

【新学術領域研究（研究領域提案型）】

理工系

研究領域名 機能コアの材料科学



名古屋大学・大学院工学研究科・教授

まつなが かつゆき
松永 克志

研究課題番号：19H05785 研究者番号：20334310

【本研究領域の目的】

本研究領域では、粒界や界面、転位などの結晶欠陥特有の電子状態が作り出す場（＝量子場）を、材料機能発現の源である「機能コア」とみなし、理論計算とナノ計測、多様な材料分野における材料創製研究者が一体となり連携研究を行う。

従来の材料機能研究では、材料内部のバルク領域の平均的構造と巨視的特性を主たる対象としていた。一方、近年のナノ計測技術や計算科学の発展は著しく、結晶欠陥の電子・原子レベル構造に関する情報が定量的に得られるようになってきている。その結果、多くの先進材料において、材料内部に存在する点欠陥や粒界、界面、転位などの結晶欠陥が、材料特性発現の起源であることが明らかとなってきた。したがって、結晶欠陥の電子・原子レベル構造と材料機能の関係についての系統的理解が、今後の新材料開発の重要指針となり得る。また、そうした結晶欠陥の機能を積極的に利用した材料開発も行われつつある。そこで本研究領域では、熱や電場、磁場、光、力などの外部刺激の下で発現する、結晶欠陥の「機能コア」としての素性を解明し、それに基づく新しい材料科学の学理構築と、機能コアに基づいた新材料機能創出及び萌芽的材料創製を目指す。

【本研究領域の内容】

機能コアという共通概念の下、材料科学の新学理構築と新材料機能創出を目指すため、以下のような研究項目を置く。

- ・研究項目 A01 機能コアの理論解析
- ・研究項目 A02 機能コアのナノ計測
- ・研究項目 A03 機能コアに基づく新材料機能創出

本研究領域では、機能コアの局所構造と局所機能の相関に関する定量的で包括的な理解を得ることが必要不可欠である。そこで A01 と A02 では、粒界や界面、転位などの機能コアの構造—機能に関する基礎学理を構築するため、世界最高水準の電子状態計算、情報科学的解析及びナノ計測により研究推進する。また、基礎学理的な研究にとどまらず、機能コアを最大限に活用した材料機能を創出するためには、機能コアを実材料にビルトインするプロセス技術も欠かせない。そこで A03 では、高機能コアを用いた材料の高機能化を実証する。そのため、A03 は、高圧や高温合成、その他特殊な物理場を利用した合成プロセス、原子層単位での薄膜合成など、単にバラエティに富むだけでなく、国際的にも学術的優位性を有するプロセス技術を有する研究者で構成されている。



図 1. 研究組織

【期待される成果と意義】

結晶欠陥を活用・制御した、新規な材料機能創出を行うための基礎学理構築が、第 1 に期待される成果である。機能コアの学理を駆使し、計画研究に挙げた各材料分野での材料の高機能化若しくは新材料創出の指針確立が第 2 に期待される成果である。さらに本研究領域を通じ、計算解析、評価・計測、材料合成など、各要素技術の高度化や飛躍的発展が、期待される第 3 の成果である。

機能コアという新概念の下に、粒界や界面、転位などの結晶欠陥を利用した材料機能向上及び新材料機能創出が達成できれば、学術的に大きなインパクトを与える。従来、結晶欠陥は材料機能における「悪玉」であった。これを「善玉」として活用するという発想の転換が期待される。

【キーワード】

結晶欠陥：結晶性材料において、原子配列の規則性が乱れることで形成される格子非整合領域
機能コア：材料内部に存在する結晶欠陥特有の電子状態が作り出す場

【研究期間と研究経費】

令和元年度—令和 5 年度
1,098,000 千円

【ホームページ等】

<http://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp>
kmatsunaga@nagoya-u.jp