
会場 D

領域 4, 5, 6, 7, 9

D-1 光で誘起したスピン波の伝播シミュレーション

九大院理^A, 東大生研^B 姫野滉盛^A, 吉峯功^B, 佐藤琢哉^A

円偏光パルスを、面内方向に磁場が印加された磁性体薄膜に照射したとき、逆ファラデー効果により磁化が面直方向に誘起され、スピン歳差運動が生じる。この時のスピン波の伝播は交換スピン波もしくは静磁波、双極子-交換スピン波に分類され、そのうちの静磁波の分散関係を数値計算に利用した。数値計算における薄膜は xy 平面に無限に広がっているものを考え、厚さを変化できるようにした。スピン波の分散関係は厚さ、印加磁場、飽和磁化、異方性などに依存しこれらは運動はマクスウェル方程式と静磁近似を用いて記述されている。これから静磁波の分散関係を得て、ポンプ光によるスピン波の誘起モデルに分散関係を取り込むことにより、スピン波伝搬の数値計算を行った。薄膜の厚さを $1\text{ nm} \sim 100\ \mu\text{m}$ 、スポットサイズを $0.1\ \mu\text{m} \sim 100\ \mu\text{m}$ のようにスケールさせながら計算させたところ、スポット光のサイズと伝播に相似性があることが判明し、発表はこのことについて議論する。また、分散関係がスピン波伝搬に及ぼす影響についても考察を行う。

D-2

DNA を利用した一次元量子ドット配列構造の作製とその光物性

九工大院工^A, 愛媛大院理工^B, 理研^C, 農工大院工^D 松尾公祐^A, 赤木啓人^A, 小田勝^A, 座古保^B, 前田瑞夫^C, 谷俊朗^D

有機会合体は、有機色素分子が約 1nm 間隔で自己組織的に一次元配列した分子集合体である。このような一次元配列構造では、光照射により生じる分子内の電子励起が、隣接分子間に働く双極子相互作用により互いに共鳴して伝播できるようになり、複数の分子に亘るコヒーレントな電子励起状態であるフレンケル励起子を形成する。このフレンケル励起子の形成に由来する光学的、及び電子励起特性は、植物・細菌の光合成初期過程における高効率な光捕集と低損失のエネルギー伝播という極めて重要な役割をもたらす。一方我々はこれまで、数 nm 程度の寸法を持つ CdSe コアの周りを数原子層厚の ZnS シェルが覆う構造を持つコア・シェル型半導体量子ドット (QD) の化学合成とその光学特性の研究に取り組んできた。この QD は、寸法が有機色素と同程度に小さく、また発光の量子効率もほぼ同じであるという特徴を持つ。そのため、この QD を用いて有機会合体のような一次元配列構造を作製できれば、フレンケル励起子の形成に伴う優れた特性をもち、且つ、無機系の強靱な耐久性を兼ねる材料となることが期待できる。今回の講演では、このような配列構造の作製に向けた取り組みの経過報告を行う。1つの QD あたり、2つの DNA オリゴマーを表面修飾して QD に結合性を与えた上で、自己組織的に QD を一次元配列する手法を述べ、この手法により合成した試料の物性の評価結果について述べる。作製した一次元配列構造を電子顕微鏡で確認すると、十数個の QD が、1nm 以下の間隔で近接して配列した様子が確認できた。講演では、構造評価の結果に加え、配列することによる吸収・発光スペクトル及び発光寿命の変化について議論する予定である。

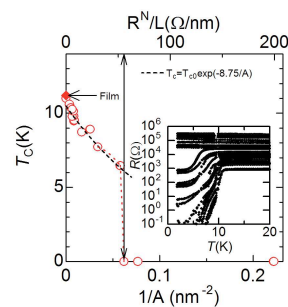
D-4

NbTiN nanowire の超伝導-絶縁体転移

九大理^A, 情通機構^B 篠崎文重^A, 牧瀬圭正^B

径がコヒーレンス長 ξ 程度の 1次元超伝導細線 (1D-SNW) では各所で超伝導揺らぎ効果のために超伝導が壊され、オーダーパラメータの位相がスリップ (phase slip) する。その結果、 $T < T_C$ でも「 $R > 0$ 」が観測される。原因の一つに量子効果による quantum phase slip (QPS) があり、その結果広い温度範囲に渡り、転移はブロードになる。1D-SNW の乱れ程度 (\propto 細線の常伝導抵抗 R_N) が増すにつれ、より転移幅は広がり、 T_C は徐々に減少する。更に R_N が増加すると、超伝導-絶縁体転移 (SIT) を起こす。2D-SIT に関しては 1970 年代からの研究があり、メカニズムや臨界抵抗 R_C についての理解は随分と深まった。しかし、1D では、同じ物質でも $R(T)$ の振る舞いが異なる場合があり、「TAPS か QPS か？」が問題となる。1D-SIT

については未解決部分が残っている。本研究では、電子線描画装置と反応性イオンエッチング装置で NbTiN 細線を作成し、測定を行った。図に T_C の乱れ依存性 (R_N/L , $1/A$; L =length, A =cross section) を示す。 \uparrow, \downarrow 近傍で SIT が起きている。挿入図には R_N 増加に伴う $R(T)$ の様子を示す。講演では理論との比較、その他の特性を紹介する。



D-5

液体急冷した Cu-Ni-Sn 合金低温でのスピノーダル分解

長崎大学部生^A, 長崎大院生^B, 長崎大院工^C 沖大成^A, 堤貴瑛^B, 近藤慎一郎^C, 森村たかお^C, 中島弘道^C

1. 諸言 Cu-15Ni-8Sn 合金は、ばね、ベアリング、電気用コネクタなどを使用されている工業用材料でありスピノーダル分解を生じることが知られている。前回の研究では 350 °C 時効について、液体急冷した試料におけるスピノーダル分解過程について考察を行ったが、今回は更に低温である 250 °C 時効の影響について、通常の溶体化処理との比較を通じて考察を行う。

2. 実験方法 Cu, Ni, Sn を Ar ガス雰囲気下において高周波誘導加熱することにより、重量組成が Cu-15Ni-8Sn の組成になる様に合金試料を作製した。次にその合金インゴットをスピんキャスト装置を用いて液体急冷を行い、melt-spun 試料を得ることが出来た。また液体急冷試料との比較のため、インゴットを 840 °C において 1 時間の溶体化処理を行い水中で焼入れを行った。この試料を quench 試料とする。これらの試料を真空封入し、250 °C において 20, 40, 60, 120, 300, 600 及び 1200min の時効処理を行い、得られた試料について、XRD 及び TEM 観察を行った。

3. 実験結果及び考察 250 °C で 1200min まで時効処理した試料についての XRD 広角測定では、melt-spun 及び quench の両試料とも金属間化合物相などは検出されず f.c.c 単相のみの構造であり、1200min という長時間時効でも固溶体を形成していることが判る。次に quench 試料および melt-spun 試料の (200) 面の X 線精密測定の結果より quench 試料ではサイドバンドらしきものが観察されたが、melt-spun 試料の場合、明確なサイドバンドは見いだされない。これから、250 °C という低温域でも、melt-spun 試料は quench 試料に比べ、スピノーダル分解が生じていないか、若しくは極めて緩やかに進行していると考えられる。

D-6

Ag の巨大歪み加工材の電気伝導度における歪み緩和特性

九工大工^A, 福大理^B, 九大院工^C 柴山慶介^A, 鶴田一樹^A, 吉田武史^A, 美藤正樹^A, 田尻恭之^B, EdalatiKaveh^C, 堀田善治^C

巨大歪み加工による金属の微細化は、硬度の増加やガス吸着特性の発現などを引き起こすため、材料工学において注目を集めている。巨大歪み加工の High Pressure Torsion (HPT) 処理を Ag に行うと、歪みが緩和する過程で結晶内の組織が変化し、それに伴い硬度が増加する報告がある [1]。我々は、交流磁化率測定による金属材料の非接触電気伝導測定方法を Ag の HPT 加工材に適用することで、巨大歪みが緩和する過程での、Ag の電気伝導を追跡し、硬度との整合性を調べた。つまり、磁気測定を通じて歪みの緩和現象が追跡可能であることを実験的に明らかにした。図 1 に HPT 処理を施した Ag における 300 K での電気伝導度の時間依存性を示す。電気伝導度は約 12 時間後には初期状態の 93 % まで減少し、約 60 時間後には 103 % まで増加した。当日は、巨大歪み緩和時の温度による電気伝導度の時間依存性の振る舞いの変化や X 線構造解析の結

果とともに詳細を議論する。[1]H. Matsunaga, and Z. Horita, Mater. Trans. **50**,1633 (2009).

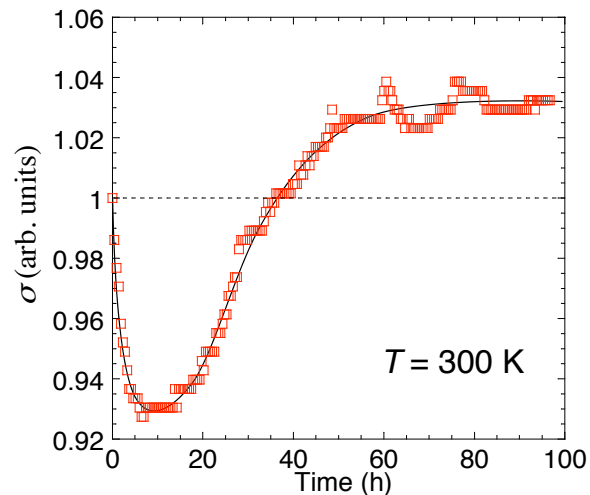


図1. AgのHPT加工材における300 Kでの相対的電気伝導度の時間依存性

D-7 ナノコンタクトを利用した低温における鉄水素化物の生成

九大工^A, 九大院工^B, 東京工大理工^C 梶原裕太^A, 高田弘樹^B, 上野友輔^B, 家永紘一郎^C, 稲垣祐次^B, 河江達也^B

純鉄 (bcc-Fe) に室温常圧下では水素はほとんど固溶しないが、水素圧下約 3.5GPa では固溶が生じ、dhcp 構造の水素化物 FeH となる。高圧下で得られる hcp 構造の純鉄が非磁性であるのに対し、鉄水素化物 dhcp-FeH は室温で強磁性を示すといったことなどから、その物性はとても興味深い。

これまでに我々は Pd などの金属ナノコンタクトにおいて、微分伝導測定による非弾性散乱にともない、液体水素からナノコンタクト内に、高濃度の水素が吸蔵されることを明らかにした [1]。

本研究では Fe ナノコンタクトに注目し、非弾性散乱にともなう液体水素中から鉄ナノコンタクト内への水素の吸蔵と鉄水素化物の生成実験を行った。図 1 に純粋な Fe と液体水素中 Fe ナノコンタクトの微分伝導度測定結果を示すが、

液体水素中では信号が大きく変化し、Fe 水素化物の生成を示唆する。講演では結果を詳細に報告する。

[1]K.Ienaga et al., Appl. Phys. Lett. 106, 021605 (2015)

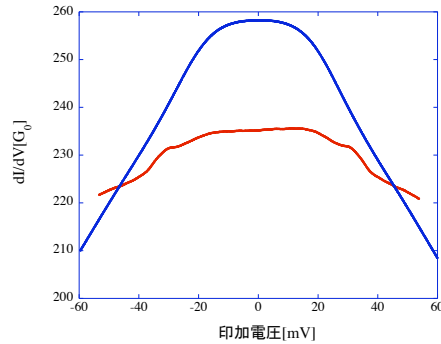


図1: Feナノコンタクト(直径d~3.7nm)の微分伝導度
青: Fe in vacuum (T=13.4K), 赤: Fe in liquid H₂ (T=15.0K)

D-8 超伝導ナノコンタクトにおける水素不純物効果

九大院工^A, 東大物性研^B, 金沢大教育^C, 九大院総理工^D 上野友輔^A, 高田弘樹^A, 家永紘一郎^B, モハメド・サイフル・イスラム^A, 稲垣祐次^A, 橋爪健一^D, 大西哲平^D, 河江達也^A

我々のグループでは MCBJ(Mechanically Controllable Break Junction) 法を用いて作成した V(バナジウム)、Nb(ニオブ) のナノコンタクトにおける超伝導特性を測定してきた。そうした中、これらの金属が水素を吸蔵することに着目し、水素と重水素の持つ核スピンの超伝導特性に与える影響について研究を行っている。今回の実験では、水素濃度の異なる複数の V、Nb 試料のナノコンタクトの微分伝導測定を行った。図 1 に T = 2K で得られた V ナノコンタクトと水素濃度 4atm % の V ナノコンタクトの微分伝導特性の結果を示す。ここで $G_0 (=2e^2/h)$ は量子伝導単位を表す。微量の水素にもかかわらず、シグナルが大きく変化することがわかった。本講演では水素濃度による超伝導特性の変化について報告する。

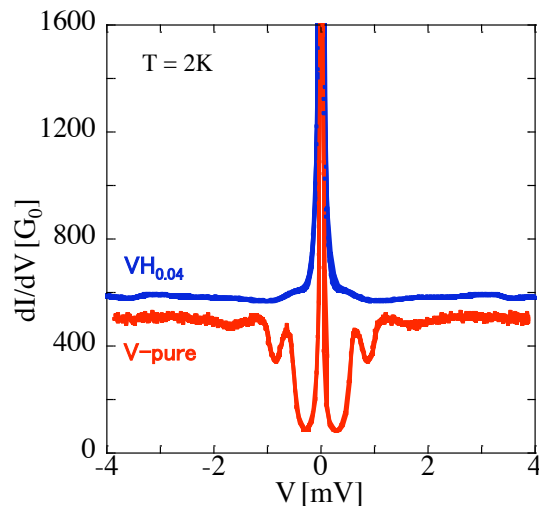


図1 V-pure、VH_{0.04}ナノコンタクトの微分伝導特性

D-9 液体水素中におけるナノコンタクトへの水素吸蔵と電気伝導特性変化

九大院工^A, 東大物性研^B, 金沢大教育^C, 九大総理工^D 高田弘樹^A, 家永紘一郎^B, 上野友輔^A, 梶原裕太^A, モハメドサイフルイスラム^A, 稲垣祐次^A, 辻井宏之^C, 橋爪健一^D, 大塚哲平^D, 河江達也^A

低温での金属への水素吸蔵には、水素の強い量子性に起因するトンネル拡散過程が重要な位置を占めると考えられている。これに対し我々は、低温での金属への水素吸蔵現象の研究を、Pd ナノコンタクトを用いた微分伝導度測定^[1]を用いて行ってきた。ナノコンタクトの作成にはブレークジャンクション法を用いる。今回、同手法を用いてバナジウム (V) への水素吸蔵実験を行った。図1に、V ナノコンタクトで得られた、液体水素導入に伴う微分伝導特性の経時変化を示す。まず、水素導入に伴い微分伝導特性のブロード化が生じ (図1、水素導入前~9200秒)、さらにその後、特異な振る舞いが現れることが分かった (図1、10500秒)。本講演ではこれら V への水素吸蔵実験の結果を報告する。^[1]K. Ienaga, H. Takata, Y. Onishi, et al., Appl. Phys. Lett. 106, 021605 (2015)

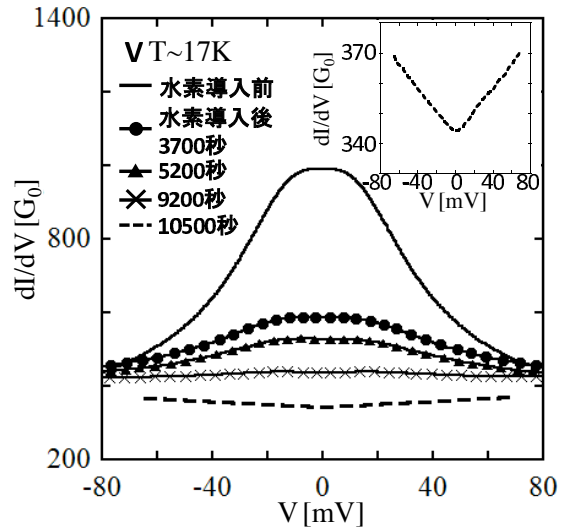


図1 T ~ 17KでのVナノコンタクトへの水素導入に伴う微分伝導特性の経時変化。图中挿図は10500秒の信号の拡大図。

D-10 Observation of Kondo-Fano resonance in ferromagnetic atomic contact

九大院工^A, 東大物性研^B, 金沢大教育^C Md. Saiful Islam^A, 高田弘樹^A, 上野友輔^A, 家永紘一郎^B, 稲垣祐次^A, 辻井宏之^C, 河江達也^A

We investigate the conductance in a Co atomic-sized contact by a mechanically controllable break junction (MCBJ) technique^[1] to study the origin of Fano resonance observed in ferromagnetic Ni and Fe atomic-sized contacts^[1,2]. By stretching the Co wire at a very low speed, we measure the conductance and differential conductance (dI/dV) simultaneously, using a lock-in technique with a frequency of 1 kHz. Fig. 1 illustrates the spectra of dI/dV as a function of bias voltage and these spectra show Fano-like features (i.e. peaks, dips or asymmetric shapes) around zero bias. Similar results found in STM experiment in atomic-sized contacts^[2]. By using Fano formula, we also calculate Kondo temperature (T_K) that varies between 80 and 150 K. ^[1] K.

Ienaga et al. Phys. Rev. B 86, 064404 (2012).
^[2] M. R. Calvo et al. Nature 458, 1150 (2009).

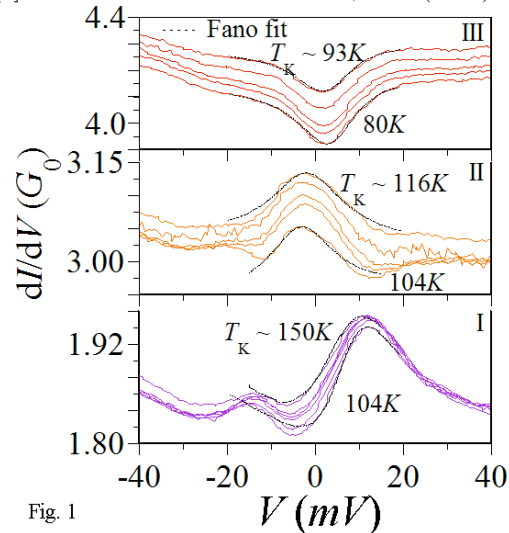


Fig. 1

D-11 Cu(111) 面上のグラフェンの回転現象

福岡教育大学 物理教室^A, 九州大学 総理工^B 三谷尚^A, 丸谷雄太^A, 吾郷浩樹^B, 水野清義^B

Cu(111) 面上に CVD で作成されたグラフェンの成長と成長後の方位性 (Ago et al. ¹⁾) について、理論的に吟味する。そのためまず、上記の実験を追試するモンテカルロ・シミュレーション (MCS) を行った。グラフェンの成長過程として6方位的な島形成が見出されたが、ここでは被覆率が1に達した状況のみを発表する。

このMCSでは、rigidなグラフェン上にsoftな銅原子を、格子定数比1:1.04で配置する。加えて、MCSが提示する現象を容易に見るため、格子定数比7:8の系でも計算を実施した。MCSの結果からは銅格子とグラフェン格子間で回転が見られず、特に現実に即した格子定数比による方では、格子定数比の差の逆数： $1 / (1.04 - 1.00) \sim 25$ 格子サイズ のモアレパターンが生じた。一方、LEED 実験では、 3.5° の回転が見出された。両格子の格子定数比1:1.04での作図あるいは連分数展開の理論により、回転が 3.5° であれば、モアレサイズは13格子程度となる。このサイズは別な研究グループのSTM観察でほぼ示されている。

すでにエピタキシャル問題に対して回転角の理論が1970年代から存在し²⁾、吸着原子格子が母層に対し 2×2 構造近傍での応用がなされていたが、今回の様な 1×1 構造近傍には適用できないことが今回、明らかになった。それに代わり、次の理論的説明を得た：銅原子配置が、下地に対して1.04倍の自然な格子間隔を持つことと、及びグラフェンヘキサゴンの頂点を避けようとするものが、回転をもたらす(角度約 3.5°)ことがわかった。

1) H.Ago et al. Chemst.Mater.(2015) 27(15)5377

2) D.Novaco et al. Phys.Rev.Lett.38(1977)1286, Y.Yamada,et al. J.Phys.Soc.Jpn.51(1982)2174

D-12 真空中において作製した $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜のSTM観察

九大総理工^A 白浜順哉^A, 竹嶋祐城^A, 中川剛志^A, 水野清義^A

図1に示すような界面にダングリングボンドを持たない理想的な薄膜($\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜)の作製を真空中で試みている。試料は6H-SiC(0001)基板上にSi蒸着、NO導入、 O_2 導入などの処理を施すことにより作製した。作製した薄膜を $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜の構造モデルと比較し構造解析を行ったところ、両者の一致度を示す信頼度因子 R_p が0.23であり、両者が同じ構造を有している可能性が高いことが示された。その後、試料をSTM付きの真空チャンバーに移し、試料表面の観察を行った。図2は観察した試料のSTM像である。探針の状態などの影響により鮮明な像ではないが、原子像が見て取れる。その周期は先行研究において大気圧中で作製された $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜の周期とほぼ同じであった。図3はSTS測定から得られた電流-電圧の特性である。バンドギャップに相当する幅が約9 eVであり、こちらもよく一致している。これらの結果より $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜を真空中において作製可能であることがわかった。

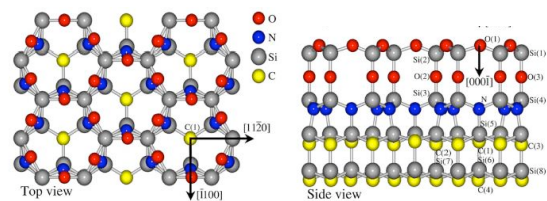


図1. $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ 薄膜の構造モデル

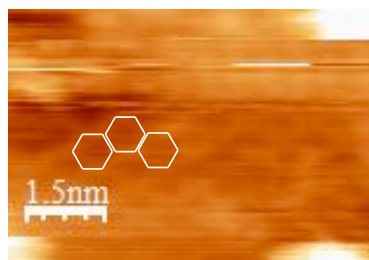


図2.
作製したSTM像
sample bias: +5.0 V
tunneling current: 1.0 nA

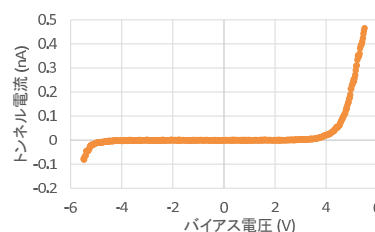


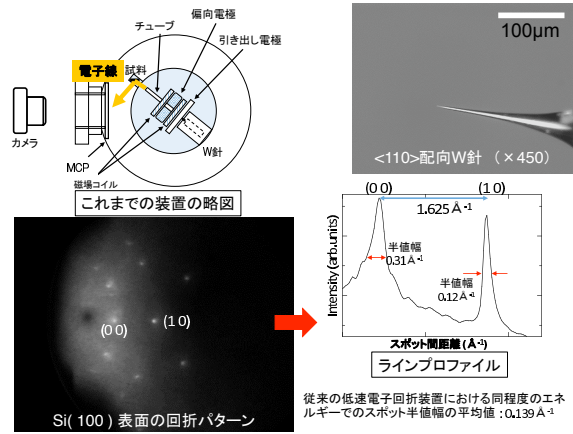
図3.
STS測定により得られた
電流-電圧の特性

D-13 電界放出型低速電子回折装置の開発

九大総理工^A 達城裕樹^A, 高田賢哉^A, 渡辺周平^A, 中川剛志^A, 水野清義^A

物質表面は内部とは特異な性質を有し、その構造や状態を解明することが重要視されている。その手法として、本研究では電界放出型低速電子回折装置を開発している。電界放出電子は熱電子に比べエネルギー幅が狭く、電界放出の領域も小さいためにコヒーレンス長が長く、より鮮明な回折スポットを得ることができる。これまでの実験で電子線の速度を変化できるように改良を行い、回折スポットの半値幅の向上を図ってきた。これまでの装置で課題であった回折パターンの湾曲を改善すべく、新たな装置の立ち上げを行っている。その装置の電子源作製部と試料観察部を個別に立ち上げ、電子源作製部分において電子源 W 針

の尖鋭化条件を見直している。今後は個別に立ち上げた両部を結合させ、構造解析につながる回折パターンを得ることを目標にしている。



D-14 W(112) 上の Co 原子鎖の構造と磁性

九大総理工^A 高村優^A, 竹嶋祐城^A, 中川剛志^A, 水野清義^A

ナノスケールにおける保磁力や磁気異方性は、磁気記録媒体の高性能化に寄与する重要な要素として研究が行われている。金属表面上の Co 原子鎖において高い磁気異方性が現れた報告があり [1]、その構造的な異方性が磁性に大きな影響を与えることが示された。本研究では、表面上に溝を持ち構造的な異方性が高い W(112) 上に Co を蒸着し、その表面構造を解析した。1 ML 以下では W(112) の溝に Co が入り込む 1×1 構造となった (Fig. 1)。また 1 から 2 ML の場合には鎖方向に沿ったワイヤが確認され、2.2 ML に達すると鎖方向に 6 倍の周期構造、さらに 8.3 ML では $c(16 \times 16)$ 構造が現れた (Fig. 2)。これらは、蒸着量増加に伴い基板の影響が弱くなり、hcp-Co(0001) を形成する過程である。当日はこれらの構造変化による磁性の変化を含め、発表する。[1] P. Gambardella et al., Nature, 416, 301 (2002).

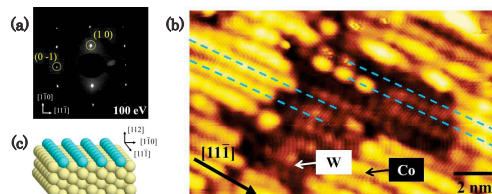


Fig. 1 1 ML 以下 Co/W(112)の構造。(a) 1 ML の LEED パターン、(b) 0.6 ML の STM 像、(c) 1 ML の構造モデル。

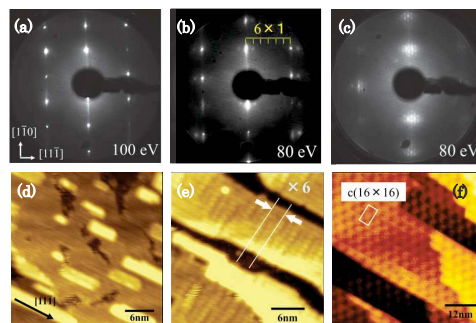
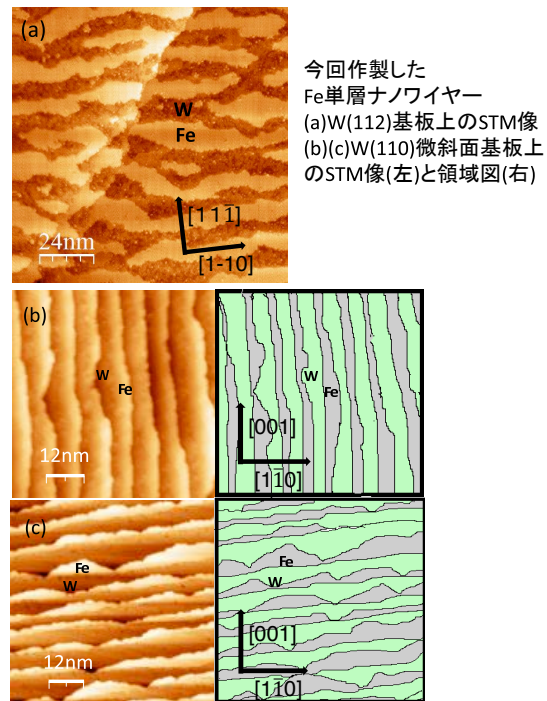


Fig. 2 1 ML 以上 Co/W(112)の LEED パターンと STM 像。(a) 2 ML、(d) 1.2 ML、(b)と(e) 2.2 ML、(c)と(f) 8.3 ML。

D-15 結晶方位を制御した Fe 単層ナノワイヤーとその磁性

九州大学大学院総合理工学府^A 竹嶋祐城^A, 山口功介^A, 中川剛志^A, 水野清義^A

重金属基板上的磁性薄膜構造の成長及び磁気特性は何十年にも渡って広く研究されているテーマである。中でも磁性薄膜をナノワイヤー状に形成した構造は、同じ基板と磁性薄膜の組み合わせであってもワイヤーの形状や方位によって保磁力が大きく異なる。これは、結晶基板特有の磁化容易軸方向により、ワイヤーの形状で磁壁の生成が異なるからであると考えられる。もし結晶方位を制御したナノワイヤーを形成できれば、高い磁気異方性を有し、保磁力を制御した磁気構造を得られるのではないかと考えられる。これに対し本研究では、W (112) 基板上に Fe 単層のナノワイヤーを形成することにより、ネオジム磁石と同等かそれ以上の磁気異方性が発現することを明らかにした。さらに、ステップ方位が異なる 2 つの W (110) 微斜面基板を用いることで、結晶方位が異なる Fe 単層ナノワイヤーの作製を目指した。



D-16 機械的剥離酸化チタンナノシートにおける光電流測定

熊本大学大学院自然科学研究科^A 川畑喜久^A, 今福達也^A, 高木健誠^A, 平野佑樹^A, 松本泰道^A, 原正大^A

近年、グラフェンをはじめとする 2 次元ナノシートへの関心が急速に高まってきている。我々は酸化チタンナノシートに注目し、紫外光照射に対する光電流の時間応答性や雰囲気ガスの影響について研究を行ってきた [1]。本研究では化学剥離単層ナノシートとの比較を行う目的で、前駆体の層状チタン酸化物を機械的に剥離した多層ナノシートの光電流測定を行った。SiO₂ 基板上に剥離したシート上に、電子線描画によりギャップ 3 μm 程度の二端子電極を作製し、測定を行った。その結果、多層シートでも同様な光電流のスイッチングが観測された。また、多層になることで光電流の低下に対する酸素吸着や窒素（不活性ガス）衝突による影響が小さくなっていることがわかった。[1] K. Matsuzaki, T. Taniguchi, Y. Matsumoto, and M. Hara, Appl. Phys. Lett. 106, 033104 (2015).

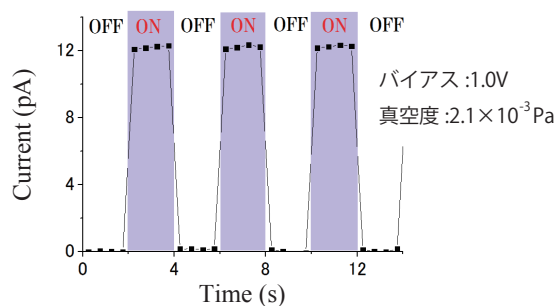


図 1: 真空中における光電流のスイッチング

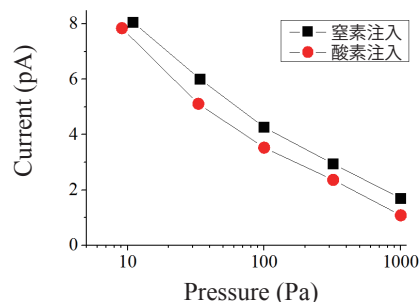


図 2: 真空度に対する光電流の変化

D-17 酸化チタンナノシートの水中 AFM 観察

熊本大学大学院自然科学研究科^A 平野佑樹^A, 山本佳輝^A, 松本泰道^A, 原正大^A

酸化チタンの単層の二次元結晶である酸化チタンナノシートは層状チタン酸化物を剥離することで得られる。我々は、1枚の酸化チタンナノシートの伝導度を測定し、湿度に対して非常に大きな変化を示すことを発見した [1]。これは、ナノシート表面へ水分子が吸着しプロトン伝導が生じることが原因だと考えている。本研究では酸化チタンナノシートへの水分子の吸着の様子を調べるため、原子間力顕微鏡を用いて大気中と純水中でマイカ基板からの高さを比較した。それぞれの条件下で観察した同じナノシートの高さをヒストグラムにすると、純水中では大気中と比べて0.3 nm程度厚さが増加していることが分かる。この差は水分子1層の厚さに相当し、マイカ基板に比べて酸化チタンナノシートが水分子を吸着しやすいことを示唆している。[1] A. Tanaka, K. Hatakeyama, A. Oku, K. Matsuzaki, N. Saitou, H. Yokoi, T. Taniguchi, Y. Matsumoto, M. Hara, Appl. Phys. Lett. 104, 163106 (2014).

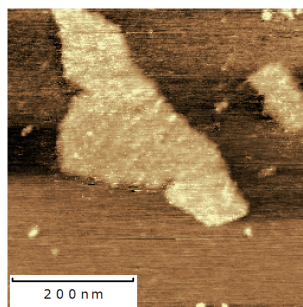


図1：純水中における原子間力顕微鏡像

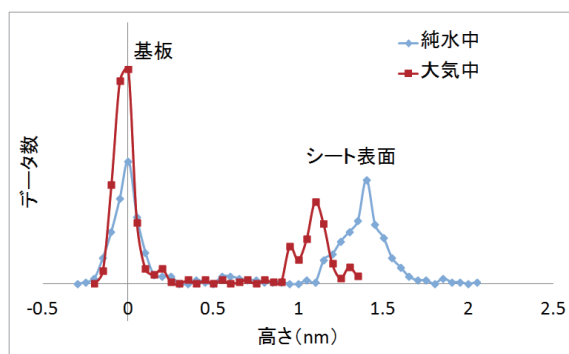


図2：大気中と純水中での高さヒストグラム

D-18 二次元ケミカルガーデンの格子モデルの構築

九州大学大学院^A, 九州大学^B 工藤竜矢^B, 坂上貴洋^{A,B}, 中西秀^{A,B}

水ガラス（ケイ酸ナトリウム水溶液）に満たされたヘレ-ショウセル内に金属塩水溶液を注入することで二次元ケミカルガーデンは実験され、注入速度に依存して様々なパターンが形成される (1)。

水ガラスの粘性は金属塩水溶液の粘性に比べて十分大きいため、当実験はビスコスフィンガリングの実験と似ているが、水ガラスと金属塩の化学反応によりシリカゲルが生じ界面の移動を妨げる点が異なっている。そこで、ビスコスフィンガリングのシミュレーションモデルを構築し、そのモデルに水ガラスと金属塩水溶液の境界面で生じたシリカゲルの効果を導入することで二次元ケミカルガーデンのシミュレーションモデルを構築した。ビスコスフィンガリングのシミュレーションモデルは注入流体内の圧力分布は場所によらず一定であるという仮定のもと、ラプラス方程式を解き、フィックの法則から導かれる流体の速度に応じた確率で界面が移動させることで構築した。そこに、新たなパラメータとしてシリカゲルの強度を導入し、水ガラスと金属塩水溶液の境界面で単位時間毎にシリカゲルの強度を一定量増加させ、上モデルの界面の移動確率にシリカゲルの強度に比例した項を加えることでシリカゲルが界面の移動を妨げる効果を導入した。

シミュレーションの結果、大きな注入速度で界面が蛇行しながらに成長し、注入速度を小さくしていくとフラクタルなパターンが得られた。これらの結果は実験とよく一致している (1)。界面が蛇行しながらに成長する注入速度とフラクタルなパターンが見られる注入速度との間の注入速度では、界面が円状に成長することが実験で確かめられているが当モデルではそのパターンの再現は出来なかった。

参考文献:1: Florence Haudin, Julyan H. E. Cartwright, Fabian Brau, and A. De Wit (2014). Spiral precipitation patterns in confined chemical gardens PNAS vol.111 17363-17367

D-19 Gd₃N@C₈₀の電気的特性評価

九州工業大学工学府^A, 九州工業大学工學院^B 瀬在丸弘喜^A, 孫勇^B

近年、安価になり供給も増加したフラーレンの工業生産が本格化している。フラーレンとは炭素分子のみからなる籠状の「炭素分子」であり、代表としてC₆₀、C₇₀、C₈₀などが挙げられる。そのフラーレンの中空の籠には原子や分子などを内包することができる。その中でも、合成方法や分子の分離技術が不十分なためにまだ解明されていないことが多い三金属窒化物は特に注目されている。本研究では、結晶性Gd₃N@C₈₀固体の電気的特性及び分子動力学特性を評価し、内包クラスター及びC₈₀分子の誘電的及びキャリア輸送特性の解明を目的とする。実験では、Gd₃N@C₈₀結晶性粉末に圧力をかけ、円板形ペレット試料を作製しAu電極を取り付けた。組成と結晶性評価を行った後、インピーダンスアナライザーを用いて室温で交流特性を測定した。また、デジタルエレクトロメーターを用いて、15Kから450Kまでの温度範囲で直流特性を測定した。まず、交流特性のCole-Coleプロットから試料と電極がオーミック接触であることが分かった。また、電極間等価容量が周波数の増加に従い減少することが判った。その理由として、高い周波数で分極が追い付かなくなり、誘電率と共に下がったと考えられる。一方、等価抵抗の減少は、分極距離が短くなったことによるものと思われる。そして、一定の周波数以上では時定数が増加し等価回路の応答が遅くなることが分かった。次に、直流特性の結果より、電気伝導率のアレニウスプロットから得られた2つの熱励起エネルギーが試料中キャリアのホッピング伝導における励起エネルギーに対応すると考えられる。これは、キャリアが束縛準位からホッピング伝導可能な準位に励起するためのエネルギーに相当する。また、電気伝導率温度依存のヒステリシス特性や電界強度依存性から、内包クラスターがもつ電気双極子のキャリア散乱およびC₈₀分子の回転によるキャリア散乱などもキャリアの移動度に影響を与えることが明らかとなった。

D-20 振動リード法を用いたLIB電極バインダーPVdFの劣化特性評価

九州工業大学大学院 先端機能システム工学^A 皇祥悟^A, 野下剛^A, 稲垣遼^A, 孫勇^A

【背景と目的】 現在LiB (lithium ion batteries) の劣化については不明な点が多く、寿命を特定するにも電池全体としての評価法はあっても、構成部品毎の寿命特定法はないといった現状である。そのため電池の寿命は分かっても、なぜそのような結果となったのか原因を追求するのが困難となっている。そこで本研究の目的は、様々な充放電回数の電池電極に対して共振周波数といった機械特性を測定し寿命との関係性を明らかにする事で、構成部品の一つである電極に対する寿命特定法を開発する事を目的としている。【実験方法】 本研究では振動リード法を用いて機械特性を測定している。真空槽中に電池電極試料を片支持にて固定し、もう一端に交流電圧による静電力を与える事で振動させ共振周波数を測定していく。測定条件としては、全ての試料において温度を100K-400Kで変化させている。また、振動リード法で得られた共振周波数を元に半値幅法・アレニウスプロットを用い内部摩擦・活性化エネルギーについても議論していく。【結果】 共振周波数・内部摩擦共に、温度と充放電回数に伴った規則的な変化がみられた。この変化を追及していくと、電極に使用されているPVdFが劣化過程に大きく関与していることが分かった。また機械特性の充放電回数に対する変化の割合を表してみると、ルート則に似通った変化であった。【結論】 機械特性は充放電回数にともなった変化を示したため、これらの特性は寿命を特徴付けるパラメータとして有用であるといえる。また機械特性の変化を割合として表す事で、一部品である電極としてもルート則を用いた寿命特定が可能であるといえる。

D-21 グラフェンの磁気特性に及ぼす欠陥の相対配置効果

熊本大学大学院自然科学研究科^A, 物質材料研究機構国際ナノアーキテクニク^B
横井裕之^A, 谷口貴章^B, 松本泰道^A

炭素系物質の磁性は、物性物理分野で長く興味をもたれてきたテーマである。グラフェンが機械的剥離だけでなく化学気相析出法により作製できるようになり、 sp^2 ネットワークをもつ炭素系物質の磁性にも大きな関心が向けられるようになった。グラフェン基面の炭素原子1個分の空孔欠陥に起因した磁性に関する理論研究では、その相対配置により欠陥1個当たり最大 $1.53\mu_B$ の磁気モーメントをもつことなどが報告されてきた [1]。このような未末端の欠陥は反応性に富み、水素原子等を容易に化学吸着すると予想される。空孔端の3個の炭素原子を完全に水素終端した場合、すなわち、個々の炭素原子に水素原子を2個ずつ化学吸着させた場合、欠陥1個あたりの磁気モーメントが $1.9\mu_B$ に達するという報告もなされた [2]。われわれは、このような完全水素終端欠陥に起因する磁性に対する相対配置の影響を第一原理計算により調査した。相対配置の典型例として、ジグザク配置とアームチェア配置を比較したところ、欠陥1個あたりの磁気モーメントに差は見られなかった。しかしながら、スピン分極分布に大きな違いが生じて、前者では欠陥の間に重なりが残る一方で、後者ではスピン分極が欠陥の周囲に局在化することがわかった。このようなスピン分極分布の特徴を考慮すると、アームチェア配置の完全水素終端欠陥では常磁性しか示さないが、ジグザク配置では強磁性が発現すると期待される。[1] O.V. Yazyev and L. Helm, *Physical Review B*, 75 (2007) 125408. [2] Y. Lei, S.A. Shevlin, W. Zhu, and Z.X. Guo, *Physical Review B*, 77 (2008) 134114.