

Kinken

IMR NEWS

2011 SPRING
vol. 64



CONTENTS 目次

■トップメッセージ／所長 新家光雄

■研究最前線／絶縁体中のスピンゼーベック効果の観測及び絶縁体からの熱電発電に成功
フント第一則及び第二則の統一的理解に成功 一磁性の根源は交換相互作用ではないー

■センター紹介／低炭素社会基盤材料融合研究センター、中性子物質材料研究センター

■退職のご挨拶／和田繁男、伊藤敏行

■金研ニュース／「原子分解能ホログラフィーによる中距離局所構造のサイエンス」報告
窒化物半導体による低炭素社会実現への可能性を求めて
第七回金研若手学校を開催して
金研ワークショップ「新素材開発と工程制御・品質管理に向けた分析・解析技術」開催報告
アジア計算材料学コンソーシアム仮想組織国際会議報告

■RESEARCH INDEX／半導体ナノ機能を直視する

左／スピンゼーベック効果測定装置
写真提供：齊藤研究室



TOHOKU
UNIVERSITY



所長
新家 光雄

進めています!

本年度もわずかな月日を残すばかりとなりましたが、皆様にとって平成22年度はいかがだったでしょうか。私は所長に就任して1年強が経過し、実に様々な経験をさせて頂きました。新年度は、この経験を生かし金研のアクティビティに更に力を入れ、存在感をより高めて行きたいと思っている次第です。

ともあれ、大学の予算の削減や大学に関連する予算の仕分けによる縮小あるいは廃止には依然として悩まされています。そのような状況の中で、金研の教職員は職務に励み、昨年10月に行われた平成22年度東北大学部局評価ヒアリングでは高い評価を受けることが出来ました。

さて、前回のIMRニュースでもお伝えしましたが、所内に新たに設置した低炭素社会基盤材料融合研究センターでは、共同研究プロジェクトの募集を行い、一般研究3件(1件の研究費:10,000千円)および若手研究2件(1件の研究費:5,000千円)の採択を決定し、革新的な研究成果が期待されます。昨年11月19日には、同センターのキックオフワークショップも開催され、経済産業省製鉄企画室、科学技術振興機構(JST)およびトヨタ自動車株式会社先端材料技術部より講演をして頂き、同センター研究者による研究紹介、さらには若手研究助成に採択された若手研究者による研究提案が紹介され、今後の研究成果に期待が持たれます。同センターと同時発足した中性子物質材料研究センターにおきましても、外部委員を入れての運営会議が開かれるなど、着々と事業が展開されております。

天津大学(中国)との第1回共同ワークショップに続き共同研究センターを本所に置いている大

連理工大学(中国)と第1回ワークショップ(The 1st Joint Workshop on Advanced Materials Research & Application (JWAMRA-1))を昨年11月3-6日に大連理工大学にて開催しました。これは、大連理工大学との共同研究センター設置5周年記念の合同ワークショップとなっています。金研から5名の教員に加えマテリアル開発系より成島尚之教授の計6名が東北大学より参加しました。今回は生体材料を主題とし、その他金属ガラスや磁性材料関係を入れてのワークショップとし、合計11件の講演発表(6件が金研関係)がなされ盛大なワークショップとなりました。ワークショップ終了後、今後の共同研究を強力に進めて行けるようにと打ち合わせ会議があり、金属ガラス、生体材料の他、原子力材料、製造プロセス、エレクトロニクス材料、エネルギー材料、デバイスまで具体的な共同研究を行いたい旨が大連理工大学から打診されましたが、慎重に進めていかなければなりません。いずれにせよ、来年度には第2回の共同ワークショップ(JWAMRA-2)を開催しようと計画しております。

恒例の金研夏期講習会が80回を迎え記念すべき回数となりましたことは前報で既に紹介しましたが、秋の金研所内講演会(2010年11月24-25日)も第120回目とこれも記念すべき回数となり盛大に開催されました。この講演会では120回記念として表に本多光太郎先生の名言で代表的な「今が大切」、裏に金研のロゴマークが彫られたステンレス製文鎮および金研の歴史的なシーンを掲載したカレンダー(写真1、2)が参加者に配られました。こ

写真1



写真2



写真3



の時の文鎮は、第80回金研夏期講習会で記念品として配られたチタン製キーホルダー（写真3）と同様に金研テクニカルセンターで作製されました。金研の技術力の高さが伺われ、金研グッズとしての販売も可能かもしれません。

金研、東京工業大学応用セラミックス研究所、大阪大学接合科学研究所、名古屋大学エコトピア科学研究所、東京医科歯科大学生体材料工学研究所および早稲田大学ナノ理工学研究機構との連携共同体制での「特異構造金属・無機融合高機能材料開発共同研究プロジェクト」では、大阪大学接合研が主催する Visual-JW2010 (The International Symposium on Visualization in Joining & Welding Science through Advanced Measurements and Simulation) (2010年11月11-12日)にて、成果発表講演がなされ6研究所による研究が着実に進められております。

金研が計算材料科学分野の研究戦略機関になって参加している「計算物質科学イニシアティブ」では、そのキックオフシンポジウムとして、東京大学物性研究所（計算物質科学戦略機関）主催の計算物質科学シンポジウムが昨年9月30日に開催され、僭越ながら同シンポジウムにて計算材料科学分野戦略機関（金研）の代表として挨拶をして参りました。今後は、金研の計算材料科学研究拠点（仮称）の組織構築作業を進めなければなりません。

国際会議では、計算物質科学に関する国際会議 The 5th General Meeting of ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials Science -Virtual Organization) (2010年12月10-13日)

が金研および松島の両会場にて盛大に開催されました。本会議は10年前に本所の川添教授が提唱し始められており、アジアの計算物質科学研究者が多数参加しております。

さて、私事ではございますが、中国西安有色金属研究所を訪問して参りました。同研究所は以前、チタンおよびチタン合金を中心とする基礎研究を行う機関でありました。今回の訪問で驚かされたのは、基礎研究はほとんど行わず応用研究と製品化に主体が移されており、基礎研究の成果が即座に製品化され市場に出せるように、研究所の下に無数の会社組織がある体制となっていたことです。話には聞いておりましたが実際に見学してみると驚愕に値します。たとえば、チタンの溶解専門会社、粉末冶金専門会社と言ったように要素技術に対応した会社組織となっています。研究所の予算、売上、論文数は数年前の10-20倍となり、今後も急速に伸び続けるだろうとのこと。ただし、品質管理に関しては、まだまだ問題がありそうです。日本の素材産業は、厳密な品質管理体制で極めて高品質な素材を生産しており、他国の追随を許さない状況ではありますが、例えば中国のような新興国の経済および産業の急伸と活力を目のあたりにしますと、やはり脅威に感じます。このような世界状況の中で金研の研究を世界トップレベルに保って展開して行かなければと思う所存です。

最後になりましたが、皆様のご鞭撻とますますのご支援をお願い申し上げます。

絶縁体中のスピンゼーベック効果の観測及び絶縁体からの熱電発電に成功

量子表面界面科学研究部門 齊藤 英治

金属や半導体に温度差を付けると、温度勾配に沿って電圧が発生します。この現象はゼーベック効果と呼ばれ、1800年代前半にドイツのトーマス・ゼーベックによって発見されました。ゼーベック効果を用いれば、排熱などから電気を生成する熱電変換素子を構築可能であるため、クリーンで信頼性の高いエネルギー源の候補として期待されており、この現象の発見以来200年近くにわたって世界中で盛んに研究が行われてきました。しかし、ジュール熱や素子内部の熱伝導によって生じるエネルギー損失、コストや設置可能箇所の制約によって、その実用化範囲は非常に限定されていました。今回、我々は温度差を付けた磁性体中に磁気（スピン）の流れが生じる「スピン版のゼーベック効果」を利用することで、従来とは全く異なる物理原理によって駆動される熱電変換素子を開発しました。これは、従来の熱電素子が抱える問題を克服する大きな可能性を秘めています。

スピンゼーベック効果は、我々のグループの博士課程学生である内田健一君が卒業研究時に発見したものであり、論文がNature誌に掲載されるなど、世界的に大きな注目を集めています。従来のゼーベック効果は電気を通す導電体でのみ生じる現象であり、同様にスピンゼーベック効果も鉄などの磁性を持つ金属でのみ観測されていましたが、今回、内田君が行った実験によってスピンゼーベック効果が絶縁体においても発現することが明らかになりました。スピンゼーベック効果によって生成されたスピンの流れ（スピン流）は、絶縁体に金属薄膜を取り付けることによって電圧に変換することが可能であり、これにより従来は不可能だと考えられていた「絶縁体を用いた熱電発電」が可能であることを初めて示しました。

今回の研究では、絶縁体である磁性ガーネット薄膜の表面に白金電極薄膜を付けた素子を作製し、絶縁体層に温度差を付けながら白金電極に発生する電気信号の精密測定を行いました。検出された電圧信号が絶縁体中のスピンゼーベック効果に由来することを明らかにし、絶縁体熱電変換素子のプロトタイプ作製に成功しました。通常のゼーベック効果は導電体中の伝導電子が温度勾配に沿って電気を運ぶことによって発生するのに対し、絶縁体におけるスピンゼーベック効果は、磁性ガーネット中に存在する多数のスピンの集団運動（スピン波）が温度勾配によって誘起されることで生じます。このスピンの集団運動が生じている場所に白金薄膜を取り付けると、磁性ガーネット / 白金界面にスピン流が生じ、白金中の「逆スピンホール効果」と呼ばれる現象によってこのスピン流は電圧に変換されます。従来の熱電素子において熱の流れと生成された電圧は同じ物質（導電体）中に存在していましたが、今回の素子では温度差は絶縁体層のみに付いており、熱の流路と電圧発生役割をそれぞれ絶縁体とそれに取り付けた金属に分離することができます。熱電素子の性能指数は電気伝導率 σ と熱伝導率 κ の比に比例するため、従来の導電体を用いた熱電素子ではウィーデマン・フランツ則（ σ/κ_e が一定になるという法則： κ_e は κ の伝導電子に由来する成分）による制約によって性能指数の向上には限界があると考えられてきました。しかし、本研究で開発した絶縁体熱電変換素子を用いれば、上記の特性により、同じ物質中の熱と電気の流れに関するウィーデマン・フランツ則による制限を回避でき、また素子設計の自由度も大幅に向上します。

環境負荷の小さなエネルギー技術への大きな需要を鑑みると、熱流や温度差から電力を取り出す熱電技術の開拓は最重要課題のひとつであるといえます。熱電変換性能指数を飛躍的に向上させることができれば、大規模発電から携帯用小型素子まで幅広い応用が期待できます。

本研究成果は2010年9月に英国科学誌「Nature Materials」に掲載され、読売新聞、日刊工業新聞、電気新聞、日経産業新聞で紹介されました。

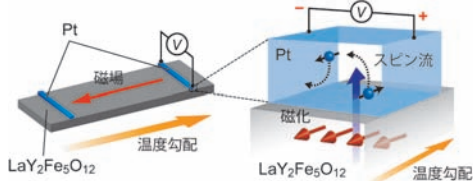


図1 絶縁体熱電変換素子の模式図と熱起電力生成メカニズム。

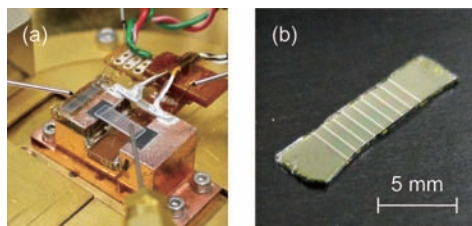


図2 (a) 温度勾配生成装置。(b) 本研究で用いた試料系。

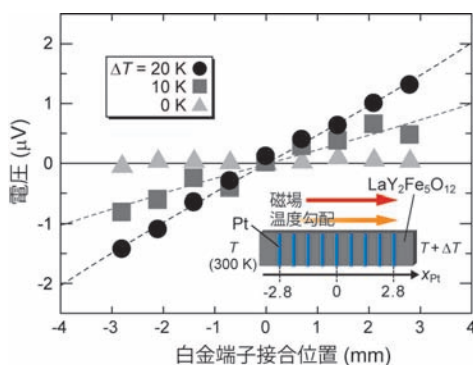


図3 試料に発生した熱起電力の白金端子接合位置依存性。

フント第一則及び第二則の 統一的理解に成功

—磁性の根源は交換相互作用ではない—

計算材料科学研究部門 川添 良幸

磁性の根源的問題であるフント則は、量子力学成立以前の1925年にフントの詳細な分光学的検討によって見いだされた経験則です。それは、第一則、第二則、及び第三則から構成されています。すなわち、第一則：原子や分子において同じ電子状態が複数存在する場合の基底状態はスピン最大の状態である。第二則：さらに、スピンの値も同じ場合には、軌道角運動量最大の状態が基底状態である。第三則：相対論に関する規則。となっています。1929年に、スレーターが生まれたての量子力学を適用し、フント第一則の説明を行いました。すなわち、電子の運動エネルギーと原子核とのクーロン引力相互作用及び電子間のクーロン斥力相互作用はスピン状態に依らず、電子の交換相互作用の2倍の差がスピン最大状態を基底状態にする、という摂動論的な解釈でした。それが今でも、標準的な教科書やウィキペディア等で採用され続けています。一方、電子の交換相互作用がフント則の起源ではない、という指摘は、1964年のディビッドソンや1984年のボイドの論文等によって喚起されて来ました。しかし、ヘリウム原子の励起状態等に限られていたため、現在に至るまで、深刻な問題として考えられたことはほとんどありませんでした。

この問題を抜本的に解決するため、安原洋本学名誉教授の卓抜したアイデアである、「多電子系の量子力学における必要条件であるビリアル定理の確認を行

うべきである」という基本方針に沿って、私の研究室の博士課程学生であった本郷研太、丸山洋平、小山田隆行の3名が、ビリアル定理を高精度で満たすレベルの超精密第一原理計算を駆使して原子・分子系のフント則の成立事情解明に当たって来ました。今回の結果は、小山田君（現理学研究科ポスドク研究員）が、2p 及び3p 原子系に対し、フントの第一則及び第二則成立の根源的理解に成功したものです。第一則でもこれまでに3p 系までの計算はありませんでしたし、さらに第二則に対する超精密計算は皆無でした。この結果は、従来の教科書の書き換えを迫るものです。すなわち、第一則のスピンや第二則の軌道角運動量が最大の状態が基底状態になる理由は、電子間の交換相互作用ではなく（正負さえ逆）、原子核に複数の電子が近寄って全エネルギーを最小化するためであることが確認出来ました。これで、80年にわたる摂動論の誤った解釈を完全に払拭することが出来たのです。

この結果は、物性物理における多くのモデル計算に警鐘を鳴らすものです。電子の交換相互作用を磁性発現の要因としてはいけません。さらに、一般的に、縮退した電子状態を先に求め、そこに摂動論でスピン状態を入れてもいけないのです。ハイトラー・ロンドンに端を発する多くのモデル計算はこの誤りの上に、パラメーターを振って実験値に合わせることで成り立っているのです。

スレーターの摂動論による誤った解釈の式

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ -\frac{1}{2} \Delta_i \right\} - \sum_i \frac{Z}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \begin{array}{c} \uparrow \downarrow \\ \uparrow \uparrow \end{array} \quad \therefore E^{\uparrow\uparrow} - E^{\uparrow\downarrow} = -2K_{12} < 0$$

(Exchange energy)

標準的な教科書に記載されているフント則のスレーターによる摂動論解釈。実は、これは全くの間違いで、2つの電子状態は、電子の運動エネルギーと原子核と電子、及び電子間のクーロン相互作用の差で決まり、上図の交換相互作用の数値は全体の計算をした場合には図と逆になる。

センター紹介

低炭素社会基盤材料 融合研究センター

センター長 古原 忠



我々が今後必要とする持続可能な社会の基盤構築においては、CO₂排出等の環境負荷低減、省エネルギー技術開発、新エネルギー利用といった視点を重視した研究を指向することは、材料科学への社会的要請と言えます。金属材料研究所は、創立以来、社会的要請に基づく実学研究を重視する一方で、材料科学の基礎に立脚しながら常に新しい視点からの研究を指向し、広範な材料開発を行うことで材料科学研究のリーダーシップの一端を担ってきました。この度、上記の背景を踏まえて、本年度より省エネルギー・新エネルギー両面での革新的材料創製とその応用展開による低炭素社会実現に向けたミッションオリエンテッド研究を推進する目的で「低炭素社会基盤材料融合研究センター（LC-IMR）」を発足させました。本センターは、同時に発足した中性子物質材料センターと共に、研究所の戦略的な材料研究を推進するために、概算要求などの予算を伴わない所内措置にて設置されたものです。

センターは、以下に挙げる6人の部門担当教授（研究のキーワード）が兼任する形で現在活動しています。

折茂慎一 教授（水素化合物、イオン伝導）、

宇田 聡 教授（結晶成長、外場応用）、

高梨弘毅 教授（磁性材料、スピントロニクス）、

松岡隆志 教授（窒化物半導体、デバイス設計）、

米永一郎 教授（半導体、格子欠陥）、

古原 忠 教授（鉄鋼材料、材料組織解析）、

各人の専門性は大変多岐に渡っており、多彩な分野で低炭素社会の実現に資する研究が推進できます。さら

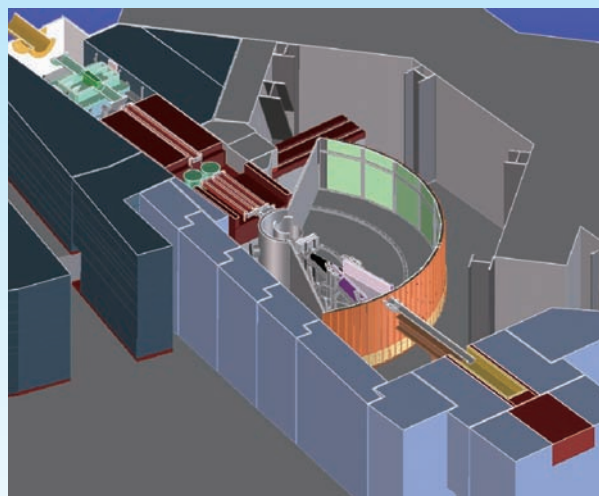
に、バックグラウンドの異なる研究者の連携によって、共通する材料科学的原理・手法の水平展開による融合研究を推進し、新しい研究領域の開拓を図ることも可能です。例えば、「水素」というキーワードに着目しただけでも、水素貯蔵の原理を生かした構造用材料の脆化抑制や、水素のエッチング効果を応用した窒化物半導体の結晶成長制御による太陽電池材料の高機能化、といった融合研究のテーマが浮かびます。このような融合の推進により優れた成果が上げられ、今後の低炭素社会構築に強いインパクトを与えられるのではと考えています。

本年度の活動としては、まずセンターが責任を持ってマネジメントする所内公募研究助成「低炭素社会基盤材料研究事業」で5件の研究テーマを採択し、若手研究も含め融合研究を奨励することで新しいシーズを育成する取り組みを開始しました。また、11月には「低炭素社会実現に向けた材料科学」と題してセンター主催ワークショップを開催し、経済産業省、JST、企業からの基調となる招待講演をいただくとともに、センターのミッションと研究シーズの紹介を行いました。

このように、センターはまだその活動を開始したばかりですが、今後は研究所の持つ豊富なインフラも有効に活用しながら本来の目的である低炭素社会の基盤材料研究を推進するとともに、ワークショップなどによる成果発信や東北大内外の研究者コミュニティ、自治体・産業界との研究連携など多方面での活動を行う予定です。今後とも皆様のご協力をよろしくお願いいたします。

中性子物質材料 研究センター

センター長 新家 光雄



東北大 J-PARC 装置完成予想図

中性子物質材料研究センターは平成22年4月に発足した新しいセンターで、中性子線を用いた各種実験により、エネルギー材料、強力磁石開発などで新しい切り口の研究を進めるために設立されました。

中性子は電気を持たない極小の粒子で、その性質を利用して他の手法では観測困難な現象をみることができます。たとえば、中性子線は水素の観測に最適です。水素は、生物を含む地球上のほとんどの物質に含まれている元素であると同時に、環境問題解決にその有効利用が重要と考えられています。したがって、よりよい未来社会の実現には、水素を含む物質の性質を理解する必要があります。それには物質中の水素がどこにどのくらい安定に存在しているかを知ることが重要ですが、中性子線ならばその両方を正確に観測できます。中性子線で水素の状態を調べることで高機能の水素系材料を開発できれば、環境問題の解決にもつながることでしょう。

また、超強力磁石開発にも中性子実験がかかせません。現在の文明には高能率モーターが不可欠ですが、それには小型超強力磁石が必要です。さらに、希土類とよばれる希少な金属を含まない強力磁石開発が緊急の課題となっています。中性子にはそれ自身に磁石の性質（スピン）があり、磁石の力の元である原子スピンの配列を正確に観測することができます。中性子を使って高い磁場をだす条件を探すことで、超強力磁石の開発を進めることができます。

さらに、エネルギー輸送にとって重要な現象である超伝導（低温で電気抵抗が0になる現象）の解明も主要研究

テーマです。現在の送電線では電気抵抗のため大きな電力ロスが生じていますが、もし超伝導物質で送電線をつくることができれば無駄のないエネルギー輸送が可能です。人類はまだ送電線が使用される摂氏20度付近で超伝導を起こす物質を作ることができていませんが、超伝導が起きるには原子の振動と原子スピンの振動が重要であることはわかっています。この両方の振動を精密に観測できるのは中性子線だけです。原子・スピンの振動の観測から超伝導のメカニズムを解明できれば、ロスのない送電が実現できるかもしれません。

このように、これからの環境問題にとって中性子線は有効な「目」となります。中性子実験が可能な場所は世界的にも限られていますが、金研は優れた中性子実験環境をもつ数少ない研究所の一つで、中性子線を用いた研究で長い実績があります。中性子物質材料研究センターは、金研のもつ強みを最大限いかしつつ国内外のグループと共同で研究を進め、新しい視点での物質材料開発を進めていきます。さらに、中性子物質材料研究センターが中核となり、大強度陽子加速器施設 J-PARC（茨城県東海村）に新しい中性子実験装置を建設する計画を進めています。この装置が実現すれば、東北大学に新しい顔がひとつ加わることになります。

退職のご挨拶



退職のご挨拶

和田 繁男

私は昭和44年(1969年)4月1日に付属工場の技術職員として入所し、当時は約60名の先輩の方々が働いていて大変賑やかで活況を呈していました。旋盤掛からスタートして、平削掛や試作掛そしてまた旋盤掛と工場内で何度か異動が有りましたが、約20年間様々な試験片や装置部品などを製作してきました。こうした中、昭和63年に本所材料データベース「KIND」を構築するということで技術職員に協力要請があり、思い切って応募しました。計算機は全くの素人でしたが、

中道先生と一緒に移った中名生充技術職員、伊藤敏行技術職員からゼロから教えて頂き、論文のイメージ情報を光磁気ディスク装置に蓄積した頃が懐かしく思い出されます。平成2年に川添先生が赴任してから本所の情報ネットワーク化が一気に進み、ユーザが快適に利用できるようネットワーク整備やスパコン導入による管理運用など17年間裏方として携わることができました。ここで培った経験が5年前に工場に戻った際、大いに役立ち移って良かったと思っております。

最後に、これまでお世話になった諸先生や職員の方々に厚くお礼を申し上げますと共に、金研の一層の発展をお祈り致します。



退職にあたり

伊藤 敏行

私が金属材料研究所に技術職員として入所したのは昭和44年4月です。それから42年の歳月が過ぎました。工業高校を出て最初に就いた職場は技術棟で、当時、工場(現在の機器開発技術グループ)と言われていた所です。そこで技術掛を2年、工程掛を2年、特殊加工掛を7年、そして試作掛を8年と合わせて19年間勤めました。当時の工場には60名余りの技術職員が働いており、仕事に余暇に、圧倒されるような活気がありました。運動会を始めとする各種スポーツ大会では華々しく活躍する工場職員の姿を忘れることが出来ません。

その後、本所が全国共同利用研究所へ改組となり、新素材開発施設(現在の金属ガラス総合研究センターの前身)の新設時に工場の技術職員へ新職場への異動の働きかけがありました。昭和63年(1988年)7月に情報端末室(現在の計算材料科学センター)設置の呼びかけに応じて、これまでの機械加工の職場から計算機を扱う全く経験のない業務に従事することになりました。ここでは3名の技術職員が勤務することになり、仕事内容は本所の材料データベース構築と、情報端末及び通信装置関係

の運用管理でした。これまでの職場とは違い、情報端末室の責任者である教員の先生から直接業務指導を受けることとなりました。これはこれまでの決められた勤務時間の業務体制から、状況に応じた業務体制をとる必要があり、この時から技術職員としての意識が大きく変わったと思っております。この職場には15年間勤務しました。この間スーパーコンピュータの新設と更新や通信機器等の画期的な変遷を現場経験し、基本的には材料データベース構築を主業務として、データの収集とWeb上からの特徴ある検索システムを構築しました。現在は新システムに移行されておりますが、そこには月に約500件程度のアクセスがありました。

その後は、再び技術棟に戻り、技術職員の組織運営支援的な業務に就き、8年間の経過しようとしています。大学の研究所という職場に技術職員として勤めて、知的興味を持てば大変面白く、又、世界の先端に行く材料研究を身近に見てこられたのは大変幸せなことだと思っております。最後になりますが、金研の皆様には大変お世話になりました。心から感謝申し上げますと共に、金研の益々の発展をお祈り致します。

「原子分解能ホログラフィーによる 中距離局所構造のサイエンス」報告

林 好一

2010年11月12、13日の日程で、標記のワークショップを開催しました。ここでの中心的手法でもある光電子ホログラフィーや蛍光X線ホログラフィーは、三次元原子像を一義的に求めることのできる手法として認識されていますが、もう一つの特徴は、数nm領域の局所構造を解析できる点です。従って、本ワークショップでは、「中距離局所構造」というキーワードを用い、今後どのようなサイエンスを展開できるのか、を意識的に議論しました。プログラムには、ホログラフィー関連の手法の講演だけでなく、X線や中性子線の先端施設の紹介や、金属ガラスセン



ター結晶作製ステーションの成果も含む材料開発に関する発表も含め、原子分解能ホログラフィーの適用がブレークスルーをもたらすであろう研究対象についての議論を行いました。多くの幅広い分野の研究者に参加してもらい、それぞれの立場からの多くの意見を頂戴しました。このような活動は、今後の我々の研究の方向性を決定する上で重要なものとなります。本ワークショップの成果は、日本表面科学会のe-journal of Surface Science and Nanotechnologyにプロシーディングスとして掲載される予定です。

窒化物半導体による 低炭素社会実現への可能性を求めて

松岡 隆志

低炭素社会の実現のために、省エネルギーおよび新エネルギーの開発が求められています。青色発光ダイオードで知られている窒化物半導体を用いて、200GHzまでの高速動作や600℃以上での高温動作の可能なトランジスタが報告されています。新エネルギーの開発としては、太陽エネルギーを利用した水分解による水素発生や、太陽光の全波長域をカバーできる太陽電池作製の試みがなされています。

当研究室では、窒化物半導体を構成する主化合物の一つである窒化インジウム (InN) の研究を進めています。この材料は、窒化物半導体中で最も長い波長で発光します。現在の広い波長間隔の波長多重通信 (C-WDM) を凌駕できる密な波長間隔の波長多重通信 (D-WDM) 用光源としての半導体レーザを目指しています。窒化物半導体を含む化合物半導体は、通常、大気圧以下での気相中で結晶成長されます。InNは従来からある材料に比べてはるかに蒸気圧の高い材料であり、成長が困難でした。独自に加圧下で成長できる装置を開発し (図1)、高品質結晶の成長に取り組んでいます。成長圧力を高めることによって、ピラミッド状から平坦膜成長へと転換でき、膜の緻密化を図ることができるようになりました (図2)。得られた結晶の発光波長の温度依存性を測定したところ、InNは現在通信用レーザの主材料として用いられている砷化インジウムに比べて小さいことも確認でき、D-WDMへの可能性を示すことができました (図3)。最近、成長条件によっては、本来の六方晶構造に立方晶が混在することも判明し、さらなる高品質を進めています (図4)。InNを中心とする材料は、現状のシリコン太陽電池の効率を凌ぐ超高効率太陽電池用材料としても期待されています。ここで述べたInNの結晶性の改善は、これらの発展の可能性に繋がります。さらに、窒化物半導体に代表される極性ワイドギャップ半導体は大きな非線形光学定数を有し、励起子が室温で安定に存在することが知られています。ところが、これら高次光物性を利用した素子応用研究は、現在のところ、多くありません。当研究室では、光導波路やフォトリソニック結晶構造によって物質と光の相互作用を増強し、波長変換素子などの光機能素子を創出し、極微小エネルギーでの量子情報処理を可能にする研究も進めています。

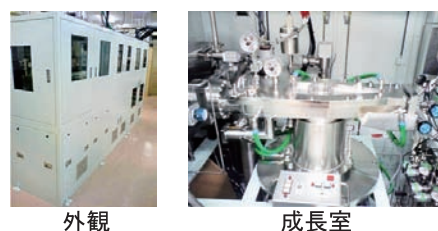


図1
加圧型有機金属気相
成長装置

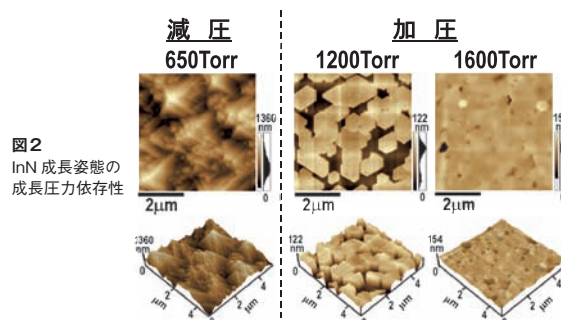


図2
InN成長形態の
成長圧力依存性

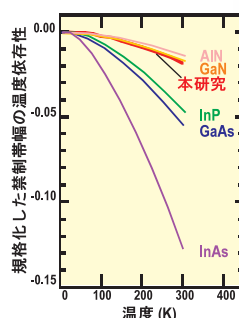


図3
各種半導体の禁制帯幅の
温度依存性

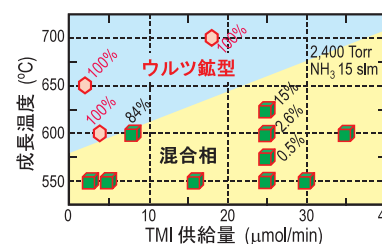


図4
原料供給・成長温度と結晶相との関係

第七回金研若手学校を開催して

阿部 弘亨、永井 康介

恒例の金研若手学校を2010年12月2-3日の一泊二日で開催しました。金研、理学研究科、工学研究科、環境科学研究科に所属する大学院生や研究員、招聘研究者など、総数91名が参加し大変盛況でした。プログラムは講義とポスター発表から構成され、今回は原子力をテーマとして著名な研究者による講義を行いました。マルチスケールモデリング (ORNL R.E.Stoller 博士)、原子力におけるアクチノイド化学と物質科学 (京大 山名教授)、核融合炉材料研究と国際協力 (CEA P.Garin 博士)、電子照射によるナノ物質創成 (阪大 保田教授) について活発な質疑討論が繰り広げられました。また、ポスターでは、通常の発表に加えて初の試みとしてショートプレゼンテー

ション (持ち時間2分) を行いました。面白く発表する人、途中までしか話せなかった人など笑いもあり、リラックスした雰囲気でのプレゼンでした。一転、ポスター発表では会場が活発な議論で満ち、若い科学者の行動力と活発さが大変印象的でした。詳しくはホームページ (<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~wakate2010/index.html>) をご覧ください。



金研ワークショップ 「新素材開発と工程制御・品質管理に向 けた分析・解析技術」開催報告 我妻 和明

2010年12月6日-7日に、上記のタイトルで金研ワークショップを開催致しました。本ワークショップは素材開発及び循環型社会へ対応するための新しい分析技術及びその高度化についての講演・討論を行ったものであり、大学及び各研究機関を始めとし、分析技術の高度化を目指す企業からも多数の御参加を頂き、延べ113名の講演者及び聴講者が集う会合となりました。分析に用いる広範な手法とそのメカニズム、それらの応用について、

様々なバックグラウンドを持つ分析分野の研究者が一同に会し、異なる視点から忌憚りの無い討論・質疑応答が活発に交わされました。本ワークショップが御参加を頂いた方々の研究の発展に寄与できれば幸いです。最後に、共催・協賛を頂きました日本鉄鋼協会東北支部、日本鉄鋼協会評価・分析・解析部会、日本分光学会東北支部、及びワークショップの開催にご協力を頂いた皆様に、厚く御礼申し上げます。



アジア計算材料科学コンソーシアム 仮想組織国際会議報告 川添 良幸

2000年に本所計算材料科学研究部門が中心となって発足したアジア計算材料科学コンソーシアム ACCMS は、既に5回の全体会議と2回のワーキンググループ会議を100-250名規模で成功裡に開催し、アジア地区に限らず国際的に認知された幅広い内容をカバーする計算材料科学の重要な学会の一つとして、来年の第6回シンガポール大会に向けた準備を着々と行っています。このコミュニティは、単なる国際会議での交流ではなく、メンバー間での日常的な国際共同研究を基盤とし、アジア地区での計算材料科学に関し着実に業績を挙げてきました。その活動をより一層活性化するため、2006年から、本所を中心とする仮想組織 ACCMS-VO を立ち上げました。仮想組織 VO というのは、計算機関係での特殊用語で、計算機ネットワークによる分散システム統合による仮想的な組織の構築を意味します。VO としての国際会議はその「オフ会議(いつものネットワーク上での計算機利用とメール等による共同研究から外れて、実際に顔を合わせる会議の方をオフと呼びます)」という位置づけになります。計算材料科学センターの業務として、ACCMS-VO を計算機ネットワーク・モデルウェア NAREGI の上に構築し、本所独自の第一原理計算プログラム TOMBO の分散処理環境構築と幅広い啓蒙活動を開始しています。TOMBO は、欧米のソフトウェアに依存している我が国の現状を打破すべく、定式化から独自で超微細構造定数等の「他では計算出来ない物理量の精密算定」が可能なプログラムとしてその利用拡大を図っています。

2010年12月10日から13日にわたり、本所のワークショップ「超大規模計算機シミュレーションによる新物質・材料設計方策の探求」及び水素貯蔵材料先端基盤研究事業 Hydro-Star の国際会議 Workshop on Computational Materials Science on Hydrogen Storage (WCMS-HS) との共同開催で、

ACCMS-VO の第5回会議を開催しました。13ヶ国から、24件の招待講演、31件の口頭発表、55件のポスター発表を得て、120名ほどの参加者間での「オフ会議」としての国際交流を盛んになすことが出来ました。参加者からは、高度な内容の研究発表ばかりで、大変に意義のある国際会議になっているとのお褒めの言葉をたくさん頂戴したことを述べさせていただきます。

最後に、エプソン国際奨学財団、インテリジェントコスモス学術振興財団や本所 ICC-IMR をはじめとして多くのご支援をいただきました。ここに感謝いたします。



Research Index

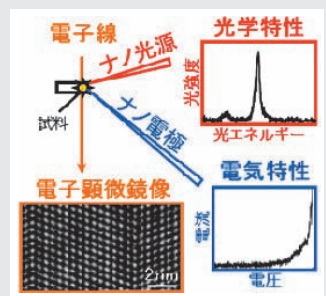
半導体ナノ機能を直視する

発光ダイオードやLSIなどの実用素子の材料として利用されている半導体結晶はナノスケールで局所的に原子配列の乱れた構造(格子欠陥・ナノ構造)をふくみ、それらは発光や電気伝導などの結晶固有の物性に影響を与えます。したがって、高機能な半導体素子を得るためには欠陥・ナノ構造の機能の制御が欠かせません。それには、個々の欠陥・ナノ構造の機能を評価する必要があります。

私たちは、原子配列を直視評価できる透過電子顕微鏡をもちいて、顕微鏡観察と同時に、観察したナノ領域の光学特性および電気伝導特性をその場で評価する装置の開発を世界に先駆けて進めています。たった一つの欠陥へ選択的に光照射してその光学特性を調べたり、たった

一つのナノ構造へ選択的に電流を注入してその電気伝導度を調べたりできます。この手法により、個々の欠陥・ナノ構造の機能が明らかになりつつあります。

これからも、ナノ機能評価を進めて、半導体欠陥・ナノ構造の制御によって材料を高性能化する・新しい機能を積極的に利用する欠陥制御科学を展開していきます。



(大野 裕)

編 | 集 | 後 | 記

皆さんは仙台の甲冑碑をご存じでしょうか? 戊辰戦争において仙台藩の命を受け亡くなった1260名の藩士を祀るため明治10年に仙台藩の有志によって建立されました。ひょんな事から、私たち(金属ガラス総合研究センター)は仙台市の委託を受けて甲冑碑修復のための調査を行うことになりましたが、明治10年と言う時代背景から説明が出来ない問題が幾つか出てきて難儀しております。紙に書かれたとおりには歴史は進んでいなかったと言う事だと考えております。しかし本誌が当時のハイテク技術の集大成であることは間違いありません。面白い調査研究ではありますが、本来の自分の仕事とあまり関係ないことが残念です。なお、甲冑

碑調査修復には既に多くの方々の協力を得ております。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

さて、はやいもので、編集後記を書くのもこれが2度目になります。広報の仕事も甲冑碑の調査のように楽しくてきたと実感しております。これも、ひとえに広報に携わっておられる先生や事務の皆様のおかげであると感謝しております。(横山 嘉彦)

残念ながら甲冑碑の裏面に藩士の名前は刻まれていませんでした。



東北大学金属材料研究所

発行日: 2011 vol.64 平成23年2月発行
編集: 東北大学金属材料研究所 情報企画室広報担当
〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1
TEL: 022-215-2144
pro-adm@imr.tohoku.ac.jp
http://www.imr.tohoku.ac.jp/