

領域略称名：ユビキタス戦略
領域番号：472

平成24年度科学研究費補助金
「特定領域研究」に係る研究成果等の報告書

「配列ナノ空間を利用した新物質科学---ユビキタス元素戦略」

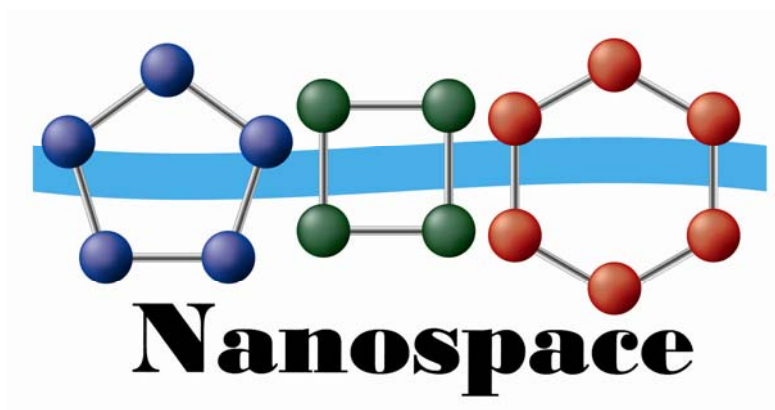
(領域設定期間)
平成19年度～平成23年度

平成24年6月

領域代表者 東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授・谷垣 勝己

目次

1. 研究領域の目的及び概要	2
2. 研究領域の設定目的の達成度	3
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	4
4. 主な研究成果(発明および特許を含む)「研究項目毎の整理」	5
5. 研究成果のとりまとめの状況	14
6. 研究成果の公表状況(主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等)	15
7. 研究組織と各研究項目の連携状況	24
8. 研究費の使用状況(設備の有効活用、研究費の効率的使用を含む)	27
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状況	29
11. 総括班評価者による評価の状況	30



配列ナノ空間を利用した新物質科学のロゴマーク

1. 研究領域の目的及び概要

(1)【研究領域の概要】

本特定領域研究は、配列ナノ空間を利用した新物質(図1)を開拓するための新しい技術ならびに開拓された物質から派生する新しい物性を対象とする新物質科学に関する研究である。物質のナノ構造を制御して新物質を創製し、科学技術を発展させる研究は、将来に向けた研究の最も重要な方向性の一つとなっている。この様な研究の進展において、配列ナノ空間を有する物質群の概念およびそれらの物質から観測される物性は、極めて重要なものとなってきている。この様な方向の研究として、配列したナノ空間を有する物質およびそのナノ空間内に閉じ込められる物質の状態を適用して新物質を開拓し、新しい物性を発現させる研究は、有力な物質開拓手法ならびに新しい物性研究手法として広く注目されている。これらの物質群では、微細加工技術だけでは容易に形成できないナノ領域の構造を、物質の自己組織化等の様々な現象を駆使して創製し、従来の物質系では得られない相互作用や量子閉じ込めに基づき新しい物性を発現させることが可能となる。また、配列ナノ空間を有する多くの物質は、地球上に広く存在する軽元素であることが多い。従って、これらの研究をユビキタス元素戦略と位置付けて行う研究は、学術的にも独創性があり社会的意義も高い研究である。本特定領域研究においては、新物質の創製と物性研究は重要な目標である。研究を推進するために、配列ナノ空間物質群の精密構造決定および種々の電子状態の測定技術ならびに基礎理論手法を大きく発展させることも同時に目標とする。また、実際に創製された新物質を次世代デバイス応用へと発展させることも念頭において、物質基礎物理学を推進する。ナノ領域の科学を発展させる研究の方向性は、物質科学における重要な潮流である。本特定領域研究により、日本から世界へ発信できる物質科学のニューパラダイムを形成し、新しい物質科学が創出され、次世代新素材の開拓が期待される。



図1. 様々な配列ナノ空間物質

2)【研究領域の設定目的】

本特定領域研究は、配列ナノ空間を有する新物質系の開拓を戦略の主要な柱として、ユビキタス元素戦略を併用した物性研究、構造研究、理論研究、応用への可能性の探求を含めた総合的な研究を推進することが大きな特徴である。配列ナノ空間を有する新物質を開拓するための新しい方法論ならびに開拓された物質から発現する物性を詳細に研究する新しい物質科学(図2)を目指すものであり、これらの基礎科学を基盤として、新物質の応用展開を考慮して、将来へ向けて発展させるものである。

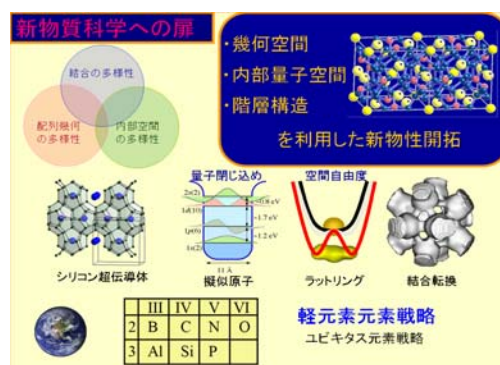


図2.配列ナノ空間を利用した新物質科学

配列ナノ空間を形成する物質とその内部空間に閉じ込められた物質の多種多様な組み合わせによって新しい物質を生み出し、これらの物質から特徴のある興味深い物性を発現させる研究は世界中で活発化している。この様な現況において、迅速に多様な専門分野の研究者が協力して、正確な状況判断のもとに研究を進めていくことは極めて重要である。この様な方針に基づく物質開拓は、柔軟且つ様々な方向からのアプローチが必要である。そのために、学際的研究分野の研究者間の連携を密にすることにより、本研究分野の将来へ向けた発展を探る。本特定領域研究では、配列したナノ空間を利用した新物質の開拓・関連した基礎物質科学(構造解析・物性測定・物性理論)・次世代デバイスへの展開という総合的な視点に立脚して、新しい領域の物質研究開発を推進する。“配列したナノ空間を有する物質”を新物質開拓の柱となる基本概念とし、この概念を材料ユビキタス元素戦略と融合する。特にIV族:C、Si、Ge、III族:Al、B、I族:H、Li、Na、K、II族:Ca、Ba、Sr、Mg、Zn、VI族:O、遷移元素:Fe、Cuを中心とする配列ナノ空間を有する共有結合構造物質、配列内部空間に分子・原子を閉じ込めた包摂系物質、周期的配列空間を有した無機系ナノ多孔質物質を取り扱う。限定された微小領域やそれらの構造自体を取り扱うのではなく、ナノ領域の構造がマクロに観測される物性として発現する新しい物質科学を集中的に取り扱う。

本特定領域研究における実際の研究では、本特定領域で開拓される配列ナノ空間を有する新物質を対象として、基礎物性、精密構造、物性理論、次世代デバイス応用への可能性に関する集中的かつ総合的な研究活動を展開する。

2. 研究領域の設定目的の達成度

【物質創製および物性】

本特定領域研究では、物質創製を柱として新しい物質科学研究を遂行するために、配列ナノ空間を有する戦略物質として、(1)ゼオライトとエレクトライド、(2)IV族元素系多面体物質(3D炭素ネットワーク物質とクラスレート物質)、(3)III族クラスター物質(準結晶物質)、(4)2次元平面グラファイト(グラフェン)物質、(5)多孔質物質を選択して戦略的に研究を推進した。

ゼオライトとエレクトライド: 研究当初集中して研究を進めていたLTA以外にFAUなど他種類のゼオライト物質を含めて、アルカリ金属元素の吸蔵量を広範囲に変化させる事および閉じ込め量子準位の観点から発現する磁性の物理をほぼ明確にする事に成功した。さらに、当初の研究範囲であった局在電子系の範囲を越えて、遍歴系の可能性のある幾つかの物質を創製した。エレクトライドに関しては、簡単な大量合成法を見出す事に成功し、低イオン化ポテンシャルという特異な性質を十分に活用した二つの応用(有機電界発光デバイスにおける電子注入のための電極材料ならびに酸素陰イオン発生源)として発展させる事に成功した。

IV族多面体物質: 種々の高温高圧環境下合成法を適用する事により、2次元から3次元分類される新しい炭素ネットワーク相を発見する事ができた。また、クラスレートにおいても、新しいクラスレート超伝導物質相を多数発見する事ができた。合成された半導体クラスレートは、熱電変換材料として、廃熱温度領域では世界最高の $ZT=1.5$ の材料を創製する事に成功した。また、クラスレート系物質で注目される非調和フォノン(ラットリングフォノン)と伝導電子との相互作用定数を実験的に正確に評価する実験手法を確立した。

平面グラファイト(グラフェン)物質: グラファイトならびにグラフェンの端状態と磁性の相関を実験として観測する事に成功した。また、ガス吸着を応用する事により可逆的な磁気スイッチ現象を確認する事に成功した。ゼオライトを鋳型とする新しい合成法を適用する事により新しい炭素材料であるZeolite-Template-Carbon(ZTC)を創製する事に成功した。この他に、再確認実験は今後の大きな課題であるが、アルカリ縮合環物質ピセンで超伝導が報告された。

III族クラスタ物質(準結晶物質): 特定領域研究発足時の重要課題であった α 多面体ボロンに対するLiインターカレーションの制御に成功して、超伝導を再現性良く確認する事に成功した。また、Al-B系の多面体系物質で半導体的物性を示す準結晶の合成に初めて成功した。ボロン系物質はこの他にもボロンナノベルト物質等の新しい物質として発展させる事ができた。

【極限精密測定技術】

放射光単結晶回折(SPring-8): ビームを極限まで絞ったX線回折により8~70 KeVの広いエネルギー範囲で $\Delta E/E \approx 10^{-4}$ の高いエネルギー分解能と 10^{10} photons/sの高い強度を両立し、無機物質なら10 μm 程度、分子性物質でも数十 μm 程度の微小結晶を用いた精度の高い単結晶構造解析を行うことができる技術として確立した。また、本測定法を適用して初めてLiを内包した C_{60} 固体の構造を決定する事に成功した。

電子線局所プローブ法: 電子顕微鏡法に立脚した収束電子回折(CBED)法による定性・定量的な構造解析手法、高分解能電子線エネルギー損失分光(EELS)法と世界初の軟X線発光分光(SXES)法による電子状態解析手法が可能な世界最高の装置へ開発を進めた。この装置を適用して、ボロンナノベルトの電子状態の測定、ZTCカーボンの電子状態、3D炭素ポリマーの構造の価電子状態、Liドープ α ボロンの電子状態を決定した。透過型電子顕微鏡という顕微手法を基軸に、高精度かつ総合的な構造・電子状態計測技術は、今後の新機能材料評価に大いに役立つと考えられる。

極限高圧ラマン分光法: ダイヤモンド・アンビル・セル(DAC)を用いて、ダイヤモンドの窓を通して、100 μm 以下の微小試料に対して20 cm^{-1} 以下のラマン測定ができる装置を開発して、クラスレート物質の圧力下の構造を詳細に検討する事に成功した。

【物性理論】

配列ナノ空間物質では、系の構成単位となる量子ナノ空間とこの構成要素が3次的に組む結晶構造のとり合わせによって多彩な電子状態が実現し、系に含まれる元素の名前から想像されない様々な物性が実現する。この様な意外性は配列空間の構成単位を一つの巨大な原子とみなし、この超原子に通常の原子では期待できない性質を付加した上で、これを適切に配列させるという設計指針によって実現される。この超原子描像という観点に立って本特定領域で行われてきた配列ナノ空間物質に対する理論研究の手法を確立した。この手法は、ゼオライトの電子状態計算やZTC材料の電子状態計算へ適用された。

【応用展開】

エレクトライドは、有機電界発光素子の電子注入電極としての適用が可能となった。また、イオン陰イオン酸素源として応用が発展した。新しく見出されたZTCは、イオン取り込み量が非常に大きい事が実験で確認され、リチウムイオンバッテリー等への応用として発展した。

3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況

配列ナノ空間を利用した新物質科学—ユビキタス元素戦略」の中間評価は平成21年9月に行われた。その結果、評価結果:A(現行のまま推進すればよい)を頂いたことは、当時本特定領域が順調に進展していることを示すものである。評価内容と今後の課題は、「配列ナノ空間という、これまでに着目されていなかった空間スケールに構造の多様性を見出し、その制御による新物質・新現象の開拓を目指しており、既に多くの成果を発信しているが、「これまでに本研究領域で見出された研究成果は、新デバイスまで発展させるに求められるレベルに達しているとはいえず、新規デバイス開発の道程は長いと認識し、基礎的な研究を充実させる必要がある」というものであった。従って、最終評価として高い評価を得るためには、当初プロジェクト開始時に掲げた基本戦略研究(物性研究:ゼオライトの磁性、クラスレートの熱伝導と電気伝導の制御、III族クラスタ物質の創製と超電導物性等)の達成に加えて、展開戦略研究(ナノ空間が創出する電子状態とフォノン、新しいユビキタス熱電デバイス、エレクトライドを利用した電子デバイス)を達成して、将来戦略研究(配列ナノ空間が創出する新物質、新物性、新デバイス概念)に関して十分な成果を達成すること、と考えた。このために、特定領域研究者の連携のもとに活発な議論と一層の協力を得て特定領域研究を推進した。

一方、本特定領域研究の採択時に、下記のコメントを受けている:「地球上に豊富に存在する元素(ユビキタス元素)を用いた配列ナノ空間という切り口の下に、豊富な実績を有する複数の分野の研究者が結集して領域を構成しており、研究者間でのシナジー効果を熟慮した展開性等、周到な準備の下に計画研究や実施体制が立案されている」。その一方、ユビキタス元素戦略という言葉については、「何をユビキタス元素と呼ぶかが曖昧である」という指摘や、「本研究課題の主目的は配列ナノ空間の物質研究であるのに対して、副題にある『ユビキタス元素戦略』という側面を強調することで研究目的が曖昧になるのではないか」という指摘である。指摘のあったユビキタス元素に関しては、研究推進のために総括班で議論を重ね、あまり強くユビキタス元素としての束縛を設けないことにした。しかし、現在の様に環境に配慮したグリーンテクノロジーが求められることは十分に認識する必要はあると考えている。

さらに中間評価後の領域会議における議論、評価委員の先生方からのコメントをもとに、研究期間後半の研究方針の策定を行った。そして、これをもとに後期公募班22グループが決定され、現研究体制がスタートした。2010年のノーベル物理学賞受賞研究は、本特定領域にも深く関連した物質であるグラフェンに関する研究であった。また、2011年度のノーベル化学賞は、本研究領域と関係の深い準結晶に与えられた。このことは我々の掲げた研究の指針が世界の潮流に乗っていることを明示していると理解している。新規材料開発および基礎物性研究以外にも、領域研究では応用展開に向けた物性理解(非調和ラットリングフォノンと関係した電子-格子相互作用、幾何対称性と関係するディラックコーン電子状態等)に大きな進展が見られ、成果を上げている。このことは後期公募班において物性理論研究分野を重点的に補強し、実験家との融合的研究を促進した結果の現れであり、それによって研究期間後半に応用展開研究に道筋を見出せたことは、本特定領域研究の一つの成果であると考えている。

本特定領域は昨年度で最終年度を終了して、領域メンバーも本特定領域研究を足がかりに多方面で活躍している。特筆すべきは若手研究者として参画したメンバーらが様々な分野で昇進すると共に、新しい独自の研究を展開し、大型プロジェクトにも研究の場を広げていったことである。計画班・公募班ともに若手研究者を積極的に登用し、重点的に予算を配分したことが実を結んだ結果と理解している。仙台では東北関東大震災の被害を受けたが、2011年度秋に当初の計画に即して、本特定領域研究の集大成とも言える国際会議「配列ナノ空間物質が拓く新物質科学:基礎と展開」を諸外国の研究者の参加のもとに、研究者盛大に開催する事ができた。そこから「配列ナノ空間物質に基づく新物質科学」をあらためて世界に発信し、本特定領域研究が先導的役割を果たした事をアピールできた。本研究分野が本特定領域研究を契機として今後更に発展していく事を祈念している。

研究費に関して

1) 研究費に関しては、昨年度発足した新学術領域研究の影響を大きく受けた。特に重要な公募研究で選択した研究者の何人かの方が、新学術研究に加わるために抜ける必要がある状況になり、特定領域研究推進に大きな影響があった。文部科学省における研究状況の変更は、現在既に推進されている研究プロジェクトへの影響をできる限り少なくする配慮をして頂きたかった。この状況で、当初予定していた資金の15%近くが、2年目あるいは1年目の途中で施行することが不可能な状況になった。このような場合は、予定していた資金を他の班に割り振ることができる等の措置があっても良いのではないかと感じた。

2) 特定領域研究のみに間接費が付与されなかった。このために、東北大学規定では100万円の資金を公費から搾取される。間接費に関する配慮の是正の必要性を感じた。

4. 主な研究成果(発明および特許を含む)

【研究総論】

本特定領域は、配列ナノ空間を有する物質創製が重要な鍵となる研究である。そこで、図3に示すゼオライト、エレクトライド、クラスレート、グラフェン、III族ボロン系物質等を配列ナノ空間戦略物質として位置づけ、新しい物性を探究するとともに、応用へ発展させた。まず、研究成果の総論を記載して、その後で各論として研究成果を説明する。

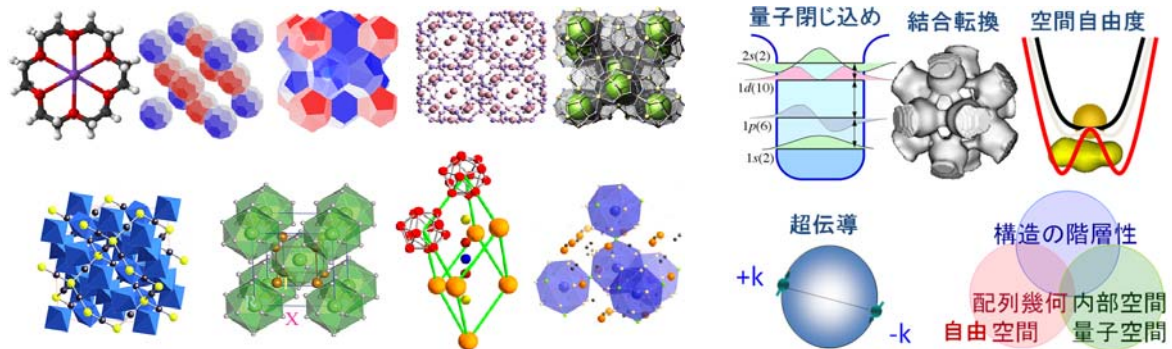


図3. 種々の配列ナノ空間物質(左)と期待される機能(右)

本特定領域で内部空間を含む構造を固体物性と関係して注目した物質の一つとして、Si-Al-Oを基本原子として形成されるゼオライトとエレクトライドがある。室温で固体として安定なエレクトライド $[\text{Ca}_6\text{Al}_7\text{O}_{16}]^+[\text{e}^-]$ は細野等により発見され、電子の遍歴性のために金属伝導を示す事で注目を集めた。本特定領域研究では神谷グループにより発展され、イオン化ポテンシャルが低い事から、電子注入電極や酸素陰イオンを発生する線源として応用された。一方、局在物質系であるゼオライトは、同様にSi-Al-Oを基本元素として構成されるアルミノ・珪酸塩として分類される物質であるが、結晶骨格全体はエレクトライド骨格とは逆に負に帯電している。このため内部空間にアルカリ金属等の陽イオンを取り込み、電荷中性を保っている。この物質は、内部空間の距離がエレクトライドより大きく、電子相関とも関係して電子は遍歴する事が困難であり、通常は内部量子空間に閉じ込められた局在電子系として理解される。ゼオライトにおいては、軽元素だけから抄出される磁性という観点から基礎研究の発展を進めた。

1990年初めにノーベル化学賞の対象となったフラーレンに対して、珪素だけで形成される内包空間を有する多面体物質としてクラスレートに着目した。炭素系物質以外の共有結合系の骨格を有するクラスレート系物質関連の内部空間物質の創出ならびに物性研究の発展は、本特定領域研究の大きな成果の一つである。本研究は、同時期に物性研究として注目された図3に示されるスクッテルダイト、パイロクロア酸化物、d元素系正12面体物質 M_{20} ($\text{M} = \text{Zn}, \text{Cd}$)等の種々物質と比較する事により、本特定領域研究で大きく進展した。種々の構造のクラスレート物質が高圧合成により創製されるとともに、超伝導や種々の物性の基礎となる電子-フォノン相互作用が実験により正確に求められた。また、クラスレート物質で最近達成された熱電変換性能指数 $ZT = 1.5$ のデータは、廃熱温度領域における最高の熱電変換性能であり、関係する研究は本特定領域研究から発展して、NEDOの幾つかの応用研究として発展した。

III族BならびにAl系物質に関しては、本特定領域において種々の多面体物質が創製された。特定領域研究の最終年度に準結晶に対する研究が、ノーベル化学賞としてシェヒトマン教授に与えられた事は、本特定領域研究の研究方向の一つとして非常に喜ばしいニュースであった。本特定領域研究では、共有結合-金属結合転換の基礎物性物理として発展させるとともに、研究発足当時に懸案であったボロンの超伝導の正式な確証実験に成功した。

炭素系物質に関しては、本特定領域研究提案書でも記載した様に、ナノチューブは範囲に含めずにグラファイトやグラフェンに特化した配列ナノ空間物質としての観点からの研究を行った。本特定領域研究期間中に、グラフェンの研究に対してGeimとNovoselovにノーベル物理賞が与えられた事は、本特定領域の方向性の正しさを示すものとして特記される。炭素系に対しては本特定領域研究では、ゼオライト骨格と炭素系物質の融合研究を利用して、ZTC (Zeolite-Template-Carbon) が新しく合成された事は大きな成果である。複雑な構造であるにも関わらず、極限環境グループならびに理論グループにより、ZTCの研究は大きく発展した。炭素物質の研究ではこの他に、ピセン超伝導という重要な実験報告があった。現在本物質系の研究に関しては、特定領域研究の中でその再現性を含めた研究が進展している。

炭素系物質の内包空間の利用は、水分子に関する新しい物性として発展させる事ができた。分子性ナノ多孔質物質に閉じ込められた水分子は、ナノ空間の影響で特別な形をとる事が構造解析により分かった。この特殊構造のために、プロトン易動度として従来で最高の値に相当する物性値を得る事ができた。また内部

空間がチューブ形状の場合には水のナノチューブが形成する事実や、水クラスレート等の研究としての大きな発展があった。水が従来に比較してさらに小さい領域に閉じ込められた場合には、凝固点に関するサイズ効果は従来とは逆転する事実が本特定領域研究において初めて明らかにされた。このようなサイズ効果は普遍的な物理現象として今後の発展が期待される。一方、酸素原子等が閉じ込められた場合の研究が進展した。次元性を制御した新しい磁性研究としての物性研究の芽を出す事ができたと考えている。

本特定領域研究では、配列ナノ空間を利用した新物質科学研究を推進する過程で、同時に新しい科学研究を可能とする新規な物性測定技術を大きく進展させる事とその基礎となる物性理論の確立を目指す事にも重点をおいた。

精密解析技術としては、放射光施設に基礎をおいて精密構造解析技術、電子線プローブを利用したナノ構造解析技術、極限高圧下におけるラマンや比熱等、通常の状態では困難な解析技術に対して新しい手法を開拓した。精密構造解析は特定領域研究の期間中に大きく進展して、配列ナノ空間に閉じ込められた原子や分子の構造や運動を可視化する解析法や電荷分布を電場として可視化する新しい技術を発展させた。このような技術を用いて、配列ナノ空間に閉じ込められた H_2 分子、水分子、金属元素等の可視化に成功した。電子線プローブを利用した精密測定は大きく進歩して、物質の微細な構造を判別できるようになった。高圧下の極限測定では、配列ナノ空間物質の研究において特に多くの知見を得る事ができるようになった。特に圧力の関数として内部構造の変化に伴う内包原子の運動の変化や外部骨格構造の変形に関して得られる知見は、配列内部空間の大きさ・内部原子の非調和運動・物性の相関を詳細に理解する重要な実験手法となった。本特定領域研究では高圧下で比熱を測定する技術の開発にも成功した。

物性理論においては、配列ナノ空間物質の取り扱いに着目した手法論の導入に成功した。配列ナノ空間では構成単位となる量子ナノ空間とこの構成要素が3次的に組み結晶構造に依存して多彩な電子状態が実現し、系に含まれる元素の種類からは想像されない様々な物性が実現する。このような意外性は配列空間の構成単位を一つの巨大な原子とみなし、この超原子に通常の原子では期待できない性質を付加した上で、これを適切に配列させるという設計指針によって実現される。物性理論においては、“超原子描像”という視点に立って、配列ナノ空間物質に対する理論研究を発展させた。この考えに基づいて、ZTCについて、大規模第一原理計算によってその電子状態を調べた。一方、配列ナノ空間物質では軽元素のみからでも特長的な電子状態をもつ超原子を3次的に適切に配列することで、興味深い電気磁気効果を発現させる可能性がある。この可能性をダイヤモンド、グラフェン等多彩なナノ構造を有する材料に適用した。トポロジカル絶縁体は一般に重元素を含むが、本研究において軽元素系に対して提案されたcurrent誘起軌道磁性の可能性は、将来軽元素からなる物質でのnew state of matterの研究に発展することが期待される。

【各論】

【A01班およびA02班 物質創製および物性研究】

ゼオライト:ゼオライトは、配列したナノ空間を提供するアルミノ珪酸塩骨格 $Al_mSi_nO_{2(n+m)}$ は共有結合により構成されていて非常に強固であり、その構造をほとんど変えずに様々なゲスト物質を大量に吸蔵したり放出したりできる。また、Alの数だけ負に帯電しており、骨格の隙間には交換可能な陽イオンが多数分布する。主な骨格構造としては図4に示すLTA構造(単純立方構造)、AlとSiの比が1のLow-Silica X (LSX)のFAU構造(ダイヤモンド構造)、ソーダライトのSOD構造(体心立方構造)、ゼオライトPのGIS構造(擬二次元構造)、ゼオライトLのLTL構造(一次元構造)等がある。

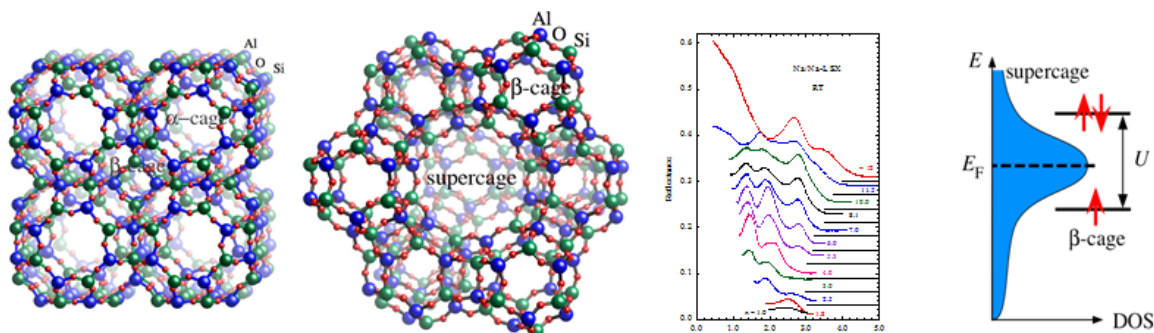


図4. ゼオライトLTAとFAUの骨格構造ならびにアルカリ吸蔵の際の光学吸収と電子状態。

ゼオライト物質の細孔にアルカリ金属を吸蔵させて創製されたナノ構造物質では、構成元素からは得られない新奇な性質が観測される。アルカリ金属は非磁性元素でありながら、ゼオライトは強磁性状態を示す。大きな細孔では、s電子の波動関数が窓を経由して隣接細孔にも広がるため、隣接する細孔への電子移動エネルギー(t)が大きくなり遍歴性を与えることができる。しかし、細孔内では電子間斥力相互作用(U)があるこ

とから相関電子系となり、 $t \ll U$ ではモット絶縁体になる。また、イオンの配置との相互作用による電子格子相互作用(S)が効くため、局在性と遍歴性に電子格子相互作用が加わった系となる。さらに細孔当たりのs電子数密度(n)を変化させると、性質が多彩に変化する。本特定領域研究では、電子相関と電子格子相互作用が関与した新奇な現象に着目して研究した。

発現する磁性現象を説明するために、s電子とイオンの変位との間の電子格子相互作用とs電子間の電子相関を考慮し、新たなモデルとしてポーラロン機構を提案した。電子は有限な変形ポテンシャル相互作用により格子を歪ませる。その歪みによりポテンシャル井戸が形成されるが、その深さがあるレベル以下では電子は量子力学的に閉じ込めを受けず、波動関数は広がり、ラージ・ポーラロンとして遍歴する。しかし S が大きい場合は量子閉じ込めを受け、電子の波動関数は局在して更に小さくなり、格子定数程度(ここでは細孔サイズ程度)でスモール・ポーラロンとして安定化される。これらは大きな格子変位を伴うため伝導には寄与しないが、常磁性を示す。しかし、 $t \ll S$ の場合は、二つのスモール・ポーラロンがクーロン斥力に打ち勝って同じポテンシャル井戸に束縛され、より深い状態を形成してスモール・バイポーラロンとなる。これも伝導には寄与しないが、こちらは非磁性となる。これは $n = 2$ 以下の状態が該当する。 n を更に増大すると、次の量子準位を電子が占有しスモール・テトラポーラロンやスモール・ヘキサポーラロン等を次々と形成する。しかし、それらの量子準位は順にエネルギーが増大するため、ある n 以上でラージ・ポーラロンの方が安定となり、金属に転移する。その際、フェルミエネルギーの直ぐ上にスモール・ポーラロン状態がある場合は、昇温に伴ってダイナミカルにスモール・ポーラロンが形成され、それによる常磁性が観測される。これらの現象は、従来にない絶縁体金属転移として興味を持たれる。

クラスレート: クラスレートは共有結合3次元網目構造を有する代表的な配列ナノ空間物質群である。クラスレートは超伝導ならびに熱電変換材料の両方の観点から注目されている。本特定研究では新規クラスレートの開発を目的とし、高温高压合成を用いて物質探索を行った。その結果として、高温高压の極限環境合成法を適用して新しい種々のクラスレート物質の合成に成功した。物性としては、非調和フォノンを含む場合の電子格子相互作用の大きさの実験による決定に成功するとともに、非調和フォノンと電子物性の相関など種々の物質科学研究に発展した。また、熱電材料としては廃熱領域で $ZT = 1.5$ の新しい材料の開拓に成功した。

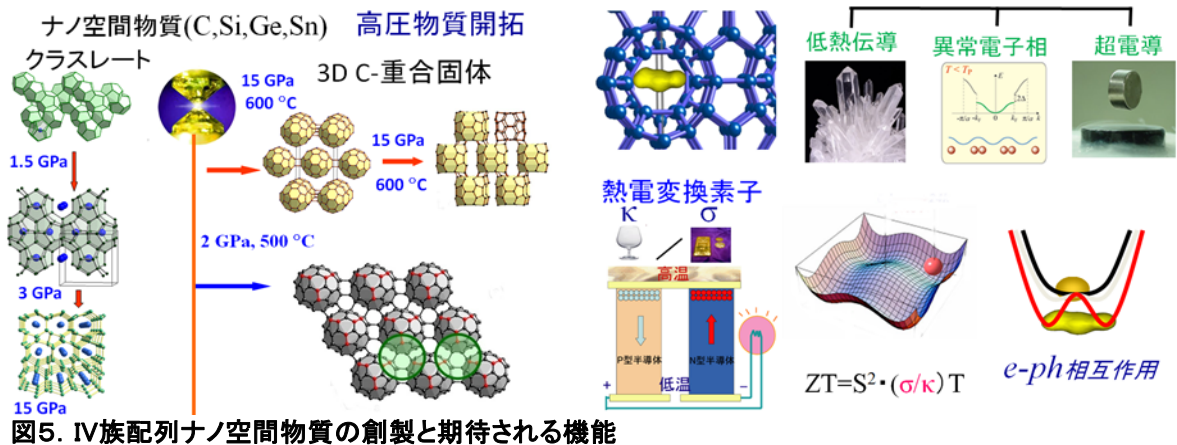


図5. IV族配列ナノ空間物質の創製と期待される機能

III族クラスター: BとAlの正20面体クラスター固体の統一的描像をさらに進めつつ物質探索を行うことに成功した。さらに、正20面体以外の多面体を持つクラスター固体にまで探索範囲を広げる事ができた。

BTiRu系における正10角形準結晶の発見: 準結晶は、1984年に液体急冷Al-Mn合金で準安定相として最初に報告された。それから四半世紀経ち、多くの系で安定相も見つかり、結晶、アモルファスと並ぶ固体構造の概念として確立し、2011年のノーベル化学賞に輝いた。一方、固体はバンド構造によって、金属、半金属、半導体、絶縁体に分類できる。これまでに見つかった準結晶は、すべて金属か半金属(擬ギャップ内にフェルミエネルギーが位置する金属)であり、半導体や絶縁体の準結晶は、まだ見つかっていなかった。本特定領域研究では、2つのアプローチで半導体準結晶を探索し、MgをTiに置き換えたB-Ru-Ti系を急冷することにより、正10角形準結晶を新しく発見した。これはBの組成が40%程度であるため、まだ半導体ではないが、半導体準結晶へ1歩近づく成果である。一方、Al-遷移金属系準結晶は、中心に原子の無い正20面体クラスターを構造単位とする。このクラスターはAl同士やAlと遷移金属間に強さの異なる共有結合を持つ一方、クラスター間の結合は比較的弱く金属結合に近い物も存在する事が判明した。

α 菱面体晶ボロンへのLiドーピングによる新超伝導体の創製: カーボンとボロンにおける層状物質とクラスター固体の超伝導を整理すると、 KC_8 等のグラファイトインターカレーション(GIC)は超伝導を示すが、転移点(T_c)は1 K以下と低い。ところが同じ元素の組合せでも K_3C_{60} というフラーレンになると20 Kに上がる。この最大の

理由は、前者が層状物質でフェルミエネルギー (ϵ_F) での状態密度 ($N(\epsilon_F)$) が小さいのに対して、後者は C_{60} が高い対称性 (正20面体対称性) のため電子状態の縮重度が大きくなり状態密度の高いエネルギー領域が生じ、そこに ϵ_F が位置することにより $N(\epsilon_F)$ が大きくなったことである。一方、 MgB_2 は GIC と同じ蜂の巣格子の層状物質であるが、 T_c は約 40 K と高い。 C_{60} と同じ高対称性を持った B_{12} の結晶に Li や Mg をドーピングできれば、 T_c の上昇が期待できる。第一原理計算によれば、Li をドーピングした α 菱面体晶ボロンの $N(\epsilon_F)$ は MgB_2 より大きい事が予言されていた。本特定領域研究では、自己補償を起こす結果して生じる原子の離脱は、 B_{12} に属するサイトでは決して起きない事に着目して、Liドーピングにより最高で $T_c = 7$ K の超伝導の発現に成功した。ドーピング量は現状では単位胞に 0.3 個程度であり、より大量にドーピングできれば T_c は更に高くなると期待される。

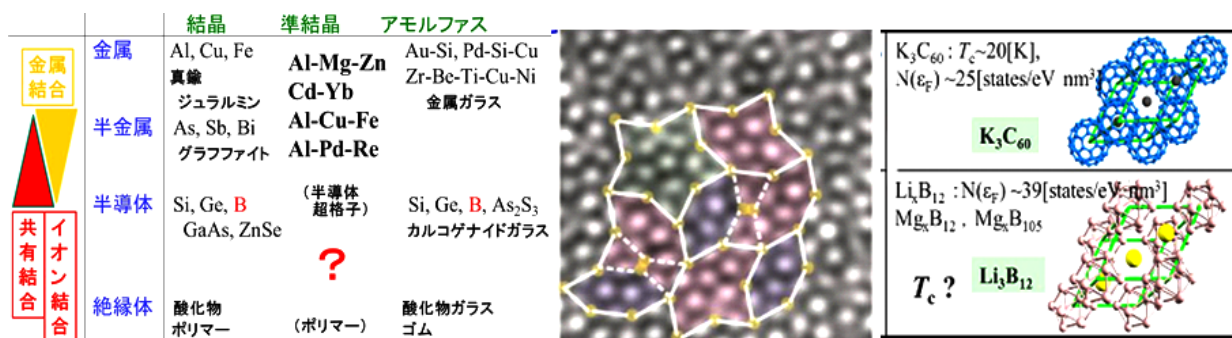


図6. III族クラスター材料の特色(左)、準結晶の電子顕微鏡(中)および α ボロン超伝導体

ナノグラファイト: ナノグラファイトは3-4層のナノグラフェンシート(面内サイズ2-3 nm)の積層からなる。グラフェンは、幾何対称性からディラック量子状態を有するが、ナノグラファイトは層間の配列空間に物理吸着や化学吸着を通して、多様なゲスト原子、分子を取り込む事ができる。本特定領域研究では、種々のゲスト分子とホストの創出する物性研究を探究した。グラフェンの電子は相対論的Weyl方程式に従い、質量の無いディラックフェルミオンとしてその電子が記述される。端が存在するとその幾何学構造に依存してグラフェンの電子構造は大きく変化する。とりわけ、ジグザグ型端においてはグラフェンの電子の擬スピンの対称性の破れの結果、強くスピン分極した局在状態(エッジ状態)が形成される。ジグザグ端にあるエッジ状態スピンは極めて強い強磁性相互作用(数1000 K)で強磁性配列し、隣り合うジグザグ端間では中ぐらいの大きさの相互作用(強磁性/反強磁性)で結合し、結果としてナノグラフェンはフェリ磁性構造を有する事を実験で確認した。非磁性のゲスト分子が取り込まれると、ナノグラファイトドメインに実効的な圧力が加わり、ナノグラフェンシート間距離が縮む。その結果、ナノグラフェン間に波動関数の重なりが形成され、エッジ状態の作るフェリ磁性磁気モーメントはナノグラフェンシート間で反平行に並び、全磁気モーメントが大きく減少する。この現象は、ゲスト分子の脱吸着にたいして可逆であり、ナノグラファイトの磁気モーメントはON/OFF的な大きさの変化を起こす。本特定領域研究では、このようなゲスト分子による機械的な効果で変化する磁気スイッチ効果を見出した。一方、グラフェンの電界効果トランジスタの金属電極接合界面を研究して、グラフェン電界効果トランジスタの金属電極接合界面での電子輸送が金属の反応性、磁性等がその特性に大きく影響する事を見出した。

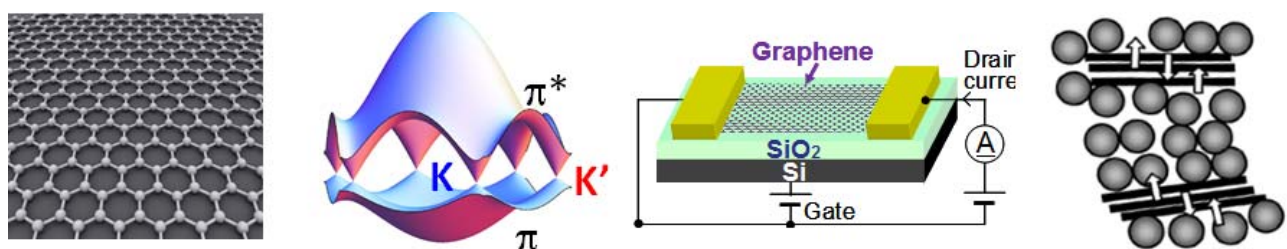


図7. グラファイトおよびディラック電子状態ならびに電界効果型トランジスタとインターカレーション

水クラスターの新しい展開: 原子や分子の凝集体の性質は、そのサイズが十分大きい場合には、サイズにほとんど依存しない。しかし、固体微粒子の融点降下等の様に、サイズが小さくなるに従い次第にバルクから大きくずれる様になる。一般に極微小の物質系では、形状、原子(分子)数、トポロジカルな性質により物性の劇的な変化が期待される。この様な極微小の物質系を作製する方法として、フラーレン、カーボンナノチューブ、超微粒子の他に、ナノ構造を有する鋳型内に原子や分子を閉じ込める方法が可能である。本特定領域研究では、このような物質系の内包空間を利用して、酸素や水の新規凝集体としての物性研究を行った。このような現象は、生体ナノチャネルのモデル系としてや新規プロトン伝導体等として注目されている。また、微細空洞内の水の性質を研究するモデル系としても興味深い。

図8に単層カーボンナノチューブ(SWNT)内の水の温度(T)- D 相図(低圧極限)を示す。高温領域は、NMR 実験から、すべての D において水は液体的であることが確認されている。低温では、 $D < \sim 1.5$ nm において秩序構造の ice NT が形成され、 ~ 1.6 nm $< D$ では wet-dry 転移を生じ、空の SWNT となる。wet-dry 転移温度の D 依存性は、これまで報告されてきたバルク領域 ($D > \sim 2$ nm) の円筒空洞内の氷の融点のそれに近く、wet-dry 転移が水の凍結と深く関係していることが示唆される。また、この直径領域は、動力学計算によれば、SWNT 内の水が単層から多層チューブ構造へと移行する領域に一致し、界面現象からバルク現象へのクロスオーバーであるとも理解できる。動力学計算によると、5 員環 ice NT は電場がゼロでも有限の電気分極を有し、電場を大きくするとステップ状の分極変化を示すことが分かる。この分極の電場依存性は、5 員環 ice NT が 1 次元的な強誘電体水チェーン 5 本からなるフェリ強誘電体であることから説明できる。また、大きな分極ヒステリシスは、温度上昇で小さくなる。これらのことから、5 員環 ice NT は電場ゼロでも有限の電気分極を有するフェリ強誘電体であることを結論した。

ナノスケールの狭い環境に閉じこめられた水のダイナミクスは、極限状態で形成するガスハイドレートや細胞内に取り込まれた水も含めて「水の機能性」を議論する上で重要である。本特定領域研究では、種々の内部空間を有する物質を合成し、閉じ込められた水の普遍的な物性を調べる事に成功した。

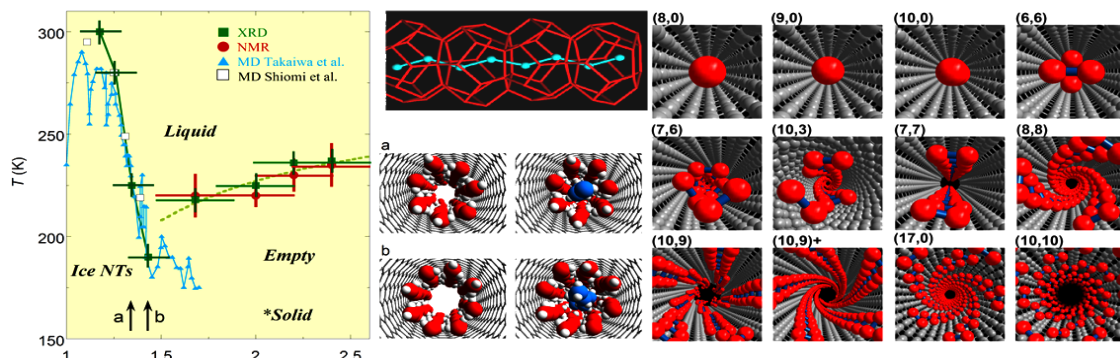


図8. 配列ナノ空間に閉じ込められた水クラスターの相図と物性。

【A03班 構造・電子状態研究】

放射光を用いた極限計測: ナノ空間が周期的に配列した配列ナノ空間物質の結晶構造の情報は合成物質の同定から量子物性の機能発現の解明に至る幅広い研究に欠かせない。結晶物質の原子配列、電子状態の解析手法として、X線回折は構成元素を選ばず適用できる代表的な手法である。本特定領域研究では、X線結晶構造解析を基盤とした配列ナノ空間物質の研究を推進するために、回折実験用のX線源として世界最高性能であるSPring-8を用いた研究を機器・手法開発を含めて進めてきた。本特定領域研究の開始から約半年経過した2008年3月にSPring-8 BL02B1に大型湾曲IPカメラが設置された。この装置は、SPring-8の高強度・高エネルギーかつトップアップ運転により時間変動のない高品質のX線を用いて、 10^6 のダイナミックレンジを持つ半径191.3 mm高さ350 mmの円筒型IP検出器と、結晶方位を ω 軸 ($-130 \sim 220^\circ$)、 χ 軸 ($-5 \sim 60^\circ$)、 ϕ 軸 ($-180 \sim 360^\circ$)により制御する3軸回折計により、広い逆空間の範囲を高い統計精度を持って測定し、物性発現に伴う微弱な構造変化や電荷分布の変化を調べることを主な目的としている。この装置は、Li内包 C_{60} の構造決定に初めて適用された。この成果は $M@C_{60}$ の分子構造を世界で初めて決定した快挙であり、フラーレンの中でも量産が可能で性質もよくわかっている C_{60} の更なる展開において大きな一歩と言える。この成果は、Nature Chemistry誌に掲載され、日本経済新聞など新聞6紙、NHK東海でテレビ放映、アメリカ化学会からのメール取材など多数の反響を集めた。

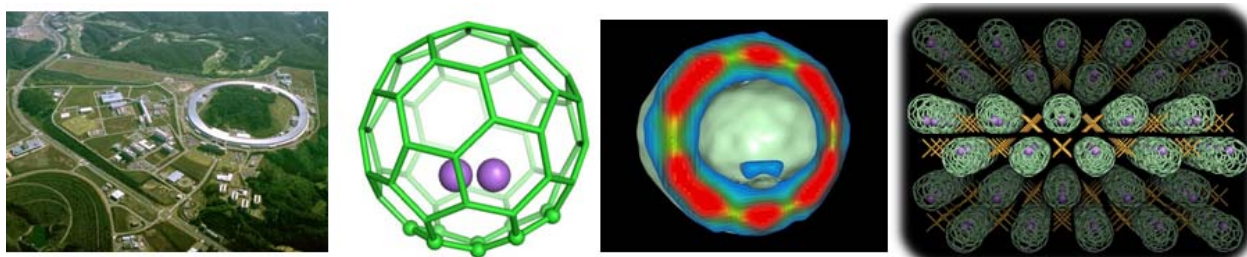


図9. SPring-8放射光施設と単結晶ビームラインで解析されたLi内包 C_{60} の結晶構造

電子プローブによる局所構造・電子状態: 電子顕微鏡法に立脚した収束電子回折法による定性・定量的な構造解析手法、高分解能電子線エネルギー損失分光 (EELS) 法と世界初のX線発光分光法による電子状

態解析手法を、本研究領域において探索するユビキタス元素のナノ空間配列物質群にいち早く適用し、精密構造解析とそれに伴う特異な電子状態の解明に成功した。

ゼオライト型カーボン(ZTC: zeolite templated carbon)の電子構造:ゼオライトのナノスケールチャンネル配列構造中にグラフェンを形成させ、その後ゼオライト骨格を除去して得られるZTCに関し、高分解能EELSおよび軟X線発光により電子状態の研究を行った。ZTCのEELS測定より sp^2 ネットワークからなる物質であることを特定し、構造モデル作成に成功した。

ボロンナノベルト(BNB)の構造・電子状態:単結晶BNBは、触媒を用いないレーザーアブレーション法により合成され、バルク体では安定に存在しないとされる α 正方晶構造を取ることが報告されているが、その詳細な構造解析は未だ行われていなかった。電子顕微鏡観察から、既に報告されている成長方位[001]のBNB結晶だけでなく、[101]方向や[210]方向に成長方位を持つBNB結晶を新たに見出した。また高分解能EELSを用いたボロンK吸収端の測定から、バンドギャップを0.2 eVと見積もれた。

収束電子回折図形の定量精密解析による価電子密度分布:収束電子回折法によるナノ領域の精密結晶構造解析法の開発と応用に取り組み、結合電子の存在による静電ポテンシャルの低下を明瞭にとらえることに成功した。本方法では、静電ポテンシャル分布を通して軌道秩序状態を調べる研究に適用でき、Fe原子の3d電子の軌道秩序による異方性を直接検出することに成功した。

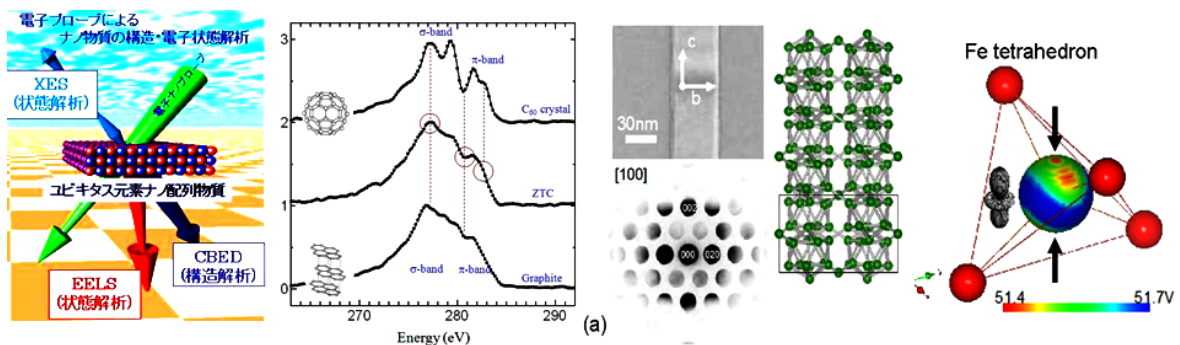


図10. 電子プローブを使用した局所電子状態の解明:ボロンナノベルトの構造と価電子密度分布解析

極限環境下における配列ナノ空間物質のラマン分光:ナノ空間を有する物質を、超高压極限状態に置いたときに見られる特有の相転移現象とケージサイズの減少によるラットリング振動の挙動を、高圧力下におけるその場ラマン散乱分光を用いて、実験的に明らかにゲスト-ホスト相互作用を理解した。

クラスレートの圧力誘起構造相転移:クラスレート化合物に圧力を印加すると共通して興味深い構造変化を示すことが明らかになった。単位胞体積は30 GPaの相転移で不連続的に減少する。30 GPaでのラマンピークの消失はケージ構造が長距離秩序を失う程度に大きく歪む事に起因する。この変化は可逆的な体積の変化を伴う非晶質化として理解される。この現象は普遍的であり、種々のクラスレー $Sr_8Ga_8Ge_{30}$, $Eu_8Ga_8Ge_{30}$, $I_8Sb_8Ge_{38}$, $Sr_8Al_7Ga_9Si_{30}$ で同様に見られた。半導体クラスレートに共通して見られた「可逆的な非晶質化」は、これまでの共有結合固体には見られない特徴である。本研究によりゲストラットリング振動が、圧力の関数ひいてはケージサイズの関数として初めて系統的に調べられた。

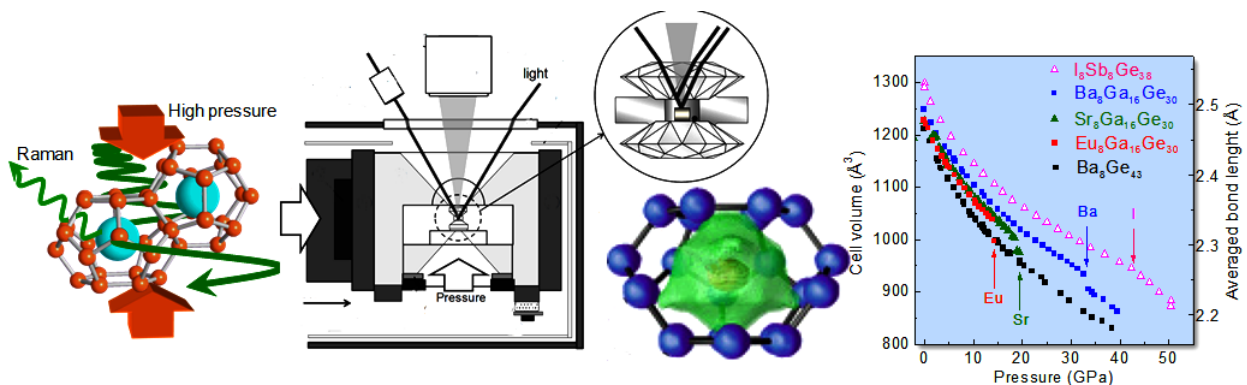


図11. 低温、高圧、低波数ラマン分光と決定されたクラスレートの構造の圧力依存性

【A04班 物性理論】

配列ナノ空間物質の第一原理電子状態解析:一般に物質の電子状態の非経験的、定量的解析には密度汎関数理論を活用することが多い。この様な手法は、単位胞中の原子が少数で、その構造が比較的単純な場合に有効で一般に広く活用されている。しかし、配列ナノ空間物質の場合は、単位胞中の原子が数十個

から数百個に及ぶため、小さなブリルアンゾーンに多数のバンドが表れ、通常の方法での解析は非常に困難である。本特定領域研究では、配列ナノ空間物質の様な複雑な系に対して、波数空間で電子状態を求めた後、フェルミ面近傍の低エネルギーの電子状態だけを抽出し、これを出来るだけ単純な実空間基底で表現するという解析手法を「超原子描像」と関連づけて研究を進展させた。

各波数において適切なユニタリ変換を施した後フーリエ変換を行うと実空間で局在したワニエ関数を得ることが出来る。一般にワニエ軌道が超原子の大きさ程度であれば、これを基底にとって構築された強束縛模型は近距離サイトにしかtransferがない非常に単純な模型になることが期待される。低エネルギーの電子状態が一たび単純な模型で精密に表現されれば、単位胞の中に含まれる原子の数にはよらずに低エネルギー物性の解析が効率よく行える様になる。本特定領域における配列ナノ空間物質の理論研究においては、この最局在ワニエ関数の方法を整備し、その後の研究において有効に活用された。図12、13にはゼオライト及び芳香族超伝導体のワニエ関数の例を示す。この様なワニエ軌道が与えられ、ハミルトニアンの一休項が構成された後に次の課題となるのが、これらの軌道に働く電子相関がどの様な大きさになるか、という問題である。例えば遷移金属化合物の場合は、フェルミ面近傍に存在する遷移金属のd軌道に対してHubbard U 等の相互作用パラメーターを導入して磁性やモット転移、非従来型超伝導等を議論する。配列ナノ空間物質の超原子軌道においても相互作用パラメーターが定義できれば、遷移金属化合物等と同様に多体効果を微視的に議論することが可能となる。この相互作用パラメーターを超原子軌道についても通常の原子軌道と同様に評価する方法として制限乱雑位相近似を適用した。

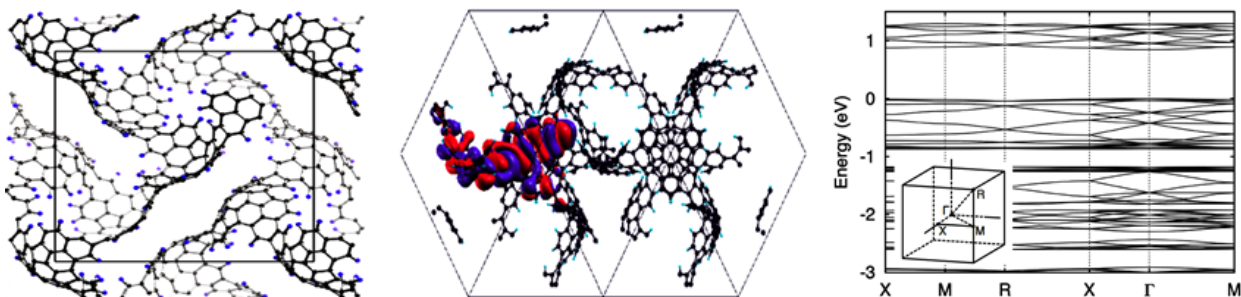


図12. ゼオライト鑄型炭素の結晶構造(左)ゼオライト鑄型炭素のワニエ関数(中)とバンド分散(右)

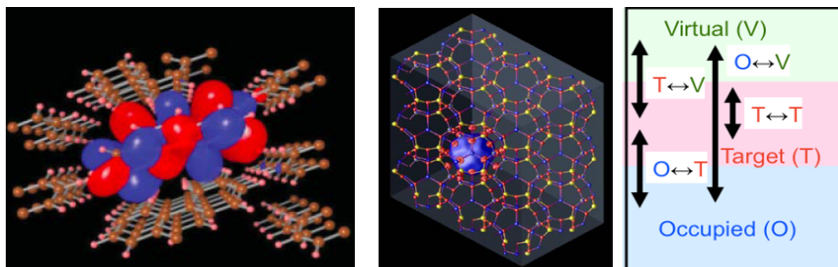


図13. 芳香族超伝導体(左)およびアルカリ金属クラスターを吸蔵したゼオライトのワニエ関数(右)およびエネルギーによる電子状態の分類。

本特定領域研究においては、この制限乱雑位相近似のコードを開発し、様々な配列ナノ空間物質に適用した。図14にフラーレン超伝導体に適用した例を示す。この計算では、9種類のフラーレン超伝導体のクーロン相互作用の大きさが見積もられ、バンド幅の比が系統的に調べられた。横軸にフラーレン分子一つが固体内でしめる体積をとると、転移温度と電子相関の強さの間に正の相関があることが容易に見て取れる。

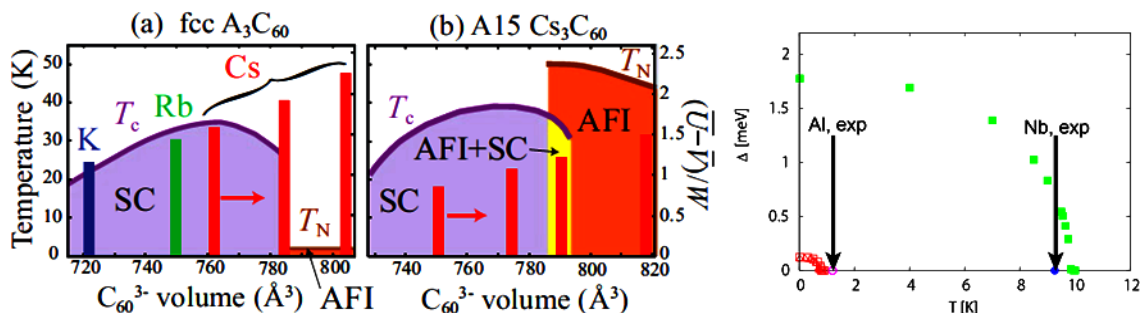


図14. フラーレン超伝導体における電子相関の強さと超伝導転移温度の関係と超伝導密度汎関数理論によって計算されたAlとNbのギャップ関数の温度依存性

超伝導密度汎関数理論 (SCDFT): 配列ナノ空間物質の興味深い特徴の一つに、発現機構が完全に理解されていない高温超伝導体が数多く存在するという事実がある。一般に超伝導体の物性を非経験的かつ定量的に計算することは物性理論における大きな挑戦課題の一つである。この問題について、最近、密度汎関数理論を拡張し、密度だけでなく超流動密度も考慮して非経験的に超伝導を取り扱う枠組みが提案された (SCDFT)。この方法論に従えば、同じ形の交換相関汎関数を用いて、経験的なパラメーターを一切導入せずに任意の物質の超伝導が議論できる。その様な理想的な汎関数の構築は将来の課題として残っているが、現在、単純金属やMgB₂等のMigdal-Eliashberg理論により記述される従来型の超伝導体について、その転移温度を非常に高い精度で再現する汎関数が提案されている。本特定領域研究では、配列ナノ空間物質に対する適用を目指し、数年をかけてSCDFTのコード開発に取り組み、本特定領域のメンバーによって発見された層状窒化物超伝導体への適用を行った。層状窒化物超伝導体の母物質は絶縁体であるが、層と層の間にアルカリ金属や有機分子を挿入すると高温超伝導が発現する。この層間のナノ空間には多様な分子を挿入でき、層間距離(系の次元性)を自由に制御できる。一方、この系の超伝導発現機構に対する理解は理論的、実験的に進んでおらず、そもそも従来型超伝導体か否かもはっきりしていなかった。本班によるSCDFT解析の結果は、この系が非従来型超伝導体であることを示す非常に興味深い成果が得られた。

【A05班 応用展開】

エレクトライド: エレクトライド12CaO・7Al₂O₃ (C12A7)は、~0.4nmの内径の籠構造が最密充填された構造をもつ結晶である。籠構造が正に帯電しているために1/6の籠にO²⁻イオンを包接していること、籠内のMadelung potentialが浅いために、籠を構成しているO²⁻イオンと同時に、籠内にO⁻やH⁺イオンといった特異価数のイオンを安定に生成できるという特徴をもつ。さらに、これら負イオンの代わりに電子を籠内に包接することができる(C12A7:e⁻)。C12A7の組成が、CaOとAl₂O₃というワイドバンドギャップ絶縁体から構成されていることから推察される様に、C12A7も6 eV以上の大きなバンドギャップをもつ絶縁体である。これに電子をドープすると、C12A7の基本的な伝導帯から1~2 eV低い位置に形成されるケージ伝導帯にフェルミ準位をつくる。このため、この電子のエネルギーは高く、その結果、C12A7:e⁻はアルカリ金属並みに小さい仕事関数(2.4 eV)をもつ。このような特徴を利用すると、室温でも電圧印加のみで高輝度の電子線を引き出すことができ、その電子を蛍光体に衝突させることで発光素子を作ることができる。有機ELの最も重大な問題は、電子親和力が非常に小さい電子輸送層や発光層に効率的に電子注入を行うことが困難な点にある。そのために、化学的に不安定なアルカリ・アルカリ土類金属を陰極に混ぜたり、LiF等のバッファ層を用いる等の工夫がされている。C12A7:e⁻を適用すると代表的な発光層であるAlq₃の電子注入障壁が0.6 eVと、これまで用いられてきたAl/LiF/Alq₃の1.4 eVの半分にまで下げられることを確認した。電界効果トランジスタのチャネルとしても機能することを確認しており、電界効果と低い仕事関数や化学活性な包接イオンを利用した新しいデバイスへの応用できる事が確認された。

ゼオライト鋳型炭素 (Zeolite Templated Carbon; ZTC): 本特定研究ではグラフェンを基礎として、ナノ空間を有するホスト系を用いて新しい配列ナノ空間の科学を発展させた。主要な物質系はZTCとナノグラフェンを基礎とした新しい炭素質物質である。ZTCは鋳型であるゼオライトの規則構造を有し、従来の活性炭を遥かに凌ぐ表面積(最大で約4000 m²/g)をもつ等の特徴を有し、燃料電池の電極材料、水素吸蔵、電気二重層キャパシタ等への応用が期待できる。本特定研究では、ZTCの分子レベルでの構造を明らかにするとともに、この方法を応用することで負の曲面をもつ閉じた構造のグラフェンネットワークの合成も試みた。この構造は表面積がそれぞれ2100 m²/g、1840 m²/gと非常に大きい事が推測でき、実際の実測値は1900 m²/gとその予測に近い事が分かった。これらの構造は負の曲面をもつ閉じた構造のグラフェンネットワークと言え、パルスCVD法によりこのようなユニークな構造が生成した可能性が高い。

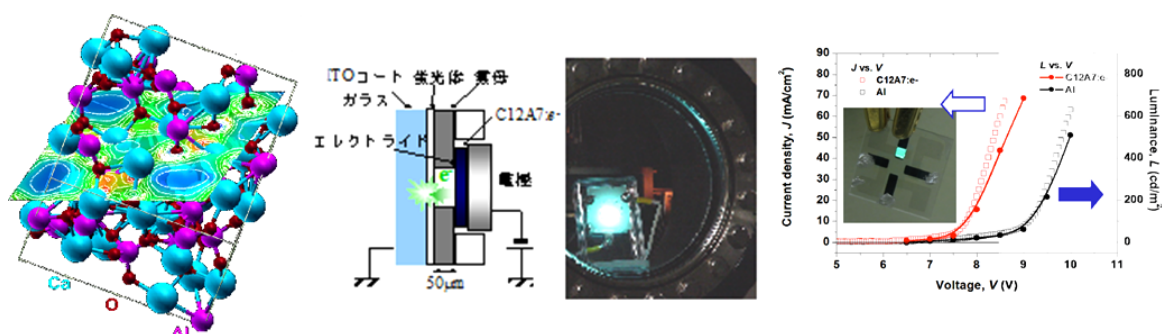


図 15. 内径~0.4 nm の籠構造を持つ C12A7 の例。(A)電子ドープした C12A7:e⁻の結晶構造と電子構造。等高線図は、籠内電子が形成するフェルミ準位の電子分布を表す。(B)C12A7:e⁻を電子源、ZnO:Zn を緑色蛍光体として用いた電界放射型発光デバイス。(C)そのカソード構造を用いた上部発光型有機 EL の電気・発光特性。

遷移金属内包シリコンクラスター半導体: イオントラップ法を用いてSiクラスターを合成し、構造制御の研究を遂行した。遷移金属イオンとモノシラン分子との反応が、遷移金属の価電子数に依存して決まる一定のサイズになった時に飽和すること、特に、タングステン(W)やモリブデン等6個の価電子を持つ遷移金属の場合、 M 原子が12個のSiに囲まれた幾何学的対称性の高い安定構造を形成することを見出した。 MSi_{12} クラスターの安定構造は、図16(中)に示す六角柱構造と5つの5員環で構成される構造に分類できる。内包したWやOsの周りには、 Si_{12} ケージから12個の電子が供給された状態が発生し、WとOsの価電子数と合わせると、それぞれ18個、20個と電子的な閉殻になっていると見ることができる。この様に、 MSi_{12} クラスターの構造や安定性を議論する上で、クラスター自体の価電子数 N_v と M の周りの価電子数が鍵となっていることが分かった。これを利用すれば、価電子数によって MSi_{12} クラスターの物性を制御することが可能である。 MSi_n を堆積して薄膜を形成し、電気伝導特性や構造の解析が可能となりつつある。近い将来、配列ナノ空間物質としての M -Si半導体材料の新しい展開が芽生えている。

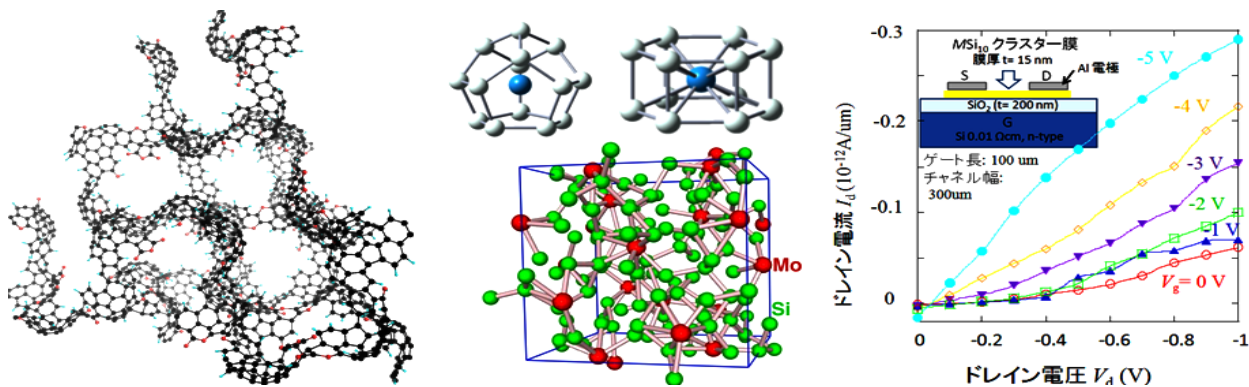


図16. ZTCの構造(左)、シリコンクラスター半導体材料(中)およびそのFET動作特性。

以下に本特定領域研究で出願された特許をまとめた。

応用展開として得られた特許

1. 伊藤仁、京谷隆、西原洋知、侯鵬翔、林慎治、水内和彦、「マイクロポーラス炭素系材料、マイクロポーラス炭素系材料の製造方法、吸着剤及びマイクロポーラス炭素系材料を用いた水素吸蔵方法」、特許公開2010-120836 (公開日2010.6.3).
2. 京谷隆、折笠広典、猪熊宣広、「管状ナノカーボンおよび管状ナノカーボンの製造方法」、特許第4292299号 (登録日2009.4.17).
3. 畑中達也、福嶋喜章、折笠広典、京谷隆、岡田充泰、「膜電極接合体及びその製造方法、並びに、固体高分子形燃料電池」、特許公開2009-129853
4. 千葉洋、伊藤健一、京谷隆、折笠広典、王暁輝、「発色構造体、及びその製造方法、並びに、該発色構造体を有する電器製品」、特許第4748735
5. 細野秀雄、神谷利夫、平野正浩、金聖雄、足立泰「抵抗変化型不揮発性メモリー及びその製法」、特願2008-287236
6. 金山敏彦、内田紀行、「金属珪素化合物薄膜及びその製造方法」、特願2008-048520
7. 金山敏彦、内田紀行、「金属珪素化合物薄膜及びその製造方法」、PCT/JP2009/053422
8. 金山敏彦、内田紀行、「金属珪素化合物薄膜及びその製造方法」、特願2008-230650、特願2009-037261
9. 内田紀行、金山敏彦、「薄膜トランジスタ」、特願2009-191603
10. 内田紀行、金山敏彦、「薄膜トランジスタ」、特願2010-207987
11. 内田紀行、金山敏彦、「ナノ結晶凝集半導体材料及びその製造方法」、特願2011-199630
12. 内田紀行、岡田直也、金山敏彦、「半導体コンタクト構造及びその形成方法」、特願2012-49040

5. 研究成果のとりまとめの状況

本特定領域研究は、2007年—2011年の5年間執行された。特定領域研究を始める前に成果をまとめるために行うと記載した重要な事項が3つある。

一つは、本特定領域研究を支えてこられた重鎮の先生が職務を終えられて退職される場合に、業績を領域研究者の方と分かち合い知識や思想を継承するために、特別研究会という形で関係分野の方と研究会を開催して、一晚の宿泊を挟んで白熱した研究の議論をする事である。第1回は、2008年に岐阜大学の清水教授の特別研究会で「高圧技術と内包空間」という観点から開催した。他領域の高圧関係から多くの方にも参加して頂いた。2回目は、2010年に広島大学の山中教授を囲んで、「配列ナノ空間を有する物質群の合成と機能」というテーマのもとに開催した。無機合成の分野の多くの方と物性研究者が研究交流を深める事ができた。3回目は、2011年の3月に特定領域研究も最後の時期に、榎教授の特別研究会を開催した。「グラフェンを中心とした炭素系空間物質」に関して様々な研究者と研究交流を深める事ができた。また、評価委員の先生方にも、領域研究会の中で機会を設定して、特別講演という形でご自身の研究経験と研究哲学を話して頂いた。これらの特別講演会に参加する事は、若い研究者にとって大きな財産となるとともに、本特定領域分野の継承にも効果があったと考えている。二つ目は、特定領域研究の最終年度に「配列ナノ空間を利用した新物質科学:基礎とその応用---ユビキタス元素戦略」という題目で国際会議を開催する事である。東北地方関東大震災という大きな災害の後であったが、仙台市の補助のもとに、2011年11月に外国人30名を含む100名を超える多くの研究者の参加を得て盛大に開催する事ができた。本特定領域を世界へアピールできたのではないかと考えている。3つ目は、本特定領域の成果を業績書として後世に残し、今後の研究発展を促すために、英語で本分野の業績書を特定領域研究の研究者と発刊する事である。現在Springer出版社との話を進めていて、来年度に発刊する方向で調整を進めている。

また、本報告書の項目10で記載したように、本特定領域から多くの若い研究者が育って、本研究に関する研究を発展させるために、独自の研究を開始する立場となって旅立っていった。近い将来、本特定領域が輩出した若い研究者が新しい形で関連研究を発展させてくれると考えている。

現在、本特定報告書が終了した後に論文など関連業績がwebで回覧できるようにする準備をすると共に、業績報告書を2013年度初頭に多くの研究者の方に配布する計画を進めている。

6. 研究成果の公表状況(主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等)

特定領域研究の成果に関しては、次の様に公開している。

(1)論文および学会発表等

研究発表の公開に関しては、一括してデータベースに登録し、随時成果リストとしてホームページで公開している。平成23年4月初めの時点での成果公開状況は以下の表のとおりである。国際会議、国内会議の発表も活発であり、重要な国際会議における講演等でも成果の報告を行っている。平成21年5月には、本特定領域研究と関係する第15回International Symposium on Intercalation Compoundsと共催で国際会議を中国で開催するとともに、同時に領域会議をサテライト会議として開催して成果の公開を促進した。

	論文	解説記事	国際会議 講演	国内会議 講演	新聞報道	受賞
2007	68	11	35	88	1	1
2008	207	31	270	455	22	10
2009	174	33	175	414	26	21
2010	165	28	164	370	23	14
2011	196	32	203	360	5	8

(2)ホームページによる成果公開

配列ナノ空間を利用した新物質科学—ユビキタス元素戦略のホームページ(<http://www-nano.phys.sci.osaka-u.ac.jp/nanospace/>)を立ち上げて、成果公開を行っている。ホームページでは、研究班の所属や研究課題等を掲載するとともに、研究会や関連する会議等の情報を提供している。本研究領域の研究内容および研究成果について公開に向けてデータベースを構築するとともに、研究成果に関しては論文、招待講演、口頭発表、ポスター発表に分類してデータベースを整理している。ホームページでは、組織・班員の構成や研究内容の紹介、各種会議の案内等を行っている。

(3)配列ナノ空間を利用した新物質科学、News Letter誌の発行

研究成果をまとめた各年度の研究報告書および領域のシンポジウムのプログラムやアブストラクト等を掲載したNews Letter を発行して関係者に配布している。News Letterでは、研究班の研究状況を公開するとともに、特定領域研究に関する様々な情報を提供している。

(4)配列ナノ空間を利用した新物質科学領域会議ならびに特別研究会

研究領域の研究交流と公開発表の場として、配列ナノ空間を利用した新物質科学領域会議を年2回開催するとともに、状況に応じた議論をするために特別研究会を年数回開催している。特に平成21年5月には、中国で開催された第15回ISIC国際会議と共催で、New Materials Science using Regulated Nano Spaces-Ubiquitous Element Strategyの国際会議を北京で開催した。また、通常開催する領域会議をサテライト会議として同時に開催した。

(5)配列ナノ空間を利用した物質科学若手研究会

本領域の若手研究者の育成ならびに技術交流の場として、配列ナノ空間を利用した物質科学に関してテーマを設定して、若手研究会を年1回開催している。本領域の研究の活性化ならびに技術交流の継承を行っている。

開催した会議

[領域会議]

平成19年 9月13-15日	第1回領域会議「キックオフ会議」東北大学数理記念会館(63名参加)
平成20年 6月 5-7日	第2回領域会議 大阪大学(豊中キャンパス)(89名参加)
平成21年 1月 8-10日	第3回領域会議 東京工業大学(大岡山キャンパス)(87名参加)
平成21年 5月14-15日	第4回領域会議 中国北京(精華大学)(60名参加)
平成22年 1月 7-9日	第5回領域会議 東京大学(本郷キャンパス)(80名参加)
平成22年 5月28-30日	第6回領域会議 名古屋大学(野依記念館)(77名参加)

平成23年 1月 6－ 8日 第7回領域会議 大阪大学(豊中キャンパス) (73名参加)
 平成23年 5月22－26日 ISIC16(チェコ)
 平成23年11月24－26日 特定領域研究国際会議「配列ナノ空間物質が拓く新物質科学:基礎と展開」(兼第8回領域会議) New Science Created by Materials with Nano Spaces: From Fundamentals to Applications 東北大学(さくらホール) (122名参加)

[特別研究会]

平成20年12月12－13日 France-Tohoku Workshop on Nano-Scale Materials: Present and Perspective Future, Lecture Hall (Suri-Kinen Kaikan, Aobayama Campus), Tohoku University (27名参加)
 平成21年 3月13－14日 第1回配列ナノ空間特別研究会 岐阜(グランベール岐山) (40名参加)
 平成22年 3月 3－ 4日 第2回配列ナノ空間特別研究会 広島(宮島商工会館) (17名参加)
 平成24年 3月22－23日 第3回配列ナノ空間特別研究会 東京工業大学(大岡山キャンパス) (25名参加)

[若手研究会]

平成20年 8月25日－26日 第1回特定領域研究若手研究会 広島大学(東広島キャンパス, 学士会館セミナーホール) (27名参加)
 平成21年11月 1－11月3日 第2回特定領域研究若手研究会 佐渡(佐渡中央文化会館, アミューズメント佐渡) (31名参加)
 平成22年 8月31日－9月1日 第3回特定領域研究若手研究会 米沢(伝国の杜, 置賜文化ホール) (23名参加)
 平成23年 7月15－16日 第4回特定領域研究若手研究会 東北大学(青葉山キャンパス) (32名参加)

[News Letter誌]

特定領域研究の広報誌

創刊号No.1 (2008年3月) No.2 (2008年7月) No.3 (2008年10月) No.4 (2009年3月) No.5 (2009年5月) No.6 (2009年8月) No.7(2010年1月) No.8(2010年3月) No.9(2010年6月) No.10(2010年7月) No.11(2010年10月) No.12(2011年3月) No.13(2011年9月) No.14(2012年3月) No.15 (2012年7月予定)

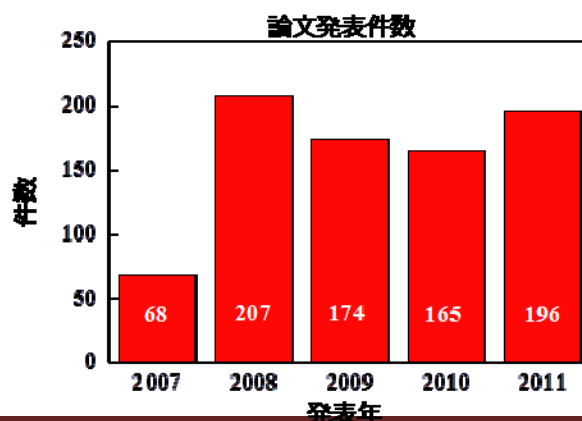
[新聞報道]

日本経済産業新聞:平成19年12月19日 配列ナノ空間物質を利用した新物質科学に関する取材を受け、特定領域研究の内容が掲載された。
 岐阜新聞:平成21年2月28日 高圧クラスレート関連研究が紹介された。
 日本経済新聞:平成21年3月9日 ゼオライト鑄型炭素の構造解明と水素貯蔵への応用が紹介された。
 日本経済産業新聞:平成21年3月12日 新構造の炭素物質の1つとしてゼオライト鑄型炭素が紹介された。
 日刊工業新聞:平成21年6月8日 ナノチューブの空間のできるアイスナノチューブが紹介された。
 日本経済新聞:平成22年6月21日 リチウム内包フラーレンの分子構造研究が紹介された。
 日刊工業新聞:平成22年7月1日 ホウ素化合物準結晶合成の成功が紹介された。
 毎日新聞:平成23年2月5日 高分子型リチウムイオン電池材料研究が紹介された。

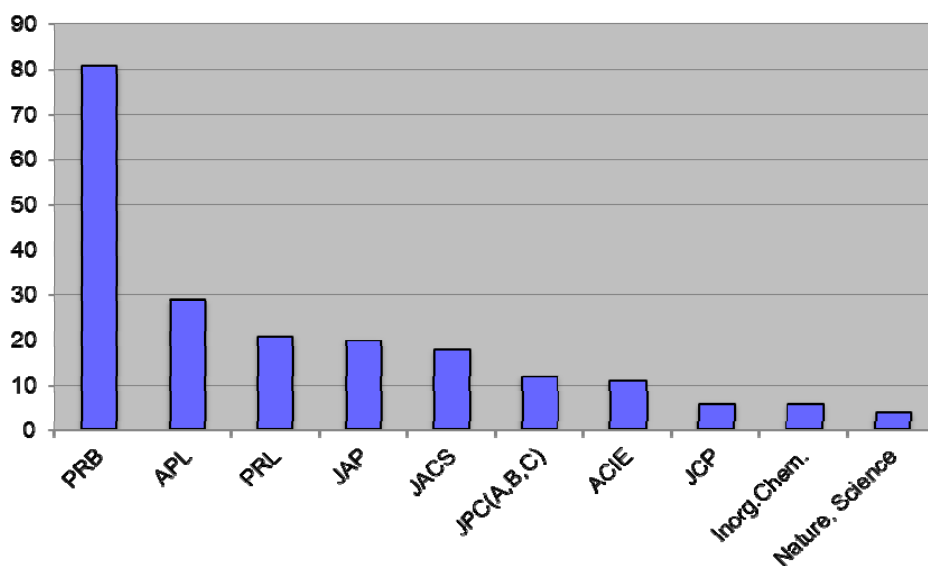
[公表されている主要論文]

2007年度から2011年度の期間に公表されている論文の総数をグラフにして右に示した。年々その数は増加して順調な推移を示している。

これまでに公表された主要な論文を整理して以下に示す。



[2007年— 2009年8月までに公表されている主要論文]



注: *[]内はサイテーション数を示す。

A01:

S. Yamanaka, T. Otsuki, T. Ide, H. Fukuoka, R. Kumashiro, T. Rachi, K. Tanigaki, F.-Z. Guo and K. Kobayashi, Missing superconductivity in BaAlSi with the AlB₂ type structure, *Physica C* **451**, 19 (2007). [16]

K. Ishizaka, R. Eguchi, S. Tsuda, T. Yokoya, A. Chainani, T. Kiss, T. Shimojima, T. Togashi, S. Watanabe, C. T. Chen, C. Q. Zhang, Y. Takano, M. Nagao, I. Sakaguchi, T. Takenouchi, H. Kawarada and S. Shin, Observation of a superconducting gap in boron-doped diamond by laser-excited photoemission spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 047003 (2007).

*S. Yamanaka, N. S. Kini, A. Kubo, S. Jida and H. Kuramoto, Topochemical 3D polymerization of C₆₀ under high pressure at elevated temperatures, *J. Am. Chem. Soc.* **130**[13] 4303-4309 (2008). [11]

M. A. Avila, K. Suekuni, K. Umeo, H. Fukuoka, S. Yamanaka and *T. Takabatake, Ba₈Ga₁₆Sn₃₀ with Type-I Clathrate Structure: Drastic Suppression, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 041902-1-3 (2008). [32]

K. Suekuni, M. A. Avila, K. Umeo, H. Fukuoka, S. Yamanaka, T. Nakagawa and *T. Takabatake, Simultaneous Structure and Carrier Tuning of Dimorphic Clathrate Ba₈Ga₁₆Sn₃₀, *Phys. Rev. B* **77**, 235119-1-8 (2008). [35]

*Y. Takasu, T. Hasegawa, N. Ogita, M. Udagawa, M. A. Avila, K. Suekuni and T. Takabatake, Off-center Rattling and Anisotropic Expansion of Type-I Clathrates Studied by Raman Scattering, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 165503-1-4 (2008). [6]

H. Hyodo, S. Aratake, S. Hosoi, K. Soga, Y. Sato, M. Terauchi and K. Kimura, Structure and electronic properties of Mg-doped rhombohedral boron constructed from icosahedral clusters, *Phys. Rev. B* **77**, 024515 (2008). [10]

C. Urata, Y. Yamauchi, Y. Aoyama, J. Imasu, S. Todoroki, Y. Sakka, S. Inoue and *K. Kuroda, Fabrication of Hierarchically Porous Spherical Particles by Assembling Mesoporous Silica Nanoparticles via Spray Drying, *J. Nanosci. Nanotechnol.* pp. 3101-3105 (2008). [12]

Y. Kuroda and *K. Kuroda, Layer-by-Layer Assembly of Imogolite Nanotubes and Polyelectrolytes into Core-shell Particles and Their Conversion to Hierarchically Porous Spheres, *Sci. Technol. Adv. Mater* **9**, pp.25018 (2008). [12]

Kyoko Ishizaka, Ritsuko Eguchi, Shunsuke Tsuda, A. Chainani, Takayoshi Yokoya, Takayuki Kiss, Takahiro Shimojima, Tadashi Togashi, Shuntaro Watanabe, C.-T. Chen, Yoshihiko Takano, Masanori Nagao, Isao Sakaguchi, Tomohiro Takenouchi, Hiroshi Kawarada and Shin Shik, Temperature-Dependent Localized Excitations of Doped Carriers in Superconducting Diamond, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 166402-1-4 (2008). [9]

H. Horie, T. Kukudome, K. Teramura and *S. Yamanaka, Controlled thermal decomposition of NaSi to derive silicon clathrate, *J. Solid State Chem.* **182**, 129-1351 (2009). [9]

Takehito Nakano, Takanari Kashiwagi, Atsufumi Hanazawa, Kunihiro Watanabe, Masayuki Hagiwara and Yasuo Nozue, Antiferromagnetic Resonance in Sodium Clusters in Sodalite, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 084723 (2009). [3]

T. Kimura and *K. Kuroda, Ordered Mesoporous Silica Derived from Layered Silicates, *Adv. Func. Mater.* **19**,

- pp.511-527 (2009). [18]
- Yoshikazu Mizuguchi, Fumiaki Tomioka, Shunsuke Tsuda, Takahide Yamaguchi and Yoshihiko Takano, Superconductivity in S-substituted FeTe, Appl. Phys. Lett. **94**, 012503-1-3 (2009). [93]
- T. Tanaka, T. Onimaru, K. Suekuni, S. Mano, H. Fukuoka, S. Yamanaka and *T. Takabatake, Interplay between thermoelectric and structural properties of type-I clathrate $K_8Ga_8Sn_{38}$ single crystal, Phys. Rev. B **81**, 165110 /1-6, (2010). [6]
- K. Suekuni, Y. Takasu, T. Hasegawa, N. Ogita, M. Udagawa, M. A. Avila, and *T. Takabatake, Off-center modes and glasslike thermal conductivity in the type-I clathrate $Ba_8Ga_{16}Sn_{30}$, Phys. Rev. B **81**, 205207/1-5, (2010). [10]
- Yoshiyuki Kuroda and *Kazuyuki Kuroda, Morphosynthesis of Nanostructured Gold Crystals by Utilizing Interstices in Periodically Arranged Silica Nanoparticles as a Flexible Reaction Field, Angew. Chem. Int. Ed., **49**, pp. 6993-6997, (2010). [12]
- Mizuguchi Y, Deguchi K, Tsuda S, Yamaguchi T, and Takano Y, Moisture-induced superconductivity in $FeTe_{0.8}S_{0.2}$, PHYSICAL REVIEW B, **81(21)**, 214510-1-5 (2010). [14]
- T. Mori, K. Iwamoto, S. Kushibiki, H. Honda, H. Matsumoto, *N. Toyota, M. A. Avila, K. Suekuni, and T. Takabatake, Optical conductivity spectral anomalies in the off-center rattling system \square - $Ba_8Ga_{16}Sn_{30}$, Phys. Rev. Lett. **106**, 015501/1-4, (2011). [6]
- Z. F. Zheng and *S. Yamanaka, Preparation and Superconductivity of New Stage and Polytypic Phases in Potassium-Intercalated Zirconium Nitride Chloride (K_xZrNCl), Chem. Mater., **23**, 1558-1563 (2011).
- Kwang-Min Choi, *Kazuyuki Kuroda, "Double function of tris(hydroxymethyl)aminomethane (THAM) for the preparation of colloidal silica nanospheres and the conversion to ordered mesoporous carbon", Chem. Commun., **47**, pp. 10933-10935 (2011). [1]
- S. Yamanaka, K. Umemoto, Z. Zheng, Y. Suzuki, H. Matsui, N. Toyota, and K. Inumaru, Preparation and Superconductivity of Intercalation Compounds of $TiNCl$ with Aliphatic Amines, J. Mater. Chem. **22**, 10752-10762 (2012).
- Y. Yamaguchi, T. Nakano, Y. Nozue and T. Kimura, Magnetolectric Effect in an XY-like Spin Glass System $Ni_xMn_{1-x}TiO_3$, Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 057203.
- J. T. Okada, P. H.-L. Sit, Y. Watanabe, Y. J. Wang, B. Barbiellini, T. Ishikawa, M. Itou, Y. Sakurai, A. Bansil, R. Ishikawa, M. Hamaishi, T. Masaki, P.-F. Paradis, K. Kimura, T. Ishikawa and S. Nanao, Persistence of Covalent Bonding in Liquid Silicon Probed by Inelastic X-Ray Scattering, Physical Review Letters **108**, 067402-1-4 (2012). [1]
- A02:**
- Y. Maniwa, K. Matsuda, H. Kyakuno, S. Ogasawara, T. Hibi, H. Kadowaki, S. Suzuki, Y. Achiba and H. Kataura, Nature Materials **6**, 135 - 141 (2007). [61]
- J. Tang, G. Xing, Y. Zhao, L. Jing, H. Yuan, F. Zhao, X. Gao, H. Qian, R. Su, K. Ibrahim, W. Chu, L. Zhang and K. Tanigaki, Switchable Semiconductive Property of the Polyhydroxylated Metallofulleren, J. Phys. Chem. B **111**, 11929 (2007). [13]
- Kazuyuki Takai, Soichiro Eto, Masayasu Inaguma, Toshiaki Enoki*, Hironori Ogata, Masatoshi Tokita and Junji Watanabe, Magnetic Potassium Clusters in the Nanographite Host System, Phys. Rev. Lett. **98**, 017203-1-4 (2007). [15]
- J. Tang, T. Rachi, R. Kumashiro, M. A. Avila, K. Suekuni, T. Takabatake, FZ. Guo, K. Kobayashi, K. Aoki and K. Tanigaki*, Energetics of endohedral atoms in type-I clathrates observed by soft x-ray spectroscopy, Phys. Rev. B **78**, 085203-085206 (2008). [16]
- K. Matsuda, Y. Maniwa and H. Kataura, Highly rotational C_{60} dynamics inside single-walled carbon nanotubes: NMR observations, Phys. Rev. B **77**, 075421 (2008). [15]
- Yoshimitsu Kohama, Takeshi Rachi, Ju Jing, Zhaofei Li, Jun Tang, Ryotaro Kumashiro, Satoru Izumisawa, Hitoshi Kawaji, Tooru Atake, Hiroshi Sawa, Yasujiro Murata, Koichi Komatsu and Katsumi Tanigaki*, Rotational and Translational Dynamics of Ortho-Hydrogen in Isotropic Fullerene Cages, Phys. Rev. Lett. **103**, 073001 (2009) . [10]
- F. Mikami, K. Matsuda, H. Kataura and Y. Maniwa, Dielectric Properties of Water inside Single-Walled Carbon Nanotubes, ACS nano. **3**, 1279-1287 (2009).
- Xiyu Zhu, Fei Han, Gang Mu, Peng Cheng, Jun Tang, Jing Ju, Katsumi Tanigaki, and Hai-Hu Wen, Superconductivity induced by doping platinum in $BaFe_2As_2$, Phys. Rev. B , **81(10)**, 104525_1-5 (2010). [8]
- Jun Tang, Jingtao Xu, Satoshi Heguri, Hiroshi Fukuoka, Syoji Yamanaka, Koji Akai, and Katsumi Tanigaki, Electron-phonon interactions of Si_{100} and Ge_{100} superconductors with Ba atoms inside Nanospaces, Phys. Rev. Lett., **105**_1-4, 176402 (2010). [2]
- Ryo Nouchi and Katsumi Tanigaki, Charge-density depinning at metal contacts of graphene field-effect

- transistors, Appl. Phys. Lett. **96** 253503-1-3 (2010). [15]
- A. Omerzu, B. Anzelak, I. Turel, J. Strancar, A. Potocnik, D. Arcon, I. Arcon, D. Mihailovic, and H. Matsui, Strong Correlations in Highly Electron-Doped Zn(II)-DNA Complexes, Phys. Rev. Lett., **104**, pp.156804 (2010). [5]
- Takanori Kida, Masahiro Kotani, Yoshikazu Mizuguchi, Yoshihiko Takano, and *Masayuki Hagiwara, Weak Superconducting Fluctuations and Small Anisotropy of the Upper Critical Fields in an Fe_{1.05}Te_{0.85}Se_{0.15} Single Crystal, J. Phys. Soc. Jpn., **79**, pp.074706-1-4 (2010). [8]
- Kazuhiro Yanagi, Hiroki Udoguchi, Satoshi Sagitani, Yugo Oshima, Taishi Takenobu, Hiromichi Kataura, Takao Ishida, Kazuyuki Matsuda, and Yutaka Maniwa, Transport Mechanisms in Metallic and Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotube Networks, ACS Nano, **4**, pp. 4027-4032 (2010). [12]
- Gang Mu, Jun Tang, Yoichi Tanabe, Jingtao Xu, Satoshi Heguri and Katsumi Tanigaki, Evidence for line nodes in the energy gap of the overdoped Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ from low-temperature specific heat measurements, Phys. Rev. B, **84**(5), 054505_1- (2011). [1]
- Yoichi Tanabe, Khuong Huynh, Satoshi Heguri, Gang Mu, Takahiro Urata, Jingtao Xu, Ryo Nouchi, Nobuhiko Mitoma and Katsumi Tanigaki, Coexistence of Dirac-cone states and superconductivity in iron pnictide Ba(Fe_{1-x}Ru_xAs)₂, Phys. Rev. B, **84**(10), 100508_1- (2011). [1]
- Khuong Huynh, Yoichi Tanabe and Katsumi Tanigaki, Both Electron and Hole Dirac Cone States in Ba(FeAs)₂ Confirmed by Magnetoresistance, Phys. Rev. Lett., **106**(21), 217004_1- (2011). [15]
- Ryo Nouchi, Tatsuya Saito and Katsumi Tanigaki, Determination of Carrier Type Doped from Metal Contacts to Graphene by Channel-Length-Dependent Shift of Charge Neutrality Points, Appl. Phys. Express, **4**(3), 035101_1- (2011). [2]
- Xiaoyan Fan, Ryo Nouchi and Katsumi Tanigaki, Effect of Charge Puddles and Ripples on the Chemical Reactivity of Single Layer Graphene Supported by SiO₂/Si Substrate, J. Phys. Chem. C, **115**(26), 12960-12964 (2011). [4]
- Ryo Nouchi and Katsumi Tanigaki, Empirical Modeling of Metal-Contact Effects on Graphene Field-Effect Transistors, Jap. J. Appl. Phys., **50**(7), 070109_1- (2011).
- T. Mori, K. Iwamoto, S. Kushibiki, H. Honda, H. Matsumoto, N. Toyota, M. A. Avila, K. Suekuni, and T. Takabatake, “Optical Conductivity Spectral Anomalies in the Off-Center Rattling System beta-Ba₈Ga₁₆Sn₃₀”, Phys. Rev. Lett., **106**, 015501, (2011). [8]
- S. Ishida, T. Liang, M. Nakajima, K. Kihou, C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, T. Kakeshita, T. Kida, M. Hagiwara, Y. Tomioka, T. Ito, and S. Uchida, “Manifestations of multiple-carrier charge transport in the magnetostructurally ordered phase of BaFe₂As₂”, Phys. Rev. B **84** 184514-1-7 (2011). [2]
- A03:**
- *H. Shimizu, T. Iitaka, T. Fukushima, T. Kume, S. Sasaki, N. Sata, Y. Ohishi, H. Fukuoka, and S. Yamanaka, Raman and X-ray diffraction studies of Ba doped germanium clathrate Ba₈Ge₄₃ at high pressures, J. Appl. Phys. **101**, 063549 (2007). [12]
- T. Kakiuchi, Y. Wakabayashi, H. Sawa, T. Itou and K. Kanoda, Wigner Crystallization in (DI-DCNQI)₂Ag Detected by Synchrotron Radiation X-Ray Diffraction, Phys. Rev. Lett. **98**, 066402 (2007). [19]
- H. Hyodo, S. Araake, K. Soga, Y. Satoh, M. Terauchi and K. Kimura, Structure and electronic properties of Mg-doped α-rhombohedral boron constructed from icosahedral clusters, Phys. Rev. B **77**, 024515 (2008). [10]
- *H. Shimizu, T. Imai, T. Kume, S. Sasaki, A. Kaltzoglou, and T.F. Fässler, Raman spectroscopy study of type-I clathrates A₈Sn₄₄□₂ (A = Rb, Cs) and Rb₈Hg₄Sn₄₂, Chem. Phys. Lett. **464**, 54-57 (2008). [4]
- X. Lu, H. Nikawa, T. Tsuchiya, Y. Maeda, M. O. Ishitsuka, T. Akasaka*, M. Toki, H. Sawa, Z. Slanina, N. Mizorogi, and S. Nagase, Bis-Carbene Adducts of Non-IPR La@C₇₂: Localization of High Reactivity around Fused Pentagons and Electrochemical Properties, Angew. Chem. Int. Ed. **47**, 8642-8645 (2008). [27]
- *H. Shimizu, R. Oe, S. Ohno, T. Kume, S. Sasaki, K. Kishimoto, T. Koyanagi, and Y. Ohishi, Raman and x-ray diffraction studies of cationic type-I clathrate I₈Sb₈Ge₃₈: Pressure-induced phase transitions and amorphization, J. Appl. Phys. **105**, 043522/ 1-6 (2009). [5]
- T. Ikeda, E. S. Toberer, V. A. Ravi, G. J. Snyder*, S. Aoyagi, E. Nishibori, and M. Sakata, In situ observation of eutectoid reaction forming a PbTe–Sb₂Te₃ thermoelectric nanocomposite by synchrotron X-ray diffraction, Scr. Mater. **60**, 321–324. (2009). [10]
- B. Zhou, H. Yajima, A. Kobayashi, Y. Okano, H. Tanaka, T. Kumashiro, E. Nishibori, H. Sawa, and *H. Kobayashi, Single-Component Molecular Conductor [Cu(tmtdt)₂] Containing an Antiferromagnetic Heisenberg Chain, Inorg. Chem. **49**, 6740-6747 (2010). [4]
- S. Aoyagi, E. Nishibori, *H. Sawa, K. Sugimoto, M. Takata, Y. Miyata, R. Kitaura, H. Shinohara, H. Okada,

- T. Sakai, Y. Ono, K. Kawachi, K. Yokoo, S. Ono, K. Omote, Y. Kasama, S. Ishikawa, T. Komuro, and *H. Tobita, A layered ionic crystal of polar Li@C₆₀ superatoms, *Nature Chem.*, **2**, 678-683 (2010). [15]
- *G. Eguchi, D. C. Peets, M. Kriener, Y. Maeno, E. Nishibori, Y. Kumazawa, K. Banno, S. Maki, and H. Sawa, Crystallographic and superconducting properties of the fully gapped noncentrosymmetric 5d-electron superconductors CaMSi₃ (M = Ir, Pt), *Phys. Rev. B*, **83**, 024512 (2010). [3]
- S. Koshiya, M. Terauchi and A.-P. Tsai, Characteristic chemical shift of quasicrystalline alloy Al₅₃Si₂₇Mn₂₀ studied by EELS and SXES, *Philosophical Magazine*, **91**, 2309-2316 (2011).
- M. Yashima, S. Matsuyama, R. Sano, M. Itoh, K. Tsuda and D. Fu, Structure of Ferroelectric Silver Niobate AgNbO₃, *Chem. Mat.*, **23**, 1643-1645 (2011). [6]
- T. Nagatochi, H. Hyodo, A. Sumiyoshi, K. Soga, Y. Sato, M. Terauchi, F. Esaka and K. Kimura, Superconductivity in Li-doped α -rhombohedral boron, *Physical Review B*, **83**, 184507-1-5 (2011). [2]
- M. C. Menard, R. Ishii, T. Higo, E. Nishibori, H. Sawa, S. Nakatsuji, J. Y. Chan, High-Resolution Synchrotron Studies and Magnetic Properties of Frustrated Antiferromagnets MAI₂S₄ (M = Mn²⁺, Fe²⁺, Co²⁺), *Chemistry of Materials*, **23**, 3086-3094 (2011).
- Satomi Kakiya, Kazutaka Kudo, Yoshihiro Nishikubo, Kenta Oku, Eiji Nishibori, Hiroshi Sawa, Takahisa Yamamoto, Toshio Nozaka and Minoru Nohara, Superconductivity at 38 K in the iron-based compound with platinum-arsenide layers Ca₁₀(Pt₄As₈)(Fe_{2-x}Pt_xAs₂)₅, *Journal of the Physical Society of Japan*, **80**, (2011) 093704. **Editors' Choice** [12]
- Shinobu Aoyagi, Yuki Sado, Eiji Nishibori, Hiroshi Sawa, Hiroshi Okada, Hiromi Tobita, Yasuhiko Kasama, Ryo Kitaura, and Hisanori Shinohara, Rock-salt of Thermally Contracted C₆₀ with Mobile Lithium Cation inside, *Angewandte Chemie International Edition*, **51**, (2012). 3377-3381. **Hot Paper**
- S. Nakatsuji, K. Kuga, K. Kimura, R. Satake, N. Katayama, E. Nishibori, H. Sawa, R. Ishii, M. Hagiwara, F. Bridges, T. U. Ito, W. Higemoto, Y. Karaki, M. Halim, A. A. Nugroho, J. A. Rodriguez-Rivera, M. A. Green, C. Broholm, Spin-Orbital Short-Range Order on a Honeycomb-Based Lattice, *Science* **336** 559-563 (2012). [1]
- A04:**
- T. Miyake and F. Aryasetiawan, Screened Coulomb interaction in the maximally localized Wannier basis, *Phys. Rev. B* **77**, 085122 (2008). [60]
- Fredrik Carlborg, *Junichiro Shiomi and Shigeo Maruyama, Thermal boundary resistance between single-walled carbon nanotubes and surrounding matrices, *Phys. Rev. B* **78**, 205406 (2008). [23]
- *Hiroshi Ueda, Hiroki Nakano, and Koichi Kusakabe, Finite-size scaling of string order parameters characterizing the Haldane phase, *Phys. Rev. B* **78**, 224402-1-13 (2008). [4]
- R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, Quasiparticle band structure of vanadium dioxide, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 064226 (2009). [1]
- *Junichiro Shiomi and Shigeo Maruyama, Water transport inside a single-walled carbon nanotube driven by temperature gradient, *Nanotechnology* **20**, 055708 (2009). [19]
- Koichi Kusakabe, A quadratic form of the Coulomb operator and an optimization scheme for the extended Kohn-Sham models, *J. Phys. Condens. Matter*, **21**, 064212-1-4 (2009). [1]
- Hiroshi Ueda, Hiroki Nakano, Koichi Kusakabe, and Tomotoshi Nishino, Scaling analysis with hyperbolic deformation for gap estimation of one-dimensional quantum systems, *Prog. Theor. Phys.*, **124**, 389 (2010).
- K. Umemoto, R.M. Wentzcovitch, S. Saito, and T. Miyake, Body-centered tetragonal C₄: A viable sp³ carbon allotrope, *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 125504-1-4 (2010). [45]
- Y. Izu, J. Shiomi, Y. Takagi, S. Okada, and S. Maruyama, Growth mechanism of single-walled carbon nanotube from catalytic reaction inside carbon nanotube template, *ACS Nano*, **4**, pp.4769-4775 (2010). [1]
- Koichi Kusakabe, Isao Maruyama, Theorems on ground-state phase transitions in Kohn-Sham models given by the Coulomb density functional, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **44**, 135305-1-18 (2011).
- Yoshiro Nohara, Kazuma Nakamura, and Ryotaro Arita, Ab initio Derivation of Correlated Superatom Model for Potassium Loaded Zeolite, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 124705 (2011)
- Taichi Kosugi, Takashi Miyake, Shoji Ishibashi, Ryotaro Arita, and Hideo Aoki, First-principles structural optimization and electronic structure of the superconductor picene for various potassium doping levels, *Phys. Rev. B* **84**, 214506 (2011). [3]
- T. Kosugi, T. Miyake, S. Ishibashi, R. Arita, and H. Aoki, Ab initio electronic structure of solid coronene: Differences from and commonalities to picene, *Phys. Rev. B* **84**, 020507(R) (2011). [6]
- Hidetoshi Kizaki, and Koichi Kusakabe, DFT-GGA Study of NO Adsorption on the LaO (001) Surface of LaFeO₃, *Surf. Sci.* **606** (2012) 337-343. [1]

Hiroshi Ueda and Koichi Kusakabe, Determination of boundary scattering, magnon-magnon scattering, and the Haldane gap in Heisenberg spin chains, *Phys. Rev. B* **84**, 054446 (2011).
Yusuke Nomura, Kazuma Nakamura, and Ryotaro Arita, Ab initio derivation of electronic low-energy models for C60 and aromatic compounds, to appear in *Phys. Rev. B*.
Fumio Nishimura, Takuma Shiga, Shigeo Maruyama, Kazuyuki Watanabe, Junichiro Shiomi, “Thermal conductance of buckled carbon nanotubes”, *Japanese Journal of Applied Physics*, **51**, 015102 (2012).

A05:

N. Uchida, H. Yahata, T. Kanayama and L. Bolotov, Local modification of electronic structure of Si (111)-7x7 surfaces by forming molybdenum-encapsulating Si clusters, *Appl. Phys. Lett.* **91** 063109 (2007). [2]

T. Miyazaki and T. Kanayama, First-principles theory for Si-based, atomically thin layered semiconductor crystal, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 082107 (2007). [7]

Masashi Miyakawa, Masahiro Hirano, Toshio Kamiya, and Hideo Hosono, High electron doping to a wide band gap semiconductor $12\text{CaO}\cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ thin film, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 182105-1-3 (2007). [18]

T. Miyazaki and T. Kanayama, “Ultra-thin layered semiconductor: Si-rich transition metal silicide”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **46** (2007) pp.L28 - L30.

T. Miyazaki and T. Kanayama, “First-principles theory for Si-based, atomically thin layered semiconductor crystal”, *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 082107. [4]

N. Uchida, H. Yahata, T. Kanayama, and L. Bolotov, “Local modification of electronic structure of Si (111)-7x7 surfaces by forming molybdenum-encapsulating Si clusters”, *Appl. Phys. Lett.* **91** (2007) 063109.

Yuji Ohishi, Kaoru Kimura, Masaaki Yamaguchi, Noriyuki Uchida and Toshihiko Kanayama, Formation of hydrogenated boron clusters in an external quadrupole static attraction ion trap, *The Journal of Chemical Physics* **128**, 124304-1-7 (2008). [4]

Noriyuki Uchida, Hiroshi Kintou, Yusuke Matsushita, Tetsuya Tada and Toshihiko Kanayama, Synthesis of New Amorphous Semiconductors Assembled from Transition-Metal-Encapsulating Si Clusters, *Appl. Phys. Express* **1**, 121502-1-3 (2008). [4]

Satoru Matsuishi, Sung Wng Kim, Toshio Kamiya, Masahiro Hirano, and Hideo Hosono, Localized and Delocalized Electrons in Room-Temperature Stable Electride $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(\text{O}^{2-})_{2-x}(\text{e}^-)_{2x}$: Analysis of Optical Reflectance Spectra, *J. Phys. Chem. C* **112**, 4753-4760 (2008). [15]

Noriyuki Uchida, Hiroshi Kintou, Yusuke Matsushita, Tetsuya Tada and Toshihiko Kanayama, “Synthesis of New Amorphous Semiconductors Assembled from Transition-Metal-Encapsulating Si Clusters”, *Appl. Phys. Express* **1**, 121502 pp.1-3 (2008). [3]

Zhihu Sun, Hiroyuki Oyanagi, Noriyuki Uchida, Takehide Miyazaki, and Toshihiko Kanayama, Structure determination of W-capsulated Si cage clusters by x-ray absorption fine structure spectra, *J. Phys D: Appl. Phys.* **42**, 015421-1-6 (2009). [2]

Zhihu Sun, Hiroyuki Oyanagi, Noriyuki Uchida, Takehide Miyazaki, and Toshihiko Kanayama, “Structure determination of W-capsulated Si cage clusters by x-ray absorption fine structure spectra”, *J. Phys D: Appl. Phys.* **42**, 015421- pp. 1-6 (2009).

Hirotomo Nishihara*, Peng-Xiang Hou, Li-Xiang Li, Masashi Ito, Makoto Uchiyama, Tomohiro Kaburagi, Ami Ikura, Junji Katamura, Takayuki Kawarada, Kazuhiko Mizuuchi and Takashi Kyotani, High Pressure Hydrogen Storage in Zeolite Templated Carbon, *J. Phys. Chem. C* **113**, 3189-3196 (2009). [29]

Hirotomo Nishihara*, Quan-Hong Yang, Peng-Xiang Hou, Masashi Unno, Seigo Yamauchi, Riichiro Saito, Juan I. Paredes, Amelia Martinez-Alonso, Juan M.D. Tascon, Yohei Sato, Masami Terauchi and Takashi Kyotani, A Possible Buckybowl-Like Structure of Zeolite Templated Carbon, *Carbon* **47**, 1220-1230, (2009). [30]

Hidenori Hiramatsu, Toshio Kamiya, Tetsuya Tohei, Eiji Ikenaga, Teruyasu Mizoguchi, Yuichi Ikuhara, Keisuke Kobayashi, and Hideo Hosono, Origins of Hole Doping and Relevant Optoelectronic Properties of Wide Gap p-Type Semiconductor, LaCuOSe , *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, pp. 15060-15067 (2010). [1]

S.J. Park, N. Uchida, and T. Kanayama, “Electronic properties of W-encapsulated Si cluster film on Si (100) substrates”, *J. Appl. Phys.* **111**, (2012) 063719.

Susumu Kashihara, Shoji Otani, Hironori Orikasa, Yasuto Hoshikawa, Jun-ichi Ozaki, Takashi Kyotani, A quantitative analysis of a trace amount of hydrogen in high temperature heat-treated carbons, *Carbon*, **50**, 3310-3314 (2012).

公募班:

H. Kamioka, Y. Moritomo, W. Kosaka and S. Ohkoshi, Dynamics of charge-transfer pairs in the cyano-bridged $\text{Co}^{2+}\text{-Fe}^{3+}$ transition metal compound, *Phys. Rev. B* **77**, 180301(R) (2008). [9]

- Y. Moritomo, F. Nakada, H. Kamioka, J. E. Kim, M. Takata, Desorption-Induced First-Order Phase Transition in a Cyano-Bridged Compound, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 141907 (2008). [4]
- Y. Moritomo, F. Nakada, J. E. Kim and M. Takata, Desorption-eraser of the Spin State Transition in Prussian Blue Cyanide, *Appl. Phys. Ex.* **1**, 111301-1-3 (2008). [8]
- Y. Maeda, A. Sagara, M. Hashimoto, Y. Hirashima, K. Sode, T. Hasegawa, M. Kanda, M. O. Ishitsuka, T. Tsuchiya, T. Akasaka,* T. Okazaki, H. Kataura, J. Lu, S. Nagase and *S. Takeuchi, Radical Coupling Reaction of Paramagnetic Endohedral Metallofullerene La@C₈₂, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 16224–16230 (2008). [17]
- Y. Yamazaki, K. Nakajima, T. Wakahara, T. Tsuchiya, M. O. Ishitsuka, Y. Maeda, T. Akasaka,* M. Waelchli, N. Mizorogi and S. Nagase*, Observation of ¹³C NMR Chemical Shifts of Metal Carbides Encapsulated in Fullerenes: Sc₂C₂@C₈₂, Sc₂C₂@C₈₄, and Sc₃C₂@C₈₀, *Angew. Chem., Int. Ed.* **47**, 7905–7908 (2008). [20]
- *Harukazu Yoshino, George C. Papavassiliou and Keizo Murata, Low-Dimensional Organic Conductors as Thermoelectric Materials, *J. Therm. Anal. Calorim.* **92**, 457-460 (2008). [15]
- Hisashi Kotegawa* Satoru Masaki, Yoshiki Awai, Hideki Tou, Yoshikazu Mizuguchi, and Yoshihiko Takano, Evidence for Unconventional Superconductivity in Arsenic-Free Iron-Based Superconductor FeSe: A ⁷⁷Se-NMR Study *J. Phys.Soc.Jpn.* **77**, 113703 (2008). [58]
- Hideki Okamoto, Naoko Kawasaki, Yumiko Kaji, Yoshihiro Kubozono, Akihiko Fujiwara and Minoru Yamaji, Air-assisted High performance field-effect transistors with thin films of picene, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 10470-10471 (2008). [52]
- Y. Takasu, T. Hasegawa, N. Ogita, M. Udagawa, M. A. Avila, K. Suekuni and T. Takabatake, Off-Center Rattling and Anisotropic Expansion of Type-I Clathrates Studied by Raman Scattering, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 165503 (2008). [23]
- Guoying Gao, Artem R. Oganov, Aitor Bergara, Miguel Martinez-Canales, Tian Cui, Toshiaki Iitaka, *Yanming Ma and Guangtian Zou, Superconducting High Pressure Phase of Germane, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 107002 (2008). [68]
- Kenichi Hayashida, Atsushi Takano, Tomonari Dotera and Yushu Matsushita*, Giant Zincblende Structures Formed by an ABC Star-Shaped Terpolymer/Homopolymer Blend System, *Macromolecules* **41**, 6269-6271 (Communication to the Editor), (2008). [18]
- M. Kawamura, Y. Tanaka, *T. Kita, O. Wada, H. Nakamura, H. Yanagi, A. Magario and T. Noguchi, Flexible Field Emission Device Using Carbon Nanofiber Nanocomposite Sheet, *Appl. Phys. Express.* **1**, 074004 (2008). [4]
- T. Tsuchiya, R. Kumashiro, K. Tanigaki, Y. Matsunaga, M. O. Ishitsuka, T. Wakahara, Y. Maeda, Y. Takano, M. Aoyagi, T. Akasaka, M. T. H. Liu, T. Kato, K. Suenaga, J. S. Jeong, S. Iijima, F. Kimura, T. Kimura and S. Nagase, Nanorods of Endohedral Metallofullerene Derivative, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 450 (2008). [21]
- Arnab Dawn, *Norifumi Fujita, Shuichi Haraguchi, Kazuki Sada and Seiji Shinkai*, An Organogel System can Control the Stereochemical Course of Anthracene Photodimerization, *Chem. Commun.* 2100-2102, (2009). [6]
- Y. Moritomo and T. Shibata, Electric pressure-induced ferromagnetism mediated by Prussian blue junction, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 043502-1-3 (2009). [6]
- Hitoshi Sugawara, Rikio Settai, Yusuke Doi, Hiroshi Muranaka, Keisuke Katayama, Hiroshi Yamagami and Yoshichika Onuki, de Haas–van Alphen Effect in LaFePO with Two-Dimensional Cylindrical Fermi Surfaces, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 113711 (2009). [21]
- Yohei Ohta, Ryoji Mitsuhashi, Ryo Nouchi, Akihiko Fujiwara, Shojun Hino and Yoshihiro Kubozono, C₇₀ close-packed surface and single molecule void-formation by local electric field through a scanning tunneling microscope tip, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 043107-1-3 (2009)
- Kazumi Igawa, Hironari Okada, Kazunobu Arii, Hiroki Takahashi*, Yoichi Kamihara, Masahiro Hirano, Hideo Hosono, Satoshi Nakano and Takumi Kikegawa, Pressure Study of Superconducting Oxypnictide LaFePO, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 023701-1-4 (2009). [5]
- R. Mitsuhashi, Y. Suzuki, Y. Yamanari, H. Mitamura, T. Kambe, N. Ikeda, H. Okamoto, A. Fujiwara, M. Yamaji, N. Kawasaki, Y. Maniwa and Y. Kubozono, *Nature* **464**, 76-79 (2010).[58]
- H. Okabe, N. Takeshita, K. Horigane, T. Muranaka, and *J. Akimitsu, Pressure-induced high-T_c superconducting phase in FeSe: Correlation between anion height and T_c, *Phys. Rev. B*, **81**, 205119/1-6, (2010).[19]
- M. Tadokoro, T. Ohhara, Y. Ohhata, T. Suda, Y. Miyasato, T. Yamada, K. Kikuchi, I. Tanaka, K. Kurihara, M. Oguni, O. Yamamuro, and K. Ryota, Anomalous Water Molecule and Mechanistic Effect of Water Nanotube Cluster Confined to Molecular Porous Crystal, *J. Phys. Chem. B*, **114**, 2091-2099 (2010).[5]

- T. Matsuda, J. E. Kim, and Y. Moritomo, Symmetry switch of cobalt ferrocyanide framework by alkaline cation exchange, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 12206 (2010). [5]
- *H. Okazaki, T. Wakita, T. Muro, Y. Kaji, X. Lee, H. Mitamura, N. Kawasaki, Y. Kubozono, Y. Yamanari, T. Kambe, T. Kato, M. Hirai, Y. Muraoka, and T. Yokoya, Electronic structure of pristine and K-doped solid picene: Nonrigid band change and its implication for electron-intramolecular-vibration interaction, *Physical Review B*, **82**, 195114 (2010). [13]
- P. Dhakal, H. Yoshino, J.-I. Oh, K. Kikuchi, and *M. J. Naughton, Observation and Simulation of All Angular Magnetoresistance Oscillation Effects in the Quasi-One-Dimensional Organic Conductor (DMET)₂I₃, *Phys. Rev. Lett.*, **105**, pp. 067201/1-4 (2010).[3]
- T. Masuda, S. Kitaoka, S. Takamizawa, N. Metoki, K. Kaneko, K.C. Rule, K. Kiefer, H. Manaka, and H. Nojiri, Instability of Magnons in Two-Dimensional Antiferromagnets at High Magnetic Fields, *Phys. Rev. B*, **81**, 100402(R) (2010).[9]
- H. Okazaki, T. Wakita, T. Muro, Y. Kaji, X. Lee, H. Mitamura, N. Kawasaki, Y. Kubozono, Y. Yamanari, T. Kambe, Takashi Kato, Y. Hirai, Y. Muraoka, and *Takayoshi Yokoya, Electronic structure of picene and K-doped solid picene: Nonrigid band change and its implication for electron-intramolecular-vibration interaction, *Phys. Rev. B*, **82**, 195114 (2010).[13]
- T. Morinari, E. Kaneshita, and T. Tohyama, Topological and Transport Properties of Dirac Fermions in Antiferromagnetic Metallic Phase of Iron-Based Superconductor, *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 037203-1-4 (2010). [24]
- Ken Niwa, Daisuke Nomichi, Masashi Hasegawa, Taku Okada, Takehiko Yagi, and Takumi Kikegawa, Compression Behaviors of Binary Skutterudite CoP₃ in Noble Gases up to 40 GPa at Room Temperature, *Inorganic Chemistry*, **50**, 3281-3285, (2011).
- T. Matsuda and Y. Moritomo, “Thin film electrode of Prussian blue analogue for Li-ion battery”, *Appl. Phys. Express*, **4**, 047101 (2011).[5]
- Takashi Kato, Takashi Kambe, and Yoshihiro Kubozono, Strong intramolecular electron-phonon coupling in negatively charged aromatic superconductor picene, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 077001 (2011)[12]
- Y. Kubozono, H. Mitamura, X. Lee, X. He, Y. Yamanari, Y. Takahashi, Y. Suzuki, Y. Kaji, R. Eguchi, K. Akaike, T. Kambe, H. Okamoto, A. Fujiwara, T. Kato, T. Kosugi and H. Aoki, Metal-intercalated aromatic hydrocarbons: a new class of carbon-based superconductors, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 16476-16493 (2011)[11]
- *K. Kikuchi, T. Isono, M. Kojima, H. Yoshimoto, T. Kodama, W. Fujita, K. Yokogawa, H. Yoshino, K. Murata, T. Kaihatsu, H. Akutsu and J. Yamada, Uniaxial Strain Orientation Dependence of Superconducting Transition Temperature (T_c) and Critical Superconducting Pressure (P_c) in β -(BDA-TTP)₂I₃, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, pp. 19590-19593 (2011).
- Mari Einaga, Ayako Ohmura, Atsuko Nakayama, Fumihiro Ishikawa, Yuh Yamada, and Satoshi Nakano Pressure-induced phase transition of Bi₂Te₃ to a bcc structure, *PHYSICAL REVIEW B*, **83**, 092102-1~4 (2011).[10]
- *Hisashi Kotegawa, Yudai, Hara, Hiroki Nohara, Hideki Tou, Yoshikazu Mizuguchi, Hiroyuki Takeya, and Yoshihiko Takano, Possible Superconducting Symmetry and Magnetic Correlations in K_{0.8}Fe₂Se₂: A ⁷⁷Se-NMR Study, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 043708 (2011).[15]
- H. Kuroe, T. Hamasaki, T. Sekine, M. Hase, K. Oka, T. Ito, H. Eisaki, K. Kaneko, N. Metoki, M. Matsuda and K. Kakurai, “Hybridization of Magnetic Excitations between Quasi-One-Dimensional Spin Chains and Spin Dimers in Cu₃Mo₂O₉ Observed Using Inelastic Neutron Scattering”, *Phys. Rev. B* **83**, 184423 (2011). [4]
- Takahiro Yamamoto, Kenji Sasaoka, and Satoshi Watanabe, Universality and Diversity in a Phonon-Transmission Histogram of Isotope-Disordered Carbon Nanotubes, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 215503 (2011).[1]
- Manabu Kiguchi, Takuya Takahashi, Yuta Takahashi, Yoshihiro Yamauchi, Takashi Murase, Makoto Fujita, Tomofumi Tada, and Satoshi Watanabe, Electron Transport through Single Molecules Comprising Aromatic Stacks Enclosed in Self-Assembled Cages, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 5708-5711 (2011)
- *Takashi Kato, Takashi Kambe, and Yoshihiro Kubozono, Strong intramolecular electron-phonon coupling in negatively charged aromatic superconductor picene, *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 077001 (2011).[12]
- *Y. Kubozono, H. Mitamura, X. Lee, X. He, Y. Yamanari, Y. Takahashi, Y. Suzuki, Y. Kaji, R. Eguchi, K. Akaike, T. Kambe, H. Okamoto, A. Fujiwara, Takashi Kato, T. Kosugi, and H. Aoki, Metal-intercalated aromatic hydrocarbons: a new class of carbon-based superconductors, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 16476-16493 (2011).[11]

7. 研究組織と各研究項目の連携状況

計画研究の研究組織の連携をとりながら研究を推進している。5つの研究班は、互いに以下の研究項目で密接な連携研究を推進している。

- (1) クラスレート空間物質 (A01班: 山中、高島、A02班: 谷垣、A03班: 寺内、清水、A04班: 草部)
- (2) ゼオライト空間物質 (A01班: 野末、A02班: 萩原、金道、真庭、A04班: 有田)
- (3) III族空間物質 (A01班: 木村、A02班: 谷垣、A03班: 寺内、A04班: 常行)
- (4) 炭素系空間物質 (A01班: 山中、高野、黒田、A02班: 谷垣、榎、A03班: 澤、寺内)
- (5) 新規ナノ空間物質 (A01班: 全員、A02班: 谷垣、A04班: 有田)

以下、総括班および計画研究班の現時点での体制を示す。

[総括班]

研究者氏名(所属・職名)	総括班における役割
[研究代表者] 谷垣勝己 (東北大学・WPI機構/理学研究科・教授)	領域代表者(領域の総括) A01-A05項目の総括・A02項目の研究推進
[総括班] 野末泰夫 (大阪大学・理学研究科・教授) 山中昭司 (広島大学・工学研究科・教授) 木村 薫 (東京大学・新領域創成科学研究科・教授) 谷垣勝己 (東北大学・WPI機構/理学研究科・教授) 寺内正己 (東北大学・多元物質科学研究所・教授) 有田亮太郎 (東京大学・工学系研究科・准教授)	事務担当・webサイト・A01項目の研究推進 A01項目の総括とA01項目の研究推進 Newsletter監修・広報とA01項目の研究推進 A02項目の総括とA02項目の研究推進 A03項目の総括とA03項目の研究推進 A04項目の総括とA04項目の研究推進
[評価委員:研究協力者] 茅 幸二 (理研・先端計算科学研究領域・領域長) 上村 洸 (東京理科大学・総合研究機構・客員教授) 新海征治 (九州先端科学技術研究所・研究所長) 伊達宗行 (大阪大学・理学部・名誉教授)	成果の評価と研究推進への助言 成果の評価と研究推進への助言 成果の評価と研究推進への助言 成果の評価と研究推進への助言

[計画研究班および新しい公募研究班の変遷]

研究項目 A01 配列ナノ空間を利用した物質創製

ア クラスレート系化合物の物質探索 (研究代表者) 山中昭司 (連携研究者) 高島敏郎
イ ゼオライト系化合物の物質探索 (研究代表者) 野末泰夫 (研究分担者) 中野岳仁、高見 剛、五十嵐睦夫
ウ III族多面体クラスター系物質の物質探索 (研究代表者) 木村 薫 (研究分担者) 桐原和夫 (連携研究者) 岡田純平、曾我公平
エ メソポーラス系物質の物質探索 (研究代表者) 黒田一幸 (研究分担者) 望月 大
オ 炭素系化合物の物質探索 (研究代表者) 高野義彦 (研究分担者) 長尾雅則 (連携研究者) 横谷尚睦
公募研究(H20-H21) ユビキタス元素からなる新しい配列ナノ空間物質の創製
武田 雅敏 「一次元チャンネルを有するホウ素系化合物の機能性材料としての可能性」
藤内 謙光 「超分子有機ゼオライトの創製に基づくユビキタス発光材料の極限機能」
藤田 典史 「一次元分子集合体を用いた有機配列空間の構築」
佐藤 英行 「高温高压合成法による4f電子系ナノ空間物質の創製と物性評価」
田村 隆治 「正20面体クラスター内・外のナノ空間を場とした超構造の作製と構造及び物性の評価」
田所 誠 「分子性ゼオライトに安定化された水ナノチューブクラスターの相転移ダイナミクス」
公募研究(H22-H23) ユビキタス元素からなる新しい配列ナノ空間物質の創製
滝沢 博胤 「超高压力場におけるホウ素含有クラスター化合物のナノ空間を利用した機能発現」
丹羽 健 「ユビキタス元素化合物の超高压超高温領域における新物質・新結晶の創製」
佐藤 英行 「周期的ナノ空隙に閉じ込められた4f電子が可能にする新奇特性の探索」

村中 隆弘 「ユビキタス元素及び軽元素が形成する共有結合性ネットワークを利用した物質探索」
田所 誠 「分子ナノ細孔内に閉じ込められたナノ構造水の科学」
今井 基晴 「半導体シリコンクラスレートの探索」

[研究内容] 種々の配列ナノ空間を有する物質を開拓する。

A02 配列ナノ空間物質の物性測定・評価

カ 配列ナノ空間物質の伝導:熱伝導・電気伝導・超伝導 (研究代表者)谷垣勝己 (研究分担者)松井広志
ク 配列ナノ空間物質の極限環境下(強磁場・高圧)物性 (研究代表者)萩原政幸 (研究分担者)金道浩一、加賀山朋子
ケ 配列ナノ空間物質の磁気共鳴プローブ (研究代表者)真庭 豊 (研究分担者)松田和之、石井広義
公募研究(H20-H21) 新しい物性測定とその解析
守友 浩 「ホスト-ゲスト相互作用を利用したCo-Fe系シアノ錯体膜の物性制御」
土屋 敬広 「常磁性物質を内包した π 電子ナノ空間の組織化と機能」
中山 敦子 「圧力を用いた炭素 π 電子系配列ナノ空間の水素吸蔵についての研究」
撰待 力生 「充填スクッテルダイト化合物の創製と新しい実験手法によるフェルミ面の研究」
吉野 治一 「無機イオンを伝導層に含む二次元有機伝導体の熱電特性評価」
公募研究(H22-H23) 新しい物性測定とその解析
帯刀 陽子 「有機伝導体を用いた一次元構造体の作製と物性評価」
守友 浩 「光励起によるナノポーラスシアノ錯体の物質移動と物性制御」
神戸 高志 「芳香族炭化水素系物質の配列空間を利用した超伝導探索」
吉野 治一 「無機イオンを伝導層に含む二次元有機伝導体の磁場中熱電特性」
森 孝雄 「希土類ホウ素クラスター化合物における伝導機構の解明」

[研究内容] 配列ナノ空間を有する物質の特異な伝導・磁性・熱・光物性を詳細に研究する。

A03 配列ナノ空間物質の構造・電子状態

コ 電子プローブによる構造と電子状態 (研究代表者)寺内正己 (研究分担者)津田健治 (連携研究者)佐藤庸平
サ 配列ナノ空間物質の極限ラマン分光 (研究代表者) (研究分担者)佐々木重雄、久米徹二
シ 配列ナノ空間物質の構造解析 (研究代表者)澤 博 (研究分担者)青柳 忍 (連携研究者)西堀英治
公募研究(H20-H21) 配列ナノ空間の構造を決定する特異な手法
藤 秀樹 「NMRによる層状・籠状物質の低温量子状態の解明」
久保園 芳博「STMによるフラーレン空隙ならびにポリマーのナノ配列制御」
宇田川 眞行「オフセンター位置にあるゲスト原子のラマン散乱による微視的解明」
中野 智志 「B ₁₂ 配列ナノ空間物質の準静水圧力下での圧力応答と構造変化」
公募研究(H22-H23) 配列ナノ空間の構造を決定する特異な手法
柚原 淳司 「固体表面上の金属酸化物ナノメッシュを利用した半導体規則ナノドットの創製」
本多 史憲 「強相関カゴ状希土類化合物の電子状態の研究」
小手川 恒 「NMRによる層状・籠状物質の低温量子状態の解明」
中野 智志 「準静水圧下での構造変化測定による配列ナノ空間物質の特異な物性の解明」
金子 耕士 「中性子散乱による配列ナノ空間物質の構造解析」

[研究内容] ナノ構造を検出できる精密ナノプローブを適用して、ナノ物質系の局所構造および局所電子状態を解明する。

A04 配列ナノ空間物質の理論計算

ス 物性理論による配列空間物質の電子状態 (研究代表者)有田亮太郎 (研究分担者)青木秀夫、常行真司、丸山茂夫、草部浩一、三宅 隆
公募研究(H20-H21) 本特定の物性理論以外の手法の計算
白井 光雲 「二十面体構造のホウ素系物質による超伝導探索」

飯高 敏晃 「配列ナノ空間物質の構造、電子状態、機能の解析」
堂寺 知成 「多元高分子配列ナノ空間物質の構造設計と物性理論」

公募研究(H22-H23) 本特定の物性理論以外の手法の計算

山本 貴博 「配列ナノ空間物質の非平衡電子・熱物性理論とデバイスモデリング」
是常 隆 「フラーレン超伝導の第一原理的解析と新物質探索」
中村 淳 「ホモマテリアルヘテロ界面の周期配列制御によるメタマテリアルの創製」
白井 光雲 「二十面体構造のホウ素系物質による超伝導探索」
加藤 貴 「配列ナノ空間における特異な物性の解明と高機能デバイス開発における振電効果の役割」
中山 恒義 「オフセンター内包イオン間の長距離相互作用が誘起するカゴ状クラスレートの特異な物性」

[研究内容] 種々の計算手法を駆使して、配列ナノ空間物質の構造および電子状態を解明する。

A05 配列ナノ空間物質のデバイスへの展開

セ シリコン系配列ナノ空間物質を利用した次世代半導体デバイス
(研究代表者) 金山敏彦 (研究分担者) 多田哲也、宮崎剛英、内田紀行

ソ 配列ナノ構造を利用した量子メソスコピックデバイス
(研究代表者) 神谷利夫

タ 配列ナノ空間をもつカーボン構造体のエネルギーおよび太陽電池デバイス
(研究代表者) 京谷 隆 (研究分担者) 折笠広典、西原洋知

公募研究(H20-H21) 配列ナノ空間を利用した新しいデバイスの構想を有する研究

安井 寛治 「炭化ケイ素-高密度ゲルマニウムナノドット積層構造の形成と量子ドットレーザへの応用」
喜多 隆 「窒素配列ナノ構造の局所光応答とコヒーレントデバイス応用」

[研究内容] 配列ナノ空間物質の機能に注目して次世代デバイスへの可能性を探る。

8. 研究費の使用状況(設備の有効活用、研究費の効率的使用を含む)

研究費の使用状況

単位：千円	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度
総括班	4,800	9,200	10,100	9,200	13,300
A01	94,600	90,200	57,100	39,500	15,300
A02	5,760	66,300	63,500	46,600	24,900
A03	3,650	41,300	30,400	25,000	12,500
A04	2,270	15,400	18,200	13,600	9,100
A05	3,690	27,700	18,600	15,500	8,100
公募班		36,000	35,000	37,400	36,100

研究費の使用状況を以下に示す。

総括班:ホームページの作成支援、報告書編集・印刷・製本、領域会議の開催費用、若手研究者の領域会議出席のための旅費等に使用した。また、本特定領域研究が開始してから、計7回の総括班会議を開催して研究方針等の議論を進めた。平成21年5月には、中国北京で国際会議と連携して領域会議を開催するために、通年より百万円程度多い会議費を準備して使用した。

A01 配列ナノ空間を利用した物質創製:領域研究を先導する配列ナノ空間物質合成のために有用な装置を導入した。

- ・超高压発生マルチアンビルブロック(11,991,000円):現有の1000トンプレスに設置して、5~20 GPaの超高压を発生させることができるアンビルブロックである。
- ・有機合成装置 PPV 型一式(2,155,639円):最大4サンプルをそれぞれ希望の温度(-10~200°C)、同じ攪拌速度条件に設定することが可能であり、効率的にサンプル合成や反応条件の検討できる。

A02 配列ナノ空間物質の物性測定・評価:ナノ空間物質に特有な物性の測定のために、装置類を整備した。

- ・EDX エネルギー分散型 X 線分析装置(9,975,000円):ナノ構造中の元素組成を局所的に分析するための装置。新ナノ構造体の元素組成の定量に使用する。電子顕微鏡観察視野中の組成分析を行う。
- ・7テスラ高均一超電導マグネット M110NSS(18,356,100円):現有の磁化測定装置の超電導磁石を7Tの高磁場までの仕様とするアップグレードをすることにより、炭素ナノ空間でのスピン間相互作用について詳細な磁氣的性質の解明が可能となり、本特定領域研究の研究目的を達成することが出来る。

A03 配列ナノ空間物質の構造・電子状態:配列ナノ空間物質の精密測定するための装置開発に研究費を使用した。

- ・低波数レーザーラマン分光光度計 (13,919,850円):半導体クラスレートのゲスト振動が示す低波数域でのラットリングモードの検出のために使用している。これにより、これまで非常に困難とされてきた低波数ラットリング振動が、明確に観測される。
- ・スライドカバーホルダー(6,300,000円):大気中で不安定な合成試料を電子顕微鏡で分析する際、不活性ガス中でホルダーにセットし、大気に曝さず電子顕微鏡内へ試料を導入するための特殊試料ホルダー。
- ・液体窒素冷却システム (2,900,096円):示唆熱分析装置における室温以下での相転移現象を観測するための低温温度制御を行う。

A04 配列ナノ空間物質の理論計算:理論班共通の計算機環境の改善のために使用した。

- ・リアルコンピューティングシステム(4,010,832円):高速計算用数値計算・大規模ファイルを利用する計算用サーバー。
- ・高性能 PC クラスタ(6,961,500円):1ノードあたり2つのintel CPUを搭載した計算機を infiniband で10ノード連結したシステムで、配列ナノ空間物質に対する大規模数値計算を実行する。

A05 デバイスへの展開グループ

- ・ベクトルネットワークアナライザ(4,200,000円):物質・電子デバイスの電気特性をマイクロ波領域で測定する。
- ・3源スパッタ装置(7,854,000円):Si基板上への金属層の蒸着に用いる。本装置で作製した蒸着基板を用

い、この上に規則性細孔を有する炭素層を形成し、電極としての性能評価を行う。

9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度

本特定領域研究は、配列ナノ空間を利用した新物質を対象として新しい物性科学領域を開拓するための領域研究として設定した。1980年後半から1990年に渡る微細加工技術の進展と半導体技術の進展とは異なり、物質の有する配列ナノ空間という構造の特異性に着目して新物質系の開拓を戦略の主要な柱として、物性研究、構造研究、理論研究、応用への可能性の探求を含めた総合的な研究を推進することが大きな特徴である。配列ナノ空間を有する新物質を開拓するための新しい方法論ならびに開拓された物質から発現する物性を詳細に研究する新しい物質科学を目指すものであり、これらの基礎科学を基盤として、新物質の応用展開を考慮して、将来へ向けて発展させる事を趣旨とした世界においてもユニークな領域研究として設定した。

2007年に開始した研究は、研究構成として5年後を考えて新旧の研究者の調和がとれる様に配慮した。また、本領域の発足の当時は物性研究として多くの研究者が同一の目的をもって集まる研究領域として存在はしていなかった。本特定領域研究を始める際に最初に配慮した事は、関係する研究者を学際的な観点から集結する事であった。そのために、特異性と共通性という二つの要素を研究に取り入れた。また、評価委員の選定は非常に重要な意味をもっていた。伊達、上村、茅、新海という物質分野においては遺産ともいえる先生方を迎える事ができた事は、本特定領域の進展にとって極めて重要な事であった。

領域課題設定の共通性を配慮して、公募班の人数を比較的多く設定した事もあり、公募班の応募は前半2年間ならびに後半2年間ともに、100名を超える多くの研究者の方の応募を頂き、各期間に20名という計画研究班の数を超える若い研究者の方々にご参加頂けた。この事は、本領域研究の物性研究としての位置づけが大きく発展する基盤となった。また、本特定領域を他の研究領域との交流を促す事にも配慮した。その代表的なものが、秋光・福山の両先生が始められていた物性科学合同研究会を、両先生の援助のもとに幾つかの研究領域が参加して学際的な研究交流ができる場とする事であった。この合同研究会は、第2回目に正式な合同研究会としてその様な設定をする事ができ、本特定領域として第2回目(東京)、第5回目(仙台)と主催する事ができた。今では、6領域が参加する活発な研究会となっている。

また、世界を先導して新しい研究領域を発展させるために、第2回の領域研究会を中国北京ので開催されたISIC15と共催で開催する試みを行った。領域会議を海外で行った初めての例である。その効果があり、その後フランス、韓国、チェコと続いたISICの会議で本特定領域の研究が評価されてきたと感じている。2013年の第18回ISIC国際会議は、仙台で開催する事が国際組織委員会で決定された。東北地方関東大震災の影響はあるが、本研究領域の発展ならびに東北地方の復興のために、成功させたいと考えている。

本特定領域研究においては、新物質の創製と物性研究は重要な目標であるが、研究を推進するために、配列ナノ空間物質群の精密構造決定および種々の電子状態の測定技術ならびに基礎理論手法を大きく発展させることも同時に目標とした。また、実際に創製された新物質を次世代デバイス応用へと発展させることも念頭において、物質基礎理学を推進した。高圧極限下の精密測定や特殊な環境下の測定技術等が著しく進展した。理論においても大規模計算と現実規模の計算を埋める超原子的概念等の種々の手法が確立された。今後本分野が更に発展するばかりでなく他の分野の研究にとっても重要な発展がもたれられたと考えている。

ナノ領域の科学を発展させる研究の方向性は、物質科学における重要な潮流である。本特定領域研究により、日本から世界へ発信できる物質科学のニューパラダイムを形成し、新しい物質科学が創出される事を祈念している。

10. 研究計画に参画した若手研究者の状況

本特定領域研究は、計画班において新旧のバランスをとって研究グループを設定した。また、若手育成を念頭において、毎年様々な形で若手研究者が活躍できる環境を設定してきた。その甲斐があり、多くの若手研究者が様々な形で活躍されている。以下にその状況を記載する。

【計画班(2007年～2011年)】

野内亮(谷垣G共同研究者):2012年4月に東北大学WPI-AIMR助教より大阪府立大学テニュアトラック特任講師へ昇進。

平郡諭(谷垣G共同研究者):2010年10月付けで東北大学WPI-AIMRポスドクから東北大学理学研究科物理専攻助手に昇任。

池田進(谷垣G共同研究者):2010年11月に東北大学理学研究科物理専攻助教より東北大学WPI-AIMR准教授に昇任。2011年11月研究部門副部門長に昇任。

神谷利夫(研究代表者):2010/8/1付で東京工業大学応用セラミックス研究所セラミックス機能部門准教授から教授に昇任。2012/4/1より、日本学術振興会産学協力研究委員会透明酸化物光・電子材料第166委員会の委員長。

西原洋知(京谷G共同研究者):2011年8月1日付東北大学多元物質科学研究所助教から准教授に昇進。

佐藤庸平(寺内G共同研究者):H19年度に教育研究支援者として参画。H20年8月から助教に昇進。

松田和之(真庭G共同研究者):2011年4月1日付で首都大学東京物理学専攻助教から神奈川大学工学部准教授に昇進。

有田亮太郎(青木G共同研究者):青木代表より研究代表者へ交代。2010年10月付で理化学研究所研究員より東京大学工学研究科応用物理准教授に昇進。

野原善郎(有田G共同研究者):東大理学部物理ポスドクからドイツのマックスプランク研究所ポスドクへ異動。

青柳忍(澤G共同研究者):2009年SPring-8ビーム担当者より名古屋大学大学院工学研究科助教へ昇進。その後2011.4年名古屋市立大学大学院システム自然科学研究科准教授へ昇進。

五十嵐睦夫(野末G共同研究者):平成22年4月より群馬高専において准教授から教授へ昇進。

久米徹二(清水G共同研究者):清水教授退職に際して研究代表者に交代。H20.7.1付で岐阜大学工学部助教から岐阜大学工学部准教授へ昇進。

桐原和大(木村G共同研究者):2011年4月産業技術総合研究所ナノテクノロジー研究部門研究員から(独)新エネルギー産業技術総合開発機構・電子材料ナノテクノロジー部主任研究員へ昇進。

曾我公平(木村G共同研究者):東京理科大学基礎工学部准教授より2012年4月に同教授に昇進。

岡田純平(木村G共同研究者):東京大学大学院工学系研究科特任助教より2008年4月に(独)宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所助教へ昇進。

高際良樹(木村G連携研究者):東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程学生から2009年4月同助教へ昇進。

兵藤 宏(木村G連携研究者):東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程学生から2009年4月東京理科大学基礎工学部助教に昇進。

大石佑治(木村G連携研究者):東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程学生から2009年9月大阪大学大学院工学研究科助教へ昇進。

田邊健治(木村G連携研究者):東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程学生から2011年4月東京理科大学基礎工学部助教へ昇進。

宮崎吉宣(木村G連携研究者):東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程学生から2012年4月大阪大学大学院工学研究科特任研究員へ昇進。

内田 紀行(金山G共同研究者):筑波大学数理物質科学研究所助手(任期付き)から(独)産業技術総合研究所研究員に正式採用。

【前期公募班(2008年4月～2009年3月)】

安井 寛治研(究代表者):2010年4月1日付で長岡技術科学大学電気系准教授より教授に昇進。

出倉春彦(白井G連携研究者):2010/4/1大阪大学博士課程修了後、愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センターポスドク研究員。

撰待力生(研究代表者):大阪大学大学院理学研究科・准教授から2012年4月に新潟大学理学部物理学科・教授へ昇進。

田村隆治(研究代表者):2010年4月に東京理科大学基礎工学部材料工学科講師より准教授に昇進。

【後期公募班(2010年4月～2011年3月)】

中村淳(研究代表者):2012年年4月1日付で電気通信大学大学院准教授から教授に昇格。

山本貴博(研究代表者):東京大学工学系研究科助教から2011年4月東京理科大学工学部講師に昇進。

金子耕士(研究代表者):2010年4月に日本原子力機構研究員より研究副主幹に昇格。

本多史憲(研究代表者):2011年4月に大阪大学理学研究科助教より大阪大学基礎工学研究科特任准教授へ昇格。

11. 総括班評価者による評価の状況

評価委員各位には本領域の領域会議にご参加頂き、本領域に対する期待と考慮すべき問題等を領域研究者にご指導頂いた。また各領域会議において各班代表者に全体の研究の進捗状況の講演をして頂き、それに対して今後の課題等に関して意見を述べて頂いた。さらに機会がある毎に随時研究に関する総括班の相談に対して助言を頂いた。その中で、本領域は従来にはない特色を有するので、研究分野を世界視野で推進するとともに世界のトップとして先導する成果を期待しているとの期待を頂いた。

伊達評価委員においては、ご自身の極限環境下における研究推進経験から、配列ナノ空間物質に対する極限環境下での研究の取り組みを真剣に考えることを助言された。特に新物質が創製された場合、様々な極限環境を利用して研究を推進する重要性を述べられている。極限環境が物性理解に役だった事例としてゼオライト磁性の研究があり、磁性の電子状態を理解するための重要な知見が得られたことを評価して頂いた。また、新しい事に取組む上でチャレンジ精神と学際分野間に連携の重要性をご指示して頂いた。

上村評価委員はご自身の経験からナノ炭素系物質の研究の発展経緯と重要性を指摘された。特に強調されるのは新物質の発見が多くの新しい物性研究の道を開くということで、炭素系インターカレーション物質の研究を例に出された。その立場に立ち、III,IV族物質から構成される配列ナノ空間物質の発展に期待を述べられた。また、研究会において実験と理論に橋をかけて議論するコンピュータ科学が大きく進歩しているので、二つの融合により新しい真実が見えてくる事を強調された。上村評価委員が自筆でご指摘下さった言葉を図18に示す。この図を絶えず心に留めながら研究を推進した。

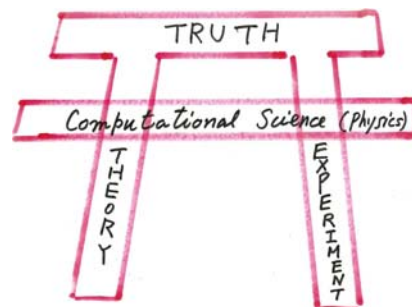


図18. 研究分野の連携の重要性

茅評価委員からは、ナノクラスターの研究の経緯を背景に本分野の発展が科学の発展に大きく貢献する期待を述べられた。特に、ご自身の研究経験からナノ物質の空間が持つ特異性を十分に活用した新しい研究の展開を進めることを強調された。量子閉じ込め効果を利用した非磁性元素から発現するスピン配列(強磁性ならびに反磁性)に関しては、理論的にも実験的にも大きな進展があったことに意義を述べられた。本特定領域分野は、従来に例をみない研究分野なので、是非今後も何らかの形で親展をされる事が重要であるとのご意見を頂いた。

新海評価委員からは、クラスター物質の発展と他の物質の界面の重要性に関して指摘を受けている。特に化学合成研究者の立場から、ユビキタス元素戦略を単なる言葉の遊びではなく、有効かつ分かり易い形で真摯に展開する必要性を強調された。

以下に頂いた重要な助言を列記する。

- ・ 特色のある本研究領域の重要性を世界的に発信することは重要なことである。
- ・ 本特定領域研究は、班員が多くの分野にまたがるので、相互の研究関係を築くことに注意しながら研究を遂行して頂きたい。
- ・ 炭素系物質に関しては、以前のグラファイトインターカレーションの活発な研究を思い出す。ナノ物質領域で新たな展開を拓く様な研究の発展を築いてほしい。
- ・ 配列ナノ空間物質の様な新しい物質は、特別の研究手法の適用が必要である。研究手法の発展という観点から、ぜひ新しい取り組みを行ってほしい。
- ・ 着実に成果を出すことにとらわれすぎて、リスクのある斬新な試みを避けてはいけない。バランスはもちろん大事であるが、5年という長期の期間を考えてリスクの大きな課題にも一貫して取り組んで頂きたい。
- ・ 配列ナノ空間物質に関する基礎研究という側面と次世代デバイスへの展開という応用研究の側面を両立させることは難しいが、果敢にチャレンジしてみたい。
- ・ 特殊な施設、例えば放射光施設(KEK,SPring-8)、強磁場・極低温施設(物性研)等の全国共同施設を利用して、最新の測定技術を取り入れた研究を展開してほしい。
- ・ いくつかの困難な課題を整理し、領域研究者間の相互の協力体制を工夫して頂きたい。
- ・ 特定領域研究の様な立場の研究では、将来に発展性のある大型研究成果を必ず一つは出すことが重要である。細部にとらわれず、果敢にチャレンジして頂きたい。
- ・ 配列ナノ空間およびユビキタス元素戦略等のキーワードが本特定領域の特徴となっているが、言葉だけではなく、実際の研究項目との関係から具体的なリンクを明確にすることが重要である。

評価委員の方々から、様々な言葉で本分野の物質科学分野におけるユニークさと今後の期待への言葉を頂いた。