



マルチスケール機能集積研究室

研究手法

透過型電子顕微鏡

電子状態計算

電磁気学シミュレーション

電子顕微鏡シミュレーション

研究対象

電池材料

酸素吸蔵材料

金属ナノ構造体

セラミックス被覆膜

水素エネルギー材料



原子・電子スケールで
材料を見る



電子顕微鏡×シミュレーションによる先端材料解析



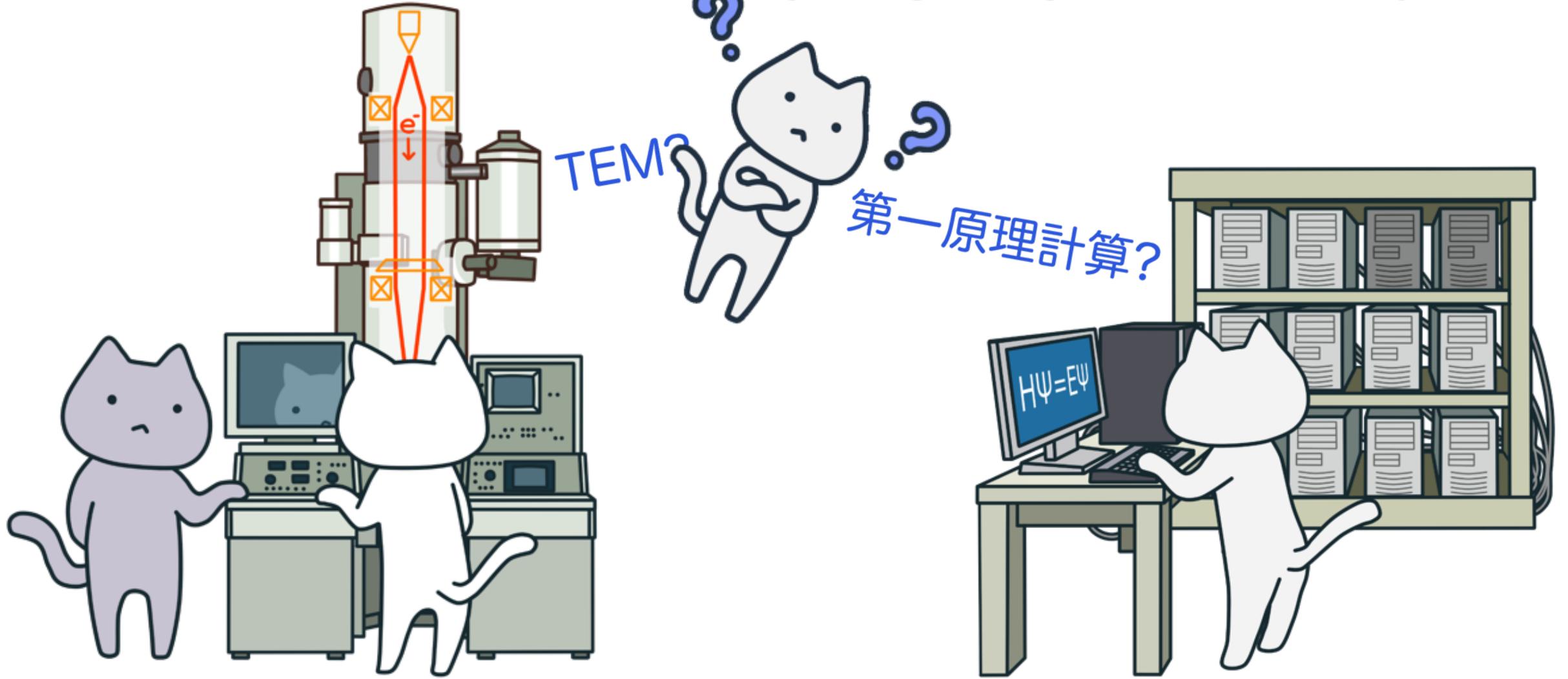
北海道大学大学院工学研究院

附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター

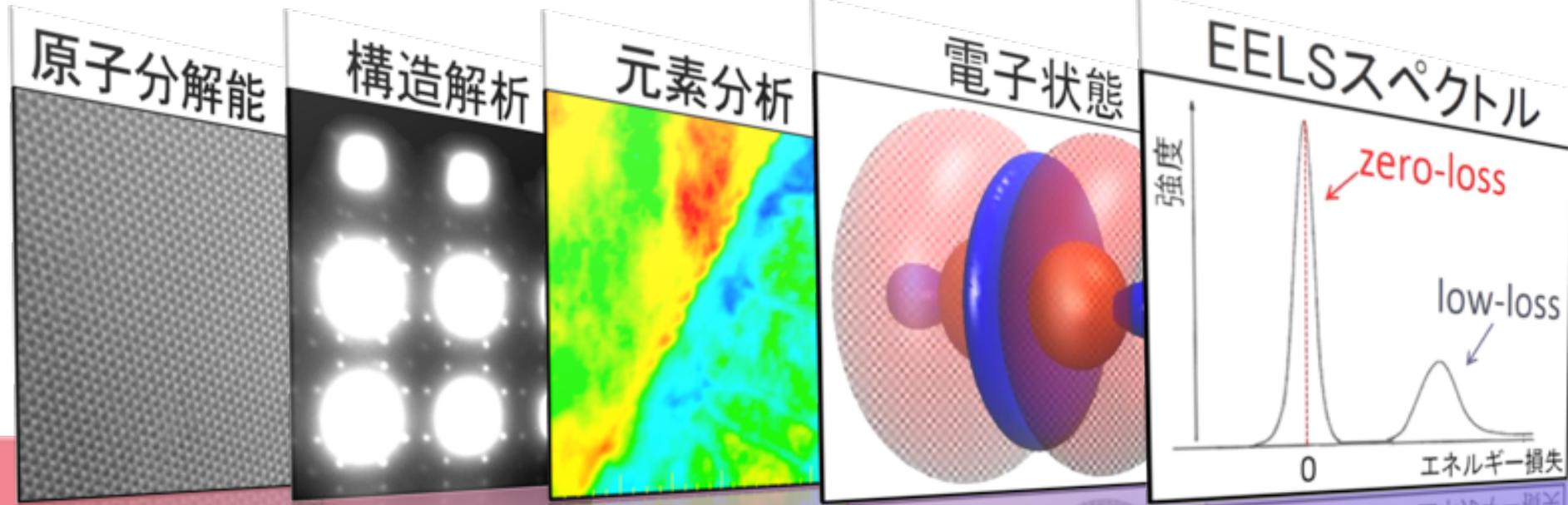
マルチスケール機能集積研究室

Laboratory of Integrated Function Materials

CAREM, Faculty of Engineering, Hokkaido University



電子顕微鏡×シミュレーションによる先端材料解析



主に実験

主にシミュレーション

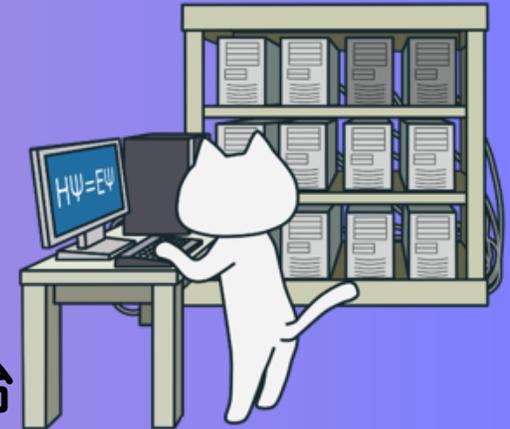
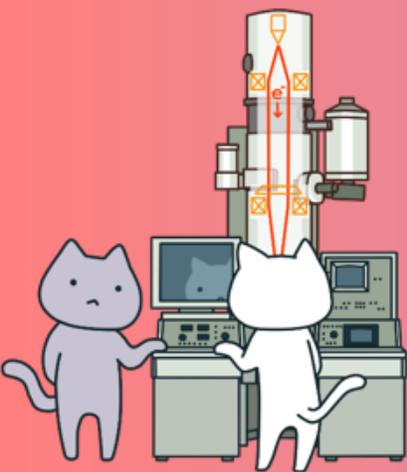
M2 : 1名
M1 : 2名
B4 : 1名

M2 : 2名
M1 : 1名
B4 : 2名



准教授 坂口 紀史

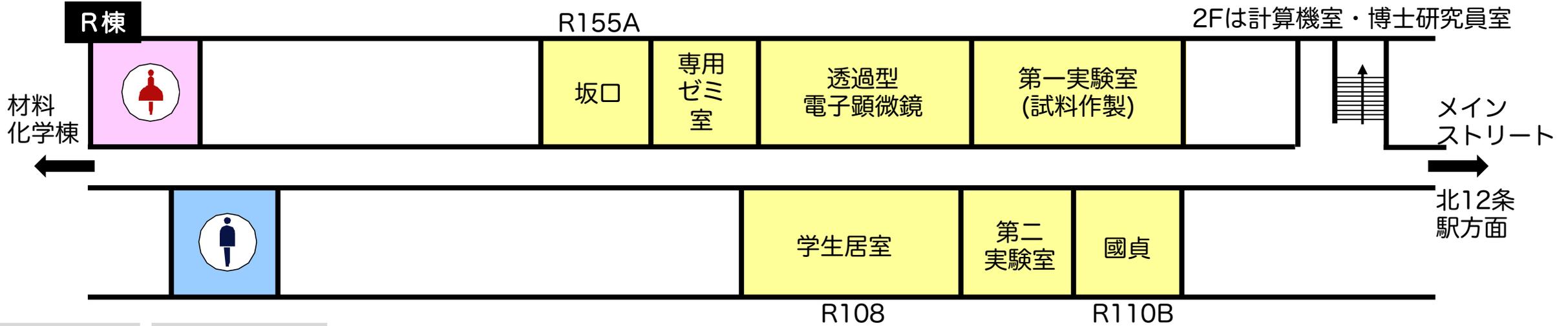
助教 國貞 雄治



研究室の場所



学生居室



2015年
4月
堂々改築

クーラー
ガス暖房
完備



豊かな陽光と開放感を演出するリビングスペース



使い勝手のよい
L型キッチン



充実のキッチン家電



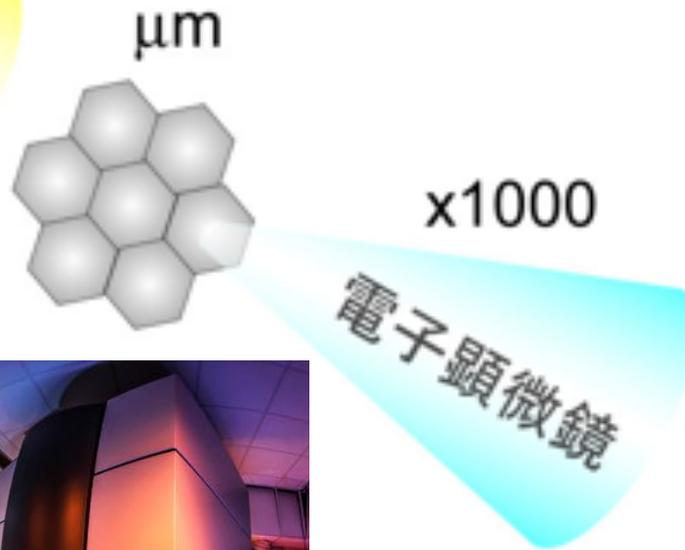
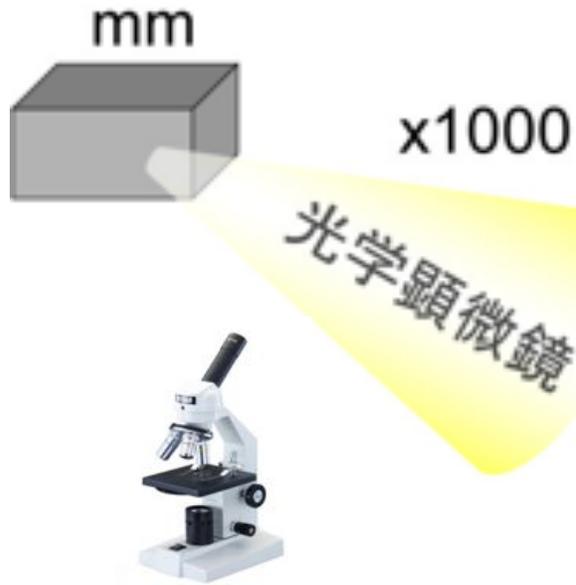
ゆとりある空間づくりを
追求した学生スペース

トイレ
温水洗浄
便座完備

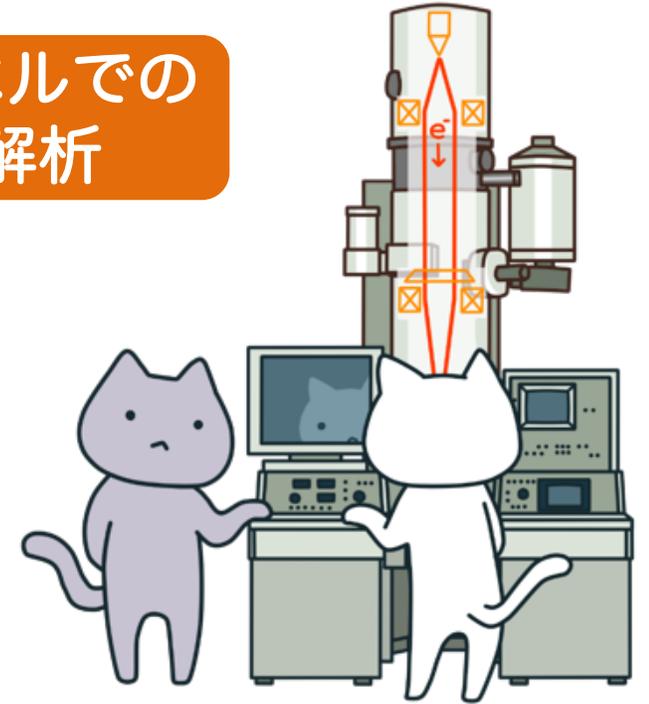
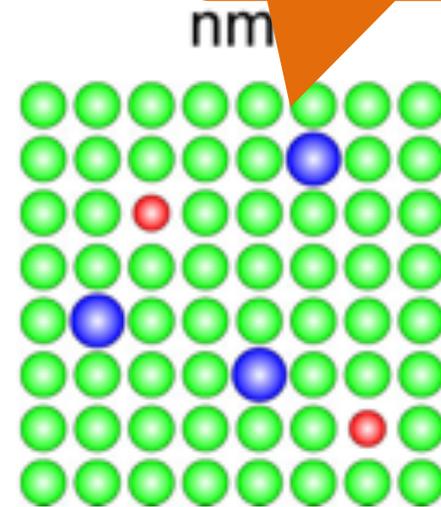
一人一台
PC

ナノ・原子スケールからの研究

材料の原子構造・電子状態の評価に基づく
特性改善・新機能発現に向けた構造制御

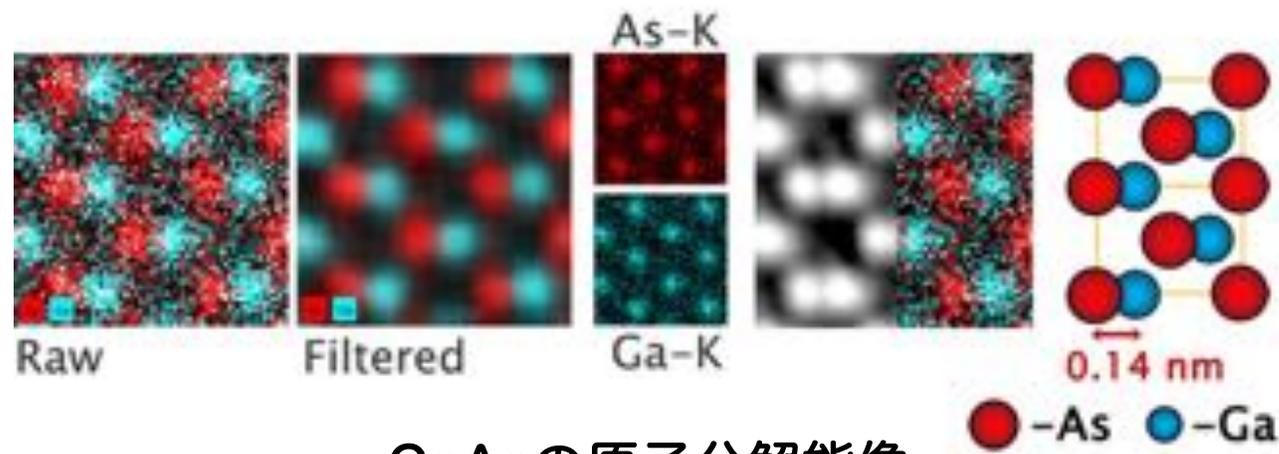


原子レベルでの
構造解析



研究イメージ（実験）

世界最新鋭の電子顕微鏡 を用いた材料解析



GaAsの原子分解能像

様々な材料（ステンレス鋼のような構造材料から半導体などの機能性材料まで）の特性や劣化機構などを

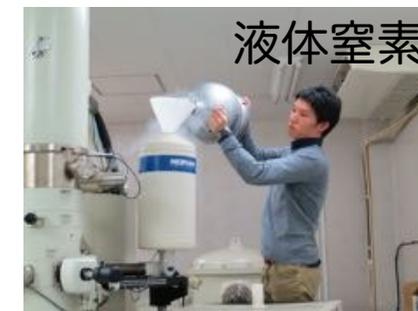
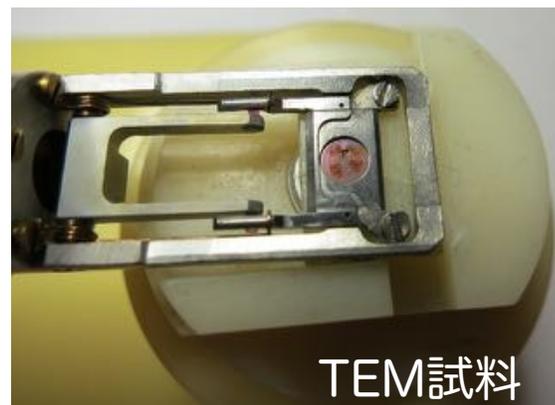
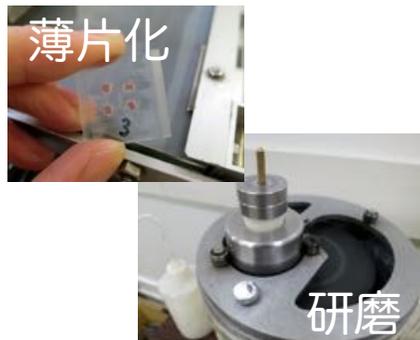
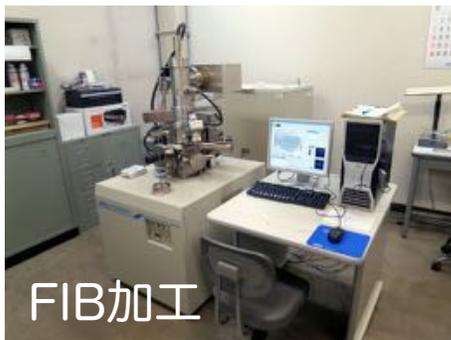
原子レベルの構造・電子状態解析から紐解く

FEI Titan³ 300kV (S)TEM



実験班の流れ

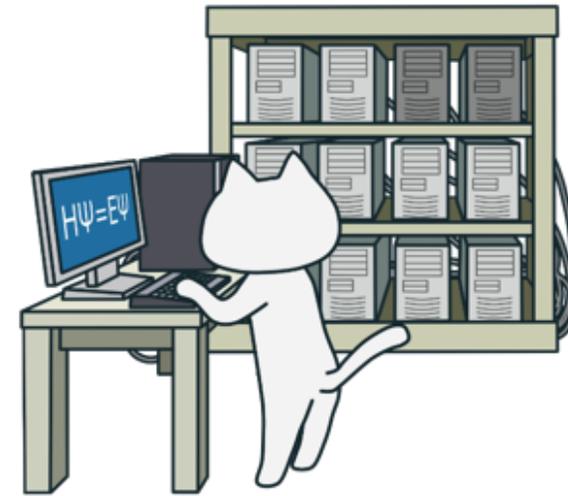
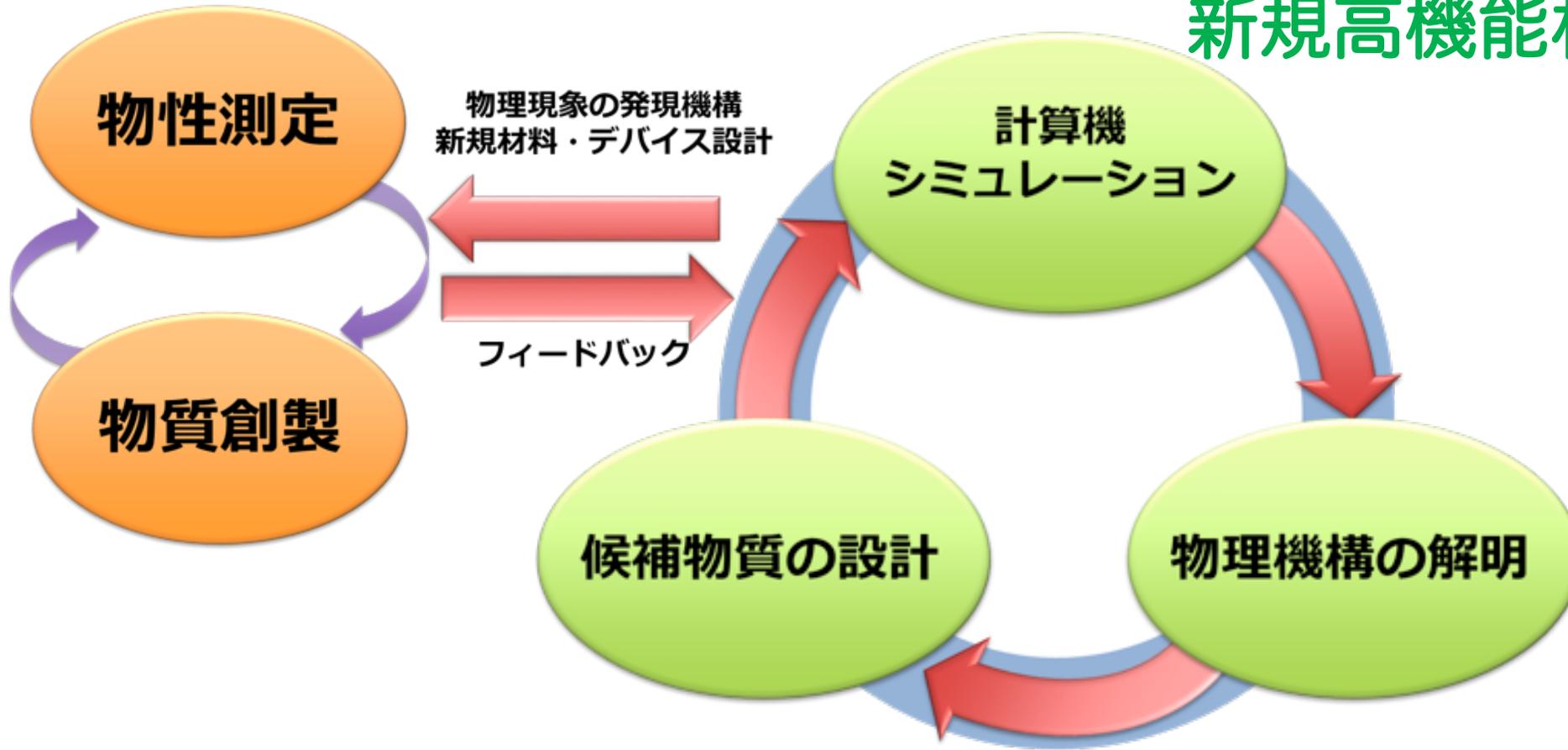
顕微鏡観察試料の作製 → 顕微鏡観察 → 結果の解析・計算との比較や理論の勉強



顕微鏡観察よりも試料の準備やデータの解析に時間がかかります。
シミュレーションと実験結果を比較して、解析を進めます。

計算機を用いた材料設計

材料の機能発現・劣化のメカニズムを
電子・原子スケールから解明し、
新規高機能材料を設計する



研究テーマ例 (シミュレーション)

アルミニウム Al
(Z=13)

シリコン Si (Z=14)

塩化ナトリウム
Na (Z=11) Cl
(Z=17)

周期表

1																	18
1 H	2											13 B	14 C	15 N	16 O	17 F	18 Ne
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	ランタノイド	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	アクチノイド	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

研究イメージ (シミュレーション)

密度汎関数理論

The Nobel Prize in Chemistry 1998



Walter Kohn
Prize share: 1/2



John A. Pople
Prize share: 1/2

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "for his development of the density-functional theory" and John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry".

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998

実験値を用いず

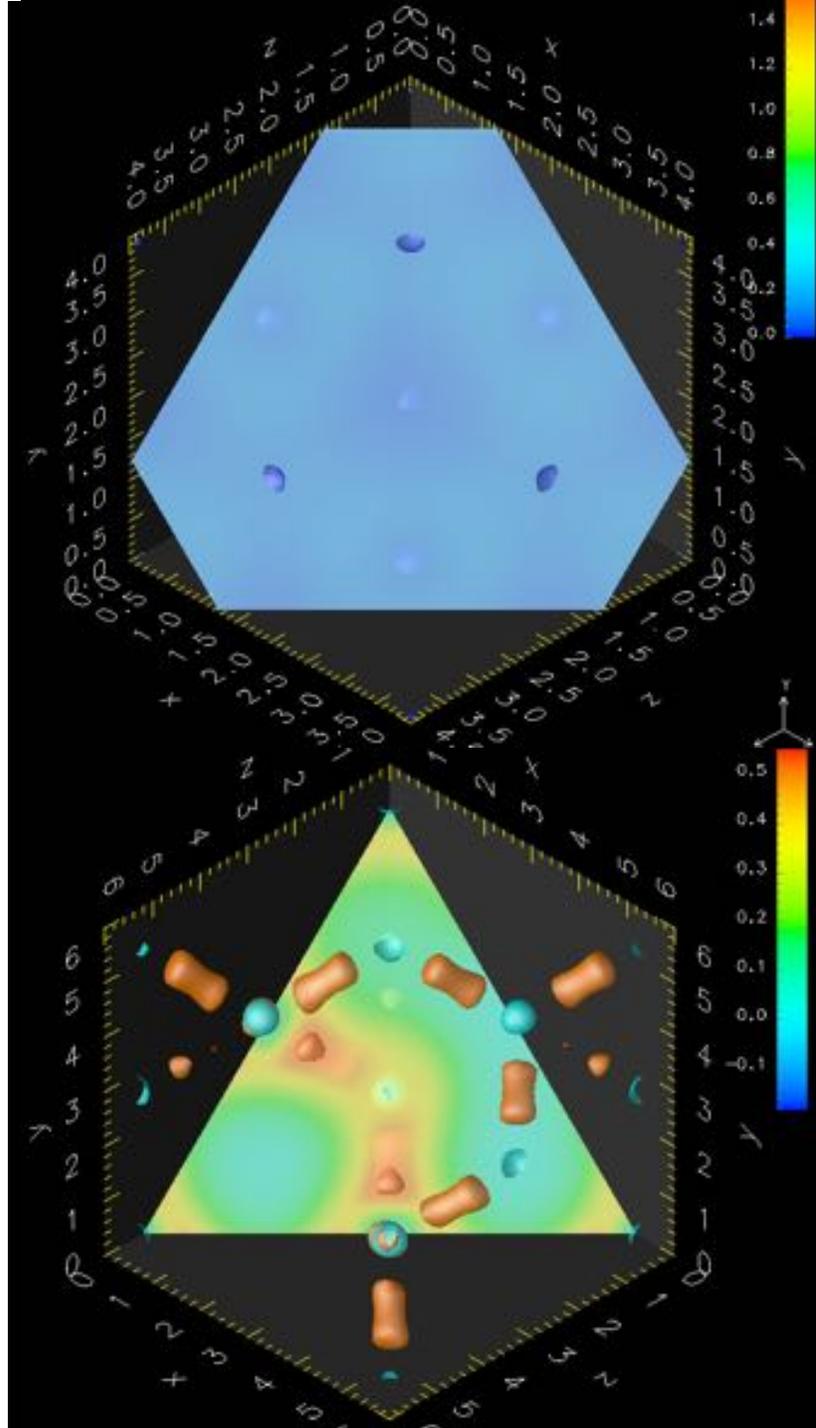
原子番号のみで物性を計算

アルミニウム
Al (Z=13)

金属結合
結晶全体に広がった
伝導電子

シリコン
Si (Z=14)

共有結合
原子間に局在化し、
両原子に共有された電子



電子顕微鏡((S)TEM)観察

- ・ 原子構造の直接観察によるナノ構造解析
- ・ 化学状態のサブナノ分析

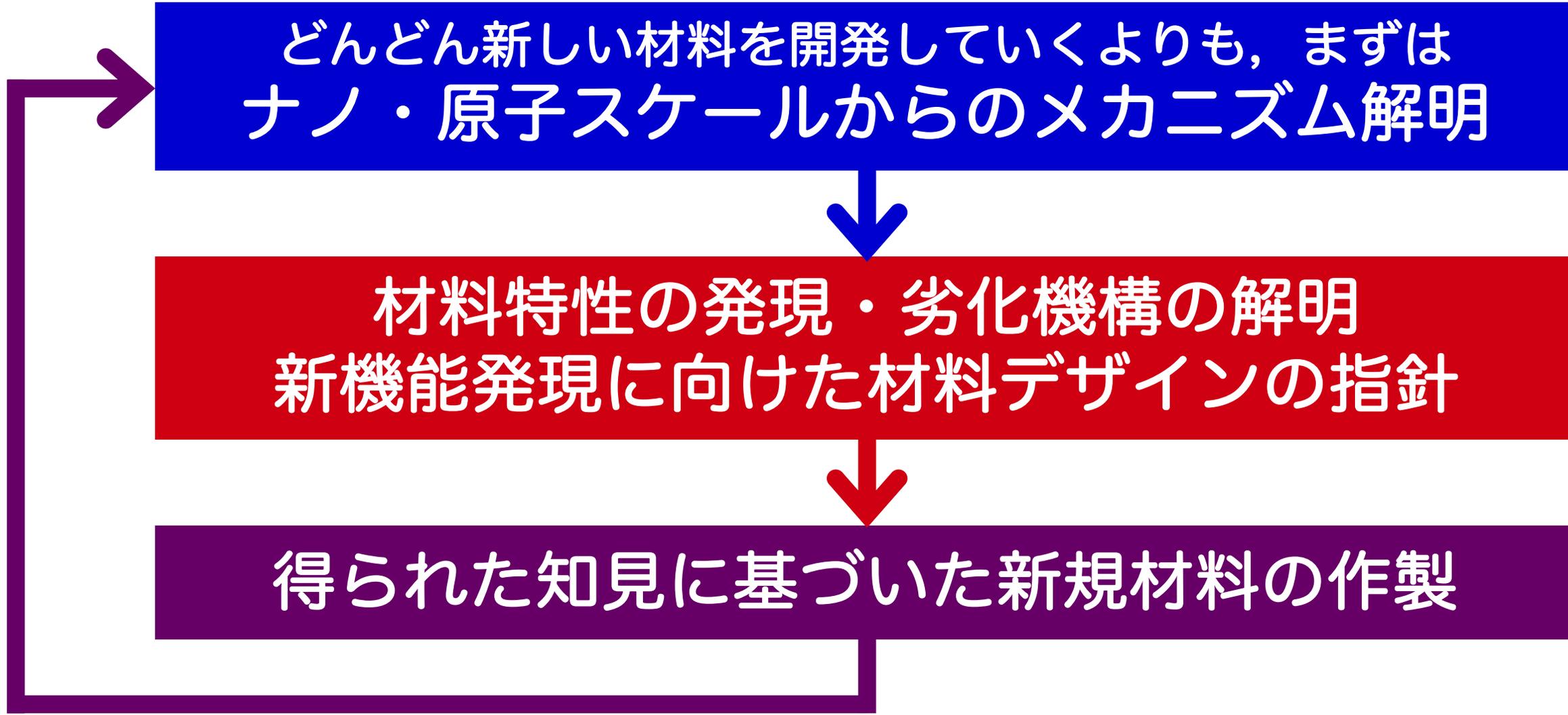
(S)TEM シミュレーション

- ・ 原子配列の変化
- ・ 特異な電子状態

第一原理計算

- ・ 電子状態予測
- ・ 材料特性の起源

研究のキーワード



どんどん新しい材料を開発していくよりも、まずは
ナノ・原子スケールからのメカニズム解明

材料特性の発現・劣化機構の解明
新機能発現に向けた材料デザインの指針

得られた知見に基づいた新規材料の作製

実験

シミュレーション

顕微鏡技術

電子顕微鏡による
光学特性測定

蛍光体材料

金属ナノ構造体
プラズモン

原子力材料

酸化メカニズム

化学

材料中の水素透過

燃料電池電極触媒

酸素吸蔵材料

水素貯蔵材料

研究テーマ例（蛍光体材料）

希土類元素ドーパセラミックス

Keyword：HAADF-STEM，構造精密化，定量評価

セラミックス中の希土類元素の分布や侵入位置の解明
⇒望ましい特性を得るためのドーパント分布は??



高温でも安定な黄蛍光体
Ca- α -SiAlON:Eu

Euの分布に依存して
発光特性が変化!!

原子番号の比較

Si:14, N:7, Ca:20, Eu:63

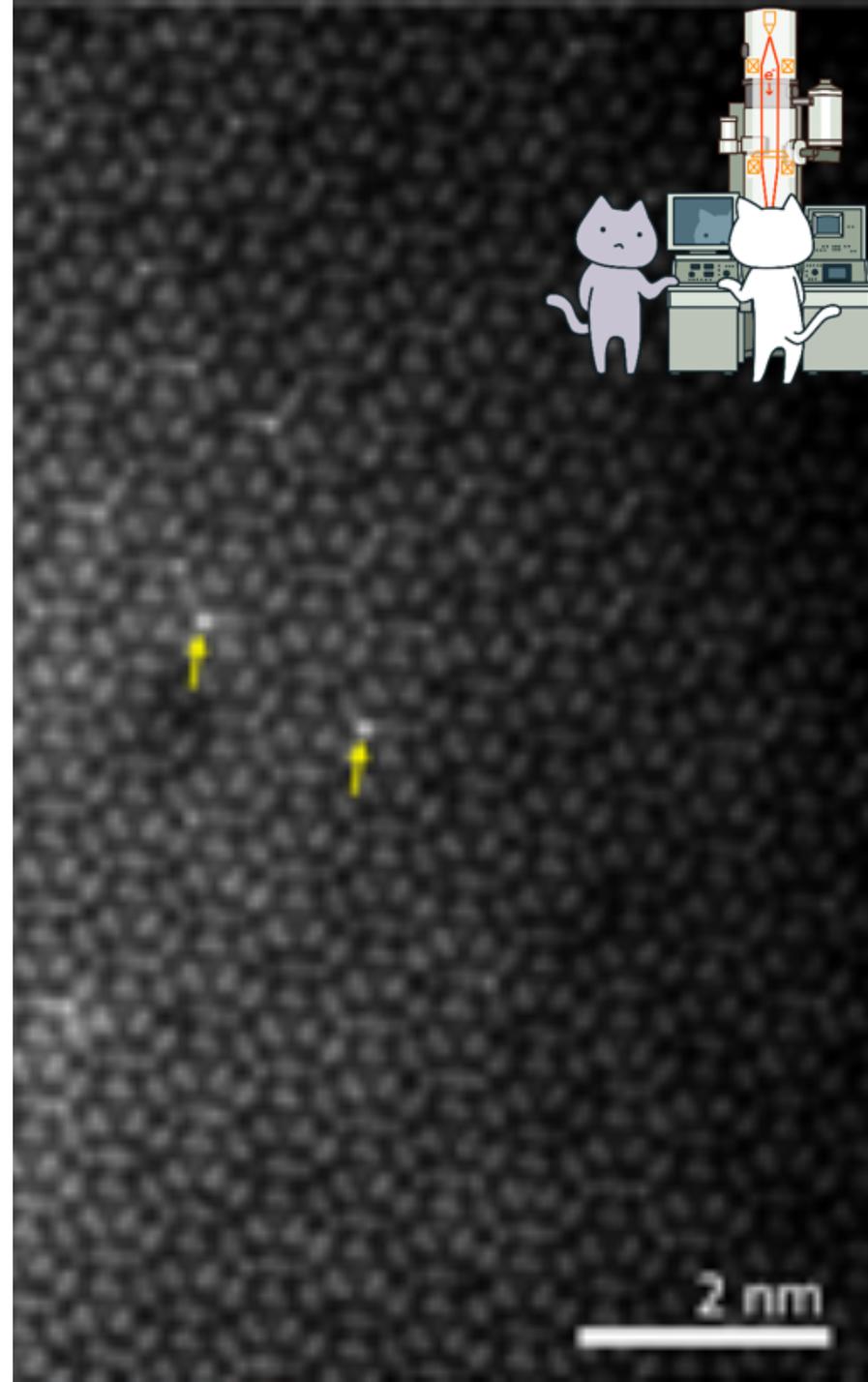
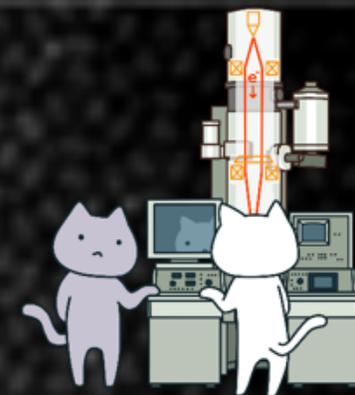
HAADF-STEM像では、原子番号の約2乗に比例したコントラストが得られます。

Euは、他より原子番号が大きいため、より明るく見えます。

⇒ 原子の区別が可能！

電子線の焦点位置を変えることにより奥行き方向の情報を得る。

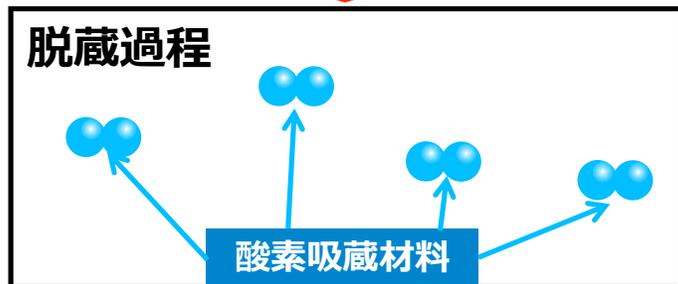
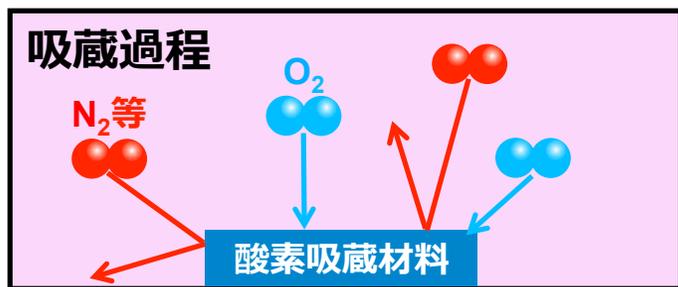
⇒ 原子の深さ測定が可能！



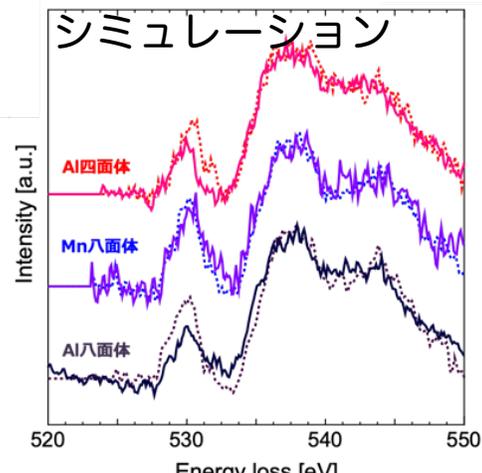
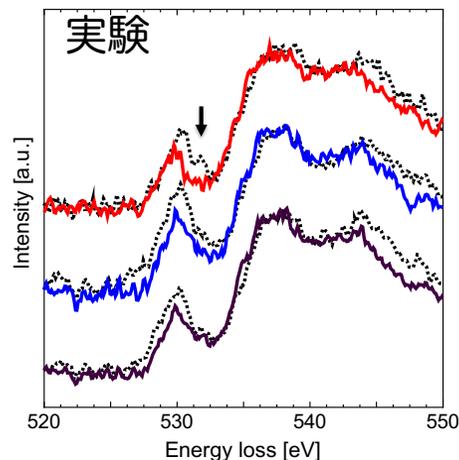
研究テーマ例（酸素吸蔵材料）

安価な元素で構成される酸素吸蔵材料
Keyword : HAADF-STEM、EELS、化学結合

酸素吸蔵材料の酸素吸蔵前後の構造・電子状態解析
⇒酸素吸放出特性を向上させるための要因は何か??

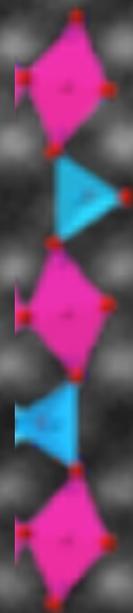


省エネルギーな
純酸素の製造!!



吸蔵前

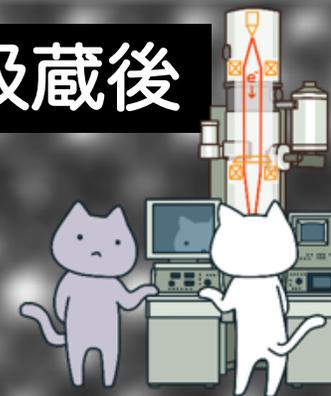
吸蔵後



0.5 nm



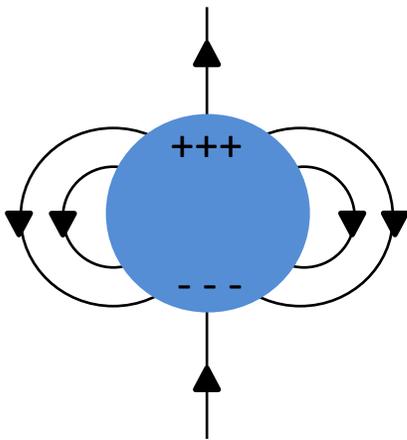
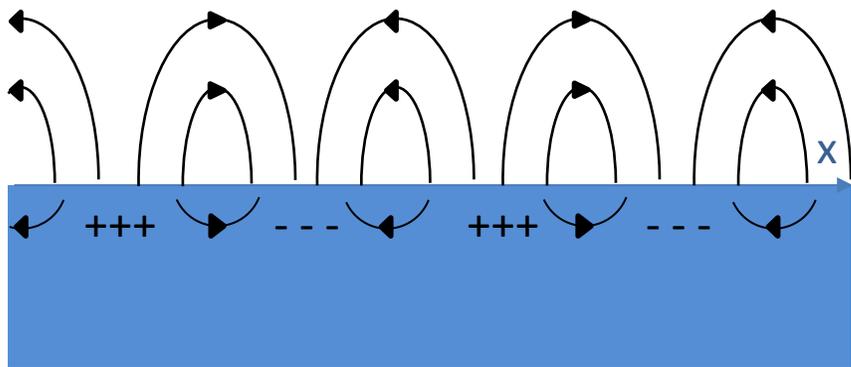
0.5 nm



研究テーマ例 (プラズモニクス材料)

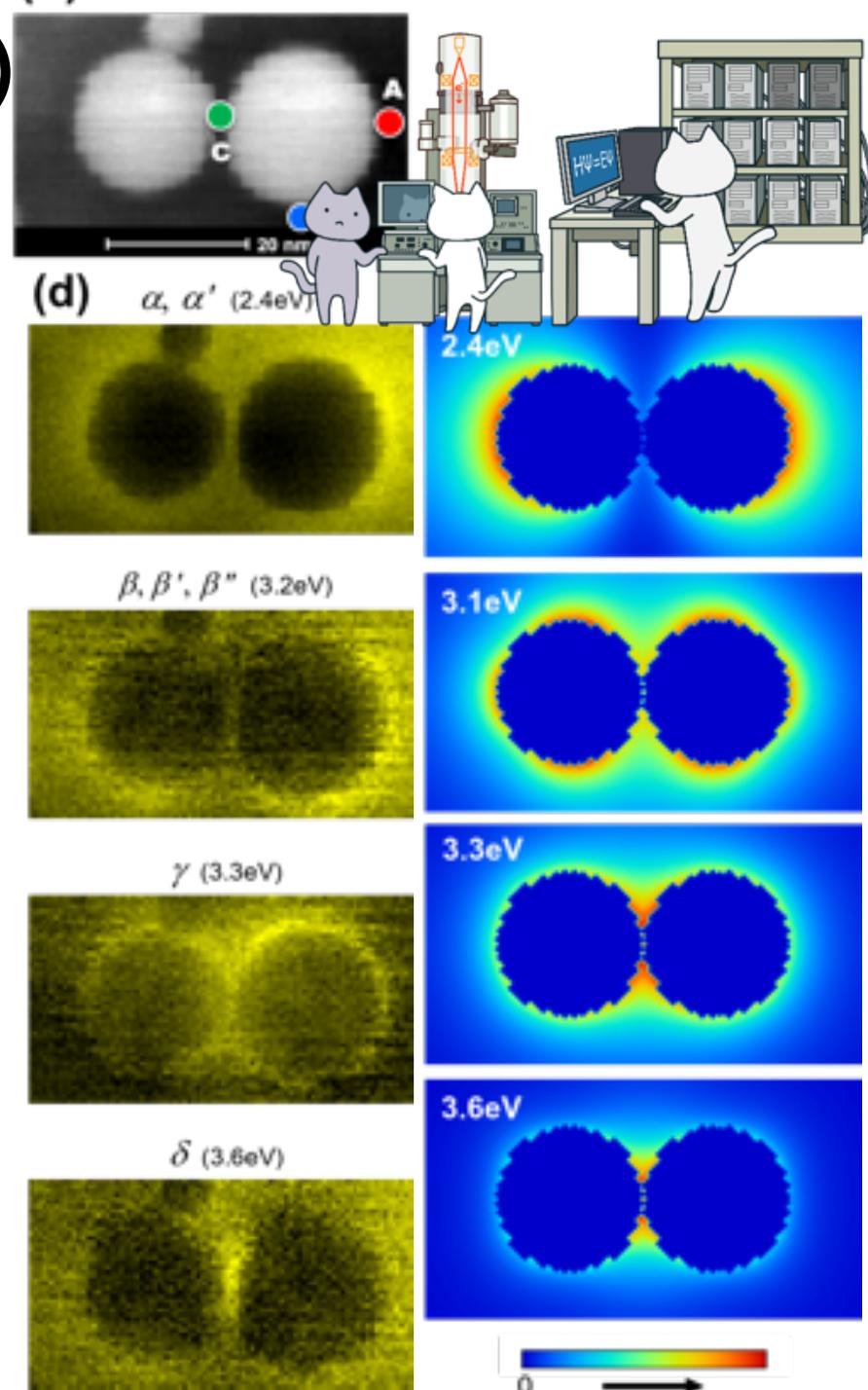
金属ナノ構造体
Keyword : STEM-EELS, ナノ粒子, 光学特性

ナノ構造体のサイズや配置がプラズモン共鳴に与える影響の解明
⇒望ましい特性を得るための材料設計は??



金属ナノ構造体表面にプラズモンが励起される
レーザーや太陽電池, 光導波路として応用可能

ナノ構造体のサイズや配置に依存して
プラズモン周波数(エネルギー)が変化!!

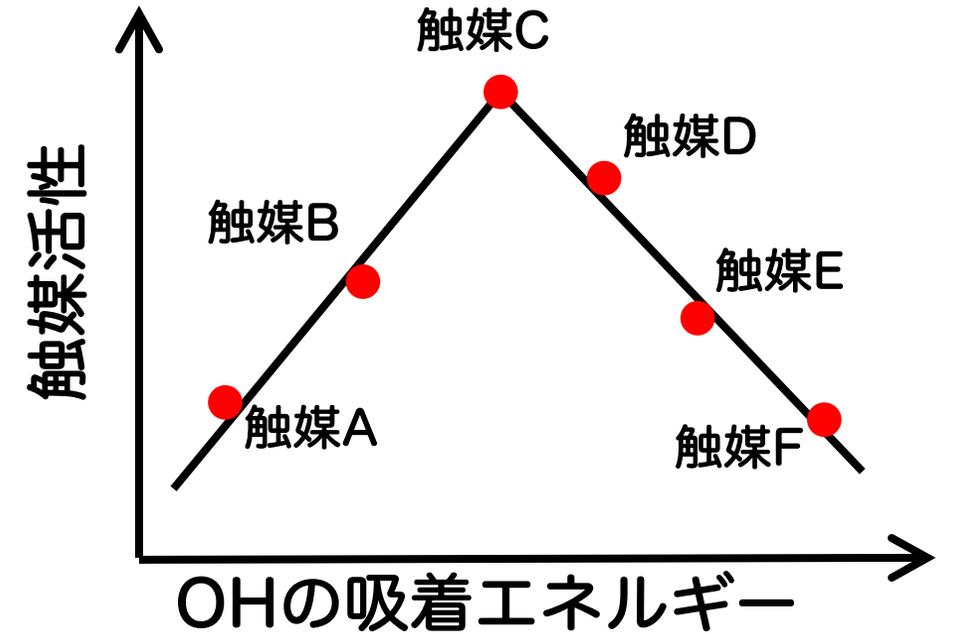


研究テーマ例 (燃料電池)

炭素系燃料電池電極触媒

Keyword : 水素, 燃料電池, 省貴金属

燃料電池反応のメカニズムを解析⇒安価で高効率な燃料電池触媒の開発⇒水素エネルギー社会の実現



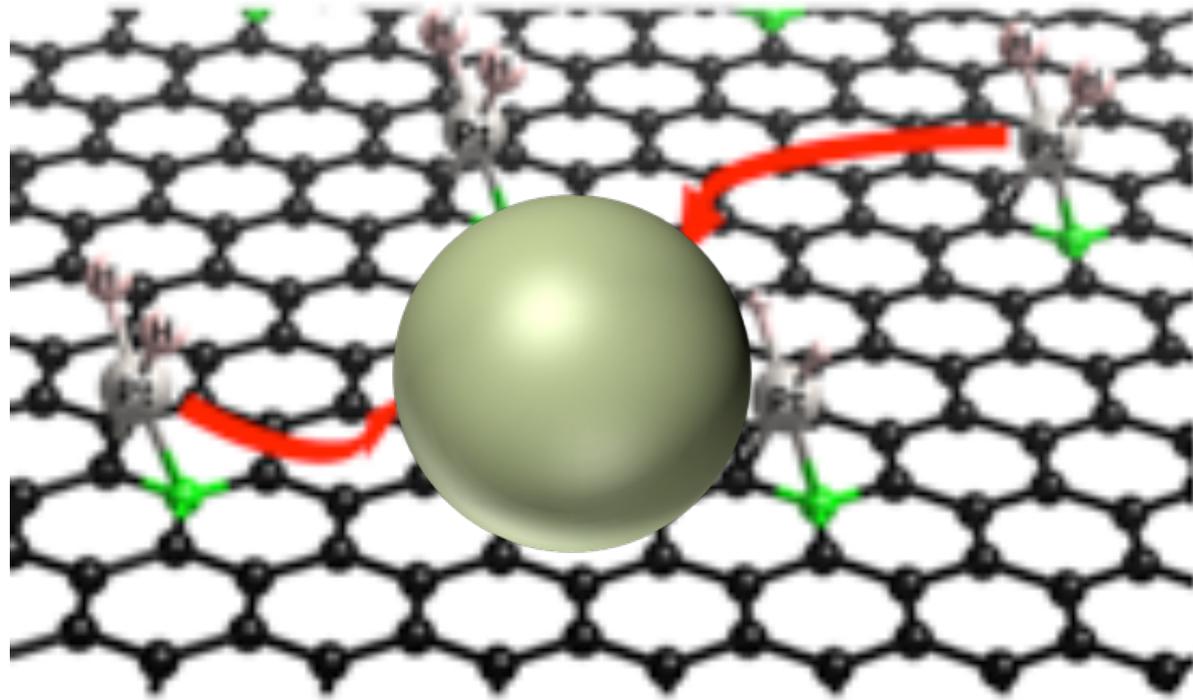
触媒反応を素過程から理解し、
反応性の起源を説明

研究テーマ例 (燃料電池)

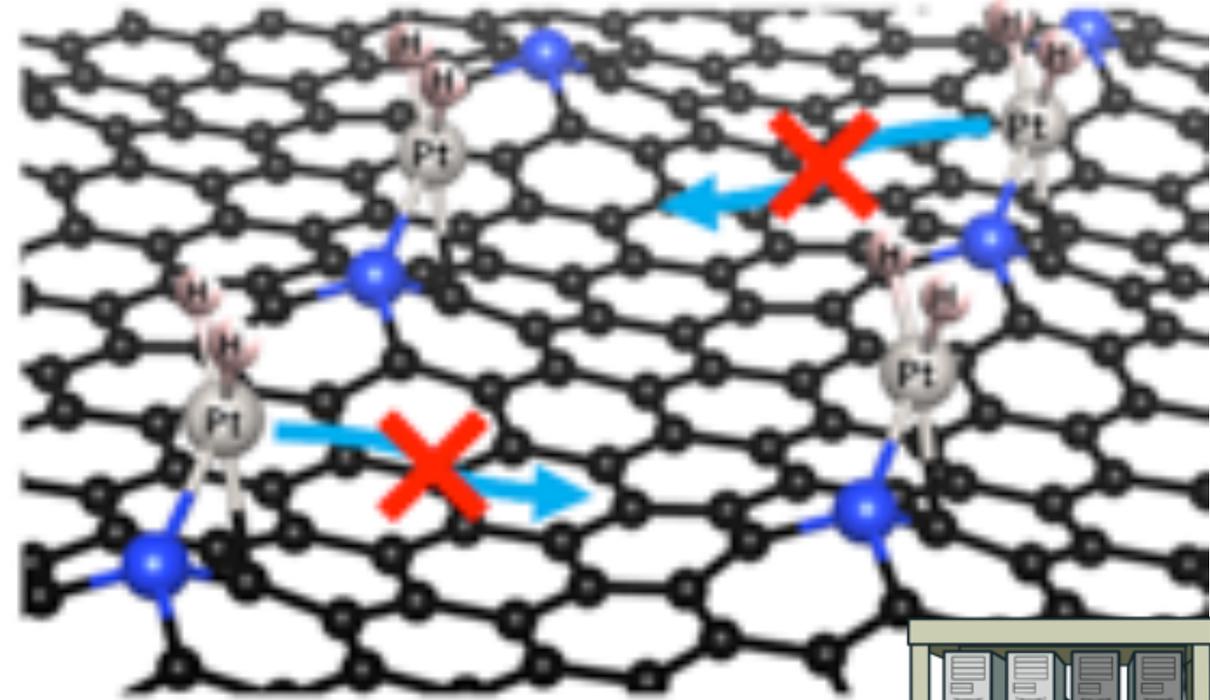
炭素系燃料電池電極触媒

Keyword : 水素, 燃料電池, 省貴金属

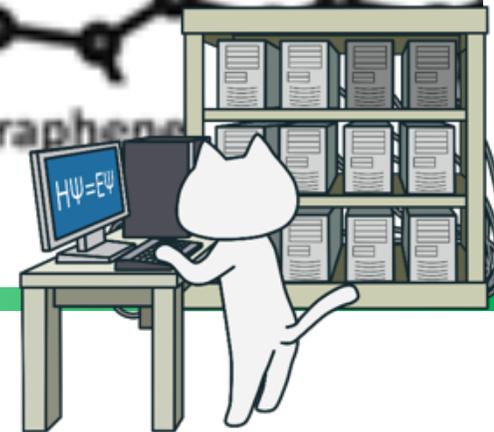
燃料電池反応のメカニズムを解析⇒安価で高効率な燃料電池触媒の開発⇒水素エネルギー社会の実現



Pristine, B-, N-, S-doped graphene



O-, Si-, P-doped graphene



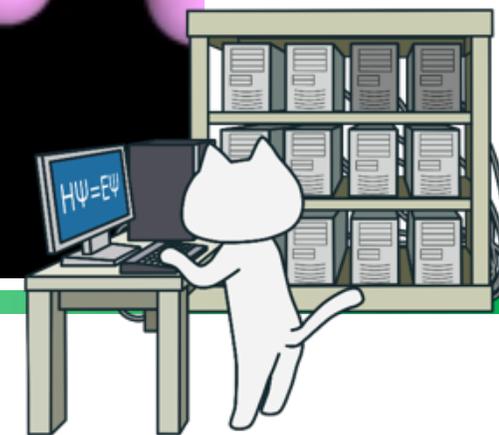
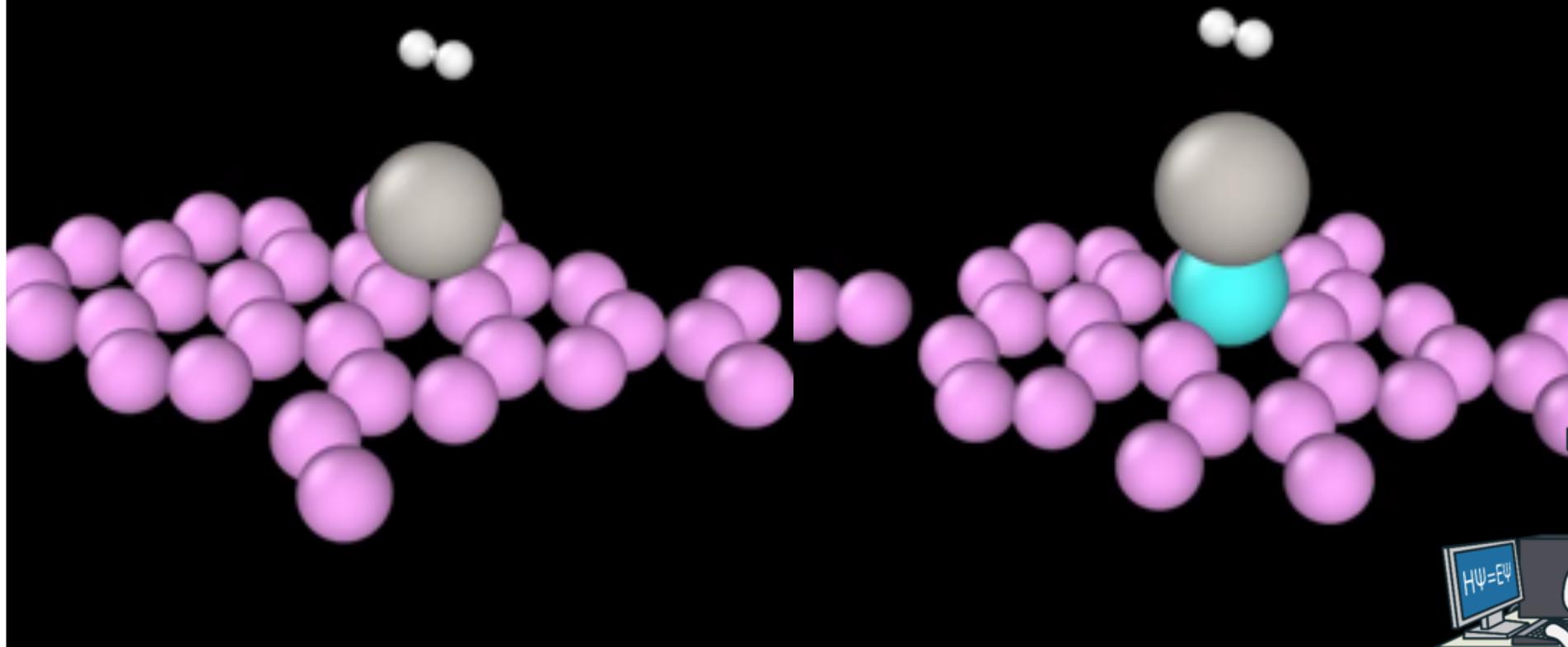
研究テーマ例 (燃料電池)

炭素系燃料電池電極触媒

Keyword : 水素, 燃料電池, 省貴金属

$H_2/Pt/$ グラフェン@400 K

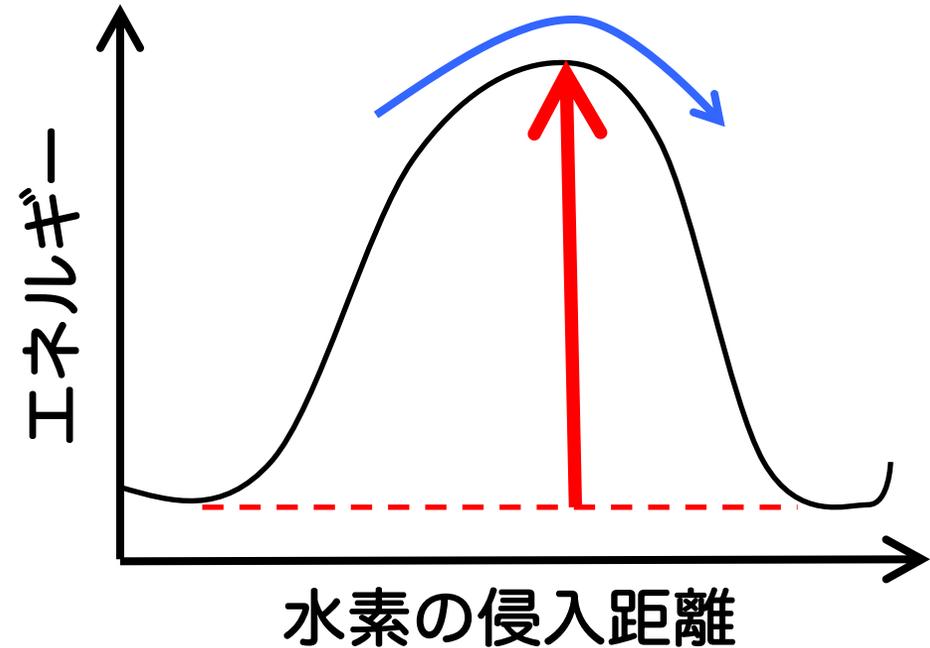
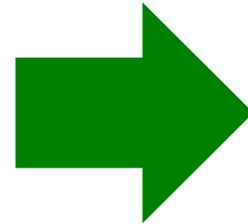
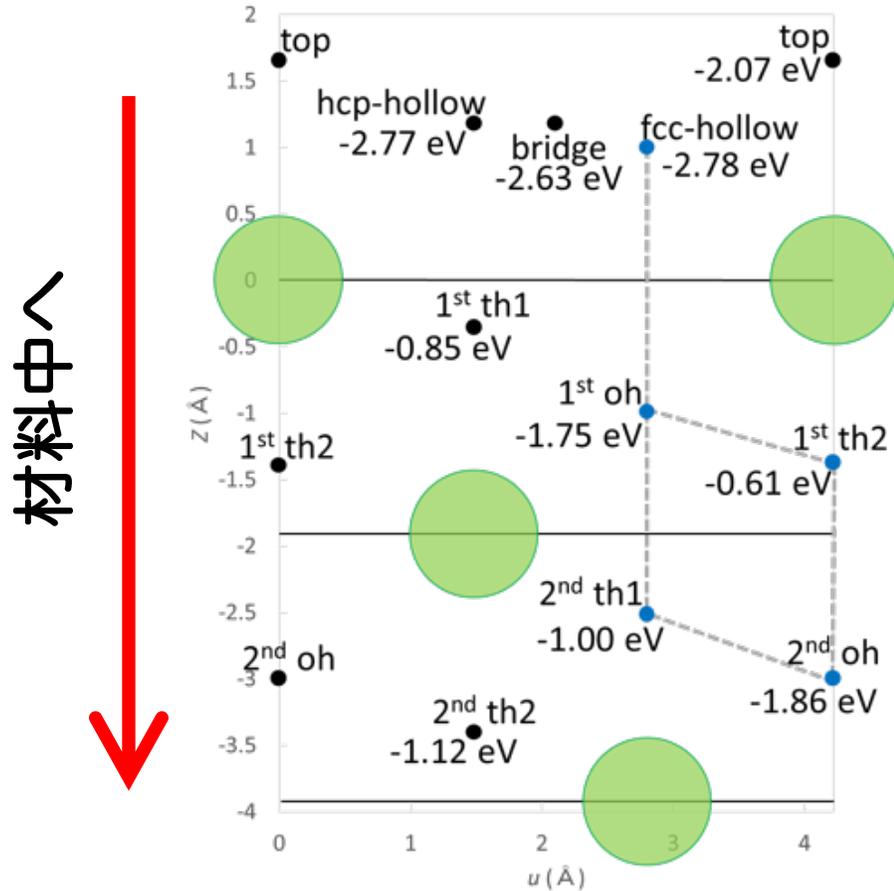
$H_2/Pt/P$ 置換グラフェン@400 K



研究テーマ例 (水素脆化に強い=水素を通さない材料)

鉄鋼材料, セラミックス材料 Keyword : 水素, 燃料電池, 水素脆化

材料中への水素侵入メカニズムを解析⇒耐水素脆化性に優れた材料の開発⇒各種材料の長寿命化へ



水素の拡散障壁を明らかにし,
侵入特性を解明する

研究室での生活

- 進捗報告(週1回)+簡単な掃除
→発表は2週間に一度
2週間分の研究の進捗を報告
- 雑誌会(週1回)
→興味のある論文を半期に1回紹介
- 教科書の輪講(週1回程度)
→教科書の担当部分を講義する
- 月1回の液体窒素当番
- その他発表練習など…

年間スケジュール

1学期	プレゼンテーション
6月	フットサル大会, 北工会運動会 ライラックセミナー
7月	金属学会・鉄鋼協会北海道支部 サマーセッション, 中間報告会
8月	大学院入学試験, 野球大会
9月	学会シーズン
12月	中間報告会, ボーリング大会, 金属学会・鉄鋼協会北海道支部 冬季講演大会
2月	卒業論文・修士論文・博士論文, 修士中間発表会
3月	学会シーズン