

令和2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)	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		
日本側拠点機関名	東京工業大学		
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、特命教授・細野 秀雄		
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	University College London	Department of Physics and Astronomy・ Professor・Alexander Shluger
	カナダ	McGill University	Department of Physics・Professor・Peter Grutter

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。

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、当初目的の達成に向け代替的に行った取組があれば、その成果も含めて記入してください。

○申請時の研究交流目標

本課題は、従来の材料開発とは一線を画した発想により、「欠陥誘起機能を利用した持続可能エネルギー材料」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、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、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を編成する。具体的な目標は、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・製造法の構築等である。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。

○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】

第3節に記すとおり、2年間に3ヶ国の拠点機関で総勢117名の参加者により計7回のセミナー／ワークショップ／シンポジウムを開催し、また、具体的な共同研究に必要な学生・若手を含む相互訪問も含め、具体的な共同研究課題を立案・実行してきた。これにより令和2年度には令和元年度後期に投稿した件も含めそれら共同研究の成果が多くの特許論文として出版される予定である。また、共同研究の遂行に必要なスキルを若手研究者・学生に体得させる目的で、上記ワークショップ等に20名以上が参加したサマースクールを併催し、共同研究の推進のみならず、若手間のコミュニティ形成を促進した。これらにより国際研究拠点の形成が十分に進んだと自己評価する。とくに、令和2年2月初に国内開催したシンポジウムは、数名の来日キャンセルが発生したものの、予定どおり開催され、計画の目標をほぼ達成することができた。令和2年度が計画どおり遂行されれば、本課題の完遂により当初目標が計画通りに達成されると見込まれる。

しかし、令和2年度計画は、新型コロナウイルス感染症拡大の影響により完遂できないことがほぼ確定しており、何らかの対策を講じなければ最終年度における目標達成は容易でない。

3. これまでの研究交流活動の進捗状況

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、代替的に行った取組があれば、その内容及び成果も含めて記入してください。

(1)これまで(令和2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】

下記セミナー一覧に記載のとおり、これまでに開催した計7回のセミナー／ワークショップ／シンポジウムを通じて具体的な共同研究課題が30件以上提案され、そのうち約半数が予備検討を経て実施された。日本側拠点機関が直接実施する課題としては、一般性の高いR1「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」の他に、個別の実施計画で遂行するR2「ホウ化水素2次元シート」、R3「単分子トランジスタ」、R4「酸化物誘電体セラミックスの風化現象」、R5「強誘電体材料」、R6「欠陥モデリング」の計6課題を分類・設定し、共同研究を推進している。これらの実施に伴い、下記のとおり各国の研究者・学生が相互に相手国拠点を訪問・滞在する研究者交流を通じて、共同研究を遂行した。いくつかの具体的な共同研究課題では、下記のとおり学術的価値の高い研究成果が得られて、令和2年度よりそれら成果に関する学術論文が公開され始めている。

○セミナー

	平成30年度	令和元年度
国内開催	1回	1回
海外開催	3回	2回
合計	4回	3回

【概要】

上の表のとおり、これまでに計7回のセミナー／ワークショップ／シンポジウムを日・英・加の三カ国の拠点機関において開催した。回を追うごとに若手研究者・学生を中心に新規参加が増し、開始時42名でスタートした本拠点の参加者数は令和元年度末で117名を数えるに至っている。ワークショップでは参加者が相互に自身の研究トピックスを報告し、ブレインストーミングにより新規の具体的な共同研究課題を提案・

検討する他、既の実施されている共同研究課題の進捗報告を行う。セミナー／シンポジウムは参加者以外にも公開し、共同研究の成果報告と当該分野の総説報告を行なっている。限られた日数でも若手・学生に発表機会を与えるために、ポスター発表も行なった。また、後述するとおり、令和元年度5月にカナダ・モントリオールのマギル大で開催した2.5日間のワークショップには、これに先立つ2.5日間にサマースクールを併催し、若手・学生が共同研究の実施に必要な知識とスキルを習得した。

○研究者交流

【概要】

研究者交流の最大の機会は、三カ国から多くの参加者が参集する上記のセミナー／ワークショップ／シンポジウムである。これらイベントへの参加者は、期間中の昼夜に亘って交流し、進行中の共同研究や新たな科学的課題について議論した。イベント期間では不足する場合、訪問者はその前後に滞在を延長し、個別の共同研究に関する議論や実験を行った。

共同研究を実施する参加者は、上記イベントとは独立して連携先拠点機関を相互に訪問し、議論や実験を行っている。議論のみや短期間で完了する実験を行う場合は数日から1週間、長期間に亘る実験を行う場合は3ヶ月程度の訪問滞在を行った。

(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、以下の観点から記入してください。

○日本側拠点機関及び相手国拠点機関の交流によってえられた、世界的水準の国際研究交流拠点となりうるような学術的価値の高い成果

上記具体的研究課題 R1-6 のうち、これまでに共同研究が進捗して成果が上り、その公表が近い例を示す：

【R2: ホウ化水素 2 次元シート】

筑波大、東工大の准教授ら合成と構造解明に成功した新物質ホウ化水素 2 次元シートに関して、UCL の教授らが実験的知見に基いた多様な欠陥構造の理論的研究を行い、ノンシンモルフィック空間群に属する構造の場合、トポロジカルな Dirac ノーダルループが存在することを明らかにした。ホウ化水素 2 次元シートの新規応用に向けた重要な知見を与える。本成果は令和元年中に論文投稿され、令和 2 年 5 月に出版されている。

N. T. Cuong, I. Tateishi, M. Cameau, M. Niibe, N. Umezawa, B. Slater, K. Yubuta, T. Kondo, M. Ogata, S. Okada, and I. Matsuda, “Topological Dirac nodal loops in nonsymmorphic hydrogenated monolayer boron”, Phys. Rev. B **101**, 195412 - Published 7 May 2020, (DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.195412>).

【R3: 単分子トランジスタ】

東工大の教授らがナノギャップ電極による単分子チャネルトランジスタ構造で実現した、単電子トランジスタや共鳴トンネルトランジスタに適した剛直性の高い単分子材料として、UCL の講師らが新たな構造の分子材料を提案し、分子合成とトランジスタ動作に成功した。本素子の実用化に向けたチャネル材料設計に指針を与える。本成果も令和元年中に論文投稿され、間もなく出版される見込みである。

【R4: 酸化物誘電体セラミックスの風化現象】

NIMS、東工大の教授らが見出した酸化物誘電体セラミックスの熱化学粉砕による風化現象は、産業上の利用価値から注目を集めているが、その粉砕過程が未解明である。UCL の研究員らの研究室は世界有数の X 線 CT を複数台擁し、これを用いて粉砕途上にあるセラミックス中に形成される空隙構造を 3 次元的に明らかにした。これにより粉砕過程の重要な部分が解明され、実用に至る障壁がひとつ取り払われた。本成果も間もなく論文発表される。

上記の例以外にも多数の共同研究が進行中であり、成果の収穫期に差し掛かった令和 2 年度には多くが公表に至る予定である。

○研究交流活動の成果から発生した波及効果

上記例に示すとおり、進行中の共同研究により得られた成果は学術的価値のみならず、いずれもそれらの産業上の利用価値を高めて当該材料の実用化に通じるものであり、本課題が掲げる革新的な「持続可能エネルギー材料」の創出に繋がる。後続の共同研究課題も同様の効果が期待され、本課題の研究交流活動から継続的にそのような成果が生み出されることによって「欠陥誘起機能」への統一的な理解が進み、本課題の国際研究拠点が構築される。

また、そのような成果が得られる共同研究に伴う研究交流活動は、国際連携体制全体の運営が推進するセミナー／ワークショップ／シンポジウムの機会以上に研究者間の交流を促進する。交流促進により相互理解もより深まることから、ひとつの具体的な共同研究課題の遂行がさらに新しい共同研究を生む効果も発生している。このように連鎖的な共同研究の発生機構を維持することによっても、継続的な成果創出に繋がる連携体制を有する国際研究拠点の構築に至る効果が発揮される。

○若手研究者育成への貢献

・若手研究者が身につけるべき能力・資質等の向上に資する育成プログラムの実施及びその効果

具体的な共同研究の遂行において、一定期間の相手先機関での滞在が必要な実験等の研究活動を、大学院学生を含む若手研究者の相互派遣・受入を行なっている。訪問研究者を受け入れた場合、滞在期間中の研究成果を最大化するために、受入側担当教員をメンターに指定し、オンザジョブトレーニングにおける様々な指導による育成も行った。また、若手間のネットワーク形成のために受入側若手研究者との交流機会も設けている。

また、上記のセミナー／ワークショップ／シンポジウムへの参加・発表を奨励し、多くの学生を含む若手研究者が発表・交流の機会を得てきた。

本課題のこれまでの研究活動における若手研究者育成施策として特筆すべきは、令和元年5月にカナダはモントリオールで開催したワークショップに先行併催した2.5日間のサマースクールである。本サマースクールの目的は、参加する若手研究者に彼らが実施遂行する共同研究に必要な知識とスキルを習得してもらうことである。カナダ拠点のマギル大学は本課題参加者の8つの研究室において、微粒子設計合成・毒性評価・電気化学・高速電極評価・テラヘルツ分光・ペロブスカイト太陽電池試作評価・ポーラロンの理論モデル計算・走査型プローブ顕微鏡、等の実習セミナーを開催した。各研究室の若手研究者・学生がホスト／ホステスとなり、参加者の実習指導に当たった。これに対して日本側拠点機関からは、助教クラス・ポスドク研究者・大学院学生ら総勢11名が、英国拠点からも6名が希望する講座に参加し、知識とスキルを習得した。サマースクール参加者は修了後ワークショップにも参加し、発表の機会も得た。習得した知識とスキルはその後の共同研究の実施に役立てられている。

このような若手対若手のスクールは、共同研究の実施に有用だけでなく、次に述べる若手間ネットワークの形成にも効果的であり、本課題期間中に再度企画したい。

・日本と交流相手国における次世代の中核を担う若手研究者の研究ネットワーク構築状況

上記の若手研究者の育成施策は、いずれも若手間の交流を促進するものであり、それらの多くは個々のイベントが終了した後も継続している。とくにサマースクールは、若手研究者同士が2.5日間連続して昼夜を共に過ごして実習するプログラムであったため、強固な人的ネットワークが形成された。これらを本課題全体の運営・推進体制が研究面からサポートすることにより、次世代の中核を担う若手研究者の研究ネットワークが構築される。