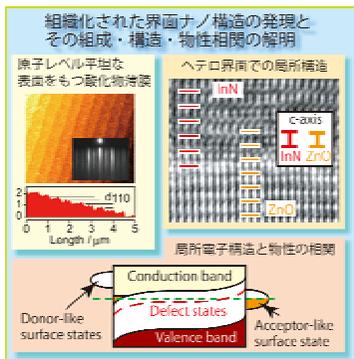


15:50 ~ 16:30

ナノ機能元素の熱拡散挙動の解明と制御

物質・材料研究機構 大橋直樹

ワイドギャップ半導体の機能を高めるためには、固溶体形成によるバンドギャップ制御、および、ドーピングによる特性制御が不可欠である。本研究課題では、そうした添加物を加えた結晶内やヘテロ接合界面に発現する、添加物由来の局所構造やこれが物性に与える効果について検討している。そのため、例えば、図に示すような、原子レベルの平坦性を持った薄膜材料の合成をはじめ、特徴ある構造の構築や探索を進めている。さらに、他の班との連携による透過電子顕微鏡観察やラマン散乱等を利用した構造解析と、電子分光測定や物性測定をリンクさせることで、ナノ機能元素に関する構造・物性相関の解明を進めている。

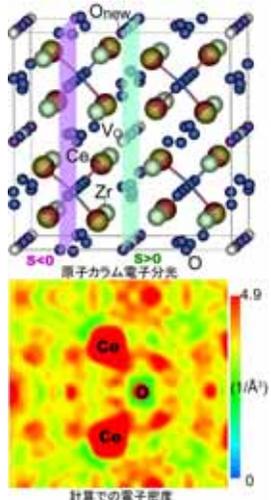


16:30 ~ 17:10

電子定在波を用いたサイト選択的電子構造分析

名古屋大学 巽 一徹

結晶に特定の方位から入射した電子が、特定の原子面・原子列に沿って伝播するチャネリング効果は、分析電子顕微鏡ではサイト選択的な元素分析法ALCHEMI法に利用されている。同条件でEELSやX線発光分光を行えば、サイトごとの電子状態を分析できる。本研究班では、逆空間制御による原子カラム電子分光を1つの目標として掲げている。その要素技術として、サイト固有のスペクトルを抽出する多変量解析やノイズデコンボリューション等の開発を行ってきた。分析技術確立のためのモデル系としたAl複合酸化物での分析を中心に発表し、実用材料への応用として、迅速な酸素吸放出能を有するCe₂Zr₂O_{7.5}についてもふれる。

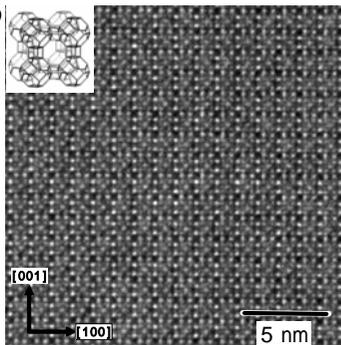


17:10 ~ 17:50

高エネルギー粒子線照射によるゼオライトのナノ加工

ファインセラミックスセンター 佐々木優吉

電子線照射によるAg型ゼオライトの非晶質化過程においてAgクラスターが規則配列する現象が観察された。これは、ゼオライトの非晶質化にともなって結晶骨格内で負に帯電していたAl⁻と隣接していたAg⁺との間で電子がやりとりされ、静電的に中性化したAgが互いに凝集してサブナノサイズのクラスターを形成する現象を捉えたものと考えられる。一方、ゼオライトに100MeV以上の重イオン照射を行うと、照射イオンの飛行に沿ったナノサイズのカラム状欠陥(非晶質層)が作られる。これら二つの実験結果は、Ag型ゼオライトへの高エネルギー重イオン照射によって、Agクラスターのナノカラムが形成されることを示唆する。発表では、TEM観察結果を用いて、上記現象の詳細を報告する。



18:15 ~

懇親会 会場 武田先端知ビル ホワイトエ 会費2000円

会場案内

会場 東京大学浅野キャンパス 武田先端知ビル
東京都文京区弥生2-11-16
交通 東京メトロ千代田線根津駅1番出口 徒歩5分
南北線東大前駅1番出口 徒歩8分



事務局

〒113-8656 東京都文京区弥生2-11-16
東京大学大学院工学系研究科総合研究機構 結晶界面工学研究室
TEL:03-5841-7688 FAX:03-5841-7694
Nanodopant@sigma.t.u-tokyo.ac.jp <http://www.nanodopant.com>

文部科学省科学研究費補助金
特定領域研究 474

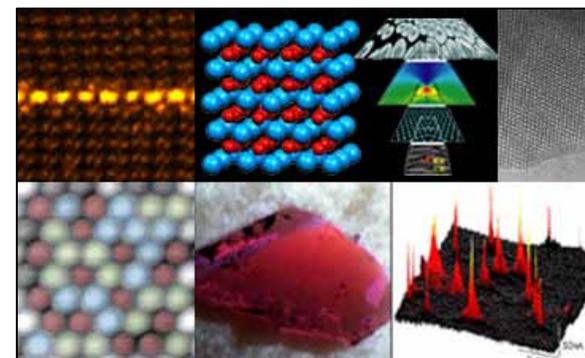
機能元素のナノ材料科学

第1回公開シンポジウム

2008年3月6日(木)
10:00 ~ 17:50

東京大学浅野キャンパス
武田先端知ビル 武田ホール

参加無料



機能元素のナノ材料科学
ATOMIC SCALE MODIFICATION

<http://www.nanodopant.com>

プログラム及び講演概要

10:00 ~ 10:30

本特定領域の目的と展望

東京大学 幾原雄一(領域代表者)

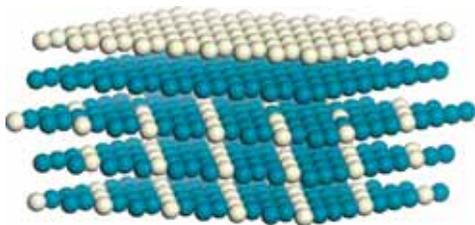
結晶の表面、界面、転位、原子空孔などの格子不整合領域は、その周期性の乱れに起因する特異な電子構造を有しており、完全結晶には見られない機能発現の起源となっている。このような不整合部近傍1ナノメートルオーダーの局所領域には添加元素(ドーパント)や不純物が偏在し、これが材料機能特性に決定的な役割を持つ。これが本特定領域研究で対象とする“ナノ機能元素”であり、機能元素の原子構造・電子状態解析、理論解析、材料創成から構成されるグループを中心に昨年より研究を開始した。まだ始まって間もないが、本公開シンポジウムでは、各グループで得られている最新の研究成果の一端について紹介したい。材料やナノ計測などの関連分野から多くの研究者にご参加頂き、本シンポジウムが有意義な意見交換の場となることを期待している。

10:30 ~ 11:10

第一原理計算と統計熱力学手法によるナノ機能元素の材料設計

京都大学 田中 功

高精度の第一原理計算を網羅的に行い、その結果にクラスター展開法に基づいた統計熱力学的処理を施すことで、材料の有限温度での構造や物性、状態図を議論することが可能である。この方法では、短距離の2体や3体に限定せず、長距離、あるいは多体間の相互作用を必要な精度に応じて取り入れることが可能である。本講演では、このような計算の最近の具体例として、熱平衡状態でのPt合金表面の機能元素分布を第一原理計算によって解明した結果を報告する。図には計算で得られたPt₂₅Rh₇₅合金の(111)表面の10Kでの原子配列を示す。金色のPt原子が最表面(図の上面)に顕著に集まっていることがわかる。



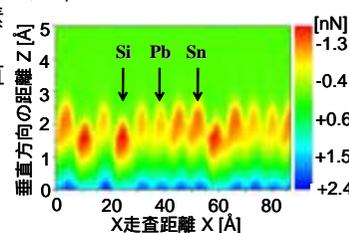
11:10 ~ 11:50

表面機能元素の制御と原子構造解析

大阪大学 森田清三

我々は、超高分解能の原子間力顕微鏡を用いて、個々の原子を見て、識別して、動かして、複数の元素で構成する複素ナノ構造体の室温での構築技術の開発を半導体系材料で行ってきた。本特定領域では、研究項目A01「機能元素の原子構造・電子状態解析の中の(ウ)「表面機能元素の制御と原子構造解析」を担当して、表面のナノ機能元素の計測技術の開発と応用研究を行っている。我々は、既に、個々の原子のフォース・カーブを測定することにより(Sn,Pb,Si)の3元素混在表面上で個々の元素の識別に成功しているが、今回は(Sn,Pb)

/Si(111)-(√3×√3)の3元素混在表面上で図のような原子間力(化学結合力の)垂直成分のフォース・マッピングを行って、元素の識別に成功した。今回はフォース・マッピングとその元素識別への応用を中心に紹介する。

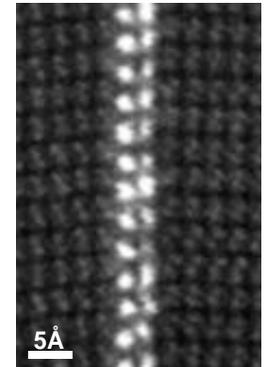


14:00 ~ 14:40

界面機能元素の超高分解能STEM観察

東京大学 柴田直哉

材料の機械的・電気的特性はその材料中に存在する微細結晶界面と密接に関連している。また、これらの結晶界面に偏析した機能元素は、界面特性に決定的な役割を果たす。本講演では、結晶界面の物理的描像を明らかにする上で有力な観察手法である透過型走査電子顕微鏡法(STEM)を用いた結晶界面機能元素の超高分解能構造解析について紹介する。近年、透過型電子顕微鏡の分解能を飛躍的に向上するレンズ収差補正技術の開発により、STEM法において1 以下の分解能が達成され、界面における機能原子構造を高精度に決定できるようになった。このような最新手法を機能元素評価に応用することにより、結晶界面研究にどのような進展が期待されるのか、実際の観察例を交えながら議論する予定である。



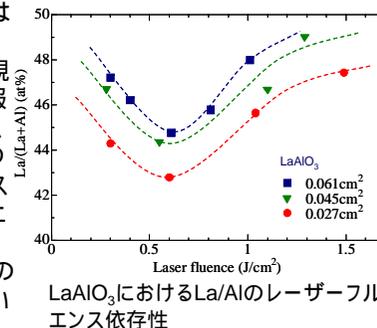
アルミナ粒界に偏析したLu 2原子層のHAADF-STEM像

11:50 ~ 12:30

複合酸化物薄膜の陽イオン比制御と基板表面ステップ構造制御

東京大学 山本剛久

薄膜堆積法であるPLD法は、最適堆積条件を容易に調整できる手法と考えられてきた。しかしながら、複合酸化物薄膜において精密に陽イオン比を調整するためにはレーザーフルエンスを厳密に制御することが求められる。例えば大西らは、SrTiO₃のホモエピタキシャル成長において、ある特定のレーザーフルエンスにおいてのみ基板と完全整合する薄膜が得られることを明らかにしている。このようなレーザーフルエンスの正確な制御技術は、薄膜に添加された機能元素を活性化させる基盤技術の確立につながる。本研究班では種々の複合酸化物における陽イオン比制御を現在展開させている。本報告ではSrTiO₃、LaAlO₃、SrRuO₃の陽イオン比の照射レーザーフルエンス依存性およびそのメカニズムについて報告する。また、SrTiO₃基板表面のステップ構造制御についてもふれる。



14:40 ~ 15:20

格子不整合領域が関与した相変態に対するPhase-fieldシミュレーション

物質・材料研究機構 小山敏幸

Phase-field法は、材料における各種の格子不整合領域(転位、粒界、相境界など)の形態形成、および相変態・析出における元素の拡散挙動などを、総合的かつ定量的にモデル化できる。図は、Fe-10at%Cuの823K等温時効における、Cuの転位上析出の計算である。黒色度がCu濃度を表し、中央の空色の横線部分は、原子面を1枚余分に挟み込んだ位置を示している。相分解初期に、刃状転位の外側にCuは濃縮し始め、時効の進行に伴いCu相が成長していく。以上の挙動は、刃状転位の応力場を緩和するようにCuが拡散した結果である。講演では、各種の格子不整合領域(転位、粒界、相境界など)が関与した相変態の計算についても報告する。

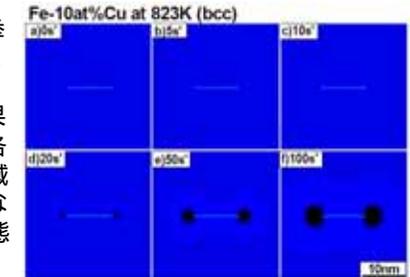


図 刃状転位におけるCu優先析出過程の計算