

平成30年度研究拠点形成事業 (A. 先端拠点形成型) 実施計画書

1. 拠点機関

日本側拠点機関:	東京工業大学
(イギリス)側拠点機関:	University College London
(カナダ)側拠点機関:	McGill University

2. 研究交流課題名

(和文): 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

(英文): Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: Design to Devices
Application

研究交流課題に係るウェブサイト: <http://www.mces.titech.ac.jp>

3. 採択期間

平成30年4月1日 ~ 平成34年3月31日 (1年度目)

4. 実施体制

日本側実施組織

拠点機関: 国立大学法人東京工業大学

実施組織代表者(所属部局・職名・氏名): 学長・益 一哉

コーディネーター(所属部局・職名・氏名): 元素戦略研究センター・センター長/ 科学技
術創成研究院・教授、細野 秀雄

協力機関: 物質・材料研究機構、高エネルギー加速器研究機構、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

事務組織: 東京工業大学 国際部 国際事業課、元素戦略研究センター事務室

相手国側実施組織 (拠点機関名・協力機関名は、和英併記願います。)

(1) 国名: 英国

拠点機関: (英文) University College London

(和文) ユニバーシティ カレッジ ロンドン

コーディネーター(所属部局・職名・氏名): (英文) Department of Physics and Astronomy・
Professor・Alexander SHLUGER

協力機関: なし

経費負担区分: パターン1

(2) 国名：カナダ

拠点機関：(英文) McGill University

(和文) マギル大学

コーディネーター (所属部局・職名・氏名)：(英文) Department of Physics・Professor・

Peter GRUTTER

協力機関：なし

経費負担区分：パターン1

5. 全期間を通じた研究交流目標

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行なければならない。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（東工大）、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。

6. 前年度までの研究交流活動による目標達成状況

該当無し

7. 平成30年度研究交流目標

<研究協力体制の構築>

平成30年度中に、三拠点内部では、“Materials design and synthesis”, “Defect modelling, characterization and function”, “Novel semiconductors”, “Reactivity and catalysis”, “Novel functional materials for energy”の五つのWG編成にて研究交流を開始する。研究交流課題の三拠点からの参加研究者はこれら五つのWGの何れかに所属する。このWG構成を軸に、課題開始以降にとくに若手を中心とした実務を担当する研究者を本課題参加研究者として追加し、四半期毎に参加研究者リストを更新する。各WGに所属する参加研究者は何れかの拠点で開催するWGミーティングに出席して共有する研究目標を設定し、さらに研究進捗を相互に確認して、共同研究を実施する。この過程において、より好適なWG編成および所属参加者の検討を行い、必要に応じて随時WG構成を再編し、年度内に平成31年度以降のWG構成を決定する。

三拠点外部を含めた研究協力体制に関しては、上記各WGにおける検討結果に応じて、東工大からは米国 Pacific Northwest National Laboratory (PNNL)や韓国 成均館大学(SKKU)等、UCLからはインペリアルカレッジロンドン(ICL)、カーディフ(Cardiff)大学、Diamond Light Source、リバプール(Liverpool)大学等、マギル大学からは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 研究部門等の何れかに本国際研究交流拠点への接続を開始する。

<学術的観点>

本研究交流課題の終了時に得られていることを期待する学術的成果は下記の9点である。

1. 欠陥の局所構造・電子構造に関する科学を深耕することによる新しい物質観。
2. 欠陥の局所構造を網羅的に探索し、高い信頼性で電子構造・物性を予測できる新たな理論計算手法。
3. 欠陥を前提としたマテリアルインフォマティクスを含めた材料探索・設計法。
4. 欠陥の局所構造・電子構造の新しい測定・解析法。
5. 欠陥を含む材料物性の新しい評価・解析法。
6. 必要な欠陥を制御された量と状態で導入できる材料合成法。
7. 上記6.までを統合することによる新しい低消費電力高速半導体材料、高効率発電・エネルギー変換材料、高効率省エネルギー触媒材料の科学。
8. 必要な欠陥を制御された量と状態で有する材料を用いる素子設計・製造法。
9. 上記8.までを統合することによる新しい低消費電力高速半導体素子、高効率発電・エネルギー変換素子、高効率省エネルギー触媒の工学。

平成30年度には、これらのうち1.-3.の最終目標に向けて、とくにUCLが有する欠陥モデリング法を各拠点の該当WG参加者で共有し、方法論の統合を進める。4.-5.の最終目標に向けては、各拠点間で分析プロトコルの標準化と相互補完的ワークフローの構築を進める。

6.-9.の最終目標に向けては各材料分野毎の共通目標を設定する。

<若手研究者育成>

参加研究者のみならず、本申請課題の研究に関わる助教クラスの教員、博士研究員、博士課程学生を積極的に相手国機関に相互に派遣し、研究課題に応じて2ヶ月程度の相手国先における滞在研究に従事させる。その際には、相手国機関に若手研究者の滞在者を指導するメンターを設定する。

他拠点から東工大に派遣され滞在研究を行う若手研究者には、研究内容に応じて、本研究交流課題を主として遂行する組織である元素戦略研究センター(MCES)が有する、最先端の分析装置や合成装置、高エネルギー加速器研究機構(KEK)、SPRING-8の大型量子ビーム施設も利用する。他拠点からUCLに派遣される若手研究者は、「Materials Chemistry Center」や「London Center for Nanotechnology」等の研究施設、「Center for Doctoral Training (CDT)」を通じた若手研究者の相互交流に基づく育成プログラムを享受する。他拠点からマギル大に派遣される若手研究者は「McGill Nanotools Microfabrication Facility」や最先端のプローブ顕微鏡、テラヘルツ領域光研究施設を利用し、カナダの50余りの大学で構成する戦略研究クラスター「Le Regroupement Quebecois sur les matériaux de pointe (RQMP)」や、大学内の「McGill Institute for Advanced Materials (MIAM)」も定期的なセミナーやワークショップに参加する。

派遣する若手研究者の計画人数は各WGにおいて2-4名程度を目標とする。

<その他（社会貢献や独自の目的等）>

初年度である平成30年度は、セミナーに位置付ける国際公開シンポジウムの開催により、当該分野の本課題外の研究者に本課題の研究方針とその発想や研究成果を公表して学術界に貢献するとともに、ウェブサイトなどを通じた一般向けの情報発信等の社会貢献も行う。

各WGにおける成果のうち、早期に産業に貢献することができる成果が見込まれた場合は、産業界との連携に着手する。

8. 平成30年度研究交流計画状況

8-1 共同研究

整理番号	R-1	研究開始年度	平成30年度	研究終了年度	平成33年度
共同研究課題名	<p>(和文) 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</p> <p>(英文) Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: Design to Devices Application</p>				
日本側代表者 氏名・所属・職名・ 研究者番号	<p>(和文) 細野 秀雄・東京工業大学元素戦略研究センター／科学技術創成 研究院・センター長／教授・1-1</p> <p>(英文) Hideo Hosono・Materials Research Center for Element Strategy / Institute of Innovative Research, Tokyo Tech・Director / Professor・1-1</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職名・ 研究者番号	<p>(英文) Alexander Shluger・Department of Physics and Astronomy, UCL・ Professor・2-1</p> <p>Peter Grutter・Department of Physics, McGill University・Professor・3-1</p>				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>本共同研究課題は、本研究交流課題の欠陥誘起機能を利用した持続可能エネルギー材料を実現するために、(1) 材料設計の新概念の構築とその機能を発揮する欠陥を制御した材料合成法およびこれを用いる素子動作実証の研究を行う WG "Materials design and synthesis"、(2) 欠陥の理論モデル化、解析評価と機能探索を行う WG "Defect modelling, characterization and function"、(3) 欠陥誘起機能に基づく新奇半導体材料を探索する WG "Novel semiconductors"、(4) 欠陥誘起機能に基づく化学反応と触媒材料を探索する WG "Reactivity and catalysis"、および (5) エネルギー材料のための(3)(4)のカテゴリーに属さない新奇機能材料を探索する WG "Novel functional materials for energy"、の5つのWG から構成される。</p> <p>WG (1) においては、材料設計法と材料合成および素子試作に関しては東工大と UCL の参加研究者が主体となり、合成した材料の物性や特性の解析評価はマギル大を中心に推進する。30年度は材料設計の新概念を導く新しい発想の抽出と具体的な材料合成に着手する。</p> <p>WG (2) においては、理論モデル化を UCL、解析評価をマギル大、機能探索を東工大が主体となって共同研究を推進する。30年度はモデル化手法の拠点間での統合と新材料候補の提案に着手する。</p> <p>WG (3) においては、新奇材料の探索を東工大と UCL が、合成した試料の解析評価をマギル大が主体となって共同研究を推進する。30年度は新機能あるいは高性能を期待することができる新奇材料候補の実証に着手する。</p>				

	<p>WG (4) においては、化学反応材料を UCL が、触媒材料を東工大が、それら材料の解析評価をマギル大が中心となって共同研究を推進する。30年度はこれら材料における欠陥誘起機能の探索に着手する。</p> <p>WG (5) においては、新機能材料の探索を UCL および東工大が、合成した試料の解析評価をマギル大が中心となって共同研究を推進する。30年度はエネルギー材料に求められる新機能の探索に着手する。</p> <p>共同研究にかかる国内の協力機関との進捗状況の確認・共有はすでに月次の全体ミーティング開催（約8回／年度）により定常運営されている。これに併せて遠隔通信により相手国とも進捗状況の確認・共有を行う。これを通じて Face-to-face で議論すべき案件を抽出し、三拠点の何れかで開催する WG ミーティングに本共同研究課題に参画する参加研究者が参集し徹底した議論を行う。また、若手研究者が長期間相手国に滞在して研究すべき課題に関して2ヶ月程度の派遣を行う。</p> <p>UCL およびマギル大で開催する5日間の WG ミーティングへの派遣は計6名、日本開催の5日間の WG ミーティングへの受入は UCL から計14名、マギル大から計2名を計画する。2ヶ月程度の若手研究者の滞在研究は UCL およびマギル大へそれぞれ計4名および計2名の派遣、UCL およびマギル大からそれぞれ計4名および計2名の受入を計画する。</p>
<p>30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果</p>	<p>30年度の本課題共同研究から各 WG において下記の成果が得られることが期待される。</p> <p>WG (1) においては、参画する参加研究者間で材料設計の新概念のあり得る姿が共有される。材料合成に関しては、拠点間で合成プロトコルが共有されるとともに、それぞれの得意領域を相互に認識することにより、合成プロセスの分業も可能になる。</p> <p>WG (2) においては、モデル化手法が各拠点から参画する参加研究者間で共有・統合され、新材料候補が提案される可能性が期待できる。</p> <p>WG (3) においては、新奇半導体材料の候補が提案されることが期待できる。</p> <p>WG (4) においては、化学反応材料や触媒材料の欠陥誘起機能が見出されることが期待できる。</p> <p>WG (5) においては、エネルギー応用に特化した新機能材料が提案される可能性が期待できる。</p> <p>上記全ての WG においては、材料の物性や特製の解析評価に関しても、分析プロトコルが標準化され、相互補完的なワークフローが構築されることが期待できる。</p>

8-2 セミナー

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「欠陥誘起機能を利用した持続可能エネルギー材料に関する第1回国際シンポジウム」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “The 1st International Symposium on Defect Functionalized Sustainable Energy Materials”
開催期間	平成31年2月21日 ~ 平成31年2月22日 (2日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 英国、ロンドン、ユニバーシティカレッジロンドン (英文) University College London, London, Great Britain
日本側開催責任者 氏名・所属・職名・研究者番号	(和文) 細野 秀雄・東京工業大学元素戦略研究センター／科学技術創成研究院・センター長／教授・1-1 (英文) Hideo Hosono・Materials Research Center for Element Strategy / Institute of Innovative Research, Tokyo Tech・Director / Professor・1-1
相手国側開催責任者 氏名・所属・職名・研究者番号 (※日本以外での開催の場合)	(英文) Alexander Shluger・Department of Physics and Astronomy, UCL・Professor・2-1 Peter Grutter・Department of Physics, McGill University・Professor・3-1

参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 英国		備考
		A.	B.	
日本	A.	15/	60	
	B.	0		
英国	A.	14/	28	
	B.	8		
カナダ	A.	4/	16	
	B.	0		
合計 <人/人日>	A.	33/	104	
	B.	8		

A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)

B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※人/人日は、2/14 (=2人を7日間ずつ計14日間派遣する) のように記載してください。

※日数は、出張期間（渡航日、帰国日を含めた期間）としてください。これによりがたい場合は、備考欄にその内訳等を記入してください。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本セミナーは本研究交流課題に関して初めてその新しい観点・概念・計画等を世界に公開する機会となる、国際公開シンポジウムとして開催する。本セミナーの開催は、参加研究者間で初年度の進捗と成果を改めて共有・再確認することに加えて、本課題の基本的な考え方と初年度の成果を広く世に問い、セミナー期間中の質疑応答や閉会後の交流を通じて外部からもフィードバックを得ることによって、それらを本課題の次年度以降の計画に反映し、全体計画をより好適に修正・推進するための情報を得ることを目的とする。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>本セミナー（国際公開シンポジウム）を開催し、本研究交流課題の新しい観点・概念・計画等を世界に公開することによって、参加研究者間で初年度の進捗と成果を改めて共有・再確認するとともに、本課題の基本的な考え方と初年度の成果に対して外部からフィードバックを得ることが期待される。それらに基づき、次年度以降の全体計画をより好適に修正・推進するための情報を得ることが期待される。本課題の国際連携拠点に更に多くの外部機関を接続し、拠点を発展させる機会となることも期待される。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>主催国 UCL コーディネーターの Prof. Alexander Shluger を Chair、東工大コーディネーターの細野 秀雄 教授およびマギル大コーディネーターの Prof. Peter Grutter を Vice Chair とし、三拠点の参加研究者からなる運営委員会、プログラム委員会、および主に UCL 参加研究者からなる現地運営委員会等の組織を構成し、セミナーを企画・宣伝・運営する。</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 外国旅費 国内旅費</p>
	<p>(英国) 側</p>	<p>内容 会議費 国内旅費</p>
	<p>(カナダ) 側</p>	<p>内容 外国旅費 国内旅費</p>

8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

共同研究、セミナー以外の交流（日本国内の交流を含む）計画を記入してください。

平成30年度実施なし

※1名につき1行で記入してください。

8-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

該当なし

9. 平成30年度研究交流計画総人数・人日数

9-1 相手国との交流計画

派遣先 派遣元	日本 <人/人日>	英国 <人/人日>	カナダ <人/人日>	合計 <人/人日>
日本 <人/人日>		22 / 315 (/)	5 / 135 (/)	27 / 450 (0 / 0)
英国 <人/人日>	18 / 310 (/)		7 / 145 (/)	25 / 455 (0 / 0)
カナダ <人/人日>	4 / 130 (/)	6 / 140 (/)		10 / 270 (0 / 0)
合計 <人/人日>	22 / 440 (0 / 0)	28 / 455 (0 / 0)	12 / 280 (0 / 0)	62 / 1175 (0 / 0)

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流する人数・人日数を記載してください。(なお、記入の仕方の詳細については「記入上の注意」を参考にしてください。)

※相手国側マッチングファンドなど、本事業経費によらない交流についても、カッコ書きで記入してください。

※相手国以外の国へ派遣する場合、国名に続けて(第三国)と記入してください。

9-2 国内での交流計画

	交流予定人数 <人/人日>
合計	0 / 0 (/)

0

10. 平成30年度経費使用見込み額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	162,000	国内旅費、外国旅費の合計は、研究交流経費の50%以上であること。
	外国旅費	12,600,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品購入費	738,000	
	その他の経費	0	
	不課税取引・非課税取引に係る消費税	0	
	計	13,500,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,350,000	研究交流経費の10%を上限とし、必要な額であること。また、消費税額は内額とする。
合 計		14,850,000	