

NIMS

研究者総覧 2023

「NIMS研究者総覧 2023」 刊行にあたって

NIMS理事長 宝野和博



国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）は、物質・材料の研究を総合的・専門的に行う公的研究機関であり、2001年4月1日の設立から20年間、「使われてこそ材料」をテーマに、未来を拓く物質・材料の研究に日々取り組んでまいりました。

また、この理念の具現化を目標に、独創性の高い基礎研究に基づくNIMSのシーズ研究成果を産業界へ橋渡しする活動や実用化のための技術移転活動も推進してきました。

今年2023年4月1日より第5期中長期計画が始まりました。それを節目として、2018年以来企業との橋渡しツールとして高い評価を頂いておりました「NIMS物質・材料研究最先端研究者総覧」をおよそ5年ぶりに全面改訂した「NIMS研究者総覧 2023」を刊行することといたしました。

本誌ではNIMSで活躍する研究者の代表的な研究課題を紹介し、産業界との連携を始めるための最初のコンタクトとしての情報を提供しています。また今回新たに各研究者が所属する学会を索引として加え、一目で学術分野が把握できるようにいたしました。これを企業がNIMSの研究者と共同研究を始めるための資料としてご活用いただき、今後、より一層の企業連携ならびに技術移転が推進することを期待しております。今回配布いたします資料は今後電子版として公開し、随時更新してまいります。

<https://technology-transfer.nims.go.jp/other/souran.php>

また本誌と合わせて、NIMSの研究者ディレクトリーSAMURAI

<https://samurai.nims.go.jp/?locale=ja>

も併せてご活用ください。

この「NIMS研究者総覧 2023」を通してNIMSとの連携にご関心いただけましたら、以下の企業様向け総合受付サイトよりお問い合わせいただければ幸いです。

<https://technology-transfer.nims.go.jp/>

エネルギー・環境材料研究センター 1

エネルギー・環境材料の界面理論・計算科学研究 2	■ 二次電池材料グループ
館山 佳尚 Tateyama Yoshitaka	Battery and energy storage technologies 21
高い信頼性を有する固体電池の創製 3	ユ デニス ヤウワイ Yu Denis Yau Wai
高田 和典 Takada Kazunori	金属リチウムを使いこなす 22
■ 固体電池材料グループ	西川 慶 Nishikawa Kei
固体電解質利用による新二次電池系の探索 4	軽量・小型なリチウム空気電池開発 23
太田 鳴海 Ohta Narumi	野村 晃敬 Nomura Akihiro
固体電解質の界面輸送特性制御 5	構造特性に基づく元素戦略蓄電池材料の創製 24
三好 正悟 Miyoshi Shogo	万代 俊彦 Mandai Toshihiko
Functional materials for next-generation Lithium batteries 6	■ 電気化学スマートラボチーム
マルセル カルパ Marcela Calpa	電気化学スマートラボによる次世代蓄電池材料開発の加速 25
先進低次元ナノ材料の探索・創製・応用 7	松田 翔一 Matsuda Shoichi
唐 捷 Tang Jie	■ 磁気冷凍システムグループ
■ 電池界面制御グループ	高効率な水素液化機の開発 26
薄膜技術を援用した酸化物型全固体電池の作製 8	神谷 宏治 Kamiya Koji
大西 剛 Ohnishi Tsuyoshi	高効率な水素再凝縮機／冷凍機の開発 27
固体電池材料のマルチスケール解析 9	夏目 恭平 Natsume Kyohei
桑田 直明 Kuwata Naoaki	■ 超伝導システムグループ
■ 電池材料解析グループ	省エネルギーと新材料開発に資する超伝導応用機器の開発 28
界面その場計測技術の開発と電気化学デバイスへの応用 10	西島 元 Nishijima Gen
増田 卓也 Masuda Takuya	MgB ₂ 超伝導線材の低温焼結 29
埋もれた界面物性評価のための超高速分光技術 11	藤井 宏樹 Fujii Hiroki
石岡 邦江 Ishioka Kunie	新機能発現を目指した高温超伝導線材の開発 30
Li 金属電池の高性能化と動作中／新規分析法開発 12	松本 明善 Matsumoto Akiyoshi
伊藤 仁彦 Ito Kimihiko	■ 水素関連材料グループ
計測技術を活かした電池材料合成 13	表界面・微細構造制御による機能発現 31
久保田 圭 Kubota Kei	武田 良彦 Takeda Yoshihiko
■ 太陽光発電材料グループ	超高エネルギーイオン照射効果の中エネルギーで実現！ 32
ペロブスカイト太陽電池の開発 14	雨倉 宏 Amekura Hiroshi
白井 康裕 Shirai Yasuhiro	水素製造・利用触媒及び水素バリア材料の研究開発 33
Organic-inorganic hybrid solar cells 15	許 亜 Xu Ya
イスラム アシュラフル Islam Ashrafal	ヨーグルト中の乳酸菌の 1 菌体レベル計測 34
ハロゲン化金属ペロブスカイト太陽電池の研究開発 16	中尾 秀信 Nakao Hidenobu
柳田 真利 Yanagida Masatoshi	■ 水素製造触媒材料グループ
Exploration of Pb-free halide perovskite materials for solar cell application, degradation dynamics, and device physics 17	水素を造る触媒を創る 35
カダカ ビ ドゥラバ Khadka Dhruva Bahadur	阿部 英樹 Abe Hideki
■ 界面電気化学グループ	触媒反応を利用したメタンからの有用化合物の合成 36
エネルギー変換界面反応ダイナミクスのその場追跡 18	加古 哲也 Kako Tetsuya
野口 秀典 Noguchi Hidenori	界面及び空間に着目した安定分子変換・水素製造 37
データ駆動型電気化学材料設計 19	庄司 州作 Shoji Shusaku
坂牛 健 Sakaushi Ken	■ 先進超伝導線材グループ
高スループット第一原理計算と AI 手法による全固体電池用の固体電解質材料デザイン 20	新しい超極細超伝導ワイヤーの開発 38
ハレム ランディ Jalem Randy	菊池 章弘 Kikuchi Akihiro
	走査 SQUID 顕微鏡を利用した材料開発 39
	有沢 俊一 Arisawa Shunichi
	超伝導技術の社会実装 40
	伴野 信哉 Banno Nobuya
	超伝導応用のための特性評価技術の開発 41
	北口 仁 Kitaguchi Hitoshi

電子・光機能材料研究センター・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 43

- 組成－構造－物性相関の解明と材料化プロセスの開発・・・44
大橋 直樹 Ohashi Naoki
- サイアロン蛍光体の材料探索とLEDへの応用・・・45
廣崎 尚登 Hirosaki Naoto
- 超ワイドギャップ半導体グループ
- 半導体ダイヤモンド研究・・・46
小泉 聡 Koizumi Satoshi
- ダイヤモンドMEMSと半導体電子デバイス及びその集積化・・・47
廖 梅勇 Liao Meiyong
- 超ワイドギャップ半導体の高速・高品質成膜技術の開発・・・48
大島 祐一 Oshima Yuichi
- 酸化物パワー半導体の新しい構造制御・・・49
大島 孝仁 Oshima Takayoshi
- 次世代半導体グループ
- ダイヤモンド／窒化物半導体の絶縁ゲート／電極材料開発・・・50
小出 康夫 Koide Yasuo
- 極性窒化物半導体薄膜のヘテロ界面構築と新機能・・・51
角谷 正友 Sumiya Masatomo
- 半導体素子信頼性評価・・・52
色川 芳宏 Irokawa Yoshihiro
- 次世代半導体を用いた光・電子・磁性デバイスの開発・・・53
井村 将隆 Imura Masataka
- ダイヤモンドMOSFET論理回路・・・54
劉 江偉 Liu Jiangwei
- 資源循環材料グループ
- 資源循環型高機能複合材料の開発・・・55
田村 堅志 Tamura Kenji
- 循環機能材料の理論計算・・・56
末原 茂 Suehara Shigeru
- 環境配慮型代替リマリー電解質材料開発・・・57
金 済徳 Kim Jedeok
- 天然材料を活用した環境調和と材料開発と
物性発現機構の解明・・・58
佐久間 博 Sakuma Hiroshi
- ナノ電子デバイス材料グループ
- 薄膜材料スマートラボによる無機薄膜電子材料開発・・・59
長田 貴弘 Nagata Takahiro
- 材料評価自動システムの開発・・・60
柳生 進二郎 Yagy Shinjiro
- 自動化第一原理網羅計算による法則発見と知識伝達・・・61
木野 日織 Kino Hiori
- 材料特異点の物性解明・・・62
山下 良之 Yamashita Yoshiyuki
- 電子セラミックスグループ
- イオンビームによる表面・界面の分析と改質・・・63
鈴木 拓 Suzuki Taku
- 低圧誘導結合プラズマCVDによるナノクリスタル
ダイヤモンドの合成・・・64
岡田 勝行 Okada Katsuyuki
- 酸化物半導体薄膜の雰囲気ガス応答特性の向上・・・65
安達 裕 Adachi Yutaka
- 酸化物界面構造の機能創出・・・66
大澤 健男 Ohsawa Takeo
- ガラス・アモルファス材料の機能探索・・・67
瀬川 浩代 Segawa Hiroyo
- 古典的急冷法による合成と相平衡図作成と新物質探索・・・68
中村 真佐樹 Nakamura Masaki
- 半導体金属酸化物ガスセンサの開発・・・69
齋藤 紀子 Saito Noriko
- 窒化物微粒子の合成と機能開拓・・・70
末廣 隆之 Suehiro Takayuki
- 岩塩型窒化物半導体の光・電子デバイスへの応用・・・71
大垣 武 Ogaki Takeshi
- X線全反射を利用した界面電子状態の研究・・・72
上田 茂典 Ueda Shigenori
- 軌道間相互作用に基づく材料設計と新規電子・光・化学機能の開拓・・・73
飯村 壮史 Iimura Soshi
- Ferroic材料・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・74
任 曉兵 Ren Xiaobing
- 安定同位体を利用した酸化物中の欠陥に関する研究・・・75
坂口 勲 Sakaguchi Isao
- 新規非ペロブスカイト・非鉛強誘電体の探索・・・76
清水 荘雄 Shimizu Takao
- 光学単結晶グループ
- 新しい機能性単結晶材料の開発・・・77
島村 清史 Shimamura Kiyoshi
- 優れた硫化物単結晶の探索および結晶育成・・・78
中村 優 Nakamura Masaru
- Crystals for optical isolators & brightness white light sources・・・79
ビジョラ ガルシア Villora Garcia
- Oxide and halide single-crystals for radiation detection・・・80
原 東升 Yuan Dongsheng
- 高機能光学セラミックスグループ
- 微構造制御したバルクセラミックス創製・・・81
鈴木 達 Suzuki Tohru
- 磁力力を利用した物質挙動制御と物質分離・・・82
廣田 憲之 Hirota Noriyuki
- 高機能電気化学インピーダンス解析プログラム開発・・・83
小林 清 Kobayashi Kiyoshi
- 化学プロセスによる次世代セラミックス材料の創製・・・84
中根 茂行 Nakane Takayuki
- CNT-MXene membranes for electrochemical energy
storage applications・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・85
エスティリ メーディ Estili Mehdi
- 結晶粒制御による異方性レーザーセラミックス・・・86
古瀬 裕章 Furuse Hiroaki
- 次世代蛍光体グループ
- 粒子1粒を用いた新蛍光体開発・・・87
武田 隆史 Takeda Takashi
- 次世代光源デバイスを指向する特殊蛍光体の開発と応用研究・・・88
中西 貴之 Nakanishi Takayuki
- 半導体エピタキシャル構造グループ
- 化合物半導体結晶成長技術開発とその機能探索・・・89
間野 高明 Mano Takaaki

■半導体エピタキシャル構造グループ

ヘテロエピタキシー新技術の開発	90
大竹 晃浩 Ohtake Akihiro	
Sb 系化合物半導体量子ドットの形成技術	91
川津 琢也 Kawazu Takuya	

■量子フォトニクスグループ

固体量子光源の開発	92
黒田 隆 Kuroda Takashi	
非線形、非エルミートナノフォトニクス	93
落合 哲行 Ochiai Tetsuyuki	
有機単結晶ファイバーによる分子メカニカルデバイス	94
高澤 健 Takazawa Ken	
分極反転非線形光学デバイスによる量子光制御	95
栗村 直 Kurimura Sunao	

■ナノフォトニクスグループ

光アンテナと量子井戸を融合した高感度中赤外検出器	96
宮崎 英樹 Miyazaki Hideki T.	
高品質コロイド結晶薄膜塗工とスマート構造色機能材料	97
不動寺 浩 Fudouji Hiroshi	
光メタ表面バイオセンサシステム	98
岩長 祐伸 Iwanaga Masanobu	

■半導体欠陥制御グループ

ダイヤモンド結晶成長と量子デバイス応用	99
寺地 徳之 Teraji Tokuyuki	
材料数理論物理	100
井上 純一 Inoue Jun-ichi	
カソードルミネッセンスによる Mg 注入 GaN の評価	101
陳 君 Chen Jun	
六方晶窒化ホウ素の気相合成	102
渡邊 賢司 Watanabe Kenji	

■多結晶光学材料グループ

新規多結晶光学材料の探索と合成手法の開発	103
森田 孝治 Morita Koji	
通信用光ファイバにおけるファイバフューズの励起増強挙動	104
轟 眞市 Todoroki Shin-ichi	
Inorganic optical materials	105
李 継光 Li Jiguang	
Deformation-resistant multipurpose ultra-high temperature ceramics	106
バジルクフ オレグ Vasyukiv Oleg	

INDEX

目次

磁性・スピントロニクス材料研究センター 107

磁気メモリ・センサ応用のための磁性体ヘテロ構造薄膜の開発	108
三谷 誠司 Mitani Seiji	
■磁気機能デバイスグループ	
磁性材料機能を活用した高性能・新機能デバイスの開発	109
桜庭 裕弥 Sakuraba Yuya	
スピントロニクス磁気抵抗センサ	110
中谷 友也 Nakatani Tomoya	
スピントルクによる磁化励起状態のデバイス応用と材料開発	111
首藤 浩文 Suto Hirofumi	
■磁気記録材料グループ	
微細組織と磁化ダイナミクス制御による 高特性磁気デバイスの開発	112
高橋 有紀子 Takahashi Yukiko	
軽元素ナノマネジメントによる磁性スピン機能拡大	113
磯上 慎二 Isogami Shinji	
■スピントロニクスグループ	
室温 630%を超える巨大トンネル磁気抵抗効果	114
介川 裕章 Sukegawa Hiroaki	
次世代スピントロニクス技術に向けた新規材料の開発	115
温 振超 Wen ZhenChao	
■スピン物性グループ	
ナノ構造磁性体の磁区構造制御とエレクトロニクス応用	116
葛西 伸哉 Kasai Shinya	
非平衡薄膜材料におけるトポロジの発現とその活用	117
杉本 聡志 Sugimoto Satoshi	

■スピンエネルギーグループ

スピンカロリトロニクスの開拓と展開	118
内田 健一 Uchida Ken-ichi	
高速熱計測技術を用いた磁性体・誘電体の熱利用方法の開拓	119
井口 亮 Iguchi Ryo	
外場によるアクティブな熱エネルギー制御機能・原理の創出	120
平井 孝昌 Hirai Takamasa	

■ナノ組織解析グループ

マルチスケール組織解析をもとにした金属材料の高特性化	121
佐々木 泰祐 Sasaki Taisuke	
組織解析とデータ科学による機能性材料の特性向上	122
大久保 忠勝 Ohkubo Tadakatsu	

■磁性理論グループ

有限温度第一原理計算による機械学習と物質探索	123
三浦 良雄 Miura Yoshio	
磁気機能デバイスに対する理論研究	124
増田 啓介 Masuda Keisuke	
先進フォノン計算を用いた有限温度物性予測	125
只野 央将 Tadano Terumasa	

■グリーン磁性材料グループ

Magnetic materials for green energy conversions	126
セペリ アミン ホセイン Sepehri Amin Hossein	
先端計測技術を用いた革新的磁性材料創成	127
間宮 広明 Mamiya Hiroaki	
全固体冷却法を用いた極低温動作ヒートポンプの基盤研究	128
寺田 典樹 Terada Noriki	
磁気と熱のエネルギー変換を担う機能材料	129
齋藤 明子 Saito Akiko	

構造材料研究センター 131

微小力学解析によるハイスループット評価と強化機構解明 132
大村 孝仁 Ohmura Takahito

不純物・有害元素を許容し活用する鉄鋼ものづくり技術 133
津崎 兼彰 Tsuzaki Kaneaki

■ 高分子系複合材料グループ

炭素繊維の構造・力学特性の異方性評価と新たな炭素繊維
強化樹脂複合材料の開発 134

内藤 公喜 Naito Kimiyoshi

環境と界面に着目した疲労破壊機構の解明 135
小熊 博幸 Oguma Hiroyuki

Sustainable and multifunctional polymeric composites 136
タンクス ジョナサン デビッド Tanks Jonathon David

室温～1400℃の高温顕微鏡観察・ひずみ測定技術 137
垣澤 英樹 Kakisawa Hideki

■ セラミックス基複合材料グループ

プラズマイオンプレーティングによるサイアロン薄膜の作製 138
鈴木 裕 Suzuki Hiroshi

高温評価技術によるナノ素材由来高温耐環境性 CMCs 創製 139
下田 一哉 Shimoda Kazuya

放射光 X 線 CT 技術を駆使した高信頼性材料設計の革新 140
大熊 学 Okuma Gaku

耐熱耐環境金属材料の設計と表面改質 141
村上 秀之 Murakami Hideyuki

■ 耐疲労合金設計グループ

耐疲労 γ / ε 二相合金による構造物の長寿命化 142
澤口 孝宏 Sawaguchi Takahiro

プロセス制御による鋳造材料特性の向上 143
高森 晋 Takamori Susumu

階層的疲労損傷メカニズムの解明と耐疲労合金創製 144
吉中 奎貴 Yoshinaka Fumiyoshi

■ 軽金属材料グループ

高性能軽金属材料の開発 145
染川 英俊 Somekawa Hidetoshi

■ 超耐熱材料グループ

高性能 Ni 基超合金の開発 146
川岸 京子 Kawagishi Kyoko

航空機エンジン用超耐熱材料の開発 147
長田 俊郎 Osada Toshio

革新的次世代断熱素材 TIISA®・EB-PVD 遮熱技術 148
ウー ラダー Wu Rudder

組成傾斜バルク試料を用いたハイスループット測定技術の開発 149
池田 亜矢子 Ikeda Ayako

■ スマートインターフェイスグループ

バイオミメティクスによる可逆的インターコネクション 150
細田 奈麻絵 Hosoda Naoe

異種材料の低温大気圧接合と低温固相分離の両立 151
重藤 暁津 Shigetou Akitsu

Mechanical performance of functional lattices 152
マーサー クリストファー Mercer Christopher

■ 積層材料グループ

マテリアルズインテグレーション (MI) による
3D 積層造形に適した新材料の開発 153

渡邊 誠 Watanabe Makoto

高感度磁気センサと非破壊検査技術研究 154
何 東風 He Dongfeng

チタン合金とニッケル基超合金の組織制御と単結晶化 155
北嶋 具教 Kitashima Tomonori

積層造形装置用のレーザー吸収率測定装置の開発 156
本田 博史 Honda Hiroshi

金属積層造形プロセスにおける熱履歴の予測と最適化 157
草野 正大 Kusano Masahiro

■ 異方性材料グループ

生物から学ぶ究極の強靱材料の創出 158
井上 忠信 Inoue Tadanobu

加工熱処理による超高強度鋼の創製 159
木村 勇次 Kimura Yuuji

Deformation and fracture of structural materials 160
邱 海 Qiu Hai

■ 耐食材料グループ

腐食メカニズムに基づく耐食/耐水素脆性被膜の開発 161
廣本 祥子 Hiromoto Sachiko

高酸素反応促進技術による金属材料の腐食・防食研究 162
土井 康太郎 Doi Kotaro

■ 加工熱処理プロセスグループ

応力や加工を利用した熱処理による組織制御の研究と
プロセスの開発 163

上路 林太郎 Ueji Rintaro

新規加工熱処理によるチタン系材料の組織制御 164
江村 聡 Emura Satoshi

■ クリープ特性グループ

耐熱材料のクリープ強度のばらつきと組織 165
澤田 浩太 Sawada Kota

レーザー粉末床溶融結合法による耐熱鋼の組織制御 166
畠山 友孝 Hatakeyama Tomotaka

耐熱鋼の長時間クリープ強度特性評価 167
木村 一弘 Kimura Kazuhiro

■ 疲労特性グループ

高強度金属材料のガガサイクル疲労特性評価 168
古谷 佳之 Furuya Yoshiyuki

材料の組織と寿命を繋ぐミクロな疲労亀裂の先進評価技術 169
西川 嗣彬 Nishikawa Hideaki

■ 極低温疲労グループ

マテリアル循環を実現するリマニュファクチャリング技術の
開発と信頼性向上 170

早川 正夫 Hayakawa Masao

熱電対用金属材料の接合界面制御による熱電発電 171
目黒 奨 Meguro Susumu

微小球反発硬さ試験機 172
宮原 健介 Miyahara Kensuke

極低温・高圧水素ガス環境における金属材料の水素脆化 173
和田 健太郎 Wada Kentaro

極限環境における金属材料の力学特性評価と変形・破壊	174
小野 嘉則 Ono Yoshinori	
■鉄鋼材料グループ	
鉄鋼材料の相変態と変形・破壊挙動	175
柴田 暁伸 Shibata Akinobu	
Novel 2D/3D characterization methods for Steel science	176
グティエレス ウルティア イヴァン Gutierrez Urrutia Ivan	
鉄鋼材料の水素脆性機構解明と耐水素脆性材料開発	177
岡田 和歩 Okada Kazuho	
鉄鋼材料中の水素：脆化元素から有効添加元素への転換	178
小川 祐平 Ogawa Yuhei	
■腐食研究グループ	
インフラ構造物の腐食損傷リスク予測技術の開発	179
片山 英樹 Katayama Hideki	
革新的表面改質技術によるステンレス鋼の超高耐食性化	180
堤 祐介 Tsutsumi Yusuke	
KFM-EBSD-EDS 解析による構造材料の耐食性評価	181
村瀬 義治 Murase Yoshiharu	
実験と計算を併用したマルチマテリアル部材の腐食挙動解析	182
門脇 万里子 Kadowaki Mariko	

■溶接・接合技術グループ	
溶接・接合機構の解明と構造体化への展開	183
柳樂 知也 Nagira Tomoya	
溶接技術の高度化に向けた AI 技術の活用	184
北野 萌一 Kitano Houichi	
■強度物性グループ	
ナノスケール計算による強度支配因子の評価	185
譯田 真人 Wakeda Masato	
■微細組織解析グループ	
電子顕微鏡による微細組織解析技術の高度化	186
原 徹 Hara Toru	
定量的物性測定技術の構築と構造材料界面への応用	187
井 誠一郎 Ii Seichiro	
■計算構造材料グループ	
ノンパラメータ階層計算技術による耐熱・機能材料設計	188
佐原 亮二 Sahara Ryoji	
状態図の熱力学解析とデータベース構築	189
阿部 太一 Abe Taichi	
実験・計算状態図を援用した組織制御と材料開発	190
大沼 郁雄 Ohnuma Ikuro	
フェーズフィールド法による材料ミクロ組織形成過程の解析	191
大出 真知子 Ode Machiko	

INDEX

目次

ナノアーキテクトニクス材料研究センター 193

高品位ダイヤモンド及び窒化物単結晶の高圧合成	194
谷口 尚 Taniguchi Takashi	
独自のコンセプトによる新物質・新機能の探索	195
細野 秀雄 Hosono Hideo	
無機ナノシートの創製と機能開発	196
佐々木 高義 Sasaki Takayoshi	
AI と高圧を用いた革新的超伝導体の開発	197
高野 義彦 Takano Yoshihiko	
■フロンティア超伝導材料グループ	
新奇強相関電子系材料の開発 ～磁気冷凍材料開発など～	198
櫻井 裕也 Sakurai Hiroya	
バルク固体機能性材料における、機械学習を用いたデータ駆動物質開発	199
寺嶋 健成 Terashima Kensei	
極限環境での物質探索を加速するダイヤモンドデバイス	200
松本 凌 Matsumoto Ryo	
創造的な機能性物質の合成と量子機能の展開	201
山浦 一成 Yamaura Kazunari	
■量子物質創製グループ	
磁場中中性子回折による磁性材料研究	202
長谷 正司 Hase Masashi	
Development of ferroelectric and multiferroic perovskite materials	203
ベリック アレクセイ Belik Alexei	
ミクロな相互作用のモデル化と理論・計算手法の開発	204
西野 正理 Nishino Masamichi	

アニオンの複合化による新機能材料の探索	205
辻本 吉廣 Tsujimoto Yoshihiro	
■量子デバイス工学グループ	
分子性ナノ物質で築くヘテロ界面エレクトロニクス	206
若山 裕 Wakayama Yutaka	
分子機能を活用した電子デバイスの開発	207
早川 竜馬 Hayakawa Ryoma	
二次元材料機能性デバイスの開発とナノ材料評価技術の開発	208
新ヶ谷 義隆 Shingaya Yoshitaka	
■2次元系量子材料グループ	
低次元量子材料の科学	209
北浦 良 Kitaura Ryo	
量子ナノ構造の光科学	210
小澤 大知 Kozawa Daichi	
■表面量子相物質グループ	
表面界面における量子物質の開拓と物性解明	211
内橋 隆 Uchihashi Takashi	
ダイヤモンドトランジスタの開発	212
山口 尚秀 Yamaguchi Takahide	
表面ダイナミクスの分光観測と制御	213
荒船 竜一 Arafune Ryuichi	
原子層物質積層構造を用いた低仕事関数・高化学的安定材料	214
長岡 克己 Nagaoka Katsumi	

■ 量子物質特性グループ

- 強磁場超低温を用いた電子状態研究 215
寺嶋 太一 Terashima Taichi
- 強相関半導体における電子状態の出現に関する理論 . . . 216
河野 昌仙 Kohno Masanori
- 中性子回折による物質・材料の非破壊検査 217
茂筑 高士 Mochiku Takashi
- 超伝導・磁性材料開発のための低温磁気特性研究 218
立木 実 Tachiki Minoru
- 量子多体物性の理論的研究 219
山瀬 博之 Yamase Hiroyuki
- 直接観察や微細化による超伝導磁束量子集団の物性研究 . . 220
大井 修一 Ooi Shuichi
- 分子性固体を舞台とした相対論的ディラック電子の研究 . . 221
鴻池 貴子 Konoike Takako

■ 量子特性モデリンググループ

- 量子物質における量子もつれ構造の解明 222
山地 洋平 Yamaji Youhei
- 相転移の効率的モンテカルロ解析：クラスター非平衡緩和法 . . 223
野々村 禎彦 Nonomura Yoshihiko
- ベリー位相エンジニアリングに基づく量子機能探索 . . . 224
田中 秋広 Tanaka Akihiro
- Realistic modelling of complex magnetic materials 225
ソロビョフ イゴール Solov'yev Igor

■ 第一原理量子物性グループ

- 量子ナノ材料に対する大規模第一原理シミュレーション . . 226
宮崎 剛 Miyazaki Tsuyoshi
- 第一原理計算プログラム PHASE/O の開発とその応用 . . 227
奈良 純 Nara Jun
- 大規模第一原理 DFT 計算の開発と応用 228
中田 彩子 Nakata Ayako

■ トポロジカル量子物性理論グループ

- 半導体トポロジカルフォトリソの開拓 229
古月 曉 Hu Xiao
- ナノ構造による電子状態制御の理論的研究 230
刈宿 俊風 Kariyado Toshikaze

■ 半導体ナノ構造物質グループ

- 半導体ナノ構造材料の機能化とデバイス応用 231
深田 直樹 Fukata Naoki
- Exploring the functionality of nanowires and
hybrid nanostructures 232
ジェバスワン ウィパコーン Jevasuwan Wipakorn
- 高速 CWLA を用いた Ge 系発光材料の薄膜成長 233
松村 亮 Matsumura Ryo

■ ナノ光制御グループ

- スペクトル制御された熱線利用材料の開拓とその応用 . . 234
長尾 忠昭 Nagao Tadaaki
- ネットワーク物質の創製と新規物性の探索 235
速水 渉 Hayami Wataru

■ 超薄膜エレクトロニクスグループ

- 2 次元薄膜半導体の開発 236
塚越 一仁 Tsukagoshi Kazuhito
- 窒化物分極場による光電デバイスの開発 237
サン リウエン Sang Liwen
- 酸素欠損型アモルファスアルミナの研究開発 238
加藤 誠一 Kato Seiichi

- Wafer-scale 2D semiconductors for flexible
inkjet-printed electronics 239
李 世勝 Li Shisheng
- 原子層堆積法による新ナノ薄膜・半導体デバイス 240
生田目 俊秀 Nabatame Toshihide

■ 量子ビット材料グループ

- 量子情報素子材料開発 241
小塚 裕介 Kozuka Yusuke
- 二次元物質ヘテロ構造の物性探索とデバイス機能開拓 . . 242
岩崎 拓哉 Iwasaki Takuya

■ イオニクスデバイスグループ

- イオニクスとエレクトロニクスによる IT, AI 素子の創製 . . 243
寺部 一弥 Terabe Kazuya
- イオニクス AI ハードウェアの要素技術開発 244
鶴岡 徹 Tsuruoka Tohru
- ナノアーキテクトニクスへの挑戦 245
245 櫻井 亮 Sakurai Makoto
- イオニクス脳型情報処理技術の開発 246
土屋 敬志 Tsuchiya Takashi

■ ソフト化学グループ

- 新規ナノシートの合成と高機能化 247
海老名 保男 Ebina Yasuo
- ナノシートの精密集積と二次加工による機能材料の創製 . . 248
坂井 伸行 Sakai Nobuyuki
- 柔軟モノリス型多孔体の簡易合成と多目的応用 249
早瀬 元 Hayase Gen

■ 機能性ナノマテリアルグループ

- 新規ナノマテリアルの創製及びエネルギー材料の開発 . . 250
馬 仁志 Ma Renzhi
- カーボンナノチューブ分子接合に基づくナノ・量子デバイス . . 251
湯 代明 Tang Daiming
- 液相剥離ナノシートの合成・コロイド集積、デバイス応用 . . 252
谷口 貴章 Taniguchi Takaaki

■ 層状ナノ化学グループ

- アクア鉄を用いた新材料開発 253
井出 裕介 Ide Yusuke
- 電子構造とダイナミクスからの不均一システム設計 . . . 254
押切 光丈 Oshikiri Mitsutake
- 実験化学とデータ科学の融合による設計的ナノ空間材料合成 . . 255
チャキッティスイン ワッチャロップ Chaikittisilp Watcharop

■ フロンティア分子グループ

- 新奇機能性分子液体・液体エレクトレットの創成 256
中西 尚志 Nakanishi Takashi
- ガスのセンシングと徐放材料 257
石原 伸輔 Ishihara Shinsuke
- 階層構造の制御された巨大共役分子性材料の創製と機能開拓 . . 258
名倉 和彦 Nagura Kazuhiko
- 合成二次元有機高分子の新規合成法と物性開拓 259
松本 道生 Matsumoto Michio
- 液滴を自在に操るナノテクノロジー 260
天神林 瑞樹 Tenjimbayashi Mizuki

■ 熱エネルギー変換材料グループ

- 高性能な熱電材料・デバイスおよび熱制御技術の開発 . . 261
森 孝雄 Mori Takao
- ハイスループット材料探索によるエネルギー変換材料の開発 . . 262
後藤 真宏 Goto Masahiro

磁性の効果を利用した熱エネルギー変換材料の開発	263
辻井 直人 Tsujii Naohito	
MI 手法を活用した熱電新物質・デバイス作製	264
大久保 勇男 Ohkubo Isao	
金属酸化物の新奇熱物性探索と結晶育成	265
橋 信 Tachibana Makoto	
フォノンエンジニアリングによる高性能熱機能材料の創製	266
佐藤 直大 Sato Naoki	
中低温廃熱回収用新規熱電材料の開発	267
岩崎 祐昂 Iwasaki Yutaka	
■ 光機能分子材料グループ	
Synthesis of functional organic chromophores	268
ヒル ジョナサン Hill Jonathan	
Organic helical nanowire based neuromorphic quantum computer	269
バンディオパダヤイ アニルバン Bandyopadhyay Anirban	
Functional nanoscale metals	270
ヘンジー ジョール Henzie Joel	
Multi-responsive porphyrin/polymer systems	271
ラブタ ヤン Labuta Jan	
■ 超分子グループ	
百万倍の感度でターゲットをセンシングできる分子膜	272
有賀 克彦 Ariga Katsuhiko	
フラーレンベースの新しいナノ多孔質炭素材料の設計	273
スレスタ ロック クマール Shrestha Lok Kumar	
超分子ドーピングによる有機半導体材料・デバイス開発	274
山下 侑 Yamashita Yu	

■ ナノ粒子グループ	
発光 / 受光波長を広帯域で変調できる微粒子の合成と応用	275
白幡 直人 Shirahata Naoto	
Synthetic chemistry and optoelectronic applications of nanocrystals	276
孫 洪濤 Sun Hong-Tao	
■ 超高压構造制御グループ	
放射光を用いた超高压実験と計算科学の協奏的構造探索	277
遊佐 斉 Yusa Hitoshi	
高压高温場を用いたナノ構造・電子状態制御	278
名嘉 節 Naka Takashi	
水素化物等の高压その場観察と高压構造物性	279
中野 智志 Nakano Satoshi	
ベルト型高压装置による薄膜・バルク新物質創製	280
川村 史朗 Kawamura Fumio	
超高压環境を利用した新規超硬質材料の探索	281
川嶋 哲也 Kawashima Tetsuya	
超高压環境を利用した機能性材料開拓	282
宮川 仁 Miyakawa Masashi	
■ 電子活性材料チーム	
エレクトライドおよび複合アニオン水素化合物の電子機能開拓	283
松石 聡 Matsuishi Satoru	
電子機能を示す薄膜ヘテロ構造の探索	284
原田 尚之 Harada Takayuki	
■ 光学ナノ構造チーム	
微細構造を用いたサーマルフォトンクス	285
石井 智 Ishii Satoshi	

INDEX

目次

高分子・バイオ材料研究センター 287

π 電子系有機材料の開発	288
竹内 正之 Takeuchi Masayuki	
超分子と高分子を用いた機能材料の創成とその機構解明	289
伊藤 耕三 Ito Kohzo	
■ メカノバイオロジーグループ	
細胞培養用の動的足場材料の開発	290
中西 淳 Nakanishi Jun	
分子シークエンスに焦点を当てた物質科学の開拓	291
田代 健太郎 Tashiro Kentaro	
イオン液体と高分子からなるソフト材料	292
上木 岳士 Ueki Takeshi	
抗がん効果を持つシグナル凝縮粒子	293
山本 翔太 Yamamoto Shota	
■ 医療応用ソフトマターグループ	
医療関連ソフトマターの非平衡ダイナミクス	294
川上 巨作 Kawakami Kohsaku	
診断・治療のためのナノバイオメディシン	295
山崎 智彦 Yamazaki Tomohiko	
リン脂質膜の物理化学的性質	296
片岡 知歩 Kataoka Chiho	
細胞膜の界面物理化学と生命情報	297
貝塚 芳久 Kaizuka Yoshihisa	
■ バイオポリマーグループ	
低侵襲治療に貢献する革新的生体接着材料の開発	298
田口 哲志 Taguchi Tetsushi	
インジェクタブルゲル開発と医療応用	299
西口 昭広 Nishiguchi Akihiro	
■ バイオセラミックスグループ	
りん酸カルシウムを基にした機能性材料開発	300
菊池 正紀 Kikuchi, Masanori	
アパタイトを利用した放射性廃棄物の固定	301
末次 寧 Suetsugu Yasushi	
■ 生体組織再生材料グループ	
再生医療のための高分子足場材料の開発	302
陳 国平 Chen Guoping	
幹細胞機能制御のためのマイクロパターン化培養材料	303
川添 直輝 Kawazoe Naoki	
局所投与型光線力学療法に向けたバイオマテリアルの開発	304
吉富 徹 Yoshitomi Toru	
■ スマートポリマーグループ	
スマートポリマーを用いた医療材料の創製	305
荏原 充宏 Ebara Mitsuhiro	
細胞機能を誘導する生体無機ナノ材料	306
長沼 環 Naganuma Tamaki	

がんの免疫療法、化学療法及び複合療法のためのバイオ材料	307	■ プリンテッドエレクトロニクスグループ	
李 霞 Li Xia		プリンテッドエレクトロニクスの研究	332
Hierarchical mesostructures for environment & healthcare	308	三成 剛生 Minari Takeo	
エルサフティ シェリフ El-Safty Sherif		多接合太陽電池のための機能性新材料の開発	333
形状記憶高分子からなる高機能性 4D 印刷材料の開発	309	新倉 ちさと Niikura Chisato	
宇都 甲一郎 Uto Koichiro		ソフトマターの配列制御と電子・光機能	334
■ 嗅覚センサグループ		荒井 俊人 Arai Shunto	
嗅覚とニオイの理解と制御	310	■ 電気化学センサグループ	
吉川 元起 Yoshikawa Genki		マイクロテクスチャー表面に凝集する分子の電気化学とセンサ応用	335
「気相」のマイクロフルイディクスの開拓	311	川喜多 仁 Kawakita Jin	
柴 弘太 Shiba Kota		高次階層構造の構築：多段階無機合成と粘性熱電材料を例に	336
においセンサの開発および新たなセンシング手法の創出	312	佐藤 宗英 Satoh Norifusa	
南 皓輔 Minami Kosuke		■ データ駆動高分子設計グループ	
■ 電気化学ナノバイオグループ		サーキュラーエコノミーを指向したデータ駆動高分子材料開発	337
材料と電気細菌の相互作用解明と一般細菌制御技術の開拓	313	内藤 昌信 Naito Masanobu	
岡本 章玄 Okamoto Akihiro		多孔質高分子材料の創製・計測・応用	338
センサ応答からの情報抽出：ニオイセンサの		佐光 貞樹 Samitsu Sadaki	
総合の開発と実用化に向けた取り組み	314	分子化学プログラミングによる高分子の形状と機能の設計	339
今村 岳 Imamura Gaku		中村 泰之 Nakamura Yasuyuki	
鉄、木材を食害する電気細菌の検出と制御の技術開発	315		
鄧 驍 Deng Xiao		低コスト CO ₂ 回収システムの開発	340
■ 分子機能化学グループ		一ノ瀬 泉 Ichinose Izumi	
高機能・高性能有機高分子薄膜の作製技術開発と評価	316	医療応用のための材料特性評価	341
坂本 謙二 Sakamoto Kenji		山本 玲子 Yamamoto Akiko	
精密重合法を用いた機能性高分子バイオ材料の創出	317		
吉川 千晶 Yoshikawa Chiaki			
新規有機半導体の開発と薄膜デバイス応用	318		
安田 剛 Yasuda Takeshi			
ドーブフリー高機能性有機電子材料の開発	319		
小林 由佳 Kobayashi Yuka			
場を利用して動く分子機械の開発	320		
中西 和嘉 Nakanishi Waka			
π電子系分子集積体の新奇機能開拓	321		
高井 淳朗 Takai Atsuro			
分子性イオンを利用した有機-無機複合材料の機能開拓	322		
梅山 大樹 Umeyama Daiki			
超巨大高分子ボトルブラシポリマーの研究	323		
山内 祥弘 Yamauchi Yoshihiro			
機能性高分子ゲル電解質の開発と電気化学デバイスへの応用	324		
玉手 亮多 Tamate Ryota			
■ 電子機能高分子グループ			
メタロ超分子ポリマーの開発	325		
樋口 昌芳 Higuchi Masayoshi			
機能性ナノ共結晶の創製：組み合わせによる新機能の発現	326		
若原 孝次 Wakahara Takatsugu			
イオン伝導性高分子材料と分子機械の融合	327		
池田 太一 Ikeda Taichi			
新規機能性無機-有機ハイブリッドポリマーの創製	328		
藤井 和子 Fujii Kazuko			
■ 分子メカトロニクスグループ			
分子配列を生かした限界突破エネルギー変換材料・素子創製	329		
吉尾 正史 Yoshio Masafumi			
高分子のナノ構造制御による有機エレクトロニクス材料開発	330		
相見 順子 Aimi Junko			
Design and synthesis of soft crystals using mechanically interlocked molecules	331		
メン ウェンジン Meng Wenjing			

マテリアル基盤研究センター 343

- 透過電子顕微鏡法 (TEM) による材料評価法の開発と応用 344
木本 浩司 Kimoto Koji
- 電子顕微鏡グループ
- 電子線パルスを利用した TEM 内ナノスケール熱輸送計測法 345
川本 直幸 Kawamoto Naoyuki
- 電子エネルギー損失分光の計測技術開発と応用 346
吉川 純 Kikkawa Jun
- 電子顕微鏡による映像分子科学および分子集合体科学の展開 347
原野 幸治 Harano Koji
- LaB₆ ナノワイヤ冷電界放出による新世代電子顕微鏡 348
張 晗 Zhang Han
- Novel microscopy techniques for advanced characterization 349
コレツ オヴィヂュ Cretu Ovidiu
- 実働環境電子顕微鏡開発グループ
- 電子線タイコグラフィーによる環境関連材料の観察 350
三石 和貴 Mitsuishi Kazutaka
- 液中試料のその場高分解能電子顕微鏡観察技術の開発 351
竹口 雅樹 Takeguchi Masaki
- 水素センサーの開発と吸着を経た吸蔵の理論モデル 352
矢ヶ部 太郎 Yakabe Taro
- 試料ホルダーを用いたその場 TEM 観察 353
橋本 綾子 Hashimoto Ayako
- 顕微表面化学分析およびそのデータフォーマットの標準化 354
大西 桂子 Onishi Keiko
- レーザー加熱方式超高温透過型電子顕微鏡ホルダーの開発 355
三井 正 Mitsui Tadashi
- 格子欠陥と相変態を活かした機能創発とそのイメージング 356
新津 甲大 Niitsu Kodai
- ナノプロープグループ
- 走査型プロープ顕微鏡を用いた表面化学 357
川井 茂樹 Kawai Shigeki
- 走査型トンネル顕微鏡による原子分解能表面電子状態計測 358
鷗坂 恵介 Sagisaka Keisuke
- ナノスケール電位計測技術を用いた機能性材料・デバイスの評価 359
石田 暢之 Ishida Nobuyuki
- 極低温走査型トンネル顕微鏡による量子材料研究 360
吉澤 俊介 Yoshizawa Shunsuke
- ボトムアップ的 2 次元・3 次元ナノ材料創成と機能開拓 361
林 宏暢 Hayashi Hironobu
- High-resolution scanning probe microscopy applied to technologically relevant materials 362
クスタンセ オスカル Custance Oscar
- 固体 NMR グループ
- 光照射 NMR 測定技術の開発と応用 363
後藤 敦 Goto Atsushi
- 量子状態選別分子ビームによる触媒反応解析 364
倉橋 光紀 Kurahashi Mitsunori
- 強磁場固体 NMR 装置を用いて行う燃料電池材料等の分析 365
丹所 正孝 Tansho Masataka
- 高温 NMR の開発と材料分析への応用 366
端 健二郎 Hashi Kenjiro
- 光電子分光グループ
- 顕微スピン分解光電子分光の高度化と量子・磁性材料研究 367
矢治 光一郎 Yaji Koichiro
- 顕微光電子分光を用いた材料研究 368
津田 俊輔 Tsuda Shunsuke
- 顕微分光とインフォマティクスによる多次元オペランド計測 369
永村 直佳 Nagamura Naoka
- 強磁場物性計測グループ
- 先端強磁場計測技術の開発と物性研究への応用 370
今中 康貴 Imanaka Yasutaka
- 強磁場による量子機能材料評価 371
竹端 寛治 Takehana Kanji
- 物性計測のための強磁場発生技術開発 372
松本 真治 Matsumoto Shinji
- 量子マテリアルの開発とその低温・強磁場下での物性評価 373
菊川 直樹 Kikugawa Naoki
- 量子ビーム回折グループ
- 量子ビーム実験と構造モデリングによる非晶質材料の構造解析と構造制御 374
小原 真司 Kohara Shinji
- 先端構造解析に基づく材料機能の理解と自律探索 375
富中 悟史 Tominaka Satoshi
- 放射光吸収・回折顕微鏡による磁性体研究 376
山崎 裕一 Yamasaki Yuichi
- Heuristic data-driven spectral analysis for nanomaterial information embed in the background 377
達 博 Da Bo
- データ駆動型無機材料グループ
- データ駆動手法を用いた無機材料の物性予測と新材料設計 378
徐 一斌 Xu Yibin
- 第一原理的手法による電子構造解析 379
新井 正男 Arai Masao
- データ科学と計算科学による新規無機材料の開発 380
小山 幸典 Koyama Yukinori
- Advancing interfacial thermal resistance prediction for thermal management in heterogeneous materials 381
ウー イェン ルー Wu Yen-Ju
- データ駆動型材料設計グループ
- データ駆動型手法と第一原理計算を用いた新材料設計 382
袖山 慶太郎 Sodeyama Keitaro
- マテリアルズ・インフォマティクスによる自律材料探索 383
岩崎 悠真 Iwasaki Yuma
- SMILES-X: autonomous molecular compounds characterization for small datasets without descriptors 384
ラムバール ギヨム Lambard Guillaume
- 新規材料創成に向けたデータ駆動的方法論の構築・応用 385
永田 賢二 Nagata Kenji
- Data-driven algorithms for materials innovation 386
ディーブ 冴 Dieb Sae
- 計測データの DX 技術とデータプラットフォームへの展開 387
吉川 英樹 Yoshikawa Hideki
- 自律的材料合成と新材料開発 388
知京 豊裕 Chikyo Toyohiro

■ 材料モデリンググループ

マテリアルズインテグレーションによる材料研究 DX	389
出村 雅彦 Demura Masahiko	
材料知識基盤の構築	390
石井 真史 Ishii Masashi	
超臨界地熱発電用耐熱材料の評価と開発	391
戸田 佳明 Toda Yoshiaki	
計算機を活用した材料研究・開発	392
渡邊 育夢 Watanabe Ikumu	
AE 法による材料製造加工のインプロセスモニタリング	393
伊藤 海太 Ito Kaita	
大規模データベース Starrydata で材料科学の世界を俯瞰	394
桂 ゆかり Katsura Yukari	

■ 材料科学計算基盤グループ

フォノン計算に関する研究と科学計算ソフトウェア開発	395
東後 篤史 Togo Atsushi	
次世代の第一原理電子状態計算の手法開発と応用展開	396
中野 晃佑 Nakano Kosuke	

■ データ駆動型アルゴリズムチーム

材料研究に特化したデータ駆動型アルゴリズム開発	397
田村 亮 Tamura Ryo	

索引 399

アルファベット順	400 ~ 409
主な所属学会 [国内]	410 ~ 423
主な所属学会 [海外]	424

エネルギー・環境材料 研究センター

エネルギー・環境材料の界面理論・計算科学研究

Keywords 第一原理計算, スーパーコンピュータ, 酸化還元反応, 電気化学反応, 蓄電池

センター長 / Director

館山 佳尚 Tateyama Yoshitaka

✉ TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/tateyama_yoshitaka



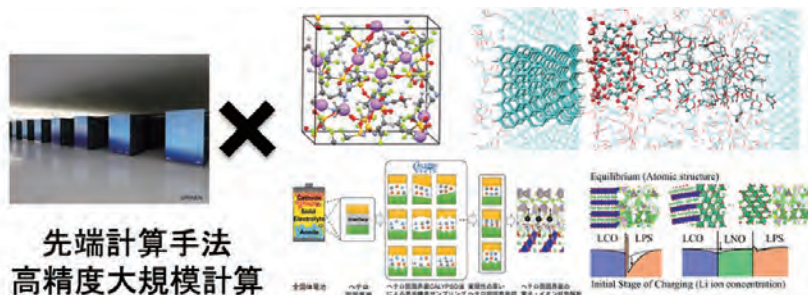
研究概要

電池、触媒などのエネルギー・環境デバイスは、電子・ホールとイオンの両者が可動であり、かつそれらが頻繁に電極界面にて電荷授受を行い(時には横切り)、さらにその動きが外部バイアスでコントロールされるという点で、複雑だが大変面白い系であると言える。これらデバイスの開発において、デバイス内材料にて起こっているミクロな現象の理解は不可欠である。先端計測により解明が進められている一方、材料内の埋もれた界面における電子・原子描像はいまだに不明な点が多い。そこで我々は実験に先んじて理論的に提案することを目標に、高精度大規模第一原理計算によるエネルギー・環境材料、特に蓄電池材料における、ミクロなメカニズムの解明を近年進めてきた。

新規性・独創性

- 蓄電池材料内の界面・イオニクス現象に関する理論・計算技術
- 界面酸化還元反応の理論・計算技術
- 「富岳」などのスーパーコンピュータを最大活用した大規模大量第一原理計算技術

研究内容



我々は実験に先んじて理論的に提案をすることを目標に、精度を十分担保しかつ複雑な構造をできるだけそのままモデル化した大規模第一原理計算を行う技術を蓄積してきた。その中で、スーパーコンピュータ「京」「富岳」の高効率利用に向けたコード開発・チューニングも進めてきた。それにより蓄電池内ミクロ現象の最難関ともいえる電極-電解質界面における電子・イオン移動のメカニズム解析を大きく進めることができた。

特に構造サンプリングが(固液界面に比べても)より困難な固固界面に対して、AI手法の1つである粒子群最適化(PSO)を組み合わせた「ヘテロ界面CALYPSO法」を開発した。これにより出現確率の高い固固界面を効率的に得ることが可能になり、よりリアリスティックな電極-電解質界面現象を記述できるようになった。これと第一原理計算を組み合わせることで、界面におけるイオン移動や電子状態変化(バンドオフセット)の見える化に成功した。これらをSPRING-8等の実験と比較することで、「蓄電固体の界面科学」の理解が大きく進むことが期待できる。我々はまた硫化物・酸化物・有機系固体電解質におけるイオン伝導に関するMD計算研究も積極的に進めている。特に最近は酸化物固体電解質の「粒界」に関する第一原理MDに挑戦し、新たな理論的知見を獲得した。

まとめ

我々が高精度大規模第一原理計算で得られた知見は、蓄電池開発においても重要な指針を与えるものとなっている。また、これらの国際的競争力のある計算技術を、企業等へ技術移転することにより我が国の産業競争力強化につなげることも重要であり、現在、課題責任者を務める文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの「富岳」材料物理化学課題においてその取り組みを進めている。今後も蓄電池開発のブレークスルーと蓄電池および界面電気化学の学理の発展を目指して研究を進めていきたい。

論文・特許

- B. Gao, R. Jalem, H. Tian and Y. Tateyama, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2102151 (2022).
- B. Gao, R. Jalem, Y. Ma and Y. Tateyama, *Chem. Mater.* **32**, 85-96 (2020).
- H. Tian, R. Jalem, B. Gao, Y. Yamamoto, S. Muto, M. Sakakura, Y. Iriyama and Y. Tateyama, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 54752-54762 (2020).

高い信頼性を有する固体電池の創製

Keywords 固体電池, 固体電解質, イオン伝導体

フェロー／Fellow

高田 和典 Takada Kazunori

✉ TAKADA.Kazunori@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takada_kazunori



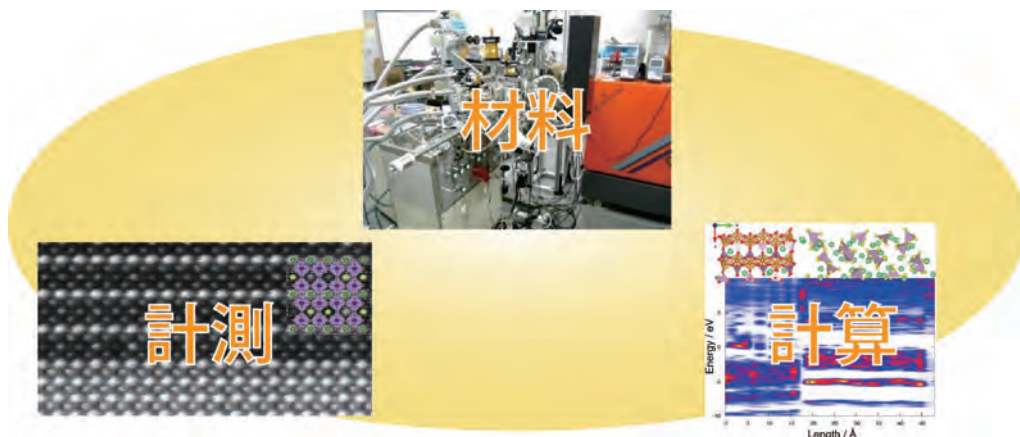
研究概要

リチウムイオン電池をはじめとする高性能蓄電池は、携帯情報端末の電源として高度情報化社会の構築に貢献してきた。さらに近年の課題であるカーボンニュートラルの達成に向けても、自動車などの移動体の電動化や、再生可能エネルギーを効率的に利用するための電力貯蔵などにおいて蓄電池が必要とされている。このように用途が変化すると、蓄電池にもこれまでに求められなかった性能が要求されるようになってくる。このような要請に応えることのできる電池系の一つと目されているものがセラミックの電解質を採用する固体電池である。

新規性・独創性

- 固体電解質の単一イオン伝導による、高い信頼性
- 不燃性電解質の使用による、高い安全性
- バルク・界面におけるイオン輸送現象の研究を通じた電池開発

研究内容



カーボンニュートラル達成に向けた様々な施策で必要とされる電池において重要視される性能が、高い信頼性である。自動車の電動化や再生可能エネルギーの貯蔵で使用される電池は大型のものであり、リチウムイオン電池において使用される可燃性の有機溶媒電解質に起因する安全性の課題は深刻なものとなる。さらに、これらの用途における電池には民生用途に比べ物にならないほどの耐久性が求められる。固体電池は可燃性の電解質を使用しないために、電池の安全性が飛躍的に高められるほか、固体電解質中の拡散種がリチウムイオンのみに限られるために、電極表面に輸送された反応種が副反応を引き起こすということがなく、電池は長寿命なものとなる。

このような特徴を備える固体電池を実現に導くためには、イオン伝導性に優れた固体電解質に加え、イオン伝導を阻害しない界面で電池材料間を接合するプロセス技術、接合界面における異常なイオン伝導現象の理解と制御が必要であり、計算・計測の研究者とともにこれらの課題に挑んでいる。

まとめ

固体電池は、カーボンニュートラル達成に向けた車載用、電力貯蔵用のみならず、IoT用の自立電源として期待されている環境発電による微弱な電力を貯蔵するデバイスとしても期待されている。これらの多彩な需要を満たすことのできる固体電池の実現に向けた研究を推進する。

論文・特許

- T. Ohnishi, K. Mitsuishi and K. Takada, *ACS Appl. Energy Mater.* **4**, 14372-14379 (2021).
- K. Takada, T. Ohno, N. Ohta, T. Ohnishi and Y. Tanaka, *ACS Energy Lett.* **3**, 98-103 (2018).
- 特許第4982866号 全固体リチウム電池

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

固体電解質利用による新二次電池系の探索

Keywords 全固体電池, 高容量負極, 高電位正極, イオン伝導性無機固体電解質

主幹研究員 / Principal Researcher

太田 鳴海 Ohta Narumi

✉ OHTA.Narumi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohta_narumi



研究概要

無機固体電解質の有する不燃・難燃性は高エネルギー密度化の進む二次電池システムに生来の高安全性を付与する。一方で、材料科学の進歩により、有機電解液では実現が不可能であった高い酸化・還元耐性及び高いイオン伝導度を有する固体電解質も数多く発見されるようになり、高安全性だけでなく高エネルギー密度化や高出力化の面でも固体電解質を利用した二次電池システムは注目を集めるようになってきた。NIMSでは、有機電解液では到達しえない固体電解質の特長やイオン伝導性固体であることの特性を利用し、特に高電位正極ならびに高容量負極活物質と固体電解質間のヘテロ固固界面や固体電池内の電極活物質間のモノ固固界面の高性能化に注力した研究開発を進めてきた。

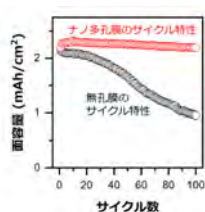
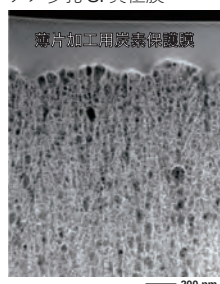
新規性・独創性

- 高い還元耐性を有する無機固体電解質と電解質・活物質界面を形成することで、充放電時に繰り返される著しい体積変化に伴って有機電解液の利用では不安定化する界面を安定化し、高容量Si負極活物質の高安定動作を実現
- 充放電時に繰り返される著しい体積変化によって引き起こされる材料破壊をナノ多孔構造の導入で抑制し、界面が安定な固体電解質内で利用することで、高容量Si負極を実用的な容量において安定動作させることに成功
- 低コストで生産性に優れた粒子積層体合成技術で活物質粒子のみから成るSi負極を作製し、固体電池内での高出力・高容量動作に成功

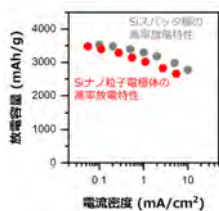
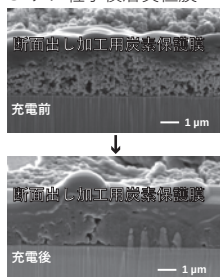
研究内容

全固体電池用高容量負極

ナノ多孔 Si 負極膜



Si ナノ粒子積層負極膜



リチウムイオン電池の性能は、現行の材料で到達可能な理論値に限りなく近づいており、更に高性能な二次電池を実現するには、電極活物質及び電解質の変更が鍵となる。特に電極活物質は充放電時のLiの吸蔵放出に伴い大きく体積変化をする材料へ変更せざるを得ず、現行の体積変化しない材料で得られてきた知見が全く役に立たず、新たな学理を構築する必要がある。NIMSでは、充電に伴い体積が4倍になるため割れて使えなくなるが、現行の黒鉛に比べ11倍の容量を持つSiに注目し、固体電解質と組合わせた電極の開発を行ってきた。割れに繋がる体積変化に伴う歪応力の蓄積を抑えるには、応力を瞬時に除去できるナノメートル級の単位構造を導入することが有効であるが、還元耐性に劣る有機電解液を利用すると、Si上で還元分解し界面が高抵抗化するので、活物質の比表面積をただ上げるだけの設計を行うことが出来ずにジレンマに陥る。そこでNIMSでは、高い還元耐性を持つ固体電解質の利用により界面の高抵抗化を解決し、割れに強いナノ多孔構造を導入することで実用的な面容量2.2 mAh/cm²を示すSi膜が電池内で非常に安定に動作することを見出した。空隙とSiのみから成るナノ多孔Si膜が実用的な負極特性を示したことは、Siが十分に速いLi拡散性と電子伝導性を持つことを証明している。つまり、Liが入り出る電極活物質のみで電極体を作製できるという事である。実際、NIMSは固体電解質と金属集電体の間にSiナノ粒子のみを詰め込んだシンプルな電極体を、スプレー塗工という比較的安価な粒子積層技術で作り上げ、高い出力特性とサイクル安定性を実証している。

まとめ

- 耐還元性に優れた無機固体電解質と組合わせることで、高容量Si負極は生来の高いイオン拡散性や電子伝導性を活用することが可能
- ナノ多孔構造の導入等、体積変化による材料破壊を抑制する技術を用いることでSi負極を高容量で高安定動作させることが可能
- 比較的安価な積層技術で作製したSi粒子積層体が、充電時の体積膨張によりその場で連続体に変化し、高い出力特性を示すことを実証

論文・特許

- N.Ohta, S. Kimura, J. Sakabe, K. Mitsuishi, T. Ohnishi and K. Takada, *ACS Appl. Energy Mater.* **2**, 7005–008 (2019).
- J. Sakabe, N. Ohta, T. Ohnishi, K. Mitsuishi and K. Takada, *Commun. Chem.* **1**, 24 (2018).
- 特許第4982866号 全固体リチウム電池

固体電解質の界面輸送特性制御

Keywords 固体電解質, セラミックス, イオン伝導, 粒界抵抗, 全固体電池

主任研究員 / Senior Researcher

三好 正悟 Miyoshi Shogo

✉ MIYOSHI.Shogo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/miyoshi_shogo



研究概要

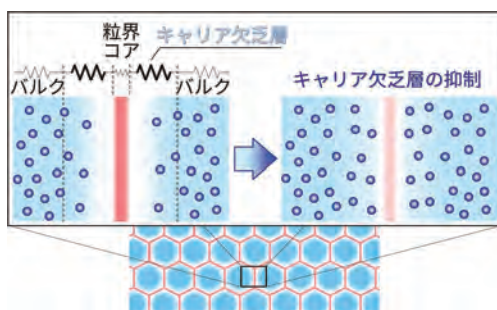
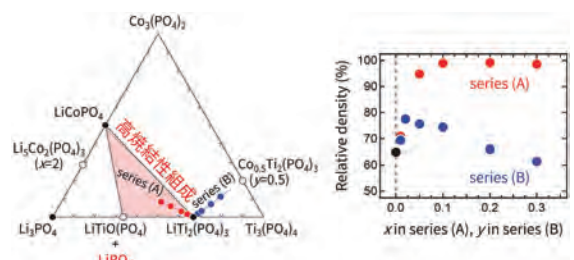
安全性に優れ、高性能な次世代電池として期待される酸化物型全固体電池の作製方法として、電解質を緻密に焼結するとともに電極活物質との接合を達成して界面輸送特性を確保する焼成プロセスが期待されるが、高温における焼成により電解質/電極活物質界面に高抵抗な異相が生成する恐れがある。異相の生成反応を抑制することを目的とした焼成プロセスの低温化に向けた、酸化物固体電解質の焼結性を向上させるための取り組みを進めている。また、緻密な固体電解質においてもしばしば観測される高い粒界抵抗の起源解明と低減手法について検討している。

新規性・独創性

- 相関係の解明と熱力学的考察による低温焼結メカニズムの解明
- メカニズムに基づいた焼結助剤の提案と最適化
- 粒界抵抗の起源解明と積極的な制御

研究内容

NASICON型固体電解質 $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$ (LATP) について、正極材料 LiCoPO_4 と混合すると焼結性が著しく向上する現象に注目し、構成元素の一部をCoで置換した組成の焼結性と生成相を詳細に調べた。その結果から、著しく高い焼結性を示す組成(右図のグラフにおけるseries(A))はLATPと平衡する共存相として低融点化合物である LiPO_3 を生成することが示唆された。すなわち高焼結性の原因は LiPO_3 を起点とする液相の生成による物質移動の促進であり、 LiPO_3 と平衡する組成(右図における網掛けをした三角形内部)であればCoの有無に依らず高い焼結性を示し、この原理に基づいて低温焼結のための多様な焼結助剤を提案することが可能である。



セラミックス固体電解質のイオン伝導性は緻密化により向上するが、十分に緻密化しても粒界において高いイオン輸送抵抗を示す材料が多い。この粒界抵抗は不純物の析出などが無い場合においても観測され、いわゆる空間電荷効果に由来するというモデルがある。すなわち、粒界近傍に形成されるイオン伝導キャリアの欠乏層が抵抗の要因となると考えられ、この仮定に基づいた粒界抵抗の起源解明に取り組んでいる。また、このキャリア欠乏層を解消するための新規プロセスや材料を開発することにより、化学-エネルギー変換デバイスの要であるセラミックス固体電解質の特性向上を目指す。

まとめ

- NASICON型固体電解質における焼結促進現象のメカニズムを解明し、焼結助剤を提案するための基盤を構築した。
- 多様な材料系の焼結に対して同様の検討を進めている。
- 粒界抵抗の起源解明と制御に向けた検討を行っている。

論文・特許

- S. Miyoshi, Y. Nishihara and K. Takada, *ACS Appl. Energy Mater.* **5**, 7515–7522 (2022).
- K. Ishii, T. Uchikoshi, S. Miyoshi, M. Ode, T. Ohno and K. Takada, *Mater. Lett.* **324**, 132736 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Functional materials for next-generation Lithium batteries

Keywords Solid state batteries, Li-rich cathode materials

研究員 / Researcher

マルセル カルパ Marcela Calpa

✉ CALPA.Marcela@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/calpa_marcela



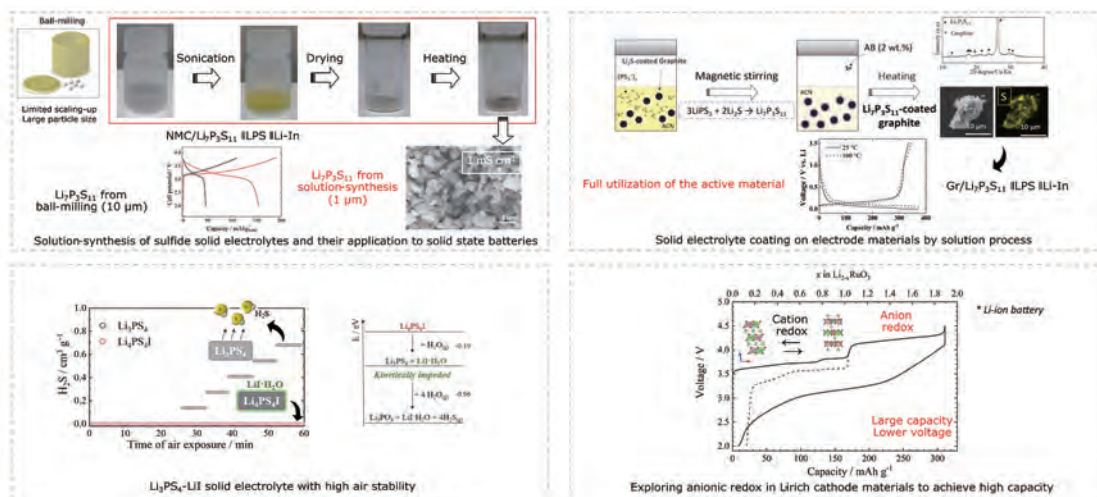
Research Summary

Energy storage systems with enhanced safety and energy density that store renewable energy and power EVs are necessary to achieve a low-carbon society. Solid-state electrolytes are developed to improve the safety of Lithium batteries. High-capacity cathodes are explored to improve their energy density.

Novelty / Originality

- A scalable liquid-phase process is used to prepare high ionic conductive and nano-sized sulfide-based solid electrolytes.
- The unexpected high air stability of Li_3PS_4 -LiI solid electrolytes is uncovered
- Solid electrolyte coating on active materials enables its full utilization in solid-state batteries

Research Contents



Sulfide electrolytes with high ionic conductivity, small particle size, and high air stability are prepared by a scalable solution synthesis and applied to solid state batteries. The use of Li-rich cathode materials holds promise to enhance the energy density of solid-state batteries further.

Summary

- Liquid-phase processes are proposed for the industrial scaling-up of sulfide solid electrolytes.
- Solid state batteries with enhanced safety are expected to power future electric vehicles.

References

- M. Calpa, N. C. Rosero-Navarro, A. Miura, R. Jalem, Y. Tateyama and K. Tadanaga, *Appl. Mater. Today* **22**, 100918 (2021).
- M. Calpa, N. C. Rosero-Navarro, A. Miura, K. Tadanaga and A. Matsuda, *Solid State Ionics* **372**, 115789 (2021).
- M. Calpa, N. C. Rosero-Navarro, A. Miura and K. Tadanaga, *Electrochim. Acta* **296**, 473-480 (2019).

先進低次元ナノ材料の探索・創製・応用

Keywords グラフェン、カーボンナノチューブ、冷陰極ナノ構造電子源、ナノ構造制御、蓄電材料、スーパーキャパシター

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

唐 捷 Tang Jie

✉ TANG.Jie@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tang_jie



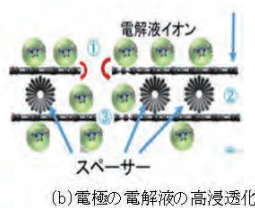
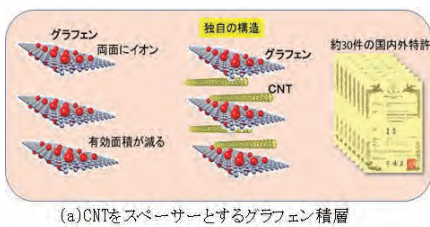
研究概要

環境・エネルギー物質科学への貢献を目的に、有用な特性をもつ新たなグラフェンなどの特異な原子配列をもつナノ物質の探索・合成を行っている。グラフェンシートや独自に創製したホウ化物、炭化物ナノワイヤーは、新規電池材料、キャパシター電極や高性能なナノ構造電子源となることを既に見出しており、これらを用いたスーパーキャパシターや高性能電子銃への実用化研究も並行して行っている。

新規性・独創性

- グラフェン剥離の単層化及び高密度グラフェン積層化の同時プロセス開発
- グラフェン複合材料による高エネルギー密度グラフェンスーパーキャパシタ開発
- 高輝度・高電流安定度・高分解能を実現できる次世代冷陰極ナノ構造電子源の開発

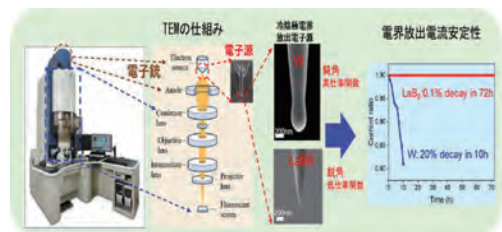
研究内容



グラフェンの特性を材料として十分に生かすためには、単層状態を保持することが必須である。これまでに、グラフェン自身の再付着の防止のため、カーボンナノチューブをスペーサーとする積層構造を開発した（左図(a)）。そして、この積層構造化プロセスを用い、電解液の高浸透化が可能な電極膜を開発した（同(b)）。更にグラフェン複合材料をポーラス構造化により、電極膜を多層化し、デバイスの容量を向上させたGSCの研究開発を進めている（同(c)）。JST-ALCA等の国プロジェクトや地域イノベーション事業の援助によって、研究成果の実用化に向けて努力している。

我々はまた、世界で初めて作製に成功したホウ化物・炭化物単結晶ナノニードルによって次世代ナノ構造電子源の開発を進めており（右図）、民間企業との共同研究により高分解能電子顕微鏡での実証実験に成功し、現在実用化を目指している。

さらに、研究成果の社会への早急な普及のため、2017年にNIMS発ベンチャーを起業した。



まとめ

グラフェン複合材料及び希土類・炭化物化合物単結晶ナノ構造電子源は我々のイニシアチブで実用化されることが大いに期待される。国の競争的資金による支援を受けるとともに企業との共同研究も進め、現有の研究成果を実用的なものにするための努力をおこなっていく。また、NIMS発ベンチャーを起業しており、それを通して研究成果の社会普及に積極的に努めていく。今後、機構内外の研究者と幅広い共同研究、及び国際共同研究を行っていきたい。

論文・特許

- S. Tang, J. Tang, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, W. Hayami, J. Yuan, M. Takeguchi, M. Mitome and L. Qin, *Nanoscale Adv.* **3**, 2787-2792 (2021).
- Q. Cheng, J. Tang, J. Ma, H. Zhang, N. Shinya and L. Qin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 17615 (2011).
- 特許第7188693号 グラフェンを用いた電極、その製造方法およびそれを用いた蓄電デバイス

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

薄膜技術を援用した酸化物型全固体電池の作製

Keywords リチウムイオン電池, 全固体電池, 薄膜, 酸化物固体電解質

グループリーダー／ Group Leader

大西 剛 Ohnishi Tsuyoshi

✉ OHNISHI.Tsuyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohnishi_tsuyoshi



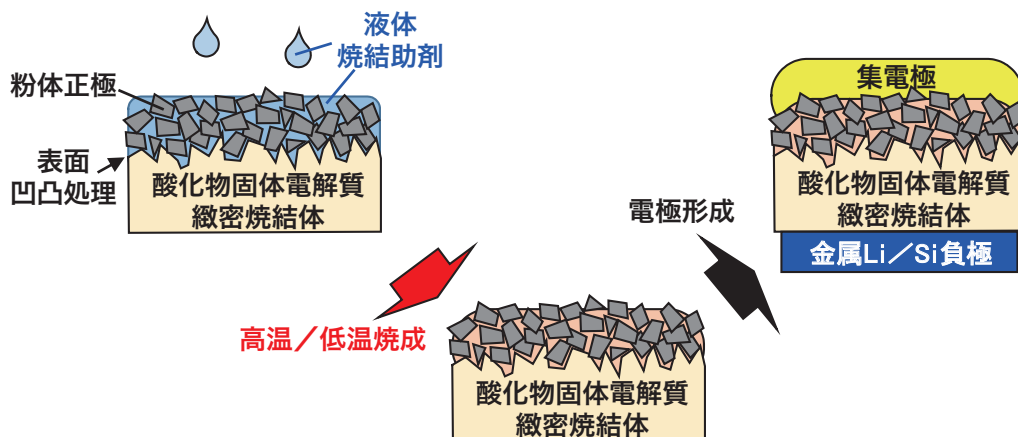
研究概要

低炭素社会構築のためにハイブリッド自動車や電気自動車の普及が求められている。車載用の二次電池には安全・軽量でかつ大きな充放電容量が求められると同時に急加速・急速充電時に大電流の出し入れができる必要がある。そこで安全性の観点から全固体電池、中でも酸化物の固体電解質をもちいた酸化物型全固体電池に注目している。全固体電池では正極、負極、固体電解質、全てが固体であるため固固界面が重要であることから、これまで培ってきた界面研究のための薄膜電池開発のノウハウや技術を取り入れて焼結体ベースのバルク型全固体電池の開発を遂行している。

新規性・独創性

- 薄膜技術を用いた界面制御による低抵抗化・長寿命化
- 焼結技術と薄膜技術の融合
- 液体を用いた表面処理、粒界制御と低温焼結

研究内容



これまで界面研究のためにパルスレーザー堆積法やスパッタ法を用いて薄膜電池を作製。厚膜化や大面積化によりある程度大容量化と高出力化を達成したが、さらなる大容量化のためには粉体ベースの焼結電池が必要。そこで、薄膜技術を援用して粉体正極を用いた全固体電池の開発に着手。

酸化物固体電解質基板の前処理で表面層を除去し低抵抗化させる過程で表面凹凸を形成し粉体正極を塗り付け低温/高温焼結。焼結前に各種液体焼結助剤を滴下。対極に金属Li膜/箔またはSi薄膜+集電極、正極側にも集電極を形成し電池を作製。電池特性を頼りに正極の塗り付け量、助剤の種類と滴下量、焼結温度/時間/雰囲気等を最適化し、大容量・高出力電池の作製を目指す。

まとめ

- 市販の酸化物固体電解質緻密焼結体を用いることで伝導度が担保できている
- 非常に簡便な方法で粉体正極を用いた全固体電池が作製できる
- 粉体正極の塗り付け量次第で電池容量が決まるためスケールアップの可能性を秘めている

論文・特許

- 大西 剛, 電気化学 **90**, 315–319 (2022).
- K. Kawashima, T. Ohnishi and K. Takada, *ACS Appl. Energy Mater.* **3**, 11803–11810 (2020).
- 大西 剛, まてりあ **58**, 311–319 (2019).

固体電池材料のマルチスケール解析

Keywords リチウムイオン電池, 薄膜電池, 拡散係数, NMR, TOF-SIMS

主幹研究員／Principal Researcher

桑田 直明 Kuwata Naoaki

✉ KUWATA.Naoaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kuwata_naoaki



研究概要

リチウムイオン電池等の電気化学デバイスは、固体中をイオンが拡散することで動作することができる。固体電解質を利用した固体電池の開発が世界的に活発に行われており、固体内および固体/固体界面の拡散係数やイオンダイナミクスを解析する手法が求められている。私たちは、飛行時間型二次イオン質量分析(TOF-SIMS)や核磁気共鳴(NMR)を利用して精密なリチウム拡散係数の解析を行う技術開発を進めており、固体電池材料に応用している。さらに、薄膜電池や焼結電池をモデルとしたその場解析技術により、固体電池の充放電機構を研究している。

新規性・独創性

- 同位体拡散とTOF-SIMSによる正極活物質・固体電解質の同位体拡散解析
- パルス磁場勾配NMR法による固体電池材料のリチウム拡散係数の精密測定
- パルスレーザー堆積法による薄膜型固体電池の作製
- その場解析技術の開発と固体電池の充放電による構造変化の検出
- 液相法による固体電池材料の合成と接合プロセスの開発

研究内容

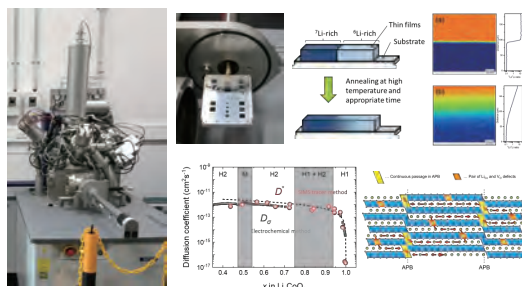


Figure 1. Measurement of tracer diffusion coefficient of lithium ion in battery materials by SIMS.

パルスレーザー堆積 (PLD) 法により、薄膜型の全固体電池を作製している。モデル界面を利用した解析、高電位正極の作製などに利用している。薄膜電池を利用したその場合ラマン分光測定では、 $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ ($0 < x < 1$) の充放電にともなうスペクトル変化が明瞭に観測された。固体電解質としてはリン酸リチウムやホウ酸リチウムなどの薄膜化が可能である。その他に、多結晶や単結晶の固体電解質を利用したパルス磁場勾配NMR法による拡散係数測定も行っている。

全固体電池を実現するため、固体中の高速リチウム拡散の機構を解明することが求められている。我々はTOF-SIMSやNMRを用いた新技術により、電池材料中のリチウムイオンの拡散係数を計測している。固体電解質に関しては、 ^6Li 同位体をイオン交換法により固体中に拡散させ、同位体比のプロファイルから拡散係数を得ることができる。イオン伝導度と比較して、ハーベン比から拡散機構を議論することが可能となる。混合伝導体であるコバルト酸リチウム(LiCoO_2)等の正極薄膜を利用した同位体拡散測定も可能である。この手法により、 LiCoO_2 の空孔拡散機構や、アンチサイト欠陥を利用した拡散機構が確かめられた。

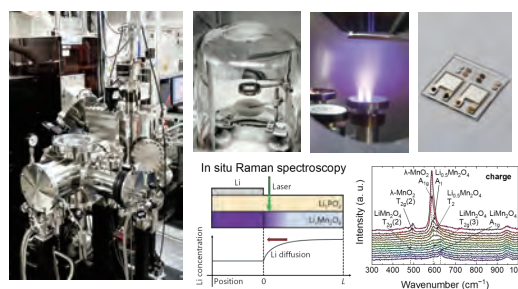


Figure 2. Fabrication of thin-film solid state batteries by pulsed laser deposition.

まとめ

固体中のリチウム拡散係数を測定する手法を確立し、TOF-SIMSイメージングにより界面でのイオン移動を可視化できることを実証した。第一原理計算と実験との連携により、材料探索にも応用可能である。バルクだけでなく、界面や複合体、粒界、ドメイン、異方性拡散を含む系、さらに動作中の電池材料にも展開することで、材料開発に貢献できると期待される。

論文・特許

- G. Hasegawa, N. Kuwata, K. Hashi, Y. Tanaka and K. Takada, *Chem. Mater.* **35**, 3815-3824 (2023).
- N. Kuwata, Y. Matsuda, T. Okawa, G. Hasegawa, O. Kamishima and J. Kawamura, *Solid State Ion* **380**, 115925 (2022).
- N. Kuwata, G. Hasegawa, D. Maeda, N. Ishigaki, T. Miyazaki and J. Kawamura, *J. Phys. Chem. C* **124**, 22981-22992 (2020).

界面その場計測技術の開発と電気化学デバイスへの応用

Keywords その場計測, 固液・固固界面, 電気化学, 燃料電池, 二次電池

グループリーダー／ Group Leader

増田 卓也 Masuda Takuya

✉ MASUDA.Takuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/masuda_takuya



研究概要

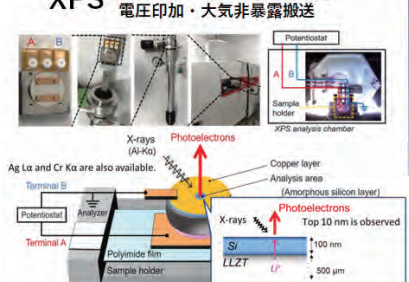
燃料電池・二次電池といった電気化学デバイスの界面では、原子・分子・イオン・電子などが関与した複雑な物理化学現象が起こっている。デバイスの性能・寿命はこうした界面現象およびこれらに起因して逐次的に起こるマルチスケールな現象の積み重ねによって決まる。したがって、高性能な材料・デバイスを開発するためにはこれらを観察し、理解するための計測技術が不可欠である。本研究では、X線吸収分光法、X線光電子分光法、走査プローブ顕微鏡などを基盤として独自のその場計測技術を開発し、試験用セルはもとより、実用志向のデバイスに応用することによって、反応機構の解明と材料設計指針の創出を目指している。

新規性・独創性

- 世界で初めてX線光電子分光法により固液界面における電気化学反応をその場観察
- 世界で初めて原子間力顕微鏡によりリチウムイオン電池の複合電極断面をナノ力学特性マッピング
- 実験室型の汎用装置を基盤に独自開発したX線光電子分光装置により全固体電池の反応観察に成功
- 酸化物型全固体電池の製造に不可欠な固体電解質・電極活物質共焼結による反応生成物解析マップを構築中
- 白金系電極触媒表面における硫黄吸着・脱離挙動の解明と耐被毒性に優れた新材料探索

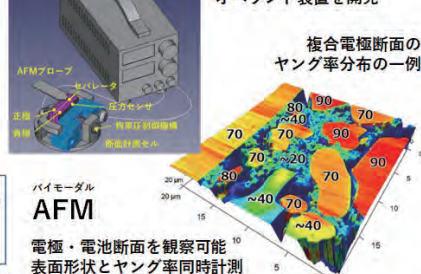
研究内容

XPS 独自のオペランド装置を開発



R. Endo, T. Ohnishi, K. Takada, T. Masuda, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11** (2020) 6649.
R. Endo, T. Ohnishi, K. Takada, T. Masuda, *J. Phys. Chem. Lett.*, **13** (2022) 7363.

電池断面計測のためのオペランド装置を開発



電極・電池断面を観察可能
表面形状とヤング率同時計測

H. Sakai, Y. Taniguchi, K. Uosaki, T. Masuda, *J. Power Sources*, **413** (2019) 29.

独自に開発した計測装置の一部を紹介する。

全固体電池をアルゴン雰囲気グローブボックスから真空槽に大気非曝露で搬送し、充放電サイクルを行いながら電極表面あるいは薄膜電極／固体電解質界面のX線光電子分光測定を行うことができる。

リチウムイオン電池などの複合電極の断面をイオンミリング法により露出させ、二つの周波数で励振されたプローブの振幅・周波数などの変化よりナノ形状・力学特性を同時にマッピングすることができる。全固体電池を対象としたオペランド計測が可能であり、液系電池への展開に向けた研究開発を進めている。

まとめ

- 電気化学条件下におけるその場・オペランド計測が可能な多様な計測技術を開発
- 燃料電池の電極触媒およびリチウムイオン電池・全固体電池の電極反応に応用
- 他に類を見ない新たな計測技術を開発しつつ、反応機構解明・材料設計指針創出を目指した研究を推進中

論文・特許

- F. Ichihara, S. Miyoshi and T. Masuda, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24**, 25878–25884 (2022).
- R. Endo, T. Ohnishi, K. Takada and T. Masuda, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11**, 6649–6654 (2020).
- H. Sakai, H. Sakai, Y. Taniguchi, K. Uosaki and T. Masuda, *J. Power Sources*, **413**, 29–33 (2019).

埋もれた界面物性評価のための超高速分光技術

Keywords コヒーレント・フォノン, ポンプ・プローブ, ペロブスカイト太陽電池

主幹研究員／Principal Researcher

石岡 邦江 Ishioka Kunie

✉ ISHIOKA.Kunie@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ishioka_kunie



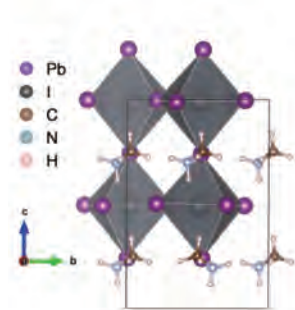
研究概要

わたしたちは日常生活で、光触媒、太陽電池、LED、レーザーなどさまざまな材料からつくられた光電子デバイスに囲まれて暮らしています。これらのデバイスの機能は、電子・正孔の光励起とそのエネルギー緩和、輸送、再結合といった微視的な過程に基づいています。このような過程は通常フェムト秒からマイクロ秒の時間スケールで起こり、異なる微視的過程の間の競合がしばしばデバイスの効率を左右します。当研究室ではポンプ・プローブ技術を用いて金属、半導体およびそれらのナノ構造の超高速光学応答を研究しています。特にフェムト秒パルス光によって物質中に誘起されるコヒーレントフォノンに注目し、これらのフォノンを用いた「埋もれた界面」の電子状態や原子構造の評価への応用を目指しています。

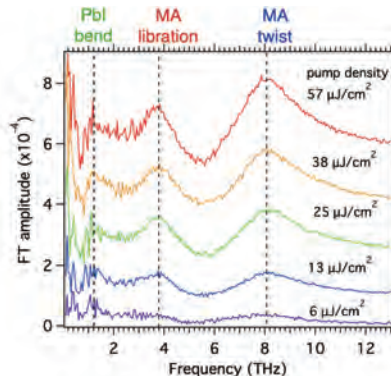
新規性・独創性

時間分解能10フェムト秒以下、過渡透過または反射率変化 $1\text{E-}5$ 以下のすぐれた検出能を利用して、光損傷を受けやすい試料の微弱な光応答も評価することが可能になっています。

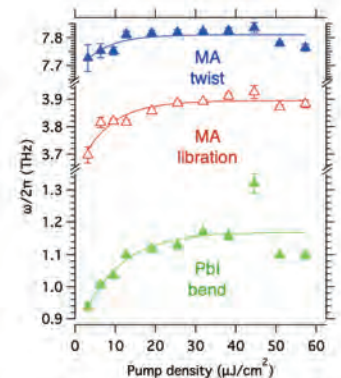
研究内容



無機PbI格子と有機MA分子より構成される、MAPbI₃の結晶構造。



時間分解信号のフーリエ変換スペクトルは、MA分子とPbIの振動に起因するピークを示す。



レーザー強度増加とともに、強い振動非調性の現れである高波数シフトを示している。

次世代の太陽電池材料として期待される無機有機ハイブリッド鉛ハライドペロブスカイトは、柔らかい鉛ハライド八面体の枠組みの中に有機分子カチオンが埋め込まれた構造を有します。無機・有機いずれの構成要素も、室温で動的無秩序をもつと理論的に予測され、これが結晶構造安定性やキャリア輸送を左右する可能性が指摘されてきました。本研究室ではMethylammonium lead iodide (MAPbI₃) 薄膜の時間分解レーザー効果測定をバンド端励起の条件で行い、その格子振動のダイナミクスを調べました。信号には1.2 THzの無機PbI格子の変角(bending)に加えて、有機カチオンの捻り(MA⁺ twisting)および秤動(MA⁺ libration)に起因する4および8 THzの周期的変調が観測されました。いずれの振動数も励起光強度の増強とともに高波数シフトを示し、理論で予測された無機格子、有機カチオンの振動の強い非調和性を実験的に検証する結果となっています。

まとめ

白色プローブ光、マルチチャンネル検出器を用いた多波長同時計測による高効率化が、今後の課題となっています。

論文・特許

- K. Ishioka, E. Angerhofer, C. J. Stanton, G. Mette, K. Volz, W. Stolz and U. Höfer, *Phys. Rev. B* **105**, 035309 (2022).
- K. Ishioka, T. Tadano, M. Yanagida, Y. Shirai and K. Miyano, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 105402 (2021).
- K. Ishioka, T. Tadano, M. Yanagida, Y. Shirai and K. Miyano, *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 3902–3907 (2017).

Li金属電池の高性能化と動作中／新規分析法開発

Keywords Li金属負極, Li空気電池, Liイオン電池, オペランド分析

主幹研究員／Principal Researcher

伊藤 仁彦 Ito Kimihiko

✉ ITO.Kimihiko@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ito_kimihiko



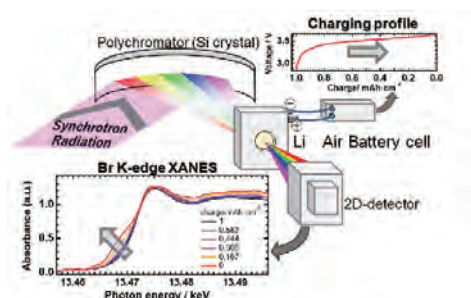
研究概要

現行Liイオン電池の性能限界を超越しうる低コスト・大容量蓄電技術へのニーズは依然としてあり、様々な原理に基づいた正極の大容量化や、負極のLi金属化に挑戦が続けられている。寿命を律する本質的要因を理解するため、正極反応を電池を動作させたままガス分析、X線回折、X線吸収分光法等の分析手法開拓を行っている。Li金属負極については、高純度Li金属を実現と並行して、充放電サイクルに伴う損失の少ない界面構造の実現を目指し、X線吸収分光の他、新たなLiの化学状態の分析手法の開発を行っている。

新規性・独創性

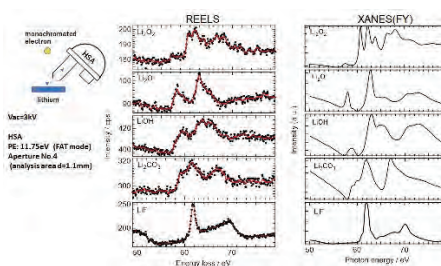
- 現行Liイオン電池の性能限界を超越しうるLi金属電池の実現
- 低コスト・大容量蓄電技術へのニーズと実現障壁を低減する分析手法の開発
- 大容量充放電も可能な高純度・高密度Li金属負極の実現
- 電解液/Li金属界面層のLi化学状態を分析できる新手法の提案

研究内容



(研究例1) リチウム空気2次電池は酸素分子のレドックスそのものを正極反応として利用する蓄電技術であるが、充電時の過電圧が高く、寿命が短いという課題がある。レドックスメディエーターと呼ばれる電解液に溶解させる一種の触媒により過電圧を抑制できるが、反応効率は依然十分ではない。レドックスメディエーターの荷電状態をX線吸収分光で電池を動作させたまま分析することで、間接的に正極反応生成物上で副反応の詳細を探る研究を行っている。レドックスメディエーターが完全動作する時間をより長くする電解液指針を得られれば、蓄電池の長寿命化につながると期待される。

(研究例2) リチウム金属負極は長寿命化できれば理想的な負極となりうるが、充放電に伴い反応に寄与できなくなるリチウム量が多くその低減が課題である。高純度・高密度で大容量充放電が可能なリチウム負極を蒸着法で実現するとともに、反応効率を改善する上で重要な電解液との界面層のLiの化学状態を、X線吸収分光に加え、単色化電子の反射電子のエネルギー分光でも同等の情報が得られることを実証し、界面化学組成探索に応用している。



まとめ

酸素分子のレドックスを利用する正極における副反応を各種動作中分析を駆使して、抑制する技術創出に結び付け寿命を改善してゆく。また、高純度化したリチウム金属をベースに充放電の繰り返しに伴うリチウム損失の少ない構造を新たな分析手法も駆使して探索する。

論文・特許

- K. Ito, D. Matsumura, C. Song and Y. Kubo, *ACS Energy Lett.* **7**, 2024-2028 (2022).
- K. Ito, Y. Harada, H. Yoshikawa and S. Tanuma, *J. Electron Spectrosc Relat. Phenomena* **257**, 147206 (2022).
- 特許第5791029号 薄型正極構造体、その製造方法及び薄型リチウム空気電池

計測技術を活かした電池材料合成

Keywords エネルギー関連化学, 無機材料化学, 電池材料, 合成, 先端計測

主任研究員 / Senior Researcher

久保田 圭 Kubota Kei

✉ KUBOTA.Kei@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kubota_kei



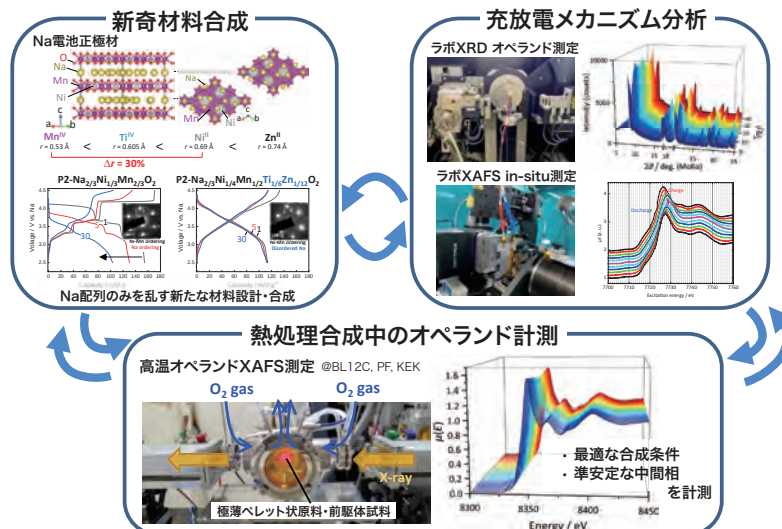
研究概要

リチウムイオン電池を始めとする蓄電池において、電池性能の根幹をなすのが電極および電解質材料であり、従来の性能を凌駕するには新物質の開拓が求められる。本研究では、従来のトライアンドエラーによる合成や実験から脱却し、より効率的かつ最短ルートでの物質探索・材料設計や材料合成を目指している。材料の構造とその充放電反応メカニズムを解明して高性能材料の設計に繋げるというのは勿論のこと、材料合成プロセスにオペランド計測を取り入れて最適な合成条件の理解や未知な中間物質の発見を狙っている。

新規性・独創性

- 構造・電池特性の相関に基づく新材料設計・材料合成
- (放射光) X線・中性子・電子回折による材料の平均・局所構造解析
- オペランド計測による電池反応メカニズムの解析
- 合成反応プロセスのオペランド計測による主要因子の可視化
- 従来のトライアンドエラーによる合成から脱却した効率的な新材料合成

研究内容



リチウムイオン電池およびナトリウムイオン電池でも、正極材料の性能向上には異種金属元素のドーピングが一般的であるが、材料の結晶構造への影響は分かっていることが多い。我々は中性子および電子回折を駆使して金属配列を詳細に調べ、金属配列の制御によって電池寿命を大幅に改善することに成功している。また、従来は放射光施設を必要とした電池のその場観察も現在ではラボスケールで行え、充放電メカニズムの解明と高性能材料の設計に役立っている。さらに、その場観察技術を材料合成にも応用し、合成プロセス中のオペランド計測によって金属の価数変化といった合成反応過程をリアルタイムで捉えている。

まとめ

- 先端計測による電極材料の構造と高性能化因子の抽出、それに基づく材料設計
- オペランド計測による合成反応プロセスの可視化
- 効率的な材料設計および材料合成条件の最適化と未知中間相の発見に期待

論文・特許

- K. Kubota, T. Asari and S. Komab, *Adv. Mater.* **35**, 2300714 (2023).
- K. Kubota, M. Miyazaki, E. J. Kim, H. Yoshida, P. Barpanda and S. Komaba, *J. Mater. Chem. A* **9**, 26810-26819 (2021).
- A. Kamiyama, K. Kubota, D. Igarashi, Y. Youn, Y. Tateyama, H. Ando, K. Gotoh and S. Komaba, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 5114-5120 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

ペロブスカイト太陽電池の開発

Keywords 太陽電池, ペロブスカイト太陽電池, 薄膜素子

グループリーダー／Group Leader

白井 康裕 Shirai Yasuhiro

✉ SHIRAI.Yasuhiro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/shirai_yasuhiro



研究概要

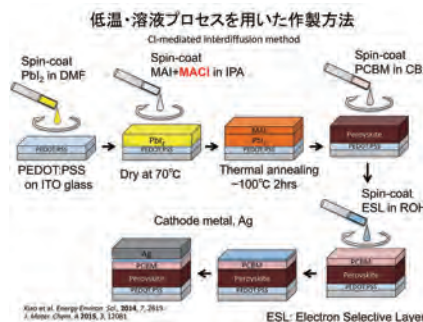
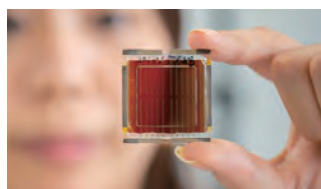
従来技術では電力の高コスト体質増長や設置場所の制約等により継続した普及は困難である。本研究では、従来技術の壁を突破する画期的な次世代素子を目指し、ペロブスカイト結晶を用いる太陽電池開発を推進している。

ペロブスカイト太陽電池の特徴は、100℃程度の低温塗布プロセスで作製可能で、その変換効率率は25%を超えるなど優れた特性がある。ただし、耐久性や大面積化には課題があり実用化に至っていない。本研究では、低温プロセスで成膜可能な新規材料や作製プロセスを開発し、これらの問題の解決を目指す。

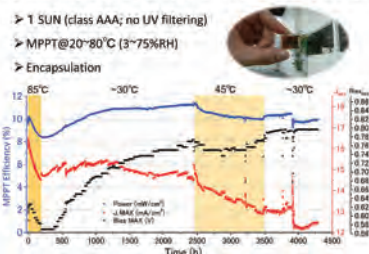
新規性・独創性

- 効率20%超で1000時間を超える耐久性
- 100℃未満のデバイス作製プロセス
- 高効率・高耐久性(連続発電4000時間超)の半透明太陽電池

研究内容



Long-term operation of sputter NiOx based perovskite



ペロブスカイト太陽電池は塗布プロセスと100℃未満のアニーリング処理の繰り返しで作製できるため、Roll-to-rollなどを適用する事が可能である。また、当初は耐久性に課題があったが、新規インターフェース材料開発により高温（85℃）環境で1000時間超の連続発電後も初期値の7割以上の変換効率を維持するペロブスカイト太陽電池の開発も可能となった。

また、室温程度の環境では4000時間を超える連続発電も可能である。半透明な素子も容易に作れることから、将来的にはこれまで太陽電池の導入が困難であった窓や建材への適用も可能である。

将来的には、ペロブスカイト太陽電池の多接合化により、光電変換効率30%を超える素子の実現も可能と考えられる。

有機系太陽電池の耐久性テストプロトコル: ISOS protocols (Nat. Energy 2020, 5, 35.)



約10年相当(?)の加速劣化試験(85°C, 1sun) (ISOSプロトコル ISOS-L-2に相当)

- ✓ 光量加速: 1sun連続照射は約6倍(設備利用率~16%を想定)
- ✓ 高温加速: 実環境45°C想定なら、2⁴=16倍(10°C毎に2倍の法則適用した場合)
→ しかし、ISOS-L-2(85°C)のテストが寿命約10年に相当するかどうかは不明
- ✓ 各種温度・光量空間内での耐久性テストによる加速因子の妥当性を検証
→ 例: 85°C (vs 45°C) @ 3sun が妥当なら、1000h連続照射は約30年に相当

まとめ

低温プロセスによる効率20%超(1cm角)デバイスを実現した。さらに劣化メカニズム解析により新規インターフェース材料を開発し、1000時間超の高耐久性を実現した。今後は実用化を見据えた研究として、これまでの変換効率や耐久性を維持しつつ、素子の面積化を進める必要がある。

論文・特許

- A. R. M. Alghamdi, M. Yanagida, Y. Shirai, G. G. Andersson and K. Miyano, *ACS Omega* 7, 12147–12157 (2022).
- M. B. Islam, M. Yanagida, Y. Shirai, Y. Nabetani and K. Miyano, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 195, 323–329 (2019).
- M. B. Islam, M. Yanagida, Y. Shirai, Y. Nabetani and K. Miyano, *ACS Omega* 2, 2291–2299 (2017).

Organic-inorganic hybrid solar cells

Keywords Solar cell, Perovskite, Dye-sensitized, Interface, Stability, High efficiency

主席研究員／Chief Researcher

イスラム アシュラフル Islam Ashraful

✉ ISLAM.Ashraful@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/islam_ashraful



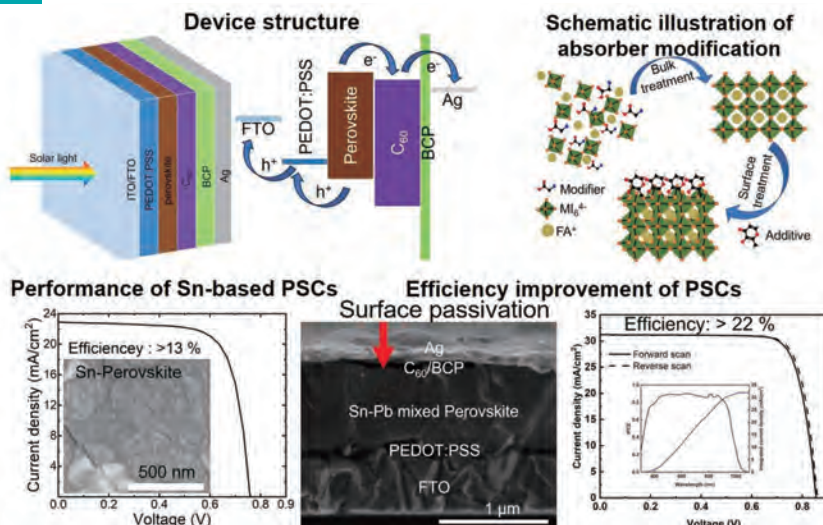
Research Summary

Photovoltaic (PV) systems have very little impact on the environment, making them one of the cleanest power-generating technologies available. Organic-inorganic hybrid perovskite solar cells have high potential as a next generation PV due to its rapid increase in the power-conversion efficiency. Improvement in durability and efficiency through the development of intelligent materials and new device structure are the current issues facing these solar cells. The key concerns are the development of an environmentally friendly lead-free perovskite layer and new charge carrying materials (ETM and HTM).

Novelty / Originality

- Materials engineering strategies to synthesize and fabricate stable perovskites.
- Size controlled growth of perovskite crystals and reactive surface engineering
- Development of inverted perovskite architecture with high stability
- Development of Pb free Sn-PSCs with new levels of efficiency and operational stability
- Development of low band gap stable Sn-Pb based PSC for tandem solar cell.

Research Contents



We have successfully fabricated highly stable Pb-PSCs, toxic Pb free Sn-PSCs and low band gap Sn-Pb-PSCs through materials engineering strategies, reactive perovskite surface and unique device architectural engineering. The rapid crystallization process of tin halide perovskite compounds results in severe electronic defects which limits the open circuit voltage. We implement bifunctional and electron withdrawing additives with FASnI_3 to reduce the electronic defects and enhance electron transportation.

Summary

The efficiency and operational stability of PSCs are heavily influenced by the inherent features of perovskite films, such as trap densities, defects forming at grain boundaries and interfaces, and bandgap mismatching. To facilitate the development of highly efficient and stable perovskite solar cells and their upscaling for practical applications we focused on the strategies through innovative ideas on materials compositional engineering, and defect passivation using novel additive and interfacial engineering.

References

- T. H. Chowdhury, R. Kaneko, T. Kaneko, K. Sodeyama, J. Lee and A. Islam, *Chem. Eng. J.* **431**, 133745 (2022).
- M. E. Kayesh, K. Matsuishi, R. Kaneko, S. Kazaoui, J. Lee, T. Noda and A. Islam, *ACS Energy Lett.* **4**, 278-284 (2019).
- M. E. Kayesh, T. H. Chowdhury, K. Matsuishi, R. Kaneko, S. Kazaoui, J. Lee, T. Noda and A. Islam, *ACS Energy Lett.* **3**, 1584-1589 (2018).

ハロゲン化金属ペロブスカイト太陽電池の研究開発

Keywords 太陽光発電, 太陽電池, ペロブスカイト, 界面制御, 酸化ニッケル

主幹研究員 / Principal Researcher

柳田 真利 Yanagida Masatoshi

✉ YANAGIDA.Masatoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yanagida_masatoshi



研究概要

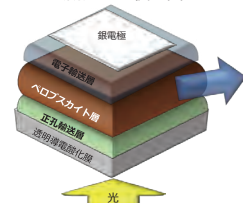
ペロブスカイト太陽電池は塗布やコーティング及び、100℃程度のアニールプロセス等で作製可能で、太陽光に対する光電変換効率も20%と高く、次世代型太陽電池として、大面積化プロセス開発が進んでいる。一方で、実用化に向けて、高い光電変換効率を維持して、約20年の長期信頼性が求められている。通常の無機半導体と異なり、ペロブスカイトでは内部におけるイオンの移動が顕著に観測され、またペロブスカイトは水や酸素分子によって劣化が進行する問題がある。NIMSでは太陽電池を構成するペロブスカイト層と電荷輸送層等の界面を跨るイオンや分子の移動が劣化要因となることを明らかにしており、界面の制御によりイオンや分子の移動を抑制し、長期信頼性を実現したいと考えている。

新規性・独創性

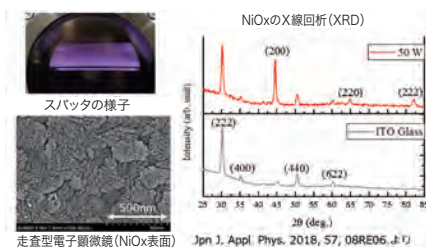
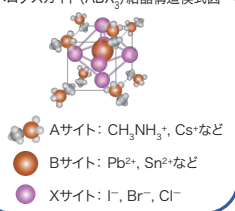
- 光電変換効率20%で1000時間連続発電のペロブスカイト太陽電池の開発
- 酸化ニッケル正孔輸送層製膜手法確立
- ペロブスカイト太陽電池作製プロセスのデータベース化
- 光電変換効率と耐久性の両立を目指した界面処理のデータベース化

研究内容

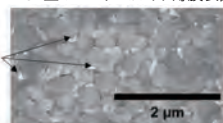
ハロゲン化金属ペロブスカイト太陽電池模式図



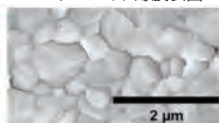
ペロブスカイト(ABX₃)結晶構造模式図



NiOx上のペロブスカイト薄膜表面

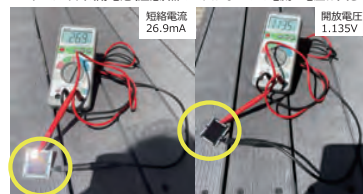


NiOxを表面処理したペロブスカイト薄膜表面



ACS. Appl. Energy Mater, 2021, 4, 4530-4540より

ペロブスカイト太陽電池(注意)黒マスクがないので電流と電圧は大きめ



電気化学会関東支部2023 年関東支部セミナー「1から学ぶ電気化学のいろは」太陽光発電—太陽電池の基礎から最新動向—より

スパッタ装置で製膜した酸化ニッケル(NiOx)を正孔輸送層として用いたペロブスカイト太陽電池は高い耐久性を示すことを見出していたが、光電変換効率は11～15%程度と低いままであった。NiOx上にペロブスカイト層を形成する際、ペロブスカイト層が一部、分解することがその要因と判明し、NiOx表面を界面処理してからペロブスカイト層を形成することによって、ペロブスカイト層の結晶性が改善し、光電変換効率が大きく向上した。NiOx表面の界面処理において、NiOx薄膜の厚み依存性の検討から、界面処理材料がNiOx薄膜のピンホール(下地の透明導電酸化膜まで繋がるNiOx薄膜の穴)を埋めて、NiOxの欠陥をパッシベーションしていることもわかった。

まとめ

- 酸化ニッケル層において界面処理によって、ペロブスカイト層と酸化ニッケルの反応を抑制し、ペロブスカイト層の結晶性を向上させ、酸化ニッケル層のピンホールを埋め、酸化ニッケルの欠陥をパッシベーションすることがわかった。
- 酸化ニッケル正孔輸送層製膜手法、界面処理手法を確立し、高い光電変換効率(20%以上)と高い耐久性を示すペロブスカイト太陽電池を開発した。
- NIMS プレスリリース2022年9月16日参考 <https://www.nims.go.jp/news/press/2022/09/202209160.html>

論文・特許

- 特開2018190928号 ペロブスカイト太陽電池およびその製造方法
- 特開2023036564号 ペロブスカイト太陽電池およびその製造方法、並びに界面が低欠陥化されたニッケル酸化膜およびニッケル酸化膜の界面処理方法
- D. B. Khadka, Y. Shirai, M. Yanagida, T. Tadano and K. Miyano, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2202029 (2022).

Exploration of Pb-free halide perovskite materials for solar cell application, degradation dynamics, and device physics

Keywords Perovskite Solar cells, Pb-free perovskite solar cells, Carrier transport layer, Interface, Defect, Device degradation dynamics, Optoelectronic properties, Device Physics

主任研究員 / Senior Researcher

カダカ ビ ドウラバ Khadka Dhruba Bahadur

✉ KHADKA.B.Dhruba@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/khadka_b_dhruba

Research Summary

Photovoltaics technology is most promising renewable-energy for long term green energy solution with well satisfied eco-environmental issues. Halide-Perovskite-Based Solar Cells have demonstrated high potential as a low-cost photovoltaic technology. However, device stability and toxicity of lead-based HPSCs have imposed challenges for its commercialization. Regardless of the high performance of Pb-HPSCs, therefore, it is obligatory to pave a new path to explore environmentally-friendly lead-free perovskite materials for photovoltaic and applications beyond photovoltaics. Indeed, there are a number of challenge to grow a high quality material and design optimal device configuration for the Pb free materials applications. There are needs for systematic experiments and in depth understanding of optoelectronics properties to get stable and efficient Pb free HaPSCs and its potential applications in other optoelectronic fields.

Novelty / Originality

- Fabrication of high efficiency and stable Pb-free perovskite solar cells.
- Investigation of device degradation mechanism and device physics.
- Exploration of interfacial band alignment and transport layer engineering

Research Contents

Fig. 1. Development of Pb-free perovskite solar cells

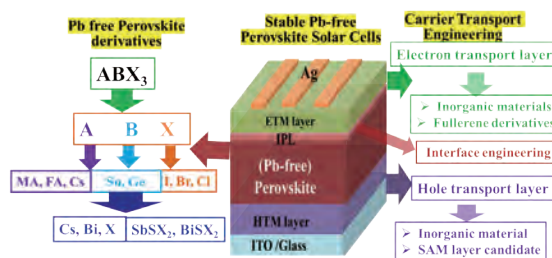


Fig. 2. Fabrication of Pb-free perovskite solar cells

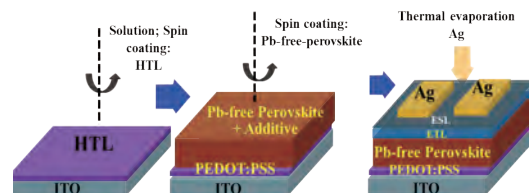


Fig. 3. Exploration of device degradation dynamics

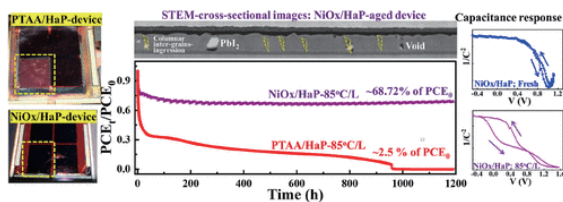
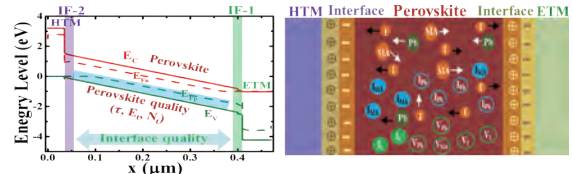


Fig. 4. Device physics and simulations



Summary

- Development of high efficient and stable Pb-free perovskite solar cells by material and carrier transport engineering.
- Unravelling the device degradation phenomena by insitu characterizations. Investigation of photophysics and device simulation.
- Exploration of new carrier transport and interface band engineering

References

- D. B. Khadka, Y. Shirai, M. Yanagida, T. Tadano and K. Miyano, *Chem. Mater.* **35**, 4250-4258 (2023).
- D. B. Khadka, Y. Shirai, M. Yanagida, T. Tadano and K. Miyano, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2202029 (2022).
- D. B. Khadka, Y. Shirai, M. Yanagida and K. Miyano, *ACS Appl. Energy Mater.* **4**, 11121-11132 (2021).

エネルギー変換界面反応ダイナミクスのその場追跡

Keywords 電気化学, 表面物理化学, 表面増強赤外分光法, 表面増強ラマン, 非線形レーザー分光法

主席研究員 / Chief Researcher

野口 秀典 Noguchi Hidenori

✉ NOGUCHI.Hidenori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/noguchi_hidenori



研究概要

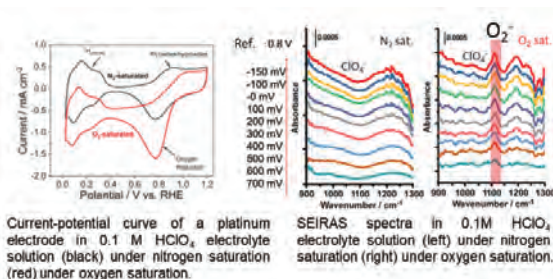
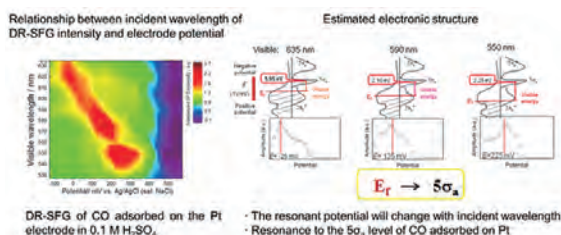
エネルギー変換プロセスの多くは、固体と溶液が接する界面で進行しています。したがって、反応機構を詳細に理解するためには、溶液中に埋もれた表面での吸着分子の構造や配向、さらには界面電子構造に関する情報を、高感度かつ選択的にその場で測定できる手法が求められています。表面・界面にとっても敏感な振動分光法のひとつである和周波発生 (SFG) 分光法や時間分解分光法 (ポンプ - プローブ法) を固体/溶液界面に適用することで、表面吸着種の構造を反応が進行している溶液中「その場」で調べ、表面反応 (電気化学反応、光エネルギー変換反応、生体関連界面) ダイナミクスを分子レベルで明らかにすることが出来ます。

新規性・独創性

- 二次の非線形光学効果を利用した振動分光法で、表面・界面選択的な分光法である。
- 光を用いるので、試料を破壊することなく「その場計測」が可能である。
- パルスレーザーを使った想定法なので、過渡的な表面現象を追跡可能である。

研究内容

周波数の異なる2つのレーザー光を試料に照射すると、2つの周波数の和の光が界面だけから発生します。その和周波光を分析することで界面の分子構造を知ることができます。振動和周波発生 (VSFG) 分光法は、波長固定の可視光と、波長可変の赤外光を試料表面に入射することで、表面の振動スペクトルを得ることができます。一方、入射する可視光の波長も変えることで、表面に存在する分子の構造だけでなく表面の電子構造もプローブ可能な二重共鳴和周波発生 (DR-SFG) 分光システムを構築しました。ここでは、電解質溶液中のPt電極表面の電子構造が電位によって変化する様子の観測に成功しました。



車載用の燃料電池では、スルホン酸基を有する酸性の固体高分子電解質膜が多く使われています。しかし、燃料電池反応で最も重要となる酸素還元反応 (ORR) 機構の理解は不十分です。ORR 反応は、酸素とプロトン (H⁺)、水が関与する単純な反応であり、その中間体もおおよそ想定されるが、実際に反応中間体の検出例がないため、律速段階の特定すらできない状態でした。反応中間体未検出の理由の一つとして考えられるのは、中間体の表面濃度が低く検出できないことにあります。今回、表面増強赤外吸収分光 (SEIRAS) に用いる基板を工夫し感度を向上させることで、これまで観測できなかった酸性溶液中でのORR反応中簡体の観測に成功しました。

まとめ

- 溶液中に埋もれた界面の電子構造を調べるための新たな界面分光法の開発に成功した。
- 界面電子構造情報から、各種電極触媒の活性の要因を議論する事が可能となる。
- 種々の材料界面の分子構造情報を得ることで、機能性材料開発における基礎的情報を得ることが出来る。

論文・特許

- H. Noguchi, T. Ishimaru and K. Uosaki, *J. Electroanal. Chem.* **896**, 115478 (2021).
- S. Kukunuri and H. Noguchi, *J. Phys. Chem. C* **124**, 7267-7273 (2020).

データ駆動型電気化学材料設計

Keywords 物理電気化学, 電極触媒材料, Power-to-X, Human-Machine Collaboration, 電極過程科学

主幹研究員／Principal Researcher

坂牛 健 Sakaushi Ken

✉ SAKAUSHI.Ken@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakaushi_ken



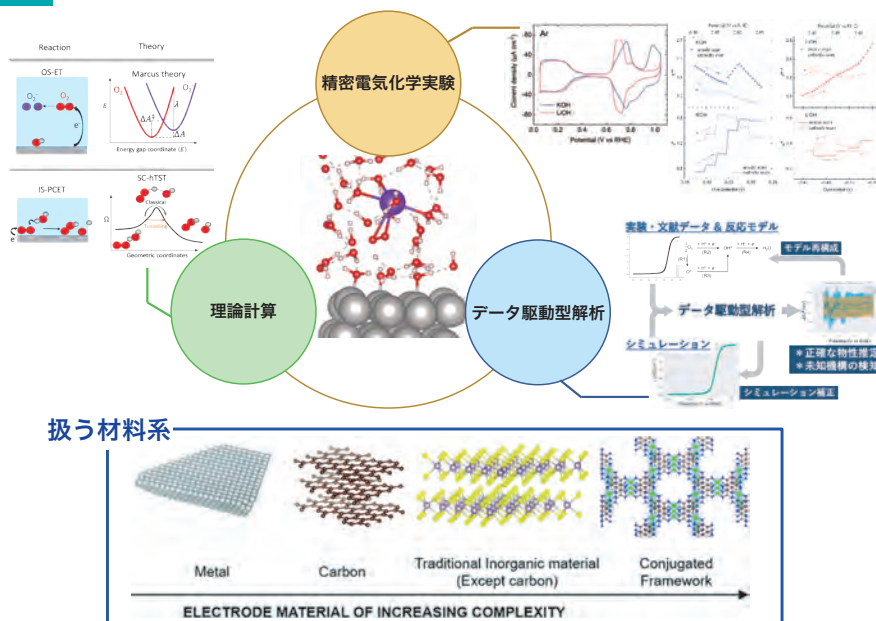
研究概要

- 背景：カーボンニュートラルを達成するための材料開発
- 社会ニーズ：大規模グリーン水素製造を達成するための電極材料
- 特徴：汎用元素・高活性・高耐久性で幅広い反応条件に対応した電極材料
- ポイント：実験・データ科学・理論が連携した新規材料の高速・高効率な探索と発見
- 従来技術における課題：目的特性を持つ材料の探索および最適化にかかる時間
- 成果：汎用元素の組合せによる目的特性の創出

新規性・独創性

- 独自性：データ駆動型手法 (AI) を活用した高速・高効率な電極触媒材料探索
- 従来技術との比較：目的特性を持つ汎用元素型材料を高速・高効率で発見可能
- 従来技術との性能比較：数千個規模の候補材料の数%を検討すれば最適化された材料が得られる

研究内容



精密電気化学測定・理論計算・データ科学の連携による、高速・高効率な材料探索と発見。

まとめ

- 成果：AIと人の連携による高速・高効率材料探索のための方法論構築
- 実用化の可能性：次世代水電解装置向けの汎用元素型電極触媒の創製
- 今後達成したいこと：材料探索と反応機構解析が統合されたAIアルゴリズムの開発

論文・特許

- 坂牛 健, 濫田 靖. 電気化学 **91**, 169-177 (2023).
- W. Hoisang and K. Sakaushi, *Curr. Opin. Electrochem.* **36**, 101136 (2022).
- K. Sakaushi and H. Nishihara, *Acc. Chem. Res.* **54**, 3003-3015 (2021).

高スループット第一原理計算とAI手法による全固体電池用の固体電解質材料デザイン

Keywords 全固体電池, 固体電解質, 第一原理計算, 分子動力学計算, マテリアルズインフォマティクス, 機械学習

主任研究員 / Senior Researcher

ハレム ランディ Jalem Randy

✉ JALEM.Randy@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/jalem_randy



研究概要

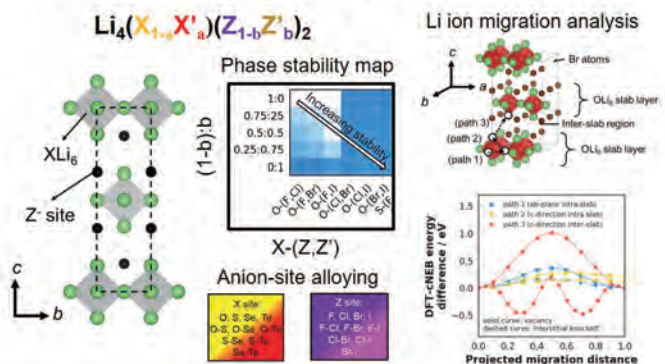
全固体電池は、非可燃性の固体電解質と高電圧の正極材料または高容量の電極の組み合わせにより、高エネルギー密度と高い安全性を備えているため、次世代のエネルギー貯蔵において最も有望な候補として広く認識されている。特に、全固体電池はの優れた特徴は、固体電解質の高い単一イオン伝導性、優れた熱安定性、簡素化されたパッケージング設計に由来している。本研究では、高スループット第一原理計算とAI手法を用いて、Liイオン電導度の高い固体電解質の新規材料探索を行う。

新規性・独創性

本研究は、高精度の第一原理の分子動力学計算を用いて材料物性(例: Liイオン伝導度)を計算し、AIベースの材料物性最適化手法に基づいて広範な材料探索空間で優れた新しい化合物を系統的に探索すること。そして、イオン伝導度だけでなく、材料の熱力学的安定性も評価し、現実的な候補材料を提案することができる。

研究内容

Li-rich antiperovskite solid electrolytes



近年、Liリッチの逆ペロブスカイト構造を持つ化合物は、全固体電池用の固体電解質として大きな関心を集めている。逆ペロブスカイト構造を持つ候補固体電解質の報告はまだ比較的小さいですが、このような材料に存在する結晶系や構造の派生物は非常に多様である。本研究では、密度汎関数理論の計算を用いて、一般式 $\text{Li}_4(\text{X}_{1-a}\text{X}'_a)(\text{Z}_{1-b}\text{Z}'_b)_2$ ($\text{X}, \text{X}' \in \{\text{O}^{2-}, \text{S}^{2-}, \text{Se}^{2-}, \text{Te}^{2-}\}$; $\text{Z}, \text{Z}' \in \{\text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-\}$; $0 \leq a, b \leq 1$)を持つ逆ペロブスカイト構造の化合物500以上を材料スクリーニングを行った。固体電解質としての候補新規化合物の特定、固体電解質設計の有用な記述子の明確化、およびこの系における特徴的なLiイオン拡散メカニズムの決定を目指した。約167の化合物が、分解エネルギーが0.1 eV/原子以下で熱力学的に安定・準安定であると予測された。特に、 $\text{Li}_4\text{O}(\text{Cl}_{1-b}\text{Br}_b)$ 系、酸素/ヨウ素を含む組成、および酸素/硫黄を含む組成に属する少なくとも20の新規化合物を強調した。Liリッチの逆ペロブスカイト化合物の熱力学的安定性と電子バンドギャップエネルギーの良好な記述子として、Goldschmidt許容因子の改良された形式が見つかった。一方、イオンの経路の空隙空間マップから抽出した幾何学的特徴は、イオン輸送特性の有用な記述子として特定された。第一原理分子動力学計算に基づいて、代表的な2つの化合物である $I4/mmm$ Li_4OBr_2 と $Cmcm$ $\text{Li}_6\text{O}_3\text{S}_3\text{I}_8$ のバルク Li^+ イオン活性化エネルギーはそれぞれ0.29および0.46 eVと推定された。

まとめ

有望なインシリコ候補固体電解質材料の実際の合成は現在進行中です。また、大規模な材料スクリーニングのために開発された計算手法は、固体電解質の探索だけでなく、他のバッテリー材料の探索にも使用される予定である。生成されたデータセットは、将来のデータ駆動型材料設計の取り組みにおいても非常に有用と期待されている。

論文・特許

- S. H. Jang, Y. Tateyama and R. Jalem, *Adv. Funct. Mater.* **32**, 2206036 (2022).
- R. Jalem, B. Gao, H. K. Tian and Y. Tateyama, *J. Mater. Chem. A* **10**, 2235-2248 (2022).
- R. Jalem, Y. Tateyama, K. Takada and M. Nakayama, *Chem. Mater.* **33**, 5859-5871 (2021).

Battery and energy storage technologies

Keywords Battery materials and systems, Ion transport, Electrochemistry, Battery safety

グループリーダー / Group Leader

ユ デニス ヤウワイ Yu Denis Yau Wai

✉ YU.Denis@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yu_denis



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

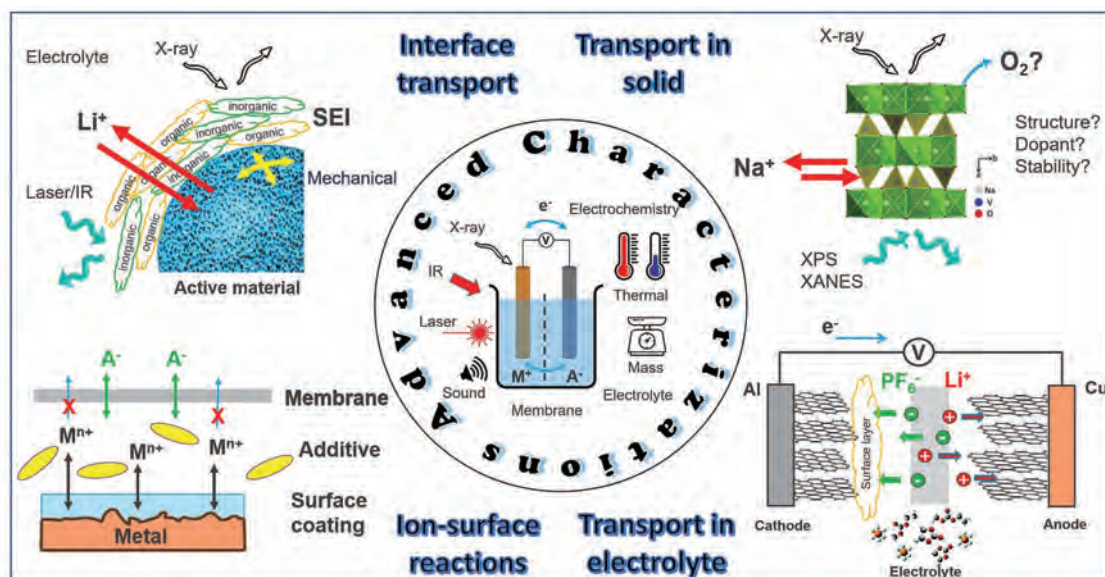
Research Summary

Battery is a key component to sustainable development that would increase energy efficiency and also enable fast adoption of renewable energies. The performances of batteries such as capacity, power, cycle life, safety and cost depend on the materials that are used inside. Prof. Yu's research focuses on developing novel materials (cathode, anode, membrane and electrolyte) for energy storage applications and understanding their fundamental charge-discharge mechanisms and stability.

Novelty / Originality

- Lithium-ion battery materials and characterizations
- Anionic reactions in sodium-ion cathodes
- High power dual-ion batteries and anion intercalation
- Technologies on electrolyte, membranes and battery safety
- Low cost metal-metal batteries

Research Contents



In a battery, ions are stored inside material structures, transported through interfaces and electrolyte, as well as reacted on surfaces. Our group uses advanced characterizations to study ion transports and charge-discharge mechanisms in various energy storage systems in order to develop technologies applicable for industry.

Summary

Prof. Denis Yu received his A.B. (Physics) from Princeton University and PhD (Applied Physics) from Harvard University. After completing his PhD, he moved to Japan to work as an engineer at SANYO Electric Co. Ltd. for 8 years, developing cathode and anode materials for Li-ion batteries. Afterwards, he joined Nanyang Technological University and then City University of Hong Kong, and was promoted to associate professor in 2018. He joined the National Institute for Materials Science in 2022 and is now also an affiliated professor at the University of Tsukuba.

References

- Y. Wang, Y. Zhang, S. Dong, W. Zhou, P. Lee, Z. Peng, C. Dang, P. H. L. Sit and J. Guo, D. Y. W. Yu, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2103360 (2022).
- T. Tan, P.-K. Lee, M. Marium, N. Zettsu and D. Y. W. Yu, *ACS Appl. Energy Mater.* **5**, 11254 (2022).
- Q. Duan, Y. Wang S. Dong and D. Y. W. Yu, *J. Power Sources* **528**, 231194 (2022).

金属リチウムを使いこなす

Keywords 蓄電池, 金属リチウム, 電気化学

主幹研究員 / Principal Researcher

西川 慶 Nishikawa Kei

✉ NISHIKAWA.Kei@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nishikawa_kei



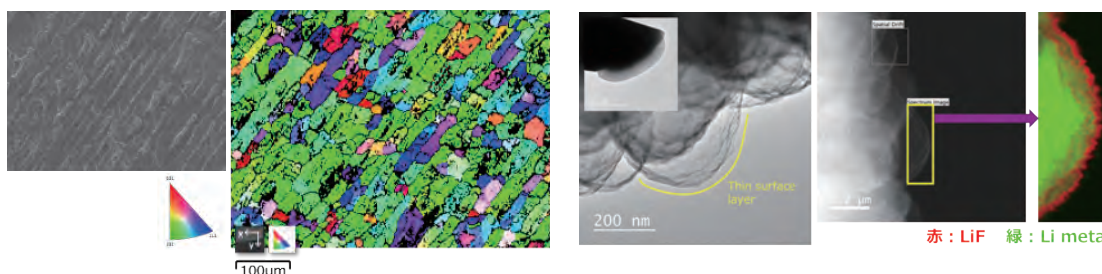
研究概要

エネルギーを効率よく、「つくる」、「ためる」、「つかう」ことは、次世代エネルギーシステムを構築のために必要不可欠である。リチウムイオン電池は特に「ためる」、「つかう」分野で重要なデバイスであり、その高性能化に関する研究開発は世界中で活発に行われている。本研究は、エネルギー密度向上のために、「金属リチウム」負極を使いこなすことを目的としている。金属リチウムの金属学的物性の制御など、新しい視点からの研究に加え、充放電条件の違いによる電極形態の変化と電極性能の相関性や、電極表面のナノスケール解析、充放電中のリチウムの物質輸送現象の解明などに取り組んでいる。

新規性・独創性

- 独自性：溶融リチウムを用いたリチウム金属箔の作成・超微小モデル電極を用いたリチウム金属表面皮膜の解析
- 従来技術との比較：結晶粒サイズや配向性を制御したリチウム金属箔作製の可能性・FIB加工プロセスを経ずにcryo-TEMによる微小領域観察が可能
- 従来技術との性能比較：多量の結晶粒界の導入による過電圧の低減・デンドライト状に析出したリチウム金属表面の皮膜解析が可能

研究内容



溶融させたリチウムを急冷し、箔化することで微細な結晶粒を有するリチウム金属を作成(左)。次世代負極であるリチウム金属を使いこなすための有望な作成方法。

超微小電極上に析出させたリチウム金属の表面皮膜をcryo-STEM-EELSにより組成分析を行った例(右)。充放電条件によるリチウム金属電極の表面状態を正確に理解することが可能となる技術。

まとめ

- 成果：結晶粒を制御したリチウム金属の作成 (TRL:1→2)
成果：超微小電極を活用したリチウム金属の充放電反応解析(解析手法)
成果：干渉計技術を利用したリチウムイオン濃度の可視化(解析手法)
- 実用化への可能性：ラボでの手作業のレベルからリチウム箔作成機の試作機の開発へ
- 今後解決すべき問題点：箔作製のための各プロセス条件の検討が必要。様々な解析手法を活用し、リチウム金属の充放電メカニズムの包括的理解と、電極としての活用のための指針の獲得。
- 今後達成したいこと：リチウム金属負極二次電池の開発のための要素技術の確立

論文・特許

- G. Kamesui, K. Nishikawa, M. Ueda and H. Matsushima, *ACS Energy Lett.* **7**, 4089-4097 (2022).
- K. Nishikawa and K. Shinoda, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 3922-3927 (2021).
- 特開2022037341号 二次電池用負極、その製造方法およびそれを用いた二次電池

軽量・小型なリチウム空気電池開発

Keywords リチウム電池, 空気電池, 二次電池, 軽量バッテリー, 高エネルギー密度電池, カーボンナノチューブ

主任研究員 / Senior Researcher

野村 晃敬 Nomura Akihiro

✉ NOMURA.Akihiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nomura_akihiro



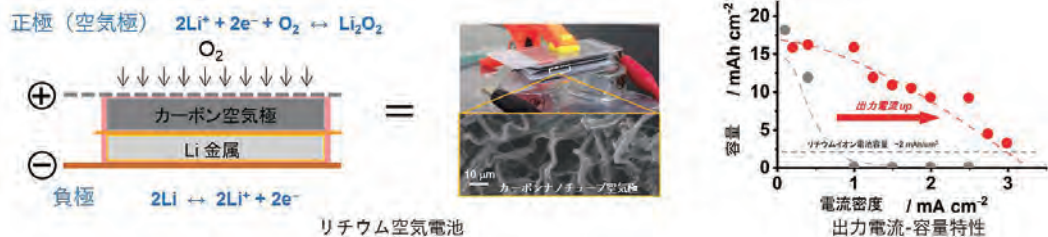
研究概要

ドローンや空飛ぶ車などの電動飛行体には軽量かつ大容量なバッテリーが求められています。バッテリーの重量やサイズは、電気自動車を含めた様々な電子機器の使用性や操作性を決定づける重要な要素です。軽いけれども長持ちなバッテリーをつくるには、重い元素を含まず、軽くてもち運びが容易な材料だけで構成できる、新しい発想の電池システムが必要です。空気に含まれる酸素を電池活物質として活用することで、空気がある環境ならどこでも利用できる、軽量で大容量なバッテリーを実現する新しい電池システムを開発しています。

新規性・独創性

- リチウム金属と酸素を活用し、現行リチウムイオン電池比5-10倍高エネルギー密度なリチウム空気電池を開発
- 柔軟かつ強じんなカーボンナノチューブ(CNT)の電極利用により、大容量リチウム空気電池を実現
- 酸素ガスを取り込む空気極の高空隙化により、現行リチウムイオン電池に匹敵する高出力電流取り出しに成功
- ラボスケール電池セルからポータブル電池電源へ、「リチウム空気バッテリー」を実現する電池システムスケールアップ技術開発

研究内容



リチウムはとても軽い金属で、そのまま電極(負極)利用することで高い電池電圧を与えます。リチウムと空気中の酸素を電池活物質として活用することで、リチウムイオン電池の限界エネルギー密度を大幅に超える、充電してくり返し使うことができるリチウム空気電池が構成されます。

リチウム空気電池を実際に動かすには、周囲の空気から酸素ガスを効率的に取り込んでリチウムと反応させる電極(空気極)が重要な役割を果たします。例えば、不織布状の高導電ネットワークパスをつくるカーボンナノチューブ(CNT)を電極材料に用いることで、すかさず酸素をすばやく吸収することができ、なおかつ迅速に電池反応を進めることができる、軽くて薄い空気極を作ることができます。このような空気極を用いることで、リチウムイオン電池に匹敵する出力密度でリチウムイオン電池より5-10倍も大きな電池容量が得られるリチウム空気電池を作れるようになっています。

リチウム空気電池は従来のリチウムイオン電池や乾電池のような密封型の電池と異なり、動作させるのに外気(酸素ガス)の吸収・排出が必要な開放型の電池です。実際に電源利用できるリチウム空気バッテリーをつくるには、電極をスケールアップさせつつ効率的なガス吸収・排出を可能とするシステムと、それを支える材料も合わせて必要になります。そのような材料とシステム開発を通じて、軽量でコンパクトなリチウム空気バッテリーの創出を目指しています。軽量・小型・大容量を合言葉に、ドローンの長距離・長時間飛行や電子機器の圧倒的長時間駆動に貢献する電池材料・電池システムを創出します。

まとめ

ドローンの飛行時間や電気自動車の航続距離を引き伸ばすには、バッテリーの従来限界を打ち破る軽量・小型・大容量化、すなわちエネルギー密度の圧倒的進化が不可欠です。究極のエネルギー密度を発揮するリチウム空気電池開発により、ドローンの長時間飛行や電気自動車の長距離運転を実現します。

論文・特許

- A. Nomura, E. Mizuki, K. Ito, Y. Kubo, T. Yamagishi and M. Uejima, *Electrochim. Acta* **400**, 139415 (2021).
- A. Nomura, K. Ito and Y. Kubo, *Sci. Rep.* **7**, 145596 (2017).
- 特許第7305163号 金属二次電池用カーボンナノチューブ正極およびその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

構造特性に基づく元素戦略蓄電池材料の創製

Keywords 元素戦略蓄電池, ユビキタス元素, マグネシウム, ナトリウム, 構造化学, 有機合成, 界面設計

主任研究員 / Senior Researcher

万代 俊彦 Mandai Toshihiko

✉ MANDAI.Toshihiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mandai_toshihiko



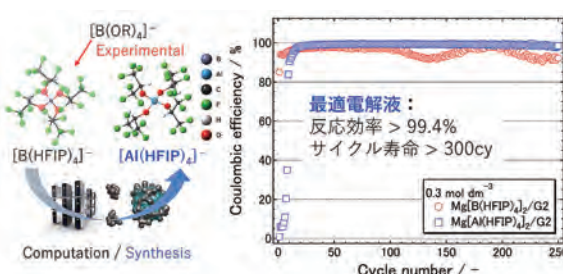
研究概要

ユビキタス元素を利用した元素戦略蓄電池は、再生可能エネルギーの高効率化に資する基盤蓄エネルギー技術として実現が期待されている。マグネシウムイオンやナトリウムイオンの電極間輸送を駆動力とする元素戦略蓄電池では、各元素固有の化学的性質に基づいた材料開発が求められる。種々の解析技術により抽出した構造特性から電気化学/溶液化学特性相関を導き出すとともに、計算科学およびデータ駆動型手法との有機的連携により有望材料を探索・設計し、有機合成/ナノ材料合成技術により具現化することで、革新的新材料を創製する。

新規性・独創性

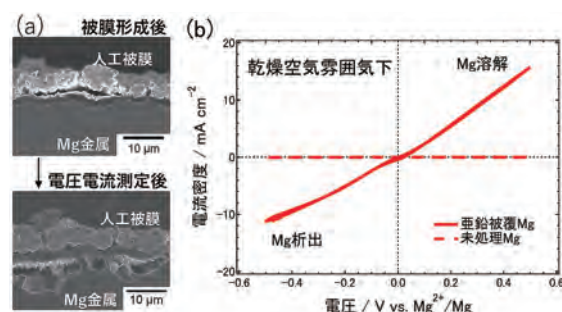
- 結晶構造と振動分光を併用することで電気化学活性種構造を同定し、電気化学特性支配因子を解明
- 計算科学に裏付けされた電解質材料の設計と有機合成技術による具現化
- マグネシウム金属蓄電池用非腐食性電解液として、負極反応効率99.4%超の世界最高性能を達成
- 緻密な系統研究に基づき、電解液溶存酸素によるマグネシウム金属の不活化機構を究明
- 人工保護被膜による金属電極の活性制御

研究内容



マグネシウム塩と有機溶媒からなるマグネシウム金属蓄電池用電解液において、ホウ素系マグネシウム塩の網羅的な化学構造・電気化学特性相関解析により、マグネシウム金属負極に好適なマグネシウム塩の骨格構造を究明した。さらにホウ素を同族元素のアルミニウムに置換することでさらなる性能向上が見込めることが計算化学的に示され、有機合成によりそれを具現化し、仮説を実験的に実証した。加えて、溶存化学種の結晶構造解析から、特性向上の構造化学的要因を解明した。最適組成の電解液は、当初98%程度であった負極反応効率を99.4%という世界最高水準まで引き上げること成功、マグネシウム金属蓄電池実現の最大のボトルネックである電解液の課題を解消するに至った。

緻密かつ系統的な実験・検証により、電解液・溶存酸素・マグネシウムの三相界面に生じる超高抵抗が、大気下でのマグネシウム金属負極の電気化学活性の喪失を引き起こすことを発見した。金属マグネシウムの高い還元力を利用して、酸素透過を抑制する人工亜鉛被膜をマグネシウム金属表面に形成させることで(a)、溶存酸素によるマグネシウムの酸化を抑え、不活性化を抑制することに成功した(b)。この成果を実用化すれば、既存のリチウムイオン電池の生産ラインをマグネシウム金属蓄電池生産用に転換して利用できるといふ、極めて画期的な基盤技術である。



まとめ

- 世界最高性能のMg金属蓄電池用革新電解液を異分野融合研究により実現
- 電池製造システムの構築において根幹をなす、革新的なMg金属用人工保護被膜を開発
- 要素技術や知見をナトリウム、カルシウム、亜鉛蓄電池に水平展開し、元素戦略蓄電池のサイエンスを深化、実電池化へと繋げる

論文・特許

- T. Mandai and M. Watanabe, *J. Mater. Chem. A* **11**, 9755-9761 (2023).
- T. Mandai, H. Naya and H. Masu, *J. Phys. Chem. C* **127**, 7987-7997 (2023).
- T. Mandai, Y. Youn and Y. Tateyama, *Mater. Adv.* **2**, 6283-6296 (2021).

電気化学スマートラボによる次世代蓄電池材料開発の加速

Keywords 次世代蓄電池, リチウム空気電池, 電解液, 水電解, メッキ

チームリーダー／Team Leader

松田 翔一 Matsuda Shoichi

✉ MATSUDA.Shoichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsuda_shoichi



研究概要

高エネルギー密度な蓄電池や水電解による水素製造の早期社会実装に向けて、電気化学材料の探索手法の高度化に対する期待は非常に高い。これまでに、大規模なデータベースが利用可能な結晶性の固体材料については、計算化学とデータ科学が連携したバーチャルスクリーニングにより材料開発の高速化が実証されている。一方で、非結晶性の蓄電池電極材料や電極触媒材料、電解液材料においては、データ科学的手法により高速・効率的に新材料探索を行うための物性データが揃っていないのが現状である。そこで、我々は、自動実験ロボットを積極的に利用し、様々な実験プロセスをハイスループット化し、大規模な実験データを短時間での取得を可能としている。取得した一連の実験データ群に対して、データ科学的手法を適用することで、革新的な電気化学材料の早期発見を主目的として研究を進めている。

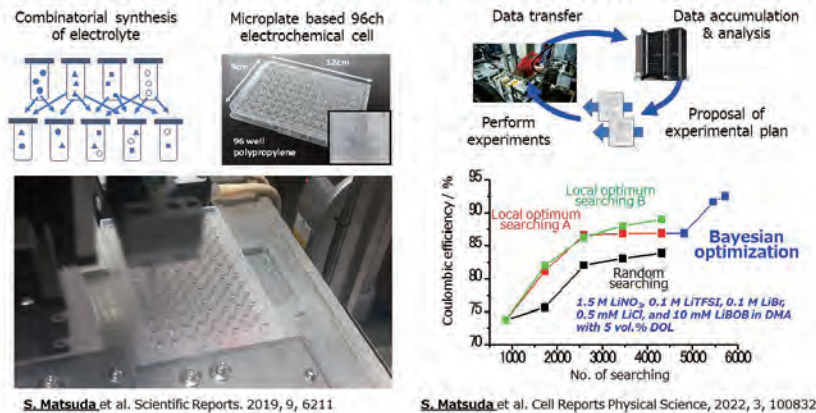
新規性・独創性

電気化学材料開発において、新規材料探索の自動化・高速化に対するニーズは高く、特に、実験の自動化・ハイスループット化に関する期待は高い。このようなニーズに対して、ロボット技術を活用した実験の自動化により、作業の高速化・高精度化が可能となる。ハイスループット実験により得られた大量のデータに対して、機械学習を代表とするデータ科学的手法を適用することで、新材料発見の時間やコストの削減が可能となる。

我々は、これまでに、蓄電池用電解液材料を対象として、電気化学自動実験ロボットとデータ科学が連携した独自の材料探索手法を開発してきた。

研究内容

Data-driven Discovery of multi-component electrolyte



蓄電池デバイスとして広く利用されているリチウムイオン電池は、既にその理論限界のエネルギー密度に迫っており、そのエネルギー密度は300Wh/kg程度が限界と推測されている。そのため、リチウムイオン電池よりも高いエネルギー密度を可実現する次世代蓄電池に関する研究が近年盛んである。我々は、リチウム空気電池や、金属リチウム電池を対象として、高エネルギー密度セル特有の劣化機構の解明、および、長期サイクルを可能とする新規材料開発に関する研究を行っている。これまでに、500Wh/kg級リチウム空気電池セルの室温での安定動作実証や、電極間クロスオーバーに伴う金属リチウム電極劣化機構の解明に成功している。

まとめ

次世代蓄電池用電解液をターゲットとして、電気化学自動実験ロボットとデータ科学が連携した独自の材料探索手法を開発し、その有効性を実証してきた。本手法は、蓄電池以外の様々な電気化学材料などにも適用可能であり、水電解材料やめっき材料への展開を進めている。併せて、高エネルギー密度蓄電池セル特有の課題解決に向けた研究開発も進めている。

論文・特許

- S. Matsuda, M. Ono, H. Asahina, S. Kimura, E. Mizuki, E. Yasukawa, S. Yamaguchi, Y. Kubo and K. Uosaki, *Adv. Energy Mater.* **13**, 2203062 (2023).
- S. Matsuda, G. Lambard and K. Sodeyama, *Cell Rep. Phys. Sci.* **3**, 100832 (2022).
- S. Matsuda, M. Ono, S. Yamaguchi and K. Uosaki, *Mater. Horizons* **9**, 856-863 (2022).

高効率な水素液化機の開発

Keywords 磁気冷凍, 水素, 磁気熱量効果

グループリーダー / Group Leader

神谷 宏治 Kamiya Koji

✉ KAMIYA.Koji@nims.go.jp ⑧ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kamiya_koji



研究概要

水素は新しいエネルギーキャリアとなり得る候補の一つとして注目されている。特に、再生可能エネルギーを利用した分散発電システムや、モビリティ（バス、トラック、鉄道、船、航空機など）において新たな役割と可能性が期待されている。水素サプライチェーンを担うキャリアの一つとして液体水素がある。液化水素はエネルギー密度の観点から有望なキャリアであるが、液化には1気圧で-253℃という極低温に冷却する必要がある。液化仕事は水素価格の3分の1を占めることから、液化水素サプライチェーンの成立には液化効率の大幅な向上が重要である。水素エネルギー社会の実現に必須である安価な水素供給に貢献するため、高効率な液化技術システムの研究開発を実施する。

新規性・独創性

従来の水素液化は、気体の圧縮・膨張を利用して行われる。気体圧縮膨張による冷凍および液化機は100年以上の歴史をもち、これ以上の劇的な性能向上は困難である。液化効率で従来方式を越える最有力候補は磁気冷凍方式であることから、磁気冷凍による水素液化技術の研究開発を実施している。磁気冷凍方式の中でも運転温度範囲が広いという特徴をもつ「能動的蓄冷式磁気冷凍」(Active Magnetic Refrigeration: AMR)という方式を採用した世界初の水素液化AMRシステムの原理実証を目指す。

研究内容

【要素技術】

①磁場発生技術

②冷凍サイクル

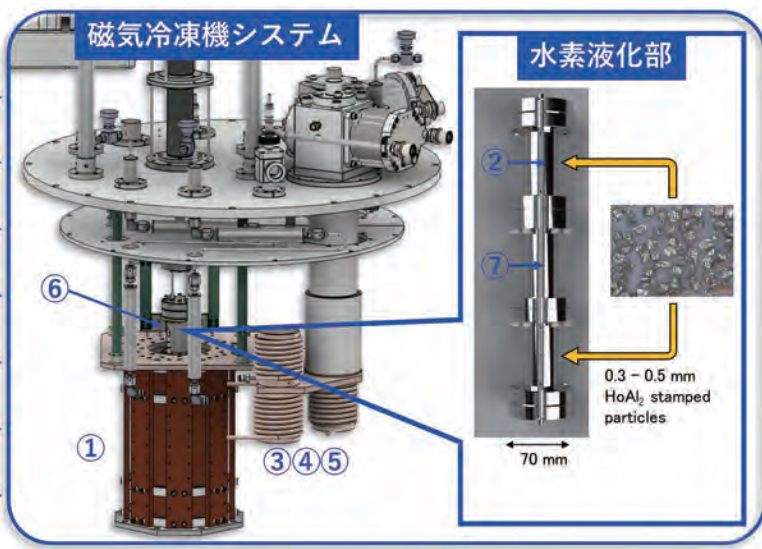
③オルソパラ変換

④熱交換器

⑤極低温ポンプ

⑥磁気応力軽減

⑦水素液面計



磁気冷凍システムの開発には、多くの要素技術が必要である。これら要素技術を統合して磁気冷凍を構築し、水素液化を実証する。磁気冷凍技術は、水素液化プラントをはじめ、宇宙での推進剤液化、量子コンピュータなどに応用可能である。

まとめ

【これまでの成果】 AMRによる水素液化に世界で初めて成功

【実用化への可能性】 AMR水素液化機の原理実証を達成することで社会実装に道を開く

【今後の課題】 AMR水素液化機の大規模化は超伝導磁石の大規模化という課題がある。

【今後の達成したい事】 社会実装に資することのできる大型AMRシステムの開発

論文・特許

- 神谷 宏治, 沼澤 健則, 松本 宏一, 増山 新二, 齋藤 明子, 竹屋 浩幸, 夏目 恭平, 白井 毅, 内田 公. 低温工学 **58**, 63-68 (2023).
- K. Kamiya, K. Matsumoto, T. Numazawa, S. Masuyama, H. Takeya, A. T. Saito, N. Kumazawa, K. Futatsuka, et al., *Appl. Phys. Express* **15**, 053001 (2022).
- 物質・材料研究機構, 金沢大学, 大島商船高等専門学校, 科学技術振興機構, 2022年4月11日, <https://www.jst.go.jp/pr/announce/20220411/index.html>.

高効率な水素再凝縮機／冷凍機の開発

Keywords 磁気冷凍, 水素, 磁気熱量効果

主幹研究員／Principal Researcher

夏目 恭平 Natsume Kyohei

✉ NATSUME.Kyohei@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/natsume_kyohei



研究概要

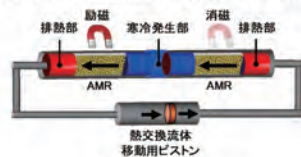
液化水素はカーボンニュートラルを目指す社会において、新しいエネルギーキャリアの候補の1つとして注目され、再生可能エネルギーを利用した分散発電システムや、モビリティ（バス、トラック、鉄道、船、航空機など）において新たな役割と可能性が期待されている。液化水素はエネルギー密度の観点から有望なキャリアであるが、液化には1気圧で20 K (-253℃) という極低温に冷却する必要がある。また、輸送や貯蔵の際には外部からの自然入熱により常時ガスが蒸発する。輸送や貯槽におけるコスト低減は重要であり、本研究では蒸発したガス（ボイルオフガス）を再度液化し貯槽に返送するための再凝縮機/冷凍機システムの高効率化の研究開発を実施している。

新規性・独創性

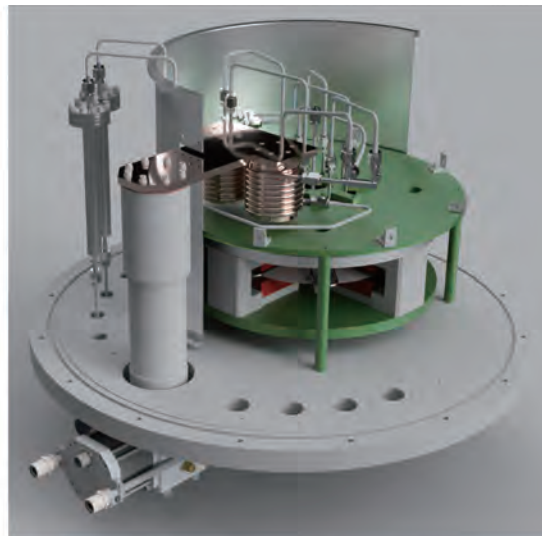
- 従来の気体の圧縮・膨張を利用した気体式冷凍機と比べると、理論的な再凝縮効率率は磁気冷凍機の方が高い。
- 気体式冷凍機に必要な圧縮機がないため小型化・省電力化・静音化が可能。
- 再凝縮の温度（~20 K）に最適な磁性材料を用いることで、磁気熱量効果を最大限発揮することができる。
- 能動的蓄冷式磁気冷凍（Active Magnetic Refrigeration: AMR）という新方式では、これまで磁気冷凍の弱点とされていた運転温度範囲を拡大できる。

研究内容

対向配置型AMR（2気筒 往復動）



4対向配置型AMR（8気筒 回転動）



AMRは粒状の磁気作業物質を容器に詰めて、粒の隙間に熱交換ガスを磁場の印加に連動して流すことによって、磁気作業物質で生じた熱/冷熱を輸送する。対向配置型AMRでは磁気作業物質は2箇所あり、磁場を発生する磁石1つが移動する。NIMSで開発した4対向配置型回転AMRでは、磁気作業物質を8等分に配置し、4つの磁石が回転することで、磁場を変化させる。

本研究では、従来に比べて効率の良い磁気冷凍システムの開発を目指している。上図は、水素再凝縮用に製作した磁気冷凍機の例で、本装置によって磁気冷凍による水素再凝縮の高効率化の研究を実施している。磁気作業物質や磁石の材質を変えることで様々な温度域に対応でき、応用先は幅広い。

まとめ

【これまでの成果】永久磁石と4対向配置型回転AMRを組み合わせた水素再凝縮用冷凍機の開発と原理実証に成功した。

【今後の課題】更なる高効率化が望ましい。熱交換器を含めた熱設計を最適化、磁石の高磁場化、磁気作業物質の大容量化が課題である。

【実用化への道筋】各構成部品の要素試験を実施し、それらを統合することで実用化のための概念実証を目指す。

論文・特許

- K. Kamiya, T. Numazawa, K. Matsumoto, S. Masuyama, A. T. Saito, H. Takeya, K. Natsume, T. Shirai and A. Uchida, *TEION KOGAKU* **58**, 63-68 (2023).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高機能・バイオ材料

マテリアル基盤

省エネルギーと新材料開発に資する超伝導応用機器の開発

Keywords 超伝導, 水素, 強磁場

グループリーダー / Group Leader

西島 元 Nishijima Gen

✉ NISHIJIMA.Gen@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nishijima_gen



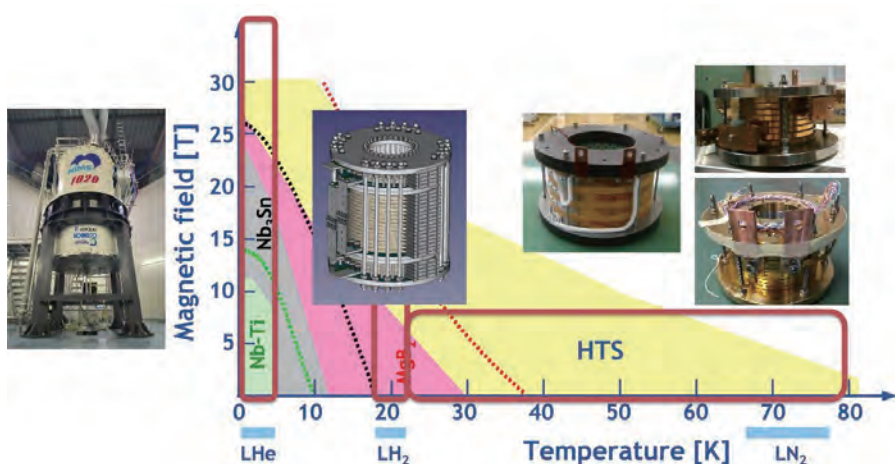
研究概要

超伝導は主として低温強磁場、高温低磁場に応用され、前者では強磁場マグネットやNMR、後者では送電ケーブル等の省エネルギー機器開発が行われている。我々は、来る水素社会に向けて、枯渇が懸念されるヘリウムではなく、液体水素の冷熱を利用した超伝導システム開発に取り組む。水素温度以上の中高温度域で動作する永久電流運転超伝導マグネット開発によって磁気冷凍システムのエネルギー効率向上に資し、強磁場発生技術と超伝導材料評価技術を高度化することで、新材料研究開発にも資する。

新規性・独創性

- 中高温度域で動作する永久電流運転超伝導マグネット開発
- 強磁場超伝導マグネット開発
- 超伝導材料評価技術の高度化

研究内容



来る水素社会に向けて、液体水素の冷熱を利用した超伝導システム開発に取り組む。水素温度以上の中高温度域で動作する永久電流運転超伝導マグネット開発によって磁気冷凍システムのエネルギー効率向上に資するとともに、将来的には液体窒素冷却により応用超伝導機器の社会実装を目指す。一方で、NIMSが長年培ってきた超伝導マグネットによる強磁場発生技術、超伝導材料評価技術のさらなる高度化にも取り組み、新材料研究開発にも資する。

まとめ

- 中高温度域で動作する永久電流運転超伝導マグネットを開発し、磁気冷凍とタイアップ
- 超伝導マグネットによる強磁場発生技術の高度化により、NMR、医療用加速器、MRI等の磁場応用機器開発に貢献
- 超伝導材料評価技術の高度化により、材料科学の発展に貢献

論文・特許

- G. Nishijima, T. Nishimura, K. Kamiya and T. Numazawa, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **33**, 4602605 (2023).
- K. Kobayashi, G. Nishijima, A. Uchida, M. Amaya, N. Banno and H. Kitaguchi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **30**, 9000204 (2020).
- G. Nishijima, H. Kitaguchi and K. Takeda, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **28**, 4300405 (2018).

MgB₂超伝導線材の低温焼結

Keywords 超伝導線材, 軽量, 超伝導磁石, 磁気浮上, 電動航空機

主席研究員 / Chief Researcher

藤井 宏樹 Fujii Hiroki

✉ FUJII.Hiroki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/fujii_hiroki



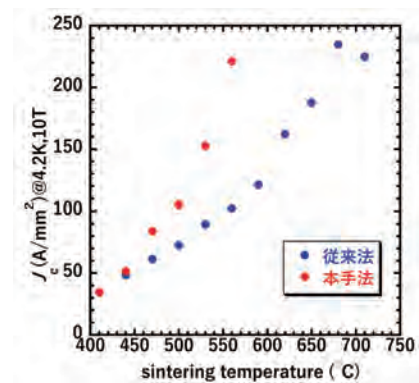
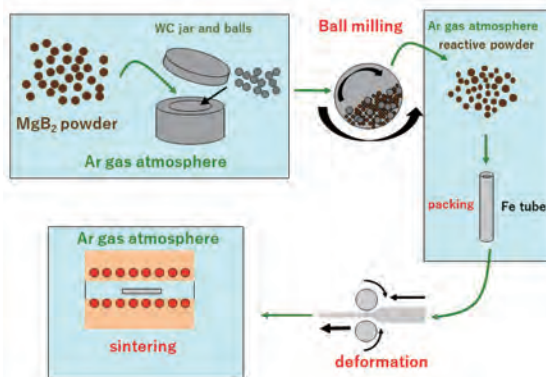
研究概要

他の超伝導体と比べると、MgB₂は比較的高い超伝導転移温度39Kと軽量性とが特長である。偏資源のHeを用いず、液体水素温度(20K)で稼働する軽量MgB₂線材を開発できれば、磁気浮上列車や電動航空機等への応用が期待される。現在開発中のMgB₂線材のシース材には、加工性や熱伝導性に優れたCu合金等が用いられているが、一層軽いAl(合金)シースでの作製を目指す。しかしAl(合金)の融点は660℃以下と低く、低温加熱処理での作製が必須となる。

新規性・独創性

- 従来の手法と比べ、本手法で作製した線材の加熱処理温度は100–300℃低下する
- 560℃での焼結で従来の手法と同等の臨界電流密度(J_c)特性が得られており、Al(合金)シース使用の可能性がある
- Feシースを用いて作製した線材の J_c 特性は、焼結温度の低下によってほとんど劣化しない

研究内容



MgB₂線材の主要な作製法はpowder-in-tube(PIT)法であるが、PIT法のうち、MgB₂粉末を充填粉とするex-situ法で開発を進めている。Mg+B混合粉等を充填粉とするin-situ法では、線材作製に際し650℃前後でのMgB₂生成反応が必要なのに対し、ex-situ法では加熱せずとも超伝導電流が流れる。しかしながら、通常 J_c 特性の改善のために900℃以上で焼結処理を行う。

本研究では、粉碎処理によって活性化された充填粉の取り扱いに細心の注意を払うことにより(左図)、最適焼結温度を100–300℃で低下させることができ、焼結温度560℃で従来の手法と同等の J_c 特性が得られた(右図)。

560℃はAlの融点660℃よりもかなり低く、現在開発中のMgB₂線材に使用されているCu(合金)シースが、より軽いAl(合金)シースに代わる可能性がある。軽量線材の開発により、Nb-Ti線材に代わる4.2Kでの軽量超伝導磁石や20Kでの磁気浮上列車や電動航空機への応用が期待される。

まとめ

- 今後Al(合金)シース使用でもFeシースと同等以上の J_c 特性を達成することを目標とする
- Nb-Ti線材に代わる4.2Kでの軽量超伝導磁石用線材としての利用が期待される
- 20Kでの低コスト軽量超伝導線材としての利用が期待される

論文・特許

- H. Fujii, *Physica C Supercond.*, **603**, 1354172 (2022).
- H. Fujii and H. Kitaguchi, *Physica C Supercond.*, **583**, 1353838 (2021).
- H. Fujii, A. Iwanade, S. Kawada and H. Kitaguchi, *Cryogenics*, **89**, 76–84 (2018).

新機能発現を目指した高温超伝導線材の開発

Keywords REBCO超伝導線材, フォトリソグラフィー, 極細多芯化技術, 交流応用, 核融合炉用超電導線材, 液体水素冷熱利用

主席研究員／Chief Researcher

松本 明善 Matsumoto Akiyoshi

✉ MATSUMOTO.Akiyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsumoto_akiyoshi



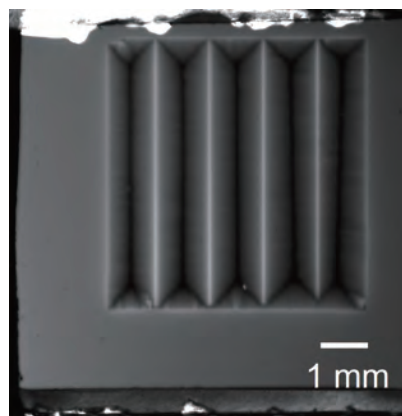
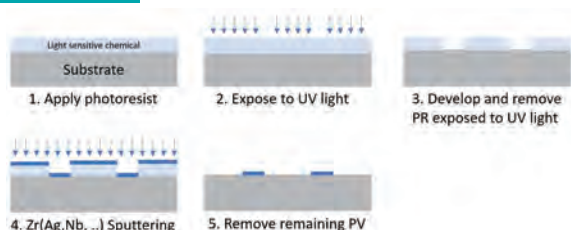
研究概要

高温超伝導線材は電気抵抗ゼロで大きな電流を流すことができ、巨大な磁場空間を必要とする超伝導電磁石や電力損失を低減できる電力応用機器への適用が期待されている材料である。近年ではエネルギー問題を解決する手段として核融合炉用の巨大電磁石に用いられ、その試験が始まっている。また、液体水素冷熱環境下における電力応用機器や超省エネ電動航空機における本材料の適用が期待されている。一方で、遮蔽電流効果や交流損失を低減するために細線化という課題が残されている。我々はこれらの超伝導線材において従来にない線材作製方法を見出した。本研究ではその細線化作製方法をさらに発展させた開発にも取り組み、その有用性を実証している。

新規性・独創性

- 基板に加工を施すという逆の発想による細線化技術
- フォトリソグラフィーという簡便な手法を用いた汎用性
- 従来1mm程度の細線幅を100 μm 級まで下げること成功
- 細線幅を従来から1/10に出来ることから損失も1/10が期待

研究内容



本研究では薄膜作製時における結晶成長の段階から欠陥を導入する手法を新たに提案し、新たな機能を有した超伝導膜を作製することを目的とする。本研究の多芯化技術の特徴はフォトリソグラフィーの技術を転用する。意図的に結晶粒の方位を制御、あるいは異なる物質を生成して、超伝導相と非超伝導相を分割して多芯化を達成する独自の技術である。左上図に薄膜作製方法の概念図を示した。基板上にフォトリソグラフィー技術によって目的とする形状のパターンを形成し、物理的蒸着等によってライン状の非超伝導層の核となる物質を堆積させた。その上にREBCO層を既存の手法を用いて堆積させた。右図は作製した薄膜の磁気光学像である。白いコントラストの非超伝導層によって黒い超伝導層が分離されていることが分かる。左下図のSTEM像においてSTO上では配向したYBCOが形成される一方で、Zr上においては不純物相も確認できSEM-EBSDによってSTO上とZr上で明らかに結晶組織が違うものを作製することができていることが分かる。Zr以外においても材質を変えることで、これらの特徴は変化させることが可能であり、応用先に合わせた材質の選択、パターンの適用が自由にできる。

まとめ

- 高温超伝導テープ線材において基板に加工することによって機能を持たせることができることを示した。
- 半導体作製等に用いられるフォトリソグラフィー技術を転用することで必要な機能を付与することが可能となる。
- これまでになかった細線化技術の可能性を拓いた。
- 今後、長尺可能性を実証し、極細多芯化による効果を議論していく。

論文・特許

- 特開2023076209 多芯薄膜超伝導線材、および、その製造方法
- A. Matsumoto, M. Tachiki and S. Ooi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **33**, 7500404 (2023).

表界面・微細構造制御による機能発現

Keywords コーティング、水素、エネルギー環境材料、レーザー、ナノフォトニクス、分光評価

グループリーダー／ Group Leader

武田 良彦 Takeda Yoshihiko

✉ TAKEDA.Yoshihiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takeda_yoshihiko



研究概要

これまで培ってきた量子ビーム技術による表面改質や分光計測を基に水素関連・ナノ光学材料開発を展開している。水素関連材料の高度化のための材料開発・計測評価手法開発に取り組み、低コスト化を図り、磁気冷凍水素液化システムへの実装化により「水素社会の実現」への貢献を目指している。コーティング技術の確立により磁気冷凍材料微細粒子への水素バリア、機械的強度・熱伝達向上を、実環境評価試験手法の検討を進めつつ実施する。また、フェムト秒レーザー技術応用では、新しいナノフォトニクス系材料の開発を目指している。レーザー照射により液体中に発生するキャビテーション気泡群を利用したレーザー発振、非線形ナノ光学材料等の研究を実施している。

新規性・独創性

- 微細粒子材料へのコーティング技術確立
- 磁気冷凍環境評価試験の検討
- 溶液中のランダムレーザー発振
- 3次非線形光学定数の波長分散評価

研究内容



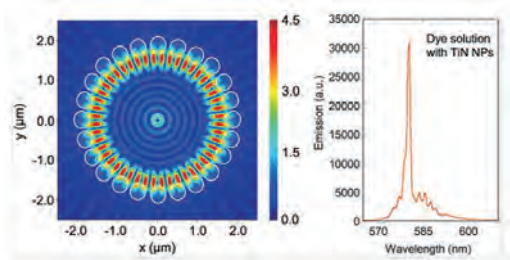
酸化物被覆 金属被覆

【磁気冷凍材料粒子への金属・酸化物被覆による高度化】

磁気冷凍による水素液化システムで利用される磁性材料は数百 μm の粒子材料である。この微細粒子へのコーティングでは、粒子表面の空隙を充填した球状形成、高圧下での耐水素化、低温での繰り返し強磁場環境に耐えうる機械的強度の向上、液化効率を高める熱伝達の向上、量産を想定した低コスト化、リサイクルが容易な材料選択、その他さらなる機能化等が求められており、性能向上を目指して微細粒子へのコーティング材料・手法の検討、表面の微細加工技術の検討、磁気冷凍環境試験手法の検討を実施している。

【プラズモン誘起キャビティバブル群によるランダムレーザー発振】

フェムト秒レーザーによるナノ粒子捕捉（光ピンセット）とレーザー誘起バブルキャビテーション（気泡形成）から、その気泡群を散乱体としたランダムレーザー発振に成功した。非常に短時間に強い電磁場を発生させるフェムト秒レーザーを液体中に照射すると、急激な圧力変化からマイクロバブルが発生する。ナノ粒子はその閾値を下げる役割を果たす。色素を含んだ溶液において、レーザー光が気泡群表面で多重散乱することで増幅され、レーザー発振する。顕微鏡映像と分光同期測定から気泡形成とレーザー発振の相関を、数値計算より気泡によるリングキャビティモード解析を実施して、その機構を明らかにしている。



まとめ

微細磁気冷凍粒子材料のコーティングによる高度化は、磁気冷凍水素液化システムにおいて液化コストの低減を図り、「水素社会の実現」に貢献するものである。

新規フォトニクス系の開拓としてのキャビティバブル群によるランダムレーザーは、簡易な微小光源としてセンサーや発光デバイス応用が期待される。

論文・特許

- R. Sato, J. Henzie, B. Zhang, S. Ishii, S. Murai, K. Takazawa and Y. Takeda, *Nano Lett.* **21**, 6064-6070 (2021).
- 特開2023064990号 磁気冷凍材料とその製造方法
- 特開2021097197号 微小レーザー光源、これを用いた微小レーザー検出装置及び状態量測定装置

超高エネルギーイオン照射効果の中エネルギーで実現！

Keywords 高速重イオン、クラスターイオン、イオンシェーピング、加速器、ナノ粒子

主席研究員／Chief Researcher

雨倉 宏 Amekura Hiroshi

✉ AMEKURA.Hiroshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/amekura_hiroshi



研究概要

超高エネルギー 100 MeV (1億電子ボルト) 級の重イオンビームをナノ粒子やナノピラーなどのナノ構造に照射し、球形から楕円形、立方体から直方体などへの集団的な形状変化を引き起こす技術は、ここ数十年以上にわたる研究により応用への目途がつきつつある。しかし変形には最低でも数十MeV以上のエネルギーが必要であり、この高すぎるエネルギーが本技術の実用化への障壁となっている。本研究では、単原子重イオンの代わりにC₆₀のようなクラスターイオンを用いることにより、加速エネルギー数MeV (つまり2桁小さいエネルギー) でもナノ構造に同様の変形を誘起できることを実証した。「加速エネルギー・ダウンサイジング」とでも呼ぶべき技術の提案である。

新規性・独創性

- 超高エネルギー 100 MeV級重イオンビーム照射によるナノ構造変形技術の優位性は知られていたが、このエネルギーを発生できる加速器施設は、国内でも数ヶ所の大型加速器施設に限られており、産業応用への展開は難しかった。
- 本研究ではC₆₀イオンを用いることにより、1 MeV級のエネルギーで、100 MeV級の単原子重イオンと同様なナノ構造の変形を実現した。
- 1 MeV級の加速器は国内だけでも数十ヶ所存在し、産業応用への障壁がだいぶ低くなった。

研究内容



図左上は100 MeV級の重イオンビーム加速器の例を示す。この例では7階建ての建物が一つの加速器を構成する。100 MeV級ビームの発生にはこのような大型加速器が必要であり、国内でもこのような施設は数ヶ所に限られる。100 MeV級ビームをガラス中に分散させた金属ナノ粒子に照射した結果を左下図に示す。球形だったナノ粒子がビーム方向に伸び、ナノロッド(ナノ棒)に変形する。

図右上に1 MeV級のタンデム加速器の例を示す。このレベルの加速器は国内だけでも数十台以上が存在し、産業応用にも用いられている。本研究でC₆₀イオンを用いれば1 MeV級加速器でもナノ粒子の楕円変形を引き起こすことが可能なこと(右下図)を示したため、産業応用への障壁が大幅に低くなった。

まとめ

極めて希少な100 MeV級のイオン加速器が必要だったナノ構造の変形を、C₆₀イオンを用いることにより国内に多数存在する1 MeV級加速器で実現した。ただし、現時点では両者のイオン照射は同等ではなく、C₆₀イオン照射はスパッタリング率が高く、条件によってはナノ構造を破壊する。これを避けるためにも数MeVのC₆₀イオンと固体の相互作用の更なる解明を進めていく。

論文・特許

- 雨倉 宏, 原子衝突学会誌しよとつ **20**, 56-68 (2023).
- H. Amekura, M. Toulemonde, K. Narumi, R. Li, A. Chiba, Y. Hirano, K. Yamada, S. Yamamoto, N. Ishikawa, N. Okubo and Y. Saitoh, *Sci. Rep.* **11**, 185 (2021).
- H. Amekura, K. Narumi, A. Chiba, Y. Hirano, K. Yamada, D. Tsuya, S. Yamamoto, N. Okubo, N. Ishikawa and Y. Saitoh, *Sci. Rep.* **9**, 14980 (2019).

水素製造・利用触媒及び水素バリア材料の研究開発

Keywords 水素製造・利用触媒・金属間化合物、合金、水素バリア膜、コーティング

主幹研究員／Principal Researcher

許 亜 Xu Ya

✉ XU.Ya@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/xu_ya



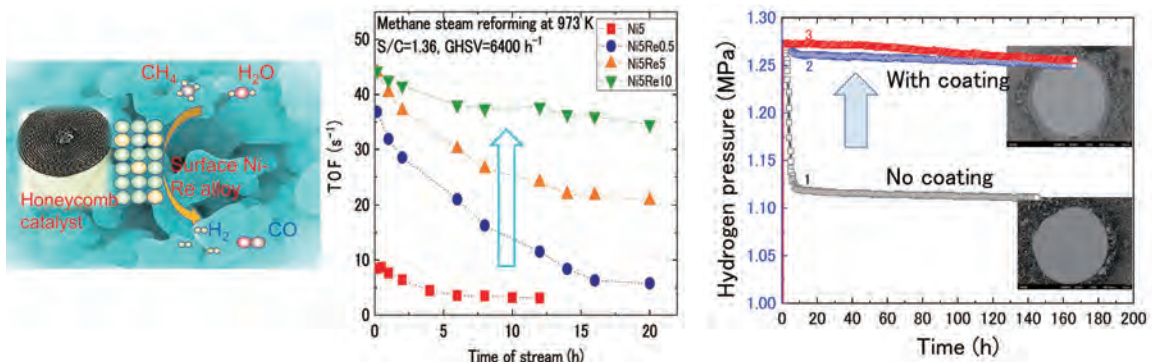
研究概要

水素社会を構築するため、水素関連材料の高度化・高機能化が不可欠である。ここでは、卑金属主体の金属間化合物や合金を用いて、水素製造・利用反応（メタン及びバイオガスの改質反応、メタネーション等）用高性能触媒の研究開発を行う。さらに、水素液化磁気冷凍システム用の磁性材料等に対し、低コストのコーティング方法による水素バリア性能及び機械的性能の向上を行う。

新規性・独創性

- 従来の粒状触媒より優れた熱伝導性と触媒性能を有する金属構造体触媒の創製
- 結晶構造及び微細組織制御により従来の触媒にない優れた触媒性能の実現
- 低コストのコーティング方法で磁性材料粒子の優れた水素バリア性能の実現

研究内容



結晶構造及び微細組織制御により卑金属主体の水素製造・利用触媒の開発を行っている。左図は高セル密度のNiハニカムにNi-Re合金触媒層を被覆した金属構造体触媒およびその表面Ni-Re合金の微細組織を示す。中図はこの構造体触媒のメタンの水蒸気改質に対する触媒活性を示す。表面層の組成と微細組織制御により極めて高い触媒活性と安定性を実現した。さらに、これらの触媒はバイオガスの改質やメタネーションに対し従来の粒状触媒より優れた触媒特性を示す。水素ステーション及び燃料電池等のオンサイト水素製造システムにおいて、都市ガスと灯油等の改質で水素を製造する反応触媒として期待される。また、二酸化炭素と水素からメタンや合成燃料を生成する反応用触媒としても期待できる。

コーティングによる磁性材料粒子の水素バリア性能の向上を行っている。右図は、コーティングによる水素液化磁気冷凍システム用のErCo₂粒子の水素バリア性能を著しく改善する結果を示す。コーティングされていないErCo₂粒子は室温で高圧水素雰囲気数時間で水素が侵入されるに対し、コーティングされたErCo₂粒子は150時間以上暴露しても水素がほぼ侵入されない。このコーティング技術は水素の運送・貯蔵システムへの応用が期待される。

まとめ

- 結晶構造及び微細組織制御による新規触媒の創製技術
- 優れた熱伝導性を有する金属構造体触媒は水素製造・利用反応への応用が可能
- 磁性材料粒子への水素バリアコーティング技術
- 実用化に必要な性能の検証

論文・特許

- H. Yoshikawa, Ya Xu and R. Tamura, *Fuel* **345**, 128171 (2023).
- Y. Xu, T. Hirano, H. Kunieda, Y. Hara and Y. Miyata, *Catal. Sci. Technol.* **10**, 2004-2019 (2020).
- 特許第6903324号 水素製造用触媒、その製造方法、および、それを用いた水素製造装置

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高圧・バイオ材料

マテリアル基盤

ヨーグルト中の乳酸菌の1菌体レベル計測

Keywords 乳酸菌, ラマン顕微鏡, 原子間力顕微鏡, 細胞外多糖

主幹研究員／Principal Researcher

中尾 秀信 Nakao Hidenobu

✉ NAKAO.Hidenobu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakao_hidenobu



研究概要

乳酸菌は、ヨーグルトや漬物などの製品に広く含まれ、腸の健康維持に有益な効果をもたらす。これら健康への有益な効果を保証するために、ヨーグルト中に一定数の乳酸菌を含むことが要求される。乳酸菌が分泌する細胞外多糖 (EPS) は食品添加物としてのニーズが高く、またヒトへの免疫賦活作用など有用な機能が報告されており、このような機能を積極的に利用した新しいヨーグルトの開発が近年盛んである。したがって微生物学および栄養学的品質と製品のコンプライアンスを確保するために、製造会社は煩雑な日常的検査を行っている。ここでは簡単・迅速な市販ヨーグルト中の乳酸菌数計測と乳酸菌産生EPSの可視化技術の開発を行っている。

新規性・独創性

- 1) ヨーグルト中から簡単・迅速な乳酸菌分離回収技術。
- 2) 画像解析とk-means法による乳酸球菌と桿菌の選択的計測。
- 3) 従来の菌数検査にかかる時間に比べ約1/30に時間短縮。
- 4) ヨーグルト中で乳酸菌が分泌したEPSの直接可視化技術。

研究内容

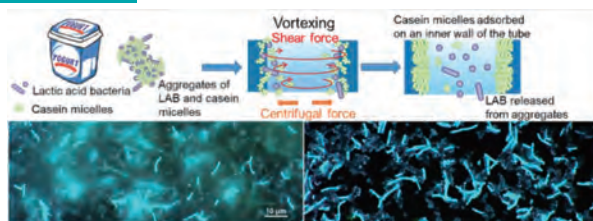


図1 ヨーグルトからの簡単迅速な乳酸菌回収

ヨーグルトは発酵過程で凝集した大量のカゼインミセル凝集体が乳酸菌と共存しており、これが遠心分離や希釈による乳酸菌の回収を妨げる。新たに開発した手法により5-10分程度で、カゼインミセルが取り除かれた乳酸菌水溶液が得られる (図1)。この水溶液の2 μ Lをカバーガラスに滴下・乾燥すると、乳酸球菌と桿菌が明瞭に顕微鏡観察できる。顕微鏡画像の画像解析とk-meansクラスタリングを行うことで、画像中の乳酸球菌と桿菌を選択的菌数計測ができた (図2)。本開発技術は従来の菌数測定法に比べ、約1/30に時間短縮可能であった。また回収乳酸菌水溶液に様々な物質 (コンカナバリンA、鉄 (III) イオン、金属ナノ粒子、スベルミジン) を加えることで、分泌細胞外多糖を凝集させる事ができた (図3)。この結果個々の乳酸菌より産生したEPSを光学顕微鏡レベルで可視化でき、画像解析より産生したEPSを定量化することもできた。今後は本技術を用いた、日常的なヨーグルトの品質検査と有用なEPSを産生する乳酸菌のスクリーニングに適用し、本プロトコルの標準化を目指す。

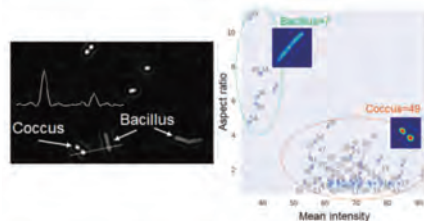


図2 画像処理とk-meansクラスタリングを用いた乳酸球菌・桿菌の選択的菌数計測

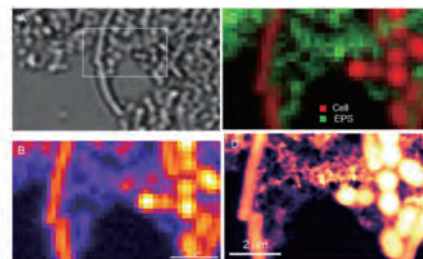


図3 スベルミジン添加により凝集した乳酸菌産生EPSの光学顕微鏡、ラマン顕微鏡、AFMイメージ

まとめ

ヨーグルト中の乳酸菌を1菌体レベルで計測する簡単・迅速な方法を開発した。本開発手法はヨーグルトから乳酸菌を回収する工程、顕微鏡観察、画像解析まで含めて、従来のコロニーカウント法よりも約1/30に短縮可能である。従来のコロニーカウント法に変わる新しい乳酸菌計測プロトコルとして本開発法は期待される。

論文・特許

- H. Nakao and Y. Magariyama, *Anal. Sci.* **38**, 191-197 (2022).
- H. Nakao and J. D. Kim, *Anal. Sci.* **35**, 1065-1067 (2019).
- 特許第7123350号 微生物回収方法、及び、微生物回収用発光性カーボンナノワイヤ

水素を造る触媒を創る

Keywords 触媒, 水素, 製造

グループリーダー / Group Leader

阿部 英樹 Abe Hideki

✉ ABE.Hideki@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/abe_hideki



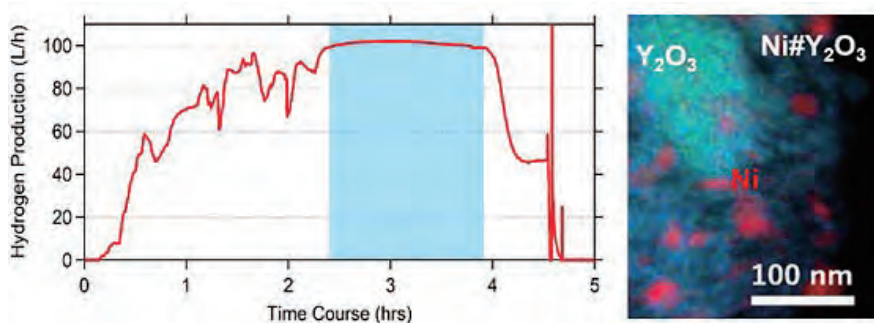
研究概要

- 背景：環境・エネルギー触媒の研究開発
- 社会ニーズ：水素社会の構築
- 特徴：高活性・長寿命・貴金属フリー水素製造触媒と製造システム
- ポイント：固体材料ナノ組織の制御による触媒性能創発
- 従来技術における課題：触媒寿命の短さ
- 成果：異相絡み合いナノ組織による材料の長寿命化に成功

新規性・独創性

- 独自性：材料ナノ組織制御による触媒性能創発
- 従来技術との比較：冶金的手法による量産と疏慮設計のための3D造形が可能
- 従来技術との性能比較：水素製造触媒寿命従来比50倍

研究内容



メタン・二酸化炭素混合ガスからの高純度水素大容量製造（左）を可能にするニッケル－イットリア根留触媒： $Ni\#Y_2O_3$ （右）。多様な炭化水素資源（バイオガス・廃プラガス・天然ガス・シェールガス・酸性ガスなど）からの水素製造と高比表面積炭素材料の製造。

まとめ

- 成果：高活性長寿命水素製造触媒 (TRL: 4)
- 成果：高速高純度水素分離抽出膜 (TRL: 7)
- 成果：親水性炭素捕集触媒 (TRL: 2)
- 成果：上記要素材料からなる水素製造システム
- 達成：99.9999%純度水素製造量>毎時100リットル
- 次期目標：パイロットプラント設計構築

論文・特許

- S. Shoji, X. Peng, T. Imai, P. S. M. Kumar, K. Higuchi, Y. Yamamoto, T. Tokunaga, S. Arai, S. Ueda, H. Abe, *et al.*, *Chem. Sci.* **10**, 3701-3705 (2019).

触媒反応を利用したメタンからの有用化合物の合成

Keywords メタン、水素、エタン、エチレン、メタノール、含酸素有機物、カップリング反応、部分酸化反応、光、熱

主任研究員 / Senior Researcher

加古 哲也 Kako Tetsuya

✉ KAKO.Tetsuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kako_tetsuya



研究概要

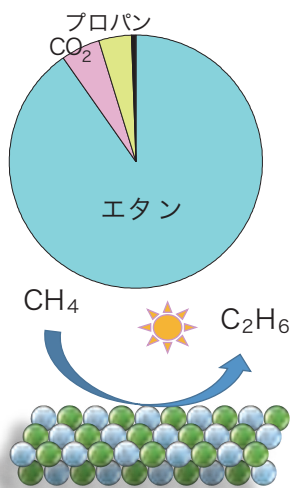
天然ガスの主成分であるメタン(CH_4)は地球上に豊富に存在している。そこで、本研究ではこのメタンを原料として利用し、カップリング反応、部分酸化反応などの触媒反応、反応環境の制御などを駆使して、水素、エタン、メタノールなどの有用な化学物質を合成しようと試みている。例えば、適量のメタンと空気と新規触媒により外部熱源を利用せず、模擬太陽光の照射のみで高い選択率でエタンの製造に成功している。さらには、メタンと酸素と水と異なる新規触媒によりメタノールを含む含酸素有機化合物が高い選択率で生成することも見出し

新規性・独創性

天然ガスの主成分であるメタン(CH_4)は地球上に豊富に存在しているが、対称性が強く、 C-H 間の結合解離エネルギーが 439kJ/mol と非常に高いため、その水素原子の解離には高温が必要となり、メタンから新たな有機物を合成するには通常約 $500 \sim 800$ 度以上程度の高温が必要であった。しかし、外部熱源を用いなくてもかかわらず、我々は反応環境及び反応条件をうまく制御し、適切な触媒に模擬太陽光を照射することで、低温でメタンからエタンなどの有用物質を製造することに成功した。

研究内容

メタンカップリング反応で生成した化学物質の割合



本研究は、安全、安価で取り扱いの容易な太陽光波長帯の光を使って、例えばメタンガスからエタンを高い生成効率を得る製造方法、触媒について検討を行った。様々な検討の結果、触媒にAu担持層状水酸化物由来酸化チタン酸化亜鉛ナノコンポジットを選び、この触媒にメタンと空気を適量入れ、模擬太陽光を照射すると、エタンの生成選択率が約90%となり、高い選択性をもってメタンからエタンを作製することに成功した。これは太陽光照射により触媒から酸化活性種が生成し、メタン分子内の水素原子を引き抜き、メチルラジカルが生成したことによる。このメチルラジカルは触媒上でさらにカップリング反応を起こし、エタンが選択的に生成したものと考えられる。また、メタンと酸素と水とAu担持酸化亜鉛触媒を利用することで、模擬太陽光照射によりメタノールを含む含酸素有機化合物の効果的な合成にも成功している。

まとめ

本研究では地球上に豊富に存在するメタンと酸素などを反応させ、適切な触媒を利用することで、低温でエタンやメタノールなどの有用物質の合成に成功してきた。今後はこれらの反応の効率の向上や水素などの他の有用物質の製造に注力していきたいと考えている。

論文・特許

- S. Song, H. Song, L. Li, S. Wang, W. Chu, K. Peng, X. Meng, Q. Wang, B. Deng, Q. Liu, Z. Wang, Y. Weng, H. Hu, T. Kako, *et al.*, *Nat. Catal.* **4**, 1032-1042 (2021).
- H. Song, X. Meng, S. Wang, W. Zhou, S. Song, T. Kako, and J. Ye, *ACS Catal.* **10**, 14318-14326 (2020).
- 特許第7270240 光触媒材料、及び、含酸素有機化合物の製造方法

界面及び空間に着目した安定分子変換・水素製造

Keywords 水素製造, 温室効果ガス変換, 熱触媒, 光触媒, ナノ界面材料, ナノ空間材料

研究員 / Researcher

庄司 州作 Shoji Shusaku

✉ SHOJI.Shusaku@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/shoji_shusaku



研究概要

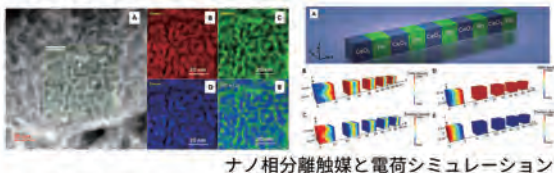
材料のナノレベルの界面や空間に着目し、高寿命や高活性の触媒を開発している。特に水やメタン、二酸化炭素を変換し水素を製造することは来る水素化社会や地球温暖化に対する対抗手段として重要となる。反応の界面や空間を設計することで、分子の移動や熱、励起キャリアの分離、効率的な分子の供給および排出など様々な機能を持たせることができる。ナノスケールのからマクロスケールまでを含めた触媒構造をデザインし、熱及び光を駆動力とし、実用レベルの活性や耐久性を目指している。

新規性・独創性

- 合金、金属間化合物、ポリマー酸化物ハイブリッド等を出発物質とした材料作製
- 自己組織化により特殊な界面や空間を作製可能
- 高温でも凝集しないナノ界面や、自由度の高い元素選択性を持つナノ空間材料を元に高難易度な触媒反応を実現
- メタンや二酸化炭素といった安定分子を低エネルギー投入で変換

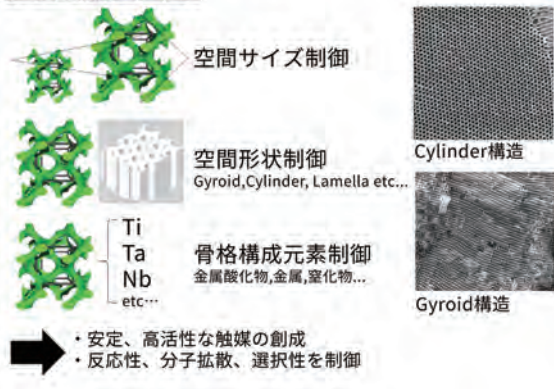
研究内容

ナノ界面デザイン



ナノ相分離触媒と電荷シミュレーション

ナノ空間デザイン



- 安定、高活性な触媒の創成
- 反応性、分子拡散、選択性を制御

左図は、合金を前駆体として作製された、固定化されたナノ界面を持った触媒及び、ポリマーと金属酸化物のハイブリッドを前駆体として作製されたナノ空間を持った触媒である。図中の上はナノ相分離触媒と呼ばれ、酸化物と金属が三次元的に絡まりあって固定化された界面を形成している。金属と酸化物の界面は触媒反応において重要な役割を果たすことが知られているが、一般的な担持触媒だと界面は固定化されておらず、熱による凝集などで活性が落ちやすい。しかし、ナノ相分離触媒は高温であってもナノ界面は構造を保ち、安定した分子変換と水素製造を実現する。また、本構造は光触媒的なメタンと二酸化炭素の変換反応にも有効である。熱触媒では数百度の加熱が必要になるところ、光照射だけで反応を駆動することが可能である。シミュレーションを行うと、光照射によるキャリアの分離が効率よく行われ、メタンと二酸化炭素を変換するに至ったことが分かった。

ナノ空間触媒は、高い比表面積と分子拡散能のため、高い分子変換能力を有している。ブロックポリマーをテンプレートとして用いた場合、ラメラ、シリンドラー、ジャイロイドなど多様な三次元ナノ構造を様々な酸化物で作製することができる。分子の導入と排出に有効な三次元的に繋がったナノ空間を持つ触媒をデザインし、同様の反応を行ったところ副反応の制御とハイスループットが実現した。これは、これまでの最高活性を持つ触媒の100～1000倍の活性であった。触媒の界面及び空間の重要性を示すと共に、実用化を目指した材料開発を行っていく。

まとめ

水素化社会への移行や温室効果ガスの削減のため、効率的で革新的な触媒開発が求められている。これに対し、物質のナノ界面や空間といった視点から課題を解決する知見を見出し、新規の触媒を創成していく。

論文・特許

- S. Shoji, X. Peng, A. Yamaguchi, R. Watanabe, C. Fukuhara, Y. Cho, T. Yamamoto, S. Matsumura, M.-W. Yu, *et al.*, *Nat. Catal.* **3**, 148-153 (2020).
- S. Shoji, X. Peng, T. Imai, P. S. M. Kumar, K. Higuchi, Y. Yamamoto, T. Tokunaga, S. Arai, A. Hashimoto, *et al.*, *Chem. Sci.* **10**, 3701-3705 (2019).
- 特許第6933337号 低温メタン改質触媒活物質

新しい超極細超伝導ワイヤーの開発

Keywords 超極細ワイヤー, 超伝導ワイヤー, 銅及び銅合金ワイヤー, アルミ及びアルミ合金ワイヤー, モーター, 送電ケーブル, 液体水素, 冷凍機

グループリーダー / Group Leader

菊池 章弘 Kikuchi Akihiro

✉ KIKUCHI.Akihiro@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kikuchi_akihiro



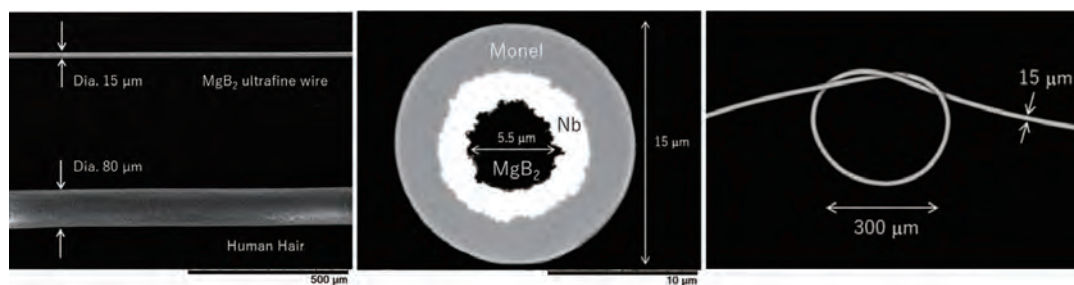
研究概要

脱炭素化を背景に様々な機器で省エネ化が求められています。自動車ではハイブリッドからオール電化に移行しつつあり、航空機も電動化が本格的に検討されています。そのためには、高効率なモーターやエネルギー損失の少ないワイヤーが必要で、今、電気抵抗がゼロの超伝導体や軽くて良導体の高純度アルミニウムが再び注目を集めています。我が国における超伝導ワイヤーの本格的な研究開発はNIMS（前身の金属材料技術研究所）から始まり、線材開発に関する様々な知見、ノウハウや加工技術を蓄積しています。それらをフル活用して従来にない新しい超伝導等の高機能ワイヤーを創出します。

新規性・独創性

- 髪の毛よりも細い超極細超伝導ワイヤー (MgB_2 , Nb_3Sn , Nb_3Al 等)
- フレキシブルな金属間化合物ケーブル
- 液体水素冷熱 (20K) を利用 (冷却ペナルティの軽減)

研究内容



金属間化合物である MgB_2 は鉛筆の芯のように硬くてもろいもの。極限的に細くすることで、曲げても折れないしなやかさを実現しました。モーターや発電機などに使われるコイルは大きさも様々で形状も複雑です。銅線のようなフレキシブルなハンドリングが重要になります。さらに交流応用では、周波数に応じた磁場変動が伴います。変動磁場中に超伝導線を置いたとき、超伝導ワイヤー内部の磁束線の侵入の仕方由来した「交流損失」が発生し、モーター効率の低下や冷凍負荷の増大などが大きな問題となります。超伝導ワイヤーの超極細化は「しなやかさ」をもたらすだけでなく、「交流損失」の低減にも大きく役立ちます。

まとめ

MgB_2 は液体水素温度 (20K) での応用が可能という特徴の他に、軽元素で構成されるために非常に軽いということも大きな魅力です。来たる脱炭素社会に向けて、液体水素を搭載した電動航空機の検討がJAXAで進められています。今回の超極細 MgB_2 超伝導ワイヤーは、それら電動航空機用の軽量・高効率超伝導モーターへの応用が有望でNIMSとJAXAの間で共同研究も始まっています。

論文・特許

- 特許第 4016103 号 MgB_2 超伝導体の製造方法
- A. Kikuchi, Y. Iijima, M. Yamamoto, M. Kawano and M. Otsubo, *IEEE Trans. on Appl. Supercond.* **32** 6000104 (2022) .
- A. Kikuchi, Y. Iijima, A. Ichinose, M. Kawano, M. Yamamoto, M. Kimura, *et al.*, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* **756** 012016 (2020) .

走査SQUID顕微鏡を利用した材料開発

Keywords 超伝導, 走査SQUID顕微鏡, 非整数磁束量子

主席研究員／Chief Researcher

有沢 俊一 Arisawa Shunichi

✉ ARISAWA.Shunichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/arisawa_shunichi



研究概要

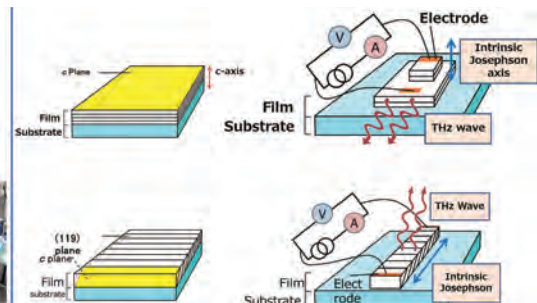
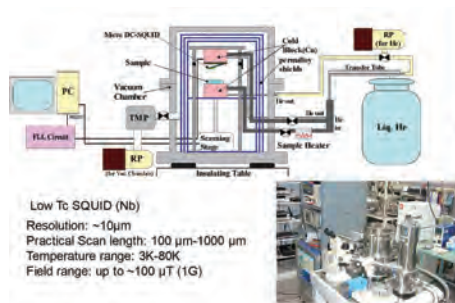
走査SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) 顕微鏡 (SSM) は高感度磁気センサーであるSQUIDを利用した走査プローブ顕微鏡である。磁気情報の可視化は極めて有効であることはもちろんであるが、SSMは感度が高く定量性が極めて良好である。SSMをはじめとした磁気イメージングを用いた材料開発と物性評価の現状を示す。

本研究は、産業技術総合研究所、東京理科大学、高エネルギー加速器研究機構、金沢工業大学、仙台高専などの外部機関と共同で行っている。

新規性・獨創性

- 走査SQUIDを用いた材料開発
- SQUIDの高い感度を活用した非整数磁束量子の直接観察
- 磁束量子の可視化によるダイナミクス

研究内容



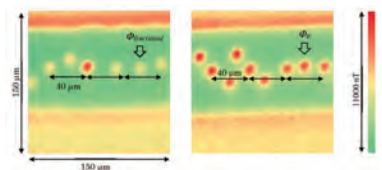
走査SQUID顕微鏡は、プローブとして高感度磁気センサーであるSQUID (超伝導量子干渉素子) を用いたSPMで、上図の左側は走査SQUID顕微鏡の構成を示す。

Bi系超伝導体はc軸方向に電流を流すことにより固有ジョセフソン効果を発現するが、通常のc軸配向膜の場合、c軸方向に電流を流すためにはメサ構造とすることがあり、デバイス化や集積化には非常に不利である。一方、非c軸配向のBi系酸化物はデバイス化に適している。左図の右側はこれを模式的に表したものである。現状では高品質な非c軸配向膜の作製が課題であり、膜質の向上を進めている。この薄膜中における磁束の評価にはSSMを用いた可視化が強力な手段となる。(金沢工業大学と共同研究)

超伝導体中では磁束が量子化され、通常は $h/2e = \Phi_0$ の単位に量子化される。しかし多バンド多成分系超伝導体中では非整数の磁束量子が存在し得ることが予測されていた。

右図は、多バンド多成分系超伝導体を人工的に模したNbの2層膜に生成した非整数磁束量子を走査SQUID顕微鏡により直接観察することに成功した例である。10.1016/j.physc.2018.02.001 [CCBY]。

その後、非整数磁束量子による超伝導位相のシフトも確認された。今後この原理を利用し、超伝導デバイス実現に必要な位相シフターへの応用が期待される。(産総研、東京理科大と共同研究)



まとめ

- 走査SQUID顕微鏡は超伝導デバイスの研究開発に強力な武器
- 非整数磁束量子の直接観察に成功
- 磁束量子の可視化は他の手法と組み合わせることにより相補的に観測可能

論文・特許

- H. Ishizu, H. Yamamori, S. Arisawa, T. Nishio, K. Tokiwa and Y. Tanaka, *Physica C Supercond.* **605**, 1354208 (2023).
- Y. Tanaka, H. Yamamori, T. Yanagisawa, T. Nishio and S. Arisawa, *Physica C Supercond.* **548**, 44-49 (2018).
- 特開第2021087004号 超伝導位相シフター

超伝導技術の社会実装

Keywords 超伝導材料, Thermodynamics, 固体拡散, 相変態, 塑性加工, 超伝導接続, 核融合, NMR, 粒子加速器

主幹研究員 / Principal Researcher

伴野 信哉 Banno Nobuya

✉ BANNO.Nobuya@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/banno_nobuya



研究概要

電気抵抗ゼロの超伝導技術はカーボンニュートラル社会に向けた究極のテクノロジーの一つです。ここでは、用途に合わせた超伝導材料を合成・線材化することで、超伝導を用いる装置の実現や高性能化を図っています。固体拡散・析出反応・相変態現象といったThermodynamicsの見地から、様々な材料の合成・線材化を行います。特に、 Nb_3Sn や Nb_3Al といった高磁場用化合物系超伝導材料を中心に取り組んでいます。材料の組織制御・改質から超伝導技術を革新し、社会実装を進めていきます。特にマグネット応用は重要な分野です。

新規性・独創性

- 世界初の拡散接合プロセスを用いたPbフリー NbTi / Nb_3Sn 超伝導接続の開発
エコフレンドリーなNMR装置の実現に期待
- EBSD等組織観察・分析を駆使した Nb_3Sn 結晶微細化メカニズムの解明
10T以上の超強力電磁石の高性能化と普及加速
- 核融合炉実現を目指した高臨界電流密度・高強度 Nb_3Sn 線材の開発

研究内容



最大2000°Cまでの超高温・高真空熱処理や、超高温からの急速冷却による非平衡組織制御等を利用し、超伝導材料合成を行う。特に Nb_3Sn や Nb_3Al などの高磁場用化合物系超伝導材料を中心に扱う。また各種伸線加工設備を用い、一般的な材料加工から超伝導芯径10ミクロン以下の極細多芯線材の製作まで実施する。さらに、冶金プロセス技術・知識・経験を駆使し、Pbフリー超伝導接続など、これまでになかった新しい技術を生み出す。こうした材料・線材をEBSD、3Dアトムプローブ、電子顕微鏡等を用いた微細組織観察・分析を行い、反応メカニズムの解明や組織制御の高度化を図る。核融合炉、NMR分析装置、高エネルギー粒子加速器、ヘリウムフリー冷凍機冷却高磁場マグネット等が、主な社会実装ターゲットとなる。

まとめ

カーボンニュートラル実現に向けて、超伝導技術への期待は大きい。こうした中、超伝導技術の社会実装加速への機運が非常に高まっている。ここでは、社会実装に向けた様々な課題を材料学的見地から解決し、実際の社会実装までをサポートする。

論文・特許

- N. Banno, *Superconductivity* **6**, 100047 (2023).
- N. Banno, T. Yagai, S. Kawashima, M. Sugimoto, S. Awaji, H. Utoh, and Y. Sakamoto, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **33**, 1-8 (2023).
- 伴野 信哉, 低温工学 **58**, 95-107 (2023).

超伝導応用のための特性評価技術の開発

Keywords 応用超伝導, 超伝導線材, 臨界電流評価, 極超低抵抗評価, 超伝導接続

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

北口 仁 Kitaguchi Hitoshi

✉ KITAGUCHI.Hitoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kitaguchi_hitoshi



研究概要

電気抵抗ゼロで電流を流すことの出来る超伝導技術は、究極の省エネルギー技術として環境・エネルギー問題を解決するための有力な候補の一つである。また、超伝導マグネットは、制御性・安定性を有する強磁場を大空間に発生させる唯一の技術であり、NMR・MRI、核融合や加速器分野で欠かせない。

NIMSで発見されたBi系高温超伝導酸化物をはじめとする様々な超伝導線材の実用化を進めるために、応用超伝導（線材の材料科学、機器応用のためのマグネット技術）分野の研究を行っている。特に、応用機器設計の基盤となる臨界電流（電気抵抗ゼロで流すことのできる電流の上限）特性の評価技術の研究や精密安定磁場が要求されるNMR・MRI用途に必要な超伝導接続に関する開発を行っている。

新規性・独創性

- 温度、磁場（強さと向き）をパラメータとした臨界電流特性の通電法による詳細な計測評価
- 一般的な方法では測定が困難な、超伝導接続の極超低抵抗 (10^{-9} から $10^{-16} \Omega$) の計測評価

研究内容

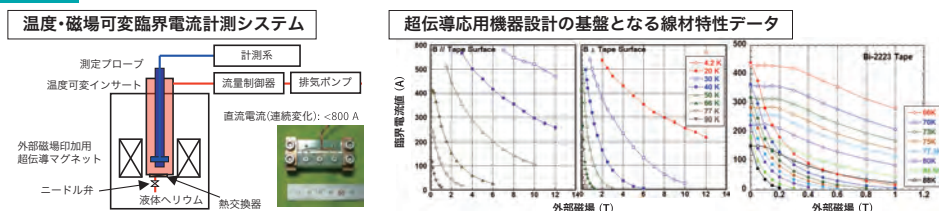


図1 超伝導線材の最も重要な特性である臨界電流を温度、磁場（強さと向き）をパラメータとして計測評価



図2 超伝導接続の極めて低い電気抵抗を、温度、磁場（強さと向き）をパラメータとして計測できる世界唯一の内製評価システム

超伝導線材の機器応用を広めて実用化を進めるために、機器設計基盤として必要となる磁場（強さと向き）や温度をパラメータとした臨界電流特性を実際に通電して詳細に計測評価している（図1）

また、精密安定磁場が要求されるNMR・MRI用途では超伝導接続技術が必要であり、その開発を進めるためには接続特性（電気抵抗）評価が欠かせない。しかしながら、超伝導接続の抵抗は極めて低い (10^{-12} から $10^{-16} \Omega$) ために、一般的な方法では測定が困難である。このために、極超低抵抗を計測できるシステムを独自に開発（図2）し、研究を進めている。

まとめ

超伝導線材は超伝導応用機器や超伝導マグネットを構成する最も基本的な材料であり、高性能な線材は超伝導技術の発展に不可欠である。材料としての最も重要な性能である臨界電流評価を通じて線材性能向上を進める。また、超伝導接続特性評価をはじめとして、応用機器開発で欠かせない様々な特性評価を積極的に行っていく。

論文・特許

- Y. Takeda, K. Kobayashi, A. Uchida, H. Kitaguchi, G. Nishijima, Y. Yanagisawa, T. Nakashima, S. Yamade, *et al.*, *Supercond. Sci. Technol.* **35**, 02LT02 (2022).
- K. Kobayashi, G. Nishijima, A. Uchida, M. Amaya, N. Banno and H. Kitaguchi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **30**, 1-4 (2020).
- K. Kobayashi, G. Nishijima, A. Uchida, M. Amaya, N. Banno and H. Kitaguchi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **28**, 1-5 (2018).

電子・光機能材料 研究センター

組成－構造－物性相関の解明と材料化プロセスの開発

Keywords 電子構造, 結晶構造, 電子物性, 光学物性, 電気特性, 欠陥構造, 界面構造

センター長 / Director

大橋 直樹 Ohashi Naoki

✉ OHASHI.Naoki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohashi_naoki



研究概要

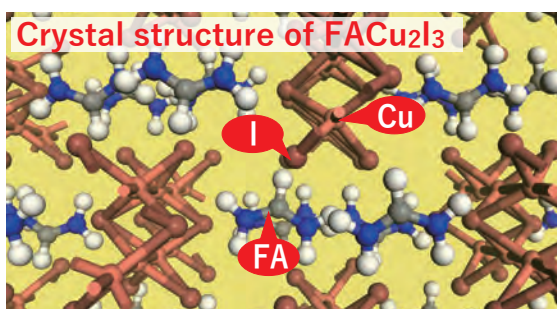
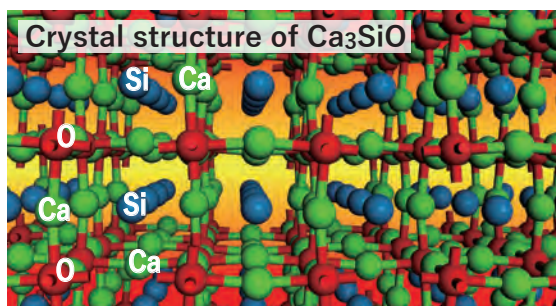
物質の機能は、化学結合状態、すなわち、化学組成とその原子配列によって決定される電子構造によって支配されている。そのため、結晶の持つ導電性や発光特性、あるいは表面・界面における機能について、化学組成、原子配列、化学結合の観点から考察し、組成－構造－物性の間の相関関係の解明を目指し、さらに、その結果を元にした新たな物質や表面・界面構造の開発につなげる。特に、環境負荷の小さなありふれた元素から構成され、また、省エネルギーや安全・安心という社会課題の解決に寄与し得る物質・材料やそれらを合成するための製造プロセスの提案を目指す。

新規性・独創性

金属以外の結晶の多くは、陰イオンと陽イオンとの静電引力がその構造形成に寄与しており、構成元素の電気陰性度やイオン化ポテンシャルという元素に特有な性質が構造形成に対して大きく寄与する。一方、電子・光物性を支配する電子のバンド構造は化学組成と結晶構造(原子配列)の両方が寄与し、また、圧電性のような結晶格子の寄与する物性には結晶構造(原子配列)の異方性がそれに寄与する。そうした中、目的とする物性屋特性を得るため、元素の持つ電荷(価数)の制御や、無機結晶に分子を導入するハイブリッド化などの手段を駆使し、新しい機能を発現する物質を開拓し、その機能を有用なものとすることを目指している。

研究内容

右の図は、 Ca_3SiO という物質の結晶構造を示す。この物質は、一般のペロブスカイト構造の陰イオン位置を陽イオンであるCaが占め、その陽イオン位置を陰イオンであるSiとOが占めるため、逆ペロブスカイト型構造と呼ばれる。Siの形式電荷が-4価と見なせることが特徴であり、価電子帯がSiの4p軌道、伝導帯がCaの4s軌道から成る。そこに酸素が含まれ、ペロブスカイト型結晶をとることから、1eVにも満たない狭いバンドギャップを持つ直接遷移型半導体となっている。II-VIやIII-Vの半導体では、砒素やカドミウムなどの毒性元素が必要となる特性も、結晶構造と化学組成の妙によって、典型元素で実現できるという実例である。



一方、左の図に示したのは、いわゆる有機－無機ハイブリッド結晶、と呼ばれる無機イオンから成る要素と、分子イオンから成る要素が共存して構成される結晶構造の一例である、ホルムアミジニウムイオン($[\text{HC}(\text{NH}_2)_2]^+$)を含んだ銅ヨウ化物結晶である。元素イオンは球体に見立てられるものとなっているのに対して、分子イオンはそれ自身が異方性を持つことから、同じ分子であってもその整列状況を制御することによって結晶の持つ対称性、ひいてはその物性を変化させられる可能性がある。分子イオンの分子量や構造もパラメータとして加えた物質探索、物質設計を進めることで、環境負荷が少なく、かつ有用な機能を備えた物質の開発を進める。

まとめ

第一原理計算を用いた仮想物質の結晶構造や電子構造のシミュレーション、薄膜やバルクなどの様々な形態の物質合成を通じ、ありふれた元素から成る環境性能に優れ、高い機能を持った物質・材料の探索により、豊かな社会の実現を目指します。

論文・特許

- N. Ohashi, Y. Matsushita and N. Saito, *J. Solid State Chem.* **306**, 122778 (2022).
- K. Hasegawa, T. Shimizu and N. Ohashi, *J. Ceram. Soc. JAPAN* **130**, 21190 (2022).
- N. Ohashi, D. Mora-Fonz, S. Otani, T. Ohgaki, M. Miyakawa and A. Shluger, *Inorg. Chem.* **59**, 18305-18313 (2020).

サイアロン蛍光体の材料探索とLEDへの応用

Keywords 蛍光体，窒化物，新物質創製，LED

フェロー／Fellow

廣崎 尚登 Hirosaki Naoto

✉ HIROSAKI.Naoto@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hirosaki_naoto



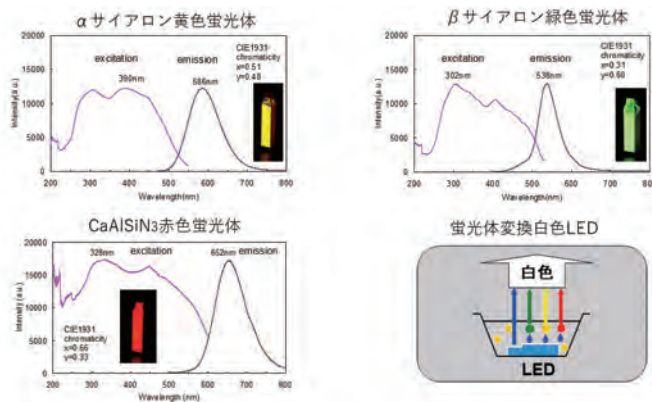
研究概要

白色LEDは青色LEDチップと蛍光体から構成され、LEDが発する青色光と蛍光体が発するその他の色の光が混合することにより白色光となる。この様に、白色LEDの発光色は青と蛍光体の色で構成されており、白色LEDの色の品質を決めているのは蛍光体である。本研究では、様々な用途のLEDに適した新規蛍光体を探索し、企業との共同開発により製品化につなげる仕事をしている。

新規性・独創性

蛍光体はセラミックスの母体結晶にEuなどの発光イオンを微量添加した材料であり、母体結晶の種類が変わると発光特性や耐久性が変わるため、用途に合った新しい母体結晶を見つけることが求められている。企業で実用化するためには、他社の特許に抵触しない独自特許で守られた新規の材料を見つけることが重要であり、高性能な未知材料の探索に力を入れている。

研究内容



図はNIMSが発見し実用化に成功した材料を示している。αサイアロンは従来は耐熱材料として研究されてきたセラミックスである。これにEuを添加すると青色を吸収して黄色発光する蛍光体が得られる。βサイアロンも耐熱材料として有名な材料である、これにEuを添加すると青色を吸収して緑色発光する蛍光体が得られる。この蛍光体の発光はシャープなスペクトルであることから色純度が求められるディスプレイ用蛍光体として実用化されている。さらに、CaAlSiN₃セラミックスにEuを添加すると青色を吸収して赤色発光する蛍光体が得られる。この材料を従来の白色LEDに添加すると赤み成分に富む暖かい光となるため、屋内照明用途に向いている。下右図に示すように、これらの蛍光体材料は青色LEDと組み合わせることにより、青色LEDが発する青色光の一部を緑、黄色、赤色に変換することができるため、様々な用途に適した白色LEDのスペクトルを設計できる。

LEDは一般照明、ディスプレイの現行製品の次として、自動車ヘッドライト、農業生体計測等の用途があり、それによって求められる特性も異なる。これらのニーズに応えるため、可視光域の発光の他に、紫外域や赤外発光の蛍光体の物質探索および実用化開発を行っている。

まとめ

白色LEDは蛍光体を変えることによって、紫外域から赤外域までの発光スペクトルを設計することができる。新材料開発を通じて、新たなデバイスの実現に向けて今後も精力的な開発を実施する。

論文・特許

- 特許第3837588号 蛍光体と蛍光体を用いた発光器具
- 特許第3921545号 蛍光体とその製造方法
- 特許第5540322号 蛍光体、その製造方法、発光器具および画像表示装置

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高次元・バイオ材料

マテリアル基盤

半導体ダイヤモンド研究

Keywords 薄膜, 半導体, ダイヤモンド

グループリーダー / Group Leader

小泉 聡 Koizumi Satoshi

✉ KOIZUMI.Satoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/koizumi_satoshi



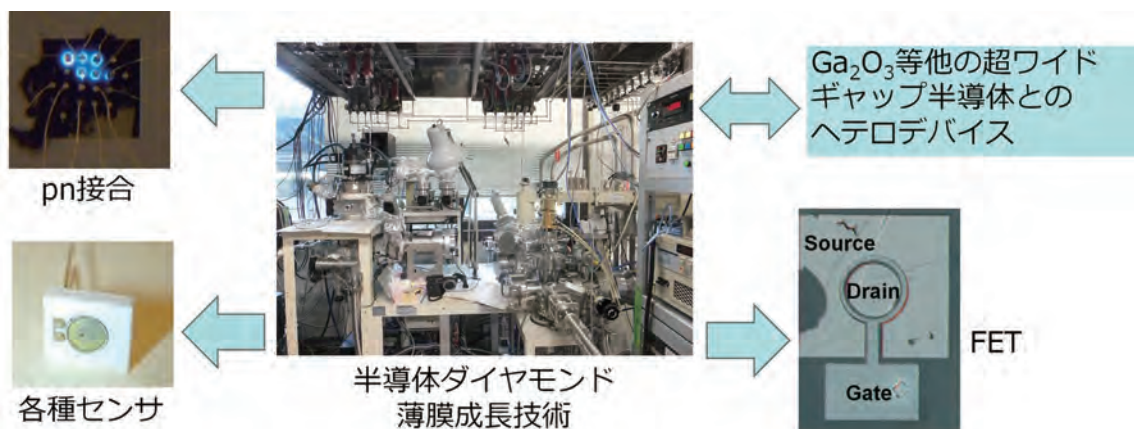
研究概要

ダイヤモンドはワイドギャップ半導体材料として深紫外線オプトエレクトロニクス、パワーデバイス等への応用が期待されています。これまでNIMSのダイヤモンド研究グループは1980年代にダイヤモンド気相成長技術を、1990年代にn型半導体化技術を確立し、さらに21世紀に入りpn接合の形成に成功してきました。全て世界初の技術であり、日本が誇る世界的研究成果です。現在、これらの研究はNIMSにおける超ワイドギャップ半導体研究の重要な一コマとして発展的に継続されています。

新規性・独創性

ダイヤモンドの5.5eVという大きなバンドギャップ、その表面が持つ負性電子親和力という特異な性質が様々な特性を生み出す可能性を持っています。ドーピング制御、成長制御の不完全さからこの性質を生かした応用が困難でした。シリコン並みの不純物制御、結晶完全性制御技術の確立を目指し、「使える」ダイヤモンド材料化を目指します。

研究内容



半導体ダイヤモンドCVD研究の中でも特にn型ドーピングを中心として、使える半導体デバイス形成を目指し、各種デバイス固有の仕様に合わせた材料制御の技術開発を行っています。また、CVD技術を通して得られた知見をもとに、デバイスレベルでの結晶評価を並行して行います。Ga₂O₃等とのヘテロデバイスも重要な研究対象です。パワーエレクトロニクス、極限環境で利用されるセンサや半導体回路等への応用を考えています。

まとめ

- n型ドーピングの高度化により種々のダイヤモンドデバイス形成に成功
- 究極のパワーデバイス半導体材料としてのダイヤモンド気相成長技術を探求
- ビアレビュー論文：179報、権利化特許：7件

論文・特許

- Y. Katamune, A. Izumi, Ki. Ichikawa and S. Koizumi, *Diamond Relat. Mater.* **134**, 109789 (2023).
- T. Shimaoka, M. Liao and S. Koizumi, *IEEE Electron Device Lett.* **43**, 588-591 (2022).
- S. Koizumi, H. Umezawa, et al., *Power Electronics Device Applications of Diamond Semiconductors*, Woodhead Publishing/Elsevier, ISBN 9780081021835 (2018).

ダイヤモンドMEMSと半導体電子デバイス及びその集積化

Keywords ダイヤモンド, MEMS, 半導体電子デバイス

主席研究員／Chief Researcher

廖 梅勇 Liao Meiyong

✉ MEIYONG.Liao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/meiyong_liao



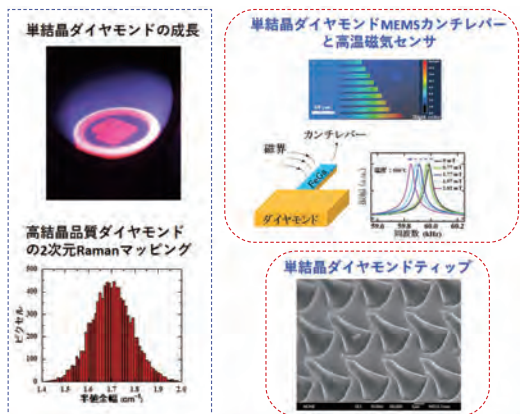
研究概要

ダイヤモンドはSi, GaN, やSiCなどの実用化済み半導体材料の物性値を凌駕し、Microelectromechanical system (MEMS) 或いは電子デバイスへの応用において圧倒的に高い素子性能が期待できる究極的半導体材料である。既存の半導体材料は実現不可能と思われる高感度・高信頼性MEMSセンサ(磁気、温度、振動、加速度など)、高周波数機械振動子および高温・高圧・極限環境に耐える電子デバイスへの応用を期待している。本研究は、高品質ダイヤモンドのCVD成長、MEMSデバイスおよび光・電子デバイスに関する研究開発に従事している。

新規性・独創性

- 先駆けて単結晶ダイヤモンドMEMS分野の開拓
- 室温で最高品質因子、高信頼性を持つダイヤモンドMEMS振動子の研究開発
- 集積化ダイヤモンドMEMSチップの研究開発
- n型ダイヤモンドのトランジスタの実証

研究内容



単結晶ダイヤモンドMEMSバッチ製造、最高温度MEMS磁気センサ、アクチュエータ、MEMS応用など数多く最先端の研究成果を生み出した。

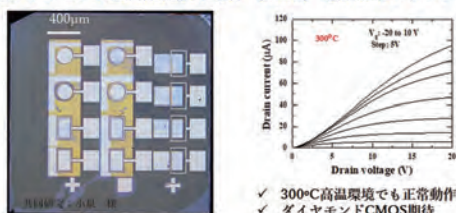
(i) 品質因子として最高レベル(Q値100万以上)のダイヤモンドカンチレバーの開発に成功し、その機械エネルギー損失機構解明から理論的にダイヤモンドMEMSの優位性を示した。

(ii) 世界で初めて電気信号で駆動する単結晶ダイヤモンドMEMSチップの開発に成功した。単結晶ダイヤモンドMEMSチップを実際に動作させたところ、高感度、低動作電圧、高温動作(600℃)などにおいて優れた特性を示した。

(iii) さらに、高温動作(500℃)可能で且つ高い磁気感度(10nT/Hz0.5)を持つダイヤモンドMEMS磁気センサを開発した。

本成果は耐磨性走査型顕微鏡プローブと内燃機関、石油、鉱物探索、原子炉の材質劣化診断、宇宙利用など過酷な環境下における磁気センシングに应用されることが期待できる。

n型ダイヤモンド金属酸化膜半導体(MOS)電界効果トランジスタ



n型ダイヤモンド半導体デバイスとCMOS回路の開発に挑戦し、世界で初めてダイヤモンドn型電子デバイスMOSFETとMESFETの開発に成功した。

まとめ

ダイヤモンドMEMSセンサーは、他の半導体よりもはるかに高い信頼性と感度を備えていることが実証されている。ダイヤモンドMEMS(カンチレバーなど)の作製プロセスは再現性が高く、制御ができ、ハイエンドセンシングへの応用が期待されている。

論文・特許

- Z. Zhang, W. Zhao, G. Chen, M. Toda, S. Koizumi, Y. Koide and M. Liao, *Adv. Fun. Mater.* **33**, 2300805 (2023).
- H. Sun, L. Sang, H. Wu, Z. Zhang, T. Teraji, T. Li, J. Q. You, M. Toda, S. Koizumi and M. Liao, *Phys.Rev. Lett.* **125**, 206802 (2020).
- M. Liao, S. Hishita, E. Watanabe, S. Koizumi and Y. Koide, *Adv. Mater.* **22**, 5393-5397 (2010).

超ワイドギャップ半導体の高速・高品質成膜技術の開発

Keywords Ga₂O₃, HVPE, パワーデバイス電動航空機

主幹研究員 / Principal Researcher

大島 祐一 Oshima Yuichi

✉ OSHIMA.Yuichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/oshima_yuichi



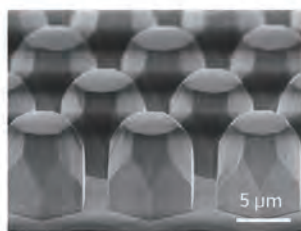
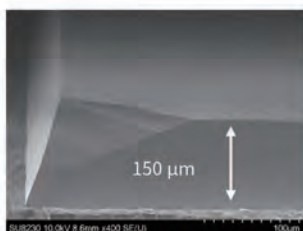
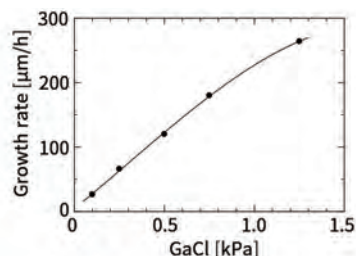
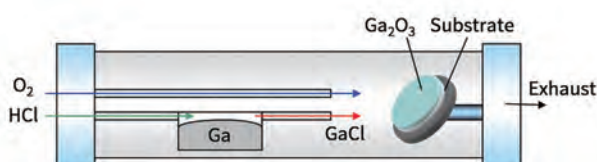
研究概要

脱炭素社会に向けた省エネ実現のため、パワーデバイスの低損失化は喫緊の課題である。現状、ほとんどのパワー半導体デバイスはSiを用いて作られているが、その性能はSiの物性限界に到達しつつある。そこで、Siを超える高性能な超ワイドバンドギャップ (ultra-wide bandgap; UWBG) 半導体パワーデバイスの実現と普及が求められている。本研究では、そのような新材料の優れたポテンシャルを引き出し、高性能デバイスを十分な経済性を確保しながら製造するために必要な高品質・高速成膜技術の確立を目指す。

新規性・独創性

- ハライド気相成長法 (halide vapor phase epitaxy; HVPE) 法のUWBG材料への展開
- 寄生反応を防ぎ、MOCVD等に比べ100倍以上の高速成膜が可能。
- 良好な電気特性制御に貢献する、高純度結晶成長技術
- 成長モード制御や選択成長を駆使した欠陥密度低減技術

研究内容



GaNなどのIII-V族化合物半導体の高速成膜で実績のあるHVPE法を、UWBG半導体として注目されているGa₂O₃の成長に展開し、その確立を目指している。これまでに、独自の反応炉設計、および成長反応とエッチング反応のバランス最適化による寄生反応抑制技術により100 μm/hを超える超高速成長を実現し、それを用いて100 μmを超える厚膜を成長することに成功している。また、選択成長と高速成長の両立にも成功し、転位密度の大幅な低減にも成功した。これらの成果は、数十μmを超える厚いドリフト層を備えた高耐圧のGa₂O₃パワーデバイスの実現に大きく貢献すると考えている。

まとめ

次々世代高性能パワーデバイス材料として注目されているGa₂O₃のHVPE法による超高速厚膜成長および選択成長による欠陥低減を実証した。本研究で得られた、平衡定数の大きな析出反応でも寄生反応を抑制しながら高速成長を実現する技術は、Ga₂O₃以外の新たな材料系にも展開可能と期待される。

論文・特許

- Y. Oshima, K. Kawara, T. Oshima and T. Shinohe, *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, 115501 (2020).
- Y. Oshima, K. Kawara, T. Shinohe, T. Hitora, M. Kasu and S. Fujita, *APL Mater.* **7**, 022503 (2019).
- Y. Oshima, E. G. Villora and K. Shimamura, *J. Cryst. Growth* **410**, 53-58 (2015).

酸化物パワー半導体の新しい構造制御

Keywords パワー半導体, 酸化ガリウム, ルチル型酸化物, 選択成長, 選択エッチング, デバイス応用

主任研究員 / Senior Researcher

大島 孝仁 Oshima Takayoshi

✉ OSHIMA.Takayoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/oshima_takayoshi



研究概要

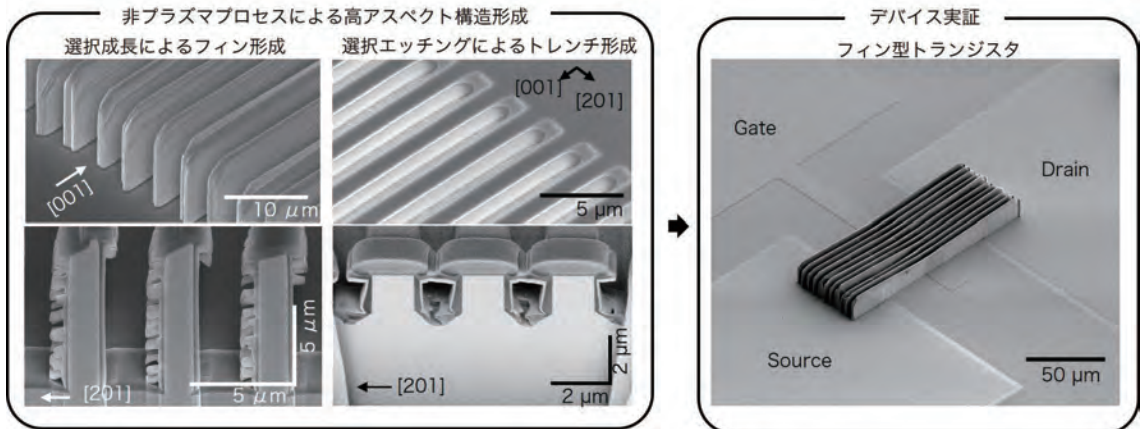
カーボンニュートラル実現のために、半導体分野では次世代パワー半導体による超低損失なパワーデバイスの実用化が求められている。その次世代パワー半導体の中でも研究開発の歴史が浅い酸化ガリウムやルチル型酸化物(酸化錫や酸化ゲルマニウム)は、先行する炭化ケイ素や窒化ガリウムと比較して、パワーデバイス応用を想定した場合の基礎物性に優れており、近年注目を集めている。

本研究では、それら比較的新しい酸化物パワー半導体に対して、選択成長や選択エッチングを用いて、結晶の自発的なファセット形成を促し、デバイス性能向上に必要とされる構造制御に取り組んでいる。

新規性・独創性

- プラズマ非使用の構造形成技術
- 従来技術では作製不可能な高アスペクト構造形成
- プラズマダメージレス+高アスペクト構造を利用したデバイス作製

研究内容



本研究例として、酸化ガリウム半導体のプラズマ非使用加工と応用について説明する。この半導体は、n型単極性でありホモpn接合を形成できない。そのため、その単極性デバイスの性能向上には、フィンやトレンチなどの高アスペクト構造を形成して、微小領域で電界を制御する必要がある。その微細構造形成においては、プラズマを利用したドライエッチングが用いられているが、高アスペクト構造の形成が困難であり、さらに反応性イオンによるダメージが加工表面に導入されるという欠点があった。本研究では、その課題を解決可能な新しい加工方法として、選択成長と選択ガスエッチングを実演した。これらの手法では、化学的に最安定な結晶ファセットを側壁面として顕在化させることで、反応性をイオンを用いずに、図に示すようなフィンやトレンチ構造を作製可能である。現在は、そのような自発的に形成された構造を利用したデバイスの試作も開始している。

まとめ

このように結晶の異方性を利用した高アスペクト構造形成により、これまで従来技術で作製が困難であった高アスペクト構造体の実現できる。今後は、デバイス試作・評価により、本手法の有用性を検証する。また、酸化ガリウムだけでなく、最近になって提案されたルチル型酸化物パワー半導体についても同様の研究を行う予定である。

論文・特許

- T. Oshima and Y. Oshima, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 162102 (2023).
- T. Oshima *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, 018004 (2023).
- H. Takane, T. Oshima, K. Tanaka and K. Kaneko, *Appl. Phys. Express* **16**, 045503 (2023).

ダイヤモンド／窒化物半導体の絶縁ゲート／電極材料開発

Keywords ダイヤモンド、窒化物半導体、絶縁ゲート材料、電極材料、メタラジー、電気伝導機構、材料設計指針

グループリーダー／Group Leader

小出 康夫 Koide Yasuo

✉ KOIDE.Yasuo@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/koide_yasuo



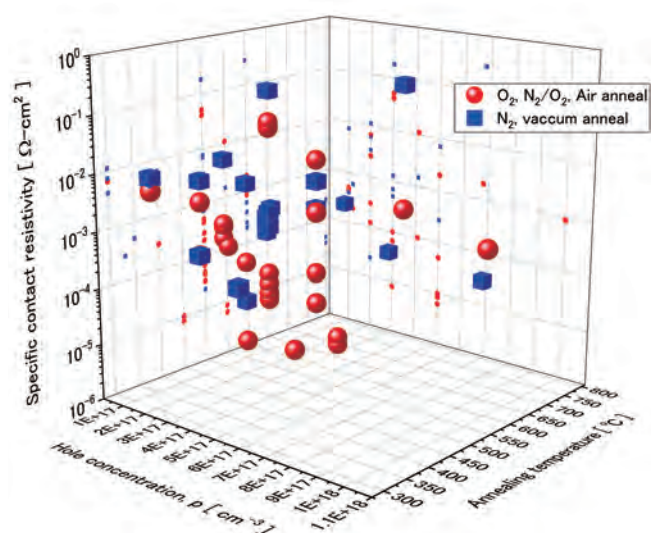
研究概要

次世代半導体としてダイヤモンド半導体及びIII族窒化物半導体それぞれの絶縁ゲート材料および低抵抗オーム性電極材料開発を目的とする。材料設計、エピタキシャル成長、微細加工、及びプロセス技術を含めて、高品質な界面特性を呈する絶縁ゲート材料開発および熱安定な低抵抗オーム性電極材料開発を推進する。同時に光電子デバイス試作を一体的に進めるとともに、材料設計指針及び電気伝導機構解明を通して半導体界面の材料設計原理を構築する。

新規性・独創性

- 独自性：ナノラミネート高誘電率ゲート材料の開発と導電性酸化物電極材料開発
- 従来技術との比較：メタラジー概念を基盤とする材料設計指針構築

研究内容



図に論文[DOI: 10.1007/s11664-999-0037-7]によって先導され、その後報告されたp-GaNに対する酸素アニールによる種々オーム性電極材料をまとめたコンタクト抵抗率と正孔濃度およびアニール温度の関係を示す。コンタクト抵抗率減少のメカニズムは現在でも不明であり、導電性酸化物電極の材料設計指針構築が不可欠である。

まとめ

- AlOx/TiOyナノラミネート高誘電率ゲート材料の開発
- p-GaNへの低抵抗オーム性電極材料開発と導電性酸化物の材料設計指針構築
- メタラジー概念を基盤とするメカニズム解明と指導原理構築が課題

論文・特許

- Y. Koide, *COJ Tech. Sci. Res.* **4**, 1-3 (2023).
- J. Liu, M. Okamura, H. Mashiko, M. Imura, M. Liao, R. Kikuchi, M. Suzuka and Y. Koide, *Nanomaterials* **13**, 1256 (2023).
- Y. Koide, T. Maeda, T. Kawakami, S. Fujita, T. Uemura, N. Shibata and M. Murakami, *J. Electron. Mater.* **28**, 341-346 (1999).

極性窒化物半導体薄膜のヘテロ界面構築と新機能

Keywords 有機金属化学堆積法, 光熱偏向分光法, 欠陥準位, ヘテロ界面, 表面酸化, 表面計算モデル, 電子デバイス, 光電変換素子

主席研究員／Chief Researcher

角谷 正友 Sumiya Masatomo

✉ SUMIYA.Masatomo@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/sumiya_masatomo



研究概要

窒化物半導体の極性構造に着目して薄膜成長メカニズムを検討してきた。極性と歪を伴うAlGaIn/InGaInヘテロ構造はその界面に特有の電子状態が形成される。さまざまな条件で成長した半導体薄膜のギャップ内欠陥準位を光熱偏向分光法で評価するとともに、ヘテロ界面の評価を低温磁場下での電子輸送特性から行っている。窒化物半導体薄膜材料の低欠陥化と物理現象の本質的な理解から物性や機能の高度化に向けた取り組みを行っている。これらの結果は高電子移動度トランジスタ、光電変換素子などの窒化物半導体電子デバイスへの特性向上につながる。

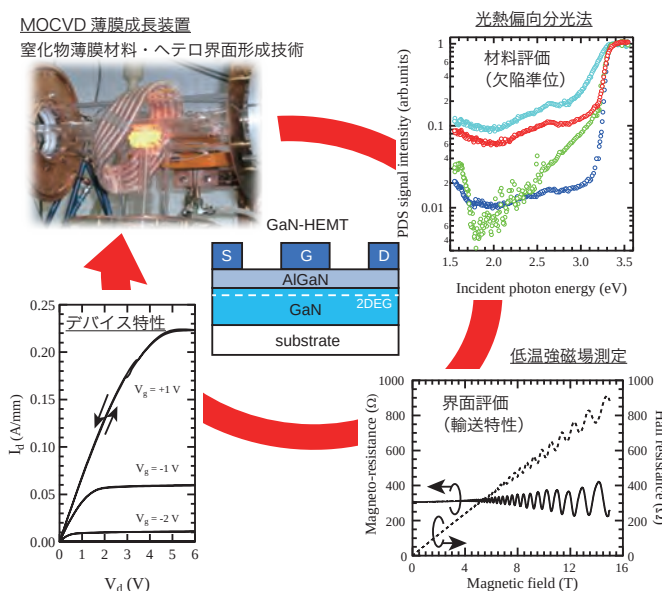
新規性・独創性

有機金属化学堆積法による窒化物半導体薄膜成長、光熱偏向分光法による欠陥準位・密度評価、低温強磁場でのヘテロ界面評価、デバイス特性を系統的に検討している。窒化物半導体特有の極性構造を考慮した表面モデル計算から酸化・界面準位といったデバイス作製プロセス上の課題についても取り組んでいる。

研究内容

MOCVD 薄膜成長装置

窒化物薄膜材料・ヘテロ界面形成技術



有機金属化学堆積法による窒化物半導体薄膜材料開発を軸に研究を行い、評価、新規デバイス開発を行っている。現在取り組んでいる光熱偏向分光法は、光学的電氣的に不活性な材料でもギャップ内欠陥を評価できる特徴がある。非輻射再結合による発熱を検出するため、輻射再結合による発光と組み合わせることさらに俯瞰的に欠陥に関する知見を得ることができる。特にイオン注入した材料の欠陥評価やドーパントの活性化に向けた知見を本手法で得ることができる。ヘテロ界面で形成される2次元電子ガスの有効質量や散乱過程の物理的な基礎データを取ることができる。これらのデータと薄膜成長条件との相関を学習することによって、物性の高度化やデバイスの高機能化を推進する。

まとめ

- 有機金属化学堆積法による窒化物半導体のヘテロ構造の構築
- 光偏向分光法によるギャップ内欠陥評価 特にイオン注入試料への高い有用性
- 低温強磁場測定による電子輸送特性評価 有効質量やキャリア散乱機構の解明
- 窒化物半導体表面の酸化プロセス解明
- デバイス特性高度化に向けた取り組み

論文・特許

- M. Sumiya, M. Sumita, Y. Tsuda, T. Sakamoto, L. Sang, Y. Harada and A. Yoshigoe, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **23**, 189-198 (2022).
- M. Sumiya, Y. Takahara, A. Alghamdi, Y. Nakayama, F. Uesugi, Y. Harada, A. Uedono and Y. Imanaka, *J. Cryst. Growth* **574**, 126324 (2021).
- M. Sumiya, S. Ueda, K. Fukuda, Y. Asai, Y. Cho, L. Sang, A. Uedono, T. Sekiguchi, T. Onuma and T. Honda, *Appl. Phys. Express* **11**, 021002 (2018).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

半導体素子信頼性評価

Keywords 半導体電子素子, 窒化物半導体, 水素, 雰囲気ガス

主幹研究員 / Principal Researcher

色川 芳宏 Irokawa Yoshihiro

✉ IROKAWA.Yoshihiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/irokawa_yoshihiro



研究概要

半導体素子の特性が測定雰囲気ガスに応じて変化することは古くから知られている。しかしながら、そのメカニズムについて推測はされているが、確定したものは未だに存在しない(界面に存在する電気二重層起因のモデルが提案されている)。一方、半導体材料として窒化物半導体を用いたデバイスは実用化が進んでおり、その信頼性向上は重要である。本研究では、窒化物半導体デバイスの信頼性向上のために、環境雰囲気やデバイス材料物性等がデバイス特性に与える影響を調べる。これまでの研究から、半導体界面に存在する絶縁膜の物性変化が重要な役割を果たしていることが明らかになっており、今後の研究で詳細を調べる。

新規性・独創性

- 実験結果を忠実に再現するモデルの提案、高感度水素センサの開発

研究内容

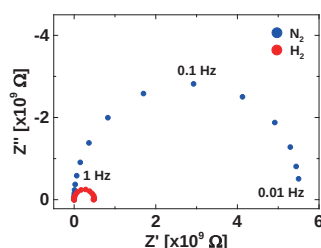


図1. Pt-AlGaIn/GaN SBDのナイキストプロット

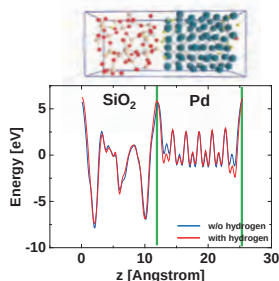


図2. 第一原理計算によって得られたPd-SiO₂界面の面内平均ポテンシャルの深さ方向分布

電極と半導体界面間に形成される電気二重層の存在を確認するために実験的・理論的手法の両面から取り組んだ。図1にそれぞれ窒素および水素雰囲気中において、Pt-AlGaIn/GaNショットキーダイオードをインピーダンス測定した結果得られたナイキストプロットを示す。図1より、水素導入後においても、電気二重層の存在に伴うRC成分を示す新たな半円が現れないことがわかる。また、図2に第一原理計算によって得られたPd-SiO₂界面の面内平均ポテンシャルの深さ方向分布を示す。図2より、水素吸着前後で面内平均ポテンシャルに大きな変化が見られない。以上の結果より、界面において水素が電気二重層を形成することは考えにくい。次に、Pt-GaNショットキーダイオードの電極と半導体界面に様々な絶縁膜を挿入して水素応答を調べた。その結果、挿入する絶縁膜の種類によって、水素応答が大きく変化することがわかった。さらに、Pt-SiO₂-GaNダイオードの電流輸送機構を解析した結果、窒素中ではFowler-Nordheim tunnelingであったが、水素中ではPool-Frenkel emissionに変化した。この結果より、水素による絶縁膜の物性変化が本質的であることが予想される。

まとめ

得られた成果は、半導体デバイスの信頼性向上以外に高性能水素センサの実現にも応用可能と考えられる。今後は提案するメカニズムの詳細な検討等を行い、半導体デバイスの信頼性向上のための知見を得るとともに高性能水素センサの実現も目指す。

論文・特許

- Y. Irokawa, M. Inoue, T. Nabatame and Y. Koide, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **11**, 085010 (2022).
- 特許第 6099085 号 窒化物半導体素子の製造方法
- Y. Irokawa, T. Nabatame, A. Ohi, N. Ikeda, O. Sakata and Y. Koide, *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 100915 (2019).

次世代半導体を用いた光・電子・磁性デバイスの開発

Keywords III族窒化物半導体, ダイヤモンド半導体, 発光ダイオード, 光・放射線検出器, 電界効果トランジスタ, 磁性デバイス, 有機金属化合物気相成長法, マイクロ波プラズマ気相成長法

主幹研究員／Principal Researcher

井村 将隆 Imura Masataka

✉ IMURA.Masataka@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/imura_masataka



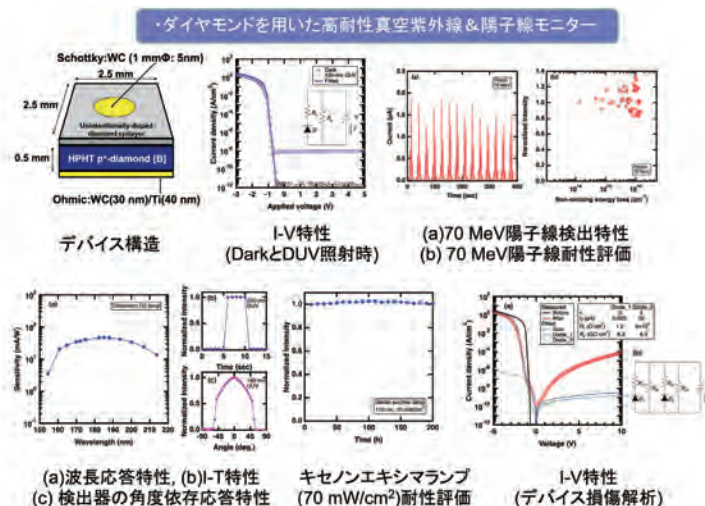
研究概要

次世代半導体光・電子・磁性デバイス分野では、Siを代替するワイドギャップ半導体の導入が不可欠である。私は応用性・実用性に優れた高い潜在能力を有するIII族窒化物半導体及びダイヤモンド半導体に早期から着目し、これらを用いたデバイス開発を行っている。NIMSでは結晶成長、デバイスプロセス、結晶評価が一体となって常にフィードバックしながら研究する体制が整えてある。

新規性・独創性

- ダイヤモンド半導体を用いた放射線・陽子線検出器の開発
- InGaN系窒化物半導体微細加工構造を用いた可視光全領域フォトニックデバイスの開発
- AlGaN系窒化物半導体を用いた高効率紫外線発光ダイオードの開発
- AlGaN/GaN及びAlInN/GaNヘテロ構造を用いた高周波パワーデバイスの開発
- BAlN及びScAlN系窒化物半導体を用いた磁性デバイスの開発

研究内容



低消費電力で長期安定動作可能な高耐性真空紫外線&陽子線検出器を実現するために、ダイヤモンドを用いた縦型ショットキーバリアフォトダイオード(SBPD)を試作しその基礎特性及び耐性を評価した。チャージアップ現象を低減させるために導電性のダイヤモンド基板を用いた。無電圧印加(ゼロバイアスモード)にてデバイスを動作させることで、低消費電力動作を実現した。また、真空紫外線及び陽子線の応答特性と真空紫外線及び陽子線に対するデバイスの耐性を評価した。

まとめ

ダイヤモンドを用いて検出器を試作した。真空紫外線及び陽子線の応答特性と真空紫外線及び陽子線に対するデバイスの耐性を評価し、デバイスの長期安定動作が可能であることを実証した。近年は、III族窒化物半導体を用いた可視光全領域フォトニックデバイス、高効率紫外線発光ダイオード、高周波パワーデバイス、新規材料を用いた磁性デバイスの研究開発を行っている。

論文・特許

- M. Imura, M. Togawa, M. Miyahara, H. Okumura, J. Nishinaga, M. Liao and Y. Koide, *Functional Diamond* 2, 167–174 (2022).
- M. Imura, H. Inaba, T. Mano, N. Ishida, F. Uesugi, Y. Kuroda, Y. Nakayama, M. Takeguchi and Y. Koide, *AIP Adv.* 12, 015203 (2022).
- M. Imura, Y. Ota, R. G. Banal, M. Liao, Y. Nakayama, M. Takeguchi and Y. Koide, *Phys. Status Solidi A* 215, 1800282 (2018).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高ハチ・バイオ材料

マテリアル基盤

ダイヤモンドMOSFET論理回路

Keywords ダイヤモンド, MOSFET, 論理回路

主幹研究員／Principal Researcher

劉 江偉 Liu Jiangwei

✉ LIU.Jiangwei@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/liu_jiangwei



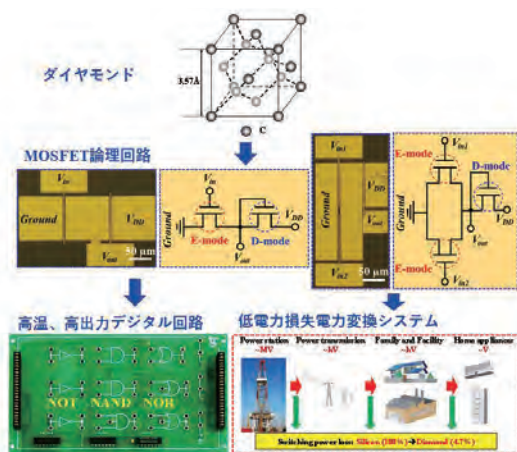
研究概要

ダイヤモンドは、高いキャリア移動度、大きな破壊電界と大きな熱伝導率を持つことから、高温、高出力、および高周波で安定に動作する電流スイッチおよび集積回路への応用が期待されている。我々は、極限環境下に強いダイヤモンド集積回路を開発するための第一歩として、ノーマリオン／オフ型動作モードの金属―酸化物―半導体電界効果トランジスタ (MOSFET) を組み合わせたダイヤモンド論理回路の開発に成功した。

新規性・独創性

- 極めて低い漏れ電流密度を持つダイヤモンドMOSキャパシタの開発
- ダイヤモンドMOSFETのノーマリオン／オフ型の制御プロセシングの開発
- ダイヤモンドMOSFET論理回路の開発
- 高熱安定性かつ低電力損失のダイヤモンド電力変換システムの開発
- 大電流出力マルチゲートダイヤモンドMOSFETの開発

研究内容



2012年に光電子分光技術により、種々酸化物と水素終端ダイヤモンド界面のバンド構造を明らかにし、酸化アルミニウム／水素終端ダイヤモンド界面の大きな価電子帯エネルギーオフセットが高性能MOS電子デバイス動作に有利であることを見出した。2013年には極めて低い漏れ電流密度を持つダイヤモンドMOSキャパシタの開発に成功するとともに、困難であったノーマリオフ型の水素終端ダイヤモンドMOSFETの開発に成功した。続いて2014年にダイヤモンドMOSFETと抵抗器の組合せでインバータ論理回路チップを試作し、2015年にはダイヤモンドMOSFETのノーマリオン／オフ型の制御プロセシングを開発するとともにそのメカニズムを明らかにした。更に2017年、2018年にはノーマリオン／オフ型動作モードのMOSFETを組み合わせたダイヤモンド論理回路の開発に成功した。高温、高出力ダイヤモンドデジタル回路と高熱安定性かつ低電力損失のダイヤモンド電力変換システムの応用を期待される。

まとめ

ダイヤモンド論理回路は、高温・放射線・宇宙環境・高出力・高周波などの極限環境条件においても安定に動作する電子デバイスへの応用が期待される。今後は、応用に必要で大電流化と高耐圧化を図るために、MOS界面のさらなる高品質化による移動度の向上、ドレイン領域に耐圧層の導入が必要ですが、近い将来、ダイヤモンドパワーエレクトロニクス産業の創出にも貢献します。

論文・特許

- J. W. Liu, H. Oosato, M. Y. Liao, M. Imura, E. Watanabe and Y. Koide, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 153501 (2018).
- J. Liu, H. Ohsato, M. Liao, M. Imura, E. Watanabe and Y. Koide, *IEEE Electron Device Lett.* **38**, 922-925 (2017).
- 特許第6783463号 ダイヤモンド半導体装置、それを用いたロジック装置、及びダイヤモンド半導体装置の製造方法

資源循環型高機能複合材料の開発

Keywords 粘土鉱物, バイオマス, ナノコンポジット, 複合材料, 吸着, リサイクル, 資源循環

グループリーダー / Group Leader

田村 堅志 Tamura Kenji

✉ TAMURA.Kenji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamura_kenji



研究概要

- “ありふれた素材” (天然鉱物やバイオマスなど) を活用してその隠れた特性を有効利用した機能性材料の開発
- 石化系プラスチック代替となるリグニン配合熱可塑性プラスチック複合材料を溶融混練法で製造
- 粘土改質、および複合化技術開発による機能性粘土バイオポリマーナノコンポジット：強度—靱性向上とリサイクル性の付与
- 多様な強化フィラーの設計技術構築：鉱物合成、表面処理、高次構造解析による高機能化
- 繊維表面への層状複水酸化物 (LDH) 担持合成や薔薇状 LDH 粒子合成による資源回収用吸着フィルター、カラム充填剤の開発

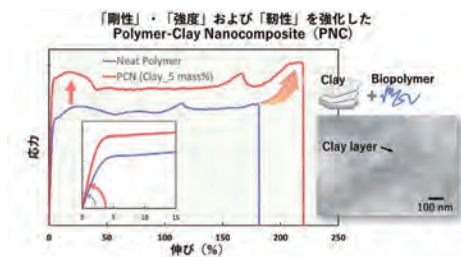
新規性・独創性

- バイオマスの欠点を克服するため、フィラー強化系複合材料の製造技術に取り組む
- 石化系プラスチックに代替する熱可塑性リグニン系プラスチック材料を開発
- バイオポリマーの欠点である力学特性をナノコンポジット技術で「剛性」、「強度」および「靱性」の向上に成功
- ナノチューブ状粘土鉱物の合成、天然雲母の膨潤性付与、廃棄資源からの鉱物合成など“ありふれた素材”を活用する技術開発
- 環境浄化、資源回収のための吸着材料を開発、プラスチックにバイオマス度向上とリサイクル性を付与

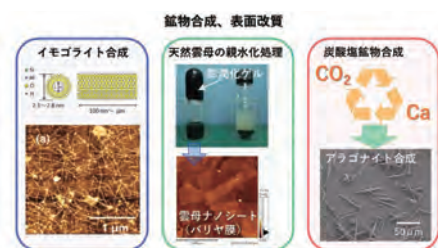
研究内容



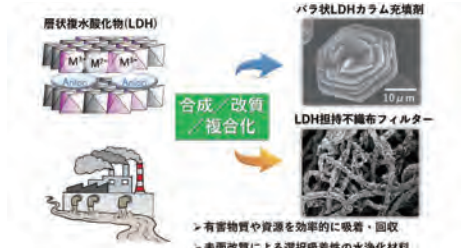
- PP/リグニン複合系の機械的性質を向上させるため、特にフィラーを重視したアプローチで、界面強化による相乗効果を発揮させる
- このコンポジットは、リグニンの抗酸化効果によって耐光性や熱老化性に優れ、材料の寿命延長やリサイクル性の向上が期待できる



- 上に示すように粘土—バイオポリマーナノコンポジットにおいて、剛性、強度及び靱性すべてを改善している



- 目的志向で様々な無機化合物の合成・改質、有機物および高分子の合成・改質、それらの応用技術の開発に取り組んでいる



- 粘土／繊維複合フィルターや粘土粒子カラムなどの使いやすい環境浄化材料など環境浄化と資源回収に資する材料開発

まとめ

粘土鉱物など鉱物資源を高機能プラスチック強化フィラーや高選択性吸着剤など機能性材料に変身可能です。さらに強化フィラー／バイオマス素材界面とその高次構造を制御した複合材料設計により石化系プラスチック代替の材料開発を実現させます。成形加工性、リサイクル性などの製品価値を高めることで資源循環型の環境調和材料への転換が図れます。

論文・特許

- J. Tanks, K. Tamura, K. Naito, T. T. Nge and T. Yamada, *Compos. Sci. Technol.* **238**, 110030 (2023).
- K. Tamura, Y. Wu, C. Kato, M. Kamon, N. Iyi and Y. Watanabe, *Appl. Clay Sci.* **228**, 106639 (2022).
- 特許第7274207号 層状複水酸化物の花冠状凝集粒子を含むカラム用充填材及びこれを充填した分離デバイス

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

循環機能材料の理論計算

Keywords 計算シミュレーション, 天然鉱物, 粘土鉱物, 機能性層状化合物, ナノシート

主幹研究員 / Principal Researcher

末原 茂 Suehara Shigeru

✉ SUEHARA.Shigeru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/suehara_shigeru



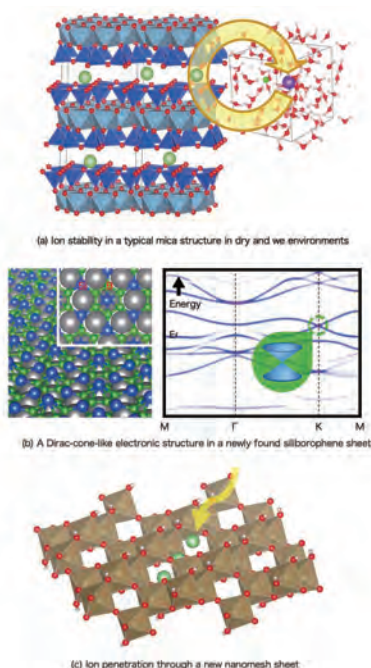
研究概要

循環型社会の実現に向けた取り組みの一環として、天然鉱物をはじめとする希少ではないありふれた元素（ユビキタス元素）で構成された物質の特性に関する理論計算研究を行います。具体的には半経験的密度汎関数計算シミュレーションを用いて循環材料の特性の再現を目指し、実験結果との比較を通してその起源を探ります。密度汎関数法は原子の配置に基づいて物質の性質を計算する手法のひとつで、本理論研究は循環型社会における天然鉱物やユビキタス元素の適切な利用や再利用に向けた基盤技術の構築、さらには環境に配慮した資源管理や廃棄物削減などの産業活動の改善につながると考えています。

新規性・独創性

- 大型計算機 (NIMSスーパーコンピュータ) やGPUを利用した高速並列計算
- 非ボルツマン型分子動力学法やエラスティックバンド法などを用いた原子・イオンの拡散や化学反応の追跡
- 各種実験スペクトルを理論的に再現することによる実験結果の検証・考察

研究内容



天然土壌に含まれる粘土鉱物の層間イオンの交換反応を理論計算を用いて評価し、2011年3月11日に発生した地震・津波による福島第一原子力発電所の事故によって放出された放射性セシウムが他の典型イオンに比べて強く粘土内に吸着していることを明らかにしました(a)。

また、代表的なユビキタス元素である珪素とホウ素からなる新規層状化合物(シリボロフェン)の構造を、その物質固有のフォノン振動を理論的に再現することで明らかにすることができました。同時に特異な電子構造(ディラックコーン)も発見することができました。これはグラフェンやボロフェン(ボロフェン)に端を発するユビキタス元素による新材料の発展型の1つとなり得る成果です(b)。

他、新型イオン電池に応用可能なナノシート膜のユビキタスイオンの透過(拡散)能力を調べる研究なども行っています(c)。

まとめ

半経験的密度汎関数計算シミュレーションを軸に、原子数個から数百個程度のモデルを用いて物質の理論研究を行っています。本研究手法のみでは、循環技術の社会実装における最初の難所「魔の川」に辿り着くことすら不可能に近いと思われますが、基礎・応用・実証実験等の各ステージにおいて、理論的なモデルが構築することができれば、実験結果の解析に大きな役割を果たすことができるはずです。

論文・特許

- S. Suehara and H. Yamada, *Geochim. Cosmochim. Acta* **109**, 62-73 (2013).
- T. Aizawa, S. Suehara and S. Otani, *Phys. Rev. Mater.* **3**, 014005 (2019).
- D.S.ジョール, J.A.ステッケル, 密度汎関数理論入門: 理論とその応用. 吉岡書店, ISBN 9784842703657 (2014).

環境配慮型代替ポリマー電解質材料開発

Keywords 非フッ素系ポリマー, エンジニアリングプラスチック, イオン伝導体, 複合体, 燃料電池, 水電解

主幹研究員／Principal Researcher

金 済徳 Kim Jedeok

✉ KIM.Jedeok@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kim_jedeok



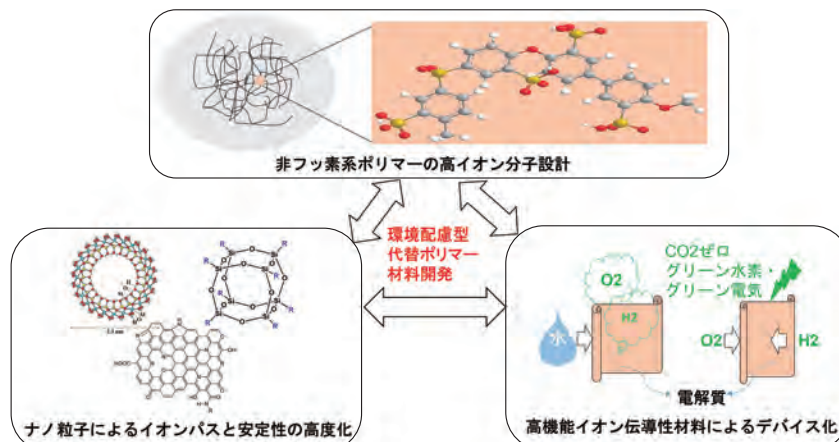
研究概要

気候変動は世界規模で2050年カーボンニュートラル実現に向けた安定的なエネルギー供給による社会システムの構築を求めている。CO₂を排出しない太陽光、風力、バイオマス等の再生エネルギーを活用する多様な技術開発が行われる中、水素は化石燃料を代替する新エネルギーパラダイムを導くと予想される。水電解や燃料電池等に用いられているフッ素系ポリマー電解質の代替材料は必須であり、非フッ素系伝導体材料として炭化水素系PPSU電解質の高機能化について研究を行っている。

新規性・独創性

- スルホン化濃度の高度化
- スルホン架橋によるポリマー化
- ナノ複合化による伝導パスの高度化
- ナノ複合化による化学的安定性の高度化

研究内容



炭化水素系ポリマーであるエンジニアリングプラスチックは高い化学的・熱的安定性により多様な分野で利用されている。その中でポリフェニルスルホン (PPSU: polyphenylsulfone) を用いた機能性電解質材料の開発を行っている。PPSUは高イオン伝導性を付与できるスルホン基導入サイトが多く、高スルホン基導入による高プロトン伝導体の創生が期待できる。また、イモゴライトやナノシリカやカーボンナノドットのようなナノ粒子の利用は保湿度が高く、ポリマー電解質に導入された場合、高温低加湿環境下でも電解質の高伝導度を維持させることができる。更に、炭化水素系電解質の化学的安定性を飛躍的に向上させると期待している。合成プロセスにより電解質材料を作製し、製膜プロセス工程により膜化し、伝導度などの物性評価を行い、デバイスとして燃料電池や水電解等のシステム評価により電解質材料特性の高度化を図る。

まとめ

カーボンニュートラル実現には多様な分野でのブレイクスルー技術開発が求められている。その中で、現在、水電解や燃料電池等で使われている、フッ素系電解質材料の代替材料として炭化水素系電解質の開発は将来の水素社会を担う革新的材料開発に大きく貢献できると期待される。

論文・特許

- J. Kim and A. Ohira, *Membranes* **11**, 861 (2021).
- J. Kim, A. Ohira and H. Nakao, *Membranes* **10**, 31 (2020).
- 特許6548176 ポリフェニルスルホン系プロトン伝導性高分子電解質、プロトン伝導性固体高分子電解質膜、固体高分子形燃料電池用の電極触媒層及びその製造方法、並びに燃料電池

天然材料を活用した環境調和材料開発と物性発現機構の解明

Keywords 炭酸カルシウム, 粘土鉱物, 天然結晶, 水熱合成, 分子シミュレーション, 表面・界面分析, 摩擦

主幹研究員／Principal Researcher

佐久間 博 Sakuma Hiroshi

✉ SAKUMA.Hiroshi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakuma_hiroshi



研究概要

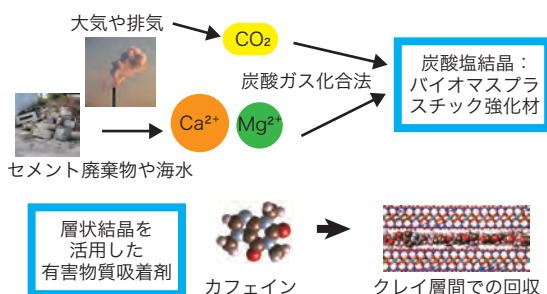
環境問題の喫緊課題に対応するため二酸化炭素の有効活用を視野に入れ、多様な形態とサイズの炭酸カルシウム結晶を合成し、バイオマス材料の性能向上に貢献する。また、天然に広く存在し環境負荷の低い材料である粘土鉱物から、有害物質の吸着材を開発する。これにより、環境負荷を軽減し、持続可能な社会への貢献を目指す。

さらに、これらの材料の開発において、科学的な分析を通じて物性発現機構を解明し、材料の信頼性向上、品質管理の強化、安全性の確保、新たな材料のイノベーションを実現する。このことは、材料の競争力を向上させ、市場での評価を高めることにつながる。

新規性・独創性

- 結晶や表面構造の理論に基づく材料設計
- 第一原理から大規模分子動力学計算による物性解析
- 固液界面の構造を0.1 nm以下の分解能で解明

研究内容



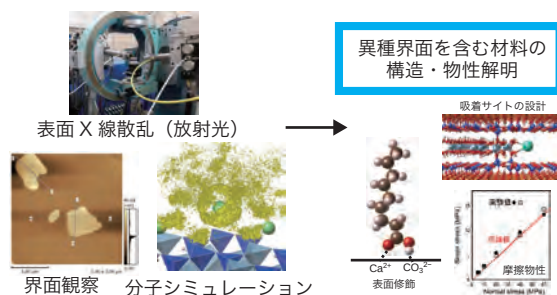
環境負荷の小さい材料設計・合成：持続可能な未来を実現

①炭酸カルシウムの合成：バイオマス材料の強度を向上させる強化材として多様な形態・サイズの炭酸カルシウム結晶を合成する。合成には大気中の二酸化炭素を活用し、カーボンニュートラルに貢献する材料を目指す。

②粘土鉱物の合成：地球表層だけでなく火星表面にも大量に存在する多様な粘土鉱物を活用した環境材料の開発を行う。粘土鉱物は層状のナノ結晶であり、様々な物質を大量に吸着することができる。使いやすく、環境負荷の小さい吸着剤等の開発を目指す。

材料の分析とシミュレーション：材料の信頼性向上・品質管理の強化・安全性の確保・さらなるイノベーションの促進につながる。

我々の技術は表面・界面のX線散乱構造解析・分子シミュレーション等であり、材料の物性発現メカニズムの科学的な解明を可能とする。これまでに有害物質吸着剤の構造モデル化による特異吸着サイト、炭酸カルシウム表面への有機分子吸着・脱離への添加剤の影響、固体潤滑剤の潤滑メカニズムの解明などの実績がある。



まとめ

- 多様な外形を持つ炭酸カルシウム結晶を合成し、この結晶を補強材とする高強度のバイオマスプラスチックを開発する。
- 天然に広く存在する粘土鉱物は層状ナノ結晶であり様々な分子を吸着する。この性質を制御し、環境負荷の低い材料として活用する。
- 結晶表面や界面の性質を、表面に敏感な分析技術や分子シミュレーションから解明し、材料の信頼性向上や新しい材料開発に活用する。

論文・特許

- 佐久間 博, 田村 堅志, 日本結晶学会誌 64, 225–230 (2022).
- H. Sakuma, K. Morida, Y. Takahashi, K. Fukushi, N. Noda, Y. Sekine and K. Tamura, *Am. Mineral.* **107**, 1926–1935 (2022).
- 特許第6647575号 層状珪酸塩粉体及びその製造方法

薄膜材料スマートラボによる無機薄膜電子材料開発

Keywords 誘電体, 半導体, ヘテロ界面, ハイスループット合成, 機能的薄膜

グループリーダー / Group Leader

長田 貴弘 Nagata Takahiro

✉ NAGATA.Takahiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagata_takahiro



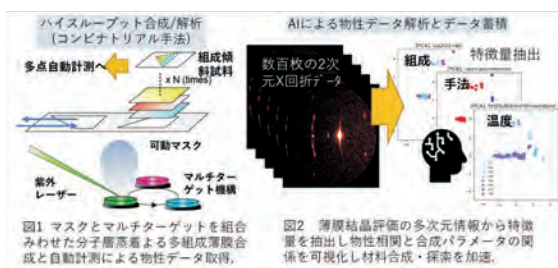
研究概要

半導体に代表される電子材料は、IoT、電気自動車などの新技術で多用途に使用されている。この中で高集積、多機能化に加えて高耐久性、高速動作や合成のしやすさなどのニーズが増加している。我々は、無機半導体/誘電体材料に注目し、高信頼性と次世代の高速/高電力電子素子に資する新薄膜電子材料の開発を目的としている。薄膜誘電体材料はキャパシタ、メモリー素子、絶縁膜など多様な応用があり、応用に合わせた材料設計にインフォマティクスの導入をすすめている。一方、新材料の応用としてメモリー素子もあるが、ここでは、ハイスループット材料開発と界面評価技術を用いて、誘電体/半導体界面の高機能化を目指している。

新規性・独創性

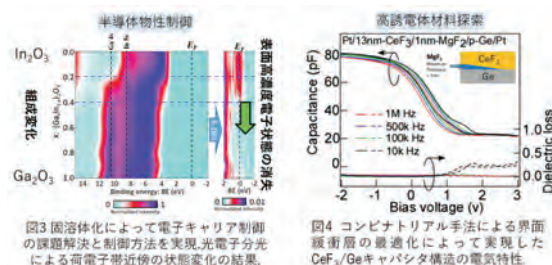
- ハイスループット薄膜合成・解析技術による系統的な薄膜材料探索
- AI技術を用いた物性解析による薄膜結晶成長条件探索の実現
- 複雑系酸化物ペロブスカイト材料による高誘電率・高熱安定材料の実現
- 非酸化物半導体材料に向けた非酸化物高誘電体材料の開発
- 光電子分光技術を併せた誘電体/半導体界面の高精度解析と高機能化の実現

研究内容



スマートラボでは、これまで開発した高速薄膜材料合成技術であるコンビナトリアル材料合成・評価技術(図1)に加えて、多量点解析・データベース化・計算科学のマテリアルズ・インフォマティクス(MI)の導入(図2)を進め、更なる材料開発の加速を行っている。また、素子応用では、異種材料の界面が特性や合成のしやすさに影響する。我々は、光電子分光を用いて界面の化学結合や電子状態を解析し、バンド構造、欠陥構造を明らかにした。さらに素子動作状態でのその場観察技術で多様な電子材料界面の電子・欠陥構造を解明してきた。これらナノスケールの界面評価手法を用いて、高速材料開発で得られた材料の基本素子構造を評価することで素子応用への検証と問題解決を行う。

これまでに、トランジスタ/パワー素子の次世代材料である酸化物半導体で、キャリア・表面電子状態制御の課題に対してコンビナトリアル手法で系統的な物性解析を実現し、固溶体化によるキャリア制御と素子応用で課題となる表面電子縮退層形成の制御を実現した(図3)。得られたデータを基盤にMIを用いたデータクラスタリングを用いた製膜条件探索を実現し、異なる合成手法のデータを連携して結晶層制御の可視化を実現した(図2)。また、同様の手法を用いることで誘電体材料開発では、半導体素子用で従来にはない非酸化物高誘電体材料の提案(図4)と薄膜キャパシタ用途での誘電体材料の高誘電率化と高温安定性の向上を実現した。



まとめ

薄膜材料スマートラボにより、薄膜電子材料の高機能化と新材料探索を加速した。系統的な材料合成と解析により、薄膜誘電体の新規材料開発の提案と既存材料においても電子物性の向上と信頼性の向上を実現した。今後もAI、DX、電動化が加速する社会ニーズに対する半導体を代表とした薄膜電子材料への期待は高まるなかで我々の技術は次世代半導体、機能的薄膜材料開発などに展開できると期待される。

論文・特許

- A. Yamashita, T. Nagata, S. Yagyu, T. Asahi and T. Chikyow, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **2**, 23-37 (2022).
- T. Nagata, T. Hoga, A. Yamashita, T. Asahi, S. Yagyu and T. Chikyow, *ACS Comb. Sci.* **22**, 433-439 (2020).
- 特許第6941346号 MI型半導体装置およびその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

材料評価自動システムの開発

Keywords 自動評価システム, スペクトル自動解析, べき乗則に従うスペクトル, 閾値解析

主幹研究員 / Principal Researcher

柳生 進二郎 Yagyu Shinjiro

✉ YAGYU.Shinjiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yagyu_shinjiro



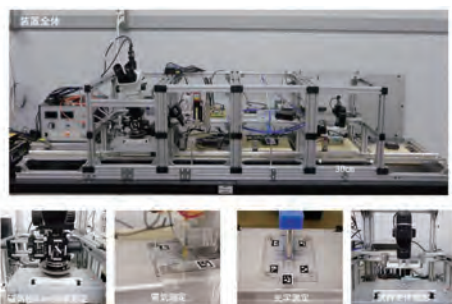
研究概要

材料の高機能化に伴い、多岐にわたる評価が必要とされている。一方で、材料特性のトレードオフを適切に把握するためには俯瞰的視点による解析も求められている。この課題を解決するために、高機能化にかかわる専門的な評価測定に加え、簡便で多様な測定装置を組み合わせることが考えられる。本研究では、簡便で多様な測定装置を組み合わせるために各評価装置について小型・モジュール化を行うとともに、全体として統一したデータの取得を行うマテリアルシーケンサーシステムの開発を行った。さらに、計測によって大量のスペクトルが生成されるため、その自動解析技術(アルゴリズムと実装)の開発を行っている。特にべき乗則に従うスペクトルについて、その閾値を自動で推定するアルゴリズムについての開発を行った。

新規性・独創性

- 基本的な特性(光学特性, 電気特性, 磁気特性)を大気中自動計測システムの開発
- 磁気特性(軟磁性・強磁性)を評価するKerr効果装置の小型化
- 測定で得られるべき乗則に従うスペクトルの自動解析アルゴリズムとその実装

研究内容



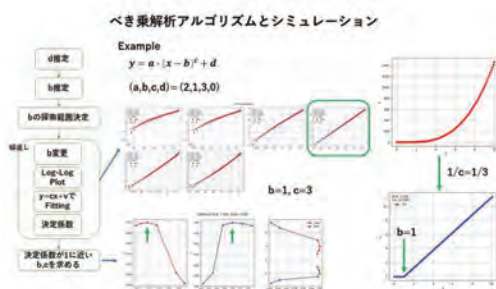
簡易自動計測システム

無機材料の様々な評価を自動で連続して行う“マテリアルシーケンサー”の開発を行った。写真は装置外観である。このシステムは、俯瞰的に高機能化する材料を考えるために、簡易的な装置を用いて多様な評価を行ういわば“材料の健康診断”として設計されている。機械学習分析などの利用を前提として評価データは収集・統合される。各測定装置は、およそ30cm角のスペースに収められ、試料へのアクセス方法や制御の入出力などモジュール化されている。試料は、0.5インチサイズの無機材料を対象としている。現在、画像測定、反射測定、抵抗測定、磁気Kerr効果測定を行うことができる。磁気Kerr効果装置は、このスペースに収めるためにパルスマグネットを用いて小型化されている。

測定スペクトルの自動解析

べき乗則で解釈可能な物理現象のスペクトルの自動解析技術について開発を行った。べき乗則で解釈するスペクトルデータでは、立ち上がり閾値とべき乗の乗数がパラメータである。例えば、超電導材料における電流電圧測定による臨界電流密度、可視紫外吸光度におけるバンドギャップ、光電子収量分光測定におけるイオン化ポテンシャルなどがある。

図はべき乗数及び閾値を推定するアルゴリズムとそのシミュレーションを示す。べき乗スペクトルは両対数プロットで解析が行われるが、閾値が移動すると単純に両対数を取ると適切なべき乗数を推定することができない。そこで、移動量も加味したプロットに直すことで推定することができる。また、ある現象に対してべき乗数が固定されている場合には、拡張したReLU関数と絶対誤差法によるFittingにより閾値を推定することができる。



まとめ

- 俯瞰的な材料評価のための簡易計測装置群及びシステムの開発
- 磁性特性の有無を判定するパルスマグネットを用いた小型Kerr装置の開発
- べき乗則に従うスペクトルの自動解析アルゴリズムの開発

論文・特許

- S. Yagyu, T. Mitsui, T. Chikyow and T. Nagata, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **1**, 192-199 (2021).
- S. Yagyu, M. Yoshitake, T. Nagata and T. Chikyow, *J. Surface Analysis*, 35-45 (2021).

自動化第一原理網羅計算による法則発見と知識伝達

Keywords 自動計算, 説明可能なAI, 知識伝達, 機能分解木手法

主幹研究員／Principal Researcher

木野 日織 Kino Hiori

✉ KINO.Hiori@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kino_hiori



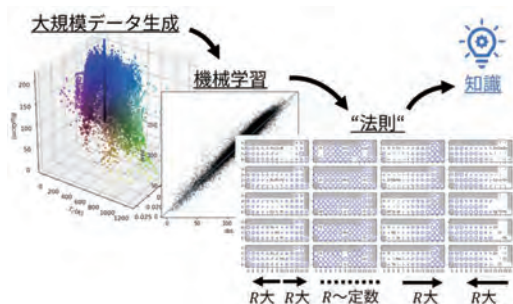
研究概要

- 合金の材料探索を自動的に行い大規模データを生成した。回帰モデルに対してホワイトボックス化を行い、簡単な理解しやすい法則を見出した。
- 新たな知識をまとめる伝えるダイアグラム手法として因果主導機能分解木手法を開発した。

新規性・独創性

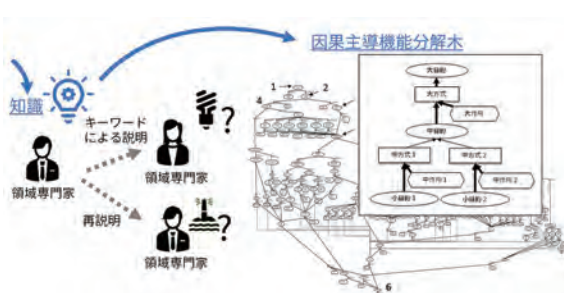
- 合金に対して計算可能なKKR-CPA法を用いる第一原理計算手法に対して、パラメタ設定を自動化し、網羅計算を実行可能とした。これにより、例として、四元固溶体の14万件の計算を可能とした。更に、このデータが説明可能なAIを用いて解析することにより、わかりやすい法則を見出すことに成功した。
- 知識をまとめ・伝えるための手法には機能分解木で実際の過程・因果と一対一対応させることが可能となる因果主導機能分解木を開発した。

研究内容



- KKR-CPA法はGaussianやVASPなどの波動関数法と異なりGreen関数法であり、計算時にエネルギー積分下限を設定する必要がある。この値は自己無撞着条件を満たすと変化していく値であり、従来は人がこの値を決めていた。この値を自動的に決定した。これにより人手を介すること無く3d元素だけでなくセミア電子状態を持つ4d,5d元素を含む自動化に成功した。これにより38元素を含む14万件の計算を可能とした。更に、説明可能なAIによる解析を行い、残留電気伝導率の簡単な法則を発見した。人手を介することなく網羅計算を行い物性データを生成できる。そしてデータから分かりやすい規則を発見することが可能となる。

- 理論家と実験家、境界領域研究者間、そして少子化が進む日本では、齟齬なく既存の知識を短時間に伝える必要がある。知識をまとめる手法としてオントロジーが有名であるが、時間順序や因果関係を記述する研究は進んでいない。また、時間順序や因果関係を記述する手法に機能分解木があるが、オントロジーの非専門家にとっては記述が難しかった。機能分解木は状態と状態への作用を暗黙に同列として扱うために作成しにくく、更に、機能分解木から仮想的な装置に対応させられないという問題点があった。これを、状態と状態への作用に明示的に分解し、仮想的な装置と一対一対応させることができるように構成することで初心者が比較的容易に機能分解木を作成できるようにした。



まとめ

- 合金の網羅計算によるデータ蓄積とそのソフトウェアの提供と理解しやすい法則の獲得が可能となる。
- ケーススタディを通して、書きやすく、理解しやすい知識の整理法を確立し、その例を提供する。

論文・特許

- T. Fukushima, H. Akai, T. Chikyow and H. Kino, *Phys. Rev. Mater.* **6**, 023802 (2022).
- H. C. Dam, V. C. Nguyen, T. L. Pham, A. T. Nguyen, K. Terakura, T. Miyake and H. Kino, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 113801 (2018).

材料特異点の物性解明

Keywords 欠陥、ドーパント、界面、表面、ホログラフィ、オペランド測定

主幹研究員 / Principal Researcher

山下 良之 Yamashita Yoshiyuki

✉ YAMASHITA.Yoshiyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamashita_yoshiyuki



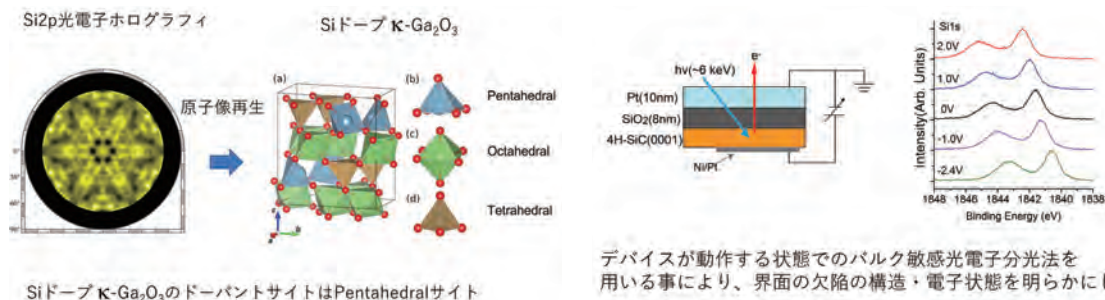
研究概要

材料における特異点は機能性材料の特性を決める。具体的には絶縁体/半導体界面、金属/半導体界面、欠陥、触媒、半導体のドーパントが特異点にあたる。一般的に材料中の特異点は密度が低く、その物性を明らかにすることは非常に困難である。そこで我々は、X線吸収分光法、光電子ホログラフィー法を用いて、特異点に吸収する光を入射してそこから発光する光、電子、及びホログラフィ像を用いる事により、特異点の原子構造、化学状態を明らかにすることを行っている。また、特異点の物性を正確に理解する為に材料が動作した状態で物性測定を行っている。

新規性・独創性

- X線吸収分光法による固体界面の物性抽出
- 光電子ホログラフィー法による物質特異点の原子構造、化学状態解明 (欠陥、触媒活性点、ドーパントの活性・不活性原子等)
- 材料が動作下した状態での物性測定

研究内容



Siドーパしたκ-Ga₂O₃のユニットセル中には3種類のGaサイトが存在するが、ドーパントとしてどのGaサイトにSiが入るかわかっていない。光電子ホログラフィー法の原子像再生によりドーパントSiの置換サイトはトリゴナルサイトであることがわかった。(左図) 本手法はSiC、GaN、Ga₂O₃に既に展開している。

Pt/SiO₂/4H-SiCデバイスが動作する状態でのバルク敏感光電子分光法により、基板から界面への電子のやりとりを調べた。また、理論計算を併用することにより、界面の欠陥の構造・電子状態を明らかにした。(右図) X線吸収分光法によりSiO₂/Si界面の化学状態に応じた価電子状態、界面近傍における誘電率変化を明らかにした。今後はコンビナトリアル手法で材料開発を行い、界面や原子特異点の物性を効率的に明らかにすることを行っていく。

まとめ

物質の特異点の原子構造を光電子ホログラフィー法、X線吸収分光法により明らかにした。まだデバイスが動作した状態で光電子分光法を適用することにより、界面の欠陥の動的振る舞いを明らかにした。今後はコンビナトリアル手法を用いて材料開発を行い、物質の特異点の物性を効率的に明らかにすることを行っていきたい。

論文・特許

- J. Tang, S. Takeuchi, M. Tanaka, H. Tomita, Y. Hashimoto, T. Nagata, J. Chen, T. Ohkuchi, Y. Yamashita, *et al.*, *ACS Appl. Electron. Mater.* **4**, 4719-4723 (2022).
- Y. Yamashita, J. Nara, E. D. Indari, T. Yamasaki, T. Ohno and R. Hasunuma, *J. Appl. Phys.* **131**, 215303 (2022).
- J. Tang and Y. Yamashita, *ACS Appl. Electron. Mater.* **3**, 4618-4622 (2021).

イオンビームによる表面・界面の分析と改質

Keywords イオンビーム, 表面・界面, 放射線物理, 酸化物半導体, ガスセンサ, 水素, オペランド分析, スピン

主席研究員／Chief Researcher

鈴木 拓 Suzuki Taku

✉ SUZUKI.Taku@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/suzuki_taku



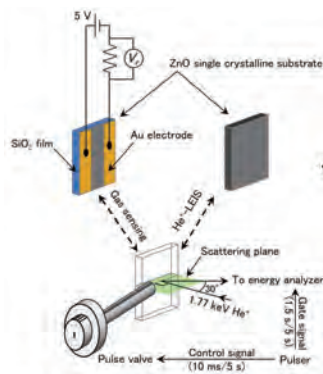
研究概要

低速イオンビームに特有な物質との相互作用を利用することで、ユニークな表面分析や表面改質が可能となる。これまでにイオン散乱を利用する固体最表面の元素組成と原子位置の分析法 (LEIS) に加え、反跳を利用した水素等の軽元素の原子位置の特定 (ERDA)、パルスジェット法の併用によるガスセンサ表面のオペランド分析 (パルスジェット-LEIS)、スピン偏極イオンを用いた表面スピンの分析 (スピン偏極LEIS)、等と研究展開してきた。またこれらの分析法の開発に加えて、イオンビームの照射効果を利用した表面改質も行っている。近年では金属酸化物半導体を主なターゲット材料に設定し、その表面・界面にある欠陥等の活性サイトを利用した表面反応の探索と応用を進めている。

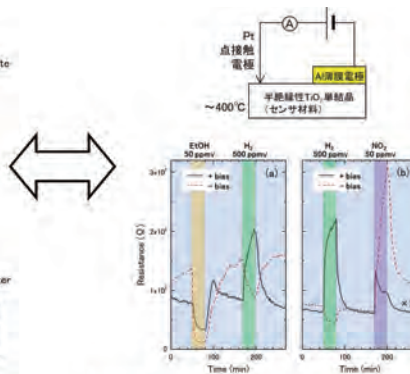
新規性・独創性

- 単一のイオンビームラインでLEIS、ERDA、TOF-SIMSの複合分析が可能なオンリーワンの装置。
- 水素を含めた全ての元素について10ppm以上の感度で最表面原子層での存在を検出することができる。
- 水素を含めた全ての元素について、規則性のあるものについては最表面原子層での原子位置を特定することができる。
- パルスジェット法やスピン偏極法を併用することで、実環境中での分析や表面スピンの分析が可能。

研究内容



低速イオンビームによる表界面の分析と改質：
パルスジェット-LEIS



酸化物半導体の表界面での活性サイトを利用した機能開拓：
高感度で選択的な水素センシング

固体の表面や界面は様々なデバイスで重要な役割を果たしており、その分析やそれに基づく制御は重要である。低速イオンと物質との相互作用には、イオン中性化、散乱・反跳、2次イオン放出、スパッタリング等があり、これらを利用することで他の手法では困難な表面分析や表面改質が可能となる。例えばイオン中性化を利用することで、表面スピンの分析が可能となる (スピン偏極LEIS)。また散乱や反跳を利用することで、それぞれ重元素と軽元素の表面分析 (元素組成と原子位置の特定) が可能となる (LEISとERDA)。さらに二次イオン放出を利用すれば、有機材料や有機吸着物の化学構造情報を得ることができる (TOF-SIMS)。これらの分析は個別の装置で別々に行われるため試料が複数必要であり、これらの試料間での差異により解析が困難になることがある。これに対して単一のイオンビームラインで (スピン偏極) LEIS、ERDA、TOF-SIMSの複合分析が可能な装置を開発した。近年ではこの低速イオンビーム法にパルスジェット法を併用することで、ガスセンサ駆動中の表面分析を実現した。その成果の一つとして、水素の選択的な高感度検知を実現した。これらの分析以外にも、低速イオンビーム法ではスパッタリングを利用することで周期的なナノ構造の形成等が可能であり、有用な表面改質法となっている。

まとめ

低速イオンビーム法による表面分析と表面改質の開発を進めている。これらの基盤技術を利用して金属酸化物半導体の表面物性、とりわけ欠陥等の活性サイトを用いた機能発現とその応用に取り組んでいる。

論文・特許

- T. T. Suzuki and I. Sakaguchi, *Surf. Interfaces* **35**, 102371 (2022).
- T. T. Suzuki, T. Ohgaki, Y. Adachi and I. Sakaguchi, *J. Appl. Phys.* **131**, 034501 (2022).
- T. T. Suzuki, Y. Adachi, T. Ohgaki and I. Sakaguchi, *Surf. Interface Anal.* **53** 747-753 (2021).

低圧誘導結合プラズマ CVDによるナノクリсталダイヤモンドの合成

Keywords ナノクリсталダイヤモンド, 低圧誘導結合プラズマ, CVD

主幹研究員 / Principal Researcher

岡田 勝行 Okada Katsuyuki

✉ OKADA.Katsuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/okada_katsuyuki



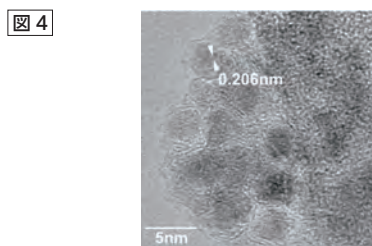
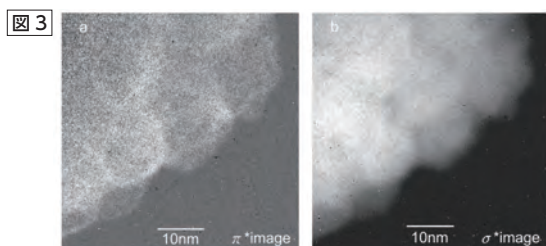
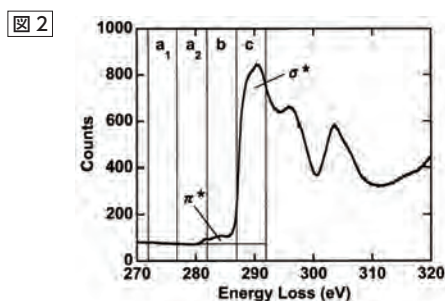
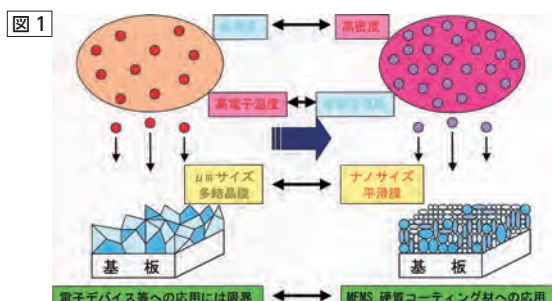
研究概要

プラズマCVDにより合成されるダイヤモンド薄膜において、nmオーダーに制御された超微小結晶を精緻に合成し、3次元構造化することにより、超平坦性、超硬度性、超潤滑性、また新たな化学的、電気的特性の発現が期待されています。

新規性・独創性

低圧誘導結合プラズマ CVDによるナノクリсталエンジニアリングを確立し(図1)、優れたトライボロジー特性(超平坦性、超硬度性、超潤滑性)を有する、nmオーダーに制御された超微小結晶のナノクリсталダイヤモンド薄膜の合成を目指します。

研究内容



低温、高密度の特性を有する低圧誘導結合プラズマを用いて、ナノクリсталダイヤモンド粒子を合成し、結晶粒界のSP₂/SP₃結合の構造評価を行い(図2)、SP₂結合が結晶粒界に約1nmの幅で局在していることを確認しました(図3)。さらに部分的ながら、粒径約5nmの”ダイヤモンドナノボール”の合成に成功しました(図4)。

まとめ

- nmオーダーで制御された結晶表面の超平坦性、超潤滑性(ゼロ摩擦係数)による省エネルギー化
- 量子サイズ効果の発現による紫外線発光材料

論文・特許

- 岡田 勝行, ケミカルエンジニアリング 55, 929-933 (2010).
- K. Okada, *Sci Technol Adv Mater* 8, 624-634 (2007).
- K. Okada, K. Kimoto, S. Komatsu and S. Matsumoto, *J. Appl. Phys.* 93, 3120-3122 (2003).

酸化物半導体薄膜の雰囲気ガス応答特性の向上

Keywords 酸化物半導体薄膜, 酸化亜鉛, 極性制御, ガスセンサ, ガス選択性

主幹研究員 / Principal Researcher

安達 裕 Adachi Yutaka

✉ ADACHI.Yutaka@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/adachi_yutaka



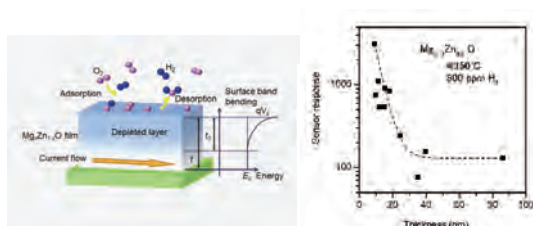
研究概要

酸化物半導体は雰囲気中のガス濃度に対応した電気抵抗変化を生じるため、ガスセンサとして応用されており、現在はより高感度、よりガス選択性の高いセンサの開発が求められている。薄膜型のセンサの場合、膜厚を薄くすると応答性が向上することが期待されるが、膜厚数十nm以上のセンサに関する報告がほとんどであった。我々は、酸化物半導体を10nm程度まで薄膜化することにより、センサ応答が劇的に向上することを明らかにした。また、酸化物半導体結晶表面にどの結晶面が露出するかは、センサのガス選択性に大きく影響する。我々は薄膜最表面に露出する結晶面を制御するプロセスを開発し、同じ材料でもガス選択特性の異なるセンサを作製できることも明らかにした。

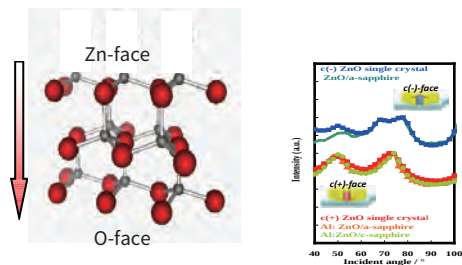
新規性・独創性

- 酸化物半導体薄膜の膜厚を10 nm程度まで薄くすることにより、薄膜ガスセンサの応答特性が劇的に向上
- 酸化物半導体ZnO薄膜作製プロセスの開発により、表面がZn原子で終端された薄膜と、O原子で終端された薄膜の作り分けが可能
- 酸化物半導体薄膜表面の結晶面を制御することで、同じ材料でも異なるガス応答特性を有するセンサの作製が可能

研究内容



薄膜型ガスセンサのモデル図とセンサ応答値の膜厚依存性



ZnOの結晶構造と極性制御された薄膜のCAISSSスペクトル

ZnOやSnO₂などのn型酸化物半導体は、古くからガスセンサとしての応用研究がなされている。比較的高感度、小型化が容易、安価、といった特徴があり、モバイルデバイスへの搭載や、センサネットワークなどへの応用に適している。これら応用のためには、センサのさらなる高感度化、ガス選択特性の改善などが求められている。

薄膜型半導体ガスセンサの膜厚は、センサ応答値に大きく影響するパラメーターであり、膜厚が薄くなるほどセンサ応答値が向上することが期待される(上左図)。これまでの、膜厚数十nm以上のセンサに関する報告がほとんどであったが、10nm程度まで薄膜化することによりセンサ応答値が劇的に向上することが明らかになった(上右図)。

また、酸化物半導体結晶表面にどの結晶面が露出するかは、センサのガス選択性に大きく影響する。ZnOのような極性結晶は表面がZn原子で終端された結晶面とO原子で終端された結晶面があるため(下左図)、最表面がどちらの結晶面であるかによりガス選択性が異なることが期待される。我々は、任意の結晶面だけを最表面に露出させる製膜法を開発し、様々な基板上に、最表面に露出する結晶面が異なるZnO薄膜を作製してきた(下右図)。それら薄膜のガスセンサ特性を評価することにより、同じ半導体材料でもガス選択特性の異なるセンサを作製できることが明らかになった。これらの結果は、高感度、高ガス選択性を持つガスセンサの設計指針に役立つことが期待される。

まとめ

- 本研究の成果を用いることにより、小型で高感度、ガス選択性に優れたガスセンサの実現が期待できる。
- 小型で高機能なガスセンサは、携帯型の呼気分析デバイスや環境ガスモニタリングネットワークへの応用が期待できる。
- 実用化のためには、様々なガスに対して選択性を示すセンサをより多く開発する必要がある。

論文・特許

- Y. Adachi, *Surf. Interfaces* **28**, 101597 (2022).
- Y. Adachi, N. Saito, I. Sakaguchi and T. T. Suzuki, *Thin Solid Films* **685**, 238–244 (2019).
- 特許第5408564号 非晶質基材

酸化物界面構造の機能創出

Keywords 酸化物半導体, 薄膜, 表面・界面, 欠陥制御, スペクトロスコピー

主幹研究員 / Principal Researcher

大澤 健男 Ohsawa Takeo

✉ OHSAWA.Takeo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohsawa_takeo



研究概要

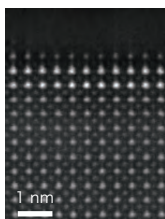
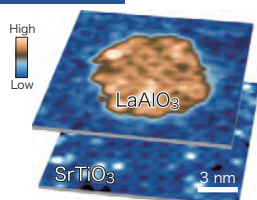
多彩な機能を有する酸化物材料を原子レベルで接合させ、これまでにない新しい機能を創出することは、省エネルギー・創エネルギー社会の実現に向けてますます重要となっています。高効率な酸化物デバイスの実現を目指して、ペロブスカイト型酸化物（主に SrTiO_3 や BaTiO_3 ）や極性酸化物半導体 ZnO ヘテロ構造が注目されています。原子レベル制御する薄膜成長技術を駆使し、不純物や欠陥密度を低減した超高品質な半導体素子を構築して、その性能を向上させる材料開発を行います。

新規性・独創性

- 優れた接合界面を形成するため、原子レベルで行う構造・組成・欠陥の制御
- 極微量不純物の計測技術とそれを利用した隠れた機能の解明
- イメージングやスペクトロスコピー計測データと電子輸送データを両輪とする物性相関

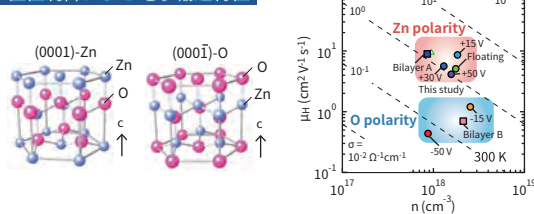
研究内容

原子レベル制御



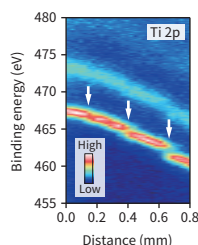
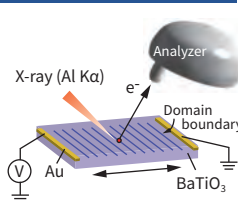
酸化物ヘテロ界面について、原子レベル秩序を有するエピタキシャル構造を作製することによって、電子状態の空間分布を原子レベル分解能で計測し独自の成長様式を解明した。また、この界面は高濃度電子を蓄積しており、新奇電子物性を引き出すことに成功した。

極性制御による電子輸送特性



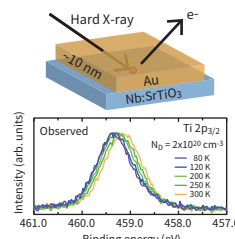
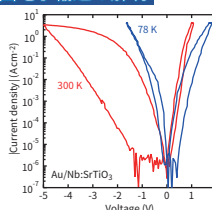
ウルツ鉱型 ZnO 薄膜の極性制御法を確立し、それに基づく電子物性変調を見出した。また、高品質 ZnO 結晶に含まれる極微不純物や欠陥構造に由来する電子輸送を明らかにして、新しいプロセス応用に展開できる知見を獲得している。

界面・粒界の電子状態の可視化



BaTiO_3 単結晶を用いて、強誘電体ドメイン構造に基づく異方的電気伝導性と局所電子状態を観測することに成功した。光電子分光測定を駆使して、ドメイン境界のポテンシャル障壁を可視化した。

界面電子輸送の解明



抵抗スイッチングメモリの動作機構を検証するために、バルク敏感な硬X線光電子分光によって界面電子状態を明らかにした。新たな機構を活用した高速メモリ創出のためのプロセスを構築する。

まとめ

- 酸化物薄膜界面・ドメイン境界の電子状態計測
- 電子分光による極性酸化物半導体の極性判定
- 極性制御による電子輸送特性の解明
- 高品質ヘテロ接合化による多彩な物性の開拓
- 実用デバイス創成に向けた新しい原理の構築
- 酸化物中の精緻な欠陥制御基盤技術の創出

論文・特許

- T. Ohsawa *J. Vac. Sci. Technol. A* **40**, 010806 (2022).
- T. Ohsawa, T. Murakami, T. Hosaka, S. Ueda, T. Ishigaki and N. Ohashi, *J. Phys. Chem. C* **125**, 14836-14842 (2021).
- T. Ohsawa, K. Tsunoda, Y. Yamagata, B. Dierre, S. Grachev, H. Montigaud, T. Ishigaki and N. Ohashi, *Cryst. Growth Des.* **18**, 5824-5831 (2018).

ガラス・アモルファス材料の機能探索

Keywords 酸化ケイ素ガラス, 陽極酸化, ゴールゲル法, 発光ガラス, セラミックス熱破砕

主幹研究員 / Principal Researcher

瀬川 浩代 Segawa Hiroyo

✉ SEGAWA.Hiroyo@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/segawa_hiroyo



研究概要

酸化ケイ素ガラスは簡便に作製でき、透明で化学的耐久性の高い材料として幅広く応用されている。酸化ケイ素ガラスの酸素を窒素に置き換えたガラスは酸化ケイ素ガラスとして知られており、窒素の導入に伴って化学的耐久性や耐熱性、硬度などの機械特性や屈折率などの光学特性など種々の物性が向上することが知られている。しかしながら、窒素の導入においては窒化物原料を用いた場合には加熱による分解が起こってしまうため、安定な融液の形成が難しく、十分なバルク物性の検討は進んでいない。本研究では、アンモニア気流中での熱処理によって窒素を導入することで様々な酸化ケイ素ガラスの作製とそのバルク物性の調査を行うことで、機能性酸化ケイ素ガラスの作製を目指している。

また、陽極酸化を用いてアモルファス酸化物の作製も行っており、光学特性や機械特性、電気特性に着目した機能性開拓についても進めている。

新規性・独創性

- 酸化ケイ素ガラスの作製によってシリカガラスより200℃程度高いガラス転移温度と高い屈折率、ヤング率を実現
- 酸化ケイ素ガラスを用いた発光性ガラスの作製に成功
- 酸化リンガラスを作製し、放射性廃棄物として固化の難しい塩化セシウムの固化に成功
- 陽極酸化アルミナ膜の構造制御により色素等の利用なしに様々な発色を発現

研究内容

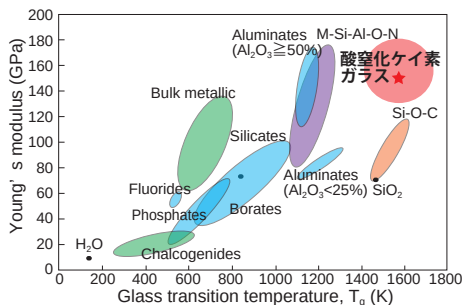


図1 各種ガラスのガラス転移温度とヤング率

酸化ケイ素ガラス中の窒素濃度の増加に伴って、ガラス転移温度とヤング率の向上が確認された。図1には各種ガラスのガラス転移温度とヤング率の関係を示す。現状でできている酸化ケイ素ガラスは赤の領域となる。シリカガラスよりも高いガラス転移温度と高いヤング率を示している。透明なガラスができており、高温での耐久性を有しており、リンガラス用の基板や車載用や高輝度プロジェクタ用のレンズなどに利用が期待される。

Euイオンをドーピングした発光性酸化ケイ素ガラス薄膜で紫外線を吸収して可視域の発光が可能である。太陽電池のカバー材料に塗布することで紫外光を効率よく利用できる波長変換機能として期待される。

酸化リンガラスでは、リン酸塩ガラスよりも高い化学的耐久性を有していることが確認されており、放射性廃棄物である塩化セシウムの固化用ガラスやイオン伝導体として電池用の電解質材料としての応用が期待される。

陽極酸化による皮膜の形成は古くから知られているが、本研究では、交流陽極酸化を用いることで既存の発色とは異なる光沢性の高い陽極酸化皮膜の形成を進めてきた。既存技術では基板に垂直な方向にナノメートルサイズの細孔が形成され、細孔内部に色素の導入などを行うことで色を制御している。色素は高温での耐久性は乏しく、退色も起こりやすい。一方、本研究で得られた皮膜ではナノメートル厚のアルミナ膜が積層をなしており、各膜の厚さを電気化学的に制御することによって発色を制御することが可能である。図2には種々の条件で作製したアルミナ皮膜の外観を示す。電圧の制御によって色の制御が可能であることが確認されている。アルミナ自体による発色のため、高温においても耐久性が高い。また、積層構造のため亀裂の進展が起こりにくく、靱性の高い皮膜となっている。

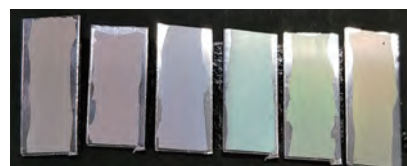


図2 陽極酸化アルミナ皮膜の発色の様子

まとめ

- 酸化ケイ素ガラスに関する技術：シリカガラス以上の耐熱性を持つガラス材料として耐熱性の必要な部品などへの応用可能性がある。また、発光ガラスについてはガラス膜として太陽電池の効率アップに貢献できる機能性となる可能性がある。
- 酸化リンガラスに関する技術：リン酸塩ガラスと同様のイオン溶解性を有しつつ高い化学的耐久性を有するガラスとして、放射性廃棄物固化用のガラスマトリックスやプロトン伝導ガラスとしての応用が期待される。
- 陽極酸化技術：発色性を利用して色材としての応用が期待される。また交流電解によって靱性の高い皮膜が形成できており、直流電解の膜に比べてクラックの入りにくい皮膜へと応用ができる。

論文・特許

- 特許第 7010476 号 波長変換部材、発光装置、および波長変換部材の製造方法
- H. Segawa, Y. Osawa, S. Watanabe, S. Machida, K. Katsumata, A. Yasumori, S. Samitsu, K. Deguchi, *et al.*, *J. Solgel Sci. Technol.* **104**, 503-511 (2022).
- H. Segawa and K. Wada, *Mater. Chem. Phys.* **250**, 123031 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

古典的急冷法による合成と相平衡図作成と新物質探索

Keywords 相平衡, 状態図, 急冷法, 新物質, 探索

主任研究員 / Senior Researcher

中村 真佐樹 Nakamura Masaki

✉ NAKAMURA.Masaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakamura_masaki



研究概要

新機能、より優れた機能をもつ物質が、社会から求められている。既存の物質を組み合わせるだけでなく、元素置換、より高温等での物質探索を行うことで新物質の探索を行ってきた。

新規性・独創性

- 酸化インジウム-酸化ガリウム-酸化亜鉛三成分系の1350度における相図の作成 他2点
- 層化合物における特異なインジウム元素の配列

研究内容



伝統的なセラミックス粉末を高温から急冷することにより安定した相を探索し、相状態図の作成を試みてきた。三成分系の相状態図により今後の新機能を持つ化合物の探索の道標となると期待される。

まとめ

これまで透明電極に使われてきたITOインジウムスズなどと並ぶ透明電極材料として期待される。

論文・特許

- 磯部 光正, 君塚 昇, 中村 真佐樹, 毛利 尚彦. 日本結晶学会誌 **31**, PA-10 (1989).

半導体金属酸化物ガスセンサの開発

Keywords 酸化物ナノ粒子, 形状制御, ガスセンサ応用

主任研究員 / Senior Researcher

齋藤 紀子 Saito Noriko

✉ SAITO.Noriko@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/saito_noriko



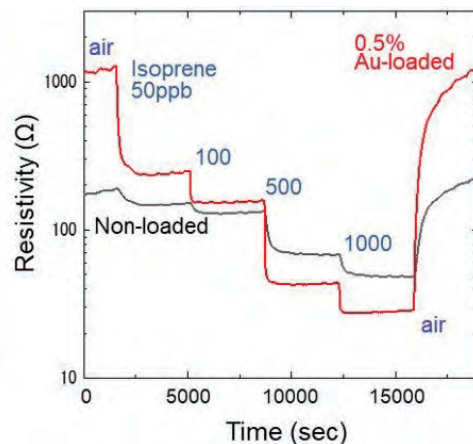
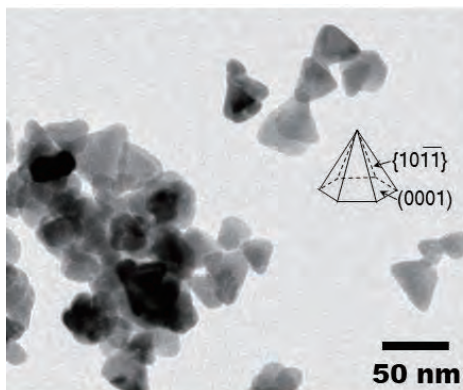
研究概要

近年のガスセンサには、従来の安全・安心に貢献する警報器だけでなく、健康・環境の分野や、より快適な暮らしや持続可能な社会の構築に期待が高まっている。さらに、小型化、省エネ化、モバイル・ウェアラブル機器への実装化が求められている。酸化物半導体は、表面吸着する酸素イオンの量によって電気抵抗が変化するため、ガスセンサとして働く。センサ感度向上のためには、材料の表面制御が重要である。本研究では、新規形状の酸化亜鉛粒子を合成し、粒子の結晶面がセンサ特性およびガス脱着特性に及ぼす影響を調べた。また、触媒ナノ粒子付与による特性向上、呼気中水蒸気の影響などの実用化課題を検討した。

新規性・独創性

- 酸化物セラミックス粉体の形状、結晶面制御。
- Auナノ粒子を担持したピラミッド型酸化亜鉛粒子のガスセンサ特性評価。
- 高湿度下で10ppbから1ppmのイソプレンガスを検出。
- 呼気分析に利用可能。

研究内容



体調・生活習慣管理のためのウェルネスセンサを目指して、呼気中の微量イソプレンガスを検知できる酸化物半導体ガスセンサの研究を行った。酸化亜鉛材料合成による微細構造制御(左図)と触媒付与の結果、高湿度下で呼気中濃度相当のイソプレンガスを検出できた(右図)。感度向上には、酸素イオン吸着サイトとなる酸素欠陥が多い活性結晶面の露出が効果的であった。このセンサは半導体型イソプレンセンサの中で最も高い感度を示した。イソプレンは眠いときに出るガスで、このガスセンサは過労防止や自動車事故防止に有用と考えられる。

まとめ

結晶面やナノ構造を利用した、ppbレベルの微量ガス検出できる酸化亜鉛ガスセンサを開発した。ppbレベルの希薄ガスの検知ができる高感度レセプタ粒子は、空気質モニタリングや呼気ガス健康診断ができるウェルネスセンサに応用可能である。今後の実用化には、ガス選択性向上、モバイル機器に搭載できる小型化が課題である。

論文・特許

- N. Saito, H. Haneda, K. Watanabe, K. Shimanoe and I. Sakaguchi, *Sens. Actuators B: Chem.* **326**, 128999 (2021).
- J.-H. Kim, I. Sakaguchi, S. Hishita, T. Ohsawa, T. T. Suzuki and N. Saito, *Sens. Actuators B: Chem.* **382**, 133501 (2023).
- N. Saito, K. Watanabe, H. Haneda, I. Sakaguchi and K. Shimanoe, *J. Phys. Chem. C* **122**, 137353–7360 (2018).

窒化物微粒子の合成と機能開拓

Keywords 窒化物, 微粒子, 還元窒化法, 蛍光体, 光触媒

主任研究員 / Senior Researcher

末廣 隆之 Suehiro Takayuki

✉ SUEHIRO.Takayuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/suehiro_takayuki

研究概要

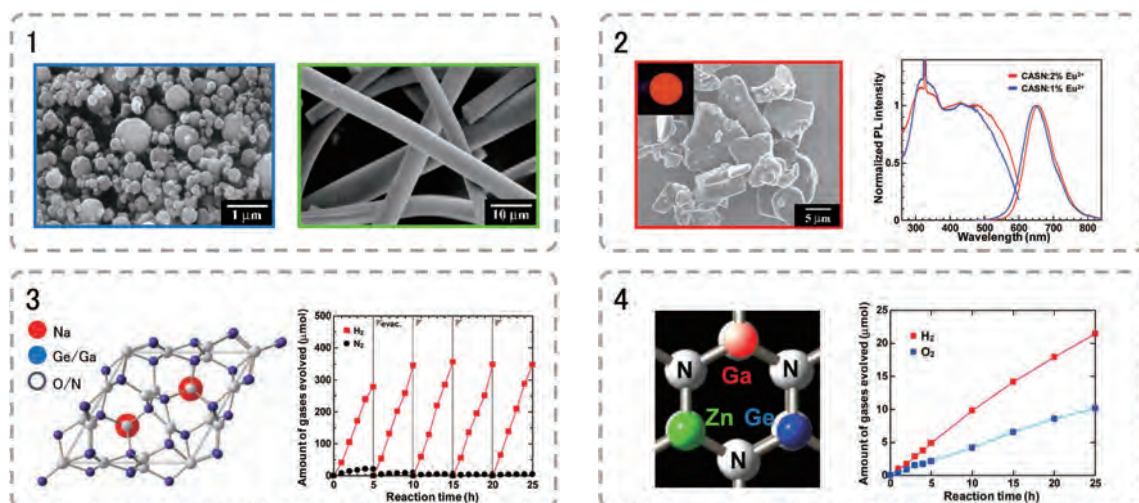
Si_3N_4 、 AlN 、 SiAlON 等に代表される14族および13族元素からなる窒化物群は、これまでにエンジニアリングセラミックス、高熱伝導性基板およびフィラーとして集中的な研究開発が行われてきた。近年では白色LED用の蛍光体ホストとして欠かせない存在となっている。

LED用蛍光体への応用を契機に、これまで殆ど確立していなかった窒化物の粉末・微粒子合成技術の開発が重要となっている。本研究では、安価で安定な酸化物原料から多元系窒化物微粒子の直接合成を行うプロセスを追究し、新機能の開拓を目指している。

新規性・独創性

- 気相還元剤を用いた低温プロセス(ガス還元窒化法: GRN)により酸化物原料から窒化物微粒子を直接合成
- 特異なモルフォロジーを有する窒化物微粒子の合成が可能
- 窒化物原料を用いることなく多様なアルカリ土類・希土類窒化ケイ素系微粒子蛍光体を合成
- 三元系を超える高次多元系窒化物の精密な組成制御が可能
- 新規多元系ゲルマニウム・ガリウム系窒化物の合成により可視光・太陽光応答型光触媒を開発

研究内容



GRNプロセスにより真球状粒子、マイクロファイバー、ナノ粒子等の特異なモルフォロジーを有する窒化アルミニウム微粒子の合成が可能である(Fig. 1)。GRNにより結晶性に優れた板状粒子の $\text{CaAlSiN}_3:\text{Eu}^{2+}$ 赤色蛍光体を合成した。希土類フッ化物のポスト合成賦活により精密な波長制御を可能とするとともに、外部量子効率72%を達成した(Fig. 2)。 α - SiAlON のアナログとなる新規物質 $\text{Na-}\alpha$ - GeGaON を合成し、紫外光照射下での水分解による安定な水素生成を観測した(Fig. 3)。新規四元系ルツァイト基窒化物 $\text{Zn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Ga}_2\text{N}_2$ を開発し、 $\lambda > 400 \text{ nm}$ の可視光照射下において純水の量論分解に成功した(Fig. 4)。

まとめ

- GRNプロセスにより、高熱伝導性フィラーとして有望な様々な粒子形態を有する窒化物微粒子の合成が可能
- スケールアップ条件の確立により、広範なLED照明用窒化物系蛍光体の量産プロセスへの応用が可能
- 新規多元系窒化物の創製により、水素エネルギー製造を実現する太陽光応答型光触媒の開発が期待される

論文・特許

- T. Suehiro, M. Tansho, T. Ishigaki and T. Shimizu, *Inorg. Chem.* **60**, 1542-1549 (2021).
- T. Suehiro, M. Tansho and T. Shimizu, *J. Phys. Chem. C* **121**, 27590-27596 (2017).
- T. Suehiro, M. Tansho and T. Shimizu, *Inorg. Chem.* **55**, 2355-2362 (2016).

岩塩型窒化物半導体の光・電子デバイスへの応用

Keywords 窒化物半導体, 岩塩型結晶構造, 光・電子材料, 薄膜

主任研究員／Senior Researcher

大垣 武 Ogaki Takeshi

✉ OGAKI.Takeshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ogaki_takeshi



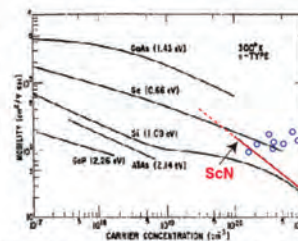
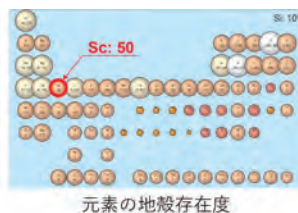
研究概要

GaNに代表されるIIIb族窒化物の光・電子デバイス研究の進展に伴い、ScNの半導体分野への応用が期待されている。ScNは、岩塩型結晶構造のIIla族窒化物であり、大きな非化学量論的組成に起因する欠陥から生成された高濃度キャリアを有するn型半導体であり、高い電子移動度を示す。また、(111)配向した岩塩型ScNとc軸配向したウルツ鉱型GaNは格子整合し、岩塩型ScNと閃亜鉛鉱型GaNの格子定数も一致することから、小さな格子不整合を利用したGaN/ScNヘテロ構造など、GaN系半導体との融合も期待されている。

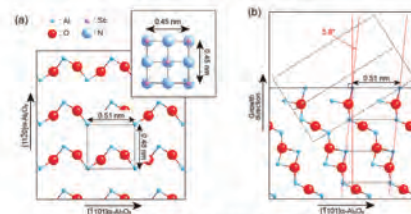
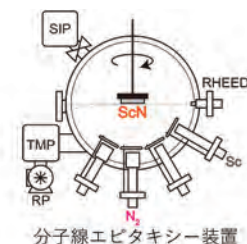
新規性・独創性

- 新しい窒化物半導体材料の探索
- 岩塩型窒化物のヘテロエピタキシャル成長
- 大きな非化学量論的組成を持つScNの物性制御
- 岩塩型窒化物とGaN系半導体との固溶・積層化

研究内容



代表的な半導体の移動度とキャリア濃度



ScNとサファイアのヘテロ成長

Scは用途が限られているために高価な元素の部類に含まれるが、地球上に豊富に存在する資源的に恵まれた材料である。その窒化物であるScNは、岩塩型結晶構造の化合物であり、非化学量論的組成に起因する欠陥から生成された高濃度キャリアを有するn型半導体であるにもかかわらず、高い電子移動度を示す。しかしながら、その物性には不明点が多い。

本研究では、分子線エピタキシー法により高品質なScN薄膜を合成し、その物性を明らかにするとともに、岩塩型半導体の半導体素子への応用の可能性を検討している。

まとめ

成長条件の最適化により、高品質なScN薄膜のヘテロエピタキシャル成長に成功し、ScNが大きな非化学量論的組成を持ち、その組成により光・電子物性が大きく変化することを明らかにした。非化学量論的組成の制御やドーピングによる物性制御が実現すれば、ScNの半導体素子への応用が期待できる。

論文・特許

- T. Ohgaki, I. Sakaguchi and N. Ohashi, *Materials* **11**, 2449 (2018).
- T. Ohgaki, I. Sakaguchi, N. Ohashi and H. Haneda, *J. Cryst. Growth* **476**, 12-16 (2017).
- T. Ohgaki, K. Watanabe, Y. Adachi, I. Sakaguchi, S. Hishita, N. Ohashi and H. Haneda, *J. Appl. Phys.* **114**, 093704 (2013).

X線全反射を利用した界面電子状態の研究

Keywords 硬X線光電子分光, X線全反射, 半導体ヘテロ界面, 絶縁体/強磁性体界面, 界面電子状態, 界面磁気状態

主任研究員 / Senior Researcher

上田 茂典 Ueda Shigenori

✉ UEDA.Shigenori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ueda_shigenori



研究概要

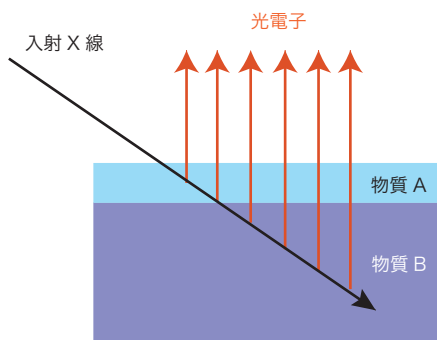
硬X線光電子分光は、従来の光電子分光にくらべ検出深度が深いため、バルク敏感な電子状態の測定を行うことができる。機能性デバイスのヘテロ界面での電子状態、磁気状態の検出を非破壊で行うことは、デバイスの性能向上のための指針につながるため、検出深度が深い硬X線光電子分光は有効である。界面近傍の電子状態、磁気状態の詳細を調べるために、X線全反射と硬X線光電子分光の組み合わせが有効であることを明らかにした。本手法を用いることで、半導体ヘテロ接合近傍のバンドオフセットや絶縁体/強磁性体界面での電子状態や磁気状態を検出することができる。

新規性・独創性

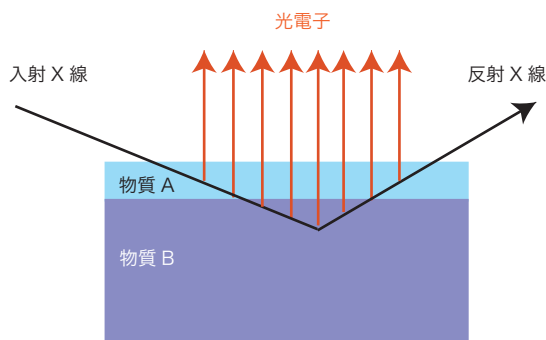
- 光電子の放出深さ分布をX線全反射を利用して制御
- 非破壊で界面近傍の電子状態の測定が可能
- 従来の深さ依存測定に比べて10倍以上の高速化を実現
- バンドオフセットやバンド曲がりの検出に有効
- 円偏光X線の利用で、強磁性体の磁気情報も得られる

研究内容

通常の硬X線光電子分光（非全反射条件）



X線全反射条件での硬X線光電子分光



硬X線光電子分光を非全反射条件で行うと、表面よりも深い領域の光電子の寄与が高くなる。一方、全反射条件とすることで、物質Aと物質Bの界面（物質Aが無い場合は、物質Bの表面）近傍からの光電子の寄与を高めることができる。X線の侵入長を全反射臨界角近傍で制御した硬X線光電子分光により、バルクのワイドギャップ半導体の表面バンド曲がりを検出することに成功した。また、絶縁体/強磁性体界面に対して本手法を適用した結果、界面近傍での磁化はバルク領域に比べて減少することも明らかとなった。本手法は、半導体ヘテロ界面のバンドオフセットや絶縁体/強磁性体界面の電子状態、磁気状態を非破壊で検出することができるため、デバイスの性能向上に必要な知見が得られるものと期待される。

まとめ

硬X線光電子分光を用いて、高スループット深さ依存性電子状態測定法をX線全反射と組み合わせることで実現した。半導体の表面バンド曲がりのみならず、デバイス構造中の半導体ヘテロ界面でのバンドオフセットの直接測定、ならびに絶縁体/強磁性体界面近傍における強磁性体の電子状態、磁気状態測定から、デバイス性能向上に必要な知見が得られるものと期待される。

論文・特許

- S. Ueda, Y. Miura, T. Fujita and Y. Sakuraba, *Phys. Rev. B* **106**, 075101 (2022).
- S. Ueda and Y. Sakuraba, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **22**, 317-325 (2021).
- S. Ueda, M. Mizuguchi, M. Tsujikawa and M. Shirai, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 796-804 (2019).

軌道間相互作用に基づく材料設計と新規電子・光・化学機能の開拓

Keywords 新材料探索, ヒドリド, 第一原理計算, 半導体, イオン伝導体, 超伝導体

主任研究員 / Senior Researcher

飯村 壮史 limura Soshi

✉ IIMURA.Soshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/iimura_soshi



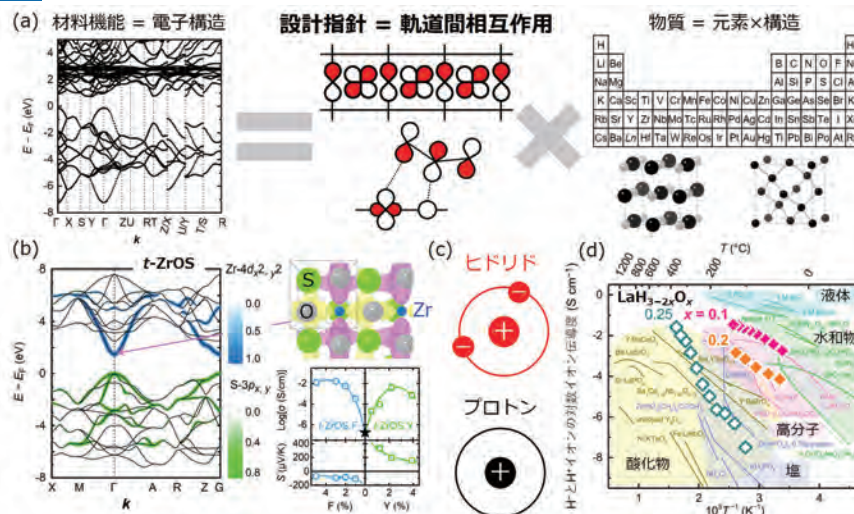
研究概要

材料の電子・光・化学機能は、電気や光エネルギー、化学物質との接触などの外的刺激に対する電子の応答によって決まる。新材料開発は所望の機能を実現する電子構造を物理的に明らかにしつつ、具体的に材料を探す際にはそれを構成元素と構造といった化学的因子に分解しなければならぬ。私はこれまでに物質中の電子軌道間の相互作用に着目し、透明アンパイポーラ半導体や室温緑色発光半導体、化学的に活性な水素の陰イオン(ヒドリド)を室温で高速に伝導させる酸水素化物電解質、ヒドリドをドーピングすることで発現する高温超伝導相、磁性相などを見出してきた。独自の設計指針に基づきユビキタス元素だけから成る新材料を開拓し、持続可能な社会の実現に貢献する。

新規性・独創性

- 直接禁制と非結合性結晶軌道を利用した透明アンパイポーラ半導体の創製
- 水素と酸素の陰イオンが共存した酸水素化物における室温高速ヒドリドイオン伝導
- 第一原理計算と光電子分光を用いた金属酸水素化物半導体の電子構造の同定
- 電子ドーパントとしてヒドリドを導入し誘起される高温超伝導相、磁性相の発見

研究内容



材料の電子・光・化学機能は半導体のバンド端を構成するフロンティア軌道によって支配される。新材料開発では固体内で隣接した軌道間の相互作用を考慮し、適切な元素と構造からフロンティア軌道を設計することが重要になる(a)。t-ZrOSの伝導帯と価電子帯は非結合性Zr-4d_{2,2}と反結合性S-3pから成り、電子と正孔を安定化できる。光学禁制なバンド端を持つアンパイポーラなt-ZrOSは透明CMOSなど新規半導体デバイスへの応用が期待できる。仕事関数の小さい半導体中にドーピングされた水素は半導体から電子を受け取り陰イオン(ヒドリド)化し、二酸化炭素などが持つ極性官能基に求核性を示すようになる(c)。LaH_{3-2x}O_xはプロトン伝導体並みに高い室温ヒドリドイオン伝導度を示す新材料である(d)。本材料を電解質として応用することで、二酸化炭素を再資源化する新規物質生産プロセスや高出力蓄電などが期待できる。

まとめ

電子軌道間の相互作用という観点から所望の機能を分解し、機能発現に必要な元素と構造を用いて材料を再構成するという方針で材料設計を行ってきた。最近では希少元素や毒性元素を使わずとも従来と同等の機能を出すことや逆に予期せず全く新しい機能を見出すことも出てきた。今後も元素戦略的視点をベースに独自の設計指針に基づく新材料開発を続けつつ、得られた材料にユニークな応用先を開拓し更なる高機能化を図ることで、持続可能な社会の実現に貢献したい。

論文・特許

- K. Fukui, S. Iimura, A. Iskandarov, T. Tada and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 1523–1527 (2022).
- S. Iimura and H. Hosono, *J. Phys. Soc. Japan* **89**, 051006 (2020).
- T. Arai, S. Iimura, J. Kim, Y. Toda, S. Ueda and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 17175–17180 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Ferroic材料

Keywords Ferroicスマート材料, 圧電材料, Strain glass, 磁歪材料, 形状記憶合金

上席研究員 / Managing Researcher

任 晓兵 Ren Xiaobing

✉ REN.Xiaobing@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ren_xiaobing



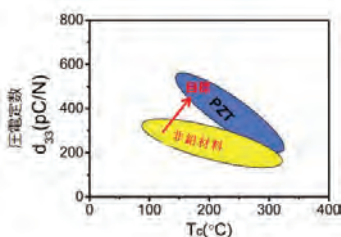
研究概要

- Ferroic材料は圧電材料、形状記憶合金、磁歪材料の総称で、電気、応力、磁場に応答する最も重要な機能性材料群の一つで、スマート社会の核心的材料群の一つとなっており、様々なセンサーやアクチュエータに応用
- これまでのFerroic材料は性能の面又は環境対応の面では社会の期待に答えず、新規Ferroic材料の創出が期待される
- 本研究は新しい原理で上記難問を解明し、高性能かつ環境型のFerroic材料を創出する

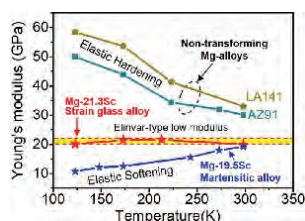
新規性・独創性

- 圧電材料において、三重点MPB理論により高性能非鉛圧電材料を設計し、圧電特性が圧電の王様であるPZTに匹敵
- 強弾性材料において、Strain Glass相転移を発見し、それによる世界で最も軽い恒弾性材料を発見

研究内容



- 三重点MPB理論によるPZTに匹敵する高性能非鉛圧電材料の設計と開発
- センサーやアクチュエータに応用
- これまで鉛材料規制の例外としてのPZTの使用が終止符を打つ可能性があり、10兆円規模の巨大圧電市場を変貌する可能性がある



- 形状記憶合金に添加元素によってStrain Glassという新しい状態を発見
- Strain Glassの特性を用いて、世界で最も軽い恒弾性合金を創製
- 精密機器などへの応用が期待される

まとめ

- 成果1 PZTに匹敵する非鉛圧電材料の開発 (Nanotech 2020プロジェクト賞)
- 成果2 Strain Glassによる世界で最も軽い恒弾性合金を創製
- 今後の展開1: 高い圧電性能かつ高い電気機械結合係数を持つ非鉛圧電材料の開発
- 今後の展開2: Strain glass合金の新しい特性の発見と材料開発

論文・特許

- W. Liu and X. Ren, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 257602 (2009).
- C. Liu, Y. Ji, J. Tang, K. Otsuka, Y. Wang, M. Hou, Y. Hao, S. Ren, P. Luo, T. Ma, D. Wang and X. Ren, *Nat. Mater.* **21**, 1003-1007 (2022).
- 特表 2021-522144/CN112469682B 鉛フリー圧電材料の取得方法、対応する鉛フリー圧電材料

安定同位体を利用した酸化物中の欠陥に関する研究

Keywords 酸化物, 酸素欠陥, 水素固溶と拡散, デバイスの信頼性

主席研究員／Chief Researcher

坂口 勲 Sakaguchi Isao

✉ SAKAGUCHI.Isao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakaguchi_isao



研究概要

酸化物では酸素欠陥が様々な現象に寄与する欠陥として議論されている。しかし、酸素欠陥(空孔)を直接捉えることはできない。酸素欠陥は合成条件や添加物の固溶によりその濃度に変化する。そこで酸素の安定同位体(質量数18の酸素)を使うと、酸素欠陥濃度に依存した拡散係数として捉えることが可能となる。同位体利用研究は物質科学的な研究だけでなく、酸化物デバイスの信頼性の評価等に利用できる。安定同位体を測定するためには、質量分析装置が必要であり、酸素の同位体測定(質量数、16, 17, 18)だけでなく、物質中の水素、重水素分析が可能である。最近では、酸化物デバイス信頼性評価に水素の安定同位体(質量数、2)の利用研究も実施してきた。

新規性・独創性

- 酸素安定同位体ガス中での熱処理
- 熱処理前の試料表面の最適化処理
- 安定同位体の分析
- 水素同位体拡散実験システム
- 低温での水素の電界ドリフト評価

研究内容

ここでは酸化ランタン中の酸素欠陥に関する研究を紹介する。酸化ランタンセラミックスは大気中ではすぐに崩壊し粉末となる。添加物を加えることで改善させることができた。図1は酸化ランタン中の ^{18}O 酸素拡散プロファイルである。熱処理温度が500度以上では比較的 ^{18}O 濃度が高く、400度では表面は ^{18}O 濃度が大きく、試料奥で濃度が減少する。試料表面には水酸化ランタンが生成しており、400度では残存していて、500度以上では分解してしまうため、このようなプロファイルになったと考えられる。

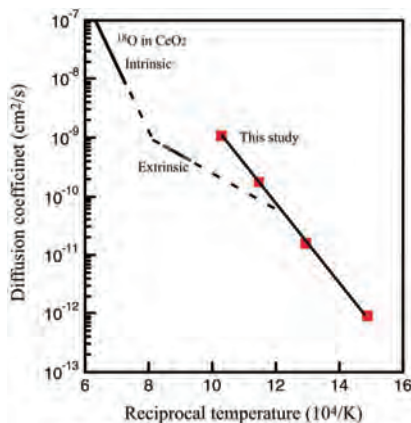


Fig. 2. temperature dependence of ^{18}O in La_2O_3 .

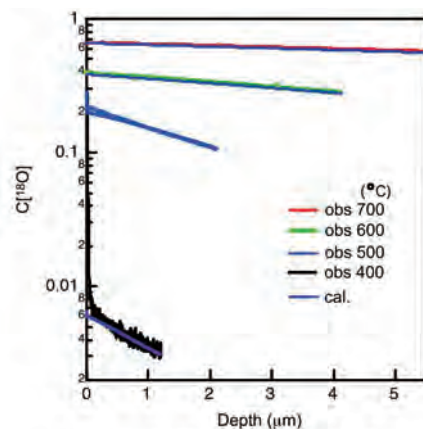


Fig. 1. ^{18}O diffusion profiles in La_2O_3 .

このプロファイルを解析して得られた酸素拡散係数を図2にまとめた。今回得られた拡散係数は良い直線性を示し、一つのメカニズムで拡散していることを示している。参考までに、酸化セリウムで得られた酸素拡散係数を示している。酸化ランタンは酸化セリウムと同程度の拡散係数を有することが明らかとなった。

まとめ

酸化ランタンはhigh-k材料候補であるが、大気安定性に大きな問題がある。これを解決することが最大の課題である。添加物を大量に加えて安定性の改善を図ることは可能であるが、完全ではない。これを解決するために、酸素空孔を制御する有効な添加物を探索している。現在、比誘電率は20-28であるが、これを改善する添加物も同時に探索している。

論文・特許

- I. Sakaguchi, N. Saito, T. T. Suzuki and T. Ohnishi, *J. Ceram. Soc. JAPAN* **129**, 79–82 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

新規非ペロブスカイト・非鉛強誘電体の探索

Keywords 強誘電体, 圧電体, 新物質探索, 薄膜成長

独立研究者 / Independent Scientist

清水 荘雄 Shimizu Takao

✉ SHIMIZU.Takao@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/shimizu_takao



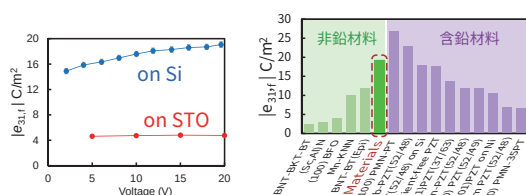
研究概要

強誘電体は、その結晶対称性から圧電性、焦電性、強誘電性など多彩な特性を示し、センサやアクチュエータ、不揮発性メモリなど幅広い用途へ応用・検討がされているが、従来使用されている材料は微細化が困難であることや、環境適合性の低い鉛が含まれることから新規材料の登場が望まれていた。我々は、非鉛ペロブスカイト型材料に始まり、 HfO_2 基材料、ウルツ鉱型材料といった従来用いられてきた組成・結晶構造の枠を超えた材料の探索・開発を行っている。

新規性・独創性

- 薄膜として高い性能(圧電歪定数 $d_{33} \approx 275$ pm/V、有効圧電応力定数 $e_{31, \text{eff}} \approx 19$ C/m²)を持つ材料の非鉛圧電体材料の開発
- 従来100 nm以下の膜厚でのみ発現すると考えられてきた HfO_2 基材料において、1 μm 以上の厚さでも強誘電性が発現することを実証
- ウルツ鉱型強誘電体における組成・膜厚の拡張

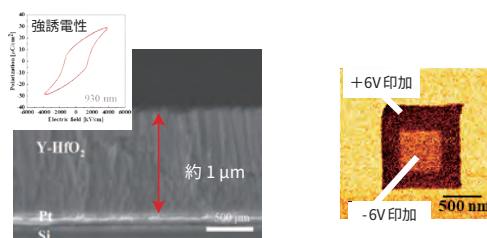
研究内容



非鉛圧電薄膜の中で最大の有効圧電歪定数を達成

近年半導体製造プロセスとの適合性の高い HfO_2 基材料や、極性反転が起こらないと考えられてきたウルツ鉱型化合物において強誘電性が報告されている。我々は HfO_2 基強誘電体について、基礎物性やその生成機構などを明らかにしてきた。その過程において、これまで膜厚の小さい領域でのみ発現すると考えられてきた HfO_2 基材料の強誘電性が、1 μm 以上の膜厚でも発現することを見出した。これによって、想定されていた不揮発性メモリ用途だけではなく圧電体等他の応用も可能であることを見出している。また、ウルツ鉱型強誘電体についても従来報告されている以上の組成や膜厚領域での強誘電性を実証しており、その巨大な自発分極を利用した不揮発性メモリ等への応用が期待できる。

圧電材料として用いられているPZTは、2つの正方晶・菱面体晶構造という異なる相の境界の組成において高い特性が発現することがわかっており、非鉛圧電体の探索においても主に組成を変化させ相境界を探索するという手法が用いられてきた。それに対して、本研究では正方晶構造持つ非鉛圧電体材料[0.7($\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}$) TiO_3 -0.3 BaTiO_3]において、ドメイン回転(結晶格子の部分的な回転)を用いることによって、非鉛圧電体薄膜として最高の性能を達成した。この手法は、組成敏感な特性でない点特徴的であり、他の様々な材料に応用できる可能性がある。高性能な圧電体薄膜は、微小電気機械システムの小型・高出力化を可能にするものであり、新材料系の探索などさらなる発展が期待できる。



HfO_2 基材料において1 μm の膜厚での強誘電性の発現に成功

10 nm 膜厚のウルツ鉱型 (Al, Sc)N において分極反転を確認

まとめ

- 分極(結晶軸)回転を用いた圧電応答に対するスケールアップ
- HfO_2 基材料における圧電・焦電応用
- ウルツ鉱型化合物の極性反転を用いたデバイス応用

論文・特許

- T. Shimizu, M. Hasegawa, K. Ishihama, A. Tateyama, W. Yamaoka, R. Tsurumaru, S. Yoshimura, *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 57532-57539 (2021).
- Y. Tashiro, T. Shimizu, T. Mimura and H. Funakubo, *ACS Appl. Electron. Mater.* **3**, 3123-3130 (2021).
- S. Yasuoka, T. Shimizu, A. Tateyama, M. Uehara, H. Yamada, M. Akiyama, Y. Hiranaga, Y. Cho and H. Funakubo, *J. Appl. Phys.* **128**, 114103 (2020).

新しい機能性単結晶材料の開発

Keywords 単結晶, 結晶成長, 光学応用, 圧電体, 半導体

グループリーダー / Group Leader

島村 清史 Shimamura Kiyoshi

✉ SHIMAMURA.Kiyoshi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/shimamura_kiyoshi



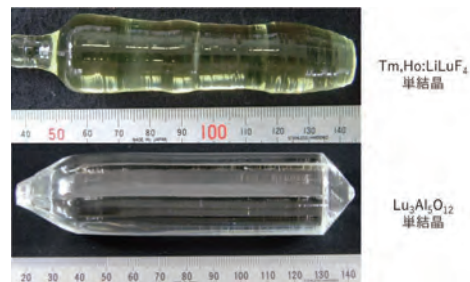
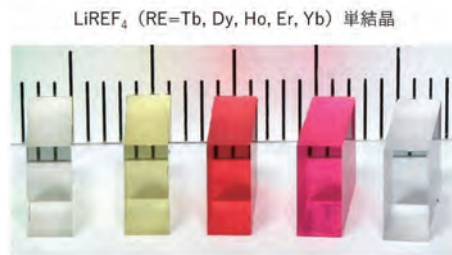
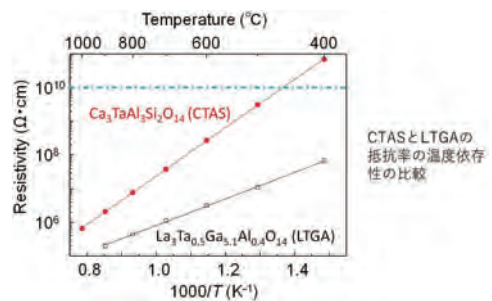
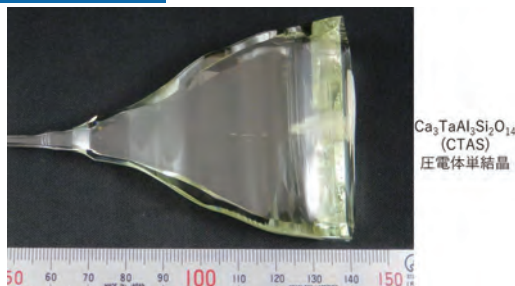
研究概要

新しい単結晶材料の設計とバルク単結晶化、それらの評価とデバイス化に関する研究を進めています。レーザー・非線形光学結晶、磁気光学結晶、シンチレーター結晶など光学関連単結晶を中心に、ワイドバンドギャップ半導体や圧電・強誘電体単結晶など、バルク単結晶に関する次世代を担う応用分野全般を対象としています。酸化物からハライド、窒化物まで、様々な材料系にも挑戦し、それぞれに適した結晶成長技術開発も行っています。大学・研究機関、企業との連携を進めると同時に積極的な国際交流を推し進め、常に新しい観点からの、基礎から実用化まで幅のある研究を目指しています。

新規性・独創性

- 超高融点を持つ材料のバルク単結晶育成
- フッ化物を中心とするハライドのバルク単結晶育成
- 従来の特性を超える機能性単結晶材料の設計
- 光から圧電、半導体まで、幅広く検討

研究内容



従来圧電体と異なり高温で圧電動作し、単結晶育成が困難とされるCTAS単結晶を得た。高温での圧電動作に有利な、400℃で10¹¹Ω・cmという、LTGAと比較しても高い抵抗率を示す。可視～赤外までの幅広い波長域で高出力全固体レーザー用として有用な単結晶を育成。レーザー加工機やEye-Safeレーザーなど、各種の展開が期待される。

まとめ

従来を上回る特性を示し、かつ大型結晶育成が可能な材料を考案し、そのバルク単結晶育成と特性の実証を進めている。こうした基礎研究の継続とデバイス製作、試験を平行して行っていきたい。

論文・特許

- X. Fu, E. G. Villora, Y. Matsushita, Y. Kitanaka, Y. Noguchi, M. Miyayama, K. Shimamura and N. Ohashi, *J. Cryst. Growth* **501**, 38-42 (2018).
- F. Jing, K. Shimamura, E. G. Villora, A. Medvedev, K. Kitamura, K. Asai and A. Sato, *J. Am. Ceram. Soc.* **91**, 296-298 (2007).
- 特許第5874946号 スイッチング制御装置及びショットキーダイオード

優れた硫化物単結晶の探索および結晶育成

Keywords 硫化物, 単結晶, 結晶成長, 赤外, 熱電, ナローバンドギャップ半導体, 2Dマテリアル

主幹研究員 / Principal Researcher

中村 優 Nakamura Masaru

✉ NAKAMURA.Masaru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakamura_masaru

研究概要

硫化物の特徴として、酸化物等と比べて、赤外域まで透過する優れた光学特性がある。そのため、赤外域で用いられる光学デバイス材料として有望である。また、光学用途以外として、熱電材料、太陽電池材料としても、期待されている。さらに、近年は2Dマテリアルとしても、再注目されている。本研究においては、蒸留精製した自家製の高純度硫黄を用いている。

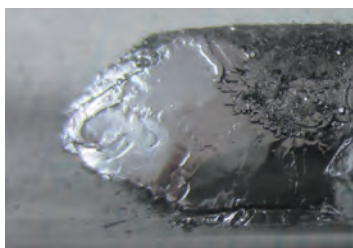
これまでに育成に成功した硫化物単結晶として、SnS、AgBiS₂、GeS、GaS等がある。

新規性・独創性

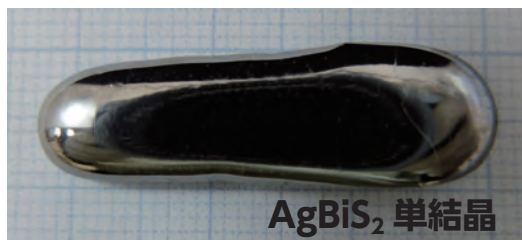
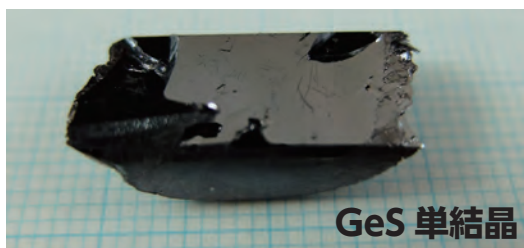
硫化物の優れた特性として以下が挙げられる。

- 波長10 μm以上まで透過する優れた赤外域透過特性
- 無毒で優れた熱電特性
- 2Dマテリアルとして再注目

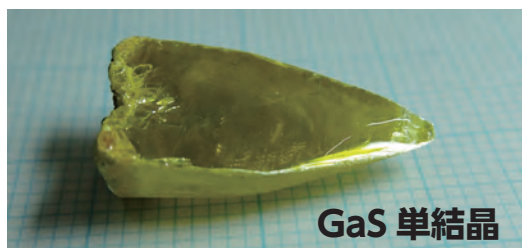
研究内容



SnS 単結晶

AgBiS₂ 単結晶

GeS 単結晶



GaS 単結晶

これまで水平型温度勾配炉内徐冷法によりSnS単結晶、徐冷法によりAgBiS₂単結晶、熔融GeSソースを用いた蒸気輸送法によりGeS単結晶、ブリッジマン法によりGaS単結晶を育成した。

GaS単結晶は14 μmまで透過域があることが分かり、赤外域の光学材料として用途が考えらる。また、SnS、GeS、GaSlは2Dマテリアルでもある。2D-SnSはPb(Zr, Ti)O₃: PZTに匹敵する圧電特性を示すことが理論的に予測されている。実際にSnS単結晶を用いて、2D-SnSの圧電特性についての共同研究を行っている。

まとめ

これまで、種々の硫化物単結晶を幾つかの方法により結晶育成を行った。その結果、主に以下の硫化物単結晶を得た。今後、硫化物固有の優れた特性を活かした硫化物を探索し、その単結晶の育成方法を研究開発する。

- SnS単結晶 (用途：2Dマテリアル、太陽電池)
- AgBiS₂単結晶 (用途：熱電素子、太陽電池)
- GeS単結晶 (用途：2Dマテリアル)
- GaS単結晶 (用途：赤外光学素子、2Dマテリアル)

論文・特許

- M. Nakamura, E. G. Villora, T. Ohsawa, K. Shimamura and N. Ohashi, *J. Cryst. Growth* **609**, 127153 (2023).
- M. Nakamura, H. Nakamura, K. Shimamura and N. Ohashi, *J. Cryst. Growth* **573**, 126303 (2021).
- M. Nakamura, H. Nakamura, M. Imura, S. Otani, K. Shimamura and N. Ohashi, *J. Alloys Compd.* **591**, 326–328 (2014).

Crystals for optical isolators & brightness white light sources

Keywords UV-VIS-IR Faraday rotators, Single-crystal phosphors

主任研究員 / Senior Researcher

ビジョラ ガルシア Villora Garcia

✉ VILLORA.Garcia@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/villora_garcia



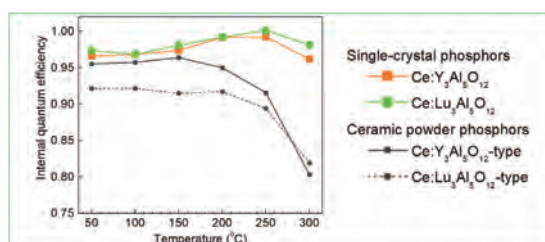
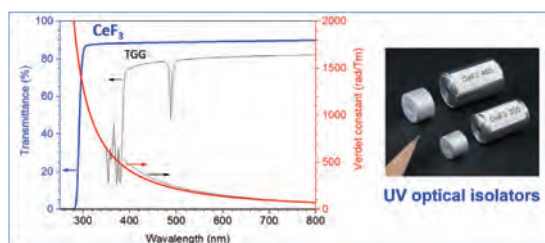
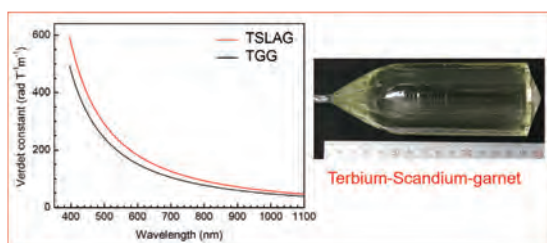
Research Summary

- Optical isolators are needed for laser machinery, marking, and high-power LDs. New novel Faraday rotators are demanded for higher laser powers and shorter wavelengths.
- Ceramic powder phosphors are used for white lighting by excitation with blue LEDs/LDs. All-inorganic efficient phosphors are needed for high-brightness applications.

Novelty / Originality

- Improvement of Tb-garnets for IR Faraday rotators and development of new UV-visible Faraday rotators.
- Development of new binder-free yellow-green single-crystal phosphors with high conversion efficiency and high thermal stability to realize high-brightness white LEDs/LDs.

Research Contents



- High optical quality fluoride and oxide single-crystals are grown by the Czochralski and Bridgman techniques.
- Grown crystals and oriented, cut, and polished for characterization in terms of crystalline quality and optical properties.
- Prototypes are fabricated to analyze the performance of actual devices and to get feedback for further development.

Summary

- Tb-Sc-garnets are already incorporated into Yb-amplified fiber-lasers by Fujikura Ltd.
- CeF₃ is implemented in commercial UV-VIS optical isolators.
- SCPs are already utilized in high-brightness light sources, and further expansion is foreseen in the next generations of projectors and headlights.

References

- E. G. Villora, D. Yuan and K. Shimamura, *Int. J. Appl. Ceram.* **20**, 2047-2054 (2023).
- E. G. Villora, S. Arjoca, D. Inomata, *et al.*, *Proc. SPIE 9768, Light-Emitting Diodes: Materials, Devices and Applications for Solid State Lighting XX*, 976805 (2016).
- E. G. Villora, P. Molina, M. Nakamura, K. Shimamura, T. Hatanaka, A. Funaki and K. Naoe, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 011111 (2011).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高ハチ・バイオ材料

マテリアル基盤

Oxide and halide single-crystals for radiation detection

Keywords Single-crystal growth, Crystal defects & engineering, Scintillators, Radiation detection

研究員 / Researcher

原 東升 Yuan Dongsheng

✉ YUAN.Dongsheng@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yuan_dongsheng



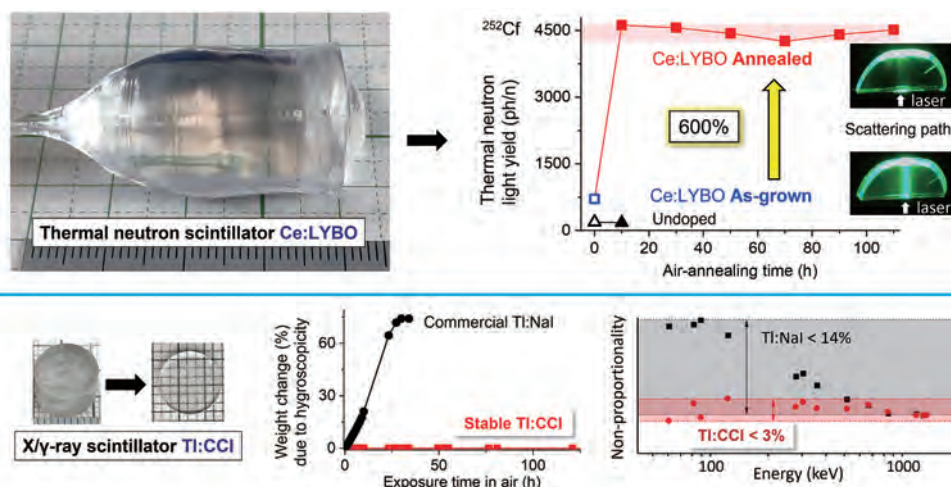
Research Summary

Inorganic single-crystal radiation detectors are widely employed in the fields of homeland security, industrial nondestructive inspection, nuclear medicine imaging, and high-energy physics. Even though depending on the specific application the required properties vary, there is a general market demand for scintillators that are chemically stable, cost-effective, and efficient. Two distinct application-oriented topics are mainly focused: (1) thermal neutron scintillators for handheld detectors (stable oxides instead of the currently used highly hygroscopic halides) and (2) new X/γ-rays scintillators (low-cost, non-hygroscopic halides).

Novelty / Originality

- Development of non-hygroscopic thermal neutron scintillator $\text{Ce:Li}_6\text{Y(BO}_3)_3$ (LYBO): (1) greatly reduced scattering centers for the first time, (2) high light yield over 4000 ph/n, (3) inch-size bulk crystal growth.
- Finding of a new chemically-stable and bright halide scintillator $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{I}_5$ (CCI) that can be grown into large-size single crystals via the melt method.

Research Contents



- The previously disregarded Ce: LYBO due to extremely low light yield has been developed using the strategies of proper Ce^{3+} -doping and drastic reduction of scattering centers, with the light yield being comparable to the reference Li-glass (GS20).
- Large-size crystal growth of the new iodide scintillator CCI is achieved by the melt method that is practicable in mass production. Ti:CCI exhibits a high light yield, good energy resolution, and excellent non-proportionality (less than 3%) while being chemically-stable compared with the commercial halide scintillators such as NaI and SrI_2 .

Summary

- High light yield of Ce:LYBO makes this family practically promising for handheld neutron detection. The successful strategies will be extrapolated to other low melting-point oxide scintillators.
- The stable and bright scintillator CCI has gained great attention worldwide. After doping, the optimized Ti:CCI has been found even brighter than the commercial Eu: SrI_2 .

References

- D. Yuan, E. G. Villora, N. Kawaguchi, D. Nakauchi, T. Kato, T. Yanagida and K. Shimamura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, 010614 (2023).
- D. Yuan, E. G. Villora, S. Tominaka and K. Shimamura, *J. Mater. Chem. C* **10**, 3567-3575 (2022).
- D. Yuan, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 38333-38340 (2020).

微構造制御したバルクセラミックス創製

Keywords 結晶配向, 透光性, コロイドプロセス, 焼結

グループリーダー / Group Leader

鈴木 達 Suzuki Tohru

✉ SUZUKI.Tohru@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/suzuki_tohru



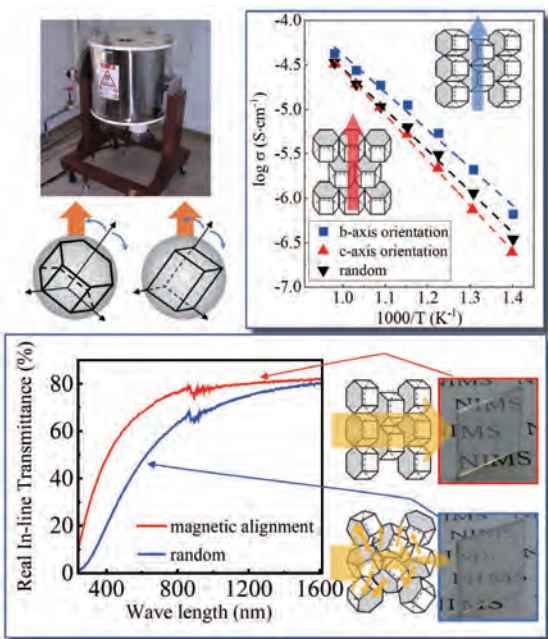
研究概要

バルクセラミックスにおける特性制御では、結晶粒径、粒界、第2相分散、結晶配向などの微構造制御が重要となり、そのためには創製プロセスの精緻な制御が必要となる。本研究では特に結晶配向に着目した微構造制御を行っている。反磁性、常磁性セラミックスでは磁場の利用は難しかったが、コロイドプロセスを用いることでアルミナ、酸化亜鉛、炭化珪素なども磁場による結晶配向を可能とし、さらに焼結時には磁場印加が不要であるため各種焼結手法を用いることが出来る。また、樹脂中におけるセラミックスフィラーの配向制御への展開も可能である。

新規性・独創性

- 反磁性体、常磁性セラミックスでも可能とする磁場を用いたバルク体における結晶配向制御
- 放電プラズマ焼結などの多岐の焼結手法との併用が可能であり、緻密に結晶配向を付与可能
- 熱伝導、イオン伝導、熱電特性、透光性などの結晶方位に依存する様々な機能特性制御
- 樹脂中などの種々のマトリックスへのセラミックスフィラー配向、短繊維などの一方向分散が可能
- ナイロンなどの造孔材の配向により多孔体における管状孔の整列制御が可能

研究内容



10T級の超伝導磁石であっても液体ヘリウムの供給が不要なタイプの使用が可能であり、その中での成形時にスラリー中で六方晶や正方晶などの結晶異方性を有する粒子が回転することにより、特定の結晶軸を揃えることが可能となる。c軸が磁化容易軸となる場合には、c軸と磁場印加方向が平行になるように粒子が回転し、c軸が磁化困難軸となる場合にはc軸が磁場と垂直になるように回転する。成形時での磁場印加だけが必要であるために、その後の緻密化過程は従来の様々な緻密化手法を用いることが出来る。

例えば、多価カチオン伝導体である $\text{Al}_2(\text{WO}_4)_3$ において、磁場の印加方法を静磁場と回転磁場とを用いることでb軸配向体とc軸配向体を造り分けることが可能であり、b軸を揃えた場合にc軸方向よりも伝導性が高くなることを見出している。また、ランダム体ではその間の特性となっている。

また、アルミナにおいては成形体のパッキン構造を制御するためのコロイドプロセスと放電プラズマ焼結を駆使することで、ランダム配向体においても透光性を有する焼結体の作製が可能であることを示した(下図の青)。しかし、アルミナは異方性を有するコランダム構造であるために粒界での複屈折により直線透過性のさらなる向上が困難であった。そこで磁場配向を用いてc軸を揃えることにより複屈折を抑制することに成功し、直線透過性に優れた多結晶アルミナを作製できることを実証している。

まとめ

2次電池や燃料電池における電解質のイオン伝導性の向上、熱電材料などの異方性セラミックスにおける結晶配向による特性向上、および緻密化による直線透過性の向上を実証している。今後は磁場強度を低下させる条件の探索とバッチプロセスから連続運転可能なプロセスの開発に取り組む。プロセスの改善によりさらに様々な材料への展開が可能となると期待される。

論文・特許

- T. Ashikaga, B. Kim, H. Kiyono and T. S. Suzuki, *J. Eur. Ceram. Soc.* **38**, 2735–2741 (2018).
- C. E. Özbilgin, K. Kobayashi, S. Tamura, N. Imanaka and T. S. Suzuki, *J. Am. Ceram. Soc.* **104**, 6364–6372 (2021).
- S. L. Tonquesse, W. Zhang, B. Srinivasan, B. Fontaine, T. Hiroto, T. Mori, J. Halet, D. Berthebaud and T. S. Suzuki, *Chem. Mater.* **34**, 1143–1156 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

磁気力を利用した物質挙動制御と物質分離

Keywords 磁場応用, 磁気力制御, 磁気浮上, 磁気分離, 磁場配向, その場観察, 高磁場, 超伝導磁石

主幹研究員／Principal Researcher

廣田 憲之 Hirota Noriyuki

✉ HIROTA.Noriyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hirota_noriyuki



研究概要

超伝導磁石で容易に得られる10 T程度の磁場を利用すると、水やプラスチック、セラミックスのような様々な物質に対して、非接触で力学的効果を与えることが出来ます。これによって、異方性を利用した配向などの組織制御、物質の位置・移動の制御や、分離・分析、磁気浮上、重力効果の制御などの様々なプロセスが実現します。効果の表れ方や大きさは物質固有の性質に基づきますが、基本となる磁性はあらゆる物質が有するものであるため、条件を整えれば多くの物質に適用できます。本研究では、磁場を利用した物質挙動制御について、磁場下で起こる現象の可視化やシミュレーションなどを通して理解を深め、空間磁場の設計も合わせて最適化を目指しています。

新規性・独創性

- 高磁場中でも利用可能な可視化デバイス群を利用
- 13 Tの磁場中で使用できる共焦点レーザースキャン顕微鏡はオンリーワンの装置
- 磁場効果を増幅する磁気アルキメデス効果を考案し、これを各種プロセスへ適用
- どの要素過程においてどのように磁場効果を作用させるのかという観点でのプロセス設計

研究内容



Fig.1

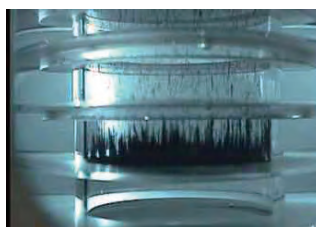


Fig.3



Fig.2



Fig.4

水に上向きの磁気力を作用させると浮上できます。Fig.1は周囲媒体により磁気力効果を増幅する磁気アルキメデス効果で実現した水の磁気浮上です。Fig.2は1 mmの金粒子に磁場を印加することで粒子間の磁気的な反発により形成した三角格子です。条件を変えると格子定数を制御できます。Fig.3は磁性フィルターを使って磁性粒子を高速で分離する高勾配磁気分離過程の可視化例です。粒子の表面加工等により多くの物質分離に適用可能ですが、堆積過程を理解することで高機能化できると期待されます。Fig.4は世界でもNIMSにしかない13Tの磁場中で利用可能な共焦点レーザースキャン顕微鏡です。磁場下で起こる現象の理解に寄与できると考えています。

まとめ

- 力学的効果を制御した特異な材料創成環境としての利用が期待される
- 物質に対して非接触で影響を与えることが出来る
- 新しい物質分離・分析、組織制御手法としての利用が期待される

論文・特許

- T. Mori, J. Yamamoto, Y. Akiyama, H. Okada, N. Hirota, H. Matsuura, S. Namba, T. Sekine, F. Mishima and S. Nishijima, *IEEE Trans. Magn.* **56**, 8300308-1-8 (2020).
- N. Hirota, T. Ando, T. Takano and H. Okada, *J. Magn. Magn. Mater.* **427**, 296-299 (2017).
- N. Hirota, T. Ando, R. Tanaka, H. Wada and Y. Sakka, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **10**, 014608-1-7 (2009).

高機能電気化学インピーダンス解析プログラム開発

Keywords 電気化学インピーダンス, 解析プログラム, 固体電気化学

主幹研究員 / Principal Researcher

小林 清 Kobayashi Kiyoshi

✉ KOBAYASHI.Kiyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kobayashi_kiyoshi



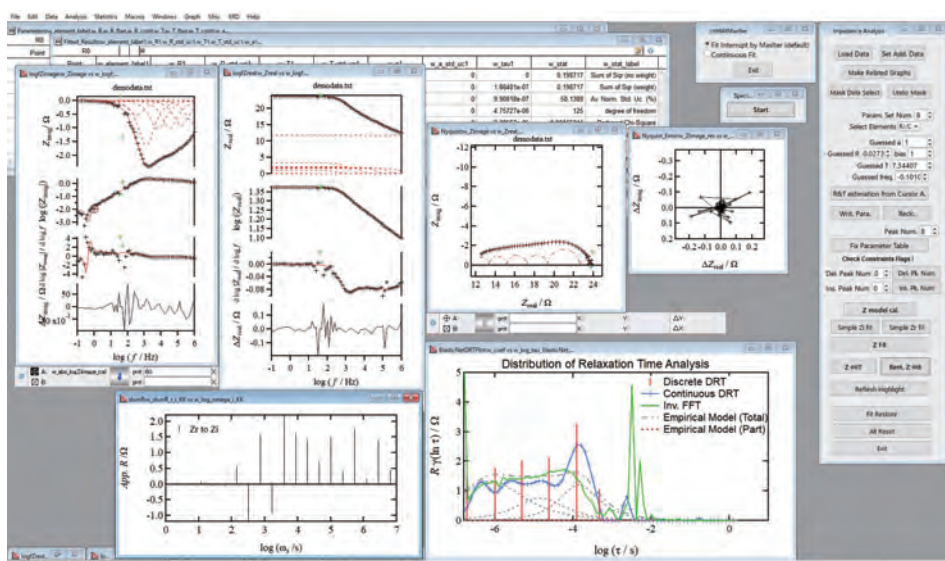
研究概要

電気化学インピーダンスについて多様な解析を一つのプログラムで可能にする高機能なプログラムを開発しています。独自の簡易人工知能自動解析, 拡張緩和時間分布解析などオリジナルな解析機能を実装しています。本プログラムは有償ライセンスで公開しています。

新規性・独創性

- GUI活用による動的モデリングが可能
- 簡易人工知能による自動解析機能の実装
- 蓄電池やキャパシターなどのスペクトルにも適用可能な独自の拡張緩和時間分布法の実装
- その他, 多数のオリジナル機能を実装
- 新規機能の開発進行中

研究内容



左図は開発した電気化学インピーダンス解析プログラムの概観図。従来の等価回路解析に加え、複数の緩和時間分布解析結果の比較などを示す。非理想的な形状のインピーダンス・スペクトルも直感的かつ容易に解析できます。

まとめ

解析が難しい実測インピーダンス・スペクトルについて複数の手法により容易に解析できるプログラム開発。本プログラムは有償ライセンスで公開中。現在は有償の汎用解析プログラムIgor Pro© (WaveMetrics社製) マクロプログラムで開発。新規解析法は現在も開発継続中、今後の課題はスタンドアロンアプリ化。

論文・特許

- 小林 清, 電気化学 **90**, 265-278 (2022).
- K. Kobayashi and T. S. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* **87**, 034004 (2018).
- 特許第6562457号 電気化学インピーダンス測定装置、電気化学インピーダンス解析支援装置、及びそのためのプログラム

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

化学プロセスによる次世代セラミックス材料の創製

Keywords 化学合成（水熱反応，マイクロ波，電気化学），ハイブリット化合物，電子機能，磁性，光，セラミックス物性

主任研究員／Senior Researcher

中根 茂行 Nakane Takayuki

✉ NAKANE.Takayuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakane_takayuki



研究概要

機能性セラミックス材料は、光学製品や電子機器、磁性体、フィルター、触媒など、現代社会の様々な場所に利用されており、先端研究では小型化や高性能化、高機能化を求められています。社会実装を議論する上では低コスト化も必要です。また近年では、環境問題や資源問題などの社会課題との共存も重要です。こうした様々な課題解決が求められる先進的なセラミックス材料の研究では、ナノ領域に見出される特異な物性をマクロサイズの機能として顕在化させる材料創製研究が盛んに行われており、新たなプロセス技術の創出が求められています。私は、化学視点でこの研究に取り組み、従来技術では応用できなかった物質や物性の材料化を目指しています。

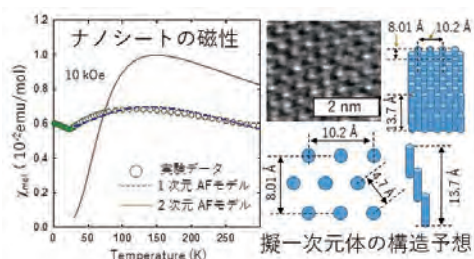
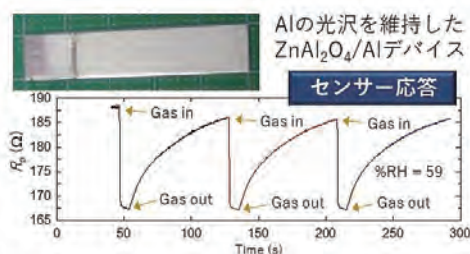
新規性・独創性

- 一般的に高温で作製されるセラミックスは、化学プロセスで低温合成すると理想とは異なる物性を示します。この現象を物性物理視点で検証し、有効な改善策や活用方法となる化学プロセスを創出します。このノウハウと技術開発が独創性の鍵です。
- ハイブリット材料や量子材料、準安定相など、化学プロセスだからこそ材料化できるセラミックスがあります。
- 従来研究が取り組んでいない条件下での合成や計測を可能にするため、独自の装置や治具を開発します。例えば、水熱合成では、連続合成やデバイス作製技術化、電圧印加や脱圧力技術化など、汎用的な手法では困難な領域でのモノ作りを志向します。

研究内容

Al基材の表面を ZnAl_2O_4 に改質する水熱製膜技術

アルミは酸化しやすい両性金属なので、従来の水熱反応条件下では金属状態を維持できません。この課題を克服し、安価なアルミの表面だけを高機能なアルミ化合物“ ZnAl_2O_4 ”にすることに成功しました。 ZnAl_2O_4 は、資源リスクが低い元素のみで構成される化合物でありながら、半導体、触媒、光学材料など様々な分野で実用化が議論されている高機能セラミックスです。研究では、作製した $\text{ZnAl}_2\text{O}_4/\text{Al}$ デバイスが、高感度なガスセンサーとして機能することも確認しました。この技術は、低コスト化、小型化、複雑形状化などのニーズにも対応可能で、他の化合物合成にも応用できます。



究極の低次元デバイス構造を持つハイブリット化合物

従来物質とは異なる量子物性が顕在化する物質として、低次元マテリアルの研究が盛んに行われています。ナノサイズのこの物質を材料化するには、高度に配列させてデバイス構造にしなければなりません。これに対し、有望な基礎研究成果を見出しました。我々が化学合成した物質は、遷移金属酸化物と有機物がナノレベルで周期配列したハイブリット構造のナノシートになります。興味深いことに、この物質内では遷移金属酸化物が擬一次的な構造をとってシートの面直方向を向いて並んでいます。この構造体を利用すれば、シートを電極で挟むだけで究極サイズの一次元化合物デバイスができると期待できます。

まとめ

物性物理と化学合成の視点から新しい機能性セラミックス材料の創製研究に取り組んでいます。研究では、水熱合成などの汎用的な技術を基盤に独自の手法や装置を開発し、従来技術では作れなかった材料の創出を目指します。最近、アルミ表面をアルミ化合物に製膜する技術を開発しました。また、究極のデバイス化が期待できるナノシートの合成法を見出しました。これらの技術の汎用化を目指しています。

論文・特許

- T. Nakane, T. Naka, M. Nakayama and T. Uchikoshi, *Sensors* **22**, 6194 (2022).
- T. Nakane, S. Ishii, T. Uchikoshi and T. Naka, *J. Am. Ceram. Soc.* **106**, 2317–2325 (2023).
- 特許第6999140号 金属酸化物からなる発泡体、および、その用途

CNT-MXene membranes for electrochemical energy storage applications

Keywords 2D MXenes, Carbon nanotubes (CNTs), CNTs dispersion, Electrochemical properties, Li-O₂ batteries

主任研究員／Senior Researcher

エスティリ メーディ Estili Mehdi

✉ ESTILI.Mehdi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/estili_mehdi



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

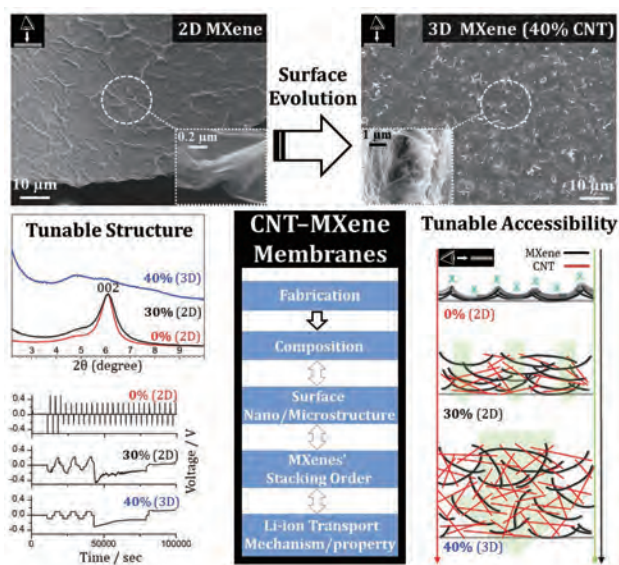
Research Summary

- Superior prospect of 2D MXenes for electrochemical energy storage applications.
- Restacking and agglomeration of MXenes considerably limit their true potential for fast ion transport.
- CNTs were dispersed to control the structure and porosity of MXene membranes.
- CNT–MXene hybrid membranes show dramatically improved Li-ion transport properties.

Novelty / Originality

- A scalable method to fabricate ultralight yet continuous CNT–MXene membranes with uniform/3D CNTs dispersion.
- Correlation among CNTs content, surface microstructure, MXenes' stacking structure & ion transport properties of the films.
- Li-ion transport mechanisms in the CNT–MXene membranes.
- MXene membranes with tunable 2D and 3D structures with improved ion-transport performances.
- Potential application of selected CNT–MXene ultralight membranes as interlayers for Li-O₂ batteries.

Research Contents



- The compact surface microstructure of MXene membranes is dramatically changed as CNTs occupy MXene/MXene edge interfaces.
- The 2D stacking order of MXenes is preserved up to 30 wt% CNTs.
- The 2D alignment is completely disrupted at 40 wt% CNTs, and a more pronounced surface opening and internal expansion of ~770% are realized.
- Both 30 wt% and 40 wt% membranes show stable cycling performance under a significantly higher current density due to faster transport channels.
- Notably, for the 3D 40 wt% membrane, overpotential during repeated Li deposition/dissolution reactions is further reduced by another ~50%.
- Ultralight yet continuous hybrid films comprising up to ~0.027 mg/cm² Ti₃C₂ MXene can be prepared using aqueous colloidal dispersions and vacuum filtration for specific applications.

Summary

- A method to fabricate ultralight yet continuous CNT–MXene membranes for electrochemical energy storage applications.
- Inexpensive multi-walled CNTs control the structure of MXene membranes and improve their ion-transport properties.

References

- M. Estili, S. Matsuda, L. Jia, N. Sakai, R. Ma, T. S. Suzuki and K. Uosaki, *Nanoscale* **15**, 8289-8303 (2023).
- M. Estili, *Carbon* **203**, 230-236 (2023).

結晶粒制御による異方性レーザーセラミックス

Keywords 透明セラミックス, レーザー, パルス通電焼結, アパタイト, 接合

独立研究者 / Independent Scientist

古瀬 裕章 Furuse Hiroaki

✉ FURUSE.Hiroaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/furuse_hiroaki



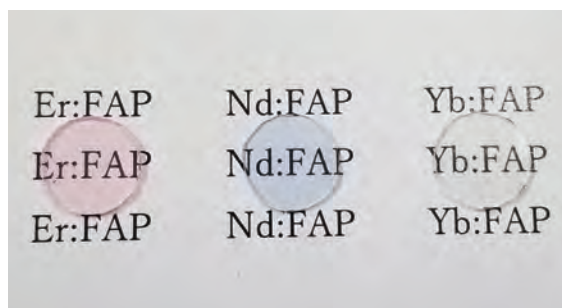
研究概要

透明セラミックスは、残留気孔や不純物などの散乱源が極限まで取り除かれたファインセラミックスである。固体レーザー材料としても用いられており、一部の材料では単結晶を凌駕する高いレーザー出力が得られている。光技術の進展には新しい光源を可能とする光学材料の開発が重要であることから、新しいレーザーセラミックスの実証や光学素子の接合技術開発を行ってきた。特に、既往技術では制限されていた光学的異方性材料の透明セラミック化とレーザー発振を実証しており、幅広い光学材料としての展開を目指している。

新規性・独創性

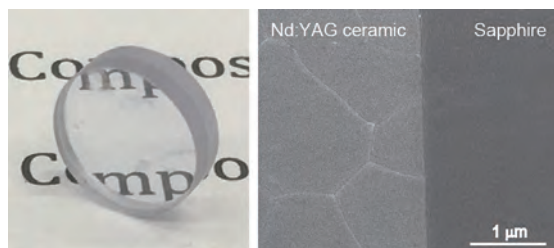
- 平均粒径が100nm程度の透明ナノセラミックスの実現
- 非立方晶アパタイトセラミックスのレーザー発振実証
- 単結晶／多結晶の接合実証

研究内容



通常、透明セラミックスの作製には気孔を除去するために高温・長時間の熱処理が施される。この場合、セラミックスを構成する結晶粒の大きさは光の波長以上となり、光学的異方性材料の場合は複屈折による粒界散乱が生じるが、結晶粒を光の波長に対して十分小さく制御すると、その影響は低減する。異方性セラミックスで単結晶並みの光学品質を得るために、微粉体の液相合成、通電加圧焼結による低温・短時間焼結を用いた結晶粒の制御を試みてきた。そして、左図のように六方晶系のアパタイトで平均粒径100nm程度の緻密な透明セラミックスを実現し、さらに希土類を添加した材料においてレーザー発振を実証した。今後、シンチレータ、白色蛍光体、生体光学材料、磁気光学材料など、幅広い光学分野への展開が期待できる。

高出力レーザーや白色光源の開発では、蛍光体で発生する熱問題の低減が重要である。特にレーザー材料では結晶内部の温度勾配が熱レンズ効果や熱複屈折効果を引き起こし、ビーム品質の劣化を招く。このような課題を解決するために、高熱伝導率のサファイアとレーザー材料との高品質な接合を簡便な手法で実施し、熱効果が低減することを実証した(右図)。現在、基礎的な評価を進めており、レーザー装置の高出力化だけでなく、多様な材料との接合組み合わせや高機能化を目指している。加工用レーザー光源だけでなく、白色照明などにも展開可能と期待している。



まとめ

- 粒径100nm程度の透明ナノセラミックスを開発した。
- 非立方晶系の透明アパタイトを作製し、レーザー発振することを示した。
- 異種光学材料の新しい接合技術を考案し、レーザー特性の向上を示した。
- 既往技術を超えるレーザー品質を達成することが課題となっており、さらなる光学品質の向上を目指している。
- レーザー以外の幅広い光学分野への展開と社会実装を期待している。

論文・特許

- H. Furuse, N. Horiuchi and B. Kim, *Sci. Rep.* **9**, 10300 (2019).
- 特許第6933349号 接合体、レーザー発振器、レーザー増幅器及び接合体の製造方法
- 特開2020055706号 アパタイト多結晶、生体材料、レーザー発振器、レーザー増幅器及びアパタイト多結晶の製造方法

粒子1粒を用いた新蛍光体開発

Keywords 蛍光体, 単粒子, レーザー照明, 次世代ディスプレイ

グループリーダー / Group Leader

武田 隆史 Takeda Takashi

✉ TAKEDA.Takashi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takeda_takashi



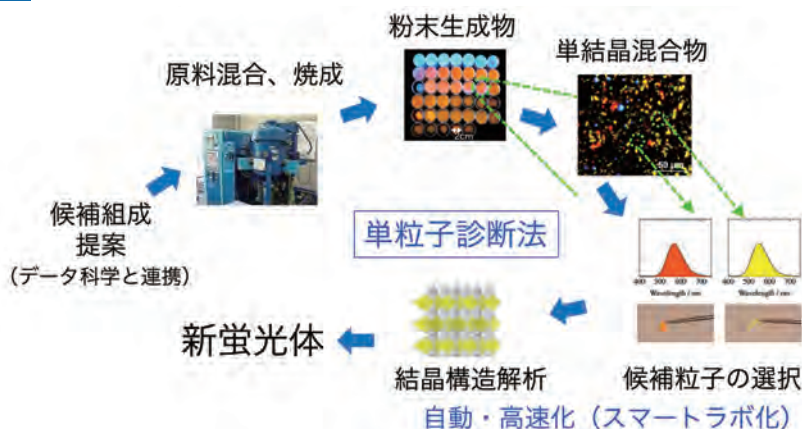
研究概要

蛍光体はLED照明やディスプレイなど様々な分野で使用されている。次世代の照明やディスプレイでは既存蛍光体を上回る性能が求められる。大幅な性能向上には既知蛍光体の改良ではない新蛍光体、結晶構造の新しい新蛍光体が必要である。しかし粉末合成で進められる蛍光体開発での新蛍光体探索には単一相合成が必要なため困難である。混合生成物中の粒子1粒に注目することで、単一相合成を必要とせずに高速で新蛍光体を開発することができる(単粒子診断法)。

新規性・独創性

- 数マイクロメートルの粒子1粒の結晶構造解析、発光特性評価から新蛍光体を開発
- 単一相合成が不要な混合粉末生成物からの新蛍光体の開発
- 粒子1粒での各種の発光特性評価法の開発

研究内容



励起光照射下の顕微鏡の観察像で示すように、探索段階での合成物の多くは様々な発光特性を有する粒子の集まりである。発光色の違いは物質の違いに相当するため、これら発光色、さらには粒子の形状の情報を元に候補粒子を選択する。多量の候補粒子にも対応できるように、粒子認識や発光スペクトル測定の自動化も取り入れており、目的特性を有する粒子にいち早くたどり着くことができる。物質の同定は単結晶X線構造解析で行うが、ここにも自動化を取り入れ、より高速での新蛍光体開発を可能としている。数マイクロメートルの粒子サイズでも結晶構造解析が可能である。特別な結晶成長プロセスが不要で、通常合成プロセスの生成物の中から新蛍光体粒子を見つけることができる。粒子の発光特性評価は粉末評価と同様に、励起・発光スペクトル、発光スペクトルの温度変化、量子効率、蛍光寿命などで可能である。また、情報科学との連携により効率的な新蛍光体開発も進めている。本手法を用いることで、次世代の照明やディスプレイに必要な蛍光体が開発される。

まとめ

温度特性に優れた蛍光体や狭帯域発光の新蛍光体が開発され、高輝度のレーザー照明や次世代ディスプレイが実現される。特性評価の手法展開により、この手法を他の材料系にも展開していきたいと考えている。

論文・特許

- S. Takemura, Y. Koyama, T. Nakanishi, S. Funahashi, N. Hirotsaki, H. Ikeno and T. Takeda, *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 11878-11882 (2022).
- T. Takeda, S. Funahashi, R. Xie and N. Hirotsakia, *J. Mater. Chem. C* **9**, 5497-5504 (2021).
- 武田 隆史, 小山 幸典, 廣崎 尚登, *セラミックス* **55**, 852-854 (2020).

次世代光源デバイスを指向する特殊蛍光体の開発と応用研究

Keywords 蛍光体, 希土類配位化合物, 遷移金属, LED波長変換材料

主任研究員 / Senior Researcher

中西 貴之 Nakanishi Takayuki

✉ NAKANISHI.Takayuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakanishi_takayuki



研究概要

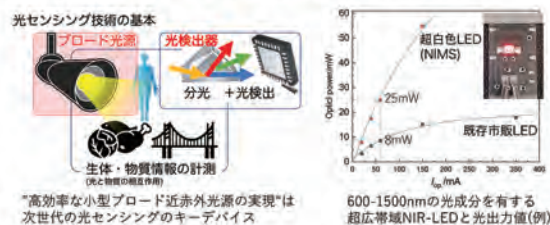
高エネルギーの光やX線を吸収し「発光」に変換する蛍光物質は日本の光産業を支えるキーマテリアルである。近年はディスプレイや μ LEDの波長変換材料、医療機器など多様な用途に合わせた新しい蛍光材料が要求されている。本研究では材料化を意識した明確な研究指針のもと、遷移金属や希土類を発光中心として、“セラミックス”および“無機有機ハイブリッド”の高輝度蛍光体を数多く創出し、その学理深化を進めてきた。特に産業連携では具体的な企業ニーズを吸上げ、共同開発による社会貢献を重視している。現在、力を入れる領域は、①分析光として重要な『超広帯域の近赤外LED』および②Min/Micro-LEDsを指向する『高輝度ナノ蛍光体の実用分野』であり、産学からのアプローチを期待している状況である。

新規性・獨創性

- 内/外部量子効率が世界トップクラスの400-1500nmの可視-近赤外帯蛍光体の開発
- 長時間の光源安定性を有するブロード近赤外LEDデバイスの実現
- 紫外-青帯で励起可能な狭線ナノ蛍光体の開発(発光幅<8nm)

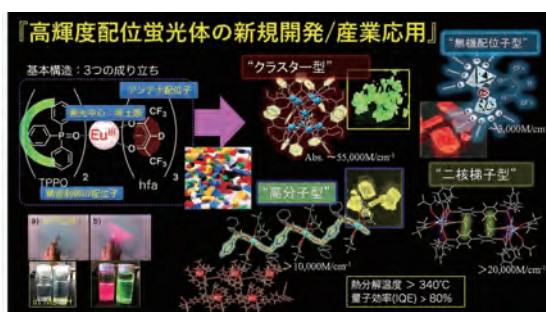
研究内容

『新規の近赤外蛍光体の開発/用途』



『新規の近赤外蛍光体の開発』 産学技術者/研究者による青色LED技術の進展はミリサイズのチップでワット(W)以上の光を創り出すレーザーダイオードへ進化している。一方で半導体プリント技術は素子が目で見えないほど小さく大面積化をも可能にする。蛍光体も同様に新ステージへ進み、本研究では特にセンサ光源やセキュリティ、生体に有用な近赤外700-1800nm発光をターゲットに新規の蛍光体を開発を進めている。開発目標である高効率で面発光が得られる『超白色LED光源の実現』には、各波長帯で実用的な複数蛍光体が不可欠である。昨今はニーズごとに求められる光の“質”が異なり、具体的応用に向けては産学との密な連携が重要であり要望を期待している。

『高輝度配位蛍光体の新規開発/産業応用』 発光強度は物質の光吸収能力と変換効率の積である。しかし如何に2つが優れても材料安定性や熱・光耐久性が低くれば材料にはならない。本研究では無機と有機化学の基礎学理を駆使し、分子レベルで設計した材料特化の希土類配位蛍光体を創出することである。配位蛍光体は発光中心となる希土類と、構造を作り光アンテナとなる有機配位子部で構成される。各パーツをレゴブロックのように組み上げることで新機能を持つオリジナル蛍光体創出が可能となる。これらは強い光吸収を有し有機バインダーに分散できる利点から次世代の透明ディスプレイやマイクロLED応用に期待される。



まとめ

- 本研究では、可視-近赤外帯での強発光、ブロード、狭線発光などそれぞれ特徴を持った特殊蛍光体開発を行っておりその材料提案が可能。
- “よく光ること”、“実用材料”をキーワードにした蛍光体物質設計により、社会ニーズにフレキシブルに対応した材料開発を提供可能。

論文・特許

- T. Nakanishi, Y. Hirai, J. Xu, T. Takeda, S. Watanabe, A. Yasumori, S. Hakamada, Y. Kitagawa and Y. Hasegawa, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **24** (2023).
- US2019119567 Rare-earth complex polymer
- 特許第 7044319 号 希土類錯体ポリマー及び発光体

化合物半導体結晶成長技術開発とその機能探索

Keywords 化合物半導体, 結晶成長, 分子線エピタキシー, ヘテロ構造, 量子ドット, 赤外線検出器

グループリーダー / Group Leader

間野 高明 Mano Takaaki

✉ MANO.Takaaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mano_takaaki



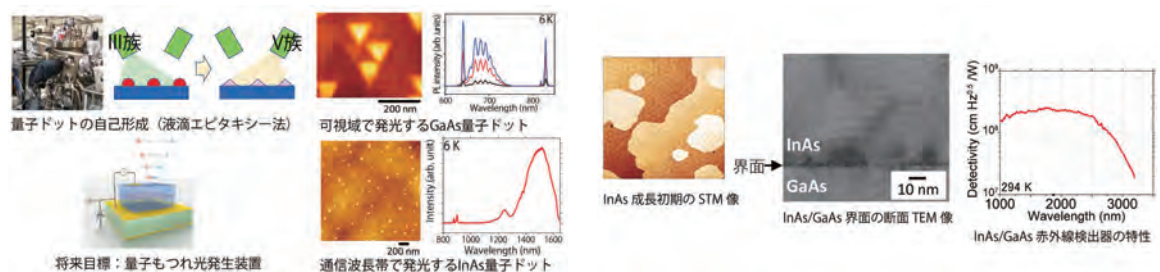
研究概要

Ⅲ-V族化合物半導体ヘテロ構造は、受光・発光デバイスや電子デバイスなど多様な身近な用途で用いられている。今後のIoT社会の発展に向けて、これらのデバイスをさらに高性能化・低価格化するとともに、新機能を開拓していくことが必要不可欠である。本研究では、Ⅲ-V族化合物半導体を中心とする材料に関して、高度なエピタキシャル成長基盤技術開発及びそれを駆使した新規ヘテロ構造の作製とその新機能開拓を行う。成長素過程の理解に基づく高度な結晶成長技術を開発することにより、次世代光源用量子ドット、高感度センシングデバイス用ヘテロ構造等の革新的な光・電子機能を有する半導体材料開発を推進する。

新規性・独創性

- NIMS独自の手法である液滴エピタキシー法を用いることにより、従来の手法では実現の難しかった極めて高い面内対称性を有する量子ドットを実現することができる。この技術は、オンデマンド量子もつれ光子源への展開が期待される。
- 格子定数の大きく異なる半導体ヘテロ構造において形成される転位ネットワークを含む界面構造を利用することにより、暗電流の少ない赤外線検出器を実現することができる。この技術は高性能な赤外線検出器を簡便かつ安価に実現することにつながる。

研究内容



- NIMS独自の手法である液滴エピタキシー法を用いて、従来法では実現の難しかった(111)A方位の基板上に高い面内対称性を有する量子ドットを自己形成することに成功した。面内対称性の高い量子ドットはオンデマンドで量子もつれ光子を発生することができるため、量子情報デバイスへの応用が期待される。可視域で発光するGaAs量子ドットに関しては、量子もつれ光子の電流注入による発生を実証している。また、通信波長帯で発光するInAs量子ドットに関しては、単一光子発生まで達成している。
- ナローギャップ半導体を用いた赤外線検出器は、環境センサーや暗視カメラなどに応用可能であるが、高性能なデバイスに関しては、材料の毒性が高い、基板が高価、などの問題があった。我々は、特異な格子緩和機構によりほとんどの格子不整合が結晶成長初期に緩和されるヘテロ材料系に着目した。その界面に局在した転位の特性を利用することにより、暗電流の低い赤外線検出器動作を実現した。これまでに、InAs/GaAsヘテロ材料系を用いることにより拡張赤外域の検出を実証している。この技術を用いることにより、安価な基板上に高性能な赤外線検出器を実現できる可能性がある。

まとめ

Ⅲ-V族化合物半導体の高度な結晶成長技術を開発し、それを駆使することにより半導体ヘテロ構造を作製し、その機能性を実証してきた。高度な機能性を有する新規ヘテロ構造の実現には、理論に基づく構造設計や原子スケールでの結晶成長素過程の理解等が必要不可欠であり、これらを高度に融合させることにより、さら研究を進展させていく。

論文・特許

- T. Mano, A. Ohtake, T. Kawazu, H. T. Miyazaki and Y. Sakuma, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 29636-29642 (2023).
- N. Ha, X. Liu, T. Mano, T. Kuroda, K. Mitsuishi, A. Castellano, S. Sanguinetti, T. Noda, Y. Sakuma and K. Sakoda, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 143106 (2014).
- T. Mano, K. Mitsuishi, N. Ha, A. Ohtake, A. Castellano, S. Sanguinetti, T. Noda, Y. Sakuma, T. Kuroda and K. Sakoda, *Cryst. Growth Des.* **16**, 5412-5417 (2016).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

ヘテロエピタキシー新技術の開発

Keywords 分子線エピタキシー，表面・界面構造解析，半導体積層構造，量子ドット

主幹研究員／Principal Researcher

大竹 晃浩 Ohtake Akihiro

✉ OHTAKE.Akihiro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohtake_akihiro



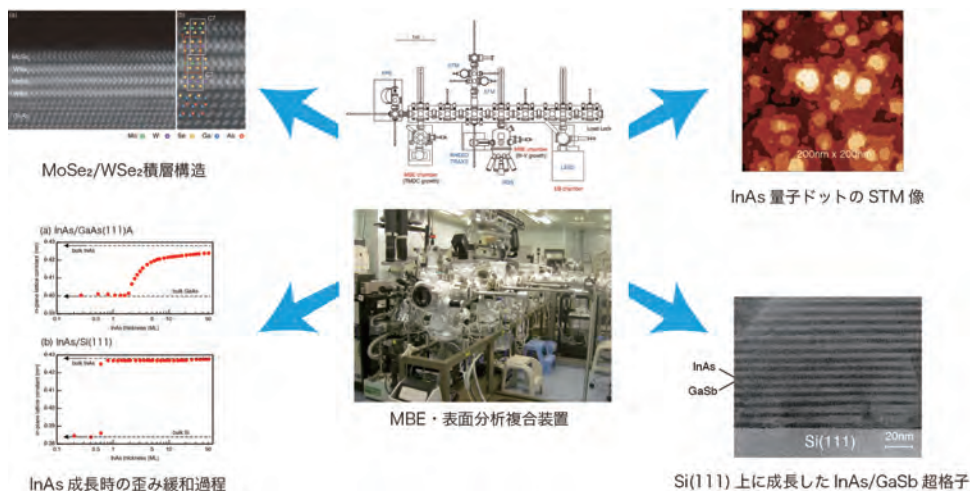
研究概要

革新的光・電子機能材料の実現に向けて、その礎となるエピタキシャル結晶成長技術の開発を進めている。分子線エピタキシー法に基づく高度な結晶成長技術と原子レベルでの表面・界面評価技術を駆使して、主に格子不整合系の半導体ヘテロ積層構造の作製と評価を行っている。

新規性・独創性

- 原子レベルでの表面構造の評価と制御に基づくヘテロエピタキシー過程の精緻な制御。
- (111)方位に特有な歪み緩和機構を利用することによって、低欠陥密度のIII-Vヘテロ積層構造を実現。
- 格子不整合に関する制約を受けにくいMoSe₂やWSe₂等の二次元層状物質を用いた多層ヘテロ積層構造を作製。
- 量子ドット形成過程のその場観察。

研究内容



分子線エピタキシー装置と電子回折、電子分光、走査トンネル顕微鏡などの表面分析装置を備えた複合型装置を用いて、III-V族半導体および遷移金属ダイカルコゲナイドのヘテロ構造を作製・評価している。具体的には、次のとおり。

- (111)面に特有な歪み緩和機構を利用して、GaAs(111)AやSi(111)基板上に低欠陥のIII-Vヘテロ積層構造を作製する技術を開発し、赤外デバイスへの応用を進めている。
- 遷移金属ダイカルコゲナイドについては、格子不整合の影響を受けにくいという特徴を活かし、MoSe₂やWSe₂等の単層膜から構成される積層構造の作製技術を開発している。
- 量子ドットの高品質化に向け、NIMS独自技術である液滴エピタキシー法による量子ドット形成過程を原子レベルで評価し、成長メカニズムの解明を目指している。

まとめ

- 主にIII-V族化合物半導体や遷移金属ダイカルコゲナイド等の材料を対象に、高度なエピタキシャル成長技術の開発を行い、それを駆使した新規ヘテロ構造の作製とその物性探索に関する研究を進めている。
- 原子レベルでの表面分析技術に基づく成長プロセスの精緻な制御方法を確立することにより、次世代光源や高感度センシングデバイス等の革新的な光・電子機能を有する半導体材料開発がより一層加速されると期待できる。

論文・特許

- A. Ohtake, X. Yang and J. Nara, *NPJ 2D Mater. Appl.* **6**, 35 (2022).
- A. Ohtake and Y. Sakuma, *J. Phys. Chem. C* **125**, 11257-11261 (2021).
- A. Ohtake, T. Mano and Y. Sakuma, *Sci. Rep.* **10**, 4606 (2020).

Sb系化合物半導体量子ドットの形成技術

Keywords 化合物半導体, 分子線エピタキシー, 量子ドット

主任研究員／Senior Researcher

川津 琢也 Kawazu Takuya

✉ KAWAZU.Takuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawazu_takuya



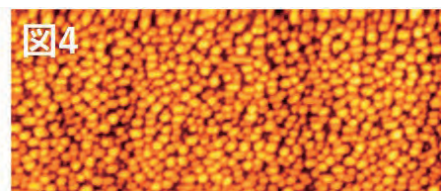
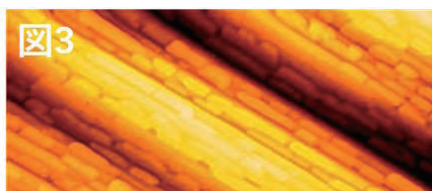
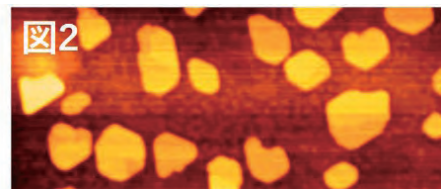
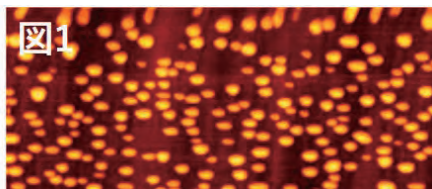
研究概要

Stranski-Krastanov (SK)モード成長は、広く用いられている量子ドット形成法の一つであり、基板上に格子定数の異なる材料を積層するだけで、10 nm 級量子ドットが転位を伴うことなく作製できる。そのようにして作製した量子ドットは、温度安定性に優れた半導体レーザーや高感度赤外検出器などの高性能デバイスへの応用が期待されている。本研究では、従来広く研究の行われてきたInAs系材料ではなく、より幅広い波長をカバーするSb系量子ドットの形成技術の確立と形状制御、高密度化を目指す。

新規性・独創性

- Sb系量子ドットの液滴エピタキシー法による幅広い密度サイズ制御
- Sb系量子ドットの高指数面基板による高密度化の実現
- Sb系量子ドットの微傾斜基板による配列構造作製

研究内容



GaSb, AlSbとGaAsの間には約7%の格子不整合があり、GaAs基板上にGaSbまたはAlSbを成長させると、ひずみを緩和するため半導体島構造(量子ドット)が形成される。本研究では、さまざまな基板温度、成長速度で高指数面GaAs基板上にGaSbあるいはAlSbを積層することにより、密度や形状が大きく異なる量子ドットが形成出来ることを見出した。図1：GaAs(311)A基板上のGaSb量子ドット。通常のGaAs(100)の場合に比べて、密度が1.5～2倍に増加する。図2：GaAs(111)A基板上に作製したGaSb量子ドット。大きく平坦な多角形のドットが形成される。図3：微傾斜GaAs(111)B基板上に作製したGaSb量子ドット。ドットは $[-101]$ 方向に沿って伸び、配列する。図4：GaAs(311)A基板上に作製したAlSb量子ドット。小さなドットが高密度に形成される。

まとめ

本研究では、基板温度、成長速度、基板面方位などのパラメータの選択により、Sb系量子ドットの形状制御を試みた。しかし、レーザーや赤外検出器などの光デバイスへの応用では、量子ドットの光学特性が重要となる。本研究で得られた量子ドット形状制御の知見をもとに、光学特性を制御する手法が確立出来れば、高性能光デバイスへの応用が期待できる。

論文・特許

- T. Kawazu *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 065503 (2022).
- T. Kawazu, T. Noda, Y. Sakuma and H. Sakaki, *AIP Adv.* **6**, 045312 (2016).
- T. Kawazu, T. Noda, Y. Sakuma and H. Sakaki, *Phys. Status Solidi C* (2016).

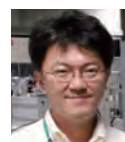
固体量子光源の開発

Keywords 量子光源, 単一光子源, 量子もつれ, 量子ドット, 量子通信, 量子情報操作

グループリーダー / Group Leader

黒田 隆 Kuroda Takashi

✉ KURODA.Takashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kuroda_takashi



研究概要

情報技術の加速度的な発展を背景に、通信セキュリティの確保が、喫緊の課題となっている。情報の漏洩を一切許さない、究極的に安全な通信手法が、量子暗号通信である。従来の光通信では、情報のキャリアとして、レーザー光パルスを用いてきた。一方、量子暗号通信では、情報のキャリアとして、単一光子のパルスを用いる。そのため、伝送距離は、石英ファイバーの透過長である100km以下に制限されていた。より長距離の通信には、未踏技術である量子中継器の開発が必要である。そのためには、非局所的な量子相関を持つ光子(量子もつれ光子)を発生する、高効率量子光源の開発が求められている。

新規性・独創性

- 量子中継の実現や量子もつれでつながった大規模量子インターネットの構築には、オンデマンドな単一光子や量子もつれ光子対の発生が必須。これを実現できるのは量子ドット光源のみ。
- NIMS 独自の量子ドット作製技術を活用。可視～通信波長の光子発生を実現。
- 半導体ベースのため、LED等のデバイス化や導波路構造へのオンチップ化も容易。

研究内容

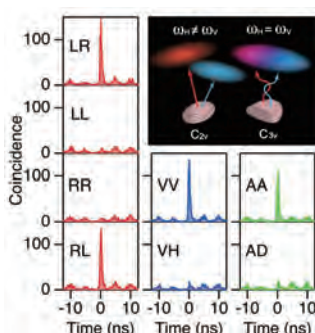


図1: GaAs量子ドットからの偏光もつれ光子対の発生 (2013)

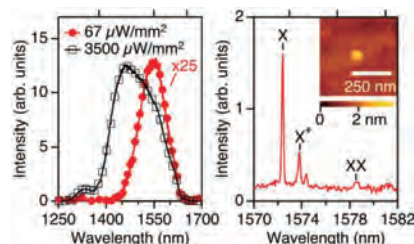


図2. InAs量子ドットからの通信波長1.55μm帯の単一光子スペクトル (2019)

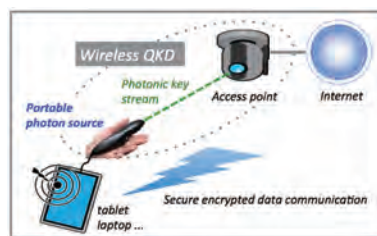


図3. 現在開発を進めるポータブル量子光源を用いたワイアレス量子暗号通信の考え方

NIMS独自の量子ドット作製技術である液滴エピタキシー手法を高精度化し、光学的異方性を根絶した理想的・等方的なGaAs量子ドットの作製に成功。偏光量子もつれの発生を観測、世界最高値の忠実度を見出した(2013年、図1)。その後、応用を目指し、外部レーザー要らずの電流注入LEDデバイス化に成功(2018年)。また通信応用を目指して、石英光ファイバーの最大透過波長である1.55μmでの単一光子発生に成功した(2019年、図2)。動作温度の向上により、大型冷凍機要らずの、ポータブルな光源デバイス(図3)を目指す開発を進めている。

まとめ

- 量子もつれが発生可能な高品質量子ドットを世界に先駆けて開発に成功。次世代量子通信技術への応用を目指し以下の研究開発を推進する。
- バンドギャップ・エンジニアリングによるアプリケーションに応じた波長の実現
- 量子中継を可能とする理想もつれ光子源の創生と量子中継等の量子操作の実証

論文・特許

- N. Ha, T. Mano, T. Kuroda, Y. Sakuma and K. Sakoda, *Appl. Phys. Lett.* **115**, 083106 (2019).
- M. Gurioli, Z. Wang, A. Rastelli, T. Kuroda and S. Sanguinetti, *Nat. Mater.* **18**, 799-810 (2019).
- T. Kuroda, T. Mano, N. Ha, H. Nakajima, H. Kumano, B. Urbaszek, M. Jo, M. Abbarchi, Y. Sakuma, K. Sakoda, I. Suemune, *et al.*, *Phys. Rev. B* **88**, 041306 (2013).

非線形，非エルミートナノフォトニクス

Keywords 光整流，高調波発生，レーザー，コヒーレント完全吸収

主幹研究員／Principal Researcher

落合 哲行 Ochiai Tetsuyuki

✉ OCHIAI.Tetsuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ochiai_tetsuyuki



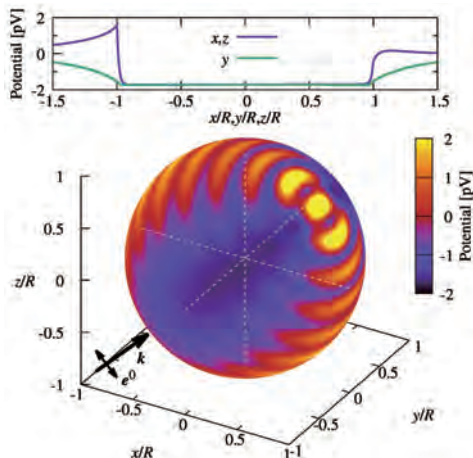
研究概要

フォトリック結晶、メタマテリアル、金属ナノ構造は物質が持つ固有の光学特性を人為的に変化させ、光の伝搬や光-物質間相互作用の制御を可能にする。光学非線形性や利得、損失、開放系などによる非エルミート性は制御のさらなる高度化をもたらし、新規な特性をもつ光電変換や高調波発生、レーザー、反レーザー（コヒーレント完全吸収）などが実現できる。これらを解析計算や数値シミュレーションによって研究している。

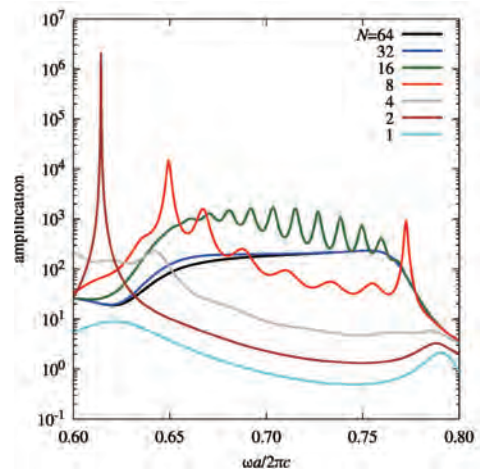
新規性・独創性

解析計算と数値シミュレーションを組み合わせた日本発のオリジナルな手法により、他の汎用的手法ではカバーできない領域や精度で現象を浮き彫りにする。固有モードや光輸送特性の精密解析を基礎に、人工構造における非線形光学応答や電磁相互作用を介した量子ドット、電子線などからの発光特性を明らかにし基礎と応用の両面での可能性を探索する。

研究内容



金属ナノ粒子における光起電力のポテンシャル配位：近年反転対称性を破った絶縁体や半導体におけるバルク光起電力がソーラーセルや超高速での光検出などの応用に向けて注目されている。これに対して金属では表面が支配的になるナノ構造での光起電力が重要になるが、金属表面はプラズモン共鳴や非局所応答、quantum spill-outなどが複雑にからみあい、未解明な部分が多い。ここでは半解析的な手法で金属ナノ粒子での光誘起静電ポテンシャルを求めている。



非エルミート光学系における増幅スペクトル：利得や損失のある系は非エルミート系と呼ばれ、近年、有限系で大多数の固有モードが端に局在するという非エルミート表皮効果が発見された。この効果の影響により指向性をもったレーザー発振やコヒーレント完全吸収がデザインできることを明らかにした。ここでは線形計算によるレーザー発振の特性解析として、入射光に対する増幅率を示している。

まとめ

- 超高速で応答する光電変換（光整流、ワイヤレスパワー伝送、光検出など）
- 特異なレーザー、反レーザー特性
- トポロジカル効果による頑強な光集積回路

論文・特許

- T. Ochiai, *J. Opt. Soc. Am B* **39**, 990 (2022).
- T. Ochiai, *Phys. Rev. B* **106**, 195412 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

有機単結晶ファイバーによる分子メカニカルデバイス

Keywords 有機単結晶, 構造相転移, ナノファイバー, アクチュエータ, 座屈

主幹研究員 / Principal Researcher

高澤 健 Takazawa Ken

✉ TAKAZAWA.Ken@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/takazawa_ken



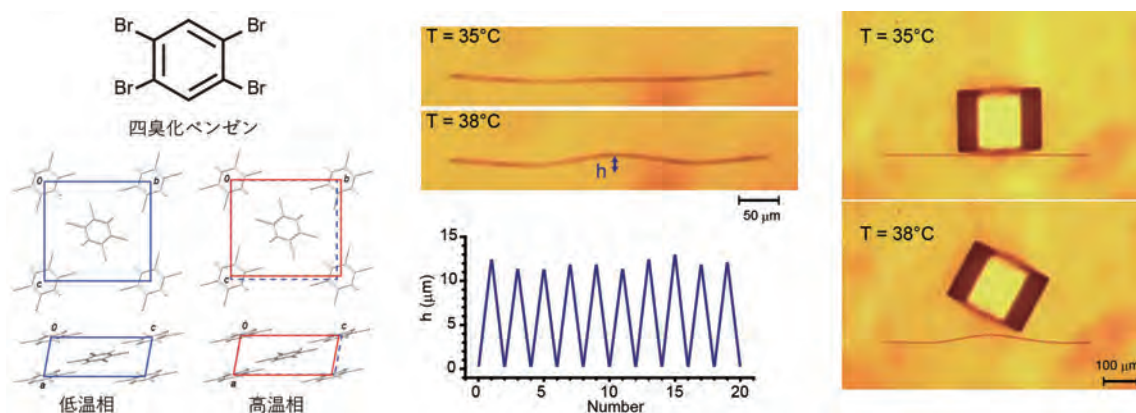
研究概要

過熱や冷却により、ある種の有機結晶が突然粉碎する現象が知られている。これは、温度誘起構造相転移により結晶に瞬間的に大きな応力が発生するためである。これらの結晶は、発生力を利用したアクチュエータなどへのデバイス応用が期待されている。しかし、結晶自体が粉碎してしまうため、デバイス化が困難であるだけでなく、相転移の進展メカニズムを詳細に研究することもできなかった。本研究では、ナノファイバー化した結晶を用いることで、これらの問題を解決した。ナノファイバーは極めて柔軟性が高いため、応力に対して柔軟に変形して粉碎を免れる。これにより、高速・高出力ナノファイバーアクチュエータの開発に成功した。さらに、ファイバーの変形から相転移の進展メカニズムを解明した。

新規性・独創性

- 結晶をナノファイバー化することで「粉碎」を「変形」に変換
- ナノファイバーの変形を解析することで相転移メカニズムを解明
- ナノファイバーを座屈させ高速・高出力アクチュエータを実現
- 自重の1万倍の質量を持つ物体を空中に跳ね上げる力を発生
- 様々な分子メカニカル素子の開発に発展可能

研究内容



1,2,4,5-四臭化ベンゼン (TBB) の単結晶は、40℃程度に加熱すると突然粉々に砕けることが知られている。これは、低温相から高温相への構造相転移により、結晶に瞬間的に大きな力が発生するためと考えられてきた (左図)。

新たに開発した手法により、TBB単結晶ファイバーを基板上に合成した。ファイバーを昇温すると、38℃付近で相転移により瞬間的に屈曲 (座屈) し、降温すると35℃付近で再び相転移して直線状に戻った。温度を上下させることで、ファイバーを繰り返し変形させることができる (中央図)。

自重の1万倍の質量を持つ物体を重力に抗して空中に跳ね上げることが可能な力を発生する (右図)。

まとめ

構造相転移により粉碎してしまう有機結晶をナノファイバー化した。これにより、粉碎を免れて、繰り返し変形が可能となり、アクチュエータ等のデバイス応用を可能にした。四臭化ベンゼンファイバーでは、40℃付近の室温領域で繰り返し屈曲変形させることができ、自重の1万倍の質量を持つ物体を空中に跳ね上げることが可能な非常に強い力を発生する。様々な分子メカニカル素子への応用が期待できる。

論文・特許

- K. Takazawa, J. Inoue and Y. Matsushita *Small* **18**, 2204500 (2022).
- K. Takazawa, J. Inoue, K. Mitsuishi, Y. Yoshida, H. Hishida, P. Tinnemans, H. Engelkamp and P. C. M. Christianen *Sci. Rep.* **11**, 3175 (2021).

分極反転非線形光学デバイスによる量子光制御

Keywords 分極反転, 擬位相整合, 非線形光学, 相関光子対, 量子光

主幹研究員 / Principal Researcher

栗村 直 Kurimura Sunao

✉ KURIMURA.Sunao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kurimura_sunao



研究概要

量子光の発生・制御は新たな通信や計測の手法として注目されている。NIMSが研究を進めてきた分極反転非線形光学デバイスは、高効率であるため光子数の少ない状況でも動作し、量子光発生・制御に優れた特性を示す。材料およびデバイス形態に関して、NIMSでは多様な知見を有し、研究開発を進めて来た。非線形光学材料・デバイスにおける、新たな設計および作製技術を用いて、量子光の制御に展開してきている。高帯域な相関光子対発生や量子光パルスの高速サンプリングなどが実現されており、量子計測や量子メモリの研究に多大な貢献をなしている。

新規性・独創性

微細加工による精密な分極反転技術に基き、GaN半導体レーザー（波長400nm帯）のような短波長レーザーで励起できる高効率非線形光学デバイスが可能になっている。これには短波長光の損傷に強いNIMS発のMg:SLT結晶が大きく貢献している。分極反転を用いないデバイスに比べ100倍高い効率が得られ、広がった設計マージンにより微細加工技術で周期を滑らかに変化させた帯域拡大デバイスが可能になっている。材料技術、分極反転技術に導波路技術を組み合わせることで、世界最高効率のデバイスが実現されている。分極反転非線形光学デバイスは、THz帯域をもつ相関光子対光源、時間分解能200fsをもつ超高速光サンプリングデバイスなど独創的なデバイスに到達している。

研究内容

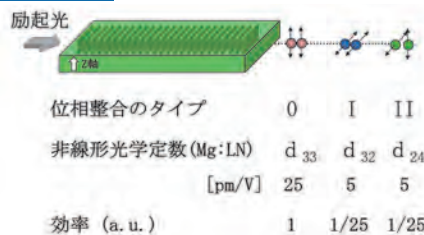


図1 位相整合のタイプと相関光子対の偏光組合せ



図2 スラブ導波路非線形光学デバイス

NIMSでは分極反転による擬位相整合デバイスの技術を成熟させたことで、多彩なデバイスの設計が可能になった。微細加工による高精度分極反転技術を活用した高効率デバイスが実現され、レーザーディスプレイ、超高速通信、光サンプリングなどの様々な用途で卓越した特性が実証されている。ここでは多様な応用群の中から、高エネルギーの励起光から低エネルギーの相関光子二光子を発生させる場合を図1に示してある。位相整合のタイプに応じて出射光の偏光の組合せを選ぶデザインができる。分極反転パターンによって偏光の組合せを自在にデザインできる「分極反転デバイスの設計自由度」が活かされている。タイプ0は高効率が高得られるため量子計測や量子テレポーションに、タイプIおよびタイプIIは偏光分離特性を活かして量子通信などに適用することができる。研究レベルでは量子計測や量子イメージングへの展開も実証実験が行われており、量子通信では既にその高い秘匿性から実用システムが市場投入されている。我々は分極反転パターンを選択することで、発生光子対の偏光タイプや発生帯域の設計を柔軟に行っている。またこれらにスラブ導波路およびリッジ導波路の構造を組み合わせることで、各量子相互作用に最適なデバイスが得られている。

GaN半導体レーザー励起による相関光子対発生が実現されている。一般に出力が小さいGaNレーザーを用いて量子光発生を行うのは困難であり、低い効率にとどまる。しかし我々は、導波路コアをNIMS発の材料であるMg:SLT結晶として接着スラブ導波路を世界で初めて作製し、強い閉じ込め効果による高効率デバイスを獲得している（図2）。従来のバルクMg:SLTを使用したデバイスに比べて約10倍高い効率が得られている。デバイスは光入射において横方向の自由度を維持しているため非直線の相関光子対発生も可能にしている。この技術により相互作用長の選択や発生波長の帯域拡大、光子対の空間的分離などが得られ、光子対の特性や光学系の選択において自由度が高くなっている。今回の接着スラブ導波路構造においては周期3.2 μmの微細分極反転構造が共存している。これにより、小型の高効率相関光子対光源を量子光波長800nm帯で実現できている。Mg:SLTの特性を活かすことで、GaNの短波長400nm励起でも損傷が少なく損失も小さく抑えられている。またMg:SLT結晶は、他の波長でも高い損傷耐性を有することから超短パルス光による光和周波発生サンプリングにも適用しており、高い効率と時間分解能が両立できている。

まとめ

NIMSが長く研究してきた分極反転非線形光学デバイスは、量子光制御の中心的なデバイスとなり、多くの機関で利用されている。様々なデバイス形態が、量子相関光子対光源への道を開き、量子光発生・制御の新たなステージに到達した。GaN半導体レーザーを電池駆動することで、レーザーポインターサイズの量子相関光子対光源も可能になり、小型の光源は量子イメージングや量子顕微鏡への搭載を可能にする。

論文・特許

- B. Cao, M. Hisamitsu, K. Tokuda, S. Kurimura, R. Okamoto and S. Takeuchi, *Opt. Express* **29**, 21615 (2021).
- M. Okano, H. H. Lim, R. Okamoto, N. Nishizawa, S. Kurimura and S. Takeuchi, *Sci. Rep.* **5**, 18042 (2016).
- 宮澤 信太郎, 栗村 直, 分極反転デバイスの基礎と応用: 光・電子デバイスの新基軸を開く材料テクノロジー. 東京: オプトロニクス社, 2005.

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

光アンテナと量子井戸を融合した高感度中赤外検出器

Keywords 光アンテナ, 量子井戸, 中赤外光, 光検出器, メタマテリアル, メタ表面, ガス計測

グループリーダー / Group Leader

宮崎 英樹 Miyazaki Hideki T.

✉ MIYAZAKI.Hideki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/miyazaki_hideki



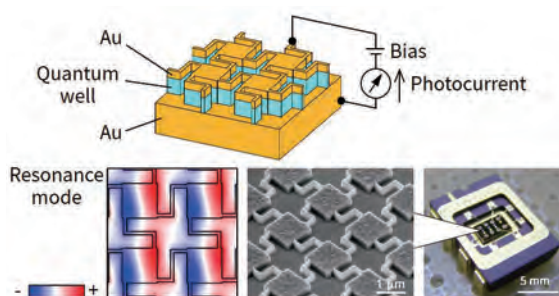
研究概要

波長5～10 μm の中赤外域には分子固有の吸収や熱放射が現れるため、中赤外光は環境計測やセキュリティに重要である。しかし、これまでの高感度中赤外検出器には、有毒な水銀やカドミウムが必要とされていた。本研究では、低毒性であるものの感度の低い量子井戸赤外検出器を独自の光アンテナ構造と融合することにより、従来の検出器と同等以上の高い感度を実現した。中心波長は量子井戸と光アンテナの設計により自由に選択できるため、本検出器は特定のガスを高感度に検出するセンサに適している。大気計測、農業、医療などへの応用が期待される。

新規性・独創性

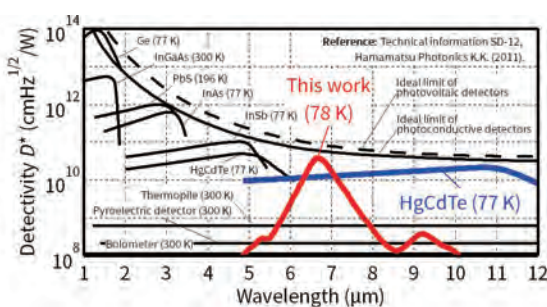
- ズグザグ配線での接続により全アンテナの共鳴を維持しつつ大きな電流の取り出しを可能にする独自の光アンテナ構造を考案
- 光アンテナとの融合により、量子井戸の感度を800倍に増大
- 共鳴波長は量子井戸・光アンテナ各部の寸法により自在に設計可能
- 現行検出器と同等かそれ以上の理論限界に迫る高い感度を実証

研究内容



光アンテナの基本形は、誘電体の上下を金属で挟み込んだ構造である。各部の寸法を適切に選べば、光アンテナは特定の波長で共鳴する。本研究では、中赤外光に感度を持ち低毒性なGaAs/AlGaAs量子井戸赤外検出器の上下をAu層で挟み込んだ。こうして量子井戸と融合した光アンテナは、共鳴波長の入射光を選択的に吸い集め、量子井戸の吸収に適した向きに電場を回転し、感度を大きく増強する。さらに、光アンテナをつなぐ配線を適切な長さのズグザグ型に折り曲げて位相を調整することにより、全アンテナの共鳴を維持したまま大きな電流を取り出すことに成功した。(光アンテナを配列したこのような構造は、メタマテリアル、メタ表面とも呼ばれる。)

量子井戸の吸収波長はGaAs/AlGaAs各層の厚さとAl組成により自在に制御できる。光アンテナの共鳴波長をそれと一致させ、さらにズグザグ配線も最適化することにより、量子井戸の感度を800倍増強し、感度 3.3 A/W (波長 $6.7 \mu\text{m}$ 、78 K)、外部量子効率 61%、検出能 $3.9 \times 10^{10} \text{ cmHz}^{1/2}/\text{W}$ を実現した。この検出能は従来用いられてきた高感度検出器であるHgCdTe検出器を超えており、理論限界値に迫る値である。感度は特定の波長で鋭いピークを示すので、特定のガスの濃度計測に適している。これまでにNO₂ (吸収波長 $6.25 \mu\text{m}$) の応答速度1 ms以下での高速濃度測定の実証にも成功している。



まとめ

光アンテナと量子井戸を融合することにより、毒性元素を用いずに従来と同等以上の性能を持った高感度中赤外検出器を実現した。中心波長は量子井戸と光アンテナの設計により自由に選択できるため、特定のガスを高感度に検出するセンサに適している。構造のさらなる最適化による動作温度向上、集積化を進め、大気計測、農業、医療などに役立てたい。

論文・特許

- H. T. Miyazaki, T. Mano, T. Kasaya, H. Osato, K. Watanabe, Y. Sugimoto, T. Kawazu, Y. Arai, A. Shigetou, H. Miyazaki, et al., *Nat. Commun.* **11**, 565 (2020).
- M. F. Hainey, T. Mano, T. Kasaya, T. Ochiai, H. Osato, K. Watanabe, Y. Sugimoto, T. Kawazu, H. T. Miyazaki, et al., *Nanophotonics* **9**, 4775-4784 (2020).
- 特開2021100033 赤外光用検出素子および発光素子

高品質コロイド結晶薄膜塗工とスマート構造色機能材料

Keywords 懸濁粒子, 自己集積, コロイド結晶, フォトニック結晶, 構造色, ブラッグ回折, センサー材料, 塗工プロセス

主席研究員 / Chief Researcher

不動寺 浩 Fudouzi Hiroshi

✉ FUDOUZI.Hiroshi@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/fudouzi_hiroshi



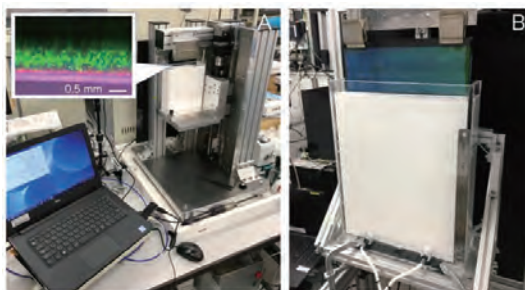
研究概要

粒子径の揃ったコロイド粒子が規則配列したコロイド結晶は最密型及び非最密型の2つに分類され、NIMSでは両タイプのコロイド結晶を対象としプロセス技術や構造色材料に関する先駆的な研究を行ってきた。例えば、フォトニックラバーは変形によって構造色が可逆的に変色する弾性材料でゴムシート上にコーティングした新材料である。一方、インフラ構造物のひび割れや塑性変形を色変化として視認できる歪み可視化シートを開発した。急増している高齢化インフラ構造物の異常を目視やスマホで簡単・簡便に検査する新技術としての応用が期待される。その基盤となる均質・均一で結晶性の高いコロイド結晶薄膜を1000cm²に成膜するプロセス技術を確立している。

新規性・独創性

- コロイドフォトニック結晶の成膜プロセス (面心立方格子(111)面配向、積層数制御)
- A3スケールサイズまで大型化及び湾曲面への塗工成膜 (ラポレベル対応)
- 応力や歪みを構造色で可視化する新材料フィルム (変形による構造色変化を視認)
- 実用化機能付与 : 歪み可視化シート (耐候性)、フォトニックラバー (耐久性)
- コロイド粒子懸濁液の製造 (粒子濃度 : 10wt% - 20%, 任意粒径 : 150 ~ 450nm)

研究内容

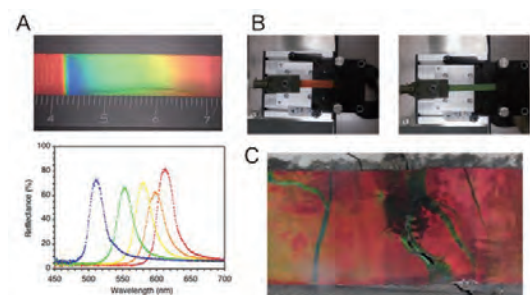


【左：オイル被覆法によるコロイド結晶薄膜塗工】

- A : 高品質コロイド結晶薄膜の縦型成膜装置。内挿写真は界面付近の拡大部。乳白色コロイド懸濁液から溶媒蒸発による濃縮に伴うアルダー相転移により非最密型のコロイド結晶が形成。赤色から緑色へ構造色の変化 (粒子間隔の縮小)、最終的に最密充填型のコロイド結晶薄膜を形成。基板は固定され、ステージに搭載された懸濁液タンクが下方に移動によりコロイド結晶薄膜を基板上に形成する。ステージの駆動制御は一定速度選択と結晶化を反射分光ファイバーで計測し、ステージ駆動にフィードバックする2種類の制御方式。
- B : A3サイズにスケールアップした成膜装置。さらに、ステージ駆動を使用しないポンプ吸引方式の塗工装置も開発済み。

【コロイド結晶薄膜による構造色材料】

- A : 同軸照射撮影、熱可塑性 (PVC) シートにポリスチレンコロイド粒子とシリコーンエラストマーで構成されるコロイド結晶薄膜。シートの加熱変形で構造色を赤色から青色まで選択可能、構造色は可視光領域のブラッグ回折ピーク、波長位置のシフトで構造色も変化。
- B : フォトニックラバー、弾性変形で構造色が可逆的に変化する。繰り返し変形に対する耐久性試験を実施、25万回の繰り返し伸長後でもフォトニックラバーとしての機能することを確認。
- C : 歪み可視化シート、コンクリート橋梁での現場施工、曲げ試験で生じたひび割れを緑色に変色、屋外に暴露して供用する歪み可視化シートでは表面保護層を形成 (暴露試験で約5年の耐候性を確認)。



まとめ

A3スケールサイズの高品質コロイド結晶薄膜、フォトニックラバー、歪み可視化シートなどの試験片供与を行っている。また、成膜プロセスの技術移転も可能。構造色だけでなく、近赤外領域を含むフォトニックバンドギャップによる光学フィルターなどへの応用も期待できる。現在、工学応用として量産化の基盤となる、ロール・トゥ・ロールの連続成膜プロセスの基礎技術の確立を目指している。

論文・特許

- 特許第6331748号 コロイド結晶膜を製造する方法およびその装置
- 特許第5164086号 物体の歪を検出する方法およびその装置
- 特許第4925025号 構造色発現弾性体

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

光メタ表面バイオセンサシステム

Keywords 人工造形ナノ構造表面, メタ表面, ナノフォトニクス, バイオセンシング, 蛍光センシング, タンパク質検出, DNA検出

主席研究員 / Chief Researcher

岩長 祐伸 Iwanaga Masanobu

✉ IWANAGA.Masanobu@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/iwanaga_masanobu



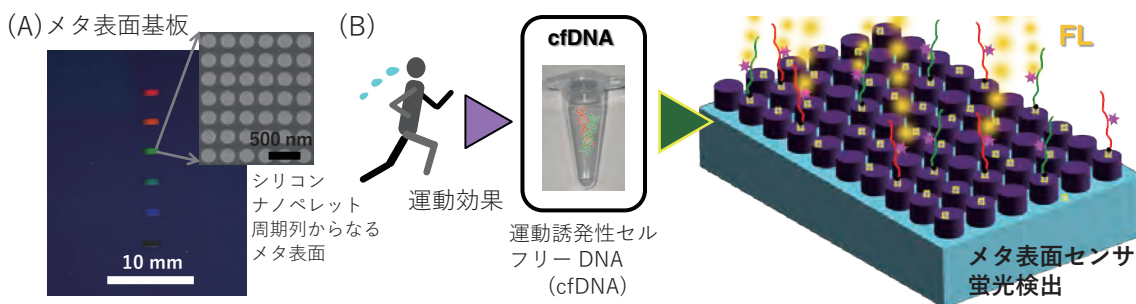
研究概要

新型コロナウイルス感染症の世界的な蔓延を経て、バイオセンシング技術の重要性は社会に広く認知されるところとなった。とくに検出性能が高く、広範な生体分子を特異的に検出でき、なおかつ短時間で結果が得られるセンシング技術への需要が大きい。検出性能を追求した結果、大型高額な検査装置となり、既存技術では需要とのミスマッチが起きており、この点にも対応できることを念頭にバイオセンシング技術の開発を行った。メタ表面は人工的な設計により特定の機能を発現するナノ構造表面であり、世界中で研究開発が行われている。メタ表面のなかで蛍光物質を特に高輝度化するものを見出し、これらを活用して蛍光バイオセンシングへの応用を進めてきた。これまでに癌マーカー抗原などのタンパク質からセルフリー DNA などの核酸に至る多様な検出対象のセンシングに成功している。

新規性・独創性

- 蛍光を高輝度化するメタ表面はNIMSで独自に発見した。
- この蛍光増強メタ表面は世界的に見ても、増強性能と再現性を両立する最上位の性能を示す。
- 夾雑環境下(血清中)の癌マーカー抗原を医療診断基準の数十倍低濃度であっても検出できる。
- 短サイクルの核酸増幅法と組み合わせることにより、1分子と0分子を区別できる単一DNA分子検出を実現した。
- この単一DNA分子検出はデジタルPCR法など既存の超高感度検出法でも実現できていない性能である。

研究内容



メタ表面基板(6チャンネル用)の写真を(A)に示している。白いスケールバーは10 mmを表す。拡大図は電子顕微鏡写真であり、シリコンナノペレット周期列からなり、周期長は300 nm、ナノペレットの高さは200 nmである。黒いスケールバーは500 nmを示す。このメタ表面は570 ~ 600 nmの波長域の発光を高輝度化する特性をもつように設計されている。[M. Iwanaga, *Biosensors* **13**, 377 (2023).]

セルフリー DNAの検出工程の概略を(B)に示す。運動効果により誘発される特定のセルフリー DNA配列を標的として、30サイクルの核酸増幅を行った(通常は40サイクル行い、さらに約1000倍増幅するが、疑反応が起きる可能性も高まる)。増幅核酸にビオチンおよび蛍光ラベリングを施すことにより、メタ表面センサ上に標的増幅物に効率的に固定し、蛍光検出することができる。右端に蛍光(FL)放出を概念的に示している。この検出方式により、1分子と0分子を区別できる単一セルフリー DNA検出を実証した。[Copyright 2023 ACS.]

このように超高感度な検出が簡便なセットアップで実現できたことは、マイクロRNAなどの次世代医療マーカーの検出を容易にし、新規の健康サービス創出に寄与することを目指している。

まとめ

- 超高感度な蛍光検出を行うメタ表面バイオセンサ開発およびその自動検出システム化を進めてきた。
- タンパク質検出から核酸検出の多様な場面で活用できる。
- DNA検出に関して、単一分子検出という究極的な性能を実現している。

論文・特許

- M. Iwanaga, T. Hironaka, N. Ikeda, T. Sugawara and K. Takekoshi, *Nano Lett.* **23**, 5755–5761 (2023).
- M. Iwanaga, *ACS Nano* **14**, 17458–17467 (2020).
- 特許第 7300201 号 蛍光検出用生体分子検査チップ

ダイヤモンド結晶成長と量子デバイス応用

Keywords ダイヤモンド, CVD, エピタキシャル, 高純度, 量子センシング, 半導体

グループリーダー / Group Leader

寺地 徳之 Teraji Tokuyuki

✉ TERAJI.Tokuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/teraji_tokuyuki



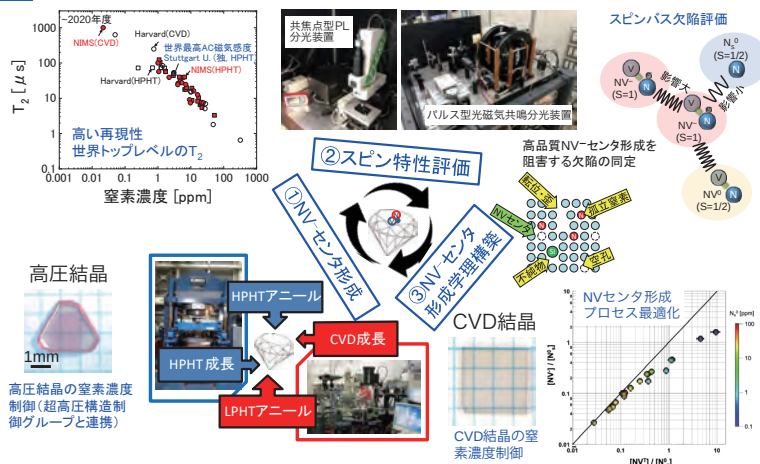
研究概要

ダイヤモンドNVセンタを用いた量子磁気センサを実用化するためには、センサ感度の更なる向上が不可欠とされている。私たちは、ダイヤモンド結晶成長技術を高めることで結晶中に形成されるNVセンタの量子特性を向上させ、磁気センサを高感度化する研究を行っている。特に、結晶中のNVセンタや窒素の濃度を精密に制御すること、NVセンタのスピンコヒーレンス時間 T_2 （スピン状態を保持する時間であり、高感度化には T_2 を長くする必要がある）を短くする不純物や欠陥を低減すること、NVセンタの空間配置をナノスケールで制御すること、結晶サイズを大型化することに焦点を置いて、現在研究を進めている。

新規性・独創性

- 量子応用に適した高度なダイヤモンド結晶成長技術
- 結晶成長、量子・光特性評価、点欠陥構造特定をシームレスに実施できる研究環境
- 量子センサ感度を向上するための窒素濃度の精密制御
- CVD法によるダイヤモンド結晶の大型化
- ^{12}C ダイヤモンド結晶などの同位体制御

研究内容



量子センシング用ダイヤモンド結晶を創製するために私たちが実施している研究方法を図に示している。①NVセンタ形成：化学気相成長(CVD)法と高温高压合成(HPHT)法を用いて様々な窒素ドープダイヤモンドを成長したり、各環境で熱処理を行ったりする。②スピン特性評価：パルス型光磁気共鳴分光(ODMR)法を用いてダイヤモンド結晶のスピン特性を評価する。共焦点型PL、ESR、FTIRなどの複数の分光評価を用い、さらに様々な結晶を評価することで、結晶の量子特性を正確に把握する。③NVセンタ形成学理構築：ステップ①と②からダイヤモンド結晶中に形成されている点欠陥の種類や濃度を類推し、これらがNVセンタのスピン特性に与える影響を定量的に調べる。ステップ③の結果から、ダイヤモンド結晶成長条件を見直し、新たな条件でのダイヤモンド成長を実施する。このように結晶成長、量子・光特性評価、点欠陥構造特定をシームレスに実施することで、NVセンタのスピン特性を確実に向上させることができる。

まとめ

量子センサ感度を高めるために、現在世界の多くの機関がしのぎを削っている。その多くが測定方法に対する工夫であり、一方で感度向上に最もインパクトがある「ダイヤモンド結晶へNVセンタの高度な作りこみ」は、難易度が高いために実施機関は世界的にも限られている。NIMSではCVD成長、HPHT成長、量子・光物性評価、計算・理論のメンバーでチームを構成し、この困難な課題に対して多角的・包括的に検討している。この研究体制により、ダイヤモンドNVセンタの特性が確実に向上している。今後はダイヤモンドNVセンタ以外のスピン欠陥にも着目して、研究を実施する予定である。

論文・特許

- T. Teraji and C. Shinei, *J. Appl. Phys.* **133**, 165101 (2023).
- C. Shinei, Y. Masuyama, M. Miyakawa, H. Abe, S. Ishii, S. Saiki, S. Onoda, T. Taniguchi, T. Ohshima and T. Teraji, *J. Appl. Phys.* **132**, 214402 (2022).
- K. Ichikawa, S. Koizumi and T. Teraji, *J. Appl. Phys.* **132**, 025302 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高機能・バイオ材料

マテリアル基盤

材料数理物性理論

Keywords 物性理論, 非平衡, 開放系, 量子光学, 凝縮系

主幹研究員 / Principal Researcher

井上 純一 Inoue Jun-ichi

✉ INOUE.Junichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/inoue_junichi



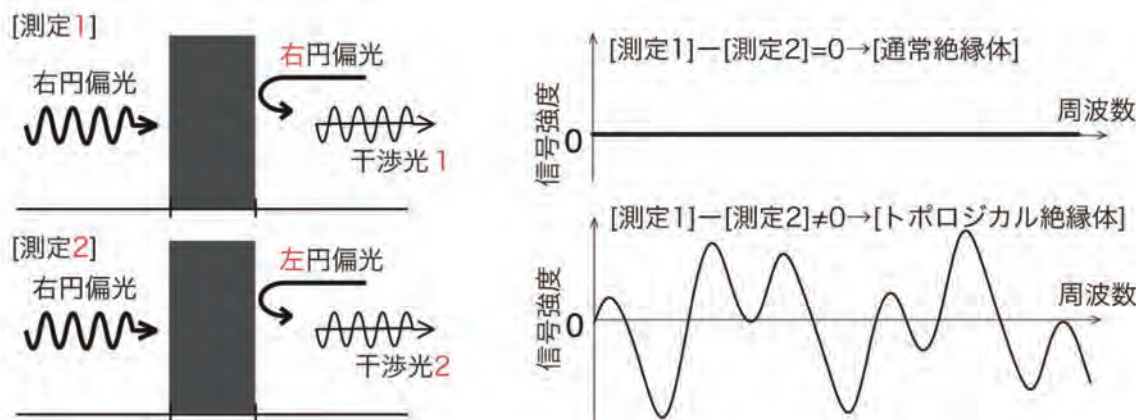
研究概要

量子論や電磁気、統計物理、固体物理などの総体である凝縮系物性理論は、材料科学における実験結果の解釈や予言に留まらず、トランジスタに代表される実デバイスの動作原理構築で成功を収めてきた。理論構築は、実験の状況に応じた前提/近似条件を元に設計されている。従って、材料それ自体が高品質化されたり全く新しい物質が合成される、或いは測定精度が向上したり全く新しい測定が可能になったりするなどの進展により、理論の前提/近似条件を見直す必要が生まれる。このような状況に対応し、得られた新たな知見を実験に還元することで、材料・測定・理論が三位一体となり材料科学が新たな局面に向かって発展することを目指す。

新規性・独創性

- 特定の対象や現象に限定されない分野横断的な波及効果を促しうる直感的な描像、解釈の提示。
- 本質的自由度に基づく抽象的記述を採用することにより、前提/近似条件を満足した多様な対象/分野/領域での横断的議論が可能。
- 実験が要請する基礎理論の前提条件の再検討に基づいた新たな理論構築から、理論側への新たな問題意識の提案。

研究内容



図は【概要】の一例として、後にトポロジカル絶縁体として認知された物質群を簡易に判定する方法の提案である。トポロジカル絶縁体は、理論から提案された新たな概念を用いた分類である。その判定にあたっては、大規模装置を用いることが通常であるが、ハイスループットな合成・評価のサイクルを確立するには、各々実験室で実施可能なトマス試験紙的簡易判定法が必須であると考え、これに応えるスキームを、理論的に提案したものである。光学的手法を採用することにより可能になった非接触型の方法であること、および、判定には解析が不要であること、を特徴とする。

まとめ

- 抽象的な記述方法を採用することで、特定分野での現象/結果を異分野・他分野へ移植/発展できる可能性が期待できる。
- 異なると考えられていたものの同一性、同一と考えられていたものの異質性に着目することで、新たな問題意識それ自身の開拓。

論文・特許

- K. Takazawa, J. Inoue and Y. Matsushita, *Small* **18**, 2204500 (2022).
- V. Karanikolas, T. Kuroda and J. Inoue, *Phys. Rev. Res.* **4**, 043180 (2022).
- J. Inoue, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 034711 (2018).

カソードルミネッセンスによるMg注入GaNの評価

Keywords カソードルミネッセンス, GaN, 結晶欠陥, イオン注入, 活性化

主任研究員 / Senior Researcher

陳 君 Chen Jun

✉ CHEN.Jun@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/chen_jun



研究概要

窒化ガリウム (GaN) 半導体は、省エネ化の切り札となるパワーデバイス用半導体として注目され、半導体産業の将来を左右するとも言える重要な研究課題です。その製造技術でキーとなるのがMgイオン注入によるp型GaN層の製造技術です。これまで、様々な分析手法でウェハー表面近傍における欠陥の評価が行われてきたものの、活性化したMg原子の空間分布を可視化する手法が無かったことから、GaN素子量産時の生産性向上の大きな壁となっていました。走査電子顕微鏡 (SEM) に分光器を組み合わせたカソードルミネッセンス (CL) 法によって、この問題に取り組みました。

新規性・独創性

- イオン注入層の厚さは1 μ m以下であり、空間分解能が100 nm程度で従来のCL法では、深さ方向に何が起きているかを明確に捉えるのは困難でした
- 斜め研磨による深さ分解法を提案し、深さ分解能は約10 nmまで上げる
- 試料作製技術の進歩で多層膜の深さ分析やナノ構造の断面解析で面白い結果が出ている

研究内容

図1に示すように、数度の傾斜で研磨することにより、厚さ方向の空間分解能を20倍程度 (傾斜3°の場合) に拡大することができる。こうして得た試料に、CLスペクトルのラインプロファイル測定することにより、Mg イオン注入層近傍での特性変化、特にその深さ方向分布を調べました。CL 観察を低温 (80 K)、低加速 電圧 (3 kV) で行うことにより、深さ分解能は約10 nmまで上げることができた。

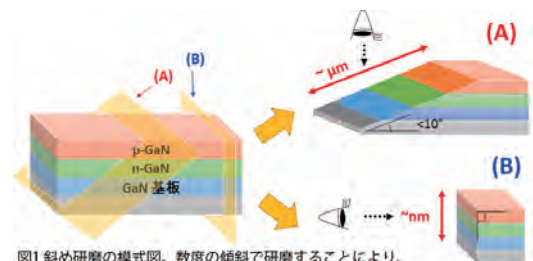


図1 斜め研磨の模式図。数度の傾斜で研磨することにより、厚さ方向の空間分解能を20倍程度 (傾斜3°の場合) に拡大することができる。

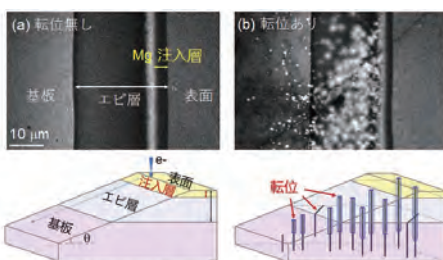


図2 Mgイオン注入GaNの斜め研磨CL発光像。(a) 転位無し；(b) 転位あり

図2に、Mgイオン注入試料 (Mg注入層/n-GaN/GaN基板) を斜め研磨した試料におけるDAP (Mgアクセプタに関連したドナーアクセプタペア) 発光 (3.28 eV) のCL像を示す。(a)は転位がない領域、(b)は転位が多く集積している領域である。Mg注入層からのDAP発光が弱く、その真下に明るい発光領域がある一方で、転位が多い場合には、n-GaNエピ層中にまで発光が広がり、Mgが転位に沿って拡散していることがわかった。

まとめ

素子製造プロセスの改良のうち、斜め研磨試料を用い、低加速電圧の電子線をつかったCL観察手法を開発した。この手法を用いて、Mgイオン注入GaN層中Mg電気的な活性化及び深さ方向への分布、Mgの拡散と貫通転位の関連を明らかにすることが出来ました。種々のデバイスに対してこの手法を適用し、他の半導体のウェハーや基板について評価を展開する希望を持っています。

論文・特許

- J. Chen, W. Yi, T. Kimura, S. Takashima, M. Edo and T. Sekiguchi, *Appl. Phys. Express* **12**, 051010 (2019).
- W. Yi, A. Kumar, J. Uzuhashi, T. Kimura, R. Tanaka, S. Takashima, M. Edo, Y. Yao, Y. Ishikawa, J. Chen, T. Ohkubo, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 242103 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

六方晶窒化ホウ素の気相合成

Keywords 結晶成長, 気相成長法, 窒化物, 発光材料, 2次元原子層科学応用

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

渡邊 賢司 Watanabe Kenji

✉ WATANABE.Kenji.aml@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/watanabe_kenji_aml



研究概要

六方晶窒化ホウ素 (hBN) は窒素とホウ素からなる黒鉛類似の結晶構造を持つ化合物 (図1) であり、化学的・熱的安定性に優れ断熱材や絶縁体、あるいはその機械的性質から摺動材料として実用に供されている。しかし、私たちの研究以前には高純度単結晶の合成例はなく電子材料としての応用はまったく未知数であった。私たちは高圧法による高純度窒化物単結晶の合成技術開発と生成物質の光物性研究を進め、高純度の単結晶合成に成功し新紫外発光材料への展開や2次元原子層科学への貢献など多くの成果を上げている。この研究をさらに発展させ、汎用性の高い気相成長法により次世代デバイス応用材料として重要な高純度単結晶を合成しようと取り組んでいる。

新規性・独創性

- 六方晶窒化ホウ素は化学的・熱的安定性に優れたロバストなワイドバンドギャップ材料
- 深紫外領域 (215 nm) に高効率なエキシトン発光を持ち水銀ランプ代替の発光デバイスの材料として期待される
- 黒鉛類似の層状化合物であり、原子層平面を形成および保護する目的で2次元原子層科学の研究には不可欠の基盤材料
- 次世代デバイス応用への基礎技術開発として、より汎用性の高い気相成長法による高純度低欠陥結晶成長技術の確立を目指す

研究内容

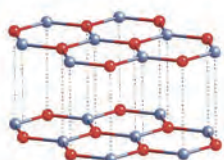


図1 結晶構造の模式図



図2 深紫外発光デバイス

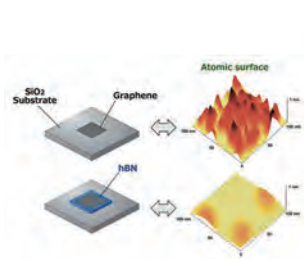


図3 h-BNによる平滑化効果

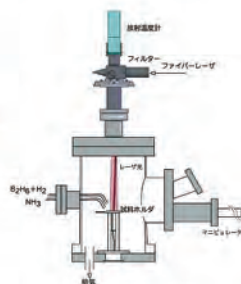


図4 気相成長装置

高温高圧法によるhBNは高純度単結晶の室温における最大発光強度は、波長215 nm (内部量子効率約5%以上) が得られている。励起源として加速電子線を使った試作デバイスでは最大放射光強度約8μW/cm²/nmを得ている (図2)。発光波長領域はFar UV-C領域と呼ばれ、細菌やウイルスへの殺菌効果がありながら人体の皮膚角質層を透過することができないので紫外光源でも安全な波長領域として知られている。また、一方でhBN単結晶をグラフェンなどの2次元原子層材料の基板に用いることにより、表面ポテンシャルのゆらぎを最低限に抑えることができる。図3の模式図は下段がhBNを基板に用いた時の表面ポテンシャルの揺らぎおよび表面荒さである。グラフェン研究初期に用いられていたSiO₂基板上のグラフェン (上段) に比べ、表面の均一性は非常に高いことがわかる。この特性から2次元原子層材料におけるデバイスには不可欠な材料として知られるようになった。

本研究ではこれらの六方晶窒化ホウ素の特性をより応用範囲の広い気相成長法によって実現するための基礎技術開発に取り組んでいる。図4に示すようにジボランとアンモニアガスをそれぞれIII族およびV族の原子ソースとして用い、レーザー加熱した基板上で結晶成長を行う。使用する基板や温度、成長雰囲気制御などの最適化を行うことにより、より高純度低欠陥の薄膜hBN成長を目指している。

まとめ

- hBNは、層状化合物でありグラフェンなどの2次元材料との組み合わせにより多彩なデバイス応用への道が期待されている。
- hBN自身でも、非常に異方性の強い材料であり新しい特性 (発光・光学非線形性・結晶対称性制御) が報告されている。
- より汎用性の高い気相成長法への展開は、今後の2次元材料応用への新しいブレークスルーのために必要不可欠の技術である。

論文・特許

- C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K. L. Shepard, *et al.*, *Nat. Nanotech.* **5**, 722-726 (2010).
- T. Taniguchi and K. Watanabe, *J. Cryst. Growth* **303**, 525-529 (2007).
- K. Watanabe, T. Taniguchi and H. Kanda, *Nature Materials* **3**, 404-409 (2004).

新規多結晶光学材料の探索と合成手法の開発

Keywords 多結晶光学セラミックス, 複雑系光学材料, ハイエントロピーセラミックス, バルク化プロセス, 外場効果

グループリーダー / Group Leader

森田 孝治 Morita Koji

✉ MORITA.Koji@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/morita_koji



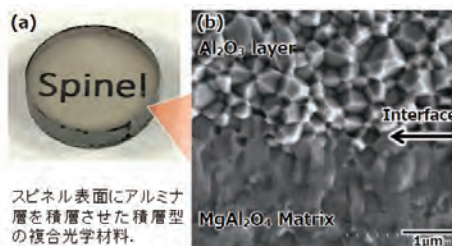
研究概要

光学セラミックスは、高効率・安全・安心な社会を人々に提供するセンサー用の窓材、ならびに高輝度光源用光学材などにおいて不可欠なキーコンポーネントである。これらの要求に資する次世代光機能材料の実現に向け大きなブレークスルーをもたらすには、新規材料開拓に向けた挑戦が不可欠である。そこで、従来のシンプル系の単相材に加え、光学セラミックス分野にブレークスルーをもたらす挑戦的な開拓領域として、「ミドル・エントロピー系」および「ハイ・エントロピー系」などの複雑系光学材料の開発に向けた研究を、機能性粉末の合成から粉末から多結晶光学デバイスを創製するためのプロセス開発までを総合的に推進する。

新規性・独創性

- 可視-近赤外域にわたる広帯域透過材料
- 複雑系の多結晶光学材料の探索
- バルク化のための新たなプロセス開発
- 光学、構造機能性を重畳した光学材料

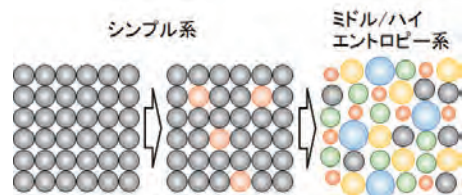
研究内容



スピネル表面にアルミナ層を積層させた積層型の複合光学材料。

センサー用の光学窓材として実際に利用するには、光学特性に加えて優れた機械特性や熱特性などの諸特性も不可欠である。複数の機能を重畳する光学材料を単相のシンプル系材料のみで実現することは容易ではなく、異なる機能を有する複数の材料を組合せた光学複合材料 (CMC: Ceramic Matrix Composite) が必要となる。例えば、左図は赤外透過材料として知られる MgAl_2O_4 スピネル表面に高硬度の $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ アルミナ相を積層させることで、優れた広帯域透過特性を維持しつつ、従来比2.0–2.5倍の機械的特性 (高硬度) を重畳する高強度・広帯域透過特性を有する積層型の光学CMC材料を実現した。合成プロセスを最適化し、良好な接合界面を達成することで積層型の光学材料の実現に至った。

オプトセラミックスにブレークスルーをもたらす新規な材料系の開発に向けた新たな領域の開拓が期待されている。近年、ハイエントロピー化による新たな機能を持った材料の探索が注目されている。ハイエントロピーとは、複数の元素を高濃度で混合した単相固溶体の総称で、金属材料、構造材料を中心に研究が進められ、新たな機能性を有する材料が報告されている。これまでに、ハイエントロピーセラミックスでも光学機能を有する材料が確認されている。ハイエントロピー材料の組合せは無限にあり、光学材料のニーズに応え得る高性能オプトセラミックスの開拓も期待できる。また、多成分、複雑系の光学セラミックスの創製に向けた新たなバルク化プロセスの開発も合わせて実施する。



シンプル系と複雑系ハイエントロピー材料の概念図。

まとめ

粉末原料から合成する多結晶光学セラミックスは、低コスト・生産性・大口径化に優れ、また最終形状のネット成形が可能となる上、優れた機械的特性も期待できる。更に、特性向上に繋がる組成調整、異相材料との複合化やナノ化など、柔軟な組織制御も可能であり、社会実装に繋がる成果が期待できる。

論文・特許

- L. Liu and K. Morita, *Scr. Mater.* **25**, 114205 (2021).
- L. Liu, K. Morita, T. S. Suzuki and B.-N. Kim, *J. Eur. Ceram. Soc.* **41**, 2096-2105 (2021).
- 特開2022180684 多結晶スピネルセラミックス焼結体、その製造方法、光学窓材、それを用いた赤外線センサ、および、フィルタ

通信用光ファイバにおけるファイバフューズの励起増強挙動

Keywords 光ファイバ, レーザー誘起損傷, シリカガラス

主席研究員 / Chief Researcher

轟 眞市 Todoroki Shin-ichi

✉ TODOROKI.Shin-ichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/todoroki_shin-ichi



研究概要

光ファイバによる大容量通信や光エネルギー伝送のスケールアップを阻む要因のひとつが、高強度伝送光によって光ファイバ自身が連続的に破壊される現象、ファイバフューズである。1987年の発見以来、これを完全に防ぐ方法は確立しておらず、システム側で回避する運用をするしか選択肢はない。光ファイバのコア内に閉じ込められたプラズマ状の高温高压ガスのふるまいについての知見も不足している。

定常条件下で損傷させたシリカガラス製光ファイバに残された空孔列の規則性に着目し、外場の乱れを導入した際に現れた規則性からの逸脱との関係性を調査した。ガスを包む熔融シリカガラスの挙動を介して、外部とのエネルギーのやり取りが明らかになった。

新規性・独創性

- 空孔列の規則性とエネルギー入出力との関係に着目した独自性
- 両者が「熔融シリカガラスの粘性挙動」で結び付けられることを見抜いた視点
- コア内に閉じ込められつつ動き回る高温高压ガスが加熱や光照射で励起されている証拠を発見
- その証拠を大量の光学顕微鏡画像から抽出した情報処理スキル
- 上記内容を直感的に理解できるようなビデオを編集(図中のQRコード参照)

研究内容

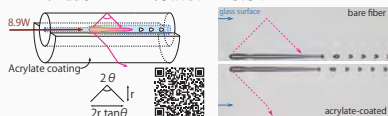
Slide 1: ファイバフューズとは? 光産業界の眠れる悪魔

- (1) 1000 °C 以上に加熱されたコアが伝搬光を吸収
- (2) 高温高压ガスとなって光源方向に移動
- (3) 光源を落とせば消滅



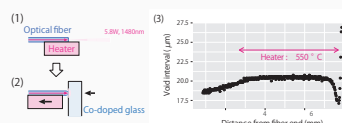
Slide 3: 発光の再吸収 戻り光がガス内包領域を延伸

- 被覆を剥いた光ファイバ中をファイバフューズが走ると、表面で全反射する戻り光が発生
- 末端側のガスが再吸収して膨張



Slide 2: 加熱の影響 温度上昇で空孔間隔増大

- (1) 5mm 角ヒータ上で光ファイバ端を加熱
- (2) Co 含有ガラスに押し付けてフューズ発生→
- (3) 加熱部で空孔間隔増大→ガスが熱エネルギー吸収



Slide 4: 供給光の急変動 空孔列の周期性が乱れる

- 供給光を 0.2ms 以内に 1 割強変動させると、空孔列が中断したり、細長い空孔が残る
- ガスを包むガラスの粘性に起因する空孔生成延遲



ファイバフューズ発生を避けて通るには相手を知る必要がある。毎秒約 1m で走り回る相手を直接観測するのは難しいが、その軌跡に残された規則的空孔列を手がかりにすれば(Slide 1 参照)相手が見えてくる。予熱した光ファイバにフューズを走らせると、加熱区間の空孔間隔が増大するし(Slide 2 参照)、自ら発した光を戻す状況を作ると、戻り光を吸収して自らの専有領域を延伸させる(Slide 3 参照)。ファイバフューズに供給する光の強度を急変動させると、空孔列の規則性が局所的に乱れるが、それは高温高压のガスを包む熔融シリカガラスが入力光の急変動に遅れて追従することを考慮すれば、うまく説明できることがわかった(Slide 4 参照)。

まとめ

- ファイバフューズへの供給光強度を増やすと空孔間隔が増大することは知られていたが、温度上昇でも増大することがわかった。
- ファイバフューズからの発光をガラス表面で全反射させて戻すと、そのエネルギーを吸収して専有体積が増大することがわかった。
- ファイバフューズへの供給光強度を急変動させると、ガスを包む熔融ガラスが遅れて追従するので、空孔列の周期性に乱れが生じる。

論文・特許

- T. Morioka, K. S. Abedin, N. Hanzawa, S. Todoroki, et al., *Space-Division Multiplexing in Optical Communication Systems*, 409-451. Springer, ISBN 783030876173 (2022).
- S. Todoroki, *Sci. Rep.* **6**, 25366 (2016).
- S. Todoroki, *Fiber Fuse: Light-Induced Continuous Breakdown of Silica Glass Optical Fiber*. Springer Japan, ISBN 9784431545767 (2014).

Inorganic optical materials

Keywords Ceramic powders, liquid phase processing, Sintering, Transparent ceramics, Optical property

主席研究員／Chief Researcher

李 継光 Li Jiguang

✉ LI.Jiguang@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/li_jiguang



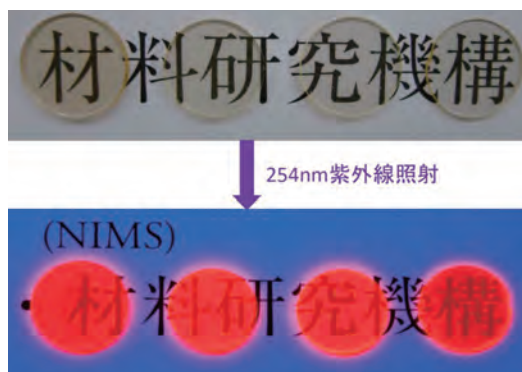
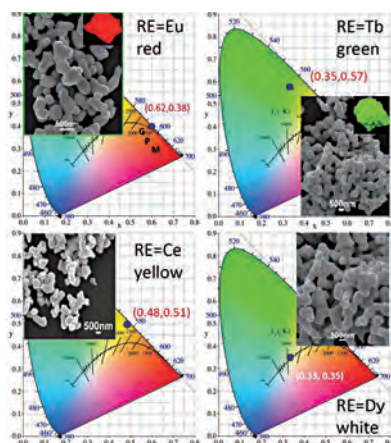
Research Summary

Phosphors and transparent ceramics are optically functional materials that are finding wide applications in LED lighting, display, solid state lasers, and scintillation. The current advances in the above technological fields are imposing a strong need for new materials and fabrication technologies to achieve cost reduction and improved/novel optical properties.

Novelty / Originality

- Through rational design of precursors and synthesis technologies, highly sinterable ceramics powders that can be fully densified at significantly reduced temperatures can be produced
- Through morphology control of the crystallites (size/shape/exposed facets), improved/novel luminescence properties can be attained
- Through polyhedron design of the activator ion and composition/structure design of the host lattice, high performance new phosphors can be expected

Research Contents



The left-hand Figure shows multicolor emitting $(\text{Gd,Ln})_3(\text{Al,M1/M2})_5\text{O}_{12}:\text{RE}^{3+}$ phosphors, where Ln is a lanthanide element, M1 and M2 are 2+ and 4+ charged dopant ions, respectively, and RE^{3+} is an activator ion. The compounds were derived by modifying the Gd and Al sites of $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{O}_{12}$ garnet (GAG), and such a strategy not only stabilized the metastable lattice of GAG but also produced multicolor luminescence by doping different types of activators.

The right-hand Figure shows the $(\text{Y,Gd})_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ transparent ceramics, which were fabricated via vacuum sintering at only 1700 °C for 4 h but are as transparent as the corresponding single crystals. The oxide powders used for sintering were obtained by engineering of layered hydroxide nanosheets, including composition design and thickness control, followed by proper calcination. The derived oxide particles showed high dispersion, high specific surface area and unimodal size distribution, revealing the significant advantages of the synthesis technology.

Summary

The ultimate goal of research is to develop advanced phosphors and transparent ceramics for application in the important fields of lighting/display, solid laser and scintillation (imaging), which is largely based on controllable processing of powders and rational design of chemical composition and crystal structure of the materials.

References

- Q. Meng, G. Zhao, Q. Zhu, X. Li, X. Sun and J. Li, *Dalton Trans.* **51**, 645-654 (2022).
- J.-G. Li and Y. Sakka, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **16**, 014902 (2015).
- B. Lu, T. S. Suzuki, H. Tanaka, X. Sun and Y. Sakka, *J. Am. Ceram. Soc.* **98**, 2480-2487 (2015).

Deformation-resistant multipurpose ultra-high temperature ceramics

Keywords Ceramic engineering, Deformation-resistance, Ultra-high elevated temperature strength, UHTC, High-entropy boride and carbide ceramics

主任研究員／Senior Researcher

バジルキフ オレグ Vasyukiv Oleg

✉ OLEG.Vasyukiv@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/oleg_vasyukiv



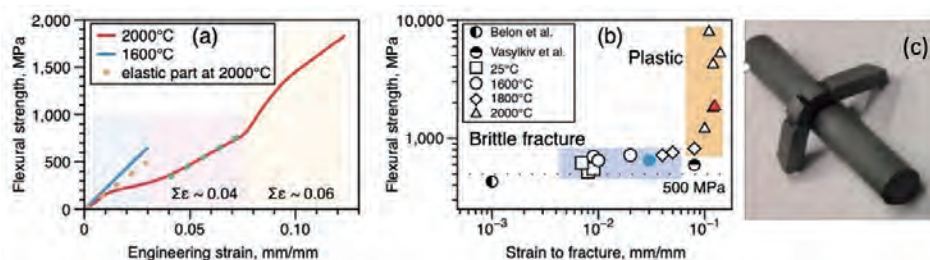
Research Summary

We are currently conducting research in the chemical & structural engineering of deformation-resistant UHTC carbides, borides, nitrides, and composites with ultra-hardness and ultra-high strength. We have combined the merits of powder synthesis and electric current activated sintering technique for the design of techniques applied on powder body with establishing morpho-structural and compositional features, which lead to the fabrication of bulk ceramics with superior characteristics.

Novelty / Originality

- multipurpose deformation-resistant UHTC carbides, borides, nitrides and composites
- sufficient balance between ultra-high hardness, ultra-strength, toughness and modulus
- morpho-structural and compositional features with superior characteristics.
- gas turbine operation in a combined cycle power plants

Research Contents



Deformation-resistant UHTC high-entropy ceramics and composites becoming extremely attractive. Light, ultra-hard bulk B₄C-based composites with hierarchical superstructure with deformation resistivity from RT to 2000°C (Fig. 1(a)) exhibit change in the deformation mechanism from brittle fracture to plastic deformation, and flexural strength far exceeding 1000MPa at 1800 - 2000°C (Fig. 1(b, c)). Depending on the loading rate, B₄C-based ceramic showed 1000 - 8400MPa strength at 2000°C (Fig. 1(b)). Bulk ultrastrong TiB-B₄C ceramic exhibits a mean flexural strength of 1000MPa up to 1800°C, and further increasing to 1760MPa at 2000°C. Recently produced bulk, ultrahard, tough, deformation-resistant Ta diboride, Ta monoboride, Zr-Ta multiboride, and high-entropy TaB₂-ZrB₂-TiB₂-HfB₂.

Summary

The request for new multipurpose deformation-resistant ultra-high temperature ceramics (UHTC), able to act as special engine and vehicle protection, ceramic segmented leading edge components for aerospace, plasma-facing, ceramic parts for solar towers used for gas turbine operation in a combined cycle power plants (grids, superheaters, reheaters, evaporators, steam turbines, condensers, and chimneys) cause the worldwide demand in a new class of ceramic composites of incredible high strength, the sufficient balance between high toughness, hardness, and high-modulus.

References

- D. Demirskiy, K. Yoshimi, T.S. Suzuki and O. Vasyukiv, *Scr. Mater.* **229**, 115383 (2023).
- D. Demirskiy, H. Sepehri-Amin, T.S. Suzuki, K. Yoshimi and O. Vasyukiv, *Scr. Mater.* **210**, 114487 (2022).
- D. Demirskiy, H. Borodianska, T. Nishimura, T. S. Suzuki, K. Yoshimi and O. Vasyukiv, *J. Am. Ceram. Soc.* **105**, 512-524 (2022).

磁性・スピントロニクス材料 研究センター

磁気メモリ・センサ応用のための磁性体ヘテロ構造薄膜の開発

Keywords 磁性薄膜材料, スピントロニクス材料, 磁気抵抗効果, ホール効果

センター長 / Director

三谷 誠司 Mitani Seiji

✉ MITANI.Seiji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mitani_seiji



研究概要

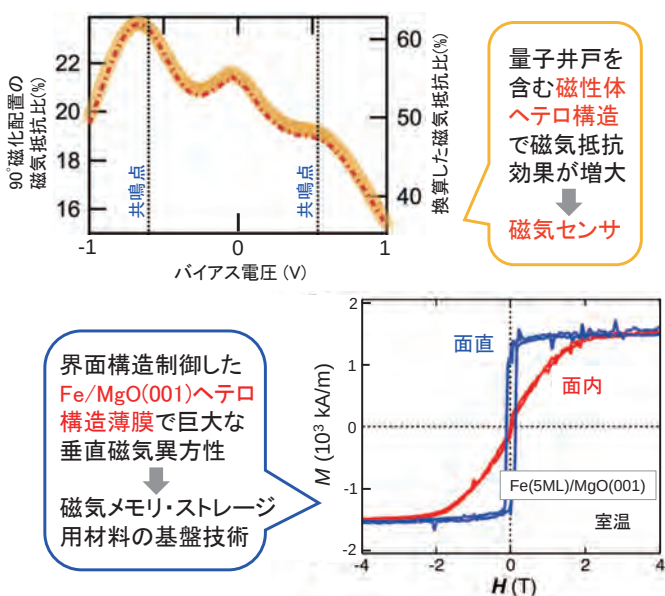
磁気メモリや磁気センサとして実用化されている強磁性トンネル接合は強磁性金属電極層と酸化物絶縁体からなるヘテロ構造薄膜である。高集積化のための垂直磁化やスピン軌道トルク記録書き込みなどを実現するには、一層高度かつ複雑な多層構造が必要である。

本研究では、これまでにない斬新な新規ヘテロ構造界面を開発し、トンネル磁気抵抗効果の増大、巨大な垂直磁気異方性の実現とその電圧制御、大きな異常ホール効果・スピンホール効果によるメモリやセンサ応用のための材料分野での要素技術開発等を行っている。

新規性・独創性

- 界面制御により、世界最高値のトンネル磁気抵抗効果、トンネル異方性磁気抵抗効果、量子井戸共鳴トンネル効果、Fe/MgO界面垂直磁気異方性を実現
- 量子井戸構造を利用した両極性の電圧制御が可能な界面磁気異方性の実現、および、素子抵抗温度特性の制御
- 新規垂直磁気異方性ヘテロ構造の開発

研究内容



磁気メモリ・センサ応用に必要な機能特性を有する、スピントロニクス分野における新規磁性体ヘテロ構造薄膜の開発を行う。

- (1) 不揮発磁気メモリの新規アーキテクチャを可能とするため、これまでに無い大きさのトンネル磁気抵抗効果の実現を狙う。トンネル磁気抵抗効果の更なる機構解明とそれに基づく界面制御を行う。通常のトンネル磁気抵抗効果のみならず、原子レベルで制御された磁性体量子井戸の創製も行い、共鳴トンネル効果による微分コンダクタンスの新規機能性開拓を目指す。図に量子井戸共鳴によるトンネル磁気抵抗効果の増大を実現した結果を示した。
- (2) バルク材料では為し得ない大きさの界面垂直磁気異方性の探索を行う。高集積化に向けた情報記録担体としての性能向上のみならず、大きな異常またはスピンホール効果を示す材料の創出、大きなトンネル異方性磁気抵抗効果の実現という狙いもある。図には1MJ/m³という巨大な界面垂直磁気異方性を有するFe/MgOヘテロ構造の磁化曲線を示した。

まとめ

- 磁性体ヘテロ構造の原子レベル制御により、顕著なトンネル磁気抵抗効果や界面垂直磁気異方性を実現してきた。これらは今後の磁気メモリ・センサにおいて利用可能な要素技術であり、更なる特性向上を目指した研究を続けている。
- 界面での原子レベル制御にはまだまだ可能性があり、バルクでは為し得ない新規機能性・巨大効果が期待される。スピントロニクスデバイスのブレークスルーを実現する材料の研究開発を推進する。

論文・特許

- T. Scheike, Z. Wen, H. Sukegawa and S. Mitani, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 112404 (2023).
- Q. Xiang, H. Sukegawa, M. Belmoubarik, M. Al-Mahdawi, T. Scheike, S. Kasai, Y. Miura and S. Mitani, *Adv. Sci.* **6**, 1901438 (2019).
- J. W. Koo, S. Mitani, T. T. Sasaki, H. Sukegawa, Z. C. Wen, T. Ohkubo, T. Niizeki, K. Inomata and K. Hono, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 192401 (2013).

磁性材料機能を活用した高性能・新機能デバイスの開発

Keywords 磁性材料, スピントロニクス, ハーフメタル, 磁気抵抗効果, 異常ネルンスト効果

グループリーダー / Group Leader

桜庭 裕弥 Sakuraba Yuya

✉ SAKURABA.Yuya@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakuraba_yuya



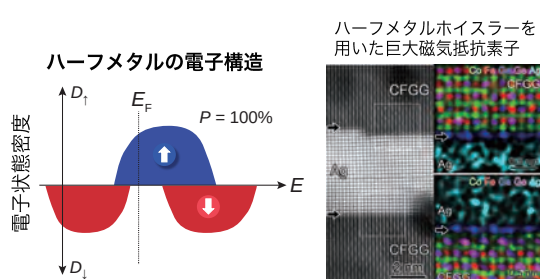
研究概要

社会のDX化が加速する中、様々な環境情報を計測するセンシング技術、それらの駆動電源となる環境発電技術、さらに得られたデータを蓄積させるストレージ技術の発展が求められている。磁性金属材料に電流や熱流を流した際に、電子のスピンの方向に依存して電気抵抗が変化する現象(磁気抵抗効果)や、磁化と電流・熱流方向の直交方向に電界が生じる異常ホール・異常ネルンスト効果は、これらの技術に新しい発展性をもたらすものである。伝導電子が大きくスピン分極したハーフメタル材料や、巨大な異常ホール・ネルンスト効果を示す新規磁性材料を開発し、社会実装に向けたデバイスに展開させることを目指す。

新規性・独創性

- 室温で高い磁気抵抗効果を示すハーフメタル材料とそれらを用いた最先端磁気抵抗デバイスの開発
- 機械学習と自律探索システムを利用した高効率な新材料開拓
- 異常ネルンスト効果を活用した超低熱抵抗熱流センサや熱発電技術の開発およびそれらの社会実装を目指した応用研究

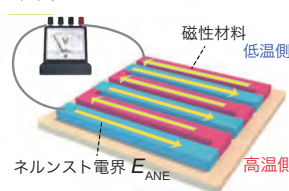
研究内容



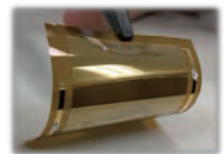
磁性材料は、上向きと下向きのスピンを持つ伝導電子の数が異なっており、この分極の度合いをスピン分極率という。上向きもしくは下向きスピンの伝導電子しか持たない材料を「ハーフメタル」と呼び、理想的にはスピン分極率が100%となる。このような材料が実現されれば、磁気抵抗効果などスピンに由来する様々な効果を飛躍的に向上させることができる。我々は世界的にも類を見ない高品質なハーフメタル合金を用いた巨大磁気抵抗素子を作製し、次世代HDD用のリードヘッドとして期待される巨大な磁気抵抗効果を上げるなどの成果を上げている。産業展開に求められる制限を満たすため、新たな材料やプロセスの開発等を進めている。

熱流センサは温度計と異なり、熱の流れを直接計測できることから、温度計よりも高速な熱の検知を通じ、より高効率なエネルギー管理や故障予知等に用いられることが期待される。異常ネルンスト効果は、磁性体特有の熱電現象であり、磁化と熱流の直交方向に電界を発生させる特徴を有する。我々はこの現象を用い、世界に先駆けて、高いフレキシビリティと小さな熱抵抗を有する熱流センサが実現できることを実証した。社会実装に向けて感度等の改善を推進している。

異常ネルンスト熱流センサ



フレキシブルシート上に作製した異常ネルンスト熱流センサ



まとめ

磁性材料が示すスピン依存伝導性や電子バンド由来の異常ホール・ネルンスト効果は、センサや発電等用途に今後更なる展開が期待できる。データ駆動型研究を通じ、より性能の高い材料やデバイス実現を目指していく。

論文・特許

- B. Büker, J. Jung, T. Sasaki, Y. Sakuraba, Y. Miura, T. Nakatani, A. Hütten and K. Hono, *Phys. Rev. B* **103**, L140405 (2021).
- W. Zhou, K. Yamamoto, A. Miura, R. Iguchi, Y. Miura, K. Uchida and Y. Sakuraba, *Nat. Mater.* **20**, 463–467 (2021).
- Y. Sakuraba, K. Yamamoto, A. Miura, R. Iguchi, Y. Miura, K. Uchida and Y. Sakuraba, *Phys. Rev. B* **101**, 134407 (2020).

スピントロニクス磁気抵抗センサ

Keywords 磁気センサ, トンネル磁気抵抗, 巨大磁気抵抗, スピントロニクス

主幹研究員 / Principal Researcher

中谷 友也 Nakatani Tomoya

✉ NAKATANI.Tomoya@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakatani_tomoya



研究概要

トンネル磁気抵抗 (TMR) や巨大磁気抵抗 (GMR) といった磁気抵抗効果は、ハードディスクの再生ヘッドや不揮発性メモリ (MRAM) として利用されているほか、さまざまな用途の磁気センサへの応用が進んでいる。磁気抵抗素子を磁気センサとして利用する場合、用途に応じた磁場強度や感度特性に対応することが求められる。我々はさまざまな方法で磁気抵抗素子のセンシング層 (磁化自由層) の磁気異方性を制御することで、磁場感度特性のカスタマイズ設計に取り組んでいる。また、磁気センサのノイズ、特に低周波における $1/f$ ノイズを測定し、その低減のための材料とデバイスの開発をおこなっている。

新規性・独創性

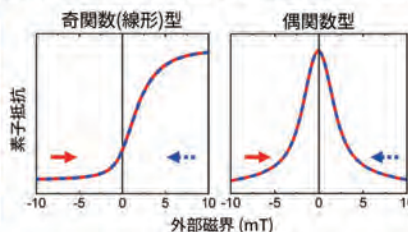
- TMR、GMRを用いた高性能磁気センサの開発
- HDD再生ヘッド、微小磁場センサから車載用センサまで対応
- センシング層の磁気異方性のカスタム設計
- 新規材料を気軽に試せる柔軟な装置運用
- 磁気・伝導伝導・ノイズ特性の総合的な評価

研究内容

11元UHVスパッタによる新規材料開発



磁気ヒステリシスのない磁気センサ特性



センサ応用

- 生体磁気
- 物体探知
- 欠陥検査
- 位置・回転
- 電流
- 地磁気 など

磁気センサにはHDDの再生ヘッドといったナノサイズのものから、生体磁場など超微弱な磁場の検出、産業・車載などさまざまな用途があり、要求性能もさまざまである。我々はこれらのセンサ応用を目指した、GMRとTMR素子の材料とセンサの研究をおこなっている。多元スパッタリング装置を用いた新規積層構造・材料を用いて、微細加工により数日以内にセンサ素子化し、さまざまな測定装置を用いて特性を評価している。一例として、非磁性層を介した層間結合を利用することにより、上図のように磁気ヒステリシスがなくなり高感度な磁気抵抗特性を実現した。これらのセンサはナノテスラ以下の微弱な磁場の検出から、産業用の位置・回転センサなど多くの用途への展開が期待される。

まとめ

- 個々のセンサ用途に対応した素子実現のため薄膜材料と素子の開発
- 柔軟かつ迅速な素子作製と評価
- NIMSの薄膜・材料技術と企業がもつセンサのニーズや回路技術の連携によって実用化が加速

論文・特許

- T. Nakatani, H. Suto, P. D. Kulkarni, H. Iwasaki and Y. Sakuraba, *Appl. Phys. Lett.* **121**, 192406 (2022).
- T. Nakatani and H. Iwasaki, *J. Appl. Phys.* **132**, 223904 (2022).
- P. D. Kulkarni, H. Iwasaki and T. Nakatani, *Sensors* **22**, 9385 (2022).

スピントルクによる磁化励起状態のデバイス応用と材料開発

Keywords スピントルク発振, 磁気記録, 強磁性共鳴, 高周波デバイス, ホイスラー合金, 負のスピントルク材料

主任研究員 / Senior Researcher

首藤 浩文 Suto Hirofumi

✉ SUTO.Hirofumi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hirofumi_suto

研究概要

スピントルクにより励起された磁化発振が、磁気記録におけるエネルギーアシスト記録応用、高周波デバイス応用などの観点から注目されている。

このスピントルク発振素子は、マイクロメートル以下という非常に小さいサイズ、直流電流を印加することによりサブGHz～数10 GHzでの発振が可能、という他の発振素子にはない特徴がある。

NIMSではこのような高周波における発振現象の解析、応用に向けた素子の開発、性能向上を実現する材料開発を行っている。

新規性・独創性

- スピントルク発振現象に関して、材料開発→素子開発→特性評価を一貫して行うことのできる研究体制
- 注入同期(Injection Lock)現象を利用した磁化ダイナミクス解析、磁化反転を利用したスピントルク能率の評価、といった独自の解析手法を開発
- 新たな素子構造を実現する負のスピントルク材料(従来の正のスピントルク材料とは逆方向のスピントルクを発生させる)を実証
- エネルギーアシスト記録の一方で熱アシスト磁気記録に関して、温度を上昇させた際の磁化ダイナミクスの解析

研究内容

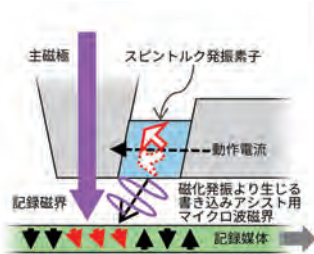


図1 スピントルク発振素子を用いたエネルギーアシスト磁気記録の模式図

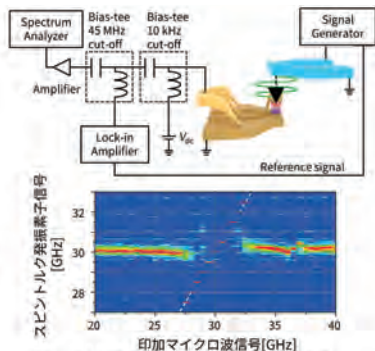


図2 注入同期を用いたスピントルク発振素子の解析手法のセットアップと注入同期時のスピントルク発振素子からの高周波信号

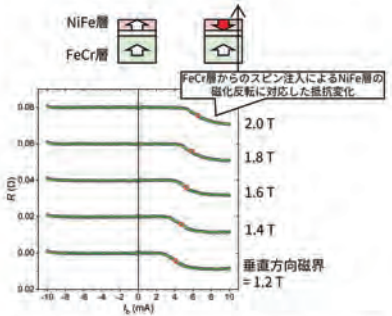


図3 FeCrの負のスピントルクを反映したスピン注入による磁化反転の実験結果

磁性体にスピントランスファートルクを作用させることで磁化発振が生じるスピントルク発振素子は、マイクロメートル以下という非常に小さいサイズ、直流電流を印加することによりサブGHz～数10 GHzでの発振が可能、という特徴があり、エネルギーアシスト磁気記録応用から注目されている(図1)。エネルギーアシスト磁気記録はHDDの記録密度を飛躍的に向上させる技術であり、近年問題となっているデータセンタの消費電力の削減につながる。

スピントルク発振素子の複雑な磁化ダイナミクスを解析するため、注入同期(Injection Lock)現象を用いた手法を開発した(図2)。

この手法は、応用上重要なパラメータであるスピントルク発振素子の発振周波数を正確に求めることができるという特徴があり、スピントルク発振素子の実用化に向けて大きな役割を果たすと期待される。

スピントルク発振素子の性能向上に向けて、負のスピントルク率を持つ材料(従来の正のスピントルク材料とは逆方向のスピントルクを発生させる)の研究を行い、そのスピントルク能率の定量的な評価を行った(図3)。

今後は、スピントルク発振素子の新たな応用の探索、さらなる性能向上の実証を行う。

まとめ

スピントランスファートルクに関連した興味深い現象であるスピントルク発振の特性向上に向けて、材料開発→素子開発→特性評価を一貫した研究を行っている。インパクトの大きい磁気記録応用に向けた研究を進めるとともに、素子特性の向上、新規応用の開拓を目指している。

論文・特許

- H. Suto, T. Nakatani, N. Asam, H. Iwasaki and Y. Sakuraba, *Appl. Phys. Express* **16**, 013003 (2023).
- H. Suto, H. Sepehri-Amin, N. Asam, W. Zhou, A. Bolyachkin, M. Takagishi, N. Narita, S. Tamaru, Y. Sakuraba, *et al.*, *Appl. Phys. Express* **14**, 053001 (2021).
- N. Asam, H. Suto, S. Tamaru, H. Sepehri-Amin, A. Bolyachkin, T. Nakatani, W. Zhou, H. Kubota and Y. Sakuraba, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 142405 (2021).

微細組織と磁化ダイナミクス制御による高特性磁気デバイスの開発

Keywords 磁性材料, 微細組織, 磁化ダイナミクス, 磁気デバイス

グループリーダー / Group Leader

高橋 有紀子 Takahashi Yukiko

✉ TAKAHASHI.Yukiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takahashi_yukiko



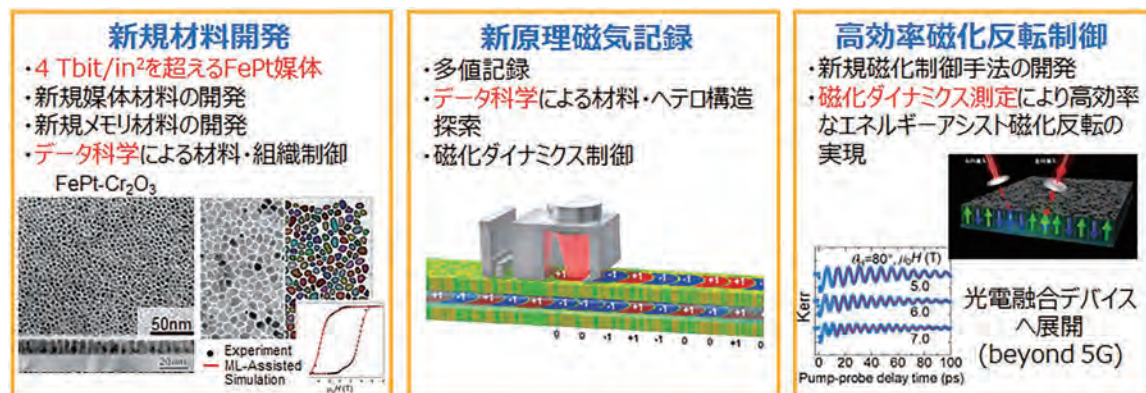
研究概要

多くの磁気デバイスは材料の物性値だけでなく微細組織に依存した磁気特性を示す。高い特性を実現するには、微細組織と磁気特性の相関から特性発現メカニズムを理解し、その知見を材料選択やプロセスへフィードバックするのが近道である。さらに、省エネルギーのために磁化を適切に制御する必要がある。以上の観点から、微細組織と磁化ダイナミクスの制御により省エネルギーかつ高特性な磁気デバイスを実現するための材料開発を行っている。

新規性・独創性

- プロセス・微細組織・磁化ダイナミクスの相関の理解に基づく磁気デバイスのための材料開発
- データ駆動型材料開発

研究内容



社会を支える磁気ストレージおよび永久磁石の高特性化に関する研究を行っている。これらの磁気デバイスは、その特性が微細組織に大きく依存する。高い磁気特性を実現するには、微細組織と特性の相関を明らかにし特性の発現メカニズムを解明することが重要となる。最近では高特性であるだけでなく省エネルギーな磁気デバイスの開発が強く求められているため、磁化ダイナミクスの理解と制御も必要となる。そこで、我々は透過型電子顕微鏡で微細組織を観察し、時間分解磁気光学カー効果で磁化ダイナミクスを測定することにより、高特性磁気デバイス実現のための材料開発を行っている。すでに実用化されている磁気デバイスだけでなく、次世代を支える新原理磁気記録方式や光電融合デバイスへの展開も視野に入れた研究を展開している。

まとめ

高特性・省エネ磁気デバイスは微細組織と磁化ダイナミクスを適切に制御することにより実現可能である。一方で、磁気デバイスの多くはマルチスケール・マルチフェーズの複雑な微細組織を持ち、それらの磁化挙動が複雑に相関している。このような系の制御のために、微細組織制御に加え、熱力学計算およびデータ駆動型研究を活用しハイスループット磁性材料および組織の開発を行っていく。

論文・特許

- Y. Sasaki, I. Suzuki, R. Mandal, S. Kasai and Y.K. Takahashi, *ACS Appl. Nano Mater.* **6**, 5901–5908 (2023).
- Y.K. Takahashi, H. Sepehri-Amin and T. Ohkubo, *Sci. Tech. Adv. Mater.* **22**, 449–460 (2021).
- I. Suzuki, S. Kubo, H. Sepehri-Amin and Y.K. Takahashi, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 16620–16627 (2021).

軽元素マネジメントによる磁性スピン機能拡大

Keywords 非金属軽元素（ホウ素・炭素・窒素），磁性薄膜，スピントロニクス

主任研究員／Senior Researcher

磯上 慎二 Isogami Shinji

✉ ISOGAMI.Shinji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/isogami_shinji



研究概要

金属元素を操作して新しい材料特性を創出する試みは常套手段として古くから取り組まれてきたが、近年、複合アニオン物質のように化合物中のアニオンの一部を他のそれで置換し、機能性を導出する試みが行われている。本研究では、侵入型軽元素を安定サイトではなく準安定サイトに固溶したスピントロニクス金属合金膜の新規開発、安定状態では得られない磁性・電子スピン状態を制御する手法の確立を通じ、Society5.0に必要なあらゆる種類の大容量磁気メモリや磁気・熱センサ技術への貢献を目指している。

新規性・独創性

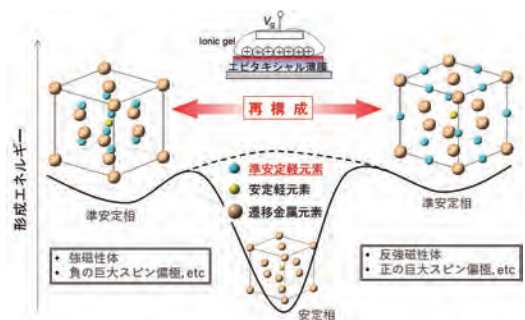
- 結晶構造、薄膜結晶配向性を変えずして光学遷移、磁気構造の制御性を拡大。
- 電気抵抗率を変えずして、異常ホール伝導率の増大または減少の制御性を拡大。
- 世界最大のインバーストンネル磁気抵抗比（室温）、インバース電流誘起磁化反転現象など「新奇な」電子スピン輸送特性の導出。

研究内容



軽元素の占有サイトを単位胞内で制御できれば、スピン偏極率のみならず磁性までも自由設計できる。電荷移動のみならず軽元素本体の遷移、移動であるため、従来の水素原子拡散の場合と比べて大幅な設計自由度（正から負にわたるスピン偏極率や反強磁性／強磁性転移）を獲得できる。本研究ではイオン液体を介した高効率な電圧誘起軽元素遷移を通して、スピン偏極率再構成、磁気相転移制御技術の確立に取り組んでいる。電圧効果以外にも、レーザー局所加熱、円偏光による角運動量注入、圧電素子による機械的歪みなど、最適な制御方法の探索も視野に入れている。

高密度磁気ストレージ、磁気センサなどのスピントロニクスデバイスの性能向上は、将来のSociety5.0を実現する上で不可欠である。本研究では新材料開発をもってこの課題解決を図っている。例えばスピン軌道相互作用が強い白金、タングステンなどの重金属を使わずして、同等以上のスピン軌道トルクやその逆特性の導出を行っている。ホウ素、炭素、窒素はその軽さの割に電子状態に与える寄与が非常に大きいことが最近の研究で明らかとなり、研究分野を問わずあらゆる機能性開拓を支えるコンセプトとして期待されるようになった。実際に固体磁気メモリのテスト素子において、電流反転効率の明らかな改善が認められるなど、応用に向けた軽元素の効果が実証されている。



まとめ

- わずかなホウ素の固溶で、光学遷移、磁気構造の制御性を拡大した。
 - わずかな炭素の固溶で、異常ホール伝導率の10倍増大を達成した。
 - 遷移金属窒化物薄膜において世界最高性能かつ新奇デバイス特性を実証した。
- 今後は準安定相を含めて軽元素の効果を巨視的に理解し、材料探索のデファクトスタンダード化を目指す。

論文・特許

- S. Isogami and Y. K. Takahashi, *Adv. Electron. Mat.* **9**, 2200515 (2023).
- S. Isogami, Y. Kota, H. Yasufuku, K. Oyoshi, M. Tanaka and Y. K. Takahashi, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 014411 (2023).

室温630%を超える巨大トンネル磁気抵抗効果

Keywords トンネル磁気抵抗素子, TMR, MRAM, 磁気センサー

グループリーダー／ Group Leader

介川 裕章 Sukegawa Hiroaki

✉ SUKEGAWA.Hiroaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sukegawa_hiroaki



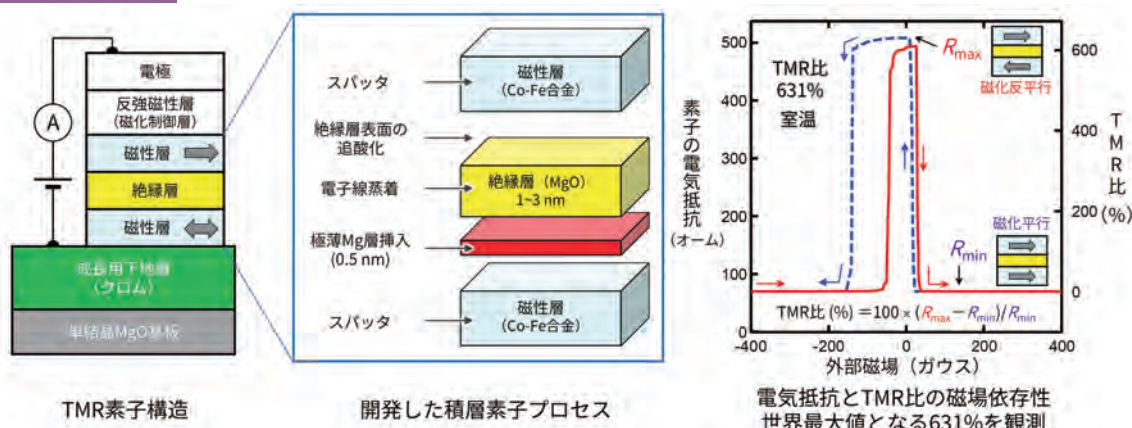
研究概要

磁性薄膜を用いたトンネル磁気抵抗素子は、ハードディスクの読み取りヘッドや、不揮発性メモリとして活用の幅を広げているMRAMの記録ビットなどに用いられている。トンネル磁気抵抗素子は磁性層に挟まれた極薄の絶縁層の電気抵抗が変化する素子で、この抵抗変化(TMR比)が室温で大きければ大きいほどデバイスの高性能化が容易となる。しかし、2008年の604%の報告を最後にTMR比の更新は実験室デモでも途絶えており、短期間で大きな進化が期待できない状態にあった。このため、最新の磁性薄膜の作製技術を活用し、トンネル磁気抵抗素子の磁性層と絶縁層の界面の結晶品質の改善に改めて取り組むことで従来の値を超える高いTMR比の実現を目指した。

新規性・独創性

- 高品位な単結晶膜の作製法の確立(エピタキシャル成長)
- 室温トンネル磁気抵抗(TMR)比記録の更新
- 巨大なTMR比振動現象の発現

研究内容



トンネル磁気抵抗素子(TMR素子)の磁性層と絶縁層の界面を精密に制御することでTMR比の更新を達成した。具体的には、左図に示すように高品位化のためエピタキシャル成長技術駆使して薄膜素子を作製した。絶縁層の下界面へのマグネシウム層の挿入や、上界面への酸化導入など、原子スケールで界面の結晶性の改善を進めた結果、上下ともに急峻な界面を持つ単結晶素子が実現された。この結果として、15年ぶりの世界記録更新となる室温631%という巨大なTMR比が実現された(右図)。さらに、絶縁層の厚さに依存して周期的にTMR比が変動する現象(TMR振動)が明確に表れ、その振動幅は141%と巨大なものとなることも見出した(従来は数%～数十%程度)。今後この振動現象のメカニズムを調べTMR比との関係を明らかにすることによってTMR比のますますの更新が期待できる。従来の値を更新する大きな室温TMR比の実証により、今後心磁場や脳磁場検出など高感度センサーへの展開に加え、従来のTMR比水準では困難な新規メモリ技術としての活用が期待される。

まとめ

- 世界最大の室温TMR比を更新する631%を達成
- 高感度磁気センサーや大容量磁気メモリ(MRAM)への展開の可能性
- 新規材料探索と薄膜プロセス改善によるさらなる特性向上に期待

論文・特許

- T. Scheike, Z. Wen, H. Sukegawa and Seiji Mitani, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 112404 (2023).
- T. Scheike, Z. Wen, H. Sukegawa and S. Mitani, *Appl. Phys. Lett.* **120**, 032404 (2022).
- T. Scheike, Q. Xiang, Z. Wen, H. Sukegawa, T. Ohkubo, K. Hono and S. Mitani, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 042411 (2021).

次世代スピントロニクス技術に向けた新規材料の開発

Keywords 磁気抵抗, スピン軌道トルク, 電圧制御磁気異方性, ホイスラー合金, 磁気トンネル接合, トポロジカル材料

主任研究員 / Senior Researcher

温 振超 Wen ZhenChao

✉ WEN.Zhenchao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/wen_zhen-chao



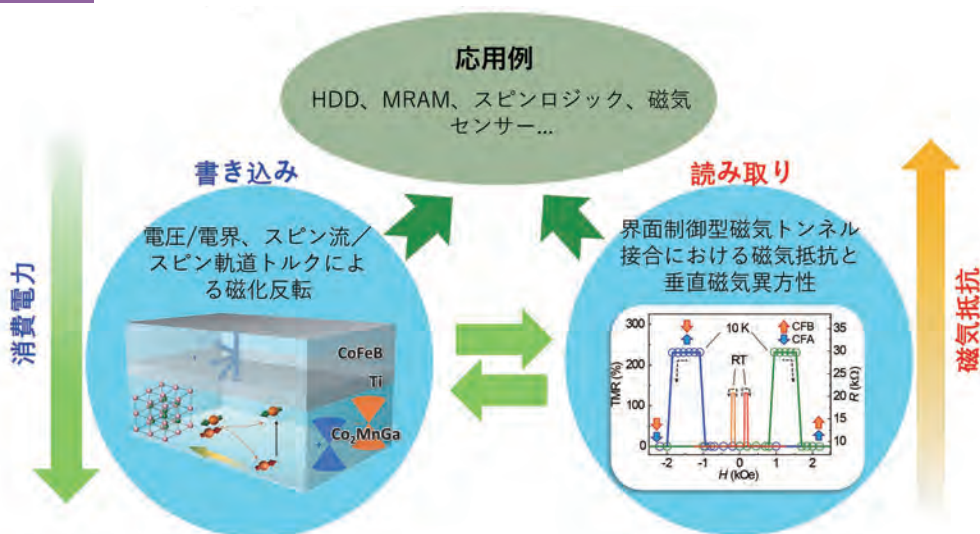
研究概要

- ホイスラー合金薄膜を用いた磁気接合による垂直磁化高磁気抵抗デバイス開発
- 新材料を用いた磁気トンネル接合における磁気異方性の電圧制御メカニズムの解明
- ホイスラー合金とトポロジカル材料によるスピントロニクスヘテロ構造におけるスピン流とスピン軌道トルクの研究

新規性・独創性

- ホイスラー合金薄膜を用いた磁気トンネル接合における大きな垂直磁気異方性、高いトンネル磁気抵抗、大きな電圧制御磁気異方性
- ホイスラー合金やトポロジカル材料を用いたスピントロニクスヘテロ構造におけるスピン流発生とスピン軌道トルクの高効率化、磁化反転
- 先端成膜技術による高品質薄膜の成膜と界面制御

研究内容



ホイスラー合金やトポロジカル材料を用いて、高度な成膜技術と界面制御により、スピントロニクスヘテロ構造を開発する。大きな垂直磁気異方性と高いトンネル磁気抵抗を持つ磁気接合デバイスを実現し、スピントロニクスデバイスの読み出しプロセスに貢献する。また、電圧制御磁気異方性、スピン流発生、スピン軌道トルクによる磁化反転の高効率化を実現し、デバイスの書き込みプロセスにおける低消費電力化に寄与する。これにより、スピントロニクスデバイスをより効率的に、より高性能に動作させることが期待される。

まとめ

先端成膜技術による高品質な薄膜の成膜と界面制御により、ホイスラー合金やトポロジカル材料を用いたスピントロニクスヘテロ構造を開発し、磁気接合素子における大きな垂直磁気異方性、高いトンネル磁気抵抗、大きな電圧制御磁気異方性、さらにスピン流発生やスピン軌道トルク、磁化スイッチングの高効率化を実現させる。次世代スピントロニクスデバイスの性能向上への活用が期待される。

論文・特許

- K. Tang, Z. Wen, Y. C. Lau, H. Sukegawa, T. Seki and S. Mitani, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 062402 (2021).
- Z. Wen, Z. Qiu, S. Tölle, C. Gorini, T. Seki, D. Hou, T. Kubota, U. Eckern, E. Saitoh and K. Takashashi, *Sci. Adv.* **5**, eaaw9337 (2019).
- Z. Wen, H. Sukegawa, T. Furubayashi, J. Koo, K. Inomata, S. Mitani, J. P. Hadorn, T. Ohkubo and K. Hono, *Adv. Mater.* **26**, 6483-6490 (2014).

ナノ構造磁性体の磁区構造制御とエレクトロニクス応用

Keywords スピントロニクス, 磁気抵抗素子, コンピューティング

グループリーダー / Group Leader

葛西 伸哉 Kasai Shinya

✉ KASAI.Shinya@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/kasai_shinya



研究概要

IoT社会の発展に伴い、現在コンピューティング技術が飛躍的な速度で発展している。これに伴い、より大容量で消費電力の少ないエレクトロニクスデバイスの構築が求められている。スピントロニクスデバイスは、不揮発性による極めて優れた低消費電力特性を有しているが、反面で書き込みに大きなエネルギーを必要とする。当該問題を打破するため、新規ヘテロ接合材料の探索、電流・スピン流の高効率変換手法の探索、新規動作原理に基づくコンピューティング手法の検討を行っている。

新規性・独創性

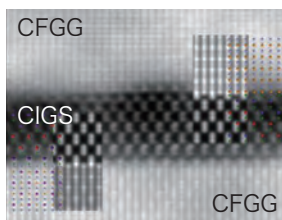
スピントロニクス分野で用いられる材料系は、厚さ1nmあるいはそれ以下となる超薄膜ヘテロ接合であり、極めて高い精度で異種材料接合を成長する必要がある。このような材料創製を可能とするため、複数の物理的蒸着手法が可能な、全自動成膜クラスターを用いた材料探索を行っている。

研究内容

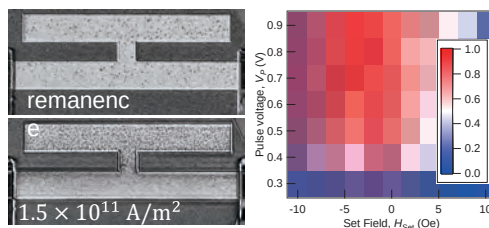
複合成膜クラスター



化合物障壁接合



スキルミオンの非局所蓄積・電圧生成



現在スピントロニクス応用における中心的な要素素子は磁気トンネル接合であるが、実用素子では、素子抵抗を下げるために障壁層をわずか数原子層まで薄膜化しなくてはならない。これに対して、我々は、化合物半導体CIGSを障壁層として用いることで、極めて低い抵抗領域で高い磁気抵抗比を実現した。当該技術は低抵抗特性が極めて重要なハードディスクの読み取りヘッド等への応用可能性が期待される。

対称性の破れた超薄膜強磁性ヘテロ接合では、接合界面に新奇な磁気的相互作用が発現する。これにより、従来材料では見られない新規な磁区構造(磁気スキルミオン)が実現される。我々はIr/Co/Pt系やMgO/CoFeB/W接合において、磁気スキルミオンの電流応答、電圧応答を観測し、電流に対する非平衡物性、電圧による生成消滅制御に成功した。また、磁気スキルミオンを用いたリザバーコンピューティングについても原理実証を行っている。

まとめ

超薄膜ヘテロ接合は薄膜成長のみで得られる非平衡材料であり、バルクでは存在しない新規物性の発現が期待できる。スマートラボ技術との組み合わせにより、非平衡特性を活かした新規材料探索を行いたい。

論文・特許

- S. Sugimoto, W. Koshibae, S. Kasai, N. Ogawa, Y. Takahashi, N. Nagaosa and Y. Tokura, *Sci. Rep.* **10**, 1009 (2020).
- K. Mukaiyama, J. W. Jung, H. Sepehri-Amin, S. Kasai, T. Furubayashi, T. Ohkubo and K. Hono, *Appl. Phys. Lett.* **114**, 172402 (2019).
- S. Kasai, S. Sugimoto, Y. Nakatani, R. Ishikawa and Y. K. Takahashi, *Appl. Phys. Express* **12**, 083001 (2019).

非平衡薄膜材料におけるトポロジの発現とその活用

Keywords 薄膜, 非平衡状態, スピントロニクス, 新規材料開発

主任研究員 / Senior Researcher

杉本 聡志 Sugimoto Satoshi

✉ SUGIMOTO.Satoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sugimoto_satoshi



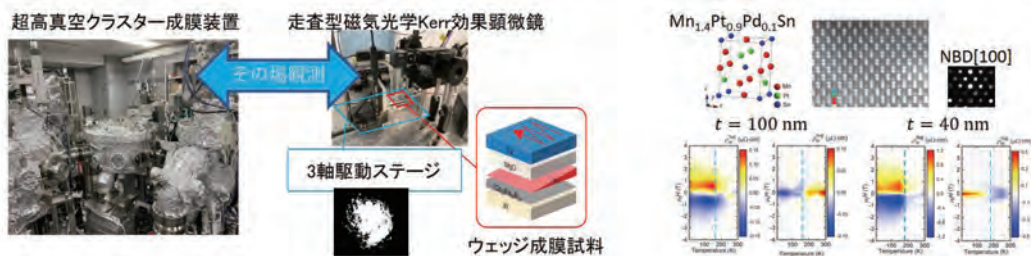
研究概要

分子線エピタキシーと、複数のマグネトロンスパッタ装置を直結された超高真空クラスター成膜装置を用いることで、多種多様な薄膜新材料の開発と、インサイチュでのデバイス構造の作製が実現できる。加えて、コンビナトリアル手法に準じた組成傾斜成膜や機械学習も併用することで、高効率な材料開発が可能となる。これらの手法を活用し、物性物理学の観点から注目されているトポロジカル材料系の非平衡状態も含め、高品質の薄膜化とデバイスへの応用、ひいては産業化の指針を見出すことを目標とする。

新規性・独創性

従来、電子状態や長距離秩序性に起因するトポロジに関する物性を観察するには、より高純度な材料作成が可能となるバルク結晶系がその発展をけん引してきた。一方で薄膜系においては、応用化への適合性に加え、一般的な熱平衡状態では存在し得ない非平衡的な規則系あるいは不規則系の材料探索が可能となる。特に界面効果が輸送特性の主因となる極薄膜材料においては、スキルミオン等の磁気的秩序や輸送特性に非平衡状態が現れることが確認され、非従来のな非線形演算デバイス等を提示することが可能となる。

研究内容



左図は超高真空クラスター成膜装置を活用した材料探索フローの概要図を示している。面内に連続的な組成・膜厚傾斜膜を作製し、RHEEDや特に磁性材料においては走査型磁気光学Kerr効果顕微鏡を利用することで、疑似的なその場観察により、一度の成膜に対し膨大なフィードバックを高効率に行うことができる。

左図は、これらを活用したD2d対称性を示すMn基ホイスラー合金であるMn_{1.4}Pt_{0.9}Snの薄膜化と、トポロジカル磁気構造に起因するトポロジカルホール信号の検出結果を示す。本アプローチとして注目すべき点として、産業化への転用が可能なスパッタ法による成膜により、高品質なエピタキシャル成長に成功した点、トポロジカル信号を増強するドーパントとしてPdが組成傾斜により効率よく最適化された点が挙げられる。加えて、50nm以下の膜厚領域では、試料表面での静磁エネルギーの寄与が顕在化し、トポロジカル信号の元となるアンチスキルミオンの安定化相が、高温領域側に転移している。特に後者については、薄膜独自の効果により、デバイス化への指標となる室温・零磁場安定化への漸近が確認できた例として、今後の更なる特性向上が期待ができる。

まとめ

近年、急速に進展しているトポロジカル機能性材料の更なる発展と共に、薄膜材料の非平衡成長、エンジニアリング技術による新材料開発を通じて、新たなデバイスの実現に向けて今後も精力的な開発を実施する。

論文・特許

- S. Sugimoto, Y. Takahashi and S. Kasai, *Appl. Phys. Express* **14**, 103003 (2021).
- S. Sugimoto, Y. Nakatani, Y. Yamane, M. Ikhlas, K. Kondou, M. Kimata, T. Tomita, S. Nakatsuji and Y. Otani, *Commun. Phys.* **3** (2020).
- S. Sugimoto, W. Koshibae, S. Kasai, N. Ogawa, Y. Takahashi, N. Nagaosa and Y. Tokura, *Sci. Rep.* **10**, 1009 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

スピカロリトロニクスの開拓と展開

Keywords スピントロニクス, スピカロリトロニクス, 熱電変換, 磁性材料, 磁気熱量効果

上席グループリーダー / Distinguished Group Leader

内田 健一 Uchida Ken-ichi

✉ UCHIDA.Kenichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/uchida_kenichi



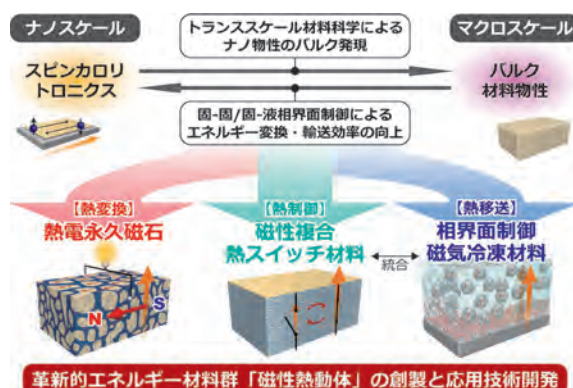
研究概要

スピントロニクスと熱電・熱輸送物性の融合に基づく「スピカロリトロニクス」に関する研究を主に行っている。従来のスピカロリトロニクスの枠組みを超えた異分野の技術や知見を導入し、電子輸送・磁性（スピン）・フォノン・強誘電性等の協奏効果によって駆動される新しい熱変換・熱制御・熱移送現象や機能性の開拓、およびそれらのエネルギー変換効率を向上させるための物質・材料科学を推進している。独自に発展させた動的熱計測技術を駆使してスピカロリトロニクスの新境地を切り拓き、熱マネジメント技術に結実させることで、持続可能社会の実現に貢献することを目指す。

新規性・独創性

- 数々のスピカロリトロニクス現象（熱スピン効果および磁気熱電効果）を世界に先駆けて観測
- 独自に発展させた動的熱計測技術により、熱流を出力とする磁気熱電効果や熱スピン効果を自在に測定・定量評価可能
- コンビナトリアル薄膜作製技術を駆使したハイスループットなスピカロリトロニクス材料探索

研究内容



スピカロリトロニクス分野の黎明期から同分野の実験研究を先導しており、スピエネルギーグループ発足（2016年10月～）後に、磁性体中で電流を曲げるだけで加熱・冷却できる熱電変換現象「異方性磁気ペルチェ効果」、非線形磁気熱電効果の一つである「磁気トムソン効果」、新機構の横型熱電変換「ゼーベック駆動横型熱電効果」の世界初の観測に成功した。磁性薄膜から磁気抵抗素子・永久磁石、そして独自に設計した磁性複合材料まで幅広く研究対象に含めており、これらの系に特有の熱変換・熱制御・熱移送原理や機能を開拓している。研究に用いる実験手法は、スパッタリング法を中心とした薄膜作製技術から放電プラズマ焼結法等のバルク材料合成技術、磁気/電気/熱輸送現象測定、ポンプ-ブロー式光計測などを含む。

現在は、これまで原理実証や要素機能開拓に留まっていたスピカロリトロニクスを、熱エネルギーデバイス技術に結び付けることを目指した物質・材料研究や応用研究を推進している（上図参照）。2022年10月にはJST ERATO「内田磁性熱動体プロジェクト」が発足しており、磁気で熱を操る新たなエネルギー材料群「磁性熱動体」の創製により、熱電変換・熱スイッチ・磁気冷凍を含む熱工学応用の革新を目指している。

まとめ

- スピカロリトロニクスに関する世界最先端の基礎研究と応用開拓を推進
- スピンを用いなければ実現できない新しい熱制御機能の実証に次々と成功
- 複合材料・階層構造設計や相界面制御により、高効率な熱変換・熱制御・熱移送を実現する革新的エネルギー材料群の創製へ

論文・特許

- W. Zhou, K. Yamamoto, A. Miura, R. Iguchi, Y. Miura, K. Uchida and Y. Sakuraba, *Nat. Mater.* **20**, 463–467 (2021).
- K. Uchida, M. Murata, A. Miura and R. Iguchi, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 106601 (2020).
- K. Uchida, S. Daimon, R. Iguchi and E. Saitoh, *Nature* **558**, 95–99 (2018).

高速熱計測技術を用いた磁性体・誘電体の熱利用方法の開拓

Keywords スピントロニクス, スピン流, 熱電効果, 熱計測

主任研究員 / Senior Researcher

井口 亮 Iguchi Ryo

✉ IGUCHI.Ryo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/iguchi_ryo



研究概要

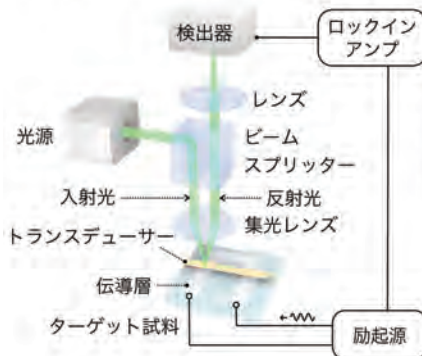
熱制御や熱電変換など熱利用技術は、情報処理デバイスの高機能化・高密度化に伴って重要視されている。その一つの技術として、磁性体中のスピンと熱の相互作用を活用するスピントロニクスという分野に注目が集まっている。スピンのダイナミクスに着目することで、絶縁体中でも熱生成・情報伝播を制御できるため、従来にはない熱利用技術を構築できる可能性がある。これら新しい現象の熱特性を調べるためには、高速・高精度な熱応答計測が必要であり、サーモグラフィ法やサーモフレクタンス法を活用した熱現象開拓・熱特性解析を行っている。さらに近年では誘電体中のダイナミクスにも着目し、新たな熱利用技術の開拓を試みている。

新規性・独創性

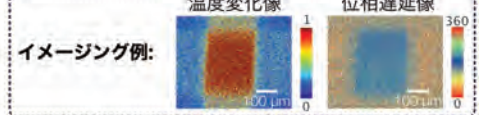
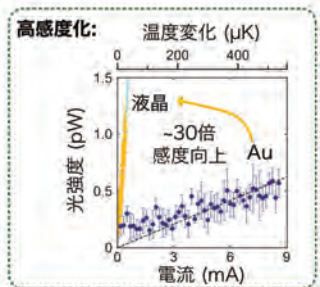
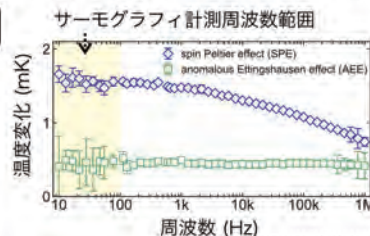
- 現象の熱特性の時間的・空間的高分解能計測
- 磁性・誘電性を利用した新しい熱利用法の開拓
- デバイスの動作時熱解析や熱設計へ展開

研究内容

サーモフレクタンス測定例



測定スペクトル:



高速化・高感度化 → 微小領域熱応答計測・新原理開拓・動作時熱解析による熱利用技術への貢献

高温度分解・時間分解・空間分解ができる非接触の熱測定に向けて、サーモグラフィ法やサーモフレクタンス法にフーリエ解析など時間方向の動的な解析を組み合わせ、幅広い現象・物質を対象とした測定を進めた。例えば絶縁体中の熱スピン変換ではMHzに迫る領域での熱振動を明瞭に捉えられており、熱解析と組み合わせることで絶縁体中1μm程度の領域で熱とスピンの変換が起きていることを明らかにした。液晶材料を用いた高感度化の追求やイメージング化なども行っている。実用デバイスでの動作解析にむけてMHzからGHz帯域への対応など、より広範な対象への熱計測の展開し、熱利用技術への貢献を目指す。

まとめ

非接触の熱計測法を活用し、磁性体・誘電体の自由度を用いる熱現象について、特性解析のための手法や測定手法を実証した。物質やデバイスの熱応答を知ることで、新しい現象が見出せたり、熱デバイス設計や性能評価が可能になる。今後さらに対象を広げて新たな熱利用原理の創出やデバイスの熱設計への貢献が期待される。

論文・特許

- A. Takahagi, R. Iguchi, H. Nagano and K. Uchida, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 172401 (2023).
- R. Iguchi, D. Fukuda, J. Kano, T. Teranishi and K. Uchida, *Appl. Phys. Lett.* **122**, 082903 (2023).
- T. Yamazaki, R. Iguchi, T. Ohkubo, H. Nagano and K. Uchida, *Phys. Rev. B* **101**, 020415 (2020).

外場によるアクティブな熱エネルギー制御機能・原理の創出

Keywords スピネカロリトロニクス, 熱マネジメント, 熱電・熱スピン変換, 熱量効果, ナノスケール熱伝導

研究員 / Researcher

平井 孝昌 Hirai Takamasa

✉ HIRAI.Takamasa@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hirai_takamasa



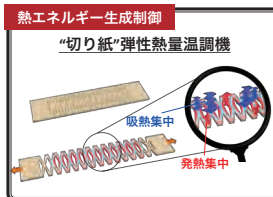
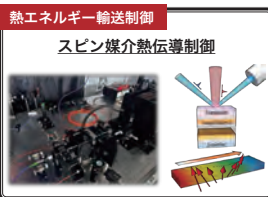
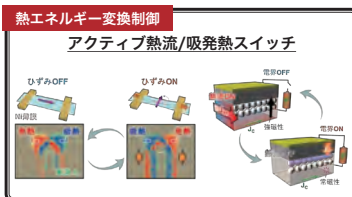
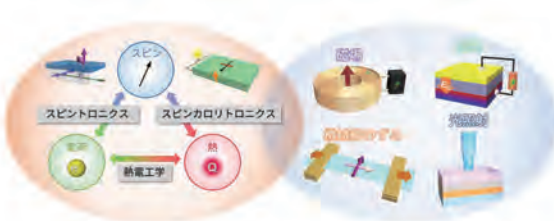
研究概要

現代のエレクトロニクス社会では、IT関連機器の小型化・高性能化・多様化が目覚ましい速度で進行している一方で、発熱によるエネルギーロスや電子機器の信頼性低下など“熱”が引き起こす問題も増加している。このような問題に対処すべく、熱エネルギーを高度に制御・利用するための熱マネジメント技術の発展が必要不可欠になっている。これまでも様々な“熱”に関する物理現象の報告や優れた熱特性を有する物質の調査が成されてきたが、本研究が目指す先は、磁場や電場などの外場を用いて、一度作製した物質の熱特性を後天的かつ能動的に制御・変調することで、これまで得られなかった新たな熱エネルギー制御機能を創出することにある。

新規性・独創性

- 外場を用いた能動的熱エネルギー制御原理・機能の実証
- 従来の熱工学やスピントロニクスにはない機能の実現
- スケーラブルな制御手法
- 日常生活に広く普及している物質に新たな物性とその制御機能を付与

研究内容



電気-磁気-熱の相互作用を広く取り扱うスピネカロリトロニクスにおいて、磁場のみならず電場・力学的ひずみ・光などの外場を積極的に導入し、後天的・能動的・可逆的な熱エネルギー制御を実現することを基盤として研究に取り組んでいる。主に、磁性体中に存在するスピン自由度と外場の相互作用を利用して、熱電効果によって生成される熱流のアクティブなON-OFFスイッチングや冷却-加熱スイッチング[熱エネルギー変換制御]、ナノスケールの固体内部の熱伝導スイッチングなどの実証[熱エネルギー輸送制御]に取り組んでいる。また、近年では、磁性体やスピントロニクス物質の枠組みを超えた物質群を用いた外場誘起熱エネルギー制御の実証も目指しており、ビニール袋などにも用いられる身近なプラスチックに日本の伝統工芸“切り紙”加工を施し、力学的に引っ張ることで、現時点で最高の弾性熱量物質である形状記憶合金の4倍以上の局所加熱/冷却能が得られることを実証した[熱エネルギー生成制御]。いずれの成果も、用いた物質は鉄やニッケルなどの磁性体やプラスチックなど日常生活にも広く普及しているものであるが、熱エネルギー制御用途としては全く注目されていなかった。本成果を支えるアイデア：外場を基軸とした物質エンジニアリングによって、すでにその機能性が調べつくされていたと考えられていた物質においても、熱ないしその他物性にも新たな制御機能の創出が期待できる。

まとめ

- 磁場/電場/ひずみなどの外場を用いた能動的・可逆的な熱変換・生成・輸送制御機能の実証
- 微細素子に対する熱マネジメント基盤技術展開へ期待
- 本成果で見出した機能の実デバイス搭載結実化が今後の課題

論文・特許

- T. Hirai, R. Iguchi, A. Miura and K. Uchida, *Adv. Funct. Mater.* **32**, 2201116 (2022).
- T. Hirai, H. Sepehri-Amin, K. Hasegawa, T. Koyama, R. Iguchi, T. Ohkubo, D. Chiba and K. Uchida, *Appl. Phys. Lett.* **118**, 022403 (2021).

マルチスケール組織解析をもとにした金属材料の高特性化

Keywords 微細組織, 3次元アトムプローブ(3DAP), 電子顕微鏡, 金属・無機材料

グループリーダー / Group Leader

佐々木 泰祐 Sasaki Taisuke

✉ SASAKI.Taisuke@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/sasaki_taisuke



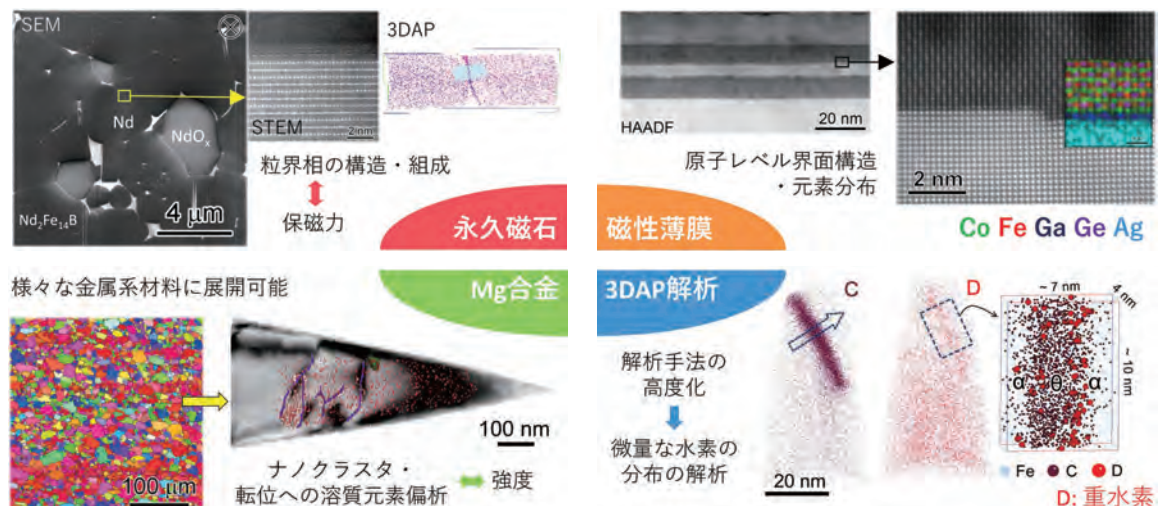
研究概要

磁気特性や力学特性などをはじめとする材料特性は、物質固有の物性のみならず、材料の作製過程で形成する微細組織に密接に関連する。特性に影響する組織はミクロ～原子レベルの広範なスケールにわたって存在するため、所望の特性を発現させるための微細組織の制御指針や材料創製の指針を提案するには、複数の組織解析手法を併用して微細組織を幅広いスケールで多面的に解析することが効果的である。そこで、永久磁石などの磁性材料をはじめとする様々な金属材料に電子顕微鏡(FIB-SEM、TEM)や3次元アトムプローブ(3DAP)などの最先端の組織解析技術を適用し、特性発現メカニズムの理解や高特性化の実証に向けた研究を進めている。

新規性・独創性

- FIB-SEM、TEM、3次元アトムプローブを相補的に用いたマルチスケール組織解析
- 3次元アトムプローブによる組織解析手法の高度化
- 水素などの軽元素分布のナノスケール3次元解析
- ラボスケールでの材料開発による高特性化の実証

研究内容



ネオジム磁石の研究では、ミクロサイズの結晶粒の結晶粒界に形成する厚み数nmの粒界相の構造や組成を解明することで、粒界相の非磁性化など、保磁力向上に向けた合金・組織の設計指針を明らかにすることができた。また、数nmの磁性層などを積層した磁性薄膜では、層間の界面付近における元素分布や構造の原子レベルで解析することで、特性向上に有用な知見を得ることができた。

一方、マグネシウム合金の研究では、独自開発合金の強度が溶質クラスターの分散と溶質元素による転位の固着によることを明らかにした。最近では、微量な水素の分布の3DAP解析にも成功し、水素分布を可視化しながら特性との関連が議論できるようになりつつある。

まとめ

電子顕微鏡(FIB-SEM、TEM)や3次元アトムプローブを駆使した微細組織の詳細な解析は様々な金属・無機材料に適用可能で、それにより獲得した知見は、応用上重要な特性向上の有用な手掛かりとすることができる。現在、微細組織解析にインフォマティクスの手法を取り入れる試みを進めるなど、組織解析や材料開発指針提案の効率化の実現に取り組んでいる。

論文・特許

- T. T. Sasaki, H. Sepehri-Amin, J. Uzuhashi, T. Ohkubo and K. Hono, *MRS Bull.* **47**, 688-695 (2022).
- M.Z. Bian, T.T. Sasaki, T. Nakata, Y. Yoshida, N. Kawabe, S. Kamado and K. Hono, *Acta Mater.* **158**, 278-288 (2018).
- T. T. Sasaki, T. Ohkubo and K. Hono, *Acta Mater.* **115**, 269-277(2016); .

組織解析とデータ科学による機能性材料の特性向上

Keywords マルチスケール組織解析, TEM, アトムプローブ, 磁石, 軟磁性材料, スピントロニクスデバイス, 半導体デバイス, マイクロマグネティクス計算

副センター長／Deputy Director

大久保 忠勝 Ohkubo Tadakatsu

✉ OHKUBO.Tadakatsu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohkubo_tadakatsu



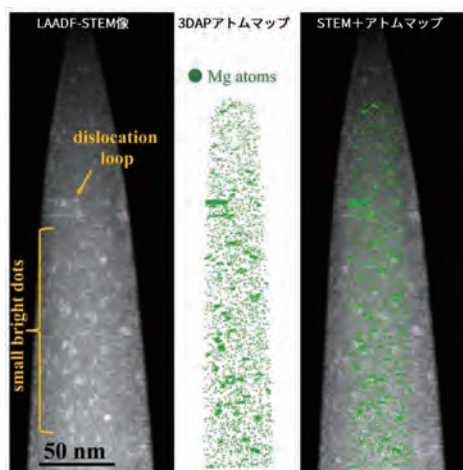
研究概要

磁石、軟磁性材料、スピントロニクスデバイス、半導体デバイス等の機能性材料の特性は、その微細組織に大きく依存している。それらの機能を向上させるためには、特性の優劣を支配する要因を明確にして、それを解消することが必要である。そこで、走査・透過型電子顕微鏡(SEM・TEM)、3Dアトムプローブ(3DAP)を用いて、ミクロスケールから原子レベルでのマルチスケール組織解析を実施することで得られる知見を基に、材料・プロセス的な見地から特性・機能性向上を目指している。また、その際に系統的に収集された材料・プロセス・組織・特性等のデータをデータ科学的手法で解析することで、数多くのパラメータから注目特性の支配因子を明確にし、特性向上、新材料創製につなげる。

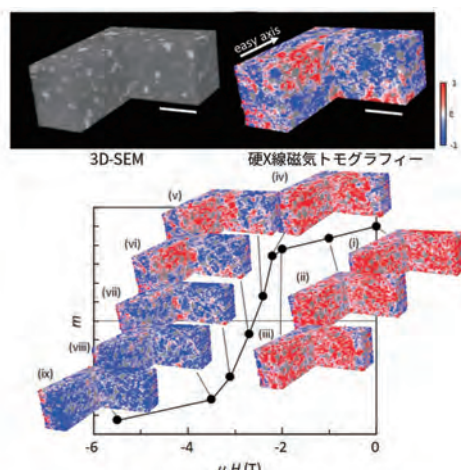
新規性・独創性

我々は、ハイエンドのSEM・TEM、3DAPを活用することで、物質・材料の微細構造と元素分布を包括的に解析する技術を有している。また、高度な解析を実施するには、高精度に制御された解析用試料が必要になるが、スクリプト制御可能な集束イオンビーム(FIB)/SEMを使って、試料作製プロセスを自動化するスクリプトも開発しており、TEM試料であれば、20nm～80nm程度で指定した試料膜厚に数nmの精度で薄膜を作り込むことが可能であり、3DAP試料であれば、先端曲率半径、試料先端部のテーパ角を指定して針状試料を作製することに成功している。

研究内容



Mgイオン注入GaNのLAADF-STEM像と3DAPアトムマップ



外部磁場変化に伴う磁石内部の磁区構造の変化

省エネルギー社会の実現に向けたGaNパワーデバイス開発に貢献するべく、Mgイオン注入されたp型GaNについて、走査(S)TEMと3DAPによる同一箇所組織解析を実施した。針状加工した試料のSTEM像で明るく見える欠陥部に、注入されたMgが偏析していることが確認され、欠陥部以外の領域に残留するMg濃度の定量評価も可能となった。

これまで磁石内部の磁区構造を3Dで可視化することは不可能であったが、SPRING-8で開発された硬X線磁気トモグラフィ法を用いて、磁石内部の磁区構造の外部磁場に対する振舞いを3Dで可視化し、NIMSの3D-SEM解析と合わせることで、微細組織と磁区構造の関係の解析が可能になった。

まとめ

SEM/TEM/3DAPによるマルチスケールで相補的に組織解析する技術と、FIB/SEM自動制御による高品質の解析試料の作製によって、高度な組織解析が可能となってきた。また、ここで得られる知見を、様々な機能性材料の創製に応用することで、その特性・機能向上に貢献が可能となり、さらにはデータ科学的手法を活用することで、これらのサイクルを高速化、高効率化することが期待できる。

論文・特許

- T. T. Sasaki, H. S. Amin, J. Uzuhashi, T. Ohkubo and K. Hono, *MRS Bull.* **47**, 688-695 (2022).
- M. Takeuchi, M. Suzuki, S. Kobayashi, Y. Kotani, T. Nakamura, N. Kikuchi, A. Bolyachkin, H. S. Amin, T. Ohkubo, *et al.*, *NPG Asia Mater.* **14**, 70 (2022).
- L. Jiangnan, H. S. Amin, 佐々木 泰祐, 大久保 忠勝, 宝野 和博, *粉体および粉末冶金* **69**, S38-S51 (2022).

有限温度第一原理計算による機械学習と物質探索

Keywords 第一原理計算, 機械学習, 有限温度効果, スピン揺らぎ

グループリーダー / Group Leader

三浦 良雄 Miura Yoshio

✉ MIURA.Yoshio@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/miura_yoshio



研究概要

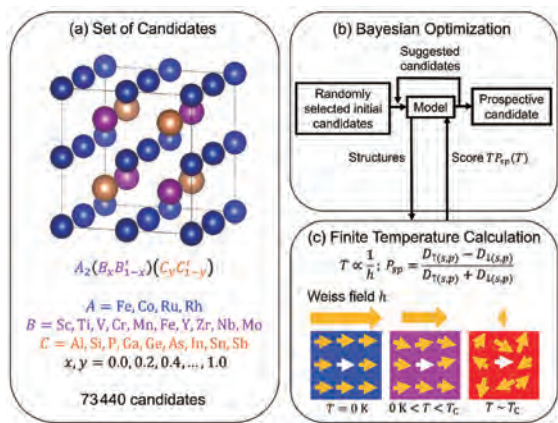
物質の電子構造において、一方のスピン状態に対しては金属的でもう一方のスピン状態に対しては半導体的な電子状態を持つ(100%のスピン分極率を持つ)強磁性体をハーフメタルという。ハーフメタルの1つとして知られるホイスラー合金(Co_2MnSi など)を磁気トンネル接合の強磁性層に用いた実験では、室温におけるトンネル磁気抵抗(TMR)比の劣化が大きな問題となっている。これはホイスラー合金のハーフメタリ性(高いスピン分極率)が室温では磁化の熱揺らぎの影響を受けて低下するためである。そこで本研究では、有限温度の電子状態の第一原理計算と機械学習を組み合わせる材料探索を行い、室温で高いスピン偏極率を保持する新しいホイスラー合金を提案した。

新規性・独創性

これまで、機械学習を用いた材料探索では、主に絶対零度における電子物性の第一原理計算が用いられてきた。しかし、材料の電子物性には温度依存性があり、特に磁気特性は温度によって大きく劣化する。したがって、実際に材料が利用される温度領域で、磁気特性の第一原理計算を行い、材料探索を行うことが必要不可欠である。本研究では、有限温度スピン揺らぎを考慮した第一原理計算と機械学習を組み合わせ、室温で機能性を有する磁性・スピントロニクス材料の理論探索を行った。有限温度での磁気特性に対して材料探索を行った結果、これまでの材料探索とは異なり、室温では使えない材料系を明確にできたことに大きな意義がある。

研究内容

本研究で考慮した周期表におけるホイスラー合金組成 A_2BC の探索空間を図1(a)に示す。機械学習としてベイズ最適化を用いて、有限温度第一原理計算に基づく物質探索を図1(b)の手順に従って行った。有限温度第一原理計算手法として、図1(c)に示すようにスピン揺らぎを平均場的に考慮したDisordered Local Moment (DLM)法を用いた。図2に物質探索の結果を表で示す。 P_{sp} の値が最もTMRに寄与する電子軌道の室温でのスピン分極率である。



【図1】

【図2】

System	a (Å)	$m_{\text{HLL}} (\mu_B)$	$T_{\text{Cur}} (\text{K})$	$P_{sp} (\%)$	$P_{sp} (\%)$
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Al}_{0.2}$	5.700	4.86	352	39.0	86.7
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}$	5.720	4.94	329	25.1	82.4
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{In}_{0.2}$	5.980	5.10	305	11.4	79.8
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{As}_{0.2}$	5.796	5.96	278	46.0	70.8
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{P}_{0.2}$	5.638	5.67	223	4.6	77.1
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Si}_{0.2}$	5.630	5.00	299	79.0	88.0
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}$	5.876	5.29	334	-1.7	85.0
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}$	5.736	5.32	280	-23.7	76.9
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.2}$	5.928	5.06	310	15.3	80.4
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}$	5.732	5.26	322	-7.4	82.4
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Al}_{0.2}$	5.876	5.03	315	18.7	80.9
$\text{Co}_2\text{Fe}_{1.8}\text{In}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}$	5.988	5.40	324	-2.5	83.3
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}_{0.2}$	5.777	5.61	300	66.8	89.0
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}$	5.728	4.80	212	74.8	83.1
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}$	5.954	5.55	276	60.5	87.8
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Al}_{0.2}\text{Si}_{0.2}$	5.644	4.80	237	80.5	88.2
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}_{0.2}$	5.781	5.61	291	65.1	88.4
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}$	5.731	4.81	208	73.3	82.2
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}$	5.958	5.56	268	58.2	86.8
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{As}_{0.2}$	5.765	5.20	264	71.2	86.4
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}$	5.898	5.21	246	67.6	83.6
$\text{Co}_2\text{Ti}_{1.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}$	5.756	4.39	216	66.7	88.0
$\text{Co}_2\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{As}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	5.979	4.60	267	37.4	81.1
$\text{Co}_2\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{In}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	6.037	4.80	264	44.9	82.4
$\text{Co}_2\text{Fe}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Si}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	6.039	4.78	265	47.0	83.2
$\text{Co}_2\text{Fe}_{0.8}\text{Nb}_{0.2}\text{In}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	6.032	4.81	244	31.2	80.6
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	5.902	5.51	230	-7.0	75.4
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Fe}_{0.2}\text{In}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	6.001	5.40	270	54.4	83.5
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Fe}_{0.2}\text{Sb}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$	6.000	5.54	275	45.9	86.3
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Nb}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}\text{As}_{0.8}$	5.773	4.90	226	74.9	89.0
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Nb}_{0.2}\text{Ge}_{0.2}\text{As}_{0.8}$	5.763	4.78	207	76.8	88.0
$\text{Co}_2\text{Mn}_{1.8}\text{Zr}_{0.2}\text{Fe}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$	5.760	4.50	203	37.8	83.1

探索の結果、AサイトにCo、BサイトにFe/Mnを有する物質のみが有限温度で高いスピン分極率を示すことがわかった。AサイトにFeやRhやRuを有するホイスラー合金はスピン分極率の温度依存性が大きいので、室温では使えない材料といえる。

まとめ

本研究では、有限温度第一原理計算と機械学習により、室温で高いスピン分極率を有するホイスラー合金の探索を行った。特に室温で高いスピン分極率を示す有望な新しいホイスラー合金として $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Al}, \text{Sb})$ 、 $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Ga}, \text{In})$ および $\text{Co}_2\text{Mn}(\text{Ga}, \text{As})$ を提案した。 $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Al}, \text{Sb})$ や $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Ga}, \text{In})$ は非磁性単体金属Agと格子整合性がよいので巨大磁気抵抗素子の強磁性層として利用できる可能性が高い。また $\text{Co}_2\text{Mn}(\text{Ga}, \text{As})$ はGaとAsを含ことからGaAsへのスピン注入源として期待できる。

論文・特許

- I. Kurniawan, Y. Miura and K. Hono, *Phys. Rev. Mater.* **6**, L091402 (2022).
- I. Kurniawan, K. Nawa, K. Masuda, Y. Miura and K. Hono, *ACTA Mater.* **218**, 117218 (2021).
- K. Nawa, I. Kurniawan, K. Masuda, Y. Miura, C. E. Patrick and J. B. Staunton, *Phys. Rev. B* **102**, 054424 (2020).

磁気機能デバイスに対する理論研究

Keywords スピントロニクス, 磁性材料, トンネル磁気抵抗効果, 第一原理計算, 有効モデル計算

主任研究員 / Senior Researcher

増田 啓介 Masuda Keisuke

✉ MASUDA.Keisuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/masuda_keisuke



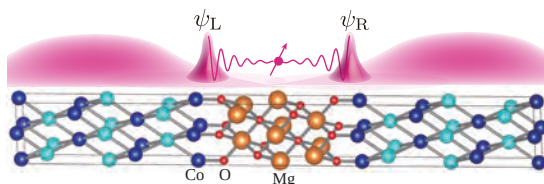
研究概要

磁気トンネル接合 (MTJ) は強磁性体/絶縁体/強磁性体の3層構造からなる代表的な磁気機能デバイスであり、これまでに磁気センサや磁気メモリなどに応用されてきた。MTJではトンネル磁気抵抗 (TMR) 効果が生じ、この効果の性能指数であるTMR比を向上させることが応用上大変重要である。NIMSでは長年にわたりこのようなTMR効果についての実験研究がなされてきたが、我々はこの現象に対する理論研究を進めている。最近の研究により、非従来型の配向性を持つMTJで新たな機構によって高いTMR比が発現しうることがわかった。またTMR比が温度上昇と共に急低下する点も実用化に際しての課題とされているが、この現象の物理的起源についても重要な知見が得られた。

新規性・独創性

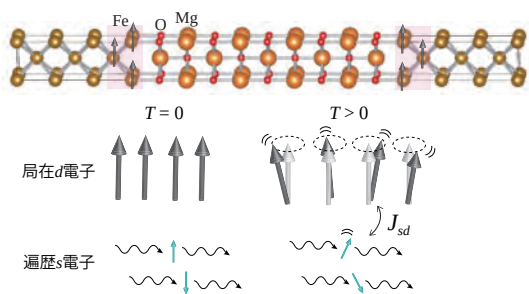
- 従来とは異なる新規配向性の磁気抵抗素子の有用性を実証
- 新規な発現機構による磁気抵抗効果を提唱
- 磁気抵抗効果の温度依存性の新規物理機構を提唱
- 磁気抵抗素子の有限温度特性を向上させる材料探索指針を提案

研究内容



界面共鳴機構による新規トンネル磁気抵抗効果

K. Masuda et al., Phys. Rev. B **101**, 144404 (2020); Phys. Rev. B **103**, 064427 (2021)



トンネル磁気抵抗効果の温度依存性の新機構

K. Masuda et al., Phys. Rev. B **104**, L180403 (2021)

まとめ

新規構造を有するMTJの有用性を実証し、有限温度下でのTMR比減少の物理機構も明らかにした。我々の提案を受け、新規(111)配向MTJに対する実験研究がNIMSで開始されている。今後はより実験的に取り組みやすい物質系の提案、及び実験結果を解釈するための解析が重要となる。また有限温度下でのTMR比向上に向けて、今回見出した指針に基づいた物質依存性の解析が必要となる。

論文・特許

- K. Masuda, H. Itoh, Y. Sonobe, H. Sukegawa, S. Mitani and Y. Miura, Phys. Rev. B **103**, 064427 (2021).
- K. Masuda, T. Tadano and Y. Miura, Phys. Rev. B **104**, L180403 (2021).
- K. Masuda, H. Itoh and Y. Miura, Phys. Rev. B **101**, 144404 (2020).

先進フォノン計算を用いた有限温度物性予測

Keywords 第一原理計算, 構造相転移, フォノン, 輸送特性, 磁性

主任研究員 / Senior Researcher

只野 央将 Tadano Terumasa

✉ TADANO.Terumasa@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tadano_terumasa



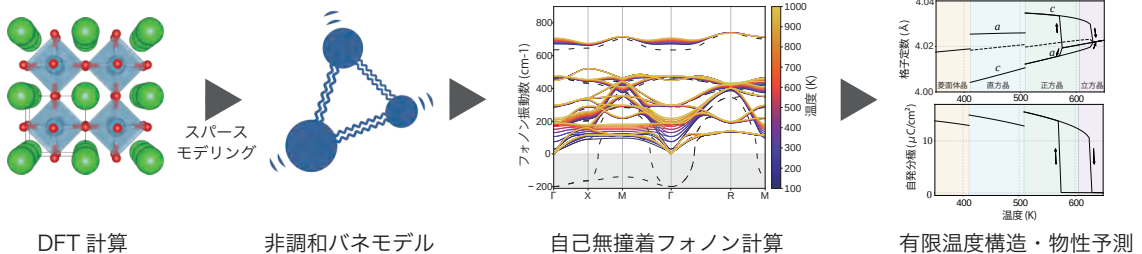
研究概要

現代の物質・材料研究において、計算機シミュレーションは実験・理論に次ぐ第3のアプローチとしての地位を確立している。特に、密度汎関数法(DFT)に基づく第一原理計算は実験結果の解釈や新物質設計、未知物性予測などに広く用いられている。しかし、DFTは基底状態の理論であるため、有限温度に潜む高機能材料や準安定相の予測が困難である。そこで、本研究では、フォノンやスピンのエントロピーを考慮し、有限温度における結晶構造や物性を予測できる効率的な第一原理計算手法の開発を行う。開発した手法を誘電材料、熱電材料や磁性材料へ適用し、その有効性を実演する。

新規性・独創性

- 有限温度における結晶構造最適化や構造相転移シミュレーションを実現
- 非調和効果を精密に考慮した第一原理フォノン計算
- 誘電性、輸送特性、磁性などの各種物性におけるフォノン効果の理解と予測

研究内容



構造相転移や熱膨張などを正確に予測するためには、格子振動の非調和性を正確に考慮する必要がある。そこで我々は、自己無撞着フォノン理論に基づく有限温度フォノン計算手法の開発を行っている。本手法では、まず単位胞を複数個含むスーパーセルで複数回DFT計算を行い、そこから得られた変位と力のデータから原子間の非調和ばね定数を推定する。このときにLASSOなどのスパースモデリング手法を用いることで、物理的に重要な非調和ばね定数を決定するために必要な学習データ数(DFT計算の回数)を大幅に減らすことが可能であり、それによって計算効率が飛躍的に向上している。つづけて、求めた非調和ばね定数を用いて自己無撞着フォノン(SCP)計算を行い、温度変化するフォノン分散を計算する。SCP法を用いることで、従来では困難だった高温相や格子振動の非調和性が強い材料のフォノン分散を正確に予測することが可能になる。さらに、SCP法によってヘルムホルツ自由エネルギーを計算し、それを最小化するように結晶構造最適化を行うことで、有限温度における構造変化も予測できる。

開発した手法をチタン酸バリウムへ適用し、降温によって立方晶→正方晶→直方晶→菱面体晶と逐次相転移する様子を再現する事に成功した。また、構造に応じて敏感に変化する自発分極についても、実験結果を再現することに成功した。

開発した手法を用いることで、準調和近似に基づく従来のフォノン計算では不可能だった構造相転移のシミュレーションが可能になり、さらに高温相のフォノン分散が高い精度で予測できるため、誘電率、電気・熱伝導率、磁性などさまざまな物性におけるフォノン効果の解析に用いられている。今後は、本手法を用いた準安定機能材料の探索やスピン励起効果の導入による汎用性向上など、多方面への展開が期待できる。

まとめ

- 従来の第一原理計算では困難だった有限温度におけるフォノン計算や結晶構造最適化を実現
- 有限温度での誘電性や電気・熱伝導特性、磁性などさまざまな物性におけるフォノン効果を理解・予測するための汎用的な手法を開発
- 今後はシミュレーションによる準安定機能材料の探索やスピン励起・スピン-フォノン相関効果を取り入れる手法拡張など多方面に展開

論文・特許

- R. Masuki, T. Nomoto, R. Arita and T. Tadano, *Phys. Rev. B* **106**, 224104 (2022).
- T. Tadano and W. A. Saidi, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 185901 (2022).
- G. Xing, Y. Miura and T. Tadano, *Phys. Rev. B* **105**, 104427 (2022).

Magnetic materials for green energy conversions

Keywords Permanent Magnets, Soft magnets, Magnetocaloric, Hysteresis, Microstructure

グループリーダー / Group Leader

セペリ アミン ホセイン Sepehri Amin Hossein

✉ H.SEPEHRIAMIN@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/h_sepehriamin



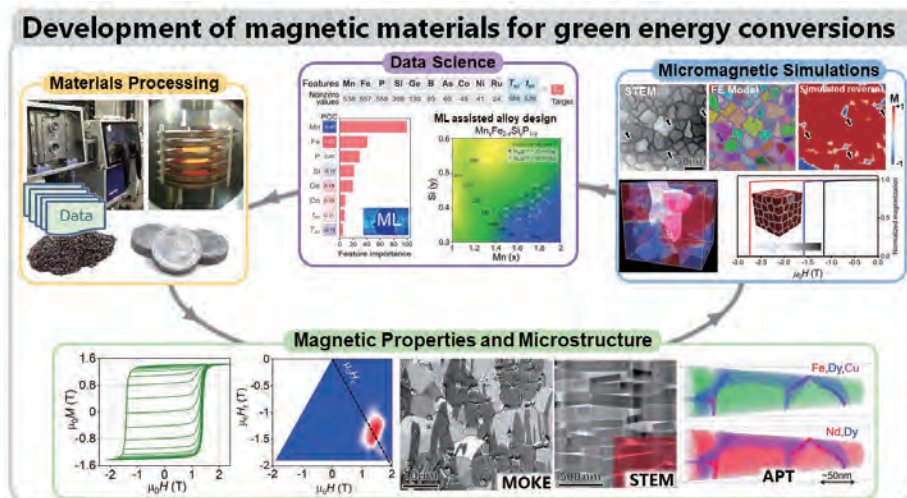
Research Summary

Magnetic materials are essential component in the green energy conversions and play a critical role in realizing carbon neutrality. Our research is dedicated to the development of bulk magnetic materials with three major research focuses on the permanent magnets, soft magnets, and magnetocaloric materials through materials development, microstructure design, and hysteresis engineering.

Novelty / Originality

New demands on magnetic materials have urged researchers to design materials and their microstructures to realize desired magnetic properties. For this purpose, we are using a worldwide unique combinatorial research approach involving micromagnetic simulations, data science, physical property/microstructure characterizations, and materials processing.

Research Contents



Our research has three main areas: (i) Development of high performance permanent magnets without reliance on scarce elements and divergence of rare earth elements. Improvement of thermal stability of magnets and transverse thermoelectric properties of permanent magnets are also being investigated. We are also working on (ii) the development of soft magnetic materials with low core losses for high-frequency applications, and (iii) magnetocaloric materials with giant and reversible magnetocaloric effect for room-temperature applications such as magnetic air conditioning and cryogenic applications for gas liquefaction. For these purposes, we use a combinatorial research approach as demonstrated in Figure 1.

Summary

The development of high performance magnetic materials requires an understanding of the complicated phenomenon of various physical and magnetic properties of materials that are cross-coupled with multi-scale microstructural features. This is the focus of our research interest to develop novel materials with desired magnetic properties.

References

- J.S. Zhang, X. Tang, A. Bolyachkin, A.K. Srinithi, T. Ohkubo, H. Sepehri-Amin and K. Hono, *Acta Mater.* **238**, 118228 (2022).
- X. Tang, H. Sepehri-Amin, N. Terada, A. Martin-Cid, I. Kurniawan, S. Kobayashi, Y. Kotani, H. Takeya, J. Lai, et al., *Nat. Commun.* **13**, 1817 (2022).
- J. Li, X. Tang, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hioki, A. Hattori and K. Hono, *Acta Mater.* **199**, 288-296 (2020).

先端計測技術を用いた革新的磁性材料創成

Keywords 磁性材料, ナノ構造・分散制御, 磁気相関操作, 非平衡状態・散逸構造, 実働条件下中性子計測

主席研究員／Chief Researcher

間宮 広明 Mamiya Hiroaki

✉ MAMIYA.Hiroaki@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mamiya_hiroaki



研究概要

従来より用いられてきた均質なバルク状強磁性材料の平衡状態の定常的磁気応答利用の枠を超え、複雑さゆえに応用を考えられてこなかった現象の本質に先端解析技術等を用いて迫り、得られた知見を基にそれらを材料の機能として発現できる構造を設計・創成・評価し、未来社会のニーズに応える材料基盤を整えることを目指している。

新規性・独創性

- 中性子散乱等の先端計測法や拡張熱揺らぎ分析等の新規分析法
- ナノ粒子分散状態・ナノヘテロ構造解析に基づく応答／散逸過程設計
- スピン再配列相転移や軌道秩序を利用した高効率エントロピー操作
- 中性子透過スペクトル分光を用いた磁気デバイスの非破壊内部スピンイメージング

研究内容



有限/非周期/非平衡/相克/不均質 3D系が示す複雑な磁気現象の積極的利用
超低損失軟磁気特性や高効率温熱効果、巨大磁気熱量効果を示す革新的磁性材料の創成

まとめ

- 中性子イメージングによる稼働状態での磁気デバイス設計検証・高度化
- 最適設計ナノ発熱体を用いた非侵襲選択的がん磁気温熱治療
- 高効率極低温磁気冷凍物質を利用した小型低消費電力水素液化装置

論文・特許

- H. Mamiya, Y. Oba, N. Terada, K. Hiroi, T. Ohkubo and T. Shinohara, *Sci. Rep.* **13**, 9184 (2023).
- H. Mamiya, H. Fukumoto, J. L. C. Huaman, K. Suzuki, H. Miyamura and J. Balachandran, *ACS Nano* **14**, 8421-8432 (2020).
- 特許第7178140号 磁気冷凍モジュール、磁気冷凍システム及び冷却方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

全固体冷却法を用いた極低温動作ヒートポンプの基盤研究

Keywords 磁気冷凍, 全固体冷却, 蓄冷材, 熱スイッチ, 中性子散乱法

主席研究員 / Chief Researcher

寺田 典樹 Terada Noriki

✉ TERADA.Noriki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/terada_noriki



研究概要

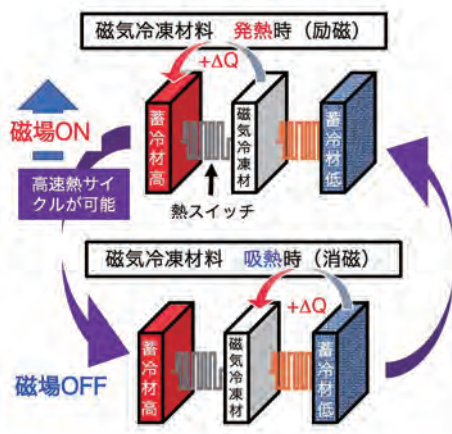
本研究は、極低温磁気冷凍技術において、低温領域で初めて発現する量子物性現象を積極的に利用することに主眼を置き、そこに潜む極低温冷却技術の根幹を成す特異な物性現象の機構解明を行い、得られた知見を冷却技術に応用するものである。我々が極低温物性の知見をもとに独自に見出した弱磁場高応答性磁性体、純金属多結晶固体熱スイッチと巨大磁気比熱蓄冷物質を組み込んだ、これまでに無い動作原理を利用した全固体冷却法による極低温動作ヒートポンプの研究開発を行う。従来技術のように強磁場、強磁性体、気体冷媒を用いるのではなく、弱磁場変化と固体熱スイッチを利用した全固体極低温ヒートポンプによる、新しい冷却法を開発することで量子コンピュータ社会や水素社会の基盤を整える。

新規性・独創性

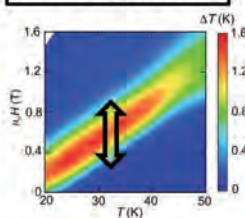
- 気体冷媒を用いない全固体冷却法の開発
- 低温領域で出現する量子物性現象の利用
- 中性子散乱実験等を利用した材料評価

研究内容

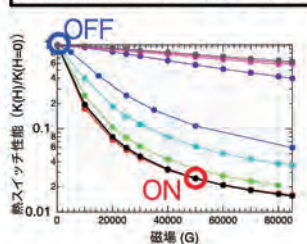
全固体冷却法



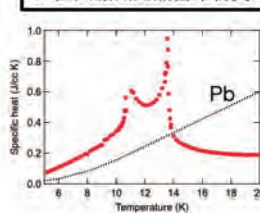
a. 弱磁場応答性磁性体



b. 巨大磁気熱抵抗 熱スイッチ



c. 巨大磁気比熱蓄冷物質



本研究では、極低温領域特有の多彩な量子物性を利用した冷却法の可能性検証という学術的「問い」に向けて、極低温冷却技術の根幹を成す特異な物性現象の機構を解明し、その知見を冷却技術に応用する。量子デバイス冷却素子や、液体水素液化、保冷などへの応用が期待される。

まとめ

近年の量子コンピュータ開発の進展や液体水素製造の社会的要請から、極低温における冷却技術には革新が求められている。これまで、我々は「弱磁場高応答性磁性体」、「巨大熱抵抗効果熱スイッチ」と「巨大磁気比熱蓄冷物質」を見出してきた。今後はこれらの研究を進展させ、極低温ヒートポンプシステムの実現のために必須な以下の研究開発を行う。

論文・特許

- N. Terada, H. Mamiya, H. Saito, T. Nakajima, T. D. Yamamoto, K. Terashima, H. Takeya, O. Sakai, S. Itoh, Y. Takano, *et al.*, *Commun. Mater.* **4**, 13 (2023).
- 特開第2023056570号 全固体熱スイッチを用いた磁気冷凍システムおよび熱スイッチ用材料の製造方法
- N. Terada and H. Mamiya, *Nat. Commun.* **12**, 1212 (2021).

磁気と熱のエネルギー変換を担う機能材料

Keywords 相転移, 磁気, 熱, 電子, 格子, 自由度, 磁気熱量効果, 低温生成

主席研究員 / Chief Researcher

齋藤 明子 Saito Akiko

✉ SAITO.Akiko@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/saito_akiko_1



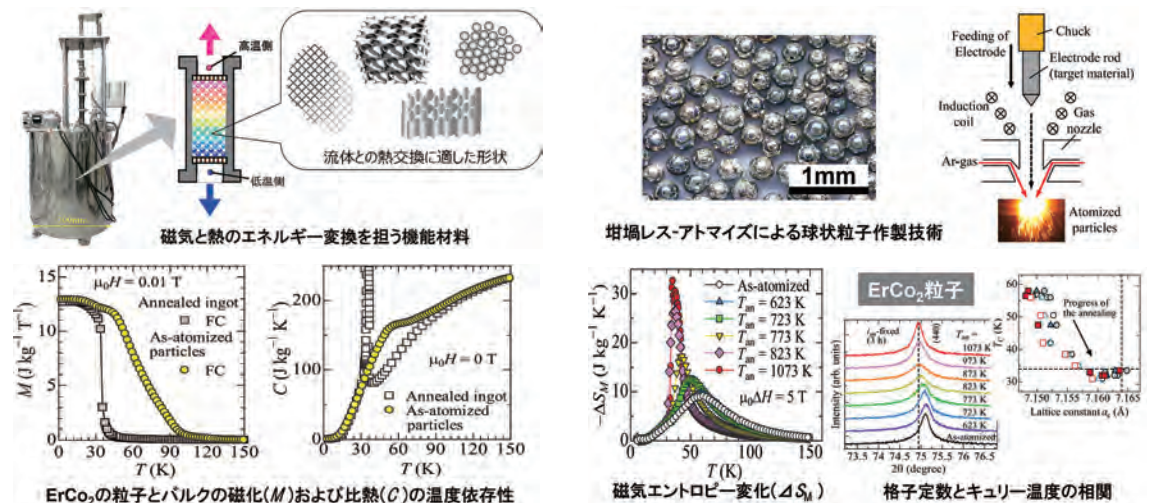
研究概要

エネルギーの高効率な活用が求められる中、電気エネルギーはもとより、熱エネルギーのマネジメント技術の重要性が増している。磁性体は、膨大な数のスピンの自由度を内包する。この自由度をエネルギーの変換や熱溜めとして用いる技術開発の一環として、磁気と熱のエネルギー変換材料の研究を行っている。このような材料を実用するためには、大きなスピン自由度や磁気熱量効果を有する材料探索に加えて、システム応用に適した形態・サイズ・量の材料作製技術・精密な特性評価技術・物理解析技術が不可欠となる。本研究では、これら技術を活用し、物性および工学応用の両面から、磁気冷凍の心臓部として働く高効率なエネルギー変換材料を開発している。

新規性・独創性

- 熱力学サイクルに適した材料機能の設計と物性デザイン
- 粒子創製技術（電極誘導溶解、熱プラズマ）、高融点で脆性な化合物の球状化（サブミリサイズの粒子作製可能）
- 外場による相転移制御（格子、スピン）、相転移温度近傍での熱特性評価・解析技術
- 微細金属組織による磁気・熱特性の制御
- 粒子表面状態による水素拡散現象の制御

研究内容



磁気冷凍システムでの熱力学サイクルに適した材料機能設計、物性デザイン、実用形態設計に基づき、材料探索および粒子創製技術の開発を行った。電極誘導溶解や熱プラズマを用いた球状化技術を構築し、優れた磁気熱量効果を有する希土類金属間化合物の粒子化に成功した。また、粒子の金属組織の微細構造が外場による相転移現象と大きく相関することも見出した。量子コンピュータや超伝導機器などに必要な極低温環境の生成や、水素や天然ガスの液化への応用を目指して、相転移温度近傍での熱・磁気特性に加え、変動磁場下での銅損・鉄損、冷凍サイクルにおける固体/流体界面での熱流動などの評価・理解・制御を進め、実用に適う材料開発を推進している。

まとめ

熱エネルギーの高効率利用を目指し、磁性体のスピン自由度をエネルギーの変換や熱溜めとして用いる機能材料の研究を推進した。今後、磁気冷凍による高効率な水素液化や空調、蓄冷式冷凍への応用、量子コンピュータや超伝導機器の冷却応用への展開を目指す。

論文・特許

- T. D. Yamamoto, A. T. Saito, H. Takeya, K. Terashima, T. Numazawa and Y. Takano, *J. Alloys Compd.* **935**, 168040 (2023).
- 齋藤 明子, 竹屋 浩幸, 山本 貴史, 神谷 宏治, 松本 宏一, 沼澤 健則, *低温工学* **58**, 51-57 (2023).
- 特許第7210072号 磁気冷凍材料、これを用いたAMRベッド、および、磁気冷凍装置

構造材料 研究センター

微小力学解析によるハイスループット評価と強化機構解明

Keywords ナノインデンテーション, 電子顕微鏡その場変形, 弾塑性変形, 転位, 降伏応力

センター長 / Director

大村 孝仁 Ohmura Takahito

✉ OHMURA.Takahito@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohmura_takahito



研究概要

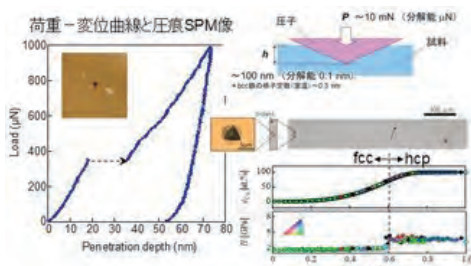
相・組織・組成などが微細・複雑に分布する材料に対してナノインデンテーションなどの微小力学解析を応用することにより、組織因子と力学挙動の関係を精緻に知ることができます。圧入変形の簡便性を活かし、多様な組成などに対する網羅的な測定をハイスループットで測定することが可能で、従来1年間を1日程度に短縮することができます。粒界、第2相、異相界面などの組織因子をスケールで分離することにより、各強化因子の寄与を定量的に評価することが可能である。これらの技術を活用して、材料設計の新たな指導原理提示と実証に貢献する。

新規性・独創性

- ミクロンスケール以下の領域における力学挙動の実験解析
- 電子顕微鏡その場変形による動的挙動の解析
- 空間分解能数ミクロン程度的高速力学マッピング
- 転位論などを基礎とする微小力学挙動モデリング
- マクロ特性発現機構のマルチスケールモデリング

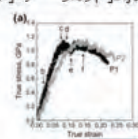
研究内容

右図は、ナノインデンテーション技術の概要とハイスループット測定の実例を示している。100 nm以下の押込深さで荷重-変位曲線が得られ、水平方向は1 μm 以下の非常に小さな領域を対象とすることができる。併設された走査プローブ顕微鏡を用いることにより、数10 nm程度の精度で測定位置を選択することが可能である。試料表面の広い範囲に対して自動多点測定を行うことにより、多様な組成や組織に対して網羅的な測定をハイスループットで行うことが可能である。ナノインデンテーションデータを基にした逆解析によって、各測定点に対応した応力-ひずみ関係を得ることも可能である。



ナノインデンテーション概要とハイスループット測定

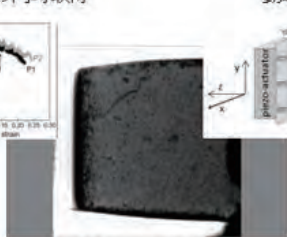
力学データの同時取得



動的挙動解析



TEMその場変形解析



左図は、走査電子顕微鏡(TEM)その場変形解析の概略を示したものである。荷重-変位の力学データを同時に取得できることが特徴であり、TEM観察の動画と同期させることによって転位の動的挙動と力学応答の関係を直接的に知ることが可能である。この技術を用いて、転位性格による易動度や転位密度と流動応力の関係、転位-粒界相互作用、変形中の粒界形成の観察などに成功している。この技術を用いることにより、微視的組織因子による強化機構の詳細を解明することが可能で、材料開発の新しい指針を得ることができる。

まとめ

微小力学解析技術は、従来の評価手法では難しかった微視スケールの力学挙動の実測、ハイスループット測定による網羅的評価、電子顕微鏡技術との連携による動的挙動解析などを可能にする。これにより、組成・組織に基づいた力学情報のデータベース構築、各組織因子による強化機構の解明が可能となり、新たな材料設計のための強力なツールとなる。

論文・特許

- 大村 孝仁, 譚田 真人, 日本金属学会誌 **87**, 31-44 (2023).
- K. Goto, A. Ikeda, T. Osada, I. Watanabe, K. Kawagishi and T. Ohmura, *J. Alloys Compd.* **910**, 164868 (2022).
- H. Li, S. Gao, Y. Tomota, S. Li, N. Tsuji and T. Ohmura, *Acta Mater.* **206**, 116621 (2021).

不純物・有害元素を許容し活用する鉄鋼ものづくり技術

Keywords 構造金属材料, 鉄鋼, 相変態・析出・再結晶, ミクロ組織, 脆性破壊, 水素脆化, 金属疲労

フェロー／Fellow

津崎 兼彰 Tsuzaki Kaneaki

✉ TSUZAKI.Kaneaki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsuzaki_kaneaki



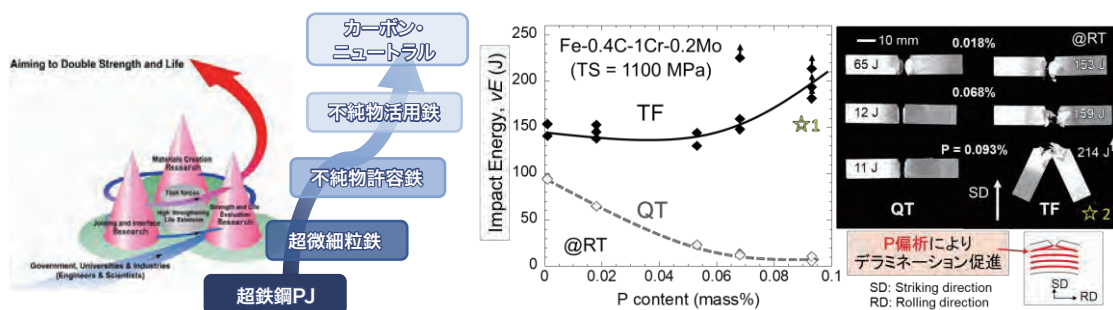
研究概要

カーボンニュートラルと資源枯渇問題の解決に向けた、超鉄鋼プロジェクトSTX21を源とした鉄鋼下工程技術における挑戦です。Niなどの希少な元素に頼らず、かつ製錬時のエネルギー負荷を下げ、破壊抵抗に優れた鉄鋼ものづくり技術の実現を目指します。鉄鋼の特徴は多様性にあります。その多様な力学特性はミクロ組織によって発現します。本研究では、ミクロ組織の制御によって、リンなどの不純物・有害元素を無害化・許容し、さらには活用する技術に挑戦しています。その結果、微細伸長粒組織と粒界偏析によって、リンが多いほど衝撃靱性値が上昇する技術を開発しました。今後は、この技術を、他の有害元素へ、また他の金属へと展開します。

新規性・独創性

- 従来は不純物また有害とされた元素を無害化・活用し、力学特性の向上に結び付ける
- 結晶粒組織と集合組織(結晶方位分布)そして元素分布を巧みに制御し活用する
- これらのミクロ組織制御によって微小き裂が進展する方向を変化させる
- リンを0.093mass%含む1100MPa級鋼(SCM440ベース)の衝撃靱性値を11Jから214Jへと向上(論文1)
- 水素7000 at.ppmのチャージによってFe-Cr-Niオーステナイト系合金の強度と伸びを共に向上(論文3)

研究内容



超鉄鋼プロジェクト(1997年から9年間)で開発した「超微細粒鉄」のものづくり技術を展開して、「不純物許容鉄」さらには「不純物活用鉄」へと結び付けました(上の左図)。リン(P)は、鉄鋼の代表的な有害元素・不純物元素の一つで、粒界に偏析して粒界凝集エネルギーを低下させることによって、粒界破壊・脆性破壊を助長します。我々は、基底結晶粒が試験片長手方向に伸長した微細結晶粒組織とすることで、き裂進展方向を変化させて、衝撃靱性を向上させることを着想しました(論文1, 2)。上の真ん中の図は、SCM440鋼をベースとして、鋼中のP量をJIS規格の0.03mass%以下のものから最大0.093%まで変化したモデル合金における室温でのシャルピー衝撃試験の結果です。通常の焼入れ焼戻し処理を施した材料(QT)では、P量の増加にともない衝撃靱性値が低下しています。これに対して加工熱処理によって伸長微細粒組織とした材料(TF)では、逆にP量に伴い衝撃靱性値が増加し、0.093%Pを含むTF材では200Jを超える値を示しました(☆1)。上の右図は、破断後の試験片形状を示すものですが、期待通りに、0.093% P-TF材では、竹を割るときのような層状破壊(Delamination)を生じていることがわかります(☆2)。

まとめ

- 超鉄鋼プロジェクトSTX21を源とし、その後の関連プロジェクトで得た技術知識を総活用
- 不純物元素Pを無害化・逆活用して高強度鋼の衝撃靱性値の飛躍的向上を達成
- カーボンニュートラル時代におけるスクラップを鉄源とした鉄鋼ものづくり技術へと展開

論文・特許

- X. Min, Y. Kimura, T. Kimura and K. Tsuzaki, *Mater. Sci. Eng. A* **649**, 135-145 (2016).
- Y. Kimura, T. Inoue, F. Yin and K. Tsuzaki, *Science* **320**, 1057-1060 (2008).
- Y. Ogawa, H. Nishida, O. Takakuwa and K. Tsuzaki, *Mater. Today Commun.* **34**, 105433 (2023).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

炭素繊維の構造・力学特性の異方性評価と新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の開発

Keywords 炭素繊維, 樹脂, 炭素繊維強化樹脂複合材料, 構造解析, 力学特性評価, 異方性

グループリーダー / Group Leader

内藤 公喜 Naito Kimiyoshi

✉ NAITO.Kimiyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/naito_kimiyoshi

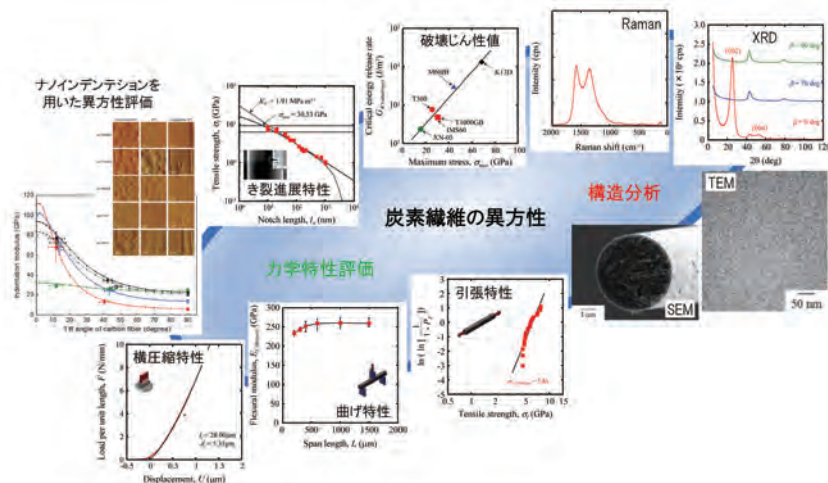
研究概要

炭素繊維は、日本が世界に誇れる材料であり、優れた力学特性を有し、多くの産業分野で使われ始めている。炭素繊維は大きく分けてポリアクリロニトリル系とピッチ系があり、構造や力学的性質の異方性の程度が異なる。炭素繊維を用いた炭素繊維強化樹脂複合材料は3次元造形やより小さな製品にも適用されてきており、炭素繊維の構造や力学特性における異方性を理解することは、炭素繊維強化樹脂複合材料を製品に適用する上でも重要な基礎情報となっている。NIMSでは様々な計測機器を用い、炭素繊維の構造や力学特性の異方性を明らかにしている。新たな樹脂の開発、炭素繊維と樹脂の界面力学特性評価、炭素繊維強化樹脂複合材料の構造や力学特性および異方性の評価も実施しており、新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の開発では本成果が活用されている。

新規性・独創性

- 多種類の炭素繊維の構造や力学特性の異方性を多くの視点(様々な計測機器)を用いて明らかにしている
- 多種類の炭素繊維の力学特性、特に引張強度のパラツキまで、を評価し、強度パラツキとは何かの学理に近づきつつある
- 膨大な構造と力学特性のデータから解析的な評価に結び付けようとしている
- 炭素繊維と樹脂の界面の課題にも対応しており、より精密な炭素繊維強化樹脂複合材料の力学特性評価が可能である
- 樹脂の開発も行っており、新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の開発も行える

研究内容



炭素繊維を用いた炭素繊維強化樹脂複合材料は3次元造形やより小さな製品にも適用されてきており、炭素繊維の構造や力学特性における異方性を理解することは、炭素繊維強化樹脂複合材料を製品に適用する上でも重要な基礎情報となっている。NIMSでは走査型・透過型電子顕微鏡、X線回折、ラマン分光を用いて分析し、炭素繊維の構造を評価している。原子間力顕微鏡、X線光電子分光を用いて分析し、炭素繊維の表面構造を評価している。本研究により、炭素繊維の表面・構造の異方性が明らかとなる。また、試験片間距離の異なる炭素繊維の引張特性を強度/パラツキを含めて評価し、構造、剛性、強度および強度パラツキについて詳細

している、試験片間距離の異なる炭素繊維の曲げ特性、横圧縮特性、角度の異なるナノインデンテーション特性から、弾性率の異方性を明らかにしている。集束イオンビームを用いた炭素繊維への長さの異なる切欠きの導入と引張試験から、炭素繊維のき裂進展特性や破壊じん性値を明らかにしている。本研究により、炭素繊維の力学的性質の異方性が明らかとなる。さらに、両研究成果より、炭素繊維の表面、構造、力学的性質の関連性が明確となる。新たな樹脂の開発、炭素繊維と樹脂の界面力学特性評価、炭素繊維強化樹脂複合材料の構造や力学特性および異方性の評価も実施しており、より精密で高度な新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の実現を目指している。

まとめ

- 炭素繊維の表面・構造を様々な計測機器を用いて分析し、表面・構造の異方性を明らかにしている。
- 炭素繊維の様々な力学特性試験を実施し、力学的性質の異方性を明らかにしている。
- 表面・構造と力学特性の関連性を明らかにし、新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の材料・構造設計手法の確立を目指している。

論文・特許

- K. Shirasu, K. Goto and K. Naito, *Compos. B. Eng.* **200**, 108342 (2020).
- K. Naito, *Carbon* **126**, 346-359 (2018).
- K. Naito, Y. Tanaka and J. M. Yang, *Carbon* **118**, 168-183 (2017).

環境と界面に着目した疲労破壊機構の解明

Keywords 疲労破壊機構, フラクトグラフィ, 極限環境, 界面, 高強度材料

主幹研究員／Principal Researcher

小熊 博幸 Oguma Hiroyuki

✉ OGUMA.Hiroyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/oguma_hiroyuki



研究概要

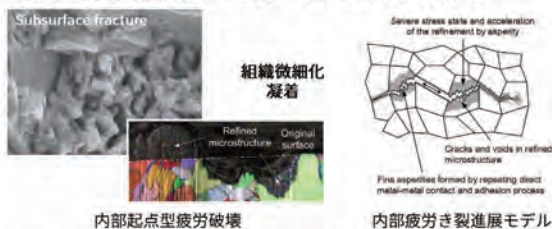
機器の高速化や軽量化に伴い複合材料の適用範囲が拡大している。しかし、材料の適用が先行し、基礎データや知見の蓄積が十分ではなく、構造物において材料の特性を生かし切れていない。そこで「界面」と「環境」に着目して疲労破壊における現象の詳細と強度支配因子を明らかにし、材料の強度と信頼性の向上を目指す。実使用環境における疲労特性を明らかにするだけでなく、破壊機構ならびに強度支配因子の解明のために周囲環境を利用する。実験データ、特に長期信頼性に関わるデータを系統的に蓄積し、強度特性ならびに破壊機構の解明を行い、材料設計・構造設計（強度・寿命設計）手法の確立をする。そして、極限環境における新材料の適用と早期導入を可能にする。

新規性・独創性

- 金属、樹脂ならびに複合材料を対象として、き裂が露される環境に着目し、破壊機構と強度特性を解明する実験的研究を展開。
- 真空環境を利用した高強度金属材料の内部起点型疲労破壊における特異な現象と強度特性との相関を解明。
- マルチマテリアル構造設計に関連した接着接合（同種・異種金属、CFRP/金属）の強度特性ならびに水環境の影響を評価。
- 新開発された機能性CFRPを対象としたデータベースを構築ならびに機能性付与と破壊機構および強度特性との相関を解明。
- CF/GFハイブリッド材料の強度評価を実施し、構成材料の強度特性からハイブリッド材料の強度特性を予測する手法を提案。

研究内容

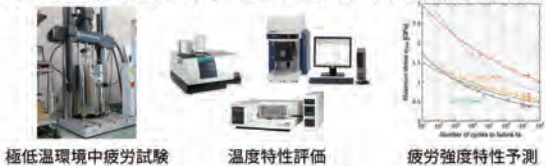
【材料：高強度金属材料 | 環境：真空 | 界面：き裂面】



【材料：樹脂（接着剤） | 環境：水・塩水 | 界面：樹脂-金属】



【材料：複合材料 | 環境：極低温 | 界面：繊維-樹脂、層間】



【金属材料】高強度金属材料の超高サイクル疲労における内部起点型疲労破壊の発生機構の解明を目的として大気中と超高真空中で実験を行い、材料内部と真空中でき裂進展機構に共通点があることを見出した。さらに組織の微細化と凝着現象がき裂進展特性に影響していることを示した。材料種に依存しない統一的な超高サイクル疲労の発生機構ならびに現象を組み込んだ高精度の疲労寿命・強度予測式を提案する。

【樹脂材料】マルチマテリアル構造に関連して接着構造（同種・異種金属、CFRP/金属）を対象として疲労強度評価を実施した。その中で接着剤の種類、接着厚さ、被着体の違いが接着構造の破壊機構や強度特性に与える影響について明らかにした。さらに、海水中での使用を想定して、塩水浸漬後の接着構造の強度や界面特性を評価し、劣化機構の解明を進めている。

【複合材料】機能性CFRPの開発の一環として強度特性（静的・疲労・層間破壊靱性）や温度特性（線膨張係数、動的粘弾性）に関するデータベースを構築した。さらにマルチスケールで界面に着目して機能性付与と破壊機構ならびに強度特性の相関を明らかにした。そして機能性付与による強度特性の低下を抑えられたことを示した。一方、新開発のCF/GFハイブリッド材料の実装化のために強度評価を実施した。その中で、繊維の体積分率が異なる材料を対象として系統的に強度試験を行い、構成材料の強度特性からハイブリッド材料の強度特性を予測する手法を提案した。さらに液体水素中での使用を想定した極低温環境下での強度特性評価や破壊機構の解明も進めている。

まとめ

- 材料種に依存しない統一的な超高サイクル疲労の発生機構ならびに現象を組み込んだ高精度の疲労寿命・強度予測式を提案する。
- 接着構造の破壊機構ならびに疲労強度特性を解明し、マルチマテリアル構造における接着接合の設計指針を示す。
- 複合材料ならびにハイブリッド材料の極低温環境下での疲労強度特性と破壊機構の解明、強度データベースの構築をする。

論文・特許

- H. Oguma, *Materialia* **21**, 101312 (2022).
- H. Oguma and K. Naito, *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **45**, 3514–3523 (2022).
- 特許第658669号 繊維強化プラスチックケーブルの定着構造体及びその製造方法、強度試験方法、並びに強度試験用サンプル

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Sustainable and multifunctional polymeric composites

Keywords Thermoplastic polymer, Crosslinked polymer, Biomass, Nanosheets, Interface

研究員 / Researcher

タンクス ジョナサン デビッド Tanks Jonathon David

✉ TANKS.Jonathon@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tanks_jonathon



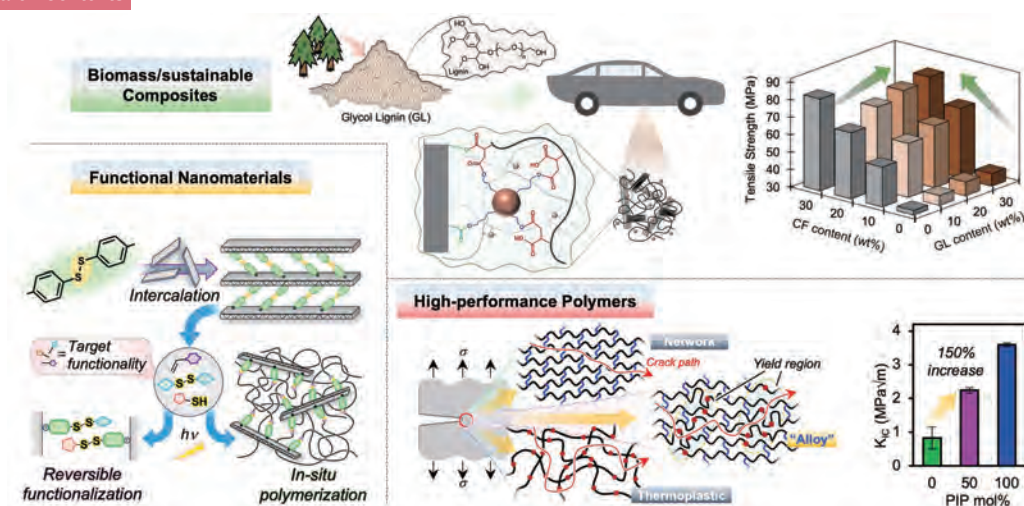
Research Summary

- Thermoplastic composites containing biomass for sustainable automobiles
- Polymers with high intrinsic fracture toughness for structural applications
- Nanocomposites with designed functionality (conductivity, transparency, etc)
- 2D materials and polymers with reversible bonding for advanced applications

Novelty / Originality

- Simultaneously improve mechanical properties while utilizing renewable biomass.
- Realize high-toughness polymers without relying on dispersed fillers.
- Stimuli-responsive nanomaterials facilitate controlled polymerization/assembly.

Research Contents



Structural applications require robust mechanical properties (strength, modulus, toughness) and environmental resistance (heat, light, moisture). We try to improve the structural performance of polymeric materials by controlling the chemical and physical structures (nano/meso). For example: modifying the network structure of crosslinked polymers to improve rate-dependent behavior; blending renewable biomass with conventional polymers like polyolefins to create mechanically robust, sustainable composites for automobiles; functionalizing inorganic layered materials with dynamic covalent bonds facilitates in-situ polymerization and photo-controllable reversible functionalization. Current and future work focuses on the development of sustainable, multifunctional polymeric composites for advanced structures and other applications.

Summary

Using various approaches to design and control the chemical or physical microstructure of polymers and their composites, we can create high-performance materials for a wide range of structural applications. My future focus is on polymeric composites that can solve environmental and energy problems.

References

- J. Tanks, K. Tamura, K. Naito, T. T. Nge and T. Yamada, *Compos. Sci. Technol.* **238**, 110030 (2023).
- J. Tanks, T. Hiroi, K. Tamura and K. Naito, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **96**, 65-71 (2023).
- J. Tanks, K. Naito and K. Tamura, *Mater. Lett.* **335**, 133821 (2023).

室温～1400℃の高温顕微観察・ひずみ測定技術

Keywords 高温観察, ひずみ測定, 耐熱材料, 高温反応, 高温損傷

グループリーダー / Group Leader

垣澤 英樹 Kakisawa Hideki

✉ KAKISAWA.Hideki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kakisawa_hideki



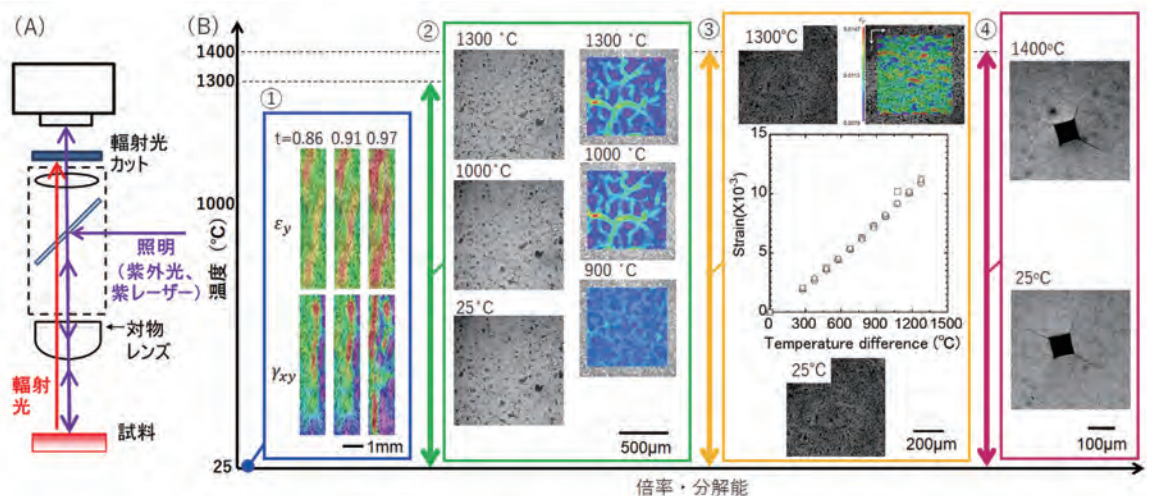
研究概要

熱エネルギーの有効活用のためセラミックス基複合材料(CMC)など耐熱構造材料の重要性が増している。高温での変形・破壊挙動や化学的な劣化をその場観察し、さらに観察画像を解析しひずみ分布測定も行うことができれば、破壊・劣化機構の理解や材料設計に大きな貢献ができる。また、熱サイクル中の材料表面を連続的に観察できれば、様々な温度で生じる変化を1回の実験、1個の試料で調べることが可能になる。本研究では、高温で材料自身が発する輻射光を遮断し、輻射光より短い波長の照明を用いることにより、輻射光の影響を受けずに室温～1400℃まで連続して高温光学顕微観察を行える技術を開発した。また、デジタル画像相関法(DIC)を組合わせ高温ひずみ測定も可能にした。

新規性・独創性

- 室温～1400℃まで連続して輻射光の影響を受けずに光学顕微観察が可能。
- 輻射光によるコントラスト低下(白飛び)のない画像を安定して取得できるためDICが適用でき、ひずみ分布測定が可能。
- 高温機械試験機と組合せた熱機械的損傷のその場観察、高温反応のその場観察、熱膨張係数測定、濡れ角測定など様々な応用。

研究内容



(A) 開発した高温光学顕微観察システムの概要。(B)開発したシステムを様々な温度、ディメンジョンで応用した例：① 引張負荷中のセラミックス基複合材料(CMC)の引張ひずみおよびせん断ひずみ分布を測定し、破壊機構を明らかにした。② CMC用耐環境コーティング(EBC)の熱サイクル中の損傷過程をその場観察し、昇温途中の1000℃でマッドクラックが発生する瞬間を捉えた。③ 冷却中のEBCの熱ひずみを測定した。これを用いて室温～1400℃での面内方向の熱膨張係数を温度の関数として取得した。④ 多結晶セラミックス上のピッカース圧痕の頂点から発生したき裂が高温でヒーリングする過程をその場観察した。

まとめ

1400℃で光学顕微レベルでDIC測定を行える技術は他に例がない。高温損傷のその場観察だけでなく、これまで困難であったコーティングの面内熱膨張係数の測定など、ユニークな成果を挙げている。既存の炉や高温機械試験機と容易に組合せ可能で、今後も多様な応用展開が考えられる。

論文・特許

- H. Kakisawa, T. Nishimura, T. Yokoi, N. Yamaguchi and S. Kitaoka, *Surf. Coat. Technol.* **439**, 128427 (2022).
- R. Inoue, Y. Arai and H. Kakisawa, *J. Mater. Sci.* **54**, 2824-2835 (2019).
- Y. Dong, H. Kakisawa and Y. Kagawa, *Meas. Sci. Technol.* **25**, 025002 (2014).

プラズマイオンプレーティングによるサイアロン薄膜の作製

Keywords セラミックス基複合材料, 耐熱性向上, 耐酸化性向上, サイアロン薄膜, 気相合成法, コーティング材料

主任研究員 / Senior Researcher

鈴木 裕 Suzuki Hiroshi

✉ SUZUKI.Hiroshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/suzuki_hiroshi



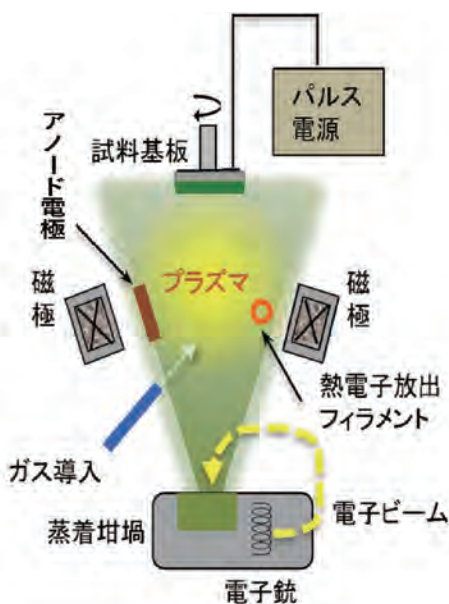
研究概要

セラミックス基複合材料 (CMC) は繊維とマトリックスの界面で剥離が生じることによりマトリックスき裂を偏向させ瞬時破壊を回避する。界面の剥離挙動を制御するため繊維表面には気相合成法によるコーティングが施されているが、実用化が始まったSiC繊維強化SiCに用いられるBNコーティングは耐酸化性不足で繊維の耐熱性を100%引き出すことはできない。本研究では、耐熱性、耐酸化性を向上させたコーティング材料としてサイアロンに着目する。様々な組成のサイアロンを気相合成するプロセス指針を熱力学的な視点から構築するとともに、SiC繊維コーティングとして最適なサイアロン組成を高温機械特性評価およびSiCとの界面特性評価を明らかにすることを目的とする。

新規性・独創性

- プラズマイオンプレーティングという気相蒸着法によるAl-Si合金からのサイアロン薄膜の直接合成
- サイアロン薄膜作製のための酸素・窒素混合ガスの圧力、混合比の最適条件探索
- 酸素・窒素ガスをイオン化するためのアルゴンガスに印加する高周波電源のプラズマ条件
- サイアロン薄膜の高温域で強度などの機械的特性と耐熱性の評価

研究内容



磁界励起型プラズマイオンプレーティング装置 模式図

本研究では、プラズマイオンプレーティングという気相蒸着法によりAl-Si合金からのサイアロン薄膜の直接合成を試みて、その機械的特性、特に高温域での強度、耐熱性を明らかにすることを目的とする。本研究で用いる磁界励起型プラズマイオンプレーティング法では、真空中容器内で電子ビームにより蒸発させたAl-Si蒸発粒子がアルゴンプラズマガス中を通過することでプラスの電荷を帯び、同じく雰囲気ガスである酸素・窒素混合ガスもプラズマでイオン化し、蒸発させたAl-Si蒸発粒子と直接反応させることで、加熱した各種基板上にサイアロン薄膜を作製するため、密着性の強い膜を作ることが出来る特徴がある。この際、問題となるのが、酸素・窒素ガスをイオン化するためのアルゴンガスに印加する高周波電源のプラズマ条件であり、また酸素・窒素混合ガスの圧力、混合比であると考えられ、その最適条件を探ることが重要である。磁界励起型プラズマイオンプレーティング装置を用いて、これまでに Si_3N_4 製のベアリングボールへのTiN薄膜のコーティングや Al_2O_3 、 Si_3N_4 基板へのBN薄膜の作製などについて研究を行ってきており、その実績は豊富である。また、提案者が所属する研究グループでは、セラミックス基バルク材料の高温での耐熱性、機械的特性についても長く研究を行ってきており、その経験と手法は、本研究で提案しているプラズマイオンプレーティングによるサイアロン薄膜の高温での耐熱性、機械的特性の評価に大いに役立つものであり、研究の進展が期待される。

まとめ

- 本研究で、酸素・窒素混合ガス中、Al-Si合金からの薄膜に Al_2O_3 、 Si_3N_4 や SiO_2 などの結晶回折ピークが見られた。
- サイアロン結晶からの回折は観察されなかったが、さらに1000℃以上の熱処理により、サイアロン結晶薄膜への変化が期待される。
- 今後、サイアロン薄膜の高温域での機械的強度、耐熱性についても評価を行う予定である。

論文・特許

- H. Suzuki, H. Araki, M. Tosa and T. Noda, *Mater. Trans.* **48**, 2202-2206 (2007).
- H. Suzuki, H. Araki, M. Tosa and T. Noda, *J. Cryst. Growth* **294**, 464-468 (2006).
- 特許第4811851号 シリコナノワイヤーの架橋成長方法

高温評価技術によるナノ素材由来高温耐環境性CMCs創製

Keywords 高温材料, 炭化ケイ素 (SiC), セラミックス基複合材料 (CMC), ナノ粒子, 分散・凝集, 水蒸気酸化

主任研究員 / Senior Researcher

下田 一哉 Shimoda Kazuya

✉ SHIMODA.Kazuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/shimoda_kazuya



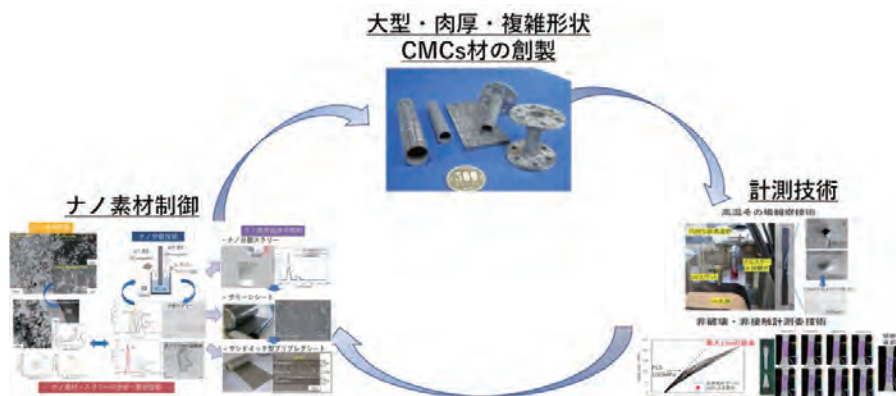
研究概要

航空宇宙や先進原子力・核融合分野等の高温過酷環境下で用いられる材料は、高温に加え環境要素が強く影響する。そのため、軽量かつ優れた高温強度や低放射化誘導特性を有するSiC系のセラミックス基複合材料 (SiC/SiC) が着目されている。本研究では、これまで培ってきた非破壊・非接触な計測技術と高温その場観察技術を組み合わせることで高温疲労特性評価の国際標準化を目指し、同時に高温過酷環境である高温疲労特性に耐える材料の創製をナノ素材の計測技術を駆使して制御しフレキシブルな高付加価値な中間材を用いて大型・肉厚・複雑形状にも対応する新規なCMCsを創製する。

新規性・独創性

- ナノ素材の分散・凝集を計測技術を駆使して制御
- サンドイッチ型プリプレグ材を用いることで再現性の高いモノづくり
- 単一の製造方法で典型的な2つの破壊挙動 (高強度型・高擬延性型) を示すCMCs材
- 1000℃を超える高温その場観察可能なUVカメラシステム
- デジタル画像相関 (DIC) 法による非接触なひずみ分布計測による高温で破壊過程の見える化

研究内容



SiC、CNTs、BN等の磁性が異なる3種類のナノ素材を分析・解析を通した分散・凝集スラリーの作製、並びにフレキシブルな高付加価値な中間材 (グリーンシート・プリプレグシート) への変換した。特に、繊維束をグリーンシートで挟むサンドイッチ型プリプレグ材により、これまで困難であった大型・肉厚・複雑形状なCMCs材作製に関して再現性の高いモノづくりができるようになった。様々な作製プロセスを組み合わせることで破壊挙動の異なるCMCs材作製を行ってきたが、本研究開発のプロセス法では、単一の製造方法で典型的な2つの破壊挙動 (高強度型・高擬延性型) を示すCMCs材が作製可能である。又、これまで培ってきた非破壊・非接触な計測技術と高温その場観察技術を組み合わせることで高温疲労特性評価の国際標準化を目指し、特にDIC法でのひずみ分布計測によって高温での破壊過程の見える化を推進していく予定である。

まとめ

扱いにくいナノ素材を安全で扱いやすい材料とすべく、ナノ素材を分析・解析を通した分散・凝集スラリーの作製、並びにフレキシブルな高付加価値な中間材 (グリーンシート・プリプレグシート) への変換、サンドイッチ型プリプレグ材を用いることで再現性の高いモノづくり、1000℃を超える高温その場観察可能なUVカメラシステムによる高温での破壊過程の見える化、これらのソフトからハードまでの一貫した研究開発のカッティングエッジは、今後、航空宇宙、先進原子力・核融合分野に限らず様々な耐熱材料の新規開発などに展開できると期待される。

論文・特許

- K. Shimoda and T. Hinoki, *Int. J. Appl. Ceram.* **20**, 2466-2477 (2023).
- K. Shimoda and H. Kakisawa, *J. Eur. Ceram. Soc.* **43**, 805-813 (2023).
- 特許第6908248号 被覆SiCナノ粒子を用いたSiCセラミックス及びその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

放射光X線CT技術を駆使した高信頼性材料設計の革新

Keywords 焼結、微構造、欠陥、X線CT

主任研究員 / Senior Researcher

大熊 学 Okuma Gaku

✉ OKUMA.Gaku@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/okuma_gaku

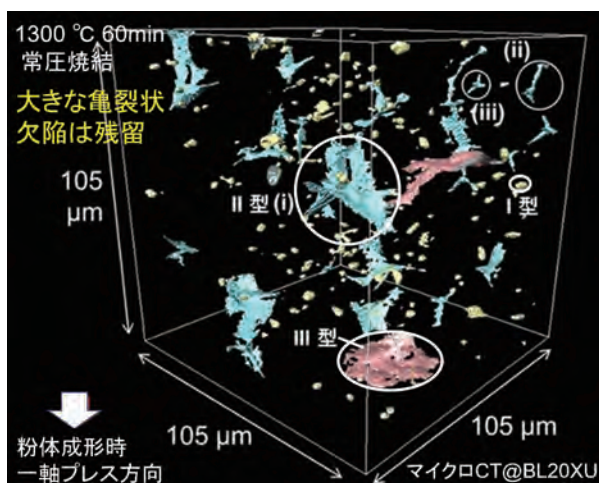
研究概要

放射光CTを用いて、現実の複雑なセラミックス製造プロセスの解明に取り組み、アルミナ内部欠陥の3次元構造と分布を観察することに世界ではじめて成功した。成果は、「放射光でセラミックス内部の欠陥観察に成功」としてプレス発表も行い、産業界からも注目された。この放射光CT技術を実用的な材料である積層セラミックコンデンサの焼結プロセス開発や、不均質な構造をもつ脆性材料、セラミックス基複合材料へ展開した。今後は、金属、セラミックス、複合材料の分野と放射光X線CTとの結びつきから新たな高信頼性材料設計のアイデアにつなげていきたいと考えている。

新規性・独創性

- 放射光X線CT技術のセラミックス分野への適用
- 焼結現象の背後にある熱力学的駆動力の起源の追求
- 製造プロセスにおける欠陥形成機構の解明
- 欠陥分布計測により局所領域の強度予測

研究内容



X線CTを駆使した焼結中の複雑な3次元構造の時間的发展の直接観察をもとに焼結現象の背後にある熱力学的駆動力の起源を追求し、焼結科学の本質に迫るとともに、技術の発展においてブレークスルーをもたらす新しい知見を次々と生み出した。

粒子スケールの微構造変化と材料特性の関係を実験的、理論的に解明した。また、焼結鍛造試験による材料物性測定の実験を行い、CTから推定した物性値が力学試験結果と比較して妥当であることを実証した。SPring8の放射光CTを用いることで、現実の複雑なセラミックス製造プロセスの解明に取り組み、アルミナ内部欠陥の3次元構造と分布を観察することに世界ではじめて成功した。成果は、「放射光でセラミックス内部の欠陥観察に成功」としてプレス発表も行い、産業界からも注目された。企業と協力体制を作り、この放射光CT技術を実用的な材料である積層セラミックコンデンサの焼結プロセス開発や、不均質な構造をもつ脆性材料(ガラスセラミックス)、セラミックス基複合材料へ展開した。さらに、FIBSEMトモグラフィーにより、金属膜の基板への拘束・自由焼結における組織の粗大化と異方性を結合ネットワーク解析、切片長さ、表面エネルギーテンソルなど多様な手法で詳細に調べた。

まとめ

放射光CT技術を実用的な材料である積層セラミックコンデンサの焼結プロセス開発や、不均質な構造をもつ脆性材料、セラミックス基複合材料へ展開した。金属、セラミックス、複合材の分野と放射光CTとの結びつきが思いがけない新たな材料設計のアイデアにつながる可能性は高く、今後の更なる展開が期待される。

論文・特許

- G. Okuma, S. Watanabe, K. Shinobe, N. Nishiyama, A. Takeuchi, K. Uesugi, S. Tanaka and F. Wakai, *Sci. Rep.* **9**, 11595 (2019).
- G. Okuma, N. Saito, K. Mizuno, Y. Iwazaki, H. Kishi, A. Takeuchi, M. Uesugi, K. Uesugi and F. Wakai, *Acta Mater.* **206**, 116605 (2021).
- G. Okuma, D. Kadowaki, T. Hondo, S. Tanaka and F. Wakai, *Sci. Rep.* **7**, 11106 (2017).

耐熱耐環境金属材料の設計と表面改質

Keywords ハイエントロピー合金, 耐熱合金, コーティング, 高温酸化

上席研究員 / Managing Researcher

村上 秀之 Murakami Hideyuki

✉ MURAKAMI.Hideyuki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/murakami_hideyuki



研究概要

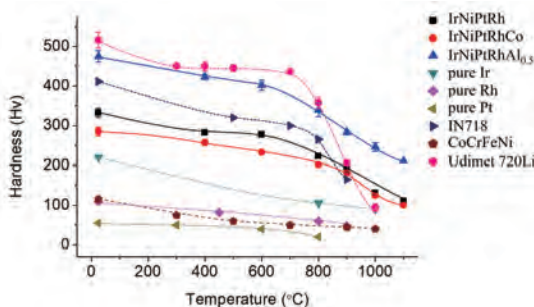
カーボンニュートラルが叫ばれてる中、水素発電やバイオマス発電、燃料電池などが注目されていますが、いずれも熱エネルギーを電気エネルギーに変換する技術です。また、ジェットエンジンやロケットなど、超高温の利用が必須である機関では、高温で過酷な環境に耐えられる部材の開発が必須である。そこでそれぞれの機関が利用する温度、雰囲気に応じ、さらにコストも考慮した材料や、コーティング技術について提案してきました。ここでは最近着目されているハイエントロピー合金による超耐熱材料の開発例、また固体酸化物型燃料電池のインターコネクターへの耐酸化コーティング開発例を紹介します。

新規性・独創性

- 高温強度に優れたIr系ハイエントロピー合金の開発に成功。スペースプレーンや超高温環境への応用に期待 (特許取得済み)
- フェライト系耐熱鋼、複合酸化物を利用した耐酸化表面層の生成に成功、そのメカニズムを解明(室蘭工業大との共同研究)

研究内容

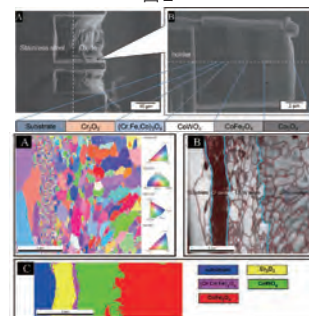
図1



800℃程度で運転する固体酸化物形燃料電池(SOFC)のインターコネクター材として、フェライト系の耐熱鋼が有望視である。しかしながら水蒸気雰囲気下では鋼表面に生成するクロム酸化物が水蒸気と反応して蒸発し、燃料電池中の固体電解質や電極触媒材料に付着、性能を劣化させるCr被毒が問題となる。そこで基材表面にCoWの合金層を電解めっき法によって被覆し、予備酸化処理を行うと図2に示す様にステンレス鋼基板から Cr_2O_3 、Cr-Fe-Co酸化物、 CoWO_4 、Co-Feスピネル、CoOの5層を有する層が生成し、この CoWO_4 がCrイオンの外方拡散を選択的に抑えることでCr被毒を抑えることを明らかにした。

白金族金属元素の一つであるIrは、高融点で高い高温強度を持つが、酸化雰囲気中でIrは1000℃付近で蒸気圧の高い酸化物を生成し減耗するという問題がある。そこでハイエントロピー合金設計の概念を基盤とし、Irの持つ高温特性を保持しつつIr単体より安価で比重が低いIrNiPtRh $\text{Al}_{0.5}$ ハイエントロピー合金を開発した。図1に本合金の硬さの温度依存性について、他の合金と比較した例を示すが、特に900℃以上の高温において最も高い硬度を持つ事が明らかとなっている。本合金はIrよりも耐酸化特性に優れ、またハイエントロピーのもつ強度と延性の両立も期待できることから、点火プラグのチップや宇宙航空分野といった極限環境下での適用を視野に入れている。

図2



まとめ

紹介したIr系ハイエントロピー合金の他、Ni基超合金と似た組織を持ちより安価なNi系ハイエントロピー超合金や、Cr、Taといった高融点金属を主元素とする耐熱ハイエントロピー合金の設計、開発を進めている。表面改質についても使用温度や環境に最適な酸化物を表面に生成させて耐酸化特性を担保する様々な手段を試みている。特に CoWO_4 や CrTaO_4 といった複合酸化物に着目している。

論文・特許

- T. K.Tsao, S. Sheikh and H. Murakami, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 191901 (2021).
- 特許第7082799号 合金構造体
- L. Gan, T. Yamamoto and H. Murakami, *Acta Mater.* **194**, 295-304 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

耐疲労 γ/ε 二相合金による構造物の長寿命化

Keywords 高Mnオーステナイト鋼, 低サイクル疲労, ε マルテンサイト, 制振構造

グループリーダー／Group Leader

澤口 孝宏 Sawaguchi Takahiro

✉ SAWAGUCHI.Takahiro@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sawaguchi_takahiro



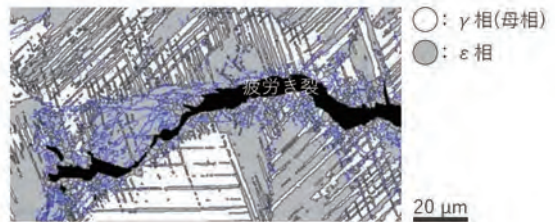
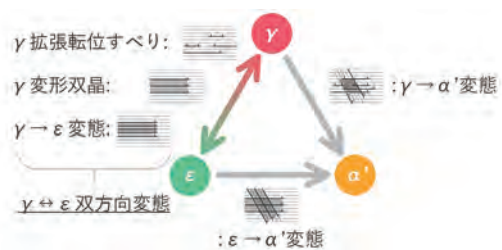
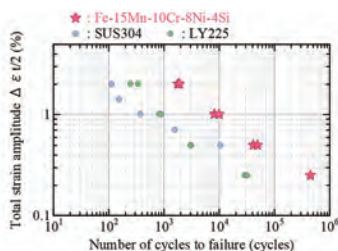
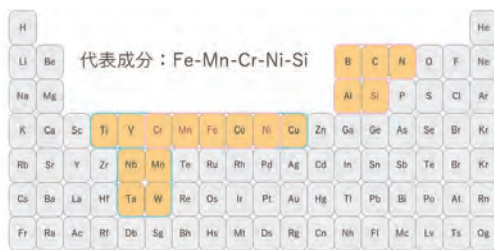
研究概要

首都直下地震や南海トラフ地震が数十年以内に発生することが予想され、その対策技術の構築は喫緊の課題である。建物の耐震補強手法について鋼材ダンパーは低コストな制振技術として現在広く普及している。一方、最近では長時間長周期地震動の問題が注目を集めている。長時間長周期地震動においては多数回の大変形を生じ、従来の鋼材ダンパーでは十分な耐久性が確保できない懸念がある。すなわち、鋼材ダンパーを長時間長周期地震動への対策技術として完成させるためには、低サイクル疲労の克服が大きな課題である。この問題に対し、高Mnオーステナイト鋼の特異な変形機構に着目し、金属疲労に対する耐久性を大幅に向上させた新材料開発に取り組んでいる。

新規性・独創性

- FCC(面心立方)構造の γ オーステナイトからHCP(稠密六方)構造の ε マルテンサイトへの相転移を合金開発のキーマニズムとして活用。
- γ/ε 二相組織による様々な機能・力学特性の改善可能性を探索・実証。
- 繰返し変形下での γ/ε 二相組織の革新的な疲労耐久性改善効果を発見。
- γ/ε 二相組織による疲労耐久性を制振ダンパー鋼材の成分設計に活用。
- 複数回の大地震に繰返し耐える耐疲労鋼材ダンパーの実現。

研究内容



高Mnオーステナイト鋼を中心に3d遷移金属元素、卑金属・半金属元素、侵入型元素といった添加元素が相安定性や原子-欠陥相互作用に与える影響を検証し、その制御を試みている。特に塑性変形メカニズムと疲労耐久性の関係を系統的に調査し、 γ/ε 二相組織が疲労耐久性改善に効果的であることを示した。開発鋼Fe-15Mn-10Cr-8Ni-4Siは塑性変形メカニズムとして可逆的な γ/ε 変態を生じるように設計された鋼材であり、疲労寿命が従来鋼材の10倍以上に及び極めて優れた疲労耐久性を示す。同鋼材は複数回の巨大地震に耐える耐疲労制振ダンパーとして社会実装されており、今後より一層の利用普及が期待される。

まとめ

- 塑性変形メカニズムと疲労耐久性の関係を解明し、 γ/ε 二相組織の活用により耐疲労鋼材が開発できた。
- 開発鋼材は鋼材ダンパーとして実用化されているが、疲労が問題となる鋼構造に広く活用が期待される。
- 元素機能の精査を進め用途に応じた合金設計と高精度な性能予測指針の確立を目指す。

論文・特許

- T. Sawaguchi, I. Nikulin, K. Ogawa, S. Takamori, F. Yoshinaka, Y. Chiba, H. Otsuka, Y. Inoue and A. Kushibe, *Acta Mater.* **220**, 117267 (2021).
- F. Yoshinaka, T. Sawaguchi, S. Takamori, T. Nakamura, G. Arakane, Y. Inoue, S. Motomura and A. Kushibe, *Scr. Mater.* **197**, 113815 (2021).
- 特許第6887642号 低サイクル疲労特性に優れるFe-Mn-Si系合金鋼材

プロセス制御による鑄造材料特性の向上

Keywords 液相プロセス, 鑄造, 複合化, 機械的性質, 素形材

主任研究員 / Senior Researcher

高森 晋 Takamori Susumu

✉ TAKAMORI.Susumu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takamori_susumu



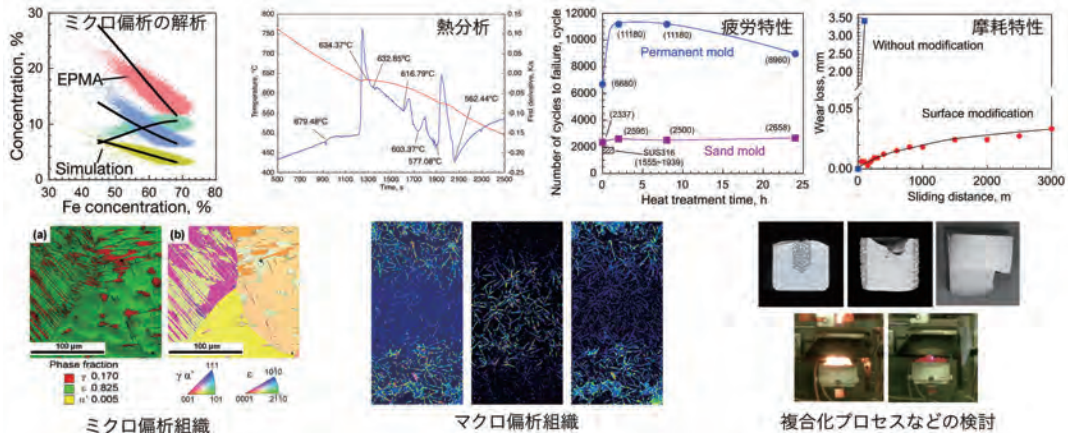
研究概要

素形材の製造方法として溶解鑄造がある。複雑形状が得られる利点があるが、凝固時の偏析や溶湯と鑄型との反応などが問題になることも多い。そのため凝固過程における基礎的知見を得ることが重要となる。各種分析法を組み合わせ、凝固時の現象を正確に把握できれば、偏析や反応などを考慮することによる新しい材料の創製が期待できる。応用としては鑄造時にセラミックスなどを鑄包むことにより局所的に耐摩耗性を持たせたり、耐高温酸化特性を持たせたりすることができると考えられる。偏析や反応を利用し熱処理などにより材料特性を向上させることを目指すとともに、複合化の観点から鑄型材料など鑄造副資材の活用も検討する。

新規性・独創性

- 熱分析やEPMA、EBSDなどを複合的に利用した凝固組織解析
- 偏析や反応を利用した材料特性の向上
- 他の材料との複合化、鑄包み、鑄型利用、熱処理の最適化による特性向上
- 計算状態図を利用し偏析も考慮した材料開発
- 鑄造副資材の新規利用法の検討

研究内容



溶解鑄造を利用したプロセスにより、優れた材料特性を持つ素形材の開発を目指す。鑄造材の特徴としては、マクロならびにミクロ偏析が大きいところにある。凝固時に起こる現象を把握することにより、その時の組織形成過程における偏析や反応が理解できる。基本的には、EPMAなどによる元素分布、EBSDなどによる出現相の分布、熱分析による相変態温度の推定を行い、計算状態図を併用しながら、偏析と出現する相の関連やそれと材料特性の関連を調べる。熱分析では、その冷却時の1次微分を取ることで凝固過程が詳細に把握できることがわかった。耐疲労合金であるFe-Mn-Ni-Cr-Si合金の鑄造材について、組成分布をEPMAなどで調査し、凝固組織と状態図との関連を調査したところ、適度な濃度分布の揺らぎがある組織において、十分な疲労特性が得られることがわかった。また、EPMAで元素分布の相関を調べることで凝固モードが判別できることがわかった。そのほか熱処理を中心とした組織改善や、各種セラミックスを鑄包むことによる局所的に耐摩耗性の向上、活性な金属を利用することによる反応を利用した複合化、その他副資材利用プロセスの検討を試みている。

まとめ

熱分析やEPMAなどにより鑄造組織を解析し元素分布の相関を調べることで、凝固過程に関する知見が得られ、熱処理温度や時間の最適化にも繋がる。さらにマクロ偏析やミクロ偏析が存在する鑄造材料においても優れた材料特性が得られる可能性が示唆できた。計算状態図とも合わせて検討することにより、液相プロセスを利用した素形材の創製方法に新しい展開が期待できる。

論文・特許

- 高森 晋, 吉中 奎貴, 檜原 高明, 澤口 孝宏, *J of Jpn Foundry Eng Soc*, 23-29 (2023).
- S. P. Kumar, S. Takamori, H. Arakia and S. Kuroda, *RSC Adv.* 5, 34109-34116 (2015).
- 特許第3981722号 表面層が改質された鉄鋳とその製造方法

階層的疲労損傷メカニズムの解明と耐疲労合金創製

Keywords 金属疲労, 疲労き裂, 破面観察, 金属材料, 鉄鋼, チタン合金, 放射光, 合金開発

主任研究員 / Senior Researcher

吉中 奎貴 Yoshinaka Fumiyoshi

✉ YOSHINAKA.Fumiyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshinaka_fumiyoshi



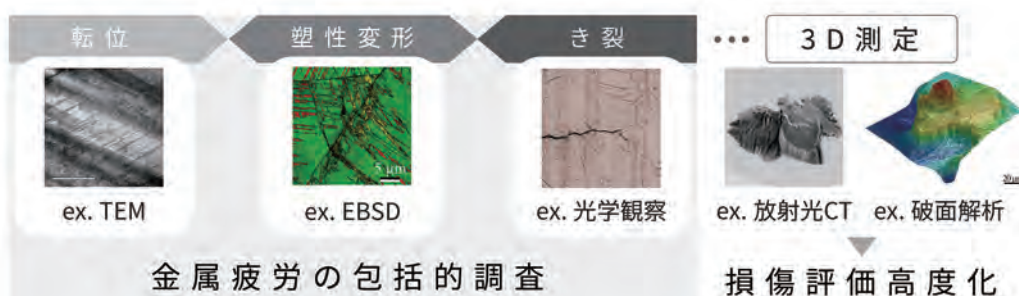
研究概要

疲労は機械構造物の破損原因の大半を占めその対策は安全を確保するうえで重要な問題である。疲労破壊は巨視的には疲労き裂が発生・進展することにより生じるが、微視的にはき裂発生個所あるいはき裂先端領域における塑性変形がき裂を駆動する。すなわち、金属疲労は転位－塑性変形－き裂にまたがる現象であり、各階層にわたる理解が必要である。そこで、主に塑性変形メカニズムに特徴を持つ合金を対象に各種顕微鏡や放射光技術を活用し疲労特性の決定因子をマルチスケールに調査することで疲労メカニズムを解明すること目的として研究を行っている。さらに、疲労メカニズムに基づいた新規耐疲労合金を開発にも取り組んでいる。

新規性・独創性

- 転位－塑性変形－き裂の関係に着目した疲労メカニズム解明
- 光学顕微鏡、電子顕微鏡、放射光技術を用いた疲労変形組織と疲労き裂の計測
- TRIP/TWIPを活用した疲労特性改善手法の模索
- 従来常識を超越した疲労耐久性を有する合金の開発
- 3D破面観察や放射光CTによる疲労き裂の三次元的調査

研究内容



合金開発事例：変形可逆性の向上により従来比20倍の疲労寿命

金属疲労の本質は塑性変形であると捉え、特にオーステナイト鋼と β チタンについて疲労特性の調査を行っている。これらの材料は特異な塑性変形メカニズムを示すことが知られている。化学成分や試験温度を変えることで系統的に塑性変形メカニズムを変化させ疲労試験を行い、金属疲労を抑制するうえで最も効果的な変形メカニズムは何かを調査した。その結果、「変形の可逆性の向上」が疲労耐久性の改善において重要であることを確認し、それを達成する変形メカニズムである「双方向変態」を発現する鋼材＝B-TRIP鋼の開発・調査を行っている。これまでに開発したB-TRIP鋼のうち、最も疲労耐久性に優れたものは一般鋼材の20倍もの疲労寿命を発揮する。また、き裂は損傷評価など実用上においても依然として重要な位置づけにある。そこで、光学顕微鏡やSpring-8を用いた放射光顕微鏡法によるき裂および微視組織のその場観察を活用した研究も推進している。き裂観察および破面観察のノウハウとSEM-EBSDなどによる組織解析を融合させることにより、転位から塑性変形、そしてき裂までを包括的に調査することで複雑な疲労現象についての理解を深めることを目指している。

まとめ

- 塑性変形メカニズムの最適化により疲労耐久性が改善できる。
- 変形可逆性の向上に主眼を置いた耐疲労合金を開発した。
- 転位から塑性変形、き裂までを包括的に解析することで、疲労メカニズムの理解に即した材料創製や損傷評価の高度化が期待される。

論文・特許

- F. Yoshinaka, T. Sawaguchi, S. Takamori, S. Emura and Y. Inoue, *Int. J. Fatigue* **171**, 107581 (2023).
- F. Yoshinaka, T. Nakamura, H. Oguma, N. Fujimura, A. Takeuchi, M. Uesugi and K. Uesugi, *Fatigue Fract. Eng. Mat. Struct.* **46**, 2338-2347 (2023).
- F. Yoshinaka, T. Sawaguchi, S. Takamori, T. Nakamura, G. Arakane, Y. Inoue, S. Motomura and A. Kushibe, *Scr. Mater.* **197**, 113815 (2021).

高性能軽金属材料の開発

Keywords 軽金属材料, 移動用部材, 力学特性, 電気化学特性

グループリーダー / Group Leader

染川 英俊 Somekawa Hidetoshi

✉ SOMEKAWA.Hidetoshi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/somekawa_hidetoshi



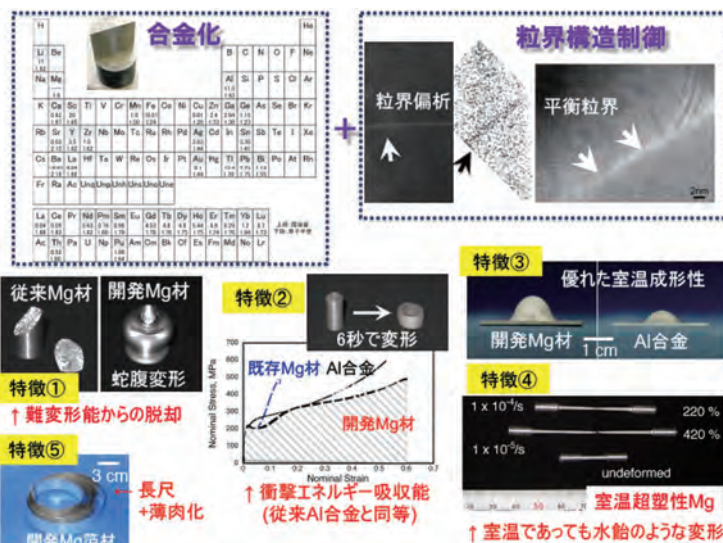
研究概要

マグネシウムやアルミニウムは、地球環境問題を解決する金属材料として注目を浴びている。とりわけ、最小密度であるマグネシウムは期待の軽金属材料ではあるが、その結晶構造（六方晶）に起因し、壊れやすい・燃えやすい・錆びやすいなどの欠点を呈し、実用、適応化事例が極めて少ない。本研究では、従来冶金学の改善策として広く使用されている「組織制御」と「合金化」を基盤としながらも、三次元配列の欠陥である「結晶粒界」の活用に着目し、「元素機能」を取り入れることで、従来にない高性能な非鉄軽金属材料の開発に取り組んでいる。主たる成果（開発例）として、蛇腹変形能や易二次成形能の付与、高衝撃吸収能化、室温超塑性、長尺+箔化などが挙げられる。

新規性・独創性

- 結晶粒サイズの微細化（組織制御）と溶質元素添加（合金化）は古来からの特性改善策
- ありきたりの結晶粒界と加工熱処理によって生じる溶質元素の粒界偏析を制御因子として活用
- 結晶粒界制御と微量・コピキタス元素添加による変形メカニズムおよび特性改質に挑戦
- 従来冶金学の常識を覆す数多くの非鉄軽金属材料の創製・開発に成功

研究内容



結晶粒界に適切な添加元素を配置（偏析）することで、『マグネシウム＝壊れやすい+加工しづらい典型な金属材料』という常識を一新した素材開発に努めている。脆さの要因となる変形双晶と転位運動の相互作用を抑制し、汎用アルミニウム合金と同等の塑性変形能および衝撃吸収特性を示すこと[図①②]、高温域で観察される超塑性が室温であっても発現し、水飴のような変形を誘起すること[図④]、汎用アルミニウム合金以上の加工性（張出し性）に優れることや[図③]、素材の長尺+箔肉化も可能であること[図⑤]を特徴とする。ユニークな特性や機能性を付与した多様な素材が創製できることから、安全・信頼性が要求される移動用構造部材への適応は勿論のこと、マグネシウム固有の特性である減衰能や電気化学を活かした電気・電子部材や電池部材への展開にも期待がもてる成果である。

まとめ

- 結晶粒界vs.元素機能に関する理解の深化と、適材適所配置による更なる特性・機能性の高度化
- 極限条件を含めた多様な環境下であっても特性・機能性発現の確保と、当該組織様相からなる素材の大型化ならびに素材創製に係る低コスト化

論文・特許

- H. Somekawa, *Mater. Trans.* **61**, 1-13 (2020).
- H. Somekawa, A. Singh, R. Sahara and T. Inoue, *Sci. Rep.* **8**, 656, (2018).
- H. Somekawa, A. Singh, T. Mukai and T. Inoue, *Philos. Mag.* **96**, 2671-2685 (2016).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

高性能Ni基超合金の開発

Keywords Ni基超合金、高温クリープ、熱疲労、耐酸化性

グループリーダー／ Group Leader

川岸 京子 Kawagishi Kyoko

✉ KAWAGISHI.Kyoko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawagishi_kyoko



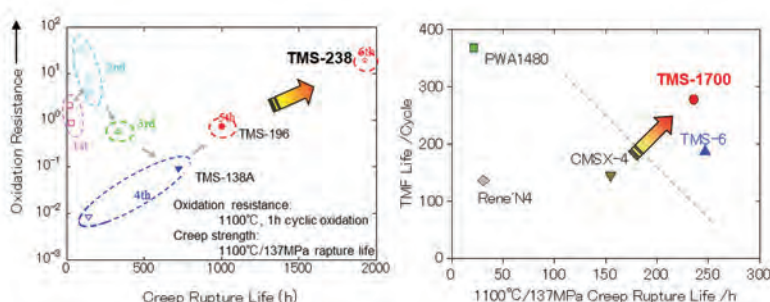
研究概要

航空用ジェットエンジンや発電用ガスタービンの効率向上のためには燃焼ガスの高温度化が必須であり、そのために、タービン材料の耐用温度の向上が求められている。当機構ではタービン翼材料として多くのNi基単結晶超合金を開発している。航空エンジン用先進単結晶超合金、発電ガスタービン用低コスト単結晶超合金、航空エンジンタービンディスク用鋳鍛造/粉末冶金超合金など、用途に応じて適切な材料設計を行い、開発合金の実用化に向けて特性評価を行う。

新規性・独創性

- 高温強度と耐酸化性の両立
- 高温強度と耐腐食性の両立
- 高温クリープ特性と熱疲労特性の両立

研究内容



左図は、縦軸に耐酸化性を表す指標を、横軸に1100°C / 137MPaでのクリープ破断寿命をプロットしたものである。Ni基単結晶超合金は世代を上げるにつれ高温強度は向上してきたが、耐酸化性は低下する傾向にあった。そこで高温強度を維持しつつ、耐酸化性高向上させる元素を増やし、それらのバランスをとったものが第5世代以降の超合金である。TMS-238は、高温酸化特性とクリープ強度特性に優れた第6世代Ni基単結晶超合金であり、航空機エンジンの高圧タービン翼としての実用化が期待される。

右図は縦軸に熱疲労特性を、横軸に1100°C / 137MPaでのクリープ破断寿命をプロットしたものである。発電タービンでは製造コストの面からReやRuの添加は望ましくないとされる。そこで、強化元素であるReを減らしつつクリープ強度特性と熱疲労特性に優れた低コストNi基単結晶超合金TMS-1700を開発した。現在、実用化に向けて検証が行われている。

まとめ

NIMSが開発したタービンブレード用単結晶超合金、タービンディスク用鋳鍛造/粉末冶金超合金は海外の汎用材料より優れた耐用温度を示し、その実用化によって燃料消費率の低減、CO₂排出量の削減に貢献することができる。現在、それぞれの合金の実用化に向けて、リサイクル技術の開発、材料特性データベースの構築を行っており、さらに製造コスト抑制のためのプロセス改良、補修技術の開発などが課題として考えられる。

論文・特許

- K. Kawagishi, C. Tabata, T. Sugiyama, T. Yokokawa, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, Y. Takata, M. Yuyama, S. Suzuki, *et al.*, *Superalloys 2020*, 798–803 (2020).
- K. Kawagishi, A. Yeh, T. Yokokawa, T. Kobayashi, Y. Koizumi and H. Harada, *Superalloys 2012*, 189-195 (2012).
- 特許第5636639号 Ni基超合金

航空機エンジン用超耐熱材料の開発

Keywords Ni基超合金, 自己治癒セラミックス, タービン翼, タービンディスク, NIMS超合金特性予測プログラム

主幹研究員／Principal Researcher

長田 俊郎 Osada Toshio

✉ OSADA.Toshio@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/osada_toshio



研究概要

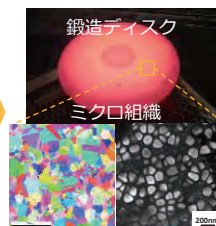
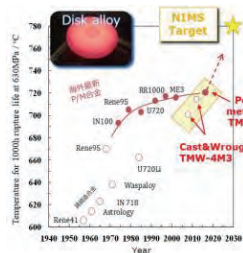
航空機市場への挑戦のためには、カーボンニュートラル目標の下、航空機エンジンにおけるCO₂排出削減に大きく貢献する耐熱材料の開発が重要である。特に、タービン翼・ディスクの軽量・高温・無冷却化に資する純国産超耐熱材料の提案および国際認証に耐えうる信頼性の評価が極めて重要である。NIMSが今後も世界をリードしていくために、Ni基超合金開発に加え、自己治癒セラミックスを含む新たな超耐熱材料の開発を推進するとともに、その組成・組織・特性予測システムの確立を目指す。

新規性・独創性

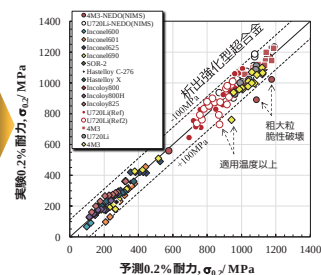
- [Ni-Co基超合金]および「自己治癒セラミックス」という新規設計概念により純国産材を創製する。
- NIMS発国産合金であるNi-Co基超合金の組織形成・特性発現メカニズムの解明を目指します。
- 提案する組織・特性・自己治癒予測手法を活用し、新材料の実用化を支援・推進します。
- 人の骨と同じ“自己治癒”機能の設計・付与により、セラミックスの“脆さ”の克服に挑戦します。

研究内容

■タービンディスク用Ni-Co基超合金の設計

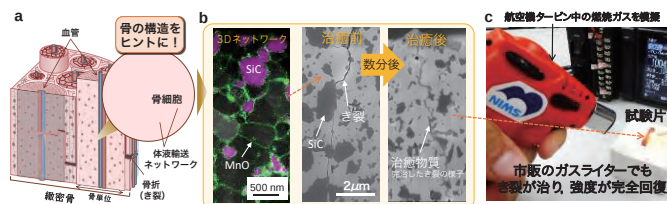


■超合金特性予測プログラム開発



■高速でき裂が完治する自己治癒セラミックスの開発

～骨の治癒がヒントに！フライト中にヒビを治す航空機エンジン用部材の実現へ大きな一歩～



まとめ

Ni-Co基超合金(TMW合金、TMP合金)はガスタービン及び航空機エンジン高圧タービンディスクへの実用化を推進するとともに、高度な安全性が要求されるタービン動翼等の回転部材に自己治療セラミックスを展開を目指します。そのために、組織形成・強度発現メカニズムをベースとした、組成・組織・特性・性能予測システムとして、「産業現場で使える」NIMS超合金特性予測プログラムの構築を目指します。

論文・特許

- T. Osada, T. Koyama, D. S. Bulgarevich, S. Minamoto, M. Osawa, M. Watanabe, K. Kawagishi and M. Demura, *Mater. Des.* **226**, 111631 (2023).
- T. Osada, K. Kamoda, M. Mitome, T. Hara, T. Abe, Y. Tamagawa, W. Nakao and T. Ohmura, *Sci. Rep.* **7**, 17853 (2017).
- T. Osada, Y. Gu, N. Nagashima, Y. Yuan, T. Yokokawa and H. Harada, *Acta Mater.* **61**, 1820-1829 (2013).

革新的次世代断熱素材TIISA®・EB-PVD遮熱技術

Keywords TIISA®, エアロゲル, 遮熱コーティング, EB-PVD

主任研究員／Senior Researcher

ウー ラダー Wu Rudder

✉ WU.Rudder@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/wu_rudder



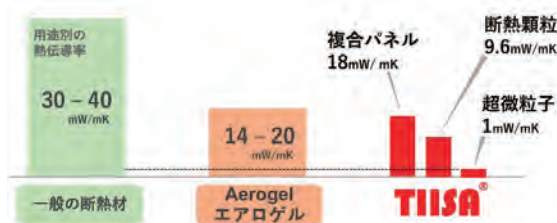
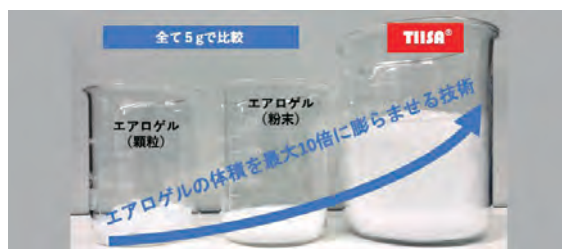
研究概要

TIISA®は現時点で最高性能の断熱材であるエアロゲルを独自の技術で再設計した新たな断熱材です。-253℃の液化水素運搬向けの保冷材や宇宙向けには優れた断熱性を有するTIISA®単体で対応し、経済性が重要な建材、プラント、家電分野にはコストパフォーマンスに優れたTIISA®複合体で対応することで、社会で必要とする断熱材に幅広く対応していきます。地球にやさしい良質なエネルギー生産の観点では水素火力発電が必要となる超高温遮熱コーティング(TBCs)サービスも開始していきます。断熱材、遮熱コーティングなどの最先端の熱制御技術を駆使して社会が抱える環境・エネルギー問題解決に挑戦していきます。

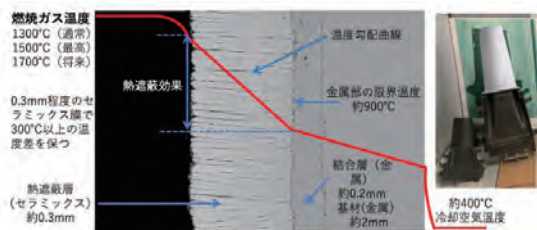
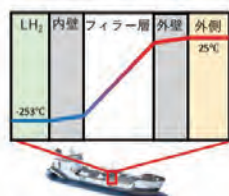
新規性・独創性

- TIISA®は、固体断熱材で最高の断熱性能を有し、1300℃の炎に長時間さらしても燃えません。
- 非常に軽量なのでモバイル装置向けに適しています。
- 航空・宇宙産業、家電、建材、液体水素貯蔵・運搬、EV向けLIBの熱暴走対策材などでの使用が期待されています。
- LNG・水素火力発電用タービンブレード向けなどの超耐熱遮熱コーティングサービスを行っています。

研究内容



水素社会実現に向けた用途開発



近年、建造物の省エネルギー化を進める上で、熱管理に大きな関心が寄せられている。また、持続可能な社会を目指して再生可能エネルギーの導入拡大、水素社会実現の推進に向け、液化水素燃料の輸送または貯蔵の際には-253℃の極低温環境を維持する優れた断熱材による保冷が欠かせない。水素社会実現のためには水素燃料火力発電に必要な遮熱コーティングの開発も必要である。本研究活動では、高い断熱性能を発揮するTIISA®(断熱・膨張型固体空気Thermal Insulation Inflatable Solid Air)と呼ばれる超エアロゲル断熱素材の合成および遮熱コーティングの成膜、並びに素材の評価と応用に係る研究開発を行っている。研究成果を社会に普及させるためには優れた性能と経済性の両方を兼ね備える実用化のための技術開発も重要となる。

まとめ

研究成果を社会に普及させるためには優れた性能と経済性の両方を兼ね備える実用化のための技術開発は重要となる。研究成果を広く社会に普及させることを目的として2021年4月にNIMS発ベンチャー（株式会社Thermalytica）を設立した。NIMSとして最先端の断熱材料技術の研究開発に取り組むことと、ベンチャーとして研究成果を自ら社会に普及することを両輪として、社会全体のエネルギー削減および持続可能な社会の構築に貢献していく。

論文・特許

- WO2022014194 ハイブリッドエアロゲル及びその製造方法、並びにハイブリッドエアロゲルを用いた断熱材
- WO2022107365 エアロゲル粉末の製造方法及びこれを用いた断熱材
- R. T. Wu, R. V. Rivera-Virtudazo and T. Mori, *MRS Adv.* **1**, 3965-3970 (2016).

組成傾斜バルク試料を用いたハイスループット測定技術の開発

Keywords Ni基超合金, ハイスループット測定, 状態図, 拡散

研究員 / Researcher

池田 亜矢子 Ikeda Ayako

✉ IKEDA.Ayako@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ikeda_ayako



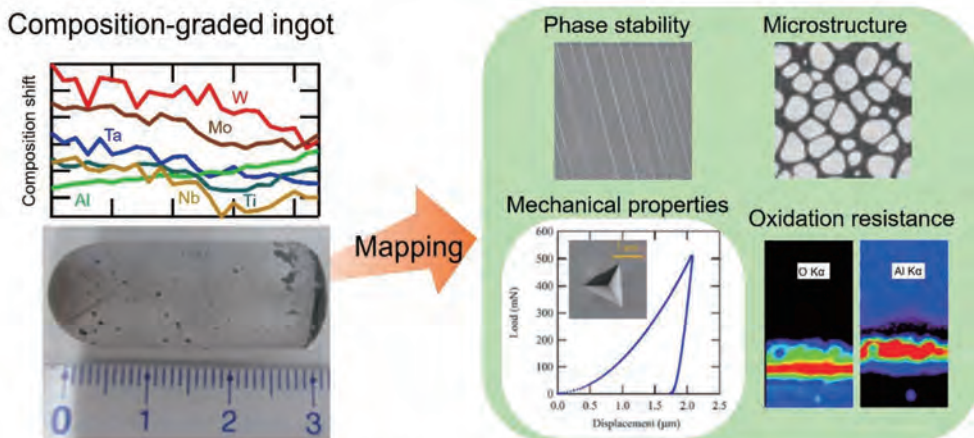
研究概要

実用材料は特性を向上させるために多くの添加元素を含んでいる。構造材料をはじめとしたバルクの形態で用いられる材料の中には微細組織の導入によってその特性を向上させているものも多い。そのような材料の組成、熱処理プロセスを最適化するためには広大な組成・温度空間における状態図の情報と諸特性と組成・温度との相関を明らかにする必要がある。そこで、組成傾斜やプロセス温度傾斜を導入したバルク試料片を用いて各種微小領域試験をすることによって、連続した異なる組成における膨大な特性データや状態図に関する情報を収集する手法の開発を進めている。得られたビックデータを活用し、精度の高いデータベースを作成することによって材料開発の高速化に貢献する。

新規性・独創性

- 各種微小領域試験に適したデザインの組成傾斜試料の作製
- 擬四元ハイスループット実験状態図作製技術の開発
- 温度傾斜熱処理試験を利用したハイスループット熱処理プロセス最適化手法の開発

研究内容



Scripta Materialia. 193 (2021) 91-96

合金開発には高品質な状態図・特性データベースが欠かせない。10元素以上から成ることもある多元合金であるNi基超合金のデータベースを構築するためには広大な組成・温度空間における膨大な量の実験データが必要であるものの、従来の引張、クリープ試験では一度の試験につき一つの組成の特性しか得られない。本研究では拡散、偏析などを利用し、連続した異なる組成を一つの試料片に導入した組成傾斜試料を用いて、ナノインデンテーション、微細組織観察、酸化試験などを実施し、組成の関数として数十～数千のデータから成る機械特性、耐酸化性、組織安定性マップを取得し、合金設計の指針となる精密なデータベースを迅速に構築する。

まとめ

- バルクで用いられる材料のハイスループット特性評価試験に適した組成傾斜試料の作製手法を開発
- 一つの試料で数十～数千組成の特性データを得ることにより、多元合金の組成-特性データベースを迅速に構築
- Ni基超合金の組成・熱処理プロセスを極めて高効率に最適化

論文・特許

- K. Goto, A. Ikeda, T. Osada, I. Watanabe, K. Kawagishi and T. Ohmura, *J. Alloys Compd.* **910**, 164868 (2022).
- A. Ikeda, K. Goto, T. Osada, I. Watanabe and K. Kawagishi, *Scr. Mater.* **193**, 91-96 (2021).
- S. Sheikh, L. Gan, A. Ikeda, H. Murakami and S. Guo, *Mater. Today Adv.* **7**, 100104 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高バネ・バイオ材料

マテリアル基盤

バイオミメティクスによる可逆的インターコネクション

Keywords バイオミメティクス, 接着, 剥離, 生物, 昆虫

グループリーダー / Group Leader

細田 奈麻絵 Hosoda Naoe

✉ HOSODA.Naoe@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/hosoda_naoe



研究概要

これまでの大量生産・消費型ものづくりは、資源の枯渇化問題や、大量廃棄物による環境破壊をもたらし、持続的発展を阻む要因となっており、リサイクル・リユースを基調としたものづくりが求められている。分離・解体技術は持続可能社会のコア技術と言える。従来の接着・接着技術は強い接合強度を求められて開発される場合が多く、解体時の分解が困難である。一方で、循環型ものづくりに優れた自然界には接着と剥離を迅速に行う仕組みが存在している。本研究は、生物が発達させた接着・剥離の原理解明と生物の形成プロセスを取り入れた発生物学的バイオミメティクスによる新しい接着・剥離技術の開発を目指している。

新規性・独創性

- 落葉をモデルにした接着・剥離技術の開発。電子配線基盤から非加熱で簡単にチップを取り外す技術開発に成功。
- 発生物学的バイオミメティクスによる新しい接着・剥離技術の開発。キイロショウジョウバエのサナギをモデルに低エネルギーで簡単にへら状の接着機構を製作することに成功。
- 生物の接着・剥離の原理解明。テントウムシの接着歩行の主たる原因が分子間力であることを証明した。
- 陸上で生息するハムシやテントウムシが水中を歩行できることを世界で初めて発見し、泡を利用した水中接着機構を開発した。ぬれた環境でも滑らない昆虫の接着剥離の原理を災害対策ロボットへ応用。

研究内容

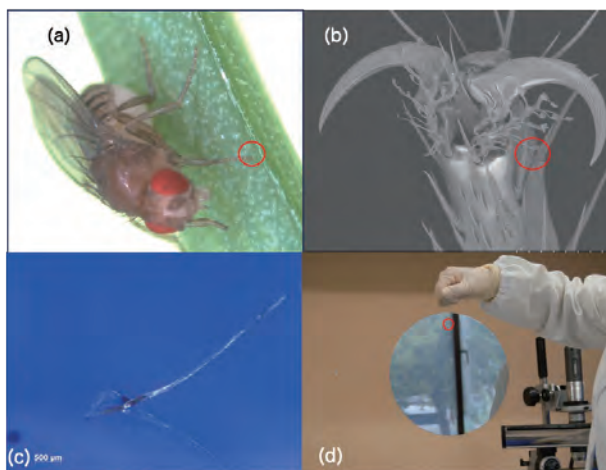


図1 (a)キイロショウジョウバエの脚先(赤丸部分)。(b)脚先の拡大(電子顕微鏡写真)。赤丸部分が「ハエ型」(脚裏のへら状接着性剛毛)の接着構造。(c)人工的に製作した「ハエ型」(脚裏のへら状接着性剛毛)の接着構造をガラス板に接着させた様子。(d)一本のみでシリコンウエハー(52.8g, 直径20.3cm)を持ち上げる様子。赤丸は接着部。

これまでのヤモリをモデルとしたバイオミメティック可逆接着は、生物の「形」を模倣するもので、複雑な微小構造を製作するためにMEMS(半導体製品製造技術)などが利用され高い生産コストが課題となっていた。一方で、生物(昆虫)は室温で少ないエネルギー消費で形成している。生物の「形」だけでなく、生物自身の「作り方」を模倣する新しい「発生物学的バイオミメティクス」を開発した。ショウジョウバエは、図1(b)のように脚裏に接着性剛毛があり、シンプルなへらの形状をしている。へら状の接着性剛毛は、①剛毛形成細胞の伸長と細胞骨格性アクチン繊維により「へら状の骨組みを形成」した後、②クチクラの分泌により「固化」して形成するという、単純な形成プロセスであることから、この形成プロセスをもとに、①ナイロン繊維の引き上げ(へら構造の形成)と②固化という2ステップのみの単純な製作プロセスが設計し、ハエ型と同等の接着構造を室温で製作できることを示した。ハエ型の接着構造は、昆虫の脱着機構と同様に、力をかける方向により強い接着力を示したり、簡単に分離させたりできる脱着効果が確認された。図1(d)はわずか1本で、52.8gのシリコンウエハーを持ち上げている写真である。これは、756本(9cm2)で60kgの人がぶら下がる強度に匹敵する。サナギをモデルにすることで単純なプロセスで製作することができ、生産コスト・製造エネルギーの低減が図れるため、環境低負荷技術としての普及が期待される。

まとめ

本研究は、生物が発達させた接着・剥離の原理解明と生物の形成プロセスを取り入れた発生物学的バイオミメティクスによる新しい接着・剥離技術の開発を行い、低環境負荷技術として発展させた。バイオミメティクスによるモノづくりを国際標準化として原案作りから発行まで行った。(ISO 18457 Biomimetics — Biomimetic materials, structures and components)

論文・特許

- N. Hosoda, M. Nakamoto, T. Suga and S. N. Gorb, *Sci. Rep.* **11**, 2279 (2021).
- K. Kimura, R. Minami, Y. Yamahama, T. Hariyama and N. Hosoda, *Commun. Biol.* **3**, (2020).
- 特許第7195026号 複合体、無人航空機、複合体の製造方法、及び、構造体

異種材料の低温大気圧接合と低温固相分離の両立

Keywords 低温大気圧接合, ハイブリッド接合, 電子実装, 移動体IoT, 低温固相分離

主幹研究員／Principal Researcher

重藤 暁津 Shigetou Akitsu

✉ SHIGETOU.Akitsu@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/shigetou_akitsu



研究概要

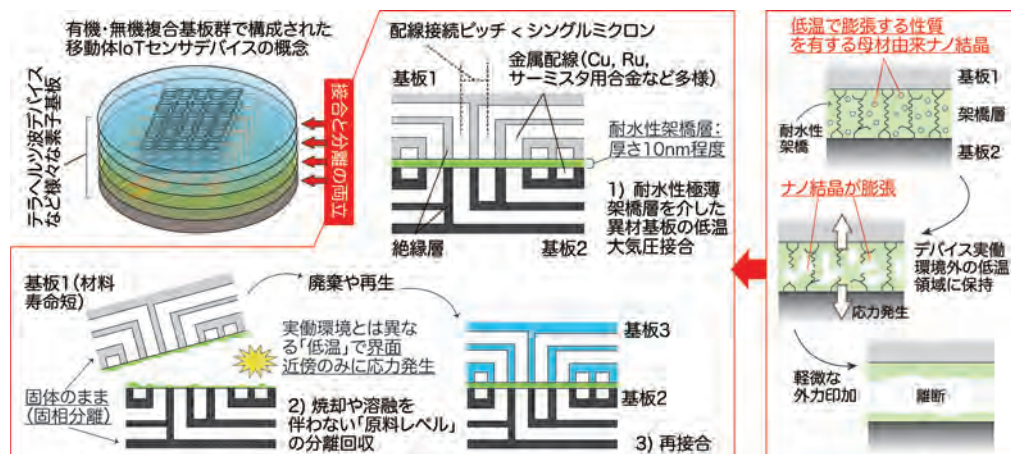
移動体IoT (Internet of things) センサデバイスの構造は、環境外乱に強いテラヘルツ波の利用や構造材料の軽量ハイブリッド化などの流れを受け、配線材料と基板材料が同一平面にある層構造を積層し、構造部材まで一括接合して構築されることが必要になる。層間の接合は、工業分野横断的な適用性を鑑み低温大気圧雰囲気下で実施可能でなければならないし、異材接合が達成されるからこそ、構成材料・部品のレベルで結合・分解を制御する機構が接合プロセスに内包されなければならない。本研究では、低温大気圧で異材表面に高い結合力を与え、デバイスの実働範囲外の低温領域で急峻に界面に応力を発生させ、固相分離を可能にする極薄架橋層を創製する。

新規性・独創性

世界的に他に例を見ない「接合と分離の両立」を実現するための極薄架橋層：

- 低温大気圧雰囲気下で異材表面間のほぼ直接接合を達成
- 接合性と同時に、耐水性や導電性などの機能を担保
- デバイス実働環境外の低温領域で界面に急峻な応力を発生させるトリガー機構を内包

研究内容



イソプロピルアルコール (IPA) などの、様々な分野で広範に用いられている簡易な有機溶剤蒸気を含有した窒素雰囲気下で、材料表面に真空中紫外光 (VUV) を照射する表面改質手法 (V-VUV, vapor-assisted VUV手法) を確立する。溶剤がVUV照射で分解して生じるラジカル種の作用で形成される極薄架橋層によって、材料寿命の違いに応じて異種材料を分離回収するための「固相分離性」を創製する。極薄架橋層は、母材金属の多座配位カルボン酸塩を基部に持つアルキル鎖など、界面の加水分解劣化を動的平衡状態に保ちながら、150℃程度以下かつ大気圧で接合が達成される構造を有する。さらに、架橋層内部には、接合が達成される際の副生成物として、母材由来のナノ結晶が一定量析出する。これらのナノ結晶の一部は低温で急峻に膨張する性質を有するため、これを固相分離のための「離層」として活用する。本研究では、接合性と固相分離性を両立するプロセス条件群を明確にすると共に、接合から再接合までを通した電気特性変化から実用性を実証する。

まとめ

- 接合プロセスに特別な手順を加えることなく固相分離性を発現させ得る、分野汎用性の高い接手法
- 固相分離による、リサイクルを含む電子デバイス製造工程全体の大幅な効率化と環境負荷の低減
- 異材接合から剥離、廃棄や再生までのライフサイクルを一括設計可能な新しいハイブリッド材料創製手法としての市場性

論文・特許

- A. Shigetou and N. Hosoda, *Mater. Lett.* **323**, 132499 (2022).
- Y.S. Chiu, C.R. Kao and A. Shigetou, *Mater. Des.* **195**, 109065 (2020).
- WO2023286711 銅-銅積層体の分離方法及び銅-銅積層体

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Mechanical performance of functional lattices

Keywords Low Thermal Expansion, Auxetics, Lattices, Additive Manufacturing, Geometry Optimization

主幹研究員／Principal Researcher

マーサー クリストファー Mercer Christopher

✉ MERCER.Christopher@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/MERCER_Christopher



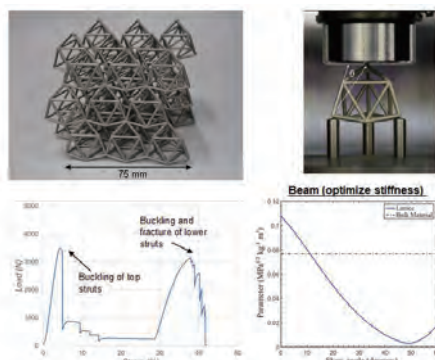
Research Summary

- Low thermal expansion lattice structures can minimize thermal stresses caused by frictional heating in hypersonic vehicles.
- Auxetic (negative Poisson's ratio) lattices exhibit superior energy absorption during dynamic (impact) loading.

Novelty / Originality

- Fabrication of lattice structures with complex geometries from metallic materials via additive manufacturing (3-D laser printing).
- Evaluation of the mechanical response of the lattices and geometry optimization to maximize lattice mechanical performance.

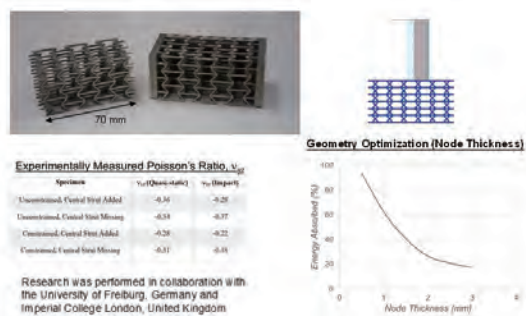
Research Contents



Research was performed in collaboration with Imperial College London, United Kingdom.

Auxetic lattices were fabricated from Ti-6Al-4V and stainless-steel powder (right). Specimens with constraining walls were also produced to assess the effect of boundary constraint on the auxetic behavior. Negative Poisson's ratio behavior was established under both quasi-static and impact loading under all conditions (even with the presence of thick constraining walls). Geometry optimization studies (using finite element analysis) have shown that with thin struts or small node thicknesses, such lattices are capable of absorbing over 90% of the energy of an impact.

A 3-D low thermal expansion lattice fabricated from Ti-6Al-4V is shown (left). The mechanical performance of the lattice unit cell under uni-axial compression is also shown. The load increases in a linear-elastic manner until buckling of the top three struts occurs. This causes the initial sharp load drop. The second load reduction corresponds to buckling and fracture of the lower struts in the unit cell. An optimization plot is shown for lattice stiffness (as a beam). At skew angles (θ) less than 11° , the performance of the lattice is superior to the bulk material.



Research was performed in collaboration with the University of Freiburg, Germany and Imperial College London, United Kingdom.

Summary

- Mechanically robust complex lattices can be fabricated by additive manufacturing.
- Optimized low thermal expansion lattices exhibit superior mechanical performance compared to the bulk material.
- Geometrically optimized auxetic lattices can possess impact energy absorption capabilities of over 90%.

References

- C. Mercer, T. Speck, J. Lee, D. S. Balint and M. Thielen, *Int. J. Impact Eng.* **169**, 104315 (2022).
- C. Mercer, J. Lee and D.S. Balint, *Compos. Struct.* **206**, 80-94 (2018).
- C. Mercer, J. Lee and D. Balint, *Proc. of the 13th International Conference on Ecomaterials*, 46-51 (2017).

マテリアルズインテグレーション(MI)による3D積層造形に適した新材料の開発

Keywords 3D積層造形, 金属材料, 耐熱材料, マテリアルズインテグレーション, DX, 数値シミュレーション

グループリーダー / Group Leader

渡邊 誠 Watanabe Makoto

✉ WATANABE.Makoto@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/watanabe_makoto



研究概要

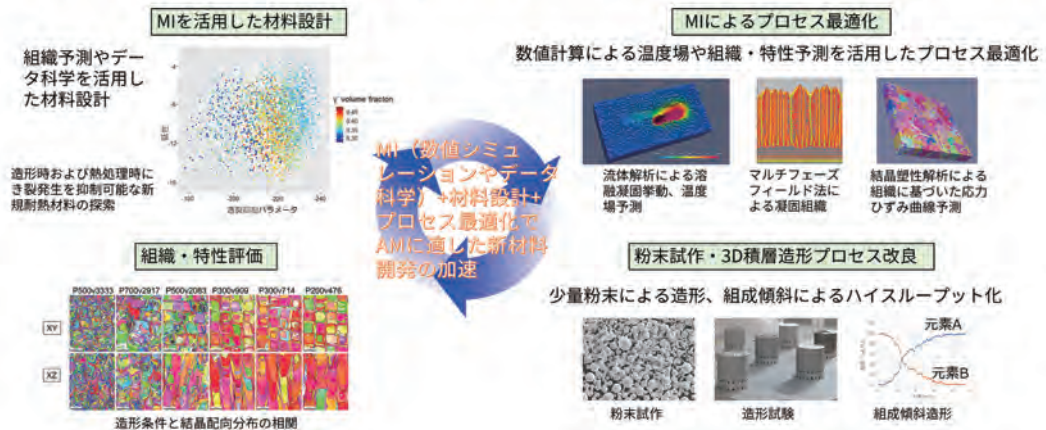
従来技術では困難な複雑構造体を製造できる3D積層造形プロセスは、革新的な材料プロセスとして大きな注目を集めている。しかし、既存材料をそのまま適用した場合には、造形中の欠陥の発生や微視組織の違いにより、期待される特性が得られないという課題がある。また、一つの部材製造でも部位形状に依存して熱履歴が変化し、欠陥や組織状態のばらつきが生じる。このため、3D造形に適した新しい材料開発、形状を考慮したプロセス最適化技術の確立が必要である。そこで、数値解析やデータ科学を活用したマテリアルズインテグレーション技術による組織や特性の予測技術を開発し、3D造形に適した新規材料の実現やプロセス最適化の効率化に取り組んでいる。

新規性・独創性

- レーザ3D造形プロセスを対象とした、溶融凝固挙動、凝固組織予測、応力場予測など様々な数値解析技術の開発
- MI (数値解析とデータ科学) の活用による新合金の探索・試作・検証
- 一つの造形体内で組成を傾斜させる造形技術の開発、ハイスループット合金探索への展開
- 材料設計、粉末試作、造形試験、評価、フィードバックまで、一気通貫した研究開発による、AMのための新材料開発の加速

研究内容

マテリアルズインテグレーション(MI)による3D積層造形に適した新材料の開発



粉末床へのレーザ走査に対して、流体解析に基づく溶融凝固挙動の数値シミュレーションを開発した。さらにマルチフェーズフィールド(MPF)法と連成した凝固組織予測技術を実現した。MPF計算結果、あるいは実験観察データに基づき、PC内で微視組織を再構築し、結晶塑性解析により局所的な応力-ひずみ特性を予測するモデルを開発した。また、熱力学計算などによるデータセット構築とMI技術を組み合わせ、造形中のき裂発生を抑制可能な新規Ni基超合金の設計を行った。粉末試作を行い造形試験を行ったところ、ベースとした商用合金と比較し、劇的にき裂発生を抑制することに成功した。MIによるAMIに適した新材料開発の加速が期待できる。

まとめ

- レーザ3D造形プロセスの様々な数値シミュレーション技術を開発した。
- MI (数値解析とデータ科学) の活用により、造形中のき裂発生を抑制可能な新規Ni基超合金の開発に成功した。
- 3D造形に適した新規材料の開発と、形状を考慮したプロセス最適化技術の高度化を進めていく。

論文・特許

- P. Daram, T. Hiroto and M. Watanabe, *J. Mater. Res. Technol.* **23**, 5559-5572 (2023).
- M. Kusano and M. Watanabe, *Mater. Des.* **222**, 111016 (2022).
- S. Nomoto M. Kusano, H. Kitano and M. Watanabe, *Metals* **12**, 1720 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高機能・バイオ材料

マテリアル基盤

高感度磁気センサと非破壊検査技術研究

Keywords 磁気センサ, 非破壊検査, サーモグラフィー, 渦電流, 電磁, 鉄筋腐食, 積層材料欠陥

主幹研究員 / Principal Researcher

何 東風 He Dongfeng

✉ HE.Dongfeng@nims.go.jp ⑧ https://samurai.nims.go.jp/profiles/he_dongfeng



研究概要

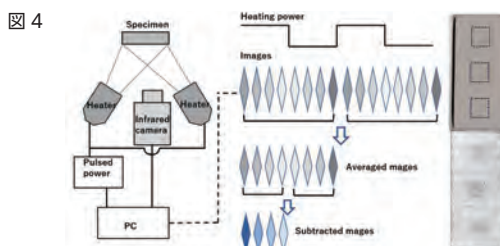
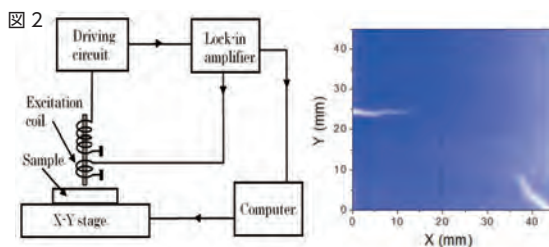
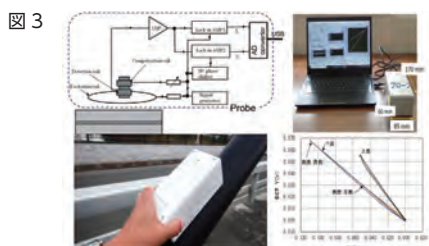
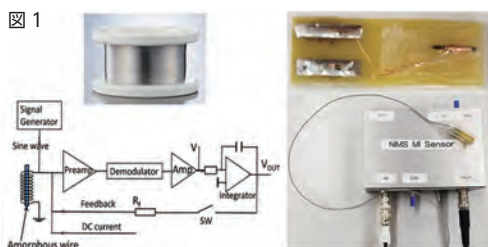
高感度磁気センサは、材料評価、バイオ磁気と疾病診断、地球物理学、コミュニケーション、自動車、航空宇宙など多くの分野で利用されている。従来の室温磁気センサの磁場分解能は、深い欠陥検出、生体磁気測定、胎児心磁図を測定するのに十分ではない。そこで、本研究では1 pT-レベル小型高感度MI磁気センサを開発し、MIセンサを使用して深部欠損を検出する。

鉄筋腐食、CFRP、粒子積層プロセスにより得られる航空機用部材の非破壊評価ために、電磁気、超音波、サーモグラフィーなどの非破壊評価技術を統合して、革新的な非破壊評価技術を開発する。

新規性・独創性

- pT-レベル小型高感度磁気センサを開発する。センサーユニットと駆動回路間のケーブルは1本のみ。
- 高感度磁気センサを用いて、材料の深部欠陥を検出する渦電流非破壊検査システムを開発した。
- 鉄筋の腐食を検出する小型プローブが開発された。PCとプローブ間はUSBケーブル1本のみで、電源供給とデータ転送が可能。
- サーモグラフィの画像処理法を開発し、試料の表面粗さの影響を低減。

研究内容



直径0.1mm、長さ5mmのFeCoSiBアモルファスワイヤーを用いて、PT-レベルの高感度磁気センサを開発した(図1)。この磁気センサを用いて渦電流非破壊評価システムを開発した。このシステムを用いて、3Dプリントしたチタン合金のクラック欠陥を評価した(図2)。鉄筋腐食評価装置を開発した。励起コイル、検出コイル、アンプ、ロックインアンプ、ADコンバータをプローブに内蔵した。RC構造体の表面をプローブでスキャンして得られる曲線の傾きより腐食程度を判別する(図3)。赤外線サーモグラフィによる非破壊評価システムを開発した。平均画像と減算画像を用いることで、不均一な加熱や試料表面の粗さの影響を低減することができる(図4)。

まとめ

- 小型高感度磁気センサを開発した。この磁気センサを用いて渦電流非破壊評価システムを開発した。
- RC構造体内部の鉄筋や橋梁などの鋼線の腐食を、迅速に判別できる電磁非破壊評価デバイスを開発し、製品化する。
- 電磁気、超音波、サーモグラフィーなどの非破壊評価技術を統合して、革新的な非破壊評価技術を開発する。

論文・特許

- D. He, M. Kusano and M. Watanabe, *NDT E Int.* **125**, 102565 (2022).
- D. He, *Sensors* **20**, 161 (2020).
- 特開2019-015655 鉄筋腐食検出システム

チタン合金とニッケル基超合金の組織制御と単結晶化

Keywords チタン合金, ニッケル基超合金, 積層造形, 高温変形, 組織制御, 析出, 相変態, 集合組織, 単結晶

主幹研究員／Principal Researcher

北嶋 具教 Kitashima Tomonori

✉ KITASHIMA.Tomonori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kitashima_tomonori



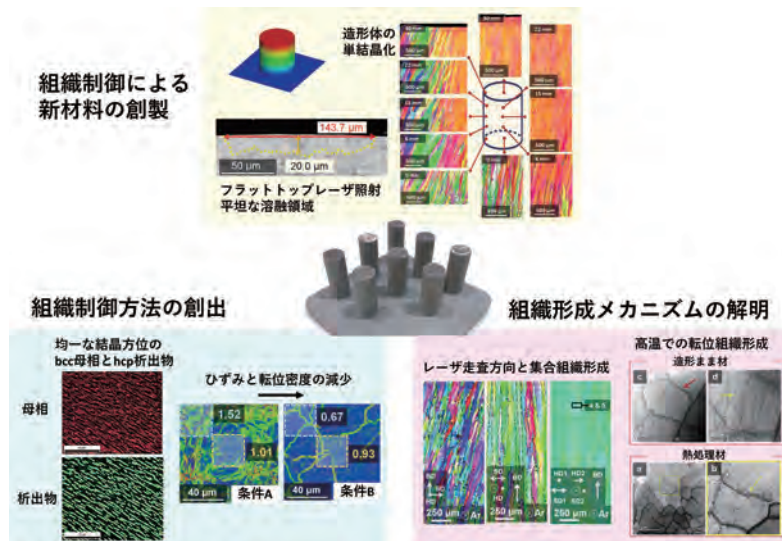
研究概要

チタン合金とニッケル基超合金は飛行機の機体やエンジンに使われており、それら材料の特性は飛行機の性能に大きく影響する。その材料特性を決定づけるのがマイクロ組織と結晶粒構造である。粉末積層造形や高温加工、熱処理により従来報告されていないマイクロ組織や結晶粒構造を創出し、材料特性の向上を図る。また、相変態、析出、集合組織形成、バリエーション選択のメカニズムを解明し、その知見を組織制御の高度化に資する。近年では、高温強度に優れた単結晶を従来困難だったレーザ粉末積層造形で創製した。単結晶構造の形成メカニズムを解明し、積層造形体の積層設計に資する。

新規性・独創性

- レーザ粉末積層造形による金属材料の単結晶化と集合組織制御
- 熱処理による積層造形材の析出物形態とバリエーション選択の制御
- レーザ粉末積層造形による高強度合金の創出
- 金属材料の高温変形時のマイクロ組織形成と集合組織形成の制御
- 高温酸化における酸化物形成と酸素固溶の数値シミュレーション

研究内容



レーザ粉末積層造形でニッケル単結晶の造形に成功した。照射面強度分布が一樣なフラットトップレーザを金属粉末に照射することで溶融領域が平坦になり、造形方向に単結晶構造の成長を促進する。また、単結晶の造形にはレーザの走査方向が重要な役割を担っており、レーザ走査面で走査方向をレイヤー毎に90°回転させることで、走査面全体で単結晶が成長する。この技術をチタン合金に展開し、チタン合金でも同様に単結晶構造が得られることを実証した。さらに、熱処理により単結晶の析出物を特異な析出形態に制御できる方法を見出した。今後、単結晶造形技術がさらに他の金属や合金に展開され、高機能化や高温強度の向上につながることを期待される。

まとめ

従来困難だったレーザ粉末積層造形で、高温で結晶構造が安定なニッケル単結晶の造形に成功した。この単結晶造形技術をチタン合金に展開し、チタン合金でも同様に単結晶を造形し、熱処理により析出物を特異な形態に制御することに成功した。単結晶は高温強度に優れ、また、異方性材料でもある。この造形技術が様々な金属や合金に展開されることが期待される。

論文・特許

- 北嶋 具教, 金属 **93**, 561-567 (2023).
- D. E. Jodi, T. Kitashima, Y. Koizumi, T. Nakano and M. Watanabe, *Addit. Manuf. Lett.* **3**, 100066 (2022).
- T. Kitashima and H. Harada, *Acta Mater.* **57**, 2020-2028 (2009).

積層造形装置用のレーザー吸収率測定装置の開発

Keywords 積層造形, レーザー, 粉末, 吸収率

主任研究員 / Senior Researcher

本田 博史 Honda Hiroshi

✉ HONDA.Hiroshi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/honda_hiroshi



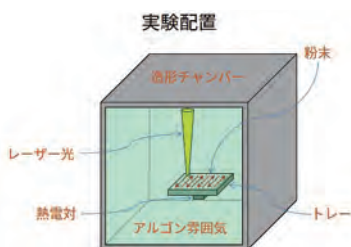
研究概要

積層造形で使用される粉末の材料の種類が増えてきている。レーザー積層造形では、レーザー光の吸収率は造形に影響する重要なパラメーターの一つであるが、レーザー光の吸収率が分かっている材料は限られる。そこで、既存のレーザー積層造形装置を用いて、造形に使用している金属粉末のレーザー光の吸収率の温度依存性の測定を試みた。

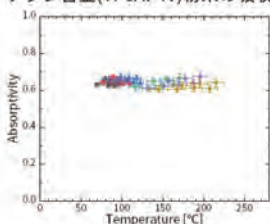
新規性・独創性

- 既存の積層造形装置を使用して、実際の造形環境下でレーザー光の吸収率を測定
- 積層造形装置のレーザー波長に対する、実際に使用している粉末などの吸収率を測定
- 吸収率の温度依存性の測定

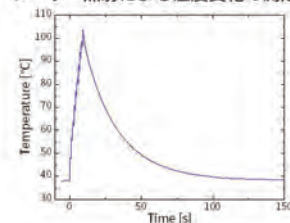
研究内容



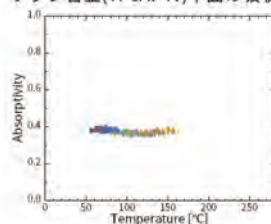
チタン合金(Ti-6Al-4V)粉末の吸収率



レーザー照射による温度変化の測定例



チタン合金(Ti-6Al-4V)平面の吸収率



積層造形装置の造形チャンバー内に粉末などの試料を載せた治具を設置し、試料に積層造形装置のレーザー光を照射した。その加熱から冷却までの温度変化を測定し、その温度変化から吸収率を算出した。ここではチタン合金について吸収率を求めた。平面の吸収率は、チタン合金粉末を敷かずチタン合金トレーのみでの吸収率を測定したものである。平面と比べ、粉末ではレーザー光の多重反射により吸収率が増加している。既存の積層造形装置を活用して測定できるため、積層造形の適用材料の拡大などにおいて、その造形プロセスの理解や最適化などに有用な測定装置となることが期待される。

まとめ

- 積層造形装置を用いたレーザー光の吸収率の測定
- レーザーによる表面改質、溶接、切断などでの吸収率の活用も期待
- 測定精度の向上や測定温度範囲の拡張、試料の交換の高速化などが課題

論文・特許

- 特開2023077723 3D造形用レーザー光吸収率測定装置および方法

金属積層造形プロセスにおける熱履歴の予測と最適化

Keywords 金属積層造形, 有限要素熱解析, プロセスモニタリング, 微細組織制御

主任研究員 / Senior Researcher

草野 正大 Kusano Masahiro

✉ KUSANO.Masahiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kusano_masahiro



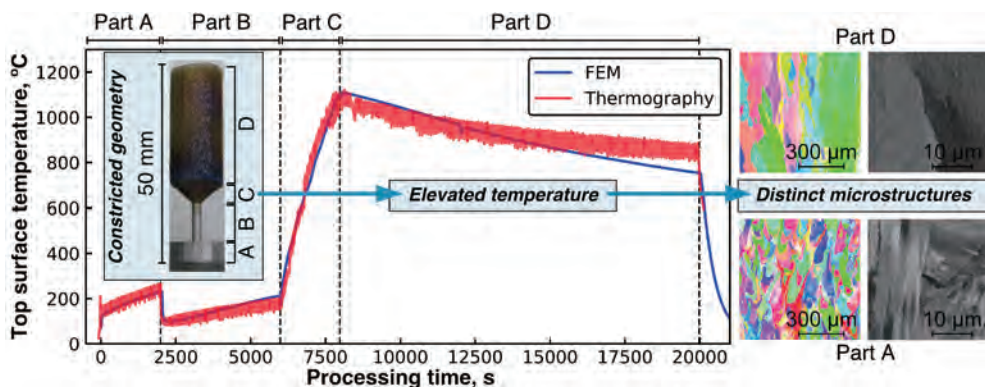
研究概要

金属積層造形法のひとつであるレーザー粉末床熔融結合法 (Laser Powder Bed Fusion, L-PBF) は、高出力レーザーでプラットフォーム上に敷いた金属粉末層を選択的に熔融・凝固させ、1層ずつ積層することで任意形状部材を造形する。航空宇宙分野では、タービンブレードや熱交換器などをLPBFで製造した事例が多数報告されている。本研究では、L-PBFにおける熱履歴を大きく変えることを目的として、基材への伝熱を抑制する形状を設計し、ニッケル基合金材の高温保持積層造形を実施した。赤外線カメラを用いたモニタリングおよび有限要素熱解析により、従来の造形よりもはるかに高温で保持しながらの造形に成功し、結果として微細組織や力学特性も大きく変えることが可能となった。

新規性・独創性

- L-PBFプロセス中の抜熱に着目し、基材への伝熱を抑制する形状を設計。予熱機構を使わずに700℃以上の高温で保持しながらの造形に成功。
- マルチスケール熱解析により、伝熱抑制形状を用いることで冷却速度が従来よりも3桁低下することを検証。
- 伝熱抑制形状による高温保持造形で結晶粒が粗大化し、硬さが低下。試料形状は熱履歴・微細組織・材料特性に影響する重要な因子である。

研究内容



ニッケル基合金Hastelloy Xをモデル材料としてLPBFプロセス中の熱履歴を、試料形状により意図的に変化させることに成功した。赤外線カメラを用いた温度場モニタリングと有限要素法によるパートスケール熱解析の結果、レーザー照射で与えられた熱が基材へと伝わるのを試料形状によって抑制することで、LPBF装置の予熱機構を用いることなく試料温度が1000℃以上に上昇し、3時間以上ものあいだ700℃以上に保持された。また、マルチトラック熱解析により、温度勾配と凝固速度がともに1桁以上低下し、冷却速度が3桁低下することが明らかとなった。単純な円柱形状の場合と比較すると、伝熱抑制形状試料では、造形方向に伸びる結晶粒が粗大化し、亜結晶粒のセル幅が厚く、炭化物の析出が多く、硬さが低下していた。これらの結果から、温度勾配と凝固速度、微細組織の相関関係から凝固マップを作成し、凝固組織形成における高温保持の影響が明らかとなった。

まとめ

LPBFの長所は任意形状部材を造形できることだが、一方で上記のように形状自体が熱履歴や微細組織、力学特性に少なからず影響することは、造形製品の信頼性の観点では必ずしも好ましいとは言えない。したがって、目的に応じた材料特性を保证するための熱解析やモニタリングに基づいたプロセスパラメータ制御が不可欠である。

論文・特許

- M. Kusano and M. Watanabe, *Mater. Des.* **222**, 111016 (2022).
- M. Kusano, H. Kitano and M. Watanabe, *Materials* **14**, 4948 (2021).
- M. Kusano, S. Miyazaki, M. Watanabe, S. Kishimoto, D. S. Bulgarevich, Y. Ono and A. Yumoto, *Mater. Sci. Eng. A* **787**, 139549 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高機能・バイオ材料

マテリアル基盤

生物から学ぶ究極の強靱材料の創出

Keywords 構造材料, 強靱化, 生物, 螺旋組織, 複合構造, 異方性

グループリーダー／ Group Leader

井上 忠信 Inoue Tadanobu

✉ INOUE.Tadanobu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/inoue_tadanobu



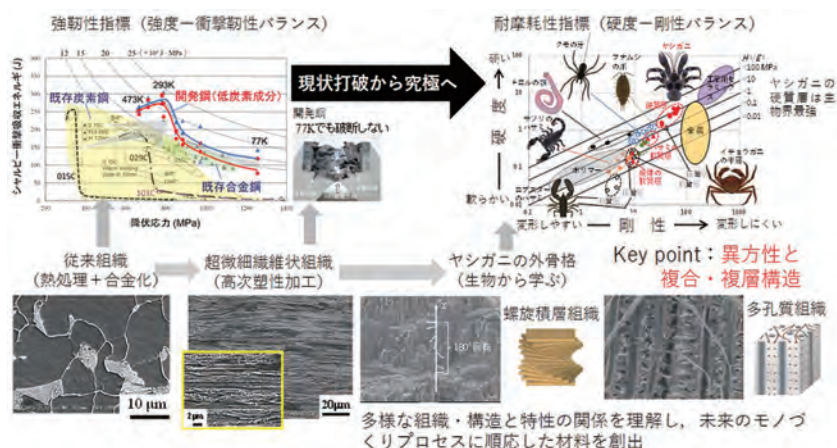
研究概要

使用部材の軽量化に貢献できる材料の強靱化（強くて壊れにくい特性）は、構造用金属材料の永遠の課題である。現在の材料科学技術をもってすれば、高強度化それ自体は難しいものではない。しかし、材料は強く（硬く）なると脆く（壊れやすく）なる。安全な高強度材料の利用に向け、この二律相反の関係を打破するアイデアと実証が必要である。生物の緻密で複雑な組織・構造を調べ、メカニズムを解明し、次世代のモノづくりプロセスを見据えた究極の強靱材料の創出を目指す。

新規性・独創性

- 結晶組織の形状（粒径・粒形）と結晶方位の制御
- 現状を打破した、竹のようにしなやかな鋼の開発
- 最強生物ヤシガニの螺旋組織と多孔質組織の複合構造の解明
- 多様な生物の強靱外骨格の組織・構造解析と特性評価
- 異方性活用の探求

研究内容



既存材料の強靱化を打破する技術として、竹のように力を受け流す鋼（強度800～1800MPa）を開発してきた。更なる高みを目指す中で、生物の持つ複雑な組織・構造に着目した。体重の90倍以上という生物界最強の把持力を持つ「ヤシガニ」のハサミは、螺旋積層組織と多孔質組織で構成された「剛」と「柔」の複合構造であり、軽さと強さを兼ね備えていた。人工物には見られない緻密で複雑な組織・構造を探索し、かつ特性との関係を解明することで、未来のモノづくりプロセスに順応した材料の創出が期待できる。究極の強靱さや耐摩耗性が要求される厳しい部位での材料・部材開発に展開することが期待される。

まとめ

強靱化技術として、主き裂を直角方向に分歧することができる超微細繊維状結晶粒組織が有効であることを実証した。材料が壊れる過程を考えると、主き裂の分歧を多方向に広げる手法が理想である。生物の螺旋積層組織や多様な組織の複合化は、壊れにくい組織・構造の理想を具現化している可能性を秘める。究極な強靱材料の開発だけでなく、生物から学べるセレンティビティ的な高機能・高特性に展開できると期待される。

論文・特許

- T. Inoue, T. Hara, K. Nakazato and S. Oka, *Materials Today Bio* **12**, 100132 (2021).
- 井上 忠信, *塑性と加工* **55**, 1063-1067 (2014).
- 特許5344454 温間加工用鋼、その鋼を用いた温間加工方法、およびそれにより得られる鋼材ならびに鋼部品

加工熱処理による超高強度鋼の創製

Keywords 低合金鋼, 加工熱処理, 強度, 靱性, 水素脆化

主席研究員／Chief Researcher

木村 勇次 Kimura Yuuji

✉ KIMURA.Yuuji@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/kimura_yuuji



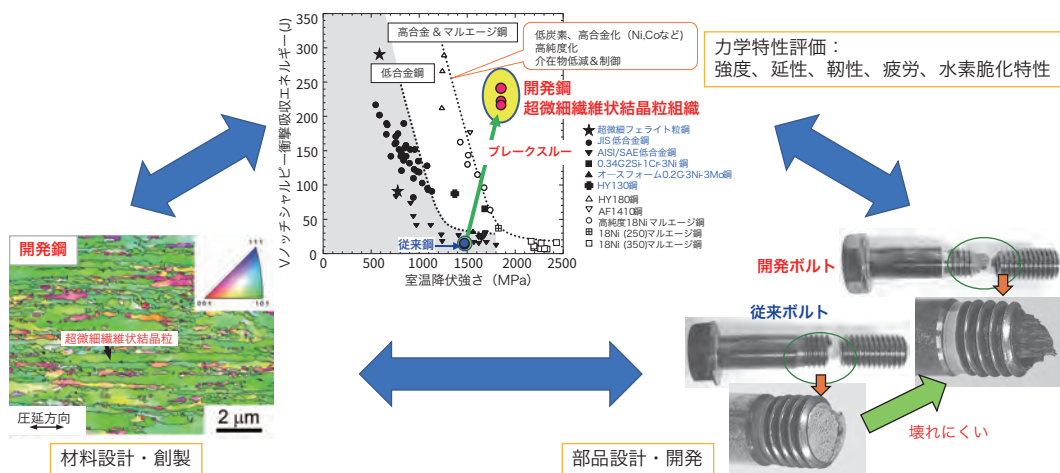
研究概要

輸送機のさらなる軽量化や次世代の新鋼構造物の実現を目指して、リサイクル性に優れた単純低合金組成で引張強さが1500MPaを超える超高強度鋼の実現が期待されている。これまでに、「部材の一部が破壊・破損しても所定の荷重以下であれば部材そのものは完全に破断しない」というフェールセーフ機能を有する超高強度低合金鋼（フェールセーフ鋼）を開発してきた。本研究では、フェールセーフ鋼の組織制御技術を基盤として、超高強度鋼の更なる進化を目指す。とくに超高強度鋼の社会実装でボルトネックとなっている遅れ破壊の発生機構を解明するとともに耐遅れ破壊特性に優れた超高強度鋼の組織制御技術を確立する。

新規性・独創性

- NIMSで培った超微細結晶粒鋼の組織制御技術を応用してフェールセーフ鋼を開発
- フェールセーフ鋼で鉄鋼材料の強度×靱性バランスをブレークスルー
- 超高強度フェールセーフ鋼の優れた耐水素脆化特性を確認
- 実機製造設備で超高強度フェールセーフ鋼のボルトへの温間鍛造法を開発
- 超高強度フェールセーフボルト締付け体の長期大気暴露実験で耐遅れ破壊特性を検証

研究内容



超高強度鋼のマルテンサイト組織が、元来、微細な結晶粒組織であることに着目し、焼戻マルテンサイト鋼を500℃～700℃付近で溝ロール圧延するという温間加工プロセスを開発して超微細繊維状結晶粒組織を有するフェールセーフ鋼を実現させた。フェールセーフ鋼は、ナノからミクロのスケールでヘテロ構造制御された超微細結晶粒組織の異方性を活用することで既存の超高強度鋼よりもはるかに優れた力学特性を示すことを見出した。さらにフェールセーフ鋼の温間鍛造プロセスを開発して超高強度フェールセーフボルトを創製にも成功した。今後、フェールセーフ鋼およびボルト開発で蓄積されたノウハウやデータベースを活用することで、フェールセーフ鋼を超える超高強度鋼の実現が期待できる。

まとめ

超微細繊維状結晶粒組織を有するフェールセーフ鋼は、2000MPaまでの引張強度レベルで既存鋼よりもはるかに優れた耐衝撃特性、耐遅れ破壊特性を示す。今後は、フェールセーフ鋼の課題として見出された量産化や大型化プロセスを確立してゆくと同時に、実験と計算科学との融合によりフェールセーフ鋼を超える超高強度低合金鋼の探索、創製プロセスならびに材料設計の構築を進める。

論文・特許

- Y. Kimura and T. Inoue, *ISIJ Int.* **60**, 1108-1126 (2020).
- Y. Kimura and T. Inoue, *ISIJ Int.* **62**, ISIJINT-2021-068 (2022).
- 特許5344454 温間加工用鋼、その鋼を用いた温間加工方法、およびそれにより得られる鋼材ならびに鋼部品

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Deformation and fracture of structural materials

Keywords Structural steel, Fracture mechanics, Strain, Microstructure

主幹研究員 / Principal Researcher

邱 海 Qiu Hai

✉ QIU.Hai@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/qiu_hai



Research Summary

High strength and high toughness steel is strongly expected to increase the resistance to fracture. Deformation occurs under an applied stress, and as deformation further advances to a certain limit, fracture takes place. Different microstructures and fracture modes have their unique micro-deformation behaviors, and as a result they determine the fracture behavior. Elucidation of the correlation of micro-deformation behavior with the microstructure and fracture mode will provide a guideline for the development of new strong and tough steels.

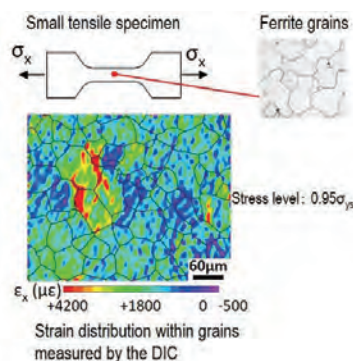
Novelty / Originality

- Development of macroscopic deformation measurement system
- Development of microscopic deformation measurement system
- Measurement of strain distribution at a scale of grain-level
- In-situ observation of deformation process
- Elucidation of strengthening mechanism in terms of micro-deformation behavior

Research Contents



DIC measurement system



The aim of my study is to improve the fracture behavior and to enhance the strength of structural steels by controlling the deformation behavior. Accurately measuring the macro- and micro-deformation in terms of strain and strain rate is one key point of the study. Strain and strain rate measurement systems have been developed by using digital image correlation (DIC) technique which are available to in-situ measure/observe the deformation process at a macroscopic scale and a microscopic scale. One developed DIC measurement system for the microscopic stain is shown in the above figure. By using this system, micro-strain distribution within grains in tensile process or bending process can be measured. From the experimental results, information on the stress concentration (position, magnitude), interaction between grains, evolution of micro-strain and so on is available. Combined with the observation of microstructure and fracture mode by the electron back scattered diffraction, scanning electron microscope and optical microscope, the correlation of micro-deformation behavior with microstructural parameters (grain size, orientation, etc.) and fracture mode is revealed.

Summary

The developed DIC measurement systems have been verified to be applicable to in-situ observe/measure the macro- and micro-deformation behavior of heterogeneous material. It is expected to be applied to the anisotropic structures, for example, multi-layers material and complex hierarchical structures of organisms in the future.

References

- H. Qiu, R. Ueji, Y. Kimura and T. Inoue, *Metals* **10**, 774 (2020).
- H. Qiu, R. Ueji, Y. Kimura and T. Inoue, *Materials* **14**, 1865 (2021).
- H. Qiu, R. Ueji and T. Inoue, *Materials* **16**, 195 (2023).

腐食メカニズムに基づく耐食／耐水素脆性被膜の開発

Keywords マグネシウム合金, アルミニウム合金, アパタイト, 層状複水酸化物, 耐食被膜, 自己修復被膜, 水素脆性

グループリーダー／ Group Leader

廣本 祥子 Hiromoto Sachiko

✉ HIROMOTO.Sachiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hiromoto_sachiko



研究概要

MgおよびAl合金は軽量構造材料として、またMg合金は生体内で溶解する高比強度の金属材料として注目されている。一方、これらの合金の使用には耐食被膜が不可欠である。我々は、使用環境や腐食・水素脆化挙動の理解に基づいた耐食被膜の開発を行っている。

軽量化材料としてのMgおよびAl合金には、腐食インヒビターを担持した層状複水酸化物 (LDH) 被膜を開発している。インヒビター担持により、被膜には自己修復性が期待される。

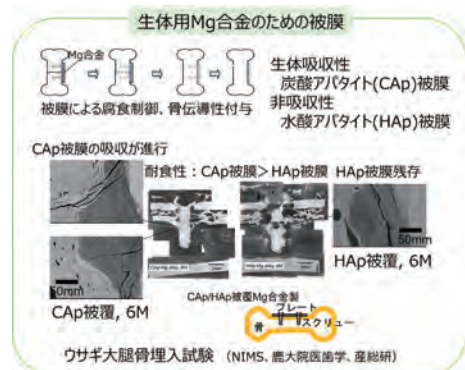
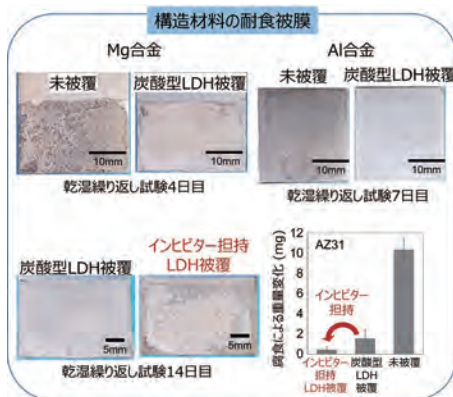
生体用Mg合金には、骨伝導性と破骨細胞による吸収性を示す炭酸アパタイト被膜および生体内での安定性に優れた水酸アパタイト被膜の開発を行っている。

新規性・独創性

LDH被覆には電着法を用い、インヒビターを担持したLDHを短時間で合金に被覆することを目指している。本方法には、LDHを合金に被覆後にインヒビターを担持するよりも、インヒビターの選択肢および被覆対象合金の範囲を広げることができるという特徴がある。

Mg合金に水溶液浸漬により炭酸／水酸アパタイトを被覆する独自の方法を開発している。骨置換する被膜は本研究のCAp被膜のみであり、基材Mg合金と被膜の両方ともが生体に吸収されて消失する画期的な生体吸収材料を実現することができる。

研究内容



MgやAl合金のLDH被覆およびインヒビター担持には、高圧／蒸気処理や化成処理での被覆、水溶液中でのLDH被膜へのインヒビター担持が行われている。我々は腐食インヒビターを担持したLDHを調製し、それを電着法により合金表面に被覆することを目指している。被覆処理が短時間で、多くの種類のインヒビターを担持することができ、処理中の基材合金の腐食を防ぐことができるという特徴がある。これまでに、LDHを用いて電着条件の検討を行い、MgおよびAl合金表面に均一な電着被膜が作製でき、合金の耐食性を改善できることを明らかにした。

現在、MgやAl合金に適した腐食インヒビターが探索されている。我々はインヒビター効果が高く、LDHに担持できるインヒビターの探索およびLDHへの担持法の検討を行っている。あるインヒビターを担持したLDHの電着被膜が、炭酸型LDHの電着被膜よりも高い耐食性を示すことを明らかにした。

Mg合金は患部の治癒に伴い溶解・吸収される生体内溶解性金属材料として期待され、骨折固定用プレート＆ネジや血管拡張用ステントへの応用が検討されている。一方、Mg合金は生体埋入初期に急激な腐食を示す場合があり、強度低下やガスだまり形成による周囲組織との接合の阻害が課題となっている。初期の腐食抑制と周囲の骨との接合の促進のため、骨の主成分と類似の組成である水酸／炭酸アパタイト (HAp / CAp) 被膜の開発を行っている。これまでに、HAp / CAp被覆Mg合金の動物の骨への埋入試験を行い、被覆によりMg合金の腐食が抑制されること、骨との接合が促進されることを明らかにした。CAp被膜では、骨内で被膜が徐々に吸収されていく様子が観察された。現在は、被覆条件 (炭酸含有量、被覆時間など) が被膜の耐食性に及ぼす影響の検討を行っている。

まとめ

- 電着法により、MgおよびAl合金にLDHを被覆した。
- Mg合金の腐食インヒビター候補を見出し、LDHへ担持、Mg合金に被覆した。インヒビター担持により被膜の耐食性が向上した。
- 生体用Mg合金のための生体吸収性被膜としてCAp被膜を開発した。
- 動物埋入試験より、CAp被膜は骨内に吸収されていく可能性を見出した。

論文・特許

- S. Hiromoto and K. Doi, *MATERIALS TRANSACTIONS*, 1011-1019 (2023).
- S. Hiromoto, E. Nozoe, K. Hanada, T. Yoshimura, K. Shima, T. Kibe, N. Nakamura and K. Doi, *Mater. Sci. Eng. C* **122**, 111942 (2021).
- S. Hiromoto, S. Itoh, N. Noda, T. Yamazaki, H. Katayama and T. Akashi, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **21**, 346-358 (2020).

高酸素反応促進技術による金属材料の腐食・防食研究

Keywords 腐食, 金属材料, 酸素還元, コンクリート, 表面処理

独立研究者 / Independent Scientist

土井 康太郎 Doi Kotaro

✉ DOI.Kotaro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/doi_kotaro



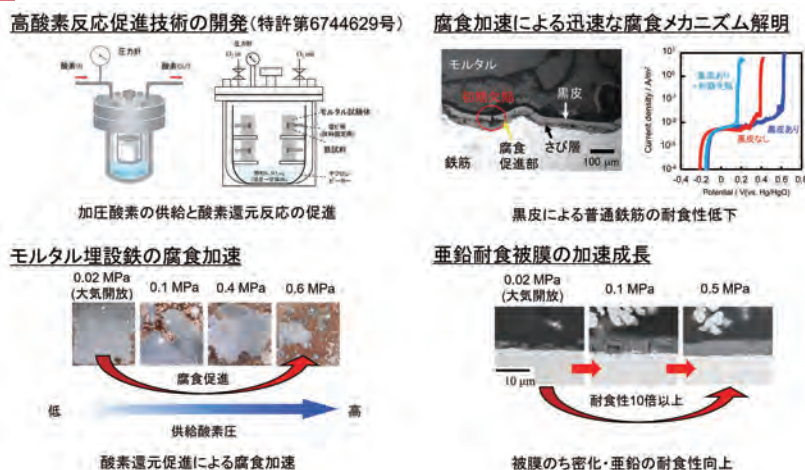
研究概要

腐食反応は、金属の溶解（アノード反応）と酸素還元（カソード反応）のカップリングである。従来の腐食加速試験法はアノード反応のみを促進しており、カソード反応に関しては着目されていなかった。本研究では、加圧酸素の供給（溶存酸素濃度の増加）により、金属表面のカソード反応を促進させ、腐食および腐食と同機構で進行する電気化学反応を加速させる新たな技術（高酸素反応促進技術）を開発した。本技術により、腐食加速による金属材料の腐食メカニズムの迅速な解明、耐食被膜の加速成長による高耐食化などが可能となった。

新規性・独創性

- アノード、カソード両反応の促進による自然な反応加速
- 実環境では数十年かかるコンクリート中鉄筋の迅速な腐食評価
- 裸の亜鉛よりも10倍以上の耐食性を発揮する耐食表面の加速創製
- 従来の腐食加速試験との融合によりさらなる腐食加速が可能（電食、乾湿繰返しなど）

研究内容



高酸素反応促進技術では、耐圧ガスチャンパー内に供試体（金属サンプルや金属を埋め込んだモルタルなど）を設置し、外部から高圧の酸素ガスを供給する。これにより金属表面と接する水溶液中の溶存酸素濃度が増加し、酸素還元反応（カソード反応）が促進される。金属の溶解（アノード反応）はもともとカソード反応により律速されているため、カソード反応の促進により反応全体が促進される。本技術を利用して、通常の酸素圧下では数年の期間が必要であったコンクリート埋設鋼材の腐食加速を可能とした。特に、普通鉄筋の表面に形成する熱い酸化皮膜（黒皮）に注目し、高酸素反応促進技術を用いて黒皮が鉄筋の耐食性を低下させることや黒皮の欠陥が鉄筋腐食の起点となることを明らかにした。最近では本技術を表面処理に応用し、裸の亜鉛と比較して10倍以上の耐食性を発揮する亜鉛の耐食被膜の加速創製にも成功している。これは亜鉛の耐食被膜の生成メカニズムが腐食と同じくカソード反応により律速されていることを利用したものである。

まとめ

カソード反応の促進により反応全体を加速させる高酸素反応技術を開発した。本技術により、低速で進行するコンクリート中鋼材などの迅速な腐食メカニズムの検討が可能となった。また、同技術を用いて亜鉛の耐食被膜の加速創製にも成功した。加圧酸素を用いる本技術は、設備導入やコスト面に課題があるため、今後は常圧酸素や酸化剤の使用による簡便・低コスト・高効率な技術への展開を目指す。

論文・特許

- K. Doi, S. Hiromoto, H. Katayama and E. Akiyama, *J. Electrochem. Soc.* **165**, C582-C589 (2018).
- K. Doi, S. Hiromoto, T. Shinohara, K. Tsuchiya, H. Katayama and E. Akiyama, *Corros. Sci.* **177**, 108995 (2020).
- 特許第6744629号 鉄筋腐食促進試験法およびこれに用いる試験装置

応力や加工を利用した熱処理による組織制御の研究とプロセスの開発

Keywords Thermomechanical processing, Plasticity, Heat treatment, Steel, Metal, Structural materials

グループリーダー／ Group Leader

上路 林太郎 Ueji Rintaro

✉ UEJI.Rintaro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ueji_rintaro



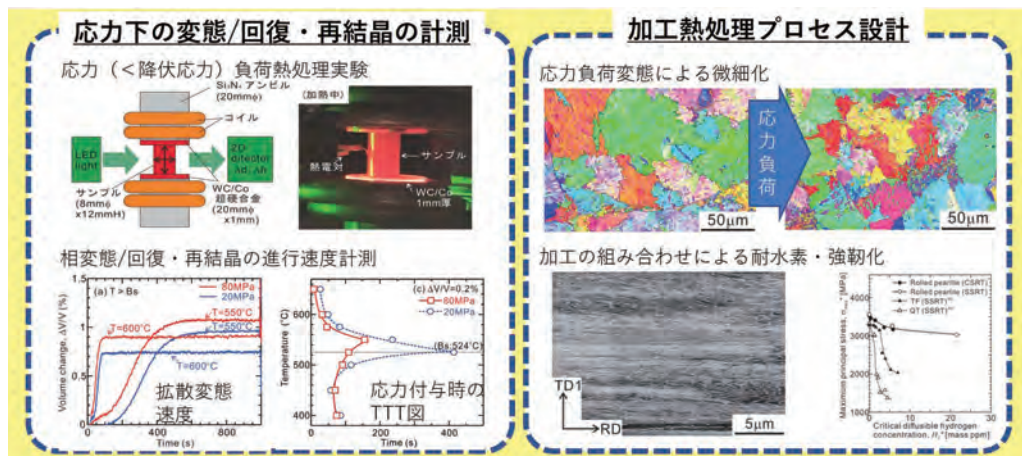
研究概要

構造材料に高強度や高延性などの優れた機械的性質を付与する方法として加工熱処理がある。加工熱処理では、合金成分と製造プロセスを工夫して金属組織（結晶構造・格子欠陥など）を制御し、ニーズに応じた特性を得るのに適した材質を作り上げる。金属材料の熱処理時に生じる現象である相変態や回復・再結晶を研究対象とする。特に、応力の影響など、新規プロセス検討において今後必要とされるにも関わらずこれまでの研究例が少ない課題に対して、特定の金属材料に縛られずに利用できる学理の構築を主として実験による検討により目指す。

新規性・独創性

- 加工組織（転位組織、集合組織など）の解析結果を利用したプロセス改良や新規提案
- 従来利用されていない温度域など加工条件の利用
- マルテンサイト以上の高強度鋼の製造
- 応力状態（引張、圧縮）により変化する加工組織を利用した材質制御

研究内容



熱処理中に応力を加えることにより、拡散変態が大幅に加速されることが明らかにした。マクロな降伏応力以上の応力に加えなくとも、局所塑性変形を誘発する程度の応力で相変態開始までの潜伏時間を大幅に短縮することができる。本研究は、図中左側に示した精密温度制御が可能な応力付与膨張測定実験を用いることにより実施した。例えば、SUP12ばね鋼のパーライト変態の場合、100MPaに満たない小さな応力により、場合によっては変態完了に要する時間を数分の一以下にすることが可能である。（図中左側下段）また、応力負荷と熱処理を組み合わせることにより、組織の微細化（図中右側上段）が可能となり、圧延などの塑性加工をさらに組み合わせて組織制御することにより、耐水素特性や強靭性を材料に付与できる。（図中右側下段）これらの相変態変化は、製造工程に要する時間の短縮などに応用できる可能性がある。その他、金属の高音変形中の変形抵抗測定、工程設計を利用した変形抵抗軽減、加工と相変態が同時に生じる状況の冶金学的解析などを行っている。

まとめ

- 主として鉄鋼材料の高性能化のための加工熱処理方法の新規開拓を行っている。
- 高強度以外の特性を付与する新規加工熱処理法を現在検討している。

論文・特許

- R. Ueji, Y. Kimura and T. Inoue, *ISIJ Int.* **62**, 368-376 (2022).
- R. Ueji and T. Inoue, *Mater. Sci. Eng. A* **764**, 138217 (2019).
- R. Ueji, A. Shibata, K. Ushioda, Y. Kimura, T. Ohmura and T. Inoue, *Scr. Mater.* **194**, 113666 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

新規加工熱処理によるチタン系材料の組織制御

Keywords 変形組織, 元素偏析, 集合組織, 層状構造, 異方性

主幹研究員 / Principal Researcher

江村 聡 Emura Satoshi

✉ EMURA.Satoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/emura_satoshi



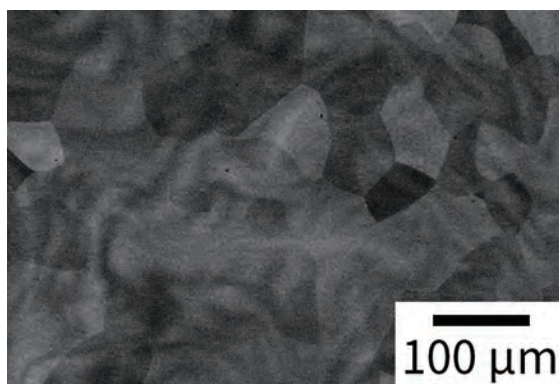
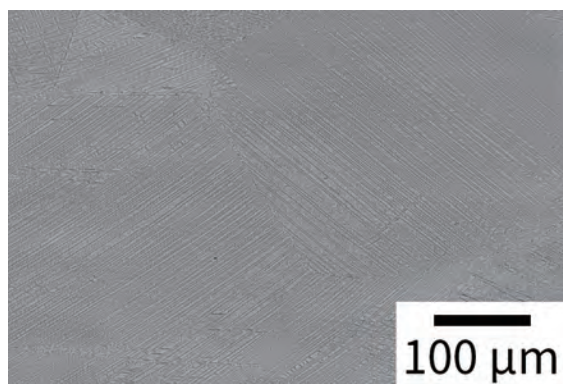
研究概要

引張強さや破断伸び、疲労強度といったチタン合金の機械的性質は合金組成だけでなくその金属組織によっても大きく影響を受ける。これまでも機械的性質の向上のため鍛造や圧延といった加工と熱処理を組み合わせた加工熱処理による金属組織制御について多くの取組が行われてきた。我々は変形双晶などの変形組織や元素偏析を利用した新たな加工熱処理手法の開発を目指した研究を進めている。主なターゲットとして複相層状組織のような異方性を有する材料の創製およびその機械的性質の評価を行う。

新規性・独創性

- 変形双晶や元素偏析を利用した新たな視点からの加工熱処理手法の構築
- NIMSの材料溶解創製ユニットと連携した精緻な加工熱処理の実施
- 層状組織のような異方性を有する新規材料の開発

研究内容



左図はTi-12Mo (mass%) 合金に軽圧延および時効熱処理を施すことで α/β 二相の複相層状組織（ミルフィーユ組織）を導入した事例を示す。溶体化熱処理によって β 単相としたTi-12Mo合金板材に5%程度の冷間軽圧延を加えることで変形双晶が層状に導入される。その後時効熱処理を施すと変形双晶の界面に α 相が優先的に析出・成長することで α/β 二相が積層した層状組織が実現する。このような層状組織はその後圧縮等の変形を加えることでキンク変形と呼ばれる層状構造が屈曲した特異な変形組織を呈することがわかっており、機械的性質に及ぼす影響について現在調査を進めている。右図は同じTi-12Mo合金の溝ロール圧延材の断面組織である。Moの拡散が遅いことから材料中にMoの偏析、すなわちMo量の多い部分（図中の明るいコントラスト）と少ない部分（暗いコントラスト）が渦状に生じる。この渦状組織（ゴッホの絵画からVGS (Van Gogh's Sky) 組織と呼ばれる）に硬質第2相である ω 相が析出する時効熱処理を施すと、Mo量の違いに対応して ω 相の析出量に濃淡ができ、それが材料中の局所的な硬さ変化を生み出し、最終的に通常の材料と比較して室温引張特性が向上することがわかった。

まとめ

- 新規加工熱処理の α/β 型チタン合金などの一般的合金への適用
- 疲労特性、衝撃特性等さまざまな機械的性質の評価
- 大型部材や複雑形状部材への適用手法の検討

論文・特許

- S. Emura and X. Ji, *Mater. Trans.* **61**, 856-861 (2020).
- J. Ruzic, S. Emura, X. Ji, and I. Watanabe, *Mater. Sci. Eng. A* **718**, 48-55 (2018).
- 特許第5885169号 Ti-Mo合金とその製造方法

耐熱材料のクリープ強度のばらつきと組織

Keywords 耐熱鋼, 長時間クリープ特性, ばらつき, 材質劣化, 偏析

グループリーダー / Group Leader

澤田 浩太 Sawada Kota

✉ SAWADA.Kota@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sawada_kota



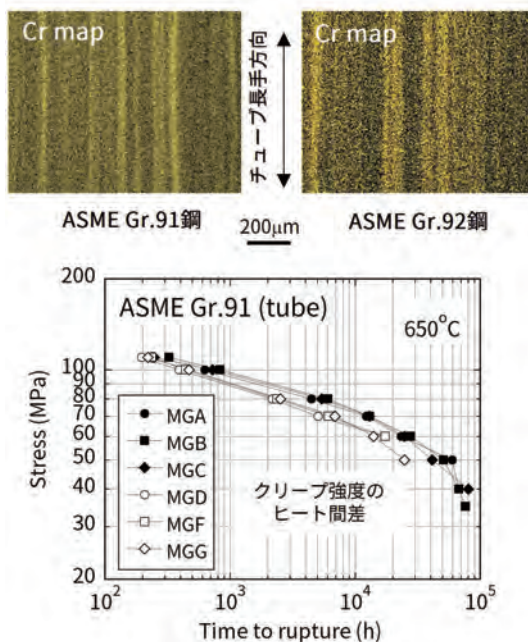
研究概要

実用耐熱材料では、規格の範囲内においても長時間クリープ強度のヒート(チャージ)間のばらつきがあり、強度の下限値を見極めるには、ばらつきの原因を明らかにする必要がある。高Crフェライト系耐熱鋼は、高効率火力発電プラントにおいて広く使用されているが、クリープ強度の低いヒートの存在などにより、許容応力の見直しが行われている。本研究では、化学組成や熱処理条件だけから類推することが難しい合金元素の偏析が、高Crフェライト系耐熱鋼のクリープ強度低下の原因の一つであることを明らかにした。なお、偏析は、オーステナイト系耐熱鋼においても生じる可能性があるため、現在、複数の鋼種において偏析とクリープ強度の関係を調査している。

新規性・独創性

- 実用耐熱材料の長時間クリープ特性とばらつき
- 製造プロセスと関連の深い合金元素の偏析と長時間クリープ強度
- 合金元素の偏析の低減による高品質化

研究内容



高Crフェライト系耐熱鋼のうち、ASME Gr.91鋼(6ヒート)およびASME Gr.92鋼(3ヒート)のチューブ材において、クリープ強度のヒート(チャージ)間差が確認された。組織観察から、チューブ長手方向に沿った合金元素の偏析があること、また、同一規格内において、偏析の程度にヒート間の差があることが分かった。構成元素のうち、添加量の多いCrに着目し、濃度分布から偏析の程度を表す指標として、Cr濃度勾配の標準偏差を提案した。両鋼ともに、Cr濃度勾配の標準偏差が大きいほど、偏析が顕著となり、クリープ強度が低下することが分かった。いずれの鋼も、材料規格を満足しているため、合金元素の偏析が残存していることは、材料規格では規定されていない製造方法などに関連しているものと推察される。ASME Gr.91鋼において、偏析を低減する熱処理を実施したところ、クリープ破断寿命が約2倍向上した。したがって、規格の範囲内で高いクリープ強度を確保するためには、合金元素の偏析をできるだけ低減することが重要である。最近では、オーステナイト系耐熱鋼である、SUS304HTB、SUS316HTB、SUS321HTB、SUS347HTBについて、合金元素の偏析の程度を表す指標を検討するとともに、偏析とクリープ強度、クリープ破断延性、結晶粒径との関連について調査している。

まとめ

- 他の製品形状(パイプや板)における偏析の影響評価
- 溶接部における偏析の影響評価
- 偏析を制限するための材料規格の見直し
- クリープ強度特性以外の材料特性への偏析の影響評価

論文・特許

- K. Sawada, K. Sekido, K. Kimura, K. Arisue, M. Honda, N. Komai, N. Fukuzawa, T. Ueno, N. Shimohata, H. Nakatomi, *et al.*, *ISIJ Int.* **60**, 382-391 (2020).
- K. Sawada, K. Sekido and K. Kimura, *Mater. Charact.* **169**, 110581 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

レーザー粉末床溶融結合法による耐熱鋼の組織制御

Keywords 耐熱鋼, 改良9Cr-1Mo鋼, 三次元積層造形, 電子顕微鏡, 電子線後方散乱回折法, 長時間クリープ

研究員 / Researcher

畠山 友孝 Hatakeyama Tomotaka

✉ HATAKEYAMA.Tomotaka@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hatakeyama_tomotaka



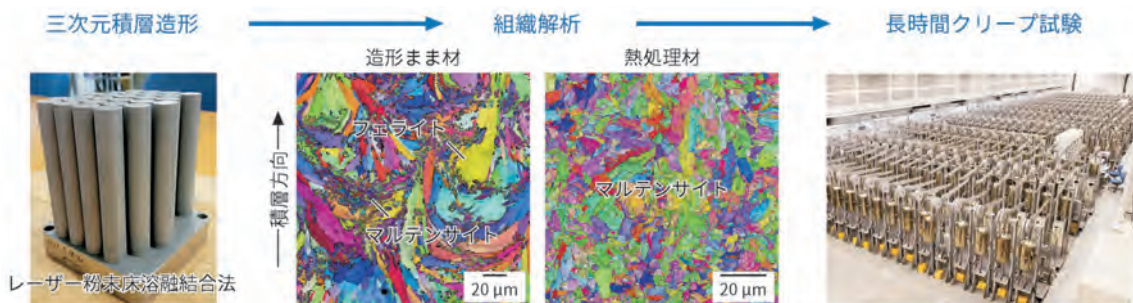
研究概要

構造材料分野では、三次元積層造形 (AM) による複雑形状部材の製造や組織制御が大きな注目を集めている。これまで、代表的なAM手法であるレーザー粉末床溶融結合法 (LPBF) を用いて、フェライト耐熱鋼 (改良9Cr-1Mo鋼) の組織制御を行ってきた。LPBFの特徴である超急凝固により、同鋼の通常製法材のマルテンサイトより組織安定性の高いフェライト相が得られることが分かっており、長時間クリープ強度の向上が期待される。また、熱処理によって積層方向への集合組織を解消できることを見出ししている。現在は、AM材の規格化・実用化を見据えた長時間クリープデータの取得を進めている。

新規性・独創性

- LPBFの超急凝固により相変態を抑制することで安定なフェライト相を得る組織制御手法。
- 熱処理による相変態を活用することでAM材の組織の異方性を解消する組織制御手法。
- AM材の長時間クリープ強度特性評価。

研究内容



LPBFにより改良9Cr-1Mo鋼を作製した。同鋼の通常製法材はマルテンサイト単相となるが、LPBFの特徴である超急冷 (冷却速度～ 10^6 K/s) により、通常のプロセスでは得られないフェライト相が生成する。一方で、フェライト相は同鋼の室温～850℃程度における平衡相であり、マルテンサイトより組織安定性が高いと考えられる。したがって、LPBFにより組織制御した改良9Cr-1Mo鋼は、優れた長時間クリープ強度を有すると期待される。レーザーにより溶融した部分の近傍 (熱影響部) にはマルテンサイトが生成するものの、造形条件によりマルテンサイトの体積率を制御できる。フェライト+マルテンサイトの二相組織を有する造形まま材に対して焼ならしを行うと、オーステナイトへの相変態に伴い組織の異方性が解消され、通常製法材と同じマルテンサイト単相組織が得られる。この熱処理プロセスによる組織制御手法は、通常製法材相当の組織と信頼性を有する複雑形状部材の製造技術へと展開可能である。現在、これらのAM材の長時間クリープ試験を実施している。得られたデータをNIMSクリープデータシートのデータと比較することで、AM材の長期信頼性を評価し、規格化・実用化に貢献する。

まとめ

- LPBFによる超急冷や熱処理プロセスにより相変態を制御することで、フェライト耐熱鋼の組織を作り込むことができる。
- 超急冷により得られるフェライト相によりフェライト耐熱鋼の長時間クリープ強度の向上が期待される。
- AM材の高温部材への適用に向けた長時間クリープデータの取得を進めている。

論文・特許

- T. Hatakeyama, K. Sawada, M. Suzuki and M. Watanabe, *Addit. Manuf.* **61**, 103350 (2023).
- T. Hatakeyama, K. Sekido and K. Sawada, *ISIJ Int.* **63**, 910-918 (2023).
- T. Hatakeyama, K. Sawada, T. Hara, K. Sekido and K. Kimura, *Scr. Mater.* **200**, 113904 (2021).

耐熱鋼の長時間クリープ強度特性評価

Keywords クリープ, 耐熱鋼, 材質劣化, 領域分割解析法, 寿命予測, 許容応力

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

木村 一弘 Kimura Kazuhiro

✉ KIMURA.Kazuhiro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kimura_kazuhiro



研究概要

火力・原子力発電や輸送用機器のエンジン等、高温機器の性能向上には稼働温度の高温化が有効であるが、温度の上昇に伴いクリープ現象が促進され、高温構造部材のクリープ寿命は短くなる。高温機器の性能向上を図るとともに高温構造部材の安全性・信頼性を確保するためには、クリープ強度特性に優れた耐熱材料の開発とともに、長時間クリープ強度特性を高精度で予測評価することが重要である。また、クリープ強度を低下させる要因を解明し、その要因を非破壊的手法を用いて簡便かつ迅速に評価できるようにすることにより、高温構造部材の信頼性を向上させることができる。

新規性・独創性

- 「領域分割解析法」による長時間クリープ強度特性の高精度予測評価
- 高強度フェライト耐熱鋼の許容応力の見直しと寿命評価式の策定
- 次世代革新高温炉の設計に必要な最長50万時間までの材料強度基準策定
- クリープ強度に有害な偏析の集合組織に着目した簡便かつ迅速な非破壊評価技術

研究内容

応力・クリープ破断時間関係に折れ曲がりが生じる場合、設計基準の設定に必要な長時間クリープ強度を過大評価する危険性がある。高強度フェライト耐熱鋼では弾性限に相当する0.2%耐力の1/2で折れ曲がりが生じることを解明し、高応力域と低応力域を個別に解析する「領域分割解析法」を提唱した。本解析法を適用することにより、許容応力の見直しや溶接接手強度低減係数及び既設プラントの寿命評価式の制定等を通して、発電プラント等の高温構造部材の信頼性向上に貢献した。また、「領域分割解析法」を用いて、次世代革新高温炉の設計に必要な最長50万時間までのGrade 91鋼の材料強度基準値を策定し、米国原子力規制委員会により承認された(2023年2月)。

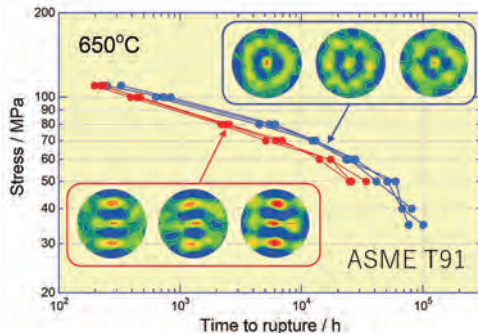


図2 偏析の程度を示す集合組織とクリープ強度との関係

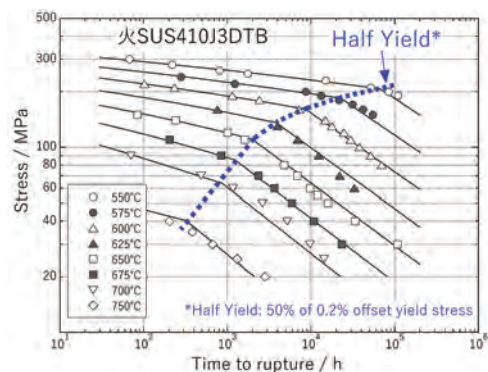


図1 高強度フェライト耐熱鋼(SUS410J3DTB)の応力・クリープ破断時間曲線

クリープ強度特性のバラツキを抑制するため、材質劣化因子の解明に基づいた材料仕様の見直しが行われており、Grade 91鋼については化学成分や熱処理条件等を制限したType 2規格が制定されている。最近、凝固偏析の残存による化学組成の不均一分布がクリープ強度を低下させることを明らかにした。現行の材料規格では、偏析が有害であることの記載はあるものの、偏析の程度を定量的に制限する要求事項はない。そこで、焼戻しマルテンサイト組織に及ぼす偏析の影響に着目し、集合組織により偏析の程度を簡便かつ迅速に非破壊で評価できる手法を提案した。

まとめ

「領域分割解析法」を用いて計18鋼種の高強度フェライト耐熱鋼の許容引張応力が引き下げられ、既設の火力発電設備に対する寿命評価式を策定するとともに、原子力用高温機器の最長50万時間までの材料強度基準値がASME規格に制定された。オーステナイト耐熱鋼に適用可能な「領域分割解析法」を開発するとともに、偏析の程度を制限する要求事項を開発し、材料規格の高度化を実現したい。

論文・特許

- 木村 一弘, ほか, J. Soc. Mater. Sci., Jpn. **52**, 57-62 (2003).
- K. Kimura, Proc. of the ASME 2017 Pressure Vessels and Piping Conference, PVP2017-65522 (2017).
- K. Kimura, K. Kwak, S. Nambu and T. Koseki, Scr. Mater. **188**, 179-182 (2020).

高強度金属材料のギガサイクル疲労特性評価

Keywords 疲労, 金属材料, ギガサイクル, 超音波疲労試験, 規格標準化

グループリーダー / Group Leader

古谷 佳之 Furuya Yoshiyuki

✉ FURUYA.Yoshiyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/furuya_yoshiyuki



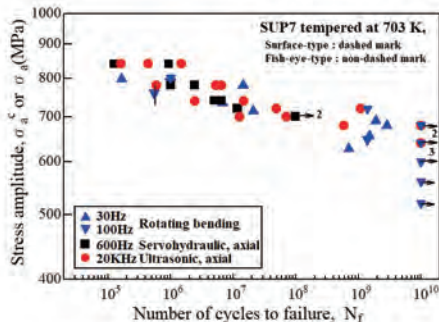
研究概要

高強度の金属材料では疲労限が存在しない場合が多い。この場合、繰返し数が 10^9 回を超えるギガサイクル疲労試験が必要となるが、これは数ヶ月以上の長期間を要する難しい試験であった。そこで、繰返し速度が20 kHzの超音波疲労試験を活用することで、ギガサイクル疲労試験を1日で完了できる加速試験技術を開発した。それにより、膨大な量のギガサイクル疲労試験データを蓄積するとともに、力学モデル構築や定式化による特性評価技術の開発を行ってきた。また、超音波疲労試験技術の開発にも取り組み、多数の技術を生み出すと同時に規格標準化も進めている。さらには、これらの研究を通して、事故調査等に活用できる材料信頼性に関する様々な知識を獲得した。

新規性・独創性

- 高強度金属材料に関する膨大な量のギガサイクル疲労試験データ
- 力学モデル構築や定式化による特性評価技術
- 多種多様な超音波疲労試験技術
- 超音波疲労試験方法の規格標準化
- 事故調査等に活用できる材料信頼性に関する様々な知識

研究内容



ギガサイクル疲労試験データ

力学モデル

$$\frac{d\sqrt{area}}{dN} = C(\Delta K \cdot \sqrt{area}^\alpha)^m$$

予測式

$$\sigma_a = A1 \times (N_f)^{a2} \times (\sqrt{area}_{inc})^{a3}$$

特性評価技術



高温超音波疲労試験

高強度鋼、チタン合金、アルミニウム合金等について研究を行い、膨大な量のギガサイクル疲労試験データを保有している。また、これらのデータを分析することで、力学モデル構築や定式化といった特性評価技術の開発も行っている。例えば、高強度鋼の場合にはビーチマーク法により内部微小き裂の伝ば速度を測定することでメカニズムを特定し、実験データの傾向をよく再現できる力学モデルと予測式を提案した。超音波疲労試験については多種多様な技術を開発したが、特筆すべきは高温超音波疲労試験技術の開発である。この技術は近年再評価され、需要が高まっている。また、これまでの経験や知識を活用して規格標準化や事故調査に関する活動も行っている。

まとめ

- 高強度金属材料のギガサイクル疲労試験技術を開発し、膨大な量のデータを蓄積するとともに、特性評価技術の開発を行っている。
- 超音波疲労試験について多種多様な技術を開発したが、特に高温超音波疲労試験の需要が近年高まっている。
- 超音波疲労試験方法の規格標準化や事故調査等の活動も行っている。

論文・特許

- 特許第 5728788 号 高温条件下での超音波疲労試験法及び試験装置
- Y. Furuya, H. Hirukawa and E. Takeuchi, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 643-656 (2019).
- Y. Furuya, Y. Shimamura, M. Takanashi and T. Ogawa, *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **45**, 2415-2420 (2022).

材料の組織と寿命を繋ぐミクロな疲労亀裂の先進評価技術

Keywords 金属疲労, 亀裂進展, その場観察, ハイスループット, 積層造形, 三次元解析

主幹研究員 / Principal Researcher

西川 嗣彬 Nishikawa Hideaki

✉ NISHIKAWA.Hideaki@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nishikawa_hideaki



研究概要

金属疲労を予測する、防ぐ、或いは疲労に強い金属材料に開発には、材料の微細組織と疲労の関係を理解する必要がある。そのためには、組織に敏感なミクロな疲労亀裂の挙動を理解することが重要となる。NIMSでは、独自の自動その場観察システムを構築することで、ミクロな疲労亀裂の発生・成長に関するデータをハイスループットで取得できるようにした。これにより多くの微細組織に対応した疲労データが収集できるようになり、微細組織の疲労における役割に関する多くの新知見を得ることに成功した。さらに、疲労亀裂に特化した大規模かつ高解像度な3D解析技術を構築することで、その成長メカニズムに関する新知見を得ることに成功した。

新規性・独創性

- 従来、観察に多大な労力を必要としたミクロな疲労亀裂の発生・成長過程を、全自動で観察する顕微鏡システムを構築
- 多様な微細組織に対応したミクロな疲労亀裂発生・成長データの収集
- 特異な微細組織が現れる積層造形材料への展開と疲労破壊メカニズムの解明
- ミクロな疲労亀裂の解析に特化した大規模・高解像度3D解析技術の確立
- 50年にわたる未解決課題であった、ミクロな疲労亀裂の結晶学的な成長メカニズムの解明

研究内容

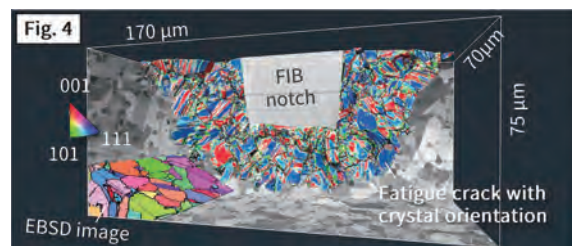
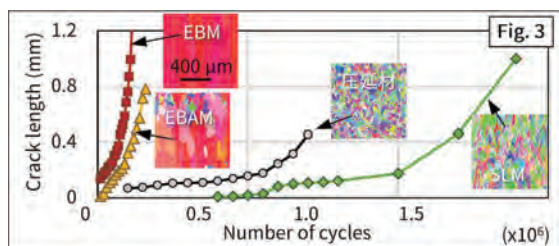
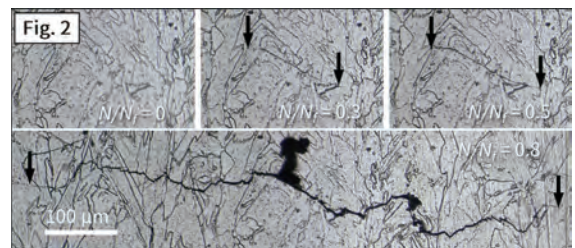
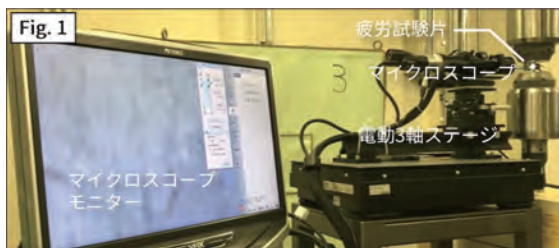


Fig. 1は、疲労亀裂の自動観察システムであり、疲労試験中、定期的にパノラマ状に試験片表面の顕微鏡画像を自動取得する。Fig. 2は、このシステムで観察したミクロな疲労亀裂の発生過程であり、いつ・どこから亀裂が発生したのか高解像度で観察できる。Fig. 3は、積層材料の疲労亀裂成長挙動の例であり、このように、造形方式による組織変化に対応して亀裂成長速度が変化する様子をハイスループットで評価できる。Fig. 4は、大規模3D解析により調べた疲労亀裂面の結晶方位である(微細組織解析グループ、超耐熱材料グループとの連携)。疲労亀裂の大部分がすべり面に沿って成長していることを解明した。

まとめ

- 多様な微細組織に対応したミクロな疲労データの蓄積と、それによる組織-疲労特性の相関関係の明確化
- 疲労限度における停留亀裂の問題など、亀裂発生・成長に関する様々な未解決課題の解明
- 経験則に頼った工学的な疲労寿命予測からの脱却

論文・特許

- H. Nishikawa and Y. Furuya, *ISIJ Int.* **60**, 2090-2096 (2020).
- H. Nishikawa, Y. Furuya, H. Kitano, T. Nakamura, K. Kuwabara, Y. Kanegae, D. S. Kang and K. Aota, *Mater. Sci. Eng. A* **835**, 142682 (2022).
- H. Nishikawa, Y. Furuya, T. Osada, K. Kawagishi and T. Hara, *Scr. Mater.* **222**, 115026 (2023).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

マテリアル循環を実現するリマニュファクチャリング技術の開発と信頼性向上

Keywords 歯車, ばね, シリンダー, 浸炭, 窒化, 低合金炭素鋼, 焼戻しマルテンサイト, 残留オーステナイト, 摺動疲労, X線回折, 渦流探傷, 老廃スクラップ, 高温疲労, 耐熱合金

グループリーダー／Group Leader

早川 正夫 Hayakawa Masao

✉ HAYAKAWA.Masao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayakawa_masao



研究概要

SDGsの達成に向けた世界的な取り組みとともに、循環経済に根ざした部品再生（リマニュファクチャリング）が大いに注目されている。機械部品のリマニュファクチャリングが環境負荷やメンテナンスコストの低減に大きな効果があるため、たとえば油圧部品やエンジンなど多種多様なリマニュファクチャリングが実施されており、産業規模が急激に拡大している。しかし、減速機などに用いられる大型歯車部品や軸受などの浸炭部品は、高負荷での稼働環境のためスクラップとなる割合が高く、それら高価部品のリマニュファクチャリングが強く求められている。

歯車や軸受のリマニュファクチャリングのためには、非破壊検査技術の開発が必要である。さらにリマニュファクチャリングの価値を著しく上げるために機能復元することが不可欠である。そこで、リマニュファクチャリングのための安価で簡便な機能復元技術と信頼性評価技術の開発を目的としている。

新規性・独創性

非破壊検査と加熱修理を組み合わせた技術開発である。

- 非破壊検査手法の高度化の一手法として、渦流探傷技術とX線回折(XRD)法と組合せることによって、部品の摺動疲労による機械的・組織的变化を評価できることを明らかにした。
- XRD法にて圧縮残留応力と残留オーステナイト相の経時変化を把握したことで、部品の再利用判定の基準を設定することを実現した。
- 加熱修理技術は、摺動疲労した部品表面にレーザー焼入れ処理を行うことにより、残留オーステナイト相の比率を稼働前の状態に回復すると同時に結晶粒径の微細化を実現することによって、疲労寿命を最大約4倍向上することができた。

研究内容

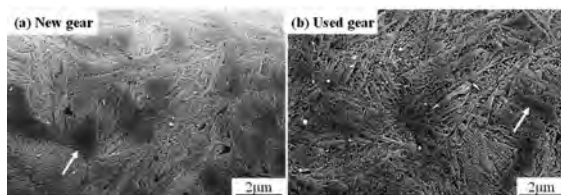


図1 稼働前後における歯車表面の断面の金属組織変化

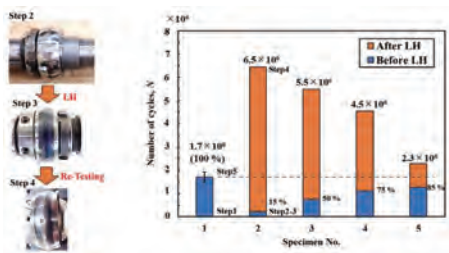


図3 レーザー焼入れによる摺動疲労寿命の長寿命化

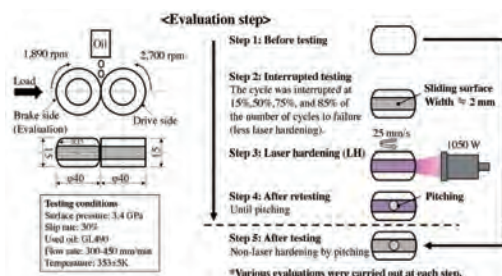


図2 摺動疲労試験におけるレーザー焼入れ処理

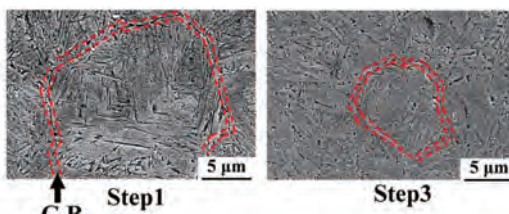


図4 レーザー焼入れによる金属組織改質(旧γ粒径の微細化)

簡便かつ安価な熱処理のみによる高負荷下の稼働部品の機能復元技術を開発することを目的とし、市場で回収された歯車や軸受部品を模擬した浸炭表層の経時変化を非破壊検査で捉えとるに、摺動疲労損傷した浸炭表層に瞬間加熱・瞬間冷却を可能とするレーザー焼入れ(LH)を施した。その結果、摺動疲労損傷を瞬時に回復し、新品部品よりも長寿命を発現する画期的な組織改質を可能とした。これまでもレーザー焼入れにより、新品材の機能向上を試みた事例はあった。しかしながら、リマニュファクチャリングを目的とする稼働部品にレーザー焼入れを施して、機能復元を実現させた前例は全く無い。浸炭摺動部品の表層に対するレーザー焼入れのタイミングを最適化することで、結晶粒微細化によるき裂発生抑制、残留オーステナイト相の分散強化によるき裂進展抑制の複合メカニズムにより、疲労損傷を回復し、長寿命化を図ることを達成した。

まとめ

信頼性評価と余寿命評価は、サブパーツをもう1 ライフサイクル使用できるか、それとも新品サブパーツに交換するべきかを、的確に判断できるか否かを決定づけるものであり、リマニュファクチャリング・リファビッシュの経済性、信頼性、省資源効果を決定づける。リマニュファクチャリングに際しては、表面傷や金属組織の変化を定量的に判定できる非破壊検査が重要となる。さらに、金属組織の機能回復技術を使いこなし、疲労寿命を改善することは、機械構造部品のリマニュファクチャリング普及に大きく貢献するものと期待される。

論文・特許

- T. Kanazawa, M. Hayakawa, D. Vinas, Y. Tahara, N. Hata and M. Yoshimoto, *J. Mater. Res. Technol.* **24**, 39-48 (2023).
- 特許第 7286092 号 歯車の再利用可否判定方法および歯車の再利用可否判定システム
- 金澤 智尚, 早川 正夫, 吉本 光宏, 田原 佑規, 畑 典仁, 目黒 奨, 廣戸 孝信, 松下 能孝, 菅原 道雄, *日本金属学会誌* **85**, 198-206 (2021).

熱電対用金属材料の接合界面制御による熱電発電

Keywords 銅, コンスタンタン, 熱電発電, 溶接継手, 高温廃熱

主任研究員 / Senior Researcher

目黒 奨 Meguro Susumu

✉ MEGURO.Susumu@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/meguro_susumu



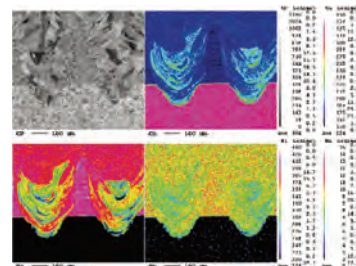
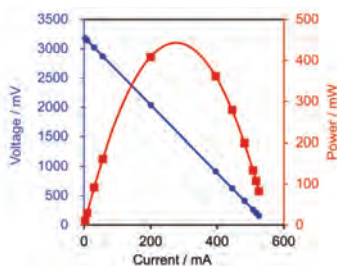
研究概要

熱電発電はカーボンニュートラル社会の実現のための有望な技術の一つであるが、本格的な社会実装には至っていない。我々はゼーベック係数の小さい熱電対用金属材料であっても大面積の接合界面制御を行うことで電流を取り出すことが可能であることを見出した。また、これまで熱電発電に用いられている半導体材料より高温の環境で利用できるため、800℃以上の温度差での発電が可能となった。

新規性・独創性

- 熱電発電に不向きとされる金属材料の特徴を活かすための接合界面制御
- 高温環境において従来の半導体材料の数十倍の温度差(800℃以上)で発電が可能
- 多数の直列接続による熱電発電出力の増大を実現

研究内容



熱電発電の原理として知られるゼーベック効果はあらゆる材料で生じるが、テルル化ビスマス系をはじめとする半導体材料が研究開発の主流である。熱電対用金属材料はゼーベック係数が小さく、これまで熱電発電には不向きとされてきた。一方、金属材料の多くは高融点のため、半導体材料よりも温度差を大きく設定することができ、さらに内部抵抗が小さいため直列接続による出力増大が容易である。そこで、本研究では銅とコンスタンタン(55%Cu-45%Ni合金)の溶接継手をレーザー溶接の手法を用いて作成した。この継手を高温側接点として利用することで発電電流の増大が可能となる。さらに高温側接点を最高900℃として熱電発電を試みた。左上のグラフは銅-コンスタンタンのレーザー溶接継手(幅4mm、厚さ1mm、長さ120mm)を144対直列接続したモジュールの900℃における熱電発電特性で、開放電圧3.2V、最大出力450mWを実現した。右上の図は溶接継手断面の反射電子組成像と元素(Cu、Ni、Mn)の分布を示しており、レーザー溶接による急峻な接合界面の生成が確認できる。この溶接継手を使った熱電発電デバイスによって、可動部分のない高温廃熱回収システムの実現が期待される。

まとめ

- 熱電対用金属材料の接合界面制御による熱電発電を実現
- 高温廃熱回収システムや地熱発電への適用の可能性
- 高温酸化の抑止手段が課題

論文・特許

- 特許6778968 熱発電セル及び熱発電モジュール
- 特開2021040084 熱発電セル及び熱発電モジュール

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

微小球反発硬さ試験機

Keywords 硬さ試験, 反発硬さ, 反発係数, JIS, アルミナ, 金属, セラミックス, 木材, 食品

主任研究員 / Senior Researcher

宮原 健介 Miyahara Kensuke

✉ MIYAHARA.Kensuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/miyahara_kensuke



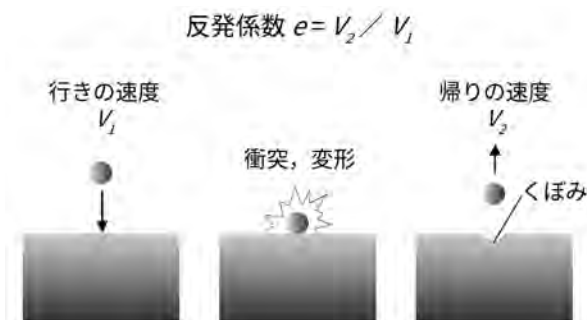
研究概要

本試験機は、直径3mmのアルミナ微小球を試料に衝突させ、行きと帰りの速度の比、つまり反発係数を計測する。塑性変形しにくい硬い試料ほど、反発係数は大きくなる。微小球は軽量(0.056g)なので、小さく薄い試料にも適用でき、試料に与える損傷も小さい。くぼみ寸法の計測が不要なので、一瞬で測定が完了するとともに、個人差がほとんどなく再現性も高い。金属材料だけでなく、セラミックスや木材、食品など幅広い材料に適用可能である。2023年現在、経済産業省の新市場創造型標準化制度の下でJISの原案作成が進められている。

新規性・独創性

反発式の硬さ試験機は押し込み式の硬さ試験に比べて、顕微鏡でくぼみの大きさを計測する必要がないことから、現場向きの試験機といえる。しかし、従来の反発硬さ試験機では、数g～数十gのインパクトボディ（衝突体）を利用するため、小さな試料に対しては正確な測定ができない。微小球反発硬さ試験機では、安価かつ高い形状精度を有する直径3mmのアルミナ微小球(0.056g)を使うことで、小さな部品から大きな構造物までを正確に測定できる。

研究内容



(左図) 微小球を試料に速度 V_1 で衝突させると、速度 V_2 で跳ね返る。この時の V_1 と V_2 の速度比を反発係数 e と呼ぶ。試料が弾性変形だけでくぼみが残らない場合、理想的には行きと帰りの速度は同じになるので、 $e = 1$ となる。一方、試料が塑性変形する場合には、微小球の運動エネルギーからくぼみの形成に費やされたエネルギーが失われるため、 e が1より小さくなる。一般に、塑性変形しやすい試料ほど e が小さく、塑性変形しにくい試料ほど e が大きくなるので、反発係数 e は硬さの指標となる。

(右図) 複数の企業と協力し、本原理に基づく製品を開発した。ポータブルで360°あらゆる向きに試験でき、現場で利用しやすい試験機となっている。複雑な調整は不要であり、電源を入れて誰でもすぐに試験可能である。この微小球反発硬さ試験機は、日本機械学会の優秀製品賞を獲得するとともに、経済産業省の新市場創造型標準化制度に採択され、2023年現在JISの原案作成が進められている。また、一瞬で測定が完了する点を活かして、高温や低温の硬さ試験にも応用されている。



まとめ

- 微小球反発硬さ試験機は、複雑な調整が不要で、誰でもすぐに使える再現性の高い硬さ試験機である。
- 小さな部品から大きな構造物まで、金属、セラミックス、木材、食品など幅広い材料に適用できる汎用的な硬さ試験機である。
- 製品化後、高い評価を受け、現在は経済産業省の新市場創造型標準化制度の下でJISの原案作成が進められている。

論文・特許

- 特許第6624564号 反発係数測定機および硬さ測定機

極低温・高圧水素ガス環境における金属材料の水素脆化

Keywords 水素脆化, 高圧水素ガス, 極低温, 純ニッケル, オーステナイト系ステンレス鋼, 金属疲労

研究員 / Researcher

和田 健太郎 Wada Kentaro

✉ WADA.Kentaro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/wada_kentaro



研究概要

カーボンニュートラルの実現に向けて水素エネルギーが注目されている。水素を貯蔵・輸送・消費するための機器開発が進められている一方、強度設計のための材料強度データ不足が問題となっている。金属材料の多くは、水素環境において強度特性が劣化（水素脆化）することが知られており、機器の開発・設計においては材料の耐水素脆化特性を含めた材料強度データの取得が必須である。特に、液化水素の利活用が広がりつつあることから、より低温での材料特性が重視されている。こうした背景から、室温以下の低温環境における材料の耐水素脆化特性を調査し、低温環境で特異的に発現する材料の水素脆化メカニズム解明に向けた研究およびそのための機器開発を行っている。

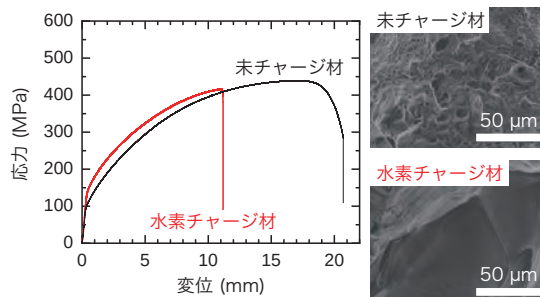
新規性・独創性

- 極低温領域において特有の水素脆化メカニズム解明
- 幅広い温度範囲（室温～4.2 K）における各種力学試験
- 中空試験片方式による高圧水素ガス中試験の低コスト・高スループット化
- 極低温・高圧水素ガス中試験を支える試験技術および関連機器の開発
- 得られた知見・材料特性データを活用した、高強度・耐水素金属の新規開発

研究内容

右図に、77 Kでの低ひずみ速度引張（SSRT）試験のセットアップを示す。真空断熱容器内部に液化窒素を充填し、試験片と治具を浸漬することにより冷却を行っている。寒剤を液化ヘリウムとすることにより4.2 Kでの試験も可能であるほか、液化水素を用いることにより20 Kでの試験も実施可能とするための技術開発を行っている。これら以外の温度域での試験については、冷凍機とヒーターの併用により試験片の温度調節を行いながら試験を実施する。この方式であれば任意の温度で試験ができる一方、装置が複雑であり、温度調節にある程度の技術が求められる。

下図に、あらかじめ水素を固溶させた純ニッケル（水素チャージ材）を用いたSSRT試験の結果を示す。



水素チャージしていない場合（黒線）に比べて、水素チャージした場合（赤線）には、材料の延性が大きく低下している。また、同図に示す破面写真からは、水素により破壊経路が粒内から粒界へと変化したことが分かる。図中には示していないが、中空試験片方式を活用した高圧水素ガス中試験（室温～20 K）も実施可能である。このように幅広い温度・ひずみ速度範囲において網羅的にデータを取得し、緻密な観察を行うことにより、極低温環境において特有の水素脆化メカニズムおよびその支配因子の解明を目指している。さらに、これら研究により取得した豊富なデータを武器に、データ駆動型研究による高強度・耐水素合金の開発を計画している。

まとめ

純ニッケルを例に試験結果を示したが、オーステナイト系ステンレス鋼や銅合金などについても水素脆化に関する研究を進めている。また、SSRT試験以外にも、破壊靱性・疲労・疲労き裂進展試験を行っている。研究により得られる知見の提供に加え、極低温・高圧水素ガス環境における材料特性データそのものについても蓄積・公開し、水素利用機器の開発・設計に貢献していく。

論文・特許

- K. Wada, C. Shibata, H. Enoki, T. Iijima and J. Yamabe, *Mater. Sci. Eng. A* **873**, 145040 (2023).
- K. Wada and J. Yamabe, *Int. J. Hydrog. Energy* **46**, 39577-39589 (2021).
- K. Wada, J. Yamabe and H. Matsunaga, *Materialia* **8**, 100478 (2019).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

極限環境における金属材料の力学特性評価と変形・破壊

Keywords 極低温, 水素, 金属材料, 力学特性, 変形, 破壊, 中空試験片, 試験設備, データシート

主幹研究員 / Principal Researcher

小野 嘉則 Ono Yoshinori

✉ ONO.Yoshinori@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ono_yoshinori



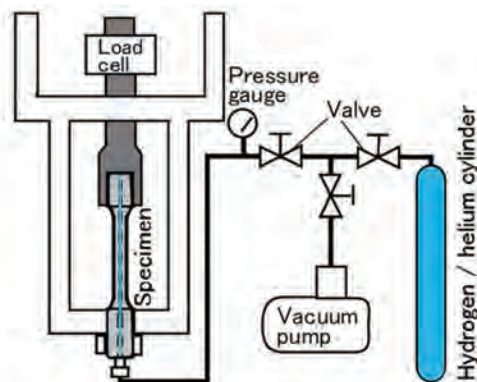
研究概要

① 液化水素サプライチェーン構築、②核融合原型炉研究開発、③液体ロケットエンジン開発 に係わる金属材料について、極低温ならびに高圧水素ガス環境といった極限環境での力学特性を評価するとともに、変形・破壊に関する研究を遂行している。

新規性・独創性

- 極低温、高圧水素ガス、極低温かつ高圧水素ガス環境における力学特性評価
- 中空試験片を用いた高圧水素ガス環境における引張試験法と疲労試験法の確立と規格化
- 液化水素関連機器の研究開発を支える材料特性評価試験設備の整備
- 極限環境材料データシート, 宇宙関連材料強度データシート

研究内容



T. Ogata, J. Japan Inst. Metals, vol. 72 (2008), pp.125-131

① 極低温試験設備群

液体ヘリウム温度 (4 K) と極低温ヘリウムガス雰囲気 (例えば20 K) で引張試験、破壊靱性試験、疲労試験が可能。液体ヘリウムの再凝縮装置を有しているため、液体ヘリウムの補給無しで、長時間の疲労試験も可能。本試験機群は、核融合原型炉用の極低温用構造材料に関する研究、液体ロケットエンジン材料に関する研究にも貢献している。

② 中空試験片を用いた高圧水素試験法

丸棒試験片試験片長手方向に加工した細穴に高圧水素を封入して引張、疲労試験を行う。従来の高圧容器を用いる方法に比べ簡便で、試験時間を短縮できるため低コストで試験が可能。試験片周囲がフリーのため温度調整など環境制御が容易。現在は、中空試験片を用いた低ひずみ速度引張試験法と疲労試験法について規格化を進めている。

まとめ

上記試験設備を用いた研究に加え、水素供給コスト低減のための技術確立に資するため、液化水素下での材料信頼性評価に新たに取り組んでいる。液化水素関連設備で使用される材料が曝される環境を具備し、材料特性評価を可能とする試験設備の設計・開発を行っている。また、当該材料に関する規格化・規制見直し・新材料開発を加速するために、研究に裏打ちされた材料データベース基盤を構築する。

論文・特許

- 物質・材料研究機構, 宇宙関連材料強度データシート. <https://sds.nims.go.jp/>
- A. Nishimura, Y. Ono, O. Umezawa, S. Kumagai, Y. Kato, T. Kato, T. Yuri and M. Komatsu, *Nucl. Mater. Energy* **30**, 101125 (2022).
- 小野 嘉則, 小松 誠幸, 川島 秀人, 船越 裕亮, *金属* **91**, 306-314 (2021).

鉄鋼材料の相変態と変形・破壊挙動

Keywords 鉄鋼材料, マルテンサイト, ミクロ組織, 水素脆性

上席グループリーダー／Distinguished Group Leader

柴田 暁伸 Shibata Akinobu

✉ SHIBATA.Akinobu@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/shibata_akinobu



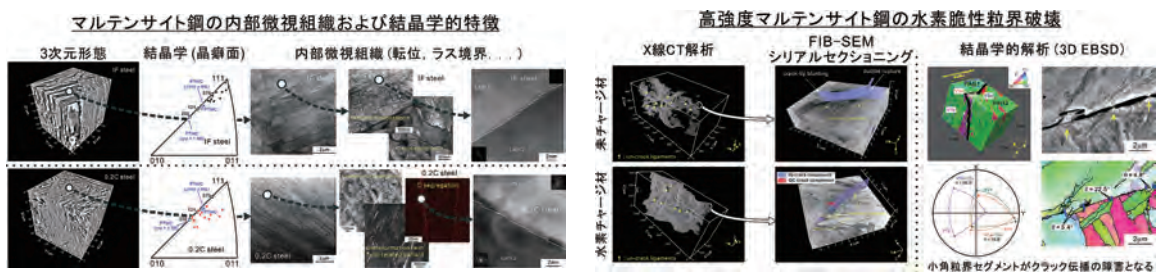
研究概要

現在、鉄鋼材料に代表される構造用金属材料の高強度化へのニーズがますます増加している状況である。高強度・高延性・高破壊特性を実現した先進鉄鋼材料を開発・実用化していくためには、変形・破壊挙動 / ミクロ組織 / プロセスの相関を系統的に研究していくことが必要となる。そこで、相変態によるミクロ組織形成メカニズムや変形・破壊挙動 (特に水素脆性などの脆性破壊) とミクロ組織の相関について研究している。そして、高強度・高延性・高破壊特性を実現した鉄鋼材料を開発するための合金設計指針・ミクロ組織設計指針を理論的な背景から提案することを目指している。

新規性・独創性

- 高強度鉄鋼材料のミクロ組織形成メカニズム解明
- 3次元マルチスケール解析による破壊挙動解析
- 水素脆性破壊を抑制した高強度鉄鋼材料開発のための材料設計概念の提唱

研究内容



「水素脆性」とは材料中に水素が侵入することによって、材料が著しく脆化する現象である。現在、開発が進んでいる引張強度1.5 GPaを超える自動車用高強度鋼板を幅広く社会実装していく上で最も大きな問題となるのが水素脆性であり、耐水素脆性に優れた材料開発を行っていくためには、水素脆性における破壊素過程や力学特性変化を的確に理解することが重要である。そこで、高強度マルテンサイト鋼の水素脆性粒界クラックを対象として研究を行った。まず高強度鋼の基組織であるマルテンサイト組織を集束イオンビーム加工 (FIB) - 走査型電子顕微鏡 (SEM) シリアルセクションング観察および透過型電子顕微鏡 (TEM) により晶癖面方位や転位組織などの内部微視組織を精密に解析し、変態後の室温までの冷却中に動的な内部微視組織変化や界面方位変化が生じていることなどを明らかにした。そして、X線コンピュータトモグラフィやFIB - SEMシリアルセクションングを用いて高強度マルテンサイト鋼の水素脆性粒界クラック伝播挙動を解析し、粒界クラックは非破壊リガメントを形成しながら不連続に伝播しており、方位差が小さい粒界セグメントにおいてクラック伝播が停止するといった破壊メカニズムを解明した。この小角粒界セグメントにてクラック伝播の局所的な停止が巨視的な力学特性に大きな影響をおよぼしていると考えられる。

まとめ

鉄鋼材料におけるマルテンサイト組織の形成メカニズムや水素脆性破壊メカニズムを明らかにし、水素脆性破壊を抑制するための材料設計概念を提唱した。これらの成果は、耐水素脆性特性に優れた材料開発に繋がると期待される。

論文・特許

- A. Shibata, G. Miyamoto, S. Morito, A. Nakamura, T. Moronaga, H. Kitano, I. Gutierrez-Urrutia, T. Hara and K. Tsuzaki, *Acta Mater.* **246**, 118675 (2023).
- A. Shibata, I. G.-Urrutia, K. Okada, G. Miyamoto, Y. Madi, J. Besson and K. Tsuzaki, *Mater. Sci. Eng. A*, **831**, 142288 (2022).
- A. Shibata, I. Gutierrez-Urrutia, A. Nakamura, G. Miyamoto, Y. Madi, J. Besson, T. Hara and K. Tsuzaki, *Acta Mater.* **234**, 118053 (2022).

Novel 2D/3D characterization methods for Steel science

Keywords SEM, ECCI, t-EBSD, t-FSEI, In-situ SEM, 3D-Materials Science, 3D-EBSD, 3D-labDCT, Plasticity, Crystal defects, Mechanical behavior, High-strength steels, Low-density steels

主任研究員／Senior Researcher

グティエレス ウルティア イヴァン Gutierrez Urrutia Ivan

✉ GUTIERREZURRUTIA.Ivan@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/gutierrezurrutia_ivan



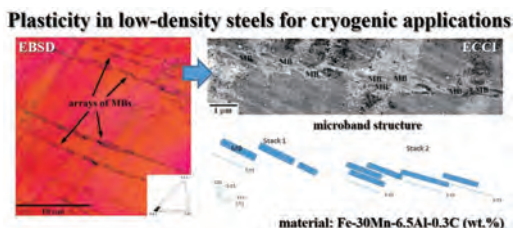
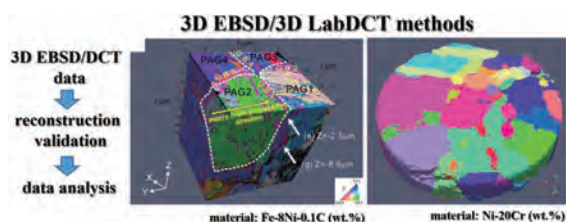
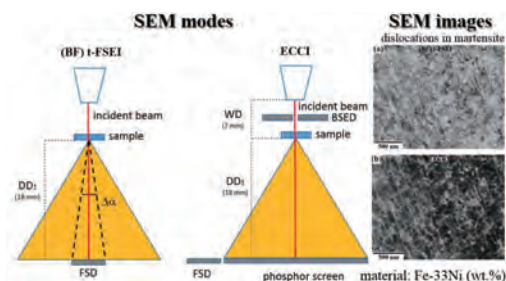
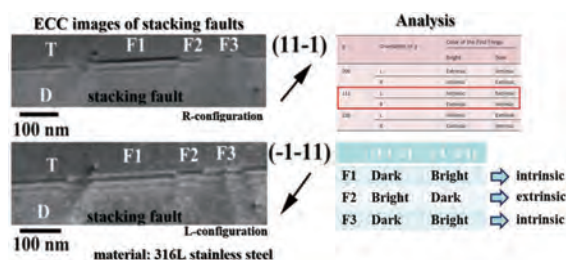
Research Summary

Development of novel SEM methods (ECCI, EBSD, t-FSEI) for the characterization of plasticity in steels; Development of reconstruction methods of 3D microstructural data (3D-EBSD and 3D LabDCT) for the investigation of 3D Materials Science in steels; Plasticity mechanisms in low-density steels for cryogenic applications

Novelty / Originality

Development of novel analysis methods (SEM, LabDCT) for 2D/3D microstructure and crystal defect characterization in steels; Investigation of strain localization mechanisms in low-density steels for cryogenic applications; 3D Microstructure-based design of advanced high-strength steels

Research Contents



(a): ECCI method for the characterization of a stacking fault in austenitic steels; (b): (BF) (t-FSEI) imaging of dislocations in lath martensite; (c): Analysis methods for 3D microstructure characterization: 3D-EBSD and 3D-LabDCT; (d): Analysis of strain localization phenomena in a FeMnAlC low-density steel

Summary

Development of analysis methods for SEM and X-Ray Contrast Tomography; Strain localization mechanisms in low-density steels for cryogenic applications; 3D Materials Science (3D-crystallography and 3D-Microstructure characterization) of steels: Mechanical behavior of high-strength steels

References

- A. Shibata, I. Gutierrez-Urrutia, A. Nakamura, G. Miyamoto, Y. Madi, J. Besson, T. Hara and K. Tsuzaki, *Acta Mater.* **234**, 118053 (2022).
- I. Gutierrez-Urrutia, A. Shibata and K. Tsuzaki, *Acta Mater.* **233**, 117980 (2022).
- I. Gutierrez-Urrutia, *Microsc. Microanal.* **27**, 318–325 (2021).

鉄鋼材料の水素脆性機構解明と耐水素脆性材料開発

Keywords 鉄鋼材料, 水素脆性破壊, 転位, 粒界偏析, 不均一変形挙動

研究員 / Researcher

岡田 和歩 Okada Kazuho

✉ OKADA.Kazuho@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/okada_kazuho



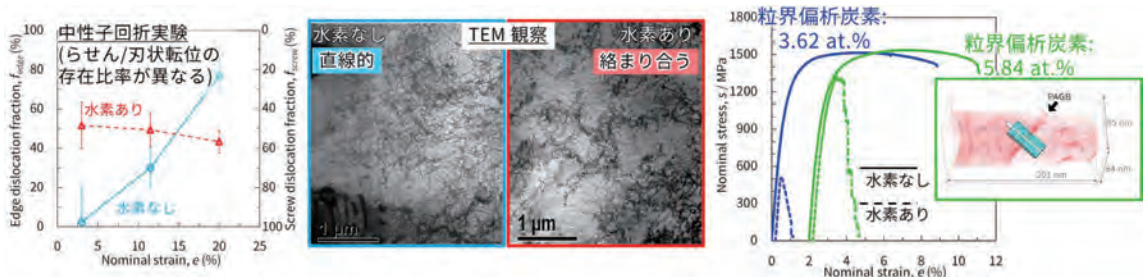
研究概要

近年、燃費向上を目的とした輸送機器の車体重量軽量化が急務となっており、出来る限り高強度な構造用金属材料を幅広く社会実装することが求められている。材料中に水素が侵入することで材料が脆くなる水素脆化現象は、引張強度上昇とともに顕著になるため、高強度鋼の実用化において大きな障害である。しかし、水素脆性破壊のメカニズムには不明な点が多い。本研究では、水素が変形・破壊挙動に及ぼす影響を「転位」「粒界偏析」「不均一変形挙動」の観点から調べ、水素脆性破壊のメカニズムを明らかにする。これにより、破壊メカニズムを抑制し材料強度と耐水素脆化特性のトレードオフ関係を打ち破るための鉄鋼材料設計指針を確立することを目的とする。

新規性・独創性

- マルテンサイト鋼とフェライト鋼を比較することで、BCC鋼の本質的水素脆性破壊機構を解明
- SEMによる3次元像構築・FIB・TEMを組み合わせ、破面の微視的な結晶学を3次的に明らかにする手法を確立
- 炭素の粒界偏析による水素脆化の抑制をマルテンサイト鋼で実証

研究内容



左図は、フェライト鋼の変形微視組織発達を中性子回折によって調べ、水素によって刃状転位とらせん転位の存在比率が変化することを実証した例である。さらに、中央図に示すように、透過電子顕微鏡によって転位組織の形態も変化することを発見した。これらの結果から、水素がらせん転位の刃状転位に対する相対的易動度を増加させることを明らかにしている。さらに、SEMによる3次元像構築・FIB・TEMを組み合わせ、破面の微視的な結晶学を3次的に明らかにする手法を確立を確立し、水素が転位運動に及ぼす影響に基づいて水素脆性疑へき開破壊という破壊のメカニズムを解明することに成功した。

右図は、マルテンサイト鋼の旧オーステナイト粒界における偏析炭素濃度を簡便な熱処理によって増加させることで粒界破壊を抑制し、強度を低下させることなく耐水素脆化特性を向上させることに成功した例である。炭素によって粒界凝集エネルギーが増加するとともに、水素の粒界集積が抑制されたものと考えられる。炭素の偏析を用いて水素脆化特性向上に成功した初の例であり、材料強度と耐水素脆化特性のトレードオフ関係を打ち破るための鉄鋼材料設計指針となることが期待される。

現在、破壊起点(粒界)における局所応力・局所ひずみの定量評価手法確立、および、不均一変形の制御による水素脆化特性向上の開発に取り組んでいる。

まとめ

「転位」「粒界偏析」「不均一変形挙動」といったナノ・ミクロスケールの現象を理解することで、破断応力や破壊靱性などのマクロな特性を制御することに取り組んできた。このようなトランススケールな現象理解・材料開発を様々な破壊現象に対して展開していくことで、あらゆる破壊現象における金属材料の耐久限度を限りなく引張強度に近づけるための材料設計指針を構築していきたい。

論文・特許

- K. Okada, A. Shibata, T. Sasaki, H. Matsumiya, K. Hono and N. Tsuji, *Scripta Mater.* **224**, 115043 (2023).
- K. Okada, A. Shibata and N. Tsuji, *Scripta Mater.* **234**, 115568 (2023).
- K. Okada, A. Shibata, W. Gong and N. Tsuji, *Acta Mater.* **225**, 117549 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノ・キエフト・プロセス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

鉄鋼材料中の水素：脆化元素から有効添加元素への転換

Keywords 鉄鋼材料, オーステナイト, 水素脆化, 強度・延性バランス, 元素戦略

研究員 / Researcher

小川 祐平 Ogawa Yuhei

✉ OGAWA.Yuhei@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ogawa_yuhei

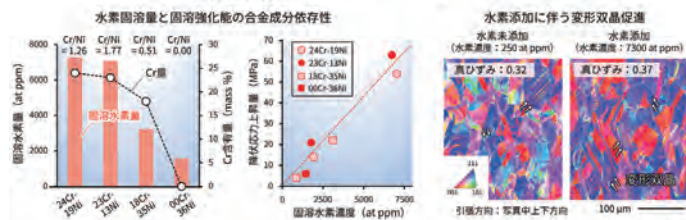
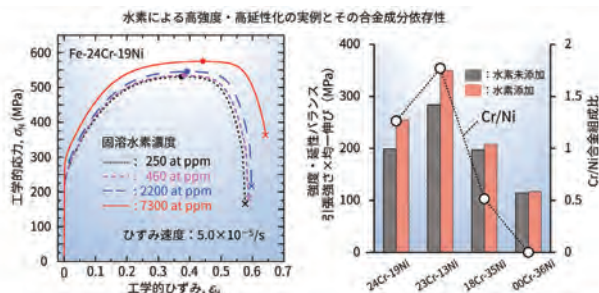
研究概要

水素原子の侵入に伴う金属の強度・延性劣化(水素脆化)は、鉄鋼材料の高強度化とその水素エネルギー関連機器への利用拡大を阻む障壁となっている。その渦中、我々は安定なFCC結晶構造と特定の合金組成を持つオーステナイト鋼に多量の水素を添加すると、強度と延性の双方が顕著に向上する現象を新たに見出した。これは、水素が材料の塑性変形を担う転位の運動を妨げること、変形双晶と呼ばれる特徴的な変形モードを誘起することに由来する。これらの効果を応用し、従来の脆化元素としての認識から高強度・高延性化元素への転換を図るべく、変形中の水素-材料間相互作用メカニズムの原子スケールでの解明と、その発現条件の定量化を目指している。

新規性・独創性

- 脆化元素を利用した強度・延性バランスの向上
- 合金成分設計による水素固溶能力と変形モードの最適化
- 水素誘起変形双晶の有効活用
- 水素原子を利用した固溶強化メカニズムの再考

研究内容



オーステナイト鋼はFe-Cr-Niの3元素を主成分とする合金であるが、特にCr量が20%を超え、Cr/Ni比率が高くなるように成分調整した材料では、高温・高圧の水素ガス中へ曝することによって1原子%に迫る多量の水素を吸蔵し、室温での変形において固溶強化と変形双晶促進効果が発現する。図中の応力-ひずみ特性はFe-24Cr-19Ni (質量%) 鋼の結果であり、約0.7原子%の水素によって強度・延性バランス (引張強度×均一伸び) が30%向上した実例である。高圧水素ガス用の鋼管など、内表面からの水素侵入が不可避の鋼材に同様の効果を適用し、かつ高価なCrやNiをMnやSi等の廉価元素で置換することができれば、使用中における材料の自発的な高強度・強靱化や、部材の肉厚低減およびコスト削減に繋がることが期待される。また、水素のように原子半径が小さく、材料中での拡散性が非常に大きい元素が、これほどまでに顕著な固溶強化や変形モード変化を誘起する事が見出されたことは、学術的観点においても極めて意義深い。同現象の素過程を紐解くことで、材料科学工学において長年の課題であった、侵入型溶質元素(C, N, Hなど)による固溶強化や各種特性変化の本質を再考するための要因としても、水素を活用できるものと考えている。

まとめ

従来は脆化元素として忌避されてきた水素により、劣化ではなく高強度・高延性化を示す鉄鋼材料が存在することを実証した。耐水素部材への積極的な応用に向け、これらの特異現象を合理的に説明するための学理的バックグラウンドの構築と、よりコストパフォーマンスに優れた状態で発現させるための合金設計の最適化に、継続して取り組んでいく。

論文・特許

- Y. Ogawa, *Mater. Jap.* **61**, 325-333 (2022).
- H. Nishida, Y. Ogawa and K. Tsuzaki, *Mater. Sci. Eng. A* **836**, 142681 (2022).
- Y. Ogawa, H. Hosoi, K. Tsuzaki, T. Redarce, O. Takakuwa and H. Matsunaga, *Acta Mater.* **199**, 181-192 (2020).

インフラ構造物の腐食損傷リスク予測技術の開発

Keywords インフラ, 鉄鋼材料, 腐食, 屋外腐食試験, 鉄さび, 機械学習, ハイパースペクトル

グループリーダー / Group Leader

片山 英樹 Katayama Hideki

✉ KATAYAMA.Hideki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/katayama_hideki



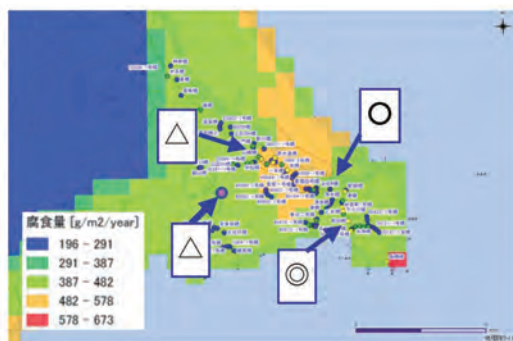
研究概要

我が国では多くのインフラ構造物が高度経済成長期に集中的に建設されており、近年では高経年化による損傷や劣化が顕在化している。今後も安全にかつ継続的に使用するためには、これらのインフラ構造物に対し修繕や再建築に膨大な投資を行わなければならないと予測されている。この対策としては、事後保全型から予防保全型の維持管理への転換によるコストの平準化が重要となる。本研究テーマでは、損傷要因の一つである腐食について、気象・環境データから補修・補強が必要なインフラ構造物を事前に抽出可能な腐食損傷リスク予測技術やハイパースペクトルカメラを活用した効率的な診断を行うための簡便な点検・評価技術の開発を実施している。

新規性・独創性

- 機械学習の活用による腐食に影響を及ぼす気象・環境因子の抽出
- 気象・環境データのみからの腐食損傷リスク予測
- 点検・評価技術へのハイパースペクトルカメラの適用
- ハイパースペクトル解析による腐食損傷リスク予測

研究内容

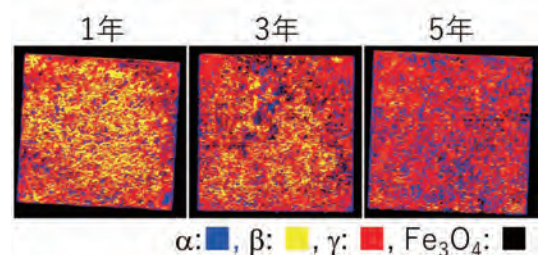


4種類の既知の鉄系腐食生成物に対してハイパースペクトル測定を行った結果、それぞれのスペクトルには有意な違いが観測され、それぞれの腐食生成物を分離できることが分かった。この解析技術を用いて、銹子で暴露試験を行ったFe-9% Niについてハイパースペクトル解析を行った。1年目の試験片では β -FeOOHや γ -FeOOHが多く検出されたのに対し、腐食期間が長くなるにつれて、 β -FeOOHは減少し、 α -FeOOHが多く検出されることが分かった。

表面に形成される腐食生成物はその後の耐食性に大きく関与すると考えられ、本技術のさらなる高度化により、簡便で定量性の高い腐食損傷点検・評価技術の実現が期待できる。

国内6か所において、月単位で屋外腐食試験を行った時の炭素鋼の腐食量データと気象・環境データを用いて、機械学習により腐食損傷リスク予測モデルを構築した。構築したモデルの検証のため、冬季1か月間の銹子市の気象データから腐食損傷マップを作成し(図1)、実際の腐食試験結果と比較した。飛来海塩量の影響の大きい2か所での腐食量の推定値は実測値と比較的近い値を示したが、内陸部では実測値との乖離があり、データの充実などさらなる高精度化を目指して研究開発を継続中である。

腐食損傷リスク予測マップは、各インフラ構造物に対する補修や補強の優先順位付けを実現することができ、これらにかかるコストの平準化に大きく貢献できる。



まとめ

- 気象・環境データから腐食リスクを予測できるマップを構築するための機械学習のモデルとして、アンサンブルモデルが高い識別率を示す。
- 実環境で屋外腐食試験した結果と推定値を比較した結果、沿岸部はかなり良い一致を示すが、内陸部では過大評価になる。
- ハイパースペクトル解析により、表面に形成される腐食生成物の同定や腐食による変化の検出が可能であり、ハイパースペクトル測定は鉄鋼材料の腐食損傷点検・評価技術として有用である。

論文・特許

- R. Onishi, K. Matsuda, H. Suto, Y. Hattori, H. Hirakuchi, S. Matsunami, S. Yagyu, T. Shinohara, and H. Katayama, *Mater. Trans.* **62**, C-M2021848 (2021).
- R. Kobayashi, H. Katayama and T. Akashi, *Zairyo-to-Kankyo* **70**, 354-357 (2021).
- 松波 成行, 柳生 進二郎, 篠原 正, 片山 英樹, 須藤 仁, 服部 康男, 平口 博丸, *土木学会論文集A1 (構造・地震工学)* **75**, 141-160 (2019).

革新的表面改質技術によるステンレス鋼の超高耐食性化

Keywords ステンレス鋼, 耐食性, 表面処理, 電気化学, 腐食防食, レーザプロセス

主席研究員 / Chief Researcher

堤 祐介 Tsutsumi Yusuke

✉ TSUTSUMI.Yusuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsutsumi_yusuke



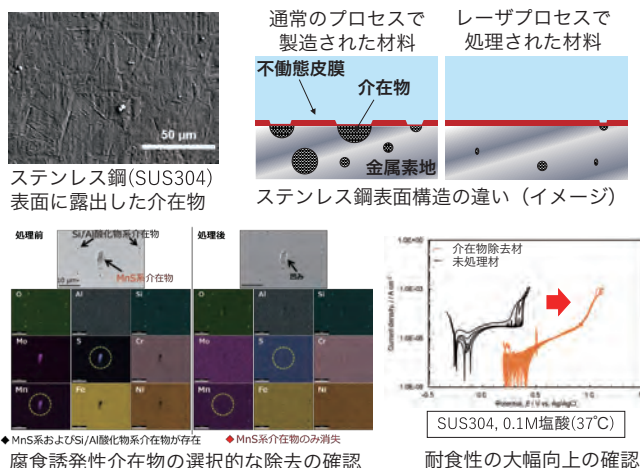
研究概要

ステンレス鋼は鉄系の耐食材料であり、構造材料や医療用材料といった産業用だけでなく、多種多様な日用品にも使用されており、我々の生活においても身近な存在である。ステンレス鋼は「腐食しない」と認識されがちだが、実際には介在物と呼ばれる不純物の微粒子が原因で、特定箇所が集中的に腐食する。このため、耐食性向上の効果がある元素を添加・増量することで腐食を抑制することができるが、その分コストは上昇してしまう。また、介在物を排除しているわけではないため、完全な防食には至っていない。そこで本研究では、安価な手法にてステンレス鋼の介在物を除去・無害化することで、ステンレス鋼の成分を変えることなく高耐食性化する技術を開発している。

新規性・独創性

- ステンレス鋼の腐食発生のメカニズムに基づいた、効率的な耐食性向上のプロセス原理
- レーザ照射による局所的な溶解と超急速冷却による介在物形成の抑制、および電気化学的処理による腐食発生リスクの高い介在物の優先的除去
- ステンレス鋼のポテンシャルを最大限発揮させることで信頼性化と用途拡大を実現

研究内容



未処理のステンレス鋼には製造プロセス中に形成した介在物が多数含まれるため、表面には必ず介在物が露出する。このなかでも、腐食誘発性の介在物は、ステンレス鋼の保護性の皮膜(不動態膜)の形成を阻害し、集中的な腐食の起点となる。本研究ではレーザー粉末床溶融結合法やレーザー熱加工法により、これらの介在物をほとんど含まないステンレス鋼表面への改質が可能であること、また、市販のステンレス鋼表面においても、特殊な電気化学処理を施すことで、腐食誘発性の介在物のみを選択的に除去できることを示した。実際に、これらのプロセスや表面処理を施したステンレス鋼は加温した塩酸においても腐食しないなど、耐食性が飛躍的に向上することを見出している。これらの成果は、燃料電池の過酷な腐食環境における材料コストの低減や長寿命化、医療用材料の高安全性化、高信頼性化に資する技術として期待される。

まとめ

レーザーを利用したステンレス鋼中の介在物形成を抑制する技術、および電気化学処理によるステンレス鋼表面の介在物を除去する技術により、ステンレス鋼の耐食性を飛躍的に向上できることを実証した。従来の防食技術はステンレス素地の溶解を抑制する、不動態皮膜を強固にするなど、疾病の治療で例えると対症療法であったのに対して、本技術は腐食の直接的な原因を排除する、原因療法に相当する。介在物という足枷により、本来の性能を発揮できていなかったステンレス鋼は、適切な追加処理により、そのポテンシャルを最大限に発揮できるようになると確信している。

論文・特許

- Y. Tsutsumi, T. Ishimoto, T. Oishi, T. Manaka, P. Chen, M. Ashida, K. Doi, H. Katayama, T. Hanawa and T. Nakano, *Addit. Manuf.* **45**, 102066 (2021).
- Y. Tsutsumi, I. Muto, S. Nakano, J. Tsukada, T. Manaka, P. Chen, M. Ashida, Y. Sugawara, *et al.*, *J. Electrochem. Soc.* **167**, 141507 (2020).
- 特開2021147636 ジルコニウムの防食処理方法、ジルコニウムの防食処理装置、並びにジルコニウムを用いた医療用機器、原子炉用機器、又は化学プラント用機器

KFM-EBSD-EDS解析による構造材料の耐食性評価

Keywords 構造材料, 耐食性評価, 結晶構造解析, 顕微鏡解析, 電気化学試験

主任研究員／Senior Researcher

村瀬 義治 Murase Yoshiharu

✉ MURASE.Yoshiharu@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/murase_yoshiharu



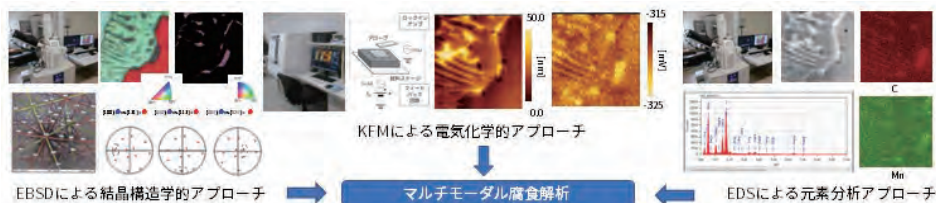
研究概要

高強度鉄鋼材料の社会実装は、省エネルギーや環境負荷低減を推進するための重要な取組課題の1つである。鉄鋼材料の高強度化は緻密に配置された異相界面組織により実現されるが、その一方で組織の不均一化によって腐食感受性は上昇するため、異相界面組織の腐食特性をナノ・ミクロレベルで評価する技術が必要である。ここでは、耐食性に優れた高強度鉄鋼材料設計指針を得ることを目的としたKFM、EBSDおよびEDSのマルチモーダル腐食解析を紹介する。

新規性・独創性

- KFMによる、異相界面のナノ・ミクロスケール表面電位マッピング
- EBSDによる、異相界面の結晶方位マッピング
- EDSによる、異相界面の元素偏析マッピング
- 上記3つの異なるマッピング手法を統合したマルチモーダル腐食解析

研究内容



KFM-EBSD-EDS解析には、KFM測定箇所とSEM-EBSD-EDS測定箇所をナノ・ミクロスケールで一致させる必要がある。このため、KFM測定において表面電位像と同時に得られる表面凹凸像をSEM像と照合させることにより、マルチモーダル解析を実現した。これにより、EBSD解析による異相界面の結晶整合性に基づく耐食性評価と、KFM解析による初期腐食反応の検出、EDS解析による腐食前後の元素偏析評価など、これまで個別に議論されていた実験データを1つに統合して包括的な腐食挙動研究が可能となった。上の図は、フェライト・パーライト鋼についてマルチモーダル解析を行った結果を示しており、EBSD解析によって結晶整合性が低いと判定されたフェライト・セメンタイト異相境界では、KFM解析によって初期腐食に伴う表面電位低下とともに孔食が確認され、さらにEDS解析から腐食反応にはMnとCの偏析が関係していることが明らかとなった。このようなマルチモーダル腐食解析手法を用いた研究は世界的にも報告例が少なく、構造材料の腐食挙動メカニズムに関する基礎・基盤研究の強化に貢献するとともに、ナノ・ミクロスケールの結晶組織に基づく構造材料の耐食性評価、さらに耐食性に優れた高強度鉄鋼材料設計技術の開発に寄与することが期待される。

まとめ

- KFM-EBSD-EDSのマルチモーダル腐食解析の実現
- ナノ・ミクロスケールの結晶組織に基づく構造材料の耐食性評価
- 耐食性に優れた高強度鉄鋼材料設計技術の開発

論文・特許

- Y. Murase, H. Masuda and H. Katayama, *J. Electrochem. Soc.* **168**, 041501 (2021).
- Y. Murase, H. Masuda and H. Katayama, *Mater. Trans.* **61**, 482–489 (2020).
- Y. Murase, N. Yamamoto and H. Katayama, *Mater. Trans.* **58**, 1386–1391 (2017).

実験と計算を併用したマルチマテリアル部材の腐食挙動解析

Keywords 鉄鋼材料, 軽金属, 腐食, 電気化学計測, 有限要素法

研究員 / Researcher

門脇 万里子 Kadowaki Mariko

✉ KADOWAKI.Mariko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kadowaki_mariko



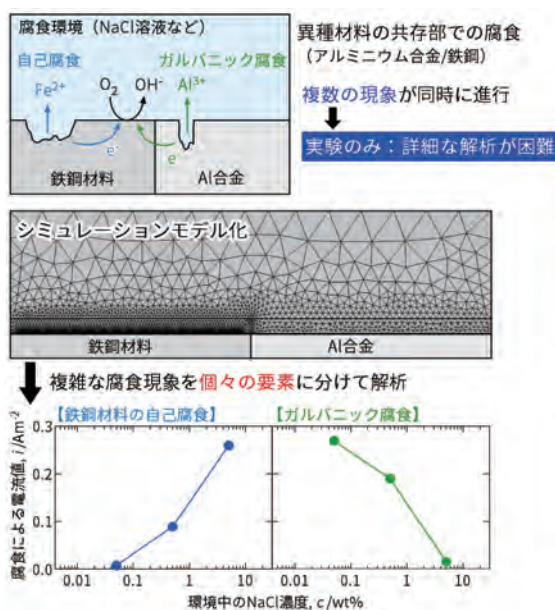
研究概要

近年、自動車の燃費向上に向けた車体の軽量化が重要視されており、鉄鋼材料の一部を軽量のアルミニウム合金などに置き換える「マルチマテリアル化」が進められている。しかし、そのような異種材料の共存部での耐食性の低さが問題となっている。腐食挙動を解析するため、従来は実験による手法が主に用いられてきたが、時間・コストがかかる点や詳細な現象解析が困難な点が課題とされてきた。ここでは、実験による手法と計算科学の手法を併用することで、効率的かつ包括的にマルチマテリアル部材の腐食機構を理解し、高耐食化の指針を得ることを目的としている。

新規性・独創性

- 有限要素法などの数値シミュレーションを活用した腐食挙動の解析
- 腐食試験にかかる費用・時間の低減、高効率化
- 正確かつ定量的な腐食量の予測

研究内容



腐食は電子を放出するアノード反応と、電子を消費するカソード反応による複合電極反応である。鉄鋼材料とアルミニウム合金の共存部では、アルミニウム合金上でのアノード反応と鉄鋼材料上でのカソード反応により進行する「ガルバニック腐食（異種金属接触腐食）」と、アノード反応とカソード反応の両方が鉄鋼材料上で進行する「鉄鋼材料の自己腐食」が同時に進行する。しかし、実験ではこれら二つの現象を同時に解析できないため、正確な腐食量の把握は困難とされてきた。そのような点を解決するため、本研究では実験による解析に加えて、有限要素法に基づく数値シミュレーションの活用に取り組んでいる。数値シミュレーションでは腐食に関わる物理化学現象を連立方程式として表し、それを近似的に解くことで系全体の腐食挙動を推定することができる。腐食反応により生じた電流値・電位・化学種の空間的分布などに関するデータが得られるため、それを基にするとマルチマテリアル部材の定量的な腐食量（「ガルバニック腐食」と「自己腐食」それぞれの定量的な腐食速度）を算出することができる。また、計算条件を変化させることで、様々な実用環境での腐食挙動をシミュレーション上で再現することも可能であり、今後はマルチマテリアル部材に限らず多種多様な材料の腐食現象解析に適用できると期待される。

まとめ

マルチマテリアル部材の腐食挙動解析に際して、有限要素法に基づく数値シミュレーションの活用が有効である。今後はマルチマテリアル部材に限らず、多種多様な材料の腐食挙動解析について、数値シミュレーションを活用した研究を展開したい。

論文・特許

- M. Kadowaki, H. Katayama and M. Yamamoto, *Corros. Sci.* **218**, 111190 (2023).
- M. Kadowaki, H. Katayama and M. Yamamoto, *Corros. Sci.* **211**, 110918 (2023).

溶接・接合機構の解明と構造体化への展開

Keywords 溶接, 接合, その場観察, 組織形成, 構造体化

グループリーダー / Group Leader

柳楽 知也 Nagira Tomoya

✉ NAGIRA.Tomoya@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagira_tomoya



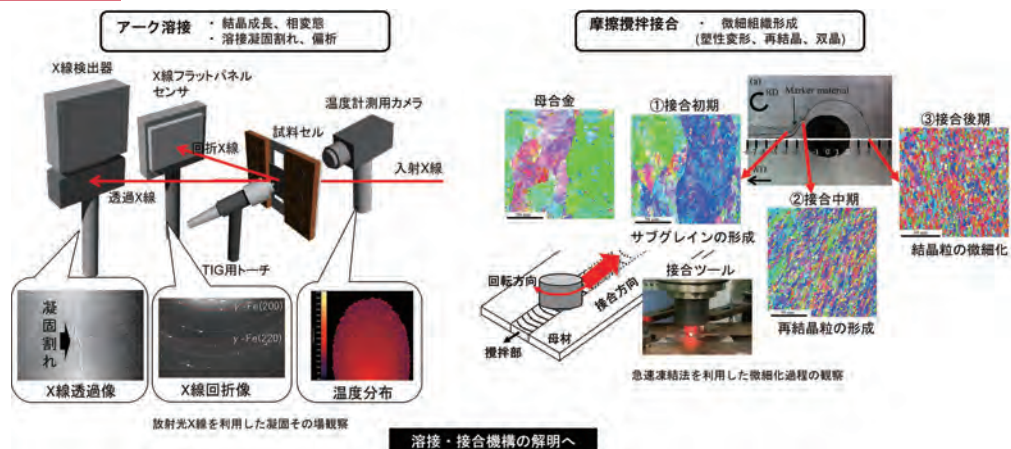
研究概要

物と物を繋げる溶接技術は、輸送機器や構造物などの製作や補修を行う不可欠な技術であり、我々の社会インフラを根底から支えている。近年、省資源、省エネルギーへの取組みが強まる中、割れ感受性が低く、高強度・高靱性を有した長寿命な溶接構造物を実現する溶接技術の開発が望まれている。しかしながら、欠陥や組織を制御する溶接技術の開発に不可欠な組織形成過程の理解が不足しているのが現状である。本研究では、その場観察などの手法を用いてアーク溶接および摩擦攪拌接合中の微細組織形成や欠陥形成に関する溶接・接合機構を明らかにする。また、機構解明を基に難溶接材料を中心に欠陥が発生することなく構造体化を行うための溶接・接合技術の開発を行う。

新規性・独創性

- 大型放射光施設(SPring-8)において、放射光X線を利用してアーク溶接過程の溶接凝固現象をその場観察できるシステムの構築
- 一般的なラボのX線とは異なり、高空間・高時間分解能で金属合金の凝固現象のその場観察が可能
- 摩擦攪拌接合中における再結晶や双晶などの微細組織形成過程を観察できる技術の確立

研究内容



溶接・接合機構の解明へ

アーク溶接では放射光X線を利用して、Fe系、Al系合金を対象に結晶粒子スケールで結晶の成長・競合、相変態、凝固割れなどの溶接凝固現象のその場観察技術を確立した。溶接中のX線透過像、X線回折像、温度分布をすべて連成して取得することが可能である。この技術により、結晶成長や凝固割れの形成機構の解明、割れ発生が起こる限界ひずみの取得、凝固割れに影響を及ぼす凝固モードの解明を行うことができた。凝固モードの特定や割れ発生条件の取得により、割れが起こらない材料設計や溶接技術の開発を行い、難溶接材料を中心に構造体化に取り組んでいる。

固相状態で接合を行う摩擦攪拌接合では、積層欠陥エネルギーが異なるFe、Al、Cu系合金などを対象に急速凍結法により、塑性変形や結晶粒の微細化に繋がる再結晶や双晶形成の発生挙動、発生位置、発生頻度を時間発展で明らかにすることができた。この知見を基にマイクロ組織制御手法の提案や実用化に向けて、従来Fe系合金では困難であった厚鋼板への摩擦攪拌接合の適用を試みている。

まとめ

高輝度、高平行度の放射光X線を利用することによって、これまで観察が不可能であったアーク溶接中での結晶成長や相変態などの組織変化や凝固割れの発生・進展挙動を結晶粒子スケールで明らかにすることが出来た。組織形成が複雑な摩擦攪拌接合では、接合温度や積層欠陥エネルギーの観点から系統的に微細化機構を明らかにすることが出来た。その場観察などから得られた組織形成に関する知見を基に、マイクロスケールでの組織制御手法の提案や割れの予測・低減に向けた信頼性のあるモデリング、シミュレーションが期待される。

論文・特許

- T. Nagira, T. Nakamura, F. Yoshinaka, T. Sawaguchi, Y. Aoki, M. Kamai, H. Fujii, A. Takeuchi and M. Uesugi, *Scripta Mater.* **216**, 114743 (2022)
- T. Nagira, X.C. Liu, K. Ushioda and H. Fujii, *Sci. Technol. Weld. Join.* **25**, 669-678 (2020)
- T. Nagira, D. Yamashita, M. Kamai, H. Liu, Y. Aoki, H. Fujii, K. Uesugi and A. Takeuchi, *Mater. Charact.* **167**, 110469 (2020)

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

溶接技術の高度化に向けたAI技術の活用

Keywords 溶接, 鉄鋼材料, 機械学習, 溶接Digital Transformation

主幹研究員／Principal Researcher

北野 萌一 Kitano Houichi

✉ KITANO.Houichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kitano_houichi



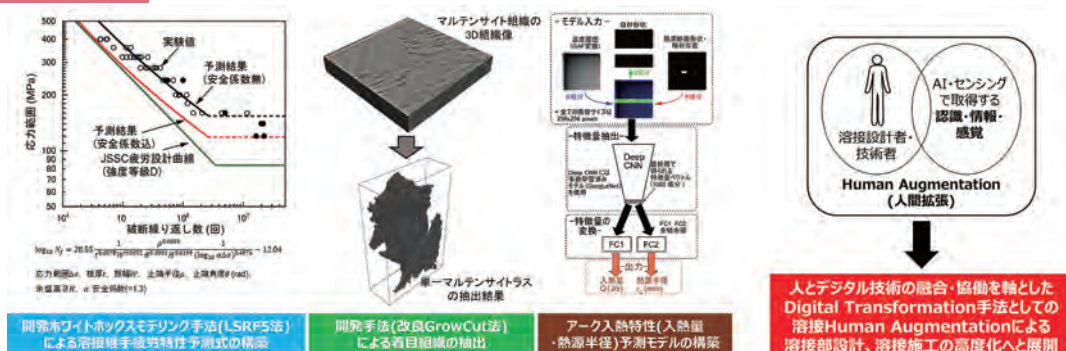
研究概要

アーク溶接技術は、アークプラズマにより溶接金属と母材を熔融し、一体化する技術あり、安価で高速な接合方法として広く活用されている。しかし、アーク溶接技術には、溶接中の温度履歴により、材質や力学状態が変化し、構造物特性を損なう可能性があるという課題がある。上記課題の解決のために、人工知能(AI)技術や機械学習技術の活用により溶接部設計や施工を脱技能化、高信頼性化する技術の開発を進めている。これまでに、溶接部特性予測モデリング手法や、3D金属組織像からの組織抽出手法、溶接解析のための入熱モデル決定手法の開発を行ってきた。以上の研究により、新規知見の創出のみならず、産業活用の観点からの技術開発も目指している。

新規性・独創性

- アーク溶接現象は、固相、液相、気相、プラズマの4つの相が数cm程度の範囲で干渉し合うため、非常に複雑であり、現象を理解する難易度は非常に高い。
- AI・機械学習技術を駆使し、数値データに限定されない「何か」から「何か」への変換を可能にするモデル構築を行うことで、新たな視点からアーク溶接現象を理解することを目指している。
- アーク溶接現象を正確にモデリングする技術によって、従来は職人や技術者の経験に頼っていた溶接部の設計や施工を脱技能化し、高信頼性化することが可能になる。

研究内容



溶接部特性予測モデリング手法の開発では、LSRF5法 (Least Squares-assisted Rule Extraction from Facts Method Version 5) を提案した。この手法は、構造を工夫したニューラルネットワーク (RF5法) と最小二乗近似を組み合わせ、入力と出力 (予測対象である溶接部特性) の関係を明確にする特性予測式を構築できる。構築モデルを活用することで、溶接部の設計や施工において、短時間かつ高い信頼性で、技能に依らず溶接部特性を予測することが可能になる (上図は突合せ継手の疲労特性予測モデル構築例)。

3D組織像からの組織抽出手法の開発では、複雑な鉄鋼材料の3D組織像から単一の組織を抽出するため、改良GrowCut法を提案した。この手法は、セルオートマトン法をベースにしたセグメンテーション手法であるGrowCut法を発展させたもので、高精度な組織抽出が可能になる (上図はマルテンサイト相の3D形状抽出例)。

溶接解析のための溶接入熱特性決定手法の開発では、溶接試験から得られる温度履歴や溶融部形状情報から量込みニューラルネットワークにより特徴抽出し、適切な溶接入熱特性を決定する手法を提案した。これにより、従来は、解析技術者が経験に頼っていた溶接現象を正確に再現するための溶接入熱特性の決定を自動化でき、溶接シミュレーションの脱技能化が達成される (上図は溶接入熱特性決定フローの概要)。

以上の研究を発展・応用することにより、様々な情報を得るためのAI・センシング技術と技術者の協働による溶接Digital Transformationの実現を目指している。

まとめ

AI・機械学習技術は近年急速に発展しており、その流れは今後もしばらく続くと考えられる。溶接現象の学術的な理解、産業活用可能な技術の開発に向けて、今後も最先端のAI・機械学習技術を取り入れ、精力的な研究を実施する。

論文・特許

- H. Kitano and T. Nakamura, *Welding Letters* **36**, 5WL-8WL (2018).
- A. Shibata, G. Miyamoto, S. Morito, A. Nakamura, T. Moronaga, H. Kitano, I. Gutierrez-Urrutia, T. Hara and K. Tsuzaki, *Acta Mater.* **246**, 118675 (2023).
- H. Kitano and Y. Mikami, *Mater. Today Commun.* **31**, 103387 (2022).

ナノスケール計算による強度支配因子の評価

Keywords 金属材料, 強度支配因子, 高精度解析, 材料欠陥, ナノスケール計算

主任研究員／Senior Researcher

譯田 真人 Wakeda Masato

✉ WAKEDA.Masato@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/wakeda_masato



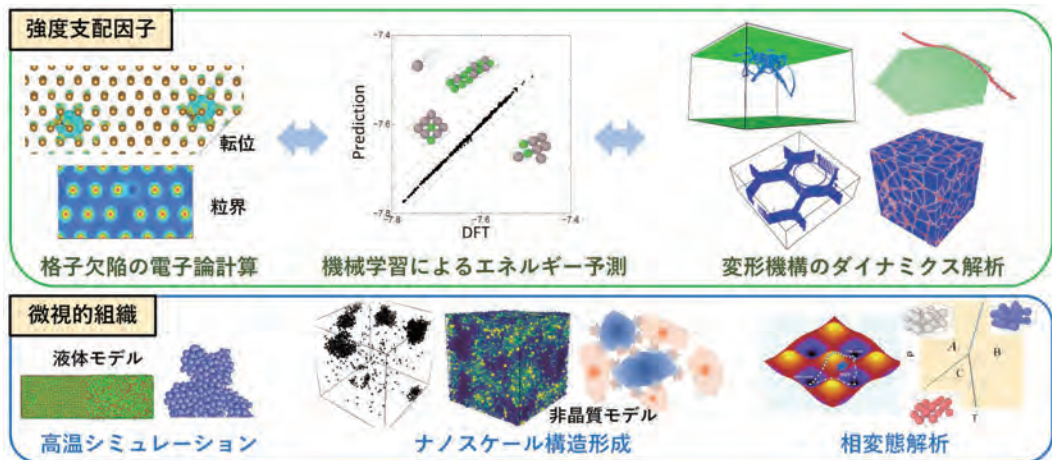
研究概要

より強く壊れにくい材料の開発指針を原理原則から獲得するためには、材料組織が変形機構と力学特性に及ぼす影響を理解することが重要となる。本研究では鉄鋼材料などの金属材料の変形機構を、第一原理計算や分子動力学法、高精度エネルギー予測手法などの様々な原子シミュレーション手法を駆使して調査するとともに、ナノ押し込み実験などの微視的スケール力学試験と連携することで、強度支配因子が材料中の力学特性に及ぼす影響をナノスケールから多角的に評価している。

新規性・独創性

材料の強度支配因子について第一原理計算で元素の影響を評価するとともに、変形現象の活性化障壁解析、先端のエネルギー論的解析、そして数理モデルを組み合わせることで、ナノスケール変形現象が巨視的な力学特性に及ぼす影響を予測する。また微視的スケール力学試験と連携することで強度支配因子に関する多角的な情報を獲得することが可能である。結晶・非晶質金属の組織形成過程についても評価を行っており、材料の組織と強さの関係を理解するための系統的な原子論的解析を実施している。

研究内容



元素の特性が強く影響する強度支配因子について電子論に基づく第一原理計算を用いて種々の格子欠陥の評価を行い、さらに第一原理計算データから機械学習モデルを作成することで格子欠陥エネルギーなどの高精度予測に取り組んでいる。またナノスケールの変形メカニズムおよび応力・温度などの影響を評価するために、エネルギー論に基づく手法、またダイナミクス解析手法などの多様なシミュレーション手法を駆使し、さらにはナノ力学試験と連携することで、金属材料の強度支配因子について多角的かつ直接的な評価を実施している。強度に影響を及ぼす結晶・非晶質材料の微視的な材料組織の形成プロセスについても原子論解析から新たな知見を獲得している。このようにナノスケールでの組織形成と強度支配因子の直接的な評価から、様々な材料について原理原則に基づく力学特性向上の指針獲得が期待される。

まとめ

- 金属材料以外の材料系の強度支配因子解析にも応用可能である。
- 計算手法と計算機性能の発展とともに今後ますます有効な手法となる。
- データ科学的手法との連携により材料設計・開発に役立つさらなる知見の獲得が期待される。

論文・特許

- M. Wakeda and J. Saida, *Comput. Mater. Sci.* **218**, 111930 (2023).
- M. Wakeda, Y. Chang, S. Ii and T. Ohmura, *Int. J. Plast.* **145**, 103047 (2021).
- M. Wakeda and J. Saida, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 632-642 (2019).

電子顕微鏡による微細組織解析技術の高度化

Keywords 走査型電子顕微鏡, 集束イオンビーム装置, 透過型電子顕微鏡, X線分光分析

グループリーダー／Group Leader

原 徹 Hara Toru

✉ HARA.Toru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hara_toru



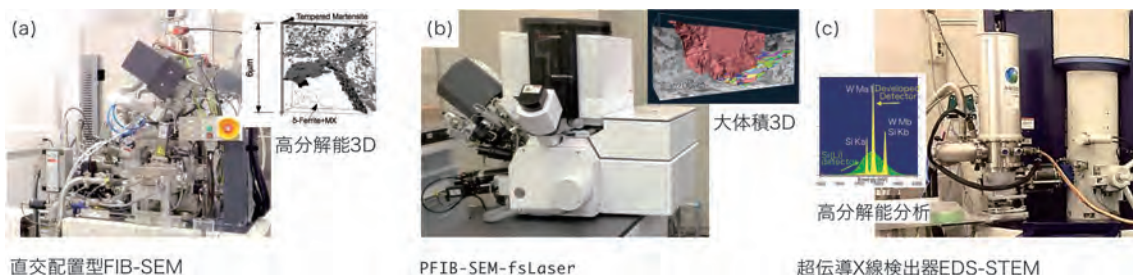
研究概要

金属やセラミックスを始めとした構造材料は、ナノメートルからミリメートルという広いスケール範囲に渡る階層的で複雑な微細組織を持っている。どのような組織因子がマクロな材料特性を左右するのかを明らかにするためには、顕微鏡による普通の組織観察だけではなく、三次元的な異質性を見たり、広い範囲に渡る組成分布を測定するなどの多角的な視点からの微細組織解析が求められてくる。そのためには従来の観察・解析技術を拡張したり、新たな分析・解析手法を構築するなど、組織解析技術の刷新が必要になる場合が多い。我々はそのような「諸特性発現要因となる組織因子」を明らかにするための組織解析の技術開発を、電子顕微鏡をベースとして進めている。

新規性・独創性

- 直交配置型FIB-SEM等の新規技術で、シリアルセクショニングによる三次元的組織観察の技術の高精度化
- PFIB-SEM-fsLaser等の新技術による三次元的組織解析の大体積化、分析機能付与などの高機能化
- FIBやSEMでの組織観察技術そのものの高度化。従来手法を超えた結像や検出技術の最適化。
- 新規検出器によるX線分光分析技術の開発。それらを用いたX線分光分析による電子顕微鏡での組織・組成解析技術の高度化。

研究内容



(a)は微細組織の三次元的観察を行うための直交配置型のFIB-SEMである。通常のFIB,SEMの配置とは異なりそれらを直交させることで、より高い分解能・コントラストでFIB-SEMシリアルセクショニング観察が行える。応用例としては例えば材料中の析出物等の粒子の形態、種類、サイズ、分布などを三次元的に解析したり、ポーラスな材料の空隙の三次元的連結性評価などを実施してシミュレーションのモデルとして材料開発にフィードバックするなどの用途で活用している。(b)は大体積三次元的組織観察を行う目的でプラズマFIBとフェムト秒レーザーを加工装置として搭載したSEMである。従来機では三次元的観察が可能な大きさは30ミクロン角程度までだが、本装置では300ミクロン角(体積では従来比千倍)以上の三次元的組織観察が可能になった。この大きさの解析が可能になると、たとえばき裂進展のようなマクロな現象が微細組織とどのように関わっているか、ということまで考察できる。(a),(b)両装置はともにEDSやEBSDも装備しており三次元組織観察にプラスして組成マップや方位マップも取得する多次元観察に展開できる。(c)は組成分析の高精度化のために、超伝導X線検出器をSTEMに搭載して開発した装置で、測定するX線のエネルギー分解能が従来比一桁向上している。この装置では、ごく微量に存在している元素を高感度かつ高空間分解能で分析することが可能である。構造材料でも最先端の性能を持つものや極限環境で使用するものは多種の元素を微量ずつ添加して所望の性能を得ている。微量添加元素が材料中のどこでどのように働いているかを解析することは、さらなる材料設計の指針を得るためにも重要である。上記のような新しい分析・解析機器や測定技術の開発と改良を行うことから、これまで見えなかったものを見て定量化する研究を行なっている。

まとめ

金属やセラミックスなどの構造材料を始めとした各種材料の三次元的組織解析や、高精度組成分析技術等の観察・解析技術を独自のアイデアで高度化し、材料開発に貢献する。観察・解析手法の高度化で、従来手法では見えていなかったものの可視化・定量化をすることで、材料特性を記述するパラメータの発掘や特性発現メカニズム解明に結びつける観察の実現を目指している。

論文・特許

- 原 徹, 精密工学会誌 **89**, 440-443 (2023).
- 原 徹, 顕微鏡 **49**, 53-58 (2014).
- 原 徹, ほか., OYO BUTURI **81**, 139-142 (2012).

定量的物性測定技術の構築と構造材料界面への応用

Keywords 構造材料, 結晶粒界・異相界面, 透過型電子顕微鏡, その場観察

主幹研究員 / Principal Researcher

井 誠一郎 li Seiichiro

✉ li.seiichiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/li_seiichiro



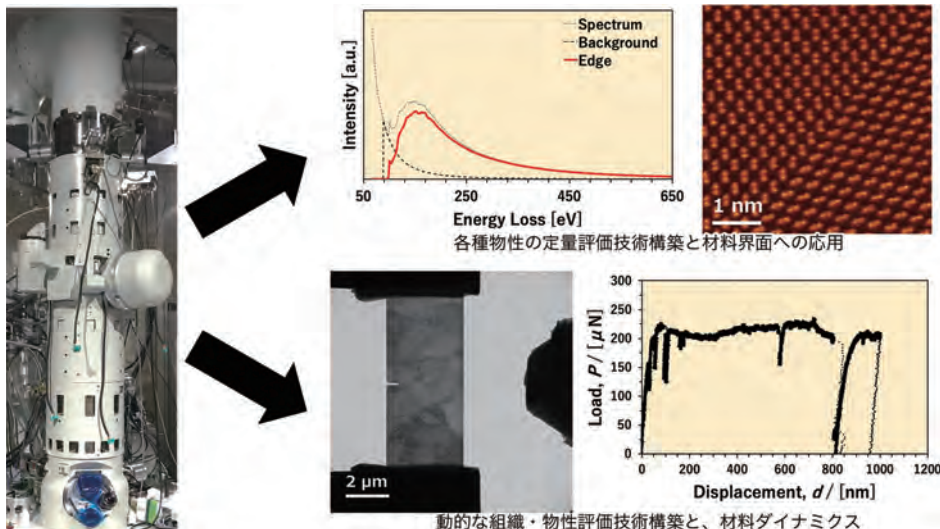
研究概要

材料のマクロ特性の多くは、その内部組織が有する性質に依存する。従って、材料組織因子単位の物性を理解することは、材料特性の根本的な理解につながる。多くの構造材料は多結晶かつ多相組織であり、不可避免的に存在する結晶粒界や異相界面が材料特性をしばしば支配する。これまで、材料特性の向上を目指した種々の組織制御が行われているが、対象となる組織因子は日に日に微細化し、電子顕微鏡の果たす役割は大きい。本研究では、透過型電子顕微鏡を用いて、電子線と試料との相互作用により生み出されるデータと定量的な物性評価の関連付けを試みている。また、静的な評価に加えて、応力などの外場に対する材料組織応答の動的な評価も並行している。

新規性・独創性

- 電子線との相互作用を利用した局所物性評価技術の提案。
- 材料内部の様々な組織単位での評価技術を構築。
- 外場に対する材料応答の組織単位での理解。

研究内容



一例として、電子線損失エネルギー分光法による局所的な磁気モーメントの定量評価法を提案し、粒界毎の変化を明らかにした。粒界磁気モーメントの起源である電子状態は材料の粒界破壊にも関連しており、力学特性を電子状態から理解する一助となることが期待される。加えて、応力印加に伴う力学・組織応答の評価も行っており、変形に伴い活動する転位が隣接粒へ伝播する現象を直接捉え、その瞬間の応力測定にすることも成功している。成果を蓄積することで、粒界など組織因子毎の物性評価が可能となることを期待している。

まとめ

- 電子顕微鏡を用いたナノスケールでの物性評価技術を提案。
- 得られるデータと各種物性の関係性の検討。
- 特徴的な界面への応用には成功。多様な界面を測定するための解析技術向上が必要。

論文・特許

- S. li, T. Enami, T. Ohmura and S. Tsunekawa, *Scr. Mater.* **221**, 114953 (2022).
- S. li, K. Hirayama and S. Tsunekawa, *Mater. Trans.* **60**, 636-641 (2019).
- S. li, K. Hirayama, K. Matsunaga, H. Fujii and S. Tsunekawa, *Scr. Mater.* **68**, 253-256 (2013).

ノンパラメータ階層計算技術による耐熱・機能材料設計

Keywords 計算材料科学, 構造材料, モンテカルロ法, フェーズフィールド法, 全電子GW計算, 酸化

グループリーダー／Group Leader

佐原 亮二 Sahara Ryoji

✉ SAHARA.Ryoji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sahara_ryoji



研究概要

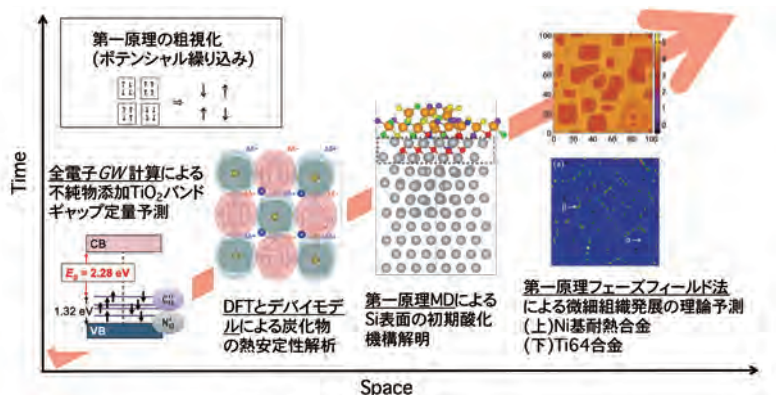
高温における材料開発のための従来の計算技術の多くは、実験データや経験的パラメータを導入して数値シミュレーションをおこなうため、予測能を持たない。一方、密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理計算は、精度は良いが扱える時間・空間スケールが非常に小さく、基底状態の記述を与えるため、高温における材料特性評価には限界がある。

本研究では、従来は実験データや経験的パラメータに依存した数値計算による材料開発支援を刷新し、独自の第一原理計算と粗視化計算技術を合わせた高度な計算技術を幅広い耐熱材料・機能材料に適用し、その設計指針を理論的に示すことで、実験家と連携しながら材料開発を進めている。

新規性・独創性

- (1)材料中の様々な原子配置や欠陥を適切に表現するため、従来のモデルの問題点を改善した新規モデルの導入
- (2)DFTのみに基づいた多元系合金状態図作成と高温材料特性予測
- (3)材料中の化学反応機構の理論的解明による耐熱材料の高精度制御
- (4)準粒子理論に基づき電子励起状態を扱う第一原理計算手法である全電子GW計算
- (5)第一原理計算をよりマクロな計算手法へ連結する高度粗視化技術による合金微細組織予測

研究内容



実験家と連携しながら、DFT計算により耐熱材料特性の理論解析をおこなっている。原子が複数個集まったクラスターの電子状態を単位として捉える「スーパーイオンモルフォロジー」解析や、局所的な規則原子配列を明示的に導入した合金モデルを構築することで、様々な耐熱材料やハイレントロピー合金の熱安定性解析をおこない、高温で安定して存在する結晶相の新たな発見につなげる。さらに、チタン合金の表面酸化機構とその添加元素の効果解明を進めている。

材料の詳細な電子特性解析には、DFTは精度が足りない場合がある。例えばDFTは半導体のバンドギャップを過小評価することが広く知られている。これを解決するため、本研究では準粒子理論に基づいた全電子GW計算を導入している。その第一原理計算プログラムには全電子混合基底法に基づいたTOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals ab initio program)を用いる。これによりバンドギャップ定量予測とそのメカニズム解明を進め、生体用構造材料開発などをおこなっている。さらに、本手法の時間発展への拡張を進めている。

第一原理計算の粗視化によるマルチスケールモデル実現のため、異なるスケール間の境界条件を適切に考慮し、第一原理計算をよりマクロなスケールの格子モデル(モンテカルロ法)やフェーズフィールド法と連結できる手法開発を進めている。ポイントは、格子定数より短い長さのスケールの自由度を消去することで、連続空間での相互作用を離散空間での相互作用に適切にマッピングすることである。一連の研究で第一原理フェーズフィールド法(First-principles phase-field method, FPPF)を提案し、Ni-Al耐熱超合金をはじめとする合金の微細組織を一切のパラメータを用いずに予測することに成功しており、多元系へ拡張を進めている。

まとめ

本研究により、ミクロな構造とマクロな特性の正しい関係性を物理の基本法則のみで捉えることで、合金設計の指針となる基盤が得られ、構造材料・機能材料設計の精度が向上することが期待される。

論文・特許

- T. Ishikawa, R. Sahara, K. Ohno, K. Ueda and T. Narushima, *Comput. Mater. Sci.* **220**, 112059 (2023).
- H. Mizuseki, R. Sahara and K. Hongo, *Sci Technol Adv Mater: Methods* **3**, 2153632 (2023).
- S. Bhattacharyya, R. Sahara and K. Ohno, *Nat. Commun.* **10**, 3451 (2019).

状態図の熱力学解析とデータベース構築

Keywords CALPHAD法, 計算熱力学, 相平衡, 永久磁石材料, 耐熱合金

主席研究員／Chief Researcher

阿部 太一 Abe Taichi

✉ abe.taichi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/abe_taichi



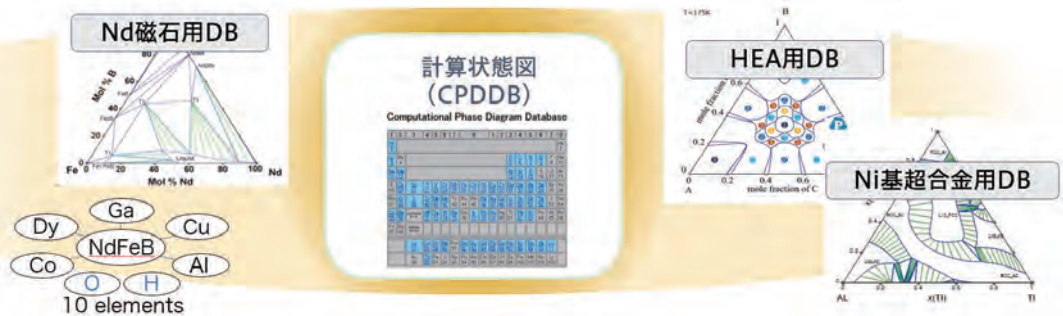
研究概要

CALPHAD法を用いて各相のギブスエネルギーを解析することで、単元系から実用多元系状態図までの相平衡や熱力学量を求めることができる状態図データベースの構築を行っている。さらに単原子空孔や複空孔などの結晶欠陥の取り扱いなどのモデル構築や磁気転移、粒界相との平衡などの多様な熱力学計算手法の開発、状態図のデジタル化などのデータ提供形式の多様化を進めている。

新規性・独創性

- 解析されたギブスエネルギーを精査して、種々の熱力学計算ソフトウェアで実行可能な形で提供。約700種の合金系の集録は世界唯一。
- データ科学解析・状態図データの多様化のため独自のデジタル状態図DBを構築。
- 熱力学モデリング技術の高度化のため、複雑な格子欠陥をギブスエネルギーに考慮した相平衡を解析。

研究内容



状態図データベースとして”計算状態図データベース(CPDDB)”とそれをデジタル化したDigital-CPDDBをMatNaviiにおいて公開している。これらのDBでは約700の単元系から多元系までの状態図データが収録されている。これらの二元系状態図のデータを基盤として多元系データベースの構築を進めている。現在構築中のデータベースの一例としては、Ni基の超合金：Ni-Al-Co-Cr-Ti+ α 、Nd基永久磁石：Nd-Fe-B-Co-Cu-Dy-Al-Ga、Nd-Fe-B-Cu-O-C-Dy。そのほかハンダ系材料、ハイエントロピー合金や次世代超高温材料MoSiBTiC用のデータベースの構築を行っている。これらの状態図データベースは、各相のギブスエネルギーデータがまとめられており、それにより実用材料の実プロセス中の相平衡の解析・計算が可能となり、プロセスパラメーターやマイクロ組織の最適化に有用な知見を得ることができる。

まとめ

多元系状態図データベースを構築することで、状態図研究は実用材料の開発に大きな寄与をすることができる。専門家により解析が行われたギブスエネルギー関数は、質の高い学習データソース、ハイスループットデータソースとしてその価値はさらに高まることが期待される。

論文・特許

- CPDDB
- Digital-CPDDB
- T. Abe, M. Morishita, Y. Chen, A. Saengdeejing, K. Hashimoto, Y. Kobayashi, I. Ohnuma, T. Koyama, and S. Hirose, *Sci. Technol. Adv.* **22**, 1557-570 (2021).

実験・計算状態図を援用した組織制御と材料開発

Keywords 状態図, CALPHAD, 拡散マルチプル, コンビナトリアル法, 格子欠陥偏析計算システム, 偏析エンジニアリング

主席研究員 / Chief Researcher

大沼 郁雄 Ohnuma Ikuro

✉ OHNUMA.Ikuro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohnuma_ikuro



研究概要

各種構造材料について、未知状態図の決定および熱力学データベースの構築を行い、計算状態図を利用して新規構造材料の合金設計を行う。さらに、拡散マルチプル等を用いたコンビナトリアル手法により材料特性データをハイスループットで評価し、多次元の材料特性最適化を実現する。

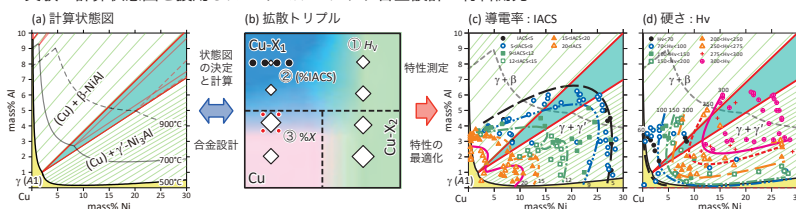
構造材料中の「転位」、「積層欠陥」、「結晶粒界」等の格子欠陥への溶質元素の「偏析」を予測し、材料の組織制御に活用する「偏析エンジニアリング」を目標とし、熱力学・拡散データベースにより計算データを計算プログラムに取り込んで、格子欠陥密度、結晶粒径、溶質元素の拡散、析出等を考慮した格子欠陥偏析計算システムを構築し、偏析を起点とした材料の組織制御を実現する。

新規性・独創性

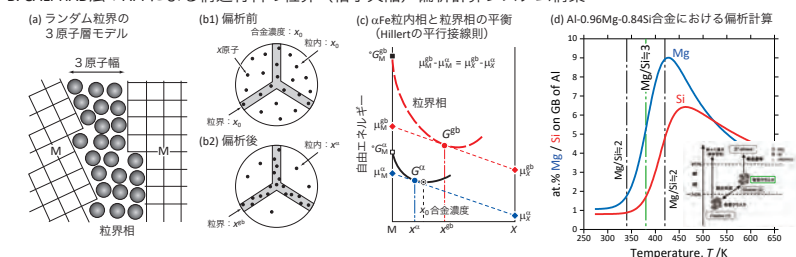
- 多元系実用合金の状態図の決定⇒熱力学データベースの構築⇒計算熱力学による新規合金設計。
- 多元系合金拡散マルチプルを活用した相平衡、界面反応、材料特性等のハイスループット評価
- 格子欠陥密度、結晶粒径、溶質元素拡散、析出を考慮した偏析計算システムの構築。
- 偏析エンジニアリングによる熱処理条件の最適化と核形成・成長の組織制御。

研究内容

A. 実験・計算状態図を援用したハイスループット合金設計と材料開発



B. CALPHAD法+APIによる構造材料の粒界（格子欠陥）偏析計算システム構築



A. Cu-Ni-Al 3 元系の計算状態図(a)より900℃と500℃の固溶度線に大きな差違が確認できる。この知見に基づき、Cu/Cu-30Ni/Cu-10Al(mass%)の拡散トリプル(b)を作製し、溶体化・時効熱処理した広範囲の濃度のCu-Ni-Al合金の導電率(c)と硬さ(d)をハイスループット評価した。導電率と硬さを最適化し新規合金を開発した。

B. 多結晶材料の結晶粒界を3原子層程度の幅を有するランダム構造の「粒界相(a)」と見なし、母相と粒界相間の平行接線則(c)から溶質原子が粒界に濃化する(b)偏析濃度を、結晶粒径、粒界エネルギー、溶質原子の拡散等を考慮して計算する。Al-Mg-Si 3 元系の計算結果(d)から、温度の違いによりMg/Si偏析濃度比が変化することが判明し、偏析エンジニアリングによる有効クラスター形成が予測できる。

まとめ

状態図・拡散の計算熱力学を援用した構造材料の多元系合金設計とプロセス最適化による組織制御と新規材料開発を目的に、合金と拡散マルチプルを併用したコンビナトリアル法による相平衡・多次元材料特性データのハイスループット評価、および格子欠陥偏析計算システムによる偏析エンジニアリングの研究開発を精力的に実施する。

論文・特許

- M. Enoki, S. Minamoto, I. Ohnuma, T. Abe and H. Ohtani, *ISIJ Int.* **63**, ISIJINT-2022-408 (2023).
- M. Egami, I. Ohnuma, M. Enoki, H. Ohtani and E. Abe, *Materials & Design* **188**, 108452 (2020).
- I. Ohnuma, S. Shimenouchi, T. Omori, K. Ishida and R. Kainuma, *Calphad* **67**, 101677 (2019).

フェーズフィールド法による材料ミクロ組織形成過程の解析

Keywords 計算機シミュレーション, フェーズフィールド法, 材料ミクロ組織

主任研究員 / Senior Researcher

大出 真知子 Ode Machiko

✉ ODE.Machiko@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ode_machiko



研究概要

計算機シミュレーションは、1) 実験結果の理論的背景を理解する、2) 実験観察が難しい現象を「見る」、のどちらかの目的で行われています。本研究で取り扱っているフェーズフィールド法は、材料ミクロ組織 (内部組織) の複雑さに関係なく、形成過程を計算することができる手法であり、デンドライト・共晶・包晶凝固、規則-不規則変態、相分離や焼結過程などの幅広い組織形態に適用が可能です。

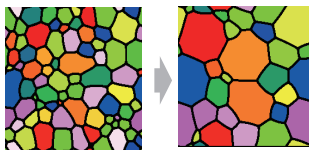
新規性・独創性

- 材料ミクロ組織のシミュレーションは、数学的な困難さ (多体問題、境界地問題など) から適用例に限られた。
- フェーズフィールド法により複雑な材料内部組織の計算が可能になった。
- 機械学習による計算時間の短縮や核生成現象の理論構築など適用範囲の拡大を行っている。

研究内容

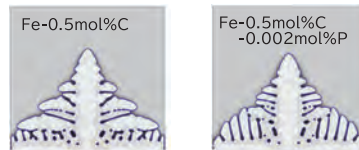
例1 Cu薄膜の再結晶過程の解析

結晶粒成長による組織粗大化過程を再現



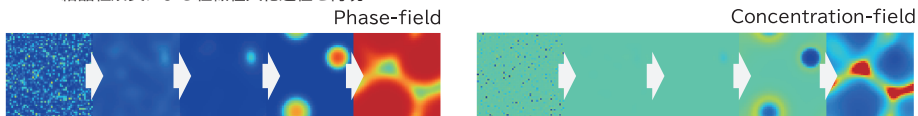
例2 デンドライト組織への元素添加の影響の解析

ppmオーダーのリン添加が組織に与える影響を再現



例3 数値的核生アルゴリズムの開発

結晶粒成長による組織粗大化過程を再現



フェーズフィールド法を用いて様々なミクロ組織解析が可能である。例1では、電子基板上的Cu薄膜が異常な結晶粒成長する過程を再現している。これは特定の結晶方位をもつ結晶粒が基板からの拘束を受けているためである。例2では、微量添加元素が凝固組織に与える影響を評価している。分配係数の小さなPなどは、微量であってもミクロ偏析効果が高く組織微細化に寄与する。例3は核生成現象を数値的に導入する検討例である。フェーズフィールド法は核生成現象の取り扱いが苦手であったが、本研究により恣意性の低いモデルが提案され、より精度の高いミクロ組織予測が可能になった。

まとめ

フェーズフィールド法は、結晶成長、結晶粒成長、焼結、デンドライト・共晶・包晶凝固、相変態、相分離などのミクロ組織現象だけでなく、転位や欠陥の生成などナノスケールの現象も含んだ、多岐にわたる応用領域で革新的な成果をもたらす可能性を秘めています。

論文・特許

- 大出 真知子, 江阪 久雄, 石田 章, 高森 晋, 村上 秀之, 鑄造工学 **94**, 673-683 (2022).
- M. Ode and I. Ohnuma, *Comput. Mater. Sci.* **194**, 110448 (2021).
- M. Ode, N. Sasajima, Y. Yamada, P. Bloembergen and H. Onodera, *Int. J. Thermophys* **32**, 2610-2622 (2011).

ナノアーキテククス材料 研究センター

高品位ダイヤモンド及び窒化物単結晶の高圧合成

Keywords 高圧合成, 立方晶窒化ホウ素, 六方晶窒化ホウ素, ダイヤモンド

センター長 / Director

谷口 尚 Taniguchi Takashi

✉ TANIGUCHI.Takashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/taniguchi_takashi



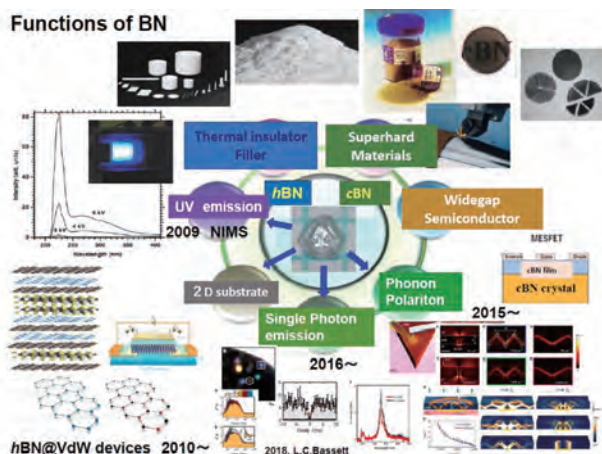
研究概要

高圧合成技術を物質・材料合成研究に活用する上での大きな動機付けとして、ダイヤモンドをはじめとする工学的なニーズに応じた既知材料の高品位化がある。同時に、新たな物質・材料の未知の物性の解明は、新材料としてのシーズの発掘としての意義がある。この際、回収可能な高圧相の合成というシンプルな手法を、通常の常圧合成法では実現が困難な化学反応プロセスの場として拡張することは興味深い。例えば、高圧合成は密閉環境下で進められるため、常圧下では取り扱いが困難な反応性の試薬や揮発性物質を結晶成長の為に溶媒等として活用することが可能となる。

新規性・独創性

- 温度、化学組成と共に材料の特性を支配するパラメーターである圧力の制御。
- ベルト型高圧装置により、200mm³以上の試料空間で、10万気圧、2000℃までの圧力、温度条件における新物質・材料の合成環境の整備。
- 高圧、高温下における300時間程度までの単結晶成長環境の開発とともに、高純度単結晶成長の為に高品位溶媒の開拓。

研究内容



超硬質材料及びワイドギャップ半導体であるダイヤモンドと立方晶窒化ホウ素(cBN)の高品位単結晶、焼結体の高圧合成を進めてきた。取り組みの根幹は、高品位単結晶合成の鍵となる最適な結晶成長溶媒の開拓である。窒化物結晶合成において高反応性のバリウム系溶媒の有用性を見出し、高純度のcBNと六方晶窒化ホウ素(hBN)の単結晶を得た。後者は波長220nm近傍で高輝度のバンド端遠紫外線発光を呈すると共に、グラフェンを初めとする2次元原子層デバイスの無干渉性基板として、現在30カ国、500以上研究機関への試料提供が進められている(関連共著論文1000報以上)。近年は室温で優れた磁気センシング特性を呈するダイヤモンド中の窒素欠陥(NV-センター)の磁気感度向上に必要な、高品位ダイヤモンド単結晶の育成溶媒の改良を進めている。

まとめ

一般的に、超高圧下の単結晶合成プロセスでは不純物の制御が容易ではなく、また、試料空間の制約などを受けるため、試料の高純度化が困難であると受け止められていた。反面、常圧下での単結晶等の合成プロセスでは、高温下での試料や溶媒の分解等により、その合成条件の制限を受けるが、高圧合成プロセスは、高圧安定相の合成に限らず、試料や溶媒の高温下での分解の抑制が可能である。高圧下で安定なバリウム系溶媒で得た高純度hBN単結晶は、高輝度遠紫外線光源としての可能性のみならず、2次元系原子層デバイスの絶縁性基板材料として、量子ビット、FET、スピンデバイス、量子光源開拓等の基礎研究を推し進めている。

論文・特許

- C. R. Dean, A. F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, *et al.*, *Nat. Nanotechnol.* **5**, 722–726 (2010).
- T. Taniguchi and K. Watanabe, *J. Cryst. Growth* **303**, 525–529 (2007).
- Y. Kubota, K. Watanabe, O. Tsuda and T. Taniguchi, *Science* **317**, 932–934 (2007).

独自のコンセプトによる新物質・新機能の探索

Keywords 新コンセプト, 新物質, 新機能, 探索, 材料設計, 半導体, 超伝導体, 触媒, 発光材料, エレクトライド, 磁気共鳴, 元素戦略

特別フェロー／Distinguished Fellow

細野 秀雄 Hosono Hideo

✉ HOSONO.Hideo@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/hosono_hideo



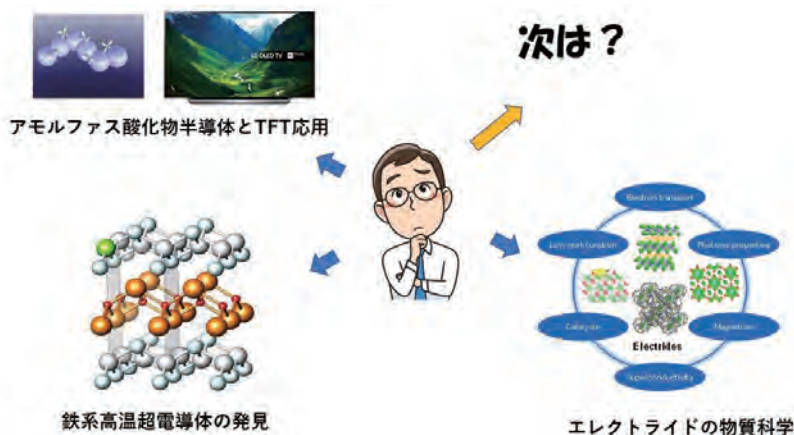
研究概要

多元素から構成される物質をベースに、役に立つ機能や際立った性質を実現することを、これからの材料研究の方向と捉え、独自のコンセプトとアプローチから新物質・新機能の創出を目指している。これまでの代表的成果としては、透明酸化物半導体(p・n型、結晶・アモルファス)の創出とTFTへの応用(IGZO)、鉄系高温超電導体の発見と電子がアニオンとして働く電子化合物の創出と応用があげられる。

新規性・独創性

(アクティブな格子内空隙を利用したアプローチ) 凝縮系物質の構造内には、欠陥は無くても多くの空隙が存在する。このような隙間を利用することで、高濃度の電子を閉じ込めてエレクトライドにしたり、イオンの補足によりキャリアのドーピングをしたり、通常ではみられない変わった局所構造が実現し極めて高い量子効率で発光体が発現している。

研究内容



新物質・新機能の探索

- ・結晶格子内の空隙を活用
- ・水素の有効利用に資する新触媒
- ・メモリー用酸化物半導体

これまでの代表的成果を図に示す。エレクトライドや鉄系超伝導体は物質科学と材料科学に新しい境域を開き、IGZO-TFTはディスプレイの駆動用バックプレーンとして産業応用に繋がった。現在のテーマは、次の大きな進展を模索している。

まとめ

材料科学の新領域の開拓とそれを大きな産業応用に繋がるのが大きな目標

論文・特許

- H. Hosono and H. Kumomi, *Amorphous Oxide Semiconductors: IGZO and Related Materials for Display and Memory*. John Wiley & Sons, ISBN 9781119715573 (2022).
- Y. Shiah, K. Sim, Y. Shi, K. Abe, S. Ueda, M. Sasase, J. Kim and H. Hosono, *Nat. Electron.* **4**, 800-807 (2021).
- T. Ye, S. Park, Y. Lu, J. Li, M. Sasase, M. Kitano, T. Tada and H. Hosono, *Nature* **583**, 391-395 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

無機ナノシートの創製と機能開発

Keywords 2次元ナノシート、層状化合物、単層剥離、集積化、ナノ薄膜、誘電機能、エネルギー貯蔵・変換

フェロー／Fellow

佐々木 高義 Sasaki Takayoshi

✉ SASAKI.Takayoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sasaki_takayoshi



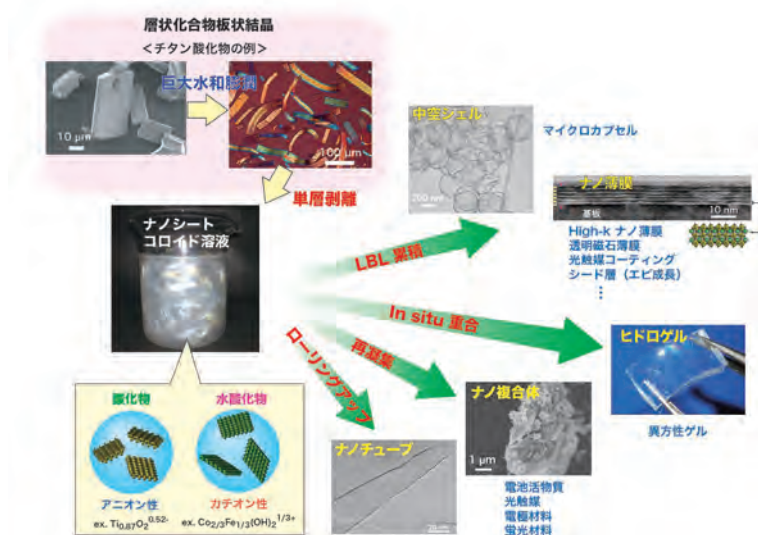
研究概要

金属酸化物や水酸化物の層状結晶を溶液中で大きく膨潤させ、層1枚にバラバラに剥離することにより、グラフェン類縁物質と言える多彩な2次元無機ナノシートの創製を目指す。さらに得られたナノシートをビルディングブロックとして、簡便、安価、低環境負荷の溶液プロセスにより、積み木細工的に集積、接合して人工ナノメソ構造を構築して、様々な有用な材料の開発を行っている。

新規性・独創性

- ユニークな2次元形状(分子レベルの厚さ、非常に高い2次元異方性)に由来して特異な機能や反応性が発現。
- 厚さ1nm単位での表面コーティングを簡便、安価に実現可能。
- ナノシートを基本ブロックとして用いることで、溶液プロセスにより人工格子レベルのナノ構造構築が可能。

研究内容



我々の得意技術である層状化合物の単層剥離技術により、厚さ約1 nmに対して横方向にはその1000倍以上の広がりを持つ酸化物や水酸化物系の2次元ナノシートが得られる。ナノシートは電荷を帯びたコロイドとして溶液中に分散した形で得られるため、自己組織化をはじめとする様々な溶液プロセスを駆使することによって、ナノメソレンジで集積化、複合化することができる。その結果、ナノ薄膜(多層膜、超格子膜)、中空ナノシェル、ナノ複合体、ゲルなどを構築でき、それらは優れた触媒性、エネルギー変換・貯蔵機能などを示す。

まとめ

多様な酸化物ならびに水酸化物ナノシートを合成し、それらを溶液プロセスによりナノメソレンジで精密に配列、集積、複合化する技術を開発した。それにより多彩な機能開発、設計が可能となり、誘電体ナノ薄膜、電極材料、触媒、機能性ゲルなど様々な応用が期待できるシーズ材料が創出されている。

論文・特許

- T. Taniguchi, L. Nurdiwijayanto, R. Ma and T. Sasaki, *Appl. Phys. Rev.* **9**, 021313 (2022).
- R. Ma and T. Sasaki, *Acc. Chem. Res.* **48**, 136-143 (2015).
- L. Wang and T. Sasaki, *Chem. Rev.* **114**, 9455-9486 (2014).

AIと高圧を用いた革新的超伝導体の開発

Keywords 超伝導, 超高圧, 機能性材料, 磁気冷凍材料, 新物質創製

グループリーダー / Group Leader

高野 義彦 Takano Yoshihiko

✉ TAKANO.Yoshihiko@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/takano_yoshihiko



研究概要

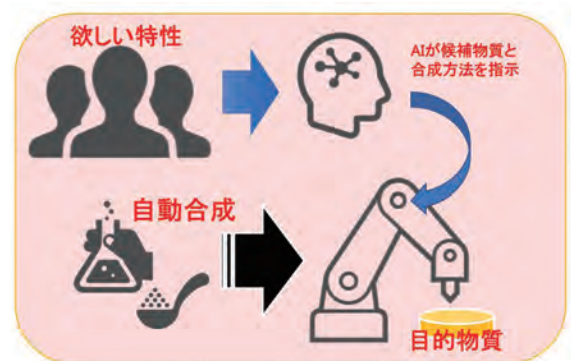
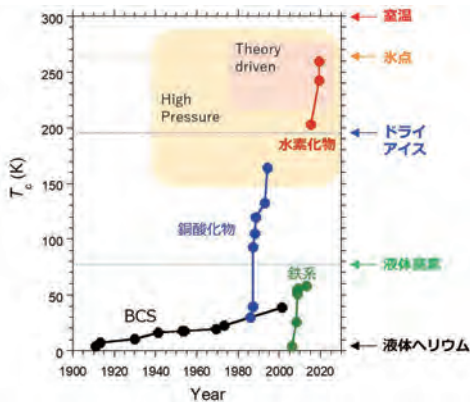
我々のグループでは、超伝導体を始めとして磁気冷凍材料など、新奇機能性材料の開発を行う。機械学習や第一原理計算など、データベースを活用したマテリアルズ・インフォマティクスにより候補材料を探索する。超高圧下でマルチモーダルに物性が評価できるダイヤモンドアンビルを開発し、候補物質の高圧合成や評価を行う。究極の目標は、人類の夢である室温超伝導体の発見である。

新規性・独創性

求める機能を持つ物質設計に、機械学習や第一原理計算などデータに基づくコンピューターシミュレーションを活用し、合成の成功確率を高める。

超高圧下ではマルチモーダルに物性を評価することはこれまで非常に困難であったが、電気の流れるホウ素ドーパダイヤモンドを電極として用いた新たなシステムにより、100万気圧程度までの超高圧下で様々な電気測定を安定して行うことができるようになった。

研究内容



超伝導状態になると電気抵抗が完全に消失し、ゼロ抵抗状態が現れる。ゼロ抵抗状態では電流を流しても一切発熱はない。すなわち、超伝導電線を用いてどんなに長距離を送電しても一切エネルギーのロスが発生しません。それ故、超伝導は環境エネルギー問題解決の切り札の一つと期待されている。しかし、この優れた性能を実現するためには、超伝導体を超伝導転移温度以下まで冷却する必要がある。これまでの多くの研究者の努力により、超伝導転移温度は飛躍的に向上し、今や260Kで超伝導が発現する物質も発見されている。あと40度ほど上昇すれば夢の室温超伝導の出現である。冷やさなくても使える夢の室温超伝導体が発見されれば世界のエネルギー事情は大きく改善すると考えられる(図1)。

我々は、データおよびAIを駆使して候補物質を選定し、マルチモーダルな高圧装置を活用し、夢の室温超伝導体の発見を目標に研究に取り組んでいる。その研究活動の一つとしてAIとスマートラボの融合がある。AIが予想した物質を第一原理計算で検証し、スマートラボが自動合成し結果をデータにフィードバックし、より目標の試料へ近づけていく。この方法を活用して新奇機能性材料を開発する(図2)。

まとめ

- 革新的な超伝導体を始め新奇機能性材料の開発を行う。
- マルチモーダルな測定や合成を可能にする高圧発生装置を開発する。
- AIとデータを活用し、自動合成装置と連携して、目標物質の自動合成を目指す。

論文・特許

- R. Matsumoto, A. Yamashita, H. Hara, T. Irifune, S. Adachi, H. Takeya and Y. Takano, *Appl. Phys. Express* **11**, 053101 (2018).
- 特許第6832574号 ダイヤモンドアンビルセル及びこれを用いた高圧物性測定装置

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高バネ・バイオ材料

マテリアル基盤

新奇強相関電子系材料の開発 ～磁気冷凍材料開発など～

Keywords 磁気冷凍材料, 強相関, 超伝導, 磁性体

主幹研究員 / Principal Researcher

櫻井 裕也 Sakurai Hiroya

✉ SAKURAI.Hiroya@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakurai_hiroya



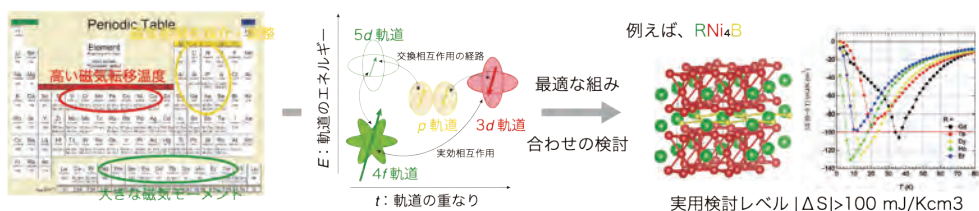
研究概要

高機能化を目的として深い学理に基づく電子材料開発が求められているなか、強相関電子物性の材料利用を目的として様々な用途の材料開発を行っている。特に最近では新磁気冷凍材料の探索的開発を主に行っている。高効率な水素液化のための新材料が求められているからである。現在の候補材料は、原料価格が高く、高融点、分解溶解でアニール処理が必要など材料利用が困難となる点がある。また1次転移で磁歪を伴うため寿命に不安がある。これらの欠点がない材料が望まれている。

新規性・独創性

- 大きな磁気モーメントを持つ希土類元素と比較的高い磁気転移温度をもつ3d遷移金属元素、その2つの磁気相関を調整するPブロック元素の効果的な組み合わせに注目
- 希土類元素、コバルトなど高価な原料を減らす工夫
 - RNi_4B (R: 希土類元素) など有望材料の発見

研究内容



RNi_4B (R: 希土類元素)は従来の候補物質 ErCo_2 と比べて希土類元素の量が1/2でCoを含まない比較的安全な原料からなる。アニール処理を必要とせずに大きな磁気エントロピー変化 $|\Delta S|$ を示す(右図)。また磁歪のほとんどない2次転移で強磁性になるため長寿命が期待される。この他にも $|\Delta S|$ がより大きな磁気冷凍材料も開発した。磁気冷凍材料に限らず電子材料全般を対象として開発を行っている。

まとめ

- 磁気相関に関する知見をもとに水素液化のための磁気冷凍材料を開発した
- さらに大きな磁気熱量効果を示す材料の開発を目指す
- 耐水素脆性のための表面処理を必要としないセラミックス系材料へのニーズへも対応する

論文・特許

- N. Kikugawa, T. Hiroto, A. Ishikawa, S. Suzuki, H. Sakurai and R. Tamura, *J. Alloys Compd.* **882**, 160669 (2021).
- 特開2021063255 磁気冷凍材料、これを用いた磁気冷凍システム、蓄冷材料

バルク固体機能性材料における、機械学習を用いたデータ駆動物質開発

Keywords マテリアルズインフォマティクス, 機械学習, 物質合成探索

主任研究員 / Senior Researcher

寺嶋 健成 Terashima Kensei

✉ TERASHIMA.Kensei@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/terashima_kensei



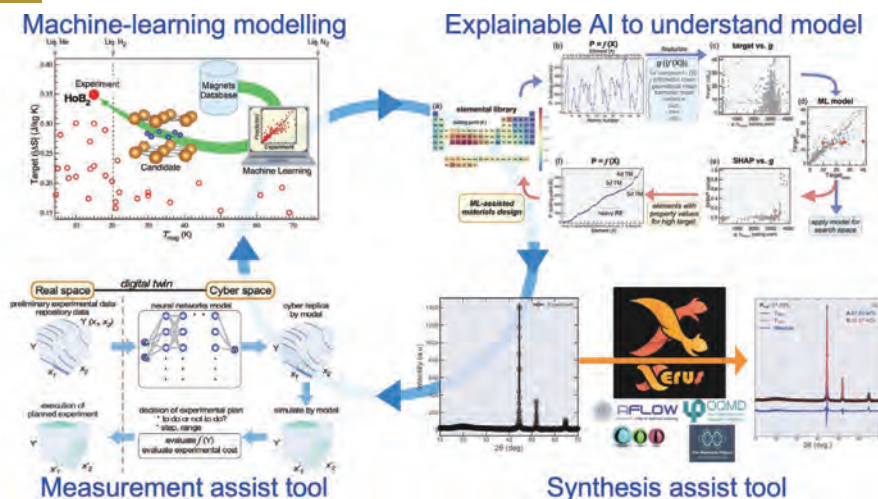
研究概要

近年物質データの蓄積が急速になされ、データ科学的手法の発達とともに様々な機能性材料探索にデータ駆動型のモデル予測が用いられるようになってきている。しかしながらこれを実際に物質開発に適用させる場合、学習データの範囲やモデルの外挿性・妥当性など、乗り越えるべき障壁は多々ある。物質合成・物性測定による実験実証までを含め、百出する機械学習手法から適するものを試行錯誤し新機能性材料の探索を行うとともに、物質探索の各プロセスにおいて自動化や機械学習手法を取り入れた高度化・効率化を推進している。

新規性・独創性

- 実験検証までを含めた機械学習による物質探索
- 説明可能AI手法を用いた機械学習による物質探索指針の開発
- 自動化推進によるXRD相同定を用いた新物質探索手法開発
- 高速機械学習を用いたデジタルツインによる物性測定合理化

研究内容



磁気冷凍材料に対し、教師データ収集から機械学習モデル作成、実際の合成評価を行い、液体水素温度近傍で世界最高水準の磁気エントロピー変化量を示す HoB_2 を見出した(左上)。モデル予測値への各特微量の貢献度解析を行い、この手法が機械学習を通し物質探索指針を得るのに有用と示した(右上)。

合成や物性評価の効率化も行っている。新物質合成の初期段階で重要となる目的以外の不純物相同定を、XRD結果から結晶構造オープンデータとの照合で高速に行うツールXERUS開発を行った(右下)。ニューラルネットワーク高速学習が、preliminaryデータから適切な物性測定条件のシミュレートに適することを見出した(左下)。

まとめ

物質開発現場の1研究者・1ユーザーの視点から、実験実証までを含めた実践的機械学習の活用により、機能性材料を発見している。今後はバルク固体物質開発の各プロセスにおいてソフトウェアによる自動化だけでなくロボットプログラミングも活用したハードウェア自動化を進め、機械学習手法の高度化とともにさらなる高機能材料の探索を行う。

論文・特許

- K. Terashima, P. B. Castro, M. G. E. Echevarria, R. Matsumoto, T. D. Yamamoto, A. T. Saito, H. Takeya and Y. Takano, *Digital Discovery* **2**, 339-345 (2023).
- K. Terashima, P. B. Castro, A. T. Saito, T. D. Yamamoto, R. Matsumoto, H. Takeya and Y. Takano, *Sci Technol Adv Mater: Methods* **3**, 2217474 (2023).
- P. B. Castro, K. Terashima, T. D. Yamamoto, Z. Hou, S. Iwasaki, R. Matsumoto, S. Adachi, Y. Saito, P. Song, H. Takeyao, et al., *NPG Asia Mater.* **12**, 35 (2020).

極限環境での物質探索を加速するダイヤモンドデバイス

Keywords ダイヤモンド、温度、圧力、薄膜、電気二重層、超伝導

研究員 / Researcher

松本 凌 Matsumoto Ryo

✉ MATSUMOTO.Ryo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsumoto_ryo



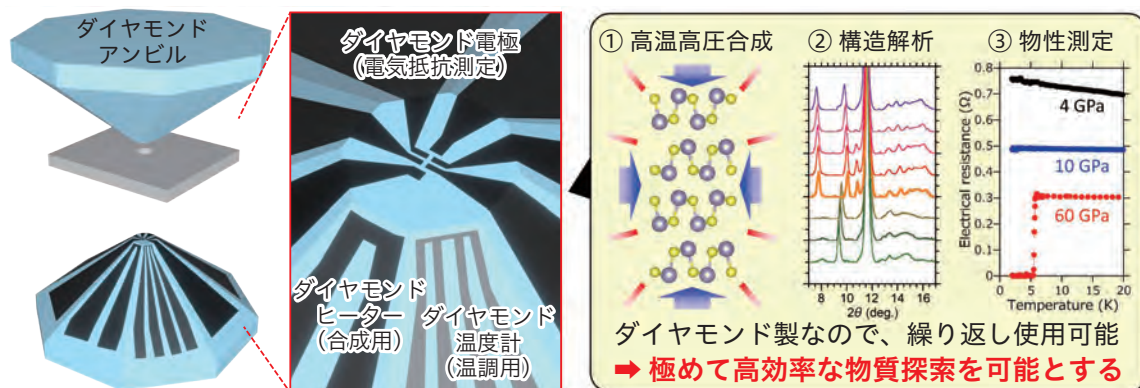
研究概要

ダイヤモンドは宝石として知られる一方、優れた機械的強度、化学的安定性および電気的特性を持ち、様々な分野で機能性材料として応用されている。我々はホウ素をドーピングした導電性ダイヤモンド薄膜を任意のパターンに成型することで、高温・低温・高圧力などの極限環境下で安定動作する電極を開発した。この電極を用いることで、極限環境下では困難であった物質の合成や物性測定がハイスループット化され、理論予測に留まっていた数々の超伝導候補物質の実験実証に成功した。現在はダイヤモンド電極の技術を活用し、極限環境下で動作する電気二重層トランジスタや量子センシング素子の開発も進めている。

新規性・獨創性

- 機械的・化学的に安定かつ電気伝導度の制御が可能なダイヤモンド電極
- ミリオーダーからサブミクロンオーダーにわたるトランススケール計測
- 極限環境下でのハイスループット機能性材料開発
- 10万気圧以上の超高圧力領域への簡単アクセス

研究内容



ホウ素ドーピングダイヤモンドは、ダイヤモンドが本来持つ優れた機械的・化学的安定性に加えて、電気的特性を絶縁体・半導体・金属とチューニングできる点が特長である。本研究では適切にキャリア密度を制御したホウ素ドーピングダイヤモンドを、試料の物性測定用電極・ヒーター・温度計の形状でダイヤモンド圧子の上にエピタキシャル成長させた「極限環境下物質探索用デバイス」を開発した。このデバイスではダイヤモンド圧子により数十万気圧以上の圧力、ダイヤモンドヒーターにより数百℃以上の高温環境を作り出し、その場で試料の電気輸送特性測定や構造解析を行うことができる。従来、同様の実験を行うためには莫大な労力が必要であったが、全ての要素に繰り返し使用可能なダイヤモンドを用いることにより、簡便かつハイスループットな物質開発を実現した。本技術は、理論的に極限環境下で存在すると予測されている室温超伝導体の実証実験に大きく貢献する。また極限環境下で動作する電気二重層トランジスタやダイヤモンド量子センサーのリード線としての応用も進めており、今後様々な形で活用することのできる技術と期待している。

まとめ

導電性ダイヤモンド薄膜を電極材料として用いることで、ハイスループットな物質開発が可能となった。特に超高圧力下での新奇超伝導体探索において強力な手法と期待される。ホウ素ドーピングダイヤモンドは希少元素を含まず、絶縁体から金属にわたって広範囲に導電性を制御できることから、貴金属電極の代替材料としても益々注目される技術となることが期待される。

論文・特許

- R. Matsumoto, S. Yamamoto, S. Adachi, T. Sakai, T. Irifune and Y. Takano, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 053502 (2021).
- R. Matsumoto, Z. Hou, S. Adachi, S. Yamamoto, H. Tanaka, H. Takeya, T. Irifune, K. Terakura and Y. Takano, *Chem. Mater.* **33**, 3602-3610 (2021).
- 特開2022088715 ダイヤモンドアンビルセルおよび高圧物性測定装置

創造的な機能性物質の合成と量子機能の展開

Keywords 新規酸化物材料, ペロブスカイト構造, 量子磁性, 輸送特性, 高圧合成

グループリーダー / Group Leader

山浦 一成 Yamaura Kazunari

✉ YAMAURA.Kazunari@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamaura_kazunari



研究概要

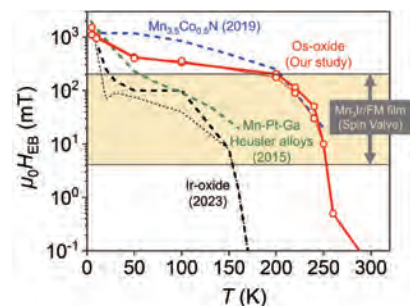
ハイパーマテリアル、トポロジカル磁性体、異常ホール効果、量子磁性、交換バイアス効果、磁気抵抗などに関する機能性物質や候補物質を研究している。特に、新物質の発見とその特性評価に焦点を当て、高温高圧合成法などさまざまな合成方法を使用して新物質を合成し、詳細な構造解析と基礎的な物性評価を行っている。また、共同研究者と協力して中性子散乱、共鳴X線散乱、第一原理計算などの手法を活用している。これらの研究を通じて、新たな機能性材料の開発の可能性を追求している。

新規性・独創性

- 新規性と独創性を重視した物質探索
- 高温高圧下での結晶育成
- 固溶領域の拡大と置換元素の多様化
- 熱力学的に準安定な化学相の合成
- 独自に実施する精密構造解析と基礎物性評価

研究内容

交換バイアス効果は、磁気記録デバイスの性能向上など、現代の半導体技術の進歩に重要な役割を果たしている。しかし、従来の多層膜を基本とする交換バイアス材料は、高品質な生産に課題がある。そのため、交換バイアス効果を発揮するバルク材料系の開発が求められている。我々は、わずかな冷却磁場で大きな交換バイアス効果を示すバルク磁性材料の合成に成功し(図1)、交換バイアス効果がスピン軌道相互作用によって増強されていることを示唆した。さらに、既存のバルク材料とは本質的に異なる発現機構が関与している可能性があるため、その機構を探索し、新機構に基づく有望な交換バイアス材料の開発を目指している。



LiOsO₃ crystals

高温高圧下で成長させた機能性結晶の写真例を図2に示す。一般的に、酸化物の場合、高圧下で成長させた機能性結晶の例は少なく、通常は多結晶試料の合成に限定されることがほとんどだ。しかし、我々は高温高圧下での詳細な結晶成長条件を検討し、試行錯誤を続けることで、小さなサイズスケールではあるが、結晶成長を実現することができた。結晶が得られると、基礎物性の評価が進み、これまで未解明だった機能性の発現機構に関する新たな知見が得られるだけでなく、新材料の開発にも有用な進展が期待できる。

まとめ

高圧合成による新物質探索の研究は、高温超伝導体から強相関電子系、マルチフェロイック物質、準結晶、さらには量子物質へと広がっている。また、研究対象も酸化物だけでなく、炭化物、窒化物、砒素、混合アニオン化合物など多様化している。これらの研究は、新しい特徴を持つ化学相の合成というアプローチで行われており、今後も社会的要請の高い機能性材料の開発に有用な役割を果たすことが期待できる。

論文・特許

- B. Dalal, X. Kang, Y. Matsushita, A. A. Belik, Y. Tsujimoto and Kazunari Yamaura, *Phys. Rev. B* **106**, 104425 (2022).
- X. Kang, A. A. Belik, Y. Tsujimoto and K. Yamaura, *Inorg. Chem.* **61**, 21148-21156 (2022).
- J. Chen, X. Wang, Z. Hu, L. H. Tjeng, S. Agrestini, M. I. Valdiviares, K. Chen, L. Nataf, F. Baudelet, K. Yamaura, *et al.*, *Phys. Rev. B* **102**, 184418 (2020).

磁場中中性子回折による磁性材料研究

Keywords 中性子回折, 磁場, 磁性材料, 量子スピン系, 量子マテリアル

主席研究員 / Chief Researcher

長谷 正司 Hase Masashi

✉ HASE.Masashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hase_masashi



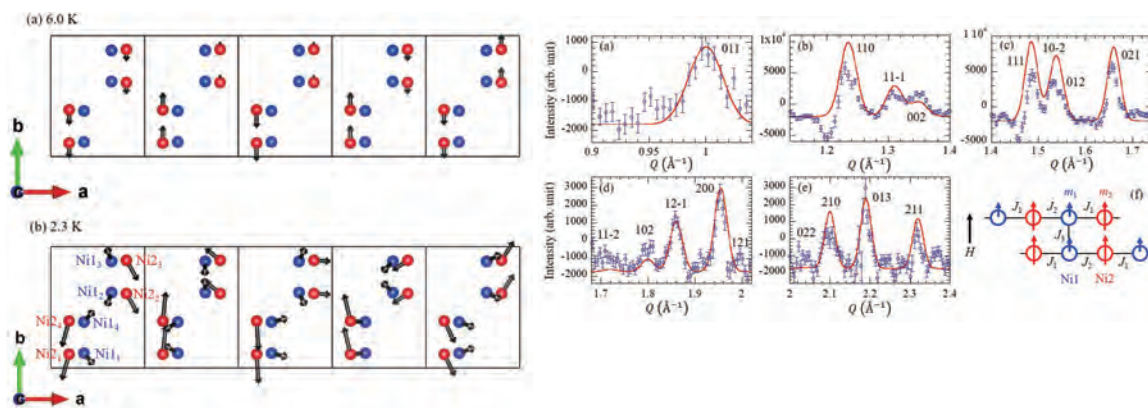
研究概要

中性子回折では磁気構造(磁気モーメントの配列)を調べることが出来るが、常磁性状態(磁気モーメントが配列していない状態)には適用できない。常磁性状態に磁場を印加すると磁場に平行に磁場誘起モーメントが現れ、磁気ブラッグピークを作る。磁気ブラッグピークを解析することで、サイト毎の磁場誘起モーメントを決めることができる。他の実験結果(磁化や比熱など)とも合わせて、物質内の磁気相互作用の情報をより正確に得ることが出来るので、磁性材料開発に貢献できる。現在までに、量子力学における固有状態の直接観測や磁気モデルの決定に成功している。

新規性・独創性

- 従来の中性子回折では適用できなかった常磁性状態の情報を得ることができる。
- 中性子の散乱ベクトルに垂直に磁場を印加することによって高感度化(約4倍)を実現できる。
- 物質内の磁気相互作用の情報をより正確に得ることができる。従来の磁化や比熱から決める方法では一意に決まらないことがあるという問題がある。

研究内容



$\text{Ni}_2\text{V}_2\text{O}_7$ という量子スピン系物質に適用した例を紹介する。左図はゼロ磁場での磁気構造を示している。TN1=6.7 KとTN2=5.7 Kで2段階の磁気転移が起こる。TN1とTN2の間の6.0 Kでは、2種類のNiモーメントの中のNi2モーメントのみが配列し、スピン密度波構造が現れる。TN2以下の2.3 Kでは2種類のNiモーメントがともに配列し、楕円型サイクロイダル構造が現れる。このような複雑な磁気構造を理解するためには、磁気相互作用の情報を正確に知ることが重要となる。そこで磁場中中性子回折を行った。この物質は80,000 Gauss以上の磁場を印加すると常磁性状態になるという性質を利用している。結果を右図に示す。100,000 Gaussの磁場でのNi1とNi2の磁場誘起モーメントはそれぞれ、0.3と1.9 μB (ボーア磁子)という値であることが分かった。この結果は先行研究で提唱されたダイマー・モノマー模型と一致した。

まとめ

従来よりも物質内の磁気相互作用の情報をより正確に得ることができるので、磁性材料、量子マテリアル、量子液晶物質などの研究開発に貢献できる。

論文・特許

- M. Hase, A. Dönni, N. Terada, V. Y. Pomjakushin, J. R. Hester, K. C. Rule and Y. Matsuo, *Phys. Rev. B* **107**, 224415 (2023).
- M. Hase, V. Y. Pomjakushin, L. Keller, U. Stuhr, A. Dönni, M. Kohno and A. Tanaka, *Phys. Rev. B* **102**, 014403 (2020).
- M. Hase, V. Y. Pomjakushin, A. Dönni, T. Yang, R. Cong and J. Lin, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 104701 (2014).

Development of ferroelectric and multiferroic perovskite materials

Keywords High-pressure synthesis, Quadruple perovskites, Ferroelectrics, Multiferroics, New mechanisms

主席研究員／Chief Researcher

ベリク アレクセイ Belik Alexei

✉ ALEXEI.Belik@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/alexei_belik



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高機能・バイオ材料

マテリアル基盤

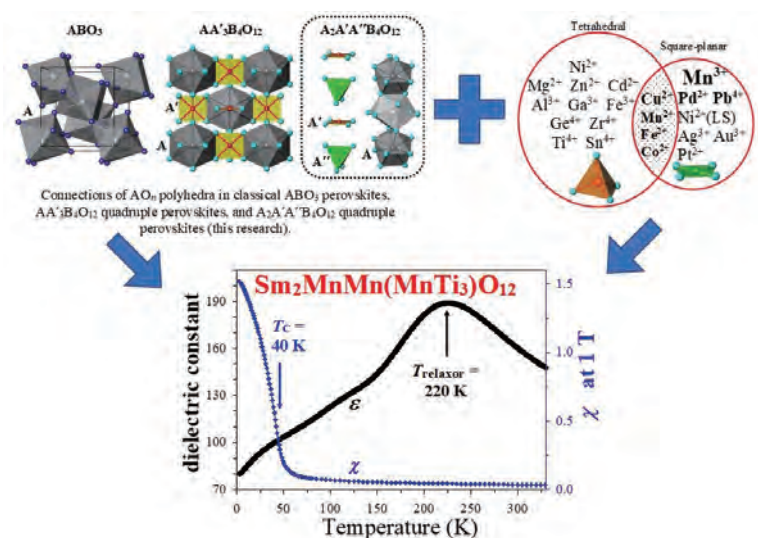
Research Summary

Perovskite-structure materials played important and crucial roles in the development of today's technologies. High-dielectric constant, ferroelectric, and giant magnetoresistance properties of perovskites are used on memory elements, the largest piezoelectric activity is utilized in different actuators and other devices. Perovskites show ferromagnetic, catalytic, and even superconducting properties. Recent hot topics include hybrid and halide perovskite-structure materials for solar cells. The field of oxide perovskites needs new ideas and new chemical compositions to explore new properties further.

Novelty / Originality

- An advanced high-pressure high-temperature preparation method is used.
- New oxide perovskites can be obtained inaccessible by other methods.
- The presence of 3d-5d transition metals at different sites with new arrangements leads to new functionalities.
- New mechanisms of ferroelectric and magnetic transitions are realized.

Research Contents



Using crystallographic information (such as, ionic radii of cations, site preferences of different cations, stoichiometry), we design new chemical compositions of perovskite oxides with targeted ferroelectric and magnetic properties. Our designs are then tested using the advanced high-pressure high-temperature preparation method. New perovskites are characterized by synchrotron X-ray and neutron diffraction methods to determine precise cation distributions and their basic, fundamental physical and chemical properties are investigated by different techniques available in NIMS and in collaboration with other institutions.

Summary

We significantly expand and explore different subfamilies of perovskite-type materials. We aim at discovering new high-dielectric constant, ferroelectric, magnetic, multiferroic, and giant magnetoresistance materials. Such perovskites also represent a new playground to study complex interactions between different electronic degrees of freedom.

References

- A. A. Belik, Y. Matsushita, M. Tanaka, R. D. Johnson and D. D. Khalyavin, *J. Mater. Chem. C* **9**, 10232-10242 (2021).
- D. D. Khalyavin, R. D. Johnson, F. Orlandi, P. G. Radaelli, P. Manuel and A. A. Belik, *Science* **369**, 680-684 (2020).
- A. A. Belik, *Dalton Trans.* **47**, 3209-3217 (2018).

ミクロな相互作用のモデル化と理論・計算手法の開発

Keywords 磁性, 相転移・臨界現象, 統計力学, モンテカルロ法 (古典・量子), マスター方程式, 分子動力学, 厳密対角化

主幹研究員 / Principal Researcher

西野 正理 Nishino Masamichi

✉ NISHINO.Masamichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nishino_masamichi



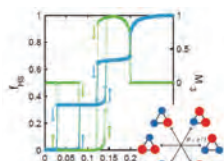
研究概要

磁場、光、圧力、温度など様々な外部刺激に応答して状態変化する、双安定性や多重安定性を持つ機能性物質の物性解明は、スイッチングデバイスの基礎研究として新規材料創生に重要なテーマである。機能発現に本質的な相互作用の微視的モデルを構築し、理論、計算手法の開発を行なうことによりその機構の解明を進めている。また、様々な電子デバイスを支える高性能永久磁石の開発も重要なテーマである。原子論に基づく新しい磁石の理論研究により、高保磁力磁石の実現やスピントロニクス応用を目指した研究も行なっている。

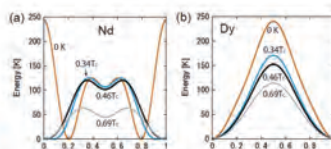
新規性・独創性

- 磁性、弾性、誘電性等に関わる短距離および長距離の相互作用の相乗や競合により発現する新しい相 (熱平衡および準安定) の発見
- 巨視的核生成など新しいダイナミクスの発見
- 新しい永久磁石の理論研究 (従来のマイクロマグネティクス計算では不可能な微視的方法論)
- 新しい計算手法、アルゴリズムの開発 (長距離力的高速計算など)

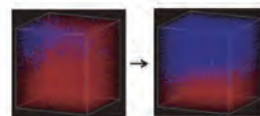
研究内容



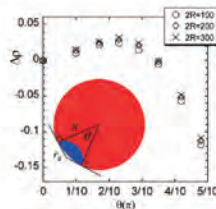
マルチステップ相転移



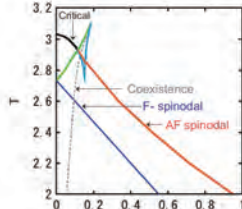
NdとDyの結晶電場エネルギー



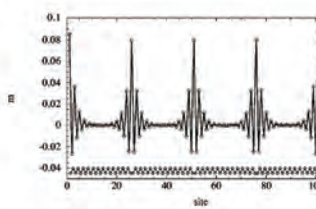
ネオジム磁石の粒の磁化反転



巨視的核生成 (新概念)



短距離および長距離相互作用の競合による角(つの)型構造の出現



不純物誘起磁化 (量子効果)

電子・スピンと格子が強く相互作用する系において、ある条件で磁性や構造のマルチステップ相転移が起こることを示した。弾性的長距離相互作用が強い場合、相図に異常な角(つ)の型構造が現れ、さらに、核生成過程が巨視的 (size-independent) になることなど、非自明な協力現象が起こることを見いだした。これらの現象は、相の安定・準安定性に相関しており、異なる相の間のスイッチングデバイス応用へ有用な知見を与える。

原子論を基礎にして、第一原理計算を用いて微視的な磁気相互作用をモデル化し、熱揺らぎを扱うダイナミクスの計算法を開発してネオジム

(Nd)磁石 (粒) の磁化反転解析を行ない、シミュレーションによる保磁力評価法を示した。さらに、ジスプロシウム(Dy)置換による保磁力増強効果の機構を、NdとDyの結晶電場エネルギーの温度依存性の相違を示すなど微視的解析から明らかにした。高保磁力の新規磁石の微視的設計にこれらの知見を生かすことができる。

量子効果により格子の不均一性 (不純物) で局所磁化が誘起されること、さらに各局所磁化は単一スピンと異なる動的性質を持っていることを発見したが、この局所磁化は新たなスピン素子の可能性を秘めている。

まとめ

電子・スピンと格子が強く相互作用する系では、非自明な熱力学的安定・準安定相やダイナミクス現象が現れることを示した。原子論を基礎にした新しい永久磁石研究は、保磁力の微視的起源に迫る方法論として有効である。量子効果により発現する局所磁化などの研究は量子デバイス応用の基礎となる。これらの基礎研究は、新規情報ストレージやセンサー開発の応用研究につながる。

論文・特許

- 西野 正理, 宮下 精二, 日本金属学会誌 **87**, 158-172 (2023).
- M. Nishino, C. Enachescu and S. Miyashita, *Phys. Rev. B* **100**, 134414 (2019).
- M. Nishino and S. Miyashita, *Phys. Rev. B* **100**, 020403(R) (2019).

アニオンの複合化による新機能材料の探索

Keywords 酸化物, 複合アニオン, 光触媒, 第二高調波発生, 低次元磁性, アニオン伝導

主幹研究員／Principal Researcher

辻本 吉廣 Tsujimoto Yoshihiro

✉ TSUJIMOTO.Yoshihiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsujimoto_yoshihiro



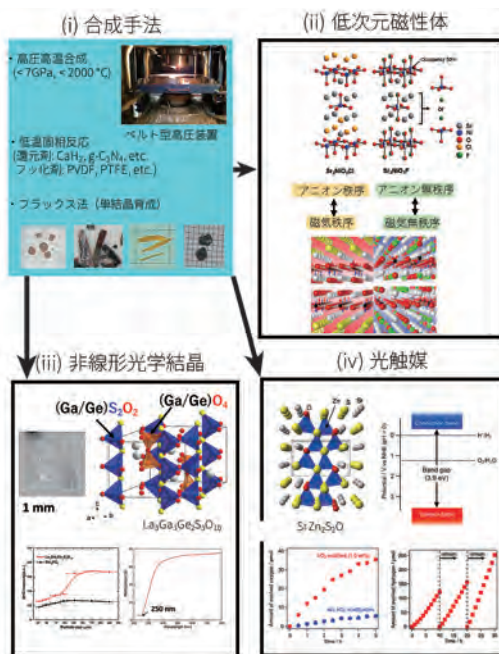
研究概要

既存の科学基盤技術に用いられている材料の多くは酸化物、窒化物等の単一のアニオンからなる物質群である。近年、物理的・化学的性質が大きく異なる複数のアニオンを複合化することにより、既存材料の機能性を高める、もしくは全く新しい機能を発現する研究が盛んに行われている。本研究では高压合成、低温合成、フラックス法等用いて酸カルコゲナイドおよび酸ハロゲン化物の新規合成を行い、特に光触媒、非線形光学、低次元磁性、アニオン伝導性など機能・物性の評価を行っている。

新規性・独創性

- 酸素・ハロゲンの複合化により遷移金属の配位構造・配位数を変化させ、磁気基底状態を制御することに成功
- $\text{Sr}_2\text{CoO}_3\text{F}$ において、5配位から6配位への構造変化を伴う無機固体物質で初めての圧力誘起スピン転移現象を発見
- ZnO/ZnS では発現しえない水の酸化・還元機能を有する亜鉛酸硫化物 $\text{SrZn}_2\text{S}_2\text{O}$ の新規合成に成功
- カルコゲン元素を含有する紫外非線形光学材料 $\text{La}_3\text{Ga}_3\text{Ge}_2\text{S}_3\text{O}_{10}$ を発見

研究内容



- 複合アニオン化合物は一般的に単一アニオン化合物より不安定であり、また合成できたとしても相同定が困難であることが多い。本研究では複合アニオン化合物の合成に有効な高压合成法、低温固相反応法、さらには単結晶が得られるフラックス法をも駆使して新規物質の開拓に取り組んでいる。
- $\text{Sr}_2\text{NiO}_3\text{X}$ (X = Cl, F)は二次元配列した NiO_2 面をもつ低次元磁性体である。低スピン状態の Ni^{3+} が5つの酸素と正方四角配位をとる。頂点サイトを占有するハロゲン原子の秩序状態がClとFの場合とで異なり、磁気基底状態にも影響を与える。
- カルコゲナイド化合物は赤外用途の非線形光学材料として応用されている。本研究ではカルコゲン元素の大きな分極率を紫外用途に適用するために、酸素とカルコゲンの複合アニオン化により、短い吸収端波長と大きな非線形光学係数を有する新規酸カルコゲナイド化合物の探索を進めている。
- 酸素と硫黄の複合アニオン化は光触媒の可視光応答性を可能にするアプローチとして知られている。本研究では、 ZnO/ZnS より優れた水分解機能をもつ光触媒 $\text{SrZn}_2\text{S}_2\text{O}$ の合成に成功している。

まとめ

複合アニオン化合物の研究は単一アニオン化合物と比較して歴史が短く、物質例も極端に少ない。それにもかかわらずSiALON蛍光体のように突出した機能材料が生まれていることからわかるように、複合アニオン化合物には従来の化合物を超える機能特性が期待される。本研究では実用材料を視野に入れた新しいモデル化合物の開拓を進めていく。

論文・特許

- Y. Tsujimoto, J. Sugiyama, M. Ochi, K. Kuroki, P. Manuel, D. D. Khalyavin, I. Umegaki, M. Månsson, D. Andreica, *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **6**, 114404 (2022).
- H. Yan, Y. Matsushita, K. Yamaura and Y. Tsujimoto, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 26561-26565 (2021).
- Y. Kobayashi, Y. Tsujimoto and H. Kageyama, *Annu. Rev. Mater. Sci.* **48**, 303-326 (2018).

分子性ナノ物質で築くヘテロ界面エレクトロニクス

Keywords 有機トランジスタ, ヘテロ界面, 多値演算, 論理演算, ロジック-イン-メモリ

グループリーダー / Group Leader

若山 裕 Wakayama Yutaka

✉ WAKAYAMA.Yutaka@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/wakayama_yutaka



研究概要

有機エレクトロニクスの新分野を開拓すべく、独自に開発したヘテロ界面トランジスタを駆使して、従来型の(0,1)の2値演算やCMOSを基軸とした回路設計を超える新しい演算機構を実現する。このトランジスタの中心部にはpnヘテロ界面が形成されており、ドレイン電流が急峻に増減するというユニークな特性を示す。この負性抵抗に類似する現象に着目して(0,1,2)の3つの演算値を示す3値演算素子の実証にも成功した。これらを発展させて4値以上の多値演算、再構成可能な論理演算素子、演算とメモリを融合したロジック-イン-メモリ、パルス信号で記憶を制御するニューロモルフィック素子など、新しいデバイス群の動作原理を確立する。

新規性・独創性

二次元分子膜などナノ物質を「部品」として新しい素子構造を組み立てることにより、電流の「増やす」「減らす」「貯める」を操る。これより飛躍的な高集積化に向けた多値演算や論理演算、演算とメモリを融合したロジック-イン-メモリ、超低消費電力化に資する非ノイマン型ニューロモルフィック素子などを実現する。いずれも電流の増減を制御できるヘテロ界面トランジスタなら可能な素子動作であり、通常のCMOS回路では達成できない。これにより、柔軟さと高集積度の両立、微細加工に頼らない素子設計、消費電力の低減、動作速度の向上を実現し、有機エレクトロニクスの未踏分野を開拓する。

研究内容

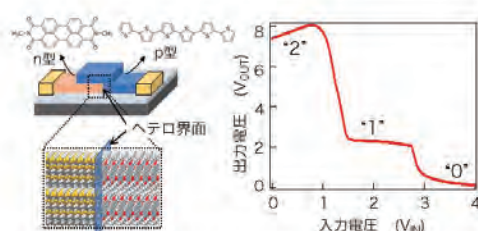


図1 ヘテロ界面トランジスタの構造と3値演算素子の実測値

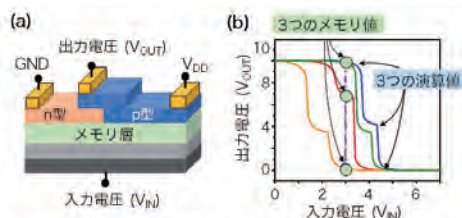


図2 多値ロジック-イン-メモリ: (a)3演算回路にメモリ効果を融合した素子構造。(b)演算値とメモリ値を同時に3値化した多値ロジック-イン-メモリの動作

多値演算素子の開発: 図1に示すように、このトランジスタの中心部にはpnヘテロ界面が形成されており、そのためドレイン電流が急峻に増減するというユニークな特性を示す。特に電圧の増加に対して電流が減少するという負性抵抗を活用して、(0,1,2)の3つの演算値を示す3値演算素子の実証にも成功した。従来型の(0,1)の2値演算では、N個の素子の集積度は2Nに比例するが、これを3値演算にしたことにより、その集積度は3Nに比例して増加できる。さらに図2に示す素子構造において、(0,1,2,3)の4つの演算素子も実現できた。有機デバイスでは世界初の成果である。

多値ロジック-イン-メモリの開発: 図3に示すように演算とメモリの2つの機能をひとつの素子で動作させ、さらにこの2つの機能を同時に多値化した多値ロジック-イン-メモリの動作を実証した。従来のノイマン型素子では、演算と記録が分離していることが素子機能のボトルネックとなっているが、本成果はその課題解決に資するだけではなく、演算とメモリの両方を同時に多値化させることに成功しており、集積度と記録密度の飛躍的な向上に繋がる成果である。

まとめ

次世代IoT素子としてエネルギーハーベスティング素子やウェアラブル素子が注目されているが、軽量で柔軟な有機エレクトロニクスがその中心的な役割を担うのは間違いない。そこではデータの処理・記録・通信など、有機エレクトロニクスが最も苦手とする機能が求められる。本研究の主旨は、この課題に対して演算機構を革新することで応えようとするものである。

論文・特許

- D. Panigrahi, R. Hayakawa and Y. Wakayama, *Adv Funct Materials* **33**, 2213899 (2023).
- D. Panigrahi, R. Hayakawa, X. Zhong, J. Aimi and Y. Wakayama, *Nano Lett.* **23**, 319-325 (2023).
- 特開第2018037466号 半導体装置

分子機能を活用した電子デバイスの開発

Keywords 有機エレクトロニクス, トランジスタ, メモリ, ヘテロ接合, 量子効果, 真空成膜技術

主幹研究員 / Principal Researcher

早川 竜馬 Hayakawa Ryoma

✉ HAYAKAWA.Ryoma@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayakawa_ryoma



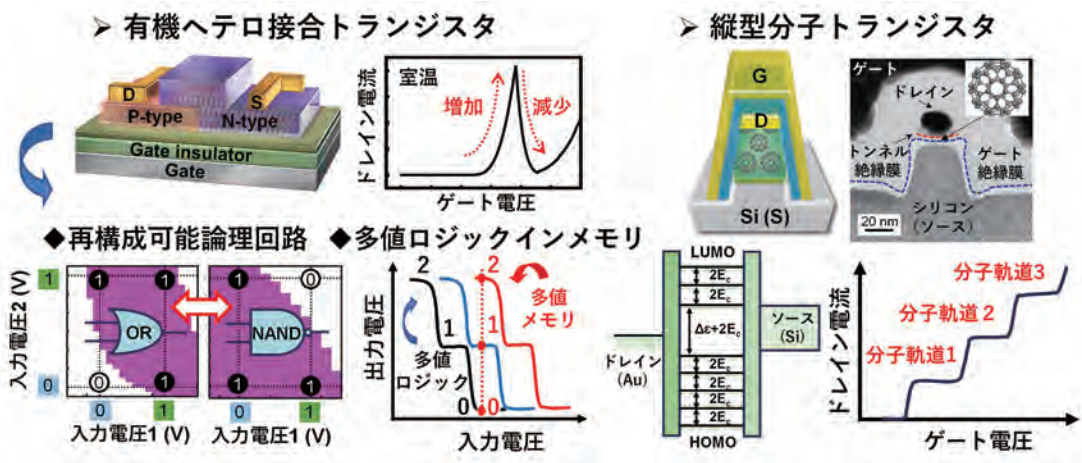
研究概要

現在の有機エレクトロニクスでは、分子材料の持つ軽量性、柔軟性、簡易な成膜性を活かしたフレキシブルデバイスの開発が中心となっている。しかしながら、有機分子は、分子設計により制御可能な離散的なエネルギー準位を持ち、優れた量子マテリアルとして機能する。我々は、デバイス開発における一つの方向性として、この有機分子の持つ量子マテリアルとしての機能を活かした電子デバイスの開発を進めている。有機pn接合を利用したヘテロ接合トランジスタや分子を量子ドットに用いた量子効果トランジスタは、その代表例である。このように従来の有機デバイスの開発指針とは一線を画す新しい切り口から有機集積回路の高性能化に寄与したいと考えている。

新規性・独創性

- 分子機能を活かしたトランジスタやメモリの開発。従来の有機デバイスとは異なる新しい動作原理に基づくデバイス開発を推進。
- 有機ヘテロ接合トランジスタを利用した再構成可能論理回路や多値ロジックインメモリの開発およびオペランド計測手法によるトランジスタのキャリア伝導機構解析。
- 機能性有機分子を量子ドットに用いた縦型トランジスタの開発。ナノギャップ電極やナノプローブを用いてしか観測できなかった少数分子を流れるトンネル伝導をシリコントランジスタで実現。高集積可能な分子デバイスの開発に期待。

研究内容



分子機能を活かした電子デバイスとして有機ヘテロ接合トランジスタおよび分子を用いた量子効果トランジスタの開発に取り組んでいる。有機pn接合をチャンネル内に持つヘテロ接合トランジスタでは、室温で3桁に渡るドレイン電流の増減現象を観測し、多値論理回路や再構成可能論理回路へ応用できることを実証した。微細化だけに依存しない有機集積回路の高性能化が期待される。また、分子を量子ドットに用いた量子効果トランジスタでは、 C_{60} を始め様々な機能性分子を壊すことなくシリコントランジスタに集積する技術を確立し、分子の離散準位を反映したトンネル電流の観測とゲート電圧制御に成功している。今後、高集積可能な分子デバイスの実現が期待される。

まとめ

- 現在の有機デバイスの開発指針とは異なる新しいアイデアを提案し、分子固有の機能を活かしたデバイス開発を推進。
- 有機ヘテロ接合トランジスタを利用した多値論理回路や多値ロジックインメモリ、再構成可能論理回路を実証。今後、実用化に向けて低電圧化が課題。
- 分子を量子ドットに用いた量子効果トランジスタを提案し、分子軌道を反映したトンネル電流を観測。今後、室温での安定動作が鍵。

論文・特許

- R. Hayakawa, K. Honma, S. Nakaharai, K. Kanai and Y. Wakayama, *Adv. Mater.* **34**, 2109491 (2022).
- R. Hayakawa, S. Takeiri, Y. Yamada, Y. Wakayama and K. Fukumoto, *Adv. Mater.* **34**, 2201277 (2022).
- R. Hayakawa, T. Chikyow and Y. Wakayama, *Nanoscale* **9**, 11297-11302 (2017).

二次元材料機能性デバイスの開発とナノ材料評価技術の開発

Keywords 二次元材料, アンチアンバイポーラトランジスタ, マルチプローブ原子間力顕微鏡, ラマン散乱増強効果

主任研究員 / Senior Researcher

新ヶ谷 義隆 Shingaya Yoshitaka

✉ SHINGAYA.Yoshitaka@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/shingaya_yoshitaka



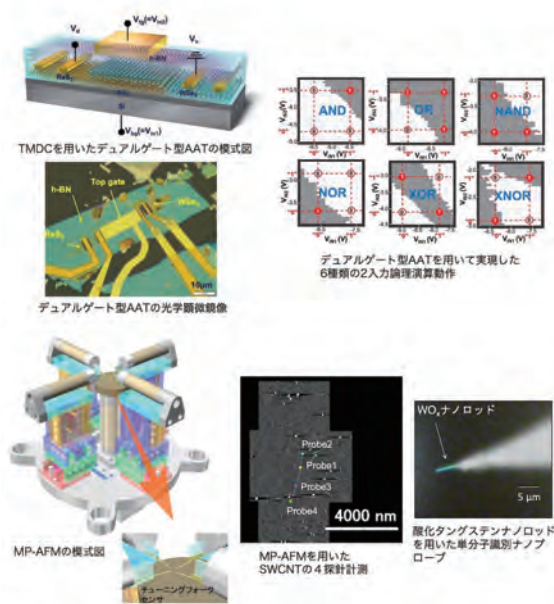
研究概要

さらなる高速性、高集積化が要求される次世代電子デバイスの実現に向けて、二次元薄膜半導体材料を組み合わせた機能性デバイスの開発を行っている。遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)のヘテロジャンクションを用いたアンチアンバイポーラトランジスタ(AAT)を作製し、再構成可能な論理演算回路を実現した。また、ナノ材料の電気特性を評価するためにマルチプローブ原子間力顕微鏡(MP-AFM)の開発を行っている。4本のAFMプローブをナノ材料に直接接触させることができ、新規ナノ材料の電気特性を直接計測することができる。単分子を識別するナノプローブの開発も行っている。酸化タングステン(WO₃)ナノロッドのラマン散乱増強効果を用いて極微量分子の識別検出を行うことができる。

新規性・独創性

- 二次元材料のヘテロジャンクションを用いたAAT
- デュアルゲートAATによる再構成可能論理演算回路
- 独立駆動可能な4本のプローブを備えたMP-AFM
- 真空中・大気中・溶液中で動作可能なMP-AFM
- WO₃ナノロッドのラマン散乱増強効果を用いた単分子識別ナノプローブ

研究内容



遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)を中心とした二次元薄膜材料を用いて機能性デバイスを作製した。図はn型半導体としてReS₂をp型半導体としてWSe₂を用いて、これらをドライ転写法により積層させてチャンネル中心にヘテロジャンクションを形成したデバイスである。このデバイスはゲート電圧操作によってドレイン電流が急激に増減するアンチアンバイポーラ特性を示す。ゲート電極を上下に配置しデュアルゲート型AATとした。上下のゲート電極を入力とし、ドレイン電流を出力とすることによって、論理演算回路として動作させることに成功した。図は入力電力を最適化することによって、単一素子でありながらAND, OR, NAND, NOR, XOR, XNORの6種類の論理演算動作を行うことができることを表している。この結果は論理演算回路設計の大幅な簡素化に寄与する。

4本の原子間力顕微鏡プローブを独立に駆動してナノスケールの精度で任意位置に配置できるマルチプローブ原子間力顕微鏡(MP-AFM)を構築した。蒸着による金属電極の取り付けを行わずに新規ナノ材料の電気伝導特性を直接計測することが可能である。このMP-AFMは真空中・大気中・溶液中で動作させることができ、様々な環境下でのナノ材料の電気特性を評価できる。図は真空中における単一単層カーボンナノチューブの4探針計測を表している。

酸素欠損面を有する導電性の酸化タングステン(WO₃)ナノロッドに非常に大きいラマン散乱増強効果があることを見だし、これを用いた単分子識別検出ナノプローブを開発している。

まとめ

二次元薄膜材料を様々な組み合わせた積層構造を作製し、機能性デバイスの開発を行っている。今後はMP-AFMを用いた動作中デバイスのオペランド計測を進め、デバイス動作原理を解明し、さらなる高性能化を図る予定である。

論文・特許

- Y. Shingaya, A. Zulkhefi, T. Iwasaki, R. Hayakawa, S. Nakaharai, K. Watanabe, T. Taniguchi and Y. Wakayama, *Adv. Electron. Mater.* **9**, 2200704 (2023).
- Y. Shingaya, H. Takaki, N. Kobayashi, M. Aono and T. Nakayama, *Nanoscale* **14**, 14552-14557 (2022).
- T. Nakayama, O. Kubo, Y. Shingaya, S. Higuchi, T. Hasegawa, C.-S. Jiang, T. Okuda, Y. Kuwahara, K. Takami and M. Aono, *Adv. Mater.* **24**, 1675-1692 (2012).

低次元量子材料の科学

Keywords ナノサイエンス, 低次元・ナノ材料, 結晶成長, 光物性

グループリーダー / Group Leader

北浦 良 Kitaura Ryo

✉ KITAURA.Ryo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kitaura_ryo



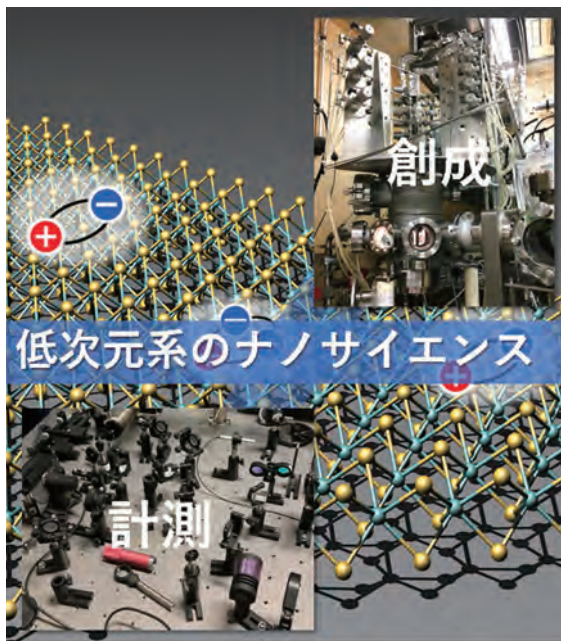
研究概要

物質中にある電子は時に驚くべき性質を示し、そのインパクトは、基礎科学はもちろんのこと、時には応用を通して社会にも及びます。我々は、「低次元・ナノサイズ」というキーワードのもと、物質創製・デバイス作製・物性探索を縦断的に行うことを通して、「物質の新機能を引き出す」・「驚くべき機能をもつ新物質を生み出す」ことを目的に研究を進めています。対象とする物質系は、二次元結晶である「原子層」、カーボンナノチューブなどの「ナノカーボン」、さらにはこれらナノスケール物質を構成要素とする多彩な複合ナノ構造・ヘテロ界面系など多岐にわたり、また用いる手法も化学気相成長法や分子線エピタキシー法を用いた物質創製、電子顕微鏡やプローブ顕微鏡を用いた構造解析、半導体微細加工技術を用いたナノデバイス作製と計測と多岐にわたります。化学や物理といった枠にとらわれず、自由な発想で次世代のナノ科学を切り開くことを目指しています。

新規性・独創性

- 先端結晶成長と物性計測の融合によるナノサイエンスの展開
- 二次元ヘテロ構造の原子レベル構造制御
- 先端分光による量子機能探索

研究内容



実現したい物性・デバイスを念頭に、「どのような構造体をデザインすればよいか?」また「その構造体をどのように実現すればよいか?」を原理に立ち返って考え、実現に必要な方法論を開発しながら新奇ナノ構造の創出を行います。ここでは、分子線エピタキシーや有機金属化学気相成長法といった先端的な結晶成長法と、マイクロメートルスケールの正確さで異物質を重ね合わせるマニピュレーション技術を融合することを通して、多彩なナノマテリアルを原子スケールの正確さで自在につなぎ合わせ・積み重ね、他の方法では実現困難な機能性結晶固体を自在創出することを目指します。また、自ら生み出した新奇ナノ構造体を対象に光・電子物性計測を行い、ナノ構造ならではの機能・物性を見出すことを目指します。低次元ナノ構造で現れる、特異な電子状態、顕在する多体効果、外場による制御性、をうまく使って他の材料系では実現できない機能を見出していきます。このために、半導体微細加工技術を用いたデバイス構造の作製、分光およびイメージング計測、電気伝導度計測を様々な外場のもとで行います。

まとめ

低次元・ナノ材料を舞台に、独自の結晶成長技術と物性計測を組み合わせることで、低次元材料の新たな機能開拓を行ってきました。成長・計測手法の高度化を進めつつ、今後さらなる研究を進め、基礎科学に立脚しつつ次世代のデバイスなどにつながる研究を精力的に展開していきたい。

論文・特許

- S. Zhao, P. Moon, Y. Miyauchi, T. Nishihara, K. Matsuda, M. Koshino and R. Kitaura, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 106101 (2020).
- M. Okada, A. Kutana, Y. Kureishi, Y. Kobayashi, Y. Saito, T. Saito, K. Watanabe, T. Taniguchi, S. Gupta, R. Kitaura, *et al.*, *ACS Nano* **12**, 2498-2505 (2018).
- M. Okada, T. Sawazaki, K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Hibino, H. Shinohara and R. Kitaura, *ACS Nano* **8**, 8273-8277 (2014).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

量子ナノ構造の光科学

Keywords 低次元材料, 量子光源, ナノ構造制御

主任研究員 / Senior Researcher

小澤 大知 Kozawa Daichi

✉ KOZAWA.Daichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kozawa_daichi



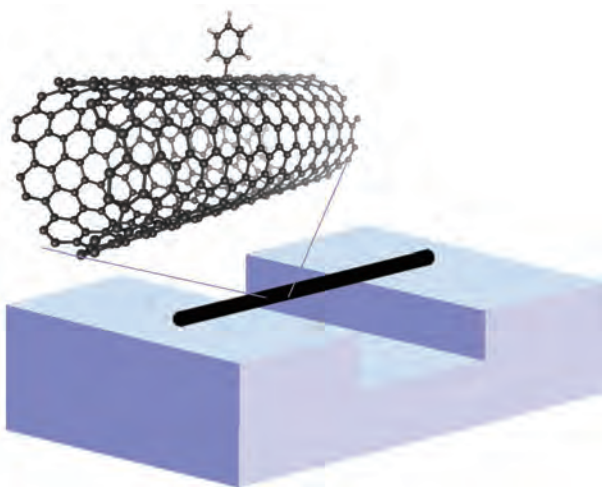
研究概要

本研究は、次世代の情報処理・通信技術として注目されている量子光を用いる手法を進化させることを目指している。その手段として架橋カーボンナノチューブを活用し、これまで不可能だった気相化学反応法で量子欠陥を導入した。これにより、架橋カーボンナノチューブの発光効率を高め、さらに発光特性を細かくコントロールできるようになった。これは、例えばデータ通信の分野で、より高速・高容量の情報処理が可能になる等、幅広い応用が期待される。特に、低密度で量子欠陥を導入できることが強みで、単一光子源としての性能向上につながる。

新規性・独創性

- 気相化学反応法の導入：従来、カーボンナノチューブの化学修飾は溶液プロセスを用いており、架橋カーボンナノチューブには適用できなかった。本研究では、気相化学反応法を用いることで、架橋カーボンナノチューブに対する化学修飾が可能になった。
- 反応精度の向上：気相化学反応法を用いることで、反応分子数の精密なコントロールが可能となり、単一分子レベルでの量子欠陥導入が可能になる。
- 低密度の欠陥導入：本手法は、ナノチューブの長さ1マイクロメートルあたり1-2個という、非常に低密度の欠陥が導入できる点で新しい。これにより、単一光子源としての性能向上が期待される。

研究内容



本研究では、気相化学反応法を用いて架橋カーボンナノチューブに量子欠陥を導入する手法を開発した。架橋カーボンナノチューブには、高い発光効率と、情報通信波長帯域での単一光子発生の可能性があり、量子情報処理技術の進化に寄与する。

架橋カーボンナノチューブに量子欠陥を導入すると、その発光スペクトルが変化し、新たなピークが観測されることが分かった。これは、量子欠陥の導入により新たな発光源が生成されることを示しており、この発光源の利用が期待される。

また、気相化学反応法を用いることで、架橋カーボンナノチューブの直径が小さいほど、より高い反応性と高密度の欠陥導入が可能であることが明らかになった。これは、精密な発光特性制御に寄与する。

これらの成果は、量子情報処理技術、特に単一光子源の性能向上につながると考えられる。単一光子源は、量子コンピューターや量子通信などの量子情報技術の重要な要素であり、その性能向上は、これらの技術の発展に大きく寄与する。したがって、本研究は、次世代の情報処理・通信技術向けの新たな技術として、大きな市場性を持つと考えられる。

さらに、本手法を用いることで、反応条件を最適化し、ナノチューブ1本に対して量子欠陥が1個だけある構造を作製することが可能になる。これは、単一光子源の制御精度をさらに向上させる可能性を秘めている。

まとめ

- 応用分野：量子情報処理、光エレクトロニクス
- 今後の課題：反応条件の最適化、デバイス設計への適応性評価、量子効果の長期安定性確認
- 達成していること：気相化学反応法で架橋カーボンナノチューブに量子欠陥導入、欠陥導入とナノチューブ結晶構造の関連性確認
- 達成したいこと：安定した量子欠陥導入、発光の長期安定性向上、実用デバイスへの応用

論文・特許

- D. Kozawa, S. X. Li, T. Ichihara, A. G. Rajan, X. Gong, G. He, V. B. Koman, Y. Zeng, M. Kuehne, K. S. Silmore, *et al.*, *Nanotechnology* **34**, 115702 (2023).
- D. Kozawa, X. Wu, A. Ishii, J. Fortner, K. Otsuka, R. Xiang, T. Inoue, S. Maruyama, Y. Wang and Y. K. Kato, *Nat. Commun.* **13**, 2814 (2022).
- D. Kozawa, A. Carvalho, I. Verzhbitskiy, F. Giustiniano, Y. Miyauchi, S. Mouri, A. H. C. Neto, K. Matsuda and G. Eda, *Nano Lett.* **16**, 4087-4093 (2016).

表面界面における量子物質の開拓と物性解明

Keywords 表面界面, 原子層, 2次元系, ナノテクノロジー, 量子物性, 超伝導

グループリーダー / Group Leader

内橋 隆 Uchihashi Takashi

✉ UCHIHASHI.Takashi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/uchihashi_takashi



研究概要

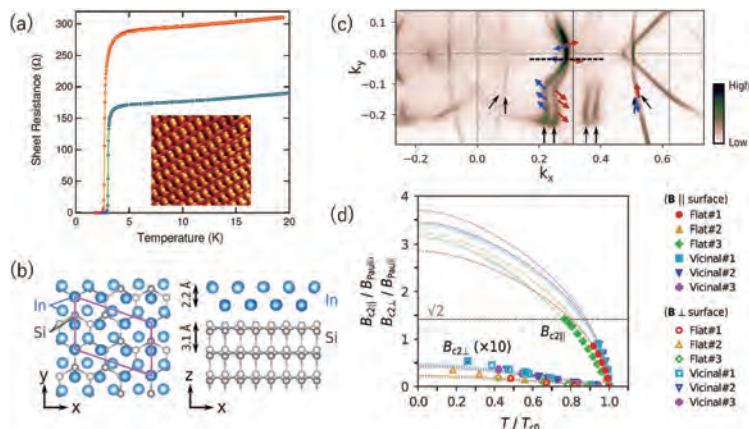
表面界面は物質の内部と外界が不連続につながる場所であり、その特異性に起因して新しい量子物質相が現れる。また外界からの制御が容易であり、デバイス機能が発現するため応用上も重要である。NIMSでこれまでに培った超高真空・ナノテクノロジー技術を駆使することで、表面界面における2次元量子系を原子・分子レベルで設計・創製し、未知の物性と機能性を明らかにしていく。

新規性・独創性

一般にこれまで存在しないと考えられていた原子層厚さの2次元超伝導体を表面界面で創製し、その明瞭な超伝導転移を実証した。さらにバルク超伝導体とは異なる特徴として、以下の性質を明らかにした。

- 表面原子ステップがジョセフソン接合として働くこと
- 表面敏感性を有し、有機分子吸着によりその超伝導状態を変調できること
- 空間反転対称性の破れによりラシュバ型のスピン軌道相互作用が生じ、このために巨大な臨界磁場をもつこと

研究内容



シリコン表面上に成長したインジウム原子層結晶の超伝導特性を、走査トンネル顕微鏡(STM)、角度分解光電子分光(ARPES)、および電子輸送測定により解明した。一般に超伝導は磁場によって容易に破壊されるが、ラシュバ型スピン偏極と動的なスピン運動量ロッキング効果により、特定方向に臨界磁場が巨大化することを見出した。

(a)超伝導転移を示す電気伝導度の温度依存性。挿入図は試料の原子分解能STM像を示す。(b)試料の原子構造モデル。2次元超伝導体はインジウム原子層2層(1ユニットセル)から構成される。(c)高分解能レーザーARPESによって得られた試料のフェルミ面。ラシュバ型スピン軌道相互作用によるフェルミ面のスピン分裂が観測された(黒矢印)。青色と赤色の矢印はフェルミ面におけるスピン偏極方向を示す。(d)温度の関数として表示した面内および面直方向の超伝導臨界磁場。温度はゼロ磁場での転移温度($T_{c0} \sim 3$ K)で、磁場はパウリ臨界磁場($B_{Pauli} \sim 5$ T)で規格化している。面内方向の臨界磁場($B_{c2||}$)が異常に増大されている。

まとめ

表面界面での2次元超伝導体の量子物性を解明することで、超伝導素子、量子演算、スピントロニクスなどへの応用が期待される。また、表面界面で形成される原子層ヘテロ構造のトポロジカル物性やスピン物性の研究も進めている。

論文・特許

- 内橋 隆, 2次元超伝導—表面界面と原子層を舞台として。基本法則から読み解く物理学最前線30。共立出版, ISBN 9784320035508 (2022)。
- S. Yoshizawa, T. Kobayashi, Y. Nakata, K. Yaji, K. Yokota, F. Komori, S. Shin, K. Sakamoto and T. Uchihashi, *Nat. Commun.* **12**, 1462 (2021)。
- T. Uchihashi, P. Mishra, M. Aono and T. Nakayama, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 207001 (2011)。

ダイヤモンドトランジスタの開発

Keywords ダイヤモンド、トランジスタ、パワーエレクトロニクス、情報通信、センシング、ワイドバンドギャップ半導体

主幹研究員／Principal Researcher

山口 尚秀 Yamaguchi Takahide

✉ YAMAGUCHI.Takahide@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamaguchi_takahide



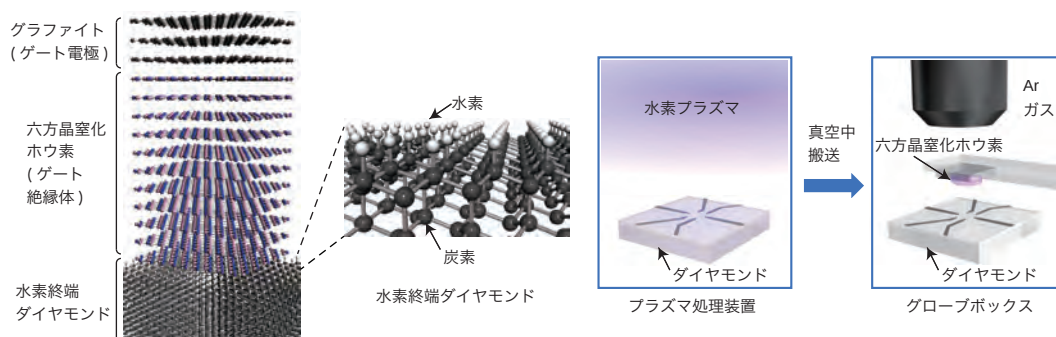
研究概要

ダイヤモンドは高絶縁破壊電界、高熱伝導度、高移動度など半導体材料として優れた特性を示し、将来のパワーエレクトロニクスや情報通信での利用が期待されている。その優れた特性を十分に活用した半導体素子を作るには、電極や絶縁体など組み合わせる材料の選択、およびその材料との界面の品質が重要になる。われわれは、従来使われてきたアルミナなどのアモルファス酸化物の代わりに、単結晶の六方晶窒化ホウ素(h-BN)をゲート絶縁体として使うとともに、水素終端ダイヤモンド表面を大気に晒さない新しい作製手法を用いることで、高性能なダイヤモンド電界効果トランジスタの開発に成功した。

新規性・独創性

- 六方晶窒化ホウ素(h-BN)単結晶をゲート絶縁体としたダイヤモンド電界効果トランジスタ(FET)を実現
- ワイドバンドギャップpチャネルFETとして最高レベルの室温チャネル移動度 ($680 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)の実現
- 室温チャネル移動度は、SiCやGaNのpチャネルFETに比べて20倍以上
- ノーマリオフ動作も同時に実現
- 従来のトランスファードーピングという特殊な手法を使わない水素終端ダイヤモンドFETの実証

研究内容



従来使われてきたアルミナなどのアモルファス酸化物の代わりに、単結晶の六方晶窒化ホウ素(h-BN)をゲート絶縁体としたダイヤモンド電界効果トランジスタ(FET)を開発した。高温高压合成した単結晶h-BNを劈開し、表面の炭素に水素が結合した水素終端ダイヤモンド表面に転写した。転写は、ダイヤモンド表面を水素プラズマによって水素終端した後、大気に晒さことなくArガス中で行った。このFETの室温チャネル移動度は $680 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ に達した。これはSiCやGaNのpチャネルFETの20倍以上の値である。パワーエレクトロニクス用途で重要なノーマリオフ動作も同時に実現した。この研究は、水素終端ダイヤモンドに電気伝導性を生じさせるのに必須だと考えられてきたトランスファードーピングという特殊な手法を使わないで、一般的な半導体と同様の設計指針で水素終端ダイヤモンドFETを実現できることを示しており、今後のダイヤモンドデバイス開発の新しい指針を与える。将来的には、パワーエレクトロニクス用の低損失・小型電力変換器や情報通信やレーダー用の高出力高周波増幅器への応用が期待される。

まとめ

ダイヤモンドと六方晶窒化ホウ素を組み合わせることで、高性能なトランジスタを実現できることを示した。今後さらなる界面の高品質化によって、より高い移動度を示すダイヤモンドトランジスタの実現を目指す。また、より実用に適した構造・作成手法をもつダイヤモンド半導体素子の開発を目指す。

論文・特許

- Y. Sasama, T. Kageura, M. Imura, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Uchihashi and Y. Takahide, *Nat. Electron.* **5**, 37-44 (2022).
- Y. Sasama, K. Komatsu, S. Moriyama, M. Imura, S. Sugiura, T. Terashima, S. Uji, K. Watanabe, Y. Takahide, *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **3**, 121601 (2019).
- 特許第7101980号 M I S型半導体装置およびその製造方法

表面ダイナミクスの分光観測と制御

Keywords 固体表面、非線形・非対称、ダイナミクス、レーザー分光、フォノン、スピン軌道相互作用

主幹研究員／Principal Researcher

荒船 竜一 Arafune Ryuichi

✉ ARAFUNE.Ryuichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/arafune_ryuichi



研究概要

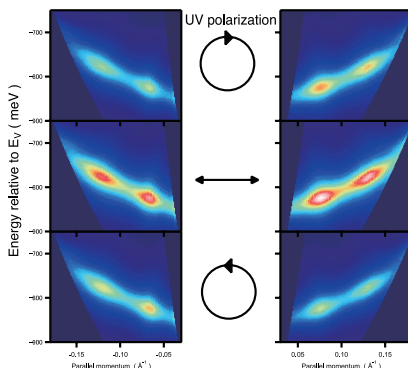
「固体表面」は量子から古典にわたって多種多様な物理・化学現象が起きる「場」である。さらに固体表面は人工的に系を設計・創出・制御できる自由度を有しており、異なる対称性、トポロジギーがであう場でもあり、物性物理を深く追究する舞台として適している。グラフェンに代表される「2次元物質」や最近では「トポロジカル」表面など、近年の物性物理の大きなトピックスが固体表面と強く関連していることは、固体表面が持つ機能の研究が重要性を意味している。

我々は光と電子をプローブとした分光学的手法で表面現象および表面物性の研究、とりわけ、光励起された表面の光電変換現象やスピン制御など、光と物質の相互作用を明らかにすべく研究を行っている。

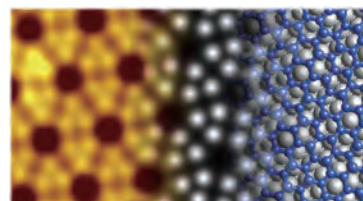
新規性・独創性

- 電子ダイナミクスを100 fs 程度の時間分解能、 μ オーダーの空間分解能、0.01 Å⁻¹オーダの波数分解能で分光解析可能。
- 赤外・ラマン分光法では困難な表面吸着種と基板の束縛振動モードを測定可能。あわせてpsオーダの時間分解能で追跡可能
- 第一原理計算との比較および、第一原理計算では予測が難しいエネルギー領域の電子物性にアクセス可能

研究内容



新奇表面物質相の創出とその機能開発



本研究で構築した測定技術を用いて測定したデータ。

a) 非線形・角度分解光電子分光を用いた表面光励起スピン流の観測制御の例。電子スピンの輸送は、スピントロニクスにおける最も重要かつ興味深いアイデアの一つである。スピン流はスピントロニクスにおいて最も重要な役割を担っている。スピン流を操作する方法は数多く提案されているが、光励起は、高速スピン・コントロールに基づく論理演算デバイスの実現につながる魅力的な手法である。本研究では、非線形・角度分解光電子分光法を用いて、スピン軌道相互作用により表面で発生する光励起スピン流を調べた。光の偏光の制御を通して、純スピン流とスピン偏極光電流の切り替えが可能であることを示した。直線偏光で励起されたスピン偏極状態間の光学的直接遷移により純スピン流が生じ、円偏光励起によりスピン偏極電流が生じる。併せてレーザー光電子分光による低振動数フォノンの観測技術や短パルス性を利用した光励起電子の緩和過程の観測技術の開発も行っている。

また、シリセン(シリコン版グラフェン)や遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)といった2次元物質の開発、またその機能発現に関する研究も積極的に行っている(右図)。新たな物質群の創出は、新機能発現を観測する測定技術の開発にフィードバックされる。

まとめ

- レーザー技術、超高真空技術の融合による超精密分析手法
- スループットの高い解析技術の開発(AI技術との連携)が課題
- 表面の非対称性を利用したプラズモンやフォノンの非相反性(ダイオード特性)を実現させたい。

論文・特許

- M. K. Lin, G. H. Chen, C. L. Ho, W. C. Chueh, J. A. Hlevyack, C. N. Kuo, T. Y. Fu, J. J. Lin, C. S. Lue, R. Arafune, *et al.*, *ACS Nano* **16**, 14918-14924 (2022).
- R. Arafune, N. Takagi and H. Ishida, *Prog. Surf. Sci.* **93**, 177-188 (2018).
- C. L. Lin, R. Arafune, R. Y. Liu, M. Yoshimura, B. Feng, K. Kawahara, Z. Ni, E. Minamitani, S. Watanabe, Y. Shi, *et al.*, *ACS Nano* **11**, 11459-11465 (2017).

原子層物質積層構造を用いた低仕事関数・高化学的安定材料

Keywords 六ホウ化ランタン (LaB₆)、六方晶窒化ホウ素 (h-BN)、ヘテロ構造、低仕事関数、電子源材料

主任研究員／Senior Researcher

長岡 克己 Nagaoka Katsumi

✉ NAGAOKA.Katsumi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagaoka_katsumi



研究概要

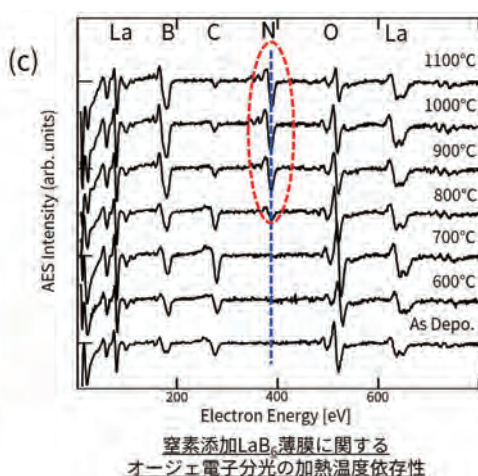
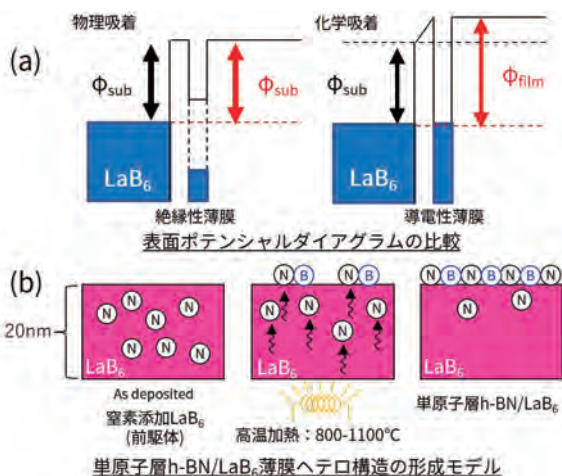
低仕事関数材料は、電子をその固体外部に取り出しやすいという特徴をもち、この特徴は、各種電子デバイスにおいて、機能発現・性能向上に有用となる。しかしながら、一般に、低仕事関数材料は、その特徴ゆえ、化学的反応性が高い(例：アルカリ金属)。その結果、低仕事関数材料は容易に雰囲気分子と反応し、安定に低仕事関数状態を保持することは難しい。現状、このことが、低仕事関数材料の応用範囲が限定されている要因となっている。本研究では、この課題を解決するため、低い仕事関数と高い化学的安定性の両方を有する、単原子層六方晶窒化ホウ素で表面被覆した六ホウ化ランタン薄膜(単原子層h-BN/LaB₆薄膜ヘテロ構造)を提案し、その作製方法を確立した。

新規性・独創性

単原子層h-BN/LaB₆薄膜ヘテロ構造は、下記の特徴をもつ。

- 通常、相矛盾する、低い仕事関数(2.35 eV)と高い化学的安定性を有する。
- RFスパッタデポ(膜厚20nm)と真空加熱により製膜するため、高いスケーラビリティと高い形状自由度を有する。
- 大気曝露後でも600℃の真空加熱で低仕事関数状態が復活し、ロバスト性も高い。

研究内容



単原子層h-BN/LaB₆薄膜ヘテロ構造では、LaB₆下地にh-BN薄膜が物理吸着しているため、系の仕事関数は下地LaB₆の仕事関数で与えられる(図(a))、さらに、不活性なh-BNが表面を被覆しているため、高い化学的安定性も有する。当該構造は、RFスパッタデポにより製膜した窒素添加LaB₆薄膜(20nm)を真空加熱すると、表面で熱拡散窒素とホウ素が反応し、形成される(図(b))。この形成過程は、AES(図(c))、HREELS、XANES測定により確認している。当該構造は、電子源材料やLEDカソード材料として優位性があり、半導体との接合界面で用いれば、設計素子機能の発現に必要なオーミックコンタクトの実現にも有用である。

まとめ

通常、相矛盾する、低い仕事関数と高い化学的安定性を有する、単原子層h-BN/LaB₆薄膜ヘテロ構造を提案し、その作製方法を確立した。当該構造は、電子源材料やLEDカソード材料として優位性があり、半導体接合界面でのオーミックコンタクトの実現にも有用である。当該構造を各種電子デバイスに用いることにより、設計機能の発現・性能向上が期待できる。

論文・特許

- 特開2023-45834 積層体、積層体を含む電子源及び電子デバイス、並びに積層体の製法及び浄化方法
- K. Nagaoka and S. Ohmi, *J. Vac. Sci. Technol. B* **38**, 062801 (2020).
- K. Nagaoka, W. Hayami and S. Ohmi, *Vacuum*, **170**, 108973 (2019).

強磁場超低温を用いた電子状態研究

Keywords 強磁場, 超低温, 量子振動, フェルミ面

グループリーダー / Group Leader

寺嶋 太一 Terashima Taichi

✉ TERASHIMA.Taichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/terashima_taichi



研究概要

物質の示す有用な機能の多くは物質中の電子が担っている。例えば、電気抵抗なしに電流が流れる超伝導は、電子が二つずつペアになることによって発現する。あるいは、未来の量子情報処理に役立つのではと大きな関心を集めているトポロジカル物質は、電子の状態が特異なためそのように呼ばれる。

私たちは、絶対温度0.03度、磁場20テスラという超低温強磁場を用いた測定により、超伝導体やトポロジカル物質などの量子マテリアル中の電子の状態を明らかにすることを目指している。

新規性・独創性

- 絶対温度0.03度、磁場20テスラの超低温強磁場極限環境における精密測定
- ドハース・ファンアルフェン振動やシュブニコフ・ドハース振動などの量子振動の計測によるフェルミロジー
- 鉄系超伝導体やトポロジカル半金属などの電子状態

研究内容

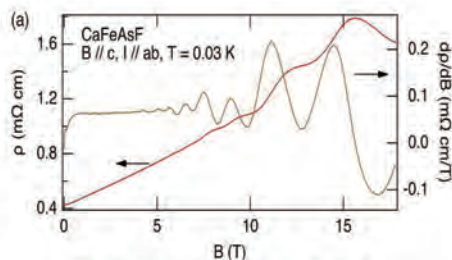
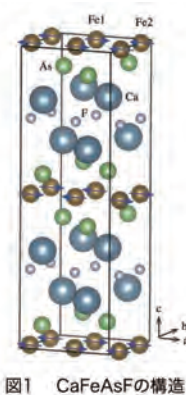


図2 磁場中での抵抗測定で観測された量子振動効果

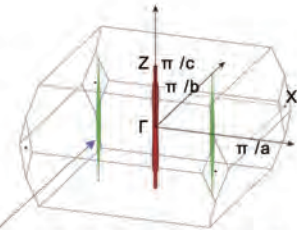


図3 決定されたフェルミ面構造

量子振動の位相の解析により、緑の電子ポケットがディラック電子によるものであることを示した。

鉄系超伝導体母物質CaFeAsF(図1)の単結晶について、超低温0.03Kで磁気抵抗を測定した(図2)。磁場方位は結晶c軸方向である。磁気抵抗(図2赤線)は磁場に対して振動しながら増大している。磁場微分(図2茶色線)を見ると5T程度から振動が始まっているのがわかる。この振動現象はシュブニコフ・ドハース効果によるものである。様々な磁場方位で同様な測定を行い、結果を解析し、バンド計算の結果と照らし合わせることで、フェルミ面が決定できる(図3)。ブリルアンゾーンの中心にホール面が、その両脇に電子面が存在する。更に、振動位相の解析により、電子面が線形分散を持つディラック電子によるものであることが明らかになった。

まとめ

量子状態を精密制御することで機能を発現する量子マテリアルの開発において、その基礎となる電子状態を明らかにすることは非常に重要である。超低温強磁場中での量子振動測定などの電子状態研究は、そのために極めて有効であり、不可欠である。

論文・特許

- T. Terashima, S. Uji, T. Wang and G. Mu, *npj Quantum Mater.* **7**, 25 (2022).
- T. Terashima, H. T. Hirose, Y. Matsushita, S. Uji, H. Ikeda, Y. Fuseya, T. Wang and G. Mu, *Phys. Rev. B* **106**, 184503 (2022).
- T. Terashima, H. T. Hirose, D. Graf, Y. Ma, G. Mu, T. Hu, K. Suzuki, S. Uji and H. Ikeda, *Phys. Rev. X* **8**, 011014 (2018).

強相関半導体における電子状態の出現に関する理論

Keywords モット絶縁体, 近藤絶縁体, 重い電子系, 電子状態, バンド構造, 理論, 数値計算

主席研究員 / Chief Researcher

河野 昌仙 Kohno Masanori

✉ KOHNO.Masanori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kohno_masanori



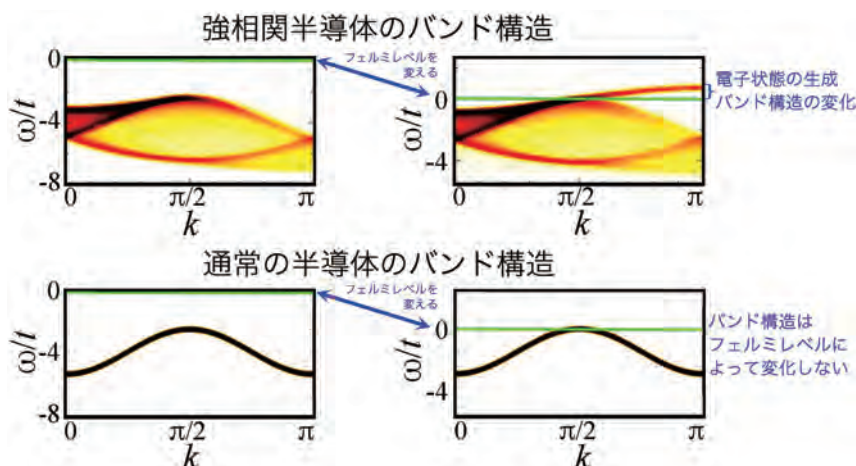
研究概要

現在のエレクトロニクスデバイスは、半導体の電子状態(バンド構造)に基づいて設計されている。バンド構造は、通常の半導体ではフェルミレベルや温度によって変化しないが、モット絶縁体や近藤絶縁体などの電子間相互作用の強い絶縁体(半導体)では、フェルミレベルや温度を変化させることによって電子状態の出現させ、バンド構造を変化させることができる。このようなバンド構造の変化は、モット絶縁体や近藤絶縁体の低エネルギーの磁気励起を反映したものであり、そのメカニズムと特徴を理論・数値計算によって明らかにした。この特徴を利用すれば、従来のエレクトロニクスの固定バンド構造の枠組みを超えた新しいエレクトロニクスを開拓できる可能性がある。

新規性・独創性

- 従来の半導体のエレクトロニクス材料ではバンド構造はフェルミレベルや温度によって変化しないが、強相関半導体ではバンド構造をフェルミレベルや温度によって変化させることができ、この特徴をエレクトロニクスの新しい機能として活用することができる。
- バンド構造の変化は、低エネルギーの磁気励起に由来することを理論・数値計算によって明らかにした。これにより、バンド構造の変化のエネルギースケールやバンド分散の予測や設計を行うことができる。
- 固定したバンド構造に基づく従来のエレクトロニクスから、バンド構造をフェルミレベルや温度によって変化させられる強相関エレクトロニクスへと、根本的変革をもたらす可能性がある。

研究内容



通常の半導体では電荷励起と磁気励起が同じエネルギー域に存在するが、強相関半導体では両者が異なるエネルギー域に存在している。この強相関系特有の性質は、電子励起(バンド構造)にも影響を与えることを理論・数値計算によって明らかにした。具体的には、図に示すように、フェルミレベルがバンド内に入ると、磁気励起を反映した電子状態が出現する(バンド構造が変化)ことを示した。また、温度を上昇させることによって同様に電子状態を出現させられることも示した。このような特徴は、従来の半導体のエレクトロニクスでは想定されておらず、強相関材料を活用することにより、従来のエレクトロニクスを根底から変革し、新しい強相関エレクトロニクスが切り拓かれる可能性がある。

まとめ

- 強相関半導体では、フェルミレベルや温度によって電子状態を生成させ、バンド構造を変えられることを理論・数値計算によって示した。
- 従来の固定バンド構造に基づくエレクトロニクスから可変バンド構造の強相関エレクトロニクスへと根本的変革をもたらす可能性がある。
- これまで知られていなかった強相関系特有の性質を、理論・数値計算結果に基づき、強相関デバイスに活用したいと考えている。

論文・特許

- M. Kohno *Rep. Prog. Phys.* **81**, 042501 (2018).
- 河野 昌仙, *日本物理学会誌(会報)* **71**, 533-540 (2016).
- M. Kohno, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 076401 (2012).

中性子回折による物質・材料の非破壊検査

Keywords 中性子回折, X線回折, 非破壊検査, 結晶構造

主幹研究員／Principal Researcher

茂筑 高士 Mochiku Takashi

✉ MOCHIKU.Takashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mochiku_takashi



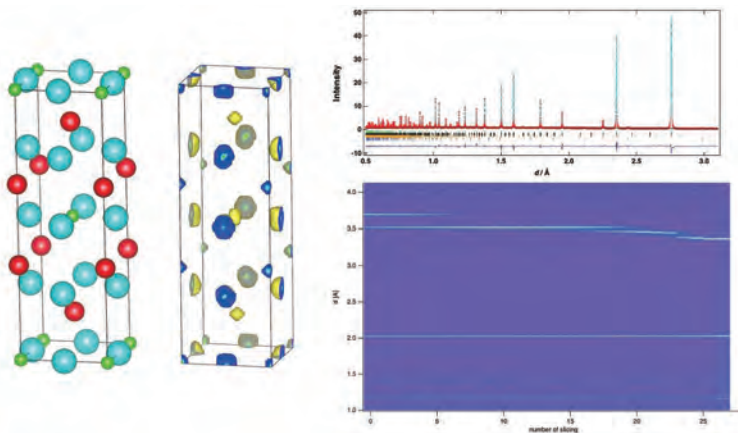
研究概要

物質・材料が発現する機能を理解するには、原子スケールの構造(結晶構造)に関する情報が必要不可欠であり、X線・中性子回折を利用することで様々な環境下の物質・材料の結晶構造に関する情報を収集することができる。特に、透過力の強い中性子を利用すると、非破壊で材料内部、稼働状態にある装置内部の材料の結晶構造に関する情報を容易に収集できることがわかった。従来は材料内部を解析するには材料を分解する必要があり、稼働状態にある装置内部の材料を解析するには専用の装置を開発する必要があったが、本研究による方法では材料や装置をそのまま測定すればよい。

新規性・独創性

- X線・中性子回折を利用した物質の原子スケールの構造評価
- 中性子回折を利用した内部を含めた材料の非破壊検査
- 中性子回折を利用した稼働状態にある装置内部の材料の非破壊検査

研究内容



- 物質のX線・中性子回折データを解析することにより格子定数、原子配列、占有率、熱振動等の情報だけでなく、三次元の電子密度分布又は散乱長密度分布(イオン分布に相当する。)を算出して、物質の機能を理解するための基盤とすることができる。左図は中性子回折により求めた高温超伝導体の結晶構造と散乱長密度分布を示す。
- 分析するためには通常材料を切断、研磨等加工をしなければならないが、中性子回折を利用することにより、非破壊で内部を含めた材料の結晶構造、構成する化合物の組成及び質量比、結晶粒、歪み等の情報をプロファイル解析から得ることができる。右上図は液化水素製造用の磁気冷凍材料のプロファイル解析の例を示す。
- 中性子回折を利用することにより、装置を稼働させた状態(オペランド)で装置内部の材料の結晶構造等の情報を解析することができる。解析するために専用の装置を開発することはなく、実物を測定すればよい。充放電中の実電池の様子等を観察することに適用でき、右下図は充放電中の18650電池の中性子回折パターンの時間変化の例を示す。

まとめ

- 中性子回折を利用することにより、材料内部や稼働状態にある装置内部の材料の結晶構造等の解析ができることがわかった。
- 解析するために材料を切断、研磨等加工をしたり、専用の装置を開発することは不要で、実際の材料や装置を非破壊で検査できる。
- 多数の材料のデータや稼働状態での時間変化のデータを自動で収集することが可能であり、収集したデータを自動で解析し、メタデータを付加してデータベース化することを目指している。

論文・特許

- T. Mochiku, Y. Matsushita, N. Subotić, T. Kashiwagi and K. Kadowaki, *Acta Crystallogr., Sect. E: Cryst. Commun.* **77**, 1327-1329 (2021).
- T. Mochiku, M. Tachiki, S. Ooi and Y. Matsushita, *Physica C Supercond.* **563**, 33-35 (2019).
- 特許第4352118号 高感度磁場センサー

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

超伝導・磁性材料開発のための低温磁気特性研究

Keywords 超伝導材料, 磁性材料, 磁気光学効果, 磁気顕微鏡, PLD成膜法, 磁束量子, 計算機シミュレーション

主幹研究員／Principal Researcher

立木 実 Tachiki Minoru

✉ TACHIKI.Minoru@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/tachiki_minoru



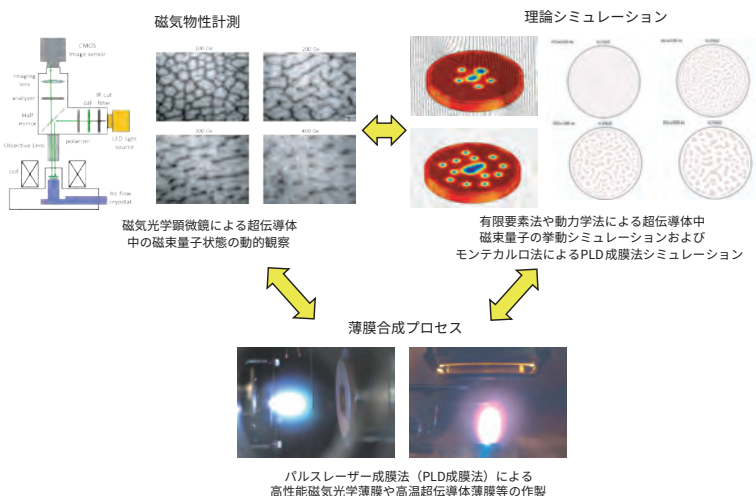
研究概要

粒子加速器などの量子ビーム応用や量子コンピュータ応用、低炭素社会へ向けた低損失線材開発などのために、これらに使用される超伝導材料の高性能化が必要である。そのためには超伝導体の低温での磁気特性の精密な研究が必要であり、磁気顕微鏡を用いた超伝導体の磁束状態の計測は材料開発の大きな指針となる。本研究では磁束量子観察が可能な磁気顕微鏡を開発し、磁束状態の動的測定を実施するとともに、計算機理論シミュレーションによる磁束量子ダイナミクスの研究も行う。さらに高性能な磁気光学センサの開発をパルスレーザー成膜法を駆使して行う。

新規性・独創性

- 独自のパルスレーザー成膜法による、高品質な磁気光学磁性薄膜や高温超伝導薄膜の合成。
- それらを使用した、高感度・高分解能な磁気顕微鏡の開発。
- 超伝導体の特異な磁束状態を含む磁気特性のこれまでにない、動的な観測。
- 実験結果を説明する、磁束量子シミュレーションの開発研究。

研究内容



素粒子物理学実験に使われる超伝導加速器空洞や量子コンピュータに用いられる超伝導量子ビットなどの超伝導共振器の性能向上のため、材料表面の高周波抵抗を低減することが求められている。高周波抵抗の要因の1つに磁束量子による損失があり、超伝導体中の磁束量子の挙動を研究することが重要である。また、金属超伝導線材や高温超伝導線材の性能向上のためにも超伝導体中の磁束状態を詳細に解析する必要がある。本研究では超伝導体中の磁束状態の動的・静的可視化、定量化を目的とした磁気光学顕微鏡の開発を行っている。高性能な磁気光学薄膜作製に適した独自のパルスレーザー成膜法(PLD成膜法)を用いて磁気光学センサを開発し、磁束量子の挙動を観察し、これまでに超伝導加速器空洞材料に特徴的な磁束量子クラスターの形成の動的な観察や、超伝導線材の高性能化に向けた高温超伝導薄膜のPLD成膜法による作製および磁束状態の可視化を行っている。また、これらの測定結果を説明するための有限要素法や磁束量子動力学法による計算機シミュレーションを行い、比較解析している。これらの知見をもとに超伝導共振器や超伝導線材の性能向上につなげるとともに、超伝導体中の磁束物性の解明を行う。

まとめ

- 薄膜合成プロセス、磁気物性計測、理論シミュレーションを連携することで、超伝導材料の磁束量子の動的挙動を研究した。
- 研究で得られた知見を超伝導材料の開発にフィードバックするとともに、磁性材料への適用も検討する。
- 磁気光学顕微鏡のさらなる高感度化、高分解能化を目指すとともに走査プローブ型磁気顕微鏡の開発も進める。

論文・特許

- A. Matsumoto, M. Tachiki and S. Ooi, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **33**, 5, 7500404 (2023).
- S. Ooi, M. Tachiki, T. Konomi, T. Kubo, A. Kikuchi, S. Arisawa, H. Ito and K. Umemori, *Phys. Rev. B* **104**, 064504 (2021).
- 特開2021130572 酸化物超伝導体の超伝導接続構造及びこれを用いた超伝導機器

量子多体物性の理論的研究

Keywords 超伝導, 磁性, 電子ネマチック液晶, 電子相関

主幹研究員／Principal Researcher

山瀬 博之 Yamase Hiroyuki

✉ YAMASE.Hiroyuki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamase_hiroyuki



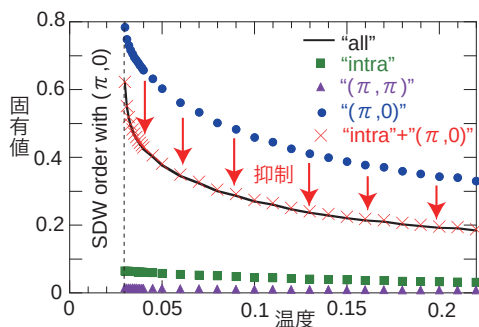
研究概要

物質中にはアボガドロ数程度の電子が含まれており、それらはクーロン力やスピン交換を介して相互作用をしています。その結果、電子系に集団励起が生じ得ます。物質が超伝導や磁性といった様々な特性を示すのは正にそのためです。したがって、これらの電子相関の理解が新たな物質概念の創出に不可欠です。特に、高温超伝導機構、超伝導と磁性の競合・協調、電子ネマチック液晶という新しい量子状態、臨界現象の理論研究を行っています。

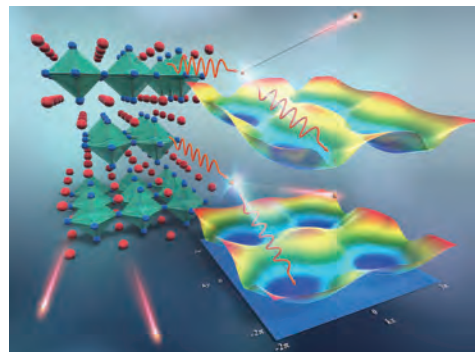
新規性・独創性

世の中の優れた技術や優れた材料の多くは、すでにある程度理解された物性に基づいたものです。しかし、学問的観点から見た時、物質に対する我々の理解は非常に僅かです。この極僅かな理解ですら、現代社会を支える技術と材料を生み出す巨大な力がある訳です。我々の物質に対する理解をさらに深め、新しい物質概念や新しい知識を作り出すことによって、不連続的な技術発展や社会発展を導くことへ貢献することを目指しています。

研究内容



高温超伝導機構の研究。銅酸化物や鉄系高温超伝導体に見られるように、高温超伝導は反強磁性相の近傍で出現することが多いです。そのため反強磁性揺らぎによって高温超伝導が引き起こされる可能性が注目されています。ところが、反強磁性揺らぎには超伝導不安定性を抑制しようとする効果が内在している、つまり高温超伝導を引き起こすには最適な機構ではないという驚くような理論的知見を得ました。上図は、波数 $(\pi, 0)$ をもつ反強磁性揺らぎによって超伝導不安定性の傾向が生じるものの(大きな固有値)、一見重要ではないと思われるイントラ散乱の成分によって、超伝導不安定性が抑制されている(固有値が小さくなる)ことを示しています。



コンプトン散乱で観測する電子状態。高エネルギーX線が物質内の電子によって散乱され、エネルギーを失う現象がコンプトン散乱で、量子力学的に記述される電子の波動関数の情報を運動量空間全体で得ることが出来ます。これによって、フェルミ面の形状の全体像も明らかにすることが出来ます。銅酸化物高温超伝導体は、上図に示すように層状の結晶構造であり、各 CuO_2 面内で二次元的な電子状態が実現していると信じられてきました。ところが、コンプトン散乱で直接その電子状態を観測してみると、電子ネマチック液晶状態になっており、フェルミ面が各 CuO_2 面で擬一次元的になり、その方向が面間で直交している可能性が明らかになりました。

まとめ

未来の技術や未来の材料を作り出すアイデアや知識を創造することを目指しており、企業での研究とは対極に位置していると思われます。しかし、両者はセレンディピティで繋がる可能性があるかと期待しています。また、必要は発明の母であり、両者の協調的関係を築くことで持続可能な社会発展に貢献できると考えています。

論文・特許

- H. Yamase, Y. Sakurai, M. Fujita, S. Wakimoto and K. Yamada, *Nat. Commun.* **12**, 2223 (2021).
- H. Yamase, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 111011 (2021).
- H. Yamase and T. Agatsuma, *Phys. Rev. B* **102**, 060504(R) (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

直接観察や微細化による超伝導磁束量子集団の物性研究

Keywords 単一磁束量子, Bi系高温超伝導体, 高純度ニオブ, 磁気光学イメージング, 磁束格子融解

主任研究員 / Senior Researcher

大井 修一 Ooi Shuuichi

✉ OOI.Shuuichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ooi_shuuichi



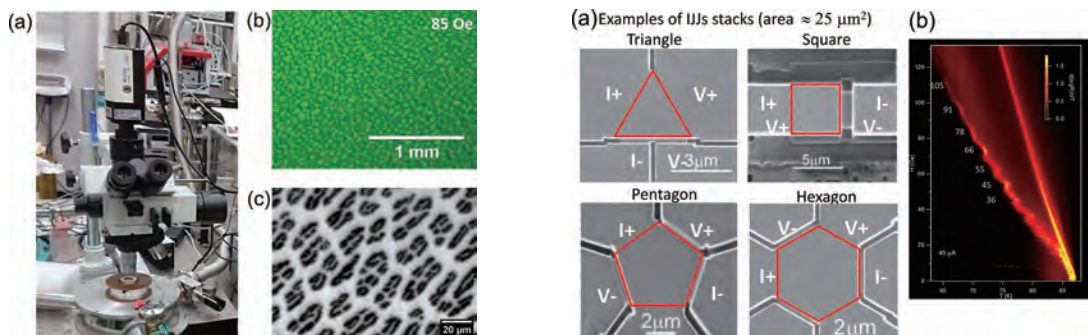
研究概要

超伝導体中の量子化された磁場(渦糸量子)の振る舞いを理解し制御することは、超伝導体の線材応用(ピン止めの最適化)や磁気センサー等のデバイス応用上重要である。また、高温超伝導体の持つ特異な超伝導状態(渦糸液体、d波超伝導、固有ジョセフソン接合構造など)におけるひも状物質の物理として興味深い。本研究では、単一磁束量子の分解能での観察・制御によりその物性に迫る。

新規性・独創性

磁束量子の集団としての振舞いは、磁束間相互作用・熱揺らぎ・超伝導体の異方性・ピン止め中心など様々な要因により影響を受ける。本研究では、単一磁束量子での観測・制御技術を向上させることや、人工的に制御したナノ構造の導入によるピン止め中心形成により、本質的な磁束量子物性を明らかにし、機能化を図る。

研究内容



1. 低温磁気光学イメージング顕微鏡を用いた磁束量子観測

超伝導加速空洞の性能向上に向けて超高純度ニオブ結晶中での磁束量子の振る舞いが注目されている。加速器で用いられるニオブの純度は残留抵抗比(RRR)で数百と非常に純良であるため、磁束量子間に引力相互作用が働くtype-II/1超伝導体であることが期待されるが、磁束量子が引きあう様子を直接観察した例はなかった。我々は、磁気光学イメージング顕微鏡を用いて(左図a)、type-II/1超伝導体で期待される中間混合状態の動的観察に成功した。磁束格子相とマイスナー相に相分離した磁束が形成される様子が観察される(左図b,c)。

2. メゾスコピック正多角形高温超伝導体中の磁束量子

磁場侵入長程度まで微細化された超伝導体では、磁束量子に対して顕著な閉じ込め効果が働くため、磁束量子制御に向けてその影響は無視できない。一方、高温超伝導体では、磁束量子集団が固体から液体へ融解相転移することが知られ、磁束量子マターの熱力学的性質は興味を惹いてきた。我々は、様々な微細Bi2212を準備し(右図a)、少数磁束量子系(磁束クラスター)の融解転移を観察した。幾何学的な整合性を反映し、融解転移温度は磁束量子数に応じて振動する(右図b)。磁束格子中に強制的に形成される刃状転位が、融解温度の抑制と関係していることを突き止めた。

まとめ

- 超伝導体中の磁束量子物性の理解と応用を目指して、単一磁束量子分解能をもつ磁気光学イメージング顕微鏡などの磁束量子観察・制御手法の向上を図る。
- 超伝導空洞材料中の磁束量子の振る舞いを理解することで、加速空洞の性能向上に貢献する。
- 高温超伝導体において、微細加工(数nm～数十nm)を追求することで、単一の超伝導渦糸量子の制御を中心として、高温超伝導体に内在する新奇な物性の発現を目指す。

論文・特許

- S. Ooi, M. Tachiki, T. Konomi, T. Kubo, A. Kikuchi, S. Arisawa, H. Ito and K. Umemori, *Phys. Rev. B* **104**, 064504 (2021).
- S. Ooi, M. Tachiki, T. Mochiku, K. Komori, K. Hirata and S. Arisawa, *Phys. Rev. B* **100**, 144509 (2019).
- S. Ooi, T. Mochiku, M. Tachiki and K. Hirata, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 087001 (2015).

分子性固体を舞台とした相対論的ディラック電子の研究

Keywords 分子性固体, 有機伝導体, ディラック電子, 電荷秩序, 超伝導, 圧力, 一軸ひずみ

主任研究員 / Senior Researcher

鴻池 貴子 Konoike Takako

✉ KONOIKE.Takako@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/konoike_takako



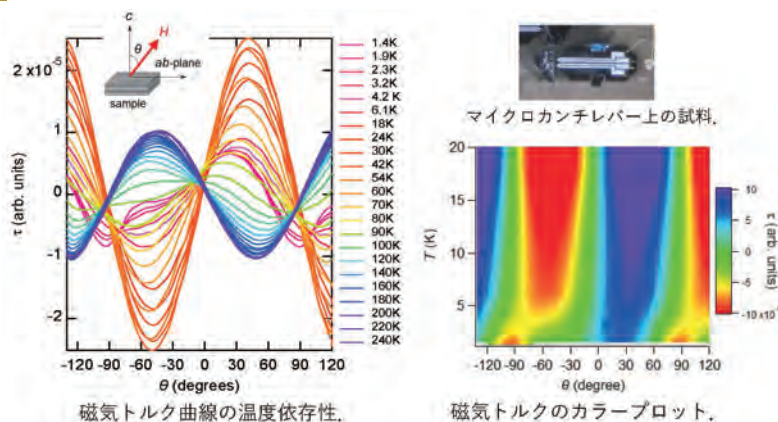
研究概要

2004年に発見されたグラフェン中の電子は質量のない相対論的なディラック電子としてふるまい、従来の金属とは全く異なる特異な性質を持つことからノーベル賞受賞に至った。しかしグラフェンは単一原子層の微細な結晶であるため、基礎物性の実験的検証には特殊技術が必要となる。一方、ほぼ同時期に分子性固体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ においてバルク結晶として初めてディラック電子系が形成されることが判明した。現在はトポロジカル絶縁体の表面状態やトポロジカル半金属など様々な物質群でディラック電子の形成が確認されているが、本研究ではディラック電子のみが物性を支配する単純なエネルギーバンドをもつ分子性固体に着目し研究を行っている。

新規性・独創性

- 分子性固体単結晶の圧力下比熱・熱起電力測定技術を開発し、ディラック電子特有の比熱・熱起電力のふるまいを初めて実証
- 強相関の有機ディラック電子系物質において、理論的に示唆される反強磁性転移を初めて観測
- ピエゾ駆動型一軸性ひずみ印加装置(低温下での連続的変化可能)を格子のやわらかい分子性固体に適用し、相転移近傍の物理を研究

研究内容



分子性固体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ では圧力下でのみディラック電子が形成されることから、圧力下における様々な物性測定技術を開発し、ディラック電子特有の比熱や熱起電力のふるまいを初めて観測する事に成功した。また、最近常圧下でディラック電子系が形成されることが判明した類縁物質 α -(BETS) $_2$ I $_3$ について、カンチレバーを用いた精密な磁気トルク測定を行い、複雑な温度変化が見られる事が分かった。これは低温においてディラック電子特有のバンド間磁場効果に起因する軌道反磁性と関連している可能性がある。また低温3.5 K以下において複雑なトルク曲線の形成が観測され、本物質における磁気秩序の存在を初めて明らかにした。この結果は、ディラック電子が強く相互作用した場合に磁気秩序化が形成されるという理論予測と一致する。近年は1軸性ひずみを試料に加え、等方的な圧力下では実現しない新奇物性の観測を目指した研究を行っている。有機分子で形成される分子性固体は格子が非常にやわらかいため1軸性ひずみにより大きな物性変化が期待できる。現在までに強い電子間相互作用による電荷秩序化を1軸性ひずみにより制御することに成功している。

まとめ

バルク結晶としてディラック電子系が実現し、特異なふるまいを引き起こすエネルギーバンドのみが物性を支配する分子性固体を対象とした研究を行うことで、ディラック電子の特異な振舞いを実証してきた。有機分子で形成され、やわらかい格子をもつ分子性固体は、基礎物性の解明のみならずエレクトロニクス分野への応用が期待され、今後のさらなる研究により革新的な材料開発への貢献を目指す。

論文・特許

- T. Konoike, T. Terashima, S. Uji, Y. Hattori and R. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **91**, 043703 (2022).
- 鴻池 貴子, 内田 和人, 長田 俊人, *高圧力の科学と技術* **30**, 274-280 (2020).
- T. Konoike, M. Sato, K. Uchida and T. Osada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 073601 (2013).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

量子物質における量子もつれ構造の解明

Keywords 遷移金属化合物, 高温超伝導, 量子スピン液体, 量子多体問題, 第一原理計算, 大規模数値計算

グループリーダー / Group Leader

山地 洋平 Yamaji Youhei

✉ YAMAJI.Youhei@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamaji_yohei



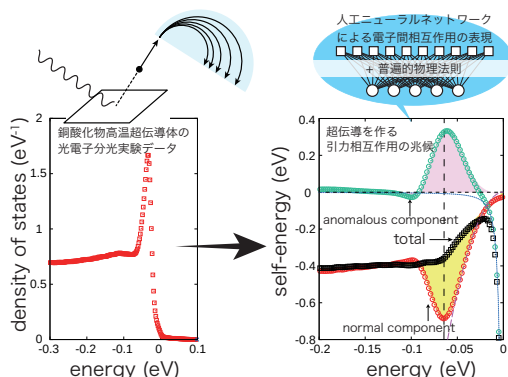
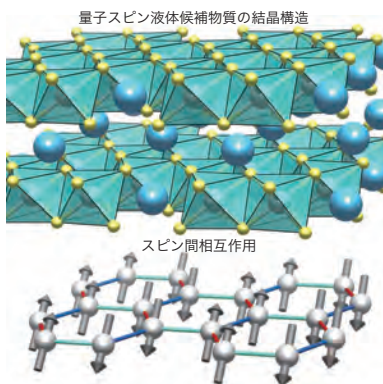
研究概要

量子論の勃興期から現在に至るまで、分子や固体中の多体電子に代表される量子多体系が示す、超伝導のような「古典力学からは予想できない量子力学的現象」は、多くの人々を魅了してきた。中でも、量子計算機の計算能力や量子暗号通信の安全性の源となる「量子もつれ」は、新たな時代の「資源」として注目を集めるだけでなく、光合成の高いエネルギー変換効率のような特異な機能を生み出す源として注目を集めてきた。このような背景のもと、我々は量子もつれが決定的な役割を果たす量子スピン液体物質や高温超伝導体の電子物性・磁性の機構解明および定量予測に、第一原理電子状態計算と高精度な量子多体シミュレーション手法を用いて挑んできた。

新規性・独創性

従来、物質科学・材料科学で用いられてきた第一原理電子状態計算の適用が難しく、量子もつれが顕著な物質群として知られる、高温超伝導体およびトポロジカル量子スピン液体の定量的な物性予測を、独自の理論・数値シミュレーション手法を開発することで可能にしてきた。さらに、分光学実験データと理論解析を機械学習によって統合する新たな解析手法を開拓することで、銅酸化物においてなぜ高温超伝導が発現するのか、その機構に迫ることが可能となった。

研究内容



固体結晶中の相互し合う多体電子系や量子ビットの集団は高温超伝導や量子誤り訂正符号に代表される量子現象の舞台となる。そこでは、一つの粒子がもつ量子力学的波として干渉できる性質、すなわち干渉性(コヒーレンス)が消失することがしばしば起こる。にもかかわらず、量子もつれが不可欠な巨視的スケールに及び量子現象が存在する。この謎に挑み、量子もつれを操る基礎科学建設に向かって、多くの研究者が様々なアプローチで研究を積み重ねてきた。

我々は、その第一歩として、スーパーコンピュータ「富岳」を始めとする大規模な古典計算機を用いて、第一原理電子状態計算と量子多体系のための高精度数値シミュレーションを行い、頑健な量子もつれを示す典型的な量子状態であるトポロジカルな「量子スピン液体」、および近年量子もつれの役割が新たな注目を集めている高温超伝導の理論解析を進めてきた。

量子スピン液体の候補物質として国際的に注目を集めながら低温では本質的な量子もつれを消失してしまうイリジウム酸化物やルテニウムハロゲン化合物について、これまで行ってきた定量的な物性予測を拡張し、数値シミュレーションとベイズ最適化を統合することで実験データから固体結晶(左図上)内の多数の電子スピンが従う「運動方程式」(左図下)を抽出する手法の開発に挑んでいる。また、なぜ高い温度で超伝導が生じるのかという銅酸化物最大の謎、その鍵を握る電子間の量子もつれ状態を明らかにするため、人工ニューラルネットワークを用いた実験データの解析手法を開発した(右図)。開発した手法を駆使し、銅酸化物高温超伝導体の発見以来、観測データだけでは見えていなかった隠れた物理量の抽出に成功し、この物理量が超伝導を引き起こすことを検証した。

まとめ

固体結晶中の量子もつれの構造を解明するため、コヒーレントな準粒子や素励起を構成要素としてボトムアップで構築されてきたこれまでの物性科学に、数値シミュレーションと実験科学を機械学習で統合する新機軸を持ち込む。これによって系全体に広がった量子纏れに基づく、新たな量子凝縮系の科学を展開し、量子情報科学の発展に寄与することを目指していく。

論文・特許

- Y. Yamaji, T. Yoshida, A. Fujimori and M. Imada, *Phys. Rev. Res.* **3**, 043099 (2021).
- M. Kawamura, K. Yoshimi, T. Misawa, Y. Yamaji, S. Todo and N. Kawashima, *Comput. Phys. Commun.* **217**, 180-192 (2017).
- Y. Yamaji, Y. Nomura, M. Kurita, R. Arita and M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107201 (2014).

相転移の効率的モンテカルロ解析：クラスター非平衡緩和法

Keywords 相転移, モンテカルロ法, クラスター更新法, 非平衡緩和法, スケーリング, 量子効果, 不純物効果

主幹研究員／Principal Researcher

野々村 禎彦 Nonomura Yoshihiko

✉ NONOMURA.Yoshihiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nonomura_yoshihiko



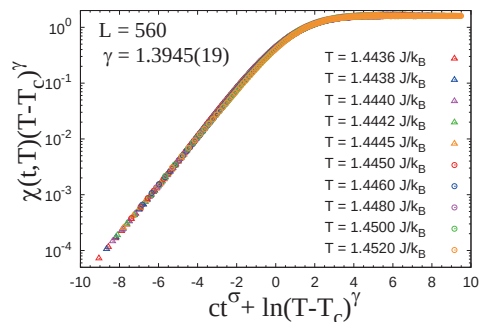
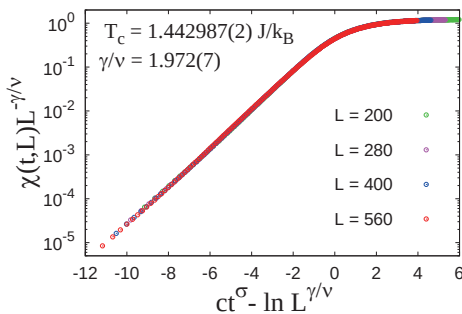
研究概要

磁性体の平衡状態を数値的に調べる手法としてモンテカルロ法は有力だが、相転移点の近傍では緩和が遅くなり、大きな系が扱いにくい。この困難を、大域的な状態更新で緩和を加速して解決したのがクラスター更新法、平衡化前の初期緩和の振舞から相転移の情報を取り出して解決したのが非平衡緩和法である。両者を融合すれば最強の手法が得られるはずだというナイーブな発想を形にしたのが我々の「クラスター非平衡緩和法」であり、この手法は量子効果の強い系や不純物を含む系にも拡張できる。この手法で不純物を含む系を扱うと、不純物サンプルに関する平均が平衡状態計算における長時間平均の役割も兼ねるため、平衡状態計算と比べて特に効率的である。

新規性・独創性

- 相転移のモンテカルロ計算で効率的とされてきたふたつの手法を融合した、「最強の手法」である
- 強力な分扱いは難しいが、スケーリング解析を工夫して平衡状態計算と同様に扱えるようになった
- 転移点直上のデータも転移点から離れたデータも扱え、両方合わせると相転移の全情報が得られる
- 量子効果の強い系も扱える（むしろ、量子系を非平衡緩和法で誤差なく扱えるのはこの枠組だけ）
- 不純物効果には特に効率的（平衡状態計算では二重の平均が必要だが、この手法では一重で済む）

研究内容



クラスター更新法の転移点における緩和の関数型を調べ、一般的な冪的緩和ではなく引き伸ばされた指数緩和になることを見出して非平衡緩和法と融合した。この関数型は扱いにくい、初期緩和と平衡状態をつなぐ非平衡-平衡スケーリングを提唱し、平衡状態計算の有限サイズスケーリングと同様の手続きで緩和データを扱うようにした。左図は等方的スピン系のモデルである3次元ハイゼンベルグモデルの帯磁率の転移点におけるスケーリング解析で、転移点と規格化された臨界指数が精度良く得られた。この手法を転移点から離れた緩和データに拡張したのが温度スケーリングである。同モデルの帯磁率をスケーリング解析したのが右図で、左図の転移点を用いて生の臨界指数が精度良く得られた。量子系の平衡状態のモンテカルロ計算は近似的に古典系に射影して行いが、クラスター更新法を用いると厳密な射影が可能になる。従って、非平衡緩和法で量子系を誤差なく扱うには本手法が不可欠である。平衡状態計算では平衡化後の長時間平均で計算精度を上げるが、本手法では乱数列平均で計算精度を上げる。平衡状態計算で不純物効果を扱う際はさらに不純物サンプル平均が必要だが、本手法では不純物平均が乱数列平均の役割を兼ね、二重の平均は不要で計算の手間は不純物を含まない系と同等になる。

まとめ

- 相転移のモンテカルロ計算で効率的とされてきたクラスター更新法と非平衡緩和法を融合した、「最強の手法」を開発した
- 非平衡緩和で量子系を誤差なく扱うには不可欠であり、不純物を含む系も含まない系と同等の手間で扱えるので非常に効率的
- 一般の手法だが適用限界はあり、その範囲にモデル化を落とし込む／その範囲で興味深い物質・材料を探すことが今後の課題

論文・特許

- Y. Nonomura and Y. Tomita, *Phys. Rev. E* **101**, 032105 (2020).
- Y. Nonomura and Y. Tomita, *Phys. Rev. E* **102**, 052118 (2020).
- Y. Nonomura, *J. Phys. Soc. Japan* **83**, 113001 (2014).

ベリー位相エンジニアリングに基づく量子機能探索

Keywords 量子磁性, トポロジカル物質相, 超伝導, 量子相転移, 場の量子論の物性への応用

主幹研究員 / Principal Researcher

田中 秋広 Tanaka Akihiro

✉ TANAKA.Akihiro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/tanaka_akihiro

研究概要

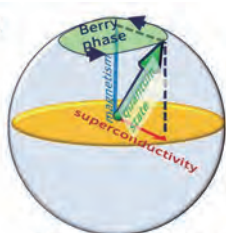
量子効果の源泉である「ベリー位相」と呼ばれる波動関数の幾何学的位相に長年注目し研究に取り組んでいる。近年この位相はトポロジカル絶縁体等のトポロジカル物質、グラフェンの特異な輸送現象においても中心的な役割を果たし注目を集めている。「ベリー位相エンジニアリング」に注力して独自性を発揮し、他の理論・実験研究者と共同で新規量子効果を発掘することを目指している。研究事例として磁性体の量子効果やトポロジカル物質相の特定、高温超伝導体の量子ビット応用に関する実験チームとの共同研究等がある。

新規性・独創性

磁性体の磁化ダイナミクスの理論では、磁化を古典的自由度として扱うことが多い。しかし量子スピン系として見た場合、スピンのベリー位相がここに反映されるはずである。このような隠れた量子効果を顕在化させることは量子マテリアル研究において重要なポイントとなり得る。実際にそのような新規の量子効果をいくつか見出すのに成功している。

研究内容

研究事例 1



複数の秩序（超伝導、磁性など）が競合する系のベリー位相効果を記述するモデルの構築

研究事例 2



量子状態としてのスピンソリトン
(⇒新規量子効果の発見)

ベリー位相はスピン磁化の運動の他、超伝導の位相のダイナミクスなどにも現れる。またグラフェンのバレー自由度に絡んだベリー位相効果も知られる。このような複数の自由度が競合するケースが多くあるが、その複合ベリー位相の追跡を可能とする手法を提案した。この手法は汎用性があり、低次元磁性体・トポロジカル超伝導体・グラフェン関連物質等、多くの量子マテリアルに対して利用されている。また共同研究者と共にカイラル磁性体のソリトンの量子論的極限で、磁化特性に新規量子効果が現れることを見出した。すなわちスピン量子数が整数か、半整数かに磁化特性が顕著に依存する。これもベリー位相効果として理解することができる。

まとめ

上述の手法を二層ねじれグラフェン、磁気スカーミオン、マルチフェロイック物質、超伝導体・磁性体接合系へ応用する。また、量子多体系の計算科学における重要課題である負符号問題への解決に資する。

論文・特許

- S. Kodama, A. Tanaka and Y. Kato, *Phys. Rev. B* **107**, 024403 (2023).
- S. Takayoshi, K. Totsuka and A. Tanaka, *Phys. Rev. B* **91**, 155136 (2015).
- 特許第5233039号 銅酸化物高温超伝導体固有ジョセフソン接合を用いた量子ビット

Realistic modelling of complex magnetic materials

Keywords Electronic structure, Magnetism, Multiferroics, Exchange interactions

主幹研究員／Principal Researcher

ソロビョフ イゴール Solovyev Igor

✉ SOLOVYEV.Igor@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/solovyev_igor



Research Summary

Deep microscopic understanding of electronic and magnetic properties by combining first-principles calculations with model theoretical analysis;

Microscopic mechanisms of coupling between electric polarization and magnetic structure in various multiferroic systems;

Unified microscopic theory of interatomic exchange interactions in complex magnetic materials

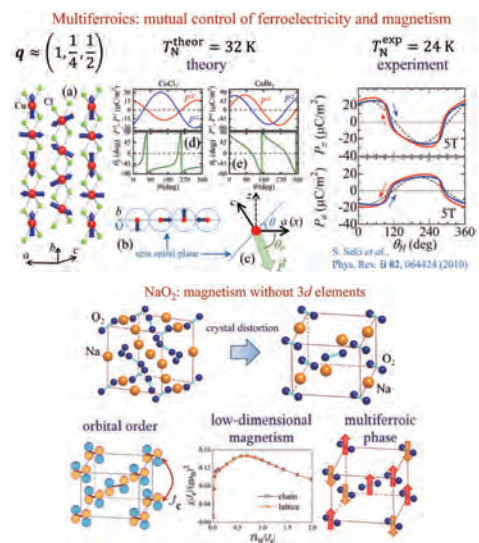
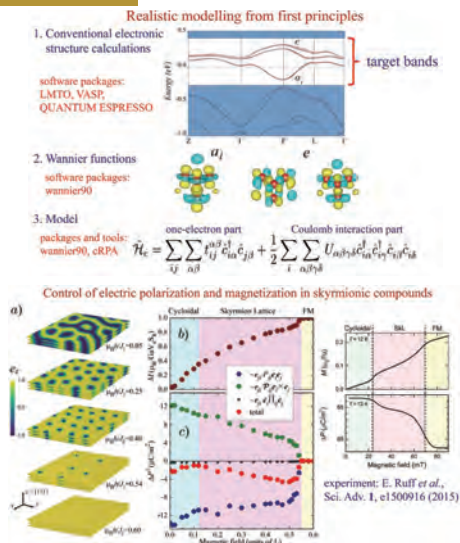
Novelty / Originality

Systematic approach for the analysis and interpretation of the electronic structure calculations on the basis of microscopic models;

Theory of interatomic exchange interactions for the wide class of magnetic materials;

Superexchange theory for magnetically driven electric polarization in multiferroic systems

Research Contents



Realistic model is derived from the first-principles calculations for the particular group of electronic states, which are primarily responsible for the considered phenomena and take into account all the advantage of these calculations by providing the material specific description, which is combined with the microscopic insight of the model analysis. The method was successfully applied for various types of materials and properties, including mutual control of the ferroelectricity and magnetism in multiferroic systems, the control of electric polarization and magnetism in compounds with complex skyrmionic structure, the design of magnetic systems without conventional 3d elements.

Summary

Besides deep fundamental understanding, the results can potentially used for developing novel electronic devices related to low-power nanoelectronics and data storage, as well as the synthesis of new type of magnetic materials without transition metal or rare earth elements. The developed computer packages can be applied for the wide class of magnetic materials.

References

- I. Solovyev, R. Ono and S. Nikolaev, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 187601 (2021).
- I. V. Solovyev, *Phys. Rev. B* **103**, 104428 (2021).
- S. A. Nikolaev and I. V. Solovyev, *Phys. Rev. B* **99**, 100401 (2019).

量子ナノ材料に対する大規模第一原理シミュレーション

Keywords 第一原理シミュレーション, 大規模計算手法, 密度汎関数法, 機械学習, ナノ複合体

グループリーダー / Group Leader

宮崎 剛 Miyazaki Tsuyoshi

✉ MIYAZAKI.Tsuyoshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/miyazaki_tsuyoshi

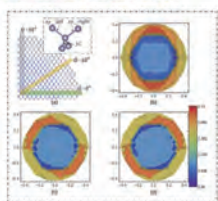
研究概要

第一原理電子状態計算は物質・材料の原子スケールの構造と物性を定量的に明らかにすることができる強力な研究手法であるが、計算量が膨大で原子を数多く含む複雑大規模系に対する研究を行うことが極めて難しいという問題があった。我々は大規模系を扱うことを可能とする独自の計算手法、プログラムを英国のグループと共同開発し、実材料やデバイスの特性に影響を与える複雑な欠陥構造、表面・界面、そしてナノ構造物質からなる複合体などに対する第一原理計算にもとづいた理論研究を行なっている。開発されたプログラムは様々な物質・材料に適用可能で、多くの研究者が用いることができるように無償公開されている。

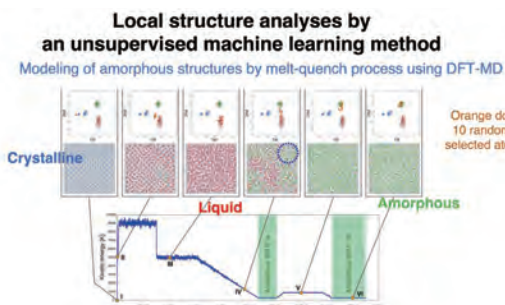
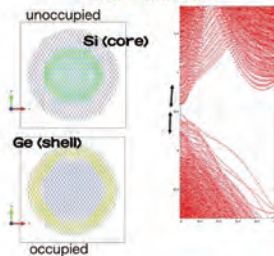
新規性・独創性

- 通常の第一原理計算が扱えない大規模系の計算が可能
- 従来手法よりも数十倍から1千倍程度の原子数を扱うことが可能
- 英国のグループ (MANAサテライト) と共同開発したプログラムの一般公開
- 機械学習力場と第一原理計算を同時に用いた複雑大規模系への理論研究
- 複雑な系における局所構造を解析するための独自の機械学習手法

研究内容

Si (core) Ge (shell)
Strain Distribution

Band Structure



我々は英国の研究グループと共同で大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの開発を行ってきた。このプログラムはオーダー N法や独自の局在軌道法を用いることによって、通常の第一原理計算手法では扱えないような巨大系に対しても第一原理計算に基づいた電子状態解析、構造最適化、分子動力学(MD)を行うことが可能となっている。CONQUESTを用いた研究例として、半導体コアシェル型ナノワイヤに対する大規模第一原理計算による理論解析が図に示されている。現実のナノワイヤのサイズを持つ構造モデル(原子配置)に対する構造最適化計算により、コア領域のシリコンとシェル領域のゲルマニウムの格子定数の違いから生じるナノワイヤ内の歪み分布、さらにフェルミ準位付近の電子状態(キャリア)の分布などを定量的に明らかにすることに成功している。プログラムCONQUESTは2020年1月に寛容型オープンソースライセンスであるMITライセンスにより公開された。これにより、国内外の研究者がこのプログラムを無償で用いることが可能となっている。

また、我々のグループではCONQUESTによる大規模第一原理MDを表面、欠陥、非晶質構造などに適用している。これら複雑系の分子シミュレーションにおいて現れる様々な構造を理解し、その結果現れる物性との相関を明らかにすることが重要な研究課題となっている。我々は分子シミュレーションで現れる様々な局所構造を教師無しの機械学習にもとづいて解析する新しい手法を提案し、その有効性を示すことに成功した。シリコンのアモルファス構造を作成するためのMelt-Quench過程に対する解析が右図に示されている。現在、様々な物質群にこの手法を適用し、その有効性を調べている。今後、この手法をさらに発展させ、すぐれた機能を持つ物質をデザインしていくことを目指している。

まとめ

我々が開発したプログラムCONQUESTにより、今までは不可能であった大規模複雑系に対しても第一原理計算による研究が可能となった。第一原理計算は様々な物質に適用可能で、我々は今までに半導体ナノ表面構造、コアシェル型ナノワイヤ、金属ナノ微粒子、強誘電体ドメイン構造、シリカガラス、水溶液中の巨大生体分子等に対して研究を行ってきた。今後、より広範囲の物質群、現象に適用していく予定である。

論文・特許

- R. Tamura, M. Matsuda, J. Lin, Y. Futamura, T. Sakurai and T. Miyazaki, *Phys. Rev. B* **105**, 075107 (2022).
- A. Nakata, J. S. Baker, S. Y. Mujahed, J. T. L. Poulton, S. Arapan, J. Lin, Z. Raza, S. Yadav, L. Truflandier, T. Miyazaki, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **152**, 164112 (2020).
- D. R. Bowler and T. Miyazaki, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 036503 (2012).

第一原理計算プログラムPHASE/0の開発とその応用

Keywords 第一原理計算, PHAS/O, 電子状態計算, 低次元系材料, 電池材料

主幹研究員 / Principal Researcher

奈良 純 Nara Jun

✉ NARA.Jun@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nara_jun



研究概要

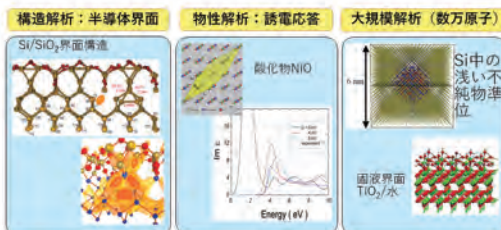
近年、材料研究において計算機によるシミュレーションが必須となってきている。特に、新規な物質・材料の開発や、それらの特性の裏にあるメカニズム探求に力を発揮すると期待されている。シミュレーション手法には、高精度、大規模、高速計算が可能であることや多様な解析機能が望まれている。我々が開発している第一原理電子状態計算プログラムPHASE/Oは密度汎関数法を用いておりそれらの要求を満たす。各種の解析機能を搭載し様々な実験手法との直接比較が出来るとともに、解析・描画に使える各種のツールや計算準備・結果表示を容易にするGUIも利用可能である。我々はこれらのプログラムを一般に公開するとともに、低次元系材料、電池材料などの研究に適用している。

新規性・独創性

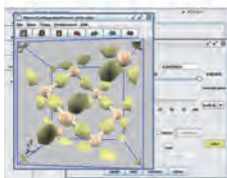
- 高速な計算を可能にすると共に、誘電率計算、EELS計算などの物性解析機能の多様化
- ウィンドウズPCから「富士」レベルのスパコンまで様々な計算機で同じように計算実行が可能
- GUIや付属ツールを充実させることによる計算実行、結果解析などの操作性の向上

研究内容

◆第一原理電子状態計算プログラムPHASE/O



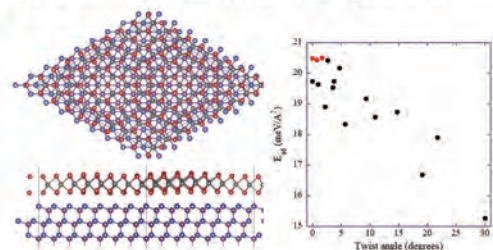
Graphical User Interface



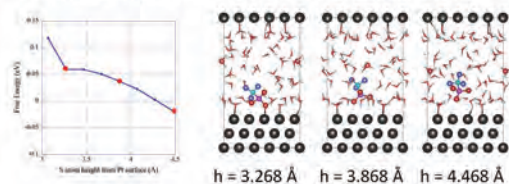
Portal: www.azuma.nims.go.jp



◆低次元系材料：GaAs(111)B上のMoTe₂の安定性



◆燃料電池材料：アイオノマ/水/白金触媒の界面



第一原理電子状態計算プログラムPHASE/O (左図)は密度汎関数法に基づいており、金属、半導体、絶縁体などの様々な系に対して高精度、高速な計算が可能となっている。また、ノートPCから富士レベルのスパコンまでのサイズの異なるマシンにおいて同じような操作性で計算を実施することが可能であり、必要に応じて利用するプラットフォームを変えることが出来る。我々はこのプログラムをGaAs上に成長したMoTe₂膜 (右上図)やホモ・ヘテロツイスト二層膜などの低次元系材料や、アイオノマ/水/白金触媒界面 (右下図)などの燃料電池材料などに適用している。

まとめ

- 電子デバイスや二次電池・燃料電池などの各種材料の開発
- 現象・物性のメカニズムの理解
- 古典計算や機械学習との併用による大規模系への適用

論文・特許

- A. Ohtake, X. Yang and J. Nara, *NPJ 2D Mater. Appl.* **6**, 35 (2022).
- N. Tajima, J. Nara, T. Ozawa, H. Nitta, K. Ohata and T. Ohno, *J. Electrochem. Soc.* **167**, 064513 (2020).
- T. Yamasaki, A. Kuroda, T. Kato, J. Nara, J. Koga, T. Uda, K. Minami and T. Ohno, *Comput. Phys. Commun.* **244**, 264-276 (2019).

大規模第一原理DFT計算の開発と応用

Keywords 密度汎関数(DFT)法, 電子状態計算, 金属ナノ粒子触媒

主幹研究員 / Principal Researcher

中田 彩子 Nakata Ayako

✉ NAKATA.Ayako@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakata_ayako



研究概要

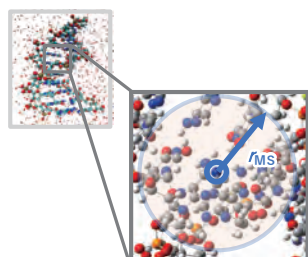
第一原理DFT計算を用いた構造・電子状態のシミュレーションは、有機・半導体・金属など様々な材料の性質の解析・予測に用いられ、新規材料の開発においても非常に有力なツールである。そのためには実在の環境に近いナノスケールでのシミュレーションが求められる。本研究では、当グループで開発している大規模DFT計算プログラムCONQUESTをもとに、新たな高効率・高精度な計算手法の開発・導入を行うことによって、DFT計算をナノサイズの材料に適用するための開発を行う。またその手法を用いて、ナノスケール実材料への応用を目指す。

新規性・独創性

- 高精度・高効率な大規模第一原理計算手法の開発
- 大規模DFT計算の解析手法の開発
- 複雑な構造をもつ材料(ナノスケール表面、界面、不規則系)への応用
- 金属ナノ粒子触媒などナノスケール実材料への応用

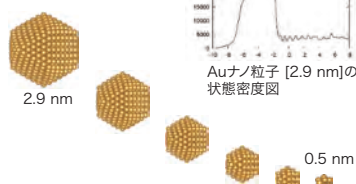
研究内容

大規模DFT計算の高効率・高精度化

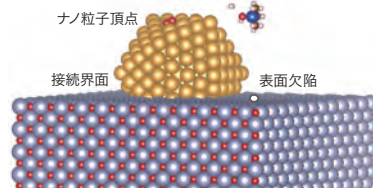


大規模DFT計算の高効率・高精度化

金属ナノ粒子触媒



複雑表面・界面



新たな基底関数の縮約手法(マルチサイト法)の導入により、第一原理計算の低コスト化・精度の向上に成功している。この方法を用いることで、金属、半導体、絶縁体を問わず幅広い材料に関する大規模第一原理計算が可能となっている。

この方法を用いて、例えば、実際に用いられている数nmサイズの金属ナノ粒子触媒に関して、構造や電子状態、反応性の詳細な解析に取り組んでいる。大規模計算では計算結果も煩雑となるため、統計解析や機械学習との組み合わせによって大規模系の中から特徴的な箇所を効率よく探索することで、ナノスケール材料の高精度、高効率な理論解析を目指している。

まとめ

- 大規模DFT計算の低コスト化・高精度化のための手法を開発
- 大規模DFT計算によって得られる大規模系の構造や電子状態を効率よく解析するための手法を提案
- ナノスケール材料における複雑表面・界面の構造・電子状態解析への応用

論文・特許

- A. Nakata, D. R. Bowler and T. Miyazaki, *J. Phys. Soc. Jpn* **91**, 091011 (2022).
- A. Nakata, J. S. Baker, S. Y. Mujahed, J. T. L. Poulton, S. Arapan, J. Lin, Z. Raza, S. Yadav, L. Truflandier, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **152**, 164112 (2020).
- A. Nakata, D. R. Bowler and T. Miyazaki, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 31427-31433 (2015).

半導体トポロジカルフォトリニクスの開拓

Keywords トポロジ、半導体フォトリニク結晶、蜂の巣構造、量子スピンホール効果

グループリーダー／ Group Leader

古月 暁 Hu Xiao

✉ HU.Xiao@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hu_xiao



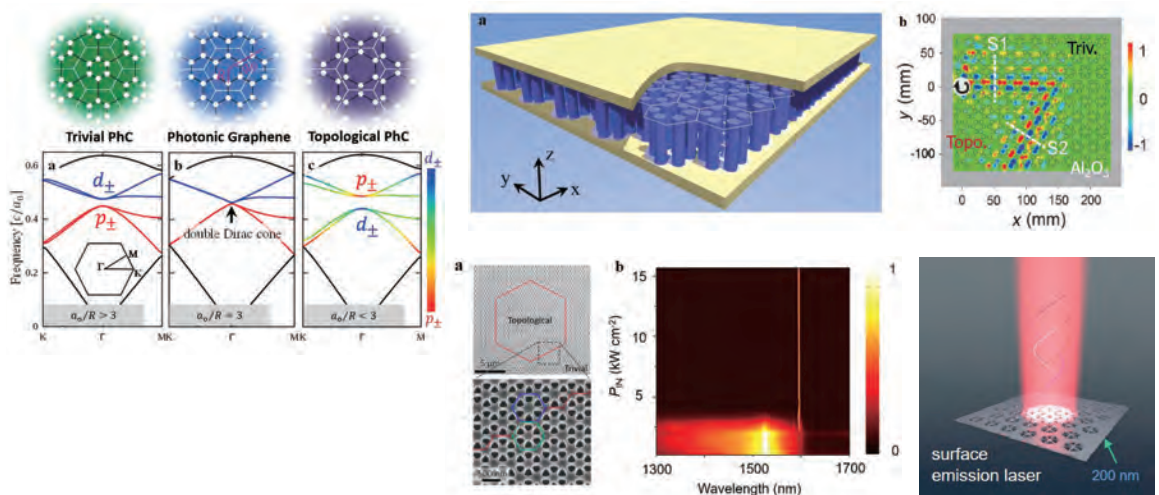
研究概要

近年、トポロジカル特性を有する電磁モードの伝播が欠陥等からの散乱を受けない強靱性を持つことが実証され、革新的フォトリニクス機能への応用が期待されている。従来トポロジカル電磁状態を作り出すために、磁場中でファラデー効果を示すジャイロ物質や、らせん構造をもつ導波路配列等が広く用いられてきた。しかし、それらは構造的にナノレベルの加工が難しく、動作周波数が低いため、高周波デバイスへの応用は困難であった。我々は世界に先駆けて、蜂の巣半導体フォトリニク結晶をベースにトポロジカルフォトリニクス状態創出のレシピを提案し、マイクロ波から可視光に至るまでトポロジカル電磁状態の実現と新規光機能の開発への道を拓いた。

新規性・独創性

- 光の量子スピンホール効果の世界に先駆けた理論
- シリコンやGaN等、普通の半導体のみを使用
- 従来のシリコンフォトリニクスとの融合性に優れる
- ナノ加工による円偏光・光渦等の自由度の創出
- トポロジカル共振器面発光レーザー（TCSEL）への応用

研究内容



蜂の巣半導体フォトリニク結晶に C_{6v} 対称な変形を加えることによって、ディラック周波数分散関係にバンドギャップが開き、双極子モードと四重極子モード間のバンド反転に伴って、トポロジカルフォトリニクス状態が創出される。その結果、今までの常識ではありえない、欠陥と鋭角経路からの散乱を受けない強靱なトポロジカル電磁伝搬が実現できる。また、該当理論によって示唆される光閉じ込めの新しいメカニズムに基づいて、新規トポロジカル共振器面発光レーザー（TCSEL）が開発された。各種特性の指標がIEEE規格を満たし、優れた指向性を持つ光渦レーザーの発振が可能になる。

まとめ

- 全光スイッチや非磁性アイソレータ等光集積回路のカギとなるデバイスの開発が今後の課題
- トポロジカルフォトリニク集積回路技術の構築が期待される
- 革新的光電融合技術の発展への寄与を目指したい

論文・特許

- Z. Shao, H. Chen, S. Wang, X. Mao, Z. Yang, S. Wang, X. Wang, X. Hu and R. Ma, *Nat. Nanotech.* **15**, 67-72 (2020).
- L. Wu and X. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 223901 (2015).
- 特許第6536938号 トポロジカルフォトリニク結晶

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

ナノ構造による電子状態制御の理論的研究

Keywords 物質設計, 電子物性, トポロジカル物質, トポロジカルメタ物質, 2次元物質, 第一原理計算

主任研究員 / Senior Researcher

刈宿 俊風 Kariyado Toshikaze

✉ KARIYADO.Toshikaze@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kariyado_toshikaze



研究概要

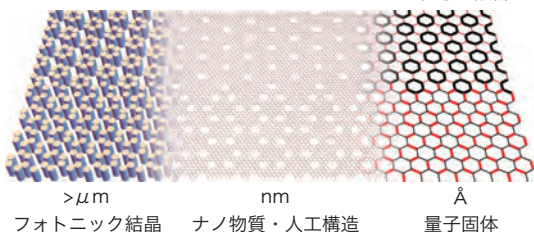
現在の物質・材料研究の課題として量子技術の発展や低消費電力デバイスの開発などが挙げられる。量子情報処理の舞台としては既存の半導体だけでなく新物質も含めた複合的な素子となる可能性もあり、その意味で物質探索や物質設計の果たす役割は大きい。またその中では電子と光(フォトン)・格子振動(フォノン)との相互作用も重要となる可能性が高く状態制御のユニバーサルな理論構築が必要になる。またパラダイムシフトのためには非散逸的な伝導も期待されるトポロジカル物質といった新概念を取り込んだ理論開発が望まれる。本研究では確固たる基礎理論に基づいた電子状態制御方法の提案や新物質の探索を推進している。

新規性・独創性

- デバイスの開発や性能向上の要素技術を基礎理論から開発
- 新物質の理論提案
- 新奇物性現象の理論開発とその応用の提案

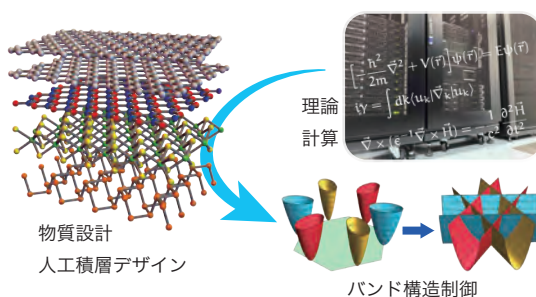
研究内容

マルチスケール・ユニバーサルなトポロジカル状態の設計



電子デバイスの肝は物質中の電子が真空中と異なる性質を持つことであり、特にバンド構造の制御が重要である。例えば近年注目されているトポロジカル物質ではバンド構造が相対論的なディラック方程式で記述される。バンド構造制御のひとつの手段としてナノ構造の付与がある。その舞台としては代表的な2次元物質であるグラフェンがあり、可能なナノ構造としては周期的に穴を開けたナノメッシュがある。興味深いことに穴の配列パターンの工夫でトポロジカル状態を実現できる。その背後にはディラック方程式に基づくユニバーサルな理論があり、電子系に限らず異なるスケールの多様な系にも適用可能で、トポロジカル状態を用いた光(フォトン)や格子振動(フォノン)の制御にもつながる。

バンド構造制御に関しては2次元物質の人工積層系(van der Waals積層系)も有用である。特に層間の非整合による長周期モアレパターンを持つ系(モアレ物質)が興味深い。モアレ物質では新奇量子相の実現等が期待され基礎学理・デバイス応用、両面の研究が進められている。モアレ物質の特徴は積層の組み合わせの豊富さであり、この豊富さ故、新物質・積層デザインの探索の指針となる理論・計算が求められる。その指針のひとつとして系の対称性と電子の典型的な結晶運動量の情報からモアレパターンが電子に与えるポテンシャルの概形を予測する一般理論が構築できる。実際のその理論は電子の伝導に大きく影響する次元性制御が可能な角度非整合二層系の理論提案にもつながった。



まとめ

量子技術開発や低消費電力デバイス実現の基礎となる電子状態制御の理論研究を行ってきた。これまでにグラフェンナノメッシュにおけるトポロジカル状態実現のためのデザインの理論提案や人工積層系の新物質探索の指針となる理論の整備を行った。今後は光(フォトン)や格子振動(フォノン)も含めた包括的な研究で量子情報処理の要素技術の開発につなげる。

論文・特許

- T. Kariyado, *Phys. Rev. B* **107**, 085127 (2023).
- T. Kariyado and A. Vishwanath, *Phys. Rev. Res.* **1**, 033076 (2019).
- T. Kariyado, Y.-C. Jiang, H. Yang and X. Hu, *Phys. Rev. B* **98**, 195416 (2018).

半導体ナノ構造材料の機能化とデバイス応用

Keywords 半導体, ナノ構造, 量子効果, トランジスタ, エネルギー変換素子

グループリーダー / Group Leader

深田 直樹 Fukata Naoki

✉ FUKATA.Naoki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/fukata_naoki



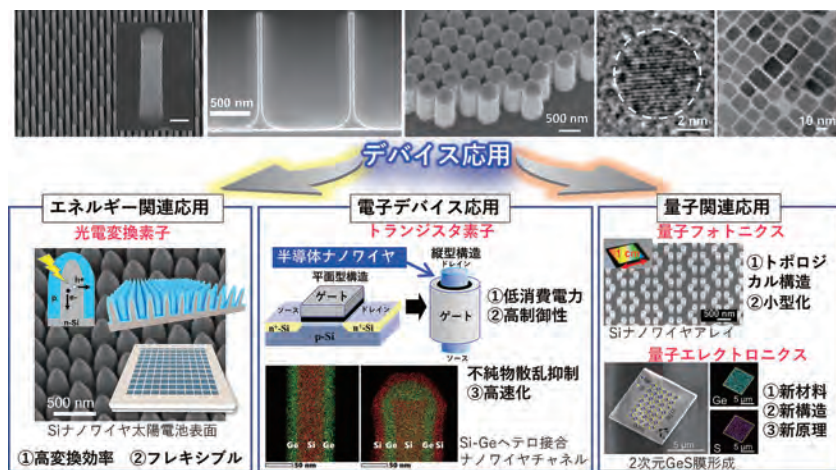
研究概要

半導体ナノ材料はバルクに無い新規な特性を発現することから、新たなデバイス応用が期待されている。そこで、ナノ構造化した半導体材料を高度に複合機能化することで、半導体材料に新しい特性・優れた機能を発現させることを目指す。研究の第一のターゲットとして、新構造・新材料による次世代高速・低消費電力トランジスタに関する研究を実施している。更に、このナノ構造の形成制御技術を利用して、新規な量子特性を発現する材料・素子の開発および光電変換素子応用等の環境・エネルギー分野まで幅広く取り組んでいる。

新規性・独創性

- ナノ加工：トップダウン/ボトムアップ手法の融合によるサイズ・次元・構造・配列制御技術
- 特殊構造：ナノ構造内部への立体ヘテロ接合形成技術
- 高感度測定：ナノ構造内部に導入された不純物の状態評価法
- 新構造デバイス：高速・低消費電力化を可能にする縦型デバイス

研究内容



トップダウン/ボトムアップ手法の融合によりサイズ・次元・構造・配列の制御されたナノ構造を形成し、バルク材料にない機能を引き出す。更に、個々のナノ構造内部へのヘテロ接合形成等による新構造創出を行い、次世代トランジスタや量子性を利用した新たなデバイス応用に関する研究を行っている。具体例を挙げると、半導体であるSiとGeのヘテロ接合をナノワイヤ内部の直径方向に形成したコアシェル型の特種ナノワイヤ構造の形成に成功している（図中央）。本構造により不純物のドーピング領域とキャリアの輸送領域を分離することができ、ナノ構造体を利用しても不純物散乱を抑制できるため、バルクSiデバイスの4倍以上の高移動度のp型トランジスタチャネルを実現できる。更に縦型構造を採用することで消費電力を大幅に低減することが期待できる。また、ヘテロ接合のバンド構造に応じて光電変換素子にも応用可能であり、内部のヘテロ接合をpn接合に変換したpn接合型の光電変換素子も作製できる（図右下）。更に図右下に示すようなハニカム構造を形成することで、トポロジカルフォトンクスへの応用も可能となる。

まとめ

サイズ・次元・構造・配列の制御された様々なナノ構造の形成手法を開発
高速・低消費電力化を可能にする次世代Si-Geヘテロナノ構造トランジスタチャネルを開発
ナノ構造を利用した種々のエネルギー変換素子の実現と量子関連デバイスへの応用展開

論文・特許

- X. Zhang, W. Jevasuwan, Y. Sugimoto and N. Fukata, *ACS Nano* **13**, 13403–13412 (2019).
- N. Fukata, T. Subramani, W. Jevasuwan, M. Dutta and Y. Bando, *Small* **13**, 1701713 (2017).
- 特許第06367652号 シリコン(Si)ナノ構造材料及びその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高次元・バイオ材料

マテリアル基盤

Exploring the functionality of nanowires and hybrid nanostructures

Keywords Silicon, Nanowire, Nanostructure, Interface

主任研究員／Senior Researcher

ジェバスワン ウィパコーン Jevasuwan Wipakorn

✉ JEVASUWAN.Wipakorn@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/jevasuwan_wipakorn



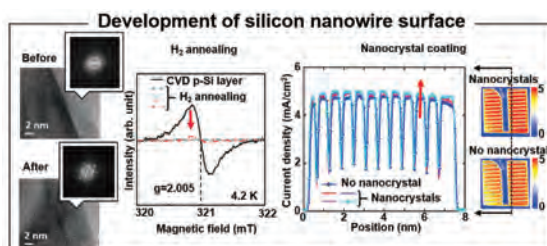
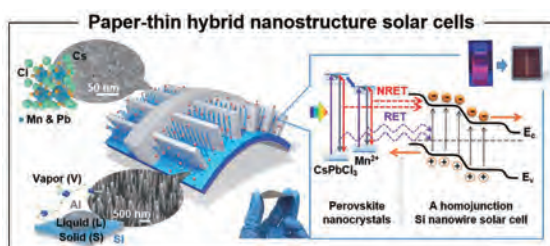
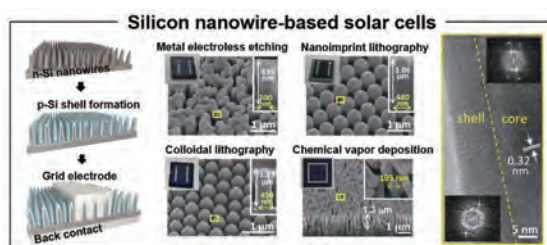
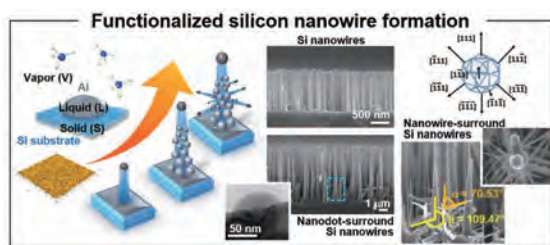
Research Summary

- Research on morphology and property controls of various nanowire (NW) and nanostructure formations.
- Realize new functionalized NW-based devices and hybrid nanostructure integrations in a wide array of advanced technological applications, ranging from photovoltaics to field-effect transistors, Li-ion batteries, sensors, and so on.
- Develop superior nanostructure interfaces using novel passivation techniques for the enhancement of device performances.

Novelty / Originality

- Development of various Si NW syntheses by top-down and bottom-up techniques of metal catalyst electroless etching, nanoimprint or colloidal lithography followed by Bosch etching, and chemical vapor deposition using metal catalysts.
- Fabrication of Si NW-based solar cells and the hybrid nanostructure integrating with perovskite nanocrystals.
- Improvement of Si NW surface by formation controls, thermal annealing, and applying of nanocrystals.

Research Contents



Vertical-oriented Si NW arrays with smooth, nanodot-, or NW-structured surfaces offer many desirable advantages for advanced device applications. They are of great interest for increasing light trapping as a black Si substrate to enhance solar cell performance. Energy transfers using nanocrystals (NCs) for hybrid nanostructures that combine absorbing components with Si NW-based solar cells also open new possibilities in light harvesting. In addition, applying H₂ annealing or NC coating efficiently helps to minimize the interfacial defects on the top surfaces of Si NW solar cells.

Summary

- NWs and hybrid nanostructures offer opportunities for leveraging their distinct properties and synergistically integrating them to generate novel functionalities.
- Through in-depth exploration and comprehension of the intricacies surrounding these structures, a wide range of exciting applications is expected to emerge across various fields, paving the path for innovative advancements in technology and scientific discovery.

References

- W. Jevasuwan, M. Abdelbar, B. M. Y. J.-Espaldon, M. Abdelhameed, H. Sodabanlu, Q. Zhang, *et al.*, *ACS Appl. Energy Mater.* **6**, 7169–7179 (2023).
- W. Jevasuwan and N. Fukata, *Nanoscale* **13**, 6798–6808 (2021).
- W. Jevasuwan, K. C. Pradel, T. Subramani, J. Chen, T. Takei, K. Nakajima, Y. Sugimoto and N. Fukata, *Jpn. J. Appl. Phys.* **56**, 04CP01 (2017).

高速CWLAを用いたGe系発光材料の薄膜成長

Keywords ゲルマニウム, シリコンフォトニクス, 光電融合技術

主任研究員／Senior Researcher

松村 亮 Matsumura Ryo

✉ MATSUMURA.Ryo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsumura_ryo



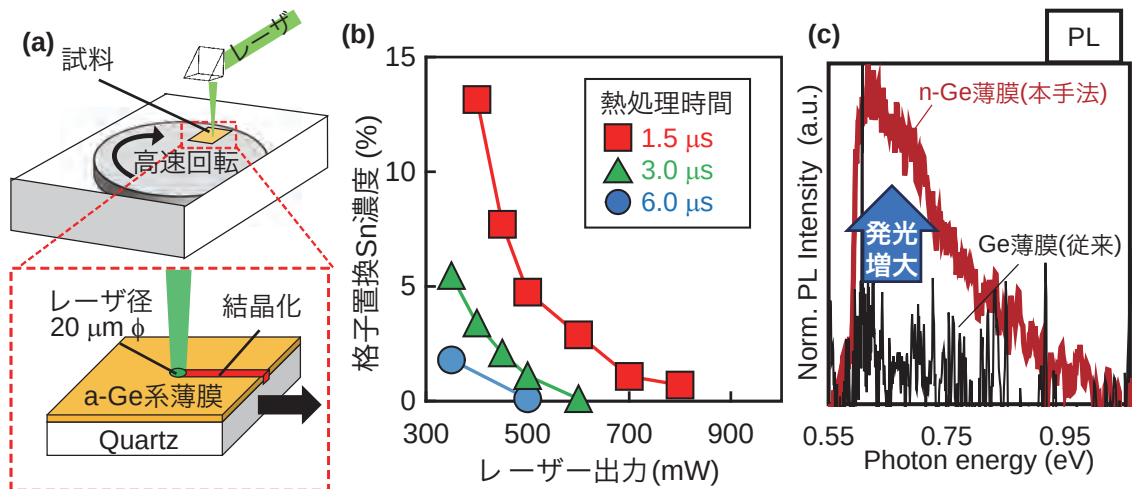
研究概要

Si-LSIのスケールング限界を打破するため、これはLSI内の通信を、従来の電気信号から光に代替する、光電融合LSIが注目されている。中でもSiを光導波路とするSiフォトニクス技術は、Si-LSI技術との親和性も高く、有望視されている。一方、発受光源の候補材料は化合物が多く、Si-LSIへの混載はコンタミ等の観点から課題となっている。この課題解決の鍵として、我々はSiとの親和性が高いゲルマニウム系材料に着目している。その結晶成長のため、高速CWレーザーアニール法を開発し、光学応用へ向けた絶縁膜基板上でのゲルマニウム系薄膜の成長を実現したため紹介する。

新規性・独創性

- 熱的非平衡状態での結晶成長による固溶度を打破したゲルマニウム系混晶の実現
- 非晶質絶縁膜基板上での結晶成長が可能＝基板を選ばない技術
- Siと同じIV族系材料であることによる、Si-LSI技術との親和性
- 絶縁膜基板上におけるGe系発光増大の実証

研究内容



Ge系発光材料を実現するアプローチとして、Ge中にSn(>8%)を加えてGeSn混晶とすることでバンド構造が直接遷移化することが知られている。一方、Geに伸張歪みを加えた上n型ドーピングを行うことで擬似直接遷移化するアプローチも注目されている。しかしこれらの共通の問題点として、Geに添加する元素(Sn, Sb)の固溶度が非常に低いことが挙げられる。この問題を解決するため、私は高速CWレーザーアニール法を開発した[図(a)]。これによりマイクロ秒単位で制御された高速な結晶成長を実現することができ、熱平衡固溶度を打破した高濃度GeSn薄膜[図(b)]や、高伸張歪を有する高濃度n-Ge薄膜を実現することができ、良好な発光特性も得ることができた[図(c)]。これらは、光電融合LSIの基盤技術として非常に有用であると期待できる成果である。

まとめ

- 非熱平衡プロセスにより、熱平衡固溶度を大きく打破するGe系混晶を実現
- フォトルミネッセンス測定からも、良好な光学特性を有していることが判明
- 絶縁膜上の技術であることから、基板を選ばず多岐に渡る応用が期待

論文・特許

- R. H. Saputro, T. Maeda, R. Matsumura and N. Fukata, *Mater. Sci. Semicond. Process* **162**, 107516 (2023).
- R. Matsumura, S. Ishii and N. Fukata, *Mater. Sci. Semicond. Process* **134**, 106024 (2021).
- R. Matsumura and N. Fukata, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **9**, 063002 (2020).

スペクトル制御された熱線利用材料の開拓とその応用

Keywords 赤外線, 熱吸収, 熱放射, セラミック, ポラリトン, スペクトル制御

グループリーダー / Group Leader

長尾 忠昭 Nagao Tadaaki

✉ NAGAO.Tadaaki@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagao_tadaaki



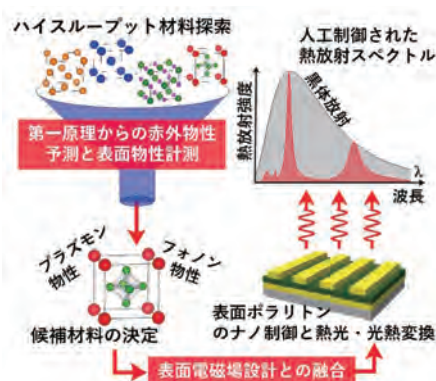
研究概要

近年、ナノ構造を用いて材料表面の熱放射や熱吸収のスペクトル(波長分布)を制御する研究が大きく進展している。熱線の吸収や放射の強度やスペクトルは、材料の表面の構造と共に、材料内部の性質にも大きく左右される。そこで、多くの材料から光学的性質の適した材料を選びだし、その上で構造を設計し、性能を最大化することが求められている。当グループでは、材料の赤外物性探索とナノ微細構造による電磁場制御の2つの方法論を融合することで、特定波長に対して高い効率で熱放射や吸収を生じる熱光・光熱変換構造や、高い効率で太陽熱を利用する技術を実現した。

新規性・独創性

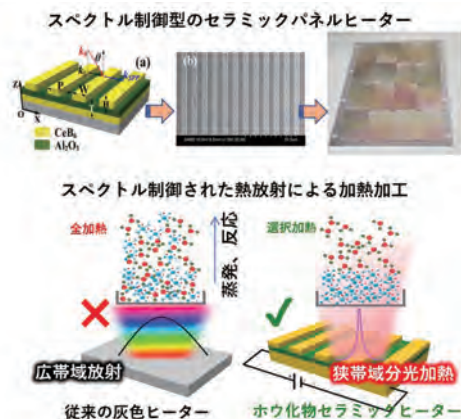
- 第一原理計算とナノスケール電磁場計算の複合化による材料探索法を開発した
- 赤外帯域で光学的な特性の良好な高耐熱な薄膜セラミック材料を開発した
- 赤外帯域で光学的な特性の良好な高耐熱な薄膜超合金材料を開発した
- 1200℃で動作する熱放射エミッターを開発した
- 3.2 μm の放射波長で26 nmの半値幅をもつ狭帯域な熱吸収素子を開発した

研究内容



開発した材料は省エネな赤外線パネルヒーターや加熱炉、小型安価で省エネな赤外線受動センサーや小型分光器、などへの応用が可能。例えば、化学合成や半導体分野の材料加熱プロセスにおける分子や化学結合の選択的な励起や蒸発、反応促進、低温省エネ、安全な加熱加工への出口がある(右図)。光学フィルターを用いて熱線を多量にカットする従来方式に比べて、初めから無駄な熱線の放射がないため、炉の構造が簡素化され、産業加熱炉の低価格化と省エネに貢献できる。新しい加工法や新製品開拓の可能性が広がる。

量子力学的赤外物性の予測技術とMaxwell電磁気学的なナノスケール赤外線制御技術とを融合し、太陽熱の吸収や熱線の放射・吸収現象の制御と、高効率なエネルギー利用のためのセラミックス微細構造を開発した(左図)。その応用として、特定波長の熱線しか放射しない1200℃動作のセラミックヒーター、太陽熱完全吸収材料および完全反射材料、中赤外で動作し波長分解能50 nmの赤外線センサー、近赤外で動作し波長分解8nmのセンサーを実証した。



まとめ

所望の光熱変換や光電変換機能を発現させ実用に供するためには、電磁気学的な境界条件のエンジニアリングと物質合成や結晶学的な知見を踏まえた材料物理学的アプローチの両立が不可欠である。我々は赤外物性探索と表面電磁場設計とを相互に連携させた材料科学研究により、これをスペクトル制御型赤外線ヒーター、太陽熱発電、多波長赤外線センサーや温調技術に応用し、熱線研究における新機軸を生み出してゆく。

論文・特許

- P. T. Tran, T. D. Ngo, H. D. Ngo, Ø. S. Handegård and T. Nagao, *Opt. Express* **30**, 38630 (2022).
- R.P. Sugavaneshwar, Ø. S. Handegård, A. T. Doan, T. D. Ngo, T. P. Tran, H. D. Ngo, T. D. Dao, S. Ishii, S. Otani and T. Nagao, *Adv. Opt. Mater.* **10**, 2101787 (2022).
- 特開2020148821 六ホウ化ランタン膜及びその製造方法

ネットワーク物質の創製と新規物性の探索

Keywords ネットワーク物質, 層状物質, ホウ素, 炭素, 理論計算

主幹研究員 / Principal Researcher

速水 渉 Hayami Wataru

✉ HAYAMI.Wataru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayami_wataru



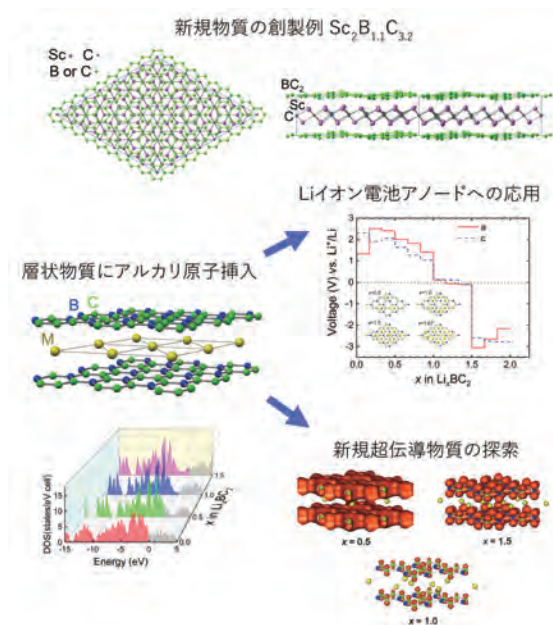
研究概要

軽元素であるホウ素、炭素は共有結合性を持つため、その化合物は1次元から3次元のネットワーク構造を取りうる。近年は特に層状物質の開発と応用が注目されており、ホウ素、炭素原子を骨格とした多種多様な新規物質の創製を目指している。本研究では主に理論計算を中心として新規物質の合成の可能性や有用な物性の探索を行っている。これまでに、金属炭化物の層状物質MXeneとホウ素炭素からなるグラフェンの複合化合物の構造を明らかにしたり、ホウ素炭素グラフェンのリチウムイオン電池への応用などを提案してきた。今後理論計算を元に実際の物質合成への展開を目指している。

新規性・独創性

- ホウ素と炭素の組み合わせによる新規構造
- 金属原子挿入による電子状態制御
- 格子間原子による熱物性制御
- ネットワーク構造間の吸蔵作用
- 高い振動数を利用した超伝導物質

研究内容



ホウ素と炭素のネットワーク構造を有する新規物質創製の例として、 $\text{Sc}_2\text{B}_{1.1}\text{C}_{3.2}$ が挙げられる(図上段)。この物質はBCグラフェンとMXeneの複合物質であり熱力学的に安定である。このような複合物質を人工的に作成する試みはあるが、熱力学的に安定な物質はまれでありホウ素と炭素の組み合わせにより可能になったと考えられる。従来はグラフェン層とMXene層の重なり方及びグラフェン層内のBCの配列の仕方が不明であったが、第一原理計算により詳細な構造が明らかになっている。

層状グラファイト的な BC_2 にアルカリ金属を挿入した物質を理論的に提案した(図左中段)。挿入量によりフェルミ準位が変化することがわかる(図右下段)。リチウム原子を挿入した場合、インターカレーションポテンシャルは図右中段のようになり、 $\text{Li}_{1.5}\text{BC}_2$ までリチウム原子が挿入されることが理論計算により判明した。これは炭素だけからグラファイトよりも多く、リチウムイオン電池のアノードとしての可能性が示された。

上記の物質は超伝導になりうることが理論的に示された。挿入量によりフェルミ準位の位置を調整することができ(図右下段)、それによりフェルミ面状の電子の広がりが増える(図右下)。フェルミ面がホール状になるとき($\text{M}_{0.5}\text{BC}_2$)に超伝導転移温度が約50K ~ 57Kと高くなることが第一原理計算により明らかになった。これはホール軌道が原子間に高い密度を持つため原子振動との結合が強いのである。今後はこの理論計算に基づき物質を実際に合成すること、さらに新しい物質の探索を目標としている。

まとめ

ホウ素、炭素を中心としたネットワーク物質は多様な構造を取り、特に2次元層状物質はリチウムイオン電池の電極、超伝導、キャパシタ、触媒などへの応用が期待される。新規物質探索には計算的手法が有効である。実用化のための今後の問題点として、理論上有望である物質の安定した合成経路の確立が求められる。

論文・特許

- W. Hayami and T. Tanaka, *AIP Adv.* **10**, 065213 (2020).
- W. Hayami and T. Tanaka, *J. Solid State Chem.* **269**, 113-117 (2019).
- W. Hayami, *J. Solid State Chem.* **254**, 144-149 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高バネ・バイオ材料

マテリアル基盤

2次元薄膜半導体の開発

Keywords 2次元半導体, 電気伝導, トランジスタ, スパッタ, 原子層堆積 (ALD), 素子作製, 電気伝導, 電流注入

グループリーダー / Group Leader

塚越 一仁 Tsukagoshi Kazuhito

✉ TSUKAGOSHI.Kazuhito@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsukagoshi_kazuhito



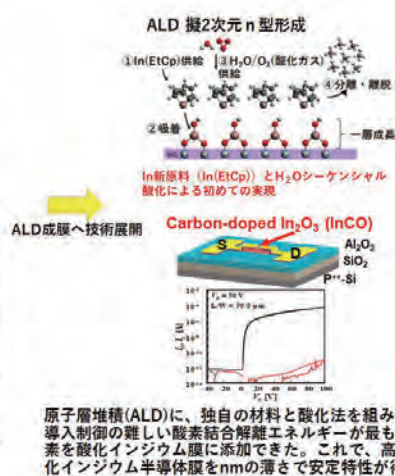
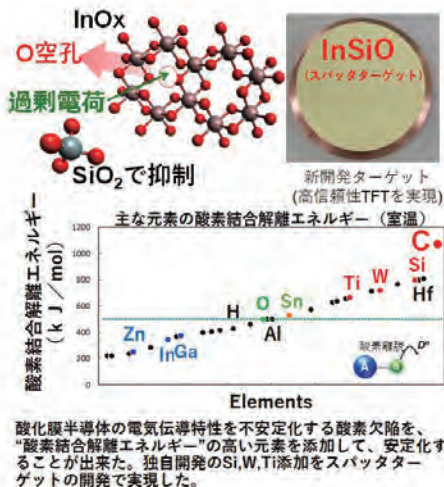
研究概要

薄膜トランジスタの研究として、応用用途に応じた原料開拓や成膜法開発、ならびに電気伝導特性の評価を行っている。成膜は、スパッタ、塗布、原子層堆積 (ALD) で、n型とp型の超薄膜半導体を開発している。現在の課題は、加熱温度上限に合わせた製法探索や電極金属選定などである。特に、プロセス温度低減要求に応えるために、ALDで原子層毎の積層による半導体膜の形成や元素ドーピングでの特性制御を試みている。

新規性・独創性

- 従来材料では400–600℃行程が不可欠であったが、独自原料や独自酸化法の適応によって、200℃以下で無機系薄膜トランジスタを作れるようになった。
- 超薄膜化とドーピングで、伝導特性を制御。
- 1–5nm厚の半導体薄膜 (n型、p型) を用いたトランジスタ構造を形成。
- 伝導機能の解析、端子電流注入機構の解析。
- 伝導特性の解析結果を基として、成膜行程へフィードバック。

研究内容



酸化膜トランジスタの電気伝導特性の不安定性 (= 低信頼性) 要因が、酸素欠損の不安定性にあることを特定し、酸素結合解離エネルギーが高い元素を添加することで制御できることを見出した。一般には、薄膜の作り易さや移動度などを重視して材料選定が行われるが、信頼性の低さが問題となる。我々は、元素移動度が高い酸化インジウム膜を基材として、添加元素と添加量の調整をスパッタ成膜で行って、素子信頼性を大きく改善させた。低温プロセスが可能となるALD成膜で、酸素結合解離エネルギーが高い炭素を調整して残留させることが出来るようになり、5nm厚程度の超薄膜でも信頼性の高いトランジスタが出来たようになった。なお、独自のALDプリカーサを使用し、成膜構成にも独自の工夫をしている。電流注入機構解析に基づく電極金属の選定によって、素子抵抗の低減も信頼性向上に有用である。

まとめ

酸化膜半導体の材料や素子の開発だけでなく、グラフェンやカルコゲナイド系半導体でもトランジスタ構造を造り電気特性評価を行ってきた。多型膜破片やナノ細線等でも素子を作製した。現時点では、酸化膜厚をさらに薄くした1-5 nm厚超薄膜での特性制御を試み、原子スケール制御の超薄膜 n 型 p 型を模索している。

論文・特許

- R. Kobayashi, T. Nabatame, T. Onaya, A. Ohi, N. Ikeda, T. Nagata, K. Tsukagoshi and A. Ogura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **60**, 3030903 (2021).
- S. Aikawa, T. Nabatame and K. Tsukagoshi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **58**, 090506 (2019).
- 特許第06583812号 多層構成の薄膜トランジスタの製造方法

窒化物分極場による光電デバイスの開発

Keywords GaN, 分極場, ヘテロ界面, 光電, 熱管理

主幹研究員 / Principal Researcher

サン リウエン Sang Liwen

✉ SANG.Liwen@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/sang_liwen



研究概要

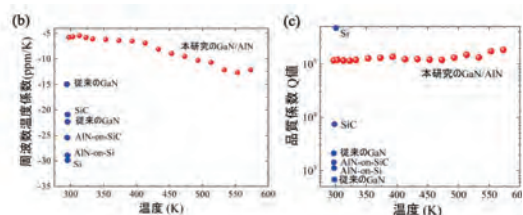
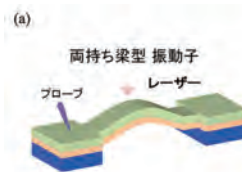
GaN、AlNおよびInNなどの窒化物半導体を用いた光・電子デバイスは、エネルギー利用の高度化・効率化を支える重要な技術である。窒化物半導体は誘電体としての特徴も強く示すと考えられ、実際に強い圧電性や自発分極を示すことが知られている。本研究は、窒化物ヘテロ界面の圧電分極と歪みを積極的に活用し、ナノスケールのフォノン・キャリアガスの輸送やバンドエンジニアリングを制御し、革新的な光・電・MEMSデバイスを開発する。

新規性・独創性

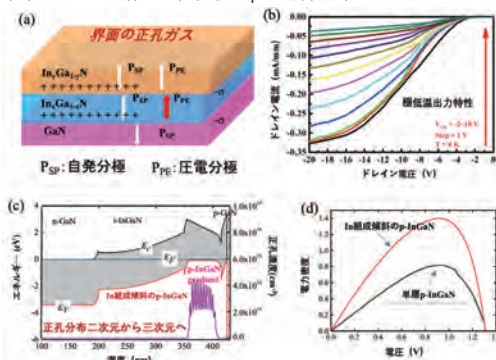
- 窒化物ヘテロ界面圧電分極場と歪みを積極的に活用
- 多層構造設計により分極場を制御
- 圧電分極によりナノスケールの物性制御により新しい分極場工学分野を開拓

研究内容

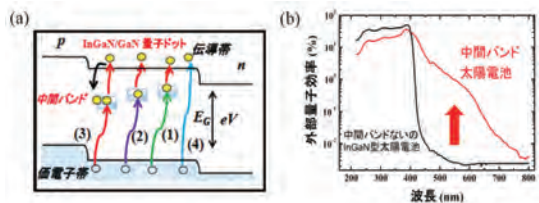
- 窒化物ヘテロ界面歪みを利用して、熱安定性が従来のデバイスより優れたGa系MEMS微小振動子を開発



- 極低温8Kで動作する低抵抗のp型電界効果トランジスタ



- 多層InGa量子井戸内の歪み制御により中間バンドの形成を初めて提案し、低In組成InGaNだけで近赤外から紫外領域までの光電変換可能な太陽電池を開発



- 窒化物ヘテロ界面歪みを利用して熱安定性が従来のデバイスより優れたGa系MEMS微小振動子を開発
- 極低温8Kで動作する低抵抗のp型電界効果トランジスタ
- 多層InGa量子井戸内の歪み制御により中間バンドの形成を初めて提案し、低In組成InGaNだけで近赤外から紫外領域までの光電変換可能な太陽電池を開発

まとめ

分極場によりナノスケールの物性を制御するというコンセプトは、窒化物デバイスの性能を向上させる革新的な提案である。本研究の成果により、エネルギー高効率利用および次世代通信領域への応用が期待されている。

論文・特許

- L. Sang, M. Sumiya, M. Liao, Y. Koide, X. Yang and B. Shen, *Appl. Phys. Lett.* **119**, 202103 (2021).
- L. Sang, H. Sun, X. Yang, T. Li, B. Shen and M. Liao, *Technical Digest - International Electron Devices Meeting*, 26.4.1-26.4.4 (2020).
- L. Sang, M. Liao, Q. Liang, M. Takeguchi, B. Dierre, B. Shen, T. Sekiguchi, Y. Koide and M. Sumiya, *Adv. Mater.* **26**, 1414-1420 (2014).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

酸素欠損型アモルファスアルミナの研究開発

Keywords アモルファスアルミナ, 酸化物半導体, ReRAM

主任研究員 / Senior Researcher

加藤 誠一 Kato Seiichi

✉ KATO.Seiichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kato_seiichi



研究概要

適度な濃度の酸素空孔をもつアモルファスアルミナ(AlOx)は電子の注入・抽出によりスイッチング現象を起こすことから、酸化物抵抗変化型メモリ (ReRAM) 材料としての応用が期待されている。そこで AlOx 薄膜を作製し動作原理の解明と実用的な素子の開発を目指す。また、スイッチングの原理として AlOx 中の酸素空孔に電子が出入りすることにより金属絶縁体転移を起こすことがスイッチングの起源であるというモデルを提唱しているが、その実験的な検証を行う。

新規性・独創性

- 金属絶縁体転移であるためオン・オフ抵抗比が非常に高い(10^6)。
- アルミと酸素だけから作製できるので希少元素、有害元素が含まれない。
- 理論上はオン・オフ動作に化学変化を伴わないため劣化がしにくいことが期待される。
- 応答速度が高速である。

研究内容

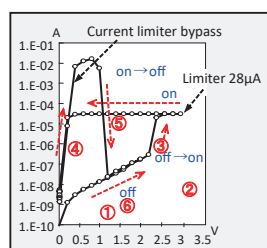
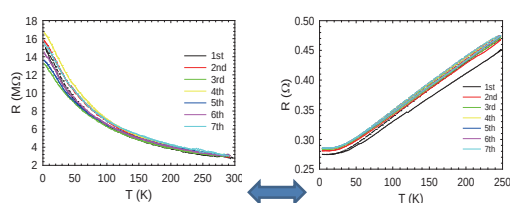


図1 AlOx -ReRAMのI-V曲線



ホッピング伝導

金属伝導

図2 オフ状態、オン状態での電気抵抗の温度変化

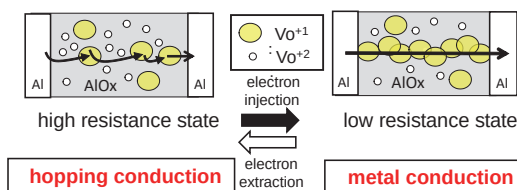


図3 酸素空孔モデル

AlOx を陽極酸化法及びスパッタ法にて作製した。スパッタ法はターゲットに金属アルミとアルミナを使用した2元同時スパッタ法を用い、各ターゲットの出力を調整することにより陽極酸化法によるものと同等の酸化膜を作ることができた。電気特性を測定したところReRAM動作が確認され(図1)、抵抗の温度変化測定により金属絶縁体転移が起きていることがわかった(図2)。第一原理計算による理論的解析及び実験データの解析から、 AlOx 中の酸素空孔に電子が出入りすることにより金属絶縁体転移を起こすというモデル(酸素空孔モデル)を提唱してきた(図3)。このモデルでは酸素空孔に電子が出入りすることにより原子間距離が変化し、電子がオーバーラップしたりしなかったりすることによりスイッチングが起こることが動作原理であり化学変化は伴わない。スイッチングに化学変化が伴うReRAMは2次生成物が発生するため書き換え回数に限界があると言われていたが、 AlOx はそれがいないため書き換え回数が非常に多い素子が実現できる可能性がある。放射光測定によりこの理論を補強する結果が得られたが、さらに実験による検証を行い書き換え回数が非常に多い素子の開発を目指す。

まとめ

AlOx 薄膜を作製しReRAM動作が確認された。酸素空孔モデルを提唱し、それを裏付ける実験結果も得られた。今後も更なる検証が必要である。モデルが正しければ原理的に繰り返し書き換え回数に限界がなく非常に繰り返し書き換え回数の多い不揮発性メモリが期待される。

論文・特許

- M. Kubota, S. Nigo, S. Kato and K. Amemiya, *AIP Adv.* **9**, 095050 (2019).
- S. Nigo, M. Kubota, Y. Harada, T. Hirayama, S. Kato and H. K. G. Kido, *J. Appl. Phys.* **112**, 033711 (2012).
- S. Kato, S. Nigo, Y. Uno, T. Onisi and G. Kido, *J. Phys. Conf. Ser.* **38**, 148-151 (2006).

Wafer-scale 2D semiconductors for flexible inkjet-printed electronics

Keywords Two-Dimensional Semiconductors, Chemical Vapor Deposition, Integration, Transistors

主任研究員 / Senior Researcher

李世勝 Li Shisheng

✉ LI.Shisheng@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/li_shisheng



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

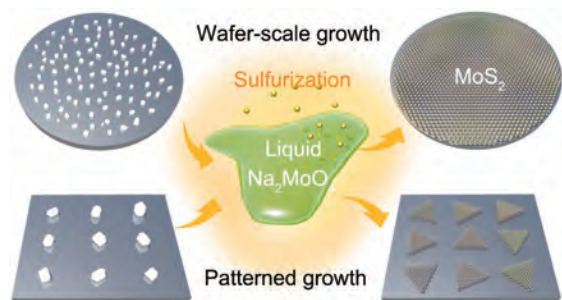
Research Summary

The advancement of smart society heavily depends on the use of flexible and wearable electronic devices. Among various semiconductor materials, two-dimensional (2D) semiconductors such as transition metal dichalcogenides (TMDs) (MX_2 , $M=Mo, W$; $X=S, Se, Te$) offer great promise. These TMDs possess atomic thinness, mechanical flexibility, durability, excellent electrical and optical properties, as well as chemical stability, making them superior to rigid 3D semiconductors. Consequently, it is crucial to develop innovative techniques for growing 2D TMD films and integrating them into flexible devices. To address this need, we have successfully developed a straightforward and replicable chemical vapor deposition (CVD) method for synthesizing 2D TMDs with large dimensions and exceptional electrical and optical qualities.

Novelty / Originality

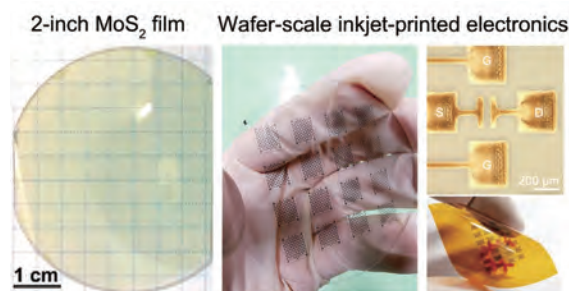
- Wafer-scale and patterned 2D TMDs are grown using an innovative CVD technique that utilizes molten salts as precursors.
- Effective n-type and p-type doping of 2D TMDs is accomplished by employing mixed molten-salt precursors.
- High-efficiency and cost-effective integration of 2D TMD-based thin-film transistors (TFTs) with inkjet printing technique.

Research Contents



Schematic illustration of the deposition of molten salt, Na_2MoO_4 , for CVD growth of wafer-scale and patterned MoS_2 film. In general, 2D TMDs (MX_2 , $M=Mo, W$; $X=S, Se, Te$) can be grown with molten salts, e.g., Na_2MoO_4 , Na_2WO_4 , $NaReO_4$ and $NaVO_3$.

The photographs showcase a 2-inch wafer-scale MoS_2 film, inkjet-printed TFTs on sapphire substrates, and flexible MoS_2 -based TFTs on a polyimide film. Further endeavors will be dedicated to the exploration of 2D TMD-based electronic devices, aimed at sensing and detecting various physical and chemical signals. These efforts will play a crucial role in advancing the development of 2D TMD-based flexible and wearable devices.



Summary

Molten-salt CVD technique is employed to synthesize wafer-scale and patterned 2D TMDs. These remarkable materials exhibit excellent mobility and display a high current on/off ratio when utilized as channel components in TFTs. In the future, considerable focus will be directed towards integrating 2D TMDs into flexible and wearable sensors and detectors using the inkjet printing technique.

References

- S. Li, J. Hong, B. Gao, Y.-C. Lin, H. E. Lim, X. Lu, J. Wu, S. Liu, Y. Tateyama, Y. Sakuma, K. Tsukagoshi, K. Suenaga, *et al.*, *Adv. Sci.*, 2004438 (2021).
- S. Li, Y.-C. Lin, J. Hong, B. Gao, H. E. Lim, X. Yang, S. Liu, Y. Tateyama, K. Tsukagoshi, Y. Sakuma, K. Suenaga, *et al.*, *Chem. Mater.* **33**, 7301-7308 (2021).
- S. Li, Y.-C. Lin, X.-Y. Liu, Z. Hu, J. Wu, H. Nakajima, S. Liu, T. Okazaki, W. Chen, T. Minari, Y. Sakuma, *et al.*, *Nanoscale*, **11**, 16122-16129 (2019).

原子層堆積法による新ナノ薄膜・半導体デバイス

Keywords 原子層堆積法, ナノラミネート, HfO₂系強誘電体膜, InO₃系酸化物半導体膜, HfO₂系アモルファス絶縁膜, ZrO₂低温結晶成長, SiO₂選択成長

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

生田目 俊秀 Nabatame Toshihide

✉ NABATAME.Toshihide@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nabatame_toshihide



研究概要

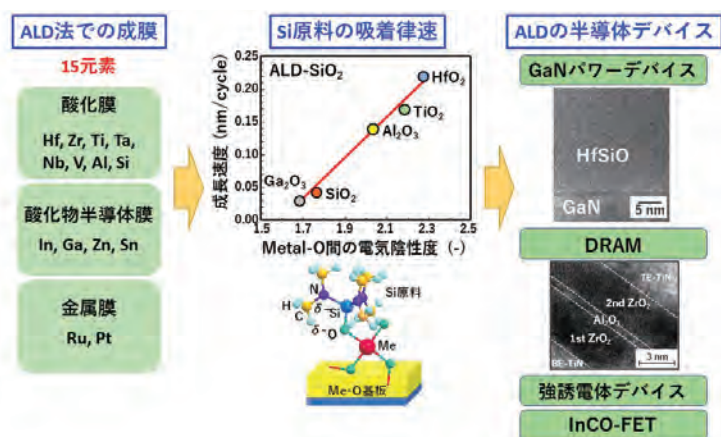
半導体デバイスは、3次元構造で、絶縁膜及び電極共にナノメートルの膜厚で作製されています。原子層堆積法(ALD)は、飽和表面吸着反応の特徴を有しており、3次元構造のホール内壁にも均質な膜を形成できます。半導体デバイスとして、DRAM、強誘電体デバイス、GaNパワーデバイス及び酸化物半導体トランジスタがあり、各々で、期待されている材料、膜厚及び構造が異なります。このニーズに答えるように、幅広い材料探索、ALD原料の選択、ALD成膜条件を、作製したデバイスの電気特性をフィードバックさせて、研究を進めています。

新規性・独創性

ALDメカニズムの新提案及びユニークなアイデアによるALD作製技術で、下記を達成しました。

- ALDによるSiO₂膜成長が、下地基板の酸素の電気陰性度で決まるメカニズムを初めて見出した。
- 新規Hf/Zrカクテル原料を用いる事で、HfZrO₂系強誘電体薄膜の300℃低温形成に成功した。
- 高誘電率でアモルファスなHfSiO₂及びHfAlO₂絶縁膜を、GaNパワーデバイスの絶縁膜として提案した。

研究内容



酸化膜として8元素、酸化物半導体膜として4元素及び金属膜として2元素のALD成膜を実施した20年以上に亘るデータの蓄積を基に、半導体デバイスの要求に対応しています。その中で、Si原料を用いたALD成膜で、ALD成長でSi原料の正電荷のSi原子が下地基板の負電荷の酸素に吸着しますが、この吸着が下地基板のMetal-Oの電気陰性度の差で決定されることを初めて見出しました。これは、下地材料を変えることでSiO₂膜の選択成長ができる事を示しています。この様にALDメカニズムを理解して、GaNパワーデバイスではアモルファスなHfSiO₂膜、DRAMではZrO₂/Al₂O₃/ZrO₂スタック構造膜を形成しています。

まとめ

ALD法は、既に、半導体デバイスの量産プロセスにも使われており、研究レベルで得られたALDデータが、そのまま技術移管がスムーズに進むメリットがあります。

論文・特許

- T. Nabatame, E. Maeda, M. Inoue, M. Hirose, Y. Irokawa, A. Ohi, N. Ikeda, T. Onaya, K. Shiozaki, R. Ochi, *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol.* **39**, 062405 (2021).
- T. Nabatame, E. Maeda, M. Inoue, K. Yuge, M. Hirose, K. Shiozaki, N. Ikeda, T. Ohishi and A. Ohi, *Appl. Phys. Express* **12**, 011009 (2019).

量子情報素子材料開発

Keywords 半導体, 超伝導, 磁性体, 量子ビット, 薄膜, 接合, 構造解析, 微細加工, 低温計測, マイクロ波

グループリーダー / Group Leader

小塚 裕介 Kozuka Yusuke

✉ KOZUKA.Yusuke@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kozuka_yusuke



研究概要

量子計算機は情報セキュリティや材料開発、創薬、金融などさまざまな分野での応用が期待されるが、その開発にはデバイス作製、冷却技術、高周波量子計測まで他分野に渡る高度な技術が必要である。これまでは、既存の材料を用いて量子計測に焦点を当てた研究が進められてきた。しかし、抜本的に性能や歩留まりを改善するには、量子システム構築の土台である材料から見直すことが有効である。NIMSでは、量子ビット及びその制御・検出に関わる材料の開発を進めている。多岐に渡る材料作製手法や異種材料界面作製手法、微細構造作製プロセス、材料解析・分析手法を駆使し、量子ハードウェアの性能向上と多様性の深化へ向けて、新たな材料系を提案し実証する。

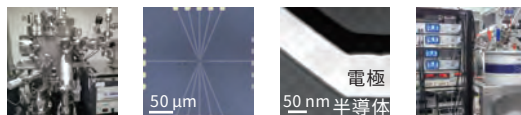
新規性・独創性

- 電子コヒーレンスの高い新規半導体材料作製手法の開発
- 量子ビットを構築する新規材料の微細加工プロセス技術の開発
- 量子ビットの効率的な制御や信頼性の向上を目指した超伝導体や磁性体の開拓
- 半導体と超伝導体の界面を用いたエラー耐性のある新たな原理の量子ビット系構築
- 量子制御・検出のための低温で動作する素子のための新たな材料の開発

研究内容

量子情報素子材料開発

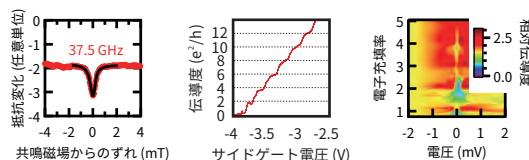
薄膜界面形成 素子加工 微細構造評価 低温評価



NIMSの作製・加工・評価技術は
様々な材料へ適用

酸化物材料 (ZnO, SrTiO₃, ...)
超伝導材料 (Nb, NbTiN, MoGe, ...)
磁性材料 (FeCo, Py, ...)

電子スピン共鳴 → 量子ビット制御 量子化伝導 → 電荷検出 超伝導/半導体接合 → 誤り耐性量子系



量子計算機は従来の計算機の性能をはるかに凌駕し、複雑な状況の計算を可能とするが、現状ではノイズへの耐性が十分ではなく、その改善を目指して多くの研究がおこなわれている。しかし、量子情報の制御や検出に関わるハードウェアのリソースが現在の量子計算機の1万倍程度必要とされ、今の技術の延長では開発の道筋が明らかとなっていない。

NIMSでは、量子計算機ハードウェアの個別の問題を解決するため、使用されている材料を抜本的に見直し、より制御性や歩留まりのよい材料・接合の作製および微細加工プロセスの開発を行っている。これまで量子計算機に用いられてきた材料は、超伝導体ではアルミやニオブ、半導体ではシリコンなど従来から応用されてきた標準的な物質であったが、酸化物や窒化物、合金材料など物質の範疇を限定せず、量子計算機への応用可能性を模索する。

1例として、高品質酸化物を半導体として用いた量子ビットの実証を進めつつあり、セラミックスに特徴的な動作安定性や金属との電気的接触の取りやすさなど、従来の半導体に対する優位性が明らかとなってきている。

また、量子ビットだけでなく、量子制御や検出に用いられるマイクロ波送信・受信ラインには超伝導体や磁性体を用いた部品が数多く存在するため、市販品では対応できない形状や特性の素子の開発も目指している。

まとめ

量子計算機の性能向上のため、ハードウェアに使われる材料を抜本的に見直し、材料の作製から微細加工、特性評価を行っている。材料の物理的、化学的特性を見極めることで、従来の材料より優れた性能が観測されはじめています。量子計算機の材料開発は性能向上につながるだけでなく、量子技術の多様性を生み出し、新しい科学と応用の幅を一層広げる礎になると期待される。

論文・特許

- H. Hou, Y. Kozuka, Jun-Wei Liao, L. W. Smith, D. Kos, J. P. Griffiths, J. Falson, A. Tsukazaki, M. Kawasaki and C. J. B. Ford, *Phys. Rev. B* **99**, 121302 (2019).
- Y. Kozuka, A. Sakaguchi, J. Falson, A. Tsukazaki and M. Kawasaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 124712 (2018).
- Y. Kozuka, S. Teraoka, J. Falson, A. Oiwa, A. Tsukazaki, S. Tarucha and M. Kawasaki, *Phys. Rev. B* **87**, 205411 (2013).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

二次元物質ヘテロ構造の物性探索とデバイス機能開拓

Keywords 二次元物質, グラフェン, モアレ超格子, 量子輸送, バレートロニクス

独立研究者 / Independent Scientist

岩崎 拓哉 Iwasaki Takuya

✉ IWASAKI.Takuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/iwasaki_takuya



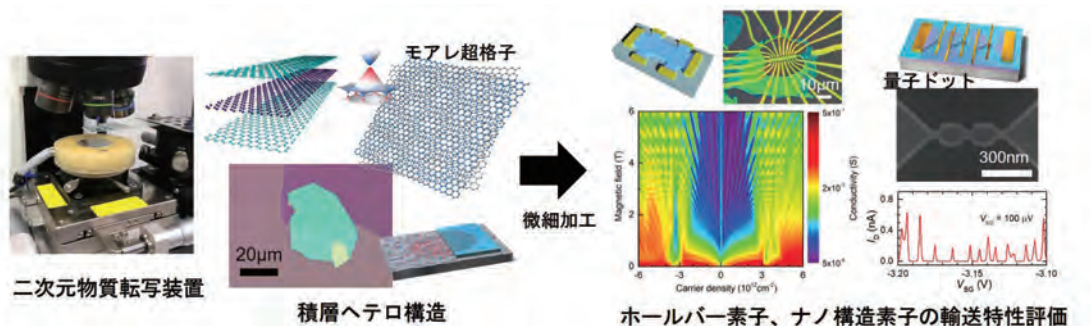
研究概要

グラフェンの発見を機に、様々な物性を持つ二次元層状物質が世界中で盛んに研究されている。二次元物質を積層したヘテロ構造では、材料の組み合わせや積層角度等、従来の材料では成しえなかった自由度を制御することにより、元の材料には見られない新奇物性を引き出すことが可能である。ここでは、二次元物質ヘテロ構造と微細加工によるナノ構造を組み合わせた全く新しい構造の素子を作製・分析し、新奇物性の探索および新原理デバイス機能の開拓を行う。

新規性・独創性

- 独自の転写法により、高品質二次元物質ヘテロ構造を任意の基板に作製
- 積層角度を精密に制御し、高品質モアレ超格子を作製
- 微細加工技術により、ナノ構造を組み合わせた素子を作製

研究内容



二次元物質界面に気泡がほとんど形成されない独自の転写技術を開発し、世界最高水準品質の界面を持つ二次元物質ヘテロ構造を作製することを可能とした。この転写法により、世界最高水準品質の二層グラフェン素子を実現した。この転写法は様々な物質、基板に対して有効であり、三次元物質や既存の半導体デバイスと二次元物質を組み合わせた新奇デバイス開発への応用展開が期待できる。

二次元物質素子作製のための微細加工プロセスを確立し、デュアルゲート型ホールバー、量子ポイントコンタクト、量子ドット等の様々なナノ構造素子を実現し、低温電子輸送特性を計測した。二層グラフェン/六方晶窒化ホウ素モアレ超格子素子におけるバンドギャップ制御実証、バレーホール効果観測、単一電子輸送観測等に成功した。この系は、他の材料では困難なバレー自由度を用いた革新的な新原理動作デバイス開発につながることが期待でき、将来のエレクトロニクスの基盤技術になり得る。

まとめ

- 独自の転写法を開発し、高品質二次元物質ヘテロ構造、モアレ超格子素子を実現
- 二層グラフェン/六方晶窒化ホウ素モアレ超格子における量子ホール効果やバレーホール効果等の新奇輸送特性を観測
- 新奇物性やその制御法を探索し、低消費電力バレートロニクスデバイスやスピン・バレー量子ビット等、新原理動作デバイスの実証を目指す

論文・特許

- 岩崎 拓哉, 小松 克伊, 守田 佳史, 森山 悟士, *固体物理* **56**, 131-143 (2021).
- T. Iwasaki, S. Nakaharai, Y. Wakayama, K. Watanabe, T. Taniguchi, Y. Morita and S. Moriyama, *Nano Lett.* **20**, 2551-2557 (2020).
- T. Iwasaki, K. Endo, E. Watanabe, D. Tsuya, Y. Morita, S. Nakaharai, Y. Noguchi, Y. Wakayama, *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 8533-8538 (2020).

イオニクスとエレクトロニクスによるIT, AI素子の創製

Keywords IT・AI用機能材料, イオニックナノアーキテクトゥクス, 原子スイッチ, ニューロモルフィック素子回路

グループリーダー／Group Leader

寺部 一弥 Terabe Kazuya

✉ TERABE.Kazuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/terabe_kazuya



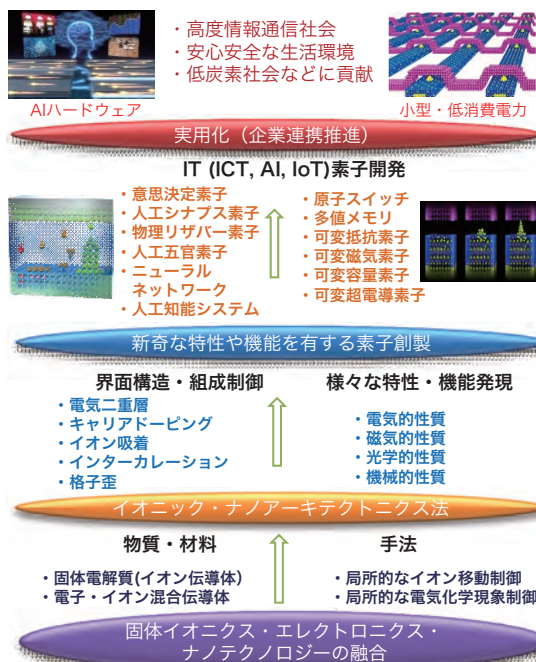
研究概要

今日の情報通信機器は、半導体素子に代表される電子素子の技術開発により、目覚ましい発展を遂げてきた。しかし、近年では半導体素子の進歩を支えてきた微細加工技術の限界が懸念されている。そのため、従来の半導体素子の開発限界を克服するために、全く新しい概念の素子創製にも注目が集まっている。このような新奇素子の開発技術として、固体中の電子輸送を制御するエレクトロニクスだけでなく、固体中のイオン輸送を制御するイオニクスも期待されている。これまで、我々はイオニクスを基盤として、これにエレクトロニクスとナノテクノロジーを融合させたイオニック・ナノアーキテクトゥクス法を開発し、様々な機能や性能を有する素子を創出してきた。

新規性・独創性

- 固体内の局所的なイオン輸送を制御して動作する新しい概念の素子
- 小型・低消費電力でOn/Offスイッチ、アナログ抵抗、量子化伝導、磁気、電気容量などの制御が可能
- 放射線や電磁ノイズなどの過酷環境下でも動作可能
- 人間の脳や五官などを模倣するニューロモルフィック機能の発現とそれらの性質を人工知能素子として利用可能
- 従来の半導体素子では得られない電氣的、磁氣的、光学的、機械的な機能や性能を有する様々な素子の創製が可能

研究内容



従来の半導体素子とは異なる原理で動作する、イオニック・ナノアーキテクトゥクス法で創製した素子の特徴は、使用する素子材料の骨格を構成している原子（イオン）の移動をナノスケールから原子スケールで制御して動作させることにある。電子と比べて質量やサイズが著しく大きなイオンの輸送制御は、素子材料の結晶構造やヘテロ界面などを再構築することであり、材料の可逆的なナノ建築（=ナノアーキテクトゥクス）を可能にする。このイオニック・ナノアーキテクトゥクスに基づく新規デバイスは、外部からの電圧印加などにより可逆的あるいは不可逆的な構造変化を素子材料内で生じさせ、そこから発現する興味深い物性を利用することによって動作する。素子材料として用いる機能性材料を目的に応じて選択することによって、従来の半導体素子では得られない電氣的、光学的、磁氣的、機械的な機能や性能を有する様々な素子を開発することが可能である。

これまでに、我々は原子スイッチ、人工シナプス、意思決定素子、物理リザパー素子、人工五官素子、多値メモリ、可変抵抗素子、可変磁気抵抗素子、可変超伝導素子などを構築している。更には、神経細胞の可塑性などを模倣する多様な素子の開発も可能になったことから、人間の脳の機能を模倣して動作する小型・低消費電力のニューロコンピューティングのための各種素子やシステムの開発を企業連携研究により推進し、次世代高度情報通信社会などへの発展に貢献したいと考えている。

まとめ

我々が開発した原子スイッチを搭載したFPGA（書き換え可能集積回路）は企業により実用化され、宇宙空間の過酷環境下で優れた動作性能が確認されている。また、脳機能を模倣する人工シナプス素子、人工視覚素子、物理リザパー素子などが創製されており、今後、これらの素子を用いて、次世代人工知能技術を担うニューラルネットワーク回路や人工知能システムなどの開発に展開できると期待される。

論文・特許

- K. Terabe, T. Tsuchiya and T. Tsuruoka, *Adv. Electron. Mater.* **8**, 2100645 (2022).
- K. Terabe, T. Tsuchiya and T. Tsuruoka, *Adv. Phys. X* **7**, 2065217 (2022).
- K. Terabe, T. Tsuchiya and T. Tsuruoka, *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, SM0803 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトゥクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

イオニクスAIハードウェアの要素技術開発

Keywords 固体イオニクス, 人工知能, 人工シナプス, 人工ニューロン, 原子層堆積法

主席研究員 / Chief Researcher

鶴岡 徹 Tsuruoka Tohru

✉ TSURUOKA.Tohru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsuruoka_tohru



研究概要

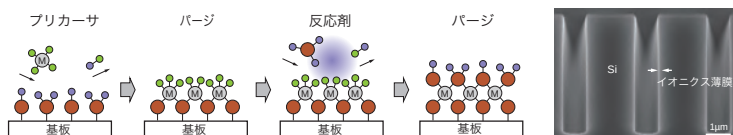
近年、ビックデータを利用した人工知能(AI)の活用が進んでいる。現状のCMOS技術を用いたAIデバイスは、情報処理の高速化と低消費電力への対応に課題がある。この問題を解決するための方策として、本研究では固体中のイオン伝導と電気化学反応などのイオニクス現象を利用した新しいAIデバイスに必要な要素技術を開発している。これまでにシナプストランジスタやニューロン側方抑制模倣素子の実証、リチウムやマグネシウム固体電解質の薄膜合成プロセスを構築した。小型で低消費電力のイオニクスAIハードウェアの実現を目指している。

新規性・独創性

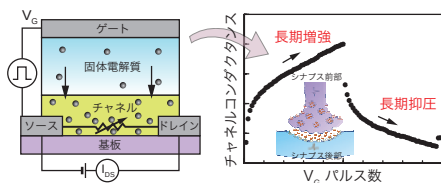
- 高イオン伝導の多元系固体電解質を均一に成膜する原子層堆積 (ALD) プロセスの開発
- 低消費電力でアナログ動作するイオンゲート型シナプストランジスタの開発
- ニューロンの信号処理を模倣するイオン移動型マルチチャネル素子の開発
- シナプストランジスタを組み込んだ人工ニューラルネットワークの実装化
- 人間の感覚知覚を再現するイオニクスセンシングシステムの構築

研究内容

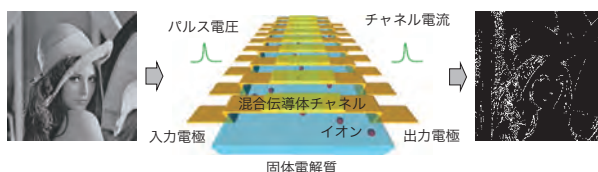
ALD 法によるイオニクス薄膜の創製



イオンゲート型シナプストランジスタ



ニューロン側方抑制を模倣したマルチチャネル素子



プラズマ援用ALDを用いて、リチウム (Li) およびマグネシウム固体電解質の成膜に成功した。良好なステップカバレッジを有し、ALDとしては世界最高水準のイオン伝導度が得られた。多元化プロセスも開発しており、今後更なる高伝導度化と低温成膜を目指す。Liイオンやプロトン伝導体を用いたイオンゲート型トランジスタを開発した。ゲート電圧パルス印加によりチャンネルコンダクタンスはアナログ的に変化し、シナプスの短期および長期可塑性を再現する。このような素子は人工ニューラルネットワークの基本単位となる。同じ伝導体を用いて1次元並列チャネル素子を作製し、感覚系ニューロンに特有な側方抑制の模倣にも成功した。この特性を利用して、網膜の信号処理の一つである画像のエッジ検出を材料特性だけで行えることを実証した。

まとめ

本研究は薄膜材料の開発から新しい動作原理の素子提案とそれらの実装化まで幅広く網羅している。固体電解質のALD膜は国内で作製可能なのはNIMSだけの独自技術である。この成膜手法はAIデバイスのみならず、イオン電池の研究にも活用できる。固体イオニクスを用いたこれらの要素技術を組み合わせて、より人間に近い情報処理と小型・低消費電力を可能にするハードウェア型AIシステムの開発に展開する予定である。

論文・特許

- H. N. Mohanty, T. Tsuruoka, J. R. Mohanty and K. Terabe, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 19279-19289 (2023).
- J. Su, T. Tsuruoka, T. Tsujita, Y. Inatomi and K. Terabe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **62**, e202217203 (2023).
- X. Wan, T. Tsuruoka and K. Terabe, *Nano Lett.* **21**, 7938-7945 (2021).

ナノアーキテククスへの挑戦

Keywords 欠陥エンジニアリング, ペプチド, 自己組織化制御, 分子機械, グラフェン, 表面化学反応, 分子スピン, 2Dネットワーク

主幹研究員 / Principal Researcher

櫻井 亮 Sakurai Makoto

✉ SAKURAI.Makoto@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakurai_makoto



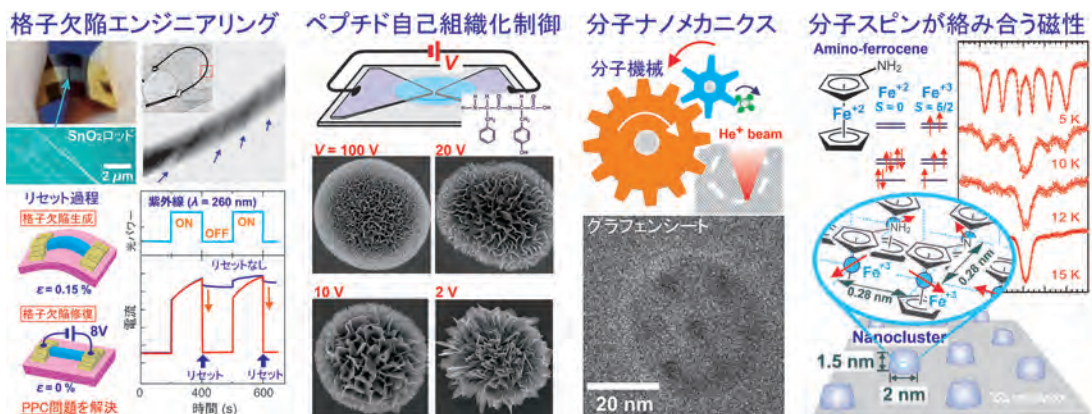
研究概要

無機・有機材料を利用したナノアーキテククスによる新しい物質作成や機能探索を続けている。さらに、計測手法の開発や理論モデルの構築を通して機能を解明して新しい応用研究へと発展させる。

新規性・独創性

- ルチル構造の酸化すずロッド内の格子欠陥を機械的応力や電圧を加えて操作し新機能を探索
- 電流を局部的に流して短いペプチドの自己組織化を制御する手法を発見
- 2次元ナノシートを集束ヘリウムイオンビームで削り分子機械のナノ部品の製造工程を模索
- 表面化学反応を利用して低次元ナノ構造を作成し、分子スピンの絡んだ複雑磁性を解明

研究内容



- 電界ピエゾ効果を示さないルチル構造のロッドを曲げて生まれた格子欠陥の生成や修復を操作（欠陥エンジニアリング）して、UV光センサーの懸案問題であったPPC(Persistent photo current)問題を可決した（左端図）。
- 電極間に電流を流して局所的な過飽和領域を溶液中に作成して短いペプチドの自己組織化の制御に成功した。高い表面積を持つポーラスマイクロ球の形状制御を可能とした（左から2番目）。
- グラフェンシートを集束ヘリウムイオンビームを用いて削り出し、現時点で世界最小のナノギアの作成に成功した。組み合わせで分子機械を作成して、ナノメカニクスを解明する（左から3番目）。
- 表面化学反応を利用して分子を自己組織的に並べて、ユニークな2次元ナノクラスターネットワークを作成した。分子スピンの空間的に絡んで生じるスローダイナミクスやスピン液体的な挙動を理論モデルを用いて解明した。新しい2D材料の開発へとつながる。

まとめ

ナノアーキテククス手法を利用した有機・無機ナノ構造体作成には多くの可能性が残されており、新機能を探索する計測手法の開発やモデルシミュレーションの開発には成長の余地が残されている。

論文・特許

- M. Sakurai, S. Nagano and C. Joachim, *Vacuum* **207**, 111605 (2023).
- M. Sakurai, K. Liu and M. Aono, *J. Appl. Phys.* **125**, 082512 (2019).
- M. Sakurai, P. Koley and M. Aono, *Chem. Commun.* **50**, 12556-12559 (2014).

イオニクス脳型情報処理技術の開発

Keywords イオニクス, ニューロモルフィックコンピューティング, 物理リザパーコンピューティング, 固体電解質, 電気二重層

主幹研究員 / Principal Researcher

土屋 敬志 Tsuchiya Takashi

✉ TSUCHIYA.Takashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsuchiya_takashi



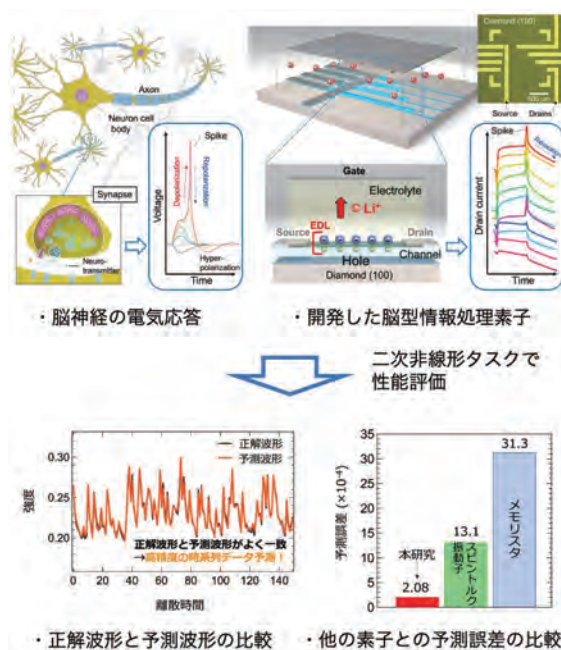
研究概要

近年、ソフトウェアの進歩による機械学習の活用が拡がりあらゆる社会活動の様式が変化しつつある一方、膨大な電力消費が深刻な社会問題となっている。ソフトウェア改良だけで改善するには限界があるため、脳神経の働きをハードウェアで模倣して消費電力を低減する「ニューロモルフィック(神経模倣)コンピュータ」の研究開発が精力的に行われているが、エネルギー効率が低く計算性能も十分でないことが課題である。NIMSは、固体材料中のイオンと電子の振舞(イオニクス)を利用して「カオスの縁」と呼ばれる脳の特徴を再現することで情報処理を行う高性能AI技術の開発を行っている。

新規性・独創性

- イオニクスを利用して秩序とカオス(混沌、無秩序)の境界付近の「カオスの縁」を実現
- 小型素子の中で世界最高の予測性能
- 厚さ数ナノメートル程の電気二重層の利用による微小デバイス・3次元高集積回路の可能性
- 固体電解質や固固界面の精密制御による高速イオン・電子ダイナミクスの達成
- 画像・人物・音声・匂いなどの分類や将来予測が可能な低消費電力エッジAI端末機器への応用

研究内容



Li^+ イオンを伝導するリチウム固体電解質薄膜とダイヤモンド単結晶を積層した界面近傍のイオンと電子の振舞いを利用して「カオスの縁」状態を発現させ、高い情報処理機能を示す小型素子を開発した。この素子は固体電解質/ダイヤモンド界面に形成される電気二重層の充放電によってダイヤモンド表面の電子キャリア密度が変化することで電気抵抗が変化する電気二重層トランジスタの原理で動作する。この素子に、情報処理が必要な時系列データを電圧パルス列として入力すると、先述の電気二重層の充放電によってダイヤモンド表面を流れる電流(ドレイン電流)が刻一刻と変化する。この際、 Li^+ イオンと電子の輸送がお互いに影響を及ぼし合って複雑に振舞い、無数のニューロンが互いにフィードバックしあう脳神経に近い状況が生まれる。実際に、脳神経の電気応答に見られる様なスパイクや緩和を伴う、複雑・多様な電気応答を出力することがわかった。

そこで、この素子を「物理リザパー」に使い、情報処理に応用した(物理リザパーコンピューティング)。物理リザパーコンピューティングとはニューロモルフィックコンピューティングの一種である。性能試験に用いられる二次非線形変換タスクでこの素子の情報処理性能(予測誤差)を評価したところ、 2.08×10^{-4} という非常に小さな値(高い予測精度)が得られた。これは、スピントルク振動子やメモリスタを用いた報告よりも数倍から1桁程度高い精度であり、小型素子の中で世界最高性能が得られた。スマートウォッチや監視カメラ、音声センサーなどの各種センサーとの組合せにより医療、防災、製造などの幅広い産業で利用できる低消費電力エッジAI端末機器への応用が期待される。

まとめ

固体電解質/ダイヤモンド界面に脳の特徴を模倣させることで高性能な脳型情報処理を行う新技術が得られた。電気二重層という厚さ数ナノメートル程の微小空間を利用して高性能を得られることは実用上の大きなメリットである。動作速度や予測精度、素子体積にはまだ改善の余地があるものの、これらを解決しSociety 5.0実現に向けた社会実装を目指す。

論文・特許

- T. Wada, D. Nishioka, W. Namiki, T. Tsuchiya, T. Higuchi and K. Terabe, *Adv. Intell. Syst.* 2300123 (2023).
- M. Takayanagi, D. Nishioka, T. Tsuchiya, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi and K. Terabe, *Mater. Today Adv.* **18**, 100393 (2023).
- D. Nishioka, T. Tsuchiya, W. Namiki, M. Takayanagi, M. Imura, Y. Koide, T. Higuchi and K. Terabe, *Sci. Adv.* **8**, eade1156 (2022)..

新規ナノシートの合成と高機能化

Keywords ナノシート、層状物質、単層剥離

主幹研究員／Principal Researcher

海老名 保男 Ebina Yasuo

✉ EBINA.Yasuo@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ebina_yasuo



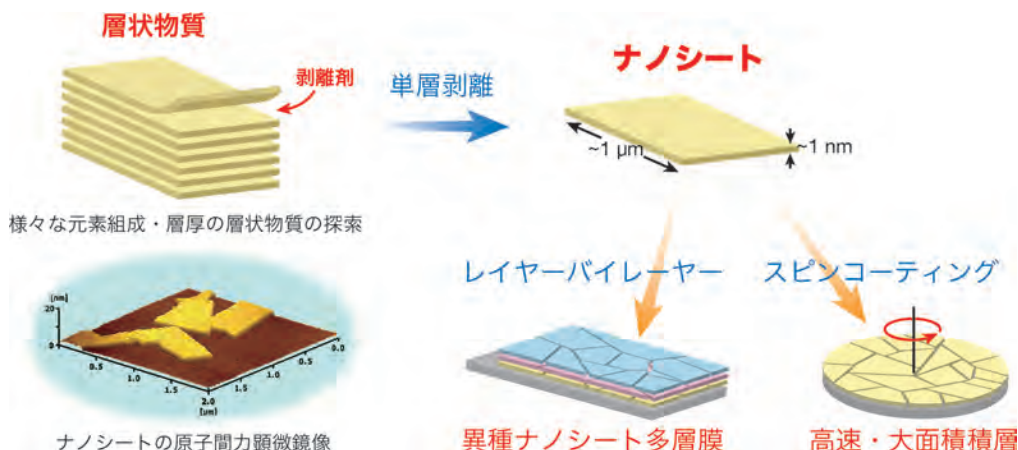
研究概要

ナノレベルでの機能性材料の構築が開発されている現在、その構築ブロックとして厚さが1ナノメートル前後、横サイズがサブマイクロメートル程度かそれ以上のシート状物質（ナノシート）を利用することが一つの有望な手法であると考えらる。ナノシートの合成手法として層状物質の単層剥離が有効であり、目的の機能に応じた特性に向けて構造・組成をデザインした層状物質を設計・合成をしている。そして得られた層状物質からナノシートを合成し、配列・集積・複合化を行うことにより特性の高機能化を目指している。

新規性・独創性

- 新規構造の層状物質の合成
- 新規・高機能化を目指した層状物質の合成
- 新規ナノシートの合成
- ナノシートの配列・集積・複合化による高機能化

研究内容



層状化合物を単層まで剥離することにより厚さ1ナノメートル程度、横サイズが1マイクロメートル程度のシート状物質、ナノシートを合成できる。出発物質として電気、磁気、触媒等の特性を持たせた層状化合物を出発物質としてナノシートの合成を行えば、様々な特性を持つナノシートを得ることができ、それを種々の異なる特性を持つナノシートを用いて成膜等を行えば単一のナノシートのみで得られなかった特性の付与が期待できる。

まとめ

- 磁性材料・誘電材料・光触媒材料等、組成・ナノシート厚による特性の制御
- ナノシートの機能の解明
- 実用化デバイスへ向けたナノシートの集積法の開発

論文・特許

- W. J. Roth, T. Sasaki, K. Wolski, B. Gil, S. Zapotoczny, J. Čejka, M. Kubů, M. Mazur, Y. Ebina, N. Sakai, *et al.*, *Inorg. Chem. Front.* **10**, 1511-1521 (2023).
- C. Wang, N. Sakai, Y. Ebina, S. Suehara, T. Kikuchi, D. Tang, R. Ma and T. Sasaki, *J. Mater. Chem. A* **10**, 25481-25489 (2022).
- Y. Ebina, K. Akatsuka, K. Fukuda and T. Sasaki, *Chem. Mater.* **24**, 4201-4208 (2012).

ナノシートの精密集積と二次加工による機能材料の創製

Keywords 酸化物ナノシート、スピコート、切断、触媒、エネルギー変換・貯蔵

主任研究員／Senior Researcher

坂井 伸行 Sakai Nobuyuki

✉ SAKAI.Nobuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakai_nobuyuki



研究概要

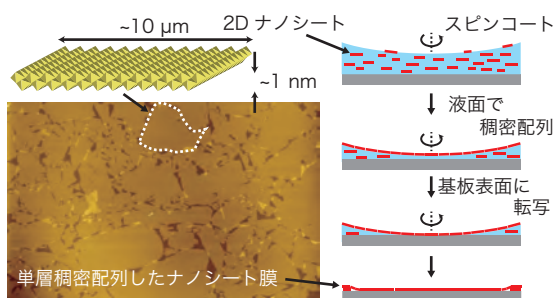
層状金属酸化物の単層剥離により得られる酸化物ナノシートは、厚みが1 nm程度である一方、横方向には厚みの数百倍から数十万倍の広がりを持つ二次元結晶である。その二次元性に基づき、組成や構造によりさまざまな魅力的な特性を示す。ナノシートはコロイド溶液として得られ、基板上に単層または多層で配列したり、バルクスケールの再積層体を構築したりすることができる。本研究では、基板上にナノシートを精密に配列する手法の確立や、異なるナノシートの交互積層による新奇物性の発現や特性向上を目指している。その過程で、凹凸のある基板表面への吸着によりナノシートが切断されることを発見し、二次加工によるナノシートの高機能化につながると期待している。

新規性・独創性

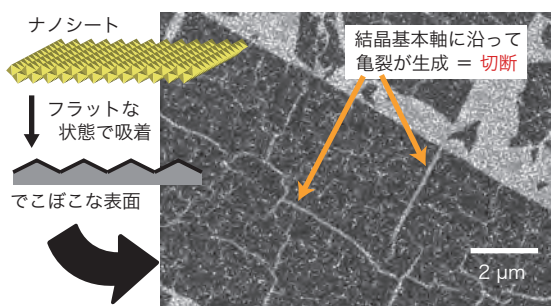
- 層状酸化物をソフト化学的に剥離することで、すべて単層のナノシートが分散したコロイド溶液を作製する手法が確立されている。
- 100種類以上の酸化物ナノシートが合成されており、組成や構造に応じてさまざまな魅力的な特性を示す。
- 溶液プロセスによりナノシートをさまざまな集積、集合、形態制御することができる。
- 基板上に異なるナノシートを交互積層することができ、個々のナノシートにはない優れた特性が得られる。
- 2種類のナノシートを自己組織化的にバルクスケールで交互積層でき、電極材料として優れた特性を示す。

研究内容

基板上にナノシート分散液を適切な条件でスピコートするとナノシートが単層で稠密配列するメカニズムについて、さまざまな回転速度においてナノシートが基板表面にどのように堆積するのかを顕微鏡観察により体系的に調べた。その結果、スピコート中にナノシートが気液界面において単層で稠密に配列し、それが溶媒の蒸発に伴って基板表面に転写されることがわかった。また、堆積状態と回転速度の関係を明らかにし、基板表面全体で単層稠密配列が達成される条件を予測する方法を見出した。さらに、スピコートを繰り返すことによりナノシートの多層膜や異種ナノシートのヘテロ膜を基板上に形成できた。異種ナノシート間の相互作用に基づく新奇特性の探索に資することができる。



気液界面に展開したナノシートが凹凸基板に吸着する過程で自発的に切断されることを発見した。吸着過程において、ナノシートは基板の表面形状に追従しようとするが、ナノシートの面積は凹凸基板の実面積より小さいため、吸着の進行に伴い分子間力に基づく引張応力がナノシートの面内方向に生じる。分子間力はナノシートの吸着面積に比例し、切断に必要な化学結合の数はナノシートの横サイズに比例するため、二次元異性が高いナノシートでは引張応力がナノシートの切断に必要なエネルギーを上回り、結合数が比較的少ない結晶格子基本軸に沿ってナノシートが切断される。切断や穿孔などナノシートを二次加工することはデバイス作製や特性向上において重要な技術である。



まとめ

- スピコート法によりナノシートが基板表面全体を隙間なく単層で配列する製膜条件を導くためのガイドラインを明らかにした。
- ナノシートと基板の間に働くファンデルワールス力を利用して、ナノシートをその結晶格子基本軸に沿って切断する手法を開発した。
- 今後、切断されたナノシートのマニピュレーションによるデバイス作製や特性評価について検討する。

論文・特許

- N. Sakai and T. Sasaki, *Langmuir* **38**, 12399-12407 (2022).
- N. Sakai, M. Suzuki and T. Sasaki, *Adv. Mater. Interfaces* **9**, 2102591 (2022).
- P. Xiong, B. Sun, N. Sakai, R. Ma, T. Sasaki, S. Wang, J. Zhang and G. Wang, *Adv. Mater.* **32**, 1902654 (2020).

柔軟モノリス型多孔体の簡易合成と多目的応用

Keywords モノリス型多孔体, ゼルゲル法, エアロゲル, 熱マネジメント材料, バイオ・医療, オルガノシロキサン

独立研究者 / Independent Scientist

早瀬 元 Hayase Gen

✉ HAYASE.Gen@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayase_gen



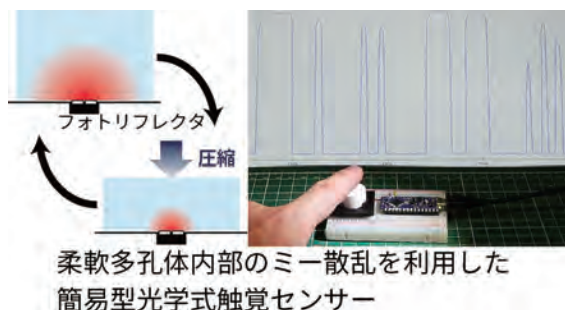
研究概要

多孔体はさまざまな種類が知られており、それぞれに特有の物性を活用することで古くから利用されてきた。ゼルゲル法を用いて作製される多孔体においてはその化学組成やマイクロ・ナノスケールの骨格・細孔構造を適切に制御することで、断熱材、吸着・分離媒体、電池材料、触媒、細胞培養用の基材といった応用目的に特化した材料を開発できる。オルガノシロキサン(シリコンなど)を基盤にしたモノリス型の多孔体は、その柔軟性および化学的安定性から、多岐にわたる先端応用が期待されている。さらに、この多孔体骨格内外にさまざまなナノ材料を組み込むことで、既存のプラスチックやセラミックスでは見られない新たな物性を生み出すための研究を行なっている。

新規性・独創性

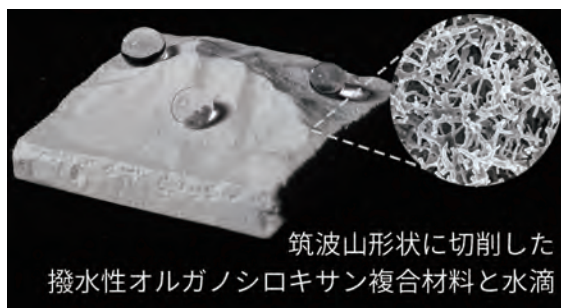
- 比較的簡易な合成法により再現性よく作製できる柔軟マクロ多孔体
- ナノセラミックスとの複合化による特徴的な微細構造形成と力学特性制御
- フライス盤を利用したCNC微細加工可能
- 優れた断熱性や光学特性をもつ熱マネジメント材料への応用
- スフェロイド・オルガノイドなど立体培養に利用可

研究内容



相分離を伴うゼルゲル法を用いたモノリス型多孔体作製においてはさまざまな微細構造を形成・制御可能であるが、疎水性が比較的高いオルガノシロキサン材料を水系ゾルから効率よく形成するためには工夫が必要である。相分離制御が容易なプロセスを開発していくことで、再現性が高く欠陥が少ないバルク材料を自在なスケールで作製できるようになった。材料の変形性を生かすことで、形を変えても性能が低下しない断熱材に加え、スポンジを絞るかのように用いるリボソーム形成基材やインターフェイスを兼ね備えた触覚センサー用光学材料など、分野を問わない新しい応用を開拓している。

モノリス型多孔体の微細骨格内部にナノ材料を複合化することで、従来よりも強度を高めたバルク材料を開発している。そのような複合材料は複合前に比べて耐衝撃性や耐摩耗性が顕著に改善されるため、これまで低嵩密度の多孔体作製後には難しかった精密機械加工が容易になった。オルガノシロキサンを表面組成にもつ複合材料は高い撥水性や生体親和性をもつことから、立体細胞培養基材を開発した。オルガノシロキサンが備える可視光透過性や赤外輻射特性、多孔構造による拡散反射などを生かした、光学材料としての開発にも力を入れている。



まとめ

オルガノシロキサンは汎用プラスチックやセラミックスと比較して原料コストは高いものの、両者には見られないさまざまな特徴をもつ。付加価値の高い機能材料として、特にバイオ・医療領域への新たな応用開発を目指している。

論文・特許

- G. Hayase, *Sens. Actuator A Phys.* **354**, 114253 (2023).
- G. Hayase, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94**, 2210-2215 (2021).
- G. Hayase and D. Yoshino, *ACS Appl. Bio Mater.* **3**, 4747-4750 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

新規ナノマテリアルの創製及びエネルギー材料の開発

Keywords ナノシート、ヘテロ複合、遷移金属、触媒、イオン伝導

グループリーダー／ Group Leader

馬 仁志 Ma Renzhi

✉ MA.Renzhi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ma_renzhi



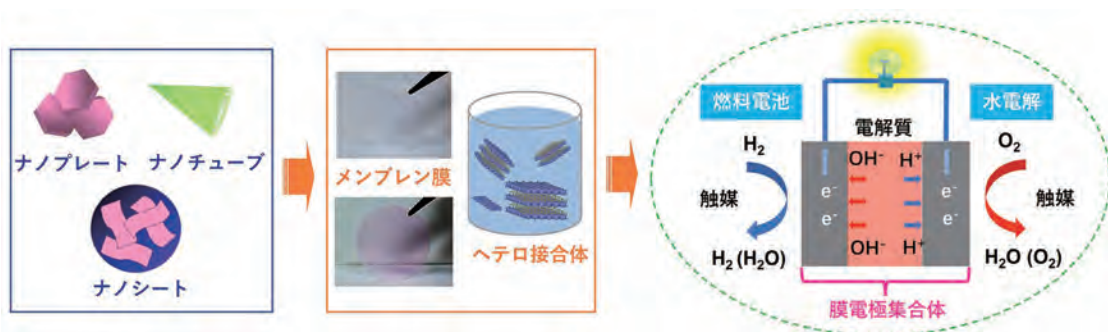
研究概要

独自のソフト化学的合成プロセスにより、金属イオンの酸化状態や配位数の高度制御を図り、これまで機能性物質として取り上げられることが殆どなかった新規ナノマテリアルを創製する。水酸化物系ナノシートを中心に、異種ナノ物質をヘテロ複合化することにより、高い触媒特性やイオン伝導性など多彩な新機能を発現し、革新的なエネルギー材料を開発する。

新規性・独創性

- 3d遷移金属 (Fe/Co/Ni等) のみで構成される高結晶性層状水酸化物合成
- 単層剥離によるナノシート化に成功
- 世界最高の水酸化物イオン伝導性を示すナノシート発見
- これまでで最高レベルの酸素発生反応触媒活性達成
- ナノシートを用いた膜電極集合体構築

研究内容



独創的なアイデアに基づき、1次元ナノチューブや2次元ナノシートに代表されるナノマテリアルを創製する。先導的に開拓してきた機能性ナノシートの合成、変換、積層・集積化技術を基盤に、メンブレン膜や人工超格子構造に基づくイオン伝導・分離膜、高性能触媒の開発を進めている。その中で、水酸化物ナノシートが従来のイオン伝導体と比べ10～100倍高い水酸化物イオン伝導性を示すことを発見し、無機アニオン固体電解質としてアルカリ燃料電池や水電解装置等エネルギー変換への応用が期待される。さらに、3d遷移金属を中心としたレドックス活性なナノマテリアルを用い、ナノカーボンなどと集積化させることで高次階層構造の設計・構築を重点的に行い、ナノハイブリッド触媒として酸素還元・発生反応などにおいて高い変換効率を達成した。燃料電池・水電解の膜電極集合体に安価な素材を使用することで、コストを大幅に低減できる高効率なエネルギー貯蔵・変換システムの基盤技術の創出を目指す。

まとめ

高度な合成技術を駆使して、水酸化物系ナノマテリアルの創製を世界に先駆けて開拓している。安価な遷移金属に由来する高いレドックス特性を活用して、持続可能な社会に向けた革新的なエネルギー材料を開発する。

論文・特許

- Y. He, L. Jia, X. Lu, C. Wang, X. Liu, G. Chen, D. Wu, Z. Wen, N. Zhang, Y. Yamauchi, T. Sasaki and R. Ma, *ACS Nano* **16**, 4028-4040 (2022).
- P. Sun, R. Ma, X. Bai, K. Wang, H. Zhu and T. Sasaki, *Sci. Adv.* **3**, e1602629 (2017).
- 特許第6831099号 燃料電池および水電解装置

カーボンナノチューブ分子接合に基づくナノ・量子デバイス

Keywords カーボンナノチューブ, 分子接合, ナノトランジスター, テラヘルツ検出器, 室温量子デバイス, その場電子顕微鏡

主幹研究員／Principal Researcher

湯 代明 Tang Daiming

✉ TANG.Daiming@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tang_daiming



研究概要

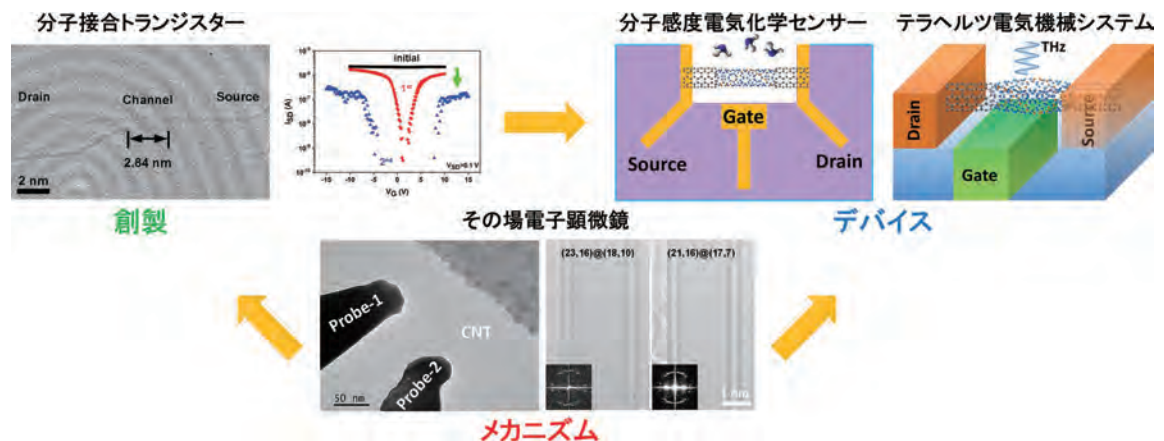
高性能なナノ・量子デバイスの作製や、量子情報技術やモノのインターネット (IoT) への応用には、原子構造、電子構造、接合特性を精密に制御することが極めて重要です。従来のリソグラフィ技術では、分子スケールの電気デバイスを作製することは大きな課題となっています。

本研究では、その場電子顕微鏡で高温機械的手法により、個々のカーボンナノチューブの分子接合を作製した。その結果、3ナノメートルという短いチャンネル長のナノトランジスタが作製された。カーボンナノチューブ分子接合を用いたデバイスは、ナノスケールのサイズと共有結合した界面から、室温での量子センサーやテラヘルツ検出器としての応用が期待される。

新規性・独創性

- カーボンナノチューブ分子接合の創製
- その場電子顕微鏡で形成メカニズムを解明する
- 分子レベルナノトランジスタ、室温量子センサー、テラヘルツ検出器への応用

研究内容



本研究では、カーボンナノチューブ分子接合に基づくユニークなナノ・量子デバイスを創製した。カーボンナノチューブ分子接合は、透過型電子顕微鏡内で、高温で加えた機械的歪みによって個々のカーボンナノチューブの局所的なキラリティを変化させることで作製した。この方法を用いて、金属カーボンナノチューブ内に半導体チャンネルを形成することにより、ナノトランジスタを作製した。このような分子接合トランジスタを用いると、チャンネル長が短く、キラリティに依存した電子特性を持つため、個々の分子にリアルタイムで応答するガスセンサーを設計することができる。また、高弾性率でナノメートルサイズのため、超高共振周波数が得られることから、テラヘルツ波検出への応用も期待される。

まとめ

金属カーボンナノチューブに半導体チャンネルを形成し、室温で量子輸送を示す2.8ナノメートルトランジスタを作製した。カーボンナノチューブ分子接合を基にしたナノデバイスは、室温量子センサーやテラヘルツ検出器としての応用が期待される。今後は、カーボンナノチューブ分子接合のウェハースケールでの原子レベルの精密加工に向けた研究も進めていきます。

論文・特許

- D-M. Tang, S. V. Erohin, D. G. Kvashnin, V. A. Demin, O. Cretu, S. Jiang, L. Zhang, P.-X. Hou, G. Chen, D. N. Futaba, *et al.*, *Science* **374**, 1616-1620 (2021).
- D-M. Tang, C.-L. Ren, L. Zhang, Y. Tao, P. Zhang, W. Lv, X.-L. Jia, X. Jiang, G. Zhou, T. Ohmura, P. Huai, *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* **29**, 1900311 (2019).
- D-M. Tang, D. G. Kvashnin, S. Najmaei, Y. Bando, K. Kimoto, P. Koskinen, P. M. Ajayan, B. I. Yakobson, P. B. Sorokin, *et al.*, *Nat. Commun.* **5**, 3631 (2014).

液相剥離ナノシートの合成・コロイド集積、デバイス応用

Keywords ナノシート、液相プロセス、電子デバイス、エネルギーデバイス

主幹研究員／Principal Researcher

谷口 貴章 Taniguchi Takaaki

✉ TANIGUCHI.Takaaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/taniguchi_takaaki



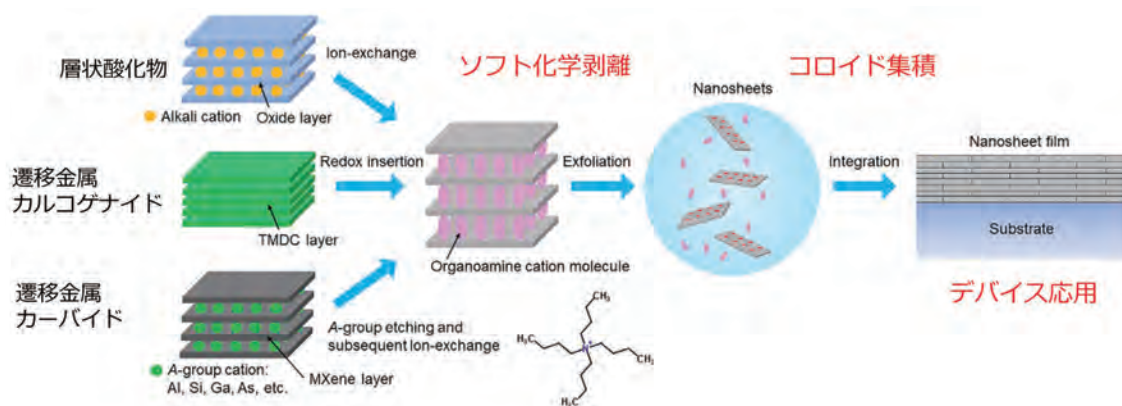
研究概要

近年、グラフェンに加え、酸化物、硫化物、炭化物等、様々な二次元ナノ物質の合成がなされるとともに、それらを用いた材料開発が世界レベルで行われている。我々は環境にやさしい液相法を用いた無機二次元物質“ナノシート”の合成、コロイドプロセスを用いたナノ構造体への集積、及びそれら技術を基軸とした材料応用を行っている。これにより低環境負荷、低コスト、高性能を具備したグリーン製造の実現を目指す。

新規性・独創性

- 高品質な酸化物ナノシート、硫化物ナノシート、グラフェンの液相合成技術と精密集積技術
- 安価・低環境負荷な溶液プロセスで高価・高環境負荷な気相プロセスを超える機能性
- 原子層材料に対する先端的な評価・解析技術

研究内容



インターカレーション反応を用いた層状酸化物の液相剥離技術、及び薄膜等への集積技術は1990年代からNIMSが先導してきた。この技術をベースとし、酸化物ナノシートの更なる機能開拓を進めると共に、遷移金属カルコゲナイドや遷移金属カーバイド等に対して技術拡張を行うことで、液相剥離ナノシート材料のラインナップ、及び機能の拡充を目指す。基礎研究としては、新規物質を合成すること、及びナノシートの構造や電子状態を実験・理論的手法の併用により明らかにすることを目的とする。また、異種ナノシートをヘテロ接合した場合にみられる物性変調について、特に異種物質界面に着目した制御を進めている。これら基礎研究を通し、当該技術の信頼性や制御性を向上させつつ、触媒、電子デバイス、防食コーティング等、多方面における応用を展開している。本技術は低環境負荷・低コストなプロセスで高性能なデバイスの作製が可能であることがユニークであり、新たなグリーン製造領域・市場において適合性を有する。

まとめ

大きく発展中である二次元ナノ物質科学の中で、液相プロセスに特化した物質・材料研究を進め、世界トップクラスの研究成果を創出してきた。近年、グリーンなもののづくりが注目されつつあるが、本技術はこの課題に対する解決策の一つとなると考える。

論文・特許

- T. Taniguchi, L. Nurdiwijayanto, R. Ma and T. Sasa, *Appl. Phys. Rev.* **9**, 021313 (2022).
- L. Nurdiwijayanto, H. Nishijima, Y. Miyake, N. Sakai, M. Osada, T. Sasaki and T. Taniguchi, *Nano Lett.* **21**, 7044-7049 (2021).
- T. Taniguchi, L. Nurdiwijayanto, S. Li, H. E. Lim, Y. Miyata, X. Lu, R. Ma, D. Tang, S. Ueda, K. Tsukagoshi, *et al.*, *ACS Nano* **14**, 6663-6672 (2020).

アクア鉄を用いた新材料開発

Keywords 化粧品, サンスクリーン, 光触媒, 顔料

グループリーダー / Group Leader

井出 裕介 Ide Yusuke

✉ IDE.Yusuke@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ide_yusuke



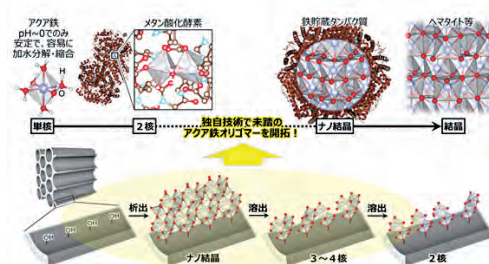
研究概要

鉄鋼や磁石、触媒、食品用顔料などとして工業的に幅広く使われている鉄色や黒色、赤色を呈する鉄や酸化鉄（以下、酸化鉄）を、「白色で、無色透明にもなる酸化鉄」に変えられれば、その資源としての豊富さ、低コストも相まって、革新的材料の創製につながる。そのキー物質と考えられるアクア鉄オリゴマーは、環境中や微生物中の酸化鉄形成の中間体とも考えられており、材料も含め各分野で重要性が認識されているにも関わらず、極めて不安定な性質から、安定化と構造設計技術が確立されていなかった。そんな中、井出は、2核のアクア鉄を粘土鉱物等を用いて安定化することに成功したのを端に、より多核のアクア鉄オリゴマーの設計、および、サンスクリーン等への応用を探索している。

新規性・独創性

- 未踏鉄物質を既存の安全な素材で安定化
- 酸化鉄と違って白く、酸化チタンと違って溶液中で無色透明
- 未知の破格の機能

研究内容



粘土鉱物やゼオライト等の多孔質シリカのミクロ細孔での鑄型合成、あるいは、多孔質シリカの細孔表面を足場としたエッチング（下図参照）により、未踏の多核アクア鉄オリゴマーの設計に取り組んでいる。類似の鉄オリゴマーは、メタン酸化酵素（図参照）や金属-有機構造体（MOF）等の物質点材料中にも見られるが、有機リンカーによって安定化されているため、水やOH基が連結した無色の（UVを吸収する）アクア鉄オリゴマーとは異なり、赤色等に着色しているため、機能や材料としての用途が全く異なる。

我々の開発している多核アクア鉄オリゴマーは、マトリックスの種類によって用途が異なる。粘土鉱物等のミクロ構造中に埋め込めば、元々有している高い光触媒活性が抑制されるので、UV吸収材、即ち、サンスクリーンとして応用可能である。既に、2核アクア鉄をオイルに分散させて作成したペーストが、白濁する酸化チタンペーストとは対照的に透明で、かつ、サンスクリーンとして安定に機能することを見出している。一方、より細孔の大きなメソポーラスシリカ等の表面に固定・安定化された場合は、光触媒として応用でき、これも、2核アクア鉄が酸化チタンに比べ最大で6倍高い光触媒活性を示すことを報告した。現在、3核以上のオリゴマーの合成に取り組んでおり、2核アクア鉄より更に破格の機能を示すことも分かってきている。材料の社会実装、用途拡大を目指している。

まとめ

独自手法により多孔質シリカ中で安定化させた2核アクア鉄が、サンスクリーンや光触媒として応用できそうなことが分かってきた。白い（UVを吸収する）だけでなく、オイル等媒体中では透明にもなる性質を利用すれば、より多様な用途が見込める。3核以上の未踏のアクア鉄オリゴマーの設計による性能向上に加え、安全性の評価が、材料の社会実装に向けた課題と認識している。

論文・特許

- H. El-Hosainy, S. Mine, T. Toyao, K. Shimizu, N. Tsunoji, M. Esmat, E. Doustkhah, M. El-Kemary and Y. Ide, *Mater. Today Nano* **19**, 100227 (2022).
- Y. Ide, S. Tominaka, Y. Yoneno, K. Komaguchi, T. Takei, H. Nishida, N. Tsunoji, A. Machida and T. Sano, *Chem. Sci.* **10**, 6604-6611 (2019).
- 特開 2020233391号 紫外線遮蔽材、その製造方法、それを用いた化粧料、および、保護シート

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高バッチ・バイオ材料

マテリアル基盤

電子構造とダイナミクスからの不均一システム設計

Keywords 第一原理, 局所密度近似, ハイブリッドファンクショナル, GW, 触媒, 光触媒, 反応メカニズム, 材料設計

主幹研究員／Principal Researcher

押切 光丈 Oshikiri Mitsutake

✉ OSHIKIRI.Mitsutake@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/oshikiri_mitsutake



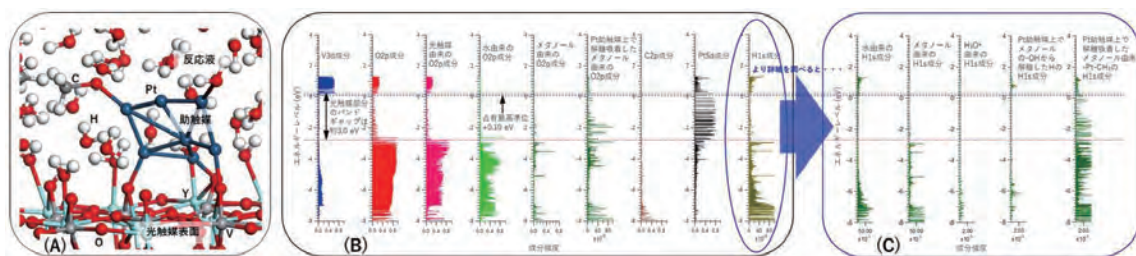
研究概要

不均一物質システムの最適化設計は社会ニーズを実現する上で重要な課題である場合が多い。例えば、環境・エネルギー分野で見受けられる、燃料電池、有機分子の改質による水素生成、アンモニアの合成・分解、光による水分解からの水素生成や有害物質の分解、等の反応システムは、反応物質（液体や気体）と触媒物質（固体）で構成される典型的な不均一系であろう。従来、不均一系の最適化は圧倒的に実験的試行錯誤によって実現されることが多かったが、本研究では計算科学的手法で不均一系の本質に根ざした見通しの良い設計指針を確立し、実験的試行錯誤による開発コストを削減しつつ、所望の機能や高活性な不均一システムを予言的に開発することを目的としている。

新規性・独創性

- 電子構造や物質構造を反応分子や触媒物質で別々に検討するのではなく、反応分子と触媒の相互作用を、不均一システム全体を丸ごと大規模シミュレーションすることで理解する。
- 特に、不均一システム全体の電子構造に対する各構成要素の電子構造のマッピングや、表面面での吸着・衝突反応分子の構造変化や触媒表面環境・構造変化等に伴う電子構造変化の詳細検討により、発現機能の起源を明確にすることで求める機能の高性能化を図る。
- 様々な第一原理手法を駆使することで、確度の高い設計指針を得る。

研究内容



図は、白金助触媒を担持した水分解用光触媒(YVO_4)が反応液であるメタノール水溶液に浸されている状態の触媒表面近くの分子・原子の実験環境温度（室温）での運動の様子(A)やそのときのシステムの電子構造の詳細を示したものの(B)、(C)である。(A)ではメタノール分子の白金助触媒上での解離吸着が観測されるなど、不均一系独特の構造が見られる。(B)や(C)ではそういった構造を反映した電子構造が見られるが、例えば、(C)では、非占有準位に、メタノール分子に属していた-OH基から解離したHや、解離吸着して形成されたPt-CH₃構造のHの1s成分の寄与が比較的大きいことが分かり、光励起による水素生成にとってメタノール分子の解離吸着特性が重要な因子であろうと容易に推測される。同様に、水分子からの水素生成についても解離吸着が重要であることが分かっている。不均一系全体の電子構造についてその構成要素の詳細を調べることが不均一システムの最適化設計の指針を得ることに繋がる。不均一システムのダイナミクスと電子構造の詳細を調べることで、これまで、光を利用することで低温域でも高活性な有機分子の水素改質用合金ナノ粒子触媒、ポリマー等を利用した二酸化炭素の光還元用触媒、チタン置換型ハイドロキシアパタイトを利用した有害物質分解用光触媒、金属有機構造体(MOF: Metal Organic Frameworks)を利用した光触媒機能材料等の開発などを行ってきた。今後は、環境・エネルギー分野で、例えば、アンモニアの合成・分解触媒システム、水の電気分解用電極、燃料電池用触媒、電気化学的二酸化炭素還元技術などへの応用を見込んでいる。

まとめ

できるだけ実際に即したシミュレーションモデルを構築し、様々な第一原理手法を駆使することで、高い確度で不均一システムの最適化を図り、開発プロセスにおける実験的試行錯誤コストの削減を目指す。さらに、ありふれた原料を活用した低コストな代替不均一システムの開発にも応用可能な設計技術として期待できる。特に環境・エネルギー分野への応用はエキサイティングであろう。

論文・特許

- S. Luo, H. Lin, Q. Wang, X. Ren, D. Hernández-Pinilla, T. Nagao, Y. Xie, G. Yang, S. Li, M. Oshikiri, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 12145–12153 (2021).
- K. Ishisone, N. Jirabornvongpongsa, T. Isobe, S. Matsushita, M. Wakumura, M. Oshikiri and A. Nakajima, *Appl. Catal. B* **264**, 118516 (2020).
- 特許第7093549号 触媒、触媒の製造方法、触媒担持担体、分解方法、水素の製造方法、及び、担体

実験化学とデータ科学の融合による設計的ナノ空間材料合成

Keywords 多孔質材料, ゼオライト, 機械学習, ガス吸着分離, 資源循環・転換

主任研究員 / Senior Researcher

チャイキッティスィン ワッチャロップ Chaikittisilp Watcharop

✉ CHAIKITTISILP.Watcharop@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/chaikittisilp_watcharop



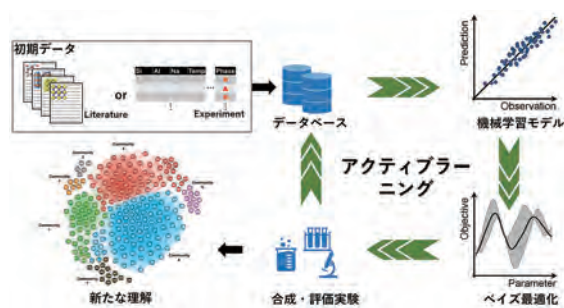
研究概要

低炭素社会・持続可能な社会を実現するエネルギー・環境問題対策の一環としてナノ空間材料の活用が期待される。このナノ空間材料が実用的に利用されるためには、あるニーズに対して骨格構造・化学組成・原子位置等の様々な条件が同時最適化されている必要がある。しかしながら、この材料の合成は、設計的合成が難しく、数多くのトライ・アンド・エラーを行っているのが現状である。この課題を解決するために、本研究では理論科学や機械学習を含むデータ科学を有効活用し、目的ニーズに適したナノ空間材料の設計的合成を行う。このような合成プラットフォームは、新たな社会課題を解決する新規材料発見の加速が期待できる。

新規性・独創性

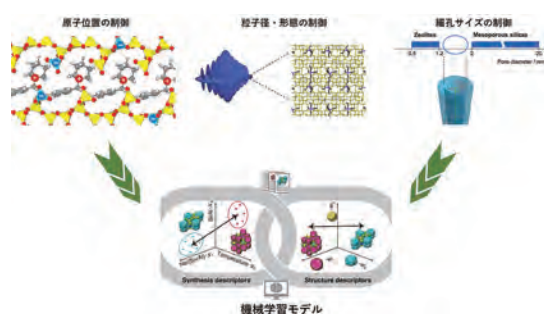
- 精密な分子設計により、ナノ空間材料の構造をマルチスケールで制御する。
- 機械学習モデルの解析により人間では取り組むことが難しい複雑な物理化学的現象の理解を深めたいと考えている。
- データ科学の適用により新規ナノ空間材料の発見とその先の展開が加速されることが期待される。
- 得られた材料は低炭素社会・持続可能な社会を実現する吸着分離・触媒材料としての利用が期待される。

研究内容



マテリアルズ・インフォマティクスを用いることで新規ナノ空間材料探索の速度を加速させ、さらに高性能な機能性材料を見つけることを目標としている。例えば、目的とする物性や機能を、少数の実験結果から予測し実験へのフィードバックを行うベイズ最適化等のアクティブラーニング手法を用いて探索効率を向上させる。また、文献で報告されているデータや実験データを収集し機械学習解析を行い、目的の用途に対する重要な物性を特定する。さらに、この解析結果を合成実験にフィードバックし、合成条件を最適化する。このような合成プラットフォームを適用することで、複雑な物理化学的現象の理解を深めることが期待できる。

ナノ空間材料を代表するゼオライトの合成には多くの反応物と合成パラメータが存在する。有機構造規定剤や化学組成はある程度計算で設計できるが、それ以外のパラメータを予測するには、同様の計算手法を適用することが困難あるいは不可能である。そのため、与えられた合成パラメータのデータセットに対して、ゼオライト生成物の結晶相を同定するための複雑なエネルギー地形を、理論計算によって記述することはほとんど不可能である。このような材料合成は熱力学効果と速度論的效果が相互に関係してくる複雑な合成という問題に対して、機械学習手法を用いることで、速度論的に制御された経路で合成されるゼオライトに対して、非常に有効である。



まとめ

設計的な材料合成を行うために、計算機化学とデータ科学の活用が有効である。これらの研究によって、設計的ナノ空間材料合成への道が開かれつつある。今後取り組むべき課題としては、同様の手法を適用することで、低炭素社会・持続可能な社会を実現する社会ニーズに適したナノ空間材料の設計的合成を行う。

論文・特許

- W. Chaikittisilp, Y. Yamauchi and K. Ariga, *Adv. Mater.* **34**, 2107212 (2022).
- W. Chaikittisilp and T. Okubo, *Science* **374**, 257-258 (2021).
- K. Muraoka, Y. Sada, D. Miyazaki, W. Chaikittisilp and T. Okubo, *Nat. Commun.* **10**, 4459 (2019).

新奇機能性分子液体・液体エレクトレットの創成

Keywords 機能性分子液体, 液体エレクトレット, 自由変形性振動発電素子

グループリーダー／ Group Leader

中西 尚志 Nakanishi Takashi

✉ NAKANISHI.Takashi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakanishi_takashi



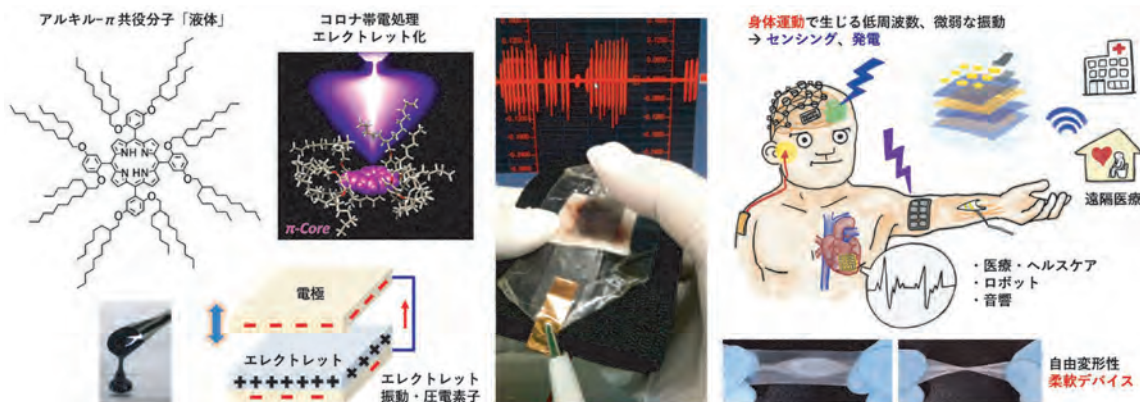
研究概要

ヘルスケアやロボット分野において、柔軟且つ高性能な光・電子機能材料を利用するソフトエレクトロニクスの発展が求められている。本研究では、自由変形性に富む π 共役「液体」分子・高分子の創成に着目した。 π 共役部位を嵩高く・柔軟な分岐アルキル鎖で被覆することで、 π 共役分子固有の光・電子機能をバルク液体状態でそのまま活用できる液体材料を創成した。また、機能性液体材料を直接塗る・挟む・染み込ませるなどの簡便な方法で、自由変形性の光電子素子の構築が可能となった。特に、静電荷を保持した液体エレクトレットを基材とする伸縮・自由変形性の振動発電・センサ素子の開発に世界で初めて成功した。

新規性・独創性

- π 共役分子を常温液体化できるアルキル- π エンジニアリング技術
- π 共役高分子の常温液体・エラストマー化
- π 共役分子固有の光・電子機能をバルク液体においてもそのまま活用
- 液体エレクトレットの創成 (世界初)
- 自由変形・伸縮自在な振動発電素子の開発

研究内容



電子活性な π 共役分子部位を柔軟且つ高い分岐アルキル鎖で被覆した分子(または共役ポリマー)は、常温で粘調な液体(またはエラストマー)となる。この液体(エラストマー)をコロナ帯電処理することで、絶縁性アルキル鎖で保護された π 共役部位周辺に静電荷が安定に保持された液体エレクトレットを創成できる。液体エレクトレットを伸縮性多孔支持膜に含浸させ、柔軟性ポリウレタン基材の電極で挟むことで、自由変形・伸縮性に富む振動発電・センサ素子を作製できる。本素子は、身体運動で生じる低周波数領域の振動においても発電可能であることから、IoT技術と組み合わせることで、遠隔医療・ヘルスケア応用等が期待できる。

まとめ

- 環境発電、音響技術等への応用を見据えた液体エレクトレットの性能向上；アルキル- π 共役分子液体の一分子内に保持できる静電荷量の向上と安定化
- ウェアラブル振動発電素子・センサとしての発電量または感度の向上ならびに素子構造の工夫；ヘルスケア機器、ロボット技術等への応用
- アルキル- π 共役分子液体の流動性を最大限に活かした流体(液体)素子の開発と応用探索

論文・特許

- A. Ghosh, M. Yoshida, K. Suemori, H. Isago, N. Kobayashi, Y. Mizutani, Y. Kurashige, I. Kawamura, T. Nakanishi, *et al.*, *Nature Commun.* **10**, 4210 (2019).
- A. Shinohara, M. Yoshida, C. Pan and T. Nakanishi, *Polym. J.* **55**, 529-535 (2023).
- R. K. Gupta, M. Yoshida, A. Saeki, Z. Guo and T. Nakanishi, *Mater. Horiz.* 2023, DOI:10.1039/D3MH00485F.

ガスのセンシングと徐放材料

Keywords 超分子、有機無機ハイブリッド、分子認識、ガスセンサ、カーボンナノチューブ、層状複水酸化物、一酸化窒素、硫化水素

主幹研究員／Principal Researcher

石原 伸輔 Ishihara Shinsuke

✉ ISHIHARA.Shinsuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ishihara_shinsuke



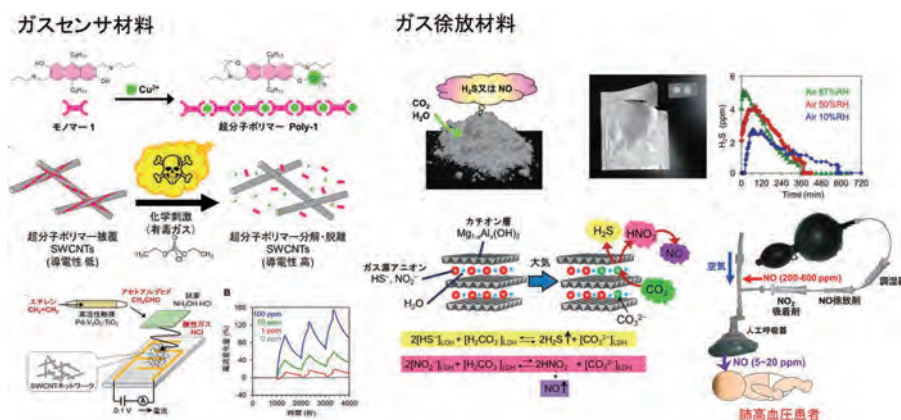
研究概要

ガス分子を高度に制御することができれば、様々な応用が期待できる。本研究では、超分子化学や有機無機ハイブリッドに基づいて、ガスを精密に検出/徐放できる新規材料の開発を進めている。カーボンナノチューブに超分子ポリマーやフロー合成、触媒反応などを融合した独自の小型センサはホルムアルデヒド・エチレン・アセチルコリンエステラーゼ阻害ガスなどを高感度かつ高選択的に検出できる。一方で、層状複水酸化物の特異的なアニオン交換能に着目し、水蒸気や二酸化炭素を刺激として、抗炎症・血管拡張作用などを有する硫化水素・一酸化窒素などの生理活性ガスを安全かつ簡便に徐放する材料を開発し、医療応用に向けた取り組みを進めている。

新規性・独創性

- サブppmのガスを検出可能
- アルコール、アルデヒド、アルケンなどを精密に識別
- NOやH₂Sなどの生理活性ガスを簡便かつ安全に徐放

研究内容



超分子ポリマーを用いてカーボンナノチューブ (CNT) を被覆し、求電子性の有毒ガスに曝されると導電性が大きく上昇するセンサ材料を開発した。超分子ポリマーの連結部位は、有毒ガスに曝されると選択的に切断されるように設計しており、有毒ガスによって被覆が破壊されると、CNT本来の高い導電性が復活する設計となっている。これにより、市販の電気抵抗計で有毒ガスを簡単に検知できる。他にも、ヒドロキシルアミンとアルデヒド類の縮合反応をフロー系に組み込んだアルデヒドセンサや、植物熟成ホルモンであるエチレンをPd触媒によってアセトアルデヒドへと変換してから検知するセンサなどの開発を行った。化学反応を積極的に組み込むことによって高感度かつ高選択的な検出が実現できる。

一方、層状複水酸化物の特異的なアニオン交換能に着目し、水蒸気や二酸化炭素を刺激として、抗炎症・血管拡張作用などを有する硫化水素・一酸化窒素などの生理活性ガスを安全かつ簡便に徐放する材料を開発した。現在、医療応用に向けた取り組みを進めている。

まとめ

超分子化学や有機無機ハイブリッドを用いて、ガスを精密に検出/徐放できる新規材料を創製した。アプリケーションに応じた材料やシステムの最適化と量産化が今後の課題である。

論文・特許

- M. K. Chahal, M. Sumita, J. Labuta, D. T. Payne, J. P. Hill, Y. Yamauchi, T. Nakanishi, T. Tanaka, H. Kataura, S. Ishihara, *et al.*, *ACS Sens.* **8**, 1585-1592 (2023).
- S. Ishihara, A. Bahuguna, S. Kumar, V. Krishnan, J. Labuta, T. Nakanishi, T. Tanaka, H. Kataura, Y. Kon and D. Hong, *ACS Sens.* **5**, 1405-1410 (2020).
- S. Ishihara and N. Iyi, *Nat. Commun.* **11**, 453 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

階層構造の制御された巨大共役分子性材料の創製と機能開拓

Keywords 有機合成, π 共役, 階層構造制御, 刺激応答性材料

研究員 / Researcher

名倉 和彦 Nagura Kazuhiko

✉ NAGURA.Kazuhiko@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagura_kazuhiko



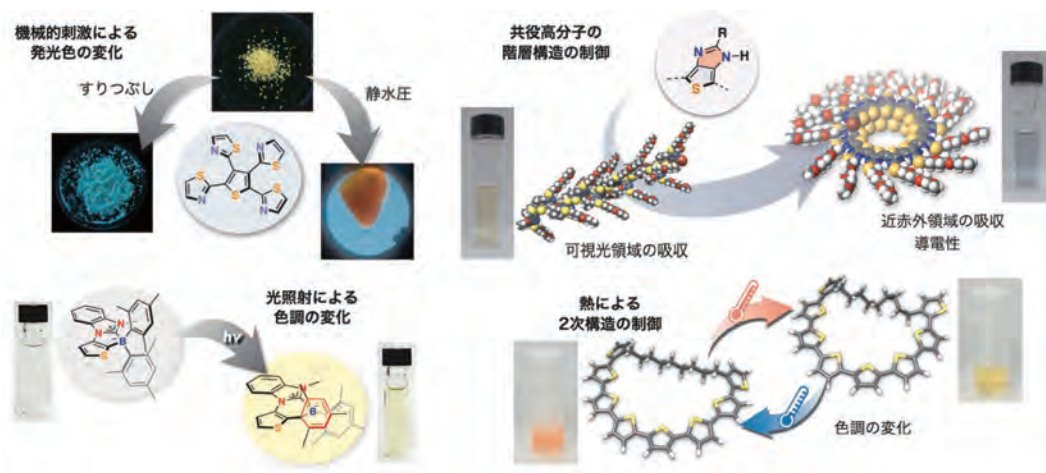
研究概要

π 共役分子・高分子は、 π 電子の非局在化に起因した光・電子物性(吸収・発光特性, 電気化学特性, 導電性・半導体特性)と有機材料に特有な軽量性・柔軟性を示すことから、近年の発展の著しい有機エレクトロニクスやセンサー, アクチュエータなどの基材として注目を集めている。いかに特異な物性・機能を示す新奇な π 共役分子・高分子を設計, 合成するかが鍵となる。特に, 結晶や薄膜などの凝集状態において標的とする機能を発現させるためには, 分子構造から集積構造まで階層的に制御する分子設計指針や合成手法の確立が必要である。

新規性・独創性

- 従来手法では構築が困難な特異な高次構造・階層構造の構築
- 特殊高次構造に起因する光・電子物性の発現
- 刺激応答性や環境応答性などの動的機能を示す分子性材料

研究内容



精密有機合成手法と量子化学計算を組み合わせ, 光学特性や導電性, 刺激応答性を示す独自の分子性材料の開発を行ってきた。分子内相互作用を巧みに組み込んだ分子構造(一次構造)の設計や効率的な合成方法の開発に取り組んだ。配座(二次構造)を制御することで, 発光効率などの光・電子物性の向上に成功した。また, 機械的刺激や光, 熱など応答して動的に変化する高次構造(三次構造)や集積構造(四次構造)の構築に成功した。この構造の変化に伴って光・電子物性も制御できるため, これらの分子性材料はセンサーやアクチュエータの基材としての応用が期待できる。

まとめ

局所的な配座制御により光・電子物性や刺激応答性を示す π 共役分子・高分子材料を開発してきた。今後は, 光・電子物性のさらなる飛躍的向上を実現する分子設計指針の確立や, 複数の階層にわたる精密な構造制御, 分子スケールの構造変化とナノ・メゾスケールへの同期や増幅などに展開する。

論文・特許

- X. Zheng, K. Nagura, T. Takaya, K. Hashi and T. Nakanishi, *Chem.-Eur. J* **29** (2023).
- K. Nagura, R. Inoue, A. Takai, K. Sugiyasu and M. Takeuchi, *有機合成化学協会誌* **76**, 200-208 (2018).
- K. Nagura, S. Saito, H. Yusa, H. Yamawaki, H. Fujihisa, H. Sato, Y. Shimoikeda and S. Yamaguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 10322-10325 (2013).

合成二次元有機高分子の新規合成法と物性開拓

Keywords 二次元高分子, 共有結合性有機構造体, ネットワーク高分子, 多孔性材料, 水浄化膜

独立研究者 / Independent Scientist

松本 道生 Matsumoto Michio

✉ MATSUMOTO.Michio@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsumoto_michio



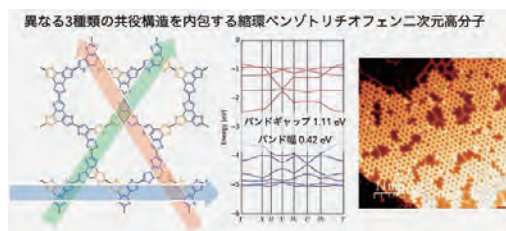
研究概要

二次元高分子は数原子の厚さを持ち、平面方向に原子が規則正しく並んだシート状化合物である。グラフェン発見以来、二次元高分子の特異な物性報告が相次ぐ中、その合成化学はいまだに黎明期にある。我々はこの二次元高分子の合成法として共有結合性有機構造体 (COF) に注目して研究を進めている。これまで、その優れた電子物性を志向した材料の分子設計法から、触媒開拓を通じた初の室温COF合成の達成、炭素と同族のSiを含んだ二次元高分子の開拓、界面重合を用いた二次元高分子薄膜の単離とその水浄化膜への応用等の成果を報告している。

新規性・独創性

- 精緻かつ自在に原子を配列可能な新規二次元材料の創生
- 電子物性を制御可能な合成二次元材料
- 自在に原子配置を行うことのできる多孔性分子分離膜

研究内容



これまで得られてきたCOF材料は不溶性の粉末であり、その応用用途への展開が限定的であった。我々は金属トリフラート触媒を用いることでCOFの室温合成に初めて成功し、さらにその条件を液相界面重合法へと展開することでCOFの薄膜合成に成功した。COF薄膜は有機小分子を水中から除去することのできる水浄化膜としての応用が検証された。(左図)

我々はヘテロ原子の配列の違いによる電子物性の違いがあることを、対称性と非対称性の縮環トリチオフェン (BTT) それぞれからなる二次元COFを計算科学手法を用いてバンド構造計算を行うことで明らかにし、実際に非対称性BTTを金属表面上で重合することで非対称性BTTからなる二次元高分子の合成に成功した。また同様の金属表面でのCOF合成法を用いることで、炭素と同族のケイ素を含むCOFの合成にも成功した。ヘテロ原子を自在に並べることで新しい電子物性をもつ二次元材料を新たに開拓することができる。(右図)

まとめ

COFが実現するバルク有機材料のボトムアップ合成法は、グラフェンなどの特異な性質を示す天然の多次元構造物の合成代替、さらにはそれらを凌駕する機能を持った合成化合物を生み出す可能性を提供する。一方、現時点で得られるCOFの結晶子の大きさは最大でも100 μm程度であり、いまだにその合成に技術的課題を多く抱えている。反応条件のさらなる向上や分子設計法の進展により新たなデザイナー材料として分離膜や半導体材料の分野で大いに発展させることができると期待している。

論文・特許

- K. Sun, O. J. Silveira, Y. Ma, Y. Hasegawa, M. Matsumoto, S. Kera, O. Krejčí, A. S. Foster and S. Kawai, *Nat. Chem.* **15**, 136-142 (2023).
- M. Matsumoto, L. Valentino, G. M. Stiehl, H. B. Balch, A. R. Corcos, F. Wang, D. C. Ralph and B. J. Mariñas, *Chem* **4**, 308-317 (2018).
- M. Matsumoto, R. R. Dasari, W. Ji, C. H. Feriante, T. C. Parker, S. R. Marder and W. R. Dichtel, *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 4999-5002 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

液滴を自在に操るナノテクノロジー

Keywords 撥水ナノ材料, 液滴の物理学, リキッドマーブル, 超撥水, 滑液表面

独立研究者 / Independent Scientist

天神林 瑞樹 Tenjimbayashi Mizuki

✉ TENJIMBAYASHI.Mizuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tenjimbayashi_mizuki



研究概要

ナノテクノロジーにより液体の不本意な付着を抑える技術の開発に注力している。食品の容器への付着は洗浄コストだけでなくフードロスにつながる。これまでに、従来困難であった低表面エネルギー液体(油・有機溶媒)・粘性液体(流動性食品)・微小液滴(ミストや結露水)の撥液性材料を開発した。他にも貴重な薬品や細胞内包液滴を固体物質のようにハンドリングする技術、微小液滴のゼロロス輸送技術、液体粉末化技術を報告してきた。

新規性・独創性

- 液滴の物理学とナノ材料科学のバックグラウンドを活かして、本分野を先導
- 撥液性コーティング：撥水性能(液体付着力・撥液可能な液体の種類)と付随機能(透明性・耐久性・易成膜性)を両立したコーティング剤を開発。
- 液滴ハンドリング技術：マイクロ液滴の機能化手法により自在ハンドリングが可能。

研究内容

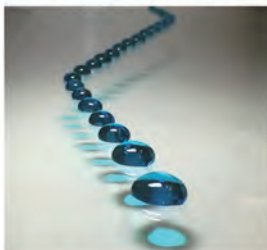
Superwetting droplets



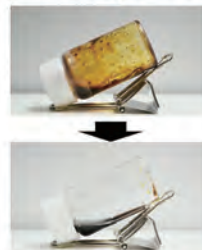
Nano-earth



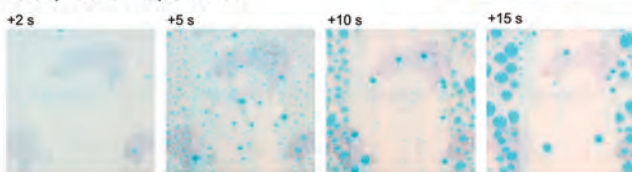
Multi-droplet transport



Non-sticking fluids



Misty water repellence



Drycell: Powdered cell microdroplets.



自然界の撥水現象や水輸送、インクジェットなどの工業プロセス、結露や凍結、汚染といった環境問題の根本にあるのは液滴の濡れ挙動である。液滴の物性や形状、生成過程によってその濡れ方は多岐にわたるが、その挙動を自在に操ることができればあらゆる分野で役立つシーズ技術となる。我々はナノ材料の自己組織化技術を軸として、液滴界面との相互作用挙動を自在に操る材料の設計を目指している。主に、液滴の付着現象や液滴同士の癒合現象、液滴の形成ダイナミクスを扱う。

まとめ

- 撥液性コーティング：防汚・防氷・防錆・抗菌・防曇コーティング・油水分離技術
- 液滴ハンドリング技術：マイクロリアクター・1細胞解析ツール・マイクロテンプレート
- 液体の構造化、液体を元にした新規機能性ソフトマテリアルの開拓にも挑戦している

論文・特許

- M. Tenjimbayashi, S. Yamamoto and K. Uto, *Adv. Mater.* **35**, 2300486 (2023).
- M. Tenjimbayashi and K. Manabe, *Sci Technol Adv Mater* **23**, 473-497 (2022).
- M. Tenjimbayashi, G. Hayase, T. Hiroi and T. Ueki, *Adv. Mater. Int.* **9**, 2200497 (2022).

高性能な熱電材料・デバイスおよび熱制御技術の開発

Keywords 熱電材料, 熱制御, 先端熱伝導率測定, 磁性, 固体物性, 無機材料科学

グループリーダー / Group Leader

森 孝雄 Mori Takao

✉ MORI.Takao@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/mori_takao



研究概要

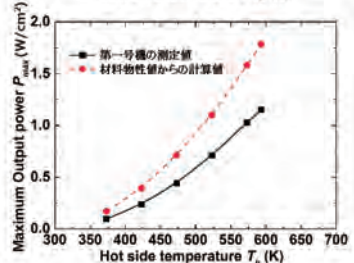
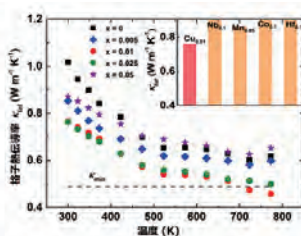
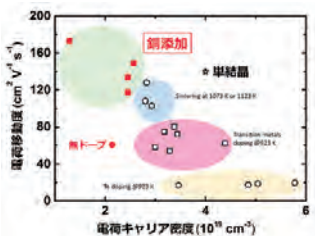
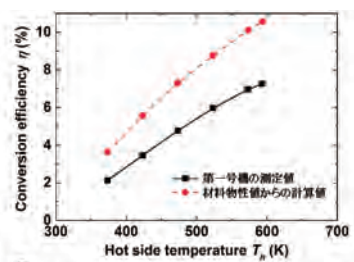
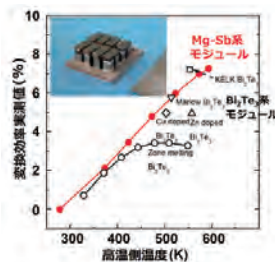
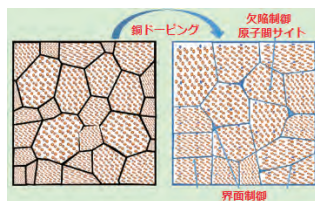
20世紀において人類はかつてないレベルまで電子、スピン、フォトンなどを制御できるようになったが、21世紀の最大の科学技術課題の一つに、フォノンの制御、すなわち熱エネルギーの高度な制御を如何に実現するかが挙げられる。

先端的な新規熱電材料の開発、および、熱輸送の根源的な解明・評価・制御手法の開発などに取り組んでいる。また、無数のIoTセンサーなどの自立駆動やカーボンニュートラルの実現へ向けた種々の形態の熱発電デバイスの開発や実装を進めている。熱管理技術の開発も推進。

新規性・独創性

- 長年のチャンピオン材料ビスマステルライド系材料を代替する待望の新規高性能熱電材料の開発に成功
- ペルチェ市場での置き換え、IoTやカーボンニュートラルに資する熱発電の創出
- 産業プロセスに合致した熱発電デバイス作製(バルク型、薄膜型、フレキシブル大面積シート型)も開発
- 熱電材料デバイスの各種事業化や事業拡大を導出する取り組みも推進

研究内容



これまでナノ構造制御や磁性や欠陥を活用した新規な高性能・超高性能原理の発掘と活用で、最近の熱電研究を先導してきた。顕著な進展として、界面制御および欠陥制御の新原理により、Mg-Sb系材料において電荷の輸送、すなわち電気伝導率、およびフォノンの輸送、すなわち格子が熱伝導率を高度に制御することに成功して、熱伝導率の低い多結晶試料でありながら、単結晶並みの高移動度を実現し、熱電高性能化を達成した。熱発電およびペルチェ冷却において、半世紀以上チャンピオンとして君臨したビスマステルに初めて匹敵・凌駕する新規材料を開発した。第一号機の8ペアの現実的な資源豊富なMg-Sbモジュールの第一号機が、極めて希少なテルルを主成分とするBi₂Te₃系の熟成されたモジュールの世界最高性能の物に匹敵する性能を示した。材料性能から見積もった変換効率は約1.5倍の変換効率、320℃で1.8W/cm²の発電量であり、大きな伸びしろがある。

まとめ

- チャンピオンを凌駕する新規な高性能熱電材料の開発の成功による熱発電の待望の広範囲実用化の実現やペルチェ冷却の応用拡大
- 無数のIoTデバイス・センサー用の自立電源やカーボンニュートラルに資する高効率熱電変換の実現

- ナノ構造制御や磁性や欠陥を活用した新規な高性能・超高性能原理の発掘と活用今後達成すべく進めていること
- 熱管理の総合設計
- 発電モジュールのデザイン
- 産業・大量生産に合致したプロセスによる発電モジュールの開発

論文・特許

- Z. Liu, W. Gao, H. Oshima, K. Nagase, C.-H. Lee and T. Mori, *Nat. Commun.* **13**, 1120 (2022).
- T. Hendricks, T. Caillat and T. Mori, *Energies* **15**, 7307 (2022).
- Z. Liu, N. Sato, W. Gao, K. Yubuta, N. Kawamoto, M. Mitome, K. Kurashima, Y. Owada, K. Nagase, C.-H. Lee, T. Mori, *et al.*, *Joule* **5**, 1196-1208 (2021).

ハイスループット材料探索によるエネルギー変換材料の開発

Keywords スパッタ、トライボロジー、熱、熱電材料、レーザー、センサー、分子注入、キャビテーションバブル、衝撃波

主席研究員／Chief Researcher

後藤 真宏 Goto Masahiro

✉ GOTO.Masahiro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/goto_masahiro



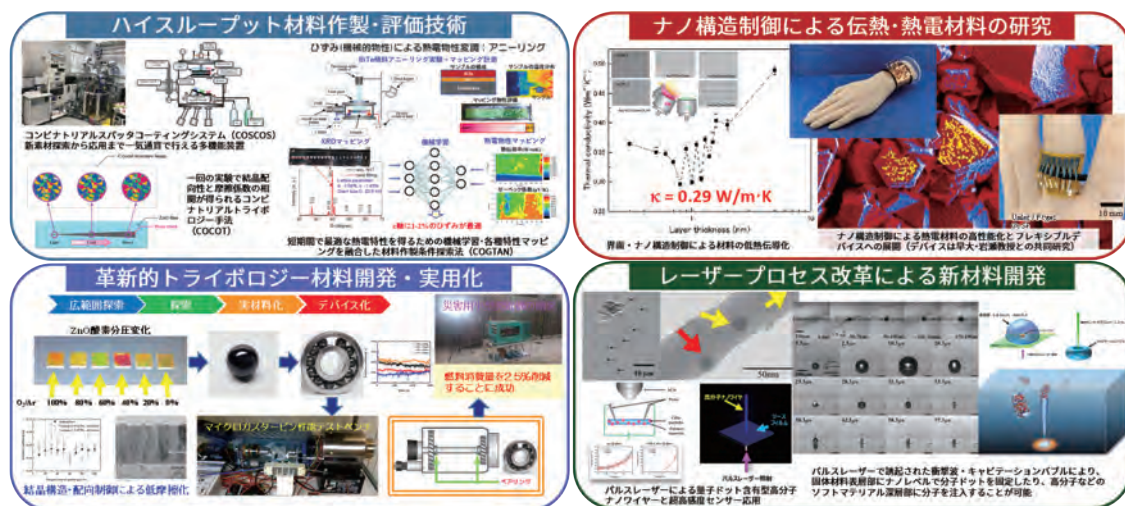
研究概要

エネルギー・環境問題は地球規模で緊急を要する共通課題であり、その解決に向けて短期間で高性能・高機能な新規材料開発が求められている。しかしながら、従来型の手法では長期に渡る研究開発期間を要することから、既存の手法を超越する効率的な材料開発が望まれていた。我々は、これらの問題に貢献すべく、独自に開発したコンビナトリアルスパッタ装置(COSCOS)、革新的レーザープロセスとデータ科学を融合したユニークな材料探索法を開発してきた。その成果として、これまでに、トライボロジー、伝熱、熱電、センサー、医療分野において、幾つかの独創的なエネルギー変換材料を見出した。

新規性・独創性

- 材料探索から実用化まで一気通貫で研究可能なコンビナトリアルスパッタシステム(COSCOS)の開発とエネルギー関連新規材料開発
- 耐環境性能に優れた金属酸化物の結晶配向性制御による低摩擦材料の創製(配向制御ZnO, CuOトライボコーティング等)とベアリング開発
- ナノ構造制御による伝熱・熱電材料性能の向上
- 独自開発レーザープロセス技術を用いた機能性ナノ材料分散型高分子ナノワイヤーの作製と超高感度センサー実証
- 衝撃波・キャビテーションバブルアシスト型分子ジェット技術の開発と医療応用への展開

研究内容



新規機能性を有する高性能なエネルギー変換材料を見出すには、これまでにない独自の材料創製法が有効である。そこで、データ科学(機械学習やデータベースなど)を組み込んだ基礎研究から産業応用までをシームレスに繋がられるスパッタ成膜装置(COSCOS)(図左上)、レーザー駆動型の衝撃波・キャビテーションバブルを基盤とする新規プロセス技術を開発・駆使して、トライボロジー(図左下)、伝熱・熱電(図右上)、センサー・医療(図右下)、各分野に有益であるユニークなエネルギー変換材料開発実績を積み重ねてきた。これらの手法は、今後、様々な分野の材料開発においてブレークスルーを図るための重要技術になることが期待されている。

まとめ

幾つかのユニークな材料創製基盤技術の開発、また、それら同士やデータ科学との融合により、革新的な材料開発手法を見出してきた。その一例として、トライボロジー分野においては、新素材の発見から、そのベアリングへの応用・高性能化を経て、最終的に企業と連携し災害用小型発電機の開発に至る実用化までを成し遂げた。今後は、この基盤技術を駆使して、更なる基礎研究・実用化実績を積み重ねる。

論文・特許

- M. Sasaki and M. Goto, *Thin Solid Films* **761**, 139522 (2022).
- M. Sasaki and M. Goto, *Scientific Reports* **11**, 11203 (2021).
- M. Sasaki, S. Ju, Y. Xu, J. Shiomi and M. Goto, *ACS Comb. Sci.* **22**, 782-790 (2020).

磁性の効果を利用した熱エネルギー変換材料の開発

Keywords 熱エネルギー変換, 熱電材料, 磁性, 金属間化合物

主幹研究員 / Principal Researcher

辻井 直人 Tsujii Naohito

✉ TSUJII.Naohito@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsujii_naohito



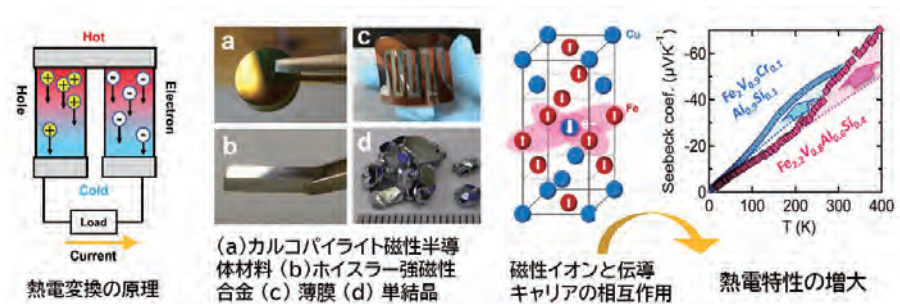
研究概要

熱から電気を取り出すことのできる熱電変換はIoT機器の自立電源や省エネルギーに役立つ技術として期待されている。より大きな電力を得ることが求められているが、このためには大きなゼーベック係数、小さな電気抵抗と熱伝導率をもった熱電材料を開発する必要がある。我々は磁性半導体の磁性イオンとキャリアの相互作用や、磁性金属のスピン揺らぎによってゼーベック係数が増大することを発見し、この原理を利用した熱電材料開発を進めている。

新規性・独創性

- 化合物半導体、金属合金、薄膜など様々な材料作製技術
- 安全・安価・安定な熱電材料
- 新規なメカニズムに基づく熱電材料
- 室温近傍での高性能発現

研究内容



熱電変換は熱から電力を得ることができ、長期耐久性を有する、小型化による損失がないなどの利点から、カーボンニュートラルへの対応や電池フリーのIoTデバイスの電源として注目されている。実用化のためには、高い特性を示し、安全・安価・安定な熱電材料の開発が急務であり、世界中で研究開発が加速している。

我々はカルコピライト磁性半導体やホイスラー型強磁性合金などで、室温付近で大きな熱電出力因子を持つ材料の開発に成功している。ここでは磁性イオンと伝導キャリアの相互作用により熱電材料の特性向上が実現していることを見出した。このメカニズムによりさらに高性能な熱電材料を得ることができる可能性がある。これらの材料は有毒元素を含まず、大気中でも安定であるため、IoT応用に適している。我々の対象とする材料系は粉末焼結バルク体や金属合金インゴットなど多岐にわたり、さらに高特性を示す挑戦的な材料として、大型単結晶や薄膜熱電材料の開発も進めている。

まとめ

熱電変換の社会実装により熱エネルギーの有効利用が実現できれば社会に大きなメリットがある。高特性で安全・安価・安定な熱電材料の開発は最も重要な課題である。今後、さらなる高性能化のための基礎研究と同時に、発電用素子やデバイスへの搭載を進めることで実用化を目指していく。

論文・特許

- N. Tsujii, A. Nishide, J. Hayakawa and T. Mori, *Sci. Adv.* **5**, eaat5935 (2019).
- N. Tsujii and T. Mori, *Appl. Phys. Express* **6**, 043001 (2013).
- 特許 6893344 銅ガリウムテルル系p型熱電半導体、及びそれを用いた熱電発電素子

MI手法を活用した熱電新物質・デバイス作製

Keywords 熱電変換物質, 薄膜作製, デバイス, 第一原理計算, 機械学習

主幹研究員／Principal Researcher

大久保 勇男 Ohkubo Isao

✉ OHKUBO.Isao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohkubo_isao



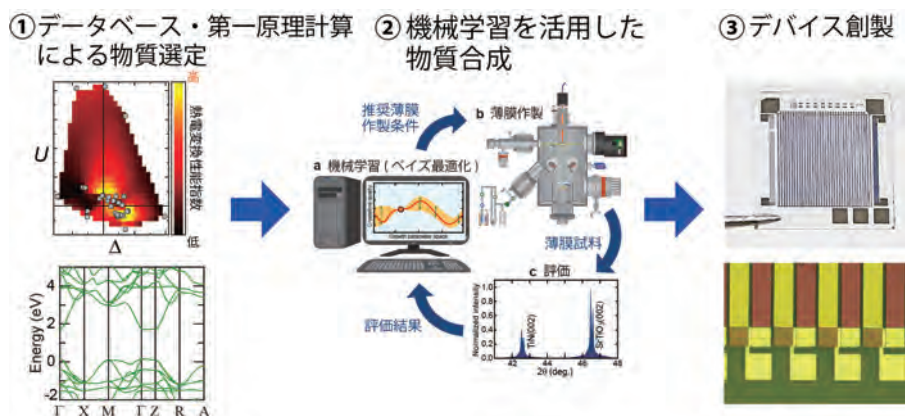
研究概要

データベース、第一原理計算、機械学習等の各種マテリアルズインフォマティクス手法を活用した新物質開拓研究とデバイス開発(特に、新物質の熱電変換機能開拓とIoT機器応用を目指した微細化熱電デバイス)に取り組んでいます。候補物質の選定やスクリーニングのみならず、物質合成(特に薄膜試料作製)プロセスにも、これらの手法をインテグレーションすることにより、プロセスインフォマティクスを駆使した新物質開拓研究からデバイス開発研究まで一連の研究のトータルスループットの向上を図り、社会実装に資する新物質の合成と機能開拓、デバイスの創製を目指します。

新規性・独創性

- 電子状態パラメータのデータベース構築と新しい熱電変換物質の設計指針の提案
- 第一原理計算による未開拓物質群の新物質開拓と薄膜合成
- 機械学習によるパラメータ最適化プロセスを導入した「closed-loop薄膜作製手法」の開発
- IoT機器応用を目指した半導体微細加工技術による微細化熱電デバイスの開発

研究内容



- ① 熱電変換物質の候補物質の選択やその特性向上には、電子状態の理解と制御が欠かせません。優れた熱電変換特性を示す物質が多く存在するイオン性遷移金属化合物群に着目し、キーとなる電子状態パラメータのデータベースを構築しました。このデータベースを用いた俯瞰的な分析から、熱電変換物質の新しい設計指針を提案しました。[*Journal of the American Chemical Society* 144, 3590-3602 (2022).]
- ② 所望の特性を示す試料を合成するためには、複数存在する合成パラメータの最適な組み合わせを決定する必要があります。パラメータの推測・最適化のために機械学習による意思決定プロセスを導入した「closed-loop薄膜作製手法」を開発し、必要とされる実験回数の大幅な削減に成功しました。[*Materials Today Physics* 16, 100296 (2021), 応用物理 Vol.91, No.4, p.224 (2022).]
- ③ 半導体微細加工技術を用いて作製した微小熱電デバイスの開発に成功しました。高い出力密度とIoT機器駆動の目安となる0.5Vを超える出力電圧を実現しました。[*Materials Today Energy* 28, 101075 (2022), クリーンエネルギー vol.31, No.11, p.15 (2022), *Applied Physics Letters* 122, 243901 (2023).]

まとめ

各種インフォマティクス手法を新物質開拓・デバイス開発研究の各所に導入する試みを実施しています。物質・材料研究のDX化を推進するために、これまで開発してきた要素技術のさらなる高度化とシステム化、さらに各プロセスにおける計算科学と実験研究の有機的な融合を目指した研究を行います。

論文・特許

- I. Ohkubo and T. Mori, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 3590–3602 (2022).
- I. Ohkubo, M. Murata, M. S. L. Lima, T. Sakurai, Y. Sugai, A. Ohi, T. Aizawa, and T. Mori, *Mater. Today Energy*. **28**, 101075 (2022).
- I. Ohkubo, Z. Hou, J.N. Lee, T. Aizawa, M. Lippmaa, T. Chikyow, and K. Tsuda, *Mater. Today Phys.* **16**, 100296 (2021).

金属酸化物の新奇熱物性探索と結晶育成

Keywords 熱伝導率, 比熱, 熱膨張率, 酸化物, 結晶育成

主任研究員 / Senior Researcher

橘 信 Tachibana Makoto

✉ TACHIBANA.Makoto@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tachibana_makoto



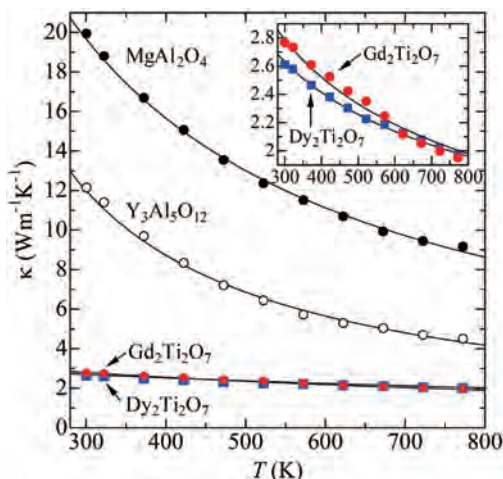
研究概要

従来の熱物性(熱伝導率, 比熱, 熱膨張率)研究は、低温に注目した基礎固体物理の研究と、高温に注目した応用材料の研究に大きく分かれていた。本研究では、固体物理の視点から主に金属酸化物の高温熱物性に注目し、新しい現象を開拓するとともに熱電変換や熱遮蔽コーティングなどへの実用化につながるような特性を導き出していく。また、特異な熱物性現象をより明確に発現させるために、酸化物の良質な単結晶を育成する。

新規性・独創性

- 固体物理のアプローチによる新奇な高温熱物性の開拓
- 高精度、高確度の熱物性測定
- 良質な単結晶育成

研究内容



パイロクロア型の酸化物 $R_2Ti_2O_7$ (R =希土類)は熱伝導率が異常に低く、空气中で高温まで安定であるため熱遮蔽コーティング材料への応用が期待できる。しかし、これまでの研究例は多結晶によるものであり、低い熱伝導率はこの物質の本質的な振る舞いであるのか不明であった。本研究ではフラックス法により良質で大型の $Gd_2Ti_2O_7$ と $Dy_2Ti_2O_7$ の単結晶の育成に成功し、高温の熱伝導率を正確に測定した。左の図は $Gd_2Ti_2O_7$ と $Dy_2Ti_2O_7$ の熱伝導率を単結晶の $MgAl_2O_4$ と $Y_3Al_5O_{12}$ の値と比較したものであり、パイロクロアでは本質的に熱伝導率が低いことが分かる。右の図は育成した $Gd_2Ti_2O_7$ の単結晶であり、サイズは1.5cm程度である。この結晶育成法は他の材料への応用が期待できる。

まとめ

金属酸化物は空气中で高温まで安定であり、多彩な物性を示すことから多くの実用材料に使われている。しかし、確かな固体物理の視点から高温の熱物性研究を展開している例は非常に少ない。本研究では、役に立つ新しい現象の発現を目指した物性研究・開発を実施する。

論文・特許

- M. Tachibana, A. R. Muchtar, and T. Mori, *Phys. Rev. Mater.* **6**, 045405 (2022).
- M. Tachibana, C. Bourges and T. Mori, *Appl. Phys. Express* **15**, 121003 (2022).
- M. Tachibana, *Beginner's Guide to Flux Crystal Growth*, Springer Japan, ISBN 9784431565871 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高バッチ・バイオ材料

マテリアル基盤

フォノンエンジニアリングによる高性能熱機能材料の創製

Keywords 熱電変換材料, 熱輸送, フォノン, 第一原理計算

研究員 / Researcher

佐藤 直大 Sato Naoki

✉ SATO.Naoki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sato_naoki



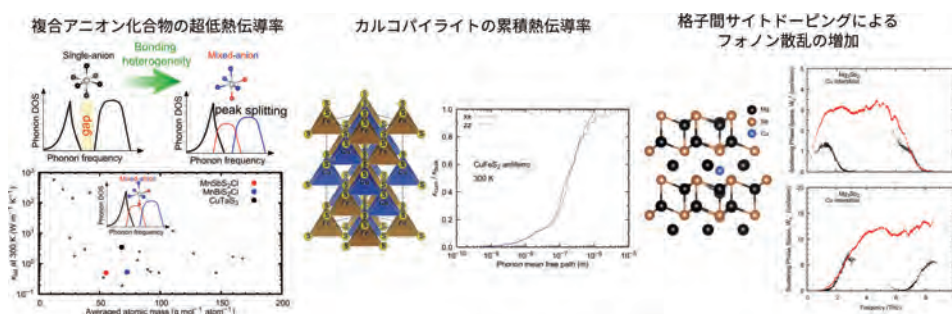
研究概要

熱電変換材料や放熱材料をはじめとした多くの機能材料において、熱伝導率は材料性能を左右する重要な物性値である。物質中では主に電子と格子振動（フォノン）が熱を運び担い手であるため、これらを精密に制御する方法論の確立が材料の高性能化に直結する。とりわけ、フォノンに由来する熱伝導のみを独立的に制御する技術のニーズが熱電変換などの分野で高まっている。そこで、第一原理計算などの理論計算手法を駆使した結晶構造や欠陥、微細組織の設計を通じて選択的にフォノンを制御し、所望の熱的特性を実現する「フォノンエンジニアリング」に立脚した材料研究を行っている。

新規性・独創性

- きわめて低い/高い熱伝導率を発現する結晶構造・局所構造のデザイン
- 未開拓物質群における新たな熱機能開発
- 所望の熱伝導率を実現する微細構造サイズの理論予測と実証
- 電子バンド・フォノンバンドの同時最適化による高性能熱電材料の創製
- 安価・低毒性・資源豊富な新規高性能材料の探索

研究内容



フォノンによる熱伝導率の大小を決定する内因的・外因的要素を理論計算と実験の両面から明らかにし、その結果に基づいて機能材料設計を行っている。歪んだ局所構造を有する複合アニオン化合物において、結合の強弱が著しく不均一になっているために周波数空間上で多様な振動状態が現れることを明らかにした。これに起因して、いくつかの複合アニオン化合物が、比較的軽元素から構成されるにもかかわらずきわめて低い熱伝導率が発現していることを理論計算と実験の両面から明らかにした。安価で環境調和性の高い熱電材料として期待される硫化物カルコパイライトの熱伝導率を低減するために、どの長さスケールのフォノンがどれだけ熱伝導率に寄与するのかを表す累積熱伝導率を理論計算によって求め、適切な微細構造のサイズを明らかにした。高性能熱電材料として知られる Mg_3Sb_2 において、特定の格子間サイトへのドーピングによってフォノンの散乱確率が著しく増加することを予測し、これに基づいて合成した試料において、大幅な熱伝導率の低減と熱電性能の向上を達成した。

まとめ

- 理論計算と実験の手法を駆使して熱伝導率を制御する内因的・外因的要素を解明
- 理論設計に基づいた低熱伝導率材料や高性能熱電材料の開発
- 材料の熱伝導率を自在に制御する技術を突き詰めることによって、さまざまな機能材料、エネルギー関連材料の高性能化が期待

論文・特許

- N. Sato, N. Kuroda, S. Nakamura, Y. Katsura, I. Kanazawa, K. Kimura and T. Mori, *J. Mater. Chem. A* **9**, 22660-22669 (2021).
- N. Sato, P. S. Gan, N. Tsujii and T. Mori, *Appl. Phys. Express* **14**, 087002 (2021).
- Z. Liu, N. Sato, W. Gao, K. Yubuta, N. Kawamoto, M. Mitome, K. Kurashima, Y. Owada, K. Nagase, C. H. Lee, J. Yi, *et al.*, *Joule* **5**, 1196-1208 (2021).

中低温廃熱回収用新規熱電材料の開発

Keywords 熱電材料, 第一原理計算, バンドエンジニアリング

研究員 / Researcher

岩崎 祐昂 Iwasaki Yutaka

✉ IWASAKI.Yutaka@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/iwasaki_yutaka



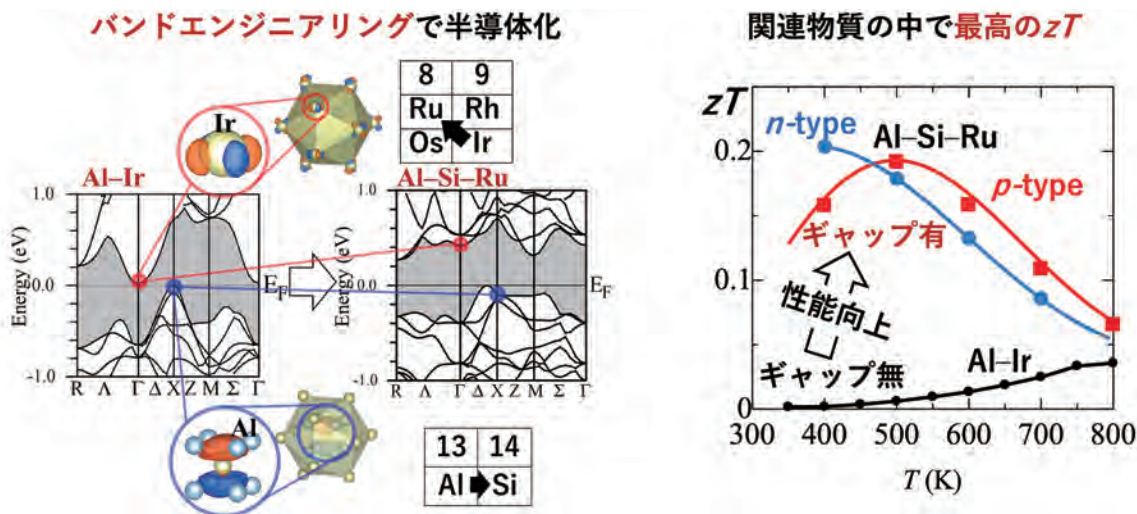
研究概要

体温や電子機器から生じる微小な熱、工場・自動車から生じる中高温廃熱を利用して発電する熱電材料は持続可能な社会の実現に貢献する材料として注目を集めている。しかし、変換効率の高い熱電材料の多くは、毒性・希少元素を含む、熱・化学的安定性が悪い、機械強度が十分でない等の多くの問題を抱えており、幅広い実用化には至っていない。本研究では金属的な性質を持つ合金系材料に半導体的特性を持たせることでこれらの問題を解決する材料を開発することを目指す。これにより、熱電材料として適していないとされていた金属的な性質を持つ材料が半導体化することによって高性能化する可能性があり、材料探索の幅が拡張される。

新規性・独創性

- 従来は金属的な性質のものしか見つかっていなかった合金系で半導体的性質のものを発見
- 第一原理計算を用いた軌道解析によってバンド構造の制御指針を見出す
- 室温付近で熱電材料の無次元性能指数 zT を最大化する材料を創製
- 元素置換によってp,n特性を制御可能であり、モジュール化に適している
- 良好な熱的・力学的特性を持つ材料を創製

研究内容



我々は近似結晶と呼ばれる低い熱伝導率を示す複雑構造固体を熱電材料として応用する研究を進めてきた。しかし、半導体の近似結晶は当時見つかっておらず、高い無次元性能指数 zT が出ないことが問題であった。そこで、ギャップの閉じた半金属的なバンド構造を持つAl-Ir系近似結晶に注目し、バンド端の電子軌道を可視化することでギャップを広げる指針を得た(図1(左))。その結果、Alの一部をSiで置換し、IrをRuで置換することでギャップを広げ、Al-Si-Ru系で世界初となる半導体の近似結晶を創製した。また、キャリアドーピングによってp型とn型の作製も可能となり、それぞれの極性で関連物質最大の zT を得ることに成功した(図1(右))。

まとめ

熱電材料に適していない金属的な性質を持つ材料に半導体的特性を持たせることで新たな熱電材料を開発することを目指す。これにより、熱電材料として適していないとされていた金属的な性質を持つ材料が半導体化することによって高性能化する可能性があり、材料探索の幅が拡張される。実際にAl-Si-Ru系近似結晶で半導体の作製とp型n型で関連物質中最高性能を得ることに成功した。

論文・特許

- Y. Iwasaki, K. Kitahara and K. Kimura, *Phys. Rev. Mater.* 5, 125401 (2021).
- Y. Iwasaki, K. Kitahara and K. Kimura, *Phys. Rev. Mater.* 3, 061601 (2019).

Synthesis of functional organic chromophores

Keywords Functional Chromophores, Self-assembly, Supramolecular Chemistry

グループリーダー／ Group Leader

ヒル ジョナサン Hill Jonathan

✉ JONATHAN.Hill@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/jonathan_hill



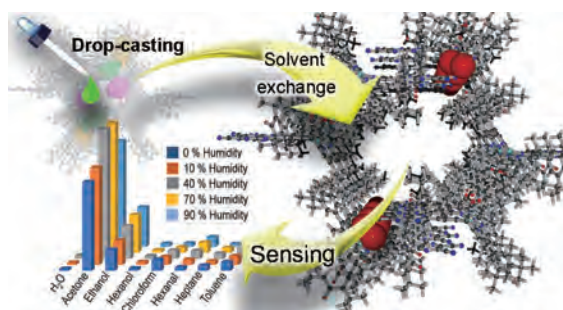
Research Summary

Organic molecular dyes are highly colored materials with a wide variety of applications. In nature, these important materials are used to harvest light energy from sunlight (e.g., chlorophyll) but also achieve other critical functions such as electron transport (cytochromes) and oxygen transport (heme). Organic synthetic pigments are therefore a significant class of materials in a wide variety of applications including solar cells, sensing and molecular electronics.

Novelty / Originality

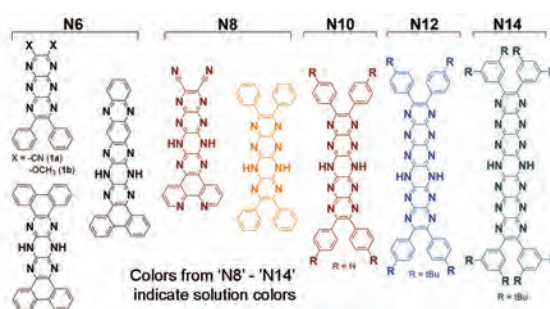
- Organic synthetic techniques allow highly flexible design of molecular species.
- New classes of compounds are prepared in our laboratories, including fuchsonarenes and pyrazinacenes (see below).
- Novel dyes have excellent properties such as excellent sensing properties, strong singlet oxygen generation, and intense wavelength-tunable fluorescence.
- Nanostructure can be controlled for crystalline porous and liquid crystalline materials.

Research Contents



Porphyrins are an important class of materials due to their high chemical stabilities and flexibility of synthesis. We have used these aspects to prepare persistently porous porphyrin derivatives with strong selective and sensitive responses for acetone (an important analyte in diabetes diagnosis) in conjunction with a nanomechanical sensor. This easy-to-prepare (by simple drop-casting - see left) molecule-based device can be used for field testing with high sensitivity. Similar molecules, such as the fuchsonarenes, can be adapted for efficient singlet oxygen generation for applications in photodynamic therapy of cancers.

The pyrazinacenes are highly nitrogen-containing analogues of pentacene, which is a widely-studied organic semiconductor. In contrast to pentacene, pyrazinacenes are highly stable, and their optical absorption and fluorescence properties can be modulated by varying their molecular structures (see figure at right). In this work, molecules suitable for uses in organic solar cells or as fluorescent dyes have been prepared and are superior to the materials currently in use in those applications.



Summary

Novel families of molecular materials can be prepared by using organic synthesis techniques. The in-depth study of these new materials can lead not only to improvements in existing technologies but also to discoveries of new applications for new classes of exotic molecules.

References

- M. K. Chahal, S. Maji, A. Liyanage, Y. Matsushita, P. Tozman, D. T. Payne, W. Jevasuwan, J. P. Hill, *et al.*, *Mater. Chem. Front.* **7**, 325-332 (2023).
- C. Bloyet, F. Sciortino, Y. Matsushita, P. A. Karr, A. Liyanage, W. Jevasuwan, N. Fukata, S. Maji, J. P. Hill, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 10830-10843 (2022).
- G. J. Richards and J. P. Hill, *Acc. Chem. Res.* **54**, 3228-3240 (2021).

Organic helical nanowire based neuromorphic quantum computer

Keywords Quantum optics, Helical nanowire, Quantum computing

主幹研究員／Principal Researcher

バンディオパダヤイ アニルバン Bandyopadhyay Anirban

✉ ANIRBAN.Bandyopadhyay@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/anirban_bandyopadhyay



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Research Summary

- Industry needs room temp quantum tech.
- Quantum optics: affordable, powerful processing for life-changing impact.
- 3D light hologram: quantum tech at room temp, ambient atmosphere.
- Organic nanowire + quantum optics = sensing, memory, processing.
- Cryogenic-free scalable quantum tech not exist, we solved both

Novelty / Originality

- Room temp: 3D photon survives, auto-corrects errors.
- Our 5K-qubit processor could model untrained big data.
- Scalability and auto quantum error correction
- Quantum teleportation and Quantum tomography are achieved
- Optical time crystal based generic machine language developed

Research Contents



- Our quantum computer models rapidly changing big data
- Understanding unknown data instantly
- Unearthing hidden intelligence in an unknown data
- We are planning TTO Nanobraintech for licensing the patents
- <https://www.brainrhythm.org/optical-vortices-based-quantum-computer>

Summary

- Our product would be a quantum computer for modeling untrained big data
- Deep learning cannot solve rapidly changing big data
- We want to make a commercial laptop like intelligent assistant

References

- P. Sahoo, P. Singh, J. Manna, R. P. Singh, J. P. Hill, T. Nakayama, S. Ghosh and A. Bandyopadhyay, *Symmetry* **15**, 158 (2023).
- 特許第6967311号 クロッキングレゾネータのアセンブリ中でのビッグデータ処理のための一般幾何学・音楽言語
- 特許第6976007号 人間の頭脳に似た知的意思決定機械

Functional nanoscale metals

Keywords Nanoparticle synthesis, Electrocatalysis, Sensing

主幹研究員／Principal Researcher

ヘンジー ジョール Henzie Joel

✉ HENZIE.Joeladam@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/henzie_joeladam



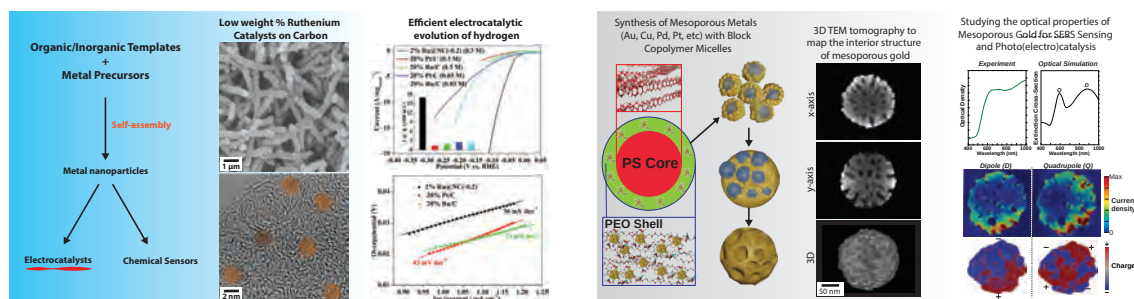
Research Summary

- Developing inexpensive methods to organize nanoscale metals.
- Creation of metals with high chemical reactivity due to surface area and crystallographic facets.
- Improving material utilization efficiency of precious metals.
- Measuring and simulating the optical properties of metals.
- Developing shaped metals for optical sensors.

Novelty / Originality

- We have shown that mesoporous metals have highly reactive surfaces and serve as high-performance electrocatalysts.
- Mesoporous metals can be alloyed with different transition metals and some nonmetals like phosphorus/boron.
- Porous metals can be assembled on 3D supports to serve as chemical sensors and catalysts.
- Porous metals can interact strongly with light and generate highly localized electromagnetic fields that are capable of driving interesting organic transformations.

Research Contents



We use inexpensive organic or inorganic templates to self-assemble metal precursors in space and transform them into chemically reactive metal nanoparticles with high surface areas and numerous dangling bonds. For example, we created a method to make Ruthenium (Ru) nanoparticle catalysts for the hydrogen evolution reaction (HER). By carefully controlling the nanoparticles in space, we could achieve good HER performance with only a 2% loading of Ru metal.

We develop simple methods to create mesoporous nanoparticles in various noble and coinage metals (e.g., Au, Pt, Pd, Cu, etc.). These metals support plasmon resonances that absorb and manipulate light at the nanoscale. We synthesized mesoporous Au and then developed methods to image their interior structure using electron tomography. Then we input this structure into an electromagnetic solver to study its optical properties. The metal supports strong dipolar and quadrupolar plasmon resonances that we can use to drive photochemical reactions and sense molecules with surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS).

Summary

We are exploring new ways to organize metals with nanoscale precision using wet chemical techniques and then use the resulting structures for electrocatalysis and chemical sensing. We cover all aspects of materials research, from synthesis to structural characterization to theoretical modeling. Achieving high material utilization efficiency is essential to effectively scale methods that require the use of precious metals.

References

- A. S. Nugraha, O. Guselnikova, J. Henzie, J. Na, M. S. A. Hossain, Ö. Dag, A. E. Rowan and Y. Yamauchi, *Chem. Mater.* **34**, 7256-7270 (2022).
- Z. Wang, K. Sun, J. Henzie, X. Hao, C. Li, T. Takei, Y. Kang and Y. Yamauchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 5848-5852 (2018).

Multi-responsive porphyrin/polymer systems

Keywords Porphyrins, Polymers, Chirality, Phase separation, Sensing, Imaging

主任研究員 / Senior Researcher

ラブタ ヤン Labuta Jan

✉ LABUTA.Jan@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/labuta_jan



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

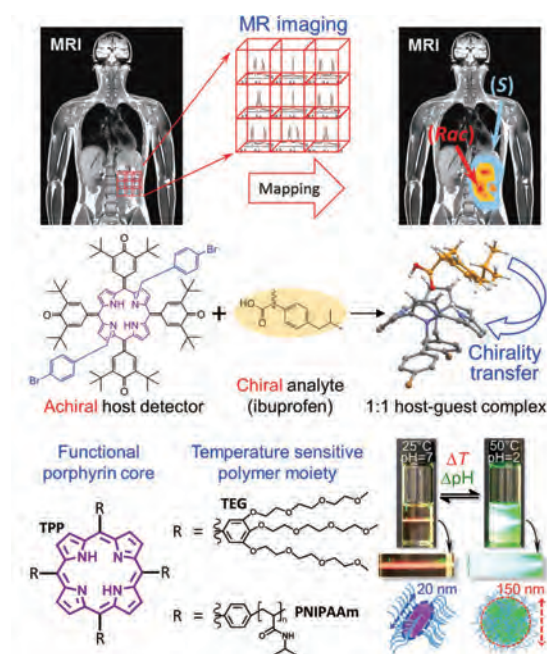
Research Summary

A combination of porphyrin functional macrocycle with suitable stimuli-responsive polymer is a promising route to materials, which can be used for various sensing applications, such as enantiopurity detection, selective detection of anions or impurities, or colourimetric detection of pH or temperature.

Novelty / Originality

- Unimolecular systems capable of multiple functions (e.g. sensing and therapeutic action).
- Water-soluble, biocompatible and biodegradable.
- Potential for in situ or in vivo local chirality imaging.
- A wide range of synthetic modifications can be used to tune/modify properties.

Research Contents



Development of magnetic resonance (MR) imaging of enantiomeric excess (ee), which can be used to monitor *in situ* or *in vivo* local ee, ideally with sub-millimetre spatial resolution. The key is the transfer of chiral information from *chiral* analyte to *achiral* detector (a porphyrin-type molecule) with subsequent detection by MR. This system is also of note from the point of view that it does not rely on the formation of diastereomers. This is perhaps counterintuitive given the prevailing opinion that formation of diastereomers is required in the NMR analysis of ee. We call this type of *achiral* porphyrin detectors a *pro-chiral* solvating agents (*pro-CSAs*).

Further peripheral modifications by tetraethylene glycol (TEG) or poly(*N*-isopropylacrylamide) (PNIPAAm) makes the core porphyrin (TPP) molecules water-soluble. This introduces temperature sensitivity through a phase separation phenomenon and subsequent formation of various supramolecular assemblies, such as 1D supramolecular polymers or large spherical globules.

Summary

The method has the potential for further improvements and applications in, for example, pharmaceutical research, where various chiral interconversion, enantioenrichment, or racemization reactions may be studied.

References

- N. Velychkivska, O. Sedláček, Anastasiia B. Shatan, M. Spasovová, S. K. Filippov, M. K. Chahal, J. Labuta, *et al.*, *Macromolecules* **55**, 2109-2122 (2022).
- J. Labuta, J. P. Hill, S. Ishihara, L. Hanyková and K. Ariga, *Acc. Chem. Res.* **48**, 521-529 (2015).
- 特許第6478188号 NMR用キラルシフト剤、および、それを用いた光学純度を決定する方法

百万倍の感度でターゲットをセンシングできる分子膜

Keywords 単分子膜, 界面, 分子認識, センシング

グループリーダー / Group Leader

有賀 克彦 Ariga Katsuhiko

✉ ARIGA.Katsuhiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ariga_katsuhiko



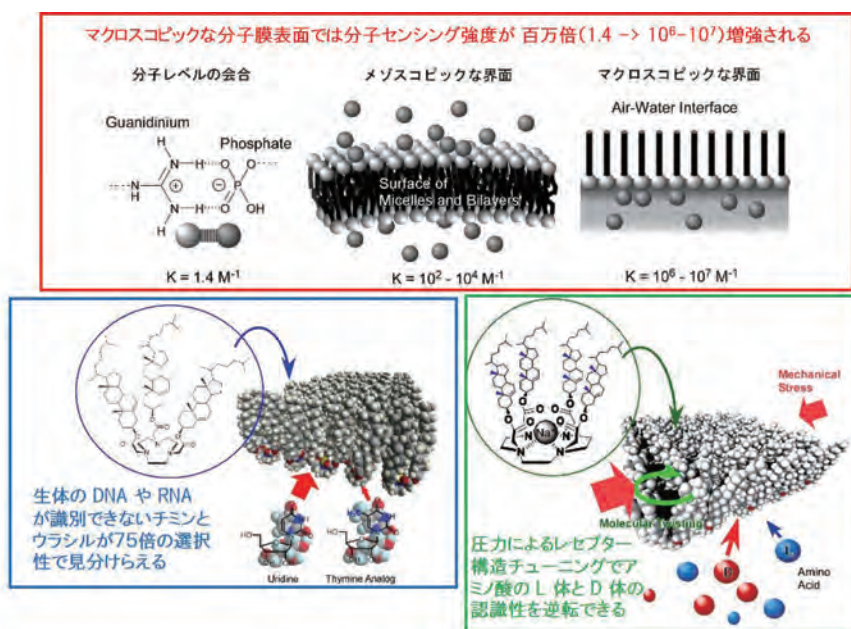
研究概要

生体系は溶液中ではなく様々な界面を用いて分子識別を行っている。それを人為的に再現・解明する。界面では、微細な力で分子を変形させることができる。これを機能開発につなげる。

新規性・独創性

- 界面での特異的分子間相互作用の増強効果を解明する(ラングミュア型分子薄膜100年の歴史の最大の発見)。
- 界面での分子チューニングという世界初の動作原理での分子センシング機構を確立する。

研究内容



まとめ

- 構造を完全に分子レベル制御した表面では分子認識性が百万倍程度増強される。
- 界面でレセプターを変形チューニングすると生体分子ですらできない分子センシングができる。

論文・特許

- K. Ariga, *Chem. Nano. Mat.* 2, 333-343 (2016).

フラーレンベースの新しいナノ多孔質炭素材料の設計

Keywords 自己組織化, 機能性材料, センシング, エネルギー貯蔵, エネルギー変換, 生物学的应用

主幹研究員 / Principal Researcher

スレスタ ロック クマール Shrestha Lok Kumar

✉ SHRESTHA.Lokkumar@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/shrestha_lokkumar



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

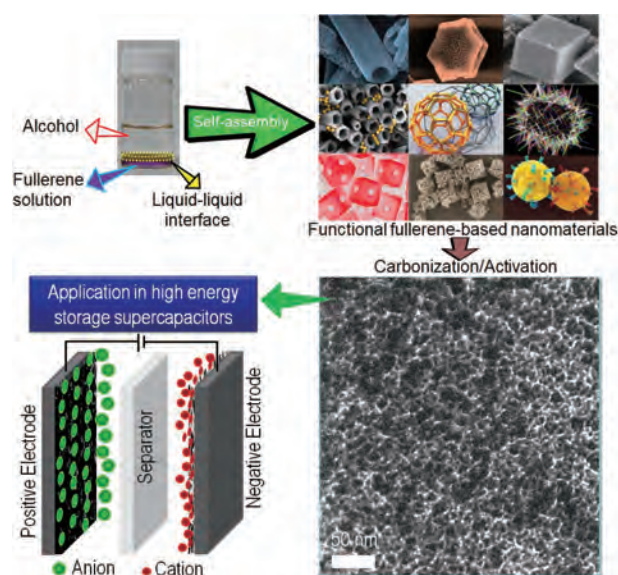
Research Summary

Fullerenes (C60 or C70) are zero-dimensional functional molecules that undergo supramolecular self-assembly due to their high symmetries and extended p-conjugated systems and form various shape-controlled micro- or nanosized crystalline objects. In NIMS, we have developed method to directly convert these highly crystalline p-electron-rich fullerene nanomaterials into hierarchically porous graphitic carbon materials with high surface area and interconnected pore structures by high-temperature carbonization, which have significant potential as electrode materials in state-of-art electrochemical energy storage supercapacitors.

Novelty / Originality

Porous carbon materials obtained from fullerene crystals exhibit a unified shape and size followed by superior electrochemical energy storage performance over conventional carbon materials because of their large surface areas, improved electrical conductivities, well-defined pore size distributions, and hierarchical and interconnected pore architectures.

Research Contents



We have recently demonstrated novel hollow carbon spheres with hierarchically porous architectures by high-temperature carbonization of self-assembled fullerene-ethylenediamine hollow spheres (FE-HS). FE-HS were prepared by using a dynamic liquid-liquid interfacial precipitation (DLLIP) method at ambient conditions of temperature and pressure. High temperature carbonization (at 700, 900, and 1100 °C) of the FE-HS yielded nanoporous (micro/mesoporous) hollow carbon spheres with large surface areas (612 to 1616 m² g⁻¹) and large pore volumes (0.925 to 1.346 cm³ g⁻¹) dependent on temperature applied. The sample obtained by carbonization of FE-HS at 900 °C (FE-HS_900) displayed optimum surface area and exhibited remarkable electrochemical electrical double-layer capacitance properties in aq. 1 M sulfuric acid due to its well-developed porosity, interconnected pore structure, and large surface area. The symmetric supercapacitor cell assembled using FE-HS_900 attained 164 F g⁻¹ at 1 A g⁻¹ with sustained 50% capacitance at 10 A g⁻¹ accompanied by 96% cycle life and 98% coulombic efficiency after 10,000 consecutive charge/discharge cycles.

Summary

Thermal annealing processes disrupt the fullerenes carbon-only skeleton contained within the self-assembled structures, maintaining the basic morphology of the starting material, accompanied by surface roughening and the emergence of a high porosity carbon network essential to enhance the energy storage, conversion, and sensing performance.

References

- L. K. Shrestha, Z. Wei, G. Subramaniam, R. G. Shrestha, R. Singh, M. Sathish, R. Ma, J. P. Hill, J. Nakamura and K. Ariga, *Nanomaterials* **13**, 946 (2023).
- L. K. Shrestha, S. Shahi, C. L. Gnawali, M. P. Adhikari, R. Rajbhandari, B. P. Pokharel, R. Ma, R. G. Shrestha and K. Ariga, *Materials* **15**, 8335 (2022).

超分子ドーピングによる有機半導体材料・デバイス開発

Keywords 有機半導体, ドーピング, センサ

研究員 / Researcher

山下 侑 Yamashita Yu

✉ YAMASHITA.Yu@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamashita_yu



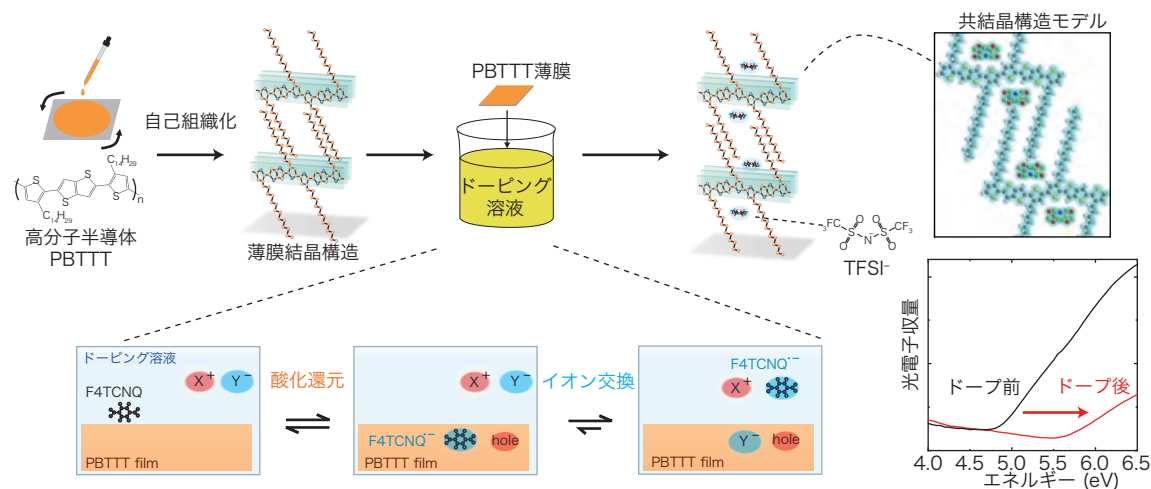
研究概要

機械学習やAI分野の進展にも後押しされ、物理・化学的な情報を取得するセンサや電子デバイスを多機能かつ多点で実装する技術への期待が高まっています。こうしたデバイスを印刷などの溶液プロセスで実現する次世代材料として、インク状態になる有機分子性半導体が期待されています。分子レベルのナノ構造設計により、従来にはない結晶性、ドーピング制御性、大気下プロセス性を示す材料を開発しています。設計された構造が自発的に形成される自己組織化プロセスにより簡単かつ歩留まりの高い生産技術にも重点を置いています。これらの取り組みから、分子認識、センシング、情報通信、エネルギーハーベストなどの機能性を実現する革新的な有機材料を生み出します。

新規性・独創性

- 有機半導体ドーピング量を均一かつ精密に大気下で制御
- 電子デバイス応用をドーピングプロセス開発とドーパント分子設計により実現
- センシングや仕事関数制御など多様な機能性を導入可能な超分子システムを構築

研究内容



有機半導体は簡単に製膜できる一方で、ドーピング量を制御することは困難でした。シリコン半導体では精密なドーピング制御により電子デバイスが実現しており、有機半導体を用いた太陽電池、集積回路、センサなどのデバイスを高性能化する上でドーピング制御は不可欠です。これまでに、高分子半導体の結晶性薄膜に対して、酸化還元とイオン交換を用いるドーピング手法を開発しました。結晶構造の隙間にドーパントイオン分子を導入する共結晶構造の設計により、再現性良くドーピング量を制御することに成功しました。高ドーピング量では白金に匹敵する高仕事関数も実現できることが光電子分光測定から分かっており、デバイス応用へと展開しています。

まとめ

溶液プロセス、酸化還元、イオン交換を駆使して半導体分子とドーパント分子が組み合わせあった共結晶構造を自己組織化によって形成することに成功しました。今後はさらに多様な分子との超分子構造を設計することで、革新的なイオン・分子認識センサやエネルギーハーベス・電子デバイスを大気下溶液プロセスによって実現することを目指します。

論文・特許

- Y. Yamashita, J. Tsurumi, T. Kurosawa, K. Ueji, Y. Tsuneda, S. Kohno, H. Kempe, S. Kumagai, T. Okamoto, J. Takeya, *et al.*, *Commun. Mater.* **2**, 45 (2021).
- 山下 侑, 竹谷 純一, 渡邊 峻一郎, *応用物理* **89**, 594-597 (2020).
- Y. Yamashita, J. Tsurumi, M. Ohno, R. Fujimoto, S. Kumagai, T. Kurosawa, T. Okamoto, J. Takeya and S. Watanabe, *Nature* **572**, 634-638 (2019).

発光/受光波長を広帯域で変調できる微粒子の合成と応用

Keywords 新物質創製, 電界発光, 光電変換, 光熱変換, 蛍光標識材料, モニター粒子, ハイパーサーミア

グループリーダー / Group Leader

白幡 直人 Shirahata Naoto

✉ SHIRAHATA.Naoto@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/shirahata_naoto



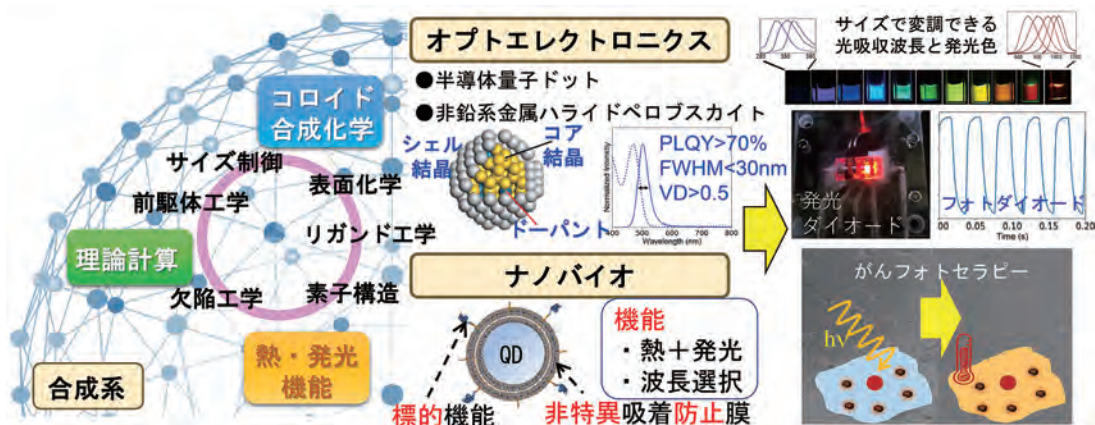
研究概要

「光」の工学的な活用が進み、電界発光、光電変換や光熱変換を利用した材料の活躍の場が広がっている。最近では、受光や発光特性に対し精緻な波長選択性が要求されるケースが増えている。我々は、受光/発光を担う活物質の合成に取り組んでいる。具体的には、湿式合成を基盤にして、前駆体工学とリガンド工学を巧みに組み合わせることで、紫外～可視～短波赤外の広帯域における任意の波長で発光/受光特性を示す微粒子を開発している。そして、それら微粒子を活物質に具備する発光ダイオード、フォトダイオードなどの光エレクトロニクス素子や医療診断に貢献する水溶性微粒子の創製を進めている。

新規性・独創性

- カドミウムや鉛など環境・人体に対し毒性の高い元素を含まない微粒子
- 300–1600nm波長域において任意の波長の光を選択的に受光/発光する微粒子
- 外部から照射した光を効率良く熱に変換する水溶性/油性微粒子
- 光起電力型フォトダイオード
- 発光色可変発光ダイオード

研究内容



左図に我々の研究の進め方を示している。具体的には、前駆体工学と計算科学を駆使しコロイダル結晶を合成する。所望の発熱・受光・発光特性を得るためにドーピング技術と欠陥エンジニアリングを巧みに使いこなし機能の発現・増強を図り、一方、光学スペクトル特性の均質化は微粒子のサイズ制御で達成する(中段上図)。合成したコロイダルインクから素子の作製を行っている。例示すると、波長可変発光ダイオード、光起電力型近赤外フォトダイオード、そしてバイオイメージングマーカー、フォトサーマルセラピー粒子である(右図参照)。オプトエレクトロニクス応用に向けては、IV族、III-V族の半導体量子ドットや非鉛系ペロブスカイト結晶の微粒子を合成し、サイズやドーパントによりバンドギャップを制御、表面配位子による無輻射失活の抑制から高量子収率で発光/受光する微粒子を調製している。さらに成膜し、デバイスのプロトタイプを製作している。医療診断用材料の創製に向けては、微粒子表面を改質することで水溶性を付与、標的細胞への選択性を高める表面制御技術の開発を進めている。さらに微粒子が示す光熱変換特性を活用したナノセラピー技術への開拓にも取り組んでいる。

まとめ

近年、急速に進歩しているプリンタブルテクノロジーと相性の良い受光/発光無機コロイダルインクを合成開発している。合成対象は、資源性に富み、環境や人体に対し毒性が低い元素で構成される無機結晶微粒子であり、結晶の構造を精密制御することで、蛍光特性・電界発光・光電変換・光熱変換特性の増強を実現してきた。さらに、優れた光学特性をもたらす学理を解明することで、新奇な光学特性を示す新物質創製へつなげたいと研究を進めている。

論文・特許

- K. Nemoto, J. Watanabe, H. Yamada, H. Sun and N. Shirahata, *Nanoscale Adv.* **5**, 907-915 (2023).
- İ. N. G. Özbilgin, T. Yamazaki, J. Watanabe, H. Sun, N. Hanagata and N. Shirahata, *Langmuir* **38**, 5188-5196 (2022).
- J. Watanabe, H. Yamada, H. Sun, T. Moronaga, Y. Ishii and N. Shirahata, *ACS Appl. Nano Mater.* **4**, 11651-11660 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Synthetic chemistry and optoelectronic applications of nanocrystals

Keywords Nanocrystals, Optoelectronic materials, Synthetic chemistry, LEDs, solar cells

主幹研究員 / Principal Researcher

孫 洪涛 Sun Hong-Tao

✉ SUN.Hong-tao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sun_hong-tao



Research Summary

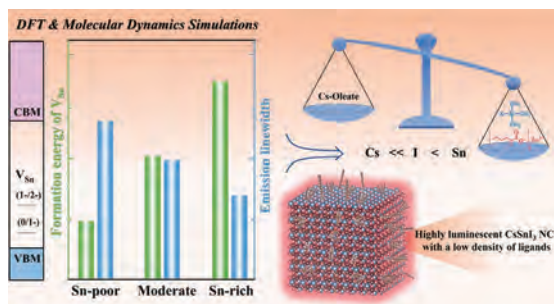
Colloidal nanocrystals have emerged as a class of nanoscale optical materials for optoelectronic applications. However, most colloidal nanocrystals suffer from tedious synthesis methods and existence of toxic elements. My work focuses on the development of novel colloidal nanocrystals that hold potential for LED and photovoltaic applications. Specifically, I try to accelerate the screening of optimal synthetic conditions based on the combination of theoretical calculations and high-throughput experiments. I then use the synthesized nanocrystals with excellent optical properties for constructing high-performance LEDs and solar cells.

Novelty / Originality

- theory-guided synthetic chemistry
- high-throughput synthesis of colloidal nanocrystals

Research Contents

Based on density function theory calculations and molecular dynamics simulations, the chemical potential-dependent formation energies of various defects and the most detrimental point defect for the radiative recombination of charge carriers in targeted systems can be known. Using these critical information as a guideline, colloidal synthesis strategies that benefit the suppression of defect formation are designed. By this means, I have successfully synthesized highly luminescent tin halide perovskite nanocrystals, and will use the concept of "theory-guided synthetic chemistry" to synthesize more nanocrystals with excellent optical properties.



Summary

The use of "theory-guided synthetic chemistry" makes it possible to synthesize hard-to-synthesize colloidal nanocrystals in a labor/resource/time-saving manner. The obtained nanocrystals with excellent optical properties could find broad applications in LEDs and other optoelectronic devices.

References

- B. Zhang, J. Chen, C. Zhang, N. Shirahata and H. Sun, *ACS Mater. Lett.* **5**, 1954-1961 (2023).
- Q. Liu, J. Yin, B. Zhang, J. Chen, Y. Zhou, L. Zhang, L. Wang, Q. Zhao, J. Hou, J. Shu, B. Song, H. Sun, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 5470-5480 (2021).
- B. Zhang, S. Yuan, J. Ma, Y. Zhou, J. Hou, X. Chen, W. Zheng, H. Shen, X. Wang, B. Sun, H. Sun, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **141**, 15423-15432 (2019).

放射光を用いた超高压実験と計算科学の協奏的構造探索

Keywords 放射光, 超高压, 構造探索, ダイヤモンドアンビルセル, 第一原理計算

グループリーダー / Group Leader

遊佐 斉 Yusa Hitoshi

✉ YUSA.Hitoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yusa_hitoshi



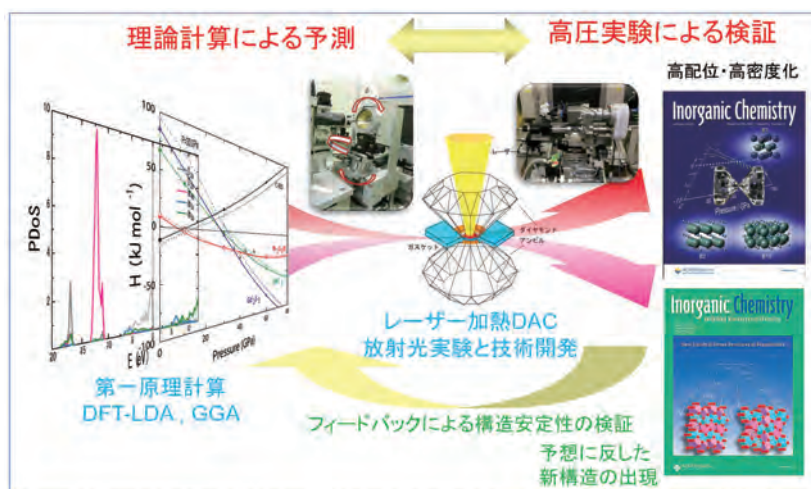
研究概要

ダイヤモンドアンビルセルによる300GPa, 5000Kまでの広大な圧力・温度空間による物質探索を遂行する技術を有する。その中で、膨大な結晶構造・組成対象を取り扱うことができる、一方、目標物質に最短で到達するためには、データ計算科学、すなわちインフォマティクスとの協業が必須である。近年では、高機能物性を示す物質提案はデータ科学から先導されることも多い。結晶構造のみならず、界面・欠陥制御において、データ科学によるスクリーニングを積極的に利用する。また、高压基盤技術を高スループット化の観点から俯瞰することで改善し、実験データ蓄積と計算・データ科学との協奏により研究効率化をはかっている。

新規性・独創性

- 広大な超高压・高温下の合成場におけるターゲット構造の的確な抽出が可能
- 第一原理計算・データ科学との協奏研究により効率的構造探索が可能に
- 先端放射光技術の利用による構造精密化と高スループット化のための高压用回折計の開発
- 実験データの蓄積による新たな構造・機能相関の構築と計算科学へのフィードバックによる構造安定性の検証

研究内容



理論計算から予測される高機能物性を持つ構造・化合物に対して、極めて広範な温度・圧力領域で実証実験を行うことが可能である。レーザー加熱ダイヤモンドアンビルセルは、このような目的に対し最も適したツールである。たとえ極微量の試料容積であっても、先端放射光からの高強度X線源の利用により、高压下での構造を解き明かすことができる。そのための、技術開発も継続的に行っている。高压実験では、計算予測外の構造が発掘されることも多い。その際は、再度、その構造に関して安定性の検証を理論計算から行う。このようにして、イットリウム窒化物やスカンジウム酸化物についての新しい構造が見いだされている(図の右論文表紙参照)。このような物質探索手法は、計算科学の発展と共に、様々な機能性物質の発掘に大きな役割を果たしていくと思われる。

まとめ

- 計算予測と高压実験による構造実証により、以下の研究が加速される。
- 高密度構造および硬質機能・構造相関の追究による、超硬質切削材料候補の提示。
 - 多様な配位構造・結晶サイトを有する構造への発光元素付与による蛍光体材料探索。
 - 高压構造緩和から形成される、準安定・非対称性結晶構造の系統的探索。

論文・特許

- H. Yusa and H. Fujihisaet, *Inorg. Chem.* **61**, 20906-20912 (2022).
- H. Yusa, *Nanoinformatics*, Springer, ISBN9789811076169, 259-277 (2018).
- 特許第5879567号 X線回折試料揺動装置、X線回折装置及びX線回折パターンの測定方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

高圧高温場を用いたナノ構造・電子状態制御

Keywords 金属酸化物, ナノレベル構造体, 超高压下の物性制御, 超・亜臨界水熱場, in-situ表面修飾

主席研究員／Chief Researcher

名嘉 節 Naka Takashi

✉ NAKA.Takashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/naka_takashi



研究概要

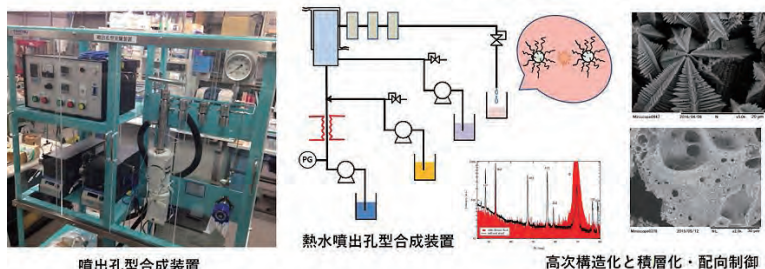
モノづくりの素材として用いられている「微粒子」は、サイズ・形状変化にともなって発現する新規機能を的確に用いることが、新しい材料開発の際のキーポイントになっている。特に磁性、誘電、触媒、光学特性に優れた特性を発現させるためには結晶サイズばかりではなく結晶形状や表出表面を制御する技術は重要な研究開発テーマである。独自の高温・高圧下での物質・材料合成技術を用い表面を有機(生体)分子で修飾されたハイブリッド結晶合成や高圧誘起電子転移を利用した新規材料の開発に取り組んでいる。

新規性・独創性

- (1) 高温高圧の水(超・亜臨界水熱場)を用いた合成法のため低環境負荷
- (2) 無機結晶合成と表面修飾が同時に進行(in-situ表面修飾法)
- (3) 表面修飾された微結晶が溶液中で"新しい化学種"としてふるまう
- (4) 基板への微結晶配向や高次構造体の形成が期待できる

研究内容

in-situ表面修飾による複合微結晶の新規連続プロセス



超臨界水熱場を用いた微結晶合成の研究開発は、有機-無機複合微結晶の合成法が近年急速に進展し、各種金属酸化物に関する合成法が確立されつつある。NIMSでは超臨界水熱場で合成した有機-無機複合微結晶が新しい化学種としてふるまうことを見出した。有機-無機複合微結晶を用いると、粒子間の相互作用により、ナノレベルの高次構造の形成や基板への結晶学的な配向が可能となる。つまり、「ナノレベルからサブミクロンレベルの構造形成能」を有している。また、多孔質や発泡体などのマクロな材料形成も確認されており、その構造体形成のメカニズムも含めさらなる研究開発の推進が必要である。

まとめ

- (1) 複合微結晶間の相互作用や独自の反応性を利用した新しい材料(金属酸化物の発泡体や高次ナノ構造体)を研究開発
- (2) 高圧・高圧で誘起される電子転移状態を常温常圧で安定化させることに成功し、強磁性の増強や交換バイアス効果の発現にも成功
- (3) この電子転移を用いる材料開発は新規性が高く今後急速な発展が期待できる。

論文・特許

- S. Ohara, T. Naka and T. Hashishin, *Sci. Adv.* **8**, eabj2487 (2022).
- 特許第6999140号 金属酸化物からなる発泡体、および、その用途

水素化物等の高圧その場観察と高圧構造物性

Keywords 水素化物, 高密度水素, 水素貯蔵, イオン伝導, 超伝導, 静水圧

主幹研究員 / Principal Researcher

中野 智志 Nakano Satoshi

✉ NAKANO.Satoshi@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakano_satoshi



研究概要

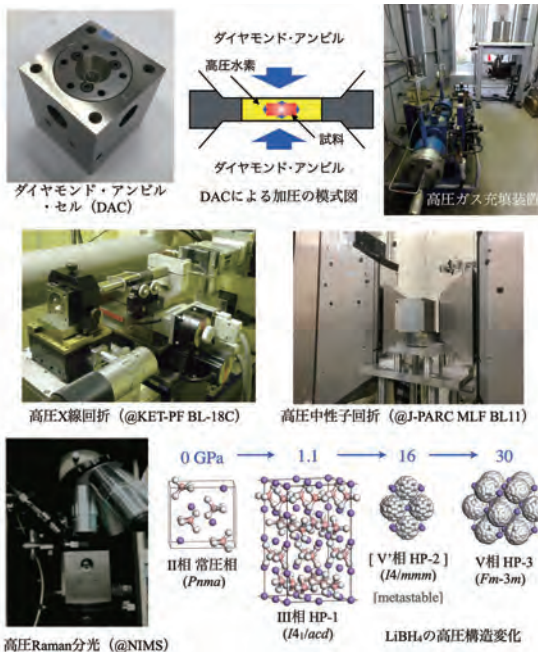
水素社会の実現には、水素利用技術とともに水素や水素化物の基礎的研究が不可欠である。高密度に水素を担持する物質を探索し、その構造と物性を明らかにすることは、水素が秘めた未知の可能性を見出すことに繋がる。

本研究は、高圧装置であるダイヤモンド・アンビル・セル (DAC) と、DACに水素やその他のガスを導入できる高圧ガス充填装置を用いて、数100GPaまでの高圧下で物質と高密度水素との反応や水素化物の構造相転移に関する高圧その場観察を行い、高密度水素化物の構造物性を明らかにする。その場観察の手段は、X線回折、中性子回折、Raman散乱分光などが可能で、これらを相補的に用いる。

新規性・独創性

- 本研究で用いる装置により、不純物の寄与がない純粋な高圧水素と物質との反応を直接その場観察できる。
- より水素密度の高い水素化物を見出し、その構造物性を明らかにすることによって、水素が関与する新規機能性材料の探索や水素の新たな機能を探索できる。
- DACにヘリウムを導入すれば、高静水圧下での高圧実験ができ、物質の高圧物性を適切に評価できる。

研究内容



DACは、数100GPaまでの静的な高圧下で物質の反応や変化をその場観察できる唯一の高圧装置である。さらに、NIMSが所有する高圧ガス充填装置は、DACに高圧ガスを導入する目的に特化した、国内に2つしかない設備である。このような特殊設備を持つアドバンテージを生かし、DACに高圧水素を導入して各種試料の水素化反応や、水素化物の高圧構造変化の観察を行っている。観察手法は、X線回折、中性子回折、Raman散乱分光、赤外吸収分光などで、これらの高圧下その場観察が可能である。これにより、より高い水素密度を持つ新規物質や新規構造を探索するとともに、その構造物性を解明する研究を行っている。

錯体水素化物である LiBH_4 は、従来は主に還元剤としての用途に用いられていたが、その高温相が超イオン導電性を示すことや、重量水素密度・体積水素密度が高く水素貯蔵材料に適することから、新たな応用研究が進められている。本研究では、 LiBH_4 の高密度構造を明らかにするとともに、高圧相が高温相に次ぐ高いイオン伝導性を示すことを見出した。

本設備を用いた研究の対象は、水素関連物質に限らない。窒素ガスを導入すれば窒化物合成の研究も可能となる。また、本設備を用いて静水圧性の高いヘリウムを圧力媒体としてDACに導入することで、試料が受ける剪断応力を最小限に抑え、高圧下でもクオリティの高い回折パターンやスペクトルを得ることができる。

これらの特長をもつ設備を用い、他の研究機関との共同研究を10件以上行っている。

まとめ

- 数100GPaまでの広い圧力範囲で、水素などの高圧ガスと物質との反応や物質の構造変化を、様々な手法でその場観察できるので、水素化物その他の構造物性の解明に寄与する。
- 一方、DACは試料空間が $0.4\text{mm}\Phi \times 0.2\text{mm}$ 以下と小さいため、工業生産のための物質合成には適さない。
- 今後はさらに高圧下で様々な物性測定 (イオン伝導、電気抵抗など) を行うための設備を整備していく。

論文・特許

- S. Nakano, H. Fujihisa, H. Yamawaki and T. Kikegawa, *J. Chem. Phys.* **157**, 234702 (2022).
- S. Nakano, A. Sano-Furukawa, T. Hattori, S. Machida, K. Komatsu, H. Fujihisa, H. Yamawaki, Y. Gotoh and T. Kikegawa, *Inorg. Chem.* **60**, 3065-3073 (2021).
- S. Nakano, H. Fujihisa, H. Yamawaki and T. Kikegawa, *J. Phys. Chem. C* **119**, 3911-3917 (2015).

ベルト型高压装置による薄膜・バルク新物質創製

Keywords 高压, 相転移, 新物質創製, 薄膜, 半導体

主幹研究員 / Principal Researcher

川村 史朗 Kawamura Fumio

✉ KAWAMURA.Fumio@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawamura_fumio



研究概要

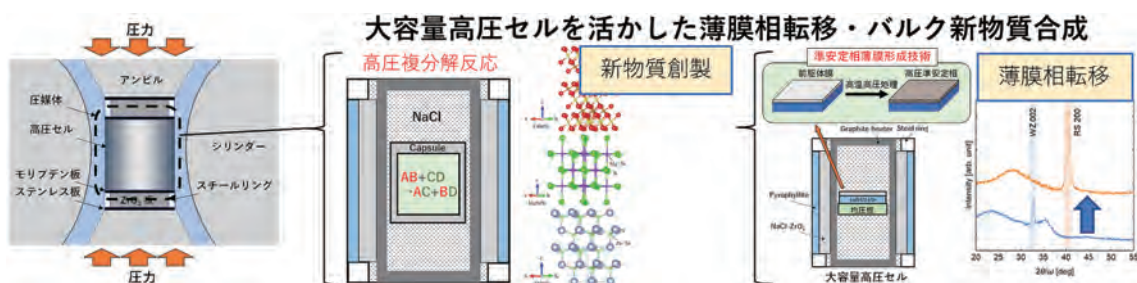
ベルト型高压装置を用いることで、大容量のセル内を約8万気圧、2400℃程度まで高温・高压環境にすることが出来る。セル内で化学反応(特に複分解反応)を進行させることで、多種多様な新物質の創製が可能である。これまでに本手法を用いて、新規窒化物半導体や硬質材料、超伝導物質を合成している。さらに、最近では大容量セルという利点を生かして、薄膜新材料の開発を実施している。

新規性・独創性

従来、高压による物質創製は、常圧相から高压相への相転移を用いることが常套手段であった。この場合、新物質を合成するためには常圧相を準備する必要があり、高压下で得られる物質の組成などに制約を受ける。

現在開発している「高压下での化学反応(特に複分解反応)」を用いることで、相転移させるための常圧相を準備する必要がなくなり、様々な新物質を生み出すことが可能である。

研究内容



左図はベルト型高压装置の概念図を示している。高压セルを超合金アンビルを用いて加圧し、その後通電することで高温・高压が実現する。

中図は、高压セル内で化学反応させる際のセットアップの模式図である。例えば、試薬としてハロゲン化合物とアルカリ土類金属窒化物を組み合わせることで、強力な窒化作用が発生し、様々な新規窒化物が合成される。これまでに層状超伝導物質 ReN_2 、新規硬質材料 W_3N_4 、新規半導体 CaSnN_2 及び MgSnN_2 等が新物質として合成されている。これらの材料を将来的にデバイス展開するために薄膜化技術にも取り組んでいる。右図は、高压下でバルク合成された新規半導体 MgSnN_2 を薄膜に展開した例である。スパッタ装置を用いて、目的組成の前駆体薄膜を基板上に形成した後に、ベルト装置内で基板ごと高温・高压処理することで、 MgSnN_2 高压相薄膜の回収に成功している。

薄膜の高温・高压処理は既存の半導体薄膜の超高温アニール等にも応用することが可能であり、従来n型しか得られなかった半導体材料のp型化技術などへの展開も期待出来る。

まとめ

近年、急速に進展しているベルト型高压装置を用いた新物質創製の更なる発展と共に、薄膜材料の高温・高压相転移、或いは薄膜の高压アニール技術による新材料開発を通じて、新たなデバイスの実現に向けて今後も精力的な開発を実施していく。

論文・特許

- F. Kawamura, H. Murata, M. Imura, N. Yamada and T. Taniguchi, *Inorg. Chem.* **60**, 1773-1779 (2021).
- 川村 史朗, 山田 直臣, *応用物理* **89**, 92-96 (2020).
- 特許第6950942号 窒化レニウムを含有する硬質材料、その製造方法およびそれを用いた切削工具

超高压環境を利用した新規超硬質材料の探索

Keywords 高压合成, 超硬質材料, 新物質探索, 遷移金属化合物

主任研究員 / Senior Researcher

川嶋 哲也 Kawashima Tetsuya

✉ KAWASHIMA.Tetsuya@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawashima_tetsuya



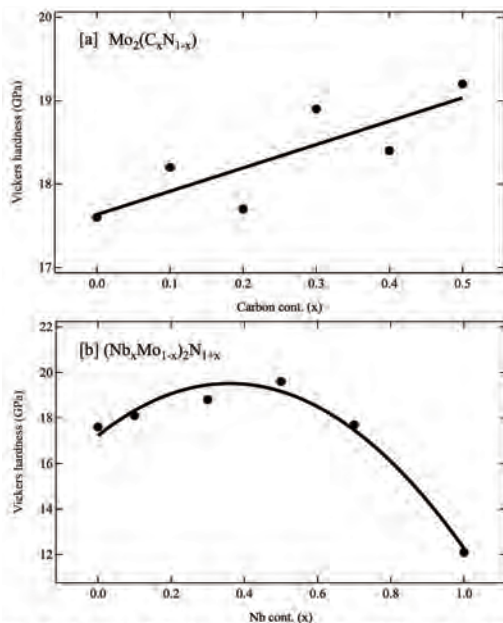
研究概要

代表的な超硬質材料である炭化タングステン(WC)合金は、タングステンの高い偏在性に由来する慢性的な供給リスクを抱える状況であり、WC合金の代替材料開発への要望が根強い。また近年、航空機や自動車産業等における軽量構造材の開発とその需要増加に伴い、WC合金にとって難削材である炭素繊維複合材料(CFRP)やCFRP/チタン合金スタック材に対する機械加工の要請が高まっており、WC合金の特性を超えるような新規超硬質材料の開発が望まれている。本研究では、主として4d遷移金属窒化物およびその関連物質における新規超硬質材料の探索実験を超高压環境下で実施し、新たな超硬質材料の合成およびその焼結体試料の合成プロセスの開発を目指す。

新規性・独創性

- 代表的な超硬質材料である炭化タングステン(WC)合金の代替材料の開発を目指した新規超硬質材料の探索
- フラットベルト型高压装置による大容量試料の高压合成(試料容積: $\sim 1\text{ cm}^3$, 発生圧力: $\sim 10\text{ GPa}$, 発生温度: $\sim 2400^\circ\text{C}$)
- アジ化ナトリウム(NaN_3)を窒素源とする各種窒化物に対する高压下窒素アニール処理

研究内容



$\text{Mo}_2(\text{C}_x\text{N}_{1-x})$ [a] と $(\text{Nb}_x\text{Mo}_{1-x})_2\text{N}_{1+x}$ [b] 焼結体試料のビッカース硬度

本研究では、300GPaを超える体積弾性率を有する4d遷移金属窒化物 $\gamma\text{-Mo}_2\text{N}$ (立方晶) および $\delta\text{-MoN}$ (六方晶) に注目し、それらの窒素原子サイトおよびモリブデン原子サイトを他の元素で置換した $(\text{Nb}_x\text{Mo}_{1-x})_2(\text{B}_y\text{C}_z\text{N}_{1-y-z})$ 系および $(\text{Nb}_x\text{Mo}_{1-x})(\text{B}_y\text{C}_z\text{N}_{1-y-z})$ 系における新規化合物の探索実験を「高温高压合成法」を用いて実施し、新たな超硬質材料の合成を目指す。また、その焼結体試料の合成プロセスを開発し、得られた焼結体試料の特性・機能評価を実施する。

一例として、7.7GPa, 2000℃で合成された立方晶 $\text{Mo}_2(\text{C}_x\text{N}_{1-x})$ 系と $(\text{Nb}_x\text{Mo}_{1-x})_2\text{N}_{1+x}$ 系の焼結体試料のビッカース硬度測定結果を左図に示す。両系とも母物質である立方晶 $\gamma\text{-Mo}_2\text{N}$ からの元素置換量 x の増加に対応してビッカース硬度が上昇する傾向が観察され、 $x=0.5$ の試料で最大値 (約19GPa) を示した。MoサイトやNサイトの原子の50%を他元素で置換することで焼結体試料のビッカース硬度が1割程度向上しており、合成条件・組成の最適化や原料粉末の粒径制御・焼結体試料の組織制御等、合成プロセスの再検討・最適化により更なるビッカース硬度の向上が見込まれる。

まとめ

- 安価かつ偏在性の低い4d遷移金属化合物を中心とする新規超硬質材料の開発
- 超硬工具分野における炭化タングステン(WC)合金の代替材料の開発
- 炭素繊維複合材料(CFRP)やCFRP/チタン合金スタック材に対する機械加工に優れた新規超硬質材料の開発

論文・特許

- T. Kawashima, E. T. Muromachi and P. F. McMillan, *Physica C Supercond.* 651-652 (2007).
- C. L. Bull, T. Kawashima, P. F. McMillan, D. Machon, O. Shebanova, D. Daisenberger, E. Soignard, *et al.*, *J. Solid State Chem.* **179**, 1762-1767 (2006).
- D. Machon, D. Daisenberger, E. Soignard, G. Shen, T. Kawashima, E. T. Muromachi and P. F. McMillan, *Phys. Status Solidi A* **203**, 831-836 (2006).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

超高压環境を利用した機能性材料開拓

Keywords 高压合成, パルス通電焼結, 機能性材料

主任研究員 / Senior Researcher

宮川 仁 Miyakawa Masashi

✉ MIYAKAWA.Masashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/miyakawa_masashi



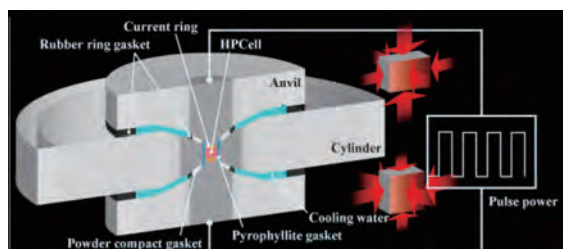
研究概要

身近にある炭素でも、圧力を加えると黒鉛からダイヤモンドへと、その形態・物性を大きく変化させることができる。つまり、圧力という独立変数を導入し、対象物質がもつ物性の全体像を、より広い条件範囲で研究することで、未知の構造・物性が見出される可能性がある。その物性評価が必要となる高品位焼結体作製にパルス通電焼結法を組み合わせ、高压環境を利用し、探索、開拓、展開することで、環境・資源問題を解決に繋がる、ブレークスルーの発端となり得る画期的な新材料や機能発現のキーとなる細工方法を見出す。

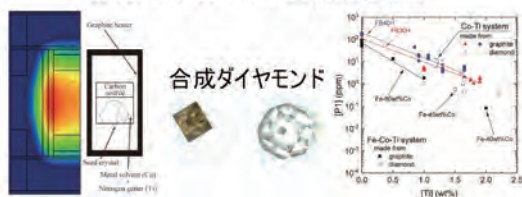
新規性・独創性

- 高压力場を利用した物質の構造制御
- 圧力-温度-組成をパラメータとした新物質探索
- 高压力下パルス通電焼結の開発
- 高压物質科学の進展と物質設計への応用

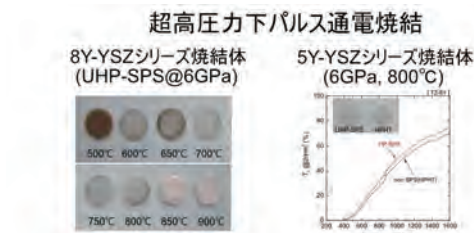
研究内容



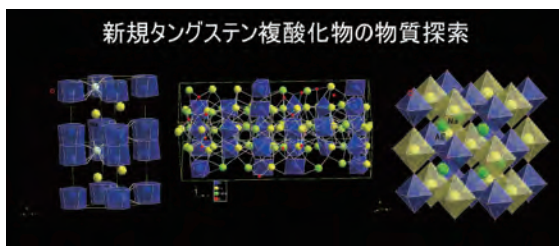
合成ダイヤモンド中の窒素濃度制御



合成ダイヤモンド



新規タングステン複酸化物の物質探索



ベルト型高压装置にパルス直流電源を組み合わせることで、超高压力下でパルス通電焼結可能な装置を立ち上げた。YSZに当該装置を適用することで、常圧焼結より低い焼結温度で、透光性の焼結体が得られた。間接加熱である高压焼結と比較し、若干、透光性が改善されていた。また当該装置を用いた従来通りの物質合成も可能であった。ダイヤモンド中の窒素の広範囲な濃度制御を行い、金属溶媒中の窒素除去剤の添加量を制御することで、所望の量の窒素を含有したダイヤモンド単結晶合成に成功した。その他、圧力を探索パラメータに加えることで、新規物質を幾つか発見し、中にはYSZと同等以上の電気伝導度を示す物質を見出した。

まとめ

パルス直流電源を組み合わせ、高压プロセスの更なる高度化を進め、高品位焼結体作製、単結晶合成、物質探索に有用なことを実証した。今後、超高压力下パルス通電焼結法の明確な優位性を明らかにするとともに、当該手法により増えた合成パラメータを理解するために、機械学習への展開を検討したい。

論文・特許

- M. Miyakawa, C. Shinei and T. Taniguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 045507 (2022).
- M. Miyakawa, H. Murata and M. Imai, *Ceram. Int.* **45**, 16028-16031 (2019).
- M. Miyakawa and T. Taniguchi, *Rev. Sci. Instrum.* **86**, 025101 (2015).

エレクトライドおよび複合アニオン水素化合物の電子機能開拓

Keywords 無機固体化学, 光波長変換, 酸水素化物, 超伝導

主幹研究員／Principal Researcher

松石 聡 Matsuishi Satoru

✉ MATSUSHI.Satoru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsuishi_satoru



研究概要

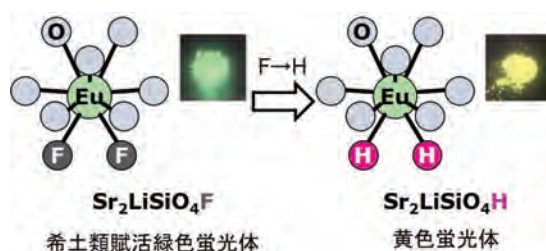
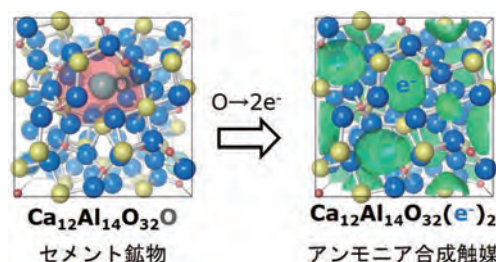
酸素 O^{2-} やフッ素 F^- など、通常の陰性元素の陰イオン(アニオン)に替わり、結晶構造中の隙間に捕捉された電子が陰イオンとして振舞うことで形成されるエレクトライド(電子化物)および、水素をアニオン H^- (ヒドリド)として取り込むことができる酸水素化物などの複合アニオン水素化合物の新物質探索と機能開拓を行っている。

新規性・独創性

- 既存の毒性・希少元素からなる機能材料を非毒性・多存元素からなる新物質で代替
- エネルギーキャリアとなる水素を活性化するための結晶内部・表面構造を持つ新物質
- 酸素を H^- で置き換えることによる、既存物質への新機能の付与

研究内容

結晶構造中の隙間に捕捉されたアニオン様の電子を含むエレクトライド物質を探索し、新機能を開拓。セメント鉱物であるカルシウム・アルミニウム複合酸化物($C_{12}A_7$)から誘導されるエレクトライド($C_{12}A_7:e^-$)は、金属的伝導性を示し、アルカリ金属並の低い仕事関数(2.4 eV)を持つにも拘わらず、大気中で取り扱える化学的安定性を併せ持つ。水素および窒素を活性化し、アンモニア合成触媒に用いることができる。 Ca_2N , Y_2C といった層状のエレクトライドは高い電子移動度やトポロジカル電子状態を示すものとして注目されている。



複合アニオン化合物、特に水素をアニオンとして含む酸水素化合物などに注目し、新物質探索を行っている。鉄系超伝導体母物質 $LnFeAsO$ (Ln = 希土類) では、酸素を水素で置換することが可能であり、フッ素で置換した場合と同様に超伝導を発現することを発見。フッ素より固溶限界が高いため、高濃度の電子ドーピングが可能であり、超伝導転移温度が上昇する。また、 Sr_2LiSiO_4F や Sr_3AlO_4F など希土類賦活蛍光体ホスト物質中の F^- イオンを H^- で全置換し、希土類イオンの励起・発光波長の長波長化に成功。化学的に不安定な水素化物イオンに依る性質は、酸水素化合物で化学的安定性と両立させることができる。

まとめ

エレクトライド中の電子や水素といった不安定なアニオン種に着目することで、多存元素からなる触媒材料、半導体、光波長変換物質などの新機能性物質を探索。今後は、第一原理安定構造予測を援用し、多彩な構造と元素の組み合わせの中から、合成可能な新物質をスクリーニングすることで探索の効率化を行う。

論文・特許

- T. Wu, K. Fujii, T. Murakami, M. Yashima and S. Matsuishi, *Inorg. Chem.* **59**, 15384-15393 (2020).
- S. Matsuishi, T. Hanna, Y. Muraba, S. W. Kim, J. E. Kim, M. Takata, S. Shamoto, R. I. Smith and H. Hosono, *Phys. Rev. B* **85**, 014514 (2012).
- S. Matsuishi, Y. Toda, M. Miyakawa, K. Hayashi, T. Kamiya, M. Hirano, I. Tanaka and H. Hosono, *Science* **301**, 626-629 (2003).

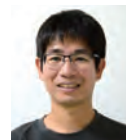
電子機能を示す薄膜ヘテロ構造の探索

Keywords 電子材料, ヘテロ構造, 薄膜結晶成長

独立研究者 / Independent Scientist

原田 尚之 Harada Takayuki

✉ HARADA.Takayuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/harada_takayuki



研究概要

異種の物質を積層したヘテロ構造は、単一の物質にはない性質や機能を示す。トランジスターやダイオードのように、エレクトロニクスの基本となるデバイスもヘテロ構造の特性を利用しており、新機能の開拓には新しい物質の組み合わせを見つけることが重要である。私達は特徴的な結晶構造や電子状態を持つ物質を主な対象として、新しいヘテロ構造の開発とエレクトロニクスへの応用に取り組んでいる。

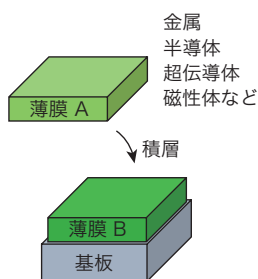
新規性・独創性

- 既知の系ではなく、新しいヘテロ構造の探索に注力
- 原子レベルで制御した薄膜ヘテロ構造の作製
- データベースや密度汎関数法による計算を活用

研究内容



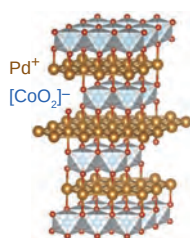
薄膜結晶成長
・スパッタリング
・パルスレーザー堆積法



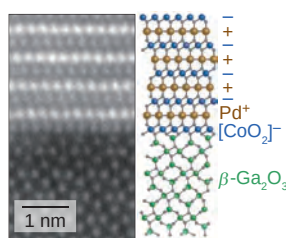
金属、半導体、超伝導体、磁性体など、結晶には様々な個性を持つものがある。スパッタリング法やパルスレーザー堆積法などの薄膜結晶成長の手法を用いると、複数の結晶を原子レベルで積層することができる。異種の結晶を積層した「ヘテロ構造」は、半導体デバイスの基礎となる構造であり、コンピューターをはじめ身近な電子機器に多く使われている。

私達は、結晶構造や電気的な性質に特徴がある結晶を組み合わせ、新しいヘテロ構造を探索している。誰も作ったことの無い新しい構造で、予想もしなかったような非自明な物性や、応用に結びつく新機能を開拓することが研究の目的である。

PdCoO₂の結晶構造



ヘテロ構造の電子顕微鏡像



最近では、高い導電性を示す層状イオン結晶 PdCoO₂に着目している。PdCoO₂は2次元的に広がるPd⁺の電気伝導層と、絶縁的な[CoO₂]⁻層が交互に積層された構造を持つ。PdCoO₂は層状構造に由来する表面分極を持つため、単体金属(4.0 ~ 5.7 eV)を大きく上回る7.8 eVの仕事関数を示す。これまでに、半導体とのヘテロ構造においてPdCoO₂の大きな仕事関数を利用することで、350℃の高温で8桁近いオン・オフ比で動作できるショットキーダイオードなど、従来系では難しかったデバイス特性を実現した。

まとめ

特徴的な結晶構造や電子状態を利用したヘテロ構造の開発を進めている。計算による物質設計と原子レベルで制御した薄膜成長技術で、次世代のエレクトロニクスに向けた新機能を実現する。

論文・特許

- 原田 尚之. 応用物理 **91**, 406-410 (2022).
- T. Harada, *Mater. Today Adv.* **11**, 100146 (2021).
- T. Harada, S. Ito and A. Tsukazaki, *Sci. Adv.* **5**, eaax5733 (2019).

微細構造を用いたサーマルフォトンクス

Keywords 熱放射, 光熱変換, 放射冷却, 微細構造, メタマテリアル

チームリーダー / Team Leader

石井 智 Ishii Satoshi

✉ sishii@nims.go.jp ④ <https://samurai.nims.go.jp/profiles/sishii>



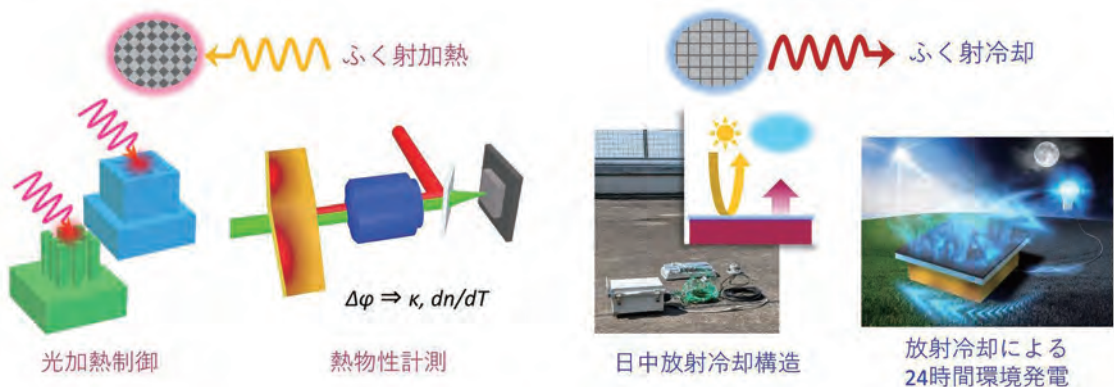
研究概要

ふく射(光)を吸収すれば試料は加熱され、逆に放射すれば試料は冷却される。これら光熱変換や放射冷却は、バルクでは物質固有の光学特性に依存するが、表面に微細構造を作製することでバルクとは異なった光熱変換や放射冷却が可能となる。これまでの成果として、光の吸収率と熱伝導率を微細構造で制御することで、実効的に異方的な熱伝導を持つ構造を開発した。また放射冷却では、日中でも受動的に冷える日中放射冷却膜や放射冷却によって発電する熱電素子などを開発した。今後も微細構造によるふく射熱制御を目指して新たな機能探索を目指している。

新規性・独創性

- CWレーザーの照射による光熱変換から熱伝導を測定する手法の開発
- 実効的に異方的な熱伝導率を持つ微細構造の開発
- 日中でも放射冷却で受動的に冷える膜の開発
- 放射冷却で生じる温度差を利用した24時間発電可能な環境発電素子の開発

研究内容



微細構造を用いた光熱変換では、高い光吸収と低い熱伝導を両立する構造を開発した。その構造の実効的熱伝導は異方的であることから、異方的な放熱が可能である。また、光熱変換による加熱で起こる位相変化を定量位相顕微鏡で測定することで、熱伝導率と屈折率温度計数が測定可能であることを実証した。

微細構造を用いた放射冷却では、従来より高性能な日中放射冷却構造を開発し、屋外でその特性を実証した。また日中放射冷却構造は常に気温と温度差を生じているので、日中放射冷却構造と熱電素子を組み合わせることとで放射冷却による環境発電が可能となる。

まとめ

微細構造を用いた光熱変換を応用することで、発生した熱の異方的な熱伝導による放熱や熱伝導・屈折率温度計数の計測などが可能であり、今後よりロバストな手法とすることで実用化へ繋がるが見込まれる。

微細構造を用いた放射冷却では、日中でも冷却可能な膜が作製できており、単に放熱や冷却の利用だけでなく、環境発電への応用が期待される。

論文・特許

- S. Ishii, N. K. Tanjaya, E. Shkondin, S. Murai and O. Takayama, *Appl. Mater. Today* **32**, 101824 (2023).
- N. K. Tanjaya, K. Toda, T. Ideguchi and S. Ishii, *Opt. Lett.* **48**, 3311 (2023).
- 特許第7090904号 発電装置

高分子・バイオ材料 研究センター

π 電子系有機材料の開発

Keywords 共役系分子・高分子, 分子集合体, 分子認識材料, 分子マシン材料

センター長 / Director

竹内 正之 Takeuchi Masayuki

✉ TAKEUCHI.Masayuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/takeuchi_masayuki



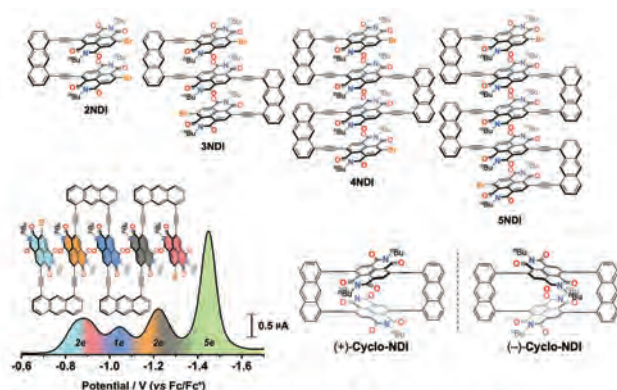
研究概要

π 共役系分子・高分子の立体配座・立体配置の制御は、溶液状態、集合状態(固体)において光・電子機能を引き出す上で重要であり、多くの分子デザインや集積手法が提案されている。分子内、分子間相互作用部位をどのように分子デザインに反映させるかという観点に加え、外部環境(溶媒、温度)からの影響が大きいことが超分子化学、構造有機化学、有機半導体高分子分野等で知られている。我々は、発散的に分子認識部位を導入する認識材料の分子デザインを拡張し、その動的特性をコントロールすることで、光・電子・集積機能を引き出す研究を実施している。

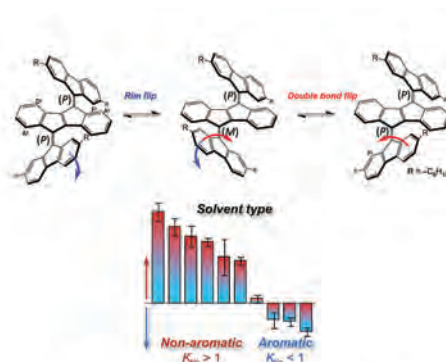
新規性・独創性

- 限定された動的特性と π 共役系分子間の相互作用のチューニングを可能とする分子デザイン
- π 共役系分子オリゴマーにおける π 共役系分子の配向制御
- 多段階可逆的還元特性

研究内容



外部刺激応答性ナフタレンジイミド (NDI) オリゴマー、シクロファン分子



溶媒パラメータを検出、識別できる動的分子プローブとして作用するフルオレニリデン誘導体

ナフタレンジイミド (NDI) 分子が1, 8-ジエチルアントラセンリンカーで架橋されたNDIを基体とする共役型シクロファン (CycloNDI) およびそのオリゴマーを新たに合成した。NDIとアントラセンの間のエチニル回転軸は、NDI誘導体中のNDI部位の距離と配向を制御し、その距離は限定した距離の範囲内で変化する。そのため、溶媒などの包摂等による構造の固定化はおこらない。本NDI誘導体は可逆的な多段階還元特性を示し、シクロファンでは比較的大きなCPL特性を示した。回転軸を2箇所所有するovercrowded alkeneの1つであるフルオレニリデン誘導体では、単純な芳香族炭化水素であるのにも関わらず溶媒パラメータを検出、識別できる動的分子プローブとして作用することを見出した。

まとめ

多くの分子デザインや集積手法が提案されている π 共役系分子・高分子の立体配座・立体配置の制御に向けて、発散的に認識部位を分子周りに組み込むデザインから、光・電子機能性有機材料へと繋がる分子を合成することに成功した。これらを利用した光・電子機能性分子・高分子のデザイン、集合体構築におけるモルフォロジー制御と精密集合体構築に展開できると期待される。

論文・特許

- S. K. Keshri, T. Ishizuka, T. Kojima, Y. Matsushita and M. Takeuchi, *J. Am. Chem. Soc.* **143**, 3238–3244 (2021).
- K. K. Kartha, A. Takai, Z. Futera, J. Labuta and M. Takeuchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 16466–16471 (2021).
- S. K. Keshri, A. Takai, T. Ishizuka, T. Kojima and M. Takeuchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **59**, 5254–5258 (2020).

超分子と高分子を用いた機能材料の創成とその機構解明

Keywords 超分子, 高分子, 強靱化, 海洋生分解性, 資源循環, サークュラーエコノミー

フェロー／Fellow

伊藤 耕三 Ito Kohzo

✉ ITO.Kohzo@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ito_kohzo



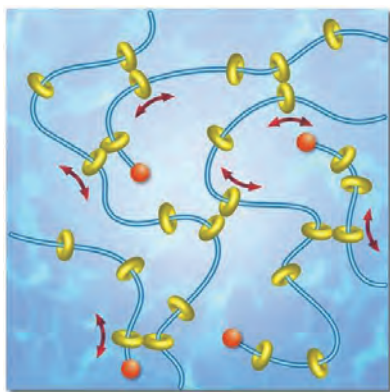
研究概要

近年、地球環境保全の見地から、資源循環型社会の構築やマイクロプラスチックによる海洋汚染への対応が求められている。我々は代表的なトポロジカル超分子であるポリロタキサンを利用して架橋点が自由に動く環動高分子を発明し、強靱性や海洋生分解性を有する様々な高分子材料を開発している。超分子と高分子を組み合わせた機能材料の創成とその機構解明を通じて、サーキュラーエコノミーシステムの構築に貢献していきたい。

新規性・独創性

- 高分子材料には一般的に強度と強磁性(破断延び)の両立が困難という問題点がある。我々はポリロタキサンを様々な高分子に少量添加することにより、強度を大きく低下すること無く10倍以上の強靱化を達成した。
- ポリロタキサンを添加した環動高分子では、強靱性だけでなく、添加前の高分子固有の自己修復性、海洋生分解性、形状記憶性、分解性など様々な物性が加速する。

研究内容



我々は、2000年ごろに代表的な超分子であるポリロタキサン構造を利用して、上図のように従来とは全く異なる架橋高分子を合成した。具体的には、8の字状の架橋点が自由に動いて応力や張力を自動的に緩和し高分子材料を強靱化できる。このような超分子ネットワークを環動高分子材料と名付けた。またポリロタキサンを他の高分子と化学的あるいは物理的に架橋することによって、様々な高分子材料を強靱化できる。環動高分子は、すでに耐傷性塗料やゴルフボールなどに実用化されているだけでなく、様々な分野で応用が検討されている。さらに最近、ポリロタキサンを添加した環動高分子では、強靱性だけでなく、添加前の高分子固有の自己修復性、海洋生分解性、形状記憶性、分解性などの様々な物性が加速することが明らかになった。これはポリロタキサンの添加によって、周囲の高分子の運動性が高まることに起因していると考えている。ポリロタキサンでは環状分子と軸高分子は共有結合ではなく幾何学的にお互いに拘束されているのみなので、環状分子は高分子上を自由にスライドできる。これが周囲の高分子の運動性の向上をもたらしていると推察している。

まとめ

ポリロタキサンなどの超分子と高分子を組み合わせ、強靱性と分解性を両立する革新的機能性高分子材料を開発することで、資源循環を基盤とする高分子のサーキュラーエコノミーの構築に貢献する。

論文・特許

- C. Liu, N. Morimoto, L. Jiang, S. Kawahara, T. Noritomi, H. Yokoyama, K. Mayumi and K. Ito, *Science* **372**, 1078-1081 (2021).
- Y. Okumura and K. Ito, *Adv. Mater.* **13**, 485-487 (2001).
- 特許第4482633号 ポリロタキサンを有するポリマー材料、並びにその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

細胞培養用の動的足場材料の開発

Keywords バイオマテリアル, 光反応, 液々界面, メカノバイオロジー, 幹細胞工学

グループリーダー / Group Leader

中西 淳 Nakanishi Jun

✉ NAKANISHI.Jun@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakanishi_jun



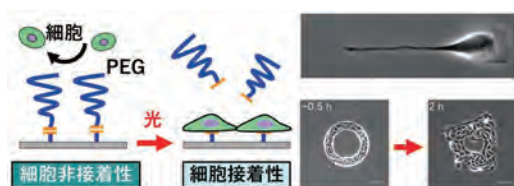
研究概要

通常の実験室の細胞培養では、プラスチック製の培養皿の表面に吸着したタンパク質分子を介して細胞が接着する。それに対して実際の生体内では、細胞と基質タンパク質との相互作用は時間・空間とともにダイナミックに変動している。本研究では、生体内のそのような「動的な」環境を模倣できる足場材料の開発を行っている。1つ目の光応答基板では、光照射によって基板上での細胞接着を制御できるため、細胞を並べたり、それらを動かしたりすることができる。2つ目の液々界面培養系では、液体のしなやかな性質により、細胞自身が発する「力」による吸着タンパク質のリモデリングが促進され、幹細胞の分化挙動に大きな影響を与える。

新規性・独創性

- 光応答基板のコンセプトはさまざまな材料表面に適用可能である。
- 光の遠隔操作性を利用することで、薬剤スクリーニングや細胞移動の基礎研究に有用である。
- 液々界面は汎用されるプラスチック培養皿とは全く異なる新しい培養足場となる可能性を秘める。
- パーフルオロカーボンを下層液体に用いて、高価な液性因子を用いずに間葉系幹細胞を神経分化させることに成功した。

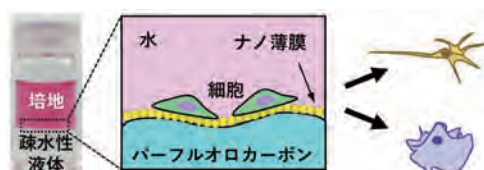
研究内容



光応答基板上での細胞接着制御

水と二相分離するパーフルオロカーボンの界面を足場材料に用いた。界面には、上層の水溶液（培地）に含まれるタンパク質が吸着し、ナノメートル厚みのタンパク質の薄膜が形成されており、細胞はこのタンパク質ナノ薄膜に対して接着していることが分かった。パーフルオロカーボンの種類に加え、培地に添加するタンパク質を最適化することで細胞の接着形状を制御でき、例えば間葉系幹細胞を培養した場合には、高価な分化誘導因子を添加しなくても神経細胞に分化誘導させることに成功した。

光応答基板のコンセプトを利用して、細胞移動の解析・研究に用いられる創傷治癒アッセイを「光」で実施することに成功した。本技術は硬い固体材料（ガラス・金）から生体組織に匹敵する軟らかさのハイドロゲルなどさまざまな材料の上で適用可能である。例えば癌の悪性化に関わる上皮間葉転換現象を模倣したアッセイを行うことで、上皮間葉転換した細胞を選択的に殺傷する薬剤候補（ナノオマイシン）を見出した。また、光の遠隔操作性を利用することで、重力の方向によって細胞の集団移動挙動が変化することを明らかにした。



液体を足場とする培養技術

まとめ

- 光応答基板については、ハイドロゲル修飾されたマルチウェルプレートなどの開発に取り組みたい。
- 液体足場の適用範囲を広げる上でも、細胞が必要とする液体の化学・力学的特徴を明らかにする必要がある。
- 液体が本質的に持つ可変形性を活かしたマイクロ流路やエマルジョン培養など新たな細胞培養モダリティの創出をめざしたい。

論文・特許

- X. Jia, K. Minami, K. Uto, A. C. Chang, J. P. Hill, J. Nakanishi and K. Ariga, *Adv. Mater.* **32**, 1905942 (2020).
- J. Nakanishi, *Chem. Rec.* **17**, 611-621 (2017).
- 特許第6712073号 シャーレ型細胞培養容器

分子シーケンスに焦点を当てた物質科学の開拓

Keywords 分子シーケンス, 生体関連物質, 超分子集合体, ゲル, ポリマー

主幹研究員／Principal Researcher

田代 健太郎 Tashiro Kentaro

✉ TASHIRO.Kentaro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/tashiro_kentaro



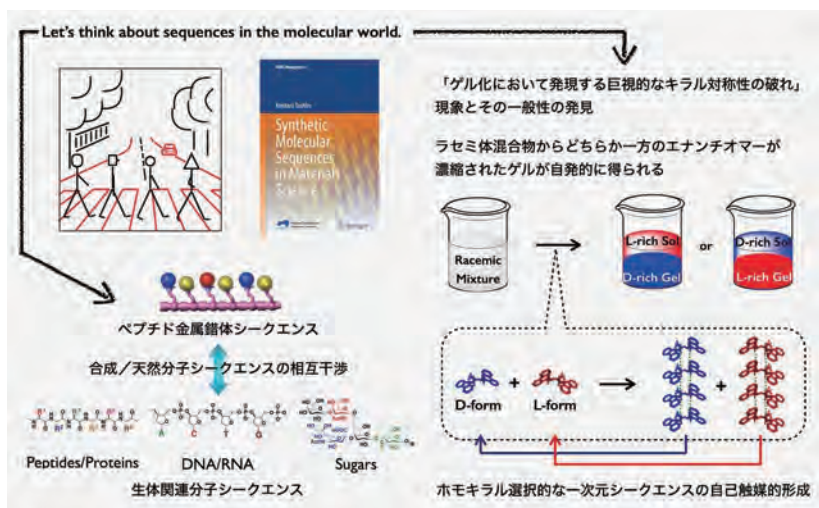
研究概要

「多様なパーツを適切な順番に配置して全体を組み上げる」操作を分子レベルで人為的に行うプロセスは今日においても多大な労力を伴うため、該当する構造的特徴を有する物質群の科学は未開拓の部分が多い。一方、自然界で広く見られる生体関連物質は制御された分子シーケンスを有する点で共通の構造的特徴を有しており、今後の物質創成指針として極めて示唆に富む。以上の背景を念頭に、分子シーケンスの制御に焦点を当てた物質科学の開拓に取り組む。現在は生体関連物質、超分子集合体、ゲル、ポリマーなどが対象となっている。

新規性・独創性

- 最近の研究を通じて以下のようにこれまでの常識を覆す現象を見出し、キラル科学の新しい分野を生み出しつつある。
- 「ラセミ体混合物からどちらか一方のエナンチオマーが濃縮されたゲルが自発的に得られる」という現象を発見。
- これまでの常識を覆す上記現象が、実は一定の普遍性を持つことを実証。
- 「自然界におけるキラル対称性の破れ」の謎を説明する新たなシナリオの提示。
- 結晶化による光学分割が不可能な大部分のキラル化合物のエナンチオマー入手法に発展する可能性。

研究内容



分子スケールでのシーケンスの制御を通じて物質科学における未知の現象を探索する。一例として、キラル分子の両エナンチオマーの等量混合物からどちらか一方のエナンチオマーが過剰となったゲルが自発的に得られる、というこれまでの常識を覆す現象を見出した。さらに、本現象が市販の単純な構造の分子においても確認され、実は一定の普遍性を持つことも明らかとなった。本発見は自然界において何故一方のエナンチオマーのみが利用されるのか、という自然科学上に残された大きな謎の一つを説明する新たなシナリオの提示であるとともに、結晶化による光学分割に難が有る大部分のキラル化合物のエナンチオマー入手法としての可能性を有する。

まとめ

「実用化」に血道を上げるよりも基礎科学的に重要性の高い革新を追求する方が長い目で見ればより大きな波及効果をもたらすことに繋がるであろう。

論文・特許

- K. Tashiro, *Synthetic Molecular Sequences in Materials Science*. Springer Japan, ISBN 9784431569336 (2023).
- K. Tashiro, T. Takei, A. M. Fracaroli, H. Ohtsu, M. Kawano and D. Hashizume, *Chem. Asian. J.* **17**, e202200230 (2022).
- 特許第6887676号 固定化光触媒およびその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクチャ材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

イオン液体と高分子からなるソフト材料

Keywords イオン液体, 高分子ゲル, ブロック共重合体, 細胞足場材料, 衝撃吸収材料, メカノバイオロジ, 生体適合性, 刺激応答性

主任研究員 / Senior Researcher

上木 岳士 Ueki Takeshi

✉ UEKI.Takeshi@nims.go.jp ⑧ https://samurai.nims.go.jp/profiles/ueki_takeshi



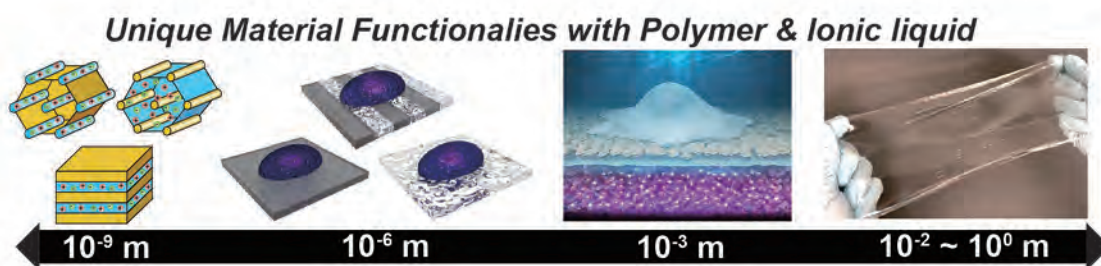
研究概要

イオン液体はリサイクルが容易な環境に優しい液体です。セルロース等の難溶性高分子の溶剤にも適用できる上、蒸気圧が極めて小さく大気中に拡散しません。熱的、(電気)化学的に安定かつ不燃性なので、様々な温度、圧力環境でも安定で、水中でも使うことができます。本研究ではイオン液体の環境適合性や、特殊溶解性を利用した、様々な時空間スケールで活躍する力学機能材料を提供します。具体的には、無毒性イオン液体／ゲルの界面を利用したメカノバイオロジカル細胞足場材料、汎用ビニルポリマーと複合化した伸縮性・自己修復性に優れたイオン導電材料、可撓性と高弾性を両立した衝撃吸収材料などです。

新規性・獨創性

- 溶媒成分のエンジニアリングによる高分子ゲルの力学機能設計。
- 幅広い温度、圧力環境に適用可能なウェット材料。
- 力学的／化学的性質の独立制御が可能なゲル材料。
- 力学特性や膨潤性のスイッチングが可能なゲル材料。
- 細胞毒性を示さない非水系高分子ゲル材料。

研究内容



ある種の疎水性イオン液体が長期間に渡って細胞と共存させても毒性を示さず、その生存を脅かさないことを見出しました。現在、我々はこの細胞無毒性イオン液体の界面を利用した細胞培養を検討しています。液体界面の細胞培養はプラスチックディッシュによる従来の2D細胞培養に比べて、細胞の接着面積を圧倒的に引き上げられるため、再生医療に貢献する有用な幹細胞資源の高速／高効率プロセス化に期待が寄せられています。また、これらイオン液体は極性が高いものの水と混じり合わず、様々な汎用(高)分子化合物を溶解させる能力を持ちます。コンポジットの設計次第で材料自身に熱や光等の外部刺激に対する応答性を織り込むことも可能です。こうした材料のデザインナビリティを活かし、様々な時空間スケールで機能を発揮する力学機能材料の設計を進めています。例えばそれはイオン導電性の次元を制御した電解質膜、細胞に力学ストレスを印加できるメカノバイオロジカルゲル、伸縮自在な自己修復ゲルなどです。研究を進めていく中で、イオン液体からなる非ニュートン性流体も発見しました。こうした基盤技術や材料は人体に貼り付けて使うストレッチャブルな電気化学デバイスや、ストレインセンサー、衝撃吸収材料にも応用可能と考えられます。

まとめ

- 無毒性イオン液体／ゲルの合理設計により新しい細胞プラットフォームを提案した。
- 液体中における高分子の刺激応答性を利用した、細胞足場材料を実現した。
- 高強度、高伸縮性等の優れた力学特性を持つ、イオン液体と高分子からなるソフト材料を実現した。
- イオン液体と高分子自身の構造設計による高機能化を目指す。例えば、力学刺激のみで所望の細胞機能(分化など)を引き出す、液体／ゲル足場の実現、および物理化学特性の解明など。

論文・特許

- R. Tamate and T. Ueki, *Chem. Rec.* e202300043 (2023).
- Y. Kamiyama, R. Tamate, T. Hiroi, S. Samitsu, K. Fujii and T. Ueki, *Sci. Adv.* **8** (2022).
- K. Homma, A. C. Chang, S. Yamamoto, R. Tamate, T. Ueki and J. Nakanishi, *Acta Biomater.* **132**, 103-113 (2021).

抗がん効果を持つシグナル凝縮粒子

Keywords 抗がん剤, ナノ粒子, タンパク質, メカノバイオロジ, バイオ分析

研究員 / Researcher

山本 翔太 Yamamoto Shota

✉ YAMAMOTO.Shota@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamamoto_shota



研究概要

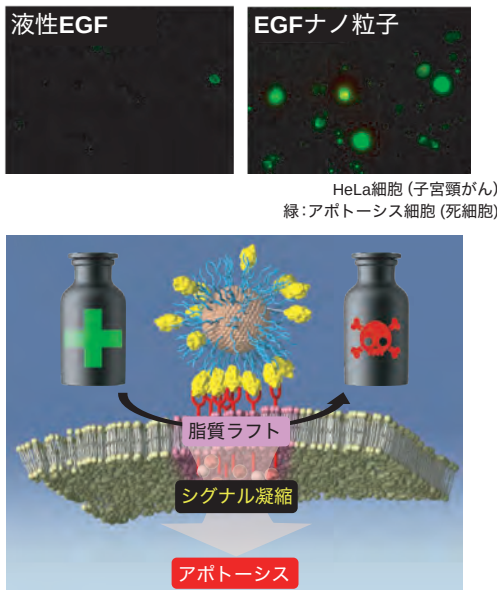
がんは、世界的に罹患人数、死亡者数が増加傾向にある。そのため、低副作用と効率性をともに満たす新たな癌治療薬や方法論の開発が求められている。ここでは、生体分子とナノ粒子のコンジュゲーションで創発される新たな機能・活性を利用した新規抗がん剤の開発を目指す。注目したのは、細胞膜の受容体と結合することで増殖や分化を促すタンパク質の上皮成長因子(EGF)である。このEGFはナノ粒子に固定化した状態でがん細胞に投与すると、その効果を突如死に切り替える特徴を有する。この奇妙な現象のメカニズムを明らかにすることで、がん細胞選択的に効能を発揮するナノ粒子抗がん剤を開発し、その有効性を実証する。

新規性・独創性

- 生体分子と材料を複合化することで本来の活性を変換する抗がん治療戦略
- 従来の受容体の活性をブロックするのではなく、活性化させて治療する新しいタイプの抗がん剤
- 受容体が過剰発現するがん細胞にのみ効能を発揮

研究内容

シグナル凝縮粒子の抗がん効果



新たな抗がん剤の候補として、上皮成長因子(EGF)を金ナノ粒子にコンジュゲートさせたEGF担持ナノ粒子を開発した。このEGFナノ粒子をがん細胞であるHeLa細胞(子宮頸がん)やA431細胞(表皮がん)へ投与すると、約80%のがん細胞をアポトーシス(細胞死)へと導いた(図上)。さらに対象を正常細胞に拡張して調べると、PHK16-10b細胞(ケラチノサイト)やEA.hy926細胞(血管内皮)には活性を示さなかった。

そこで通常成長を誘導するEGFの機能が逆転する奇妙な現象を調べると、ナノ粒子が、シグナル分子の集積する伝達場である脂質ラフトにEGF受容体を拘束することで活性を凝縮し、細胞運命を調節する細胞内シグナル伝達に変化を与えることでアポトーシスを誘導していた(図下)。これは、従来の活性化を”抑制”して治療するEGF受容体阻害剤とは異なり、積極的に”促進”させることで抗がん効果を示す新しい抗がん剤となる。

今後、より詳細な解析や個体レベルでの検証を行うことで、伝達場に生体分子の作用を凝縮することで本来の活性を変換する「シグナル凝縮粒子」を、新しいナノ粒子抗がん剤として医療分野に役立てたい。

まとめ

- ナノ粒子とEGFを複合化することで、がん細胞を選択的にアポトーシスさせるシグナル凝縮粒子の開発に成功。
- ナノ粒子がEGFの作用を脂質ラフトに局限することで抗がん効果を獲得。
- 今後、より詳細な解析や個体レベルでの効能を実証することで、新しいナノ粒子抗がん剤へと展開。

論文・特許

- S. Yamamoto and J. Nakanishi, *Anal. Sci.* **37**, 741-745 (2021).
- S. Yamamoto, Y. Iwamaru, Y. Shimizu, Y. Ueda, M. Sato, K. Yamaguchi and J. Nakanishi, *Acta Biomater.* **88**, 383-391 (2019).
- 特開2022141991号 複合体、局所貼付材、及び、上皮がん治療方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

医療関連ソフトマターの非平衡ダイナミクス

Keywords 医薬品、非晶質、過飽和、相分離、ナノ粒子

グループリーダー／ Group Leader

川上 亘作 Kawakami Kohsaku

✉ KAWAKAMI.Kohsaku@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawakami_kohsaku

研究概要

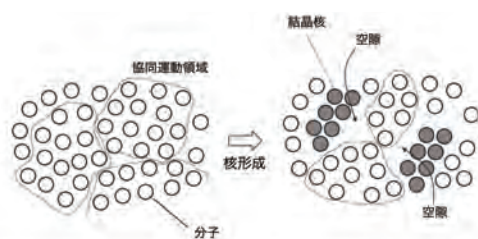
効果的な医薬品は、活性物質の創成に加えてその機能を最大化するための製剤化によって完成する。特に近年は難水溶性の医薬品化合物が多く創出されており、それらを溶解度以上に溶解させる技術が求められている。我々は非晶質状態を利用することで安定な過飽和溶解状態を形成する技術を開発しているが、そのためには非平衡状態にある医薬品および関連材料の固体ダイナミクスや溶解過程の制御が必要となる。構造多様性を持つ有機分子の非平衡ダイナミクスの理解と制御は基礎科学としても解明が望まれている分野であり、非晶質医薬品の実用化を志向しつつも核形成理論の深化など基礎科学の発展にも貢献している。

新規性・独創性

- 直接観察が極めて困難な核形成過程の評価を実現した
- 結晶化速度を予測する一般則を導いた
- 非晶質材料の過飽和溶解過程を制御し、医薬品の消化管吸収を液液相分離濃度で説明した
- 分子構造や分子間相互作用の多様性に富む有機低分子の結晶化理論構築を進めている

研究内容

難水溶性医薬品の実用化手段のひとつとして非晶質状態の利用があるが、その保存安定性を担保するためには結晶化挙動を把握しなければならない。さらに、医薬品分子の結晶化挙動を厳密に制御するためには、まず核形成過程を制御しなければならない。核形成過程は直接的な観察が極めて困難であるが、我々は熟慮を厳密に制御した実験により核形成過程の評価に成功した。さらにそれを利用して核形成させた非晶質のダイナミクスを評価したところ、構造不均一化により緩和挙動や協同運動領域に変化が生じることを見出した。これは、逆にこれらの物性を観察することで、材料中の核形成を類推できることを意味している。



ガラス構造中の核形成の模式図。核形成により協同運動領域が小さくなり、構造が不均一化する。構造緩和（ α 緩和）は促進され、分子内緩和（ β 緩和）は抑制される。

非晶質固体は結晶溶解度以上の濃度で溶解し、過飽和状態を形成する。この過程において結晶化を抑制すると、一定濃度以上の過飽和溶液はスピノーダル分解の原理により安定化され液液相分離を起こす。このとき濃縮相をナノ粒子として安定化することで、過飽和状態を安定に維持し、消化管吸収が溶解度律速となる薬物の吸収性を大幅に高めることができる。以上の非平衡過程は晶析速度、固相転移速度、界面エネルギー、さらには消化管内のpH変化や生体成分の影響等の多くの因子に影響を受けるため制御が難しいが、我々はこの過程を安定化し消化管吸収を促進するための多くの知見を有している。

まとめ

- 有機分子が形成する非晶質固体について、緩和・核形成・結晶成長等のダイナミクスを高度に制御、かつ一般論として解釈することに成功した。
- 非晶質固体が形成する過飽和溶解状態の効果的な創出や制御に成功した。
- 以上の成果は非晶質医薬品への応用のみならず、非晶質状態が活かせる多くの産業分野への展開が期待される。

論文・特許

- K. Kawakami, *Thermochim. Acta* **671**, 43-47 (2019).
- K. Kawakami, K. Sato, M. Fukushima, A. Miyazaki, Y. Yamamura and S. Sakuma, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* **132**, 146-156 (2018).
- K. Kawakami, T. Harada, K. Miura, Y. Yoshihashi, E. Yonemochi, K. Terada and H. Moriyama, *Mol. Pharm.* **11**, 1835-1843 (2014).

診断・治療のためのナノバイオメディシン

Keywords ナノメディシン, 核酸医薬品, アジュバント, ワクチン, バイオセンサー, イメージング, ガン, アレルギー

主幹研究員 / Principal Researcher

山崎 智彦 Yamazaki Tomohiko

✉ YAMAZAKI.Tomohiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamazaki_tomohiko



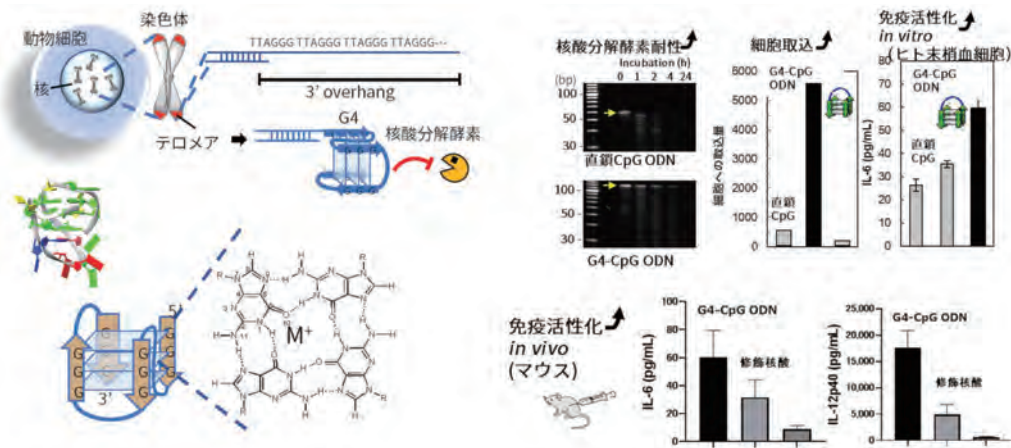
研究概要

我々の体内では病原体由来の核酸や細胞膜などの構成成分を認識して免疫を活性化し、ウイルスや微生物に対して防御するシステムがある。このシステムを利用して免疫反応を制御できるナノメディシンの開発を進めている。特に、核酸分子を中心とした研究を展開しており、核酸分子の体内での安定性や動向の問題点を解決するために、四重らせん構造を形成する核酸分子を設計し、物性、標的分子との相互作用、また体内動向の解析を進めている。将来的には、高次構造を形成する核酸分子を体内での治療と診断への応用することを目指している。ワクチンアジュバントとして感染症の予防、ガンワクチンへの応用、アレルギー治療への応用、また体内での疾患の診断への応用が期待される。

新規性・独創性

- 実用化されている核酸医薬品は全て修飾核酸であり、蛋白質の非特異的吸着などの特性から、副作用が懸念される。
- 細胞核内に存在するDNAの四重らせん構造であるグアニン四重鎖構造を核酸医薬品のスキャホールドに用いる。
- グアニン四重鎖構造を用いることで、核酸分子の安定性(熱、核酸分解酵素)と細胞への取込が増強する。
- 核酸分子はハイスループット合成、機械学習などを用いた配列の最適化が可能である。

研究内容



細胞核内の染色体で形成されているグアニン四重鎖 (G4) 構造をスキャホールドとして用いることで、免疫を活性化するCG繰り返し配列を有するオリゴデオキシヌクレオチド(CpG ODN)の機能向上を試みた。G4構造のループ部分にCpG ODNを導入したG4-CpG ODNは、G4構造により核酸分解酵素に対する耐性が向上し、また細胞内への取込量が增大した。この相乗効果により、G4-CpG ODNは修飾核酸と同レベルに、B細胞を活性化することで抗体産出を誘導するインターロイキン(IL)-6を免疫細胞から発現誘導した。即ち、G4-CpG ODNは、安全性の高い未修飾核酸のみから構成されているにも関わらず、免疫細胞を活性化し、抗ウイルス免疫応答に重要なサイトカインを産生することから、ワクチンアジュバントとして機能することがわかった。マウスに投与した結果でも修飾核酸以上にG4-CpG ODNはサイトカインを誘導しており、G4構造の有効性が示された。

まとめ

グアニン四重鎖構造を形成させることにより、未修飾核酸の安定性が向上すること、また細胞への取込が増加することを実証した。マウス投与と実験において、グアニン四重鎖構造形成核酸の体内での有効性が実証されている。機能性核酸のスキャホールドとしてのグアニン四重鎖構造の利用、また免疫を活性化するCGモチーフをループに導入したグアニン四重鎖構造形成未修飾核酸をワクチンアジュバントとして用いることで感染症の予防、ガンワクチンへの応用、アレルギー治療への応用、また体内での疾患の診断への応用が期待される。

論文・特許

- A. T. T. Tu, K. Hoshi, Y. Ma, T. Oyama, S. Suzuki, K. Tsukakoshi, K. Nagasawa, K. Ikebukuro and T. Yamazaki, *ACS Chem. Biol.* **17**, 1703-1713 (2022).
- A. T. T. Tu, K. Hoshi, K. Ikebukuro, N. Hanagata and T. Yamazaki, *Biomacromolecules* **21**, 3644-3657 (2020).
- 特開 2022038517 免疫刺激オリゴヌクレオチド

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

リン脂質膜の物理化学的性質

Keywords ベシクル、表面、界面、蛍光顕微鏡、界面張力

主任研究員／Senior Researcher

片岡 知歩 Kataoka Chiho

✉ KATAOKA.Chiho@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kataoka_chiho



研究概要

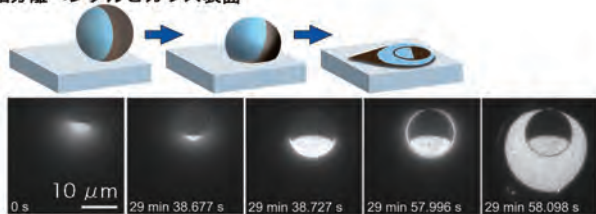
リン脂質膜は生体膜の基本構造である。リン脂質膜は柔らかく、様々な形を形成し、また、脂質組成に応じて相分離を引き起こす。これらの性質が生体内で重要な役割を果たしている。従って、生体膜の機能を解明するためには、リン脂質膜の変形や相分離について、その基本的性質を理解しなければならない。そこで、最小構成要素からなるモデルリン脂質膜を用いて、物理化学的性質を研究している。ベシクルが固液界面および油水界面に接触すると、膜が変形し形態変化を引き起こす。これまでに、界面で起こる様々な形態変化を明らかにした。また、油水界面での単分子膜の計測手法を開発した。これらの知見をもとに、脂質膜に関する新しい現象を発見する。

新規性・独創性

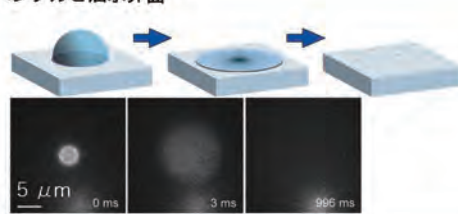
- リン脂質二重膜に関する新規現象の探索
- リン脂質膜の形態変化の解明
- モデル脂質膜を用いた生体膜の理解
- 油水界面リン脂質単分子膜の性質の解明
- 界面測定法の開発

研究内容

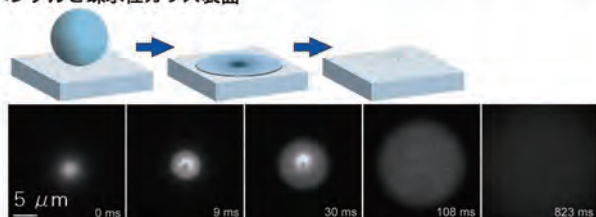
相分離ベシクルとガラス表面



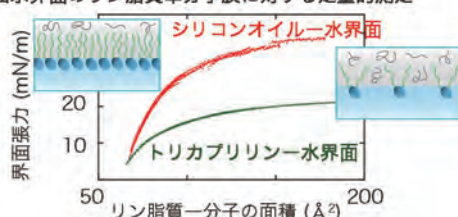
ベシクルと油水界面



ベシクルと疎水性ガラス表面



油水界面のリン脂質単分子膜に対する定量的測定



蛍光顕微鏡を用いて、ベシクルと界面との相互作用を調べた。液体秩序相と液体無秩序相が共存するベシクルをガラス表面に吸着させると、球状構造が開いて平らな脂質二重膜が形成された。吸着の途中で、二相のドメインが再配置を引き起こし、最終的に得られる平面膜は特徴的なドメイン配置を有していた。また、一様な膜からなるベシクルが油水界面や疎水性ガラス表面に吸着すると、約3～100 msの間に膜が開き単分子膜を形成した。さらに界面張力計を用いて、油水界面の定量的測定を試みた。単分子膜の分子密度が増加すると、膜から油が徐々に取り除かれ、界面張力が減少した。気液界面の実験と組み合わせ、脂質一分子面積と界面張力とを関係づけることができた。

まとめ

液体秩序相と液体無秩序相が共存するベシクルと固液界面との相互作用を明らかにした。また、疎水性表面や油水界面とベシクルとの相互作用を明らかにした。さらに、油水界面を覆うリン脂質単分子膜について、脂質一分子占有面積と界面張力との相関を決定する手法を開発した。これらの結果をもとに、生体膜の基本的性質に関する研究を進める。

論文・特許

- C. Kataoka-Hamai and K. Kawakami, *Langmuir* **37**, 1082-1088 (2021).
- C. Kataoka-Hamai and K. Kawakami, *Langmuir* **37**, 7527-7535 (2021).
- C. Kataoka-Hamai and K. Kawakami, *Langmuir* **35**, 16136-16145 (2019).

細胞膜の界面物理化学と生命情報

Keywords 生物物理, 細胞生物学, 膜タンパク質, イメージング

主任研究員 / Senior Researcher

貝塚 芳久 Kaizuka Yoshihisa

✉ KAIZUKA.Yoshihisa@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kaizuka_yoshihisa



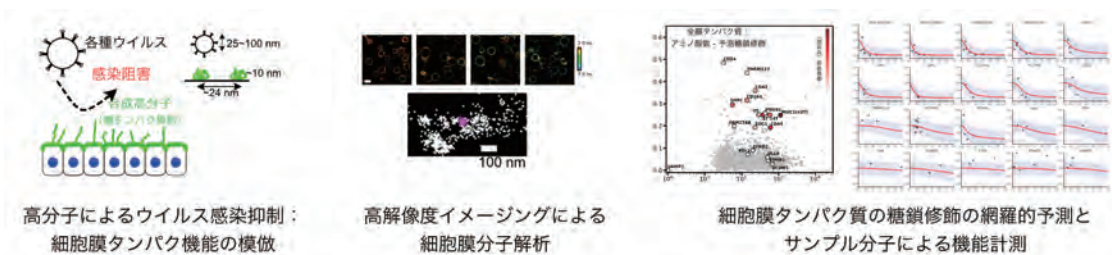
研究概要

生体材料開発では材料と相互作用する生体側の表面についての理解が重要である。そこで細胞レベルで外部と界面を構成する細胞膜について、接触する材料表面による制御や合成分子による直接的修飾などの技術開発を進めてきた。これらの基盤的技術・知見を基に、細胞の分子多様性と複雑性を考慮した機能性材料の開発に資するべく実験とデータ科学に基づく複合的な細胞膜とその制御機構の解析技術の開発を進めている。

新規性・独創性

- 材料科学と生化学・生命情報科学の融合
- 高分子による細胞結合、細胞へのウイルス感染の制御・抑制技術
- In situにおけるnmスケールでの細胞膜分子反応・構造解析の技術
- 多様な細胞膜タンパク質に対する網羅的・統計的な解析

研究内容



細胞膜の科学としてウイルスの細胞への感染、細胞膜タンパク質の相分離、細胞間界面での分子相互作用についての研究を進め、材料応用の可能性を探る。細胞膜タンパク質の生化学・高分子科学を細胞膜の界面科学と連動して理解しながら、界面への合成材料の導入法を開発する。特に細胞膜結合性の合成高分子で細胞間・細胞-ウイルスの界面を制御する手法については基盤的な原理から理解を進めており、細胞膜の糖タンパク質が行うウイルス感染抑制反応を材料によって模倣することが可能となった。

また第2の方向性として生命情報に立脚した技術開発を行う。これまでの開発では平均的な細胞の物性を想定し、また特定分子の生化学反応に限定して着目する場合が大半であったが、実際の細胞は多様な遺伝子が混在し大きなばらつきが存在する。そこで生体分子レベルでの多様性が細胞膜界面と材料開発に与える影響について生命情報科学の技術も活用して調べる。例として、細胞膜タンパク質の多様な糖鎖修飾がウイルス感染に与える影響の解析を行っている。

まとめ

本研究は細胞膜-材料の界面について多角的に解析する研究基盤の構築を目指すものであり、高分子～ナノ物質の材料開発における計測・評価等への応用展開が想定される。

論文・特許

- Y. Kaizuka and R. Machida, *Langmuir* **39**, 5408-5417 (2023).
- Y. Kaizuka, R. Machida and Y. Ota, *Langmuir* **37**, 366-375 (2021).
- 特許07286078 細胞凝集抑制剤、細胞凝集抑制方法、細胞分散方法、及び、細胞分析方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

低侵襲治療に貢献する革新的生体接着材料の開発

Keywords 生体接着, 低侵襲治療, タラゼラチン, 疎水基, 血管新生

グループリーダー／ Group Leader

田口 哲志 Taguchi Tetsushi

✉ TAGUCHI.Tetsushi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/taguchi_tetsushi



研究概要

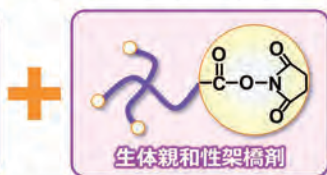
外科手術、内科的処置は高度化しており、患者負担の身体的負担を軽減するために腹腔鏡、内視鏡およびカテーテル等を用いた低侵襲治療が行われている。このような低侵襲治療に対して、湿潤環境での組織接着・閉鎖、止血、塞栓、癒着防止、血管新生誘導等の機能を有する材料設計を行い、物理化学的機能および生物学的機能の評価を行っている。低侵襲治療用材料に関する基礎的・基盤的知見の蓄積に留まらず、医学/歯学系機関、企業との連携へと発展させ、臨床応用へ展開している。

新規性・独創性

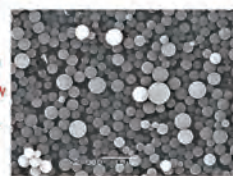
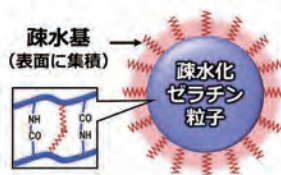
- 湿潤環境で生体組織・臓器に接着する疎水化タラゼラチン接着剤
- 早期消化管がん除去部に吹き付けるだけで被覆できる組織接着性粒子
- ホスト-ゲスト反応を活用した低膨潤組織接着性ゲル
- 成長因子を用いることなく血管新生を誘導する生体吸収性材料
- 湿潤皮膚に適用可能なフレキシブル接着シート

研究内容

疎水化タラゼラチン接着剤



組織接着性粒子



接着剤混合システム



肺欠損部閉鎖



内視鏡下での噴霧



優れた接着能



生体内の湿潤環境において生体組織・臓器表面に接着し、機能を発揮すると共に体内で強い炎症を引き起こすことなく分解・吸収される革新的生体接着材料の開発を行っている。既存の生体接着材料は強度と生体親和性の両立に課題があり、両者を併せ持つ材料が望まれている。そこで、世界第2位の漁獲量を誇るスケソウダラの水産加工廃棄物(皮・骨)から抽出したスケソウダラ由来ゼラチン(以下、タラゼラチン)を疎水化した疎水化タラゼラチンを主成分とした生体接着材料を開発している。手術後の肺表面への適用を目指した疎水化タラゼラチン接着剤および早期消化管がん除去部に内視鏡を用いて適用可能な組織接着性粒子に展開している。

まとめ

低侵襲治療を行う際の局所領域に対して組織接着・閉鎖、止血、塞栓、癒着防止、血管新生誘導等の機能を有する材料設計を行い、疎水化タラゼラチンを主成分とした生体接着材料が肺の空気漏れ防止や早期消化管がん除去部の被覆に対して有効であることを明らかにした。これらの革新的生体接着材料は、外科・内科領域での手術・処置に幅広く適用可能であることから、患者や医療従事者の身体的負担の軽減に繋がると考えられる。

論文・特許

- H. Komatsu, S. Watanabe, S. Ito, K. Nagasaka, A. Nishiguchi and T. Taguchi, *Macromol. Biosci.* **23**, 2370024 (2023).
- S. Ito, A. Nishiguchi and T. Taguchi, *Acta Biomater.* **159**, 83-94 (2023).
- Y. Mizuno and T. Taguchi, *NPG Asia Mater.* **12**, 48 (2020).

インジェクタブルゲル開発と医療応用

Keywords 低侵襲治療, 再生医療, 組織接着, ハイドロゲル, 液-液相分離

主幹研究員／Principal Researcher

西口 昭広 Nishiguchi Akihiro

✉ NISHIGUCHI.Akihiro@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nishiguchi_akihiro



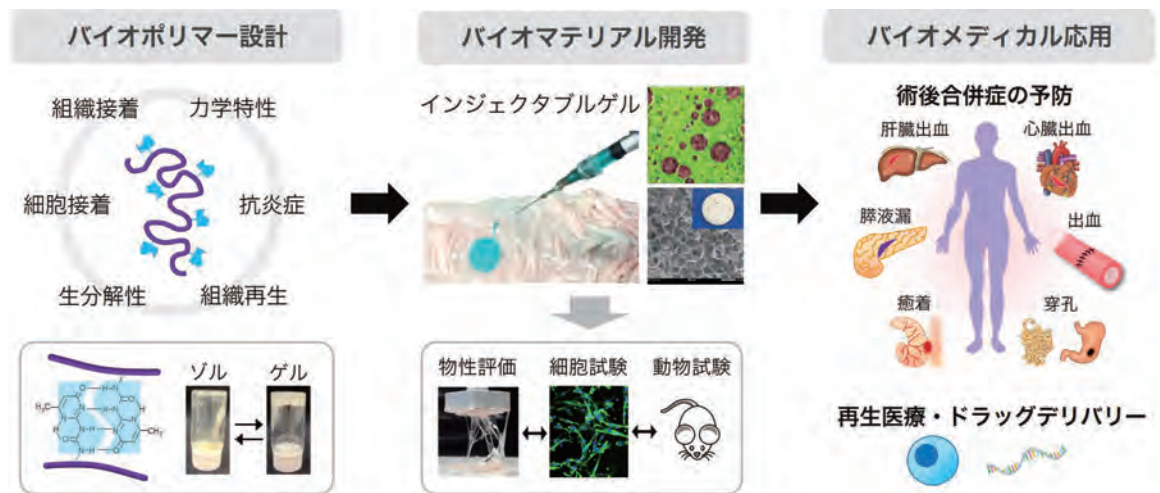
研究概要

術後合併症とは、外科的・内科的手術後に発生する合併症であり、臨床上大きな課題である。創部を保護し組織再生を促すバイオマテリアルは術後合併症を予防する医療材料として有用である。本研究では、機能性バイオポリマーをベースとしたバイオマテリアルの開発とそれらの医療応用を目的としている。バイオポリマー設計に基づき、1液型インジェクタブルゲルや多孔体、止血材等の機能性バイオマテリアルを開発している。これらの技術を基に、組織接着性・生体適合性・組織再生能・操作性に優れた医療材料を創出し、術後合併症の予防や再生医療、ドラッグデリバリーへの応用を目指している。

新規性・独創性

- 高分子反応技術によってバイオポリマーの構造・機能を分子レベルで制御
- 分子間相互作用の制御に基づく1液型インジェクタブルゲルの設計
- 組織接着性・生体適合性・操作性に優れたバイオマテリアル開発技術
- 創部に対する接着・被覆効果によって術後合併症を予防
- ゲルに内包した細胞や医薬品の局所投与による治療効果と安全性の向上

研究内容



バイオポリマーの構造・機能を分子レベルで制御することで、組織接着・力学特性・細胞接着・抗炎症・生分解性・組織再生を制御したバイオポリマーを新規に合成している。材料物性評価と細胞試験、動物試験を行うことで臨床上求められる医療材料としての機能を実現し、1液型インジェクタブルゲルや多孔体、止血材等を開発している。これらの機能性バイオマテリアルは、術後合併症の予防のみならず、再生医療やドラッグデリバリーへの応用が期待される。

まとめ

- 分子機能制御によって組織接着性・生体適合性・操作性に優れたバイオマテリアルを開発
- 出血や体液漏れ、癒着、穿孔等の術後合併症の予防
- 再生医療、ドラッグデリバリー分野への応用

論文・特許

- A. Nishiguchi and T. Taguchi, *Biomed. Mater.* **18**, 015012 (2023).
- A. Nishiguchi, H. Ichimaru, S. Ito, K. Nagasaka and T. Taguchi, *Acta Biomater.* **146**, 80-93 (2022).
- A. Nishiguchi, S. Ito, K. Nagasaka and T. Taguchi, *ACS Appl. Bio Mater.* **5**, 4932-4941 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

りん酸カルシウムを基にした機能性材料開発

Keywords りん酸カルシウム, 有機高分子, 複合体, 廃棄物, 機能化, 生体材料, 環境浄化

グループリーダー / Group Leader

菊池 正紀 Kikuchi, Masanori

✉ KIKUCHI.Masanori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kikuchi_masanori



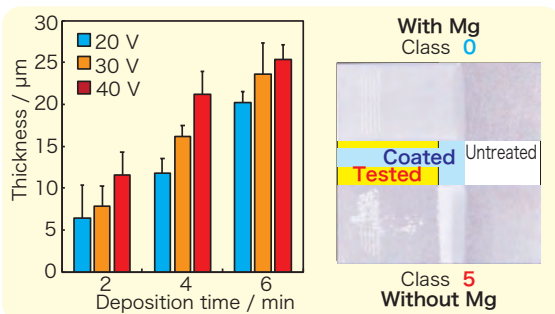
研究概要

脊椎動物の骨の主成分が塩基性りん酸カルシウムである水酸アパタイト (HAp) ことから、りん酸カルシウムはこれまでも多くが生体材料として研究・応用されてきた。現在では、HAp等の生体親和性を保ちつつ、吸収性骨ペーストや組織反応の迅速化など治療効果を高める材料が求められている。我々はHApと有機高分子であるコラーゲン (Col) との界面相互作用を適切に誘起することで、自己組織化的に骨類似のナノ構造を持つ HAp/Col 複合体を創成した。これは骨リモデリングプロセスに取り込まれる世界初の材料であり、多孔体として実用化されている。さらに、HAp/Col の優れた生体反応を利用できるよう、生体吸収性自己硬化型骨ペーストを初めとした新機能を持つ生体材料の開発を進めている。さらに、ウニ殻等の水産廃棄物や鶏骨などの廃棄物を用いた機能性材料 (骨補填材や環境浄化材料) の創成を目指している。

新規性・独創性

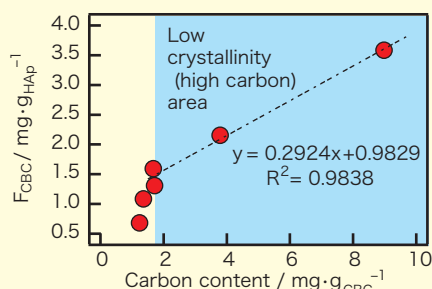
- 骨類似のナノ構造と化学組成を持つ材料 (HAp/Col) の創成とその高生体機能性の評価
- 骨リモデリングプロセスに取り込まれて自分の骨と置き換わる HAp/Col 自己硬化型骨ペースト
- チタンへのオッセオインテグレーション (骨とほぼ一体化すること) を3倍迅速化する HAp/Col コーティング膜
- 生体由来廃棄物の持つ気孔構造を活かした新时期骨補填材料
- 生体由来廃棄物などを用いたネットゼロりん資源・フッ化物イオン回収

研究内容



これまで、HAp/Col スラリーにチタンを浸漬してコーティング層を作る (ディップコーティング) ことで、チタンへのオッセオインテグレーションが3倍速くなることを明らかにした。しかし、実用化に向けて HAp/Col を複雑な形状に膜厚の精度良く剥がれにくくコーティングする手法の開発が必要となった。そこで、打越らと協力し、HAp/Col を Mg をバインダーとした改良電気泳動堆積 (mEPD) 法でコーティングすることを試みた。その結果、左図のように膜厚を簡便に制御しつつ、はく離強度の高い HAp/Col 膜をコーティングすることに成功した。さらに細胞培養試験や動物試験によって、ディップコーティングと同等以上の生体機能性を持つことが確認できた。

炭には廃液中のF-の除去には効果がないとされていたが、鶏骨炭中の非化学量論HAp (nHAp) におけるフッ化物イオンの除去効率は異常に高い。そこで、鶏骨をHApの結晶成長温度以下で焼成し、焼成時間を変えることで炭素量を変化させた鶏骨炭を製し、F-除去能力を検討した。骨炭中の nHAp は上記条件でも成長するため、炭素量と結晶子サイズの両面からF-除去に与える影響を検討したところ、nHAp が低結晶を保ち炭素の多い領域では、右図のように炭素量とF-除去能力に強い正の相関 ($R^2=0.984$) が認められた (結晶子サイズとは $R^2=0.743$ と弱い相関)。したがって、骨炭中において炭素量が F- 除去に重要なファクターであることが示唆された。



まとめ

自己組織化により合成された HAp/Col が持つ機能を活かして新しい生体機能を発揮できる材料を創成することができた。より優れた新機能生体材料の開発に繋がることを目指して北大歯学部と HAp/Col の持つ生体機能性の詳細な検討を進めている。また、廃棄物の持つ特性を理解することで機能性材料の創成に繋がることが明らかとなった。SDGs に向けて更に検討を進める。

論文・特許

- K. Iwanami-Kadowaki, T. Uchikoshi, M. Uezono, M. Kikuchi and K. Moriyama, *J. Biomed. Mater. Res. A* **109**, 1905-1911 (2021).
- M. Kikuchi, Y. Arioka, M. Tafu and M. Irie, *Int. J. Ceram. Eng. & Sci.* **2**, 83-91 (2020).
- 特許第6459631号 骨補填剤、その製造方法及びその使用方法

アパタイトを利用した放射性廃棄物の固定

Keywords アパタイトセラミックス, ヨウ素129, 地層処分

主任研究員／Senior Researcher

末次 寧 Suetsugu Yasushi

✉ SUETSUGU.Yasushi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/suetsugu_yasushi



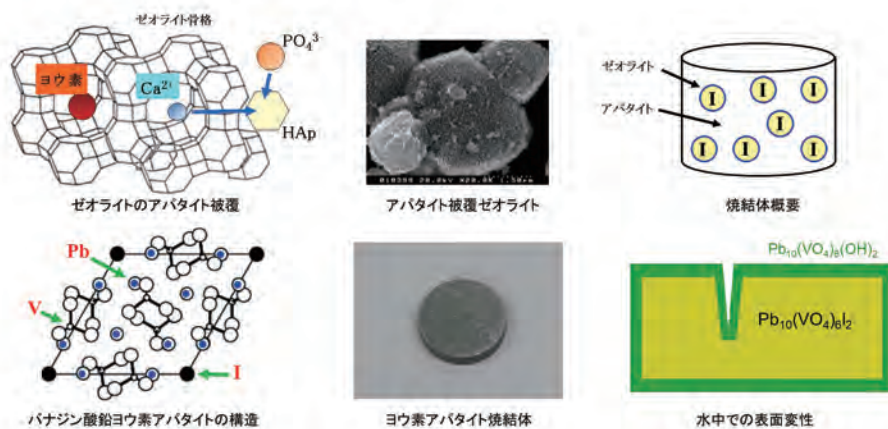
研究概要

核廃棄物の中には、半減期が長く、地層処分した場合に人工・天然バリアに対する収着性が低い放射性核種が存在し、これらを固定化して長期間にわたり放出をコントロールするための新しい技術が必要である。そこで、溶解度が低く、物理・化学的に安定なアパタイト系化合物に注目し、これを放射性廃棄物の固定材料として応用するための研究を行った。

新規性・独創性

- 放射性核種としてヨウ素129 (半減期1570万年) を想定
- ヨウ素吸着ゼオライトとリン酸カルシウムアパタイトの複合焼結、アパタイト構造中に直接ヨウ素を導入した「ヨウ素アパタイト」の合成などを試みる。
- 複合焼結では、ゼオライト表面を水酸アパタイトで被覆し、ゼオライトとアパタイトの焼結親和性を高める。
- ヨウ素アパタイトの合成では、メカノケミカル反応の利用で反応温度の低下を図る。

研究内容



- ゼオライト/アパタイト複合焼結体 (図上段)：ヨウ素吸着担持剤として用いるゼオライト粒子の表面を水酸アパタイトでコーティングするため、ゼオライト中にCaイオンを導入した後にリン酸イオンと反応させるという手法について検討した。
- ヨウ素アパタイト焼結体 (図下段)：ヨウ素を構造中に含むアパタイトとしては、バナジウム酸鉛系のヨウ素アパタイト ($\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{I}_2$) が有望であるが、通常その合成には高温条件が必要であり、その際のヨウ素の脱離が問題となる。ここでは、メカノケミカル処理による反応温度の低下を図った。

まとめ

- ゼオライト/アパタイト複合焼結体では、被覆処理により、加熱時におけるヨウ素の保持能が向上する効果が認められた。
- ヨウ素アパタイトについては、模擬地下水に浸漬してヨウ素の浸出挙動を調べた結果、試料表面にバナジウム酸鉛水酸アパタイト ($\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$) の層が生じ、内部のヨウ素を封じ込める効果を示した。

論文・特許

- Y. Suetsugu, *J. Nucl. Mater.* **454**, 223-229 (2014).
- 特許第5004230号 ヨウ素吸蔵体

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

再生医療のための高分子足場材料の開発

Keywords 再生医療, 足場材料, 高分子, 生体材料, 組織再生, がん治療, 温熱療法

グループリーダー／ Group Leader

陳 国平 Chen Guoping

✉ GUOPING.Chen@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/guoping_chen



研究概要

再生医療のための細胞足場材料には、組織の再生にともなって材料が消失する生体吸収性に加え、臓器・組織としての形態を維持するために必要な力学強度と細胞の接着や増殖、分化などの機能を制御するためのすぐれた細胞親和性も求められる。また、細胞を足場材料にまんべんなく均一に分布させ、機能的組織を再生するためには、足場材料の外表面の空孔が開いていること、空孔が連通していることが必要である。さらに、がん手術後の欠損組織を再生する場合は、組織再生を促進するだけでなく、がんの再発を抑えることもできる多機能性足場材料が望ましい。このようなニーズを満たすため、合成高分子と天然高分子を複合化した複合足場材料、氷を空孔の鋳型に用いて多孔質構造を制御した足場材料、および温熱足場材料を開発した。細胞培養及び動物実験でこれらの足場材料の効果を実証した。

新規性・独創性

- 連通孔の創出が簡単
- 強度が高く生体親和性が高い足場材料の作製が可能
- 各素材の長所を兼ね備えることが可能
- 一つの足場材料にいくつの要素技術を集積することが可能
- 大きな組織の再生が可能
- がん治療と組織再生が単一足場材料で実現

研究内容

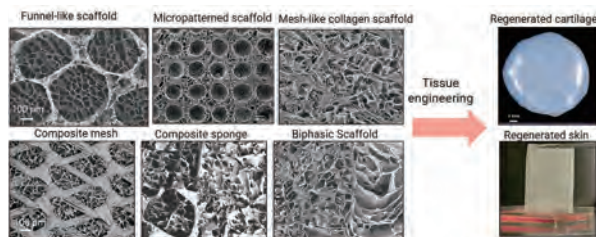


図1. 様々な細胞足場材料および足場材料を用いて再生した皮膚と軟骨組織

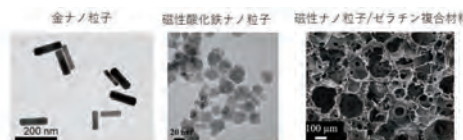


図2. 金ナノ粒子、磁性酸化鉄ナノ粒子、および磁性ナノ粒子/ゼラチン複合多孔質材料

力学強度の高い生体吸収性合成高分子と生体親和性に優れた天然高分子を複合化する手法を開発した。複合化によって、生体吸収性合成高分子の多孔質骨格の空孔や隙間に、コラーゲンやゼラチンなどの天然高分子のマイクロスポンジが形成される。これにより、合成高分子足場材料の細胞親和性が高められる。また、天然高分子の足場材料の強度不足が補われる。この複合化技術でPLGA-コラーゲン複合メッシュやPLGA-コラーゲン複合スポンジなどの複合多孔質足場材料を作製できた。複合多孔質足場材料は高い力学強度と細胞親和性を示した。PLGAのメッシュやスポンジは骨格として複合足場材料に高い力学強度を提供し、足場材料の形状を保持する。他方、コラーゲンやゼラチンのマイクロスポンジは、複合足場材料の細胞親和性を高める役割を担う。これらの高分子複合足場材料を用いて、軟骨細胞や骨芽細胞、間葉系幹細胞、線維芽細胞などを三次元的に培養し、軟骨や骨、皮膚などの組織を再生できた。

足場材料の多孔質構造を制御するために、あらかじめ作製した氷微粒子を新しい氷晶成長の結晶核として利用し、開いた表面空孔を有し、高い気孔率をもち、かつ連通性に優れた多孔質足場材料の作製技術を確立した。この方法を用いて、多孔質構造を制御したコラーゲンやゼラチンなどの多孔質足場材料を作製した。走査電子顕微鏡により、大きな空孔とそれを囲む小さな空孔が観察された。大きな空孔は小さな空孔とつながることによって多孔質足場材料の連通性を高めることができた。これにより、播種した細胞は多孔質足場材料に均一に分布させることができ、より均一な組織を再生できた。また、近赤外光の照射や交流磁場の印加によって発熱するナノ粒子等を導入したがん治療と組織再生の機能を兼ね備える複合足場材料を開発した。外科手術によるがん治療は広く行われているが、病巣を切除した後も体内にがん細胞が残存している場合がある。また、組織を切除することによって、臓器や体の機能が失われてしまうことがある。これらの問題を解決するために、残存したがん細胞を死滅させるとともに、切除によって欠損した組織を再生できる温熱足場材料を作製した。この温熱足場材料を近赤外光の照射や交流磁場の印加により、局所的に温度が上昇し、足場材料内及び周りのがん細胞を死滅させることができた。近赤外光の照射や交流磁場の印加がない場合は、温熱足場材料は幹細胞の増殖を促進し、外科手術で除去した組織の再生を促進することも確認した。

まとめ

生体吸収性をもつ合成高分子、天然高分子、氷微粒子、光熱変換ナノ粒子を用いて、多孔質足場材料の新しい作製方法を開発し、高機能の多孔質足場材料を創出した。これらの足場材料は細胞の機能を制御し、組織再生を誘導すること、がん細胞死滅効果と組織再生促進効果を引き出すことができた。

論文・特許

- R. Sun, H. Chen, J. Zheng, T. Yoshitomi, N. Kawazoe, Y. Yang and G. Chen, *Adv. Healthcare Mater.* **12**, 2202604 (2023).
- 特許第6786120号 細胞の内包化方法および内包化細胞
- 特許第6386824号 架橋ゼラチンスポンジの製造方法

幹細胞機能制御のためのマイクロパターン化培養材料

Keywords 再生医療, 幹細胞, マイクロパターン化培養材料

主席研究員／Chief Researcher

川添 直輝 Kawazoe Naoki

✉ KAWAZOE.Naoki@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawazoe_naoki



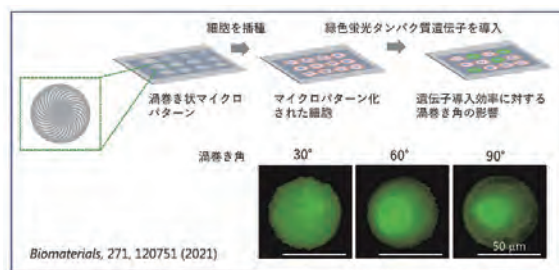
研究概要

細胞の大きさや形状、配向性などは、細胞、細胞が集まってできた機能単位である組織、さらに組織が組み合わさってできた器官や臓器の機能に密接に関わっていると考えられている。NIMSでは、細胞の大きさ・形状等を単一細胞レベルで制御したり、細胞の集合状態を制御したりすることが可能なマイクロパターン化培養材料を開発している。これまで、再生医療の重要な細胞源である幹細胞に対し、その大きさ、形状、伸展、キラリティー、細胞間相互作用などの物理的ファクターを制御しながら培養を行った。これらの物理的ファクターによって、幹細胞の分化能および未分化能維持、遺伝子導入効率、ナノメカニクス等にどのような影響が生じるかを研究した。さらに最近では、細胞の大きさ・形状を培養環境(たとえば培養液の粘度)ともに変化させた場合の分化誘導効率の相乗効果を明らかにした。

新規性・独創性

- 細胞の集合状態を制御可能
- 細胞の大きさ・形状等を単一細胞レベルで制御可能
- 同一材料表面に任意の異なるマイクロパターンを形成可能
- 数週間～数か月にわたる細胞培養にも安定なマイクロパターン
- 光リソグラフィーによる、量産化に適した製造プロセス

研究内容



光リソグラフィー法を用いて、感光性高分子をマイクロパターン状に固定化した細胞培養材料を開発した。細胞非接着高分子を感光基で化学修飾した後、細胞培養基材に塗布する。塗布面をフォトマスク(マイクロパターンを描画)で覆い、UV光に露光する。露光領域のみに細胞非接着高分子がグラフト固定化されたマイクロパターン化培養材料が得られる。本材料を用いれば、細胞が接着できる領域を制限することができる。その結果、細胞の大きさ、形状、伸展、キラリティーなどを制御することができる。本材料によって幹細胞の大きさ、形状、伸展、キラリティーなどを制御しながら培養を行い、これらの物理的ファクターによって、幹細胞の分化能および未分化能維持、遺伝子導入効率、ナノメカニクス等にどのような影響が生じるかを明らかにした。図は、幹細胞を異なるらせん状マイクロパターン上で培養し、渦巻き角の違いによる遺伝子導入効率への影響を調べた例である。遺伝子導入効率は渦巻き角に依存することがわかった。

まとめ

細胞の集合状態や、細胞の大きさ、形状、伸展、キラリティー等を制御することが可能なマイクロパターン化材料を開発した。本材料は、幹細胞研究のための培養システム、ハイスループット幹細胞機能評価システム、およびハイスループット創薬スクリーニングシステム等に应用できると期待される。その実現に向けて今後も研究開発を推進する。

論文・特許

- J. Zheng, Y. Wang, N. Kawazoe, Y. Yang and G. Chen, *J. Mater. Chem. B* **10**, 3989-4001 (2022).
- Y. Wang, Y. Yang, X. Wang, T. Yoshitomi, N. Kawazoe, Y. Yang and G. Chen, *Biomater.* **271**, 120751 (2021).
- 特許第5822266号 パターン化多孔質材料及びその製造方法

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

局所投与型光線力学療法に向けたバイオマテリアルの開発

Keywords バイオマテリアル, 酸化ストレス, 光線力学療法

主幹研究員 / Principal Researcher

吉富 徹 Yoshitomi Toru

✉ YOSHITOMI.Toru@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshitomi_toru



研究概要

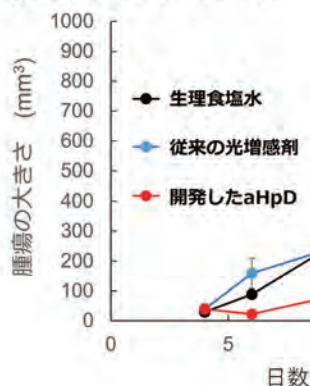
光線力学療法(PDT)は、光増感剤と特定の波長のレーザーを組み合わせた非侵襲的な治療法である。しかし、全身投与した光増感剤が、皮膚や眼に長期残存するため、術後、日光や部屋の明るいライトに当たると、目や皮膚に炎症が生じる。この光線過敏症を抑えるため、現在の治療では、術後約1か月間は光遮光管理が必要であり、患者にとって大きなストレスとなる。例えば、高齢者の中には、せん妄や認知症を発症する患者がいるだけでなく、働き世代としては、治療後、外での作業やパソコンを使った作業も避ける必要がある。この問題を解決するため、低分子光増感剤の全身投与ではなく、局所投与によって治療効果を発揮する新しい材料開発を行っている。

新規性・独創性

- バイオマテリアル設計に基づく光増感剤の薬物動態制御
- 局所投与で効果を発揮する光増感剤
- 光線過敏症を引き起こさない光線力学療法

研究内容

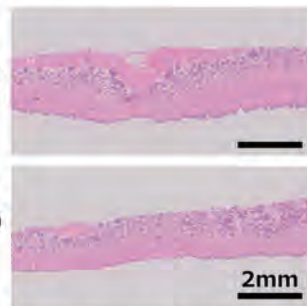
(a) 高いがん治療効果



(b) 光線過敏症の回避

従来の光増感剤

開発したaHpD



*)ラット皮膚の切片→光線過敏症が起きると炎症が生じて、皮膚が厚くなる。

注射部位に長期残存しつつ、癌組織への浸透性のある光増感剤(aHpD)を開発した。このaHpDを腫瘍近傍に投与すると、腫瘍内に徐々に浸透し、細胞膜に接着する。ここで、赤色のレーザーを照射すると、細胞が風船のように膨らみ、アポトーシスによって癌細胞が死んでいくことを見出した(図a)。一方で、aHpDを腫瘍近傍に注射しても、皮膚や眼に拡散せず、光線過敏症を引き起こさないことも実証した(図b)。aHpDを用いた局所投与型PDT治療を行うと、腫瘍を効率的に縮小するだけでなく、光線過敏症を起こさないため、患者にとってストレスが少なく、働きながらでもPDTができるウェルビーイングな治療法として期待される。

まとめ

新しい光増感バイオマテリアルを用いた局所投与型PDT治療を行うと、腫瘍を効率的に小さくできるだけでなく、光線過敏症を起こさないため、高齢者にとってもストレスが少なく、また働きながらでもがん治療ができる画期的なウェルビーイングながん治療法になる可能性を実証した。また、LEDライトを当てると赤色に光るため手術前の患部のマーキングに用いるといった活用法も見出している。

論文・特許

- Y. Komatsu, T. Yoshitomi, K. Furuya, T. Ikeda, A. Terasaki, A. Hoshi, N. Kawazoe, G. Chen and H. Matsui, *Int. J. Mol. Sci.* **23**, 4218 (2022).
- T. Yoshitomi, N. Kawagoe and G. Chen, *J. Jpn. Soc. Colour Mater.*, **95**, 331-335 (2022).
- 吉富 徹, ほか., ポリフィリンを含むカチオンポリマーおよびそれを含む組織マーキング剤、および光増感剤、特願2021-127676、PCT/JP2022/16226

スマートポリマーを用いた医療材料の創製

Keywords スマートポリマー, 刺激応答性ポリマー, バイオマテリアル, 癌治療, 早期診断, 途上国医療, SDGs

グループリーダー / Group Leader

荻原 充宏 Ebara Mitsuhiro

✉ EBARA.Mitsuhiro@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ebara_mitsuhiro



研究概要

外部の刺激に応答性性質を変化させるスマートポリマーを用いて、癌治療用ナノファイバーメッシュ、携帯型血液透析代替フィルター、抗炎症ポリマー、形状記憶ポリマー、早期診断など、新たな医療用デバイス・材料の開発を行っている。特に、インフラが整備されていない途上国や被災地でも利用可能な医療用デバイスの開発を目指している。

新規性・独創性

体外からの刺激によって性質をON-OFF変化可能なため、体外からのリモートコントロールによる治療や診断など、今までにない画期的な医療応用が期待できる。

研究内容

Smart Polymer Technologies For Global Health



まとめ

安全で安価な高分子材料を用いることで、SDGsの目標3にもなっているグローバルヘルスの実現に向けた様々な医療技術の発展に貢献できる。

論文・特許

- Y. Nakagawa, J. Lee, Y. Liu, S. Abbasi, T. Hong, H. Cabral, S. Uchida and M. Ebara, *ACS Macro Lett.* **11**, 270-275 (2022).
- A. Nabil, E. Yoshihara, K. Hironaka, A. A. Hassan, G. Shiha and M. Ebara, *Comput. Struct. Biotechnol. J.* **19** 3609-3617 (2021).
- N. Fujisawa, M. Takanohashi, L. Chen, K. Uto, Y. Matsumoto, M. Takeuchi and M. Ebara, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **22**, 522-531 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

細胞機能を誘導する生体無機ナノ材料

Keywords 酸化セリウム、ナノザイム、生体足場材料、幹細胞/がん組織由来細胞、細胞増殖

主任研究員／Senior Researcher

長沼 環 Naganuma Tamaki

✉ NAGANUMA.Tamaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/naganuma_tamaki



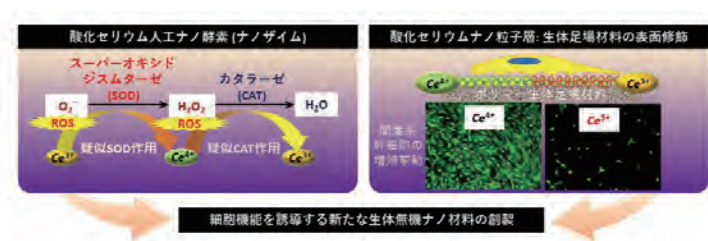
研究概要

高齢化に伴い医療費負担の増大が問題となる中、安全かつ低コストで治療効果の高い生体医療材料の開発が求められている。これまでに、いくつかの無機ナノ材料において、酵素活性をもつものが見出されている。しかし、これらの材料の物理化学的特性がもたらす相互作用や細胞機能への影響については、未だ不明な点も多い。そこで、ナノ材料が細胞外からもたらす細胞挙動への影響に着目し、そのメカニズムの解明に挑むことにより、細胞機能を誘導する新たな生体無機ナノ材料の創製を目指す。

新規性・独創性

- 無機ナノ材料の細胞外シグナルによる機能誘導
- 酸化セリウムの非Redoxのメカニズム探索
- 無機ナノ材料における金属イオンの安定化

研究内容



優れた触媒機能をもつ酸化セリウムナノ材料は、その酸化還元(Redox)反応を生かし、生体医療分野に向けた研究が進められている。この材料は、細胞内にて、Redox反応によって複数の酵素(例えば、スーパーオキシドジスムターゼやカタラーゼ)を模した疑似酵素として働き、抗酸化効果を発現できる。そのため、人工酵素(ナノザイム)としての利用が期待されている。これまでに、 Ce^{3+} イオンの安定化や面方位制御などにより、疑似酵素作用の高効率化やスイッチング効果を見出してきた。さらに、この材料は、細胞外において、セリウム特有の価数の違いにより接着細胞の増殖挙動を大きく変化させることを可能にした。このような特性は、組織工学や再生医療における生体足場材料の表面修飾にもちいることにより、より複雑な3D人工組織の設計やがん細胞の増殖抑制に役立つと期待される。今後、このメカニズムの探索により、酸化セリウムのRedox以外の新たな機構が明らかになれば、治療効果を向上できる革新的な生体無機ナノ材料の創製につながるものと期待される。

まとめ

酸化セリウムナノ材料をもちいて、疑似酵素作用の高効率化/スイッチング効果や、セリウム価数の違いによる細胞増殖への影響について明らかにした。前者は、Redox反応が関わるが、後者は、Redox以外のメカニズムが関わる可能性がある。細胞機能に対する酸化セリウムの新たなメカニズムの理解が進めば、組織工学や治療応用に向けた革新的な生体無機ナノ材料の開発に展開できると期待される。

論文・特許

- T. Naganuma, *Biomater. Sci.* **9**, 1345-1354 (2021).
- T. Naganuma, *Nano Res.* **10**, 199-217 (2017).
- T. Naganuma and E. Traversa, *Biomater.* **35**, 4441-4453 (2014).

がんの免疫療法、化学療法及び複合療法のためのバイオ材料

Keywords がん免疫療法, がんワクチン, アジュバント, 化学療法, ドラッグデリバリーシステム (DDS), 複合療法, 相乗効果

主任研究員 / Senior Researcher

李 霞 Li Xia

✉ Li.Xia@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/li_xia



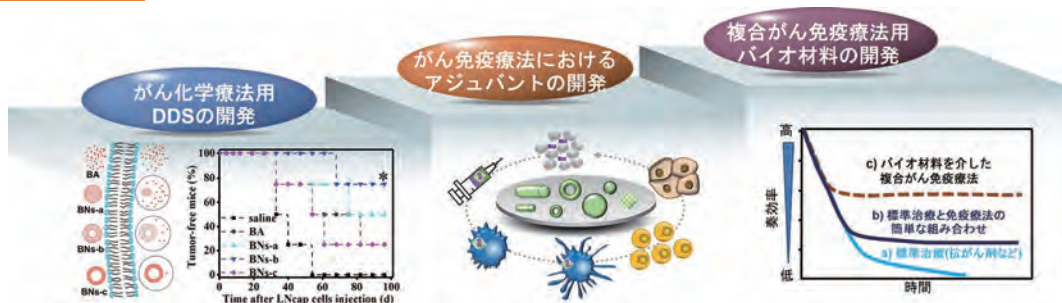
研究概要

従来のがん治療は手術療法、化学療法、放射線療法が主体である。しかし、手術療法は早期がんに限られており、化学療法や放射線療法は有効用量・線量と副作用の矛盾、再発・転移等の問題を抱えている。近年、がん免疫療法が抗がん免疫を活性化すること（がんワクチンなど）や負の免疫調節を阻害すること（免疫チェックポイント阻害剤）から、がん治療だけでなく再発や遠隔転移を防ぐ、第4の治療法として脚光を浴びている。しかし、奏効率が低い、費用が高いという問題が残っている。ここでは、腫瘍の特徴に応じて設計されたバイオ材料を用いて、効果的かつ低コストで行えるがん治療法の実現を目指す。

新規性・独創性

- 材料を担体として利用するだけでなく、材料自体の組成特性を最大限に活用する。
- がん免疫アジュバントを設計・オーダーメイドする。
- ナノ構造、組成、表面修飾等を制御することで、標的細胞や臓器、生分解性等を調整することができる。
- 材料を媒体として使用して、異なるがん治療法の相乗効果を達成する。
- 実際のニーズに応じて個別化複合がん免疫療法のためのバイオ材料バンクを開発する。

研究内容



- 1). がん化学療法用DDSの開発: ホウ素含有化合物は、がん細胞の増殖を抑制するため、がんの化学予防及び治療薬として期待される。しかし、可溶性ホウ素化合物（ホウ酸BA等）の全身への投与は、その半減期の短さと有効性の低さによって阻まれている。我々は、中空構造を有する窒化ホウ素ナノ粒子を設計・合成し、結晶化度とホウ素放出速度を制御した。そして、最適化した窒化ホウ素中空ナノ粒子の顕著な腫瘍抑制効果を動物実験で確認した。
- 2). がん免疫療法におけるアジュバントの開発: アジュバントは抗原に対する免疫応答を増強させることができる物質である。我々は、構築した一連の細胞レベル、動物レベルの評価系を通じて、自ら合成した成分・粒径・形状・多孔質構造等の異なる複数の無機、有機或は複合アジュバント材料を網羅的に評価し、組成・構造制御と抗腫瘍免疫応答の関連性を解明した。開発されたアジュバントとモデル抗原或は腫瘍由来のがん抗原を同時投与することで、優れたがん再発予防効果を有することを実証した。
- 3). 複合がん免疫療法用バイオ材料の開発: バイオ材料を媒体として使用し、異なるがん治療法を組み合わせることで複合がん治療法の開発を行った。例えば、バイオ材料を利用してがん抗原と免疫チェックポイント阻害剤を送達し、がんワクチンと免疫チェックポイント阻害剤の相乗効果を生み出す。また、バイオ材料が抗がん剤の薬物送達システムであると同時にin situがんワクチンのアジュバントとして機能し、化学療法と免疫療法の相乗効果を生み出すことで、治療された腫瘍増殖を阻害するだけでなく、未治療の遠隔腫瘍を抑制できることを動物実験で実証した。

まとめ

ナノスケールで新たなバイオ材料を創造し、空間内で薬物、がん抗原或は免疫チェックポイント阻害剤等を高度に集積化させることで、相乗的融合を実現させることを目指す。よって、がん治療法のコストを削減し、奏効率の改善、及びがん再発や遠隔転移を防ぐとともに、副作用を抑えることが期待される。

論文・特許

- X. Li, X. Wang, J. Zhang, N. Hanagata, X. Wang, Q. Weng, A. Ito, Y. Bando and D. Golberg, *Nat. Commun.* **8**, 13936 (2017).
- X. Li, M. A. Shenashen, X. Wang, A. Ito, A. Taniguchi and S. A. El-Safty, *Sci. Rep.* **7**, 16749 (2017).
- X. Li, C. Zhi, N. Hanagata, M. Yamaguchi, Y. Bando and D. Golberg, *Chem. Commun.* **49**, 7337-7339 (2013).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Hierarchal mesostructures for environment & healthcare

Keywords Nanoscale, Biocaptors, Sensors, Catalysts, E-waste Recycling, Water Treatment

独立研究者 / Independent Scientist

エルサフティ シェリフ El-Safty Sherif

✉ SHERIF.Elsafty@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sherif_elsafty



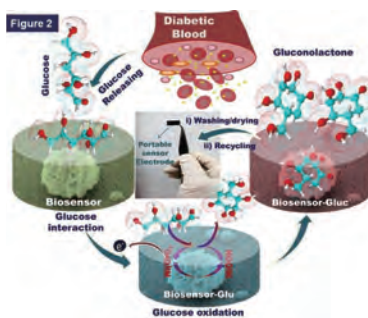
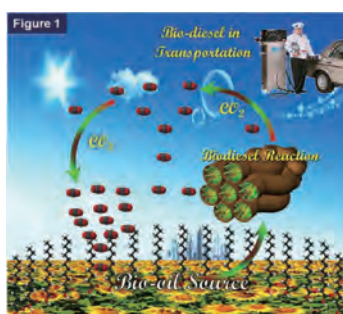
Research Summary

- The environmental protection, recognition and prevention of hazards and pathogens.
- Monitoring of neurotransmitters in human neuronal cells for diagnoses of Parkinson's and schizophrenia diseases.
- Nano-architectures for high capacitance & long-term stability of energy storage devices, fuel cell and capacitors.
- Environmental recycling and remediation (nano for simple detection/extraction/removal of REEs, radioactive materials and toxins)
- Nano-catalysts for biodiesel production from waste

Novelty / Originality

- Fabrication of the Hierarchy Nano-metric Order Materials (HOM) family with various areas of application; water treatment, sustainable and green energy, pollution management, urban mining, biosensors and bioelectronics devices, and disease diagnosis.
- Developing nanomembrane to solve water-related problems as interdisciplinary scientific breakthroughs. It is the first technology based on nanoporous membrane filters easily fabricated with different hierarchical designs. Selective monitoring and removal of hazardous and radioactive substances using high-volume, pressureless filtration provides an energy-efficient technology.

Research Contents

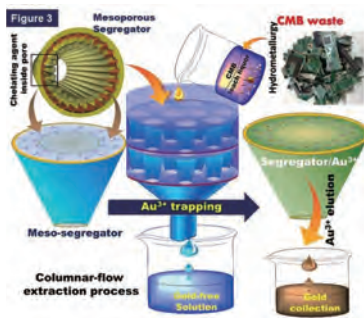


Nanocatalyst Biodiesel Production from Waste: Fabrication of thermally stable nanocatalyst leads to biodiesel production with features of high product yield, cost-efficiency, and long-term reusability (Figure 1).

Glucose Biosensor for Diabetics: Portable sensor enables highly sensitive and selective detection of glucose from diabetic blood (Figure 2).

REEs & Critical Metals Recycling: A fine chemical recycling to recover rare earth metals and precious elements from E-waste. The simple E-waste management reduces waste volume and protects environment (Figure 3).

Filter Membrane for Water Purification: Available in i) sensor; ii) tea bags; iii) pellets; iv) masks; and v) nanofilters for visual early warning of toxic and radioactive substances and for safe water (Figure 4).



Summary

With the aim of providing integrated solutions to major environmental issues, new know-how and expertise have been developed for industrial-scale manufacturing processes. A variety of application-based nanomaterials to meet a wide range of market needs are being produced in a simple, cost-effective and environmentally friendly manner.

References

- H. Gomaa, M. A. Shenashen, M. F. Cheira, K. Sueki, T. A. S. El-Nasr, M. M. Selim and S. A. El-Safty, *Chem. Eng. J.* **461**, 142014 (2023).
- M. A. Shenashen, M. Y. Emran, A. E. Sabagh, M. M. Selim, A. E. and S. A. El-Safty, *Prog. Mater. Sci.* **124** 100866 (2022).
- 特開2016035109 ランタノイド元素又はアクチノイド元素の抽出方法及びナノ構造体

形状記憶高分子からなる高機能性4D印刷材料の開発

Keywords 形状記憶高分子, 4D印刷, 積層造形, 生分解性, メカニカルメタマテリアル, バイオメディカルデバイス, マテリオバイオロジー

独立研究者 / Independent Scientist

宇都 甲一郎 Uto Koichiro

✉ UTO.Koichiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/uto_koichiro



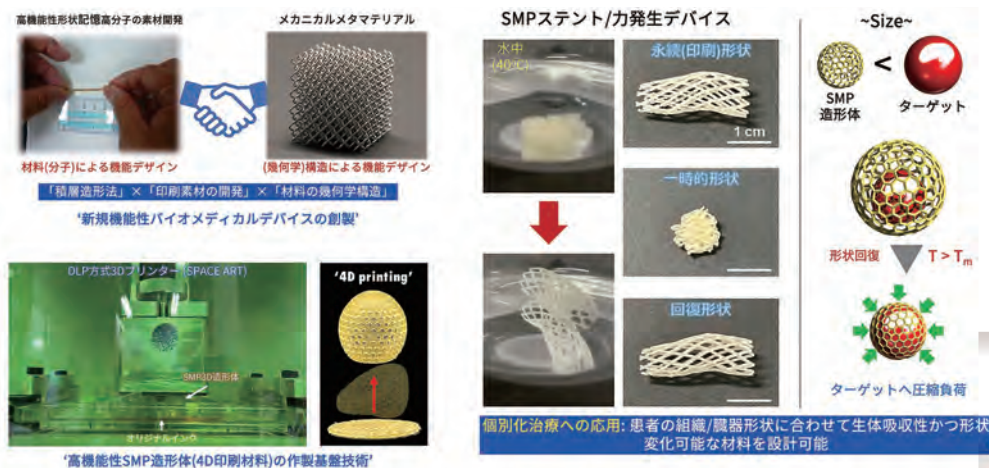
研究概要

4D印刷技術は、従来の積層造形技術を進化させたものであり、経時的な形態変化という新しい次元を製造プロセスに組み込むことで、機能性材料の開発や生産方式に変革をもたらすと期待される。NIMSでは、高分子ナノアーキテクトニクスの精密設計・合成により形状記憶高分子材料の転移温度、分解性、力学特性や形状記憶特性を制御する方法論の構築に成功している。この形状記憶高分子を基軸とし、3D印刷などの積層造形法と組み合わせることで従来の分子論に限定されない、構造論を併用した材料機能設計を展開し、新奇な高機能性4D印刷材料を創製する。この形状記憶高分子の4D印刷技術を深化させ、日本発の形状記憶高分子からなるバイオメディカル材料の開発を目指す。

新規性・独創性

- 生理的環境において駆動する形状記憶高分子材料の設計指針
- 形状記憶高分子の各種物性（転移温度、分解性、力学・形状記憶特性など）制御技術
- 高機能性4D印刷材料の作製を可能とする独自印刷インクおよび精密4D印刷技術
- 4D印刷技術を駆使したバイオメディカルデバイスの新規設計方法

研究内容



積層造形技術を駆使し、複雑な三次元形状を有する高性能形状記憶高分子材料の合理的設計論（「積層造形法」×「印刷インク開発」×「材料幾何学構造」）の構築および、バイオマテリアルのメソスケールの材料構造と力学的機能の関係を実験・計算科学的に明らかとし、構造特異的な力学機能の発現を意図的に創出するメカニカルメタマテリアル化基盤技術を構築し、新規機能性バイオメディカルデバイスの創製を目指す。これまでNIMSが蓄積してきた形状記憶高分子材料の設計・合成戦略を基軸として高速かつ高精度・高解像度の4D印刷の基盤技術を築き、複雑な形状変化を誘起可能な4D印刷造形体を創製する。従来法である既存の材料（幾何学）構造解析から機能や物性を検証する試行錯誤法ではなく、望みの機能から逆設計により構造を出力するアルゴリズムやシステムを構築することで、力学的材料機能をデジタルに設計し意図的かつ効率的なメカニカルメタマテリアルの製造を可能にする。それをバイオメディカルデバイス設計へと展開し、バイオマテリアルの構成分子・物質のみならず材料の幾何学構造に由来した多様な力学負荷を印加可能なデバイスを開発し、モデル動物実験による治療効果の検証を通じ、「メカニカルメタバイオマテリアル」という新しい概念を打ち出せることが期待される。

まとめ

形状記憶高分子4D印刷材料は、幾何学構造の導入による力学的機能の改質に加え、スマートポリマーに基づく新奇材料機能発現および4D印刷材料の実用化に大きく貢献できる。「積層造形法」×「印刷素材の設計」×「（幾何学的）構造」の3要素の連関性を理解し、相加的でなく相乗的な機能発現をバイオマテリアル設計が可能となれば、新たなカラーアプリケーションの創出にもつながる。

論文・特許

- K. Uto, Y. Matsushita and M. Ebara, *Polym. Chem.* **14**, 1478-1487 (2023).
- X. Zheng, K. Uto, W. H. Hu, T. T. Chen, M. Naito and I. Watanabe, *Appl. Mater. Today* **29**, 101662 (2022).
- A. Fulati, K. Uto, M. Iwanaga, M. Watanabe and M. Ebara, *Adv. Healthc. Mater.* **11**, 2200050 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

嗅覚とニオイの理解と制御

Keywords 嗅覚センサ, ニオイ, 生体ガス, 呼気, 感応膜材料, 機械学習, 音響, 量子計測

グループリーダー / Group Leader

吉川 元 起 Yoshikawa Genki

✉ YOSHIKAWA.Genki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_genki



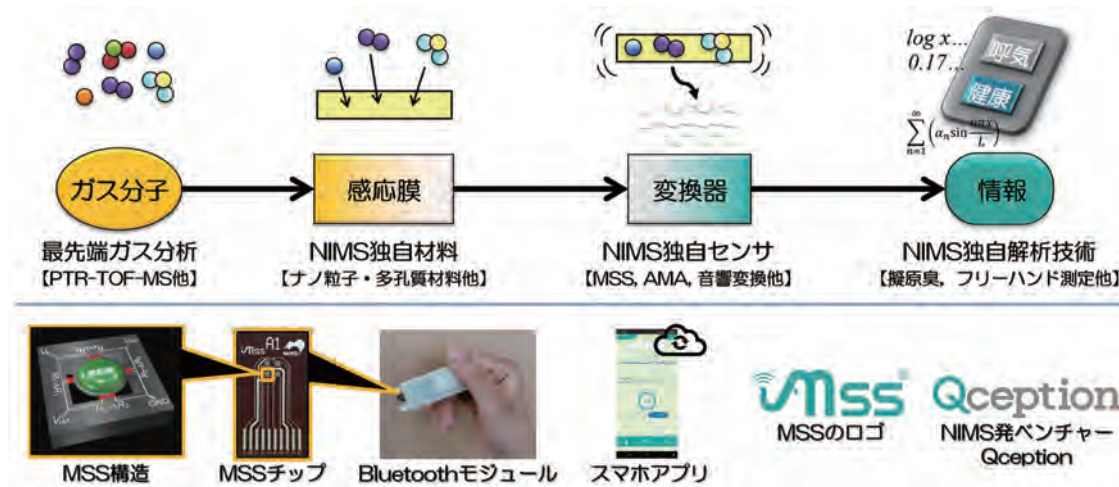
研究概要

ニオイは膨大な情報を含んでおり、かつ揮発性であるため、非接触・非侵襲・連続・迅速測定が可能である。そのため、医療・ヘルスケア・食品・農畜産業・環境・介護・工業・防災など多様な分野で、これまでにない課題解決手段として期待されている。しかしながら、ニオイ成分は数十万種類以上あると言われており、時間的にも空間的にも絶えず揺らぎ続けている。この複雑なニオイを測定する嗅覚センサの社会実装は、40年以上の歴史を経てなお実現しておらず、単純に思いつくようなセンサやシステムでは歴史を繰り返すだけとなる。本グループでは、これまでの膨大な知見を踏まえ、さらにそれを超える技術体系を構築し、現場で使える嗅覚センサの実現を目指している。

新規性・独創性

- 嗅覚センサMSS：高感度・小型・多様性・高速応答・低消費電力
- 最先端ガス分析装置群によるppt濃度レベルでの多角的検証
- 高感度・高選択性を実現する機能性感応膜材料群
- 科学的・論理的検証に基づく高精度・高再現性ニオイ測定システム
- 最先端機械学習によるさまざまな高精度予測モデル

研究内容



独自に開発した嗅覚センサMSSを軸に、ガス成分の吸脱着挙動に関する基礎研究、多種多様な機能性感応膜材料、現場での高精度測定を実現する統合システム、最先端機械学習モデル、世界最大の産学官連携など、基礎から応用、ハードからソフトまで網羅した総合的研究開発を継続中。また、NIMS発ベンチャー（株式会社Qception）を通じた社会実装も推進中。

まとめ

- 牧場や製造現場などの過酷な環境でも、僅かなニオイの変化を再現性良く現場で測定可能であることを実証し、現在事業化を推進中。
- 生体ガスによる医療診断を実現するには、対応する代謝経路の確定など科学的エビデンスの確立が必要。
- 究極の目標は、スマホに搭載されたセンサによる、科学的エビデンスに基づいた高精度な呼気がん診断。

論文・特許

- K. Minami, G. Imamura, R. Tamura, K. Shiba and G. Yoshikawa, *Biosensors* **12**, 762 (2022).
- G. Yoshikawa, T. Akiyama, S. Gautsch, P. Vettiger and H. Rohrer, *Nano Lett.* **11**, 1044–1048 (2011).
- 特許第5649138号 表面応力センサ

「気相」のマイクロフレイディクスの開拓

Keywords 気体, マイクロフレイディクス, 質量分析, 鼻腔, センシング, 有限要素解析

主幹研究員／Principal Researcher

柴 弘太 Shiba Kota

✉ SHIBA.Kota@nims.go.jp ⑧ https://samurai.nims.go.jp/profiles/shiba_kota



研究概要

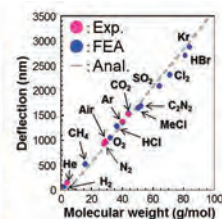
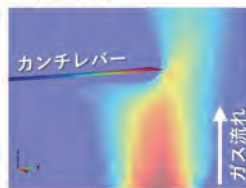
マイクロ流体デバイスは、ミクロンサイズの空間における流体挙動の制御を通じ、高効率かつ高速な化学反応、分析、分離・濃集などを実現する技術としてその研究開発が進められている。従来は液相での用途が圧倒的に多く、気相が主役となることはなかった。本研究では、気相をメインとしたマイクロフレイディクス研究を展開することで、微小空間における気体挙動の制御・計測・センシングなどを指向した新たな学問・技術体系を構築する。

新規性・独創性

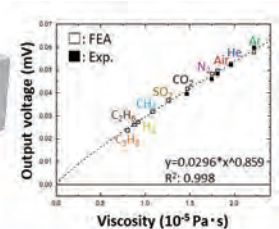
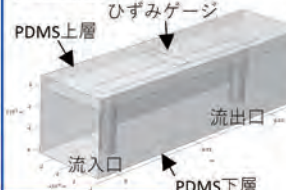
- 気体流れにフォーカスしたマイクロフレイディクス
- 多種多様な気体の定性および定量
- 小型かつ簡易な気体計測デバイス
- 生物由来の微小空間における複雑な気体流れの理解と応用

研究内容

【分子量測定】

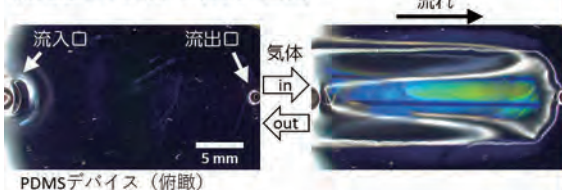


【粘度測定】

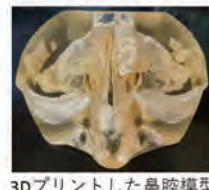


気相のマイクロフレイディクス

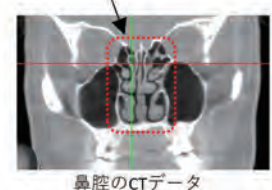
【構造色による気体の可視化・識別】



【鼻腔内流れの理解と利用】



この中の流れを扱う



これまでの研究により、簡単な構成のデバイスを用いて気体の分子量や粘度が測定できることを示した(図左上、右上)。いずれも気体流れが引き起こすカンチレバー等の変形を基本原理とするため、単一デバイスによる両パラメータの同時測定も視野に入る。これは、イオン化不要の新規質量分析技術につながる可能性がある。また、色変化に基づく読取り方式を導入することで、気体計測・識別が目視ベースで行える手法も開発した(図左下)。鼻腔は生物が有する複雑なマイクロ流路であり、ここでの気体流れを理解し、デバイス応用する研究も推進中である(図右下)。

まとめ

- 小型の簡易デバイスを用いて気体の分子量や粘度を計測する手法を開発した
- 上記をガスクロマトグラフィーと組み合わせることで、イオン化不要の新規質量分析法の実現を目指す
- 鼻腔内の気体流れの理解を通じて、嗅覚のエッセンスを取り込んだこれまでに無い気体計測手法を創出する

論文・特許

- K. Shiba, C. Zhuang, K. Minami, G. Imamura, R. Tamura, S. Samitsu, T. Idei, G. Yoshikawa, L. Sun and D. A. Weitz, *Adv. Sci.* **10**, 2204310 (2023).
- K. Shiba, G. Li, E. Virot, G. Yoshikawa and D. A. Weitz, *Lab Chip* **21**, 2805-2811 (2021).
- K. Shiba and G. Yoshikawa, *Sci. Rep.* **6**, 28849 (2016).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

においセンサの開発および新たなセンシング手法の創出

Keywords ナノメカニカルセンサ, 理論解析, 材料合成, 有機合成, センサ応用, 医療診断

主任研究員 / Senior Researcher

南 皓輔 Minami Kosuke

✉ MINAMI.Kosuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/minami_kosuke



研究概要

化学センサの一種であるナノメカニカルセンサは、原理的にありとあらゆる固体材料が感応膜、すなわち、分子を検出する材料として利用可能であり、ガスセンサやにおいセンサへの応用が期待されている。ナノメカニカルセンサの理論モデルの構築による感応膜材料開発の指針の創出、幅広い化学選択性を持つ感応膜材料の開発などの基礎的な研究から、においセンサの社会実装に向けた応用研究に至る幅広い研究を進めている。また、ナノメカニカルセンサの基礎的な研究開発から着想を得た新たなセンシング手法の開発・確立へと展開している。

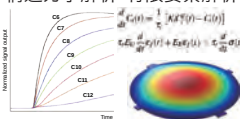
新規性・独創性

- 吸着速度論と粘弾性理論を用いた応答シグナルの理論化
- 新たな機能性材料合成による幅広い化学選択性の創出
- パターン認識や機械学習を用いた「におい」の識別
- 理論モデル・基礎的研究から創出した新たなセンシング手法の開発・確立

研究内容

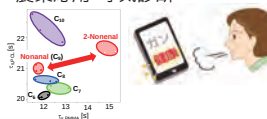
理論的解析

- ・吸着速度論解析・粘弾性解析
- ・構造力学解析・有限要素解析

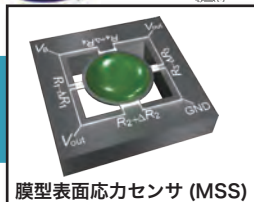


ガスセンサ・においセンサ応用

- ・においセンサ
- ・農業応用・呼吸診断



基礎

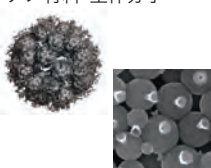


膜型表面応力センサ (MSS)

応用

感応膜材料開発

- 多様な化学選択性の獲得
- 有機材料・ポリマー材料
- ナノ材料・生体分子



新たなセンシング手法の開発

- ・固体材料測定・粘弾性測定
- ・超微量水分測定
- ・バイオ・医療診断デバイス



化学センサやそれらを複数並べたセンサアレイは、人間の鼻を模倣した『においセンサ』として注目されている。このにおいセンサの実現には、センサアレイそれぞれに多様なにおいを識別すべく、幅広い化学選択性を有する「感応膜」が求められている。原理的にありとあらゆる固体材料が感応膜として利用可能なナノメカニカルセンサに着目し、これまで理論解析・感応膜材料開発など基礎的な研究からにおいセンサの社会実装を目指した応用研究まで幅広く研究している。においセンサ応用として、例えば、農業分野における食品・農作物の品質管理や医療分野における呼吸で病気を判断する究極の非侵襲の診断手法である「呼吸診断」の研究など多岐にわたって研究を進めている。

他方で、理論解析などの基礎的な研究開発から、新たなセンシング手法の創出にも成功している。例えば、微量水分へ極めて高い選択性を持つ感応膜材料開発から、有機化学反応において重要な有機溶媒中の超微量水分測定を可能にするセンサの開発や、ガス分子がセンサに吸脱着する際の理論解析から、逆転の発想から新たなパターン認識による固体材料の識別法の確立、さらに、この固体材料識別法を応用した医療診断デバイスへの展開など、においセンサ開発にとどまらず新たなセンシング手法の開発も進めている。

まとめ

においセンサ開発における基礎から応用に至る総合的な研究開発により、センサ開発における五感最後の砦である「嗅覚」の社会実装に向けて研究している。さらに、基礎的な研究開発から、新たなセンシング理論の創出・センシング手法やセンサデバイスの開発へと展開している。

論文・特許

- K. Minami, G. Imamura, R. Tamura, K. Shiba and G. Yoshikawa, *Biosensors* **12**, 762 (2022).
- K. Minami, K. Shiba and G. Yoshikawa, *J. Appl. Phys.* **129**, 124503 (2021).
- K. Minami, G. Imamura, T. Nemoto, K. Shiba and G. Yoshikawa, *Mater. Horizons* **6**, 580-586 (2019).

材料と電気細菌の相互作用解明と一般細菌制御技術の開拓

Keywords 鉄腐食細菌, 歯周病細菌, 腸内細菌, 微生物発電, 有害細菌センサー, 殺菌技術

グループリーダー / Group Leader

岡本 章玄 Okamoto Akihiro

✉ OKAMOTO.Akihiro@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/okamoto_akihiro



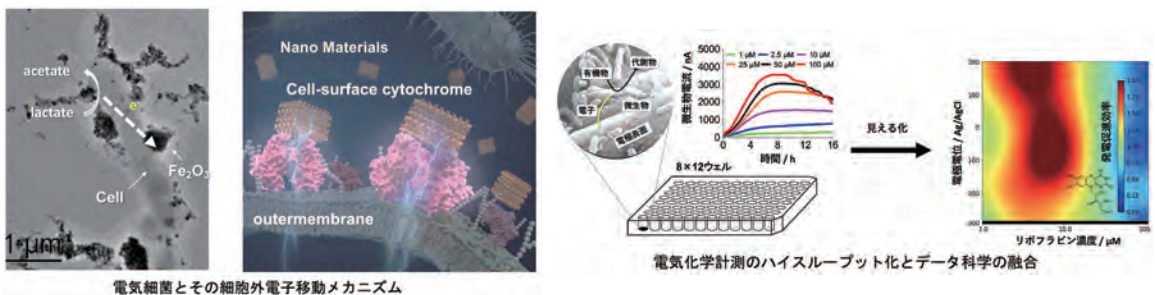
研究概要

細胞の状態を精緻に捉えることや、制御することは、基礎科学にとどまらず、エネルギー・環境や医療分野においても本質的な重要性を有する。しかし、ありのままの細胞の状態へアプローチする方法は、依然限られている。実は多くの細菌が、導電性ナノ粒子やレドックス小分子、膜酵素といった多様なメカニズムで、細胞外にある鉱物との電子のやり取りをする「電気細菌」であることが近年明らかになってきた。この電気細菌の持つ仕組みを理解・模倣することで、細胞内へ非侵襲にアクセスする物質・技術を開発し、革新的な殺菌や診断技術、微生物腐食のオンサイト検査技術等の創成へと繋げる。

新規性・独創性

- 電気化学による細菌代謝活性のin vivo追跡技術
- ハイスループット電気化学によるバイオ材料の高速スクリーニング技術の開発
- 機械学習・ベイズ最適化による酸化還元分子・バイオ材料の能動的学習と探索手法
- 電気化学を用いた細胞内浸透圧の制御技術の確立
- 細菌由来微粒子のDNA解読技術の確立とそれを利用した診断技術の開発

研究内容



電気細菌とその細胞外電子移動メカニズム

微生物電気化学は、材料化学、微生物学、電気化学を含む分野横断性を持つ研究分野である。電気細菌の発電能力の向上や、鉄腐食細菌や病原細菌を環境サンプルから高感度に電気化学検出するための薬剤やナノ材料の探索を行うためには、測定スループットの低さが長年のボトルネックであった。そこで、従来の100倍以上のアウトプットが可能な当測定系を用いることで、高速に条件検討やデータベースの作成が可能になり、ベイズ最適化といったデータ駆動的な解析手法を組み合わせることに成功した。さらに、この発明は基礎科学の研究も加速し、電気化学による新殺菌原理の発見、その大幅な効率化へと繋がった。本技術は殺菌に加えて、治療技術へも展開できることが期待される。多様な用途での応用が期待でき、数百億ドルといった大型の市場も視野に入る。

まとめ

- 微生物電気化学測定のハイスループット化と物質探索基盤技術の確立
- 微生物発電、有害細菌の検出、新原理殺菌技術
- 殺菌技術を治療法として利用するために、人体への安全性の検討
- 毒性の低い薬剤による高い殺菌効率の実現
- 既存技術に対する高い安全性の証明

論文・特許

- C. Ho, M. Y. Emran, S. Ihara, W. Huang, S. Wakai, W. Li and A. Okamoto, *Chem. Eng. J.* **466**, 142936 (2023).
- W. Miran, W. Huang, X. Long, G. Imamura and A. Okamoto, *Patterns* **3**, 100610 (2022).
- D. Naradasu, A. Guionet, W. Miran and A. Okamoto, *Biosens. Bioelectron.* **162**, 112236 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

センサ応答からの情報抽出：ニオイセンサの総合的開発と実用化に向けた取り組み

Keywords ニオイセンサ, 材料開発, インフォマティクス, 実用化

主任研究員／Senior Researcher

今村 岳 Imamura Gaku

✉ IMAMURA.Gaku@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/imamura_gaku



研究概要

センサとインフォマティクスを組み合わせることで、測定対象から多様な情報を抽出することができる。今村は、複数の特性の異なるガスセンサを組み合わせ、得られたセンサ応答をもとにその気体（ニオイ）が何であるかを推定する「ニオイセンサ」の研究開発を行っている。このニオイセンサを実現するための要素技術として、ガス検知材料、測定法、データ解析法等、多分野にわたる総合的な研究開発を行い、さらに、このニオイセンサの社会実装に向けた取り組みの一環として会社を立ち上げた。

また、ニオイセンサに加えて、ハイスループットな電気化学センサからの情報抽出にも取り組んでいる。

新規性・独創性

- ニオイセンサに求められる要素技術を網羅した包括的なアプローチ
- インフォマティクスを取り入れたセンシング技術の開発
- 起業による実産業界とのつながり
- ニオイセンサのシグナル解析技術を他のセンサに展開

研究内容



センサで得られるデータにインフォマティクスを適応し解析することで、測定対象のもつ様々な情報を抽出することができる。今村はこれまでに、膜型表面応力センサ（Membrane-type Surface stress Sensor, MSS）を用いたガスセンサ測定系をセンシングのプラットフォームとして、気体試料を対象としたニオイセンサの研究・開発を行ってきた。

ニオイセンサは、ガスセンサ測定により得られるデータを元に、その試料のニオイを識別したり、その試料の持つパラメータを推定したりする技術である。ニオイセンサは、ニオイのもととなる分子を検出する技術に加え、ニオイの情報を正しく反映した結果を得る測定法や、得られたセンサデータから目的の情報を抽出するための解析技術など、多様な要素技術を統合する必要がある。そのため、実用的なニオイセンサを実現するために、ニオイ分子を検知するための感応材料開発や、機械学習を含むインフォマティクスを活用したデータ解析法の開発、外乱の影響を排除するための測定法の開発など、総合的な取り組みを行ってきた。これにより、産業での応用性が高まったことから、2022年5月に、ニオイセンサのスタートアップである株式会社Qception（代表：今村岳）を設立し、ニオイセンサ技術の社会実装の促進を行っている。

また、このニオイセンサ技術で育んだセンサの時系列データ解析法を電気化学センサに適応し、ハイスループットな測定系で得られるデータからの情報抽出に取り組んでいる。

まとめ

- ガスセンサシグナルからの情報抽出（ニオイの推定、パラメータ抽出）を実証。
- 新規材料を用いた高感度ガス測定を実現。
- 設立したスタートアップを通じた、産業界のニーズに根ざしたさらなる開発を推進。
- 多様なセンサを活用したマルチモーダルなセンシング技術の開発を検討。

論文・特許

- W. Miran, G. Imamura and A. Okamoto, *Patterns* **3**, 100637 (2022).
- G. Imamura, K. Minami, K. Shiba, K. Mistry, K. P. Musselman, M. Yavuz, G. Yoshikawa, K. Saiki and S. Obat, *Chemosensors* **8**, 82 (2020).
- G. Imamura, K. Shiba, G. Yoshikawa and T. Washio, *Sci. Rep.* **9**, 9768 (2019).

鉄、木材を食害する電気細菌の検出と制御の技術開発

Keywords 鉄腐食細菌, 電気化学測定, シロアリ, セルロース分解, バイオセンサ

研究員 / Researcher

鄧 驍 Deng Xiao

✉ DENG.Xiao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/deng_xiao



研究概要

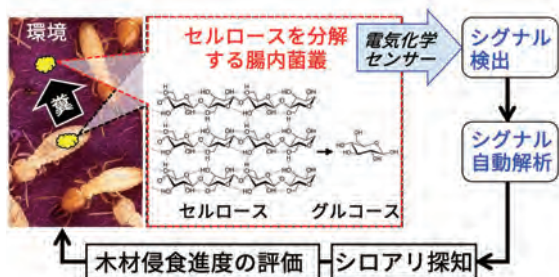
近年、金属や鉱物などの固体と電子授受ができる「電気細菌」が、土壌、海底、腸内等の幅広い環境から発見され、環境や生体の健全性維持において重要な役割を果たしていることが分かってきている。私は①鉄腐食を引き起こす電気細菌、②シロアリ腸内のセルロース分解電気細菌を主な研究対象としている。電気細菌が電極上で電流生成する能力を利用し、細菌の電子授受過程とそれに伴う代謝を電気化学的手法により追跡するのが本研究の特徴である。さらに、菌体の代謝制御と材料の表面改質によって電子授受速度の制御を行い、有害な電子授受過程（鉄腐食、セルロース分解過程）を阻害する技術や素早く検出できる技術を開発している。

新規性・独創性

- (鉄腐食) 鉄からの電子摂取を促進する生体分子と環境因子の網羅的解析
- (鉄腐食) これまで数週間かかる鉄腐食菌の検知を1/10以下に短縮 (特許申請済み)
- (セルロース分解) 昆虫腸内環境における世界初の細胞外電子移動過程の発見
- (セルロース分解) 木造住宅におけるシロアリ被害の迅速簡便な診断法 (特許申請済み)

研究内容

地下や海底に生息している電気細菌は石油パイプライン等の鉄材料から電子を引き抜き、材料を劣化・破損させ、先進国で年間数百億ドルの経済損失を引き起こしている。そのため、微生物鉄腐食機構の解明とそれに基づいた腐食の予測・検知法の確立が喫緊の課題である。私は、鉄からの電子摂取を媒介する生体物質を同定し、それらを腐食バイオマーカーとして環境から検出する手法を開発している。また、材料表面改質を行い、電子摂取速度を制御することによる腐食抑制技術を開発している。



シロアリは木材を食害し、木造建築物の劣化を引き起こすため、住宅害虫として知られている。シロアリの早期検出は、被害が深刻化する前に対策を講じるための起点となる重要な課題である。しかし、シロアリは床下などの湿度が高い閉鎖環境に好んで生息し、木材を内部から侵食するため、その発見は困難である。私は、シロアリの腸内にのみ生息するセルロース分解菌叢を切口として、それらの菌が電気化学活性を有することを発見している。従って、セルロース分解菌の代謝活動をリアルタイムに検出する電気化学センサを開発することで、高感度・簡便なシロアリ探知法の確立を目指している。

まとめ

- 嫌気鉄腐食を促進するバイオマーカーを同定し、環境から検出する。
- シロアリを迅速検出するための電気化学センサを開発する。
- 実用化可能な鉄腐食・シロアリセンサのプロトタイプを作成する。

論文・特許

- X. Deng, D. Luo and A. Okamoto, *Electrochim. Acta* **421**, 140504 (2022).
- X. Deng, N. Dohmae, A. H. Kaksonen and A. Okamoto, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2**, 5995-5999 (2020).
- X. Deng, N. Dohmae, K. H. Neilson, K. Hashimoto and A. Okamoto, *Sci. Adv.* **4**, eaao5682 (2018).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

高機能・高性能有機高分子薄膜の作製技術開発と評価

Keywords 高分子有機半導体, 分子配向制御, 親液・撥液パターン, 溶液プロセス, 有機トランジスタ

主席研究員 / Chief Researcher

坂本 謙二 Sakamoto Kenji

✉ SAKAMOTO.Kenji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sakamoto_kenji



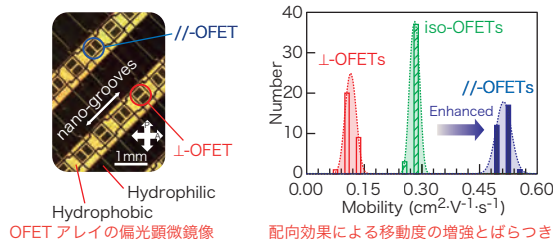
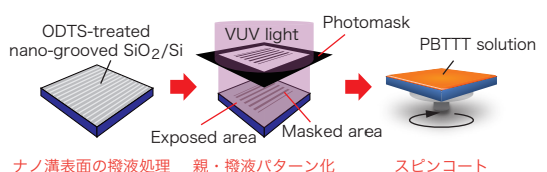
研究概要

有機エレクトロニクスは、大面積、軽量、低コスト、柔軟性、伸縮性といった特徴を有し、フレキシブル・ディスプレイ、情報タグ、スマートカード、各種ウェアラブル・デバイスへの応用が期待されている。我々は、信号処理素子である有機電界効果トランジスタ (OFETs) の高性能化、高動作安定化、素子特性のばらつき低減を可能にする高分子有機半導体の薄膜作製技術の開発と、その手法によって作製したOFETsの特性評価を行っている。従来の単純な移動度競争から脱却し、高移動度と高動作安定性を同時に達成できる薄膜作製技術の開発と、デバイス構造や材料合成の設計指針の獲得を行う。

新規性・独創性

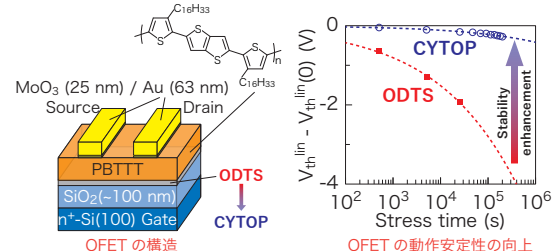
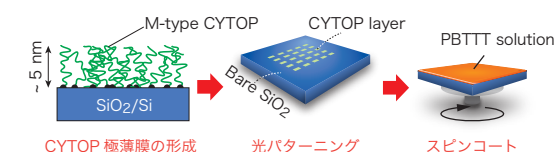
- 低表面エネルギー（撥液性）ゲート絶縁膜上に高分子有機半導体薄膜を形成する手法の開発
- 有機半導体高分子のエッジオン配向とソース・ドレイン方向への高分子主鎖の配向を同時に達成できる分子配向技術
- 配向効果による2倍の移動度増強、移動度のばらつき4%以下、a-Si FETと同等のバイアス・ストレス安定性を達成
- ゲート絶縁膜表面を極薄アモルファス弗素樹脂コートすることにより3桁以上のトラッピング時定数の増強（高動作安定化）

研究内容



アモルファス弗素樹脂(CYTOP)の極薄化、光パターン化をすることにより高分子有機半導体溶液の塗布が可能となった。ゲート絶縁膜表面を撥液化するためのコーティング材料をオクタデシルトリクロロシラン(ODTS)から、CYTOPに変えることにより、3桁以上のトラッピング時定数の増強（高動作安定化）を実現した。

高分子有機半導体溶液を高撥液性表面に塗布する手法（親・撥液パターン化）を確立し、撥液性ナノグループ・ゲート絶縁膜（配向誘起層）を組み込んだPBTBT-OFETアレイを作製し、分子配向効果による約2倍の移動度の増強、素子間のばらつき4%を達成した。真空環境下で、a-Si FETと同等のバイアス・ストレス安定性（トラッピング時定数 $\sim 10^7$ s）を確認した。



まとめ

- PBTBT-OFETsにおいて分子配向効果による移動度の増強、素子間のばらつき4%以下、高い動作安定性を同時に達成した。
- 動作安定性を決定する要因を解明し、高分子有機半導体の分子設計指針、OFET構造の設計指針を得る。
- 高移動度、高動作安定性、高均一な素子特性を同時に達成できるデバイス作製プロセスの開発を行う。

論文・特許

- K. Bulgarevich, K. Sakamoto, T. Yasuda, T. Minari and M. Takeuchi, *Adv. Electron. Mater.* **6**, 2000161 (2020).
- K. Bulgarevich, K. Sakamoto, T. Minari, T. Yasuda, K. Miki and M. Takeuchi, *Adv. Funct. Mater.* **29**, 1905365 (2019).
- K. Bulgarevich, K. Sakamoto, T. Minari, T. Yasuda and K. Miki, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 6237-6245 (2017).

精密重合法を用いた機能性高分子バイオ材料の創出

Keywords 精密重合法, 表面・界面, 機能性高分子, バイオインターフェース

主幹研究員 / Principal Researcher

吉川 千晶 Yoshikawa Chiaki

✉ YOSHIKAWA.Chiaki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_chiaki



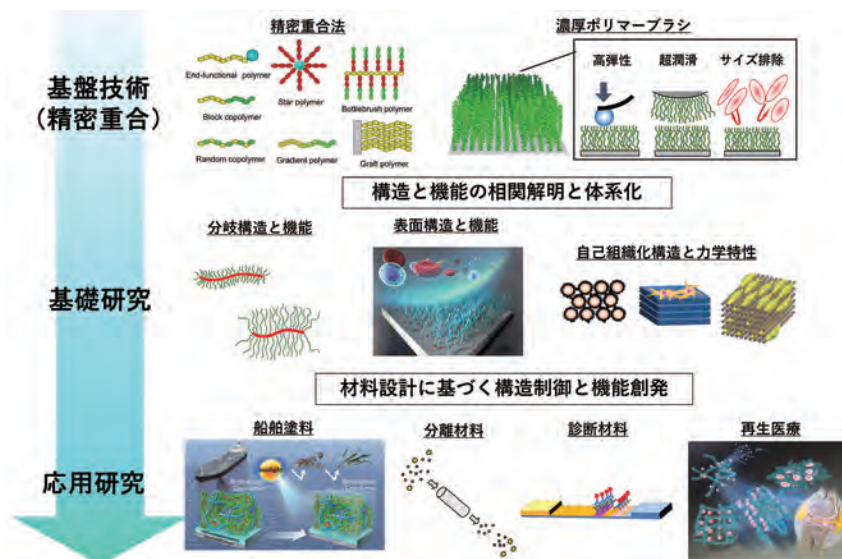
研究概要

機能性高分子材料の世界市場は成長しつづけており、2030年には約14兆円に達すると予測されている。特に、生体適合性材料や再生医療用材料などのバイオ機能材料は最も高い成長率を示しており、医療分野における機能性高分子材料の需要は今後も拡大していくと考えられる。この点に鑑みて、精密重合法を駆使した高分子材料設計により、新しい構造・物性・機能をもつ高分子バイオ材料の創出に取り組んでいる。特に、濃厚ポリマーブラシと呼ばれる特殊な高伸張・高配向組織を用いた表面・界面制御による材料開発を行っている。

新規性・独創性

- 濃厚ポリマーブラシの構造・機能に基づく優れた生体適合性
- 構造制御によるボトルブラシポリマーの機能発現
- 塗るだけで材料表面に生体適合性が付与できるコーティング剤
- ナノ材料を活用した三次元培養法
- 多孔質材料を活用した分離材料・細胞培養基材の開発

研究内容



【基盤技術】精密重合法を用いた高分子の一次構造の制御、【基礎研究】高次構造と物性・機能の相関解析と体系化、【応用研究】材料設計に基づく構造制御と機能発現、による高分子・バイオ材料の創出を行っている。現在、生体適合性コーティング、船舶塗料、細胞培養基材、診断材料などの応用研究に注力している。

まとめ

精密重合法を駆使し、様々な機能性高分子・バイオ材料を開発している。例えば、濃厚ポリマーブラシはその特異な構造・物性を反映して優れた生体適合性を発現するが、その発現機構に基づいた材料設計を行い、塗るだけで濃厚ポリマーブラシを様々なデバイス表面に付与できるボトルブラシポリマーを開発した。このコーティング剤は医療デバイス、船舶塗料など様々な分野への展開が期待できる。

論文・特許

- C. Yoshikawa, R. Takagi, T. N. Hirabayashi, T. Ochi, Y. Kawamura and H. Thissen, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14**, 32497-32509 (2022).
- P. Nonsuwan, N. Nishijima, K. Sakakibara, T. N. Hirabayashi and C. Yoshikawa, *J. Mater. Chem. B* **10**, 2444-2453 (2022).
- C. Yoshikawa, S. Hattori, C. Huang, H. Kobayashi and M. Tanaka, *J. Mater. Chem. B* **9**, 5794-5804 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

新規有機半導体の開発と薄膜デバイス応用

Keywords 有機半導体, 共役高分子, 有機薄膜デバイス

主幹研究員 / Principal Researcher

安田 剛 Yasuda Takeshi

✉ YASUDA.Takeshi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yasuda_takeshi

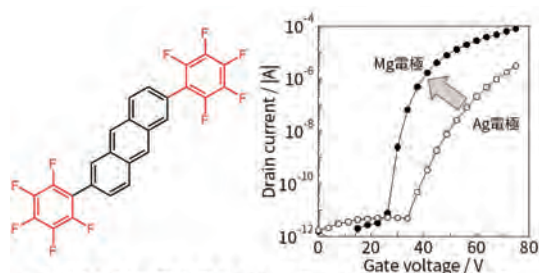
研究概要

有機薄膜デバイスの有機ELは、真空蒸着法で製膜可能な低分子半導体で実用化しているが、溶液塗布法で製膜可能な高分子半導体は更なる開発が望まれている。また、有機ELに続くターゲットである有機薄膜トランジスタ(有機TFT)、有機薄膜太陽電池の実用化に向けた有機半導体の開発が必要である。このような材料開発は、新規有機半導体の物性、有機薄膜デバイスの特性を迅速かつ簡便に導出し、材料合成にフィードバックを行うことが重要である。本研究では、有機半導体の物性に合わせた有機薄膜デバイスの選定、有機薄膜デバイスの構造最適化を行うことで、新規有機半導体の特徴を最大限まで引き出す研究開発を行っている。

新規性・独創性

- 新規有機半導体の特徴を活かす有機薄膜デバイスの作製
- 有機薄膜デバイスの構造最適化による高性能化
- ダイオード特性解析等による有機半導体薄膜の移動度評価
- 発光スペクトル解析等による有機半導体薄膜の構造評価

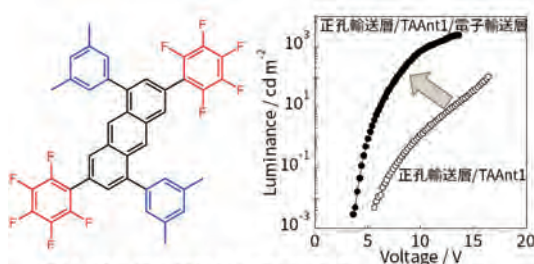
研究内容



2,6-DPA-Fをn型半導体として用いた有機TFTの開発例

一方、2,6-DPA-Fのアントラセンにm-キシリル基を導入したTAAnt1の真空蒸着膜は2,6-DPA-Fとは対照的にアモルファス性であった。また薄膜の蛍光量子収率は29%であった。上記の特徴によりTAAnt1を発光材料として用いた有機ELの作製・評価を行った。デバイス構造の最適化として、発光材料を正孔輸送層と電子輸送層で挟むことにより発光材料内に正孔と電子を閉じ込め、効率的な再結合を促すことで、有機EL発光効率の指標である外部発光効率1.3%が得られた。材料の蛍光量子収率を考慮した外部発光効率の理論限界は1.45%であるため、デバイス構造の最適化で、材料の特徴を最大限活かしたデバイス作製に成功した。

代表的な新規有機半導体の開発例として、アントラセン誘導体を用いた有機薄膜デバイス作製・評価の解説を行う。強いアクセプター性を有するペンタフルオロフェニル基をアントラセンに付与した2,6-DPA-Fは、低いLUMOエネルギー準位を有し、その真空蒸着膜の結晶性は分子が基板に対して垂直に配向していることから、基板に対し平行方向に π 電子の重なりが生じた。上記の特徴により2,6-DPA-Fをn型半導体として用いた有機TFTの作製・評価を行った。デバイス構造の最適化として、ソース・ドレイン電極をAgから電子注入が容易な低仕事関数のMgに変更することで、高い電子移動度 $0.12 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ を得ることに成功した。



TAAnt1を発光材料として用いた有機ELの開発例

まとめ

- 有機半導体のエネルギー準位・蛍光量子収率等の物性、結晶性を総合的に判断し、最適な有機薄膜デバイスの作製
- 有機薄膜デバイスの構造最適化等による高性能化
- 未だ実用化していない有機EL用塗布材料、有機TFT用材料、有機薄膜太陽電池用材料の更なる開発

論文・特許

- R. Sato, T. Yasuda, T. Hiroto, T. Kanbara and J. Kuwabara, *Chem. Eur. J.* **29**, e202203816 (2023).
- R. Sato, K. Chen, T. Yasuda, T. Kanbara and J. Kuwabara, *Org. Chem. Front.* **10**, 2955-2962 (2023).
- T. Yasuda and K. Sakamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **59**, SDD001 (2020).

ドープフリー高機能性有機電子材料の開発

Keywords 機能性有機材料, 有機金属, 高移動度有機材料, 有機熱電材料, 伝導性有機薄膜

主幹研究員 / Principal Researcher

小林 由佳 Kobayashi Yuka

✉ KOBAYASHI.Yuka@nims.go.jp ③ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kobayashi_yuka



研究概要

有機エレクトロニクスは次世代IT社会における幅広い貢献が期待されている。現在、分子設計および結晶工学を駆使して分子間相互作用を精密に制御することにより、電子物性を操ることが可能となりつつある。これまでに、自身の開発した電荷制御のためのプロトン欠陥を導入した新しい原理に基づいて、高い化学的安定性を有する様々な高機能性有機電子材料の創製を実現している。ドープフリー有機電子材料が拓く新しい高機能性有機エレクトロニクスを多角的に展開している。

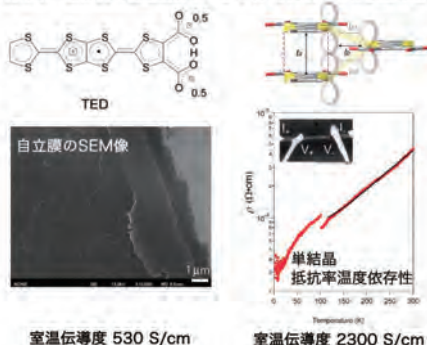
新規性・独創性

- ドープフリー高伝導性有機材料の合目的設計
- ニーズに合わせた電子機能設計
- 分子設計によるモルフォロジー制御
- π 軌道エンジニアリングによる高移動度有機材料設計

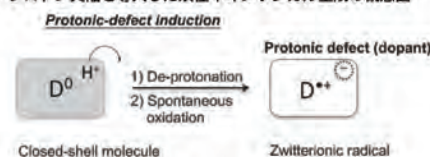
研究内容

閉殻構造を有する安定な有機物は元来絶縁体であるため、荷電キャリアを発生するために、これまで複数の分子を「混合（ドープ）」して電荷移動させる必要があった。一方で、プロトン欠陥と π 軌道の非局在化を導入した分子設計により、奇電子を有する開殻分子（双性イオンラジカル）はドープすることなく化学的に安定なキャリアを獲得できる。さらに、その分子に「半導体」または「金属」特性を合目的に付与するためには、分子上の電子が受けるオンサイトクーロン反発 (U) と重なり積分 (W) を結晶中での π 軌道の重なり様式によって制御することにより実現できる。この2段階の分子設計指針により、化学的に安定な有機半導体から有機金属までを自在に創製することが可能になった。

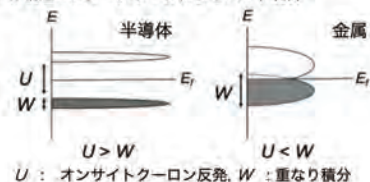
・初の単一成分有機金属分子 $U < W$ を実現する π 軌道の重なり



・プロトン欠陥を導入した双性イオンラジカル生成の概念図



・ π 軌道エンジニアリングによるバンド制御



これまで、軽元素からなる純有機物では、電荷移動錯体または伝導性高分子と言った2種以上の混合物でしか金属伝導性が実現しなかった。ところが、プロトン欠陥法によって設計された拡張テトラアフルバレンジカルボン酸(TED)は、常圧条件で初めて金属伝導性を示す分子となった。ここでは、2方向における π 軌道の効果的な重なり様式により $U < W$ が達成され、二次元的なフェルミ面が構築される。層状単結晶の面内方向は室温で2300 S/cmと有機物でトップクラスの高い伝導性を示している。また空気中で数ヶ月経過しても高い伝導性を保持する。透明電極を始めとした様々な応用用途が期待されている。

まとめ

有機電子材料の化学的安定性は実用化において重要な要素であり、プロトン欠陥を導入した分子設計によるドープフリー有機電子材料は大気下で数ヶ月経過しても高い電子機能を保ち、極めて有効な設計指針であることを実証した。また、既存有機材料の枠組みを超えた新しい電子物性の発現が次々に開拓されており、この高機能性を活かした新規デバイス開発への展開が期待される。

論文・特許

- Y. Kobayashi, K. Hirata, S. N. Hood, H. Yang, A. Walsh, Y. Matsushita and K. Ishioka, *Chem. Sci.* **11**, 11699-11704 (2020).
- Y. Kobayashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 467-485 (2018).
- Y. Kobayashi, T. Terauchi, S. Sumi and Y. Matsushita, *Nat. Mater.* **16**, 109-114 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

場を利用して動く分子機械の開発

Keywords 機能性材料, 分子, 有機合成, 表面化学

主幹研究員 / Principal Researcher

中西 和嘉 Nakanishi Waka

✉ NAKANISHI.Waka@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakanishi_waka



研究概要

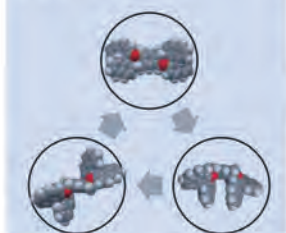
機械的な動きをする有機分子は、分子機械と言われ、主に均一系有機溶媒中で動く分子機械の研究がなされている。本研究では、分子機械を有機溶媒ではなく、材料内部や材料表面で動かすことを目的とする。有機分子単体では難しい動きを、金属や高分子材料といった異種材料を利用することで実現する。

新規性・独創性

- 有機分子が存在する場との相互作用を加味した分子設計
- 孤立有機分子ではできない分子構造や分子運動の提案
- 場の変化により分子構造や分子運動を制御

研究内容

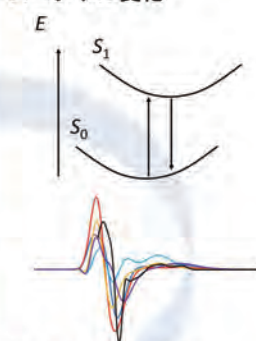
配座変化により動く分子機械



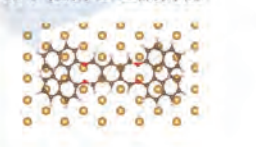
場を利用して動く分子機械



基底・励起状態の制御 配座変化による スペクトル変化



場の影響を加味した 分子設計と理論計算



本研究は、金属表面や高分子等の異種材料を場として用い、これらと相互作用する分子機械を外部からのエネルギーにより動かす。理論計算により材料表面や材料中にある分子構造を予測し、異種材料との相互作用を考慮した分子機械を設計する。設計した分子を有機合成的手法により合成し、材料と相互作用させる。外的なエネルギーを付与し、分子機械を動かす。分子の変形によるスペクトル変化を測定し、外的なエネルギーの付与によりえられた構造変化の情報を実験により得る。得られた実験結果を分子設計にフィードバックし、分子機械の構造と動きを自在に制御することを目指す。分子機械を動かすためには分子中の単結合周りの回転運動を制御することが鍵である。単結合周りの回転障壁はエネルギーが低く制御が容易でないが、異種材料からなる場を用いることで単結合周りの回転から生じる構造(=配座)を制御する。

本研究対象である分子機械はその配座を検出できるセンサーとしての機能を兼ね備えている。このことから材料中にある分子の配座を検出することが可能である。有機材料の機能物性と分子配座は大きく影響しており、本研究により、環境刺激を受けた材料中の分子配座とその機能物性の関係を明らかにする一助となることが期待される。

まとめ

有機材料の機能性発現には、有機分子の配座や配置といった変化しうる構造の制御が重要である。本研究により、材料中の分子配座の情報を実験的に知ることができ、材料におけるより詳細な構造解析につながると考えられる。社会的要求に対して、本研究は、高分子材料等の機能性材料開発などに展開できる可能性がある。

論文・特許

- W. Nakanishi, Y. Matsushita, M. Takeuchi and K. Sagisaka, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 13702-13707 (2023).
- W. Nakanishi, Y. Yamauchi, Y. Nishina, M. Yoshio and M. Takeuchi, *RSC Adv.* **12**, 3372-3379 (2022).
- W. Nakanishi, A. Nakata, P. Perez, M. Takeuchi, C. Joachim and K. Sagisaka, *J. Phys. Chem. C* **125**, 9937-9946 (2021).

π 電子系分子集積体の新奇機能開拓

Keywords π 電子系材料, 光・電子機能, クリック反応, 超分子集積体, 非平衡系

主任研究員 / Senior Researcher

高井 淳朗 Takai Atsuro

✉ TAKAI.Atsuro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/takai_atsuro



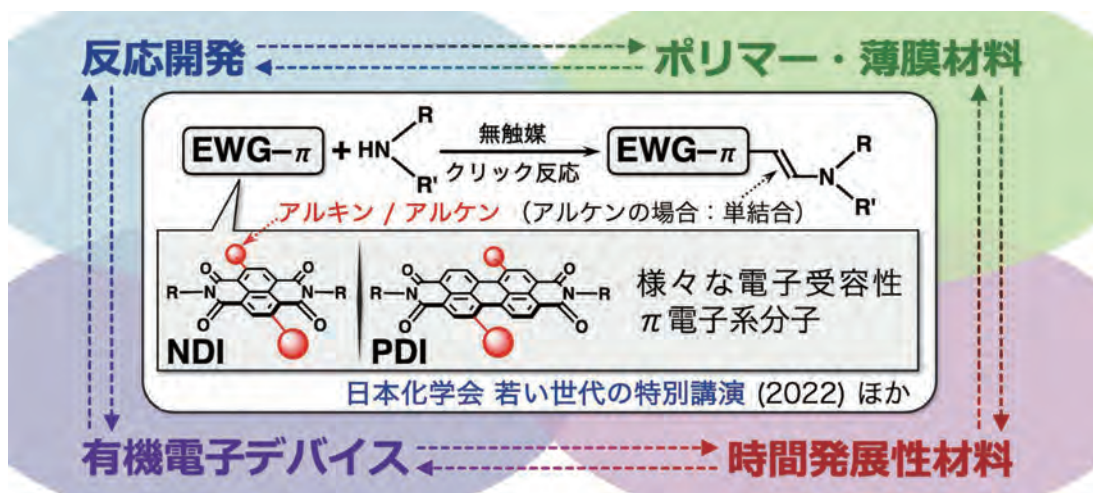
研究概要

π 共役分子を基盤とする π 電子系材料は、有機エレクトロニクス産業や紫外～赤外光を利用した光技術を支える基幹材料の一つである。 π 共役分子はその配向や集積構造によって、異なる電子的および光学的特性を発現し得る。そのため π 電子系材料の開発においては、 π 共役分子自体の機能拡張も然ることながら、緻密な分子配向制御に基づく分子集積体の機能開拓も重要である。しかし、 π 共役分子の機能拡張や集積化に要する合成手法の煩雑さが π 電子系材料開発のボトルネックの一つとなっている。当研究者は、アトムエコミカルな化学反応を基軸とする独自の有機合成技術と分子設計を強みとして、 π 電子系材料の簡便な創成法の開発と新奇機能の開拓に従事している。

新規性・独創性

- 新奇 π 電子系材料の設計と合成
- 電子受容性 π 共役分子とアミンとの無触媒クリック反応
- 光・電子・力学応答の時間発展性を伴う非平衡系を活用した材料開発

研究内容



一例として、電子受容性 π 共役分子と汎用な官能基であるアミンの無触媒クリック反応を見出した。現在、このクリック反応の適用範囲の拡張や反応機構の解明、ポリマーや薄膜材料・有機電子デバイス・時間発展する超分子材料への展開などを行っている。

まとめ

構造有機化学・超分子化学・材料化学のバックグラウンドを基盤として、独自の技術・知見を元に新奇な光・電子機能性 π 電子系材料の開発を行っている。これらの π 電子系材料に基づく化学センサーやエネルギー変換デバイスの開発や、光・電子・力学応答の時間発展性を伴う非平衡系を活用した材料開発が期待される。

論文・特許

- H. Sanematsu, M. Takeuchi and A. Takai, *Chem. Commun.* **59**, 4903-4906 (2023).
- 高井 淳朗, *化学と工業* **75**, 822-823 (2022).
- M. Tan, M. Takeuchi and A. Takai, *Chem. Sci.* **13**, 4413-4423 (2022).

分子性イオンを利用した有機－無機複合材料の機能開拓

Keywords 有機－無機複合材料, 分子性イオン, キャリアドーブ, 光電物性

研究員 / Researcher

梅山 大樹 Umeyama Daiki

✉ UMEYAMA.Daiki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/umeyama_daiki



研究概要

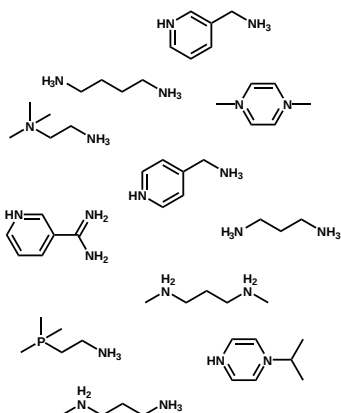
ハライドペロブスカイトなどの有機－無機複合物質は優れた光電材料として注目されている。これらの物質の光電的特性は主に金属イオンやハロゲンイオン等の無機イオンによって実現されている一方で、化学的安定性やキャリア注入手法などの面で未解決課題がある。そこで、本研究ではイオン性の有機分子を用いて有機－無機複合材料の物性を制御することを目的とする。物性に対して活性な分子軌道を複合材料に導入する手法を開発し、物性設計の新たな機軸とすることを目指す。分子軌道を積極的に活用し、化学的安定性やキャリア注入手法などの面で無機イオンの軌道のみでは得られない材料特性を開拓する。

新規性・独創性

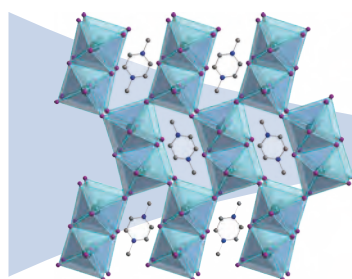
- 有機－無機複合物質中に物性活性な分子軌道を導入
- 水などに対する化学的安定性が向上
- 分子の酸化・還元を介した電子注入が可能
- 分子構造の多様性を活用した材料開発の可能性

研究内容

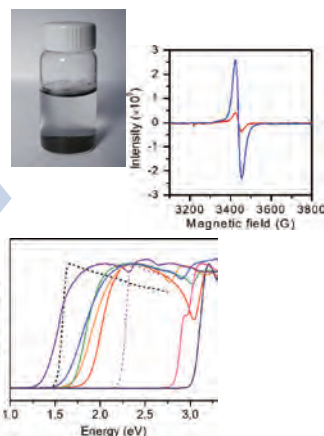
分子性イオンの多様化



分子軌道の特性を生かした複合材料



安定性の向上、電子ドーブ



種々の有機アミンをメチル化等により二価のカチオン分子とし、金属ハライドと複合化することで図のような有機－無機複合物質を得た。これらの複合物質では金属ハライドからなる無機格子は同じトポロジを持つ一方、格子空隙を占めるカチオン分子が異なる。例えばカチオン分子を官能基装飾することで疎水性を付与し、水に対する安定性を飛躍的に向上させることができる。また、分子軌道のエネルギー準位を制御し、物性について活性な状態にすることで、分子の酸化還元を介した電子ドーブも可能となった。このような物性の制御は複合物質中での分子の多様性によって実現されており、分子工学的手法によりさらなる高機能化が期待できる。

まとめ

- 複合物質中に物性活性な分子軌道を導入することで、分子軌道を用いた物性制御が可能になった
- 分子軌道に分散性を与える手法の開発が今後の課題
- 金属イオンと強く相互作用できる分子性アニオンを用いた物性開拓も検討していく

論文・特許

- D. Umeyama, *J. Jpn. Soc. Colour Materi.* **96**, 147-151 (2023).
- D. Umeyama, A. Takai and K. Sonobe, *Inorg. Chem.* **61**, 1697-1703 (2022).
- D. Umeyama, L. Leppert, B. A. Connor, M. A. Manumphil, J. B. Neaton and H. I. Karunadasa, *Angew. Chem. Int. Ed.* **59**, 19087-19094 (2020).

超巨大高分子ボトルブラシポリマーの研究

Keywords 高分子化学, 高分子材料, 相分離, 精密重合

独立研究者 / Independent Scientist

山内 祥弘 Yamauchi Yoshihiro

✉ YAMAUCHI.Yoshihiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamauchi_yoshihiro



研究概要

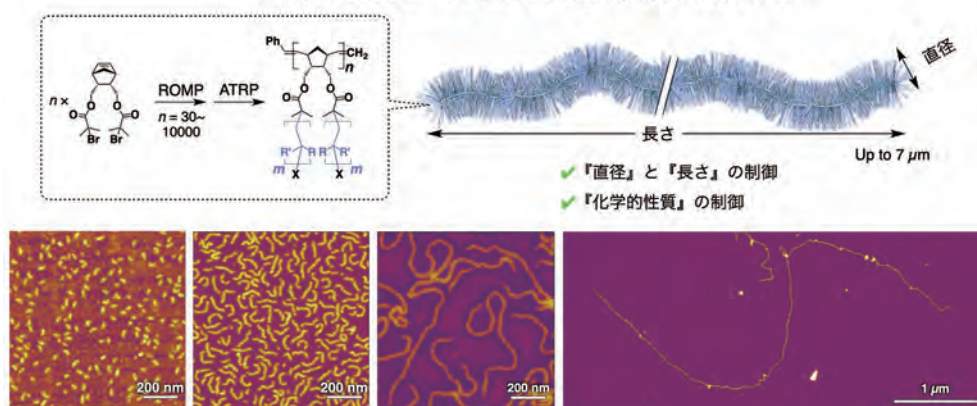
ボトルブラシポリマーは、1本の主鎖と複数の側鎖から構成される超巨大高分子である。この高分子は、側鎖の排除体積効果に基づく主鎖伸長の結果として、シリンダー型構造をとる。直鎖状高分子が『長さ』という1つの構造情報のみを制御可能であるのに対し、ボトルブラシポリマーは『長さ』と『直径』という2つの構造情報を制御できる。我々は、他の物質では達成し難い、ボトルブラシポリマーの1次元ナノマテリアルとしての高い構造制御性に着眼し研究を遂行している。

新規性・独創性

- 史上最長のボトルブラシポリマー
- 『化学的性質』を制御可能な1次元ナノマテリアル
- 『長さ』と『直径』を制御可能な1次元ナノマテリアル

研究内容

ボトルブラシポリマー：自在合成可能な1次元ナノマテリアル



ボトルブラシポリマーは、従来の鎖状高分子には困難な構造制御を可能にする。2つの原子移動ラジカル重合開始点を有するノルボルネンモノマーを出発原料とし、開環オレフィンメタセシス重合(ROMP)と原子移動ラジカル重合(ATRP)によって、ボトルブラシポリマーの主鎖と側鎖を合成する。これらのオルソゴナルなリビング重合によって、それぞれの重合度を制御することにより、ボトルブラシポリマーの『長さ』と『直径』を独立に調整可能である。開環オレフィンメタセシス重合において、このモノマーは高い反応性と優れたリビング重合性を有し、[モノマー]/[開始剤] = 10,000の場合でも、15分以内に反応が定量的に進行する。この主鎖から、側鎖をグラフトすることにより、史上最長のボトルブラシポリマーを合成できる。長さは7 μmに到達し、生物学的尺度で示すと、大腸菌よりも長いサイズである。この合成の要素技術を基軸とし、固体および液体中での相分離構造に焦点を当て、研究を進めている。原子間力顕微鏡や小角X線散乱、そして粘弾性測定などの観察・測定・解析を通じて、ボトルブラシポリマーの構造、それらが形成する秩序構造、そして物性の関係を明らかにすることを目指している。

まとめ

ボトルブラシポリマーは、『長さ』と『直径』と『性質』を自在制御可能な1次元ナノマテリアルである。側鎖の種類を変えることにより、ガラス転移温度、屈折率、溶解性などを制御することが可能である。このため、ボトルブラシポリマーは、それ単独の性質のみならず、鎖状高分子との複合材料や多孔性材料合成の鋳型など様々な研究への展開が期待できる。

論文・特許

- Y. Yamauchi, N. N. Horimoto, K. Yamada, Y. Matsushita, M. Takeuchi and Y. Ishida, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 1528-1534 (2021).
- Y. Yamauchi, S. Samitsu, K. Goto and M. Takeuchi, *Chem. Comm.* **56**, 14641-14644 (2020).
- Y. Yamauchi, K. Yamada, N. N. Horimoto and Y. Ishida, *Polymer* **120**, 68-72 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトゥラ材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

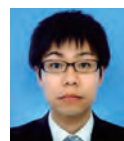
機能性高分子ゲル電解質の開発と電気化学デバイスへの応用

Keywords 自己修復, 高強度, イオン液体, ゲル電解質, リチウム二次電池

独立研究者 / Independent Scientist

玉手 亮多 Tamate Ryota

✉ TAMATE.Ryota@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamate_ryota



研究概要

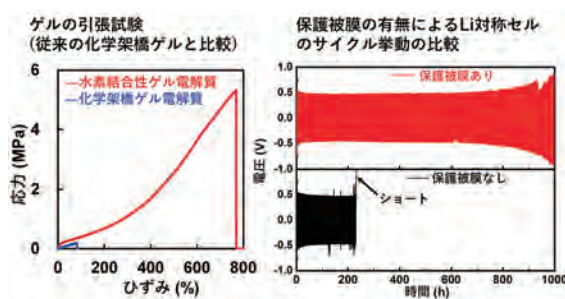
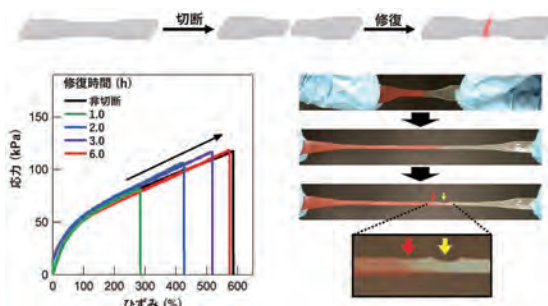
電気自動車・ドローンなど新たな移動体の出現、IoT時代の到来により、フレキシブル/ウェアラブル機器や高容量・高安全な二次電池といった新たな電気化学デバイスが求められている。このような背景をもとに、不揮発性・電気化学/熱的安定性などの性質から次世代電解液として注目されるイオン液体と高分子からなるゲル電解質「イオンゲル」に関する研究を実施してきた。特にウェアラブルデバイス等に求められる機械的な耐久性の向上を目的とした自己修復性イオンゲルの創製を行った。更に有機溶媒と無機塩からなる有機電解液に対象を拡げて、ゲル電解質への自己修復性・高強度性など力学機能の付与、次世代リチウム二次電池への応用に関して研究を実施した。

新規性・獨創性

- 自発的に損傷を修復できる新しいイオン伝導性ゲル材料の開発
- 超高分子量ポリマーの絡み合いという汎用的かつ全く新しいコンセプトによる自己修復ゲル
- 優れた力学特性と自己修復性の両立、リサイクル性の付与
- 非常に高強度なリチウム伝導性ゲル電解質の創出
- リチウム金属負極の保護被膜への応用によるリチウム金属電池のサイクル性能の大幅な向上を実現

研究内容

イオン液体中でのラジカル重合において、開始剤量を極低濃度とすることで超高分子量ポリマーが高いモノマー転化率で生成し、超高分子量ポリマーの絡み合いにより化学架橋剤フリーで自立したゲル「超高分子量ゲル」が形成されることを見出した。超高分子量ゲルは、高い自己支持性・伸張性・リサイクル性に加え、室温での迅速な自己修復性という優れた性質を示す。超高分子量ゲルは汎用のモノマー・イオン液体から非常に簡単に作成できるため、ストレンセンサーやフレキシブルバッテリーなどウェアラブルデバイスの電解質として応用が期待される。



高容量蓄電池に対する需要の高まりから、リチウム金属負極を用いた二次電池に注目が集まっており、リチウム金属負極の問題である安全性・サイクル安定性を向上させる試みが活発に進められている。有機電解液組成と高分子構造の最適化により、リチウム塩濃厚電解液と新規水素結合性高分子から形成されるゲル電解質が、これまでに報告されたリチウム伝導性ゲル電解質の中で破格に高い力学強度を持つことを見出した。このゲルをリチウム金属負極の保護被膜に用いることで、サイクル特性を大きく向上させることに成功した。次世代リチウム二次電池の実用化に貢献する技術となることが期待される。

まとめ

- イオン液体中での超高分子量ポリマーの絡み合いを利用することで、汎用的で簡単に合成できる新しい自己修復ゲルを創製した。
- 高強度ゲル電解質をリチウム金属負極の人工保護被膜に適用し、リチウム金属電池のサイクル特性を大きく向上した。
- これらの機能性ゲルは、今後ますます需要が高まるIoT機器や次世代蓄電池の電解質としての応用展開が期待される。

論文・特許

- R. Tamate, Y. Peng, Y. Kamiyama and K. Nishikawa, *Adv. Mater.* **35**, 2211679 (2023).
- Y. Kamiyama, R. Tamate, T. Hiroi, S. Samitsu, K. Fujii and T. Ueki, *Sci. Adv.* **8**, eadd0226 (2022).
- R. Tamate, K. Hashimoto, T. Horii, M. Hirasawa, X. Li, M. Shibayama and M. Watanabe, *Adv. Mater.* **30**, 1802792 (2018).

メタロ超分子ポリマーの開発

Keywords メタロ超分子ポリマー, 配位高分子, 酸化還元, エレクトロクロミック, 電気化学デバイス, 調光素子

グループリーダー / Group Leader

樋口 昌芳 Higuchi Masayoshi

✉ HIGUCHI.Masayoshi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/higuchi_masayoshi



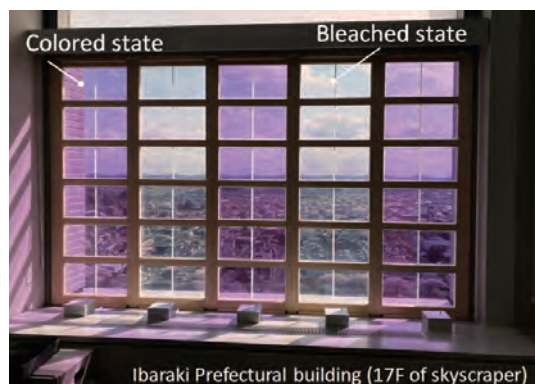
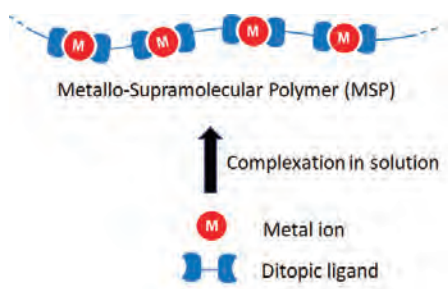
研究概要

メタロ超分子ポリマーは金属イオンと有機配位子が錯形成により交互につながった構造を有する配位高分子であり、有機高分子のように溶剤に溶かして塗布などの手法により基板に製膜することで、アモルファスな薄膜を形成する。一方で、ポリマー中の金属錯体部位や、有機配位子を介して隣接する金属間の電気化学的相互作用により、従来の有機高分子にはない特異な電子・光・触媒機能などの発現が期待される。

新規性・独創性

- MOFなどの結晶性の配位高分子と比較して、製膜性などの加工性に優れる
- メタロ超分子ポリマーにおけるエレクトロクロミック特性を発見した

研究内容



メタロ超分子ポリマー (Metallo-Supramolecular Polymer, MSP) は、多数の金属錯体がじゅずつなぎになった構造を有する配位高分子である。金属イオンと、2つの金属イオンと配位できる有機配位子 (Ditopic Ligand) を錯形成させることで、一次元鎖状のメタロ超分子ポリマーが得られる (左図)。これまでに金属種として、クロム、マンガン、鉄、コバルト、ニッケル、銅、亜鉛、モリブデン、ルテニウム、パラジウム、カドミウム、オスミウム、白金、ユウロピウム、テルビウムを導入したメタロ超分子ポリマーを合成し、エレクトロクロミック特性 (電気化学的酸化還元により着色状態と透明状態が切り替わる特性) や発光特性など多様な電子・光・触媒機能などを見出している。特に、エレクトロクロミック特性に関しては、メタロ超分子ポリマーを透明電極膜を有するガラス基板上に塗布し、電解質層、対極物質層と組み合わせることで、電気で透明状態と着色状態を切り替えることができる調光ガラスの製造に成功した (右図)。

まとめ

メタロ超分子ポリマーは金属錯体部位を多数含有する新しいアモルファス高分子材料であり、既存の有機高分子材料と同様の製膜手法や加工技術を使用することができる。そのため、ポリマーに含まれる金属錯体の多様な電子状態とその制御により新機能材料としての発展が期待される。

論文・特許

- M. Kumar Bera, Y. Ninomiya and M. Higuchi, *Commun. Chem.* **4**, 56 (2021).
- Y. S. L. V. Narayana, S. Mondal, U. Rana, Y. Ninomiya, D. C. Santra, T. Yoshida and M. Higuchi, *ACS Appl. Electron. Mater.* **3**, 2044-2055 (2021).
- H. C. Lu, L. Hsiao, S. Kao, Y. Seino, D. C. Santra, K. Ho and M. Higuchi, *ACS Appl. Electron. Mater.* **3**, 2123-2135 (2021).

機能性ナノ共結晶の創製：組み合わせによる新機能の発現

Keywords ナノ共結晶, 有機半導体, 有機導電体, 光応答, 近赤外, 電界効果トランジスタ, フォトトランジスタ, ambipolar, ドナー, アクセプター, 電荷移動

主席研究員／Chief Researcher

若原 孝次 Wakahara Takatsugu

✉ WAKAHARA.Takatsugu@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/wakahara_takatsugu



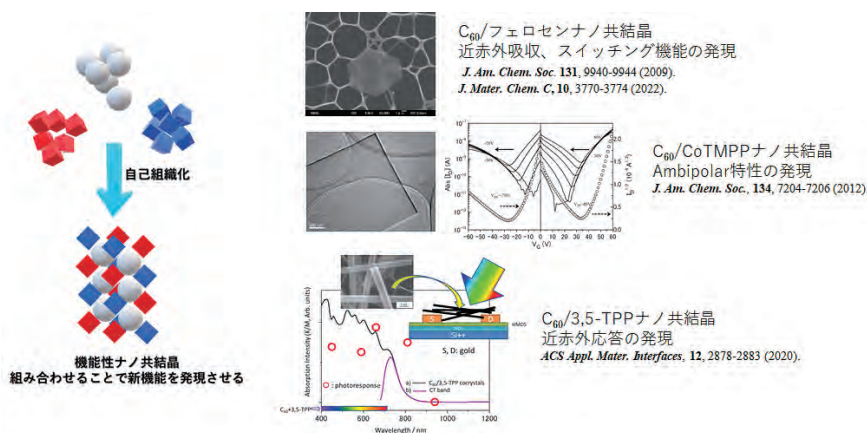
研究概要

機能性共結晶は複数の分子の組み合わせで新機能を発現することが可能な新しい材料群である。以前は、創薬分野や光学材料などの分野で主に研究が行われてきたが、2012年に両極性を示す有機半導体としての有用性を我々が示して以降、電子材料だけでなく、磁性材料や光触媒などとして盛んに研究されるようになった。通常新規の機能性分子の合成には多大な労力と時間が必要であるが、本研究では、既存の分子を組み合わせるだけで機能の向上や新規機能の発現が期待できる。これまでに本研究では、分子の組み合わせにより両極性を示す有機半導体ナノ共結晶や、近赤外応答性ナノ共結晶、加熱により半導体特性を変化させる有機半導体ナノ共結晶などを創出している。

新規性・独創性

- 複数の異なる機能を有する分子を組み合わせることで機能向上や新機能の発現
- 複雑な有機合成を用いない有機機能性材料の開発
- 既存の材料の再利用
- 機能性ナノ共結晶を用いたナノデバイスの作製

研究内容



新しい機能性有機材料の開発には多大な労力と時間が必要であるが、本研究では複雑な有機合成を用いず、既存の材料を組み合わせ、ナノ共結晶とすることで機能の向上や新機能の発現を目指している。現在では、本研究を用いた両極性の有機半導体ナノ共結晶の報告がきっかけとなり、電子材料だけでなく磁性材料や光触媒などの様々な分野での研究が進められている。本研究では新しい有機半導体や有機導電体の開発を行い、有機トランジスタや光電変換素子、光センサーなどへの応用を目指している。フレキシブルでプリンタブルな有機電子材料は今後ますます重要になると期待され、本研究による迅速で低コストな有機材料開発法の確立が望まれる。今後、より迅速な開発のためデータ科学との連携によるデータ駆動型への展開を目指す。

まとめ

- 複数の異なる機能を有する分子を組み合わせることで新しい有機半導体ナノ共結晶を開発
- 有機合成を必要せず、既存の材料を再利用することで低コストで迅速な材料開発
- より迅速な開発を目指し、データ駆動型へ

論文・特許

- T. Wakahara, P. D'Angelo, K. Miyazawa, Y. Nemoto, O. Ito, N. Tanigaki, D. D. C. Bradley and T. D. Anthopoulos, *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 7204-7206 (2012).
- T. Wakahara, K. Nagaoka, A. Nakagawa, C. Hirata, Y. Matsushita, K. Miyazawa, O. Ito, Y. Wada, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 2878-2883 (2020).
- D. Mahdoui, C. Hirata, K. Nagaoka, K. Miyazawa, K. Fujii, T. Ando, M. Abderrabba, O. Ito, T. Wakahara, et al., *J. Mater. Chem. C* **10**, 3770-3774 (2022).

イオン伝導性高分子材料と分子機械の融合

Keywords 高分子電解質, イオン伝導性材料, 分子機械, フォルダマー, イオン液体

主幹研究員／Principal Researcher

池田 太一 Ikeda Taichi

✉ IKEDA.Taichi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/ikeda_taichi



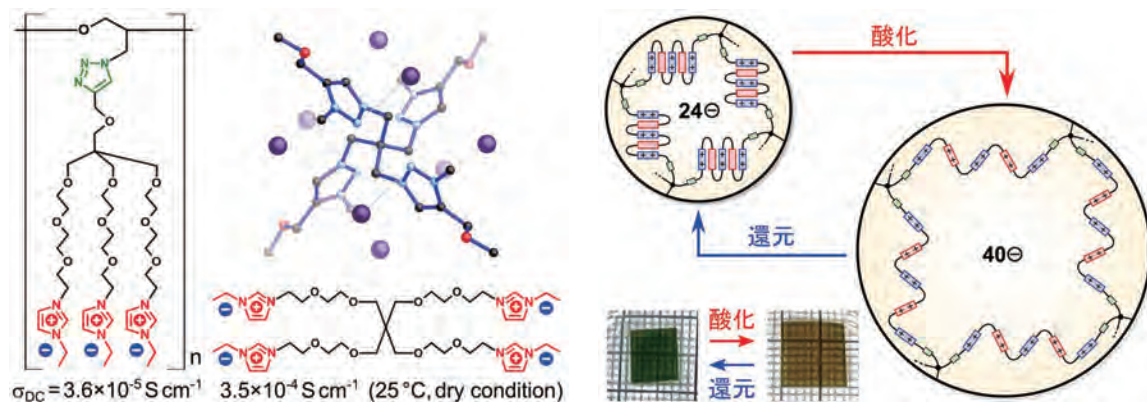
研究概要

高分子電解質は液漏れや発火リスクがない安全なイオン伝導性材料として蓄電材料、エレクトロクロミックディスプレイ、アクチュエータ、イオン交換樹脂など様々な応用先がある。イオン伝導度は材料の性能を決める重要な指標であり、その改善が課題となっている。我々は分岐構造の導入による分子間相互作用・ガラス転移温度の低下を利用したイオン伝導度改善を実証するために、側鎖に分岐構造を有するポリイオン液体、多価(主に4価)イオン液体の開発を行って来た。並行して分子機械を高分子網目に埋め込んだ新規アクチュエータ開発も行った。電気化学駆動による作動を実現するためにイオン伝導性材料と分子機械の融合を進めている。

新規性・独創性

- ポスト機能化法により複雑な側鎖構造を有する高分子量で高イオン伝導度を示す高分子電解質の合成を実現
- 材料の構造-物性相関を明らかにし、分岐側鎖の有効性を実証
- 分子量100万以上・無添加・無加湿・25°C条件でイオン伝導度 $4 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ を達成 (従来、同条件では $3 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ が限界)。
- 分岐テトラカチオンイオン液体は直鎖テトラカチオンイオン液体よりも低粘度・高イオン伝導度を示すことを実証
- 分子機械フォルダマーを高分子網目に導入することで 35 gf cm^{-2} の力発生を確認

研究内容



グリシジルアジドポリマーとアルキン化合物を銅触媒存在下で環化付加反応させることでグリシジルトリアゾリルポリマー (GTP)を合成することができる。我々はこれまでに50種類以上の様々な機能化GTPを新規開発してきた。最近特にポリエーテル主鎖の柔軟性を生かしたイオン伝導性材料の開発に力を入れており、上記のような3分岐側鎖を有するカチオン性GTPは高いイオン伝導度を示した。4分岐テトラカチオンイオン液体も開発しており、多価イオンであるにもかかわらず低い粘度と高いイオン伝導度を実現している。分子機械を利用した新原理アクチュエータの開発も行っており、(電気)化学的酸化・還元刺激に応じて折りたたみ・伸びきり転移を示すフォルダマーを高分子網目に組み込むことでマクロスケールの変形を誘起することに成功した。

まとめ

機能性GTPにより様々な高分子量機能高分子を簡単に収率よく合成できることを実証した。電解質材料に関してはポリカチオンのみではなくポリアニオンの開発を行うとともに、さらなるイオン伝導度の向上と機械的特性の向上を行い、電子機能材料(電池材料、エレクトロクロミックデバイス、アクチュエータ)への応用を目指す。分子機械アクチュエータに関しては電気化学的駆動人工筋肉の実現を目指す。

論文・特許

- T. Ikeda, *ACS Appl. Polym. Mater.* **5**, 839-845 (2023).
- T. Ikeda, *Polym. Chem.* **12**, 711-718 (2021).
- 特開 2021-80218 イオン液体

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

新規機能性無機-有機ハイブリッドポリマーの創製

Keywords メタロ超分子ポリマー, 無機-有機ハイブリッドポリマー, 層状無機-有機複合体, エネルギー移動, 環境応答

主任研究員 / Senior Researcher

藤井 和子 Fujii Kazuko

✉ FUJII.Kazuko@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/fujii_kazuko



研究概要

機能性物質の実用化には固体材料が有利だと考えられる。本研究では、NIMSでこれまでに研究されてきたメタロ超分子ポリマー (MSP) や無機-有機複合化技術を活かし、MSPの機能の向上やエネルギー移動が起こる固体の創製を目指した。MSPを層状の無機-有機ハイブリッドポリマー (層状IOP) と複合化することでMSPの特性が向上した。また、層状IOPでは有機基が無機層に共有結合で強固に一体化している。この特徴を活かし、従来研究の課題であったデインターカレーションを克服しエネルギー移動が起こる固体材料の創製を達成した。有機基、無機層、有機/無機界面の構造や組成の設計・制御により多様な機能性材料の創製が期待される。

新規性・独創性

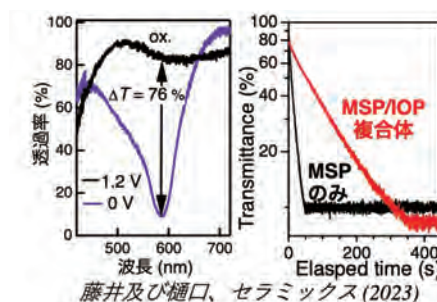
- メタロ超分子ポリマー (MSP) と層状無機-有機ハイブリッドポリマー (層状IOP) の複合化を比較的簡便な方法で達成
- 複合化によりMSPのエレクトロクロミック特性が向上
- 可逆溶融層状IOP、発光性層状IOP、湿度応答性層状IOPを開発
- 層状IOPの特異な構造を活かし、従来技術では困難であった異種色素共存系の構築を達成
- 本研究で創製した異種色素共存系ではエネルギー移動が起こる

研究内容

メタロ超分子ポリマーの複合化

メタロ超分子ポリマー (metallo-supramolecular polymer, MSP) では、金属イオンから有機配位子への電荷移動吸収 (MLCT) が可視域に見られる。MLCTを金属イオンの電気化学的酸化還元により制御することでエレクトロクロミック (EC) 特性が発現することは既にNIMSの樋口らにより見出されている (樋口&Kurth, Chem. Rec., 2007)。

本研究では、MSPを層状の無機-有機ハイブリッドポリマー (IOP) と複合化した。複合化によりEC特性が向上した。今後は、新しいIOPを創製し、これをMSPと複合化することでさらなる機能の向上や新しい機能の発現を目指したい。



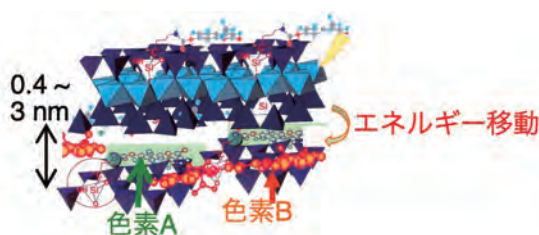
藤井及び樋口、セラミックス(2023)

無機-有機ハイブリッドポリマーの創製

無機層と有機基が共有結合で一体化した化合物をここでは無機-有機ハイブリッドポリマー (IOP) と呼ぶ。本研究では、特に層状の無機-有機ハイブリッドポリマー (層状IOP) に注力する。

層状IOPは、前述のMSPとの複合化や層間のナノレベルの二次元空間に構築した異種色素共存系のエネルギー移動、可逆溶融層状化合物等に展開してきた。有機基が無機層に共有結合で強固に一体化しているため従来研究で課題であったデインターカレーション等を克服し異種色素共存系の構築が達成された。

今後は、組成や構造の制御に挑み、新しい無機-有機ハイブリッドポリマーを創製し、機能の多様化を目指す。



まとめ

- メタロ超分子ポリマーのEC特性の向上を達成した。また、光応答性等の機能が発現する層状無機-有機ハイブリッドポリマー (層状IOP) を創製した。
- 環境(温度・湿度・光・電圧・磁場) 応答性の機能性固体材料や光反応が起こる固体材料、表示素子等への展開が期待される。
- 無機層、有機基及び無機/有機界面の組成・構造を設計・制御する技術をさらに開発し、様々な組成・構造を持つ層状IOPの創製を可能にし、ニーズに応える機能性固体材料の開発に展開していきたい。

論文・特許

- K. Fujii, M. K. Bera, D. C. Santra and M. Higuchi, *Polymers* **14**, 915 (2022).
- K. Fujii, K. Kurashima, H. Hashizume, S. Shimomura, T. Wakahara and T. Ando, *J. Inorg. Organomet. Polym. Mater.* **31**, 1195-1207 (2021).
- 特許 7016493 号 無機無機複合体およびその製造方法

分子配列を生かした限界突破エネルギー変換材料・素子創製

Keywords 超分子ポリマー、液晶、有機半導体、アクチュエータ、ソフトロボット、触覚素子、光電変換素子

グループリーダー／ Group Leader

吉尾 正史 Yoshio Masafumi

✉ YOSHIO.Masafumi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshio_masafumi



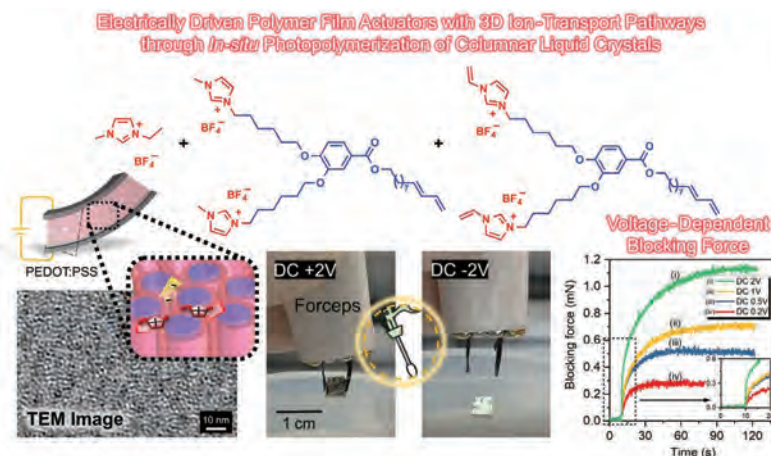
研究概要

イオン性液晶ネットワーク高分子や強誘電 π 共役高分子などの新しい高分子材料の合成とナノ構造・配列制御を基盤として、電界によって屈曲・伸縮運動を示すソフトアクチュエータ、触覚素子、ソフトロボット、圧電センサー、光電変換素子などの次代スマートデバイスの開発を推進している。高分子の軽量性、伸縮・柔軟性、自己修復性、形状記憶性、生分解性と電子・イオン・光機能を融合して、既存の概念を打ち破るような新物質・材料・素子創出を狙う。

新規性・独創性

- 2V以下で高速振動100Hz・高出力5gfを発揮する液晶高分子アクチュエータの創製
- 自己消火性と不揮発性を兼ね備えた高速リチウムイオン伝導性ナノ構造電解質の開発
- 環境に配慮した生分解性を示す光架橋ナノ構造高分子アクチュエータの構築
- 強誘電性 π 共役半導体によるバルク光起電力効果を活用する光電変換素子デザイン
- 自己修復性と形状記憶機能を示す金属錯体超分子ポリマーの創出

研究内容



安全性、省エネルギー性に優れ、相反する高速振動性と高出力性を兼ね備えた触覚素子やソフトロボットの開発を志向し、イオン伝導型液晶高分子フィルムアクチュエータを創製した。光架橋性を有する楔形分子構造のイオン性分子を設計・合成し、少量のイオン液体と自己組織化することにより、三次元的に連結した高速イオン伝導パスを形成したナノ相分離構造を有する室温カラムナール液晶が得られた。液晶場で紫外線重合することにより、ナノ構造を保持した強靱かつフレキシブルな高分子フィルムが得られた。この超薄切片の透過型電子顕微鏡観察 (TEM) によって、ナノスケールのイオン伝導パスの可視化に成功した。この液晶高分子電解質フィルムを2枚のドーパポリチオフェン系導電性高分子電極 (PEDOT:PSS) で挟んだ三層積層アクチュエータ素子を作製した。2Vの電圧印加によって、繰り返し耐久性のある大きな屈曲変形が得られた。2つのアクチュエータ素子が内側に變形するように回路を設計し、物体を柔らかく握める微小ピンセットを創製した。0.2-2.0Vの範囲で印加電圧を変えることにより、出力の制御が可能である。従来材料にはない新機能として、電圧を切っても変形が保持される形状記憶機能が発現することを見出した。VR触覚技術、視覚障害者歩行支援センサー、医療器具等への応用が期待される。

まとめ

イオン液晶高分子アクチュエータは、高速大変形と高出力の相反機能を両立できる新材料として多方面での応用が期待できる。今後は、物質探索空間の拡張、宇宙等の極限環境耐性や自己修復性などの未踏機能の創出、データベース化を進め、ウェルビーイング社会の実現に貢献したい。

論文・特許

- C. Liu, S. Cao and M. Yoshio, *Adv. Func. Mater.* **33**, 2300538 (2023).
- S. Cao, C. Liu and M. Yoshio, *Mater. Chem. Front.* **7**, 2828 (2023).
- C. Wu, W. Meng, K. Iakoubovskii and M. Yoshio, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 4495-4504 (2023).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

高分子のナノ構造制御による有機エレクトロニクス材料開発

Keywords 高分子精密合成, 有機メモリ, ナノフローティングゲート, 有機半導体

主任研究員 / Senior Researcher

相見 順子 Aimi Junko

✉ AIMI.Junko@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/aimi_junko



研究概要

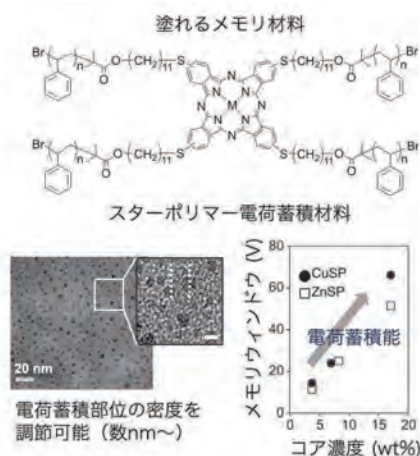
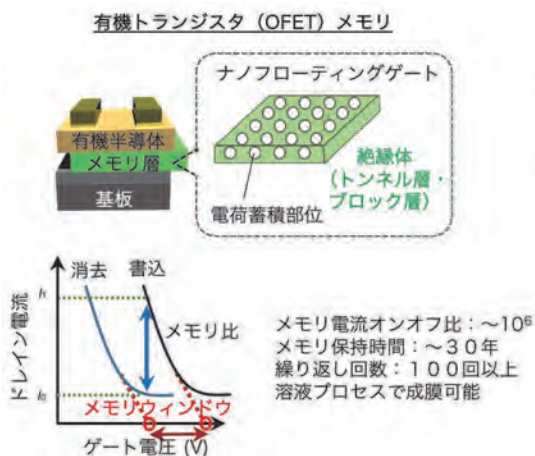
ウェアラブルメモリやディスプレイブルメモリなどの新たな社会ニーズに応えるメモリデバイスの需要が高まっている。そこで柔軟かい有機材料を用いる「有機不揮発性メモリ」が有望視されているが、性能や耐久性に関して未だ課題が多い。

メモリ機能の鍵となるメモリ材料(フローティングゲート)に、精密に構造を制御した高分子材料を利用する、有機トランジスタ (OFET) メモリを作製した。有機材料ならではの化学構造の柔軟性を利用して、デバイス性能のチューニングやウェアラブルデバイスに向けた材料開発を目指す。

新規性・独創性

- 精密重合法による3次元構造を制御した高分子材料の開発
- 機能性高分子を用いた新しいナノフローティングゲート材料
- 溶液プロセスで簡便に成膜可能なメモリ材料
- 素子性能を高分子の分子設計により調節可能
- 多値ロジックインメモリへの応用

研究内容



OFETメモリでは、ゲート電圧を印加すると有機半導体に誘起された電荷がナノフローティングゲートに移動し蓄積される。ここで蓄積された電荷の量によりトランジスタのしきい値電圧が変動するため、書込(1)と消去(0)が区別できる。

金属フタロシアニンをコアに持つスターポリマーをメモリ材料として用いたOFETメモリ素子を作製した。この高分子材料は、電荷蓄積部位である金属フタロシアニン分子がポリマーで覆われた構造を持ち、溶液プロセスで簡便にナノフローティングゲート構造を持つ薄膜を形成する。また、分子設計により電荷蓄積部位の三次元高密度化が可能であり、メモリウィンドウや電荷保持時間の調節と高い耐久性が実現できる。

まとめ

- 機能性分子をコアに持つスターポリマーをナノフローティングゲート材料に用いた有機トランジスタメモリを開発
- 分子デザインによりメモリ性能の調節が可能。溶液プロセスで簡便に成膜が可能。
- 高性能有機メモリ開発、ロジックインメモリ開発、ニューロモルフィック素子開発への展開を目指す。

論文・特許

- J. Aimi, T. Yasuda, C. Huang, M. Yoshio and W. Chen, *Mater. Adv.* **3**, 3128-3134 (2022).
- J. Aimi, C. Lo, H. Wu, C. Huang, T. Nakanishi, M. Takeuchi and W. Chen, *Adv. Electron. Mater.* **2**, 1500300 (2016).
- 特許第6548190号 スターポリマーを含む電荷蓄積材料

Design and synthesis of soft crystals using mechanically interlocked molecules

Keywords Organic synthesis, Crystallography, Metal-organic framework, Molecular machine

研究員 / Researcher

メン ウェンジン Meng Wenjing

✉ MENG.Wenjing@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/meng_wenjing



エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

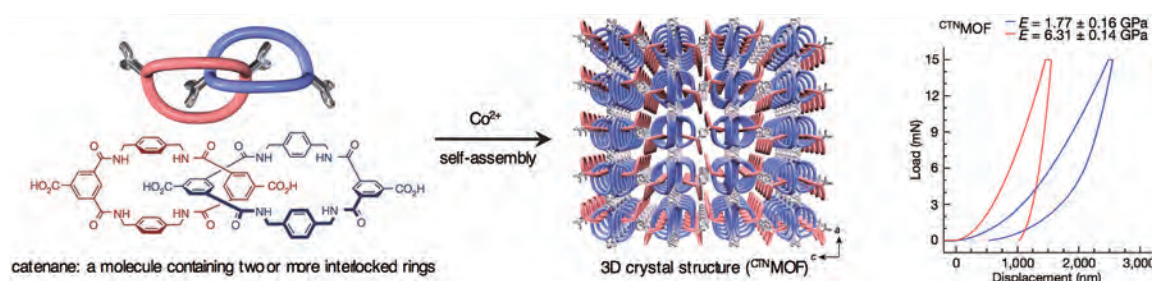
Research Summary

A variety of mechanically interlocked structures have been found in nature, of which the geometries and large potential to exert unique functions are of major scientific interest. Unlike covalently constructed molecules, mechanically interlocked molecules (MIMs) such as catenanes bear spatially restricted freedom of motion, and a wide variety of synthetic molecular machines and switches based on MIMs have been developed so far. Since the first success in the synthesis of polycatenane in the 1970s, such mechanically interlocked polymers have attracted particular attention as their densely populated mechanical bonds are expected to move coherently along the main chains, providing anomalous mechanical properties. We envisaged that if the backbone of a metal-organic crystal were composed of a catenane structure, such a porous crystal might exhibit rubber-like elastic properties. Currently we are synthesizing a variety of catenanes and trying to construct porous crystals with them.

Novelty / Originality

- Offer an insight into how mechanical bond can be organized and manipulated collectively.
- Can produce new multi-dimensional structures which are aesthetically appealing.
- Can offer a general strategy for the rational design of elastic, porous single crystal.

Research Contents



Our prototype of a porous metal-organic crystal composed of a catenane-based backbone was constructed using a catenane ligand with four carboxylic acids. Green crystals were obtained by heating the ligands and cobalt ions in N,N-dimethylformamide (DMF).

Using single-crystal X-ray diffraction, it was found that the deprotonated carboxyl groups of catenanes are linked by cobalt ions to form a linear chain structure, and these chains are linked vertically and horizontally by the mechanical bond of catenanes. It was also revealed from various X-ray diffraction analysis, this porous crystal can dynamically change its geometry upon guest molecule release, uptake and exchange, and also upon temperature variation even in a low temperature range.

The mechanical properties were examined by nano-indentation. It was found that the material deformed easily when pressed mechanically—and that its Young's modulus (E), an index of the ease with which it deforms, is comparable to that of polypropylene. Surprisingly, the crystal returned to its original shape, without damage, upon removal of the force. Furthermore, when isostatically compressed, the crystal is compressed most in a specific direction. The crystal structure obtained at a high pressure showed the deformable nature of the crystal comes from the slipping motion between the rings of the catenane molecules.

Summary

In the future, by devising the design of ligands with mechanical bonds, we aim to understand how the structure and properties of ligands affect the properties of crystals, and develop soft porous crystals with responsive properties.

References

- W. Meng, S. Kondo, T. Ito, K. Komatsu, J. Pirillo, Y. Hijikata, Y. Ikuhara, T. Aida and H. Sato, *Nature* **598**, 298-303 (2021).

プリンテッドエレクトロニクスの研究

Keywords プリンテッドエレクトロニクス, フレキシブルエレクトロニクス, 有機半導体, 薄膜トランジスタ

グループリーダー / Group Leader

三成 剛生 Minari Takeo

✉ MINARI.Takeo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/minari_takeo



研究概要

金属や半導体をインク化し、塗布・印刷プロセスによって電子回路を描く「プリンテッドエレクトロニクス」を基盤とし、自己組織化やめっきを用いた様々な製造技術や、太陽電池やセンサといった応用素子まで、幅広い研究を行っている。社会に実装することを目的としているため、単なる学術研究にとどまらず、社会のニーズに合わせた開発と、株式会社プリウェイズを通したビジネス構築を目指している。

新規性・独創性

- 低温による金属配線の印刷を可能とする新規金属インク
- 酸化に強い銅インク
- サブミクロンスケールの印刷配線を形成する微細プリンテッドエレクトロニクス技術
- プリンテッド技術で作製する薄膜トランジスタやセンサ素子
- NIMS発ベンチャー企業による社会実装

研究内容



NIMSでは、印刷・塗布プロセスによって電子デバイスや回路を形成するプリンテッドエレクトロニクスの研究開発を行っている。特に、材料から印刷プロセス、およびアプリケーションまで一貫した開発を行っていることが特徴である。これまでに、新たな塗布型金属材料として、室温導電性を有する金属ナノ粒子インクと、大気安定性を有する銅錯体インクの開発を行った。さらに、表面に微細な極性・無極性パターンを施すことで、線幅 0.6 μm が可能な微細印刷技術を開発した。加えて、全印刷プロセスによる薄膜トランジスタの形成に早くから成功しており、現在では全印刷トランジスタ素子の動作電圧を 1 V まで低減することに成功している。これらの技術を利用して、印刷で大量に形成できるセンサ素子といったアプリケーション開発を行っている。これらの成果は、NIMS発ベンチャー企業である株式会社プリウェイズを通して、社会実装が進んでいる。

まとめ

これまでにプリンテッドエレクトロニクスに関する様々な技術を開発し、低温化や低コスト化、微細化を大きく進展させてきた。株式会社プリウェイズと連携し、Society 5.0 で実装されるフレキシブル素子やセンサ、アクチュエータといった次世代デバイス向けの製造技術をさらに発展させていく。

論文・特許

- Q. Sun, C. Ma, W. Li, X. Li, K. Sakamoto, X. Liu, A. Okamoto and T. Minari, *ACS Appl. Electron. Mater.* **5**, 2558-2565 (2023).
- W. Li, L. Li, F. Li, K. Kawakami, Q. Sun, T. Nakayama, X. Liu, M. Kanehara, J. Zhang and T. Minari, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14**, 8146-8156 (2022).
- L. Li, W. Li, X. Liu, M. Tenjimbayashi, H. Segawa, C. Niikura, T. Nakayama and T. Minari, *Adv. Mater. Technol.* **7**, 2101687 (2022).

多接合太陽電池のための機能性新材料の開発

Keywords 太陽電池, 薄膜, CVD, シリコン, 光マネジメント, プリンテッドエレクトロニクス

主任研究員 / Senior Researcher

新倉 ちさと Niikura Chisato

✉ NIIKURA.Chisato@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/niikura_chisato



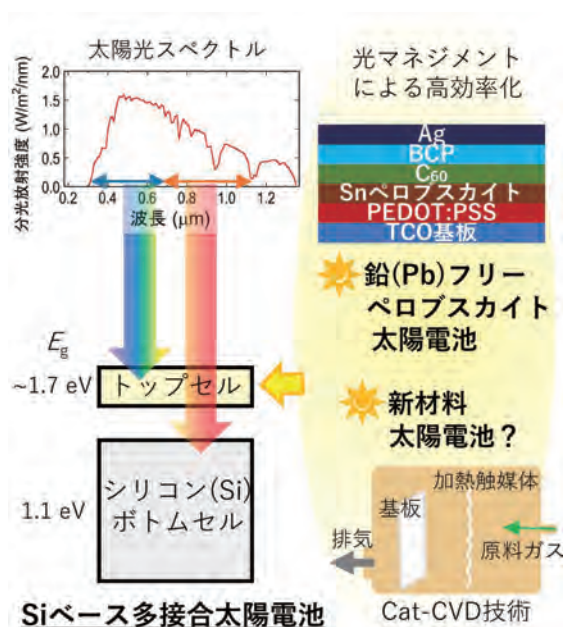
研究概要

カーボンニュートラルの実現に向けた再生可能エネルギー主力電源化のために、現状のシリコン(Si)単接合太陽電池を超える超高効率太陽電池が求められている。その候補である“Si太陽電池(ボトムセル)をワイドギャップ材料の太陽電池(トップセル)と組み合わせる広い波長域の光を利用する多接合太陽電池”の実現のための材料研究を幅広く行っている。例えば、トップセル候補として有望なペロブスカイト太陽電池について、有害な鉛(Pb)の代替として錫(Sn)を使用した太陽電池の高効率化に有効な光閉じ込めの検討等を行っている。長期信頼性に優れた環境にやさしいトップセル用新材料の検討等も行い、高効率多接合太陽電池の実現を目指している。

新規性・独創性

- プリンテッドエレクトロニクス技術を活用した高ヘイズ・スムーズTCO基板によるPbフリーペロブスカイト太陽電池の光閉じ込め
- プリンテッドエレクトロニクス技術を活用したTCO基板を用いた軽量・フレキシブル太陽電池
- CVD法によるシリコン低温エピタキシャル成長技術を応用したワイドギャップ新材料開発

研究内容



Siボトムセルにエネルギーバンドギャップ(E_g)がワイドな材料のトップセルを組み合わせる、Siベース多接合太陽電池の概要を図に示す。トップセル候補として期待されるペロブスカイト太陽電池(PSC)は、Pbによる環境負荷、屋外長期耐久性等の問題がある。研究が進められているPbフリーPSCは、キャリア拡散長が短く光吸収層を厚くできないため、光を十分に吸収できず、エネルギー変換効率が低い。このPbフリーPSCの高効率化のための光閉じ込め技術の開発を行っている。

スタンダードな膜厚のPbを用いたPSCを、光散乱効果の高い(高ヘイズ)表面テクスチャー付の透明導電膜(TCO)基板上に作製したところ、短絡電流密度が向上する結果が得られ、反射率測定から、基板テクスチャーによる入射光の反射防止に起因することが示された。今後は、まず、単接合の薄いPbフリーPSCに対して、入射光の反射防止、光吸収層内における光路長の増大、裏面からの反射光の閉じ込め等の光マネジメントを適用し、光吸収量・短絡電流密度の増大による効率向上を目指す。高ヘイズでありながらラフネスが小さく表面上に高品質膜形成が可能なTCO基板の開発を、プリンテッドエレクトロニクス技術等を活用して行い、Sn等を使用するPbフリーPSCへの適用を進める。

さらに、リスクヘッジとして、長期信頼性・環境負荷等の課題を有するペロブスカイトに替わるトップセル用ワイドギャップ新材料の検討・開発も、触媒化学気相成長(Cat-CVD)法やフローティングゾーン法等の幅広い手法を用いて行っている。

まとめ

- 光マネジメント技術により、Sn等を用いるPbフリーペロブスカイト太陽電池の効率向上が期待できる
- プリンテッドエレクトロニクス技術の活用による軽量・フレキシブル太陽電池用TCO基板の開発が期待できる
- Siベース多接合太陽電池のトップセル用ワイドギャップ新材料の検討・開発をリスクヘッジとして行っている

論文・特許

- Y. He, C. Niikura, P. Sichenugrist, T. Sakurai, M. Konagai and A. Islam, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **164**, 107605 (2023).
- L. Li, W. Li, X. Liu, M. Tenjimayashi, H. Segawa, C. Niikura, T. Nakayama and T. Minari, *Adv. Mater. Technol.* **7**, 2101687 (2022).
- 特許第6415942号 薄膜太陽電池用三次元微細構造パターン基板と薄膜太陽電池

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

ソフトマターの配列制御と電子・光機能

Keywords ソフトマター、複雑流体、プリンテッドエレクトロニクス、自己組織化

独立研究者 / Independent Scientist

荒井 俊人 Arai Shunto

✉ ARAI.Shunto@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/arai_shunto



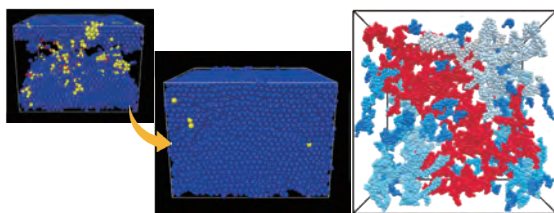
研究概要

文字や写真を印刷するように電子・光デバイスを作製する技術はプリンテッドエレクトロニクスと呼ばれ、大規模かつ複雑化したこれまでのデバイス製造工程を格段に簡易化できると期待されている。こうしたデバイスの高性能化には有機分子やコロイドなどソフトマターと呼ばれる素材の自己組織化を理解し、制御することが求められる。これまでに、コロイド粒子・有機半導体・有機強誘電体などの配列制御に取り組み、塗布型有機トランジスタをはじめとする電子デバイスの高性能化を進めてきた。

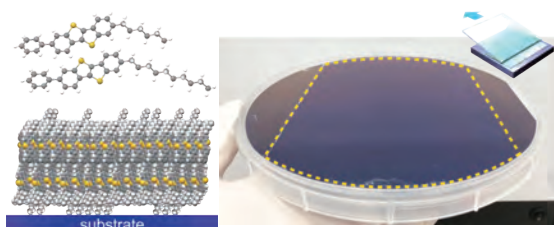
新規性・独創性

- 液中での微粒子の運動を調べる実験手法を開発
- 流体力学的相互作用を踏まえた独自の数値シミュレーション手法を開発
- 分子レベルで厚みが均質な有機半導体の結晶を作製する技術を開発
- 駆動電圧 2 V 以下・移動度 $10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 以上の有機トランジスタの作製に成功

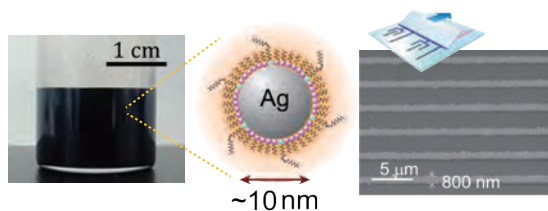
研究内容



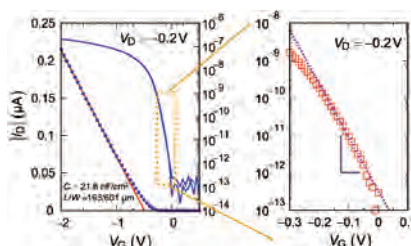
コロイド系の自己組織化制御。焦点深度を変えて撮影した顕微鏡像から3次元的な粒子配置を再構成することで、粒子配置の時間変化を追跡した。コロイド結晶やゲル状ネットワークなど粒子間の相互作用を制御することで作り分けができる。



有機半導体の配列制御。積層方向の長距離秩序化を抑制することで、分子レベルで厚みが均一な単結晶薄膜を作製した。



金属ナノ粒子の分散・凝集制御と塗布型電極への応用。



作製した有機トランジスタの典型的な伝達特性。将来的にはフレキシブル・ウェアラブルデバイスに活用できる可能性がある。

まとめ

ソフトマターの軽量性や柔軟性を活かしたデバイスの作製に向けて、コロイド粒子や有機分子の配列制御を進めている。作製した有機トランジスタは良好な性能を示すことを明らかにした。ここで開発した数値シミュレーション手法や薄膜作製技術は、他の流体・界面現象の制御にも有用だと期待される。今後さらなる塗布型材料の開拓を通じて、新たな実験・計算技術の開発を進める。

論文・特許

- S. Arai, S. Inoue, M. Tanaka, S. Tsuzuki, R. Kondo, R. Kumai and T. Hasegawa, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 025602 (2023).
- S. Arai, S. Inoue, T. Hamai, R. Kumai and T. Hasegawa, *Adv. Mater.* **30**, 1707256 (2018).
- S. Arai and H. Tanaka, *Nat. Phys.* **13**, 503 (2017).

マイクロテクスチャー表面に凝集する分子の電気化学とセンサ応用

Keywords 分子, 吸着, 凝縮, 結露, 蒸散, 検知

グループリーダー / Group Leader

川喜多 仁 Kawakita Jin

✉ KAWAKITA.Jin@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawakita_jin



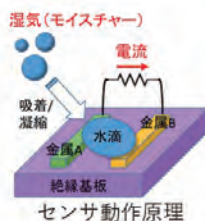
研究概要

サブミクロンのギャップを設けて並べた異種金属の細線（アレー）に導電体が接触した際に流れるガルバニ電流を計測することで、吸着水分子や目に見えないくらい小さな水滴を検知できることを見出した。これを基に、結露の極初期・早期の検知や、人や植物などからわずかに蒸散する水の計測ができることが分かった。さらに、水以外の分子の検知やその凝集構造、相変化、導電機構などについての研究を進めている。

新規性・独創性

- 微小／微量な水の検知について、サブフェムトリットルの分解能と4桁以上のダイナミックレンジ（市販の湿度センサ等と比べて10倍以上）
- 0.05秒の高速応答性（市販の湿度センサ等と比べて100倍以上）
- 普及している製造技術の利用
- 検知部の材料選択の多様性

研究内容



用途に応じたセンサデバイスの例

1) 電気応答現象の解明

電気応答を引き起こす分子凝集の状態を電気計測と観察・分光を同時に行うことで解明している。

2) 性能の向上

マイクロテクスチャーの構造、電子回路、周辺機構を改良することで、センサ性能を10倍以上向上させている。

3) デバイス／ネットワーク化

チップ、増幅/アナログ/デジタル回路、制御/フィードバック系への連携、IoT化を進めている。

4) 情報処理/統計解析

センサ応答を含めたマルチモーダルな時系列データの処理・解析を行い、健康状態などを推定する技術の確立を目指している。

まとめ

- 水を始めとする凝集分子を電氣的に検知する技術。
- モノづくり、物流、農業、ヘルスケアへの応用。
- 新規な検知対象の探索・拡大。

論文・特許

- M. Mekawy, E. Terada and J. Kawakita, *Chemosensors* **10**, 300 (2022).
- R. G. Shrestha and J. Kawakita, *Sens. Actuator A Phys.* **331**, 113036 (2021).
- Y. Kubota, N. Satoh, M. Mekawy, Y. Sakamoto and J. Kawakita, *J. Electrochem. Soc.* **168**, 067522 (2021).

高次階層構造の構築：多段階無機合成と粘性熱電材料を例に

Keywords 有機/無機ハイブリッド、無機/無機ハイブリッド、原子制御、電子制御、熱制御

主幹研究員／Principal Researcher

佐藤 宗英 Satoh Norifusa

✉ SATOH.Norifusa@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/satoh_norifusa



研究概要

既に先達によって多種多様な概念やナノ構造を有する物質・材料が切り拓かれている現状で、種類に限りがある周期表上の元素からさらに未踏の物質・材料を創出するには、非従来型の化学構造を創り出せる新たな合成論や各構成要素の単体からは想像できない機能を創発できる高次階層構造の開拓が必要。そこで、様々な有機分子を原子精度で精密合成できる多段階有機合成（ノーベル化学賞2017年）の原理を無機合成に展開することで原子制御型ドット集積構造を合成可能とする**多段階無機合成**、フレキシブルな大面積冷却シートの実現に必要な複雑に絡みあう要件に原子スケールからマクロスケールまでの各階層を制御することで応えることを特徴とした**粘性熱電材料**を探索中。

新規性・独創性

- **多段階無機合成**：自己組織化膜や超分子といった比較的新しい概念構造を化学変換することを特徴とした独自の合成論で、分子線エビタキシー（ノーベル物理学賞2000年）等でも不可能だった量子ドット超格子のドットとそれを取り囲むマトリックスを原子制御
- **粘性熱電材料**：単一物質では実現できない高次機能を複数の物質を組み合わせで成立させる有機デバイスを参考に、原子スケールでの無機粒子の元素配合制御による高い熱起電力、ナノスケールで無機粒子間の界面電気抵抗を低減、マイクロスケールでハイブリッド化する有機溶媒や封止材によって低い熱伝導と柔軟性、マクロスケールでのデバイス構造設計と各階層で所望の物性・機能を実現

研究内容

多段階無機合成の溶液・真空融合プロセス



粘性熱電材料を用いた冷却シートの製造工程



多段階無機合成：具体的には溶液プロセスを用いる独自の原子制御酸化物ドット堆積法（Satoh et al. Nat. Nanotech. 2008, Sci. Rep. 2013）とエレクトロニクス分野で実用される真空プロセスを用いる原子層堆積法を組み合わせで実現でき、人工原子核のサイズや結合長をデザインして室温で興味ある物性・機能を示す人工原子凝縮系を実現しうる。

粘性熱電材料：Roll-to-Roll等で大量生産する観点から逆設計。地球温暖化が加速する昨今、世界人口の25～50%が熱帯地域で未だ室内冷房器具へアクセスできていない。全面冷却シートによる空気を介さない人体の直接冷却や自動運転に要するセンサ等の精密温度制御は安心・安全・快適でありながらエコな社会の実現に貢献しうる。

まとめ

先達の確立した学術基盤に立脚しながらも、無機化学と有機化学、真空プロセスおよび溶液プロセスといった確立された学問・規定された技術の垣根を超えて物質・材料科学を統合的に精査することは、未踏の物質・材料を合理的に生み出す新規な合成論や高次階層構造、ひいては新たな学術的・産業的な価値の創出に資する。

論文・特許

- N. Satoh, M. Otsuka and J. Kawakita, *MRS Adv.* **8**, 446-450 (2023).
- N. Satoh, *Interdiscip. J. Chem.* **1**, 52-57 (2017).
- N. Satoh, *Soft Matter Nanotechnology*, 217-232, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., ISBN 9783527337224 (2015).

サーキュラーエコノミーを指向したデータ駆動高分子材料開発

Keywords スマートラボ, 生物模倣材料, 接着, コーティング, ポリマーインフォマティクス

グループリーダー / Group Leader

内藤 昌信 Naito Masanobu

✉ NAITO.Masanobu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/naito_masanobu



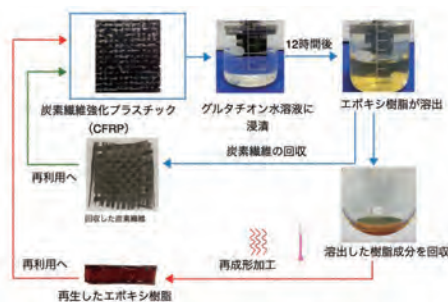
研究概要

プラスチック誕生から100年。軽量・安価・加工性などの特徴から、日々の生活に必要な不可欠な材料としてプラスチックは浸透しています。しかし、21世紀の今、大量消費に伴う海洋プラスチックごみや、天然資源・生物多様性への影響など、プラスチックが地球に与える深刻な環境負荷の側面が顕在化したため、大量生産・大量消費・大量廃棄を前提としたリニアエコノミーモデルから、モノを長く使い、廃棄物を資源に循環するシステムへと転換するサーキュラーエコノミーシステム(CE)への移行が期待されています。私の研究では、スマートラボやAI、生物模倣といった手法を駆使することで、CE時代に求められる高分子材料の開発に真摯に取り組んでいきます。

新規性・独創性

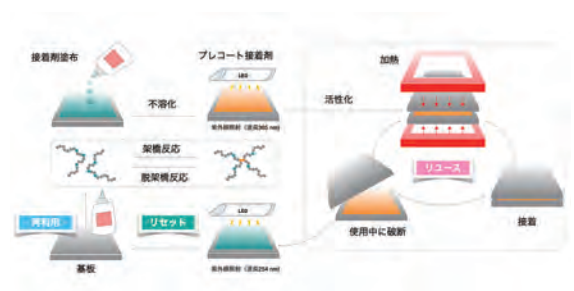
- ポリマー材料の合成から物性評価まで一気通貫したAI支援スマートラボシステムを開発
- 生物をヒントにしたエコフレンドリーな接着・コーティング・樹脂の開発を展開
- AIツールを駆使した新規高分子材料開発

研究内容



- エポキシ樹脂のような熱硬化性樹脂については、熱による溶融や溶媒への溶解が困難なため、リサイクルへの道筋がついていません。
- 天然由来のペプチド「グルタチオン」の水溶液につけるだけで分解できるエポキシ樹脂のリサイクル法を新たに開発しました。グルタチオンは生体内で毒物を解毒する際に使われますが、その反応を参考に、エポキシ樹脂の構造にジスルフィド(-S-S-)基を導入することで、グルタチオンが持つチオール(-SH)基を用いて切断することが可能になります(図)。
- 本技術は、炭素繊維と樹脂を分離・回収する技術が確立しておらず、しかも燃えにくいCFRPの新たなリサイクル手法としての活用が期待されます。

- 接着と剥離は、矛盾する要素が含まれていることから、強力な接着力と容易な剥離を両立することは困難でした。
- この問題を解決するため、波長の異なる紫外線を照射することで架橋・脱架橋反応(図)を可逆的に引き起こすカフェ酸に注目しました。カフェ酸を組み込んだ高分子を基材に塗布したのちに、紫外線を当てると、架橋反応によって不溶化した塗膜となります。この塗膜は加熱することで接着と剥離を繰り返すことができます。さらに、より短波長の紫外線を照射することで、接着剤と基板の両方を回収、再利用できるようになります。カフェ酸の化学構造に含まれるカテコール基は、ムラサキイガイが分泌する接着成分にも多く含まれており、フッ素樹脂や水中での接着などにおいても、強力な接着力とリサイクル性を発揮しました。



まとめ

- 成果：データ駆動型高分子材料研究の基盤構築とその運用
- 実用化への可能性：用途開拓のパートナー企業募集
- 今後解決すべき問題点：企業連携による協業を通じた課題解決
- 今達成していること：水中接着や異材接合など、バイオミメティック接着剤やサーキュラープラスチックの開発

論文・特許

- H-Y. Tsai, T. Fujita, S. Wang and M. Naito, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **22**, 532–542 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

多孔質高分子材料の創製・計測・応用

Keywords 多孔化技術, 多孔体, 微粒子, 多孔膜, 分離, 吸着, 吸音, 断熱, X線CT, データ科学, 相分離, ナノ結晶

主幹研究員 / Principal Researcher

佐光 貞樹 Samitsu Sadaki

✉ SAMITSU.Sadaki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/samitsu_sadaki



研究概要

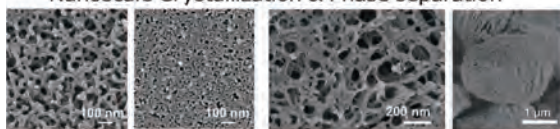
- エネルギー・安全安心・水循環・熱マネジメントといった多様な社会ニーズの解決に高分子ナノ多孔体が活躍
- 多孔質材料の創出・新たな多孔化技術の開発は産業競争力強化に貢献
- 高分子多孔体を「作る」・「観る」・「使う」の全方位で研究開発を進め、多孔体材料技術を総合的に深化
- ナノからマクロまで多孔構造を制御して最適形状に作り込む高度な多孔化手法を開発
- X線CTで3次元構造を可視化・定量化、AI技術を活用した多孔体の開発手法を開発

新規性・独創性

- ナノ結晶化を利用した独自の汎用高分子ナノ多孔化技術
- 高精細・高コントラストX線CTで高分子材料の3次元構造を可視化し、画像解析技術で特徴量を数値化することで機械学習に適用
- 多孔膜・分離膜・吸着材・断熱材・吸音材等の高分子多孔体の性能向上・機能開拓

研究内容

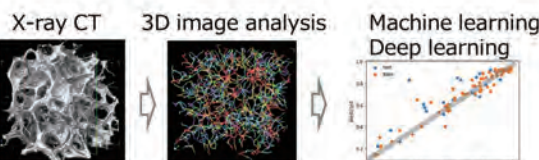
Nanoscale Crystallization & Phase separation



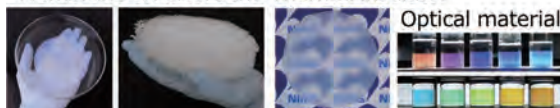
高分子溶液中での結晶化・相分離を制御することで、従来法では困難だったサイズの揃ったナノ細孔（10～20 nm）を全面に形成して200m²/gを越える高比表面積を達成した。高分子を結晶化させるプロセス、溶剤分子を結晶化させるプロセス、高分子と溶剤の親和性を変えて相分離させるプロセスなど、目的に応じて多孔化プロセスを設計することで、モノリス・シート・微粒子・ファイバー等の多様な材料形状への加工が可能になる。

有機材料に適したX線波長の高輝度並行ビームを照射することで、高コントラスト・高精細なX線CT撮影が可能（最高でサブμm程度）。多孔構造などのCT像から特徴量を抽出して定量化する3次元画像解析技術。

多孔質材料評価装置群を駆使してナノからマクロまでマルチスケールの多孔構造解析を可能にし、機械学習によるプロセス最適化・深層学習による領域抽出といったデータ科学の技術も活用しながら多孔膜・分離膜・吸着材・断熱材・吸音材等の多様な高分子多孔体の創製と性能向上を進めている。



Membrane & Adsorbent Thermal insulator



まとめ

高分子多孔体の製造法・構造評価法・用途展開という3つの軸で研究開発を進め、多孔体材料技術を深化してきた。新たな素材の適用、多孔化メカニズムの開拓、データ科学・AI技術を用いた多孔体製造プロセスの実装、多孔質材料の用途展開をさらに進め、新たな社会課題の解決に向けた新たな高分子多孔体の研究開発に貢献していきたい。

論文・特許

- S. Samitsu, *Macromolecules* **51**, 151-160 (2018).
- S. Samitsu, R. Zhang, X. Peng, M. R. Krishnan, Y. Fujii and I. Ichinose, *Nat. Commun.* **4**, 2653 (2013).
- 特許第5637208号 ネットワーク状高分子ナノファイバー、その製造方法、ガス吸着剤、及びガス分離材

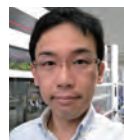
分子化学プログラミングによる高分子の形状と機能の設計

Keywords 精密高分子合成, ラジカル重合, エラストマー, 応答性高分子

主任研究員 / Senior Researcher

中村 泰之 Nakamura Yasuyuki

✉ NAKAMURA.Yasuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakamura_yasuyuki



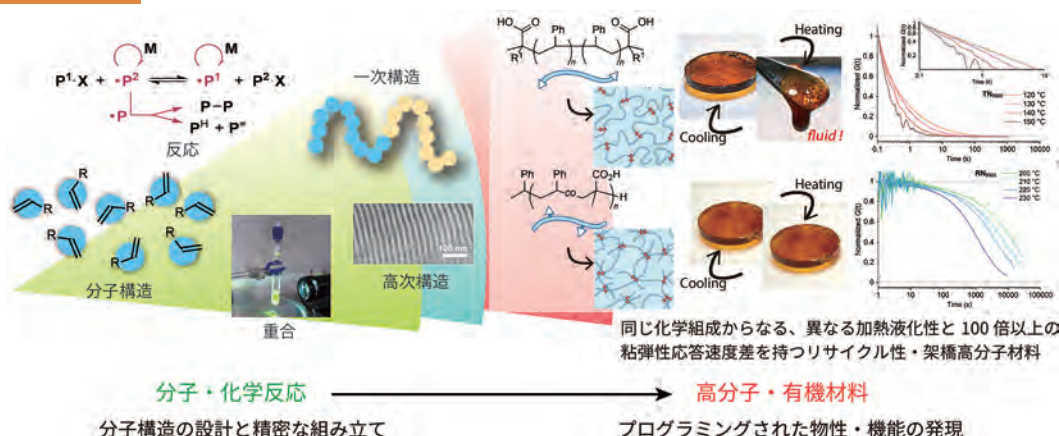
研究概要

高分子材料の物性はモノマーや分子量、架橋など化学的な構造要因で根本的に変化する。さらに制御重合法や高分子反応法の発展により高分子鎖の鎖形状や配列、化学反応の組み込みが、新たな物性設計の軸として加わった。化学合成法を基盤とした精密な高分子の分子構造設計—分子化学プログラミング—を駆使することにより、所望の物性や機能を持つ高分子の設計と合成、高分子合成の効率化、物性やその変化のメカニズムの解明、リサイクル性や分解など社会的課題へ対応する高分子材料に取り組んでいる。

新規性・独創性

- 重合反応メカニズムにもとづいた精密な高分子合成と合成の効率化
- 高分子鎖の構造とダイナミクスにもとづく粘弾性コントロール
- 同一の化学組成でも鎖の構造制御により100倍以上の粘弾性応答速度差
- 高分子の合成研究を加速させるための自動化研究手法

研究内容



制御重合法と選択的な高分子間反応を利用することで、動的共有結合（可逆的な結合生成）性の架橋点を有し、かつポリマー鎖中の架橋点の配置が精密にコントロールされたネットワーク高分子を合成した。動的結合に由来する架橋の可逆性によって3次元ネットワーク構造を保ったまま、加熱と冷却により再成形プロセスや材料リサイクルが可能な流動化と優れた力学特性を有する固体化を自由に变化させることができた。この状態変化の応答速度は高分子の鎖構造や架橋点の配置によって操作することが可能であり、同一の化学組成を持つ高分子から100倍以上の応答速度差を持つ材料を作り分けることもできた。これまでの高分子材料設計の軸であるモノマー化学構造、分子量、架橋といった要素に、鎖の精密構造や化学反応の組み込み、反応点の配置などが高分子材料物性をプログラムするための新しい軸として加えられる。化学合成と鎖構造制御による機能性高分子材料や、ポリマーの化学組成を変えずにより優れた物性を持つ材料を創成することなど、これまでの枠にとらわれない高分子材料開発が可能になると期待される。

まとめ

重合反応など化学合成反応を駆使する高分子の鎖構造設計の精密化が材料物性を大きく変える新たな要素であることを示した。化学反応や反応メカニズムに基づく分子構造設計と、化学組成とは独立している高分子鎖構造設計の両軸は、高機能や持続性など社会を支える高分子材料の開発における基盤技術となる。

論文・特許

- Y. Nakamura, M. Tenjimbayashi, A. Moriya and M. Naito, *Macromol Mater. Eng.* **223**, 2100433 (2022).
- X. Li, T. Ogihara, T. Kato, Y. Nakamura and S. Yamago, *Macromolecules* **54**, 4497-4506 (2021).
- Y. Nakamura, Y. Nakamura, T. Ogihara, S. Hatano, M. Abe and S. Yamago, *Chem. Eur. J.* **23**, 1299-1305 (2017).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

低コストCO₂回収システムの開発

Keywords CO₂吸着材, エラストマー, 深冷分離, 天然ガス開発, バイオガス製造

上席研究員 / Managing Researcher

一ノ瀬 泉 Ichinose Izumi

✉ ICHINOSE.Izumi@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ichinose_izumi



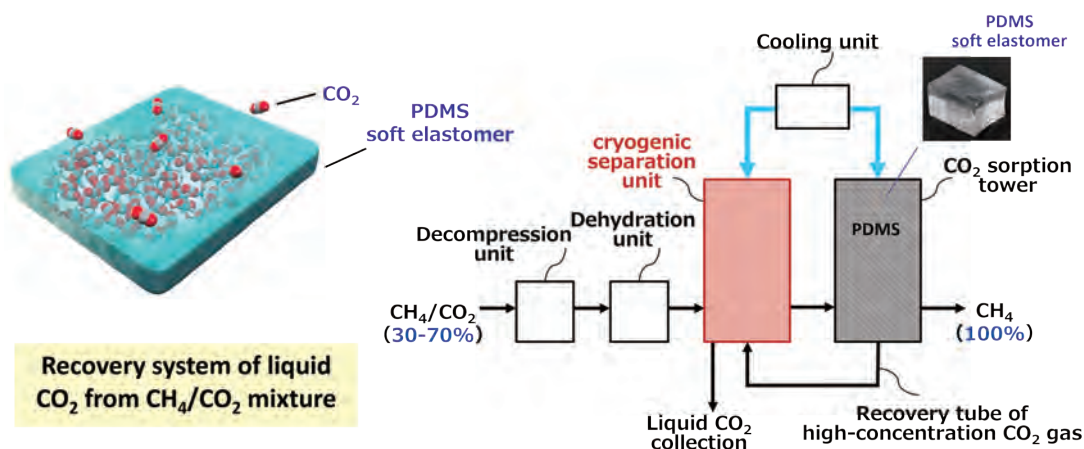
研究概要

経済的に利用可能な低コストCO₂回収技術は、脱炭素社会の実現のために必須となる。輸送や圧入を考えると液状CO₂として回収する必要がある、コストは3,000円/t-CO₂以下が望ましい。天然ガスやバイオガスの生産では、高濃度CO₂を含むCH₄/CO₂混合ガスからCO₂を分離する必要がある、一層の高効率化が求められている。我々は、低温でCO₂を吸脱着する高分子エラストマーを用いて、従来にない高効率CO₂回収システムを開発している。

新規性・独創性

- 低温高圧下での800mg/g程度の大きなCO₂吸着量
- 10kJ/mol以下の弱い吸着エネルギー
- 低温高圧下でCO₂を吸脱着
- 簡易深冷法と組み合わせた液状CO₂の回収
- CH₄ロスがないグリーンなCO₂分離回収技術

研究内容



高濃度のCO₂を含有する天然ガス田では、ガス中のCO₂濃度が30-70%に達する。CO₂は高圧下で冷却すると容易に液化するが、-40℃での蒸気圧が1MPaもある。即ち、10MPa (100気圧)に加圧しても、濃度は10%以下にならない。我々は、簡易深冷装置の後段にCO₂吸着塔を組み合わせることで、混合ガス中のほぼ全てのCO₂を回収することに成功した。この吸着塔は、低温高圧で運転されるが、パウダー状のPDMSソフトエラストマーは、このような環境下での吸脱着に適しており、優れた耐久性も有する。吸着したCO₂は、CH₄と一緒にコンプレッサーで簡易深冷装置に戻される。この循環システムでは、CH₄のロスがなく、吸着材の再生エネルギーが少なく、システム全体でのGHG発生量が小さい。即ち、グリーンなCO₂分離回収技術となる。また、CO₂が液体として回収されるため、輸送や地下への圧入が容易となる。

まとめ

パウダー状のソフトPDMSエラストマーは、低温高圧でのCO₂吸脱着速度が大きく、吸着量も多い。この特性をCO₂液化技術と組み合わせることで、優れたCO₂回収システムが構築できた。今後は、回収システムを大規模化し、バイオガスや天然ガスの生産に活用したい。

論文・特許

- M. Inoue, E. Ismail, S. Samitsu, H. Kanoh and I. Ichinose, *Sep. Purif. Technol.* **306**, 122634 (2023).
- M. Inoue, E. Ismail, S. Samitsu, H. Kanoh and I. Ichinose, *Chem. Lett.* **51**, 1113-1116 (2022).
- 特許第 6202450 号 硬質カーボン膜製N₂又はRO膜、濾過フィルター、2層接合型濾過フィルター及びそれらの製造方法

医療応用のための材料特性評価

Keywords バイオマテリアル, 体内分解性, 疑似組織, 抗菌材料, 抗ウイルス活性, 核酸分解能

上席研究員／Managing Researcher

山本 玲子 Yamamoto Akiko

✉ YAMAMOTO.Akiko@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamamoto_akiko



研究概要

医療応用に際しては、材料の機能性だけでなく生体安全性確認が必須である。多くの材料は体内で分解・腐食等による損傷を生じるため、体内環境における材料の分解性・耐食性評価も重要である。これまで、医療用材料評価の多くは動物を用いた試験により実施されていた。しかし、動物試験結果は必ずしもヒト臨床結果と一致せず、またコストや動物愛護等の問題があるため、世界中で動物試験の削減・代替が進められている。そこで、in vitro（生体外）にて生体内環境を再現することで、より簡便な材料機能性・耐久性評価手法を開発している。研究成果は動物試験の縮小や新規医療材料・治療デバイス開発の低コスト・迅速化に有用である。

新規性・独創性

- ヒト組織環境をin vitroにて再現——低コスト・短期間・高再現性試験法の確立へ
- 開発段階における候補材のスクリーニングに適用——開発期間・コスト低減に貢献
- 体内における材料の分解・腐食損傷機構の解明に寄与
- 医療用途に限らず、材料の安全性/体内分解性評価に適用可能——例えば無機繊維材料の体内溶解性評価など

研究内容

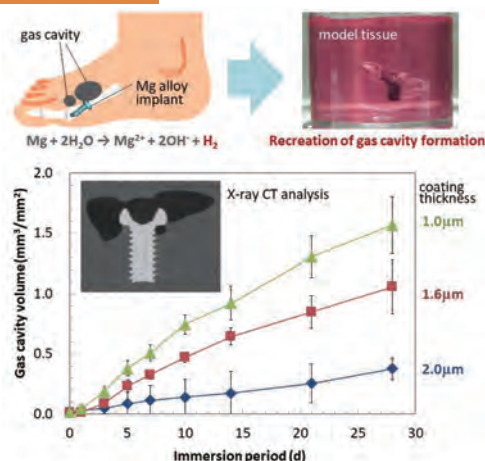


図1 生体吸収性金属材料の疑似組織中浸漬試験結果

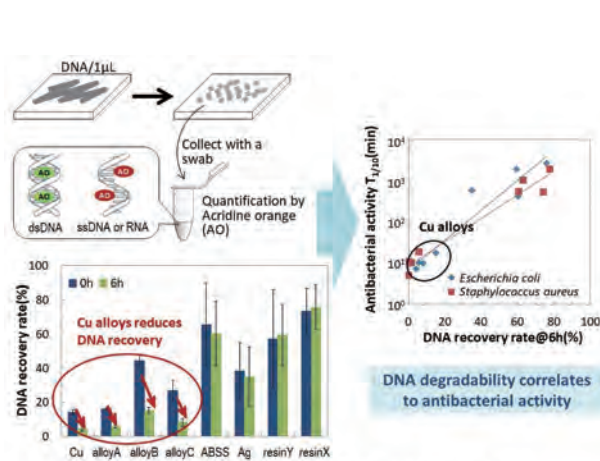


図2 材料表面における核酸分解と抗菌活性

マグネシウム合金スクリューの疑似組織浸漬における空孔形成量を図1に示す。表面処理による腐食抑制に伴い、空孔形成量は低下した。疑似組織の組成制御により生体内の様々な組織を模擬可能であり、in vitroにおいて臨床使用時のリスク評価が可能になる。さらに、疑似体液を用いて肺胞内環境を再現することにより、無機繊維材料の体内溶解性評価にも応用できる。

汎用抗菌材料である銅・銅合金や抗菌ステンレス(ABSS)、銀(Ag)、抗菌樹脂(resin X・Y)表面における核酸分解試験結果を図2に示す。銅・銅合金表面においてのみ、著しい核酸分解を認めた。材料表面の核酸分解能と抗菌活性の間には相関があり、核酸分解能評価により菌を用いずとも環境表面の抗菌活性推定が可能である。

まとめ

- 疑似体液や疑似組織を用い、生体吸収性金属材料や無機繊維材料の生体内腐食・溶解性評価法を開発
- 核酸溶液を用いた環境表面の抗菌・抗ウイルス活性評価法の開発
- 低コスト・迅速・簡便な手法のため、より多くの候補材の評価が可能であり、新規医用材料やデバイス開発の加速に貢献

論文・特許

- A. Yamamoto and A. Kikuta, *ACS Biomater. Sci. Eng.* **8**, 2437–2444 (2022).
- A. Yamamoto, S. Tanaka and K. Ohishi, *Antibiotics* **10**, 1439 (2021).
- 特許第6799854 無機繊維の生体溶解性評価装置および評価方法(2020)

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

マテリアル基盤 研究センター

透過電子顕微鏡法（TEM）による材料評価法の開発と応用

Keywords 透過電子顕微鏡法, 走査透過電子顕微鏡法, 電子エネルギー損失分光法, 結晶構造解析, 化学結合状態解析

センター長 / Director

木本 浩司 Kimoto Koji

✉ KIMOTO.Koji@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/kimoto_koji



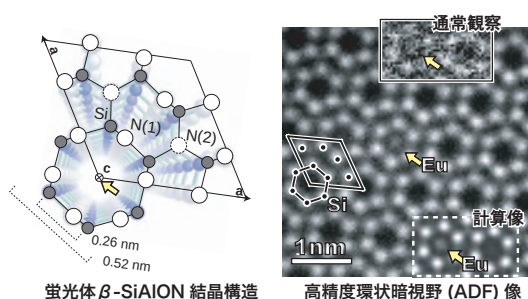
研究概要

透過電子顕微鏡法(TEM)は、極微小領域の拡大像を観察するイメージング、電子回折図形による結晶構造解析、電子エネルギー損失分光法(EELS)などによる元素分析など、様々な微細構造解析が可能である。球面収差補正装置・モノクロメーター・高感度検出器が開発され、原子分解能で評価・分析できるようになった。これまで我々は、高精度/高感度計測のためのTEM手法の開発や、データ解析手法を開発してきた。TEMの各種手法を組み合わせ、特異な物性や優れた性能を実現する微細構造を評価することにより、マテリアル革新力強化に寄与することを目指している。

新規性・独創性

- STEMによる結晶構造観察。特に独自ソフトウェアによる高速多重計測とドリフト補正、高精度・高感度・定量計測。ドーパント検出や、欠陥配列構造の観察、原子位置のピコメートル精度での解析が可能。
- モノクロメーターを用いた低加速高分解能TEMおよび高エネルギー分解能高空間分解能STEM。
- DigitalMicrograph (Gatan Inc.)のscriptingを用いた自動計測手法の開発。例えば、教師無し機械学習(非負値行列因子分解など)による4D-STEM解析など。

研究内容



蛍光体 β -SiAlON 結晶構造

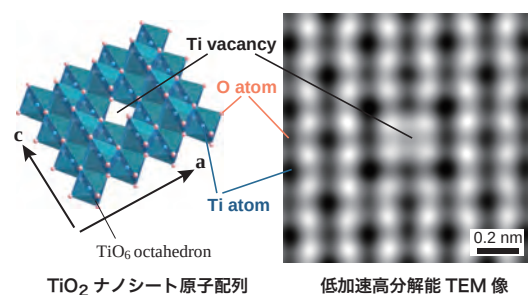
高精度環状暗視野 (ADF) 像

STEMによる高分解能高感度高精度結晶構造観察：NIMSの広崎らにより合成されたEu-doped SiAlON蛍光体において単原子ドーパントがどの結晶サイトにあるのかをSTEMで観察した。通常のTEM像では検出できないが、環状暗視野像で多重計測した高SN比画像ではEu原子を見ることができる。シミュレーションによる解析で、TEM試料膜厚や撮影条件も同じし、Eu単原子ドーパントの位置を決定した。

ADF像を定量計測することにより、原子番号Zに関する情報が得られる。我々は、Zが大きく加速電圧低いと、いわゆる Z^2 則から外れていくことを見出した。シミュレーションと定量比較することにより、ADF像での原子の識別も可能である。

TiO₂ナノシート構造解析と新物質創成：NIMSの佐々木らにより合成されたTiO₂ナノシート中の点欠陥を、TEMおよびSTEMで直接観察した。TEMではモノクロメーターにより色収差を従来の1/10に低減するとともに、球面収差補正により高分解能(1 Å)を実現した。低加速電圧(80kV)化によりダメージを低減し、多重計測によりSN比を向上させた。第一原理計算やシミュレーションを行い、観察された画像がTi点欠陥であることを明らかにした。

さらに、電子線照射により膜構造を保ったままTi₂O₃ナノシートが創成されることもわかった。そのほか4D-STEMによる電子回折と機械学習とを組み合わせ、還元部分のマッピングや、原子分解能STEMによるTi欠陥の観察にも成功している。



TiO₂ ナノシート原子配列

低加速高分解能 TEM 像

まとめ

- STEM/TEM/EELSと独自のデータ取得・解析ソフトウェアなども使い、高精度・高感度に微細構造を解析できる。
- 原子分解能で、ドーパントや欠陥、あるいはピコメートルレベルの原子位置変動を解析できる。
- TEMによる様々な計測法を組み合わせ、材料開発上の問題の解決や、あるいは材料に関する新たな知見を得ることができる。

論文・特許

- 木本浩司, 三石和貴, 三留正則, 原徹, 長井拓郎, 物質・材料研究のための透過電子顕微鏡, 講談社, ISBN 978-4065203866 (2020).
- K. Kimoto, *Microscopy* **63**, 337-344 (2014).
- K. Kimoto, T. Asaka, T. Nagai, M. Saito, Y. Matsui and K. Ishizuka, *Nature* **450**, 702-704 (2007).

電子線パルスを利用したTEM内ナノスケール熱輸送計測法

Keywords 透過電子顕微鏡, 温度計測, 熱伝導率, パルス電子線, 温度波, 熱電対, 熱拡散率, その場観察, TEM, STEM

主幹研究員／Principal Researcher

川本 直幸 Kawamoto Naoyuki

✉ KAWAMOTO.Naoyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawamoto_naoyuki



研究概要

放熱用材料、熱絶縁材料、熱電材料などの高性能化に向けた精密な材料設計やデバイス開発を行うためには、欠陥や界面などの局所領域でフォノンがどのように散乱され、どのくらいの熱抵抗が生じるのかなどを直接観察し、熱輸送時の現象を理解する必要がある。そこで、本研究では、微細構造と同時に熱輸送がナノスケールで直接評価できる透過電子顕微鏡法 (TEM) をベースとした新たな熱輸送評価手法の開発を進めている。特に、電子線をパルス化することで、温度波の位相および振幅解析を基にしたTEM試料の定量的な熱拡散率測定や時間分解的なその場温度波観察手法の開発に注力している。

新規性・独創性

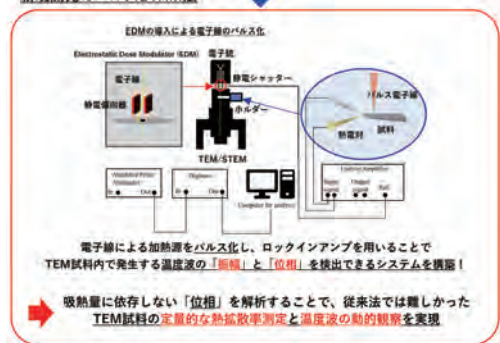
- 10^{-2} Kの高い温度分解能をもつ独自のナノ熱電対による温度変化測定を実現
- STEMによるナノスケール熱走査による所望の領域への熱入力が可能
- ナノスケール温度波を利用した熱拡散率測定の実現
- その場観察による温度波の可視化
- 従来のTEMによる微細構造・導電性・電磁場観察などとの同時測定が可能

研究内容

従来のSTEM-based thermal analytical microscopy (STAM)法



新規開発のパルスSTAM法



本グループが独自に開発を進めてきた従来のSTEM-based thermal analytical microscopy (STAM)法では、収束電子線照射による局所加熱と独自のナノ熱電対を利用した温度計測を組み合わせることで、定常熱伝導状態におけるナノスケール熱輸送評価を実現している。例えば、図に示すような熱伝導性が高いフィラーが低熱伝導性の樹脂中に硬化している放熱用複合材料内において、STAM像 (定常熱伝導状態における試料上の電子線加熱位置に応じた熱電対の温度変化分布像) を得ることができ、その温度勾配を基にした、熱輸送経路の解析が可能である。一方で、本手法では、電子線により入力する熱量が試料厚さや材料に依存しているため、それらを考慮した熱伝導性解析が必須であるなど、いくつかの課題があった。

そこで本研究では、図中の静電シャッターを備えたElectrostatic Dose Modulatorを有する加速電圧が300 kVのTEM内に導入し、電子線をパルス化することで、TEM試料内に温度波を発生させることに成功した。発生させた温度波の検出は、従来のSTAM法で用いたナノ熱電対による温度計測技術を応用することで可能であり、ロックインアンプにより温度波の位相と振幅を記録することで、入力熱量の大きさに影響を受けない位相計測を基にした定量的なTEM試料の熱拡散率測定が可能な新たな熱輸送評価システム (パルスSTAM法) の開発を進めている。本手法により、従来のSTAM法で課題であった、試料厚さや材料の種類に依存する入力熱量を考慮した解析が不要になるだけでなく、様々な材料の定量的な熱拡散率や界面熱抵抗の測定、さらには温度波の動的観察による定常状態における熱の伝わり方の可視化が可能になる。

まとめ

パルス電子線とナノ熱電対を利用した本手法は、温度波の位相評価による定量的な熱拡散率測定や動的な温度波観察が可能になる。本手法を従来のTEMによる微細構造評価手法などと組み合わせることで、熱拡散率や界面熱抵抗などの評価や定常的なナノスケール熱流のその場観察による直感的理解など、熱が関わる各種先端材料や電子・熱デバイスの評価に展開できると考えられる。

論文・特許

- N. Kawamoto, Y. Kakefuda, I. Yamada, J. Yuan, K. Hasegawa, K. Kimoto, T. Hara, M. Mitome, Y. Bando, T. Mori and D. Golberg, *Nano Energy* **52**, 323-328 (2018).
- N. Kawamoto, Y. Kakefuda, T. Mori, K. Hirose, M. Mitome, Y. Bando and D. Golberg, *Nanotechnology* **26**, 465705 (2015).
- 特許第6164735号 微小熱伝導率測定装置及び測定方法

電子エネルギー損失分光の計測技術開発と応用

Keywords 電子エネルギー損失分光 (EELS), 走査型透過電子顕微鏡法 (STEM), 格子振動, ギャップ内準位

主幹研究員 / Principal Researcher

吉川 純 Kikkawa Jun

✉ KIKKAWA.Jun@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kikkawa_jun



研究概要

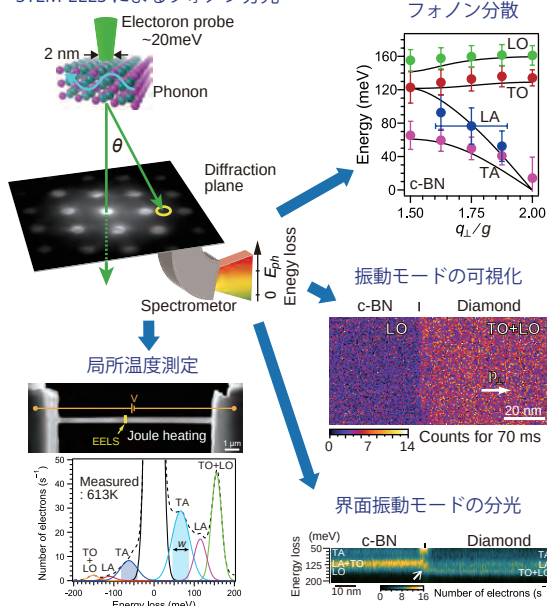
ナノメートル分解能での諸物性を高精度に計測する技術が求められている。赤外領域に現れる諸物性をナノメートル分解能で計測できる技術として、超高エネルギー分解能 ($\sim 20\text{meV}$) の電子エネルギー損失分光法 (EELS) と走査型透過電子顕微鏡法 (STEM) を組み合わせた STEM-EELS の技術開発と計測応用を進めている。

新規性・独創性

- 超高エネルギー分解能 ($\sim 20\text{ meV}$) で赤外領域の計測が可能
- EELS で温度をナノメートル分解能で測る技術
- EELS でギャップ内準位をナノメートル分解能で測る技術
- EELS で有機材料 (電子線に弱い材料) を測る技術

研究内容

STEM-EELS によるフォノン分光



STEM-EELSで超高エネルギー分解能 ($\sim 20\text{ meV}$)、位置分解能 ($\sim 1\text{ nm}$)、波数分解能 ($\sim 3\text{ nm}^{-1}$) を両立することで、赤外領域の物性をナノメートル分解能で計測できる。例えば、熱物性を決める格子振動 (フォノン) に関して、(1) 角度 θ 分解によるフォノン分散計測、(2) フォノンの強度や振動モードのマッピング、(3) 界面に局在する振動モードの検出、(4) フォノン分光に基づく温度測定、などの技術を確認してきた。電子デバイス等の熱制御が重要な課題となってきたなかで、これらの成果は今後STEM-EELSがナノスケール熱解析ツールとして使える可能性を示すものである。超高エネルギー分解能は可視領域や紫外領域の計測においても有利であり、民間企業との共同研究を通してギャップ内準位のナノメートル分解能計測にも取り組んだ。一方で、電子線に弱くて計測が難しいとされてきた有機材料に対しても、低電子線量かつ低ノイズ・高感度検出での計測技術の確立を進めている。

まとめ

- 赤外領域、可視領域、紫外領域のナノメートル分解能での物性計測ができる。
- フォノン分光によるナノメートル分解能での温度測定ができる。
- 有機材料 (電子線に弱い材料) への計測応用を進める。

論文・特許

- J. Kikkawa, and K. Kimoto, *Phys. Rev. B* **106**, 195431 (2022).
- J. Kikkawa, T. Taniguchi and K. Kimoto, *Phys. Rev. B* **104**, L201402 (2021).
- T. Asano, M. Tezura, M. Saitoh, H. Tanaka, J. Kikkawa and K. Kimoto, *Appl. Phys. Express* **15**, 076501 (2022).

電子顕微鏡による映像分子科学および分子集合体科学の展開

Keywords 電子顕微鏡, 映像分子科学, 分子集合体, 単分子観察, その場観察, ナノ薄膜

主幹研究員／Principal Researcher

原野 幸治 Harano Koji

✉ HARANO.Koji@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/harano_koji



研究概要

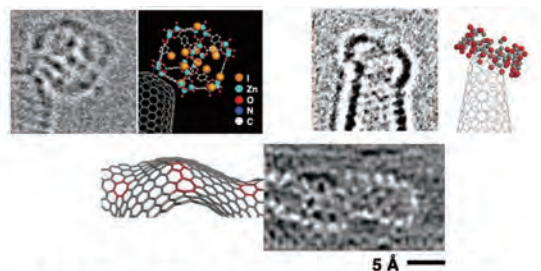
分子集合体、有機・錯体結晶、高分子などの分子性材料の電子顕微鏡観察においては、電子線照射による試料損傷が高分解能イメージングの妨げとなっている。本研究では、独自開発した電子顕微鏡試料作製手法および高速電子顕微鏡動画撮影・解析技術に基づき、単一分子や分子集合体の構造を原子分解能で明らかにし、さらに化学反応や構造変換など分子が関わる動的過程をリアルタイム映像として記録する「映像分子科学」研究を展開している。また、これらの研究で培った電顕技術を活かし、分子とマクロを繋ぐナノ、メゾ領域の階層的分子集合機構の理解に基づく、ナノ薄膜などの機能性分子集合体材料の開発を行っている。

新規性・独創性

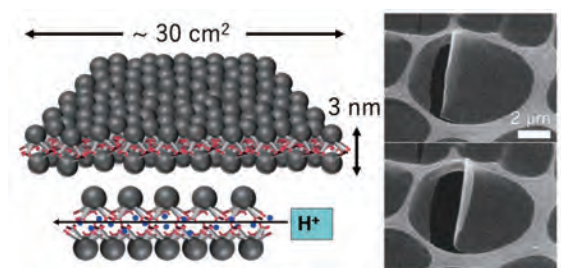
- 単一分子の構造およびその時間変化を原子分解能映像として記録
- 電子線損傷に弱い有機・高分子試料の高分解能イメージング
- 複雑な化学反応を単分子レベルで可視化、反応機構の解明
- 炭素材料、金属有機構造体などの形成過程における中間体の逐次構造解析
- 極薄かつ柔軟な構造を有する分子集合性自立型ナノ薄膜の合成と応用

研究内容

単分子原子分解能時間分解電子顕微鏡法(SMART-EM)は、カーボンナノチューブやグラフェン等の低次元材料に孤立化して担持した観察対象分子を透過電子顕微鏡(TEM)と高速撮像素子を用いて動画撮影するイメージング手法である。原子分解能の映像として分子の時間変化を追跡できる本手法は、複雑な有機分子や分子集合体の三次元構造変換や、熱や電子線によって誘起される化学反応を映像として与え、バルク分析では得られない個々の分子の振る舞いの統計データとして様々な化学現象を解析することができる。また、分析電子顕微鏡を用いた単分子レベルの元素組成や電子状態の分析にも取り組んでいる。



有機分子・分子集合体・高分子の原子分解能動画撮影



柔軟かつ安定なナノ膜厚フラーレン二分子膜の開発

電子顕微鏡による構造観察・動画撮影と材料合成を融合した機能性材料開発研究も推進している。一例として、気液界面を分子集合の場として用いることで、水素結合性部位を導入した[60]フラーレン分子からなる二分子膜の合成に成功している。この膜は数十平方センチメートルにわたって3ナノメートルの均一な膜構造を保ち、自立膜として単離可能という特長がある。また、膜内部に形成された親水性空間を介した高速プロトン伝導を示す。電子顕微鏡観察によって、柔軟な非晶質構造であること、また電子線照射に応答した可逆なアクチュエータ様挙動を示すことも見いだしており、イオン伝導体やセンシング材料、電子顕微鏡試料担体としての応用が期待される。

まとめ

- 分子科学と電子顕微鏡科学の融合によりこれまで困難とされてきた有機分子・高分子材料の高分解能イメージングを実現
- 材料の分子レベルの構造情報およびダイナミクスを材料設計へとフィードバックすることでより高機能な材料の開発へと展開
- 今後、観察対象を触媒反応やイオン輸送などへと拡張し分析手法としての応用用途を拡大

論文・特許

- T. Ishikawa, F. Tanaka, K. Kurushima, A. Yasuhara, R. Sagawa, T. Fujita, R. Yonesaki, K. Iseki, K. Harano, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **145**, 12244-12254 (2023).
- T. Shimizu, D. Lungerich, K. Harano and E. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 9797-9805 (2022).
- P. Ravat, H. Uchida, R. Sekine, K. Kamei, A. Yamamoto, O. Konovalov, M. Tanaka, T. Yamada, K. Harano and E. Nakamura, *Adv. Mater.* **34**, 2106465 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

LaB₆ ナノワイヤ冷電界放出による新世代電子顕微鏡

Keywords LaB₆, ナノテクノロジー, 電子源, 冷電界放出, 電子顕微鏡, SEM, TEM, 半導体検測

主任研究員 / Senior Researcher

張 晗 Zhang Han

✉ ZHANG.Han@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/zhang_han



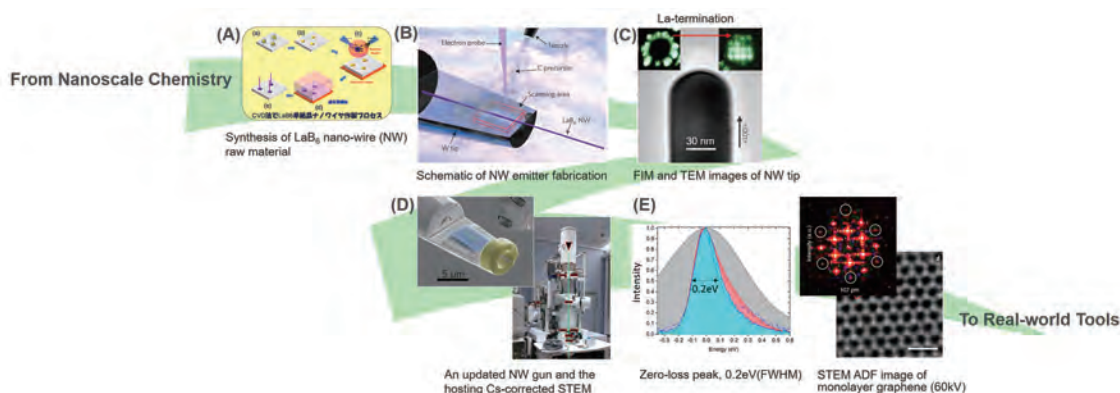
Research Summary

Cold field emission (CFE) produces the brightest and the most monochromatic electron beam. Such electron beam is highly demanded in application of electron microscopy for use in material research, pharmaceutical discovery and semiconductor manufacturing. For a long time, wide application of CFE was hindered because it suffers from emission instability in conventional vacuum condition. We produced nanowires of LaB₆ material one out of 100 billion size of a conventional electron emitter. The combination of low work function and nanometric size produced an emission brightness 100 times higher and stability 10 times better than conventional electron sources. Wide application of LaB₆ nanowire CFE has been realized from compact tabletop SEMs to atomic-resolution aberration-corrected TEMs.

Novelty / Originality

1. LaB₆ nanowires are synthesized as single crystalline without defects or impurity;
2. We developed nano-manipulation method to assemble single-nanowire emitter with high speed and high quality;
3. LaB₆ nanowire emitter produced electron beam with energy spread of 0.2eV;
4. Brightness is 100 times higher than state-of-the-art Tungsten single crystal cold field emitter;
5. No emission decay and probe current noise lower than 1% under vacuum of 1E-7Pa, which is 1000 times higher than that required by Tungsten CFE;
6. Extraction voltage of ~200V is enough to generate high density electron emission. (Tungsten: ~3000V)

Research Contents



We first used a chemical vapor deposition method to synthesize large quantity of LaB₆ nanowires on a catalyzed substrate. (A) A single nanowire was picked up and assembled into a nanowire electron emitter using nano-manipulation method (B) A special field evaporation method was used to form a clean and La atom terminated surface on the nanowire tip to enable stable high brightness electron emission. (C) Such an emitter was then installed into commercial electron microscopes to improve both energy and spatial resolution. (D) Using the nanowire emitter, we showed 0.2eV energy spread shown in the zero-loss peak of EELS and single atom resolution in STEM. (E)

Summary

Recently, material research and semiconductor manufacturing both approached precision of 1nm. As the eye of industry, electron microscopy with high resolution is increasingly demanded. The high brightness, monochromaticity and endurance of the LaB₆ nanowire emitter not only enhances resolution of the current electron microscope tools, but also lead to invention of new generation electron microscopes of more compact design, lower equipment cost and faster analysis speed.

References

- H. Zhang, Y. Jimbo, A. Niwata, A. Ikeda, A. Yasuhara, C. Ovidiu, K. Kimoto, T. Kasaya, H. T. Miyazaki, N. Tsujii, *et al.*, *Nat. Nanotech.* **17**, 21-26 (2022).
- H. Zhang, J. Tang, J. Yuan, Y. Yamauchi, Taku T. Suzuki, N. Shinya, K. Nakajima and L. C. Qin, *Nat. Nanotech.* **11**, 273-279 (2016).
- 特許第 5660564 号 希土類六ホウ化物冷陰極電界放出型電子源

Novel microscopy techniques for advanced characterization

Keywords Electric field mapping, Nanoscale temperature distribution, Thermal vibration mode imaging

主任研究員／Senior Researcher

コレツ オヴィヂュ Cretu Ovidiu

✉ CRETU.Ovidiu@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/cretu_ovidiu



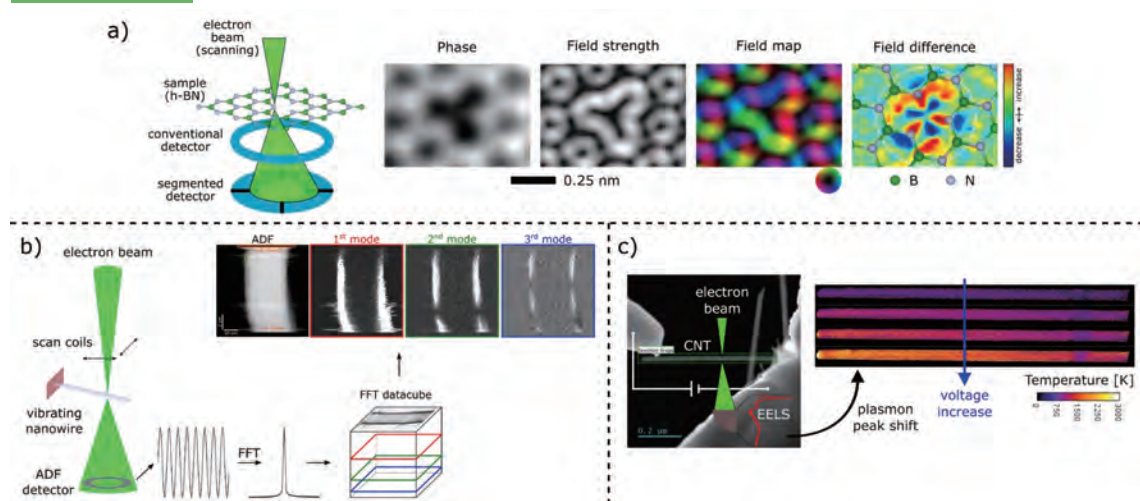
Research Summary

Our aim is to extend the range of information that can be obtained by transmission electron microscopy (TEM) by developing new analysis methods. By combining these new techniques with the already impressive capabilities of modern TEMs, we can measure material properties which are not accessible by any other methods. This furthers our understanding of the advanced materials investigated and provides feedback towards improving their performance.

Novelty / Originality

- Atomic-resolution measurement of the distribution of electric fields around defects in 2-D materials
- Direct observation of the thermal vibration modes of individual nanowires
- Nanometer-scale temperature mapping of in-situ Joule-heated carbon nanotubes

Research Contents



(a) By introducing new hardware and custom-developed software, we were able to build a multi-dimension data acquisition system which allows characterizing the electrostatic properties of materials. (b) With the addition of a high-speed data acquisition interface, we were able to acquire signals in the MHz range and thus measure the vibration properties of nanomaterials and directly observe their vibration modes. (c) By carefully measuring changes in the plasmon energy, we could determine the temperature distribution of individual carbon nanotubes, while heating them to the limit of their stability at over 2000K.

Summary

The current research offers new critical information:

- About the properties of defects in 2D materials, which influence their electrical performance and damage mechanism.
- About the vibration properties of nanowires, towards their use as resonators or electron sources.
- About the thermal strength of carbon nanotubes under electrical load, as ultimate interconnects.

References

- O. Cretu, D. Tang, D. Lu, B. Da, Y. Nemoto, N. Kawamoto, M. Mitome, Z. Ding and K. Kimoto, *Carbon* **201**, 1025-1029 (2023).
- O. Cretu, H. Zhang and K. Kimoto, *Nano Lett.* **22**, 10034-10039 (2022).
- O. Cretu, A. Ishizuka, K. Yanagisawa, K. Ishizuka and K. Kimoto, *ACS Nano* **15**, 5316-5321 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高バネ・バイオ材料

マテリアル基盤

電子線タイコグラフィーによる環境関連材料の観察

Keywords 電子顕微鏡法, 4DSTEM, タイコグラフィー, 位相計測

グループリーダー / Group Leader

三石 和貴 Mitsuiishi Kazutaka

✉ MITSUIISHI.Kazutaka@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mitsuiishi_kazutaka



研究概要

近年の環境問題の高まりに関連し、2次電池材料や触媒などの高性能化が求められています。これら環境関連材料の開発では、材料の構造を様々な手法を用いて明らかにし、その特性との関連を明らかにすることが必要です。電子顕微鏡は原子レベルでの構造評価を行う事ができ、非常に有効な手段ではありますが、これら環境関連材料は電子線照射に弱い材料が多く、その観察は容易ではありません。本研究では細く収束した電子線をスキャンし、得られるすべてのスキャン点からの回折図形を処理する4DSTEMと呼ばれる手法を用い、環境材料に適用することでその有効性を検証しました。

新規性・独創性

- 通常の100分の1の電子線照射量での高分解能観察が可能に
- 電子線で容易に壊れてしまうゼオライトの高分解能観察を実現
- ゼオライト中添加された金属元素の単原子レベル解析に成功

研究内容

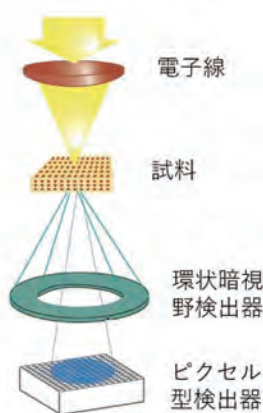


図1 4DSTEM計測の模式図

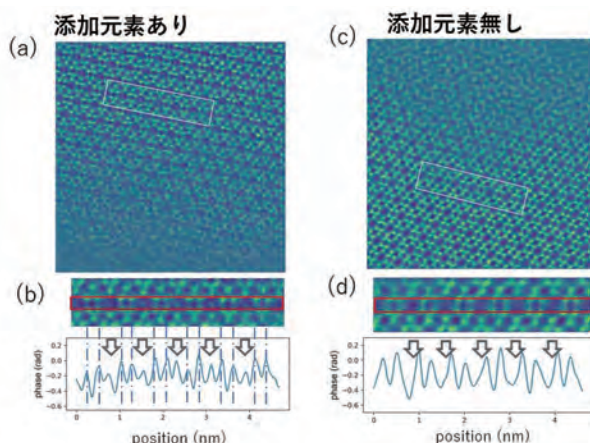


図2 ゼオライト中の微量添加金属原子の観察例

現在、電子顕微鏡での高分解能像の取得には、細く収束した電子線を用いて試料上をスキャンし散乱してくる電子を環状の検出器で捉えて像を作る環状暗視野走査透過電子顕微鏡法が主に用いられています。近年、ピクセル型検出器の性能向上により、スキャンの際の各点からの回折図形を非常に高速に取得することが可能となってきました（図1）。この得られた大量データを処理することで、これまでより遥かに少ない電子線量での高分解能観察が可能となり、ダメージを受けやすい材料の観察が可能となりました。図2はこの手法で得られたゼオライト中の微量添加元素の観察例です。ゼオライトの構造を壊すことなく、内部の添加元素を明瞭に捉えることに成功しています。

まとめ

スキャン各点からの回折図形を集めた4次元データには、これまで捨てられていた多くの情報が含まれており、その処理手法を今後も継続検討していくことでより多くの情報をより少ない電子線量で得る手法を開発し、これまで観察の難しかった材料への適用や、さまざまなその場観察への適用を進めてまいります。

論文・特許

- K. Mitsuiishi, K. Nakazawa, R. Sagawa, M. Shimizu, H. Matsumoto, H. Shima and T. Takewaki, *Sci. Rep.* **13**, 316 (2023).
- K. Nakazawa and K. Mitsuiishi, *Microscopy*, dfad006 (2023).
- 三石 和貴, 中澤 克昭, 溝口 照康, 佐川 隆亮, 山崎 裕一, *顕微鏡* 31-37 (2021).

液中試料のその場高分解能電子顕微鏡観察技術の開発

Keywords 液体セル, 透過型電子顕微鏡(TEM), 液中観察, 高分解能観察

主席研究員 / Chief Researcher

竹口 雅樹 Takeguchi Masaki

✉ TAKEGUCHI.Masaki@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/takeguchi_masaki



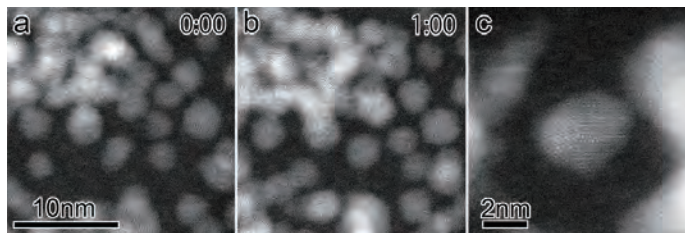
研究概要

液中試料のTEM観察技術が普及し始めているが、液体セルの隔膜や溶液自身の散乱の影響による低コントラスト化や電子線による溶液の放射線分解の影響などのため、高分解能TEM観察は容易ではない。また市販の液体セルTEMホルダーでは、研究対象に応じた液体TEM観察実験のためのカスタマイズが容易ではない。本研究では電気化学反応やソフトマテリアル観察など、対象に応じた様々な液体セル開発および低ドーズレートでの高倍率観察のための技術開発、それらを駆使した実働環境材料評価の応用研究を行っている。

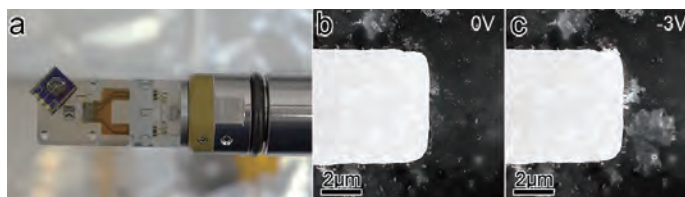
新規性・独創性

- 大収束角ビームによる3D-STEM効果を利用した液体セル内試料の高コントラスト化
- STEMイメージングによる低ドーズレート観察
- 各種液体セルの開発による様々な応用研究

研究内容



水中のPtナノ粒子の凝集過程をHAADF-STEM観察した結果である。(b)は(a)の1分後であり、Ptナノ粒子が徐々に凝集していることがわかる。(c)は別の視野における2つの粒子が合体した直後のPtナノ粒子であり、粒子は[111]面で優先的に合体するなどの過程をとらえている。本技術によって液中の試料の動的過程を原子分解能で観察可能であることを実証した。



(a)は開発した電気化学セルTEMホルダーである。これを用いて ZnSO_4 の電気分解反応をその場観察した。(b)から(c)は電極へ-3V印加した時のZnデンドライト形成を示している。電気化学反応時における構造変化や組成変化のその場観察が可能であることを実証した。

まとめ

- 各種電池材料や水素製造触媒材料の動作時における現象を高分解能でとらえることが可能となる。
- 生体材料の実際の環境での形態・構造や生体材料と薬剤の相互作用の様子を高分解能でとらえることが可能となる。

論文・特許

- M. Takeguchi, X. Li and K. Mitsuishi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, SD1021 (2022).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

水素センサーの開発と吸着を経た吸蔵の理論モデル

Keywords 水素センサー, 吸着と吸蔵, 水素吸蔵膜, MSS

主幹研究員 / Principal Researcher

矢ヶ部 太郎 Yakabe Taro

✉ YAKABE.Taro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/yakabe_taro



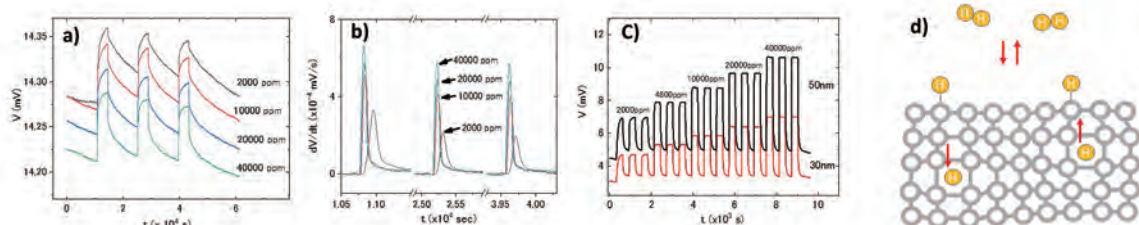
研究概要

クリーンなエネルギーキャリアとして水素利用が広がっており、安全な利用のため低コストな水素センサー開発も重要な研究課題となっている。我々は膜型表面応力センサー (MSS) と水素吸蔵膜を組み合わせた水素センサーを研究している。高感度かつ希少金属の省資源化も期待できる水素センサーを実現できた。

新規性・独創性

- MSSを利用することで非常に高感度なセンサーの設計が可能
- 感応膜を非常に薄く設計でき、希少金属の利用を低減可能
- 吸着を経た吸蔵過程を使った速度論モデルで理論的で定量的な解釈が可能

研究内容



水素が感応膜中へ吸蔵されると格子が広がることにより応力が発生する。その応力を膜型表面応力センサーにて感知する。水素の分圧により吸蔵膜の応力が異なることで、水素濃度に応じた信号を検知できる。感応膜をPdとした時の水素濃度0.2%(2000ppm)から4%(40000ppm)に対する応答を図中のa)に示す。Pdは水素吸蔵の際に飽和まで達する時間が非常に長いことが知られている物質であるが、この実験でも飽和まで90分程度は必要である。ところがこれを数値微分すると (図b)、100秒程度で最大値を示す。吸蔵速度に着目することで、吸蔵に時間がかかるPdでも判定時間の短縮が可能であることがわかる。また、感応膜をPdCuSiとした場合の結果が図cである。Pdが感応膜の場合と比較して、同一濃度の信号量は大きくなり、飽和までの時間は数秒となる。信号量が大きいため同じベースラインをとることができ、この場合は微分を使わずとも直接信号量参照値として利用できる。また、これらの水素の濃度と信号強度の関係については吸着を経た吸蔵過程を反応速度論モデルにより評価することで定量的に取り扱える。この理論は低濃度極限において水素吸蔵の際によく現れるジューペルト則を含む理論となっている。

まとめ

膜型表面応力センサー (MSS) を応用することにより高感度な水素センサーとして利用可能であることを示した。環境温度など利用環境により感応膜を最適化する必要があり、今後の課題の一つである。一方でMSSは感応膜を自由に選ぶことができ、同時に多チャンネル測定も可能であることから、複数種のガスに対応するセンサー開発も可能である。信号値評価のための理論モデルも開発できた。

論文・特許

- T. Yakabe, G. Imamura, G. Yoshikawa, N. Miyauchi, M. Kitajima and A. N. Itakura, *Sci. Rep.* **11**, 18836 (2021).
- T. Yakabe, G. Imamura, G. Yoshikawa, M. Kitajima and A. N. Itakura, *J. Phys. Commun.* **4**, 025005 (2020).
- WO2020179400 水素センサー及び水素検出方法

試料ホルダーを用いたその場TEM観察

Keywords 透過型電子顕微鏡, その場観察, 触媒

主幹研究員／Principal Researcher

橋本 綾子 Hashimoto Ayako

✉ HASHIMOTO.Ayako@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/hashimoto_ayako



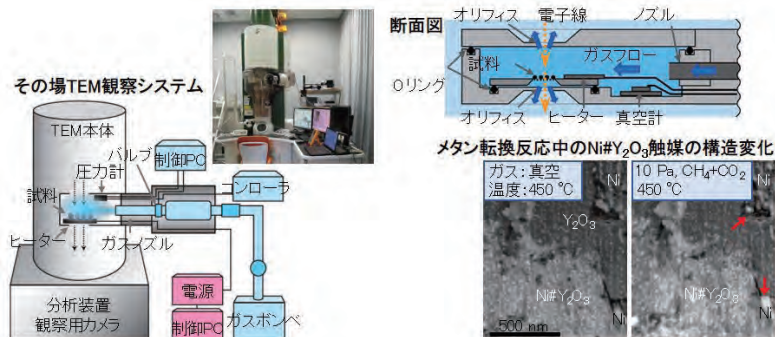
研究概要

透過型電子顕微鏡(TEM)は原子レベルで材料の構造や挙動を観察・分析できる観察手法である。しかし、TEMの観察環境(真空、室温)は、材料の実働環境とは乖離しているため、その場TEM観察技術が必要である。例えば、環境・エネルギー問題の解決策としても注目される触媒は、ガス雰囲気、高温下で使用されることが多い。そこで、触媒材料のその場観察への応用に向けて、TEM試料ホルダーを用いたその場観察システムを開発した。試料ホルダーはTEM本体とは独立しているため、対象に合わせたカスタマイズや改良が容易である。本システムとTEMの観察・分析手法の併用により、触媒を多角的に観察・計測することを目指す。

新規性・独創性

- 差動排気機構をTEM試料ホルダーに搭載
- 試料ホルダーを利用するので、既存のTEMを使用可
- 隔膜がないので、電子エネルギー損失分光(EELS)やホログラフィーに有利

研究内容



開発した触媒観察用その場TEM試料ホルダーは、20Paのガス雰囲気、1000℃までの試料を加熱しながら観察ができる。また、TEMや走査TEM(STEM)観察、電子線回折法だけでなく、EELSやホログラフィーによる分析・解析も行える。これを用いて、触媒を観察した。例えば、NIMSで開発した二相(Ni触媒とY₂O₃担体)がひも状に絡み合う「根留触媒」Ni#Y₂O₃は、メタン転換を長時間持続させる触媒である。その要因を調べるために、その場STEM観察・EELS分析を行った。通常のNi触媒粒子と異なり、反応中も根留触媒は構造的にも、化学的にも安定なことが判明し、長時間反応が持続する要因を明らかにした。

まとめ

ガス雰囲気下で、加熱しながら試料を観察できるその場TEM観察システムを開発した。触媒材料の観察に向けたものであるが、金属、セラミックス材料の観察にも応用できると考える。ガス中の加熱だけでなく、ガス中の電気測定、観察中のガス種の交換等への展開も可能で、今後、応用範囲を拡大していきたい。

論文・特許

- A. Hashimoto, Y. Han, H. Akimoto, R. Hozumi and M. Takeguchi, *Microscopy* **70**, 545-549 (2021).
- A. Hashimoto, (eds. W.Y. Teoh, A. Urakawa, *et al.*), *Heterogeneous Catalysts: Advanced Design, Characterization and Applications*, WILEY-VCH, 253-262, (2021).
- S. Shoji, X. Peng, T. Imai, P. S. M. Kumar, K. Higuchi, Y. Yamamoto, T. Tokunaga, S. Arai, S. Ueda, A. Hashimoto, *et al.*, *Chem. Sci.* **10**, 3701-3705 (2019).

顕微表面化学分析およびそのデータフォーマットの標準化

Keywords 表面化学分析, 走査型プローブ顕微鏡 (SPM), イメージング, データフォーマット, 国際標準化

主任研究員 / Senior Researcher

大西 桂子 Onishi Keiko

✉ ONISHI.Keiko@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/onishi_keiko



研究概要

材料開発には、様々な分析装置、特に顕微表面化学分析によるナノスケールで場所を特定した解析結果の比較が不可欠である。比較のためには、同じ名称の測定値が同じものを指しているか、測定方法は同じか、試料の前処理方法は同じか、あるいは異なるならどのように異なるか、などが重要である。また、大量のデータを比較するには、人間の目ではなく自動的に同一箇所データを抽出して比較できる必要がある。自動比較には、データフォーマットが同一であることも必要となる。表面化学分析の国際標準化はISO/TC 201で、国内での標準化はJISとして行われており、ISO国内審議団体やJIS作成委員会の委員としてこれらの標準化活動を行っている。

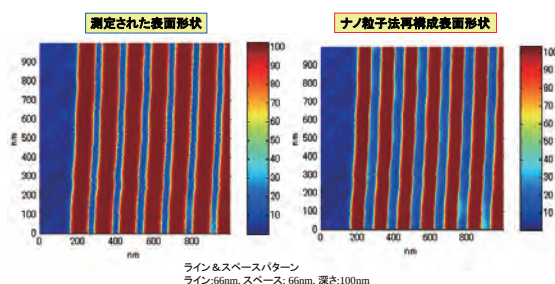
新規性・独創性

- 比較、自動化、機械学習に利用可能な、用語・手順等の標準化
- 機械可読でかつ人間にもわかりやすいデータフォーマット
- 国際的な協力体制

研究内容

原子間力顕微鏡の高さ像は試料表面の3次元形状を表していると考えられているが、実際の観察像は有限の大きさを持つ探針先端形状によって拡張されたものであり、探針先端形状から観察像をより正しい試料表面の3次元形状に再構成するためのガイドラインが我々の提案により国際規格 (ISO 23729: 2022) として発行された。さらに、様々な探針先端形状の推測方法を検討している。

SPMの一種であるケルビンプローブフォース顕微鏡 (KPFM) は探針と試料表面の接触電位差をナノスケールで測定できるが、正確な測定のためには適切な標準試料の選定等が不可欠であり、ガイドラインの提案が採択され、国際規格を作成中である。



材料開発には、顕微表面化学分析装置によるナノスケールでの同一箇所解析が不可欠である。しかし、複数装置の出力から同一箇所の情報を自動抽出することは難しく、画像を人間の目で比較し場所を特定しているのが現状である。ある装置の座標系での位置情報と別の装置の装置の座標系との関係が決定できれば、異なる座標系で同一位置を指定することが可能となる。また、データの自動比較にはデータフォーマットが同一である必要がある。我々が日本から提案したSPM標準フォーマットが国際規格 (ISO 28600: 2011) として発行されている。また、共通位置合わせの国内規格 (JIS K 0199: 2022) が発行され、共通データフォーマットのJIS規格も審議中である。

日本産業規格

JIS
K 0199 : 2022

異なる顕微測定装置間における同一箇所分析のための位置合わせ手順

Guideline for alignment procedure for identical location analysis
between different microscopic measuring instruments

1 適用範囲

この規格は、複数の異なる顕微測定装置で同一試料を測定する際の、試料の同一箇所を分析するための手順について規定する。

まとめ

- 表面化学分析、特に走査型プローブ顕微鏡の様々な材料評価技術、用語、データの共通化・標準化に貢献
- 計算科学や情報科学を利用して材料開発をスピードアップさせるマテリアルインフォマティクスに必要な不可欠な標準化
- JISやISOなどの規格は普及し利用されてこそ価値があるため、普及させることがこれからの課題

論文・特許

- 大西 桂子, 顕微鏡 **48**, 154-158 (2013).
- K. Onishi and D. Fujita, *Anal Sci* **27**, 157-161 (2011).
- K. Onishi and D. Fujita, *J. Vac. Soc. Jpn.* **53**, 357-360 (2010).

レーザー加熱方式超高温透過型電子顕微鏡ホルダーの開発

Keywords 透過型電子顕微鏡, その場観察, レーザー加熱, 高熔点耐火金属炭化物, 超高温

主任研究員 / Senior Researcher

三井 正 Mitsui Tadashi

✉ MITSUI.Tadashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/mitsui_tadashi



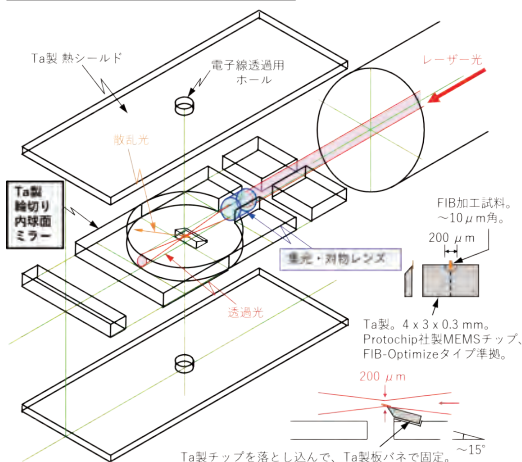
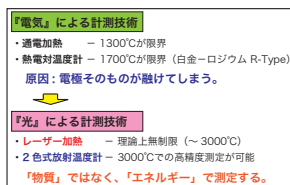
研究概要

極超音速 高高度旅客機（スペースプレーン）のスクラムジェットエンジンの内部は最大2327℃に達するとされ、革新的な耐熱素材の開発が必要とされている。その際、その場(In-situ)透過型電子顕微鏡(TEM)観察法を用いた材料組織の原子レベルの観察・分析は非常に有用である。しかしながら、現在、一般に販売されている加熱実験用TEMホルダーは通電加熱方式が主流であるため、電極の耐久性の限界から1300℃が上限となっている。そこで本研究では、レーザー加熱方式を採用することで2000℃を超える超高温環境下における再現性の高い、その場TEM観察を実現し、超高温耐熱材料の開発に寄与することを目的とする。

新規性・独創性

- 鉄の熔点1538℃を超える超高温環境下でのTEMその場観察
- 内部に光ファイバーを用いないレンズ光学系のみで構成されるレーザー加熱装置が持つ高い耐久性と再現性
- 2色式放射温度計を同軸光学系に組み込むことで実現した正確な試料温度測定(～3000℃)

研究内容



材料の耐熱強度や機械的強度、耐腐食性等の物理特性を明らかにし、劣化を抑制するための開発を行う上で、材料を実際に使用する環境(実働環境)をTEMの内部に再現し、材料組織の原子レベルの観察・分析を行うことは非常に有用である。しかしながら、現在の最新型の加熱実験用TEMホルダーでも1300℃程度が上限となっている。さらに温度計測法についても制約があり1700℃が上限である。これらは、電極そのものが融けてしまう、という宿命に起因しており、その解決には、『光』を用いた測定に転換する必要がある。本研究では、精密な計算機シミュレーションを用いてTEMホルダーの細いパイプ内部にレンズ光学系のみで構成されるレーザー加熱装置の設計を行い、その実証試験を行った。本研究で開発する装置は、2色式放射温度計を用いることで3000℃における正確な温度測定が可能になっているが、そこで使用する誘電体多層膜光学フィルタの波長特性の影響を最小限にとどめるための詳細な設計と確認実験も行っている。試料ホルダーの先端部は近年の精密加工技術を用いてタンタル(熔点2985℃)で作られた内球面ミラーを用いて光を再集光し、高効率なレーザー加熱ができるようになっている。これを用いて、耐熱材料や切削工具材料に用いられる高熔点耐火金属の炭化物(タンタルカーバイド、タングステンカーバイド等)のガスアトマイズ法(直径20μm程度の微粒子による粉末冶金)による生成過程、及び劣化過程をTEM中で再現し、観察できるようになると考えられる。

まとめ

革新的な耐熱素材の開発のために、一般に販売されている加熱実験用TEMホルダーでは未踏領域である2000℃を超える超高温環境下での再現性の高い、その場観察を行うための装置の設計と開発を行っている。タンタルカーバイドやタングステンカーバイド等の生成過程、及び劣化過程をTEM中で再現し、観察することで、その性能向上に貢献できると考えられる。

論文・特許

- T. Mitsui, N. Ishikawa and M. Takeguchi, *Rev. Sci. Instrum.* **92**, 095103 (2021).
- S. Yagyu, T. Mitsui, T. Chikyow and T. Nagata, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **1**, 192-199 (2021).
- T. Mitsui, Y. Wakayama, T. Onodera, T. Hayashi, N. Ikeda, Y. Sugimoto, T. Takamasu and H. Oikawa, *Adv. Mater.* **22**, 3022-3026 (2010).

格子欠陥と相変態を活かした機能創発とそのイメージング

Keywords 格子欠陥, 相変態, 機能性材料, 透過型電子顕微鏡, 電子線ホログラフィー

独立研究者 / Independent Scientist

新津 甲大 Niitsu Kodai

✉ NIITSU.Kodai@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/niitsu_kodai



研究概要

結晶内に導入される格子欠陥の近傍では弾性場の変調をもたらすことはもとより、電子状態を変化させることにより電磁気物性をはじめとする多様な物性に変化をもたらす。即ち、欠陥の多くは弾性場が揃った強弾性(Ferroelastic)状態であると同時に、電磁気物性や導電性、スピン分布、光・熱応答などがマトリックスのそれとは異なる状態が達成しうる領域であると言える。さらに結晶にはない欠陥特有の「狭所性(低次元性)」「可動性」といった特徴は、欠陥同士の相互作用や欠陥-マトリックス間の相互作用において幾何の自由度をもたらすため、結晶体の物性相関では考えられないユニークでダイナミカルな幾何に基づく交差相関の概念が生まれると考えた。局在物性に着目し、結晶と欠陥間の物性相互作用および欠陥の幾何特性を活かすことでこれまでにない物性応答の創発とその起源探索のための実空間イメージングに取り組む。

新規性・独創性

- 格子欠陥の局在物性を起源とするバルク巨大応答
- 低次元・狭所領域に拘束された磁気構造の実空間イメージング
- 格子欠陥を活かす材料設計

研究内容



結晶の変形下では格子欠陥が動的に生成・活動するため、欠陥に局在する物性秩序も付随して移動すると考えられる。欠陥に内在する諸物性にまで視野を広げると強化理論の枠組みはより一般化・体系化された形で説明されると考えられ、欠陥内在の弾性場-諸物性秩序間の物性相関をプラットフォームとし、欠陥という幾何学的制約が生む自由度(幾何相関)が欠陥独自の相互作用の多様性が加わると考えられる。物性と幾何という2つの相関から構成され、弾性場以外の秩序因子を組み込むことで機能性探索空間の拡大とその体系的理解を目指す。さらに電子線ホログラフィー法をはじめとする透過型電子顕微鏡法を駆使することで、局在領域での物性相互作用およびその幾何条件についての解明に取り組む。

弾性場以外の物性相互作用による巨大応答を示すバルク力学機能の創発とより一般化された材料強化学理の構築が期待される。

まとめ

格子欠陥のローカルな物性研究からバルクの新たな機能性の開拓へとより奥行き深い研究領域への展開を図る。忌避されがちな格子欠陥を「活かす」材料設計が可能となり、従来の材料では実現困難な特長(強指向性・空間局在性など)を持つ機能性や逆相関に相当する「応力誘起の物性応答」の創発を含む「欠陥物性を基軸とする多様な機能性」への展開を目指す。

論文・特許

- K. Niitsu, Y. Liu, A. C. Booth, X. Yu, N. Mathur, M. J. Stolt, D. Shindo, S. Jin, J. Zang, N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nat. Mater.* **21**, 305-310 (2022).
- K. Niitsu, Y. Kimura, T. Omori and R. Kainuma, *NPG Asia Mater.* **10**, e457-e457 (2018).
- Y. Murakami, K. Niitsu, T. Tanigaki, R. Kainuma, H. S. Park and D. Shindo, *Nat. Commun.* **5**, 4133 (2014).

走査型プローブ顕微鏡を用いた表面化学

Keywords 表面合成, 炭素ナノ構造体, 原子間力顕微鏡, 走査型トンネル顕微鏡, 単分子

グループリーダー / Group Leader

川井 茂樹 Kawai Shigeki

✉ KAWAI.Shigeki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kawai_shigeki



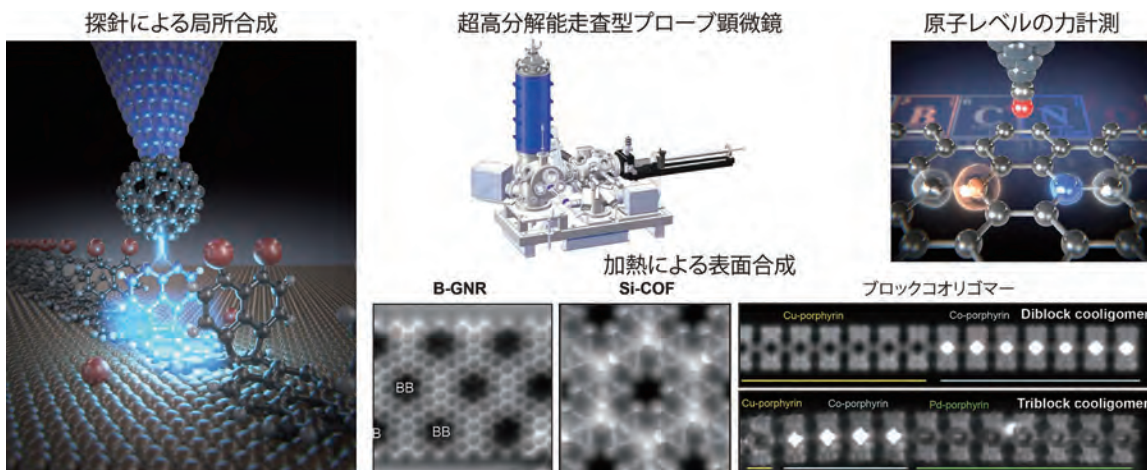
研究概要

将来のナノエレクトロニクス・量子デバイスを担う材料として、バンドギャップやスピンを有する炭素ナノ構造体の自在合成が求められる。そのために分子の構造を自在に操ることができる表面合成の展開が必要である。これまでに、超高分解能の走査型プローブ顕微鏡を用いて、表面での化学反応の開発、生成物の構造同定、電気・機械特性の計測などを進めて来た。本研究を更に展開して、より多彩な構造の炭素ナノ構造体のボトムアップ合成や磁性機能の探索に加えて、これらの研究を支えるプローブ顕微鏡の開発などを行う。

新規性・独創性

- プローブ顕微鏡を用いた単分子の超高分解能解析
- 小分子を用いた炭素ナノ構造体の表面合成
- 探針を用いた分子の任意合成

研究内容



近年の走査型プローブ顕微鏡の計測技術の向上により、直接的な分子の構造解析ができるようになった。これにより、単分子レベルの化学が創生された。表面に蒸着させた小分子を加熱することで、それらを一つのパーツと見なしたボトムアップ合成で多彩な炭素ナノ構造体ができるようになった。これらの構造体は将来のナノエレクトロニクス・スピントロニクスに展開できるものである。さらに、探針を用いて分子の構造を直接的に変化させることで、有機合成では実現が困難な分子の合成もできるようになり、その特異な分子の物性も計測できるようになった。今後は、プローブ顕微鏡を用いた表面化学を更に展開させ、炭素ナノ構造体の自在合成と磁性機能などの創出が可能になると期待される。

まとめ

走査型プローブ顕微鏡を用いて、単分子レベルの化学を研究できることを実証した。また、さまざまな炭素ナノ構造体も合成することに成功した。これらのナノ材料の物性を計測して機能を創出することで、次世代のデバイスに向けた素子の開発に寄与できるものと期待される。

論文・特許

- K. Sun, O. J. Silveira, Y. Ma, Y. Hasegawa, M. Matsumoto, S. Kera, O. Krejčí, A. S. Foster and S. Kawai, *Nat. Chem.* **15**, 136-142 (2023).
- S. Kawai, O. Krejčí, T. Nishiuchi, K. Sahara, T. Kodama, R. Pawlak, E. Meyer, T. Kubo and A. S. Foster, *Sci. Adv.* **6**, eaay8913 (2020).
- S. Kawai, A. Benassi, E. Gnecchi, H. Söde, R. Pawlak, X. Feng, K. Müllen, D. Passerone, C. A. Pignedoli, P. Ruffieux, R. Fasel, *et al.*, *Science* **351**, 957-961 (2016).

走査型トンネル顕微鏡による原子分解能表面電子状態計測

Keywords STM, STS, 原子分解能, 分光, 強磁場, 金属, 半導体, トポロジカル絶縁体, 二次元物質, 単分子

主幹研究員／Principal Researcher

鷲坂 恵介 Sagisaka Keisuke

✉ SAGISAKA.Keisuke@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/sagisaka_keisuke



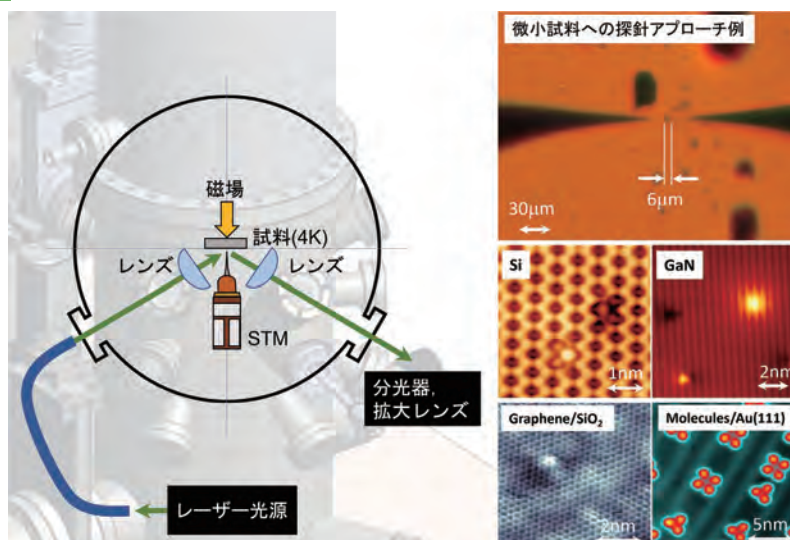
研究概要

環境・資源・エネルギー課題を解決するための物質・材料研究において、原子・分子レベルでの特性制御と計測の重要性はますます高まっている。固体表面の原子・分子を実空間で観察可能な走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy: STM)は電子状態計測と原子・分子操作の機能を備えた強力な研究ツールである。我々のSTM装置では、磁場印加や光照射に対する材料表面の量子状態の応答検出や、ラマン分光やフォトルミネッセンス(PL)によるナノスケールの分光測定を実施することができる。

新規性・独創性

STMでは先鋭な金属探針で表面をなぞるように電子状態測定を行う。従来、不可能であった10 μ m程度の微小試料への探針アプローチが可能となり、微細加工した試料や試作段階の微小試料にも適応することが出来るようになった。また、1pA以下の極微電流を検出することで、STM計測の多結晶試料への展開も進めている。

研究内容



STMは右図に示すように、導電性物質表面の形状や電子状態を原子分解能で測定可能な計測法である。左図に示す装置では、超高真空・低温チャンパー内のSTMヘッドの探針近傍に光学レンズを装備することで、微小試料の観察やラマン散乱光の集光が可能となっている。これにより、従来の原子・分子分解能測定機能に加え、右図の微小試料への探針アプローチの例に示すように約6 μ mの遷移金属カルコゲナイド試料の測定に成功している。このような測定機能を有するSTM装置は、試作段階の微小試料や電極形成や微細加工を施した二次元物質などのデバイス試料の電子状態計測への応用が考えられる。

まとめ

- 半導体、トポロジカル絶縁体、遷移金属カルコゲナイド、磁性薄膜等の新規電子デバイス材料へ適用可能な原子分解能電子状態計測技術
 - トンネル分光とラマン分光・PLを組み合わせた複合分光技術による半導体中の欠陥や単分子研究を可能とする計測技術
- これらの計測技術の高度化を目指すとともに、材料の実用化に活用される基礎データの提供を行う。

論文・特許

- K. Sagisaka, T. Kusawake, D. Bowler and S. Ohno, *J. Phys.: Cond. Matter.* **35**, 135001 (2023).
- W. Nakanishi, Y. Matsushita, M. Takeuchi and K. Sagisaka, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25**, 13702-13707 (2023).
- K. Sagisaka, O. Custance, N. Ishida, T. Nakamura and Y. Koide, *Phys. Rev. B* **106**, 115309 (2022).

ナノスケール電位計測技術を用いた機能性材料・デバイスの評価

Keywords 電位計測, ケルビンプローブフォース顕微鏡 (KPFM), オペランド計測, 太陽電池, 全固体リチウムイオン電池

主幹研究員 / Principal Researcher

石田 暢之 Ishida Nobuyuki

✉ ISHIDA.Nobuyuki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ishida_nobuyuki



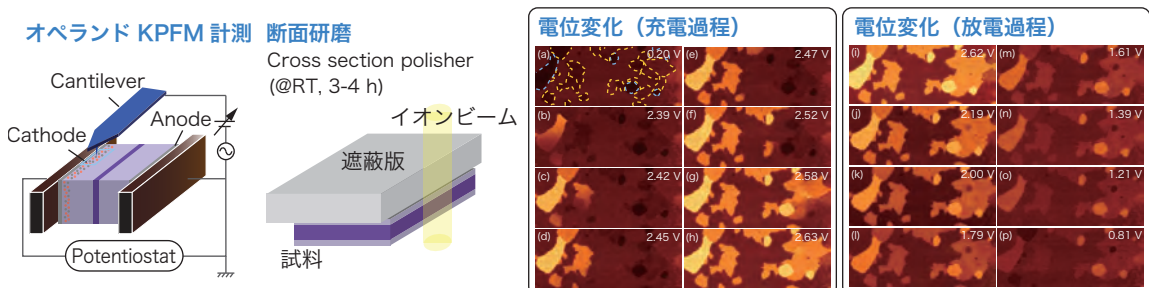
研究概要

材料やデバイス中の電位分布は電子やイオンなどのキャリア挙動を制御する重要な物理量である。そのため、デバイス動作下における内部電位の計測から、デバイス動作原理説明に資する重要な知見を得ることができる。我々は走査型プローブ顕微鏡技術(主にケルビンプローブフォース顕微鏡 (KPFM))を用いて高い空間分解能・時間分解能を有した電位計測技術を開発し、太陽電池などの半導体デバイスや全固体リチウムイオン電池をはじめとするイオン伝導体の評価へ応用している。これにより、微視的な視点からデバイス動作原理を理解し、新しいデバイス設計指針を得ることを研究の目的としている。

新規性・独創性

- 10nm程度の空間分解能を有した電位計測
- オペランド計測を行うため、様々な環境場で動作する測定系を構築
- オペランド計測によって得られるミクロな物性変化を、マクロなデバイス特性と直接比較し解析
- 周波数応答計測による局所インピーダンスの計測

研究内容



不活性雰囲気や電圧印可状態、光照射下などで動作可能なKPFM測定系を構築し、蓄電池や太陽電池などの評価へ応用した。全固体リチウムイオン電池の評価では、イオンミリングにより電池性能を保った状態で断面加工を行い、電池内部をその断面に露出させる手法を開発した。これにより、充放電に伴う複合電極中の内部電位の変化を明瞭に可視化することに成功した。その結果、上図に示す通り、充電反応は集電体側から負極側へ不均一に進行していくのに対し、放電反応は複合正極全体で均一に進むことが分かった。このような反応機構の違いは従来の電気化学計測から解明することは難しい。このように電極内の充放電反応機構の微視的理解が進むことで、デバイス性能向上に資する新たなデバイス設計指針の獲得につながると期待される。また、開発した手法は、電池性能の劣化解析や充放電に寄与しない活物質の可視化など、様々な電池評価技術へと応用が可能である。

これまでに、同様の手法をペロブスカイト太陽電池、量子井戸太陽電池、GaN p-n接合など様々なデバイス評価へと応用している。また、通常の電位計測に加えて、電位の周波数応答を計測することで局所インピーダンスを計測する手法を開発し、電池材料(イオン伝導帯材料)の評価へと応用している。

まとめ

デバイス動作下における電位計測から、デバイス内部のキャリアの挙動を解析するための重要な知見が得られることを実証した。得られた情報を、マクロなデバイス特性と比較することで、デバイス動作原理の理解が進み、新たなデバイス設計指針の獲得につながる。これは試行錯誤の材料・デバイス開発を脱却し、物理・化学的知見に根ざした機能設計・制御を行うための重要な手段となり得る。

論文・特許

- N. Ishida, *J. Phys. Chem. C* **126**, 17627-17634 (2022).
- H. Masuda, K. Matsushita, D. Ito, D. Fujita and N. Ishida, *Commun. Chem.* **2** (2019).
- M. Cai, N. Ishida, X. Li, X. Yang, T. Noda, Y. Wu, F. Xie, H. Naito, D. Fujita and L. Han, *Joule* **2**, 296-306 (2018).

極低温走査型トンネル顕微鏡による量子材料研究

Keywords 量子材料, 走査型トンネル顕微鏡 (STM), 極低温, 高磁場, 計測技術, 解析技術

主任研究員 / Senior Researcher

吉澤 俊介 Yoshizawa Shunsuke

✉ YOSHIKAWA.Shunsuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshizawa_shunsuke



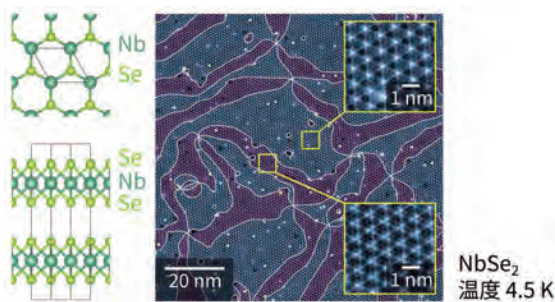
研究概要

既存材料で実現不可能な新しい機能の探索と将来的な量子デバイスへの応用を見据え、量子材料の研究が世界的に推進されている。超伝導現象をはじめとして多くの量子現象は極低温で顕著になるので、量子材料研究には極低温における電子状態の解明が不可欠である。とくに物質表面の電子状態を原子空間分解能で可視化できる走査型トンネル顕微鏡 (STM) への期待は大きい。われわれはNIMSの有する高性能極低温STMを駆使し、独自の測定・解析技術を開発しながら、様々な量子材料の電子状態計測と新奇現象探索に取り組んでいる。

新規性・独創性

- 温度 0.4 K、磁場 16 T の極限環境での測定が可能な STM システム
- STM を使って精度の良いデータを得るための測定技術開発
- STM データから埋もれた情報を抽出するための解析手法の開発

研究内容



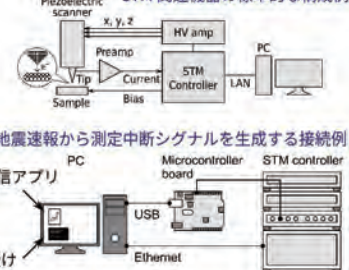
遷移金属ダイカルコゲナイド NbSe_2 は層状構造を持つ2次元性の強い物質で、超伝導 (転移温度約 7 K) と電荷密度波 (結晶格子の3倍周期の電荷密度変調、転移温度約 30 K) という異なる秩序状態が共存する物質として知られる。最近この物質の電荷密度波状態がドメインを構成していることが報告されたが、その構造が未解明だった。われわれはSTMデータを元にそのドメイン構造を原子レベルで可視化する手法を提案し、2種類のドメインが作る特徴的なパターンを明らかにした。この研究は長周期構造を示す様々な量子材料の物性評価に活用できる可能性がある。

STM は原理的に振動に弱く、日本では地震が深刻な問題となる。一般に装置全体を防振台に乗せるといった振動対策は取られるが、地震の震度によっては減衰が十分でない場合も多い。そこで、気象庁が発表する緊急地震速報 (「予報」と呼ばれる比較的規模の小さな地震に対しても発表されるもの) を受信して地震対策に利用した。「予報」に含まれる震源やマグニチュードなどの情報をもとに実験室における震度を推定し、その値に応じて自動で測定を中断し、安全な状態で地震動をやり過ごす仕組みを構築した。

緊急地震速報 (予報) から得られる情報の例

```
{
  "type": "eqw",
  "time": "165380732000",
  "report": "1",
  "epicenter": "茨城県沖",
  "depth": "50km",
  "magnitude": 5.7,
  "latitude": 36.3,
  "longitude": 141,
  "intensity": "4",
  "index": 4
}
```

STM 関連機器の標準的な構成例



まとめ

- 遷移金属ダイカルコゲナイドの他にも鉄系超伝導体、トポロジカル絶縁体、熱電材料などで共同研究を進めており、極低温・高磁場を生かした測定で成果が出つつある。
- ナノスケールで行う電子状態計測を物質開発にフィードバックすることで実用量子材料開発に貢献したい。
- 現状、超高真空中で成膜・清浄化できる物質が劣限により平坦な表面が得られる物質に測定対象が限定されているが、今後はより幅広い物質の測定にも取り組みたい。

論文・特許

- 吉澤 俊介, 表面と真空 **66**, 46-51 (2023).

ボトムアップ的2次元・3次元ナノ材料創成と機能開拓

Keywords 機能性材料, ナノ材料, 有機デバイス, 薄膜, 有機合成, 表面化学合成, 自己組織化

主任研究員 / Senior Researcher

林 宏暢 Hayashi Hironobu

✉ HAYASHI.Hironobu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hayashi_hironobu



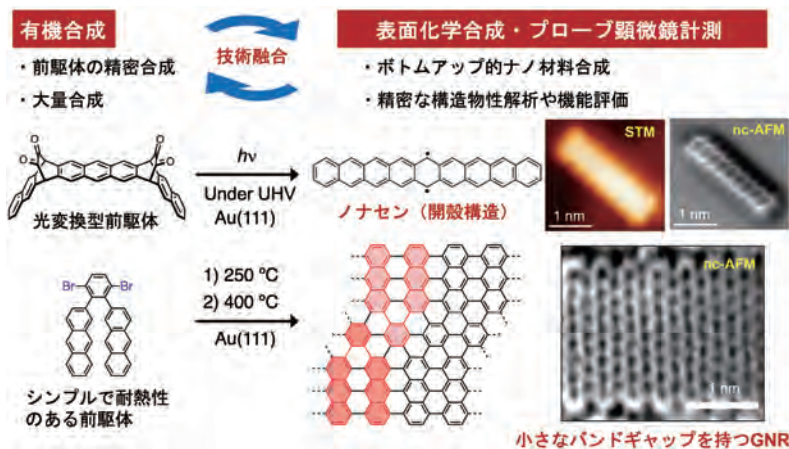
研究概要

有機分子からボトムアップ的に構成されるナノ材料は、構造に応じて物性制御でき、様々な用途への応用が期待される。先進的ナノ材料創出には、その迅速合成と精密構造物性解析、原料設計へのフィードバックの効率的循環が必須である。表面化学合成は優れたボトムアップ的ナノ材料合成法であり、プローブ顕微鏡計測は精密構造解析やナノ材料1個体が示す物性評価をも可能とする。NIMSでは、プローブ顕微鏡計測・表面化学合成法と、有機合成による独自前駆体作製との融合により、先進的2次元・3次元ナノ材料の創出を行う。また、実デバイスへの展開を見据え、表面化学合成により導かれたナノ材料を、有機合成を用いた大量合成へとフィードバックする。

新規性・独創性

- 有機合成により精密合成された前駆体を用いた2次元・3次元ナノ材料創出
- 有機合成と表面化学合成の技術融合による効率的ナノ材料探索
- 最先端プローブ顕微鏡計測による原子レベルでの精密構造物性解析
- ナノ材料1個体における機能評価

研究内容



優れた電荷輸送特性を示し、ナノカーボン材料の合成・物性とも大きな関連を持つ、高次アセンの合成法を開拓した。有機合成による適切な前駆体作製と、表面化学合成や最先端プローブ顕微鏡計測の利用により、ノナセンや含窒素ウンデカセンの合成と、それらの基底状態における開設シグレット構造を実験的に証明した。この際、単結晶金属表面での特異反応を発見し、表面化学合成を利用した斬新なナノ材料創成につながる成果を得た。さらに、表面化学合成で得た知見を発展させ、単結晶内部での高次アセン合成を実現した。また、簡便な合成ルート・安定性、表面化学反応メカニズムを考慮して設計した高次アセンを原料とし、シリコンよりも小さなバンドギャップ(0.6eV)を持つGNR合成を実現した。最近、高次アセン骨格へ折れ曲がり構造を導入し、興味深い集積構造や光学特性を示す環状分子を開発した。今後はこの成果を、2次元ナノ材料であるポーラスナノシート創成へと展開する。さらにプローブ顕微鏡計測による構造・物性評価により、様々な応用展開に繋がるナノシート設計にフィードバックする。本研究で開発する材料は、半導体関連材料・電極材料や機能性薄膜材料などへの応用が期待される。

まとめ

有機合成技術による独自分子作製は、プローブ顕微鏡計測やプローブ探針による局所化学反応などに対し相補的な関係にあり、これらの融合は新材料創成の大きな原動力となることを実証した。より積極的で質の高い融合研究推進により、デバイス応用・社会実装を見据えた先進的2次元・3次元ナノ材料の効率的探索に貢献できると期待される。

論文・特許

- K. Eimre, J. I. Urgel, H. Hayashi, M. D. Giovannantonio, P. Ruffieux, S. Sato, S. Otomo, Y. S. Chan, N. Aratani, *et al.*, *Nat. Commun.* **13**, 511 (2022).
- J. Yamaguchi, H. Hayashi, H. Jippo, A. Shiotari, M. Ohtomo, M. Sakakura, N. Hieda, N. Aratani, M. Ohfuchi, Y. Sugimoto, *et al.*, *Commun. Mater.* **1**, 36 (2020).
- Y. S. Chan, H. Hayashi, S. Sato, S. Kasahara, K. Matsuo, N. Aratani and H. Yamada, *Eur. J. Org. Chem.* e202200621 (2022).

High-resolution scanning probe microscopy applied to technologically relevant materials

Keywords Scanning tunneling microscopy, Atomic force microscopy, Ultra-high vacuum, Atomic resolution, Metal oxide surfaces, Molecular surface chemistry

上席研究員 / Managing Researcher

クスタンセ オスカル Custance Oscar

✉ CUSTANCE.Oscar@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/custance_oscar



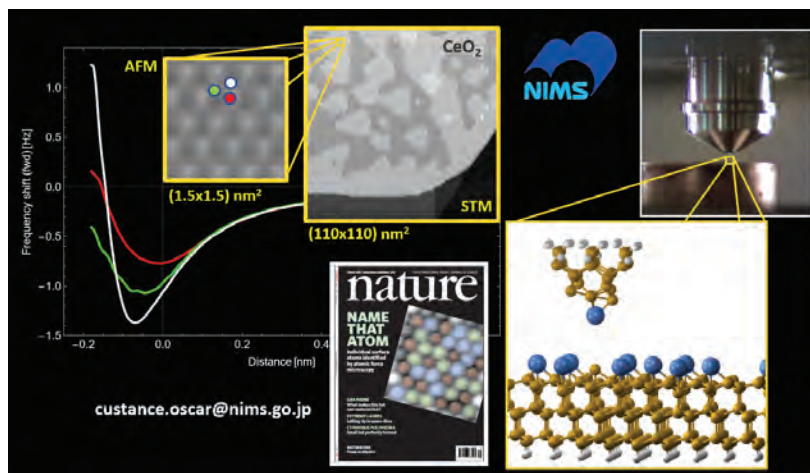
Research Summary

- Fundamental studies on single-atom catalysis on wide band-gap metal oxide surfaces using atomic force microscopy.
- Fundamental studies on atomic defects and adsorbates at on technological semiconductor substrates using scanning probe microscopy
- Study of surface chemical reactions of organic molecules using scanning probe microscopy

Novelty / Originality

- Sub-molecular and atomic resolution on insulating and wide band-gap substrates with high-resolution atomic force microscopy
- Combination of simultaneous scanning tunneling microscopy and atomic force microscopy for an unambiguous identification of molecules and atoms
- High-resolution scanning tunneling spectroscopy for the study of single spins and surface electronic properties of materials
- High-resolution atomic force microscopy for the characterization of interatomic forces and local reactivity of surfaces

Research Contents



We apply state-of-the-art scanning probe microscopy techniques to study single-atom catalysis. We try to clarify fundamental properties of transition metals dispersed on oxide supports and to understand how the interaction with the substrate modify their reactivity with different molecular species for hydrogen production and other energy sources. We also simultaneously combine scanning tunneling microscopy and atomic force microscopy to study chemical reactions of organic molecules at surfaces.

Summary

Our research approach bears potential to find combinations of materials for enhancing the production of hydrogen and methanol, as well as to find novel approaches to produce chemical reactions of organic compounds that only occur in the presence of the reactants at surfaces.

References

- O. Stetsovych, M. Todorović, T. K. Shimizu, C. Moreno, J. W. Ryan, C. P. León, K. Sagisaka, E. Palomares, V. Matolín, D. Fujita and R. Perez, *Nat. Commun.* **6**, 7265 (2015).
- O. Custance, R. Perez and S. Morita, *Nat. Nanotech.* **4**, 803-810 (2009).
- Y. Sugimoto, P. Pou, O. Custance, P. Jelinek, M. Abe, R. Perez and S. Morita, *Science* **322**, 413-417 (2008).

光照射NMR測定技術の開発と応用

Keywords 核磁気共鳴, in-situ NMR, 超偏極, 量子計測, 量子情報処理

グループリーダー / Group Leader

後藤 敦 Goto Atsushi

✉ GOTO.Atsushi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/goto_atsushi



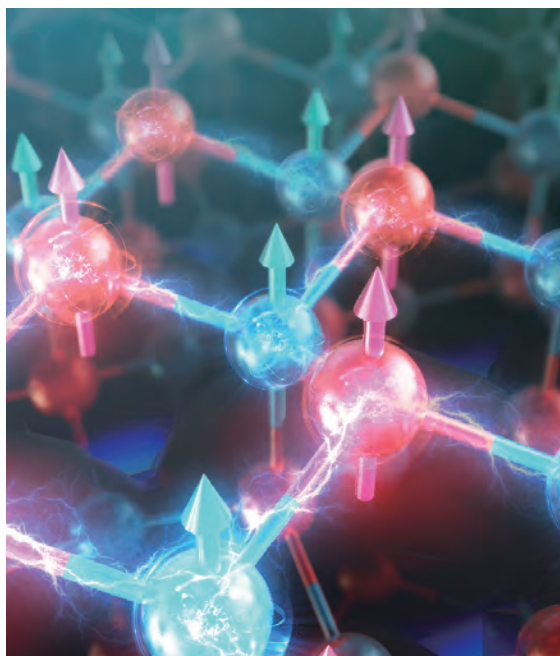
研究概要

環境・エネルギー問題に貢献する技術には、光触媒や太陽電池など、固体表面における光効果を利用しているものが多いが、それらを直接観測できる技術は限られている。本研究では、現代の主要分析手法の一つである核磁気共鳴 (NMR) 分析を光照射下で実現する技術を開発するとともに、その技術を用いることで、光により誘起される様々な現象のNMRその場 (in-situ) 観測を進めている。また、本技術を半導体に適用すると、光ポンピング効果により核スピンの偏極状態 (超偏極) が生成され、NMRの感度が数桁向上する。この技術は、超高感度NMR技術として半導体ヘテロ界面の分析に利用できるほか、量子情報処理への展開も期待される。

新規性・独創性

- 光照射がもたらす様々な現象の分析にNMRが利用可能となり、光が関係するグリーン・イノベーション技術の開発に貢献。
- 光誘起相転移など、固体物理学における課題の解明にも貢献。
- 光ポンピングNMR技術は、半導体のNMR分析のほか、固体NMR量子計算機の開発にも貢献が期待される。

研究内容



【技術開発】

本技術における主な開発要素は、励起光をその光源から超伝導磁石内にある試料位置まで導光する光照射システムと、極低温から室温までの広い温度領域での測定に対応する測定プローブである。前者では、紫外から近赤外までの広い波長範囲に対応するため、チタンサファイアレーザーや各種半導体レーザーを光源に用い、さらに、偏波保持光ファイバーを導光に用いることで励起光の偏光性の制御を実現した。また、後者では、測定プローブをクライオスタット内に設置し、伝導冷却方式において試料の効率的な冷却を実現した。これによりクライオスタット内を真空状態に保てるため、従来のガスフロー方式で問題となるヘリウムガス中での高周波放電を完全に抑止することに成功した。

【応用例】

本技術の応用として、NMR量子計算機への展開例を示す。NMR量子計算機は、量子計算研究の黎明期より開発が進められている有望な手法の一つであるが、初期化と量子ゲートの実現が課題となっている。このうち、初期化に必要な「超偏極」は光ポンピング法を用いることで半導体内に生成できるが、量子ゲートで必要となる「核スピン間相互作用の制御技術」が見つかっていなかった。本技術により、半導体内では光照射により核スピン相互作用の制御が可能であることが示された [1,2] (図は、光照射により相互作用が発生する様子を示した想像図)。

まとめ

- 光照射下でNMR測定を実現する技術を開発。光照射により誘起される様々な現象の機構解明に貢献。
- 特徴：偏光性が制御された幅広い波長域の励起光が利用可能。室温から極低温までの広い温度領域に対応。
- 応用例：光触媒や光誘起相転移現象のNMRその場測定、半導体における核スピンの超偏極および光制御など。

論文・特許

- A. Goto, K. Hashi, S. Ohki and T. Shimizu, *NPJ Quantum Inf.* **8**, 59 (2022).
- A. Goto, S. Ohki, K. Hashi and T. Shimizu, *Nat. Commun.* **2**, 378 (2011).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

量子状態選別分子ビームによる触媒反応解析

Keywords 触媒材料, 表面反応, 分子配向, スピン

主席研究員 / Chief Researcher

倉橋 光紀 Kurahashi Mitsunori

✉ KURAHASHI.Mitsunori@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kurahashi_mitsunori



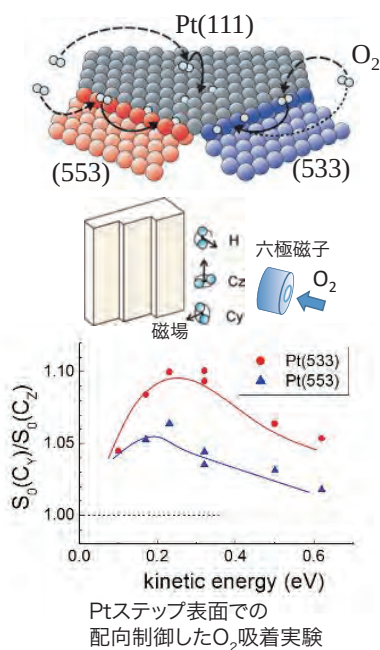
研究概要

触媒材料分野では、反応効率と耐腐食性が高く、貴金属使用量低減に寄与できる材料の開発と反応特性の理解が求められている。反応特性を議論する際、触媒表面と接するガス中には運動エネルギーや振動・回転状態、分子配向などが異なる分子が含まれ、これらの量が分子吸着特性に多大な影響を与える点を考慮する必要がある。運動エネルギーや配向等を制御できる分子ビームとモデル触媒を用いた表面反応解析は、この問題解明と反応機構理解に有益な情報を提供する。NIMSでは、独自開発の分子軸とスピンの向きを制御できるO₂分子ビームを用いた触媒酸化反応解析を進めており、分子/表面相互作用の分子レベル理解と触媒材料設計へのフィードバックを目指している。

新規性・独創性

- 軸・スピン方位を制御可能な量子状態選別酸素分子ビームを初めて開発
- O₂吸着・触媒酸化反応の支配要因の詳細解析が可能
- 微細化した配向・スピン制御O₂ビームと面内分布試料を用い、反応特性評価の効率化を実現

研究内容



酸素分子(O₂)はスピンを持つ直線分子のため、表面へのO₂吸着確率は、表面に対するO₂分子軸の向き、磁性体表面では磁化に対する分子スピンの向きに依存する。我々は、O₂分子の磁気モーメントが電子スピンと回転角運動量に依存する点に着目し、磁場選別法を用いることにより、分子配向とスピンを指定できるO₂分子ビームを初めて開発し、これまで主に平坦表面へのO₂吸着、触媒酸化反応解析に応用してきた。

最近の研究例として、白金ステップ表面へのO₂吸着への応用例を左図に示す。白金表面へのO₂吸着は燃料電池や排ガス浄化触媒反応の素過程として応用上重要である。実触媒として使用される白金ナノ粒子表面にはステップ等の非平坦構造が存在し、反応活性点として働く。しかし、非平坦構造の反応特性の研究例は少なく、特にO₂分子配向とステップでの吸着特性の相関は不明であった。配向制御O₂分子ビームと白金高指数面を用い、O₂分子軸方位がステップ列に平行な場合に反応が起こりやすいこと、配向依存吸着特性がステップ原子配列に依存することを示した。最近、状態選別O₂ビームを微細化し、ステップ密度や組成等に面内分布がある試料上でビームを走査させる方式を導入し、効率的に反応計測を行えるようになった。今後、ステップ面や合金触媒への展開を予定している。

まとめ

量子状態選別酸素分子ビームは、O₂吸着・触媒過程の分子配向・スピン依存性の解析を可能にする。構造、組成を規定した合金等のモデル触媒作製と表面キャラクタリゼーションを実施でき、吸着・触媒酸化反応を効率的に計測できるシステムを開発した。今後、多様なモデル触媒に対する系統的実験により触媒設計に有益な指針が得られると期待される。

論文・特許

- M. Kurahashi and X. Sun, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 8489-8494 (2021).
- K. Cao, R. Lent, A. W. Klyen, M. Kurahashi and L. Juurlink, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **116**, 13862-13866 (2019).
- M. Kurahashi, *Prog. Surf. Sci.* **91**, 29-55 (2016).

強磁場固体NMR装置を用いて行う燃料電池材料等の分析

Keywords イオン伝導、周期表隣接元素、ペロブスカイト、構造解析、酸化物、エネルギー材料、環境技術

主幹研究員／Principal Researcher

丹所 正孝 Tansho Masataka

✉ TANSHO.Masataka@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/tansho_masataka



研究概要

近年、酸化物型燃料電池の材料であるイットリア安定化ジルコニアを超える材料として $\text{Ba}_3\text{MoNbO}_{8.5}$ やその関連化合物が注目されている。鍵となる酸素(O)イオンの動きやすさは、モリブデン(Mo)やニオブ(Nb)周囲の局所的構造が重要だと考えられる(図1)が、周期表で隣り合うMoとNbは通常のエクス線構造解析などでは区別が難しいので同じ物として扱われてきた。特別な工夫と共にNIMSの強磁場固体NMR装置を用いたところ(図2)、NbとMoのNMR結果は明らかに異なり(図3、図4)、酸素移動に重要なMoの酸素5配位の存在が初めて明らかになった(論文1)。

新規性・独創性

- 酸素イオン伝導の鍵となるMoとNbに着目した構造解析
- 実験的な困難さからMoとNbを区別しない構造解析が行われてきた
- エックス線・電子線・中性子線のいずれでもMoとNbの区別は難しい
- NMRでMoとNbの識別は容易だが、通常の市販品での実用レベルのMo観測は困難
- Mo観測のために、強磁場利用・自作プローブ利用・ ^{95}Mo エンリッチを組み合わせで行い、MoとNbの識別に成功した。

研究内容

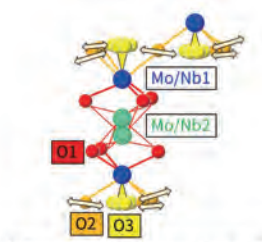


図1 燃料電池材料として注目される $\text{Ba}_3\text{MoNbO}_{8.5}$ では、MoやNb上にある酸素(O)の移動がポイントだが、MoとNbのどちらの近くの酸素がカギなのか知りたい



図2 通常はできないMoとNbの区別をNIMSの強磁場固体NMR装置を用いて行った

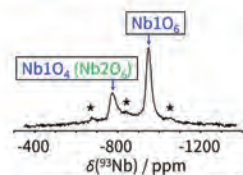


図3 ^{93}Nb -NMRの測定結果

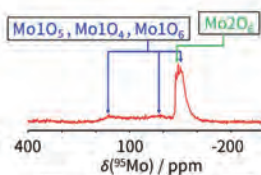


図4 ^{95}Mo -NMRの測定結果

Moの酸素5配位構造がカギらしいことがわかった

MoとNbは周期表で隣り合うため、エクス線や電子線での識別が難しい。さらに、中性子の散乱長も近いため、中性子線による識別も困難である。他方、NMRの共鳴周波数は ^{95}Mo と ^{93}Nb で4倍違うので、原理的にはMoとNbの識別にNMRは極めて有効である。

しかしながら、 ^{95}Mo の実際の測定には困難が伴い、標準的なNMR装置では不十分であることから、多くの工夫を必要とする。具体的には(1)固体NMR用の装置構成であること、(2)低周波用のオプションでは感度不十分なので、低周波用のプローブを特別に用意すること、(3)十分な感度や分解能実現のために通常のNMR装置より強磁場であること、(4)十分な感度のために分光器が新しい事、(5) ^{95}Mo は天然では濃度が低いいため数倍に濃縮したサンプルを使う事、(6)1試料につき1週間のマシンタイムを用意すること、などが必要であり、これらが全て可能な研究機関は、国内においてはNIMS以外にはごく少数であると思われます。

実験結果はNbとMoで信号が全く異なることが、示された(図3、図4)。 ^{93}Nb が2つのピークしか示さないのに対し、 ^{95}Mo は4つのピークを支援している。この結果は、酸素5配位構造がMoの方に集中していることを示す。

結晶中のNbとMoの偏り分布があきらかになったが、酸化物型燃料電池材料を開発する上でこのことが重要であると考えられる。

まとめ

- 注目度のより高い $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ についてもNIMSでのNMRによりMoとNbの不均一分布がはっきり現れており(論文2)、今後は、組成による違いについて、詳細を明らかにしていきたい。
- 他にも、NMR法では、周期表で隣り合うZnとGaとGeを識別した構造解析(光触媒材料)などにも有効である(論文3)。

論文・特許

- M. Tansho, A. Goto, S. Ohki, Y. Mogami, Y. Sakuda, Y. Yasui, T. Murakami, K. Fujii, T. Iijima and M. Yashima, J. Phys. Chem. C 126, 13284-13290 (2022).
- Y. Yasui, M. Tansho, K. Fujii, Y. Sakuda, A. Goto, S. Ohki, Y. Mogami, T. Iijima, S. Kobayashi, S. Kawaguchi, K. Osaka, et al., Nat. Commun. 14, 2337 (2023).
- T. Suehiro, M. Tansho, T. Ishigaki and T. Shimizu, Inorg. Chem. 60, 1542-1549 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

高温NMRの開発と材料分析への応用

Keywords 固体NMR, 構造解析, 拡散, オペランド計測, 高温

主幹研究員 / Principal Researcher

端 健二郎 Hashi Kenjiro

✉ HASHI.Kenjiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/hashi_kenjiro



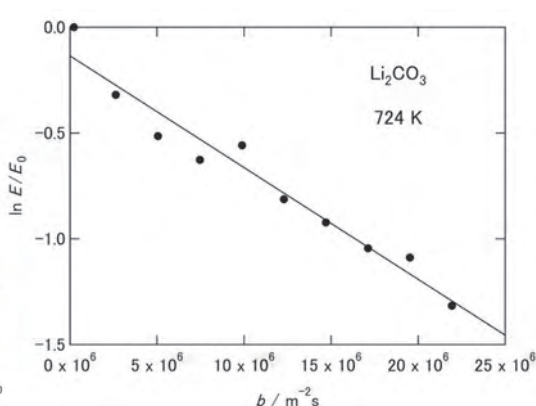
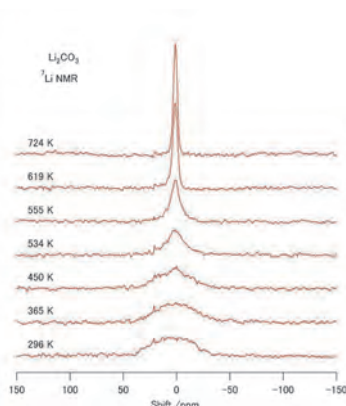
研究概要

- 核磁気共鳴法(NMR)は有機化学や材料研究など広い分野で利用されている。
- 近年ではリチウムイオン電池のリチウムイオンを直接観測する方法として利用されている。
- 固体電解質のリチウムは溶液電解質のリチウムより動きが遅く、室温付近の測定だけでは十分な評価が出来ない。
- リチウムの運動性を上げる方法として温度を上げることが考えられるが、市販の装置では昇温範囲が限られている。
- 市販の装置では測定できない高温でのNMR測定ができるシステムを開発し、材料への適用を行った。

新規性・独創性

- 市販のNMR装置では拡散係数の測定温度の上限は 1 4 0 °C 程度であったが、4 5 0 °C まで測定できるシステムを開発した。
- 固体電解質におけるリチウムイオンの拡散係数がNMRによって高温まで測定できるようになった。
- 従来の装置より高温での材料の評価への活用が期待される。

研究内容



固体NMRは溶媒に不溶な高分子や電池材料、無機材料の化学構造を分析する手段として利用されている。しかし、市販されている装置だけでは希望する条件での測定が出来ないことがある。特に近年盛んに研究が行われている二次電池材料の固体電解質では電荷の動きを担うイオンの動きが溶液の電解質に比べて遅く、拡散現象などは十分に測定することが出来ない。そこで、イオンの動きを速くするために温度を上げた状態でNMR測定ができるシステムを開発した。市販されている通常のNMRプローブはソーダガラス製の試料管を使用し、特段の冷却機構は備えておらず、測定上限温度は 1 4 0 °C 程度である。今回開発したプローブは石英製試料管を使用し、水冷ジャケットを内蔵しておりチラーにより冷却することで 4 5 0 °C 程度まで昇温することが出来た。このように高温にすることで室温付近では広い線幅を持つ電池材料関連物質である Li_2CO_3 の ^7Li の NMR スペクトルは線幅が狭くなり、勾配パルス磁場と組み合わせることで拡散係数の測定も可能となった。今後より多くの電池関連物質をはじめとする固体材料の評価への応用が期待される。

まとめ

- 市販装置では測定できない 4 5 0 °C という高温まで NMR 測定ができるようになった。
- 高温にすることによって固体中でのイオンの拡散現象が観測できるようになった。
- 電池材料をはじめとする拡散現象が重要な材料開発への貢献が期待される。

論文・特許

- K. Hashi, S. Ohki, Y. Mogami, A. Goto and T. Shimizu, *Anal. Sci.* **37**, 21A001 (2021).

顕微スピン分解光電子分光の高度化と量子・磁性材料研究

Keywords 顕微スピン分解光電子分光の高度化と量子・磁性材料研究

グループリーダー／ Group Leader

矢治 光一郎 Yaji Koichiro

✉ YAJI.Koichiro@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/yaji_koichiro



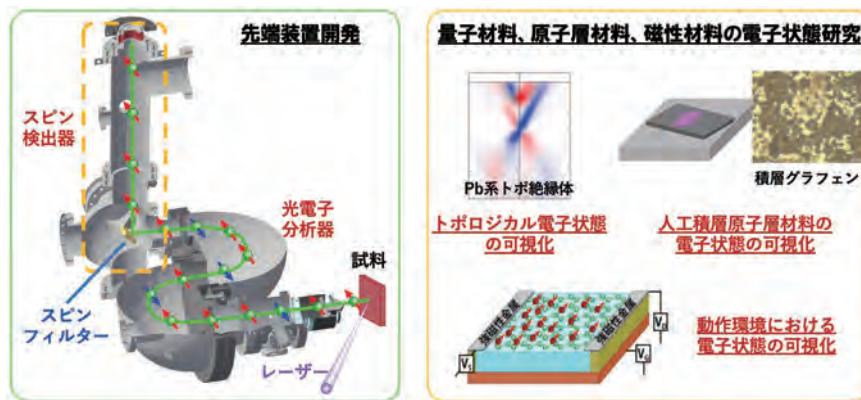
研究概要

材料の電気的性質や磁気的性質はその中で運動する電子によって決まる。したがって、材料中の物質中の電子がどのように振舞っているかを理解することは、新規材料やデバイス開発やその性能向上のために極めて有用である。物質中の電子はエネルギー、運動量、スピンという三つの物理量で完全に記述される。NIMSではスピンも含めた電子状態を精密計測できるスピン角度分解光電子分光や局所的な電子状態を可視化できる顕微光電子分光の開発・高度化を行っている。これらの手法を駆使して材料の定常状態や動作環境における電子状態を精密計測し、機能発現に直接寄与する因子を特定することで材料研究を加速させる。

新規性・独創性

- 材料の電子状態完全決定
- 高い空間分解能でのスピン偏極度の可視化
- 従来の一万倍のデータ収集効率でのスピン偏極電子状態イメージング
- 動作環境における電子状態計測システムの開発
- 従来の光電子分光では測定対象とならなかった微小材料や不均一材料への研究展開

研究内容



新規材料開拓やデバイス設計およびその性能向上を目指す上で、機能発現の鍵となるフェルミ準位近傍の電子状態を明らかにすることが重要である。例えば、最近では鉛系トポロジカル絶縁体におけるトポロジカル表面状態形成メカニズムを解明し、スピントロニクス応用に向けた指針を示している。また、材料やデバイスの微細化に対応するためには局所的な電子状態を計測することも求められる。我々は微細材料の局所的な電子状態を観測することを目的として、ナノスケール領域の観測が可能な顕微スピン角度分解光電子分光装置の開発と高度化を行っている。これまで100 nm以下の空間分解能を達成し、実験室系の光電子分光装置としては世界トップクラスの空間分解能を有している。また、イメージング型スピン検出器の開発に成功し、従来の一万倍のデータ収集効率でのスピン分解光電子分光測定を実現した。高い空間分解能を利用することにより、従来の光電子分光では測定が不可能だった微小試料や不均一試料の局所的な電子状態を完全決定できる。今後は、材料開発で重要な定常状態と動作環境の両方の電子状態計測を可能にすることを目指している。量子マテリアルや磁性材料の機能に直接寄与する因子を可視化することで、新規材料探索や高機能化に向けた研究に貢献する。

まとめ

近い将来、顕微スピン角度分解光電子分光は材料の電子状態を可視化するための標準的な実験手法となることが期待されている。超高効率計測によりハイスループットで様々なスピン偏極電子状態の観測ができるようになれば、基礎研究の枠内に留まらず応用研究や産業界においてもデバイス中のスピンの依存した物理現象のメカニズムが解明できるようになり、量子材料や磁性材料等への研究応用が可能になる。

論文・特許

- K. Kuroda, K. Yaji, R. Noguchi, A. Harasawa, S. Shin, T. Kondo and F. Komori, *Phys. Rev. B* **105**, L121106 (2022).
- S. L. Wu, K. Yaji, Y. Ota, A. Harasawa, S. Shin, T. Imai, K. Miyamoto, M. Nagao, S. Watauchi, I. Tanaka, X. Ma, et al., *Phys. Rev. B* **106**, 104511 (2022).
- Koichiro YAJI, *表面と真空* **64**, 275-280 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

顕微光電子分光を用いた材料研究

Keywords 計測, 電子状態, 光電子分光, 顕微, オペランド

主任研究員 / Senior Researcher

津田 俊輔 Tsuda Shunsuke

✉ TSUDA.Shunsuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tsuda_shunsuke



研究概要

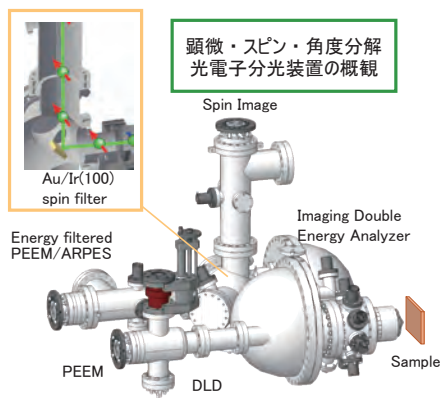
電子デバイスの動作を担う電子の状態解析は、デバイス動作の理解の上では不可欠です。特に実働環境における電子のふるまいは製造過程の歩留まりや性能の向上へと寄与することが期待できます。

光電子分光は電子状態を直接観測することのできる強力な手法ですが、これまでのところマクロな領域の定常的な測定が主でした。本研究では電子状態の直接観測を可能とする光電子分光を顕微測定およびオペランド測定と組み合わせることで実材料評価につなげることを特徴としています。

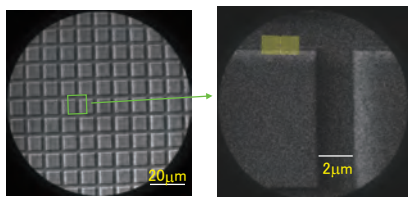
新規性・独創性

- 100nmを切る高い空間分解能で状態密度を直接観測
- 走査型ではないため多点同時観測が可能
- オペランド計測
- スピン計測
- 低温計測

研究内容



標準メッシュ試料による空間分解能の評価



電子デバイスは電子を用いているので、その振る舞いを知ることが極めて重要です。その電子のふるまいを知るとても有力な計測手法として光電子分光があります。紫外光を当てて出てくる電子（光電子）を分光することにより、物質内部での電子のふるまいを直接知ることができます。これまではマクロな領域での測定が行われてきましたが、我々は光電子顕微鏡とエネルギー分析器を組み合わせた装置を採用することで、高い空間分解能で光電子分光を行うことが得切ようになりました。

上図に我々の装置の概要図を示します。試料から出た光電子は光電子顕微鏡と同様の電子レンズ系を経て拡大像となったのち、二重の半球型エネルギー分析器を通してエネルギーフィルタリングを行った後、像のまま検出器へと至ります。このため、我々の装置では走査型顕微測定装置と異なり、多点同時計測が可能です。また、スピンフィルターを備えることにより、多点同時にスピン偏極度の測定も可能としています。下図にあるように、既に100nmを切る空間分解能を達成しています。

例えば半導体製造ラインで出てきた不良素子に対してこれまで光学顕微鏡やSEMのような観察に頼っていた部分に本装置を適用することで不良に至った原因究明に役立つと考えます。また実働デバイスの動作を直接観測することで、性能向上の律速となる要因の同定も期待できます。

まとめ

- 実験室系光電子分光装置において高い空間分解能(100nm以下)による多点同時観測を達成
- 実験室系光電子分光装置において多点同時スピン観測に成功
- オペランド計測化へ向けた改良が進行中

論文・特許

- S. Tsuda, A. Yoshinari, S. Takezawa, K. Ohishi, N. Nagamura, W. Zhang, Y. Iwasaki and Y. Takagiwa, *Mater. Res. Express*, **10**, 055506 (2023).
- M. Imura, S. Tsuda, H. Takeda, T. Nagata, R. G. Banal, H. Yoshikawa, A. Yang, Y. Yamashita, K. Kobayashi, *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **123**, 095701 (2018).
- S. Tsuda, N. Kikugawa, K. Sugii, S. Uji, S. Ueda, M. Arai, M. Nakajima, A. Iyo and H. Eisaki, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 053702 (2017).

顕微分光とインフォマティクスによる多次元オペランド計測

Keywords 放射光, 光電子分光, ラマン分光, イメージング, オペランド分析, 原子層材料, ナノ材料, 電池, 半導体素子

主任研究員 / Senior Researcher

永村 直佳 Nagamura Naoka

✉ NAGAMURA.Naoka@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagamura_naoka



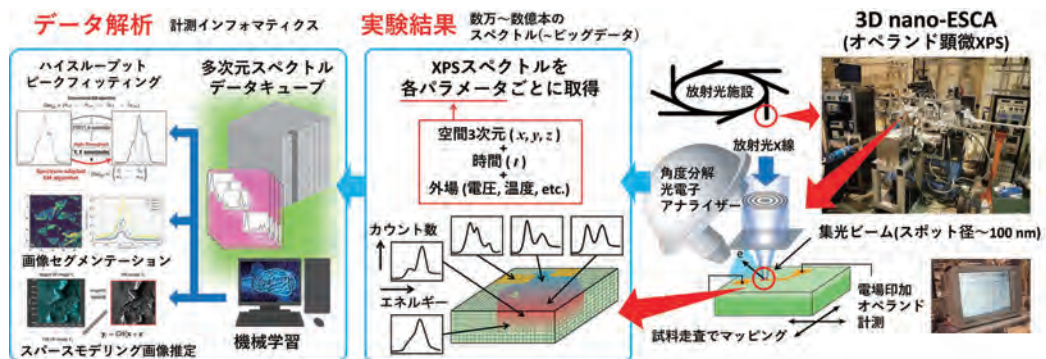
研究概要

材料開発において物性評価のために多彩な分析技術が活用されるが、中でもX線分光分析は、元素選択的な結合状態や電子状態の情報が得られる一方、従来の実験室系分析装置では時空間分解能に乏しかった。そこで優れた高輝度光源である放射光を活用することで、高空間分解能のX線光電子分光(XPS)イメージング計測を実現し、ナノ構造材料や微細デバイス構造の界面状態ダイナミクスを明らかにしてきた。さらに、空間・時間・外場(電場など)にわたる多次元パラメータでスペクトルを取得すると、実験結果のデータ量が膨大になる。機械学習を活用した高速自動ピークフィッティングや超解像画像処理など、データ駆動型解析技術開発にも取り組んでいる。

新規性・独創性

- 従来のXPSよりも高空間分解能(面内方向で ~ 100 nm)でのイメージング計測
- バイアス電圧を印加しながらの半導体デバイス分析、充放電しながらの電池内部分析などのオペランド計測
- 低次元マテリアルにおける非破壊での埋もれた界面状態分析(表面から数 nmの範囲)
- 機械学習を活用したハイスループット自動スペクトル解析で解析時間を短縮、1億本のスペクトルデータセットも取り扱い可能

研究内容



顕微分光を軸として、分析装置の開発およびその装置を用いたナノ構造材料や微細デバイスの分析に取り組んでいる。放射光X線を集光して試料に当てつつ試料を走査してXPSの空間分布を観測する顕微XPS装置では、オペランド分析ができるように改良を実施し、原子層(グラフェンなど)電界効果トランジスタ(FET)における電極/チャネル界面の電荷移動領域や基板/チャネル界面の電気二重層などを世界に先駆けて実測に成功した。また、窒化ガリウム系高移動度トランジスタ(GaN-HEMT)における電荷トラップの可視化、有機FETのチャネル内ポテンシャル分布計測、Liイオン二次電池電極活物質結晶内の充放電中Li分布ダイナミクス観測などを行ってきた。現在、多探針オペランド顕微ラマン分光装置も開発中である。また、顕微XPSに限らず、放射光を用いたNEXAFS(XANES)評価、EXAFS構造解析も解析手法として扱っている。

顕微分光で得られるスペクトルビッグデータの効率的なデータ処理・解析のために、計測インフォマティクスの観点からの分析技術開発にも取り組んでいる。機械学習を活用した高速自動スペクトルピークフィッティングのPythonパッケージ”EM Peaks”(OSSとして公開中)の開発に携わり、顕微XPSをはじめ、ラマン分光やRHEED画像などのデータ解析に展開している。また、スパースモデリングを活用した超解像技術による顕微分光画像の高解像度化も目指しており、空間分解能の向上や、ダメージレスな計測に貢献できると見込まれる。

このように、先端計測とインフォマティクスを組み合わせたデータ駆動型オペランド顕微分光を推進している。

まとめ

データ駆動型先端計測は、計測技術の進歩に伴い、今後扱うデータ量が膨大になっていくことが必至である中、求められるアプローチである。顕微分光を通して、これまで様々なナノ材料やデバイスの解析を行ってきたが、インフォマティクスの知見を導入していくことで、これまで不可能だった物理現象の可視化や、最適なデバイス構造や材料合成プロセスの探索を実現したいと考えている。

論文・特許

- A. Yoshinari, Y. Iwasaki, M. Kotsugi, S. Sato and N. Nagamura, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **2**, 162-174 (2022).
- N. Nagamura, H. Fukidome, K. Nagashio, K. Horiba, T. Ide, K. Funakubo, K. Tashima, A. Toriumi, M. Suemitsu and K. Horn, *Carbon* **152**, 680-687 (2019).
- T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata and Y. Ando, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 733-745 (2019).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

先端強磁場計測技術の開発と物性研究への応用

Keywords 半導体物性, 量子物性, 磁気冷凍, 強磁場計測, 強磁場発生

グループリーダー／ Group Leader

今中 康貴 Imanaka Yasutaka

✉ IMANAKA.Yasutaka@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/imanaka_yasutaka



研究概要

今後ますます注目される先端半導体、量子物質などの先進物質・次世代材料の研究において、強磁場や極低温といった極限環境下での計測がその電氣的、光学的、磁氣的物性研究へと果たす役割は大きく、物性量の精密測定や新規物性探索において非常に強力なツールとなる。特に市販装置では到達できない磁場、周波数、温度領域での計測の実現は、オンリーワン計測技術として様々な物質・材料研究へ広く波及するものであり、多面的な強磁場計測より物質の本質を明らかにできるものである。

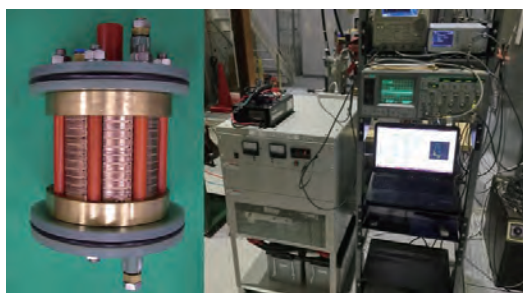
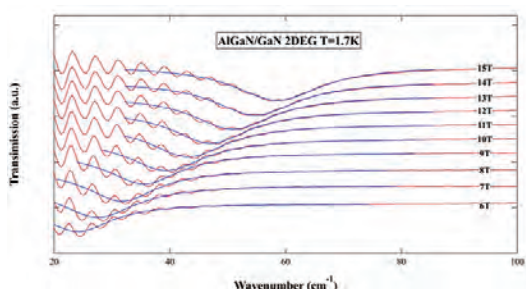
新規性・独創性

- 強磁場かつ液体ヘリウムを使った極低温下での計測は、物質材料の基礎物性を調べる上で非常に重要で、テラヘルツ分光などの先端計測との組み合わせはオンリーワン計測としての独自性と先端性を有している。
- 強磁場発生技術の開発については、これまで最大到達磁場、磁場発生時間の拡大方向で進められてきたが、我々は任意波形の磁場発生や短時間での磁場発生の繰返しといった観点からの独自性の高い開発を行っている。

研究内容

異種半導体を積層させた量子構造試料やトポロジカル表面を持つ量子材料などの物性を明らかにする上で、強磁場極低温下での各種物性測定は大きな威力を発揮する。特に当グループでは、紫外から可視、近赤外～遠赤外、ミリ波までの広帯域の強磁場分光により、様々な物質・材料の強磁場光学研究が可能となっている。

図はGaNの二次元電子系の強磁場テラヘルツ分光によるサイクロトロン共鳴吸収の測定結果の結果であるが、こうした磁気光学的手法により電極を必要とせず、キャリア有効質量、キャリア濃度、キャリア移動度などのパラメーターを非接触に高精度に得ることが可能である。



強磁場発生技術の開発において、従来の発生磁場強度の増強やパルス磁場などでの発生時間の長時間化という点が重要であったが、当グループでは様々な波形の磁場を発生させることや繰返し発生に着目し、テスラ級の磁場発生装置の開発を進めている。

図は水冷型強磁場磁石であるビッターマグネットと数テスラまでの波形可変磁場発生が可能となる電源である。蓄電池や小型キャパシターとの組み合わせにより、移動可能な小型なシステムとなっている。

まとめ

各種強磁場物性計測の適用領域の拡大を進め、様々な先進物質・次世代材料の物性研究への適用し、基礎物性量の高精度評価や新規量子現象の解明を進めている。

また強磁場計測の基礎となる磁場発生技術、特にこれまであまり着目されなかった波形可変技術や繰返し発生技術の確立により、省工型の磁場計測や新規磁気冷凍システムへの応用など新たな研究分野への展開を目指している。

論文・特許

- Y. Okamoto, H. Amano, N. Katayama, H. Sawa, K. Niki, R. Mitoka, H. Harima, T. Hasegawa, N. Ogita, Y. Imanaka, *et al.*, *Nat. Commun.* **11**, 3144 (2020).
- D. Kindole, Y. Imanaka, K. Takehana, L. Sang and M. Sumiya, *J. Korean Phys. Soc.* **74**, 159-163 (2019).
- S. Yamada, A. Fujimoto, S. Hidaka, M. Akabori, Y. Imanaka and K. Takehana, *Sci. Rep.* **9**, 7446 (2019).

強磁場による量子機能材料評価

Keywords 強磁場, 磁気光学効果, 量子機能材料評価

主幹研究員 / Principal Researcher

竹端 寛治 Takehana Kanji

✉ TAKEHANA.Kanji@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/takehana_kanji



研究概要

トポロジカル物質などの量子機能材料は、新規現象の探求や次世代量子機能デバイス応用への期待から精力的な研究競争が行われていますが、強磁場を印加することでより多彩な特性を示すことが知られており、その解明、および応用が期待されています。本研究では、それらの量子機能材料を強磁場中での光学的測定(可視光領域、赤外線領域)や電気伝導度などの様々な計測手段で物性情報評価を行う。

新規性・独創性

- 量子機能材料の強磁場下での物性情報を「非接触」で光学的に評価を行う。
- 「透過型」「反射型」の選択で金属から半導体、絶縁体試料まで評価可能です。
- 超伝導マグネットとFT-IR分光器を組み合わせた特殊な測定手法であるため、同様な測定装置は数少なく希少である。(国内では本装置のみ、世界的にも数例)

研究内容

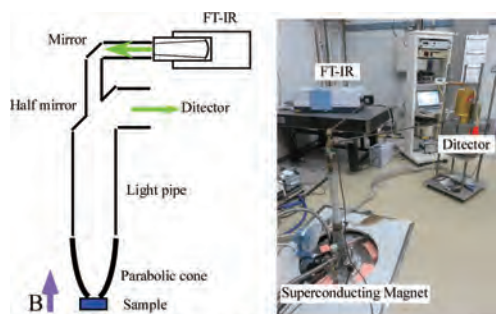


図1 「反射型」強磁場テラヘルツ分光装置の概略

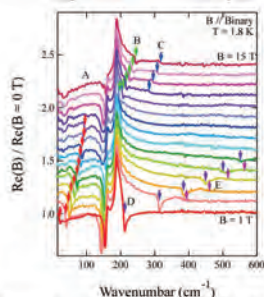


図2 ビスマスのB // Binaryにおける強磁場反射スペクトル

これまで我々に実績がある「透過型」強磁場テラヘルツ分光測定は半導体や薄膜試料などの研究に有効であったが、近年注目を集めているトポロジカル物質などの量子機能材料の研究には適していなかった。そのため、新たに図1に示す「反射型」強磁場テラヘルツ分光装置を開発した。検出光はライトパイプにより磁場中心まで導かれ、放物面集光ミラーを用いて試料面に照射される。

現在は開発された「反射型」強磁場テラヘルツ分光装置を用いて、トポロジカル関連物質であるビスマス-アンチモン合金のサイクロトロン共鳴などの磁気光学効果に関して研究を行っている。図2にビスマスのBinary軸方向に磁場を印加(B // Binary)した場合の磁場中反射スペクトルを示す。反射スペクトルはゼロ磁場で規格化されている。磁場と共にエネルギーシフトする複数のブランチ(A, B, C, D, E)はランダウ準位間光学遷移に依るものである。B // Bisectrix、およびB // Trigonalにおいても同様に複数のランダウ準位間遷移が観測された。各ブランチの起源に関しては、光学遷移の選択則およびランダウ準位理論計算との比較により同定され、その磁場依存性などを解析することでバンドギャップやキャリアの有効質量などの物性情報を求めた。同様の測定を組成の異なるビスマス-アンチモン合金にも行うことで同物質群の物性情報を明らかにしていくことを目指している。

まとめ

開発した「反射型」強磁場テラヘルツ分光装置を用いて、トポロジカル関連物質であるビスマス-アンチモン合金に関して磁気光学効果を測定し、バンドギャップやキャリアの有効質量などの物性情報を求めた。今後はワイル半金属など他の量子機能材料への応用を推進していきたい。

論文・特許

- K. Takehana, Y. Imanaka, E. Watanabe, H. Oosato, D. Tsuya, Y. Kim and K.-S. An, *Curr Appl Phys* **17**, 474-478 (2017).
- K. Takehana, Y. Imanaka, T. Takamasu, Y. Kim and K.-S. An, *Curr Appl Phys* **14**, S119-S122 (2014).
- K. Takehana, Y. Imanaka, T. Takamasu and M. Henini, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 193110 (2010).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

物性計測のための強磁場発生技術開発

Keywords 物性計測, 強磁場発生技術, Bitter型コイル, 水冷式常伝導磁石, パルス磁石, 超伝導磁石

主幹研究員／Principal Researcher

松本 真治 Matsumoto Shinji

✉ MATSUMOTO.Shinji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsumoto_shinji



研究概要

半導体、磁性体、超伝導体などの物質は、極低温、超高压、強磁場などの極限場、これらを組み合わせた複合極限場において、様々な興味深い物性を示す。物性計測のための強磁場発生技術開発を行っている。物性計測用強磁場磁石のひとつである、Bitter型磁石は、高強度・高電気伝導率の銅合金製Bitter盤を、ソレノイド状に積層したコイルを組み込んだ、水冷式常伝導磁石である。Bitter型磁石は、超伝導磁石では到達できない定常強磁場の発生が可能である。Bitter型コイルの良い冷却効率を活かすことで、高速繰り返し磁場を発生させる、パルス磁石への応用が期待できる。

新規性・独創性

- 目的とする物性計測のための強磁場発生技術の研究開発
- 極めて特殊なコイル材料である高強度・高電気伝導率の銅合金製Bitter盤のコイル化技術の研究開発
- Bitter型コイルの冷却効率の良さを活かした高速繰り返し磁場発生パルス磁石への応用
- 既存の汎用機では実現できない磁場分布や磁場利用方法のためのユニークな磁場発生技術の研究開発

研究内容



Bitter盤

- ・銅合金製
- ・径方向スリット
- ・最外周四角形孔：コイル締付スタッドボルト用
- ・周方向千鳥長孔：水冷用

Bitter型コイル

- ・コイル構成に従いスリット位置を調整し積層
- ・コイル構成に従いBitter盤間に扇形絶縁シートを挿入
- ・積層したBitter盤と絶縁シートをプレス機により密着させてスタッドボルトにより固定
- ・水冷用孔に強制的に冷却水を流した状態でコイルを励磁



現在、実用材料として不可欠な、半導体、磁性体、超伝導体などの物質は、極低温、超高压、強磁場などの極限場、これらを組み合わせた複合極限場において、様々な興味深い物性を示す。

物性計測に用いられる、数10テスラの強磁場を発生させるためには、水冷式常伝導磁石、超伝導磁石、パルス磁石がおもに用いられている。水冷式常伝導磁石である、Bitter盤をソレノイド状に積層したコイルを組み込んだBitter型磁石は、超伝導磁石では到達できない定常強磁場の発生が可能である。高強度・高電気伝導率の銅合金製Bitter盤は、励磁中の大きな電磁力に耐え、消費電力も低減させる。目的の磁場の強度と分布を実現させるためには、最適な設計を行い、有限要素法などにより、コイル内の電流密度分布、温度分布、磁場分布、電磁力による応力分布などを評価することで、実現の可能性を判断し、実際のコイルを製作しなければならない。また、Bitter型コイルを、パルス磁石へ応用し、良い冷却効率を活かした、高速繰り返し磁場発生が期待できる。

NIMSでは、強磁場発生技術研究・開発を長年にわたり行ってきた。Bitter型コイルと超伝導コイルを組み合わせたハイブリッド磁石では、37.9テスラの定常磁場に到達した。試料空間で、極めて高い、磁場の均一性と安定性が求められる、1ギガヘルツ級NMR超伝導磁石を開発した。既存の汎用機では実現できない、ユニークな磁場の発生方法の研究や磁石の開発も行っている。

まとめ

- 物性計測のための強磁場発生技術の研究開発を行っている。
- 極めて特殊なコイル材料である、高強度・高電気伝導率の銅合金製Bitter盤のコイル化技術の研究開発を行っている。
- Bitter型コイルの冷却効率の良さを活かした、高速繰り返し磁場発生パルス磁石の研究開発を行っている。

論文・特許

- S. Matsumoto, G. Nishijima, A. Nakai, H. Sakamoto, S. Mukoyama, Y. Miyoshi, K. Saito and M. Hamada, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **29**, 4602005 (2019).
- S. Matsumoto, T. Kiyoshi, A. Otsuka, M. Hamada, H. Maeda, Y. Yanagisawa, H. Nakagome and H. Suematsu, *Supercond. Sci. Technol.* **25**, 025017 (2012).
- T. Asano, S. Matsumoto, H. Yoshioka, T. Kiyoshi, H. Wada and G. Kido, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **16**, 965-968 (2006).

量子マテリアルの開発とその低温・強磁場下での物性評価

Keywords 量子マテリアル, 単結晶育成, 物性評価, 低温, 強磁場

主幹研究員／Principal Researcher

菊川 直樹 Kikugawa Naoki

✉ KIKUGAWA.Naoki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/kikugawa_naoki



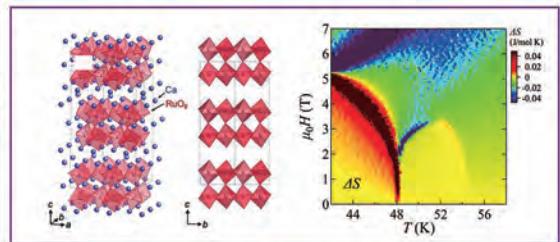
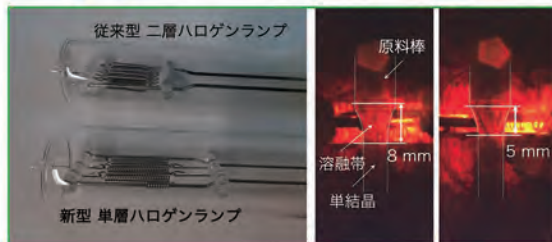
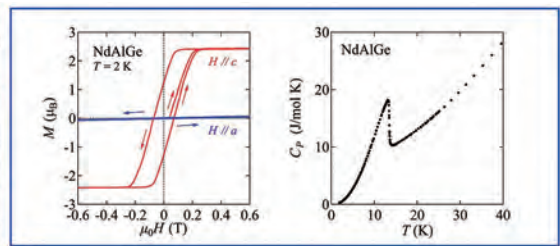
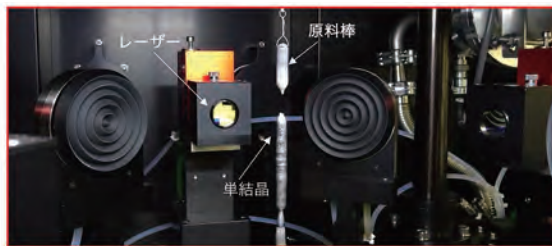
研究概要

量子マテリアルは、トポロジ概念も包括することで、次世代材料につながる新規な機能物性が近年提案され、多様な物質開発の研究が活発となっている。高品質な単結晶を用い、様々な実験手法にて本質的な物性を明らかにすることは研究の第一歩と言える。本研究では、高品質、かつ大型単結晶を得ることが可能な、浮遊帯域法により量子マテリアルの育成をおこなっている。育成した単結晶を用い、NIMSにて測定可能な30ミリケルビンまでの低温、かつ20テスラ級強磁場を駆使した輸送および磁気測定、熱物性測定をおこない、量子マテリアルの本質的なバルク基礎物性を明らかにしている。

新規性・独創性

- 量子マテリアルの本質的な物性
- 浮遊帯域法による高品質・大型単結晶の育成
- 低温・強磁場下での物性測定

研究内容



(左上図) 浮遊帯域法にて育成した磁気ワイル候補物質NdAlGe単結晶。レーザーを光源としたことで安定した溶融帯が形成でき大型単結晶が得られた。(右上図) 育成したNdAlGe単結晶の比熱と磁化測定。浮遊帯域法での育成により、磁気転移温度が鋭く、かつ、磁気異方性を明確に観測した。(左下図) 赤外線集中加熱炉を用いた浮遊帯域法にて、熱源となるハロゲンランプを改良した。従来の二層型から単層型にしたことで、溶融域を狭めることができ安定した結晶育成を可能にした。(右下図) 改良型単層ハロゲンランプにより育成したルテニウム酸化物の磁場-温度相図。空間反転対称性の破れに起因する新たな磁気相が熱力学的に安定することを明らかにした。

まとめ

- 浮遊帯域法での大型・高品質単結晶の育成
- 低温・高磁場下での輸送および熱力学的なバルク物性測定
- 本質的な物性の解明
- 電子構造、磁性、およびトポロジが絡む量子マテリアルの開発およびその制御

論文・特許

- N. Kikugawa, T. Terashima, T. Kato, M. Hayashi, H. Yamaguchi and S. Uji, *Inorganics* **11**, 20 (2023).
- N. Kikugawa, D. A. Sokolov, T. Nagasawa and A. P. Mackenzie, *Crystals* **11**, 392 (2021).
- N. Kikugawa, D. A. Sokolov, C. Sow, Y. Maeno and A. P. Mackenzie, *J. Phys. Soc. Japan* **90**, 103704 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

量子ビーム実験と構造モデリングによる非晶質材料の構造解析と構造制御

Keywords X線回折, 中性子回折, ガラス・液体, アモルファス, 構造, 高温・高圧

グループリーダー／ Group Leader

小原 真司 Kohara Shinji

✉ KOHARA.Shinji@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/kohara_shinji



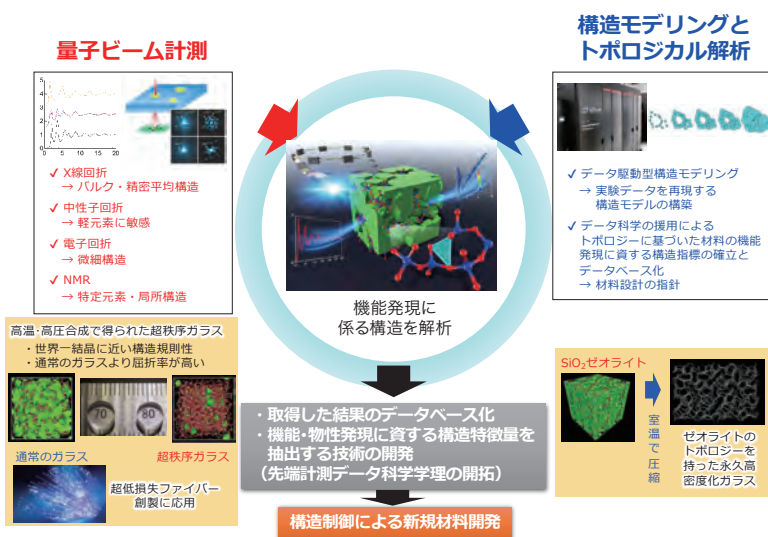
研究概要

ガラス・液体・アモルファス材料は我々の生活に欠かせないものである。酸化ガラスを例にとると窓ガラス、光ファイバー、スマートフォンのカバーガラス等が挙げられる。ガラスの材料開発における難点は結晶材料のように規則正しく原子が配列していないことから、構造を実験データに基づいて一意的に決定できない点であり、それゆえ構造制御による材料設計が困難になる。我々は、この状況を打開するために、放射光X線、中性子、電子線といった量子ビームを使った実験に基づいた構造モデリングにより、非晶質の乱れた構造に潜んだ秩序を抽出し、さらに高温・高圧といった環境を利用した新規材料開発を行う。これまでの研究では、世界でもっとも構造秩序のある高屈折率ガラスの合成に成功している。

新規性・独創性

- 放射光X線、中性子、電子線といった量子ビーム技術を横断的に利用
- データ駆動型構造モデリングにより、実験データを再現する非晶質の構造モデルを構築
- 非晶質の乱れた構造に潜んだ秩序をトポロジーに注目して抽出
- 温度や圧力を駆使することによりガラスの構造を制御し、新規材料を合成

研究内容



先端非晶質材料の機能発現は構造制御が鍵となるが、非晶質材料の構造は乱れており、構造を通して機能や物性を理解することが困難である。本研究ではX線・中性子・電子線といった量子ビーム実験を横断的に利用し、従来解析が困難であった機能発現に係る構造の乱れを明らかにする。さらに、得られた結果をデータベース化し、データ科学・データ駆動型モデリングを取り入れ、構造制御による新規材料設計へと展開する。

まとめ

- 本研究では、温度と圧力を制御することにより世界一構造秩序のある高密度（高屈折率）シリカ(SiO₂)ガラスの合成に成功
- 密度と組成が同じで構造が異なるシリカガラスの合成に成功
- これらのガラスの構造の違いをトポロジーという概念を用いて説明することに成功
- さらなる高密度（高屈折率）ガラスの設計指針が得られ、現在研究をすすめている

論文・特許

- Y. Onodera, S. Kohara, P. S. Salmon, A. Hirata, N. Nishiyama, S. Kitani, A. Zeidler, M. Shiga, A. Masuno, H. Inoue, S. Tahara, *et al.*, *NPG Asia Mater.* **12** (2020).
- S. Kohara and K. Ohara, *日本結晶学会誌* **64**, 50-56 (2022).
- S. Kohara, *表面と真空* **65**, 466-472 (2022).

先端構造解析に基づく材料機能の理解と自律探索

Keywords X線構造解析, 全散乱, 放射光, 燃料電池, 触媒, 人工知能, 自律探索

主幹研究員／Principal Researcher

富中 悟史 Tominaka Satoshi

✉ TOMINAKA.Satoshi@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/tominaka_satoshi



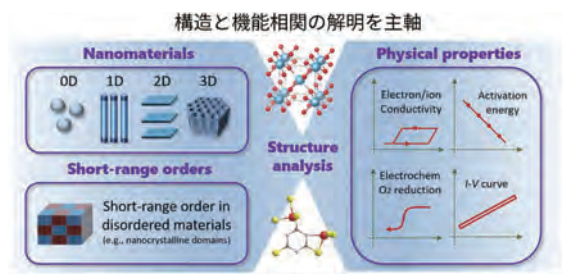
研究概要

物質・材料の機能は原子の種類と配置によって決まる。構造解析が困難なナノ材料や低次元材料を中心に、詳細な解析を通じて機能発現の根源を理解する研究を行い、燃料電池触媒、ペロブスカイト結晶、導電性ナノシート材料など多くの分野で解析に成功している。例えば、僅かな原子位置の変化による物性の大きな変化について、導電性ナノシートやペロブスカイト材料で報告している。また、電子レベルの秩序についても解析を試み、新しい化学結合様式の発見にも成功している。さらに、この先端かつ高速解析を主軸に、合成へフィードバックし自律的に材料を探索するシステムの開発も行っている。

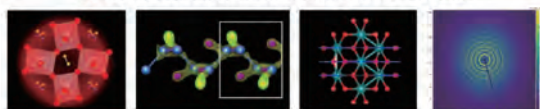
新規性・独創性

- 物質としての新規性を定義可能な構造情報の取得 (新物質の証明)
- 独自プログラムを用いた正確かつ高速な解析 (1000倍の高速化)
- 長期間構造が謎だった材料の解析に成功
- 人工知能導入による構造解析の高度化
- 高速データ解析に基づく燃料電池触媒の自律探索 (1000倍の探索スピード)

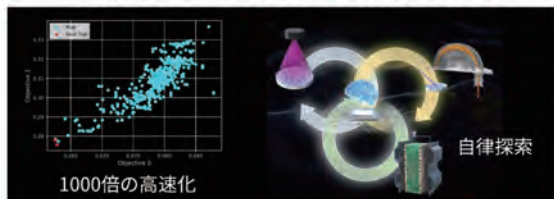
研究内容



独自の高度解析技術による幅広い分野への貢献



解析技術を人工知能へ発展させて材料開発を高速化



全散乱データを用いた二体分布関数を中心に、様々な計測手法や計算化学を併用して多角的に構造解析を行い材料の機能発現の本質を研究している (図上段)。特に解析が困難なナノ材料や低次元材料を主に扱い、機能発現下での解析を含め、原子位置やその対称性、原子レベルの歪などを解析することで、様々な材料の本質の解明に成功している (図中段)。構造未知の物質の解明にも成功しており、新物質としての知財獲得に繋がる技術である。計測は放射光施設で行い、解析はNIMSで開発している独自のプログラムで行うことで、正確かつ高速な解析が可能になっている。例えば酸化ルテニウムナノシートの構造は20年以上に渡って不明だったが、秩序だった歪が生じることでグラフェンのような電子状態になり、高い導電性を発現することを解明した。個別の材料の解析を進め、燃料電池や太陽電池、エレクトロニクスなどの分野へ貢献しながら、解析技術の高度化を続けている。例えば、複雑な材料の解析では、1つの仮説の検証に1年かかるが、その解析が1晩で終わるようになった。研究者の解析を高度・高速化する基盤を構築してきており、その基盤を人工知能やロボットと結びつけることで、人間の1000倍近いスピードで燃料電池触媒を探索するシステムの構築を行っている (図下段)。

まとめ

- 詳細かつ高速な構造解析技術は様々な分野で重要 (基礎研究、品質管理、知財獲得など)
- 高度解析技術はプログラム実装を継続 (独自性、高度化)
- ベイズ最適など基礎的な機械学習は導入済み
- 人間の活動の大半を置き換える複雑なアルゴリズムの構築が今後の解決すべき課題

論文・特許

- K. Sonobe, S. Tominaka and W. Sugimoto, *J. Am. Chem. Soc.* **144**, 15008-15012 (2022).
- S. Tominaka, I. Karimata, T. Matsuoka, M. Sakamoto, T. Nakajima, K. Ohara and T. Tachikawa, *ACS Energy Lett.* **6**, 3858-3863 (2021).
- S. Tominaka, R. Ishibiki, A. Fujino, K. Kawakami, K. Ohara, T. Masuda, I. Matsuda, H. Hosono and T. Kondo, *Chem* **6**, 406-418 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

放射光吸収・回折顕微鏡による磁性体研究

Keywords 放射光, 計測インフォマティクス, 磁性体, 量子マテリアル, スピントロニクス

主幹研究員 / Principal Researcher

山崎 裕一 Yamasaki Yuichi

✉ YAMASAKI.Yuichi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/yamasaki_yuichi

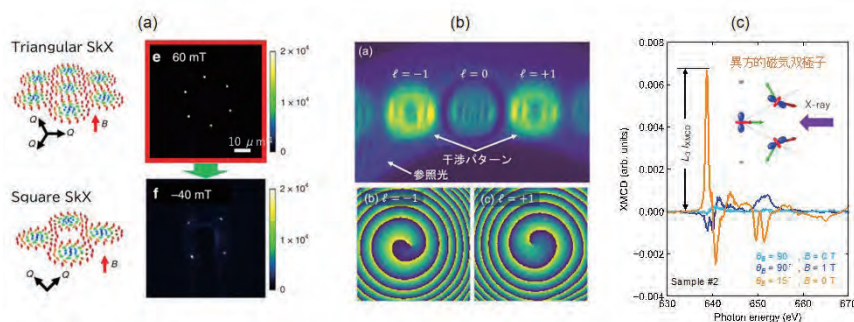
研究概要

放射光の高輝度、短パルス、エネルギー・偏光可変などの特長を活かして、X線吸収・回折顕微鏡の計測手法を開発しています。また、データ科学手法を活用して計測データを解析する計測インフォマティクス技術の開発も行っています。先端計測と解析技術を融合させ、量子マテリアルや磁性体の構造や電子状態を観測し物性や機能の発現機構解明を目指します。

新規性・独創性

- 高い時間と空間の分解能を両立した軟X線顕微鏡
- 創発物性に関与する新奇電子状態の探索
- データ科学を活用した高効率な解析手法開発
- 放射光を使った新しい吸収・回折計測手法開拓

研究内容



放射光から発生する高輝度X線を活用し、物質や材料の構成元素の吸収端にX線のエネルギーや波長を調整して吸収・散乱測定することで、物性や機能に関与する電子状態を解明することができます。トポロジカル特性を有し、次世代のスピントロニクス材料への応用が期待される磁気スキルミオンにおいては、過冷却による磁気構造相転移を観測することに成功しています(図(a))。また、インラインホログラフィ法と呼ばれる軟X線顕微鏡を開発することで、軌道角運動量を有する軟X線の位相情報を直接観測することに成功しており(図(b))、物質や材料中に含まれる格子の位相欠陥などを効率よく可視化する技術になると期待されます。従来、観測できないと考えられてきた反強磁性体におけるX線磁気円二色性について、ある特殊な磁性体材料においては発現しうことを理論的に提唱し、実験によって実際に観測できることを実証しています(図(c))。これらの放射光による新しい計測手法や技術の開発は、従来の計測手法では観測できなかった物質や材料の物性や機能の潜在的な決定因子を可視化・抽出することができるようになり、より高性能な物質・材料の開発に寄与する解析情報を提供できると期待されます。

まとめ

次世代放射光NanoTerasuの高輝度軟X線を活用し、オペランド計測やマルチフィジックス計測により動作状態における機能電子やスピン構造を観測する手法を開発します。これにより物性や機能に直接関与する潜在因子を抽出し解明することを目指します。さらに、データ科学による先端的な解析手法を融合した計測装置を構築し、物質・材料研究のボトルネックを解消するAI技術統合型計測システムの構築していきます。

論文・特許

- Y. Ishii, H. Nakao, M. Mizumaki, Y. Wakabayashi, T. Arima and Y. Yamasaki, *Sci. Rep.* **12**, 1044 (2022).
- M. Kimata, N. Sasabe, K. Kurita, Y. Yamasaki, C. Tabata, Y. Yokoyama, Y. Kotani, M. Ikhlal, T. Tomita, K. Amemiya, *et al.*, *Nat. Commun.* **12**, 5582 (2021).
- R. Takagi, Y. Yamasaki, T. Yokouchi, V. Ukleev, Y. Yokoyama, H. Nakao, T. Arima, Y. Tokura and S. Seki, *Nat. Commun.* **11**, 5685 (2020).

Heuristic data-driven spectral analysis for nanomaterial information embed in the background

Keywords Nanomaterial, Surface analysis, Background signal, Secondary electron

主任研究員／Senior Researcher

達 博 Da Bo

✉ DA.Bo@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/da_bo



Research Summary

Low energy electron–electron interactions in nanomaterial, low energy electron transport properties of nanomaterial, electronic properties of nanomaterial at low energies. Extracting meaningful information from the background and characterizing material using energy-filtered scanning electron microscopy.

Novelty / Originality

- 1.finding proper AD descriptors that meet the actual requirement according to the experience learned from many measurements under different experimental conditions
- 2.an extension of the traditional data-driven analysis approach
- 3.holds immense potential to become a new benchmark method in data processing

Research Contents



Firstly, the proposed heuristic data-driven analysis method represents a benchmark to extract meaningful information from background data, which, in principle, can be easily implemented in many more reflection-configuration techniques than surface analysis techniques and does not demand extra investment in equipment. Therefore, such technique will generate broad interest from numerous fields that use reflection-configuration techniques for ultrathin material characterization.

Secondly, implemented in SE spectra, this method expands the energy scale of analysis down to several electron volts and thus allows one to quantitatively probe the e–e interactions of a nanomaterial and hold to potential to observe ‘hidden’ electronic energy transfer to and from a nanomaterial on a substrate.

Finally, with the exploit of SE signals, the heuristic data-driven analysis method can be extended to energy-filtered SEM for material characterization, and rival conventional techniques based on core-level signals in signal-to-noise ratio by orders of magnitude, holding great potential for manufacture monitoring and quality control. This new technique is of particularly importance for steel industry because the nanometer-thick passive films on stainless steel could be automatically characterized without any additional procedures other than processing scanning energy-filtered SEM images.

Summary

The virtual substrate method represents a benchmark for surface analysis to provide “free-standing” information about supported nanomaterials.

References

- B. Da, Y. Sun, Z. Hou, J. Liu, N. T. Cuong, K. Tsukagoshi, H. Yoshikawa, S. Tanuma, J. Hu, Z. Gao and Z. Ding, *Phys. Rev. Appl.* **13**, 044055 (2020).
- B. Da, J. Liu, M. Yamamoto, Y. Ueda, K. Watanabe, N. T. Cuong, S. Li, K. Tsukagoshi, H. Yoshikawa, H. Iwai, S. Tanuma, *et al.*, *Nat. Commun.* **8**, 15629 (2017).
- B. Da, H. Shinotsuka, H. Yoshikawa, Z. J. Ding and S. Tanuma, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 063201 (2014).

データ駆動手法を用いた無機材料の物性予測と新材料設計

Keywords 機能性材料, 界面, 結晶, アモルファス, 物性予測, 材料設計, データキュレーション, 自然言語処理

グループリーダー／ Group Leader

徐 一斌 Xu Yibin

✉ XU.Yibin@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/xu_yibin



研究概要

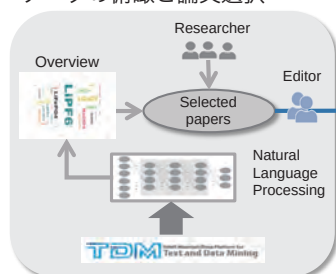
熱、電気、光などの材料基礎物性の予測と最適化は、新機能材料開発の基盤技術である。データ駆動研究は、材料の化学組成や、結晶構造、作製条件、や物性などのデータを用いて、各物性と相関性の強い要因を特定し、材料機能の理解、物性予測、新材料設計に役立つアプローチである。しかし、現在のデータ駆動材料研究は、データ不足、物理を理解できない、モデルの適応範囲が分らないなどの問題点も抱えている。ここでは、論文、計算、実験からデータを収集・整理し、既存のデータベースとの統合利用によって、データ不足問題を解消する。材料の専門知識と統計学の融合によって、物性予測と物理の解明を同時に行い、材料実験により検証する。

新規性・独創性

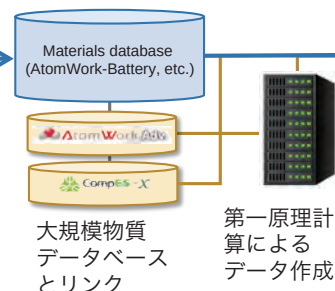
- テキストマイニングと人工収集による論文からのデータ収集
- ハイスループット計算によるデータの生成
- 専門知識と機械学習を用いた物性モデリング
- 材料機能のメカニズム解明と材料設計

研究内容

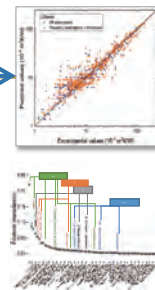
テキストマイニングによる論文データの俯瞰と論文選択



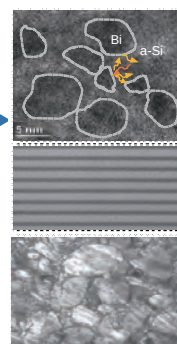
エディターによるデータ収集とキュレーション



記述子選択、物性予測



材料設計と試作



材料の物性とパフォーマンスは、物質から材料までの様々な要因に支配されている。それらの要因を広くカバーする信頼性の高いデータは、信頼できる物性予測と材料設計の基盤になる。無機材料データ駆動研究に必要なデータ基盤を構築するために、自然言語処理によりデータ収集対象論文の選択を最適化し、高度な知識を有するエディターが収集したデータをデータベースに登録する。また、既存の物性データベースとのリンクや関連物質の電子構造やフォノン構造についての第一原理計算によりデータを拡充する。

物質の電子構造、結晶構造、材料のプロセス条件、組織構造、特性、パフォーマンスのデータを統合し、機械学習を用いて材料物性に影響の大きい要因を解析し、物理化学理論に基づいてそのメカニズムを解明する。多相材料、界面や複合材料を含めて、複雑系材料の設計と最適化を行い、材料実験により検証する。

まとめ

高品質なデータは、データ駆動材料研究の基盤である。高度な材料知識は、機械学習の効率と信頼性を向上させる指針である。高品質なデータと高度な材料知識の融合により、材料物性予測とメカニズム解明の新しい手法を確立し、様々な新機能材料の設計に貢献する。

論文・特許

- Y. J. Wu, T. Tanaka, T. Komori, M. Fujii, H. Mizuno, S. Itoh, T. Takada, E. Fujita and Y. Xu, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **21**, 712-725 (2020).
- Y. J. Wu, L. Fang and Y. Xu, *NPJ Comput. Mater.* **5**, (2019).
- 特許第7010474号 断熱材料、その製造方法および内燃機関

第一原理的手法による電子構造解析

Keywords 第一原理計算, 電子物性, 超伝導, トポロジカル絶縁体

主席研究員／Chief Researcher

新井 正男 Arai Masao

✉ ARAI.Masao@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/arai_masao



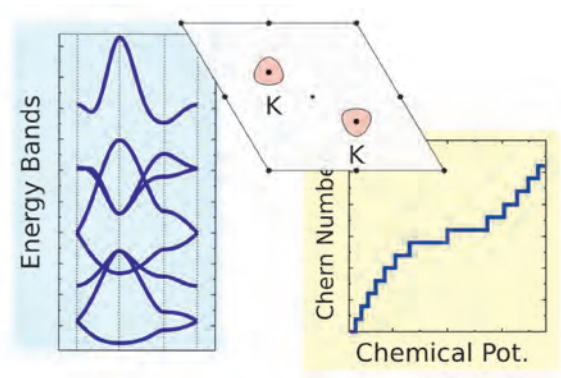
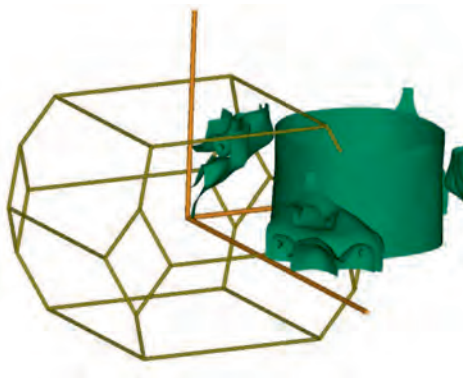
研究概要

計算機によって物質の特性を予測することができれば、新規材料の開発に有用な方法となる。非経験的手法による電子構造計算は広く利用されているが、得られた電子構造から物質の物性を予測するためには、多様な理論と組み合わせる必要が生じるため、様々な課題が残されている。そのため、物性物理学における様々な理論研究の成果を、具体的な物質群へ適用する研究が必要とされている。非経験的手法によって得られた電子構造を用いて、各種の物性量を定量的に予測するための手法とプログラムを開発している。

新規性・独創性

- 非経験的手法による定量的物性評価
- トポロジカル解析

研究内容



[左図] 第一原理的手法による電子構造解析

NIMSで発見された「反転対称性のない超伝導体」 SrAuSi_3 について、第一原理的手法による電子構造計算によりバンド構造とフェルミ面構造を解析することで、スピン軌道相互作用を定量的に評価して物性に与える影響を解析した。

[右図] 電子物性評価の例

現実的なバンド構造に対してトポロジカル数(Chern数)を計算するプログラムを作成した。強結合(タイトバインディング) 近似を用いて磁場中の電子構造を求め、グラフェンの量子化されたホール伝導度を定量的に評価した。また、2次元遷移金属炭化物Mxenesにおいてトポロジカル絶縁体の候補物質を理論的に予測した。

まとめ

第一原理的手法による電子構造を入力として、様々な物性理論の成果を用いて特性を評価した。超伝導体では臨界磁場の温度、角度依存性を定量的に評価した。バンド構造の解析によりトポロジカル絶縁体の候補物質を見出した。今後、プログラムの拡張と公開を目指して開発を進める。

論文・特許

- M. Isobe, M. Arai, and N. Shirakawa, *Phys. Rev. B* **93**, 054519 (2016).
- M. Khazaei, A. Ranjbar, M. Arai, and S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **94**, 125152 (2016).
- M. Arai and Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* **79**, 075429 (2009).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

データ科学と計算科学による新規無機材料の開発

Keywords インフォマティクス, 第一原理計算, 無機材料, 機能性材料, 材料設計

主幹研究員 / Principal Researcher

小山 幸典 Koyama Yukinori

✉ KOYAMA.Yukinori@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/koyama_yukinori



研究概要

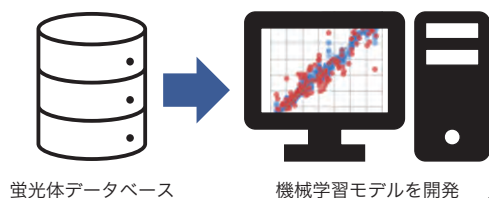
新材料の開発において試行錯誤的な実験は避けられないが、実験を有望な候補材料に集中させるために、有望な候補材料を提案する手法が求められている。そこで、材料研究にデータ科学を応用するマテリアルズ・インフォマティクスと、量子力学に基づく理論計算手法である第一原理計算を用いて、新規で高機能な無機材料の材料設計・探索に取り組んできた。ここでは、材料特性を予測する機械学習モデルを開発し、これを用いて有望な候補材料を探索する。第一原理計算で評価可能な材料特性の場合は、第一原理計算を適用して候補材料の確度を高める。このようにして抽出した候補材料を実験研究者と共同で検証実験することで、材料開発を加速する。

新規性・独創性

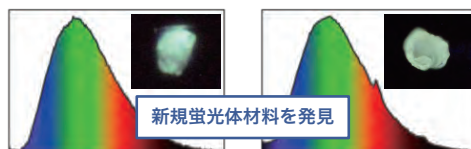
- 無機化合物の機能・特性の機械学習
- 材料特性に対する知見を活かした特徴量設計
- 機械学習を用いた材料探索範囲の拡張
- 第一原理計算を用いた機能・特性・安定性の理論解析

研究内容

① 蛍光体発光スペクトルの機械学習



③ 候補材料の検証実験（実験研究者と共同研究）



② 機械学習モデルを用いた候補材料探索



2価のEuイオンを発光中心とする蛍光体はその宿主材料によって多様な発光色を示すため、所望の発光色の蛍光体を発見することは難しい問題であった。そこで、既知蛍光体のデータベースを使って、蛍光体の発光スペクトルを予測する機械学習モデルを開発した。緑色発光の新規蛍光体を探索するために、無機材料データベースに登録されている蛍光体宿主材料となりそうな材料の発光スペクトルを予測し、緑色発光と予測された候補材料を抽出した。これらの候補材料を実験研究者に提案し、実際に合成・評価を行ったところ、様々な新しい蛍光体を発見することができた。これらの新規蛍光体は予測された通りの緑色発光を示した。

まとめ

機械学習を用いて広範な材料空間を探索することで、有望な候補材料を効率よく提案できることを実証した。今回の研究は発光色という単一の特性に注目したものであったが、実用材料の開発では複数の特性を兼ね備えることが求められる。今後は、様々な特性に対する機械学習モデルを開発し、複数の機能・特性を考慮した材料設計・探索に展開していきたい。

論文・特許

- Y. Koyama, H. Ikeno, M. Harada, S. Funahashi, T. Takeda and N. Hirosakic, *Mater. Adv.* **4**, 231-239 (2023).
- S. Takemura, Y. Koyama, T. Nakanishi, S. Funahashi, N. Hirosaki, H. Ikeno and T. Takeda, *Scr. Mater.* **215**, 114686 (2022).
- Y. Koyama, A. Seko, I. Tanaka, S. Funahashi and N. Hirosaki, *J. Chem. Phys.* **154**, 224117 (2021).

Advancing interfacial thermal resistance prediction for thermal management in heterogeneous materials

Keywords Interfacial thermal resistance, Thermal management, Predictive modeling, Heterogeneous materials, Machine learning

研究員 / Researcher

ウー イェン ルー Wu Yen-Ju

✉ WU.Yenju@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/wu_yenju



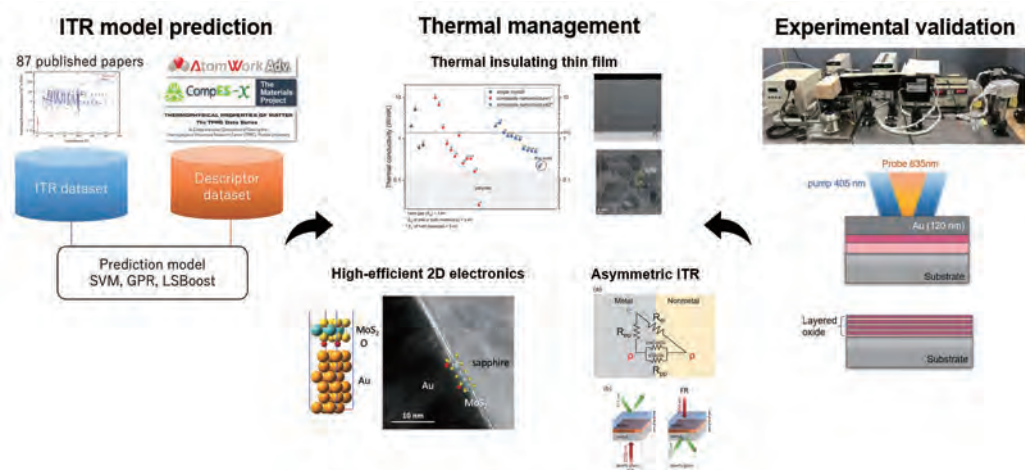
Research Summary

This research aims to address the challenges associated with interfacial thermal resistance (ITR) and develop predictive models for efficient thermal management in various applications. The background that led to this study is the increasing need for accurate prediction and control of ITR in interfaces between dissimilar materials. In many practical scenarios, such as microelectronics and energy conversion systems, precise understanding and management of ITR are essential for optimal thermal behavior. To fulfill these needs, this study focuses on advancing our understanding of ITR mechanisms and developing predictive models for different material systems.

Novelty / Originality

- This research combines machine learning and comprehensive descriptors to understand and predict ITR.
- Advanced Predictive Models: The study achieves a remarkable 96% accuracy with highly accurate predictive models for ITR, surpassing previous limitations.
- Exploration of Asymmetric ITR: The research uncovers the novel phenomenon of asymmetric ITR, revealing the interplay between interfacial electron-phonon couplings and temperature differences.
- Tunability of Thermal Conductance through interfacial chemical modifications.
- Efficient thermal management solutions in Thermal Insulators and Microelectronics

Research Contents



Our research focuses on advancing ITR prediction and control in heterogeneous materials for optimal thermal management. Through innovative machine learning techniques and comprehensive descriptors, we have achieved 96% accuracy in predicting ITR. We can develop ultra-low thermal conductivity thermal insulators and materials with tunable thermal and electrical conductance. This research meets the growing demand for efficient thermal management in industries like electronics, automotive, and energy. Going forward, we aim to collaborate with industry partners to apply our findings and develop cutting-edge thermal management technologies, enhanced insulating materials, and optimized microelectronic devices. This research opens up new possibilities for improved thermal management in diverse industries.

Summary

- Achievements: Significant advancements have been made in predicting and controlling ITR in heterogeneous materials, achieving a high accuracy rate of 96%.
- Potential Applications: The research holds promise for practical applications in fields such as microelectronics, energy systems, and thermal management.
- Future Goals: The focus will be on advancing thermal management technologies, optimizing thermal insulating materials, and enhancing microelectronic device performance.

References

- Y-J. Wu, Y. Lan, S. Hsu, C. Yeh, Y. Ku, J. Jiang and Y. Xu, *Adv. Mater. Interfaces* **7**, 2000364 (2020).
- Y-J. Wu, T. Zhan, Z. Hou, L. Fang and Y. Xu, *Sci. Data* **7**, 36 (2020).
- Y-J. Wu, M. Sasaki, M. Goto, L. Fang and Y. Xu, *ACS Applied Nano Materials* **1**, 3355–3363 (2018).

データ駆動型手法と第一原理計算を用いた新材料設計

Keywords マテリアルズ・インフォマティクス, 第一原理分子動力学計算, 固液界面, 電池材料, 磁性材料

グループリーダー／Group Leader

袖山 慶太郎 Sodeyama Keitaro

✉ SODEYAMA.Keitaro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/sodeyama_keitaro



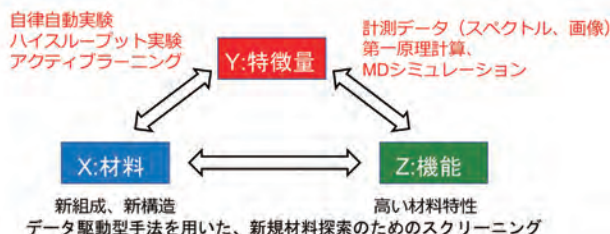
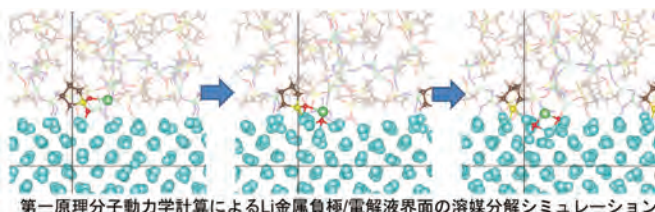
研究概要

従来の材料探索では、実験で得られた良好な結果のメカニズムを計算などで解明し、それに基づく材料を探すことで着実に成果を収めてきた。しかしそれでは実験の成功を待つ必要があり、逆問題と呼ばれる必要な特性を持つような新規材料を探索することは難しかった。データ駆動型手法と既存の実験データとして第一原理計算による仮想的な材料データを利用することでこれを可能にする。社会のニーズ、特に産業競争力を高めるためには、研究しやすい科学的に面白いものだけでなく顧客関心度を高められるような複数の物性や指標を全て高められるような材料探索の必要がある。そのためのMIを利用した材料探索のノウハウを様々な材料系に対して蓄積している。

新規性・独創性

- データ駆動型手法と第一原理計算データを用いた材料探索
- 蓄電池の電極/電解液などの固液界面における第一原理分子動力学計算データの利用
- 電池材料や磁性材料など、様々な材料系におけるMI解析ノウハウの蓄積

研究内容



Li金属負極の実用化に向けた検討として、基礎的な負極電解液界面における構造やLiの拡散反応に関する分子サイズレベルの理解は、非常に重要であり、実験と計算の双方からのアプローチが必要不可欠である。Li金属負極/電解液界面構造を第一原理分子動力学計算により現在比較的性能よく動作するLiFSA/SL(スルホホン)高濃度電解液の負極界面での分解挙動を解明した。それまでは実験家に疑問視されていたSL溶媒の分解が、SL分子に含まれるS-O結合が解離し、解離した酸素原子がLi金属中に取り込まれて強く安定化することで起きることを計算により提案した。これはその後実験的に確認された。現在、Li負極でも分解されない電解液をMIを用いて探索している。電解液に限らず新材料の探索においては、いくつかの材料とその機能(物性)データがある程度用意した後、各材料の特徴量となる計測データや第一原理計算データを用いて機能の予測を行い、どのような特徴量が予測に有用かを抽出し、その特徴量を低コストなハイスループット計算や実験などを用いて求めることで新材料を探すパーチャルスクリーニングを行っている。

まとめ

材料探索のためのデータ駆動型手法利用と第一原理計算によるデータ創出およびメカニズム解明を実施している。複数の材料系における材料探索を行ってきており、これらのデータの連携と仮想的な材料の第一原理計算によるデータ蓄積により、外挿的な材料探索のための仕組みづくりを達成したいと考えている。

論文・特許

- NJ. Liu, T. Kaneko, J. Ock, S. Kondou, K. Ueno, K. Dokko, K. Sodeyama and M. Watanabe, *J. Phys. Chem. C* **127**, 5689-5701 (2023).
- T. Kaneko and K. Sodeyama, *Chem. Phys. Lett.* **762**, 138199 (2021).
- K. Sodeyama, Y. Igarashi, T. Nakayama, Y. Tateyama and M. Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 22585-22591 (2018).

マテリアルズ・インフォマティクスによる自律材料探索

Keywords データ科学, 機械学習, 自律材料探索, ハイスループット, マテリアルズ・インフォマティクス

主任研究員／Senior Researcher

岩崎 悠真 Iwasaki Yuma

✉ IWASAKI.Yuma@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/iwasaki_yuma



研究概要

近年、材料の多元素化・複合化・準安定相化などにより、材料探索空間は急速に拡大している。この巨大な空間を効率的に探索するため、我々は機械学習、材料シミュレーション、ロボティクスなどを組み合わせた自律材料探索システムの開発を進めている。このシステムは実行（材料合成やシミュレーション）と考察（機械学習による解析）を繰り返しながら、自律的に巨大材料空間全体を探索・把握し、特性の優れた新材料を発見することが可能である。汎用性にも優れ、様々な材料系に応用可能である。

新規性・独創性

- 次元圧縮等による自律探索に適した材料空間の設計
- 自律探索用の機械学習アルゴリズム
- ハイスループット第一原理計算による高速データ収集

研究内容



我々は大きく分けて2種類の自律材料探索システムを開発している。1つ目はロボット型自律材料探索システムである。ロボットが材料の合成と計測を自動的に行い、そこで得られたデータから機械学習により次に合成すべき材料およびプロセス条件を決定することでclosed loopを形成し、自律的に材料探索を進める。2つ目はシミュレーション型自律材料探索である。第一原理計算等の材料シミュレーションから得られたデータを機械学習で解析し、次に実行するシミュレーションの条件（組成・構造など）を決定するclosed loopで、コンピュータ内で自律的に材料空間を探索する。

まとめ

ロボット型自律材料探索システムとシミュレーション型自律材料探索システムを紹介した。これらの応用先は特定の材料系・特性の最適化に限定されず、様々な材料開発に応用可能である。このシステムにより、より多くの材料開発が加速可能であると考えられる。

論文・特許

- Y. Iwasaki, H. Jaekyun, Y. Sakuraba, M. Kotsugi and Y. Igarashi, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **2**, 365-371 (2022).
- Y. Iwasaki, R. Sawada, E. Saitoh and M. Ishida, *Communications Materials* **2**, 31 (2021).
- Y. Iwasaki, R. Sawada, V. Stanev, M. Ishida, A. Kirihaara, Y. Omori, H. Someya, I. Takeuchi, E. Saito and S. Yoroazu, *NPJ Comput. Mater.* **5**, 103 (2019).

SMILES-X: autonomous molecular compounds characterization for small datasets without descriptors

Keywords Cheminformatics, Small molecules, SMILES, Natural language processing, Machine learning, Attention mechanism, Small datasets

主任研究員 / Senior Researcher

ラムバール ギヨム Lambard Guillaume

✉ LAMBARD.Guillaume@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/lambard_guillaume

Research Summary

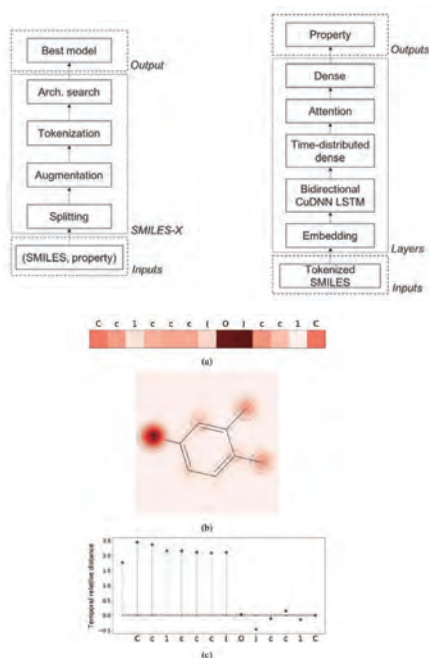
Key Takeaways:

- The SMILES-X is an autonomous pipeline that uses machine learning to predict physicochemical properties of molecular compounds, overcoming the challenges of small datasets and the need for task-specific descriptors.
- The SMILES-X achieves state-of-the-art results in predicting aqueous solubility, hydration free energy, and octanol/water distribution coefficient of molecular compounds.
- The SMILES-X is a valuable tool for materials scientists and chemists, providing interpretable predictions and improving the accuracy of physicochemical property inference.

Novelty / Originality

- The SMILES-X is an autonomous pipeline for molecular compounds characterization
- The SMILES-X is based on a neural architecture with a data-specific Bayesian hyper-parameters optimization
- The attention mechanism in the SMILES-X enables the interpretation of output predictions
- The SMILES-X shows state-of-the-art results in the inference of aqueous solubility, hydration-free energy, and octanol/water distribution coefficient of molecular compounds
- The source code for the SMILES-X is available at <https://github.com/Lambard-ML-Team/SMILES-X>

Research Contents



- The SMILES-X is a novel approach that tackles both the issue of small datasets and the difficulty of developing task-specific descriptors, making it a valuable asset in the toolkit of materials scientists and chemists.
- The SMILES-X can be used in various applications such as drug discovery, material design, and chemical synthesis. It can help researchers predict the physicochemical properties of molecular compounds accurately and efficiently, which can save time and resources.
- The marketability of the SMILES-X depends on its ability to accurately predict the physicochemical properties of molecular compounds and its ease of use. If the method proves accurate and efficient, it could be a valuable tool for researchers in materials science and related fields.
- The potential exit for the SMILES-X could be through licensing the technology to companies in materials science and related fields or through the development of a software tool that researchers can use to predict the physicochemical properties of molecular compounds.

F1: The SMILES-X pipeline

F2: Fixed skeleton of the neural architecture in the SMILES-X

F3: Visualisation of the importance of each token within the SMILES towards the final prediction of the property of interest. The illustration is done on the structure Cc1ccc(O)cc1C from the FreeSolv [31] dataset, with hydration-free energy as the corresponding property. The 1D (a) and 2D (b) attention maps show the projections of the attention vector α on the SMILES string and molecular graph, respectively. The redder and darker the colour is, the stronger is the attention on a given token. The temporal relative distance is shown in (c). The closer to zero is the distance value, the closer is the temporary prediction on the SMILES fragment to the whole SMILES prediction.

Summary

- The SMILES-X can be applied in various areas such as drug discovery, material design, and chemical synthesis to predict the physicochemical properties of molecular compounds accurately and efficiently.
- The SMILES-X can be integrated with other materials informatics methods to create a more comprehensive toolkit for researchers in materials science and related fields.

References

- G. Lambard, K. Yamazaki and M. Demura, *Sci. Rep.* **13**, 566 (2023).
- G. Lambard, T.T. Sasaki, K. Sodeyama, T. Ohkubo and K. Hono, *Scr. Mater.* **209**, 114341 (2022).
- G. Lambard and E. Gracheva, *Mach Learn: Science and Technology* **1**, 025004 (2020).

新規材料創成に向けたデータ駆動的方法論の構築・応用

Keywords マテリアルズインフォマティクス, データ駆動的方法, ベイズ推定, 機械学習, MCMC法

主任研究員／Senior Researcher

永田 賢二 Nagata Kenji

✉ NAGATA.Kenji@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nagata_kenji



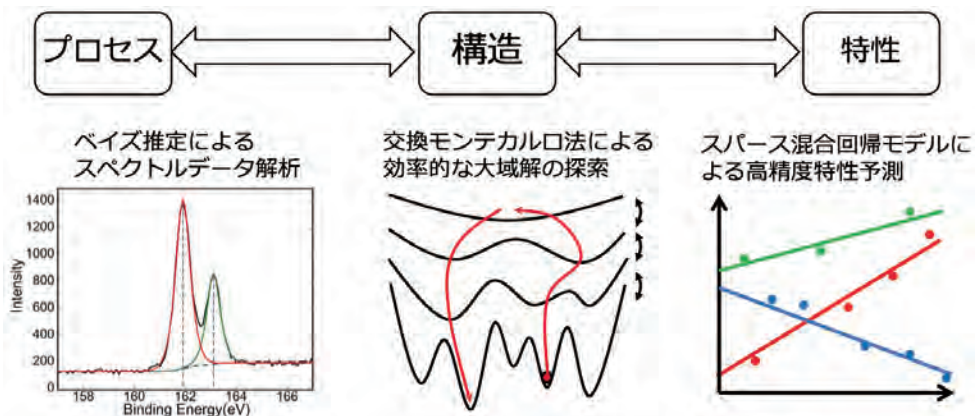
研究概要

Materials Genome Initiativeに代表されるように、材料開発にデータ科学や情報科学を取り入れる動きが国内外で盛んに行われている。NIMSでもデータプラットフォームなど材料に関する実験・計測データの収集を実施している。ここでは、こうした材料の実験・計測データの利活用を目的としたデータ駆動的方法の開発および応用を実施する。特に、材料設計に関わる組成やプロセス条件と、強度や延性、触媒反応や電気特性などの機能・特性の間を適切かつシンプルに回帰できるモデルを実現するために、実験・計測データからの特徴量の抽出、および予測モデルの構築をデータ駆動的方法により実施する。

新規性・独創性

- ベイズ的スペクトル解析による信頼区間つき推定評価
- 交換モンテカルロ法にもとづく近似的な全状態探索による特徴選択
- スパース混合回帰モデルによる予測モデル構築

研究内容



材料設計に関わるプロセス情報と材料の特性の間を繋ぐ役割を担う構造に関する特徴量をいかにして効率よくかつ精度よく抽出するかがデータ駆動に基づく材料開発の重要な課題である。特に、XPSやIR、XRDなどの分光データに対して、ベイズ推定によるスペクトル解析法を開発しピークパラメータのみならずピークの個数の推定およびそれらの推定精度・信頼区間の導出が可能となっている。また、特性の予測においては、構造材料などに代表されるようにいくつかの層構造が存在する系において、自動的に複数の層に対応する線形モデルを組み合わせるスパース混合回帰モデルを開発し、アルミ合金や鉄鋼などにおいて新規材料設計条件の提案に成功している。これら材料分野における物理や法則に基づくモデリングを柔軟に最適化に組み込む技術として、交換モンテカルロ法による効率的な探索法をキーテクノロジーとして用いることで、オーダーメイドな材料データ解析アルゴリズムの系統的な開発が可能となる。

まとめ

来たるデータ科学時代に対して、これまで蓄積されてきた材料学における知見を融合するための方法論としてベイズ推定を基本としたアルゴリズム開発は必須の技術となる。こうした事例を多数輩出し、データプラットフォームを介して広く産業界へと展開されることが今後期待される。

論文・特許

- R. Ueji, K. Nagata, H. Somekawa and M. Demura, *Scr. Mater.* **222**, 115028 (2023).
- A. Machida, K. Nagata, R. Murakami, H. Shinotsuka, H. Shouno, H. Yoshikawa and M. Okada, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **1**, 123-133 (2021).
- K. Nagata, R. Muraoka, Y. Mototake, T. Sasaki and M. Okada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 044003 (2019).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

Data-driven algorithms for materials innovation

Keywords Materials informatics, Machine learning, Natural Language Processing

研究員 / Researcher

ディーブ 冨 Dieb Sae

✉ DIEB.Sae@nims.go.jp 🌐 <https://samurai.nims.go.jp/profiles/moustafadiebsae>



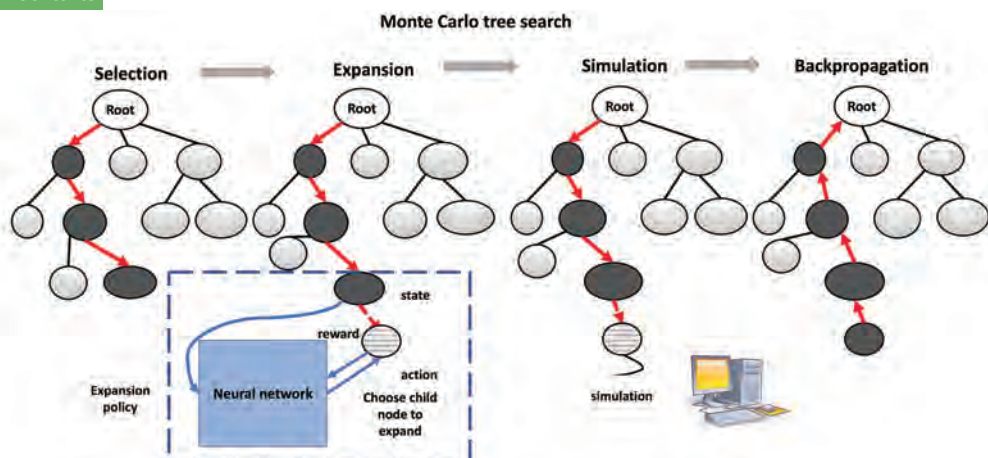
Research Summary

- Development of machine learning algorithms for materials design and discovery.
- Automatic construction of materials databases from related research papers using natural language processing.
- Development of profiling service for materials science researchers.
- Prediction of materials properties using regression methods.

Novelty / Originality

- Development of MDTs (Materials Design by Tree search) Python package for materials space exploration based on Monte Carlo tree search (MCTS) (<https://github.com/tsudalab/MDTs>).
- Development of visualization service for NIMS SAMURAI researchers catalogue to capture research output and connect researchers with similar research interest using natural language processing.

Research Contents



Materials design and discovery can be represented as selecting the optimal structure from a space of candidates that optimizes a target property. The selection is an iterative process, where selected candidate in one iteration is evaluated and feedback to the process for a more informed selection in the next iteration. Since the number of candidates can be exponentially proportional to the structure determination variables, the efficiency to obtain the optimal structure is a critical issue. We use Monte Carlo tree search (MCTS) approach in combination with expansion policy neural network to accelerate this process. MCTS has no tuning parameters and works autonomously in various problems. Additionally, it does not require pre- available training data and it is highly scalable making it good fit for large spaces problems such as the chemical and materials space.

Summary

- Optimization of the chemical compositions and heat treatment scheduling for new Ni-based superalloy for additive manufacturing using machine learning.
- Active-Learning-Driven Development of Platinum-Free Electrocatalysts for the Hydrogen Oxidation Reaction.

Thesis / Patent

- S. Dieb, K. Amano, K. Tanabe, D. Sato, M. Ishii and M. Tanifuji, *STAM-Methods* **1**, 2-11 (2021).
- T. M. Dieb and K. Tsuda, *Nanoinformatics*, 65-74 (2018).
- T. M. Dieb, S. Ju, K. Yoshizoe, Z. Hou, J. Shiomi and K. Tsuda, *STAM* **18**, 498-503 (2017).

計測データのDX技術とデータプラットフォームへの展開

Keywords DX技術, 計測データ, データプラットフォーム, データ駆動型解析, 材料情報学, MI

主席研究員／Chief Researcher

吉川 英樹 Yoshikawa Hideki

✉ YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_hideki



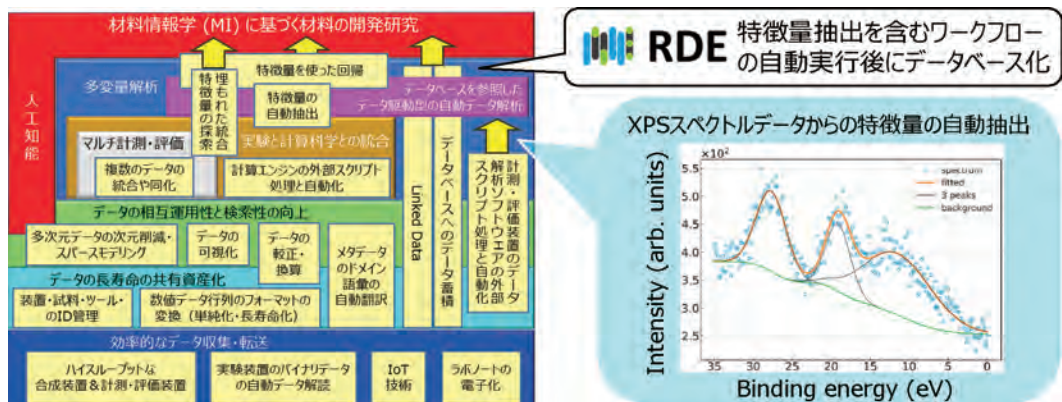
研究概要

分光スペクトルや顕微画像等を得る材料計測において、データ駆動型の自動データ解析を含むDX技術の開発とその普及のためのデータプラットフォームへの展開を行う。データ駆動型の自動解析の実現にあたっての大きな課題は、(1)データの統計ノイズを評価し属人性を排した自動データ解析技術と(2)計測装置のメーカー、機種、機関、操作者に依存してばらつく多数のデータを評価して(装置の違いに由来するデータのばらつきに影響されない)材料の本質的な情報を自動抽出する技術の2点である。ベイズ推定等の情報学と材料工学を融合してこの課題を解決する。またデータ駆動型の方法論を実現するためにデータの相互運用性を高める変換技術も必要となる。

新規性・独創性

- 計測データの統計ノイズを評価し属人性を排した自動データ解析技術
- 計測装置のメーカーや操作者等の違いに由来するデータのばらつきと試料材料の違いに由来するデータの違いを自動識別する技術
- 上記を実現するベイズ推定等の情報学と材料工学と分析機器学の融合
- データの相互運用性を高めるための装置出力ファイル内のメタデータや数値行列データの抽出・変換・蓄積の自動化技術
- 以上をNIMS内外に広く普及するデータプラットフォームの設計と構築

研究内容



材料研究における計測データのDX技術を実現するには、過去他機関のデータを含めて、多くの機関の多様な計測装置で日々生成されるデータについて、図に示すように収集・変換・校正・検索・特微量抽出・蓄積などの多段階層の複数の工程からなるワークフローを実現することが必要となる。しかもDX技術は、個人レベルに閉じた技術ではなく社会インフラの開かれた技術であるため、(1)属人性を排したワークフローの自動化や(2)ワークフローの多機関共用が要求される。NIMSでは、この要求に対して Research Data Express (RDE) というシステムをデータプラットフォーム DICE に構築し、国内の多数の研究機関で共用されている。そのRDEシステムでの特微量抽出の例として、図にあるX線光電子(XPS)スペクトルから特微量(ピークパラメータ)をベイズ情報量規準を用いて自動抽出する新機能が組み込まれて共用されている。

まとめ

分光スペクトルや顕微画像等を得る材料計測において、データ駆動型の自動データ解析を含むDX技術を開発し、その成果のNIMS内外への普及のためデータプラットフォームDICE上にRDEシステムとして展開している。分光スペクトル(例、XPS)から試料材料の特微量を自動抽出してデータ駆動型解析として再利用するニーズは多く、開発対象を他の計測手法にも拡大する予定。

論文・特許

- R. Murakami, Y. Harada, Y. Sonobayashi, H. Oji, H. Makino, H. Tanaka, H. Taguchi, H. Yoshikawa, et al., *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **264**, 147298 (2023).
- R. Murakami, H. Tanaka, H. Shinotsuka, K. Nagata, H. Shouno and H. Yoshikawa, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **245**, 147003 (2020).
- H. Shinotsuka, H. Yoshikawa, R. Murakami, K. Nakamura, H. Tanaka and K. Yoshihara, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **239**, 146903 (2020).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

自律的材料合成と新材料開発

Keywords 機能性材料, 自律的, インフォマティクス, ハイスループット実験, スパッタ

特命研究員／Senior Scientist with Special Missions

知京 豊裕 Chikyo Toyohiro

✉ CHIKYO.Toyohiro@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/chikyo_toyohiro



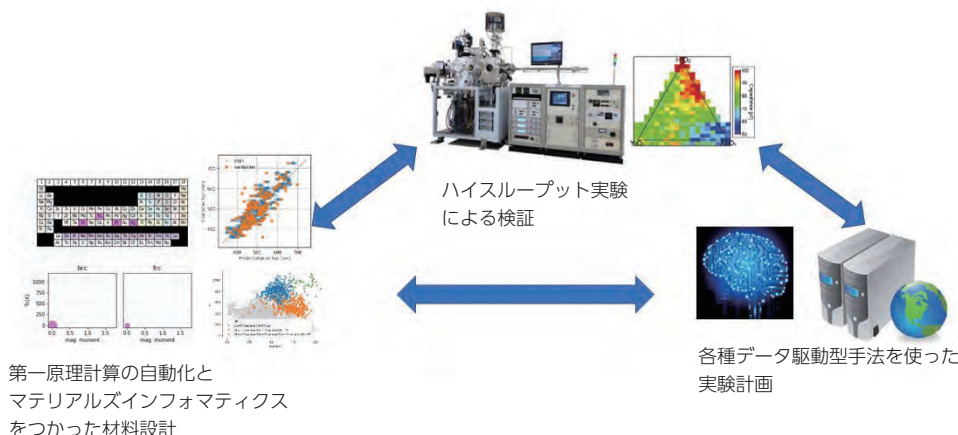
研究概要

機能性デバイスを実現する材料は多くの要素を同時に満たすことが求められる。そのために組成は多元化しプロセス条件も制限されている。このような状況下で新しい機能性材料開発を加速するためには、これまでにはない方法が必要である。NIMSではデータ駆動型手法を使って仮想空間で材料開発を進めてきた。ここでは、それを拡張して、自動計算と機械学習などのデータ駆動型手法を使って対象とする材料探索空間を拡張し、その中から有望な領域についてハイスループット合成・評価で実データを蓄積し、さらに次の計算・実験をデザインする。この材料探索ループを回すことで自律型材料探索の手法の開発をその有効性を実証する。

新規性・独創性

- 第一原理計算の自動化による材料探索空間の拡張とデータベース作成
- ハイスループット合成・評価条件の自動取得とデータベース化
- 機械学習・ベイズ最適化による自律実験デザイン
- 自律的材料探索手法の開発 (Discovery Loop)
- これまでより100倍効率的な材料開発

研究内容



第一原理計算の自動化で多元系金属間化合物であるハイレントロピー合金の組成と磁化特性、電気特性を含む各種特性を計算しデータベース化した。ここでは開発したアルゴリズムを使い自律的に構成元素を選択しFCCとBCCの結晶構造を仮定した場合の各種特性が自動計算される。このデータベースを使い、求める特性の材料の組成を機械学習で求めた。この中から有望な組成と構成元素をスパッタ法を使ったハイスループット合成で実際に作製し、各種計測装置で磁化特性や電気伝導性を計測した。自動計算とハイスループット合成条件、各種計測結果のデータはサーバーに蓄積され、機械学習やベイズ最適化で次の探索すべき材料空間を求めた。この過程を繰り返すことで求める電気抵抗を示す4元系ハイレントロピー合金を見つけることができた。今後は、一連の作業を自動化することで自律的材料探索が可能になると期待される。この方法は半導体関連材料や機能性薄膜材料などの開発に適用できると期待される。

まとめ

自動計算による材料探索空間の拡張、ハイスループット実験による実空間材料探索、データ駆動型手法による材料予測が新材料探索に有効であることを実証した。これからの材料開発は多元化すると同時に高機能化が求められ、材料探索空間は拡大する。この社会的要求にたいして、この方法は次世代半導体材料開発、機能性材料開発などに展開できると期待される。

論文・特許

- A. Yamashita, T. Nagata, S. Yagyu, T. Asahi and T. Chikyo, *Sci. Technol. Adv. Mater. : Methods* 2, 23-37 (2022).
- T. Nagata, Y. Suemoto, Y. Ueoka, M. Mesuda, L. Sang and T. Chikyo, *ACS Omega* 7, 19380-19387 (2022).
- 特許第3752534号 多元化合物作製装置 (2005)

マテリアルズインテグレーションによる材料研究DX

Keywords 計算材料工学, データ駆動, 逆問題, 産学連携プラットフォーム

グループリーダー / Group Leader

出村 雅彦 Demura Masahiko

✉ DEMURA.Masahiko@nims.go.jp ④ https://samurai.nims.go.jp/profiles/demura_masahiko



研究概要

高度化する社会課題に対応して迅速に材料開発を進めるために、オープンイノベーションの重要性が認識されつつある。特に、アカデミアの知恵をフル活用できれば、材料イノベーションは加速できる。我々は、マテリアルズインテグレーションという考え方のもと、Mintという材料設計システムを開発してきた。マテリアルズインテグレーションは、材料工学の4要素、プロセス、構造、特性、性能をデジタルで繋いで材料開発を加速するという考え方である。これを具現化したMintは、計算機シミュレーション、データ駆動手法を組み合わせ、様々な材料課題に対応したワークフローを組み上げることができる。このワークフローが、アカデミアの知恵をデジタルとしたものとしてストックされ、産学によるオープンイノベーションのプラットフォームとなる。

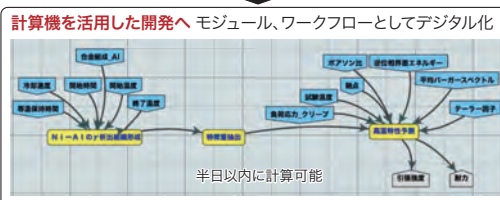
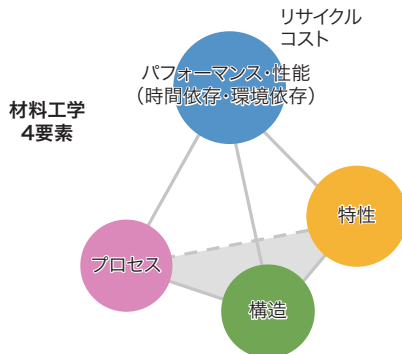
新規性・独創性

- さまざまな材料課題に対応できる柔軟性を有する。
- プロセスから構造、特性、性能を予測する順方向ワークフローを構築することで、欲しい性能から材料・プロセスを最適化する逆問題を解ける。
- アカデミアとの共同研究で得られたツール・予測手法をデジタル化することができ、webアプリケーションとして利用できる。

研究内容

マテリアルズインテグレーション: 材料工学手法にデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システム

→ 材料工学をデジタル化してオープンイノベーションを実現



Mint

マテリアルズインテグレーションを具現化した汎用的な材料設計システム
Materials Integration by Network Technology

Mintシステムは材料のプロセス、評価といった実験を計算に置き換えることで試行錯誤の時間とコストを短縮する。入力と出力の関係で記述されていれば、経験式、理論式、計算シミュレーション、機械学習モデル等、あらゆる予測モデルをモジュールとして実装できる。複雑な材料課題も、細かく文節化していくと、汎用性の高いモジュールに還元され、これを組み合わせたワークフローによって、プロセスから構造、特性、性能を予測することができる。順方向のワークフローをAI最適化手法と組み合わせることで逆問題を解くこともできる。Mintには現在、金属構造材料を中心としたモジュール・ワークフローが搭載されているが、アカデミアとの共同研究等で開発することにより、さまざまな材料課題向けの予測モデルを搭載可能である。

まとめ

Mintは、モジュールを組み合わせるワークフローを構成することで、さまざまな材料課題に対して、プロセスから構造、特性、性能を予測する順問題、欲しい性能から最適な材料・プロセスを提案する逆問題を解くことができる汎用の材料設計システムである。企業の材料開発に利用するためには、課題ごとに予測技術を開発してモジュールとして実装する必要がある。

論文・特許

- 出村 雅彦. *TETSU TO HAGANE-J Iron Steel Inst. Jpn.*, 490-500 (2023).
- M. Demura and T. Koseki, *Mater. Trans.* **61**, 2041-2046 (2020).
- 特許第7215710号 予測管理システム、予測管理方法、予測管理装置及び予測実行装置

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアークテクトニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

材料知識基盤の構築

Keywords 知識基盤, データベース, インフォマティクス, オントロジー, リポジトリ

主席研究員 / Chief Researcher

石井 真史 Ishii Masashi

✉ ISHII.Masashi@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ishii_masashi



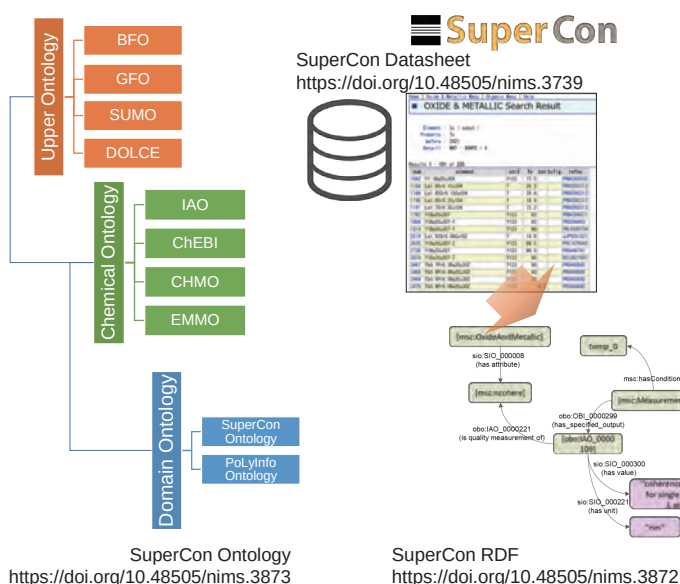
研究概要

データベース、リポジトリ、論文、報告書、ラボノートなど、様々な形態のデータがあふれている。これらのデータをいかに活用するかがデータ駆動型の材料研究開発のカギになっている。NIMSは、独自のデータベースMatNaviやデータリポジトリMDR (Materials Data Repository) などの多くの質の良いデータ源を構築し運用し続けている。材料データの機械可読化と統合による知識化は、人工知能の進捗と相まって、資源循環、環境問題、材料価格の高騰など材料を取り巻く社会的課題に対するソリューションを提供すると考えられる。ここでは、NIMS内外の材料データを統合した知識ベース、およびその構築の方法を提供する。

新規性・独創性

- 国際的な概念(オントロジー)を使ったNIMSデータベースのデータ構造の標準化
- 国際基準のデータ構造によるNIMS内外のデータとの連携
- 専門外の知識も取り込んだ知識ベースの構築
- 知識ベースによる社会課題の解決
- 社内データなど各所で埋もれたデータがNIMSデータにつながる方法の提供

研究内容



国際的な上位オントロジー Basic Formal Ontology (BFO) に準拠する材料オントロジーを構築した。上位オントロジーは、材料科学以外の学術分野を包含する概念であるため、NIMS外部のデータともつながる機械可読なデータ構造を設計できた。NIMSの高分子データベースPolyInfoや超伝導データベースSuperConなどのオントロジーを作成し、有機/無機を越えた共通データ形式ができることを立証した。これらのオントロジーに基づく Resource Description Framework (RDF) によるグラフデータベースを作成し、実用性を示した。実際、これによりPolyInfoで収録していない、バイオロジーデータとの連携が確立し、合成ポリマーを分解するバクテリアの情報を外部の巨大データベースから取得する統合データベースができた。統合データベースは、各自の専門を越えた知識の集約・利用を意味し、巨大な材料知識ベースができたといえる。統合データベースは多様な記述子を包含するため、様々な社会課題を考慮しながらターゲット物性を予測する機械学習が可能であり、実用上の障壁や機能性のメカニズムが説明できるモデルの構築が期待される。

まとめ

- 巨大知識ベースにつながる、NIMS材料オントロジーを作成し、実用性を実証した
- データアクセスのためのエンドポイントの作成を進めており、広い活用が近いうちに実現される
- オープン/クローズ戦略についても検討を進めている。様々なデータを適切に使い分け、材料研究を活性化したい

論文・特許

- M. Ishii and K. Sakamoto, *Sci Technol Adv Mater: Methods* **3**, 2223051 (2023).
- M. Ishii, *SuperCon Ontology in Materials Data Repository (MDR)* (2023), <https://doi.org/10.48505/nims.3873>
- M. Ishii, *SuperCon RDF Ver 1.1*, <https://doi.org/10.48505/nims.4216>.

超臨界地熱発電用耐熱材料の評価と開発

Keywords 再生可能エネルギー，地熱発電，ケーシング材，耐熱鋼，腐食，酸化，高温高圧，超臨界水，水蒸気，酸性

主幹研究員／Principal Researcher

戸田 佳明 Toda Yoshiaki

✉ TODA.Yoshiaki@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/toda_yoshiaki



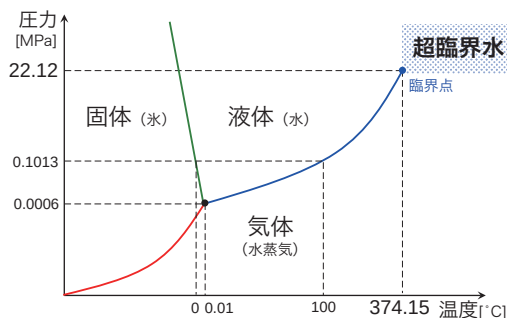
研究概要

超臨界地熱発電は二酸化炭素が発生しない再生可能エネルギーで、大型火力や原子力発電と同等の発電出力が得られ、他国の資源や昼夜・天候に依存することなくベースロード発電が可能であることから注目されている。この発電が利用する超臨界地熱流体は、酸化ケイ素等の固形不純物を含んだpH指数が2の酸性超臨界水であり、中性の熱水や水蒸気よりも金属材料を著しく酸化・腐食させることが予想される。そこで、固形不純物を含んだ酸性超臨界水による耐熱鋼の酸化・腐食試験を行う装置と方法を確立し、流体温度・圧力、不純物濃度やpH指数が耐熱鋼の酸化・腐食挙動に及ぼす影響を調査して、超臨界地熱流体を採取するための抗井ケーシング管に用いる材料を開発する。

新規性・独創性

- 超臨界水酸化試験装置の設計により650℃で23MPaまでの中性超臨界水による酸化試験
- 固形不純物を含んだ酸性超臨界水による耐熱鋼の酸化・腐食試験を行う装置と方法の確立
- 流体温度・圧力、不純物濃度やpH指数が耐熱鋼の酸化・腐食挙動に及ぼす影響の系統的な調査
- 様々な地熱流体条件・環境における耐熱鋼の酸化・腐食挙動を予測するための材料モデリング技術の開発
- 超臨界地熱発電用坑井ケーシング材の選定・開発・設計およびカーボンニュートラルの実現

研究内容



超臨界地熱発電は、金属管の内枠（ケーシング）が付けられた坑井を地上から掘削し、火山地帯の深部3～5 kmに存在する400～500℃で30 MPa以上の超臨界状態（上図左）にある地熱流体を自噴させ、蒸気タービンを回して発電する方法である。しかし、金属材料の超臨界水に対する耐酸性や耐腐食性に関する研究例やデータはほとんど無く、pH指数や不純物の影響を調べた結果は皆無である。そのため、超臨界地熱発電のケーシング材の選定も進んでいない。

そこで、圧力容器内で金属材料試験片を超臨界水に曝露できる超臨界水酸化試験装置（上図右）を設計し、9Crフェライト耐熱鋼と18Cr-8Ni オーステナイト耐熱鋼の650℃における水蒸気－亜臨界水－超臨界水による酸化・腐食挙動を調査し、各材料の酸化速度定数の圧力依存性を決定した。また、種々の量の酸素を溶解させたチタン材料を500℃の超臨界水に曝露して酸化挙動を調査した結果、2 mass%までの酸素溶解は純チタンの超臨界水酸化に影響しないことを明らかにし、スクラップチタンが超臨界地熱発電プラントの高温構造部材に有効であることを示した。

今後は、酸性で固形不純物を含んだ、より地熱流体の実態に近い超臨界水による金属材料の酸化・腐食挙動の調査が必要である。しかし、酸性超臨界水を保持する圧力容器そのものが著しく酸化・腐食する恐れがあるため、試験片のみが酸性超臨界水に触れるように工夫した装置を設計・開発し、流体温度・圧力、不純物濃度やpH指数が耐熱鋼の酸化・腐食挙動に及ぼす影響を系統的に調査したい。

まとめ

超臨界地熱は国内に豊富に存在すると予想され、昼夜・天候に関係無く利用できる再生可能エネルギーであるため、本研究により超臨界地熱流体の種々の条件が金属材料の酸化・腐食挙動に及ぼす影響を系統的に解明でき、超臨界地熱発電の坑井ケーシング材の設計に貢献できれば、カーボンニュートラルの実現に向けて大きく前進すると期待される。

論文・特許

- Y. Toda, Y. Nakamura, N. Harada, A. Kaseya, N. Kobata, Y. Yamabe-Mitarai and O. Umezawa, *Mater. Sci. Eng. A* **797**, 140104 (2020).
- M. Shibuya, Y. Toda, K. Sawada, H. Kushima and K. Kimura, *Mater. Sci. Eng. A* **652**, 1-6 (2016).
- Y. Toda, M. Auchi, M. Shibuya, K. Sawada, H. Kushima and K. Kimura, *Energy Materials 2014*. John Wiley & Sons, Inc., ISBN 9783319485980 (2014).

計算機を活用した材料研究・開発

Keywords 計算機支援工学, マルチスケールモデリング, 有限要素法, 数値最適化

主幹研究員／Principal Researcher

渡邊 育夢 Watanabe Ikumu

✉ WATANABE.Ikumu@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/watanabe_ikumu



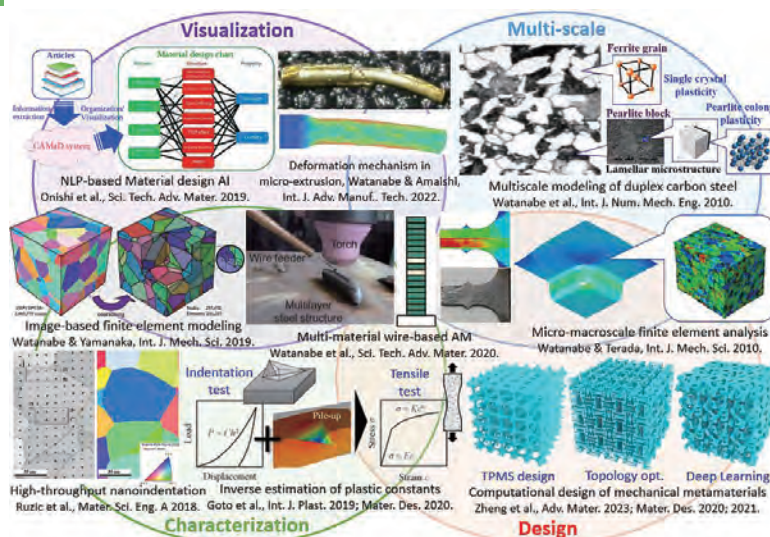
研究概要

計算機を積極的に活用して研究・開発を進めるための枠組み計算機支援工学 (CAE; Computer Aided Engineering) はものづくりを飛躍的に効率化した。本研究では、この枠組みを材料研究・開発へ活用・展開するとともに、マルチスケールな新しい枠組みとして発展させるための研究に取り組んでいる。

新規性・独創性

実験・理論・計算・データ科学を組み合わせる新しい手法を開発する。特に、計算機支援工学の特長を活かし、可視化、特性評価、マルチスケール、設計に注目し、プロセスを考慮した材料微視構造および特性変化のモデリング、実験と数値シミュレーションを連携したハイスループット特性評価手法、深層学習を活用した材料設計AIなどの開発に取り組んでいる。

研究内容



- 材料設計では、材料特性の発現をそのメカニズムの源である材料微視構造およびそれを制御するためのプロセスと関連づけて考えることが有効である。自然言語処理技術を用いて無数の論文から知識抽出し、この材料設計を支援する材料設計AIを開発した。
- 異なる計算手法を階層的に連携させることで、一般的な炭素鋼のマクロ力学特性を原子スケールから記述した。さらに、塑性加工プロセスと関連付けることに成功した。
- 押し込み試験から引張試験相当の応力-ひずみ関係を推定する手法を開発し、複相積層造形の不均一構造へ適用することで、造形試料の変形機構を評価した。
- 三次元幾何関数、トポロジー最適化法、深層学習を用いた最適設計といったメカニカルメタマテリアルを設計するための手法を開発している。

まとめ

航空機・自動車用構造材料を中心に原子レベルの材料挙動から成形加工プロセスまで複数のスケールに渡る現象を数理モデルとして扱い材料挙動および材料特性を評価・予測する。数理モデルと数値最適化法を組み合わせることで新たな材料研究・開発指針を提示するアプローチの開発を目指す。

論文・特許

- X. Zheng, T. T. Chen, X. Jiang, M. Naito and I. Watanabe, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **24**, 2157682 (2023).
- T. T. Chen and I. Watanabe, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* **2**, 416-424 (2022).
- I. Watanabe and K. Terada, *Int. J. Mech. Sci.* **52**, 343-355 (2010).

AE法による材料製造加工のインプロセスモニタリング

Keywords アコースティック・エミッション法, Acoustic Emission, 非破壊評価, 非破壊検査, インプロセスモニタリング, IoT

主任研究員／Senior Researcher

伊藤 海太 Ito Kaita

✉ ITO.Kaita@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/ito_kaita



研究概要

製造加工プロセスに関わる研究開発や品質管理の現場では「いつ・どこ」で不良が発生したかの把握が重要だが、加工後の試料観察やX線検査は工数が高み、一方で加工中のリアルタイム情報は非常に限定されている。本研究は、ノイズに弱いためプロセスモニタリングに適さないとしてきたアコースティック・エミッション (AE) 法による微小な不良の検出を、独自開発の計測システムで実用化した。このシステムは現場志向を徹底しており、バッテリー駆動の小型無線IoTボードでも簡便に試せるため、導入のハードルも低く抑えている。積層造形・接合・溶射をはじめ豊富な実績があり、また特定材料に依存せず金属・CFRP・セラミックスなど広汎に利用できることも特徴である。

新規性・独創性

- 独自開発のAE計測装置で材料の製造加工プロセス (高ノイズ環境) にも対応できる
- バッテリー駆動・ワイヤレス・軽量小型で、容易に現場で試用できる
- 連続波形を保持しているため、再計測無しに再解析できる
- 微小欠陥が「いつ・どこ」に起きたか、リアルタイムに判明する
→ 数値シミュレーションや AI による予測の検証、プロセス制御にも使える

研究内容

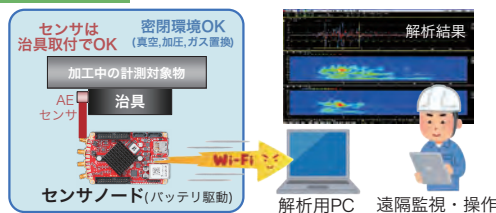


図 1

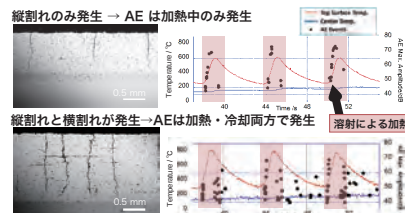


図 2

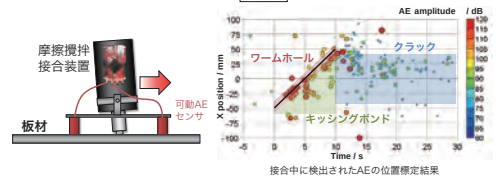


図 3

AEと欠陥要因をリンクできれば、以降はAEの検出結果から欠陥要因を推定できる

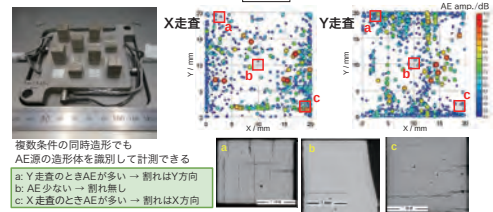


図 4

バッテリー駆動で全波形を無線送信して解析できるAE計測装置を開発し、現場で難計測となりがちな密閉環境のほか、回転体や大型部材のモニタリングにも対応した。(図1)

セラミックの遮熱コーティングの溶射では応力分散に有用な縦割れと有害な横割れを区別して検出した。(図2)

摩擦攪拌接合ではAEをタイミングと位置から要因別に分類し検出できた。(図3)

積層造形では複数同時造形のモニタリングで個々の造形体内部のき裂をマッピングできた。(図4)

今後も、特定の材料や加工法に限定されず、幅広く製造加工における不良検出や削減、加工条件の最適化などの課題を解決できるツールとして磨いていきたい。

まとめ

固体材料の製造加工で「高速変形」(き裂の発生や進展、摩擦、体積変化のある相変態など)をとまぬ異常であれば、AEとして検知できる可能性があり、簡便かつリアルタイムの異常検出が期待できる。

導入のハードルが低いので、まず試してみて有効性を確認してから本格導入を検討できる。

論文・特許

- K. Ito, M. Kusano, M. Demura and M. Watanabe, *Addit. Manuf.* **40**, 101915 (2021).
- K. Ito, H. Kuriki, H. Araki, S. Kuroda and M. Enoki, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **15**, 035007 (2014).
- K. Ito and M. Enoki, *Mater. Trans.* **48**, 1221-1226 (2007).

大規模データベースStarrydataで材料科学の世界を俯瞰

Keywords マテリアルDX, データベース, マテリアルズ・インフォマティクス, 新物質探索, 無機結晶構造, 熱電材料, 磁石, 準結晶, 超伝導, 電池材料

主任研究員 / Senior Researcher

桂 ゆかり Katsura Yukari

✉ KATSURA.Yukari@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/katsura_yukari



研究概要

世界の材料科学データを構造化して、デジタル形式で提供することで、世界の材料科学研究を加速できるインフラを作りたいと考えている。このため、過去に出版された1万本以上の論文から材料科学の実験データを収集するチームを作り、世界の材料科学者が自由に活用できるオープンデータベースStarrydataを公開している。さまざまなデータセットを用いたMaterials Informatics (MI)の新規手法の開発に取り組むとともに、実験系研究者の共同研究による大規模新物質探索にも取り組んでいる。

新規性・独創性

- 1万本以上の論文のグラフ画像から5万試料以上の実験データを収集
- 試料単位で材料物性の2次元データ、化学組成と製法などの情報を収録
- 引用だけで無償で利用できるユーザー参加型のオープンデータベース
- 企業などとの共同研究でデータ収集対象やデータベース構造を設計
- データ科学を生かした新物質探索支援ツールを開発

研究内容

数万種類の物質から目的の機能を持った新物質を見つけるには、材料科学全体を見渡せる俯瞰的な視野が必要となる。Materials Informatics (MI)は、その思考をアシストできる新しい研究手法である。機械学習などのデータ科学から候補を洗い出し、研究者がさまざまな角度からデータを見ることで、直観と洞察に基づく材料開発ができるようになると期待している。

本研究者らが開発したStarrydata2 webシステム (<https://www.starrydata2.org>) は、図のように論文中のグラフ画像から材料特性の実験データを収集した大規模オープンデータベースである。熱電材料や磁石材料などさまざまな無機機能材料について、特性の良し悪しに基づく選別を行わず試料単位でデータを収集することで、データ数とバイアスの低減を両立したMI用のデータセットを構築している。これを用いて目的別に使いやすく加工したデータセットや、その閲覧用Webシステムを開発している。これにより世界中の材料科学者が、これまでに報告されてきた試料組成の分布と、各材料系の特性の特徴とばらつきを俯瞰するとともに、それぞれ独自のアプローチでMIの研究を行うことができる。

Starrydataでは、共同研究先の企業や研究グループの支援を受けて専属のデータ収集者を雇用することで、自動と手動の併用による正確なデータ収集を目指している。共同研究先には、目的に合わせた対象論文の選定やデータベース設計と、他所に先駆けた実験データMIのノウハウ共有などのメリットを提供している。

論文データ以外にも、大規模結晶構造データに基づく結晶構造のモデリングツールなど、新物質探索に役立つさまざまなWebツールの開発に取り組んでいる。合成実験と第一原理計算の研究経験を活かして、世の中の膨大な知識を俯瞰できるツールとデータの提供を通して材料研究への貢献を目指している。



まとめ

- 世界の材料科学の実験データへのデジタルアクセスの実現を目指すオープンデータベース
- データ科学的視点で材料開発を行う研究者人口の増大と、それによる新規材料開発の加速が目標
- 世界の研究者と企業が協力して、論文などの実験データを共有・集積していく文化の醸成を目指す

論文・特許

- 桂 ゆかり, 応用物理 **80**, 400-404 (2020).
- Y. Katsura, M. Kumagai, T. Kodani, M. Kaneshige, Y. Ando, S. Gunji, Y. Imai, H. Ouchi, K. Tobita, K. Kimura, et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 1603885 (2019).

フォノン計算に関する研究と科学計算ソフトウェア開発

Keywords 第一原理計算, フォノン, 科学計算ソフトウェア

グループリーダー / Group Leader

東後 篤史 Togo Atsushi

✉ TOGO.Atsushi@nims.go.jp ① https://samurai.nims.go.jp/profiles/togo_atsumshi



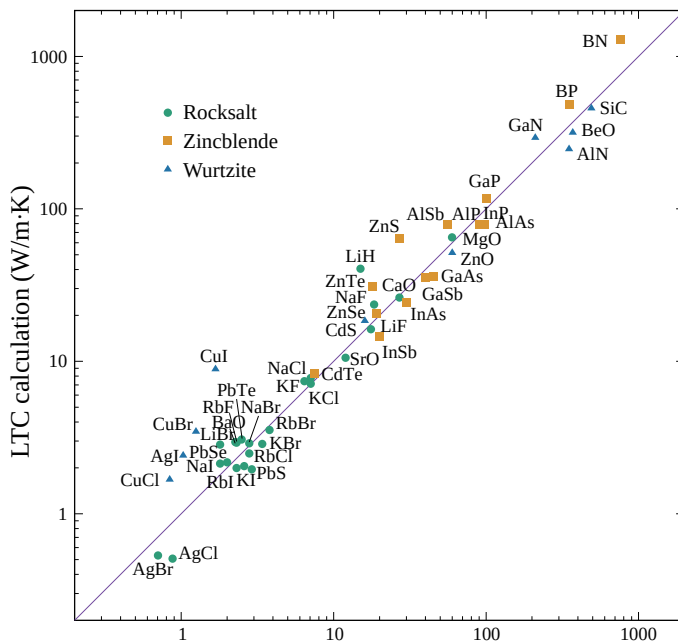
研究概要

コンピュータパワーの増加で計算機シミュレーションにより材料特性を精度良く予測することが可能になってきた。既存のソフトウェアで行えない材料特性予測を計算機シミュレーションにより行いたい場合はソフトウェアの開発が必要となる。そのために理論計算手法研究や継続的な科学ソフトウェア開発が必要とされている。

新規性・独創性

- 多様なフォノン物性の予想ができる。
- オープンなシミュレーションソフトウェア開発体制をとっている。
- シミュレーションソフトウェアがAPIによる高い利便性を備えている。

研究内容



- 結晶の格子比熱、熱膨張率、格子熱伝導率といったフォノン物性に関する系統的な予測ができる。
- 結晶構造からフォノン物性計算を自動的に行えるような自動計算環境を整備する方向で研究開発を進めている。

まとめ

- 実用化への可能性：計算機シミュレーションの材料スクリーニングへの応用
- 実用化に至るまでの課題：計算機シミュレーションを実行し、結果を解釈できる人材の養成

論文・特許

- A. Togo, L. Chaput, T. Tadano and I. Tanaka, *J. Phys. Condens. Matter* **35**, 353001 (2023).
- A. Togo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**, (2023).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノアーキテクトゥラ材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

次世代の第一原理電子状態計算の手法開発と応用展開

Keywords 第一原理量子モンテカルロ法, 第一原理電子状態計算, ハイスループット計算, ソフトウェア開発

独立研究者 / Independent Scientist

中野 晃佑 Nakano Kosuke

✉ NAKANO.Kosuke@nims.go.jp 🌐 https://samurai.nims.go.jp/profiles/nakano_kosuke



研究概要

第一原理量子モンテカルロ法 (ab-initio Quantum Monte Carlo method)は、モンテカルロ法を利用して多体シュレーディンガー方程式を数値的に解くことで物質の電子状態を計算する方法である。本手法は、現在最も普及している第一原理計算手法である密度汎関数法や波動関数法の難点を解消する、次世代の厳密計算手法として期待されている。基礎理論が20世紀初頭に提案された後、21世紀になり大型並列計算機が発達したことにより、モンテカルロ法を利用することに起因する原理的な問題であった統計誤差の問題が大幅に緩和され、実用化が急激に進んだ分野である。エクサスケール級スーパーコンピュータとの相性がよく、現在、世界中で熾烈な開発競争が始まっている。

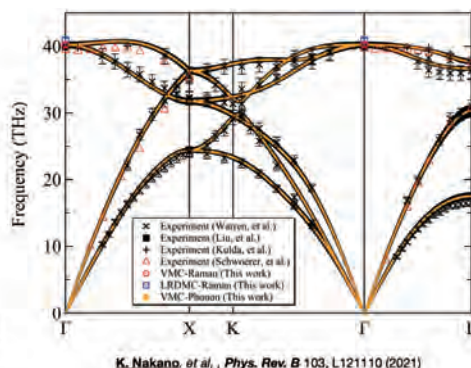
新規性・独創性

- 第一原理量子モンテカルロ法を実装するソフトウェアの開発
- ハイスループット計算の実現
- フォノン分散や分子動力学を可能とするフォースの計算
- スレーター行列を超えるフレキシブルな多体波動関数の実装

研究内容



筆者が開発する第一原理量子モンテカルロ法のパッケージ群



第一原理量子モンテカルロ法によるダイヤモンドのフォノン計算

筆者は、多くの海外の研究者と協働し、第一原理量子モンテカルロ法分野における新規理論の研究を行うと共に、それらの理論を実装したソフトウェアパッケージ「TurboRVB」の開発を行っている。現在は、国内(富岳など)、及び国外(Leonardoなど)の大型高速計算機群を活用し、第一原理量子モンテカルロ法の物性物理学分野、材料科学分野での応用研究も積極的に行っている。第一原理量子モンテカルロ法の応用的な観点からの特徴は、密度汎関数計算と異なり、交換相関汎関数のような(半)経験的なパラメータを有しない点である。密度汎関数法では精度に不安にある2次元層状物質等を対象に、応用展開を進めている。TurboRVBの特徴の1つは、原子に働く力(フォース)が計算可能な点である。第一原理量子モンテカルロ法では、原子に働く力のような微量量の算定が、特に固体周期系に対して難しいという問題を解決した点である。この特徴により、第一原理量子モンテカルロ法を利用したフォノン分散や分子動力学の計算も可能となっている。

まとめ

第一原理量子モンテカルロ法は、モンテカルロ法を利用するという特徴から、並列化効率が実用上もほぼ100%となり、ムーアの法則の恩恵を最大限享受することが可能であり、エクサスケール級スーパーコンピュータとの相性が非常に良い。近年のハードウェア、特にCPUコア数の急激な成長により、密度汎関数法で行われているような、ハイスループット計算が、第一原理量子モンテカルロ法で実行可能となりつつある。最近では、そのようなハイスループット計算を実現するためのソフトウェアパッケージ「TurboGenius」の開発にも力を入れている。

論文・特許

- K. Nakano, T. Morresi, M. Casula, R. Maezono and S. Sorella, *Phys. Rev. B* **103**, L121110 (2021).
- K. Nakano, C. Attaccalite, M. Barborini, L. Capriotti, M. Casula, E. Coccia, M. Dagrada, C. Genovese, Y. Luo, et al., *J. Chem. Phys.* **152**, 204121 (2020).
- K. Nakano, R. Maezono and S. Sorella, *Phys. Rev. B* **101**, 155106 (2020).

材料研究に特化したデータ駆動型アルゴリズム開発

Keywords マテリアルズ・インフォマティクス手法, 材料探索用人工知能, ブラックボックス最適化, 自律自動実験

チームリーダー／Team Leader

田村 亮 Tamura Ryo

✉ TAMURA.Ryo@nims.go.jp 地球 https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamura_ryo



研究概要

物質・材料科学では多くのデータが日々生み出されており、データ駆動型手法で解析することで、所望の特性を有すると期待される材料の提案や、材料設計指針の構築ができます。既存のデータ駆動型手法をただ単に適用するだけでなく、ニーズに合わせた適切なアルゴリズムを考案・適用することで、新材料探索・開発が加速されます。これまで、材料探索用人工知能(AI)として利用できるブラックボックス最適化手法をはじめとして、多くの材料研究に特化したデータ駆動型アルゴリズムを開発し、OSSとして公開してきました。

新規性・独創性

- ベイズ最適化PythonパッケージPHYSBOの開発
- 相図・状態図作成効率化手法PDCの開発とWebアプリケーションAIPHADの公開
- ロボット実験と材料探索用AIをつなぐミドルウェアNIMS-OSの開発
- 量子アニーリング・イジングマシンを利用した材料探索手法の開発
- 嗅覚センサー、リートベルト解析等、計測システムを対象としたデータ解析手法の開発

研究内容

■ ベイズ最適化：PHYSBO

PHYSBO

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/physbo/>

■ 相図作成効率化：PDC

AIPHAD

<https://aiphad.org/>

■ イジングマシン利用：FMQA

<https://github.com/tsudaib/fmqa>

■ ロボット実験：NIMS-OS

<https://github.com/nimsos-dev/nimsos>

少ないデータ数からスタートし、機械学習による特性予測と、予測に基づく実験を交互に繰り返すことで、徐々にデータを増やしながら材料特性の最適化を行う研究手法をブラックボックス最適化と呼びます。これは材料探索を行う際に、次に実験すべき材料を提案するための材料探索用人工知能(AI)として利用できます。ブラックボックス最適化手法のうち、材料分野で最も利用されているベイズ最適化を、簡単に実行できるPythonパッケージPHYSBOを開発し、OSSとして公開しています。また、材料候補が膨大な場合、ベイズ最適化では長時間計算が必要となってしまう問題がありました。これを解決するために、量子アニーリング・イジングマシンを利用したブラックボックス最適化手法FMQAも開発してきました。さらに、材料研究では、材料特性の向上だけでなく詳細な相図・状態図を描きたいという研究ニーズがあります。このニーズに対応するために、相図・状態図作成用のブラックボックス最適化手法PDC(Phase Diagram Construction)を開発し、これを簡単に実行できるWebアプリケーションAIPHADも公開しています。これらの材料探索用AIとロボット実験を人の介入なくつなげることで、自律自動材料探索が実現できます。そこで、人の介入しない自律自動材料探索システムを実現するためのミドルウェアとして、NIMS-OS(NIMS Orchestration System)を開発し、公開しています。NIMS-OSでは、ロボット実験、材料探索用AIをそれぞれモジュールとして扱うことで、様々な組み合わせで、自律自動材料探索を実施できます。

まとめ

開発してきたデータ駆動型手法を用いることで、合金材料、磁性材料、有機分子材料、ポリマー材料、メタマテリアル材料、Liイオン電池材料、太陽電池材料、電解質材料などを対象とした応用研究、嗅覚センサー開発、リートベルト解析の自動化などを実施してきました。開発手法はさまざまな材料開発基盤で活用できるため、データ駆動型手法開発を通して革新的材料開発に貢献できると考えています。

論文・特許

- R. Tamura, K. Tsuda and S. Matsuda, *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods* **3**, 2232297 (2023).
- 田村 亮, 寺山 慧, 勝部 涼司, 野瀬 嘉太郎, *応用物理* **91**, 96-100 (2022).
- R. Tamura, T. Osada, K. Minagawa, T. Kohata, M. Hirotsawa, K. Tsuda and K. Kawagishi, *Mater. Des.* **198**, 109290 (2021).

エネルギー・環境材料

電子・光機能材料研究

磁性・スピントロニクス材料

構造材料

ナノエレクトロニクス材料

高分子・バイオ材料

マテリアル基盤

索 引

アルファベット順

Name	名前	研究課題 / Title	Page
A			
Abe Hideki	阿部 英樹	水素を造る触媒を創る	35
Abe Taichi	阿部 太一	状態図の熱力学解析とデータベース構築	189
Adachi Yutaka	安達 裕	酸化物半導体薄膜の雰囲気ガス応答特性の向上	65
Aimi Junko	相見 順子	高分子のナノ構造制御による有機エレクトロニクス材料開発	330
Amekura Hiroshi	雨倉 宏	超高エネルギーイオン照射効果の中エネルギーで実現!	32
Arafune Ryuichi	荒船 竜一	表面ダイナミクスの分光観測と制御	213
Arai Masao	新井 正男	第一原理的手法による電子構造解析	379
Arai Shunto	荒井 俊人	ソフトマターの配列制御と電子・光機能	334
Ariga Katsuhiko	有賀 克彦	百万倍の感度でターゲットをセンシングできる分子膜	272
Arisawa Shunichi	有沢 俊一	走査 SQUID 顕微鏡を利用した材料開発	39
B			
Bandyopadhyay Anirban	バンディオパダヤイ アニルバン	Organic helical nanowire based neuromorphic quantum computer	269
Banno Nobuya	伴野 信哉	超伝導技術の社会実装	40
Belik Alexei	ベリック アレクセイ	Development of ferroelectric and multiferroic perovskite materials	203
C			
Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスィン ワッチャロップ	実験化学とデータ科学の融合による設計的ナノ空間材料合成	255
Chen Guoping	陳 国平	再生医療のための高分子足場材料の開発	302
Chen Jun	陳 君	カソードルミネッセンスによる Mg 注入 GaN の評価	101
Chikyo Toyohiro	知京 豊裕	自律的材料合成と新材料開発	388
Cretu Ovidiu	コレツ オヴィヂュ	Novel microscopy techniques for advanced characterization	349
Custance Oscar	クスタンセ オスカル	High-resolution scanning probe microscopy applied to technologically relevant materials	362
D			
Da Bo	達 博	Heuristic data-driven spectral analysis for nanomaterial information embed in the background	377
Demura Masahiko	出村 雅彦	マテリアルズインテグレーションによる材料研究 DX	389
Deng Xiao	鄧 驍	鉄、木材を食害する電気細菌の検出と制御の技術開発	315
Dieb Sae	ディーブ 冴	Data-driven algorithms for materials innovation	386
Doi Kotaro	土井 康太郎	高酸素反応促進技術による金属材料の腐食・防食研究	162
E			
Ebara Mitsuhiro	荏原 充宏	スマートポリマーを用いた医療材料の創製	305
Ebina Yasuo	海老名 保男	新規ナノシートの合成と高機能化	247
El-Safty Sherif	エルサフティ シェリフ	Hierarchical mesostructures for environment & healthcare	308
Emura Satoshi	江村 聡	新規加工熱処理によるチタン系材料の組織制御	164
Estili Mehdi	エスティリ メーディ	CNT-MXene membranes for electrochemical energy storage applications	85
F			
Fudouzi Hiroshi	不動寺 浩	高品質コロイド結晶薄膜塗工とスマート構造色機能材料	97
Fujii Hiroki	藤井 宏樹	MgB ₂ 超伝導線材の低温焼結	29
Fujii Kazuko	藤井 和子	新規機能性無機 - 有機ハイブリッドポリマーの創製	328
Fukata Naoki	深田 直樹	半導体ナノ構造材料の機能化とデバイス応用	231
Furuse Hiroaki	古瀬 裕章	結晶粒制御による異方性レーザーセラミックス	86
Furuya Yoshiyuki	古谷 佳之	高強度金属材料のギガサイクル疲労特性評価	168
G			
Goto Atsushi	後藤 敦	光照射 NMR 測定技術の開発と応用	363

Name	名前	研究課題 / Title	Page
Goto Masahiro	後藤 真宏	ハイスループット材料探索によるエネルギー変換材料の開発	262
Gutierrez Urrutia Ivan	グティエレス ウルティア イヴァン	Novel 2D/3D characterization methods for Steel science	176
H			
Hara Toru	原 徹	電子顕微鏡による微細組織解析技術の高度化	186
Harada Takayuki	原田 尚之	電子機能を示す薄膜ヘテロ構造の探索	284
Harano Koji	原野 幸治	電子顕微鏡による映像分子科学および分子集合体科学の展開	347
Hase Masashi	長谷 正司	磁場中中性子回折による磁性材料研究	202
Hashi Kenjiro	端 健二郎	高温 NMR の開発と材料分析への応用	366
Hashimoto Ayako	橋本 綾子	試料ホルダーを用いたその場 TEM 観察	353
Hatakeyama Tomotaka	畠山 友孝	レーザー粉末床溶融結合法による耐熱鋼の組織制御	166
Hayakawa Masao	早川 正夫	マテリアル循環を実現するリマニュファクチャリング技術の開発と信頼性向上	170
Hayakawa Ryoma	早川 竜馬	分子機能を活用した電子デバイスの開発	207
Hayami Wataru	速水 渉	ネットワーク物質の創製と新規物性の探索	235
Hayase Gen	早瀬 元	柔軟モノリス型多孔体の簡易合成と多目的応用	249
Hayashi Hironobu	林 宏暢	ボトムアップ的2次元・3次元ナノ材料創成と機能開拓	361
He Dongfeng	何 東風	高感度磁気センサと非破壊検査技術研究	154
Henzie Joel	ヘンジー ジョール	Functional nanoscale metals	270
Higuchi Masayoshi	樋口 昌芳	メタロ超分子ポリマーの開発	325
Hill Jonathan	ヒル ジョナサン	Synthesis of functional organic chromophores	268
Hirai Takamasa	平井 孝昌	外場によるアクティブな熱エネルギー制御機能・原理の創出	120
Hiromoto Sachiko	廣本 祥子	腐食メカニズムに基づく耐食 / 耐水素脆性被膜の開発	161
Hirosaki Naoto	廣崎 尚登	サイアロン蛍光体の材料探索と LED への応用	45
Hirota Noriyuki	廣田 憲之	磁気力を利用した物質挙動制御と物質分離	82
Honda Hiroshi	本田 博史	積層造形装置用のレーザー吸収率測定装置の開発	156
Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	バイオミメティクスによる可逆的インターコネクション	150
Hosono Hideo	細野 秀雄	独自のコンセプトによる新物質・新機能の探索	195
Hu Xiao	古月 暁	半導体トポロジカルフォトニクスの開拓	229
I			
Ichinose Izumi	一ノ瀬 泉	低コスト CO ₂ 回収システムの開発	340
Ide Yusuke	井出 裕介	アクア鉄を用いた新材料開発	253
Iguchi Ryo	井口 亮	高速熱計測技術を用いた磁性体・誘電体の熱利用方法の開拓	119
Ii Seiichi	井 誠一郎	定量的物性測定技術の構築と構造材料界面への応用	187
Iimura Soshi	飯村 壮史	軌道間相互作用に基づく材料設計と新規電子・光・化学機能の開拓	73
Ikeda Ayako	池田 亜矢子	組成傾斜バルク試料を用いたハイスループット測定技術の開発	149
Ikeda Taichi	池田 太一	イオン伝導性高分子材料と分子機械の融合	327
Imamura Gaku	今村 岳	センサ応答からの情報抽出: ニオイセンサの総合的开发と実用化に向けた取り組み	314
Imanaka Yasutaka	今中 康貴	先端強磁場計測技術の開発と物性研究への応用	370
Imura Masataka	井村 将隆	次世代半導体を用いた光・電子・磁性デバイスの開発	53
Inoue Jun-ichi	井上 純一	材料数物性理論	100
Inoue Tadanobu	井上 忠信	生物から学ぶ究極の強靱材料の創出	158
Irokawa Yoshihiro	色川 芳宏	半導体素子信頼性評価	52
Ishida Nobuyuki	石田 暢之	ナノスケール電位計測技術を用いた機能性材料・デバイスの評価	359
Ishihara Shinsuke	石原 伸輔	ガスのセンシングと徐放材料	257
Ishii Masashi	石井 真史	材料知識基盤の構築	390
Ishii Satoshi	石井 智	微細構造を用いたサーマルフォトニクス	285

Name	名前	研究課題 / Title	Page
I			
Ishioka Kunie	石岡 邦江	埋もれた界面物性評価のための超高速分光技術	11
Islam Ashrafu	イスラム アシュラフル	Organic-inorganic hybrid solar cells	15
Isogami Shinji	磯上 慎二	軽元素マネジメントによる磁性スピン機能拡大	113
Ito Kaita	伊藤 海太	AE 法による材料製造加工のインプロセスモニタリング	393
Ito Kimihiko	伊藤 仁彦	Li 金属電池の高性能化と動作中 / 新規分析法開発	12
Ito Kohzo	伊藤 耕三	超分子と高分子を用いた機能材料の創成とその機構解明	289
Iwanaga Masanobu	岩長 祐伸	光メタ表面バイオセンサシステム	98
Iwasaki Takuya	岩崎 拓哉	二次元物質ヘテロ構造の物性探索とデバイス機能開拓	242
Iwasaki Yuma	岩崎 悠真	マテリアルズ・インフォマティクスによる自律材料探索	383
Iwasaki Yutaka	岩崎 祐昂	中低温廃熱回収用新規熱電材料の開発	267
J			
Jalem Randy	ハレム ランディ	高スループット第一原理計算と AI 手法による全固体電池用の固体電解質材料デザイン	20
Jevasuwan Wipakorn	ジェバスワン ウィパコーン	Exploring the functionality of nanowires and hybrid nanostructures	232
K			
Kadowaki Mariko	門脇 万里子	実験と計算を併用したマルチマテリアル部材の腐食挙動解析	182
Kaizuka Yoshihisa	貝塚 芳久	細胞膜の界面物理化学と生命情報	297
Kakisawa Hideki	垣澤 英樹	室温 ~ 1400°C の高温顕微鏡観察・ひずみ測定技術	137
Kako Tetsuya	加古 哲也	触媒反応を利用したメタンからの有用化合物の合成	36
Kamiya Koji	神谷 宏治	高効率な水素液化機の開発	26
Kariyado Toshikaze	刈宿 俊風	ナノ構造による電子状態制御の理論的研究	230
Kasai Shinya	葛西 伸哉	ナノ構造磁性体の磁区構造制御とエレクトロニクス応用	116
Kataoka Chiho	片岡 知歩	リン脂質膜の物理化学的性質	296
Katayama Hideki	片山 英樹	インフラ構造物の腐食損傷リスク予測技術の開発	179
Kato Seiichi	加藤 誠一	酸素欠損型アモルファスアルミナの研究開発	238
Katsura Yukari	桂 ゆかり	大規模データベース Starrydata で材料科学の世界を俯瞰	394
Kawagishi Kyoko	川岸 京子	高性能 Ni 基超合金の開発	146
Kawai Shigeki	川井 茂樹	走査型プローブ顕微鏡を用いた表面化学	357
Kawakami Kohsaku	川上 亘作	医療関連ソフトマターの非平衡ダイナミクス	294
Kawakita Jin	川喜多 仁	マイクロテクスチャー表面に凝集する分子の電気化学とセンサ応用	335
Kawamoto Naoyuki	川本 直幸	電子線パルスを利用した TEM 内ナノスケール熱輸送計測法	345
Kawamura Fumio	川村 史朗	ベルト型高圧装置による薄膜・バルク新物質創製	280
Kawashima Tetsuya	川嶋 哲也	超高圧環境を利用した新規超硬質材料の探索	281
Kawazoe Naoki	川添 直輝	幹細胞機能制御のためのマイクロパターン化培養材料	303
Kawazu Takuya	川津 琢也	Sb 系化合物半導体量子ドットの形成技術	91
Khadka Dhruba Bahadur	カダカ ビドゥラバ	Exploration of Pb-free halide perovskite materials for solar cell application, degradation dynamics, and device physics	17
Kikkawa Jun	吉川 純	電子エネルギー損失分光の計測技術開発と応用	346
Kikuchi Akihiro	菊池 章弘	新しい超極細超伝導ワイヤーの開発	38
Kikuchi Masanori	菊池 正紀	りん酸カルシウムを基にした機能性材料開発	300
Kikugawa Naoki	菊川 直樹	量子マテリアルの開発とその低温・強磁場下での物性評価	373
Kim Jedeok	金 済徳	環境配慮型代替ポリマー電解質材料開発	57
Kimoto Koji	木本 浩司	透過電子顕微鏡法 (TEM) による材料評価法の開発と応用	344
Kimura Kazuhiro	木村 一弘	耐熱鋼の長時間クリープ強度特性評価	167
Kimura Yuuji	木村 勇次	加工熱処理による超高強度鋼の創製	159
Kino Hiori	木野 日織	自動化第一原理網羅計算による法則発見と知識伝達	61

Name	名前	研究課題／ Title	Page
Kitaguchi Hitoshi	北口 仁	超伝導応用のための特性評価技術の開発	41
Kitano Houichi	北野 萌一	溶接技術の高度化に向けた AI 技術の活用	184
Kitashima Tomonori	北嶋 具教	チタン合金とニッケル基超合金の組織制御と単結晶化	155
Kitaura Ryo	北浦 良	低次元量子材料の科学	209
Kobayashi Kiyoshi	小林 清	高機能電気化学インピーダンス解析プログラム開発	83
Kobayashi Yuka	小林 由佳	ドーブフリー高機能性有機電子材料の開発	319
Kohara Shinji	小原 真司	量子ビーム実験と構造モデリングによる非晶質材料の構造解析と構造制御	374
Kohno Masanori	河野 昌仙	強相関半導体における電子状態の出現に関する理論	216
Koide Yasuo	小出 康夫	ダイヤモンド／窒化物半導体の絶縁ゲート／電極材料開発	50
Koizumi Satoshi	小泉 聡	半導体ダイヤモンド研究	46
Konoike Takako	鴻池 貴子	分子性固体を舞台とした相対論的ディラック電子の研究	221
Koyama Yukinori	小山 幸典	データ科学と計算科学による新規無機材料の開発	380
Kozawa Daichi	小澤 大知	量子ナノ構造の光科学	210
Kozuka Yusuke	小塚 裕介	量子情報素子材料開発	241
Kubota Kei	久保田 圭	計測技術を活かした電池材料合成	13
Kurahashi Mitsunori	倉橋 光紀	量子状態選別分子ビームによる触媒反応解析	364
Kurimura Sunao	栗村 直	分極反転非線形光学デバイスによる量子光制御	95
Kuroda Takashi	黒田 隆	固体量子光源の開発	92
Kusano Masahiro	草野 正大	金属積層造形プロセスにおける熱履歴の予測と最適化	157
Kuwata Naoaki	桑田 直明	固体電池材料のマルチスケール解析	9
L			
Labuta Jan	ラブタ ヤン	Multi-responsive porphyrin/polymer systems	271
Lambard Guillaume	ラムバール ギヨム	SMILES-X: autonomous molecular compounds characterization for small datasets without descriptors	384
Li Jiguang	李 継光	Inorganic optical materials	105
Li Shisheng	李 世勝	Wafer-scale 2D semiconductors for flexible inkjet-printed electronics	239
Li Xia	李 霞	がんの免疫療法、化学療法及び複合療法のためのバイオ材料	307
Liao Meiyong	廖 梅勇	ダイヤモンド MEMS と半導体電子デバイス及びその集積化	47
Liu Jiangwei	劉 江偉	ダイヤモンド MOSFET 論理回路	54
M			
Ma Renzhi	馬 仁志	新規ナノマテリアルの創製及びエネルギー材料の開発	250
Mamiya Hiroaki	間宮 広明	先端計測技術を用いた革新的磁性材料創成	127
Mandai Toshihiko	万代 俊彦	構造特性に基づく元素戦略蓄電池材料の創製	24
Mano Takaaki	間野 高明	化合物半導体結晶成長技術開発とその機能探索	89
Marcela Calpa	マルセル カルパ	Functional materials for next-generation Lithium batteries	6
Masuda Keisuke	増田 啓介	磁気機能デバイスに対する理論研究	124
Masuda Takuya	増田 卓也	界面その場計測技術の開発と電気化学デバイスへの応用	10
Matsuda Shoichi	松田 翔一	電気化学スマートラボによる次世代蓄電池材料開発の加速	25
Matsuishi Satoru	松石 聡	エレクトライドおよび複合アニオン水素化合物の電子機能開拓	283
Matsumoto Akiyoshi	松本 明善	新機能発現を目指した高温超伝導線材の開発	30
Matsumoto Michio	松本 道生	合成二次元有機高分子の新規合成法と物性開拓	259
Matsumoto Ryo	松本 凌	極限環境での物質探索を加速するダイヤモンドデバイス	200
Matsumoto Shinji	松本 真治	物性計測のための強磁場発生技術開発	372
Matsumura Ryo	松村 亮	高速 CWLA を用いた Ge 系発光材料の薄膜成長	233
Meguro Susumu	目黒 奨	熱電対用金属材料の接合界面制御による熱電発電	171
Meng Wenjing	メン ウェンジン	Design and synthesis of soft crystals using mechanically interlocked molecules	331

Name	名前	研究課題 / Title	Page
M			
Mercer Christopher	マーサー クリストファー	Mechanical performance of functional lattices	152
Minami Kosuke	南 皓輔	においセンサの開発および新たなセンシング手法の創出	312
Minari Takeo	三成 剛生	プリンテッドエレクトロニクスの研究	332
Mitani Seiji	三谷 誠司	磁気メモリ・センサ応用のための磁性体ヘテロ構造薄膜の開発	108
Mitsui Tadashi	三井 正	レーザー加熱方式超高温透過型電子顕微鏡ホルダーの開発	355
Mitsuishi Kazutaka	三石 和貴	電子線タイコグラフィーによる環境関連材料の観察	350
Miura Yoshio	三浦 良雄	有限温度第一原理計算による機械学習と物質探索	123
Miyahara Kensuke	宮原 健介	微小球反発硬さ試験機	172
Miyakawa Masashi	宮川 仁	超高圧環境を利用した機能性材料開拓	282
Miyazaki Hideki T.	宮崎 英樹	光アンテナと量子井戸を融合した高感度中赤外検出器	96
Miyazaki Tsuyoshi	宮崎 剛	量子ナノ材料に対する大規模第一原理シミュレーション	226
Miyoshi Shogo	三好 正悟	固体電解質の界面輸送特性制御	5
Mochiku Takashi	茂筑 高士	中性子回折による物質・材料の非破壊検査	217
Mori Takao	森 孝雄	高性能な熱電材料・デバイスおよび熱制御技術の開発	261
Morita Koji	森田 孝治	新規多結晶光学材料の探索と合成手法の開発	103
Murakami Hideyuki	村上 秀之	耐熱耐環境金属材料の設計と表面改質	141
Murase Yoshiharu	村瀬 義治	KFM-EBSD-EDS 解析による構造材料の耐食性評価	181
N			
Nabatame Toshihide	生田目 俊秀	原子層堆積法による新ナノ薄膜・半導体デバイス	240
Nagamura Naoka	永村 直佳	顕微分光とインフォマティクスによる多次元オペランド計測	369
Naganuma Tamaki	長沼 環	細胞機能を誘導する生体無機ナノ材料	306
Nagao Tadaaki	長尾 忠昭	スペクトル制御された熱線利用材料の開拓とその応用	234
Nagaoka Katsumi	長岡 克己	原子層物質積層構造を用いた低仕事関数・高化学的安定材料	214
Nagata Kenji	永田 賢二	新規材料創成に向けたデータ駆動的方法論の構築・応用	385
Nagata Takahiro	長田 貴弘	薄膜材料スマートラボによる無機薄膜電子材料開発	59
Nagira Tomoya	柳樂 知也	溶接・接合機構の解明と構造体化への展開	183
Nagura Kazuhiko	名倉 和彦	階層構造の制御された巨大共役分子性材料の創製と機能開拓	258
Naito Kimiyoshi	内藤 公喜	炭素繊維の構造・力学特性の異方性評価と新たな炭素繊維強化樹脂複合材料の開発	134
Naito Masanobu	内藤 昌信	サーキュラーエコノミーを指向したデータ駆動高分子材料開発	337
Naka Takashi	名嘉 節	高圧高温場を用いたナノ構造・電子状態制御	278
Nakamura Masaki	中村 真佐樹	古典的急冷法による合成と相平衡図作成と新物質探索	68
Nakamura Masaru	中村 優	優れた硫化物単結晶の探索および結晶育成	78
Nakamura Yasuyuki	中村 泰之	分子化学プログラミングによる高分子の形状と機能の設計	339
Nakane Takayuki	中根 茂行	化学プロセスによる次世代セラミックス材料の創製	84
Nakanishi Jun	中西 淳	細胞培養用の動的足場材料の開発	290
Nakanishi Takashi	中西 尚志	新奇機能性分子液体・液体エレクトレットの創成	256
Nakanishi Takayuki	中西 貴之	次世代光源デバイスを指向する特殊蛍光体の開発と応用研究	88
Nakanishi Waka	中西 和嘉	場を利用して動く分子機械の開発	320
Nakano Kosuke	中野 晃佑	次世代の第一原理電子状態計算の手法開発と応用展開	396
Nakano Satoshi	中野 智志	水素化物等の高圧その場観察と高圧構造物性	279
Nakao Hidenobu	中尾 秀信	ヨーグルト中の乳酸菌の 1 菌体レベル計測	34
Nakata Ayako	中田 彩子	大規模第一原理 DFT 計算の開発と応用	228
Nakatani Tomoya	中谷 友也	スピントロニクス磁気抵抗センサ	110
Nara Jun	奈良 純	第一原理計算プログラム PHASE/0 の開発とその応用	227

Name	名前	研究課題／ Title	Page
Natsume Kyohei	夏目 恭平	高効率な水素再凝縮機／冷凍機の開発	27
Niikura Chisato	新倉 ちさと	多接合太陽電池のための機能性新材料の開発	333
Niitsu Kodai	新津 甲大	格子欠陥と相変態を活かした機能創発とそのイメージング	356
Nishiguchi Akihiro	西口 昭広	インジェクタブルゲル開発と医療応用	299
Nishijima Gen	西島 元	省エネルギーと新材料開発に資する超伝導応用機器の開発	28
Nishikawa Hideaki	西川 嗣彬	材料の組織と寿命を繋ぐミクロな疲労亀裂の先進評価技術	169
Nishikawa Kei	西川 慶	金属リチウムを使いこなす	22
Nishino Masamichi	西野 正理	ミクロな相互作用のモデル化と理論・計算手法の開発	204
Noguchi Hidenori	野口 秀典	エネルギー変換界面反応ダイナミクスのその場追跡	18
Nomura Akihiro	野村 晃敬	軽量・小型なりチウム空気電池開発	23
Nonomura Yoshihiko	野々村 禎彦	相転移の効率的モンテカルロ解析：クラスター非平衡緩和法	223
O			
Ochiai Tetsuyuki	落合 哲行	非線形、非エルミートナノフォトニクス	93
Ode Machiko	大出 真知子	フェーズフィールド法による材料ミクロ組織形成過程の解析	191
Ogaki Takeshi	大垣 武	岩塩型窒化物半導体の光・電子デバイスへの応用	71
Ogawa Yuhei	小川 祐平	鉄鋼材料中の水素：脆化元素から有効添加元素への転換	178
Oguma Hiroyuki	小熊 博幸	環境と界面に着目した疲労破壊機構の解明	135
Ohashi Naoki	大橋 直樹	組成-構造-物性相関の解明と材料化プロセスの開発	44
Ohkubo Isao	大久保 勇男	MI 手法を活用した熱電新物質・デバイス作製	264
Ohkubo Takakatsu	大久保 忠勝	組織解析とデータ科学による機能性材料の特性向上	122
Ohmura Takahito	大村 孝仁	微小力学解析によるハイスループット評価と強化機構解明	132
Ohnishi Tsuyoshi	大西 剛	薄膜技術を援用した酸化物型全固体電池の作製	8
Ohnuma Ikuo	大沼 郁雄	実験・計算状態図を援用した組織制御と材料開発	190
Ohsawa Takeo	大澤 健男	酸化物界面構造の機能創出	66
Ohta Narumi	太田 鳴海	固体電解質利用による新二次電池系の探索	4
Ohtake Akihiro	大竹 晃浩	ヘテロエピタキシー新技術の開発	90
Okada Katsuyuki	岡田 勝行	低圧誘導結合プラズマ CVD によるナノクリスタルダイヤモンドの合成	64
Okada Kazuho	岡田 和歩	鉄鋼材料の水素脆性機構解明と耐水素脆性材料開発	177
Okamoto Akihiro	岡本 章玄	材料と電気細菌の相互作用解明と一般細菌制御技術の開拓	313
Okuma Gaku	大熊 学	放射光 X 線 CT 技術を駆使した高信頼性材料設計の革新	140
Onishi Keiko	大西 桂子	顕微表面化学分析およびそのデータフォーマットの標準化	354
Ono Yoshinori	小野 嘉則	極限環境における金属材料の力学特性評価と変形・破壊	174
Ooi Shuuichi	大井 修一	直接観察や微細化による超伝導磁束量子集団の物性研究	220
Osada Toshio	長田 俊郎	航空機エンジン用超耐熱材料の開発	147
Oshikiri Mitsutake	押切 光丈	電子構造とダイナミクスからの不均一システム設計	254
Oshima Takayoshi	大島 孝仁	酸化物パワー半導体の新しい構造制御	49
Oshima Yuichi	大島 祐一	超ワイドギャップ半導体の高速・高品質成膜技術の開発	48
Q			
Qiu Hai	邱 海	Deformation and fracture of structural materials	160
R			
Ren Xiaobing	任 曉兵	Ferroic 材料	74
S			
Sagisaka Keisuke	鷺坂 恵介	走査型トンネル顕微鏡による原子分解能表面電子状態計測	358
Sahara Ryoji	佐原 亮二	ノンパラメータ階層計算技術による耐熱・機能材料設計	188
Saito Akiko	齋藤 明子	磁気と熱のエネルギー変換を担う機能材料	129

Name	名前	研究課題 / Title	Page
S			
Saito Noriko	齋藤 紀子	半導体金属酸化物ガスセンサの開発	69
Sakaguchi Isao	坂口 勲	安定同位体を利用した酸化物中の欠陥に関する研究	75
Sakai Nobuyuki	坂井 伸行	ナノシートの精密集積と二次加工による機能材料の創製	248
Sakamoto Kenji	坂本 謙二	高機能・高性能有機高分子薄膜の作製技術開発と評価	316
Sakaushi Ken	坂牛 健	データ駆動型電気化学材料設計	19
Sakuma Hiroshi	佐久間 博	天然材料を活用した環境調和材料開発と物性発現機構の解明	58
Sakuraba Yuya	桜庭 裕弥	磁性材料機能を活用した高性能・新機能デバイスの開発	109
Sakurai Hiroya	櫻井 裕也	新奇強相関電子系材料の開発 ～磁気冷凍材料開発など～	198
Sakurai Makoto	櫻井 亮	ナノアーキテクトニクスへの挑戦	245
Samitsu Sadaki	佐光 貞樹	多孔質高分子材料の創製・計測・応用	338
Sang Liwen	サン リウエン	窒化物分極場による光電デバイスの開発	237
Sasaki Taisuke	佐々木 泰祐	マルチスケール組織解析をもとにした金属材料の高特性化	121
Sasaki Takayoshi	佐々木 高義	無機ナノシートの創製と機能開発	196
Sato Naoki	佐藤 直大	フォノンエンジニアリングによる高性能熱機能材料の創製	266
Satoh Norifusa	佐藤 宗英	高次階層構造の構築：多段階無機合成と粘性熱電材料を例に	336
Sawada Kota	澤田 浩太	耐熱材料のクリープ強度のばらつきと組織	165
Sawaguchi Takahiro	澤口 孝宏	耐疲労 γ/ϵ 二相合金による構造物の長寿命化	142
Segawa Hiroyo	瀬川 浩代	ガラス・アモルファス材料の機能探索	67
Sepehri Amin Hossein	セペリ アミン ホセイン	Magnetic materials for green energy conversions	126
Shiba Kota	柴 弘太	「気相」のマイクロフルイディスクの開拓	311
Shibata Akinobu	柴田 暁伸	鉄鋼材料の相変態と変形・破壊挙動	175
Shigetou Akitsu	重藤 暁津	異種材料の低温大気圧接合と低温固相分離の両立	151
Shimamura Kiyoshi	島村 清史	新しい機能性単結晶材料の開発	77
Shimizu Takao	清水 荘雄	新規非ペロブスカイト・非鉛強誘電体の探索	76
Shimoda Kazuya	下田 一哉	高温評価技術によるナノ素材由来高温耐環境性 CMCs 創製	139
Shingaya Yoshitaka	新ヶ谷 義隆	二次元材料機能性デバイスの開発とナノ材料評価技術の開発	208
Shirahata Naoto	白幡 直人	発光 / 受光波長を広帯域で変調できる微粒子の合成と応用	275
Shirai Yasuhiro	白井 康裕	ペロブスカイト太陽電池の開発	14
Shoji Shusaku	庄司 州作	界面及び空間に着目した安定分子変換・水素製造	37
Shrestha Lok Kumar	スレスタ ロック クマール	フラーレンベースの新しいナノ多孔質炭素材料の設計	273
Sodeyama Keitaro	袖山 慶太郎	データ駆動型手法と第一原理計算を用いた新材料設計	382
Solov'yev Igor	ソロビョフ イゴール	Realistic modelling of complex magnetic materials	225
Somekawa Hidetoshi	染川 英俊	高性能軽金属材料の開発	145
Suehara Shigeru	末原 茂	循環機能材料の理論計算	56
Suehiro Takayuki	末廣 隆之	窒化物微粒子の合成と機能開拓	70
Suetsugu Yasushi	末次 寧	アパタイトを利用した放射性廃棄物の固定	301
Sugimoto Satoshi	杉本 聡志	非平衡薄膜材料におけるトポロジの発現とその活用	117
Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	室温 630%を超える巨大トンネル磁気抵抗効果	114
Sumiya Masatomo	角谷 正友	極性窒化物半導体薄膜のヘテロ界面構築と新機能	51
Sun Hong-Tao	孫 洪濤	Synthetic chemistry and optoelectronic applications of nanocrystals	276
Suto Hirofumi	首藤 浩文	スピントルクによる磁化励起状態のデバイス応用と材料開発	111
Suzuki Hiroshi	鈴木 裕	プラズマイオンプレーティングによるサイアロン薄膜の作製	138
Suzuki Taku	鈴木 拓	イオンビームによる表面・界面の分析と改質	63
Suzuki Tohru	鈴木 達	微構造制御したバルクセラミックス創製	81

Name	名前	研究課題 / Title	Page
T			
Tachibana Makoto	橘 信	金属酸化物の新奇熱物性探索と結晶育成	265
Tachiki Minoru	立木 実	超伝導・磁性材料開発のための低温磁気特性研究	218
Tadano Terumasa	只野 央将	先進フォノン計算を用いた有限温度物性予測	125
Taguchi Tetsushi	田口 哲志	低侵襲治療に貢献する革新的生体接着材料の開発	298
Takada Kazunori	高田 和典	高い信頼性を有する固体電池の創製	3
Takahashi Yukiko	高橋 有紀子	微細組織と磁化ダイナミクス制御による高特性磁気デバイスの開発	112
Takai Atsuro	高井 淳朗	π 電子系分子集積体の新奇機能開拓	321
Takamori Susumu	高森 晋	プロセス制御による鑄造材料特性の向上	143
Takano Yoshihiko	高野 義彦	AI と高圧を用いた革新的超伝導体の開発	197
Takazawa Ken	高澤 健	有機単結晶ファイバーによる分子メカニカルデバイス	94
Takeda Takashi	武田 隆史	粒子1粒を用いた新蛍光体開発	87
Takeda Yoshihiko	武田 良彦	表界面・微細構造制御による機能発現	31
Takeguchi Masaki	竹口 雅樹	液中試料のその場高分解能電子顕微鏡観察技術の開発	351
Takehana Kanji	竹端 寛治	強磁場による量子機能材料評価	371
Takeuchi Masayuki	竹内 正之	π 電子系有機材料の開発	288
Tamate Ryota	玉手 亮多	機能性高分子ゲル電解質の開発と電気化学デバイスへの応用	324
Tamura Kenji	田村 堅志	資源循環型高機能複合材料の開発	55
Tamura Ryo	田村 亮	材料研究に特化したデータ駆動型アルゴリズム開発	397
Tanaka Akihiro	田中 秋広	ベリー位相エンジニアリングに基づく量子機能探索	224
Tang Daiming	湯 代明	カーボンナノチューブ分子接合に基づくナノ・量子デバイス	251
Tang Jie	唐 捷	先進低次元ナノ材料の探索・創製・応用	7
Taniguchi Takaaki	谷口 貴章	液相剥離ナノシートの合成・コロイド集積、デバイス応用	252
Taniguchi Takashi	谷口 尚	高品位ダイヤモンド及び窒化物単結晶の高圧合成	194
Tanks Jonathon David	タンクス ジョナサン デビッド	Sustainable and multifunctional polymeric composites	136
Tansho Masataka	丹所 正孝	強磁場固体 NMR 装置を用いて行う燃料電池材料等の分析	365
Tashiro Kentaro	田代 健太郎	分子シークエンスに焦点を当てた物質科学の開拓	291
Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	エネルギー・環境材料の界面理論・計算科学研究	2
Tenjimbayashi Mizuki	天神林 瑞樹	液滴を自在に操るナノテクノロジー	260
Terabe Kazuya	寺部 一弥	イオニクスとエレクトロニクスによる IT, AI 素子の創製	243
Terada Noriki	寺田 典樹	全固体冷却法を用いた極低温動作ヒートポンプの基盤研究	128
Teraji Tokuyuki	寺地 徳之	ダイヤモンド結晶成長と量子デバイス応用	99
Terashima Kensei	寺嶋 健成	バルク固体機能性材料における、機械学習を用いたデータ駆動物質開発	199
Terashima Taichi	寺嶋 太一	強磁場超低温を用いた電子状態研究	215
Toda Yoshiaki	戸田 佳明	超臨界地熱発電用耐熱材料の評価と開発	391
Todoroki Shin-ichi	轟 眞市	通信用光ファイバにおけるファイバフュージの励起増強挙動	104
Togo Atsushi	東後 篤史	フォノン計算に関する研究と科学計算ソフトウェア開発	395
Tominaka Satoshi	冨中 悟史	先端構造解析に基づく材料機能の理解と自律探索	375
Tsuchiya Takashi	土屋 敬志	イオニクス脳型情報処理技術の開発	246
Tsuda Shunsuke	津田 俊輔	顕微光電子分光を用いた材料研究	368
Tsujii Naohito	辻井 直人	磁性の効果を利用した熱エネルギー変換材料の開発	263
Tsujimoto Yoshihiro	辻本 吉廣	アニオンの複合化による新機能材料の探索	205
Tsukagoshi Kazuhito	塚越 一仁	2 次元薄膜半導体の開発	236
Tsuruoka Tohru	鶴岡 徹	イオニクス AI ハードウェアの要素技術開発	244
Tsutsumi Yusuke	堤 祐介	革新的表面改質技術によるステンレス鋼の超高耐食性化	180

Name	名前	研究課題 / Title	Page
T			
Tsuzaki Kaneaki	津崎 兼彰	不純物・有害元素を許容し活用する鉄鋼ものづくり技術	133
U			
Uchida Ken-ichi	内田 健一	スピнкаロリトロニクスの開拓と展開	118
Uchihashi Takashi	内橋 隆	表面界面における量子物質の開拓と物性解明	211
Ueda Shigenori	上田 茂典	X線全反射を利用した界面電子状態の研究	72
Ueki Rintaro	上路 林太郎	応力や加工を利用した熱処理による組織制御の研究とプロセスの開発	163
Ueki Takeshi	上木 岳士	イオン液体と高分子からなるソフト材料	292
Umeyama Daiki	梅山 大樹	分子性イオンを利用した有機-無機複合材料の機能開拓	322
Uto Koichiro	宇都 甲一郎	形状記憶高分子からなる高機能性 4D 印刷材料の開発	309
V			
Vasykiv Oleg	バジルクフ オレグ	Deformation-resistant multipurpose ultra-high temperature ceramics	106
Villora Garcia	ビジョラ ガルシア	Crystals for optical isolators & brightness white light sources	79
W			
Wada Kentaro	和田 健太郎	極低温・高圧水素ガス環境における金属材料の水素脆化	173
Wakahara Takatsugu	若原 孝次	機能性ナノ共結晶の創製：組み合わせによる新機能の発現	326
Wakayama Yutaka	若山 裕	分子性ナノ物質で築くヘテロ界面エレクトロニクス	206
Wakeda Masato	譚田 真人	ナノスケール計算による強度支配因子の評価	185
Watanabe Ikumu	渡邊 育夢	計算機を活用した材料研究・開発	392
Watanabe Kenji	渡邊 賢司	六方晶窒化ホウ素の気相合成	102
Watanabe Makoto	渡邊 誠	マテリアルズインテグレーション (MI) による 3D 積層造形に適した新材料の開発	153
Wen ZhenChao	温 振超	次世代スピントロニクス技術に向けた新規材料の開発	115
Wu Rudder	ウー ラダー	革新的次世代断熱素材 TIISA®・EB-PVD 遮熱技術	148
Wu Yen-Ju	ウー イェン ルー	Advancing interfacial thermal resistance prediction for thermal management in heterogeneous materials	381
X			
Xu Ya	許 亜	水素製造・利用触媒及び水素バリア材料の研究開発	33
Xu Yibin	徐 一斌	データ駆動手法を用いた無機材料の物性予測と新材料設計	378
Y			
Yagyū Shinjiro	柳生 進二郎	材料評価自動システムの開発	60
Yaji Koichiro	矢治 光一郎	顕微スピン分解光電子分光の高度化と量子・磁性材料研究	367
Yakabe Taro	矢ヶ部 太郎	水素センサーの開発と吸着を経た吸蔵の理論モデル	352
Yamaguchi Takahide	山口 尚秀	ダイヤモンドトランジスタの開発	212
Yamaji Youhei	山地 洋平	量子物質における量子もつれ構造の解明	222
Yamamoto Akiko	山本 玲子	医療応用のための材料特性評価	341
Yamamoto Shota	山本 翔太	抗がん効果を持つシグナル凝縮粒子	293
Yamasaki Yuichi	山崎 裕一	放射光吸収・回折顕微鏡による磁性体研究	376
Yamase Hiroyuki	山瀬 博之	量子多体物性の理論的研究	219
Yamashita Yoshiyuki	山下 良之	材料特異点の物性解明	62
Yamashita Yu	山下 侑	超分子ドーピングによる有機半導体材料・デバイス開発	274
Yamauchi Yoshihiro	山内 祥弘	超巨大高分子ボトルブラシポリマーの研究	323
Yamaura Kazunari	山浦 一成	創造的な機能性物質の合成と量子機能の展開	201
Yamazaki Tomohiko	山崎 智彦	診断・治療のためのナノバイオメディシン	295
Yanagida Masatoshi	柳田 真利	ハロゲン化金属ペロブスカイト太陽電池の研究開発	16
Yasuda Takeshi	安田 剛	新規有機半導体の開発と薄膜デバイス応用	318
Yoshikawa Chiaki	吉川 千晶	精密重合法を用いた機能性高分子バイオ材料の創出	317

Name	名前	研究課題／ Title	Page
Yoshikawa Genki	吉川 元起	嗅覚とニオイの理解と制御	310
Yoshikawa Hideki	吉川 英樹	計測データの DX 技術とデータプラットフォームへの展開	387
Yoshinaka Fumiyoshi	吉中 奎貴	階層的疲労損傷メカニズムの解明と耐疲労合金創製	144
Yoshio Masafumi	吉尾 正史	分子配列を生かした限界突破エネルギー変換材料・素子創製	329
Yoshitomi Toru	吉富 徹	局所投与型光線力学療法に向けたバイオマテリアルの開発	304
Yoshizawa Shunsuke	吉澤 俊介	極低温走査型トンネル顕微鏡による量子材料研究	360
Yu Denis Yau Wai	ユ デニス ヤウワイ	Battery and energy storage technologies	21
Yuan Dongsheng	原 東升	Oxide and halide single-crystals for radiation detection	80
Yusa Hitoshi	遊佐 斉	放射光を用いた超高压実験と計算科学の協奏的構造探索	277
Z			
Zhang Han	張 晗	LaB ₆ ナノワイヤ冷電界放出による新世代電子顕微鏡	348

主な所属学会〔国内〕

	学会名称	Name	名前	page
い	イオン液体研究会	Mandai Toshihiko	万代 俊彦	24
		Tamate Ryota	玉手 亮多	324
		Ueki Takeshi	上木 岳士	292
え	エレクトロニクス実装学会	Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	150
		Shigetou Akitsu	重藤 暁津	151
お	応用物理学会	Adachi Yutaka	安達 裕	65
		Arafune Ryuichi	荒船 竜一	213
		Arai Shunto	荒井 俊人	334
		Arisawa Shunichi	有沢 俊一	39
		Banno Nobuya	伴野 信哉	40
		Chikyo Toyohiro	知京 豊裕	388
		Custance Oscar	クスタンセ オスカル	362
		Fukata Naoki	深田 直樹	231
		Furuse Hiroaki	古瀬 裕章	86
		Goto Masahiro	後藤 真宏	262
		Harada Takayuki	原田 尚之	284
		Hashimoto Ayako	橋本 綾子	353
		Hayakawa Ryoma	早川 竜馬	207
		Henzie Joel	ヘンジー ジョール	270
		Hirai Takamasa	平井 孝昌	120
		Hirosaki Naoto	廣崎 尚登	45
		Hirota Noriyuki	廣田 憲之	82
		Honda Hiroshi	本田 博史	156
		Hosono Hideo	細野 秀雄	195
		Iguchi Ryo	井口 亮	119
		Iimura Soshi	飯村 壮史	73
		Imamura Gaku	今村 岳	314
		ImaNaka Yasutaka	今中 康貴	370
		Imura Masataka	井村 将隆	53
		Irokawa Yoshihiro	色川 芳宏	52
		Ishida Nobuyuki	石田 暢之	359
		Ishii Masashi	石井 真史	390
		Ishii Satoshi	石井 智	285
		Isogami Shinji	磯上 慎二	113
		Ito Kimihiko	伊藤 仁彦	12
		Ito Kohzo	伊藤 耕三	289
		Iwanaga Masanobu	岩長 祐伸	98
		Iwasaki Takuya	岩崎 拓哉	242
		Iwasaki Yuma	岩崎 悠真	383
		Jevasuwan Wipakorn	ジェバスワン ウイパコーン	232
		Kasai Shinya	葛西 伸哉	116
		Kataoka Chiho	片岡 知歩	296
		Kato Seiichi	加藤 誠一	238
		Katsura Yukari	桂 ゆかり	394
		Kawai Shigeki	川井 茂樹	357
		Kawamura Fumio	川村 史朗	280
		Kawazu Takuya	川津 琢也	91
		Khadka Dhruva Bahadur	カダカ ビ ドゥラバ	17
		Kikuchi Akihiro	菊池 章弘	38
		Kino Hiori	木野 日織	61
		Kitaura Ryo	北浦 良	209
		Kobayashi Kiyoshi	小林 清	83
		Koide Yasuo	小出 康夫	50
		Koizumi Satoshi	小泉 聡	46
		Koyama Yukinori	小山 幸典	380
		Kozawa Daichi	小澤 大知	210
		Kozuka Yusuke	小塚 裕介	241

	学会名称	Name	名前	page
お	応用物理学会	Kurahashi Mitsunori	倉橋 光紀	364
		Kurimura Sunao	栗村 直	95
		Liao Meiyong	廖 梅勇	47
		Liu Jiangwei	劉 江偉	54
		Mano Takaaki	間野 高明	89
		Masuda Keisuke	増田 啓介	124
		Matsuishi Satoru	松石 聡	283
		Matsumoto Akiyoshi	松本 明善	30
		Matsumoto Ryo	松本 凌	200
		Matsumura Ryo	松村 亮	233
		Minami Kosuke	南 皓輔	312
		Minari Takeo	三成 剛生	332
		Mitani Seiji	三谷 誠司	108
		Mitsui Tadashi	三井 正	355
		Mitsuishi Kazutaka	三石 和貴	350
		Miura Yoshio	三浦 良雄	123
		Miyazaki Hideki T.	宮崎 英樹	96
		Mori Takao	森 孝雄	261
		Nabatame Toshihide	生田目 俊秀	240
		Nagamura Naoka	永村 直佳	369
		Nagao Tadaaki	長尾 忠昭	234
		Nagata Takahiro	長田 貴弘	59
		Nakamura Masaru	中村 優	78
		Nakane Takayuki	中根 茂行	84
		Nakanishi Takayuki	中西 貴之	88
		Nakano Kosuke	中野 晃佑	396
		Nakatani Tomoya	中谷 友也	110
		Nara Jun	奈良 純	227
		Niikura Chisato	新倉 ちさと	333
		Ogaki Takeshi	大垣 武	71
		Ohashi Naoki	大橋 直樹	44
		Ohkubo Isao	大久保 勇男	264
		Ohnishi Tsuyoshi	大西 剛	8
		Ohsawa Takeo	大澤 健男	66
		Ohtake Akihiro	大竹 晃浩	90
		Okada Katsuyuki	岡田 勝行	64
		Onishi Keiko	大西 桂子	354
		Oshikiri Mitsutake	押切 光文	254
		Oshima Takayoshi	大島 孝仁	49
		Oshima Yuichi	大島 祐一	48
		Ren Xiaobing	任 曉兵	74
		Sakaguchi Isao	坂口 勲	75
		Sakamoto Kenji	坂本 謙二	316
		Sakuraba Yuya	桜庭 裕弥	109
		Sakurai Makoto	櫻井 亮	245
		Sang Liwen	サン リウエン	237
		Sato Naoki	佐藤 直大	266
		Segawa Hiroyo	瀬川 浩代	67
		Shiba Kota	柴 弘太	311
		Shimamura Kiyoshi	島村 清史	77
		Shimizu Takao	清水 荘雄	76
		Shingaya Yoshitaka	新ヶ谷 義隆	208
		Shirai Yasuhiro	白井 康裕	14
		Suehiro Takayuki	末廣 隆之	70
		Sugimoto Satoshi	杉本 聡志	117
		Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	114
		Sumiya Masatomo	角谷 正友	51
		Suto Hirofumi	首藤 浩文	111
		Suzuki Hiroshi	鈴木 裕	138
		Suzuki Taku	鈴木 拓	63

	学会名称	Name	名前	page
お	応用物理学会	Tachiki Minoru	立木 実	218
		Takahashi Yukiko	高橋 有紀子	112
		Takano Yoshihiko	高野 義彦	197
		Takeda Takashi	武田 隆史	87
		Takeda Yoshihiko	武田 良彦	31
		Takeguchi Masaki	竹口 雅樹	351
		Terabe Kazuya	寺部 一弥	243
		Teraji Tokuyuki	寺地 徳之	99
		Terashima Kensei	寺嶋 健成	199
		Todoroki Shin-ichi	轟 眞市	104
		Tsuchiya Takashi	土屋 敬志	246
		Tsukagoshi Kazuhito	塚越 一仁	236
		Tsuruoka Tohru	鶴岡 徹	244
		Uchida Ken-ichi	内田 健一	118
		Uchihashi Takashi	内橋 隆	211
		Villora Garcia	ビジョラ ガルシア	79
		Wakayama Yutaka	若山 裕	206
		Watanabe Kenji	渡邊 賢司	102
		Wen ZhenChao	温 振超	115
		Yagyu Shinjiro	柳生 進二郎	60
		Yakabe Taro	矢ヶ部 太郎	352
		Yamaguchi Takahide	山口 尚秀	212
		Yamasaki Yuichi	山崎 裕一	376
		Yamashita Yoshiyuki	山下 良之	62
		Yamashita Yu	山下 侑	274
		Yanagida Masatoshi	柳田 真利	16
		Yasuda Takeshi	安田 剛	318
		Yoshikawa Genki	吉川 元起	310
		Yoshikawa Hideki	吉川 英樹	387
		Yuan Dongsheng	原 東升	80
か	化学工学会	Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスィン ワッチャロップ	255
	化学センサ研究会	Saito Noriko	齋藤 紀子	69
		Yoshikawa Genki	吉川 元起	310
き	基礎有機化学会	Takai Atsuro	高井 淳朗	321
	強磁場フォーラム	Goto Atsushi	後藤 敦	363
け	軽金属学会	Hono Kazuhiro	宝野 和博	
		Ii Seiichiro	井 誠一郎	187
		Kitashima Tomonori	北嶋 具教	155
		Sasaki Taisuke	佐々木 泰祐	121
		Somekawa Hidetoshi	染川 英俊	145
	蛍光体同学会	Hirosaki Naoto	廣崎 尚登	45
		Takeda Takashi	武田 隆史	87
こ	合金状態図研究会	Abe Taichi	阿部 太一	189
	高分子学会	Aimi Junko	相見 順子	330
		Ariga Katsuhiko	有賀 克彦	272
		Chen Guoping	陳 国平	302
		Ebara Mitsuhiko	荏原 充宏	305
		Fudouzi Hiroshi	不動寺 浩	97
		Fujii Kazuko	藤井 和子	328
		Harano Koji	原野 幸治	347
		Higuchi Masayoshi	樋口 昌芳	325
		Ichinose Izumi	一ノ瀬 泉	340
		Ikeda Taichi	池田 太一	327
		Ishihara Shinsuke	石原 伸輔	257
		Ishii Masashi	石井 真史	390
		Ito Kohzo	伊藤 耕三	289
		Kawazoe Naoki	川添 直輝	303
		Kim Jedeok	金 済徳	57
		Matsumoto Michio	松本 道生	259
		Naito Masanobu	内藤 昌信	337

	学会名称	Name	名前	page
こ	高分子学会	Nakamura Yasuyuki	中村 泰之	339
		Nakanishi Takashi	中西 尚志	256
		Nishiguchi Akihiro	西口 昭広	299
		Samitsu Sadaki	佐光 貞樹	338
		Segawa Hiroyo	瀬川 浩代	67
		Takai Atsuro	高井 淳朗	321
		Takeuchi Masayuki	竹内 正之	288
		Tamate Ryota	玉手 亮多	324
		Tamura Kenji	田村 堅志	55
		Tanks Jonathon David	タンクス ジョナサン デビッド	136
		Tashiro Kentaro	田代 健太郎	291
		Ueki Takeshi	上木 岳士	292
		Yamamoto Shota	山本 翔太	293
		Yamauchi Yoshihiro	山内 祥弘	323
		Yasuda Takeshi	安田 剛	318
		Yoshikawa Chiaki	吉川 千晶	317
		Yoshio Masafumi	吉尾 正史	329
		Yoshitomi Toru	吉富 徹	304
	固体 NMR・材料フォーラム	Hashi Kenjiro	端 健二郎	366
		Tansho Masataka	丹所 正孝	365
し	CVD 反応分科会	Satoh Norifusa	佐藤 宗英	336
	自動車技術会	Oguma Hiroyuki	小熊 博幸	135
触媒学会	触媒学会	Abe Hideki	阿部 英樹	35
		Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスィン ワッチャロップ	255
		Ebina Yasuo	海老名 保男	247
		Ide Yusuke	井出 裕介	253
		Xu Ya	許 亜	33
	人工知能学会	Imamura Gaku	今村 岳	314
せ	繊維学会	Samitsu Sadaki	佐光 貞樹	338
		Yoshikawa Chiaki	吉川 千晶	317
た	耐火物技術協会	Kakisawa Hideki	垣澤 英樹	137
て	低温工学・超電導学会	Fujii Hiroki	藤井 宏樹	29
		Kamiya Koji	神谷 宏治	26
		Kikuchi Akihiro	菊池 章弘	38
		Kitaguchi Hitoshi	北口 仁	41
		Matsumoto Akiyoshi	松本 明善	30
		Natsume Kyohei	夏目 恭平	27
		Nishijima Gen	西島 元	28
		Ono Yoshinori	小野 嘉則	174
		Saito Akiko	齋藤 明子	129
	電気化学会	Deng Xiao	鄧 驍	315
		Higuchi Masayoshi	樋口 昌芳	325
		Ito Kimihiko	伊藤 仁彦	12
		Kawakita Jin	川喜多 仁	335
		Kobayashi Kiyoshi	小林 清	83
		Kubota Kei	久保田 圭	13
		Kuwata Naoaki	桑田 直明	9
		Mandai Toshihiko	万代 俊彦	24
		Masuda Takuya	増田 卓也	10
		Matsuda Shoichi	松田 翔一	25
		Miyoshi Shogo	三好 正悟	5
		Nagamura Naoka	永村 直佳	369
		Nishikawa Kei	西川 慶	22
		Noguchi Hidenori	野口 秀典	18
		Nomura Akihiro	野村 晃敬	23
		Ohta Narumi	太田 鳴海	4
		Sakai Nobuyuki	坂井 伸行	248
		Sakaushi Ken	坂牛 健	19
		Takada Kazunori	高田 和典	3
		Tamate Ryota	玉手 亮多	324

	学会名称	Name	名前	page
て	電気化学会	Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	2
		Tominaka Satoshi	富中 悟史	375
		Tsuchiya Takashi	土屋 敬志	246
		Yanagida Masatoshi	柳田 真利	16
		Yu Denis Yau Wai	ユ デニス ヤウワイ	21
		Banno Nobuya	伴野 信哉	40
		Matsumoto Akiyoshi	松本 明善	30
	電子情報通信学会	Todoroki Shin-ichi	轟 眞市	104
	電池技術委員会	Kubota Kei	久保田 圭	13
と に	土木学会	Doi Kotaro	土井 康太郎	162
	日本 DDS 学会	Ebara Mitsuhiko Kawakami Kohsaku	荏原 充宏 川上 亘作	305 294
	日本 MRS	Amekura Hiroshi	雨倉 宏	32
		Arisawa Shunichi	有沢 俊一	39
		Iimura Soshi	飯村 壮史	73
		Ikeda Taichi	池田 太一	327
		Lambard Guillaume	ラムバール ギヨム	384
		Naito Masanobu	内藤 昌信	337
		Nakanishi Takashi	中西 尚志	256
		Nakano Satoshi	中野 智志	279
		Ohashi Naoki	大橋 直樹	44
		Shimoda Kazuya	下田 一哉	139
		Takeda Yoshihiko	武田 良彦	31
		Yamaura Kazunari	山浦 一成	201
	日本アイソトープ協会	Nakamura Masaki	中村 真佐樹	68
	日本アパタイト研究会	Kikuchi Masanori	菊池 正紀	300
	日本イオン交換学会	Sasaki Takayoshi	佐々木 高義	196
	日本液晶学会	Sakamoto Kenji	坂本 謙二	316
		Yoshio Masafumi	吉尾 正史	329
	日本化学会	Aimi Junko	相見 順子	330
		Ariga Katsuhiko	有賀 克彦	272
		Ebina Yasuo	海老名 保男	247
		Fujii Kazuko	藤井 和子	328
		Goto Masahiro	後藤 真宏	262
		Harano Koji	原野 幸治	347
		Hayashi Hironobu	林 宏暢	361
		Higuchi Masayoshi	樋口 昌芳	325
		Hosono Hideo	細野 秀雄	195
		Ichinose Izumi	一ノ瀬 泉	340
		Ide Yusuke	井出 裕介	253
		Ikeda Taichi	池田 太一	327
		Ishihara Shinsuke	石原 伸輔	257
		Ito Kohzo	伊藤 耕三	289
		Kako Tetsuya	加古 哲也	36
		Kataoka Chiho	片岡 知歩	296
		Kawai Shigeki	川井 茂樹	357
		Kobayashi Yuka	小林 由佳	319
		Kubota Kei	久保田 圭	13
		Ma Renzhi	馬 仁志	250
		Mandai Toshihiko	万代 俊彦	24
		Masuda Takuya	増田 卓也	10
		Matsuishi Satoru	松石 聡	283
		Matsumoto Michio	松本 道生	259
		Minami Kosuke	南 皓輔	312
		Nagura Kazuhiko	名倉 和彦	258
		Naito Masanobu	内藤 昌信	337
		Nakamura Yasuyuki	中村 泰之	339
		Nakanishi Jun	中西 淳	290
		Nakanishi Takashi	中西 尚志	256
		Nakanishi Waka	中西 和嘉	320

	学会名称	Name	名前	page
に	日本化学会	Nakata Ayako	中田 彩子	228
		Nishino Masamichi	西野 正理	204
		Noguchi Hidenori	野口 秀典	18
		Ohta Narumi	太田 鳴海	4
		Oshikiri Mitsutake	押切 光文	254
		Sakai Nobuyuki	坂井 伸行	248
		Sakaushi Ken	坂牛 健	19
		Sasaki Takayoshi	佐々木 高義	196
		Satoh Norifusa	佐藤 宗英	336
		Shiba Kota	柴 弘太	311
		Shingaya Yoshitaka	新ヶ谷 義隆	208
		Shirahata Naoto	白幡 直人	275
		Shrestha Lok Kumar	スレスタ ロック クマール	273
		Sodeyama Keitaro	袖山 慶太郎	382
		Takai Atsuro	高井 淳朗	321
		Takazawa Ken	高澤 健	94
		Takeuchi Masayuki	竹内 正之	288
		Tamura Kenji	田村 堅志	55
		Taniguchi Takaaki	谷口 貴章	252
		Tansho Masataka	丹所 正孝	365
		Tashiro Kentaro	田代 健太郎	291
		Ueki Takeshi	上木 岳士	292
		Umeyama Daiki	梅山 大樹	322
		Wakahara Takatsugu	若原 孝次	326
		Yamashita Yu	山下 侑	274
		Yamauchi Yoshihiro	山内 祥弘	323
		Yamazaki Tomohiko	山崎 智彦	295
		Yanagida Masatoshi	柳田 真利	16
		Yoshio Masafumi	吉尾 正史	329
	日本核酸化学会	Yamazaki Tomohiko	山崎 智彦	295
	日本ガスタービン学会	Ikeda Ayako	池田 亜矢子	149
		Kawagishi Kyoko	川岸 京子	146
		Kitashima Tomonori	北嶋 具教	155
		Osada Toshio	長田 俊郎	147
	日本機械学会	Furuya Yoshiyuki	古谷 佳之	168
		Inoue Tadanobu	井上 忠信	158
		Kimura Kazuhiro	木村 一弘	167
		Kimura Yuuji	木村 勇次	159
		Kitano Houichi	北野 萌一	184
		Murakami Hideyuki	村上 秀之	141
		Naito Kimiyoshi	内藤 公喜	134
		Nishikawa Hideaki	西川 嗣彬	169
		Ogawa Yuhei	小川 祐平	178
		Oguma Hiroyuki	小熊 博幸	135
		Okada Kazuho	岡田 和歩	177
		Okuma Gaku	大熊 学	140
		Sawada Kota	澤田 浩太	165
		Shibata Akinobu	柴田 暁伸	175
		Somekawa Hidetoshi	染川 英俊	145
		Tsuzaki Kaneaki	津崎 兼彰	133
		Wakeda Masato	譯田 真人	185
		Watanabe Ikumu	渡邊 育夢	392
		Yamamoto Akiko	山本 玲子	341
		Yoshinaka Fumiyoshi	吉中 奎貴	144
	日本希土類学会	Nakanishi Takayuki	中西 貴之	88
	日本金属学会	Abe Taichi	阿部 太一	189
		Banno Nobuya	伴野 信哉	40
		Chikyo Toyohiro	知京 豊裕	388
		Demura Masahiko	出村 雅彦	389
		Doi Kotaro	土井 康太郎	162

学会名称	Name	名前	page
に 日本金属学会	Emura Satoshi	江村 聡	164
	Furuya Yoshiyuki	古谷 佳之	168
	Hara Toru	原 徹	186
	Hatakeyama Tomotaka	畠山 友孝	166
	Hayakawa Masao	早川 正夫	170
	Henzie Joel	ヘンジー ジョール	270
	Hiromoto Sachiko	廣本 祥子	161
	Hono Kazuhiro	宝野 和博	
	Ii Seiichiro	井 誠一郎	187
	Ikeda Ayako	池田 亜矢子	149
	Ito Kaita	伊藤 海太	393
	Iwasaki Yutaka	岩崎 祐昂	267
	Kadowaki Mariko	門脇 万里子	182
	Kakisawa Hideki	垣澤 英樹	137
	Katsura Yukari	桂 ゆかり	394
	Kawagishi Kyoko	川岸 京子	146
	Kawamoto Naoyuki	川本 直幸	345
	Kawamura Fumio	川村 史朗	280
	Kawashima Tetsuya	川嶋 哲也	281
	Kikuchi Akihiro	菊池 章弘	38
	Kitano Houichi	北野 萌一	184
	Kitashima Tomonori	北嶋 具教	155
	Koide Yasuo	小出 康夫	50
	Kusano Masahiro	草野 正大	157
	Meguro Susumu	目黒 奨	171
	Morita Koji	森田 孝治	103
	Murakami Hideyuki	村上 秀之	141
	Murase Yoshiharu	村瀬 義治	181
	Nagira Tomoya	柳樂 知也	183
	Nakatani Tomoya	中谷 友也	110
	Niitsu Kodai	新津 甲大	356
	Nishikawa Hideaki	西川 嗣彬	168
	Ode Machiko	大出 真知子	191
	Ohkubo Tadakatsu	大久保 忠勝	122
	Ohmura Takahito	大村 孝仁	132
	Ohnuma Ikuo	大沼 郁雄	190
	Okada Kazuho	岡田 和歩	177
	Okuma Gaku	大熊 学	140
	Ono Yoshinori	小野 嘉則	174
	Osada Toshio	長田 俊郎	147
	Ren Xiaobing	任 曉兵	74
	Sahara Ryoji	佐原 亮二	188
	Sasaki Taisuke	佐々木 泰祐	121
	Sato Naoki	佐藤 直大	266
	Sawaguchi Takahiro	澤口 孝宏	142
	Sepehri Amin Hossein	セペリ アミン ホセイン	126
	Shibata Akinobu	柴田 曉伸	175
	Shigetou Akitsu	重藤 曉津	151
	Shimoda Kazuya	下田 一哉	139
	Somekawa Hidetoshi	染川 英俊	145
	Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	114
	Suzuki Hiroshi	鈴木 裕	138
	Takada Kazunori	高田 和典	3
	Takahashi Yukiko	高橋 有紀子	112
	Takamori Susumu	高森 晋	143
	Toda Yoshiaki	戸田 佳明	391
	Tsutsumi Yusuke	堤 祐介	180
	Tsuzaki Kaneaki	津崎 兼彰	133
	Ueji Rintaro	上路 林太郎	163
	Wada Kentaro	和田 健太郎	173

	学会名称	Name	名前	page
に	日本金属学会	Wakeda Masato	譯田 真人	185
		Watanabe Makoto	渡邊 誠	153
		Xu Ya	許 亜	33
		Yamamoto Akiko	山本 玲子	341
		Yusa Hitoshi	遊佐 斉	277
	日本計算工学会	Watanabe Ikumu	渡邊 育夢	392
	日本結晶学会	Mochiku Takashi	茂筑 高士	217
		Nakamura Masaki	中村 真佐樹	68
		Yusa Hitoshi	遊佐 斉	277
	日本結晶成長学会	Nakamura Masaru	中村 優	78
		Oshima Yuichi	大島 祐一	48
		Shimamura Kiyoshi	島村 清史	77
		Villora Garcia	ビジョラ ガルシア	79
		Yuan Dongsheng	原 東升	80
	日本建築学会	Sawaguchi Takahiro	澤口 孝宏	142
	日本顕微鏡学会	Cretu Ovidiu	コレツ オヴィヂュ	349
		Hara Toru	原 徹	186
		Harano Koji	原野 幸治	347
		Hashimoto Ayako	橋本 綾子	353
		Kawamoto Naoyuki	川本 直幸	345
		Kikkawa Jun	吉川 純	346
		Kimoto Koji	木本 浩司	344
		Mitsui Tadashi	三井 正	355
		Mitsuishi Kazutaka	三石 和貴	350
		Niitsu Kodai	新津 甲大	356
		Ohkubo Tadakatsu	大久保 忠勝	122
		Onishi Keiko	大西 桂子	354
		Takeguchi Masaki	竹口 雅樹	351
	日本高圧力学会	Kawamura Fumio	川村 史朗	280
		Kawashima Tetsuya	川嶋 哲也	281
		Matsumoto Ryo	松本 凌	200
		Miyakawa Masashi	宮川 仁	282
		Naka Takashi	名嘉 節	278
		Nakano Satoshi	中野 智志	279
		Takano Yoshihiko	高野 義彦	197
		Tang Jie	唐 捷	7
		Taniguchi Takashi	谷口 尚	194
		Yusa Hitoshi	遊佐 斉	277
	日本工学アカデミー	Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	150
	日本航空宇宙学会	Mercer Christopher	マーサー クリストファー	152
	日本固体イオニクス学会	Kuwata Naoaki	桑田 直明	9
		Miyoshi Shogo	三好 正悟	5
		Takada Kazunori	高田 和典	3
		Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	2
		Terabe Kazuya	寺部 一弥	243
		Tsuchiya Takashi	土屋 敬志	246
	日本再生医療学会	Chen Guoping	陳 国平	302
		Kawazoe Naoki	川添 直輝	303
	日本材料科学会	Shimamura Kiyoshi	島村 清史	77
	日本材料学会	Hatakeyama Tomotaka	畠山 友孝	166
		Inoue Tadanobu	井上 忠信	158
		Kimura Kazuhiro	木村 一弘	167
		Naito Kimiyoshi	内藤 公喜	134
		Ogawa Yuhei	小川 祐平	178
		Oguma Hiroyuki	小熊 博幸	135
		Sawada Kota	澤田 浩太	165
		Wada Kentaro	和田 健太郎	173
		Wakeda Masato	譯田 真人	185
		Yoshinaka Fumiyoshi	吉中 奎貴	144
	日本材料試験技術協会	Miyahara Kensuke	宮原 健介	172

	学会名称	Name	名前	page
に	日本酸化ストレス学会	Yoshitomi Toru	吉富 徹	304
	日本歯科理工学会	Tsutsumi Yusuke	堤 祐介	180
	日本磁気科学会	Hirota Noriyuki	廣田 憲之	82
日本磁気学会		Hirai Takamasa	平井 孝昌	120
		Hirota Noriyuki	廣田 憲之	82
		Hono Kazuhiro	宝野 和博	
		Isogami Shinji	磯上 慎二	113
		Kasai Shinya	葛西 伸哉	116
		Kikugawa Naoki	菊川 直樹	373
		Mamiya Hiroaki	間宮 広明	127
		Masuda Keisuke	増田 啓介	124
		Mitani Seiji	三谷 誠司	108
		Miura Yoshio	三浦 良雄	123
		NakataNI Tomoya	中谷 友也	110
		Nishino Masamichi	西野 正理	204
		Ohkubo Tadakatsu	大久保 忠勝	122
		Saito Akiko	齋藤 明子	129
		Sakuraba Yuya	桜庭 裕弥	109
		Sakurai Makoto	櫻井 亮	245
		Sasaki Taisuke	佐々木 泰祐	121
		Sepehri Amin Hossein	セペリ アミン ホセイン	126
		Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	114
		Suto Hirofumi	首藤 浩文	111
		Takahashi Yukiko	高橋 有紀子	112
		Uchida Ken-ichi	内田 健一	118
		Ueda Shigenori	上田 茂典	72
		Wen ZhenChao	温 振超	115
	日本シミュレーション学会	Miyazaki Tsuyoshi	宮崎 剛	226
	日本人工臓器学会	Taguchi Tetsushi	田口 哲志	298
	日本生化学会	Kaizuka Yoshihisa	貝塚 芳久	297
	日本生物工学会	Yamazaki Tomohiko	山崎 智彦	295
	日本生物物理学会	Kaizuka Yoshihisa	貝塚 芳久	297
	日本ゼオライト学会	Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスィン ワッチャロップ	255
	日本赤外線学会	Miyazaki Hideki T.	宮崎 英樹	96
日本接着学会		Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	150
		Naito Kimiyoshi	内藤 公喜	134
		Nishiguchi Akihiro	西口 昭広	299
		Taguchi Tetsushi	田口 哲志	298
日本セラミックス協会		Adachi Yutaka	安達 裕	65
		Fudouzi Hiroshi	不動寺 浩	97
		Furuse Hiroaki	古瀬 裕章	86
		Hirosaki Naoto	廣崎 尚登	45
		Hosono Hideo	細野 秀雄	195
		Kakisawa Hideki	垣澤 英樹	137
		Kikuchi Masanori	菊池 正紀	300
		Kohara Shinji	小原 真司	374
		Koyama YuKinori	小山 幸典	380
		Li Jiguang	李 継光	105
		Miyakawa Masashi	宮川 仁	282
		Mori Takao	森 孝雄	261
		Morita Koji	森田 孝治	102
		Nakamura Masaki	中村 真佐樹	68
		Nakane Takayuki	中根 茂行	84
		Nakanishi Takayuki	中西 貴之	88
		Nakano Kosuke	中野 晃佑	396
		Ogaki Takeshi	大垣 武	71
		Ohashi Naoki	大橋 直樹	44
		Ohsawa Takeo	大澤 健男	66
		Okuma Gaku	大熊 学	140
		Saito Noriko	齋藤 紀子	69

学会名称	Name	名前	page
に 日本セラミックス協会	Sakaguchi Isao	坂口 勲	75
	Sasaki Takayoshi	佐々木 高義	196
	Segawa Hiroyo	瀬川 浩代	67
	Shimizu Takao	清水 荘雄	76
	Shimoda Kazuya	下田 一哉	139
	Shirahata Naoto	白幡 直人	275
	Suehara Shigeru	末原 茂	56
	Suzuki Tohru	鈴木 達	81
	Takeda Takashi	武田 隆史	87
	Taniguchi Takaaki	谷口 貴章	252
	Taniguchi Takashi	谷口 尚	194
	Todoroki Shin-ichi	轟 眞市	104
	Tsujimoto Yoshihiro	辻本 吉廣	205
	Vasyukiv Oleg	バジルキフ オレグ	106
日本塑性加工学会	Inoue Tadanobu	井上 忠信	158
	Ueki Rintaro	上路 林太郎	163
日本地質学会	Sakuma Hiroshi	佐久間 博	58
日本地熱学会	Toda Yoshiaki	戸田 佳明	391
日本中性子科学会	Hase Masashi	長谷 正司	202
	Iimura Soshi	飯村 壮史	73
	Mamiya Hiroaki	間宮 広明	127
	Mochiku Takashi	茂筑 高士	217
	Terada Noriki	寺田 典樹	128
日本鑄造工学会	Ode Machiko	大出 真知子	191
	Takamori Susumu	高森 晋	143
日本鉄鋼協会	Abe Taichi	阿部 太一	189
	Deng Xiao	鄧 驍	315
	Emura Satoshi	江村 聡	164
	Furuya Yoshiyuki	古谷 佳之	168
	Hara Toru	原 徹	186
	Hatakeyama Tomotaka	畠山 友孝	166
	Hayakawa Masao	早川 正夫	170
	Ii Seiichiro	井 誠一郎	187
	Ito Kaita	伊藤 海太	393
	Kadowaki Mariko	門脇 万里子	182
	Katayama Hideki	片山 英樹	179
	Kimura Kazuhiro	木村 一弘	167
	Kimura Yuuji	木村 勇次	159
	Kusano Masahiro	草野 正大	157
	Meguro Susumu	目黒 奨	171
	Murakami Hideyuki	村上 秀之	141
	Nagira Tomoya	柳楽 知也	183
	Nishikawa Hideaki	西川 嗣彬	169
	Ode Machiko	大出 真知子	191
	Ogawa Yuhei	小川 祐平	178
	Ohmura Takahito	大村 孝仁	132
	Ohnuma Ikuo	大沼 郁雄	190
	Okada Kazuho	岡田 和歩	177
	Ono Yoshinori	小野 嘉則	174
	Osada Toshio	長田 俊郎	147
	Qiu Hai	邱 海	160
	Sahara Ryoji	佐原 亮二	188
	Sawada Kota	澤田 浩太	165
	Sawaguchi Takahiro	澤口 孝宏	142
	Shibata Akinobu	柴田 暁伸	175
	Toda Yoshiaki	戸田 佳明	391
	Tsuzaki Kaneaki	津崎 兼彰	133
	Ueki Rintaro	上路 林太郎	163
	Wada Kentaro	和田 健太郎	173
	Watanabe Ikumu	渡邊 育夢	392
	Yoshinaka Fumiyo	吉中 奎貴	144

	学会名称	Name	名前	page
に	日本銅学会	Ohnuma Ikuo	大沼 郁雄	190
	日本熱処理技術協会	Emura Satoshi	江村 聡	164
		Kimura Yuuji	木村 勇次	159
	日本熱測定学会	Kawakami Kohsaku	川上 亘作	294
	日本熱電学会	Iwasaki Yutaka	岩崎 祐昂	267
		Katsura Yukari	桂 ゆかり	394
		Mori Takao	森 孝雄	261
		Ohkubo Isao	大久保 勇男	264
		Sakuraba Yuya	桜庭 裕弥	109
		Sato Naoki	佐藤 直大	266
		Tachibana Makoto	橘 信	265
		Tsujii Naohito	辻井 直人	263
	日本熱物性学会	Wu Yen-Ju	ウー イェン ルー	381
		Xu Yibin	徐 一斌	378
	日本粘土学会	Fujii Kazuko	藤井 和子	328
		Ide Yusuke	井出 裕介	253
		Sakuma Hiroshi	佐久間 博	58
		Suehara Shigeru	末原 茂	56
		Tamura Kenji	田村 堅志	55
	日本バイオマテリアル学会	Chen Guoping	陳 国平	302
		Ebara Mitsuhiro	荏原 充宏	305
		Hiromoto Sachiko	廣本 祥子	161
		Kawazoe Naoki	川添 直輝	303
		Nakanishi Jun	中西 淳	290
		Nishiguchi Akihiro	西口 昭広	299
		Taguchi Tetsushi	田口 哲志	298
		Yamamoto Akiko	山本 玲子	341
		Yamamoto Shota	山本 翔太	293
		Yoshitomi Toru	吉富 徹	304
	日本ばね学会	Hayakawa Masao	早川 正夫	170
	日本光学会	Kurimura Sunao	栗村 直	95
		Miyazaki Hideki T.	宮崎 英樹	96
	日本非破壊検査協会	He Dongfeng	何 東風	154
		Ito Kaita	伊藤 海太	393
		Watanabe Makoto	渡邊 誠	153
	日本表面真空学会	Arafune Ryuichi	荒船 竜一	213
		Da Bo	達 博	377
		Ishida Nobuyuki	石田 暢之	359
		Kurahashi Mitsunori	倉橋 光紀	364
		Masuda Takuya	増田 卓也	10
		Nagamura Naoka	永村 直佳	369
		Nagao Tadaaki	長尾 忠昭	234
		NagaoKA Katsumi	長岡 克己	214
		Nakao Hidenobu	中尾 秀信	34
		Nara Jun	奈良 純	227
		Noguchi Hidenori	野口 秀典	18
		Ohkubo Isao	大久保 勇男	264
		Onishi Keiko	大西 桂子	354
		Sagisaka Keisuke	鷺坂 恵介	358
		Suzuki Taku	鈴木 拓	63
		Uchihashi Takashi	内橋 隆	211
		Wakayama Yutaka	若山 裕	206
		Yaji Koichiro	矢治 光一郎	367
		Yakabe Taro	矢ヶ部 太郎	352
		Yamashita Yoshiyuki	山下 良之	62
		Yoshikawa Hideki	吉川 英樹	387
		Yoshizawa Shunsuke	吉澤 俊介	360
	日本物理学会	Amekura Hiroshi	雨倉 宏	32
		Arafune Ryuichi	荒船 竜一	213
		Arai Masao	新井 正男	379

	学会名称	Name	名前	page
に	日本物理学会	Arai Shunto	荒井 俊人	334
		Goto Atsushi	後藤 敦	363
		Goto Masahiro	後藤 真宏	262
		Harada Takayuki	原田 尚之	284
		Hase Masashi	長谷 正司	202
		Hashi Kenjiro	端 健二郎	366
		Hayami Wataru	速水 渉	235
		Hu Xiao	古月 暁	229
		Iguchi Ryo	井口 亮	119
		Imanaka Yasutaka	今中 康貴	370
		Inoue Jun-ichi	井上 純一	100
		Iwanaga Masanobu	岩長 祐伸	98
		Iwasaki Takuya	岩崎 拓哉	242
		Iwasaki Yutaka	岩崎 祐昂	267
		Kariyado Toshikaze	刈宿 俊風	230
		Kasai Shinya	葛西 伸哉	116
		Kikkawa Jun	吉川 純	346
		Kikugawa Naoki	菊川 直樹	373
		Kino Hiori	木野 日織	61
		Kitaura Ryo	北浦 良	209
		Kobayashi Yuka	小林 由佳	319
		Kohno Masanori	河野 昌仙	216
		Konoike Takako	鴻池 貴子	221
		Kozawa Daichi	小澤 大知	210
		Kozuka Yusuke	小塚 裕介	241
		Kurahashi Mitsunori	倉橋 光紀	364
		Kuroda Takashi	黒田 隆	92
		Kuwata Naoaki	桑田 直明	9
		Mamiya Hiroaki	間宮 広明	127
		Masuda Keisuke	増田 啓介	124
		Matsuishi Satoru	松石 聡	283
		Matsumoto Ryo	松本 凌	200
		Mitani Seiji	三谷 誠司	108
		Mitsui Tadashi	三井 正	355
		Mitsuishi Kazutaka	三石 和貴	350
		Miura Yoshio	三浦 良雄	123
		Miyazaki Tsuyoshi	宮崎 剛	226
		Mochiku Takashi	茂筑 高士	217
		Nagao Tadaaki	長尾 忠昭	234
		Naka Takashi	名嘉 節	278
		Nakane Takayuki	中根 茂行	84
		Nakano Kosuke	中野 晃佑	396
		Nakata Ayako	中田 彩子	228
		Nara Jun	奈良 純	227
		Niitsu Kodai	新津 甲大	356
		Nishino Masamichi	西野 正理	204
		Nonomura Yoshihiko	野々村 禎彦	223
		Ochiai Tetsuyuki	落合 哲行	93
		Ohmura Takahito	大村 孝仁	132
		Ohtake Akihiro	大竹 晃浩	90
		Ooi Shuuichi	大井 修一	220
		Oshikiri Mitsutake	押切 光文	254
		Sagisaka Keisuke	鷺坂 恵介	358
		Saito Akiko	齋藤 明子	129
		Sakurai Hiroya	櫻井 裕也	198
		Sakurai Makoto	櫻井 亮	245
		Shimizu Takao	清水 荘雄	76
		Shingaya Yoshitaka	新ヶ谷 義隆	208
		Sodeyama Keitaro	袖山 慶太郎	382
		Solovvey Igor	ソロビョフ イゴール	225

	学会名称	Name	名前	page
に	日本物理学会	Sugimoto Satoshi	杉本 聡志	117
		Suzuki Taku	鈴木 拓	63
		Tachibana Makoto	橋 信	265
		Tadano Terumasa	只野 央将	125
		Takano Yoshihiko	高野 義彦	197
		Takeda Yoshihiko	武田 良彦	31
		Takehana Kanji	竹端 寛治	371
		Tamura Ryo	田村 亮	397
		Tanaka Akihiro	田中 秋広	224
		Tang Jie	唐 捷	7
		Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	2
		Terada Noriki	寺田 典樹	128
		Terashima Kensei	寺嶋 健成	199
		Terashima Taichi	寺嶋 太一	215
		Tsuda Shunsuke	津田 俊輔	368
		Tsujii Naohito	辻井 直人	263
		Tsujimoto Yoshihiro	辻本 吉廣	205
		Uchida Ken-ichi	内田 健一	118
		Uchihashi Takashi	内橋 隆	211
		Ueda Shigenori	上田 茂典	72
		Watanabe Kenji	渡邊 賢司	102
		Yaji Koichiro	矢治 光一郎	367
		Yakabe Taro	矢ヶ部 太郎	352
		Yamaguchi Takahide	山口 尚秀	212
		Yamaji Youhei	山地 洋平	222
		Yamasaki Yuichi	山崎 裕一	376
		Yamase Hiroyuki	山瀬 博之	219
		Yamashita Yu	山下 侑	274
		Yamaura Kazunari	山浦 一成	201
		Yoshizawa Shunsuke	吉澤 俊介	360
	日本フラックス成長研究会	Tachibana Makoto	橋 信	265
日本分析化学会		Nakanishi Jun	中西 淳	290
		Nakao Hidenobu	中尾 秀信	34
		Yamamoto Shota	山本 翔太	293
日本放射光学会		Ishii Masashi	石井 真史	390
		Kohara Shinji	小原 真司	374
		Nakano Satoshi	中野 智志	279
		Terashima Kensei	寺嶋 健成	199
		Yaji Koichiro	矢治 光一郎	367
		Yamasaki Yuichi	山崎 裕一	376
日本膜学会		Ichinose Izumi	一ノ瀬 泉	340
日本薬剤学会		Kawakami Kohsaku	川上 亘作	294
日本誘電体学会		Nagata Takahiro	長田 貴弘	59
日本溶射学会		Watanabe Makoto	渡邊 誠	153
日本流体力学会		Shiba Kota	柴 弘太	311
ニューダイヤモンドフォーラム		Koide Yasuo	小出 康夫	50
		Koizumi Satoshi	小泉 聡	46
		Taniguchi Takashi	谷口 尚	194
		Teraji Tokuyuki	寺地 徳之	99
		Watanabe Kenji	渡邊 賢司	102
		Yamaguchi Takahide	山口 尚秀	212
は	バイオインテグレーション学会	Kikuchi Masanori	菊池 正紀	300
ひ	表面技術協会	Katayama Hideki	片山 英樹	179
		Kawakita Jin	川喜多 仁	335
ふ	腐食防食学会	Doi Kotaro	土井 康太郎	162
		Hiromoto Sachiko	廣本 祥子	161
		Kadowaki Mariko	門脇 万里子	182
		Katayama Hideki	片山 英樹	179
		Kawakita Jin	川喜多 仁	335
		Tsutsumi Yusuke	堤 祐介	180

	学会名称	Name	名前	page
ふ	フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会	Hayashi Hironobu	林 宏暢	361
		Kitaura Ryo	北浦 良	209
		Shirai Yasuhiro	白井 康裕	14
	分子科学会	Sodeyama Keitaro	袖山 慶太郎	382
	分子シミュレーション学会	Sakuma Hiroshi	佐久間 博	58
	粉体工学会	Fudouzi Hiroshi	不動寺 浩	97
		Suzuki Tohru	鈴木 達	81
	粉体粉末冶金協会	Kobayashi Kiyoshi	小林 清	83
		Morita Koji	森田 孝治	103
		Sakurai Hiroya	櫻井 裕也	198
Shirahata Naoto		白幡 直人	275	
Suzuki Tohru		鈴木 達	81	
Tsuji Naohito		辻井 直人	263	
む	無機高分子研究会	Satoh Norifusa	佐藤 宗英	336
	有機合成化学協会	Nagura Kazuhiko	名倉 和彦	258
Nakamura Yasuyuki		中村 泰之	339	
Nakanishi Waka		中西 和嘉	320	
よ	溶接学会	Honda Hiroshi	本田 博史	156
		Kitano Houichi	北野 萌一	184
		Meguro Susumu	目黒 奨	171
		Nagira Tomoya	柳樂 知也	183
		Qiu Hai	邱 海	160
		理論化学会	Nakata Ayako	中田 彩子
り	レーザー学会	Furuse Hiroaki	古瀬 裕章	86
		Honda Hiroshi	本田 博史	156
		Kurimura Sunao	栗村 直	95
		Iwanaga Masanobu	岩長 祐伸	98
わ	ワイドギャップ半導体学会	Sumiya Masatomo	角谷 正友	51

主な所属学会〔海外〕

	学会名称	Name	名前	page
A	American Ceramic Society	Kikuchi Masanori	菊池 正紀	300
		Kobayashi Kiyoshi	小林 清	83
		Nakanishi Takayuki	中西 貴之	88
		Ohashi Naoki	大橋 直樹	44
		Okuma Gaku	大熊 学	140
		Ren Xiaobing	任 曉兵	74
		Segawa Hiroyo	瀬川 浩代	67
		Shimamura Kiyoshi	島村 清史	77
		Shimoda Kazuya	下田 一哉	139
		Suzuki Tohru	鈴木 達	81
		Vasykiv Oleg	バジルキフ オレグ	106
		Yuan Dongsheng	原 東升	80
	American Chemical Society	Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスイン ワッチャロップ	255
		Hill Jonathan	ヒル ジョナサン	268
		Hosono Hideo	細野 秀雄	195
		Ikeda Taichi	池田 太一	327
		Ito Kohzo	伊藤 耕三	289
		Nakanishi Takashi	中西 尚志	256
		Nakanishi Takayuki	中西 貴之	88
		Nakano Kosuke	中野 晃佑	396
		Noguchi Hidenori	野口 秀典	18
		Ohkubo Isao	大久保 勇男	264
		Ohta Narumi	太田 鳴海	4
		Suehiro Takayuki	末廣 隆之	70
		Takeuchi Masayuki	竹内 正之	288
		Tamate Ryota	玉手 亮多	324
		Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	2
		Ueki Takeshi	上木 岳士	292
		Wakahara Takatsugu	若原 孝次	326
		Yanagida Masatoshi	柳田 真利	16
	American Institute of Chemical Engineers	Chaikittisilp Watcharop	チャイキッティスイン ワッチャロップ	255
	American Physical Society	Hu Xiao	古月 曉	229
		Nagaoka Katsumi	長岡 克己	214
		Suehara Shigeru	末原 茂	56
		Yamase Hiroyuki	山瀬 博之	219
B	BIOKON	Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	150
C	Clay Minerals Society	Sakuma Hiroshi	佐久間 博	58
	COST Action	Hosoda Naoe	細田 奈麻絵	150
E	Electrochemical Society	Hill Jonathan	ヒル ジョナサン	268
		Kadowaki Mariko	門脇 万里子	182
		Katayama Hideki	片山 英樹	179
		Kobayashi Kiyoshi	小林 清	83
		Mandai Toshihiko	万代 俊彦	24
		Nishikawa Kei	西川 慶	22
		Ohta Narumi	太田 鳴海	4
		Tominaka Satoshi	富中 悟史	375
	European Colloid & Interface Society	Kawakami Kohsaku	川上 亘作	294
	European Society for Biomaterials	Naganuma Tamaki	長沼 環	306
I	IEEE Magnetics Society	Hono Kazuhiro	宝野 和博	
		Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	114
		Takahashi Yukiko	高橋有紀子	112
	Institute of Electrical and Electronics Engineers	Nabatame Toshihide	生田目 俊秀	240
		Shigetou Akitsu	重藤 暁津	151
		Sukegawa Hiroaki	介川 裕章	114
		Takahashi Yukiko	高橋 有紀子	112
	Institute of Physics	Nagao Tadaaki	長尾 忠昭	234

	学会名称	Name	名前	page
I	International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry	Kawakami Kohsaku	川上 亘作	294
	International Society of Electrochemistry	Mandai Toshihiko	万代 俊彦	24
		Sakaushi Ken	坂牛 健	19
		Tateyama Yoshitaka	館山 佳尚	2
		Yanagida Masatoshi	柳田 真利	16
	International Thermoelectric Society	Ohkubo Isao	大久保 勇男	264
M	Materials Research Society	Hosono Hideo	細野 秀雄	195
		Kikuchi Masanori	菊池 正紀	300
		Kozuka Yusuke	小塚 裕介	241
		Mitsui Tadashi	三井 正	355
	Minerals, Metals & Materials Society	Hono Kazuhiro	宝野 和博	
		Ii Seiichiro	井 誠一郎	187
		Kitashima Tomonori	北嶋 具教	155
		Mercer Christopher	マーサー クリストファー	152
		Murakami Hideyuki	村上 秀之	141
		Ohmura Takahito	大村 孝仁	132
		Ren Xiaobing	任 曉兵	74
		Sasaki Taisuke	佐々木 泰祐	121
		Watanabe Ikumu	渡邊 育夢	392
		Watanabe Makoto	渡邊 誠	153
	OPTICA	Furuse Hiroaki	古瀬 裕章	86
		Iwanaga Masanobu	岩長 祐伸	98
		Kurimura Sunao	栗村 直	95
		Miyazaki Hideki T.	宮崎 英樹	96
R	Royal Society of Chemistry	Chen Guoping	陳 国平	302
		El-Safy Sherif	エルサフティ シェリフ	308
		Ma Renzhi	馬 仁志	250
S	Society for Biomaterials	Naganuma Tamaki	長沼 環	306
T	The Asian Society for Colloid and Surface Science (ASCASS)	Shrestha Lok Kumar	スレスタ ロック クマール	273
	Tissue Engineering and Regenerative Medicine International Society	Chen Guoping	陳 国平	302
		Kawazoe Naoki	川添 直輝	303

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

NIMS研究者総覧 2023

ISBN978-4-9912350-1-6

発行所：国立研究開発法人 物質・材料研究機構

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

発行部署：外部連携部門 企業連携室

発行日：2023年（令和5年）10月1日

©All rights reserved by the National Institute for Materials Science

企画・編集：企業連携室 川喜多 磨美子

デザイン：前田印刷株式会社

印刷：朝日印刷株式会社

NIMS公式HP：<https://www.nims.go.jp/>

NIMS企業向け総合窓口ページ：<https://technology-transfer.nims.go.jp/>

本書に関するご意見・お問合せは外部連携部門企業連携室までお願いいたします。

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 外部連携部門企業連携室

E-mail：technology-transfer@nims.go.jp