

日本側拠点機関名	東京工業大学
日本側コーディネーター所属・氏名	東京工業大学 元素戦略研究センター・細野 秀雄
研究交流課題名	欠陥誘起機能を利用した持続可能エネルギー材料：材料設計の新概念から素子応用まで
相手国及び拠点機関名	英国：ユニバーシティカレッジロンドン(UCL) カナダ：マギル大学

研究交流計画の目標・概要

【研究交流目標】交流期間（最長5年間）を通じての目標を記入してください。実施計画の基本となります。

持続可能な社会の確立には、社会を支える材料を低消費エネルギー、低コスト、低環境負荷、安定供給が可能なものにしなければならない。わが国は、希少／毒性元素を要する材料の代替を喫緊の課題とし、また、ありふれた元素で構成する高機能・高性能材料の開発・応用を目指す「元素戦略」を国家戦略としている。

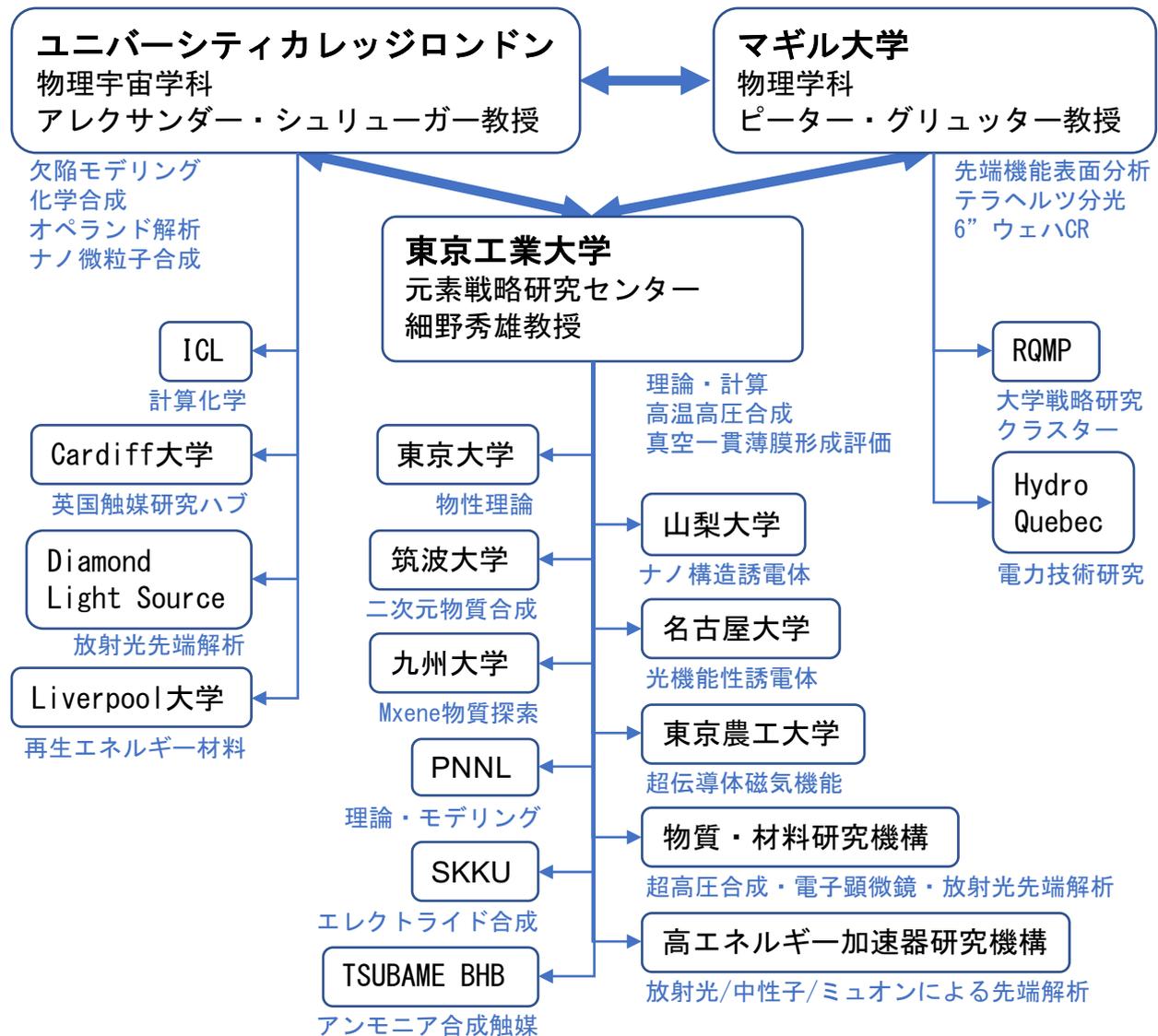
本申請の研究交流課題「欠陥誘起機能を利用した持続可能エネルギー材料：材料設計の新概念構築から素子応用まで」は、従来の材料開発とは一線を画した発想により、これらを創出することを可能とする世界最先端の研究交流拠点を形成することを全体目標とする。とくに持続可能な革新的エネルギー材料（低消費電力電子素子材料、高効率発電材料、高効率省エネルギー触媒材料等）に力点を置く。通常は物質中の欠陥は短所と考えられているが、一部の欠陥が有する特異な電子構造こそが新機能の発現の源となる、という共通認識の下、東京工業大学、英国 UCL、カナダ マギル大学の各研究拠点機関は国際セミナーの共同開催等による研究者交流を通じて、新機能を見出し、革新的エネルギー材料の創出を導くためのキーとなる材料設計の概念を構築する。この目標達成に向けて、各研究拠点機関のエキスパートからなる参加者により、マテリアルインフォマティクスを駆使した先端的な理論計算による新材料設計・探索、先端解析、難合成材料の極限合成技術、電子素子・触媒材料の設計・試作、新規応用探索等のワーキンググループ(WG)を編成し、それぞれの目標設定のもと国際的な共同研究を実施する。具体的な目標としては、欠陥物性の理論および計算法の構築、欠陥を導入した材料設計法の構築、欠陥構造・物性の精密解析法の構築、有効な欠陥を制御した物質／材料合成法ならびに電子素子・触媒材料の設計・製造法の構築等がある。

各 WG の参加者が本事業を通じて活発な研究者交流を重ねてそれぞれの目標に到達することで、全体目標を達成する。その全体目標が達成された際には、国際研究交流拠点が形成され、物質／材料設計の新しい概念が確立するのみならず、新機能物質／材料によって持続可能な社会を支える革新的エネルギー材料が持続可能な産業を勃興させることが期待できる。また、セミナー、研究者交流さらには共同研究を通じて、本事業の後もさらに革新的な材料の持続的創出を担う国際的水準の若手研究者を多く育成することも目標とする。

【研究交流計画の概要】①共同研究、②セミナー、③研究者交流を軸とし、研究交流計画の概要を記入してください。

- ① 共同研究：上記全体目標と同じ目標を掲げた交流期間と同じ期間に有効な共同研究契約を三拠点機関で締結し、この枠組みの中で、個別の具体的共同研究課題に関する従属共同研究を推進する。具体的課題は上記の理論計算、設計、解析、合成、素子設計・試作、触媒、応用探索等のチーム内で共同研究されるばかりでなく、理論・解析・合成・試作のメンバーからなる物質／材料別のワーキンググループ(WG)および機能・応用別のWGを編成したマトリクス体制で推進する。また、各WGにおいては、理論→設計→合成・試作→解析(→理論→・・・)の研究サイクルの循環を速めて高効率の研究開発を加速する。
- ② セミナー
上記のとおり、東京工業大学とUCLは、既に平成29年2月16-17日にわたり、本研究交流課題の目標を共有する第一回の国際共同シンポジウムを開催し、本研究交流課題のキーとなる欠陥誘起機能という新しい観点に到達した。この枠組みを基に、本研究交流では各年に一回、拠点機関あるいはその属する国において公開国際シンポジウムと本課題の総会を開催する。
- ③ 研究者交流
②の公開国際シンポジウムにおける研究者交流に加えて、WGの単位で年間5回のミーティングを開催し研究課題の徹底的な議論を行う。各WGから選抜した若手研究者が長期に互いの拠点機関に滞在し集中研究を行い、研究を加速するとともに国際的な若手研究者の育成を図る。

【実施体制概念図】 本事業による経費支給期間（最長5年間）終了時までには構築する国際研究協カネットワークの概念図を描いてください。



東京工業大学、UCL、マギル大学の三極を本申請課題の連携拠点とする。本課題を遂行する東京工業大学／元素戦略研究センター (MCES) は、その能力を補完する国内協力機関として、物質・材料研究機構 (NIMS)、高エネルギー加速器研究機構 (KEK)、東京大学、九州大学、名古屋大学、筑波大学、山梨大学、東京農工大学の研究者を加えて国内研究ネットワークを形成する。本申請の研究交流課題によりこの国内ネットワークをUCL、マギル大を拠点とする国際ネットワークに接続する。MCESはまた、同センターの生み出した技術である低温・低圧下でのアンモニア合成触媒の実用化を目指すベンチャー企業「TSUBAME BHB」とも連携し、成果として得られる技術の出口戦略と新展開に繋げる。

4年間の研究交流の過程で、東京工業大学はさらに関連する研究課題で連携のある米国 Pacific Northwest National Laboratory (PNNL) や東アジアネットワークの増強のための韓国 成均館大学 (SKKU) 等に、UCLは英国を中心とした材料の理論と計算化学に強いインペリアルカレッジロンドン (ICL)、触媒研究の英国国内ハブであるカーディフ (Cardiff) 大学、国立放射光施設の Diamond Light Source、再生エネルギー材料の解析と自動探索に強いリバプール (Liverpool) 大学等に、マギル大学は北米カナダのモントリオール大・シャープブルック大・エコーポリティク等50余りの大学からなる戦略研究クラスター Le Regroupement Quebecois sur les materiaux de pointe (RQMP) やケベック州電力会社の Hydro Quebec 研究部門等にネットワークを拡張し、核となる三研究交流に接続することで、日垂欧米にわたる国際ネットワークが構築される。