

領域略称名：機能コア科学

領域番号：6103

令和3年度科学研究費助成事業  
「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
に係る中間評価報告書

「機能コアの材料科学」

領域設定期間

令和元年度～令和5年度

令和3年6月

領域代表者 名古屋大学・工学研究科・教授・松永 克志

# 目 次

## **研究組織**

- |   |                |   |
|---|----------------|---|
| 1 | 総括班・総括班以外の計画研究 | 2 |
| 2 | 公募研究           | 3 |

## **研究領域全体に係る事項**

- |    |                        |    |
|----|------------------------|----|
| 3  | 研究領域の目的及び概要            | 5  |
| 4  | 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況 | 7  |
| 5  | 研究の進展状況及び主な成果          | 9  |
| 6  | 研究発表の状況                | 14 |
| 7  | 研究組織の連携体制              | 19 |
| 8  | 若手研究者の育成に関する取組状況       | 20 |
| 9  | 研究費の使用状況・計画            | 21 |
| 10 | 今後の研究領域の推進方策           | 22 |
| 11 | 総括班評価者による評価            | 24 |

**研究組織**

(令和3年6月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

**1 総括班・総括班以外の計画研究**

| 研究項目[1]                            | 課題番号<br>研究課題名                  | 研究期間                | 研究代表者<br>氏名 | 所属研究機関・部局・職                          | 人数<br>[2] |
|------------------------------------|--------------------------------|---------------------|-------------|--------------------------------------|-----------|
| X00<br>総                           | 19H05785<br>機能コアの材料科学          | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 松永 克志       | 名古屋大学・工学研究科・教授                       | 8         |
| A01<br>計                           | 19H05786<br>機能コアのモデリング         | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 松永 克志       | 名古屋大学・工学研究科・教授                       | 3         |
| A01<br>計                           | 19H05787<br>情報科学による機能コア計算設計    | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 溝口 照康       | 東京大学・生産技術研究所・教授                      | 4         |
| A02<br>計                           | 19H05788<br>界面機能コア解析           | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 柴田 直哉       | 東京大学・大学院工学系研究科・教授                    | 6         |
| A02<br>計                           | 19H05789<br>表面機能コア解析           | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 阿部 真之       | 大阪大学・基礎工学研究科・教授                      | 3         |
| A03<br>計                           | 19H05790<br>高温高压プロセスによる新材料機能創出 | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 遊佐 斉        | 国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・グループリーダー | 4         |
| A03<br>計                           | 19H05791<br>界面制御による高機能薄膜材料創製   | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 太田 裕道       | 北海道大学・電子科学研究所・教授                     | 3         |
| A03<br>計                           | 19H05792<br>耐熱・耐環境セラミックスの高機能化  | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 北岡 諭        | 一般財団法人ファインセラミックスセンター・材料技術研究所・主幹研究員   | 3         |
| A03<br>計                           | 19H05793<br>高機能固体イオニクス材料の創出    | 令和元年度<br>～<br>令和5年度 | 平山 雅章       | 東京工業大学・物質理工学院・教授                     | 3         |
| <b>総括班・総括班以外の計画研究 計 9 件（廃止を含む）</b> |                                |                     |             |                                      |           |

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

## 2 公募研究

| 研究項目[1]  | 課題番号<br>研究課題名   | 研究期間                | 研究代表者<br>氏名 | 所属研究機関・部局・職                | 人数<br>[2] |
|----------|---|---------------------|-------------|----------------------------|-----------|
| A01<br>公 | 20H05190<br>第一原理量子応力場解析による磁性強誘電欠陥機能の解明                        | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 嶋田 隆広       | 京都大学・工学系研究科・准教授            | 1         |
| A01<br>公 | 20H05192<br>電子線エネルギー損失分光の機械学習モデルを用いた機能コア解析                    | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 池野 豪一       | 大阪府立大学・工学系研究科・准教授          | 1         |
| A01<br>公 | 20H05195<br>ナノスケール界面におけるフォノン熱輸送の理論解析                          | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 藤井 進        | 大阪大学・工学研究科・助教              | 1         |
| A02<br>公 | 20H05176<br>ナノ電子プローブを用いた電子密度分布解析による機能コアの電場応答解明                | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 森川 大輔       | 東北大学・多元物質科学研究所・助教          | 1         |
| A02<br>公 | 20H05178<br>走査プローブ顕微鏡を用いたシリコン単原子層の局所計測                        | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 杉本 宜昭       | 東京大学・新領域創成科学研究科・准教授        | 1         |
| A02<br>公 | 20H05179<br>単一原子センサによる機能コアのサブオングストロームスケール物性評価                 | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 宮町 俊生       | 名古屋大学・未来材料・システム研究所・准教授     | 1         |
| A02<br>公 | 20H05196<br>多孔結晶内カチオンコアの蛍光発現機構の解明                             | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 吉田 要        | ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所・研究員 | 1         |
| A03<br>公 | 20H05180<br>酸素欠損を利用した電気化学反応促進機構の研究                            | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 八木 俊介       | 東京大学・生産技術研究所・准教授           | 1         |
| A03<br>公 | 20H05181<br>機能コアとして蛍光性カルボン酸を置換固溶した光機能性リン酸八カルシウム結晶の創製          | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 横井 太史       | 東京医科歯科大学・生体材料工学研究所・准教授     | 1         |
| A03<br>公 | 20H05183<br>界面を制御した SrTiO <sub>3</sub> 上の単層 FeSe 薄膜の高温超伝導特性解明 | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 平原 徹        | 東京工業大学・理学院物理学系・准教授         | 1         |
| A03<br>公 | 20H05184<br>アパタイト型氧化物イオン伝導体の高イオン伝導度の構造的要因解明と新材料の創出            | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 藤井 孝太郎      | 東京工業大学・理学院化学系・助教           | 1         |
| A03<br>公 | 20H05185<br>電場によって誘起されるドメイン界面の解明とそれを用いた機能発現                   | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 清水 荘雄       | 物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・独立研究者  | 1         |

|                     |   |                     |       |                    |   |
|---------------------|---|---------------------|-------|--------------------|---|
| A03<br>公            | 20H05186<br>高速化学気相析出法を駆使して導入した欠陥構造を高効率発光源とする透明蛍光体   | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 伊藤 暁彦 | 横浜国立大学・環境情報研究院・准教授 | 1 |
| A03<br>公            | 20H05187<br>シリコンベース化合物半導体の機能コアを利用した新規高性能薄膜太陽電池構造の開発 | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 黒川 康良 | 名古屋大学・工学系研究科・准教授   | 1 |
| A03<br>公            | 20H05188<br>I V族混晶結晶粒界で生じる特異なキャリア・フォノン散乱の機構解明と制御    | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 黒澤 昌志 | 名古屋大学・工学系研究科・講師    | 1 |
| A03<br>公            | 20H05189<br>ナノ構造体の局所力学場制御によるバレートロンクスデバイスの創製         | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 蒲 江   | 名古屋大学・工学系研究科・助教    | 1 |
| A03<br>公            | 20H05191<br>ナノドットを用いた機能コア界面制御法に基づく高性能透明熱電材料の開発      | 令和2年度<br>～<br>令和3年度 | 石部 貴史 | 大阪大学・基礎工学研究科・助教    | 1 |
| 公募研究 計 17 件 (廃止を含む) |   |                     |       |                    |   |

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

## 研究領域全体に係る事項

### 3 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

#### 研究の学術的背景

人類文明の発生以来、環境エネルギー・社会基盤・情報通信などの各分野で新材料が開発され、文明社会の発展を支えてきた。近年、社会の複雑化・多様化が急激に進み、材料の高性能化・高機能化・高信頼性化に対する要求がますます高くなっている。材料の基礎から応用までをカバーする材料科学は、その期待に応えるための欠かせない学問分野となっている。しかし現在、材料科学にもとづく新材料開発には停滞感が漂っている。経験やノウハウにもとづき行われてきた、伝統的な経験知にもとづく材料開発に限界が来ているためである。この状況を打破するには、既存の材料・プロセスの延長線上でない、幅広い学問分野を融合した、新しい観点に立った学問体系の構築が切望される。

従来の材料科学研究では、材料内部の「バルク領域」の平均的構造と巨視的特性を主たる対象としていた。平衡状態図や自由エネルギー、結晶構造等の経験的データベースにもとづき、材料開発が行われてきたためである。これに対し、近年、電子顕微鏡技術や計算科学が著しく発展し、材料の構造や安定性を原子レベルから高精度に解析することが可能となった。その結果、粒界・転位などの結晶中の「格子不整合領域」（結晶欠陥）が「バルク」と全く異なる原子配列をもち、様々な材料現象や特性と密接に関係していることが明らかにされてきた。しかし、偶発的な成功例は別にして、**結晶欠陥を高度に制御して材料特性を飛躍的に向上させた、革新的な材料開発につながった、という例はほとんど存在しない。**この原因は、従来研究の多くが個別の結晶欠陥の構造解析を行った研究であり、**結晶欠陥の原子レベル構造と局所特性の関係に対する系統的理解が確立されていないためである。**

格子不整合領域にもとづく新しい材料科学を構築し、革新的な新材料機能創出につなげていくには、特定の結晶欠陥の原子レベル構造解析に留まるのではなく、結晶欠陥のナノ構造を系統的に制御し、さらに機能の起源まで掘り下げた研究を行う必要がある。**結晶欠陥の機能は、そのバルクと異なる原子配列と局所的な化学組成に加え、そこに局在した電子、電子と相互作用する電磁場、光子、フォノン等によって形成される量子場を起源とする。**機能発現の源となる格子不整合領域に創り出されるこの量子場こそ、本領域の研究対象とする「**機能コア**」である。

**本領域の目的と、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか**

これまでの材料科学や物性科学において、「機能コア」という観点での研究は存在せず、その幾何学的構造の制御、光や電磁場といった外場の制御により、**新奇な材料機能の創出や材料開発を行うアイデアはなかった。**材料特性の起源となる機能コアをデザインし、それを実材料にビルトインできれば、既存の材料・プロセスの延長線上にない、常識を超えた材料特性の発現が期待できるとの構想の下、**本新学術領域は「機能コアの材料科学」の基礎学理を構築し、それに基づいた新材料機能創出および新材料創製を実現することを目的とする。**

「機能コアの材料科学」領域の発展が期待できる理由としては、本領域メンバーによる結晶欠陥、ナノ計測、計算科学の最近の研究において、大きな学術的進歩があったことが挙げられる。例えば、線状

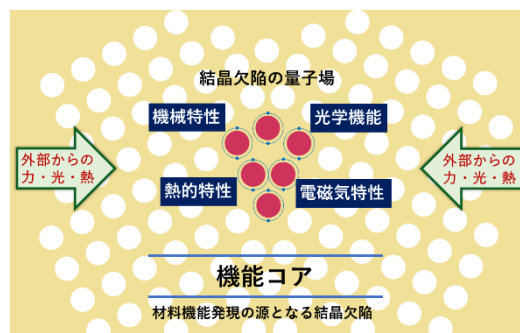


図1 機能コアとしての結晶欠陥

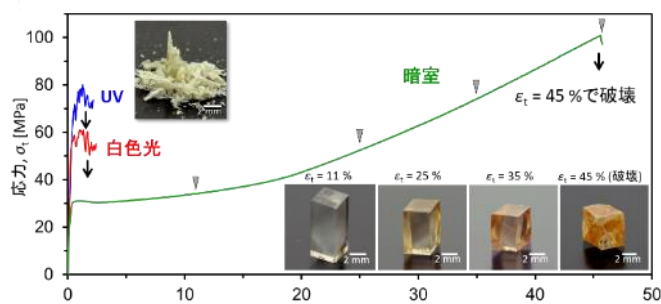


図2 ZnS 結晶の暗室下での巨大変形能

の結晶欠陥である転位（Dislocation）に関わる研究では、単に可視光を当てるかどうかだけで、硬くて脆い無機化合物結晶を、金属並みに柔らかくしなやかに変形・加工することができることを見出した（Oshima et al., *Science* 2018、図 2）。この現象は、転位コアにおける電子と光子との相互作用、つまり転位機能コアが重要因子となっている（Matsunaga et al., *Acta Mater.* 2020）。これらはいずれも、従来の材料科学で用いられてきた転位論や弾性論の枠組みを超えた材料現象である。

また、ナノ構造解析技術の発展も機能コアの材料科学の構築には必要不可欠であることはいうまでもない。その最たるものが、近年の収差補正走査型透過型電子顕微鏡（STEM）法の発展である。局所の原子サイトを特定できるだけでなく、不純物やドーパントの存在位置・濃度に関する定量情報までが得られるようになった。本領域のメンバーは、酸化物粒界の粒界コア構造と材料特性解明（Shibata et al., *Science* 2007; Shibata et al., *Nature Mater.* 2009 等、図 3)のように、世界を先導する研究成果を挙げている。さらに最近では、分割型 STEM 検出器の独自開発により、微分位相コントラスト(DPC)STEM 法による局所的な電磁場の可視化にも成功している（Shibata et al., *Nature Phys.* 2012, *Nature Comm.* 2017）。この手法により、構成原子の原子内電場の観察が可能となる（図 4）。つまり、機能コア内の物理場・量子場も可視化できる段階に到達しつつある。

ナノ計測技術に沿うように、計算科学も大きな発展を遂げている。具体例として、第一原理計算と機械学習との組み合わせにより、結晶粒界・界面の原子レベル構造を高速・高精度に決定する手法の開発（Kiyohara et al., *Science Adv.* 2016、図 5）、低熱伝導材料の探索（Seko et al., *Phys. Rev. Lett.* 2015）、プロトン伝導機構の高効率解析法の開発（Toyoura et al., *Phys. Rev. B* 2016）など、マテリアルズ・インフォマティクス手法の開発と応用でも、本領域メンバーは先鞭をつける研究成果を挙げている。これらの手法により、これまで多大な計算時間（数か月）を有した複雑な結晶欠陥の安定構造決定を、精度を損なうことなく短時間（数時間内）に行うことができるようになってきた。

以上のように、結晶欠陥由来の特異物性の発見、ナノ構造解析手法と計算科学技術の最近の著しい発展がなされてきた今こそ、本領域「機能コアの材料科学」に取り組むべき段階にあるといえる。これらを実現しうるナノ材料科学で実績ある研究者群が集う本領域こそ、「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」である。

### 領域設定期間終了後に期待される成果

結晶の格子不整合領域を制御した、新規な材料機能創出を行うための基礎学理が、第 1 に期待される成果である。機能コアの学理を駆使し、計画班に挙げた各材料分野での材料の高機能化もしくは新材料創出が第 2 に期待される成果である。さらに本領域研究を通じ、計算解析技術、評価・計測技術、材料合成手法など、各要素技術の高度化や飛躍的発展が、期待される第 3 の成果である。

### 期待される学術的又は社会的意義・波及効果

機能コアという新概念のもとに、粒界や界面、転位などの結晶欠陥を利用した材料機能向上および新材料機能創出が達成できれば、学術的に大きなインパクトを与える。これまでの結晶欠陥は材料機能における“悪玉”とされてきたが、これを“善玉”として積極的に活用するという発想の転換がなされるためである。これを端緒にして、企業共同研究や JST 等の応用プロジェクトに移行し、社会実装へ加速されれば、産業界にも大きなインパクトを与える。機能コアの材料科学は、材料科学・材料技術レベルで世界的に優位にあるわが国が先導して開拓すべき学術分野である。

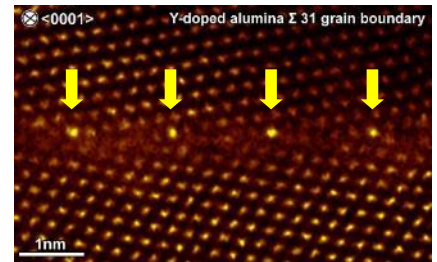


図 3 粒界偏析元素の配置同定

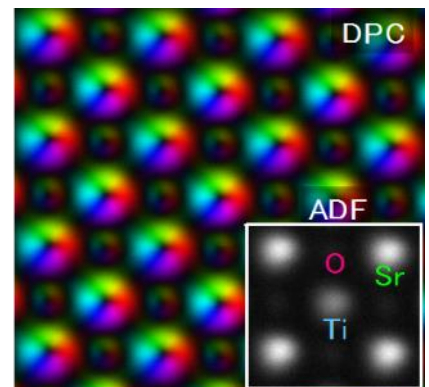


図 4 個々の原子内電場の直視

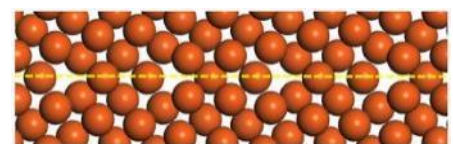
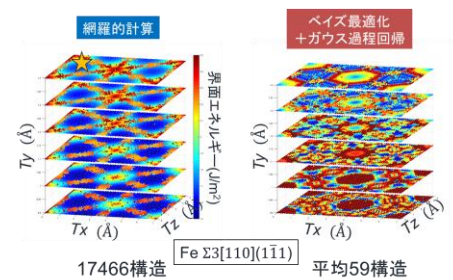


図 5 情報学による粒界構造決定



#### 4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、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、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

##### 【指摘事項1】

「機能コア」という用語の定義が一般にはやや分かりにくく、「コア」の認識についても各計画研究間で幾分、差があるように思われるため、学理の構築及び社会への成果発信に当たって、十分な検討を要望する。

##### 対応状況1

本指摘事項を受け、採択後、領域代表者および計画研究班研究代表者と幾多の議論を交わした。その結果、指摘を受けた「コアの認識の差」を解消するため、「機能コア」概念を基軸として、各研究項目の目的と役割、領域内共同研究を再整理することが必要との結論に達した。そこで8名からなるタスクフォース(A01(ア)松永、中村、星野(大学院生)、A02(ウ)柴田、石川、馮、A03(カ)太田、A03(キ)吉田)を設置し検討した結果、本領域で展開している共同研究は、結晶欠陥の機能によって次の5つに分類することができることが判明した。光物性に関する**光機能コア**、力学物性に関わる**力機能コア**、熱物性に関わる**熱機能コア**、電磁気物性に関わる**電磁気機能コア**、イオン伝導・輸送に関わる**イオン機能コア**、である(図6)。

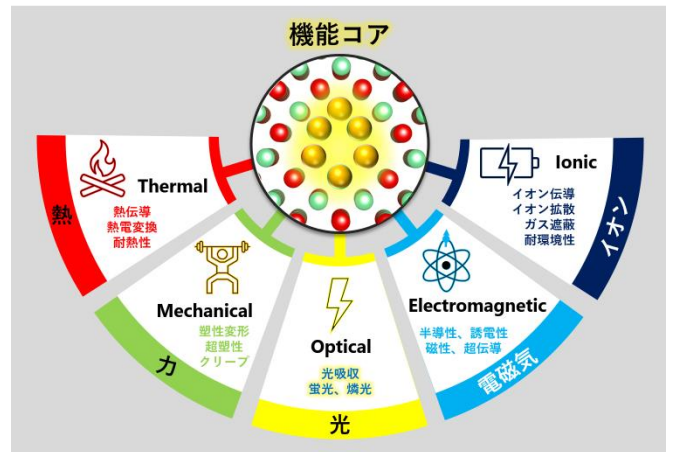


図6 機能コアの分類

5つの機能コア分類に従って、計画研究班・第1期公募研究班を分類したのが図7である。これまでの材料科学が辿った歴史と同じく、これまでの結晶欠陥研究は、半導体や金属、セラミックスなどの材料分野による縦割りで実施されてきた。しかし、5つの機能コアに基づく本領域研究は、研究手法や研究対象、材料分野に捉われず、分野横断的な概念であることが浮き彫りとなった。まさに、**従来の材料科学に横串を刺す概念が「機能コアの材料科学」である**。学理の構築にあたって、5つの分類は学理の柱となることは言うまでもない。

現在では、「5つの機能コア」を**共通の志**として、総括班主導で連携・共同研究を行うように指導し、活発な連携および共同研究を進めていく。

|  新学術領域研究(研究領域革新型) 令和元年-令和5年<br><b>機能コアの材料科学</b><br>NEW MATERIALS SCIENCE ON NANOSCALE STRUCTURES<br>AND FUNCTIONS OF CRYSTAL DEFECT CORES |              |              | 研究対象とする機能コア |   |   |     |     |
|--|--------------|--------------|-------------|---|---|-----|-----|
|  |              |              | 光           | 力 | 熱 | 電磁気 | イオン |
| 研究項目   | 研究班・代表者      | 研究手法・対象材料    |             |   |   |     |     |
| A01<br>機能コアの理論解析   | (ア) 松永(名大)   | 第一原理計算・モデル実験 | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | (イ) 溝口(東大)   | 材料インフォマティクス  | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | 公募研究         |              |             | ● | ● |     |     |
| A02<br>機能コアのナノ計測   | (ウ) 柴田(東大)   | 原子直視電子顕微鏡    | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | (エ) 阿部(阪大)   | 走査プローブ顕微鏡    | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | 公募研究         |              |             | ● |   | ●   | ●   |
| A03<br>機能コア制御に基づく<br>新材料機能創出   | (オ) 遊佐(NIMS) | 硬質材料、蛍光体     | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | (カ) 太田(北大)   | 高熱電能薄膜       | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | (キ) 北岡(JFCC) | 高温耐環境セラミックス  | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
|  | (ク) 平山(東工大)  | 固体イオニクス      | ●           | ● | ● | ●   | ●   |
| 公募研究   |              |              | ●           | ● | ● | ●   | ●   |

図7 機能コアに基づく領域内研究の分類



## 対応状況 2

社会への成果発信に際しても、「機能コア」の定義・認識を明確にすることが望ましいとの指摘を受けた。材料科学や物性科学に関わる研究者や大学院生レベルではなく、より広く国民に本領域活動を周知することは、科学研究費による研究活動に強く求められている。そこで上述のタスクフォースでも議論を重ね、本領域の YouTube チャンネルおよび Twitter を開設し、なるべく平易な形式でかつタイムリーに、本領域のいう「機能コア」の概念や領域内活動を告知する動画を紹介している (図 8)。



図 8 本領域の成果発信の一例

### 【指摘事項 2】

**研究上かつ産業上、重要なシリコンへの取組も、公募研究で補強されることを期待したい。**

### 対応状況

本領域では、材料科学において構造解析研究の対象とされてきた結晶欠陥について、そのコア構造を機能発現の源 (=機能コア) と再定義し、系統的な基礎研究を行い新しい材料科学を構築する。機能コアという概念を、特定の分野に限定されない普遍的共通概念として確立するには、主要な材料分野の研究者との集中的な共同研究が欠かせない。そこで計画研究班に、環境・エネルギー関連材料として重要な光機能材料、エネルギー変換材料、耐熱・耐環境材料、固体イオニクス材料を選択し、各分野で高い研究実績を挙げている若手・中堅研究者を配置し、新材料機能の創出および新材料創製を目指している。

これに加え、指摘事項 2 は、本研究の波及効果の観点から、産業界にとって重要な機能材料として、シリコンおよびその関連材料を用いたエレクトロニクスへの展開を推奨するものである。そこで、令和 2 年度第 1 期公募研究で同分野からの研究提案を募るべく、計画研究班の研究代表者・研究分担者らが、本新学術領域の研究目的や公募研究募集の周知を積極的に行った。具体的には、領域内研究者が、金属学会やセラミックス協会だけでなく、応用物理学会などでの講演時に本領域を紹介、物性科学に関わる新学術領域研究から構成される「物性科学領域横断研究会」への参画とそこでの本領域紹介、公募要領にも掲載される「研究概要」の印刷物配布・PDF ダウンロードなど、広くアナウンスすることに努めた。

その結果、多数のシリコンおよび関連するエレクトロニクス研究提案を得ることができた。厳正な審査の結果、下の表に示すように、各研究項目に計 4 件の同分野に関する公募研究を採択できた。これらの公募研究者とは、遠隔連携会議および個別のオンライン研究打合せを通じて、領域研究者と連携を図っており、すでに共同による学術論文発表に至ったもの、領域内のモデル試料センターを通じた双結晶基板を用い、Si 薄膜の熱電性能や太陽電池性能評価を実施中の課題など、公募研究開始から 1 年ほどの短い研究期間にも関わらず、綿密な連携研究を進めている。

表 第 1 期公募研究におけるシリコンおよびその関連材料に関する採択課題

| 研究項目 | 所属           | 研究代表者 | 研究題目                                    |
|------|--------------|-------|---|
| A01  | JFCC (現大阪大学) | 藤井 進  | ナノスケール界面におけるフォノン熱輸送の理論解析                |
| A02  | 東京大学         | 杉本 宜昭 | 走査プローブ顕微鏡を用いたシリコン単原子層の局所計測              |
| A03  | 名古屋大学        | 黒川 康良 | シリコンベース化合物半導体の機能コアを利用した新規高性能薄膜太陽電池構造の開発 |
| A03  | 名古屋大学        | 黒澤 昌志 | I V 族混晶結晶粒界で生じる特異なキャリア・フォノン散乱の機構解明と制御   |

## 5 研究の進展状況及び主な成果

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

### (1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか

#### 領域設定期間全体における目的

本領域研究は、結晶欠陥のもつ特徴的な原子レベル構造と、そこに内包される電子やフォノン、フォトンが創り出す局所的な物理場(=量子場)を「機能コア」と定義し、「機能コアの材料科学」の基礎学理構築と、それに基づいた新材料機能創出および新材料創製を目的とする。

本領域を推進するにあたっての、**基本的な研究戦略と、そのために設定した研究項目の役割**は以下の通りである。

- ① 粒界や界面、転位などの機能コアの構造—機能相関に関する基礎学理を構築するため、世界最高水準の電子状態計算、モデル実験、ナノ計測を三本柱とし、そこに関わる研究者が一体となって研究推進する。そのための研究項目として、A01とA02を設置する。
- ② 上記で明らかにする高機能コアを実材料にビルトインし、材料の高機能化を実証する研究項目としてA03を設ける。A03は、高圧や高温合成、その他特殊な物理場を利用した合成プロセス、原子層単位での薄膜合成など、単にバラエティに富むだけでなく、国際的にも学術的優位性が高い材料合成技術を駆使する研究者で構成する。
- ③ 機能コアを新しい材料科学として昇華させるため、公募班を置き、研究適用分野の拡大や新しいアイデアの発掘を行う。

#### 各研究項目における中間評価実施時までの進捗目標と進捗状況

##### 研究項目 A01 機能コアの理論解析(計画研究班2班、公募研究3班)

第一原理計算、情報科学にもとづく計算解析に加え、粒界や転位のモデル試料の創製・解析を行い、A02と連携して計算・実験の両面から機能コアの構造と機能のモデル化を目指す。中間評価までは、「機能コアの材料科学」学理の礎となる、機能コアの素性と材料特性の関係解明を目的としてきた。現段階では、**酸化物粒界コアによる熱伝導散乱機構の解明**(*Nature Commun.* 2020) : A01(ア)+公募班連携)、**化合物半導体結晶中の転位—光相互作用解明と特異発光現象の発見**(*Acta Mater.* 2020, *Nano Letters.* 2021) : A01(ア)+A02(ウ)+公募班連携)、**機械学習を利用した機能コア構造の高速決定法の開発と公開**(*Phys. Rev. Mater.* 2020 : A01(イ)+公募班連携)など、多くの学術的にインパクトのある成果が挙げられている。また、本領域で開発したデータベースやソフトウェアの整備と一般への公開も進めた。

##### 研究項目 A02 機能コアのナノ計測(計画研究班2班、公募研究4班)

世界最先端の分解能を有する電子顕微鏡および非接触原子間力顕微鏡等を駆使し、材料内部の粒界・界面、表面解析を行う。A01の理論解析・モデル試料合成と連携しながら、機能コアの原子レベル構造や電子状態を解明することを目的とする。中間評価までは、機能コアである結晶欠陥の構造および物理場計測手法の先鋭化を行うとともに、機能コアの素性と材料特性に関する重要な知見を発掘することを目的としてきた。**世界初の酸化物粒界移動機構の原子レベル直接観察**(*Nature Mater.* 2021 : A02(ウ)+A01(ア)連携)、**酸化物粒界バンドギャップの定量計測**(*Nano Letters.* 2020 : A02(ウ)+A01(ア)+A03(キ)連携)、TiO<sub>2</sub>光触媒表面の線欠陥構造と荷電状態の解明(A02(エ)+A01(ア)連携)など、機能コアの量子場に関する画期的成果を得ることに成功した。

##### 研究項目 A03 機能コア制御にもとづく新材料機能創出(計画研究班4班、公募研究10班)

各種プロセスを活用した多様な材料創製への展開を行うだけでなく、機能コアによる機能発現機構に関する知見をA01、A02にフィードバックして、学理構築をサポートする。中間評価までは、各計画班が得意とする材料を主たる対象とした研究を推進しつつ、A01、A02と連携しながら機能コアの解析と制御による材料特性の向上や新機能発掘を目指してきた。これまでに、**新規Eu賦活アルミン酸蛍光体の高圧合成**(A03(オ)+A01(ア)連携)、**過去最高の室温熱電変換性能指数を示す酸化物の開発**(*J. Mater. Chem. A* 2020 : A03(カ)+A02(ウ)連携)、**高電磁場合成による酸化物セラミックスの超塑性発現や蛍光特性開発**(*J. Euro. Ceram. Soc.* 2020, *Appl. Phys. Exp.* 2020 : A03(キ)+A03(オ)+A02(ウ)連携)、**硫化物リチウムイオン伝**

導体の高性能化 (Chem. Mater. 2020, J. Mater. Chem. A 2020 : A03(ク)+A01(イ)+A02(ウ)+公募班連携)、蛍光有機分子挿入による生体用リン酸カルシウムの高機能化 (Commun. Chem. 2021 : 公募班-A01(ア)連携)、などに成功している。いずれも、多様な材料分野における「機能コア」概念の重要性を実証する学術的に価値の高い成果である。現在も、計画班・公募班との多数かつ多様な共同研究を精力的に進めている。

以上のように、領域発足から2年間、発表された学術論文は155報、うちNature系列誌は9報、高インパクトファクター誌 (IF=10以上 : Nano Letters, ACS Nano, Chem. Mater., J. Mater. Chem. A 等) は22報であり、数多くの学術的価値の高い成果が得られている。

## (2) 本研究領域により得られた成果

### 研究項目 A01 機能コアの理論解析

#### A01(ア) 機能コアのモデリング

##### ● 結晶粒界の熱伝導度の定量予測手法開発 : 公募班との連携

計算材料科学と機械学習を融合することで、結晶粒界の熱伝導度を局所原子配列から直接的に予測するモデルの構築に成功し、粒界の熱機能コアとしての役割が解明できた。これにより、熱伝導度を制御するための粒界設計が可能となった。さらには、結晶中の転位についても応用できる手法・概念であることも示した (図9)。この成果は、熱電変換材料や耐熱材料の設計、電子デバイスの性能向上に応用できる (Nature Commun. 2020, Scripta Mater. 2021)。

##### ● 半導体中転位の力学的・光学的機能 : A02(ウ)+公募班との連携

第一原理計算、モデル試料実験、電子顕微鏡解析の連携により、化合物半導体結晶における転位と照射可視光の相互作用メカニズムの解明 (転位コアでの静電場形成) に成功した (図10上)。さらに、すべり転位が蛍光・燐光を示す現象を見出した (図10下)。転位は外力に応答する力機能コアとしてのみならず、光物性にも関わる光機能コアとなりうることを示す成果である。(Acta Mater. 2020, Nano Letters 2021, +論文投稿中)

#### A01(イ) 情報科学による機能コア計算設計

##### ● 機械学習を利用した機能コア構造の高速決定法の開発と公開 : 公募班との連携

機能コア解析のための大規模計算を、効率的かつ高精度に実施するために、高精度な機械学習原子間ポテンシャル (MLIP) を開発してきた。現在までにSiやTi-Al合金系など49種類のMLIPを開発し (Phys. Rev. Mater. 2020)、web上で公開している (<https://sekocha.github.io/>)。これを活用した研究として、高温でのSi界面の構造安定性や熱伝導特性の解析を行い、熱機能コアとしての同粒界の役割を明らかにした (図11)。

##### ● 推薦システムに基づいたイオン伝導物質探索 : A03(ク)との連携

情報科学的手法である推薦システムを導入し、新規リチウムイオン導電体を探索した。実証実験にも成功し物質探索効率の劇的な高効率化を実証した (J. Mater. Chem. A 2020)。イオン機能コア設計に有用な手法である。

#### A01 公募研究 (嶋田、池野、藤井)

独自開発している第一原理量子応力場解析法によって、力・電磁気機能コアとなる結晶欠陥固有の力場とマルチフェロイック機能との量子力学的関連性を明らかにした (嶋田)。機械学習により、任意の物質およびそこでの機能コアとなる欠陥からの電子線損失エネルギー分光スペクトルを予測する手法を開発した (池野)。粒界や異相界面の局所的構造と格子熱伝導の関係を解明するため、機械学習による熱伝導予測モデルを構築し、熱機能コアとしての役割を定量化した (藤井)。

#### 研究項目 A02 機能コアのナノ計測

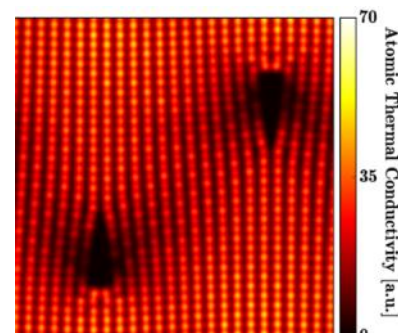


図9 熱機能コアとしてのMgO転位

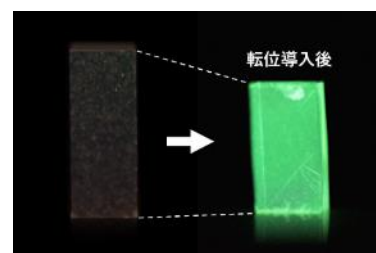
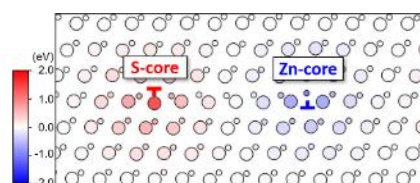


図10 光機能コアとしてのZnS転位

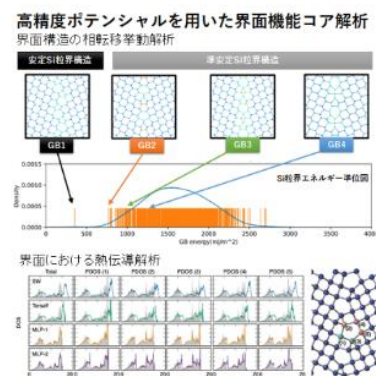


図11 Si界面の構造・機能予測



## A02(ウ) 界面機能コア解析

### ● 酸化物粒界バンドギャップの定量計測：A01(ア)+A03(キ)との連携

原子分解能 STEM-EELS の計測条件を最適化し、高温構造用セラミックスの代表格である、酸化アルミニウム粒界の局所バンドギャップの直接計測に世界で初めて成功した (*Nano Letters* 2020)。高温クリープや酸素透過性能など、同セラミックスの高温構造材料・耐環境性材料としての特性は、粒界でのイオン拡散 (**イオン機能コア**) によって決定される。理論計算との連携で、粒界イオン拡散は粒界バンドギャップに依存することも解明し、**イオン機能コア**を活性化する**粒界量子構造の重要性**を示す画期的な成果となった。

### ● 酸化物粒界移動機構の直接観察：A01(ア)との連携

$\text{Al}_2\text{O}_3$  セラミックスにおいて、結晶粒界は**力機能コア**となり、高温強度・耐クリープ特性を決定づけている。本研究では、外部歪み場の影響により、粒界構造ユニットが逐次変化しながら粒界移動が進行することを世界で初めて、原子レベルで直接観察することに成功した。さらに理論計算との連携により、粒界移動の原子レベル機構を解明した (*Nature Mater.* 2021, 図 12)。

## A02(エ) 表面機能コア解析

### ● $\text{TiO}_2$ 表面の機能コア光触媒表面の原子分解能観察：A01(ア)との連携

光触媒材料である、ルチル型  $\text{TiO}_2(110)-(1 \times 2)$  表面に存在する様々な局所構造観察と表面活性度の超高分解能観察を NC-AFM/STM で行った。特異な表面線欠陥の存在を見出し、さらにこの線欠陥には水が全く吸着しないことがわかった。線欠陥の荷電状態計測から、負に帯電していることが判明し、吸着分子の還元反応に重要な役割を果たす**光機能コア**であることを明らかにした。 (*Beilstein J. Nanotechnol.* (2020))

### ● 酸化物表面における脂質膜分解過程の動的観察：公募班との連携

単原子ステップおよびテラス構造をもつ  $\text{TiO}_2$  および  $\text{SrTiO}_3$  それぞれの表面に、細胞の脂質二重膜をアイランド状に展開し、紫外線照射を行いながら、脂質二重膜が分解される過程を高速原子間力顕微鏡で動的観察した。その結果、①脂質二重膜の分解速度は一樣ではなく、担持した脂質膜に依存して約 10 倍の差があること、② $\text{TiO}_2$  表面と  $\text{SrTiO}_3$  表面とでは、脂質の分解過程が異なることを発見した (論文投稿中、図 13)。表面の原子レベル構造の、**光・イオン機能コア**としての役割を示す結果である (論文投稿中)。

## A02 公募研究 (森川、杉本、宮町、吉田)

ナノ電子プローブを用いた局所領域の結晶構造解析および電子密度分布解析手法を応用し、**電磁気機能コア**となる双晶境界における分極構造の発現や、電場印加による中心対称性の破れを観測した (森川)。原子間力顕微鏡 (AFM) と走査トンネル顕微鏡 (STM) の複合装置により、**電磁気機能コア**となるシリセンの欠陥の構造と電子状態を明らかにした (杉本)。スピントロニクス素子中のトンネル障壁材料である  $\text{MgO}$  表面について、単一原子を磁気センサとして利用し、**電磁気機能コア**表面電子状態・磁性を解明した (宮町)。新規蛍光材料である銀ゼオライトについて、低電子線照射条件での TEM による原子直接観察を行い、**光・イオン機能コア**となる銀クラスターの構造および機能発現機構を解明した (吉田)。

## 研究項目 A03 機能コア制御にもとづく新材料機能創出

### A03(オ) 高温高压プロセスによる新材料機能創出

#### ● 新規 Eu 賦活アルミン酸蛍光体の開発：A01(ア)との連携

高圧力合成法により新規蛍光体物質  $\text{Ba}_2\text{Al}_6\text{O}_{11}$  と  $\text{Sr}_2\text{Al}_6\text{O}_{11}$  の合成に世界で初めて成功した。これらの物質に微量 Eu を高圧下でドーブすると、 $\text{Sr}_2\text{Al}_6\text{O}_{11}$  は青色、 $\text{Ba}_2\text{Al}_6\text{O}_{11}$  は青緑色に発光し、それぞれ母体となる結晶構造の特定サイトに固溶した Eu イオンが**光機能コア**となってい

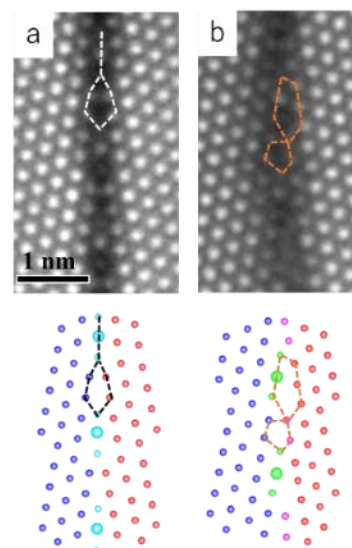


図 12 粒界移動前(a)、移動後(b)の HAADF-STEM 像および原子構造モデル

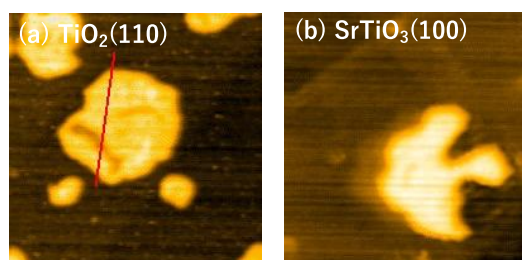


図 13 高速 AFM による脂質二重膜の光触媒効果の動的観察

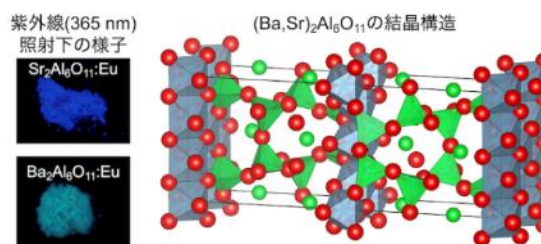


図 14 高圧合成による新規蛍光体の発見

ることがわかった（論文投稿中、図 14）。

● 高圧合成による Cr-Ge 化合物の発見：A01(ア)との連携

ダイヤモンドアンビルセルによる高温高圧合成により、新規化合物である MoSi<sub>2</sub> 型 CrGe<sub>2</sub>、および Chimney-Ladder 型 CrGe<sub>1.77</sub> の合成に成功した。第一原理計算との連携により、CrGe<sub>2</sub> が熱電変換材料として有望であることが予測された。CrGe<sub>2</sub> と CrGe<sub>1.77</sub> の構造および物性の違いは、Ge 空孔の配置によって説明できることが判明した。Ge 空孔が熱電性発現の**電磁気機能コア**となっている(*Inorg. Chem.* 2021)。

A03(カ) 界面制御による高機能薄膜材料創製

● 過去最高の室温熱電変換性能指数を示す酸化物を実現：A02(ウ)との連携

Na<sub>3/4</sub>CoO<sub>2</sub> に代表される層状コバルト酸化物は、酸化物熱電材料候補として期待されてきたが、熱伝導率が高く、熱電変換性能指数 ZT が低いという弱点があった。本研究では、層状コバルト酸化物 A<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> の A<sub>x</sub> イオンを重くすることで層に平行方向の熱伝導率が低減させられることを見出した。層界面が、**熱機能コア**となっていることを示している。特に、アルカリ土類金属の中で最も重い Ba<sup>2+</sup> に置換した結果、熱伝導率だけを劇的に減少させることができた結果、室温で ZT = 0.11 を示す Ba<sub>1/3</sub>CoO<sub>2</sub> を実現した。室温における ZT=0.11 は、再現可能な酸化物の ZT の中では過去最高値である (*J. Mater. Chem. A* 2020、図 15)。

● 多結晶よりも熱が伝わりにくい、機能コア界面からなる単結晶を発見：A02(ウ)との連携

一般に、結晶方位が揃っていない多結晶には多くの結晶界面が存在するため、多結晶の熱伝導率は単結晶よりも低い。本研究では、c 軸方向に InO<sub>2</sub>-層と GaO(ZnO)<sub>m</sub><sup>+</sup> (m は自然数) 層が交互に積層した自然超格子構造を有する InGaO<sub>3</sub>(ZnO)<sub>m</sub> 単結晶薄膜を作製し、超格子に垂直方向の熱伝導率が、多結晶よりも低いことを発見した。これは、InO<sub>2</sub>-層と GaO(ZnO)<sub>m</sub><sup>+</sup> の間に存在する、**熱機能コア**としての界面の熱抵抗が大きく、フォノンを高効率で散乱させることを示している (*Adv. Mater. Interface* 2021)。

A03(キ) 耐熱・耐環境セラミックスの高機能化

● 高酸素遮蔽性向上のための酸化物セラミックス膜の粒界機能コアの高度制御：A02(ウ)+A01(ア)との連携

航空機エンジン等の過酷な熱的・化学的環境下で用いられる Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 多結晶保護膜の、酸素遮蔽性向上の基本原則を解明した。高温の酸素分圧勾配下では、膜粒界の局所的バンドギャップの低下が、**イオン機能コア**である酸化物イオンの粒界を介した移動の起源であることを解明した (*Nano Letters* 2020)。また、表面近傍の電子的伝導性に起因して誘起される表面電位が、酸化物イオンの表面近傍の移動を抑制することを見出した (図 16)。さらに、イットリウムの粒界偏析は、膜内部の酸化物イオンの移動を抑制し酸素遮蔽性を向上させることを明らかにした (*Acta Mater.* 2020)。

● 高電場焼結法開発とセラミックスの高機能化および新規機能付与：A03(オ)+A02(ウ)との連携

高電磁場を利用した革新的焼結プロセス構築に関しては、高電磁場下で酸化物粉末成形体の高速緻密化挙動や高温変形が促進されるとともに、蛍光発光等の新機能発現を見出した (*J. Eur. Ceram. Soc.* 2020, *Appl. Phys. Exp.* 2020, 図 17)。これらの事象は、高電磁場により形成される**イオン機能コア** (酸素イオン空孔) が**光機能コア**としても機能するためである。また、高電磁場の正弦波交流の周波数依存性から、**イオン機能コア**の物質輸送促進効果の支配要因も明らかにした。

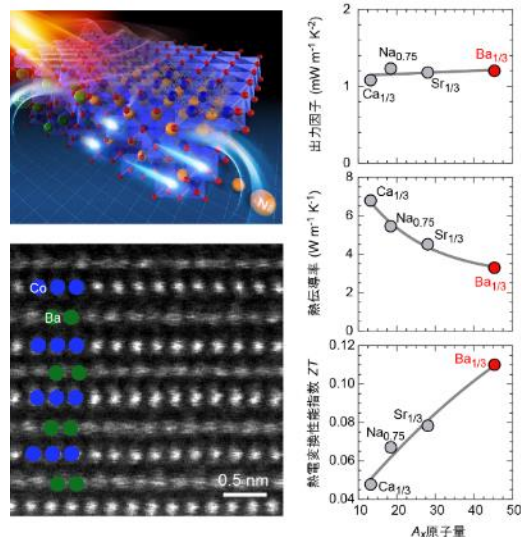


図 15 過去最高熱電性能指数を示す酸化物

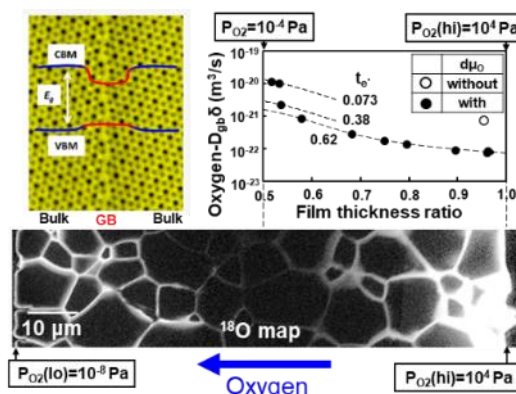


図 16 高温環境下における無添加 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 膜粒界を介した酸化物イオンの移動

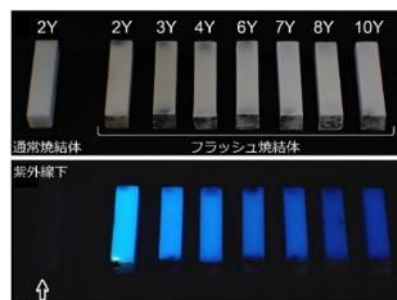


図 17 高電場焼結セラミックスの高機能化



### A03(ク) 高機能固体イオニクス材料の創出

#### ● 硫化物系リチウムイオン伝導体の高機能化： A01(イ)+A02(ウ)+公募班との連携

Li<sub>10</sub>GeP<sub>2</sub>S<sub>12</sub> 電解質を対象とし、**イオン機能コア**として異種カチオンやアニオンを結晶粒界に微量添加することで、大気安定性や低電位安定性を向上できた。ガーネット型酸化物電解質では、合成時に微量のフラックス成分を導入することで、課題である粒界でのリチウム導電を向上できることを見出した (*Chem. Mater.* 2020)。さらに、リチウム系、ヒドリド系では、**イオン機能コア**となる結晶格子内の可動イオン量と空孔量を制御することで、超イオン導電性の新規イオン伝導体を創出することにも成功した。 (*J. Mater. Chem. A* 2021、図 18)

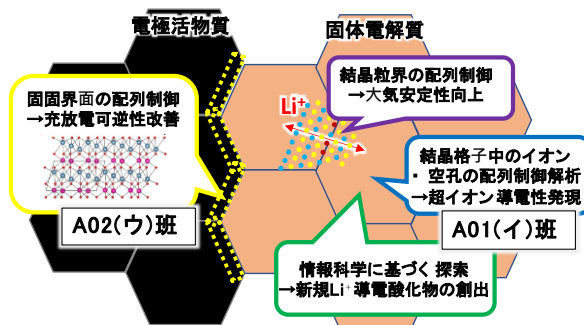


図 18 固体イオニクス材料における機能コア開拓

#### ● イオニクス粒界・界面の合成および評価手法構築：公募班との連携

**イオン機能コア**として重要な、リチウム電池正極/固体電解質界面を薄膜モデル系で構築し、表面 X 線散乱法、硬 X 線光電子分光で反応場のその場観測に成功した。有機電解液との界面で不安定な Li<sub>2</sub>MnO<sub>3</sub> 正極表面が、固体電解質との界面で Li 脱挿入する場合は、異なる原子配列を有することで可逆的に充放電できることを示し、蓄電池電極材料における**イオン機能コア**の重要性を実証できた (*ACS Appl. Mater. Interfaces* 2021)。並行して、実用多結晶系での合成・評価手法開拓に展開し、硫化物電解質粒界への異元素導入および走査型電子顕微鏡・原子間力顕微鏡を用いた大気非暴露測定手法、粒内と粒界のイオン導電性を個別評価する実験系を構築することに成功した。

### A03 公募研究（八木、横井、平原、藤井、清水、伊藤、黒川、黒澤、蒲、石部）

SrFeO<sub>3</sub> 等のペロブスカイト型酸化物表面に形成される、酸素欠損や表面に形成された非晶質層 (**イオン機能コア**) が、酸素発生反応に果たす役割を明らかにした (八木)。人工骨の素材として期待されている層状リン酸カルシウムの結晶の中に、**光機能コア**として蛍光性テトラカルボン酸を導入した新規材料の合成に成功した (横井、*Commun. Chem.* 2021、図 19)。高い超伝導転移温度 (T<sub>c</sub>) を示す、SrTiO<sub>3</sub> (001) 基板上的鉄セレン (FeSe) は、その T<sub>c</sub> が表面酸素欠陥や終端面の違い (**電磁気機能コア**) に強く依存することを明らかにした (平原)。高いイオン伝導体の構造的要因解明と新材料の創出を目指した研究を行い、層状ペロブスカイト型 BaNdScO<sub>4</sub> やルチル型 LiTeO<sub>3</sub>(OH) を見出し、結晶構造およびイオン伝導経路 (**イオン機能コア**) の解析に成功した (藤井、*J. Mater. Chem. A* 2021、図 20)。微小部 X 線回折や圧電応答顕微鏡を用いた構造観察によって、電場によって再配列された圧電体中のドメイン構造の 3 次元的な特徴を調査し、さらには電圧印加中のその場観察手法を用いることによって、ドメイン構造が電場によってどのように応答するのかを明らかにした (清水)。

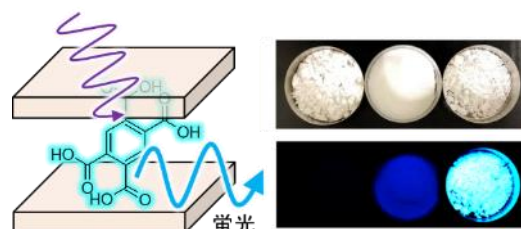


図 19 蛍光性付与リン酸カルシウム開発

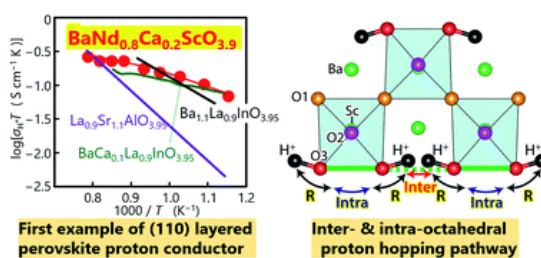


図 20 新規酸素イオン伝導体の発見

(清水)。酸化マグネシウムをモデル材料として、透明セラミックス蛍光体の高速化学気相析出法による合成プロセスを確立し、**光機能コア**となる酸素欠損およびナノ構造形成と、発光機構や量子効率との関係を明らかにした (伊藤)。太陽電池用シリコンベース化合物半導体材料 BaSi<sub>2</sub> について、**電磁気機能コア**となる点欠陥や粒界におけるキャリアの相互作用ならびに生成メカニズムを解明した (黒川)。代表者が開発した、熱電変換材料として期待できる p 型 IV 族混晶薄膜において、正孔や電子、フォノン散乱に有効な粒界構造 (**電磁気機能コア**) を明らかにした (黒澤)。それ自身が**電磁気機能コア**となる、新奇原子層物質である遷移金属ダイカルコゲナイドにおける、局所歪みによる力学場と結晶・電子構造の相関を解明した (蒲)。**熱電磁気機能コア**となる格子間欠陥濃度を意図的に変調した“高密度 ZnO ナノドット含有 SnO<sub>2</sub> 薄膜”を創製して、熱電出力因子増大及びフォノン局在状態形成による熱伝導率低減を狙い、環境調和型の高性能透明熱電材料を開発した (石部)。



## 6 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けのアウトリーチ活動等の状況。令和3年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に\*印を付すこと。

【主な雑誌論文】（全155報から抜粋、すべて査読有り）

### 研究項目 A01(ア) 機能コアのモデリング

- [1] T. Zhu, K. Ding, Y. Oshima, A. Amiri, E. Bruder, R. W. Stark, K. Durst, K. Matsunaga, \*A. Nakamura, \*X. Fang: “Switching the fracture toughness of single-crystal ZnS using light irradiation”, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 154103 (2021).
- [2] \*L. Porz, A.J. Klomp, X. Fang, N. Li, C. Yrim, C. Detlefs, E. Bruder, M. Höfling, W. Rheinheimer, E.A. Patterson, P. Gao, K. Durst, A. Nakamura, K. Albe, H. Simons, \*J. Rödel: “Dislocation-toughened ceramics”, *Mater. Horiz.* **8**, 1528 (2021).
- [3] \*A. Nakamura, \*X. Fang, A. Matsubara, E. Tochigi, Y. Oshima, T. Saito, T. Yokoi, Y. Ikuhara, K. Matsunaga: “Photoindentation: A new route to understanding dislocation behavior in light”, *Nano Lett.* **21**, 1962 (2021).
- [4] Q.K. Muhammad, \*L. Porz, A. Nakamura, K. Matsunaga, M. Rohnke, J. Janek, J. Rödel, \*T. Frömling: “Donor and acceptor-like self-doping by mechanically induced dislocations in bulk TiO<sub>2</sub>”, *Nano Energy* **85**, 105994 (2021).
- [5] \*T. Kanno, H. Tamaki, M. Yoshiya, H. Uchiyama, S. Maki, M. Tanaka, Y. Miyazaki: “High-density Frenkel defects as origin of n-type thermoelectric performance and low thermal conductivity in Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>-based materials”, *Adv. Funct. Mater.* **31**, 2008469 (2021).
- [6] \*T. Nishi, \*K. Matsunaga, T. Mitsuoka, Y. Okimura, Y. Katsu: “Advanced superhard composite materials with extremely improved mechanical strength by interfacial segregation of dilute dopants”, *Scientific Reports* **10**, 21008 (2020).
- [7] \*L. Porz, T. Frömling, A. Nakamura, N. Li, R. Maruyama, K. Matsunaga, P. Gao, H. Simons, C. Dietz, M. Rohnke, J. Janek, J. Rödel: “Conceptual framework for dislocation modified conductivity in oxide ceramics deconvoluting mesoscopic structure, core, and space charge exemplified for SrTiO<sub>3</sub>”, *ACS Nano* (2020), published online.
- [8] Y. Oshima, \*A. Nakamura, K.P.D. Lagerlöf, T. Yokoi, K. Matsunaga: “Room-temperature creep deformation of cubic ZnS crystals under controlled light conditions”, *Acta Mater.* **195**, 690 (2020).
- [9] \*K. Matsunaga, S. Hoshino, U. Masaya, Y. Oshima, T. Yokoi, A. Nakamura: “Carrier-trapping induced reconstruction of partial-dislocation cores responsible for light-illumination controlled plasticity in an inorganic semiconductor”, *Acta Mater.* **195**, 645 (2020).
- [10] \*S. Fujii, T. Yokoi, Craig A. J. Fisher, H. Moriwake, \*M. Yoshiya: “Quantitative prediction of grain boundary thermal conductivities from local atomic environments”, *Nature Commun.* **11**, 1854 (2020).
- [11] \*T. Yokoi, Y. Noda, A. Nakamura, K. Matsunaga: “Neural-network interatomic potential for grain boundary structures and their energetics in silicon”, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 014605 (2020).

### 研究項目 A01(イ) 情報科学による機能コア計算設計

- [12] S. Kiyohara, M. Tsubaki, \*T. Mizoguchi: “Learning excited states from ground states by using an artificial neural network”, *npj Comp. Mater.* **6**, 68 (2020).
- [13] K. Liao, A. Masuno, A. Taguchi, H. Moriwake, H. Inoue, \*T. Mizoguchi: “Revealing spatial distribution of Al-coordinated species in a phase-separated aluminosilicate Glass by STEM-EELS”, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 9637 (2020).
- [14] M. Tsubaki, T. Mizoguchi: “Quantum deep field: data-driven wave function, electron density generation, and atomization energy prediction and extrapolation with machine learning”, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 206401 (2020).
- [15] \*A. Seko: “Machine learning potentials for multicomponent systems: The Ti-Al binary system”, *Phys. Rev. B* **102**, 174104 (2020).
- [16] \*A. Seko, S. Ishiwata: “Prediction of perovskite-related structures in ACuO<sub>3-x</sub> (A = Ca, Sr, Ba, Sc, Y, La) using density functional theory and Bayesian optimization”, *Phys. Rev. B* **101**, 134101 (2020).
- [17] \*Y. Ogura, T. Yokoi, K. Toyoura, K. Matsunaga: “First-principles analysis of oxide-ion conduction mechanism in neodymium silicate”, *Solid State Ionics* **355**, 115367 (2020).
- [18] \*K. Toyoura, T. Fujii, K. Kanamori, I. Takeuchi: “Sampling strategy in efficient potential energy surface mapping for predicting atomic diffusivity in crystals by machine learning”, *Phys. Rev. B* **101**, 184117 (2020).
- [19] \*K. Toyoura, K. Kanayama: “Machine-learning-based sampling method for exploring local energy minima of interstitial species in a crystal”, *Phys. Rev. B* **102**, 174105 (2020).
- [20] K. Nakazawa, K. Shibata, K. Mitsuishi, S. Amma, \*T. Mizoguchi: “Local thickness and composition measurements from scanning convergent-beam electron diffraction of a binary non-crystalline material obtained by a pixelated detector”, *Ultramicroscopy* **217**, 113077 (2020).
- [21] R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata, \*T. Mizoguchi: “Prediction of interface and vacancy segregation energies at silver

interfaces without determining interface structures”, *Appl. Phys. Exp.* **13**, 065504 (2020).

[22] \*T. Mizoguchi, S. Kiyohara: “Machine learning applications for ELNES/XANES”, *Microscopy* **69**, 92 (2020).

#### 研究項目 A01 公募研究

[23] W. Sekimoto, S. Fujii, \*M. Yoshiya: “Direct numerical analyses of nanoscale thermal transport near MgO edge dislocations”, *Scripta Mater.* **202**, 113991 (2021).

[24] Y. Okazaki, Y. Kato, Y. Kizawa, S. Oda, K. Uemura, T. Nishino, F. Fujii, S. Fujinari, M. Kinoshita, T. Otake, H. Togano, T. Kamegawa, S. Kawaguchi, H. Yamamoto, H. Ikeno, S. Yagi, K. Wada, K.H. Ahn, A. Hariki, I. Yamada: “Metamagnetic behavior in a quadruple perovskite oxide”, *Inorg. Chem.* **60**, 7023 (2021).

[25] I. Yamada, M. Kinoshita, S. Oda, H. Tsukasaki, S. Kawaguchi, K. Oka, S. Mori, H. Ikeno, S. Yagi: “Enhanced catalytic activity and stability of the oxygen evolution reaction on tetravalent mixed metaloxide”, *Chem. Mater.* **32**, 3893 (2020).

#### 研究項目 A02(ウ) 界面機能コア解析

[26] B. Han, R. Zhu, X. Li, M. Wu, R. Ishikawa, B. Feng, X. Bai, Y. Ikuhara, \*P. Gao: “Two-dimensional room-temperature giant antiferrodistortive SrTiO<sub>3</sub> at a grain boundary”, *Phys Rev Lett.* **126**, 225702 (2021).

[27] \*R. Ishikawa, R. Tanaka, K. Kawahara, N. Shibata, Y. Ikuhara: “Atomic-resolution topographic imaging of crystal surface”, *ACS Nano* **15**, 9186 (2021).

[28] J. Wei, \*B. Feng, R. Ishikawa, T. Yokoi, K. Matsunaga, N. Shibata, \*Y. Ikuhara: “Direct imaging of atomistic grain boundary migration”, *Nature Mater.* (2021), published online.

[29] H. Nakade, E. Tochigi, B. Feng, Y. Nezu, H. Ohta, N. Shibata, \*Y. Ikuhara: “Fabrication and characterization of tetragonal yttria-stabilized zirconia single-crystalline thin film”, *J. Am. Ceram. Soc.* **104**, 1198 (2021).

[30] C. Yang, \*B. Feng, J. Wei, E. Tochigi, S. Ishihara, N. Shibata, \*Y. Ikuhara: “Atomic and electronic band structures of Ti-doped Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> grain boundaries”, *Acta Mater.* **201**, 488 (2020).

[31] \*T. Seki, Y. Ikuhara, \*N. Shibata: “Toward quantitative electromagnetic field imaging by differential-phase-contrast scanning transmission electron microscopy”, *Microscopy* **70**, 148 (2020).

[32] T. Futazuka, \*R. Ishikawa, N. Shibata, \*Y. Ikuhara: “First-principles calculations of group IIA and group IV impurities in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>”, *Phys Rev Mater.* **4**, 073602 (2020).

[33] Y. Murakami, T. Seki, A. Kinoshita, T. Shoji, Y. Ikuhara, \*N. Shibata: “Magnetic-structure imaging in polycrystalline materials by specimen-tilt-series averaged DPC STEM”, *Microscopy* **69**, 312 (2020).

[34] \*R. Ishikawa, N. Shibata, T. Taniguchi, Y. Ikuhara: “Three-Dimensional Imaging of a Single Dopant in a Crystal”, *Phys. Rev. Appl.* **13**, 034064 (2020).

[35] J. Wei, T. Ogawa, B. Feng, T. Yokoi, R. Ishikawa, A. Kuwabara, K. Matsunaga, N. Shibata, \*Y. Ikuhara: “Direct measurement of electronic band structures at oxide grain boundaries”, *Nano Lett.* **20**, 2530 (2020).

#### 研究項目 A02(エ) 表面機能コア解析

[36] S. Kitora, S. Jinno, H. Toki, M. Abe: “Relation of integro-partial differential equations with delay effect based on the Maxwell equations to the Heaviside and Pocklington equations”, *IEEE Access* **9**, 66781 (2021).

[37] S. Jinno, S. Kitora, H. Toki, M. Abe: “The time domain numerical method of three-dimensional conductors including radiation with lumped parameter circuit”, *Scientific Reports* **11**, 4598 (2021).

[38] \*H. Kashida, K. Nishikawa, W. Shia T. Miyagawa, H. Yamashita, M. Abe, H. Asanuma: “Helical amplification system composed of artificial nucleic acids”, *Chemical Science* **12**, 1656 (2021).

[39] P. Wagner, \*R. Homann-Vogel, A. Foster, I. Yi, M. Abe, Y. Sugimoto: “Role of tip apices in atomic force spectroscopy at room temperature”, *Nanotechnology* **32**, 035706 (2020).

[40] \*E. Inami, M. Yamaguchi, R. Nemoto, H. Yorimitsu, P. Krüger, T-K. Yamada: “Direct imaging of precursor adcomplex states during cryogenic-temperature on-surface metalation: scanning tunneling microscopy study on porphyrin array with Fe adsorption at 78.5 K”, *J. Phys. Chem. C* **124**, 3621 (2020).

[41] Z. Diao, D. Katsube, H. Yamashita, Y. Sugimoto, O. Custance, M. Abe: “Automated extraction of the short-range part of the interaction in non-contact atomic force microscopy”, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 033104 (2020).

[42] D. Katsube, S. Ojima, E. Inami, M. Abe: “Atomic-resolution imaging of rutile TiO<sub>2</sub>(110)-(1x2) reconstructed surface by non-contact atomic force microscopy”, *Beilstein Journal of Nanotechnology* **11**, 443 (2020).

[43] S. Jinno, S. Kitora, H. Toki, M. Abe: “Time-domain formulation of a multi-layer plane circuit coupled with lumped-parameter circuits using Maxwell equations”, *Scientific Reports* **9**, 17891 (2019).

[44] S. Jinno, S. Kitora, H. Toki, M. Abe: “Mechanism of common-mode noise generation in multi-conductor transmission lines”, *Scientific Reports* **9**, 15036 (2019).

#### 研究項目 A02 公募研究

[45] D. Morikawa, K. Tsuda: “Local crystal symmetry and structure at CaTiO<sub>3</sub> twin boundaries”, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 092901 (2021).

[46] J. Onoda, T. Hasegawa, \*Y. Sugimoto: “In Situ Reproducible Sharp Tips for Atomic Force Microscopy”, *Phys. Rev. Appl.* **15**, 034079 (2021).

- [47] L. Feng, A. Shiotari, K. Yabuoshi, M. Fukuda, T. Ozaki, Y. Sugimoto: “Structure of one-dimensional monolayer Si nanoribbons on Ag(111)”, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 034002 (2021).
- [48] T. Hattori, N. Kawamura, T. Iimori, T. Miyamachi, F. Komori: “Subatomic distortion of surface monolayer lattice visualized by Moiré pattern”, *Nano Lett.* **6**, 2406 (2021).
- [49] K. Yoshida: “Atomic-scale imaging of zeolites with transmission electron microscopy”, *Accounts of Materials & Surface Research* **6**, 40 (2021).

#### 研究項目 A03(オ) 高温高压プロセスによる新材料機能創出

- [50] \*F. Kawamura, \*H. Murata, M. Imura, N. Yamada, T. Taniguchi: “Synthesis of CaSnN<sub>2</sub> via a high-pressure metathesis reaction and the properties of II-SnN<sub>2</sub> (II = Ca, Mg, Zn) semiconductors”, *Inorg. Chem.* **60**, 1773 (2021).
- [51] \*T. Sasaki, K. Kanie, T. Yokoi, K. Niwa, N.A. Gaida, K. Matsunaga, M. Hasegawa: “Crystal and electronic structures of MoSi<sub>2</sub>-type CrGe<sub>2</sub> synthesized under high pressure”, *Inorg. Chem.* **60**, 1767 (2021).
- [52] \*R. Ishikawa, R. Tanaka, S. Morishita, Y. Kohno, H. Sawada, T. Sasaki, M. Ichikawa, M. Hasegawa, N. Shibata, Y. Ikuhara: “Automated geometric aberration correction for large-angle illumination STEM”, *Ultramicroscopy* **222**, 113215 (2021).
- [53] \*K. Soda, D. Kato, M. Komabuchi, T. Terabe, S. Takayama, T. Ibaragi, M. Kato, K. Niwa, M. Hasegawa, S. Takakura, M. Nakatake: “Electronic structures of transition-metal pernitrides studied using X-ray absorption and photoelectron spectroscopy”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 044710 (2021).
- [54] \*K. Niwa, Y. Iijima, M. Ukita, R. Toda, K. Toyoura, T. Sasaki, K. Matsunaga, N.A. Gaida, M. Hasegawa: “Nitriding synthesis and structural change of phosphorus nitrides at high pressures”, *J. Raman Spectroscopy*, 1 (2021).
- [55] \*川村史朗, 遊佐斎: “高压下複分解反応による窒化物硬質材料と半導体物質合成”, *高圧力の科学と技術* **30**, 195 (2020)
- [56] Y. Song, \*F. Kawamura, K. Shimamura, T. Ohgaki, N. Ohashi: “Development of a flux-film-coated sputtering (FFC-sputtering) method for fabricating c-axis oriented AlN film”, *AIP Advances* **10**, 115011 (2020).
- [57] \*S. Asano, K. Niwa, T. Sasaki, N.A. Gaida, M. Hasegawa: “Thermal expansion of incompressible U<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-type Nb<sub>2</sub>N<sub>3</sub> synthesized in a diamond anvil cell”, *Inorg. Chem.* **9**, 7915 (2020).
- [58] \*N.A. Gaida, T. Sasaki, Z. Liu, K. Niwa, M. Horozawa, T. Ohsuna, M. Hasegawa: “Nanowire crystals of tantalum nitride grown in ammonium halide fluxes at high pressures”, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 123102 (2020).

#### 研究項目 A03(カ) 界面制御による高機能薄膜材料創製

- [59] Y. He, D. Sato, K. Misawa, D. Nishihara, A. Kimura, A. Nakano, H. Taniguchi, \*I. Terasaki: “Unconventional high-temperature ferromagnetic semiconductor PbPd<sub>1-x-y</sub>Fe<sub>y</sub>Li<sub>x</sub>O<sub>2</sub>”, *J. Appl. Phys.* **129**, 203903 (2021).
- [60] S. Kawasaki, A. Nakano, H. Taniguchi, H.J. Cho, H. Ohta, F. Nakamura, \*I. Terasaki: “Thermal diffusivity of the Mott insulator Ca<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> in a non-equilibrium steady state”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 063601 (2021).
- [61] \*H.J. Cho, Y. Wu, Y. Zhang, B. Feng, M. Mikami, W. Shin, Y. Ikuhara, Y.-M. Sheu, K. Saito, \*H. Ohta: “Anomalously low heat conduction in single-crystal superlattice ceramics lower than randomly oriented polycrystals”, *Adv. Mater. Interfaces* **8**, 2001932 (2021).
- [62] \*G. Kim, B. Feng, S. Ryu, H.J. Cho, H. Jeon, Y. Ikuhara, \*H. Ohta: “Anisotropic electrical conductivity of oxygen-deficient tungsten oxide films with epitaxially stabilized 1D atomic defect tunnels”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 6864 (2021).
- [63] \*M. Hasegawa, \*K. Saito: “Delta-T noise in the Kondo regime”, *Phys. Rev. B* **103**, 045409 (2021).
- [64] \*D. Liang, B. Chen, B. Feng, Y. Ikuhara, H.J. Cho, \*H. Ohta: “Optimization of two-dimensional channel thickness in nanometer-thick SnO<sub>2</sub>-based top-gated thin-film transistors using electric field thermopower modulation: implications for flat-panel displays”, *ACS Appl. Nano Mater.* **3**, 12427 (2020).
- [65] Y. Takashima, \*Y. Zhang, J. Wei, B. Feng, Y. Ikuhara, H.J. Cho, \*H. Ohta: “Layered cobalt oxide epitaxial films exhibiting thermoelectric ZT = 0.11 at room temperature”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 274 (2021).
- [66] \*G. Kim, B. Feng, Y.-M. Sheu, H.J. Cho, Y. Ikuhara, \*H. Ohta: “Coexistence of high electron conduction and low heat conduction in tungsten oxide epitaxial films with 1D atomic defect tunnels”, *ACS Appl. Electron. Mater.* **2**, 2507 (2020).
- [67] S.G. Jeong, T. Min, S. Woo, J. Kim, Y. Zhang, S.W. Cho, J. Son, Y.M. Kim, J.H. Han, S. Park, H.Y. Jeong, H. Ohta, S. Lee, T.W. Noh, \*J. Lee, \*W.S. Choi: “Phase instability amid dimensional crossover in artificial oxide crystal”, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 026401 (2020).
- [68] \*H.J. Cho, Y. Takashima, Y. Nezu, T. Onazato, \*H. Ohta, “Anisotropic heat conduction in ion substituted layered cobalt oxides”, *Adv. Mater. Interfaces* **7**, 1901816 (2019).

#### 研究項目 A03(キ) 耐熱・耐環境セラミックスの高機能化

- [69] \*T. Matsudaira, M. Wada, N. Kawashima, M. Takeuchi, D. Yokoe, T. Kato, M. Takata, S. Kitaoka: “Mass transfer in polycrystalline ytterbium monosilicate under oxygen potential gradients at high temperatures”, *J. Eur. Ceram. Soc.* **41**, 3150 (2021).
- [70] \*Y. Sasaki, K. Morita, T. Yamamoto, K. Soga, H. Masuda, H. Yoshida: “Electric current dependence of plastic flow

behavior with large tensile elongation in tetragonal zirconia polycrystal under a DC field”, *Scripta Mater.* **194**, 113659 (2021).

- [71] \*M. Wada, T. Matsudaira, N. Kawashima, M. Takeuchi, D. Yokoe, T. Ogawa, T. Kato, M. Takata, S. Kitaoka: “Effect of water vapor on mass transfer in polycrystalline  $\text{Yb}_2\text{Si}_2\text{O}_7$  under oxygen potential gradients at high temperatures”, *Acta Mater.* **201**, 373 (2020).
- [72] U. Matsumoto, \*T. Ogawa, S. Kitaoka, H. Moriwake, I. Tanaka: “First-principles study on the stability of weberite-type, pyrochlore, and defect-fluorite structures of  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  ( $\text{A}=\text{Lu}^{3+}$ - $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{B}=\text{Zr}^{4+}$ ,  $\text{Hf}^{4+}$ ,  $\text{Sn}^{4+}$ , and  $\text{Ti}^{4+}$ )”, *J. Phys. Chem. C* **124**, 20555 (2020).
- [73] M. Takemoto, \*Y. Tokudome, D. Noguchi, R. Ueoka, \*K. Kanamori, K. Okada, H. Murata, A. Nakahira, M. Takahashi: “Synthesis of a crystalline and transparent aerogel composed of Ni–Al layered double hydroxide nanoparticles through crystallization from amorphous hydrogel”, *Langmuir* **36**, 9436 (2020).
- [74] \*H. Yoshida, H. Hayasaka, K. Soga, K. Morita, B.-N. Kim, T. Yamamoto: “Doping effect on the flash sintering of  $\text{Y}_2\text{O}_3$ : promotion of densification and optical translucency”, *J. Eur. Ceram. Soc.* **40**, 6053 (2020).
- [75] \*Y. Yamashita, A. Itoh, T. Tokunaga, H. Yoshida, T. Yamamoto: “Blue photoluminescence at room temperature from  $\text{Y}_2\text{O}_3$ -doped  $\text{ZrO}_2$  polycrystals sintered by flash sintering”, *Appl. Phys. Exp.* **13**, 035506 (2020).
- [76] \*Y. Kezuka, E. Tochigi, H. Murata, M. Yoshida, K. Eguchi, A. Nakahira, Y. Ikuhara, M. Tajika: “Synthesis of tunable-aspect-ratio calcite nanoparticles via  $\text{Mg}^{2+}$  doping”, *Crystal Growth & Design* **19**, 6784 (2019).

### 研究項目 A03(ク) 高機能固体イオニクス材料の創出

- [77] K. Hikima, Y. Hinuma, K. Shimizu, K. Suzuki, S. Taminato, M. Hirayama, T. Masuda, K. Tamura, \*R. Kanno: “Reactions of the  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  cathode in an all-solid-state thin-film battery during cycling”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 7650 (2021).
- [78] \*Y. Matsuda, N. Ueda, K. Funakoshi, J. Nakashima, D. Mori, S. Taminato, S. Higashimoto: “Proton conductivity in mixed cation phosphate,  $\text{KMg}_{1-x}\text{H}_2\text{x}(\text{PO}_3)_3 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ , with a layered structure at low-intermediate temperatures”, *Dalton Transactions* (2021), published online.
- [79] X. Sun, S. Hori, Y. Li, Y. Yamada, K. Suzuki, M. Hirayama, \*R. Kanno: “Annealing-induced evolution at the  $\text{LiCoO}_2/\text{LiNbO}_3$  interface and its functions in all-solid-state batteries with a  $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  electrolyte”, *Chem. Mater.* **9**, 4117 (2021).
- [80] Y. Li, S. Daikuhara, S. Hori, X. Sun, K. Suzuki, M. Hirayama, \*R. Kanno: “Oxygen substitution for Li–Si–P–S–Cl solid electrolytes toward purified  $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ -type phase with enhanced electrochemical stabilities for all-solid-state batteries”, *Chem. Mater.* **32**, 8860 (2020).
- [81] \*K. Suzuki, K. Ohura, A. Seko, Y. Iwamizu, G. Zhao, M. Hirayama, I. Tanaka, and R. Kanno, “Fast material search of lithium ion conducting oxides using a recommender system”, *J. Mater. Chem. A* **8**, 11582 (2020).
- [82] N. Matsui, Y. Hinuma, Y. Iwasaki, K. Suzuki, J. Guangzhong, H. Nawaz, Y. Imai, M. Yonemura, M. Hirayama, G. Kobayashi, \*R. Kanno: “The effect of cation size on hydride-ion conduction in  $\text{LnSrLiH}_2\text{O}_2$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$ ) oxyhydrides”, *J. Mater. Chem. A* **8**, 24685 (2020).
- [83] M. Xu, Y. Sun, S. Hori, K. Suzuki, W. Huang, M. Hirayama, \*R. Kanno: “A lithium conductor  $\text{Li}_{6.96}\text{Sn}_{1.55}\text{Si}_{1.71}\text{P}_{0.8}\text{S}_{12}$  with a cubic argyrodite-type structure in the  $\text{Li}_2\text{S}–\text{SnS}_2–\text{SiS}_2–\text{P}_2\text{S}_5$  system: Synthesis, structure, and electrochemical properties”, *Solid State Ionics* **356**, 115458 (2020).
- [84] \*Y. Matsuda, K. Funakoshi, R. Sebea, G. Kobayashi, M. Yonemura, N. Imanishi, D. Mori, S. Higashimoto: “Arrangement of water molecules and high proton conductivity of tunnel structure phosphates  $\text{KMg}_{1-x}\text{H}_2\text{x}(\text{PO}_3)_3 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ ”, *RSC. Advances* **10**, 7803 (2020).
- [85] \*鈴木耕太, 菅野了次: “固体電池開発に向けたリチウム導電体探索-古典的手法から機械学習の活用まで-”, *電気化学* **88**, 3 (2020).

### 研究項目 A03 公募研究

- [86] \*T. Yokoi, T. Goto, M. Hara, T. Sekino, T. Seki, M. Kamitakahara, C. Ohtsuki, S. Kitaoka, S. Takahashi, M. Kawashita: “Incorporation of tetracarboxylate ions into octacalcium phosphate for the development of next-generation biofriendly materials”, *Commun. Chem.* **4**, 4 (2021).
- [87] M. Shiraiwa, T. Kido, \*K. Fujii, M. Yashima: “High-temperature proton conductors based on the (110) layered perovskite  $\text{BaNdScO}_4$ ”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 8607 (2021).
- [88] T. Ishibe, A. Tomeda, Y. Komatsubara, R. Kitaura, M. Uenuma, Y. Uraoka, Y. Yamashita, Y. Nakamura: “Carrier and phonon transport control by domain engineering for high-performance transparent thin film thermoelectric generator”, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 151601 (2021).
- [89] T. Tanaka, S. Ichinokura, A. Pedersen, T. Hirahara: “Monolayer FeSe films grown on  $\text{SrTiO}_3$  with controlled surface superstructures studied by scanning probes: evidence for interface superconductivity”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, SE0801 (2021).
- [90] S. Matsumoto, \*A. Ito: “Preparation of  $\text{HfO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$  nanocomposite films using chemical vapor deposition”, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **129**, 1 (2021).
- [91] K. Matsuki, J. Pu, T. Takenobu: “Recent progress on light-emitting electrochemical cells with nonpolymeric

materials”, *Adv. Func. Mater.* **30**, 1908641 (2020).

[92] S. Yamagata, I. Takahara, M. Wang, T. Mizoguchi, \*S. Yagi: “EQCM analysis of intercalation species into graphite positive electrodes for Al batteries”, *J. Alloy. Compd.* **846**, 156469 (2020).

### 【学会発表（基調講演・招待講演を一部抜粋）】

- [1] (基調講演) 松永克志: “機能コアの材料科学 -ナノ材料科学の新展開-”, 日本金属学会 2019 年秋期講演大会 (2019.9.11、岡山).
- [2] (基調講演) K. Matsunaga: “Electronic structures of dislocation cores in zinc sulfide showing extraordinary plastic deformation”, The 2nd Global Forum on Advanced Materials and Technologies for Sustainable Development (GFMAT-2) (2019.7.26, Toronto, Canada).
- [3] (基調講演) T. Mizoguchi: “Bridging atomic-resolution experiment and computation using machine learning”, Materials Research Meeting (MRM) (2019.12.11, Yokohama).
- [4] (招待講演) N. Shibata: “Development of magnetic-field-free atomic resolution STEM”, MRS fall meeting (2020.11.27, online).
- [5] (基調講演) 阿部真之: “金属酸化物表面の走査型トンネル顕微鏡/非接触原子間力顕微鏡測定”, 日本金属学会 2020 年秋期講演大会 (2020.9.18, online).
- [6] (招待講演) 遊佐 斉: “新材料機能創出に向けた高温高压プロセス”, 日本セラミックス協会 2019 秋季シンポジウム (2019.9.3, online).
- [7] (招待講演) 太田裕道: “金属酸化物薄膜の熱電能・熱伝導”, 第 68 回 応用物理学会春季学術講演会, シンポジウム「ニューノーマル時代の DX を進める IoT 用創エネルギー材料・デバイス研究の新展開」(2021.3.16-19, online).
- [8] (招待講演) S. Kitaoka: “Strategies for improving oxygen shielding performance of multilayer EBCs”, the 44th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites (ICACC20) (2020.1.29, Daytona Beach, USA).
- [9] (基調講演) 平山雅章: “リチウム電池における電極・電解質界面の構造解析と制御”, 日本金属学会 2019 年秋期講演大会 (2019.9.12、岡山).

### 【ホームページ】

- [1] 「機能コアの材料科学」領域ホームページ <https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/>
- [2] 「機能コアの材料科学」YouTube チャンネル <https://www.youtube.com/channel/UC0Uz0GvdjCIyaFVF5s5C3NA>
- [3] 「機能コアの材料科学」Twitter [https://twitter.com/defect\\_cores](https://twitter.com/defect_cores)

### 【主催シンポジウム】

- [1] 2021 年 3 月 8 日 2020 年度「機能コア科学」公開シンポジウム (オンライン)
- [2] 2021 年 2 月 3 日 第 167 回超塑性研究会 (オンライン)
- [3] 2020 年 9 月 15 日～18 日 日本金属学会秋季(第 167 回)講演大会 (オンライン)  
公募シンポジウム「機能コアの材料科学I」
- [4] 2020 年 9 月 2 日～4 日 日本セラミックス協会 第 33 回秋季シンポジウム (オンライン)  
特定セッション「機能コア構造解析に基づく材料科学の新展開」
- [5] 2019 年 12 月 18 日～20 日 The 3<sup>rd</sup> Workshop on Functional Materials Science (札幌)
- [6] 2019 年 11 月 10 日～12 日 Joint 5<sup>th</sup> International Symposium on Frontiers in Materials Science & 3<sup>rd</sup> Nanomaterials, Technology and Applications (Da Nang, Viet Nam)
- [7] 2019 年 10 月 27 日～11 月 1 日 国際会議 PACRIM13 (沖縄)  
Symposium15: “Advanced Nanocharacterization and Atomic-Scale Modeling of Grain Boundaries and Interfaces in Ceramics: Structures, Dynamics and Properties”
- [8] 2019 年 9 月 11 日～13 日 日本金属学会秋季(第 165 回)講演大会 (岡山)  
公募シンポジウム S5 「先進ナノ構造解析に基づく材料科学の新展開II」

### 【アウトリーチ活動】

- [1] 2021 年 3 月 21 日 名大オープンレクチャー2021 「結晶における原子の並び方のはなし」
- [2] 2020 年 10 月 17 日 テクノフェア名大 2020 「機能コアの材料科学」
- [3] 2020 年 8 月 17 日 名大オープンキャンパス講義 「物質における原子配列の乱れと物質科学」
- [4] 2019 年 10 月 19 日 テクノフェア名大 2019 「結晶中の原子配列の乱れを科学する」

## 7 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携は、総括班が司令塔となって「研究領域の全体的な研究方針の策定」、「連携研究および設備有効利用の促進」、「若手人材育成・国際活動支援」、「公開講演会、シンポジウム等」を行い、管理運営している。

共同研究や研究グループ間交流のみならず、若手相互派遣や広報活動、国際連携も視野に入れ、スムーズな領域運営ができるよう、領域運営の柱として連携研究、交流推進、国際連携、若手育成、広報の部門にそれぞれ、総括班メンバーを配置した(図21)。また総括班には、材料科学、計算科学、ナノ計測分野で著名な4名の研究者が評価委員として参画し、さらには特定領域研究・新学術領域研究の領域代表経験を有する2名の研究者が領域アドバイザーとして加わり、多角的な観点から連携体制をチェックする機構を導入している。

共同研究に際しては、「連携研究および設備有効利用の促進」のため、計算解析センター、ナノ計測センター、モデル試料センターの計3つの研究センターを通じて、共同研究や連携研究を強く推進している。特に公募研究は、領域研究期間の途中で参画すること、多様な研究分野からの研究者の参画であることから、領域研究者と連絡・交流しやすい環境作りが必要不可欠である。本領域では、コミュニケーションツールとしてSlackを導入し、研究者間だけでなく、大学院生間で速やかなフランクな情報収集・交流を行える体制をとっている(「9 研究費の使用状況・計画」の頁参照)。「若手人材育成・国際活動支援」は、若手の会開催とともに、本領域内の計画研究班および公募研究班間で若手研究者相互派遣を支援する体制をとっている。総括班の若手育成担当が派遣内容の検討や派遣先との連絡・連携を担い、派遣希望状況や派遣時期、回数などを調整・斡旋する。「公開講演会、シンポジウム等」は、広報担当が主導し企画運営する。異分野交流や若手発表などイベントの場合は、交流推進担当や若手育成担当も協力する。

令和2年度から、公募研究17件が参画した。公募研究班と領域研究者との連携研究を促進するため、当初予定では「領域全体会議」を年1回開催することとしていた。しかしながら、17件の研究課題に対し、年1回の議論では討論・議論を尽くすことが難しいこと、新型コロナウイルスの影響で対面実施ができないことから、領域全体会議代替として、オンラインシステムを活用した「遠隔連携会議」を複数回実施し、領域内交流および連携の活性化を図った(図22および下表)。令和2年度は計6回実施し、各公募研究テーマについての深い議論を行った。その結果として、多くの連携研究がすでに進められている。

さらに計画班と公募班の調和の一環として、総括班の指揮により、9名の公募班研究代表者(藤井進、池野、宮町、平原、横井、吉田、八木、藤井孝、石部)を、各自の得意とする研究手法や研究対象に応じて、計画班の研究協力者として配置した。これは、計画班が公募研究をサポートするだけでなく、公募研究者の持つ強みを生かして、計画班研究のさらなる強化・活性化を企図したものである。

以上の体制を、研究期間後半も引き続き機能させて、領域運営を進めていく。

### 令和2年度「遠隔連携会議」実施スケジュール

|     |       |                          |
|-----|-------|--------------------------|
| 第1回 | 7/16  | 池野(大府大)、藤井(JFCC)、嶋田(京大)  |
| 第2回 | 8/17  | 森川(東北大)、杉本(東大)、宮町(電通大)   |
| 第3回 | 9/25  | 吉田(JFCC)、清水(NIMS)、黒澤(名大) |
| 第4回 | 10/30 | 伊藤(横国大)、横井(東医歯大)         |
| 第5回 | 11/26 | 蒲(名大)、平原(東工大)、石部(阪大)     |
| 第6回 | 12/21 | 八木(東大)、藤井(東工大)、黒川(名大)    |

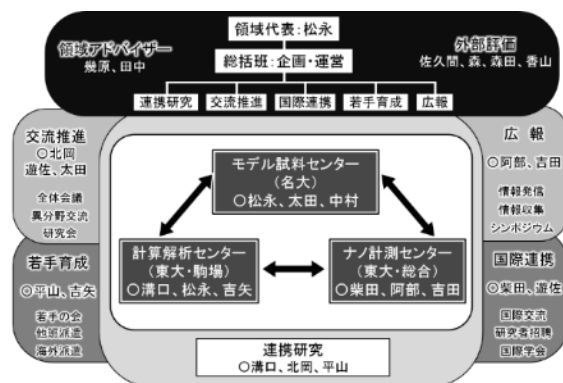


図21 総括班連携体制図(○は主担当者)

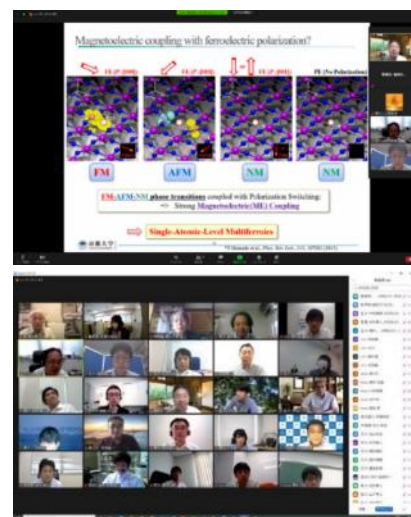


図22 第1回遠隔連携会議の様子



## 8 若手研究者の育成に係る取組状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和3年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組状況について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

### 「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」を初年度（令和元年9月）に開催した（図23）。泊まりこみで深夜までポスターセッションを行って徹底的に議論を戦わすものであり、大学院生の自立心の強化や、健全な競争心を刺激することに大いに役立った。これにより、大学、研究分野の垣根を越えた若手のネットワークが構築され、大学院生の場合は、卒業した後までネットワークが機能している。ここで若手ネットワークが構築されて相互理解が進んだことで、諸学会においても、若手研究者による分野横断的な討論が活性化している。



図23 第1回若手の会(浜名湖)

### オンラインによる「若手コラボツアー」開催

令和2年度以降、対面・合宿形式での若手の会が実施できなかった。しかしながら、第1回若手の会で培われた若手研究者・大学院生間のネットワークを維持・発展させるため、オンラインによる「若手コラボツアー」を実施した（図24）。これは大学院生もしくは若手研究者による最新研究トピックの発表と討論だけでなく、オンラインカメラもしくは収録動画を活用した研究室ツアーを行い、各研究グループの研究環境を紹介するものである。令和2年度は3回（名古屋大学、東京大学、物質・材料研究機構）実施し、令和3年度も3回（東京大学、北海道大学、東京工業大学）予定している。今後の連携研究を計画する際に有益である、という参加した若手研究者・大学院生からの肯定的な意見が多かった。



図24 若手コラボツアー(東大)

### 若手研究者および大学院生のキャリアアップおよび受賞

本領域研究実施中に17名もの若手研究者がキャリアアップしている。39歳以下で、博士課程大学院生から博士研究員への昇任3件、助教への昇任6件、講師への昇任1件、准教授への昇任が6件あった。さらに、准教授から教授への昇任も1件あり、これらの大多数が新たな職位において、現在も本領域研究の新展開を目指した研究を実施している。さらに、若手研究者および大学院生が国内外において高い評価を受けており、合計50件の賞を受賞した。



## 10 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後公募する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

### 本研究領域の達成目標（当初領域計画より）

- ① 本領域メンバーによる最先端の計算解析技術、ナノ計測手法、モデル試料合成技術を駆使し、機能コアの構造と機能の相関に関する系統的な情報を獲得し、従来に無い新しい材料科学の学理を構築する。
- ② 機能コアの学理にもとづき、光機能材料、エネルギー変換材料、耐熱・耐環境材料、固体イオニクス材料の各材料分野における、材料の高性能化、新機能創出、新材料創製を示し、機能コアが普遍的共通概念であることを示す。
- ③ 機能コアの学理構築には、計算、計測、合成プロセスの各要素技術の先鋭化が不可欠である。これらの材料解析・材料創製技術の世界最先端を目指す。
- ④ 材料科学における次世代のリーダーを育成する。すでに高い実績を挙げつつある若手・中堅研究者を中心とする計画研究班を設置し、経験・実績豊富な総括班メンバーとの連携を深めながら領域を運営する。また、大学院生、若手研究者を共同研究に主体的に、積極的に参画させる。

### 今後の推進方策

上述の本領域の達成目標をクリアすべく、以下の方策を実施する。

#### ① 「機能コアの材料科学」の学理構築

すでにこれまでも、領域内の連携研究により、「セラミックス粒界の物質移動に及ぼす粒界バンドギャップ効果 (A01(ア)-A02(ウ)-A03(キ)連携、*Nano Letters* 2020)」、「外部刺激による粒界移動現象の原子レベル直視観察とそのメカニズム解明 (A01(ア)-A02(ウ)連携、*Nature Mater.* 2021)」、「無機結晶中の転位による新しい発光現象の発見 (A01(ア)-A02(ウ)-公募班連携)」など、従来の粒界幾何学、原子拡散理論、転位論など、単独理論では到底説明のつかない現象・特性を見出すとともに、結晶欠陥内部の量子場まで踏み込んだ理論的な解釈にも成功してきた。これこそが、我々の目指す「機能コアの材料科学」学理となる知見である。研究期間後半では、現在進行中の連携研究をさらに強化・展開することで、新規の機能コアに起因する材料現象・特性を発掘していく。さらに、それらを「5つの機能コア」(「4. 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況」の図6参照)に基づき体系化していく、従来の縦割りの材料科学とは異なる「機能コアの材料科学」の学理を構築する。

学理構築には綿密な連携・共同研究が必要不可欠である。2021年6月末現在の、本領域内の共同研究数は138件であり、研究代表者・分担者一人当たりで換算すると3件の共同研究に取り組んでいることに相当する。さらに下表に、各班間の連携数分布を示した。解析評価に関わる研究項目A01とA02が主導して、公募班との連携を積極的に進めている。さらには、海外機関及び領域外研究機関との連携数も領域内連携に匹敵するほど多く、本領域研究が領域外研究者に対しても波及効果の大きいことが読み取れる。令和4年第2期公募班の参画に加え、第1期公募班研究者も交えて、共同研究を強化していく。

表 本領域の共同研究における各班・研究機関間の連携数

|           | A01(ア) | A01(イ) | A02(ウ) | A02(エ) | A03(オ) | A03(カ) | A03(キ) | A03(ク) | 公募 | 海外機関 | 国内領域外機関 |
|-----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|----|------|---------|
| A01(ア) 松永 |        | 2      | 9      | 2      | 2      | 1      | 4      | 0      | 9  | 5    | 3       |
| A01(イ) 溝口 |        |        | 1      | 0      | 1      | 0      | 1      | 5      | 6  | 2    | 2       |
| A02(ウ) 柴田 |        |        |        | 0      | 7      | 13     | 6      | 1      | 2  | 16   | 14      |
| A02(エ) 阿部 |        |        |        |        | 0      | 0      | 2      | 0      | 3  | 1    | 1       |
| A03(オ) 遊佐 |        |        |        |        |        | 0      | 10     | 0      | 0  | 1    | 3       |
| A03(カ) 太田 |        |        |        |        |        |        | 0      | 0      | 0  | 15   | 1       |
| A03(キ) 北岡 |        |        |        |        |        |        |        | 0      | 5  | 1    | 22      |
| A03(ク) 平山 |        |        |        |        |        |        |        |        | 5  | 0    | 0       |



## ② 機能コアに基づく、各材料分野への展開、新材料機能・創製

「機能コアの材料科学」学理が分野横断的で普遍的な概念であることを示すには、多様な材料における機能コアの解明と材料機能創出および材料創製の実績を挙げるのが重要である。すでに領域内では、層状ペロブスカイト型酸化物による世界最高の熱電性能指数の達成 (A02(ウ)-A03(カ)連携) や世界最高強度を示す工具用セラミックス複合材料の開発 (A01(ア)-A02(ウ)-A03(キ)連携)、高リチウムイオン伝導化合物の探索と実験実証 (A01(イ)-A03(ク)連携) など、機能材料や構造材料、固体イオニクスなどの材料分野に捉われない成果を挙げてきた。これ以外の材料応用研究も、領域内外で共同研究が進行中である。

## ③ 計算、計測、合成プロセスの各要素技術の先鋭化

本領域研究を世界最先端で展開するには、研究の要素技術である、計算科学、ナノ計測、合成プロセスの先鋭化は必須である。すでに本領域内では研究期間前半に、49 元素にも対応できる高精度機械学習原子間ポテンシャルの開発と公開 (A01(イ))、磁場フリーSTEM 法開発 (A02(ウ))、フラッシュ焼結による蛍光・超塑性ジルコニア開発 (A03(キ)) など、計算・計測・合成手法の確立に成功している。今後は、これら各手法のさらなる高度化と共に、研究進行中の新合成手法の開拓を強化していく。

## ④ 若手育成

材料科学における次世代のリーダー育成のための領域活動として、研究期間前半には、「若手の会」もしくはオンラインによる「若手コラボツアー」を実施してきた。これにより、若手研究者および大学院生間のネットワークの基礎は構築できた。しかしながら、若手研究者・大学院生の活動や交流が十分でない状況であったため、研究期間後半は、これらを継続するとともに、まずは国内の若手相互派遣を皮切りに、若手育成支援活動を進めていきたい。

## 公募研究について

多様な分野における新材料機能創出に関わる研究展開は、「機能コアの材料科学」学理構築には欠かせない。この点、領域外からの参画が望ましいため、第2期公募研究では、A03 班に関する**多様な公募研究を中心として、本領域の計画研究との共同研究により、大きな進捗が期待できそうな研究提案、特色ある研究提案、さらには「機能コア」の学理構築に貢献できるような研究提案**を募集したい。

## 研究推進上の問題の有無について

これまでの本領域の連携研究により、基礎学理面および材料応用面で、機能コアの概念に基づく多くの研究成果を得ることに成功してきた。一方、当初計画に対して、「機能コア」という用語の定義が一般にはやや分かりにくく、「コア」の認識に関しても各計画研究間で幾分、差があるように思われるため、学理の構築及び社会への成果発信に当たって、十分な検討を要望する。」と指摘を受けていた。本報告書の「4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況」に詳述した通り、**計画研究班代表者と領域内若手研究者を加えたワーキンググループを設置し議論を進めることによって、互いに意思疎通をはかり、研究目標や研究展開の方向性を共有した。**これを基礎として、継続して領域研究を進めることで、同様な問題を抱えることなく、真の学理構築に邁進できると考えている。

## 国際的なネットワークの構築等の取組について

本領域の研究活動を国内外に発信するとともに、研究を加速させる、あるいは新しい展開を見出すために、国内外での連携を積極的に行う。これまでも本領域では、新型コロナの影響で直接の人的交流はできなかったものの、領域研究者と海外研究機関との連携・共同研究は進めてきた。「**光環境制御下における ZnS 結晶のナノレベルでの塑性変形挙動解明 (A01(ア)班と独ダルムシュタット工科大学との国際共同研究、ACS Nano 2021)**」、「**TiO<sub>2</sub> 結晶への転位導入による電気伝導性発現と制御 (A01(ア)班と独ダルムシュタット工科大学との国際共同研究、Nano Energy 2021)**」、「**多結晶よりも熱が伝わりにくい単結晶を発見 (A03(カ)班-A02(ウ)班と台湾国立交通大学との国際共同研究、Adv. Mater. Interface 2021)**」、「**深紫外線を透過する透明なトランジスタを実現 (A03(カ)班と北京科技大学との国際共同研究、Adv. Electron. Mater. 2020)**」などがその例である。これら以外でも、本領域研究者は、多くの国際学会での基調・招待講演に招へいされていることからわかるように、国外からの多くの共同研究依頼を受けている。それらの研究ネットワークを活用して、総括班支援の下、今後も国際連携を強化していく。

## 11 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

### 総括班評価者による評価体制

評価委員は、総括班会議および領域全体会議に出席し、計画研究・公募研究の研究進捗状況のチェックと評価を行い、領域代表者、計画研究班研究代表者、個々の領域内研究者に評価結果をフィードバックする。領域運営が独善的にならないよう、大所高所からアドバイスする役割を有する。評価委員は、以下の通りである。

#### 評価委員氏名・専門分野

|                          |           |
|--------------------------|-----------|
| 佐久間健人（東京大学名誉教授）          | 専門：材料科学   |
| 森博太郎（大阪大学・特任教授）          | 専門：材料科学   |
| 森田清三（大阪大学・名誉教授）          | 専門：表面科学   |
| 香山正憲（産業技術総合研究所・名誉リサーチャー） | 専門：計算材料科学 |

また、本領域では、評価委員に加え、領域代表経験者から2名（幾原雄一東大教授、田中功京大教授）に領域アドバイザーとして協力を仰ぎ、共同研究促進のための方策や中間評価、事後評価に向けての領域成果取りまとめの相談役を務めていただいている。

### 本研究領域に対する評価コメント

#### 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、それをもとに結晶欠陥の構造と特性にフォーカスした、普遍的な材料設計指針を獲得することを目指している。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。走査型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、ナノレベルの結晶欠陥に関わる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こそが進めるべき課題である。

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し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」、新学術領域研究「ナノ構造情報」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挙げられていると判断でき、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。

#### 森 博太郎（大阪大学・特任教授、大阪大学・名誉教授）

地球規模のエネルギー・環境問題解決など、持続的社会的構築には、材料科学による新しい原理の発見

や、新原理に基づく超高性能材料の開発が必要不可欠である。その点で、材料科学に携わる研究者は非常に重要な使命を負っていると言える。本領域に参画している主要な研究者は、すでに、暗環境下での無機結晶の柔軟性発見や、材料の格子欠陥に対する最新の電子顕微鏡法開発、情報科学と第一原理計算を融合させた計算科学手法の開発等、新しい材料現象の発見や新解析手法開発の実績を挙げており、極めて高いレベルでの材料科学研究を推進している。これらの研究者が核となる本領域は、従って、これからの材料科学を支え、未来を開拓する上で重要な貢献をなすものと期待される。

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、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実施し多くの成果を挙げている。また、各班の研究代表者らが協力し合い、理論計算と実験の従来になかった緊密な相互連携も行われ、重要な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。

### 森田清三（大阪大学・名誉教授）

電子顕微鏡やプローブ顕微鏡などの最先端ナノ計測技術はナノテクノロジーの基盤を支える重要な解析手法である。本領域ではこれをさらに深化させ、単に空間分解能を上げるのみならず、原子レベルでの直接的な構造情報および組成情報の取得までも可能とする取り組みに挑戦し、それに成功している。さらに、第一原理計算を始めとする最先端の理論計算技術を連携させ、新しい材料機能の創出をも目指し、世界トップレベルでの材料研究を推進している。

本領域における新たな試みは、結晶欠陥の持つ特徴的な原子レベル構造とそこに閉じ込められた量子構造を機能コアと再定義し、その考え方を横串として材料科学に導入するという革新的なものである。領域内連携研究を活発に行うことで、本領域が開始した時点と比べると数段高いレベルの融合を達成している。これは領域代表者のリーダーシップによるところが大きい。本領域は、世界的に見ても、このような新しい展開が実践できる数少ない研究組織の一つであることは論を俟たない。よって、新学術領域として十分な達成度に至っていると判断できる。

### 香山正憲（産業技術総合研・名誉リサーチャー）

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、長年にわたる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、機械学習や情報学的手法を融合させた計算科学を駆使して定量的に結晶欠陥の素性を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、*Nature Materials*、*Nano Letters* 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受けている。そして、それ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、連携して共同研究に取り組み、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。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。