



# 溝口研究室

## [原子・電子構造の精密計測]

生産技術研究所 物質・環境系部門

Institute of Industrial Science, Dept. Mater. Envi. Science

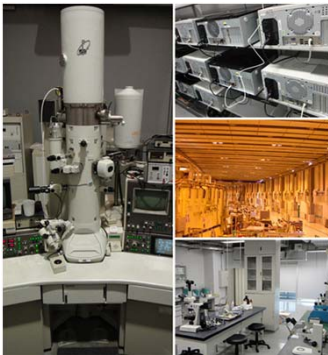
http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp

ナノ物質設計工学

Nano-Materials Design Lab.

## 計測と計算による物質設計指針の確立

Paving the way for Materials Design

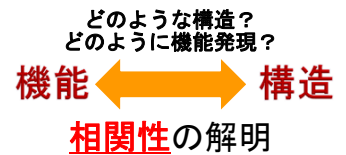


### ナノ物質設計工学研究室(溝口研究室)の研究内容

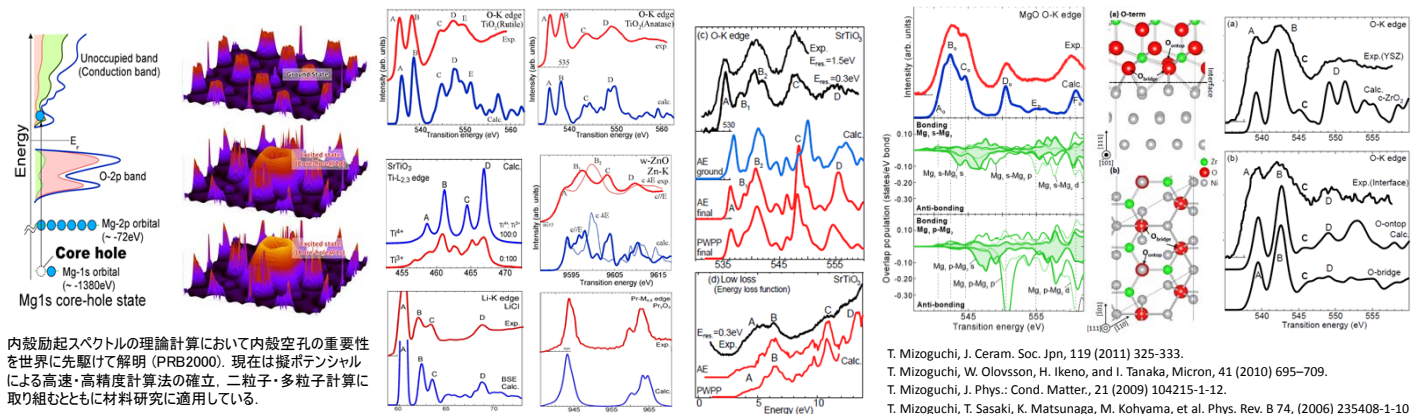
材料機能の発現は物質の原子・電子構造と密接に関係している。一方で材料機能がどのように発現するのかというメカニズムは十分に理解されていない。本研究室では、材料機能が発現するメカニズムを原子レベルで理解し、高機能な材料の設計指針を確立することを目的として研究活動を行っている。

材料機能が発現するメカニズムを明らかにするためには、物質の原子・電子構造を定量化する必要がある。本研究室では透過型電子顕微鏡 (TEM)、走査TEM (STEM)、電子線エネルギー吸収端近傍微細構造 (ELNES)、X線吸収端近傍微細構造 (XANES)、第一原理計算法および独自開発した ELNES/XANES理論計算法を複合利用した研究を行っている。

具体的には、人工超格子やイオン液体などの先進材料、Liイオン電池材料やSiなどのエネルギー材料を研究対象とし、原子・電子構造をナノ計測と理論計算により定量的に明らかにし、機能発現メカニズムを解明する。さらに、高機能化のための指針を確立し、実際に高機能材料の開発を目指している。

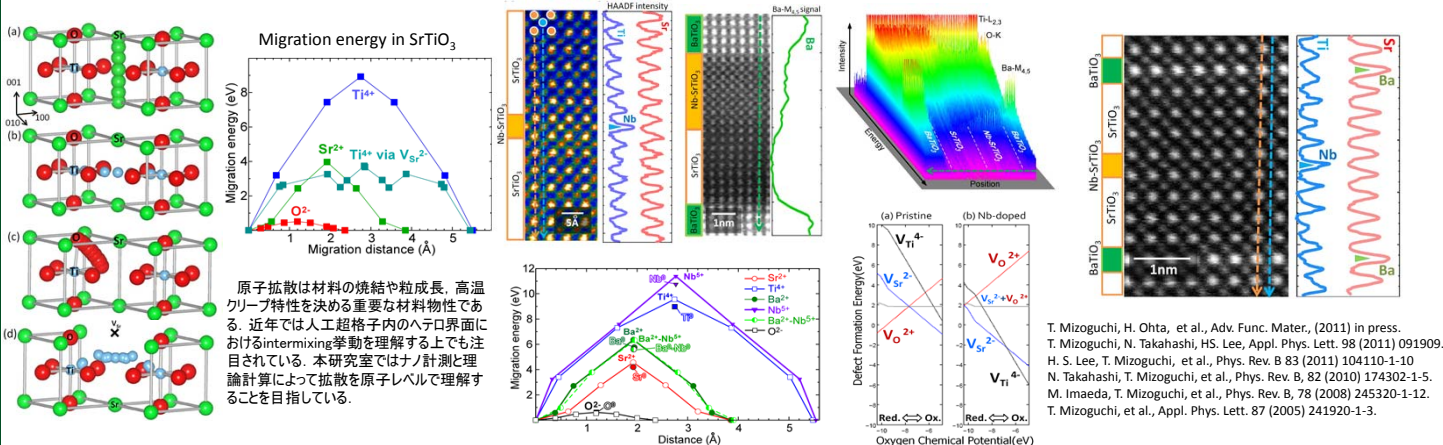


## 内殻励起スペクトル (ELNES/XANES) による電子構造の精密計測



T. Mizoguchi, J. Ceram. Soc. Jpn, 119 (2011) 325-333.  
T. Mizoguchi, W. Olovsson, H. Ikeno, and I. Tanaka, Micron, 41 (2010) 695-709.  
T. Mizoguchi, J. Phys.: Cond. Matter, 21 (2009) 104215-1-12.  
T. Mizoguchi, T. Sasaki, K. Matsunaga, M. Kohyama, et al. Phys. Rev. B 74, (2006) 235408-1-10  
T. Mizoguchi, K. Tatsumi, and I. Tanaka, Ultramicroscopy, 106 (2006) 1120-1128.  
T. Mizoguchi, I. Tanaka, M. Yoshiya, et al., Phys. Rev. B, 61 (2000) 2180-2186.

## 拡散の原子論的研究



原子拡散は材料の焼結や粒成長、高温クリープ特性を決める重要な材料物性である。近年では人工超格子内のヘテロ界面におけるintermixing挙動を理解する上でも注目されている。本研究室ではナノ計測と理論計算によって拡散を原子レベルで理解することを目指している。

T. Mizoguchi, H. Ohta, et al., Adv. Func. Mater., (2011) in press.  
T. Mizoguchi, N. Takahashi, H.S. Lee, Appl. Phys. Lett. 98 (2011) 091909.  
H. S. Lee, T. Mizoguchi, et al., Phys. Rev. B 83 (2011) 104110-1-10  
N. Takahashi, T. Mizoguchi, et al., Phys. Rev. B, 82 (2010) 174302-1-5.  
M. Imaeda, T. Mizoguchi, et al., Phys. Rev. B, 78 (2008) 245320-1-12.  
T. Mizoguchi, et al., Appl. Phys. Lett. 87 (2005) 241920-1-3.