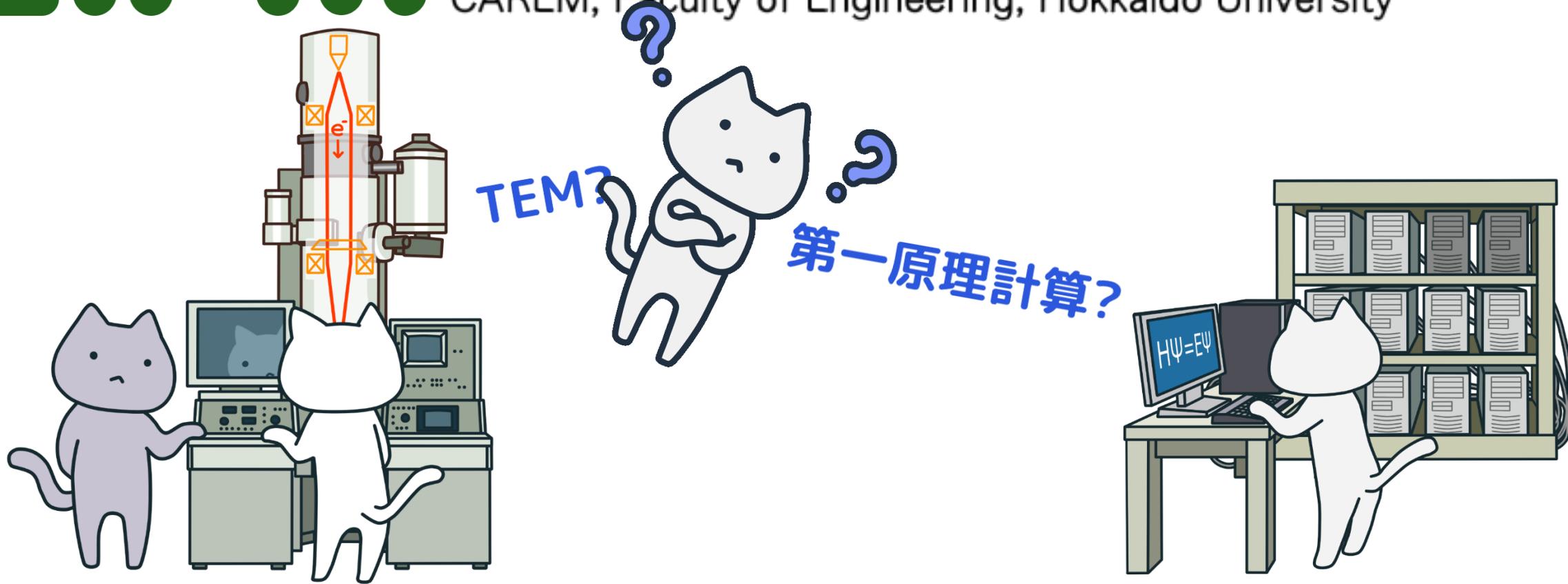




北海道大学大学院工学研究院
附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター

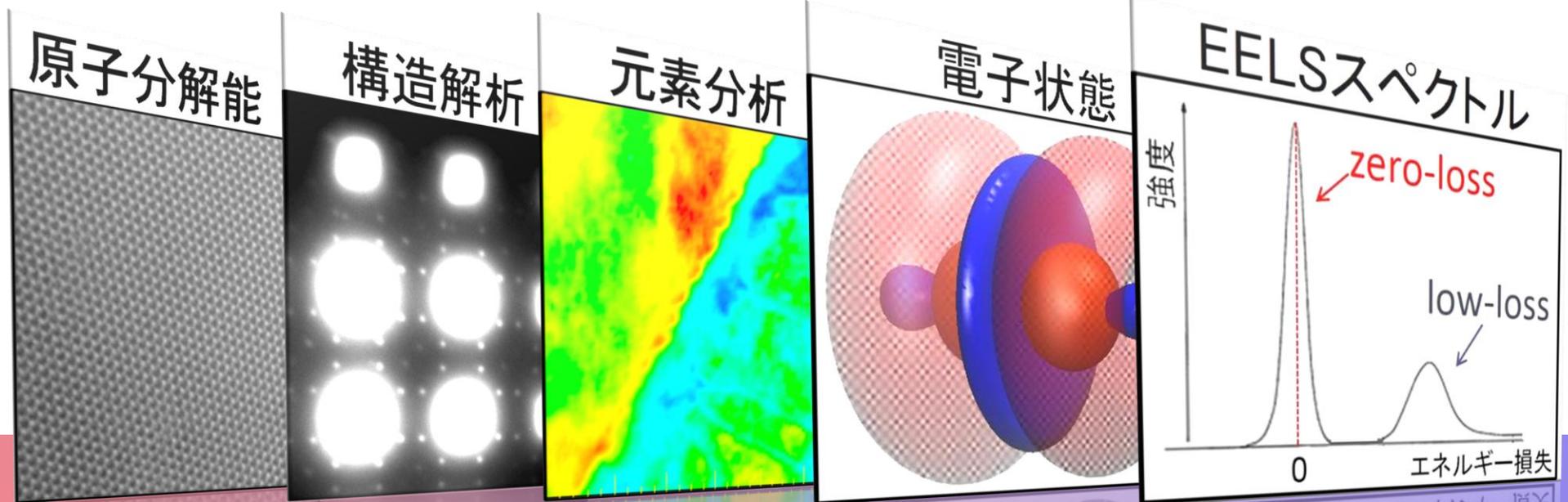
マルチスケール機能集積研究室

Laboratory of Integrated Function Materials
CAREM, Faculty of Engineering, Hokkaido University



電子顕微鏡・量子力学シミュレーション・AIを駆使し
材料機能の起源を原子レベルで解明する

電子顕微鏡×シミュレーションによる先端材料分析



主に実験



教授 坂口 紀史

研究員：小針 笑美子
田中 由紀子
M2：石塚 基
山田 望実
M1：板東 朋百花
山野 寛司
B4：2名

主にシミュレーション



准教授 國貞 雄治

M2：矢ヶ崎 優大
M1：秋元 裕貴
永井 凌太
B4：2名

微細なところを研究してます

実験

TEM

SEM

光学顕微鏡

シミュレーション

DFT

古典分子動力学法

原子構造
不純物
単原子触媒
格子欠陥

粒界
析出物
二次元材料

結晶粒
材料組織
合成用原料粉末

機械的特性
デバイス作製
実機での評価

Å

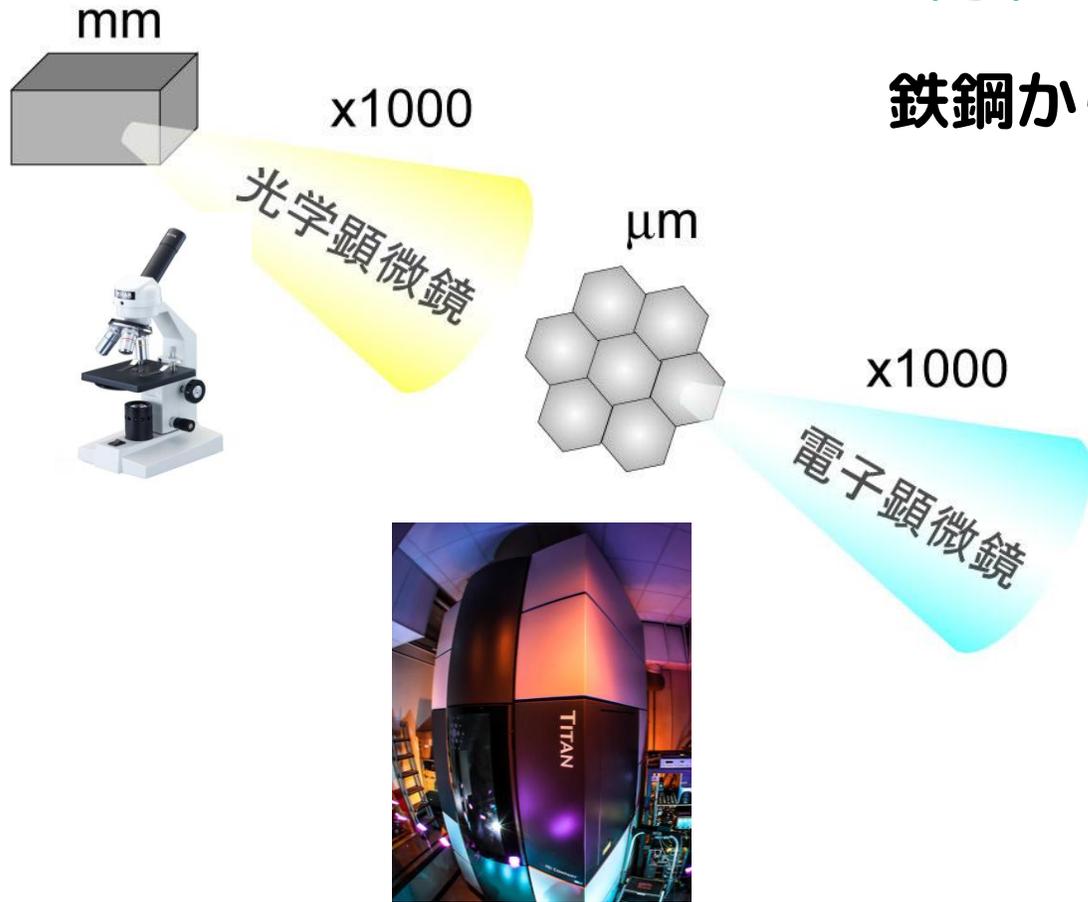
nm

μm

mm

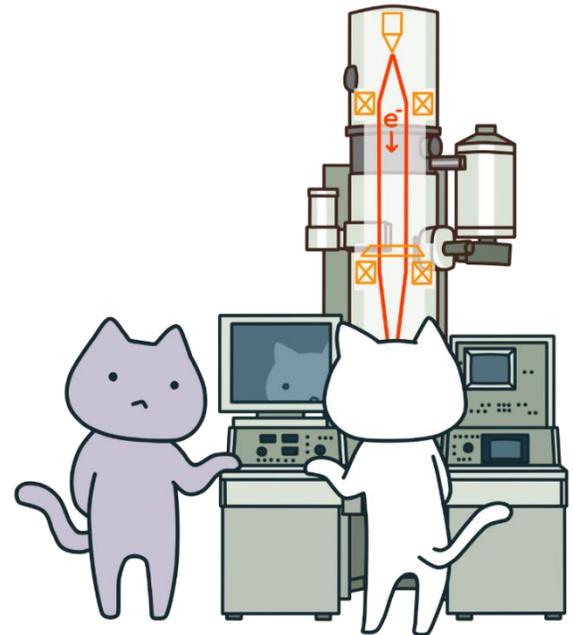
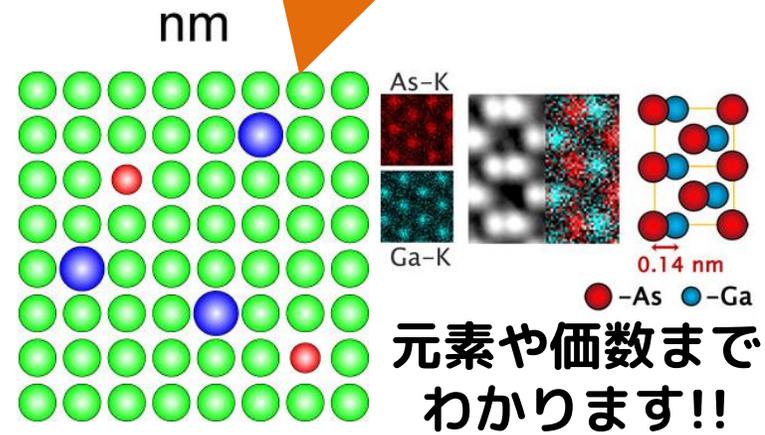
ナノ・原子スケールからの研究

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

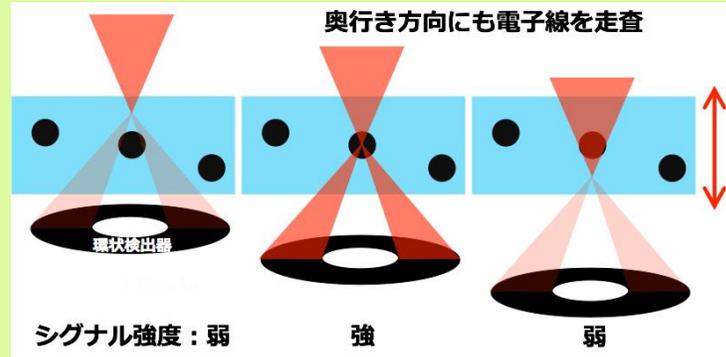
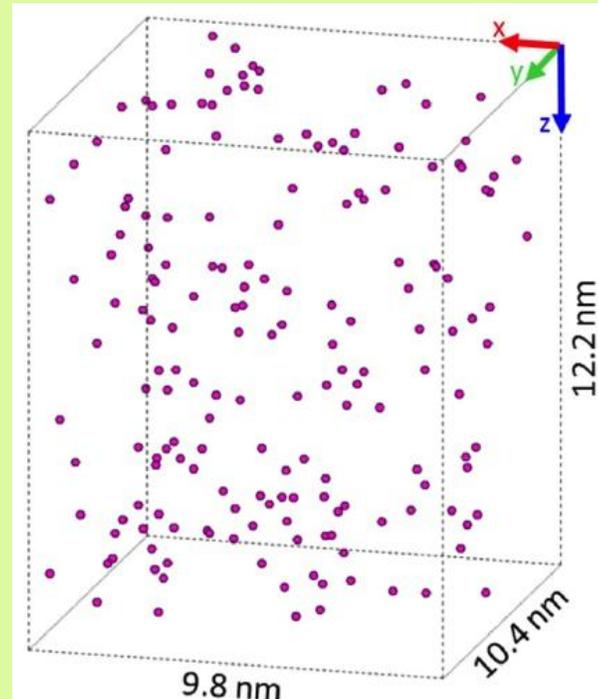
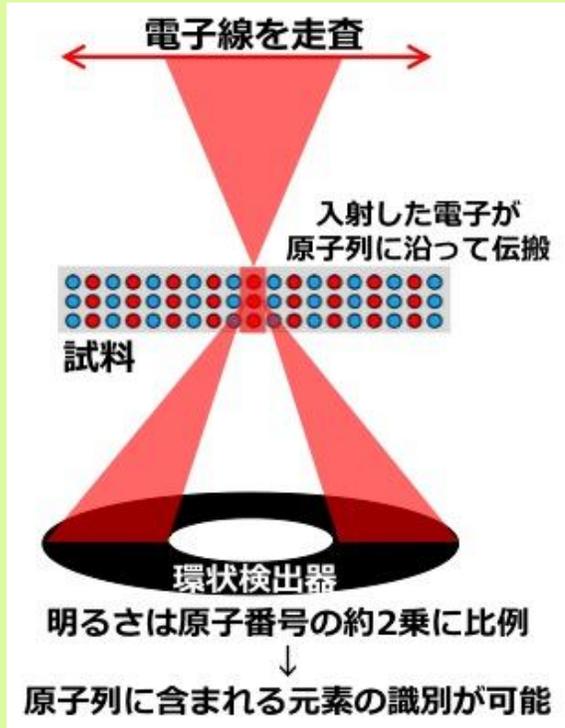


鉄鋼から半導体，触媒までの様々な材料特性を
原子レベルの構造・電子状態解析から紐解く

原子レベルでの
構造解析

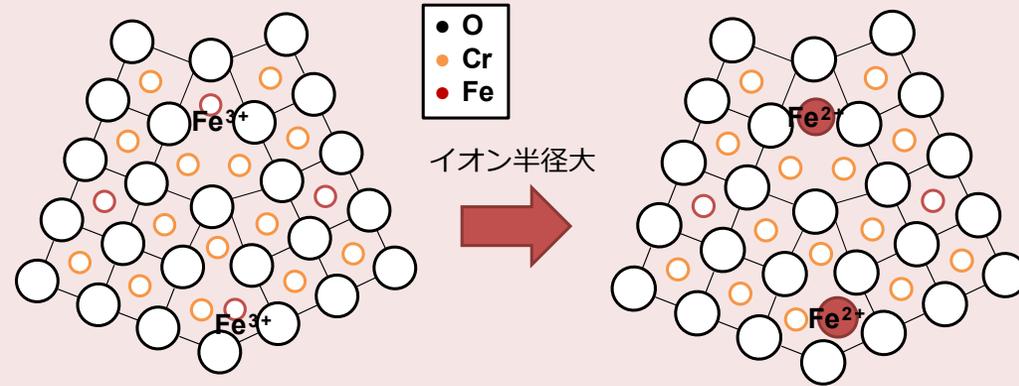
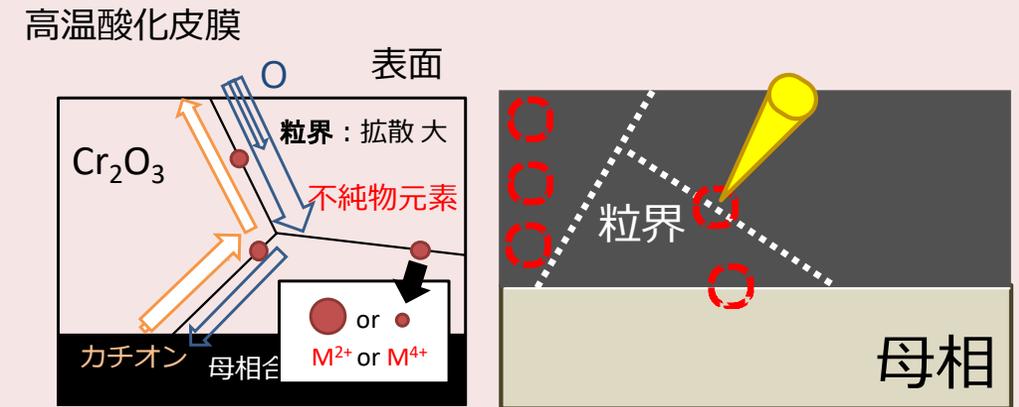


色々な透過型電子顕微鏡の活用法



応用例：黄蛍光体
Ca- α -SiAlON:Eu

発光特性を支配している
Euの空間分布がわかる!!



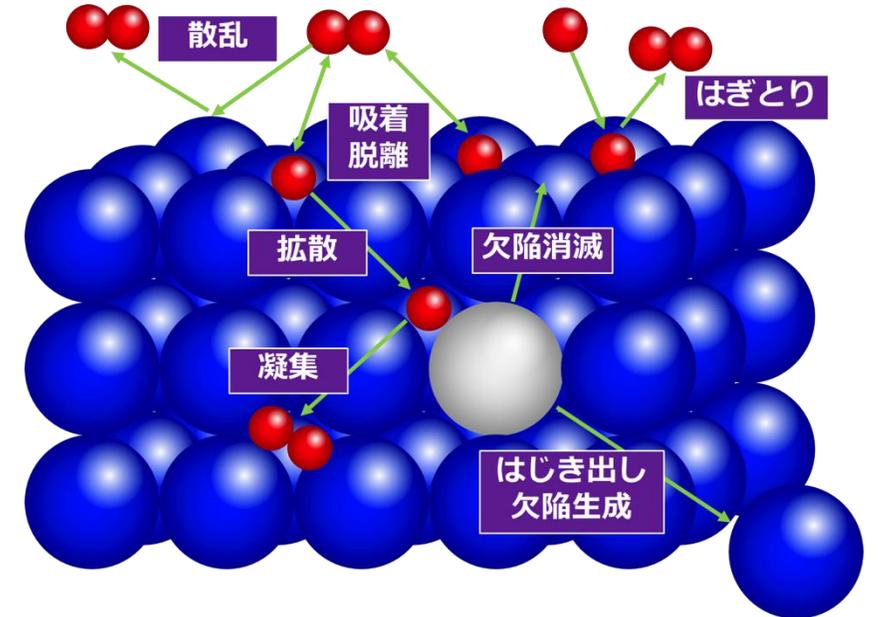
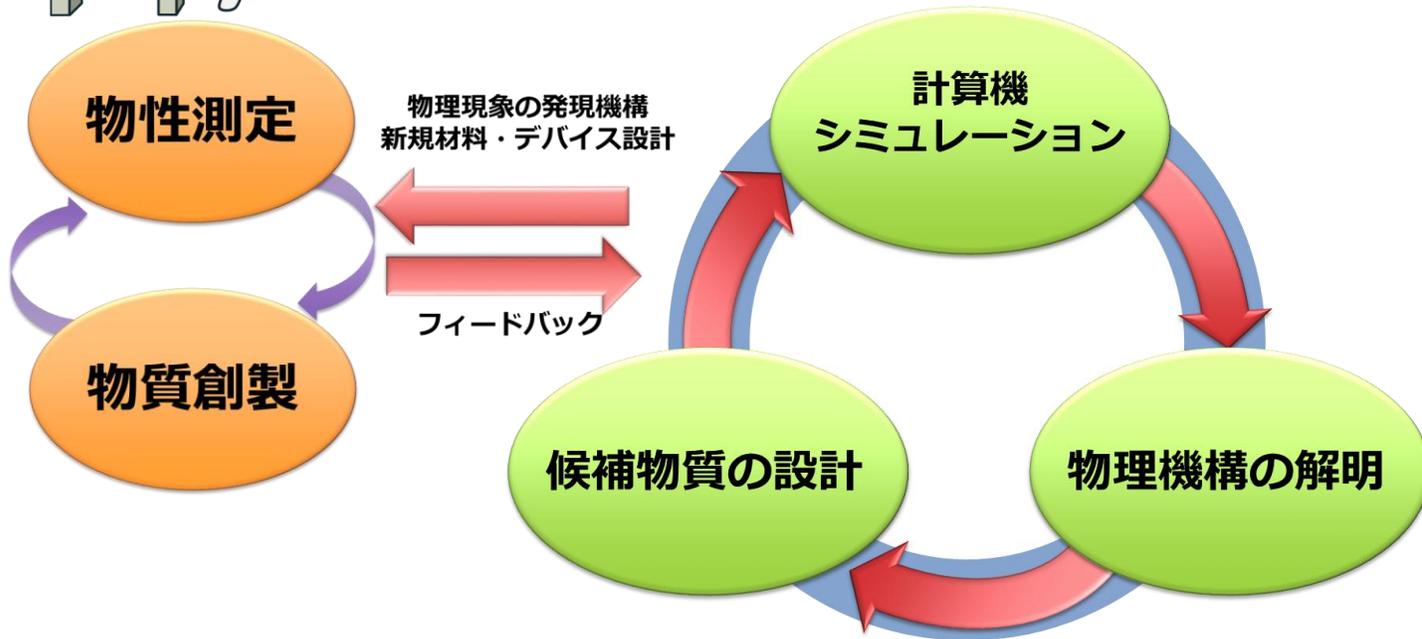
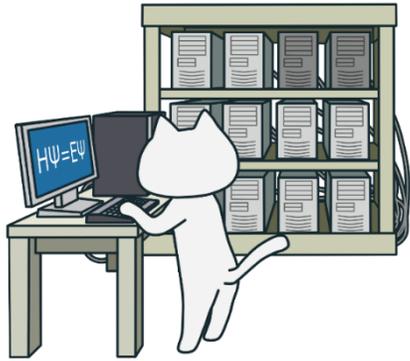
応用例：ステンレス鋼の保護皮膜
Cr₂O₃皮膜中のFe

粒界拡散に影響するFeの価数がわかる!!

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



触媒反応・腐食・電気伝導等の着目する現象を素過程から解析し、
省貴金属・高機能材料設計の指針を得る

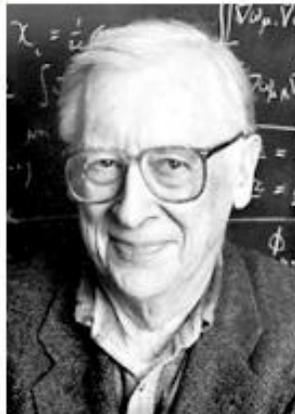
研究イメージ(シミュレーション)

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/

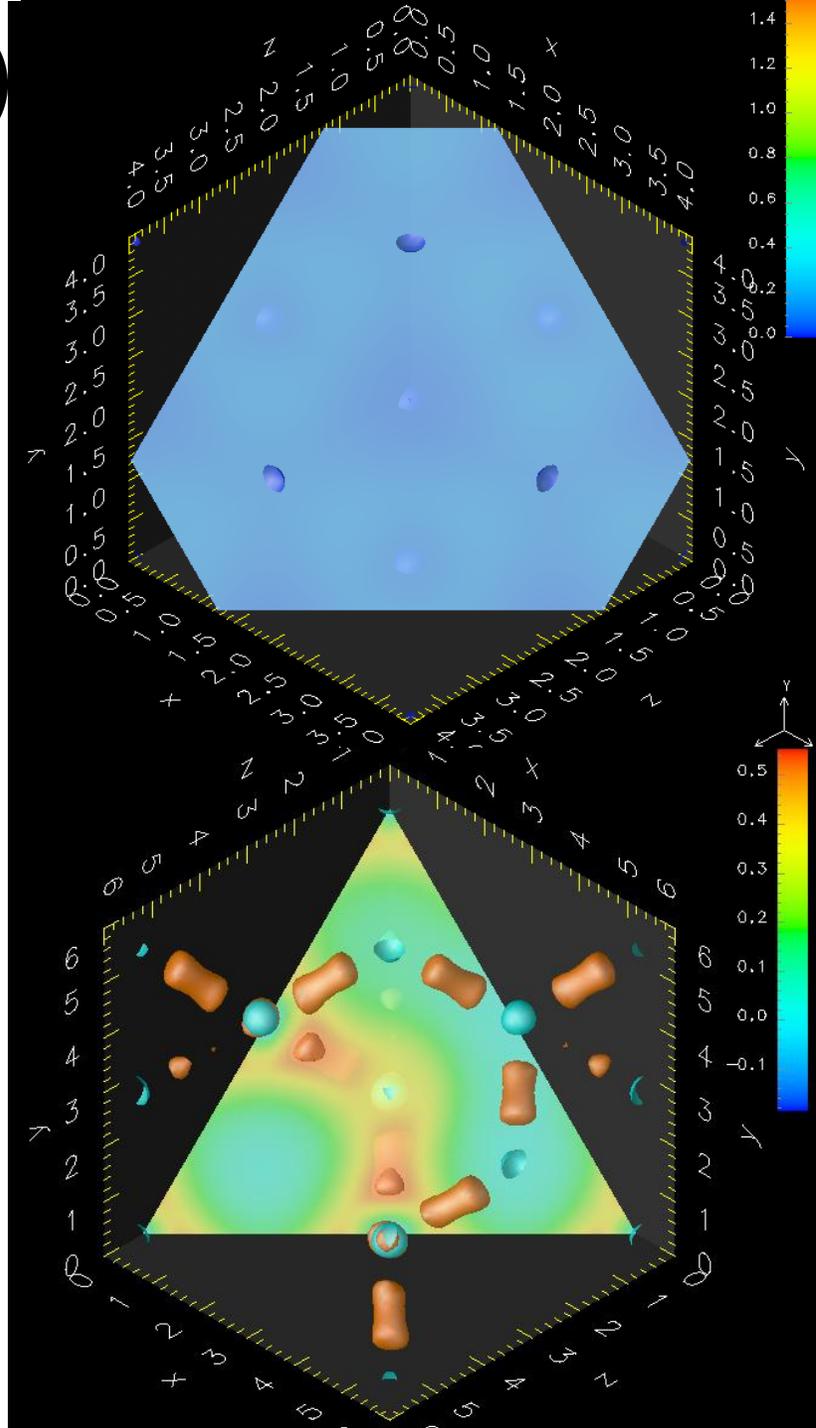
実験値を用いず
原子番号のみで物性を計算

アルミニウム
Al (Z=13)

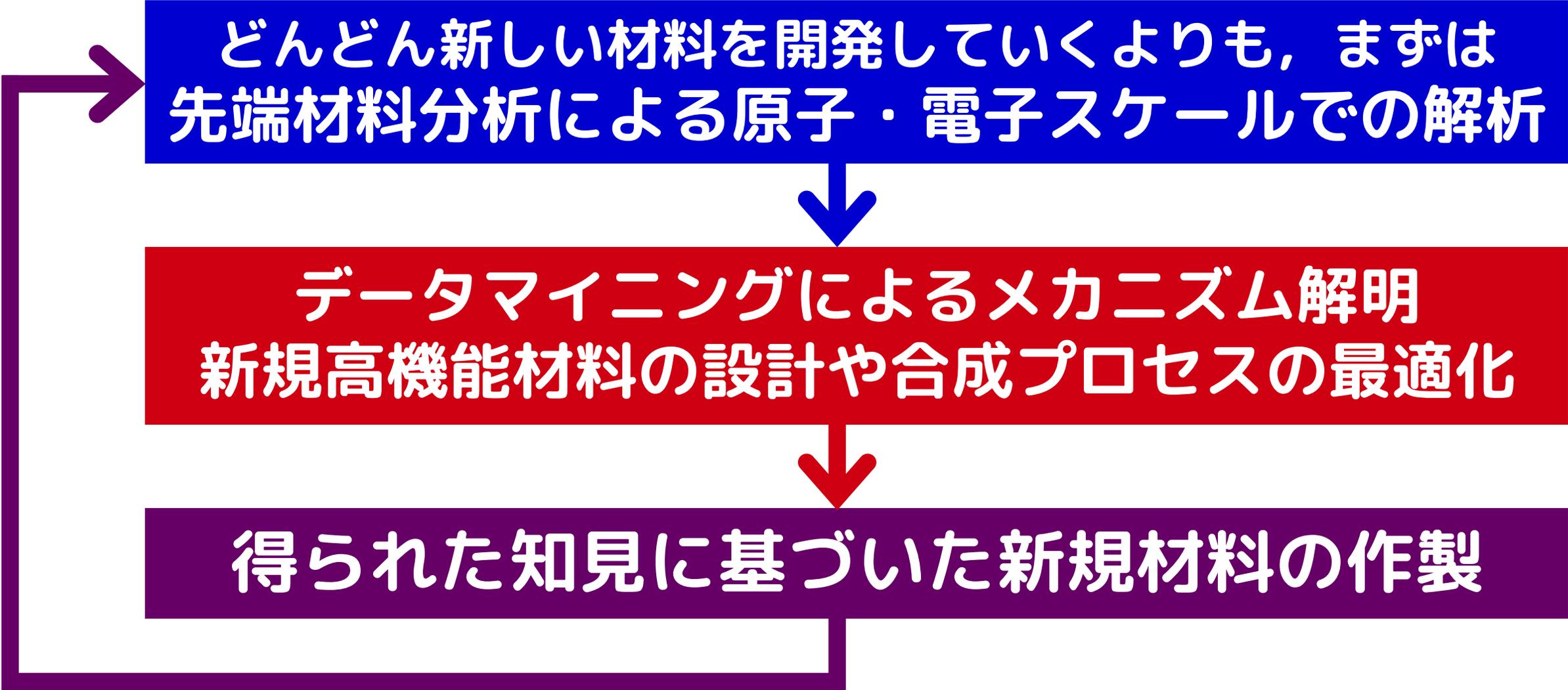
金属結合
結晶全体に広がった
伝導電子

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



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
先端材料分析による原子・電子スケールでの解析

データマイニングによるメカニズム解明
新規高機能材料の設計や合成プロセスの最適化

得られた知見に基づいた新規材料の作製

研究テーマ例一覧

実験

金属3Dプリンター
造形材の組織解析

鉄鋼材料の
結晶粒径制御

光学特性測定

原子力材料

酸化メカニズム

ナノ構造体
プラズモン

蛍光体材料

微細触媒ダイナミクス

先端半導体材料解析

新規二次元材料合成

酸素吸蔵材料

シミュレーション

水素貯蔵関連触媒

燃料電池電極触媒

水素遮蔽・透過膜

研究テーマ例 (鉄鋼材料の熱処理の簡略化)

鉄鋼材料の熱処理の簡略化による省エネルギー化

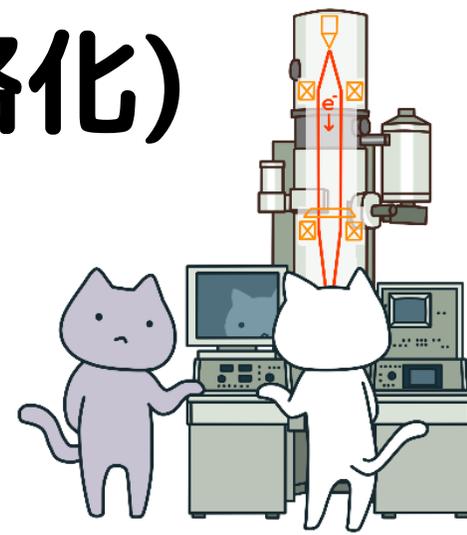
Keyword : 圧縮加工、SEM、結晶粒、添加元素

旧 γ 粒の微細化による鉄鋼材料の靱性向上の実現

⇒旧 γ 粒を微細化できる実験手順や添加元素は何か??



2023年度
あらがね賞

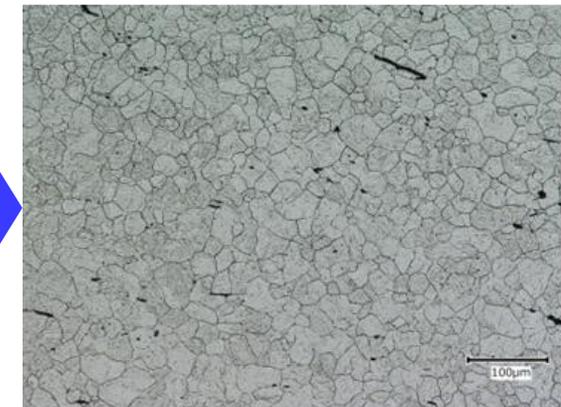
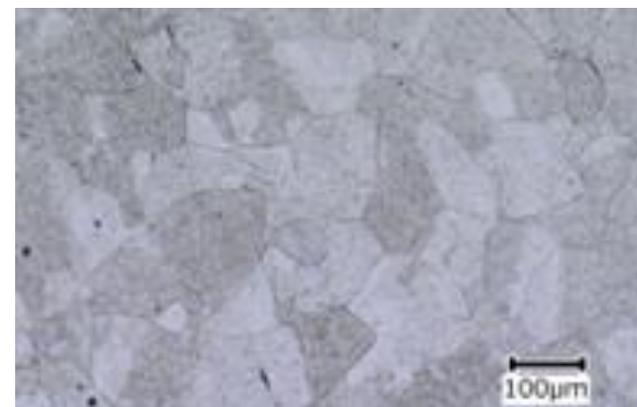


どうやって鉄鋼材料の靱性を上げるの?

二工程?

鉄鋼材料の熱処理の消費エネルギーを削減
→旧 γ 粒が大きいため靱性が低下

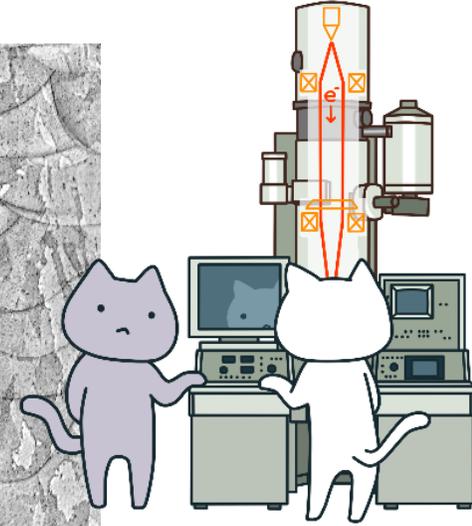
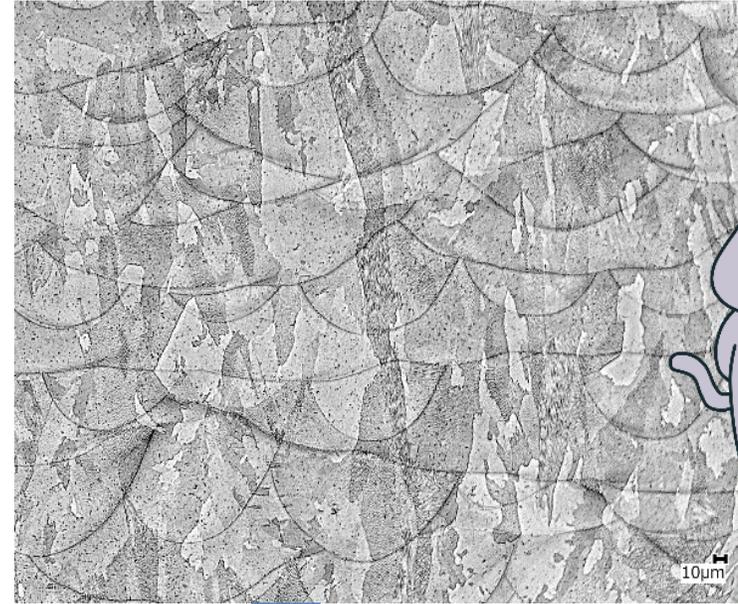
鍛造開始温度, 圧縮加工条件,
添加元素濃度などを適切に制御
→動的再結晶やピン止め効果などで
結晶粒を微細化!!



研究テーマ例 (金属3Dプリンター造形材の金属組織)

金属3Dプリンターによる構造物作製コストの削減
Keyword : 3Dプリンター、SEM、デンドライト

金属3Dプリンター造形材特有の機械特性の異方性
→ 積層造形材の金属組織とは??

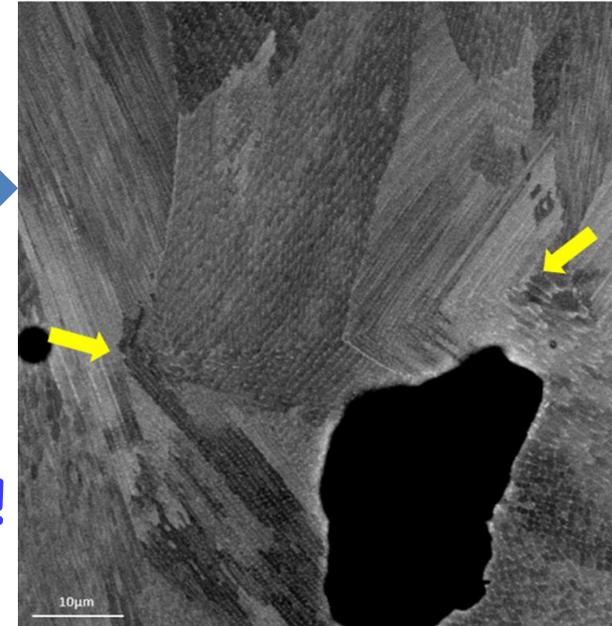


溶融と凝固を繰り返した
金属組織は?



金属3Dプリンターレーザー照射を行い溶融と凝固を
繰り返して構造物を作製
→ このときとは異なる金属組織と機械特性

積層造形材の
マイクロ組織を
直接観察!!

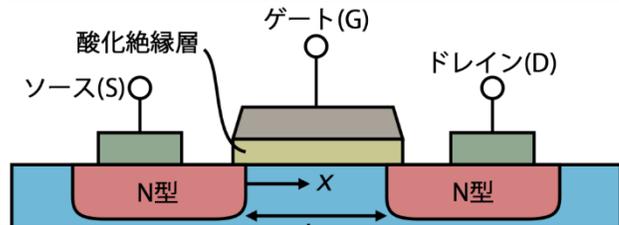
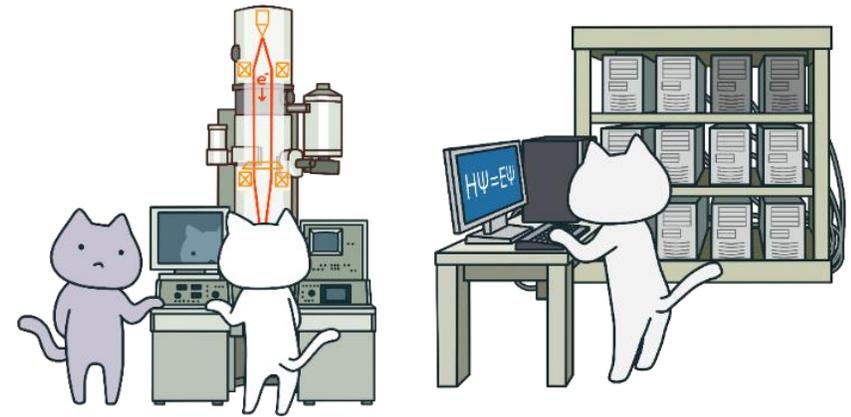


研究テーマ例 (半導体解析)

MOSFETゲート絶縁膜材料

Keyword : 半導体, HAADF-STEM、EELS, 機械学習

電子顕微鏡の測定結果から半導体の性能を評価できないか?
⇒ AIを用いて顕微鏡の測定結果を直接電気特性に変換する

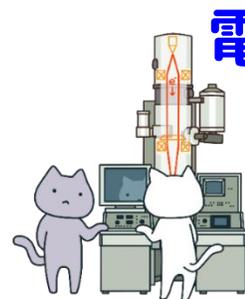


電子顕微鏡測定データからトランジスタの電気特性を予測する
ニューラルネットワークに基づく機械学習モデルを構築することで、
多数のトランジスタに対する歩留まり評価を短時間で実現する

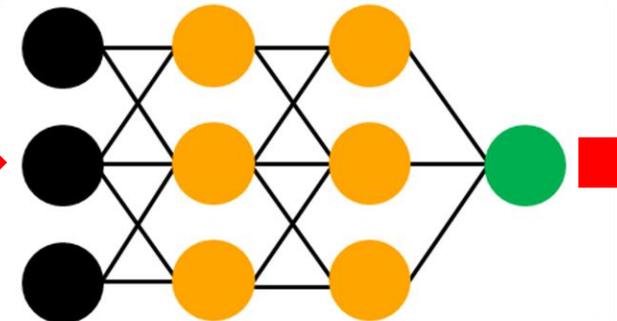
どうやって電気特性を
評価するの?

ゲート絶縁膜中の不純物
欠陥、界面構造に
依存して電気特性が
大きく異なる

電子顕微鏡測定から
半導体の性能を評価したい



電子顕微鏡の
測定データ



ニューラルネットワーク

電気特性

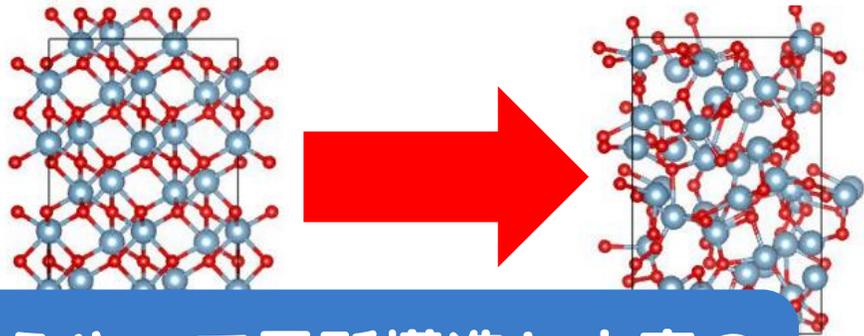


量子力学計算による解釈

研究テーマ例 (セラミック材料中の不純物)

鉄鋼材料, セラミック材料, 半導体材料 Keyword: アモルファス, 水素, 水素脆化, 機械学習

アモルファス材料中の水素不純物の安定性を解析 ⇒ 材料中の水素不純物を制御し, 材料の信頼性向上



Al_2O_3

どうやって局所構造と水素の安定性を関連付けるの?

アモルファス Al_2O_3 は

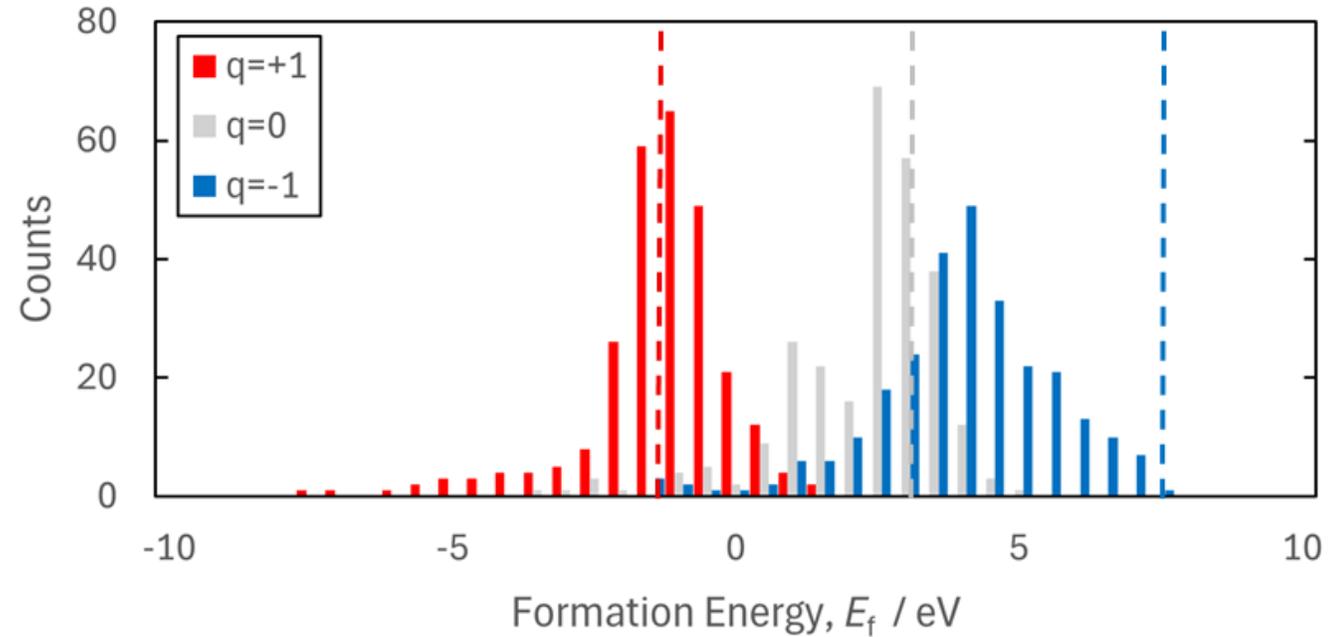
抵抗変化型メモリ

半導体絶縁膜

保護膜

などで利用されている

残留不純物により特性が変化



様々な局所構造が存在するため、
水素不純物の安定性が広い分布を持つ
→ さらに網羅的な研究を行うため、
量子力学計算の結果を再現する
機械学習ポテンシャルを作製!!

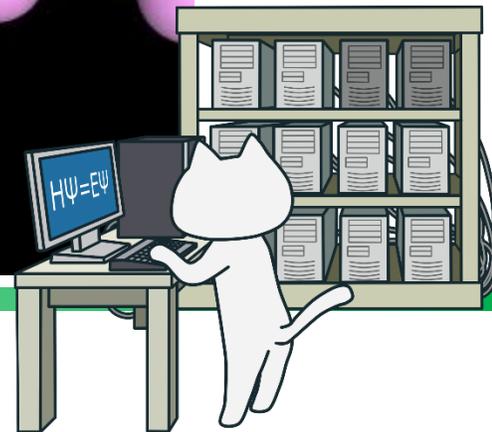
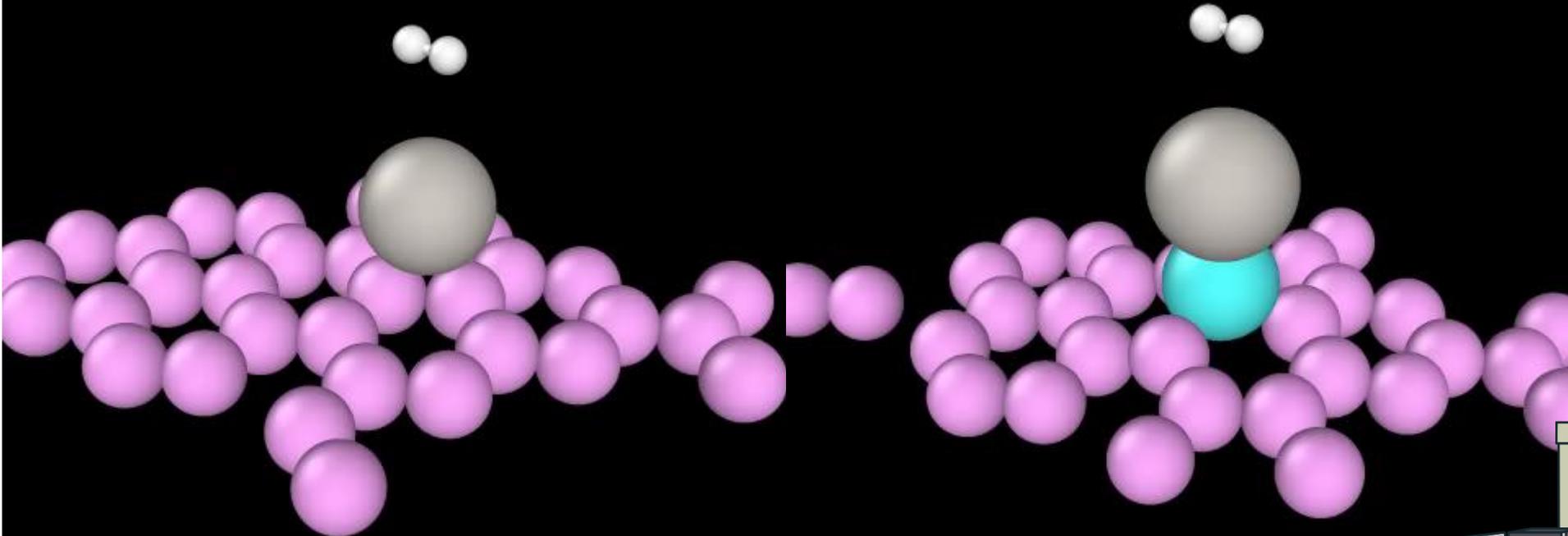
研究テーマ例 (触媒活性)

炭素系燃料電池電極触媒, ギ酸分解触媒

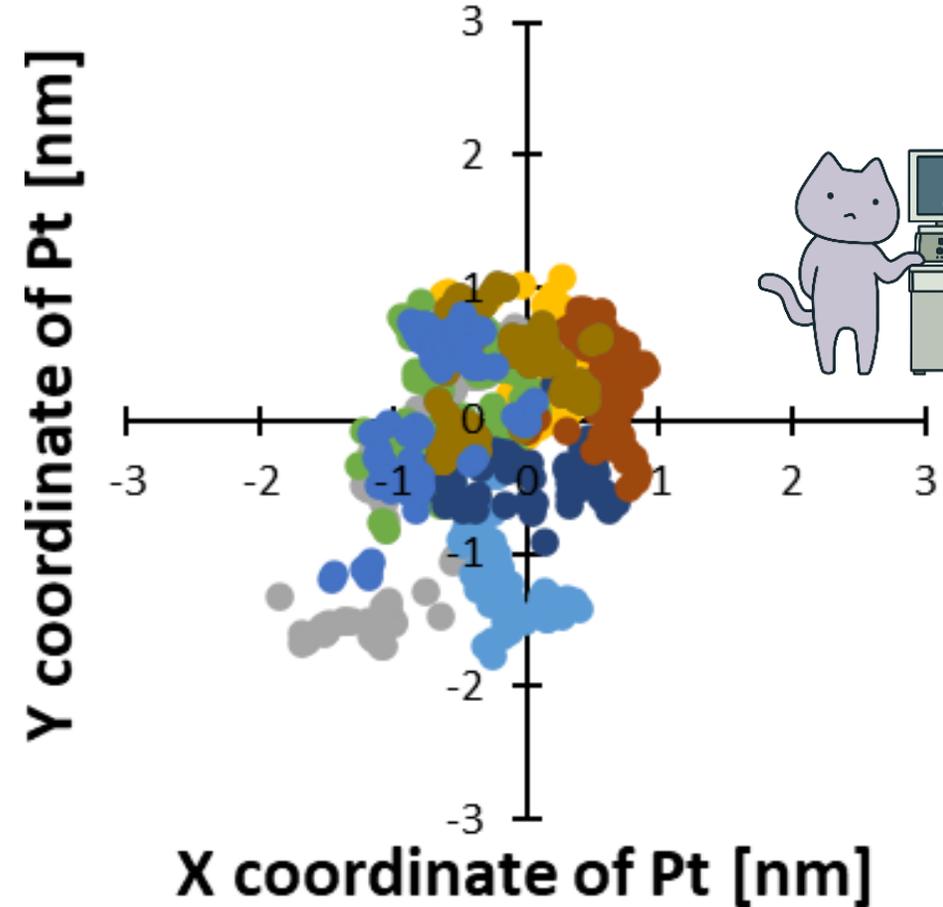
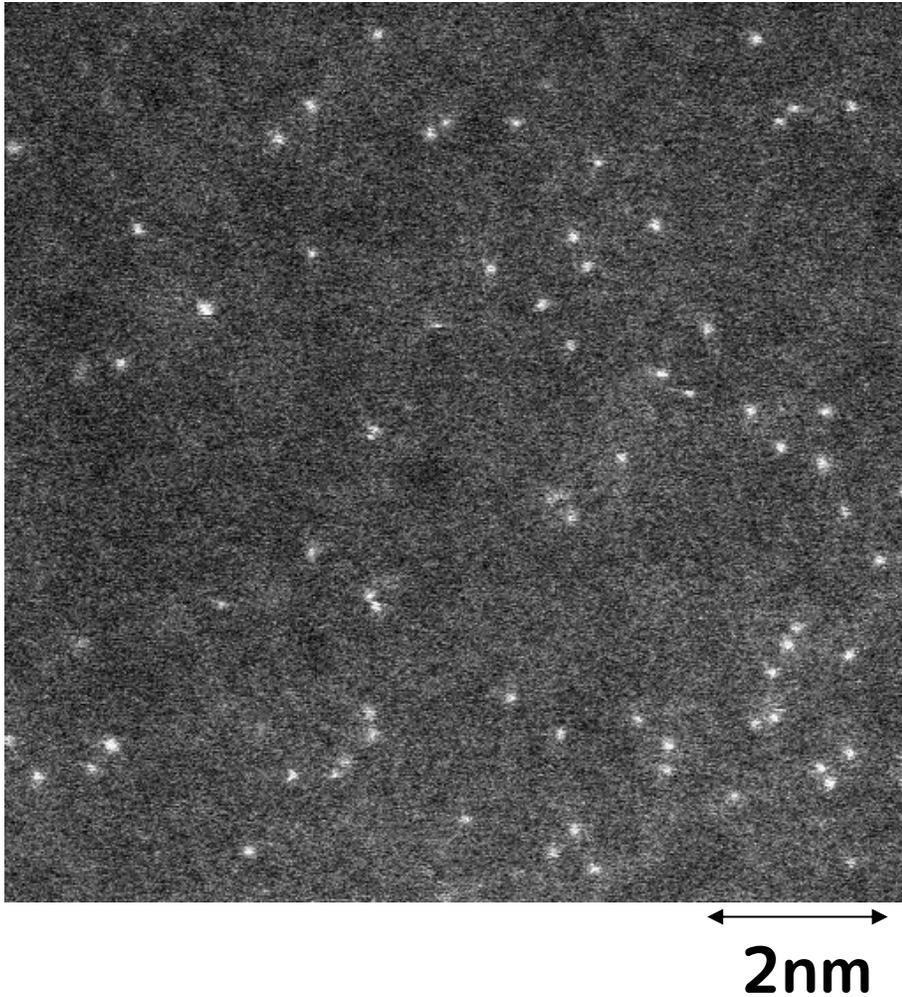
Keyword : 水素, 燃料電池, 省貴金属

$H_2/Pt/$ 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 (触媒ダイナミクス)



Pt単原子触媒の拡散挙動を直接観察!!



2021年度
あらがね賞

電子顕微鏡・量子力学シミュレーション・AIを駆使し 材料機能の起源を原子レベルで解明する

主に実験



研究員：小針 笑美子
田中 由紀子
M2：石塚 基
山田 望実
M1：板東 朋百花
山野 寛司

B4：2名

教授 坂口 紀史

主にシミュレーション



M2：矢ヶ崎 優大
M1：秋元 裕貴
永井 凌太
B4：2名

准教授 國貞 雄治

こんな人に向けています

- ・最先端電子顕微鏡で原子スケールの分析をしたい
- ・量子力学に基づいて電子スケールの分析をしたい
- ・得られた結果の背景にある理論を学び正しく分析・解釈したい