

特定研究 (2023年度)

「マテリアルデジタルトランスフォーメーションによる電子機能材料・デバイスの開発」

共同利用研究分担者：木村睦（龍谷大学 先端理工学部 電子情報通信課程）

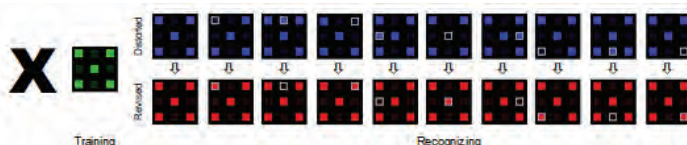
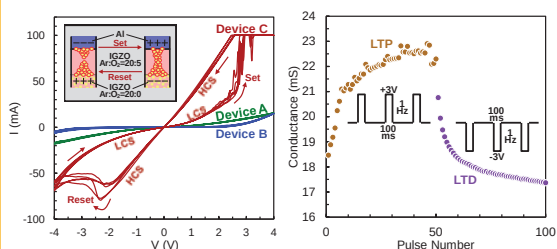
共同研究対応教員：神谷 利夫

研究目的

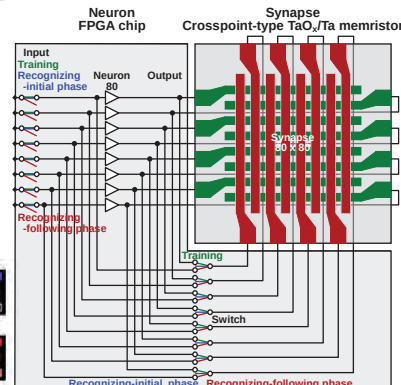
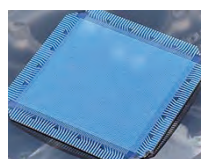
アモルファス酸化半導体(AOS)の新規応用提案：メモリスタ・脳型集積回路

研究成果・効果

異なるVO密度の2層を有するIGZOメモリスタ
ニューロモルフィック応用に向けたLTMを確認



クロスポイント型TaOx/Taメモリスタを用いた
ニューロモルフィック・システム
連想記憶用の直接デバイス・トレーニング



T. Katagiri, M. Kimura, In-Ga-Zn-O Memristor with Double Layers of Different Oxygen Vacancy Densities and Long-Term Memory towards Neuromorphic Applications, JJAP 62, 058002, 2023
M. Kimura, Neuromorphic System using Crosspoint-type TaOx/Ta Memristors and Direct Device Training for Associative Memory, IEEE Trans. Electron Devices. 70, 4635, 2023

特定研究 (2023年度)

「建築物における地震時の機能維持技術の確立」

研究代表者：吉敷祥一（東京工業大学 多元レジリエンス研究センター）

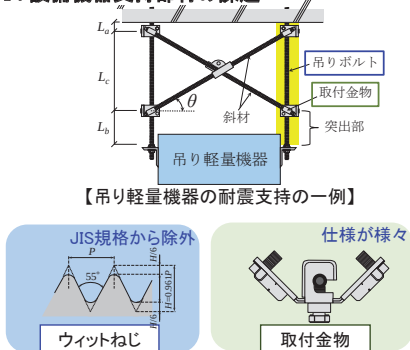
共同研究対応教員：吉敷祥一

研究目的

社会活動の中核としての役割を果たす建築構造物において、地震後も継続して使い続けられる機能維持技術の確立が求められている。また、構造骨組だけでなく、室内空間を構成する非構造部材、室内環境を整える設備機器についても耐震性能を把握し、より高い耐震性能を付与する必要がある。本年度は、吊りボルトの破断による空調用設備機器の落下や損傷が建物の機能喪失に直結する重要な被害であることに着目し、設備機器を支持する吊りボルトの材料特性と断面特性を、要素実験を通して把握した。さらに、吊りボルトと斜材繋ぐ取付金物が、設備機器とそれを支持する部材で構成されるユニット(吊り支持部材)の剛性に与える影響を評価した。

研究成果・効果

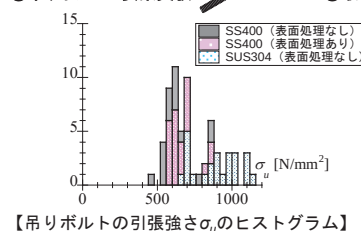
I. 設備機器支持部材の課題



いずれも力学特性などが不明

II. 研究成果

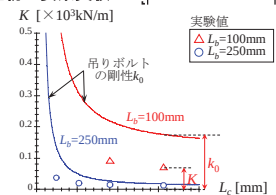
①吊りボルトの要素実験



【吊りボルトの引張強さ σ_u のヒストグラム】

- 材質による違いが顕著（表面処理の違いによる影響はほぼなし）
- ロット毎のばらつきが大きい

②取付金物の要素実験



【全体剛性Kと距離 (L_b, L_c) の関係】

- L_b が短いほど k_0 とKの差が大きい（➡取付金物の形状により生ずる振りモーメントの影響と思われる）

吊りボルト(ウイトねじ)の特性と取付金物が
吊り支持部材の剛性に与える影響を把握

特定研究 (2023年度)

「固体中の量子重ね合せ状態のダイナミクス」

研究代表者：中村一隆 (東京工業大学フロンティア材料研究所)

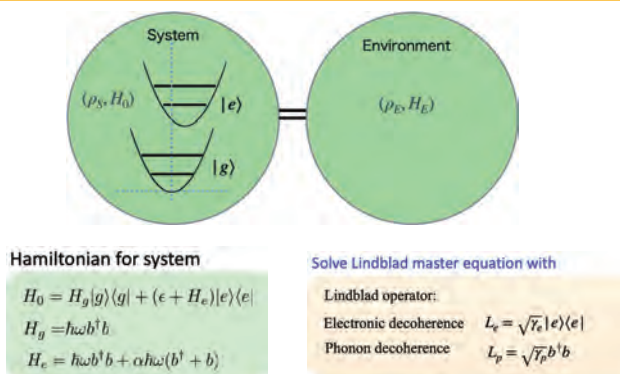
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

本研究課題では、フェムト秒光パルスで励起される、電子状態やフォノン状態における量子重ね合わせ状態の超高速ダイナミクスを、フェムト秒時間分解領域分光実験および理論研究により明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

電子2準位系と調和振動子を用いた量子モデルハミルトニアンとLindblad型量子マスター方程式を用いて、コヒーレントフォノンダイナミクスの計算を行なった。共鳴条件でのGaAsにおける光学フォノン強度の励起強度依存性を計算した。構築した量子モデルは、他の結合量子系にも適用できるものである。



発表論文・関連論文：

K. G. Nakamura and I. Takagi, in Progress in Ultrafast Intense Laser Science XVII, Topics in Applied Physics 151, Springer (in press)

特定研究 (2023年度)

「元素戦略にもとづく機能材料の開発」

研究代表者：平松秀典 (東京工業大学フロンティア材料研究所)

共同研究対応教員：同上

— 研究目的 —

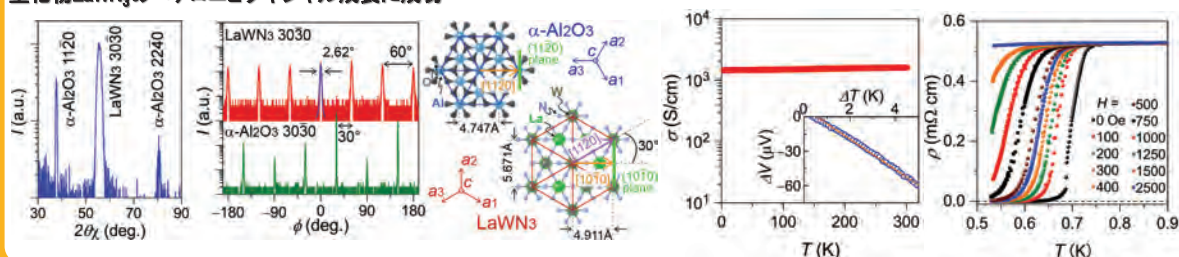
資源に乏しい日本において、ありふれた元素からなる物質から有用な機能性を引き出していくことは極めて重要であり、このような視点から社会に寄与することが求められている。本課題では、エレクトロニクスを中心とする様々な有用な機能性材料の実現を目指し、ありふれた元素をベースに物質開発を行う。研究手法としては、バルクおよび薄膜などの試料作製に加え、試料の構造的、および電子的観測、さらに理論的な解析も含む。

— 研究成果・効果 —

大気中の約80%を占める最もありふれた「窒素」に着目し、有望な窒化物の機能開拓に取り組んだ

「強誘電半導体」として有望と期待されているペロブスカイト型

・強誘電性の観察には至らなかった(今後のプロセス開拓が必須)

窒化物LaWN₃のヘテロエピタキシャル成長に成功・10²²cm⁻³台の電子濃度と、縮退伝導(左図)・超伝導転移(右図)を観察

発表論文：K. Hanzawa and H. Hiratsugu, "Heteroepitaxial Growth, Degenerate State, and Superconductivity of Perovskite-Type LaWN₃ Thin Films" ACS Applied Electronic Materials, vol. 5, pp. 2793 – 2798 (2023).

International CRP 2023 – Category A

Quantum Dynamics of Charge and Spin Orders in Highly Correlated Electron Systems

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

MSL Faculties: Takao Sasagawa

- Aims of Research -

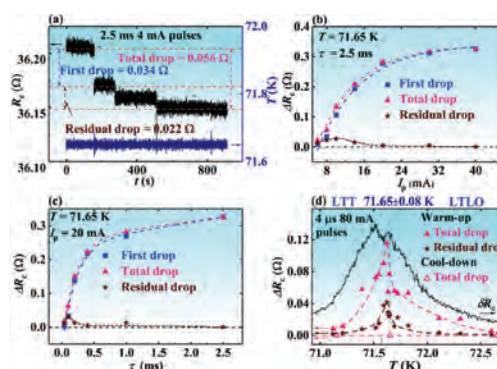
The quantum dynamics of the charge-order domains has been investigated in single crystals of $\text{La}_{1.48}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$, a prototypical stripe-ordered cuprate high-temperature superconductor, using electrical transport measurements with pulsed current injection.

- Results -

We first identify the regime in which nonthermal effects dominate over simple Joule heating [Fig. (a)] and then demonstrate that, for small enough perturbation, pulsed current injection allows access to nonthermally induced resistive metastable states [Fig. (b)-(c)].

The nonequilibrium effects are revealed only when the transition is approached from the charge-ordered phase. The results are consistent with the pinning of the fluctuating charge order, with fluctuations being most pronounced at the charge-order onset temperature (~ 71.65 K) [Fig. (d)].

Our experiment establishes pulsed current injection as a viable and effective method for probing the charge-order dynamics in various other materials.


 Web page: <https://nationalmaglab.org/staff/?name=DraganaPopovic>

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

International CRP 2023 – Category A

High-pressure growth and multiple structural phase transitions of Pb_2NiWO_6 single crystal with possible negative thermal expansion

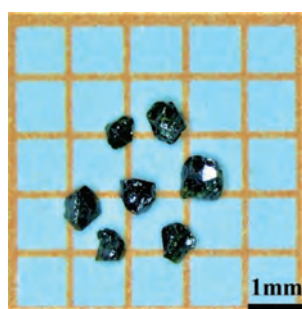
Project Coordinator Name: Youwen Long (Institute of physics, CAS)

MSL Faculties: Masaki Azuma

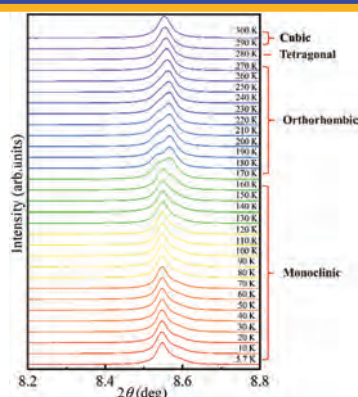
- Aims of Research -

The research aims to prepare high-quality Pb_2NiWO_6 single crystals using high-pressure and high-temperature method, and investigate the structural phase transitions and related physical properties.

- Results -



High-quality Pb_2NiWO_6 single crystals.



Temperature-dependent XRD patterns for Pb_2NiWO_6 between 5.7 and 300 K. As the temperature decreases, Pb_2NiWO_6 undergoes three structural phase transitions around 280 K, 250 K and 160 K. Below 160 K, the ferroelectric phase begins to appear. Pb_2NiWO_6 is a typical material system for studying the relationship between structure and physical properties.

International CRP 2023—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. Two doctoral students joined the Romanian university to help with the experimental program on walls to be tested in-plane in a static cyclic regime.

- Results -

Within the work done during this last year, both Romanian and Japanese professors collaborated successfully, and Kishiki lab members went to Bucharest. A paper is now being written about the experimental tests that were conducted on not-strengthened walls. Another paper was accepted and will be presented at the WCEE conference in Milano in June 2024, related to the strengthening solutions tested. The lower right figure shows prof. Dutu together with Kishiki lab members (Mr. Hirano and Mr. Mey), during experiments.

A book was published by CRC-Press – Taylor and Francis Group with the title “Seismic Resistance of Vernacular Timber Frames with Infills Case Studies from Japan and Romania”, having as co-author prof. Yoshihiro YAMAZAKI and it can be used by both Japanese and Romanian students.



International CRP 2023—Category B

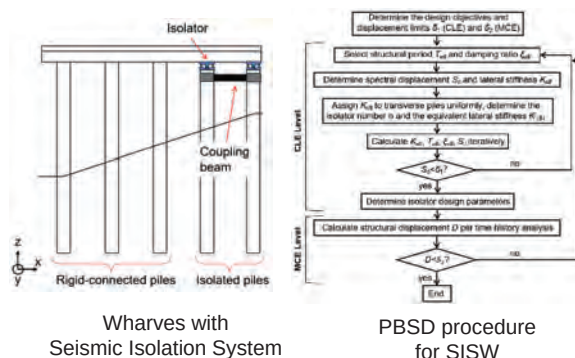
Development of Seismic Resilient Technologies for Pile-supported Wharves**Project Coordinator Name: CUI Yao (Dalian University of Technology)****MSL Faculties: KISHIKI Shoichi****- Aims of Research -**

To mitigate the inertial demands transmitted to pile foundations from the wharf deck, Wharves with the Seismic Isolation System (SISW) have been imposed. This system involves placing isolation bearings at the tops of the piles to concentrate the structural plastic deformation in the isolation layer. Subsequently, this study presents a Performance-Based Seismic Design (PBSD) method for SISW that combines multiple levels of seismic objectives. Furthermore, the PBSD method is applied to a reference facility, and its seismic performance is evaluated. The analysis results demonstrate that the proposed design method effectively fulfills the multi-level seismic objectives for SISW, significantly enhancing the seismic resilience of wharves in high-intensity seismic regions.

- Results -

(1) Performance-based seismic objectives for SISW are established, and a two-stage PBSD method for SISW is proposed. In the first stage, the design for the CLE level is based on the elastic response spectrum method. In the second stage, displacement verification is conducted for the MCE level through time history analysis.

(2) The seismic performance of a reference wharf employing the proposed PBSD method has been investigated. SISW, using piles of the same specifications, achieves a higher fortification level than non-isolated wharves (NIW), attaining "minimal damage" objectives at the CLE level and "controlled and repairable damage" objectives at the MCE level.



International CRP 2023—Category B

Seismic damage assessment of RC buildings via OMA

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

MSL Faculties: KONO Susumu

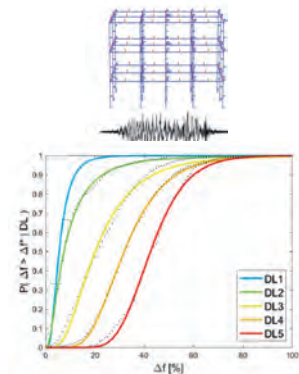
- Aims of Research -

This project investigates the use of Operational Modal Analysis (OMA) for assessing and quantifying the damage level of reinforced concrete (RC) structures after an earthquake. In detail, experimental and numerical data in terms dynamic properties (e.g., natural frequencies, mode shapes) are correlated with defined damage states and reparability conditions.

- Results -

A FE modelling has been developed in *OpenSees* and validated on pseudo-dynamic test results. The validated FE model is used to assess the variation of fundamental frequencies due to structural damage RC frames for increasing ground shaking intensity. The figure reports the natural frequency variation (Δf) as a function of the ground motion intensity and related damage level experienced by 100 bare RC frames.

	EMS 98		MIDR [%]
Damage level	Damage Description		Damage severity
DL0	No damage		<0.10%
DL 1	Slight damage	<i>Fine cracks in plaster over frame members</i>	0.10%-0.25%
DL 2	Moderate damage	<i>Cracks in columns and beams of frames</i>	0.25%-0.50%
DL 3	Heavy damage	<i>Cracks in columns and beam-column joints</i>	0.50%-1.00%
DL 4	Very heavy damage	<i>Large cracks in structural elements; collapse of a few columns</i>	1.00%-1.50%
DL 5	Destruction	<i>Collapse of part or ground floor of buildings</i>	>1.50%



International CRP 2023—Category B

Assessment of Modeling Techniques for RC Beam–Column Joints Subjected to Cyclic Loading

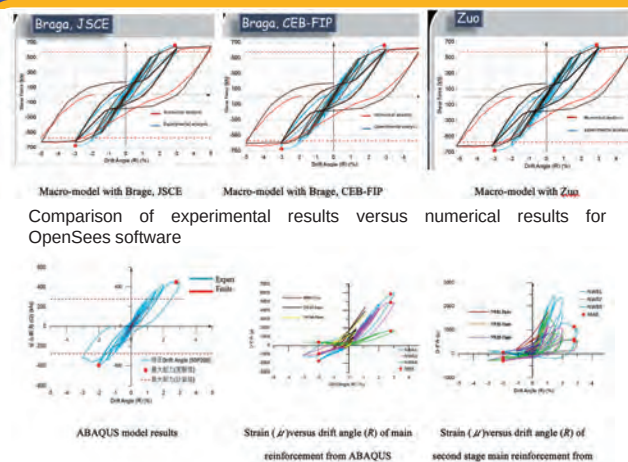
Project Coordinator Name: H. A. D. Samith Buddika

MSL Faculties: Prof. Susumu Kono

- Aims of Research -

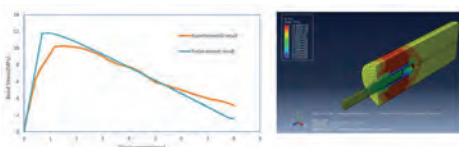
The aim of this study is to investigate macro-modeling methods and detailed finite element modeling techniques for reinforced concrete (RC) beam-column joints. It involves critically evaluating the strengths and weaknesses of each modeling technique using simulation benchmark data. Additionally, the study aims to propose recommendations for effectively modeling RC beam-column joints subjected to cyclic loading.

- Results -



Comparison of experimental results versus numerical results for ABAQUS software

ABAQUS Finite element results for Pull out test by Lettow and Elgehausen (2003)



The OpenSees macro models are found to be capable of simulating the global response of the structure under cyclic loading. OpenSees model incorporating Braga with bond strength given in (JSCE code) accurately predict the bar pullout stress under cyclic loading. In ABAQUS, Concrete Damaged Plasticity Model with given parameters is capable of modeling the bond slip behavior of reinforced concrete. Traction separation law with surface based cohesive behavior is capable to model the bond-slip in reinforced concrete structures. Recommended Concrete Damage Plasticity parameters are shown below.

Dilation angle (Ψ)	Eccentricity	f_{bo}/f_{co}	K	Viscosity Parameter
38°	0.1	1.16	0.67	0.001

International CRP 2023—Category B

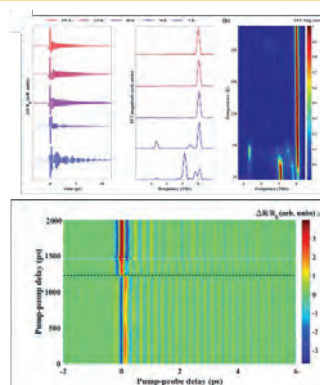
All-optical manipulation of charge density waves in kagome metal CsV_3Sb_5 **Project Coordinator Name: Jianbo HU****MSL Faculties: Kazutaka G. Nakamura****- Aims of Research -**

This project aims to utilize ultrafast coherent phonon spectroscopy to investigate the possibility of optically manipulating the charge density order in kagome metal CsV_3Sb_5 . This will open exciting prospects for all-optical engineering of the Van Hove scenario to tune correlated quantum phases in topology networks.

- Results -

Firstly, we have observed only one phonon mode at temperatures beyond 80 K and three additional oscillation modes when the temperature goes down to 70 K. From the map of FFT, the three additional coherent phonon modes are highly related to the CDW structural modulation, and photoexcitation can modulate the CDW phase in CsV_3Sb_5 .

Secondly, we have conducted a three-pulse experiment to rule out that these anomalous features originating from the trivial laser-induced heating effects. The experiment shows that the heat dissipation time for an individual laser pulse is about ~ 1.4 ns in CsV_3Sb_5 at 80 K, which is much less than the 12.5 ns time interval for the 80 MHz repetition rate.



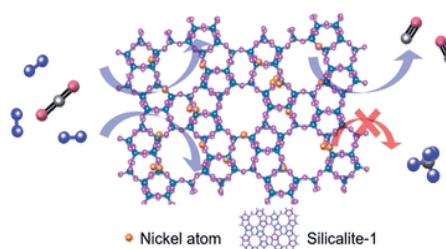
International CRP 2023—Category B

Tailoring the nature of Ni/SiO₂ catalysts in the reduction of CO₂**Project Coordinator Name: Yu-Chuan Lin (National Cheng Kung University)****MSL Faculties: Keigo Kamata****- Aims of Research -**

This project aims to investigate the nature of Ni/SiO₂ in CO₂ hydrogenation. Through the Silicalite-1 confinement effect, the nature of Ni can be tailored from methanation-oriented to reverse water-gas shift oriented.

- Results -

This study investigates the catalytic hydrogenation of CO₂ to CO through the reverse water-gas shift (RWGS) reaction using Ni/SiO₂-based catalysts. Ni/SiO₂ derived from the reduction of silicalite-1-encapsulated, ligand-protected Ni²⁺ (Ni_{0.2}@S-1-red) demonstrated exceptional performance. The catalyst exhibited a CO₂ conversion rate nearing the equilibrium conversion of RWGS, a CO selectivity exceeding 99%, and a high space-time yield of CO (9.7 mol gNi⁻¹ h⁻¹). Key factors include the highly dispersed Ni⁰ and Ni^{δ+} species, and the presence of bridging oxygen in the Ni–O–Si structure, enabling moderate CO₂ adsorption. This moderate adsorption facilitates efficient desorption of the reduced intermediate (*CO), leading to rapid gaseous CO generation and preventing deep hydrogenation to CH₄.



International CRP 2023—Category B

Lateral resistance of vertical structural elements in relation to confinement characteristics

Project Coordinator Name: Marina L. Moretti (National Technical University of Athens)

MSL Faculties: Susumu KONO

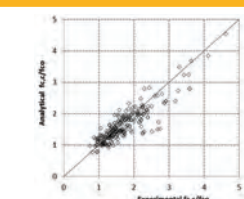
- Aims of Research -

This project aimed to study analytically the effect of the layout of confinement, both in-height and in-plan on the resistance of reinforced concrete vertical structural elements and also to propose reliable design equations, both in case of modern reinforcement detailing as well as in case of RC elements with substandard reinforcement detailing. The project profits from observations on tests performed as part of CRP2022.

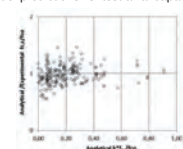
- Results -

The project focused on studying the impact of the confinement layout on the axial strength of RC columns. A database of 433 specimens, 168 with round and 265 with rectangular cross section has been assembled. The database includes reinforced concrete specimens with different amount of confinement, either with only steel transverse reinforcement, or both with steel stirrups and fiber reinforced polymer jackets. Different design models were applied to predict the axial strength of the columns. Considerable differences in the design approaches and in the predictive performance of the models considered was observed. Better model performance was observed for specimens with round section, for which lateral confinement is uniform and more effective, as compared to rectangular sections. Reduced accuracy is obtained in case of columns with sparsely spaced stirrups along the height, for which buckling of the longitudinal reinforcement bars is liable to occur. One of the major parameters determined to affect the analytical predictions is the estimation of the effective lateral confining pressure and how this contributes to axial resistance.

A new design model with comparatively better predictive capacity was proposed, applied in Fig. (a) for the rectangular columns of the database. Fig. (b) depicts the relation between the respective lateral confining pressure and the ratio of analytical to experimental axial strength. The model can be applied for the calculation of flexural resistance of RC walls with confined regions at both ends of the cross-section.



(a) Model predictions vs. test axial capacity



(b) Model efficacy vs. confining pressure

Impact of confinement on the axial capacity of circular and rectangular reinforced concrete columns, ICCS27, Bologna, Italy, 3-6 September 2024.

International CRP 2023—Category B

Codes and standards for the Seismic Design, Construction and Retrofitting of Historical and Monumental Structures of Nepal

Project Coordinator Name: Maskey Nath Prem

MSL Faculties: Prof. Susumu Kono

- Aims of Research -

The project aims to elucidate the physics behind strain-coupled ferromagnetic-ferroelectric domains in multiferroic heterostructures. In particular, the ability to drive magnetic domain walls by an electric field without assistance of a magnetic field or spin-polarized current will be demonstrated and assessed. This new driving mechanism will provide a low-power alternative for the design of spintronic devices.

- Results -

The study had facilitated in identification of the principles and strong base for formulating the seismic/structural assessment and approach conducive to the typology of the cultural buildings and structures of Nepal. The interaction in Japan was supposed to facilitate in developing the updated form of the seismic standards/code at par with any other international code. This study and interaction have highlighted on the need and ways to develop Nepalese Code/Standard and the rational ways to handle with the maintenance of the cultural heritage rationally.



International CRP 2023—Category B

Retrofit Guideline for Nepalese Low Strength Masonry Buildings**Project Coordinator Name:** Gokarna Bahadur Motra**MSL Faculties:** Susumu Kono**- Aims of Research -**

The project aims to evaluate performance of existing and retrofitted low strength masonry buildings using different retrofit methods and to develop retrofit guideline for such buildings. Jacketing and splint and bandage type retrofitting techniques are investigated. For the particular considered buildings, splint and bandage retrofitting technique is adequate to meet the seismic demand in the existing building.

- Results -

Sampled buildings are investigated via macro modelling technique using FEM software SAP 2000 to evaluate the performance before and after retrofitting. The existing buildings are found deficient for the PGA of 0.36g. Buildings retrofitted with bandage and jacketing of wall section using welded GI wire mesh as splint reinforcement at inner and outer walls are found sufficient for PGA of 0.36g, for which the probability of exceeding the IO limit-state is 80% and 15% for LS and almost negligible for CP limit-states. Thus, the retrofitted building outperformed the existing one with sufficient safety against life safety and collapse prevention limit states. The building is expected to function better than at present state. The intervention methods proposed are not highly sophisticated and do not require heavy equipment, which can be easily implemented with the locally available building materials and trained masons.

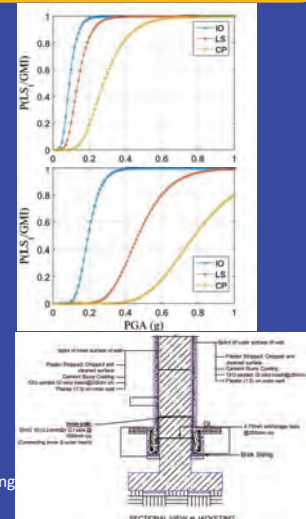


Fig. a) Fragility of existing BMM buildings, b) Fragility of retrofitted buildings, c) Retrofitted wall cross-section with jacketing

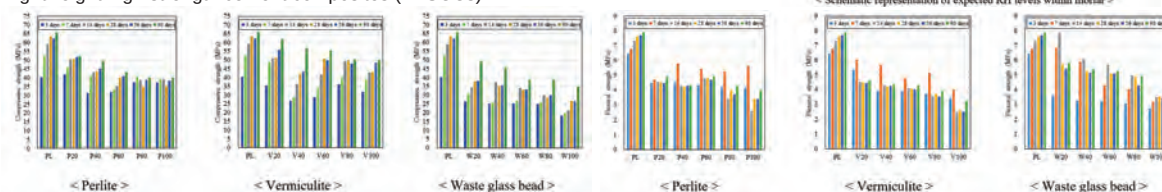
International CRP 2023—Category B

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 -**

The objective of this research is to assess the potential for improving internal curing in high-strength lightweight mortar by incorporating porous materials and to investigate the possibilities of extending the application of porous materials. The research aims to provide quantitative criteria for evaluating the internal curing effect and to assess the hydration characteristics of cementitious materials where internal curing technology is applied

- Results -

P20, V20, and W20 showed high compressive strength when incorporated with LFA, but the strength decreased with higher LFA ratio. This difference is attributed to the increase of water infiltration pores and the development of ITZ. The W test group showed strength improvement with ITZ reinforcement at long-term aging. The pozzolanic reaction of LFA increases hydration and densifies the ITZ to improve long-term strength development. In addition, excessive internal RH variation adversely affects the ITZ, which can lead to different strength expression and void effects in lightweight high strength cement composites (LHSCCs).

Web page: <https://concrete.cnu.ac.kr/>

International CRP 2023—Category B

Impact of hydrogen on the TFT device operation p-SnO-TFT

Project Coordinator Name: Kenji Nomura (University of California San Diego)

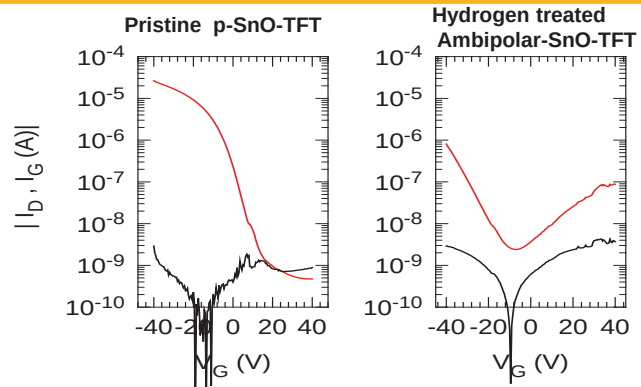
MSL Faculties: Keisuke Ide

- Aims of Research -

The project aims to investigate the impact of hydrogen impurity on TFT device characteristics of p-channel SnO-TFTs, which are considered as promising counterparts of n-channel oxide-TFTs. Specifically, the focus will be on assessing its influence on the TFT operation mode. This new approach to control the operation mode for SnO-TFT will be proposed.

- Results -

The influence of hydrogen on TFT device characteristics of p-channel SnO-TFTs was examined by using hydrogen plasma treatment. We found that the TFT operation mode was altered by the incorporation of hydrogen into the SnO channel. The pristine p-channel mode transitioned to the ambipolar mode by reducing the subgap defects by Hydrogen.



国際研究B (2023年度)

「InGaN/GaN量子井戸の超高速光応答」

研究代表者：大川和宏 (King Abdullah University of Science and Technology)

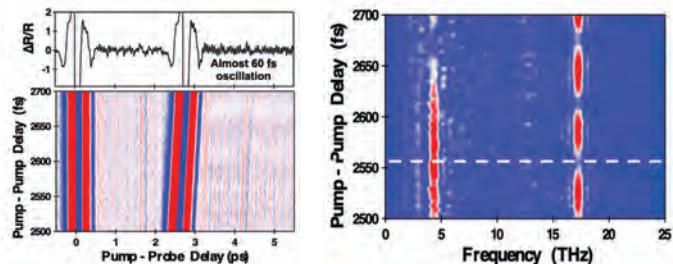
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

本研究では、フェムト秒光パルスを用いたInGaN/GaN量子井戸の超高速光応答計測を用いて、キャリアフォノン散乱やフォノン欠陥散乱のダイナミクスを調べることを研究目的とする。InGaN/GaN量子井戸構造およびGaNを試料として用い、レーザーパルス励起による光応答過程をポンプ・プローブ型の過渡反射率・透過率計測を用いて調べる。

— 研究成果・効果 —

GaN結晶には4THzと17THzの周波数を持つ二つの光学フォノンが存在する。本研究では、ダブルパルスで励起することによって、コヒーレントフォノンのモード選択励起を行うことに成功した。図には、遅延時間を制御した平行偏光条件のフェムト秒パルス対照射による、過渡反射率の変化を示した。2559fs遅延のタイミングでは4THz振動のみが観測されていることを示している。



平行偏光のダブルパルス励起したn-GaNの過渡反射率: (左)横軸をポンプ・プローブ遅延時間、縦軸をダブルポンプ間隔とした反射率変化の2次元マップ、(右)左の図で第2ポンプ照射後の横軸時間をフーリエ変換して表した2次元マップ

International CRP 2023—Category B

Key problem identified from observed damage to seismic isolators and dampers in constructed base-isolated buildings

Project Coordinator Name: Zhe Qu

MSL Faculties: Shoichi Kishiki

- Aims of Research -

This project aims to enhance the understanding of the ultimate performance of seismic isolators. We aimed to determine the primary cause of damage to seismic isolators and dampers in the constructed base-isolated buildings. We aim to develop a numerical model to better simulate the response of base-isolated buildings, with a particular focus on the behavior of rubber bearings or friction pendulum bearings.

- Results -

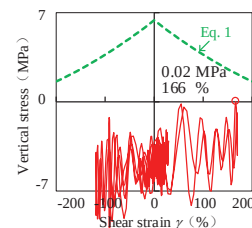
The seismic response of two base-isolated buildings during the Luding earthquake is simulated based on on-site observations, design information, and ground motion recorded by nearby seismometers. The simulation results of the superstructure and relative displacement in the isolation layer are consistent with the on-site observations. However, if the parameters of the seismic isolators and dampers in the buildings are reasonable and the construction quality is assured, they should not severely damaged. Further investigation is required to determine the reason for the observed damage.



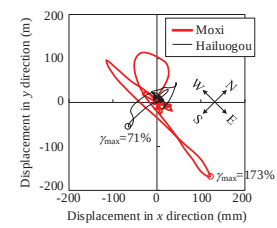
Shear failure of rubber bearing



Buckling of damper



Response of isolator



orbit of isolation layer

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

International CRP 2023—Category B

Automatic structural damage detection using AI vision technology

Project coordinator name: Tony T.Y. Yang (The University of British Columbia)

MSL Faculty: KONO Susumu

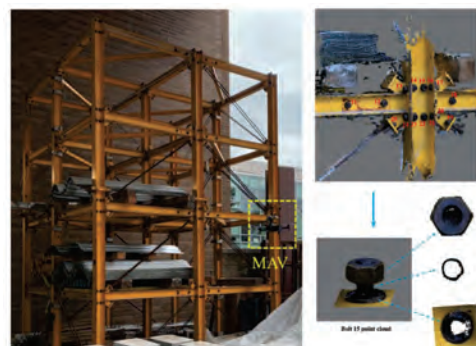
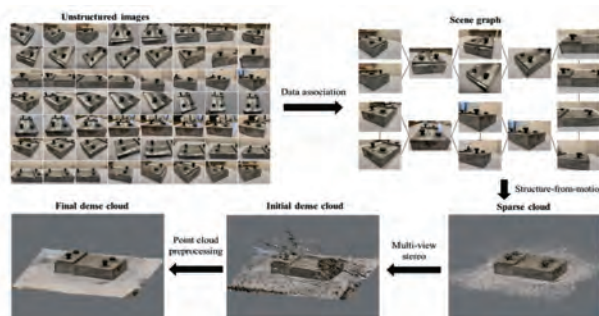
MSL Faculties:

- Aims of Research -

Develop and implement autonomous bolt loosening assessment using unman aerial vehicle and 3D vision-based technology.

- Results -

Figure 1 shows the 3D point cloud generated using the developed technology. Figure 2 shows the implementation on a real-world application.



International CRP 2023—Category B

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

This study aims to investigate the influence of wall design parameters (e.g. geometry, reinforcement) and to develop a data-driven model to predict energy dissipation capacity of reinforced concrete shear walls. A well-established, powerful machine learning-based method (Gaussian Process Regression, GPR) and a meta-modeling method (The High Dimensional Model Representation, HDMR) is utilized in this study

- Results -

GPR results: Regression-based feature selection methods reveal that nine wall design parameters (features) have a relatively stronger influence on the NCDE of the shear walls, namely: geometric properties (i.e., length, thickness, boundary width, aspect ratio), concrete compressive strength, axial load ratio, longitudinal boundary and web reinforcement ratio, and transverse boundary reinforcement spacing. The influential features are noted as consistent with the experimental results. The reliability of the predictive model is evaluated based on the following four statistical metrics: coefficient of determination, mean absolute error, root mean square error, and mean prediction accuracy (the ratio of predicted to actual NCDE values). The mean R^2 of the GPR method based on test data over a thousand different train-test data sets is 0.830, whereas the best R^2 is obtained 0.963. The mean predicted to actual NCDE ratio is very close to 1.0 indicating that high accuracy and robustness is achieved.

HDMR results: The method allows to develop explicit analytical functions to represent complex relationships. The predictive model is validated using unused data, and it demonstrated robustness and high accuracy, with a prediction accuracy close to 1.00 and a high coefficient of determination.

Relevant research papers: Topaloglu, B., Kaya, G. T., Sutcu, F., & Deger, Z. T. (2022, November). Machine learning-based estimation of energy dissipation capacity of RC shear walls. In Structures (Vol. 45, pp. 343-352). Elsevier.

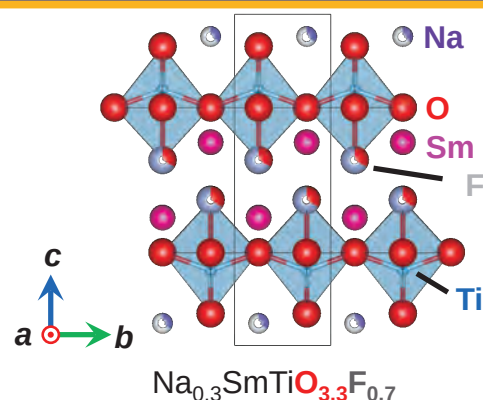
一般研究B(2023年度)

「異種アニオン置換・挿入による層状ペロブスカイト化合物の結晶・電子構造チューニング」**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 —**

結晶構造は物性と深く関連しているため、構造歪みの制御は物性の創出や制御のために不可欠である。ペロブスカイト関連化合物においてよく見られる配位八面体の回転は、許容因子に基づいて、カチオンの置換により制御されることが多い。本研究では、本研究では構成アニオンの置換に焦点を当てる。異原子価アニオンドーピングあるいは格子間隙アニオンの導入を通じた原子・電子構造の修飾による誘電特性制御の可能性を検討する。

— 研究成果・効果 —

Ruddlesden-Popper相 NaSmTiO_4 に対して、フッ素含有ポリマーPTFEを混合し焼成することによりフッ素化を行った。SmO岩塩層側のアピカル位置の酸化物イオンの一部がフッ化物イオンを置き換えるとともに、Naイオンが欠損することが明らかになった。SmO岩塩層側のアピカル位置の酸化物イオンは、NaO岩塩層側のアピカル位置の酸化物イオンと比べて Ti^{4+} イオンとの結合が弱いために、フッ化物イオンと置き換わったと考えられる。その置換と同時に Na^+ イオンが欠損することにより、電荷が補償される。今後はその他の層状ペロブスカイトへのフッ化物イオン挿入を検討する予定である。



一般研究B(2023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」

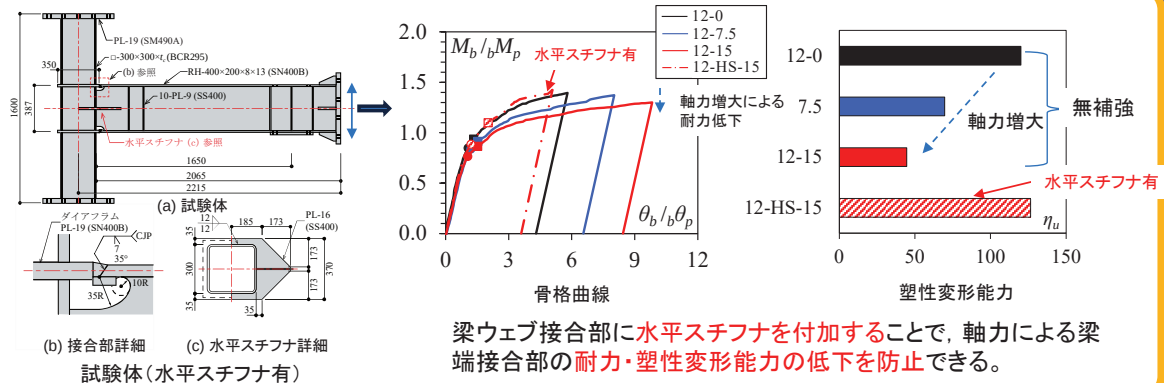
研究代表者：浅田 勇人(芝浦工業大学)

共同研究対応教員：吉敷 祥一

— 研究目的 —

曲げと軸方向力を同時に作用させた梁端接合部の載荷実験から、その現実的な性能を実証し、軸方向力の影響を考慮した設計法ならびに軸方向力による性能低下を防止できる補強工法を提案することを目的とした。

— 研究成果・効果 —



一般研究B(2023年度)

「カルボニルの水素化反応に活性を示す金属伝導性水素化物固体の創製」

研究代表者：飯村壮史(NIMS)

共同研究対応教員：氏名平松秀典

— 研究目的 —

本研究では、ルイス酸点との配位結合によって安定化されたH⁻を有する金属伝導性固体を創製し、カルボニル化合物への水素化反応活性を調べる。金属が持つ空軌道と水素との相互作用に着目し、固体材料でもヒドリド錯体並みの水素化反応活性を持ちうるのかを問う。フロンティア材料研究所とは材料の評価に関して共同し研究を行う。

— 研究成果・効果 —

令和5年度は、まず種々の前周期遷移金属基酸化物(eTM酸化物)に水素ドーピングを施し、ドーピングによって電気伝導性が発現する材料の探索を行った。次に水素取り込みが確認されたeTM酸化物を対象に、その格子中の様々なサイトに置いたH_iの欠陥生成エネルギーを第一原理計算から評価することで酸化物の電子構造と水素イオンと実際に結合する近接イオンの化学的性質から格子間水素H_iの取り込みやすさを評価した。第一原理計算ソフトにはVASPを用い、欠陥生成エネルギーの評価に必要な種々の計算や静電ポテンシャルに基づく安定H_i位置の同定などはpydefectを用いて半自動的、半網羅的に行った。

合計5つのeTM酸化物中のH_iの安定水素位置(フェルミ準位を価電子帯下端CBMとしたとき、H_i⁺の生成エネルギーが最も低かったH_i)と生成エネルギーを調べ、今回調べた化合物ではプロトンが常にヒドリドよりも安定であることがわかった。また価電子帯上端VBMの波動関数を評価し、最安定H_i⁺は、VBMを構成する酸素のローンペアと結合することが分かった。また、実験によってH_i⁺位置が同定されている4つの化合物では、計算から求めた最安定H_i⁺位置と実験結果を比較し、全て合致した。

酸素2sを基準としバンドアラインメント作成したところ、当初電子を安定化する深いCBMがH_i⁺を安定化する主たる駆動力と考えていたが、よりバンドギャップが広い酸化物中でもH_i⁺が安定化され、その際、浅いVBMを構成する酸素ローンペアがBrønsted塩基点となってH_i⁺の安定化に寄与することが分かった。

一般研究B(2023年度)

「免震装置における熱・力学連成挙動への対策」

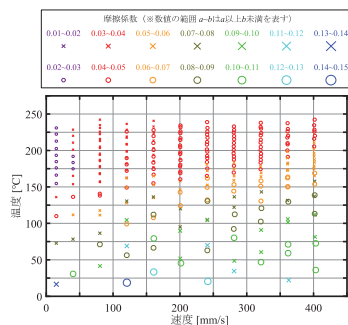
研究代表者：石井建(北海道大学大学院工学研究院)

共同研究対応教員：吉数祥一

— 研究目的 —

免震構造は通常設計レベルの地震動に対して上部建物の安全性を大きく向上させるが、そこに用いられる主要な免震装置は地震時のエネルギー吸収に応じて装置温度が上昇し減衰性能が低下するという熱・力学連成挙動を生じることが指摘されている。本研究は、免震装置の熱・力学連成挙動の発生機構を詳しく分析し、地震時の性能低下を防止するための対策手法を検討することを目的とする。

— 研究成果・効果 —



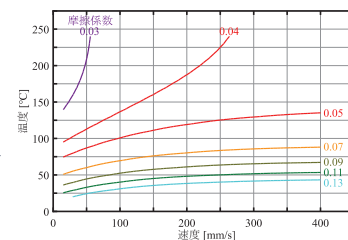
速度・温度・摩擦係数の関係(実験結果)

速度依存性と温度依存性を数値的に分離する手法の合理化

(1) 格子状の再サンプリング

(2) 二変数関数の分離

評価式の作成



摩擦係数の等高線図(評価値)

石井建, 菊地優, 入澤祐太, 和氣知貴: すべり系支承の力学特性における速度依存性と温度依存性を同時に評価するための加振実験および分析手法の提案, 日本建築学会構造系論文集, Vol. 88, No. 814, pp. 1646–1654, 2023.12.

一般研究B(2023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 —

光励起下の電子・格子系における過渡ダイナミクス計算において、特に光の量子化を考慮した場合には数値計算規模が指数関数的に増大する。この問題を克服するため、小規模の部分系についての波動関数を用いてより大きな規模の系を記述可能な手法を開発した。

— 研究成果・効果 —

2サイト系時間依存シュレーディンガー方程式の解 $|\Phi(t)\rangle$ について、2段階の特異値分解を行う

1. 電子・格子系と光子系の分離

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_n \lambda_n |\eta_n(t)\rangle |\theta_n(t)\rangle$$

電子・格子系 光子系

2. 時間依存性の分離

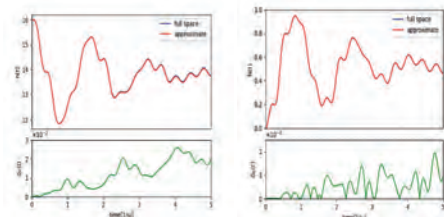
$$|\eta_n(t)\rangle = \sum_k \kappa_k^n \zeta_k^n(t) |\Gamma_k^n\rangle$$

$|\Gamma_k^n\rangle$ から4サイト系の波動関数を構築して基底とした

計算結果

光子数

電子励起率



同等の精度で計算量は約1/30000に低減

より大きな系への適用と実空間繰り込み手法の確立へ

発表論文: K. Ishida and F. Sunaga, "Dynamics of photoinduced entanglement in electron-phonon systems", to be published in Progress in Ultrafast Intense Laser Science XVII

一般研究B(2023年度)

「GdをドーブしたFerrite磁気ナノ微粒子の磁気特性」

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 —

これまでに当研究室では、独自の湿式混合法を用いてナノサイズの磁気ナノ微粒子を作製し、その磁気特性について評価してきた。そのなかで、異方性の小さい MnFe_2O_4 ナノ微粒子について、保磁力を減少・初透磁率を増大させるためにGdをドーブした MnFe_2O_4 ナノ微粒子を作製し、その磁気特性を向上させることを目的とした。また、作製した磁気ナノ微粒子について交流磁場応答の測定を行い、MPI応用・磁気温熱療法応用の可能性を探った。

— 研究成果・効果 —

$\text{MnGd}_{0.065}\text{Fe}_{1.935}\text{O}_4$ を粒径別(10.6 nm, 14.0 nm, 17.0 nm, 21.2 nm)に作製

(交流磁化率実数部)

室温(300 K)付近では17 nm以下の粒子が高い交流磁化率実数部を持つ

→交流磁場を印加することで磁化の変化を高調波として検出するMPI応用において高い応答を示すことが期待

(交流磁化率虚数部)

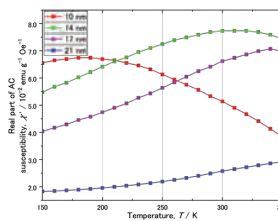
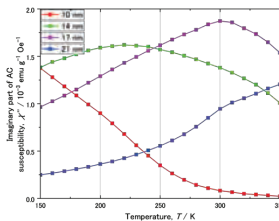
室温(300 K)付近では14 nm以上の粒子が高い交流磁化率虚数部を持つ

→17 nmのサンプルで最も磁気緩和損失による発熱が期待

(磁気緩和損失の発熱量 $P = \mu_0 \pi \chi'' f H^2$)

一方で、虚数部の値が大きい粒子に関しては交流磁場に対する応答が阻害されるため、高調波応答が弱くなる可能性がある。

粒径別交流磁化温度依存性(交流磁化率 $\chi = \chi' - i\chi''$)

(実数部: χ')(虚数部: χ'')

粒径14.0 nmの粒子がMPI応用・磁気温熱療法応用に最適である

発表論文・関連論文：T. Sakamoto, K. Nii, Y. Fujita, T. Moriwaki, H. Amano, R. Abe and Y. Ichiyanagi

"Harmonic response of Gd-doped Mn-ferrite nanoparticles under AC magnetic field and optimization of Gd doping for MPI applications", AIP Advances, vol. 14(2024)

一般研究B(2023年度)

免震建物上部構造へのオイルダンパー付加による擁壁衝突時の応答制御に関する研究 —エネルギーの釣合いに基づくダンパー設計法の構築—

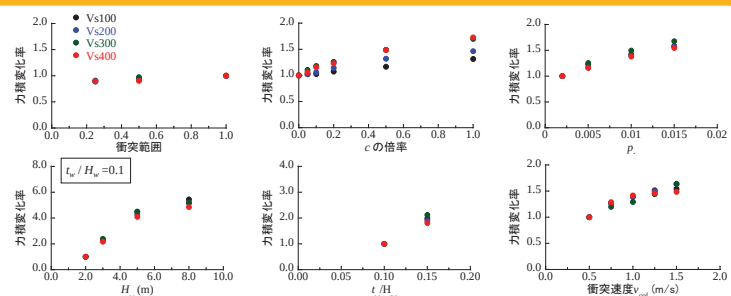
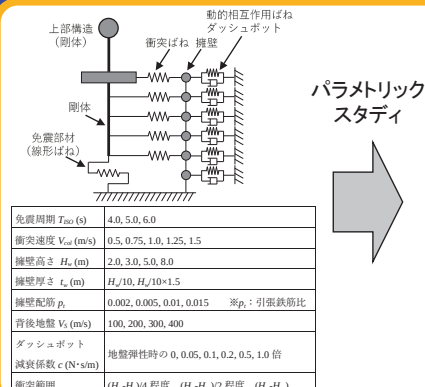
研究代表者：犬伏徹志(近畿大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

— 研究目的 —

免震建物のロバスト性やレジリエンス性能向上のため、擁壁衝突時における免震建物上部構造応答をオイルダンパーにより制御する。今年度は上部構造に加わる衝突エネルギー推定式の提案を行うため、上部構造の特性、衝突速度、擁壁部の特性をパラメータとした数値解析を行い、衝撃力と擁壁との接触時間から計算される力積を評価する。

— 研究成果・効果 —



各パラメータが力積におよぼす影響の分析を行った。今後はこれらの関係を一般化した力積の評価式および衝突エネルギー推定式の提案を行う。さらに、エネルギーの釣合いに基づく応答予測式を構築する。

一般研究B(2023年度)

「4-アミノ-3,5-ジハロ安息香酸のプロトントンネルと相転移機構」

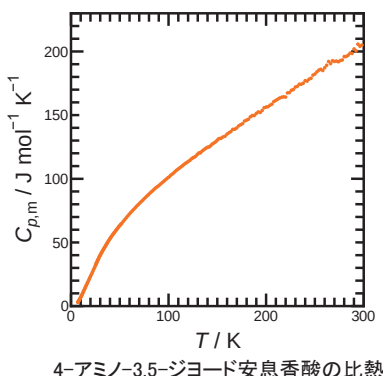
研究代表者：上田康平(阿南工業高等専門学校 創造技術工学科 化学コース)

共同研究対応教員：川路均

— 研究目的 —

4-アミノ-3,5-ジハロ安息香酸(ハロゲン=Cl, Br, I)の室温相では、水素結合中のプロトンがコヒーレントプロトントンネル状態を実現し、低温相でインコヒーレントプロトントンネル状態へ相転移する。これらの相転移は、低温相に量子的な効果が反映された熱異常を示す可能性があるが、未解明にある。そこで、PPMSで比熱を測定し、4-アミノ-3,5-ジハロ安息香酸の相転移機構を明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —



4-アミノ-3,5-ジヨード安息香酸の比熱

本研究で求めた4-アミノ-3,5-ジヨード安息香酸の比熱を示す。4-アミノ-3,5-ジヨード安息香酸は、 ^1H NMRの結果から40 K前後でコヒーレント→インコヒーレントプロトントンネル相転移を起こすとされているが、比熱測定ではその相転移に対応する熱異常が観測されなかった。この結果は、138 Kで同様の相転移を示す4-アミノ-3,5-ジクロロ安息香酸の振る舞いと対照的である。4-アミノ-3,5-ジクロロ安息香酸では、 ^1H NMRや ^{35}Cl NQRで相転移が観察されたのと同じ温度に明瞭な熱異常が観察されている。4-アミノ-3,5-ジヨード安息香酸で相転移温度に明確な熱異常が無いということは、この変化が相転移前後でエントロピーに大きな差がない相転移、もしくはクロスオーバー的な現象であることを示唆している。

一般研究B(2023年度)

「シリカ系材料の局所構造と物性」

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)

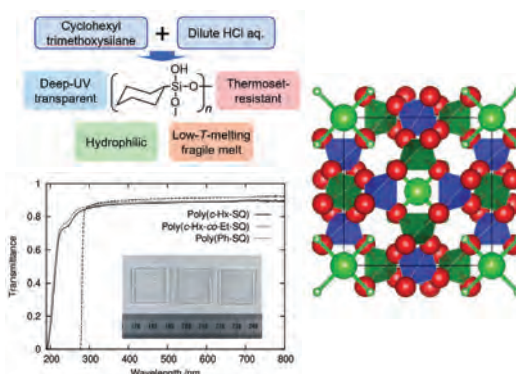
共同研究対応教員：平松秀典

— 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)、ゼオライトなど複数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 —

- ✓ Si原子1個あたり1個の有機官能基Rを有するシルセスキオキサンで、R基が環状アルキル基であるシクロヘキシル基のとき、深紫外透明性を有し、SiOH基を多量に含むため親水性で親水性基板等に対して強く接着し、縮合熱硬化もしにくい低融点ガラスが得られることを見出した。
- ✓ 含リチウムソーダライト $\text{Li}_8\text{B}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}\text{Cl}_2$ を発見した。この化合物は初めての含ホウ素アルカリソーダライト、かつ均一融液から結晶化ガラスが得られる初めてのソーダライトであり、得られた結晶化ガラスはリチウムイオン伝導性を示し金属リチウムとの接触に対しても安定であった。



発表論文・関連論文：K. Kajihara, R. Suzuki, R. Seto, H. Itakura, M. Ishijima, "Poly(cyclohexylsilsesquioxane)-based hydrophilic thermoel-resistant deep-ultraviolet-transparent glasses with low melting temperatures," ACS Appl. Mater. Interfaces 15, 31880-31887 (2023); H. Arima, N. Tezuka, M. Ishijima, K. Kanamura, K. Kajihara, "Lithium-ion-conducting glass-ceramics of a boron-containing alkali sodalite $\text{Li}_8\text{B}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}\text{Cl}_2$," J. Ceram. Soc. Jpn. 131, 291-297 (2023)

一般研究B (2023年度)

「種々の先進材料の高密度エネルギー計測分野への応用」

研究代表者：糟谷 紘一（応用ながれ研究所 & レーザー技術総合研究所）

共同研究対応教員：川路 均

一 研究目的・概要 一

パソコン関連一式設備を見直し、基本情報処理用PC等を追加購入設置した。非接触レーザー超音波可視化検査装置の本研究に適したコンパクトで安価な市販品調査を行い、マイクロチップレーザー利用の装置を開発する必要があることを再確認した。被検査体に及ぼす検査用レーザー等の照射損傷の極小化ができる本計画の主目的は、核融合分野に限らず、医療診断・診療等の生体応用や広範囲新材料開発分野にも応用可能であり、近い将来のスピンオフ研究に生かすことができるから、関連の研究シンポジウムにも参加し、講演と情報収集を行った。更に、応用分野は異なるが、マイクロチップレーザー搭載の小型ロボットによる溶接分野への応用が進んでおり、本研究への展開が期待できることを示した。

一 研究成果・効果 一

レーザー誘起超音波法による諸材料厚さ測定法の有用性を再確認した。
また、同種装置の小型化・低価格化のためには、マイクロチップレーザーの活用が必須であり、今後のさらなる研究・開発が期待されることを示した。
レーザー等照射による被測定対象に及ぼす照射損傷の極小化は、より広範囲の開発・応用分野にも展開できることを示した。

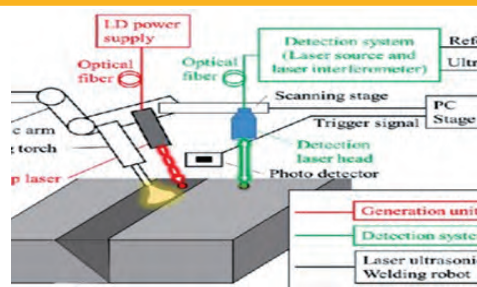


図1 阪大・野村・浅井研のチップレーザー搭載超音波計測システム

型式	MSPN3	MSPN3H	MWPN15	単位
レーザー波長	1064	1064	1064	nm
最大パルスエネルギー	3	3	15	mJ/Pulse
パルス幅	1.5	1.5	1.5	ns
繰り返し周波数	20	100	20	Hz
ピークパワー	2	2	10	MW
ビーム径	12	12	2	mm
冷却方法	空冷方式	空冷方式	空冷方式	-
質量	12	55	80	g
外形寸法 (mm)	Φ12×430	40W×430×180	40W×650×180	mm
レーザークラス	3B	3B	3B	-

表1 ユニテック社の市販チップレーザー特性

発表論文：1) 糟谷 紘一, 徳永 和俊, 川路 均, 平等 拓範, 沖野 晃俊 他, 九大応力研共同利用研究成果報告, 26, 1, 158-159, 2023. 2) ibid., 東工大・フロンティア材料研共同利用研究報告書, 27, 1, 93-95, 2023. 3) ibid., 2023年度NIFS共同研究夏の合同研究会, 筑波大, 2023年9月5日-9月6日. 4) ibid., 第1回医療フォトリソシンポジウム〜フォトリソの医療応用を加速させるには〜, 2024年3月13日 14:00〜20:00, 阪大・銀杏会館.

一般研究B (2023年度)

「層状テルライドにおける量体化形成とその前駆現象の開拓」

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

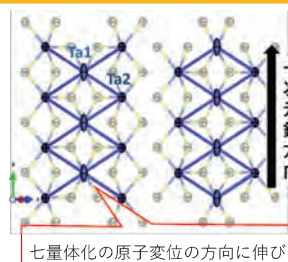
一 研究目的 一

低温で七量体転移を生じるTaTe2に対して、高温相における前駆の局所揺らぎの存在を明らかにするために、単結晶を用いた放射光X線構造研究が必要となる。本共同利用課題において、SPring-8での放射光X線構造解析に必要な大型単結晶を育成・評価することを本研究の目的とする。

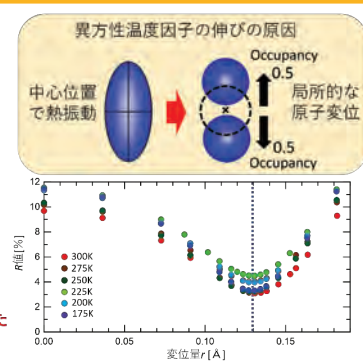
一 研究成果・効果 一

ヨウ素を輸送剤として用いた気相輸送法(CVT法)により、大型単結晶の育成に成功。その後、七量体化が生じることも電気抵抗測定により確認した。

得られた単結晶試料を用いた放射光X線構造解析により、高温相において七量体化に向かう局所的な原子変位が生じていることを突き止めた。



局所的な原子サイトのスプリットが生じていることを、共同利用で合成した単結晶試料による放射光X線回折で明らかにした。



N. Katayama, Y. Matsuda, K. Kojima, T. Hara, S. Kitou, N. Mitsuishi, H. Takahashi, S. Ishiwata, K. Ishizaka, and H. Sawa, Phys. Rev. B **107** (2023) 245113.
K. Kojima, N. Katayama, Y. Matsuda, M. Shiomi, R. Ishii, and H. Sawa, Phys. Rev. B **107** (2023) L020101.
K. Kojima, N. Katayama, K. Sugimoto, N. Hirao, Y. Ohta, and H. Sawa, Phys. Rev. B **108** (2023) 094107.
T. Kubo, K. Kojima, N. Katayama, T. Run'cevski, R. E. Dinnebier, A. S. Gibbs, M. Isobe, and H. Sawa, Phys. Rev. B, *accepted* (2024).

一般研究B(2023年度)

「傾斜組成構造を導入したリチウムイオン二次電池エピタキシャル薄膜の性能評価」

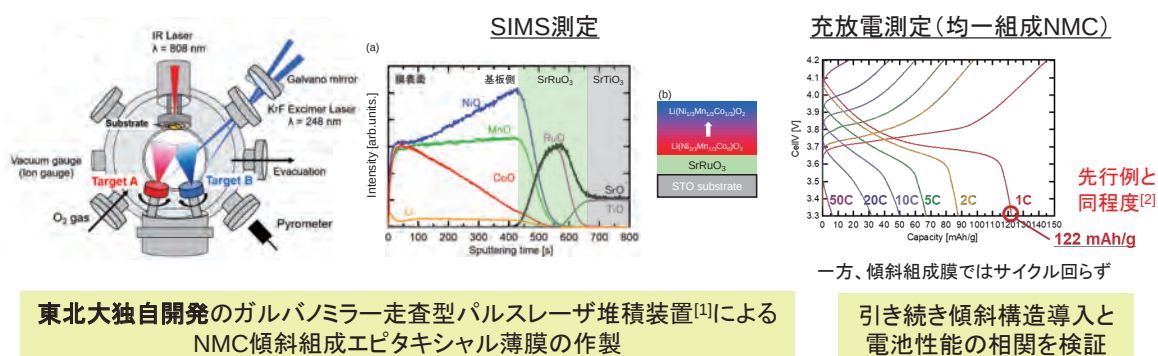
研究代表者：神永 健一(東北大学工学研究科)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

本研究では、代表的なリチウムイオン二次電池正極材料である3元系 $\text{LiNi}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{O}_2$ (NMC)を研究対象とする。ガルバノミラー走査型パルスレーザ堆積装置を利用して、基板界面から薄膜最表面にかけてNi濃度とCo濃度を線形に変化させたNMC傾斜組成エピタキシャル薄膜を実際に作製し、均一組成膜との電池性能の比較によって傾斜組成導入の効果を吟味することを目的とする。東北大は傾斜組成エピタキシャル薄膜の作製を担当し、フロンティア研は薄膜の電池測定を担当した。

— 研究成果・効果 —



関連論文 : [1] *Rev. Sci. Instrum.*, **90**, 093901 (2019).
[2] *RSC Adv.*, **6**, 78963-78969 (2016).

一般研究B(2023年度)

「電子フォノン結合系のコヒーレント励起の量子理論モデル」

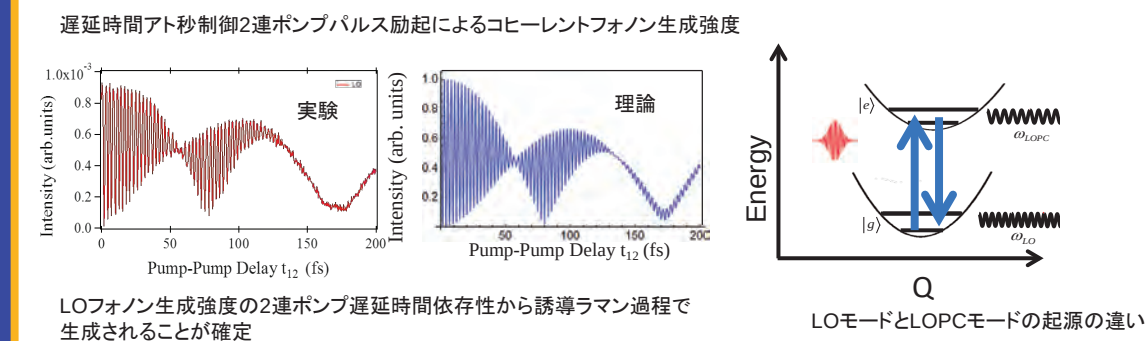
研究代表者：萱沼洋輔(大阪公立大学理学研究科)

共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

半導体・絶縁体などの結晶におけるコヒーレントフォノンの生成・観測メカニズムの解明を理論的側面から明らかにする。固体という舞台の上で演じられるフォトン・電子・フォノンという素励起の超高速ダイナミクスを、量子経路干渉の視点から解き明かし、実験データの解析を行う。

— 研究成果・効果 —



一般研究B(2023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)

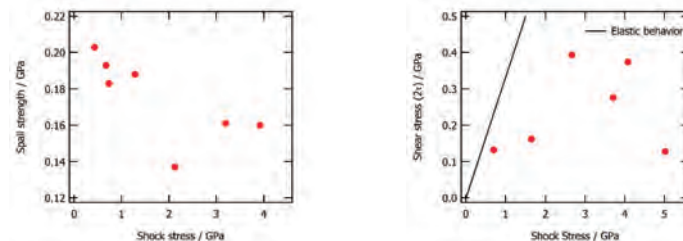
共同研究対応教員：中村一隆

— 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、高分子材料の衝撃強度特性を評価するため、ポリカーボネートの衝撃荷重下における最大せん断応力およびスポール強度の測定・評価を行った。

— 研究成果・効果 —

- 衝突表面の自由表面速度プロファイル測定により、試験体内部に生じた引張応力に起因するプルバック速度を決定し、スポール強度を導出
- 平面衝撃圧縮により達成される一軸ひずみ圧縮状態を利用し、衝撃波伝播方向とそれに垂直な応力の差から最大せん断応力を導出



ポリカーボネートにおける衝撃応力に対するスポール強度および最大せん断応力

スポール強度測定：2 GPa以上の衝撃応力によりスポール強度が低下することが明らかとなった。

せん断強度測定：3 GPaまでの衝撃応力に対しては、負荷応力の増加に伴い内部に生じるせん断応力も増加していく一方、衝撃応力が3 GPaを超える領域においては、せん断応力は減少に転じることが明らかとなった。

一般研究B(2023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)

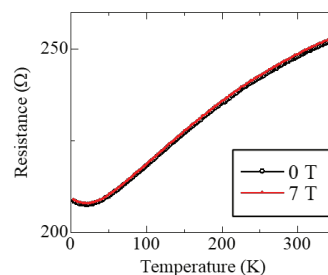
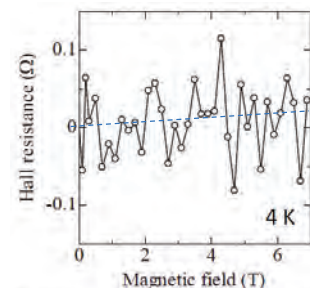
共同研究対応教員：片瀬貴義 准教授

— 研究目的 —

次世代の超高集積磁気デバイスの実現のために、漏れ磁場が小さいにも関わらず大きな異常ホール効果を示す「ワイル反強磁性体」が注目を集めている。我々は、その候補材料である $\text{Mn}_3(\text{Ge,Mn})\text{N}$ に着目した。本研究では、それらの組成について、PLD法を用いてエピタキシャル薄膜を得ること、およびその異常ホール効果を測定することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

PLD法を用いて、 $\text{MgO}(001)$ 基板および $\text{MgO}(111)$ 基板上に、 $\text{Mn}_3(\text{Ge,Mn})\text{N}$ 薄膜を作製した。それぞれの基板上で、エピタキシャル成長していることが確認された。微量の酸化物相の混在も見られたが、抵抗測定の結果、数 $\text{m}\Omega\text{cm}$ の抵抗率を示し、低温まで金属的に抵抗が減少するという、バルク試料と近い振る舞いが観測された。一方、ホール効果測定の結果、いずれの薄膜でも異常ホール効果の発現は見られなかった。文献調査の結果、異常ホール効果の発現には十分な格子歪の導入が必要であると考えられる。

Fig. 1: Temperature dependence of resistance of $\text{Mn}_3(\text{Ge,Mn})\text{N}$ thin film grown on $\text{MgO}(001)$.Fig. 2: field dependence of Hall resistance of $\text{Mn}_3(\text{Ge,Mn})\text{N}/\text{MgO}(111)$.

一般研究B(2023年度)

「スズ含有14族混晶薄膜の低温熱電物性に関する研究」

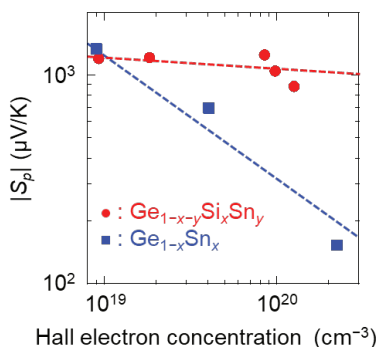
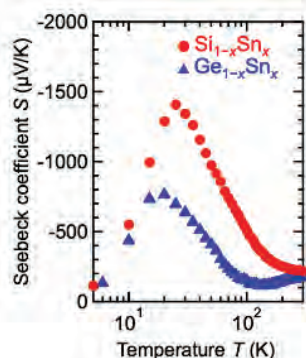
研究代表者：黒澤 昌志(国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学 大学院工学研究科)

共同研究対応教員：片瀬 貴義

— 研究目的 —

これまでの共同利用推進で、従来のモデルでは説明できない巨大なフォノンドラッグ熱電能(格子振動に電子が引きずられて発電する現象)がゲルマニウムスズ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$)半導体の“薄膜”で発現すること、そのパワーファクタ(単位長さに温度差1Kを印加した際の発電量)は他を凌駕することを見出した。今回の新規申請では、この特徴を活かした局所排熱デバイスの創製を新たな目標に設定し、「冷却性能の精密制御により様々な温度での局所排熱」を可能とする新しいスズ含有14族混晶薄膜の熱電材料開発に取り組んだ。

— 研究成果・効果 —



様々なスズ含有14族混晶薄膜の低温熱電物性を明らかにした。

- $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$: $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ と比較し、ゼーベック係数のピーク温度が5~10 K高温側にシフトする(左図)。
- $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_y\text{Sn}_x$: 電子濃度が増大してもフォノンドラッグ成分 $|S_p|$ が残存。結果、 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ より2倍程度大きなパワーファクタ($2.3 \times 10^3 \mu\text{W}/\text{cmK}^2$)が得られた(右図)。

受賞2件 [1] 大岩樹, 柴山茂久, 坂下満男, 中塚理, 片瀬貴義, 黒澤昌志: 第7回 応用物理学会フォノンエンジニアリング研究会 優秀ポスター賞 (2023/8/6)
[2] 大岩樹, 柴山茂久, 坂下満男, 中塚理, 片瀬貴義, 黒澤昌志: 第54回(2023年春季) 応用物理学会講演奨励賞 (2023/9/19)

一般研究B(2023年度)

「少数キャリア希土類モノプニクタイトにおける新奇電子相関物性の開拓」

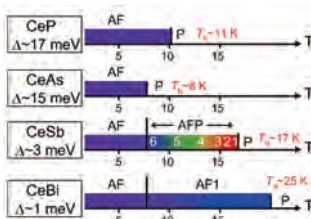
研究代表者：黒田健太(広島大学 先進理工科学研究科 物理学プログラム)

共同研究対応教員：笹川崇男

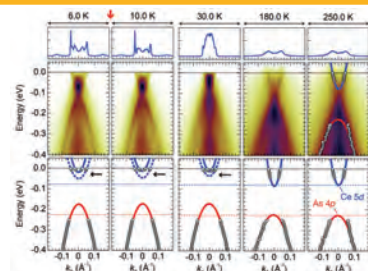
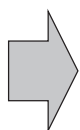
— 研究目的 —

少数キャリア希土類モノプニクタイトにおける局在・遍歴電子の電子相関や多体効果が示す異常物性の機構解明および新奇量子物性の開拓を目的として行う。希土類イオン $4f$ 結晶場の大きさ、キャリア数やフェルミ面の大きさなど物理パラメータと対応づけることで、悪魔の階段へ導く機能物性の解明を目指す。そして、セリウム系で発現していた多体効果のバランスが崩れたときにどのような電気・磁気特性が発現するのか調査する。

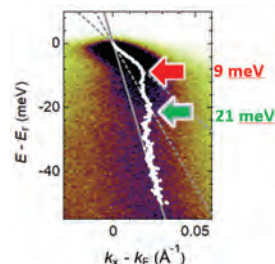
— 研究成果・効果 —



CeAs と CeBi は共に通常の反強磁性転移を示すのに対して、CeSb では複雑な転移現象である「悪魔の階段」を示す。



CeAs の光電子分光測定によって、電子・ホールバンドの温度変化を観測した



CeAs の光電子分光測定によって、電子ボゾン結合によるキंक構造を2つ観測した。

関連論文：

黒田健太, 新井陽介 他: "Devil's staircase transition of the electronic structures in CeSb" Nature Communications 11, 2888 (2021)., "Multipole polaron in the devil's staircase of CeSb" Nature Materials 21, 410 (2022).

一般研究B(2023年度)

「レーザ指向性エネルギー堆積法によるWC-HEA超硬合金の開発」

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 —

レーザ指向性エネルギー堆積法 (Laser Directed Energy Deposition: L-DED)によって、WCとCo金属相からなる、WC-Co超硬合金中のCo金属相をハイエントロピー合金 (High-Entropy Alloy: HEA) に代替したWC-HEA超硬合金を材料開発する。主として金属相を溶融させて作製する従来型のWC-HEA超硬合金の開発に加えて、高出力のレーザ加工で金属相とセラミックス相を同時に溶融させて作製するハイエントロピーカーバイド (High Entropy Carbide: HE Carbide) 型のWC-HEA超硬合金も研究開発の対象とする。

— 研究成果・効果 —

WC-Co超硬合金の機械的性質の向上を目的として、HEAを代替バインダーとして使用した。実験ではCrMnFeCoNi HEA粉末をバインダーとして使用し、L-DEDによってWC-HEA超硬合金を造形した。WC-Co超硬合金粉末も比較のために使用した。造形試料は、主にWC、 M_6C 、 M_7C_3 の3種類の炭化物と2相に分離したW含有量の異なるHEA相で構成されていることが明らかにされた。エネルギー分散型X線分光法 (EDS) 分析により、形成された M_6C 、 M_7C_3 炭化物とHEA相はW, Cr, Mn, Fe, Co, Ni の元素を含有していることが示された。WC-Co超硬合金粉末を使用した造形試料と比較して、100~250 Wのレーザ出力で加工したWC-HEA超硬合金造形試料では200 HV以上の高い硬度を示した。これらの結果は、レーザ照射後に WC-Co 超硬合金では M_6C が形成されるのに対して、WC-HEA超硬合金では M_7C_3 が形成されることに起因する。300 Wでは、WC-Co超硬合金造形試料においても M_7C_3 が形成されたため、WC-HEA超硬合金造形試料の硬度とほぼ同じ硬度が得られた。

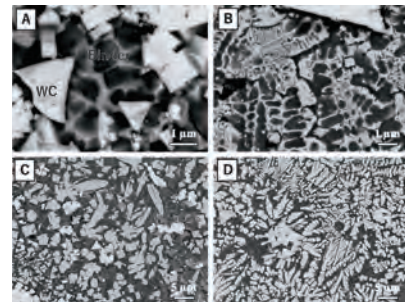


Fig. 1. SEM-BSE images showing microstructures of the L-DEDed WC-Co and WC-HEA cemented carbides. (A) WC and binder phase, (B) M_6C , (C) M_7C_3 in the WC-Co cemented carbide, (D) M_7C_3 in the WC-HEA cemented carbide.

一般研究B(2023年度)

「透明電子伝導性酸化物ガラス材料の開発」

研究代表者：斎藤 全(愛媛大学)

共同研究対応教員：平松秀典

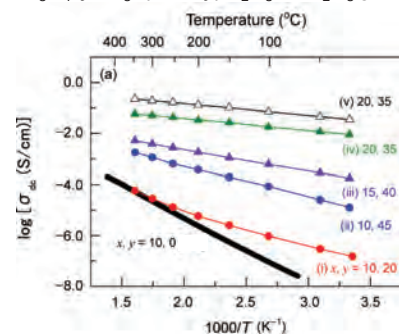
— 研究目的 —

可視光透明な酸化物半導体の設計指針は、結晶、非結晶を問わず、伝導帯下端(LUMO)が金属酸化物の球対称なs軌道からなり、かつ閉殻なd¹⁰軌道を有する酸化物により構成されることにある。伝導帯がs-p混成軌道からなる酸化物ガラスとして、 Bi_2O_3 - B_2O_3 ガラスがあり、 Fe_3O_4 とフッ素を添加したガラスに対して、導電率、キャリア密度、移動度、ゼーベック係数に関する電子輸送特性を調べた。

— 研究成果・効果 —

・導電性酸化物ガラスの創出を目指して、伝導帯下端がs軌道性の Bi_2O_3 を含み、n型ドーピングを目的として、 Fe_3O_4 とフッ素を導入した Fe_3O_4 - BiF_3 - Bi_2O_3 - B_2O_3 ガラスを見出した。

・ $10Fe_3O_4$ - $45Bi_2O_3$ - $45B_2O_3$ 半導体ガラスにフッ素を添加した試料は高伝導度を示す。電子伝導メカニズムとして、不純物準位(Fe^{2+} および Fe^{3+})間のホッピング伝導と結論付けている。

 $xFe_3O_4-yBiF_3-(55-x-y)Bi_2O_3-45B_2O_3$ glass


一般研究B(2023年度)

「スティショバイト型Al, H:SiO₂の超イオンH⁺伝導の解明に向けた単結晶薄膜の作製」

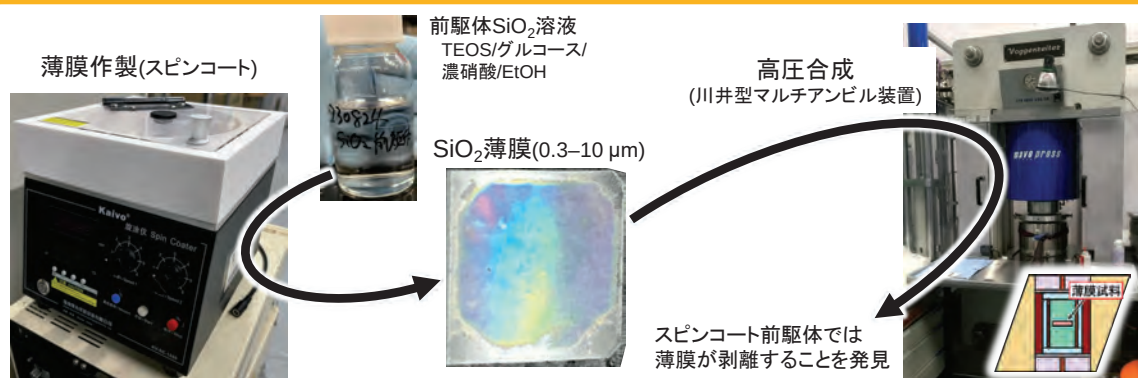
研究代表者：笹原 悠輝(京都大学)

共同研究対応教員：東 正樹 教授

— 研究目的 —

SiO₂はSiの一部がAlに置換されることで水酸化物イオンとして水素を取り込むことができるため、高圧高温環境においても唯一脱水をせずに地球マントルの最深部にまで表層の水を輸送できると考えられている鉱物である。スティショバイト型AlドープSiO₂中のH⁺は超高压超高温条件下で高速で伝導すると理論的に予測されており、地球内部の電気伝導度観測で観察されている高電気伝導度異常領域の原因であると考えられている。観測結果を説明するためにはスティショバイト型AlドープSiO₂の電気伝導度とその結晶方位依存性を調べる必要があるが、物性研究に必要な大型単結晶合成がこれまで困難であったため、これまで実験的な電気伝導度測定が行われた例はない。そこで本研究では、Al₂O₃基板上にSi_{1-x}Al_xO_{2-x/2}(OH)_xの非晶質薄膜を堆積した試料を用意し、その試料を超高压処理することでスティショバイト型Al, H:SiO₂の大型エピタキシャル薄膜の合成を行うことを目的とする。

— 研究成果・効果 —



一般研究B(2023年度)

「溝形鋼ブレース接合部における高力ボルトの配置方法が最大耐力に与える影響」

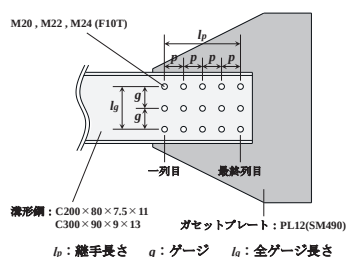
研究代表者：薩川恵一(愛知工業大学)

共同研究対応教員：吉敷祥一

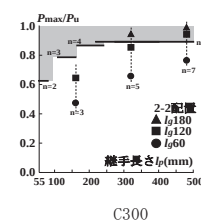
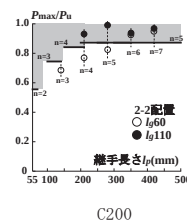
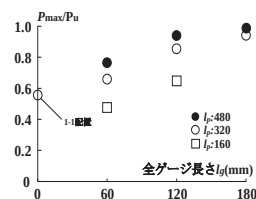
— 研究目的 —

本研究では、溝形鋼のブレース接合部におけるボルトの配置方法に着目し、その中で継手長さやゲージが最大耐力に与える影響を確認する。

— 研究成果・効果 —



溝形鋼ボルト配置



ボルトの配置方法が最大耐力に与える影響について確認した。継手長さや全ゲージ長さが最大耐力に影響があることが確認できた。

一般研究B(2023年度)

「解析データならびに実測データを用いた 建物の減衰モデルの同定に関する研究」

研究代表者：白山 敦子(徳島大学大学院 社会産業理工学研究部)

共同研究対応教員：佐藤 大樹

一 研究目的

建物の内部粘性減衰については、多くの観測記録の検討などによって、大まかな傾向などは示されつつあるが、その原因や大きさ、特性などは今も明らかになっていない。本研究では、東京工業大学すずかけ台キャンパスの建物(J1棟とS2棟)を対象として、東北地方太平洋沖地震において得られた加速度データを用いてシステム同定を行い、建物の固有周期ならびに減衰定数について検討する。

一 研究成果・効果

J1棟においては、地下1階のデータを入力、9階のデータを出力とし、S2棟は、X、Y方向のそれぞれについて、1階を入力、4階と7階を出力としたケースと1階を入力、7階を出力としたケースの2つの解析を行う。なお、解析時間は、全時間(900秒)とし、システム次数は最適なものを採用した。

これらの結果より、J1棟の固有周期は約0.66秒となった。また、S2棟のX方向は約0.38秒、Y方向は約0.78秒となり、Y方向のほうが固有周期は長い結果となった。

建物概要と観測システムならびに解析方法について説明するとともに、全時間を対象とした部分空間法による同定を行い、各建物の固有周期ならびに減衰定数を算定した。



一般研究B(2023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

単分子電子デバイスは、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デバイスとして期待されており、空気下帯電状態で再現性よく安定に動作するデバイスを構築するためには、動作条件下で安定な π 共役有機化合物の開発・利用が必要となる。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および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、今年度も引き続き $\text{Si}2\text{x}2$ 構造をもつケイ素架橋 π 共役化合物を中心に検討し、その両端にリンカーを介してチオー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。昨年度の知見に基づき、リンカーとしては左右非対称のものを用いることとし、その剛直性/柔軟性についての検討とともに、デバイス作製時に光電場を照射する新たな手法の開発について取り組んだ。その結果、メチレンまたはエチレン鎖をもつ分子に対し、光電場を電極間と平行に照射することにより、分子が電極に化学吸着する効率が向上し、以前の分子および手法を用いた場合よりも高い確率で電極間を架橋したデバイスが作製できることがわかり、共鳴トンネル現象を示すデバイスの作製にも成功した。今後は π 共役骨格およびリンカー構造をさらに改良し、それを用いたデバイス作製と機能評価を行う予定である。



一般研究B(2023年度)

「既存建物の耐震診断基準の建物形状による性能低減係数と測定値による建物の振動特性との関連性に関する研究」

研究代表者：鈴木有美(大阪大学大学院工学研究科)

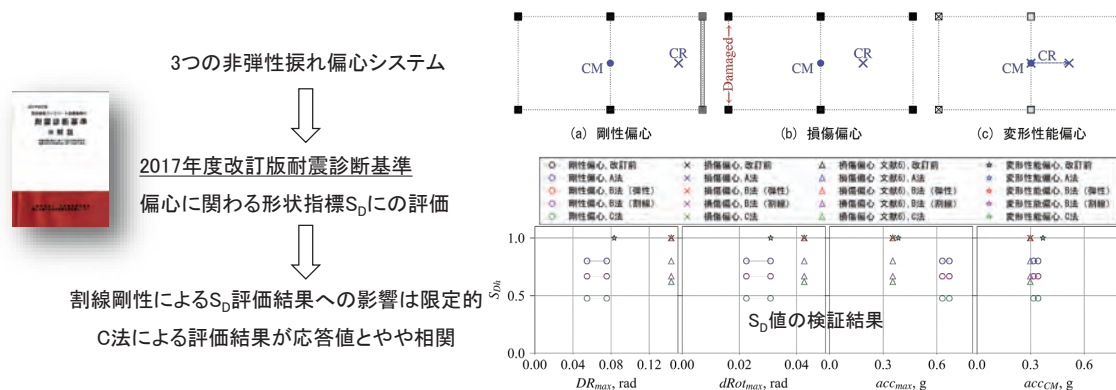
共同研究対応教員：佐藤大樹

研究目的

既存RC造建物の耐震診断基準では、建物の不整形性の影響を簡略化された形状係数 S_D により耐震性能を低減することで評価しているが、不整形な建物の応答(例えば、ねじれによる変位の増幅等)との整合性については検証が不十分である。

本研究では、2017年改訂版の耐震診断基準に示されている S_D 値のうち、水平剛性偏心に関わる項目について実地震応答の対応性を解明することを目指し、本研究ではその初期段階として、過去に実施された非弾性ねじれ応答に関する振動台実験の公開済みのデータを用い、 S_D 値の評価と応答値と比較検証することを目的とした。

研究成果・効果



一般研究B(2023年度)

「局所C-Vマッピング法と圧電応答顕微鏡の統合計測による強誘電体薄膜のナノスケールドメインダイナミクス解析」

研究代表者：平永良臣(東北大学)

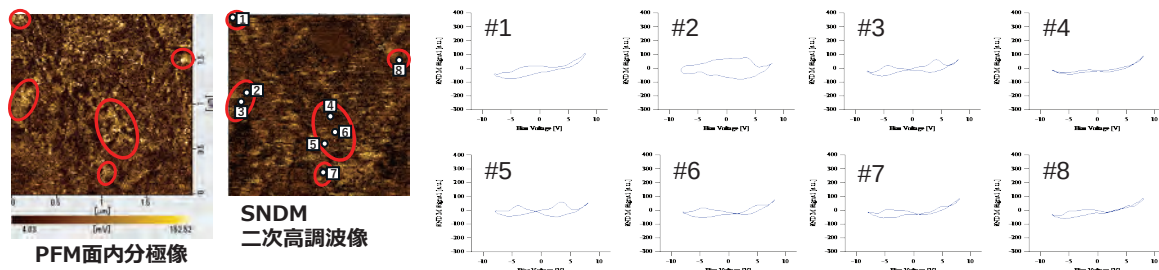
共同研究対応教員：重松圭

研究目的

強誘電体材料・デバイスの開発において、ナノスケールでのドメインダイナミクスの理解は極めて重要である。本研究では、局所C-Vマッピング法および圧電応答顕微鏡を併用した計測を通じて、強誘電体薄膜材料について、これまでの単一の手法によるアプローチでは得られなかったような新たな知見を得て、当該分野の発展に資することを目的とする。

研究成果・効果

局所C-Vマッピング法／圧電応答顕微鏡統合計測システムによるドメインダイナミクス解析の例

測定サンプル：HfO₂基多結晶強誘電体薄膜

発表論文・関連論文：

平永良臣，長 康雄：局所C-Vマッピング法を用いた強誘電体メモリ材料のナノスケールドメイン挙動分析，映像情報メディア学会技術報告，pp.9-15 (2023年6月)

一般研究B(2023年度)

「 $\text{PbWO}_4 - \text{LaNbO}_4$ 系固溶体の相転移現象」

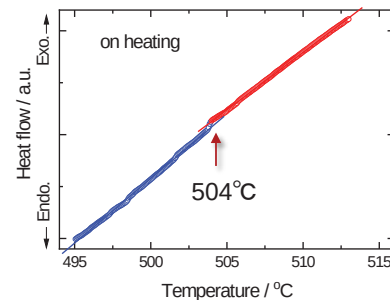
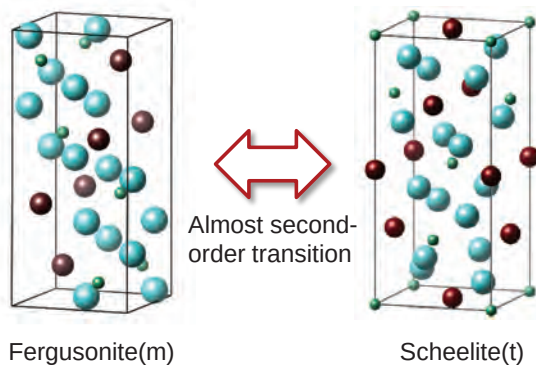
研究代表者：高井 茂臣(京大院エネ科)

共同研究対応教員：川路 均

— 研究目的 —

我々はこれまで $\text{PbWO}_4 - \text{LaNbO}_4$ 系固溶体の灰重石型構造を示す高温領域について、格子間酸化物イオンを導入し酸化物イオン伝導性の発現を見出してきた。本研究では、この系においてFergusonite型構造の低温相になる2次に近い1次相転移をDSCで検出することを目的とした。

— 研究成果・効果 —



DSCによって相転移を検出できた。
今後は表題の系の相図を完成させる。

一般研究B(2023年度)

「凍害劣化したコンクリート構造部材に対する補修・補強効果の解明」

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 —

劣化した鉄筋コンクリート建物を長寿命化させるには、1) 劣化したコンクリート構造部材の耐震性の把握、2) 劣化した構造部材に対する補修効果および補強効果の定量評価、3) 効率的な補修・補強工法および設計法を確立する必要がある。そこで、本研究では、鉄筋コンクリート(RC)梁を製作し、主筋の引き抜き実験(付着実験)および3点曲げ加力実験を実施し、表層コンクリートの劣化が付着強度と曲げ強度に及ぼす影響を検証する。

— 研究成果・効果 —

付着実験のパラメータ

1) 相対動弾性係数DM
100%, 80%, 60%

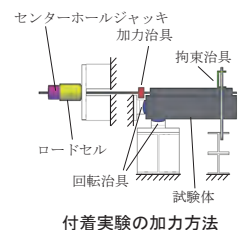
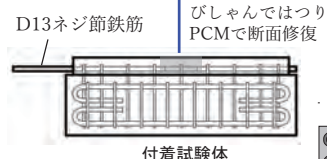
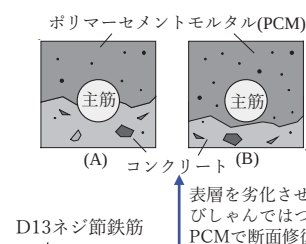
2) 未補修/補修

3) 付着長さ: 10d/7d

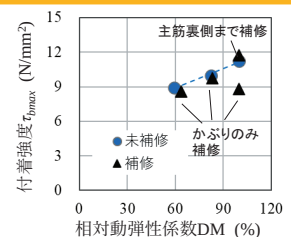
補修試験体

(A) かぶりコンクリートのみ補修

(B) 主筋の下部まで補修



3点曲げ加力実験: DM=100%と60%の2体で検証した。



付着実験の結果: 劣化により付着強度も低下した。また、(A)の補修では、完全に強度回復しなかった。

DMが60%になると、終局曲げモーメントが6%低下した。

一般研究B(2023年度)

「リチウムイオン二次電池用 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ 正極材料における粒子径効果の解明」

研究代表者：高橋 勝國(岡山大学 環境生命自然科学研究科)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

研究目的

安価かつ環境負荷の低い鉄元素を含有した正極材料 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ は、従来材料の $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ と異なり粒子径によって電池性能が大幅に変化する。本研究では粒子径を制御した $\text{LiNi}_{0.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ を合成し、粒子径と電池性能の相関性を明らかにすることで、粒子径が電池性能に寄与するメカニズムを解明する。

研究成果・効果

NFMのサイクル特性評価結果から、(a) NFM811の粒子径が増加するに伴って、容量維持率が減少することが明らかになり、従来のNCM811とは逆の傾向を示した。この理由として、Feの相分離があると考えられる。FeはNi、Co、Mnとは異なり八面体サイトへの選択制が無く、容易に四面体配位と八面体配位の両方を有するスピネル構造へと不可逆的な相転移を起こす。この不可逆的な相転移は、鉄系正極材料ではナノ粒子化によって抑制されることが報告されている。本研究でも同様に粒子径の減少によって不可逆的な相転移反応が抑制されたため、容量保持率が増加したと考えられる

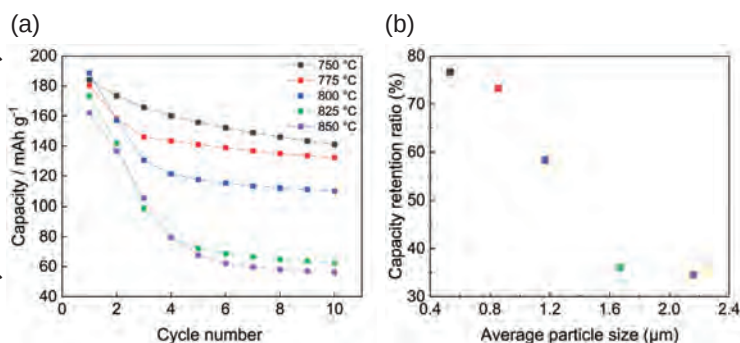


Fig. 2(a) Cycle performances from 2.5 to 4.5 V at 0.1 C for 10 cycles of NFM811s with different annealing temperature. (b) The correlation between the average particle size and capacity retention ratio of NFM811s.

一般研究B(2023年度)

「負熱膨張材料の熱膨張抑制能力評価法の構築」

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

産業技術の高度化にともない、熱膨張制御の要求が高まっている。これに応えるものとして、「温めると縮む」負熱膨張材料が大きな関心を集めており、様々な新規材料が提案されてきた。これらの負熱膨張材料に対し、材料間の比較や、材料設計を容易にするため、熱膨張抑制能力評価手法を確立することを目的とした。本年は、異なる製造バッチのピロバナジン酸リン酸塩 $\text{Cu}_{1.8}\text{Zn}_{0.2}\text{VPO}_7$ 微粒子についてなされた結果を検討した。

研究成果・効果

①30vol%- $\text{Cu}_{1.8}\text{Zn}_{0.2}\text{VPO}_7$ /エポキシ樹脂複合体の合成

マトリックス：(株)ADEKA製(基剤EP-4100Eと硬化剤EH-105L)
フィラー：異なる6バッチの $\text{Cu}_{1.8}\text{Zn}_{0.2}\text{VPO}_7$ 微粒子
体積比：負熱膨張フィラー30vol%に対しマトリックス樹脂70vol%
回転モールド法により固化[1]

②(株)共和電業製歪ゲージ(KFL)で線熱膨張評価(100-400 K)

③複合則を用いてフィラーの線膨張係数 α_f を推定[2]

α : 線膨張係数, v : 分率 c : 複合材料, f : フィラー, m : マトリックス

$$\alpha_c = v_f \alpha_f + v_m \alpha_m, \text{ただし } v_f + v_m = 1$$

ここで $\alpha_m = 63 \text{ ppm/K}$

6サンプルの α_c (実測値)と α_f (見積値)

α_c : 37.8 39.6 38.9 39.9 37.6 38.2 [ppm/K]

α_f : -20.7 -14.7 -17.0 -13.8 -21.2 -19.2 [ppm/K]

実測のばらつき(5%程度)に対して α_f の見積のばらつきは40%と大きい → 定量性に課題

※フィラーの体積比が30vol%と小さいことによる

今後の課題

同じバッチ(全く同一)のフィラーを用いた精密な評価
フィラー比率を増大(均一分散が難しくなる恐れ)
より熱膨張の小さなフィラーの活用

関連論文 [1] K. Nabetani et al., Appl. Phys. Lett. 106 (2015) 061912.

[2] V. Warne-Lang et al., Ceram. Int. 46 (2020) 27655-27659.

一般研究B(2023年度)

「チタン石型化合物における新規機能性誘電体材料の開発」

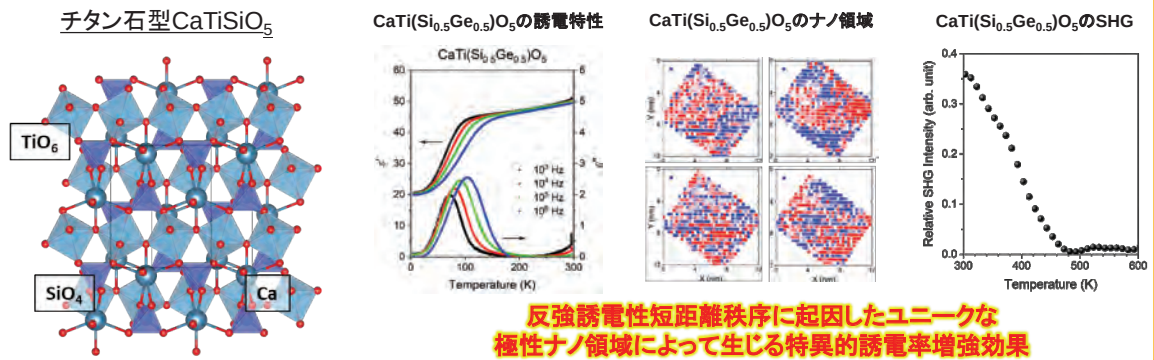
研究代表者：谷口博基(名古屋大学大学院理学研究科)

共同研究対応教員：安井伸太郎

研究目的

結晶構造中に酸素四面体と酸素八面体の複合的ネットワークを有するチタン石型化合物に着目し、新たな反強誘電体の設計と探索に取り組む。それによって見出した物質系の物性を最適化することによって、優れた蓄エネルギー特性や高電圧下における高誘電率を備えたセラミックス新材料の開発に取り組む。

研究成果・効果



一般研究B(2023年度)

「風荷重を受ける非線形性アクティブ免震の設計方法の開発」

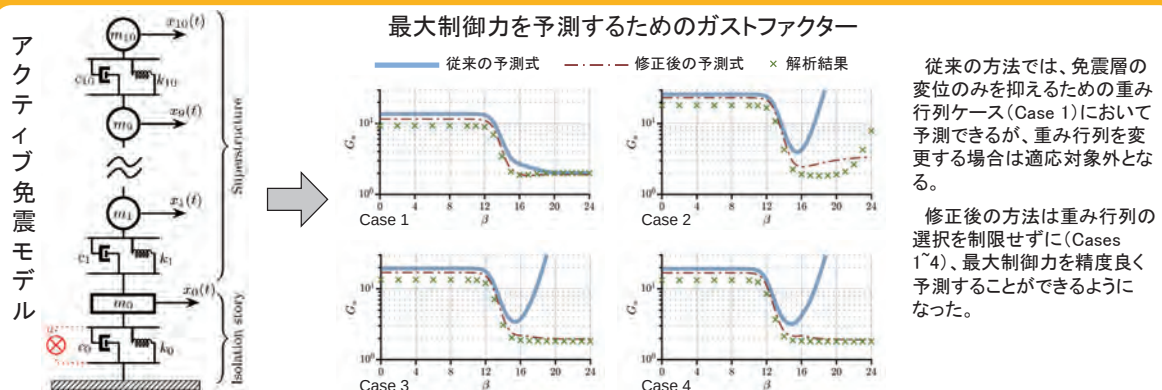
研究代表者：陳引力(東京理科大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

研究目的

試行錯誤的な設計に起因するアクティブ免震の応用のボトルネックを取り除き、数値シミュレーションと試行錯誤を必要としない制御系の設計パラメータを決定するための簡易的な設計方法を提案する。今までは、免震層の変位のみを抑えるための重み行列を対象にして、風方向においての簡易設計方法を提案した。今年度は重み行列を制限しない場合の設計方法を提案する。

研究成果・効果



関連論文：Yinli Chen, Daiki Sato, Kou Miyamoto, Jinhua She, Osamu Takahashi: Gust Factor Approach for Estimating Maximum Response and Control Force in High-Rise Base-Isolated Buildings with Active Structural Control, *Structural Control and Health Monitoring*, Vol. 2024, 9995641, 2024.3, doi: 10.1155/2024/9995641

一般研究B(2023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)

共同研究対応教員：吉数祥一

— 研究目的 —

コンクリート表層の空隙構造は、調合や施工、養生条件などの影響を受けて大きく異なることが報告されている。そこで本研究では、コンクリート表層の空隙構造をW/Cと材齢の違いで調整した供試体を用い、表面含浸材の浸透性に与える影響を検討することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

試験期間中での供試体への含浸材の浸透や水分の吸水および乾燥による質量変化を、水分移動シミュレーション予測結果と併せて図1にまとめて示す。全体的に高W/Cの方が乾燥と吸水による質量の変化量は大きく、また材齢の進行により変化量は小さくなる傾向にあった。また、含浸材なし供試体に比べて含浸材浸漬供試体のほうが、よりマイナス側の値を推移している。これは、含浸材による水分浸透抑制効果により、吸水量が抑制され乾燥量が卓越したためであると考えられる。

水分移動シミュレーションにより含浸材浸漬後のモルタルの水分の拡散係数を推定した。高W/Cのほうに細孔構造が疎であるため含浸材の浸透量が大きくなり、見掛けの拡散係数の低減率は小さくなった。また、モルタルの材齢が進行すると細孔構造が緻密になり含浸材の浸透量が小さくなり、拡散係数の低減率は小さくなった。

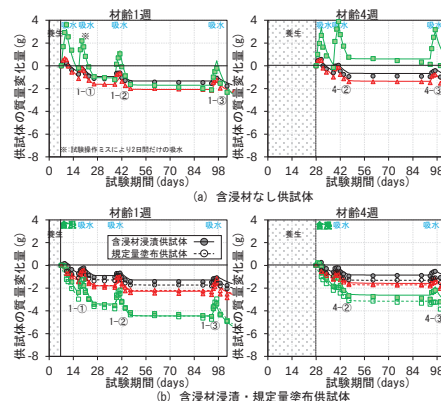


図1 曝露試験中の吸水・乾燥による試験体重量変化

関連論文：1) 浦川 奈実, 塚越 雅幸, 中山 一秀, 樋原 弘貴：ケイ酸塩系含浸材の浸透および吸水防止効果に及ぼす素地モルタルの性質の影響, 2023 年度 (第63回) 九州支部研究報告, pp. 129-132, 2024. 3

一般研究B(2023年度)

「界面制御による高性能酸化物系全固体電池の開発」

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 —

R4まで：主として液系リチウムイオン電池(LIB)において、誘電体界面の出力改善効果を実証した。

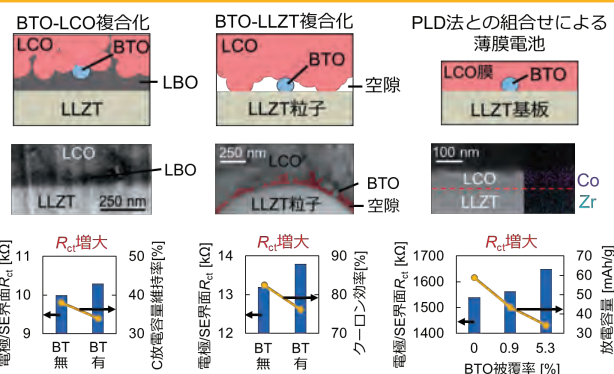


誘電体界面技術を酸化物全固体電池に適用する。酸化物全固体電池における誘電体界面の効果確定と、誘電体を介した電荷移動メカニズムについて調査することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

今回検討した系では液系LIBのような誘電体界面による電荷移動の顕著な促進効果は確認されなかった。今後更なる条件検討が必要。

⇒全固体LIBのSE(固体電解質)内では、 Li^+ は正電荷を帯びたシングルイオンとして存在する。よって、正電荷である Li^+ は絶縁性のBTO表面よりも負電荷を帯びたLCO表面に強く引き付けられる。すなわち、LCO表面で優先的に吸着が起るため、LCO/LLZT界面の直接的なイオン拡散が支配的になると推察した。



発表論文・関連論文：* Y. Toyota, T. Teranishi et al., ACS Appl. Energy Mater. 7, [4], 1440-1447 (2024), T. Teranishi et al., J. Power Sources, 494, 229710 (2021), T. Teranishi et al., J. Appl. Phys. 131, 124105-1-10 (2022).

一般研究B(2023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」

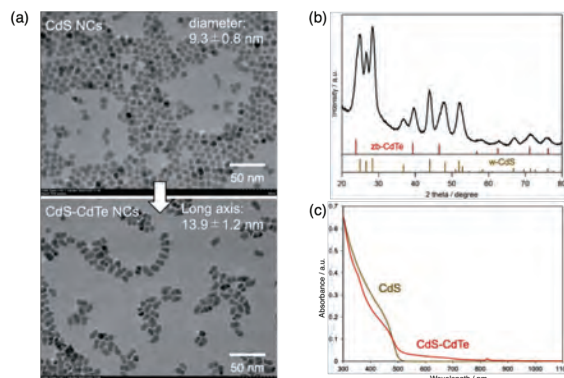
研究代表者：寺西利治(京都大学)

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 —



9.3±0.8 nm六方晶CdSナノ粒子の部分アニオン交換により、六方晶CdSと立方晶CdTeが異方的に相分離した13.9±1.2 nmのタイプII型CdS/CdTe二量体ナノ粒子の合成に成功した。CdS/CdTe二量体ナノ粒子をナノギャップ電極への選択集積し、電流-電圧特性を評価したところ、9 Kにおいて単電子トランジスタとして動作することが分かった。さらに、±1.5 V程度で非対称なさらなる電流の立ち上がりが見られ、この整流性は、室温においても若干観察された。

一般研究B(2023年度)

「擬立方晶構造を用いた高効率熱電変換材料の開発とスマートビルディングへの応用」

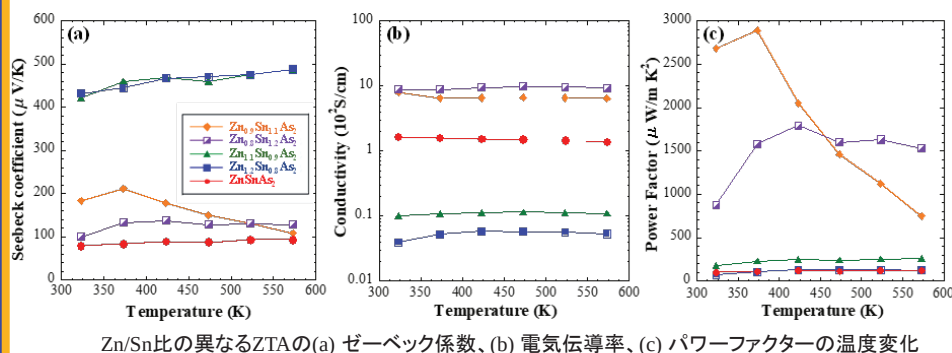
研究代表者：永岡章(宮崎大学 工学部 環境・エネルギー工学研究センター)

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

Zero Energy Building (ZEB)を代表とするスマートビルディングにおける熱利用を目標として、100 °C以下で高効率を示す熱電材料開発を開発する。本研究では、擬立方晶構造の対称性から価電子帯に縮退が生じ、高いゼーベック係数(=高いパワーファクター)が期待出来るカルコパイライト化合物ZnSnAs₂(ZTA)に注目し、Zn/Sn比が異なるサンプルの熱電特性の評価を行った。

— 研究成果・効果 —



・全てのZTAサンプルで、ゼーベック係数が正の値を示したためp型半導体であることを確認した。
・Zn/Sn比が0.81において、パワーファクターが375 KでBi₂Te₃と同等の最大2890 μW/mK²を示した。

100 °C以下の熱利用において高いポテンシャルを示す。

発表論文・関連論文：A. Nagaoka et al. Mater. Trans., 64 2535 (2023)

一般研究B(2023年度)

「コーン状破壊により損傷した露出柱脚の被災後補修」

研究代表者：仲田章太郎(豊橋技術科学大学)

共同研究対応教員：吉敷祥一

— 研究目的 —

本研究課題は、近年の地震被害において被害が散見されている露出柱脚の被災後補修法を構築することが目的である。2023年度は、増打ちコンクリート部(以下、補修部)を対象とした要素実験を行い、補修部のあと施工アンカーおよび柱主筋が被災後補修の力学性能に与える影響について検討した。

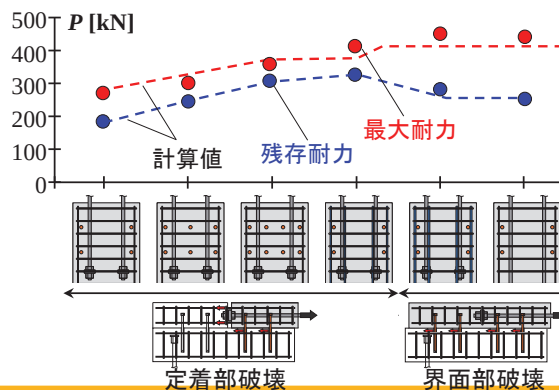
— 研究成果・効果 —

試験体ごとに露出柱脚の耐力を左図に示す。図中、●印は最大耐力、●印は残存耐力の実験値であり、破線は本研究が提案した両者の計算値である。

定着部破壊の最大耐力は指針式とダボ効果の和、界面部破壊の最大耐力は既往研究の界面のせん断応力度と界面部の総面積の積として評価する。

一方、残存耐力は、破壊後に作用するあと施工アンカーと柱主筋が全て降伏すると仮定して、それらの和として評価する。

最大耐力と残存耐力の計算値は、両者の実験値と概ね対応している。したがって、本研究課題が提案した評価式を用いて、最大耐力と残存耐力を評価できる。



- 1) 仲田章太郎, 齊藤大樹: 露出柱脚のアンカーボルトを対象とした締め直しによる被災後補修に関する解析的検討 その1 不完全な締め直しが行われた露出柱脚の余震に対する安全検証, 日本建築学会大会大会学術講演, 日本建築学会大会学術講演梗概集, 日本建築学会, 構造Ⅲ, pp. 869-870, 2023.9
- 2) S. Nakada, W. Ramos, T. Saito: NUMERICAL STUDY ON SEISMIC REPAIR BY RETIGHTENING ANCHOR BOLTS FOCUSING ON SAFETY VERIFICATION AGAINST AFTERSHOCKS, 18th World Conference on Earthquake Engineering, Proceedings of 18th World Conference on Earthquake Engineering,

一般研究B(2023年度)

「強固な相互作用を有する表面修飾剤を用いた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illumius)

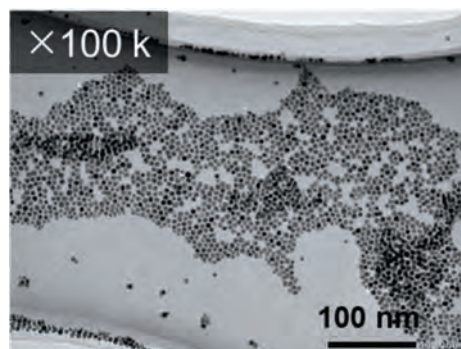
共同研究対応教員：真島 豊

— 研究目的 —

本共同研究では、単電子トランジスタの室温領域における構造安定化を目的として研究を行った。レーザー還元法により構造安定化が確認されている金-白金合金ナノ粒子を対象とし、異なる分子構造を有する表面修飾剤を用いた修飾を検討した。作製された表面修飾ナノ粒子の電子顕微鏡観察と熱物性測定により、ナノ粒子の構造と熱安定性を評価した。

— 研究成果・効果 —

レーザー誘起還元法により作製した熱安定に優れる金-白金合金ナノ粒子に対して、ドデカンチオール修飾後に二価のチオールを持つトルエン-3, 4-ジチオールを用いた分子置換により修飾した場合、ならびにアルキル架橋効果が期待される3-メルカプトプロピル(ジメトキシ)メチルシランの添加により修飾した場合において、従来のドデカンチオール修飾した金-白金合金ナノ粒子に比べて、熱安定が向上していることが確認された。今後は、同ナノ粒子を単電子島とし、熱安定に効果が見られた表面修飾剤により安定化したナノギャップ電極より構成されるSETを形成し高温領域における動作安定性について検討を行う。



TEM image of surface modified Au-Pt nanoparticles with dodecanthiol (C12S) → toluene-3,4-dithiol.

一般研究B(2023年度)

「実験データベースを用いた鉄筋コンクリート部材の構造性能評価」

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、実験データベース¹⁾における過去に実施された多数の実験結果を用いて変形性能を調べる。崩壊変形(軸力保持能力喪失時水平変形)および限界変形(水平力が最大耐力の80%まで低下したときの水平変形)を対象として、主筋量や軸力比およびせん断補強指標²⁾に着目して変形性能に関わる条件を検討する。

— 研究成果・効果 —

崩壊変形とせん断補強指標²⁾の関係を図1に示す。崩壊変形は1.28%~20.6%であった(検証に用いた試験体は44体)。相関係数は0.18であり、あまり相関は見られない。

崩壊変形においては主筋比の影響が大きい可能性が考えられるため、崩壊変形とせん断補強指標の分母を主筋軸力比 η_s に変更したものの(主筋軸力比指標)の関係を図2に示す。横軸をせん断補強指標から主筋軸力比指標に変更した図3では、相関係数が0.34と対応が良くなった。図2より主筋軸力比指標が小さいと崩壊変形は小さいものが多いことがわかる。

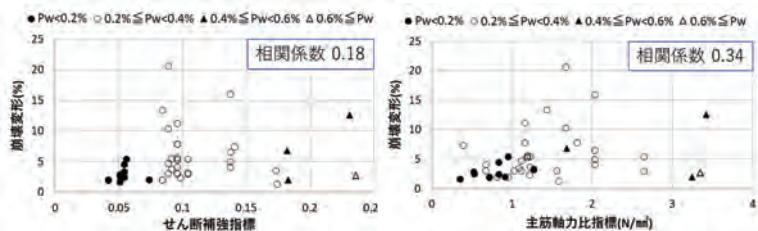


図1 崩壊変形とせん断補強指標の関係

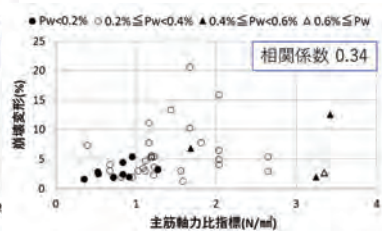


図2 崩壊変形と主筋軸力比指標の関係

$$\eta_s = N / (A_g \cdot \sigma_y) \quad \text{ここで、} N: \text{軸力、} A_g: \text{主筋総断面積、} \sigma_y: \text{主筋降伏強度}$$

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 2) 日本建築学会: 鉄筋コンクリート構造保有水平耐力計算規準・同解説, 2021.2

一般研究B(2023年度)

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

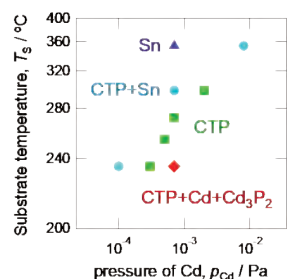
研究代表者：野瀬嘉太郎(京都大学大学院工学研究科)

共同研究対応教員：大場史康

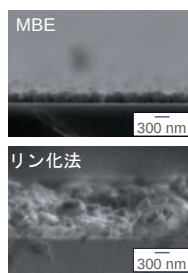
— 研究目的 —

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

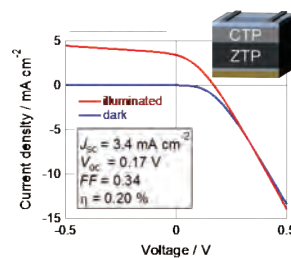
— 研究成果・効果 —



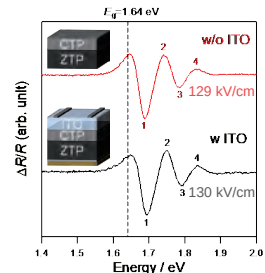
MBEによるCdSnP₂ (CTP) 製膜におけるプロセス相図(基板温度とCd分圧)



従来のリン化法よりも表面形態、電気的特性ともに良好



n-CTP/p-ZTP 接合を用いた太陽電池特性。変換効率は低いものの、光起電力を確認。



フォトフレクタンズによる界面電場評価。CTP/ZTP界面は透明導電膜がなくても十分に大きな電場を有している

発表論文・関連論文：1) I. Sumiyoshi et al., J. Appl. Phys., 133 (2023), 235702. 2) S. Nakatsuka et al., ACS Appl. Energy Mater., 1 (2018), 1635. 3) Y. Hinuma et al., J. Appl. Phys., 114 (2013), 043718. 4) S. Nakatsuka et al., Jpn. J. Appl. Phys., 58 (2019), 075508. 5) D. E. Aspnes et al., Phys. Rev. B, 7 (1973), 4605.

一般研究B(2023年度)

「反応焼結法により作製した誘電体セラミックスに関する研究」

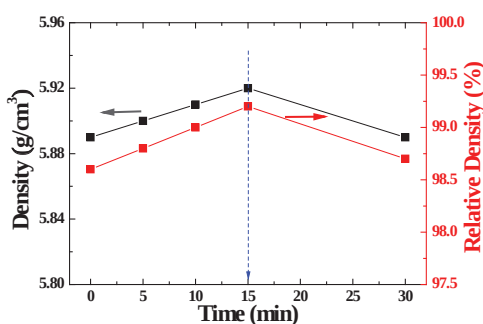
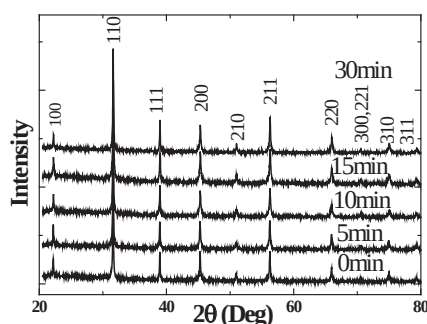
研究代表者：符徳勝（静岡大学）

共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

セラミックスの緻密化や物性は作製プロセスに大きく影響を受ける。本研究では、 BaTiO_3 - SrTiO_3 固溶体を対象とし、新しい焼結手法であるSPSを用いた反応焼結法によってセラミックスを作製し、結晶相の形成や緻密化の可能性を明らかにした。

— 研究成果・効果 —



SPSを用いた反応焼結法による $(\text{Ba},\text{Sr})\text{TiO}_3$ セラミックスの作製では、 N_2 雰囲気、印加圧力50 MPa、温速度 $100^\circ\text{C}/\text{分}$ 、焼結温度 1200°C の条件下で焼結温度に達する段階で BaTiO_3 と SrTiO_3 間の固相反応は完了し、単相のBSTOセラミックスが形成された。得られたセラミックスの相対密度が99をも超えた。

一般研究B(2023年度)

「希土類酸水素化物の半導体物性に対するヒドリドイオン伝導性の影響」

研究代表者：福井 慧賀（山梨大学 大学院総合研究部）

共同研究対応教員：半沢 幸太

— 研究目的 —

水素の陰イオンであるヒドリドイオン (H^-) を含む希土類酸水素化物は、水素欠陥の生成に由来する抵抗変化やフォトクロミズムなど半導体的な性質を有するだけでなく、 H^- についてイオン伝導性を示すことが明らかとなっている。本研究は希土類酸水素化物の H^- 伝導性が半導体物性に与える影響を調査することで、イオン伝導性を有する半導体材料についての知見を深めるとともに、新たな活用法を検討することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

- ✓ 雰囲気制御可能なゼーベック測定装置を構築
- ✓ 酸水素化ランタン ($\text{LaH}_{2.6}\text{O}_{0.2}$) に対するアルゴン/水素雰囲気下での熱起電力測定
 - ✓ 加熱方向・電圧の極性→いずれの雰囲気でもキャリアタイプはn型
 - ✓ 水素中で傾き増加：水素欠陥減少に伴うキャリア密度の減少を示唆
- ✓ 測定方法の都合で正確な温度測定が困難→装置を改良予定

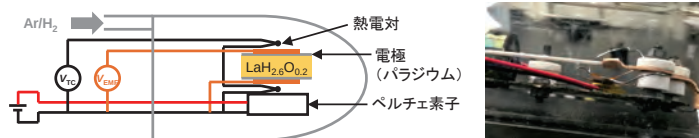


図1 雰囲気制御ゼーベック測定装置の構成。

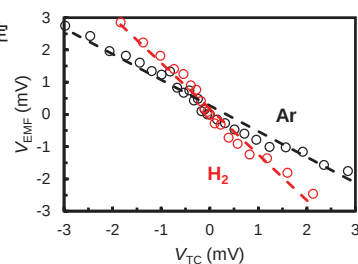


図2 熱起電力測定結果。

一般研究B(2023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

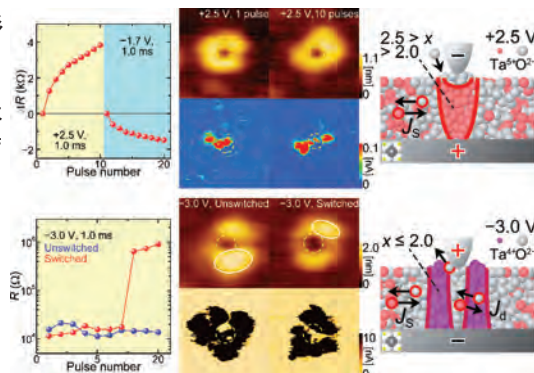
— 研究目的 —

アモルファス酸化物半導体においては近年、材料に対し外部電場を印加することでメモリスタ型動作などの様々な非線形伝導現象が発現し得る事が報告されており、その非線形を活かした新たなデバイス応用が現在開拓されつつある。本研究ではこれらの非線形伝導現象の起源となる材料内のイオン移動の詳細な機構解明を目指して、アモルファス酸化物による超平坦薄膜の作製と、プローブ顕微鏡法によるイオン移動の直接観察を実施する。

— 研究成果・効果 —

アモルファス状態でありながらその表面に原子平坦面を形成した超平坦 α -TaO_x薄膜と α -NbO_x薄膜を新たに作製し、探針/試料界面に理想的に均一な電気的・構造的接触を形成した条件下において導電性原子間力顕微鏡(C-AFM)法による電気計測を行ったことで、応用デバイスと同様の特性を持つメモリスタ型の抵抗変化現象をプローブ顕微鏡を用いて直接的に電気計測することが可能となった(右図)。

C-AFMによる構造・伝導度分布の観察結果からは、 α -TaO_xが示す抵抗変化現象の連続性には、準安定 α -TaO₂相との間でのアモルファス相転移が重要な役割を果たす事が示唆されており、アモルファス酸化物の非線形伝導現象のデバイス応用に向けた重要な知見を得ることができた。



一般研究B(2023年度)

「合金触媒の活性—電子状態相関に関する研究: PdAu合金による酢酸ビニルモノマー合成の例」

研究代表者：古川 森也(大阪大学 大学院工学研究科)

共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

酢酸ビニルモノマー(VAM)は石油化学工業における重要な化学中間体であり、KOAc/Pd-Au/SiO₂(Pd/Au = 4)を用いたエチレンのアセトキシル化($\text{HOAc} + \text{C}_2\text{H}_4 + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{VAM} + \text{H}_2\text{O}$)により主に製造されている。PdにAuおよびKOAcを添加することで活性・選択性が飛躍的に向上することが知られており、AuおよびKOAcの機能についてこれまで様々な議論がなされてきたが、これらを詳細に解明した報告は未だない。本研究では、様々な組成のPd-Au/SiO₂を精密に合成し、反応前後における構造解析、速度論的検討、DFT計算を詳細に行うことでAuとKOAcの役割を解明することに成功した。

— 研究成果・効果 —

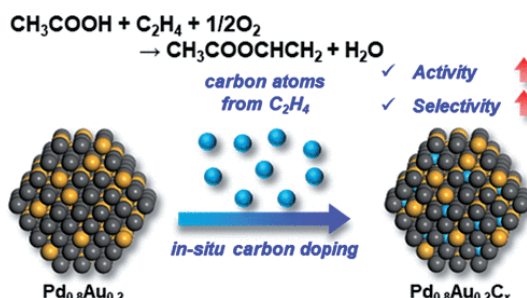
本研究では、精密に合成したPd-Au合金を活用することでエチレンのアセトキシル化に有効なKOAc/Pd-Au/SiO₂触媒が持つAuとKOAcの役割を解明することに成功した。

(1) エチレンのアセトキシル化の反応中においてPd-Au合金の粒子径や組成は変化せず、一方でC₂H₄由来の炭素原子が合金の格子間隙に取り込まれカーバイドが形成される。

(2) KOAcはPd-Au合金への炭素ドーピングを促進するとともに、ドーピングされた格子間炭素を保持する役割も果たす。

(3) Auの効果(電子的効果+幾何学効果)と格子間炭素の効果(電子的効果)の相乗により律速段階であるOAcとC₂H₄のカップリングの障壁が低下し活性が向上する。

(4) Auと格子間炭素の効果によりC₂H₄の分解が抑制され、選択性も向上する。



論文：Y. Nakaya, E. Hayashida, R. Shi, K. Shimizu, S. Furukawa*, J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 2985-2998.

"Interstitial Carbon Dopant in Palladium-Gold Alloy Boosting the Catalytic Performance in Vinyl Acetate Monomer Synthesis"

一般研究B(2023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)

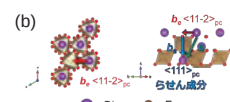
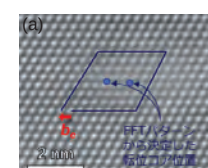
共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

室温で強誘電性と反強磁性が共存した BiFeO_3 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。 $\text{SrTiO}_3(111)$ 基板上の BiFeO_3 薄膜は、バルクと同じ菱面体晶構造を持つにも関わらず、室温で $0.01 \mu_B/\text{Fe}$ 程度の飽和磁化をもった超常磁性的な挙動を示す。本研究では BiFeO_3 薄膜中の転位構造解析と転位周りの歪み場の解析を行い、超常磁性状態が安定化される機構を解明することを目的とした。

— 研究成果・効果 —

本研究では $\text{SrTiO}_3(111)$ 基板上の BiFeO_3 薄膜中の貫通転位の構造と転位周りの歪み場を調べ、同薄膜における超常磁性的な磁気特性の起源について検討した。直交する面内2方向からのコントラスト実験により、薄膜内の貫通転位は刃状成分 $\langle 11-2 \rangle_{\text{pc}}$ とらせん成分 $\langle 111 \rangle_{\text{pc}}$ をもった混合転位であることがわかった。ピーク対解析法を用いて転位周りの歪み場の解析を行った。その結果、磁気構造が変化するために必要な $\pm 2\%$ 程度の格子歪みが転位周り 10 nm^2 程度に存在することが確認できた。転位コアとその周辺領域が磁化に寄与すると仮定すると、それらの領域に通常の傾角コリニア構造では説明できない大きな磁化が発現している可能性が示唆された。



<111>方向からの(a)ADF像と(b)パーガーズベクトルを表す模式図

一般研究B(2023年度)

「熱放出型ドラッグデリバリーシステム用フェライト粒子の合成と評価」

研究代表者：牧之瀬 佑旗(島根大学 学術研究院 環境システム科学系 物質化学コース)

共同研究対応教員：松下 伸広

協力者：佐野 藍子, 久保田 雄太, 中川 泰宏, 生駒 俊之

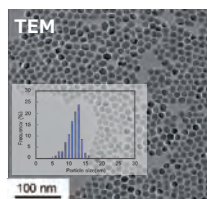
— 研究目的 —

がん治療の分野で研究されているドラッグデリバリーシステム(DDS)は、通常の服薬に比べて少量で作用し、副作用を抑えることが可能となる重要な治療法である。誘導の一つに磁力による方法が研究されており、磁性ナノ粒子が用いられる。この粒子には、薬剤を誘導するだけでなく、交流磁場において発熱するという特性がある。これを利用して粒子を発熱させ薬剤を放出させること(熱放出)が可能ならば、より効果的に薬剤を運ぶことができる。しかしながら、DDS応用の磁性粒子の発熱特性については未知の部分が多い。そこで本研究では、水熱合成したフェライトナノ粒子をシリカでコートした複合体を作製し、その発熱特性や水分散媒中での分散の様子、磁気特性を評価した。

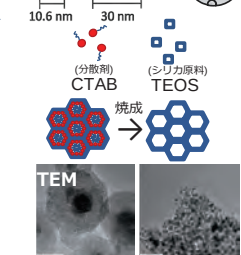
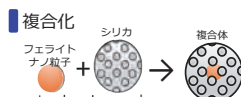
— 研究成果・効果 —

フェライト(Fe_3O_4)ナノ粒子
* オレイン酸修飾水熱合成
oleic acid

量論比の FeCl_2 , FeCl_3 ,
オレイン酸塩, アンモニア
水を原料として水熱合成

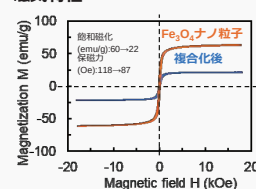


13nm程度のナノ粒子が得られた



ナノ粒子を中心に均一に被覆層を形成

磁気特性



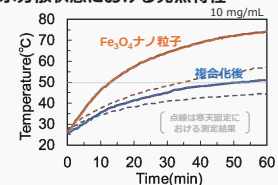
✓ 飽和磁化及び保磁力の低下
→ 軟磁性体

水分散状態の写真



✓ 水に分散性あり ✓ 磁石に追従

水分散状態における発熱特性



✓ 発熱温度が低下
✓ 複合化後も水分散で50°C達成
→ 中心部では50°Cより高温の可能性

✓ 複合化後も軟磁性体
✓ 磁石での輸送可能
✓ 水分散では目標温度50°Cを達成
→ 薬物送達・放出の可能性

一般研究B(2023年度)

「RC造袖壁付き柱の降伏時変形に影響を及ぼす構造因子に関する研究」

研究代表者：松井 智哉(豊橋技術科学大学)

共同研究対応教員：西村 康志郎

研究目的

建物に対して弾塑性フレーム解析によって耐震性能の評価をする際には、2次壁付き部材の断面形状が多様であることから、モデル化において多くの工学的な判断が必要となる。本研究では、壁筋比が異なる袖壁付き柱を対象に静的加力実験を実施し、耐力および変形挙動を把握するとともに、復元力特性モデルにおける降伏時変形の評価とその適用性について検討を行う。

研究成果・効果

RC造袖壁付き柱の復元力特性;降伏時の変形の評価法

●評価法1

菅野式を準用した手法

$$\alpha_y = \left(0.043 + 1.64 n p_t + 0.043 \frac{a}{D} + 0.33 \eta_0 \right) \left(\frac{d}{D} \right)^2$$

●評価法2

耐力壁のモデル化手法に準じて曲げ変形とせん断変形をそれぞれモデル化

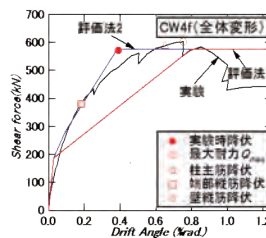
曲げ

$$\alpha_y = \frac{M_u c_n}{E_c I_e \varepsilon_y}$$

せん断

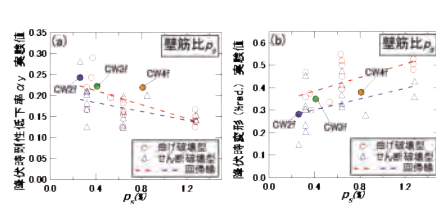
$$\beta_u = \frac{p_w \sigma_y}{F_c} + 0.14$$

実験結果との比較



評価法1: 実験結果を過大評価
評価法2: 実験結果と対応

壁筋比が及ぼす影響



今回の実験では、壁筋比が大きくなるほど、降伏時剛性低下率は小さく、降伏時変形は大きくなる傾向を示すことが確認された

発表論文・関連論文

松井智哉, 佐々木菜月, Chadraabal Enkh-od: RC造袖壁付き柱の構造実験と降伏時変形の評価に関する考察, コンクリート工学年次論文集, Vol.44, No.2, pp.337-342, 2022.7

一般研究B(2023年度)

「耐震性・施工性・断熱性に優れた木質制振壁の開発」

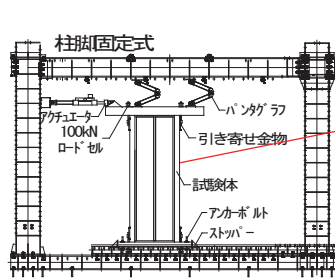
研究代表者：松田和浩(名城大学理工学部建築学科)

共同研究対応教員：佐藤大樹

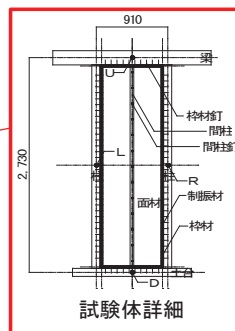
研究目的

真壁形式のパネル内に予め断熱材や制振材(ダンパー)を組み込んでおけば、現場での施工性は非常に高く、かつ、パネル内で断熱材の屋内側に制振材を組み込めば、温度依存性の影響を抑制し、ダンパー性能の安定性を高めることも可能と思われる。本研究では、釘配列の影響を上下左右の4点に縮約する手法を応用することで、提案する壁の特性を評価する手法を提案するとともに、評価結果と実験の比較を行う。

研究成果・効果



壁実験セットアップ

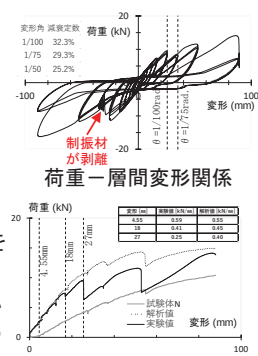


試験体詳細

提案する制振壁について、動的な強制変形実験を実施

層間変形1/75載荷で、制振材が剥離した

剥離前までの実験結果を解析で概ね再現できた。
今後は剥離を起こさないよう接着方法を改善する



実験と解析の比較

一般研究B(2023年度)

「ジラジカルスピンの挙動に着目した開殻分子エレクトロニクス」

研究代表者：松田建児(京都大学 大学院工学研究科)

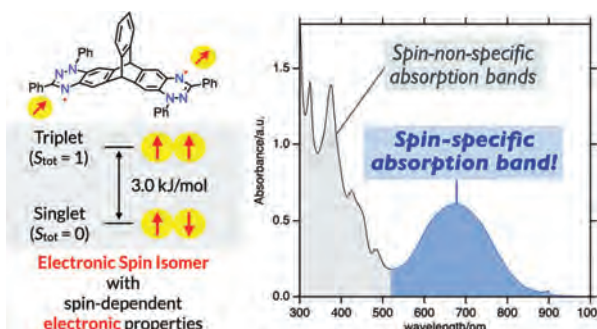
共同研究対応教員：真島豊

— 研究目的 —

2つのスピンの三重項状態と一重項状態がエネルギー的に近く、温度変化により占有数に変化するジラジカル分子を合成し、分子コンダクタンスを個別に観測することを目的とする。三重項状態と一重項状態の分子物性を、時間によってデジタルに変化する物性として計測することができると考えられる。開殻系分子が関与するユニークな電子物性を見出し、新たな分子エレクトロニクス機能を実現することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

三重項状態と一重項状態のエネルギーが室温で共存可能なほど近く、紫外可視域の光吸収挙動が三重項状態と一重項状態で大きく異なるジラジカル分子の合成に成功した。トリプチセン骨格をもつこの分子は室温で650 nmの近赤外領域に吸収帯を持つが、温度を下げてこの吸収帯の強度が増加し、強度変化は磁化率測定によって求められた一重項状態の占有率で説明できたことから一重項状態に特有の吸収であることが示唆された。



発表論文 D. Shimizu, H. Sotome, H. Miyasaka, K. Matsuda, *ACS Cent. Sci.* **2024**, on the web. Doi: 10.1021/acscentsci.4c00284.

一般研究B(2023年度)

「ペロブスカイト型酸化物の合成反応メカニズムと特性調査」

研究代表者：三浦 章(北海道大学)

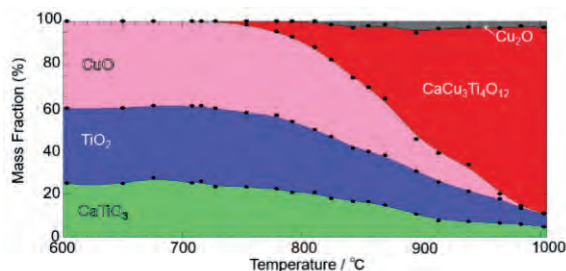
共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

複雑な相の形成において、近年中間相や液相の形成が調査されている。たとえば、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ の合成では、熱力学的に駆動される BaO_2 と CuO との間の熱力学的反応と、それに続く Y_2O_3 と Ba-Cu-O 液体との高速反応によることが、その場XRD-TEM解析によって明らかになった。本研究では、そこで、 CaO 、 CuO 、 TiO_2 からのダブルペロブスカイト $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ の生成をモデルとして、合成反応をXRDとSEMで調査した。

— 研究成果・効果 —

CaTiO_3 、 CuO および TiO_2 からの反応を、空気および真空中でその場XRDによって測定しました。温度が上昇すると、 TiO_2 と CuO の相分率はおよそ減少し始めます。700°Cで、 $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ は750°C以上で出現し、その相比は増加とともに増加した。温度800°C以上では、 CuO の還元により少量の Cu_2O が現れました。その場SEM解析の結果、750°C以上で急激な形態変化が観察された。液相生成の可能性も含めて、現在調査中である。



CaTiO_3 、 CuO および TiO_2 からの反応のin-situ XRD

一般研究B(2023年度)

「有機・無機ハイブリッドペロブスカイト薄膜の微視的構造と光電子物性」

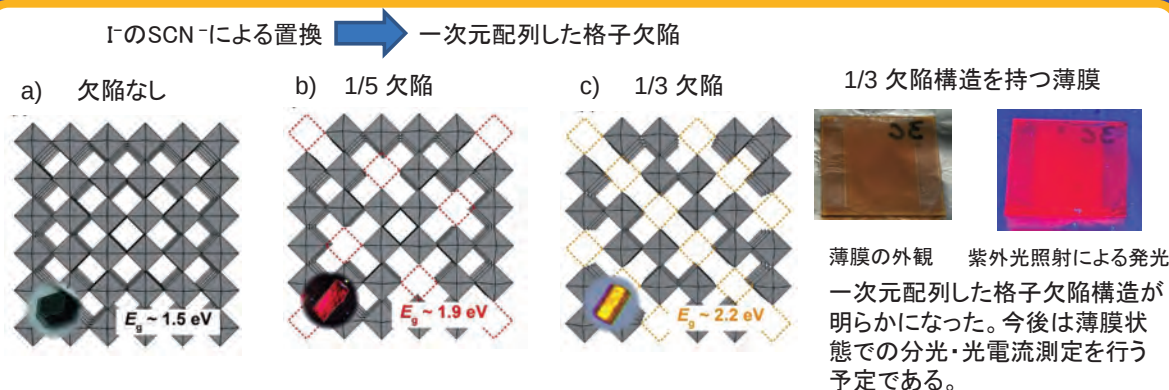
研究代表者：三浦智明(新潟大学)

共同研究対応教員：山本隆文

— 研究目的 —

次世代のペロブスカイト太陽電池材料として注目を集めているFAPbI₃(FA⁺: CH(NH₂)₂⁺)のSCN⁻アニオン置換による安定性・光電変換機能向上の機構を解明することにより、より優れた材料開発への指針が得られる。本研究では、新規SCN⁻アニオン置換ペロブスカイトの合成と構造解析を行うことにより、安定性向上に寄与する微視的構造を明らかにする。さらに、時間分解光電流、分光測定に向けた薄膜作成を行う。

— 研究成果・効果 —



関連論文：T. Ohmi, I. W. H. Oswald, J. R. Neilson, N. Roth, S. Nishioka, K. Maeda, K. Fujii, M. Yashima, M. Azuma, T. Yamamoto, *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 19759.

一般研究B(2023年度)

「高効率有機分子変換に有効な両性金属酸化物担持金触媒の開発」

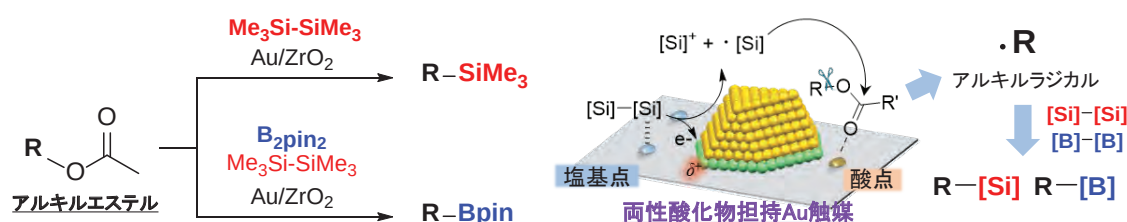
研究代表者：三浦大樹(東京都立大学都市環境科学研究科)

共同研究対応教員：鎌田慶吾

— 研究目的 —

金ナノ粒子と担体である金属酸化物の双方の触媒特性を協働させることで、効率的な有機分子変換の実現が期待できる。本研究では、ルイス酸性と塩基性の双方を有する両性金属酸化物を担体とする金ナノ粒子触媒を活用することにより、高効率な有機分子変換を実現することを目的として検討を行った。

— 研究成果・効果 —



両性酸化物であるZrO₂にAuナノ粒子を担持した触媒を用いることで、エステルに含まれる安定なC-O結合がC-Si結合¹⁾やC-B結合²⁾へと効率的に変換できることを明らかにした。Auナノ粒子の近傍にある塩基点がジシランを活性化することで、ジシランからAuナノ粒子への1電子移動が促進され、酸点がエステルを活性化することでシリルラジカルの求核付加が進行しアルキルラジカル中間体が効率的に発生することが分かった。本反応を用いることで多様な有機ケイ素化合物や有機ホウ素化合物が効率的に合成できる。

関連論文：

1) Miura, H.; Doi, M.; Yasui, Y.; Masaki, Y.; Nishio, H.; Shishido, T. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 4613–4625.2) Doi, M.; Miura, H.; Shishido, T. *Org. Lett.* 2024, DOI:10.1021/acs.orglett.4c00225.

一般研究B(2023年度)

「トポロジカル量子デバイスの作製と評価」

研究代表者：三澤哲郎(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 —

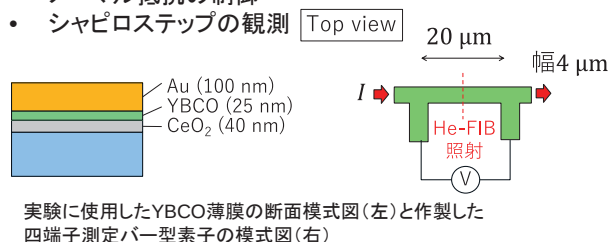
ヘリウムイオン顕微鏡技術を用いて集束ヘリウムイオンビームを試料に照射することで、ナノメートルレベルの局所物性制御が可能である。この技術を用いて様々なトポロジカル物質にトンネル障壁層を形成することにより、ジョセフソン接合を作製しトポロジカル量子デバイスの作製および評価を行う。

— 研究成果・効果 —

高温超伝導体YBCOにおける実証

照射量に応じた系統的な物性変化の制御を観測

- ・ 超伝導臨界温度の制御
- ・ ジョセフソン臨界電流の制御
- ・ ノーマル抵抗の制御
- ・ シャピロステップの観測



YBCOの酸素秩序状態を、集束ヘリウムイオンビームにより局所的に乱すことにより超伝導を局所的に抑制することができた。これによりトンネル障壁層を形成し、ジョセフソン接合とする技術が確立された。

今後ヘリウムイオン照射の現象理解を目指すとともに、トポロジカル物質、特に剥離したファンデルワールス層状物質に対し本技術を適用し、ジョセフソン接合の作製および新奇準粒子状態の検出、制御へ向け研究を進めていく。

一般研究B(2023年度)

「触媒性能の向上に資する表面金属粒子と固定化有機分子との相互作用解析」

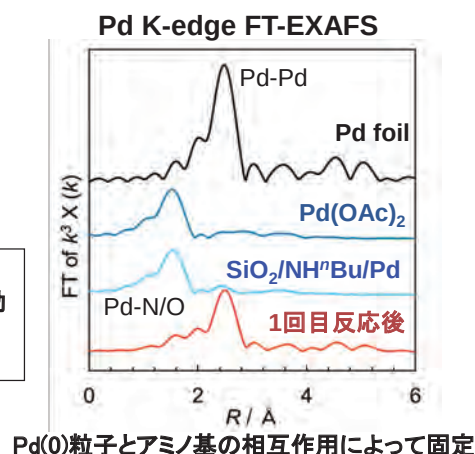
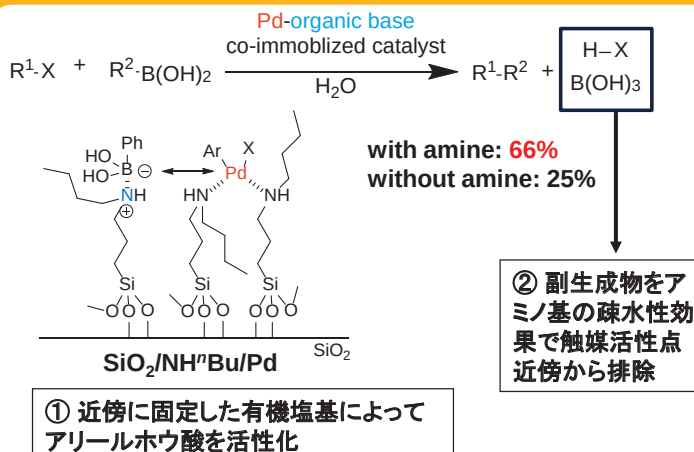
研究代表者：本倉 健(横浜国立大学)

共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

活性なPd種とアルキル鎖をもつ有機塩基を固体表面に共存させて、鈴木-宮浦カップリング反応において触媒的に固定化塩基を機能させる。さらに、Pd種と有機塩基の構造と相互作用に関して調査する。

— 研究成果・効果 —



一般研究B(2023年度)

「透過型電子顕微鏡を用いた蓄電固体材料の微細構造解析」

研究代表者：森 茂生(大阪公立大学)

共同研究対応教員：東 正樹

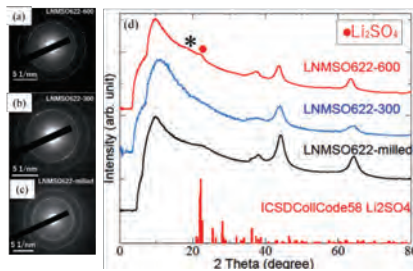
— 研究目的 —

本研究では、透過型電子顕微鏡(TEM)を用いてホロコーン照射による暗視野法(ホロコーン暗視野法)と電子回折を用いたPDF法を用いて、ガラスセラミックス系蓄電固体材料で構成される全固体電池のヘテロ/ホモ界面近傍でのナノスケールで生じる結晶/非晶質状態(結晶構造、結晶対称性、サイズ、形状や密度(結晶化度))および局所歪を定量的に評価・解析し、充放電サイクル特性等の電池特性を支配する物理化学因子(特に構造的因子)を明らかにすることを目的とする。

— 研究成果・効果 —

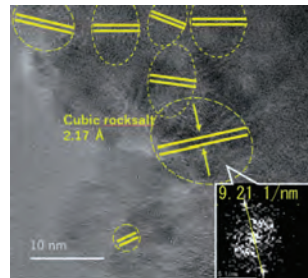
研究対象試料：60LiNiO₂-20Li₂MnO₃-20Li₂SO₄(LNMSO622)

熱処理温度：LNMSO622-milled, LNMSO622-300 (300℃熱処理), LNMSO622-600 (600℃熱処理)



電子回折パターン

(a) LNMSO622-milled,
(b) LNMSO622-300
(c) LNMSO622-600



LNMSO622-milled試料の高分解能TEM像

試料の熱処理温度が上昇するとともにナノ結晶が粗大化し、有する結晶相が立方晶岩塩型構造が優勢な状態から六方晶構造が優勢な状態へ遷移していることが分かった。粗大化した六方晶構造のナノ結晶が増加がLiイオンの拡散を困難にすることで電池性能が劣化していることが考えられる。

一般研究B(2023年度)

「ペロブスカイト結晶成長制御を目指した自己成長技術のための基礎研究」

研究代表者：森 竜雄(愛知工業大学)

共同研究対応教員：真島 豊

— 研究目的 —

ペロブスカイト太陽電池はシリコン並みの変換効率とその作製の容易さからシリコンを補完する太陽電池と期待されている。この太陽電池は多結晶構造であり、その結晶性を膜厚方向に成長させることが重要である。この結晶構造をポリマーを利用することで自発的に実現したい。

— 研究成果・効果 —

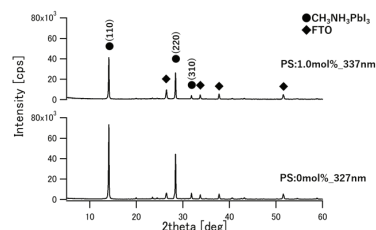


図1 XRD特性へのポリスチレン添加の影響
ポリスチレン添加により結晶が減少し、微細化

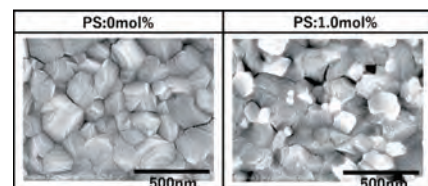


図2 ペロブスカイト膜のSEM像の比較

ポリスチレン(PS)領域がキャリア電導を阻害
⇒ 界面の改善とPSの添加方法を検討

一般研究B(2023年度)

「磁性層状化合物における新奇電子物性の開拓と超伝導近接効果」

研究代表者：矢野力三(名古屋大学 工学研究科)

共同研究対応教員：笹川崇男

— 研究目的 —

正味の磁化が小さいながらも強磁性体と同等な現象を発現する物質に注目が集まっている。そのような物質ではより高感度の磁気センサや高集積化した磁気メモリの実現が期待されている。さらに超伝導体との組み合わせ(接合)によって、通常では発現しない超伝導状態が実現できる可能性がある。本年度ではその新たな磁性化合物候補の探索を行い、候補物質の単結晶育成法の確立および物性評価を行った。

— 研究成果・効果 —

将来的な応用も考慮して大気中で安定なカルコゲン化合物に着目した。候補物質として AB_2X_4 ($A, B = 3d$ 元素)に着目し、気相輸送法によって図1左中写真のような単結晶の育成に成功した。この物質の磁化測定から、フェリ磁性的磁気曲線であり、比較的正味の磁化が小さいことを確認した(図1左)。ホール抵抗率の測定により、温度域によって振る舞いが大きく変わるような異常ホール効果を観測した(図1右)。通常の磁場に対して線形ホール効果に加えて磁化に依存するものを異常ホール効果という。反強磁性体にもかかわらず大きな異常ホール効果を示す典型的な物質の Mn_3Sn と比べても、ホール効果の絶対値は Mn_3Sn に匹敵するが磁化の大きさは1桁大きかった。 Mn_3Sn と同様の異常ホール効果の起源をもつ可能性がある新たな候補物質といえ、正味の磁化も組成制御によって今後さらに小さくできる可能性がある。

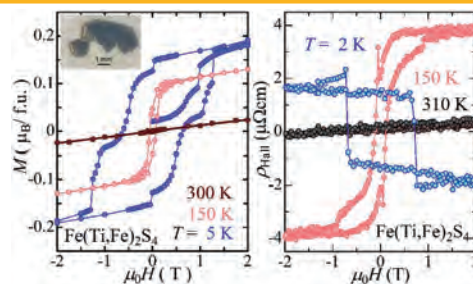


図1(左)初めて育成に成功した単結晶の磁化曲線と結晶が外景。(右)同単結晶の各温度におけるホール抵抗率の磁場依存性。

関連論文：R. Yano *et al.*, Nature Communications, **14**, 6817 (2023). 関連発表：矢野力三ら, 日本物理学会 第78回2023年次大会, 19aA404-10

一般研究B(2023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)

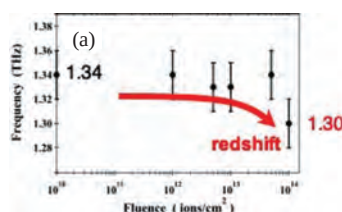
共同研究対応教員：中村一隆

— 研究目的 —

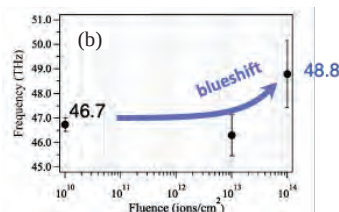
本研究は、イオンビーム誘起欠陥を有する炭素担体を利用した高活性白金ナノ微粒子触媒の創製に資するため、レーザー分光計測によって物質表面へのイオンビーム照射効果の解明を目指すものである。特に、フェムト秒時間分解分光計測により、フォノン・電子ダイナミクスにおけるイオンビーム誘起欠陥の影響を調べる。

— 研究成果・効果 —

380 keV Ar^+ を $1.0 \times 10^{12} \sim 1.0 \times 10^{14}$ ions/cm²の間で照射量を変えて高配向性熱分解グラファイトに照射し、フェムト秒時間分解過渡反射率計測を行った。グラファイト面間及び面内C-C振動モード(それぞれ1.35 及び47.4 THz)のコヒーレントフォノン振動を計測することができた。 1.0×10^{14} ions/cm²では、グラファイト面間C-C振動モードの周波数は赤方遷移し、面内C-C振動モードの周波数は青方遷移することがわかった。



(a) グラファイト面間C-C振動モードの周波数変化



(b) グラファイト面内C-C振動モードの周波数変化

発表論文・関連論文：T. Kimata, T. Kato, I. Takagi, Y. Konno, H. Okazaki, S. Yamamoto, T. Yamaki, K.G. Nakamura, "Coherent optical phonons in HOPG modified by Ar-ion irradiation" 33rd International Conference on Diamond and Carbon Materials (Spain, 2023.9.12), T. Kimata, T. Kato, I. Takagi, Y. Konno, H. Okazaki, S. Yamamoto, T. Yamaki, K.G. Nakamura, "380-keV Ar⁺-irradiation effects on optical phonons in graphite studied with transient reflection measurement" J. Appl. Phys. **134**, 135306 (2023).

一般研究B(2023年度)

「長時間・長周期特性を有する模擬地震動を対象とした 免震部材の繰り返し特性変化に関する研究」

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 一

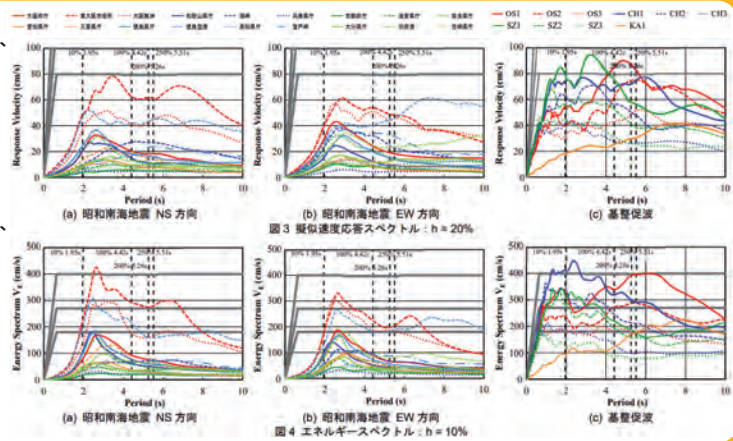
本研究では、鉛プラグ挿入型積層ゴム支承を設けた免震建物を対象に、長時間・長周期地震動により生じる特性変化を、応答解析を行わずに判断できる指標を提案することを目的として、地震調査研究推進本部で作成された1946年昭和南海地震の模擬地震動ならびに対象地域毎に公表されている南海トラフ沿いの巨大地震を想定した長周期地震動(「基盤促波」)を用いて、繰り返し特性変化に影響を及ぼす長周期地震動特性について検討を行う。

一 研究成果・効果 一

免震層の歪200%の等価減衰定数である $h=20\%$ の擬似速度応答スペクトルでは、40cm/sを境に、東大阪市役所、大阪舞洲や徳島空港では傾向が異なることがわかった。また、エネルギースペクトルは、前述した3地点において全体的に180cm/sを超えていることがわかる。

免震層の累積吸収エネルギーより算出したLRBの繰り返し特性変化と比較すると、東大阪市役所の吸収エネルギーと特性変化が最も大きく、大阪舞洲、徳島空港がそれに続いて大きい結果となっており、スペクトルの結果と対応していることがわかる。

繰り返し特性変化に影響を及ぼす長周期地震動特性について、擬似速度応答スペクトルとエネルギースペクトルに着目すれば、煩雑な地震応答解析を行わなくても、特性変化が生じやすい地震動の特徴がわかった。



一般研究B(2023年度)

「先端機能材料の材料特性データベース構築に向けた電気磁気特性の評価に関する研究」

研究代表者：山本 明保 (東京農工大学 大学院工学研究院)

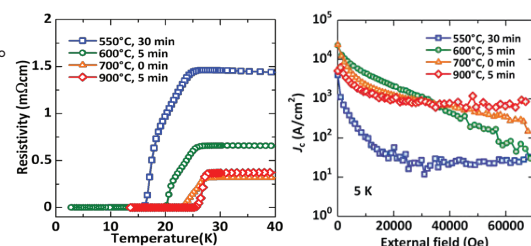
共同研究対応教員：半沢 幸太

一 研究目的 一

先端機能材料のハイスループット創出に向けた課題の一つであるインフォマティクス応用に供する、良質な材料特性データベース構築のためのデータ取得を行うことを目的とする。

一 研究成果・効果 一

BaFe₂As₂(Ba122)は鉄系高温超伝導体の母物質の一つであり、元素置換(キャリアドープ)により超伝導が発現する。上部臨界磁場が高いため、高磁場応用に期待されている。本研究では、スパークプラズマ焼結法によりプロセス条件を変化させて試料を合成し、電氣的磁気特性を評価した。単結晶(25 K)を上回る高い転移温度と、HIP法で報告された値を超える臨界電流密度が得られている。これらのデータをデータ駆動型プロセス設計へと展開予定である。



発表論文：N. R. Ayukaryana and A. Yamamoto, Densification Behavior Investigation of K-doped Ba122 Bulk Superconductor through Spark Plasma Sintering, STAC-D2MatE 2024/2/29.

一般研究B(2023年度)

「RC梁の主筋座屈に基づく安全限界性能の定量化に関する解析的研究」

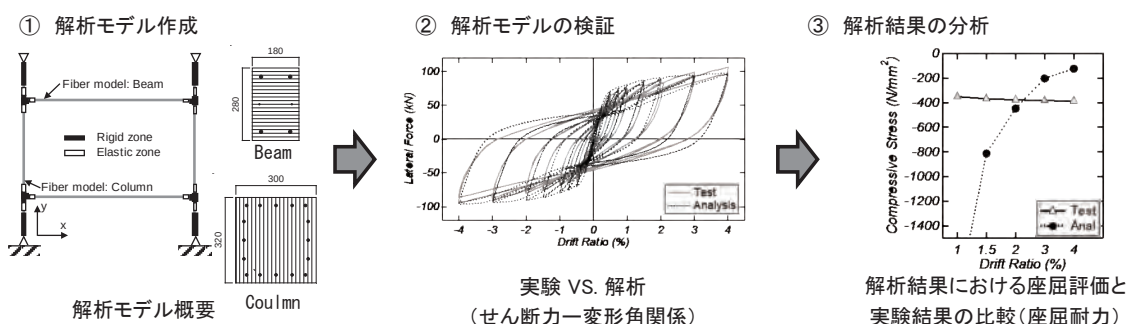
研究代表者：尹ロク現(大阪大学大学院工学研究科)

共同研究対応教員：Sujan Pradhan

— 研究目的 —

既往の主筋座屈の研究は大きな軸力が生じるRC柱部材に焦点を当てて研究が行われてきたが、RC梁の主筋座屈に焦点を当てたものではなく、その安全限界点に対する変形性能の具体的な評価手法は明らかに定めていない。本研究では主筋の座屈に基づくRC梁の安全限界性能評価法を構築することを目的とし、数値解析を通して検討する。ここで、解析モデルについては梁主筋座屈が確認された既往の試験体を対象に数値解析を行い、梁座屈発生点を適切に評価できるモデル化方法を検証する。

— 研究成果・効果 —



主筋座屈が発生した試験体を対象に骨組解析を行い、実験結果の再現性を確認することで、本解析モデルの妥当性を検証した。また、数値解析より得られた梁主筋の応力-ひずみ関係を梁主筋の座屈発生点を評価した結果、実験結果と良好に対応することを示した。

一般研究B(2023年度)

「Liイオン二次電池用セパレータの保護膜形成技術の開発」

研究代表者：吉野賢二(宮崎大学)

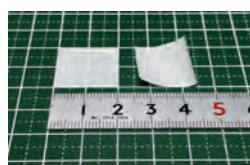
共同研究対応教員：安井伸太郎

— 研究目的 —

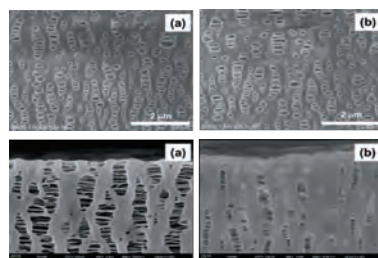
LIBの安全性や機能に関わる重要な部材であるセパレータの熱安定性を向上させるために、メチルアルミノキサン(MAO)をN-メチルピロリドン(NMP)でAl濃度1 wt%に希釈した前駆体溶液(MAO/NMP)を用いたスプレー塗布を行った。また、多孔質フィルムであるセパレータ上にMAO/NMP溶液を塗布することで、セパレータ保護膜としての効果を検証した。

— 研究成果・効果 —

ポリオレフィン製セパレータ上の新規保護膜の効果の検証



塗布前後の外観写真
(左:塗布前、右:塗布後)



(a):塗布前 (b):塗布後
図3:SEM像(上:表面、下:断面)

塗布前セパレータの表面上には、延伸により形成された微細孔が確認できた。塗布後セパレータの表面には、全体を覆う堆積物は確認されず、塗布前と同様に微細孔が表面に現れていることが観察され、また、厚さ方向に延びる基材を中心に微細孔構造が形成されていることが観察された。塗布後のセパレータの収縮率は25.5%と、塗布前に比べ12.5%減少した。それゆえ、微細孔側壁に Al_2O_3 の保護膜により熱安定性の向上効果が得られた。

General CRP 2023—Category C

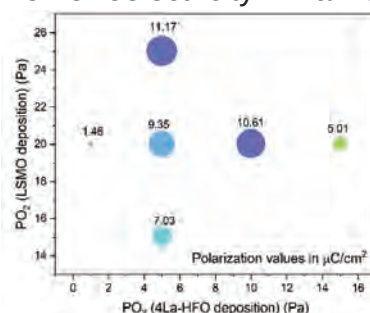
Investigation of ferroelectric hafnia based multiferroic heterostructures for novel memory storage applications.

Project Coordinator Name: Badari Narayana Aroor Rao (Chiba University)**MSL Faculties: Shintaro Yasui****- Aims of Research -**

The project aims to investigate the use of ferroelectric hafnia thin films and LSMO heterostructures for multiferroic applications. We first aimed to optimize the fabrication condition of LSMO and hafnia epitaxial films on STO substrate. The main objective was to understand the effect of varying oxygen partial pressure during growth and varying top-electrode material on ferroelectric stability of hafnia.

- Results -

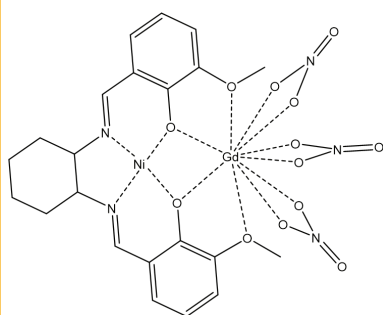
- Higher oxygen pressure during LSMO deposition improves the ferroelectric stability of hafnia layer.
- Stoichiometric oxygen in the hafnia layer is necessary to observe ferroelectricity.
- Oxygen vacancies play an active role in establishing ferroelectricity in hafnia.
- XPS analysis confirmed films showing good ferroelectricity had stoichiometric oxygen in hafnia layer and excess oxygen in non-lattice sites in LSMO layer.
- Choice of top and bottom electrode materials are also important. Those that promote oxygen mobility are needed.

Oxygen pressure dependence of ferroelectricity in hafnia

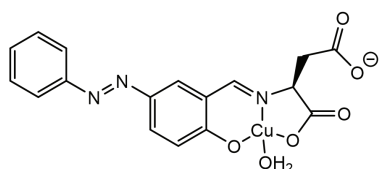
一般研究C(2023年度)

「発光磁気機能性アゾサレン希土類錯体の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 —**

発光性と磁性を担うキラルサレン希土類(III)錯体カチオンと、光機能性(アゾ基の光異性化)を担うアゾベンゼンアミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体アニオンからなる、高分子膜複合材料の構成要素の、希土類(III)イオンの元素確認をXPSで行うことを最終目的とした。

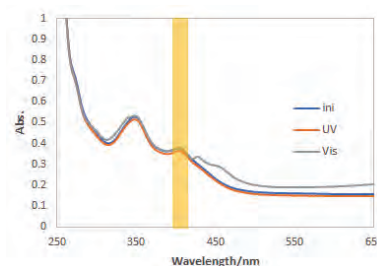
— 研究成果・効果 —

キラルサレン希土類錯体



アゾベンゼンアミノ酸シッフ塩基銅錯体

キラルサレン希土類錯体カチオンと、光機能性(アゾ基の光異性化)を担うキラルアミノ酸シッフ塩基銅錯体アニオンからなる、高分子膜中での複合機能材料の創製。

複合膜の光照射前後電子スペクトル (黄色帯は配位子のn- π^* バンド)記事発表 T. Akitsu *et al.*, "[Editorial] Chemistry for Space Group Symmetry beyond Crystals", *Symmetry*, 2024年, 3月 (accepted).

一般研究C(2023年度)

「磁気温熱療法への応用へ向けたCoPdナノ粒子の磁気特性評価」

研究代表者：石島 政直（東京都立大学都市環境科学研究科）

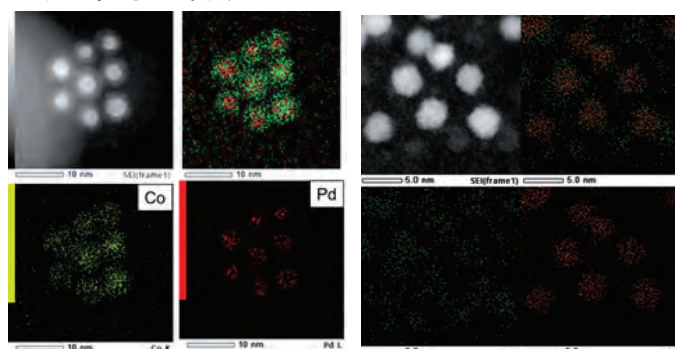
共同研究対応教員：平松 秀典

— 研究目的 —

がんの治療法の一つに磁気温熱療法が挙げられる。この手法では交流磁場下における磁気ナノ粒子の緩和減少による発熱を利用している。マグネタイトなどの酸化物磁性ナノ粒子についての発熱特性評価は多く報告されているが、合金ナノ粒子の発熱特性についての報告は数が少ない。本研究では、合金としてCoPdを選択し、組成や元素分布の異なるCo-Pdナノ粒子の磁気特性評価を目的とする。

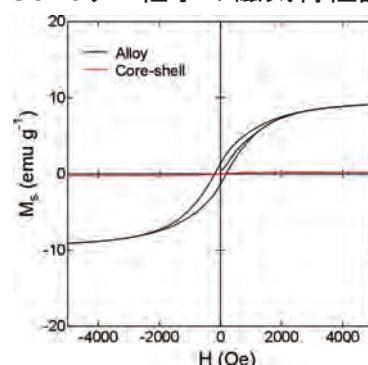
— 研究成果・効果 —

CoPdナノ粒子の合成



アルコール還元法を用いて元素分布の異なるCoPdナノ粒子を合成した。得られた粒子の磁気特性を評価し、元素分布によって飽和磁化が異なることを確認した。

CoPdナノ粒子の磁気特性評価



一般研究C(2023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

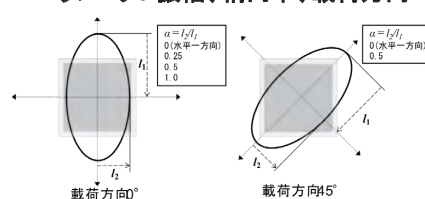
— 研究目的 —

近年、南海トラフを震源域とする長周期地震動の発生が危惧されており、高層建物では小振幅の多数回繰り返しに対する部材の安全性検証が求められている。一方、柱は常時大きな軸力を支持していることに加え、地震荷重下では、水平1方向だけでなく、水平2方向の変形を強いられることとなる。本研究では、角形断面のコンクリート充填鋼管柱を対象に小振幅での水平2方向載荷実験を行い、水平2方向変形下での履歴曲線、耐力劣化挙動を明らかにすることを目的とする。

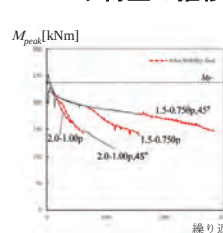
— 研究成果・効果 —

水平面内の載荷履歴を楕円形とした一定軸力下での水平2方向載荷実験

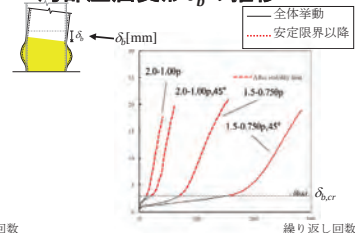
パラメータ：振幅、楕円率、載荷方向



ピーク荷重の推移



局部座屈変形δ_bの推移



載荷履歴が耐力劣化挙動や局部座屈変形の推移に及ぼす影響を調査
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(2023年度)

低温化学溶液還元による銅酸化物高温超伝導体の電子ドーパ量の制御

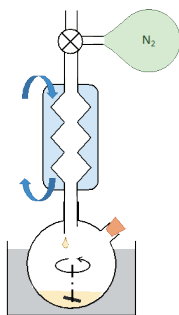
研究代表者：井上 亮太郎(日本大学医学部)

共同研究対応教員：気谷 卓

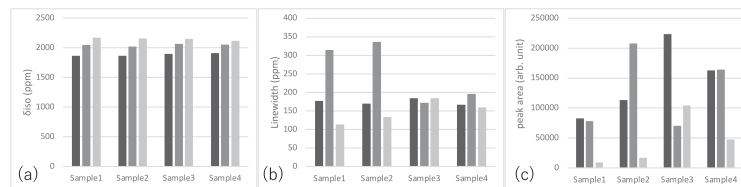
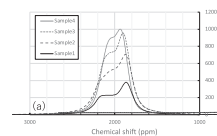
一 研究目的

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) を還元した。固体粉末試料の ^{63}Cu 室温NMRスペクトルを測定し磁気的構造を調べる。

一 研究成果・効果

低温化学溶液還元
(常圧環流方式)

Sample	ヒドリド還元剤	還元剤濃度(mM)	還元温度(°C)	還元時間(h)
1	未還元	—	—	—
2	LiBH_4	200	101	65.5
3	$\text{LiBH}_4[\text{N}(\text{CH}_3)_2]$	200	101	60
4	$\text{LiBH}_4(\text{C}_2\text{H}_5)_2$	200	101	64



一般研究C(2023年度)

「高速通信機器搭載に向けた圧電体薄膜の強誘電体ドメイン構造の設計2」

研究代表者：江原 祥隆(防衛大学校通信工学科)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

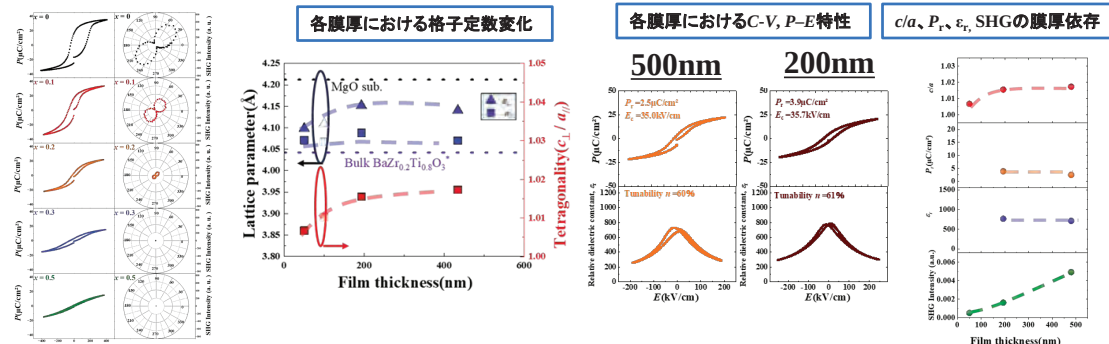
一 研究目的

本研究では、高速通信機器搭載に向けた圧電体薄膜の候補として $\text{Ba}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ 膜に着目し、 MgO 単結晶基板上にエピタキシャル成長した全固溶領域において膜厚が異なる $\text{Ba}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ ($x = 0 - 1.0$)膜を作製し、結晶構造及び電気的特性を評価する。

一 研究成果・効果

P-E, SHGにより相転移を確認

厚さの異なるBZT膜の結晶構造と誘電特性、光学特性結果



学会発表：[1]高橋 良・江原 祥隆・濱崎 容丞・澤井 真也・安井 伸太郎・安岡 慎之介・舟窪 浩・西田 謙、日本セラミックス協会第36回協会秋季シンポジウム、2Q19
[2] R. Takahashi, Y. Ehara, Y. Hamasaki, S. Sawai, S. Yasui, S. Yasuoka, H. Funakubo, K. Nishida, MRS Fall Meeting and Exhibit, EL03. 10. 11
[3]高橋 良・江原 祥隆・濱崎 容丞・澤井 真也・安井 伸太郎・安岡 慎之介・舟窪 浩・西田 謙、2024年日本セラミックス協会基礎討論会、1C14

一般研究C(2023年度)

「強誘電体BaTiO₃薄膜における傾斜バンドのエネルギーシフトと電気分極の相関性」

研究代表者：狩野 旬(岡山大学環境生命自然科学学域)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

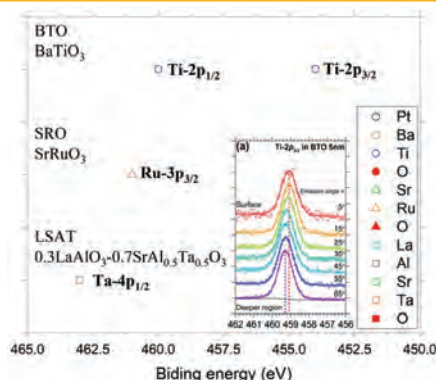
— 研究目的 —

我々により解明された強誘電体の傾斜バンド構造は未知な点が多い。傾斜バンド構造のエネルギーシフト量は電気分極が結晶中に形成させる反電場に線形対応することが予測されるが、強誘電体薄膜における電気分極は、膜厚、単結晶基板、電極に依存することが知られており、これらの複数パラメーターを制御した環境での実験が求められる。そこで本研究では、強誘電体BaTiO₃(BTO)について複数パラメーターを変えた試料を精密合成し、その試料の分極量を定量化させることを目的とした。

— 研究成果・効果 —

パルスレーザー堆積装置を用いた、強誘電体BTO薄膜の合成

電極とBTOの仕事関数バランスを考え、下部電極をSrRuO₃(SRO)とした。面内歪みを大きくすることでas grownでの分極安定性を保持したかったため、(LaAlO₃)_{0.3}-(SrAl_{0.5}Ta_{0.5}O₃)_{0.7}(LSAT)単結晶基板を用いることにした。そのためBTO, SRO, LSATの各原子軌道の結合エネルギーの見積もりを行った(右図)。我々の注目している原子軌道はTi-2p_{1/2}であるが、図からもわかるようにTi-2p_{1/2}の結合エネルギーとの重畳がないことが確認された。現在、成膜中である。成膜が出来次第P-Eループ実験により、分極反転を確認したうえで分極値を実測する。なお傾斜バンド構造のエネルギーシフト量はSpring-8 BL09XUにて測定を予定している。



発表論文・関連論文：Sci. Rep. 10, 10702 (2020), 日本物理学会誌 77, 469 (2022)

一般研究C(2023年度)

「次世代ナノ記録材」

研究代表者：小林 齊也 (株式会社Future Materialz)

共同研究対応教員：東 正樹

— 研究目的 —

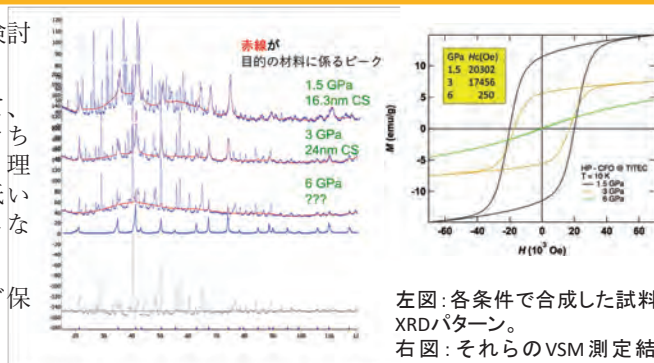
サーバーのバックアップとして必須である磁気テープ用の材料は年々その記録密度が増大し、情報担体の磁性体は超微細であることが求められている。次世代のナノ記録材の開発は非常に重要である。高圧合成法を利用することで20nm以下のナノ記録材の粒子を種々の合成条件にて作製し、得られた試料の構成相・粒子サイズ、磁気特性、組成に関する検討を網羅する。

— 研究成果・効果 —

同じ前駆体原料より、種々の合成条件で検討した。

30minというとても短い反応時間において、常圧下では粒子生成しないが、高圧下ではきちんと生成していることがXRDパターンより理解できる。粒子の結晶子サイズは圧力が低い1.5GPaで小さく、6GPa下ではほぼ生成しなかった。

VSM測定結果では、合成圧力が低いほど保磁力と磁化の値が高いことが分かった。



左図：各条件で合成した試料のXRDパターン。
右図：それらのVSM測定結果(磁気特性)。

一般研究C(2023年度)

「ウルツ鉱型強誘電体の局所分極反転挙動」

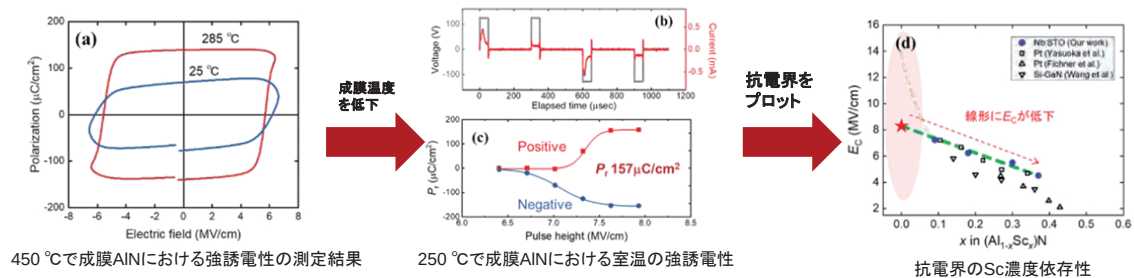
研究代表者：清水 荘雄(物質・材料研究機構)

共同研究対応教員：安井 伸太郎

— 研究目的 —

$\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ における強誘電性が報告された後に、ウルツ鉱型構造を持ついくつかの物質において強誘電性が報告されているが、これまで強誘電性が確認されている物質は、カチオンを置換した固溶体であり、単純な化合物での報告はほとんどない。そこで、本研究では、このような置換元素が本質的に必要かどうかについて無置換のAlNでの強誘電性について研究を行うことによって検討した。

— 研究成果・効果 —



450 °Cで製膜したAlNでは、局所的な分極反転が室温では観測されたのに対して、285 °Cで測定した場合には明瞭な強誘電性を示した。さらに成膜温度を低下させた場合には、室温においても分極反転を確認することに成功した。結果として、抗電界がSc濃度に対して線形に低下していくことが分かった。

発表論文・関連論文：K. Hasegawa, T. Shimizu, T. Ohsawa, I. Sakaguchi, and N. Ohashi, *Appl. Phys. Lett.* 123, 192903 (2023).

一般研究C(2023年度)

「室温で動作するマルチフェロイック酸フッ化物薄膜の開発」

研究代表者：近松 彰(お茶の水女子大学)

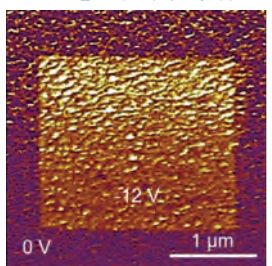
共同研究対応教員：重松 圭

— 研究目的 —

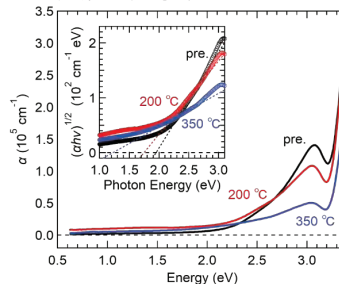
誘電性と磁氣的挙動を同時に示すマルチフェロイック物質は、電場によって物質の磁気状態を制御するデバイスへの応用が期待されている。これまで報告されているマルチフェロイック物質は、一部を除き低温でしかその特性を示さないため、実用化に向けて室温で安定して動作する物質の開発が切望されている。本研究では、極性構造を持つ鉄酸フッ化ビスマスの単結晶薄膜を作製し、結晶構造、誘電特性、光学バンドギャップを調べた。

— 研究成果・効果 —

$\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.8}\text{F}_{0.2}$ 薄膜の
圧電応答顕微鏡像



フッ化前後の $\text{Bi}_{0.8}\text{Ba}_{0.2}\text{FeO}_{2.9}$
薄膜の光学吸収スペクトル



- ・ フッ化反応の反応温度を変えることで、フッ素量と結晶構造(ペロブスカイト構造と蛍石構造)を制御できることを見出した。
- ・ 作製した酸フッ化物薄膜の強誘電性を実験で証明した。
- ・ フッ化に伴いバンドギャップが小さくなることを実験で明らかにした。

研究発表:

- ・ 佐野 瑞歩, 上垣外 明子, 片山 司, 廣瀬 靖, 近松 彰, “鉄酸ビスマス薄膜のトポケミカルフッ化反応における温度依存性”, 第84回応用物理学会秋季学術講演会, 熊本城ホール(熊本県熊本市), 2023年9月, 21p-D903-11.(口頭)
- ・ 上垣外 明子, 佐野 瑞歩, 重松 圭, 出村 郷志, 片山 司, 廣瀬 靖, 近松 彰, “ペロブスカイト型鉄酸フッ化ビスマス薄膜の強誘電性と磁気特性”, 第84回応用物理学会秋季学術講演会, 熊本城ホール(熊本県熊本市), 2023年9月, 21p-A307-6.(口頭)

一般研究C(2023年度)

「バイオマス変換用担持金属触媒の構造解析」

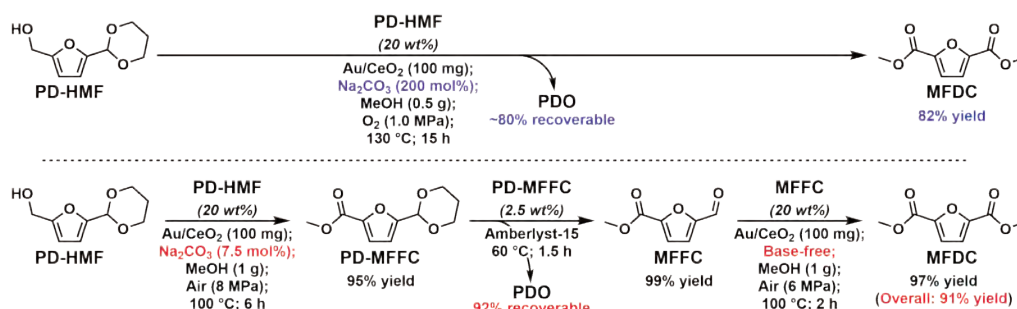
研究代表者：中島 清隆(北海道大学 触媒科学研究所)

共同研究対応教員：鎌田 慶吾

— 研究目的 —

HMFアセタール体の酸化的エステル化反応において、目的生成物であるフランジカルボン酸ジメチルの高い生産率と保護材である1,3-プロパンジオールの回収率を両立し、かつ塩基添加を大幅に抑制した環境調和型触媒反応プロセスの構築に取り組んだ。

— 研究成果・効果 —



HMFアセタールの逐次的な酸化的エステル化反応をデザインした。ワンポット反応に比べ、MFDC収率の向上、添加する塩基量の大幅削減、保護材の高い回収率を達成することができた。

発表論文・関連論文：1) Jan J. Wiesfeld et. al., "Oxidative Esterification of Acetal-Protected 5-Hydroxymethylfurfural to Dimethyl Furan-2,5-dicarboxylate with High Recovery of Protecting Agent", ACS Sus. Chem. Eng., 2024, 12, 450-458. 2) Nirupama Sheet et. al., "A Protection Strategy for High-yield Synthesis of Dimethyl Furan-2,5-dicarboxylate from 5-Hydroxymethylfurfural Using Methanol as an Acetalizing Agent", ChemCatChem, 2024, e202301259.

一般研究C(2023年度)

「層状シリケート型Bi₂SiO₅強誘電体多結晶薄膜の作製」

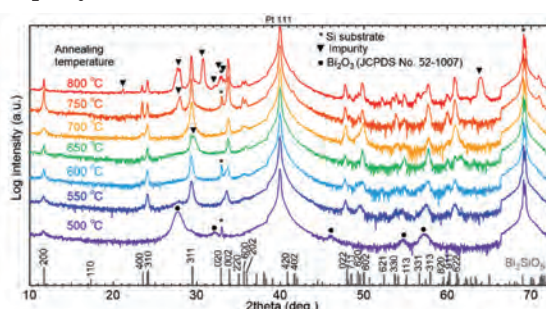
研究代表者：永沼 博(東北大学/名古屋大学)

共同研究対応教員：安井伸太郎

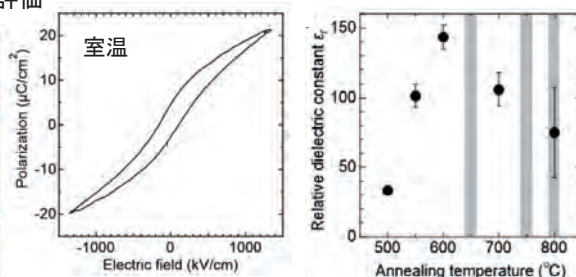
— 研究目的 —

本研究は、PLD法を用いてPt電極付きSi基板の上にBi₂SiO₅多結晶膜を作製する最適条件を探索し、膜構造解析だけでなく、強誘電性および光学特性を含めて系統的に評価することを目的とする。

— 研究成果・効果 —

Bi₂SiO₅多結晶膜の最適製膜条件の探索と強誘電性評価

ポストアニリング温度が550, 600°CのときBi₂SiO₅多結晶単相膜が得られた。(ラマン分光解析の結果と一致)



強誘電性を評価したところ、室温でエピタキシャル膜より僅かに高い自発分極は $2P_r=7.2 \text{ uC/cm}^2$ 、比較的高い比誘電率143を得た。

(発表論文) H. Takahashi, S. Maruyama, H. Naganuma (責任著者), H. Taniguchi, R. Takahashi, S. Yasui (受入教員), K. Kaminaga, Y. Matsumoto, J. Alloys and Compounds, 988, 174195 (2024). オープンアクセス

一般研究C(2023年度)

「層状ペロブスカイト強誘電体の研究」

研究代表者：濱寄 容丞(防衛大学校 応用科学群 応用物理学科)

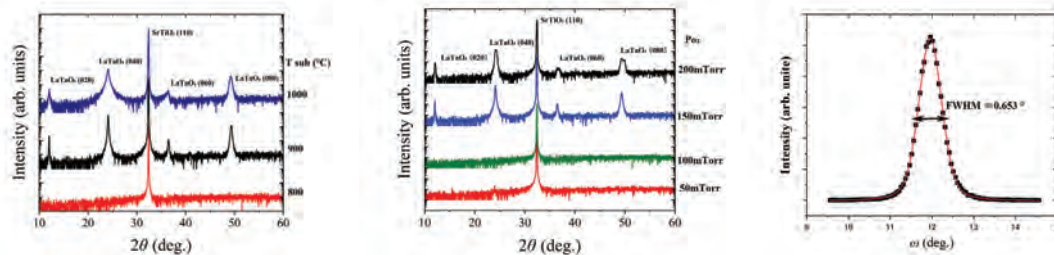
共同研究対応教員：氏名 安井 伸太郎

— 研究目的 —

層状ペロブスカイト強誘電体は、高いキュリー温度を持つことが知られており、その中でもペロブスカイトスラブ構造を持つ酸化物に着目した。本研究では準安定相の直方晶 LaTaO_4 に着目し、エピタキシャル薄膜の作製を試みた。

— 研究成果・効果 —

X線回折パターン



酸素分圧、基板温度等の条件で製膜し、直方晶 LaTaO_4 エピタキシャル薄膜を作製に成功した。

一般研究C(2023年度)

「数値解析による合成梁における合成効果の合理化」

研究代表者：松井良太(北海道大学)

共同研究対応教員：西村康志郎

— 研究目的 —

デッキプレートと鉄筋コンクリートを一体化した床スラブを一体化させた合成梁の合成効果を評価するうえで、鉄筋コンクリートが負担する圧縮力は同定しがたい。代表者らは、数値解析モデルで有効幅を同定したが、対象とした試験体数が寡少であった。そこで、今後の数値解析による合成梁の有効幅を検討するうえで役立つ、合成梁の仕様と耐力に着目したデータベースを構成することとした。

— 研究成果・効果 —

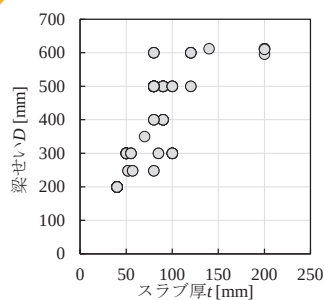


図1 試験体寸法

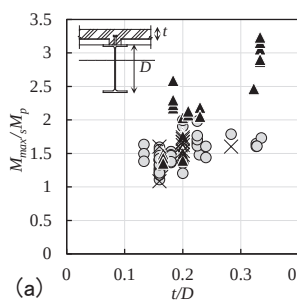
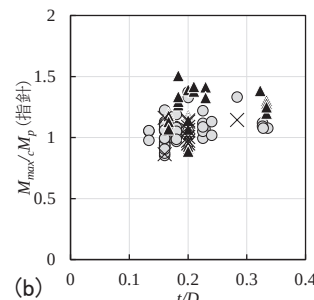


図2 最大耐力と寸法の関係: (a) 鋼梁耐力指標との比



(b) 合成梁耐力指標との比

データベースより得られた定量的な結果とした左図を挙げる。具体的な数値の範囲は以下の通り。

- ・試験体寸法(図1)
スラブ厚: 40 – 200 mm
鋼梁せい: 200 – 612 mm
- ・合成梁最大耐力(図2)
鋼梁比: 1.09 – 3.24
(相関係数0.62)
合成梁比: 0.85 – 1.51

一般研究C(2023年度)

「深紫外光プロセスによる遷移金属基酸化物半導体の薄膜相制御と構造解析」

研究代表者：松田晃史(東京工業大学 物質理工学院 材料系)

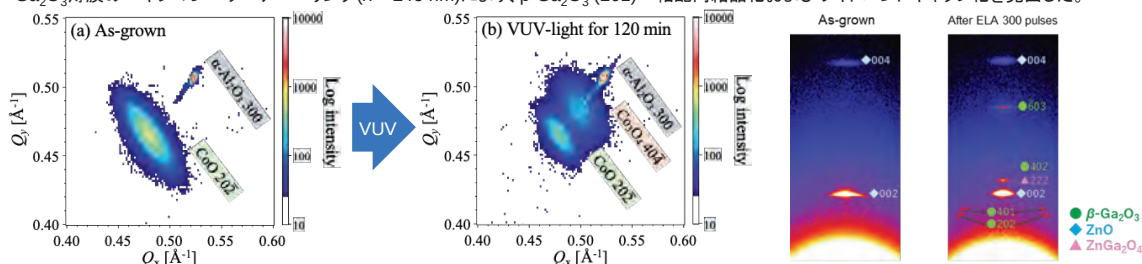
共同研究対応教員：重松圭

— 研究目的 —

遷移金属基などの酸化物半導体において、高温プロセス・不純物ドーピングに依らず深紫外光照射・活性化学種を介した長距離秩序の形成、構造・化学状態制御、顕著な導電性向上がこれまでに見出された。本研究はコバルト系・ガリウム系のワイドギャップ酸化物半導体に着目し、そのエピタキシャル薄膜を用いて特に真空紫外波長域を含む深紫外光照射による長距離秩序構造の変化と物性への影響を見出すことを目的とした。

— 研究成果・効果 —

酸化コバルト系半導体ではCoO (111) 薄膜へエキシマランプ照射($\lambda = 172 \text{ nm}$)を行い、表面近傍におけるスピネル型 Co_3O_4 (111)へエピタキシャル構造を維持した結晶相変化を伴う 10^2 程度の導電率向上を見出した。また、熱バリア層・シード層を伴ったフレキシブルCOP基板上において、非晶質 Ga_2O_3 薄膜のエキシマレーザーアニーリング($\lambda = 248 \text{ nm}$)により、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (201)一軸配向結晶化およびワイドバンドギャップ化を見出した。



エキシマランプによる真空紫外光照射により、岩塩型CoO (Co^{2+})からスピネル型 Co_3O_4 (Co^{2+} , Co^{3+})へエピタキシャル構造を維持した表面近傍の構造制御と導電性向上を得た。

エキシマレーザー照射による Ga_2O_3 薄膜の急速一軸配向性固相結晶化を得た。

発表論文・関連論文：[1] K. Kaneko, T. Oga, S. Kaneko, T. Katase, M. Yoshimoto, A. Matsuda, J. Ceram. Soc. Jpn., 131, 383–388 (2023).
[2] K. Kaneko, Y. Qiao, S. Kaneko, M. Yoshimoto, A. Matsuda, MRM2023, G4-O503-06, Kyoto, Japan, Dec-2023.
[3] R. Kai, T. Oga, S. Kaneko, M. Yoshimoto, A. Matsuda, MRM2023, G4-P401-13, Kyoto, Japan, Dec-2023.

他

一般研究C(2023年度)

「鋼構造制振建物におけるダンパー力が合成梁の挙動に及ぼす影響に関する研究」

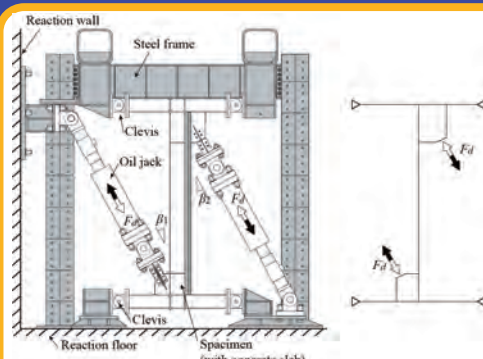
研究代表者：松田頼征(工学院大学)

共同研究対応教員：佐藤大樹

— 研究目的 —

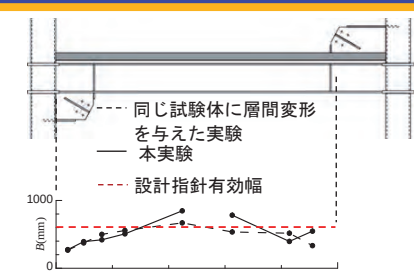
制振構造においてダンパーが取付く構面の挙動は、層間変形によるものとダンパー力によるものが複合することが知られている。本研究は、コンクリートスラブを含めた当該構面の合理的な設計法・評価法の確立に資するため、ダンパー力がスラブに及ぼす影響を載荷実験から明らかにするものである。

— 研究成果・効果 —



実験セットアップと力学モデル

ダンパーが取付く構面にダンパー力のみを与える実験を実施した。



スラブ内鉄筋の歪値に基づく有効幅分布

合成梁図心と軸力の作用線の分布 (鋼梁図心を原点とする)

スラブ内鉄筋の歪から算出したスラブ有効幅の分布は、層間変形のみを与えた実験と概ね一致する。

軸力の作用線は鋼梁図心付近にあり、これと合成梁図心との距離、及び軸力によって偏心曲げモーメントが作用する。

一般研究C(2023年度)

「異常格子熱膨張を示す遷移金属ジルコナイドの開発と物性評価」

研究代表者：水口佳一(東京都立大学理学研究科)

共同研究対応教員：片瀬貴義

— 研究目的 —

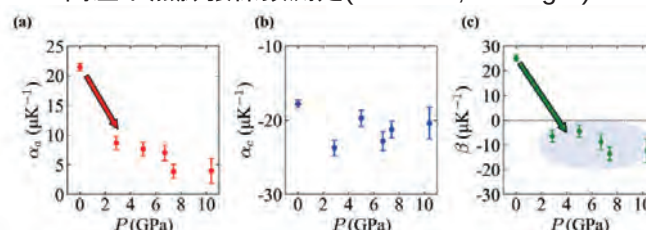
正方晶系CuAl₂型構造を持つ遷移金属ジルコナイドCoZr₂, NiZr₂, FeZr₂, およびそれらの固溶系において、熱膨張係数(X線回折による)および基礎物性を評価し、さらに比熱や音速の測定、フォノン計算から上述の光学フォノンと異常熱膨張の関連を探ることを目的とした。また、本系における体積ゼロ熱膨張実現に向けた物質開発も目的とした。

— 研究成果・効果 —

フォノン・音速評価

- ・比熱測定による光学フォノンエネルギーと振動子強度の評価
- ・音速測定によるデバイ温度評価
- ・フォノン計算(トルコGazi大との共同)
 - フォノンバンド
 - 音速計算
 - グリュナイゼンパラメータ

高圧下熱膨張係数測定(BL10XU, SPring-8)



CoZr₂の熱膨張係数((a) α_a : a軸, (b) α_c : c軸, (c) β : 体積)の圧力依存性。圧力印加によってa軸の正の熱膨張が抑制され、負の体積熱膨張が発現することを見出した。

発表論文: Y. Watanabe et al., Adv. Electron. Mater. 2024, 2300896 (2024).

International CRP 2023 Workshop

The Japan-Korea-Taiwan Joint Seminar on Earthquake Engineering for Building Structures (SEEBUS)

Date and time: 2023.12.01-2023.12.02

Place: National Taiwan University of Science and Technology

Project Coordinator Name: Atsushi Sato

MSL Faculties: Susumu Kono

- Aims of Research -

The latest research findings will be shared among three countries (Korea, Taiwan, and Japan), and a discussion will be held to analyze them.

- Results -

Over the course of two days, each country made 10 presentations on the primary structural materials used in reinforced concrete and steel structures, totaling 30 presentations. Fruitful discussions were held during the workshop, with active participation and questions. It was agreed that the next workshop would take place in Seoul, Korea.



国際ワークショップ(2023年度)

「2023年 日中韓—高層建築フォーラム」

開催日時: 2023年7月7日(金) 9:00~17:30

場 所: 東京工業大学 大岡山キャンパス(デジタル多目的ホール)

研究代表者: 中井 政義(株式会社 竹中工務店)

共同研究対応教員: 吉敷 祥一

— 研究目的 —

本フォーラムは、CTBUH(Council on Tall Buildings and Urban Habitat: 高層ビルと都市居住協議会、本部は米国シカゴ)のアジアでの活動の一環として、中国、韓国、日本の構造エンジニア、学識経験者を中心に、2014年より、ほぼ毎年開催されている国際会議である。高層建築分野における最新の研究、構造設計事例など様々な取り組みについて、日中韓3か国で情報の共有を図るとともにそれらに関する議論を行うことを主目的とする。

— 研究成果・効果 —

冒頭の基調講演では、田村幸雄教授(重慶大学)より高層建物の形態と風力特性の関係について、一連の風洞実験に基づく研究成果が紹介された。中国からは、①AIを活用した構造設計技術、②耐震性能設計、③地震後の機能維持から見た耐震設計手法に関する3件、また韓国からは、①ソウル市内の都市再生事業、②AIを活用した火災安全システムと耐火性能設計、③設備のマルチトレードプレファブ工法に関する3件の発表がなされた。また今回は、昨年のCTBUH技術論文(IJHRB)最優秀賞を受賞したオーストラリアのKenny Kwok教授より、高層建築の風に対する居住性能評価に関する講演があった。日本からは、①日本の高層建築の歴史、②変位増幅機構と同調粘性マスダンパーを用いた構造設計、③麻布台ヒルズにおけるDXの取り組みに関する3件が発表された。フォーラム参加者は、ZOOM参加を含め120名近くとなり、各講演に対して活発なディスカッションが行われ、各国の交流を深める有意義な会議となった。



Kenny Kwok教授の講演



ディスカッションの様子

ワークショップ(2023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: 2023年7月22日、9月30日

場所: 東京工業大学 大岡山キャンパス 南7号館2階201講義室

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、バルク等幅広い形態の種々の機能性セラミックスについてプロセッシングを最適化することにより卓越した機能を発現させることを目指している。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3回ナノ材料研究会] 講演3件、参加者: 11名、参加機関: 8機関

[第4回ナノ材料研究会] 講演3件、参加者: 11名、参加機関: 8機関

(2) 本年度は4年ぶりに研究会を2回、対面開催することができた。それぞれ、ともに参加者は11名であったが、すべての講演に関してほぼ全員からの質問・コメントがあり、非常に熱のこもった議論がなされた。興味深い研究について深く議論したことで、研究の幅が広がった・新しい知見を得られた、などの意見が寄せられ、非常に有意義な研究会となった。さらに、今年度だけで合計5名の新しい若手研究者にご参画いただくことができ、共同研究なども含めて研究会の益々の発展が期待される。



図 第4回ナノ材料研究会における集合写真