



研究課題名 金属人工格子ルネサンス

東北大学・金属材料研究所・教授

たかなし こうき  
高梨 弘毅

研究課題番号：18H05246 研究者番号：00187981

キーワード：金属人工格子、スピン軌道相互作用、反強磁性構造、スピнкаロリトロニクス

【研究の背景・目的】

異種の金属をナノスケールで周期的に積層した金属人工格子は、巨大磁気抵抗効果(GMR)や層間交換結合、界面磁気異方性等の観点で1980~90年代に盛んに研究された物質群であり、スピントロニクスの基礎を築いた。スピントロニクスは現在新たな展開期を迎え、軌道の自由度を取り入れたスピンオービトロニクスや反強磁性体のメリットを利用した反強磁性スピントロニクス、熱との相関を対象としたスピнкаロリトロニクスが近年注目を集めている。これらの研究の中で、従来考えられていた以上にきわめて強いスピン軌道相互作用が働くなど、異種金属界面の特殊性があらためて認識されるようになり、界面の集合体である金属人工格子は、研究の舞台を提供する格好の材料であると期待される。

本研究では、図1に示した特徴を有する金属人工格子を現代の目であらためて見直し、①界面磁気異方性とスピン軌道トルクの比較によるスピン軌道相互作用の界面効果の解明(スピンオービトロニクス)、②反強磁性結合人工格子におけるスピン軌道トルクを用いた磁化スイッチングと磁化ダイナミクスの解明(反強磁性スピントロニクス)、③大きな熱磁気効果と小さな熱伝導率を併せ持つ金属人工格子の作製(スピнкаロリトロニクス)の3つの課題を柱として研究を進め、スピントロニクスの新展開における金属人工格子の有用性を明らかにする。

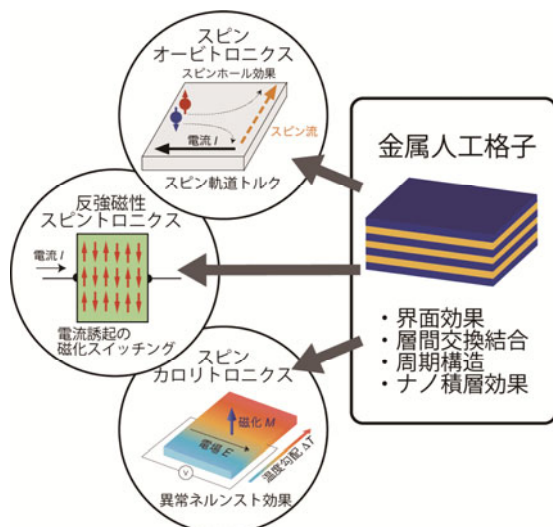


図1 金属人工格子ルネサンスの概念図

【研究の方法】

スピンオービトロニクスでは、界面磁気異方性とスピン軌道トルクを同時に評価する試料構造として「非磁性層1/強磁性層/非磁性層2」の3層構造を基本とし、層厚や材料を様々に変えた薄膜試料を作製する。界面におけるスピン軌道相互作用の役割を明らかにし、スピン軌道トルクの界面効果を最大限に発揮させる。

反強磁性スピントロニクスでは、「強磁性層/非磁性層/強磁性層」の3層構造を基本とする。反強磁性構造のための層間交換結合と磁化スイッチングのための大きなスピン軌道トルクを両立できる非磁性層材料を探索し、面内電流による磁化スイッチングの高効率化を狙う。

スピнкаロリトロニクスとしては異常ネルンスト効果に着目し、界面効果およびナノ積層効果を活用することで、大きなネルンスト係数と小さな熱伝導率を有し、結果として高い無次元性能指数( $ZT$ )を示す材料の開発指針を確立する。

【期待される成果と意義】

金属人工格子は、界面でのスピン軌道相互作用や反強磁性結合とスピン軌道トルクの相関を系統的に調べるための理想的な材料であり、界面での増強効果を上手く利用すれば、巨大なスピン軌道トルクの発現も期待できる。これは、スピンオービトロニクスや反強磁性スピントロニクスの発展に資する重要な成果となりうる。また、スピнкаロリトロニクスにおける金属人工格子の有用性が明らかになれば、新規な熱電材料としての応用も期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ "Enhancement of anomalous Nernst effects in metallic multilayers free from proximity-induced magnetism", K. Uchida, T. Seki, K. Takanashi *et al.*, *Phys. Rev. B*, 92, 094414-1-6 (2015).

【研究期間と研究経費】

平成30年度-34年度  
150,900千円

【ホームページ等】

<http://magmatelab.imr.tohoku.ac.jp>  
koki@imr.tohoku.ac.jp



**研究課題名** 分子—固体表面の直接相互作用による新しい固体触媒  
活性点の設計・構築

とみしげ けいいち  
東北大学・大学院工学研究科・教授 **富重 圭一**

研究課題番号： 18H05247 研究者番号： 50262051  
キーワード： 触媒機能、バイオマス、二酸化炭素

【研究の背景・目的】

現在、多くの化学製品が石油から製造されているが、二酸化炭素の排出削減や石油資源の制約を踏まえると、持続可能な社会構築のためにはバイオマスや未利用な二酸化炭素などを活用する技術の開発が求められている。一方で、バイオマスや二酸化炭素の変換により有用な化学品を製造する場合、化学変換の方法が石油化学製品を製造する場合と大きく異なるため、従来技術を適用することが難しく、新たな技術の開発が必要となる。一方で、生成物と触媒の分離や触媒の再使用の観点で、固体触媒プロセスが有望である。また、現在多ステップを必要とするプロセスを1段で進行させる固体触媒プロセスを開発できれば、二酸化炭素の排出削減への寄与が期待できる。そのため、本研究では、バイオマスや二酸化炭素の効率的な変換のための固体触媒の開発を目的とし、触媒開発のキーとなる触媒活性点の設計法の確立を目指す。

【研究の方法】

本研究では、固体表面と分子・クラスターという2つの成分を直接結合させ、それらのシナジーで、それぞれが持つ性能よりも飛躍的に高い性能を持った触媒活性点を作り出すことを目指す。固体触媒の調製方法の一般的な例の一つは、分子触媒をリンカーで固体表面につなぐというものである(図1(a))。この場合、分離は容易になるが、性能は分子触媒と同等以下のままである。これに対して本研究では、固体表面に直接相互させることにより、分子触媒と比較して飛躍的に高い性能を示す表面種へと構造変化させることを狙う(図1(b))。

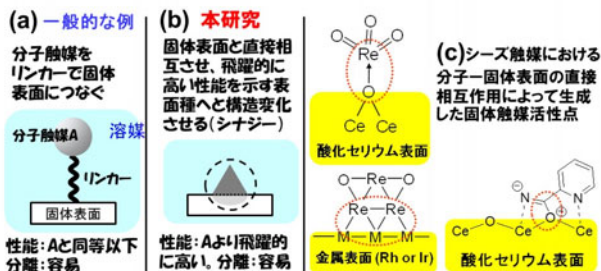


図1. 固体触媒の調製方法(a), (b)および分子—固体表面の直接相互作用を活用したシーズ触媒(c)

シナジーを発現する成分の組み合わせは特異的で、それを見いだすためには絨毯爆撃的探索が必要と考

えられている。これに対して、本研究では、研究代表者らが見いだしてきたシーズとなる触媒を詳細解析し、それらの知見に基づき、実用的(安価、元素戦略)な触媒の開発へ活用する。触媒構造や反応機構の詳細解析には、触媒反応条件下での解析が重要であるため、他の手法と合わせて、シンクロトロン放射光準大気圧X線光電子分光法および計算化学を用いて、相互作用した表面種の挙動を解析する。

【期待される成果と意義】

シーズ触媒としては、脱酸素脱水反応に有効な酸化セリウム上の単核酸化レニウム種、炭素—酸素結合水素化分解に有効なロジウムまたはイリジウム金属表面上酸化レニウムクラスター、二酸化炭素とアルコールからの有機カーボネート合成に有効な酸化セリウム+2-シアノピリジン触媒系などが挙げられる(図1(c))。これらの触媒系はバイオマスや二酸化炭素からの有用化学品合成に対して非常に高い性能を示すが、レニウム、ロジウム、イリジウムなどの貴金属や2-シアノピリジンなど複雑な分子が用いられており、より安価で豊富に存在する元素や単純な分子を用いた触媒が求められる。一方で、活性点を構成する元素が変更されると、それに伴って組み合わせる成分についても検討が必要になるが、シーズ触媒の詳細解析の結果を踏まえ、その探索を効率化させる。安価な触媒が開発できれば、バイオマスや二酸化炭素から化学品を合成するプロセスの実用化につながるものと期待できる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Transformation of Sugars to Chiral Polyols over a Heterogeneous Catalyst, M. Tamura, K. Tomishige, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 57, 8058-8062 (2018)
- Self-Assembled Hybrid Metal Oxide Base Catalysts Prepared by Simply Mixing with Organic Modifiers, M. Tamura, K. Tomishige, et al., *Nature Commun.*, 6, 8580 (2015)

【研究期間と研究経費】

平成30年度—34年度  
146,900千円

【ホームページ等】

<http://www.che.tohoku.ac.jp/~erec/tomi@erec.che.tohoku.ac.jp>



## 研究課題名 50T 高温超伝導無冷媒超伝導磁石の要素技術開発

東北大学・金属材料研究所・教授

あわじ さとし  
淡路 智

研究課題番号：18H05248 研究者番号：10222770

キーワード：超伝導磁石、高温超伝導

### 【研究の背景・目的】

1986年に発見された高温超伝導材料は、30年以上の年月を経て実用線材として販売されるようになり、応用化フェーズへ入っている。特に、高温超伝導線材はその優れた特性から20Tを超える強磁場マグネットへの応用が期待されている。しかし、高温超伝導材料のマグネット応用における設計理論が、従来超伝導材料とは大きく異なるため、実用の強磁場マグネットは我々以外には実現していない。

一方で、無冷媒超伝導マグネットは、従来の液体ヘリウムで浸漬冷却する方式ではなく、冷凍機で直接マグネットを冷却する方式で、高価で取り扱いの難しい液体ヘリウムが必要なく、長時間安定した磁場を発生できるメリットがある。

本研究では、我々が有する52mmの室温空間に24.6Tを発生する世界最高実用無冷媒超伝導マグネットのノウハウを発展させて無冷媒超伝導マグネットの世界記録を更新することで、高温超伝導材料の持つ優れた性能を最大限に引き出し、50T超伝導マグネット開発のための基礎的現象の理解に基づく要素技術を開発する。

### 【研究の方法】

強い磁場を安定に発生させる高温超伝導マグネット技術として以下の4課題を設定する。

- ① 伝導冷却を見据えたコイル化技術、
- ② 高い電磁力に対する機械的変形と補強、
- ③ クエンチ（熱暴走）現象の理解と保護、
- ④ 交流損失と不斉磁場、

コイル化技術としては、極力劣化防止を施し、さらに一部の劣化でも運電可能な無冷媒コイル化技術を実施。さらに、高い電磁力に耐える補強コイルの変形挙動の解明、部分的に劣化した場合の熱暴走挙動の理解と保護方法に関しては、サーモグラフィによるクエンチ伝搬挙動の計測と、詳細なシミュレーションによるクエンチ挙動を理解し、保護方法を確立する。また、遮蔽電流や電磁気的な結合の影響を考慮した交流損失や不均一電流による影響を計算と実験から追求する。これらを最初の2年間で目途をつけ、3年目には実用レベルのREBCOコイルを製作し、25T無冷媒超伝導マグネットのインサートを置き換えることで、無冷媒超伝導マグネットの世界記録24.6Tを超える強磁場を発生させて、世界記録の更新を行い、将来の50T級超伝導マグネットへの要素技術を実証する。

### 【期待される成果と意義】

高温超伝導強磁場マグネットのための新しいマグネット技術を確立することで、50T級超伝導マグネットへの道標を示す。現在、強磁場発生は世界的に20MW以上の大電力を使って40Tを超える強磁場を発生させているが、日本では高温超伝導技術を駆使して超伝導だけで同等かそれ以上の強磁場発生を狙える。優れた強磁場環境によって、強磁場科学の新たな展開のほか、高温超伝導技術により核融合・加速器・MRI・NMRなど高温超伝導応用への波及効果も期待できる。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ S. Awaji *et al.*, "First performance test of a 25 T cryogen-free superconducting magnet", *Supercond. Sci. Technol.* **30** (2017) 065001.
- ・ S. Awaji *et al.*, "10T generation by an epoxy impregnated GdBCO insert coil for the 25T-cryogen-free superconducting magnet", *Supercond. Sci. Technol.*, **29** (2016) 055010.

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度－平成33年度

146,100千円

### 【ホームページ等】

<http://www.hflsm.imr.tohoku.ac.jp/>  
[awaji@imr.tohoku.ac.jp](mailto:awaji@imr.tohoku.ac.jp)

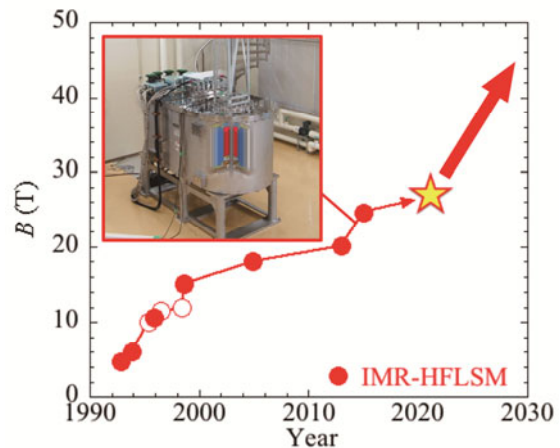


図1 無冷媒超伝導マグネットによる発生磁場の世界記録と目標



## 研究課題名 リチウムイオンと多価イオンが奏でるデュアルイオン蓄電池に向けた新学理の構築

東北大学・金属材料研究所・教授

いちつぼ てつ  
市坪 哲

研究課題番号：18H05249 研究者番号：40324826

キーワード：多価イオン伝導、協奏的相互作用、デンドライトフリー、合金負極蓄電池

### 【研究の背景・目的】

蓄電技術の構築はサステナブル環境エネルギー科学の観点から必須である。高効率にエネルギーを利用するには、エネルギー貯蔵とエネルギー消費とをバランスさせながら使用することが求められ、発電・蓄電・ITを併用したスマートグリッドシステムの開発が進められている。しかし、現状で主役を担っているリチウムイオン電池の高エネルギー密度化は限界にきている。よって、新たな蓄電デバイス系を確立していく必要がある。

リチウムイオン電池などの一価キャリアイオンを使う蓄電池の物理化学機構はよく理解されているが、マグネシウムなどの多価イオンをキャリアとする蓄電池系の基礎科学は殆ど未解明である。我々は、国内でいち早く二価キャリアを利用するマグネシウム蓄電池用正極材料開発に努めてきており、マグネシウム蓄電池用正極材料として、可能性のあるいくつかの候補群の提案に成功してきた。また、我々は、これまでに一価イオンと二価イオンを同時に利用するデュアルキャリア蓄電池の概念を先駆けて提案し、本分野でその潮流を作ってきた。そこで本研究では、多価イオンをキャリアとして利用する蓄電池のための材料科学を確立し、一価および多価イオンが奏でるデュアルキャリアの協奏的相互作用の学理を構築することを目指す。これは、蓄電池分野のみならず、燃料電池固体電解質やイオン伝導体などの分野へも拡張される発展的なテーマになると考えられる。

### 【研究の方法】

本研究において解決すべき学術的な問題は下記の通りである。

【課題1】相転移による整合歪場効果：キャリアイオンの脱挿入に伴い、活物質の構造が異なる相へ整合相転移するが、格子整合するために生じる整合歪場が電極特性に大きな影響を及ぼしていると考えられる。その歪場の定量的な評価を走査・透過電子顕微鏡や軟X線分光法、放射光やX線回折解析などで行い、また歪エネルギーを第一原理計算やマイクロメカニクス計算などにより評価する。そして相分離系であっても高サイクル性を示すため指針を確立することを目指す。

【課題2】デュアルイオン間の協奏的效果の解明：一価イオンと多価イオンとの協奏的相互作用を、実験や第一原理計算などを用いて解明し、図1に示すように拡散パスの決定や多価イオンの活性化エネルギーを低減させる学理を構築する。一価イオンとしてリチウムイオンを用い、その存在下で、多価イオ

ンが室温でも可動できる機構を見出す。

【課題3】デンドライト抑制機構の提案：充電時におけるデンドライト形成を理解することは、極めて重要な問題である。我々は、リチウムイオン以外のマグネシウムイオンの存在下において、デンドライト形成が抑制される傾向があることを見出してきた。この現象を熱力学や速度論に基づいて理論的・実験的に解明し、そこから逆にデンドライト形成機構・抑制機構を相転移ダイナミクスの観点から明らかにする。

### 【期待される成果と意義】

一価イオンおよび多価イオンの二種のキャリアが協奏的に正の効果を及ぼすことによって、これまで単一キャリアのみではなし得なかった特徴を作り出すことができることに着目し、新しい機構を有する革新的な蓄電池キャリアの科学の構築を目指す。

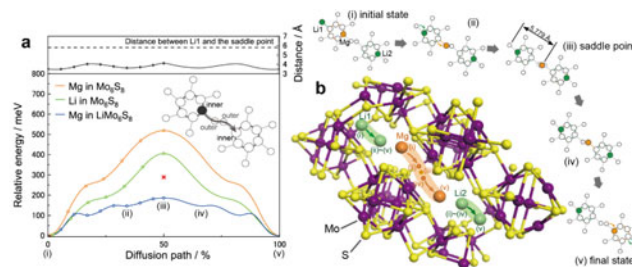


図1 拡散の活性化エネルギーの低減(左)とデュアルイオンの拡散パス(右)

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ H. Li, N. L. Okamoto, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, F. Oba, T. Ichitubo, *Advanced Energy Materials*, 1801475 (2018).
- ・ H. Li, T. Ichitubo, S. Yagi, E. Matsubara, *Journal of Materials Chemistry A5*, 3534 (2017).
- ・ T. Ichitubo, S. Okamoto, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara, *Journal of Materials Chemistry A3*, 10188 (2015).

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度～34年度  
152,800千円

### 【ホームページ等】

<http://ilab.imr.tohoku.ac.jp/index.html>  
tichi@imr.tohoku.ac.jp

## 【基盤研究(S)】

### 大区分D



## 研究課題名 次世代極短パルスレーザーによるアト秒科学の新展開

東京大学・物性研究所・准教授 いたたに じろう  
板谷 治郎

研究課題番号：18H05250 研究者番号：50321724

キーワード：アト秒科学、軟X線分光、極短パルスレーザー、波長変換

### 【研究の背景・目的】

過去二十余年にわたる高強度チタンサファイアレーザー技術の進展によって、高次高調波による極端紫外域でのアト秒パルス発生が実現し、「アト秒科学」と呼ばれる超高速光科学が劇的に進展した。しかし現在、チタンサファイアレーザーそのものに起因するレーザー性能の限界（特に、波長が近赤外で固定されていることと、平均出力がレーザー結晶の熱負荷によって制限されていること）により、アト秒科学の更なる発展が制限されている。

本計画では、アト秒光パルスを「実験手法の原理実証のための光源」から「物質科学のツールとして使える光源」へ飛躍させるために、高出力 ytterbium (Yb) 固体レーザーによって励起される高強度光パラメトリック増幅光源を「次世代極短パルスレーザー」として開発する。これにより、真空紫外・極端紫外・軟X線をカバーし、分光应用到十分なフォトンフラックスをもつアト秒極短パルス光源を実現し、その物性研究への応用を実証する。

### 【研究の方法】

高次高調波の最大光子エネルギーはレーザー波長の2乗に比例することから、より短波長のアト秒パルスを発生するには、長波長の高強度レーザー光源が必要になる。一方、高次高調波の変換効率はレーザー波長の5~6乗に反比例することから、軟X線領域のアト秒パルスのフォトンフラックスを増大させるには、レーザーの繰り返しを高める必要がある。これらのスケール則を踏まえ、軟X線領域・極端紫外域・真空紫外域の三つの波長域において、適切な波長をもつ高強度極短パルス光パラメトリック増幅(Optical Parametric Chirped Pulse Amplification; OPCPA)光源を開発する。光パラメトリック増幅では、適切な非線形光学結晶と位相整合条件の選択により、様々な波長域で広帯域増幅が可能である。また、増幅媒質となる非線形光学結晶に励起エネルギーが蓄積されないため、熱負荷がきわめて小さいという特徴がある。OPCPA光源の励起光源としては、高平均出力、低フォトンコスト、高信頼性といった特徴をもつ半導体レーザー励起 Yb 固体レーザーを用いる。

高フォトンフラックスのアト秒光源の開発と同時に、アト秒ビームライン・先端計測装置を開発し(図1)、フェムト秒からアト秒領域での軟X線吸収分光や光電子分光などの物性実験への展開を図る。

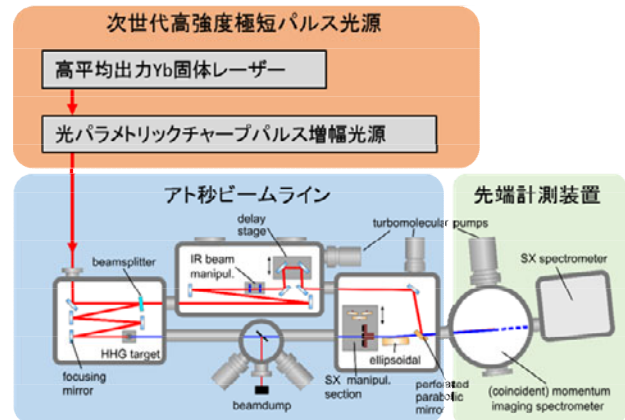


図1 アト秒光源と計測系の概念図

### 【期待される成果と意義】

本研究により、真空紫外・極端紫外・軟X線領域におけるアト秒パルス光の繰り返し周波数とフォトンフラックスが増大し、アト秒パルス光を利用した広範な物性計測が可能となる。これにより、「アト秒科学」と「物質科学」が融合し、物質の非平衡・励起状態に関する新しい学理構築への展開が期待出来る。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- N. Saito, N. Ishii, T. Kanai, S. Watanabe, and J. Itatani, "Attosecond streaking measurement of extreme ultraviolet pulses using a long-wavelength electric field," *Scientific Reports*, 6:35594, 1-5 (2016).
- N. Ishii, K. Kaneshima, K. Kitano, T. Kanai, S. Watanabe, and J. Itatani, "Carrier-envelope phase-dependent high harmonic generation in the water window using few-cycle infrared pulses," *Nature Commun.* 5:3331, 1-6 (2014).

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度-34年度  
150,300千円

### 【ホームページ等】

<http://itatani.issp.u-tokyo.ac.jp/>  
[JItatani@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:JItatani@issp.u-tokyo.ac.jp)



## 研究課題名 電子供与の増幅による低温作動アンモニア合成触媒の開発

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授 はら みちかず  
原 亨和

研究課題番号：18H05251 研究者番号：70272713

キーワード：不均一系触媒、アンモニア合成

### 【研究の背景・目的】

鉄系触媒を使うハーバー・ボッシュ法によるアンモニアの大量生産は100年以上に渡って人類の人口増加と文明を支えてきた。アンモニア生成反応は発熱反応であるため、反応温度の上昇と共にアンモニア収率は激減する。実際、400℃でのアンモニアの理論収率は20 MPaの高圧条件でも40%を越えることはない。このため、最適な反応温度が400℃以上の鉄系触媒を使い、十数 MPaの加圧条件で運用される商用ハーバー・ボッシュ法では、多くのエネルギーを消費するのにもかかわらず、そのアンモニア収率は30%程度に過ぎない。

自然エネルギー等による水素源の多様化、液体NH<sub>3</sub>の分散生産、加圧によるエネルギー消費、プラントの耐圧性・規模の観点から、来るべきNH<sub>3</sub>生産には数 MPaで可能な限り高いNH<sub>3</sub>収率を達成する不均一系触媒プロセスが好ましいと考えられる。しかし、これはハーバー・ボッシュ法によるアンモニア生産の開始以来の課題である。

本研究は上記100年来の課題を解決するため、80%以上のNH<sub>3</sub>収率を5 MPa未満の圧力で達成する不均一系触媒の創出を目的としている。これは150℃未満で高いNH<sub>3</sub>合成活性をもつ不均一系触媒の創出を意味する。

### 【研究の方法】

本研究では新たに見出された強い電子供与能をもつ材料群と遷移金属で構成される触媒を基盤とし、下記の検討を通して目的を達成する。

1. 遷移金属を担持した種々の上記電子供与材料群の触媒作用と表面特性の関係を明らかにし、低い温度でのNH<sub>3</sub>合成に有望な電子供与材料を選定する。
2. 選定した電子供与材料担持遷移金属触媒における電子供与性を2つの方法で増幅し、低い温度でのNH<sub>3</sub>合成活性を大きく押し上げる。
3. 開発した触媒を加圧下(1~5 MPa)で性能評価することによって、目標達成の成否を判断し、より高性能な触媒の開発指針を得る。

### 【期待される成果と意義】

近年、「Wind to Ammonia」と呼ばれる新たなアンモニア製造プロセスが海外で注目されている(図1)。これは風力発電で水を電気分解し、生成した水素をハーバー・ボッシュ法によりアンモニアに変換する

プロセスであり、化石資源を使わずに持続的にアンモニアを生産する試みである。しかし、現時点で「Wind to Ammonia」の実現は極めて困難である。これは高温・高圧が不可欠な既存のハーバー・ボッシュ法を風力発電だけで稼働させるためである。メタン改質による水素製造とハーバー・ボッシュ法を組み合わせた既存のアンモニア製造商用プラントでは、豊富なスチームを綿密に利用することによってハーバー・ボッシュ法のエネルギー消費を極限まで低減させているが、スチームを使えない「Wind to Ammonia」ではハーバー・ボッシュ法で消費されるエネルギーは飛躍的に高くなる。本研究成果はこの化石資源を使わないアンモニア生産の実現に大きく貢献すると考えられる。

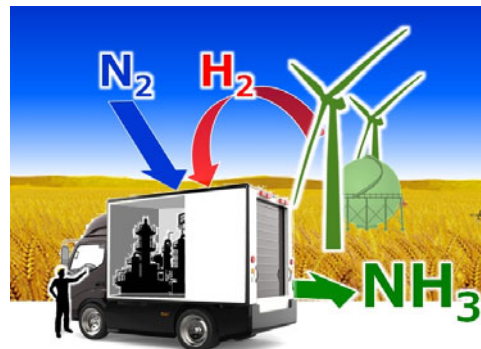


図1 Wind to Ammonia

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Komanoya, T; Kinemura, T; Kita, Y; Kamata, K; Hara, M\*, “Electronic Effect of Ruthenium Nanoparticles on Efficient Reductive Amination of Carbonyl Compounds”, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 11493–11499, 2017.
- Hara, M\*; Kitano, M; Hosono, H\*, “Ru-Loaded C12A7:e Electride as a Catalyst for Ammonia Synthesis”, *ACS Catalysis*, **7**, 2312–2324, 2017.

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度–34年度  
146,600千円

### 【ホームページ等】

[http://www.msl.titech.ac.jp/~hara\\_mhara@mas.titech.ac.jp](http://www.msl.titech.ac.jp/~hara_mhara@mas.titech.ac.jp)



## 研究課題名 多次元X線タイコグラフィによる 次世代放射光顕微分光プラットフォームの構築

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

たかはし ゆきお  
高橋 幸生

研究課題番号：18H05253 研究者番号：00415217

キーワード：放射光、X線タイコグラフィ、位相回復、X線吸収分光

### 【研究の背景・目的】

実用材料の多くは、ナノメートルからサブマイクロメートルスケールでのドメイン構造を有する不均質・複雑系である。したがって、新材料を設計・開発する際、ナノ・メソスケールでの微細構造と機能の相関を解明することが極めて重要である。

我々は、これまで、放射光コヒーレントX線回折と位相回復計算に基づくナノ構造可視化技術であるX線タイコグラフィ法の高分解能化・高感度化に関する研究を推進し、世界最高水準の性能を実現してきた。更に、X線タイコグラフィ法を入射X線のエネルギー軸方向に発展させることで、ナノスケールでの試料のX線吸収微細構造(XAFS)の空間分布を取得する「タイコグラフィ-XAFS法」を実証し、不均質なバルク材料の構造-機能相関解析に応用してきた。

本研究課題では、タイコグラフィ-XAFS法を高度化することで多次元X線ナノイメージング技術とし、様々な機能性材料のマルチスケール構造-機能相関解析に応用することで、次世代の放射光顕微分光の共通基盤技術として確立することが目的である。

### 【研究の方法】

本研究課題では、いくつかのX線光学的アプローチ、情報科学的アプローチにより、目的の空間分解能を達成するために必要なタイコグラフィ-XAFS法の計測時間を大幅に短縮する。そして、タイコグラフィ-XAFS法に計算機断層撮影法を組み合わせることで、タイコグラフィ-XAFS法を三次元空間に拡張した多次元X線タイコグラフィ法として確立する。そして、大型放射光施設SPring-8において、触媒材料、高分子材料、磁性材料などの様々な機能性材料のナノ構造と機能の相関解析に関する共同研究を推進する。

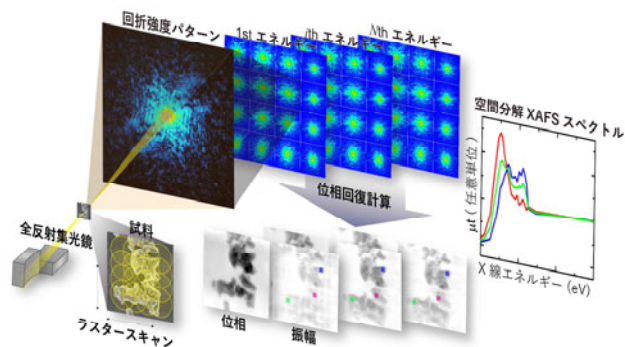


図1 タイコグラフィ-XAFS法の概念図

### 【期待される成果と意義】

現在、顕微分光ツールとして、透過型電子顕微鏡(TEM)を用いて電子線エネルギー損失分光(EELS)測定を用いて行うTEM-EELSが普及しているが、電子線の侵入深さの問題から数十nm以上の厚みを有する試料観察を苦手とする。多次元X線タイコグラフィは、マイクロメートルの厚みを有する試料を10nmの空間分解能で可視化できるため、未開拓となっているバルク試料全体に対する構造-機能相関の科学が開拓される。

また、低エミッタンス光源である次世代放射光施設では、利用可能なコヒーレントX線のフラックスが増加するため、X線タイコグラフィの空間分解能・時間分解能の向上が見込まれる。次世代放射光施設において多次元X線タイコグラフィのプラットフォームを活用することで、実試料観察に関する応用研究を加速させることができる。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- A. Suzuki, K. Shimomura, M. Hirose, N. Burdet, and Y. Takahashi, "Dark-field X-ray ptychography: Towards high-resolution imaging of thick and unstained biological specimens", *Scientific Reports* 6, 35060 (2016).
- M. Hirose, K. Shimomura, N. Burdet, and Y. Takahashi, "Use of Kramers-Kronig relation in phase retrieval calculation in X-ray spectro-ptychography", *Optics Express* 25, 8593-8603 (2017).
- M. Hirose, N. Ishiguro, K. Shimomura, N. Burdet, H. Matsui, M. Tada, and Y. Takahashi, "Visualization of Heterogeneous Oxygen Storage Behavior in Platinum-Supported Cerium-Zirconium Oxide Three-Way Catalyst particles by Hard X-ray Spectro-Ptychography", *Angewandte Chemie International Edition* 130, 1490-1495 (2018).

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度-34年度  
136,400千円

### 【ホームページ等】

<http://www-up.prec.eng.osaka-u.ac.jp/takahashi>



研究課題名 骨異方性誘導のための「異方性の材料科学」の構築

大阪大学・大学院工学研究科・教授 **なかの たかよし**  
**中野 貴由**

研究課題番号：18H05254 研究者番号：30243182

キーワード：生体機能材料、骨異方性

【研究の背景・目的】

骨アパタイトは、六方晶系をベースとした異方性の強い原子配列を持ち、*c*軸に沿って高強度特性を発揮する。その結果、同じ骨密度骨であっても、最適な骨強度を発揮するために、骨アパタイト配向性は骨部位に依存して変化する(図1)。

本研究では、「なぜ骨異方性が形成されるのか?」という「異方性」を強く意識した核心的問いに、材料科学・生物科学の両側面からのアプローチの融合による解決を目指す。具体的には、(1) 自発的骨異方性形成(直接的アプローチ)、(2) 骨代替異方性インプラント創製(間接的アプローチ)に基づき、骨系細胞の織り成す異方性骨形成機構を解明・制御すると同時に、全く異なる側面からのアプローチとして的人為的な手法である金属3Dプリンタによる低弾性異方性インプラントを開発し、その異方性原子配列化の基本原則を解明することを目的とする。

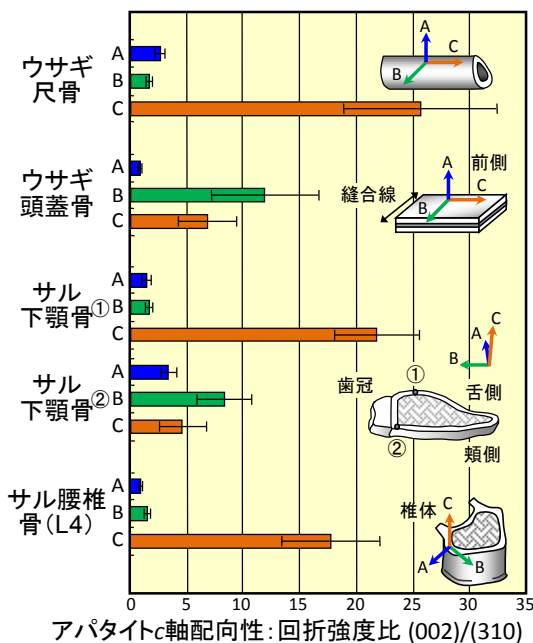


図1 骨部位に依存したアパタイト *c*軸の優先配向性

【研究の方法】

本研究では、骨内外の「異方性」を中心に、疾患や失われた骨の積極的な配向性組織誘導を行うために、以下2つの全く未知な重要項目を解明する。

(1) 自発的骨異方化機構の解明

生体骨が自発的・内在的に持つコラーゲン/アパタイト異方化機構を、骨系細胞による、異方化シグナ

ル伝達経路の同定に基づき明らかにする。

(2) 人為的骨異方性促進材料・インプラントの創製

金属3Dプリンタにより導入・制御される異方性原子配列の形成機構を解明することにより、低弾性異方性骨インプラントを開発する(図2)。

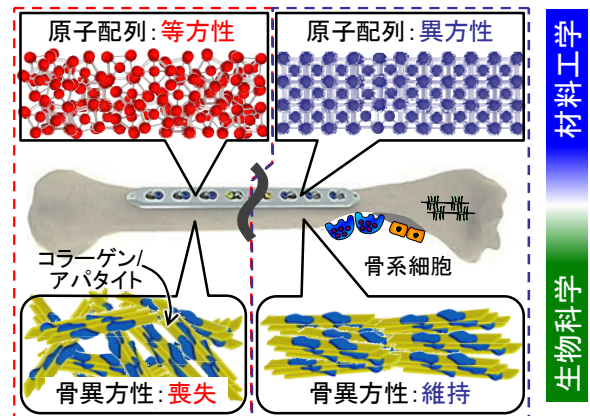


図2 本課題が目指す異方性骨インプラントロジー

【期待される成果と意義】

未解明の異方性骨組織誘導を自発的・人為的両側面から検討することで、生体骨の最も重要な「異方性」発現機構の本質に迫ることができるとともに、金属3Dプリンタによるインプラント造形体を通じた「異方性の材料科学」という新学理の構築を行うことを可能とする。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- T. Ishimoto, K. Hagihara, T. Nakano et al.: Crystallographic texture control of beta-type Ti-15Mo-5Zr-3Al alloy by selective laser melting for the development of novel implants with a biocompatible low Young's modulus, *Scripta Materialia*, 132 (2017) pp. 34—38.
- T. Ishimoto, T. Nakano et al.: Co-deteriorations of anisotropic extracellular matrix arrangement and intrinsic mechanical property in *c-src* deficient osteopetrotic mouse femur, *Bone*, 103 (2017) pp. 216—223.

【研究期間と研究経費】

平成30年度—34年度  
148,800千円

【ホームページ等】

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp6/nakano/nakano@mat.eng.osaka-u.ac.jp>





## 研究課題名 全固体イオニクスデバイスにおける電極複合体 ダイナミクスの研究基盤確立

大阪府立大学・大学院工学研究科・教授

たつみさご まさひろ  
辰巳砂 昌弘

研究課題番号：18H05255 研究者番号：50137238

キーワード：電極複合体、イオン伝導体、固体界面、機械的性質

### 【研究の背景・目的】

全固体イオニクスデバイスに注目が集まっている。中でも無機固体電解質を用いた全固体電池は、高安全、高エネルギー密度、高出力、長寿命を兼ね備えた究極のエネルギー貯蔵デバイスである。近い将来に訪れる全固体電池の実用化をきっかけに、全固体キャパシタ、全固体空気電池など、全固体イオニクスデバイス時代の到来が予測されている。

全固体イオニクスデバイス固有の課題である固体-固体界面の構築に関しては、まだ着手されていない課題が山積している。我々はこれまでに「常温加圧焼結」現象を発見し、良好な固体-固体界面の構築に成功している。一方で、デバイス作動時に生じる力学的現象に伴う諸問題に対しては、その高い重要性にも関わらず学術的なアプローチは皆無に等しい。現状では、電極活物質自体の体積変化など個々の物質に生じる現象の理解に留まっており、電極複合体全体における動的挙動（ダイナミクス）の本質についてはほとんど理解されていない。

本研究課題では、電極複合体のダイナミクスに係る課題を明確化し、材料研究の観点からの解決策を提案するなど、全固体イオニクスデバイスの共通課題である固体界面に関する学術基盤の確立を目指す。

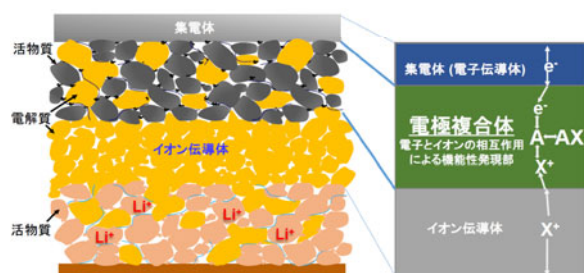


図1 全固体イオニクスデバイスと電極複合体の機能発現の概念図

### 【研究の方法】

目的達成の手段として、①電極複合体構造と電気的特性の関係を定量化するための手法を開発するなど、電極複合体構造と電気的特性に関する研究基盤を構築し、②電極複合体の弾性領域および塑性領域それぞれのダイナミクスの基盤を構築する。

挑戦的な基盤材料研究としてゴム弾性イオニクス

材料の創製や、可塑性イオニクス材料による自己修復固体界面に関する知見の獲得を目指す。可動イオン種はリチウムイオンに限らず、ナトリウムイオン及びその他のイオンの伝導体も用いる。また、酸化物、硫化物、窒化物、高分子材料等の材料種も限定せず、全固体デバイスの電極複合体に関する共通課題の解決に資する研究を総合的に遂行する。

### 【期待される成果と意義】

本研究課題は全固体イオニクスデバイスの共通課題である「固体-固体界面の構築・保持」について基盤の確立を目指すものである。これまでに着手されていない電極複合体に関する基礎的な研究手法の確立を目指しており、蓄積される知見は材料工学や電気化学をはじめとする工学系の幅広い学問領域に対して極めて有用である。さらに本研究課題の達成は、全固体電池をはじめとする全固体イオニクスデバイスの応用研究を加速させる。日本発のリチウムイオン電池やNAS電池に続く、次世代電池“全固体電池”の実用化を早め、科学的基盤に基づく長期的かつ本質的な優位性を得ることが期待される。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- A. Sakuda, A. Hayashi, M. Tatsumisago, “Sulfide Solid Electrolyte with Favorable Mechanical Property for All-Solid-State Lithium Battery”, *Sci. Rep.*, **3**-2261, 1-5 (2013).
- A. Hayashi, A. Sakuda, M. Tatsumisago, “Development of Sulfide Solid Electrolytes and Interface Formation Processes for Bulk-Type All-Solid-State Li and Na Batteries”, *Front. Ener. Res.*, **4**:25, 1-13 (2016).
- A. Sakuda, A. Hayashi and M. Tatsumisago, “Recent Progress on Interface Formation in All-Solid-State Batteries”, *Curr. Opin. Electrochem.*, **6** (1), 108-114 (2017).

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度～34年度  
143,400千円

### 【ホームページ等】

<http://www2.chem.osakafu-u.ac.jp/ohka/ohka2/index.html>



## 研究課題名 調和組織材料の革新的力学特性発現機構の解明と次世代構造材料創製指導原理の創発

立命館大学・理工学部・教授

あめやま けい  
飴山 恵

研究課題番号：18H05256 研究者番号：10184243

キーワード：組織制御、ヘテロ構造、強度・延性

### 【研究の背景・目的】

社会基盤の骨格とも言える構造用金属材料には、高い強度と大きな延性が同時に要求される。しかし、金属材料の強度と延性は両立しない性質であることが一般常識であった。材料を高強度化すると、早期に塑性不安定条件に達しくびれが生じるためである。これに対し、われわれは「調和組織」という新しい微細構造を提案し、高強度と高延性・高靱性が両立することを明らかにした。調和組織は、図1に示すような、超微細粒組織(Shell)と粗大粒組織(Core)の混合体(ヘテロ構造)であるが、単なる「混合」ではなく、「硬い」微細粒組織と「軟らかい」粗大粒組織が網目構造を作り、材料内部の空間を「周期的」に埋め尽くしている。このようなマイクロとマクロの構造が重畳して、調和組織を持つ調和組織材料は様々な特異な力学特性を示す。

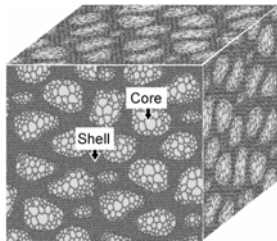


図1 調和組織のイメージ

本課題では、調和組織材料が示す数々の特異力学現象、例えば、選択的再結晶や選択的加工誘起相変態等々の通常の材料では起こらないような現象、を統一的に理解し、その結果を基に次世代構造材料創製の指導原理を創発することを目的としている。金属材料組織学、弾・塑性力学、材料強度学、計算材料力学、など多彩な学術分野の研究者が結集し、内在するマイクロ・マクロレベルの組織の力学応答の観点から、調和組織材料の「高強度と高延性・高靱性の両立」や様々な特異な力学特性を、調和組織材料製造技術、最先端の力学特性・組織解析手法を駆使して解明する。得られた成果をもとに、高強度と高延性・高靱性などの複数の優れた力学特性を具備し軽量化も達成できる、安心・安全な次世代構造材料としての調和組織材料創製を試みる。

### 【研究の方法】

調和組織材料の特異現象の発現は、主に転位のすべり運動により担われるナノ・マイクロ領域の現象と、周期構造を持った数十～数百マイクロのマクロ領域の現象が重畳していると推測される。ナノ・マイクロ

領域のサブマイクロ結晶の粒界は、転位の障害物としてだけでなく、転位の発生源かつ消滅場所として働いている可能性が高い。同時に、結晶粒径に広い分布(粒径勾配)が存在する調和組織では、粒径勾配に起因した特異な変形も起こりえる。そうした観点の下、本研究では、材料創製手法、SEM内その場変形解析、ならびに大型放射光による変形解析等によるマイクロ・マクロ力学特性評価、シミュレーション手法を駆使して研究を進める。これにより、マイクロからマクロに広がる、転位/粒界/周期構造の関連性を系統的に明らかにする。

### 【期待される成果と意義】

調和組織材料は、金属粉末に表面強加工を施し超微細粒組織を粉末表面に作り込み、その後、焼結することで作製される。つまり、すでに実用化されている技術の組み合わせで作製が可能な手法であるため、工業的な拡がり期待できる。近年、話題となっている3Dプリンターへの展開も容易である。このような実用展開と同時に、調和組織材料の特異現象の発現機構の統一モデルを、先端的な実験とシミュレーションにより提案・証明することで、強度と延性・靱性を両立させた「夢の構造材料」の材料設計指針を獲得することが期待される。

さらに、国際共同研究を展開することで、新たな国際連携ネットワークの構築が期待できる。その中で、若手研究者の育成・交流を推進させることを目指している。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- S.K.Vajpai, M.Ota, Z.Zhang, K.Ameyama, *Three-Dimensionally Graded Harmonic Structure Design: An Integrated Approach for High Performance Structural Materials*, Materials Research Letters, 4, 191-197, 2016.
- J.Li, J.Liu, G.Dirras, K.Ameyama, F.Cazes, M.Ota, *A three-dimensional multi-scale polycrystalline plasticity model coupled with damage for pure Ti with harmonic structure design*, Int. J. Plasticity, 100, 192-207, 2018.

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度～平成34年度  
155,000千円

### 【ホームページ等】

<http://www.amelab.se.ritsumei.ac.jp/en/homeameyama@se.ritsumei.ac.jp>



## 研究課題名 走査トンネル顕微鏡で拓く微小極限の光科学

理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員

きむ ゆうす  
金 有洙

研究課題番号：18H05257 研究者番号：50373296

キーワード：近接場光、走査トンネル顕微鏡、単一分子、エネルギー移動・変換

## 【研究の背景・目的】

光と物質の相互作用は、物質が示す色、発光、光電変換、光化学反応など様々な“機能”の起源であり、また多くの計測技術の根幹をなすものである。

ナノスケールの金属微細構造に光を照射すると、光の回折限界(数 100 nm)を遥かに超えた数 nm の微小領域に光を集める事ができる。我々はこれまでに、走査トンネル顕微鏡 (STM) の金属探針と金属基板の間に局在する極小の光(近接場光)を用いて、単一分子レベルの分光計測や光化学反応の研究を展開してきている。しかしながら、これまで用いられている近接場光の周波数(エネルギー)や偏極状態などは極めて限定的であった。すなわち、可視~近赤外など限られた周波数領域で線形応答の範囲において電場成分のみが調べられてきた。

本研究では、STM に照射する光のエネルギーや偏光などの性質や非線形光学効果を利用して近接場光のポテンシャルを最大限に引き出し、近接場光と物質との相互作用を解明することによって、近接場光化学や単一分子分光計測を大きく発展させることを目的とする。実験結果に基づき、近接場光と物質の相互作用に関する理論解析も並行して行い、光科学のフロンティアを広げる新しい研究領域の学術基盤を確立する。本研究は、エネルギー変換デバイスや光合成、量子情報処理など幅広い分野へ貢献が期待できる学術的基礎研究である。

## 【研究の方法】

近接場光科学のさらなる発展には、基礎科学的な観点から近接場光そのものを更に深く理解し物質との相互作用を解明する必要がある。しかしながら、近接場光自身を精密に調べるには、数 nm という近接場光の大きさよりも十分に小さい原子スケール(~0.1 nm)の空間分解能をもつ顕微鏡を用いる必要があり、実験技術的な困難さから未解明の問題が多

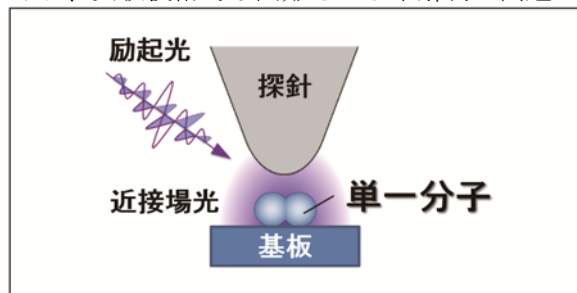


図1 近接場光の生成と単一分子との相互作用

く残されている。

そこで本研究では、原子分解能をもつ顕微鏡である STM をベースとして、照射する光を様々に変えることで、STM 探針直下に誘起される近接場光の周波数や偏極状態を制御する。また、原子レベルで規定された系において、単一分子の量子状態をプローブとして高精度計測・理論解析を行う事で近接場光と物質の相互作用を解明する。特に、未探索の周波数領域や非線形光学効果、磁場成分に焦点を当てることで、近接場光の新しい性質を広く開拓する。

## 【期待される成果と意義】

近接場光と物質の相互作用は、すでに近接場光学顕微鏡や近接場光化学反応、増強ラマン散乱分光などに応用され盛んに研究されているが、本研究により近接場光と物質の相互作用の詳細が解明されることで、それぞれの素過程を司る原理の確立が期待される。それだけではなく、近接場光の未探索の性質を用いる事で、新しい物質機能や計測手法の開発にも繋がると思われる。本研究は、微小極限における光科学という新たな学問領域を開拓する意義をもつと共に、次世代デバイス開発へ寄与することによる社会への貢献が期待される。

## 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- E. Kazuma, J. Jung, H. Ueba, M. Trenary, Y. Kim, “Real-space and real-time observation of a plasmon-induced chemical reaction of a single molecule” *Science* 360 (2018) 521.
- H. Imada, K. Miwa, M. Imai-Imada, S. Kawahara, K. Kimura and Y. Kim, “Single molecule investigation of energy dynamics in a coupled plasmon-exciton system” *Phys. Rev. Lett.* 119 (2017) 013901.
- H. Imada, K. Miwa, M. Imai-Imada, S. Kawahara, K. Kimura and Y. Kim, “Real-space investigation of energy transfer in heterogeneous molecular dimer” *Nature* 538 (2016) 364.

## 【研究期間と研究経費】

平成 30 年度—34 年度  
150,600 千円

## 【ホームページ等】

<http://www.riken.go.jp/Kimlab/index.html>  
ykim@riken.jp



研究課題名 単電子制御による量子標準・極限計測技術の開発

NTT 物性科学基礎研究所・量子電子物性研究部・上席特別研究員

ふじわら あきら  
藤原 聡

研究課題番号： 18H05258 研究者番号： 70393759

キーワード： 単電子、量子計測三角形、量子ホール、量子電気標準

【研究の背景・目的】

ナノ構造における帯電効果を利用した単電子の操作や検出は、量子電流標準、高感度センサなど高精度エレクトロニクスや極限計測技術への応用が期待できる。本研究では単電子の超高速転送技術、超高速検出技術、単電子検出による転送精度の絶対評価技術、高精度電流通倍技術、量子ホールアレイを用いた微小電流計測技術を開発し、これらを統合的に組み合わせることにより、電気標準の整合性の検証実験である「量子計測三角形」(図1)の世界一の精度での実現を目指す。また、超精密微小電流発生・検出技術、リアルタイム計測技術など極限計測技術の基盤技術を確立する。

【研究の方法】

NTT、産総研、電通大の3つのチームで、必要なデバイス技術、測定技術を開発し、それらを組み合わせることにより、5か年計画で量子計測三角形の高精度実験を実施する。

NTTにおいては、ナノアンペア以上の電流標準の実現のため、クロック周波数サブ 10 GHz 動作相当の高電流単電子転送を可能とするシリコン単電子素子(図2)の開発に取り組む。サブ 10 GHz 動作における単電子ダイナミクスの物理や単電子転送の高周波動作限界を支配するエラー機構を解明し、転送の高精度化を実現する。

産総研においては、上記単電子電流標準をジョセフソン電圧標準と比較可能な電圧に変換するために、高抵抗量子ホールアレイ抵抗標準(10M オーム)の開発に取り組む。また、量子計測三角形の実験に向けて、全量子電気標準(単電子電流標準、量子ホールアレイ抵抗標準、ジョセフソン電圧標準)搭載型システムを単一冷凍機内に構築する。

電通大においては、高精度電流通倍を行うための高誘電体絶縁膜を用いた強結合量子電流ミラーを開発する。また、「量子計測三角形」の実験に対して相補的に必要となる単電子転送精度の絶対評価のため、

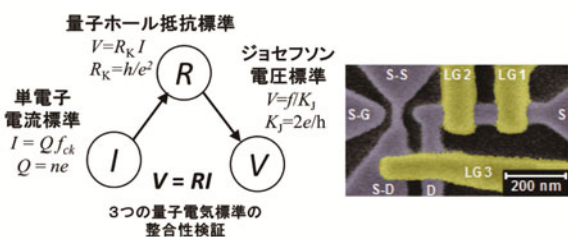


図1 量子計測三角形

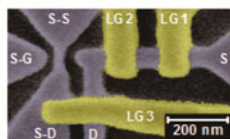


図2 シリコン単電子デバイス

単一磁束量子を用いたサブ 10 GHz 超高速単電子検出技術の動作実証と開発を進める。

以上のデバイス技術、評価技術を組み合わせることにより、0.1ppm 以下での量子計測三角形の実験を目指す。

【期待される成果と意義】

量子計測三角形は、基礎物理定数であるプランク定数や素電荷量などの関係性に矛盾がないかの検証実験として数十年にわたり実現が期待されてきたものであり、世界最高精度での実験を行うことにより大きな学術的インパクトを創出できる。また、高精度な電流標準や量子ホールアレイ抵抗標準の実現は、電子計測機器の校正やポータブル型量子電気標準の開発につながるものであり、産業基盤や計量標準分野に貢献できる。さらに、超高速・高感度電荷検出や超精密微小電流発生・検出技術は、抵抗精密評価、単一分子・化学反応センサ、放射線センサなど材料、化学、工業、医療分野など電気量の関連する広範な領域への応用が期待できる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- G. Yamahata, K. Nishiguchi, and A. Fujiwara, Gigahertz single-trap electron pumps in silicon, Nat. Commun. **5**, 5038 (2014).
- G. Yamahata et al., Gigahertz single-electron pumping in silicon with an accuracy better than 9.2 parts in 10<sup>7</sup>, Appl. Phys. Lett. **109**, 013101 (2016).
- N. Kaneko, Review of Quantum Electrical Standards and Benefits and Effects of the Implementation of the 'Revised SI', IEEJ Trans. **12** 627 (2017).

【研究期間と研究経費】

平成 30 年度 - 34 年度  
151,400 千円

【ホームページ等】

NTT :  
<http://www.brl.ntt.co.jp/people/afuji/index-j.html>  
[http://www.brl.ntt.co.jp/j/group\\_004/group\\_004.html](http://www.brl.ntt.co.jp/j/group_004/group_004.html)  
 産総研 : <https://unit.aist.go.jp/ripm/qelec-std/>  
 電通大 : <http://inaho.pc.uec.ac.jp/>