

## 第2回 材料設計討論会

東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所

**日時：** 2017年3月7日（火） 13:00～17:45

**場所：** 東京工業大学すずかけ台キャンパス  
元素戦略研究センター（S8棟）1Fレクチャーホール

**プログラム**（講演時間 25分、質疑応答 10分）

13:00～13:05 開会挨拶

13:05～13:40 「薄膜合成を利用した遷移金属酸窒化物の機能探索」

東京大学大学院理学系研究科 廣瀬 靖

13:40～14:15 「 $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$  薄膜におけるスピン構造変化による強磁性発現」

九州大学総合理工学研究院 北條 元

14:15～14:50 「金属元素のアニオンを含む複合アニオン化合物の電子構造と物性」

元素戦略研究センター 松石 聡

休憩

15:00～15:35 「第一原理計算と原子分解能構造解析をはじめとする高精度実験との連携によるセラミックス材料研究」

ファインセラミックスセンター(JFCC)/物質・材料研究機構(NIMS) 森分 博紀

15:35～16:10 「トポロジー最適化とマルチマテリアル 3D プリンタによるポーラス複合材料の熱膨張設計」

広島大学大学院工学研究院 竹澤 晃弘

休憩

16:20～16:55 「構造制御された複合酸化物材料の触媒化に基づく高効率反応系の開発」

フロンティア材料研究所 鎌田 慶吾

16:55～17:30 「特異な電気伝導性を発現する前周期遷移金属酸化物の薄膜合成戦略」

物質理工学院応用化学系 大友 明

17:30～17:45 総合討論

【連絡先】 フロンティア材料研究所 大場 史康 (oba@mssl.titech.ac.jp)

# 講演概要

## 薄膜合成を利用した遷移金属酸窒化物の機能探索

東京大学大学院理学系研究科 廣瀬 靖

遷移金属酸窒化物は光触媒や無機顔料として研究されてきた。酸窒化物の多くは酸化物前駆体粉末の部分窒化反応により合成されてきたが、物理気相堆積法を用いることで高品質な単結晶薄膜や非晶質薄膜を直接合成することが可能となった。本講演では、エピタキシャル応力を利用した結晶中の酸素/窒素配列の制御や、高移動度の非晶質酸窒化物半導体の合成について報告し、異種アニオンの共存を利用した材料設計の可能性について議論する。

## $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$ 薄膜におけるスピン構造変化による強磁性発現

九州大学総合理工学研究院 北條 元

$\text{BiFeO}_3$  は室温で強誘電性と、サイクロイド変調の重畳した反強磁性が共存した代表的なマルチフェロイック物質である。バルク体の研究により、Fe を一部 Co で置換することで、昇温によりスピン構造変化が起こり、弱強磁性が発現することが明らかとなった。また、薄膜試料においてもスピン構造変化による本質的な弱強磁性が発現することを見出している。本講演では、これらの結果を中心に、 $\text{BiFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_3$  薄膜における強磁性と強誘電性の相関に関する最近の結果についても紹介する。

## 金属元素のアニオンを含む複合アニオン化合物の電子構造と物性

元素戦略研究センター 松石 聡

酸化物のようなイオン性固体は、陰性の典型元素(O, F, N など)を陰イオン(アニオン)とし、陽性の金属元素を陽イオン(カチオン)として構成されるのが一般的である。しかしながら、金属元素の中には電気陰性度が比較的大きいものがあり、電気陰性度小さい金属との組み合わせでは、アニオンとして振る舞っていると考えた方が良いものが存在する。本講演では、金属元素のアニオンを含む複合アニオン物質に注目し、その電子構造と物性について議論する。

## 第一原理計算と原子分解能構造解析をはじめとする高精度実験との連携によるセラミックス材料研究

ファインセラミックスセンター(JFCC)/物質・材料研究機構(NIMS) 森分 博紀

近年、第一原理計算の発展は著しく、現実の材料研究・材料開発に広く活用されるようになってきている。講演者らの所属するファインセラミックスセンター (JFCC)では、この第一原理計算の有用性・有効性に早くから注目しセラミックス材料研究に活用してきた。本講演では、特に原子分解能構造解析をはじめとする高精度実験との連携によるセラミックス材料研究における著者らの最近の成果 (Li イオン電池材料研究、強誘電体材料研究等) について講演する。

## トポロジー最適化とマルチマテリアル 3D プリンタによるポーラス複合材料の熱膨張設計

広島大学大学院工学研究院 竹澤 晃弘

熱膨張率の異なる複数材料で適切に内部構造を構成したポーラス複合材料は負の熱膨張等の特殊な熱変形特性を有することが一般的に知られている。他方、数値計算により最適な形状を導出可能なトポロジー最適化は、複雑な弾性変形メカニズムの導出に有効である。また、得られた最適内部構造は、近年著しく技術発達している 3D プリンタで容易に試作可能である。本講演では、両者を活用した熱収縮から過剰膨張まで様々な見かけ熱変形特性を実現するポーラス複合材料の開発について述べる。

## 構造制御された複合酸化物材料の触媒化に基づく高効率反応系の開発

フロンティア材料研究所 鎌田 慶吾

固体触媒は従来、構造と機能の解明が困難な材料群である。一方、構造物性研究の分野で盛んに研究されている複合酸化物材料を触媒化できれば、従来触媒に使用されていなかった材料に基づく新しいブレイクスルーが期待される。本講演では、面共有複核金属ユニットをもつペロブスカイト酸化物や酸塩基ユニットを併せもつ希土類リン酸塩などの複合酸化物による特異的分子活性化能に基づいた高効率触媒反応系の開発について議論する。

## 特異な電気伝導性を発現する前周期遷移金属酸化物の薄膜合成戦略

物質理工学院応用化学系 大友 明

モット絶縁体やパイエルス絶縁体では、それぞれ電子-電子相互作用と電子-格子相互作用が支配的に働き、本来は遍歴的なキャリアが局在化する。それらの相互作用を組成制御、電場・磁場印加、光照射によって変調し、キャリアの遍歴性を取り戻すと、劇的な抵抗変化を伴う金属-絶縁体転移や超伝導転移が発現することがある。その観点から Ti や V を含む電気伝導性酸化物に注目し、薄膜試料でのみ見られる特異な電気伝導性や格子歪みの効果について理解を深めてきた。本講演ではそれらの結果に基づき、PLD による薄膜合成戦略について議論する。