



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

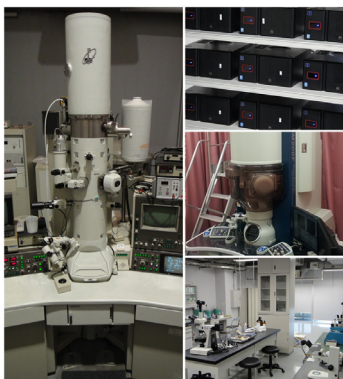
Institute of Industrial Science, Dept. Mater. Envi. Science

<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

物質の機能は原子・電子構造と密接に関係しています。一方で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ません。本研究室では、物質の機能が発現するメカニズムを原子レベルで理解し、高性能な物質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ます。

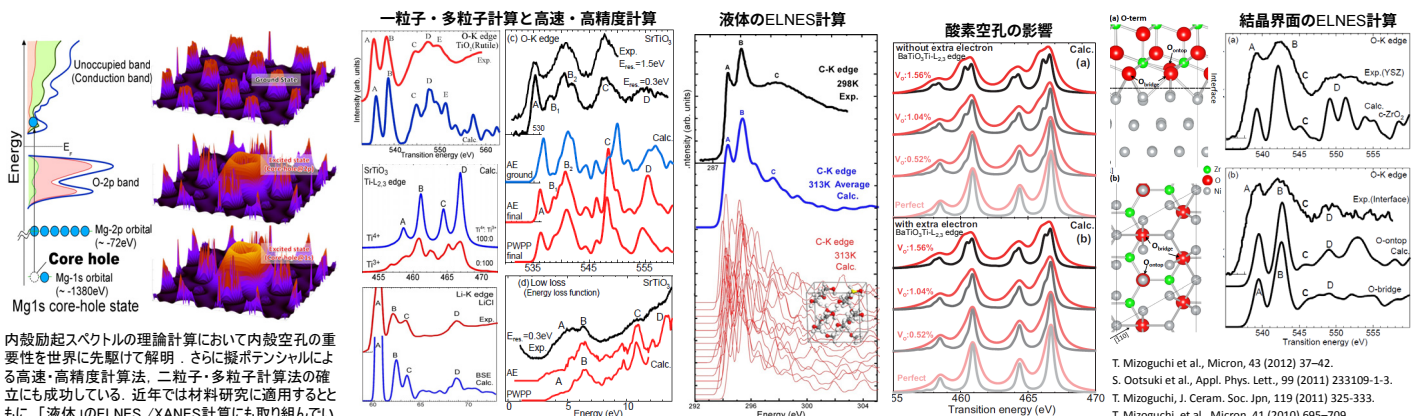
物質の機能が発現するメカニズムを明らかにするためには、物質の原子・電子構造を定量化する必要があります。本研究室では透過型電子顕微鏡 (TEM), 走査TEM (STEM), 電子線エネルギー吸収端近傍微細構造 (ELNES), X線吸収端近傍微細構造 (XANES), 第一原理計算法および独自開発した ELNES/XANES理論計算法を複合利用した研究を行っています。

具体的には、人工超格子やガラス、イオン液体などの先進材料、Liイオン電池や太陽電池材料などのエネルギー材料を研究対象とし、ナノ計測と理論計算により原子・電子構造を定量的に解析することで「構造」と「機能」との相関性を明らかにします。以上の研究を通し「物質設計」を実現することを目指しています。

どのような構造？
どのように機能発現？

機能 ↔ 構造
相関性の解明

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



格子欠陥の形成とダイナミクス

