

領域略称名：機能コア科学

領域番号：6103

令和6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）」
に係る事後評価報告書

「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6年6月

領域代表者 名古屋大学・大学院工学研究科・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 交付決定額	6
4 研究領域の目的及び概要	7
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	9
6 研究目的の達成度及び主な成果	11
7 研究発表の状況	16
8 研究組織の連携体制	21
9 研究費の使用状況	22
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	24
11 若手研究者の育成に関する取組実績	25
12 総括班評価者による評価	26

研究組織

(令和6年3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 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	19H05785 機能コアの材料科学	令和元年度 ～ 令和5年度	松永 克志	名古屋大学・工学研究科・教授	8
A01 計	19H05786 機能コアのモデリング	令和元年度 ～ 令和5年度	松永 克志	名古屋大学・工学研究科・教授	3
A01 計	19H05787 情報科学による機能コア計算設計	令和元年度 ～ 令和5年度	溝口 照康	東京大学・生産技術研究所・教授	4
A02 計	19H05788 界面機能コア解析	令和元年度 ～ 令和5年度	柴田 直哉	東京大学・工学系研究科・教授	7
A02 計	19H05789 表面機能コア解析	令和元年度 ～ 令和5年度	阿部 真之	大阪大学・基礎工学研究科・教授	4
A03 計	19H05790 高温高压プロセスによる新材料機能創出	令和元年度 ～ 令和5年度	遊佐 齊	国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテクトニクス材料研究センター・グループリーダー	4
A03 計	19H05791 界面制御による高機能薄膜材料創製	令和元年度 ～ 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 計	19H05792 耐熱・耐環境セラミックスの高機能化	令和元年度 ～ 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 計	19H05793 高機能固体イオニクス材料の創出	令和元年度 ～ 令和5年度	平山 雅章	東京工業大学・物質理工学院・教授	3
総括班・総括班以外の計画研究 計 9 件（廃止を含む）					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	20H05190 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 ～ 令和3年度	嶋田 隆広	京都大学・工学研究科・准教授	1
A01 公	20H05192 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 ～ 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 公	20H05195 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 ～ 令和3年度	藤井 進	大阪大学・工学研究科・助教	1
A02 公	20H05176 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 ～ 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 公	20H05178 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 ～ 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 公	20H05179 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 ～ 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 公	20H05196 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 ～ 令和3年度	吉田 要	一般財団法人ファイナセラミックスセンター・ナノ構造研究所・研究員	1
A03 公	20H05180 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 ～ 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 公	20H05181 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 ～ 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 公	20H05183 界面を制御した SrTiO ₃ 上の単層 FeSe 薄膜の高温超伝導特性解明	令和2年度 ～ 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 公	20H05184 アパタイト型酸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 ～ 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 公	20H05185 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 ～ 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 公	20H05186 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 ～ 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 公	20H05187 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 ～ 令和3年度	黒川 康良	名古屋大学・工学研究科・准教授	1
A03 公	20H05188 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 ～ 令和3年度	黒澤 昌志	名古屋大学・工学研究科・講師	1
A03 公	20H05189 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 ～ 令和3年度	蒲 江	名古屋大学・工学研究科・助教	1
A03 公	20H05191 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 ～ 令和3年度	石部 貴史	大阪大学・基礎工学研究科・助教	1
A01 公	22H04508 半導体における転位コア構造および転位ダイナミクスの理論解析	令和4年度 ～ 令和5年度	横井 達矢	名古屋大学・工学研究科・講師	1
A01 公	22H04512 電子線エネルギー損失スペクトルに対する画像生成・画像認識アルゴリズムの適用	令和4年度 ～ 令和5年度	池野 豪一	大阪公立大学・工学系研究科・准教授	1
A02 公	22H04495 局所電子密度分布解析による強誘電体ドメイン壁における分極回転の直接観測	令和4年度 ～ 令和5年度	森川 大輔	東北大学・多元物質科学研究所・助教	1
A02 公	22H04496 シリコン単原子層における異種元素の配列制御	令和4年度 ～ 令和5年度	杉本 宜昭	東京大学・新領域創成科学研究科・教授	1
A02 公	22H04515 ゼオライト触媒内カウンターカチオンと反応種の構造解析	令和4年度 ～ 令和5年度	吉田 要	一般財団法人ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所・主任研究員	1
A03 公	22H04497 構造内に欠陥または空間を有する物質の電気化学反応促進機構の研究	令和4年度 ～ 令和5年度	八木 俊介	東京大学・生産技術研究所・准教授	1
A03 公	22H04500 機能コアの導入により光機能を付与したリン酸八カルシウムナノ粒子の合成とバイオ応用	令和4年度 ～ 令和5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 公	22H04501 酸化物ヘテロ界面における異方的な歪み状態の解明と機能創出	令和4年度 ～ 令和5年度	打田 正輝	東京工業大学・理学院物理学系・准教授	1
A03 公	22H04502 SrTiO ₃ 基板中の Nb を機能コアとする単層 FeSe 薄膜の超伝導特性解明	令和4年度 ～ 令和5年度	平原 徹	東京工業大学・理学院物理学系・教授	1
A03 公	22H04504 アパタイト型酸化物イオン伝導体の系統的な機能コアの解明と新材料探索	令和4年度 ～ 令和5年度	藤井 孝太郎	東京工業大学・理学院化学系・助教	1
A03 公	22H04505 高結晶性エピタキシャル薄膜における結晶欠陥と電子機能	令和4年度 ～ 令和5年度	相馬 拓人	東京工業大学・物質理工学院応用化学系・助教	1
A03 公	22H04506 希土類窒素水素化合物の創製と窒素がもたらす物性変調機序の微視的解明	令和4年度 ～ 令和5年度	清水 亮太	東京大学・理学系研究科・准教授	1
A03 公	22H04507 精密元素配合によるサブナノ機能コアの開拓	令和4年度 ～ 令和5年度	神戸 徹也	大阪大学・工学研究科・准教授	1
A03 公	22H04510 機能コア界面への原子挿入操作による高性能透明熱電材料の実現	令和4年度 ～ 令和5年度	石部 貴史	大阪大学・基礎工学研究科・助教	1
A03 公	22H04511 触媒表面機能コア制御による二酸化炭素還元光触媒設計への挑戦	令和4年度 ～ 令和5年度	吉田 朋子	大阪公立大学・人工光合成研究センター・教授	1
A03 公	22H04513 機能コアであるカチオン位置を精密に制御したゼオライト薄膜の創製	令和4年度 ～ 令和5年度	酒井 求	早稲田大学・ナノ・ライフ創新研究機構・講師	1
A03 公	22H04514 H ⁻ 導電性材料のメカノケミカル合成	令和4年度 ～ 令和5年度	小林 玄器	理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員	1
公募研究 計 34 件（廃止を含む）					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
令和元年度	304,460,000 円	234,200,000 円	70,260,000 円
令和2年度	293,670,000 円	225,900,000 円	67,770,000 円
令和3年度	293,540,000 円	225,800,000 円	67,740,000 円
令和4年度	293,540,000 円	225,800,000 円	67,740,000 円
令和5年度	242,190,000 円	186,300,000 円	55,890,000 円
合計	1,427,400,000 円	1,098,000,000 円	329,400,000 円

4 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、材料科学に基づく新材料開発には停滞感が漂っている。経験やノウハウに基づき行われてきた、伝統的な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基づき、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てきた。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。

格子不整合領域に基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、フォトン、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。

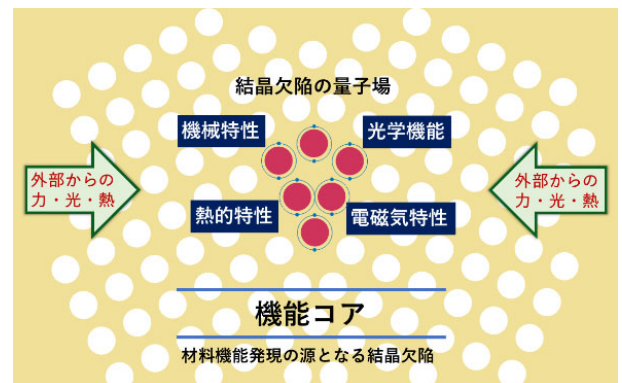


図 4-1 機能コアとしての結晶欠陥

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、線状の結晶欠陥である転位に関わる研究では、室内光をオフにするだけで、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

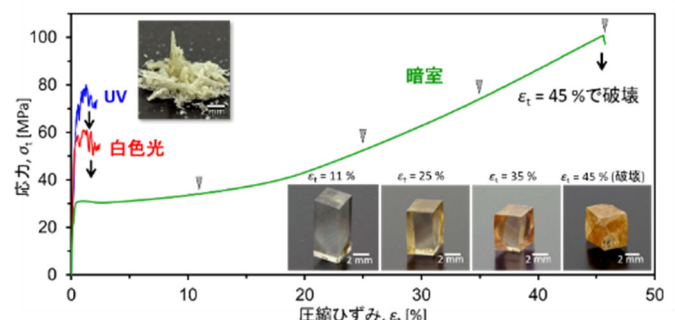


図 4-2 ZnS 結晶の暗室下での巨大変形

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 4-2)。この現象は、転位コアにおける電子とフォトンとの相互作用、つまり転位コアそのものが機能コアとなっていると考えられる。この成果は、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 4-3) 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 Commun.* 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 4-4)。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 4-5)、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手法の開発 (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。本領域は、これらの実績を有する研究者群で構成されているという優位性からも、「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるといえる。

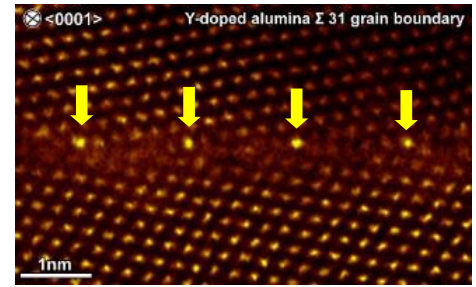


図 4-3 粒界偏析元素の配置同定

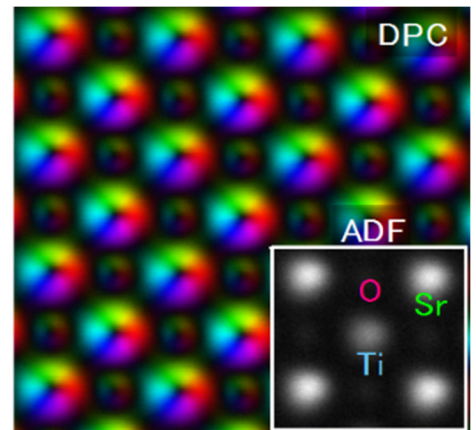


図 4-4 個々の原子内電場の直視

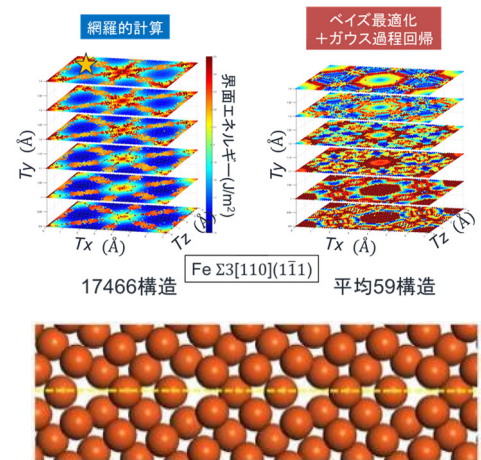


図 4-5 情報学による粒界構造決定

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の確立が、第 1 に期待される成果である。機能コアの学理を駆使し、計画班に挙げた各分野での材料の高機能化もしくは新材料の創出が第 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。

5 審査結果の所見及び中間評価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、審査結果の所見及び中間評価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。

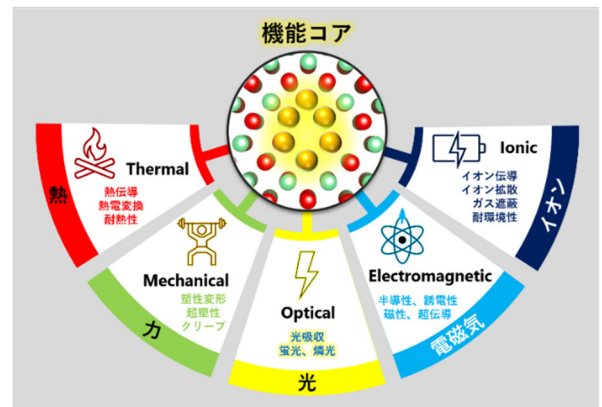
(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

【指摘事項1】

「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。

対応1：総括班＋領域内若手メンバーも加えたタスクフォースを設置し、「機能コア」概念の明確化、再確認と共有を行った。それに基づき領域内共同研究における研究推進の指針とした。

採択後、総括班メンバーに新進気鋭の領域内若手研究者を加えたタスクフォースを設置し、「機能コア」概念を基軸とした各研究項目の目的と役割を再整理した。その結果、本領域で展開している領域内研究は、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との結論に達した。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(右図)。この「5つの機能コア」を、個別の材料の各論に留まらない、材料開発における共通認識としてメンバー内で再確認し、領域における連携および共同研究を進めた。



機能コア概念の分類

対応2：社会への成果発信に際しての「機能コア」の定義・認識を明確にするため、本領域ホームページだけでなくYouTubeチャンネル等の創設により広く周知した。

「機能コア」概念をなるべく平易な形でかつタイムリーに公開することで、材料科学や物性科学に関わる研究者だけでなく、次世代を担う大学院生、より広く国民に本領域活動を周知することに努めた。

【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：公募研究として、シリコンおよび関連するエレクトロニクス研究の提案を採択した(第1期4件、第2期3件)。

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、領域内研究者がこれまで関係してきた金属学会やセラミックス協会、電気化学会だけでなく、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、広くアナウンスした。その結果、エレクトロニクス分野の研究者の公募研究としての参画はもちろんのこと、物理学会で活躍する多数の物性科学研究者が参画する結果となり、本領域研究の多分野への広がり至った。また、総括班が領域研究者と公募研究者との連携の橋渡しを行い、領域内のモデル試料センターを通じた双結晶基板を用



広報活動の例

いた共同研究、Si 薄膜の熱電性能や太陽電池性能評価など、多数の共同研究を実施した。

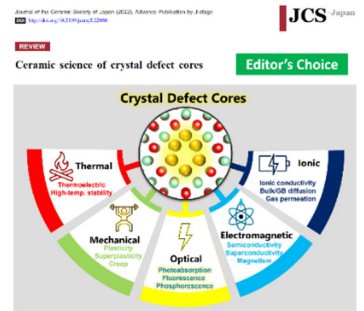
(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

【指摘事項 1】

計画研究ごとに何を『機能コア』と呼ぶかについて様々な観点が混ざっており、『機能コア』という概念を明瞭にする必要性が感じられる。『機能コア』の統一性のある学理構築への取り組みが更に具体的に進むことを求めたい。

対応：国際学術誌での「機能コア科学」の総説論文および特集号、日本語解説特集号を出版した。

総括班のリーダーシップのもと、機能コア概念を領域内外でより明瞭にするため、計画研究班代表者を共同執筆者とした英文総説論文を 2022 年 8 月に発表した(K. Matsunaga et al., *JCS-Jpn.* 130, 648-667 (2022))。本論文は同月号 Editor's choice として選定されただけでなく、2022 年優秀総説論文賞を受賞するなどした。また領域代表者が Guest Editor となり、「機能コア科学」特集号を *Journal of Ceramic Society of Japan* 誌上で企画した。同誌の他の特集記事収録論文数を大きく上回る 28 件の学術論文を収録しただけでなく、収録論文のうち領域内研究者が著者の掲載論文 2 件が 2023 年度における同雑誌全体の優秀論文として選定され、高い評価を受けた。さらに会報誌「まてりあ」(日本金属学会、右図は表紙)において、各計画研究班による邦文解説記事の特集号も出版した。以上のような、幾つもの領域主導の研究発表活動を通じて、本領域の志をメンバー間で共有し、統一ある学理構築につながるよう努めた。



【指摘事項 2】

成果の単なる寄せ集めとならないように『機能コア』の学理構築への道筋を踏まえた研究の進展を期待する。

対応：審査結果の所見【指摘事項 1】および中間評価結果の所見【指摘事項 1】と対応は同じであり、機能コア概念の分類とその共有・再確認および総説や特集号等を出版した。

【指摘事項 3】

結晶欠陥のナノ構造を機能コアとして解明するナノ材料科学は重要で、いくつかの興味深い現象を見出している。しかし、材料特性にどのように結びつけるかについては、学理の構築の観点からだけでなく、領域研究の観点から俯瞰的に整理することを心掛けて頂きたい。また、本新学術領域研究の成果と領域外の成果との切り分けを明確にしつつ、領域内外に統一感のある成果発信を進めることが望まれる。

対応：総括班のリーダーシップのもと、新材料機能創出に関わる研究項目 3 各班 (計画・公募) の重点研究課題を選定し、集中的な共同研究推進を実施した。

本領域研究では普遍的な材料開発原理となる学理の構築を目指している。したがって分野横断的に多様な材料を対象にしなければならない一方で、領域研究が総花的にならないような工夫が重要である。そのため、総括班主導のもと新材料機能創出に関わる研究項目 3 の計画研究や公募研究における重点研究項目を検討・選定した。それら重点研究課題にナノ計測センター・計算解析センター・モデル試料センターの主要メンバーを重点配置し、機能コア概念を強く共有したうえで、共同研究を実施した。また、公募研究者も研究内容の関連が大きい計画班の研究協力者として参画するよう差配した。これにより、領域内研究者との敷居を下げ、共同研究が円滑となるよう配慮した。その成果として、超高リチウム伝導体開発 (Y. Li, et al., *Science*, vol.381, 50-53 (2023)) 等に成功した。また、本領域研究の研究成果を明確にするため「研究成果ホームページ」を開設し、すべての本領域研究成果一覧を一般公開した。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(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) 研究項目ごとの達成度

本領域の目的は、機能コアに基づく新材料学理の構築と新材料機能の創出である。研究項目 A01 と A02 が前者、研究項目 A03 が後者において中心的な役割を果たすが、互いに密接に連携することで、相乗効果による研究開発の大きな進展を達成することができた。以下に述べる通り、3つすべての研究項目において当初計画・目標を100%以上達成したと自己評価している。

項目 A01 機能コアの理論解析 (構成：計画班2班、公募1期3班、公募2期2班)

当初目標：第一原理計算、情報科学に基づく計算解析に加え、粒界や転位のモデル試料の創製・解析を行う。A02 と連携し計算・実験の両面から、機能コアのナノレベル構造と特性の関係を解明する。

① 転位・粒界・界面の新材料学理構築と新材料機能開拓

先進材料における、転位、粒界、界面の量子場とそれに起因する各種物性・特性との関係に関する多くの画期的な成果が得られた。例えば、従来の熱伝導理論では、転位を原子空孔列とするなど、非常に単純化したモデルしかなかった。これに対し、本研究では転位や粒界を高精度かつ系統的にモデル化した。その結果、酸化物中の転位・粒界による熱伝導は、**欠陥コアの原子配列や結合状態 (= 熱機能コア)** によって決まることを見出すとともに、熱伝導予測モデルの構築にも成功した (*Nature Commun.* 2020 等)。化合物半導体結晶の力学物性に関する研究では、**転位コアと光励起キャリアとの強い相互作用を見出し、それが力機能コアとして働くこと**で、光環境に依存した劇的な変形挙動変化に至ることを解明した (*Acta Mater.* 2020, *Phys. Rev. Mater.* 2023 等)。さらに転位コアでのキャリア捕獲に着想を得て、転位特有の発光特性や電子伝導特性の発現、つまり**光・電子機能コアとしても機能させることに成功した** (*J. Am. Ceram. Soc.* 2024 等)。また、微量添加イオンで修飾した**力機能コア異相界面を多結晶組織にビルトインすることにより**、従来強度を飛躍的に上回るセラミックスの開発にも成功し、民間企業からも注目され、**切削工具としての実用化につなげた** (*Sci. Rep.* 2020 等)。これらの成果は、従来別々の材料部門・業界で研究されてきたが、機能コア概念により合理的かつ統一的に、その材料特性発現原理の根本的理解とその応用が可能であることを示した。

② 機能コア解析のための情報科学手法開発とデータベース構築

機能コア解析および材料探索を加速させるための各種手法開発に取り組んだ。**広範な物質群に適用可能な高精度機械学習ポテンシャルの構築と公開** (*J. Appl. Phys.* 2023 等)により、領域内外の機能コア研究を大いに加速させた。また、電子顕微鏡から得られる電子エネルギー損失分光スペクトルなどの分光データから、**材料中の局所配位構造や電子構造の情報を抽出する情報科学手法を開発**するとともに、**10万以上の理論スペクトルをデータベースとして公開した** (*Sci. Data* 2023 等)。これらの成果は、各種材料研究へ適用、またナノ計測班と共有することにより、機能コアのモデル化や素性解明に大きく貢献した。

以上より、機能コアのナノレベル構造と特性との関係や新規情報科学手法・データベースという、本領域学理の柱となる知見および要素技術を獲得した。加えて、熱や光、力場等の多彩な外部場における機能コアとしての新欠陥機能の創出にも成功しており、当初目標は100%以上達成できたと自己評価している。

項目 A02 機能コアのナノ計測 (構成：計画班2班、公募1期4班、公募2期3班)

当初目標：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、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の解析を行う。

① 粒界移動の原子レベル動的直接観察

原子分解能 STEM 法に基づく局所量子場計測手法やその場観察法など、新規機能コア計測手法の開発に成功し、多くの革新的成果が得られた。領域内共通試料の双結晶試料を用い、酸化物セラミックスの組織形成や高温安定性において重要な、**結晶粒界の移動を原子レベルで直接観察することに成功し**、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.* 2020, 本成果は同誌のハイライト記事”news & views”においても紹介された)。

② 先進材料内の局所電磁場可視化

原子分解能を有する局所電磁場観察 STEM 法を開発し、**電磁気機能コアとなる半導体界面二次元電子ガスや反強磁性結晶内の原子磁場の実空間観察等に世界で初めて成功した** (*Nature* 2022 等)。以上により、

結晶欠陥の局所量子場の可視化を実現し、機能コアに基づく材料学理構築を強力にサポートした。

以上より、機能コア量子場の直接観察・定量計測という、従来の材料科学では到底達成できなかったナノ計測に見事に成功しており、世界を先導する成果を得ている。当初目標は100%以上達成できたと自己評価している。

項目 A03 機能コア制御にもとづく新材料機能創出 (構成: 計画班 4 班、公募 1 期 10 班、公募 2 期 12 班)

当初目標: 各種合成プロセスを活用し、機能コア概念を応用した多様な材料機能創製を行うだけでなく、機能コアの機能発現機構に関する知見を A01、A02 にフィードバックし、学理構築をサポートする。

① 機能コア制御による高性能熱電材料開発

機能性酸化物における層界面を高度に制御して、高性能な熱電材料・デバイスを創製した。例えば、 $\text{Na}_{3/4}\text{CoO}_2$ を Ba^{2+} 置換で $\text{Ba}_{1/3}\text{CoO}_2$ とすることで、熱・電子機能コアとなる層界面での原子間相互作用を制御し、**空気中でも実用できる過去最高性能の熱電変換材料の開発に成功した** (*J. Mater. Chem. A* 2020 等)。固体電解質 YSZ と接合させた SrCoO_x 薄膜の研究では、電気化学的酸化還元により**酸素空孔 (熱・電子機能コア)** を制御することで、**可逆的に熱伝導率が大きく変化する全固体熱トランジスタの実現に世界で初めて成功した** (*Adv. Funct. Mater.* 2023 等)。また、界面におけるフォノン伝導機構に関する知見を A01(ア) 班にフィードバックすることで、粒界・転位を含む酸化物の熱伝導に関する基礎学理構築にも貢献した。

② 機能コア概念による耐環境材料の本質理解と設計

航空機エンジン等に用いられる Al_2O_3 多結晶保護膜の、耐久性・寿命を決定づける高温安定性の基本原理が、**熱機能コアとなる粒界量子場 (粒界バンドギャップ)** であることを、双結晶試料と最先端電子顕微鏡法を活用した系統的研究に基づき解明した (*Nano Lett.* 2020 等)。さらにその知見を活かし、**複合酸化物の積層構造を設計することで、飛躍的な保護膜性能向上に成功した** (*Acta Mater.* 2020)。高温構造材料分野においても、機能コアに立脚した研究開発アイデアが有効であることを示したという点で、工業的・産業的にも大きな波及効果をもつ成果である。

③ 超高性能固体イオニクス材料の創製

イオン機能コアとなるアニオン種を A01(イ)班と探索し、その導入と制御により、**世界最高のイオン伝導率を示す新硫化物系リチウム伝導体の創製に成功した** (*Science* 2023, *Chem. Mater.* 2022 等)。さらには第一原理計算により導入アニオンの機能コアとしての役割も突き止め、それを設計指針として他のヒドリド系にも適用し、特性向上のための合理的な設計指針の獲得に成功した。

以上より、A01・A02 と密接に連携し、機能コアの基礎学理を最大限活用することで、新材料創製および飛躍的な特性向上に成功した。当初目標は100%以上達成できたと自己評価している。

(2) 得られた成果 (下に示すものはすべて領域内共同研究)

研究項目 A01 機能コアの理論解析

計画研究 A01(ア) 機能コアのモデリング

● 結晶粒界・転位の熱伝導度予測手法開発 (連携班数: 4)

計算科学と機械学習の融合により、結晶粒界の熱伝導度を予測するモデルの構築に成功するとともに、粒界の**熱機能コア**としての役割も解明した。これにより、熱伝導度を制御するための粒界設計指針を世界で初めて得た。さらに、結晶中の転位に適用できることも実証した (図 6-1)。これらは、結晶欠陥コアによる熱伝導特性制御の指針であり、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貢献しうる (*Nature Commun.* 2020, *Scripta Mater.* 2021, *J. Ceram. Soc. Jpn.* 2023(優秀論文賞受賞)等)。

● 化合物半導体結晶における多機能コア転位による力学的・光学的機能 (連携班数: 4+国際共同研究)

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、半導体結晶 ZnS における転位コアの静電場と可視光励起されたキャリアの相互作用が、同結晶の暗室下巨大変形・光照射下硬化の起源であることを突き止めた (図 6-2 上)。さらに、転位コアのキャリア捕獲に着想を得て、転位による蛍光・燐光の発現とその強度の制御にも成功した (図 6-2 下)。転位コアは外力場に応答する**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**として機能することを明らかにした (*Acta Mater.* 2020, *Nano Lett.* 2021, *Phys. Rev. Mater.* 2023 等)。

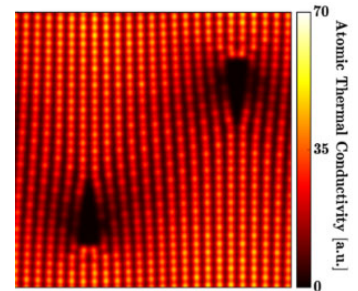


図 6-1 MgO 転位コア近傍の熱伝導

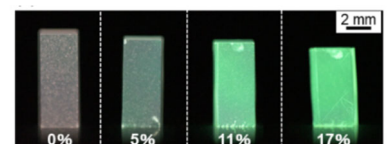
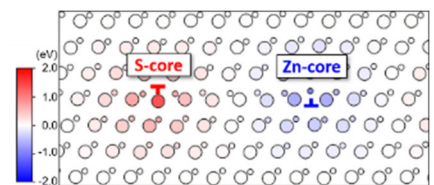


図 6-2 ZnS 転位コアの静電場(上)、転位導入試料のりん光発現(下)

計画研究 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開発とデータベース公開 (連携班数:4)

機能コア解析を効率的かつ高精度に実施するための機械学習原子間ポテンシャルを開発し、データベースとして一般公開した (<https://sekocha.github.io/>)。この応用として、公募班 (阪大・藤井) と共同で Si 界面の大規模 MD 計算を行い、同界面の**熱機能コア**としての役割を解明した (*Comp. Mater. Sci.* 2022, *Acta Mater.* 2023, 図 6-3)。その他、機能コア解析に有用な ELNES/XANES スペクトルから動径分布関数や電子構造を抽出する手法の開発 (*Mater. Trans.* 2023, *J. Phys. Soc. Jpn.* 2022) と、それを活用して A03(キ)班と共同でガラス中の配位数分布の解明 (*J. Phys. Chem. Lett.* 2020) に成功し、得られた計算スペクトル群はデータベースとして公開した (*Sci. Data* 2023)。

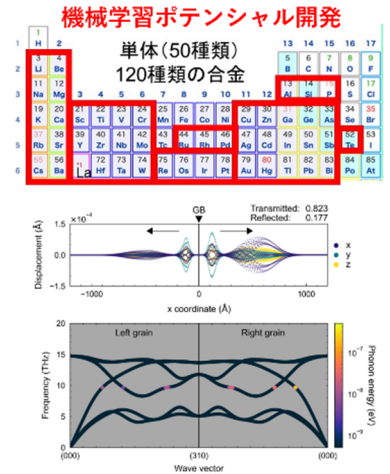


図 6-3 開発した原子間ポテンシャルと Si 界面の構造・機能予測

● 固体イオニクス材料探索 (連携班数:3+国際共同研究)

A03(ク)と連携し高リチウムイオン伝導物質の探索に取り組み、新規物質の合成に成功し、**イオン機能コア**となる置換元素種の役割やリチウムイオン伝導経路を解明した (*Science* 2023, *J. Mater. Chem. A* 2020)。またデータ駆動型手法を適用し、層間化合物の安定性に対する新たな回帰式を導き、層間化合物探索の道を切り拓いた (*J. Phys. Chem. C* 2023, *ACS Phys. Chem. Au* 2024)。

公募研究 1 期 (嶋田, 池野, 藤井進)

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機械学習手法を開発した (池野)。機械学習による熱伝導予測モデルを構築し、粒界・界面の**熱機能コア**としての役割を定量化した (藤井進)。

公募研究 2 期 (横井達, 池野)

機械学習原子間ポテンシャルを開発し、Si 材料における機能コア転位の構造と移動度を解明した(横井達)。STEM-EELS スペクトルから、対象物質の局所構造を抽出できるアルゴリズムを開発した(池野)。

研究項目 A02 機能コアのナノ計測

計画研究 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 (連携班数:3)

A01(ア)+A03(キ)と連携し、原子分解能 STEM-EELS の計測条件を最適化し、 Al_2O_3 双結晶モデル粒界の局所バンドギャップの直接定量計測に世界で初めて成功した (*Nano Lett.* 2020, 図 6-4)。さらに、理論計算および双結晶モデル実験との連携で、粒界の高温安定性は、**粒界バンドギャップ=粒界量子場**に支配されていることを解明した。

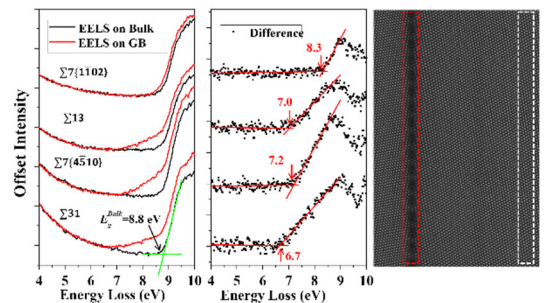


図 6-4 粒界バンドギャップと粒界性格依存性

● 粒界移動の原子レベル動的直接観察 (連携班数:3)

高温構造用 Al_2O_3 セラミックスにおいて**熱・力機能コア**となる、粒界の移動現象を原子分解能 STEM により直接観察することに成功した。さらに、A01(ア)の理論計算と連携し、粒界移動過程は粒界性格に依存し、粒界コアにおける原子多面体の逐次構造変化というメカニズム (*Nature Mater.* (2021), *Nature Commun.* (2022), 図 6-5)を提案した。

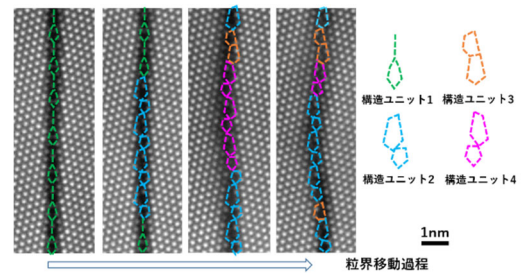


図 6-5 粒界移動の原子レベル直接観察

● 先進材料内の局所電磁場可視化 (連携班数:2)

回折コントラストを大幅に低減する tilt-scan averaging 微分位相コントラスト法(tDPC)を開発することにより、機能コア界面の局所電磁場定量観察法を確立した。本手法を用いて、**電子機能コア**である GaN 系半導体異相界面の二次元電子ガスの定量観察 (*Nature Nanotech.* (2023))、**イオン機能コア**である YSZ 粒界における空間電荷層の実証、さらに同 DPC 法を原子分解能化させ、**磁気機能コア**となる反強磁性ヘマタイト (Fe_2O_3) 結晶中の原子磁場の実空間観察に世界で初めて成功した (*Nature* (2022), 図 6-6)。

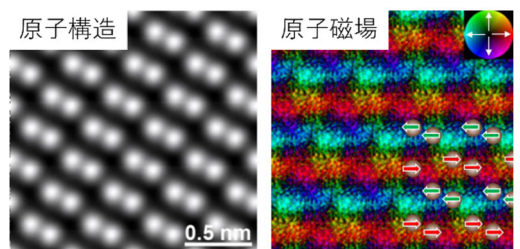


図 6-6 Fe_2O_3 結晶中の原子磁場の直接観察

計画研究 A02(エ) 表面機能コア解析

● 酸化物表面の機能コア線欠陥の量子場解明 (連携班数:4)

超高分解能 NC-AFM/STM により、ルチル型 $\text{TiO}_2(110)-(1 \times 2)$ 表面における特異な表面線欠陥の存在を見出した。A01(ア)+公募班との連携により、この線欠陥は負に帯電し水を全く吸着しないことを確認し、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), *Langmuir* 2021, 図 6-7)。また公募班との連携で SnO_2 表面や SrTiO_3 表面の**電子機能コア**欠陥とそのイメージコントラストとの関係を解明した (*Appl. Phys. Lett.* 2023)。

公募研究 1 期 (森川, 杉本, 宮町, 吉田要)

AFM と STM の複合装置により、シリセンの欠陥構造と電子状態を解明した(杉本)。新規蛍光材料銀ゼオライトに内包される、**光機能コア**となる銀クラスター構造を解明した(吉田要)。

公募研究 2 期 (森川, 杉本, 吉田要)

収束電子回折法により、強誘電体ドメイン壁の局所構造解析に成功した(森川)。シリセン表面にさらに Si 原子を吸着した構造について、AFM による原子操作と原子分解能観察に成功した(杉本)。

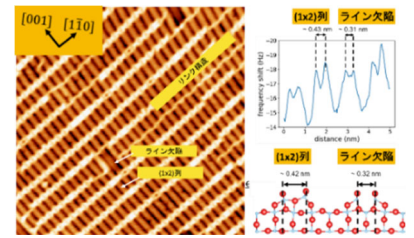


図 6-7 TiO_2 表面の特異な線欠陥

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 A03(オ) 高温高压プロセスによる新材料機能創出

● **新規窒化物結晶の開発 (連携班数:3)**

大型ベルト型高压装置を用い、窒化が困難とされてきた多元性スズ窒化物半導体結晶の合成に成功するとともに、**電子機能コア**となる Ca 等のドーパントによるバンドギャップ制御(1.0~2.4 eV)を達成した(*Eur. J. Inorg. Chem.* 2020, 図 6-8)。また、これまで実現されていなかった窒素に富んだ多数の金属窒化物の合成に成功した。A03(キ)との連携で、同物質の高硬度の起源が、結晶中の配位多面体構造とそれらの連結様式に起因することを突き止めた(*Inorg. Chem.* 2021;2023, *Dalton Trans.* 2022)。

● **高压合成による Cr-Ge 化合物の発見 (連携班数:3)**

ダイヤモンドアンビルセルによる高温高压合成により、新規化合物 MoSi_2 型 CrGe_2 および Chimney-Ladder 型 $\text{CrGe}_{1.77}$ の合成に成功した。A01(ア)による理論計算により、 CrGe_2 が熱電変換材料として有望であり、Ge 空孔が**電子機能コア**となることを解明した(*Inorg. Chem.* 2021)。

計画研究 A03(カ) 界面制御による高機能薄膜材料創製

● **高温・空气中で使える実用的な熱電変換材料開発 (連携班数:3)**

層状コバルト酸化物 $\text{Na}_{3/4}\text{CoO}_2$ の Na^+ イオンを Ba^{2+} に置換した $\text{Ba}_{1/4}\text{CoO}_2$ を合成し、カルコゲン化合物に匹敵する性能指数 ZT (0.11@室温、0.55@600°C) を達成した。A02(ウ)との連携による構造評価により、 Ba^{2+} 置換した**層界面が熱・電子機能コア**となり、電気特性に影響を及ぼすことなく熱伝導率を劇的に低減させることを見出した。従来材料より飛躍的に再現性良くかつ高性能を示す実用的な熱電変換材料の実現となった(*J. Mater. Chem. A* 2020, *ACS Appl. Mater. Interf.* 2022, 図 6-9)。

● **世界初の全固体熱トランジスタを実現 (連携班数 3+国際共同研究)**

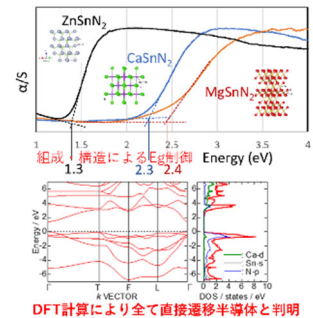
結晶構造を維持したまま、酸素含有率を変えることができる SrCoO_x ($2 \leq x \leq 3$) 薄膜(活性層)と、固体電解質である YSZ を組み合わせ、電気化学的に酸化することで高熱伝導率 (~3.8 W/mK) 化、還元することで低熱伝導率 (~0.95 W/mK) 化する全固体熱トランジスタを実現した(*Adv. Funct. Mater.* 2023, 図 6-10)。**熱・電子機能コア**である酸素空孔の量・分布の自在制御による成果である。

計画研究 A03(キ) 耐熱・耐環境セラミックスの高機能化

● **耐環境酸化特性の本質的理解と設計 (連携班数:3)**

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_2O_3 多結晶保護膜の、耐久性・寿命を決める組織安定性向上の基本原則を解明した。A01(ア)+A02(ウ)と連携し、これらの保護膜組織安定性に関わる Al^{3+} 空孔の生成と移動が、保護膜中の粒界バンドギャップにより支配されていることを見出し、同材料における**熱機能コア**としての結晶粒界の役割を解明した(*Nano Lett.* 2020, *Acta Mater.* 2023)。さらに、高温酸素分圧勾配下での保護膜組織の構造変化から、複合酸化物を用い

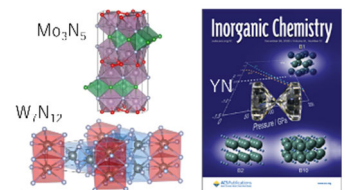
高压複分解反応による難窒化元素(Sn)の窒化反応開拓



組成・構造によるEg制御

DFT計算により全て直接遷移半導体と判明

窒素流体内反応により新規金属窒化物を合成



高配位構造と硬質機能相関

図 6-8 高压合成による新規多窒化物の発見

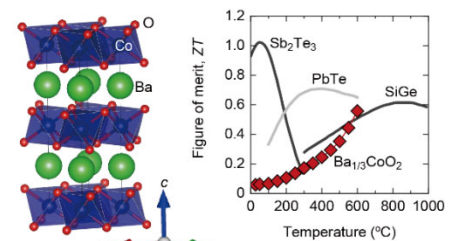


図 6-9 新材料 $\text{Ba}_{1/3}\text{CoO}_2$ の構造と特性

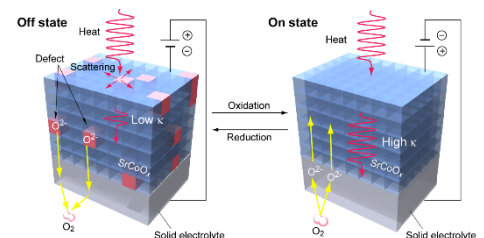


図 6-10 世界初の全固体熱トランジスタ

た積層膜を設計・適用することで、酸素遮蔽性と組織安定性の飛躍的な向上に成功した(*Acta Mater.* 2020, *J. Ceram. Soc. Jpn.* 2023)。

● **高電場焼結法開発による機能コア制御とセラミックスの高機能化 (連携班数:2)**

高電磁場を活用した革新的焼結プロセスにより、酸化物粉末成形体の高速緻密化や低温での超塑性を実現することに成功した (*Ceram. Int.* 2022, *Acta Mater.* 2022)。またそれらの現象は、高電磁場下で生成される酸素イオン空孔が**熱・力機能コア**となり、発現することを突き止めた。さらに高電場焼結したジルコニアセラミックスが蛍光発光を示すことを見出した (*J. Eur. Ceram. Soc.* 2020, *Appl. Phys. Exp.* 2020, 図 6-11)。新規光物性の起源は、**光機能コア**となる高電磁場下で形成されたアニオン空孔であることを解明した。

計画研究 A03(ク) **高機能固体イオニクス材料の創出**

● **機能コアアニオンによる超イオン伝導体の創出 (連携班数:3)**

イオン機能コアとなるアニオン種 Br の導入と制御により、新硫化物系イオン伝導体 $\text{Li}_{9.54}[\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}]_{1.74}\text{P}_{1.44}\text{S}_{11.1}\text{Br}_{0.3}\text{O}_{0.6}$ (LSiGePSBrO, *Science* 2023)、 $\text{Li}_{10}\text{P}_3\text{S}_{12}\text{Br}$ (*Chem. Mater.* 2022)の創製に成功した。特筆すべきは、LSiGePSBrO(図 6-12)において世界最高のイオン伝導率 32 mS cm^{-1} を達成したことである。さらに A01(イ)との連携による第一原理計算によって、添加アニオンがイオン拡散障壁を低下させる役割をもつことも解明した。このような機能コアアニオンによる可動イオンの制御・設計指針をヒドリド系にも展開し、幾つかの高性能な新イオン伝導体の創出にも成功した(*J. Mater. Chem. A* 2021, *ACS Appl. Ener. Mater.* 2022)。

● **リチウム電池電極/電解質界面構造の制御と高機能化 (連携班数:3)**

リチウムイオン伝導を決めるリチウム電池正極/固体電解質界面を薄膜モデル系で構築し、*in situ* 中性子反射率解析から電解質側界面構造を実測することで、リチウム脱溶媒和の律速過程を解明した (*Adv. Ener. Mater.* 2023, *Adv. Mater. Inter.* 2024)。固体系では、粒界への**イオン機能コア**となる異種イオン導入により、リチウム負極/固体電解質界面における Li デンドライド成長の抑制に成功した(*J. Ceram. Soc. Jpn.* 2023)。

公募研究 1 期 (八木, 横井太, 平原, 藤井孝, 清水, 伊藤, 黒川, 黒澤, 蒲, 石部)

生体親和材料の層状リン酸カルシウム結晶の中に、**光機能コア**となる蛍光性テトラカルボン酸を導入した新規蛍光生体材料の合成に成功した (横井太, *Commun. Chem.* 2021, 図 6-13)。 SrTiO_3 (001) 基板上鉄セレン(FeSe)層の超伝導転移温度は、表面酸素欠陥が**電子機能コア**として重要であることを明らかにした (平原)。高プロトン伝導体の層状ペロブスカイト型 BaNdScO_4 を見出し、**イオン機能コア**であるプロトン伝導経路と結晶構造の関係を解明した (藤井孝, *J. Mater. Chem. A* 2021)。太陽電池材料 BaSi_2 中の**電子機能コア**となる点欠陥や粒界とキャリアの相互作用を解明した (黒川)。

公募研究 2 期 (八木, 横井太, 打田, 平原, 藤井, 相馬, 清水, 神戸, 石部, 吉田, 酒井, 小林)

高い触媒活性を有する $(\text{LaMn})_{1-x}\text{O}_3$ について、機能コアであるカチオン欠損を制御して触媒活性向上に成功した(八木)。 RuO_2 薄膜に超伝導が発現することを見出し、表面局所の異方的歪みが起源であることを解明した(打田)。放射光結晶構造解析技術を駆使して、高プロトン伝導体 $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ の結晶構造と**イオン機能コア**となるプロトン位置の決定に成功した (藤井孝, *Nature Commun.* 2023, 図 6-14)。エピタキシャル薄膜成長技術を高度に制御し、**電子機能コア**の Sc^{2+} 添加による SrFeO_3 や Ga_2O_3 の電子物性制御を行った(相馬)。新規電子物性発現を目指して、**光・磁気機能コア**となりうる希土類イオンを添加した Ca-窒素-水素複合アニオン化合物の合成に成功した(清水)。有機分子を鋳型とした金属元素集積手法を用いて、原子の数や配列を高度に制御した機能コアクラスターの系統的な合成に成功した(神戸)。人工光合成を促進する $\text{Ag}/\text{Ga}_2\text{O}_3$ 触媒の**光機能コア**となる活性サイトの評価と特性制御を行った(吉田朋)。室温で作動するヒドリド系電解質の開発および新規酸水素化合物の合成に成功した(小林)。

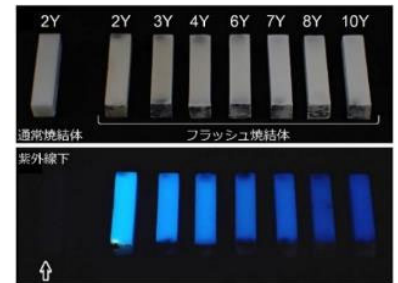


図 6-11 高電場焼結 YSZ の高機能化

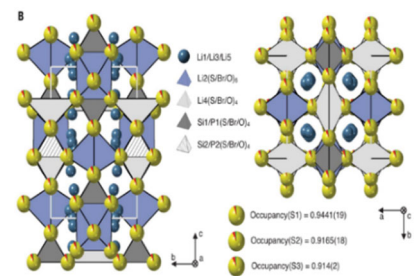


図 6-12 新規超イオン伝導体の結晶構造

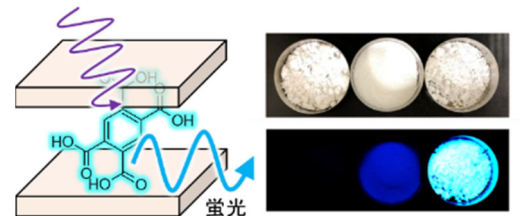


図 6-13 蛍光性付与リン酸カルシウム開発

高イオン伝導体 $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ 中の隠れた規則性を発見
共鳴X線回折 & 固体NMR & DFT

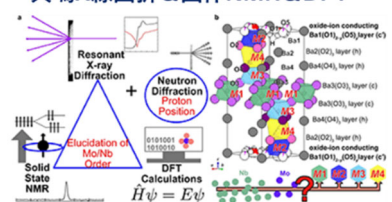


図 6-14 新規プロトン伝導体の構造決定

7 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、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和6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。

【雑誌論文】（全 418 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] *Y. Ogura, A. Nakamura, T. Kameyama, Y. Kurokawa, E. Tochigi, N. Shibata, T. Torimoto, S. Hoshino, T. Yokoi, K. Matsunaga, “The effect of room-temperature plastic deformation in darkness on the photoluminescence properties of ZnS” *J. Am. Ceram. Soc.* **107**, 2040-2047 (2024).
- [2] *Y. Li, X. Fang, E. Tochigi, Y. Oshima, S. Hoshino, T. Tanaka, H. Oguri, S. Ogata, Y. Ikuhara, K. Matsunaga, A. Nakamura, “Shedding new light on the dislocation-mediated plasticity in wurtzite ZnO single crystals by photoindentation”, *J. Materi. Sci. Tech.*, **156**, 206-216 (2023).
- [3] *S. Kitou, *Y. Oshima, A. Nakamura, K. Matsunaga, H. Sawa, “Room-temperature plastic deformation modes of cubic ZnS crystals”, *Acta Mater.* **247** 118738 (2023).
- [4] V. P. Kumar, S. P., B. Zhang, S. Fujii, K. Yoshizawa, P. Boullay, S. L. Tonquesse, C. Prestipino, B. Raveau, P. Lemoine, A. Paecklar, N. Barrier, X. Zhou, M. Yoshiya, K. Suekuni, *E. Guilmeau, “Engineering transport properties in interconnected enargite-stannite type $\text{Cu}_{2+x}\text{Mn}_{1-x}\text{GeS}_4$ nanocomposites”, *Angew. Chem.Int. Ed.* **61**, e202210600 (2022).
- [5] *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**, 1962-1967 (2021).
- [6] 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_2 ”, *Nano Energy* **85**, 105994 (2021).
- [7] *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_3Sb_2 -based materials”, *Adv. Funct. Mater.* **31**, 2008469 (2021).
- [8] *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_3 ”, *ACS Nano* **15**, 9355-9367 (2020).
- [9] 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**, 690-697 (2020).
- [10] *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**, 645-653 (2020).
- [11] *S. Fujii, T. Yokoi, C. A. J. Fisher, H. Moriwake, *M. Yoshiya: “Quantitative prediction of grain boundary thermal conductivities from local atomic environments”, *Nature Commun.* **11**, 1854 (2020).
- [12] 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”, *Sci. Rep.* **10**, 21008 (2020).

研究項目 A01(イ) 情報科学による機能コア計算設計

- [13] *PY. Chen, *K. Shibata, K. Hagita, T. Miyata, *T. Mizoguchi, “Prediction of the Ground State Electronic Structure from Core-loss Spectra of Organic Molecules by Machine Learning”, *J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 4858-4865 (2023).
- [14] *YS. Xie, K. Shibata, T. Mizoguchi, “A defect formation mechanism induced by structural reconstruction of a well-known silicon grain boundary”, *Acta Mater.* **250**, 118827 (2023).
- [15] H. Hayashi, A. Seko, *I. Tanaka, “Recommender system for discovery of inorganic compounds”, *npj Comput. Mater.* **8**, 217 (2022).
- [16] *K. Shibata, K. Kikumasa, S. Kiyohara, *T. Mizoguchi, “Simulated carbon K edge spectral database of organic molecules”, *Scientific Data* **9**, 214-1-11 (2022).
- [17] P. Zhong, *K. Toyoura, L. Jiang, L. Chen, S. A. Ismail, N. Hatada, *T. Norby, *D. Han, “Protonic Conduction in $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ and $\text{La}_{2-x}\text{A}_x\text{NiO}_{4+\delta}$ (A = Ca, Sr, Ba) Ruddlesden–Popper Type Oxides”, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2200392 (2022).
- [18] K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata, *T. Mizoguchi, “Quantification of the Properties of Organic Molecules Using Core-Loss Spectra as Neural Network Descriptors”, *Advanced Intelligent Systems* **4**, 2100103 (2022).
- [19] *Y.S. Xie, K. Shibata, *T. Mizoguchi, “A brute-force code searching for cell of non-identical displacement for CSL grain boundaries and interfaces”, *Computer Physics Communications* **273**, 108260 (2022).
- [20] K. Liao, K. Shibata, *T. Mizoguchi, “Nanoscale Investigation of Local Thermal Expansion at SrTiO_3 Grain Boundaries by Electron Energy Loss Spectroscopy”, *Nano Lett.* **21**, 24, 10416–10422 (2021).
- [21] 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).
- [22] K. Nakazawa, S. Amma, *T. Mizoguchi, “In situ observation of the dynamics in the middle stage of spinodal decomposition of a silicate glass via scanning transmission electron microscopy”, *Acta Mater.* **200**, 720-726 (2020).
- [23] K. Suzuki, K. Ohura, A. Seko, Y. Iwamizu, G. Zhao, M. Hirayama, I. Tanaka, *R. Kanno, “Fast material search of lithium ion conducting oxides using a recommender system”, *J. Mater. Chem. A* **8**, 11582-11588 (2020).

[24] S. Kiyohara, M. Tsubaki, *T. Mizoguchi, “Learning excited states from ground states by using an artificial neural network”, *npj Comp. Mater.* **6**, 68 (2020).

研究項目 A01 公募研究

[25] M. Higashi, H. Ikeno: “Extraction of Local Structure Information from X-ray Absorption Near-Edge Structure: A Machine Learning Approach”, *Mater. Trans.* **64**, 2179-2184 (2023).

[26] M. Matsuura, *T. Yokoi, Y. Ogura, K. Matsunaga, “Anharmonicity in grain boundary energy for Al: thermodynamic integration with artificial-neural-network potential”, *Scripta Mater.* **236**, 115685 (2023).

[27] *T. Yokoi, A. Hamajima, J. Wei, B. Feng, Y. Oshima, K. Matsunaga, N. Shibata, Y. Ikuhara, “Atomic and electronic structure of grain boundaries in α -Al₂O₃: A combination of machine learning, first-principles calculation and electron microscopy”, *Scripta Mater.* **229**, 115368 (2023).

[28] *S. Fujii, K. Shimazaki, A. Kuwabara, “Empirical interatomic potentials for ZrO₂ and YSZ polymorphs: Application to a tetragonal ZrO₂ grain boundary”, *Acta Mater.* **262**, 119460 (2024).

研究項目 A02(ウ) 界面機能コア解析

[29] *T. Seki, T. Futazuka, N. Morishige, R. Matsubara, Y. Ikuhara, *N. Shibata, “Incommensurate grain-boundary atomic structure”, *Nature Commun.* **14**, 7806 (2023).

[30] C. Yang, *B. Feng, J. Wei, N. Shibata, *Y. Ikuhara, “Dopant-impurity interactions on grain boundary segregation in alumina”, *J. Mater. Sci. & Tech.* **181**, 58-62 (2023).

[31] *K. Matsui, K. Hosoi, *B. Feng, H. Yoshida, *Y. Ikuhara, “Ultrahigh toughness zirconia ceramics”, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **120**, e2304498120 (2023).

[32] S. Toyama, *T. Seki, Y. Kanitani, Y. Kudo, S. Tomiya, Y. Ikuhara, *N. Shibata, “Real-space observation of a two-dimensional electron gas at semiconductor heterointerfaces”, *Nature Nanotech.* **18**, 521-528 (2023).

[33] T. Futazuka, *R. Ishikawa, N. Shibata, *Y. Ikuhara, “Grain boundary structural transformation induced by co-segregation of aliovalent dopants”, *Nature Commun.* **13**(1), 5299 (2022).

[34] *R. Ishikawa, Y. Ueno, Y. Ikuhara, N. Shibata, “Direct Observation of Atomistic Reaction Process between Pt Nanoparticles and TiO₂ (110)”, *Nano Lett.* **22** (10), 4161-4167 (2022).

[35] Y. Kohno, T. Seki, S. D. Findlay, Y. Ikuhara, N. Shibata, “Real-space visualization of intrinsic magnetic fields of an antiferromagnet”, *Nature* **602**, 234-239 (2022).

[36] *J. A. Quirk, B. Miao, B. Feng, G. Kim, H. Ohta, Y. Ikuhara, *K. P. McKenna, “Unveiling the Electronic Structure of Grain Boundaries in Anatase with Electron Microscopy and First-Principles Modeling”, *Nano Lett.* **21**, 9217-9223 (2021).

[37] *E. Tochigi, B. Miao, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, “Atomic-scale mechanism of rhombohedral twinning in sapphire”, *Acta Mater.* **216**, 117137 (2021).

[38] S. Sasano, *R. Ishikawa, G. Sánchez-Santolino, H. Ohta, N. Shibata, *Y. Ikuhara, “Atomistic Origin of Li-Ion Conductivity Reduction at (Li_{3x}La_{2/3-x})TiO₃ Grain Boundary”, *Nano Lett.* **21**, 6282-6288 (2021).

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

[40] J. Wei, *B. Feng, R. Ishikawa, T. Yokoi, K. Matsunaga, N. Shibata, *Y. Ikuhara, “Direct imaging of atomistic grain boundary migration”, *Nature Mater.* **20**, 951-955 (2021).

[41] 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**, 2530-2536 (2020).

研究項目 A02(エ) 表面機能コア解析

[42] *E. Inami, K. Nishioka, and J. Kanasaki, “Atomic-scale view of the photoinduced structural transition to form sp³-like bonded order phase in graphite”, *Sci. Rep.* **13**, 21439 (2023).

[43] Z. Diao, K. Ueda, L. Hou, H. Yamashita, O. Custance, *M. Abe, “Automatic Drift Compensation for Nanoscale Imaging Using Feature Point Matching”, *Appl. Phys. Lett.* **122** (12), 121601 (2023).

[44] *D. Katsube, R. Shimizu, Y. Sugimoto, T. Hitosugi, M. Abe, “Identification of OH groups on SrTiO₃(100)-(R13xR13)-R33.7° reconstructed surface by non-contact atomic force microscopy and scanning tunneling microscopy”, *Appl. Phys. Lett.* **122** (7), 071602 (2023).

[45] A. Tsuji, *H. Yamashita, O. Hisatomi, M. Abe, “Dimerization processes for light-regulated transcription factor Photozipper visualized by high-speed atomic force microscopy”, *Sci. Rep.* **12**, 12903 (2022).

[46] *H. Yamamura, T. Hagiwara, Y. Hayashi, K. Osawa, H. Kato, T. Katsu, K. Masuda, A. Sumino, H. Yamashita, R. Jinno, M. Abe, A. Miyagawa, “Antibacterial Activity of Membrane-Permeabilizing Bactericidal Cyclodextrin Derivatives”, *ACS Omega* **6**, 47, 31831-31842 (2021).

[47] *D. Katsube, S. Ohno, S. Takayanagi, S. Ojima, M. Maeda, N. Origuchi, A. Ogawa, N. Ikeda, Y. Aoyagi, Y. Kabutoya, K. Kyungmin, H. Linfeng, L. Fengxuan, Y. Tsuda, H. Yoshida, S. Nishi, T. Sakamoto, E. Inami, A. Yoshigoe, M. Abe, “Oxidation of Anatase TiO₂(001) Surface Using Supersonic Seeded Oxygen Molecular Beam”, *Langmuir* **37**, 42, 12313-12317 (2021).

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

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

[50] 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).

- [51] *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”, *Sci. Rep.* **9**, 17891 (2019).

研究項目 A02 公募研究

- [52] *K. Yoshida, A. Nakahira, “Atomic-scale imaging of electron sensitive zeolites with aberration corrected transmission electron microscopy”, *Open Ceramics* **16**, 100494 (2023).
- [53] *D. Morikawa, Y. Noguchi, K. Tsuda, “Direct observation of rotation of polarization at 90-degree domain walls in BaTiO₃”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, SM1003 (2023).
- [54] *M. S. Islam, D. Morikawa, S. Yamada, B. Aryal, K. Tsuda, M. Terauchi, “Determination of the crystal structures of NdBaMn₂O₆: Coexisting polar and nonpolar phases”, *Phys. Rev. B* **108**, L060104 (2023).
- [55] Y. Adachi, R. Zhang, X. Wang, M. Fukuda, T. Ozaki, *Y. Sugimoto, “Atomic arrangement of Si adatom on the Silicene/Ag(111) surface”, *Appl. Surf. Sci.* **630**, 157336 (2023).

研究項目 A03(オ) 高温高压プロセスによる新材料機能創出

- [56] *H. Yusa, M. Miyakawa, “High-pressure synthesis of corundum-type Ga₂O₃:Cr³⁺ and application of its fluorescence to the pressure scale”, *Inorg. Chem.*, (2024), in press.
- [57] T. Naka, J. Valenta, T. Nakane, S. Ishii, M. Nakayama, H. Mamiya, K. Takehana, N. Tsujii, Y. Imanaka, Y. Matsushita, H. Abe, T. Uchikoshi, *H. Yusa, “Phase transitions and slow spin dynamics of slightly inverted A-site spinel CoAl_{2-x}Ga_xO₄”, *J. Phys.: Condens. Matter* **36**, 125801 (2024).
- [58] Y. Umeda, Y. Nagai, N. Tomioka, T. Sekine, M. Miyakawa, T. Kobayashi, *H. Yusa, T. Okuchi, “Deformation microstructures in shock-compressed single crystal and powdered rutile”, *J. Mineral. Petrol. Sci.* **119**, 230706 (2024).
- [59] *L. Li, N. Watanabe, C. Jiang, A. Yamamoto, T. Fujita, M. Miyakawa, T. Taniguchi, H. Hosono, T. Kondo “Development of a highly stable nickel-foam-based boron monosulfide-graphene electrocatalyst with a high current density for the oxygen evolution reaction” *Sci. Technol. Adv. Mater.* **24**, 2277681 (2023).
- [60] *K. Miyazaki, A. Yamaguchi, H. Kusaka, N. Watanabe, A. C. Wardhana, S. Ishii, A. Yamamoto, M. Miyakawa, T. Taniguchi, T. Kondo, M. Miyauchi, “Rhombohedral boron monosulfide as a metal-free photocatalyst”, *Sci. Rep.* **13**, 19540 (2023).
- [61] S. Asano, K. Niwa, K. V. Lawler, S. Kawaguchi-Imada, T. Sasaki, *M. Hasegawa, “High-Pressure Synthesis of a High-Pressure Phase of MnN Having NiAs-Type Structure”, *Inorg. Chem.* **62**, 20271-20278 (2023).
- [62] *H. Yusa, H. Fujihisa, “Dense structure of Yttrium Nitride as a post-rock-salt phase: High-pressure experiments and computations”, *Inorg. Chem.* **61**, 20906-20912 (2022).
- [63] *F. Kawamura, *Y. Song, *H. Murata, H. Tampo, T. Nagai, T. Koida, M. Imura, N. Yamada, “Tunability of the bandgap of SnS by variation of the cell volume by alloying with A.E. elements”, *Sci. Rep.* **12**, 7434 (2022).
- [64] *F. Kawamura, *H. Murata, M. Imura, N. Yamada, T. Taniguchi, “Synthesis of CaSnN₂ via a High-Pressure Metathesis Reaction and the Properties of II-Sn-N₂ (II = Ca, Mg, Zn) Semiconductors”, *Inorg. Chem.* **60**, 1773-1779 (2021).

研究項目 A03(カ) 界面制御による高機能薄膜材料創製

- [65] *A. Tsurumaki-Fukuchi, T. Katase, H. Ohta, M. Arita, Y. Takahashi, “Direct Imaging of Ion Migration in Amorphous Oxide Electronic Synapses with Intrinsic Analog Switching Characteristics”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 16842-16852 (2023).
- [66] Q. Yang, H. J. Cho, Z. Bian, M. Yoshimura, J. Lee, H. Jeon, J. Lin, J. Wei, B. Feng, Y. Ikuhara, *H. Ohta, “Solid-State Electrochemical Thermal Transistors”, *Adv. Funct. Mater.* **33**, 2214939 (2023).
- [67] T. V. Vu, K. Saito, “Thermodynamic Unification of Optimal Transport: Thermodynamic Uncertainty Relation, Minimum Dissipation, and Thermodynamic Speed Limits”, *Phys. Rev. X* **13**, 011013 (2023).
- [68] *A. Nakano, U. Maruoka, I. Terasaki, “Correlation between thermopower and carrier mobility in the thermoelectric semimetal Ta₂PdSe₆”, *Appl. Phys. Lett.* **121**, 153903 (2022).
- [69] L. Gong, M. Wei, R. Yu, H. Ohta, *T. Katayama, “Significant Suppression of Cracks in Freestanding Perovskite Oxide Flexible Sheets Using a Capping Oxide Layer”, *ACS Nano* **16**, 21013-21019 (2022).
- [70] X. Zhang, *Y. Zhang, L. Wu, A. Tsuruta, M. Mikami, H. J. Cho, H. Ohta, “Ba_{1/3}CoO₂: A Thermoelectric Oxide Showing a Reliable ZT of ~0.55 at 600 °C in Air”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14**, 29, 33355-33360 (2022).
- [71] T. Kuwahara, K. Saito, “Exponential clustering of bipartite quantum entanglement at arbitrary temperatures”, *Phys. Rev. X* **12**, 021022 (2022).
- [72] A. Tao, T. Yao, Y. Jiang, L. Yang, X. Yan, H. Ohta, Y. Ikuhara, *C. Chen, H. Ye, *X. Ma, “Single-Dislocation Schottky Diodes”, *Nano Lett.* **21**, 5586-5592 (2021).
- [73] 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**, 274-280 (2021).

研究項目 A03(キ) 耐熱・耐環境セラミックスの高機能化

- [74] F. S. Ong, K. Nambu, K. Hosoi, K. Kawamura, H. Masuda, B. Feng, K. Matsui, Y. Ikuhara, *H. Yoshida, “Tetragonal phase stabilization and densification in AC flash-sintered 1.5 mol% yttria-stabilized zirconia polycrystals with high toughness”, *J. Eur. Ceram. Soc.* **44**, 1036-1043 (2024).
- [75] *T. Matsudaira, T. Ogawa, M. Takeuchi, J. Wei, B. Feng, N. Shibata, Y. Ikuhara, *S. Kitaoka, “Effect of oxygen potential gradient on mass transfer along grain boundary in alumina bicrystal”, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **131**, 632-639 (2023).
- [76] 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 Yb₂Si₂O₇ under Oxygen Potential Gradients at High

Temperatures”, *Acta Mater.* **201**, 373-385 (2020).

- [77] A. Nakamoto, K. Nambu, H. Masuda, *H. Yoshida, “Chemical bonding and crystal structure in flash sintered Y_2O_3 under DC or AC field”, *J. Eur. Ceram. Soc.* **43**, 3516-3523 (2023).
- [78] *T. Matsudaira, T. Ogawa, M. Takeuchi, N. Shibata, Y. Ikuhara, *S. Kitaoka, “Effect of Oxygen Potential Gradient on Mass Transfer in Polycrystalline Alumina Film Doped with Trace Elements”, *Acta Mater.* **252**, 118927 (2023).
- [79] *H. Murata, T. Nakamura, R. Kawanabe, Y. Tokudome, A. Nakahira, “Reaction of stoichiometric hydroxyapatite with different crystallinity in Mg^{2+} aqueous solution”, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **131**, 8-11 (2023).
- [80] H. Masuda, K. Morita, T. Tokunaga, T. Yamamoto, *H. Yoshida, “Anelasticity induced by AC flash processing of cubic zirconia”, *Acta Mater.* **227**, 117704 (2022).
- [81] *K. Nambu, K. Morita, K. Soga, T. Yamamoto, H. Masuda, H. Yoshida, “Densification of Y_2O_3 by flash sintering under an AC electric field”, *J. Eur. Ceram. Soc.* **42**, 567-575 (2022).
- [82] *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).
- [83] *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).

研究項目 A03(ク) 高機能固体イオニクス材料の創出

- [84] *K. Watanabe, Y. Horisawa, M. Yoshimoto, K. Tamura, K. Suzuki, R. Kanno, *M. Hirayama, “Stable Photoelectrochemical Reactions at Solid/Solid Interfaces toward Solar Energy Conversion and Storage”, *Nano Lett.* **24**, 1916-1922 (2024).
- [85] Y. Lee, S. Song, H. Kim, K. Nomoto, H. Kim, X. Sun, S. Hori, K. Suzuki, N. Matsui, M. Hirayama, T. Mizoguchi, T. Saito, T. Kamiyama, *R. Kanno, “A lithium superionic conductor for millimeter-thick battery electrode”, *Science* **381**, 50-53 (2023).
- [86] N. Matsui, T. Seki, K. Suzuki, M. Hirayama, *R. Kanno, “Accelerated Exploration of Fast Fluoride-Ion Conductors Based on Compositional Descriptors”, *ACS Appl. Ener. Mater.* **6**, 11663-11671 (2023).
- [87] S. Song, S. Hori, Y. Li, K. Suzuki, N. Matsui, M. Hirayama, T. Saito, T. Kamiyama, *R. Kanno, “Material Search for a $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ -Type Solid Electrolyte in the Li-P-S-X (X = Br, I) System via Clarification of the Composition-Structure-Property Relationships”, *Chem. Mater.* **34**, 8237-8247 (2022).
- [88] G. Zhao, K. Suzuki, T. Okumura, T. Takeuchi, M. Hirayama, *R. Kanno, “Extending the Frontiers of Lithium-Ion Conducting Oxides: Development of Multicomponent Materials with $\gamma\text{-Li}_3\text{PO}_4$ -Type Structures”, *Chem. Mater.* **34**, 3948-3959 (2022).
- [89] K. Hikima, K. Shimizu, H. Kiuchi, Y. Hinuma, K. Suzuki, M. Hirayama, E. Matsubara, *R. Kanno, “Reaction Mechanism of Li_2MnO_3 Electrodes in an All-Solid-State Thin-Film Battery Analyzed by Operando Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy”, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 236-247 (2022).
- [90] X. Sun, Y. Yamada, S. Hori, Y. Li, K. Suzuki, M. Hirayama, *R. Kanno, “Discharge voltage profile changes via physicochemical phenomena in cycled all-solid-state cells based on $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ and LiNbO_3 -coated LiCoO_2 ”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 17905-17912 (2021).
- [91] 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”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 4117-4125 (2021).
- [92] 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 $\text{LnSrLiH}_2\text{O}_2$ (Ln = La, Pr, Nd, Sm, Gd) oxyhydrides”, *J. Mater. Chem. A* **8**, 24685-24694 (2020).

研究項目 A03 公募研究

- [93] *T. Kambe, *H. Nishihara, *K. Yamamoto, “Chemical bottom-up approach for inorganic single-atomic layers aiming beyond graphene”, *Dalton Trans.* **52**, 15297-15302 (2023).
- [94] W. Wang, W. Liu, M. Kamiko, *S. Yagi, “Effect of cation vacancies in nonstoichiometric $(\text{LaMn})_{1-x}\text{O}_3$ on oxygen reduction reaction catalysis”, *JALCOM.* **946**, 169398 (2023).
- [95] Y. Yasui, M. Tansho, K. Fujii, Y. Sakuda, A. Goto, S. Ohki, Y. Mogami, T. Iijima, S. Kobayashi, S. Kawaguchi, K. Osaka, K. Ikeda, T. Otomo, *M. Yashima, “Hidden chemical order in disordered $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ revealed by resonant X-ray diffraction and solid-state NMR”, *Nature Commun.* **14**, 2337 (2023).
- [96] Y. Izumi, F. Takeiri, K. Okamoto, T. Saito, T. Kamiyama, A. Kuwabara, *G. Kobayashi, “Electropositive Metal Doping into Lanthanum Hydride for H- Conducting Solid Electrolyte Use at Room Temperature”, *Adv. Energy Mater.* **13**, 2301993 (2023).
- [97] Y. Sakuda, T. Murakami, M. Avdeev, K. Fujii, Y. Yasui, J. R. Hester, M. Hagihara, Y. Ikeda, Y. Nambu, *M. Yashima, “Dimer-Mediated Cooperative Mechanism of Ultrafast-Ion Conduction in Hexagonal Perovskite-Related Oxides”, *Chem. Mater.* **35**, 9774-9788 (2023).
- [98] K. Kuroyama, R. Fujikawa, T. Goto, T. Sekino, F. Nakamura, H. Kimura-Suda, P. Chen, H. Kanetaka, T. Hasegawa, K. Yoshida, M. Murata, H. Nakata, M. Shimabukuro, M. Kawashita, T. Yoda, *T. Yokoi, “Development of bioinspired damage-tolerant calcium phosphate bulk materials”, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **24**, 2261836 (2023).
- [99] S. Nishihaya, A. Nakamura, M. Ohno, M. Kriener, Y. Watanabe, M. Kawasaki, and *M. Uchida, “Intrinsic insulating transport characteristics in low-carrier density EuCd_2As_2 films”, *Appl. Phys. Lett.* **124**, 023103 (2024).

【学会発表】（国際学会基調講演全 17 件、国際学会招待講演 全 205 件中、一部抜粋）

- [1] (基調講演) Katsuyuki Matsunaga: “Electronic and Atomic Structures of Crystal Defect Cores in Advanced Materials”, The 3rd Materials Research Meeting (MRM 2023) (2023.12.12, Kyoto).
- [2] (基調講演) Katsuyuki Matsunaga: “Electronic and Atomic Structures of Glide Dislocations in Inorganic Semiconductors Relevant to Their Light-illumination Dependent Mechanical Behavior”, The 11th International Conference Pacific Rim on Advanced Materials & Processing (PRICM11) (2023.11.20, Korea).
- [3] (基調講演) Katsuyuki 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).
- [4] (基調講演) Teruyasu Mizoguchi: “Bridging Atomic-Resolution Experiment and Computation Using Machine Learning”, Materials Research Meeting (MRM) (2019.12.11, Yokohama).
- [5] (基調講演) Naoya Shibata: “Development and Application of Magnetic-Field-Free Atomic-Resolution Scanning Transmission Electron Microscopy”, The 2nd Materials Research Meeting (MRM 2021) (2021.12.15, Yokohama).
- [6] (招待講演) Hiromichi Ohta: “Single Crystalline Film Growth of Layer Structured Oxides and Their Phonon Transports”, 2019 Materials Research Society Fall Meeting (2019.12.1, Boston, USA).
- [7] (基調講演) Satoshi Kitaoka: “The Effects of Yttrium Segregated at Grain Boundaries on Mass Transfer in Polycrystalline Alumina under Oxygen Potential Gradients at High Temperatures”, International Symposium on High-temperature Oxidation and Corrosion 2022 (ISHOC-2022) (2022.10.16, Takamatsu).
- [8] (基調講演) Masaaki Hirayama: “Electrochemical Interface Phenomena: Toward the Development of Next-generation Lithium-ion Batteries”, The 2nd Global Forum on Advanced Materials and Technologies for Sustainable Development (GFMAT-2) (2019.7.26, Toronto, Canada).

【産業財産権】（一部抜粋）

- [1] 太田裕道, 楊 倩, チョ ヘジュン, “熱トランジスタ”, 特開 2023-055209
- [2] 遊佐 齊, 宮川 仁, “蛍光体、その製造方法、それを用いた顔料、圧力標準材料、および、発光装置”, 特願 2023-118909
- [3] 遊佐 齊, 川村史朗, 谷口尚 “窒化レニウムを含有する硬質材料、その製造方法およびそれを用いた切削工具”, 特許第 2021-6950942

【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>

【主催シンポジウム】（一部抜粋）

- [1] 2024 年 3 月 9 日 2023 年度「機能コア科学」公開シンポジウム
- [2] 2023 年 12 月 11 日～16 日 The 3rd Materials Research Meeting (MRM 2023) / The 24th IUMRS-International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2023) (Kyoto, Japan)
- [3] 2023 年 9 月 19 日～22 日 日本金属学会秋季講演大会公募シンポジウム「機能コアの材料科学 IV」
- [4] 2023 年 3 月 28 日 2022 年度「機能コア科学」公開シンポジウム
- [5] 2022 年 9 月 21 日～23 日 日本金属学会秋季講演大会公募シンポジウム「機能コアの材料科学 III」
- [6] 2022 年 3 月 30 日 2021 年度「機能コア科学」公開シンポジウム
- [7] 2021 年 12 月 13 日～16 日 国際会議 PACRIM14 (online)
Symposium1: “Characterization and Modeling of Ceramic Interfaces: Structure, Bonding, and Grain Growth”
- [8] 2021 年 9 月 14 日～17 日 日本金属学会秋季講演大会公募シンポ「機能コアの材料科学 II」
- [9] 2021 年 3 月 8 日 2020 年度「機能コア科学」公開シンポジウム
- [10] 2020 年 9 月 15 日～18 日 日本金属学会秋季講演大会公募シンポジウム「機能コアの材料科学 I」
- [11] 2020 年 9 月 2 日～4 日 日本セラミックス協会秋季シンポジウム
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」
- [12] 2019 年 12 月 18 日～20 日 The 3rd Workshop on Functional Materials Science (Sapporo, Japan)
- [13] 2019 年 11 月 10 日～12 日 Joint 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science, Nano-materials, Technology and Applications (Da Nang, Viet Nam)
- [14] 2019 年 10 月 27 日～11 月 1 日 国際会議 PACRIM13 (Okinawa, Japan)
Symposium15: “Advanced Nanocharacterization and Atomic-Scale Modeling of Grain Boundaries and Interfaces in Ceramics: Structures, Dynamics and Properties”
- [15] 2019 年 9 月 11 日～13 日 日本金属学会秋季講演大会公募シンポジウム
「先進ナノ構造解析に基づく材料科学の新展開II」

【一般向けアウトリーチ活動】（一部抜粋）

- [1] 2023 年 10 月 21 日 テクノフェア名大 2023 「機能コアの材料科学」
- [2] 2022 年 10 月 15 日 テクノフェア名大 2022 「機能コアの材料科学」
- [3] 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はなし」
- [4] 2020 年 10 月 17 日 テクノフェア名大 2020 「機能コアの材料科学」
- [5] 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」
- [6] 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」

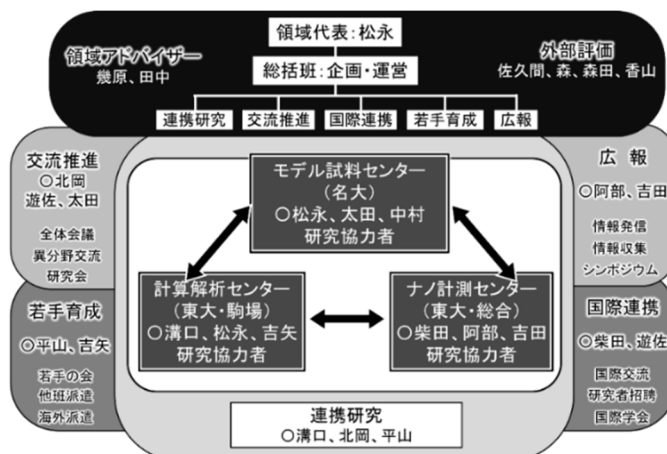
8 研究組織の連携体制

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。

本領域では、総括班が主導的役割を担い、研究項目間、計画研究および公募研究間の連携を推進した。連携促進活動のポイントは以下の通りである。

総括班体制

総括班に設置した「連携研究」、「交流推進」、「国際連携」、「若手育成」、「広報」の各部門に、それぞれ総括班メンバーを主副担当として配置し、領域内連携の旗振り役となった。また総括班内に、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、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った。



総括班連携体制図(○は主担当者)

領域内連携に対する領域代表を中心とした体制とチェック機構の構築

領域代表と総括班メンバーとが密接な意思疎通をとり、各部門における活動状況の確認や推進方針の策定を行った。評価委員および領域アドバイザーを含む総括班会議を年2回開催し、運営方針や活動状況を多角的にチェックした。

共同研究および設備有効利用の促進

共同研究促進および領域内設備の有効利用のため、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3つの研究センターを通じて連携することで、研究者間の風通しを良くした。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重要で、本体制が多くの共同研究において奏功した。さらに本領域では、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、大学院生とも速やかでフレキシブルな情報収集・交流を行える体制も整えた。

また、2020年から2022年に亘るコロナ禍による活動制限への対策として、オンラインシステムを活用した「遠隔連携会議」を総括班が企画し(計8回実施)、領域内交流および連携の活性化を図った。

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、公募班研究代表者を、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、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・活性化につながった。

若手人材育成・国際交流支援

研究グループ間の共同研究促進だけでなく、機能コア科学の学理と志を受け継ぐ若手人材育成にも総括班は注力した。2019年と2023年には「若手の会」を対面開催し、若手間のネットワーク構築の機会を設けた。コロナ禍での活動制限中には、オンラインシステムをいち早く導入し、「若手コラボツアー」を計8回開催することで各研究グループの若手研究者および大学院生間の交流の機会を設けた。2023年度に入ってから活動抑制解除後は、大学院生・若手研究者の領域他班への短期・長期滞在を実施した。以上の活動を通じて、分野横断的な若手人材ネットワークが構築され、互いに切磋琢磨することで大学院生・若手研究者の連携強化や研究者としての素養の涵養に大きな作用を及ぼした。

国際交流については、コロナ禍による推進の難しさはあったが、初年度・最終年度は国際シンポジウムの開催や海外研究者短期招へい、海外研究者による若手向けセミナー開催を積極的に行った。若手の海外機関への留学(2023年度1名)に関しても、共通試料の提供など、派遣先での研究活動を支援した。

9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

研究領域全体を通じた研究費の使用状況

本領域の研究開始に際し、総括班主導で研究費使用方針を掲げ、研究代表者・研究分担者に対し当初研究計画に沿った研究費使用を励行するよう要請した。各計画研究代表者には、使途の変更を希望する場合は、事前にその目的と変更理由を総括班に申請し、審議を経るよう徹底した。

一方で、研究期間第2年度目に始まった、新型コロナウイルス感染拡大に伴う、国内外出張および研究者・学生の領域内外への派遣の制限のため、人件費や旅費の使途変更、公開シンポジウムや領域全体会議に備えた会議費や出張旅費の繰越しなど、一部研究費の使途変更を余儀なくされた。しかしそのような場合でも、科研費使用ルール遵守のもと、可能な限り共同研究で使用する共通試料費や、評価解析のための装置使用料として活用するようし、最大限共同研究成果に結びつくような使途とするよう指揮した。

研究設備等の活用状況

本領域では、総括班傘下に、本領域研究の3つの核心的技術要素に関する**計算解析センター**、**ナノ計測センター**、**モデル試料センター**を設置した。領域メンバー専用 Slack（コミュニケーションツール）を立ち上げ、各センターにおける共用設備に関する情報を提供・共有した。また情報共有だけでなく、計算方法や解析方法、電子顕微鏡観察のための試料作製方法や観察方法、共通試料の有無、その他研究に際してのノウハウについても領域内で共有化し、共同研究を円滑に推進するためのプラットフォームを整えた。この環境は、公募班として参画する異分野からの研究グループのように、領域内連携の拠り所がわからない場合に特に有効に機能した。その結果、**研究者間の見通しが良くなり、研究経費の効率的活用だけでなく、多くの共同研究の成果に繋がった。**

各センターに導入・活用した主な設備とその活用状況は、以下の通りである。

(1) 計算解析センター（東京大学、京都大学、名古屋大学）

第一原理計算および機械学習解析に関する共同研究に活用するため、A01(イ)班が中心となり計算解析に関わる設備導入およびその共同利用の運営を司った。また同センターの運営や連絡調整、解析補助のため、技術補佐員を1名配置した（総括班費による雇用）。主な導入共用設備は、「機能コア解析用機械学習システム（2019年度、設置場所：東京大学）」、「高精度機械学習ポテンシャル開発用第一原理計算システム（2019年度、設置場所：京都大学）」、「第一原理拡散計算用計算機システム（2020年度、設置場所：京都大学）」である。これらは計算データ収集用の計算資源としてだけでなく、データ共有用のファイルサーバーとしても使用し、本領域の非常に多くの共同研究に活用した。これらに加え、東京大学、名古屋大学におけるスーパーコンピュータ共用設備も利用した。スパコンの利用により、多くの単体・化合物を対象とする機械学習ポテンシャルおよび固体内拡散の高精度・高効率解析手法のパフォーマンス評価、汎用性評価を短期間で実施することが可能となった。さらには、各班との共同研究において対象とする、より現実的で大規模な機能コアの計算解析も実施することが可能となり、研究の高度化と効率化が図れた。

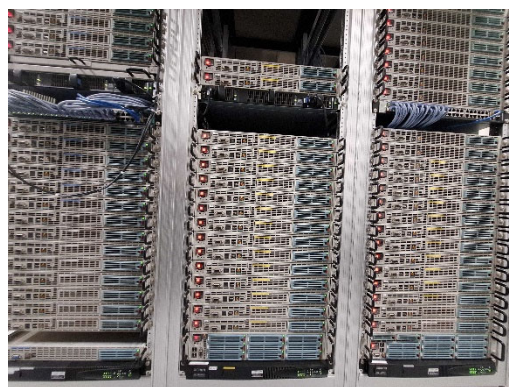
(2) ナノ計測センター（東京大学、大阪大学）

高分解能での走査型透過電子顕微鏡(STEM)観察のために、試料作製に不可欠な「電子顕微鏡用試料クリーニング装置（2019年度、設置場所：東京大学）」を導入した。これは本領域研究の開始に伴い、機能



Slack による各センターの情報共有

結果、研究者間の見通しが良くなり、研究経費の効率的活用だけでなく、多くの共同研究の成果に繋がった。



機能コア解析用機械学習システム

スパコンの利用により、多くの単体・化合物を対象とする機械学習ポテンシャルおよび固体内拡散の高精度・高効率解析手法のパフォーマンス評価、汎用性評価を短期間で実施することが可能となった。さらには、各班との共同研究において対象とする、より現実的で大規模な機能コアの計算解析も実施することが可能となり、研究の高度化と効率化が図れた。

(2) ナノ計測センター（東京大学、大阪大学）

高分解能での走査型透過電子顕微鏡(STEM)観察のために、試料作製に不可欠な「電子顕微鏡用試料クリーニング装置（2019年度、設置場所：東京大学）」を導入した。これは本領域研究の開始に伴い、機能

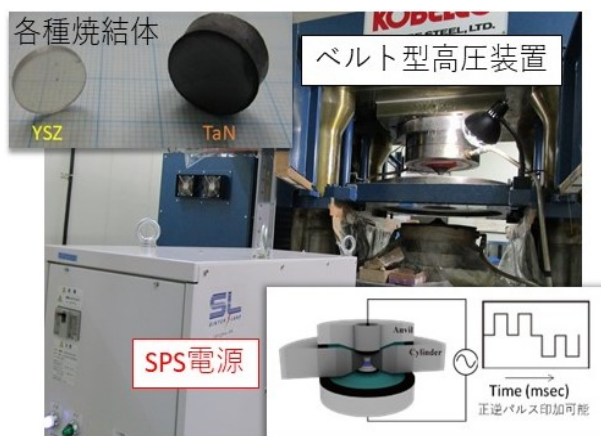
コアの精密計測において、電子顕微鏡試料に付着するコンタミネーションが極めて大きな問題であることが判明したためである。本装置は、本領域内での共通試料の解析や各班との共同研究におけるほぼすべての電子顕微鏡試料に活用した。その結果、電子顕微鏡試料を長時間クリーンな状態に保持することが可能となり、機能コアの精密計測に加え（*Nano Lett.* 2020）、動的挙動の原子分解能観察にも成功し（*Nature Mater.* 2021）、着実に実績を挙げることができた。また本領域の共同研究を進めていく過程で、電池関連材料や環境材料にはイオン研磨に弱い試料が多くみられたため、当初計画には入っていなかったが、2020年度に「イオン研磨装置（液体窒素冷却仕様）（2019年度、設置場所：東京大学）」を導入した。これにより、イオン照射に弱い機能コアを含む試料作製も可能となり、多くの共同研究において活用した。その他、本領域研究者が関わっている、文科省ナノテクプラットフォーム事業共用設備の利用（東京大学、名古屋大学等）も積極的に行った。また、東京大学に本センターにおける試料作製を補助する技術補佐員を1名配置し（総括班費による雇用）、事務連絡・情報共有・研究推進の効率化を図った。さらには、領域内モデル試料センターと試料を共有することでも、研究費を効率的に活用した。



電子顕微鏡用試料クリーニング装置

（3）モデル試料センター（名古屋大学、北海道大学、NIMS）

本領域研究の特色として、他の研究グループでは容易に合成できない、双結晶試料や高圧合成試料、原子堆積薄膜試料などの良質試料の獲得が挙げられる。双結晶関連の設備として、「高純度界面形成システム（2019年度、設置場所：名古屋大学）」を導入した。所定のドーパントを双結晶界面に導入する装置であり、A02(ウ)班やA03(キ)、公募研究との連携に関する多くの共通試料作製に活用した。またこれらの試料作製補助のため、技術補佐員を1名配置した（総括班費による雇用）。「超高压合成装置用パルス電源装置（2020年、設置場所：物材機構）」は、既存のベルト型高压装置では困難であった硬質材料や難焼結性材料の合成を可能にし、A03(キ)班やA03(ク)班との共同研究に活用した。原子層薄膜試料については、当初計画通り新規高額装置は導入せず、A03(カ)班の現有装置・合成条件データを最大限に活用し、A03(ク)班における固体電解質研究に活用するなど、研究費の効率的使用を図った。



超高压合成用パルス電源装置

その他総括班活動に関わる研究費活用

（1）イベント企画

「総括班会議」、「公開シンポジウム」、「領域全体会議」、「若手の会」、「国際シンポジウム」を開催するための会議費・会場賃借料（オンライン開催時はシステム利用料）等に使用し、領域の円滑な運営および領域内外の研究者間の交流促進に有効活用した。これらのイベント時には案内ポスター、ニュースレターや概要集を印刷・配布し、各イベントの盛況な開催をアシストした。

（2）国際交流

初年度および最終年度を中心に、著名な海外研究者の招へいに必要な旅費や講演謝金に使用し、国際的ネットワーク構築に役立てた。また、最終年度に若手1名の海外機関滞在（ドイツ、2023年8月～2024年1月）に際しては、滞在先での共同研究に必要な原材料費にも使用して、国際活動を支援した。

（3）広報

領域活動広報と領域内共同研究促進のため、領域ホームページおよび研究成果ホームページの作成費、領域メンバー専用コミュニケーションツール利用料に使用した。

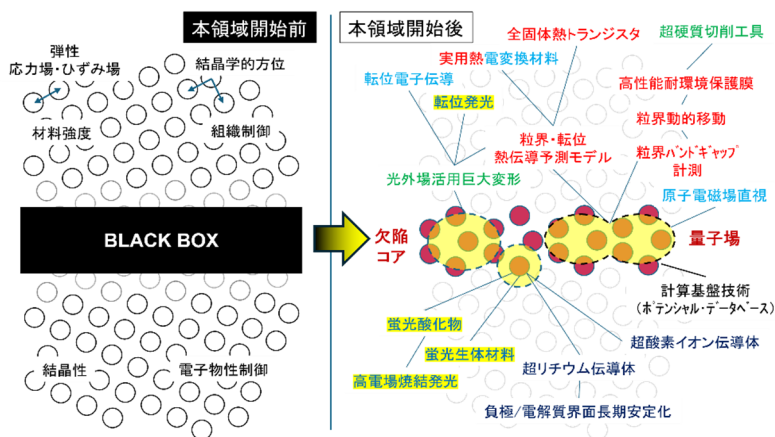
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「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1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

本領域成果の関連学問領域でのインパクト

本領域は、「②当該領域の格段の発展・飛躍的な展開を目指すもの」を選択した。

従来の材料科学における結晶欠陥研究は、結晶学的方位や格子整合性と、それに基づくひずみなど、線形弾性論に基づいた議論が主であった。本領域は、従来理論が適用できない非線形領域であり、これまでブラックボックスとされてきた欠陥コアの構造と量子場(=機能コア)に踏み込むことで、欠陥の新機能発掘・新材料創製を目指した。その結果(右図および「6. 主な成果」参照)、光外場を活用した無機材料巨大変形機構解明、転位発光と制御、転位・界面における熱伝導解明と予測、粒界バンドギャップによる酸化物保護膜性能解明、原子レベル粒界移動動的観察と機構解明、界面局所電磁場の可視化を始めとする数多くの革新的な研究成果を挙げることに成功し、これまでの材料科学の枠組みを遥かに凌駕する「機能コア」の学理構築を達成できた。



本領域の革新的・創造的な研究成果と学術の発展

さらに、高性能熱電変換材料、全固体熱トランジスタ、超高性能固体イオニクス材料、高性能耐環境保護膜、超硬質切削工具の開発など、**領域研究開始前には想定していなかった、多岐の材料分野に亘る創造的な実用材料開発を「機能コア」の学理に基づき実現した。**それらの成果は、**Nature 系列誌に 28 報、Science 系列誌に 8 報、その他インパクトファクター10 以上の学術誌に 41 報**を含む合計 418 報の学術論文として発表した。**当該・関連学問分野に多大なインパクトを与えた**と自己評価している。

本領域の学協会活動と国際活動におけるインパクト

学協会活動も活発に行い、本領域のプレゼンスをアピールした。本領域研究者が、国内学協会のシンポジウムや講演会を計 17 件企画・運営し、基調・招待講演を行うなどリードした。国際会議においても、本領域研究者が計 7 件のシンポジウムを企画・運営した。特に最終年度には、国際会議 MRM2023/IUMRS-ICA2023 において「機能コア科学」シンポジウムを開催した(上写真)。開催地は国内(京都)であったが、全 63 件の発表のうち 24 件が海外機関からの発表であり、国際交流と本領域のプレゼンス向上の絶好の機会となった。今回招へいた米・仏の研究者達から、今後欧米で開催される国際会議での運営協力も要請されており、現在でも継続的な連携を進めている。また、研究期間内に領域研究者が行った**国際会議基調講演は計 17 件、国際会議招待講演は計 205 件**にも上り、本領域研究は国際的にも大きな注目を集めた。その他にも、領域代表者が筆頭著者として出版した英文総説論文(K. Matsunaga et al., *JCS-Jpn.* 130, 648-667 (2022)) は、同誌の **1) Editor's choice** として選定され、**2) 2022 年優秀総説論文賞を受賞**し、**3) 2023 年 1 月号表紙**として選定され、**4) 2023 年 Most Cited Article**にもなった。**以上の活動とその結果から、本領域の認知度は国内外で大きく高まった**といえる。



その他、本領域研究の波及効果

多くの本領域研究者は、本領域で培った志と実績に基づき、既に他プロジェクトにも研究展開している。例えば、JST 事業では ERATO に 1 名、CREST に 1 名、さきがけに 7 名、創発に 8 名採択され、活躍の場を広げている。個人賞受賞の中には、日本学士院賞(2023 年・東大柴田)、サー・マーティン・ウッド賞(2023 年・理研小林)、ジェームス・C・マックグラディ新材料賞(2023 年・物材機構谷口)等、権威ある個人賞も含まれ、本領域研究者に対する分野を超えた高い学術的評価が伺える。また、**女性研究者・大学院生による受賞は計 41 件**にも上り、さらに 3 名が国内大学助教に正規任用されている。**本領域は我が国の材料科学分野における女性研究者の育成と輩出にも大きな役割を果たした**といえる。

11 若手研究者の育成に関する取組実績

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6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。）の育成に係る取組の実績について、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「若手の会」を2019年度と2023年度に開催し、合わせて200名以上が参加した。長時間に亘り、ポスターセッションを通じて徹底的に議論を戦わせ、大学院生の自立心強化や、健全な競争心の刺激に大いに役立った。これにより、研究機関や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、卒業後もそのネットワークが機能している。

2020年度以降、コロナ禍により対面・合宿形式での若手の会が実施できなかった。これに対し、領域内若手研究者・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。ここでは、大学院生・若手研究者による最新研究トピックス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、各研究グループの相互理解を促した。「コロナ禍であっても交流や連携研究のきっかけとなり有益であった」と、参加者からの多くの肯定的な意見が寄せられた。



2023年度若手の会(東大)



若手コラボツアー(東大)

国内外著名研究者による若手向け研究セミナー開催

コロナ禍前後には、国内外で著名な研究者による若手研究者・大学院生向けセミナーを、各計画班で対面開催した。海外講師セミナーでは、米、仏、独、韓国等の材料科学の研究者に依頼し、転位や粒界、界面、ナノ計測、エネルギー材料合成などに関わる基礎から最新研究動向を学ぶ機会とした。コロナ禍後期以降は、オンライン開催による国内他機関からの参加も可能とし、領域内若手の国際性の涵養を促進した。



Till 博士による転位セミナー(名大)

キャリアアップおよび受賞

本領域研究期間中にのべ **43名**の若手研究者がキャリアアップ(海外含む)している。39歳以下で、博士研究員としての就職11件、助教への昇任11件、講師への昇任6件、准教授への昇任が9件、研究機関への採用も4件あった。これらには**女性研究者が8名含まれる(うち3名が国内大学助教に着任(東大、名大、阪大))**。加えて教授への昇任も2件あり、これらの大多数が新たな職位に着任後も、材料科学研究で活躍中である。また若手研究者・大学院生の研究活動は国内外において高い評価を受けており、**計198件**の発表賞・個人賞を受賞した。さらにJST さきがけ、創発研究での若手の採択も14件ある。**本領域は若手のキャリアパスとしても大きな役割を果たし、本領域研究の学理や志は確実に次世代に継承できている**といえる。

本領域研究期間中にのべ **43名**の若手研究者がキャリアアップ(海外含む)している。39歳以下で、博士研究員としての就職11件、助教への昇任11件、講師への昇任6件、准教授への昇任が9件、研究機関への採用も4件あった。これらには**女性研究者が8名含まれる(うち3名が国内大学助教に着任(東大、名大、阪大))**。加えて教授への昇任も2件あり、これらの大多数が新たな職位に着任後も、材料科学研究で活躍中である。また若手研究者・大学院生の研究活動は国内外において高い評価を受けており、**計198件**の発表賞・個人賞を受賞した。さらにJST さきがけ、創発研究での若手の採択も14件ある。**本領域は若手のキャリアパスとしても大きな役割を果たし、本領域研究の学理や志は確実に次世代に継承できている**といえる。

12 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った。その結果を領域代表者、計画班研究代表者、個々の領域内研究者にフィードバックし、領域内研究成果の質的および量的な向上をもたらすだけでなく、研究展開の新たな方向性の提案も行い、領域研究を強力にサポートした。さらに領域内での共同研究の状況や総括班の活動状況を逐次チェックし、領域全体の運営に関する評価と指導を行った。

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・名誉教授）	専門：材料科学・電子顕微鏡学
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、上記評価委員に加え、材料科学分野の領域代表経験者から2名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た。

領域アドバイザー氏名・専門分野

幾原雄一（東京大学・教授）	専門：材料科学、電子顕微鏡材料学
※特定領域研究「機能元素のナノ材料科学」領域代表(2007-2011)	
田中功（京都大学・教授）	専門：計算材料科学
※新学術領域研究「ナノ構造情報のフロンティア開拓」領域代表(2013-2017)	

評価委員による評価コメント

佐久間健人(東京大学名誉教授)

本領域研究は、先端ナノ計測と計算科学で卓越した研究業績を挙げているメンバーが結集して核となり、結晶欠陥の電子・原子レベル構造と特性の関係解明に立脚した、普遍的な材料設計指針を獲得することを目指したものである。本領域の特徴は、領域代表の強いリーダーシップの下、これまでの材料科学では踏み込むことが難しかった、結晶欠陥コアの量子状態解明や新機能発現に果敢に挑戦し、成功した点である。例えば、光環境によって半導体結晶の変形挙動がドラマチックに変化する現象をベースにした、転位コア発光の発見、独自開発の無磁場原子分解能電子顕微鏡による半導体・セラミックス界面の空間電荷計測の成功は、従来の材料科学における未踏領域に踏み込んだ世界的に卓越した成果である。さらに、基礎的学理にとどまらず、材料応用への取り組みも精力的に進めた。硬質材料や熱電材料、セラミックス材料、固体イオニクス材料など、いくつかの異なる材料分野への応用に挑み、機能コアのコンセプトに立脚した具体的な研究開発成果も得られている。これらの成果による知見や研究手法は、学術的に高いインパクトをもつだけでなく、これからの材料科学研究のスタンダードとなったとって過言ではない。本領域の研究者達には、引き続き世界最高水準の研究を続け、世界を牽引していただきたい。

若手研究者育成という点においても、コロナ禍の状況にも関わらず、さまざまなツールを活用した運営にいち早く取り組み、それらを実現した領域代表と総括班メンバーの努力や工夫には大いに敬意を表したい。その結果として、研究期間中に多数の学生や大学院生、博士研究者が、大学や研究機関の研究スタッフとしてステップアップしているのであろう。これは本領域研究の研究水準の高さを示しているが、材料科学に関わる他大学や他研究機関の若手研究者にも大きな刺激となっているであろう。これらの若手の成長が、今後の材料科学の発展を支えて、我が国の国際的な競争力向上にもつながるはずである。

森 博太郎(大阪大学・名誉教授)

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、未来社会の構築には必要不可欠である。材料科学研究における 10 年に一度の大発見が、世の中を大きく変える原動力になりうる。それを目指した先進的な取り組みは、材料科学研究者の使命であると言って過言でない。その点で、本領域の主要な研究者は、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いる。本領域は材料科学の新しい潮流を生み出せる、数少ない研究組織の一つであることは論をまたない。革新的な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。

さらに本領域の優れた研究者のもとで学んだ多くの大学院生が、大学や研究機関、一般企業における研究者として成長していることは非常に頼もしい。領域代表の強いリーダーシップの下、総括班および若手を中心とした班員らの不断かつ有機的な連携の賜物である。若手というものは、熱意ある優れた研究者を目の当たりにしたとき、自分の将来と重ねて、その道を目指すものである。次世代育成という観点でも、本領域の意義は非常に大きい。

これからも手綱を緩めることなく、本領域の研究水準をさらに向上させ、材料科学だけでなく物質科学、物性科学を含めた分野の発展を横断的に支えることを期待している。

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、独自開発の電子顕微鏡法により、原子レベルでの構造情報だけでなく、原子内部や界面における局所的な物理場の計測まで成功している。さらに、第一原理計算やマテリアルインフォマティクスによ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目指し、世界トップレベルでの材料研究を推進している。とくにインフォマティクス手法の発展は目を見張るものがあり、本領域研究者による熱電材料特性の予測モデル開発やナノ計測・スペクトル解析との連携の成果は、他に類を見ない素晴らしいものである。

本領域では、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。これは領域代表者を始め多くの中堅研究者が志を一つにし、より優れた成果を得るために日々取り組んだ結果である。本領域は終了するが、これに留まらず、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。

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。ナノ計測技術や、第一原理計算と機械学習・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、本領域では、従来の材料科学研究からは想像もできないぐらいの新しい知見を得ている。これは、多くの研究成果が *Nature*, *Science*, *Nature Material* などの一流誌で発表されていることから明白である。

新学術領域研究は、多様な研究者・研究室間での有機的な連携研究を行うことで、単一の研究室では達成困難な新しい学術の創出を達成することに最大の意義がある。とくにナノ計測や計算科学の現在までの発展は、互いの連携によるものといって過言ではない。本領域はそれを実践するものであり、得られた成果の学術的価値は想定を超えた非常に高いレベルにあり、本領域の目標は十二分に達成している。ここで活躍した若手・中堅研究者が、今後の材料科学の発展に大きく寄与することを期待している。