

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：異常原子価および特異配位構造を有する新物質の探索と新機能の探求
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

島川 祐一(京都大学化学研究所 教授)

主たる共同研究者

陰山 洋(京都大学大学院工学研究科 教授)

木村 滋(公益財団法人高輝度光科学研究センター利用研究促進部門 副部門長・主席研究員)

小口 多美夫(大阪大学産業科学研究所 教授)

### 3. 事後評価結果

○評点:

<b>B</b> 成果がやや不足している
----------------------

○総合評価コメント:

本研究課題では、鉄(Fe)、銅(Cu)、マンガン(Mn)、チタン(Ti)などのありふれた3d遷移金属の酸化物を中心に、異常原子価状態・特異配位構造をもつ新物質の探索と新機能の探求を目的として研究を進めてきた。新物質の探索では、高圧合成法、エピタキシャル原子層薄膜積層、低温トポクティブ反応といった手法を駆使して物質合成を行い、高分解能電子顕微鏡、放射光X線分光、第一原理電子状態計算などにより構造・電子状態を評価・解析することで、多くの新物質・新構造を見出した。また、異常高原子価イオン $Fe^{4+}$ を含むAサイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物について、一見全く異なる電氣的・磁氣的振る舞いを「酸素ホールの局在化挙動の違い」として統一的に説明するなど、新物質の示す興味深い物性の解明も行った。

一方、新機能の探求については、研究開始から2年半後に実施された中間評価において取り組みの改善が求められ、これを受けて「省電力エレクトロニクス(スピントロニクス)応用」と「エネルギー応用」を中心課題に設定して対象物質を絞り込み、また、物質合成・解析・理論を担う各研究グループ間の連携強化を図った。こうした取り組みの下、CREST研究の後半では高い磁気転移温度を有するハーフメタル新材料の発見や、多孔質酸化チタンの高い導電性の発見など、当初の想定を超える成果が得られた。さらに、酸化物薄膜ヘテロ構造界面における原子レベル格子歪を超高分解能電子顕微鏡で観察することに成功、ヘテロ構造界面が新しい機能発現の場となり得ることに着目し、数原子層の厚さの酸化物を界面に挿入することで薄膜の機能特性を制御する「界面エンジニアリング」を提案・実証した。

数多くの新物質を生み出し、発表論文も100報を超えるなど、新物質探索を指向した基礎研究としての研究成果は質・量ともに十分であったと判断される。しかしながら、本研究課題における両輪の一方であった新機能探求に関しては、掘り下げが十分であったとは言い難い。上述の通り、中間評価における指摘を受け止めた結果、想定を超える成果が得られたことは評価したいが、ニーズ側の意見を取り入れる仕組みを作るなど、機能特性の追求に向けてもう一步踏み込んだ体制強化を行うことが望ましかったと思われる。本CREST研究からは「界面酸素イオン伝導」や「界面エンジニアリング」など、将来の楽しみな新分野の種が生まれている。デザインされた新機能物質創製に向けて、今後の展開に期待する。