



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 ~Paving the way for Materials Design~

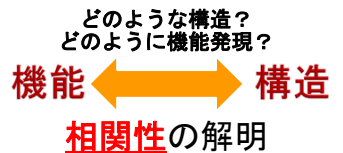


ナノ物質設計工学研究室：Nano-Materials Design Laboratory (NMDL) (溝口研究室)の研究内容

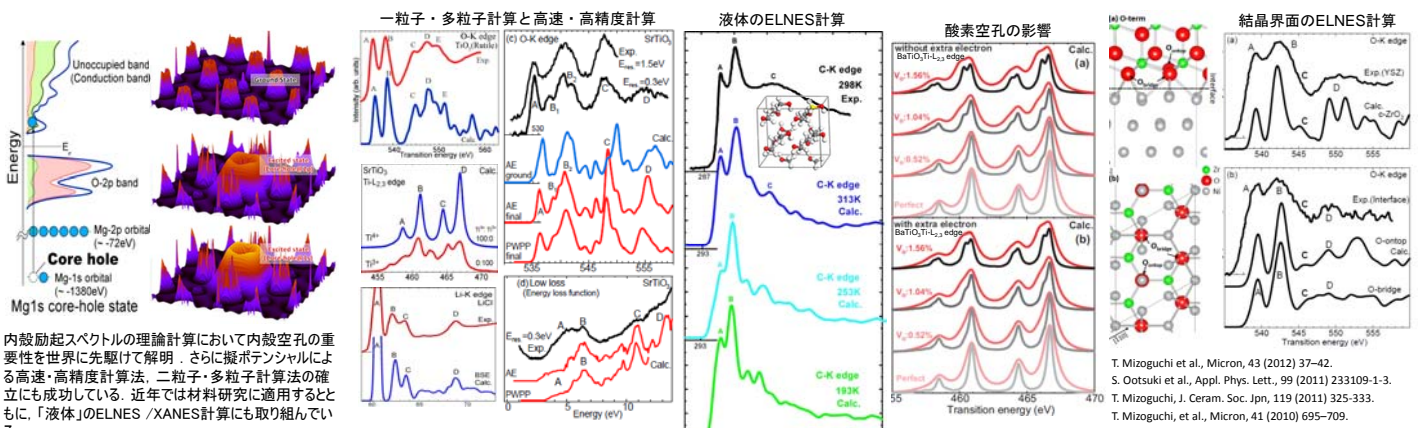
材料機能の発現は物質の原子・電子構造と密接に関係している。一方で材料機能がどのように発現するのかというメカニズムは十分に理解されていない。本研究室では、材料機能が発現するメカニズムを原子レベルで理解し、高機能な材料を設計するための指針を確立することを目的として研究活動を行っている。

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イオン電池材料や太陽電池材料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することで「構造」と「機能」の相関性を明らかにすることを目的としている。以上の研究を通し「物質設計」の実現を目指している。

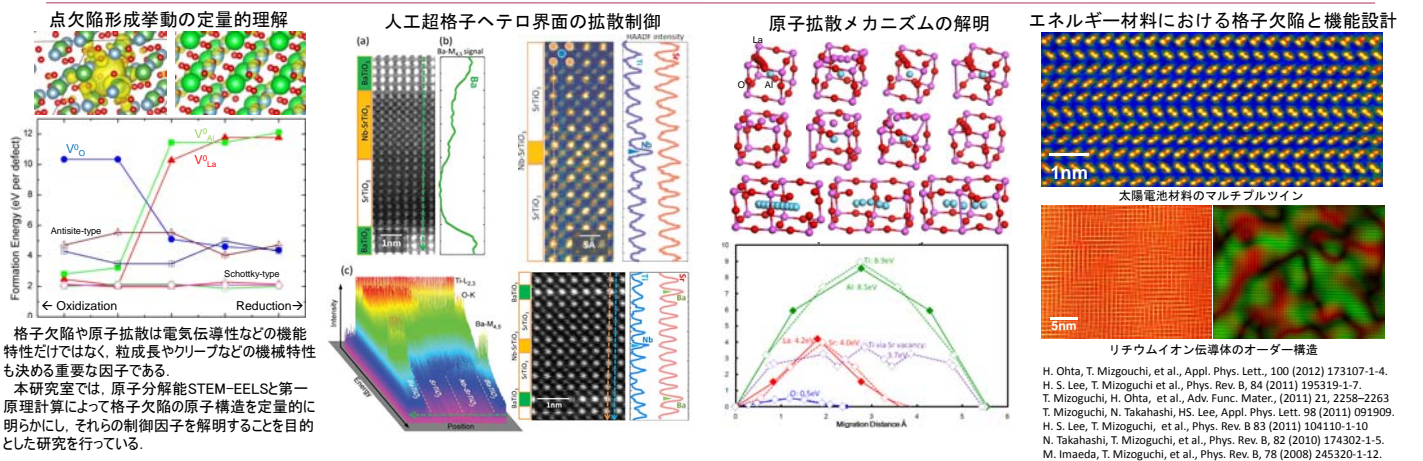


内殻励起スペクトル (ELNES/XANES) による電子構造の精密計測



内殻励起スペクトルの理論計算において内殻空孔の重要性を世界に先駆けて解明。さらに擬ポテンシャルによる高速・高精度計算法、二粒子・多粒子計算法の確立にも成功している。近年では材料研究に適用するとともに、「液体」のELNES/XANES計算にも取り組んでいる。

機能材料の格子欠陥と原子拡散



格子欠陥や原子拡散は電気伝導性などの機能特性だけでなく、粒成長やクレープなどの機械特性も決める重要な因子である。本研究室では、原子分解能STEM-EELSと第一原理計算によって格子欠陥の原子構造を定量的に明らかにし、それらの制御因子を解明することを目的とした研究を行っている。