

**平成30年度 研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型)
中間評価資料(進捗状況報告書)**

1. 概要

研究交流課題名 (和文)	遷移金属酸化物の固体化学：新物質探索と革新的機能探求		
日本側拠点機関名	京都大学化学研究所		
コーディネーター 所属部局・職名・氏名	化学研究所・教授・島川 祐一		
相手国側	国名	拠点機関名	コーディネーター所属部局・職名・氏名
	英国	エジンバラ大学	Centre for Science at Extreme Conditions and School of Chemistry・Professor・J. Paul ATTFIELD
	フランス	モンペリエ大学	Institute Charles Gerhardt・Professor・Werner PAULUS
	ドイツ	マックスプランク 固体研究所	Max-Planck-Institute for solid state research・Director・Hidenori TAKAGI
	台湾	国立台湾大学	Department of Chemistry・Professor・Ru-Shi LIU

2. 研究交流目標

申請時に計画した目標と現時点における達成度について記入してください。

○申請時の研究交流目標

本研究交流では、主として遷移金属酸化物材料を対象に、物質合成手法の開発を含めた「新物質探索・合成」を行う国際的な先端物質創製研究の拠点形成を目指す。従来の出口指向で縦割りされたプロジェクトとは異なり、基盤横断的な物質開発から「革新的な物性・機能の探求」を目指す。特に、高圧合成やイオン液体合成、単結晶育成、2次元薄膜成長、低温トポタクティク物質変換などの特異な最先端物質合成手法を発展させながら、非平衡準安定な物質までを含めた新物質の探索を行うことで、将来のエレクトロニクス・スピントロニクスへの応用が可能なデバイス材料やエネルギー・環境問題の解決に資する新規な機能性酸化物の創出を目指す。新しい遷移金属酸化物材料の化学と物理、基礎物性研究と応用展開におよぶ新しい学際領域の構築へと深化させ、世界的なレベルでの物質・材料科学研究、固体化学研究を先導する。

このような基盤横断的な固体化学研究の推進には、作製した物質・材料の正確で迅速な構造評価が必須である。世界各国の大型ビーム実験施設での放射光 X 線や中性子を効率的に用いて、国際的な連携による新物質開発と精密な構造評価、機能特性開拓を総括的に進める体制を構築する。

さらに、本研究交流では、相手国拠点が中心となり既に多くの実績を挙げている国際共同プロジェクトと連携することにより、より広範な国際連携の拠点形成への発展を目指す。これにより、若手研究者に共同研究と交流の場を提供するだけでなく、教育プログラムとの連携による世界各国の優秀な若手研究者発掘の場としての機能も果たす。

○目標に対する達成度とその理由

上記目標に対する2カ年分の計画について、

十分に達成された

概ね達成された

ある程度達成された

ほとんど達成されなかった

【理由】

計画に従い、活発な共同研究を展開し、大型ビーム実験施設での国際共同実験のプロポーザルも幾つか採択されるなど、共同研究を進展させることができた。これらの実験に若手研究者を帯同するなどして、相手国に2年間で67名(405人日)の派遣を行い、5報の国際共著論文を含む16報の論文発表と32件の国際学会での発表ができた。また、相手国からは学生や若手研究者の研究滞在を中心に積極的に受け入れ、2年間の交流は36名(1,110人日)に達した。国際共同研究からは注目される研究成果も得られ、特に京都大学の学生の国際学会での発表がBest presentation awardで表彰されるなど、若手の活躍も見られた。本交流事業の参加国外の研究者をセミナーに招へいするなどして、今後の拠点形成に向けての活動も展開しており、当初2年間の活動は目標を十分に達成し順調に進んでいると考えている。

3. これまでの研究交流活動の進捗状況

(1)これまで(平成30年3月末まで)の研究交流活動について、「共同研究」、「セミナー」及び「研究者交流」の交流の形態ごとに、派遣及び受入の概要を記入してください。※各年度における派遣及び受入実績については、「中間評価資料(経費関係調書)」に記入してください。

○共同研究

【概要】

平成28-29年度では、主として3つの中心課題に沿った共同研究を実施してきた。「酸化物新材料の合成と構造物性研究」(R-1)では、主に京都大学、エジンバラ大学、モンペリエ大学が中心となり、高圧合成やエピタキシャル薄膜作成、低温でのトポクティブな物質変換など、本交流事業で中心となる特徴的な物質合成技術に関して、情報交換や実験試料の相互提供、各研究グループの所有する特異な装置の相互利用を積極的進めた。特に物質合成において、各研究グループで有する特異な装置を利用して、いくつかの新物質の合成に成功した。また、合成した新物質の構造解析において、本国際共同研究のメリットを最大限に生かして、英国中性子実験施設ISIS(平成29年3月、12月)、および台湾放射光実験施設NSRRC(平成29年3月、6月、12月)へ国際共同研究プロポーザルを申請し採択され、合成した新物質の結晶構造・磁気構造解析を現地において行った。成果の一部は国際共著論文として発表した。一連の研究では、若手研究者を中心とする派遣・受け入れを積極的に活用し、2年間の間に、英国へ12名(79人日)、フランスへ10名(89人日)を派遣し、また英国からは8名(155人日)、フランスからも8名(658人日)を日本国内の参加機関へ受け入れた。

「酸化物量子相の研究」(R-2)では、東京大学とマックスプランク固体研究所が中心となり、量子スピン液体や3次元ディラック電子系など特異な量子物性を占めず材料に焦点を当てて研究を進めてきた。独自の改良を施した固体NMRなど日本が有する特殊測定技術とドイツでの理論家との連携を活かした計算によるアプローチなど、実験及び計算の協力・分担体制を構築し、若手研究者を中心に派遣(20名、221人日)および受け入れ(11名、262人日)も活用して研究を展開した。

「酸化物発光材料の評価」(R-3)では、国立台湾大学が作成している酸化物発光材料に関して、京都大学が有する先端評価装置を用いて、これまでは台湾側では十分にできなかった非常に速いスケールでの発光特性を明ら

かにすることに成功した。発光評価には台湾から 9 名 (57 人日) が来日して共同実験及びその結果の議論を行った。

以上のように本研究拠点形成事業の枠組みを最大限に利用した国際共同研究が着実に進展しており、学生を含めた交流も数多く行われた。本交流事業の相手国とは 5 報の国際共著論文を発表した。2 年間の交流活動により今後の発展的研究の基盤を作ることができた。

○セミナー

	平成28年度	平成29年度
国内開催	1 回	0 回
海外開催	2 回	3 回
合計	3 回	3 回

【概要】

平成 28 年 12 月に本研究拠点形成事業のキックオフセミナーを京都において開催し、事業に参画する研究者が一同に会することにより、各研究機関の情報を共有し、技術や装置の相補的な利用を目指した理解を深めた。また、その後のセミナー開催計画を議論して、共同研究の進捗状況の確認に加えて、研究展開の方向性を議論していく他、開催地の特色を出していくことで合意が得られた。

このような計画にしたがった平成 29 年度のセミナーは非常に特徴的なプログラムを編成した。8 月にドイツで開催したセミナーは“Novel Quantum and Functional Materials –Design and Synthesis–”と題し、近年活躍が目覚ましい若手研究者も広く欧州から招へいして参加者が 50 名を超える規模となった。特に参加した各国拠点の若手研究者にとっては良い刺激となったばかりでなく、幅広い技術分野を知る格好の機会となった。12 月に台湾で開催したセミナーでは、“From Basic to Application of Materials”と題して本研究交流事業の共同研究の進捗確認に加えて、台湾の半導体企業(TSMC)と LED 製造企業(EpiSTAR)の見学訪問が設定され、台湾におけるエレクトロニクス産業の急速な発展の歴史と現在の活発な研究開発の一端を垣間見ることができた。参加者にとってはまたとない有意義なものであった。

モンペリエ大学では、欧州横断教育プロジェクトを主宰して学生に放射光 X 線や中性子などの大型ビーム実験施設を活用した材料研究を学ぶプログラム、MaMaSELF: Master of Materials Science Exploiting European Large Scale Facilities を提供している。毎年 9 月に行われるサマースクールでは、欧州を中心に 10 名程度の講師が担当するが、日本からも本交流事業の代表者である島川が参加した。MaMaSELF プログラムは欧州を中心とする世界各国から選抜された 40 名ほどの学生が学んでおり、若手国際交流においても重要な場となっている。一方、日本側としても、サマースクールをはじめとするプログラムへの参加は本研究拠点形成事業の説明と宣伝を行う良い機会であり、このプログラムの学生を交換留学生として日本へ受け入れ、国際共同研究に参画させてきた。サマースクールは優秀な学生を選抜するための予備的面接の場でもあり、今後の交流活動で活躍できる欧州の若手人材と接する機会となった。

○研究者交流

【概要】

本研究拠点形成事業では、固体化学的視点に基づく物質開発と構造物性評価を進めており、このための実験試料の相互提供、および電子メールなどによる研究者間での情報交換は頻繁に行われている。また、本交流事業でのセミナーに加えて、学会・研究会での議論を中心に研究者交流を進めている。さらに、国際共同実験を重視しており、特に大型量子ビーム施設での実験に積極的に研究者を派遣してきた。日本国内の放射光実験施設 SPring-8 に加え、英国中性子実験施設 ISIS、および台湾放射光実験施設 NSRRC で多くの実験課題が採択され、多角的な

研究を展開するとともに、ビームラインサイエンティストとも多くの技術交流を進めている。また、国内施設と海外施設を併用することにより、各国施設の相違に応じた特徴的な研究ができるようになってきた。

国内での固体化学コミュニティーの発展と若手研究者の取り込みを目的に関連研究会と交流し本交流事業の宣伝にも力を入れてきた。平成 28 年度は東京大学物性研究所、29 年度は東北大学金属材料研究所で開催された「固体化学フォーラム」研究会に協力し、本事業の参加者の積極的な参加を促している。また、平成 28 年度から発足した新学術領域「複合アニオンの化学」とも連携して国内の固体化学関連プロジェクトと連携する体制を構築し、広く研究者交流の場を設けてきた。

国内外の学会・研究会は、技術動向調査と研究者交流に加え、本事業の成果発表の機会として積極的に参加を促してきた。新たに国際共同研究を進める可能性を検討しているものもあり、本研究拠点形成事業を今後さらに発展させるうえで学会・研究会への参加は有効な機会となっている。

(2)(1)の研究交流活動を通じて、申請時の計画がどの程度進展したか、「学術的側面」、「若手研究者の育成」、及び「研究交流拠点の構築」の観点から記入してください。

○学術的側面

本研究交流の特徴である特異な合成手法を発展させ、それらを駆使した新物質開発を進めてきた。その結果、京都大学化学研究所を中心に幾つかの新規酸化物を合成することに成功した。日本と台湾の放射光 X 線施設、および英国の中性子施設を使った結晶構造・磁気構造解析から、異常高原子価 Fe イオンの示す興味深い電荷転移（電荷不均化転移と電荷移動転移）に関する構造－物性相関を解明することに成功した。特に $\text{Ca}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{FeO}_3$ で見出した電荷不均化状態における Fe の idle spin 状態は極めて特異な磁気構造である。一連の成果は国際共著論文として学会発表や論文発表を行った。

東京大学理学研究科は、マックスプランク固体研究所と共同で、磁性イオンがハニカム格子をなす Ir 酸化物においてスピン－軌道量子液体が実現していること初めて明らかにすることに成功した。また、東京大学物性研究所でも、2色性を示す新物質 $\text{Ca}_3\text{ReO}_5\text{Cl}_2$ の発見やカゴメ格子反強磁性体 $\text{CdCu}_3(\text{OH})_6(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ において従来にない磁気秩序も見出すことにも成功した。

また、京都大学大学院工学研究科を中心とするグループでは、英国と共同で新規酸水素化物の放射光 X 線測定を行い、化学圧力によりアニオンの秩序無秩序転移を明らかにした。これは、ヒドリドイオンのサイズの柔軟性によることを示すもので重要な結果である。

以上のように、本事業での国際協力により幾つかの新物質や新現象を発見している。特異な物質合成手法と解析技術を相互活用することにより、重要な成果が得られており、当初の共同研究基盤の構築が達成され、今後の国際共同研究の礎が築けたと考えている。研究成果は、5報の国際共著論文を含む 16報の論文と 32件の国際学会での講演で発表した。

○若手研究者の育成

本事業で展開する国際共同研究へは、派遣・受け入れを通して若手研究者を積極的に参加させている。東京大学物性研究所博士課程学生が溶液からの物質合成技術の習得のためドイツに滞在したほか、英国 ISIS での中性子回折実験（平成 29 年 3 月、12 月）や台湾 NSRRC での放射光 X 線回折実験（平成 29 年 3 月、6 月、12 月）、および多数の国内 SPring-8 での放射光 X 線実験では、若手研究者や学生を派遣して研究に参加させた。各国の異なる環境での実験経験に加えて、現地でのビームラインサイエンティストとの議論などは、若手研究者が研究を進展させるうえで良い効果を生み出している。一方で、海外からの学生も本事業のマッチングファンドに加えて、国内参加機関の国際プログラムなどとも連携して積極的に受け入れてきた。英国、ドイツ、フランス、台湾の相手国からは、研究滞在として若手研究者や博士課程の学生を中長期にわたり日本側の研究室に受け入れ交流した（2 年間で 36 名、1,110 人日）。これは、滞在若手研究者にとって貴重な経験となったばかりでなく、相互の技術や手法を学び有効に利用するうえでも効果的であった。また同時に、日本側にも受け入れ研究室において学生同士が交流する機会となるなど多くのメリットがあった。

フランスで開催される欧州横断育プログラム MaMaSELF のサマースクール、およびドイツマックスプランク研究所で開催されたサマースクールにも各々、京都大学と東京大学の博士課程学生を参加させた。サマースクールでの学習に加えて、世界から参加している学生と生活を共にして交流する経験は貴重なものである。MaMaSELF サマースクールには、日本から講師としても参加し、若手研究者に本研究交流活動を効率的に宣伝するとともに、翌年度以降の学生受け入れのための予備面接の場としても機能している。

本事業で開催した日本でのセミナーでは、英国、ドイツ、フランス、台湾の若手研究者および学生も多数来日し、

また平成 29 年度のドイツおよび台湾で開催したセミナーには、学生を含め、多数の日本の参加機関の若手研究者を帯同し、ショートプレゼンテーションを含むポスターでの成果発表を行った。また、台湾でのセミナーでは、学会合に引き続き、先進のエレクトロニクス企業への訪問見学が設定され、若手研究者にとって大いに刺激を受けた貴重な機会となった。

その他、研究者交流として、多くの国内外の学会・研究会での発表を支援した。特筆すべきは、ポーランドで開催された欧州材料学会 (e-MRS) において、京都大学化学研究所の博士後期課程の学生の発表が、Best presentation award を受賞したことである。

以上のように、様々な形式で若手の研究参加を促しており、本事業ならではの貴重な機会設定もできている。学生を含めて多くの若手研究者が、積極的に本事業の国際共同研究に参加しており、論文執筆や学会発表などの成果も現れてきている。

○研究交流拠点の構築

本交流事業の採択を受けて、英国エジンバラ大学では、EPSRC-JSPS Core-to-Core Collaboration in Spintronics and Advanced Materials の採択が決定した。また、国立台湾大学も、学内の国際連携支援プロジェクトに本研究交流のマッチングとしての単年度プログラムが採択された。これらをはじめとする資金的支援を十分に活用することで、本研究交流事業の各参加国での共同研究体制の構築と実質的な研究のための交流をスムーズに開始できた。特に本事業の重要な研究協力項目である構造評価において、日本、英国、台湾の各国の大型量子ビーム実験施設での国際利用が非常にスムーズに進んでおり、重要な成果を得ることができている。共同研究を中心に人的交流と装置の相互利用なども着実に進んでいる。

フランス、ドイツで開催されているサマースクールとの連携は、海外の若手研究者との接点として重要となっている。また、台湾での企業訪問など、応用分野との連携も試みており、当初の参加機関を核とする発展的な展開も開けつつある。

本事業で主催するセミナーでの交流により、海外機関の間での共同研究のための議論も幾つか始まっており、本事業の狙い通り「固体化学」をキーワードとした研究拠点が発展しつつある。国内外での固体化学研究者の取り込みや本交流事業の宣伝にも力を入れ、本事業のセミナーには参加機関以外からの研究者を招へいしてきた。国内では、「固体化学フォーラム」に積極的に協力している他、平成 28 年度から発足した新学術領域「複合アニオンの化学」とも連携を進め、国内の固体化学関連プロジェクトと連携する体制を構築することが出来た。

このように「固体化学」を中心課題とするバーチャルな研究拠点として、今後の発展の基盤は構築できたと考えている。

4. 事業の実施体制

本事業を実施する上での、「日本側拠点機関の実施体制」、「相手国拠点機関との協力体制」、及び「日本側拠点機関の事務支援体制」について記入してください。

○日本側拠点機関の実施体制（拠点機関としての役割・国内の協力機関との協力体制等）

京都大学では、国際化推進支援として「国際競争力のある海外大学等との国際共同研究の推進」を掲げており、本事業はそれに沿ったものである。また、化学研究所は、これまで化学を中心とする自然科学の広い分野で基礎研究に重点を置いた先駆的・先端的研究に進進してきており、国際共同研究も積極的に推進している。既に附属元素科学国際研究センターでは外国人客員教授ポストを設置、活用しているほか、部局の独自事業として、「若手海外派遣・受入事業」も行っており、若手研究者や学生を含めた国際共同研究への参加も強く支援している。さらに、現在、国際共同利用・共同研究拠点への申請も行なっている。本研究拠点形成事業に参加している海外機関とは部

局間交流協定が締結されており、双方で学生交流／教職員・研究者交流／共同研究・セミナー・シンポジウムの実施／資料・情報交換のための便宜を図ることが謳われており、国際共同研究を効率的かつ円滑に推進するための支援体制を整えている。

京都大学化学研究所は、固体化学研究の伝統があり、高圧合成装置やエピタキシャル薄膜作成装置など、特異な物質合成技術も有しており、本研究交流の拠点中心として機能する。国内の参加研究機関は、相補的な物質合成・評価装置を有しており、共通の固体化学的な興味をもちながらも、相互協力により広く物質・材料化学と物理を展開できる体制になっている。また異なる学会コミュニティに属しているグループを統括することで、本研究交流事業を広く日本の物質・材料科学と結びつけることができる体制としている。

○相手国拠点機関との協力体制（各国の役割分担・ネットワーク構築状況等）

英国、エジンバラ大学は COE として設立された極限条件科学センター (CSEC) を中心に固体化学研究を推進し、高圧や強磁場などの極限環境下での物質合成や物性測定で日本側の研究を補完協力できる。また、京都大学化学研究所とは部局間交流協定も締結している。英国中性子実験施設や欧州の放射光実験施設へのプロポーザルの申請はエジンバラ大学を通して行っており、現地での測定にはエジンバラ大学の若手研究者が参加してくれている。本研究交流事業の採択を受け、EPSRC-JSPS Core-to-Core Collaboration in Spintronics and Advanced Materials が採択されている。

フランス、モンペリエ大学は電気化学を含めた固体化学を積極的に推進している。欧州放射光 X 線/中性子実験施設のあるグルノーブルからも近く、構造物性評価でも共同で研究できる体制を構築している。欧州横断教育プログラム MaMaSELF の主要機関であり、大型ビーム実験施設を使った物質・材料研究のハブとして機能に加えて、この分野の学生教育を熱心に進めている。近年では、更なる国際的な拡大を図っており、欧州に留まらず、ロシア、インド、中国、台湾からの学生を受け入れている。これらの優秀な学生を日本に呼び込みための窓口としても非常に重要な機能を果たしている。

ドイツ、マックスプランク固体研究所はドイツ屈指の固体化学・固体物理研究拠点であり、広い物質・材料研究を高いレベルで展開している。コーディネーターの Takagi 教授は Director として量子物質部門を率いており、東京大学との兼務によって日本の固体化学との強い連携を構築するのに格好となっている。

台湾、国立台湾大学はアジアトップレベルの大学として、アジアの優秀な若手研究者との接点を作るうえで重要である。基礎的な材料研究に加えて、台湾エレクトロニクス企業とも積極的に共同研究を進めていることから、本研究交流の応用展開の可能性を広げる上で重要な役割を果たしている。平成 29 年度のセミナー開催時には、台湾エレクトロニクス企業への訪問見学を設定してくれた。京都大学とは部局間交流協定の他、大学間交流協定も締結している。

○日本側拠点機関の事務支援体制（拠点機関全体としての事務運営・支援体制等）

京都大学宇治地区事務部／研究協力課および宇治 URA 室が国際交流関連の事務的なサポートを行っており、研究交流活動の推進から学生の支援までを行える体制を構築している。京都大学国際交流サービスオフィスが、交流で来日する研究者や招へい研究者のビザの申請から宿舎の手配までを行い、中長期の研究滞在にも対応できる支援体制となっている。

研究交流に伴う出張手続きなどについては、化学研究所で採用している事務補佐員が総括して担当しており、効率的な事務運営を行っている。国内参加機関との事務的な連携も問題なく進行しており、本研究交流事業の活動を支援している。