

領域略称名：ナノ構造情報
領域番号：2505

平成27年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開」

(領域設定期間)

平成25年度～平成29年度

平成27年6月

領域代表者 (京都大学・工学研究科・教授・田中 功)

目 次

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	4
2. 研究の進展状況	6
3. 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	9
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	11
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	15
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	21
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	23
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 総括班評価者による評価	25
10. 今後の研究領域の推進方策	27

研究組織

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	25106001 ナノ構造情報のフロンティア開拓－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	9
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・准教授	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・エコトピア科学研究所・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－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ニクス材料の創出	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・触媒化学研究センター・准教授	4
計画研究 計10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
公募研究 計14件					

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ程度）

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。

提案の概要

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，材料特性に決定的な役割を担う例は極めて多い．近年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った．本領域研究の構成メンバーは，これら一連のナノ材料科学の研究において多くの先駆的な成果を上げている．本領域研究では，ナノ材料科学のフロンティア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．このために，材料科学，応用物理，固体化学，触媒化学，情報科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一体となって研究を進め，新しい材料科学の奔流を創り出す．

「我が国の学術水準の向上・強化につながる新たな研究領域」である点

本領域研究は，わ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．2つの明確な目的がある．その第一は**ナノ材料科学のフロンティア開拓**である．最先端の透過型電子顕微鏡や原子間力顕微鏡により，個々の原子を直接観察・電子分光できるようになり，これらナノ機能元素の特徴的な局所構造や化学結合状態が発見された．さらに高精度第一原理計算によって，特定の構造が熱力学的に安定であることや，材料機能を強く発現させることがわかってきた．これら世界最高水準での研究をリードしている研究者が，本領域研究の構成メンバーとして結集した．本領域研究では，ナノ材料科学の未踏領域を世界に先駆けて，さらに深く広く開拓する．第二の目的は，**ナノ構造情報の活用**である．実験と理論計算に基づいた膨大な材料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科学の学問体系に立脚して強力に進め，同時に実験によって新しい構造－機能相関を探求する．その結果，デザインされた材料創製を合理的・効率的に行うための学問基盤となる新しい材料科学の奔流を創り出すことができる．

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・創出という観

ナノ構造情報のフロンティア開拓－材料科学の新展開

Exploration of nanostructure-property relationships for materials innovation



領域研究の骨子

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。

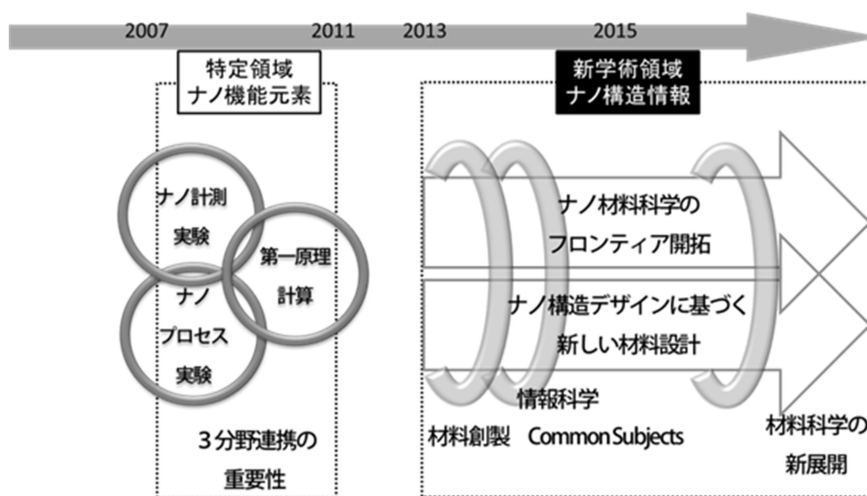
一方で、実験や理論計算で得たナノ構造情報そのままでは、材料創出への応用範囲は極めて限定的である。個別の材料についての、いわゆるアナリシス型研究開発である。これに対し、情報の統合化＝**シンセシス**を、統計熱力学および情報科学という学問体系に立脚して強力に進めるという研究は、諸外国にも例を見ない独創的なものである。

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た。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提案とは、次の2点において決定的に異なる。第一は、本領域提案がナノ構造情報に焦点を合わせている点である。本領域提案者らは、新材料設計・創出に情報科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、平成19～23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、材料創製や情報科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、下の図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つの目的が、新しく参加した材料創製や情報科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、図に表現した。



本領域における新学術創出の方策と、特定領域研究との関係

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（3 ページ程度）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。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、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

【研究戦略】

- ①ナノ材料科学の未踏フロンティアを世界最高水準で開拓する。そのために、ナノビルトイン実験、ナノ計測実験と高精度第一原理計算を密接に連携させた研究を進め、これまで未知であったナノ構造情報を系統的に獲得する。とくに実験と理論計算の研究者が一体となって活動できるよう工夫し、各計画研究代表者が**実験と理論計算が一体となった研究**に責任を持つ体制を作る。
- ②獲得される新たな**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、実験と理論計算の連携によって進め、この手法の有用性を実証する。そして**情報科学研究者との融合研究**を通じて、新しい学術領域として確立させる。
- ③**新時代のリーダー育成**を強く意識し、すでに高い研究実績をあげつつある若手・中堅研究者を中心とする 9 班の計画研究を設置し、相互に密接連携させる。また若手研究者や大学院生を共同研究に主体的・積極的に関与させる。
- ④**公募研究**を A01, A02, A03 の各研究項目に置き、ナノ構造情報を材料設計・創出に繋げる研究分野の拡大、斬新なアイデアの取り込みと研究者層の拡大を目指す。
- ⑤研究成果の国内外への発信、領域外を含む**国際的な連携・共同研究**の推進を積極的に進める。

【研究の進展状況】

初年度は、領域内での共同研究を念頭に、各研究項目において研究環境の整備を行うことを計画した。これと並行して、計画研究間の連携の要諦である研究理念と具体的な研究対象の共有化を達成することを目指した。本領域はナノ材料科学に関する分野横断的な学理の構築を目指すことから、多様な材料系をカバーした広範な研究対象とすることが望まれる。また、新学術領域研究では、通常の基盤研究のような一つの研究室、あるいは自然体でも共同研究が見込まれる複数の研究室だけでは達成が困難であるような、新しい「場」を形成することを目指すべきである。このような強い信念のもとで、計画研究 A03 (キ), (ク), (ケ) の代表者がエキスパートであり、材料創製のターゲットとしている①機能性セラミックス材料、②固体イオニクス材料、③触媒材料を**コモンサブジェクト (CS)**課題と設定し、これらを対象とした連携研究を総括班のリーダーシップのもとで 9 班の計画研究が一丸となって重点的に推進することとした。さらに公開講演会を開催し、研究理念と体制をグループ内外に発信し、公募班の潜在的候補に対し適切な情報を発信した。

第 2 年度以降は、初年度に設定した CS 課題を中軸に、各研究項目、計画研究において設定した個別の研究計画・目標を達成すべく連携研究を推進した。また、領域代表研究者のリーダーシップのもとで、CS 課題以外にも連携研究や分野横断研究を積極的に進めた。さらに、情報科学の研究者を公募班に積極的に採り入れ、計画研究との分野融合研究を進めた。また共同研究により、大きな進捗が期待されるような萌芽的な材料研究を行っている提案についても各研究項目で公募研究として採択し、密接な連携研究を行った。その結果、領域発足から数えて約 2 年、公募研究参画から約 1 年の現段階においても、融合研究の結果がすでに一流学術雑誌に掲載されるなど、期待以上の成果が得られており、上述の研究戦略に沿った領域研究が当初計画以上に進展している。

領域全体における**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**という明確な目的それぞれに対する計画および現時点での達成度は以下のとおりである。

1) **ナノ材料科学のフロンティア開拓**：最先端の顕微鏡、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開拓し、CS 課題を中心に、領域

内での連携研究で材料機能に重要な役割を持つナノ構造情報を先端手法で系統的に獲得することを目指している。顕著な成果が既に得られ、フロンティアを開拓すべく多数の連携研究が進行中である。

2) ナノ構造情報の活用：A01 で得られたナノ構造情報を A02 で統合・整理し、具体的なナノ構造デザインに昇華させ、その結果をもとに A03 で新材料の創出を試みるというものである。これまでに、計画研究・公募研究の密接な連携により、多数の成果が上がっている。情報科学と材料科学の分野横断融合研究についても、その成果が既に一流科学雑誌に出版されるなど成果があがり始め、新しい学術領域が形成されつつあることが実感できる。

各研究項目における応募時に設定した研究課題についての進捗状況を以下にまとめる。

各研究項目における研究の進捗状況

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

最先端の顕微鏡，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開拓し，領域内連携研究に供することを重要なミッションとして研究を進めてきた。現段階で，表面，界面，不純物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ている。また以下に具体的に示すように，CS 課題を主なターゲットに，計画研究・公募研究との多数の連携研究・融合研究が進行中である。

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（計画研究3班，公募研究6班）

ナノ構造情報を統合・整理し，具体的なナノ構造デザインに昇華させることを目的として研究を推進している。H26 年度より情報科学分野からの 6 件の公募研究が参画し，分野横断融合研究についても，領域代表者を中心としたタスクフォースなどの強化策が奏功し，すでに一流学術論文として発表した共同研究成果を挙げている。また高圧・高温プロセスや原子層制御によるモデル試料作成の中核として，多数の連携研究において中心的な役割を果たしており，高いレベルの研究が進行中である。

研究項目 A03 ナノ構造デザインに基づく新しい材料創製（計画研究3班，公募研究5班）

CS 課題を主なターゲットとした計画研究 3 班に加えて，強誘電体，巨大負熱膨張物質，酸化物ナノワイヤ，ゼオライト，電子セラミックス材料をカバーした公募研究 5 班が加わり，多様な材料の創製に向けた連携研究が進行している。CS 課題は A03 各班の材料創製に関する具体的なモチベーションが連携研究の起点となっている。A01，A02 との連携とフィードバックを経て，A03 が材料創製へと展開するスキームによる多数の連携研究が効率的に進行中である。

計画研究および公募研究における連携研究の進捗状況

①コモンサブジェクト(CS)課題に関する連携研究

CS 課題「機能性セラミックス材料」

A03(キ),(ク),(公募)- A02(エ),(オ),(カ),(公募)-A01(ア),(イ),(ウ),(公募)連携

酸化アルミニウム等の耐環境セラミックス中の物質移動に関して，実験・理論計算の連携により単一モデル界面を用いた原子レベルの現象解明，設計指針構築を目指した研究を推進している。第一原理計算結果を統計力学処理し，熱力学的安定性の議論も進めている。輻射熱反射素材 $Y_2Ti_2O_7$ について，統計的 ALCHEMI 解析により機能元素のサイト占有率を決定できることを示した。これらの研究により環境遮蔽性に及ぼす機能元素の影響が明らかになりつつある。さらに，強誘電体界面としてニオブ酸リチウムの単一モデル界面を創製・評価した結果，特定の界面構造において顕著な電気伝導性が発現することを明らかにした。

CS 課題「固体イオニクス材料」

A03(ク),(キ),(ケ),(公募)-A01(ア),(イ),(ウ)-A02(エ),(オ),(カ),(公募)連携

リチウム，酸素，プロトン，ヒドリドといった多様なイオン拡散種を有する幾つかの新規材料を発

見し、その構造とイオン導電メカニズムの解明を実験・理論の連携により進めている。また、第一原理計算と情報科学的手法の連携による新物質の理論探索とその実験による検証へと研究を展開している。イオン伝導体における伝導性の効率的な評価のため、第一原理計算と機械学習を組み合わせた手法の開発とその応用を多様な系を対象に進めている。リチウムイオン二次電池の 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、充放電履歴現象を STEM-EELS イメージの結果から、その起源を明らかにした。さらに、ジルコニア粒界の偏析現象を原子レベルで解明することに成功し、界面抵抗の起源の解明につながる画期的な成果を得ている。

CS 課題「触媒材料」

A03(ケ),(ク)-A01(ア),(イ),(ウ),(公募)-A02(エ),(オ),(カ),(公募)連携

$\text{TiO}_2(110)$ 表面上での Pt および Au 単原子吸着の安定サイトとその起源となっている表面酸素空孔の存在を超高分解能電子顕微鏡観察と第一原理計算により解明した。現在、情報科学的手法も取り入れて、高活性触媒の設計・探索に向けた連携を展開している。また、様々な組み合わせの担持金属触媒でカルボン酸還元反応を行い、その活性を機械学習法によってモデル化した。さらに理論計算により得られた知見に基づいて、高圧相などを利用した新規チタニア系光触媒材料の開発や Sn 系光触媒の材料設計を進めている。その他、自動車排気ガス浄化触媒としての Au-Ni 合金微粒子のガス中その場観察を行い、可逆的な触媒反応の起源となる元素協奏効果を明らかにするなど、触媒材料に関する多様な連携研究が進展している。

②CS 課題以外の連携研究

CS 課題以外のテーマにおいても、多くの連携研究の成果が上がっており、それが CS 課題研究のレベルアップに相乗効果をもたらしている。包括的には、材料の表面や粒界、転位、不純物などに関する実験と理論計算によって定量化されたナノ構造情報に基づき特性発現メカニズムを理解し、それを新材料の設計・開発に繋げるという研究成果である。

③材料科学と情報学との融合研究

公募研究として情報分野の研究者を 6 名採択できたので、材料科学と情報学の研究者間で、研究目標や概念、専門用語を共有するために、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、月に 1 回以上の定期的な会合をもった。(遠隔メンバーはテレビ参加)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，A02(オ)村田，A02(カ)片瀬，A03(キ)森分，桑原，A03(ク)小林，A02(ケ)高草木，情報科学：A02(エ)津田，A02(公募)鹿島，志賀，竹内，池野である。この強化策が奏功し、個々の研究者の意思疎通が進み、この領域メンバーでしか成し得なかった融合研究成果をあげることに成功している。具体的には、超長サイクル寿命を示すリチウム電池正極材料の探索と開発、新しい熱電材料の探索、ナノ電子顕微分光における情報処理技法の応用、粒界インフォマティクスの開拓、酸窒化物蛍光体の材料探索などである。

④独自研究による特筆すべき成果と新たな領域内共同研究への萌芽

研究領域 A01 ではナノ構造情報の定量化精度を向上させる実験において未踏フロンティアを開拓できた。たとえば、試料作製と評価を一貫して行える PLD/SPM 複合装置の開発や、原子分解能 STEM 法の定量化手法の開発、ナノ複合電子分光装置の開発である。新たな領域内共同研究の具体的な材料テーマに関して様々な萌芽的成果が上がり始めている。

国際的な共同研究や連携研究の進捗状況

積極的に実施している。たとえば、A01(ウ)とスウェーデン・ウプサラ大や A02(エ)と米国アイオワ州立大などは、研究者・大学院生の相互滞在なども行ない、共同研究の成果が上がっている。

3. 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（2 ページ程度）

審査結果の所見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。

（指摘事項 1）本研究領域において情報学の知見を積極的に取り入れるためには、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。

本領域は材料科学の新展開を目指すものであり、実験や理論計算で得られたナノ構造情報を具体的な材料設計・創出に活かすべく様々な分野の研究者が緊密連携している。当初計画においても、すでに情報分野の有力な研究者（津田宏治（東大））が研究項目 A02(エ)に研究分担者として参加している。上記のコメントを頂戴し、さらに世界的なマテリアルズ・インフォマティクス分野の機運が、計画立案時の予想を超えたものであるため、情報分野の研究者との密接連携を促進することとした。具体的には、以下の対応策を取ることにした。

対応策 1：公募研究として情報分野の研究者を 6 名採択し、材料研究者とのタスクフォースを形成。

公募研究として情報分野の研究者を招き入れるために、まず情報分野の研究者に公募内容を周知する目的で、同年度に開始した新学術領域「疎性モデリング（代表者岡田真人）」と合同で、情報分野の研究者をターゲットとした公募説明会を平成 25 年 10 月に実施し、これと並行して情報分野のメーリングリスト等に参加して、本領域研究の狙いを丁寧に説明した。その結果、多数の公募研究への応募を得ることができた。厳正な審査の結果、研究項目 A02 に 6 件の情報分野の公募研究を採択できた。この採択された情報分野の研究者と材料科学研究者の間で、研究目標や専門用語を共有するために、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、月に 1 回以上の定期的な会合をもった。この強化策が奏功し、個々の研究者の意思疎通が進み、すでに学術論文として発表した共同研究成果をあげることに成功している。さらに新学術領域「疎性モデリング」とは領域同士で積極的に交流し、定期的な勉強会を開催しているほか、公募研究でも相互乗り入れしている。

対応策 2：平成 28 年度より情報分野の計画研究の新設を希望。

上述のように情報分野の研究者との連携が成功しているが、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ことで、領域内での融合研究にさらに大きな進展が見込まれる。領域外へのインパクトも大きいと期待できる。そこで平成 28 年度より、研究項目 A02 内に計画研究を新設し、現在は A02(エ)の研究分担者である津田宏治（東大）を研究代表者とし、公募研究代表者である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することを希望している。この計画研究 A02(コ)の新設が承認された場合には、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目指す。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、分野融合の進んだ「新学術領域」の構築に貢献する。

対応策 3：平成 28 年度より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。

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に参加頂き、領域研究の指針について独善的にならないような議論を行う。

対応策 4：魅力的な研究成果やアイデアの積極的な発信と新学術分野振興への貢献。

材料科学研究に情報学の知見を積極的に取り入れる研究者を増大させるためには、魅力的な研究成果やアイデアを国内外の学会に向けて発信し続けることが重要である。この認識のもとで、材料分野だけでなく情報分野の学会においてシンポジウムを企画し、領域代表者や構成メンバーが積極的に講演を行った。さらに JST におけるマテリアルズ・インフォマティクス分野の調査報告書の作成に、本領域メンバーが全面協力した。それが 2015 年度開始の NIMS「データ駆動型物質・材料科学技術イニシアティブを推進する新領域融合拠点」や JST「さきがけ」立案の土台となった。このような分野振興は、当初予想していたよりも遥かに躍動的に展開しており、それは本領域研究の波及効果であるこ

とは間違いない。これらの動きは新学術領域の更なる発展や若手人材育成に繋がるものと確信している。

(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。
- ・本研究領域を特徴づける手法や概念についても、5年間の研究期間内で確立される必要がある。
- ・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。

本領域研究は、特定の材料について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、ナノ材料科学における重要な未踏分野を開拓することとともに、獲得されるナノ構造情報を具体的な材料設計・創出に活かすための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、多様な材料系をカバーした広範な研究対象を設定している。上記のコメントを頂戴し、研究が総花的とならないための工夫として、領域メンバーが一丸となり重点的に推進する課題を設定することにした。

対応策 1：コモンサブジェクト(CS)課題を領域内に明示し、領域内で徹底して取り組む。

9 班の計画研究と 14 班の公募研究が一丸となって重点推進するために設定した共通課題に対し、メンバーが意識しやすいように、コモンサブジェクト(CS)課題という名前を付けた。具体的には、①機能性セラミックス材料、②固体イオニクス材料、③触媒材料である。これらはそれぞれ、計画研究 A03(キ)、(ク)、(ケ)の代表者が材料創製のエキスパートであり、ターゲットとしているものである。その連携と進捗については、領域代表者のリーダーシップで監督するとともに、総括班において調整を行うようにした。

対応策 2：分野横断による新学術創成へのチャレンジを加速させる。

材料分野と情報分野の横断的展開による新学術創成を加速させることを強く意識し、タスクフォース活動の成果を領域全体に広げ、5年間の融合研究で手法や概念を確立させる。

(指摘事項 3) 研究経費については、大雑把な内容の設備備品が研究項目 A01 に計上されているが、実験装置の共有など、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。

研究項目 A01 の 3 つの計画研究では、ナノ構造情報を実験あるいは理論計算によって獲得するために世界最先端の研究を進めている。研究設備に関しては、電子顕微鏡等の大型実験装置はすべて既存の共用施設を有効活用し、設備備品も本研究を遂行する上で必要最小限の物品のみを導入している。

この研究の性格上、実験装置は市販品をそのまま使うことでは対応できず、特注仕様の物品購入が多い。そのため当初の予算申請時には詳細仕様が確定しておらず、それが大雑把と見えてしまったのは残念である。これらの実験装置については、最高性能を維持するためにエキスパートによる繊細な維持管理が必要であるため、一般的な意味での物理的な「共有」は困難である。しかし、これらの装置を活用した最先端の「共同研究」は、領域代表者が強く奨励しており、とくに大学院生や若手研究者が相互訪問することによる実質的な共同利用を促した。その結果として、組織全体としての装置の効率的活用ができています。

対応策：各班の所有する装置や機器等について情報共有し、効率的活用に努める。

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・議論を行うだけでなく、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。その結果、大型機器のみならず、小型機器についても、使用頻度が低く、必ずしも手元に置く必要のないものについては、共同利用が可能となり、研究経費の効率的な活用に努めることができた。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、無駄を省くために活発に共同利用した。

4. 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 ページ程度）

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。

領域内の共同研究による成果を記す。進行中を含め全 40 件の領域内連携研究のうち、新しいものから代表的なものを抜粋。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)

- パルスレーザー堆積法/原子間力顕微鏡複合装置の開発：A01 公募，A02(カ)との連携
絶縁性の機能性材料を原子レベルで評価するために、試料作成と評価を一貫して行えるパルスレーザー堆積法と原子間力顕微鏡の複合装置の開発を世界ではじめて行った（2015）。
- 強誘電体界面における新奇機能発現と発現メカニズム解明：A01(イ)との連携
バイクリスタル法を用いてニオブ酸リチウム結晶内部に結晶格子欠陥制御が施された単一界面を創製し、その機能評価を行っている。これまでに、単一界面を創製する手法の確立ならびにその原子構造解析を行ない、特定の界面構造において顕著な電気伝導性が発現することを明らかとした（2015）。
- 機能性酸化物表面上での機能元素の局所構造解明：A01(イ)，A03(ケ)との連携
TiO₂(110)表面上での Pt および Au 単原子吸着の安定サイトとその起源となっている表面酸素空孔の存在を超高分解能電子顕微鏡観察と第一原理計算により解明し、その触媒機能との関連について議論している。（*Nano Lett.* 2014, *Phys. Rev. B* 2014, 日本経済新聞 2014 年）

A01(イ)

- ジルコニア粒界の空間電荷層解析：A01(ア)，A02(エ)，A02(カ)との連携
原子分解能 STEM-EDS 法を用いることにより、固体イオニクス材料として重要なジルコニア粒界における Y 原子，O 原子の分布状態を解析し、A02(エ)班の統計熱力学計算と総合することにより、空間電荷層の有無を議論した（2015）。
- AlN 中希土類機能元素の STEM 直接観察：A02(エ)，A02(オ)との連携
A02(オ)班が高圧合成した AlN 新規蛍光体中の Ce 原子について、超高分解能 STEM を用いてそのサイトを 3 次元的に決定した。この結果を A02(エ)の第一原理計算結果と総合することにより Ce 原子の安定化メカニズムを明らかにした。（*Nano Lett.* 2014, *Phys. Rev. Lett.* 2014, *Sci. Rep.* 2014）
- 磁性半導体における機能元素の局所構造解明：A02(エ)，A01(ウ)，A03(公募)との連携
A02(エ)班においてパルスレーザー堆積法により室温強磁性を示す Ga₂O₃:Mn 薄膜を合成し、その中の Mn 磁性機能元素の局所原子・電子構造を第一原理計算と X 線分光実験により明らかにした。（*Phys. Rev. B* 2014）

A01(ウ)

- 生体活性チタニア中の機能元素状態解析：A01(ア)，A03(キ)との連携
A03(キ)班においてチタン酸窒化処理により窒素をドーブしたチタニアスケールを形成し、A01(ウ)班がスケール表面近傍の N-K 端 EELS スペクトルを第一原理バンド計算での理論スペクトルと照合し、窒素の化学状態を明らかにした（2015）。
- 情報学・統計学に基づいたスペクトラムイメージ解析法の開発：A02(エ)，A02(公募)，A03(公募)との連携
STEM と分光スペクトル (EDX, EELS) を組み合わせたスペクトラムイメージデータにおいて、

隠れたスペクトル成分とその空間分布を抽出するため、EELS スペクトルの成分間クロストークの問題を直交性制約の導入により解決することに成功した。また関連手法により、鉄のナノ結晶体の定量測定に世界で初めて成功した。(Nature Comm. 2014, 日刊工業新聞 2014 年)

A01(公募・一杉): A01(ア), A02(カ)との連携により、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。(J.Am.Chem. Soc.2014)

A01(公募・王): A01(イ), A02(オ), A03(キ)との連携により、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(Nature Comm. 2015, 日経産業新聞 2015 年).

A01(公募・高橋): A01(イ), A03(ケ)との連携により、コヒーレント 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 法を目指し、その可能性について検討した(Nature Comm. 2015).

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)

- 光触媒の材料設計: A01(ア), A03(ク), A03(ケ), A01(ウ)との連携
第一原理計算と機械学習による光触媒の材料設計を実施し、材料合成に成功した (2015).
- 酸化アルミニウム粒界の熱力学的安定性: A03(キ) との連携
第一原理計算結果に基づいた統計力学処理手法を新たに開拓し、酸化アルミニウム粒界の熱力学的安定性を議論した (2015).
- 新しい熱電変換材料の探索: A02(カ), A03(キ)との連携
無機化合物データベース収録の全 54000 件の多様な化学組成・構造の化合物を対象にバーチャルスクリーニングを実施し、新しい熱電変換材料の探索を実施、第一原理計算による熱伝導率計算を行うことにより、探索結果を検証した (2015).
- 高性能リチウムイオン電池正極材料の設計: A03(公募)との連携
第一原理計算と情報科学手法により高充放電サイクル特性を示す候補材料を提案し A03(公募)と共同して材料合成実験を行うことにより、充放電サイクルが従来約 6 倍となる正極材料を発見した。(Nature Comm 2014)
- 第一原理計算結果と機械学習手法との分野融合研究: A02(公募), A01(ア) との連携
多様な化合物の融点を予測するモデルをベイズ最適化した。(Phys. Rev. B 2014)

A02(オ)

- 新規窒化物蛍光体中の希土類機能元素評価: A02(エ), A01(イ), A03(公募)の連携
高圧合成した新規窒化物蛍光体中の希土類機能元素について、第一原理計算に基づき希土類元素が特異な局所構造を有することを明らかにした。(Nano Lett. 2014, Phys. Rev. Lett. 2014, Sci. Rep. 2014).
- 酸化チタン高圧結晶の光触媒活性解明: A02(エ), A03(ケ)との連携
酸化チタン結晶の高圧相(α -PbO₂型)微粒子の高圧下での相安定性、結晶のバンド構造等評価し、光触媒として優れた性質を持つ可能性を示した。これについて、実際に高圧合成し、従来型のルチル、アナターゼ型よりも優れた光触媒活性を示すことを検証した。(Phys Stat Sol (RRL) 2014).
- 高圧合成によるワイドギャップ半導体の機能元素の局所環境解析: A01(イ), A02(エ)との連携
高圧合成したワイドギャップ半導体である Si ドープ n 型 cBN 結晶中の Si の配位環境を X 線吸収スペクトル回折実験で評価し、第一原理計算により理論的に解析した。(J. Appl. Phys. 2013)

A02(カ)

- 新原理の薄膜デバイスの提案とメカニズムの検証: A01(イ), A03(公募)との連携
室温下で VO₂ 薄膜のプロトン化を実証するなど、原子レベルの界面構造とデバイス機能発現に

関して重要な知見が得られた(*Adv. Electron. Mater.* 2015, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2014).

- **太陽電池材料 CuInSe_2 薄膜の粒界構造解明 : A01(イ)との連携**

太陽電池材料 CuInSe_2 薄膜を合成し、高分解能 STEM によりその粒界構造を観察し、第一原理計算を組み合わせることで CuInSe_2 の粒界形成エネルギーが非常に小さいことを明らかにした (*Appl. Phys. Lett.* 2015).

- **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)との連携**
室温における電解誘起酸化-還元反応を利用してフェリ磁性金属 SrCoO_3 -反強磁性絶縁体 $\text{SrCoO}_{2.5}$ の導電性・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に成功した (特願 2015-002769).

- **室温強磁性 $\text{Sr}_{4-x}\text{Er}_x\text{Co}_4\text{O}_{12-\delta}$ 薄膜の秩序構造解明 : A01(イ)との連携**

固相エピタキシャル成長法により室温強磁性を示す $\text{Sr}_{4-x}\text{Er}_x\text{Co}_4\text{O}_{12-\delta}$ 薄膜を合成し、高分解能 STEM により A サイト陽イオンおよび酸素空孔の秩序構造を原子分解能で明らかにした (2015).

A02(公募・永田) : A02(エ)との連携により、高精度な統計熱力学計算を可能にするための相互作用抽出のデータ駆動型アルゴリズムの開発を行った. (*J Phys Soc Jpn* 2014)

A02(公募・鹿島) : A02(エ)との連携により、第一原理計算とマルチタスク学習を連携させたバーチャルスクリーニングにより、新規リチウムイオン伝導体の材料探索を行った. (信学技報 2014)

A02(公募・本多) : A02(エ)との連携により、線形モデルの材料探索における有効性について検討を行ない、一般的に線形モデルのもとでも非常に効率良い探索が可能であることを示した (2014).

A02(公募・志賀) : A02(ウ), A02(エ)との連携により、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. A02(エ)との連携により、未知物性値予測のための統計的機械学習法を開発した. (*Machine Learning* 2015)

A02(公募・竹内) : A01(ア), A02(エ), A03(キ), A03(ク)との連携により、第一原理計算と情報科学手法に基づき、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 (2015).

A02(公募・池野) : A02(エ)との連携により、化学組成の巨大なバラエティのなかからの情報学的手法を用いた酸窒化物蛍光体の材料設計を行った (2015).

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)

- **生体活性チタニアにおける窒素の化学状態解明 : A01(ウ), A01(ア)との連携**

生体活性チタニアにおいて表面近傍の窒素の化学状態を N-K 端 EELS により明らかにし、表面構造と生体活性との相関について議論を進めている (2015).

- **輻射熱反射素材 $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 中の機能元素のサイト占有率の決定 : A01(ウ)との連携**

輻射熱反射素材 $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 中の機能元素について、統計的 ALCHEMI 解析により機能元素のサイト占有率を決定した (2015).

- **酸化アルミニウム中における物質移動と粒界構造の相関解明 : A01(ア), A01(イ)との連携**

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保護膜を高性能化するために、開発した酸素トレーサー高温ガス透過法により、酸素ポテンシャル勾配下における物質移動と粒界構造の相関や粒界偏析元素の効果を解明した. (*J. Am. Ceram. Soc.* 2014, 2013, *Acta Mater* 2014)

- **酸化アルミニウム粒界の熱力学的安定性 : A02(エ)との連携**

酸化アルミニウム粒界の熱力学的安定性を、第一原理計算と実験とを対応させて議論した (2015).

A03(ク)

- ヒドリド導電体の発見と導電機構解析：A01(ア), A02(エ), A02(公募), A03(キ)との連携
発見した新規物質について, A02(エ)の理論計算により電子状態と各構成元素の価数, イオン導電中のエネルギー障壁を明らかにし, 実験と計算の連携によって, 酸化物中のヒドリドのイオン導電現象を世界で初めて確認した (2015) .
- 新規プロトン導電体の開発と導電機構解析：A01(ア), A02(エ), A02(公募), A03(キ)との連携
高プロトン導電を示す材料 $\text{RbMg}_{1-x}\text{H}_{2x}(\text{PO}_3)_3 \cdot y(\text{H}_2\text{O})$ のプロトン拡散メカニズムを, 中性子回折実験と, 第一原理計算と情報科学手法に基づき検討した (2015). また構造内の H_2O の制御が可能な範囲と H_2O 量による導電メカニズムの変化について明らかにした. (*J. Mater. Chem.* 2013)
- 高リチウムイオン導電物質の探索と実証：A01(ア), A02(エ), A03(カ)との連携
ペロブスカイト型とパイロクロア型に着目し, それぞれ $(\text{Li}, \text{Sr})(\text{Ga}, \text{Ta})\text{O}_3$ および $(\text{Li}, \text{Sr})\text{Nb}_2\text{O}_6\text{F}$ において高イオン導電率を実現させた. これらの系を理論計算し, それをもとに機械学習とバーチャルスクリーニングを実施すべく, 検討を開始している. (*J. Solid State Chem.* 2014, *J. Mater. Chem.* 2014, *Cryst Eng Comm* 2014)

A03(ケ)

- 機械学習法による活性序列の予測・最適化の検討：A02(エ), A02(公募)との連携
A03(ケ)が様々な金属/酸化物の組み合わせの担持金属触媒を用いてカルボン酸還元反応を行った結果 (*Catal. Sci. Technol.* 2014) に対し, A02(エ)および A02(公募)において, 機械学習法による活性序列の予測・最適化の検討を行っている (2015).
- Pt/TiO₂ 触媒の SMSI 現象発現機構の解明：A01(ア), A01(イ)との連携
Pt/TiO₂(110)表面の高分解能 STM 観察から, SMSI (strong metal-support interaction) における格子間 Ti の表面拡散による Pt との化合物形成を提案し, A01(ア)が第一原理計算により, 格子間 Ti のバルクから表面への拡散プロセス等を評価し, A01(イ)の高分解能電子顕微鏡観察と A01(ウ)のナノ複合電子分光により, 触媒機能に寄与するナノ構造情報を獲得している (2015) .
- CO₂ 水素化による有用化合物の合成：A01(ア), A01(イ), A02(エ)との連携
実触媒を用いて N-メチルアラニン を CO₂ 水素化によってメチル化し, N,N-ジメチルアニリンを高収率・高選択性で得た (*Chem. Eur. J.* 2014). 現在, A01(ア), A01(イ), A02(エ)と連携して触媒ナノ構造情報を蓄積するとともに収率・選択性の最適化を図っている (2015) .
- 固定化金属錯体触媒における三次元ナノ構造の決定：A01(ア), A01(公募), A02(カ)との連携
A03(ケ) が三次元ナノ構造の決定に成功した TiO₂(110)表面上の固定化金属錯体触媒に関して, 電子状態解析と他の酸化物表面への適用可能性を議論した (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2013).

A03(公募・東)：A01(イ), A02(オ)との連携により, ペロブスカイト非鉛圧電材料の設計を行い, 高圧合成法により単斜晶相を得る事に成功した (*Appl. Phys. Lett.* 2014).

A03(公募・藤田)：A01(イ), A02(エ)との連携により, 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 (*Phys. Rev. Lett.* 2014).

A03(公募・横井)：A03(ケ)との連携により, ゼオライト骨格の原子配列制御による触媒特性の制御を目指し, 骨格内原子分布が触媒活性に与える影響を検討した (*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014).

A03(公募・舟窪)：A01(ウ), A03(キ)との連携により, HfO₂ 基強誘電体を熱膨張率の異なる基板上に作成し, 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 (*Jpn. J. Appl. Phys.* 2014).

A03(公募・柳田)：A02(エ)および A02(カ)との連携により, ナノワイヤ表面・界面に関するナノ構造情報を抽出し, 新しい金属酸化物単結晶ナノワイヤ設計を進めている (*J. Am. Chem. Soc.* 2014).

5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開發表等）（5 ページ程度）

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。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。また、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。また、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。

1. 領域内における発表論文数

総論文数	2015 年	2014 年	2013 年
419 (うち Nature family: 16, Science: 2)	82	236	101

以下に主に 2014 年に発表された論文 111 件を抜粋。論文は特記しない限りすべて査読有。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

1. *K. Matsunaga, Y. Tanaka, K. Toyoura, A. Nakamura, Y. Ikuhara, and N. Shibata, "Existence of basal oxygen vacancies on the rutile TiO₂ (110) surface," Phys. Rev. B, 90 [19] 195303-1-6 (2014).
2. K. Imaizumi, *K. Toyoura, A. Nakamura, and K. Matsunaga, "Stable sites and diffusion pathways of interstitial oxide ions in lanthanum germanate," Solid State Ionics, 262 512-516 (2014).
3. T. Kubota, A. Nakamura, K. Toyoura, and *K. Matsunaga, "The effect of chemical potential on the thermodynamic stability of carbonate ions in hydroxyapatite," Acta Biomater., 10 [8] 3716-3722 (2014).
4. *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 α -alumina," Acta Mater., 69, 365-371 (2014).
5. K. Kato, *K. Toyoura, A. Nakamura, and K. Matsunaga, "Proton channels along oxygen octahedral chains in La₃NbO₇," J. Phys. Chem. C, 118 [18] 9377-9384 (2014).
6. D. Fernández-Torre, *A. Yurtsever, J. Onoda, M. Abe, S. Morita, Y. Sugimoto, and R. Pérez, "Pt atoms adsorbed on TiO₂(110)-(1×1) studied with non-contact atomic force microscopy and first-principles simulations," Phys. Rev. B, 91 [7] 075401-1-8 (2015).
7. *E. Inami, I. Hamada, K. Ueda, M. Abe, S. Morita, and Y. Sugimoto, "Room-temperature concerted switch of a binary atom cluster," Nature Commun., 6 1-7 (2015).
8. S. Kitora, M. Abe, and *H. Toki, "Electromagnetic Noise in Electric Circuits: Ringing and Resonance Phenomena in the Common Mode," AIP advances, 4 [11] 117119-1-6 (2014).
9. S. Kuhn, M. Kittelmann, Y. Sugimoto, M. Abe, A. Kühnle, and *P. Rahe, "Identifying the absolute orientation of a low-symmetry surface in real space," Phys. Rev. B, 90 [19] 195405-1-12 (2014).
10. *Y. Sugimoto, A. Yurtsever, N. Hirayama, M. Abe, and S. Morita, "Mechanical gate control for atom-by-atom cluster assembly with scanning probe microscopy," Nature Commun., 5 1-7 (2014).
11. *K. Shitara, H. Murata, K. Watanabe, C. Kojima, Y. Sumida, A. Nakamura, A. Nakahira, I. Tanaka, and K. Matsunaga, "Cytotoxicity of stoichiometric hydroxyapatites with different crystallite sizes," J. Asian Ceram. Soc., 2 [1] 64-67 (2014).
12. ◎T. Y. Chang, Y. Tanaka, R. Ishikawa, K. Toyoura, K. Matsunaga, Y. Ikuhara, and *N. Shibata, "Direct imaging of Pt single atoms adsorbed on TiO₂ (110) surfaces," Nano Lett., 14 [1] 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

13. ◎K. Inoue, M. Saito, Z. Wang, M. Kotani and Y. Ikuhara, "On the periodicity of <001> symmetrical tilt grain boundaries", Mater. Trans., 56, 281-287(2015).
14. *H. Chang, M. Saito, T. Nagai, Y. Liang, Y. Kawazoe, Z. Wang, H. Wu, K. Kimoto, and Y. Ikuhara, "Single adatom dynamics at monatomic steps of free-standing few-layer reduced graphene," Scientific Reports, 4, 6037(2014).
15. T.-Y. Chang, Y. Tanaka, R. Ishikawa, K. Toyoura, K. Matsunaga, Y. Ikuhara, and *N. Shibata, "Direct Imaging of Pt Single Atoms Adsorbed on TiO₂ (110) Surfaces," Nano Letters, 14[1], 134-138(2014).
16. *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).
17. K. Matsui, H. Yoshida, and *Y. Ikuhara, "Nanocrystalline, Ultra-Degradation-Resistant Zirconia: Its Grain Boundary Nanostructure and Nanochemistry," Scientific Reports, 4, 4758(2014).
18. M. Matsukawa, R. Ishikawa, T. Hisatomi, Y. Moriya, N. Shibata, J. Kubota, *Y. Ikuhara, and K. Domen, "Enhancing Photocatalytic Activity of LaTiO₂N by Removal of Surface Reconstruction Layer," Nano Letters, 14[2], 1038-1041(2014).
19. *K. Matsunaga, Y. Tanaka, K. Toyoura, A. Nakamura, Y. Ikuhara, and N. Shibata, "Existence of basal oxygen vacancies on the rutile TiO₂ (110) surface," Physical Review B, 90[19], 195303(2014).

20. A. Nakamura, S. Furutsuki, S.-i. Nishimura, T. Tohei, Y. Sato, N. Shibata, A. Yamada, and *Y. Ikuhara, "Phase Boundary Structure of Li_xFePO_4 Cathode Material Revealed by Atomic-Resolution Scanning Transmission Electron Microscopy," *Chemistry of Materials*, 26[21], 6178-6184(2014).
21. D. Oka, Y. Hirose, H. Kamisaka, T. Fukumura, K. Sasa, S. Ishii, H. Matsuzaki, Y. Sato, *Y. Ikuhara, and T. Hasegawa, "Possible ferroelectricity in perovskite oxynitride SrTaO_2N epitaxial thin films," *Scientific Reports*, 4, 4987(2014).
22. S.-i. Okuoka, Y. Ogasawara, Y. Suga, M. Hibino, T. Kudo, H. Ono, K. Yonehara, Y. Sumida, Y. Yamada, A. Yamada, M. Oshima, E. Tochigi, N. Shibata, Y. Ikuhara, and *N. Mizuno, "A New Sealed Lithium-Peroxide Battery with a Co-Doped Li_2O Cathode in a Superconcentrated Lithium Bis(fluorosulfonyl)amide Electrolyte," *Scientific Reports*, 4, 5684(2014).
23. I. Sugiyama, Y. Kim, S. Jesse, E. Strelcov, A. Kumar, A. Tselev, E. K. Rahani, V. B. Shenoy, T. Yamamoto, *N. Shibata, Y. Ikuhara, and *S. V. Kalinin, "Spatially-resolved mapping of history-dependent coupled electrochemical and electronic behaviors of electroresistive NiO ," *Scientific Reports*, 4, 6725(2014).
24. K. Takehara, Y. Sato, T. Tohei, N. Shibata, and *Y. Ikuhara, "Titanium enrichment and strontium depletion near edge dislocation in strontium titanate 001/(110) low-angle tilt grain boundary," *Journal of Materials Science*, 49[11], 3962-3969(2014).
25. *Z. Wang, M. Saito, C. Chen, Y. Matsubara, K. Ueno, M. Kawasaki, and Y. Ikuhara, "Full Determination of Individual Reconstructed Atomic Columns in Intermixed Heterojunctions," *Nano Letters*, 14[11], 6584-6589(2014).
26. *Z. Wang, M. Saito, K. P. McKenna, and Y. Ikuhara, "Polymorphism of dislocation core structures at the atomic scale," *Nature Communications*, 5, 3239(2014).

A01(ウ)計画研究 ナノ電子状態解析のフロンティア開拓

27. I. Sugiyama, Y. Kim, S. Jesse, E. Strelcov, A. Kumar, A. Tselev, E. K. Rahani, V. B. Shenoy, T. Yamamoto, *N. Shibata, Y. Ikuhara, and *S. V. Kalinin, "Spatially-resolved mapping of history-dependent coupled electrochemical and electronic behaviors of electroresistive NiO ," *Scientific Reports*, 4, 6725(2014).
28. *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, 991-1000 (2014)
29. Y. Kotaka, *T. Yamazaki, M. Ohtsuka, K. Watanabe, "Image formation mechanisms of spherical aberration corrected BF STEM imaging methods", *Ultramicroscopy*, 136, 119-126, (2014)
30. *K. Niwa, H. Ikegaya, T. Taguchi, S. Muto, T. Tokunaga, M. Hasegawa, "Growth of rectangular hollow tube crystals with rutile-type structure in supercritical fluids", *Journal of Physics: Conference Series*, 500, 022007-1-4 (2014)
31. *T. Yoshida, E. Kuda, S. Muto, "Depth distribution of dopant effective for visible-light response in nitrogen-doped TiO_2 photocatalyst", *Surface and Interface Analysis*, 46, 1236-1239, (2014)
32. *K. Niwa, K. Suzuki, S. Muto, K. Tatsumi, K. Soda, T. Kikegawa, M. Hasegawa, "Discovery of the last remaining binary platinum-group pernitride RuN_2 ", *Chemistry - A European Journal*, 20, 1-5, (2014)
33. *S. Muto, J. Ruzs, K. Tatsumi, R. Adam, S. Arai, V. Kocevski, P. M. Oppeneer, D. E. Burgler, C. M. Schneider, "Qualitative characterization of magnetic materials based on electron magnetic circular dichroism with nanometric resolution using the JEM-1000K RS ultra-high voltage STEM", *JEOL News*, 49, 21-28 (2014)
34. *K. Tatsumi, S. Muto, J. Ruzs, T. Kudo, S. Arai, "Signal enhancement of electron magnetic circular dichroism by ultra-high-voltage TEM, toward quantitative nano-magnetism measurements", *Microscopy*, 63, 243-247, (2014)
35. ©*S. Muto, J. Ruzs, K. Tatsumi, R. Adam, S. Arai, V. Kocevski, P. M. Oppeneer, D. E. Burgler and C. M. Schneider, "Quantitative characterization of nanoscale polycrystalline magnets with electron magnetic circular dichroism", *Nature Communications*, 5, 3138 -1-7, (2014)

A01 公募研究(一杉) 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

36. 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).
37. *Taro Hitosugi, Ryota Shimizu, Takeo Ohsawa, and Katsuya Iwaya, "Scanning tunneling microscopy/spectroscopy on perovskite oxide thin films deposited in situ", *The Chemical Records* 14, 935-943 (2014).

A01 公募研究(高橋) 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

38. 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," *Nat. Commun.*, 5 14061 (2014).

A01 公募研究(王) 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

39. K. P. McKenna, F. Hofer, D. Gilks, V. K. Lazarov, C. L. Chen, *Z. C. Wang, and Y. Ikuhara, "Atomic Scale Structure and Properties of Highly Stable Antiphase Boundary Defects in Fe_3O_4 ", *Nature Communications* 5, 5740-1-8 (2014)
40. *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)

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

41. ©*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," *Physical Review B*, 89[5] 054303 (2014)
42. ©*A. Seko, A. Takahashi and I. Tanaka, "Sparse representation for a potential energy surface," *Physical Review B*, 90[2] 024101 (2014)

43. ©*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 Communications*, 5, 4553 (2014)
44. ©*Y. Ikeda, A. Seko, A. Togo and I. Tanaka, “Phonon softening in paramagnetic bcc Fe and its relationship to the pressure-induced phase transition,” *Physical Review B*, 90[13] 134106 (2014)
45. *A. Seko, K. Shitara and I. Tanaka, “Efficient determination of alloy ground-state structures,” *Physical Review B*, 90[17] 174104 (2014)
46. *H. Akamatsu, K. Fujita, T. Kuge, A. Sen Gupta, A. Togo, SM. Lei, F. Xue, G. Stone, JM. Rondinelli, LQ. Chen, I. Tanaka, V. Gopalan and K. Tanaka, “Inversion Symmetry Breaking by Oxygen Octahedral Rotations in the Ruddlesden-Popper NaRTiO₄ Family,” *Physical Review Letter*, 112[18] 187602 (2014)
47. *K. Moridomi, K. Hatano, E. Takimoto and K. Tsuda. Online matrix prediction for sparse loss matrices. 6th Asian Conference on Machine Learning, pp. 250-265, 2014.
48. *N. Ueshima, M. Yoshiya, H. Yasuda, T. Fukuda, T. Kakeshita, "Impact of interplay between magnetic field, transformation strain, and coarsening on variant selection in L1₀-type FePd", *J. Appl. Phys.*, Vol. 115, 073501-1-10 (2014).
49. A. Grüneis, *G. Kresse, Y. Hinuma, and *F. Oba, “Ionization potentials of solids: The importance of vertex corrections”, *Phys. Rev. Lett.*, 112 [9], 096401 (2014).
50. *Y. Kumagai and F. Oba, “Electrostatics-based finite-size corrections for first-principles point defect calculations”, *Phys. Rev. B*, 89 [19], 195205 (2014). [Editors’ Suggestion]

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

51. *R. Ishikawa, A. R. Lupini, S. D. Findlay, T. Taniguchi, and S. J. Pennycook, “Three-dimensional location of a single dopant with atomic precision by aberration-corrected scanning transmission electron microscopy” *Nano Letters*, 14 1903 (2014).
52. *R. Ishikawa, A. R. Lupini, F. Oba, S. D. Findlay, N. Shibata, T. Taniguchi, K. Watanabe, H. Hayashi, T. Sakai, I. Tanaka, Y. Ikuhara, S. J. Pennycook, “Atomic structure of luminescent centers in high-efficiency Ce-doped w-AlN single crystal” *Scientific Report* 4, 3778 (2014).
53. *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).
54. *J. D. Caldwell, A. V. Kretinin, Y. Chen, V. Giannini, M. M. Fogler, Y. Francescato, C. T. Ellis, J. G. Tischler, C. R. Woods, A. J. Giles, M. Hong, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. A. Maier, and K. S. Novoselov, “Sub-Diffractive Volume-Confined Polaritons in the Natural Hyperbolic Material Hexagonal Boron Nitride” *Nature Communications*, 5, 5221, (2014).
55. S. Dai, Z. Fei, Q. Ma, A. S. Rodin, M. Wagner, A. S. Mcleod, M. K. Liu, W. Gannett, W. Regan, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Thiemens, G. Dominguez, A. H. C. Neto, A. Zettl, F. Keilmann, *P. Jarillo-Herrero, M. M. Fogler, and D. N. Basov “Tunable Phonon Polaritons in Atomically Thin Van Der Waals Crystals of Boron Nitride” *Science*, 343, 1125, (2014).
56. A. R. Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R.-S. Ma, J.-C. Lu, H.-M. Guo, X. Lin, G.-L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Y. N. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H.-J. Gao, A. K. Geim, and *K. S. Novoselov, “Commensurate-Incommensurate Transition in Graphene on Hexagonal Boron Nitride” *Nature Physics*, 10, 451, (2014).
57. J.S. Ross, P. Klement, A.M. Jones, N.J. Ghimire, J. Yan, D.G. Mandrus, T. Taniguchi, K. Watanabe, K. Kitamura, W. Yao, D.H. Cobden, *X. Xu, “Electrically Tunable Excitonic Light Emitting Diodes based on Monolayer WSe₂ p-n Junctions”, *Nature Nanotechnology*, 9, 268 (2014).
58. *H. Yusa, F. Kawamura, T. Taniguchi, N. Hirao, Y. Ohishi, T. Kikegawa, “High-pressure syntheses and compressive behavior of tantalum nitrides”, *J. Appl. Phys.*, 115, 103520 (2014).

A02(カ)計画研究 原子層制御による新しい材料機能探索

59. *S. Haindl, M. Kitzun, S. Oswald, C. Hess, B. Büchner, S. Kölling, L. Wilde, T. Thersleff, V. V. Yurchenko, M. Jourdan, H. Hiramatsu, and H. Hosono, “Thin film growth of Fe-based superconductors: from fundamental properties to functional devices. A comparative review” *Rep. Prog. Phys.* 77 [4], 046502 (2014). (2014.4.2)
60. H. Yamaguchi, H. Hiramatsu, H. Hosono, and *T. Mizoguchi, “The atomic structure, band gap, and electrostatic potential at the (112)[110] twin grain boundary of CuInSe₂” *Appl. Phys. Lett.* 104 [15], 153904 (2014). (2014.4.17)
61. *H. Hiramatsu, H. Sato, T. Katase, T. Kamiya, and H. Hosono, “Critical factor for epitaxial growth of cobalt-doped BaFe₂As₂ films by pulsed laser deposition” *Appl. Phys. Lett.* 104 [17], 172602 (2014). (2014.5.1)
62. *W. S. Choi, H. Ohta, and *H. N. Lee, “Thermopower Enhancement by Fractional Layer Control in 2D Oxide Superlattices”, *Adv. Mater.* 26 [39], 6701–6705 (2014). (2014.7.25)
63. Z. Xiao, H. Hiramatsu, S. Ueda, Y. Toda, F.-Y. Ran, J. Guo, H. Lei, S. Matsuishi, H. Hosono, and *T. Kamiya, “Narrow Bandgap in β-BaZn₂As₂ and Its Chemical Origins” *J. Am. Chem. Soc.* 136 [42], 14959 – 14965 (2014). (2014.9.25)
64. T. Katase, K. Endo, and *H. Ohta, “Thermopower analysis of the electronic structure around metal-insulator transition in V_{1-x}W_xO₂,” *Phys. Rev. B* 90, 161105(R) (2014). (2014.10.21)
65. Y. Wang, H. Sato, Y. Toda, S. Ueda, *H. Hiramatsu, and H. Hosono, “SnAs with the NaCl-type Structure: Type-I Superconductivity and Single Valence State of Sn” *Chem. Mater.* 26 [24], 7209 – 7213 (2014). (2014.12.8)
66. *W. S. Choi, H. K. Yoo, and H. Ohta, “Polaron transport and thermoelectric behavior in La-doped SrTiO₃ thin films with elemental vacancies,” *Adv. Funct. Mater.* 25 [5], 799–804 (2015). (2014.12.22)
67. T. Katase, H. Hiramatsu, T. Kamiya, and *H. Hosono, “Electric double-layer transistor using layered iron selenide Mott insulator

- TiFe_{1.6}Se₂" Proc. Natl. Acad. Sci. USA 111 [11], 3979 – 3983 (2014). (2014.2.7)
68. F.-Y. Ran, Z. Xiao, H. Hiramatsu, H. Hosono, and *T. Kamiya, "Growth of high-quality SnS epitaxial films by H₂S flow pulsed laser deposition" Appl. Phys. Lett. 104 [7], 072106 (2014). (2014.2.20)
- A02 公募研究(永田) 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
69. H. Takenaka, K. Nagata, T. Mizokawa and M. Okada, "Model selection of NiGa₂S₄ triangular lattice by Bayesian inference", J. Phys. Soc. Jpn. 83, 124706 (2014).
- A02 公募研究(鹿島) 機械学習に基づく材料探索技術の開発
70. ©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]
71. *R. Tomioka, T. Suzuki, K. Hayashi, and H. Kashima, "Low-rank tensor denoising and recovery via convex optimization," In J. Suykens, M. Signoretto, & A. Argyriou (editors), Regularization, Optimization, Kernels, and Support Vector Machines, 313-336, Chapman and Hall/CRC (2014).
- A02 公募研究(本多) 効率的な材料探索のための実験計画法の開発
72. *J. Honda and A. Takemura, "Optimality of Thompson Sampling for Gaussian Bandits Depends on Priors," AISTATS2014, JMLR Workshop and Conference Proceedings 33, 375-383 (2014).
- A02 公募研究(志賀) 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
73. *M. Shiga, V. Tangkaratt, M. Sugiyama, "Direct Conditional Probability Density Estimation with Sparse Feature Selection", Machine Learning, 2015. (採択、オンライン版 DOI 10.1007/s10994-014-5472-x)
74. *M. Shiga, H. Mamitsuka, "Non-negative Matrix Factorization with Auxiliary Information on Overlapping Groups", IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 27[6], 1615-1628, 2015.
- A02 公募研究(竹内) 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
75. H. Sasaki, I. Takeuchi, M. Okada, R. Sawada, K. Kanie, Y. Kiyota, H. Honda, *R. Kato. "Label-Free Morphology-Based Prediction of Multiple Differentiation Potentials of Human Mesenchymal Stem Cells for Early Evaluation of Intact Cells," PLoS ONE, 9 e93952 (2014).
76. Y. Guo, I. Takeuchi, S. Karnan, T. Miyata, K. Ohshima, *M. Seto "Array CGH profiling of immunohistochemical subgroups of diffuse large B-cell lymphoma shows distinct genomic alterations," Cancer Science, 105 481-489 (2014).
77. F. Matsuoka, I. Takeuchi, H. Agata, H. Kagami, H. Shiono, Y. Kiyota, H. Honda, *R. Kato. "Characterization of time-course morphological features for efficient prediction of osteogenic potential in human mesenchymal stem cells," Biotechnology and Bioengineering, 111 1430- 1439 (2014).
- A02 公募研究(池野) インフォマティクスに基づく固体光学結晶材料の設計
78. 池野豪一, 溝口 照康, 「第一原理計算の基礎と EELS 計算への応用」, 顕微鏡 51 号, in print (2015). [査読なし]
79. *Hidekazu Ikeno, "Ab-initio Multiplet Calculations of Fe-L_{2,3} X-ray Absorption Spectra in LiFePO₄ and FePO₄", Mater. Trans. accepted (4 pages) (2015).
- 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
80. *T. Ogawa, A. Kuwabara, C.A.J. Fisher, H. Moriwake, K. Matsunaga, K. Tsuruta, S. Kitaoka, "A density functional study of vacancy formation in grain boundaries of undoped α-alumina," Acta Mater., 69, 365–371 (2014).
81. *S. Kitaoka, T. Matsudaira, M. Wada, T. Saito, M. Tanaka, Y. Kagawa, "Control of oxygen permeability in alumina under oxygen potential gradients at high temperature by dopant configurations," J. Am. Ceram. Soc., 97 [7], 2314–2322 (2014).
82. *T. Ogawa, A. Kuwabara, C.A.J. Fisher, H. Moriwake, "A Density Functional Study of Oxygen Adatoms on a Step-Doubled Platinum Surface," J. Phys. Chem. C, 118, 23675–23681 (2014).
83. *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).
84. T. Hashimoto, *H. Moriwake, "Dielectric properties of BaTiO₃ by molecular dynamics simulations using a shell model," Molecular Simulation, 39, 1-7 (2014).
85. *H. Maeshima, H. Moriwake, A. Kuwabara, C.A.J. Fisher, I. Tanaka, "An improved method for quantitatively predicting the electrochemical stability of organic liquid electrolytes using Ab initio calculations," J. Electrochem. Soc., 161 [3], G7-G14 (2014).
86. *T. Matsudaira, M. Wada, M. Tanaka, Y. Kagawa, S. Kitaoka, "Effect of Dopant Configurations on Oxygen Shielding Properties of Polycrystal Alumina," Mater. Sci. Forum, 783-786, 1452-1457 (2014).
- A02(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, I. Muhammad, K. Suzuki, Y. Matsuda, M. Yonemura, M. Hirayama, and *R. Kanno "Syntheses, structures, and ionic conductivities of perovskite-structured lithium–strontium–aluminum/gallium–tantalum-oxides," J. Solid State Chem., 225, 431-437 (2014).
88. S. Taminato, M. Hirayama, K. Suzuki, K. Kim, Y. Zheng, K. Tamura, J. Mizuki, and *R. Kanno "Mechanistic studies on lithium intercalation in a lithium-rich layered material using Li₂RuO₃ epitaxial film electrodes and in situ surface X-ray analysis," J. Mater. Chem. A, 2 [42], 17875-17882 (2014).
89. J. Lim, S. Lee, K. Suzuki, K. Kim, S. Kim, M. Hirayama, Y. Oshima, K. Takayanagi, and *R. Kanno "Synthesis, structure and electrochemical properties of novel Li–Co–Mn–O epitaxial thin-film electrode using layer-by-layer deposition process," J. Power Sources, 279, 502-509 (2014).

90. S. Kim, M. Hirayama, W. Cho, K. Kim, T. Kobayashi, R. Kaneko, K. Suzuki and *R. Kanno "Low temperature synthesis and ionic conductivity of the epitaxial $\text{Li}_{0.17}\text{La}_{0.61}\text{TiO}_3$ film electrolyte", *CrystEngComm*, 16 [6], 1044-1049 (2014).
91. H. Chang, K. Kubota, G. Kobayashi, M. Hirayama and *R. Kanno "High-pressure synthesis and electrochemical properties of lithium transition metal oxides with layered rock-salt structure", *J. Power Sources*, 252, 1-7 (2014).
92. H. Konishi, K. Suzuki, S. Taminato, K. Kim, Y. Zheng, S. Kim, J. Lim, M. Hirayama, J.-Y. Son, Y. Cui, and *R. Kanno "Effect of surface Li_3PO_4 coating on $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ epitaxial thin film electrodes synthesized by pulsed laser deposition", *J. Power Sources*, 269, 293-298 (2014).
- 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
93. *S. Takakusagi, T. Ogawa, H. Uehara, H. Ariga, K. Shimizu, and K. Asakura, "Electrodeposition Study on a TiO_2 Single Crystal Electrode: Pt on a Nb-doped $\text{TiO}_2(110)$ ", *Chem. Lett.*, 43 [11], 1797-1799 (2014).
94. T. Kaito, H. Mitsumoto, S. Sugawara, K. Shinohara, H. Uehara, H. Ariga, S. Takakusagi, and *K. Asakura, "A new spectroelectrochemical cell for in situ measurement of Pt and Au K-edge X-ray absorption fine structure", *Rev. Sci. Instrum.*, 85 [8], 084104 (2014).
95. K. Fujikawa, H. Ariga, S. Takakusagi, H. Uehara, T. Ohba, and *K. Asakura, "Micro Reverse Monte Carlo Approach to EXAFS Analysis", *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* 12, 322-329 (2014).
96. A. Chaudhari, S. M. A. H. Siddiki, M. Tamura, and *K. Shimizu, "Acceptorless Dehydrogenative Synthesis of 2-Substituted Quinazolines from 2-Aminobenzylamine with Primary Alcohols or Aldehydes by Heterogeneous Pt Catalysts", *RSC Adv.*, 4, 53374-53379 (2014).
97. M. A. Ali, S. M. A. H. Siddiki, K. Kon, J. Hasegawa, and *K. Shimizu, "Versatile and Sustainable Synthesis of Cyclic Imides from Dicarboxylic Acids and Amines by Nb_2O_5 as a Base-Tolerant Heterogeneous Lewis Acid Catalyst", *Chem. Eur. J.*, 20 [44], 14256-14260 (2014).
98. K. Kon, W. Onodera, S. Takakusagi, and *K. Shimizu, "Hydrodeoxygenation of Fatty Acids and Triglyceride by Pt-loaded Nb_2O_5 Catalysts", *Catal. Sci. Technol.*, 4, 3705-3712 (2014).
99. S. K. Moromi, S. M. A. H. Siddiki, M. A. Ali, K. Kon, and *K. Shimizu, "Acceptorless dehydrogenative coupling of primary alcohols to esters by heterogeneous Pt catalysts", *Catal. Sci. Technol.*, 4, 3631-3635 (2014).
100. *K. Shimizu, S. Kanno, and K. Kon, "Hydrogenation of Levulinic Acid to γ -Valerolactone by Ni and MoO_x Co-loaded Carbon Catalysts", *Green Chem.*, 16, 3899-3903 (2014)
101. K. Kon, S. M. A. H. Siddiki, W. Onodera, and *K. Shimizu, "Sustainable Heterogeneous Platinum Catalyst for Direct Methylation of Secondary Amines by Carbon Dioxide and Hydrogen", *Chem. Eur. J.*, 20 [21], 6264-6267 (2014)
- A03 公募研究(東) 圧力誘起体積収縮を用いた巨大負熱膨張物質の開発
102. *H. Hojo, K. Onuma, Y. Ikuhara, and M. Azuma, "Structural evolution and enhanced piezoresponse in cobalt-substituted BiFeO_3 thin films," *Applied Physics Express* 7[9] 091501-1-4 (2014).
103. *R. Yu, H. Hojo, K. Oka, T. Watanuki, A. Machida, K. Shimizu, K. Nakano, and M. Azuma, "New PbTiO_3 □Type Giant Tetragonal Compound Bi_2ZnVO_6 and Its Stability under Pressure," *Chem. Mater.*, 27[6] 2012-2017 (2015).
- A03 公募研究(藤田) 配位の特異性を活用した機能性酸化物の創製
104. *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 NaRTiO_4 family", *Phys. Rev. Lett.*, 112 [18] 187602-(1-5) (2014).
105. *H. Hojo, *K. Fujita, H. Ikeno, T. Matoba, T. Mizoguchi, I. Tanaka, T. Nakamura, Y. Takeda, T. Okane, and K. Tanaka, "Magnetic structures of FeTiO_3 - Fe_2O_3 solid solution thin films studied by soft X-ray magnetic circular dichroism and ab initio multiplet calculations", *App. Phys. Lett.*, 104 [11] 112408-(1-5) (2014).
- A03 公募研究(横井) 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
106. H. Yamazaki, T. Yokoi, T. Tatsumi and *J. N. Kondo, "Intra-molecular H/D exchange of ethanol catalyzed by acidic OH groups on H-ZSM-5 zeolite", *J. Phys. Chem. Lett.*, 5, 3528-3531 (2014), (DOI: 10.1021/jz5018625).
107. Trees De Baerdemaeker, Hermann Gies, Bilge Yilmaz, Ulrich Müller, Mathias Feyen, Feng-Shou Xiao, Weiping Zhang, Toshiyuki Yokoi, Xinhe Bao and *Dirk E. De Vos, "A new class of solid Lewis acid catalysts based on interlayer expansion of layered silicates of the RUB-36 type with heteroatoms", *J. Mater. Chem. A*, 2, 9709-9717 (2014). (DOI: 10.1039/C4TA01384K)
- A03 公募研究(舟窪) 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
108. Takao Shimizu, Tatsuhiko Yokouchi, Takahiro Oikawa, Takahisa Shiraishi, Takanori Kiguchi, Akihiro Akama, Toyohiko J. Konno, Alexei Gruverman, and *Hiroshi Funakubo, "Contribution of oxygen vacancies to the ferroelectric behavior of $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ thin films", *Appl. Phys. Lett.*, 106, 112904-1-5 (2015).
109. Takao Shimizu, Tatsuhiko Yokouchi, Takahisa Shiraishi, Takahiro Oikawa, P. S. Sankara Rama Krishnan, and *Hiroshi Funakubo, "Study on the effect of heat treatment conditions on metalorganic-chemical-vapor-deposited ferroelectric $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ thin film on Ir electrode", *Jpn. J. Appl. Phys.*, 53, 09PA04-1-6 (2014).
- A03 公募研究(柳田) 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
110. He, Y., K.Nagashima, M.Kanai, G.Meng, F.Zhuge, S.Rahong, X.Li, T.Kawai and *T.Yanagida, "Nanoscale Size-Selective Deposition of Nanowires by Micrometer Scale Hydrophilic Patterns", *Sci. Rep.*, 4, 5943 (2014).
111. Fuwei, Z., *T.Yanagida, N.Fukata, K.Uchida, M.Kanai, K.Nagashima, G.Meng, Y.He, S.Rahong, X.Li and T.Kawai, "Modulation of Thermoelectric Power Factor via Radial Dopant Inhomogeneity in B-doped Si Nanowires" *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 14100 (2014).

2. ホームページ

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る。また、公開シンポジウムや研究会を開催する際には、ホームページにおいて告知し、参加者を広く募っている。さらに、領域内外の研究水準を高めるため、本領域に関する教育的なスライドを作成し、ホームページにて公開している。

3. 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
2013年11月10～13日	【公開】国際会議 EMMM2013（京都）共催
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）
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）

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）
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）
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 S7 マテリアルズインフォマティクス
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）

4. 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2013（12月21日）および2014（9月28日）に参加し、「原子配列の乱れ: 新しい材料開発の鍵」というポスターを掲げて研究紹介を行った。その説明要員として、領域代表者の田中のほかに、各計画研究班から大学院生に参加させた。学会発表とは異なり、一般市民を対象とした説明をすることは大学院生にとっては大きな教育効果があり、研究の意義について改めて考える良い機会になっている。

6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ程度）

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、研究組織間の連携状況について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。

本領域の研究組織は以下のとおりである。前述の戦略に基づいた領域内連携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 件の公募研究が各研究項目に加わることで研究組織が強化された。ナノ材料科学のフロンティア開拓を担う A01 では、3 件の公募班が加わり、最先端の顕微鏡法、X 線回折・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・解析のための体制が構築された。情報学的手法の援用による材料機能設計・探索を目指す A02 では、情報学分野の 6 名の研究者の参画により研究組織が大幅に強化された。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領域研究を加速させる予定である。また、テーマ上関係の深い新学術領域「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成（領域代表 岡田真人）」のメンバーをはじめとした領域外の国内研究者や、Klaus-Robert Müller 教授（ベルリン工科大）、Krishna Rajan 教授（アイオワ州立大）ら国外の情報学、材料情報学に関する著名な研究者と密接な情報交換、連携を行っている。そして、A03 に多様な材料創製の研究提案をする 5 件の公募班が加わることで、より広範な材料系を対象とした材料創製を展開するための体制が整った。

【研究組織】

研究項目 A01 ナノ材料科学のフロンティア開拓

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 一杉 酸化物表面における特異なナノ構造の超高分解能 S T M 測定
高橋 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
王 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

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—機能相関の探求
(カ) 太田 原子層制御による新しい材料機能探索
(コ) 津田 (H28 年度から新設予定) 材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓

公募研究 永田 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 (情報学)
鹿島 機械学習に基づく材料探索技術の開発 (情報学)
本多 効率的な材料探索のための実験計画法の開発 (情報学)
志賀 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 (情報学)
竹内 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 (情報学)
池野 インフォマティクスに基づく固体光学結晶材料の設計 (材料情報学)

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 東 圧力誘起体積収縮を用いた巨大負熱膨張物質の開発
藤田 配位の特異性を活用した機能性酸化物の創製

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ程度）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

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」を毎年夏に開催している（2014.7 名古屋，2015.7 淡路島，2016.7 北海道（予定））。これは、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る。大学院生には互選で優秀ポスター表彰も行っている。これは、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ている。また、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つつあり、大学院生の場合は、卒業した後までも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ている。

大学院生のアウトリーチ活動への参画

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 2013（12 月 21 日）および 2014（9 月 28 日）に参加し、「原子配列の乱れ：新しい材料開発の鍵」というポスターを掲げて研究紹介を行った。その説明要員として、領域代表者の田中のほかに、各計画研究班から大学院生に参加させた。学会発表とは異なり、一般市民を対象とした説明をすることは大学院生にとっては大きな教育効果があり、研究の意義について改めて考える良い機会になっている。

8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）（1 ページ程度）

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総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

領域研究で行う研究のための大型設備の導入については、各装置ともに独自のノウハウを取り込んだ設備の整備が予定通り終了した。これら大型設備についての情報は総括班から各研究班へアナウンスを行ない、共同研究への活用を促している。以下に、その設備のうち、主要なものについて記す。

A01(ア) コンパクト高出力エキシマレーザー

新規に開発したパルスレーザー堆積法/原子間力顕微鏡複合装置において、立ち上がり時間が短い高性能パルスレーザーの導入が重要である。調査を行った結果、本研究で測定試料として考えている金属酸化物薄膜の作製には本製品が必須であると判断し導入を行った。

A01(イ) 精密イオンミリング装置

TEM 観察用試料を精密に作製する装置である。従来よりも良好な観察試料が作製できるようになり、解析精度の向上に寄与している。

A01(ウ) 透過電子顕微鏡用 STEM-CL ユニット

ナノ領域複合電子顕微分光装置のための光検出器として、世界最高の集光効率によって物質の電子励起発光スペクトルを取得、及び発光ピーク毎のナノマッピングが可能となった。希土類元素を使わないユビキタス元素のみから成る白色蛍光材料の分析によって 2015 年 5 月 14 日に日本顕微鏡学会 71 回学術講演会優秀ポスター賞を受賞した。

A02(エ) 並列計算機クラスター

第一原理計算を実行する装置である。A02(エ)では、1つの化学組成あたり数百～千種類の構造に対する高精度第一原理計算を実行する必要があるため、多数ノードかつ大容量メモリを実装した並列計算クラスターを導入した。これにより、A02(エ)で計画している統計熱力学に基づいたナノ構造情報の統合および材料探索のためのデータマイニング技法の応用が可能となった。

A02(オ) 大出力赤外ファイバーレーザー

ダイヤモンドアンビルセルで加圧した物質に照射することにより、高圧下で高温を発生させ、高温高圧合成をおこなうための装置。超硬質物質や強誘電体など、様々な高密度相を合成することにより、網羅的物質探索に貢献している。

A02(カ) オゾンガス発生処理装置

パルスレーザー堆積法による酸化物薄膜合成で高酸化状態の薄膜を作製するためには高酸素圧が必要であった。本オゾンガス発生処理装置の導入により、RHEED が使用可能な低圧力で高酸化状態の薄膜が得られるようになった。

A03(キ) ナノ構造作製装置

合成した耐環境性膜や、高温腐食環境下曝露後の膜の断面を平滑に加工するために使用する。その後、得られたサンプルの断面組織を電子顕微鏡やエネルギー分散型分光法等により観察・分析する。本装置の使用により、変質層等の非常に脆く壊れやすいサンプルに対しても平滑な断面組織の観察・分析が可能になった。

A02(ク) 高温超高压発生装置

超高压下で存在する準安定相および、反応性、飛散能の高いリチウムやヒドリドなどの材料合成を実現するために導入した。新規なイオン導電体の開発を実現し、その収量を増加させた。一度の合成で得られる試料量が増えることで、様々な評価を同一の試料に対して行えるようになった。

A02(ケ) 半球型エネルギーアナライザー

触媒活性ナノ構造を三次元決定する偏光全反射蛍光 XAFS 装置に取り付けることで、XAFS に加えて、光電子分光法による元素分析・化学状態評価を含めた複合分析が可能となった。

9. 総括班評価者による評価（2 ページ程度）

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。

足立 裕彦（京都大学・名誉教授）

材料の表面や界面、欠陥、不純物が材料の特性を決めている例は枚挙に暇がなく、それを理解し、設計することは材料科学の重要な課題である。これらをナノ計測技術や第一原理計算を用いて定量的に掌握する研究において、本領域メンバーは世界のトップレベルにあることは間違いない。実際、本領域の成果は、*Science*、*Nature*、*Phys. Rev. Lett.*などの一流誌で多数発表されており、国際的に極めて高い評価を耳にすることが多い。そして、その名声に満足することなく、30 から 40 歳台の若手研究者を中心に貪欲に新しい課題に挑戦し、新しい手法も積極的に取り入れて先端研究を切り拓いている。さらに代表研究者の強いリーダーシップのもとで、CS 課題という共通テーマについて連携して取り組み、大きな成果を挙げていることも頼もしく感じている。この領域研究の成果は、世界の研究水準の指標とも考えられるので、是非、この分野のフロンティア開拓に邁進していただきたい。

一方で、本領域では、ナノレベルで得られる材料情報を、実際の材料開発に結びつけるための方法論を情報科学の研究者の参加も得て取り組もうとしている。これは、アメリカを中心とした流行であるが、わが国としても看過できない状況である。本領域での意欲的な取り組みには敬意を表したい。しかしながら、情報科学と材料科学の連携というのは、学術用語や文化の相互理解にまで踏み込む必要があり、拙速に成果を急ぐのではなくじっくりと学問領域を醸成するべきだと思う。本領域研究の中で、情報学との連携の萌芽を大事にすることは必要と思うが、本領域に期待する第一は、ナノ材料科学のフロンティア開拓であることは忘れて頂きたい。

本領域研究は、若手の育成にも積極的であり、人材育成といった観点からも大いに評価できる。

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、先端ナノ計測と計算科学、合成プロセスの間の連携研究を進め、それをもとに普遍的な材料設計指針を獲得することを目指す内容であり、今後の材料科学の発展のための基盤となる重要な研究分野である。透過電子顕微鏡など最先端のナノ計測と第一原理計算から得られる成果は、これまで経験的要素が大きかった材料プロセスのアプローチを大きく変革する可能性を秘めている。一方で、これまでナノレベルの材料情報に基づいて実際の材料設計・開発が成された例はそれほど多くなく、偶発的に見いだされた材料について、解析実験や計算によるメカニズム解明が行われてきたケースが多かった。本領域では、ナノレベルの材料科学とマクロな材料創出を繋ぐ学術的枠組みを作り出すことを企図している。これに成功すれば、材料研究に与えるインパクトは計り知れないほど大きい。これらの手法は、材料立国を標榜するわが国が進めるべき課題であり、元素戦略・希少代替材料開発にも展開できる可能性が高い。

研究組織には、我が国の材料科学分野に新しい潮流をもたらさうる気鋭の研究者が参画しており、これらは本領域研究の前に推進された特定領域研究「機能元素のナノ材料科学」で若手として育成されたメンバーも多い。この研究組織の高い研究レベルは、これらの人材育成の成果であると言っても過言ではない。本領域でも、領域代表者のリーダーシップのもと計画研究班および公募研究班の連携が上手く進み、多くの重要な成果があがっていると判断でき、これは次世代を担う人材の育成という点からも大いに期待できる。本領域メンバーの優れた能力をさらに結集し、より一層ステップアップした成果を目指し、その成果を世界に向けて発信して頂きたい。

高野 幹夫 (京都大学・名誉教授)

この領域研究では、代表者の強力なリーダーシップのもとで、透過電子顕微鏡などのナノ計測手法と第一原理計算に基づいた理論計算手法を高いレベルで融合することにより、合理的、普遍的な材料探索・設計手法の開拓を目指しており、材料科学分野における新たな展開が生み出されつつある。参加者も計測分野、計算分野、材料開発分野のトップレベルの研究者が力強く研究を進めており、計画班内の研究はもちろん、各計画班同士の連携や公募班との共同研究も活発に行われている。その結果として、ネイチャーなど一流誌に多数論文を発表するなど、既に特筆すべき成果を数多く挙げており、高く評価できる。

領域内で情報学との連携についても意欲的な取り組みが始まっている。フォノンの非調和性についての独創的な第一原理計算をもとにした新しい熱電材料の探索や、ナノ電子顕微分光における情報処理技法の応用など、この領域での共同研究ならではの成果も上がっている。最近、材料と情報との連携が過剰に喧伝される風潮にあるが、単に連携すればよいと言うものではない。本領域の目的は、世界トップレベルのナノ構造情報を獲得したうえで、それを材料開発に応用するために情報学のアイデアや手法を利用することである。これを念頭に、本領域メンバーでこそなし得る特徴的な連携を考えて頂きたい。

領域内において若手研究者の育成や大学院生の教育に力を入れている点も注目している。特に、年1回のペースで開催される“若手の会”においては、泊まり込みで研究発表・討論を行っている。このような交流は、若手研究者の競争心や自立心を刺激し、領域全体を活性化させる源となっており、本領域研究とその将来を見据えた素晴らしい取り組みであると言える。今後も、若手研究者らを中心にさらにグループ間の連携を深め、ナノ構造情報に基づいた材料科学の新しい学理の構築に向かって精力的に研究を進めて頂きたい。

森 博太郎 (大阪大学・特任教授、大阪大学・名誉教授)

ナノサイエンス・ナノテクノロジーの発展には、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が必要不可欠である。本領域では、世界トップクラスの最先端計測手法を材料科学分野にいち早く取り入れ、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、極めて高いレベルでの材料研究を推進している。こうした本領域での取り組みは、現在材料科学の様々な具体的分野に波及してきており、その意味において、本領域は材料科学分野の模範となりつつあると言える。

さらに、本領域では、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試みを行っている。これは挑戦的な取り組みであるが、成功すれば材料のナノ構造研究をいわば異質な次元の高みにまで押し上げる駆動力となるものであり、世界を先導する研究成果が導かれることを期待する。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待たない。また領域の目標達成に向けて、領域代表者のリーダーシップのもとで、若手を中心とした班員らが不断に有機的な連携研究を心がけている積極的な姿勢が強く感じ取られる。

新学術領域研究は、個々の研究室単位で行われる基礎研究などでは達成困難な「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。すでに本領域では、理論計算と実験の従来にない緊密な相互連携で多くの成果が挙げられている。しかし手綱を緩めることなく、現在の世界最高の研究水準をさらに向上させてゆくことを期待する。

10. 今後の研究領域の推進方策（2ページ程度）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

本領域研究では、『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』の2つを目的として計画研究と公募研究が一丸となった連携研究を進めている。今後の推進方策は以下の通りである。

ナノ材料科学のフロンティア開拓

・領域内の連携研究により、材料の表面、界面、転位、不純物、点欠陥などに特徴的な局所構造や化学結合状態について、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手法を研究項目 A01 において世界に先駆けて開拓し、それを適用することで多くの成果を挙げてきた。すでに当初想定した以上のペースで進捗している。CS 課題を中心に、研究項目 A01 と A02 は領域内の連携研究テーマのナノ構造解析に大きく貢献してきた。今後も、ナノビルトイン実験、ナノ計測実験と高精度第一原理計算の密接連携によって重要な未踏領域を開拓し、継続して世界に向けて発信していく。

・さらに、ナノ構造情報を使って演繹的アプローチで材料創製するために不可欠なステップである『ナノ構造探索』を発展させるべく、研究項目 A01, A02 において、より高度な方法論について検討し始めている。これは、研究者の経験により試行錯誤的にモデル化が行われてきた従来の方法ではなく、表面や界面における膨大な元素・原子配列の組み合わせの中から最安定な構造を選び出す作業である。しかし探索空間が膨大であるため、大胆な近似を行ったうえでも、実験や計算による試行錯誤的な探索では長い時間がかかってしまい、研究進捗のボトルネックになっている。研究項目 A02 における情報科学との連携により、この構造探索を効率的に行う手法を開拓し、それを適用することで、この作業の大幅な効率改善を目指す。すでに萌芽的な連携研究の成果は得ている。

ナノ構造情報の活用

・現在、研究項目 A01, A02 によるナノ構造解析から、CS 課題を中心とした重要な材料設計指針が得られつつある。今後も、当初計画に従って領域内の連携研究を推進し、デザインされた材料創製を合理的・効率的に行うための学問基盤を創出する。研究項目 A02, A03 により実施される『材料探索』には、2つの方策が考えられる。第1は、確立された統計熱力学などの物理法則に基づいて材料を作り込む**演繹的アプローチ**であり、従来からの材料科学の王道である。第2は、実験や第一原理計算結果を機械学習し、予測モデルを構築してベイズ推定に基づいて探索を進める**帰納的アプローチ**である。対象とする材料特性や物質群に応じて、2つの手法の長所・短所を活かしたナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすケーススタディを重ねていく。

・これまでに、実験と理論計算で得られるナノ構造情報を具体的な材料創製に活かすべく、材料科学と情報学との融合新領域を創出することを目標とし、まず研究目標や概念、専門用語を共有するために領域全体の若手研究者を中心としたタスクフォースなどの活動を続けてきた。その結果、領域内の個々の研究者の意思疎通が進み、幾つかの共同研究成果をあげることに成功している。今後は、この新領域の萌芽を大きく成長させることを目指した領域一丸となった活動を展開する。

・タスクフォースでの議論の中で、材料科学と情報学との融合新領域におけるターゲットを、『材料探索』、『構造探索』、『物理法則探索』の3つに峻別するべきという考えが洗い出された。この3つの目的それぞれに合致した圧縮センシング法やカーネル法など機械学習の手法を研究項目 A02 において選び出す、あるいは必要に応じて新手法を開発する。そして、研究項目 A01, A02 における『ナノ構造探索』、研究項目 A02, A03 における『材料探索』に適用するとともに、領域全体として材料科学の究極の目標ともいえるデータ駆動での『物理法則探索』を目指す。

各計画研究における研究課題例

A01(ア) (連携 A01(イ)(ウ), A02(エ)(カ)(コ), A03(キ)(ケ))

酸化物表面上の貴金属クラスターのナノ構造情報と触媒活性

A01(イ) (連携 A01(ア)(ウ), A02(エ)(オ)(コ), A03(キ)(ク))

機能性セラミックスの粒界ナノ機能元素構造と特性

A01(ウ) (連携 A01(ア)(イ), A02(エ)(オ)(カ)(コ), A03(キ)(ク)(ケ))

情報処理技法を応用したナノ電子顕微分光の材料機能探索への適用

A02(エ) (連携 A01(ア)(ウ), A02(オ)(カ)(コ), A03(キ)(ク)(ケ))

ナノ構造情報に基づいた材料探索と構造探索手法の開拓

A02(オ) (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(オ)(カ), A03(キ)(ク)(ケ))

高圧・高温プロセスを利用した新しいナノ構造情報の探求

A02(カ) (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(オ)(カ), A03(キ)(ク)(ケ))

原子層制御による新しいナノ構造情報の探求

A02(コ) 新設予定 (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(オ)(カ), A03(キ)(ク)(ケ))

材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓

A03(キ) (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(オ)(コ), A03(ク))

ナノ構造情報に基づいた新しい耐環境性セラミックス材料の創出

A03(ク) (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(オ)(カ)(コ), A03(キ)(ケ))

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

A03(ケ) (連携 A01(ア)(イ)(ウ), A02(エ)(カ)(コ), A03(ク))

ナノ構造情報に基づいた新しい触媒機能の創出

問題点と今後の対応策

当初計画に対しては、本領域の第2の目的である『ナノ構造情報の活用』について、さらなる情報分野の研究者の参加が必要であると『指摘』を受けていた。本報告書の『指摘事項への対応状況』に詳述した通り、公募研究として情報分野の研究者を6名採択し、材料研究者とのタスクフォースを形成して意思疎通を図り、研究目標や専門用語を共有した。これは大きく奏功し、すでに融合研究の成果が上がっている。

今後、この融合研究をさらに強化し、新学術領域として確立させるために、平成28年度より情報分野の計画研究A02(コ)を新設し、現在の情報分野からの計画研究分担者1名と公募研究代表者3名を参加させる。この新設が承認された場合には、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を目指し、領域全体として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、「新学術領域」の構築に貢献することを目指す。