工学系研究科マテリアル工学専攻



[原子と電子の役割を知る]

生產技術研究所 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



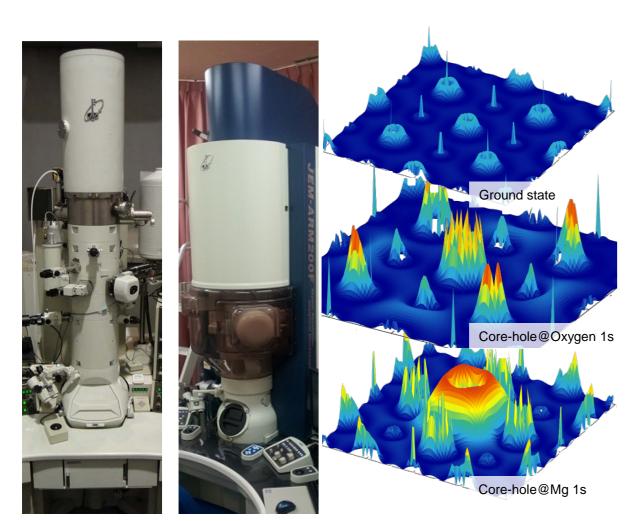
ナノ物質設計工学研究室: Nano-Materials Design Laboratory (NMDL) (溝口研究室)の研究内容

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.

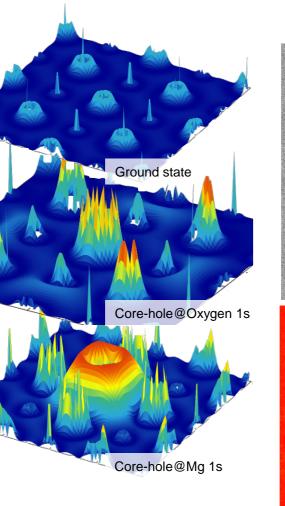
溝口研究室ではそのような原子と電子の構造 を透過型電子顕微鏡(TEM/STEM),電子・X 線吸収分光(ELNES/XANES),第一原理計算, さらに情報科学手法(インフォマティクス) を用いて精密に解析しております. 我々の研 究を通して原子と電子の役割を知ることで 『物質設計』を実現し、太陽電池材料や光学 材料、電池材料、イオン液体等の先進材料を より高性能化することを目指しております.

多粒子ELNES計算

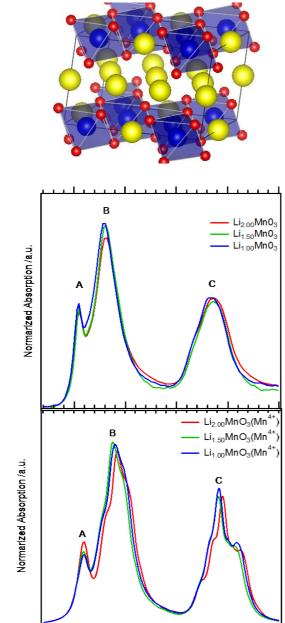
『The Ultimate Analysis ~究極の分析法~』を用いた原子分解能物質計測



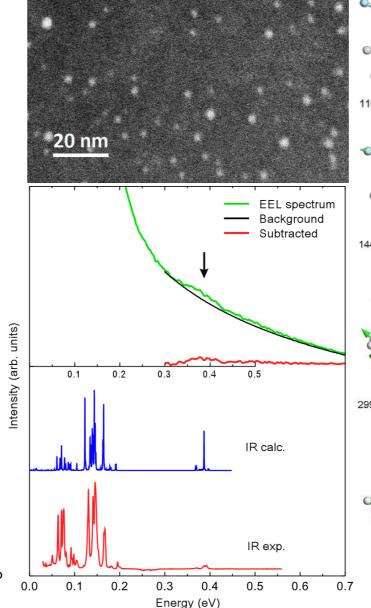
内殻励起スペクトル(ELNES/XANES)は高い空間分解能と時間 分解能, 感度を有しており, STEM-ELNESは Nature 誌に『The Ultimate Analysis 究極の分析法』と紹介されるほど強力な分析 手法です. 溝口研究室ではELNES/XANESを理論計算する手法 を世界に先駆けて確立し、最近では、一粒子・多粒子理論に基 づいて全構造・全元素・全吸収端の確立を目指した研究を行って おります. 『究極の分析法』と定量的理論計算を組み合わせること により、物質の原子と電子の構造を精密解析しております.



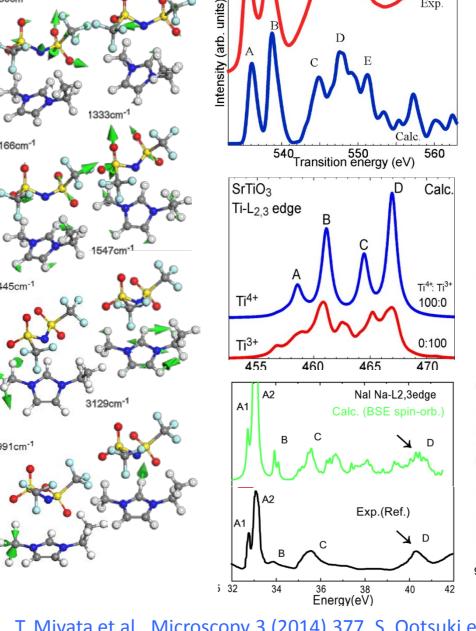
ガラスの原子分解能解析

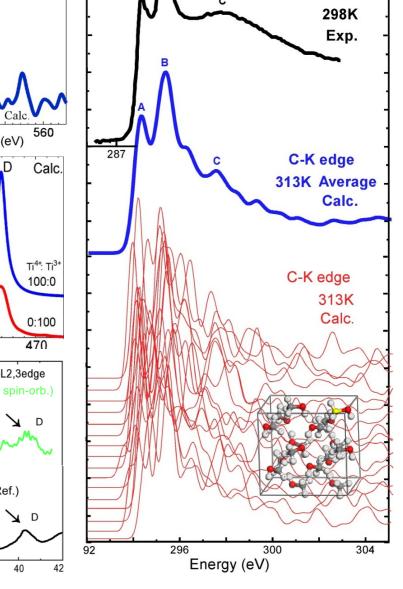


Liイオン電池の反応解析



液体の高空間分解能振動計測





液体のELNES計算

T. Miyata et al., Microscopy 3 (2014) 377, S. Ootsuki et al., Microscopy 3 (2014) 249, 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.

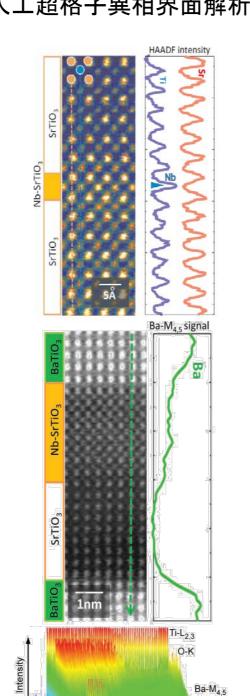
格子欠陥の定量化とインフォマティクスによる物質設計

界面原子拡散メカニズムの解明 $[1 \ \overline{1} \ 0] \longrightarrow [1 \ 1 \ \overline{1}]$: Se

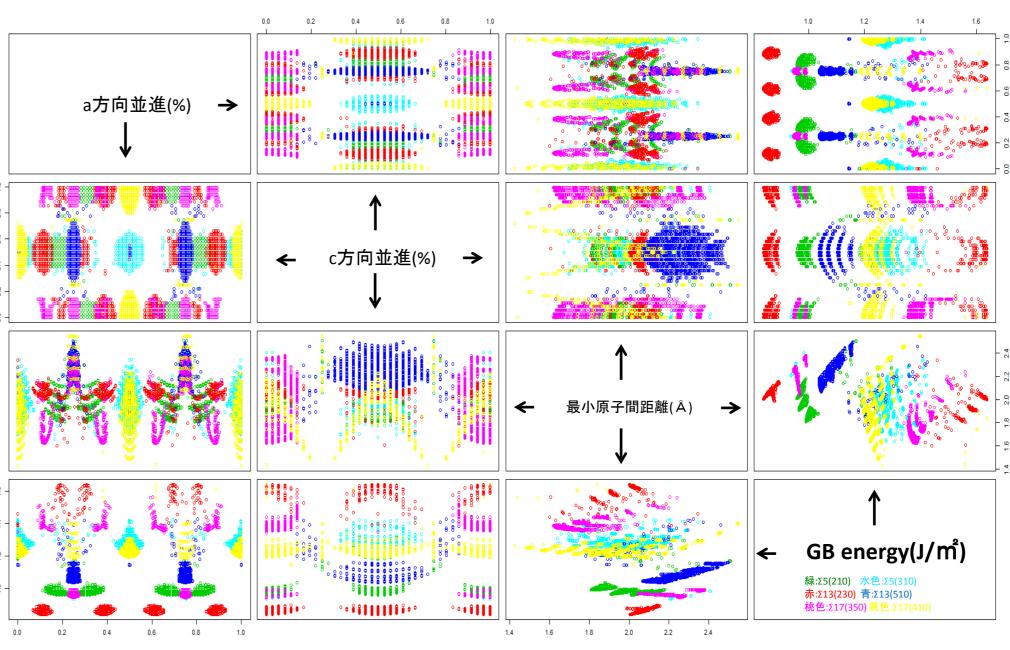
太陽電池材料の界面原子構造

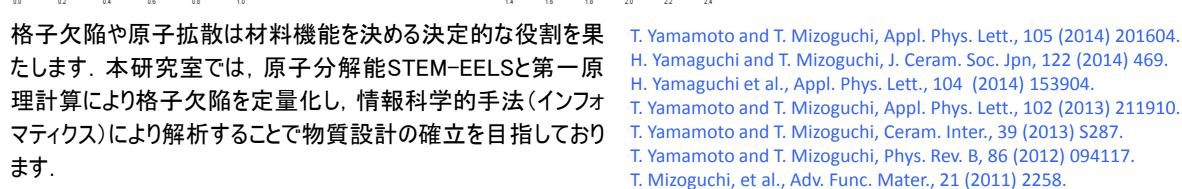
: -Cu-In-Cu-

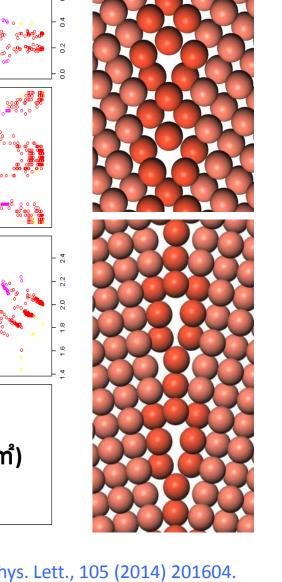
人工超格子異相界面解析



情報科学手法(インフォマティクス)を用いた界面構造およびエネルギーの予測







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.