

令和 6 年 5 月 21 日現在

機関番号：13901

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05785

研究課題名（和文）機能コアの材料科学

研究課題名（英文）New Materials Science on Nanoscale Structures and Functions of Crystal Defect Cores

研究代表者

松永 克志（Matsunaga, Katsuyuki）

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：20334310

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 82,400,000円

研究成果の概要（和文）：本領域研究では、世界最高水準の電子状態計算、モデル実験、ナノ計測を三本柱とし、機能材料、エネルギー材料、構造材料分野で高い研究業績を上げている中堅・若手研究者らと一体になって、機能コアの概念に立脚した新しい材料科学の学理を構築する。さらに、機能コア制御による多様な材料創製への展開を目指す。これらの研究を推進・支援するため、領域内研究に対する助言や進言、共同研究や共通試料・設備利用の推進、若手育成・国際支援を目指した企画とその運営等を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

世界最高水準の電子状態計算、モデル実験、ナノ計測の密接な連携に基づく有機的な共同研究により、機能コアの概念に立脚した新しい材料科学の学理構築に至った。さらに、機能コア制御による多様な材料創製にも成功した。これらの研究を推進・支援するため、領域内研究に対する助言や進言、共同研究や共通試料・設備利用の推進、若手育成・国際支援を目指した企画とその運営等が奏功した。また本領域で、志を共有できる中堅・若手研究者の人的ネットワークが形成され、材料科学における新たな潮流を生み出す契機となることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：In this project, specific electronic and atomic structures of grain boundaries, interfaces and dislocations that can realize novel and distinct materials properties are defined and referred to as “crystal defect cores”. Researchers specializing in theoretical calculations, nanoscale characterization and advanced materials processing conduct collaborative studies, aiming at creating a new area in materials science named “crystal defect core”. Through establishing new scientific principles based on the concept of “crystal defect core”, we will further explore novel properties and materials due to crystal defects. In order to support this research activity, the steering committee members play important roles in promotion of individual scientific researches, collaborations between researchers, preparation of standard samples, shared use of research facilities, young generation development, international research collaboration.

研究分野：ナノ材料科学

キーワード：結晶欠陥

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

先進材料の示す優れた材料特性の多くは、純物質としての材料特性ではなく、点欠陥や転位、表面、粒界、界面などの結晶欠陥に起因している。したがって、結晶欠陥近傍の原子配列と特徴的な電子状態を理解し、それらと材料特性との関係を解明することは、今後の材料開発において不可欠となる。結晶欠陥特有の電子構造や原子配列に関する情報を革新的な材料開発につなげるには、第一に、結晶欠陥のナノレベル構造を制御した系統的な研究が必要である。第二には、結晶欠陥の静的な構造情報だけでなく、結晶欠陥に局在した電子と、電磁場やフォノン、フォトン等の相互作用を解明し、材料特性とどのように結びついているか、つまり結晶欠陥のコア領域の量子場 = 「機能コア」にまで掘り下げた研究が必要である。

本領域研究では、世界最高水準の電子状態計算、モデル実験、ナノ計測を三本柱とし、機能材料、エネルギー材料、構造材料分野で高い研究業績を上げている中堅・若手研究者らと一体になって、機能コアの概念に立脚した新しい材料科学の学理を構築する。さらに、機能コア制御による多様な材料創製への展開を目指す。これらの研究を推進・支援するため、領域内研究に対する助言や進言、共同研究や共通試料・設備利用の推進、若手育成・国際支援を目指した企画とその運営等を行う仕組みが必要不可欠である。

### 2. 研究の目的

先進材料の示す優れた材料特性の多くは、純物質としての材料特性ではなく、結晶欠陥における量子場 = 「機能コア」に起因している。本領域研究では、世界最高水準の電子状態計算、モデル実験、ナノ計測を三本柱とし、機能材料、エネルギー材料、構造材料分野で高い研究業績を上げている中堅・若手研究者らと一体になって、機能コアの概念に立脚した新しい材料科学の学理を構築する。総括班ではこの領域の目的を達成するため、

- 1) 研究領域の全体的な研究方針の策定
- 2) 連携研究および設備有効利用の促進
- 3) 若手人材育成・国際活動支援
- 4) 公開シンポジウム等の成果公表活動
- 5) アウトリーチ活動

を行う。さらに、連携研究が最大限の効果を上げるよう、総括班のなかに、計算解析センター、ナノ計測センター、モデル試料センターを設置し、計算解析手法や共通試料、特性評価方法、研究設備を共有化する。

### 3. 研究の方法

本領域では、各計画研究班の研究代表者 8 名、研究分担者 3 名、外部有識者による評価委員 4 名、および領域代表経験者である領域アドバイザー 2 名から構成される総括班を設置する。総括班は、以下のような役割および活動を通じて、領域推進に貢献する。

#### 1) 研究領域の全体的な研究方針の策定

領域研究の全体的な研究方針の策定、各計画研究への助言を行い、領域研究の効率的な推進をサポートする。研究期間内に 2 度行われる公募研究についても、募集方針を決める。さらに、外部評価委員と領域アドバイザーは、独善的な組織運営および領域研究とならないよう、領域内研究者に適宜助言・指導を行う。

#### 2) 連携研究および設備有効利用の促進

本領域研究の 3 つの核心的技術要素である、計算科学、ナノ計測、モデル・共通試料合成を司るセンターを設置する(計算解析センター(東大駒場)、ナノ計測センター(東大総合)、モデル試料センター(名大))。これを通じて、研究経費の効率的な使用および大型設備の効果的利用を促すとともに、領域内でモデル試料・共通試料の提供を行う。

#### 3) 若手人材育成・国際活動支援

若手研究者や大学院生主体の「若手の会」を定期的実施し、そのプログラムを策定・管理する。また、国際連携研究および研究者派遣・受入に関するシステムを運用し、活動を支援する。

#### 4) 公開講演会、シンポジウム等の企画調整と実施

外部への公開講演会、領域内のいくつかのトピックスについて集中的に議論を行う研究会、学会を利用した公募セッションの開催し、国際シンポジウム等を企画する。

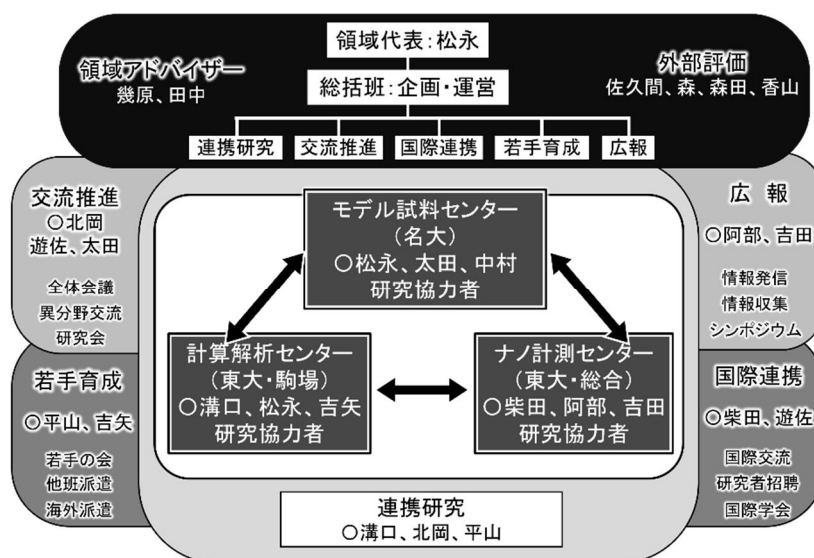
#### 5) アウトリーチ活動

最新の研究内容を年 1 回、ニュースレターとして発行する。また、領域研究に対するより多くの国民からの理解を得ることを目的とし、ニュースレターという媒体だけでなく、積極的なプレス発表を行う。大学における研究成果公開イベントなどにも積極的に参加・出展する。

#### 【総括班の組織と役割分担】

研究代表者 松永克志(名古屋大学・教授): 全体の総括、モデル試料センター主担当、計算解析センター副担当

- 研究分担者 溝口照康 (東京大学・准教授): 計算解析センター主担当、連携研究主担当
- 研究分担者 柴田直哉 (東京大学・教授): ナノ計測センター主担当、国際連携主担当
- 研究分担者 阿部真之 (大阪大学・教授): 広報主担当、ナノ計測センター副担当
- 研究分担者 遊佐 斉 (物質・材料研究機構・主席研究員): 交流推進副担当、国際連携副担当
- 研究分担者 太田裕道 (北海道大学・教授): モデル試料センター副担当、交流推進副担当
- 研究分担者 北岡 諭 (ファイナセラミックスセンター・主幹研究員): 交流推進主担当、連携研究副担当
- 研究分担者 平山雅章 (東京工業大学・准教授): 若手育成主担当、連携研究副担当
- 研究協力者 吉矢真人 (大阪大学・准教授): 計算解析センター副担当、若手育成副担当
- 研究協力者 中村篤智 (大阪大学・准教授): モデル試料センター副担当、事務担当
- 研究協力者 吉田英弘 (物質・材料研究機構・主幹研究員): ナノ計測センター副担当、広報副担当
- 研究協力者 佐久間健人 (東京大学・名誉教授): 評価担当
- 研究協力者 森博太郎 (大阪大学・名誉教授): 評価担当
- 研究協力者 森田清三 (大阪大学・名誉教授): 評価担当
- 研究協力者 香山正憲 (産業技術総合研究所・名誉リサーチャー): 評価担当
- 研究協力者 幾原雄一 (東京大学・教授): 領域アドバイザー
- 研究協力者 田中 功 (京都大学・教授): 領域アドバイザー



総括班連携体制図 (○は主担当者)

#### 4. 研究成果

##### 1) 研究領域の全体的な研究方針の策定

本領域のキックオフ会議と同日(2019年9月7日)を第1回として、各年度2回を目安に計9回の総括班会議を開催した。領域研究者および評価委員、領域アドバイザーと、領域の計画や企画、運営について状況を確認するとともに、適宜助言・進言が行われた。また研究分担者や協力者の追加・変更、公募研究の応募方針策定など、領域構成に関わる議論を行い、領域運営に反映させた。

##### 2) 連携研究および設備有効利用の促進

本領域研究の3つの核心的技術要素である、計算科学、ナノ計測、モデル・共通試料合成を司るセンターを設置した。これを通じて、総括班の監督のもと、共同研究や連携研究を強く推進した。具体的には、(1)共同研究内容を各センター主副担当が査定し、(2)問題解決に必要なアプローチおよびそれを遂行する領域内研究者のアサイン、(3)研究者間の引き合わせと研究内容のすり合わせ、までをケアすることで、共同研究が円滑に進むよう配慮した。また、各センターや各計画班で所有する装置・機器について情報共有する手段として、コミュニケーションツールである Slack を導入し、設備の有効利用とそれによる共同研究の促進を図った。計画班・公募班連携に関しては、オンラインによる「遠隔連携会議」を実施し、公募研究者の研究分野や研究アプローチ、保有装置に関する相互理解を深めた。さらに、研究内容・手法に応じて、公募班研究者を計画班の研究協力者として参画させ、より実質的な領域への貢献を指揮した。

##### 3) 若手人材育成・国際活動支援

将来を担う若手人材の育成に力を注いだ。まずは、大学院生が主催する研究発表会「若手の会」を開催した。初年度の「若手の会」(令和元年9月、浜名湖(静岡))では計97名の参加者があった。一方、令和2年度から令和4年度は、オンライン形式による「若手コラボツアー」を実施した。これは、本領域内の若手研究者・大学院生による最新の研究成果の発表・討論に加え、各

研究グループの研究設備や研究環境をオンライン配信し、対面実施が困難な状況にあっても若手の相互理解促進に大きく貢献した。令和5年度は対面による「若手の会」(8月、東京大学にて)を開催し、各大学・研究機関の若手スタッフや教員も含めた交流を深めた。

国際活動支援も積極的に進めた。まずは、本領域メンバーがすでに有している国際的ネットワークを活用した。新たな研究機関との国際連携に際しては、総括班の国際連携担当が連携先機関の調査および連携の有効性を総括班で審議し、研究者招聘・派遣の可否を決定した。

#### 4) 公開講演会, シンポジウム等の企画調整と実施

一般も含めた公開シンポジウム(2019年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響で中止)を、各年度末に実施した。また各年度において、日本金属学会秋期大会における公募シンポジウム「機能コアの材料科学」を主催した。加えて、2020年度には日本セラミックス協会秋季シンポジウムで「機能コアの材料科学」シンポジウムを開催した。

国際シンポジウムについては、2019年10月の第13回環太平洋セラミックス会議(PACRIM13)、2022年12月の第14回環太平洋セラミックス会議(PACRIM14)にて機能コアに関わる界面シンポジウムを共催し、海外トップレベルの研究者との情報交換および協力関係構築に努めた。加えて、2019年12月に3<sup>rd</sup> Workshop on Functional Materials Science(札幌)、2023年6月も4<sup>th</sup> Workshop on Functional Materials Science(韓国・釜山)を共催し、本領域の研究活動及び成果を多くの国からの参加研究者に強くアピールした。また、2023年12月には国際会議MRM2023/IUMRS-ICA2023(京都)において、主催シンポジウム“New Materials Science on Nanoscale Structures and Functions of “Crystal Defect Cores””を開催し、10名の海外研究者を基調講演・招待講演者として招聘した(右写真)。最先端の研究成果について議論するとともに、本領域のコンセプトの普及に努めた。



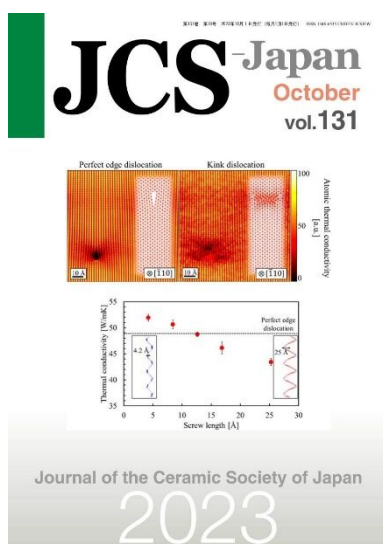
#### 5) アウトリーチ活動

最新の研究内容を年1回、ニュースレターとして発行した。また、領域研究に対するより多くの国民からの理解を得ることを目的とし、ニュースレターという媒体だけでなく、積極的なプレス発表を行った。大学における研究成果公開イベントなどにも積極的に参加・出展した。

また、名古屋大学で開催される「名大テクノフェア」に毎年「機能コア科学」ブースを出展、オープンキャンパス(2020年8月)及びオープンレクチャー(2021年3月)において一般・中高生を対象とした科学・技術対話を実施した。

#### 6) その他

本領域研究の研究成果を学理として取りまとめるため、国際学術誌JCS-JAPANにおいて、機能コア科学特集号を企画し、20報の論文を掲載した。その中から2報のEditor's Choice(編集委員長推薦論文)および2023年度優秀論文として選ばれ、本領域研究の学術的価値の高さを示すことができた。また、日本語による解説特集「結晶欠陥に形成される「機能コア」研究の最前線」を「まてりあ」誌上で発表した。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Matsunaga Katsuyuki, Yoshiya Masato, Shibata Naoya, Ohta Hiromichi, Mizoguchi Teruyasu	4. 巻 130
2. 論文標題 Ceramic science of crystal defect cores	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Ceramic Society of Japan	6. 最初と最後の頁 648 ~ 667
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2109/jcersj2.22080	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Katsuyuki Matsunaga
2. 発表標題 Electronic and Atomic Structures of Crystal Defect Cores in Advanced Materials
3. 学会等名 Advanced Materials Research GRAND MEETING (MRM2023/IUMRS-ICS2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

機能コアの材料科学 <a href="https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/">https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/</a> YouTube「機能コアの材料科学」 <a href="https://www.youtube.com/channel/UC0Uz0GvdjCIyaFVF5s5C3NA">https://www.youtube.com/channel/UC0Uz0GvdjCIyaFVF5s5C3NA</a> 機能コアの材料科学 <a href="https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/">https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/</a> YouTube「機能コアの材料科学」 <a href="https://www.youtube.com/channel/UC0Uz0GvdjCIyaFVF5s5C3NA">https://www.youtube.com/channel/UC0Uz0GvdjCIyaFVF5s5C3NA</a>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	阿部 真之  (Abe Masayuki)  (00362666)	大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授    (14401)	

## 6. 研究組織 (つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	遊佐 斉  (Yusa Hitoshi)  (10343865)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテクトニクス材料研究センター・グループリーダー   (82108)	
研究分担者	柴田 直哉  (Shibata Naoya)  (10376501)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授   (12601)	
研究分担者	平山 雅章  (Hirayama Masaaki)  (30531165)	東京工業大学・物質理工学院・教授   (12608)	
研究分担者	溝口 照康  (Mizoguchi Teruyasu)  (70422334)	東京大学・生産技術研究所・教授   (12601)	
研究分担者	太田 裕道  (Ohta Hiromichi)  (80372530)	北海道大学・電子科学研究所・教授   (10101)	
研究分担者	北岡 諭  (Kitaoka Satoshi)  (80416198)	一般財団法人ファインセラミックスセンター・その他部局等・主幹研究員   (83906)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	吉矢 真人  (Yoshiya Masato)	大阪大学・工学研究科・教授   (14401)	

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	中村 篤智 (Nakamura Atsutomo)	大阪大学・基礎工学研究科・教授  (14401)	
研究協力者	吉田 英弘 (Yoshida Hidehiro)	東京大学・工学系研究科・教授  (12601)	

## 7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会	開催年
Advanced Materials Research GRAND MEETING (MRM2023/IUMRS-ICS2023)	2023年～2023年

## 8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
フランス	University de Lille	CNRS		
ドイツ	Technische Universitat Darmstadt	Karlsruher Institute of Technology		
韓国	Pusan National University	Inha University	Seoul National University	
米国	University of California at Davis			