

特定研究 (2019年度)

「巨大負熱膨張材料を用いた熱膨張抑制技術の確立」

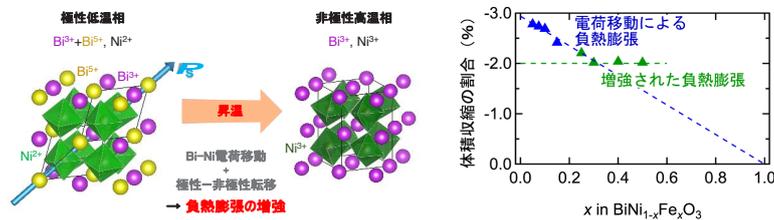
研究代表者：東 正樹(東京工業大学フロンティア材料研究所)

研究目的

BiNiO₃は、Bi³⁺_{0.5}Bi⁵⁺_{0.5}Ni²⁺O₃という特徴的な電荷分布を持つペロブスカイト型酸化物である。ニッケルの一部を鉄で置換したBiNi_{1-x}Fe_xO₃では、昇温によってBi⁵⁺とNi²⁺の間で電荷の移動が起こるようになり、ニッケルが2価から3価に酸化される。この際、ニッケルと酸素の間の結合が収縮するため、結晶格子全体が約3%縮む、負熱膨張が起こる。BiNi_{0.85}Fe_{0.15}O₃ (x=0.15)では、負の熱膨張係数は既存材料の5倍の-187 × 10⁻⁶/Kに達する。今年度は、Fe置換量(x)を増やした場合の振る舞いを調べた。

研究成果・効果

BiNi_{1-x}Fe_xO₃の鉄置換では、低温で2価が安定なニッケルを、3価が安定な鉄で置換するため、鉄置換量が増えるのに伴って、電荷移動に寄与する低温相のNi²⁺の量は減少する。このため、低温相から高温相へ変化する場合の体積収縮の割合は、x = 0.05で2.8%であるのに対し、x = 0.15では2.5%と減少する(右図)。この減少ペースでいくと、x = 1.0では負熱膨張による体積収縮が消失することが予測される。しかし実際には、0.20 ≤ x ≤ 0.50では極性-非極性転移が電荷移動と同時に起こるため(左図)、負熱膨張が増強され、鉄置換量が増えても体積収縮は2%と一定であった(右図)。鉄置換量を変化させても体積収縮の割合が変化しないことは、負熱膨張材料の特性が安定することを意味する。



発表論文 T. Nishikubo, Y. Sakai, K. Oka, T. Watanuki, A. Machida, M. Mizumaki, K. Maebayashi, T. Imai, T. Ogata, K. Yokoyama, Y. Okimoto, S. Koshihara, H. Hojo, T. Mizokawa, M. Azuma: J. Am. Chem. Soc., 141, 19397 (2019).

特定研究 (2019年度)

「構造と物性の相関解明による新規機能性熱伝導材料の開発」

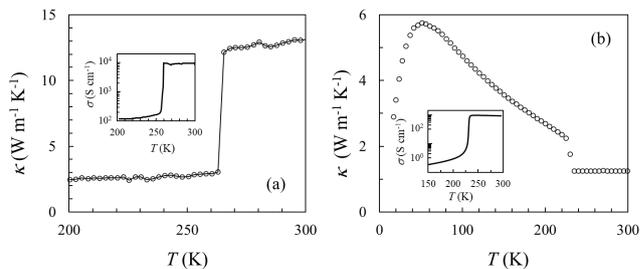
研究代表者：川路 均(東京工業大学)

研究目的

熱エネルギーの有効活用に向け、温度に応じて熱伝導率が大きく変化する材料が求められている。金属絶縁体転移(MIT)を有する物質は相転移において電気伝導率が大きく変化的ことから、それに応じて熱伝導率も大きく変化する事が期待される。本研究ではMIT物質の熱伝導材料への応用を目指し、これまであまり着目されていなかったMIT物質の構造と熱伝導の相関解明を目的とした。

研究成果・効果

NiSはMITにともない電気伝導率が増加し、Wiedemann-Franz則から期待されるように熱伝導率も大きく増加した。一方のCuIr₂S₄では電気伝導率が増加するにも関わらず熱伝導率が減少しており、低温の特殊な秩序構造と関連していることが示唆された。今後、新たなMIT物質の開発をすすめることで、様々な用途に対応する熱伝導率スイッチング材料としての応用が期待される。



(a) NiSと(b) CuIr₂S₄の熱伝導率κおよび電気伝導率σ(挿入図)

特定研究 (2019年度)

「繰返し効果を考慮した建築構造設計手法の構築」

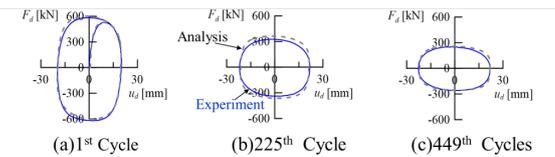
研究代表者：佐藤大樹(東京工業大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

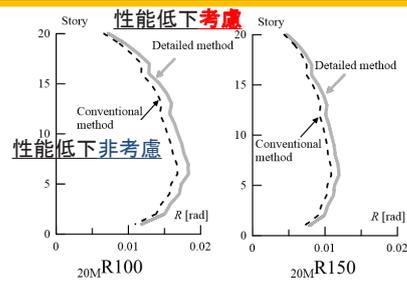
— 研究目的 —

長時間の繰返しによるダンパー性能の低下を考慮した超高層建物の応答予測および設計法の構築という目的の基、今年度は①性能低下を考慮できる粘性ダンパーの解析モデルを汎用時刻歴応答解析ソフトに実装し、②3次元部材構成モデルによる超高層建物を構築し、長時間の時刻歴応答解析により性能低下による応答増大を確認する。

— 研究成果・効果 —



繰返しによる応答性能低下を考慮した解析モデルの構築¹⁾



Story drift ratio (CH1)

長周期地震動による多数回の繰返しにより粘性ダンパーの性能低下を考慮することで、応答が1.2~1.5倍程度増大²⁾

- 1) 佐藤大樹, 長山祥, 笠井和彦, 松田和浩: 長周期地震動時における粘性ダンパーの性能低下を考慮した制振構造建物の応答評価, 日本建築学会大会技術報告集, 24(56), 59-62, 2018.2
- 2) 劉錫媛, 佐藤大樹: 粘性ダンパーの性能低下が超高層建物の地震応答増大に与える影響分析, 構造工学論文集, Vol.66B, pp.331-338, 2020.3

国際共同研究 A

Shanghai institute of ceramics, Chinese academy of science
Jianding Yu(p.8)

International CRP 2019—Category A

Single crystal growth of k-Al₂O₃-type multiferroic oxides

Project Coordinator Name: Jianding Yu (SICCAS)

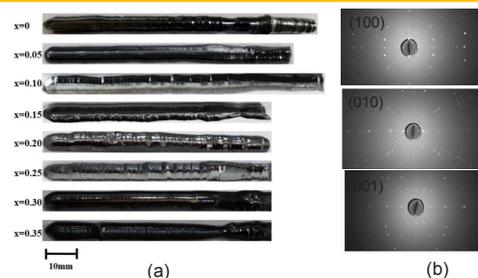
MSL Faculties: Misturu Itoh

- Aims of Research -

The project aims to explore novel functionalities of multiferroic k-Al₂O₃ type oxides by novel techniques. k-Al₂O₃ type multiferroic oxide Sc_xGa_{1-x/2}Fe_{1-x/2}O₃ single crystals were grown by laser-heated and optical floating zone method to investigating the theoretical prediction ferroelectricity and explore new mechanism for novel functionalities of multiferroic oxides.

- Results -

A series of high-quality Sc_xGa_{1-x/2}Fe_{1-x/2}O₃ single crystals were grown by FZ method. The orthorhombic structure Pna2₁ confirmed by X-ray diffraction and excellent composition homogeneity was demonstrated by EDX. Rietveld analysis show that all cell parameters increase with the increase of Sc content. Moreover, leakage current density decreases by four orders of magnitude because of the doping of Sc. As results, it allows to measure the ferroelectric hysteresis loop of the samples at liquid nitrogen and showed a theoretical prediction large residual polarization. s high as 25μC/cm².



(a) single crystalline boules of Sc_xGa_{1-x/2}Fe_{1-x/2}O₃ (x=0-0.35). (b) Laue spot pattern of x=0.35.

International CRP 2019—Category A

Exploration of Novel Quantum Materials

Project Coordinator Name: Phil D.C. King (University of St Andrews)

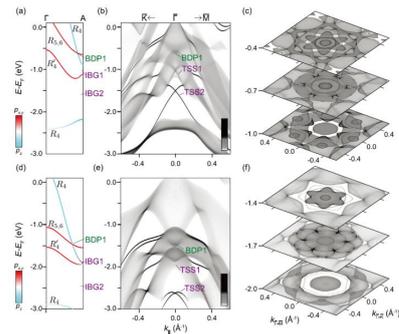
MSL Faculties: Takao Sasagawa

- Aims of Research -

Recently, the concept of single orbital-manifold band inversions occurring along high-symmetry lines in topological electronic materials has been demonstrated, stabilizing multiple bulk and surface Dirac fermions [1]. In this work, we further studied the underlying ingredients necessary to achieve such phases, and discuss their existence within the family of transition metal dichalcogenides (TMDs).

- Results -

Figures show how the three-dimensional band structures in TMDs naturally produce only small k_z projected band gaps, and demonstrate how these play a significant role in shaping their surface electronic structures (i.e. topological ladders and small k_z -projected band gaps in PtSe_2 and PdTe_2). (a) Orbitaly projected DFT calculation along the Γ -A direction of PdTe_2 . Bulk Dirac points (BDPs) and inverted band gaps (IBGs) are labelled. (b) Corresponding surface slab calculation along the in-plane directions. Topological surface states, TSS1 and TSS2, are labelled. (c) Constant energy k_x - k_y contours of PdTe_2 produced by surface slab calculations. ((d)-(f)) Equivalent plots for PtSe_2 .



Web page: <https://www.st-andrews.ac.uk/physics/condmat/arpes/index.html>

[1] M.S. Bahramy, K. Okawa, M. Asakawa, T. Sasagawa, P.D.C. King *et al.*, Nature Materials **17**, 21 (2018).

[2] O.J. Clark, K. Okawa, T. Sasagawa, P.D.C. King *et al.*, Electron. Struct. **1**, 014002 (2019).

International CRP 2019—Category A

P-type dopability of quadruple perovskite chlorides

Project Coordinator Name: Zewen Xiao (Huazhong University of Science and Technology)

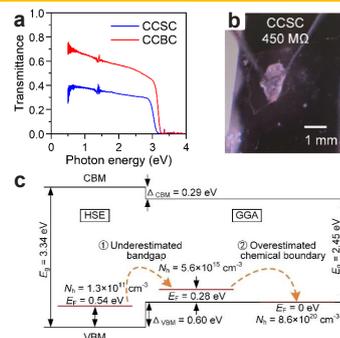
MSL Faculties: Toshio Kamiya and Takayoshi Katase

- Aims of Research -

Quadruple perovskite chlorides have previously been predicted to be the top p-type transparent conductors, which attracts a lot of attention. The project aims to verify the p-type dopability of quadruple perovskite chlorides and to reveal the underlying mechanisms by combining experimental characterizations and hybrid density functional theory (DFT) calculations.

- Results -

The optical and electrical characterizations reveal that these materials are optically transparent but electrically insulating, which contradicts the previous prediction. The hybrid DFT calculations show that the difficulty in forming p-type doping in these compounds is because of the easy formation of the compensating n-type intrinsic defects in the p-type region, which is resulted from too deep valence band maximum levels. We further demonstrate that the bandgap underestimation associated with the semilocal DFT and the unintentional chemical boundary overestimation should be the origins of the p-type conductivity predicted previously. Our results highlight the importance of reasonable bandgap description and chemical boundary determination in predicting defect thermodynamics.



Sanlue Hu, Bing Xia, Yang-Peng Lin, Takayoshi Katase, Jun Fujioka, Toshio Kamiya, Hideo Hosono, Ke-Zhao Du, and Zewen Xiao*: p-Type Transparent Quadruple Perovskite Halide Conductors: Fact or Fiction? Advanced Functional Materials, 2020 (In press).

International CRP 2019—Category B

Enhancing seismic behavior of timber structures

Project Coordinator Name: Andreea Casuta

MSL Faculties: Associate Prof. Shoichi Kishiki

- Aims of Research -

The purpose of the project is to share information on the seismic behavior of timber structures researched in both Romania and Japan and to exchange successful practices applied for such structures for seismic resistance. Thus, a small reaction frame for testing timber connections was designed and made in Romania, with the assistance of the Japanese side. By means of this testing facility, timber connection tests could be conducted corresponding to the project that was ongoing on timber shear walls. The results were used for numerical analysis to model a timber wall test, the one which showed the best behavior during the experimental study.

- Results -

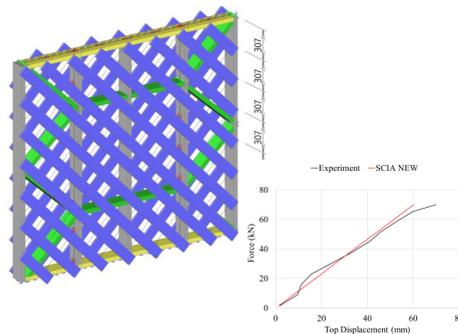
The numerical analysis was done in a commercial software, SCIA, in order to be more accessible for engineers and practitioners. The overall model scheme is shown hereby, in the left photo. The analysis was push-over type, simulating the wall experiment and results compared to the experimental envelope are shown in the right photo.

The project helped to accomplish the model, which showed good matching results with the experimental envelope curve, and can be easily reproduced by engineering professionals due to its simplicity.

The timber wall presented, which was proposed as a good solution for new residential houses, aims at reducing as much as possible the human error in manufacture, and thus has very simple and effective details that can be built by unskilled workers [1].

References

[1] <http://tralom.utcb.ro/> (24.04.2019)



International CRP 2019—Category B

Numerical Modeling and Simulation of Rocking Walls with Energy Dissipators

Project Coordinator Name: David Mukai (University of Wyoming)

MSL Faculties: Susumu Kono and Taku Obara

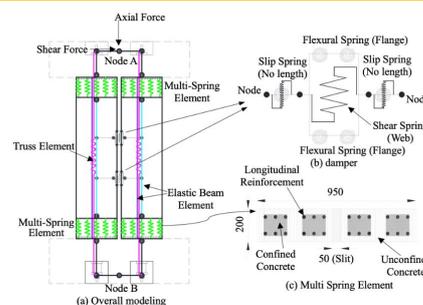
- Aims of Research -

In this project, the team will develop numerical models for rocking walls with energy dissipators and use these models to carry out simulations of these walls. These simulations will be calibrated with experimental work already conducted by the Kono group. After being calibrated, these models will be used to carry out multiple simulations to better understand the behavior of these walls, optimize the walls (particularly the energy dissipators), and ultimately impact the design of rocking walls with energy dissipators. The societal impact will be lives saved, valuable infrastructure preserved, and recovery from earthquakes made quicker.

- Results -

Four hybrid rocking walls with dampers were tested and compared to a rocking wall without dampers and a traditional shear wall. Three hybrid rocking walls were modeled numerically. The results are:

- The hybrid rocking walls had low damage, but axial force transmitted from the dampers accelerates compressive concrete damage. The hybrid rocking walls were able to achieve higher drifts than the traditional shear walls for both Serviceability and Repairability limit states.
- The numerical model captured shear-drift relations at all drift levels. Moreover, they modeled residual drift angle, concrete strain, pre-tensioning tendon force with good accuracy up to a drift of 2%.
- The numerical model captured damage conditions and limit states for the hybrid rocking walls.



Numerical model of hybrid walls (Obara)

International CRP 2019—Category B

Magnetotransport Studies of Collective Dynamics in Highly Correlated Electron Systems

Project Coordinator Name : Dragana Popović (Nat. High Mag.Field Lab.)

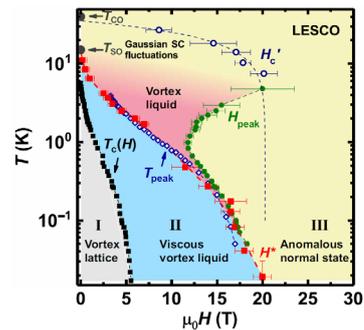
MSL Faculties: Takao Sasagawa

- Aims of Research -

The phase diagram of underdoped cuprates in a magnetic field (H) is key to understanding the anomalous normal state of these high-temperature superconductors. However, the upper critical field (H_{c2}), the extent of superconducting (SC) phase with vortices, and the role of charge orders at high H remain controversial.

- Results -

We study stripe-ordered La-214 (LESCO: $\text{La}_{1.7}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_{0.1}\text{CuO}_4$ and LNSCO: $\text{La}_{1.48}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$), i.e., cuprates in which charge orders are most pronounced and zero-field SC transition temperatures T_c^0 are lowest. This enables us to explore the vortex phases in a previously inaccessible energy scale window. By combining linear and nonlinear transport techniques sensitive to vortex matter, we determine the T - H phase diagram, directly detect H_{c2} , and reveal novel properties of the high-field ground state. Our results demonstrate that quantum fluctuations and disorder play a key role as $T \rightarrow 0$, while the high-field ground state is likely a metal, not an insulator, due to the presence of stripes.



- [1] Z. Shi, P.G. Baity, T. Sasagawa, and D. Popović, *Science Advances* **6**, eaay8946 (2020).
[2] P.G. Baity, T. Sasagawa, and D. Popovic, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 156602 (2018).

International CRP 2019—Category B

Evaluation of Residual Drift Demands in Self-Centering Rocking Walls for Performance-based Seismic Assessment

Project Coordinator Name : H. A. D. Samith Buddika

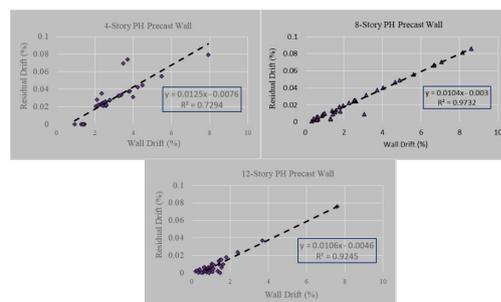
MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

The aim of this research is to propose a residual drift spectrum for self-centering rocking walls for performance-based seismic assessment.

- Results -

The residual wall drift increases as the maximum wall drift increases. Residual drift demands for 4-, 8-, and 12-story buildings are less than 0.1% even after sustaining walls drifts more than 3%. Residual drift values decrease as the building height increases. This demonstrates the ability of the PH precast concrete walls to undergo larger lateral deformations without sustaining permanent deformations under earthquake loading and also the possibility of incorporating these systems into mid-rise buildings. Cyclic loading tests of self-centering rocking walls has been extensively carried out by Prof. Kono in the MSL. Residual deformations observed in those tests could be due to the absence of the dynamic shake-down effects. Hence, target magnitude of the residual deformation need not to be taken as a design factor if the PH precast walls are designed with appropriate amount of energy dissipation devices as per design guidelines and by preventing premature yielding of post-tension tendons and crushing of confinement concrete at the wall-foundation interface.



国際研究B(2019年度)

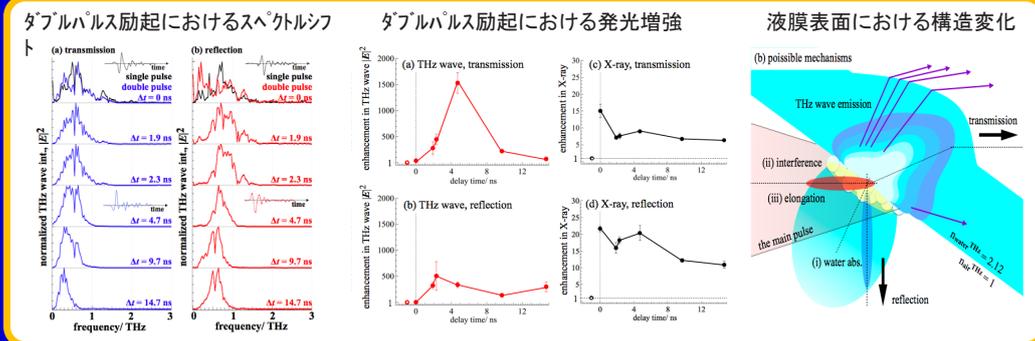
「レーザープラズマのコヒーレント制御」

研究代表者：畑中耕治(中央研究院應用科學研究中心)
 共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

フェムト秒レーザーダブルパルス励起条件下における水溶液膜からのテラヘルツ波の強度増加とX線発光との相関に着目しナノ秒領域の遅延時間におけるダブルパルス励起の特徴を明らかにすること、基礎過程のひとつとして考えられるプラズマのダブルパルス照射によるコヒーレント励起を試みる為の予備実験を開始することを目的とした。

— 研究成果・効果 —



Huang, H. H.; Nagashima, T.; Yonezawa, T.; Matsuo, Y.; Ng, S. H.; Juodkazis, S.; Hatanaka, K., "Giant Enhancement of THz Wave Emission under Double-Pulse Excitation of Thin Water Flow", *Applied Sciences* 2020, doi:10.3390/app10062031, in print.

International CRP 2019 – Category B

Evaluation of lattice strain effects within epitaxially grown multiferroic films

Project Coordinator Name: In-Tae Bae (State University New York at Binghamton)

MSL Faculties: Shintaro Yasui

- Aims of Research -

This project aims to develop a novel method that can unambiguously answer the questions of: (1) how the crystal structure of epitaxially grown BiFeO₃ (BFO) is affected by lattice mismatch with substrate?, (2) how can we quantitatively evaluate the amount of lattice strain in terms of biaxial in-plane as well as uniaxial out-of-plane orientation?

- Results -

Two different single crystalline oxide substrates, i.e., La_{0.6}Sr_{0.4}MnO₃(LSMO)/SrTiO₃(STO) and YAlO₃ (YAO) are used to grow BFO films by ultra high vacuum r.f. sputtering technique to study. Cross-sectional transmission electron diffraction patterns in tandem with structure factor calculation demonstrate the existence of rhombohedral signature reflections, indicating both of the BFO films possess rhombohedral crystal structure with R3c space group. Cross-sectional atomic resolution scanning transmission electron microscope (STEM) image shows atomistically coherent BFO/LSMO interface with no sign of dislocation. This indicates that the lattice strain caused by the lattice mismatch with LSMO/STO substrate is stored as elastic energy within BFO film. On the other hand, cross-sectional bright-field TEM image of BFO grown on YAO substrate readily shows domain boundaries and dislocations within the BFO film, indicating lattice strain is not stored within the BFO film, but relaxed. X-ray reciprocal space mapping technique reveals that ~1.0 % of compressive biaxial strain applied by LSMO/STO substrate exerts ~2.4 % of uniaxial tensile strain along out-of-plane orientation. The epitaxial relationship between BFO film and YAO substrate is analyzed by nanobeam electron diffraction technique. Based on this result, the lattice mismatch between BFO film is calculated ~6.8%, which is considered too large to be stored as elastic energy within epitaxially grown BFO.*

* I-T Bae et al., "Short range biaxial strain relief mechanism within epitaxial grown BiFeO₃", *Scientific Reports* 9, 6715 (2019).

International CRP 2019—Category B

Improving the Resilience of Buildings and Infrastructures in Seismic Prone Countries; A Case of Indonesia

Project Coordinator Name: Iswandi Imran (Institut Teknologi Bandung)

MSL Faculties : Susumu Kono

- Aims of Research -

This project aims to formulate the strategies to improve the resilience of infrastructures in Indonesia. The information on the correlation between building/infrastructure damages due to recent earthquakes in Indonesia (i.e. Lombok and Palu earthquakes) and the consistency in applying relevant building codes in the design of those buildings/infrastructures will be used as the first step in formulating the strategies. This information contains basically insight and lesson learned from the performances of buildings, bridges and other infrastructures in the seismic affected zone.

- Results -

The design and construction of building structures resilient to potential natural disaster should be carried out consistently and properly. To minimize damages on buildings and infrastructures (especially the critical infrastructures) during earthquakes, the relevant design and construction codes such as seismic loading code, building design codes, construction code etc. shall be consistently implemented in the design process and the construction activities. In addition, as there were also some lessons learned obtained from each seismic event, it is important then to follow them up in research activities and ultimately in updating the relevant codes and seismic hazard maps needed for design and construction. This is one of the important steps to improve seismic resilience of buildings and infrastructures in Indonesia.

International CRP 2019—Category B

Ultrafast phonon dynamics in inorganic solids

Project Coordinator Name : Jianbo HU (China Academy of Engineering Physics)

MSL Faculties: Kazutaka NAKAMURA :

- Aims of Research -

The aim of this project is to elucidate the ultrafast dynamics of optical phonons in inorganic materials, such as polar semiconductors, wide bandgap materials and oxides within picosecond time range using femtosecond infrared pulses.

- Results -

We have performed ultrafast transient reflectivity measurements on a single crystal of 4H-SiC, which is materials used as power-semiconductor devices, using infrared femtosecond pulses (pulse width ~40 fs).

The obtained transient signal (Fig. 1) shows clear coherent oscillation with 6.0 THz due to the zone-folded acoustic phonons. The estimated lifetime from a decay of the intensity was 56 ps, which is approximately 10 times larger than that of the longitudinal optical phonons.

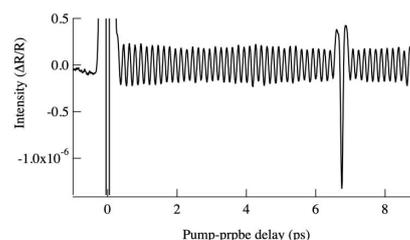


Fig.1 transient reflectivity from 4H-SiC

International CRP 2019—Category B

Structure and Properties of New Quantum Materials

Associate Prof. Jiangang Guo, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

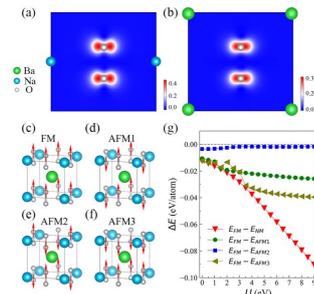
MSL Faculties: Takayoshi Katase

- Aims of Research -

It is argued to emerge anionogenic ferromagnetism and half-metallicity in the interface of KO_2/BaO_2 through double exchange interactions of O_2^{2-} and O_2^- from the first principles calculations. A question arises, is a long-range FM ordering possible in a bulky molecule oxygen containing compound as in a 3d metal counterpart? If so, can a half metal be evolved from the FM? This is of importance in further understanding the interaction behavior among these local moments carried by O_2 dimers.

- Results -

We show that $\alpha\text{-BaNaO}_4$ is a half-metal. It is energetically favorable, lattice-dynamically, mechanically and thermally-dynamically stable. It possesses robust FM ordering with a T_c of 120 K. The partially occupied π^* orbitals in the metallic channel and fully occupied π^* orbitals in the semiconducting channel is the origin of half-metallicity. Unlike previously reported AO_2 ($A=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$) with AFM orderings between (001) layers through indirect exchange interactions, the O_2 dimer layers in $\alpha\text{-BaNaO}_4$ coupled ferromagnetically through direct interactions with head-to-head alignment along the [001] direction. Our work provides new insights in exploring the FM and half-metallicity in O_2 -dimer-containing compounds.



Molecule Oxygen Induced Ferromagnetism and Half-metallicity in $\alpha\text{-BaNaO}_4$: A First Principles Study, *J. Am. Chem. Soc.* 142, 5234-5240 (2020) by J. Deng, J. G. Guo* and X. L. Chen*

International CRP 2019—Category B

Detailed assessment procedure for residual capacity of reinforced concrete buildings

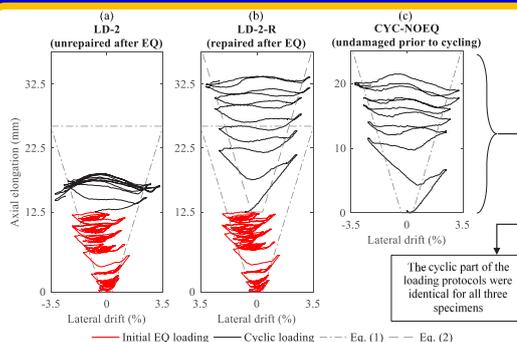
Project Coordinator Name: Kenneth J. Elwood, University of Auckland, NZ

MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

- Identify the factors influencing the residual capacity of epoxy-repaired RC plastic hinges.
- Determine influence of residual deformations at the time of repair on future seismic performance.
- Assess the recovered stiffness achieved in epoxy-repaired plastic hinges.

- Results -



Observations:

- Axial elongation after earthquake loading (red) is "locked in" by epoxy repairs.
- Total strain experienced by reinforcement in repaired plastic hinges will be larger than in an undamaged plastic hinge due to locked-in strain from initial damaging earthquake.

Marder, K., et al (2020). Quantifying the effects of epoxy repair of reinforced concrete plastic hinges. *Bulletin of NZSEE*, 53:1 37-51.

International CRP 2019—Category B

Behavior of RC columns under biaxial shear and bending moment

Project Coordinator Name: Marco Di Ludovico (University of Naples Federico II)

MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

The research project aimed at investigating the behavior of reinforced concrete (RC) columns under simultaneous horizontal actions and axial load that induce biaxial shear and bending in those members

- Results -

From the few experimental results available in literature for columns subjected to biaxial shear, this loading condition slightly affects the shear capacity of RC columns. Few numerical/analytical tools and models have been developed so far, mainly based on mechanical considerations on the reduced performance of concrete in the case of biaxial solicitations. However, the lack of a proper validation of these models against experimental results make their reliability and accuracy still not acceptable for assessment purposes. Based on experimental results, the circular interaction domain suggested by the JSCE represents a good balance between reliability and low computational effort.

International CRP 2019—Category B

Seismic Shear Failure in Reinforced Concrete Columns

Project Coordinator Name: Marc Eberhard (Univ. of Washington)

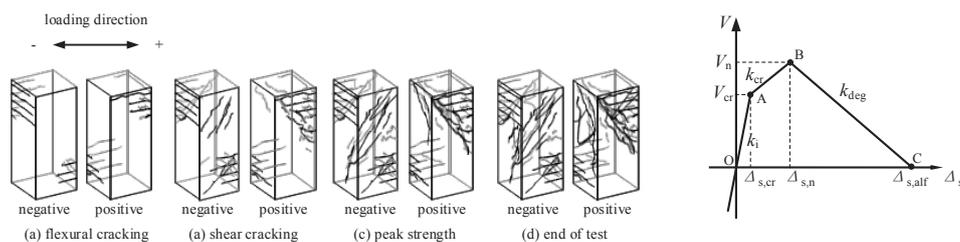
MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

The project aims to develop a versatile methodology that can evaluate the likelihood that a reinforced concrete column will fail in shear when it is subjected to deformation reversals, such as would occur during an earthquake.

- Results -

Based on experimental results, a model has been developed to describe the shear force-deformation curve for reinforced concrete columns subjected to deformation that are not necessarily parallel to one of the column faces.



国際研究B(2019年度)

「繊維補強セメント複合材料の超高性能化および有効活用技術開発」

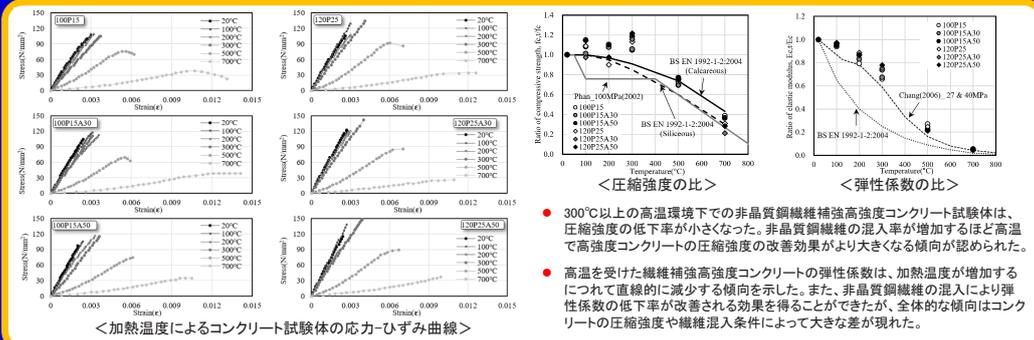
研究代表者：南 正樹(韓国 忠南大学校 建築工学科)
 共同研究対応教員：河野 進

— 研究目的 —

＜高温環境下での非晶質鋼繊維補強高強度コンクリートの力学特性＞

加熱温度に応じた非晶質鋼繊維補強高強度コンクリートの応力-ひずみ関係、圧縮強度、弾性係数などの力学的特性を評価することにより、非晶質鋼繊維の混入が高強度コンクリートの力学的性能に及ぼす影響を実験的に検討した。

— 研究成果・効果 —



発表論文：G.Choe, G.Kim, H.Kim, E.Hwang, J.Nam: 高温環境での非晶質鋼繊維補強高強度コンクリートの力学特性, Journal of the Korea Concrete Institute, Vol.32, No.1, pp.19-26, 2020.2
 その他、大会論文発表5件(日本コンクリート工学会年次大会-2019.7, 日本建築学会大会-2019.09, 韓国コンクリート学会大会-2019.5, 韓国建築施工学会大会-2019.5)

国際研究B(2019年度)

「昇温脱離ガス分析によるp型酸化半導体SnO薄膜中の水素評価」

研究代表者：野村研二(カリフォルニア大学サンディエゴ校(UCSD))
 共同研究対応教員：神谷利夫

— 研究目的 —

酸化半導体における膜中水素の定量評価や化学結合状態を明らかにし、その役割について深く理解することは高性能酸化半導体デバイスを開発するうえで不可欠である。そこで本研究では、昇温脱離ガス分析法にて、p型酸化半導体SnO薄膜中の水素の評価を実施した

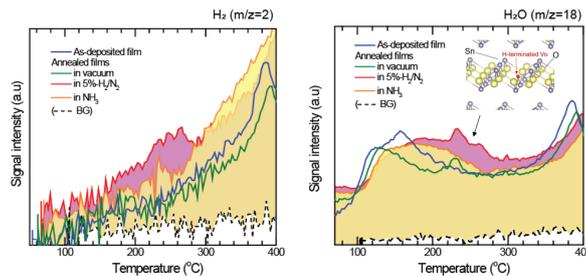
— 研究成果・効果 —

昇温脱離ガス分析(TDS)を用いて p型酸化半導体SnO薄膜中の膜中水素の評価

➡ 多結晶SnO膜の水素化処理の効果

- 膜中水素はH₂およびH₂O脱離により観察
- 多量の水素は主に水分子として脱離
- 膜中水素濃度 >10²¹cm⁻³
- 水素熱処理により多量のSn-H結合の形成

➡ 水素による酸素空孔低減
 (欠陥の水素終端)



International CRP 2018 – Category B

Development of innovative dampers for seismic applications,
Name: Tony T.Y. Yang (University of British Columbia) MSL Faculty:
KONO Susumu

Aims of Research

The aim of the research is to develop high performance metallic damper for earthquake engineering applications. Upon successful implementation, this research will facilitate high-performance earthquake-resilient buildings to be construction in Canada, Japan and elsewhere.

In this research, a simple metallic damper, named Welded Wide Flange Fuse (WWFF), is proposed. WWFF utilizes the commonly available welded wide flange section to dissipate the earthquake energy through shear yielding of the web in the longitudinal direction, while the flanges remain elastic. WWFF offers many advantages: 1) The use of the welded wide flange sections makes the WWFF very easy to be fabricated into any shapes; 2) the use of the welded plate as the web of the WWFF makes the WWFF very stiff and very efficient to dissipate stable earthquake energy; 3) WWFF is designed to be easily replaceable, hence making the structure equipped with WWFF more resilient towards future earthquakes. In this research, detailed experimental testing was conducted. The result shows that the newly proposed WWFF has high stiffness and stable energy dissipation capacity, where WWFF can be used as a cost effective and efficient metallic damper.

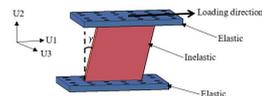


Figure 1: Concept of WWFF

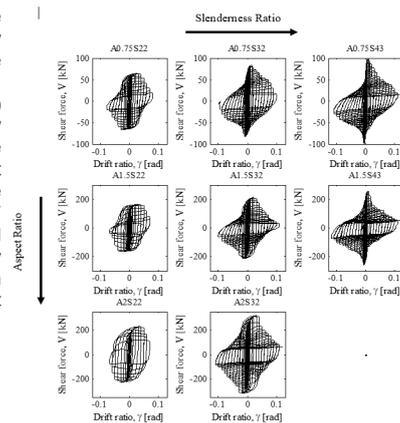


Figure 2: Force-deformation response of WWFF

International CRP 2019 – Category B

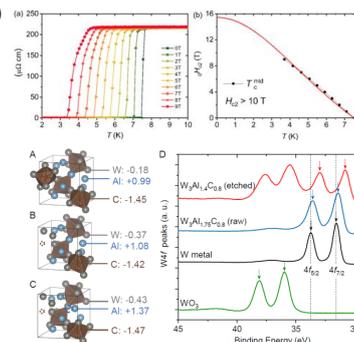
Exploration Novel Superconductors with Abundant Element using HPHT Method
Project Coordinator Name: Yanpeng Qi (ShanghaiTech University)
MSL Faculties: Takayoshi Katase ::

- Aims of Research -

The target of this project is exploration novel superconductors with Abundant Element using high pressure high temperature methods and investigation the exotic properties of the new superconducting materials. In particular, Exploration the relation between structure and superconducting properties and try to improve superconducting transition temperature.

- Results -

We report the discovery of superconductivity in W_3Al_2C ($T_c=7.6$ K) synthesized by high-pressure method. W_3Al_2C is isostructural to Mo_3Al_2C (space group $P4_132$) but with stronger spin-orbit coupling (SOC). The realization of superconductivity by replacing 4d Mo toward 5d W provides a candidate for the search of potential triplet superconductors with enhanced SOC. In addition, we successfully extract Al from M_3Al_2C ($M= Mo, W$) by applying a chemical etching method and discovery of an anomalous charge state evolution, where electron doping can be achieved through "oxidation". Specially, with the continuous removal of electron donor (Al) from the structure, we found an electron doping effect in the negatively charged transition metals. The peculiar charge state in M_3Al_2C plays an important role in both its structure and superconductivity.



International CRP 2019—Category B

Seismic Performance of Exposed-Type Column Base Connections with Flexible Base Plate

Project Coordinator Name: Yao Cui (Dalian University of Technology)

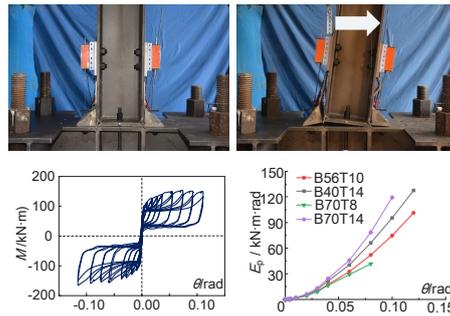
MSL Faculties: Satoshi Yamada;

- Aims of Research -

This project focused on the effect of the width-to-thickness ratio and cross-sectional area of the bar-type fuse on the seismic behavior of the proposed exposed column base. Based on a series of quasi-static tests, the failure mode, moment strength and energy dissipation of the proposed column base were discussed. This study will lead to a better understanding of the proposed column base.

- Results -

1. Under combined axial and flexure load, the behavior of the exposed column base with bar-type fuse was dominated by rotation. This type of exposed column base exhibited excellent self-centering behavior without compromising the energy absorption.
2. As the width-to-thickness ratio increased from 2.86 to 8.75, the reduction in the maximum moment strength and energy absorption when the drift angle reached 0.03 rad was 14% and 28%.
3. Specimen B70T14 developed as much as 24% and 25% larger maximum moment strength and energy absorption than those of Specimen B56T10 due to the use of larger bar-type fuse, respectively.



Yao Cui, Fengzhi Wang, Hao Li, (2019). Satoshi Yamada. Rotational behavior of exposed column bases with different base plate thickness. *Steel & Composite Structures*, 32(4), 497-507.

International CRP 2019—Category B

High-pressure synthesis and charge state study of PbFeO₃

Project Coordinator Name: Youwen Long (Institute of physics, CAS)

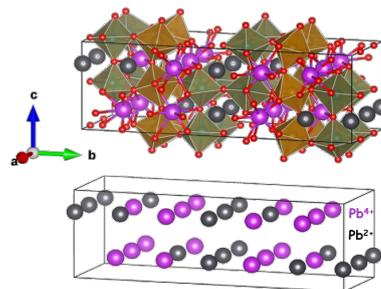
MSL Faculties: Masaki Azuma

- Aims of Research -

This project aims to apply high pressure and high temperature conditions to prepare a single-phase PbFeO₃ sample, and then investigate the detailed charge states for Pb and Fe both at different temperatures by a series of synchrotron-based spectroscopy methods. It is highly expected to find exotic charge states as well as the temperature-induced charge combination transition in this compound.

- Results -

High-quality PbFeO₃ perovskite samples with a good single phase was obtained. By means of synchrotron x-ray diffraction and absorption studies, we determined the detailed crystal structure and charge states of both Fe and Pb. An unusual 2a_p × 6b_p × 2c_p orthorhombic super unit cell with Cmcm space group and charge disproportionation state Pb²⁺_{0.5}Pb⁴⁺_{0.5}Fe³⁺O₃ were confirmed for the first time. Unique long-range column-like charge ordering was discovered in this system, which is very different from other Pb-based materials. Melting of Pb charge ordering wasn't observed while the sample was heated up to 740 K.



International CRP 2019—Category B

Effect of cumulative heat on hysteretic behavior of structural steel in energy dissipating devices

Project Coordinator Name: Zhe Qu

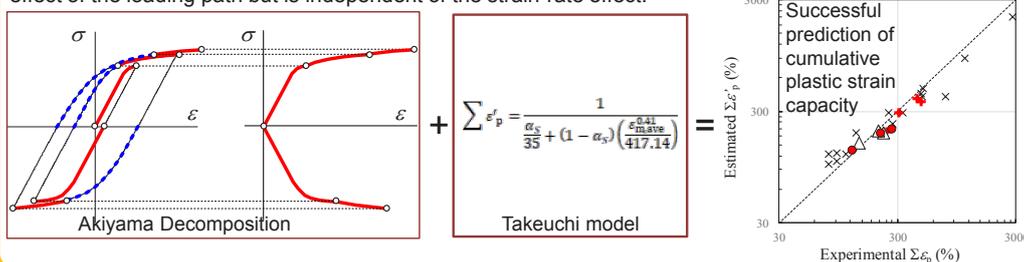
MSL Faculties: Shoichi Kishiki

- Aims of Research -

The activities in 2019 aimed at analyzing the results of a previous test on buckling restrained braces to see if its dynamic behavior can be predicted by existing models. This may provide a clue for better understanding and even modelling the heat effect on the hysteretic behavior of metallic dampers.

- Results -

The effect of dynamic loading on the cumulative deformation capacities of BRBs is negligible. The cumulative plastic strain at fracture can be well estimated by an existing empirical model that considers the effect of the loading path but is independent of the strain-rate effect.



Effects of strain rate on the hysteretic behavior of buckling restrained braces. ASCE Journal of Structural Engineering, 146(1), 2020: 06019003.

Please fill information such as URLs, research papers, etc., which you wish to publicize, in this section.

International CRP 2019—Category B

All Solid State Thin Film Solid Oxide Fuel Cell

Project Coordinator Name: Zhipeng Li

MSL Faculties: Shintaro Yasui

- Aims of Research -

We aim to reduce the operating temperature of traditional SOFC, and to develop new intermediate-temperature SOFC, which can work at 500 – 800 °C. One promising and efficient way is to reduce the thickness of electrolyte, resulting in the developing of thin film SOFC in recent years. Therefore, in this research program, we try to use thin film technique to develop all solid state thin film SOFC devices. The pulsed laser deposition (PLD) has been widely used as the robust and efficient thin film technique in energy-related materials systems, such as lithium ion battery. We hence try to apply this technique to be used for thin film SOFC fabrication in order to develop high quality thin film SOFC devices.

- Results -

First of all, we designed the all state thin film SOFC structure as shown in Figure 1. Si is the substrate, etched by reactive ion etching (RIE). Subsequently, the anode, electrolyte and cathode thin films are deposited by PLD layer by layer. Finally, the top layer is deposited to cover the surface. The anode is mixed with NiO_x and YSZ, and the electrolyte is pure YSZ thin film, followed by the cathode which we used LaSrMnO_x in this study. After all thin film deposited by PLD on Si substrate, we try to pattern each cell individually on the Si substrate. The RIE process was applied to pattern each unit cell. Figure 2 demonstrates a typical example of such a SOFC unit cell after patterning. For the first step, we have successfully designed new all solid thin film SOFC structures. With this thin film SOFC structures, we can use different thin film deposition techniques for such an approach. The PLD technique was applied in this study. From our preliminary result, it shows that PLD technique is promising to deposit all SOFC electrode and electrolyte materials on the substrate. For the following study, we will develop optimized methods to fabricate all solid thin film SOFC by this approach.

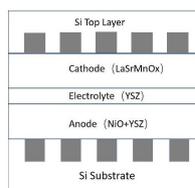


Figure 1 Schematic diagram of all state thin film SOFC.

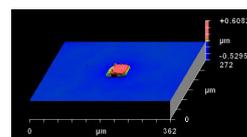


Figure 2 AFM imaging of a SOFC single cell after patterning.

一般研究B(2019年度)

「天草磁器土を原料とするアルミナ強化磁器の強化メカニズムの解明」

研究代表者：赤津 隆(佐賀大学)

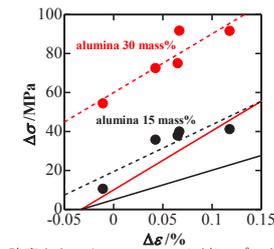
共同研究対応教員：若井史博

— 研究目的 —

提唱されているアルミナ強化磁器の強化メカニズムのうち、信頼性の高い「pre-stress説」について定量的に検証することによって、アルミナ強化磁器の真の強化メカニズムを明らかにし、さらなる強度向上を実現する材料設計に対する指針を与える。

— 研究成果・効果 —

天草磁器土ベースのアルミナ強化磁器に対して、コーディエライトが結晶化しないくらい少量のタルクを添加し(0~0.7mass%)、磁器素地マトリックスの熱膨張率を変化させ、アルミナとの熱膨張率差に起因するpre-stressの関数として磁器の強度を測定した。その結果、pre-stressが大きくなるほど強度が向上することが確認できたが、Eshelby理論から推定されるpre-stressよりも大きく強度が向上することがわかった(右図)。この強度向上は、熱膨張率の大きなアルミナ添加が、石英周囲におけるき裂発生を抑制したことによることを、実験(冷却中の亀裂発生に起因する熱収縮曲線上のステップの有無)で明らかにした。



強度向上 $\Delta\sigma$ をPrestrain $\Delta\varepsilon$ に対してプロットした図。黒丸、赤丸および点線は実測値。黒実線と赤実線は理論推定値。両者の差がアルミナ添加によるき裂発生抑制によることが明らかになった。

発表論文・関連論文：Journal of the American Ceramic Societyに投稿中

一般研究B(2019年度)

「電子誘電体 RFe_2O_4 の常温電気分極」

研究代表者：池田直(岡山大学大学院自然科学研究科)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

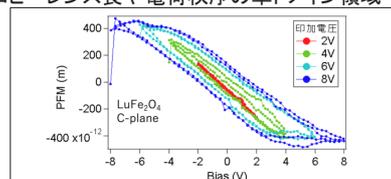
イオン変位に起源を持たず強誘電性を示す、電子型強誘電体の候補物質である $LuFe_2O_4$ について、圧電顕微鏡による電歪応答測定から、常温に自発分極が存在することを確かめる。

— 研究成果・効果 —

電子の極的な分布から電気分極を形成する新しい強誘電体、電子強誘電体は、まだ候補物質が少ない。そのうち希土類複電荷酸化鉄材料、 RFe_2O_4 (R=重希土類と、Y, Sc, In)は、鉄イオン電子間相互作用の競合を起源として極的な電子分布が現れる誘電体と考えられている。我々が1993年に極的な電場応答の存在を報告して以来、電荷秩序に伴う電気分極の発生について長い議論があった。最近我々はこの物質の化学当量性を精密に制御することで、高品質な単結晶を育成した。この結晶は、スピノヒーレンス長や電荷秩序の単ドメイン領域も大きい。

今回初めて電歪ヒステリシスループの観測に成功した。この結果は、非線形光学応答(SHG)測定と整合する。電荷秩序は400Kまで存在するが、電気分極はこれを起源とし、Cmの空間群を持つことも確かめた。

また電場中SHG測定から、抗電場が5V/cm程度と著しく小さいことが示唆されたが、これも圧電顕微鏡の測定結果と整合する。これらの結果は、電子型強誘電体は、著しく小さい抗電場を持つ特異な強誘電体であることを示している。



$LuFe_2O_4$ 単結晶の電歪ヒステリシスループ。電場はc軸方向にかいた。

関連論文：K. Fujiwara, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 88, 044701 (2019)

一般研究B(2019年度)

「拡張性の高い免震装置の極限挙動解析システムの開発」

研究代表者：石井建(北海道大学大学院工学研究院)

共同研究対応教員：吉敷祥一

— 研究目的 —

免震構造に対する需要拡大により、従来の想定を超えた範囲での安全性の検証が求められている。すでに普及している免震装置についても、実験によって新たに発見される特性が少なくないが、通常の構造解析プログラムではそれらの再現が困難である。本研究では拡張性の高い解析システムを開発し、かつ普及させることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

The flowchart shows a process starting with 'Initialize', followed by a loop 'i = 1 to N'. Inside the loop, it performs 'Update mechanical properties', 'Seismic response analysis: t → t + Δt', and 'Calculate absorbed energy increment: ΔE'. A sub-loop 'j = 1 to n' follows, performing 'Distribute ΔE/n to the heat generating parts' and 'Thermal conductivity analysis: t → t + ΔE/n'. The process ends with 'next j', 'next i', and 'End'.

Diagrams include:

- '弾性すべり支承の荷重-変形関係' (Load-deformation relationship of elastic sliding bearings) with a graph showing a red curve on a grid.
- '鉛プラグ入り積層ゴムの荷重-変形関係' (Load-deformation relationship of lead-plug layered rubber) with a graph showing a red curve on a grid.
- '力学モデルと熱伝導解析モデルの分離・開発' (Separation and development of mechanical and thermal conductivity analysis models) with a 3D diagram of a sliding bearing assembly including 'Multi-layered natural rubber pad', 'Sliding material', 'Sliding plate', 'Base plate', and 'Heat generating parts'.

熱・力学連成挙動解析手法の一般化
任意の力学モデルと熱伝導解析モデルを組み合わせ可能

Ken Ishii, Masaru Kikuchi: Mechanical behavior of sliding bearings for seismic isolation under cyclic loading, 16th World Conference on Seismic Isolation, Energy Dissipation and Active Control of Structures, St. Petersburg, Russia, 2019.

一般研究B(2019年度)

「電子・格子・電磁場結合系の量子波束ダイナミクスにおけるラマン効果の理論」

研究代表者：石田 邦夫(宇都宮大学)

共同研究対応教員：中村 一隆

— 研究目的 —

電子・格子系に対するコヒーレント制御の理論構築には、光励起下における系の時間変化を記述することが必要である。本研究では量子状態の重要な指標としての量子相関に着目し、相互作用しない2つの電子・格子系に光照射によって形成される量子相関について、数値計算を用いて調べた。

— 研究成果・効果 —

The figure contains two graphs:

- (a) '励起状態占有確率' (Excitation state occupation probability) vs 'Time [1/ω]'. It shows two curves for M=2 (red solid) and M=1 (blue dashed), both showing an initial rise and then oscillating around a value of approximately 0.5.
- (b) '量子相互情報量' (Quantum mutual information) vs 'Time [1/ω]'. It shows a red curve that increases from 0 to about 0.4 over time.

入射光電場
励起状態占有確率
量子相互情報量

励起状態占有確率の時間変化は、電子・格子系が1つの場合と2つの場合で殆ど差がない

1体演算子の期待値には量子相関の効果が明確には現れない

量子相互情報量
量子相互情報量
$$I_M = S(A) + S(B) - S(A \otimes B),$$

を評価することにより、時間と共に系間に量子相関が現れることが明らかとなった→量子相互情報量が有効な指標となる

発表論文・関連論文：

K. Ishida, "Coherent control of nonadiabatic dynamics of electron-phonon systems by quantized light field", to be published in Progress in Ultrafast Intense Laser Science XV (Springer, Berlin).

一般研究B(2019年度)

「PEG包含多元系フェライトナノ微粒子の磁気特性と医療応用」

研究代表者：一柳優子(横浜国立大学)

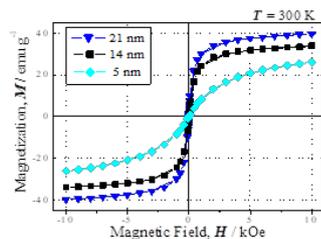
共同研究対応教員：川路均

— 研究目的 —

当研究室では、これまで磁気ナノ微粒子の開発を行ってきた。数nmオーダーで作製される磁気ナノ微粒子は、1 nmほどのわずかな粒径変化で、磁気特性の大きな変化を示すことがこれまでの研究で明らかとなっている。作製したナノ微粒子の磁気特性を厳密に調査するためには、東京工業大学の保有するSQUID磁束計を用いて磁化測定を行い、ナノ微粒子の磁化特性の調査と、微粒子の医療分野への応用の可能性の検討も併せて行った。

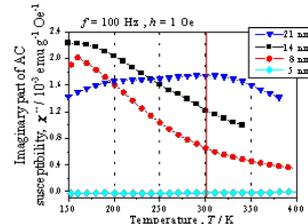
— 研究成果・効果 —

①粒径別Ni-ferriteナノ微粒子の磁化曲線



直流での磁化曲線の測定を行った結果、粒径の増大にともない保磁力と最大磁化が増大し、作製した中で最も大きい、21 nmの粒子が最も高い最大磁化を示した。Ni-ferriteも、超常磁性的振る舞いを示した。

②粒径別Ni-ferriteナノ微粒子の交流磁化率温度依存性



粒径の増大に伴い、交流磁化率虚数部のピーク位置は高温側にシフトすることが明らかとなった。室温付近では、粒径が大きい粒子ほど高い交流磁化率虚数部を示したことから、21 nmの粒子が磁気緩和損失による最も高い熱散逸効果を示すことが示唆される。

一般研究B(2019年度)

「免震部材の繰り返しによる特性変化とハードニングを考慮した免震建物応答性状に関する研究」

研究代表者：犬伏徹志(近畿大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

— 研究目的 —

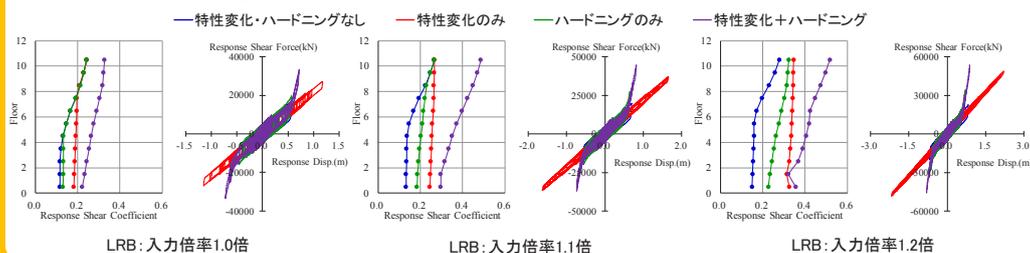
免震建物が長周期・長時間地震動を受けると、多数回の繰り返しによる免震部材の特性変化や、それに伴う免震層水平変位の増大によるハードニングが発生する恐れがある。本研究では、これらの要因を同時に考慮した場合の建物応答評価を行い、免震層応答変位や上部構造の応答の変化など、基本的な応答性状を把握することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

建物モデル：10層基礎免震建物(多質点系)

免震部材：鉛プラグ挿入型積層ゴム支承(LRB)、高減衰ゴム系積層ゴム支承(HDR)

入力波：南海トラフ地震を想定した長周期地震動(大阪圏：OS1)



一般研究B(2019年度)

「触媒反応を用いた非可食バイオマス資源から機能性バイオポリマーへの大量供給プロセスの検証」

研究代表者：岩越万里(株式会社BrainGild)

共同研究対応教員：原亨和教授

— 研究目的 —

1)非可食バイオマス資源から糖類、2)グルコースからHMF、3)HMFからAMF或いはFDCA

これらそれぞれについて、原亨和教授の新型触媒プロセスを用いて、実用化レベルへの開発をめざす。そのため、個別プロセス実用化に興味ある企業・団体を探索し、共同研究体制を築き、推進して成果を出す。

— 研究成果・効果 —

1)秋田県企業と「モミガラ⇒グルコース」、東京の企業と「コーヒー抽出滓⇒マンノース」及び「廃糖蜜⇒HMF、バガス⇒グルコース」、商社との商流検討などを行った。

共同利用研究に1社が参加してきた。

2)「グルコース⇒HMF」プロセスを上場企業に紹介した。3)マッチングに至らず

4)上記2)及び3)の製造原価を試算し提出した。

まとめ：

プロセスに興味を持ちつつも、自社内に研究開発する実働要員がない、という企業が多い。実験補助サービスを行いながら共同研究の実現率を上げたい。

本年度はわずかな成果だったが、引き続き潜在的顧客を掘り起こしていきたい。

一般研究B(2019年度)

「ペロブスカイト型酸化物LaLuO₃の電子構造評価」

研究代表者：植田和茂(九州工業大学大学院工学研究院)

共同研究対応教員：神谷利夫

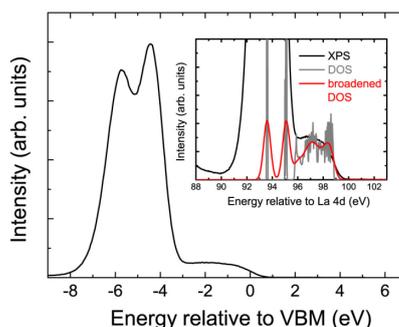
— 研究目的 —

最近注目されるようになったBサイトに希土類イオンを置換できるペロブスカイト型酸化物に関して、その欠陥の安定性を知り、またAサイトとBサイトで欠陥の安定性を比較することは重要である。本研究では、代表的なペロブスカイト酸化物母体を選択して希土類イオンをAまたはBサイトに置換し、それぞれの場合の欠陥の安定性について解析することを目標とし、まずはその母体の電子構造を計算と実験の両側面から評価することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

代表的なペロブスカイト酸化物母体として、希土類イオンをAまたはBサイトのいずれにも置換できるLaLuO₃を選択した。¹ 電子構造の計算はWien2kコードを用い、エネルギー図および状態密度を求めた。電子構造の実験的な評価はXPSスペクトルを測定し、計算で求めた状態密度と比較することを試みた。

XPSスペクトル測定の実験と比較するために、オンサイトクーロン反発Uやスピン軌道相互作用のパラメータを入力して計算に補正を加えたが、希土類イオンの4f軌道のため、実験結果を再現できるような十分な計算結果を得られなかった。引き続きパラメータの最適化と母体物質の選択について検討することとした。



一般研究B(2019年度)

「ビスマス酸化物前駆体を用いた酸フッ化物のトポタクティック合成」

研究代表者：岡 研吾(近畿大学・理工学部・応用化学科)

共同研究対応教員：東 正樹

研究目的

PbやBiを含む酸フッ化物は、Pb/Biイオンの6s孤立電子対に誘起される異方的な化学結合により、酸素とフッ素のアニオン秩序配列が誘発される。Pbを含む酸フッ化物の合成報告はいくつかあるものの、Biを含む酸フッ化物の報告例は少ない。その理由として、BiOFが安定的に生成されるため、固相反応での合成が難しいことが挙げられる。本研究では、この問題を解決するためトポタクティックな手法による新規Bi含有酸フッ化物合成を試みた。

研究成果・効果

本研究では、Bi含有酸フッ化物を合成するにあたり、固相反応法を用いてワンステップで合成するのではなく、先に酸化物として結晶構造の骨格を作ってからフッ素を導入するトポタクティックな合成手法を行った。ポリフッ化ビニリデン(PVDF)は、化学的に安定で取り扱いが用意であり、融点が200°C以下であるため、低温で母構造を壊さずにフッ化することに適した物質である。よってPVDFを用いたトポタクティックなフッ化による新規酸フッ化物の合成を試みた。

フッ化するビスマス酸化物として高圧法で合成されるBiNiO₃を選んだ。酸化物イオンに対するフッ化物イオンの置換は還元的に働くため、BiNiO₃においてフッ化反応はよく進むことが期待される。BiNiO₃に対しPVDFを用いたフッ化を行ったところ、試料の回折パターンが変化し、BiMnO₃に似たパターンが得られたことからBiNiO₃Fが得られた可能性が考えられる。しかし、まだ不純物なども多く、詳細な解析のためには合成条件の改良が必要である。

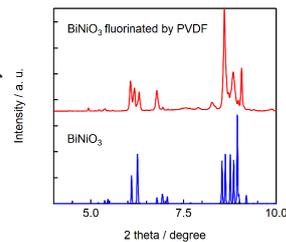


図 BiNiO₃フッ化前後での放射光X線回折パターン(波長0.421 Å)の変化。

一般研究B(2019年度)

「低温用熱電変換材料候補物質Ta₄SiTe₄の単結晶合成」

研究代表者：岡本 佳比古(名古屋大学 大学院工学研究科)

共同研究対応教員：笹川 崇男

研究目的

熱電冷却は伝導電子によるヒートポンプであり、次世代の全固体冷却技術として期待される。しかし、従来材料を用いた性能向上が頭打ちであり、現状の実用は特殊用途に留まる。本研究では、研究代表者らが見出した新しい低温用熱電変換材料候補Ta₄SiTe₄の、これまで得られていないバルクサイズのp型・n型単結晶試料を合成することにより、Ta₄SiTe₄が次世代の実用材料の有力候補であることを示す。

研究成果・効果

TaサイトへのTi置換により、p型のTa₄SiTe₄ウィスカー結晶の合成に成功した。Tiを5%置換した試料においてBi₂Te₃系の実用材料に匹敵する高い出力因子が得られた(図1)。合成されたp型・n型のTa₄SiTe₄ウィスカー結晶を用いて熱電冷却素子を試作し、熱電冷却が起こることを確かめた(図2)。また、気相成長法により、数100 μmの太さの単結晶の合成に成功し、ホール抵抗などこれまで測定できていなかった各種の物性を測定できた。

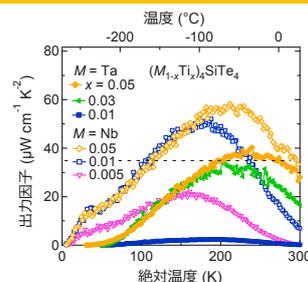


図1. 本研究において得られたp型材料の出力因子。破線はビスマス系実用材料の室温の値の目安を示す。

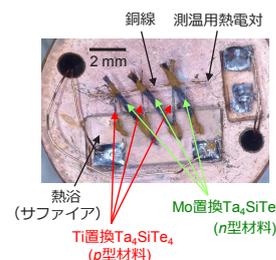


図2. p型・n型Ta₄SiTe₄針状試料を用いて試作した冷却素子。

発表論文: Hole-Doped M_4SiTe_4 ($M = Ta, Nb$) as an Efficient p-Type Thermoelectric Material for Low-Temperature Applications, Yoshihiko Okamoto, Yuma Yoshikawa, Taichi Wada, and Koshi Takenaka, Appl. Phys. Lett. **115**, 043901(1-5) (2019).

一般研究B(2019年度)

「シリカ系材料の構造・欠陥と物性」

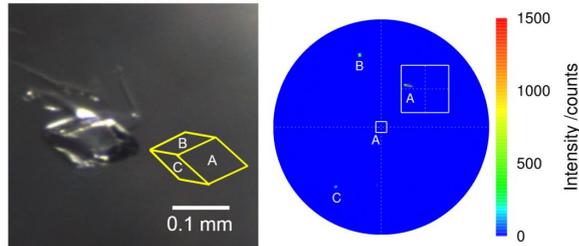
研究代表者：梶原浩一(首都大学東京大学院都市環境科学研究科環境応用化学域)
 共同研究対応教員：平松秀典

— 研究目的 —

シリカはSi-O結合を骨格とする化合物群であるが、Siが強い結合による三次元的な網目構造を構築するため構造の多様性が高い。また、このようなシリカ系材料の物性は、構造だけでなく、しばしば欠陥の影響を大きく受ける。本研究では、SiO₂の組成をもつ結晶や非晶質(シリカガラス)、ゼオライトなど多種のシリカ系材料の構造や欠陥を種々の分光法・測定手法を用いて解析し、それらの物性との互いの相関を明らかにすることを目的とした。

— 研究成果・効果 —

- 気体分離材料などとして期待されているシリカゼオライトdeca-dodecasil 3R (DDR)の菱面体状粒子の露出面の面指数はこれまで精確に決定されていなかった。極点測定(図)を行い、この面が{1010}面[菱面体晶系表示の{100}面]であることを同定した。
- 各種放射線や電子線を照射したα-石英に形成された酸素ダングリングボンド(NBOHC)の発光測定を行い、この発光の生成には局所的な非晶質化が不可欠なこと、ゆえに非晶質化能をもつ粒子線照射を受けた指標として使用できることを指摘した。



発表論文・関連論文：L. Skuja, N. Ollier, K. Kajihara, K. Smits, Zero-phonon line and vibronic structures in the green luminescence band in irradiated pure alpha-quartz, The 20th International conference on Radiation Effects in Insulators (REI-20), Astana, Kazakhstan; L. Skuja, N. Ollier, K. Kajihara, Luminescence of non-bridging hole centers as a marker of particle irradiation of β-quartz, The 19th International Conference on Solid State Dosimetry (SSD19), Hiroshima, Japan

一般研究B(2019年度)

種々の先進材料の高密度エネルギー計測分野への応用

研究代表者：糟谷紘一(応用ながれ研究所 & レーザー技術総合研究所)
 共同研究対応教員：川路 均

— 研究目的 —

東京工業大学フロンティア材料研究所の熱加熱装置を用いて諸材料を加熱し、各種計測装置により、高温下での表面損耗量(喪失総質量)等を測定する。これらの結果を生かして、極限状態材料の損耗破壊監視計測法の確立を目指す。これらが本共同研究の最終目標である。本研究では、近く再開する高熱流照射のために、レーザー誘起超音波法による材料の肉厚測定関連計測装置の準備と、新規な方法の調査・提案を行った。

— 研究成果・効果 —

図1は本測定法の原理図である。これによる鋼材サンプル測定結果の1例を表1に示す。鋼材の代わりにサンプルの種類を色々換えて実験を行った。計測用オシロスコープの信号波形の1例を図2に示す。サンプルの実厚さと計測厚さの一致は、予想通りであった。音波の多重反射周波数 F、伝播速度 V、材料厚さ d の関係は、 $d = V / (2F)$ で表わせる。F=800 kHzとなる核融合炉壁候補材料の厚さ d を計算すると、表2が得られた。今後、測定可能厚さ範囲や精度について詳しく検討する。

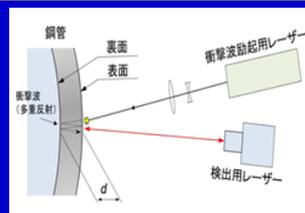


図1 本測定法の原理図

表2 軽金属板の予想測定厚

	鋼鉄	アルミニウム	ベリリウム
音速	5.92	6.38	12.8
厚さ	3.70	3.98	8.00

表1 鋼材サンプルの実測厚さ結果

厚さ (mm)	多重反射周波数 (計測値) (kHz)	計測厚 (mm)
7.1	420	7.0
5.0	610	4.8
33.7	800	3.7

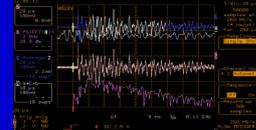


図2 計測用オシロスコープの信号波形例

K.Kasuya et al., Proc. XXIII Int. Symposium on High-Power Laser Systems and Applications, Czech, submitted (2020). / 糟谷紘一 他, 九州大学応用力学研究所共同利用研究成果報告, 22, pp 203-204 (2019). / 糟谷紘一, 東京工業大学・フロンティア材料研究所・共同利用研究報告書, 23, pp 77-79 (2019). / 糟谷紘一 他, レーザー学会東京支部第20回研究会, 講演要旨集, 東海大学高輪キャンパス, 印刷中 (2020).

一般研究B(2019年度)

「層状バナジウムカルコゲナイドにおけるスピン軌道電荷複合秩序状態」

研究代表者：片山 尚幸(名古屋大学大学院工学研究科)

共同研究対応教員：笹川 崇男

— 研究目的 —

鉄系超伝導体では、正方晶-斜方晶転移の直上において、電子構造が平均構造の持つC4回転対称性よりも低いC2回転対称性を有している(電子ネマティック相)ことが各種実験により確認され、高温超伝導発現メカニズム解明に向けた有力な手がかりと目されている。この電子系の低対称化と対応して、軌道縮退の破れと関連した局所的な構造歪が生じていることが、二体相関分布関数解析により明らかになりつつある。このような局所構造歪を持つ対称性の自発的な低下は、鉄系とは全く異なる、量体化転移を示す系においても低温で現れる。鉄系と量体化の系で共通して現れる局所的な構造歪は、ダイナミクスを伴って現れるのか?という点を明らかにすることを目的とした。

— 研究成果・効果 —

研究のターゲットとして、二次元三角格子系層状LiVS₂を選んだ。LiVS₂はVが3+, d²電子状態を持ち、スピン・軌道に自由度を持つ系である。層状LiVS₂は低温でバナジウムが三量体を形成することが申請者による先行研究から明らかにされており、高温ではバナジウム三量体が消失してレギュラーな二次元三角格子が復活する。この系を舞台として、高温で短距離秩序が現れるのか?また、その短距離秩序はダイナミクスを示すのか?という点を明らかにすることを目指して研究を行った。平均構造の解析はX線回折実験によるRietveld解析を用い、局所構造の解析にはPDF解析を用いた。また、ダイナミクスの観測には時間分解STEM測定を用いた。

LiVS₂において動的に揺らいだジグザグ鎖状の短距離秩序を見出した。局所歪が現れるという点では、緒言で述べたFeSeやCuIr₂S₄などと共通である。ジグザグ鎖の結合そのものは原子あたり2本のボンドで構成されていること、バナジウムのt_{2g}軌道は隣り合った原子の方向を向いていること、などを考えると、このジグザグ鎖の秩序形成はバナジウムの持つスピン・軌道の動的な短距離秩序の形成によるものと考えてよいであろう。しかし、① 高温で現れるジグザグ鎖短距離秩序が低温相の三量体とは明確に異なっていること、② 130 nm以上という相関長は既存の系における相関長をはるかに凌ぐ異常に長いものであること、などは従来の系とは明確に異なる性質であり、このような特徴が現れる原因は今後も本共同研究を進めていく中で明らかにすべき課題である。現在は、笹川研究室のゾーン電気炉を利用して、より詳細な構造実験に用いるための単結晶試料を育成中である。

一般研究B(2019年度)

「トポロジカル絶縁体の量子ホール状態の普遍性研究」

研究代表者：金子晋久(国立研究開発法人 産業技術総合研究所)

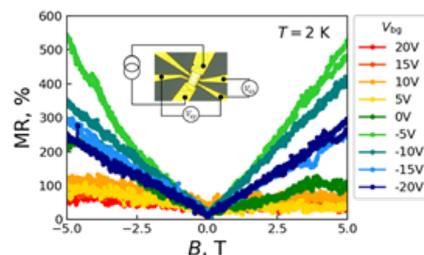
共同研究対応教員：笹川崇男

— 研究目的 —

量子化ホール抵抗は、高い普遍性を持つことから今日では直流抵抗の一次標準に用いられている。様々な物質における量子化ホール抵抗の同等性の検証が行われてきたが、トポロジカル絶縁体においては十分検証されていない。本研究ではトポロジカル絶縁体における量子ホール効果の実現と精密測定を目的とし、キャリア制御技術の構築及び輸送測定を行う。

— 研究成果・効果 —

高いバルク絶縁性を持つトポロジカル絶縁体である、Sn_{0.02}Bi_{1.08}Sb_{0.9}Te₂S (Sn-BSTS)の高品質単結晶を作製・薄片化し、電子線リソグラフィ法によりホールデバイスを作製した。低温におけるホール係数測定により、上面および下面におけるキャリア濃度が電界効果によりそれぞれ独立に制御できることを検証した。上下面における独立したキャリア制御技術は、量子伝導実現に向けた重要技術である。このとき縦抵抗も大きく変調され、適当なゲート電圧条件のもとで、5 Tの磁場に対し500%を超える大きな磁気抵抗(MR)が観測された(右図)。この振る舞いは半金属において見られるのと同様、電荷補償による機構による説明が考えられる。今後試料の改善により量子伝導状態の実現が期待される。



縦抵抗 R_{xx} の下面ゲート電圧による変調。
差し込み図は測定素子の光学顕微鏡像。

一般研究B(2019年度)

「衝撃波を利用した超高ひずみ速度変形下における降伏機構の解明」

研究代表者：川合伸明(熊本大学 パルスパワー科学研究所)

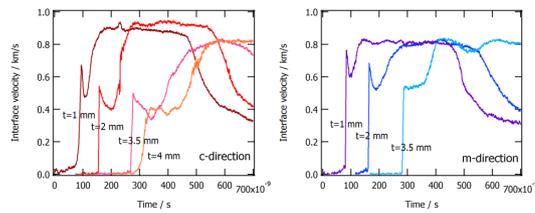
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

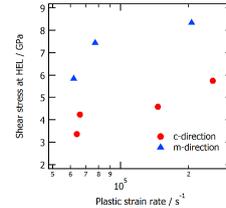
材料の強度特性は、顕著なひずみ速度依存性を示し、ひずみ速度が 10^5 /s以上にも達する衝撃圧縮下においては、静的な材料試験で得られる値の数倍も大きくなる。本研究では、超高ひずみ速度変形下における降伏機構の解明を目的として、6H SiC単結晶に対して衝撃波伝播プロファイル測定を行い、衝撃圧縮下での降伏における塑性ひずみ速度やせん断応力の評価を行った。

— 研究成果・効果 —

6H SiC単結晶のc面(0001)および m面(10-10)に対して衝撃圧縮実験を実施(衝撃応力: 25 GPa)



構成則との比較



SiC単結晶を伝播する衝撃波プロファイル

➢ 弾性衝撃波と塑性衝撃波からなる2波構造の衝撃波伝播を確認

衝撃波による降伏時のせん断応力とひずみ速度

➢ すべり系が活動しにくいc方向の衝撃荷重に対して、低い変形抵抗を示す

静的変形とは異なる超高ひずみ速度変形特有の変形機構の存在を示唆

一般研究B(2019年度)

「アモルファス酸化物半導体の電子構造解析と新規応用提案」

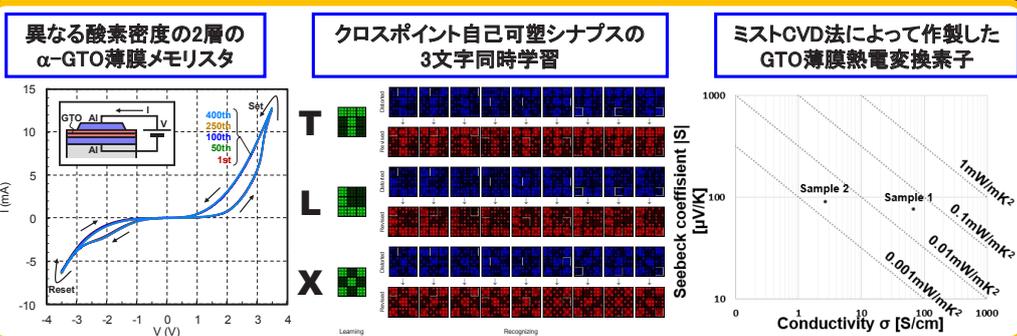
研究代表者：木村睦(龍谷大学 理工学部 電子情報学科)

共同研究対応教員：神谷 利夫

— 研究目的 —

IGZOのみならずGTOなどといった新規材料も含め、アモルファス酸化物半導体の電子構造解析と新規応用提案
 メモリスタ・脳型集積回路・熱電素子の 研究・試作・評価

— 研究成果・効果 —



発表論文：A. Kurasaki, Memristive Characteristic of an Amorphous Ga-Sn-O Thin-Film Device with Double Layers of Different Oxygen Density, Materials, 12, 3236, 2019
 発表論文：M. Kimura, Neuromorphic System with Crosspoint-type Amorphous Ga-Sn-O Thin-Film Devices as Self-Plastic Synapse Elements, ECS Trans., 90, 157, 2019
 発表論文：荒牧 達也, ミストCVD法により成膜したGa-Sn-O薄膜の組成比に対する熱電特性の変化, 薄膜材料デバイス研究会 第16回研究会, 70, 2019

一般研究B(2019年度)

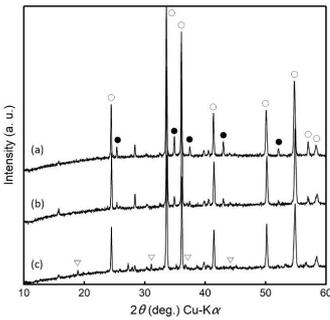
「 $(Al,Fe)_2O_3$ 固溶体の高圧合成と磁気特性」

研究代表者：草野 圭弘(岡山理科大学・工学部)
共同研究対応教員：東 正樹

一 研究目的 一

GaFeO₃型Al_{2-x}Fe_xO₃固溶体の高圧合成を試み、その固溶域を明らかにするとともに、Al置換量と磁気特性の関連を明らかにすることを目的とし検討した。

一 研究成果・効果 一



Fe:Al = 0.60:0.40 ~ 0.70:0.30となるようAl(NO₃)₃・9H₂OおよびFe(NO₃)₃・9H₂Oで混合し、混合物を大気中にて500°Cで1h熱分解した後、2GPaで加圧して1400°Cで1h熱処理した。得られた試料の粉末X線回折パターン(XRD)を図1示す。いずれの試料においても、GaFeO₃型Al_{2-x}Fe_xO₃固溶体は生成せず、Al置換ヘマタイト(α -Fe_{2-x}Al_xO₃)とFe置換コランダム(α -Al_{2-x}Fe_xO₃)が主な生成相であった。

Fe:Al = 0.70:0.30の試料(図1(c))中には、少量のスピネル構造化合物(FeAl_{2-x}Fe_xO₄)が生成した。

今後、熱処理温度と時間および圧力の影響を詳細に検討し、磁気特性との関連を検討する予定である。

図1 Fe:Al = 0.60:0.4 (a), 0.65:0.35 (b)および0.70:0.30 (c)の原料を、2GPaで加圧し1400°Cで1h熱処理した試料のXRDパターン。
○: α -Fe_{2-x}Al_xO₃, ●: α -Al_{2-x}Fe_xO₃ および ▽: スピネル構造化合物。

一般研究B(2019年度)

「接合部降伏する鉄筋コンクリート造骨組の非線形地震応答解析」

研究代表者：楠原文雄(名古屋工業大学)
共同研究対応教員：河野 進

一 研究目的 一

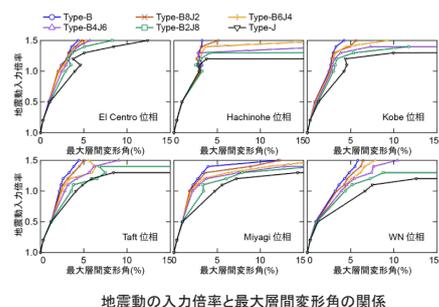
梁降伏型骨組と接合部降伏型骨組の2種類の鉄筋コンクリート骨組を一定の割合で連結した骨組を設定し、地震応答解析によりある層の柱梁接合部のうちの程度の接合部降伏を許容できるかを検討する。

一 研究成果・効果 一

・骨組全体に対して接合部降伏型柱列の割合が20%程度であれば極めて稀に発生する地震動の1.5倍までの範囲では骨組の崩壊は生じなかった。骨組全体に対して接合部降伏型柱列の割合が増大すると崩壊荷重は減少し、骨組全体に対して接合部降伏型柱列の割合が80%となると接合部降伏型骨組と同様に極めて稀に発生する地震動の1.3~1.5倍程度で崩壊が生じる可能性が高い。

・極めて稀に発生する地震動では、骨組全体に対して接合部降伏型柱列の割合が60%を上回ると、最大層間変形角が著しく増加する。

・稀に発生する地震動を含む極めて稀に発生する地震動の0.5倍程度までは、最大応答層間変形角は、骨組全体に対する接合部降伏型柱列の割合によらず梁降伏型骨組と同程度となる。



地震動の入力倍率と最大層間変形角の関係

一般研究B(2019年度)

「元素戦略に基づく新規磁石高密度化に関する研究開発」

研究代表者：小林 斉也(株式会社 Future Materialz)

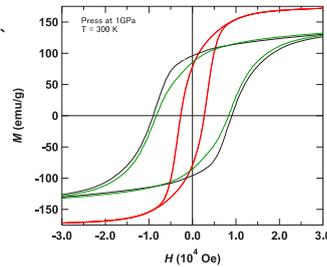
共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

弊社の持つ元素戦略に基づく新規磁石材料粉末を、より高性能・高機能化するために、別の磁石材料との複合化を念頭に、従来のプレス圧力域を超えた超高压領域で磁石成型体を作製し、複合的な磁石特性の獲得を目指す。

— 研究成果・効果 —

一つは希土類元素を含んだ磁性材料粉末(A)、もう一方は弊社の持つ元素戦略に基づく新規磁石材料(B)である。これら2つの磁性材料粉末を種々の組成比で混合した原料を用いて5tonf/cm²までのプレス機で成型したものの、いずれも2種の材料が独立した磁化反転挙動を示し、結果として磁気曲線はスワン型を示すだけであった。そこで、特に高压力の発生が可能な東教授が構築してきた超高压加圧法を利用することにより、高密度な成型体を作製し、その成型体密度とともに、微細構造解析や磁気特性評価を行い、それらの相関を探った。作製試料は、超高压を用いないと得られない、80vol%以上の高密度パッキングされた成型体であった。磁気特性を右図に示す。図中の赤線が(B)、黒線が(A)のそれぞれ単独の成型体の磁化曲線である。緑線は、(A)と(B)の複合磁性粉末を10tonf/cm²でプレスした成型体の磁気特性である。これまで5tonf/cm²までのプレス圧で作製した成型体では得られなかった複合的な磁化曲線が確認できた。複合磁石成型体(緑線)は、黒線と赤線、つまり、(A)と(B)の中間的な磁気特性を示している。これは、両磁性材料間に非常に強いスピントラッピングが発生したことにより、このような複合的な磁気特性となったのではないかと予想している。今後は、この複合的な磁気特性が得られる条件領域を探求していく。



一般研究B(2019年度)

「高分極性イオンを含有した透明酸化物ガラスの低光弾性と短・中距離構造」

研究代表者：斎藤 全(愛媛大学 大学院理工学研究科)

共同研究対応教員：平松 秀典

— 研究目的 —

非常に小さい光弾性定数を有し、かつ透明な酸化物ガラスの開発と、分光学的手法を用いた関連するマイクロ構造の特定を目的とした、継続研究を実施した。ns²型の電子配置を有する高分極性ビスマスイオンを含むケイ酸塩、ホウ酸塩、リン酸塩ガラスにおいて、光弾性定数が非常に小さいガラスの局所構造の特徴を調査した。

— 研究成果・効果 —

本共同研究利用で取得した2元系Bi₂O₃-SiO₂ガラスの核磁気共鳴スペクトルの解析によると、ケイ酸塩ガラスでは、光弾性定数が非常に小さい組成において、ゼロ光弾性機能を発現するような特徴的なガラスネットワーク構造は有しないが、非架橋酸素を1-2個含んだSiO₄四面体構造が、ビスマス含有量が増えるにしたがって、連続的に増加している結果を得ている。一方、ホウ酸塩ガラスでは、光弾性定数が小さい組成において、ラマン散乱スペクトルより、4配位構造を有するホウ酸塩ユニットが存在し、リン酸塩ガラスでは孤立した4配位構造を有するリン酸塩ユニットが存在する。高分極性イオンとしてのBiイオンが、短鎖状の四面体構造に付随した高分極率酸素イオンとネットワーク内で混じることによって、Biと短鎖状四面体によるサブネットワークが形成されていることが示唆される。これにより、酸化物ガラスにおける小さい光弾性特性を決定する主要因の一つとして、大きな電子分極率を持つイオン(OとBi)がガラス内で中距離範囲(四面体ユニットとその近傍)程度で均一に分布し、広がった電子波動関数によって空間的な電子雲の分布が保たれていると考えられる。ガラスに応力が加わって原子変位が生じたときに、異方的な電子雲分布が誘起されず、マクロ物性としての屈折率の異方性が認められないと考えられる。これらの成果の一部については、下記2報として公表されている。

発表論文：“Optical properties and zero photoelastic constant of ns²-type metal cation containing oxide glasses”, A. Saitoh, M. Itadani, K. Suzuki, H. Takebe, and H. Hosono, Opt. Quantum. Electron. 55, 30201-30210 (2019).
“Structure and photoelastic constant of binary ns²-type metal cation containing silicate glasses”, A. Saitoh, S. Kitani, S. Matsuishi, H. Kawaji, H. Takebe, H. Hosono, Journal of Non-Crystalline Solids 521, 1195261-1195265 (2019).

一般研究B(2019年度)

「既存山形鋼の高力ボルト接合部に対する簡便な耐震補強」

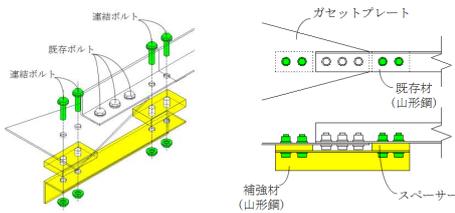
研究代表者：薩川恵一(愛知工業大学)
共同研究対応教員：吉敷祥一

研究目的

山形鋼筋交いが広く適用されている倉庫や体育館などの低層建築物は、災害時に避難場所に使用されているため、高い耐震性能を要求される。現在の基準法では、山形鋼の保有耐力を満たすために、作用軸力に直交する全断面積から応力伝達が十分になされていない無効突出脚を除いた断面積を有効断面積と定義している。1)一方、旧基準法では、無効突出脚を含めた有効断面積としており、旧基準を適用した既存建物では、保有耐力を満たさない可能性がある。近年の地震調査報告では、旧基準が適用された建物の被害が多数報告²⁾されていることから早急に耐震補強を実施しなければならない。本研究では、山形鋼の平板部に連結ボルトを設け、補強材を背面に付加する乾式補強方法を提案し、載荷実験を通して補強効果を検証する。

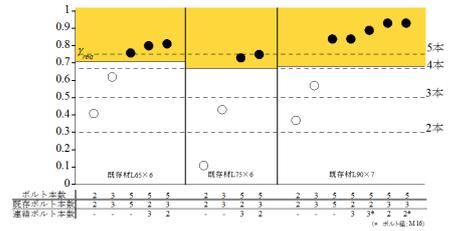
研究成果・効果

本研究で提案する補強概要



本研究で提案する補強方法は、既存ボルト接合部側の背面にスペーサーを介して、補強材を取り付け高力ボルト摩擦接合する。本手法の特徴は、既存ボルトを取り外さず、室内時の施工の際に火気の使用による火災の危険性を回避でき、施工品質の確保が可能となる。

載荷実験による検証結果



補強材を背面に取り付けることにより耐力が上昇し、補強効果が得られる。補強を施すことで、突出脚有効率は上昇し、保有耐力接合を満たしている。

一般研究B(2019年度)

ハフニア系セラミックスを用いた耐環境性セラミックスコーティング材料に関する研究

研究代表者：篠田 豊(宇部工業高等専門学校 機械工学科)
共同研究対応教員：氏名 若井 史博

研究目的

高温下に於いてジルコニア(ZrO_2)より安定なハフニア(HfO_2)ならびにハフニアケイ酸塩($HfSiO_4$)に注目し、とりわけ酸素イオンの拡散を抑えることができるハフノン($HfSiO_4$)を用いた耐環境性コーティングの設計についての知見を得るために、 $HfSiO_4$ にSiCを添加した $HfSiO_4$ -SiC複合材料を作製し、微細組織、力学特性を明らかにすることを目的とする。

研究成果・効果

$HfSiO_4$ -SiC複合材料の微細組織

微細結晶粒 $HfSiO_4$ を30vol%のSiCナノ粉末と混合して放電プラズマ焼結により1600°C、100MPaの条件で、緻密な2相組織を有する $HfSiO_4$ -SiCセラミックスを作製した。微細な $HfSiO_4$ 粒子の集合した巨大な $HfSiO_4$ 相をSiC相が取り囲む組織を示した。 HfO_2 をケイ酸塩化し、SiCをマトリックスとすることで酸素拡散が効果的に抑えられ、熱力学的にも安定なため、耐環境性コーティング材料として有望であると考えられる。

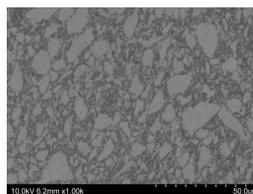


Fig.1 SEM images of $HfSiO_4$ -30vol%SiC

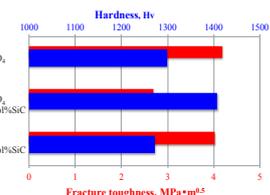


Fig.2 Hardness and fracture toughness of $HfSiO_4$ ceramics and composite.

力学特性評価

ピッカース試験の結果、 $HfSiO_4$ にSiCを添加することで耐摩耗性が著しく向上したが、韌性の低下が見られた。 $HfSiO_4$ 相粗大であるため、SiCとの間の熱膨張係数差に起因する残留応力が関与しているものと考えられる。

一般研究B(2019年度)

「風外力に対する鉛プラグ入り積層ゴム支承の復元力特性に関する研究」

研究代表者：白山 敦子(大阪工業大学)

共同研究対応教員：佐藤 大樹

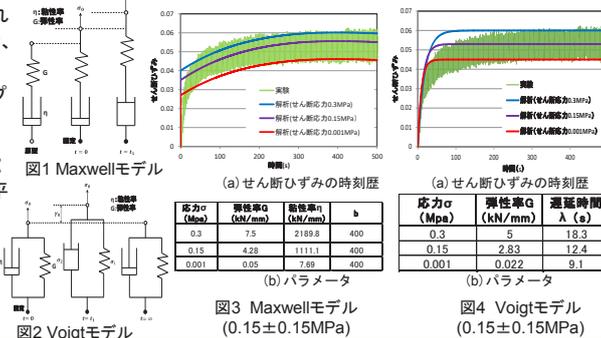
一 研究目的 一

近年、超高層建物に免震装置を設置する事例が増えている。建物の高層化に伴い、免震装置設計時の荷重は、地震荷重と風荷重が拮抗し、耐震性能のみならず耐風性能に関する検討も必要である。さらに、鉛プラグ入り積層ゴム支承は、減衰特性を持つため、クリープ特性を示し、風荷重時には時間と共に変形が増大し、残留ひずみが生じる。本研究では、鉛プラグ入り積層ゴム支承に着目し、クリープ特性を考慮した風外力に対する復元力モデルを提案し、解析結果と実験結果を比較・検討することで解析モデルの妥当性を検証し、設計時の指標となるデータを提供することを目的とする。

一 研究成果・効果 一

解析モデルは、図1に示すような、バネとダッシュポットが直列に組み合わせられているMaxwellモデルと、図2に示すような、バネとダッシュポットが並列に組み合わせられているVoigtモデルとし、一定応力を与えることで、クリープ特性を表現する。

鉛プラグ入り積層ゴム支承(ゴム外径225mm、プラグ径45mm、ゴム層厚1.8mm×25層)のせん断応力が 0.15 ± 0.15 MPa時における解析結果と実験結果の比較を図3、図4に、あわせて設定したパラメータ値をそれぞれ示す。なお、実験結果は水平繰り返し載荷試験である。これらの図より、どちらのモデルにおいても、おおむね一致していることが分かる。今後、大きさの異なる鉛プラグ入り積層ゴム支承を用いて、解析モデルの妥当性を検証する必要があると考えられる。



一般研究B(2019年度)

「キノイド型縮環オリゴシロールを用いた単分子電子デバイスの開発」

研究代表者：新谷 亮(大阪大学 大学院 基礎工学研究科)

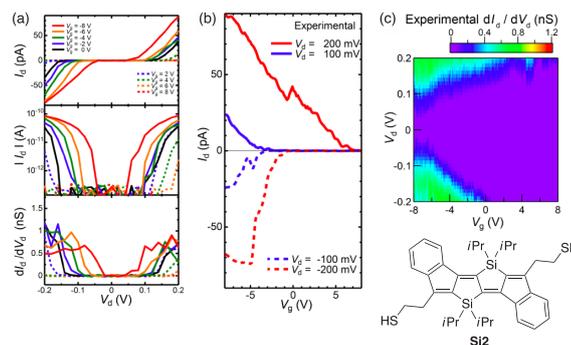
共同研究対応教員：真島 豊

一 研究目的 一

単分子デバイスは、その小さなサイズと低い消費電力からナノテクノロジーを支える次世代の電子デバイスとして期待されており、空気下帯電状態で再現よく動作するデバイスの構築のためには、安定性に優れた π 共役有機化合物の開発・利用が必要である。本共同研究では、代表者が最近開発した新しい有機合成手法によって精密に構造制御された新規 π 共役化合物を用いた単分子電子デバイスを作製し、その半導体特性の発現と機能の向上を目的とする。

一 研究成果・効果 一

デバイス作製に用いる化合物として、今年度は特にケイ素架橋 π 共役化合物Si2を中心に検討し、その両端にアルカンチオール部位を持たせてヘテロエピタキシャル球状無電解金めっき白金ナノギャップ電極に固定化した。その結果、作製したデバイスが9 Kにおいて単分子単電子トランジスタとして再現よく動作することを確認し、 I_d - V_g 特性におけるゲート電圧依存性と、高いon/off比を観測した。得られた (a) I_d - V_g 特性、(b) dI_d/dV_g 特性、および (c) 安定性ダイアグラムから、本デバイスはSi2がAu-S結合を介してソース電極側に化学吸着した構造を持っていることが強く示唆され、 ~ 1 nmスケールの単分子単電子トランジスタとして有望なシステムであることを見出した。



発表論文：Single-Molecule Single-Electron Transistor (SM-SET) based on π -Conjugated Quinoidal-Fused Oligosilole and Heteroepitaxial Spherical Au/Pt Nanogap Electrodes. Lee, S. J.; Kim, J.; Tsuda, T.; Takano, R.; Shintani, R.; Nozaki, K.; Majima, Y. *Appl. Phys. Express* **2019**, *12*, 125007.

一般研究B(2019年度)

「ペロブスカイト型酸化物蛍光体Pr添加CaSrTiO₃薄膜の紫外線侵入長の実験的検討」

研究代表者：高島 浩(国立研究開発法人産業技術総合研究所)

共同研究対応教員：伊藤 満

— 研究目的 —

紫外線励起による蛍光は、太陽電池の効率を向上させる波長変換デバイスやセキュリティとして紙幣やパスポートにも広く利用されていることが知られている。今回、セキュリティとして利用される蛍光体の長期耐久性、環境負荷低減、希少金属の利用料低減に着目し、励起光として用いる紫外線が、薄膜中に侵入する深さを蛍光体薄膜の膜厚をパラメータとして各膜厚の強度を調べ、その相関について実験的に検証を行った。紫外線の侵入限界を調べることで、紫外線強度を固定した際、最強の蛍光強度を得るための膜厚が決定される。この結果、膜厚の最大が決定されるため蛍光体の発光中心に用いている希少金属の利用料低減に資する。

— 研究成果・効果 —

薄膜はパルスレーザー堆積法(PLD)によって作製した。膜厚は約50, 100, 200, 500 nmである。XRDおよびRHEEDによって(001)方位に配向したエピタキシャル薄膜であることを確認した。X線のスキャンにより90° 毎のピークを確認し面内配向を確認し結晶性に優れた単結晶の薄膜であることが分かった。両面研磨SrTiO₃(001)単結晶基板を用いて透過率を調べた。その結果、透過率は波長550nm で約70%であることを確認した。図は、一定強度の紫外光 ($\lambda_{ex} = 300 \text{ nm}$) の照射によって生じた赤色PL ($\lambda_m = 613 \text{ nm}$) の強度の膜厚依存性を示す。この発光は、主に価電子(O 2p)-伝導帯(Ti 3d)励起からのエネルギー伝達によるPr³⁺イオンの¹D₂-³H₄遷移が起源である。PL強度は50-200 nmの範囲では膜厚が増加するにつれて増加し、200 nmを超える膜厚で飽和した。この実験結果とBox-Lucas方程式を用いた解析とを併せ、PCSTOへの紫外光侵入長は約200 nmと決定することができた。この手法は、母体のバンド間遷移がPLを引き起こす薄膜型蛍光体に適用可能であり、蛍光体薄膜を用いたデバイス開発の薄型化、省資源化に有用である。

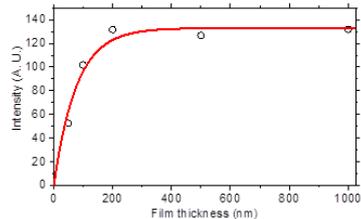


Fig 1. Thickness dependence of the photoluminescence-peak intensity for the Pr-doped CSTO films

Ceram. Int. 45, 21011 (2019)

一般研究B(2019年度)

「鉄筋とコンクリートの付着特性がダウエル効果に及ぼす影響」

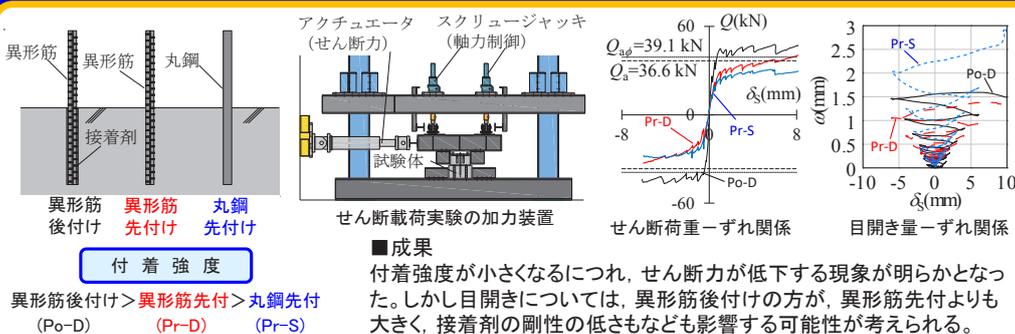
研究代表者：高瀬 裕也(室蘭工業大学)

共同研究対応教員：西村 康志郎

— 研究目的 —

アンカー筋の付着特性が鉄筋のダウエル効果に及ぼす影響については、十分に明らかにされていない。そこで、本研究では、アンカー筋の定着方法を、①異形筋後付け、②異形筋先付、③丸鋼先付の3種類に設定して、付着実験およびせん断荷重実験を実施し、付着強度の違いによって、せん断力や目開き量に、どのような違いが生じるか把握することを目的とする。

— 研究成果・効果 —



菊地成美, 松永健也, 窪田凌平, 高瀬裕也; 付着特性の違いと多数回繰り返しせん断荷重がアンカー筋の力学挙動に及ぼす影響, コンクリート工学年次論文集, 2020年(採用決定)

一般研究B(2019年度)

「メタン選択酸化反応用触媒の開発」

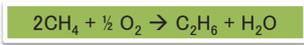
研究代表者：高鍋和広(東京大学大学院工学系研究科)
 共同研究対応教員：鎌田慶吾

研究目的

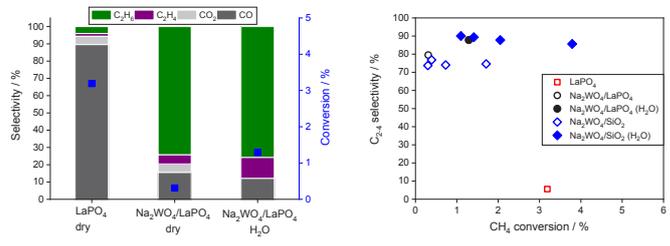
化学的に安定なメタンを転換する反応には、一般的に高温で安定な触媒が必要となる。メタンが有する4つの炭素—水素の結合のうち一つのみを選択的に酸化的解離する反応が可能になると、様々な有用な生成物の直接合成が可能になる。そのような高温で安定で高い表面積をもち、高い選択性を有する触媒の開発を本研究の目的とする。メタンからメタノールなどの含酸素化合物や、エチレンなどのC₂以上の炭化水素の生成を目指す。

研究成果・効果

高比表面積なLaPO₄を触媒および触媒担体として高温メタン酸化カップリング反応に適用



Na₂WO₄を活性点とする、新規触媒担体として機能できることを見出した。
 メタンからのC₂選択率は約90%と高選択性を達成した。



研究室URL: <https://www.catec.t.u-tokyo.ac.jp>

一般研究B(2019年度)

「負熱膨張材料の微粒子化」

研究代表者：竹中康司(名古屋大学)
 共同研究対応教員：東正樹

研究目的

研究代表者の発見した巨大負熱膨張を示すマンガン窒化物をサブミクロンの微粒子にして、電子デバイスをはじめ、産業の広い分野に存在する局所領域の熱膨張制御の強い要望に応える。X線構造解析や電子顕微鏡観察等により、微粒子化による特性変化の起源を明らかにする。とりわけ、粉碎による構造欠陥の導入に着目し、粉碎後、低温・短時間のアニールを施すことが、構造ならびに負熱膨張特性に与える影響を調べる。

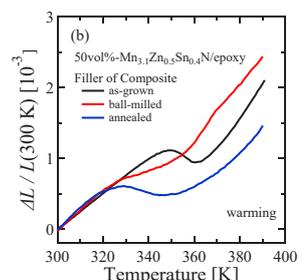
研究成果・効果

微粒子化にともなう特性変化の起源

- ・粉碎の際に導入される構造歪の影響
 高分解能電子顕微鏡による観察
- ・粉碎後の低温・短時間アニール
 導入された構造ひずみが解消され、負熱膨張特性も回復

サブミクロンの負熱膨張性微粒子

- ・粒径を変えずに、構造と機能の劣化を回復
- ・サブミクロンで機能する負熱膨張性マンガン窒化物を実現



50vol%-Mn_{3.1}Zn_{0.5}Sn_{0.4}N/エポキシ樹脂複合材料の熱膨張。As-grown, ボールミル粉碎, 粉碎後アニール, 3種のフィラーの比較。

成果の口頭発表:

尾関将樹, 岡本佳比古, 片山尚幸, 竹中康司, 酒井雄樹, 東正樹, 塚崎裕文, 森茂生, 日本物理学会2019年秋季大会11aPS-76, 2019年9月(岐阜大学)
 尾関将樹, 岡本佳比古, 片山尚幸, 竹中康司, 酒井雄樹, 東正樹, 塚崎裕文, 森茂生, 日本物理学会第75回年次大会18pPSA-72, 2020年3月(名古屋大学)

一般研究B(2019年度)

「セラミックス配向成形体の焼結時における構造変化に関する研究」

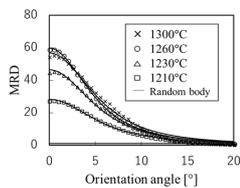
研究代表者：田中 諭(長岡技術科学大学)
共同研究対応教員：若井 史博

— 研究目的 —

結晶配向成形体の焼結時の配向構造発達を、初期から終期までの微構造発達および配向評価から、その機構を明らかにする。

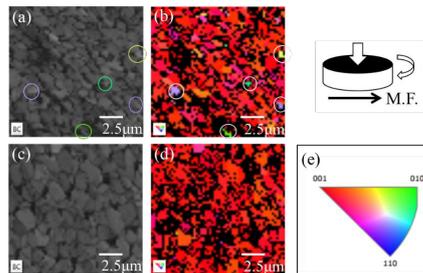
— 研究成果・効果 —

C軸配向 $(\text{Sr,Ca})_2\text{NaNb}_5\text{O}_{15}$ 焼結時に異方的な粒成長が知られる



焼結とともにc軸方向の配向性が上昇

焼結時の微構造をEBSDで評価



配向していない微細な結晶が粒成長とともに消滅

配向性と緻密化に寄与

焼結時の配向性向上を利用した微構造制御

発表論文・関連論文・S. Baba, A. Maître, N. Pradeilles, G. Antou, S. Tanaka, "Graded evolution of anisotropic microstructure during sintering from crystal oriented powder compact", Int. Journal. Ceramic Technology, 2020, 17, 2, 677-684. <https://doi.org/10.1111/ijac.13360>

一般研究B(2019年度)

「アンボンドプレストレストコンクリート部材の曲げおよびせん断性状のモデル化の精度向上」

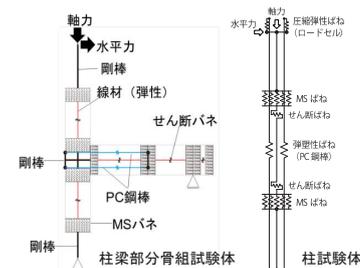
研究代表者：谷昌典(京都大学)
共同研究対応教員：河野進

— 研究目的 —

プレストレストコンクリート(以下、PC)構造は、その高い復元性や損傷制御性から地震後の継続使用性に優れた構造であり、特に、PC鋼材をアンボンドとすることで、PC鋼材の危険断面付近へのひずみ集中が抑えられ、より高い復元性を与えることが可能となる。本研究は、Multi-spring要素などの材端バネモデルや有限要素法を用いた数値解析に基づいて、アンボンドPC部材の耐力および変形性能の評価精度向上を目指し、構造性能評価に関する知見を収集することを主な目的とする。

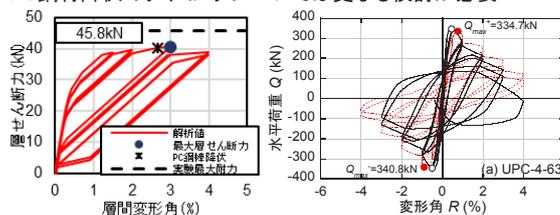
— 研究成果・効果 —

・MSばねを用いたモデル化



・解析結果

履歴性状やPC鋼材降伏の予測精度について検討を実施
→ 全体の包絡線は良好な精度で予測できたが、残留変形やPC鋼材降伏のタイミングについては更なる検討が必要



発表論文・関連論文・谷昌典ほか、高圧縮力を受けるPcCaPC圧着柱の力学性状と性能評価、第28回プレストレストコンクリートの発展に関するシンポジウム論文集、pp.215-220、2019.11

一般研究B(2019年度)

「充填ゼオライトにおける新規誘電性・弾性・熱機能性の創出」

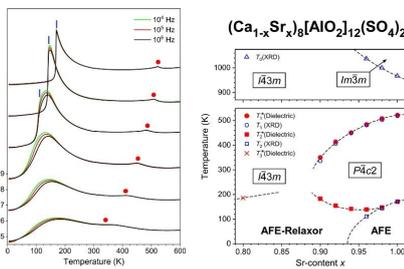
研究代表者：谷口博基(名古屋大学大学院理学研究科)
共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

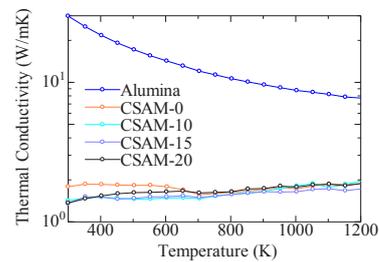
地殻に豊富に存在する高クラーク数元素の酸化物(ユビキタス酸化物)に着目し、新たな機能性材料の開発に取り組む。特に本研究では申請者のこれまでの成果に基づいて充填ゼオライト型酸化物に着目し、新しい誘電機能性、弾性機能性、熱機能性を備えた新規物質系の探索を実施する。本研究の成果によって、優れた機能性と高い環境親和性を共に備えた革新的な酸化物誘電体材料の創出が見込まれる。

— 研究成果・効果 —

(Ca_{1-x}Sr_x)₈[AlO₂]₁₂(SO₄)₂ (0.8 ≤ x) の物性相図
～ 反強誘電性-反強誘電性リラクサー転移 ～



(Ca_{1-x}Sr_x)₈[AlO₂]₁₂(MoO₄)₂ (x ≤ 0.2) の熱伝導率
～ 室温から1000°Cで約1W/mKの低熱伝導率 ～



発表論文・関連論文：Antiferroelectric to Antiferroelectric-Relaxor Phase Transition in Calcium Strontium Sulfoaluminate, T. Wakamatsu, G. Kawamura, T. Abe, Y. Nakahira, S. Kawaguchi, C. Moriyoshi, Y. Kuroiwa, I. Terasaki, and H. Taniguchi Inorg. Chem. 58 (2019) 15410-15416.

一般研究B(2019年度)

「規則合金薄膜におけるスピン緩和異常の機構解明」

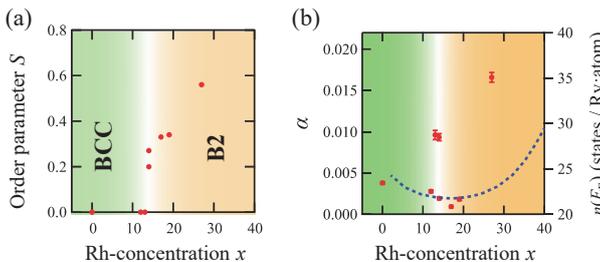
研究代表者：谷山智康(名古屋大学大学院理学研究科)
共同研究対応教員：伊藤満

— 研究目的 —

強磁性スピン波を情報伝送に利用することを目指した研究が国内外において精力的に進められている。スピン波を情報伝送媒体に利用するためには、スピン緩和の小さな強磁性材料の開発が必須となる。本研究では、低緩和スピン波材料としてFeRh規則合金に着目し、FeRh規則合金におけるスピン緩和を系統的に調査することで、FeRh規則合金におけるスピン緩和の機構解明を目的とした。

— 研究成果・効果 —

B2規則合金FeRh薄膜に対して、種々のRh組成を持つ合金薄膜試料を製し、B2規則度Sを評価した結果、x=15以下の組成領域で、bcc構造を示すのに対して、x=15以上の領域でB2規則構造が発現することがわかった。また、強磁性共鳴によりギルバートダンピング定数αを評価した結果、x=20までのRh組成領域では、αがxと共に減少し、α=9×10⁻⁴の極めて小さな値を示すことが見出された。この結果は、Kamberskyモデルにより定性的に理解され、FeRh合金がスピン波材料として有望であることを示している。



(a) Fe_{100-x}Rh_xエピタキシャル薄膜のB2規則度Sと(b)ギルバートダンピング定数αのRh組成依存性

発表論文・関連論文：T. Usami, M. Itoh, and T. Taniyama, Appl. Phys. Lett. 115, 142403 (2019).

一般研究B(2019年度)

「超高速充放電二次電池に向けた強誘電体—活物質ナノ積層正極膜の開発」

研究代表者：寺西貴志(岡山大学)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

強誘電体BaTiO₃ (BTO)を人工的な固体電解質界面(SEI)として、活物質LiCoO₂(LCO)上にPLD法により積層させた二次元正極膜を作製し、リチウムイオン電池の出力特性を大幅に改善させた。これまで、誘電体—活物質—電解質の三相界面近傍において活性なLi移動パスが形成されることが分かっている。本年度は、誘電体界面が寄与する電池素反応を明らかにするとともに、詳細なLi移動経路を特定することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

担持させる誘電体SEIと電解液溶媒の誘電率を変化させて急速充放電試験を行った(図1)。溶媒にEC($\epsilon_r=90$)を用いた場合、比誘電率の増加に伴いレート特性は単調に改善した。一方、DMC($\epsilon_r=3.1$)においては、誘電体界面の誘電率増大に伴い出力特性は悪化した。つまり、誘電体SEIと電解液溶媒の誘電率が同程度の時、最も界面電荷移動抵抗が低下することを示唆するものであった。

LCO(104)とBTO(001)表面でのEC-Li溶媒とイオンの吸着、脱溶媒とエネルギーをDFT-MDにより計算した(図2)。BTO表面ではLCOに比べ溶媒とイオンの吸着エネルギーが遥かに低く、BTO上でより優先的に吸着しやすいことが分かる。加えて吸着後の脱溶媒とエネルギーもBTO上の方が低く、脱溶媒と反応も進行しやすいことを確認した。

これまでに得られた実験事実からLiイオンの推定経路を以下に示す。誘電体SEIと電解液誘電率が近い際に、①溶媒とイオンが誘電体の表面に吸着、脱溶媒を起こす。②誘電体表面を拡散、③三相界面から活物質にインターカレーションすると考えた。

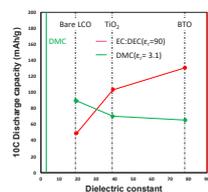


図1 各種誘電体SEIと電解液の組み合わせにおける10C電池容量

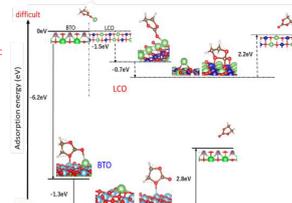


図2 電荷移動過程におけるエネルギーダイアグラム

発表論文・関連論文：[1] T. Teranishi et al., *Appl. Phys. Lett.* **105**, 143904 (2014), [2] T. Teranishi, S. Yasuhara, S. Yasui, M. Itoh et al., *Adv. Electron. Mater.* **4**, 1700413 (2018), [3] S. Yasuhara, S. Yasui, T. Teranishi, M. Itoh et al., *Nano Lett.* **19**, 1888 (2019), 2019.3.6東工大・岡山共同プレスリリース <https://www.litech.ac.jp/news/2019/043711.html>

一般研究B(2019年度)

「室温駆動単電子トランジスタの開発」

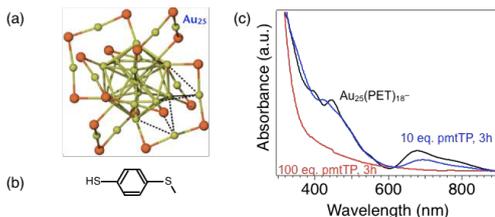
研究代表者：寺西利治(京都大学)

共同研究対応教員：真島豊

— 研究目的 —

本研究では、単電子トンネル素子の電圧印加による室温トランジスタ動作を目指し、寺西研究室において導電性の高い(トンネル抵抗の低い)種々の有機配位子を合成し、これらの配位子で表面修飾した熱力学的に安定なAu原子25個からなるAu₂₅クラスターを合成する。次に、Au₂₅クラスターを上記ナノギャップ電極間に化学結合により配置することにより、Au₂₅クラスターをクーロン島とした単電子トランジスタを作製し、常温動作単電子トランジスタを実現する。

— 研究成果・効果 —



Au₂₅クラスター(a)をナノギャップ電極へ化学結合した際のトンネル抵抗を下げるため、架橋配位子となるベンゼンジチオールと化学状態に近いp-(メチルチオ)チオフェノール(b)とAu₂₅クラスターとの配位子交換反応について検討した。その結果、10当量のp-(メチルチオ)チオフェノールを用い3時間配位子交換すると、Au₂₅コアを維持したまま全ての配位子が交換されることが分かった。これをナノギャップ電極へ化学結合することにより、室温駆動単電子トランジスタの創製が期待される。

学会発表：J. Kim, S. Lee, M. Sakamoto, T. Teranishi, and Y. Majima, "Single-Electron Transistor based on Au₂₅ Nanocluster", 第80回応用物理学会秋季学術講演会, AP1-23.

一般研究B(2019年度)

「バイオマス変換用担持金属触媒の構造解析」

研究代表者：中島 清隆(北海道大学 触媒科学研究所)
共同研究対応教員：鎌田 慶吾

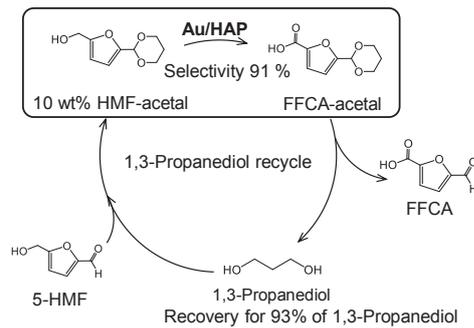
— 研究目的 —

両性または塩基性酸化担体を使用した担持Au触媒を合成し、酸素加圧下(0.5 MPa)にて2等量のNa₂CO₃を含む10 wt%の高濃度HMFアセタール水溶液からのホルミルフランカルボン酸の選択合成を検討した。具体的には両性または塩基性酸化担体を担体として活用し、その触媒作用を検討する。高活性な触媒に関してXPSを利用して構造解析を進め、活性-構造相関を考察した。

— 研究成果・効果 —

Au/HAPを用いて、高濃度(10 wt%)HMFアセタールを酸化すると、6時間の反応でFFCAアセタールが収率85%、選択率91%で得られた。また、希硫酸を溶離液として利用したHPLCにて反応後の溶液を分析することにより、保護基として利用した1,3-プロパンジオールを93%で回収した。よって、高濃度HMFアセタール水溶液から選択的にFFCAアセタールを合成し、課題であった保護材として利用した1,3-プロパンジオールの回収率を向上できた。

更なる検討により、FFCAアセタールを経由して“1,3-プロパンジオールのリサイクル”をベースとしたFDCA製造プロセスの構築を目指す。



一般研究B(2019年度)

「直径30nmの微小ドット内の磁壁の反強磁性結合を利用したアナログ磁化反転の研究」

研究代表者：永沼 博(東北大学)
共同研究対応教員：安井 伸太郎

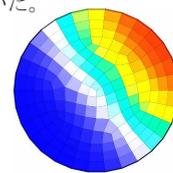
— 研究目的 —

マイクロマグネティクスシミュレーションにより反強磁性交換結合を有する磁性ドットの磁化反転挙動を計算し、実際に試料を作製して実証する

— 研究成果・効果 —

磁気計算には富士通社製のExamagを用い、試料はr.f.マグネトロンスパッタを用いた。

マイクロマグネティクスシミュレーションの結果、適切な設計サイズにすると反強磁性体と磁性ドットを接することにより磁区の大きさを制御できることがわかった。r.f.マグネトロンスパッタにより作製した試料の構造解析を行ったところ、磁性ドットのCoFe層はfccのテクスチャー構造として成長していることがわかった。反強磁性体と強磁性体ドメインが界面を形成すると反強磁性体ドメインの大きさが強磁性体ドメインの大きさに影響を与えていた。また、ドメインサイズは反強磁性体および強磁性体の膜厚およびドットサイズによることがわかった。この結果は反強磁性交換結合がドメインサイズの制御に利用できることを示しており、微小磁性ドットにおけるアナログ磁化反転の実現に寄与することが示唆された。



直径30 nmの磁性ドットのマイクロマグネティクスシミュレーションによるZ方向の磁化分布

シミュレーションに関する発表:

永沼 博、佐藤 英夫、池田 庄司、造藤 哲郎 第67回応用物理学会春季講演会 上智大学 2020年3月14日

講演番号 [14p-PA1-46] Estimation of switching energy barrier by String method assuming side-wall damage in perpendicular magnetized magnetic tunnel junctions

一般研究B (2019年度)

「有機分子修飾した高融点合金ナノ粒子を単電子島とする室温動作単電子デバイスの実現」

研究代表者：中村貴宏(東北大学多元物質科学研究所)
 共同研究対応教員：真島 豊

一 研究目的

本研究では、有機分子修飾した高融点金属ナノ粒子を単電子島とした単電子トランジスタを作製し、同デバイスの室温動作を実現することを目的に研究を行う。申請者独自の手法であるレーザー誘起核生成法により高融点金属あるいはその合金ナノ粒子を作製する。作製したナノ粒子に対して相関移動法により有機分子修飾を施し、それを単電子島として用いる。単電子トランジスタの室温動作のための要因をナノ粒子の物性の観点から検討し、単電子トランジスタの温度に伴う構造揺らぎと動作特性との関係について明らかにする。

一 研究成果・効果

全率固溶合金ナノ粒子の表面修飾

レーザー誘起核生成法により作製した合金ナノ粒子に対して相関移動法を適用することで、表面がアルカンチオール修飾された全率固溶合金ナノ粒子の作製に成功した (Fig. 1).

合金ナノ粒子の熱安定性評価

金ナノ粒子は電子線照射によってアルカンチオールが分解された直後に融合・溶融するが、高融点の白金との合金ナノ粒子は長時間の電子線照射によってもその形態が変化せず熱安定性の向上が示唆された (Fig. 2).

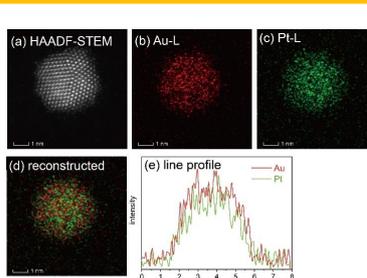


Fig. 1 STEM-EDS mapping for the Au20Pt80 NP. (a) HAADF-STEM, (b) Au and (c) Pt mappings, (d) reconstructed image, and (e) EDS line profile of Au and Pt of the Au20Pt80 NP (d).

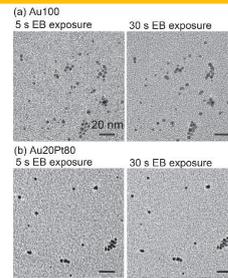


Fig. 2 TEM images of Au100 and Au20Pt80 alloy NPs after 5 and 30 sec electron beam (EB) exposure.

発表論文, M. S. I. Sarker, T. Nakamura et al., RSC Advances, 9, 38882-38890 (2019). 他4件
 学会発表, R. Kuroda, T. Nakamura et al., The 13th Pacific Conference of Ceramics Societies 他3件

一般研究B (2019年度)

「鉄筋コンクリート部材データベースによる構造設計式の検討」

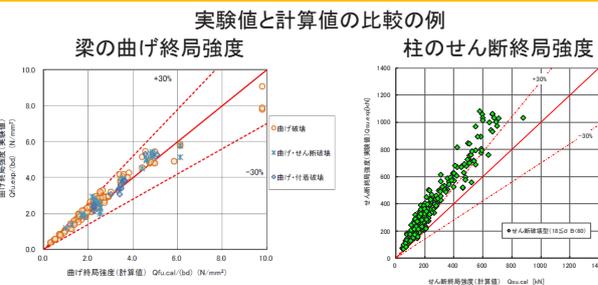
研究代表者：中村孝也(新潟大学 工学部)
 共同研究対応教員：西村康志郎

一 研究目的

鉄筋コンクリート(RC)建物の構造設計においては、過去の研究に基づいて整備された部材の設計式を用いることがおこなわれている。ただし、梁、柱、耐震壁などの個々の部材に対して、それら設計式の信頼性は概ね認められているものの、近年実施された実験結果は反映されていない。そこで、近年実施されたRC梁・柱部材の実験結果を収集・整理し、設計式に当てはめることで式の有用性を確認する。

一 研究成果・効果

1976年から2017年に発表されたRC部材の実験結果を取りまとめたデータベースを作成した。次に、部材の曲げ終局強度、せん断終局強度などを求める設計式を用いて、データベースで整理したそれぞれの部材に対する値を算定した。これらの計算値と実験結果として得られた実際の値とを比較検討することで、設計式の信頼性を確認した。



→ 現行の耐震設計で使用されている評価式は設計式として十分な精度を有していることが確認できた。

関連文献: 国立研究開発法人 建築研究所 建築研究資料 実験データベースを用いた鉄筋コンクリート造部材の構造特性評価式の検証 (2020年版), 2020年3月

一般研究B(2019年度)

「研究ナノ多結晶ダイヤモンド、ナノ多結晶立方晶窒化ホウ素の破壊靱性測定」

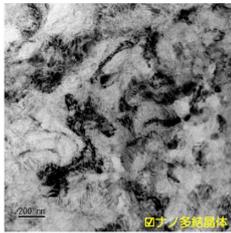
研究代表者：西山宣正(住友電気工業株式会社)
共同研究対応教員：若井史博

研究目的

ダイヤモンドは全物質中最も硬い物質であり、立方晶窒化ホウ素はそれに次ぐ硬さを持つ超硬物質である。ナノ多結晶ダイヤモンドおよびナノ多結晶立方晶窒化ホウ素は単結晶をしのぐ硬さを有し、さらにそれらの破壊靱性値は $10 \text{ MPa m}^{1/2}$ を超え、とても割れにくい物質であることが近年報告されている。本研究では、これらの物質の曲げ試験を実施し、それらの高靱化機構を明らかにすることを目指す。

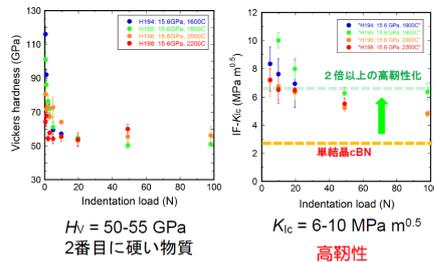
研究成果・効果

住友電工の大型超高压プレスを用いて、ナノ多結晶窒化ホウ素の合成に取り組んだ。硬さ(~50 GPa)、破壊靱性(8-10 $\text{MPa m}^{1/2}$)、直径10mm、厚み3mmの試料作製に成功。これを $2 \times 2 \times 10 \text{ mm}$ の四角柱の試験片に加工した。



ナノ多結晶
立方晶窒化ホウ素
のTEM写真

ノッチ加工の後、
曲げ試験に取り組む



一般研究B(2019年度)

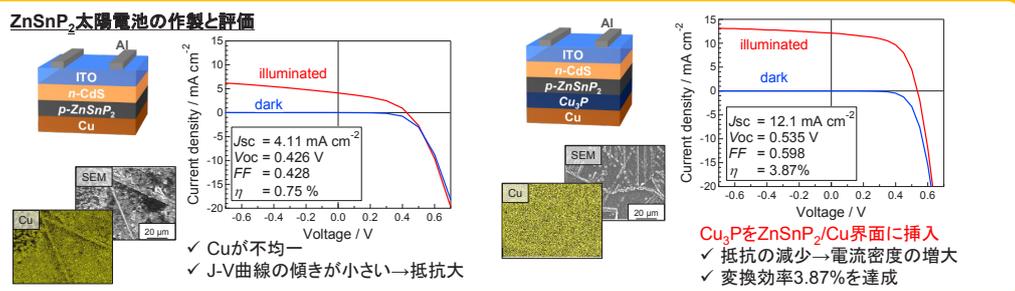
「実験と理論計算との融合によるリン化物半導体太陽電池の高効率化に関する研究」

研究代表者：野瀬嘉太郎(京都大学大学院工学研究科)
共同研究対応教員：大場史康

研究目的

当研究グループでは、これまでにユビキタス元素から構成されるリン化物半導体を用いた太陽電池に関する研究を遂行し、世界で初めて発電に成功した。一方で、実用化にはさらなるエネルギー変換効率の向上が求められる。そこで本研究では、二元系、三元系のリン化物半導体を用いた太陽電池に関してデバイスにおける各種ヘテロ接合界面に関する研究を遂行し、得られた界面構造および物性と理論計算の結果とをつき合わせて高効率化への指針を得ることを目的とする。

研究成果・効果



発表論文・受賞:
R. Kuwano, R. Katsube, Y. Nose, "Improvement of Ohmic Behavior of Back Contact in ZnSnP₂ Solar Cells by Inserting Cu₃P", Proc. IEEE 46th Photovoltaic Specialist Conference, (2019), 3007-3009.
桑野太郎, 第46回応用物理学会講演奨励賞(2019年9月)

一般研究B(2019年度)

「酸水素化物中の点欠陥の安定性と評価」

研究代表者：林 克郎 (九州大学)
共同研究対応教員：大場 史康

研究目的

水素化金属を用いた酸化物の還元手法(固相還元法)が、特殊な価数状態のカチオン種や結合を有する新規化合物や、Hを含む新規酸水素化物の合成手法として注目されている。本研究では、Yドーピングによってあらかじめ酸素空孔を生成させたBaSnO₃系およびBaCeO₃系単純ペロブスカイトに着目し、本母物質に固相還元法を適用し、Hの導入や酸素空孔の生成、Sn⁴⁺からSn²⁺への価数変化、Ce³⁺の生成など局所的な欠陥生成とその効果、結晶対称性、構造変化について調査した。

研究成果・効果



Fig. 1 Appearance of CaH₂-reduced BaSn_{0.7}Y_{0.3}O_{2.85} samples.

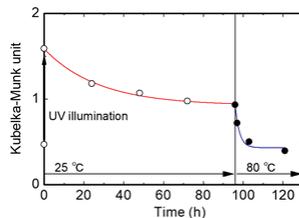


Fig. 2 Decay of the absorption band centered at 2.6 eV in a CaH₂-reduced BaCe_{0.8}Y_{0.2}O_{2.9} sample.

BaSn_{1-x}Y_xO_{3-x/2} (x = 0.1, 0.3)に固相還元法を適用すると、立方結晶ペロブスカイト構造を維持したまま、黄色～茶色に至る強い着色を発生する。この際、結晶にH-イオンが導入され、またSn²⁺が生成し、これがcis配置された酸素空孔対によって安定化されていることが、メスバウアー測定とDFT計算による解析から明らかとなった。着色は、安定化されたSn²⁺の5s電子の孤立電子対による。

固相還元されたBaCe_{1-x}Y_xO_{3-x/2} (x = 0.2)では、Ce³⁺の生成と、紫外照射による2.6 eV吸収帯の生成とその消失が観測された。

発表論文・関連論文：

K. Hayashi, H. Watanabe, H. Akamatsu, G. Hasegawa, Defect Chemistry of Metal Hydride Agent-Reduced Simple Perovskites, The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13) Oct. 27, 2019 - Nov. 1, 2019 at Okinawa Convention Center, Japan.

一般研究B(2019年度)

「損傷を抑制するための鉄筋コンクリート造壁付き梁部材の端部領域設計手法の確立に関する研究」

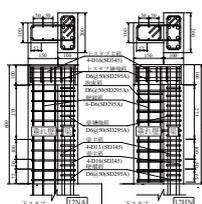
研究代表者：日比野 陽(広島大学)
共同研究対応教員：河野 進

研究目的

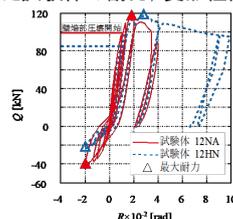
二次壁と主体架構の接合部における壁縦筋の定着を除去し、壁の圧縮領域に拘束筋を配筋した部材において、優れた靱性能を発揮することが明らかになっている。本研究では、鉄筋コンクリート造壁付き梁部材の壁端部の拘束筋が構造性能に与える影響を把握することを目的とし、壁縦筋の定着を除去し拘束筋を配置した試験体の構造実験を行った。

研究成果・効果

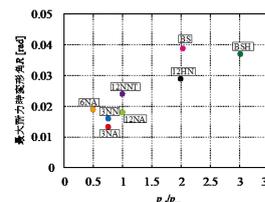
壁縦筋の定着を除去し拘束筋を配置した試験体の耐力、変形性能を調査



壁付き梁部材の壁端部を模擬した試験体



拘束筋を配筋し、定着を除去した試験体で高い耐力と靱性を発揮した。



壁縦筋比よりも壁横筋比pshを大きくすることで、最大耐力時の変形角が大きくなり、靱性が向上する。

発表論文：田中宏城, 日比野陽:壁筋の定着および端部拘束筋が壁付き梁部材の構造性能に及ぼす影響, 日本建築学会中国支部研究報告集, Vol.43, pp.141-143, 2020.3

一般研究B(2019年度)

「Ba(Ti,Zr)TiO₃誘電体に関する研究」

研究代表者：符 徳勝（静岡大学工学部電子物質科学科）
 共同研究対応教員：伊藤 満

— 研究目的 —

医療イメージングをはじめとするPZT圧電セラミックスの応用は様々な分野に広がっている。一方で環境問題の視点から非鉛系圧電セラミックスの開発は社会の要請である。本研究では、構造制御の視点からBa(Ti,Zr)TiO₃相転移機構の解明を行った。その結果、BaサイトにCaを導入することより、T_cが上昇することや立方晶の強誘電相がより安定になることが判明した。本研究では、Ca置換による(Ba_{1-x}Ca_x)(Ti_{0.5}Zr_{0.5})O₃セラミックスの圧電特性の変化を究明し、鉛フリー圧電体としての材料開発を行った。

— 研究成果・効果 —

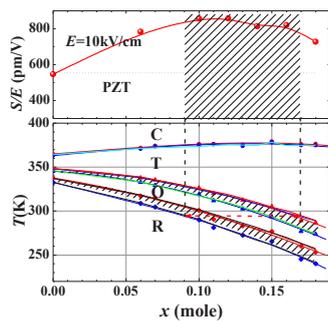


図2. (Ba_{1-x}Ca_x)(Ti_{0.5}Zr_{0.5})O₃セラミックスの電場誘起歪みと組成の関係。比較のため、市販PZT圧電セラミックスの値も示している。下の図は(Ba_{1-x}Ca_x)(Ti_{0.5}Zr_{0.5})O₃の相図を示している。

新たな発見：

- ① x=0.1~0.18組成範囲の試料は800pm/Vを超えた巨大な圧電応答を示す。
- ② それら組成の圧電セラミックスは市販PZT圧電セラミックスの歪み応答を超えた。
- ③ その巨大な圧電応答は室温に現れる菱面体晶-斜方晶、斜方晶-正方晶相境界に由来すると考えられる。
- ④ 巨大な電場誘起歪み応答を示すそれら組成のセラミックスが有望な非鉛系圧電セラミックスであると期待している。

一般研究B(2019年度)

「ルテニウム酸化物における電場誘起電子相転移を利用した抵抗変化素子の開発」

研究代表者：福地厚（北海道大学）
 共同研究対応教員：片瀬貴義

— 研究目的 —

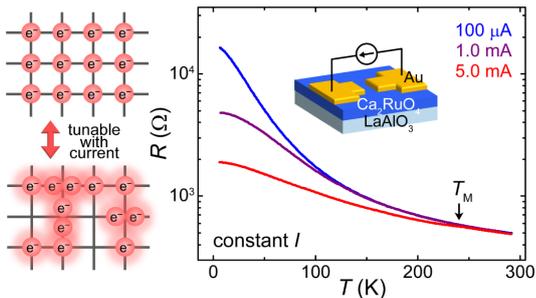
Ca₂RuO₄は、その金属絶縁体転移を電場・電流等の電氣的パラメータによっても誘起可能である事が近年見出され、その物性と電子デバイス応用に大きな注目が集められている物質である。本研究の目的はCa₂RuO₄の良質エピタキシャル薄膜の作製を通じて、電場・電流誘起転移の機構解明を進めるとともに、転移を利用した新たな抵抗変化デバイスの開発を実現させる事である。

— 研究成果・効果 —

非真空プロセスを用いたの薄膜成長によって、膜中のRu欠損を抑えた、Ca₂RuO₄の良質エピタキシャル薄膜の作製に成功した。

作製したCa₂RuO₄/LaAlO₃(001)薄膜ではT≤240 Kの温度範囲において、電流値に依存した連続的な電気抵抗の変化が観測され、Ca₂RuO₄の電流誘起転移のエピタキシャル薄膜における発現が実証された。

一定温度条件における電流-電圧測定では、明瞭な抵抗スイッチング動作が観測されており、その動作電流・動作電圧は従来素子と比べて大幅に高い安定性を持つ事が明らかとなった。



一般研究B(2019年度)

「合金触媒の活性—電子状態に関する研究」

研究代表者：古川 森也(北海道大学触媒科学研究所)
 共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

メチルシクロヘキサン(MCH)—トルエン系に代表される有機ハイドライドは、高い水素含有量、低い毒性、さらには既存石油インフラが使用可能であるといった利点から、水素キャリアとして有望視されている。MCHから水素を取り出すプロセスには現在Pt触媒が用いられているが、社会実装を進めていく上で更なる触媒の改良とそれによるプロセスのコストダウンが求められている。本研究では種々の二元Pt系金属間化合物Pt₃M/SiO₂を用いてMCH脱水素に有効な触媒の探索を行った。また見出された第二金属の一部を第三金属で置換した擬二元系合金触媒も検討し、本反応に高い性能を示す触媒の探索を行った。さらに見出された最適触媒の電子状態をXPSにより明らかにし、活性—電子状態に関する検討を行った。

— 研究成果・効果 —

種々の二元Pt系金属間化合物Pt₃M/SiO₂を用いてMCH脱水素性能を試験したところ、Pt₃FeがPt₃Snを含む従来触媒に比べ高い活性、耐久性を示すことを見出した。さらにFeの一部を種々の第三金属で置換した擬二元系合金触媒を試験した結果、Znを用いたPt₃(Fe_{0.75}Zn_{0.25})/SiO₂が本反応に極めて高い活性(Ptの3倍)、選択性(>99.9%)、耐久性を示すことを見出した。特に耐久性に関しては、400℃という厳しい条件においても大きな活性低下は見られず、また通常の運転温度(320℃)においては少なくとも50 hの間は活性低下が見られず、99%以上の高いMCH転化率を維持することが判明した。



また詳細な反応機構解析をよびDFT計算から、Feは触媒上への炭素質の析出を抑制し、またZnは生成物であるトルエンの脱離を促進することでそれぞれ副反応を抑え、選択性および耐久性の向上に寄与していることが示された。特にZnは、他の金属種とは異なり、合金化によりPtの電子密度を増加させる働きがあることがXPSによる検討から判明した。

電子リッチなPt上では生成物であるトルエンのπ電子との静電反発によりトルエンの脱離が促進され、脱メチル化などの分解反応が抑制されるため選択性が向上し、さらにそれによってコーク析出も抑えられるために耐久性も向上すると考えられる。

発表論文・関連論文：Y. Nakaya, M. Miyazaki, S. Yamazoe, K. Shimizu, S. Furukawa,* ACS Catal., 2020, 10, 5163-5172.
 化学工業日報 「MCH脱水素 低コストで」 2019年11月8日 10面

一般研究B(2019年度)

「モデル触媒としてのペロブスカイト型酸化物薄膜の構造・物性評価」

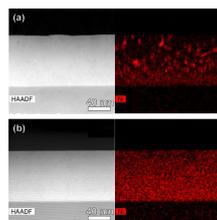
研究代表者：北條 元(九州大学大学院総合理工学研究院)
 共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

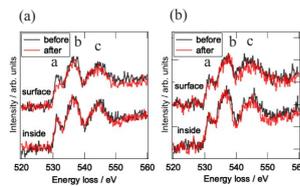
Bサイトが過剰となるようNiを加えて調製したLaMnNi_{0.1}O_{3+δ}は、Ni未添加のLaMnO_{3+δ}と比較し、優れたベンゼン酸化活性を示す。その機構解明のため、モデル表面としてLaMnNi_{0.1}O_{3+δ}薄膜とLaMnO_{3+δ}を製作し、ベンゼン暴露前後での電子状態変化をSTEM-EELSにより調べた。

— 研究成果・効果 —

- 成膜条件を最適化することで、Niが薄膜中に高分散したLaMnNi_{0.1}O_{3+δ}薄膜を得ることに成功した。
- ベンゼン暴露前後の電子状態変化を、モデル表面を用いて観測することに成功(高活性のLaMnNi_{0.1}O_{3+δ}薄膜で変化がみられないことは、格子酸素の反応性向上を示唆)。



酸素分圧5.0 x 10⁻¹ Pa、基板温度 (a) 700度および (b) 500度で作製したLaMnNi_{0.1}O_{3+δ}薄膜の断面HAADF像とEDSによるNiの元素マッピング



(a) LaMnO_{3+δ}薄膜と(b) LaMnNi_{0.1}O_{3+δ}薄膜のベンゼン暴露前後の酸素のK吸収端におけるEELSスペクトル

一般研究B(2019年度)

「開発途上国のレンガ壁を有する鉄筋コンクリート造建築物の耐震診断と改修工法の開発」
 研究代表者：前田匡樹(東北大学大学院工学研究科都市・建築学専攻)
 共同研究対応教員：山田哲

研究目的

開発途上国では経済発展により都市化が進行する一方で、低強度・低品質な建築物が数多く存在し、地震などの災害により甚大な人的・経済的被害が発生するリスクが急激に高まっている。そこで、開発途上国の各国の技術レベル、設計規準・慣行、施工品質、経済や文化的背景に基づいて、日本が誇る耐震診断・耐震改修技術を、改良し、また、新たな技術を開発し、開発途上国の建築及び都市の耐震化に資すること。

研究成果・効果

①レンガ壁を含むRC架構の耐震性能

破壊モードを4タイプに分類した。

① Sliding failure ② Diagonal compression
 ③ Punching and joint ④ Overall flexural

②フェローセメントによる耐震補強

with ferro-cement
 with masonry infill
 Bare RC frame

③簡易診断法 (VR法) の開発

Range	Classes
$0.25 \leq l_{RR}$	A
$0.20 \leq l_{RR} < 0.25$	B
$0.15 \leq l_{RR} < 0.20$	C
$0.10 \leq l_{RR} < 0.15$	D
$l_{RR} < 0.10$	E

発表論文・関連論文：Hamood Alwashali, Yuta Torihata, Kiwoong Jin, Masaki Maeda, "Experimental observations on the in-plane behavior of masonry wall infilled RC frames; focusing on deformation limits and backbone curve", Bulletin of Earthquake Engineering, 2017.10.
 SATREPSプロジェクトURL: <https://www.maedalab-tohoku-u.com/stareps>

一般研究B(2019年度)

「高温・高圧印加による新規非平衡材料の創製とトポロジーに注目した構造評価」

研究代表者：正井博和(産業技術総合研究所)
 共同研究対応教員：東正樹

研究目的

ガラスやゼオライトといった非平衡酸化物材料においては、材料特有のナノサイズの空隙が存在する。このような空隙を有する材料においては、大気圧よりもはるかに高い圧力を印加することにより、熱力学的に準安定な構造を半永久的、あるいは、過渡的に材料中に形成させることが可能である。本研究は、様々な温度・圧力印可条件下において作製したゼオライトの構造を評価し、構造の作製条件依存性を明らかにすることを目的とした。

研究成果・効果

Glass **Silicalite**

高密度SiO₂ガラスとアモルファスシリカライトにおける空隙分布(緑部)。同じ密度(密度:2.7 g cm⁻³)にも関わらず、トポロジーが大きく異なる

水酸基濃度の異なるシリカライト(ゼオライト)に対して、室温で7.7 GPa、および、20 GPaの圧力を印加して試料を作製した。この作製した試料に対して、SPring-8 BL04B2ラインで高エネルギーX線回折実験を実施し以下の知見を得た。

1. シリカガラスを用いた場合と異なり、原料のシリカライト中の周期性を一部残した状態でアモルファス化が進行する。
2. 出発原料における水酸基濃度に依存して、圧力印加した試料における結晶化挙動が異なる。

FSDP(Q₁)
 Q₀

SiO₂ glass (without press)
 Densified SiO₂ glass (20 GPa @ RT)
 Haines et al. (20 GPa @ RT)
 Treated (20 GPa @ RT)
 Untreated (20 GPa @ RT)
 Treated (7.7 GPa @ RT)
 Untreated (7.7 GPa @ RT)

一般研究B(2019年度)

「セルフセンタリング型CLT壁柱を有する木質制振架構の開発」

研究代表者：松田和浩(名城大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

研究目的

セルフセンタリング機能を持つロッキング壁柱と摩擦ダンパーを併用したCLT制振架構の実験研究を行い、残留変形が少なく、エネルギー吸収性能が高い架構を開発している。その研究では架構としての挙動を把握しているが、架構の構成要素の挙動をより詳細に把握する必要がある。そのため本研究では、ポストテンションによるCLTロッキング壁柱単体の実験を行い、その力学的挙動を把握する。

研究成果・効果

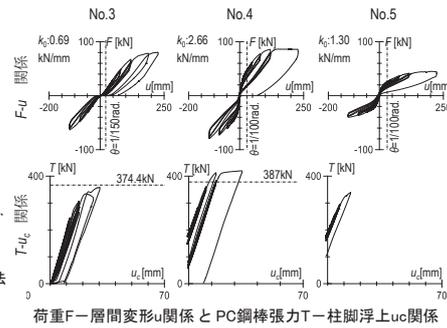
CLTの幅やプレストレスをパラメータとして変化させることで、**センタリング性能や除荷剛性を把握**することができた。

実大実験

試験体No.3 CLT幅1,000mm プレストレス0%	試験体No.4 CLT幅1,000mm プレストレス30%	試験体No.5 CLT幅600mm プレストレス50%
------------------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------



荷重F、変形u、張力T、柱脚浮き上がり u_c 、回転中心位置 x_0 、柱脚部曲げモーメント M_f 、回転角 θ 、等算出して力学的挙動を把握
今後、CLT壁柱の評価法の提案に期待



一般研究B(2019年度)

「傾斜組成エピタキシャル薄膜における強誘電体ドメイン構造と物性」

研究代表者：丸山伸伍(東北大学 大学院工学研究科)

共同研究対応教員：安井伸太郎

研究目的

面直方向に組成を意図的に変化した傾斜組成薄膜は、均一な組成の薄膜と比較してその組成変調構造に由来する新しい物性等が期待されることから近年注目されてきている。本研究では、パルスレーザ堆積(PLD)法で作製した、連続的に傾斜組成したエピタキシャル強誘電体薄膜を精密に作製する技術の開発と、そのドメイン構造や物性を調査することを目的とした。

研究成果・効果

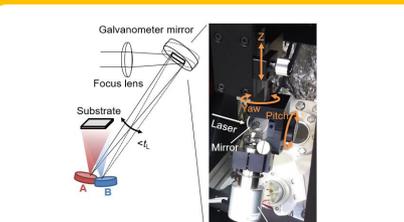


図1. ガルバノ走査型PLD装置の模式図とガルバノミラー部の写真。

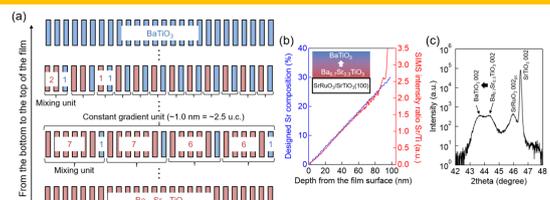


図2. (a) BaTaO₃とBa_{0.7}Sr_{0.3}TiO₃ターゲットの打ち分けにおけるレーザパルスのタイムチャート。(b) 設計組成とSIMSによるSr/Ti強度比の深さプロファイル。(c) BaTiO₃ 002 回折ピーク付近のXRDパターン。

ガルバノ走査型PLD(図1)によってターゲットの機械的な交換を不要とし、1パルスレベルでの現実的な複数ターゲットの打ち分けを可能とすることで、設計通りの線形な傾斜組成(図2)を実現し、これらの成果をまとめて論文にした[1]。

発表論文・関連論文：

[1] S. Maruyama, N. Sannodo, R. Harada, Y. Anada, R. Takahashi, M. Lippmaa, and Y. Matsumoto, Rev. Sci. Instrum. 90, 093901 (2019).

一般研究B(2019年度)

「酸窒化スピネルの特性評価」

研究代表者：三浦章(北海道大学)

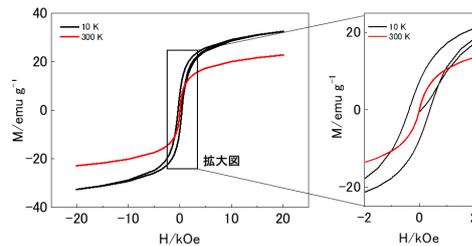
共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

近年、岩塩型、ペロブスカイト型、バテライト型などの結晶構造を持つ酸窒化物が報告されているが、スピネル型酸窒化物の報告例は限られている。本研究ではナトリウムアミド溶液を用いた液相法による窒化で、スピネル化合物を低温で合成し、その磁化率を調査した。

— 研究成果・効果 —

XRDパターンから生成物の結晶構造はスピネル型と同一した。スピネル型のモデルを用いて、リートベルト解析を行ったところ、生成物は単相であり、格子定数は8.42745 Åであった。四面体サイトと八面体サイトのカチオンの占有率は1であった。原料の比をMn:Fe=1.0:0.0, Mn:Fe=0.9:0.1と変えたとき生成物の結晶構造は岩塩型であった。スピネル型構造の生成物についてFE-SEM,酸素窒素分析計,ICP,XPS,SQUIDで評価した。酸素窒素分析計からアニオンはO=27.5 wt.%, N=0.4 wt.%で、ICPからカチオンの原子数比はMn:Fe=0.11:0.89であった。この結果から、生成物はスピネル型構造であり、欠陥がないと仮定したときの組成式は $Mn_{0.33}Fe_{2.67}O_{3.94}N_{0.06}$ と決定した。生成物のXPSスペクトルから結合エネルギー397 eVにおいて窒化物に帰属されるピークが確認された。SQUIDを用いて生成物のH-Mを測定した。生成物の飽和磁化は10 Kのとき33 emu g⁻¹で、300 Kのとき23 emu g⁻¹であった。



NaNH₂の低温処理により合成した化合物の磁化率測定

一般研究B(2019年度)

Tiドーブした六方晶マンガン酸化物における酸素吸蔵特性と微視的構造

研究代表者：森 茂生(大阪府立大学 大学院工学研究科)

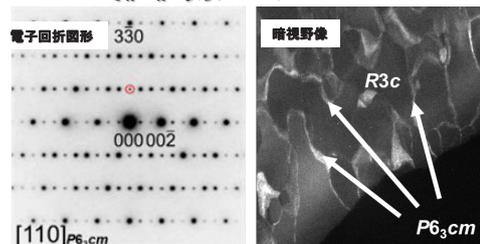
共同研究対応教員：東 正樹 教授

— 研究目的 —

近年、強誘電体や強弾性体のドメイン境界において、磁性、誘電性や超伝導特性などバルク構造と異なる特異な機能性が発現することが報告され、ドメイン境界に特異な結晶構造や機能性の発現に関する研究が盛んに行われている。本研究では、六方晶強誘電体HoMnO₃およびMnサイトの一部をTiで置換したHoMn_{1-x}Ti_xO_{3+δ}(x = 0 ~ 0.4)を作製し、そのドメイン構造およびドメイン境界の局所構造について、透過型電子顕微鏡法を用いて調べた。また、本物質系が示す酸素吸蔵特性について検討を行った。

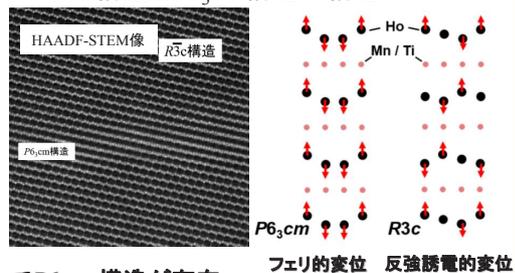
— 研究成果・効果 —

HoMn_{1-x}Ti_xO_{3+δ}(x=0.3)でのドメイン構造



R $\bar{3}c$ 構造によるドメイン構造のドメイン境界としてP₆₃cm構造が存在

R $\bar{3}c$ 構造とP₆₃cm構造の構造モデル



・内橋研人・塚崎裕文・Fernando Cubillas・石橋広記・久保田佳基・石井悠衣・森茂生・山崎順, HoMn_{1-x}Ti_xO₃の特異なドメイン構造, 日本セラミックス協会2020年年会、明治大学(駿河台キャンパス)、2020年3月18日~20日

一般研究B(2019年度)

「新奇超伝導状態観測に向けた層状物質の単結晶育成と物性評価」

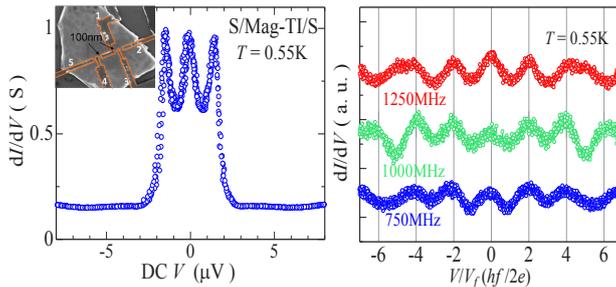
研究代表者：矢野力三(名古屋大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻)
共同研究対応教員：笹川崇男

— 研究目的 —

新奇超伝導状態では人類未発見の素粒子や準粒子の発現、量子コンピューターへの応など用が期待されている。ところがそのような超伝導状態を発現する理想的な研究舞台が確立していない。本研究はそのような超伝導状態の確立を目指して研究を行った。研究の舞台として特に磁性をドーピングしたトポロジカル絶縁体と通常の超伝導体の接合に着目し、その超伝導近接効果で出現する超伝導状態を調査した。

— 研究成果・効果 —

へき開した磁性ドーピングトポロジカル絶縁体の単結晶と超伝導体の接合を左図内挿図のように作製し、極低温での輸送特性を調査した。井戸型または1本のピーク構造が出現する通常の超伝導状態とは明らかにことなる3本ピーク構造を観測した。さらにマイクロ波を照射すると、通常のシャピロスステップ周期($hf/2e$)の倍の周期のステップ構造を意味する微分コンダクタンスが得られた。これらは特異な超伝導状態が出現していることを強く示唆する結果であり、実際にこの超伝導状態上での素粒子観測と、準粒子状態の観測を目指して今後研究を進めていく。



接合の微分コンダクタンス(左)とマイクロ波照射時の特性(右)

発表論文・関連論文：Rikizo Yano, Masao Koyanagi, Hiromi Kashiwaya, Kohei Tsumura, Hishiro T. Hirose, Yasuhiro Asano, Takao Sasagawa, and Satoshi Kashiwaya, "Unusual Superconducting Proximity Effect in Magnetically Doped Topological Josephson Junctions", J. Phys. Soc. Jpn. 89, 034702 (2020).

一般研究B(2019年度)

「免震部材の繰り返し特性変化を考慮した長周期|長時間地震動および風外乱による応答評価」

研究代表者：氏名 山下 忠道 (Dynamic Control Design Office山下一級建築士事務所)
共同研究対応教員：氏名 佐藤 大樹

— 研究目的 —

本研究では、長周期地震動に対する免震部材の繰り返し特性変化を考慮した免震建物の応答を簡易評価するため、免震部材の累積吸収エネルギーを一括評価して特性変化率を求める簡易応答評価法(以下、「簡略法」と称す)と、免震部材の累積吸収エネルギーを時々刻々と評価して特性変化率を求める応答評価法(以下、「準精算法」と称す)との比較検討を行う。

— 研究成果・効果 —

図1に入力地震動OS1, OS2, OS3に対する評価法毎の最大応答層せん断力係数、最大応答加速度、最大応答層間変位、最大応答層間変形角を、図2に免震層の荷重変形関係を示す。これらの図より、OS3入力時は、準精算法と簡略法との結果は概ね一致しているが、OS2, OS1と長周期成分の影響が強くなるほど、応答差が大きくなり、特性変化が大きくなるに従い、解析精度が悪化していることがわかる。また、OS1, OS2のいずれも免震層の変形が準精算法に対して簡略法のほうが大きくなるため、上部構造の最大応答層せん断力係数や最大応答層間変形角では下部層の応答値が大きくなっているが、最大応答加速度ではより小さな値を示している。

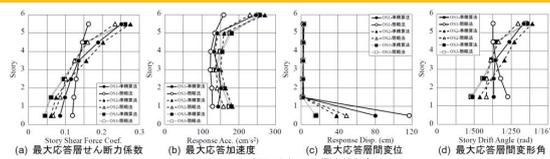


図1 評価法毎の地震応答解析

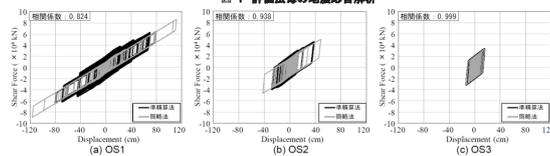


図2 免震層の復元力特性

一般研究B(2019年度)

「イオンビーム照射炭素材料のレーザー分析」

研究代表者：山本春也(量子科学技術研究開発機構 高崎量子応用研究所)
共同研究対応教員：中村一隆

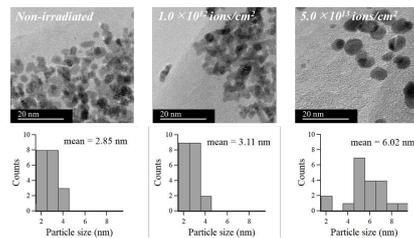
— 研究目的 —

炭素担体中のイオンビーム照射欠陥が白金(Pt)ナノ粒子の触媒特性を高めることが見出されており、イオン照射された炭素担体表面とPtナノ粒子との間に発現する特異な界面相互作用に起因すると考えられる。そこで本研究では、この界面構造を詳細に理解するため、イオンビーム照射した高配向性熱分解グラファイト(HOPG)表面上にPt微粒子を堆積した試料に対して透過型電子顕微鏡(TEM)観察及びラマン分光測定を行った。

— 研究成果・効果 —

イオン注入装置を用いて380 keV Ar⁺をフルエンスを変えてHOPGに照射した後、スパッタ蒸着によりPtナノ粒子を堆積し、これらの試料に対するTEM観察像及びラマンスペクトルを取得した。

TEM観察の結果、照射したHOPG表面上のPt微粒子は未照射に比べ大きくなるのが分かった(右図)。また、ラマン分光測定では、フルエンス 1.0×10^{12} ions/cm²でグラファイト構造に空孔欠陥が生成され始め、 5.0×10^{13} ions/cm²よりも大きいフルエンスでsp³欠陥が生成されることが示された。イオンビーム誘起欠陥を有するグラファイト構造がPtの粒成長を促進したと考えられる。



発表論文：

T. Kimata, K. Kakitani, S. Yamamoto, T. Yamaki, T. Terai, K.G. Nakamura, "Platinum nanoparticles on HOPG surface modified by 380 keV Ar⁺ irradiation: TEM and Raman studies" *Radiation Effects and Defects in Solids* (2020) In press.

一般研究B(2019年度)

「V, Cr, Mnなどの遷移金属イオンを含む酸化物における3d軌道秩序とマルチフェロイック特性の研究」

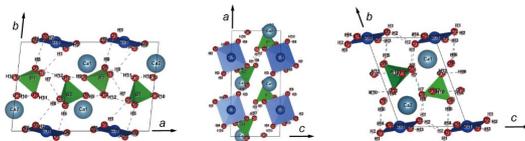
研究代表者：山本孟(東北大学多元物質科学研究所)
共同研究対応教員：東正樹

— 研究目的 —

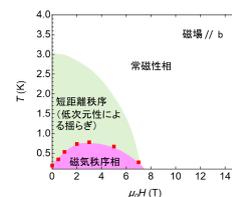
遷移金属イオンを含む化合物は、磁性や電気的特性において多様な性質を示すことから、広く研究がされている。我々の研究グループでは、放射光X線や中性子などの量子ビームを用いてこれらの特性の起源に関する研究を行っている。今回、日本産天然鉱物逸見石Ca₂Cu(OH)₄[B₂(OH)₄]₂に着目した。

— 研究成果・効果 —

逸見石の結晶構造と電気特性、磁性について研究を行った。



・270 Kで非極性(反強誘電, P-1)-極性構造(P1)相転移が起こることを発見



・極低温で異常な振る舞いを示す磁気秩序相を発見

H.Y. et al., Antiferroelectric hydrogen-bond networks in natural mineral henmilite Ca₂Cu(OH)₄[B(OH)₄]₂ from the Fuka mine, under preparation.
山本孟ほか 日本物理学会2019年秋季大会 岡山県布賀に産する逸見石Ca₂Cu(OH)₄[B(OH)₄]₂における低次元反強磁性

一般研究B(2019年度)

「銅酸化物高温超伝導体の超伝導状態の自己エネルギー解析」

研究代表者：吉田 鉄平(京都大学大学院人間・環境学研究科)
 共同研究対応教員：笹川崇男

研究目的

銅酸化物高温超伝導体の発見から30以上年経過するが、その超伝導機構は解明されていない。電子対を媒介する引力の起源を解明することが最も重要な課題である。本研究では角度分解光電子分光(ARPES)によって得られるスペクトル関数から、電子の自己エネルギー $\Sigma(k, \omega)$ を抽出し、電子対を形成する相互作用の情報を得ることを目的とした。特にこれまでに研究例の少ない、超伝導ギャップが開いている電子状態について解析を行った。

研究成果・効果

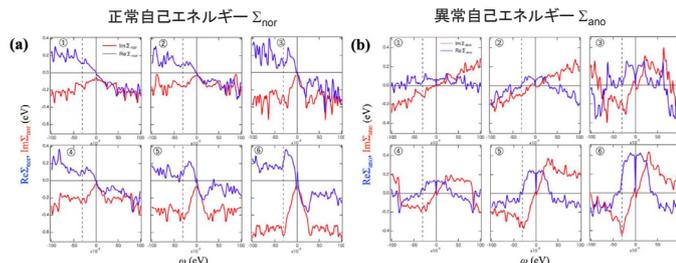


図1 最適ドープBi2212の自己エネルギーの方向依存性。

①から⑥の自己エネルギーはノード付近の波数からアンチノード付近の波数に対応している。

超伝導状態の自己エネルギー

$$\Sigma_{tot} = \Sigma_{nor} + \frac{\Sigma_{ano}^2}{\omega + \epsilon_k + \Sigma_{nor}}$$

高温超伝導体Bi2212 ($T_c = 92$ K)についてARPESスペクトルから正常(a)および異常自己エネルギー(b)の抽出を行い方向依存性を調べた。~30 meVの励起構造は方向依存性が弱く、全自己エネルギーに現れない。これらの結果はハバードモデルの電子状態計算と一致し、「隠れたフェルミオン」モデルを示唆している。

一般研究B(2019年度)

「直流電場アシストされたジルコニアナノ粒子の焼結」

研究代表者：吉田道之(岐阜大学)
 共同研究対応教員：若井史博

研究目的

粉末成型体に電圧を印加することで緻密化を促進させる手法(Field assisted sintering technology:FAST)の中で近年、特に注目されているのがフラッシュ焼結と呼ばれるもので、成形体に高電圧を印加しながら加熱すると、ある温度で急激に緻密化が開始し、わずか数秒のうちに焼結緻密化が完了してしまうという特異な現象である。フラッシュ焼結には、単純な装置構成による焼結プロセスの低温化・短時間化・省エネルギー化という大きな利点があり、酸化物セラミックスを中心に多くの材料で焼結挙動の調査が進められている。本研究は、フラッシュ焼結に伴う諸現象を考察し、そのメカニズムの枠組みを作ることを目的とする。今年度は、原料粒子サイズとフラッシュ焼結の緻密化に要する電流密度の関係について検討した。

研究成果・効果

昨年度の検討において、フラッシュ焼結のメカニズムの枠組みがジュール加熱の熱暴走によって説明できることを明らかにした。サンプル温度が上昇することで電気抵抗が雪崩的に低下して起こる熱暴走では、電源で設定する電流密度が高いと電流の局在化を引き起こし、焼結体の組織は不均一となる。従って、より低い電流密度での処理が望まれる。

正方晶ジルコニアナノ粒子が密に充填したサンプル(原料粒子サイズ15 nm)を、リミット電流を30 mA/mm²として直流電場を印加しながら焼結を行ったところ、850°Cで急激な収縮が観察され、密度が86.8%まで増大した(Fig.1)。

フラッシュ焼結のモデル材料として広く用いられている粒子サイズが50 nmの原料において同一の密度を得るには60 mA/mm²の電流密度を必要とすることから、原料粒子の微細化が、フラッシュ焼結において緻密化に要する電流密度の低減に寄与し、均一な組織を得るために鍵となる要素であることが示唆された。

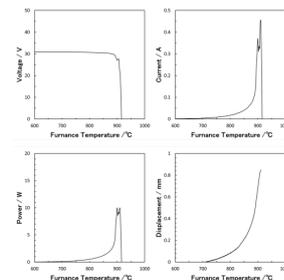


Fig.1 Voltage, Current, power and displacement versus furnace temperature graphs during flash sintering

発表論文・関連論文：

M. Yoshida, M. Hada, Y. Shinoda, O. Sakurada and F. Wakai: Preliminary investigation of low current flash sintering in zirconia nanoparticle compact, The Malaysian Journal of Analytical Sciences 23 [4] 15-22 (2019).

一般研究C(2019年度)

「酸化チタン表面上のサレン金属錯体および錯体ナノワイヤーのXPS測定」

研究代表者：秋津貴城(理学部第二部化学科)

共同研究対応教員：原 享和

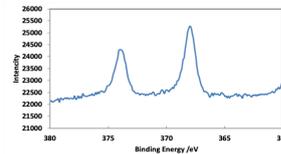
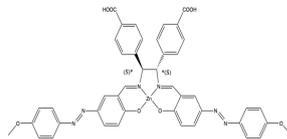
— 研究目的 —

DSSCの応用に向け錯体とTiO₂の複合化に起因する光機能付与を目指して探索した結果、ナノワイヤー錯体の採用には至らず、アゾベンゼン及びカルボキシル基を含むジフェニルサレン型キラルシッフ塩基金属錯体を用いて、これと酸化チタンまたは銀ナノ粒子の複合化を行い、その吸着構造をXPSを用いて解明することを目指す。

— 研究成果・効果 —

試料は、FTOガラス基板にスクリーンプリンター法により酸化チタンを焼成し、錯体(左図)を吸着させた。特定の束縛エネルギーのピークシフトによって化学吸着における電子状態の変化を議論する。酸化チタンのTi 2p軌道は錯体が吸着すると高エネルギー側にシフトした(右図)。吸着基の-COOHは電子求引基であり、Ti 2p軌道が安定化することが明らかになった。これにより、表面吸着における化学結合の形成が示唆された。

表面吸着の確認を踏まえて、銀ナノ粒子をセルに組み込むことで局在表面プラズモン共鳴と呼ばれる現象により、セルの変換効率が上昇することが今後期待される。



一般研究C(2019年度)

「アルカン選択酸化反応に活性な斜方晶Mo₃VO_x複合酸化物触媒の酸素種解析」

研究代表者：上田 渉(神奈川大学工学部物質生命化学科)

共同研究対応教員：原 享和

— 研究目的 —

計算化学から、MoVOの活性酸素種として、格子酸素欠損部位で酸素分子からオキソ種ができることが示され、この実態解明を目的に、格子酸素欠損の生成挙動やその周辺の構造解析、そして低温における分子酸素吸着測定による活性酸素種形成を追跡することを目的として研究を実施した。また、斜方晶Mo₃VO_x複合酸化物触媒と関連する細孔性結晶であるε-POM触媒の持つ酸素分子活性化能と選択酸化触媒能も検討した。

— 研究成果・効果 —

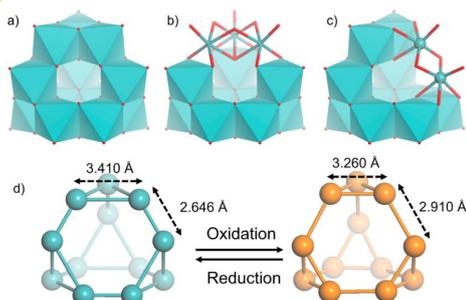


図 (a) ε-POM ユニットの構造図。(b)、(c) ε-POMユニット内 Mo の Mo₃O₁₃種 (b) および Mo₂O₁₀種 (c) を ball-and-stick で表示。(d) 酸化還元によるε-POMユニット内の構造変化。

斜方晶Mo₃VO_xの構造中に形成される活性酸素を調査するため、還元型や酸化型の試料のABF-STEM測定を行ったところ、7員環チャンネル近傍の酸素原子の占有率がランダムに減少していることがわかった。

一方、ε-POM触媒はε-POMユニットが適切なリンカー元素と架橋し形成したY型ゼオライト様のマイクロ細孔性材料である。Moがε-POMユニットを形成し、Feがリンカーで構成されたε-MoFeOが室温程度で特異な酸素吸着挙動を示すことを見出した。また、この触媒は乳酸エチル(EL)酸化反応に高い触媒活性を示した。

O₂吸着したε-MoFeOIにELを導入すると、ε-POMユニットが還元、構造変異し、生成物を与えたことから(図)、Fe上で活性化された酸素種がε-POM上に移動し、酸化活性が発現したと考えられる。分子酸素活性化サイトと酸化触媒活性サイトが構造で隔てられ、それぞれが独立して機能している可能性が示唆された。

一般研究C(2019年度)

「多孔性イオン結晶の多形の制御と細孔構造—触媒活性の相関」

研究代表者：内田さやか(東京大学 大学院総合文化研究科)

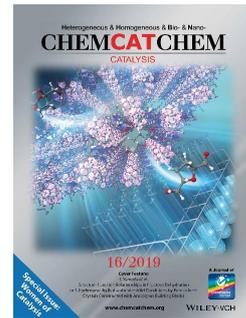
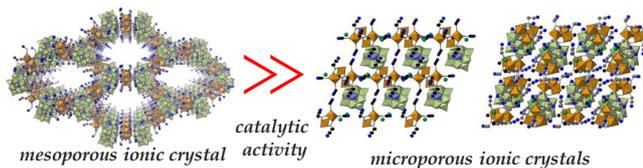
共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

本研究では、ポリオキシメタレートアニオンを構成ブロックとして、固体触媒等の機能性材料となる多孔性イオン結晶を合成した。さらに、結晶多形の作り分けを行い、結晶構造と触媒活性の相関を検討した。昇温脱離ガス分析装置により、反応に関わる物質(反応物、生成物、溶媒)のなかで、細孔内に留まるものと細孔外へと排出されるものを特定することを、具体的な目的とした。

— 研究成果・効果 —

下記の多孔性イオン結晶は、メタノール/トルエン混合溶媒中で、フルクトースを5-ヒドロキシメチルフルフラール(HMF)へと副生成物無しに変換する。細孔にトルエンは吸着されず、メタノールは吸着される。触媒活性は、細孔径1 nm以下のミクロ孔を持つものより、細孔径が2 × 3nmと大きなメソ孔をもつものの方が高い。本研究成果は、学術誌の表紙に採択された(右図)。



発表論文

T. Yamada, K. Kamata, E. Hayashi, M. Hara, S. Uchida*, ChemCatChem, 11, 3745-3749 (2019). (表紙に採択)
 これに加えて共著論文(XPS測定に関するご協力)1報執筆中

一般研究C(2019年度)

「高温発光特性に優れるコロイダル量子ドットの材料開発」

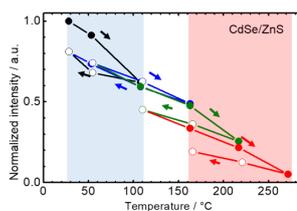
研究代表者：小俣孝久(東北大学)

共同研究対応教員：神谷利夫

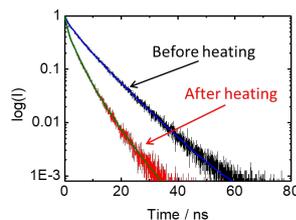
— 研究目的 —

量子ドット蛍光体の発光強度は室温以上で急激に低下し、実用上十分な発光強度を保てないため、動作温度が室温以上となる用途では使用できないため改善が望まれている。本研究では、100℃以上でも実用上十分な発光強度を維持できる新たな量子ドット材料を開発することを最終的な目的とする。本研究はその第一段階として、量子ドットを高温に曝すと生じる不可逆的な発光強度の劣化の原因を究明した。

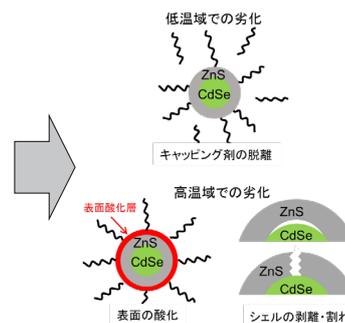
— 研究成果・効果 —



劣化が生じる温度域は、(i)室温～100℃、および、(ii)150℃以上の2領域



劣化後は蛍光寿命が短くなり、非輻射発行中心となる量子ドットの表面準位が増大したことを示唆



一般研究C(2019年度)

「近藤格子系における複合電子状態に関する研究」

研究代表者：神原 陽一(慶應義塾大学理工学部)

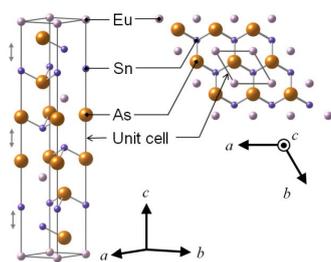
共同研究対応教員：伊藤 満

研究目的

近藤格子系は、化学組成や外部圧力の制御により、近藤状態から磁気秩序相へ量子相転移を示すことが知られている。本研究課題では、金属間化合物における量子相転移を化学組成の制御することで実現し、Kondo状態と磁気秩序相を人為的に制御する技術開発の一助とすることを目的とする。ここでは、母相となりうる、層状希土類磁性体、 EuSn_2As_2 の多結晶合成を行った。

研究成果・効果

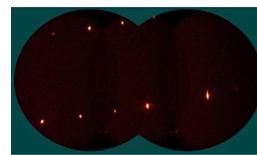
EuSn_2As_2 の結晶構造
↔ はvan der Waals 結合を示す！



多結晶 EuSn_2As_2 より取り出した
配向結晶(単結晶)³



EuSn_2As_2 配向結晶(単結晶)の
Laue法によるXRDパターン³



Eu^{2+} イオンと $[\text{Sn}_2\text{As}_2]^{2-}$ イオンで形成された $\text{Eu}^{2+}[\text{Sn}_2\text{As}_2]^{2-}$ 分子
同士が、van der Waals力により弱く結合した状態で存在する。

発表論文・関連論文：

1. R. Sakagami, et al, Mater. Sci. Tech. Jpn. 55, 72-76 (2018), in Japanese, 2. M. O. Arguilla, et al, Inorg. Chem. Front. 4, 378-386 (2017).
3. 平田昂輝, 坂上良介, 嶋場正憲, 神原陽一, 「六方晶層状化合物 EuSn_2As_2 の自発分極」第43回 日本磁気学会学術講演会 2019年9月25日

一般研究C(平成31年度)

「5価のビスマスを含む新しい酸化物の合成と結晶構造および電子構造解析」

研究代表者：熊田伸弘(山梨大学)

共同研究対応教員：東 正樹

研究目的

アルカリ土類金属を含むビスマス酸化物において5価のビスマスを含む化合物にはペロブスカイト型構造を持つ BaBiO_3 があり、この化合物の金属イオンを一部置換することで超伝導性を示す $\text{Ba}(\text{Bi,Pb})\text{O}_3$ および $(\text{Ba,K})\text{BiO}_3$ が有名である。また、水熱反応を用いることでダブルペロブスカイト型構造を持つ新しいビスマス酸化物超伝導体である $(\text{K}_{1,00})\text{(Ba}_{1,00})\text{(Bi}_{0,89}\text{Na}_{0,11})\text{O}_{12}$ 、 $(\text{Ba}_{0,82}\text{K}_{0,18})\text{(Bi}_{0,53}\text{Pb}_{0,47})\text{O}_3$ 、 $(\text{Ba}_{0,62}\text{K}_{0,38})\text{(Bi}_{0,92}\text{Mg}_{0,08})\text{O}_3$ および $(\text{Ba}_{0,54}\text{K}_{0,46})\text{Bi}_4\text{O}_{12}$ を見出している。この他にトリルチル型構造の MgBi_2O_6 および PbSb_2O_6 型構造の BaBi_2O_6 も水熱反応で合成できることを報告した。この一連の水熱反応を用いた5価のビスマスを含む酸化物の探索の過程でパイロクロア型 $\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$ および $\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$ を合成することができたので、その結晶構造および電子構造を明らかにすることが本研究の目的である。

研究成果・効果

パイロクロア型 $\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$ および $\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$ は出発物質として $\text{NaBiO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ あるいは $\text{Sr}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ を1:1のモル比で秤量し、蒸留水50mLとともに内容積70mLのテフロンでライニングしたオートクレーブに入れ、80°Cで48時間水熱処理することによって合成できた。SPRing-8の放射光粉末X線回折データを用いて結晶構造の精密化を行ったところ、空間群は $\text{Fd-}3\text{m}(\#227)$ 、格子定数は $a = 10.75021(5) \text{ \AA}$ ($\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$)および $a = 10.94132(6) \text{ \AA}$ ($\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$)で、 R 因子は $R_{\text{int}} = 5.53\%$ 、 $R_{\text{e}} = 4.28\%$ ($\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$)および $R_{\text{wp}} = 6.40\%$ 、 $R_p = 4.84\%$ ($\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$)であった。図1にパイロクロア型 $\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$ の結晶構造を示す。室温で6GPaの高圧で押し固めた試料の室温での電気抵抗率は $0.1 \Omega \cdot \text{m}$ ($\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$) および $0.03 \Omega \cdot \text{m}$ ($\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$)で、その温度依存性は半導体的であった。また、2から400Kまでの磁化率測定では、低温での不純物由来と考えられる立ち上がりが見られたが、温度に依存しない反磁性であった。パイロクロア型構造のトンネル中に存在する酸素である $\text{O}2$ の2p軌道とアルカリ土類金属イオンとの無視できるような交わりと伝導帯との弱い重なりが電子密度計算で認められ、半導体な挙動を示唆していた。

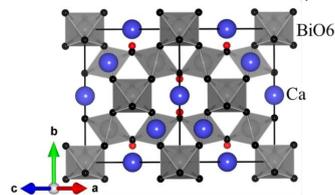


Figure 1. Crystal structure of $\text{Ca}_2\text{Bi}_2\text{O}_7$

一般研究bC(2019年度)

「有田焼ボタン再生のための実験的分析」

研究代表者：甲賀 ゆうこ、原 大輔(株式会社SLOW)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

— 研究目的 —

本研究では、50年以上前に作製されていた「幻の磁器ボタン」の再現に注力する。本開発では、失われた陶磁器の3次元成形技術と絵付け技術を学術的観点から精査し、再現することで、次世代へ新技術を交えた伝統工芸として発展させることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

有田焼の原料である天草陶石と泉山陶石は、日本で唯一添加剤なく磁器を焼成できる。有田焼特有の白色度、高度な成形技術と伝統的な絵付け技術を応用し、工芸として普及したのが「有田焼ボタン」と言われている。しかし21世紀に入り、職人の引退に伴い有田焼ボタンの作製に必要な技術は失われ、現在では再現が難しい。技術的な課題を解決することによって、失った有田焼ボタンの技術は復活することが可能となる。

その一端として、戦時中に作製された有田焼ボタンについてリバースエンジニアリングを行った。X線回折およびEDXによる組成分析を行う事で、ボタン作製に用いられた原料は天草陶石であることがわかった。図に有田焼ボタンを示したが、ボタン形状を作製する技術は非常に難しい。現在用いられている湿式および乾式によるファインセラミックスの作製方法ではボタン穴の作製が非常に難しく、半湿式による成形が用いられたと思われる。今後は成形技術および多彩な色つけおよび釉薬の解析に従事する予定である。



図 戦時中に作製されたと思われる有田焼ボタン

プロジェクトURL <http://missinglink2.mystrikingly.com/>

一般研究C(2019年度)

「鉄筋コンクリート造構造部材の損傷評価」

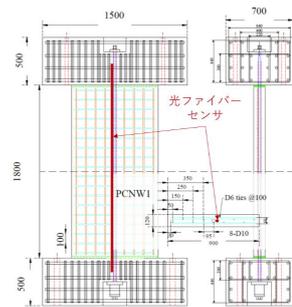
研究代表者：柴山淳(電力中央研究所 地球工学研究所 構造工学領域)

共同研究対応教員：河野 進

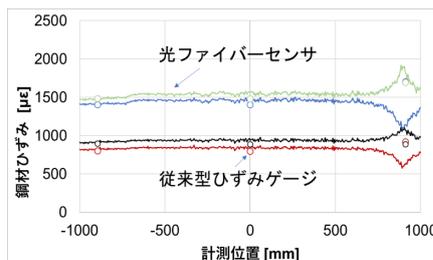
— 研究目的 —

地震で多くの被害が報告されがちな鉄筋コンクリート造建物であるが、都市構造物には欠かせない利点を有している。地震に対する鉄筋コンクリート造部材の損傷について再度検討を行い、どのような損傷が問題で、どのようにすれば損傷を低減できるかについて考察を行うことが重要である。本研究では、鉄筋コンクリート造部材の実験においてこれまでに使われなかった光ファイバーセンサを用いて、損傷をこれまで以上の精度で検知する技術を開発する。

— 研究成果・効果 —



鉄筋コンクリート造部材への光ファイバーセンサの設置



光ファイバーセンサによる計測結果

光ファイバーセンサを用いることで、これまでになく詳細にひずみを計測することに成功し、鉄筋コンクリート造物の損傷をこれまで以上の精度で損傷を検知する技術を開発した。このデータは、損傷を精度よく評価できるようになること、簡単なモデルで精度よく予測できるようになること、残存性能を評価できるようにつながる。

一般研究C(2019年度)

「鋼構造柱梁接合部の耐震性能を評価するための実験载荷プロトコルの提案」

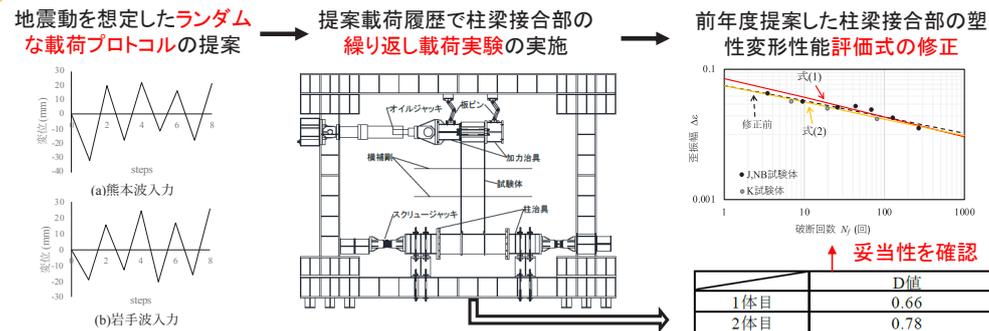
研究代表者：焦 瑜(東京都市大学)

共同研究対応教員：山田 哲

— 研究目的 —

本研究では、まず前年度で提案した柱梁接合部の塑性変形性能評価式を修正する。そして、骨組の応答解析を行い、実際起こり得る地震で梁端接合部が経験するランダムな载荷プロトコルを提案し、提案したランダムな载荷履歴を用いて鋼構造柱梁接合部の繰り返し载荷実験を行った。最後に、実験の結果を検討し、梁部材の面内解析を行い、修正した柱梁接合部の塑性変形性能評価式の妥当性を確認した。

— 研究成果・効果 —



発表論文・関連論文：

- Yu Jiao, Hiroki Konno, and Satoshi Yamada, Evaluation of plastic deformation capacity of steel beam-to-column connections based on flange strain amplitudes. Proceedings of the Pacific Structural Steel Conference 2019. 2019.11
- 近野裕樹、焦瑜、山田哲：歪履歴に着目した鋼構造柱梁接合部の塑性変形能力評価、鋼構造年次論文報告集、2019年11月

一般研究C(2019年度)

「分子状酸素を用いたパラジウム複核錯体触媒によるケトンのα-メチレン酸化反応の開発とその反応機構解析」

研究代表者：末木 俊輔(武蔵野大学薬学研究所)

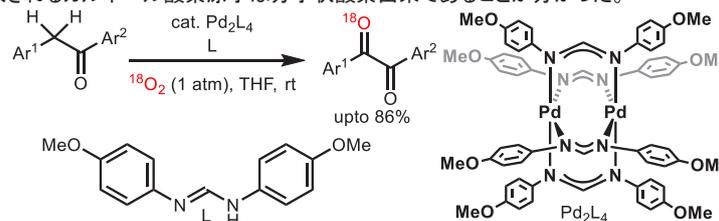
共同研究対応教員：喜多 祐介

— 研究目的 —

分子状酸素を用いる酸素官能基導入反応は、有機合成化学における非常に重要な基盤技術かつ理想的な反応の一つである。我々はパラジウム複核錯体が効率的に分子状酸素を活性化し、通常、触媒再生に必要となる犠牲還元剤を用いることなく酸化反応を触媒することを見出している。本研究では、本法の基質適用範囲の検討および反応機構解明に向けた検証実験を行い、反応機構の詳細を明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

ホルムアミジナートを架橋配位子とするpaddle-wheel型パラジウム複核錯体を触媒として用い、添加剤としてホルムアミジン存在下、種々の置換基を組み込んだベンジルアリールケトンの酸素酸化を検討したところ、反応は1気圧の酸素雰囲気下室温で円滑に進行し1,2-ジケトンが高収率で得られることを見出した。¹⁸O₂雰囲気下での反応より、導入されるカルボニル酸素原子は分子状酸素由来であることが分かった。



一般研究C(2019年度)

「 $(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.75}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.25}$ の低温熱容量測定」

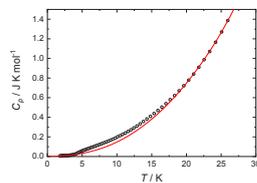
研究代表者：高井 茂臣(京都大学大学院エネルギー科学研究科)
 共同研究対応教員：川路 均

— 研究目的 —

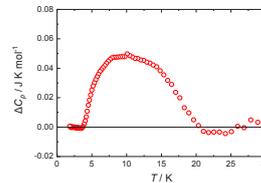
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ および $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ はいずれもコランダム型構造を示すものの、固溶範囲は極めて限られることが知られていた。近年我々はメカノケミカルな手法で $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ 系固溶体を全率で合成できることを見いだした。これまでに $(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.5}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.5}$ の組成については低温熱容量測定を行ってきた。しかし研究が進むにつれ別の組成についても熱容量測定が必要であることがわかってきた。表題では $(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.75}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.25}$ を記載しているが、来年度以降も含めて系統的に行うことにした。

— 研究成果・効果 —

本年度は以前に行った $(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.5}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.5}$ の熱容量測定結果の解析と他の組成の合成を行った。極低温の熱異常について、下に示すように取り出し、過剰エントロピーが $56 \text{ mJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ であることを示した。



$(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.5}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.5}$ の低温熱容量とベースライン。



$(\text{Fe}_2\text{O}_3)_{0.5}(\text{Al}_2\text{O}_3)_{0.5}$ の低温熱異常。

一般研究C(2019年度)

「計算科学を用いた酸化物半導体の安定性および電子状態評価」

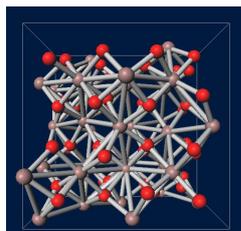
研究代表者：霍間勇輝(出光興産株式会社 電子材料部)
 共同研究対応教員：神谷利夫

— 研究目的 —

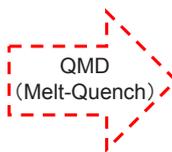
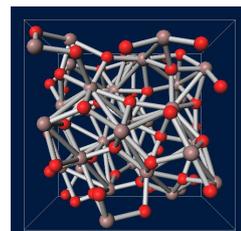
構造既知の材料に関してはDFT計算にて電気物性を得ることが容易であるが、構造が実験的に検証困難なアモルファス材料に対しては構造作成の段階が重要となる。現状では古典分子力学計算(以下、CMD)を利用してアモルファス構造を作成することが多いが、CMD実施には原子-原子間に働く2体間ポテンシャルについて既知であることが前提となっているため、新しい組み合わせの元素でのアモルファス構造作成には、CMD適応困難な部分があった。そこで、我々は、既知ポテンシャルデータが不要であり、未知元素の組み合わせにも適用可能なDFT計算を用いた分子力学計算(以下、QMD)でのアモルファス構造作成について検討した。

— 研究成果・効果 —

単結晶酸化インジウム



アモルファス酸化インジウム



一般的な酸化物半導体である酸化インジウムの単結晶構造をもとに、QMDにてMelt-Quench法を用いてアモルファスの酸化インジウム構造を作成した。Melt-Quench時のQMDの設定パラメータを変化・検討することで、アモルファス構造作成時の一般的なシミュレーションパラメータを得た。

一般研究C(2019年度)

「鋼構造ボルト接合部の弾塑性挙動と応力伝達機構」

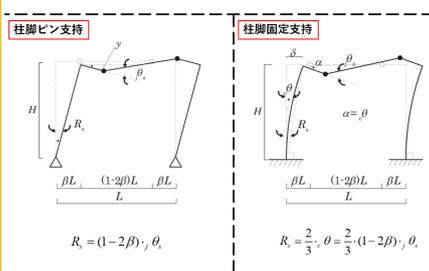
研究代表者: 中野達也(宇都宮大学 地域デザイン科学部 建築都市デザイン学科)

共同研究対応教員: 吉敷祥一

— 研究目的 —

小規模鋼構造建築物では普通ボルト接合が用いられており、近年、鉄鋼系住宅では天井の高い居住空間のニーズが高まっている。しかし、普通ボルト接合部のすべりの影響は定量的に評価されていない。本研究では、普通ボルト接合部のすべりによる梁継手の回転角と骨組の層間変形角の増加量を評価することを目的とする。

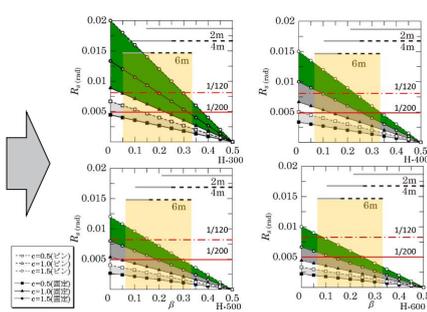
— 研究成果・効果 —



$R_c = (1-2\beta)\theta_c$ (Pin support)
 $R_c = \frac{2}{3}\theta_c, \theta = \frac{2}{3}(1-2\beta)\theta_c$ (Fixed support)

β : ブラケット長さとスパンの比, θ_c : すべりによる梁継手の回転角
 R_c : すべりによる骨組の層間変形角, R_c, θ_c : 柱脚固定支持の R_c, θ_c ; R_c, θ_c : 柱脚ピン支持の R_c, θ_c

梁継手の回転角と骨組の層間変形角の関係



すべりによる層間変形角の評価

普通ボルト接合部のすべりによる梁継手の回転角と骨組の層間変形角の関係を定式化した。

クリアランス、梁せい、継手位置が層間変形角の増大に及ぼす影響を把握した。

大場稜平, 中野達也, 他: 普通ボルトによる梁継手の力学性状(その1~2), 日本建築学会大会学術講演梗概集, 構造III, 2020.9(投稿予定)

一般研究C(2019年度)

「モノアニオン三座配位子を有する第一列後周期遷移金属錯体を用いたアルケンのヒドロ官能基化反応の開発」

研究代表者: 橋本徹(横浜国立大学大学院工学研究院機能の創生部門)

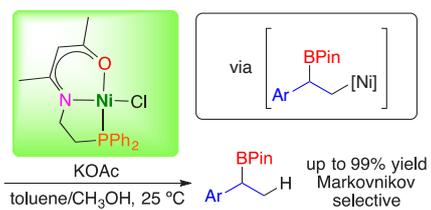
共同研究対応教員: 喜多祐介

— 研究目的 —

有機ホウ素化合物は他の有機金属反応剤に比べ取扱いが容易であり、高い官能基許容性を示すことから、医薬品や液晶材料などの様々な機能性材料の合成に利用されている。このような特徴を有する有機ホウ素化合物の合成法の一つにロジウムなどの希少金属触媒を用いたアルケンのヒドロホウ素化反応が知られている。しかし2000年以降、元素戦略の観点から希少金属触媒の代替触媒として第一列後周期遷移金属触媒を利用した触媒反応の開発が盛んに行われている。特にアルケンのヒドロホウ素化反応では、銅触媒を用いた分子変換反応が多数開発されているのに対し、鉄やコバルト、ニッケル触媒を用いた例は非常に少なく、これらの金属元素特有の反応性を利用した分子変換反応の開発に興味もたれる。このような背景から、本研究課題では、我々が開発したニッケル錯体を用いてアルケンのヒドロホウ素化反応の検討を行った。

— 研究成果・効果 —

我々が開発したモノアニオン性三座配位子を有するニッケル触媒を用いることで、スチレン誘導体の高マルコフニコフ選択的なヒドロホウ素化反応の開発に成功した。開発した反応を利用することでスチレン誘導体の高位置選択的なホウ素化が可能となり、多様な第2級アルキルホウ素化合物を合成できる。重水素化実験からβ-ポリルアルキルニッケル中間体を経て反応が進行することが示唆されたことから、同中間体を利用した新しい分子変換反応の開発が期待できる。



一般研究C(2019年度)

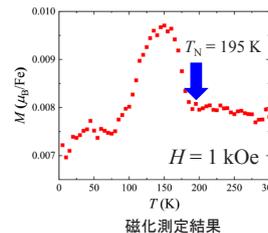
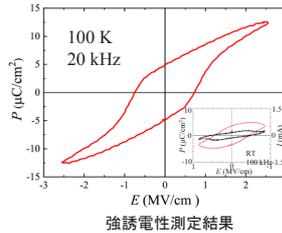
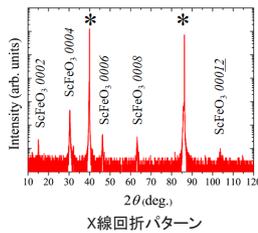
「強誘電性鉄酸化物の研究」

研究代表者：濱崎 容丞(防衛大学校 応用科学群 応用物理学科)
共同研究対応教員：伊藤 満

— 研究目的 —

強誘電性、強磁性を併せ持つマルチフェロイック材料は、低消費電力デバイスへの応用が期待される。しかし、多くの材料が室温以下でしか両秩序を持っておらず、室温で両秩序を示す材料は非常に少ない。そこで、磁気交換相互作用の強い鉄酸化物に着目し、新規マルチフェロイック物質を探索した。

— 研究成果・効果 —



準安定相であるマルチフェロイックYMnO₃型ScFeO₃をエピタキシャル成長させることで安定化させ、物性評価を行った。195Kの磁気相転移温度を持つ弱強磁性および残留分極 $\sim 4.9\mu\text{C}/\text{cm}^2$ の強誘電性を確かめることに成功した。

発表論文: Yosuke Hamasaki et al., Switchable third ScFeO₃ polar ferromagnet with YMnO₃-type Structure, *J. Mater. Chem. C*, 2020,8, 4447-4452

一般研究C(2019年度)

「薄膜技術と超高压技術を組み合わせた新物質創製」

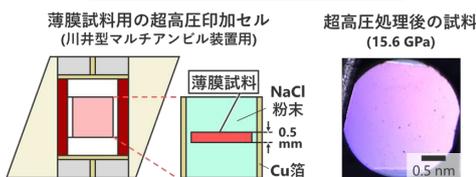
研究代表者：一杉 太郎(東京工業大学)
共同研究対応教員：西山 宣正

— 研究目的 —

超高压下では大気圧下では合成できない物質を合成することができるが、その多くの大気圧下に取り出せない。そこで、そのような物質の安定化に向けて、エピタキシャル薄膜に着目した。エピタキシャル薄膜では、基板単結晶から生じた応力によってバルクでは不安定な構造を安定化することができる。本研究では、エピタキシャル薄膜を用いた高压相の物質研究を行うために、高压相薄膜合成に向けた技術開発と、その技術による高压相薄膜の作製を目的とする。

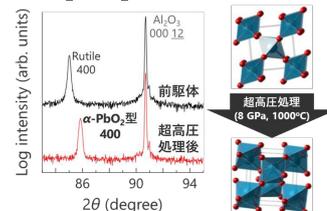
— 研究成果・効果 —

薄膜試料への超高压処理技術を開発



物理的な衝撃に極めて弱い薄膜試料への超高压処理技術を開発した。試料の周囲を柔らかくて高温・高压で安定なNaCl粉末で覆えるセルを開発することで、基板も薄膜も破損することなく薄膜試料への超高压処理を実現できた。

高压相 $\alpha\text{-PbO}_2$ 型TiO₂の単相エピタキシャル薄膜作製



本技術を用いてRutile型TiO₂エピタキシャル薄膜に超高压処理することで、単相かつ高品質な高压相 $\alpha\text{-PbO}_2$ 型TiO₂のエピタキシャル薄膜作製に初めて成功した。

発表論文・関連論文: Yuki Sasahara, Koki Kanatani, Hiroaki Asoma, Masayuki Matsuhsa, Kazunori Nishio, Ryota Shimizu, Norimasa Nishiyama, and Taro Hitosugi. Ultrahigh-pressure fabrication of single phase $\alpha\text{-PbO}_2$ -type TiO₂ epitaxial thin films. *AIP Advances* 10, 025125 (2020).

一般研究C (2019年度)

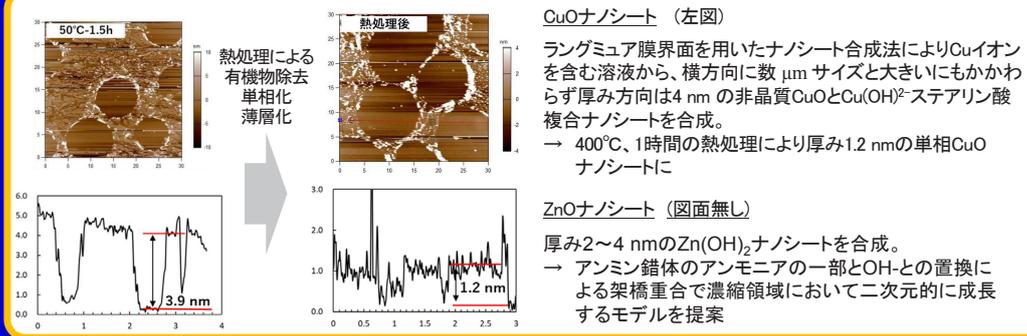
「溶液プロセスで作製した機能性材料の構造・物性研究」

研究代表者：松下伸広(東京工業大学 物質理工学院)
共同研究対応教員：安井伸太郎

一 研究目的 一

ラングミュア膜界面を用いたナノシート合成法によるCuO, ZnOナノシートの作製とその表面構造のAFMにより観察・評価を目的とする。界面のみナノシートの合成反応を行うには、バルク溶液中における酸化物の析出ならびに成長が起こりにくい環境とする必要があることをふまえて、本研究では原料溶液に銅アンミン錯体、亜鉛アンミン錯体を用いる。アンミン錯体からのナノシート合成を通して、ナノシート形成に必要な条件の解明や反応モデルの提案など、研究過程を通じたプロセス開拓を目的とした。

一 研究成果・効果 一



一般研究C(2019年度)

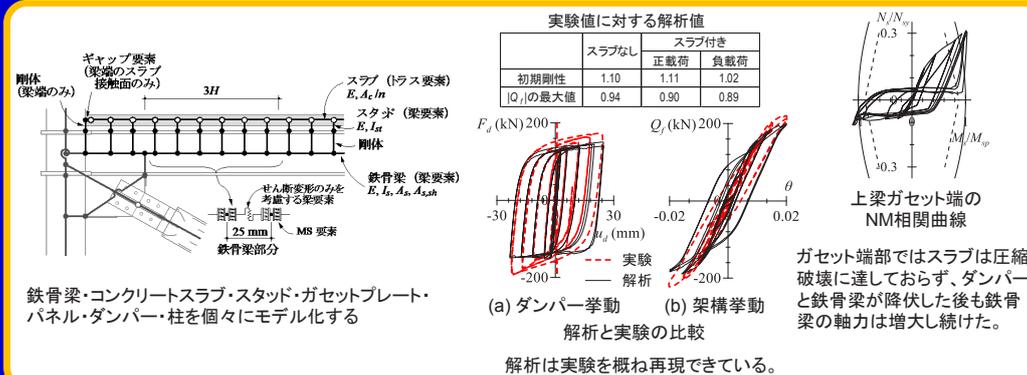
「制振部材を有する鋼構造骨組における合成梁の弾塑性挙動」

研究代表者：松田頼征(東京理科大学)
共同研究対応教員：佐藤大樹

一 研究目的 一

本研究の目的は、軸力と複曲率曲げを受ける合成梁を対象に、合成梁を構成する部材の弾塑性、ひいては主架構の挙動に及ぼす影響を明らかにすることで、鋼構造制振構造における主架構の設計法の確立に資することである。本年度は、昨年度に実施した縮小部分架構試験体の載荷実験¹⁾を解析で再現し、ダンパーが取付く構面とその構成部材にスラブが及ぼす影響を明らかにする。ここに、その結果と考察を述べる。

一 研究成果・効果 一



一般研究C(2019年度)

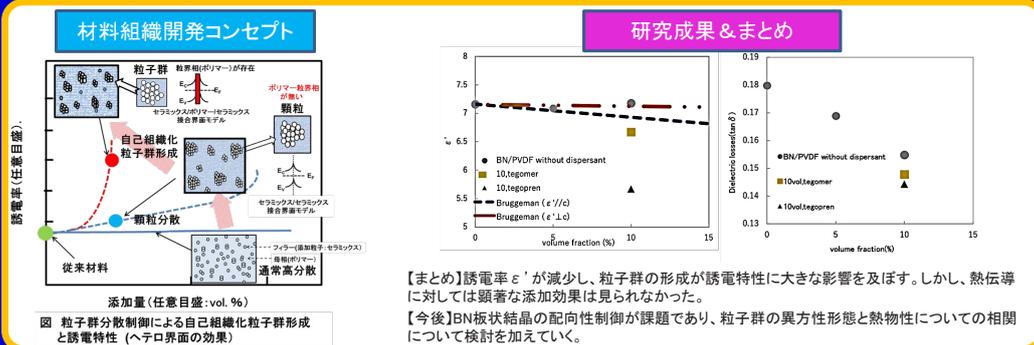
「高熱伝導コンポジット材料の熱物性に対する自己組織化材料組織の効果」

研究代表者：宗像文男(東京都市大学)
 共同研究対応教員：川路 均

研究目的

圧電性ポリマー(PVDF)中に高熱伝導性を示す窒化物微結晶としてBN結晶を母材中に分散配置させ、混合混練過程や熱処理過程で生じる分散粒子の自己組織化を利用した低誘電特性と高熱伝導性の両立を図った方向制御コンポジット材料を開発する。特にBN結晶と母材との界面はコンポジット材料の熱伝導や熱容量の他、特に半導体基板として重要な誘電特性との両立性について、異方性BN板状結晶の添加効果について知見を得る。

研究成果・効果



(学会発表) 富山 涼介, 武田 真理子, 伊東 颯, 気谷 卓, 川路 均, 谷村 誠, 井上 翔秀, 小山 泰正, 宗像 文男, “自己組織化したBN/PVDFコンポジット材料の誘電特性と熱伝導特性の両立”, 日本セラミックス協会 2020年年会, 1P006, 東京, 2020年3月

一般研究C(2019年度)

「コーヒーかす由来糖の高収率製造に寄与する、飼料へ適用可能な糖吸着材の探索」

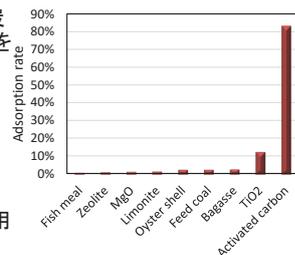
研究代表者：山本 啓博
 共同研究対応教員：原 亨和

研究目的

本研究では、高値で取引されている高付加価値糖であるマンノースを、未利用バイオマスであるコーヒーかすを原料として低コストかつ高収率に製造すると共に、得られたマンノースを糖吸着能を持つ飼料原料に吸着させることで、安価なマンノース含有飼料を提供し畜産業に資することを旨とし、糖吸着能を有する吸着材料を探索することを目的とした。

研究成果・効果

穀類、粕類、草類、無機類などからなる家畜飼料および比較として粉末活性炭(ヤン殻水蒸気賦活)、二酸化チタン(アナターゼ型)を用いてマンノース吸着率を測定した。
 マンノース吸着率は、マンノース溶液中に各種飼料を添加攪拌後、マンノース溶液濃度をHPLCで測定し、マンノース濃度減少率からマンノース吸着率を求めた。
 選定した家畜飼料25種類のマンノース吸着率を測定し、最も吸着率が高かった飼料はバガスおよび飼料用炭で2%であった。比較として測定した粉末活性炭および二酸化チタンの吸着率はそれぞれ83%、12%であったことから家畜用飼料の吸着率は低いと考える。



一般研究C(2019年度)

「準安定六方晶系希土類フェライト薄膜の創製と物性評価」

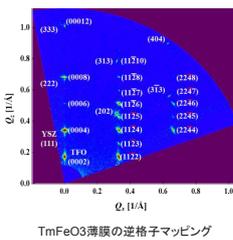
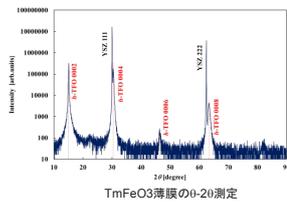
研究代表者：横田 紘子(千葉大学大学院 理学研究院 物理学研究部門)
 共同研究対応教員：安井 伸太郎

— 研究目的 —

マルチフェロイック物質は基礎・応用の観点から注目されているにも関わらず、現存する数が少なく研究の妨げとなってきた。これは強誘電性と磁気秩序がそれぞれ好むd電子状態が異なることに由来している。本研究では、d問題に左右されない六方晶希土類フェライトに着目し、パルスレーザー堆積法を用いた薄膜の創製とその物性評価を目標に実験を行った。

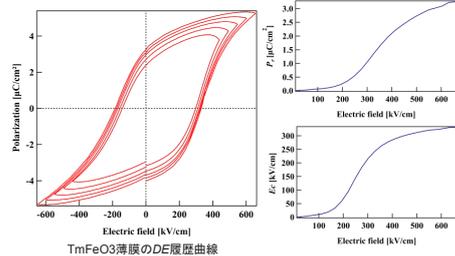
— 研究成果・効果 —

構造評価



薄膜X線回折測定から得られた薄膜が不純物相を含まない軸配向膜であることがわかった。また、面内に関しては、基板に対して30度回転して配向していることがわかった。

DE履歴曲線



室温において強誘電性を有していることを確認できた。

一般研究C(2019年度)

「液中レーザープロセスによるナノ粒子の作製と工学的応用」

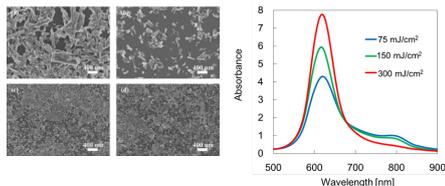
研究代表者：和田裕之(東京工業大学 物質理工学院)
 共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

機能性ナノ粒子は各分野での応用が期待されており、研究が広く行われている。その中でもレーザープロセスによるナノ粒子生成は簡便に様々なナノ粒子を作製できる等の利点から近年注目されている。本研究では、液中レーザーアブレーション法により有機ナノ粒子を作製し、その光学的応用を検討する。また、液中レーザー溶融法によりフッ化物の球状ナノ粒子を作製し、この応用を検討する。

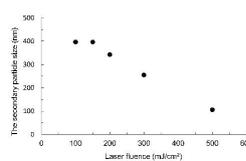
— 研究成果・効果 —

液中レーザーアブレーション法:
 フタロシアニン¹⁾



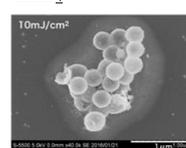
- ・一次粒径: ミクロンサイズの柱状原料がナノサイズに微細化
- ・二次粒径: フルエンスの増加とともに120 nmから80 nm程度まで減少
- ・吸収スペクトル: 620 nmのピークはフルエンスの増加とともに増加し、800 nmのピークはフルエンスの増加とともに減少したことから、結晶構造の変化を示唆

液中レーザーアブレーション法:
 ナフタロシアニン²⁾



- ・一次粒径: 柱状原料が微細化
- ・二次粒径: フルエンスの増加とともに460 nmから100 nm程度まで減少
- ・吸収スペクトル: フルエンスの増加とともにピーク比が変化し、結晶構造の変化を示唆

液中レーザー溶融法:
 NaYF₄:Er,Ybナノ粒子³⁾



- ・ナノ粒子: 球状ナノ粒子が生成
- ・一次粒径は数百ナノメートル
- ・生成メカニズム: レーザー光集光点付近でアブレーション効果によりナノ粒子が生成し、それ以外のところでは溶融効果により球状化

1) T. Akimori, et al. J. Laser Applications, in press. 2) K. Omura, R. et al. Jpn. J. Appl. Phys. in press. 3) K. Yagi, et al. J. Laser Applications, in press.

国際ワークショップ(2019年度)

「第11回先進セラミックスの科学と技術に関する国際会議 (STAC-11)」

開催日時: 2019年7月9日(火)~11日(木)

場所: つくば国際会議場

研究代表者: 大垣武(物質・材料研究機構)

共同研究対応教員: 東正樹

— 研究目的 —

先進セラミックスの科学と技術に関する国際会議(STAC)は、新しい無機材料科学・技術を創生する国際会議として2007年に第1回が開催され、今回は11回目となる。STAC-11では、無機材料に関連する様々な研究を11のセッションで構成されるプログラムに編成し、それぞれのセッションで最先端の研究に関する講演、議論を実施する。さらに、研究分野の異なる無機材料研究者同士の情報共有、交流の場となることも目的としている。

— 研究成果・効果 —

STAC-11には、国内外から無機材料を研究対象とする研究者194名が参加した。プログラムは、11のセッションから構成され、口頭講演80件、ポスター講演79件、合計159件の講演が、それぞれのセッションに割り振られ、発表、討論が行われた。

口頭講演では、海外の研究機関から12名、国内の研究機関から16名の研究者を招き、28件の招待講演が行われた。ポスター講演では、厳正な審査により、金賞2件、銀賞6件の優秀ポスター賞が選ばれ、懇親会で表彰式が行われた。

懇親会には、100名以上の研究者が参加し、研究に関する情報交換のみならず、参加者同士の交流を深める場として有益であった。



URL: <https://www.nims.go.jp/fm/STAC2019/index.html>

ワークショップ(2019年度)

「バルクセラミックスの信頼性に関するワークショップ」

開催日時: 2019年12月18日(水) 14:00- 17:00

場所: 東京工業大学キャンパスイノベーションセンター2階多目的室3

研究代表者: 田中諭 (長岡技術科学大学)

共同研究対応教員: 若井史博

— 研究目的 —

本ワークショップでは、粉体プロセスで作られる機能性セラミックス、ガラス、バイオセラミックス、エンジニアリングセラミックスなどのバルクセラミックス各分野の研究者が一同に会して、セラミックスの高信頼性化を実現するための具体的な議論をし、その結果として、次世代バルクセラミックス開発のための基盤技術と基礎科学の構築することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

(1) 講演件数 7件 参加者15名

(2) 内容: 2021年春に開催予定の焼結国際会議Sintering2021の開催のためのワークショップを兼ねて、焼結に関する最近のトピックから基礎的な内容について議論した。コールドシタリング、急速加熱、通電加圧焼結、フラッシュ焼結、室温での緻密化など焼結に関する極最近の話題を中心とした内容となった。

(3) 効果: セラミックスの共通の焼結が各応用分野で活発に研究されていることが認識され、次年度以降もホットなトピックとなることがわかった。



Sintering 2021国際会議: <https://www.sintering2021.org/>
バルクセラミックス研究会HP: <https://mst.nagaokaut.ac.jp/ceramsci/Bulkceramics/bulk%20ceram.html>

ワークショップ(2019年度)

「卓越した機能発現を目指したセラミックプロセッシングに関するワークショップ」

開催日時: 令和元年8月3日(土)(第1回)、令和元年12月8日(日)(第2回)

場所: 東京工業大学キャンパスイノベーションセンター東京(CIC東京)

研究代表者: 脇谷 尚樹(静岡大学)

共同研究対応教員: 片瀬 貴義

— 研究目的 —

薄膜、微粒子、バルク等幅広い形態の種々の機能性セラミックスについてプロセッシングを最適化することにより卓越した機能を発現させることを目指す。この目的を達成するため、本ワークショップでは多くのセラミックスの研究者によってプロセッシングが結晶構造、微構造、ナノ構造、バンド構造やその他の物性に及ぼす影響について議論・検討を行う。

— 研究成果・効果 —

(1)[第1回研究会] 講演者: 倉科 佑太 助教(東京工業大学)、荻野 拓 先生(産業技術総合研究所)、大野 智也 教授(北見工業大学)、塩田 忠 准教授(岡山大学) 参加者: 16名、参加機関: 9機関

[第2回研究会] 講演者: 片瀬 貴義 准教授(東京工業大学)、朝倉 裕介 助教(東北大学)、増田 淳 先生(産業技術総合研究所)、川口 昂彦 助教(静岡大学)、参加者18名、参加機関: 10機関

(2)今年度で9年目のワークショップとなったプロセス研究会であるが、これまでも劣らず熱のこもった議論がなされた。超音波のバイオ応用、バイオ応用も視野に入れた炭化物薄膜コーティング、地元企業との共同研究によるホタテ貝殻を用いた酸土矯正剤の開発、新規機構に巨大熱電特性の発現、複合アニオンに基づく新規材料の設計と合成、光触媒応用に向けた酸窒化物ナノ粒子の形態制御、酸窒化物薄膜の新規製膜方法の開発といった、プロセス・応用両面の最先端研究に関する、これまでに無い新しい分野の情報交換がなされた。これにより、研究の幅が広がった・新しい知見を得られた、などの意見が数多く聞かれ、参加者にとって有意義な研究会となった。また参加者間の協力による新たな研究成果も得られつつある。研究会の参加者にもたいへん好評であることから、今後も継続して研究会の開催及び共同利用研究として継続させて頂きたい。