



The Japan Society of Applied Physics

応用物理学会関西支部

平成 29 年度 第 1 回講演会

マテリアルデザインとグリーンデバイスの最前線

～関西発、イノベーションと若手研究者からの発信～

主 催：応用物理学会関西支部（URL：<http://jsap-kansai.jp/>）

日 時：2017 年 5 月 26 日（金）14:00～20:00

場 所：イーグレひめじ 3F あいめっせホールおよび B1F 第 4 展示室

〒670-0012 姫路市本町 68 番 290

TEL: 079-289-3443、URL：<http://www1.winknet.ne.jp/~egret-himeji/>

プログラム

第一部：

講演の部 イーグレひめじ 3F あいめっせホール

14:00～14:05 開会の辞 : 民谷 栄一 (支部長, 大阪大学)

14:05～14:35 招待講演 1 : 笠井 秀明 (明石工業高等専門学校 校長, 大阪大学名誉教授)
「知的マテリアルデザインによるグリーン・イノベーションの促進」

14:35～15:05 招待講演 2 : 坂口 浩司 (京都大学)
「生物模倣触媒を用いる機能性ナノ炭素細線の合成」

15:05～15:20 休 憩

15:20～15:40 招待講演 3 : 松井 文彦 (奈良先端科学技術大学)
「光電子ホログラフィーによるグリーンマテリアルの表面局所構造研究」

15:40～16:00 招待講演 4 : 荒木 貞夫 (関西大学)
「疎水性シリカ膜の開発と応用：透過性予測および最適膜設計技術の開発」

16:00～16:20 招待講演 5 : 中嶋 誠二 (兵庫県立大学)
「非鉛強誘電体BiFeO₃薄膜における異常光起電力効果」

第二部：

ポスターの部 イーグレひめじ B1F 第 4 展示室

16:30～18:30 ポスター発表

(奇数番号のコアタイム：16:30～17:30, 偶数番号のコアタイム：17:30～18:30)

P- 1 Surface Segregation and Stability of PdRuM (M=Rh, Ir, Ni, Ag) Ternary Metal Alloy Surfaces
Through First Principles-based Studies

Susan Meñez Aspera¹, Ryan Arevalo¹, Bhume Chantaramolee¹

Hiroshi Nakanishi^{1,2}, and Hideaki Kasai^{1,3,4}

¹National Institute of Technology, Akashi College

²Department of Applied Physics, Osaka University

³Center for International Affairs, Osaka University

⁴Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

- P- 2 HCHO dissociation to HCO+H on (111) surfaces of Pt and Rh
Bhume Chantaramolee¹, Susan Meñez Aspera¹, Ryan Lacdao Arevalo¹
Hiroshi Nakanishi^{1,2} and Hideaki Kasai^{1,2,3}
¹ 国立明石工業高等専門学校, ² 大阪大学, ³ 東京大学
- P- 3 How do Ru and Ni surfaces catalyze the steam reforming of methane?
Ryan Lacdao Arevalo¹, Susan Meñez Aspera¹, Mary Clare Sison Escaño²
Hiroshi Nakanishi^{1,3} and Hideaki Kasai^{1,4,5}
¹National Institute of Technology, Akashi College
²Graduate School of Engineering, University of Fukui
³Graduate School of Engineering, Osaka University
⁴Institute of Industrial Science, The University of Tokyo
⁵Center for International Affair, Osaka University
- P- 4 DFT-BASED STUDY OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF
h-BORON NITRIDE/ GRAPHENE HETEROBILAYER AND SILICENE/ h-BORON
NITRIDE/ GRAPHENE HETEROSTRUCTURE
Carlo Angelo Pelotenia¹, Allan Abraham Padama², Susan Aspera⁷,
Nelson Arboleda, Jr.^{1,3,4}, Hideaki Kasai^{5,6,7} and Melanie David^{1,4}
¹Physics Department, De La Salle University
²Institute of Mathematical Sciences and Physics, College of Arts and Sciences,
University of the Philippines, Los Baños
³De La Salle University- Science and Technology Complex
⁴Center for Natural Sciences & Environmental Research, Computational Materials Design Unit,
De La Salle University
⁵Division of Precision Science and Technology and Applied Physics,
Graduate School of Engineering, Osaka University
⁶Institute of Industrial science, The University of Tokyo
⁷National Institute of Technology, Akashi, College
- P- 5 高効率人工光合成デバイス実現のための 3d 遷移金属添加 AlN の設計と合成
立溝 信之, 三浦 良雄, 今田 早紀
京都工芸繊維大学大学院 工学科学研究科
- P- 6 グラフェン/h-BCN 超格子構造の光吸収特性シミュレーション
栗原 健汰, 小川 真人, 相馬 聡文
神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

- P-7 グラフェン状物質 h-BCN の電気伝導特性シミュレーション
生水出 浩斗, 小川 真人, 相馬 聡文
神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻
- P-8 グラフェン/h-BCN 超格子構造の電気伝導特性シミュレーション
石原 友也, 小川 真人, 相馬 聡文
神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻
- P-9 Interstitial impurity-induced surface magnetism in a layered oxide
Arguelles Elvis¹, Aspera Susan², 網野 修一³, 中西 寛^{1,2}, 笠井 秀明^{1,2}, Dino Wilson¹
¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校, ³株式会社アライグマテリアル
- P-10 Quantum and nuclear bound states of H₂ on a stepped metal surface
Arguelles Elvis¹, Kasai Hideaki², Katsuyuki Fukutani³, Yajima Ayako⁴
Nakayama Kousuke⁴, Yamashita Seiji⁴, Dino Wilson¹
¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校, ³東京大学, ⁴川崎重工業株式会社
- P-11 o-キノン体の反応解析: チオール結合と分子内環化
岸田 良¹, 笠井 秀明²
¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校
- P-12 フィッシュネットプリズムによる可視光の負屈折
五十嵐 俊, 馬越 貴之, Verma Prabhat
大阪大学大学院 工学研究科
- P-13 Lanthanides ions for molecular protection in DUV Raman imaging in different pH conditions
Yau Chuen YIU¹, Yasuaki KUMAMOTO², Atsushi TAGUCHI¹, Satoshi KAWATA¹
¹Department of Applied Physics, Osaka University
²Department of Pathology and Cell Regulation, Kyoto Prefectural University of Medicine
- P-14 不良金属の材料設計~貴金属の次元(構造)と軌道占有(電子状態)を制御~
豊田 智史¹, 森田 将史¹, 福田 勝利¹, 堀場 弘司², 組頭 広志², 松原 英一郎¹
¹京都大学, ²高エネ研
- P-15 アルミニウムナノ粒子を用いた深紫外第二高調波発生
新田 将, 田口 敦清, 藤田 克昌
大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻

- P-16 蛍光性パラジウムナノクラスターの合成及び光学特性評価
馬場 務, 石飛 秀和, 井上 康志
大阪大学大学院 工学研究科
- P-17 低温環境下のカーボンナノチューブ表面増強ラマン分光
谷口 雅紀, 馬越 貴之, バルマ プラブハット
大阪大学大学院 工学研究科
- P-18 Q 値 100 万を超えるシリコンナノ共振器へのポストプロセス付加
伊藤 隆浩, 芦田 紘平, 高橋 和
大阪府立大学
- P-19 HfO₂ 抵抗変化型メモリ (ReRAM) のアナログ動作の検討
畑本 正浩, 松尾 陽樹, 奈良 安雄
兵庫県立大学大学院 工学研究科
- P-20 Receptor protein analysis of single cell using centrifugal microfluidic device
Chen Zhu¹, Takaaki Okajima¹, Espulgar Wilfred Villariza¹, Wataru Aoki²
Hiroyuki Yoshikawa¹, Masato Saito¹, Mitsuyoshi Ueda², Eiichi Tamiya¹
¹大阪大学工学研究科, ²京都大学農学研究科
- P-21 銅フタロシアニンを用いた高耐熱性を有する有機薄膜トランジスタ
渡邊 翔太郎, 高橋 一, 花房 佑樹, 北村 雅季
神戸大学大学院工学研究科 電気電子工学専攻
- P-22 レーザー冷却に向けた Yb 添加 YAG の作製
中山 雄太¹, 尾崎 勝也¹, 原田 幸弘¹, 喜多 隆¹, 石原 嗣生²
¹神戸大学, ²兵庫県立工業技術センター
- P-23 ベンゼンチオール誘導体による表面修飾した水晶振動子センサの相対湿度に対する特性
北村 正樹, 北村 雅季
神戸大学大学院工学研究科
- P-24 糖鎖機能化グラフェン FET を用いたインフルエンザウイルスの検出
川田 拓哉¹, 小野 堯生¹, 金井 康¹, 大野 恭秀^{1,2}, 前橋 兼三^{1,3}, 井上 恒一¹
渡邊 洋平⁴, 河原 敏男⁵, 鈴木 康夫⁵, 中北 慎一⁶, 松本 和彦¹
¹阪大産研, ²徳島大, ³東京農工大, ⁴京都府立医大, ⁵中部大, ⁶香川大

- P-25 酸化グラフェンキャパシタの揮発性有機化合物ガス応答特性に関する研究
田中 康¹, 清水 優¹, 田畑 博史¹, 久保 理¹, 西野 貴幸², 石橋 幸治², 片山 光浩¹
¹大阪大学大学院工学研究科 電気電子情報工学専攻, ²理化学研究所
- P-26 放射光を利用した Al-Cr 系水素化物の高温高压合成
宇野 和仁^{1,2}, 齋藤 寛之^{1,2}, 綿貫 徹^{1,2}
¹兵庫県立大学大学院 物質理学研究科, ²量子科学技術研究開発機構
- P-27 高温高压下における Co₃Ti の水素化反応の放射光その場 X 線回折
森本 勝太^{1,2}, 齋藤 寛之^{1,2}, 綿貫 徹^{1,2}
¹兵庫県立大学大学院物質理学研究科, ²量子科学技術研究開発機構
- P-28 疎水性シリカ膜を用いた水素/トルエン混合ガス分離における操作条件の影響
岡部 有未, 荒木 貞夫, 山本 秀樹
関西大学大学院 理工学研究科
- P-29 エピタキシャル Ge/Si(001)薄膜における熱電性能の膜質依存性
谷口 達彦, 宮本 拓, 渡辺 健太郎, 中村 芳明
大阪大学大学院 基礎工学研究科
- P-30 HfO₂/Si 構造の保持電荷量に対するアニール効果
松尾 陽樹, 畑本 正浩, 森 英喜, 奈良 安雄
兵庫県立大学大学院 工学研究科
- P-31 MOCVD 法による BiFeO₃ 薄膜の作製~精密な組成制御の検討~
吉村 奈緒, 藤沢 浩訓, 清水 勝, 中嶋 誠二
兵庫県立大学大学院 工学研究科
- P-32 低環境負荷非鉛 BiFeO₃ 薄膜に導入された帯電ドメインウォールが示す特異な電気伝導
黒川 悠太, 中嶋 誠二, 藤沢 浩訓, 清水 勝
兵庫県立大学大学院 工学研究科
- P-33 ZnO ナノワイヤ上での HfO₂ 薄膜の結晶化に関する検討
清水 勝, 藤沢 浩訓, 中嶋 誠二, 竹内 洋平
兵庫県立大学大学院 工学研究科
- P-34 反応性スパッタ法による結晶シリコン太陽電池用パッシベーション膜の開発
丸金 稔弥, 原田 貴志, 前田 光治, 新船 幸二
兵庫県立大学

- P-35 ペロブスカイト太陽電池における金属元素の添加効果
白幡 泰浩, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部
- P-36 Mn ドープしたペロブスカイト系結晶の電子構造と磁氣的性質
鈴木 厚志, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部
- P-37 Mn の元素をドープしたペロブスカイト系太陽電池の作製と評価
田口 雅也, 大石 雄也, 鈴木 厚志, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部
- P-38 NH₄Cl を添加した(CH₃NH₃)_{1-2x}Cs_xRb_xPbI₃ 太陽電池の作製と光起電力特性評価
上岡 直樹, 奥健夫, 鈴木厚志
滋賀県立大学大学院 工学研究科
- P-39 金属およびハロゲンイオン添加 CH₃NH₃PbI₃ 半導体におけるペロブスカイト構造の安定性
田中 大基*, 上岡 直樹, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部 材料科学科 (*着任予定)
- P-40 13、14、15 族元素ドープペロブスカイト系太陽電池の作成と評価
大石 雄也, 奥 健夫, 鈴木 厚志
滋賀県立大学 工学部
- P-41 SiC デバイスを搭載した可搬型太陽光発電システムの開発
安藤 裕二¹, 奥 健夫¹, 安田 昌司², 牛嶋 和文³, 室園 幹夫⁴
¹滋賀県立大学 工学部, ²滋賀県立大学 産学連携センター
³アルモテック株式会社, ⁴株式会社クリーンベンチャー21
- P-42 平面型素子を用いた有機薄膜中の励起子束縛エネルギーの評価
瀬島 彬智, 奥田 侑希, 末延 知義, 中山 健一
大阪大学大学院工学研究科 生命先端工学専攻
- P-43 グラフェン状物質 h-BCN の光吸収特性シミュレーション
岡本 一希, 小川 真人, 相馬 聡文
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

知的マテリアルデザインによるグリーン・イノベーションの促進

Intelligent Materials Design for the Promotion of Green Innovation

明石工業高等専門学校 °笠井 秀明, 武田 宇浦

National Institute of Technology, Akashi College, °Hideaki Kasai, Naho Takeda

E-mail: kasai@akashi.ac.jp

21 世紀に入り科学技術の進歩は目覚ましく、これまで未来絵巻として描かれていた新規デバイスや新規物質が次々と開発されている。その一方では、従来の技法では解決できないような問題も浮上してきている。ナノテクノロジーの発展は目を見張るばかりだが、新規デバイス開発がナノメートルオーダーやそれ以下の微細領域に及ぶにつれ、量子効果を考慮しなければならなくなっている。また、効率良く新規物質を開発するためには、計算機シミュレーションで予測してから実験を行う必要がある。このような状況において、今日、量子力学に基づき、実験に頼らない高信頼性シミュレーションが求められている。

これらの要望に応える計算手法である第一原理計算は、量子力学から導かれる密度汎関数理論に基づいており、実験値等の経験的パラメータに頼らない物性予測が可能である。第一原理計算手法の開発と、最近の計算機性能の飛躍的な向上により、第一原理を根幹とした計算機マテリアルデザインが現実性を増しており、この計算機マテリアルデザインによる知的設計が産業製品の開発へ応用され始めている。計算機マテリアルデザインによる先行特許出願についても、その戦略的重要性が高まるものとして期待される（2005 年出版の「計算機マテリアルデザイン入門」^[1]より）。

12 年を経過して、まさに、その通りだと実感している。この計算機マテリアルデザインについて説明しよう。図 1 には計算機マテリアルデザインエンジンを示す。まず、望む物性をもつ候補となる物質を構築し、その構造に基づいて量子シミュレーションを行う（量子シミュレーション）。その結果からこの物質がもつ物性やその発現機構を定量的に評価する（物理機構の演繹）。そして、その定量的評価に基づいて、より望ましい物性を発現するだろう仮想物質を推論し（仮想物質の推論）、その仮想物質が望む物性をもつかどうかを検証するために再度量子シミュレーションを行う。ここで望む物性が得られればよし、得られない場合は、不発現機構を演繹し、再度、リファイルして仮想物質を推論する。というように、これまでの処理を再帰的に行うことによってより望ましい物質に仮想物質を近づけていく。このような、量子

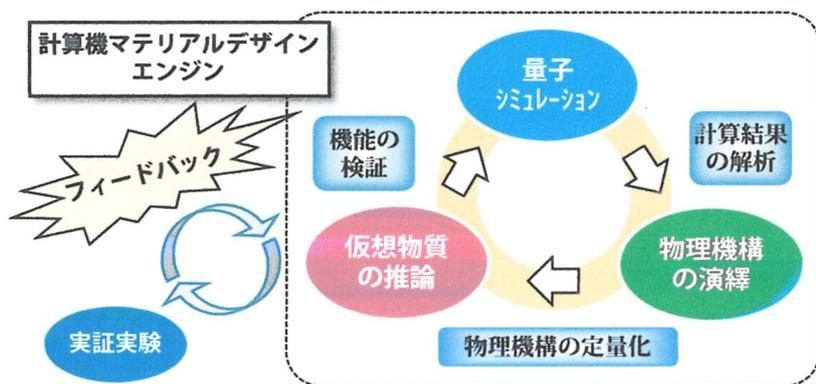


図 1 計算機マテリアルデザインエンジン

シミュレーションに基盤を置く新規物質の研究開発は、研究開発当初から実際に物質を製造する実験的なアプローチに比べ、設備投資等のコストを計算コストに置き換えることができるといった点で優れていると考えられる。もちろん、計算機マテリアルデザインの解析結果を実験で実証する必要がある。そうすることで新規物質・新規デバイスが実現される。

グリーン・イノベーションを促進するマテリアルデザインの先端研究事例^[2,3,4,5,6,7]として固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料に関する研究や次世代の電子デバイスに関する研究、建設分野における次世代構造材料の研究を紹介する。

【参考文献】

- [1] 笠井秀明, 赤井久純, 吉田博:『大阪大学新世紀レクチャー 計算機マテリアルデザイン入門』, 大阪大学出版会, 2005 年
- [2] 笠井秀明, 津田宗幸:『大阪大学新世紀レクチャー 計算機マテリアルデザイン先端研究事例 I 固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計』, 大阪大学出版会, 2008 年
- [3] 笠井秀明, 岸浩史:『大阪大学新世紀レクチャー 計算機マテリアルデザイン先端研究事例 II 抵抗変化メモリの知的材料設計』, 大阪大学出版会, 2012 年
- [4] 笠井秀明, 坂上護:『アドバンスト物理学シリーズ 1 表面界面の物理』, 朝倉書店, 2013 年
- [5] 笠井秀明: 量子テクノロジーの時代を拓くデザイナーマテリアル, 生産研究, 第 67 巻, 第 5 号, pp.107-117, 東京大学生産技術研究所, 2015 年
- [6] Hideaki Kasai and Mary Clare Sison Escaño: “Physics of surface, interface and cluster catalysis”, IOP Publishing, Ltd., 2016
- [7] 武田字浦, 井上晃祐, 澁谷卓, : ステアリン酸系金属石鹸および爆砕竹繊維を混入したモルタルの物理特性, 土木学会, 土木学会年次学術講演会講演概要集(CD-ROM) , 71 巻, p.V - 248, 2016 年

生物模倣触媒を用いる機能性ナノ炭素細線の合成

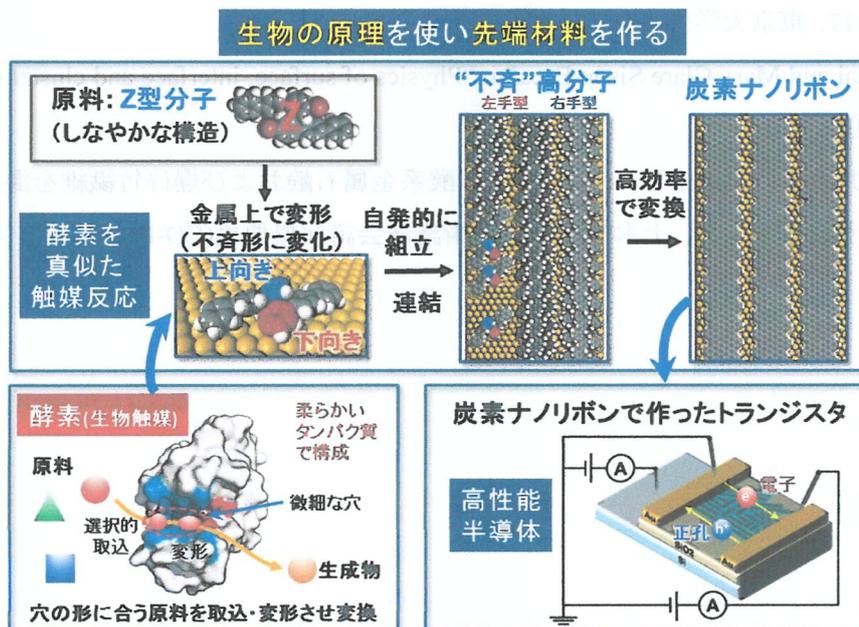
Graphene Nanoribbons produced by biomimetic surface catalysis

京大エネ研 坂口 浩司

Kyoto Univ., Hiroshi Sakaguchi

E-mail: sakaguchi@iae.kyoto-u.ac.jp

グラフェンを分子レベルで‘細く切った’炭素材料であるグラフェンナノリボン (GNR) は、構成する炭素原子の結合方向 (キラル軸) やエッジ構造により物理的性質が大きく変わることが理論的に予測されている半導体 (導体) であり、太陽電池、電子・磁気素子などのエネルギー、電子分野への応用が期待されている。しかし、その合成は、精密に制御された炭素軸を分子レベルで行う必要があり、非常に困難である。GNR を合成する最も有望な方法は、原料分子を金属基板上で組み立てて作るボトムアップ (表面触媒) 法と考えられている。我々は、これまで金属表面上で分子の化学反応を精密に行う表面重合の原理を用いて、分子レベルで配向した分子細線の合成に成功してきた^{1,2)}。最近、独自に開発した 2 ゾーン化学気相成長法を用い³⁾、生物の原理 (キラル、自己組織化、進化・選択、ソフト触媒) を使った新しい合成法を見出し、従来困難であったアセン型 GNR の合成に初めて成功した⁴⁾。



References

1. H. Sakaguchi, H. Matsumura, H. Gong, A. Abouelwafa, *Science*, 310, 1002-1006 (2005).
2. H. Sakaguchi, H. Matsumura, H. Gong, *Nature Mater.*, 3, 551-557 (2004).
3. H. Sakaguchi, Y. Kawagoe, Y. Hirano, T. Iruka, M. Yano, T. Nakae, *Adv. Mater.* 26, 4134-4138 (2014).
4. H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *Nature. Chem.* 9, 57-63 (2017).

光電子ホログラフィーによるグリーンマテリアルの表面局所構造研究 Local structure characterization of green material surfaces by photoelectron holography

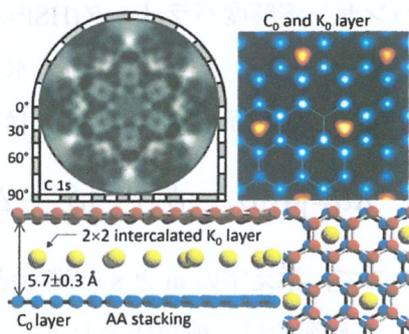
奈良先端大¹, 高輝度光科学研究センター² ◦松井 文彦¹, 太田 紘志¹, 嶽太輔¹, 松下 智裕²

Nara Institute of Science and Technology¹, Japan Synchrotron Radiation Research Center²,

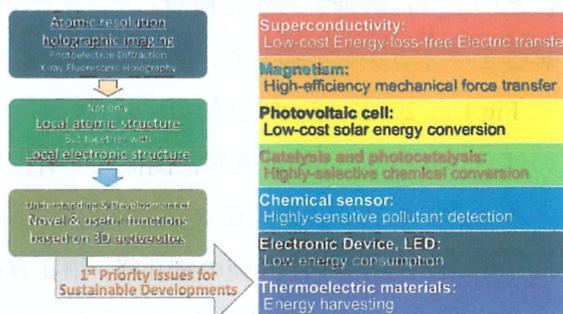
◦Fumihiko Matsui¹, Hiroshi Ota, Daisuke Take, Tomohiro Matsushita²

E-mail: matui@ms.naist.jp

内殻準位から放出される光電子の強度角度分布には、励起原子からの電子の波と周囲の原子の散乱による波が干渉し、光電子回折(ホログラム)として原子配列の立体的な情報が記録される。光電子を用いた測定は元素選択的・表面敏感であり、また表層下の不純物や界面、配向分子など、非周期構造の系に適応できる強みがある。右図は超伝導黒鉛層間化合物の劈開表面の光電子ホログラム解析の例である。(Ca_xK_{1-x}C_y)表面では KC8 原子配列構造が再生された。K が挿入された炭素層間距離は 0.57±0.03nm であった。表面敏感な XPS では Ca が検出されなかった。これは Ca 原子がグラフェン層と強く結合し、濃度のムラで Ca がほばない層が選択的に劈開されたことを示唆している[Sci. Rep. 6 36258 (2016)]。



特異な機能発現は、表面や結晶中の欠陥や不純物特有の電子状態に起因する例が多数あり、原子レベルで構造と電子状態を解明していくことでこうした機能性材料の開発に有用な知見が得られる。光電子ホログラフィーの測定において十分なエネルギー分解能があれば、化学シフトを利用し、価数や結合の異なる原子サイトを個別に局所構造解析(分光回折)することができる。励起原子から隣接原子の方向に現れる前方収束ピークなど、サイト特有な回折模様を用いて分光測定を行うとサイト選択的な電子状態の情報が引き出せる(回折分光)。本講演では触媒や光触媒表面の活性中心となるナノ構造についての研究例を紹介したい。



疎水性シリカ膜の開発と応用：透過性予測および最適膜設計技術の開発

Development and Application of hydrophobic silica membrane: Prediction of permeation flux and design of optimal membrane structure

関西大学 荒木 貞夫

Kansai Univ., Sadao Araki

E-mail: araki_sa@kansai-ua.c.jp

近年、水溶液中に低濃度で含まれる有機物の分離回収技術として省エネルギーな分離法である膜を用いた浸透気化分離(PV)が注目されている。一般的に PV における分離は膜と有機物の親和性が重要であると考えられる。本研究では有機物と膜材料の親和性を評価するために、膜材料のハンセン溶解度パラメータ(HSP)に着目した。HSP は単位モル体積当たりの凝集エネルギーに基づいた分散力 δ_d 、双極子間力 δ_p 、水素結合 δ_h で表される。HSP による溶解性の評価は膜と有機物の HSP の距離を示す $Ra [(J/cm^3)^{1/2}]$ が用いられる。

$$Ra = \left[4 \cdot (\delta_{dm} - \delta_{ds})^2 - (\delta_{pm} - \delta_{ps})^2 - (\delta_{hm} - \delta_{hs})^2 \right]^{1/2}$$

ここで、添え字の m と s は膜と溶媒を表している。

本研究では、前駆体としてフェニルトリメトキシシラン(PhTMS)、エチルトリメトキシシラン(ETMS)、n-プロピルトリメトキシシラン(PrTMS)、i-ブチルトリメトキシシラン(BTMS)およびヘキシルトリメトキシシラン(HTMS)の 5 種類を用いて疎水性シリカ膜を調製した。その上で、有機物の分離特性を PV により把握し、官能基が異なることによる有機物との Ra の変化が透過流束にどのように影響するかを検討した。また、濃度や温度変化が Ra と透過流束の関係にどのような影響を与えるかを把握した。

Fig.1 に 295 K, 5wt%の有機物を含む水溶液中での有機物の透過流束と Ra との関係を示す。多少のばらつきはあるが、官能基に関係なく有機物の透過流束の対数と Ra の間に比較的高い相関性があると考えられる。透過流束には濃度差、圧力差などの推進力と透過物質の膜中の拡散性や溶解性が影響する。拡散性は膜の細孔径、細孔容積や屈曲率に透過物質の分子直径などに依存すると考えられる。本研究で調製した疎水性シリカ膜は、すべての膜において約 1nm 程度の細孔が形成されており、膜厚は約 1 μ m であった。これらのことから、官能基の違いによって膜の細孔構造や膜厚に大きな変化はなく拡散性に大きな違いがなく、疎水性シリカ膜を透過する有機物の透過流束は溶解性と関連がある Ra と透過流束に相関性が得られたと考えられる。

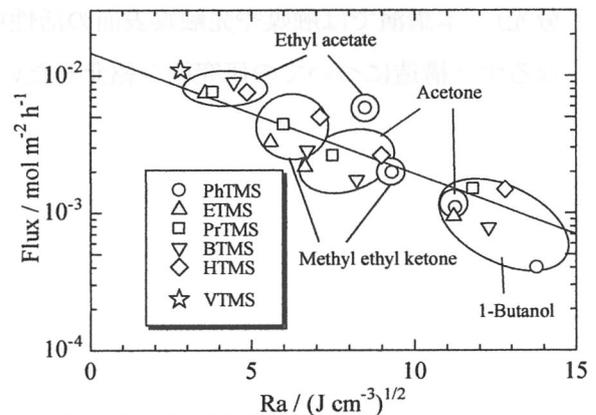


Fig.1 Relationship between Ra and organic flux.

非鉛強誘電体BiFeO₃薄膜における異常光起電力効果

Anomalous Photovoltaic Effect in Lead-free Ferroelectric BiFeO₃ Thin Films

兵庫県立大院工 °中嶋 誠二, 藤沢 浩訓, 清水 勝

Univ.of Hyogo, °Seiji Nakashima, Hironori Fujisawa, and Masaru Shimizu

E-mail: nakashima@eng.u-hyogo.ac.jp

強誘電体は、焦電性、圧電性、を有し、自発分極を外部電場により反転でき、これらの性質を利用し、極めて多くのデバイスに応用されてきた。強誘電体材料の中で特に優れた圧電性を示すのが Pb(Zr,Ti)O₃(PZT)であり、焦電センサ、圧電アクチュエータ、強誘電体不揮発性メモリ (FeRAM) 等に応用されている。しかしながら、欧州 HoHS 指令や WEEE 指令を等の法規制に伴い Pb の削減が求められている。我々は非鉛強誘電体である BiFeO₃ (BFO) に着目し、これまでにない新規物性の探索を行ってきた。

BFO は、室温で優れた強誘電性と反強磁性を示すマルチフェロイック材料であり、光学バンドギャップが 2.5~2.8 eV と可視光域にあり、典型的な強誘電体である PZT の 3.4~3.7 eV に比べて小さい。近年この BFO 薄膜に可視光を照射することでバンドギャップに制限されない巨大な開放端電圧を呈する異常光起電力効果が報告され、注目されている。^{1),2)}

我々は単結晶 BFO 薄膜を用い、Fig. 1 に示すような Pt/BFO/Pt コプレーナキャパシタを作製し、青紫色半導体レーザ ($\lambda=405$ nm) 照射下においてその物性を詳しく調べ、室温において 40V の開放端電圧を呈することを見出した。さらに、BFO 薄膜に Mn を 1at% ドープすることにより開放端電圧が 287V まで増加することが分かった (Fig. 2)。これは電界に換算すると 11.0kV/cm に相当し、逆圧電効果により BFO 薄膜への歪の誘起が期待できる値である。このことから、光の照射により発生した歪を利用した光アクチュエータの実現が示唆される。当日は、より詳しい特性と光アクチュエータへの応用も紹介する予定である。

【参考文献】

- 1) S. Y. Yang *et al.*, *Nat. Nanotechnol.* **5**, 143 (2010).
- 2) A. Bhatnagar, A. R. Chaudhuri, Y. H. Kim, D. Hesse and M. Alexe, *Nat. Commun.* **4**, 2835 (2013).

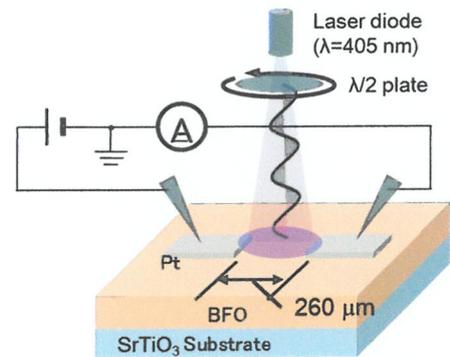


Fig. 1 Schematic diagram of sample structure and measurement setup

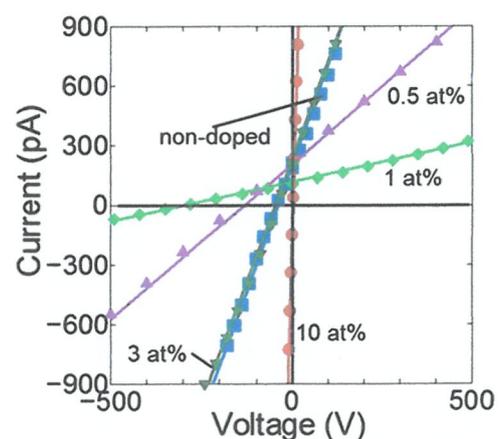


Fig. 2 I - V characteristics of Pt/Mn:BFO/Pt coplanar capacitors with various Mn content under violet laser illumination.

~memo~

非鉛鉛酸電池の電圧変動に対する影響を調べるための BiFeO₃ 薄膜

Non-leads Photovoltaic Effect in Lead-free Ferroelectric BiFeO₃ Thin Films

兵庫農立大理工 中嶋 誠二 藤原 浩二 藤原 浩二

E-mail: nakashima@eng.hyogo.ac.jp

非鉛鉛酸電池は、鉛酸電池に比べて、有害な鉛を含まず、環境にやさしい電池として注目を集めている。しかし、鉛酸電池と比較して、電圧変動が大きいという欠点がある。この電圧変動の原因は、電極材料の劣化や電解液の濃度変化によるものである。本研究では、非鉛鉛酸電池の電圧変動を抑制するために、BiFeO₃ 薄膜を電極材料として用いることを提案する。BiFeO₃ は、室温で強磁性を示すフェロエレクトリック材料であり、また、光電効果を示すため、非鉛鉛酸電池の電圧変動を抑制する効果が期待される。本研究では、BiFeO₃ 薄膜の合成と、非鉛鉛酸電池への応用について報告する。



Fig. 1 Schematic diagram of sample structure and measurement setup.



Fig. 2 I-V characteristics of Pt/BiFeO₃/Pt coplanar capacitors with various Mn content under violet laser illumination.

1) H. Y. Yang et al. *Adv. Funct. Mater.* **14**, 1201 (2004).
 2) A. Boumgar, A. R. Chaudhuri, Y. H. Kim, D. Hesse and M. Alexe, *Adv. Funct. Mater.* **17**, 2832 (2003).

P-1

Surface segregation and sintering of Pd-based catalysts on Pt and Rh surfaces through first principles-based studies.
Shun-ichiro Aoyama, Kazuo Aoyama, Hiroaki Yamamoto, Hiroaki Nakamura, and Hiroaki Kasahara
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba Central Research Laboratory, 1-1-1 Higashi, Tsukuba, Ibaraki 305-8565, Japan
Center for Nanostructured Materials, Graduate School of Science, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8654, Japan
We used density functional theory (DFT)-based calculation to determine surface segregation and sintering of binary metal alloys. In simple, we used the ternary combination PdPtRh (Pt:Rh:Ir:Ag). Considering the alloying energy for all possible combinations of the binary alloy slab system, we observed that the sintering (1) is caused by the type of atoms of the surface and (2) can be explained by the interaction at the binary combination of the constituent atoms.

P-2

HCHO dissociation on HCO/H on (111) surfaces of Pt and Rh
Hiroaki Nakamura, Shun-ichiro Aoyama, Kazuo Aoyama, Hiroaki Nakamura, and Hiroaki Kasahara
1 国立高度工業技術センター / 大阪大学 / 物質科学
ポスター発表要旨
HCHO dissociation on HCO/H on (111) surfaces of Pt and Rh was studied via the first-principles approach based on the density functional theory (DFT). HCHO and CO adsorption on Pt(111) prefer low-coordinated sites in contrast to the adsorption on Rh(111), which prefer the higher-coordinated sites. We show the most stable adsorption configurations of HCO/H and CHO/H as the initial and the final states, respectively, for studying the reaction paths. The dissociation of HCHO to CHO/H generally requires the Metal-C and Metal-O bond weakening in the case of HCHO/H, because the surface-binding Metal-H bond is the product. We will discuss the dissociation processes of HCHO on Pt and Rh surfaces in the meeting.

P-1

Surface Segregation and Stability of PdRuM (M=Rh, Ir, Ni, Ag) Ternary Metal Alloy Surfaces Through First Principles-based Studies

Susan Meñez Aspera¹, Ryan Arevalo¹, Bhume Chantaramolee¹, Hiroshi Nakanishi^{1,2}, and Hideaki Kasai^{1,3,4}

¹National Institute of Technology, Akashi College, ²Department of Applied Physics, Osaka University

³Center for International Affairs, Osaka University, ⁴Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

We used density functional theory (DFT)-based calculation to determine surface segregation and stability of ternary metal alloys. To sample, we used the ternary combination PdRuM (M= Rh, Ir, Ni, Ag). Comparing the alloying energy for all possible combinations of the ternary alloys slab systems, we observed that the stability: (1) is based on the type of atoms at the surface, and (2) can be approximated by the interaction at the binary combination of the constituent atoms.

P-2

HCHO dissociation to HCO+H on (111) surfaces of Pt and Rh

Bhume Chantaramolee¹, Susan Meñez Aspera¹, Ryan Ladao Arevalo¹, Hiroshi Nakanishi^{1,2}, and Hideaki Kasai^{1,2,3}

¹国立明石工業高等専門学校, ²大阪大学, ³東京大学

HCHO dissociation to HCO+H on (111) surfaces of Pt and Rh was studied via the first-principles approach based on the density functional theory (DFT). HCHO and CHO adsorptions on Pt(111) prefer low-coordinated sites, in contrast to the adsorptions on Rh(111), which prefer the higher coordinated sites. We chose the most stable adsorption configurations of HCHO and CHO+H as the initial and the final states, respectively, for studying the reaction paths. The dissociation of HCHO to CHO+H generally requires the Metal-C and Metal-O bond weakening to tilt one of HCHO's hydrogen towards the surface, making Metal-H bond in the process. We will discuss the dissociation processes of HCHO on Pt and Rh surfaces in the meeting.

P-3

How do Ru and Ni surfaces catalyze the steam reforming of methane?

Ryan Lacdao Arevalo¹, Susan Meñez Aspera¹, Mary Clare Sison Escaño², Hiroshi Nakanishi^{1,3}
Hideaki Kasai^{1,4,5}

¹National Institute of Technology, Akashi College, ²Graduate School of Engineering, University of Fukui

³Graduate School of Engineering, Osaka University, ⁴Institute of Industrial Science, The University of Tokyo;

⁵Center for International Affair, Osaka University

In this presentation, we will discuss how Ru and Ni surfaces catalyze the steam reforming of methane using first principles calculations based on density functional theory. This study is of tremendous importance for the science community since an efficient production of hydrogen is one of the greatest challenges of our time. Though the steam reforming of methane is a non-zero carbon emission technology, it remains as one of the current state-of-the-art in producing hydrogen. However, the mechanism on how this reaction is being catalyzed is still a matter of debate and speculation. Hence, it is imperative to provide an atomic-scale understanding of the catalysis of steam methane reforming, that poses significant insights into the design of catalytic materials for this reaction.

P-4

DFT-BASED STUDY OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF h-BORON NITRIDE/ GRAPHENE HETEROBILAYER AND SILICENE/ h-BORON NITRIDE/ GRAPHENE HETEROSTRUCTURE

Carlo Angelo Pelotenia¹, Allan Abraham Padama², Susan Aspera⁷, Nelson Arboleda, Jr.^{1,3,4}, Hideaki Kasai^{5,6,7}, Melanie David^{1,4}

¹Physics Department, De La Salle University, ²Institute of Mathematical Sciences and Physics, College of Arts and Sciences, University of the Philippines, Los Baños, ³De La Salle University- Science and Technology Complex, ⁴Center for Natural Sciences & Environmental Research, Computational Materials Design Unit, De La Salle University, ⁵Division of Precision Science and Technology and Applied Physics, Graduate School of Engineering, Osaka University, ⁶Institute of Industrial science, The University of Tokyo, ⁷National Institute of Technology, Akashi, College

Hexagonal-boron nitride/graphene heterobilayer and silicene/hexagonal-boron nitride/graphene heterostructure were studied using DFT. Both systems are stable compared to graphite, with small band gaps and preserved Dirac Cones. However, the Dirac Cones of Si/h-BN/G are slightly shifted.

P-5

高効率人工光合成デバイス実現のための 3d 遷移金属添加 AlN の設計と合成

立溝 信之, 三浦 良雄, 今田 早紀

京都工芸繊維大学大学院 (工芸科学研究科)

高濃度に 3d 遷移金属 (3d-TM) を添加した AlN は多段階電子遷移による広帯域光電変換材料として期待されている。

我々は、種々の 3d-TM を添加した AlN の第一原理バンド構造計算を行い、最適 3d-TM 種を探索するとともに、実際に薄膜を作成し評価している。本講演では、理論バンド構造と、光電子分光や X 線吸収分光から得られた実験的なバンド構造を比較し、その 3d-TM 種依存性を議論する。さらに実デバイスの構造を提案する。

P-6

グラフェン/h-BCN 超格子構造の光吸収特性シミュレーション

栗原 健汰, 小川 真人, 相馬 聡文

神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

グラフェンは原子一層分の厚さにもかかわらず白色光の吸収率が 2.3% と高いことから赤外線センサなどへの応用が期待されているが、より高感度なセンサの実現にはより吸収率の高い材料が求められる。本研究では、六方晶窒化ホウ素 (h-BN) をベースとした h-BCN とグラフェンから構成される超格子構造を提案し、この光吸収特性を強束縛近似法を用いたシミュレーションによって解析した。超格子構造にすることによりバンドギャップを制御でき、グラフェンより赤外領域の光の吸収率が大きくなることを報告する。

P-7

グラフェン状物質 h-BCN の電気伝導特性シミュレーション

生水出 浩斗, 小川 真人, 相馬 聡文

神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

近年、グラフェンがその電子移動度の高さから FET のチャネル材料として注目されている。しかしながらグラフェンにはバンドギャップがないため電流のスイッチングできないという欠点がある。これに対する解決策として、h-BN とグラフェンを混在させたグラフェン状物質である h-BCN により適度なバンドギャップを作り出す事が期待されている。本発表では、この h-BCN をチャネル材料とした FET の特性を明らかにすることを目的とし、強束縛近似法を用いたシミュレーションを行った結果、原子配置のパターンに依存して電流の異方性が得られることを報告する。

P-8

グラフェン/h-BCN 超格子構造の電気伝導特性シミュレーション

石原 友也, 小川 真人, 相馬 聡文

神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

近年、シリコンに代わる FET の材料としてグラフェンが注目されている。グラフェンは電子移動度がシリコンに比べて大きい点で優れているが、バンドギャップが存在しないため電流のスイッチングができないという欠点がある。そこで、新たなグラフェン状物質である h-BCN を用いることで適度なバンドギャップを得る事が期待されている。本発表では、グラフェンと h-BCN の超格子構造により電流の制御性を向上させる事を目的とし、強束縛近似法を用いたシミュレーションを行った結果を報告する。

P-9

Interstitial impurity-induced surface magnetism in a layered oxide

Arguelles Elvis¹, Aspera Susan², 網野 修一³, 中西 寛^{1,2}, 笠井 秀明^{1,2}, Dino Wilson¹

¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校, ³株式会社アライグマテリアル

We investigated the possibility of employing the polycrystalline α PbO as a spintronics device by first principles calculations based on the density functional theory (DFT). In particular, we explored the effects of 3d transition metal atom, Fe on the structural and electronic properties of the layered PbO (001) surface. The results show that the interstitial Fe induces spin polarization in the host crystal with magnetic moment value of 2.25 μ_B . Moreover, the magnetic order is determined using the energy difference between the antiferromagnetic and ferromagnetic states. The magnetic state energy difference is 0.068 eV, suggesting that Fe interstitial impurities induce ferromagnetism in PbO. In the mean field approximation, the corresponding Curie temperature is greater than 300K.

P-10

Quantum and nuclear bound states of H₂ on a stepped metal surface

Arguelles Elvis¹, Kasai Hideaki², Katsuyuki Fukutani³, Yajima Ayako⁴, Nakayama Kousuke⁴, Yamashita Seiji⁴, Dino Wilson¹

¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校, ³東京大学, ⁴川崎重工業株式会社

We investigate the dynamics of the nuclear spin states of H₂ under the influence of a highly anisotropic potential induced by the stepped Pd(210) by first principles calculations based on the density functional theory (DFT). H₂ has been shown to be at a chemisorption state on top of the step-edge Pd atom, contrary to flat transition metal surfaces where the adsorption is governed by weak van der Waals interaction. Our calculated orientation-dependent potential energy surface (PES) shows that H₂ adsorption is highly anisotropic and molecular orientation parallel to the surface plane is energetically favored. From this PES, we calculate the bound nuclear spin states of H₂ on Pd(210) and show that the desorption is significantly favored for para-H₂ isomers.

P-11

o-キノン体の反応解析: チオール結合と分子内環化

岸田 良¹, 笠井 秀明²

¹大阪大学, ²明石工業高等専門学校

生体色素メラニンを合成する環境内では、化学的活性の高い o-キノン体が生成される。o-キノン体は、チオール (R-SH) と結合するほか、分子内で 4 位置換基がベンゼン環炭素に結合する反応 (環化) を引き起こす。チオールとの結合は黄色から赤褐色のフェオメラニン、環化は黒色から暗褐色のユーメラニンの生成に至る。本発表では、密度汎関数理論に基づいた第一原理計算に反応解析 o-キノン体の反応解析を通して、4 位置換基の種類と o-キノン体の反応性の関係を調べた結果を紹介する。

P-12

フィッシュネットプリズムによる可視光の負屈折

五十嵐 俊, 馬越 貴之, Verma Prabhat

阪大院工

網目状の金属層と誘電体層からなるフィッシュネットメタマテリアルは、シンプルな構造で可視光域での負屈折率を達成できる。本研究では、フィッシュネットから成るプリズム構造を電磁場計算することによって、可視光域での負の屈折(分散性)を観察・解析した。700nm-800nm の範囲で、0° から -22° の負の屈折を示した。通常のガラスプリズムと比較しても、高い分散性を示すことを見出した。

P-13

Lanthanides ions for molecular protection in DUV Raman imaging in different pH conditions.

Yau Chuen YIU¹, Yasuaki KUMAMOTO², Atsushi TAGUCHI¹, Satoshi KAWATA¹

¹Department of Applied Physics, Osaka University

²Department of Pathology and Cell Regulation, Kyoto Prefectural University of Medicine

Lanthanides ions, terbium (Tb^{3+}) and europium (Eu^{3+}), have been reported as promising energy quenchers for the biomolecules including nucleotide bases and aromatic amino acids as they can absorb energy from the biomolecules and release as photons after forming ligand with the biomolecules [1]. This attractive property could help for the development of deep ultraviolet (DUV) Raman imaging. DUV Raman imaging is a high sensitive technique for Raman analysis of biomolecules such as nucleotides and aromatic amino acids benefiting from the resonant Raman effect. However, the practical use is limited because of the DUV induced photodamages on the samples. One of the typical photodamages is recognized as the electronic transitions and the subsequent ionizations of molecules. Quenching the excited energy state in molecules can help to protect the molecules from photodamages. We have recently demonstrated Tb^{3+} , Eu^{3+} , and also the thulium (Tm^{3+}) as protecting agents for biological cells in DUV Raman imaging [2]. Here, we report the influence of the ions pH on the protection effects for better understanding of the role of lanthanide ions for molecular protection in DUV biological imaging. Our results show that the protection effect can have a pH dependence. Details will be discussed in this presentation.

Reference:

[1] Frederick S. Richardson, "Terbium (III) and Europium (III) Ions as Luminescent Probes and Stains for Biomolecular Systems", *Chemical Reviews*, 82, (5), 541-552, (1982)

[2] Y. Kumamoto et al., "Deep-UV biological imaging by lanthanide ion molecular protection", *Biomedical Optics Express*, 7, (1), 158-170, (2016)

P-14

不良金属の材料設計~貴金属の次元(構造)と軌道占有(電子状態)を制御~

豊田 智史¹, 森田 将史¹, 福田 勝利¹, 堀場 弘司², 組頭 広志², 松原 英一郎¹

¹京都大学, ²高エネ研

不良金属は通常バンド理論に基づく金属とは異なるカテゴリーに属しており、高温超伝導や巨大磁気抵抗などが創発される量子多体系において観測される。この金属を自在に設計できれば、エネルギー変換デバイスなどの材料設計指針に新たな可能性が得られるだろう。そこで本研究では、金およびプラチナ基板上のルテニウム原子膜を軟 X 線分光により解析し、貴金属の次元(構造)と軌道占有(電子状態)の制御が重要であることを見出した。

P-15

アルミニウムナノ粒子を用いた深紫外第二高調波発生

新田 将, 田口 敦清, 藤田 克昌

大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻

金属ナノ粒子からの第二高調波発生(SHG)研究は、可視から赤外線領域において無数の報告があるが、深紫外線領域での報告はなく、効率やメカニズムについて不明である。本研究では、波長 530 nm のフェムト秒パルスレーザー光をアルミナナノグレインに集光させ、深紫外 SHG の観測を行った。SHG 発生効率と紫外プラズモン共鳴との関連についても報告する。

P-16

蛍光性パラジウムナノクラスターの合成及び光学特性評価

馬場 務, 石飛 秀和, 井上 康志

大阪大学大学院 工学研究科

金属原子数個から十数個の集合体であるナノクラスターは、量子サイズ効果により発光機能を発現することが知られており、近年、新たな蛍光プローブとして注目されている。本研究では、パラジウムナノクラスターを新たに合成し、蛍光性を有することを明らかにするとともに、光学特性の評価を行った。具体的にはパラジウムイオン、還元剤、鋳型分子各々のモル比と pH をパラメータとして合成条件の最適化を行い、励起・蛍光スペクトルを測定した。

P-17

低温環境下のカーボンナノチューブ表面増強ラマン分光

谷口 雅紀, 馬越 貴之, バルマ プラブハット

大阪大学大学院 工学研究科

本研究では、ラマン散乱光の表面プラズモンにより増強する表面増強ラマン分光 (SERS) の低温環境下での影響を分析した。銀 SERS 基盤上でカーボンナノチューブのラマンスペクトルを温度 277K、200K、100K で取得することによって、低温であるほど表面プラズモン振動の効率が上がり、ラマン散乱光がより増強されることを確認した。カーボンナノチューブのみの温度依存性とも比較し、277K から 200K の間で特に温度低下による SERS 効果の向上が顕著であることを見出した。

P-18

Q 値 100 万を超えるシリコンナノ共振器へのポストプロセス付加
伊藤 隆浩, 芦田 紘平, 高橋 和
大阪府立大学
<p>高 Q 値ナノ共振器は、革新的デバイス創生が期待され、多数の物質において研究されてきた。近年注目を集めているのが、ナノ材料との融合により新機能を付加する試みである。だが、いずれの研究においても Q 値 1 万弱のナノ共振器が用いられている。我々は、Q 値 100 万以上を有するシリコンナノ共振器の大量作製に成功している。本研究では、共振器にポストプロセスを付加し、共振器の表面状態が Q 値に及ぼす影響、共振器の酸化による波長シフト軽減の 2 点について評価した。</p>

P-19

HfO ₂ 抵抗変化型メモリ (ReRAM) のアナログ動作の検討
畑本 正浩, 松尾 陽樹, 奈良 安雄
兵庫県立大学大学院 工学研究科
<p>抵抗変化型メモリ (ReRAM) は電圧印加による絶縁膜中の抵抗変化を利用した不揮発性メモリである。近年では、抵抗値のアナログ的な変化を利用して脳型コンピュータへの応用研究が盛んに行われている。本研究では HfO₂ を絶縁膜に用いて、膜厚の異なる ReRAM を作製し、アナログ動作の検討を行った。測定の結果、全ての試料でアナログ動作が確認できた。また、抵抗値の変化は膜厚 15nm で 11.7 倍、膜厚 22.5nm で 2030 倍と厚膜で大きな抵抗値変化が得られた。</p>

P-20

Receptor protein analysis of single cell using centrifugal microfluidic device
Chen Zhu ¹ , Takaaki Okajima ¹ , Espulgar Wilfred Villariza ¹ , Wataru Aoki ² , Hiroyuki Yoshikawa ¹ Masato Saito ¹ , Mitsuyoshi Ueda ² , Eiichi Tamiya ¹
¹ 大阪大学工学研究科, ² 京都大学農学研究科
<p>Cell membrane receptor proteins play important roles as a mechanism for receiving cell signals. FACS is widely used to analyze them, but it cannot simultaneously detect all receptor proteins on single cell's membrane and requires many cells. Therefore, we are developing microfluidic devices that totally analyze expressed receptor proteins in single cell level and can analyze small cell population. Photobleaching was utilized to stain cells repeatedly. Two type of Cells were distinguished by this method. Bleaching time of fluorescent dyes was also measured.</p>

P-21

銅フタロシアニンを用いた高耐熱性を有する有機薄膜トランジスタ

渡邊 翔太郎, 高橋 一, 花房 佑樹, 北村 雅季

神戸大学大学院 工学研究科 電気電子工学専攻

有機薄膜トランジスタは次世代ディスプレイなどへの応用が期待されている。実用化へ向けて高い耐熱性が求められるが、有望な有機材料として銅フタロシアニンがある。本研究ではアニール温度が銅フタロシアニン薄膜トランジスタの特性に与える影響を調べた。結果として、アニール温度によって移動度が変化し、350°Cのアニール後でも電界効果トランジスタとして動作することが確認された。

P-22

レーザー冷却に向けた Yb 添加 YAG の作製

中山 雄太¹, 尾崎 勝也¹, 原田 幸弘¹, 喜多 隆¹, 石原 嗣生²

¹神戸大学, ²兵庫県立工業技術センター

近年、ペルチェ素子やスターリング冷凍機よりも省電力化・小型化が可能な新たな冷却技術として、レーザー冷却が注目されている。これまでに報告されている冷却ホスト材料としては YLiF₄ などのフッ化物が主流であるが、本研究では酸化物である Y₃Al₅O₁₂ (YAG) に着目した。発表では、レーザー冷却の要となる Yb³⁺を添加した YAG における結晶構造の Yb³⁺添加量依存性について述べる。

P-23

ベンゼンチオール誘導体による表面修飾した水晶振動子センサの相対湿度に対する特性

北村 正樹, 北村 雅季

神戸大学大学院 工学研究科

水晶振動子センサの金電極部分に異なるベンゼンチオール単分子膜を形成し、湿度を変化させた場合の大気中水分子の吸着特性を評価した。水酸基を持つ HBT を形成したセンサで周波数変化量が最も大きくフッ素を持つ PFBT で最も小さくなった。また、HBT を形成したセンサでは数回程度の湿度変化に対して数秒で応答し各湿度でほぼ決まった周波数を示すことが分かった。単分子膜の種類に依存した感度の異なる、高速応答可能な気体センサの実現が期待できる。

P-24

糖鎖機能化グラフェン FET を用いたインフルエンザウイルスの検出
川田 拓哉 ¹ , 小野 堯生 ¹ , 金井 康 ¹ , 大野 恭秀 ^{1,2} , 前橋 兼三 ^{1,3} , 井上 恒一 ¹ , 渡邊 洋平 ⁴ , 河原 敏男 ⁵ , 鈴木 康夫 ⁵ , 中北 慎一 ⁶ , 松本 和彦 ¹
¹ 阪大産研, ² 徳島大, ³ 東京農工大, ⁴ 京都府立医大, ⁵ 中部大, ⁶ 香川大
<p>近年、高病原性鳥インフルエンザウイルスのヒト感染性変異と、それによる世界規模の感染爆発が危惧されている。</p> <p>本研究では、ウイルスのヒト感染性を迅速・高感度に鑑別するため、ウイルスがヒト気管上皮細胞への侵入時に足掛かりとするシアロ糖鎖を、ウイルスの表面電荷に鋭敏に応答するグラフェン FET 上に修飾したデバイスを開発した。本手法は、ウイルス RNA 等でなくウイルス感染機構そのものを利用しているため、新たに発生した変異ウイルスも迅速に鑑別可能である。</p>

P-25

酸化グラフェンキャパシタの揮発性有機化合物ガス応答特性に関する研究
田中 康 ¹ , 清水 優 ¹ , 田畑 博史 ¹ , 久保 理 ¹ , 西野 貴幸 ² , 石橋 幸治 ² , 片山 光浩 ¹
¹ 大阪大学大学院工学研究科 電気電子情報工学専攻, ² 理化学研究所
<p>揮発性有機化合物(VOC)による健康被害を防ぐため、これらの検知・計測は非常に重要である。本研究では、酸化グラフェン(GO)を用いたキャパシタンス型ガスセンサーを作製し、エタノール、メタノールガス、及び水蒸気に対する応答を調べた。その結果、水蒸気とそれ以外のガスに対して異なる極性の応答を示した。その応答は GO 層間へのガス吸蔵による GO の実効的な誘電率の変化と、その層間の膨張の競合によって説明できることがわかった。</p>

P-26

放射光を利用した Al-Cr 系水素化物の高温高压合成
宇野 和仁 ^{1,2} , 齋藤 寛之 ^{1,2} , 綿貫 徹 ^{1,2}
¹ 兵庫県立大学大学院 物質理学研究科, ² 量子科学技術研究開発機構
<p>新規の Al 合金水素化物の実現を目的として Al-Cr 系の高温高压水素化実験を行った。Al₈Cr₅合金、および、Al+Cr 混合粉末と水素の反応条件の探索とそれらの反応過程の観察を放射光高温高压その場 X 線回折により行った。Al₈Cr₅合金は圧力 9 万気圧、温度 600°C で水素と反応し、水素との固溶体を形成した後、CrH と Al-Cr 合金に相分離した。これに対して Al+Cr 混合粉末は 9 万気圧、600°C の水素流体中で、最初に CrH を生成し、その後 CrH と Al が反応し新規水素化物を形成した。</p>

P-27

高温高压下における Co_3Ti の水素化反応の放射光その場 X 線回折

森本 勝太^{1,2}, 齋藤 寛之^{1,2}, 綿貫 徹^{1,2}

¹兵庫県立大学大学院物質理学研究科, ²量子科学技術研究開発機構

水素貯蔵合金に注目し、反応性に富む高温高压水素と金属を反応させることで新規金属水素化物の合成研究を進めている。本研究では、難水素化金属 Co を多く含む Co_3Ti の水素化を試みた。高压下における結晶構造変化を放射光その場 X 線回折を用いて観察した。9 GPa, 900°C の水素流体中に試料を保持することで新規水素化物 Co_3TiH_4 の合成に成功した。難水素化金属から新規水素化物が合成できることを示した重要な結果である。

P-28

疎水性シリカ膜を用いた水素/トルエン混合ガス分離における操作条件の影響

岡部 有未, 荒木 貞夫, 山本 秀樹

関西大学大学院 理工学研究科

近年、新エネルギー源として水素利用が注目されている。効率的な水素輸送方法として有機ハイドライド法が研究されており、水素/トルエン分離の必要性が高まっている。これまでに、従来の水素透過膜と異なり疎水性シリカ膜を用い毛管凝縮によってトルエンを選択的に分離する方法を報告している。本研究では分離性能向上を目的とし、膜の細孔径および操作条件の影響を把握した。

P-29

エピタキシャル Ge/Si(001)薄膜における熱電性能の膜質依存性

谷口 達彦, 宮本 拓, 渡辺 健太郎, 中村 芳明

大阪大学大学院 基礎工学研究科

熱電材料では、ナノ構造・薄膜導入による熱伝導率低減を用いた性能向上が知られているが、Si 系材料では、それは不十分である。我々は、出力因子そのものの増大を狙って、高移動度歪 Ge 薄膜/Si 基板に注目した。しかし、性能の基準となる無歪 Ge 薄膜の熱電性能も未知であるため、本研究ではまず、様々な膜質の無歪 Ge 薄膜の熱電性能を明らかにした。その結果、ゼーベック係数と比較して電気伝導率は結晶性に大きく依存することがわかった。

P-30

HfO₂/Si 構造の保持電荷量に対するアニール効果

松尾 陽樹, 畑本 正浩, 森 英喜, 奈良 安雄

兵庫県立大学大学院 工学研究科

環境の微小な振動から電力を得るエレクトレット材料を用いた振動発電が注目されている。本研究では、エレクトレット材料として、帯電した酸素欠損を生じやすい HfO₂ に着目した。保持電荷の増大を目的として、アニール温度及び時間依存性について調査した結果、温度 700℃、時間 60 分の条件で最も保持電荷量が大きかった。また、HfO₂/Si 界面層の形成が保持電荷量と深く関係していることが XPS 分析から分かった。

P-31

MOCVD 法による BiFeO₃ 薄膜の作製~精密な組成制御の検討~

吉村 奈緒, 藤沢 浩訓, 清水 勝, 中嶋 誠二

兵庫県立大学大学院

BiFeO₃(BFO)は、分極が大きいなどの特長を持つが、酸素欠陥や組成ずれなどにより絶縁性が低い。有機金属化学気相堆積(MOCVD)法は、組成制御が容易であるだけでなく、高酸素分圧下で成膜できるため BFO の酸素欠陥抑制に有効であると考えられている。本研究では、より酸化力の高い O₃ を使い、精密な組成制御を行うことによって BFO の絶縁性改善を試みた。

P-32

低環境負荷非鉛 BiFeO₃ 薄膜に導入された帯電ドメインウォールが示す特異な電気伝導

黒川 悠太, 中嶋 誠二, 藤沢 浩訓, 清水 勝

兵庫県立大学大学院

強誘電体の帯電ドメインウォール(Charged Domain Wall : CDW)では、分極反転により導電率が変化することが知られている。この現象をスイッチングデバイスへ応用するためには、任意の位置に CDW を導入する技術が必要である。本研究では CDW を形成するために、SrTiO₃(110)傾斜基板表面に形成されるステップの傾斜方向が対向するような斜面パターンを形成し、その上に非鉛強誘電体である BiFeO₃ 薄膜を作製した。その結果、SrTiO₃ 基板の表面ステップの傾斜方向が変わる位置で、BiFeO₃ 薄膜に CDW を導入することに成功した。また、走査プローブ顕微鏡を用いた電流像から CDW において導電性の変化がみられた。

P-33

ZnO ナノワイヤ上での HfO₂ 薄膜の結晶化に関する検討

清水 勝, 藤沢 浩訓, 中嶋 誠二, 竹内 洋平

兵庫県立大学大学院

超高集積強誘電体メモリの実現に向けて強誘電体ナノワイヤキャパシタ(ZnO/HfO₂/ZnO)の作製及び特性評価を行っている. ナノワイヤキャパシタの中心電極に当たる ZnO ナノワイヤは有機金属化学気相堆積(MOCVD)法により Pt/SiO₂/Si 基板上に成長させ, その平均直径と長さはそれぞれ約 170nm, 11 μ m である. HfO₂ 薄膜も同様に MOCVD 法により作製を行い, 窒素中での RTA 処理による結晶化について検討した.

P-34

反応性スパッタ法による結晶シリコン太陽電池用パッシベーション膜の開発

丸金 稔弥, 原田 貴志, 前田 光治, 新船 幸二

兵庫県立大学

結晶シリコン太陽電池の発電効率を向上させるためには、パッシベーション膜の高性能化が必要である。そこで、導入ガスの流量比により膜中の酸素比率を変えることが可能な反応性スパッタ法を用いて AlO_x 膜の製膜を行い、膜の性能を評価した。その結果、パッシベーション膜を酸素比率の異なる二層で構成することにより更なる高性能化ができると考え、二層での製膜及び評価を行った。その結果、単層膜に比べて、より高性能な膜が得られた。

P-35

ペロブスカイト太陽電池における金属元素の添加効果

白幡 泰浩, 奥 健夫

滋賀県立大学 工学部

CH₃NH₃PbI₃ などから構成されるペロブスカイト太陽電池の研究は隆盛を極めている。最近では、種々の元素を添加したペロブスカイト太陽電池における光電変換特性の向上が確認され始めている。本研究では、金属元素を添加した CH₃NH₃Pb_{1-x}M_xX₃ (M: 金属, X: ハロゲン化物) 太陽電池の作製と光電変換特性を評価・検討したので報告する。

P-36

Mn ドープしたペロブスカイト系結晶の電子構造と磁氣的性質
鈴木 厚志, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部
Mn ドープしたペロブスカイト系結晶のバンド構造やケミカルシフト、g テンソル、吸収特性について、第一原理計算から予測し、Mn ドープ効果について検討を行った。Mn ドープによりバンドギャップ、状態密度、吸収特性に著しい影響を与えた。Mn ドープによりスピン間相互作用や電荷分布が影響を受け、I-NMR ケミカルシフトが高磁場側にシフトした。伝導帯では Mn の 3d 軌道と I、2p 軌道と混成軌道を形成し、伝導電子と d 電子と相互作用を生じ、太陽電池特性であるキャリア移動に影響を与えたと考えられる。

P-37

Mn の元素をドープしたペロブスカイト系太陽電池の作製と評価
田口 雅也, 大石 雄也, 鈴木 厚志, 奥 健夫
滋賀県立大学 工学部
Mn の元素をドープしたペロブスカイト系太陽電池を作製し、変換効率の向上を試みた。作製した太陽電池の光起電力特性や外部量子効率や光吸収特性から、それぞれの元素の添加効果と濃度依存性について検討した。光学顕微鏡、SEM や X 線回折から、表面形態や結晶構造への影響を検討した。Mn を微量添加すると結晶の格子間隔が減少し、短絡電流密度、変換効率が向上した。

P-38

NH ₄ Cl を添加した(CH ₃ NH ₃) _{1-2x} Cs _x Rb _x PbI ₃ 太陽電池の作製と光起電力特性評価
上岡 直樹, 奥 健夫, 鈴木 厚志
滋賀県立大学大学院 工学研究科
NH ₄ Cl はペロブスカイト結晶膜を平滑化し、結晶成長を促進させる効果があると報告されている。結晶膜が平滑化することで各層に輸送される際のキャリア抵抗が減少し、電流の向上が期待できる。本研究は Cs ⁺ 、Rb ⁺ をドープした(CH ₃ NH ₃) _{1-2x} Cs _x Rb _x PbI ₃ に NH ₄ Cl を添加したペロブスカイト系太陽電池を作製し、光起電力特性評価を行うことを目的とした。J-V 特性曲線や光学顕微鏡、X 線回折を用いた結晶構造の評価を行ったので報告する。

P-39

金属およびハロゲンイオン添加 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 半導体におけるペロブスカイト構造の安定性

田中 大基*, 上岡 直樹, 奥 健夫

滋賀県立大学 工学部 材料科学科 (*着任予定)

ペロブスカイト $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 半導体を用いた太陽電池は、20%以上の変換効率が報告され注目されている。 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ペロブスカイト結晶は、大気中で不安定な構造を有することが報告されており、将来的な応用のためには、構造安定化が必須である。本研究では、金属およびハロゲンイオンを添加した $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 半導体結晶の構造安定性について理論的予測を行った。その結果、添加イオンにより、歪みの小さいペロブスカイト構造となることが予測された。

P-40

13、14、15 族元素ドーピングペロブスカイト系太陽電池の作成と評価

大石 雄也, 奥 健夫, 鈴木 厚志

滋賀県立大学 工学部

ペロブスカイト構造を有する $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ を用いた太陽電池は、有機 - 無機ハイブリッド型太陽電池であり、比較的安価で容易に作製が可能であり、高い特性を示すことから、次世代太陽電池の一候補として期待され、近年研究が盛んに行われている。 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 結晶に様々な元素のドーピングを行うことにより、太陽電池の特性が大きく変化することが知られている。本研究では、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 前駆体溶液の組成・溶媒を変え、元素ドーピングを行った太陽電池を作成し、光起電力特性とペロブスカイト構造の相関を調べたので報告する。

P-41

SiC デバイスを搭載した可搬型太陽光発電システムの開発

安藤 裕二¹, 奥 健夫¹, 安田 昌司², 牛嶋 和文³, 室園 幹夫⁴

¹滋賀県立大学 工学部, ²滋賀県立大学 産学連携センター, ³アルモテック株式会社,

⁴株式会社クリーンベンチャー21

SiC デバイス搭載 150 W インバータ、球状 Si 太陽電池、Li イオン蓄電池からなる可搬型 (重量: 4.3 kg) の太陽光発電システムを開発した。本システムの電力変換効率は市販の 100 W 級 Si 系システムを凌ぎ、日照条件に依らず安定した出力電力特性を確認した。以上の結果は SiC デバイスが 100 W 級の小電力システムにおいても有用であることを示しており、可搬型情報通信機器や防災用非常電源等への応用が期待される。

P-42

平面型素子を用いた有機薄膜中の励起子束縛エネルギーの評価

瀬島 彬智, 奥田 侑希, 末延 知義, 中山 健一

大阪大学大学院工学研究科 生命先端工学専攻

現在主流のバルクヘテロ型有機太陽電池がかかえる、ドナー・アクセプタ界面での電圧ロス問題を解決するために、我々は単一吸収材料による有機太陽電池の可能性を検討している。性能向上のためには励起子束縛エネルギーを小さくすることが重要であるが、そもそも有機半導体材料でそれを測定する手法が確立されていない。本研究では、平面型素子における光照射時の J-V 曲線を Onsager-Braun モデルで解析することにより、有機半導体材料の励起子束縛エネルギーを見積もった。

P-43

グラフェン状物質 h-BCN の光吸収特性シミュレーション

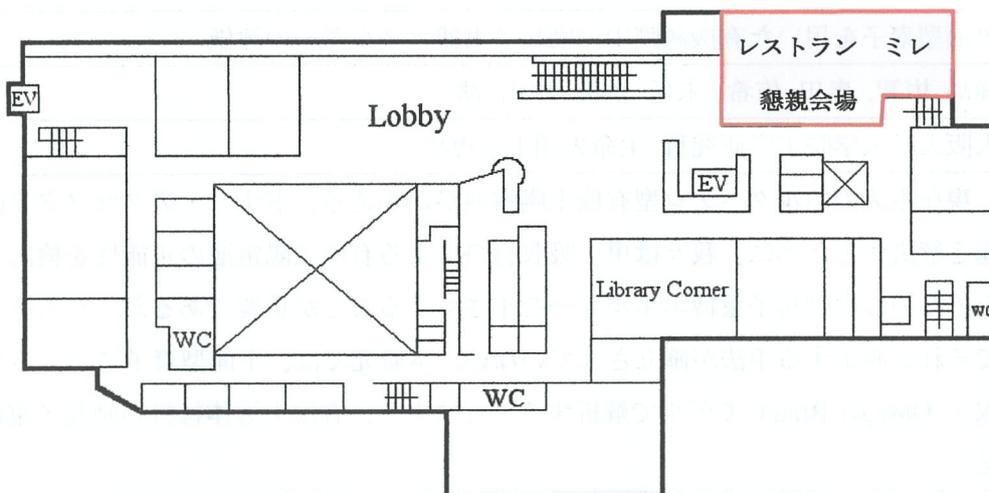
岡本 一希, 小川 真人, 相馬 聡文

神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

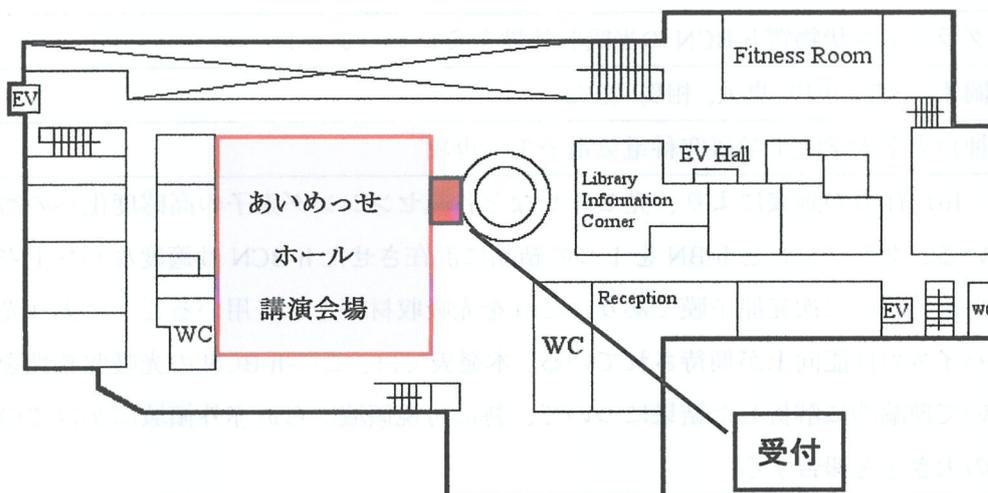
IoT 社会の到来により、光センサなど各種センシング素子の高感度化への需要が高まってきている。グラフェンと h-BN を 1 つの結晶に混在させた h-BCN は適度なバンドギャップを持つグラフェン状の二次元原子膜であり、これを光吸収材料として用いることにより光センサなどの光デバイスの性能向上が期待されている。本発表では、この h-BCN の光吸収特性を強束縛近似法を用いて理論的に解析した結果について、特に可視領域から近赤外領域にかけての波長の光の吸収率の大きさを報告する。

会場案内図

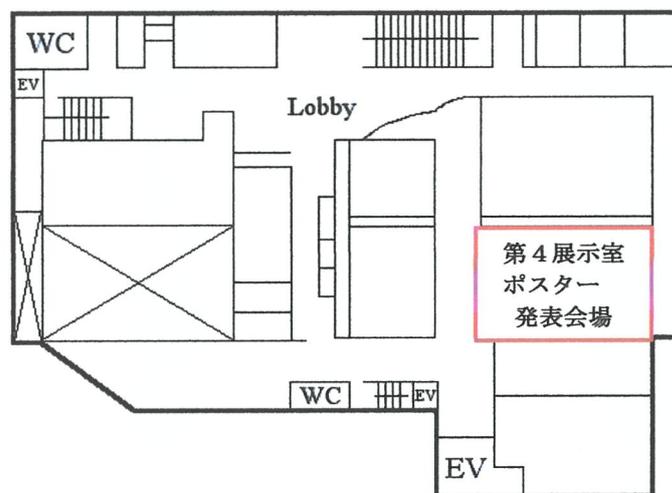
4F



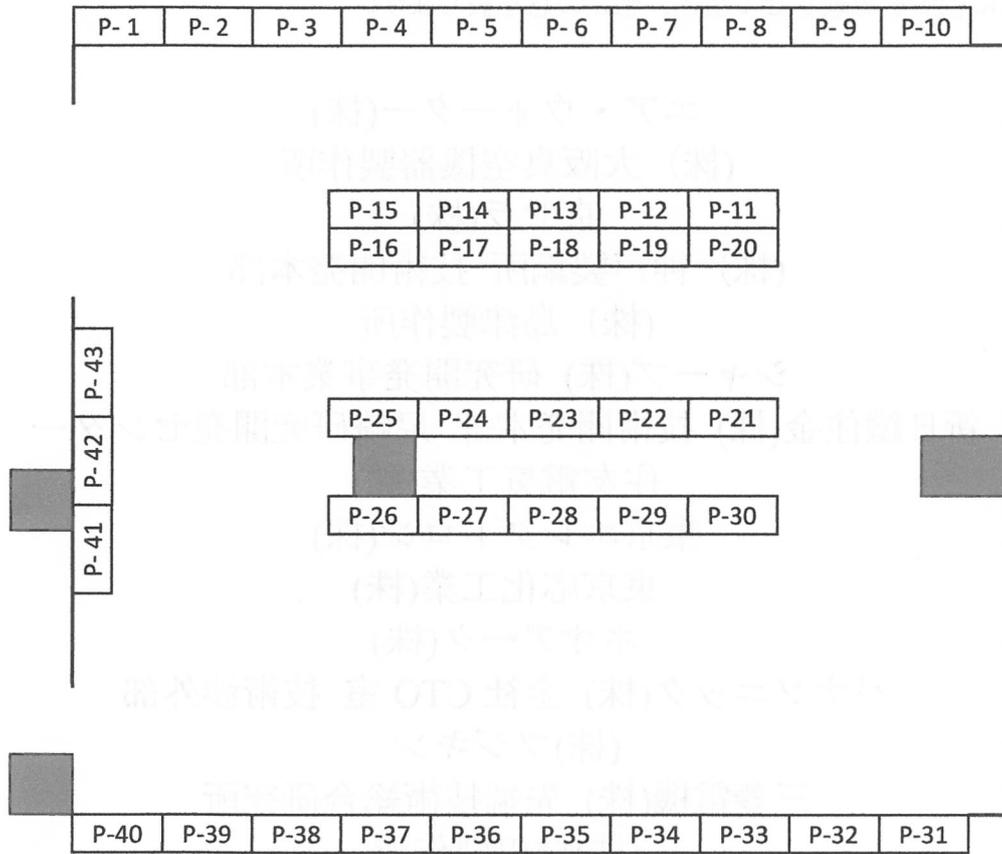
3F



B1F



第 4 展示室
ポスター配置図



* あいめっせホール及び第 4 展示室内でのご飲食はご遠慮ください。

賛助会員

応用物理学会関西支部の本事業活動に関し、下記賛助会員各位よりご支援を頂いております。ここに社名を記載させて頂き、感謝の意を表します。

エア・ウォーター(株)
(株) 大阪真空機器製作所
京セラ(株)
(株) 神戸製鋼所 技術開発本部
(株) 島津製作所
シャープ(株) 研究開発事業本部
新日鐵住金(株) 技術開発本部 尼崎研究開発センター
住友電気工業(株)
東京エレクトロン(株)
東京応化工業(株)
ネオアーク(株)
パナソニック(株) 全社 CTO 室 技術渉外部
(株)フジキン
三菱電機(株) 先端技術総合研究所
(株)村田製作所
(株) リガク
ローム (株)

(2017年5月11日現在、50音順)