工学系研究科マテリアル工学専攻

溝口研究室

[原子と電子の役割を知る]

生産技術研究所　物質・環境系部門
Institute of Industrial Science, Dept. Mater. Envi. Science
http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp

ナノ物質設計工学
Nano-Materials Design Lab.

マテリアルデザイン ～Paving the way for Materials Design～

どのような構造？どのような機能？
どのように機能発現？

機能 ⟷ 構造

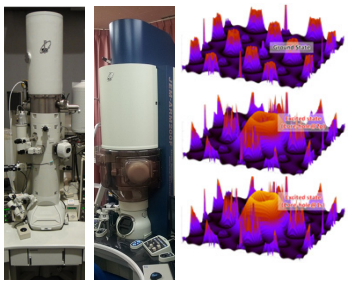
構造機能相関の解明

ナノ物質設計工学研究室： Nano-Materials Design Laboratory (NMDL)（溝口研究室）の研究内容

我々の周りには様々な物質が存在しています．電気を流す物質や流さない物質，硬い物質やよく曲がる物質など，それぞれの物質には良い面もあれば悪い面もありますが，我々の社会生活はそれら物質の性質をうまく組み合わせることにより支えられています．そのような物質の多様な性質は，物質を構成している原子や電子が支配しており，原子と電子の構造を知ることができれば，その物質の性質の起源を突き止めることができます．

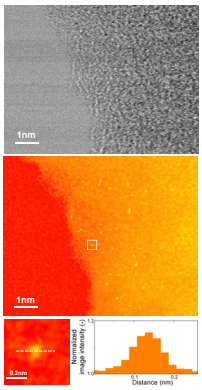
溝口研究室ではそのような原子と電子の構造を透過型電子顕微鏡（TEM/STEM），電子・X線吸収分光（ELNES/XANES），第一原理計算，さらに情報科学手法（インフォマティクス）を用いて精密に解析しております．我々の研究を通して原子と電子の役割を知ることで**『物質設計』**を実現し，太陽電池材料や光学材料，電池材料，イオン液体等の先進材料をより高性能化することを目指しております．

『The Ultimate Analysis ~究極の分析法~』を用いた原子分解能物質計測

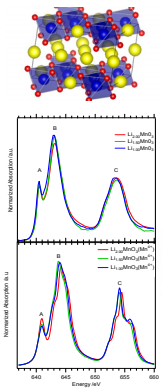


内殻励起スペクトル(ELNES/XANES)は高い空間分解能と時間分解能，感度を有しており，STEM-ELNESは*Nature*誌に『The Ultimate Analysis 究極の分析法』と紹介されるほど強力な分析手法です．溝口研究室ではELNES/XANESを理論計算する手法を世界に先駆けて確立し，最近では，一粒子・多粒子理論に基づいて全構造・全元素・全吸収端の確立を目指した研究を行っております．『究極の分析法』と定量的理論計算を組み合わせることにより，物質の原子と電子の構造を精密解析しております．

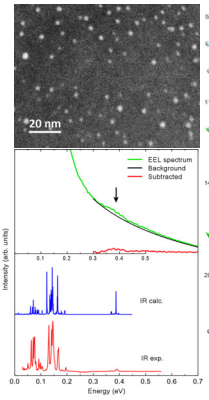
ガラスの原子分解能解析



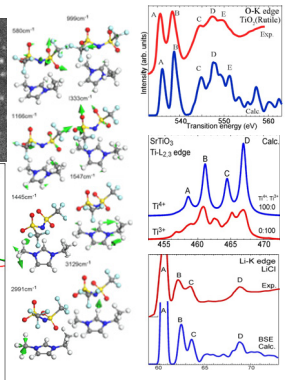
Liイオン電池の反応解析



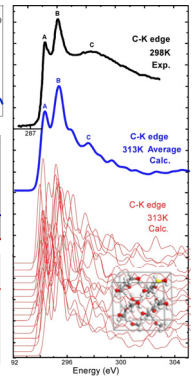
液体の高空間分解能振動計測



一粒子・多粒子ELNES計算



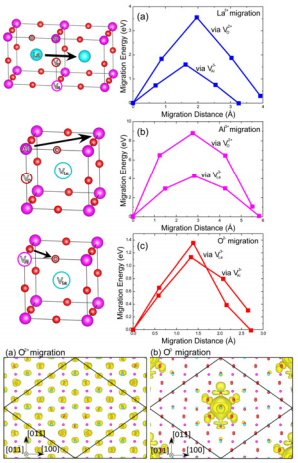
液体のELNES計算



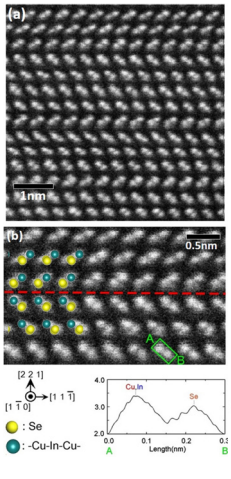
T. Miyata et al., (2014) submitted, S. Ootsuki et al., Microscopy (2014) in press, K. Kubobuchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 053906, T. Mizoguchi et al., ACS Nano, 7 (2013) 5058, Y. Matsui et al., Sci. Rep., 3 (2013) 3503, S. Ootsuki et al., Appl. Phys. Lett., 99 (2011) 233109, T. Mizoguchi, et al., Micron, 41 (2010) 695–709.

格子欠陥の定量化とインフォマティクスによる物質設計

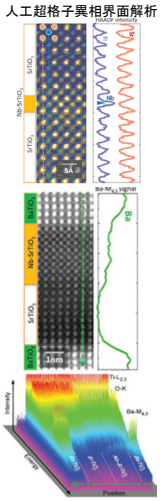
原子拡散メカニズムの解明



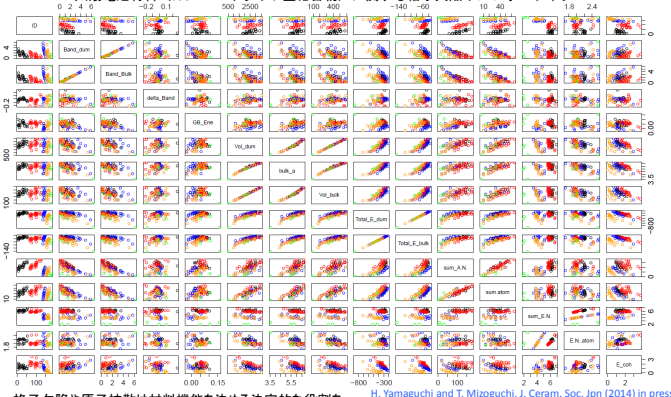
太陽電池材料の界面原子構造



人工超格子異相界面解析



太陽電池材料（カルコパイライト型化合物）に関する格子欠陥インフォマティクス



格子欠陥や原子拡散は材料機能を決める決定的な役割を果たします．本研究室では，原子分解能STEM-EELSと第一原理計算により格子欠陥を定量化し，情報科学的手法（インフォマティクス）により解析することで物質設計の確立を目指しております．

H. Yamaguchi and T. Mizoguchi, J. Ceram. Soc. Jpn (2014) in press.
H. Yamaguchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 153904.
T. Yamamoto and T. Mizoguchi, Appl. Phys. Lett., 102 (2013) 211910.
T. Yamamoto and T. Mizoguchi, Ceram. Inter., 39 (2013) S287.
T. Yamamoto and T. Mizoguchi, Phys. Rev. B, 86 (2012) 094117.
T. Mizoguchi, et al., Adv. Func. Mater., 21 (2011) 2258.