

Kinken



IMR NEWS

vol.68
2012 SUMMER

CONTENTS

トップメッセージ

所長 新家光雄

研究室紹介

原子力材料物性学研究部門
分析科学研究部門

センター紹介

量子エネルギー材料科学国際研究センター

研究最前線

材料科学における元素戦略
ナノ構造体を利用して結晶シリコン太陽電池の高効率化に成功

金研物語

計算材料学の旅立ち

金研ニュース

計算材料科学研究拠点 第2回シンポジウム報告
LC-IMR 第2回ワークショップ報告
金研ワークショップ「素材製造プロセスおよび
新素材開発の迅速化・高度化に資する分析・解析技術」報告
附属研究施設関西センター ものづくり基礎講座第26回技術セミナー
「金属ガラス」研究開発の最新動向

Research Index

ボロノイ多面体解析

編集後記



TOHOKU
UNIVERSITY



所長
新家 光雄

新生金研を目指して

東日本大震災から1年以上が経過し、2年ぶりに東北大学では、伝統のある学位記授与式および入学式が開催されました。現在も東北大学は復興段階にあるものの、このような行事が出来たことは、通常の大学環境が整ってきたからこそだと実感し大変嬉しく思います。

東北大学は、病院長であった里見進先生が本年4月から総長に就任され、就任の挨拶で述べられた2つのキーワードである「ワールドクラスへの飛躍」と「東北復興の先導」を掲げ、新執行部体制のもと、それらを実践すべく新たな東北大学の展開に向け船出を開始しました。既に発足している東北大学災害復興新生研究機構に加え、東北メディカル・メガバンク機構および概算要求による大学附置研究所としては我が国で40年ぶりに設立されたという災害科学国際研究所が新たに発足し、東日本大震災からの復興に向け貢献することが大いに期待されています。災害科学国際研究所は、寄附研究部門を含め7部門からなる大きな研究所で、国立大学附置研究所・センター長会議へ東北大学から7つ目の研究所として参加が認められました。

金研におきましては、本年1月に所長選挙が行われました。私が再選され、本年4月より2期目(任期2年)の所長業務を開始しております。副所長には引き続き、高梨弘毅教授と古原忠教授が就任しております。また、金属ガラス総合研究センター長に牧野彰宏教授、計算材料学センター長に高梨弘毅教授、テクニカルセンター長には齊藤今朝美技術職員が新たに就任しました。

以上のように、金研の運営に関わる執行部体制は、若干の変化はありつつも継続されていますが、これまでの様々な事項を精査・整理し、平成28年の金研創立100周年を1つの目標として、新たな基軸を構築し、新生金研の確立を目指し邁進して行く覚悟しております。金研創立100周年に向けて実行委員会も活動を活性化しており、情報企画室では広報記念品グッズを作製し宣伝を強化しています。(写真1)



写真1：広報記念品グッズ

特筆すべき本年度4月から発足した金研が大きく関与する災害復興のための大型事業として、仙台マテリアルバレー構想(仮称)の一環である東北大学産学連携材料開発拠点および牧野彰宏教授がセンター長として推進する超低損失ナノ結晶軟磁性材料研究開発センターがあります。東北大学産学連携材料開発拠点は、経済産業省から補助を受けて行われる事業で、金研、多元研、流体研、本部が連携して研究を行い革新的材料の実用化を目指します。新生金研に向けて大きな戦略の1つになると期待しております。

さて、共融会主催の金研花見が2年ぶりに宇田聡研究室の世話人のもと、仙台市太白区にある三神峯公園で開催されました。一昨年は雨天のため屋内で、昨年は震災による中止でした。私が所長就任以来、初めての屋外で行う花見で、三神峯公園到着時は桜の開花状況は3分咲きでしたが、当日は晴天で暖かく、花見開始から時間が経つにつれ、さらに開花していたような印象でした。来年度の金研花見は、桜が満開の状態で行われることを期待しています。(写真2)



写真2：共融会主催の金研花見

最後になりましたが本年3月には、川添良幸教授の定年退職に伴う最終講義が金研講堂で開催され、同教授(現在、東北大学名誉教授、未来科学技術共同研究開発センター研究支援員)、同じく本年3月末で任期満了を迎えた福原幹夫准教授(現在、電磁材料研究所)、昨年9月末で定年を待たずに退職された小林典男名誉教授の金研恒例送別会が秋保温泉にて1泊で行われ、有意義な送別会となり大いに盛り上がりました。また、笹森賢一郎前テクニカルセンター長におかれましても、本所への支援を長年にわたり全うし退職されました。退職された方々には金研に多大な貢献をして頂き、この場を借りて御礼を申し上げます。

最後になりましたが、今後とも皆様のご支援・ご鞭撻を何卒宜しくお願い致します。

研

究室紹

介

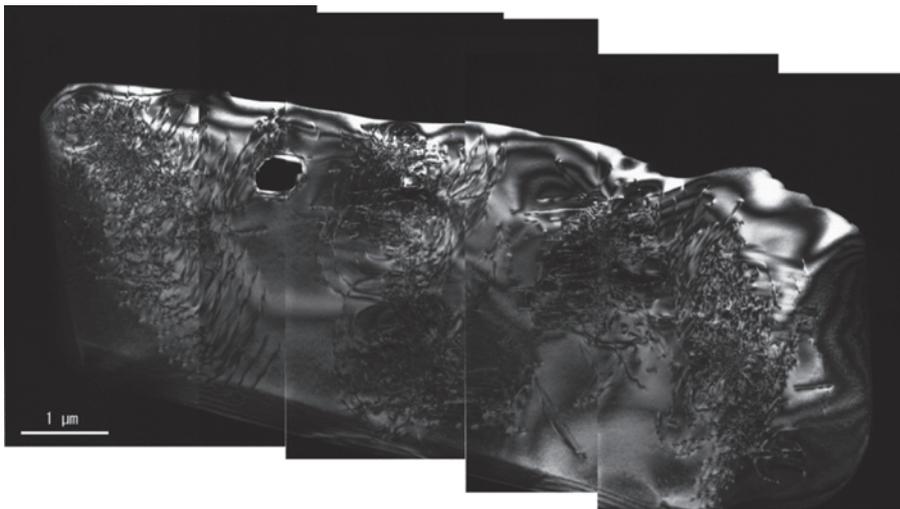
セラミック材料に対する中性子重照射効果(機械的性質と微細組織変化)

原子力材料物性学研究部門
四竈 樹男

セラミック材料は高強度で耐火性に優れ、原子力など高温極限過酷環境で使用される可能性を秘めた材料であり、また、環境モニタリングに適した機能特性を持っており、核融合炉、次世代原子炉更には、高レベル廃棄物閉じ込め用材料として注目されています。しかし、一般的には高エネルギー中性子などによる重照射によって構造が大きく変化し、結果として材料として最も重要な機械的性質が著しく劣化することが課題となってきました。セラミックスの実用化で最も野心的な核融合炉開発においては、これら照射による劣化を考慮し、照射損傷量として1dpa(すべての構成原子が一度はじき出される)程度を限界として設計開発が進められています。しかし、原子力システムの健全性、効率性を確保して行くには、セラミック材料が10-100dpa程度まで、その機械的性質を保持することが必要です。特に、近年注目を集める高レベル廃棄物閉じ込めでは100dpaを大幅に上回る照射効果に耐える必要があります。

本研究では、1970年代よりほとんど研究が進められていなかった10-100dpaまでの中性子照射によりセラミック材料の機械的特性変化を日本原子力研究開発機構と共同で検討しました。このように重照射された材料は、ほとんどの高速炉が停止した現在、世界ではほとんど手に入れることができないのが現状です。対象セラミック材料としては比較的照射効果により機械的特性が劣化しないと考えられている等方性結晶構造を持つものを中心に選択し、その機械的特性をマイクロビッカース硬度測定と亀裂進展挙動より評価し、微細構造組織変化を電子顕微鏡を用いて検討しました。

その結果、複数のセラミック材料が100dpa程度までの中性子重照射に対して機械的特性が劣化しない、もしくは靱性を一部改善することを見いだしました。これはセラミック材料の高出力密度原子力システムへの適用に道を拓くものです。この強靱な耐照射特性の基となる微細組織変化を検討した一例をスピネル($MgAl_2O_4$)について図に示します。100dpaまで照射されたスピネルでは積層欠陥が不均一に分布するのが観察されるのみで、金属材料などで観察される転位ループやボイドなどは全く見いだすことができませんでした。体積膨張の原因となるボイドが生成されないことが寸法安定性に結びついていると考えられ、不均一積層欠陥が亀裂進展の妨害物として働くことにより、靱性の改善が図られていると考えられます。



図：100dpa程度まで中性子照射された $MgAl_2O_4$ スピネルの微細組織。不均一に分布する{110}面上の積層欠陥のみが観察され、ボイド、転位ループは全く見いだされない。

■原子力材料物性学研究部門URL <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~wshikama/>

レーザーブレイクダウンプラズマ を用いた材料評価

分析科学研究部門
我妻 和明

素材産業の生産プロセスでは、製造工程に組み込まれてオンライン/オンサイトで分析情報を提供できる分析方法が重要な役割を果たしています。本研究部門では、このような用途に最も適する原子スペクトル励起源として、レーザー照射による固体表面近傍の絶縁破壊現象を利用した分光分析用プラズマの研究を行っています。

高いエネルギー密度を持つレーザー光を試料表面に収束照射することにより、表面近傍のガス体をプラズマ状態とすると、その中で試料のサンプリング、原子化、励起・電離が同時に起こることが知られています。この現象を用いた分析法は、一般に、試料原子から発せられる原子発光スペクトルが測定対象となることから、laser-induced breakdown emission spectrometry (LIBS) と呼ばれています。図1はLIBS測定装置の構成を模式的に示したもので、装置はレーザー光源と分光器およびそれらを制御するための電子機器から組み立てられます。プローブとしてレーザー光を用い原子発光を検出するため、いずれも空气中を透過する光を扱うことになります。非接触で遠隔での測定、リモートセンシングが可能な測定技術です。

高いエネルギー密度を有するレーザー光が固体表面に照射されると、表面近傍にあるガス体の電子密度が上昇し、電子衝突が連鎖反応として起こるため、ガス原子/分子は一部が電離して弱电離気体となります。この現象をブレイクダウンと呼び、レーザー誘起プラズマ生成の引き金となります。図2はブレイクダウンが起こった瞬間を捉えた写真です。それと同時に、試料表面ではレーザー光の照射により試料原子の熱蒸発が起こり、飛び出した試料原子はプラズマに取り込まれます。この現象をレーザーアブレーションと呼び、LIBS法においては試料原子のサンプリングに利用されます。

試料表面に対するレーザー照射は不連続パルス状に行われ、生じるプラズマも不連続に生成されます。プラズマは空間的・時間的に不均一なものであり、発光スペクトルの測定は単発プラズマの生起から消滅までの過渡現象を記録していると考えられます。図3はプラズマ中の試料原子の発光強度の空間分布を測定した分光像です。このように、プラズマから発せられる試料原子の発光強度はプラズマ部位により変化するため、分析応用では測光条件の最適化が重要となります。本研究部門では、空間分解及び時間分解測定法を採用して、プラズマの発光過程の詳細な研究を行い、雰囲気ガスの種類やガス圧力がその特性を決める主要な実験因子であることを明らかにしました(図3)。

鉄鋼等の素材生産現場においては、より高速な応答性能を持つ分析方法が求められており、LIBS法の研究開発は特に推進されるべき課題であると考えられます。今後とも、当該分野の研究を推進いたします。

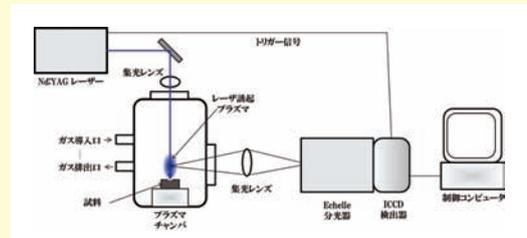


図1：レーザーブレイクダウン発光分析法の装置構成

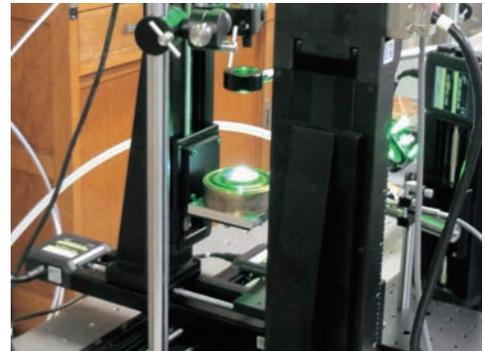


図2：レーザーブレイクダウンプラズマ生成の瞬間

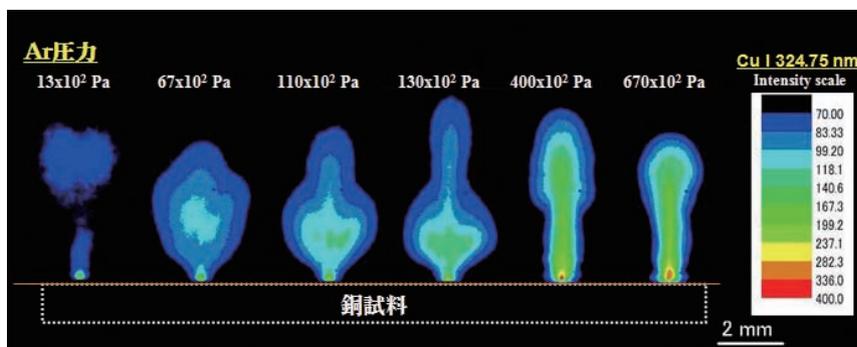


図3：プラズマガス（アルゴン）の圧力に依存した銅324.74nmの発光強度の空間分布の変化。ガス圧力により強度分布が異なり、最適な観測位置があることがわかる。

■分析科学研究部門URL <http://wagatsuma.imr.tohoku.ac.jp> wagatuma@imr.tohoku.ac.jp

量子エネルギー材料科学 国際研究センター

センター長 四竈 樹男



図：昇温脱離実験装置

本センターは、原子炉を用いた材料、核燃料の研究のための全国共同利用施設として、国立大学のみならず私立大学、独立行政法人等の利用を受け入れています。本センターは、大学関連では国内唯一の大型試験研究炉利用施設、高レベル放射性同位元素（照射済み燃料、材料を含む）取り扱い施設を有し、先進原子力材料開発を視野に入れつつ、1. 材料研究のための原子炉利用高度化、2. ナノ構造解析による照射効果基礎研究、3. アクチナイド元素関連の物性研究、を主要課題として研究に取り組んでいます。

現在、原子力研究開発分野では、平成23年3月11日の東日本大震災に引き続いて発生した福島第一原子力発電所の事故の復旧支援および原子力システム安全対策の強化のため、日本原子力研究開発機構（原研機構）と緊密に連携を取りながら材料研究施設として寄与できる研究課題を模索しています。一方、今後の共同利用については、原研機構との研究協力を一層強化し、今後重要となると考える若手研究者、専門技術者育成にも積極的に関わる（経済産業省原子力人材育成プログラム、夏の学校など）と同時に、今後の展開に柔軟に対応するため、原研機構の原子炉を用いたこれまでの全国共同利用の枠組みに加えて幾つかの新しい取り組みを始めています。その一つは、国際研究協力の推進であ

り、特に国際ネットワーク化が不可欠な原子炉利用では、欧州拠点との連携強化のためベルギー国原子力研究所（SCK/CEN）との研究協力（MICADO計画）、米国との間ではオークリッジ国立研究所との研究協力を進めています。また、超ウラン元素関連の研究では、フランス国原子力庁（CEA）グルノーブル研究所、EU超ウラン研究所（ITU）との研究協力の緊密化を図っています。一方、国内においては大学共同利用の新たな形態として双方向型共同利用のあり方を模索しており、核融合研究の分野において、核融合科学研究所や拠点大学（筑波大学、九州大学、富山大学など）の複数の研究センターの研究設備を結びつけた、新たな学際領域的な研究組織の構築に着手しています。図は、この双方向型研究のために本センターに新しく設置された、プラズマ対向材料中の水素同位体保持特性を調べる昇温脱離実験装置（Thermal Desorption Spectrometer（TDS））であり、核融合炉実用化に向けた、照射材料と水素同位体との相互作用に関する貴重なデータ取得が期待されています。

この他にも、「中性子照射超伝導材料の高磁場、極低温下での物性に関する研究」、「水素化物中性子吸収材を用いた革新的高速炉炉心の実用化研究開発」など、国の施策に対応した外部資金による設備整備、研究開発を積極的に進めています。



材料科学における元素戦略

金属組織制御学研究部門 古原 忠

最近の材料科学の研究／開発では、持続可能社会システムの構築、あるいは加工貿易立国としての日本の資源戦略の観点に立って、サステナブル、低炭素社会、元素戦略をキーワードとした研究組織が発足するとともに、関連する領域での大型研究プロジェクトが推進されています。その背景には、平成18年度から始まった「第3期科学技術基本計画」の「ナノテク・材料分野」において「資源問題解決の決定打となる希少資源・不足資源代替材料革新技術」が「戦略重点科学技術」として位置付けられたことがあります。翌年度には、文部科学省が「元素戦略プロジェクト」、経済産業省/NEDOが「希少金属代替材料開発プロジェクト」をそれぞれスタートさせましたが、文科省の「元素戦略プロジェクト」では、豊富で無害な元素／物質による貴金属・希少元素の代替材料の研究、材料のユビキタス化など戦略元素の有効機能の高度活用、元素の有効利用のための実用材料設計技術が対象となり、3年間に計16件が採択、推進されました。平成22年度からは、JSTのCREST/ さきがけの研究領域「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」/ 「新物質科学と元素戦略」がそれぞれ発足し、元素機能を基礎から解明し、構造・機能・反応のデザインによる革新的機能の創出を目指す研究が金属、セラミクス、有機材料など幅広い課題で行われています。

代表的な構造用金属材料である鉄鋼材料では、実用で要求される高い機能（特に強度や延性、靱性といった力学特性）を得るために多くの合金元素が添加されますが、その中では希少元素（レアメタル）がたくさん含まれています。我が国では素材としての鉄鋼が毎年1億トン前後製造されており、昨年度は世界全体で15億トンにも達しています。その中で1%添加されていたとしてもその量が膨大で、表1に示すように実際には日本で使われるレアメタルの大半が鉄鋼業で使用されます。現在、私たちのグループは、鉄鋼における軽元素の持つ元素機能を極めレアメタル利用の低減に向けた研究を展開していますが、このような研究の推進には、材料の構造における原子や電子の振る舞いを理解することが必要で、それには最先端解析技術や計算科学の活用が大変大きな役割を果たします。

今や、電子顕微鏡や高性能ワークステーションは汎用機器として用いられるようになっていますが、材料中の微量かつ局在化した元素の状態を捉えるのはまだまだ困難です。このため、放射光や中性子利用の大型研究施設や、先般の事業仕分けで「2位じゃだめなんですか?!」という発言で一躍脚光を浴びた次世代スパコン「京」の活用が大いに期待されています。今年度から開始される新元素戦略プロジェクトでは、「磁石材料」「触媒・電池材料」「構造材料」「電子材料」の対象分野で希少元素の機能・挙動解明に基づいた代替材料を創出するため「電子論」「物質創製」「機能評価」の研究者がチームを組んだ拠点研究が推進される予定です。また「産」と「学」の対話の中で基盤的研究を行う JST「産学共創基礎基盤研究プログラム」も上記の材料分野で並行して行われています。今後の持続可能社会の構築においては、日本の強みである「ものづくり」の優位性を維持しさらに発展させるために、基盤研究の裾野を広げた研究者育成と異分野融合／産学連携の推進を通じて新しいブレークスルーとなる研究／技術開発を行っていくことが重要です。

元素	鉄鋼業での消費量 A(千トン)	国内総消費量 B(千トン)	鉄鋼業での消費の 占める割合 A/B (%)
Si	365	609	59.9
Mn	358	618	57.9
Cr	591	612	96.5
Ni	90	230	39.1
Ti	3.0	13.1	22.1
Mo	27.8	33.7	82.6
Nb	7.1	7.3	97.8
V	1.89	2.26	83.7
W	13	80	16.2
Zn	322	522	61.7

表1：鉄鋼業での主要元素の年間使用量と国内消費に占める割合。注) 経産省指定レアメタルを黄色のハイライトで示す。(出典:工業レアメタル第22巻「2005年統計」)

ナノ構造体を利用して結晶シリコン太陽電池の高効率化に成功

結晶物理学研究部門 宇佐美 徳隆

格子定数の異なる半導体のヘテロエピタキシャル成長では、ナノスケールの島状結晶が自己形成される場合があり、量子ドットの簡便な作製技術として古くから研究が行われていました。量子ドットの形成は、歪みの弾性緩和を伴うため、量子ドットが周期的に形成されると、周期的な歪み分布を伴うことになります。

私たちは、この歪み分布によって、溶液に対するエッチング速度が周期的に変調されるのではないかと着想しました。実際に、シリコン基板上に成長したゲルマニウム量子ドット積層構造(図1)を、ある溶液を用いてエッチングを行ったところ、二次元ナノフォトニック結晶ともいえるべき、量子ドットの大きさを反映したナノスケールの微小な凹凸が試料表面に現れました(図2)。この現象を制御すると、ナノフォトニック結晶と量子ドットが結合した極めてユニークなナノ構造体を、リソグラフィを利用することなく大面積に作製可能となります。

このようなナノ構造体は、さまざまな応用が考えられますが、私たちは、結晶シリコン太陽電池の表面にナノ構造体を融合することをまず試みました。ナノ構造体を利用することで、①ナノ構造体と光の強い相互作用による光吸収の増大、②ゲルマニウム量子ドットによる吸収可能波長域の拡大、③ゲルマニウムとシリコンのヘテロ界面による電子と正孔の空間分離を活用したキャリア再結合の抑制により、光とキャリアを有効に利用できると考えたからです。実際に太陽電池を試作したところ、光電流密度の増加により、エネルギー変換効率を増加できることを実証できました(図3)。この成果は、ナノ構造が、実用太陽電池の高効率化に有用であることの初めての实証例といえます。作製した太陽電池は、量子ドットを利用した太陽電池の特性を支配する要因を調べる格好のモデルともなり、超高効率太陽電池への応用を目指した基礎研究にも活用したいと考えています。

本研究成果をベースとした研究提案は、科学技術振興機構・先端的低炭素化技術開発(ALCA)に採択されました。私たちは、先端分析研究部門と京都大学化学研究所と連携した研究体制で、ALCAプロジェクトを強力に推進してまいります。



図1: シリコン基板上に成長したゲルマニウム量子ドット積層構造の断面透過型電子顕微鏡写真(先端分析研究部門・木口賢紀准教授による)

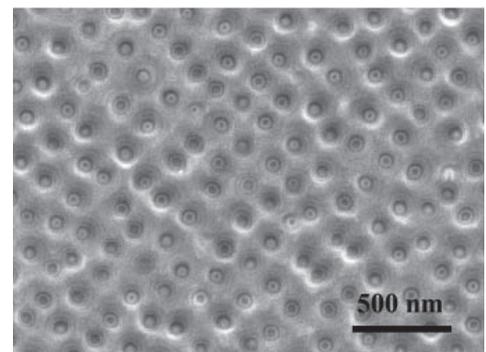


図2: エッチングにより形成したナノフォトニック結晶の表面の走査型電子顕微鏡写真

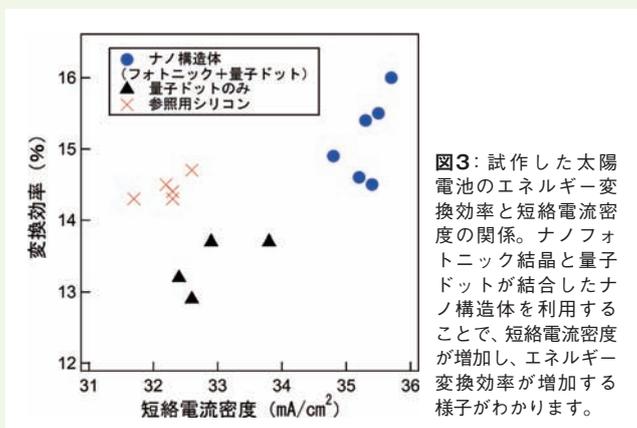


図3: 試作した太陽電池のエネルギー変換効率と短絡電流密度の関係。ナノフォトニック結晶と量子ドットが結合したナノ構造体を利用することで、短絡電流密度が増加し、エネルギー変換効率が増加する様子がわかります。

金研物語

先達との
出逢い

きんけんものがたり

第二部

計算材料学の旅立ち

東北大学未来科学技術共同研究センター

川添 良幸

1. 始まり

今からちょうど22年前、平成2年5月に、仁科先生に呼ばれて金研に雇っていただいた時に、私に与えられた研究テーマは、「計算機シミュレーションによる新材料設計と材料データベース構築」で、出迎えてくれたのは、中名生、伊藤、和田の3名の志願技官でした。彼等は仁科先生等の誘いで従来の金属加工等の業務を離れ、材料データベース構築という全く異なる新たなテーマに参加することになった人達でした。私を入れた4名の専任の職員と、木戸助教授等が中心となって、熱心にこの幅広いテーマで何が出来るのか、そのためには何が必用なのか、を考えました。

当時の将来計画委員会で、これだけの大きなテーマを成功裏に実施するには、3部門規模の体制が必用であるという結論となり、不足する2部門は現在の計算材料学センターと寄附研究部門を設置して賄うということになりました。これらの立ち上げは、自分の部門さえまだ神山助手1名であったのですが、川添が担当するしかありませんでした。何せ東北大学にはまだ寄附講座も寄附研究部門もなく、その規程を作ることから始めました。ナノ学会という名称も

私が主張して作ったものですが、計算材料学という言葉も私の造語で、それにもこだわりました。それは、短い程内容が広い、という私の持論によるものです。当時は何も無かったのですが、今では、一般に計算材料学と呼ばれるようになりました。しかし、この1文字の差が大きいのです。私は、やはり、自分の卒業した素粒子論・原子核理論が一番好きです。何かを論ずる、というレベルの研究こそ大学でやるべきテーマであると信じています。次のレベルが物理学等の広い範囲を網羅する分野別学問で、何とか科学とか何とか工学となれば、既に確立した分野を対象とするレベルになります。

計算材料学で、必用となる機材を検討すると、直ぐに専用のスーパーコンピューターがなければ何も出来ないことが明らかになりました。早速、2番目に参加してくれた大野助教授と概算要求書作成に当たり、新たなセンター設置を試みました。しかし、当時は大学附置の研究所には3施設しか認められておらず、断念せざるを得ませんでした。日本アイ・ビー・エム社からの寄附でいただいた中型汎用計算機とワークステーションを使って所内のネットワーク環境を整備しながら、独自の

第一原理シミュレーション計算プログラムの構築を始めました。当時は、フラーレンが発見されたばかりで、それに対する精密シミュレーション計算は大変困難でした。我々は炭素の様な軽い元素に対しては従来の標準的バンド計算で用いられる擬ポテンシャルと平面波展開より、原子軌道と平面波で全電子を扱う方が得であると気づき、定式化から数値計算用プログラム作成までを開始しました。このシミュレーション計算プログラムは、現在、TOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals *ab initio* Simulation Package) と呼ばれ、東北大学の知財に認定されるまでになりました。こうして研究成果も出始めた頃の平成4年に、やっと文部省から金研の概算要求が認められ、センターは設立出来ないが、スーパーコンピューターの買い取りが出来ることになりました。2年間の国際競争入札過程を経て、1ノードの処理速度が8GFLOPSで3ノード、トータル24GFLOPS(カタログ値)の水冷の日立S-3800システムが選ばれました。当時、世界ランキング26位に入り、届いた証明書に大喜びたのを覚えています。CPUのアドレスが31ビットだったため、メモリー量は2GBに制限され、それに比

べCPUの処理速度が速く、メモリーネットワークの状態でした。現在は、全く逆で、メモリーは64ビットアドレッシングで実質無限大に積めますが、CPUは数年来クロック数が上がっておらず、処理速度の方が追いつかない状態になっています。

2. 安定運用に向けて

初号機は買取でしたので、数年経つと他に比べて見劣りがして来ました。電気代の方が本体価格より高くなると、さすがにそれ以上の延命は困難でした。しかし、2号機の導入は至難の命題でした。安定した計算機利用環境を確立するため、レンタル化の概算要求を行いました。これはある意味、無限大の予算要求ですので、生やさしいものではありません。膨大な資料作成と頻繁に計算材料学の重要性説明を行って、認められるまでに数年かかり、平成12年度に2号機のSR8000導入に成功しました。空冷のCMOS機で、64ノードで921.6GFLOPS、20倍の処理能力と20倍のノード数となり、膨大に膨れあがりつつあったジョブ処理に対応できる最適なシステムとして歓迎されました。3号機は51ノードで7.5TFLOPSを出せる空冷のSR11000になり、さらに、この4月から稼働を開始した第4号機は、水冷で300TFLOPSという処理速度(リンパック値)、42TBのメモリー量ですので、この約20年で約1万倍の高速化と2万倍のメモリー量増大が達成

されたこととなります。驚くべき技術の進展です。

図1. 4月16日に稼働を開始したばかりの本所の4代目スーパーコンピューター SR16000。10筐体並べるレイアウトは私の主張で、途中で変更したため、日立製作所には、1400本以上もある光ファイバーの束をもう1回作り直してもらうことになってしまいました。



一方、施設化の方は、途中で公式な施設数が3という制限はなくなったのですが、スーパーコンピューターがあるから良いのでは?と言われ、公式な施設の概算要求はなされず、他の新規案件が優先されたまま、現在に至っています。年間約7億円という膨大な予算が認められているのですから、早くきちんとした施設に格上げして欲しいものです。幸い、本年4月から佐原准教授が専任となって活躍していますので、従来の責任部門のみでの運用より格段にサービス体制が改善するとは思いますが、全国共同利用施設としてのサービス体制充実にはまだまだ人手不足です。より充実した人員体制実現を図っていただきたいと思います。

3. これまでの研究テーマ

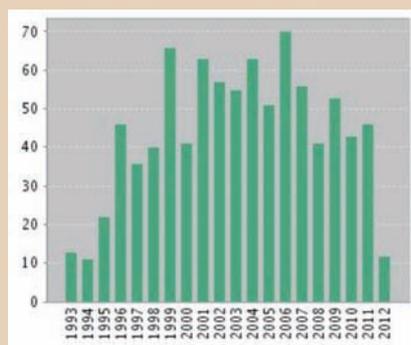
スーパーコンピューターとは言っても、計算機のハードはただの箱です。借り物ではなく、他では出来ない高度な処理を可能とする真に良いシミュレーションプログラムを作成し、実行しない限り、良い成果は得られません。画竜点睛とでも言うべきものです。我々は最初、TOMBOによって、当時、C₆₀には原子を内包出来ないと言われていたのを、本学のプラズマの実験家である佐藤教授等と一緒にC₆₀を加速して原子にぶつけることで可能であることを示しました。この成果は、当時、静的な物理量計算に止まっていた物性物理の世界で、トンボの様に軽く飛ぶTOMBOでは、第一原理分子動力学を実行するという離れ業が出来る、と高い評価を得ました。

自分が使い、良く知っているものでなければ、他の人には勧められない。そのため、スーパーコンピューターシステムの設計、導入、運用から、シミュレーションプログラム作成、実行と全てに関わりました。本所以前は本学情報処理教育センターで学生教育専門の計算機の運用に当たっていただけだったので、システム関係には既に10年の経験がありましたが、さらに、東北大学情報シナジーセンター長や本部事務機構情報部長を併任し、学内外の情報サービス全般も経験に加えて、本所の計算機サービスのグレードアップに努めました。

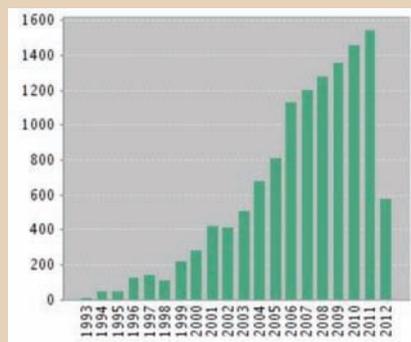
最近の計算材料学研究部門の出

版論文数と引用回数を、Web of Scienceで検索した結果を図2に表示します。数が多いのは共同研究者がたくさんいるからですが、引用回数が増加している一方で、自己引用が少ないことは自慢です。この中でも、図3に原子構造を示す、京都大学の北川先生と共著の金属-有機構造体でのアセチレンと二酸化炭素分離のNature論文は、600回を超える引用回数になっています。次に引用回数が多い論文は、ポーランドのParlinski教授と共同研究した成果である格子振動の第一原理計算法に関するPRLですが、この手法は今では理論計算の標準となっています。川添は、平成2年までは、教養部で物理の先生を生業としていましたので、このような世界には全く関係ありませんでした。あこがれの金研に入れていただき、最初にとまどったのは、辺りの教授の皆さんの素晴らしい業績でした。せっかく買ったもらったスーパーコンピューターですから、最大限に活用し、その元を取れるだけの業績を挙げたいと本気で仕事をしていました。プログラムが完成するまで徹夜で頑張ることが出来たのは若かったからですが、業績ゼロのままでは終わりがたくなかったからでもありました。

図2. 計算材料学研究部門の出版論文数と引用回数。平成2年にスタートした当時は、実験部門を引き継ぎ、合金設計制御工学研究部門を名乗らざるを得ず、辺りからも何をしているのか不明で、大変苦労しましたが、途中で計算材料学研究部門と名称変更出来た頃には、もう既に業績も挙げられるようになっていました。



計算材料学研究部門の年ごとの出版論文数。何もなかったところからの出発でしたが、数年で立ち上がりました。年間50報で打ち止め、インパクトファクターの大きい雑誌にのみ掲載することにし、最近では平均が3を超えています。



引用回数は、5月15日現在、総計12,598回ですが、自己引用を除いた11,070回が重要です。

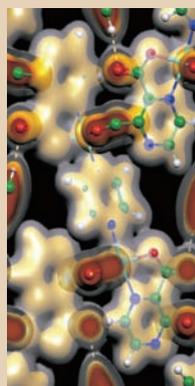


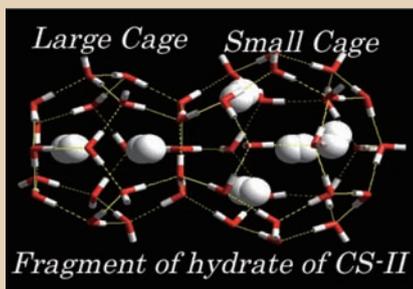
図3. アセチレンと二酸化炭素を分離出来る金属-有機構造体。有機物合成の基盤材料となるアセチレンは二酸化炭素とほぼ同じサイズのため分離が困難でした。それがこのMOFによって容易に分離でき、工業的にも大変役に立つ成果となりました。

計算材料学の学問内容は、従来の実験主体の材料研究を基盤から考え直すための理論の確立と、それを実際の実用材料に適用するための大規模シミュレーション計算の実行で

す。まず、本所の多くの実験部門と仲良くさせていただき、そのご要望に対応したシミュレーション計算を実施し、共著の論文を出版し始めることが出来ました。

現日立製作所の橋詰さん(当時、本所助教授)との分子エレクトロニクス研究が、我々の大規模予算獲得の最初でした。独自の電子伝導計算プログラムを開発し、他では出来ない高精度のシミュレーションを実行しました。現在もTOMBOに結合し、継続的テーマとして実施中です。水素貯蔵材料と省インジウムITO探索に関する2つのNEDOプロジェクトは、この2月に終了するまでの5年にわたって、多くの人員が関わって研究に当たりました。図4に、究極の水素貯蔵材料として我々が提案しているクラスレート水和物の構造を示します。何故、究極なのかというと、このクラスレート水和物が解け、水素が放出されて酸素と結合してエネルギーを生み出すと、残るのは水だけになるからです。現在、数学の小谷教授と実験の阿尻教授と実施しているCRESTは、数学者が代表の最初のプロジェクトで、 sp^2 結合のK4対称性を有する新3次元炭素結晶の発見と存在可能性追求、実験家による安定化策の統合的な研究として大変興味あるテーマとなっています。多くの研究者がグラフェンの様な既にノーベル賞受賞となった対象を研究しているのに対し、我々は独自の分野を切り開こうと必死に努力中です。

図4. 究極のクリーンなエネルギーキャリアである水素輸送用のクラスレート水和物。自然界にはメタンガスを含むハイドレートが大量に存在し、次世代エネルギー源と考えられています。メタンガスの代わりに水素分子の貯蔵可能性を検討しています。もちろん、実用化を目指し、出来る限り、常温・常圧での貯蔵材料を探索しています。



4. 国際化とアジア計算材料学コンソーシアム ACCMSの設立

金研で雇っていただいた平成2年、全国共同利用の研究者に外国人を入れて提出したところ、それは別枠で入れられない、と言われてびっくりしたのを覚えています。全国とは日本全国で世界ではない! 世界の金研だったのでは? この後、世界の金研のため、imr.eduドメイン取得に奔走することになります。それは、米国の大学が全てmit.edu、stanford.eduと世界の大学のドメインを所有しているのに対応した状態にしたからです。この業務実現は大変困難だったのですが、幸い、鈴木所長に呼ばれて天皇陛下ご参加の晩餐会に出た、という情報を米国のドメイン管理者に伝えて認めてもらうことに成功しました。計算機シミュレーションによって新材料を設計すると

いうテーマで、しかも、独自の定式化やプログラム作成を要求すると国内では人材は限られてしまいます。自然と諸外国との交流が広がって行きました。中国復旦大学の顧問教授、インド材料学会の名誉会員等にもしていただきました。このような一見意味のなさそうなことが実は功を奏して、相手方から極めて優秀な人材を派遣してもらえるようになったのが、研究室の一番大きな収穫です。一頃は助教授、助手、ポスドクから学生まで外人ばかりの研究室になりました。こうなると、英語はもうどうでも良くなり、イラン人同士はペルシャ語、北インド人はヒンズー語、南インド人同士はタミール語で話す、という状況になります。新入りには母国語が一番で、スーパーコンピューターの使い方からネットワーク接続まで各国語での入門がなされ、大変に効率的でした。この人達が松島の多国語案内板を作るのに協力してくれたり、インテリジェントコスモスの10カ国語パンフレットの作成も行ってくれました。

平成11年、仙台で開催された東北大学の一大イベントで、国際共同研究の充実が取り上げられました。国際会議とか言っても少人数の外国人の参加に止まることの多い日本で、我々は最初から外国人半分の状態でしたので、我々のアクティビティが認定されました。この機会に、アジア計算材料学コンソーシアムACCMSの立ち上げがなされました。欧米のソフトウェアの利用に止

まることの多いアジア地区で、独自の定式化とプログラム作成、さらにはスーパーコンピューター利用による共同研究推進というコンソーシアムであるACCMSはアジアの研究者に大変歓迎されました。最初は、日頃のインターネット上での共同研究と2年に1回の実際の会議(オフという)でスタートしたのですが、今年度は3回の国際会議が企画されるまでになりました。7月にインド国バンガロール、11月に本所、1月に台湾で開催予定です。特に、仙台での会議は、ACCMS-VO(仮想組織、計算機用語で、インターネット上での仮想的な研究組織を言う)のオフミーティングとして毎年開催されるようになりました。川添は創始者ということで全てに関わっていますが、実行は各国にお願いしています。今後、本所では水関准教授中心の開催となりますので、皆様、ぜひ、ご支援のほど、よろしく願います。

図5. アジア計算材料学コンソーシアムACCMS-VOのオフミーティングの集合写真。10年前に仙台で30名規模で始まった国際会議が、今では毎回100～300名を集めるまでに発展し、本所発のアジア地区の重要な集まりと認識されるようになりました。



計算材料科学研究拠点 第2回シンポジウム報告 計算材料科学研究拠点CMRI 拠点長 毛利 哲夫

計算材料科学研究拠点では、昨年12月6日、7日の2日間にわたって、本所の材料科学国際週間2011との協賛および元素戦略ワーキンググループとの共催の下で、「計算材料科学の展望：構造用材料の機械的性質・耐熱強度における課題克服と産官学連携推進に向けて」を開催しました。産官学からの招待講演、特別講演を含めて18件の講演と、「界面と組織制御」をテーマとした産官学連携シンポジウム、及び、パネルディスカッションという極めて

盛りだくさんの内容で、参加者数も52人を数えました。物性科学や分子科学とは異なり、材料科学の諸課題、特に本シンポジウムで対象にした機械的性質や強度の問題を容易に計算の俎上に乗せることは困難ですが、本シンポジウムを通じて、今後の挑戦に向けた多くの萌芽となる取り組みに接することができました。非常に活力にあふれたシンポジウムであったと思います。関係各位の御努力・御協力に謝意を表します。

LC-IMR 第2回ワークショップ報告 低炭素社会基盤材料融合研究センター (LC-IMR) センター長 古原 忠

低炭素社会基盤材料融合研究センター (LC-IMR) は、平成22年度に省エネルギー・新エネルギー両面での革新的材料創製とその応用展開を通じて低炭素社会実現に向けた研究を推進する目的で発足しました。持続可能社会の実現に向けた材料科学研究の推進、共通課題の解決に向けた融合研究の模索、産業界との研究連携等の活動を行うと共に、ワークショップを開催し、金研での関連研究シーズの紹介、政府関連機関や産業界からの話題提供をいただいています。昨年度は材料科学国際週間の一環として、12月9日に第2回ワークショップ「低炭素社会実現に向けた材料科学」(参加者30名)を開

催しました。その中ではNTT社よりグリーン社会実現に向けた研究開発、東芝社会インフラシステム社よりスマートコミュニティ実現に向けた材料開発の取り組みをそれぞれご紹介いただき、金研側からは、次世代太陽電池用材料、省エネルギーメカニカルデバイス、金属ガラスのトライボロジー応用などについて紹介しました。比較的少人数での会議でしたが有意義な意見交換がなされました。センターでは、研究所の豊富なインフラを活用しながら東北大内外との研究連携を拡大し、金研における材料科学研究の新たな柱となるべく活動を行う予定ですので、今後ともよろしくお願ひ申し上げます。

金研ワークショップ「素材製造プロセスおよび新素材開発の迅速化・高度化に資する分析・解析技術」報告

我妻 和明

平成23年12月12日(月)から13日(火)にわたり、金研ワークショップを開催しました。本ワークショップでは素材分析に関する研究について29件の講演が行われ、大学、研究機関、及び企業からのべ94名の参加を頂きました。素材産業のニーズを背景に、分析技術の迅速化・高精度化・高精度化に関する研究事例を中心に講演がなされ、特に、オンサイト/オンライン分析への応用が期待されているレーザー誘起プラズマ発光分析法(Laser-Induced Plasma Spectroscopy, LIPS)に関する講演が集中的に行われました。LIPSにおける講演では、プラズマ励起現象に関する基礎研究の話題に加え、リサ

イクルや廃棄物処理の選別技術への応用、さらに原子炉内部などの危険箇所におけるリモートセンシングへの応用が紹介され、大変活発な議論が行われました。今後、この討論を活かし、それぞれの研究分野の新展開が図られることを期待しております。最後に、本ワークショップに共催・協賛頂きました日本鉄鋼協会評価・分析・解析部会、材料科学国際週間2011、日本鉄鋼協会東北支部、及び日本分光学会東北支部に、この場を借りて御礼申し上げます。



附属研究施設関西センター ものづくり基礎講座第26回技術セミナー 「金属ガラス」研究開発の最新動向

附属研究施設関西センター 早乙女 康典

附属研究施設関西センターでは、関西地域の企業との個別技術相談会を毎月数回開催しているほかに、年4回程度の技術セミナーを開催しています。「金属ガラス」研究開発の最新動向、と題した表記セミナーは、12月14日、兵庫県工業技術センターにて開催されました。関西センター・早乙女康典教授、金属ガラス NEDO 特別講座・山浦真一准教授らによる金属ガラスの機

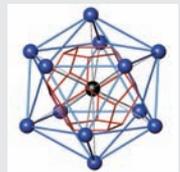
能材料特性とナノインプリント、小型燃料電池部材等への応用事例紹介、(株)中山製鋼所・三村恒裕氏からは溶射技術に応用した高耐食性アモルファス合金被膜の特性と商業化例が紹介されました。講演会場には、各種金属ガラス部材や開発製品が多数展示され、実用化への熱い息吹が感じられるセミナーでした。

Research Index

ポロノイ多面体解析

回折法を用いて原子の配列を決定することは物質科学の基本である。決定された構造を表記するために、原子間距離および配位数に関する情報は欠かすことができない。しかし複雑な構造を持つ物質の場合、着目する原子がいくつもの原子に囲まれているかを記述することに困難が生ずることがある。このような場合、原子の空間配列を記述する方法の一つとしてポロノイ解析がある。ポロノイ解析は、解析の対象となる中心原子 i を選択しその周囲にある原子 j との垂直二等分面を作図し、それらの面の集合体として構成されるポロノイ多面体 V_i を求める。すなわち、元素 i 周囲のポロノイ多面体 V_i は、原子ペア相関 r_{ij} に対応するポロノイ多角形 S_{ij} から構成され、原子 i 周囲の短距離構造の3次元イメージを多面体の面の

かたちとその数で整理することができる。具体的には、ポロノイ多面体 V_i を構成する三角形の数を n_3 、四角形の数を n_4 と定め、これを列挙したポロノイ指数 $(n_3 n_4 n_5 n_6 n_7)$ によって短距離構造を整理する。例えば、非晶質合金の短距離秩序構造として注目を集めている正二十面体クラスターに対応するポロノイ多面体は正十二面体となり指数は $(0 0 12 0 0)$ と表現できる。このような、幾何学的な整理方法は、複雑な構造をもつ準結晶の近似結晶或非晶質金属の構造の整理のための強力なツールとなる。(杉山 和正、川又 透)



編 | 集 | 後 | 記

平成24年度から広報班の体制が変わり、弊方が班長を務めさせていただくこととなりました。創立100周年を控えて金研の広報に鋭意努めて参りますので、今後ともご指導ご鞭撻よろしくお願い申し上げます。

班では、杉山前班長のユニークなアイデアとご指導のもとで、本紙一ページ写真1にあるような様々な金研グッズを作成いたしました。

ホームページにも情報をアップしています。広報活動の一環として配布いたしておりますので、ご希望ありましたら庶務係または広報班までご連絡ください。また、金研所縁の写真などもデータベース化しつつあります。金研のある風景、ユニークな装置等々、皆様からの投稿をお待ちしております。

(阿部 弘亨)



東北大学金属材料研究所

発行日：2012 vol.68 平成24年6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/

