

研究領域名 超秩序構造が創造する物性科学



名古屋工業大学・大学院工学研究科・教授

はやし こういち  
林 好一

領域番号： 20A206 研究者番号：20283632

【本研究領域の目的】

様々な材料における機能性の根幹は、母物質と添加元素（ドーパント）の組合せによる協調・協奏現象と言っても過言ではない。そのような中、結晶中のドーパント解析など欠陥の科学も進展し、その理解も大きく進んできた。しかしながら、ドーパントを点欠陥として利用する限り、創出できる機能性には限界がある。

本研究領域では、その限界を打破するために、「超秩序構造」を積極的に利用する。「超秩序構造」とは、異種元素ドーパントや空孔・空隙から構成されるナノ構造体のことを指す。例えば、図 1(a)における、In-Nb-Ti<sup>3+</sup>で構成される構造体は、酸化チタンの誘電率を 1000 倍向上させることに寄与する。通常の単元素ドーピングとは異なり、「超秩序構造」を利用すれば、元素の組合せや立体配置により無限の可能性を追究できる。

一方、図 1(b)は、結晶化前のゼオライトの原子配列であるが、幾何学的に規則性の高い空隙構造を形成する。この空隙構造とドーパントであるアルミニウムの関係はゼオライト触媒の高温耐久性と関連があることが知られている。このような、空隙構造とドーパントとの関係も「超秩序構造」と捉えられ、トポロジー解析によって、ナノスケール秩序となる特徴量が抽出できると考えている。

「超秩序構造」は、他にも幅広い材料群に存在しており、まさしく材料機能性の宝庫とも捉えられる。本研究領域では、「超秩序構造」を正確に決定できる計測、深く理解するための理論、構造制御のための合成プロセスを融合し、材料開発に新たなブレークスルーをもたらすことを目的とする。

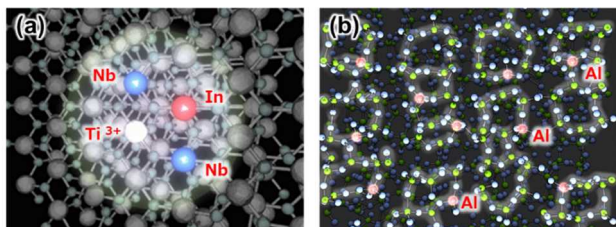


図 1 「超秩序構造」の例。(a):酸化チタンにおけるIn-Nb-Ti<sup>3+</sup> ナノ構造体。(b):ゼオライト前駆体における結晶トポロジー

【本研究領域の内容】

重点研究対象として、A「ドーパント誘起超秩序構造」、B「空孔・空隙を含む超秩序構造」、C「結晶/アモルファス境界の超秩序構造」を設定している。組織としては、A01 試料グループ、A02 手法グループ、A03 理論グループから構成される。

様々な材料に存在する「超秩序構造」に対し、サイト選択的な量子ビーム技術によって計測し、逆モンテカルロ法などを用いてそれらの構造を正確に決定する。その情報を基に、大規模第一原理計算などを駆使した理論的アプローチによって機能性解明と新規「超秩序構造」の設計に取り組む。また、パーシステントホモロジーに代表されるトポロジー解析などの数学的手法を活用し、「超秩序構造」等、これまで着手されなかった「非周期構造」の記述子の作成についても進める。なお、これらの知見を基に、機械学習などのデータ科学を活用した効率の良い「超秩序構造」材料の探索を推し進め、単なる置換サイトドーピングのような発想を超えた、トポロジー制御による高機能な材料創製への道筋を切り拓く。

【期待される成果と意義】

本研究領域は、ドーパントやガラスなどの非周期構造を決定する上で、世界最高水準レベルである分析・解析技術を有している。「超秩序構造」を対象とした研究を推し進めることにより、更なる分析・解析技術の先鋭化を達成でき、国際的な存在感を確固たるものとする。

これまで未開拓であった、結晶材料と非晶質材料とをつなぐ、あるいは、その中の特異点を見いだす新興の研究領域と捉えている。従来、接点の少ない分野の人的交流により、新たな学問の創出や若手人材育成が期待される。

応用面においても、幾つかのブレークスルーが期待される。例えば、「従来の 1000 倍の比誘電率と高温安定性を兼ね備えた革新誘電体の創製」、「超耐熱ゼオライト deNOx 触媒」、「100cm<sup>2</sup>/V·s 移動度の低コスト薄膜トランジスタ」、「割れないスマートフォン用カバーガラス」、「高温高信頼性キャパシタ」などであり、日本の産業発展に貢献できる。

【キーワード】

超秩序構造：ドーパントや空孔・空隙によって形成される特異ナノ構造体を指す。具体的には、異種元素や空孔による複合欠陥、また、アモルファスでもトポロジカル的なオーダーを示すナノスケール原子配列など。

【領域設定期間と研究経費】

令和 2 年度－6 年度 1,155,300 千円

【ホームページ等】

<http://www.hyperordered.org>  
[khayashi@nitech.ac.jp](mailto:khayashi@nitech.ac.jp)