

研 究 課 題
分野融合型格子欠陥研究の発展にむけて

研究代表者
東北大学・金属材料研究所・大野 裕

研究分担者
東北大学・金属材料研究所・米永 一郎、千葉 晶彦、永井 康介、宇佐見 徳隆、林 好一

1. はじめに

格子欠陥研究は研究対象の多様化が進み、それにともない個別の研究対象のための物性評価と制御技術が急進的に発達して、個別の材料・領域における知識の展開が急速に進んでいます。しかしその結果、各研究者の活動する研究領域ないし学会が分散化し、分野間の接点が非常に少なくなりました。既存の格子欠陥研究をブレークスルーして発展させ、新奇な研究対象を発掘するには、異分野を融合させた格子欠陥の研究が不可欠です。

分野融合型の格子欠陥研究を推進させる足がかりとするべく、2008年9月24日および2009年1月19～20日に、東北大学・金属材料研究所ワークショップ「格子欠陥研究の現状と今後の在り方」が開催されました。物理学会、金属学会、応用物理学会、機械・化学系学会など異なる学会に所属される通常接点が非常に少ない研究者の方々に講演者として選び、総計36名（有機材料7、半導体13、金属・金属ガラス15）の先生にご講演頂きました。その結果、「普段は聞くとこのできない他分野の格子欠陥研究に触れることができ非常に新鮮な内容であった」「新しい概念や評価法との遭遇により自身の研究に対する新しいアイデアを得られた」など、異分野融合型の格子欠陥研究の必要性が認識され、またこのような研究会の継続が合意されました。ワークショップ後に参加研究グループ間で共同研究が進み、多角的な格子欠陥研究が進められています。さらなる研究推進には、それらの研究の現状と問題を認識するとともに、より広い分野での格子欠陥研究のニーズを発掘する必要があると考え、本ワークショップの開催に至りました。

最近の欠陥研究分野での特徴は、ナノ構造化による新物性や現象の発見および新しい観察原理に基づく微細精密評価法・その場観察法の開発です。とりわけ、電子顕微鏡やプローブ顕微鏡などを用いた原子直視型ナノ機能その場評価法やアトムプローブ法などのナノ構造3次元評価法など、ユニークな原子・電子レベルでの構造・機能評価法の実現が新物性や現象の発見に結びついています。これらの新物性・現象と評価法を共有して、多くの実用材料に共通する欠陥（たとえば点欠陥や転位・積層欠陥など）のユニバーサルな機能を解明していくことで、材料に依拠しない基盤知識としての格子欠陥研究が展開され、今後の物質材料の開発へとつながることを期待し、本ワークショップを開催しました。

2. 研究経過

研究対象が急速に拡大する格子欠陥分野において、物質材料の区分を超えて、さらに基礎と実用の分野、理論と実験を問わない、分野融合型の格子欠陥研究のあるべき方向性を議論するため、22人の講師の先生方を含む参加者100人規模のワークショップを2日間にわたり開催しました。講演として、2008年度シンポジウム参加者で異分野融合型の格子欠陥研究を進めておられる先生方7人に現状と問題点をご報告いただきました。さらに、従来タイプの特定の物質材料の研究、特異な現象の解明、新物質材料の開発を目的とせず、広範な材料分野から研究者15人にお集まりいただきました。格子欠陥物性の観点で相互のフランクな意見交換を行うことで有機材料、半導体、酸化物、金属などの多岐にわたる物質材料における格子欠陥研究の現状、とりわけ、異分野融合型の欠陥研究の進展状況とニーズ、を認識して、今後の物質材料の開発のために有用な格子欠陥の共通的な基盤知識の確立と拡大を推進することを目的としました。

3. 研究成果

2011年10月27日と28日に東北大学金属材料研究所講堂にて次に示す東北大学金属材料研究所ワークショップを開催しました。

東北大学金属材料研究所共同研究ワークショップ「分野融合型格子欠陥研究の発展にむけて」

共催：日本物理学会領域10 格子欠陥・ナノ構造分科「格子欠陥フォーラム」
材料科学国際週間2011

ワークショップにおいて、参加者数は以下のとおりでした。

10月27日

東北大学（教員）10名、東北大学（学生）14名、他大学（教員）18名、独立行政法人2名、民間1名

10月28日

東北大学（教員）14名、東北大学（学生）23名、他大学（教員）18名、独立行政法人1名、民間1名

二日間の合計：102名

図1に表紙および裏表紙を示す概要集（106ページ）を作成して、参加者へ配布しました。また、概要集はワークショップ終了後にwebにて公開しました。

概要集アドレス <http://lab-defects.imr.tohoku.ac.jp/workshop/2011WS.pdf>

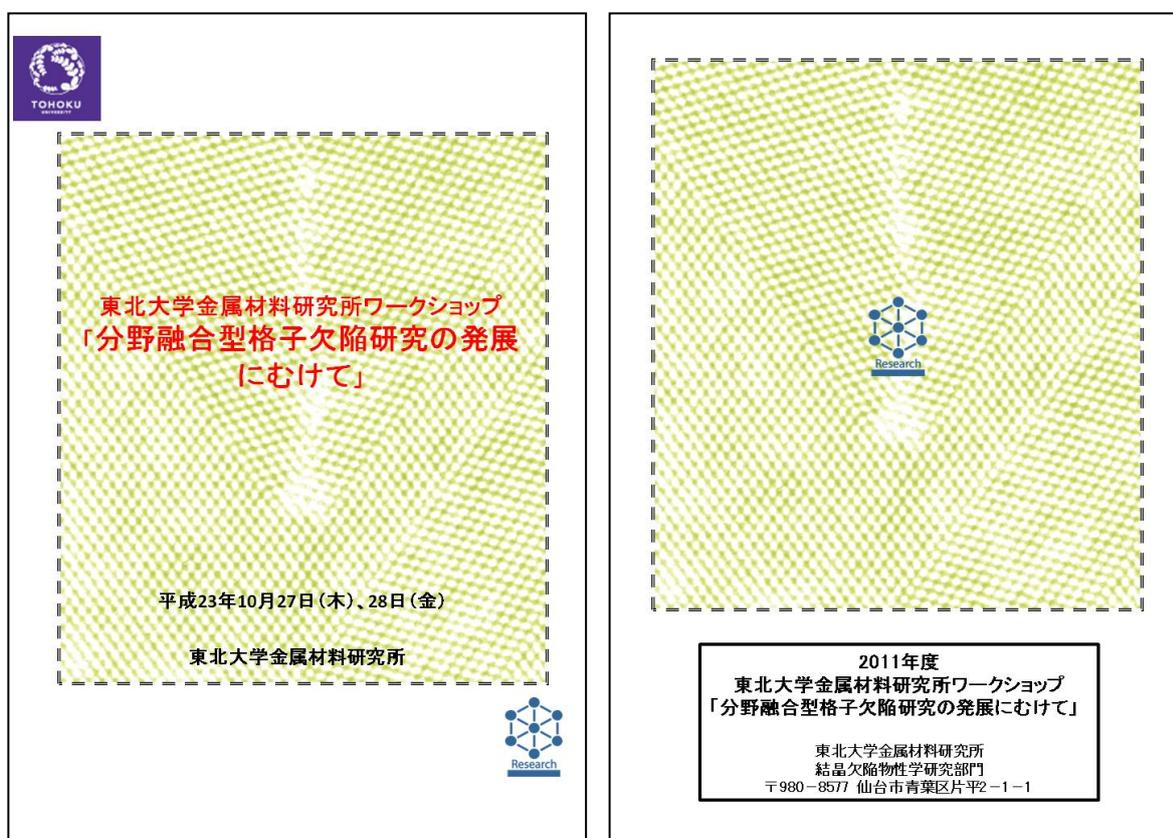


図1 東北大学金属材料研究所ワークショップで配布された概要集の表紙および裏表紙

ワークショップのプログラムを以下に示します。27日は半導体ナノ構造体（午前、午後前半）および炭素系ナノ構造体（午後後半）などの電子材料、28日はエネルギー・環境材料（午前）および構造材料（午後）の講演で構成しました。発表は研究の最前線に立つ若手および中堅を中心に構成し、議論する時間も十分取れるように考慮して各講演時間を30分としました。また、格子欠陥物性の観点での相互のフランクな意見交換を行う目的で、27日夜に懇親会を開催しました。

10月27日

座長：藤井稔（神戸大）、前田康二（東京大）

10:30-10:35 大野裕（東北大金研）

「はじめに」

10:35-11:05 保田英洋（阪大超高压電子顕微鏡センター）

「ナノ粒子の構造物性の進展」

11:05-11:35 河野日出夫（阪大理）

「TEM-STMによるナノ結晶成長と伝導特性の進展」

11:35-12:05 徳本有紀（東北大金研）

「半導体の転位ナノ物性」

休憩

座長：山下善文（岡山大）、白井光雲（大阪大）

13:30-14:00 枝川圭一（東大生研）

「アモルファス・フォトリソグラフィ物質における光禁制帯形成と点欠陥光共振器」

14:00-14:30 西谷滋人（関学理工）

「第一原理計算による半導体欠陥と機能」

14:30-15:00 永井康介（東北大金研）

「アトムプローブによる半導体・金属材料の欠陥機能の解明」

休憩

座長：庭瀬敬右（兵庫教育大）、齊藤峯男（金沢大）

15:15-15:45 重川秀実（筑波大）

「光STMによるナノスケール分光」

15:45-16:15 宮本良之（AIST）

「高強度レーザー光によるナノカーボン構造制御の第一原理計算」

16:15-16:45 平原佳織（阪大工）

「HRTEMによるカーボンナノチューブの構造特性と機能」

16:45-17:15 目良裕（東大工）

「カーボンナノ構造の欠陥と機能の進展」

休憩

18:30-21:00 懇親会

10月28日

座長：大島義文（大阪大）、水野正隆（大阪大）

09:30-10:00 竹田精治（阪大産研）

「環境 TEM による触媒ナノ機能」

10:00-10:30 田中真悟（AIST 関西）

「第一原理計算による触媒ナノ機能」

10:30-11:00 武藤俊介（名大）

「TEM を用いた分光法によるナノ機能評価の現状と今後」

11:00-11:30 山内美穂（北大）

「ナノ金属・合金中の水素機能の進展」

11:30-12:00 宇佐美徳隆（東北大金研）

「太陽電池の高効率化と欠陥制御の進展」

休憩

座長：堀史説（大阪府立大）、田中克志（神戸大）

13:30-14:00 尾形修司（名工大）

「マルチスケール・ハイブリッド計算による欠陥機能」

14:00-14:30 千葉晶彦（東北大金研）

「高機能構造材料の欠陥と機能の進展」

14:30-15:00 白井泰治（京都大）

「構造材料・耐熱材料の欠陥と機能のその場評価」

15:00-15:30 藤浪真紀（千葉大）

「陽電子顕微鏡の現状と今後」

15:30-16:00 林好一（東北大金研）

「原子分解能ホログラフィーの現状と今後」

16:00-16:30 小泉大一（明治大）

「液体金属脆性と粒界機能の進展」

16:30-16:35 大野裕（東北大金研）

「おわりに」

エネルギー・環境材料および構造材料は電子材料に比べて構造・組成・モフォロジーが三次元的に複雑に分布した、多種多様な格子欠陥を内包する材料といえます。材料物性に寄与する個々の欠陥機能を微視的に評価するための、実験的・理論的な最新評価法が紹介されました。3次元アトムプローブ法(永井)による3次元組成分布、高分解能環境TEM法(竹田)による原子反応その場観察、複合分光TEM法(武藤)や原子分解能ホログラフィー法(林)、光STM法(重川)による電子状態の局所解析、陽電子寿命その場評価装置(白井)や陽電子顕微鏡法(藤浪)による空孔型欠陥の構造評価、第一原理計算(田中)およびマルチスケール・ハイブリッド計算(尾形)による欠陥機能の理論的評価法は、講演での材料研究にとどまらず多くの材料に共用できる欠陥機能の汎用評価手法として展開するでしょう。実際、ワークショップ後にこれらの手法を利用した参加研究グループ間での共同研究が複数立ち上がり、新しい分野融合型の格子欠陥研究が進められつつあります。

電子材料のセッションでは、主に電子（保田、河野、平原、目良）や光（宮本）などの量子と材料の相互作用による、局所的な熱的・非熱的な点欠陥・原子の移動を介したナノ構造体の加工・制御に関する実験的・理論的な研究が紹介されました。また、転位（徳本）やアモルファス（枝川）、界面（西谷）などの拡張欠陥と点欠陥の相互作用を利用した拡張欠陥物性の制御に関する研究も紹介されました。エネルギー・環境材料および構造材料のセッションでも、点欠陥との相互作用を介したナノ構造体・格子欠陥の構造制御による触媒機能（山内）や電池機能（宇佐美）、力学特性（千葉、小泉）の向上に関する研究が紹介されました。このようなナノ加工法の原理が基盤知識として確立することは、欠陥を材料物性の制御へと応用する上で非常に重要であり、さらなる展開が求められます。

4. まとめ

実用材料は、構造・組成・モフォロジーが三次元的に複雑に分布した材料が多く、単結晶の立場から眺めると多種多様な格子欠陥を内包する材料といえます。そのような格子欠陥は、本質的な材料機能を担う場合もあれば悪影響を及ぼす場合もあるため、新規機能性材料の開発あるいは改良には、それら欠陥の機能を理解し、制御する必要があります。本ワークショップでは、新奇物性や新現象の発見・理解へとつながる電子顕微鏡や量子プローブなどの原子直視型のナノ機能その場評価法やアトムプローブに代表されるナノ構造3次元評価法、大規模第一原理計算による理論的アプローチなどの、ユニークな原子・電子レベルでの構造・機能評価法に関する最新の研究状況の紹介と意見交換を通じて、格子欠陥物性の観点での基礎研究の充実と応用研究の推進につなげる場を提供できました。本ワークショップと関連して、日本物理学会第67回年次大会 領域10・9合同シンポジウム「エネルギー・環境材料の機能と格子欠陥」（2012.03.25, 関学・兵庫）と第21回格子欠陥フォーラム「格子欠陥が担うエネルギー・環境材料に関する挑戦課題」（2011.09.19-20, 立山国際ホテル・富山）が開催されるなど、機能の制御・新機能の創製にむけた格子欠陥の精密評価を切り口とした実用材料の研究が進展しています。これからも多くの材料に共通する欠陥（たとえば点欠陥や転位・界面など）のユニバーサルな機能を解明していくことで、今後の物質材料の開発のために有用となる格子欠陥の共通的な基盤知識の確立と拡大を推進することが重要であると考えます。