

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月15日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
名古屋大学・工学研究科
[職・氏名]
准教授・丹羽 健
[課題番号]
JPJSBP 120203204

1. 事業名 相手国: フランス (振興会対応機関: MEAE-MERSI) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 最先端の高圧合成と計算科学に基づく共同研究による新規高エネルギー密度材料の開発

(英文) Experimental and computational discovery of new High Energy Density Materials: insights from high-pressure synthesis (Japan) and crystal structure prediction (France)

3. 共同研究実施期間 令和2年4月1日～令和4年3月31日 (2年0ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Poitiers University・Professor・FRAPPER Gilles Paul Joseph

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		1,893,360 円
内訳	1年度目執行経費	943,360 円
	2年度目執行経費	950,000 円
	3年度目執行経費	0 円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	12名
相手国側参加者等	2名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	0	0	0(0)
2年度目	0	0	0(0)
3年度目	0	0	0(0)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣: 委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

本申請課題の目的は、日仏の若手研究者が最先端の超高压実験と理論計算の共同研究に取り組み、新しいアプローチに基づいて高エネルギー密度材料を開発することであった。本来であれば申請者と大学院生が日本で行った実験結果を携えて渡仏し、それに対してフランス側の研究者が理論計算からその物理的・化学的解釈を付加することで、先進的な物質科学の確立を目指すことを予定していた。実際は実施期間がコロナ禍と重なり海外渡航が実質不可能になった。しかし、オンラインシステムを用いた情報交換や国内実験の積極実施、新たな共同研究者の参加により、精力的に研究を展開することができた。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

本研究では日本側による Bi や Sb,Sn の新規窒化物の創製と、フランス側による第一原理計算からの物質科学的なアプローチに取り組んだ。Bi-N 系物質に関しては、十分な実験データが得られていたので、その結果に対して独自に第一原理計算をおこない、結晶構造や安定性、電子状態などを求めた。プロジェクト期間内で論文としてまとめており、近日中の投稿を目指す。Sb や Bi はポスト遷移金属元素と呼ばれているが、これらの窒化物の超高压下での新規物質合成に関する報告はなかった。我々は超高压実験の結果を精査し、構造安定性や実験では追従しきれない物質科学的な視点に関して、第一原理計算からアプローチすることに成功した。これは他の新規窒化物系にも適当可能であり、今後他のポスト遷移金属元素系の超高压下における新規高エネルギー密度物質の創製に非常に有効な知見が得られたと考えられる。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

コロナ禍のためお互い日仏を直接行き来することはできなかったが、オンラインシステムによる会議やメールによるデータのやり取り、新しく加わった共同研究者を介した展開により、活発に取り組むことができた。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

科学・技術の発展には新物質の存在が関わっている場合が多い。超高压下における新物質合成では試料サイズが非常に小さくなり、物性測定そのものも非常に難しいが、常圧下では存在しない魅力的な新物質の創製が期待される。さらに近年発展著しい第一原理計算を組み合わせれば、その機能性まで詳細に知ることができる。今回の共同研究は先駆的な新物質創製とその魅力的な性質解明に向けて、その一翼が担えたものと考えている。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

日本側からは博士課程前期課程(修士課程)以上の学生が何らかの形で加わった。渡仏できなかったのは残念だったが、実験だけでなく計算等にも挑戦し、研究の幅を広げることができたと確信できる。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

超高压下における新物質合成は合成そのものも困難を伴うが、その評価も非常に大変である。したがって理論計算によるアプローチが加わると、研究の知見が大幅に広がる。フランス側研究者とは今後も共同研究に取り組むことで認識は一致しており、さらなる発展を目指す。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

特になし