

先端国際共同研究推進事業
2023 年度採択
「Top 研究者のための ASPIRE」
マテリアル分野

2023 年度～2024 年度
年次報告書（公開版）

研究課題名 先進的合成法を駆使した遷移金属化合物の創製と
構造物性相関に基づく新規機能特性の探求

日本側研究代表者 島川 祐一 京都大学 教授

相手側研究代表者 J. Paul Attfield, Professor, University of Edinburgh

研究期間 2024 年 2 月 1 日～2029 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

<実施したこと>

本研究の中心課題である特異な高圧法やトポクティブ物質変換、水熱合成、ナノ粒子合成を用いる非平衡・準安定な領域までの物質探索に関して、基本的な合成装置や材料特性の機能性実証へ向けた特性評価装置、および手法についての整備を進めた。また、水素利用が注目を集める中、薄膜材料への水素（プロトン）を電気化学的に脱挿入するという新たなアイデアを実証した。

大型実験施設を使った構造物性評価では、国内放射光実験施設 SPring-8 に加え、海外施設である英国中性子実験施設 ISIS、英国放射光実験施設 Diamond light source、および台湾放射光実験施設 NSRRC などでの国際共同実験で必用なデータを収集した。若手研究者や学生は現地での滞在で実験に参加することで解析手法を学び、現在幾つかの試料に関する詳細な解析が進行中である。また、2025 年度の実験に向けて、国際共同研究のプロポーザルも提案した。

<得られた成果>

新物質探索により、新規な熱物性を示す候補物質として A サイト秩序型ペロブスカイト構造酸化物に加えて、層状物質 $LnBaFe_2O_6$ や $LnBaCo_2O_{5.5}$ などの合成に成功した。また、立方晶フラットバンド物質 NbSeI と ReSTe、ノンコプラナー spin 構造を実現する 5d 磁性体 Ba_2NaOsO_6 、フラストレートファンデルワールス磁性体 GdGaI、励起子相転移を示すトポロジカル半金属 KAlGe、新超伝導体 Zr_6RuBi_2 といった、新奇量子物性発現の候補となる物質を複数確立できた。薄膜材料へのプロトン脱挿入制御は水素貯蔵関連の重要な成果として報道にも取り上げられた。

放射光や中性子を使った構造物性評価では、上記で合成した新規物質群の結晶構造を明らかにした他、温度可変データなどから物性変化を引き起こす構造相転移の詳細を明らかにした。また、英国中性子実験施設 ISIS では、磁場印加における中性子回折から、遷移金属酸化物の特異な磁気構造を示すデータが得られている。

② 国際ネットワーク構築・拡大に関する成果 / 国際頭脳循環の促進に資する若手研究者の人材育成に関する成果

<実施したこと>

相手国である英国エジンバラ大学の卒業生を含む 2 名の外国人ポスドク研究員を採用した。

欧州統合物質・材料プログラムで本研究に関わっている MaMaSELF に関しては、2024 年 3 月にモンペリエ大学でのレクチャーと併せて、日本での研究滞在候補者に対して現地インタビューを行い、2024 年 4 月～8 月に 1 名を京都大学で受け入れ、国際共同研究を進めた。またこのプロジェクトのサマースクールに京都大学博士後期課程学生を派遣した。さらに、薄膜評価研究のため、実績のあるオーストラリア・NSW 大学へも博士後期課程の学生 1 名を 31 日間派遣し、現地での国際共同実験を行った。

海外大型実験施設での構造物性評価を中心とする国際共同研究では、中性子実験、放射光実験ともに若手研究者や学生を含め 22 名の短期派遣を実施した。また、海外大型放射光実験施設へはビームラインを担当する若手 3 名を派遣して、最新の技術情報の交換と技術討議を行った。

その他、成果発表や国際ネットワークの構築・拡大のために、海外で開催された国際学会や国際ワークショップなどへ若手を中心に積極的に派遣した。

<得られた成果>

エジンバラ大学から採用したポスドクは、英国中性子施設での実験実績があり、現地でのビームラインサイエンティストとの連携や日本側メンバーの解析プログラムの習得、さらには現地施設のメンバーを通してのユーザーグループとのネットワークの構築にも大きな貢献をしている。欧州統合物質・材料プログラムとは、学生の派遣・受け入れの双方向での交流が実施できており、継続的な発展に繋がっている。

海外大型放射光・中性子実験施設に若手研究者と学生を積極的に派遣し、現地での実験に参加することで、ビームラインサイエンティストを中心とする現地関係者との交流が進んでいる。これにより、解析手法を学ぶだけでなく、解析のノウハウを含めた情報交換が生まれている。また、SPring-8 の若手ビームライン担当者を海外大型放射光実験施設へ派遣することで最新の技術動向を知り技術情報交換を行うことができた。

若手研究者と学生に国際学会や国際ワークショップで発表する機会を積極的に与えてきた。これらの機会は若手研究者の育成観点からも良い刺激となっているだけでなく本研究の成果を発信する良い機会ともなっている。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1 新規遷移金属 化合物創製と 新奇物性開拓	島川 祐一 岡本 佳比古 J. Paul Attfield	京都大学・化学研究所・教授 東京大学・物性研究所・教授 Edinburgh Univ. ・ CSEC ・ Professor
研究テーマ2 精密構造評価 と構造物性相 関の解明	木村 滋 大熊 隆太郎 Pascal Manuel	高輝度光科学研究センター ・ 回折・散乱推進 室・主席研究員 東京大学・物性研究所・助教 ISIS neutron facility・ Group leader

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

<原著論文>

- [1] R. Okuma, K. MacFarquharson, R. D. Johnson, D. Voneshen, P. Manuel and R. Coldea, "Compass-model physics on the hyperhoneycomb lattice in the extreme spin-orbit regime", *Nature Communs* **15**, 10615 (2024). **相手国側との共同研究による成果、プレスリリースを東京大学などから発表**
- [2] Y. Shen, K. Ooe, X. Yuan, T. Yamada, S. Kobayashi, M. Haruta, D. Kan, and Y. Shimakawa, "Ferroelectric freestanding hafnia membranes with metastable rhombohedral structure down to 1-nm-thick", *Nature Communs* **15**, 4789 (2024). **プレスリリースを京都大学などから発表**
- [3] Y. Isoda; T. N. Pham, R. Aso, S. Nakamizo, T. Majima, S. Hosokawa, K. Nitta, Y. Morikawa, Y. Shimakawa, and D. Kan, "Stabilization of oxygen vacancy ordering and electrochemical-proton-insertion-and-extraction-induced large resistance modulation in strontium iron cobalt oxides Sr(Fe,Co)O_y", *Nature Communs* **16**, 56 (2024). **プレスリリースを京都大学などから発表、関連記事が日刊工業新聞、および日経 XTECH に掲載**
- [4] W. -T. Chen, T. Nishikubo, Y. Sakai, H. Das, M. Fukuda, Z. Pan, N. Ishimatsu, M. Mizumaki, N. Kawamura, S. I Kawaguchi, O. Smirnova, M. G Tucker, T. Watanuki, A. Machida, S. Takajo, Y. Uwatoko, Y. Shimakawa, M. Takano, M. Azuma, and J. P. Attfield, "Pressure-induced charge amorphisation in BiNiO₃", *Nature Communs* **16**, 128 (2025). **相手国側との共同研究による成果、プレスリリースを発表**