

特定研究 (2021年度)

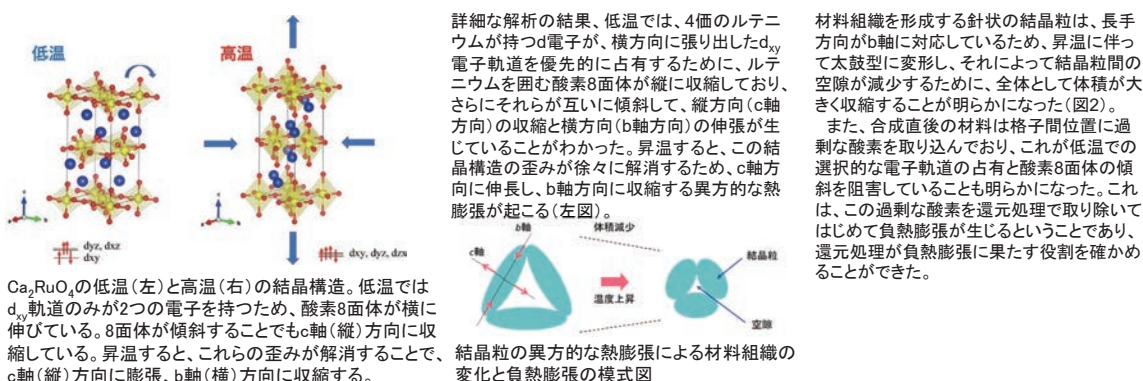
「巨大負熱膨張材料を用いた熱膨張抑制技術の確立」

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)

一 研究目的 一

負熱膨張材料は、光通信や半導体製造装置などの構造材で、精密な位置決めをさまたげる熱膨張を補償(キャンセル)できる。還元処理した層状ルテニウム酸化物 Ca_2RuO_4 の焼結体は大きな負熱膨張を示すが、そのメカニズムはこれまで不明であった。そこで本研究では Ca_2RuO_4 の結晶構造変化を、電子線回折や放射光X線解析、第一原理計算などの方法で調べた。

一 研究成果・効果 一



Lei Hu, Yingcai Zhu, Yue-wen Fang, Masayuki Fukuda, Takumi Nishikubo, Zhao Pan, Yuki Sakai, Shogo Kawaguchi, Hena Das, Akihiko Machida, Tetsu Watanuki, Shigeo Mori, Koshi Takenaka, Masaki Azuma, "Origin and absence of giant negative thermal expansion in reduced and oxidized Ca_2RuO_4 ", Chemistry of Materials, **33** (2021) 7665–7674.

特定研究 (2021年度)

「計算・データ科学による電子材料の機能解明と設計」

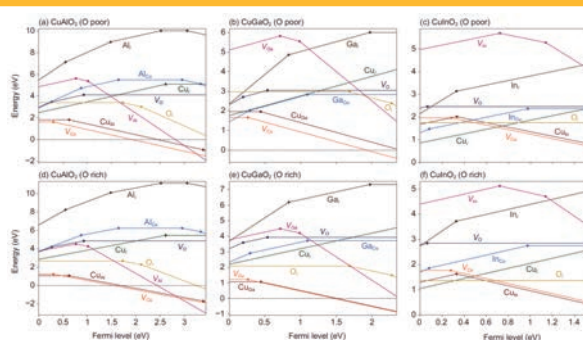
研究代表者：大場史康(東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所)

一 研究目的 一

電子材料の真の理解と的確な設計には、機能の起源となる原子・電子スケールの構造まで掘り下げた考察が不可欠である。本課題では、最先端の第一原理計算手法並びにデータ科学手法を駆使して、電子材料の原子・電子構造と機能の相関を解明することを目的とする。また、得られた知見をもとに新材料の設計・提案へと展開することを目指す。

一 研究成果・効果 一

研究成果の一例として、 CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$) 中の固有点欠陥の形成エネルギーを右図に示す。いずれの物質においても、Cu空孔は低い形成エネルギーを示し、比較的浅いアクセプタ準位を形成するため、ホール生成に寄与すると考えられる。また、 CuAlO_2 および CuGaO_2 では、フェルミレベルが高い場合、アクセプタ型欠陥のうち特にCu空孔が低い形成エネルギーを示し、ドナーを添加してもCu空孔がキャリア電子を補償することでn型ドーピングが制限されることが示唆される。以上の結果は、 CuMO_2 および関連物質のキャリア生成・補償機構を理解・設計する上で重要な指針になると考えられる。



CuMO_2 ($M = \text{Al, Ga, In}$) 中の固有点欠陥の形成エネルギーのフェルミレベル依存性。フェルミレベルの下限は価電子帯上端、上限は伝導帯下端に対応。

発表論文： 1. T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, and F. Oba, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 104602 (2021).
2. A. Takahashi, Y. Kumagai, H. Aoki, R. Tamura, and F. Oba, *Sci. Tech. Adv. Mater: Methods*, in press.

特定研究 (2021年度)

「建築物の損傷制御のための構造的評価方法の開発」

研究代表者：西村康志郎(東京工業大学科学技術創成研究院)

— 研究目的 —

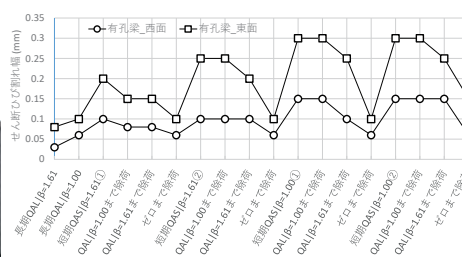
建築物の構造設計は、許容応力度設計から終局限界耐力設計となり、2000年くらいからは性能評価型設計に移行しつつある。この研究では、主にコンクリート系の建築構造物を対象に、損傷制御のための構造的評価方法の開発を目的としている。鉄筋コンクリート梁(RC梁)には配管などのために貫通孔を設けられるが、ここでは、貫通孔を有するRC梁部材の損傷制御のための許容せん断耐力式を検証し、開孔低減率の見直しを行う。

— 研究成果・効果 —

- 貫通孔のあるRC梁のせん断耐力は、開孔比(=開孔径 H /梁せい D)に低減率 β を乗じた分だけ低減させる。
- 現行は $\beta=1.00$ で、低すぎるのが問題。
- 貫通孔の無いRC梁と有孔梁の実験結果より、ひび割れ性状を比較。
- 許容せん断耐力式の開孔低減率を引き上げることを提案。



せん断破壊した貫通孔のあるRC梁



貫通孔を有する梁ののせん断ひび割れ幅推移

関連論文：柴尾 海斗, 西村 康志郎: 貫通孔と鉄筋のカットオフを有するRC梁の構造性能に関する実験的研究, 日本建築学会構造系論文集, Vol.86, No.785, pp. 1095-1105, 2021.7

International CRP 2021—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 -

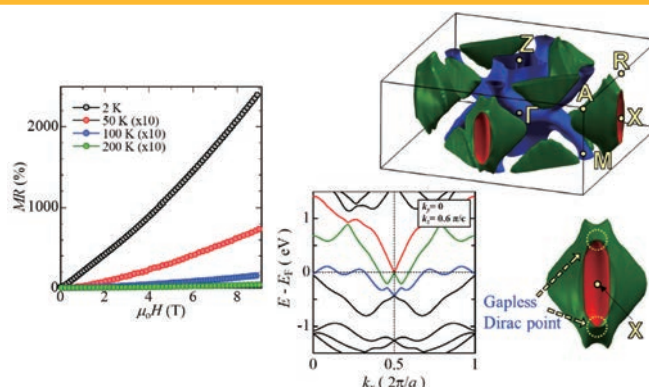
With the advent of topological electronic materials, the concept of semimetals has expanded: topologically-protected zero-gap (= massless) electronic systems are now classified as Dirac/Weyl semimetals. In this study, we have investigated the magnetotransport properties and electronic structures of a topological Dirac nodal-line semimetal, LaAgBi₂.

- Results -

We succeeded in growing high quality single crystals of LaAgBi₂, which was evidenced by the values of the residual resistivity (~250 nΩcm at 2 K) and the residual resistivity ratio (~130).

The MR showed quadratic field-dependence and reached 2400% at 9 T and 2 K without saturation.

First-principles calculations revealed that LaAgBi₂ had nonsymmorphic symmetry-protected "massless" Dirac nodal-line dispersions across the Fermi energy, suggesting an important contribution to the observed large magnetoresistance.



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

[1] M. Murase and T. Sasagawa, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 055003 (2020).

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

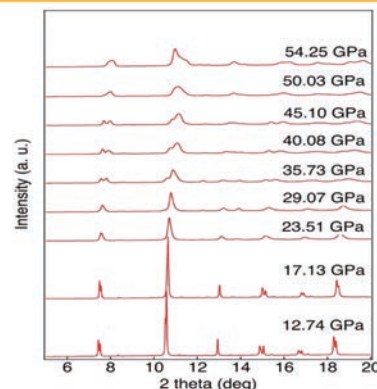
International CRP 2021 – Category A

Pressure effects on the unique charge order and spin reorientation of PbFeO_3 **Project Coordinator Name: Youwen Long (Institute of physics, CAS)****MSL Faculties: Masaki Azuma****- Aims of Research -**

This project aims to apply high pressure methods to investigate the lattice, charge and spin structural evolutions in PbFeO_3 . It is highly expected to find exotic pressure-induced charge state transition, crystal structure evolution and/or tunable effects on the spin reorientation transition in this compound. These new findings can significantly accelerate other researches on functional materials.

- Results -

High-quality PbFeO_3 perovskite samples with a good single phase was obtained under high-pressure and high temperature conditions. The ambient detailed crystal structure and charge states of both Fe and Pb were determined. We performed synchrotron x-ray diffraction under high pressure of 0-55 GPa. Two structural phase transitions were found to occur around 35 and 50 GPa, respectively, as shown in the right figure. Since intermetallic charge transfer often occurs in PbMO_3 family and the distinctive charge ordering state in PbFeO_3 , the transition of $\text{Pb}^{4+} + 2\text{Fe}^{3+} \rightarrow \text{Pb}^{2+} + 2\text{Fe}^{4+}$ and pressure induced new charge ordering may be responsible for these two transitions.

Web page: <http://physics.aalto.fi/groups/nanospin/>

International CRP 2021 – Category B

Enhancing seismic behavior of timber structures**Project Coordinator Name: Andreea Casuta****MSL Faculties: 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. A textbook for students is under development, with a special purpose to teach students about the traditional construction methods in both Japan and Romania.

- Results -

Nowadays, most of the people wish new materials for their new houses and this is a sound reason, to actually use the recent research results on new materials. Other people want to learn from tradition and use in a modern and more practical way in the present, taking advantages of the new technologies applied for natural materials, such as insulation panels, rammed earth, cob, etc. But in order to learn from tradition it is necessary to understand it first.

This book focuses on and describes two completely different countries' traditional timber houses. The local materials used for these houses are not very different, although 9000 km apart. The way the people used them is also not very different, and the feeling one gets while visiting such a house is, in fact, the same, you can actually touch the past, the history, the baggage that made us nowadays who we are, and we tend to forget it. This book is about noticing the details of each traditional construction method and compare them between them, with an engineer's eye and taking into account the local seismic culture, which both have in common, although not at the same intensity and frequency.



Tfmo.utcb.ro

International CRP 2021 – Category B

Surrogate Resilience Modeling of Steel Moment-Resisting Frames

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

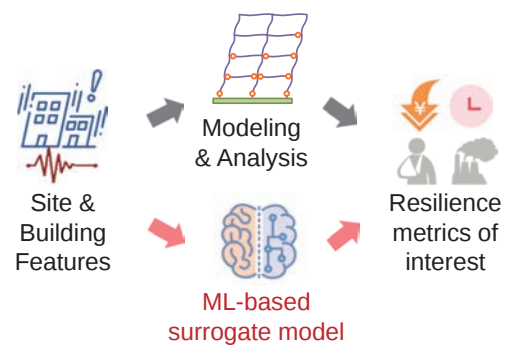
MSL Faculties: KISHIKI Shoichi

- Aims of Research -

The project aims to bridge the gap between preliminary design variables and resilience metrics of interest by developing a machine learning-based surrogate model, which aids the design practitioners in selecting satisfying design combinations of stiffness and strength in the preliminary seismic design. With a proper choice, the time and effort involved in iterative design revisions can be drastically reduced.

- Results -

The project proposed a machine learning-based surrogate resilience modeling method in preliminary design for the support of direct resilience-informed design approach. An illustrative application to the steel moment-resisting frames (SMRF) office buildings validated its effectiveness based on a data set composed of 10,000 code-compliant SMRFs subjected to 100 strong ground motions. The XGBoost model performed best to obtain the resilience index R as regards loss and recovery time among six regression algorithms. The SHapley Additive exPlanations (SHAP) approach highlights the importance of the seismic-hazard-related design basic acceleration and the stiffness-related building period coefficient on the prediction of the XGBoost model.



Web page: http://faculty.dlut.edu.cn/cuiyao/zh_CN/index.htm

International CRP 2021 – Category B

Numerical Modeling and Simulation of Rocking Walls with Energy Dissipaters

Project Coordinator Name: David Mukai (University of Wyoming)

MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

The primary aims of this research are to develop a numerical model for rocking concrete walls with energy dissipaters, calibrate this model, model walls for validation, conduct simulations of buildings with traditional and rocking walls, estimate impact of rocking walls on damage levels.

- Results -

This project has resulted in a calibrated numerical model for rocking walls with energy dissipaters, multiple parameter studies of walls with energy dissipaters. The team was able to develop the numerical model, calibrate it, use it to model structures, and finally evaluate limit states of rocking concrete walls with dissipaters. This has resulted in a publication:

Taku Obara , Susumu Kono & David Mukai (2020): Damage Evaluation and Limit States of Rocking Concrete Walls with Energy Dissipaters, Journal of Earthquake Engineering.

International CRP 2021 – Category B

Magnetotransport Studies of Collective Dynamics in Highly Correlated Electron Systems

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

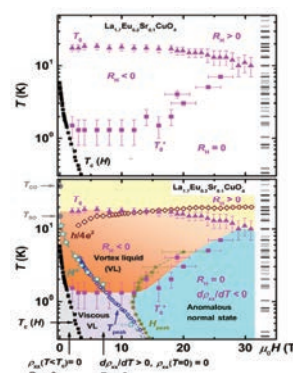
MSL Faculties: Takao Sasagawa

- Aims of Research -

The central issue for understanding the high-temperature superconductivity in cuprates is the nature of the ground state that would have appeared had superconductivity not intervened. The purpose of this study is to gain new insight into the electronic ground state of high- T_c cuprates by means of the Hall effect.

- Results -

The Hall effect on $\text{La}_{1.7}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_{0.1}\text{CuO}_4$ was measured over the entire in-plane T - H vortex phase diagram for T down to $T/T_c^0 \sim 0.003$ and fields up to $H/T_c^0 \sim 10$ T/K, and deep into the normal state. We found the vanishing of the Hall coefficient in this field-revealed normal state for all $T < (2 - 6)T_c^0$, where T_c^0 is the zero-field superconducting transition temperature. The behavior of the high-field Hall coefficient is fundamentally different from that in other cuprates such as $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, and may imply an approximate particle-hole symmetry that is unique to stripe-ordered cuprates. Our results highlight the important role of the competing orders in determining the normal state of cuprates.

[1] Z. Shi, P.G. Baity, J. Terzic, B.K. Pokharel, T. Sasagawa, and D. Popović, Nature Commun. **12**, 3724 (2021).[2] Z. Shi, P.G. Baity, J. Terzic, T. Sasagawa, and D. Popović, Nature Commun. **11**, 3323 (2020).

International CRP 2021 – Category B

Ultrafast phonon dynamics in heavy fermion materials

Project Coordinator Name: Fang Xu (Southwest University of Science and Technology)

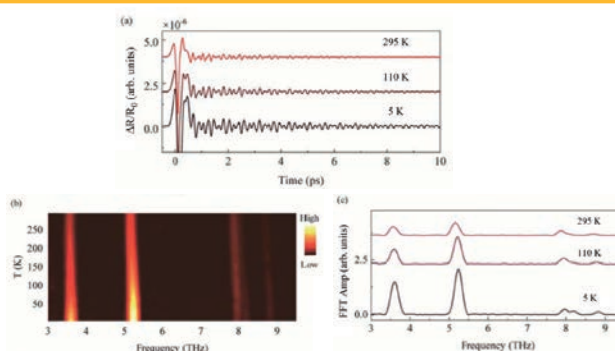
MSL Faculties: Kazutaka Nakamura

- Aims of Research -

The Kondo effect in electronic correlation systems manifests as the emergence of collective hybridization and the formation of an energy gap at the coherent temperature T^* . Thus, to verify the existence of the Kondo effect in CeNiGe₃ material, femtosecond-resolved coherent phonon spectroscopy, which provides a non-equilibrium way to study the dynamics of collective bosonic excitations in CeNiGe₃, are used in this work. And we report a comprehensive study of the temperature-dependent dynamics of bosonic quasiparticles in CeNiGe₃ utilizing coherent phonon spectroscopy.

- Results -

The phenomena of non-equilibrium dynamics of bosonic quasiparticles in CeNiGe₃ does not exhibit any features which can be associated with the emergence of collective hybridization induced by the Kondo effect at low temperature is revealed by femtosecond-resolved coherent phonon spectroscopy. Instead, the temperature-dependent coherent phonon behavior can be well described by the common anharmonic effect. Moreover, we have also indicated that the appearance of the crystal field effect can affect the lattice vibrations in CeNiGe₃.



International CRP 2021 – Category B

Retrofit of Hi-rise RCC Buildings in Nepal (Renovation and Strengthening of Institutional Brick Masonry Buildings)

Project Coordinator Name: Gokarna Bahadur Motra

MSL Faculties: Prof. Susumu Kono

**- Aims of Research -**

Evaluating seismic performance of brick masonry buildings with precast beams and slabs. Finding technically viable retrofit options and evaluating seismic performance.

- Results -

- Moderate decrease in fundamental period with retrofit options (24-29%), indicates the increase on structural stiffness (performance).
- RC-jacketing found to be most efficient option of strengthening for masonry structures (80% increase in capacity, 48% decrease in roof displ.).
- RCC columns combined with brick piers via shear-keys, is the new option developed, moderately increased the capacity (57%) and reduces roof displacement by 26%.
- RCC columns combined with piers via shear-keys only at ground storey, slightly increased the capacity (14%) and reduces roof displacement by 21%.

International CRP 2021 – Category B

Multi-spring model to account for bond-slip of reinforcement bars in the beam-column joint region of reinforced concrete structures

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

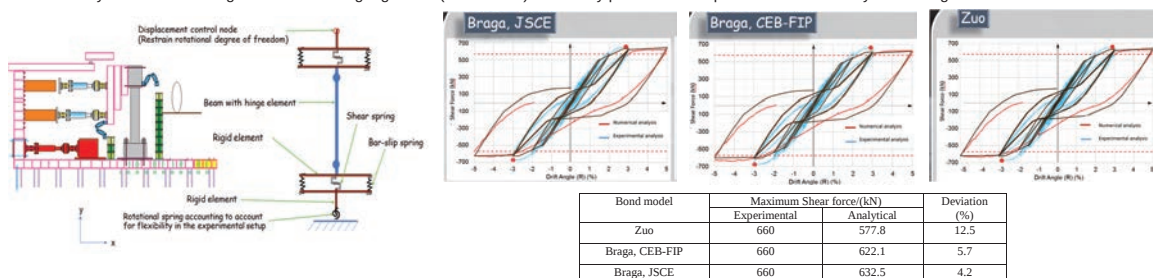
MSL Faculties : Prof. KONO Susumu

- Aims of Research

To develop a multi-spring macro model to account for bond-slip of reinforcement bars in the beam-column joint region of reinforced concrete structures and validate with the full -scale

- Results -

The specimen is subjected to reverse cyclic loadings. Cyclic analysis results are compared with experimental results for the selected specimen to check the accuracy of predictions from considered bond models. Three selected bond models from (JSCE 2005; Braga-CEB-FIP 1990; Zuo 2000) are considered. Comparison of analytical and experimental results are shown in Figure 5. The numerical results obtained showed good agreement with the experimental results. Based on the further analysis the energy dissipation of the numerical model is due to nonlinear behavior of the concrete. Reinforcement steel behaved mainly elastic. Similar results are obtained for other specimens. Based on the results obtained the model is particularly suitable for simulating the response of concrete buildings in which slippage of longitudinal bars are significant under lateral loads. Experimental and analytical results are compared at 3% drift ratio as shown in Table. Analytical model of Braga with bond strength given in (JSCE code) accurately predict the bar pullout stress under cyclic loading.



Undergraduate Thesis was published in 2021, Faculty of Engineering, University of Peradeniya, Sri Lanka

国際研究B(2021年度)

「水からのX線/テラヘルツ波増強を目指したレーザー・プラスマのコヒーレント励起」

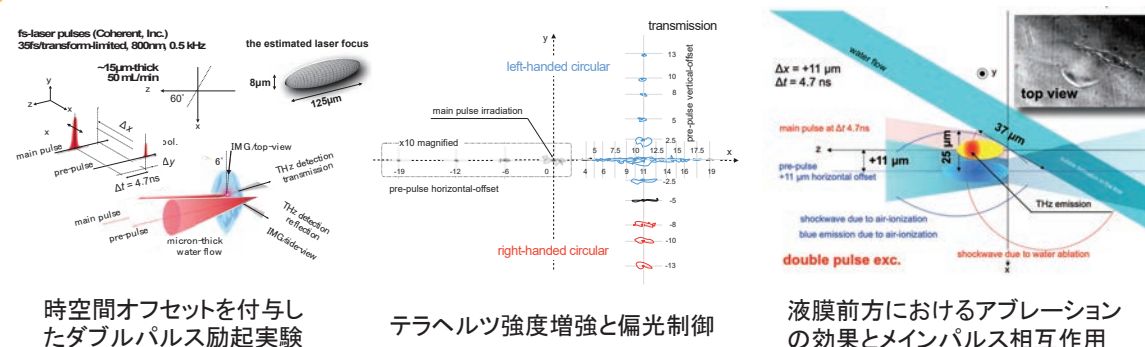
研究代表者：畑中耕治(中央研究院應用科學研究中心)

共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

高強度ダブルパルス励起条件では、プレパルス照射により対象試料表面の過渡的な改質を誘起した後メインパルスを照射することでテラヘルツ発生に至る。プレパルスの強度が十分高く遅延時間も数nsと長い場合、試料表面の電子励起状態の生成緩和に続き、アブレーションと呼ばれる巨視的形態変化が誘起される。この条件においては、プレパルスとメインパルスを同軸で照射する条件が必ずしも最適とは限らず、アブレーションに起因する試料表面の過渡的形態変化に応じた空間オフセットを考慮する必要があると考えられる。本研究では、ダブルパルス照射(プレパルス+メインパルス)の遅延時間(Δt)と照射する相対的位置に対して空間オフセット($\Delta x, \Delta y, \Delta z$)を精緻に付与した上で励起光として用い、試料を蒸留水の液膜としテラヘルツ波の発生機構を明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —



発表論文: H. -H. Huang, et al., "Giant Enhancement of THz Wave Emission under Double-Pulse Excitation of Thin Water Flow", Applied Sciences, 10(6), 2031-2044 (2020). H. -H. Huang, et al., "Spatio-temporal control of THz emission", submitted (2022). H. -H. Huang, et al., "Shockwave-assisted THz wave emission from air", in preparation.

International CRP 2021 - Category B

Quantum transport evidence of topological band structures of kagome superconductor CsV_3Sb_5

Project Coordinator Name: Hechang Lei

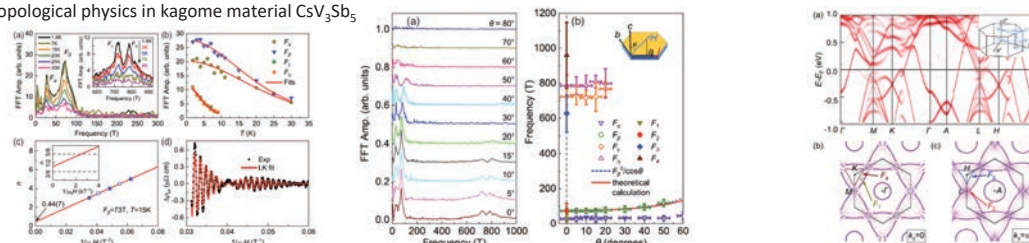
MSL Faculties: Toshio Kamiya

- Aims of Research -

The original target of this project is exploration correlated topological materials with exotic physical properties. CsV_3Sb_5 is a good candidate to study the relation between topological electron structure and correlation effects. In this project, we synthesized CsV_3Sb_5 single crystals by the Sb flux method and then studied the magnetotransport properties under high magnetic field to reveal the topological band structure of CsV_3Sb_5 .

- Results -

The Shubnikov-de Haas (SdH) oscillations emerge at low temperature and four frequencies of $F_\alpha = 27$ T, $F_\beta = 73$ T, $F_\gamma = 727$ T, and $F_\delta = 786$ T with relatively small cyclotron masses are observed. For F_β and F_γ , the Berry phases are close to π , providing clear evidence of nontrivial topological band structures of CsV_3Sb_5 . Furthermore, the consistence between theoretical calculations and experimental results implies that these frequencies can be assigned to the Fermi surfaces locating near the boundary of Brillouin zone and confirms that the structure with an inverse Star of David distortion could be the most stable structure at charge density wave (CDW) state. These results will shed light on the nature of correlated topological physics in kagome material CsV_3Sb_5 .



Analysis of SdH oscillations in CsV_3Sb_5 for $H//c$ Angular dependence of SdH oscillations Comparison between theoretical and experimental results

International CRP 2021 – Category B

Misfit lattice strain effect on the crystal growth behavior within epitaxially grown BiFeO₃ film

Project Coordinator Name: In-Tae Bae MSL Faculties: Shintaro Yasui

- Aims of Research -

BiFeO₃ is by far the most widely studied multiferroic material because of its unique property, i.e., the combination of large ferroelectric polarization and G-type antiferromagnetism well above room temperature, implies tremendous potential in spintronics and smart energy applications. There has been extensive effort to improve the ferroelectricity and antiferromagnetism properties in thin film BiFeO₃ through so called "strain engineering". With this approach, the epitaxial BiFeO₃ films grown on a variety of single crystalline oxide substrates are under lattice stress.

- Results -

An epitaxial BiFeO₃ layer was grown on LSAT (100) substrate to investigate lattice misfit effect of LSAT on the BiFeO₃ overlayer in terms of crystal structure, lattice strain status, and domain structure. TEM and SAED data was acquired to show microstructural and crystal structural details of the BiFeO₃ layer, respectively. TEM data was further compared with HAADF-STEM image to quantitatively evaluate lattice imperfections such as dislocation to evaluate strain status within BiFeO₃ film. SAED pattern was further compared with XSRM data to quantitatively evaluate the volume-averaged amount of lattice strain applied within BiFeO₃. Since XSRM is volume-averaged information as opposed to SAED being highly localized information, XSRM data can also be used to study BiFeO₃ domain structure. Moreover, while most of the previous reports have used pseudocubic approximation to describe domain structures found in BiFeO₃, we used hexagonal notation, which describes rhombohedral symmetry flawlessly, to discuss domain structure. The result was compared with those acquired by using pseudocubic notation to find whether there are any discrepancies or not. Based on the epitaxial relationship determined by SAED and XSRM data, atomistic model was created to discuss about growth mechanism of BiFeO₃ film. Overall, the suitability of LSAT substrate to grow high-quality BiFeO₃ was discussed.

International CRP 2021 – Category B

Development of ultra-high performance and effective utilization technology of fiber reinforced cementitious composites

Project Coordinator Name: Jeongsoo Nam (Chungnam National University)

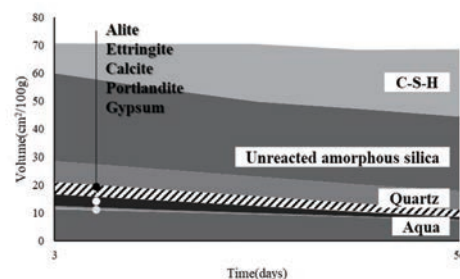
MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

In this study, we examined whether non hydrated reactants inside HSCC can be reduced using waste glass beads (WGB) as LWA based on the internal hydration mechanism of high-density concrete. In addition, WGB was subjected to pre-wetting to examine the internal hydration improvement effect of water-containing aggregates, and the hydration tendency by age was identified through thermodynamic modeling.

- Results -

The experimental results of this study show that the WGB used in HSCC can improve the internal hydration reaction. It was found that the curing method for HSCC mixed with WGB can affect the number of hydration products according to age which also influences the extent of strength development. In case of steam curing, strength development and internal hydrate formation levels at early ages were almost resembled those of room temperature curing at 56 days of age. Even after the completion of steam curing, the proportion of unreacted silica inside was partially reduced and the internal moisture content was maintained at a certain level by pre-wetted WGB. Therefore, it is judged that WGB can contribute to reducing unreacted hydrates inside HSCC.



<Typical thermodynamic modeling of HSCC with WGB>

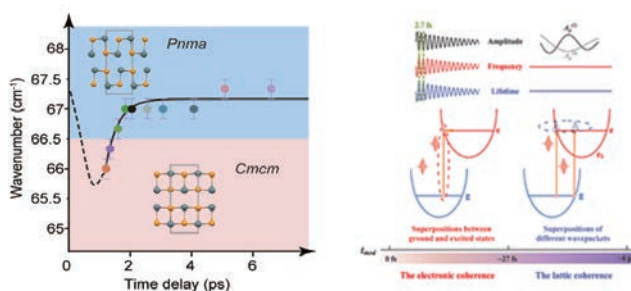
International CRP 2021 – Category B

Photo-induced ultrafast and coherent control in SnSe**Project Coordinator Name: Jianbo Hu** (Southwest University of Science and Technology)**MSL Faculties: Kazutaka Nakamura****- Aims of Research -**

This project aims to investigate the non-equilibrium property in SnSe. In particular, the ability to drive symmetry switch by ultrafast lasers without assistance of temperature or pressure and to temporally and discriminatorily manipulate phononic processes in thermoelectric materials will be demonstrated and assessed. These observations not only reveal fascinating physical phenomena, but also provide insight for the design optimization of the next generation of thermoelectric materials.

- Results -

Our results demonstrate that optical excitations can transiently switch the point-group symmetry of the crystal from *Pnma* to *Cmcm* at room temperature in a few hundreds of femtoseconds with an ultralow excitation carrier density. Furthermore, we have demonstrated that utilizing coherent control spectroscopy, electronic and lattice coherences inherited from optical excitations can be exploited independently to manipulate phonon oscillations in a highly selective manner.



Jianbo Hu, et al. J. Phys. Chem. Lett. 13: 442 (2022); 13: 2584 (2022)

Web page: <http://physics.aalto.fi/groups/nanospin/>

International CRP 2021 – Category B

Enhanced negative thermal expansion and crystal structure of Pb/Bi-based perovskites under High Pressure**Project Coordinator Name: Jun Chen** (University of Science and Technology Beijing)**MSL Faculties: Masaki AZUMA****- Aims of Research -**

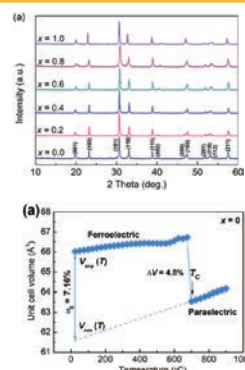
- (1) Preparation of new $\text{PbTiO}_3\text{-BiMeO}_3$ compounds that could exhibit enhanced NTE by high-temperature and high-pressure method.
- (2) Study the crystal structure and electron structure of these materials by using diffraction and absorption spectrum based on the large synchrotron radiation facility (SPring-8).

- Results -

(1) A series of $0.5\text{PbTiO}_3\text{-}0.5\text{BiCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$ compounds have been synthesized by the high-pressure and high-temperature method. Its crystal structures have been studied by the temperature dependence of the synchrotron X-ray diffraction. Controllable thermal expansion from large volume contraction in a limited temperature window ($x = 0$, $\Delta V = -4.8\%$, $675 \sim 700^\circ\text{C}$) to a nonlinear strong NTE over a wider temperature range ($x = 0.8$, $\alpha_V = -6 \times 10^{-5}/^\circ\text{C}$, $\text{RT} \sim 600^\circ\text{C}$) were achieved in these ferroelectrics.

(2) High-resolution synchrotron X-ray diffraction data of a series of perovskite-type ferroelectrics, such as, $\text{NaNO}_3\text{-Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$, La-doped PbZrO_3 solid solutions have been collected at the state-of-the-art the large synchrotron radiation facility SPring-8.

Part of these results have been submitted to ACS Applied Materials & Interfaces, Inorganic Chemistry journals.



International CRP 2021 – Category B

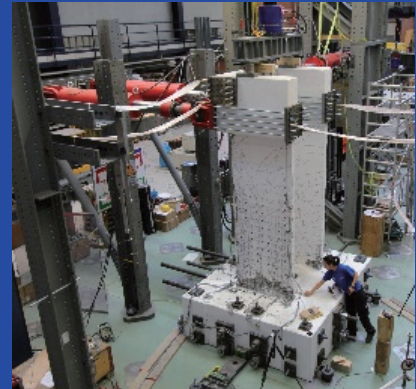
International database on bi-directional tests on RC core walls

Project Coordinator Name: Prof. Katrin Beyer, EPFL, Switzerland**MSL Faculties:** Prof. Susumu (Sam) Kono**- Aims of Research -**

The aim of the research is to establish a catalogue of laboratory tests on bi-directional tests on RC walls. While such databases exist for uni-directional tests, it has yet to be established for bi-directional tests. All relevant data (cross sections, boundary conditions, force-displacement hysteresis) will be made publically available where possible.

- Results -

Our understanding of the seismic response of RC walls is largely based on findings from quasi-static cyclic tests, which allow to study the damage evolution in a systematic way. However, the large majority of these tests have been conducted as uni-directional tests and it is therefore important to understand in which aspects results from uni-directional tests differ from those of bi-directional tests. Tests on planar and non-planar walls showed that the stiffness is not significantly affected by bi-directional loading. For planar walls the strength and deformation capacity is also rather independent of the load path while for non-planar walls the load path has an effect on the strength and deformation capacity. Based on the test data available, the deformation capacity in the principal directions is reduced by $\sim 1/3$ if the wall is subjected to bi-directional loading.



Test setup for bi-directional test at EPFL

International CRP 2021 – Category B

Proposal of detailed assessment procedure for residual capacity of reinforced concrete buildings

Project Coordinator Name: Kenneth J. Elwood, University of Auckland, NZ**MSL Faculties:** Sam Kono**- Aims of Research -**

The expectation is to provide recommendations for New Zealand's detailed post earthquake damage evaluation guidelines to allow a more accurate assessment of damaged building performance. There is also an expectation to provide suggestions for alternative design approaches with the aim of improving resilience of concrete buildings to seismic events.

- Results -

The results indicate that the fatigue damage sum does not exceed approximately 10%, provided the effective plastic hinge length is $0.4h$ or greater. This conclusion was not sensitive to the parameters used, including the fatigue life relationship, meaning that fatigue is unlikely to be consequential provided:

- The maximum chord rotation is less than 0.02 rad,
- The significant duration (D_{5-95}) of the damaging earthquake was less than 45 seconds, and
- The effective plastic hinge length is greater than 0.4 times the member depth when calculated on the basis commonly adopted in New Zealand (NZSEE et al. 2018).

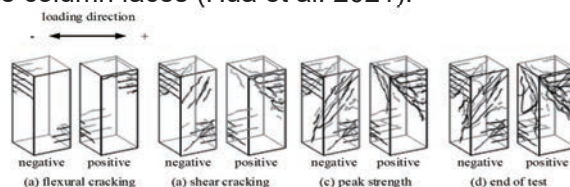
International CRP 2021—Category B

EFFECT OF LOADING DIRECTION ON SEISMIC SHEAR FAILURE IN REINFORCED CONCRETE COLUMNS**Project Coordinator Name:** Marc Eberhard, University of Washington**MSL Faculty:** Professor Susumo Kono**- Aims of Research -**

Modify the current evaluation methodology (Hua et al. 2019) to apply to columns that are deformed in a general direction, not just along one of the principal axes of a column.

- Results -

The Covid-19 pandemic made it impossible for US researchers to visit Tokyo Institute of Technology in 2021. Independently, a model was 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 (Hua et al. 2021).



Hua, Jingjing, Gu, Xiang-Lin, Eberhard, Marc O., Wouagabe, Jusin (2021). "Influence of Lateral Loading Direction on Seismic Behavior of Shear-Critical Reinforced Concrete Intermediate Short Columns." Engineering Structures. February. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2021.113573>.

International CRP 2021—Category B

Post-earthquake damage evaluation of RC columns reparability and residual capacity**Project Coordinator Name:** Marco Di Ludovico (University of Naples Federico II, Italy)**MSL Faculties:** Susumu Kono**- Aims of Research -**

The present project aims at the definition of a framework for assessing the residual capacity and the reparability of reinforced concrete (RC) structures in the aftermath of an earthquake. A methodology for the seismic damage quantification for existing RC structures has been developed in correlation with the variation of dynamic properties (period elongation) through vibration-based SHM.

- Results -

A set of 250 rectangular RC bridge piers with solid cross-section has been generated to assess the range of variation of the selected modal-based damage features as a function of the seismic damage level. The definition of the RC bridge piers dataset relies on the Latin Hypercube sampling technique. Lower bounds (i.e., 16th percentile) and upper bounds (i.e., 84th percentile) of the distribution for the natural period elongation have been computed to build the correlation matrix between changes in dynamic properties for each seismic damage level, as shown in the figure.

Table 1: Seismic damage level and corresponding reparability

Park&Ang Damage Index	Damage level	Reparability	Damage state (DS)
$DI < 0.10$	No or slight damage	Repairable damage	DS0
$0.10 \leq DI \leq 0.25$	Minor damage	Repairable damage	DS1
$0.25 < DI \leq 0.4$	Moderate damage	Repairable damage	DS2
$0.4 < DI < 0.80$	Severe damage	Irreparable damage	DS3
$DI \geq 0.80$	Complete damage	Irreparable damage	DS4

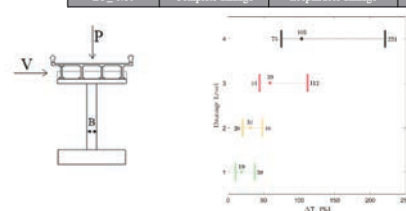


Figure 1: Seismic damage level and natural period elongation relations

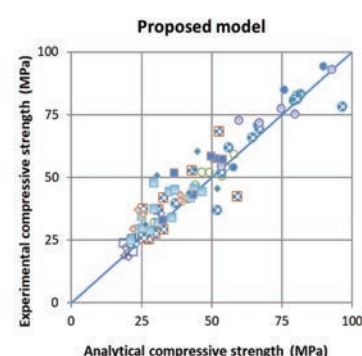
International CRP 2021—Category B

Effect of Sparsely Spaced Stirrups on the Seismic Behavior of Reinforced Concrete Vertical Structural Elements**Project Coordinator Name:** Marina L. Moretti (National Technical University of Athens)**MSL Faculties:** Susumu Kono**- Aims of Research -**

This project aimed to further explore the potential of using fiber reinforced polymer (FRP) jackets to counterbalance the negative effect of inadequate transverse reinforcement on reinforced concrete (RC) columns, and more particularly on the prevention of buckling of the longitudinal rebars. The objectives of the project included the assessment of existing design models for the resistance of substandard RC columns.

- Results -

The potential of retrofitting RC columns with buckled longitudinal reinforcement by application of fiber reinforced polymer (FRP) jackets seems to be a promising technique to enhance the seismic performance of RC columns, as demonstrated by experimental studies in the literature. In order to assess the seismic performance of RC vertical elements, with different layouts of transverse reinforcement, which are strengthened through FRP jackets, it is essential to accurately estimate the axial strength of such RC columns. To this end, experimental results from the literature for FRP-confined RC columns, with different geometrical and reinforcement characteristics, have been assembled and applied to evaluate the predictive capacity of 7 existing design models. It was concluded that Eurocode 8-1 (EN1998-1) provisions lead to generally safe and reliable results, and hence are recommended to use.



Moretti M.L et al. 2021. Axial strength estimation of reinforced concrete columns confined through fiber reinforced polymer (FRP) jacketing. Journal of Multidisciplinary Engineering Science, Volume 8, Issue 4.

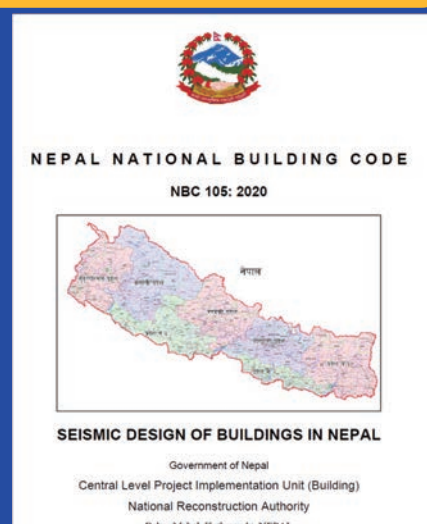
International CRP 2021—Category B

Revised Building Code NBC 105: 2020 Seismic Design of Buildings in Nepal**Project Coordinator Name:** Prem Nath Maskey**MSL Faculties:** Susumu Kono**- Aims of Research -**

The Project aimed at achieving the enhancement of the seismic code for building design in Nepal by learning the chronological development of Japanese ways of designing and regulating in the seismic codes and standard laws. The safety of people and mitigation of large damages during large earthquakes have been the key words of Japanese regulations.

- Results -

The study had facilitated in identification of the principles and strong base for formulating the seismic/structural design approach conducive to the typology of buildings and environment of Nepal. The interaction in Japan was supposed to facilitate in developing the updated form of the seismic code at par with any other international code. This study and interaction have highlighted on the strengths and weaknesses of the present Nepalese Code and the rational ways to enhance it.



国際研究B(2021年度)

「Transport properties of Zn_3N_2 investigated by ionic liquid gate electric-double-layer transistors」

研究代表者：Qun Zhang (Fudan university) 共同研究対応教員：井手啓介

— 研究目的 —

Zn_3N_2 shows high electron mobility $>100 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ in polycrystalline phase, which endows it with high potential as an active material for transistor devices. In this study, we have fabricated ionic liquid gated electric-double-layer transistors (EDLTs) to investigate the transport properties of Zn_3N_2 and exhibit its true potential as an active material for thin-film transistors.

— 研究成果・効果 —

The output curves of a typical Zn_3N_2 EDLT with Ti/Au contacts are shown in Fig. 1. The transfer curve measured at 210 K shows an optimum saturation mobility of $46.6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, a threshold voltage of 0.07 V, an on/off current ratio of 106, and a subthreshold swing of 0.17 V/dec^{-1} . The temperature dependence of channel sheet electron density under different gate voltages was also investigated. It is estimated that a sheet electron density of $1.85 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ is accumulated when a $V_g = +2.5 \text{ V}$ is applied at 210 K. The results indicate that Zn_3N_2 is a promising high-mobility active material for future electronics applications.

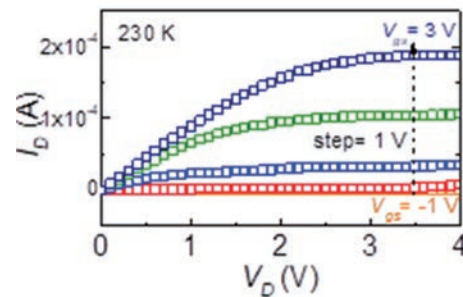


Fig. 1 Typical output curves of Zn_3N_2 EDLT measured at 230 K.

International CRP 2021—Category B

Development of New Reinforced Concrete Wall System

Project Coordinator Name: Rafik Taleb (University of Edinburgh)

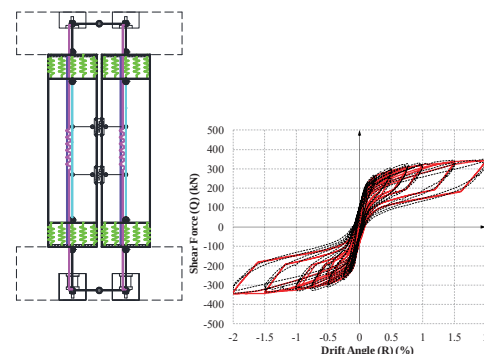
MSL Faculties: Taku OBARA

- Aims of Research -

This research aims to evaluate a multi-spring model in predicting the load-deformation curves and the damage of the tested rocking concrete walls. The numerical model is able to evaluate the timing and determining factors of each damage limit state of the rocking concrete wall with dampers and without dampers.

- Results -

Numerical analysis was conducted to reproduce the limit states and damage conditions for the hybrid rocking wall. Shear force - drift angle relation was well simulated with the multi-spring model by using a spring element length of l_p equal to 0.5 times wall length. Residual drift angle, strain condition of the concrete, and PT rod force were simulated numerically with good accuracy until $R=2.00\%$. Damage conditions and limit states for the hybrid rocking wall were simulated numerically and the drift angle of each limit state was well-simulated. Limit state controlling factors in the experiment were also reproduced by the numerical model.



International CRP 2021—Category B

Exploring origin of spin reorientation transition in RE-TM oxides

Project Coordinator Name : Tanusri Saha-Dasgupta

MSL Faculties: Hena Das

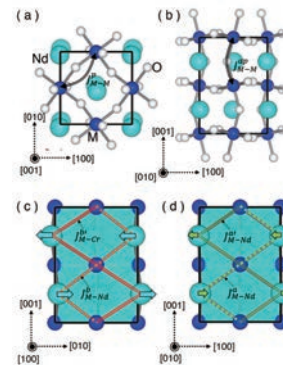
- Aims of Research -

To provide microscopic understanding of complex magnetic behavior arising due to interplay of rare-earth and transition metal magnetism.

- Results -

Interplay of transition metal and rare-earth Hybridization and single-ion anisotropy drives the observed spin-reorientation transition in Specific RE-TM oxide, NdCrO₃.

A yet unreported C-type antiferromagnetism Is found in Nd sublattice, throwing debate on cooperative ordering of Nd spins.



International CRP 2021 —Category B

Development of self-centering earthquake resilient friction damper

Name: Tony T.Y. Yang (The University of British Columbia)

MSL Faculty: KONO Susumu

Aims of Research

The aim of the research is to develop high performance self-centering friction 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 novel self-centering damper named SCFD is proposed. SCFD uses the conical and flat friction surfaces and PT tendons to provide self-centering capability when the SCFD is subjected to translation deformations in all directions. Detailed mechanisms and design equations for SCFD have been derived. The response of the SCFD is verified using cyclic component tests. The results show that the proposed equation matches well with the experimental results. The results show that SCFD can be easily tuned to achieve different hysteresis shapes with stable energy dissipations.

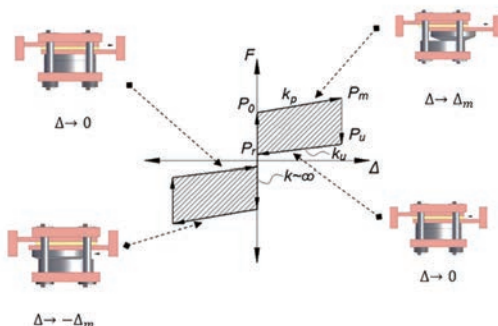


Figure 1: Concept of SCFD

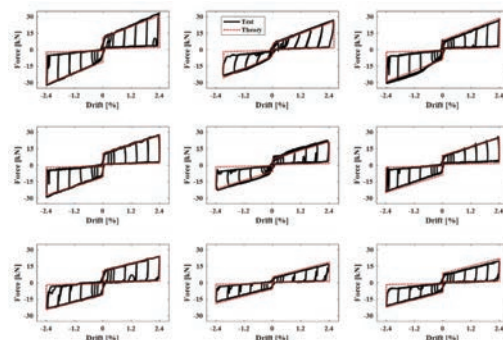


Figure 2: Force-deformation response of HSF

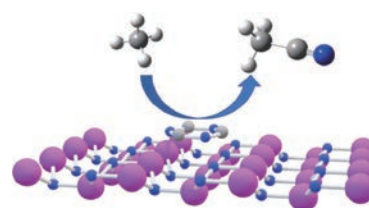
International CRP 2021 – Category B

GaN catalysts synthesized through the pyrolysis of gallium and melamine and their applications in methane conversion**Project Coordinator Name:** Yu-Chuan Lin (National Cheng Kung University)**MSL Faculties:** Keigo Kamata**- Aims of Research -**

The anaerobic conversion of methane to acetonitrile (AcCN) using GaN catalysts synthesized through the solid-state pyrolysis of gallium nitrate hydrate and melamine was investigated. The as-synthesized GaN catalysts had higher porosities, lower crystallinities, and better activities in methane conversion than those of the commercial GaN.

- Results -

The anaerobic conversion of methane to acetonitrile (AcCN) using GaN catalysts synthesized through the solid-state pyrolysis of gallium nitrate hydrate and melamine was investigated. A series of GaN catalysts (unsupported GaN, 50 wt% GaN/SiO₂, and 5 wt% GaN/SiO₂) were prepared, and their physicochemical properties were analyzed. The as-synthesized GaN catalysts had higher porosities, lower crystallinities, and better activities than those of the commercial GaN. Among tested catalysts, 5 wt% GaN/SiO₂ displayed the highest methane conversion rate and AcCN productivity at 700 °C. Residual carbonaceous and nitrogen species, such as sp²-N (N = C) and cyano-N (NC), are likely to participate in the transformation of methane to AcCN.



Methane conversion to acetonitrile by surface CN containing GaN

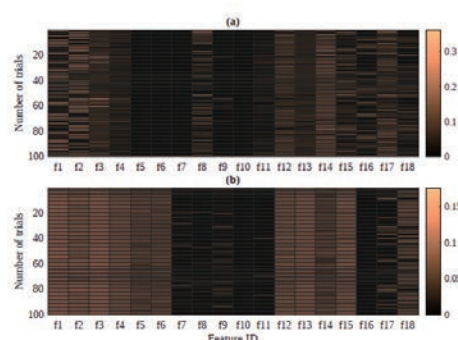
International CRP 2021 – Category B

Energy behavior of reinforced concrete shear walls**Project Coordinator Name:** Zeynep Tuna Deger (Istanbul Technical University)**MSL Faculties:** Susumu Kono**- Aims of Research -**

This research focuses on energy dissipation capacity of reinforced concrete shear walls. The most influential wall design parameters on energy dissipation capacity will be assessed and a machine learning based predictive equation will be developed to estimate the energy dissipation capacity of RC shear walls. The proposed equations will be valuable in energy-based seismic design of shear wall buildings as the capacity will be easily calculated and available to be used once the input energy (demand) is known.

- Results -

- A machine learning method, namely: High Dimensional Model Representation (HDMR), was used to investigate the most influential wall design parameters (e.g., material properties, reinforcement details) on energy dissipation capacity of shear walls, as well as to develop predictive models to estimate energy dissipation capacity.
- The ability of the proposed model to make robust and accurate predictions is validated based on unused data with prediction accuracies (the ratio of predicted/actual values) close to 1.00 (where 1.00 means perfect match) and high coefficient of determination values ($R^2 > 0.90$).



Feature weights calculated by (a) GPR and (b) NCA based on 100 training-test trials

International CRP 2021 – Category B

Effect of cumulative heat on hysteretic behavior of structural steel in energy dissipating devices | Project Coordinator Name: Zhe Qu

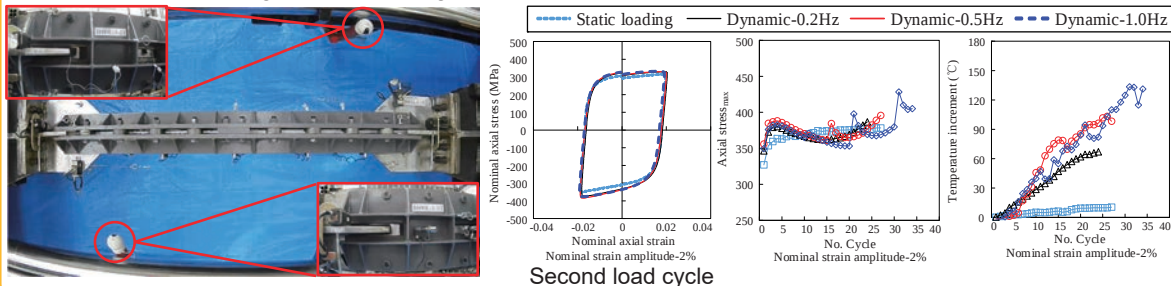
MSL Faculties: Shoichi Kishiki

- Aims of Research -

We aim to obtain reliable test data by performing quasi-static loading and dynamic loading tests on the geometrically identical BRBs, which provides data support for the calibration of the one-dimensional rheological model proposed before. Specially designed all-steel assembled BRBs were used so that the core can be visually inspected and temperature of the core directly measured.

- Results -

Eleven geometrically identical BRBs were subjected to either dynamic or quasi-static uniaxial loading until the core plates fractured. The results show that higher strain rate resulted in higher peak axial force, higher compression overstrength factor and higher temperature of core plate.

Web page: <http://qu-zhe.net/>

International CRP 2021 – Category B

All Solid State Thin Films for Solid Oxide Fuel Cell

Project Coordinator Name: Zhipeng Li

MSL Faculties: Shintaro Yasui

- Aims of Research -

A key approach is 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.

- Results -

In this work, we investigated possibilities of synthesizing all solid state thin film SOFC by using PLD thin film deposition. PLD-grown of Gd doped ceria (GDC) thin films on Ni-GDC substrate were conducted. In order to comprehensively study the all growth conditions, in the following studies, we plan to use different substrates, such as single crystal GDC, polycrystal GDC, and other transition metal-GDC compounds in more details, followed by SEM, TEM and electrochemical testing. Therefore, we can understand more about the electrochemical processes including structural transformations, anisotropy of ion diffusion, and interfacial reactions.

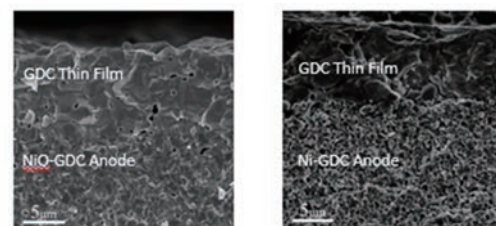


Fig. Gd doped ceria thin film deposited on Ni-GDC Anode substrate.

一般研究B(2021年度)

「第一原理計算によるCsNdNb₂O₇における強誘電スイッチングパスの探索」

研究代表者：赤松寛文(九州大学)

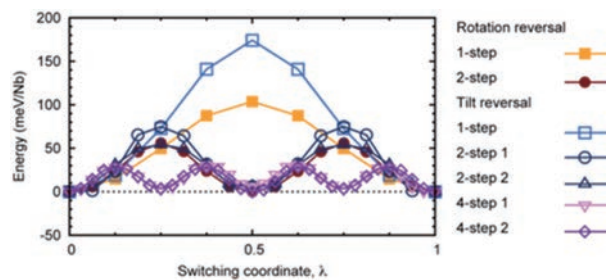
共同研究対応教員：大場史康

— 研究目的 —

本研究では、第一原理計算を用いて、ハイブリッド間接型強誘電体 Dion-Jacobson(DJ)型CsNdNb₂O₇における強誘電スイッチング機構を明らかにし、ハイブリッド間接型強誘電体の誘電特性を改良する指針を得ることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

第一原理格子動力学計算により得られた空間群 $P2_1am$ 、 $Pbcm$ 、 $Cc2m$ 、 $Pnam$ 、 $I2cm$ に属する構造の計64種類のドメインバリエーションを経由構造とする分極反転パスを探索した。最もエネルギー障壁の低い分極反転パス(4-step 2)では、 $P2_1am \rightarrow Cc2m \rightarrow Pb2_1m \rightarrow C2cm \rightarrow P2_1am$ と4ステップで構造が変化し、分極が反転した。このパスでは、層と並行な方向への八面体チルトが90度ずつ、上下の層で交互に回転する。RP型Ca₃Ti₂O₇と比較してエネルギー障壁は小さいことが明らかになった。これはDJ型CsNdNb₂O₇が、RP型よりも低い抗電場を示した理由の一つであると考えられる。



一般研究B(2021年度)

「軸力と曲げを受ける鋼構造梁端接合部の耐震性能評価」

研究代表者：浅田勇人(芝浦工業大学)

共同研究対応教員：吉敷祥一

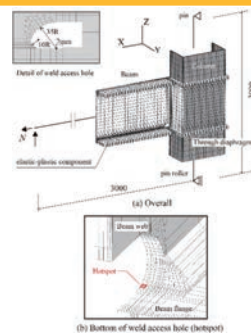
— 研究目的 —

曲げと同時に軸方向力を作用させた梁端接合部の載荷実験および数値解析(FEA)を通じて、その現実的な性能を実証し、その結果から、軸方向力の影響を陽に考慮した設計法を構築することを目的とする。具体的には軸方向力を考慮した最大曲げ耐力を明らかにするとともに、塑性変形能力を確保する観点から、梁端接合部に許容できる軸方向力(軸力比)の限界値を明確にする。

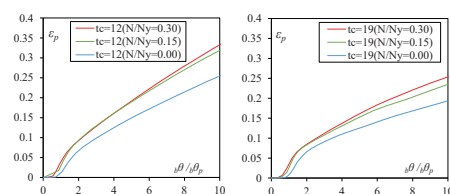
— 研究成果・効果 —

本年度は載荷実験に対応した有限要素解析モデルを製作し、梁の引張軸力および柱の鋼管厚が破壊起点位置の相当塑性歪に与える影響を検討した。

解析結果より、同一の軸力比であっても、梁が接合される柱の鋼管厚によって破壊起点位置(HotSpot)の歪集中の程度に違いがあり、塑性変形能力を確保する上で、鋼管厚に応じた軸力比制限の必要性が示された。



解析モデルと破壊起点位置



鋼管厚12mm

鋼管厚19mm

相当塑性歪と梁の塑性率の関係

一般研究B(2021年度)

「非結合軌道を有する新規半導体の探索と物性」

研究代表者：飯村壮史(物質・材料研究機構)

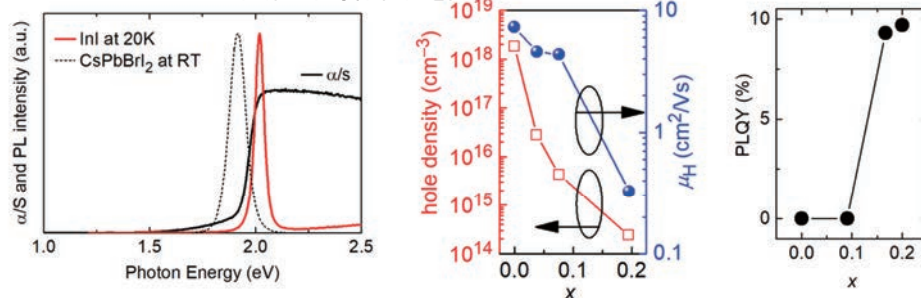
共同研究対応教員：平松秀典

— 研究目的 —

ダイヤモンド型構造を有する半導体を用いた発光ダイオード(LED)は、緑色波長域において発光量子効率低下する“グリーンギャップ問題”や赤外域のバンドギャップを得るために毒性元素の利用が必須等の問題を抱えている。本研究では、結晶軌道の非結合化に着目し、伝導帯および価電子帯のエネルギー準位を制御することにより、ダイヤモンド型半導体にはない新たな機能を示す新規半導体材料の設計、合成、物性解明に取り組む。

— 研究成果・効果 —

ヨウ化インジウムおよびヨウ化亜鉛銅の半導体特性を評価



新規LED向け半導体創製を目的としてInIおよびCu_{1-x}Zn_xIの第一原理計算による電子物性の評価と固相法による試料合成および物性評価を行った。InIは20Kで2eVにピーク中心を持つシャープなバンド端発光が、Cu_{1-x}Zn_xIはZnドーピング量を増やすに従いPLQYが10%ほどの赤色発光が観測された。

発表論文：

Tsuiji, M.; Iimura, S.; Kim, J.; Hosono, H. Hole concentration reduction in CuI with Zn substitution and its mechanism: toward Device application, submitted.

一般研究B(2021年度)

「電子誘電体RFe₂O₄の常温電気分極2」

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

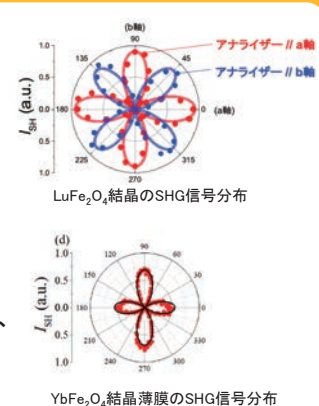
— 研究目的 —

極的な電子分布だけで強誘電体となる電子強誘電体候補のLuFe₂O₄、YbFe₂O₄、YFe₂O₄単結晶試料や単結晶薄膜試料について、常温での自発分極の存在を確定する。電子強誘電体に期待される、電場や磁場などへの交差応答、また超高速、あるいは低エネルギー応答等の特徴的な物性を解明する。

— 研究成果・効果 —

電子強誘電体では、自発電気分極がイオン変位ではなくイオン上の電子の分布だけで現れ、電子交換で分極が反転する新しい強誘電体である。このうち希土類複電荷酸化鉄材料、RFeFe₂O₄ (R=重希土類と、Y, Sc, In)は、鉄電子間相互作用の競合を起源としてFeイオンが極性電子分布を持つ。我々はこれまで化学当量の優れたYbFe₂O₄の合成に成功し、非線形光学応答(SHG測定)から、常温の電気分極の存在を確定し、電子分布の超格子単位胞がCmの空間群に属することを解明した。今年度はLuFe₂O₄やYFe₂O₄の単結晶、YbFe₂O₄単結晶薄膜も、同様の極性電荷秩序相を持つことを解明した。さらに単結晶薄膜でも電場アニール効果を明らかにした。右図に新たに判明したLuFe₂O₄結晶とYbFe₂O₄薄膜の二次高調波光発生(2HG)の測定データを示す。

21年度は、コロナ禍の移動制限のため、当初予定のPFM実験ができなかったが、郵送ベースで東工大のグループとの共同研究測定を遂行した。今後もこの研究を続け、これまで見出した数V/cmという抗電場の精密な解析や、超高速あるいは極低エネルギーの誘電分極応答の解明を行う。

・学会発表: Electronic Ferroelectricity from the Polar Charge Ordering of RFe₂O₄, N. Ikeda, et al., MRM2021, Dec 16, 横浜パシフィコ

・プレス発表: 室温で結晶内の電子秩序が強誘電性を生み出すことを発見

一般研究B(2021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」

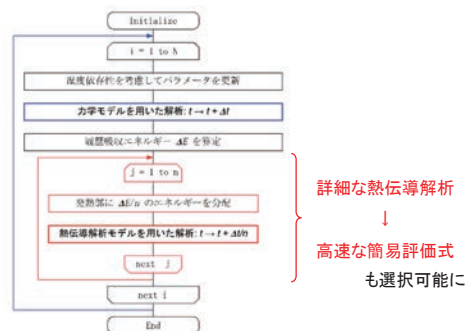
研究代表者：石井建(北海道大学大学院工学研究院)

共同研究対応教員：吉数祥一

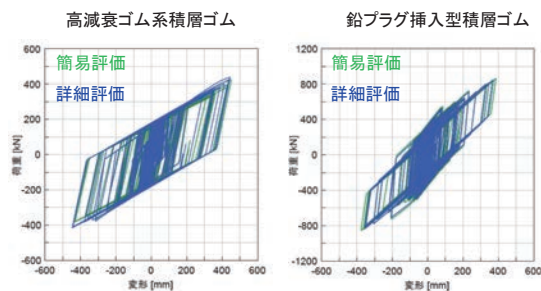
— 研究目的 —

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 —



一般化→単純化された熱・力学連成挙動解析



計算を高速化しつつ、ほぼ同等な応答結果を取得

https://opensees.berkeley.edu/wiki/index.php/MultipleShearSpring_Element
https://opensees.berkeley.edu/wiki/index.php/KikuchiAikenHDR_Material

一般研究B(2021年度)

「電磁場が媒介する遠隔系間量子もつれ生成ダイナミクス理論」

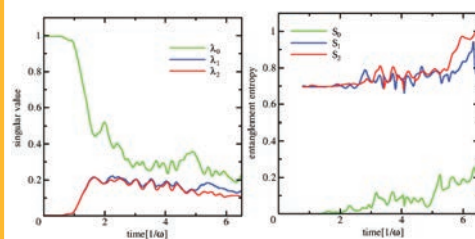
研究代表者：石田 邦夫(宇都宮大学)

共同研究対応教員：中村 一隆

— 研究目的 —

本研究では電子・格子系に対する光照射した場合に特有の量子相関(もつれ)生成機構について、理論的に調べた。各時刻における電子・格子・光子系波動関数についてSchmidt分解の方法によって特徴的な状態を抽出し、量子もつれ生成過程の詳細を明らかにする。

— 研究成果・効果 —



各時刻における特異値 λ_n (左図)およびそれそれぞれに対応するフォノン間エンタングルメントエントロピー S_n (右図)

Schmidt分解によって量子もつれ生成ダイナミクスを支配する量子状態を抽出し、それぞれの特異ベクトルが生成する量子もつれとそのダイナミクスを数値計算によって調べた。

光照射前の状態が直接的に時間発展することによる量子もつれ生成とは別に、フォノン生成とともに現れる強くもつれた状態が、系全体としてのもつれ生成に重要な役割を果たす。

観測・測定過程の選択によって強くもつれた状態を効率的に抽出することにより、系に貯蔵される量子もつれを増強可能である。

発表論文・関連論文：

K. Ishida and H. Matsueda, "Two-step dynamics of photoinduced phonon entanglement generation between remote electron-phonon systems", J. Phys. Soc. Jpn. 90, 104714 (2021).

K. Ishida and H. Matsueda, "Dynamics of photoinduced entanglement generation between remote electron-phonon systems", J. Phys. Conf. Ser. 2207, 012041 (2022).

一般研究B(2021年度)

「ZnO系希薄磁性半導体へのGdドーピング効果と磁気特性」

研究代表者：一柳優子(横浜国立大学 工学研究院)

共同研究対応教員：川路均

— 研究目的 —

本来ZnOはバルクで反磁性を示すが、ナノサイズにすることで磁化が発現する。ZnOはワイドバンドギャップ、高いイオン結合性をもつ。このようなZnOに室温強磁性であるGdをドーピングすることで、磁化の向上を試みた。また、GdはZnに比べてイオン半径が大きいため、ドーピングされたGdがどのように配位するかが重要である。本研究では、Gdドーピング量を0, 3, 5, 10%と変えたZnOを作製し、XAFSによる局所構造解析をした上で、電気・磁気的特性の変化の考察を行うことを目的とした。

— 研究成果・効果 —

- ・作製した粒子は単相のウルツ鉱型構造
- ・ナノサイズにすることで酸素欠損を示唆
- ・GdはZnと置換
- ・ナノサイズにすることで
バンドギャップエネルギーが減少
→酸素欠損により電子がドナー準位を形成
- ・ナノ粒子に磁化が発現&
Gdドーピング量に従い磁化が上昇
→磁気ポーラロンモデル

Table.1 ZnOナノ微粒子のGdドーピングによる特性変化

	粒径 (nm)	Zn-O 間の配位数	E_g (eV)
ZnO std.	-	4.00	3.37
Gd 0% ZnO	16	3.71	2.80
Gd 3% ZnO	16	3.92	2.89
Gd 5% ZnO	17	3.80	2.82
Gd 10% ZnO	17	3.80	2.86

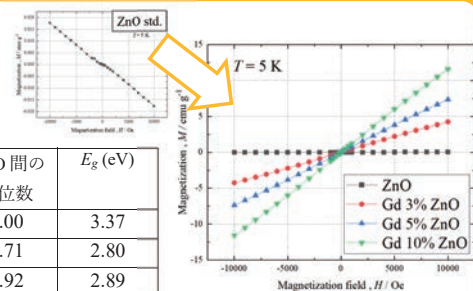


Fig.2 ZnOナノ微粒子のGdドーピング量別磁化曲線

発表論文・関連論文

T. Ide, K. Fujikawa, T. Hashimoto, K. Kanda, A. Aihara, A. Oshima, Y. Ichinagagi, e-J. Surf. Sci. Nanotechnol., 16 (2018) 1

一般研究B(2021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。本年度は擁壁との衝突を考慮した場合における建物応答について検討を行う。

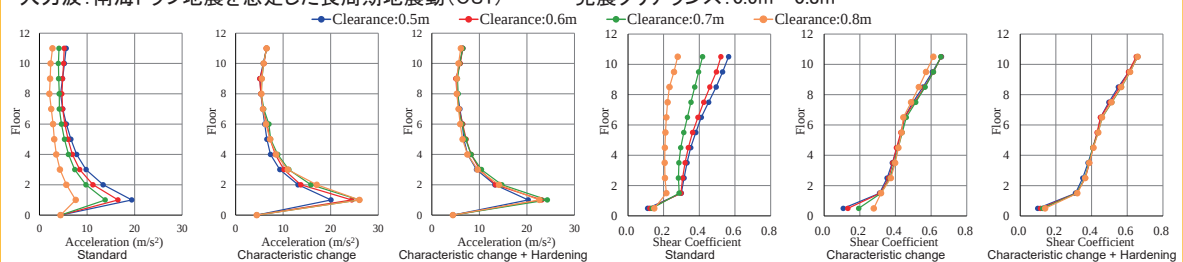
— 研究成果・効果 —

建物モデル：10層および20層基礎免震建物(弾塑性多質点系等価せん断型モデル)

免震部材：鉛プラグ挿入型積層ゴム支承(LRB)＋弾性すべり支承(LSB)、高減衰ゴム系積層ゴム支承(HDR)＋弾性すべり支承

入力波：南海トラフ地震を想定した長周期地震動(OS1)

免震クリアランス：0.5m～0.8m



10層モデル(LRB+LSB)：入力倍率1.2倍

特性変化が大きい場合はハードニングの影響は小さく、クリアランスが大きいほど応答が大きくなる可能性がある

一般研究B(2021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。そのために、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「モミガラ糖化残渣の肥料化」および「窒素肥料」の開発に取り組み、生育に効果があることを確認した。

2) 「グルコース⇒HMF」プロセスを上場企業に紹介した。触媒反応装置の開発に参加し知見を提供した。流通リアクター、筒型濃縮機の実現に寄与した。

3) FDCAプロセス開発に参加企業を得た。

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いない、ガラス実験装置の次の小型実験装置が無いという企業が多い。実験補助サービスなども含めプロセスへの関心を高めることが必要である。

一般研究B(2021年度)

「アパタイト型化合物の負熱膨張特性の研究」

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 —

本研究では、新しい負熱膨張材料として、アパタイト型化合物に着目した。予備的な研究によりフッ素アパタイト $Pb_5(VO_4)_3F$ が、150 K以下の温度で負熱膨張を示す事を発見している。本研究では、異方的な熱膨張挙動を示す $Pb_5(VO_4)_3F$ において、結晶粒の空隙を埋める微細構造効果による負熱膨張特性の向上が起こっているのかを確かめるため、焼結体試料の負熱膨張を測定することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

歪みゲージを用いて、490℃、12時間の条件で焼結した $Pb_5(VO_4)_3F$ 焼結体試料の、試料片長さ温度変化を測定した。測定した結果を図に示す。150 K以下での、高温六方晶から低温単斜晶への構造相転移に伴い、負熱膨張が起こっていることが確認された。しかし、格子体積の温度変化から見積もられる線熱膨張係数 α_L が -43 ppm/Kであるのに対して、試料片長さ温度変化から見積もられる線熱膨張係数 α_L は -44 ppm/Kであった。 $Pb_5(VO_4)_3F$ は、c軸長が大きく変化する一方、a,b軸長の変化は大きくないという異方的な熱膨張挙動を示すが、そこから期待される微細構造効果による負熱膨張特性の向上は確認できなかった。微細構造効果には、焼結状態が大きな影響を与えるものと推測される。よって、今後は、焼結条件の再検討および元素置換による負熱膨張動作温度の向上を行っていく。

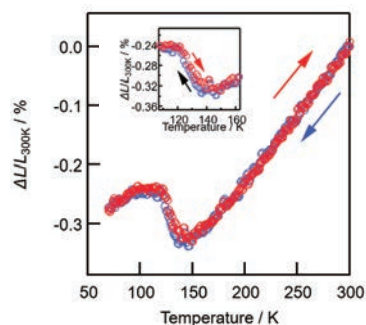


図 $Pb_5(VO_4)_3F$ 焼結体試料の試料片長さ温度変化。

一般研究B(2021年度)

「低温用熱電変換材料候補物質 Ta_4MTe_4 ($M = Si, Mn, Fe, Cr$)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 —

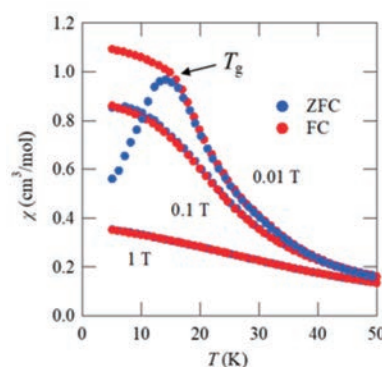
熱電冷却は伝導電子によるヒートポンプであり、次世代の全固体冷却技術として期待される。しかし、従来材料を用いた性能向上が頭打ちであり、現状の実用は特殊用途に留まる。本研究では、様々な遷移金属Mを含む Ta_4MTe_4 と Nb_4MTe_4 の単結晶を合成し、熱電変換性能を評価する。様々な元素の場合の結果を比較検討することにより、 Ta_4SiTe_4 の合成条件の最適化に反映させる。

— 研究成果・効果 —

$Nb_4(M, Si)Te_4$ ($M = Cr, Fe, Co, Ni$)ウィスカー結晶はいずれも、金属的な電気伝導を示した。このうち、 $Nb_4(Co, Si)Te_4$ の磁気抵抗は、磁場に対して直線的に増加する特異なふるまいを示した一方、 $Nb_4(Cr, Si)Te_4$ と $Nb_4(Fe, Si)Te_4$ では負の磁気抵抗が現れた。また、 $Nb_4(Fe, Si)Te_4$ では、右図に示したように $T_g = 15$ Kのスピングラス的な磁化率が観測された。



上図: $Nb_4(Fe, Si)Te_4$ ウィスカー結晶の電子顕微鏡像。
右図: $Nb_4(Fe, Si)Te_4$ ウィスカー結晶の磁化率の温度依存性。 T_g はスピングラス転移温度。



一般研究B(2021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(東京都立大学大学院都市環境科学研究科環境応用化学域)

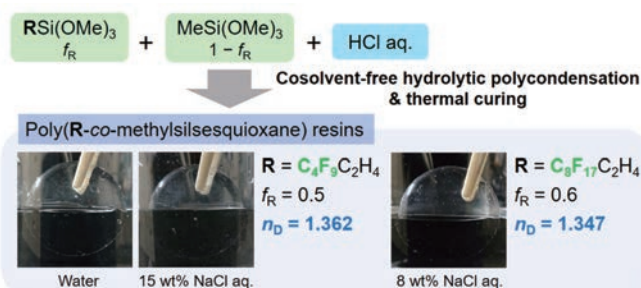
共同研究対応教員：平松秀典

— 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、 SiO_2 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 —

- ケイ素アルコキシドと水のみからシリカ系材料が合成できる無共溶媒法によって、フルオロアルキル基を含む3官能ケイ素アルコキシドから低屈折深紫外透明樹脂の合成に取り組み、波長589nmでの屈折率が~1.35の深紫外透明樹脂の合成に成功した。
- 含塩酸素過剰シリカガラス中に $ClOClO$ 分子に加え、 $ClOCl$ 分子が存在することを示し、紫外吸収に寄与していることを指摘した。また、 Cl_2 分子から O_2 分子へエネルギー移動が起こることを見出した。



発表論文・関連論文：T. Tsuchiya, Y. Fukuda, K. Kanamura, K. Kajihara, "Low-refractive-index deep-ultraviolet transparent poly(fluoroalkyl-co-methyl-silsesquioxane) resins synthesized by cosolvent-free hydrolytic polycondensation of organotrimethoxysilanes," J. Phys. Chem. B 125, 8238-8242 (2021); L. Skuja, N. Ollier, K. Kajihara, I. Bite, M. Leimane, K. Smits, A. Silins, "Optical absorption of excimer laser-induced dichlorine monoxide in silica glass and excitation of singlet oxygen luminescence by energy transfer from chlorine molecules," Phys. Status Solidi A 218, 2100009 (2021)

一般研究B(2021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（応用なぐれ研究所 & 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・概要 —

レーザー変位計の利用により、表題解析法開発の可能性を調べた。デモ機併用により損耗厚さを測定したが、超音波測定法に固有のレーザー損耗厚さは十分薄く、本測定法による被測定材料の表面損耗量が許容範囲内であることを示した。代表的な核融合用構造材料等の高密度エネルギー入射損耗解析が、本超音波法により問題なくできることを示した。さらに同類の変位計により測定可能な透明材料の厚さの極小値の推定ができることを示した。これらの結果、変位計の残り部分の追加調達により、次年度の成果がさらに期待できることが判った。

— 研究成果・効果 —

我々は最近、近い将来の核融合炉構造壁候補材料等の厚さ変化をその場測定するために、レーザー誘起超音波測定法の利用を提案している。そこで先ず、同法によるサンプルの厚さ測定を、レーザー技術総合研究所で行った。その際、照射レーザー光による被測定材料の表面損耗が許容範囲内であることを示しておく必要がある。そこで、マルチカラー同軸変位計を新規に調達するための準備を進めた。寸法的に2小モデルの変位計1式をメーカーよりデモ機として借受け、サンプルの表面損耗量を測定した。これらの結果、損耗量は十分少なく、超音波法による厚さ測定が問題なく行えることを示した。更に透明材料の厚さ測定にもマルチカラー同軸変位計が有用であることを示し、来年度に変位計の残りの部分を追加調達できれば、さらなる成果が得られる見通しが立った。研究結果の一部を図に示す。図1は稼働中の変位計計測システム、図2はアルミニウム（放射性ベリリウム代替）の変位量測定結果で、この他にもタンングステン、炭化ケイ素、黒鉛等も測定した。

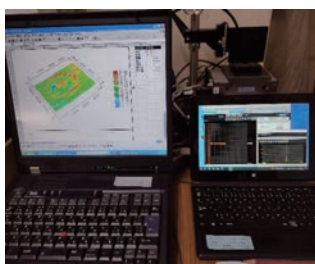


図1 稼働中の変位計計測システム近影

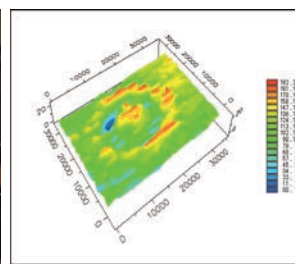


図2 サンプル材料の変位計測結果例

発表論文：K.Kasuya, O.Kotyaev, Y.Izawa, K.Tokunaga, H.Kawaji: Various laser applications to material thickness measurements, Abstract Book and Proceedings of full text paper, 23rd Symposium on High power laser sources and applications, Prague, Czech, June 20-23, 2022.

一般研究B(2021年度)

「量体化転移近傍で現れる動的短距離秩序構造の探索」

研究代表者：片山 尚幸(名古屋大学大学院工学研究科)

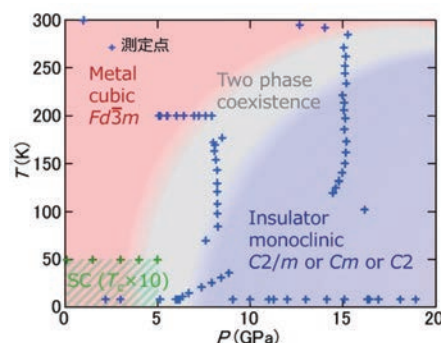
共同研究対応教員：笹川 崇男

— 研究目的 —

低温で金属-非磁性絶縁体転移を示すロジウムスピネル LiRh_2O_4 において、①低温で Rh^{3+} と Rh^{4+} の価数分離が生じていること、② Rh^{4+} 間では二量体が形成されていること、③ Rh の価数分離のパターンは Anderson 条件を満たしていること、④絶縁体の直上では電荷と量体化の結合した揺らぎが現れていること、を明らかにした。この研究を礎として、超伝導を示すロジウムスピネルの構造物性研究に着手する。 CuRh_2S_4 や CuRh_2Se_4 は常圧下で超伝導を示すが、圧力下で超伝導-絶縁体転移を生じる。圧力下で LiRh_2O_4 のような電荷秩序を伴う量体化相が実現していると考えている。この圧力下構造を解き明かし、超伝導が電荷と短距離化した量体化の結合した揺らぎから現れていることを明らかにすることを目指す。

— 研究成果・効果 —

笹川研究室の電気炉を利用した合成により、 CuRh_2S_4 の純良粉末試料を得ることに成功した。これを用いて、あいちSR BL5S2において回折実験、Spring-8 BL10XUにおいて高圧X線回折実験を行い、常圧と圧力下における構造研究を行った結果、高圧下において電荷秩序/量体化相が発達していることを明らかにした。得られた電子相図は右図のようになっている。これは、電荷秩序に隣接して超伝導相が現れる $\text{Na}_0.33\text{V}_2\text{O}_5$ などに代表される圧力相図とは圧力に対する応答が真逆であるという面白い特徴をもつ。また、J-PARC PLANETにおいて高圧下PDF解析実験を行った結果、相転移近傍で短距離秩序が発達している兆候を捉えることに成功した。今後は、短距離秩序と超伝導の絡み合いについて明らかにしていきたい。



発表論文・関連論文：M. Shiomi, NK et al., Phys. Rev. B **105** L041103 (2022).

一般研究B(2021年度)

「強誘電体BaTiO₃の傾斜バンド構造におけるエネルギーシフトの膜厚依存性」

研究代表者：狩野 旬(岡山大学)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

酸化物強誘電体が発見された当時よりその半導体物性の研究が試みられたが、誘電体は絶縁体であるという認識からあまり注目されることがなかった。我々は放射光を用いた角度分解硬X線光電子分光(AR-HAXPES)により、BaTiO₃薄膜の結晶表面から内面に向かって価電子帯を含む原子軌道がエネルギーシフトするバンド傾斜現象の解明を目指している。

— 研究成果・効果 —

誘電体は、強誘電性の有無に関わらず一般的にキャリア濃度が低い。傾斜バンド構造は放射光源を用いたAR-HAXPESにより観測する。AR-HAXPESはバルク敏感とはいえ、チャージアップを防ぐ手立てが必要である。これらの問題は、平坦性の高い単結晶基板上に下部電極層、誘電体層、上部電極層を連続エピタキシャル成長させることによって解決可能である。幸いにも本課題で用いる物質はどれもペロブスカイト型構造の酸化物であり、パルスレーザー堆積法(PLD)を用いることでナノオーダーの膜厚をもつ積層薄膜構造を作製することに成功した。得られた試料を使ってAR-HAXPES実験を5月下旬にSPring-8にて実施予定である。

発表論文・関連論文：セラミックス 56, 463 (2021)
日本物理学会誌 最近の研究から(掲載決定)

一般研究B(2021年度)

「衝撃荷重下における超高ひずみ速度変形機構の解明」

研究代表者：川合伸明(防衛大学校 応用科学群 応用物理学科)

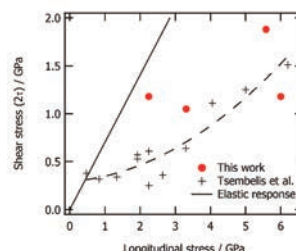
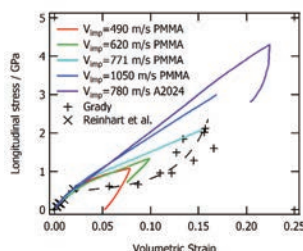
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

材料の変形・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 10^4 /s以上にも達する衝撃圧縮下においては、静的な荷重条件とは全く異なる機械的特性を示す。本研究課題は、超高ひずみ速度変形下における強度・変形特性の評価を目的としている。本年度においては、近年、大型構造物の基礎・柱部材への使用が進んでいる超高強度コンクリートを対象に衝撃荷重に対する圧縮変形挙動およびせん断強度の評価を行った。

— 研究成果・効果 —

- 高速飛翔体の衝突により生じる衝撃応力波を試験体内部に埋め込んだマンガニンフィルム応力ゲージにより測定
- 測定された応力波伝播プロファイルおよび、衝突方向とそれに垂直な方向との応力差から、衝撃圧縮挙動およびせん断強度を導出



超高強度コンクリートの衝撃応力-圧縮体積ひずみ関係および、衝撃応力-内部せん断応力関係

- 内部空隙の圧壊強度が、静的圧縮強度(170 MPa)の約3倍(0.5 GPa)に上昇⇒空隙圧壊過程に顕著な荷重速度依存性が存在
- 低衝撃応力ではセメント単体より高いせん断応力を維持できるが、衝撃応力の増加に伴いその差は小さくなる。⇒セメントのせん断強度における圧縮応力依存性の効果により、骨材とセメントの強度差が小さくなったことが原因と考えられる。

一般研究B(2021年度)

「ワイル磁性体候補物質である逆ペロブスカイト型マンガン窒化物における輸送特性の調査」

研究代表者：川口昂彦(静岡大学)

共同研究対応教員：片瀬孝義

— 研究目的 —

本研究では、逆ペロブスカイト型構造を有するマンガン窒化物のひとつである Mn_3SnNi に着目した。本物質はマンガンの磁気モーメントが三角格子を組むことで、磁気フラストレーションを生じることや、理論計算においてワイル点の存在が示唆されていることから、ワイル磁性を発現することが期待されている。ただし、 Mn_3SnNi におけるワイル磁性発現の報告はこれまでにない。一方で、 Mn_3SnNi にBi部分置換を試みた粉末試料において、ワイル磁性を示唆する特異な磁気特性を確認した。これは、スピン軌道相互作用の大きなBiが置換されたことで、伝導に寄与する電子のスピン軌道相互作用が強化されたのではないかと推察している。もしこの試料が確かにワイル磁性体であれば新規磁気デバイスのための新しい材料候補となり得る。そこで、本研究ではその実用化に向けて、 $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ の薄膜化と、そのホール効果の測定を目的とした。

— 研究成果・効果 —

$\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ 薄膜はパルスレーザー堆積(PLD)法を用いて MgO (001)基板上に30~60 nm程度の膜厚となるように成膜を行った。700°Cの成膜では、薄膜中に $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ がエピタキシャル成長する様子は確認されたが、単相ではなくMn単体の析出も見られた。また、大気中では薄膜中で次第に劣化していく様子が確認された。これは副相であるMn単体が酸化反応を起こし、同時に $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ も分解・酸化したと考えられる。また、300°Cの成膜では $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ 相の結晶化は見られなかった。一方、500°Cの成膜では、(001)面外配向した単相の $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ エピタキシャル薄膜を得ることに成功した。

単相薄膜の磁化測定を行ったところ、270 K程度での強磁性的な磁気転移を確認した。また250 K以下の低温ではゼロ磁場冷却後測定(ZFC)と磁場中冷却測定(FC)で磁化の大きさに明らかに違いが認められた。これはスピングラスの挙動と呼ばれ、バルク試料でも観測されている。すなわち、薄膜試料でもバルク試料と同様な挙動が観測された。ただし、バルク試料に比べて、薄膜試料では磁気転移温度は低く、飽和磁化はやや大きいことが分かった。この原因の候補として、格子歪が考えられる。実際に、薄膜の面内および面外の格子定数を測定したところ、面内に伸張していることが分かった。すなわち、基板との熱膨張係数差によって薄膜に格子歪が生じ、 $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ 中のMn-Mn距離の変化やカゴメ格子のバランスの崩れが、磁気転移温度や飽和磁化に影響を与えたと考えられる。

さらに、磁気転移温度以下の100 Kにおいてホール効果測定を行ったところ、通常のホール効果は観測されたものの、異常ホール効果は観測されなかった。薄膜表面が酸化した可能性もあるため、その影響も考えられるが、本質的な問題だった場合、これはベリ曲率の影響を受けなかった可能性が高い。理論的解析がまだ及んでいないが、ノンコリニアな磁気三角格子だとしても、スピングラスの挙動を示す温度域では、むしろ異常ホール効果は小さくなっていく可能性も Mn_3Sn 合金などでは示されている。実際、本研究で得られた $\text{Mn}_3(\text{Sn,Bi})\text{N}$ 単相薄膜は強磁性的な転移が見られた270 K以上でもM-H測定においてヒステリシスが確認されており、むしろ室温の方が、異常ホール効果が観測される可能性も残されている。本年度の研究では100 K以外のホール効果測定をするまでには至らなかったが、今後の研究で様々な可能性を明らかにしていきたい。

発表論文・関連論文：白井友晴、川口昂彦、坂元尚紀、鈴木久男、脇谷尚樹、第34回日本セラミックス協会秋季シンポジウム講演予稿集、2021.9.

白井友晴、川口昂彦、坂元尚紀、鈴木久男、脇谷尚樹、第41回電子材料研究討論会講演予稿集、2021.11.

一般研究B(2021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 先端理工学部 電子情報通信課程)

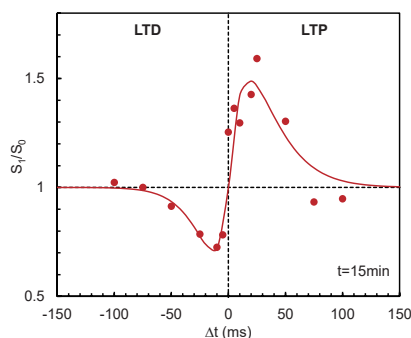
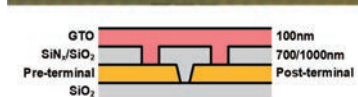
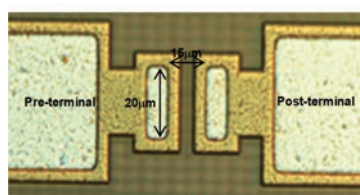
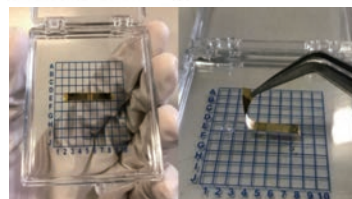
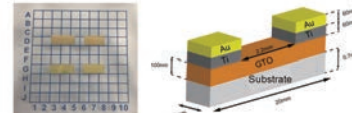
共同研究対応教員：神谷 利夫

— 研究目的 —

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

— 研究成果・効果 —

AOS薄膜プレーナ型STDPシナプスデバイス

AOS薄膜デバイス
熱電発電素子

発表論文：Y. Ohnishi, Amorphous Ga-Sn-O Thin-Film Crosspoint-type Spike-Timing-Dependent-Plasticity Device, Jpn. J. Appl. Phys. 60, 7, 078003, 2021

Y. Shibayama, Amorphous-Metal-Oxide-Semiconductor Thin-Film Planar-type Spike-Timing-Dependent-Plasticity Synapse Device, IEEE Electron Device Lett. 42, 7, 1014, 2021

M. Kimura, Thermoelectric Generator using Amorphous Ga-Sn-O Thin-Film Device, ICCE 2022

一般研究B(2021年度)

「レーザ指向性エネルギー堆積法によるハイエントロピー合金基WC粒子分散型複合材料の積層造形」

研究代表者：國峯崇裕(金沢大学 理工研究域 機械工学系)

共同研究対応教員：安井伸太郎

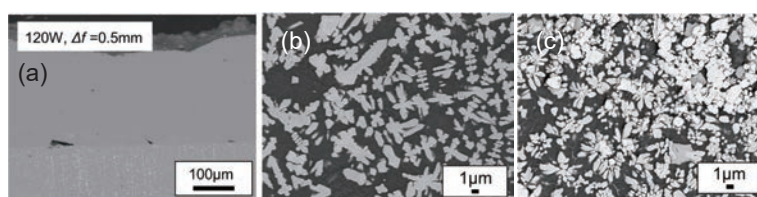
研究目的

ハイエントロピー合金(High Entropy Alloy: HEA)は構成元素が5元素以上のほぼ等原子組成比を有した多元系固溶体合金と定義されており、高温での力学特性に優れているという点で近年注目されている。一方、WC-Co超硬合金は切削工具用材料などの用途に用いられるが、切削加工時には高温下にさらされるため、高温で高硬度・高靱性かつ高耐摩耗性を必要とされ、それらの向上が図られてきた。本研究では、WC-Co超硬合金中のCo結合材をHEAとしたWC-HEA超硬合金を開発する。

研究成果・効果

付加製造(Additive Manufacturing: AM)の一種である指向性エネルギー堆積法(Directed Energy Deposition: DED)によってWC-HEA超硬合金の積層造形を実施した。

WC-HEA超硬合金の硬度をWC-Co超硬合金のそれと比較すると、25vol.%WCの場合で380HV程度、また50vol.%WCの場合で300HV程度の顕著な硬度の上昇が得られた。



レーザDEDで積層造形した(a)HEA, (b)HEA-25vol.%WC, (c)HEA-50vol.%WCの微細組織。

	0vol.%WC	25vol.%WC	50vol.%WC
WC-Co超硬合金	170 HV	550 HV	900 HV
WC-HEA超硬合金	200 HV	930 HV	1200 HV

一般研究B(2021年度)

「ゲルマニウムスズ薄膜のフォノンドラッグ熱電能に関する研究」

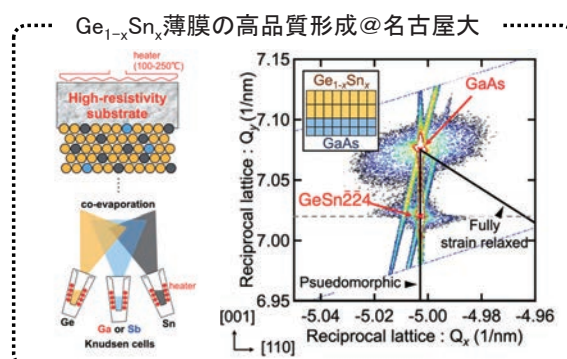
研究代表者：黒澤 昌志(名古屋大学 大学院工学研究科 物質科学専攻)

共同研究対応教員：片瀬 貴義

研究目的

IoT社会実現には、メンテナンスフリーなセンサモジュール(即ち、省エネ+創エネ)が必須である。本共同利用研究では、創エネ方法として「熱発電」にフォーカスし、低温物性の理解が進んでいない新しいIV族熱電材料(ゲルマニウムスズ: $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$)の基礎物性を実験的に明らかにすることを目的とした。低温物性評価@フロンティア研で明らかとなる知見を結晶成長@名古屋大にフィードバックし、フォノンドラッグ熱電能の出現可能性を探索した。

研究成果・効果



高パワーファクター($30 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$ @室温)、バルクでは観測されない条件下での熱起電力の増大を発見

温度依存性の同時計測
@東工大フロンティア研



・電気伝導率
・キャリア密度
・キャリア移動度
・熱起電力

一般研究B(2021年度)

「新規ナノコンポジット磁石の探索研究」

研究代表者：小林 斉也(株式会社Future Materialz)

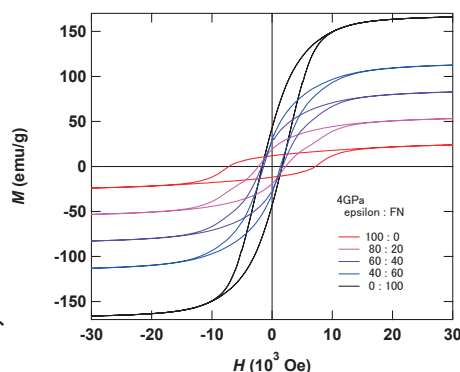
共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

東教授が構築してきた超高压加圧法を利用し、弊社の独自技術で得られる Fe_{16}N_2 、 $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 粉末を高圧プレスによって、ナノコンポジット成形体化することで、非常に扱いやすい硬質磁石材料が得られるか、その検証を行った。

— 研究成果・効果 —

Fe_{16}N_2 、 $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ を100:0~0:100の重量比で混合した粉末を、4GPaでプレスした試料の磁化曲線データを右図に示す。うまくナノコンポジット化した。混合比により、システマティックに磁気特性が変化していることが分かる。つまり、 $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ が増えると磁化は小さいが保磁力が大きくなる傾向、 Fe_{16}N_2 が増えると磁化が大きくなる傾向が明らかである。磁化については、組成量により直線的に変化していた。一方、保磁力は Fe_{16}N_2 が増えると「一気に」小さくなっていった。この「一気に」という部分には実はからくりがある。 $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の結晶密度は $5.12\text{g}/\text{cm}^3$ 、 Fe_{16}N_2 のそれは $7.44\text{g}/\text{cm}^3$ であり、 Fe_{16}N_2 は $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の1.45倍もの密度を持っているので、 Fe_{16}N_2 を $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 100%から増やす組成にすると、実は体積当たりの Fe_{16}N_2 量は想定以上に増えている。このため「一気に」という感覚のデータとなっている。今後は、 $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ -rich組成部分で、重量比を細かく振って、その変化を再度確認する必要がある。



関連新聞発表：化学工業日報 2022年1月12日 「窒化鉄系磁石材料 実用化へ レアースフリー訴求」

一般研究B(2021年度)

「透明低光弾性酸化物ガラスの電気伝導に関する研究」

研究代表者：斎藤 全(愛媛大学 大学院理工学研究科)

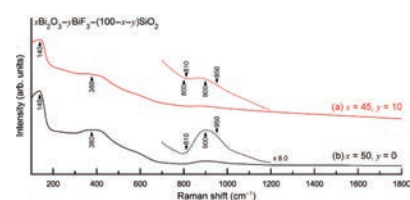
共同研究対応教員：平松 秀典 教授

— 研究目的 —

偏光制御用光学素子としての高屈折率性・低光弾性を有する鉛フリー透明酸化物ガラスの構造解析を実施した。高電子分極性カチオン周囲の局所構造情報とガラスネットワークの特徴を抽出し、得られた知見を電気伝導性酸化物ガラス探索に活かすことを目的とした。

— 研究成果・効果 —

顕微鏡ラマン散乱分光によるフッ素をドーピングした $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ および $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$ ガラスのネットワークを調査した。

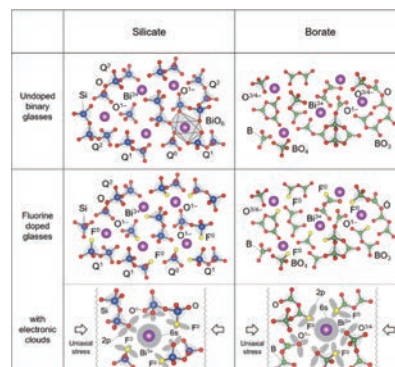


フッ素アンドープ(上)およびドーピング(下)ビスマス酸化物ガラスのラマン散乱スペクトル。

フッ素をドーピングすると光学バンドギャップが増加して無色透明な試料が得られる。



フッ素ドーピングによって高電子分極カチオン(Bi^{3+})が分散した高屈折率・低光弾性ガラス構造が実現される。



発表論文：K. Hayashi, T. Shimizu, S. Matsuishi, H. Hiramatsu, A. Saitoh, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 33, 2242 (2022).

一般研究B(2021年度)

「縁端距離の違いによる山形鋼筋かい接合部の最大耐力に関する載荷実験」

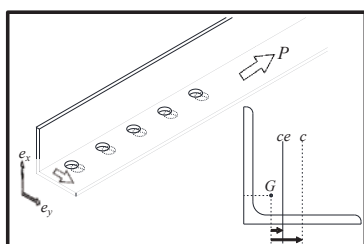
研究代表者：薩川恵一(愛知工業大学)

共同研究対応教員：吉数祥一

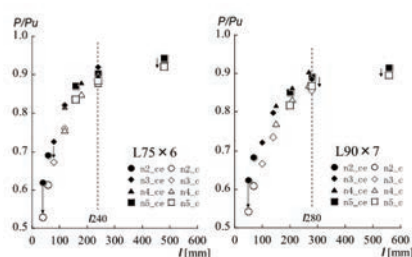
— 研究目的 —

本研究では山形鋼断面の中立軸位置と軸力方向の作用軸位置との縁端距離に着目し、縁端距離の違いが接合部耐力へ及ぼす影響について検証する。

— 研究成果・効果 —



研究概要



実験結果

本研究では面外偏心量に着目し、偏心量の大きさが接合部耐力へ及ぼす影響を追加検証した。継手長さが短いときは面外偏心量の違いは最大引張耐力に大きく影響することがわかった。

一般研究B(2021年度)

「 α -Tiにおける粒界構造と固溶酸素拡散の第一原理計算」

研究代表者：設楽 一希(大阪大学 接合科学研究所)

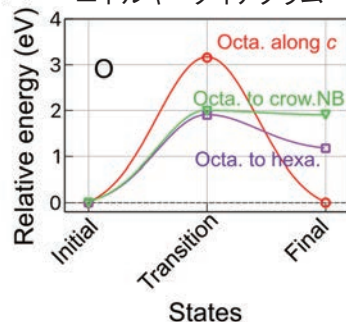
共同研究対応教員：熊谷 悠

— 研究目的 —

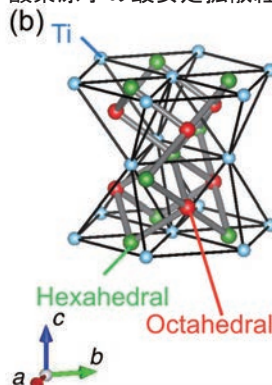
金属中の微量軽元素は実験では検出、分析が困難であることが多く、粉末冶金プロセスの設計においては軽元素のTi格子内や界面での拡散挙動の理解が望まれている。本研究では、プロセス設計に必要な酸素原子の拡散挙動を第一原理計算により原子レベルで明らかにし、優れた機械特性を有する軽元素固溶型Ti合金の設計指針を得ることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

(a) 酸素原子の各拡散経路でのエネルギーダイアグラム



(b) 酸素原子の最安定拡散経路



α -Ti結晶中の酸素原子の拡散機構を解明

- ・ 遷移エネルギーは約1.9 eV
- ・ 八面体孔サイトから六面体孔もしくはNon-basal crowdionサイトを経由して長距離拡散

一般研究B(2021年度)

「実測データを用いた各種建築物の減衰モデルに関する研究」

研究代表者：白山 敦子(徳島大学)

共同研究対応教員：佐藤 大樹

一 研究目的

建築物における耐震設計や耐風設計において、減衰は建物応答に大きな影響を及ぼす重要な要因であるにもかかわらず、今なお、不明点が多く残されている。実際の設計において、減衰モデルや減衰定数は、構造種別毎に慣用的なモデルや値が採用されることが多く、その値も概ね類似したものが使用されている。一般的に、建物の内部粘性減衰の設定は、慣例的に2~3%の減衰定数を想定して、剛性比例型減衰やレーリー型減衰を採用している。しかしながら、この内部粘性減衰は、建物の骨組や外装材、積載物による摩擦からの減衰と地盤との動的相互作用効果から得られる減衰に大別されるものの、解明されていない事象も多いため、簡易的に内部粘性減衰として一括評価されているのが現状である。そこで、本研究では、地盤との動的相互作用を考慮した建築物(SRモデル)に対して、同等の応答が得られる基礎固定系建物の減衰定数を抽出する手法として、応答せん断力係数から算出する一致係数を提案し、その一致係数が最大となる際の各種建築物の減衰定数の傾向について、内部粘性減衰を剛性比例型減衰とした場合の検討を行う。さらに、地盤との動的相互作用を考慮した建築物の応答加速度時刻歴を用いて、部分空間法によるシミュレーションにより、減衰定数のシステム同定を行い、一致係数が高くなる減衰定数と比較検討する。

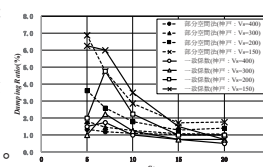
一 研究成果・効果

部分空間法によるシミュレーション手順について、まず、SRモデルの時刻歴応答解析を行い、上部構造の全ての質点における加速度応答時刻歴を算出する。次に、入力データを地動加速度時刻歴、出力データを全ての質点の加速度応答時刻歴とした場合、最下階・中間階・最上階の3質点を用いた場合、最上階のみの場合の3ケースについて、部分空間法により基礎固定系モデルにおける等価固有周期ならびに等価減衰定数を同定を行い、比較検討する。

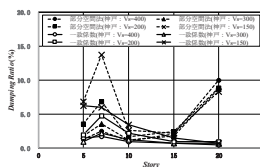
全出力データを用いることができれば、階数や地盤のせん断波速度に関わらず、精度よく同定できる。

出力数を減らした場合、低層建物においては、ある程度、精度よく推定できていることがわかる。しかし、階数が高くなるにつれて、減衰定数を過大評価しており、危険側の傾向になっている。さらに、地盤のせん断波速度 V_s が小さくなると、部分空間法による等価減衰定数は、大きく算定される。

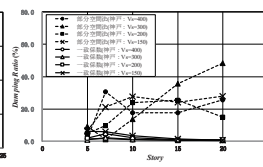
最上階のみのデータを用いた場合、5層の建物は精度よく同定できているが、7層以上の建物になると、減衰定数は大きく算出される。また、せん断波速度の違いによるばらつきも大きくなる。減衰定数の値も、他ケースと比較して、大きな値となっており、過大評価していることがわかった。



全出力データ告示神戸



3出力データ告示神戸



1出力データ告示神戸

一般共同研究B (P137)

一般研究B(2021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)

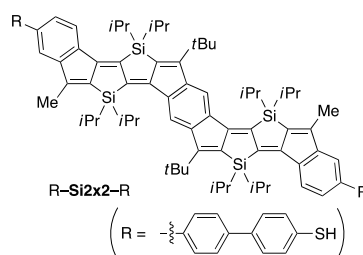
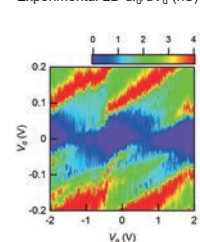
共同研究対応教員：真島 豊

一 研究目的

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を構築するには、このような条件下で安定な π 共有有機化合物の開発・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

デバイス作製に用いる化合物として、今年度はとくにケイ素架橋 π 共役化合物 Si_2x_2 を中心に検討し、その両端に剛直なビフェニル部位をもたせた分子を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、分子が電極の片側に吸着したデバイスが単電子トランジスタとして有効に機能することを見出した。一方、同分子が電極間を架橋したデバイスの動作については、更なる改善が必要であることもわかり、 π 共役分子と電極を繋ぐ両側のリンカーとして剛直かつ非対称な構造を新たに設計し、その合成およびデバイス作製と機能評価を行う予定である。

Experimental 2D dI/dV_3 (nS)

一般研究B(2021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)

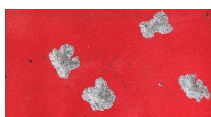
共同研究対応教員：西村 康志郎

— 研究目的 —

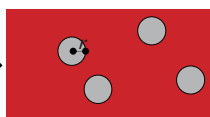
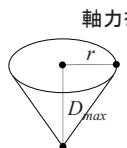
既存構造物の耐震補強では、あと施工アンカーとチッピングによる目荒らしによって、新設部材が既存部材に接合される。しかし、組み合わせ応力を受ける接合部の挙動を、定量的に評価した研究例は見当たらない。2020年度までに、付着特性を考慮したアンカー筋のダウエルモデル¹⁾を構築しているため、本研究では、目荒らしとアンカー筋による接合部に組み合わせ応力を与える実験を行って、荷重変位曲線のモデル化の構築を目的とする。

— 研究成果・効果 —

チッピングによる目荒らし



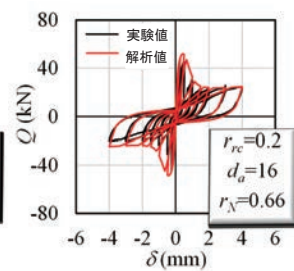
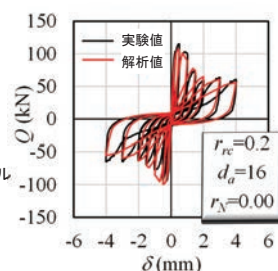
目荒らしの凹凸を円錐形状にモデル化

包絡曲線モデル
繰り返し則

軸力を考慮した目荒らしのせん断強度式

$$\tau_{rc} = \left(\frac{r_{rc} D_{max}}{\sqrt{50\pi}} f_c^{0.4} + 0.5 \right) (1 - 0.85c)$$

τ_{rc} : 最大せん断応力度, r_{rc} : 目荒らし面積比, f_c : コンクリート圧縮強度, D_{max} : 最大深さ, c : 圧縮応力または引張応力比



提案強度式を用い、さらに包絡曲線モデル²⁾と繰り返し則を導入して目荒らしの挙動を再現し、ダウエルモデル¹⁾と累加することで、組み合わせ応力を受ける接合部の挙動を良好に再現できた。本成果は、耐震補強接合部の合理的で効率的な設計法の構築に寄与できるものと期待される。

発表論文・関連論文：1) Matsunaga, K., Takase, Y. and Abe, T.: Modeling of dowel action for cast-in and post-installed anchors considering bond property, Engineering Structures, Vol.245, Article Number:112773, 2021.10, 2) 山田太蔵, 高瀬裕也, 阿部隆英: 目荒らしとあと施工アンカーを併用した耐震補強接合部の組み合わせ応力下における力学挙動, コンクリート工学論文集, Vol. 33, pp.33-42, 2022.5 (掲載決定)

一般研究B(2021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

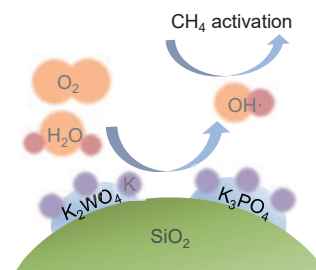
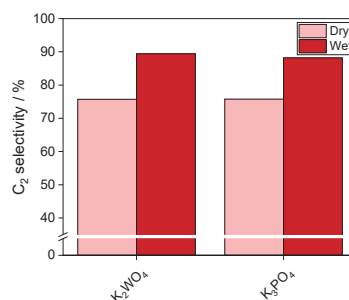
— 研究目的 —

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保ち、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 —

新規アルカリ金属塩触媒の探索

メタン選択酸化反応用触媒にはアルカリ金属タングステン酸塩が頻繁に用いられる。今回、リン酸塩でもタングステン酸塩と同様の高い選択性が得られることが明らかになった。特にH₂Oが共存するときに高い選択性を示し、アルカリ金属カチオンがOHラジカルを経由した高選択的な酸化反応の中心的役割を果たしている可能性が示唆される。

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

一般研究B(2021年度)

「材料組織型負熱膨張材料における構造と負熱膨張機能の相関解明」

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 —

研究代表者が開発したルテニウム酸化物 Ca_2RuO_4 や $\text{Cu}_{1.8}\text{Zn}_{0.2}\text{V}_2\text{O}_7$ といった材料組織効果型負熱膨張材料における、負熱膨張と構造の相関を詳細に調べるとともに、新規材料の探索を行う。これにより、電子デバイスをはじめ、産業の広い分野に存在する熱膨張制御の強い要望に応える。結晶学的なユニット・セルの熱膨張が正でも、十分大きな材料組織効果がある場合にバルク体が負熱膨張を示すかを、 Ti_2O_3 を例に検証する。

— 研究成果・効果 —

 Ti_2O_3 セラミック焼結体で大きな負熱膨張を観測[1]

・絶縁体-金属転移と関係

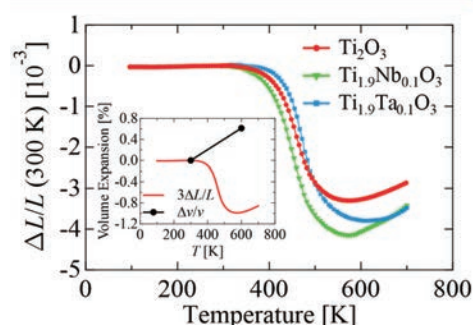
310–570 Kにおいて線膨張係数 $\alpha_L = -12$ ppm/K・結晶学的ユニット・セルは正の熱膨張 ($\alpha_L = +7$ ppm/K)

ユニット・セルは顕著な違方向的な熱変形

➡ 材料組織効果のみによるバルクの負熱膨張発現

 Ca_2RuO_4 における電子軌道の役割[2]

・負熱膨張に対する電子軌道の役割を詳細に検証



$\text{Ti}_{2-x}\text{M}_x\text{O}_3$ (M: Nb, Ta) 焼結体の線膨張率 $\Delta L/L$ [1]. 基準温度: 300 K. 昇温過程で測定された。

成果の論文発表:

[1] Y. Kadowaki, R. Kasugai, Y. Yokoyama, N. Katayama, Y. Okamoto, and K. Takenaka, Appl. Phys. Lett. 119, 171901 (2021).

[2] L. Hu, Y. C. Zhu, Y. W. Fang, M. Fukuda, T. Nishikubo, Z. Pan, Y. Sakai, S. Kawaguchi, H. Das, A. Machida, T. Watanuki, S. Mori, K. Takenaka, and M. Azuma, Chem. Mater. 33, 7665 (2021).

一般研究B(2021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 —

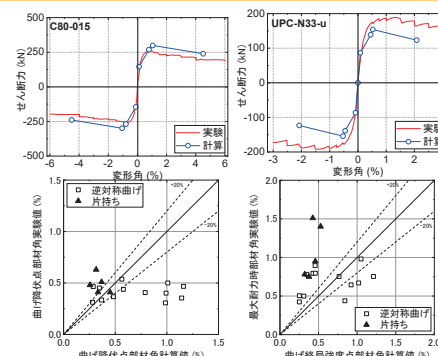
プレストレストコンクリート(以下、PC)構造は、その高い復元性や損傷制御性から地震後の継続使用性に優れた構造であり、特に、PC鋼材をアンボンドとすることで、PC鋼材の危険断面付近へのひずみ集中が抑えられ、より高い復元性を与えることが可能となる。本研究は、数値解析や既往の設計式などを用いた検討に基づいて、アンボンドPC部材の耐力および変形性能の評価精度向上を目指し、構造性能評価に関する知見を収集することを主な目的とする。

— 研究成果・効果 —

日本建築学会「プレストレストコンクリート造建築物の性能評価型設計施工指針(案)・同解説」に示される、ボンドPC部材を対象とした骨格曲線の特特性点評価法を準用

既往のアンボンドPCaPC柱試験体の実験結果(18体)を用いて、評価式の精度を検証

- ・第二折れ点(曲げ降伏): 逆対称曲げ試験体では過大評価傾向、片持ち試験体では大幅に過小評価
- ・第三折れ点(曲げ終局): 全体的に過小評価傾向、特に片持ち試験体では大幅に過小評価
- ・第四折れ点(安全限界): 全体的に過小評価傾向



関連文献: 日本建築学会大会パネルディスカッション資料(PC構造), 2021

一般研究B(2021年度)

充填ゼオライト型化合物における新規強誘電・圧電材料の開発

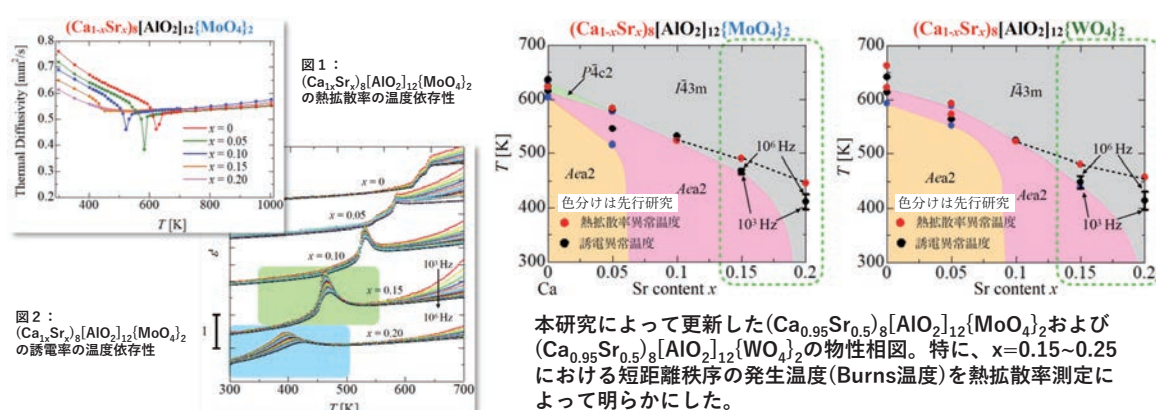
研究代表者：谷口博基(名古屋大学)

共同研究対応教員：大場史康

— 研究目的 —

持続可能な科学技術が望まれる昨今、優れた機能性と高い環境親和性を共に備えた革新的な材料の創製は、材料科学者に課せられた重要な課題である。本研究では、地殻に豊富に存在する高クラーク数元素を主な構成元素とするアルミニートソーダライト型の充填ゼオライト型酸化物に着目し、優れた誘電・圧電特性を備えた新規材料の開発に取り組む。

— 研究成果・効果 —



一般研究B(2021年度)

「実構造部材を想定した2面同時暴露による鉄筋コンクリート部材の劣化挙動の把握」

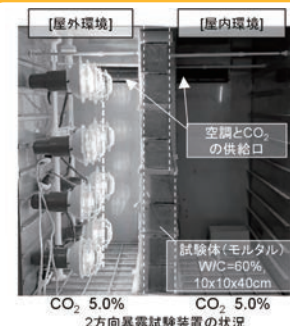
研究代表者：塚越雅幸(福岡大学 工学部 建築学科)

共同研究対応教員：吉敷祥一

— 研究目的 —

建築物の実使用状態に近い室内外を想定した2面暴露の促進劣化試験方法を提案し、内外壁面での中性化の進行の挙動と、その後の鉄筋腐食性状について、部材内部の温度・含水率が非定常である場合について検討し、従来の定常状態での試験法と結果の有効範囲と限界について明らかにする。

— 研究成果・効果 —



実際の建築物の壁面では、室内外面でそれぞれ異なる温湿度となり、さらにこれが年間・一日を通して変化するような環境に曝されることになる。本研究では、このような壁面の状況を右図のようにモデル化して再現できる装置を作製した。

従来通りの試験体全体を一定の環境に暴露する方法では、室内側の中性化による劣化については夏季と冬季の温湿度差の影響の評価が難しいケースが存在することを実験的に示した。

これにより、従来の試験方法では見つけることが出来ない、不具合や劣化の生じる条件を明らかとし、部材構成と使用環境を考慮した新しい材料の性能の基準や耐久性評価システムを構築し、各使用状態に応じた塗膜・含侵系の鉄筋コンクリートの保護仕上工法と材料の開発を行う。

投稿した関連の論文

- 1) 塚越 雅幸, 船坂 健介, 上田 隆雄, 室内外を想定した2方向からの異なる温湿度の作用が外断熱が施工されたモルタルの中性化および内部の鉄筋腐食に及ぼす影響 日本建築学会構造系論文集, vol.86, No.783, pp.686-695, 2021年5月
- 2) 野崎一磨, 塚越雅幸, 上田隆雄, 本田悟, 室内外2方向への暴露下での外断熱・防水を有するモルタル中の鉄筋腐食性状, コンクリート工学会年次論文集, vol.43, No.1, pp.437-442, 2021年6月

一般研究B(2021年度)

「誘電体界面の導入による超高出力リチウムイオン電池の開発」

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 —

これまで誘電体界面を介した高速電荷移動経路を特定し、誘電体-活物質-電解質の三相界面(TPI)密度が一つの重要な構造パラメータとなることを明らかにした。本年度は、粒径が小さく分散性に優れた誘電体ナノキューブを用いてTPI密度を増大させ、更なる電池出力特性の改善を目指した。

— 研究成果・効果 —

図1は最適熱処理600℃における、従来sol-gel方で作製したBTO、およびナノキューブBTO(NC-BTO)における10C容量保持率のTPI密度依存性である。Sol-gel BTOでは、TPI密度 $4.5 \times 10^6 \mu\text{m}/\text{mm}^2$ においてレート特性は極大となり、それ以上のTPI密度では悪化に転じた。一方、BTO-NCではTPI密度の増大に伴い、レート特性は単調に向上した。同程度のTPI密度($\sim 10^7 \mu\text{m}/\text{mm}^2$)で比較すると、BTO-NCの容量保持率はsol-gel BTOの約1.6倍であった。この時、BTO-NCのLCO表面被覆率は20%以下であったのに対し、Sol-gel BTOにおいては被覆率が80%近くであった。

図2に示すように、Sol-gelにおいては、TPI近傍で充放電反応に寄与できない不活性Liが多く残存する領域(デッドレイヤー)が存在している一方、BTO-NCにおいては、Redox反応に寄与するLi量に対して供給されるTPIが十分多く、LiデッドレイヤーがSol-gelに比べて大幅に低減できていることが特性改善の要因と推定した。

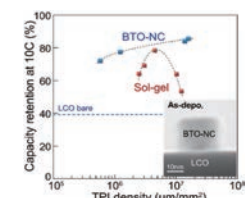


図1 BTO-NCおよびsol-gel BTOにおける10C容量保持率のTPI密度依存性

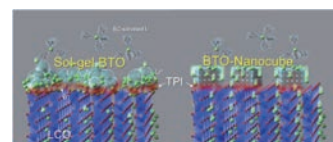


図2 BTO-NCおよびSol-gel BTOにおけるLi移動経路の模式図

[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**, 1688 (2019). [4] T. Teranishi, S. Yasuhara, S. Yasui et al., *J. Power Sources* **494**, 229710 (2021). [5] T. Teranishi et al., *Adv. Mater. Interfaces* **8**, 2101682 (2021). *Inside back cover*採用. 2021.12.24岡山大学プレスリリース

一般研究B(2021年度)

「半導体ナノ粒子を用いた室温共鳴トンネルトランジスタの創製」

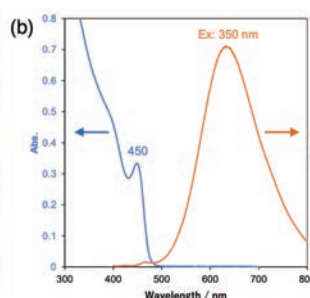
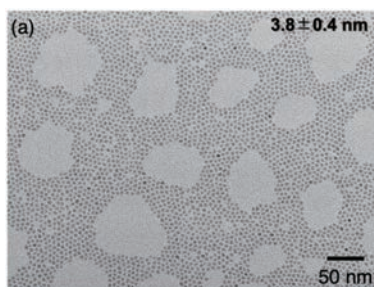
研究代表者：寺西利治(京都大学)

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共鳴トンネルトランジスタ動作を目指し、寺西研究室において種々の粒径(バンドギャップ)の半導体ナノ粒子を合成する。次に、半導体ナノ粒子を真島研究室で作製した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、トンネル遷移により少数のエネルギーレベルを通じて電子がソースからドレインへと共鳴輸送される室温共鳴トンネルトランジスタを創製する。

— 研究成果・効果 —



粒径 $3.8 \pm 0.4 \text{ nm}$ の単分散CdSナノ粒子に成功し(a)、紫外可視近赤外吸収スペクトルおよび発光スペクトル(励起波長350 nm)から、CdSナノ粒子は欠陥発光が支配的であり、ナノ粒子表面に多数の欠陥があることが分かった(b)。このCdSナノ粒子を架橋性有機配位子でナノギャップ電極に選択集積させたデバイスにおいて9 Kで負性微分コンダクタンスが確認でき、異なる粒径・配位子長・欠陥量のCdSナノ粒子を用いることで、室温共鳴トンネルトランジスタ動作が期待される

一般研究B(2021年度)

「酸化物メモリスタ材料における点欠陥挙動の第一原理解析」

研究代表者：藤平哲也(大阪大学)

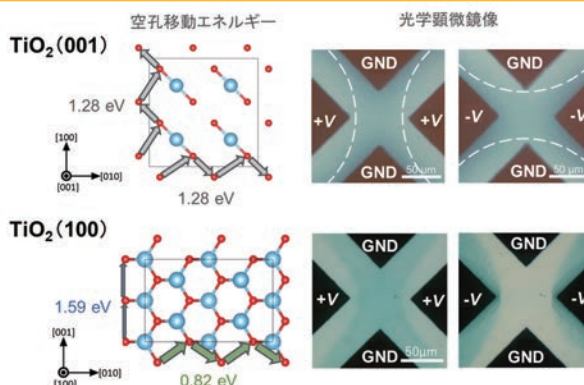
共同研究対応教員：熊谷悠

— 研究目的 —

超低消費電力の非従来型記憶論理演算素子(人工シナプス)への応用が期待される金属酸化物系のメモリスタ材料について、抵抗変化現象の原子レベル素過程を理解し、高性能メモリスタ素子の設計と開発を行うことを目的とする。特にルチル型 TiO_2 酸化物に着目し、抵抗変化の起源と考えられている酸素空孔の形成、ドリフト・拡散および集積の挙動を第一原理計算により解析し、結晶微細構造変化・電気特性との相関を明らかにする。

— 研究成果・効果 —

ルチル型 TiO_2 の(001)及び(100)面方位を有する表面スラブモデルを構築し、酸素空孔の形成エネルギーおよび移動エネルギー障壁を第一原理電子状態計算により評価した。酸素空孔の移動エネルギー障壁は(001)面モデルでは面内で等方的な傾向を示す一方で、(100)面モデルでは[010]方向の障壁が小さくなるという結果が得られた。この計算結果は実験で観察されている TiO_2 平面型メモリスタ素子における酸素空孔の再分布挙動とよく整合している(右図)。さらにダイポールシート法を用いた計算から、欠陥挙動に与える外部電場の効果を検討した。



発表論文・関連論文：

二宮 雅輝, 藤平 哲也, 林 佑介, 酒井 朗, 第82回応用物理学会秋季学術講演会, 10p-S203-3

一般研究B(2021年度)

「多元系化合物半導体材料の熱電特性」

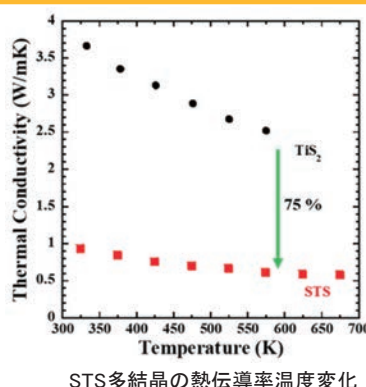
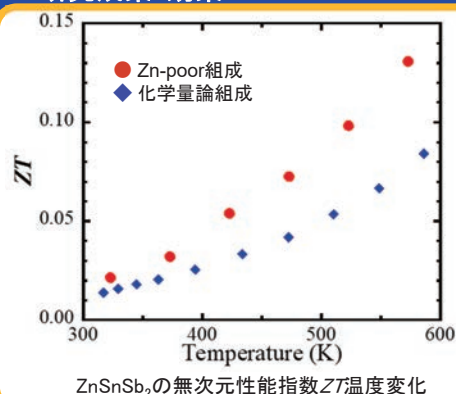
研究代表者：永岡章 宮崎大学(工学部 環境・エネルギー工学研究センター)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

現在実用化されている熱電材料はBi系やPb系の化合物であり環境負荷が大きい。そのため、「低コスト・安全性」と「熱電特性の向上」が求められる。本研究では、新規多元系熱電材料としてカルコパイライト化合物 ZnSnSb_2 とチムニーラダー型化合物 $\text{Sr}_9\text{Ti}_8\text{S}_{24}$ (STS)の熱電特性に注目する。高品質な新規熱電材料のバルク結晶を用いて、信頼性のある熱電特性を明らかにすることを本研究の目的とする。

— 研究成果・効果 —

単相 ZnSnSb_2 バルク結晶

Zn-poor組成において無次元性能指数 $ZT = 0.12@573 \text{ K}$ を達成

単相STSバルク結晶

関連化合物 TiS_2 より75%低い熱伝導率の達成

発表論文・関連論文：Y. Shigeeda, A. Nagaoka, K. Yoshino, and K. Nishioka, J. Phys. Chem. Solids **161**, (2022) 110417.K. Kamimizutaru, A. Nagaoka, Y. Shigeeda, K. Nishioka, T. Higashi, S. Yasui, and K. Yoshino, J. Phys. Chem. Solids **163**, (2022) 110589.

一般研究B(2021年度)

「バイオマス変換用担持金属触媒の構造解析」

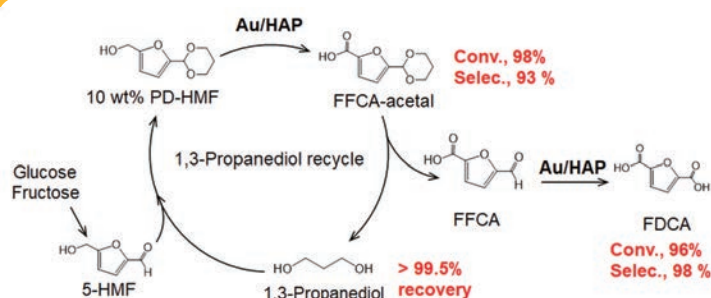
研究代表者：中島 清隆(北海道大学 触媒科学研究所)

共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

ヒドロキシアパタイト(HAP)を利用して担持Au触媒を合成し、酸素加圧下(0.5 MPa)にて2等量の Na_2CO_3 を含む10 wt%の高濃度HMFアセタール水溶液からのフランジカルボン酸(FDCA)の選択合成を検討した。保護材の分離回収を意識した逐次反応をデザインし、高いFDCA収率と保護材の回収率の両立を目指した。

— 研究成果・効果 —



HMFアセタール水溶液(10 wt%)にAu/HAP、 Na_2CO_3 (基質に対して2等量)を加え、耐圧容器内にて酸素加圧下(0.5 MPa)、60 °C、6時間の加熱撹拌し、FDCAを選択率96%(転化率98%)で得た。この逐次反応における生産性向上を目指すためには、2つの酸化過程をさらに最適化する必要がある。未保護のFFCAをFDCAへと変換する2段階目の酸化反応をさらに最適化すると、20 wt%の基質水溶液とAu/HAP触媒を利用しても、FDCAを95%で合成できた。

HMFアセタール水溶液(10 wt%)にAu/HAP、 Na_2CO_3 (基質に対して2等量)を加え、耐圧容器内にて酸素加圧下(0.5 MPa)、100 °C、2時間の加熱撹拌をしたところ、FFCAアセタールを93%の選択率(転化率 98%)で得た。ここで得られた反応溶液に塩酸を加えて60 °Cで加熱すると加水分解が定量的に起こり、FFCAおよび1,3-プロパンジオールが99.5%以上の収率で得られた。更に10 wt%のFFCA水

一般研究B(2021年度)

「不揮発性磁気メモリのための L_{10} -FePd規則合金/グラフェン-トンネル接合の極微構造解析」

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

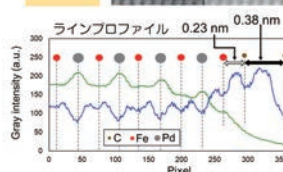
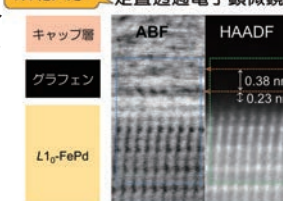
— 研究目的 —

MgOをグラフェンに代替した強磁性トンネル接合構造のために界面構造について詳細に理解することを目的とし、グラフェンと L_{10} -FePdの界面を共同利用装置である反射率X線回折により明らかにする。

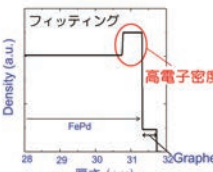
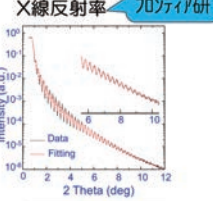
— 研究成果・効果 —

共同利用装置の反射率X線回折の結果、 L_{10} -FePdとグラフェンの界面の L_{10} -FePd側に高電子密度層が形成していることがフィッティングの結果から明らかとなった。また、その厚さは L_{10} -FePd表面から約1nmであった。東北大学内で走査型電子顕微鏡による断面観察実験と比較検討を行った。その結果、グラフェンと L_{10} -FePdの層間距離が約0.23 nmとPhysisorption型に比べて距離が短くなっており、Chemisorption型のファンデルワールス力となっていることがわかった。つまり、 L_{10} -FePdとグラフェンの層間距離が短くなり、界面での電子密度が増大したと考えられる。この電子密度が増大した結果、混成軌道が誘起されて界面垂直磁気異方性が現れることをX線磁気円二色性(XMCD)測定により明らかとなった。この界面垂直磁気異方性はFe/MgO系に匹敵する強い結合となっていることが第一原理計算より予測されており、マイクロマグネティクスシミュレーションの計算から最先端のXnm世代の超高記録密度に対応できることが示唆された。

東北大学 走査透過電子顕微鏡



東工大 70V型X線



発表論文: H.Naganuma, S. Yasui, ACS Nano, 16, 4139 (2022).

学会発表: H.Naganuma, S. Yasui, 応用物理学会秋季講演会(講演番号22p-02-2) 2021年9月22日 ポスター賞受賞

日経新聞web版(2022年3月2日掲載): https://www.nikkei.com/article/DGXZRP627561_S2A300C2000000/

一般研究B(2021年度)

「白金ベースナノギャップ電極と高融点合金シングルナノ粒子からなる単電子トランジスタの室温安定動作」

研究代表者：中村貴宏(株式会社GCEインスティテュート)

共同研究対応教員：真島 豊

研究目的

研究代表者の独自手法であるレーザー誘起核生成法では、熱平衡状態では作製が困難な全率固溶合金ナノ粒子を組成を制御して作製することができるが、二つの金属を合金化する際の混合熱が大きな正の値をとる金ならびにイリジウムの合金化は達成されていない。本研究では、両者との混合熱が小さい白金を介在した三元系合金とすることで、構造が安定かつアルカンチオール修飾が可能なナノ粒子の合成を試みた。

研究成果・効果

Au₂₀Pt₄₀Ir₄₀水溶液中に形成したナノ粒子のXRDプロファイルは面心立方構造に起因する回折パターンを示し、そのピーク位置は金、白金、イリジウムいずれのピーク位置とも一致しない。また、ナノ粒子のSTEM-HAADF像では金がナノ粒子の外側に多く分布するものの固溶合金を形成していることがわかる。このことから、熱的に極めて不安定な組み合わせの金属(金とイリジウム)であっても、その間を取り持つ金属(白金)を介在させることで固溶合金を形成できることが明らかとなった。

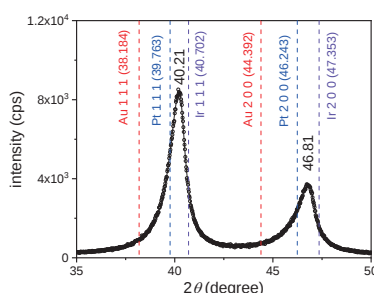


Fig. 1. (a) XRD profile and (b) STEM-EDS mappings of NPs fabricated by laser-induced nucleation method in Au₂₀Pt₄₀Ir₄₀ solution.

学会発表：T. Nakamura, 6th International Conference on Advanced Nanoparticle Generation & Excitation by Lasers in Liquids 他4件
書籍：T. Nakamura, High-Energy Chemistry and Processing in Liquid, Springer Nature, 21-32 (2022).

一般研究B(2021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)

共同研究対応教員：西村康志郎

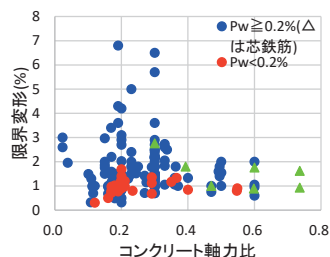
研究目的

せん断破壊型鉄筋コンクリート(RC)柱を対象として、過去に実施された多数の実験結果を用いて軸力との関係を調べることを目的とする。ここで、限界変形は大変形領域において水平力が最大耐力の80%まで低下したときの水平変形と定義する。検討に際して、過去に実施された多数のRC部材の実験結果を収集・分析した実験データベース¹⁾等に示されたせん断破壊型RC柱試験体195体を用いて検討する。

研究成果・効果

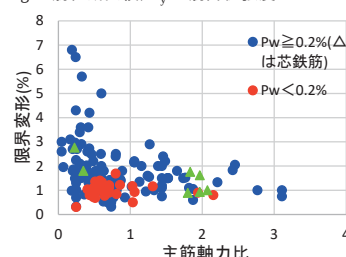
限界変形とコンクリート軸力比 η には明確な相関はみられない。

$\eta = N / (b \cdot D \cdot \sigma_B)$
N: 軸力, b・D: 柱断面面積, σ_B : コンクリート圧縮強度



限界変形と主筋軸力比 η_s には相関があり、 η_s が大きいほど限界変形が小さい。

$\eta_s = N / (A_g \cdot \sigma_y)$
A_g: 主筋総断面積, σ_y : 主筋降伏強度



限界変形時にはコンクリートが損傷し、主筋が軸力の多くを支持しているためと考えられる。



参考文献 1) 向井智久, 渡邊秀和, 坂下雅信, 田才晃, 楠浩一, 磯雅人, 楠原文雄, 西村康志郎, 中村孝也, 田尻清太郎, 谷昌典: 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), 国立研究開発法人建築研究所建築研究資料, 2020.3

一般研究B(2021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剤の探索」

研究代表者：春山 智紀

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目指し、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 —

マンノース吸着試験では、1wt%マンノース溶液30ml中に各種単体飼料3gを添加し1時間攪拌後、マンノース溶液濃度をHPLCにて測定し、その濃度から各単体飼料のマンノース吸着率を求めた。

各単体飼料のマンノース吸着率は、乾燥バガス、飼料用炭の2%が最大であった。また、菜種油粕、キャッサバ、アルファルファについては、試験後のマンノース溶液濃度の増加がみられた。特にアルファルファは23%増となったことから、クエン酸処理などを行うことでマンノースが得られる可能性がある。

単体飼料とは別にマンノース吸着性が認められたTiO₂をマンノースとガラクトース混合溶液(0.5wt%~1.0wt%濃度)30ml中に3g添加し吸着試験を行ったところ、わずかにガラクトースの方がマンノースより優先的にTiO₂に吸着することが分かった。

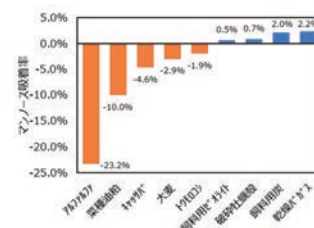


Fig.1 単体飼料のマンノース吸着率

Table 1 マンノースとガラクトース混合液中のTiO₂吸着能

濃度条件	マンノース	ガラクトース
0.5 wt%	27.7%	31.2%
1.0 wt%	14.1%	17.1%

一般研究B(2021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(名古屋大学)

共同研究対応教員：河野進

— 研究目的 —

壁付き鉄筋コンクリート部材の壁筋の付着と拘束効果の関係を定量的に把握することを目指し、鉄筋の付着性状がコンクリートの拘束効果と圧縮性状に及ぼす影響を明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

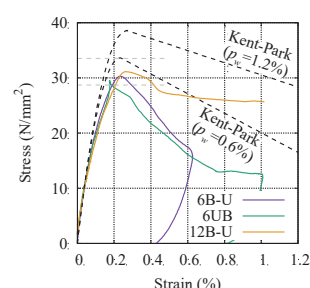
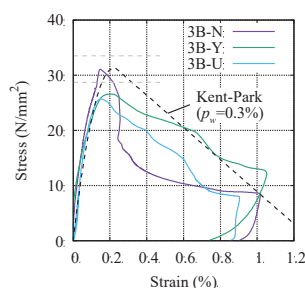
鉄筋の付着劣化性状によりコンクリートの破壊性状が異なる。



3B-N

3B-U

鉄筋が付着劣化を有する場合の最大圧縮応力度はKent-Park式で計算される最大圧縮応力度よりも小さくなった。



一般研究B(2021年度)

「BaTiO₃系強誘電体におけるドメイン構造の解明」

研究代表者：符徳勝（静岡大学）

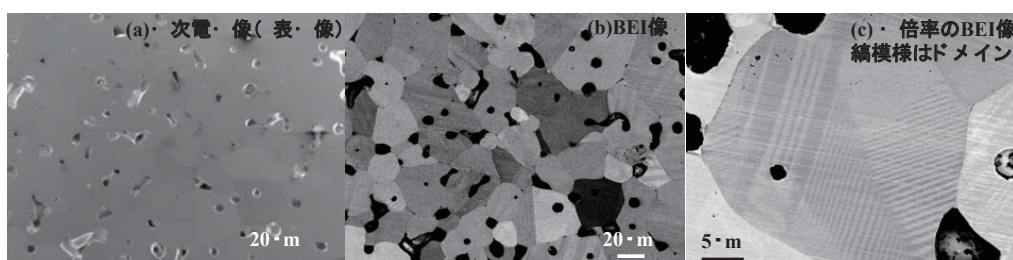
共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

BaTiO₃セラミックスは高誘電率材料としてセラミックスコンデンサ(MLCC)の製造に使用されている。そのMLCCは多くの電子デバイスに数多く使われている。本研究では、BaTiO₃セラミックスにおける強誘電体ドメイン構造を系統的に調査し、ドメインによる誘電率などの物性への影響を明らかにする。

— 研究成果・効果 —

走査型電子顕微鏡のBackscattering electron image法による強誘電体ドメインの観察



走査型電子顕微鏡(SEM)観測法で強誘電体ドメインを観測した場合、一般的に適切な酸で試料をエッチングした後、ドメインの観測を行うが、本研究で化学エッチングを使わない簡便なドメイン観測方法を検討した。その結果、Backscattered electron image(BEI)法による強誘電体ドメインの観測ができた。今後、本手法を活用し、BaTiO₃などの強誘電体セラミックスのドメイン解明、さらにドメインによる物性への影響を明らかにしたいと考えている。

一般研究B(2021年度)

「2元系アモルファス酸化物における非線形伝導現象発生時のイオン移動解析」

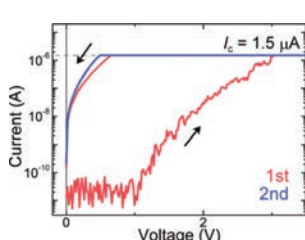
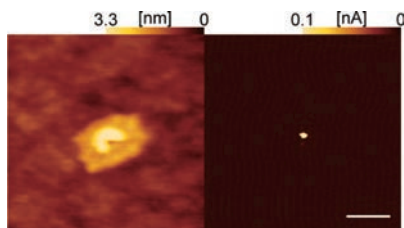
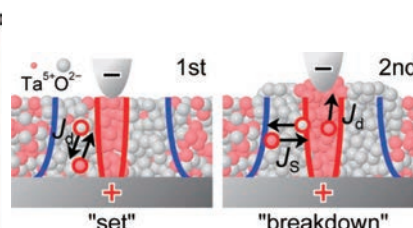
研究代表者：福地 厚（北海道大学 情報科学研究院）

共同研究対応教員：片瀬 貴義

— 研究目的 —

アモルファス酸化物半導体では近年、単純に材料に電場を印加するだけで顕著かつ多様な非線形伝導現象が発現する事が実験的に報告されており、従来の半導体としての用途を超えた、機能性エレクトロニクス材料としての新たな応用可能性が開拓されつつある。本課題では a-TaO_x、a-NbO_x 等のアモルファス酸化物半導体において原子レベルの平坦性を持つ超平坦薄膜を作製し、そのプローブ顕微鏡計測を通じて、各種の非線形伝導現象の起源となるイオン移動の物理的な機構を明確化させ、アモルファス酸化物を用いた人工シナプス・人工ニューロン素子の設計・開発指針を確立する事を目的とする。

— 研究成果・効果 —

C-AFM法により測定された a-TaO_x 膜の I-V 特性2段階の伝導度変化の発生後において a-TaO_x 膜に観測されたナノプラトー構造

提案されたイオン移動機構の模式図

0.2 nm以下の二乗平均粗さを持つ超平坦a-TaO_x薄膜を作製したことで、そのC-AFM計測においてアナログ抵抗変化現象の発現を示す多段階の伝導度変化が観測された。a-TaO_xにおけるアナログ抵抗変化は、数nm未満の極めて微小な構造変化を伴う現象であることが示されたとともに、不可逆的な絶縁破壊の発生時には膜内に特徴的なナノプラトー構造が発生する事が分かった。

一般研究B(2021年度)

「室温マルチフェロイック材料の開発」

研究代表者：藤田 晃司(京都大学)

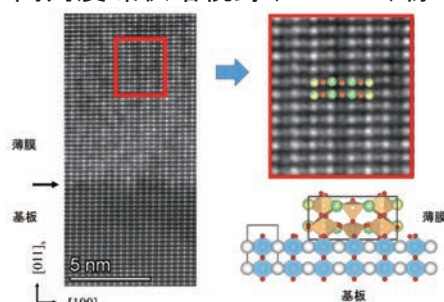
共同研究対応教員：重松 圭

— 研究目的 —

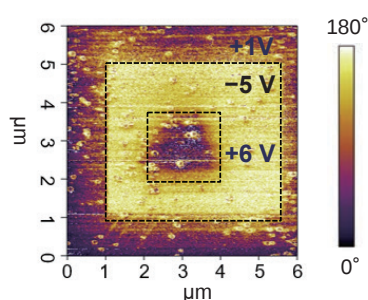
強誘電性と強磁性を併せ持つマルチフェロイック材料では、電場による磁化の制御や磁場による分極の制御が可能であり、低消費電力メモリーへの応用が期待されている。しかし、多くの材料が室温以下でしか両秩序を持っておらず、高温動作する実用材料の開発が望まれている。本研究では、高温マルチフェロイック材料として層状ペロブスカイト鉄酸化物に着目し、構造解析と物性評価を行った。

— 研究成果・効果 —

高角度環状暗視野(HAADF)像



圧電応答顕微鏡(PFM)像



単結晶基板上にエピタキシャル成長した $\text{LaCa}_2\text{Fe}_3\text{O}_8$ 薄膜に対して、外部電場による分極反転挙動を確認し、室温での強誘電性を明らかにした。

一般研究B(2021年度)

「合金触媒の活性—電子状態相関に関する研究: CO_2 を利用したプロパン酸化脱水素の例」

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 —

CO_2 を利用したプロパン酸化脱水素は高効率なプロピレン製造と CO_2 の有効利用を同時に達成可能な反応として近年注目されているが、実用レベルで有効な触媒が開発されていないため未だ基礎研究の範囲を出ていなかった。そこで本研究では、多元素合金触媒を基盤とした新規触媒設計により、 CO_2 とプロパンの活性化や副反応の抑制に有効な金属を原子レベルで近接させることで、本反応に有効な触媒の開発を目指した。

— 研究成果・効果 —

C_3H_8 の活性化、 CO_2 の活性化、副反応の抑制にそれぞれPt、Co、Inが有効であることを見出し、これら有する三元系合金ナノ粒子を調製した。また担体にはコークの燃焼除去や CO_2 の吸着促進のため CeO_2 を用いた。Pt-Co-In/ CeO_2 触媒は本反応に極めて高い性能を示す革新的触媒として機能し、**活性・選択性・耐久性・ CO_2 利用効率の全てにおいて世界最高性能を発揮する**ことが判明した。

特に**活性は従来触媒の5倍**に達し、 CO_2 を削減しながらプロピレンを高効率かつ長時間安定的に製造することが可能になる。本研究結果を進展させることで、従来型のプロパン脱水素工業プロセスに代わって**カーボンニュートラルの実現に貢献可能な新たなプロピレン製造システム**を構築できると期待される。



論文：F. Xing, Y. Nakaya, S. Yasumura, K. Shimizu, S. Furukawa, *Nature Catalysis*, **2022**, 5, 55-65. 特許：特願2021-088480 「酸化脱水素用触媒」
日刊工業新聞 2022年1月31日 「プロパン脱水素反応、 CO_2 を酸化剤に活用 北大が高効率触媒」
日経産業新聞 2022年3月2日 「プラスチック原料「プロピレン」製造に CO_2 活用 北大」

一般研究B(2021年度)

「NaNbO₃系反強誘電薄膜の結晶構造の評価」

研究代表者：別府孝介(龍谷大学 先端理工学部)

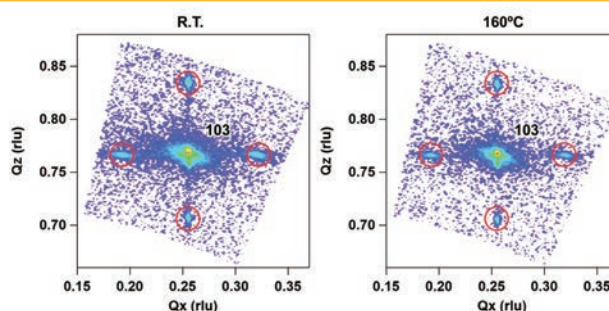
共同研究対応教員：山本隆文

— 研究目的 —

エネルギー貯蔵を指向した反強誘電薄膜の開発においてその構造を知ることは必須事項の一つである。我々は環境に配慮した反強誘電体としてNaNbO₃ (NN)系の反強誘電体に着目し、NNに様々な金属種をを少量添加した反強誘電体薄膜を作製することに成功している。本研究ではNaNbO₃-CaSnO₃ (NNCS)薄膜に着目し、室温時と実際に反強誘電特性が観察される高温時の薄膜構造について検討を行った。

— 研究成果・効果 —

NNCS薄膜は室温においても160°Cにおいてもその反強誘電相をほぼ同じ状態で維持していることが確認された。最も優れたエネルギー貯蔵特性を示した温度も160°Cと一致していることから、薄膜構造の保持が高温での反強誘電特性、特にエネルギー貯蔵特性の維持にも寄与していることを示唆する知見を得ることができた。今後の高性能反強誘電薄膜の開発の設計へと応用が期待される成果であると考えている。



NNCS薄膜の逆格子マップの103反射付近の拡大図
赤い円はNNCSの反強誘電相由来の反射スポットを示している

発表論文・関連論文：

Kosuke Beppu, Fumiya Funatomi, Hideaki Adachi, Takahiro Wada, "Fabrication of antiferroelectric NaNbO₃-CaSnO₃ film by pulsed laser deposition" Japanese Journal of Applied Physics, 60, SFFB01 (2021).

一般研究B(2021年度)

「室温マルチフェロイック薄膜における電場印可磁化反転機構の解明に関する研究」

研究代表者：北條元(九州大学大学院総合理工学研究院)

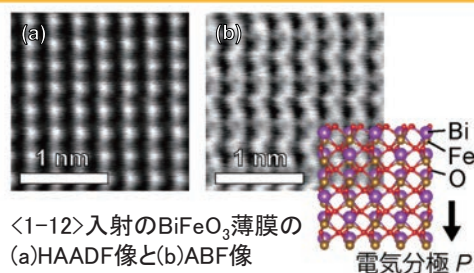
共同研究対応教員：東正樹

— 研究目的 —

複数の強制的秩序が共存したマルチフェロイック物質は、次世代の超低消費電力のメモリ実現のための鍵となる物質である。室温で強誘電性と反強磁性が共存したBiFeO₃は、電場による磁化制御が可能な物質として注目を集めている。本研究ではBiFeO₃薄膜について、電気分極の反転前後におけるFe-O₆八面体の酸素カラムの位置を原子分解能の走査透過電子顕微鏡を用いて直接観察することで、電気分極反転に伴うFe-O₆八面体回転パターンの変化の有無を調べ、電場印可磁化反転機構を解明することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

- 集束イオンビーム法を用いて、位置選択的に高品質なTEM試料を作製する手法を確立
- 当初の目的であった電気分極が反転した領域としていない領域の界面を特定し観察することはできなかったが、ABF像において酸素カラムに起因したコントラストを観測することに成功し、Fe-O₆八面体が回転している様子を直接観察することができた



<1-12>入射のBiFeO₃薄膜の
(a)HAADF像と(b)ABF像

電気分極P

一般研究B(2021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：吉数祥一

一 研究目的

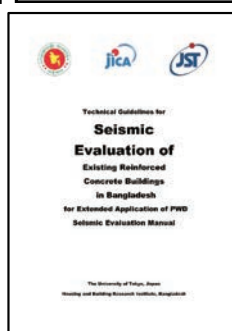
開発途上国では経済発展により都市化が進行する一方で、低強度・低品質な建築物が数多く存在し、地震などの災害により甚大な人的・経済的被害が発生するリスクが急激に高まっている。そこで、開発途上国の各国の技術レベル、設計規準・慣行、施工品質、経済や文化的背景に基づいて、日本が誇る耐震診断・耐震改修技術を、改良し、また、新たな技術を開発し、開発途上国の建築及び都市の耐震化に資すること。

一 研究成果・効果

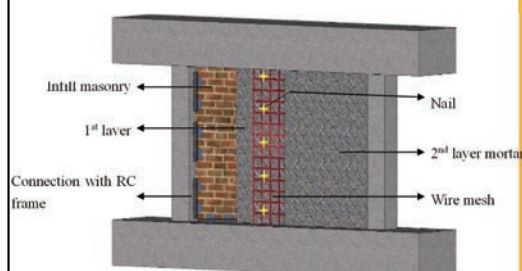
① URM壁の破壊メカニズムと影響因子

	Column $h_c = h_{eff}$		Short Column $h_c = h_{eff}/2$ (change at mid height)	
	Shear Type A $Q_u/Q_m < 1$	Flexural Type B $Q_u/Q_m > 1$	Shear Type C $Q_u/Q_m < 1$ for $h_{eff}/2$	Flexural Type D $Q_u/Q_m > 1$ for $h_{eff}/2$
Type I Diagonal compression $a_1/a_2 \geq 0.30$			N.A.	N.A.
Type II Sliding - diagonal cracking failure $0.2 < a_1/a_2 < 0.30$	N.A.	N.A.		
Type III Overall flexural $a_1/a_2 \geq 0.2$			N.A.	N.A.
Type IV Column pushing & joint sliding $a_1/a_2 \geq 0.2$	N.A.		N.A.	N.A.

② 耐震診断法への URM 壁の導入



③ URM 壁の耐震補強構法



発表論文・関連論文：D. Sen, H. Alwashali, M.S. Islam, M. Seki, M. Maeda, "Lateral Strength Evaluation of Ferrocement Strengthened Masonry Infilled RC frame Based on Experimentally Observed Failure Mechanisms", Research Square, ver 1, April 2021, <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-422754/v1>

一般研究B(2021年度)

「高圧印可処理を施した非晶質材料における経時変化の出発原料依存性」

研究代表者：正井博和(産業技術総合研究所 材料・化学領域)

共同研究対応教員：東 正樹

一 研究目的

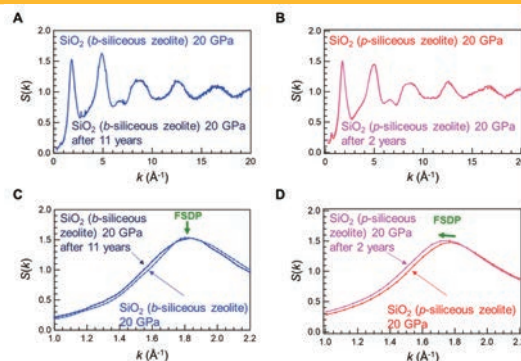
ガラスやゼオライトといった非平衡酸化物材料におけるネットワークは、種々の作製条件に依存し変化する。昨年度までの共同利用研究により、高圧印可により、原料のシリカライト中の周期性を一部残した状態でアモルファス化することを見出した。本年度は、これまでに高圧印可により作製した非晶質SiO₂について、再度、高エネルギー回折実験を実施し、構造の経時変化と出発原料との相関を明らかにすることを目的とした。

一 研究成果・効果

粉末ゼオライト(Siliceous zeolite)を出発原料として、2019年度、及び、2020年度共同研究において作製した非晶質SiO₂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、構造因子S(k)におけるFirst sharp diffraction peak (FSDP)の経時変化を検討した。

1. 粉末ゼオライトを原料として高圧印可により作製された非晶質SiO₂において、作製2年後に測定したS(k)において、FSDPのピークシフトが確認された。
2. 単結晶ゼオライトを用いて作製された試料においては、作製から11年経った後においても、FSDPの明瞭なシフトは確認されなかった。

➡ 高圧印可により作製した非晶質材料の安定性が原料に依存することを実証した。



単結晶ゼオライト (b-siliceous zeolite) (A)、および、粉末ゼオライト (p-siliceous zeolite) (B) から得られた非晶質SiO₂における時間経過後の構造因子S(k)の比較。C、D. それぞれのFSDP領域の拡大図

一般研究B(2021年度)

「合成梁のシアコネクタと床スラブの合成効果に関する研究」

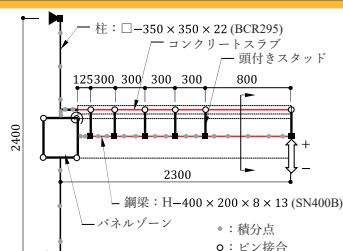
研究代表者：松井良太(北海道大学大学院工学研究院)

共同研究対応教員：西村康志郎

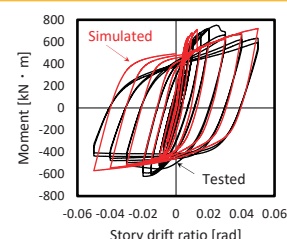
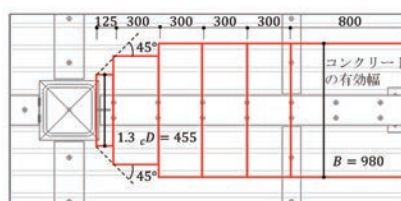
— 研究目的 —

昨年度、実施した模型載荷実験より、デッキプレート付合成梁の耐力および変形性能を検証し、デッキプレートを配置やシアコネクタの本数に影響を受けることを確認した。本研究では、数値解析により、デッキ合成スラブ、鋼梁、頭付きスタッドをモデル化し、合成梁の実験挙動を数値解析により再現することを試み、合成梁を合理的に評価する手法の提示を目的とした。

— 研究成果・効果 —



対象試験体のモデル化



荷重-変形関係

数値解析で、デッキ合成スラブのコンクリート有効幅、有効厚さを変化させて、対象試験体の載荷性能を分析できる手法を確立した。今後、シアコネクタの剛性、耐力や、コンクリートの材料特性を見直しつつ、さらに実験結果を合理的に捉えられるモデルの構築を目指す。

発表論文・関連論文：外山寛太郎、松井良太、岡崎太郎、西村康志郎：数値解析によるデッキプレート付合成梁の載荷性能の検証，日本建築学会大会学術講演梗概集，2022.9(発表予定)

一般研究B(2021年度)

「高層木質制振建物を対象としたCLTロッキング壁構造の開発」

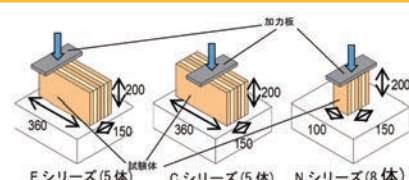
研究代表者：松田和浩(名城大学理工学部建築学科)

共同研究対応教員：佐藤大樹

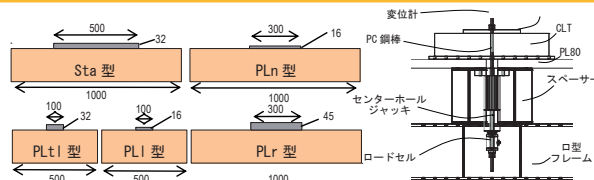
— 研究目的 —

持続可能な社会の実現に向けて、木材利用の必要性が高まっている。これまでに、CLTロッキング壁構造の壁柱単体実験や、柱・梁接合部実験を行い、その力学特性を把握してきた。本年度は、昨年度のCLT壁柱試験体から切り出した試験体を用いて、めり込み発生時の材料特性を把握する実験と、柱頭部周辺の要素実験を実施し、実験結果を踏まえて構造性能評価法を改良する。

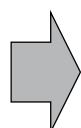
— 研究成果・効果 —



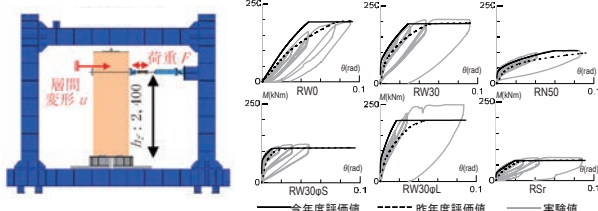
CLTめり込み試験 → めりこみ特性を把握



定着板部分圧縮試験 → 圧着部の特性を把握



壁柱単体実験で得られた柱脚支持部のM-θ関係の評価式を改良した。かつ、上で示した2つの要素実験の結果を用いることにより、評価値の精度を向上させることができた。



共同研究対応教員：安井伸太郎

傾斜組成薄膜は、膜厚方向に組成を意図的に変化させた構造の薄膜で、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、傾斜組成構造を光触媒材料へ応用することを目的とし、ZnO薄膜にMgのドーピング濃度を連続的に傾斜組成したエピタキシャル薄膜をパルスレーザ堆積法により作製して、その構造や光触媒特性を調査した。

図2. 光反応後の薄膜のXRDパターン

c面サファイア基板上に結晶性と表面平坦性を向上させるためのバッファ層(100nm)を堆積させ、その上にMgのドーパ量が連続的に変化した傾斜組成を作製した。XPSのピーク強度の深さプロファイル(図1)から、ほぼ設計通りの線形な傾斜組成が出来ていることを確認した。各薄膜を硝酸銀水溶液に浸し高圧水銀ランプを照射して光反応を行なった結果、銀の酸化物が生成し、そのXRDピーク強度はDown-graded薄膜で最も大く、Mgの濃度傾斜の違いが光触媒特性に影響を与えることが示唆された[1]。

[1] 佐藤 湧太, 丸山 伸伍, 神永 健一, 松本 祐司, 第82回応用物理学会秋季学術講演会, 13p-N203-4, 2021年9月13日.

共同研究対応教員：鎌田慶吾

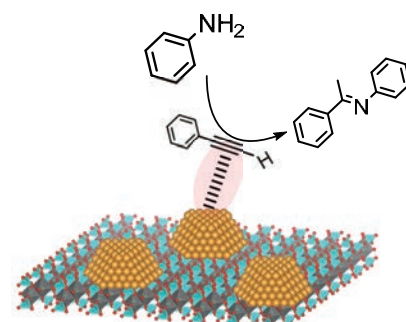
粒子径が数nm以下に制御された金ナノ粒子はソフトなルイス酸性や特異な酸素分子活性化能といった他の金属ナノ粒子にはないユニークな触媒特性を示すことが知られている。多様な機能を有する金属リン酸塩を金触媒の担体として適用できれば、担持金触媒の有機合成用触媒としての有用性を高めることが出来る。そこで本研究では、金ナノ粒子を金属リン酸塩上に高分散に担持する手法の開発を目的とした。

The diagram illustrates the synthesis of Au-MPOx nanocomposites. It shows a beaker containing a yellow solution with a magnetic stirrer. Three reaction pathways are shown, all starting from the same solution:

- Top pathway:** Addition of HAuCl_4 and NaOH leads to a single Au nanoparticle on an MPO_x support.
- Middle pathway:** Addition of HAuCl_4 and Urea leads to two Au nanoparticles on an MPO_x support.
- Bottom pathway:** Addition of HAuCl_4 and Ammonia leads to a large MPO_x support with multiple Au nanoparticles.

Figure 1 shows a TEM image of ZnO nanorods and a histogram of their size distribution. The histogram indicates a peak size of 3.5 ± 0.9 nm and a BET surface area of $S_{\text{BET}} 6 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$. A scale bar of 20 nm is provided.

Au/ZrP₂O₇のTEM像



金属リン酸塩担持金触媒がアルキンの
ヒドロアミノ化に高活性を示した

発表論文・関連論文： H. Nishio, H. Miura, K. Kamata, T. Shishido, *Catal. Sci. Technol.* **2021**, *11*, 7141–7150.

一般研究B(2021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」

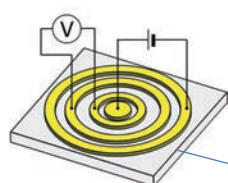
研究代表者：三澤哲郎(国立研究開発法人 産業技術総合研究所)

共同研究対応教員：笹川崇男

— 研究目的 —

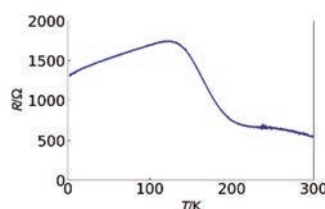
量子ホール効果は低温・強磁場中の二次元電子系においてホール抵抗が量子化される現象である。量子化ホール抵抗は、直流抵抗の一次標準としても用いられている。本研究ではトポロジカル絶縁体の表面金属状態における量子ホール効果の精密測定を目指している。トポロジカル絶縁体の表面状態を精密に測定するため、コルビノ型の4端子素子を作製し、単一トポロジカル表面による輸送特性の評価を行った。

— 研究成果・効果 —



コルビノ型素子の特長

- 単一表面の輸送測定が可能
- 一様な電流分布が実現できる
- 電極形状を精密決定可能

トポロジカル絶縁体
Sn-BSTS結晶薄片

抵抗の温度依存性

等価回路モデルを用いた電気伝導のシミュレーションにより、室温付近では上面および下面の金属電子状態が電気伝導を支配しており、低温では上面のみが伝導に主に寄与していることが確認された。

トポロジカル絶縁体は絶縁体的なバルクと金属的な表面を併せ持つ物質である。金属的な表面に由来する電気輸送特性を正確に測定するため、高バルク絶縁性トポロジカル絶縁体Sn-BSTS結晶薄片の表面に4端子コルビノ型素子を作製した。抵抗の温度依存性測定を解析することにより、低温においてSn-BSTSの上面金属状態に由来する電気伝導が実現していることが確認された。トポロジカル表面における量子輸送現象の精密理解や、トポロジカル絶縁体を用いた新たなデバイスへの応用が期待される。

発表論文・関連論文：T. Misawa, S. Nakamura, Y. Okazaki, Y. Fukuyama, N. Nasaka, H. Ezure, C. Urano, N.-H. Kaneko, and T. Sasagawa, Single-surface conduction in a highly bulk-resistive topological insulator $\text{Sn}_{0.02}\text{Bi}_{1.08}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2\text{S}$ using the Corbino geometry, Appl. Phys. Lett. 118, 033102 (2021)

一般研究B(2021年度)

「高エントロピー合金型カルコゲナイドの輸送特性評価」

研究代表者：水口佳一(東京都立大)

共同研究対応教員：片瀬貴義

— 研究目的 —

NaCl型金属テルライド(MTe)は超伝導体、熱電材料、トポロジカル物質として物性研究が進められている。また、MTeのMサイトを5元素で固溶した(Ag,In,Sn,Pb,Bi)Teは高エントロピー合金型(HEA型)超伝導体として興味深い性質を示す。本研究では金属テルライド超伝導体の新規開発と、(Ag,In,Sn,Pb,Bi)Te系におけるキャリアドーピング機構の解明を目的とした。

— 研究成果・効果 —

① 新超伝導体(Ag,In,Sn,Bi)Teの開発(図1)

(Ag,Sn,Bi)Teがトポロジカル物質である可能性をバンド計算との比較から提案し、In部分置換によって電子キャリアドーピングを行い、バルク超伝導体を開発した。今後、トポロジカル超伝導体候補物質としての研究が期待される。

② HEA型超伝導体(Ag,In,Sn,Pb,Bi)Teのキャリアドーピング機構解明

(Ag,In,Sn,Pb,Bi)Te系においてIn量を系統的に変化させた物質を開発し、In置換が電子キャリアを生じさせ、 T_c を上昇させることを見出した。

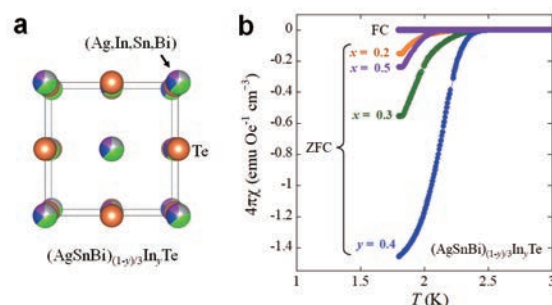


図1. (a) 新超伝導体(Ag,In,Sn,Bi)Teの結晶構造図. (b) 磁化率の温度依存性.

発表論文・関連論文：T. Mitobe et al., Sci Rep 11, 22885 (2021).

一般研究B(2021年度)

「金属間化合物エレクトライドの探索」

研究代表者：溝口拓(物質材料研究機構MANA)

共同研究対応教員：平松秀典

— 研究目的 —

これまでのエレクトライドは、 $C_{12}A_7:e$ や Ca_2N など明らかな電子過剰型のバルクのイオン性結晶を母体とするものであるが、本研究では、この範疇を超えた新規なエレクトライド物質を計算と実験を組み合わせで探索した。DFT電子構造計算と実験を組み合わせ、効率的に材料探索を進める。我々のこれまでの経験に基づき、その化学的安定性からマイルドなエレクトライドとして材料応用の可能性を持つケイ化物や、遷移金属陰イオンを含むユニークな電子構造を持つ金属間化合物などを中心に調査を行った。

— 研究成果・効果 —

計算によるスクリーニングの結果、ハーフホイスラー型のSi、Ge化合物の金属間化合物が、ユニークな電子構造を持つことを発見した。例えば、 $LiAlSi$ は、欠陥bcc型の結晶構造を取る。見方を変えると、 $AlSi$ の閃亜鉛型フレームワークを持ち、それに付随する結晶学的すき間の半分を、 Li イオンが占有している。図1に示すように、ダイヤモンド型(Si)、閃亜鉛型(SiC)の結晶構造と密接な関係がある。しかし、 $LiAlSi$ はバンドギャップ $E_g \sim 0.1\text{eV}$ の間接ギャップ半導体であり、その E_g は極端に小さい。伝導帯の底は、実空間では、 $LiAlSi$ 中の空隙に位置し、この半導体は電子化物によく似た電子構造を持つことを発見した。DFT計算により、圧力依存性を調査したところ、 $LiAlSi$ は、10GPa以下の圧力で、 E_g を閉じ、価電子帯の電子は伝導帯に移動し、電子化物が出現することがわかった。

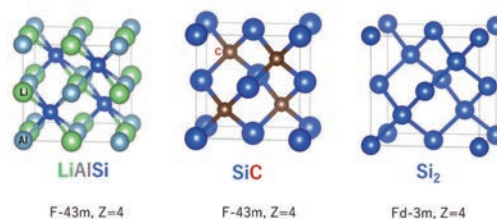


図1. 四配位系半導体の結晶構造の比較

一般研究B(2021年度)

「ナノ多孔性結晶中に取り込まれた異種元素クラスターの局所環境解析」

研究代表者：村田 秀信(大阪府立大学)

共同研究対応教員：熊谷 悠

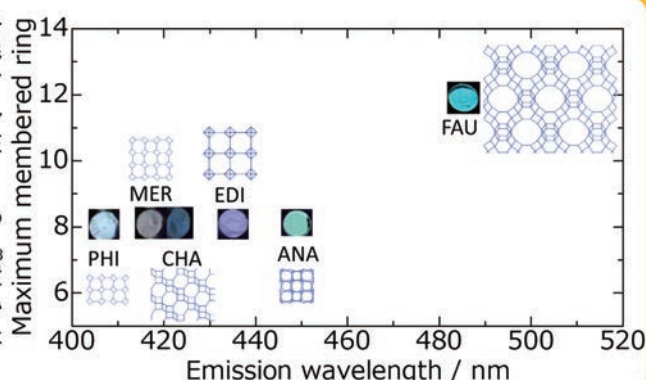
— 研究目的 —

ゼオライトや金属有機構造体(MOF)は結晶構造中にナノメートル程度の細孔を有する物質であり、その細孔内に様々なイオンや分子を取り込むことができる。一部の物質では、細孔中で複数のイオンや分子がクラスターを形成することが報告されているが、その詳細については未解明な点が残されている。そこで本研究では、ナノ多孔性結晶中で形成される異種元素クラスターの局所環境解析を行った。

— 研究成果・効果 —

Ag添加ゼオライトでは、イオン交換後に熱処理を行うことでゼオライトの細孔中にAgクラスターが形成され、蛍光を発現する。これらのAg添加ゼオライト蛍光体に関して、 $Ag-L_3$ 端X線吸収スペクトル(XANES)を測定したところ、Agは0価の状態が存在することが明らかになった。

一方、Ag添加LTL型ゼオライトは、熱処理を行っても蛍光を発現しなかった。粉末X線回折と $Ag-L_3$ XANESから、Agは0価でゼオライト中のKサイトを置換していることが分かった。このサイトは開口が小さいため、Agが0価の状態では拡散が制限されるためにクラスターの形成が妨げられたと考えられる。



一般研究B(2021年度)

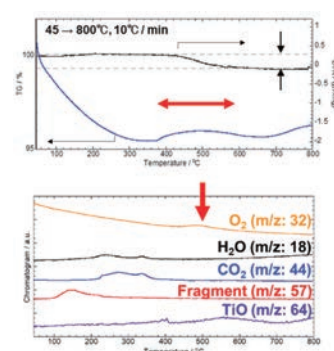
「強誘電体/強弾性体におけるドメイン界面構造と機能特性」

研究代表者：森茂生(大阪府立大学)

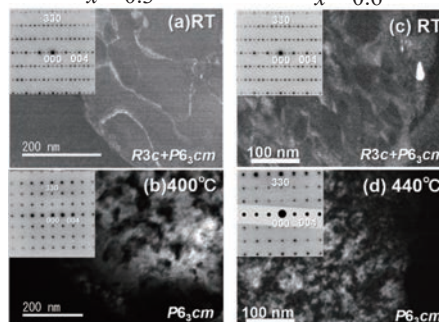
共同研究対応教員：東正樹

— 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、ドメイン境界に特有な結晶構造や機能性の発現に関する研究が盛んにおこなわれている。本研究では六方晶マンガン酸化物 HoMnO_3 において、Mnサイトの一部をTiで置換した $\text{HoMn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_{3+\delta}$ の多結晶試料を作製し、Ti置換による結晶構造やドメイン構造の変化を明らかにすることを目的とし、放射光X線回折法および透過型電子顕微鏡法を用いて調べた。

DSC及びGC-MS測定結果 ($x = 0.3$)

TEM加熱その場観察

 $x = 0.3$ $x = 0.6$ 

菱面体構造中の過剰酸素が脱離することに誘発されて、菱面体構造から六方晶構造へ構造変化

S.Mori, T. Kamoi, H. Nakajima, H. Tsukasaki, Y. Ishii, H. Ishibashi, Y. Kubota, J. Yamasaki, MRM2021, 2021年12月16日、Yokohama。

一般研究B(2021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 未来材料・システム研究所)

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用などが期待されている。そのような超伝導状態を発現する研究舞台には様々なものが提案されている。本研究ではその舞台として特に磁性をドーパしたトポロジカル絶縁体に着目し、結晶特性の改善と評価から取り組み、その超伝導近接効果の調査を行っている。本年度ではこの物質の表面の評価と通常の近接効果とは異なる現象の観測に取り組んだ。

— 研究成果・効果 —

物質の内側であるバルクは半導体で、表面状態は高易動度の電子がいるのを反映し、結晶を薄くへき開すると表面支配率が上昇することを通じて表面状態支配的な輸送特性の観測にまず取り組んだ。その結果図1(a)に示すように薄いほど桁で抵抗率の減少を確認し、さらに低温・高磁場下では高易動度の低キャリアを反映した表面状態の抵抗の量子振動現象を観測した。この物質においては初めての観測となり、表面状態の理解へとつながった。さらにこの物質にNbの超伝導電極を使って近接効果を調査した。その結果、図1(b)に示すように、極低温では超伝導ギャップを反映したギャップ構造を観測した。特異なのは、磁場を印加するとギャップが深化する点である。通常の超伝導接合では磁場による超伝導電子対の破壊によってギャップはなだらかに浅く変化していくことが期待される。それとは真逆の現象は特異な表面状態に起因したものと考えている。今後はさらにこの詳細を明らかにしていく。

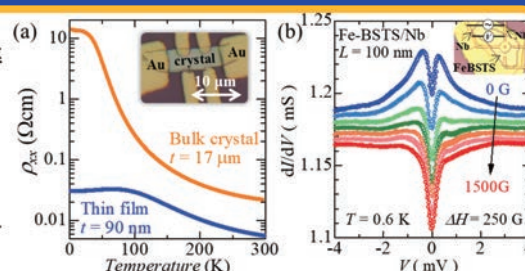


図1(a)バルク結晶と剥片化した微小結晶の抵抗率の温度依存性の比較。高温ではバルクの特性を、低温では表面状態を反映した温度依存性になっている。(b)Fe-BSTSとNbの超伝導接合の磁場応答。磁場の印加でギャップが深化している。

関連発表論文：R. Yano et al., Journal of Physical Chemistry Letters 12, 4180-4186 (2021).

一般研究B(2021年度)

「イオンビーム誘起欠陥を有する物質表面のレーザー分光計測」

研究代表者：八巻 徹也(量子科学技術研究開発機構 高崎量子応用研究所)

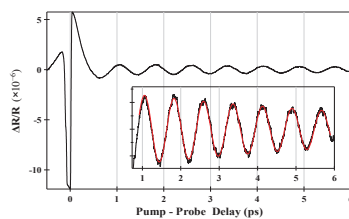
共同研究対応教員：中村一隆

一 研究目的

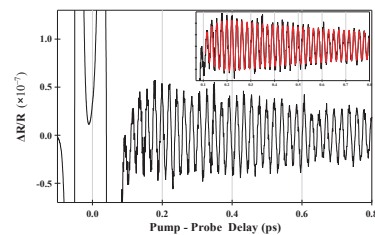
本研究は、イオンビーム誘起欠陥を有する炭素担体を利用した高活性白金ナノ微粒子触媒の創製に資するため、レーザー分光計測によって物質表面へのイオンビーム照射効果の解明を目指すものである。特に、フェムト秒時間分解分光計測により、フォノン・電子ダイナミクスにおけるイオンビーム誘起欠陥の影響を調べる。

一 研究成果・効果

高配向性熱分解グラファイトのフェムト秒時間分解過渡反射率計測を行い、グラファイト面間C-C振動モード(1.35TH)と面内C-C振動モード(47THz)のコヒーレントフォノン振動を計測することができた。



グラファイト面間C-C振動モード(1.35TH)



グラファイト面内C-C振動モード(47TH)

発表論文・関連論文：T. Kimata, K. Nakamura, and T. Yamaki, "Electrocatalysts developed from ion-implanted carbon materials" in "High energy chemistry and processing in liquid", eds. T. Yatsuhashi et. al., pp. 311-330 (Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2022).

一般研究B(2021年度)

「免震部材の繰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：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：佐藤大樹

一 研究目的

本研究では、相模トラフ地震を想定した長周期地震動に対する免震建物の応答特性を把握するため、免震部材の組合せ配置の異なる二つのモデルを設定し、各免震部材の特性変化を考慮した時刻歴応答解析により、南海トラフ地震を想定した長周期地震動との比較を行う。

一 研究成果・効果

図4に示す相模トラフ地震の各地点の累積吸収エネルギーを見ると、同じ関東圏のKA1より大きな値を示す地点が多いことが分かる。特に小田原と富津の値が大きく、OS1やCH1ほど大きくはないがOS2,CH2,SZ1,SZ2と同等以上の値を示している。特性変化率については、HDRモデルは、等価水平剛性、切片荷重ともに、地震動によらず比較的小さい。LRBモデルは、Keqの変化率は比較的小さいが、累積吸収エネルギーの大きな地点ではQdの変化率が大きく、小田原、富津、OS1~SZ2で変化率が25%を下回っている。

図5に示す相模トラフ地震の各地点の応答は、免震部材の組合せによらず、同じ関東圏のKA1に比べて大きいことがわかる。特に、小田原やHDRモデルの神奈川EWではクライテリアの50cmを超えており、特性変化を考慮したOS2と同程度の応答となっている。また、HDRモデルは、検討した全地震動において、特性変化の有無による応答の差は小さい。LRBモデルも、相模トラフ地震においては、小田原を除けば特性変化の影響による応答の差は小さく、OS1やCH1で見られるような、特性変化の影響による極端な変位増大は生じていないことがわかる。

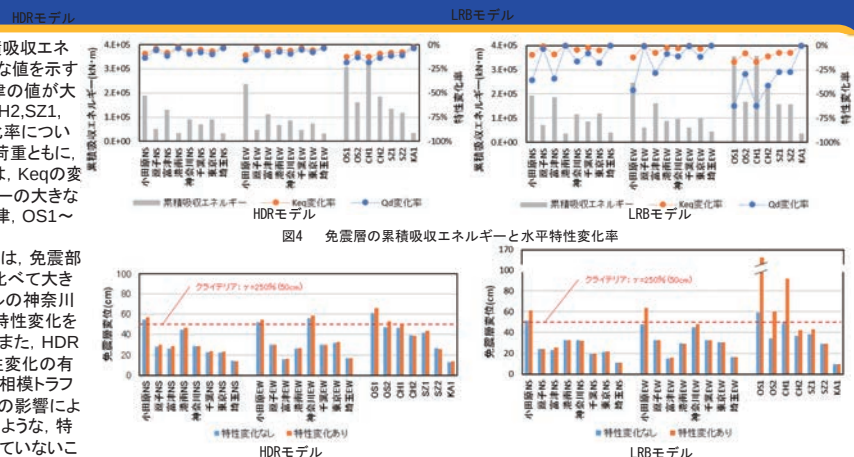


図4 免震層の累積吸収エネルギーと水平特性変化率

図5 免震層の最大応答変位

一般研究B(2021年度)

「遷移金属イオンを含む酸化物の電子物性」

研究代表者：山本孟(東北大学多元物質科学研究所)

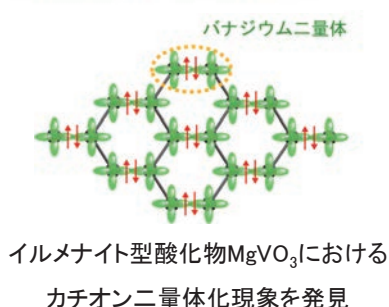
共同研究対応教員：東正樹

— 研究目的 —

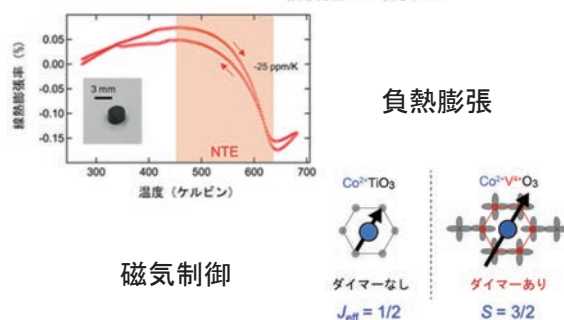
最大で10万気圧以上の圧力を発生する超高压合成法と量子ビーム実験、強相関電子物理学に基づく電子物性制御を駆使して、新たな電子状態の発見と革新的な機能性物質の創出を行った。

— 研究成果・効果 —

新たな電子状態の発見



機能の創出



発表論文・関連論文：1. Hajime Yamamoto ほか、Journal of the American Chemical Society, 144, 3, 1082-1086 (2022)

一般研究B(2021年度)

「ペロブスカイト型ニッケル酸化物薄膜における基板歪み効果と次元性による新しい電子状態の実現」

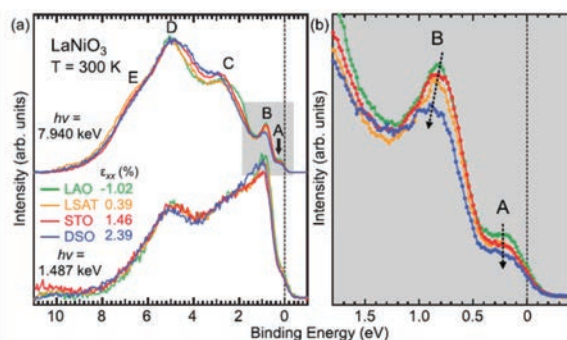
研究代表者：和達大樹(兵庫県立大学 大学院理学研究科)

共同研究対応教員：片瀬貴義

— 研究目的 —

ペロブスカイト型ニッケル酸化物薄膜の基板からの歪み効果により、電子相関の物理を明らかにし、金属絶縁体転移や新しい磁気秩序の実現を行いたいと考えた。特に、放射光X線による光電子分光を用いることで、新しい電子状態の観測を目指した。最終的には、基板歪み効果、次元性、レーザー光照射などによる新しい電子状態の実現を行いたい。

— 研究成果・効果 —

LaNiO₃薄膜の価電子帯の光電子分光スペクトル

7.940 keVと1.487 keVのX線により、価電子帯の光電子分光スペクトルに対する伸長歪みの影響を調べた。左図(a)に示すように、A-Eの5つの特徴的な構造が観測された。以前の研究との比較により、構造AとBは、それぞれO2p軌道と混成したNi 3dのeg軌道とNi2g軌道の反結合性状態と考えられる。結合状態と非結合状態は構造C-Eに対応する約2-8eVにある。構造A-Cに対応する0-4 eV付近の状態は、伸長歪みに伴い(b)のような系統的な変化を示している。このように、新しい電子状態の実現に向けた重要な一歩となる成果が得られた。

発表論文：K. Yamagami, K. Ikeda, A. Hariki, Y. Zhang, A. Yasui, Y. Takagi, Y. Hotta, T. Katase, T. Kamiya, and H. Wadati, "Hard x-ray photoemission study on strain effect in LaNiO₃ thin films", Appl. Phys. Lett. **118**, 161601 (2021).

一般研究C(2021年度)

「酸化チタン表面上のラッカーゼ及びサレン錯体のXPS測定」

研究代表者：秋津貴城(東京理科大学)

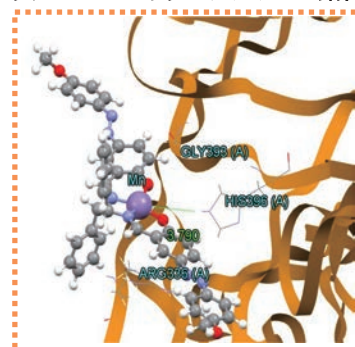
共同研究対応教員：原 亨和

— 研究目的 —

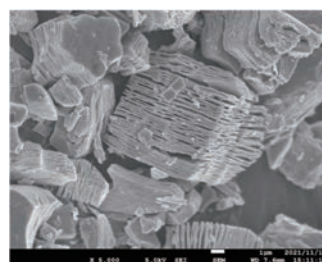
錯体と酵素ラッカーゼとの複合化を用いた光利用型のバイオ燃料電池への応用で、陽極部分を中心とした電極構築を目指した、酵素ラッカーゼとキラルアゾサレン(シッフ塩基)金属錯体の複合系に関して、いくつかの要素技術の条件検討を行った。

— 研究成果・効果 —

ラッカーゼ+キラルアゾサレン錯体

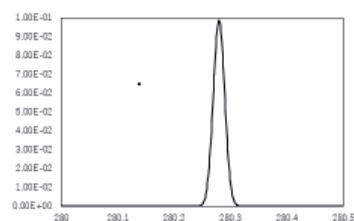


電極材料となる無機固体の探索

(MxeneTi₂C₃はCNTより高電流値)

グラフェンでの内殻DFT計算

(XPS実験と合わせる補正が必要)



招待講演: T. Akitsu et al., "Electrode materials for laccase using two dimensional MXene " Virtual Meet on 2D Materials and Graphene (2022).

T. Akitsu, "XPS and XAS studies on adsorption and valences for metal complexes" Role of Chemistry in Environmental Protection, Indian Chemical Society (2021).

T. Akitsu, "Photophysical and chiroptical properties of hybrid materials of chiral azo-Schiff base metal complexes" The 7th Int'l Conference on Physical Chemistry (2021).

一般研究C(2021年度)

「小振幅繰り返し荷重を受けるコンクリート充填鋼管柱の耐震性能評価」

研究代表者：石田孝徳(横浜国立大学)

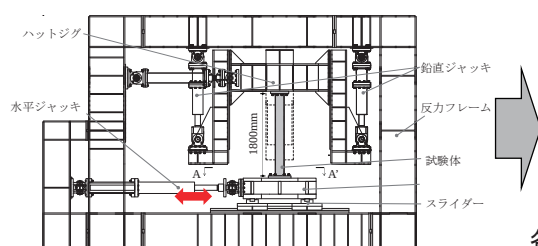
共同研究対応教員：吉敷祥一

— 研究目的 —

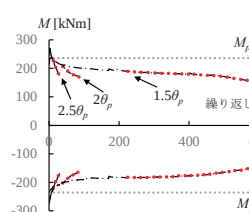
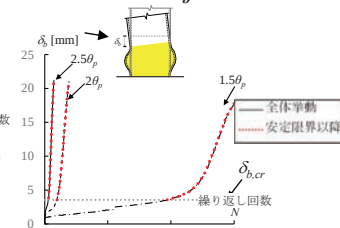
近年発生が懸念されている南海トラフなどを震源とする巨大海溝型地震は、長周期成分が卓越し、かつ、継続時間が長いという特徴を有している。このような地震荷重下では、建物を構成する構造部材には、比較的小さな振幅での多数回の繰り返し荷重を受けることが考えられる。本研究では、我が国の超高層鉄骨造建物の柱材として用いられるコンクリート充填角形鋼管柱(CFT柱)を対象として、小振幅下での耐力劣化挙動や繰り返し変形性能を把握することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

変位振幅を主なパラメータとした載荷実験



ピーク荷重の推移

局部座屈変形 δ_b の推移

各サイクルにおけるピーク荷重と局部座屈変形の推移を調査
既往の中空鋼管における知見(安定限界=耐力劣化と局部座屈変形が急激に進展する限界)の適用性を検証

一般研究C(2021年度)

「低温化学溶液還元による銅酸化物高温超伝導体中の電子ドーパ量の制御」

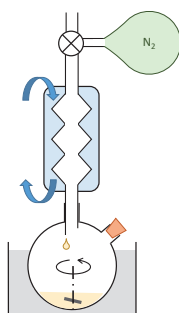
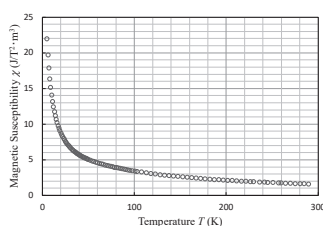
研究代表者：井上 亮太郎(日本大学医学部)

共同研究対応教員：気谷卓

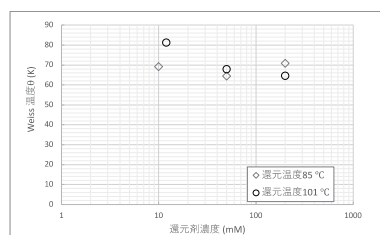
— 研究目的 —

研究代表者らはこれまでに200℃以下の低温で酸化物を還元する手法＝低温化学溶液還元を開発してきた。これを用いて銅酸化物高温超伝導体の超伝導転移温度の制御を目指す。電子ドーパ系銅酸化物高温超伝導体 $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ (NCCO)を還元し、SQUIDによって磁化率の温度依存性を測定して超伝導転移温度を調べる。

— 研究成果・効果 —

低温化学溶液還元
(常圧環流方式)LiBH₄ 101℃ 50 mM 68.8 h

$$\text{Curie-Weiss則 } \chi(T) = \frac{C}{T + \theta}$$



還元によってWeiss温度 θ が減少
反強磁性的電子相関がもっと抑制され
れば超伝導が発現すると期待

一般研究C(2021年度)

「アルカン選択酸化反応に活性な斜方晶 Mo_3VO_x 複合酸化物触媒のマイクロ細孔反応場と酸素種解析」

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 亨和

— 研究目的 —

本研究では、Keggin構造ベースの新規合成、酸化触媒能試験、そして活性酸素種の同定と形成過程を解明することを目的とした。活性酸素種は通常、活性化の程度に応じてO-O結合の強度が異なるため、重酸素を用いた分光測定によりその酸素種の状態解明が可能であるが、触媒の性質に大きく依存し、容易ではない。今回の研究期間内では、過酸からの酸素種の発生とそれによるオレフィンのエポキシ化反応の検証と結晶構造解析に基づく物質状態解析から酸素種の形成機構の解明を実施した。

— 研究成果・効果 —

Keplarate[Mo₇₂V₃₀]

と呼ばれる大きなボール型のヘテロポリ酸を原料にBiの酸素多面体をリンカーに縮合させ、3次元細孔性結晶Bi_{3.3}[VMo_{9.4}V_{2.6}O₄₀]を合成した。このものは不均一触媒として穏和な条件で各種オレフィンを過酸で液相酸化し、高い選択率で対応するエポキシ化合物を与えることを見出した。

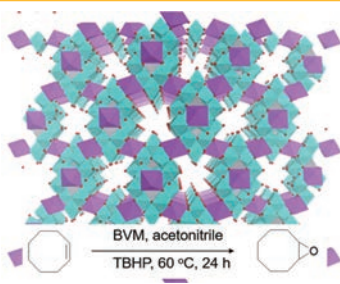


図1 ε-Keggin構造を基本単位とする細孔性結晶の構造とこれを触媒とするオレフィンのエポキシ化

α-Keggin構造のヘテロポリモリブドリン酸のビリジニウム塩合成し、これを適切な温度で熱処理することで、ビリジニウム塩結晶が生成する。このものの構造解析に成功し、またアルデヒドの気相酸化に極めて高い触媒性能を示すことを見出した。結晶構造を基に新しい酸素分子活性化の機構を提示した。

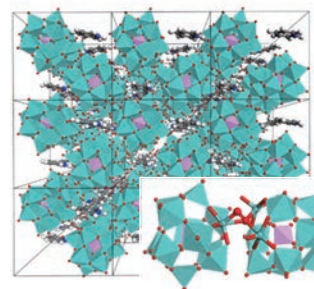


図2 α-Keggin構造を基本単位とするビリジニウム塩結晶の構造とα-Kegginダイマー間での酸素分子活性化

一般研究C(2021年度)

「安価な粉末ケイ素から作製したケイ素セラミックスを土台にした3層構造をもつ自己発熱型CO₂吸収シート作製の試み」

研究代表者：大石克嘉(中央大学大学院理工学研究科)

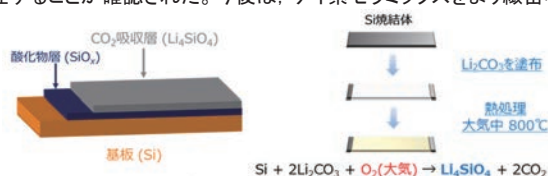
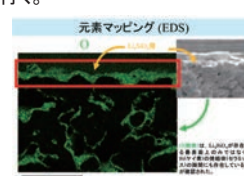
共同研究対応教員：真島豊

一 研究目的 一

本研究課題では、通電により実現する自己発熱型CO₂吸収コンポジットの1つである{Si/SiO_x/Li₄SiO₄}を、より安価で単位質量あたりのCO₂吸収量が拡充されたシート状の自己発熱型CO₂吸収コンポジットにバージョンアップさせるための新たな製造方法の開発を目指している。今回、CO₂コンポジット中のケイ素ベース部分を、レアメタリック社製のケイ素粉末から作製したケイ素セラミックス使用して自己発熱型CO₂吸収コンポジットの作製を試みる。

一 研究成果・効果 一

自己発熱型CO₂吸収コンポジット{Si/SiO_x/Li₄SiO₄} (図1)のSiベース部分を成す導電性Siセラミックス(焼結体)の製造工程について検討した。今回、安価なケイ素Si粉末からSiセラミックスを製造する際、カーボンヒータ加熱式電気炉を使用せず、代わりに気密性が非常に高い電気炉を使用して、高純度アルゴン中もしくは、高真空中で熱処理を行う事により、良質な導電性ケイ素セラミックスが容易に得られる事を確認できた。さらに、得られたケイ素セラミックスの表面上にCO₂吸収物質であるLi₄SiO₄層の作製にも成功した。しかしながら、真島研所有の分析装置が付属した電子顕微鏡で観察及び元素・分析を行った結果、ベースを形成するケイ素セラミックスには数%の気孔が存在するため、Li₄SiO₄作製時に融解したLi₂CO₃がそれら気孔内部に浸透したため、ケイ素セラミックス内部にも酸素が存在することが確認された。今後は、ケイ素セラミックスをより緻密なものにして行く。

図1 自己発熱型CO₂吸収コンポジットの構造と作製方法図2 自己発熱型CO₂吸収コンポジット上の元素分析

関連論文：Analysis of CO₂ absorption reaction of Li₄SiO₄ on the basis of Madelung potential of Li site in crystal structure, K. Oh-ishi*, R. Kobayashi, K. Oka, J. Ceram. Soc. Japan, 2017, 125 [5], 383-386.

一般研究C(2021年度)

「東京工業大学開発触媒を用いたヒドロキシメチルフルフラール合成処方の確立」

研究代表者：大久保明浩、天野達、小林誠、太田貴之(群栄化学工業株式会社)

共同研究対応教員：原 亨和 教授

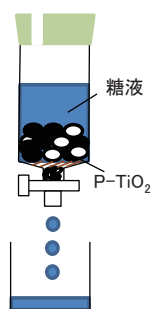
一 研究目的 一

2020年度より、リン酸チタニア触媒(P-TiO₂ 原研究室開発)を用いたヒドロキシメチルフルフラール(HMF)合成処方の検討を開始。昨年度はバッチ式での基礎検討を進めた。2021年度は、高収率及び高選択率を実現する処方確立を目指し、固定相流通系(カラム合成系、循環合成系)での合成実験を試みた。

一 研究成果・効果 一

東京工業大学 原研究室に訪問し、以下2点を実施した。

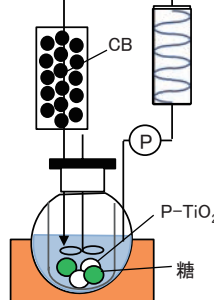
(1) 実験結果に対するディスカッション (2021.6.15)



合成装置イメージ図

- ・弊社内で、左図の様なカラム合成系(常圧)にてHMF合成実験を実施。
- ・原研究室に訪問し、上記系での合成結果を報告。
- ・カラム合成系ではHMFが合成できなかったことを報告。

(2) 循環合成装置 状況確認 (2021.12.21)



合成装置イメージ図

- ・原研究室より、ラボ内に循環合成装置を構築中と報告を受け、実際の装置を確認する為に訪問し立ち合いを実施。
- ・各槽の容量、ポンプの性能及び装置の材質等の知見を共有した。

一般研究C(2021年度)

「イオン液体を用いた金属酸化物ナノシートの合成と電気物性評価」

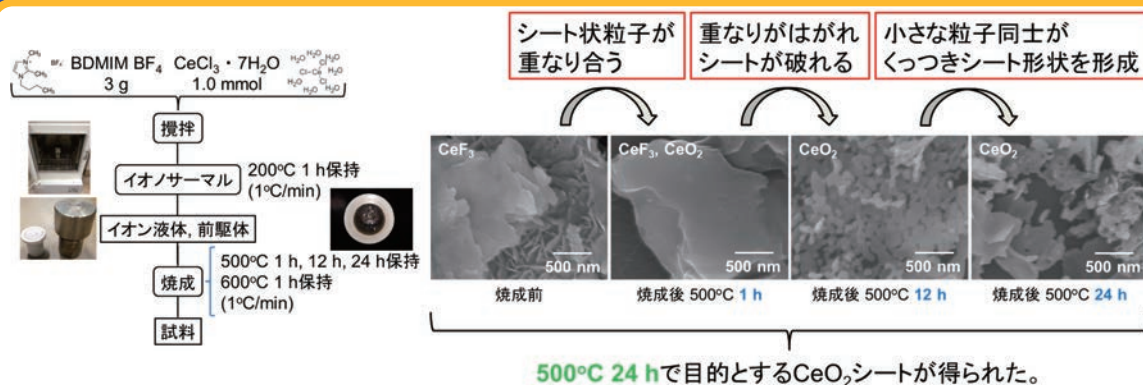
研究代表者：勝又健一(東京理科大学)

共同研究対応教員：東康男

— 研究目的 —

イオン液体の分子構造と不揮発性で高い融点という特徴を利用して酸化ジルコニウム単結晶ナノシートを合成できたことをふまえて、自動車排気ガス浄化触媒(三元触媒)として使われているセリヤージルコニア固溶体ナノシートの合成を目指し、 CeO_2 ナノシートの合成に挑戦した。

— 研究成果・効果 —



一般研究C(2021年度)

「振動エネルギーを利用した触媒的物質変換のための圧電薄膜の開発」

研究代表者：吉川聡一(東京都立大学 大学院理学研究科)

共同研究対応教員：山本隆文

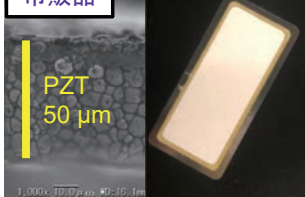
— 研究目的 —

我々は、柔軟な金属基板上に $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ (PZT) 圧電薄膜と金属粒子活性サイトをデザインし、振動エネルギーを数Vから数十Vの電位に変換して化学反応を進行させる振動触媒反応系を構築したい。本研究では、ステンレス基板上にスキージ法、水熱合成法など、種々の成膜方法でPZT圧電薄膜を作製し、その表面形状や結晶性を調べ、高効率な振動触媒の開発を試みた。

— 研究成果・効果 —

振動触媒素子の自在設計

市販品



- ・高い圧電特性が期待できる 50~100 μm 程度の厚みのPZT
- ・表面金属種を自在に設計可能

4通りの製膜方法を検討

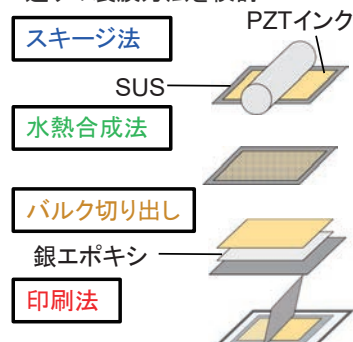
スキージ法

水熱合成法

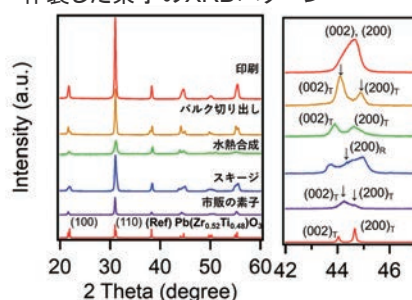
バルク切り出し

銀エポキシ

印刷法



作製した素子のXRDパターン



c軸方向へ結晶成長→高い圧電特性が期待される

一般研究C(2021年度)

「光配向性色素ドーブ液晶」

研究代表者：木下基(埼玉工業大学)

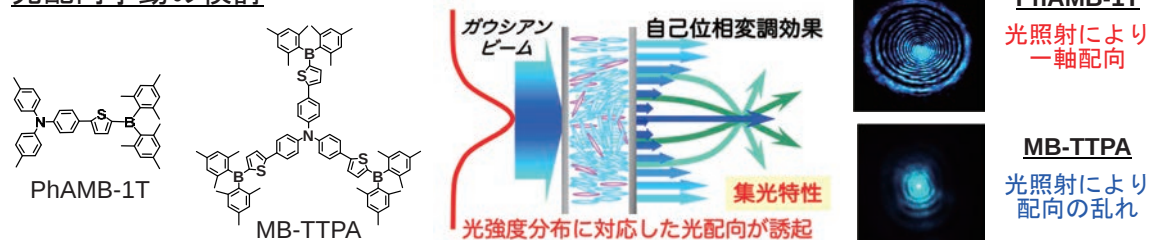
共同研究対応教員：東 康男

— 研究目的 —

これまでに π 共役系色素である液晶性オリゴチオフェンを用いて、光を照射するだけで液晶の配向変化を誘起し、緻密な配向制御により光学部材へ応用可能なことを示した。昨年度は、太陽電池用の有機半導体として知られているジケトピロロピロールを含むオリゴチオフェン誘導体について検討を行い、液晶と相溶性の高い誘導体が光配向性を示すことを明らかにした。本年度は、有機EL素子としても実績のあるホウ素とチオフェンを含む有機半導体の光応答挙動について検討した。

— 研究成果・効果 —

光配向挙動の検討



類似したクロモフォアをもつ異なる有機半導体の光配向挙動について検討したところ、遷移吸収モーメントが一方向性のPhAMB-1Tが光配向性を示した。今後は弱い光強度においても配向応答可能な有機半導体の開発が必要である。

一般研究C(2021年度)

「鉄筋コンクリート造構造部材の損傷評価」

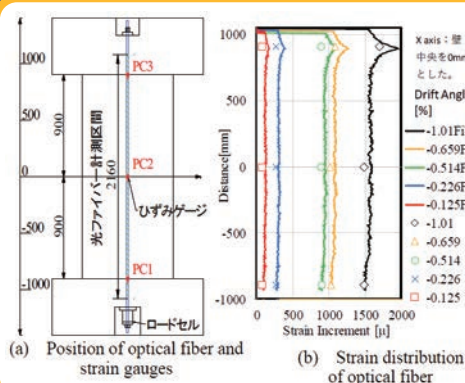
研究代表者：柴山淳(電力中央研究所 地球工学研究所 構造工学領域)

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 —



コンクリートと直接的な接触がないアンボンドPC鋼棒では、ひずみが一様化すると予想されたが、光ファイバーセンサを用いてこれまでにない詳細に計測したひずみの分布を分析した結果、構造体の変形が大きくなると、シース管との接触によりPC鋼棒のひずみが局所化が発生した可能性があることを明らかにした。今後このようなデータを収集することで、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。

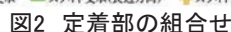
発表論文・関連論文：

植村 一貴、小原 拓、河野 進、柴山 淳：PC 鋼材の緊張力に着目したアンボンドPCaPC 造壁の曲げ耐力に関する実験的研究、日本建築学会大会学術講演梗概集(関東)、pp.725-726、2020.9

共同研究対応教員：吉敷 祥一

ベースプレートに長孔を有してローラー支承とした鉄骨屋根接合部(以下、長孔定着部)は長孔の可動域を超えた鉄骨屋根の応答変位により、アンカーボルトの破断、ベースプレートやモルタル等の損傷が生じるが、水平二方向からの地震入力を受けて、長孔側面にアンカーボルトが衝突した場合の破壊は明らかではない。長孔定着部および補強を施した長孔定着部を対象に水平二方向載荷を受けた場合の力学的性状を検討する。

図1 解析モデルの構成



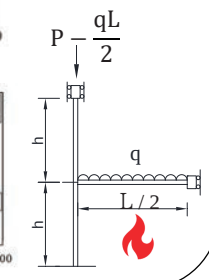
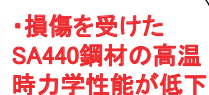
長孔のスライド方向においては定着部間で変位差を生じる(図3)が、直交方向は変位がほぼ生じないため、二方向载荷の履歴は、変形と荷重を同時に加える履歴が適当と考えられる。

共同研究対応教員：吉敷 祥一

大地震発生後、地震被害を受けた建物が火災に見舞われる例が多い。地震後ある程度損傷を受けた場合、損傷が鋼材の高温時力学特性へ与える影響が不明であり、無損傷鋼材の高温時性能を用いた基本崩壊温度の算出及び耐火性能の検討の妥当性を検証する必要がある。本研究では、建築構造用鋼材SS400とSA440を対象とし、**大地震による損傷が鋼材の高温時力学性能及び鋼架構の基本崩壊温度に及ぼす影響**を検討する。

Diagram illustrating the mechanical testing setup for a specimen. The specimen is held between two end plates (エンドプレート) and is connected to a displacement transducer (変位計) via a specimen tool (試験体道具). A displacement gauge (ひずみゲージ) is attached to the specimen. A vertical scale (伸び計) is used to measure the displacement. The distance between the end plates is 300 mm.

300°C
500°C
700°C



一般研究C(2021年度)

「新規NiおよびMn不均一系触媒を用いた炭素-炭素結合形成反応の開発」

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 —

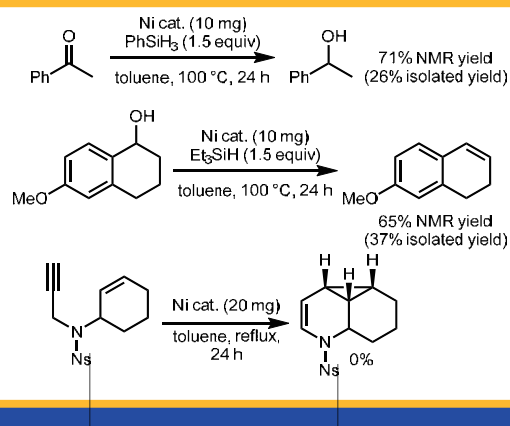
共同研究者の喜多助教らにより調製されたアルコールの酸化反応や還元的アミノ化反応に対して高い触媒活性を示す不均一系ニッケルおよびマンガン触媒について、さらなる有機合成化学反応への適用を目指し、具体的には炭素-炭素結合形成反応や還元反応などへの適用を試みることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

不均一系ニッケル触媒およびヒドロシランを還元剤として用い、アセトフェンを基質とする還元反応を検討した。種々のヒドロシランを用いて反応を行ったところ、フェニルシランを用いた際に目的の還元反応が進行することが分かった。

また不均一系ニッケル触媒存在下、 α -テトラロールを基質、トリエチルシランを添加剤としてトルエン溶媒中反応させたところ、脱水反応が進行し、スチレン誘導体が得られることが分かった。

最後に炭素-炭素結合生成反応としてエンイン類の環化異性化反応についても適用を試みたが、触媒活性は認められなかった。



一般研究C(2021年度)

「LaPO₄分散LATPリチウムイオン伝導体のイオン拡散挙動」

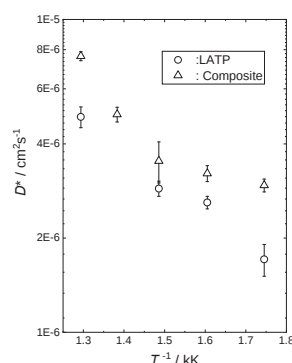
研究代表者：高井 茂臣(京都大学大学院エネルギー科学研究科)

共同研究対応教員：川路 均

— 研究目的 —

リチウムイオン伝導体LATP (Li_{1.3}Al_{0.3}Ti_{1.7}(PO₄)₃)は、全固体電池の酸化物系固体電解質材料として有力な候補の一つである。我々はLaPO₄絶縁体粒子を分散させることにより、イオン伝導率が3倍程度まで向上することを見出してきた。本研究では、リチウムイオンの拡散挙動を明らかにするために、固体NMRおよび中性子ラジオグラフィ実験を行い、リチウムの拡散係数を直接調べることにした。

— 研究成果・効果 —



固体NMRは現在のところ有為のデータが得られていない。⁶Liをトレーサーとして⁷LiからなるLATPおよびLATP-LaPO₄コンポジット中のリチウムの拡散係数測定の結果を左図に示す。母体とコンポジットの拡散係数の差は室温の電気伝導率から予想されるよりも小さいものの、確かにコンポジットの拡散係数は母体よりも高い値を示した。マクロなトレーサー拡散係数測定では、バルクと空間電荷層を利用した拡散の両方の総和を観測しているが、高温ではバルクの寄与が大きくなるために、室温で予想されたよりも低い値になるものと考えられた。

左図：トレーサー拡散係数のアレニウスプロット。○：LATP，△：LATP-LaPO₄コンポジット。

一般研究C(2021年度)

「強誘電性鉄酸化物の研究」

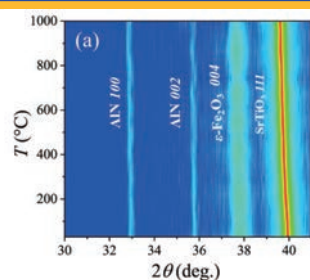
研究代表者：濱 容丞(防衛大学校 応用科学群 応用物理学科)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

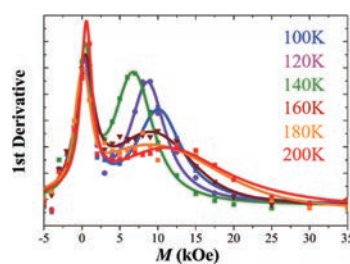
— 研究目的 —

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。

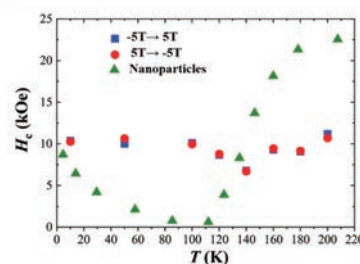
— 研究成果・効果 —



X線回折パターン



Hcの温度依存性



Hcの温度依存性

マルチフェロイック ϵ -Fe₂O₃エピタキシャル薄膜を作製し、結晶相の安定性および磁気特性の詳細について調査した。

発表論文: Yosuke Hamasaki et al., Ferroelectric and magnetic properties in ϵ -Fe₂O₃ epitaxial film, *Appl. Phys. Lett.*, 2021, 119, 182904

一般研究C(2021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)

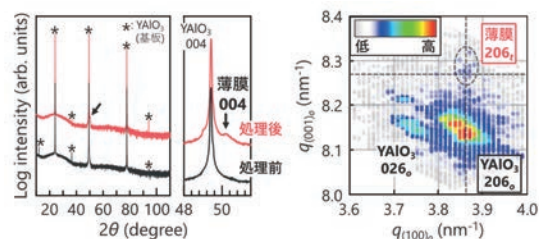
共同研究対応教員：東 正樹

— 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。しかし、超高压下のみで存在でき、大気圧下に取り出せない物質も無数に存在する。そこで、そのような物質の安定化に向け、エピタキシャル薄膜における構造安定化に着目し、薄膜試料に超高压印加するための技術開発を進め、実現してきた。本年度は、高压相物質の中でも大気圧下で不安定なペロブスカイト(Pv)型CaSiO₃に着目し、その大気圧下回収を検討した。

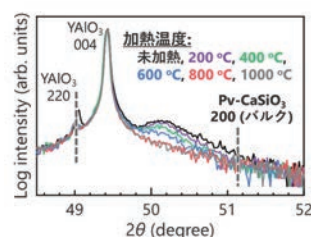
— 研究成果・効果 —

基板の影響を受けたPv構造を有する薄膜結晶の合成に成功



Pv構造を持つYAlO₃基板上に非晶質CaSiO₃薄膜を堆積し、15.6 GPa、600 °Cの超高压処理を施した。その結果、基板の影響を受けたPv構造を有した薄膜結晶の合成に成功した。

得られたPv型薄膜結晶の安定性を確認



大気圧下で加熱を行ったところ、薄膜結晶の非晶質化が生じることを観測した。得られた結晶は準安定構造であることを確認した。

発表論文・関連論文: 笹原 悠輝, 清水 亮太, 西山 宣正, 東 正樹, 一杉 太郎.
エピタキシャル安定化を活用したCaSiO₃ペロブスカイトの大気圧下回収の検討, 第62回高压討論会, 2021年10月18-20日 アクリエひめじ

一般研究C(2021年度)

「生体信号解析に適したデジタルフィルタの比較」

研究代表者：松浦 康之(岐阜市立女子短期大学)

共同研究対応教員：東 康男

— 研究目的 —

近年、着衣や腕時計型などによるウェアラブル機器を用いた生体信号計測を簡便に収集可能になっている。一方で、生体信号計測では、体動や呼吸といったノイズの処理手法の検討は重要である。このデジタルフィルタの周波数の設定によって、本来抽出すべき情報を抽出できず、必要な生体信号を得られていないといった課題がある。本研究では、生体信号評価のためのノイズ処理手法の基礎的研究の蓄積を行うことを目的とする。

— 研究成果・効果 —

本研究の概念図



生体信号中のノイズ信号

- ・医療機器による測定
- ・ウェアラブル機器による測定
- ・生体計測機器による測定

など

適切な信号処理・解析

- ・フィルタによるノイズ除去
(カットオフ周波数の妥当性)
- ・機器の違いによるノイズ除去
- ・目的に応じた処理手法の選択
- ・数値シミュレーション
(疑似乱数列を用いた
ノイズの比較検討)
- ・個人間ばらつきの考慮

- ・新たな生体反応指標の開発
- ・生体活動センシング
パラメータの検証
- ・個人推定アルゴリズムの開発

※今年度もコロナ禍の影響で、当初予定していた研究内容を進めることができなかった。当初予定していた実験については、プレ実験のみしか行うことが出来ず、フィルタや評価手法の検討のみに留まった。

一般研究C(2021年度)

「コンクリートスラブと梁継手がガセットプレートに有する合成梁・主架構挙動に及ぼす影響に関する実験研究」

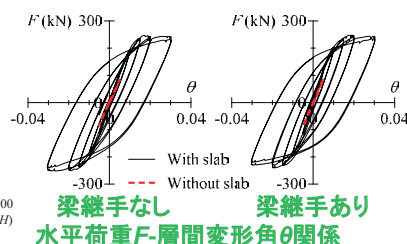
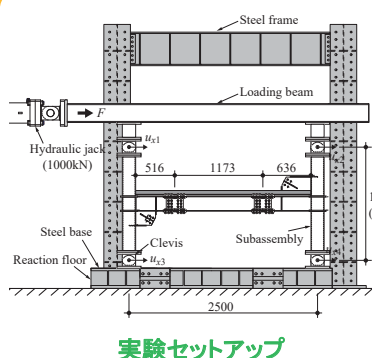
研究代表者：松田頼征(工学院大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

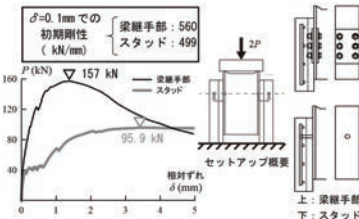
— 研究目的 —

本研究の目的は、ガセットプレートと梁継手が取付く合成梁を対象に、複曲率曲げと梁継手挙動の相互作用が合成梁の弾塑性挙動に与える影響を明らかにすることである。本年度は、縮小部分架構試験体の載荷実験を実施した。ここに、その結果と考察を述べる。

— 研究成果・効果 —

梁継手なし 梁継手あり
水平荷重F-層間変形角θ関係

梁継手によって初期剛性が增大するが、スラブによる剛性増大は梁継手の有無でほぼ差異はなかった。鉄筋や鋼梁の歪挙動も同様であった。



梁継手部は高力ボルトによって、スタッド1本よりも高いせん断力耐力と初期剛性を示した。これによる影響度を今後の解析検討で明らかにする。

一般研究C(2021年度)

「研究課題」 自己組織化コンポジット材料の物性に対するフラクタル材料組織の効果

研究代表者： 宗像文男(東京都市大学 理工学部)

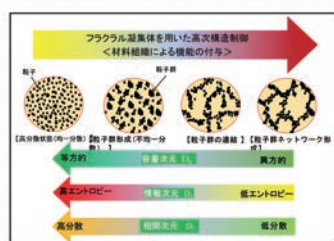
共同研究対応教員： 川路 均 教授

— 研究目的 —

自己組織化プロセスによって形成されるフラクタル凝集体の内部構造や界面構造は、コンポジット材料の熱伝導や熱容量といった熱物性や電子物性に大きな影響を及ぼす。そこで、ポリフッ化ビニリデン(PVDF)中に添加された高熱伝導性β型窒化ケイ素や強誘電体酸化物BaTiO₃が形成したフラクタル凝集体のコンポジットの材料物性への影響についてマルチフラクタル解析による材料組織解析とこれらの物性機能の両立性を検討する。

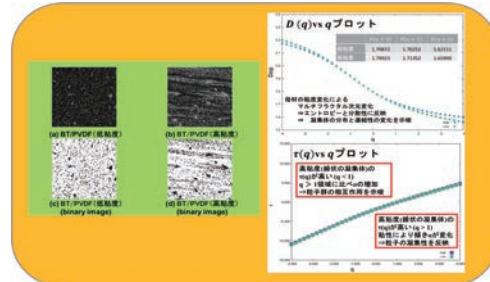
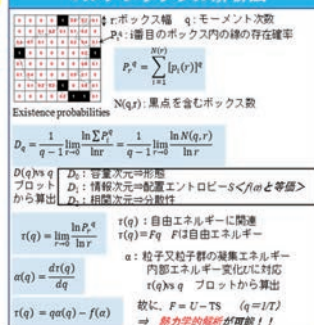
— 研究成果・効果 —

高次構造制御による材料機能の付与



コンポジット化による異なる材料機能の両立
(高熱伝導と強誘電性)

マルチフラクタル解析法



【まとめ】材料組織の変化に対応してフラクタル一般次元D-qプロットに加えて、 τ -qプロットを用いる事で熱力学的解析が可能になった。特に、内部エネルギーに関連する α が粒子群の凝集性に関連した材料組織の変化を反映していた。

関連論文： Fumio Munakata, Mariko Takeda, Kazuhiro Nemoto, Kazuya Ookubo, Yoshihiro Sato, Yuka Mizukami, Masashi Koga, Satoko Abe, Yue Bao, Ryota Kobayashi, "Multifractal characteristics of the self-assembly material texture of β -Si₃N₄/SUS316L austenitic stainless steel composites", Journal of Alloys and Compounds, 853(2021)156570. ; Fumio Munakata, Kazuya Ookubo, Mariko Takeda, Yoshihiro Sato, Yuka Mizukami, Kazuhiro Nemoto, Satoko Abe, Yue Bao and Ryota Kobayashi, "Self-assembly process under a solid-state reaction of β -Si₃N₄/austenitic stainless-steel composites: stirring conditions and material texture", Journal of Composite Materials, 56(2022)455-466.

一般研究C(2021年度)

「C-C結合の切断を伴った触媒的イソシアノ化反応の開発」

研究代表者： 百合野大雅(北海道大学大学院工学研究院応用化学部門)

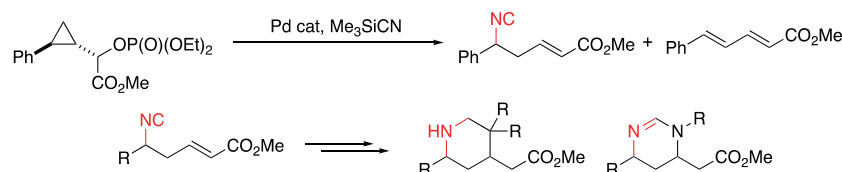
共同研究対応教員： 喜多 祐介

— 研究目的 —

多様な有機変換反応に用いられるイソニトリルは、材料化学、医薬品製造の両方の観点から注目されている重要な反応剤である。他方、イソニトリルそのものの合成については古典的な手法に頼らざるを得ないのが現状である。本研究では、従来困難であったイソニトリルの触媒的合成法の開発、なかでも、C-C結合切断を伴った新奇かつ実用に即した官能性イソニトリルの触媒的合成手法の実現を目的とした。

— 研究成果・効果 —

シクロプロピルメチルリン酸エステルを用いた触媒的イソシアノ化反応の開発



適切にデザインした基質を用いることで、シクロプロパンの開裂を伴った触媒的イソシアノ化反応の実現に世界で初めて成功した。特に、シクロプロピル基上にアリール基、脱離基 α 位にエステル基を導入することが鍵であった。得られたイソニトリルは含窒素六員環化合物であるピペリジンや、環状アミンなど、様々な有用化合物に変換できることが期待される。

一般研究C(2021年度)

「液中レーザーアブレーションによる機能性ナノ粒子生成と光学的応用」

研究代表者：和田裕之(東京工業大学 物質理工学院)

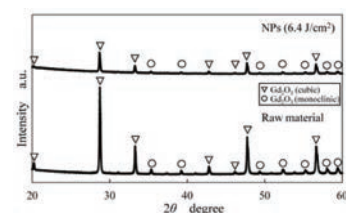
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

レーザーアブレーションを用いた材料創成は大変注目されており、高い結晶性で元素をドーピングした機能性ナノ粒子の生成が可能で、医療、エネルギー、エレクトロニクス等の幅広い分野での応用が期待されている。本研究では、各種機能性ナノ粒子を作製し、特に医療分野の光線力学的療法によるがん治療や光音響によるバイオイメージングへの応用を検討する。

— 研究成果・効果 —

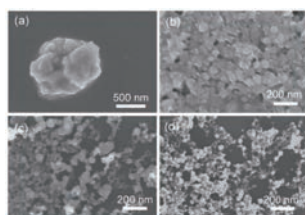
医療分野(がん治療)

Gd₂O₃:Er,YbXRD patterns of (a) target and (b) nanoparticles.¹⁾

- ・高い結晶性のナノ粒子が生成
- ・結晶性の不純物の生成はなし

医療分野(バイオイメージング)

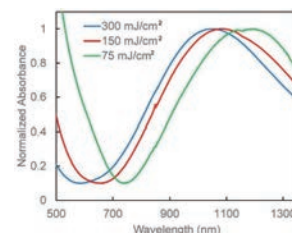
銅フタロシアニン

SEM images of raw material and nanoparticles at each fluence: (b) 75 mJ/cm², (c) 150 mJ/cm² and (d) 300 mJ/cm².²⁾

- ・レーザー照射によるナノ粒子化と更なる微細化

医療分野(バイオイメージング)

CuS

Normalized absorption spectra of CuS nanoparticle solution at each laser fluence.³⁾

- ・レーザー照射強度の増加と共に吸収スペクトルがブルーシフト

1) Y. Tei, H. Wang, Y. Kitamoto, M. Hara, H. Wada, J. Laser Micro / Nanoengineering (JLMN), 16 (2021) 115.

2) K. Omura, Y. Kitamoto, M. Hiroyuki Wada, Jpn. J. Appl. Phys. in press.

3) K. Isoda, R. Yanagihara, Y. Kitamoto, M. Hara, H. Wada, IEICE Trans. Electronics, E104-C (2021) 390.

国際ワークショップ(2021年度)

「第12回先進セラミックス国際会議 (STAC12—The Twelfth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics)」

開催日時：2021/7/6-8、場所：オンライン

研究代表者：瀬川 浩代(国立研究開発法人物質・材料研究機構)

共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

STACは先端のセラミックス科学技術研究に特化した国内発の国際会議である。今回のSTAC-12では様々なセラミックス材料の中でも電池材料などのエネルギー利用に関する技術を重点テーマとして取り上げた。今回のSTAC-12はコロナ禍により1年延期を行い、オンラインにより計算による材料設計に関する研究を中心に種々のセラミックス材料に関する発表が行われた。

— 研究成果・効果 —

招待講演22件、口頭発表47件、ポスター発表49件の計118件の論文発表があり、246名が参加した。STACの特徴として、毎回主催機関と重点領域が変わることが挙げられる。口頭発表トピックスは大別して(1)Advanced characterization、(2)Bio/medical/environmental materials、(3)Catalyst, Chemical materials、(4)Electro-magnetic materials、(5)Engineering materials、(6)Materials design and informatics、(7)Semiconductors、(8)Solid state chemistryの8つについて行った。オンラインにもかかわらず多数の出席者があった。


<http://conf.msl.titech.ac.jp/Conference5/STAC12/wiki/>

ワークショップ(2021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:2022年1月8日

場所:オンライン(zoom)

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 准教授

－ 研究目的 －

本ワークショップでは、薄膜、微粒子、パ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している。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回ナノ材料研究会] 講演者:参加者全員。 参加者:15名、参加機関:10機関

(2)本年度は研究会の名称を「ナノ材料研究会」に改名し、その第1回の研究会を開催した。今年度も感染症拡大の影響で対面開催ができず、オンライン開催となったが、15名の参加があった。今回は15名の参加者全員に短い講演をいただいたが、これまでも劣らず熱のこもった議論がなされた。それぞれ短い講演ながらも興味深い研究の数々に触れたことで、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。



図1 第1回ナノ材料研究会における集合写真