



高強度と高延性を具備するバルクナノ六方晶金属材料

Concurrent enhancement of strength and ductility in bulk nanostructured hexagonal metals

元素戦略
構造材料研究拠点



GL: 辻 伸泰
京都大学大学院工学研究科

研究の背景

- ・安心・安全な社会を支える構造材料は、強度(つよさ)と延性(ねばさ)を具備することが不可欠である。
- ・チタンやマグネシウム合金は軽量で高い強度を有するが、六方結晶構造に起因して延性に乏しいため用途が限定される。
- ・合金元素の添加ではなく、バルクナノ組織化による強度と延性両立を目標とした。

研究のポイント

- ・サブミクロンまでの様々な平均粒径を有する完全再結晶チタンおよびマグネシウム合金の作製に成功した。
- ・バルクナノメタル化することで、高強度と高延性を両立させることに成功した。
- ・バルクナノメタル材料における延性向上メカニズムを、電子顕微鏡、中性子回折実験と計算科学によって原子レベルから解明した。

研究概要

1

様々な平均粒径を有する完全再結晶材料

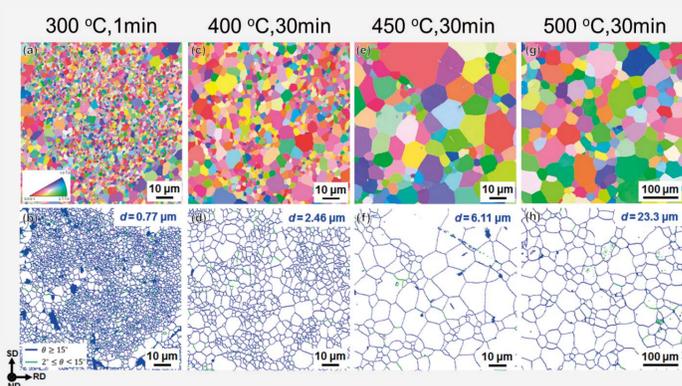


図1 高圧ねじり(HPT)法と焼鈍により作製した、種々の平均粒径を有する完全再結晶マグネシウム合金の電子線後方散乱回折(EBSD)法による微細構造。(上)逆局点図(IPF)マップ。結晶粒の結晶方位を色で識別している。(下)粒界(GB)マップ。青と緑の線は、それぞれ大角粒界および小角粒界を表す。

研究概要

2

バルクナノ材料において強度と延性の両立に成功

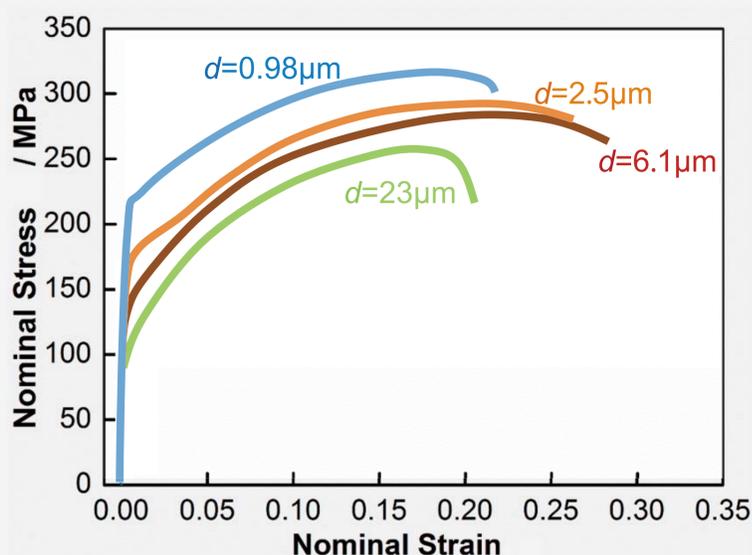


図2 4種の異なる結晶粒径dを有するマグネシウム合金の応力-ひずみ曲線

研究概要

3

バルクナノ材料における延性向上機構の解明

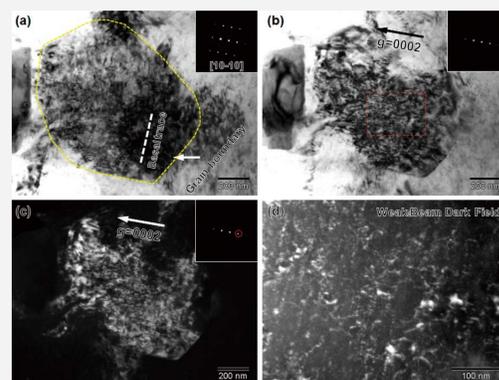


図3 平均粒径 $d=0.98\mu\text{m}$ の超微細粒マグネシウム合金試料をひずみ0.095まで引張変形させた後の透過電子顕微鏡観察結果。(a) [10-10]晶帯軸から観察した明視野像、(b)(c)回折ベクトル $g = (0002)$ での二波条件での明視野および暗視野像。(d) (b)図に示した領域を拡大しウィークベーム法で観察した結果。マグネシウムでは通常活動しない成分を持つ転位が多数観察された。このような特異な転位は、応力レベルが高くなった時に粒界で核形成したものと考えられる。

研究概要

4

バルクナノメタルにおける延性向上機構の新しい変形子概念による包括的な理解

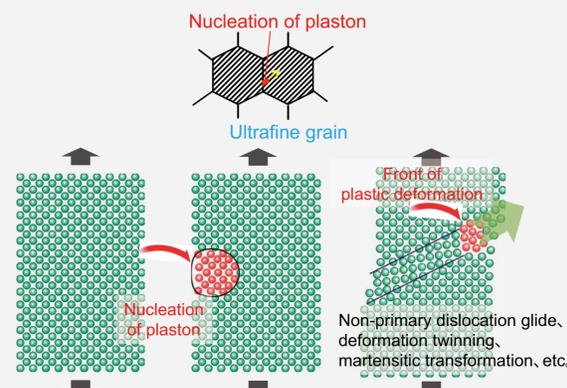


図4 バルクナノ材料では、非主すべり転位、変形双晶、変形誘起マルテンサイト変態のような特異な塑性変形機構が実験的に観察される。これらは、変形子という新しい概念により包括的に説明することが可能である。すなわち、十分に高い応力が印加されると、表面や粒界のように結晶格子が不完全な部分で集団的な原子の励起が起こり、変形子の核形成が生じる。塑性変形フロントにおいても、同様の現象が起こっていると考えられる。

ロードマップ

- ・新しい変形子概念に基づく高強度と高延性を具備する鉄鋼材料の創製
- ・多様な化学結合を有する構造材料における変形子解明と脆性克服への指針獲得

応用分野

- ・輸送用機器
- ・建造物
- ・生体材料

問い合わせ先

京都大学 構造材料元素戦略研究拠点
admin@esism.kyoto-u.ac.jp



元素戦略
Element Strategy Initiative
To Form Core Research Centers



貴金属フリー自動車触媒と高性能Na電池の開発

R&D on precious-metal-free automotive catalysts and sodium ion battery systems

元素戦略
触媒・電池材料研究拠点



GL: 田中庸裕
京都大学大学院工学研究科

研究の背景

- 自動車触媒に用いる白金族元素(PGM)の使用量節減
- 電池システムにおける電解液機能の多様な展開
- リチウムイオン電池を凌駕する性能のナトリウムイオン電池の必要性

研究のポイント

- 触媒反応場を二段に分割して役割分担
- 理論的手法を援用した触媒反応メカニズムの解析
- 電解液内の分子の並び方を利用した超機能の発現
- Na欠陥の導入と立方晶構造の形成による高い導電率

研究概要

1

貴金属フリー自動車三元触媒～タンデム型触媒システム

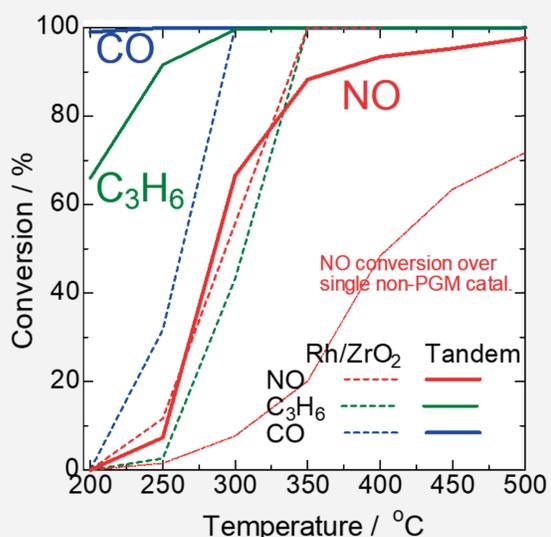
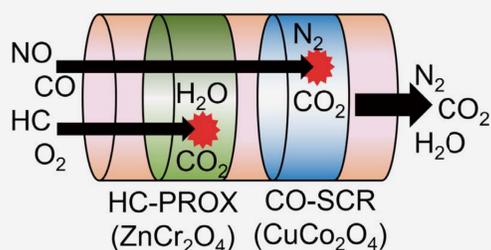


図1 炭化水素(HC)の酸素酸化とNO-CO反応を二段に分割し、含酸素炭化水素中間体による表面の被毒を回避する。タンデム触媒は典型的な貴金属触媒と同等の触媒活性を実現した。



研究概要

3

電解液に秘められていた数々の超機能

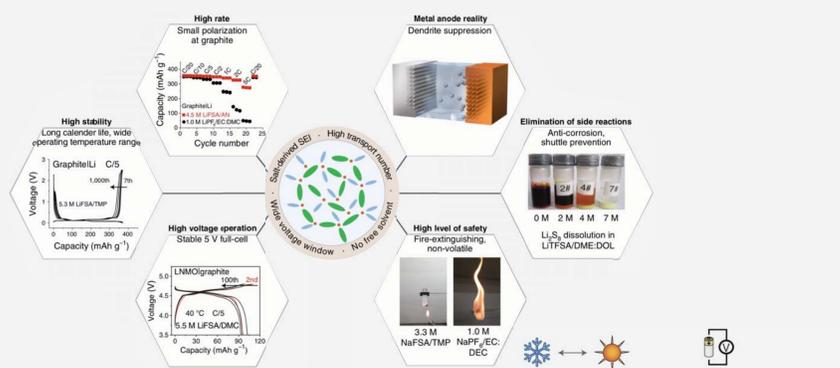
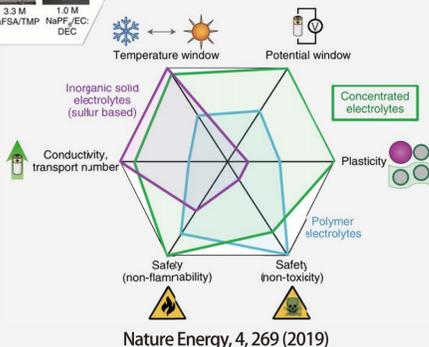


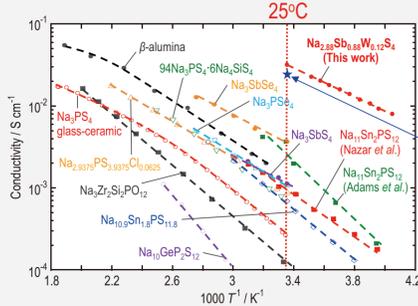
図3 “電解液を濃くする”という誰にでもできる簡単な方法により、溶液内の分子の並び方を大きく変えることができる。これをうまく利用することで、超高速充放電、5V級高電圧耐性、消火機能、長期安定動作といった従来得られなかった多くの超機能が高レベルで実現可能となった。電池生産ラインもそのまま使用できる。



研究概要

4

世界最高の導電率を示すナトリウムイオン伝導性硫化物固体電解質



Na_{2.88}Sb_{0.88}W_{0.12}S₄の導電率: 3.2×10⁻² S cm⁻¹@25°C
Nat. Commun. 10, 5266 (2019)
Li⁺イオン伝導体の最高値 (2.5×10⁻² S cm⁻¹, LGPS-type Li_{0.54}Si_{1.74}P_{1.44}S_{11.7}Cl_{0.3}) よりも高い導電率を実現!
Nat. Energy 1, 16030 (2016)

図4 Na₃Sb₄結晶のSbの一部をWに置換したNa_{2.88}Sb_{0.88}W_{0.12}S₄電解質は、Na欠陥の導入と立方晶構造の形成によって、室温で3.2×10⁻² S cm⁻¹の極めて高い導電率を示す。これはリチウムイオン伝導性固体電解質の中で最大の導電率を示すLGPS型硫化物Li_{0.54}Si_{1.74}P_{1.44}S_{11.7}Cl_{0.3}よりも高い導電率を示すことから、硫化物電解質において世界最高のアルカリ金属イオン伝導度を実現した。

研究概要

2

貴金属フリー三元触媒によるCO-NO反応のメカニズム解析

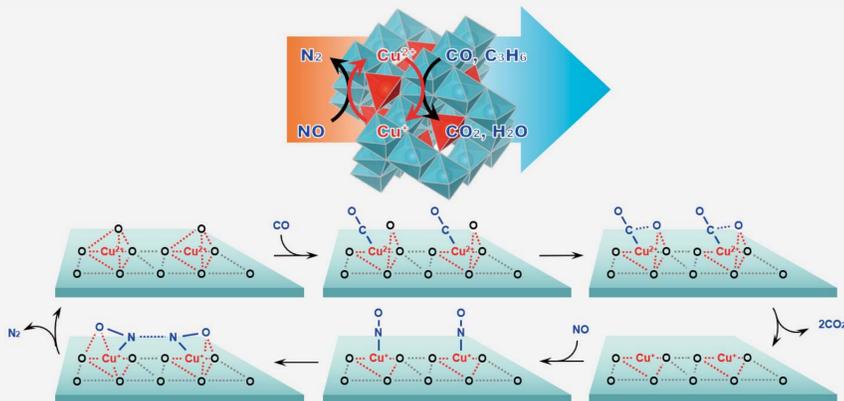


図2 Spinel型複合酸化物上に形成された4配位Cu²⁺は、三元触媒反応においてCOによりCu⁺に還元され、再酸化によりNOを還元するとともにCu²⁺が再生する。

ロードマップ

- 高活性が発現する自動車触媒の反応メカニズムの解明
- 電池電解質に対する既成概念の打破
- 低コスト化と量産に向けた最適化

応用分野

- 自動車排気浄化触媒
- 民生用電池、自動車用電池
- 大型定置用電池

問い合わせ先

京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点
admin@esicb.kyoto-u.ac.jp





永久磁石の産業応用へ向けた新展開

New development of permanent magnets for industrial applications

元素戦略
磁性材料研究拠点



研究の背景

- ・希少元素を利用しない永久磁石開発
- ・産業応用可能な磁性材料解析のための技術開発

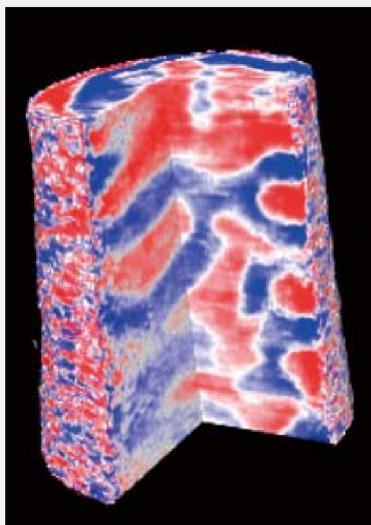
研究のポイント

- ・熱間押出加工によるナノ結晶永久磁石の試作
- ・磁石内部磁化分布の三次元計測
- ・機械学習モデルを利用した永久磁石材料化学組成の最適化

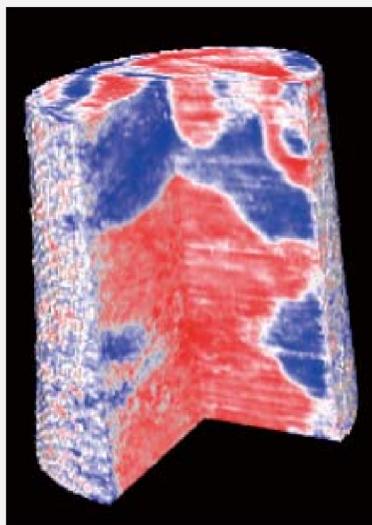
研究概要

1

放射光を用いた磁性材料内部磁化分布の三次元観察



(a) 消磁状態



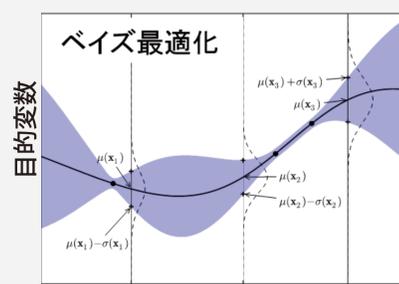
(b) 残留磁化状態

図1 直径12μmの円柱状に加工したNdFeB磁石の磁化分布。(a) 消磁状態、(b) 残留磁化状態。

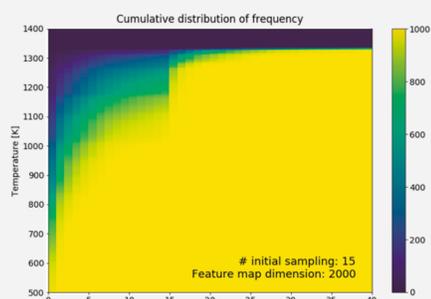
研究概要

2

機械学習による磁石材料化学組成の最適化



(a) ベイズ最適化によるモデル生成



(b) 最適化モデルによるキュリー温度予測

図2 (a) $(R_{1-\alpha}R'_\alpha)(Fe_{(1-\beta)(1-\gamma)}Co_\beta Ti_\gamma)_{12}$ の化学組成で赤字のパラメータを関数化、(b) キュリー温度を目的変数とした場合に、最適解を求められる確率の変化。

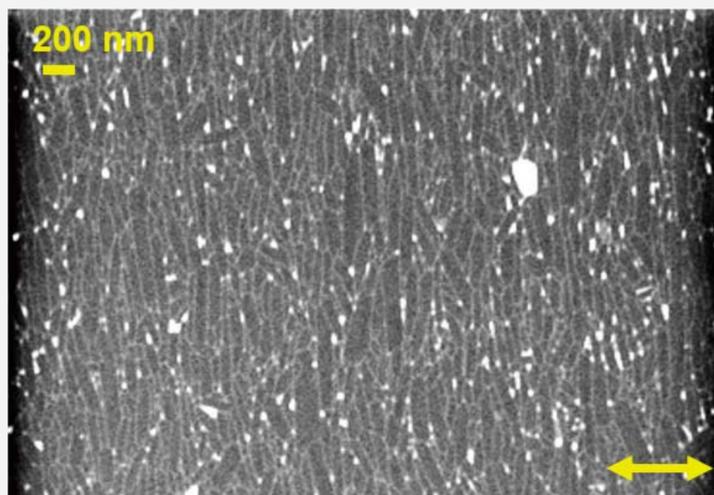
研究概要

3

熱間押出加工による高耐熱性ナノ結晶バルク磁石の試作



(a) 熱間押出装置



(b) ナノ結晶組織

図3 (a) 熱間押出装置の概形、(b) ナノ結晶磁石の結晶組織、矢印の方向に圧縮応力を印加。

ロードマップ

- ・究極性能永久磁石の開発
- ・新奇高Fe組成磁石材料の実現
- ・研究成果の産業界への還元

関係分野

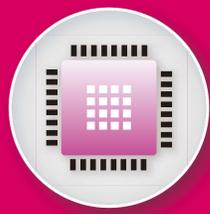
・本研究成果の関連技術はAT-01新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)モビリティゾーンMagHEMプロジェクトにて公開中。合わせて、ご訪問ください。

問い合わせ先

物質・材料研究機構 元素戦略磁性材料研究拠点 企画室
Info-esicmm@nims.go.jp



元素戦略
Element Strategy Initiative
To Form Core Research Centers



新しい材料設計に基づく 新機能高性能電子材料と水素

Creation of Novel-Function & High Performance Electronic Materials based on a Novel Design Concept & Hydrogen

元素戦略
電子材料研究拠点



GL: 細野秀雄
東京工業大学

研究の背景

- GDPへの寄与の大きい電機・電子産業を支える電子材料の大型国家プロジェクトは多数
- 旧来の材料設計指針は半導体ならダイヤモンド構造、誘電体ならペロブスカイトと固定化
- 従来の成功体験に拠る固定化した攻め方から意図的に離れた多存元素の新しい視点が必要
- 電子材料中の水素の役割・機能の多くは未解明

研究のポイント

- 物性論、電子論、計算化学、インフォマティクス等を駆使して新材料候補と合成法を探索
- 超高圧や超高真空等の極限環境を含む材料合成で迅速な試料試作
- 放射光(KEK-PF, SPring-8)、中性子線、ミュオン(J-PARC)を駆使する先端解析で迅速なフィードバック
- 微量水素の定量法の開発から状態の同定まで

研究概要

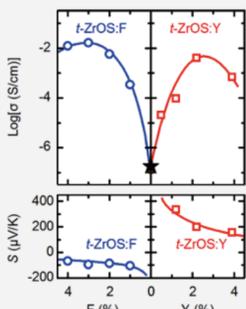
1

M.I.や分子軌道等の新設計指針による新しい直接遷移型両極性半導体



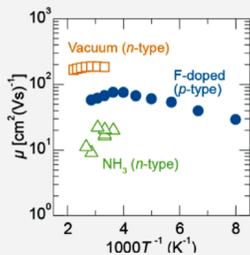
理論予測通りの赤色発光

図1 M.I.で発見し高圧合成した窒化物半導体新物質CaZn₂N₂



予測通りの両極性ドーピング

図2 分子軌道で設計した前周期遷移金属の硫酸化物半導体ZrOS



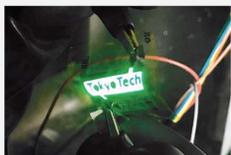
n/p型Cu₃Nのホール移動度

図3 理論予測による窒化物半導体Cu₃Nへの両極性ドーピング

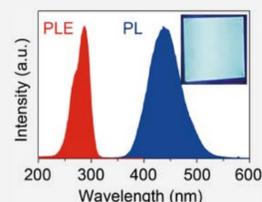
研究概要

2

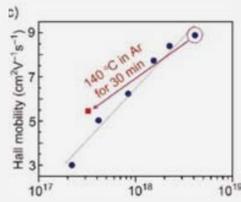
次世代自発光平面ディスプレイ用半導体新材料



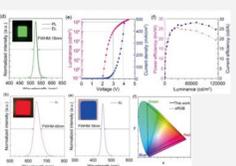
フレキシブル緑色LED



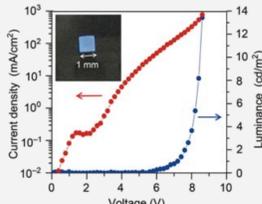
PL (QY>90%)スペクトル



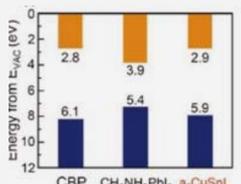
ホール移動度



I-V, L-V, P-V特性とBT2020をカバーするRGB発光色域



青色LEDのI-V, L-V特性



バンドアラインメント

図4 Zn-Si-O (ZSO)を電子輸送層に用いるペロブスカイトLED

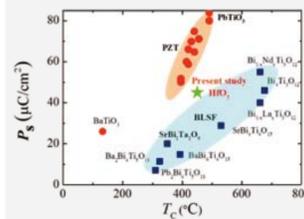
図5 0次元電子構造の高効率青色発光鉛フリー無機ヨウ化物半導体: Cs₃Cu₂I₅

図6 低温塗布形成可能な高移動度p型透明アモルファス半導体: a-Cu-Sn-I

研究概要

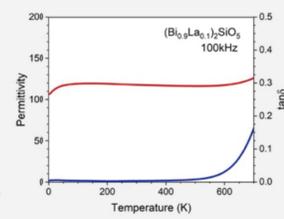
3

パワーエレクトロニクス用高温安定高誘電率非ペロブスカイト系誘電体



従来材料より高いT_cとP_s

図7 高いT_cとP_sを示す蛭石構造強誘電体: HfO₂:Y



誘電特性の温度依存性

図8 車載用安定性規格を満たすケイ酸塩系強誘電体: (Bi,Lu)₂SiO₅



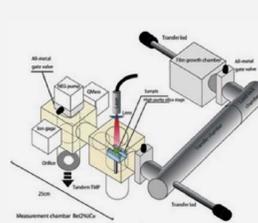
2インチ単結晶とセンサーモジュール

図9 車載用圧電素子用ランガサイト材料: CTAS (Ca₃TaAl₃Si₂O₁₄)

研究概要

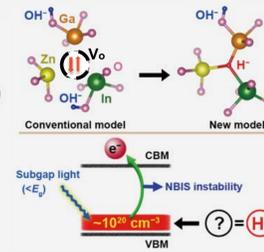
4

物質中の水素の役割・機能・状態の解明と高感度定量



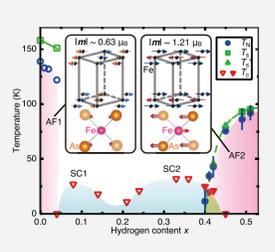
薄膜形成から真空一貫の装置構成

図10 SIMSを>2桁上回る高感度(10¹⁶ cm⁻³)の水素の高感度定量法と装置の開発
• a-IGZO薄膜で実証
• 市販装置化が進行中



水素負イオンH⁻の局所構造と深いバンド間占有準位の形成

図11 a-IGZO中のH⁻イオンの発見と光不安定性の解明
• 水素による欠陥補償
• 光不安定性の起源



放射光X線、中性子、ミュオンの量子ビームにより解明

図12 水素ドーパ鉄系超伝導体LaFeAsO_{1-x}H_xの構造/磁気相図
• 二つの母相による高温化
• 超伝導発現機構を解明

ロードマップ

- 新コンセプトと新材料創出頻度の定常化
- 産業界への技術移転
- ポスト元素戦略へのコンセプト提案

応用分野

- 平面ディスプレイ用高効率・低コスト半導体材料
- 車載等パワーエレ用高温安定高誘電率誘電体
- 触媒応用エレクトライド材料

問い合わせ先
東工大元素戦略拠点
ties@mces.titech.ac.jp



元素戦略
Element Strategy Initiative
To Form Core Research Centers