク) 菅野 ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出  
(ケ) 高草木 規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出

公募研究（1期）東，藤田，横井，舟窪，柳田  
 （2期）舟窪，北條，藤井，山崎，黒川

**【研究者相互の有機的連携と研究の効率的進捗のための方策と連携状況】**

領域内での研究項目あるいは研究班を跨った融合研究や共同研究は，本報告書の『5. 主な研究成果』に挙げた 17 件にとどまらず，合計 52 件に上る．この成果は，領域内の計画研究・公募研究者相互の有機的連携の賜物であり，以下に述べる方策が功を奏したものと判断している．

**1. 領域代表者と総括班が密接に意思疎通を取りリーダーシップを発揮する体制を構築**

領域代表者と総括班メンバーとが密接な意思疎通をとり，連携・融合研究，国際活動，若手育成，成果公表，アウトリーチ活動の諸項目についての司令塔となり，それを領域全体で共有する体制を構築した．さらに評価委員を含む総括班会議を年 2 回企画実行し，領域の方向性への評価・助言を得ることで，方針の軌道修正を可能とした．

**2. 研究センター設置による共同研究の推進**

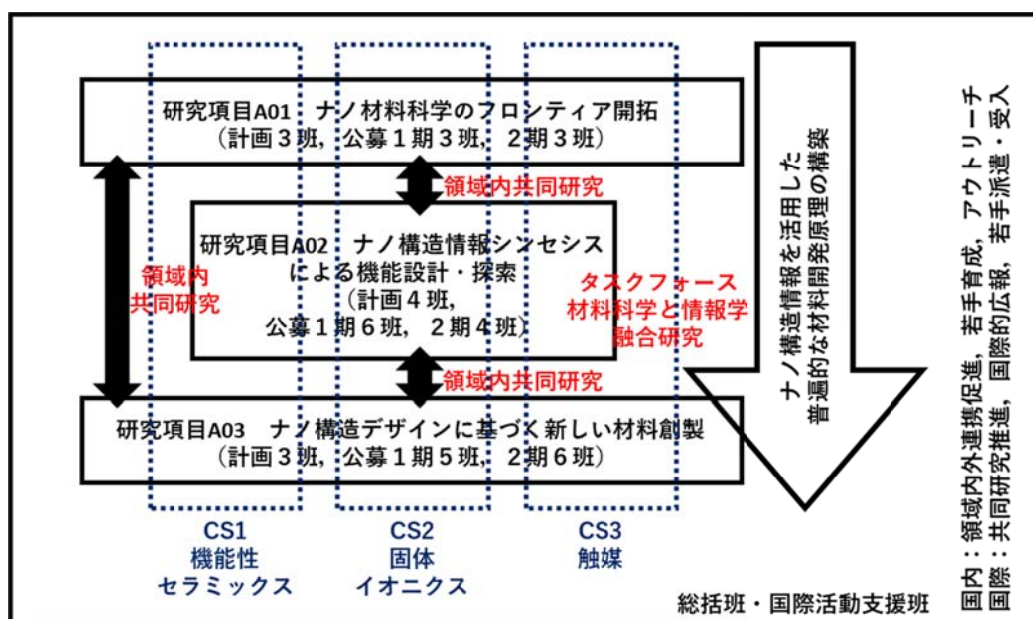
総括班において領域内で特徴的な評価・プロセス装置と技術を有する 5 つのグループを研究センターと命名して組織化することを決め，その設備を活用した共同研究を推進した．具体的には，STEM センター（東大），ハイパー電子顕微鏡センター（名大），AFM センター（名大→阪大），高圧・高温プロセスセンター（NIMS），原子層制御プロセスセンター（北大）である．これにより，計画研究相互のみならず，公募研究班との共同研究の見通しが良くなり，センターを核とした多くの共同研究が行われた．

**3. 材料科学—情報学融合研究タスクフォースの活動**

材料科学と情報学分野で，研究目標や専門用語を共有したうえで，高度な連携共同研究に発展させるために，領域代表者を中心として若手研究者によるタスクフォースを形成し，月に 1 回以上の定期的な会合を平成 24 年度より 5 年間，欠かさず実施した．これにより加速的にナノ材料科学と情報学の融合研究が進展し，本領域研究期間内に融合論文を 33 報出版するに至った．

**4. 融合分野を担う若手人材育成への注力**

領域間で共同研究を実施するだけでなく，ナノ構造情報を活用して材料開発原理を構築するという領域研究の共通の志を受け継ぐ若手人材を育成することに，総括班主導で注力した．研究の着眼点や方法論における異文化を共有・経験するために，年一回の「若手の会」では，大学院生・若手研究者が合宿形式にて個々の研究ポスターを活用して深夜まで徹底的に議論した．また大学院生・若手研究者の領域内他班への相互訪問を奨励し，その延長線上として，1 年程度の大学院生・若手研究者の領域内他班への長期滞在プログラムを 4 件実施した．このような活動を通して分野横断的な大きな若手人材ネットワークが構築でき，それが研究者相互の有機的連携の強化に大きな作用をもたらした．



領域内の連携・融合研究体制



## 8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む。）（1 ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について記述してください（総括班における設備共用等への取組の状況を含む。）。

領域内で特徴的な評価・プロセス装置と技術を有する 5 つのグループを**研究センター**と命名して組織化することを総括班において決定し、その設備を活用した共同研究を強く推進した。そして総括班の監督のもとで、CS 課題における試料作製や構造・物性評価で必要な設備の共同利用を促進した。各センターやグループで所有する装置・機器等については、領域の全体会議や若手の会などの機会に情報共有することを促した。さらに、A02(エ)が所有する計算機クラスターについては遠隔操作が可能であるため、他班でも活発に共同利用した。これらの方策により、計画研究相互のみならず、公募研究班との共同研究の見通しが良くなり、研究経費の効率的活用が可能となっただけでなく、多くの共同研究の成果に繋がった。

各センターにおける設備の導入・活用状況は、以下の通りである。

### （1）STEM センター（東大、A01(イ)）、

現有の走査型透過電子顕微鏡(STEM)を共同研究に活用するために、TEM 試料作製のための精密イオンミリング装置を平成 25 年度予算で購入した。公募班から提供された試料のなかで、イオンミルによる熱ダメージが著しいものがあったため、これを抑制できる精密断面試料作製装置(冷却仕様)を平成 28 年度予算で購入した。これらを活用した共同研究の成果例は以下のとおり。

- ・粒界インフォマティクスに基づく粒界構造の解明（領域内融合研究，工学と情報学）
- ・セラミックス粒界における溶質偏析挙動の解明（A03(キ), A02 公募, A02(エ), A02(オ)との共同研究）

### （2）ハイパー電子顕微鏡センター（名大、A01(ウ)）

平成 25 年度予算で購入した透過電子顕微鏡用 STEM-CL ユニートを現有の透過電子顕微鏡に接続することにより、ハイパースペクトルイメージの取得が可能となった。さらに、このシステムの安定動作を確認した後、液体窒素温度までの実験を行うために冷却ホルダー及びコントローラを平成 26 年度予算で購入し、スペクトル取得用アレイ検出機一式を平成 27 年度予算で購入した。これらを活用した共同研究の成果例は以下のとおり。

- ・非負値テンソル分解法によるハイパースペクトルイメージ解析（領域内融合研究，工学と情報学）
- ・生体親和性の高い酸化チタンセラミックス材料の表面解析（A03(キ), A02 公募, A02(エ)との共同研究）

### （3）AFM センター（名大→阪大（研究者異動のため）、A01(ア)）

絶縁性の機能性材料を原子レベルで評価するために、試料作製と評価を一貫して行える超高分解能非接触原子間力顕微鏡（NC-AFM）とパルスレーザー堆積の複合装置を世界で初めて開発した。そのために平成 25 年度予算でコンパクト高出力エキシマレーザーを購入した。表面担持原子・クラスターの原子分解能観察によって得られた共同研究の成果例は以下のとおり。

- ・酸化チタン表面の担持原子吸着構造の解明（A01(イ), A01 公募, A02(カ), A02(ケ)との共同研究）
- ・酸化物最表面における d 電子状態の高分解能測定（A01 公募, A02(エ), A02(カ)との共同研究）

### （4）高圧・高温プロセスセンター（NIMS、A02(オ)）

ベルト型装置による高圧合成（2GPa/3000℃～10GPa/2000℃）とダイヤモンドアンビルセルによる高圧下その場観察（100GPa/2000℃領域）を基盤としたプロセス実験を行うため、平成 25 年度予算で大出力赤外ファイバーレーザーを購入した。また A03(ク)での固体イオニクス材料合成実験をオンサイトで実施するために、平成 25 年度予算での A03(ク)への高温超高压発生装置を導入にあたり技術サポートした。これらを活用した共同研究の成果例は以下のとおり。

- ・ダイヤモンド cBN ヘテロ接合界面の形成と発光機能発現（A01(イ), A01 (ウ), A01 公募との共同研究）
- ・高圧相凍結による新しい酸化チタン光触媒材料の創製（A02(エ), A03(ク), A03 公募 との共同研究）

### （5）原子層制御プロセスセンター（北大、A02(カ)）

平成 25 年度予算でエキシマレーザーを購入し、ナノ構造を原子層制御でビルトインできる超精密薄膜合成技術を開発した。これにより領域内共同研究に供する様々な酸化物人工超格子薄膜試料を作製できるようになった。また平成 25 年度予算での A01(ア)へのエキシマレーザー導入にあたり専門家の見地から技術サポートした。共同研究の成果例は以下のとおり。

- ・新しい酸化物二次元電子系熱電材料の創製（A01(イ), A02(エ), A01 公募との共同研究）
- ・導電性・磁性の同時可逆スイッチング可能な全固体デバイスの作製（A01(ア), A01(イ)との共同研究）

・研究費の使用状況（（１），（２），（３）を合わせて３ページ以内）

（１）主要な物品明細（計画研究において購入した主要な物品（設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。）について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。）

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価（円）	金額（円）	設置(使用)研究機関	
25	透過電子顕微鏡用STEMCLユニット	日本電子(株)製	1	22,995,000	22,995,000	名古屋大学	
	高温超高压発生装置	南葵エンジニアリング工業社製	1	15,697,500	15,697,500	東京工業大学	
	半球型エネルギーアナライザー	独国オミクロン・ナノテクノロジー社製 EA125	1	12,967,500	12,967,500	北海道大学	
	コンパクト高出力エキシマレーザー	米国コヒレント社製 COMPexPro110-KrF	1	11,549,998	11,549,998	大阪大学	
	精密イオンミリング装置	米国 Gatan 社製 Model 695 Cool	1	8,190,000	8,190,000	東京大学	
	ナノ構造作製装置	日立ハイテクノロジーズ, IM4000	1	7,875,000	7,875,000	一般財団法人ファインセラミックスセンター	
	エキシマレーザー	米国コヒレント社製 COMPexPro 10 2-TI	1	7,778,400	7,778,400	北海道大学	
	大出力赤外ファイバーレーザー	SPI Laser 社製 R4 モデル	1	6,909,000	6,909,000	物質・材料研究機構	
	26	冷却ホルダー及びコントローラ	日本電子製 EM-Z13330TG4652	1	13,886,640	13,886,640	名古屋大学
27		スペクトル取得用アレイ検出機一式	日本電子製	1	13,886,640	13,886,640	名古屋大学
		ボトムマウント CCD カメラ(共用)	日本電子製 OriusSC200 D	1	9,180,000	9,180,000 (5,180,000)	名古屋大学
28	高温加熱炉システム	株式会社東陽テクニカ製 UHT-Z	1	5,495,040	5,495,040	東京大学	
	精密断面試料作製装置(冷却仕様)	日本電子株式会社・IB-09060CIS	1	9,990,000	9,990,000	東京大学	
29	ドライ SD60G 検出器	EX-24241M1G4T 日本電子製	1	9,612,000	9,612,000	名古屋大学	
	四重極質量分析計(共用)	JMS-Q1500GC 日本電子株式会社製	1	9,990,000	9,990,000 (7,490,000)	名古屋大学	
	TEM 内高温その場観察用二軸傾斜ホルダー一式(合算使用の例外)	Protochips 社製	1	9,990,000	9,990,000 (2,391,803)	東京大学	

(2) 計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

#### 【平成25年度】

##### ・旅費

1. Materials Research Society Fall Meeting (アメリカ, ボストン)に参加し, 成果発表した. (京都⇄ボストンの交通費, 宿泊費)4名 1,670,000円 A02(エ)班
2. 38nd International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (米国 デイトナビーチ)に参加, 成果発表した. (東京⇄デイトナビーチの交通費, 宿泊費)1名 875,570円 A01(イ)班
3. ヨーク大学にて共同研究打合せおよび The Electron Microscopy and Analysis Group Conference (英国 ヨーク)に参加, 成果発表した. (東京⇄ヨークの交通費, 宿泊費)1名 731,560円 A01(イ)班

##### ・人件費・謝金

1. 博士研究員の雇用 1名 2,520,000円 A02(エ)班 (ナノ構造情報に基づいた機能探索)
2. 研究支援員の雇用 1名 2,166,700円 A03(ケ)班 (規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出)
3. 博士研究員の雇用 1名 1,603,000円 A03(ク)班 (ナノ構造情報に基づいた固体イオニクス材料の創出)

##### ・その他

1. スパコン利用負担金 2,250,000円 A02(エ)班 (多数の第一原理計算を実施するため)
2. 透過型電子顕微鏡修理費 1,470,000円 A01(イ)班 (既存設備活用のため)
3. 第一原理計算ソフトウェア保守料金 932,400円 A01(イ)班 (第一原理計算を実施するため)

#### 【平成26年度】

##### ・旅費

1. 18th International Microscopy Congress Prague 2014 (チェコ共和国, プラハ)に参加, 成果発表した. (名古屋⇄プラハの交通費, 宿泊費)3名 883,450円 A01(ウ)班
2. Int'l Symposium on Nitrides (ドイツ, ダルムシュタット)に参加, 成果発表した. (京都⇄ダルムシュタットの交通費, 宿泊費)1名 830,000円 A02(エ)班

##### ・人件費・謝金

1. 博士研究員の雇用 3名 13,310,000円 A02(エ)班 (ナノ構造情報に基づいた機能探索)
2. 博士研究員の雇用 1名 4,802,000円 A03(ク)班 (ナノ構造情報に基づいた固体イオニクス材料の創出)
3. 研究支援員の雇用 1名 4,382,409円 A03(ケ)班 (規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出)

##### ・その他

1. 共用設備(TEM, X線解析装置等)利用料 2,070,400円 A01(イ)班 (結晶構造, 微細組織の解析のため)
2. 第一原理計算ソフトウェア保守料金 1,080,000円 A02(エ)班 (第一原理計算を実施するため)

#### 【平成27年度】

##### ・旅費

1. The 15th Frontiers of Electron Microscopy in Materials Science (米国 レイクタホ)に参加, 成果発表した. (東京⇄レイクタホの交通費, 宿泊費)2名 749,120円 A01(イ)班
2. 17th International Conference on the Strength of Materials (チェコ, ブルノ)に参加, 成果発表した. (名古屋⇄ブルノの交通費, 宿泊費)1名, 556,070円 A01(ア)班

##### ・人件費・謝金

1. 博士研究員の雇用 3名 11,400,000円 A02(エ)班 (ナノ構造情報に基づいた機能探索)
2. 博士研究員の雇用 1名 4,814,000円 A03(ク)班 (ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出)
3. 博士研究員の雇用 1名 4,099,589円 A02(カ)班 (原子層制御による新しい材料機能探索)
4. 研究支援員の雇用 1名 3,300,540円 A03(ケ)班 (規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出)

##### ・その他

1. 電子顕微鏡室防音工事 3,996,000円 A01(イ)班 (既存設備の空間分解能安定性向上のため)
2. 共用設備(TEM, X線解析装置等)利用料 1,284,200円 A01(イ)班 (結晶構造, 微細組織の解析のため)

**【平成28年度】****・旅費**

1. Microscopy and Microanalysis 2016(米国 コロンバス)に参加, 成果発表した. (東京⇄コロンバスの交通費, 宿泊費) 4名, 1,486,316円 A01(イ)班
2. Materials Research Society Fall Meeting(米国, ボストン)に参加, 成果発表した. (つくば⇄ボストンの交通費, 宿泊費) 4名, 1,200,000円 A02(オ)班

**・人件費・謝金**

1. 博士研究員の雇用 2名 7,600,000円 A02(エ)班 (ナノ構造情報に基づいた機能探索)
2. 事務支援員の雇用 1名 3,870,000円 A03(ク)班 (ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出)
3. 研究支援員の雇用 1名 3,285,052円 A03(ケ)班 (規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出)

**・その他**

1. 計算機クラスター電気料金 1,680,000円 A02(エ)班(第一原理計算および機械学習実行のため)
2. ソフトウェア開発作業費用 1,053,000円 A01(ア)班(計算データ処理プログラム開発補助のため)

**【平成29年度】****・旅費**

1. 12th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology(米国 ワイコロワ)に参加, 成果発表した. (東京⇄ワイコロワの交通費, 宿泊費) 3名 839,508円 A01(イ)班
2. Materials Research Society Fall Meeting(米国, ボストン)に参加, 成果発表した. (つくば⇄ボストンの交通費, 宿泊費) 1名, 450,000円 A02(オ)班
3. Microscopy and Microanalysis 2017(米国 セントルイス)に参加, 成果発表した. (東京⇄セントルイスの交通費, 宿泊費) 1名 420,220円 A01(イ)班

**・人件費・謝金**

1. 研究支援員の雇用 1名 2,696,959円 A03(ケ)班 (規整ナノ反応場の構築と新しい触媒機能の創出)
2. 博士研究員の雇用 1名 2,020,000円 A02(エ)班 (ナノ構造情報に基づいた機能探索)
3. リサーチアシスタントの雇用 5名 1,251,000円 A03(ク)班 (ナノ構造情報に基づいた新しい固体イオニクス材料の創出)

**・その他**

1. 共用設備(TEM, X線解析装置等)利用料 2,770,400円 A01(イ)班(結晶構造, 微細組織の解析のため)
2. SIMS分析 4回 885,600円 A03(キ)班(酸素原子の空間分布評価のため)

(3) 最終年度(平成29年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

該当なし

## 9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ以内）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

### 1. 本領域研究の当該学問分野と関連学問分野への波及効果

本領域研究は、材料科学分野をさらに強化するために平成 24 年に立案され同 25 年に開始した。5 年間の領域研究の結果、CS 課題の 3 つの材料分野における多様な材料を対象に、**ナノ構造情報**を活用した**普遍的な材料開発原理を構築する**という**材料科学の新展開**を導くことに成功した。平成 23 年には米国で *Materials Genome* と呼ぶ研究展開がアナウンスされていたものの、当時は黎明期で、材料科学と情報学の両方が理解でき、それを実践している研究者は国際的にもほとんど居ない状況であり、我が国も同様であった。本領域研究は、そのような時期にスタートした。本領域では、総括班主導により構成した若手研究者による融合研究タスクフォースにおいて、材料科学と情報学の研究者が高い頻度で議論を重ねることで、早期に研究目標や専門用語を共有し、種々の材料科学の現象を情報学における問題として設定し、多くの融合研究の成果を上げることに成功した。領域研究の成果は、高インパクトの **Nature ファミリー誌 20 報と Science ファミリー誌 5 報**を含む合計 **735 報**の学術論文として公表されている。

学会等での成果発表は活発に行い、領域内の多数の材料科学研究者が情報学の国際会議、また情報学の研究者が材料科学の国際会議で招待講演を行った。国内の関連する学協会のシンポジウムや講演会では本領域の研究者が企画、あるいは基調・招待講演を行い、各イベントをリードした。たとえば日本金属学会の平成 25 年から 5 年間の公募シンポジウム、日本物理学会での平成 30 年共催シンポジウムなどである。

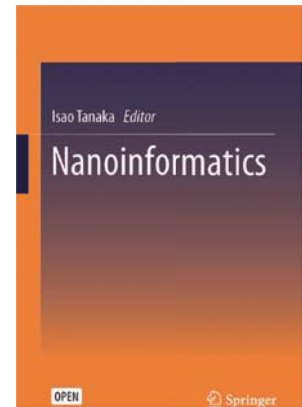
英文での書籍や雑誌としては、領域代表者を編集者として本年 2 月に Springer 社より *Nanoinformatics* という表題で出版した解説書（右図）は、出版後 3 か月で電子版のダウンロードが 2 万件を超える出版社が驚異的と言う数字をあげ、世界的なインパクトの大きさを物語っている。さらに領域代表者を **Guest Editor** として、材料科学分野で国際的に広く流通する雑誌 *MRS Bulletin* に特集号を提案したところ採択され、本年 9 月発刊を目指して現在編集の最終作業中である。

本領域研究が先導した分野の盛り上がりを受けて、平成 27 年に物質・材料研究機構（NIMS）に情報統合型物質・材料研究拠点(MI<sup>2</sup>I)が設置され、平成 27 年と 29 年には科学技術振興機構（JST）で関連するさきがけと CREST 事業が開始した。本領域メンバーの多くは、これらの新展開にアドバイザーや研究員として貢献している。JST 事業には本領域の若手メンバーが研究代表者として課題提案し、さきがけに 8 名、CREST に 2 名が採択され、活躍中である。

このように 5 年間で本領域での材料科学と情報学の融合研究成果は世界を先導するものとなり、またその成果は国際的な関連学協会において材料科学の新展開として認知され、確実に次世代に継承されている。

### 2. 本領域研究の社会への波及効果

現代社会は、エネルギー問題、安心・安全の確保、環境保全、情報通信などの各分野において、革新的な材料開発の新しい概念や発展が待望されている状況にある。本領域研究の成果である材料科学と情報学の連携や、ナノ構造情報を活用した普遍的な材料開発原理については、学界のみならず、鉄鋼、非鉄、電気・電子、セラミックス、重工、自動車など産業界からの注目度も高く、領域メンバーとの産学連携研究や講演依頼が多数行われている。領域代表者への JST のサイエンスチャンネル（平成 28 年 4 月、You Tube 視聴回数 6,100 回）や日経 XTECH でのインタビュー記事がインターネットで配信され、注目を集めている（右図中、下）。



ISBN 978-981-10-7617-6



インタビュー  
新材料発見にアマゾン技術、グーグルが触手 トップ研究者の焦燥  
京都大学教授 田中 功氏  
日経 XTECH



## 10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1 ページ以内）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者（※）の研究終了後の動向等を記述してください。

※研究代表者・研究分担者・連携研究者・研究協力者として参画した若手研究者を指します。

### 若手研究者による異分野融合のための研究会開催

情報学分野と材料科学分野で、研究目標や専門用語を共有したうえで、高度な融合研究に発展させるために、領域代表者を中心として若手研究者によるタスクフォースを形成して、月一回以上の会合を開催した。その結果、多くの融合研究が生まれただけでなく、情報学の専門家の補助なしに材料科学と情報学を融合した研究を推進できる人材を輩出することに成功した。領域研究終了後も、会合に参加していた若手研究者が中心となり、情報分野と材料科学分野の融合研究を行うべく、月一回以上の会合を開催している。

### 大学院生および若手研究者が主催する「若手の会」開催と若手ネットワーク構築

大学院生および若手研究者同士の連携を促すための活動として、大学院生が主催する研究発表会「若手の会」を毎年夏に開催した。泊まりこみで深夜までポスターセッションを行って徹底的に議論を戦わすものであり、大学院生の自立心の強化や、健全な競争心を刺激することに大いに役立った。これにより、大学、研究分野の垣根を越えた若手のネットワークが構築され、大学院生の場合は、卒業した後までネットワークが機能している。若手の会は年1回であるが、このようなネットワークが構築されて相互理解が進んだことで、国内・国外の諸学会において、若手研究者による分野横断的な討論が活性化した。

### 大学院生および若手研究者の領域内他班での長期滞在プログラム

領域間で共同研究を実施するだけでなく、研究の着眼点や方法論における異文化を経験するために、総括班主導で1年程度の大学院生および若手研究者の領域内他班への長期滞在プログラムを4件実施した。具体的には A03(ク)の研究協力者である東京工業大学の大学院生（堀）が A02(エ)の京都大学に1年間、A02(エ)の研究協力者である京都大学の大学院生とポスドク3名（村田、片山、設楽）が、それぞれ A02(オ)、A02(カ)、A03(キ)に1年間滞在し、研究の複合的な着眼点や方法論を習得した。

### 大学院生および若手研究者の海外留学

H26年7月には A02(エ)の協力研究者であった博士課程大学院生2人（設楽、炭谷）が、材料情報学分野の世界的権威である米国 Iowa 州立大学の Rajan 教授のもとに1か月間の短期海外留学した。また国際活動支援班の活動の一環として、H29年4月より、特定助教1人（池田）を独国マックスプランク研究所 Neugebauer 教授のもとに1年間派遣した。これを契機に本領域との国際共同研究が開始し、本領域における成果の1つとなった。[Y. Ikeda *et al.* npj Comput. Mater. 4, 7 (2018)]

### 若手研究者および大学院生のキャリアアップおよび受賞

本領域研究実施中に多数の若手研究者がキャリアアップした。博士課程大学院生から博士研究員への昇任4件、助教への昇任11件、講師への昇任2件、准教授への昇任9件、教授への昇任が4件あった。これらの大多数が、新たな職位において、現在も本領域研究の新展開を目指した研究を実施している。また、材料インフォマティクス関連の JST 事業においても、CREST2名、さきがけ8名が研究代表者として活躍しており、情報分野と材料科学分野の融合研究が定着していると言える。さらに、若手研究者および大学院生が国内外において高い評価を受けており、合計47件の賞を受賞した。

#### 【以下、非公開部分】

代表的なキャリアアップおよび受賞は、以下の通りである。

A01(ア)	分担者	豊浦 和明	名古屋大学助教から京都大学准教授、第24回日本金属学会奨励賞、日本セラミックス協会 国際交流奨励賞 21世紀記念個人冠賞井関賞 (H28)
A01(イ)	分担者	佐藤 幸生	東京大学助教から九州大学准教授 第67回日本セラミックス協会進歩賞 (H25)
A01(イ)	分担者	藤平 哲也	東京大学助教から大阪大学准教授
A01(イ)	分担者	栃木 栄太	第24回日本金属学会奨励賞(H26)
A01(イ)	分担者	石川 亮	第25回日本金属学会奨励賞(H27)、Albert Crewe Award (H28)
A01(ウ)	分担者	巽 一蔵	日本顕微鏡学会奨励賞 (H26)
A02(エ)	連携者	世古 敦人	京都大学助教から京都大学准教授、本多記念研究奨励賞 (H28)
A02(エ)	連携者	林 博之	京都大学特定助教から京都大学助教
A02(エ)	協力者	高橋 亮	京都大学博士研究員から東京工業大学助教
A02(エ)	協力者	横井 達矢	大阪大学博士課程学生から名古屋大学助教
A02(カ)	分担者	村田 秀信	物質材料研究機構博士研究員から大阪府立大学助教
A02(コ)	連携者	片瀬 貴義	北海道大学助教から東京工業大学准教授 日本セラミックス協会賞進歩賞 (H28)

## 11. 総括班評価者による評価（2ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

### (1) 総括班の評価体制

評価委員は総括班会議および全体会議に出席し、計画研究・公募研究の研究内容の聴取による研究進捗状況の評価を行い、領域代表者、計画研究代表者のみならず個々の領域内研究者に評価結果をフィードバックした。さらに領域内での共同研究の状況や総括班の活動状況を逐次チェックし、領域全体の研究運営に関する評価と指導を行った。

### (2) 評価委員による評価コメント

#### 足立 裕彦（京都大学・名誉教授）

領域代表者の強いリーダーシップの下、情報科学との融合による新しい材料科学の展開を目指した研究開発・領域運営がなされた。世界トップクラスの最先端電子顕微鏡技術を駆使し、高精度な第一原理計算を始めとする最先端計算科学を連携させた研究を行い、従来の材料研究からは想像もできないぐらいの詳細なナノ構造情報を得ている。さらに、本領域研究で取り組んできた情報科学との融合を実現する手法や方法論の開発も行われ、計算科学の新しい側面を切り開いた。その結果、数多くのNature, Science級の研究成果が生み出され、その学術的価値の大きさはいうまでもない。さらに、基礎的学理にとどまらず、材料応用への取り組みも精力的に進めている。高温で使われるセラミックス材料や生体材料、固体イオックス材料、触媒材料などいくつかの異なる分野への適用応用にも挑み、具体的な研究開発成果も出ている。これは、この新学術領域研究で得られたナノ構造情報に基づく材料開発原理が、材料分野を問わない普遍的なものであることを示している。

また、若手研究者の成長にも目を見張るものがある。本領域で多くの成果を挙げた研究者が、大学・研究所に採用され、次世代の材料科学を担う研究者として活躍してくれるものと確信している。若手育成のみならず、有機的な連携研究や共同研究を進めるべく、若手～中堅の研究者が頭を捻り、積極的な姿勢で領域運営に取り組んでいた。この経験は、この領域に参画していた研究者コミュニティによる次の展開を目指す際の大きな財産となるであろう。

#### 佐久間 健人（東京大学・名誉教授、高知工科大学・前学長）

本領域研究は、最先端の電子顕微鏡や第一原理計算に関わる有力な研究者が結集し、ナノ構造に基づいた材料科学の新展開を目指したものである。とりわけ本領域の特徴は、情報学の手法を融合させた新しいナノ材料科学の展開という点にある。材料探索や構造探索を効率的に行うための新しい手法に取り組み、そこで得られた研究成果は高いインパクトをもち、材料科学の成果として卓越している。これらの成果によるナノ材料科学およびその研究手法は、いまや材料科学研究のスタンダードとなったとって過言ではない。その先駆者たる領域代表者を始めとする領域内研究者には、引き続き世界最高水準の研究を続けていただき、世界をけん引していただきたい。

領域内運営という点では、情報班やタスクフォース、各センターの設置など、研究の効率化・加速化を目指した努力・工夫が見られ、大いに評価したい。その結果、700報を超える発表論文に大きな貢献をしているのであろう。今年2月に英文出版した解説書がすでに世界中から2万件を超えるダウンロードを得ているということも、この領域研究への世界的な注目度の高さを示している。

若手研究者の育成という点においても、研究期間中に、多数の学生や博士研究者が優れた研究機関にステップアップしていることは特筆に値する。これは、本研究領域の研究アクティビティの高さを示しているが、領域外の材料科学に関わる他機関や大学の若手研究者にも大いなる刺激を与えているであろう。以上の研究成果や若手の成長が、今後の材料科学の発展を支えて、我が国の国際的な競争力向上にもつながることを期待する。

#### 森 博太郎（大阪大学・特任教授，大阪大学・名誉教授）

電子顕微鏡やプローブ顕微鏡などの最先端ナノ計測技術はナノテクノロジーを基盤的に支える重要な解析手法である。本領域ではこれをさらに深化させ、単に空間分解能を上げるのみならず、原子レベルでの組成情報や3次元情報の取得までも可能とする取り組みに挑戦し、それに成功している。この意味において、ナノ構造解析のフロンティアを大きく前進させたといえる。さらに、第一原理計算を始めとする最先端の理論計算技術を連携させることで、世界トップレベルでの材料研究を推進している。

本領域における新たな試みは、材料科学研究のなかに情報学の考え方を横串として導入するという革新的なものである。情報学分野の研究者を領域にとりこみ、領域内連携研究を活発に行うことで、情報学と材料科学の融合に取り組んだ。その結果、本領域が開始した時点と比べると数段高いレベルの融合を達成している。これは領域代表者のリーダーシップによるところが大きい。本領域は、世界的に見ても、このような新しい展開が実践できる数少ない研究組織の一つであることは論を俟たない。

新学術領域研究は、単一の研究室では達成困難な「新学術」の創出を多様な研究室間での有機的な連携により達成することに最大の意義がある。本領域では、数多くの研究室間にわたる、理論計算と実験さらに情報学との緊密な相互連携が図られ、それによって幾多の優れた成果が挙げられている。よって、新学術領域として十分な達成度に至っていると判断できる。

#### 高野 幹夫（京都大学・名誉教授）

巨視的な材料特性が、局所的な界面や格子欠陥に大きく左右されることがよくある。その機構を電子・原子レベルで解析し、それを新材料開発や材料設計の高精度化に活かすことができれば素晴らしい。本領域研究は、ナノ計測、理論計算、薄膜作製や高压合成、各種材料応用分野の有能な研究者で構成されており、当初より大きな期待感をもって評価を務めた。加えて、ナノ材料科学と情報学を融合して材料開発と設計の精度と速度を上げるという未踏領域への挑戦が目標の1つとして掲げられ、領域代表者を始めとして研究者たちのたゆまぬ努力が重ねられた。その甲斐あって、界面数原子層の構造が巨視的特性を左右する新たな研究例や、高イオン伝導体候補物質の提示と検証などの非常に興味深い成果が多数得られており、大いに評価したい。これらの成果を挙げた研究者は30代半～40代の世代であるため、この領域に参画した経験をもとに、次の材料分野を担うべくさらに邁進していただきたい。

#### 樋口 知之（統計数理研究所・所長）

本領域の、材料科学研究のなかに情報学の手法を導入し、新しい分野を確立しようという試みは革新的で挑戦的である。そこで、総括班主導により形成した若手研究者によるタスクフォースを起点とし、領域内の連携研究を通じて、情報学的方法論をいかに材料科学の課題に適用するかについて、材料科学と情報学との研究者の間で多くの議論が重ねられた。その結果得られた方法論や開発手法は独創的なもので、セラミックス粒界構造の高効率探索、第一原理計算とベイズ最適化によるイオン伝導経路の高効率探索、推薦システムによる新規無機化合物の探索、材料科学者をサポートする機械学習ソフトウェアの開発など、多くの方法論や手法が開発されている。さらに、それらによって得られた融合研究の成果は数多くの高インパクトの学術雑誌に発表されている。この5年間における進歩は驚くべきものであり、情報学分野の研究者にも大きな刺激を与えている。

本領域研究はここで終了となるが、ここで取り組んだ材料科学と情報学の融合手法の開発が引き続き発展することを期待している。そのためには、ここに参画している研究者たちが主導的立場にあると考えられるので、この融合分野をさらに展開していただきたい。