

## 科学研究費補助金研究成果報告書

平成25年 6月 1日現在

機関番号： 12601  
 研究種目： 特定領域研究  
 研究期間： 2007 ~ 2011  
 課題番号： 19053003  
 研究課題名（和文） 機能元素のナノ材料科学

研究課題名（英文） Nano Materials Science for Atomic Scale Modification

## 研究代表者

幾原 雄一 (IKUHARA YUICHI)  
 東京大学・大学院工学系研究科・教授  
 研究者番号： 70192474

## 研究成果の概要（和文）：

材料の界面・表面・転位などに局在する異種元素はしばしば材料全体の特性を大きく変える役割を果たす。我々はこのような元素を「ナノ機能元素」と位置づけ、その存在位置・存在状態を原子・電子スケールで理解することを主目的とした。本総括班は、ナノ計測グループ、理論計算グループ、プロセスグループ間の連携を効率的に運営・管理し、個々の研究活動の内容と全体の方向性を策定し、各研究項目の取り纏めと評価を行ってきた。さらに、公開シンポジウムやセミナーの開催、学術誌への特集号の企画・刊行を行った。

## 研究成果の概要（英文）：

Dopant elements that localize to lattice defects such as interface, grain boundary, surface, and dislocation often largely influence the material property of the whole system. Here, we designate such dopant elements as “nano-functional elements”, and we have aimed to reveal the atomic-scale location and the electronic structure in detail. This group manages this research project and determines the direction. In particular, we organize symposium, seminar, and special issue.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	4,000,000	0	4,000,000
2008 年度	3,200,000	0	3,200,000
2009 年度	5,600,000	0	5,600,000
2010 年度	4,100,000	0	4,100,000
2011 年度	6,700,000	0	6,700,000
総計	23,600,000	0	23,600,000

研究分野： 工学

科研費の分科・細目： 材料工学

キーワード： 機能元素, 電子顕微鏡, ドーパント, 粒界, 界面, 理論計算

## 1. 研究開始当初の背景

現代の高度技術社会は、エネルギー問題、安心安全の確保、環境保全、情報伝達などの分野を問わず、常に高性能、高機能な新素材の開発とともに発展してきた。人間社会がさ

らに高度化、複雑化するに伴い、材料の高性能化、高機能化、精緻化、高信頼性に対する要求は益々高くなり、これに応えることのできる革新的な材料の創出が切望されている。しかし、現在、新規材料開発は広い意味での

閉塞状態に陥っている。これは、従来の材料開発の多くが経験とノウハウに基づいて行われてきたことに起因しており、次世代の材料創出の手法としてはもはや限界がきていることを示唆している。また、これまでの新たな材料の開発もその多くが偶発的な発見・発明に頼らざるを得なかったことも否めない。この状況を打破するためには、材料機能を決定している普遍的原理を解き明かし、それに基づいた合理的な材料設計・開発を進めることが唯一の方策となる。本領域研究は、このような問題意識と動機のもと、計測－計算－プロセスが三位一体となって強固に連携し材料設計指針を確立することを目的として立案された。

## 2. 研究の目的

本領域研究は、材料の機能特性と直結する粒界・界面・表面などの格子不整合領域に配置したナノ機能元素の原子構造や電子状態を定量的に理解し、これを制御した新たな材料設計を目的としている。格子不整合領域に配置した機能元素の特性を明らかにし、材料設計へと展開させるためには、サブナノスケールまで立ち入った原子構造に関する知見、その原子構造から予想される電子状態に関する情報を包括的に理解することが必要となる。

総括班は、ナノ計測グループ、理論計算グループ、プロセスグループ間の連携を効率的に運営・管理し、個々の研究活動の内容と全体の方向性を策定し、各研究項目の取り纏めと評価を行うものであり、領域代表者と事務担当者、連携研究者（各計画研究の代表者を兼ねる）の計8名に加えて、外部からの評価担当者4名の計12名から構成される。加えて、公開シンポジウムやセミナーの開催、学術誌への特集号の刊行により、得られた成果を広く社会に啓蒙普及することも総括班の活動目的とする。

## 3. 研究の方法

総括班は、以下のような方法により本特定領域研究で得られた成果の啓蒙普及を行った。

- 特定領域公開シンポジウムの開催

- 若手育成を目的とした若手の会の開催
- 国内・国際学会の特定セッション開催
- 学術雑誌特定特集号の発刊

また、インターネット会議システムの導入や、標準試料の設置などにより、領域内の連携をスムーズに行う。

## 4. 研究成果

### (1) 若手研究者育成のための会合

各研究班に所属する若手研究者による成果発表の会合を定期的に行い、若手研究者の育成と交流を行った。これまでに合宿形式の会合「若手の会」を計4回開催し、毎回約100名が参加した。

第1回若手の会：

2008年6月27-28日 (財)ファインセラミックスセンター (名古屋)

第2回若手の会：

2009年7月23日 京都大学福井謙一記念研究センター (京都)

第3回若手の会：

2010年7月30日-31日 岡山空港温泉レスパール藤ヶ鳴 (岡山)

第4回若手の会：

2011年9月27日-28日 愛知県知多半島師崎荘 (愛知)

同会により大学や研究室の垣根を越えた活発な交流が行われた。また、学生及び若手研究者を対象としたセミナーも行い、得られた成果の啓蒙普及にも努めた。

### (2) インターネット会議

領域研究の情報交換を効率的に行うよう各計画研究拠点にデータサーバーを整備しデータ共有化している。また、インターネット会議システムを構築し、議論、打ち合わせを効率的に行ってきた。

### (3) 成果公開

領域内で得られた研究成果を広くアピールするために定期的な公開シンポジウム(計5回)、セミナー等を開催している。また国際会議(計6回)、国内学会でのシンポジウム(計7回)、論文特集号(計9刊)等についても行った。

○公開シンポジウム

キックオフミーティング

2007年10月2日(火)

東京大学 山上会館

第一回 公開シンポジウム

2008年3月6日(木)

東京大学武田先端知ビル

第二回 公開シンポジウム

2009年5月13日(水)~14日(木)

東京大学山上会館

第三回 公開シンポジウム

2010年10月15日(金)

東京大学小柴ホール

最終成果報告公開シンポジウム

2012年6月8日(金)

東京大学 武田先端知ビル

○国内学会特定シンポジウム

・日本金属学会

春・秋期講演大会 2008年3月・9月,  
2009年3月, 2010年3月, 2011年11  
月)

・日本セラミックス協会

秋季シンポジウム (2009年9月)

・応用物理学会

第56回応用物理学関係連合講演会  
春季大会 (2009年9月)

○国際会議

・国際会議 AMTC1

2008.6.29-30

名古屋国際会議場 (名古屋)

・国際会議 TEX2008

2008.7.2-4

(財)ファインセラミックスセンター (名  
古屋)

・協賛 FEMMS2009

2009.9.27-10.2

ハウステンボス (長崎)

・国際会議 TMI2009

2009.11.11-13

名古屋国際センター (名古屋)

・国際会議 AMTC2

2010.6.24-26

名古屋国際会議場 (名古屋)

・国際会議 IIB2010

2010.6.27-7.2

志摩観光ホテル (三重)

・国際会議 AMTC3

2012.5.9-11

長良川国際会議場 (岐阜)

○学術雑誌特集号

・日本金属学会学会誌まてりあ

2009年06月

・日本金属学会欧文誌特集号 MATERIALS  
TRANSACTIONS Vol.50 No.5 (2009)

・J. Phys.: Cond. Matter 特集号 Vol.21,  
No.10 (2009)

・マテリアルインテグレーション誌  
特集号 2009年9.10 合併号

・日本セラミックス協会学会誌セラミック  
ス 特集号 2009年9月号

・J. Phys.: Cond. Matter 特集号 Vol.22,  
No.38 (2010)

・J. Mater. Sci. 特集号 2011年 Vol. 46, No.  
12 (2011).

・日本セラミックス協会学会誌 セラミッ  
クス 特集号 2011年6月号

・日本セラミックス協会学会誌 セラミッ  
クス 機能元素特集号 2012年7月号

また、後述のようにホームページにてそれ  
らの成果を公開している。

#### (4) 領域内連携

研究班の垣根を越えた密接な連携研究を  
推進するために、① 理論班へのプロセス技  
術の支援、② 解析班への理論計算手法の支  
援、③材料班へは汎用的 TEM 解析が行える  
研究者の配置を行った。総括班のもと各研究  
班間での若手研究者の短期滞在プログラム  
を実施した。また、領域間の共通試料として、  
実用セラミック材料として広範に使用され  
ているアルミナ ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )、および酸化チタン  
( $\text{TiO}_2$ )を設定し、各研究班の研究成果につ  
いて共通の切り口で議論できるよう配慮した。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に  
は下線)

[雑誌論文] (計0件) [学会発表] (計0件)

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕出願状況（計 0 件）取得状況（計 0 件）

〔その他〕ホームページ

<http://nanodopant.com/> という独自ドメインを取得しホームページを公開している。ホームページでは、研究目的、研究内容、組織、活動状況などの領域研究に関する概要などの説明とともに、研究成果リストの公開についても適宜行っている。さらに、開催予定の会議、シンポジウムに関する情報をいち早く掲載している。また配布したニュースレターの PDF ファイルもアップし、本特定領域で得られた成果と知見を広く公開するよう努めている。

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

幾原 雄一 (IKUHARA YUICHI)  
東京大学・大学院工学系研究科・教授  
研究者番号：70192474

### (2)研究分担者

山本 剛久 (YAMAMOTO TAKAHISA)  
名古屋大学・工学研究科・教授  
研究者番号：20220478

### (3)連携研究者

武藤 俊介 (MUTO SHUNSUKE)  
名古屋大学・工学研究科・教授  
研究者番号：20209985

森田 清三 (MORITA SEIZO)  
大阪大学・工学研究科・准教授  
研究者番号：50091757

田中 功 (TANAKA ISAO)  
京都大学・工学研究科・教授  
研究者番号：70183861

鶴田 健二 (TSURUTA KENJI)  
岡山大学・自然科学研究科・教授  
研究者番号：00304329

谷口 尚 (TANIGUCHI TAKASHI)

(独) 物質・材料研究機構・グループリーダー

研究者番号：80354413

北岡 諭 (KITAOKA SATOSHI)

ファインセラミックスセンター・主席研究員

研究者番号：80416198