

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月1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]

筑波大学・数理物質系

[職・氏名]

教授・西堀 英治

[課題番号]

JPJSBP 120209906

1. 事業名 相手国: デンマーク (振興会対応機関: OP) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 先端 X 線源による材料の生成と崩壊過程の原子スケール構造

(英文) Structure of Materials in atomic-scale using an advanced X-ray source under the processes of synthesizing and destroying.

3. 共同研究実施期間 2020 年 4 月 1 日 ~ 2022 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】)

Department of Chemistry Aarhus University, Professor, Iversen, Bo Brummerstedt

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		3,800,000 円
内訳	1年度目執行経費	1,900,000 円
	2年度目執行経費	1,900,000 円
	3年度目執行経費	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	4 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()
2 年度目	0	0	0()
3 年度目			()

* 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)

本研究では、中型(3GeV)と大型(6GeV)の世界最高性能の放射光施設と X 線自由電子レーザー(XFEL)を利用し、物質合成から破壊挙動までの物質が生成されてから劣化し崩壊するまでを時分割 X 線その場観察により可視化する物質科学研究を推進することを目的とした。生成から崩壊までを原子スケールで観測することで、物質開発の決定的な設計指針の獲得を目指した。放射光、XFEL が最も威力を発揮する原子スケール構造計測の新境地を国際連携の知を集約して開拓を目標とした。研究交流の具体的な目的は、笠井助教と大学院生藤田氏がオーフス大学に滞在し、X 線回折実験に適した試料の作成方法と特性評価の技術とノウハウを習得することであった。

この2年間、コロナウィルス感染症対策のため、双方が相手国を訪問することができなかった。また、2020 年には、緊急事態宣言により、主要実験施設である大型放射光施設 SPring-8、SACLAも 6 月下旬まで閉鎖されるとともに、4 月から 6 月に実施予定だった実験マシンタイムが 10 月から 2021 年 2 月までの期間に延期された。4 月の時点で、相手方の Iversen 教授、Overgaard 教授と e-mail および Web 会議システムで協議し、当面の共同研究の進め方を決定した。

オーフス大学のグループは、2020、2021 年度の 2 年間に SPring-8 の2つの実験課題で各約 5 日間のマシンタイムを前期、後期、合計 20 日間確保していた。2020 年 4 月～7 月の実験は 2020 年 10 月～2 月に、2020 年 10 月～2 月の実験は 2021 年の 4 月～7 月に延期された。これらのマシンタイムはすべて、国際共同研究として筑波大グループが SPring-8 に行き実験を行った。この実施を円滑に行うために、試料の郵送での受け渡しと、1回の実験で 1 テラバイトを超えるデータの保管、転送を行うための環境整備を 2020 年度に実施した。2021 年 7 月で終了となった課題の延長についても、オーフス大学のグループと協議し、2021 年 7 月までの 1 年間の必要なマシンタイムを共同で申請し、採択された。2021 年 10 月以降も、オーフス大学のグループが SPring-8 に行けない状況が続いたため同様の形での共同研究を2年目の最後まで継続した。

上述した状況であったが、オーフス大との Web 会議システムを使った SPring-8 での共同実験による筑波大グループのオーフス大学のノウハウの獲得や、訪問して習うはずの試料調整のメール、Web会議での習得などこの状況を利用して共同研究をより深めていくことにも成功した。

慣れないオンラインの接続と、メール中心の交流で1年目には成果までつなげることが難しかったものの、2年目には2件の国際会議での共同発表や、共同研究の論文が Nature Communications 誌に掲載されて筑波大学とオーフス大学でプレスリリースされるなど、研究が円滑に回り始めて、複数の成果が得られた。特に、修士の研究者高橋がオンラインとメールベースの共同研究で積極的な交流を行い、Nature Communications 誌の共著者や、国際会議発表の共著者に名を連ねたことは、想定外の若手育成の成果に繋がったと考えている。尚、高橋はこうした研究に感化され、博士課程への進学を決定した。また、その研究成果で、筑波大学物理学学位プログラムリーダー賞を受賞し、つくばスカラシップ研究奨励学生にも選抜された。2019 年にオーフス大に留学し、本プロジェクトの期間中に XFEL SACLA での国際共同研究に尽力した博士課程の藤田も 2022 年 3 月に無事に学位を取得し、筑波大学物理学専攻長賞を受賞した。尚、藤田は 2021 年度より学振特別研究員に採択された。

(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)

本研究で計測科学と物質科学の両面で新たな学術的知見が得られた。計測科学では、原子スケールの動的な動きや欠陥構造を観測する 3 次元差分対相関関数(3D- Δ PDF)の SPring-8 を利用したデータ測定法、解析法をほぼ確立した。これは、オーフス大学の成果(Phys. Rev. B 2020)や国際共同研究の成果(Nature Communicaitons 2021)から明らかである。この手法が測定から解析法まで含めて確立されたことは、本研究の国際交流で得られた大きな知見である。

物質科学としては InTe で見つかった単純な構造内の Disorder 構造の発見が挙げられる。この成果は、新しい熱電変換材料の指針としてだけでなく、物質科学全体に知見を与えた。2種類の元素から構成され、原子サイトも 3 個しかない InTe において、2 個のサイトを持つ In の片側の、10%の原子のみが Disorder 構造を有することの発見は、単に熱伝導度を下げる新しい機構の発見を示すだけでなく、物質の構造安定性において、こうした特異な状態があり得る新しい例を提案している。

(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)

Nature Communications 誌に掲載された InTe の成果は、密接な交流によって得られた成果であり、本国際交流なしでは成しえなかったと思われる。データの測定は、合計で3回にわたるマシンタイムが利用されており、オーフス大からの指示、筑波大の測定と筑波大からの提案、オーフス大からの改良の指示、など複数の交流を繰り返し、最終的なデータを得ることに成功している。コロナ禍で対面での交流はできなかったが、お互いができる限り自分たちの考えを伝えるべく、緊密な議論を繰り返したデータが新構造の発見につながった。この意味でオンラインベースの新しい学術交流でえられた成果ということができる。

(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)

物質科学の構造計測の研究であるため、社会生活の質の改善に資するような貢献をすぐに得るのは難しいが、熱電変換材料で特筆すべき成果が得られているため、エネルギー問題の解決に向けた観点での進展がみられたといえる。InTe で発見された低い熱伝導度を生み出す新構造と新しい機構の提案であり、熱電変換デバイスが利用される昨今では、現代的諸問題の一つであるエネルギー材料の高性能化の指針提案による社会貢献とみなすことができる。

(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)

本事業の開始時に博士課程2年の学生であった藤田は、2年目に学振特別研究員に採択されるとともに、XFEL SACLA の実験に積極的に参加した。2022 年の 3 月には無事に学位を取得し、筑波大学物理学専攻長賞を受賞した。また、2021 年度から参加した修士 2 年の高橋は、共同研究の国際会議発表の発表者に名前を連ねるとともに、Nature Communications 誌の共著者に名を連ねた。こうした経験を経て、高橋は博士課程進学を決意した。高橋は 2022 年 3 月に修士の学位を取得し、筑波大学物理学学位プログラムリーダー賞を受賞し、つくばスカラシップ研究奨励学生にも選抜された。また、笠井氏も日本放射光学会での招待講演や、SACLA Users Meeting での依頼講演など、複数の学会や研究会で講演を要望された。加えて Jacob Overgaard 教授が、筑波大学で 2022 年 3 月にオンラインで1週間の講義を行い、高橋が単位を取得した。以上のように本研究は若手研究者養成に貢献した。

(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)

コロナ禍のせいであるが、本事業の実施は、大型施設利用を基軸とした国際共同研究をオンライン、オンデマンドで進めるための技術と知見を磨く機会となった。これを2年間推進したことにより、日本側、相手国側両方で、実際に対面でやるべきことは何か？オンラインで進めることは何か？が明確化したと感じている。また、時系列で増加の一途をたどるデータを円滑に送るためのデータ転送技術などこれまでは注目していなかった技術の利用も促進された。コロナ禍の後の研究では、上述したコロナ禍で培った技術と、対面を組み合わせることでより効率的かつ密接な国際共同研究が可能になると感じている。

(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)

例: 大学間協定の締結、他事業への展開、受賞など

マシンタイム申請では2回の XFEL 課題の採択と、SPRING-8 での1年課題の採択が本事業中にあった。受賞については、参加した学生の受賞が(5)に記述したように3件あった。