

## 学術変革領域研究（A）の公募研究の内容

### 超セラミックス：分子が拓く無機材料のフロンティア

<https://supraceramics.jp>

領域略称名：超セラミックス

領域番号：22A205

設定期間：令和4(2022)年度～令和8(2026)年度

領域代表者：前田 和彦

所属機関：東京工業大学理学院

#### ① 領域の概要

この10年間での発見や技術革新により、既存のセラミックスにある「硬い」「脆い」「均質」といった価値観が変容しつつある。例えば、分子アニオン含有無機結晶が生み出す優れた二次電池特性や、無機固体と分子の融合により発現する革新的触媒機能や物性など、従来の無機セラミックス材料では実現できない新たな機能物性獲得の可能性が見えてきた。

本研究領域では、無機材料に分子性のユニット（分子イオン、錯体、クラスター等）を組み込んだ物質群を「超セラミックス」と定義し、異分野の研究者が結集した分野横断的研究により、革新的な物性・機能を有する新材料を創製する。これにより、無機材料を中心とした材料科学の学術体系を大きく変革することを目的とする。本研究領域では、研究対象とする超セラミックスを分子性ユニットの組み込み方の違いにより以下の2種類に分類し、両タイプの新材料の創製を図る。

**内圏型超セラミックス：** 無機結晶の格子内に分子イオン種を含む新材料。結晶中の狭い空間での強い電子的相互作用に基づき、従来型の分子イオン含有材料（MOF等）では生み出せない新たな物性や機能の創出が期待できる。

**外圏型超セラミックス：** 無機材料表面の特定の位置に機能性分子を配置することで物性・機能を変革した新材料。従来の有機-無機ハイブリッド材料とは異なり、結晶表面あるいは界面からの摂動を最大限活用し、無機材料や分子単独では有さない構造・形態および電子状態を新たに作り出し、物性変調・機能改変へと繋げる。

#### ② 公募する内容、公募研究への期待等

本研究領域では、「合成」、「解析・理論」、「物性・機能」の各項目間の密な連携を軸に、超セラミックスの材料設計学理を構築する。計画研究A01、A02をあわせてA班と定義し、ここに公募研究からなる研究項目A03を設置する。同様にB班、C班を定義し、それぞれ研究項目B03、C03を設置する。現状の計画研究には含まれてはいない重要な研究テーマを公募研究として取り込むことにより領域全体に拡がりを持たせ、領域研究の推進力とする。

固体化学、錯体化学、結晶学、超分子化学、触媒化学、物性物理学など材料に関する多様な分野からの応募を期待する。それぞれの研究項目で例えば以下のような課題の可能性を検討しているが、これらに収まらない独創的な内容も歓迎する。  
**A班：**電場、高圧等を活用した物質合成、特殊雰囲気下での物質合成、分子イオン・有機配位子の化学組成や配列（規則配列・不規則配列）の精密制御プロセスの開発や、ナノ・マクロ構造を含む次元・形態制御指針の確立に関する研究等。

**B班：**超セラミックスの構造ダイナミクス（X線及び中性子の回折・散乱・分光、NMRなど）、軽元素を対象とした電子状態計測装置の開発及び解析手法の開拓、分析電子顕微鏡や各種分光法のデータの第一原理計算等を用いた解析法、超セラミックスの化学結合、物性の理解と予測のための理論構築や理論計算技術、マテリアルズインフォマティクスを用いた物質・組成予測等（なお、合成予測や物性機能解明等、実験グループとの連携に取り組む理論計算の提案をA班およびC班でも募集する。）。

**C班：**超セラミックスの物性・機能創出に関する実験・理論研究。固体・材料のバルク物性、薄膜を含む界面物性、電子デバイス、触媒、エネルギー材料、生体材料等。

本研究領域では、公募研究者が主体となった、計画研究メンバーとの共同研究を強く奨励する。計画研究メンバーの保有装置の共同利用なども促進して、公募研究者を強力に支援する方針である。研究領域内での共同研究に伴う国内出張（班内・班間留学）や海外実験（派遣）にかかる費用の総括班によるサポートも実施する。応募にあたっては、計画研究メンバーとの具体的な共同研究を想定した研究計画立案を歓迎する（必ずしも事前の連絡や相談は求めない）。また、具体的な共同研究計画だけでなく応募者が本研究領域に提供可能な試料や技術（シーズ）、あるいは応募者が求める試料や技術（ニーズ）を研究計画調書で提示することも可とする。経験豊富なシニア研究者から次世代の材料科学研究を担う斬新なアイデアを有する若手研究者まで、これから本領域に進出しようとする意欲的な研究提案を期待する。

#### ③公募する研究項目、応募上限額、採択目安件数

研究項目番号	研究項目名	応募上限額（単年度当たり）	採択目安件数
A03	超セラミックスの新規合成法開発と次元・形態制御	実験系：250万円	7件
B03	超セラミックスの設計と高度構造解析	実験系：250万円	4件
C03	超セラミックスの新物性開拓と新機能創出	実験系：250万円	7件
A03	超セラミックスの新規合成法開発と次元・形態制御	理論・計算系：150万円	4件
B03	超セラミックスの設計と高度構造解析		
C03	超セラミックスの新物性開拓と新機能創出		

#### 領域全体で取り組む2種類の超セラミックス

