

薄膜・表面物理分科会企画
「機能元素のナノ材料科学と材料イノベーション」

阪大 森田清三

東大 幾原雄一

神大 大西洋

表面・界面・転移などの結晶の周期性の乱れに起因する格子不整を有する局所領域に偏在し機能を発現する微量の添加元素や不純物元素は“機能元素”と呼ばれる。格子不整領域は特異な電子構造を有し、完全結晶には見られない機能発現のサイトとなっており、マクロな高機能実用材料への機能元素の応用も急速に広がっている。本シンポジウムでは、ナノ領域に偏在する機能元素のナノ計測および機能発現機構の理論計算を通じて、機能元素を用いた実際の材料設計・プロセスへと導く道筋を見だし、材料イノベーションを誘起することを目指した。最初に、イントロダクトリートークとして「機能元素のナノ材料科学と材料イノベーション」で幾原雄一（東京大学）が、格子不整合部近傍の局所領域に偏在する“機能元素”が材料のマクロ特性を大きく変化させる例を幾つか挙げて、ナノ材料科学における機能元素の重要性を示した。さらに、ナノ領域に偏在する機能元素のナノ計測手法と材料設計の理論計算手法が急速に進歩しており、得られた結果をタイムリーに材料プロセスにフィードバックすることにより、これまでブラックボックスであった機能元素を利用した材料設計指針を得る歴史的に重要な転換期にあることを明らかにした。

引き続き、「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」で山本剛久（東京大学）が SrTiO₃, SrRuO₃, LaAlO₃ などの複合酸化物の高品質な薄膜を PLD 法で作成するには陽イオン比の制御が重要であることを明らかにした。また、薄膜成長用の SrTiO₃ 基板単結晶ではステップ構造などの原子構造制御が必要であることを示した。

「XAFS による機能元素状態解析」では吉田朋子（名古屋大学）が X 線吸収スペクトル(XAFS)で Ge 添加シリカガラス中に 1nm 程度の Ge クラスターが存在する時に強い紫外光発光が発現することを示した。

「第一原理統計熱力学手法による材料探索」では田中功（京都大学）が第一原理計算に基づいた計算材料科学は多種類の高精度第一原理計算が可能となりクラスター展開法などの統計処理を施すことで、材料の有限温度での構造や物性を第一原理計算の精度を損ねること無く議論できるようになったことを SnO_{2-x} の構造探索の例などを挙げて紹介した。

「原子間力顕微鏡による多元素ナノ材料の元素マッピングとボトムアップ組立」では阿部真之（大阪大学）が原子間力顕微鏡(AFM)で個々の原子の元素識別、結合力、結合ポテンシャルなどの計測が可能となり、力学的原子操作により多元素ナノ構造体のボトムアップ組立も可能となってきたことを紹介した。

「超高分解能 STEM と EELS によるナノ界面研究」では、柴田直哉（東京大学）と溝口照康（東京大学）が走査透過型電子顕微鏡(STEM)を用いた HAADF-STEM で元素識別して界面に局所偏析した機能元素位置を直接同定できることを紹介した。また、電子線損失エネルギー分光(EELS)と組み合わせた STEM-EELS で界面の局所電子構造を詳細に計測する技術が確立されつつあることを報告した。応用例として、セラミックス粒界ドーパント直接観察、セラミックス転位コア構造解析、チタニア表面超構造解析、金触媒界面解析などを紹介した。

「先端実用電子セラミックス材料におけるナノ領域構造解析」では、鈴木利昌（太陽誘電(株)）が積層セラミックコンデンサ(MLCC)の例を取り上げて、材料開発現場での TEM を用いたナノ領域での微細構造の解析事例を報告した。講演では、MLCC の誘電体層は個々のグレインが強誘電性を示す BaTiO₃ のコア相とそれを囲む Ho, Mg などの添加物のシェル相から構成されたコアシェル構造になっていることを紹介して、コアシェル内の格子定数分布の TEM-CBED (収束

電子回折)測定結果を報告した。

「複合電子分光によるナノテク実材料のナノ領域特性画像診断」では、武藤俊介(名古屋大学)がSTEM-EELSを用いたスペクトラムイメージングと多変量解析を組み合わせた状態マッピングについて紹介して、実用材料への応用としてリチウムイオン二次電池正極材料の劣化診断やAlH₃系水素吸蔵材料の分解過程およびその微細組織と結合状態分析について報告した。

今後、本シンポジウムの開催が、“機能元素のナノ材料科学”と呼ぶべき材料イノベーション技術につながる学問体系の構築の推進と普及に大いに寄与すると期待される。なお、本シンポジウムは文部科学省特定領域研究「機能元素のナノ材料科学」における活発な研究活動に触発されて、薄膜・表面物理分科会が企画したものである。