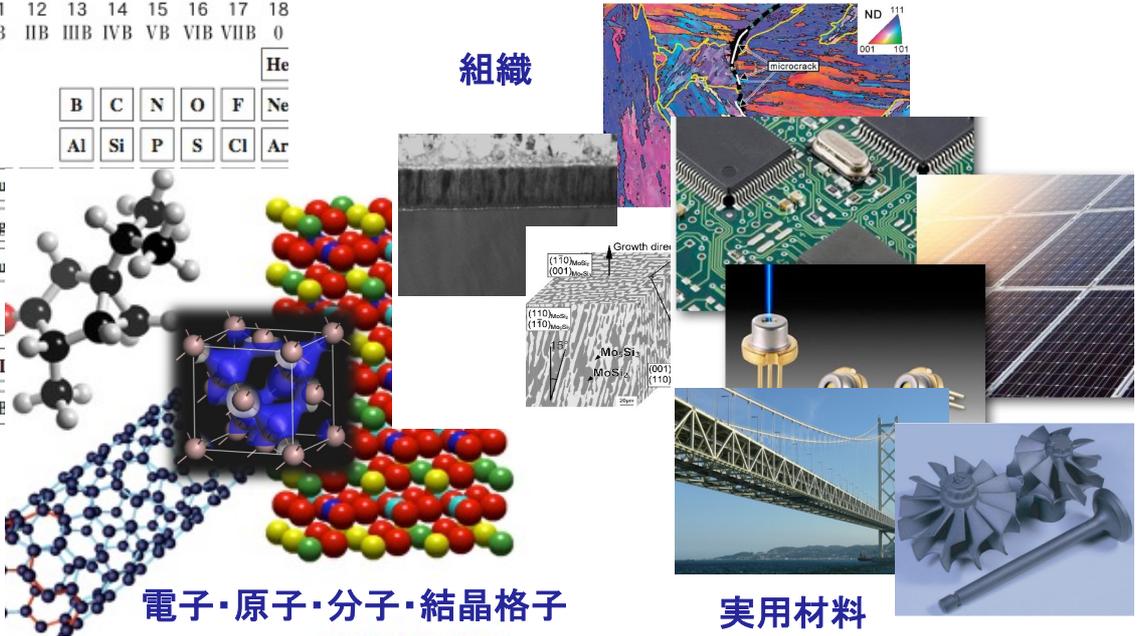


# 材料科学コース

# 材料科学コース

「物質」を、電子・原子・分子・結晶格子・組織構造という様々な階層レベルで設計し、新しい「材料」を創造する理論・技術を構築しています。

7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
VIIA	VIII			IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIA	0
He											
元素											
		B	C	N	O	F	Ne				
		Al	Si	P	S	Cl	Ar				
Mn	Fe	Co	Ni	Cu							
Tc	Ru	Rh	Pd	Ag							
Re	Os	Ir	Pt	Au							
-----											
Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	I						
U	Np	Pu	Am	Cm	F						



京都大学工学部 物理工学科 材料科学コース

# 材料科学コース

## コースの歴史

120年の伝統

明治30年(1897年)	採鉱冶金学科設立（京都帝国大学の創立と同時に設立）
昭和17年(1942年)	採鉱冶金学科が冶金学科と鉱山学科の2学科となる（鉱山学科は後に資源工学科となる）
昭和36年(1961年)	冶金学科が金属加工学科を新設する
平成6年(1994年)	冶金学科と金属加工学科は改組により、材料工学専攻とエネルギー応用工学専攻になる。材料工学専攻が現在の物理工学科の材料科学コースを兼担する
平成20年(2008年)	国際融合創造センター（旧 メゾ材料研究センター）の2講座が材料工学専攻に加わり、全12研究室に



旧 採鉱冶金学教室

## 現在の研究分野

### 材料設計工学

材料設計工学分野  
先端材料設計・教育分野

### 材料プロセス工学

表面処理工学分野  
物質情報工学分野  
ナノ構造学分野

### 材料物性学

量子材料学分野  
結晶物性学分野  
構造物性学分野

### 先端材料物性学

先端材料物性学分野

### 材料機能学

磁性物理学分野  
材質制御学分野  
機能構築学分野

### 先端材料機能学

先端材料機能学分野

ホームページ

<http://www.s-es.t.kyoto-u.ac.jp/mat/ja>

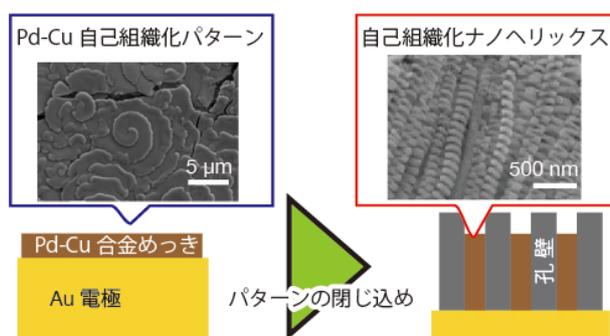


京都大学工学部 物理工学科 材料科学コース

## -材料の“表面”と“カタチ”をナノスケールでデザインする工学-

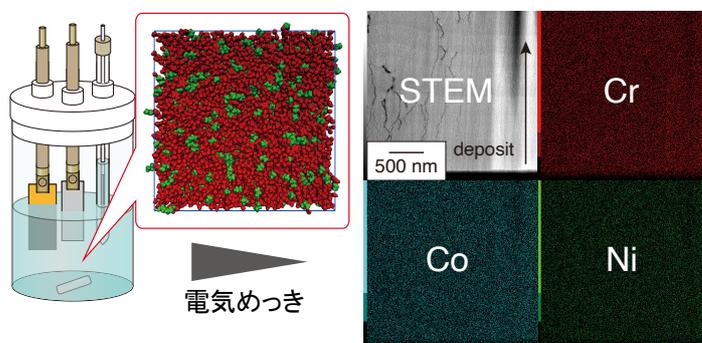
金属や半導体材料の微細構造形成において、カタチや組成を精密に制御することで光学特性、耐摩耗性、反応活性に優れた革新材料の創製を目指しています。

### ナノヘリカル材料創製



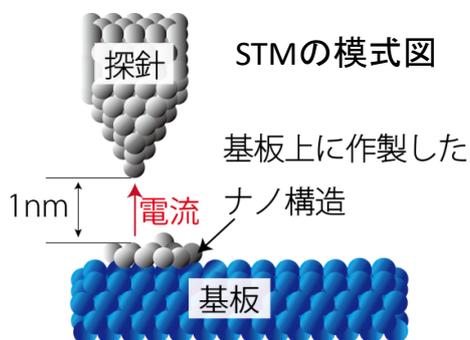
合金の電気めっきにおける自己組織化を利用してナノヘリカル構造をもつ金属材料の創製を可能にしました。円偏光の制御やキラル選択的な触媒としての利用が期待できます。

### 多元系合金コーティング



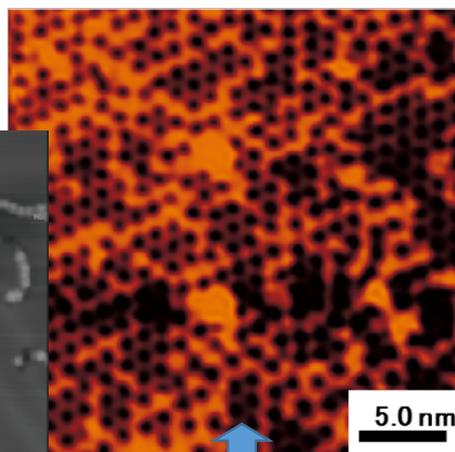
多元素を含む合金の電気めっきは組成制御が難しいと考えられていました。私たちはイオン液体と水溶液からなる液体を用いることで高い耐摩耗性をもつCrCoNi合金の電気めっきを実現しました。

### STMを用いた表面ナノ構造の評価・バルク材料の評価



STMは表面を“なぞる”ことによって原子像を得る手法です。これを用いて、表面に形成されたナノ構造やバルク材料内部の構造の、観察・評価を行っています。

貴金属表面に形成された新奇炭素ナノ構造の研究



Mg-Zn-YLPSO合金内部のSTMによる組織観察

電気化学・熱力学に立脚した環境に優しい材料開発

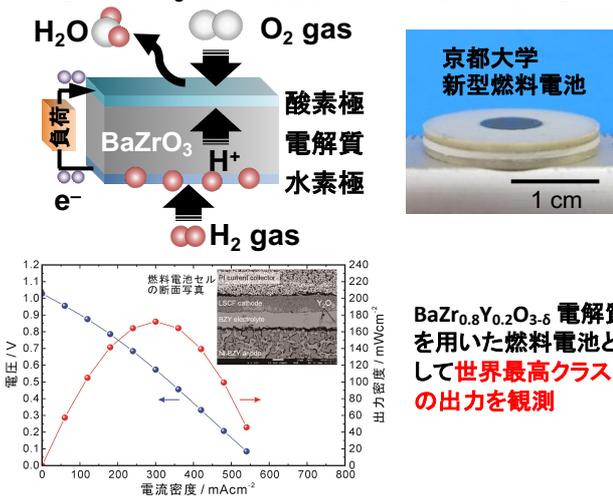
中温型燃料電池

- ・ 火力発電では、燃料のもつエネルギーのうち 35~40%しか使われていない
- ・ 一方、エネファーム型燃料電池では、都市ガス燃料の 87% を有効利用
- ・ 火力発電の代わりに燃料電池が普及すれば原発は必要なくなるが、その普及は進んでいない  
それは、燃料電池の価格が高いから！

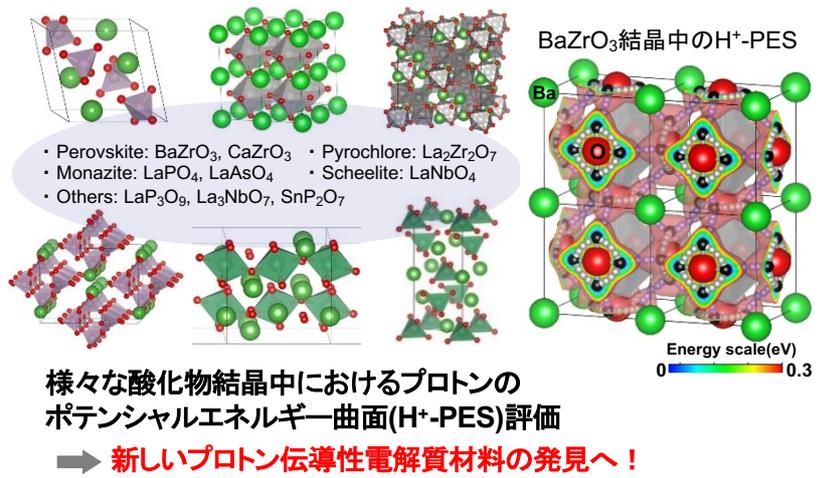
【低コストを実現する新型燃料電池に求められる条件】

- ・ 高価な白金を使わないこと
- ・ 動作温度がマイルド(すなわち 600°C 以下)であること

【BaZrO<sub>3</sub>電解質を使用した燃料電池】



【理論計算主導のプロトン伝導性材料の探索】



溶融塩を用いたチタンの新製錬プロセス

【夢の金属チタン】

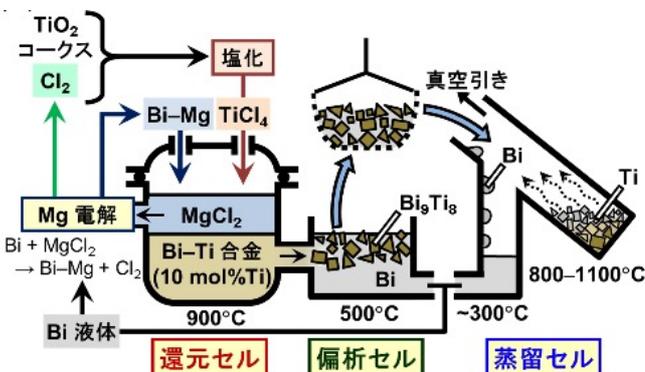
- ・ 資源埋蔵量が豊富
- ・ 重量当たりの強度が金属材料で最高クラス
- ・ 海水中での耐食性が金・白金等の貴金属並みに高い

しかし、チタンの生産量は伸び悩んでいる  
それは、チタンの製造コストが高いから！

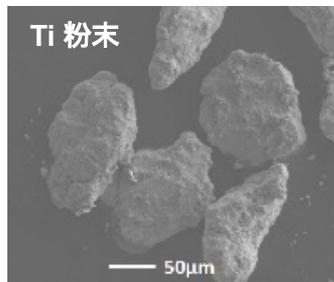
チタン鉱石からの金属チタンの製造は、70 年前に Kroll 博士が開発した手作業に近い手法のまま！  
連続法によるチタン製錬法の革新が必要

【R2 (Reduction and Refining) 連続新製錬プロセス by 京都大学】

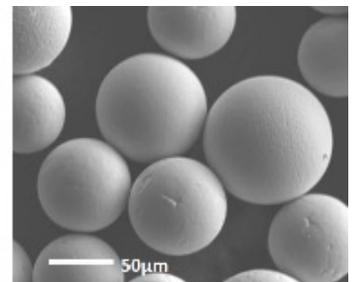
チタン化合物 (TiCl<sub>4</sub>) を Bi-Ti 液体合金中に還元し、蒸留によって Ti を分離



真空蒸留後



球状化処理後



真空蒸留により、Bi-Ti 合金から 高純度 Ti 粉末が得られた

## 原子スケールでの結晶・欠陥構造解析に基づく材料設計

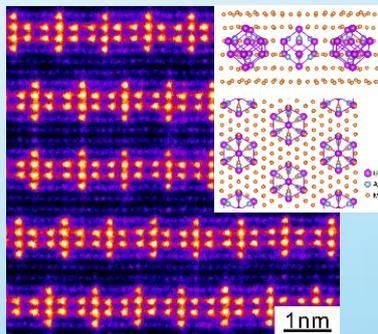
構造材料を主たる研究ターゲットとし、新しい力学特性評価法であるマイクロピラー機械試験法を駆使したマイクロ～サブミクロン領域での力学特性評価と、原子分解能電子顕微鏡法をはじめとする各種解析手法を活用した結晶構造・結晶欠陥構造の精密解析を組み合わせることにより、各種結晶性材料の塑性変形機構、特性発現機構を明らかにする研究を行っています。

### 世界最高性能の透過電子顕微鏡による 原子スケールでの結晶・欠陥構造解析

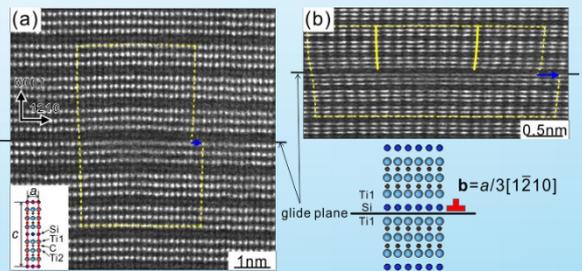
極めて高い空間分解能(約0.08nm)で原子配列を直接観察することにより、従来構造解析が困難であった非常に複雑な結晶の構造決定に成功しています。



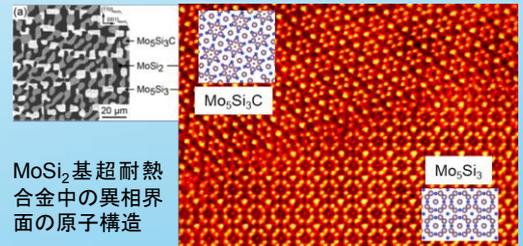
球面収差補正走査透過電子顕微鏡 (Cs-corrected STEM)



長周期積層構造Mg合金の走査透過電子顕微鏡像



Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> MAX相中の刃状転位の転位芯構造

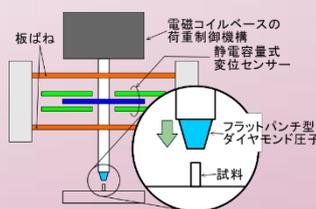


MoSi<sub>2</sub>基超耐熱合金中の異相界面の原子構造

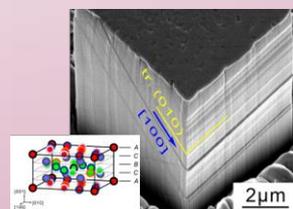
### マイクロピラー圧縮試験法による 力学特性評価・変形機構解析

近年、新しい力学特性評価・変形機構解析法として、集束イオンビーム(FIB)加工により作製した微小試料を、フラットパンチ型ダイヤモンド圧子を備えたナノインデント装置を用いて圧縮する試験法であるマイクロピラー圧縮試験法が注目されています。

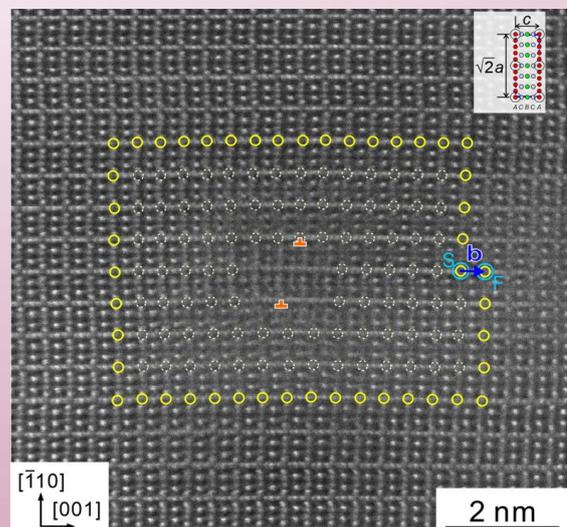
これまでに大型単結晶の育成が困難な試料や複相材料中の微小単相領域、バルクサイズでは室温で脆性的な性質を示す材料等の力学特性評価・変形機構解析を行い、様々な新しい知見を得ています。



マイクロピラー圧縮試験法



FeCr  $\sigma$ 相単結晶の室温圧縮変形

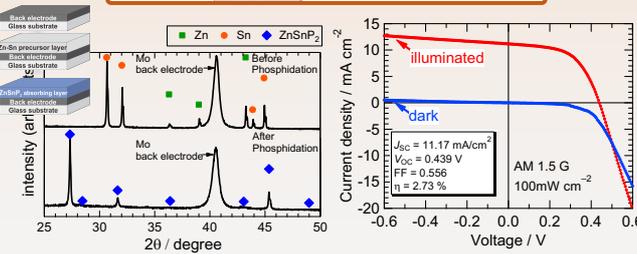


FeCr  $\sigma$ 相単結晶で活動したZonal転位の転位芯構造

## エネルギー創成材料の創出・空間の幾何学が繋ぐ構造-物理量

### レアメタルフリー太陽電池の開発 —新規太陽電池材料ZnSnP<sub>2</sub>—

太陽光発電の更なる普及には、安価で高効率な太陽電池を実現する必要があります。当グループでは、レアメタルフリー太陽電池の実用化を目指して研究を進めています。

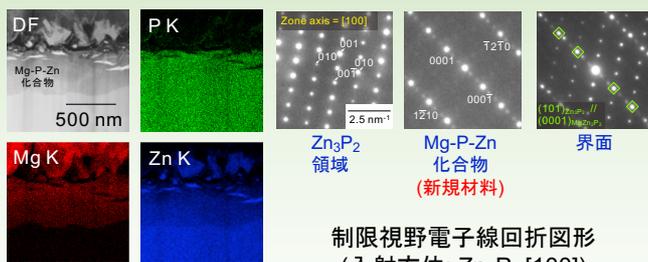


Zn-Sn膜のリン化反応を利用してZnSnP<sub>2</sub>膜の作製に成功。ZnSnP<sub>2</sub>太陽電池が発電することを世界で初めて確認。

### ヘテロ接合界面における構造と特性

デバイスにおけるキャリア輸送は、金属/半導体接合、半導体/半導体接合などの界面反応の影響を強く受けます。当グループでは、平滑な表面が得られるバルク結晶を用いた実験と熱力学に基づく考察の両面から基礎研究を進めています。

#### Mg(p-Zn<sub>3</sub>P<sub>2</sub>)太陽電池 (最高変換効率 6%)の断面観察

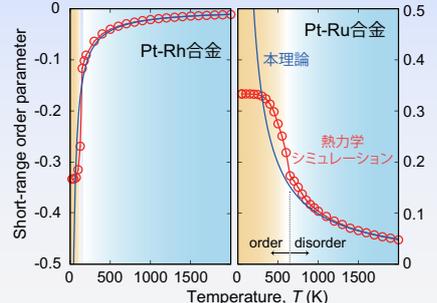
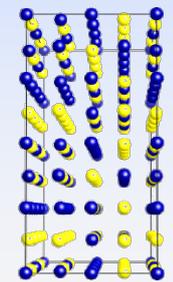
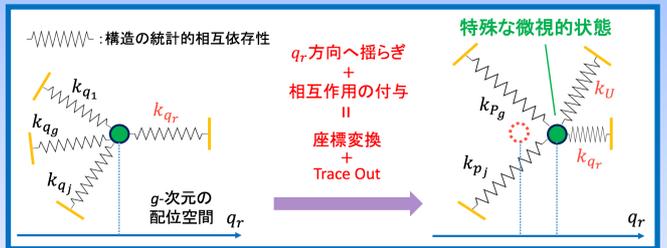


断面 STEM-EDX 測定 (300 °C, 1 h 熱処理後)

熱処理により、Mg/Zn<sub>3</sub>P<sub>2</sub> 界面で反応拡散が起こり、これまで知られていなかったMg-P-Zn化合物が形成されることを初めて見出しました。この化合物は、太陽電池の高効率化の鍵を握ると考えています。

### 平衡状態の性質に対する空間的拘束の役割の解明 -次元の呪いへの挑戦-

平衡状態に対応する微視的状态は、系のサイズと共に指数関数的に増加します。私達は構成粒子に対する空間的拘束(格子等)に着目し、平衡状態の物理量の特徴付ける特殊な微視的状态を解明しました。現在、この理論の応用研究を進めています。

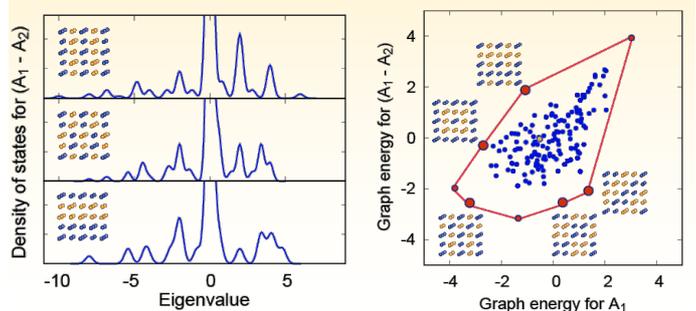
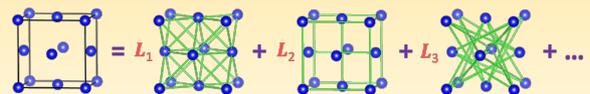


特殊な微視的構造

合金の短範囲規則度の温度依存性

### 結晶性固体の「固い」空間と「柔らかい」空間の統一 -構造と物理量をつなぐ-

内部エネルギー等を古典系で扱う場合、系の微視的構造は通常部分系のテンソル空間で表します。一方でトポロジーの情報が必要になる物理量も考慮すると、統一的な記述が必要になります。私達は両方の利点・特徴を保持した記述の統一に成功し、物理量を表現する新しい枠組みを構築する基礎研究を進めています。



規則構造のスペクトル表示

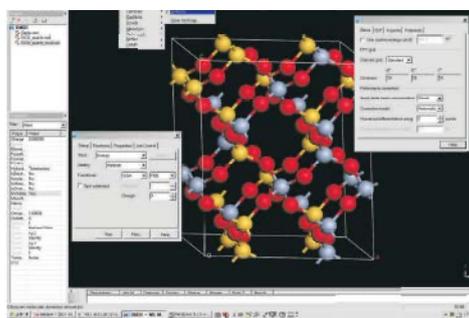
新規記述に基づく特徴構造の探索

## コンピュータシミュレーションに基づいた合理的な材料設計

近年、量子論に基づいた計算技法の進歩とコンピュータの演算能力の飛躍的な向上により、元素の組み合わせや並べ方を決めたときにどのような性質が現れるか、実際にその物質を合成しなくてもシミュレーションによって予測することが可能になってきました。目的とする機能を最大限に引き出すための設計図をコンピュータ上で描くことができるようになりつつあり、私たちはこれを量子材料設計法と呼んでいます。合理的かつ経済的な材料探索を可能とする量子材料設計法は、近い将来、材料開発に革新をもたらすこととなるでしょう。私たちはその先鞭をつける仕事をしています。

高速並列処理コンピュータ

量子力学計算ソフトウェア

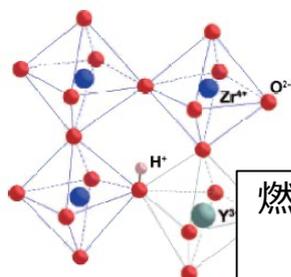


- 量子力学計算
- 分子動力学計算
- 統計熱力学計算
- 機械学習法
- データベース

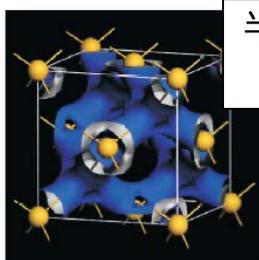
高性能コンピュータを駆使し、材料機能を  
原子・電子レベルで設計

### 先端技術を支える新素材開発へ

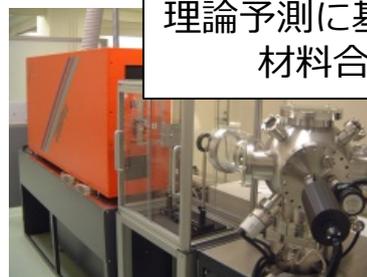
- リチウムイオン二次電池、燃料電池材料
- 半導体材料
- 構造材料



燃料電池固体電解質中の  
イオン伝導



半導体材料中の  
電子の分布



理論予測に基づいた  
材料合成

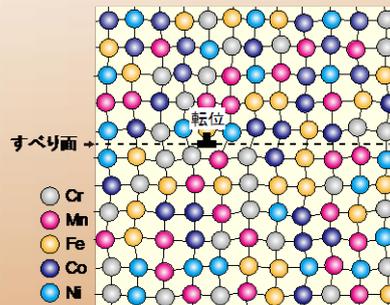
高エントロピー合金等の新規構造用金属材料の基礎研究

結晶性材料の特性はナノ・スケールの結晶欠陥により左右されます。このようなナノ・スケール結晶欠陥そのものの特性(Defect Properties)を評価し、それらの構造や配列を制御することによりバルク結晶の特性向上を図る基礎研究(Defect Engineering)をおこなっています。

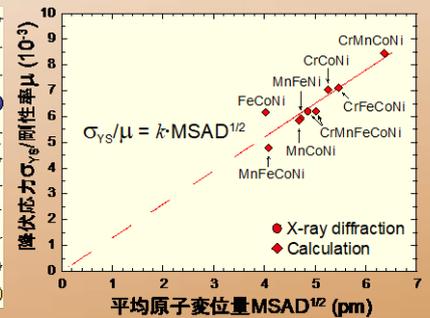
ハイエントロピー合金の特異な力学特性の発現機構

5つ以上の元素をほぼ等モル量含む合金で、大きな混合エントロピー効果により単純な結晶構造(FCC, BCC等)を持つ単相固溶体が安定化された合金のことをハイエントロピー合金といいます。最近の研究により、ハイエントロピー合金とその派生合金の中に、従来の希薄固溶体合金にない特異な力学特性を示す材料が見出されたことから、新規構造材料の候補として国内外で盛んに研究が行われています。

これまでに異なるサイズの原子が混ざり合うことに起因して生じる結晶格子歪が存在し、強度特性に影響を及ぼすことを明らかにされてきました。私たちは結晶格子歪を格子点からの平均原子変位量として定量化し、その値により合金強度を予測する新しいモデルを提案しています。



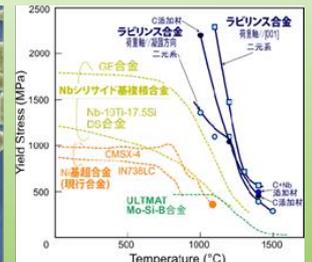
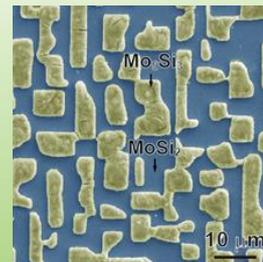
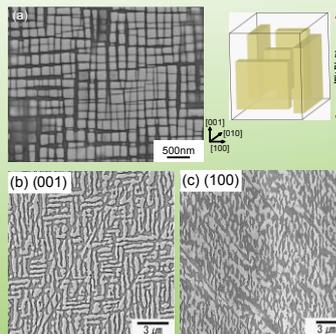
Cr-Mn-Fe-Co-Niハイエントロピー合金の結晶構造の模式図



等モル量合金における降伏強度と平均原子変位量の相関

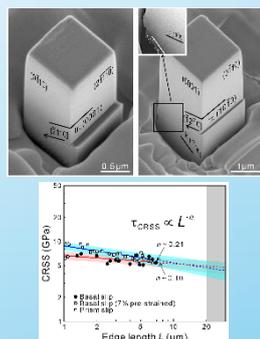
新規耐熱構造材料の開発

現在、ガスタービンやジェットエンジンで用いられているNi基超合金を超える力学特性を有するCo基耐熱合金や、高融点で高温強度に優れた遷移金属シリサイドを組み合わせたBrittle(脆性)/Brittle複相材料という全く新規な概念のもと、Ni基超合金などDuctile(延性)相を含む旧来の合金では達成できない燃焼温度1800°C級ガスタービンでの使用に耐える超高温用耐熱材料に関する基礎研究を行っています。



ハードマテリアルの室温塑性変形挙動

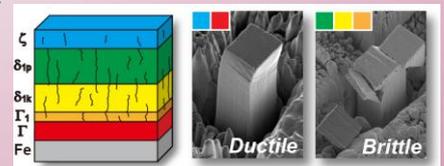
半導体やセラミックスなどは、バルクサイズの試料を用いた機械試験では一般的には室温では非常に脆く簡単に壊れてしまいます。最近の研究でこれら極めて脆い材料も、試験片サイズをμmオーダーまで小さくすると、室温でも塑性変形することがわかってきました。我々の研究室では、マイクロピラー圧縮試験法という新しい実験手法を用いて、SiCや結晶構造が複雑な金属間化合物相などの各種ハードマテリアルの室温塑性変形に関する研究を行っています。



6H-SiC単結晶マイクロピラーの圧縮変形挙動

溶融めっき鋼板めっき被膜中の金属間化合物相の塑性変形

合金溶融垂鉛めっき鋼板は耐食性に優れていますが、複数のFe-Zn系やFe-Al系金属間化合物相で構成されるめっき被膜が鋼板の成型加工時に剥離するという問題があります。我々はこれを解決するため、めっき被膜中に形成される種々の金属間化合物相の塑性変形・破壊挙動を調べ、被膜剥離が極限まで低減される最適な被膜構造の設計指針確立を目指しています。



合金溶融垂鉛めっき鋼板めっき被膜の模式図と、構成相のマイクロピラー圧縮変形挙動

教授 辻 伸泰, 准教授 高 斯, 助教 朴 明駿, 助教 吉田 周平  
 特定助教 Gholizadeh Reza, 特定助教 八子 早保

研究室HP <http://www.tsujilab.mtl.kyoto-u.ac.jp/ja>

## 安心・安全で環境にやさしい社会基盤材料の革新



社会の基盤を支え、安全性・信頼性を高めるために、様々な金属材料が用いられています。私たちの研究室では、鉄鋼・アルミニウム合金といった構造物金属材料のナノ・ミクロ組織の形成機構やナノ・ミクロ組織と力学特性の相関に関する基礎研究を行っています。

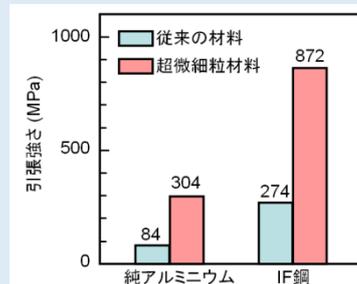
### バルクナノメタルの創製とその力学特性

我々は、ARBという大きな塑性変形を施す巨大ひずみ加工プロセスや新しい加工熱処理プロセスを独自に開発し、超微細粒・ナノ組織の創製に成功しています。結晶粒径 $1\mu\text{m}$ 以下のバルク金属(バルクナノメタル)は、粒径数十 $\mu\text{m}$ の従来金属に比べて優れた力学特性を示します。たとえばバルクナノメタル材は同じ化学組成で従来粒径材の4倍にも達する強度を有しています。

我々の研究室では、バルクナノメタルの創製プロセスやバルクナノメタルが示す優れた力学特性の発現原理を明らかにするための研究に取り組んでいます。



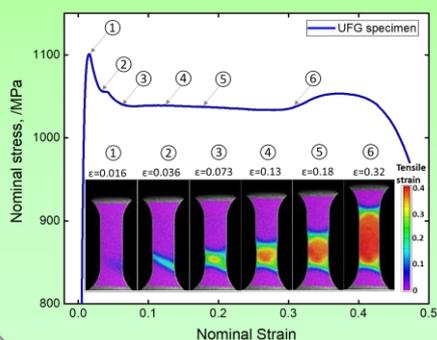
ARB法で作製した超微細粒アルミニウム



合金元素を添加しない単純化学組成で強度が3倍以上に!

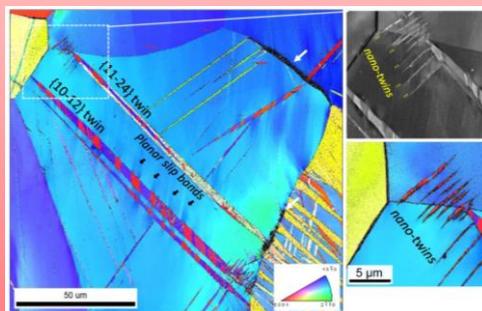
### 局所変形挙動の定量解析

金属結晶の塑性変形は、本質的に不均一です。そうした不均一な変形の重ね合わせの結果として、材料の平均的な強度や延性が決定されます。変形の不均一性は、結晶の構造やナノ・ミクロ組織と強く相関していると考えられます。我々は、引張試験時の二方向その場外形変化測定システムや、画像相関ひずみ解析 (Digital Image Correlation: DIC) 法などを駆使して、変形の不均一性とマクロな力学物性との関わりを基礎的に明らかにすることを目的とした実験研究を行っています。



### 金属の加工硬化と変形組織の関係

金属材料に塑性変形を施すことで転位等の格子欠陥から成る変形組織が発達します。変形組織は、金属材料の力学特性を決定する最も重要な因子の一つです。我々は、様々な金属材料において発達する変形組織を電子顕微鏡による組織観察や変形中のその場放射光X線/中性子回折測定等により詳細に解析し、変形組織発達メカニズムの解明や、優れた力学特性を有する革新的な新材料設計のための指針獲得を目指して研究を行っています。



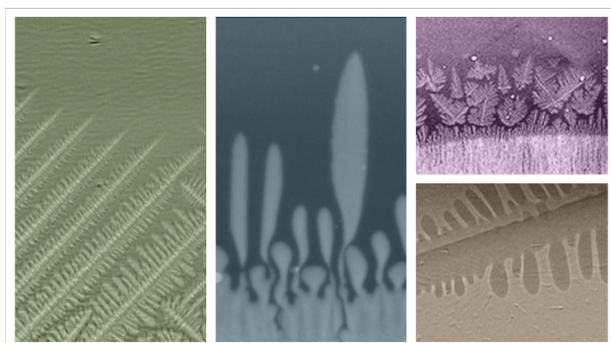
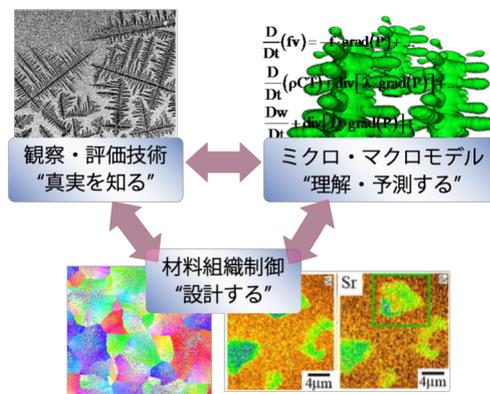
液体窒素温度で引張変形を施したTi-0.30合金における変形組織。微細な双晶(twin)が生成している。

## 実証データに立脚した新しい材料・材料プロセスの開発

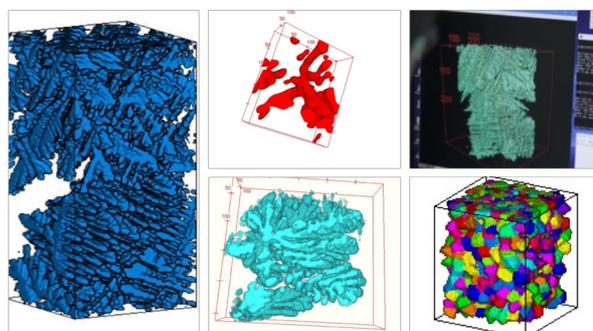
材料を製造するプロセスである融液からの凝固・結晶成長プロセスは、材料の特性を発現させるために重要なプロセスですが、高温・光学的不透明などの理由により未解明の現象が少なくありません。本研究室では、放射光(X線)を用いた時間分解その場観察などの実験手法を開発し、金属合金を中心に凝固組織形成の素過程を実証的に解明し、物理モデルの構築・シミュレーションにより検証を行い、新しい組織制御手法や材料プロセスの開発を目指しています。また、物質の磁場などの外場に対する応答性を顕在化させ、材料プロセスに応用する原理の構築から、結晶が高次に配向した組織などを実現する新しい材料プロセッシングに関する研究を行っています。



大型放射光施設SPring-8(兵庫県)での実験風景



凝固組織形成の様子 (透過X線イメージング)



組織形成の3D解析 (時間分解X線トモグラフィ)

研究室ホームページはこちら ▶▶▶



その場観察の様子はこちら ▶▶▶



新たな磁気材料と新奇磁気現象の発見

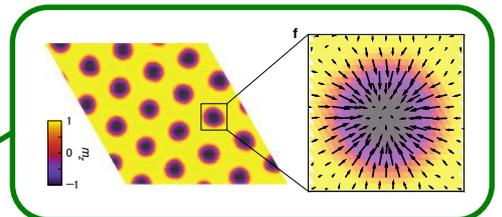
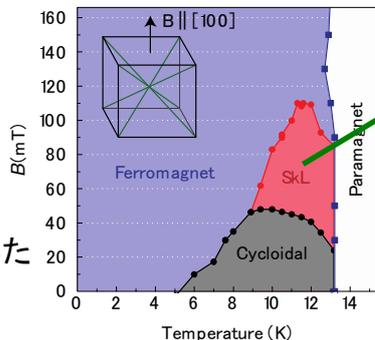
磁石は社会のあらゆる分野で利用される機能性材料です。物質のもつ磁氣的性質は物質を構成している原子やイオンがもつ磁気モーメントの集団の振舞いによって決まり、それを理解するには量子力学と統計力学を駆使する必要がありますが、一筋縄ではいかず、新たな発見が後を断ちません。

基礎的な磁性物理の進歩と磁性材料の機能の開発は車の両輪であり、我々は、新奇な磁気現象の発見とその物理の基礎的理解を通し、新たな磁性材料や磁氣的機能の開発を目指しています。例えば、下に挙げているのはスカーミオンと呼ばれる原子の磁気モーメントが渦状に巻いた特異な磁氣的状態です。我々はGaV<sub>4</sub>S<sub>8</sub>という物質でこのスカーミオンが出現していることを見出しました。一つ一つのスカーミオンを情報のビットとして利用することが考えられています。また、現在永久磁石材料として広く利用されているM型Srフェライトの性能向上を目指して、単結晶試料を育成して基礎物性の解明を目指しています。



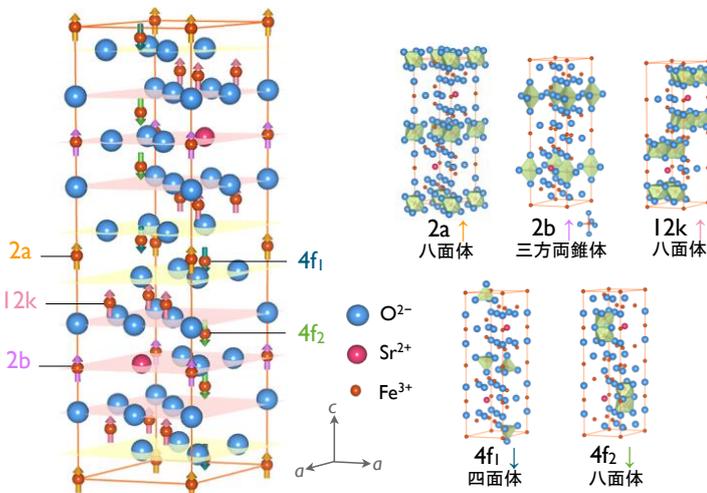
スカーミオン...

原子のもつ磁気モーメントが渦を巻いたように見える配列



欠損スピネル化合物GaV<sub>4</sub>S<sub>8</sub>の温度磁場相図

図中のSkLと書かれてある領域でスカーミオンが三角形に並んだスカーミオン格子が実現している



永久磁石材料M型Srフェライトの結晶構造  
5つの異なるFeサイトがあり、Fe<sup>3+</sup>イオンのスピンの向きが上向きサイトの下向きサイトがあるフェリ磁性体である

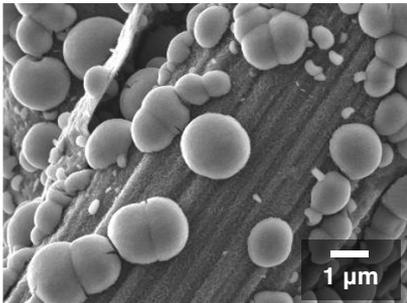
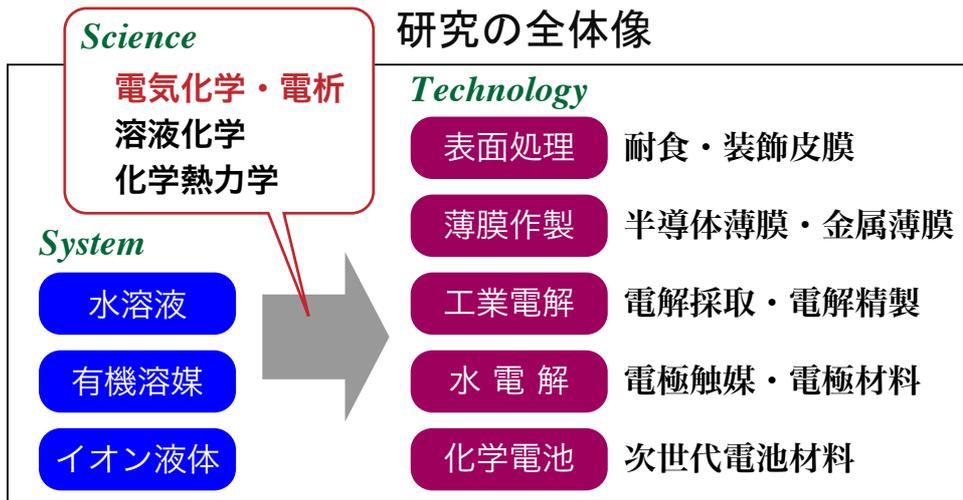


永久磁石材料M型Srフェライトの単結晶の写真  
Na<sub>2</sub>Oフラックスを使って育成した単結晶試料  
これらの単結晶試料を用いてSrフェライトの磁氣的性質を研究している

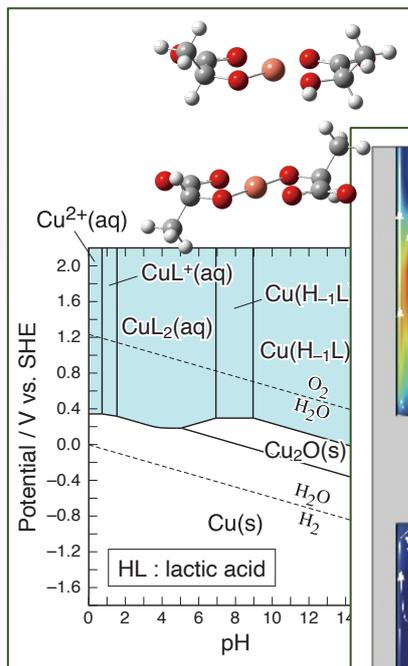
溶液系の電気化学と熱力学に基づく材料プロセッシング

人間社会を支えそして豊かにしている材料は、ほとんどすべてが2つ以上の物質の組み合わせで成り立っており、そこには物質の「表面」と「界面」が必ず存在して機能の発現に寄与しています。いいかえれば、種々のものづくり技術では、表界面の形成と機能化が鍵を握っています。

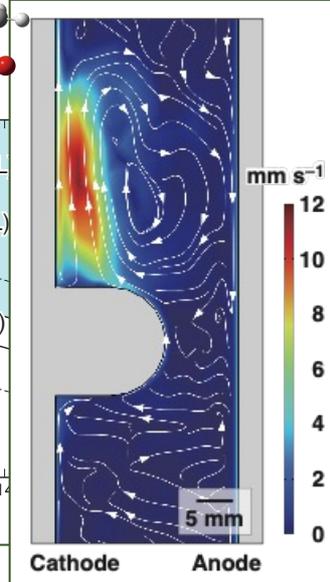
私たちの研究室では、溶液系と非水溶液系(イオン液体や有機溶媒)の電気化学、溶液化学、ならびに化学熱力学に立脚し、基礎から応用にわたる様々な表界面の湿式機能化プロセスを研究しています。



電池の反応解析



電析の熱力学



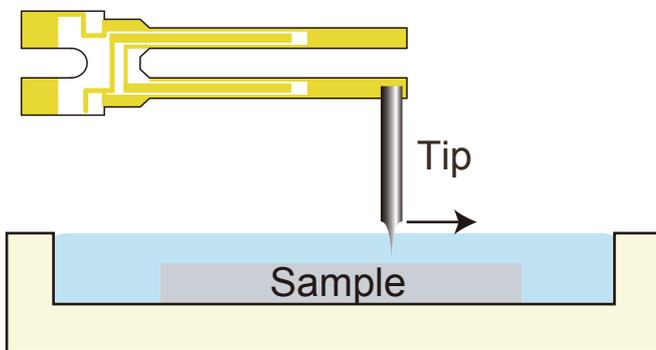
電析溶媒の探索

電解・電解液のシミュレーション

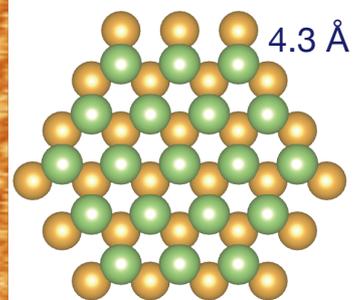
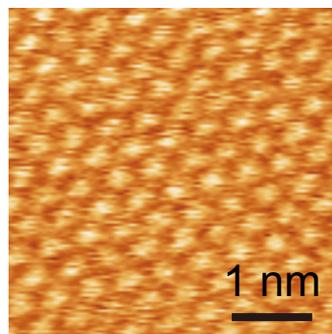
## 固体/液体界面の原子・分子材料工学

私たちの研究室では、材料表面・界面の物理と化学に立脚した原子スケール解析技術開発と構造形成プロセス創成に取り組んでいます。界面とは2つのものが接する面であり、固体と液体が接する場合は固液界面と呼ぶことがあります。固液界面は電気化学反応や結晶成長などの反応「場」です。そこがどうなっているかを見る、そして描くことを目指した原子間力顕微鏡（AFM）を開発しています。特に電池の充放電過程、液体金属中の合金化過程といった固液界面が関わる各種現象を原子分解能で直接観察することを目指しています。また、二次元原子・分子薄膜材料を用いた半導体表面構造形成プロセスにも取り組んでいます。

### 固液界面現象の原子スケール解析

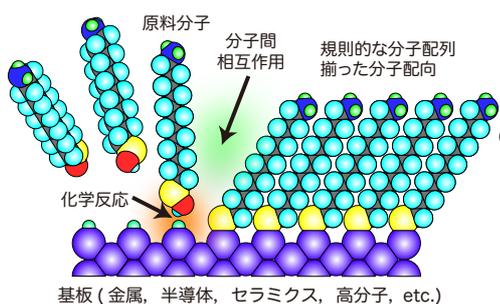


原子間力顕微鏡の開発

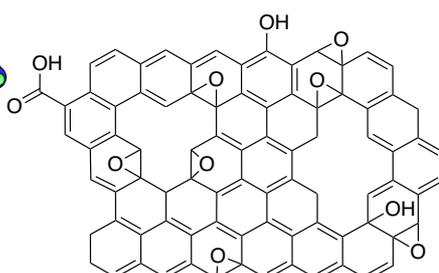


融液中で得られた合金表面  
(AuGa<sub>2</sub>(111)結晶面)の原子像

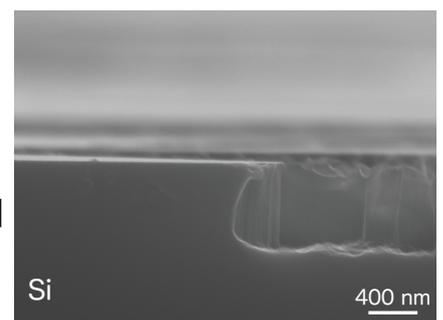
### 二次元原子・分子薄膜材料



自己集積化単分子膜



酸化グラフェン



シリコンの孔構造