

# Materia Japan

- 永久磁石材料における FORC 解析
- 単結晶弾性率を決定する方法の構築
- マグネシウムケイ化物の結晶構造と熱電性能
- 第一原理計算による半導体の物性予測

# まてりあ

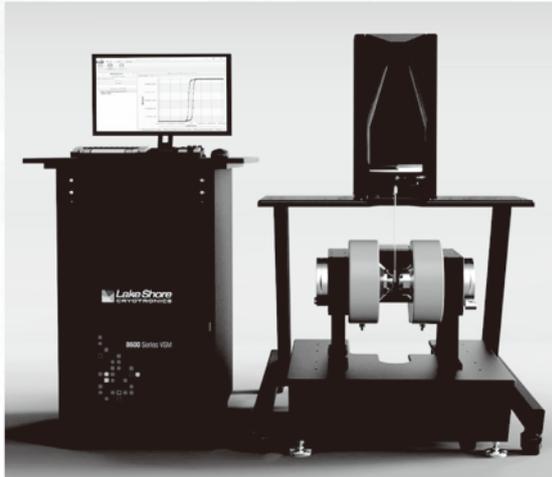
Vol.56 MTERE2 56 (9) 533~582 (2017)

2017 **9**

# 振動試料型磁力計 VSM 8600 シリーズ

FORC 測定および磁性材料評価に最適

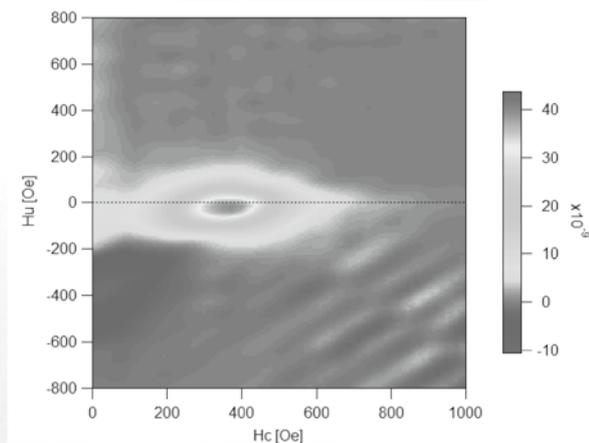
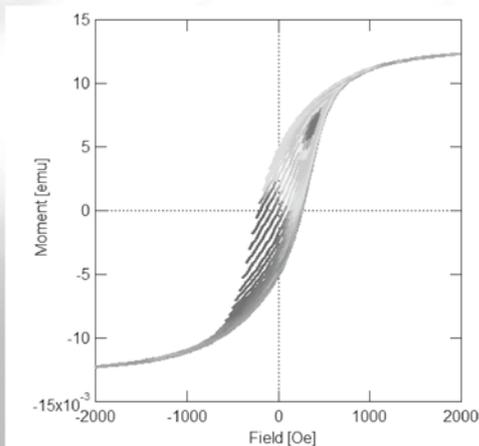
高感度、ハイスピード測定を実現した次世代 VSM 誕生



- 高感度：25nemu (10 s/pt)
- 磁界強度：最大 3.26T (室温)
- 温度可変オプションあり (4.2K-1273K)
- 磁場スイープ速度：最大 10,000 Oe/s
- データ収録速度：最大 10ms/pt

## FORC (First Order Reversal Curves) 測定例

FORC 測定とは、磁性材料中の構成物質間の磁気相互作用や保磁力分布などを解析できる測定手法です。FORC 解析では多くのデータポイントの測定が必要となりますが、Lake Shore 社の高速かつ高精度測定を実現する VSM に適しています。



磁気テープの測定例

◎ 会告原稿締切：毎月1日



翌月号(1日発行)掲載です。

- 支部行事：[shibu@jim.or.jp](mailto:shibu@jim.or.jp)
- 本会記事：[stevent@jim.or.jp](mailto:stevent@jim.or.jp)
- 掲示板：[materia@jim.or.jp](mailto:materia@jim.or.jp)

## 解説

### First-order Reversal Curve (FORC)解析と永久磁石材料への適用

岡本 聡 蓬田貴裕 宮澤和則 菊池伸明 北上 修 渡辺奈生巳 吹田尚久……………533  
FORC解析を永久磁石材料に適用する際における注意点やその解釈について解説。

## 最近の研究

### 結晶配向性を有する多結晶体の弾性率から単結晶弾性率を決定する方法の構築

多根正和……………541  
単結晶育成が困難な材料においても結晶配向性を有する多結晶試料を用いて単結晶弾性率を決定する方法について紹介。

### マグネシウムケイ化物の結晶構造と熱電性能 林 慶 窪内将隆……………546

マグネシウムケイ化物の結晶構造に存在する点欠陥の定量評価について紹介。点欠陥を応用した熱電性能の向上に成功!!

### 第一原理計算による半導体の物性予測と物質探索 大場史康 日沼洋陽 熊谷 悠……………554

最近の第一原理計算による物性予測や新物質探索の進展について、半導体の例を取り上げて紹介。

## 新進気鋭

### 熱電特性データベースの構築と実験値マテリアルズ・インフォマティクスへの展開 桂 ゆかり……………560

## 企業紹介

### 「高信頼性鋼」を支える特殊鋼製造技術と材料開発 高須一郎……………564

## はばたく

### 「配向」と「ランダム」の融合 李 誠鎬……………565

## 本会記事

会告……………566	新入会員……………576
支部行事……………570	次号予告……………576
掲示板……………572	行事カレンダー……………577
書評……………574	訂正……………581
会誌・欧文誌9号目次……………575	

会誌・欧文誌・まてりあの投稿規定・投稿の手引・執筆要領、入会申込書、刊行案内はホームページを参照下さい。  
<http://jim.or.jp/>

表紙デザイン：北野 玲  
複写をご希望の方へ

本会は、本誌掲載著作物の複写に関する権利を一般社団法人学術著作権協会に委託しております。本誌に掲載された著作物の複写をご希望の方は、(一社)学術著作権協会より許諾を受けて下さい。但し、企業等法人による社内利用目的の複写については、当該企業等法人が社団法人日本複写権センター((一社)学術著作権協会が社内利用目的の複写に関する権利を再委託している団体)と包括複写許諾契約を締結している場合にあつては、その必要はありません。(社外頒布目的の複写については、許諾が必要です。)

権利委託先 一般社団法人学術著作権協会  
〒107-0052 東京都港区赤坂9-6-41 乃木坂ビル3F  
FAX 03-3475-5619 E-mail: [info@jaacc.jp](mailto:info@jaacc.jp) <http://www.jaacc.jp/>  
複写以外の許諾(著作物の引用、転載、翻訳等)に関しては、直接本会へご連絡下さい。

## Goodfellow

www.goodfellow-japan.jp

### 研究開発向け材料サプライヤー

グッドフェロー日本代表事務所  
〒105-0003 東京都港区西新橋2-7-4 CJビル7F  
Tel: 03-5579-9285 Fax: 03-5579-9291  
info-jp@goodfellow.com

【代理店一覧】

(株)ニューメタルスエンドケミカルコーポレーション  
www.newmetals.co.jp Tel: 03-3231-8600

仁木工芸(株)  
www.nikiglass.co.jp Tel: 03-3456-4700

和光純薬工業(株)  
www.wako-chem.co.jp Tel: 0120-052-099

(株)ジャパンメタルサービス  
www.jpn-ms.co.jp Tel: 048-920-3200

ON-LINE CATALOGUE



8万点取扱い



小ロット



即配達



カスタムオーダー



〈材料検査・評価機器・製品〉

### 小型精密試料作製システム IS-POLISHER ISPP-1000

価格(税別): 2,980,000円～  
※給水機は別途オプション

IS-POLISHERは、幅広い業界の分析・解析分野で活躍しています

～お客様の声から独自の発想を考案～

- ◆「ウエイトキャンセラ機構」により  
試料へのダメージを軽減  
研磨機だけでEBSD観察が可能です
- ◆試料を直接固定できる豊富な「試料ホルダ」で、包埋せずに試料研磨が可能  
観察までの時間を大幅に短縮できます
- ◆削り過ぎを防止できる「研磨量調整機構」  
ミクロン単位の研磨量を調節できます



#### 株式会社 池上精機

(問合せ先) 新横浜事業所 IS製品営業責任者 赤澤 純  
〒222-0033 神奈川県横浜市港北区新横浜3-8-8 日総第16ビル1101  
TEL 045-474-1880 FAX 045-474-1882  
http://www.ikegamiseiki.co.jp e-mail: sales@ikegamiseiki.co.jp

#### ■次回予定

来年4月号には2018年度科学研究費最終選定のための製品ガイドを掲載予定にしております。

## 2018年度 科研費選定関連 製品ガイド

企画・製作 株式会社 明報社

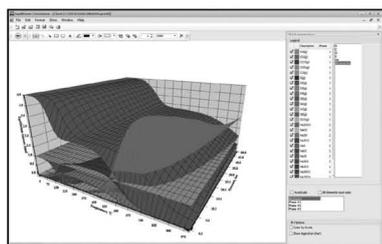
〒104-0061 東京都中央区銀座7丁目12番4号(友野本社ビル)  
TEL 03(3546)1337(代) FAX 03(3546)6306  
URL http://www.meihosha.co.jp  
E-mail: info@meihosha.co.jp 担当/後藤

# 科研費関連機器・製品申請ガイド

〈ソフトウェア・書籍・サービス〉

## 化学反応／平衡計算ソフトウェア HSC Chemistry for Windows, Ver.9.0

約28,000種についてのエンタルピー、エントロピー、熱容量のデータベースを基に化学反応の計算やGIBBSまたはSOLGASMIXのルーチンによる化学平衡を計算します。反応、熱平衡、分子量計算などの一般的なモジュールの他、電気化学セル平衡と相安定性、腐食の研究に使われるEh-pH（プールベ）状態図の作成などユニークなモジュールを持ち合わせています。計算結果のテーブルと状態図はクリップボードにコピーできます。SIM Flowsheetモジュールもあり、複数のユニットプロセスからなるプロセス全体のシミュレーションとモデリングができます。



定価(税別)  
¥650,000(一般)  
¥280,000(教育)

システムプラットフォーム:  
Windows 7/8/10  
(Outotec Research  
Oy. 製作)

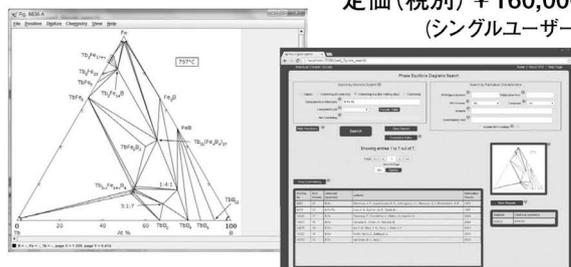
### 株式会社 デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル  
TEL 03-5641-1771 FAX 03-5641-1772  
<http://www.ddmcorp.com>

〈ソフトウェア・書籍・サービス〉

## 26,500件のセラミックス状態図データベース ACerS-NIST Phase Equilibria Diagrams, Version 4.2

定価(税別) ¥160,000  
(シングルユーザー)



- データソース : Phase Equilibrium Diagrams for Ceramics, Vol. 1 - (対応書籍) XIV, Annual 91-93, High-Tc Superconductors I-II, Zirconium and Zirconia System, Electric Ceramics I
- 検索項目 : 元素、成分系、コメントテキスト、PED Volume、Figure Number、刊行年、Authors
- 検索条件 : Inclusive、Exact、Not (partially)
- データ出力 : PDF、PNG (Portable Network Graphics)
- システム構成 : Windows 7/8/10、Java 7 Runtime Environment、PDF Reader (Javaはサムネイル画像の拡大に必要) (American Ceramic Society)

### 株式会社 デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル  
TEL 03-5641-1771 FAX 03-5641-1772  
<http://www.ddmcorp.com>

〈材料化学関係機器・製品〉

## グローブボックス 価格(税別) : 3,500,000円～ Labmaster SP MBRAUN社製

最も汎用的なグローブボックスシステムで、最も多く使用されている装置です。この装置は、拡張が可能で、幅125cmから、幅600cmまで任意のサイズの選択が可能です。独自に開発した、周波数コンバータ付、ステンレス製カプセル型の大容量ブロワーを採用しております。システムは全自動で、本体の右上に設置された操作パネルにて制御されます。また精製棟を2棟装備したLabmaster DP シリーズも用意されております。



- 精製能力 : 酸素・水分共に1ppm以下
- ボックスサイズ : W125～XD78～XH90cm
- 付属品 : ●ミニ・アンティチャンバー ●酸素・水分濃度計 ●冷蔵庫 ●ソルベント・トラップ

### 株式会社 ブライト

〒351-0114 埼玉県和光市本町6-32 吉川ビル3F  
TEL.048-450-5770 FAX.048-450-5771  
〒573-0032 大阪府枚方市岡東町4-8 ムッシュビル5F  
TEL.072-861-0881 FAX.072-861-0882  
URL: <http://www.bright-jp.com>

〈材料化学関係機器・製品〉

## 有機溶媒精製装置 価格(税別) : 970,000円 MB-SPS Compact 独国MBRAUN社製

1溶媒用の単独卓上型有機溶媒精製システムです。ベンゼン、エーテル、THF、ヘキサン、トルエンなどの有機溶媒に含まれている酸素、水分濃度を数ppm以下までに精製します。今までの有機溶媒の熱蒸留に代わる安全なシステムです。ピュアーな有機溶媒がいつでもすぐに使えます。



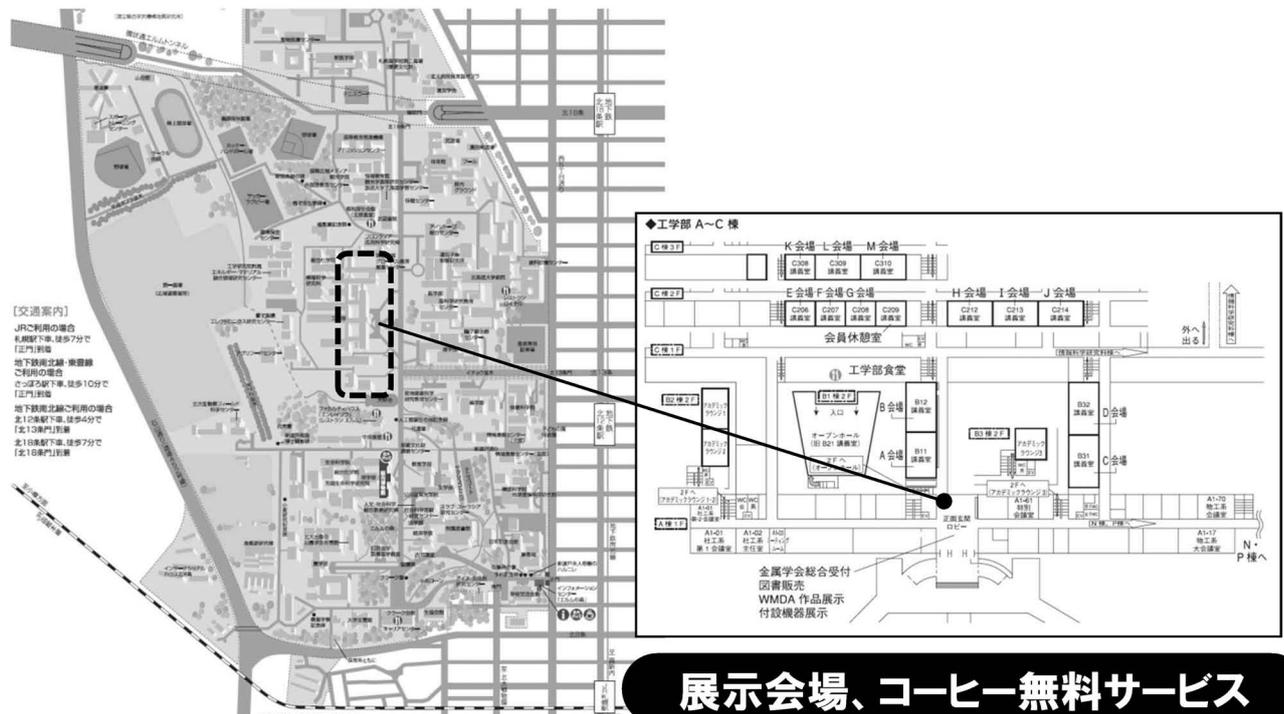
- 精製カラム数 : 2カラム/1溶媒  
精製能力 : 800リットル
- 寸法 : W250mm×H840mm×D380mm  
その他、耐熱性溶媒保管庫を装備できる  
5溶媒用の有機溶媒精製装置も用意されております。

### 株式会社 ブライト

〒351-0114 埼玉県和光市本町6-32 吉川ビル3F  
TEL.048-450-5770 FAX.048-450-5771  
〒573-0032 大阪府枚方市岡東町4-8 ムッシュビル5F  
TEL.072-861-0881 FAX.072-861-0882  
URL: <http://www.bright-jp.com>

# 日本金属学会 2017年秋期講演大会 付設展示会

会場：工学部A棟1階ロビー  
9/6(水)～8(金)  
9:00～17:00(8日は14:00まで)



【機器展示】(8/1現在)  
アドバンスソフト(株)  
茨城県中性子ビームライン  
SKメディカル電子(株)  
オックスフォード・インストルメンツ(株)  
カクタスコミュニケーションズ(株)  
(株)ケミカル山本  
(株)サーモ理工  
大亜真空(株)  
(株)TSLソリューションズ  
名古屋大学

日本テクノプラス(株)  
ハルツोक・ジャパン(株)  
(株)日立ハイテクノロジーズ  
北海道大学(ナノテクノロジー連携研究推進室)  
(株)モルシス  
(株)UNICO  
(株)米倉製作所

【カタログ展示】  
エルミネット(株)  
Good Fellow

【次回開催予定】  
2018年春期講演大会 3/19(月)～21(水・祝) 千葉工業大学・新習志野キャンパス

企画/運営 株式会社明報社 Tel:03-3546-1337

# First-order Reversal Curve (FORC)

## 解析と永久磁石材料への適用

岡本 聡<sup>1)</sup> 蓬田貴裕<sup>2)</sup> 宮澤和則<sup>2)</sup> 菊池伸明<sup>3)</sup>  
 北上 修<sup>4)</sup> 渡辺奈生巳<sup>\*\*</sup> 吹田尚久<sup>\*\*</sup>

### 1. はじめに

永久磁石材料はモーターや発電機をはじめとする電気/動力の変換に欠かせない、つまりエネルギー変換のキーマテリアルとして、我々の今日の社会生活を支えている。Nd-Fe-B 磁石<sup>(1)(2)</sup>は最強の永久磁石材料として長年君臨し続けているが、高温特性に難点がある。特に近年は、ハイブリッド/電気自動車の駆動用モーターに対する需要が高まっており、Nd-Fe-B 磁石に Dy などの重希土類元素を添加することによって、その高温特性改善が図られている。しかしながら、重希土類元素の産出地域偏在や供給不安などの問題などから、資源の乏しい我が国では元素戦略的な観点で、重希土類フリー高性能磁石材料の開発は極めて重要な課題となっている<sup>(3)-(5)</sup>。

では、高温特性に優れた高性能 Nd-Fe-B 磁石の開発のためには、何をすれば良いのであろうか。まずは現行 Nd-Fe-B 磁石における保磁力の発現機構や高温特性劣化機構を理解することが必要になるが、実はこれらに対する理解は、長年の数多くの取組みにもかかわらず<sup>(6)-(10)</sup>、未だ不十分なのが現状である。最も直接的に磁化反転挙動を評価するものとして磁気イメージング手法を挙げることができ、これまでに磁気力顕微鏡<sup>(11)-(13)</sup>、ローレンツ電子顕微鏡<sup>(14)(15)</sup>、可視光ならびに放射光を用いた磁気光学顕微鏡像<sup>(11)(16)-(19)</sup>などの測定が行われている。これらは、磁化反転の進行具合を直接可視化し、磁化反転過程に関する非常に多くの知見を与えてくれる。一方で、これらの磁気イメージング手法は試料の表面や薄板化した状態での磁化過程であり、バルク内部で同じ状態であるかを確かめる術は今のところない。

磁化曲線の解析手法の一つである First-order-reversal curve (FORC) 解析は、これまでに微粒子<sup>(20)(21)</sup>、薄膜<sup>(22)-(25)</sup>、岩石磁気<sup>(26)-(28)</sup>、永久磁石材料<sup>(29)-(32)</sup>など、様々な磁性材料や分野で用いられてきた。しかしながら、FORC 解析からどのような情報を得たいのかは試料形態や分野によって異なっており、それに基づいて適切な解析や考察を行わなければならない。この点でこれまでに多少の混乱が見受けられている。本稿では、バルク永久磁石材料に対して FORC 解析を行う場合に特化して、筆を進めたいと思う。その意味において、FORC 解析を一言で表せば、バルク内部での磁化過程に関する情報を可視化可能な手法、と行うことができる。むしろ、磁気イメージング手法のように磁化反転の様子を直接可視化している訳ではなく、その解釈には従来の磁気イメージング手法や構造解析など様々な手法と組み合わせることが必要であるが、今後の永久磁石研究において非常に強力なツールとなるものと期待される。

本稿では、まず FORC 解析の基礎について説明し、その後、永久磁石材料への適用事例とその解析結果の考察について説明する。

### 2. FORC 解析の基礎

FORC 解析は元々、Preisach モデルの解析手法として提案されたものである<sup>(33)</sup>。Preisach モデルとは磁化曲線の数値計算手法の古典的なものの一つであり、図 1(a)に示すような hysteron と呼ばれる磁化反転単位の集合を仮定してヒステリシス曲線を計算するものである。hysteron の左側と右側の反転磁場をそれぞれ  $H_r$ ,  $H$  (この定義の仕方は、のちに FORC 解析と同じパラメータとするためである) とする

\* 東北大学多元物質科学研究所；1)准教授 2)大学院生 3)助教 4)教授(〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

\*\* ㈱東陽テクニカ

First-order Reversal Curve (FORC) Analysis and Its Application for Permanent Magnet Materials; S. Okamoto\*, T. Yomogita\*, K. Miyazawa\*, N. Kikuchi\*, O. Kitakami\*, N. Watanabe\*\* and N. Suita\*\* (\*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai. \*\*Toyo Corp., Tokyo)

Keywords: FORC (first-order-reversal curve), permanent magnet, magnetization reversal

2017年6月27日受理[doi:10.2320/materia.56.533]

と、保磁力  $H_c$  ならびにバイアス磁場  $H_{\text{int}}$  は、それぞれ

$$\begin{cases} H_c = (H - H_r) / 2 \\ H_{\text{int}} = (H + H_r) / 2 \end{cases} \quad (1)$$

と定義できる。バイアス磁場は各 hysteron に作用する仮想的な相互作用場とみなすことができる。したがって、 $H_c$  と  $H_{\text{int}}$  に対する hysteron の分布関数  $f(H, H_r)$  を仮定すると、 $(H, H_r)$  座標平面では図 1(b) に模式的に示す三角形の領域内で表示される。なお、ここで式 (1) の定義より、 $H_c$  軸ならびに  $H_{\text{int}}$  軸は、それぞれ斜め  $45^\circ$  下方ならびに斜め  $45^\circ$  上方

に伸びる軸となる。

一方、FORC 測定は、図 1(c) に示すように、正の飽和状態から磁場を負方向に掃引して磁化曲線を測定する際に、その減磁途中の磁場  $H_r$  で磁場掃引方向を反転させ、再び磁場  $H$  を正の飽和に向けて掃引する。このようにして得られるのが FORC であり、 $H_r$  を徐々に変えながらこのプロセスを順次行っていくことで、ヒステリシス曲線 (major curve) の内側が FORC で埋まっていく。この場合、各 FORC 上の磁化  $M$  は  $(H, H_r)$  の関数となっていることが分かる。なお、FORC の first-order とは、major curve を 0 次曲線としていることに起因する。この磁場掃引プロセスは図 1(b) の  $(H, H_r)$  座標平面では、hysteron 分布を仮定した三角形領域において、白矢印で示されるように  $H_r$  を順次変えながら  $H$  軸方向に走査していることになる。つまり、この三角形領域内部の磁化情報  $M(H, H_r)$  をくまなく取得していることになる。ここで、FORC 分布  $\rho(H, H_r)$  を以下のように定義する。

$$\rho(H, H_r) = -\frac{\partial M^2}{\partial H_r \partial H} \quad (2)$$

この  $\rho(H, H_r)$  の強度マップを  $(H, H_r)$  平面上に表したものが FORC diagram と呼ばれるものであり、図 2 に幾つかの例を示す。なお、FORC diagram の具体的な作図法は、詳しい解説があるのでそちらを参考にして欲しい<sup>(20)</sup>。また、Harrison らが開発した FORCinel というフリーソフトも利用することができる<sup>(34)</sup>。

次に FORC 分布  $\rho(H, H_r)$  と hysteron 分布  $f(H, H_r)$  の関係を考える。まず話を単純化させるため、単一の hysteron に対して考えると、式 (2) の定義より、この場合は  $\rho(H, H_r) \propto \delta(H, H_r)$  とデルタ関数となる。したがって、単一 hys-

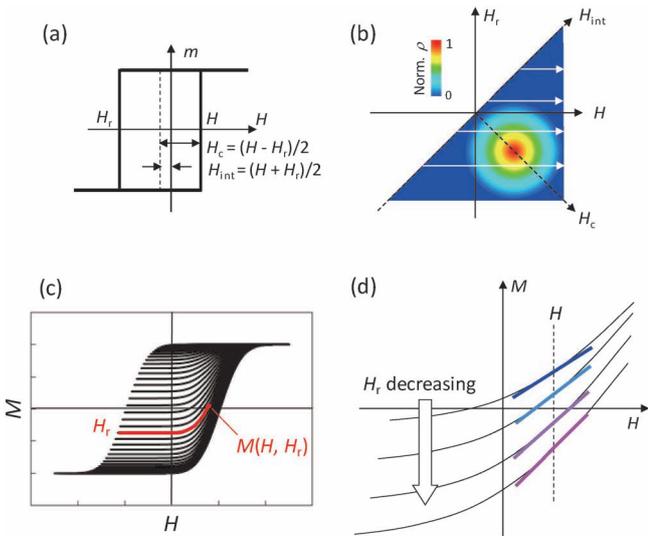


図 1 (a) hysteron の模式図。 (b)  $(H, H_r)$  座標平面上での hysteron 分布  $f(H, H_r)$  の模式図。 (c) FORCs の模式図。 (d) FORC の傾き変化の模式図。

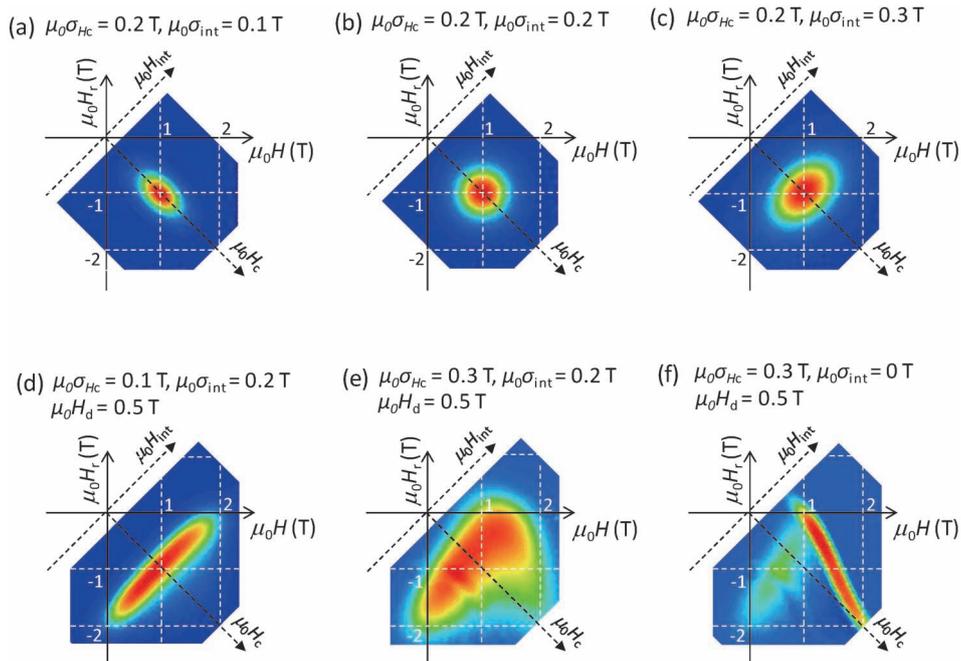


図 2 (a)–(c) Preisach モデルに基づいて計算した FORC diagram。 (d)–(f) 双極子磁場  $\mu_0 H_d = 0.5$  T を仮定して Moving Preisach モデルに基づいて計算した FORC diagram。

teronの集合である分布関数 $f(H, H_r)$ は $\rho(H, H_r)$ と一致することが理解される。つまり、FORC diagramを測定することでhysteron分布 $f(H, H_r)$ が得られることになる。図2(a)~2(c)は $f(H, H_r)$ として、Gauss分布に従う適当な保磁力分散 $\sigma_{H_c}$ ならびに相互作用分散 $\sigma_{H_{int}}$ を仮定し、計算したFORC diagramである。それぞれ $\sigma_{H_c}/\sigma_{H_{int}} > 1, = 1, < 1$ の場合であり、 $H_c$ 軸に沿って伸びたパターンから $H_{int}$ 軸に沿って伸びたパターンに形状が変化していることが確認できる。また、 $H_c$ 軸ならびに $H_{int}$ 軸に沿った広がり、最初に設定した $\sigma_{H_c}$ ならびに $\sigma_{H_{int}}$ に一致していることも確かめられる。このことから、FORC diagramを解析することにより、磁性材料の保磁力分散や相互作用分散が評価できるのではと期待される。しかしながら、ここで注意したいのは、FORC diagramより保磁力分散や相互作用分散が評価できるのは、上述の説明の通り、磁性材料の磁化反転がhysteron分布と同様の分布関数に従う場合に限られ、現実にはこのような理想的なケースは決して多くない。現に、実際の磁性材料のFORC diagramは非常に複雑なパターンをとることが多い<sup>(22)-(24) (29)-(32)</sup>。また、負の $\rho$ が高い頻度で現れることも知られているが<sup>(23) (24) (29)-(32)</sup>、これもhysteron分布に基づいた単純な議論では理解できない。さらに、現実の磁性材料での相互作用場は双極子相互作用や交換結合に起因するものであり、対象とする磁化の周囲環境、つまり磁性体の磁化状態によって方向や大きさが変わる。したがって、Preisachモデルが仮定するような個々のhysteronが固有の相互作用場を持つ、という状況は現実には殆ど存在し得ない。Preisachモデルに平均場近似で磁化状態に応じた相互作用場を取り込むことは可能であり、これはMoving Preisachモデルと呼ばれる。平均場近似で双極子磁場 $\mu_0 H_d = 0.5$  TとしてMoving Preisachモデルで計算したFORC diagramを図2(d)~2(f)に示す。 $\sigma_{H_c}$ の小さい図2(d)では $H_c$ 軸と $H_{int}$ 軸に沿った広がりそれぞれ $\sigma_{H_c}$ 、 $\sigma_{H_{int}} + H_d$ に一致したものが得られているが、それ以外の場合では、FORC diagramの広がり $\sigma_{H_c}$ 、 $\sigma_{H_{int}}$ とは全く対応していないことは明らかである。相互作用場とFORC diagramパターンとの相関を理論的に研究する試みも多数なされており、相互作用と相関のあるwishbone型などと呼ばれる特徴的なパターンがあることも報告されている<sup>(35)-(37)</sup>。しかし、これらは相互作用場が良く制御された理想的なケースであり、かつhysteron分布に対応する磁化反転挙動を示すことが前提である。したがって、永久磁石材料において、これらの議論を適用するのは無理があるように思われる。

では、FORC diagramを永久磁石材料に適用する場合、得られる情報とは何であろうか。この問いに答えるには、式(2)の定義式に立ち戻って考える必要がある。式(2)を $\rho = \partial(\partial M / \partial H) / \partial H_r$ と書換えると、図1(d)に模式的に示すように $\rho$ は各FORCの傾きの変化を表すものであることが分かる。したがって、 $H_r$ が減少するに従って、傾きが増加すれば $\rho > 0$ 、傾き変化がなければ $\rho = 0$ 、傾きが減少すれば $\rho < 0$ となり、実験において $\rho < 0$ が生じることは何の不思議

もない。このFORCの傾き変化が物理的に意味するものは不可逆磁化反転であり、FORC diagramは不可逆磁化反転が $(H, H_r)$ 座標平面のどこで、どれくらいの強さで生じているのかを表すもの、というのが式(2)の定義式に基づいた理解である。本稿の冒頭で、「FORC解析はバルク内部での磁化過程の可視化ツールである」と述べたのはこの意味である。以下では実際の永久磁石材料への適用事例を参考に、FORC diagramと実際の磁化反転挙動の相関について議論していきたい。

### 3. 永久磁石材料へのFORC解析適用事例

図3に例として、焼結Nd-Fe-B磁石とSm-Co磁石のFORCsならびにFORC diagramを示す。電磁石を用いているため、測定温度を高くして電磁石で飽和できる範囲で測定を行っている(焼結Nd-Fe-B磁石: 100°C, Sm-Co磁石: 350°C)。両者を比較すると、それぞれのFORC diagramパターンは大きく異なっていることが分かる。特に焼結Nd-Fe-B磁石のそれは複数のスポットパターンで構成されており、不可逆磁化反転が多数の異なる磁場領域で断続的に生じていることが示される。一方、Sm-Co磁石は比較的広い領域にひろがったスポットパターンとなっており、不可逆磁化反転が広い磁場範囲で連続的に起きていることが分かる。各スポットと磁化曲線との対応を色付けた丸で囲んだ領域で表した。また特徴的なFORC挙動を見やすくするため、減磁始め、保磁力近傍、飽和点近くの各FORCを青点線でトレースした。

焼結Nd-Fe-B磁石のFORC diagramで見られている比較的強度の強いスポットは、高磁場側と低磁場側の $\rho > 0$ の

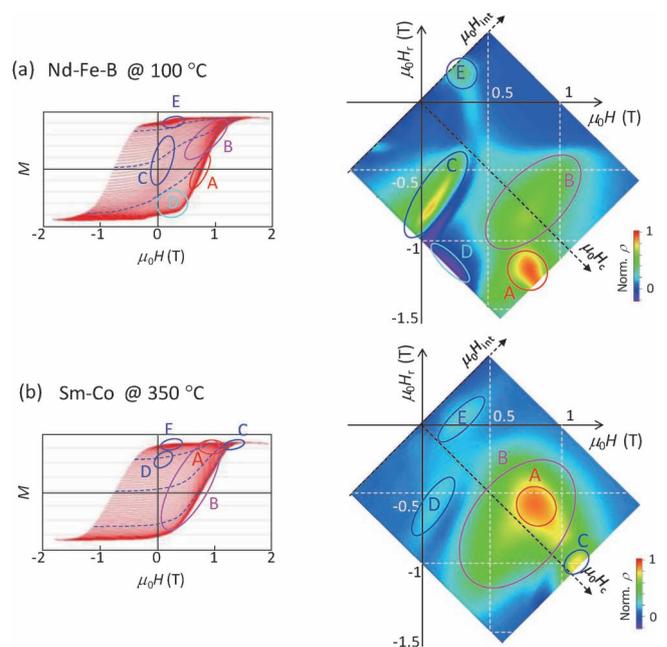


図3 (a)焼結Nd-Fe-B磁石ならびに(b)Sm-Co磁石のFORCsとFORC diagram。

スポット A, C ならびにその中間に位置する  $\rho < 0$  のスポット D があり, このようなスポットパターンは, これまでに報告されている焼結 Nd-Fe-B 磁石においても確認されることから<sup>(24)(29)(30)</sup>, 焼結 Nd-Fe-B 磁石における特徴的なパターンと言って良さそうである. また,  $\rho < 0$  のスポット D の上方に強度が弱く広がったスポット B があり, さらにスポット C の上方にも強度の弱いスポット E が確認できる. これらスポットが生じている ( $H, H_r$ ) を FORC 上で辿ることで, 容易に FORC との対応が付けられる. まず, スポット A からみていく. これは FORC ではまさに保磁力点付近に対応している. ここで注意したいのは, このスポットは  $\mu_0 H_r = -1.2 \sim -1.4$  T 付近にあり, これは飽和点近くまで  $H_r$  を印加しないと保磁力が発現しないことを意味している. 次に減磁途中の  $H_r$  領域で生じているスポット B, C について見てみよう. スポット C に対応するのはゼロ磁場付近の FORC で生じているキックであり, この領域では非常に弱い磁場で磁化反転が生じていることを表している. 一方, スポット B では, スポット C とほぼ同じ  $H_r$  領域で生じているが,  $H$  軸に対してより高磁場側であるため, 各 FORC の飽和領域に対応し, さまざまな磁化反転が生じていることが分かる. 次に  $\rho < 0$  のスポット D については, 磁化曲線の肩の部分に対応している.  $\rho < 0$  は  $H_r$  減少に伴い FORC の傾きが減少することに対応していることを思い出すと,  $H_r$  が飽和磁場に近づくにつれて, 磁化曲線の肩が張り出してくる様子を反映している.

以上, ここまでの挙動は焼結 Nd-Fe-B 磁石の磁化過程の特徴を非常に良く反映したものであり, 十分に飽和させないと焼結 Nd-Fe-B 磁石では磁化曲線の角形性は悪く, 保磁力も低くなってしまふ. またスポット E についても言及しておく. これは磁化曲線では major curve 上でも確認できるゼロ磁場近傍の微小なキックに対応している. これは一般には磁石表面のダメージ層であると言われている. 問題は, このダメージ層の影響がどの程度か, である. FORC diagram においてスポットが観測されている, ということはこのダメージ層が不可逆磁化反転を引き起こしていることを表しており, 磁石全体の磁化過程に多少なりとも影響を及ぼしている可能性が示唆される.

次に Sm-Co 磁石では, 比較的強いスポットは A と C であり, 弱いスポット B が広い範囲にひろがっている. FORCs との対応をみるとスポット A, C は各 FORC の飽和点付近に対応していることが分かる. またスポット B は, 先にも述べた通り, さまざまな磁化反転が広い範囲で生じていることに対応する. また弱いスポット D, E は, FORC 上では殆ど認識できないものの, これらの磁場領域でわずかに不可逆磁化反転が生じていることを示している.

焼結 Nd-Fe-B 磁石と Sm-Co 磁石の FORC diagram パターンの違いは両者の磁化過程の違いを非常に良く反映したものである. 焼結 Nd-Fe-B 磁石は直径が数~数 10  $\mu\text{m}$  の主相粒子が粒界相で分断された組織構造を有しており, 各主相粒子はほぼ単結晶である. したがって, 主相粒内に磁壁が侵入

すると, その磁壁は低い磁場で容易に動くことが出来る. これが焼結 Nd-Fe-B 磁石で観測されたスポット C に対応するものと思われる. また, これら主粒子内に侵入した磁壁が抜けて完全に飽和することで, 磁化曲線の角形性が向上し, 大きな保磁力が発現することになり, これがスポット D, A に対応している. 一方, Sm-Co 磁石は磁壁ピニング型の磁化反転挙動であることが知られており, 非常に細かいピニングサイトが無数に分布している. したがって, スポット B でみられるように, さまざまな磁化反転が広い領域で生じるのはこのためである. また強度の強いスポット A, C が  $H_c$  軸に近いところで生じていることも特徴として挙げられる.  $H_c$  軸上では  $H_{\text{int}} = 0$ , つまり式 (1) より  $(H + H_r) = 0$  である. これは, 減磁場  $H_r$  での FORC において,  $H_r$  とほぼ同じ  $H$  で磁化反転が生じていることを意味する.

次に 2 種類の異なる焼結 Nd-Fe-B 磁石での FORC diagram パターンを比較し, 磁石特性との相関をみてみよう.

図 4 に FORCs ならびに FORC diagram の 100°C から 300°C までの挙動を示す. Sample-A, B で示した 2 種類の磁石は製造元の異なるものであるが, 100°C での保磁力はそれぞれ 0.8 T と 0.7 T とほぼ同程度である. ただし, 高温特性がわずかであるが Sample-A の方が優れている. Major curve から得られる情報はせいぜいこの程度であるが, FORC diagram を測定することで, 両者の違いが明瞭に浮かび上がる. なお図 3 で示した焼結 Nd-Fe-B 磁石の FORC diagram は, Sample-A のものである.

Sample-A では高磁場側スポットの強度が低磁場側のそれに比べて強く, 温度上昇とともに高磁場側のスポットが低磁場領域にシフトしながら次第に弱まっていく. 一方, Sample-B では, 低磁場スポットの強度が高磁場スポットのそれよりも強いことが分かる. また低磁場スポットの位置が  $H_r$  軸の原点に近づいており, 減磁過程のより早い段階で低磁場スポットに対応する磁化反転が起きていることが分かる. また, Sample-A でみられる高磁場スポットと低磁場スポットの中間にある弱く広がったスポットが, Sample-B ではほとんど確認できない. これは図 3 のスポット B で示した通り, 減磁途中での FORC が飽和に近づいた領域に対応するものであり, これがほとんど見られない, ということは図 3 のスポット C で示したゼロ磁場付近での磁化反転で, 各 FORC がほぼ飽和近くまで磁化されてしまうことを意味している. また 200°C では低磁場スポットがより原点近くに移動し, かつ高磁場スポットが弱まっている.

このように FORC diagram を測定することで, どの磁場範囲でどのような磁化反転が生じ, それが温度上昇とともに, どのように変化していくのか, などに関する情報が定量的にかつ視覚的に得ることができる. これらの情報は, 特性の異なる磁石を数多く比較することで, より詳細な磁化過程と磁気特性の関係が議論できるものと期待される.

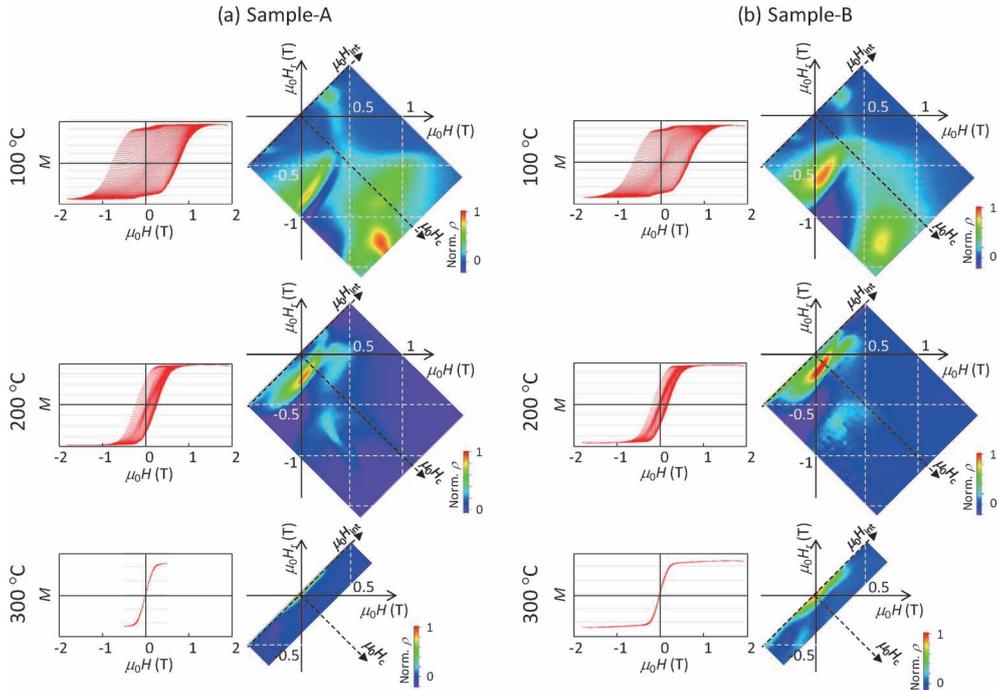


図4 製造元の異なる2種類の焼結Nd-Fe-B磁石、(a) Sample-A、(b) Sample-B、のFORCsとFORC diagramの温度変化。

#### 4. 熱間加工Nd-Fe-B磁石のFORC解析

熱間加工Nd-Fe-B磁石は、新規Dyフリー高性能磁石として最近実用化されたものであり<sup>(38)</sup>、その作製法の違いから焼結Nd-Fe-Bとは異なり、直径数100nm、厚み数10nmの微細な平板粒子が緻密に配列した組織構造となっている<sup>(15)</sup>。平板の厚み方向がc軸となっており、試料全体のc軸配向性も非常に高い。この試料に対して、秋屋らが開発した膨張拘束下でのNd-Cu共晶合金の粒界拡散を施すことで、残留磁化を大きく低減させることなく、保磁力を大幅に高めることができる<sup>(39)</sup>。ここでは、熱間加工処理を施したままの試料と、膨張拘束下でのNd-Cu粒界拡散処理を施した試料の2種類でFORC解析を実施し、磁化反転に関する考察を行った結果を紹介する。本稿では前者をHD、後者をGBDとして表記する。

図5に外形をロッド(1mm×1mm×2mm)と平板(3mm×3mm×0.3mm)に加工したGBD試料の150°Cで測定したFORCsならびにFORC diagramを示す。c軸はそれぞれ、ロッド試料の長軸、平板試料の厚み方向であり、反磁場係数 $N_z$ はそれぞれ0.17と0.93である。 $N_z$ の違いを反映して、ロッド試料に比べて平板試料の磁化曲線は傾きの大きい形状となっていることが分かる。ただし、両者のFORCsをみると、焼結Nd-Fe-B磁石で観察されたようなゼロ磁場近傍でのキंकは見られておらず、各FORCはmajor curveに接するまではH軸に沿ってほぼ真横に伸びている。それぞれのFORC diagramも焼結Nd-Fe-B磁石のそれとは大きく

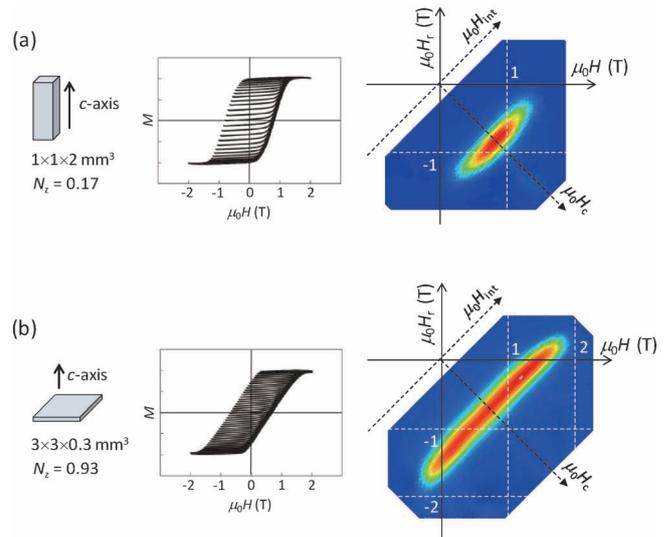


図5 (a)ロッド形状ならびに(b)平板形状の熱間加工Nd-Fe-B磁石(GBD試料)のFORCsとFORC diagram。測定温度は150°C。

異なっており、 $H_c$ 軸上ならびに $H_{int}$ 軸に対して対称なパターンとなっている。これは図2(d)に示した保磁力分散の小さい場合のMoving Preisachモデルで計算されるFORC diagramパターンに非常によく似ていることが分かる。実際に、 $H_{int}$ 軸に沿った広がり反磁場 $N_z M_s$ にはほぼ一致しており、熱間加工Nd-Fe-B磁石の磁化過程が平均場近似の下でPreisachモデルに良く対応するものであることが示唆される<sup>(40)</sup>。本稿の冒頭で、Preisachモデルは、現実の磁性材料

の磁化過程に対応するような状況は殆どないと述べたが、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石は、そのような状況が成立している非常に珍しいケースであると言える。

熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の FORC diagram の詳細な解析のためには、図 5 で用いたロッド試料でも反磁場が大きく、その FORC diagram パターンがほぼ反磁場でのみ形状が決まっている。したがって、さらに細長いピラー形状 (0.5 mm × 0.5 mm × 3 mm) に試料を加工し、 $N_z = 0.04$  まで小さくした。図 6 にピラー形状に加工した HD 試料と GBD 試料の FORCs と FORC diagram を示す。 $H_c$  軸上に強いスポットパターンがみられ、明らかに図 5 の FORC diagram と比較して、スポットサイズが小さくなっていることが確認できる。 $H_c$  軸上のスポット位置は major curve の保磁力と一致しており、やはり Preisach モデルに対応する挙動であることが分かる。また、このスポットパターンに加えて、 $H_r$  軸に沿って  $\rho < 0$  と  $\rho > 0$  が対になった弱いライン状パターンも確認できる。HD 試料と GBD 試料を比較すると、それぞれ保磁力は 1.1 T ならびに 2 T と大きく異なるものの、 $H_c$  軸上の強いスポットパターンと  $H_r$  軸に沿った弱いライン状パターンは両方の試料で確認できる。この  $H_c$  軸上の強いスポットパターンの広がりから保磁力分散を見積もると、HD 試料と GBD 試料で保磁力に対して約 2% と非常に小さな値であることが分かった。この非常に小さな保磁力分散の値については、後ほど熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の磁化反転機構と併せて考察する。次に  $H_r$  軸に沿った弱いライン状パターンについては、これは Preisach モデルに対応させることは難しく、焼結 Nd-Fe-B 磁石の場合と同様に式 (2) に基づいて考察する必要がある。 $H_r$  軸に対して  $H_r < -H_c$  の領域のみこのパターンが現われていることを考えると、飽和磁場に近い  $H_r$  領域で、保磁力や角型性が  $H_r$  に対してわずかに増加していることを反映したパターンであることが分かる。実

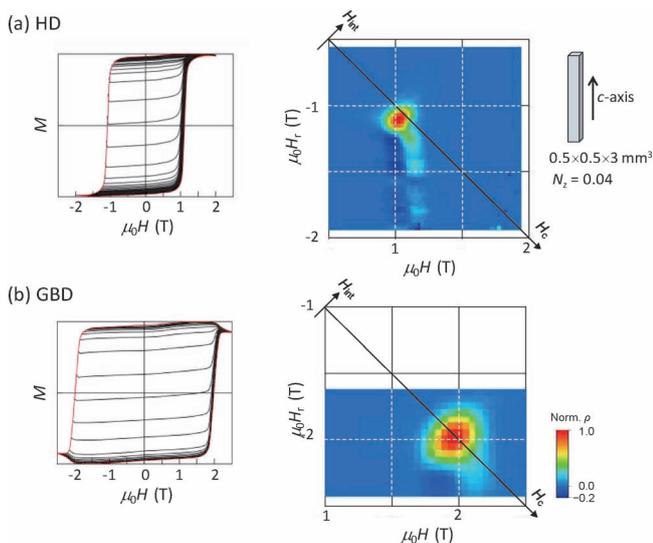


図 6 ピラー形状に加工した熱間加工 Nd-Fe-B 磁石、(a) HD 試料、(b) GBD 試料、の FORCs と FORC diagram.

際にわずかであるが保磁力の着磁場依存性が確認されている。なお、ここで強調したいことは、この  $H_r$  軸に沿った弱いライン状パターンはピラー形状にして  $N_z$  をできる限り小さくすることで確認できたものであり、実際の測定に際してはこういった点も留意すべき事項である。

次に図 7 に HD 試料の FORCs と FORC diagram の温度依存性を示す。焼結 Nd-Fe-B 磁石で見られたようなパターン形状の著しい温度変化は見られず、 $H_c$  軸上の強いスポットパターンと  $H_r$  軸に沿ったライン状パターンそのものは変化せず、単調に  $H_c$  軸上を低磁場側にシフトしていく。この挙動は GBD 試料でも同様であった。つまり、熱間加工 Nd-

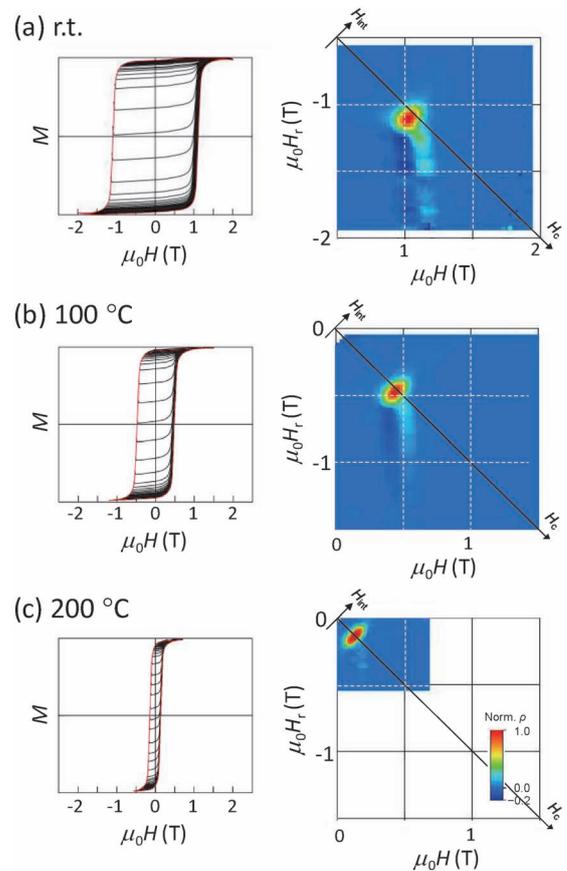


図 7 熱間加工 Nd-Fe-B 磁石、HD 試料、の FORCs と FORC diagram の温度依存性。

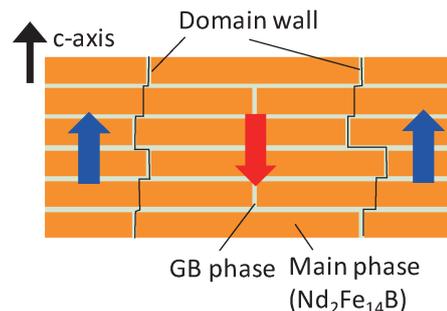


図 8 熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の組織と磁壁の模式図。

Fe-B 磁石では、保磁力が大きく異なる状況、つまり粒界拡散プロセスや異なる温度下などでも、その FORC diagram パターンそのものには変化はみられない。このことは、保磁力が大きく異なっても、その磁化反転過程自体はほぼ同じであることを意味する。

ここまでの FORC 解析の結果に基づいて、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の磁化反転過程を考察してみよう。まず、平均場近似によく従う FORC diagram パターンである点について考える。これは言い換えれば磁化状態によらずマクロな反磁場係数が変化しない、と言える。つまり、内部反磁場などの影響は熱間加工 Nd-Fe-B 磁石においては非常に小さいと考えてよく、磁区もマクロな反磁場係数を変化させないような形状で生成していることを示す。次に、FORC diagram が Preisach モデルによく対応する点について考えてみる。これまでに熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の磁化過程評価は、磁気粘性解析<sup>(41)</sup>や磁区観察<sup>(13)(15)</sup>などにより行われ、図 8 に模式的示すように、 $c$ -軸に沿って形成される磁壁のピニングによるものであることが分かっている。一見すると、磁壁ピニングは Preisach モデルで想定する磁化反転挙動とは全く異なるようにも思われるが、1次元の磁壁ピニング系では Preisach モデルとの対応が非常に良いことが理論的に示されている<sup>(26)</sup>。熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の磁区観察結果より、各磁壁は  $c$ -軸に沿って多数の粒子にまたがって形成されており、そのピニングが  $ab$ -粒界面で生じている状況を考えれば、個々の磁壁は 1次元磁壁ピニングモデルに近い振る舞いを取っているとみなして良さそうである。ここまでの考察より、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の  $H_c$  軸上の強いスポットは磁壁ピニングによるものであり、 $H_r$  軸に沿ったライン状パターンは保磁力の飽和特性を反映したものであることが分かった。またこの挙動自体は粒界拡散処理や温度など、保磁力の値が大きく変わる状況でも変化しないことも分かった。では、保磁力分散、つまりピニング磁場分散が保磁力のわずか数%と非常に小さいことはどう考えれば良いのであろうか。ピニングが  $ab$ -粒界面で生じている状況を考えれば、もっと大きなピニング磁場分散が生じる筈と考えるのが自然である。これは粒子サイズに比べて非常に広い磁壁を考えることで理解できる。図 8 の模式図のように、各磁壁は多数の粒子にまたがった状態で  $ab$ -粒界面でピニングされている状況を考える。個々の粒子の  $ab$ -粒界面がピニングサイトとして振る舞うことを考えれば、各磁壁は膨大な数のピニングサイトを含んでいることになる。それぞれの磁壁のデピニングは、そこに含まれる最も弱いピニングサイトを起点として生じると考えれば、ピニング磁場分散は各磁壁に含まれる最も弱いピニングサイトの分布が反映される。したがって、各磁壁に含まれるピニングサイト数が十分に多ければ、試料全体でみたピニングサイト分布の最も弱いピニングサイトがすべての磁壁に含まれることになり、結果としてピニング磁場分散が非常に狭くなる。同様の現象は垂直磁化ドットの反転磁場分散でも観測されており、ドット径が大きくなるにつれて、反転磁場分散が狭くなることが報告されている<sup>(42)</sup>。こ

の  $c$ -軸方向に伸びた広い磁壁形成は、上述のようにマクロな反磁場係数を変化させない磁区生成とも非常に良く対応するものである。

以上の磁区観察と FORC 解析に基づく考察より、熱間加工 Nd-Fe-B 磁石の磁化過程は、まず  $c$ -軸方向に広い磁壁が形成され、その磁壁移動により進行するものであることが示され、その結果としてピニング磁場分散が極めて狭くなることが分かった。また、僅かではあるが保磁力の飽和磁場依存性も確認できる。このような挙動は、磁区観察の詳細な考察からも同様の結論が得られるかもしれない。しかし、本稿の冒頭でも述べた通り、これらは試料表面や薄板状に加工した試料の情報であり、バルク内部での磁化過程に関する情報を得ることは非常に難しい。FORC 解析は、このバルク内部での磁化反転挙動に関する情報を非常に高感度に提供してくれるものである。むしろ FORC 解析は万能ではなく、磁区観察、組織観察など他の分析手法と組み合わせる解析することが重要であるが、非常に細かな磁化反転挙動の変化も敏感に可視化できることも含めて、今後の永久磁石開発において非常に重要なツールとなることを期待している。

## 5. ま と め

本稿では永久磁石材料に対する FORC 解析の適用について、基礎的な部分から実際の適用事例などを紹介した。永久磁石材料以外にも FORC 解析は広く適用されており、用いる材料やその分野によって、FORC 解析に求める内容は異なり、必然的に解析や考察なども異なる。この点を十分に踏まえて解析することが FORC 解析を有効に活用する上で重要なことであろう。永久磁石材料への適用に際しては、FORC 解析の定義に基づいて磁化曲線との対応を丹念に検討することにより、バルク内部での磁化反転挙動を定量的に議論することが可能となる。さらに磁区観察や構造解析結果と併せて考察することで、得られる情報は飛躍的に増大する。このようなバルク内部の磁化反転挙動の可視化ツールとして、他に中性子を用いた小角散乱法(SANS)<sup>(43)</sup>もあり、これらの分析手法も相補的に活用することで、今後、永久磁石内部の磁化挙動がより詳細に解明されることを期待する。

本稿に記載した成果の一部は物質・材料研究機構 H. Sepelari-Amin 博士、大久保忠勝博士、宝野和博博士ならびに大同特殊鋼株式会社 秋屋貴博氏、日置敬子氏、服部 篤氏との共同研究によるものであり、文部科学省の委託事業である元素戦略プロジェクト<拠点形成型>ならびに物質・デバイス領域共同研究拠点による支援の下で実施された。

## 文 献

- (1) M. Sagawa, S. Fujimura, N. Togawa, H. Yamamoto and Y. Matsuura: J. Appl. Phys., **55**(1984), 2083-2087.
- (2) J. J. Croat, J. F. Herbst, R. W. Lee and F. E. Pinkerton: Appl.

Phys. Lett., **44**(1984), 148–149.  
 (3) S. Sugimoto: J. Phys. D: Appl. Phys., **44**(2011), 064001.  
 (4) K. Hono and H. Sepehri-Amin: Scr. Mater., **67**(2012), 530–535.  
 (5) S. Hirosawa: J. Magn. Soc. Jpn., **39**(2015), 85–95.  
 (6) H. Kronmuller: Phys. Status Solidi B, **144**(1987), 385–396.  
 (7) R. Ramesh, G. Thomas and B. M. Ma: J. Appl. Phys., **64**(1988), 6416–6423.  
 (8) X. C. Kou, H. Kronmuller, D. Givord and M. F. Rossignol: Phys. Rev. B, **50**(1994), 3849–3860.  
 (9) D. Givord, M. Rossignol and V. M. T. S. Barthem: J. Magn. Magn. Mater., **258–259**(2003), 1–5.  
 (10) S. Bance, J. Fischbacher and T. Schrefl: J. Appl. Phys., **117**(2015), 17A733.  
 (11) E. Zueco, W. Rave, R. Schafer, A. Hubert and L. Schultz: J. Magn. Magn. Mater., **190**(1998), 42–47.  
 (12) J. Thielsch, H. Stopfel, U. Wolff, V. Neu, T. G. Woodcock, K. Güth, L. Schultz and O. Gutfleisch: J. Appl. Phys., **111**(2012), 103901.  
 (13) 日置敬子, 森田敏之, 服部 篤, 入山恭彦: 電気製鋼, **86**(2016), 83–92.  
 (14) Y. Shinba, T. J. Konno, K. Ishikawa, K. Hiraga and M. Saga-wa: J. Appl. Phys., **97**(2005), 053504.  
 (15) J. Liu, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hioki, A. Hattori, T. Schrefl and K. Hono: Acta Mater., **61**(2013), 5387–5399.  
 (16) J. D. Livingston: J. Appl. Phys., **57**(1985), 4137–4139.  
 (17) M. Takezawa, T. Shimada, S. Kondo, S. Mimura, Y. Morimoto, T. Hidaka and J. Yamasaki: J. Appl. Phys., **101**(2007), 09K106.  
 (18) K. Ono, T. Araki, M. Yano, N. Miyamoto, T. Shoji, A. Kato, A. Manabe, H. Nozaki, Y. Kaneko and J. Raabe: IEEE Trans. Magn., **47**(2011), 2672–2675.  
 (19) M. Suzuki, A. Yasui, Y. Kotani, N. Tsuji, T. Nakamura and S. Hirosawa: Acta Mater., **106**(2016), 155–161.  
 (20) C. Pike, A. Roberts and K. Verosub: J. Appl. Phys., **85**(1999), 6660–6667.  
 (21) N. Sakuma, T. Ohshima, T. Shoji, Y. Suzuki, R. Sato, A. Wachi, A. Kato, Y. Kawai, A. Manabe and T. Teranishi: ACS Nano, **5**(2011), 2806–2814.  
 (22) J. E. Davies, O. Hellwig, E. E. Fullerton, G. Denbeaux, J. B. Kortright and K. Liu: Phys. Rev. B, **70**(2004), 224434.  
 (23) J. E. Davies, O. Hellwig, E. E. Fullerton, J. S. Jiang, S. D. Bader, G. T. Zimanyi and K. Liu: Appl. Phys. Lett., **86**(2005), 262503.  
 (24) J. Yin, H. Zhang, F. Hu, B. Shen and L. Q. Pan: J. Appl. Phys., **106**(2009), 103901.  
 (25) V. Bonanni, Y. Fang, R. K. Dumas, C. Zha, S. Bonetti, J. Nogués and J. Åkerman: Appl. Phys. Lett., **97**(2010), 202501.  
 (26) C. R. Pike, A. P. Roberts, M. J. Dekkers and K. L. Verosub: Phys. Earth Planet. Inter., **126**(2001), 11–25.  
 (27) C. Carvallo, A. R. Muxworthy and D. J. Dunlop: Phys. Earth Planet. Inter., **154**(2006), 308–322.  
 (28) R. Egli, A. P. Chen, M. Winklhofer, K. P. Kodama and C. S. Horng: Geochem. Geophys. Geosyst., **11**(2010), Q01Z11.  
 (29) H. Chiriac, N. Lupu, L. Stoleriu, P. Postolache and A. Stancu: J. Magn. Magn. Mater., **316**(2007), 177–180.  
 (30) C. Rong, Y. Zhang, M. J. Kramer and J. P. Liu: Phys. Lett. A, **375**(2011), 1329–1332.

(31) T. Schrefl, T. Shoji, M. Winklhofer, H. Oezelt, M. Yano and G. Zimanyi: J. Appl. Phys., **111**(2012), 07A728.  
 (32) P. Chen, C. Yang, S. Chang, M. Lee, N. Tang, S. Yen and Y. Tseng: J. Magn. Magn. Mater., **370**(2014), 45–53.  
 (33) I. D. Mayergoyz: IEEE Trans. Magn., **MAG-22**(1986), 603–608.  
 (34) R. J. Harrison and J. M. Feinberg: Geochem. Geophys. Geosyst., **9**(2008), Q05016.  
 (35) A. Stancu, C. Pike, L. Stoleriu, P. Postolache and D. Cimpoesu: J. Appl. Phys., **93**(2003), 6620–6622.  
 (36) C. R. Pike, C. A. Ross, R. T. Scalettar and G. Zimanyi: Phys. Rev. B, **71**(2005), 134407.  
 (37) D. A. Gilbert, G. T. Zimanyi, R. K. Dumas, M. Winklhofer, A. Gomez, N. Eibagi, J. L. Vicent and K. Liu: Sci. Rep., **4**(2014), 4204.  
 (38) 灰塚 弘, 服部 篤: 電気製鋼, **82**(2011), 85–88.  
 (39) T. Akiya, J. Liu, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hioki, A. Hattori and K. Hon: Scr. Mater., **81**(2014), 48–51.  
 (40) T. Yomogita, S. Okamoto, N. Kikuchi, O. Kitakami, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hono, T. Akiy, K. Hioki and A. Hattori: Proc. 24th Inter. Workshop on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and Their Applications (REPM 2016), Darmstadt, Germany, (2016), 649–653.  
 (41) S. Okamoto, R. Goto, N. Kikuchi, O. Kitakami, T. Akiya, H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, K. Hono, K. Hioki and A. Hattori: J. Appl. Phys., **118**(2015), 223903.  
 (42) T. Thomson, G. Hu and B. D. Terris: Phys. Rev. Lett., **96**(2006), 257204.  
 (43) M. Yano, K. Ono, M. Harada, A. Manabe, T. Shoji, A. Kato and J. Kohlbrecher: J. Appl. Phys., **115**(2014), 17A730.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

岡本 聡

1997年3月 東北大学大学院工学研究科修士課程修了

1997年4月 東北大学 科学計測研究所 助手

2001年4月 東北大学 多元物質科学研究所 助手

2007年4月 現職

専門分野: 磁性薄膜, 磁気デバイス

©磁性薄膜の物性, ナノスケール磁気デバイスの磁化制御技術開発, 永久磁石材料の磁化反過程解析などを中心に研究を進めている。

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



岡本 聡

蓬田貴裕

宮澤和則

菊池伸明



北上 修

渡辺奈生巳

吹田尚久

# 結晶配向性を有する多結晶体の弾性率から 単結晶弾性率を決定する方法の構築

多根正和\*

## 1. はじめに

弾性特性は、構造材料、機能材料および生体材料において最も基本的な力学特性である<sup>(1)(2)</sup>。特に、単結晶の弾性特性は、材料設計だけではなく、有限要素法等を用いたモデル計算<sup>(3)</sup>や Phase-field 法を用いた組織形成シミュレーション等<sup>(4)</sup>の計算機シミュレーションおよびモデリングにおいても必要とされる物性値である。さらに、単結晶の弾性特性は X 線および中性子回折を用いて実施される、応力負荷時の格子ひずみ測定を用いた塑性変形の解析においても用いられている<sup>(5)</sup>。

このように単結晶の弾性特性は材料科学において極めて重要な物理特性であるにもかかわらず、多くの材料種において明らかとなっていない。その理由として、単結晶育成が困難なことが挙げられる(単結晶の育成に要する実験的な労力もその一因であるだろう)。単結晶弾性率の測定に、一般的な測定法である超音波パルスエコー法や超音波共鳴法を用いる場合、通常は数 mm 角程度の単結晶試料が必要である<sup>(6)(7)</sup>。しかし、多くの材料種においてそのような単結晶を育成することは困難である。例えば、Mg 合金においては、単結晶育成の困難さのため、多くの組成や結晶相において単結晶弾性率が明らかにされていない。

単結晶育成の困難さを回避するため、微細結晶で構成された多結晶試料を利用して、単結晶の弾性率を求めるためのいくつかの手法がこれまでに提案されている。最もよく知られている手法は、X 線、中性子線、および放射光施設を用いる方法である。この方法では、多結晶試料に対して応力負荷を行い、構成している結晶粒の複数の結晶面の格子ひずみを測定し、それを解析することによって、単結晶弾性率を決定する<sup>(8)</sup>。そのため、精度の良い測定を行うために、中性子線

もしくは放射光施設の利用がなされている。この手法は、主に立方晶系単結晶の弾性率の推定に利用されており、結晶の対称性が低く独立な弾性スティフネスの数が多い他の結晶系に対する適用例は少ない。これらの点は手法の汎用性を考える上で重要である。最近では、ナノインデンテーション法、結晶方位分布解析および有限要素解析を組み合わせることによって、多結晶を構成している複数の結晶粒の荷重-変位曲線を調べることにより、単結晶弾性率を推定する方法も提案されている<sup>(9)</sup>。この方法も、立方晶系の単結晶に対して適用されているが、他の結晶系には適用例がない。さらに、結晶粒毎の荷重-変位曲線の測定が必要であるため、ナノスケールの結晶で構成された多結晶体への適用は不向きである。このことも、手法の汎用性を考える上で重要である。先に述べた 2 つの手法は、応力負荷(変形)時の結晶粒内のひずみを直接的に測定することによって単結晶弾性率を決定するというアイデアに基づいている。

著者は、これまでの研究において、従来法とは異なる単結晶弾性率の決定手法として、結晶配向性を有する多結晶体の巨視的(平均的な)弾性率の測定と多結晶を構成している結晶粒の結晶配向分布の解析により、単結晶弾性率を決定するという新規な手法を提案している。この方法は、多結晶体の巨視的な弾性特性(応力-ひずみ関係)から、それを構成している単結晶の弾性特性を求めるため、結晶の粒内ひずみ測定をベースとした従来法とは異なるアイデアに基づいている。新規に提案した手法は、多結晶の弾性率から単結晶弾性率を解析する方法の違いに起因して、inverse Voigt-Reuss-Hill (iVRH) 近似<sup>(10)</sup>および inverse Self-consistent (iSC) 近似<sup>(11)</sup>と名付けられている。これまでに、これらの手法を用いて、単結晶育成が困難なため単結晶弾性率が決定されなかった Mg-Zn-Y 合金の長周期積層型規則 (LPSO) 相<sup>(10)(12)</sup>、純 Ti の  $\omega$  相<sup>(13)</sup>および AZ31Mg 合金<sup>(11)</sup>の単結晶の弾性特性を

\* 大阪大学産業科学研究所; 准教授(〒567-0047 茨木市美穂ヶ丘 8-1)

Extraction of Single-crystalline Elastic Constants from Polycrystalline Samples with Crystallographic Texture; Masakazu Tane (The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, Ibaraki)

Keywords: *elastic properties, single crystal, crystallographic texture, micromechanics, polycrystal*

2017年6月23日受理[doi:10.2320/materia.56.541]

明らかにしてきた。本稿では、考案した iVRH 近似および iSC 近似について紹介する。

## 2. inverse Voigt–Reuss–Hill 近似

多結晶体の弾性率から単結晶弾性率を決定するための手法である iVRH 近似を説明するにあたり、まず初めに、単結晶弾性率から多結晶弾性率を推定する方法について説明する。単結晶の全ての独立な弾性スティフネスの成分が既知であれば、それらの値と多結晶体を構成する結晶の配向分布の情報から、多結晶体の巨視的な弾性スティフネスを計算することができる。この計算のための最も簡便な手法は Voigt–Reuss–Hill (VRH) 近似である。iVRH 近似は VRH 近似をベースとして構築された手法であり、VRH 近似とは逆に多結晶体の弾性スティフネスから単結晶の弾性スティフネスを推定することができる。

次に、iVRH 近似のベースとなる Voigt 近似の詳細について説明する。応力負荷により、多結晶体を構成する結晶粒に均一なひずみが発生すると仮定すると、多結晶体の巨視的な弾性スティフネステンソル  $C_{ijkl}^{pc(V)}$  は、単結晶の弾性スティフネスと結晶配向分布  $f(\alpha, \beta, \phi)$  を用いて、次式で与えられる (14)–(16)：

$$C_{ijkl}^{pc(V)} = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi) \sin \alpha \, d\alpha d\beta d\phi \quad (1)$$

ここで、 $C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi)$  は結晶粒の座標系  $\mathbf{x}'$  と単結晶の座標系  $\mathbf{x}$  との間のオイラー角  $\alpha, \beta$  および  $\phi$  により、単結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{sc}$  を結晶粒の座標系に座標変換した結晶粒 (単結晶) の弾性スティフネスである。オイラー角の  $N$  極は多結晶座標の  $x_3$  軸方向である。式 (1) における結晶配向分布  $f(\alpha, \beta, \phi)$  には次式が成立する。

$$\frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) \sin \alpha \, d\alpha d\beta d\phi = 1 \quad (2)$$

式 (1) は多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{pc(V)}$  が単結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{sc}$  の線形結合で表されることを意味する。

inverse Voigt (iVoigt) 近似は、多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$  と結晶配向分布  $f(\alpha, \beta, \phi)$  が既知である場合 (実測されている場合)、式 (1) に基づいて未知数である単結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{sc}$  を決定する方法である。この方法では、多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{pc(V)}$  が、多結晶の弾性スティフネスの実験値  $C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$  と一致するように未知数である単結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{sc}$  を決定する。多結晶と単結晶が共に六方晶系の弾性対称性を示す場合、すなわち、多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{pc(V)}$  と単結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{sc}$  の独立な成分の数が等しい場合、式 (1) に  $C_{ijkl}^{pc(V)} = C_{ijkl}^{pc(\text{meas})}$  を代入することによって得られる連立方程式を解くことにより、 $C_{ijkl}^{sc}$  を求めることができる (10) (12)。一方、多結晶の独立な弾性スティフネスの数が単結晶の弾性スティフネスの数よりも大きい場合、単結晶の弾性スティフネスは以下に示すような逆問題を解くことによって決定される。

一例として、立方晶系の単結晶によって構成され、柱状晶

組織等によって巨視的に六方晶の弾性対称性を有する多結晶の弾性スティフネスから、単結晶の弾性スティフネスを決定する場合について考える。この場合、式 (1) の多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{pc(V)}$  は次式で与えられる (11)。

$$C_{ijkl}^{pc(V)} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} f'(\alpha) C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (3)$$

ここで、 $f'(\alpha)$  は軸対称の繊維状集合組織 (fiber texture) における結晶配向分布であり、

$$f'(\alpha) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha, \beta, \phi) \, d\phi d\beta \quad (4)$$

で与えられる。 $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$  は、単一のオイラー角  $\alpha$  を有する結晶粒で構成され、巨視的に六方晶系の弾性対称性を示す多結晶の弾性スティフネスである。

$$C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} C_{ijkl}^{sc'}(\alpha, \beta, \phi) \, d\phi d\beta \quad (5)$$

単一のオイラー角  $\alpha$  を有する多結晶の弾性スティフネス  $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$  に注目した場合、式 (5) は立方晶系単結晶の  $C_{ijkl}^{sc}$  と  $C_{ijkl}^{fb(V)}(\alpha)$  の行列表記からなる  $\mathbf{c}^{sc} = (c_{11}^{sc}, c_{12}^{sc}, c_{44}^{sc})^T$  および  $\mathbf{c}^{fb(V)} = (c_{11}^{fb(V)}, c_{33}^{fb(V)}, c_{12}^{fb(V)}, c_{13}^{fb(V)}, c_{44}^{fb(V)})^T$  を用いて次式で表される。

$$\mathbf{c}^{fb(V)} = \mathbf{M}_V(\alpha) \mathbf{c}^{sc} \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{M}_V(\alpha)$  は、 $\alpha$  を変数とする  $5 \times 3$  行列である (11)。

配向角  $\alpha$  に分布が存在する場合、多結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{pc(V)}$  は次式で与えられる。

$$\mathbf{c}^{pc(V)} = \overline{\mathbf{M}}_V \mathbf{c}^{sc} \quad (7)$$

$$\overline{\mathbf{M}}_V = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{M}_V(\alpha) f'(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (8)$$

ここで、式 (7) は式 (3) に対応している。

iVoigt 近似では、単結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{sc}$  を未知数として計算される多結晶の弾性スティフネス  $c_{ij}^{pc(V)}$  と多結晶の弾性スティフネスの実験値  $c_{ij}^{pc(\text{meas})}$  との差

$$F_{sc}(c_{11}^{sc(V)}, c_{12}^{sc(V)}, c_{44}^{sc(V)}) = \sum_{ij=11,22,\dots,66} \left\{ \frac{c_{ij}^{pc(V)} - c_{ij}^{pc(\text{meas})}}{c_{ij}^{pc(\text{meas})}} \right\}^2 \quad (9)$$

を最小化する  $\mathbf{c}^{sc}$  を決定する。ここで、総和 (summation) は斜方晶系弾性体の 9 個の独立な弾性スティフネスに適用される。

Reuss 近似では、六方晶系の弾性対称性を有する多結晶の弾性コンプライアンス  $\mathbf{s}^{pc(R)}$  は、立方晶系の弾性コンプライアンス  $\mathbf{s}^{sc(R)} (= \mathbf{s}_{ij}^{sc(R)})$  を用いて次式で与えられる (17)。

$$\mathbf{s}^{pc(R)} = \overline{\mathbf{M}}_R \mathbf{s}^{sc(R)} \quad (10)$$

$$\overline{\mathbf{M}}_R = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{M}_R(\alpha) f'(\alpha) \sin \alpha \, d\alpha \quad (11)$$

ここで、 $\overline{\mathbf{M}}_R$  は  $\alpha$  を変数とする  $5 \times 3$  行列である (11)。inverse Reuss (iReuss) 近似では、iVoigt 近似の場合と同様に、Reuss 近似によって得られる多結晶の弾性スティフネス  $c_{ij}^{pc(R)} (= \{s_{ij}^{pc(R)}\}^{-1})$  と多結晶の弾性スティフネスの実験値  $c_{ij}^{pc(\text{meas})}$  との差が最小となるように、立方晶系単結晶の弾性スティフネス  $c_{ij}^{sc(R)} (= \{s_{ij}^{sc(R)}\}^{-1})$  を決定する。

VRH 近似においては、多結晶の弾性率は Voigt 近似と Reuss 近似の平均値によって与えられる (14)。iVRH 近似に

においても、単結晶の弾性スティフネスは iVoigt 近似と iReuss 近似の平均値で与えられる<sup>(11)</sup>。

$$c_{ij}^{\text{sc(H)}} = \frac{c_{ij}^{\text{sc(V)}} + c_{ij}^{\text{sc(R)}}}{2} \quad (12)$$

### 3. inverse Self-consistent 近似

まず、単結晶弾性率から多結晶弾性率を計算する方法である Self-consistent 近似を説明し、次に多結晶弾性率から単結晶弾性率を決定するための iSC 近似について説明する。

有効媒体近似<sup>(18)</sup>と Eshelby の介在物理論<sup>(19)</sup>に基づいた Self-consistent 近似では、多結晶の弾性スティフネスの行列表記 ( $\mathbf{c}^{\text{pc}}$ ) は次式で与えられる<sup>(20)-(22)</sup>。

$$\mathbf{c}^{\text{pc}} = \langle \mathbf{c}^{\text{sc}(i)} \mathbf{A}^{(i)} \rangle \langle \mathbf{A}^{(i)} \rangle^{-1} \quad (13)$$

ここで、 $\mathbf{A}^{(i)}$  は  $\bar{\mathbf{e}}^{\text{sc}(i)} = \mathbf{A}^{(i)} \bar{\mathbf{e}}^{\text{pc}}$  で定義されるひずみ集中係数である。 $\bar{\mathbf{e}}^{\text{pc}}$  は多結晶体の平均ひずみであり、 $\bar{\mathbf{e}}^{\text{sc}(i)}$  は結晶粒内のひずみである。 $\mathbf{c}^{\text{sc}(i)}$  は単結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{\text{sc}}$  をオイラー角  $\alpha, \beta$  および  $\phi$  によって結晶粒の座標系に座標変換した結晶粒(単結晶)の弾性スティフネスである。Eshelby の等価介在物理論<sup>(19)</sup>により、ひずみ集中係数は次式で与えられる。

$$\mathbf{A}^{(i)} = [\mathbf{I} + \mathbf{S}^{(i)} (\mathbf{c}^{\text{pc}})^{-1} (\mathbf{c}^{\text{sc}(i)} - \mathbf{c}^{\text{pc}})]^{-1} \quad (14)$$

ここで、 $\mathbf{I}$  は単位行列であり、 $\mathbf{S}^{(i)}$  は多結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{\text{pc}}$  と結晶粒の形状に依存する Eshelby テンソル<sup>(16)(23)</sup> の行列表記である。 $\langle \mathbf{X} \rangle$  は多結晶を構成する結晶粒の結晶配向分布  $f(\alpha, \beta, \phi)$  を考慮した行列  $\mathbf{X}$  の配向平均である。多結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{\text{pc}}$  を得るためには、Self-consistent 計算によって式(13)および式(14)を満足する  $\mathbf{c}^{\text{pc}}$  を決定する。

Self-consistent 近似においては、多結晶内の結晶粒は楕円体として近似され、多結晶の弾性スティフネスと等価な弾性スティフネスを有する均質な媒体に埋め込まれる。このようなモデルに対して、式(14)におけるひずみ集中係数  $\mathbf{A}^{(i)}$  を計算することにより、結晶粒の結晶配向性、弾性異方性および形状を反映した結晶粒間の弾性相互作用を考慮することができる。この点は、結晶粒間の弾性相互作用の影響を直接的に考慮しない VRH 近似と比較して優れている。

iSC 近似においては、式(13)において計算された多結晶の弾性スティフネス  $c_{ij}^{\text{pc}}$  とその実験値  $c_{ij}^{\text{pc(meas)}}$  との差を最小化するように、単結晶の弾性スティフネス  $\mathbf{c}^{\text{sc}}$  を決定する。iSC 近似および iVRH 近似を用いて、単結晶の弾性スティフネスを決定するためには、多結晶の独立な弾性スティフネスの数が単結晶の独立な弾性スティフネスの数と等しいか、それより大きい必要がある。

### 4. inverse Voigt-Reuss-Hill および inverse self-consistent 近似の精度検証

#### (1) 柱状晶組織を有する多結晶銅

単結晶弾性率が既知である純銅単結晶(立方晶系)を対象として、iVRH および iSC 近似の単結晶弾性率の決定精度を検証する。また、純銅は比較的強い弾性異方性を示すことが知

られていることから、その弾性異方性が単結晶弾性率の決定精度に及ぼす影響についても考察する。

図1に iVRH および iSC 近似を適用する、一方向凝固によって作製された柱状晶組織を有する多結晶銅の光学顕微鏡観察写真を示す。図1(a)および(b)はそれぞれ、多結晶銅の凝固方向に垂直および平行な断面の観察写真である。結晶粒は凝固方向に伸長しており、一方向凝固により柱状晶組織が形成されていることがわかる。また、X線極点図を用いた解析により、凝固方向に結晶の $\langle 100 \rangle$ が強く配向し、凝固方向に垂直な方向への結晶配向はほぼランダムであることが明らかとなった<sup>(11)</sup>。このような集合組織を反映し、巨視的にはおおそ六方晶系の弾性対称性を有する多結晶銅試料の全ての独立な弾性スティフネスを超音波共鳴法と電磁超音波共鳴法を組み合わせた手法<sup>(24)</sup>を用いて測定した。得られた弾性スティフネスとX線極点図の情報に基づき、iVRH および iSC 近似を用いて単結晶銅の弾性スティフネスを求めた<sup>(11)</sup>。

図2(a)に iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶銅の弾性スティフネス  $c_{11}$  を示す。iSC 近似においては、多結晶内の銅結晶粒の形状を、アスペクト比  $a_3/a_1$  を 1, 2, 3, 5, 10, もしくは  $\infty$  とする回転楕円体に近似した。プロットおよびエラーバーはそれぞれ11個の測定値から得られた平均値と標準偏差を表す。比較として、単結晶銅試料を用いて直接的に得られた弾性スティフネスの文献値(Ref. 25)と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを示す。iSC 近似によって得られた  $c_{11}$  は、アスペクト比  $a_3/a_1$  の増加に伴って増加し、文献値との差はアスペクト比  $\infty$  を仮定した場合に最も小さい。 $c_{12}$  においても、図2(b)に示すように、文献値(Ref.)と iSC 近似との差は  $a_3/a_1$  の増加に伴って減少する。これは、図1に示す多結晶銅の結晶粒の形状に対応したアスペクト比において、最も精度良く弾性スティフネスを決定可能であることを意味する。図2(c)に示すように、 $c_{44}$  における文献値(Ref.)と iSC 近似との差は  $a_3/a_1$  に依存せず非常に小さい。ここで、iVRH 近似に着目すると、図2(a)-(c)に示すように、全ての弾性スティフネスの成分において iVRH 近似と文献値と

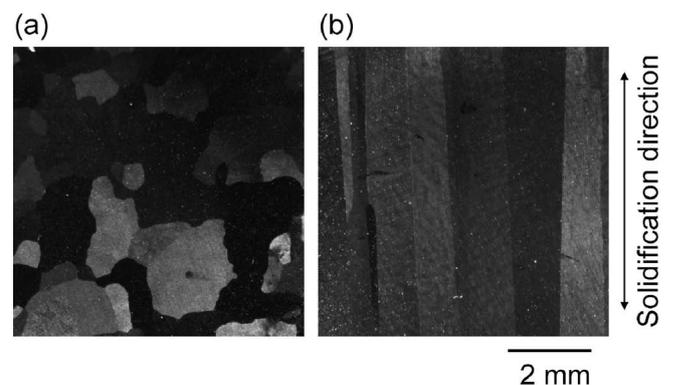


図1 一方向凝固法によって作製された多結晶銅の微細組織の光学顕微鏡観察写真：凝固方向に(a)垂直および(b)平行な断面。(Reprinted from Ref. 11 with permission from Elsevier.)

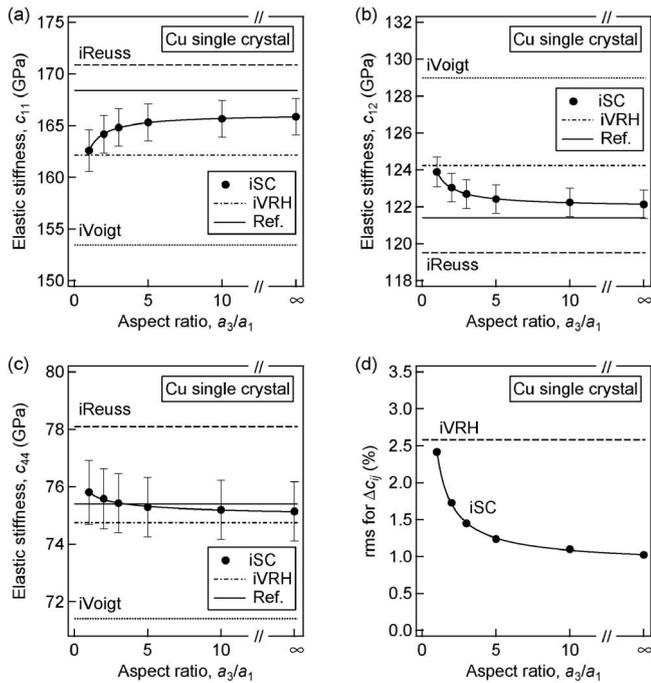


図2 iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶銅の弾性スティフネス: (a)  $c_{11}$ , (b)  $c_{12}$  および (c)  $c_{44}$ . iSC 近似では、多結晶内の銅結晶粒の形状を、アスペクト比  $a_3/a_1$  を 1, 2, 3, 5, 10, もしくは  $\infty$  とする回転楕円体に近似した. 比較として、単結晶銅試料を用いて直接的に測定された弾性スティフネスの文献値 (Ref. 25) と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを図中に示す. (d) iSC 近似と文献値<sup>(25)</sup>の弾性スティフネスの差の二乗平均平方根 (rms) 値および iVRH 近似と文献値の差の rms 値. (Reprinted from Ref. 11 with permission from Elsevier.)

の差は、iSC 近似と文献値との差よりも大きい. これは、単結晶銅の弾性スティフネスの決定において、iVRH 近似よりも iSC 近似の方が優れていることを意味する. 図 2(d) に iSC 近似および iVRH 近似により得られた単結晶銅の弾性スティフネスと文献値<sup>(25)</sup>との差の二乗平均平方根 (rms) 値を示す. iSC 近似における rms 値は、アスペクト比の増加に伴って減少し、すべてのアスペクト比において iVRH 近似の rms 値よりも小さい. これも iSC 近似の優位性を示す結果である. また、iSC 近似において、アスペクト比  $\infty$  での rms 値は 1% 程度であり、非常に高い精度で単結晶弾性率を決定可能であることがわかる.

ここで、iSC 近似の優位性について、単結晶の弾性異方性を反映した多結晶内の弾性不均質性に着目して考察する. 多結晶内の弾性不均質性を評価するにあたり、iVoigt 近似と iReuss 近似との差に着目する. 図 2(a)-(c) に示すように iVoigt 近似と iReuss 近似によって計算される  $c_{ij}$  の値の差は、大きい. Voigt 近似と Reuss 近似との間の差は、多結晶体内の弾性不均質性の増加に伴って増加する<sup>(26)</sup> ことから、iVoigt 近似と iReuss 近似との差は多結晶銅中の弾性不均質性が強いことを意味している. この弾性不均質性により、結晶

粒間に強い弾性相互作用が働く. このため、多結晶銅の弾性スティフネスは結晶粒の形状に影響を受け、結果的に、結晶粒のアスペクト比は単結晶の弾性スティフネスの決定に影響を与える. iSC 近似では、このような結晶粒の形状を反映した結晶粒間の弾性相互作用を考慮することができるが、iVRH 近似では、弾性相互作用は考慮されない. そのため、単結晶の弾性異方性を反映し、弾性不均質性の強い多結晶銅に対しては、iVRH 近似と比較して iSC 近似の方が有効である.

## (2) 押出加工によって作製された純 Mg 多結晶

iVRH および iSC 近似を押出加工によって作製された純 Mg 多結晶に適用する. ここで、純 Mg 多結晶においては、押出方向に垂直な方向に結晶の [0001] 方位が配向し、巨視的に六方晶系の弾性対称性を示す. また、結晶粒を回転楕円体に近似した際のアスペクト比は 1.8 程度であり、その長軸はランダムに配向している<sup>(11)</sup>. 純 Mg 単結晶は六方晶系の弾性対称性を示し、比較的弱い弾性異方性を示すという特徴を有しており、この弱い弾性異方性が単結晶弾性率決定に与える影響についても考察する.

iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶 Mg の弾性スティフネス  $c_{11}$  を図 3(a) に示す. 比較として、単結晶 Mg 試料を用いて直接的に測定された弾性スティフネスの文献値 (Ref. 27) と iVoigt 近似および iReuss 近似によって得られた弾性スティフネスを図中に示す. iSC 近似によって得られた  $c_{11}$  は、アスペクト比  $a_3/a_1$  にほとんど依存せず、全てのアスペクト比において文献値と非常に良く一致する. このことは、図 3(b) に示すように、 $c_{66}$  においても同様であり、アスペクト比の考慮は単結晶弾性率にほとんど影響を与えない. また、iVRH 近似に着目すると、図 3(a) および (b) に示すように、2 つの弾性スティフネスの成分において iVRH 近似と文献値との差も非常に小さい.

iSC 近似および iVRH 近似によって得られた単結晶 Mg の弾性スティフネスと文献値<sup>(27)</sup>との差の rms 値を図 3(c) に示す. iSC 近似における rms 値は、アスペクト比にほとんど依存せず、iVRH 近似の rms 値とほぼ同様である. 両近似法の rms 値は 1% 程度であり、高い精度で単結晶弾性率を決定可能であることがわかる. このように、単結晶 Mg の場合においては、多結晶銅の場合とは異なり、iSC 近似と iVRH 近似の間に単結晶弾性率の決定精度に大きな差はない.

純 Mg 単結晶の弾性スティフネスの決定において、iSC 近似と iVRH 近似との差が小さいことに対して、多結晶 Mg の弾性不均質性に着目して考察する. 図 3(a) および (b) に示すように、単結晶銅の場合とは異なり、iVoigt 近似と iReuss 近似によって計算される  $c_{ij}$  の値の差は、極めて小さい. これは、多結晶銅と比較して、単結晶の弾性異方性に起因した多結晶 Mg 内の弾性不均質性が極めて小さいことを意味している. この弾性的な均質性により、結晶粒間の弾性相互作用が小さい. このため、iSC 近似において、結晶粒のアスペクト比は単結晶の弾性率の決定に影響を与えない. このように、単結晶の弾性異方性が弱く、多結晶の弾性不均質性が小さい多結晶においては、iSC 近似よりも計算が簡便な



# マグネシウムケイ化物の結晶構造と熱電性能

林 慶\* 窪内 将隆\*\*

## 1. はじめに

今日、我々は大量のエネルギーを消費することで、日々の生活を送っている。特に電気エネルギーに対する依存は大きく、多くの人々にとって電気が使えなくなると、経済活動は停止し、日常生活は成り立たないであろう。そこで、我々は化石燃料、原子力、水力、太陽光といった様々な方法で電気エネルギーを生み出している。しかし、我々が有効に利用できているエネルギーは30%程度で、残りの70%近くの莫大なエネルギーは、排熱として捨てられている。この無駄に捨てられている未使用の排熱を、有用な電気エネルギーに変換する方法として、熱電発電が注目されている。

熱電発電はゼーベック効果を利用して、熱を電気に変換する方法である。ゼーベック効果とは、2種類の異なる物質の両端を接合し、その接点に温度差をつけることで起電力が生じる現象である。熱電発電は有毒ガスを発生しないクリーンな発電方法であり、駆動部がないためメンテナンスフリーで長期間使用できるといった利点がある。また、温度勾配さえあれば規模にかかわらず発電するので、火力発電所やゴミ焼却所など大規模なものだけでなく、自動車や一般家庭などの小規模なものにも利用できる。2015年に国連が定めた持続可能な開発目標(SDGs)の一つに「すべての人々に手ごろに信頼でき、持続可能かつ近代的なエネルギーへのアクセスを確保する」とあるように、これらの排熱を利用した「サーマルリサイクル」は、持続可能な社会を実現するための喫緊の課題である。

図1はπ型熱電発電モジュールを用いた熱電発電の模式図である。p型半導体とn型半導体をπ型に接続し、接合部の一端を加熱、もう一端を冷却することでそれぞれの電気伝導キャリアが拡散し、電流が流れる仕組みである。熱電材料の性能は、無次元性能指数 $zT$ で評価される。 $zT$ はゼーベ

ック係数 $S(V/K)$ 、電気伝導率 $\sigma(S/m)$ 、熱伝導率 $\kappa(W/mK)$ および絶対温度 $T(K)$ を用いて、 $zT=S^2\sigma T/\kappa$ と表される。特に $S^2\sigma$ の部分を出力因子 $PF$ と呼ぶ。 $zT$ が高いほど変換効率が高くなる。従来、加熱源温度600 K、冷却源温度300 Kのときに熱電変換効率が10%程度となる $zT=1$ が実用化の目安とされていたが、近年の $zT$ の著しい向上から<sup>(1)-(4)</sup>、現在は $zT=2$ を目標とする傾向にある。

熱電材料として、我々が注目しているのが $Mg_2Si$ 系半導体である。 $Mg_2Si$ 系半導体は毒性が低い、主な原料であるMgとSiは地殻に大量に存在するため安価であるといったメリットを有する。 $Mg_2Si$ の結晶構造は立方晶系空間群の逆蛍石構造(格子定数 $a=0.6351\text{ nm}$ )であり、エネルギーギャップ $E_g=0.7\text{ eV}$ の間接遷移型 narrow gap 半導体である<sup>(5)(6)</sup>。Si原子が $4a(0\ 0\ 0)$ サイトを、Mg原子が $8c(1/4\ 1/4\ 1/4)$ サイトをそれぞれ占有している(図2)。 $Mg_2Si$ は熱電材料として古くから研究されているが、電気伝導率が低く、熱伝導率が高いため、それ自体の $zT$ は高くない。そこで、 $Mg_2Si$ にSbやBiをドーブして電気伝導率を増大した

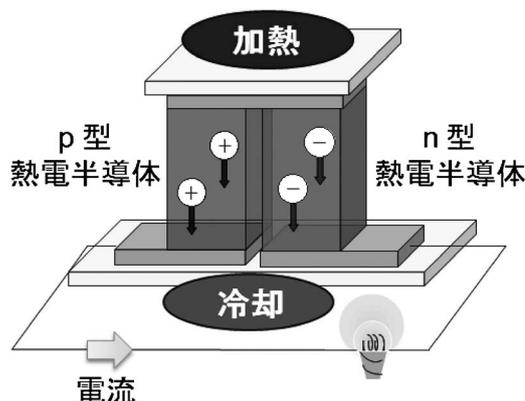


図1 π型熱電発電モジュールを用いた熱電発電の模式図。

\* 東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻；准教授(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-05)

\*\* 産業技術総合研究所無機機能材料研究部門；研究員

Crystal Structure and Thermoelectric Properties of Magnesium Silicide; Kei Hayashi\*, Masataka Kubouchi\*\* (\*Department of Applied Physics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai. \*\* Inorganic Functional Materials Research Institute, Advanced Industrial Science and Technology, Ikeda)

Keywords: *magnesium silicide, interstitial site, single-crystal X-ray diffraction, thermoelectric properties, electronic structure calculation*

2017年6月26日受理[doi:10.2320/materia.56.546]

り、Siサイトを原子半径が大きいGeやSnで部分置換して熱伝導率を低減したりして、 $zT$ の向上が行われてきた<sup>(7)-(11)</sup>。現在の最高の熱電性能はn型で $zT=1.63$  (600 K)に達しており<sup>(12)</sup>、実用化が期待されている。一方、p型の熱電性能は $zT=0.7$  (673 K)に過ぎず<sup>(13)</sup>、n型と比べると低い。その原因として、 $Mg_2Si$ の結晶構造に存在する点欠陥が挙げられる。

$Mg_2Si$ の点欠陥については、形成エネルギー(点欠陥が生じるために必要なエネルギー)の観点から議論されている。Katoら<sup>(14)</sup>は、第一原理計算によって $Mg_2Si$ の単位格子の2倍周期のスーパーセル( $Mg_{64}Si_{32}$ )の中に点欠陥が生じるときの形成エネルギーを計算し、格子間サイト $4b(1/2\ 1/2\ 1/2)$ に若干量のMgが存在する格子間サイト欠陥( $Mg_i$ )が最も起こりやすいことを報告した。また、Imaiら<sup>(15)</sup>は、MgとSiのdivacancyとtrivacancyを考慮しても $Mg_i$ が生じる可能性が最も高いと述べている。格子間サイトにMgが侵入するとイオン化して電子を放出することから( $Mg \rightarrow Mg_i^{2+} + 2e^-$ )、 $Mg_i$ はドナー型の欠陥である。 $Mg_2Si$ 系半導体でn型よりp型の熱電性能が低いのは、 $Mg_i$ によって放出された電子キャリアがp型ドーピングを阻害しているためと予想される。

前述した高性能のn型、p型熱電性能は $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系で達成されていることから、 $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系の伝導型をみてみよう。図3は、磯田ら<sup>(16)</sup>が調査した $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系のSn組成 $x$ とSeebeck係数の関係である。 $x \leq 0.7$ の範囲ではSeebeck係数が負(n型)であるのに対し、 $x > 0.7$ の範囲では $x=1.0$  ( $Mg_2Sn$ )を除いて正(p型)になっている。図4に第一原理計算による $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系( $x=0.2$ および $x=0.8$ )の電子エネルギーバンド構造を示す<sup>(17)</sup>。Sn組成 $x$ が増加すると、X点において伝導帯の下端がフェルミ準位 $E_F$ に近づくことがわかる。しかし、この振る舞いは、Sn組成 $x$ が増加するとむしろn型に遷移することを予想させるものであり、なぜp型に遷移するのか明らかになっていない。考えられる可能性のひとつは、 $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系にも $Mg_i$ が存在し、その量がSn組成 $x$ によって変化することである。Sn組成 $x$ の増加にともなって $Mg_i$ 量が減少していくと仮定すると、p型に遷移することを説明することができる。

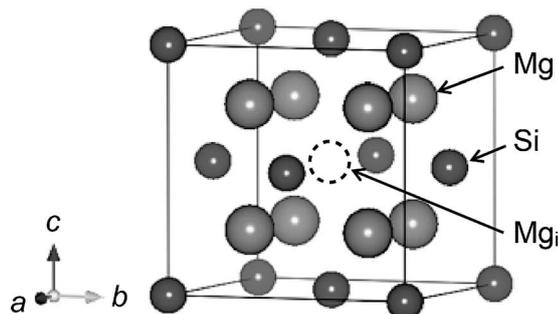


図2  $Mg_2Si$ の結晶構造。

以上で述べてきたように、 $Mg_2Si$ 系半導体には格子間サイト欠陥の $Mg_i$ が存在しうることを示す計算結果や間接的な実験結果が報告されているが、その量を定量的に評価した研究はない。 $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系では、Sn組成 $x$ と伝導型の関係に基づいて、n型では $0.4 \leq x \leq 0.6$ の組成、p型では $0.5 \leq x \leq 0.7$ の組成の試料で熱電性能の向上が試みられているが<sup>(7)-(11)(18)-(24)</sup>、n型、p型のいずれにおいても $Mg_i$ が熱電性能の良し悪しを決めていることは想像に難くない。そこで、本研究では、 $Mg_2Si$ に本当に $Mg_i$ が存在するのか実験的に明らかにすることにした。以下では、Mgを過剰に仕込んで作製した $Mg_2Si$ の $Mg_i$ 量を定量評価した結果を述べ<sup>(25)</sup>、さらに格子間サイト欠陥を制御することで熱電性能を向上できる<sup>(26)</sup>ことを示す。

## 2. $Mg_{2+z}Si$ の作製および点欠陥の定量的評価

まず、MgとSiの単体から $Mg_{2+z}Si$ 多結晶試料を合成して、Mgの仕込み組成と $Mg_i$ 量の相関を明らかにすることを試みた。試料の酸化を防ぐため、グローブボックス内でMg粉末(3N, 180  $\mu m$ )とSi粉末(4N, 45  $\mu m$ )を $(2+z):1$ の

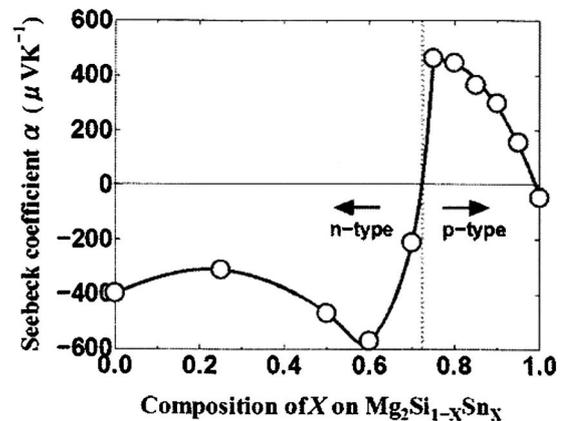


図3  $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系の組成 $x$ と室温におけるゼーベック係数の関係<sup>(16)</sup>。

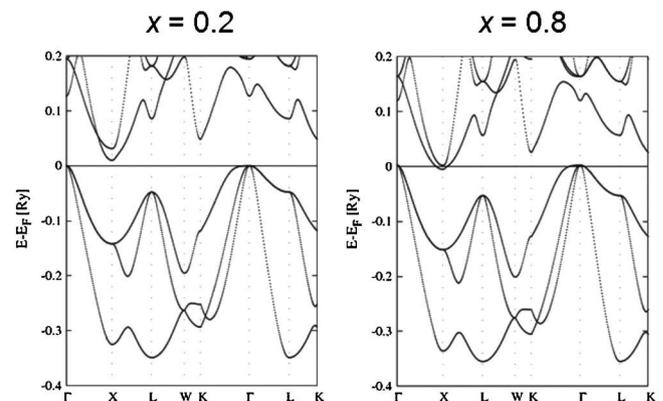


図4  $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$ 三元系( $x=0.2, 0.8$ )の電子エネルギーバンド構造<sup>(17)</sup>。

モル比で秤量し、10分間混合した。混合粉末をグローブボックス内でカーボンダイに詰めたのち、温度 1123 K、圧力 30 MPa、保持時間10分の条件で SPS 焼結 (Spark Plasma Sintering, 放電プラズマ焼結) を行った。図 5 に SPS 焼結後の  $Mg_{2+z}Si$  試料の粉末 XRD (X-ray diffraction, X 線回折) パターンおよび  $Mg_2Si$  のシミュレーションパターンをまとめる。すべての試料において  $Mg_2Si$  が主相であり、Mg を過剰に仕込んだ  $z=0.5$  試料においても、粉末 XRD パターンには Mg などの第二相は確認されなかったが、走査型電子顕微鏡を用いて微細組織観察を行ったところ、作製した試料には粉末 XRD の検出感度以下の微量の Mg 相が存在することが判明した。Mg を過剰に仕込んだにもかかわらず残存する Mg 相が微量だったのは、焼結温度が Mg の融点である 923 K を上回っており、過剰 Mg が焼結中にカーボンダイから漏出したことが主な原因である。もうひとつの原因として、過剰に仕込んだ Mg が格子間サイトを占有している可能性がある。そこで、測定した粉末 XRD パターンのリートベルト解析を行い、占有率の精密化を試みた。測定した粉末 XRD パターンをシミュレーションのそれと比較すると、111ピークが他のピークに比べて強く現れていることがわかる。これは、逆蛍石構造によく見られる (111) 面でのへき開性を  $Mg_2Si$  が有していることに対応している。そこで、選択配向パラメータを導入したリートベルト解析による結晶構造解析を試みた。Mg<sub>i</sub> の占有率は有限の値が得られたが、誤差がその値よりも大きくなり、Mg<sub>i</sub> が存在すると結論することはできなかった<sup>(27)</sup>。

より精度よく Mg<sub>i</sub> 量を定量評価するために、試料形状に応じて吸収補正をかけることができる単結晶 XRD を行った。測定には、 $Mg_{2+z}Si$  多結晶試料から採取した数 10 μm サイズの微小な単結晶を使用した。測定結果の解析に用いた結晶構造モデルは、(a) Mg 欠損がある  $Mg_2Si$  と (b) Mg 欠損

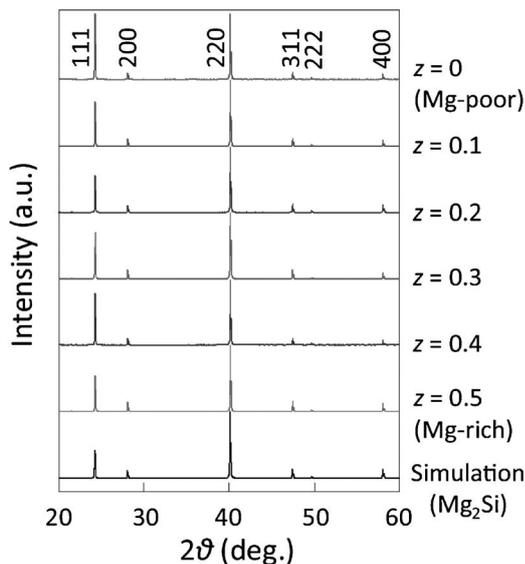


図 5 仕込み組成  $Mg_{2+z}Si$  の粉末 XRD パターンと  $Mg_2Si$  のシミュレーションパターン<sup>(25)</sup>。

と格子間サイトの Mg<sub>i</sub> が存在する  $Mg_2Si$  の 2 つである。図 6 にこれらの構造モデルで解析したときの R 値を示す。R 値は構造モデルから予測される回折強度と測定結果との一致の度合いを表す指標であり、低いほど構造モデルが妥当であることを意味する。すべての試料において、(a) から (b) に構造モデルを変更すると R 値が減少した。このことから、Mg<sub>i</sub> が存在すると仮定した (b) の構造モデルが妥当であり、 $Mg_{2+z}Si$  には Mg<sub>i</sub> が存在していることが示唆された。 $Mg_{2+z}Si$  の結晶構造解析結果を表 1 にまとめる。Mg<sub>i</sub> の占有率は 1% 弱であることが明らかになった。また、Mg サイトの占有率は 99% 強であり、1% 弱欠損していることがわかった。一方、Si サイトの占有率は 100% であり、Si 欠損はないことがわかった。Mg サイトの欠損量は Mg<sub>i</sub> の占有率よりわずかに少ない程度であり、Mg サイトの Mg が格子間サイトに移動したように見えることから、格子間サイトの Mg (Mg<sub>i</sub>) と Mg サイトの欠損 (V<sub>Mg</sub>) がフレンケル対を形成している可能性がある。

差フーリエマップおよびハミルトンテスト<sup>(28)</sup>を用いて、Mg<sub>i</sub> が確かに存在することを再検討した。フーリエマップとは、回折強度をフーリエ変換して得られる電子密度分布のことで、測定結果から得られる電子密度  $F(\text{obs.})$  から、結晶構造解析で最適化した構造モデルから得られる電子密度  $F(\text{calc.})$  を差し引いた差フーリエマップ [ $F(\text{obs.}) - F(\text{calc.})$ ]

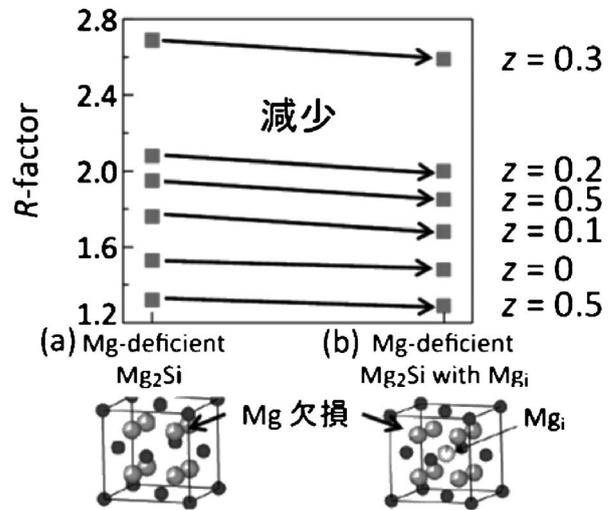


図 6  $Mg_{2+z}Si$  の結晶構造解析で使った 2 つの構造モデルとそれぞれの構造モデルにおける R 値。

表 1  $Mg_{2+z}Si$  の結晶構造解析結果。

$z$	$wR_p$ (%)	$gof$	格子定数 (Å)	Mg サイトの占有率 (%)	Mg <sub>i</sub> の占有率 (%)	Si サイトの占有率 (%)
0	1.48	1.34	6.3436 (18)	99.4 (5)	0.6 (4)	100 (5)
0.1	1.68	1.25	6.3586 (9)	99.4 (5)	0.9 (4)	100 (5)
0.2	2.00	1.18	6.3398 (8)	99.9 (5)	0.9 (4)	100 (5)
0.3	2.59	1.48	6.3327 (33)	99.4 (7)	1.2 (6)	100 (5)
0.4	1.85	1.42	6.3394 (8)	99.7 (6)	0.6 (2)	100 (5)
0.5	1.29	1.15	6.3513 (5)	99.2 (3)	0.4 (3)	100 (5)

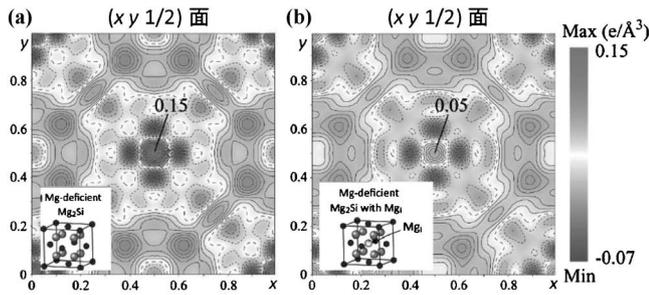


図7 構造モデル(a)および(b)における差フーリエマップ<sup>(25)</sup>.

を用いることで、結晶構造解析の可否を視覚的に確認できる。図7は構造モデル(a)および(b)における、 $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}$  ( $z=0$ )の $(xy\ 1/2)$ 面の差フーリエマップである。残差電子密度が正になっている位置は何らかの原子が存在していることを意味する。構造モデル(a)では、格子間の $(1/2\ 1/2\ 1/2)$ サイトにおける残差電子密度が他の部分より高いことがわかる。この差異は単位格子の中で最も大きく、有意であった。形成エネルギーを考慮すると、格子間サイトを占有する可能性が高い原子はMgであることから、 $\text{Mg}_i$ の存在が示唆される。一方、 $\text{Mg}_i$ の存在を仮定した構造モデル(b)では、格子間サイトにおける残差電子密度が、(a)と比べて減少していることがわかる。このことから、 $\text{Mg}_i$ を仮定した構造モデル(b)が妥当であり、 $\text{Mg}_i$ が確かに存在していることが示された。また、ハミルトンテストとは、構造モデルの変更に伴う $R$ 値の変化の有意性を、F分布関数を使って統計的に検定する方法である。本研究では、構造モデル(a)から構造モデル(b)に変更した際の $R$ 値の減少が有意な変化と言えるか検証した。結果として、すべての試料で10%以下の有意水準が得られたことから<sup>(27)</sup>、格子間サイトにMgが存在する構造モデルが妥当であるといえる。

$\text{Mg}_i$ の存在が明らかになったことから、 $\text{Mg}_i$ 量と熱電性能の関係を調査した。しかし、本研究で作製した $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}$ 多結晶試料では、微量のMg相が熱電性能を支配していることが判明し<sup>(25)</sup>、 $\text{Mg}_i$ 量と熱電性能の相関は明らかにできなかった。Liuら<sup>(10)</sup>は、Mgを過剰に仕込んだ $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}_{0.5-y}\text{Sn}_{0.5}\text{Sb}_y$ 多結晶試料を合成しており、Mg相などの第二相は観察されなかったと述べている。また、 $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}_{0.5-y}\text{Sn}_{0.5}\text{Sb}_y$ 試料のキャリア密度はMg仕込み量 $z$ の増加に伴って単調に増加していると報告している(図8下)。本研究で作製した試料とは組成が違うので、単純に比較できないが、 $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}$ の $\text{Mg}_i$ 量は $z=0$ から $z=0.3$ までは増加しており(図8上)、ドナー型欠陥である $\text{Mg}_i$ 量が増加したためキャリア密度が増加したと考え、Liuらの結果を良く説明することができる。したがって、 $\text{Mg}_i$ 量を適切にコントロールすることができれば、キャリア密度の最適化が可能となり、さらなる熱電性能の向上につながると考えられる。今後、 $\text{Mg}_2\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ 三元系についても $\text{Mg}_i$ 量を調査する必要がある。

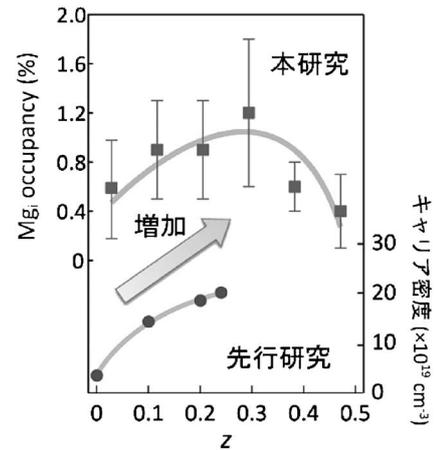


図8 表1で示した $\text{Mg}_i$ 量と先行研究<sup>(10)</sup>のキャリア密度との比較。

### 3. $\text{Mg}_2\text{Si}$ における格子間サイトの制御

$\text{Mg}_i$ の存在が明らかになったことから、 $\text{Mg}_i$ 量を制御することで熱電性能を向上できるか調査することとした。熱処理や電気化学法などを用いて $\text{Mg}_i$ の脱離や挿入を試みたが、正規のMgサイトが欠損するなどして、 $\text{Mg}_i$ 量のみ制御するのは難しいことがわかった。そこで、格子間サイトに他の元素を挿入することを考えた。平山ら<sup>(29)</sup>は、第一原理計算を用いて、各元素が占有しやすいサイトを調査している。結果として、Cl, Na, Kが格子間サイトを占有する可能性があり、p型性能が向上すると述べている。また、同グループは別の論文<sup>(30)</sup>で、Bでもp型性能が向上し、BはSiサイトを占有すると予測している。実際に合成されたBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ 試料は、作製方法によって伝導型が異なることが報告されている<sup>(31)</sup>。電気炉で加熱合成した試料はn型であるのに対し、NaCl flux法を用いて作製した試料はp型になるとされている。このように、Bドープした $\text{Mg}_2\text{Si}$ の伝導型は明確にわかっておらず、また熱電性能も測定されていない。本研究では $\text{Mg}_i$ が $\text{Mg}_2\text{Si}$ の結晶構造中に存在する場合のBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の伝導型について理論的に調査し、実際に合成して熱電性能を測定した。

#### (1) 第一原理計算を用いたBの占有サイトの予測

単位格子の2倍周期のスーパーセルに $\text{Mg}_i$ が1個存在する構造モデル(図9)について、全エネルギー $E$ とDOS(Density of States, 電子状態密度)を計算した。使用した構造モデルは、(i)  $\text{Mg}_{64}\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i$ : Bが存在しないモデル、(ii)  $\text{Mg}_{64}\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i + \text{B}_i$ : 格子間サイトをBが占有するモデル、(iii)  $(\text{Mg}_{63}\text{B})\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i$ : MgサイトをBで置換したモデル、(iv)  $\text{Mg}_{64}(\text{Si}_{31}\text{B}) + \text{Mg}_i$ : SiサイトをBで置換したモデルの4つである。構造モデル(i)、(ii)および(iii)については、B, MgおよびSi孤立原子の全エネルギーを加えて、すべての構造モデルの原子の数をそろえて比較できるようにした。

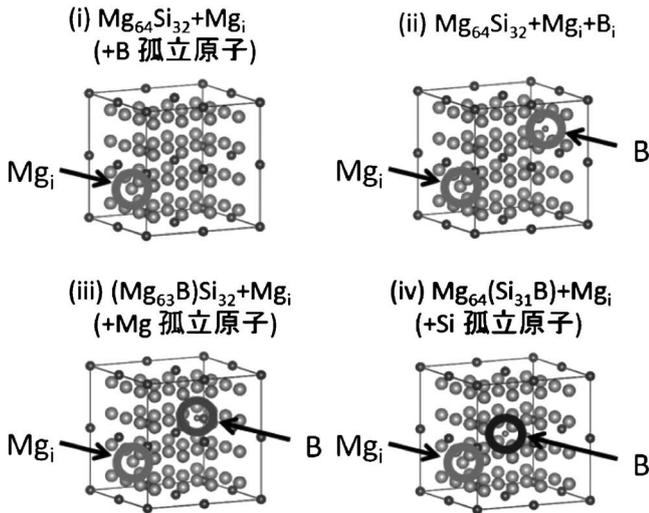


図9 使用した4つの構造モデル：それぞれ(i)ノンドープ、(ii)Bが格子間サイトを占有、(iii)BがMgサイトを置換、(iv)BがSiサイトを置換している<sup>(26)</sup>。

それぞれの構造モデルの全エネルギーの計算式を下に示す。

$$E_{\text{model(i)}} = E(\text{Mg}_{64}\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i) + E(\text{isolate B atom})$$

$$E_{\text{model(ii)}} = E(\text{Mg}_{64}\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i + \text{B}_i)$$

$$E_{\text{model(iii)}} = E((\text{Mg}_{63}\text{B})\text{Si}_{32} + \text{Mg}_i) + E(\text{isolate Mg atom})$$

$$E_{\text{model(iv)}} = E(\text{Mg}_{64}(\text{Si}_{31}\text{B}) + \text{Mg}_i) + E(\text{isolate Si atom})$$

なお、 $k$ 点の数は120とした。

図10に各構造モデルの全エネルギーを示す。縦軸が全エネルギー、横軸がスーパーセルの体積である。図中の矢印で示された最低エネルギーにおける体積を各構造モデル間で比較すると、Bが存在する構造モデル(ii)、(iii)および(iv)では、Bが存在しない構造モデル(i)よりも体積が小さくなっていることがわかる。これは、Bの原子半径がMgやSiに比べて小さいため、Bドープすると単位格子が小さくなることを示している。また、全エネルギーは構造モデル(ii)が最も低かった。つまり、Bは格子間サイトを占有しやすいことがわかった。一方で、構造モデル(iv)の全エネルギーが最も高く、Siサイトには置換されにくいことがわかった。

図11に各構造モデルの最小エネルギーにおけるDOSを示す。図中にはTotal DOSおよびMg, Si,  $\text{Mg}_i$ , Bのpartial DOSを載せている。すべての構造モデルにおいて、エネルギーギャップ中に $\text{Mg}_i$ 由来のエネルギー準位が現れた(図中▼)。このエネルギー準位を無視してDOSを見ると、構造モデル(i)および構造モデル(ii)においては $E_F$ が伝導帯にかかっており、n型伝導を示すことが予想される。また構造モデル(i)と構造モデル(ii)を比較すると、構造モデル(ii)の $E_F$ における状態密度が大きくなっていることから、Bが格子間サイトを占有すると、電子キャリア密度が増加する可能性がある。構造モデル(iii)については、 $E_F$ がエネルギーギャップ内に位置しているため、伝導型は断定できないが、 $E_F$ の位置が構造モデル(i)と変わらないことから、おそらくn型

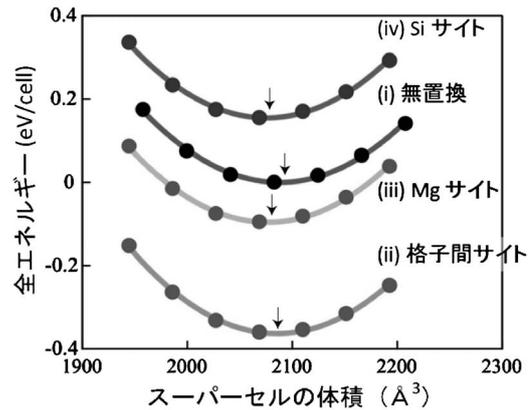


図10 4つの構造モデルの全エネルギー<sup>(26)</sup>。

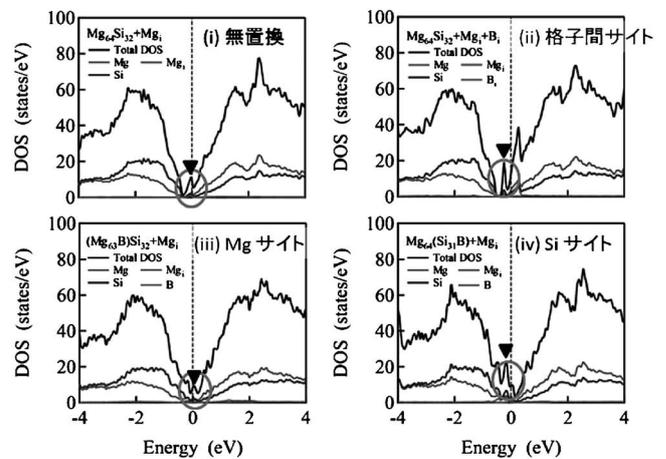


図11 4つの構造モデルのDOS (Density of States, 電子状態密度)<sup>(26)</sup>。

伝導を示すと思われる。構造モデル(iv)では $E_F$ が価電子帯にかかっているため、p型伝導を示すと考えられる。以上の結果から、Bが格子間サイトを占有すると、n型の熱電性能が向上することが予想される。

## (2) Bドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の作製と熱電性能の測定

計算結果から、Bは格子間サイトを占有しやすく、n型性能が向上することが示唆された。そこで、 $100 \text{Mg}_2\text{Si} + x\text{B}$  ( $x = 0, 0.375, 0.75, 1.5, 3.0$ )の仕込み組成でBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ 多結晶試料を作製して、Bの占有サイトと熱電性能を評価した。原料として $\text{Mg}_2\text{Si}$ 粉末(2N)とB粉末(3N)を用いた。酸化を防ぐためにグローブボックス内で秤量し、10分間混合した。混合粉末をカーボンダイに詰めたのち、温度1123 K、昇温速度100 K/min、保持時間10分、圧力30 MPa、真空度20 Paの条件でSPS焼結を行った。

図12にノンドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ とBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の多結晶試料の粉末XRDパターンを示す。主相は $\text{Mg}_2\text{Si}$ であり、B由来の第二相は粉末XRDでは確認できなかった。Bが固溶しているか確かめるために、RIETAN-FP<sup>(32)</sup>を用いてリートベルト解析を行い、格子定数を算出した。表2にリートベルト

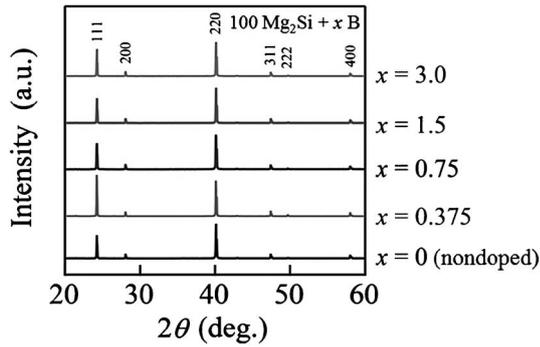


図12 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の粉末 XRD パターン<sup>(26)</sup>.

表2 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  のリートベルト解析結果.

$x$	格子定数(Å)	Mgの占有率(%)	Siの占有率(%)
0	6.3532(1)	92.6(7)	100.1(1)
0.375	6.3527(1)	91.9(7)	99.9(1)
0.75	6.3517(3)	91.9(8)	99.9(1)
1.5	6.3527(1)	94.3(7)	99.9(1)
3.0	6.3525(1)	92.9(7)	99.9(1)

解析の結果をまとめる. Siサイトの占有率がほぼ100%であったのに対し, Mgサイトの占有率は92~94%と低かった. これはSPS焼結中にMgが蒸発したためと考えられる. 図13に格子定数のB量 $x$ 依存性を示す.  $x \leq 0.75$ の範囲では, 格子定数は $x$ の増加に伴い減少した.  $x=0$ と $x=0.75$ 試料の格子定数を比較したところ, 減少率は0.024%であった. 一方,  $x > 0.75$ の範囲では格子定数が変化しなかったことから, Bの固溶限は $0.75 \leq x \leq 1.5$ の範囲にあると考えられる. 前節の計算結果で述べたように, 格子定数の減少はBが固溶していることを示唆している. 図10で示した構造モデル(ii), (iii), (iv)の最低エネルギーにおける格子定数を見積り, 構造モデル(i)と比較したところ, 格子定数の減少率はそれぞれ0.032%, 0.18%, 0.20%であった. 実験における格子定数の減少率は, 構造モデル(ii)のそれと近いことから, Bは格子間サイトを占有していると予想される. この予想は, Bが格子間サイトを占有するときの全エネルギーが最も低いという計算結果とも矛盾しない. したがって, 作製したBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の熱電性能はn型であり,  $\text{Mg}_2\text{Si}$ のそれより向上していることが期待される.

図14にノンドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ とBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の多結晶試料の(a)ゼーベック係数 $S$ , (b)電気伝導率 $\sigma$ , (c)出力因子 $PF$ を示す. すべての試料でゼーベック係数は負であり, n型であることを確認した. ノンドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ と比べて, Bドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ の電気伝導率は高くなったことから, Bドープにより電子キャリア密度が増加したと考えられる. 測定した電子キャリア密度を表3に示す.  $x=0.75$ 試料の電子キャリア密度はノンドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ より一桁高いことがわかった. 前節の計算結果から, 電子キャリア密度が向上するのはBが格子間サイトを占有する場合であると予想されることから,

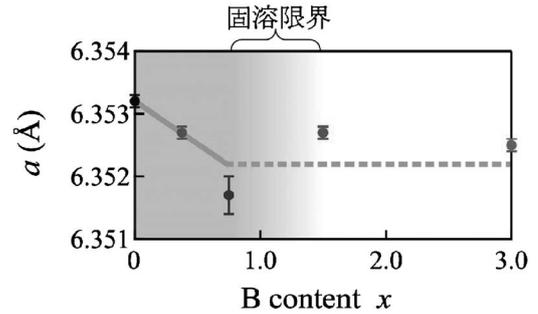


図13 Bドープ量 $x$ と格子定数の関係<sup>(26)</sup>.

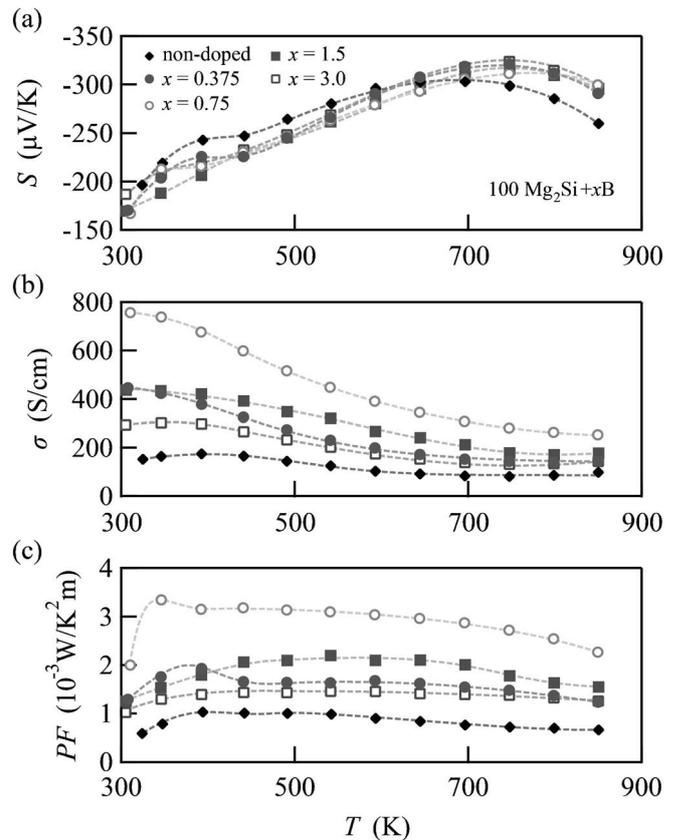


図14 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の(a)ゼーベック係数 $S$ , (b)電気伝導率 $\sigma$ , (c)出力因子 $PF$ <sup>(26)</sup>.

表3 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  ( $x=0, 0.75$ ) の電子キャリア密度.

$x$	キャリア密度( $\text{cm}^{-3}$ )
0	$2.8 \times 10^{19}$
0.75	$3.8 \times 10^{20}$

作製したBドープ $\text{Mg}_2\text{Si}$ でもBは格子間サイトを占有していると考えられる. また, B量 $x$ の増加とともに電気伝導率は増加し,  $x=1.5$ を超えると減少した. Bの固溶限が $0.75 \leq x \leq 1.5$ の範囲にあると考えられることから,  $x \geq 1.5$ の範囲では粉末XRDでは検出できないB由来の第二相

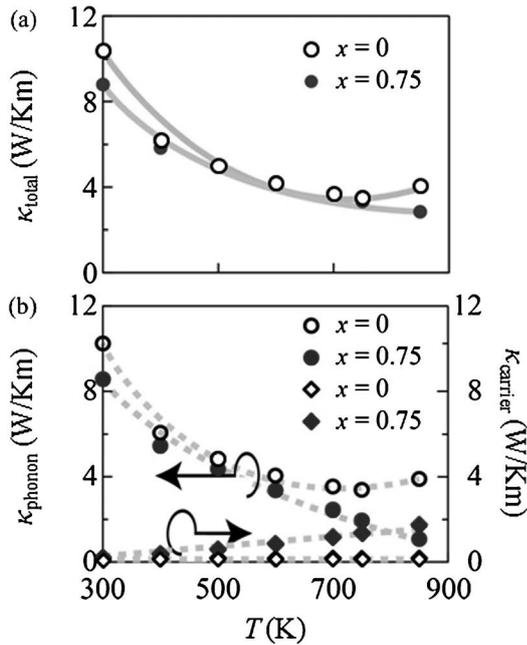


図15 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  ( $x=0, 0.75$ )の(a)全熱伝導率, (b)熱伝導率のフォノンによる寄与および電子による寄与.

が生成しており, キャリア移動度の低下を引き起こしたものと推測される. 出力因子  $PF$  はBドープによって向上し,  $x=0.75$  で最大の  $PF=3.2 \times 10^{-3} \text{ WK}^{-2}\text{m}^{-1}$  (450 K) を示した.

図15にノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  とBドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  ( $x=0.75$ ) の多結晶試料の(a)全熱伝導率  $\kappa_{\text{total}}$  と(b)フォノンによる寄与  $\kappa_{\text{phonon}}$  および電子による寄与  $\kappa_{\text{carrier}}$  を示す. 図15(a)の  $\kappa_{\text{total}}$  を見ると, どちらの試料でも熱伝導率は温度上昇とともに減少する傾向が見られた. ただし, ノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  では700 K以上で熱伝導率が上昇していくのに対し,  $x=0.75$  試料ではそのような変化は見られず, さらに熱伝導率は低下した. 図15(b)を見ると, ノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  よりも  $x=0.75$  試料の電気伝導率が高いことを反映して,  $\kappa_{\text{carrier}}$  はノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  よりも  $x=0.75$  試料の方が高くなっている. 一方で,  $\kappa_{\text{phonon}}$  はノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  よりも  $x=0.75$  試料の方が低くなっていた. これはBドープすることでフォノン散乱が増大したためと考えられる. つまり, 700 K以上ではBによるフォノン散乱の効果が大きく,  $\kappa_{\text{total}}$  の低減をもたらしたと結論できる.

出力因子  $PF$  の向上と700 K以上における熱伝導率の低下から, Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の  $zT$  はノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の6倍以上向上し,  $zT=0.68$  (850 K) に達した(図16)<sup>(26)</sup>. この  $zT$  の値は,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  のn型ドーパントとして有力なSbやBiを用いた試料に匹敵することから<sup>(33)</sup>,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  のn型ドーパントとしてBが有効であることがわかった. 本研究結果は, 格子間サイトを制御することで熱電性能を向上できることを実証した初めての成果であり,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  系半導体の熱電性能向上の新しい潮流を生み出すものと期待される.

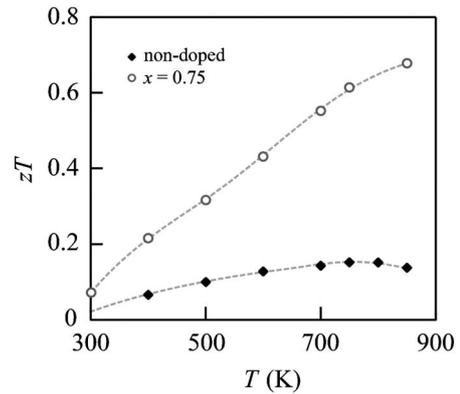


図16 Bドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  ( $x=0, 0.75$ )の  $zT$ <sup>(26)</sup>.

#### 4. まとめ

本研究では, Mgを過剰に仕込んだ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の  $\text{Mg}_i$  量を定量評価するとともに, 格子間サイトを制御することで熱電性能を向上できることを示した.

$\text{Mg}_2\text{Si}$  に  $\text{Mg}_i$  が存在するか調査するために,  $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}$  多結晶試料を作製した. 単結晶XRDを用いて  $\text{Mg}_i$  量を評価したところ, すべての試料において1%弱の  $\text{Mg}_i$  が存在していることを明らかにした. また正規サイトのMg占有率が99%強であったことから,  $\text{Mg}_i$  と正規サイトのMgはフレンケル対を形成している可能性が示唆された.  $\text{Mg}_i$  の存在は, ハミルトンテストや差フーリエマップでも裏付けられた.  $\text{Mg}_i$  の存在を考慮すると,  $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$  三元系のキャリア密度の増加に伴う熱電性能の向上は,  $\text{Mg}_i$  量が増加したためであると結論できる. 今後は  $\text{Mg}_2\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$  や  $\text{Mg}_{2+z}\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$  三元系に対しても  $\text{Mg}_i$  量を調査し, 熱電性能との関係を明らかにする必要がある.

Bを格子間サイトに導入することで, 熱電性能の向上を試みた. 本研究では  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の単位格子の2倍周期のスーパーセル( $\text{Mg}_{64}\text{Si}_{32}$ )を仮定して, 各サイトを占有した構造モデルの全エネルギーを計算したところ, Bは格子間サイトを占有しやすいことがわかった. また, Bが格子間サイトを占有した場合のDOSを見ると,  $E_F$  付近のDOSが大きくなっていたことから, n型性能が向上することが推測された. 以上の結果を踏まえて, Bドープした  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の多結晶試料を作製したところ, ノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  と比べてBドープしたすべての試料で電気伝導率が向上し, n型性能が向上した. このことから, Bは確かに格子間サイトを占有していると結論した. またBドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  においては, 不純物散乱とみられる  $\kappa_{\text{phonon}}$  の低減も見られた. 結果として,  $x=0.75$  試料において, ノンドープ  $\text{Mg}_2\text{Si}$  の約6倍の性能である  $zT=0.68$  (850 K) を得た. この結果は, 格子間サイト制御による熱電性能向上という新しい指針を実証したものである. 今後, 重元素置換の方法と組み合わせることにより, キャリア密度や格子熱伝導率を制御して, さらに  $\text{Mg}_2\text{Si}$  系半導体の熱電性

能を向上できるものと期待される.  $\text{Mg}_2\text{Si}$  における  $\text{Mg}_i$  のように, 結晶欠陥ほどの無機材料にも存在しうるものであり, 熱電性能などの機能開発において結晶欠陥を適切に制御, あるいはそれを積極的に利用することで無機材料が潜在的に持っている機能を最大限に発揮させることができると考えている.

本研究の一部は, 経産省サポーターリングインダストリー事業, 日本学術振興会特別研究員奨励費(課題番号4789), 文部科学省科学研究費補助金基盤研究(B)(課題番号25289222)の支援の下で行われました. また, 本研究成果は, 東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻宮崎研究室において, 宮崎讓教授, 鈴木翔悟氏, 小川陽平氏, 林原佑太氏, 齋藤亘氏との日々の研究により得られたものです. ここに感謝致します.

## 文 献

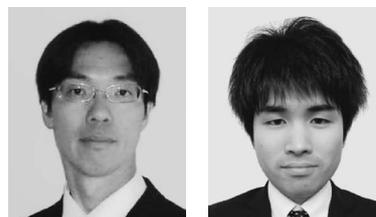
- (1) H. Zhao, J. Sui, Z. Tang, Y. Lan, Q. Jie, D. Kraemer, K. McEnaney, A. Guloy, G. Chen and Z. Ren: Nano Energy, **7** (2014), 97–103.
- (2) D. Wu, L. D. Zhao, S. Hao, Q. Jiang, F. Zheng, W. J. Doak, H. Wu, H. Chi, Y. Gelbstein and C. Uher: J. Am. Chem. Soc., **136** (2014), 11412–11419.
- (3) L. D. Zhao, S. H. Lo, Y. Zhang, H. Sun, G. Tan, C. Uher, C. Wolverton, V. P. Dravid and M. G. Kanatzidis: Nature, **508** (2014), 373–377.
- (4) Y. Lee, S. H. Lo, C. Chen, H. Sun, D. Y. Chung, T. C. Chasapis, C. Uher, V. P. Dravid and M. G. Kanatzidis: Nature Commun., **5** (2014), 3640.
- (5) Y. Noda, H. Kon, Y. Furukawa, N. Otsuka, I. A. Nishida and K. Masumoto: Mater. Trans., JIM, **33** (1992), 845–850.
- (6) J. J. Pulikkotil, D. J. Singh, S. Auluck, M. Saravanan, D. K. Misra, A. Dhar and R. C. Budhani: Phys. Rev. B, **86** (2012), 155204.
- (7) V. K. Zaitsev, M. I. Fedorov, E. A. Gurieva, I. S. Eremin, P. P. Konstantinov, A. Y. Samunin and M. V. Vedernikov: Phys. Rev. B, **74** (2006), 045207.
- (8) W. Liu, X. Tang and J. Sharp: J. Phys. D: Appl. Phys., **43** (2010), 085406.
- (9) W. Luo, M. Yang, F. Chen, Q. Shen, H. Jiang and L. Zhang: Mater. Trans., **51** (2010), 288–291.
- (10) W. Liu, X. Tang, H. Li, J. Sharp, X. Zhou and C. Uher: Chem. Mater., **23** (2011), 5256–5263.
- (11) Z. Du, T. Zhu, Y. Chen, J. He, H. Gao, G. Jiang, T. M. Tritt and X. Zhao: J. Mater. Chem., **22** (2012), 6838–6844.
- (12) H. Ning, G. D. Mastroillo, S. Grasso, B. Du, T. Mori, C. Hu, Y. Xu, K. Simpson, G. Maizzab and M. J. Reece: J. Mater. Chem. A, **3** (2015), 17426–17432.
- (13) P. Gao, J. Davis, V. V. Poltavets and T. P. Hogan: J. Mater. Chem. C, **4** (2016), 929–934.
- (14) A. Kato, T. Yagi and N. Fukusako: J. Phys.: Condens. Matter,

- 21** (2009), 205801.
- (15) Y. Imai, Y. Mori, S. Nakamura and K. Takarabe: J. Alloys. Comp., **664** (2016), 369–377.
- (16) 磯田幸弘: 日本熱電学会誌, **8** (2012), 7–12.
- (17) P. Zwolenski, J. Tobola and S. Kaprzyk: J. Electr. Mater., **40** (2011), 889–897.
- (18) P. Bellanger, S. Gorsse, G. B. Granger, C. Navone, A. Redjaimia and S. Vives: Acta Mater., **95** (2015), 102–110.
- (19) W. Li, L. Lindsay, D. Broido, D. Stewart and N. Mingo: Phys. Rev. B, **86** (2012), 174307.
- (20) W. Luo, M. Yang, F. Chen, Q. Shen and H. Jiang: Mater. Sci. Eng. B, **157** (2009), 96–100.
- (21) K. Mars, H. Ihou-Mouko, G. Pont, J. Tobola and H. Scherrer: J. Electr. Mater., **38** (2009), 1360–1364.
- (22) Y. Isoda, S. Tada, T. Nagai, H. Fujiu and Y. Shinohara: Mater. Trans., **51** (2010), 868–871.
- (23) T. Sakamoto, T. Iida, S. Kurosaki, K. Yano, H. Taguchi, K. Nishio, Y. Kogo and Y. Takanashi: J. Electr. Mater., **39** (2010), 1708–1713.
- (24) H. Ihou-Mouko, C. Mercier, J. Tobola, G. Pont and H. Scherrer: J. Alloys Comp., **509** (2011), 6503–6508.
- (25) M. Kubouchi, Y. Ogawa, K. Hayashi, T. Takamatsu and Y. Miyazaki: J. Electron. Mater., **45** (2016), 1589–1593.
- (26) M. Kubouchi, K. Hayashi and Y. Miyazaki: Scripta Mater., **123** (2016), 59–63.
- (27) 窪内将隆: 修士学位論文, 東北大学大学院工学研究科, (2014).
- (28) W. C. Hamilton: Acta Crystallogr., **18** (1965), 502–510.
- (29) 平山尚美, 飯田 努, 向後保雄, 西尾圭史, 浜田典明: 第12回日本熱電学会学術講演会, 口頭発表 S5B-1, (2015).
- (30) N. Hirayama, T. Iida, S. Morioka, M. Sakamoto, K. Nishio, Y. Kogo and Y. Takanashi: J. Mater. Res., **30** (2015), 2564–2577.
- (31) Y. Noda, H. Kon, Y. Furukawa, N. Otsuka, I. A. Nishida and K. Masumoto: Mater. Trans., JIM, **33** (1992), 845–850.
- (32) F. Izumi and K. Momma: Solid State Phenom., **130** (2007), 15–20.
- (33) Y. Hayatsu, T. Iida, T. Sakamoto, S. Kurosaki, K. Nishio, Y. Kogo and Y. Takanashi: J. Solid State Chem., **193** (2012), 161–165.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

林 慶  
2002年3月 東京大学大学院理学系研究科博士課程修了. 同年4月 理化学研究所フォトダイナミクス研究センター研究員. 2006年1月 東北大学大学院工学研究科助手, 2007年4月同助教を経て, 2014年4月から現職.  
専門分野: 物性物理, 結晶学  
◎電子状態の実験的・理論的解析に基づく機能性材料開発に従事.

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



林 慶                      窪内将隆

# 第一原理計算による半導体の 物性予測と物質探索

大場史康<sup>\*,\*\*,\*\*\*<sub>1)</sub></sup> 日沼洋陽<sup>\*\*\*\*,\*\*\*</sup> 熊谷 悠<sup>\*\*,\*\*\*\*\*<sub>2)</sub></sup>

## 1. はじめに

昨今の資源・環境問題やエネルギー情勢を背景に、卓越した機能だけでなく、地球上に豊富に存在する元素により構成され、安価で高い環境調和性を示す新材料が望まれている。社会に役立つ「材料」へと昇華できる新物質を見いだすためには、的確に設計・探索の指針を立てることが重要であることは言うまでもない。そして次の関門が、いかに広い探索空間をカバーするか、その中からどのように有望な物質を絞り込むかである。最近では計算科学の進展とスーパーコンピュータの演算能力の向上により、第一原理計算等の計算科学手法を用いることで物質の安定性や特性を高精度かつ網羅的に予測できるようになってきた(図1)。これにデータ科学手法、更にはコンビナトリアル合成・評価等を連携させることで、新物質・新材料の開発を加速し、同時に膨大なデータの解析から設計・探索指針を得ようとする試みが世界各国で盛んになっている。いわゆる「マテリアルズ・インフォマティクス」によるアプローチである。

所望の機能に対して、量子力学に基づいて算出可能な物理量がよい記述子となる場合は、第一原理計算を用いた候補物質のスクリーニングが威力を発揮する。一方、複合的な因子からなる複雑な機能が対象の場合は、第一原理計算のみによるアプローチは困難であり、マルチフィジクス・シミュレー

ションやデータ科学手法によるモデリング等に期待がかかっている。本稿で紹介する半導体材料については、バンドギャップや有効質量等の基礎物性、点欠陥の形成エネルギーや準位、界面におけるバンドオフセット等、直接計算可能な物理量がよい指標となることから、第一原理計算によるアプローチが有効である。ここで問題となるのは、計算精度と計算対象数の両観点から見た理論予測・スクリーニングの信頼性である。基礎物性や格子欠陥の特性を高精度かつ高速に算出するためには、高精度と低計算コストを両立した近似や手法が不可欠になる。本稿では、このような半導体に関する理論予測の現状と新物質探索への展開について、筆者らの最近の研究<sup>(1)-(6)</sup>を中心に紹介する。

## 2. 半導体の基礎物性

半導体の最も基本的な物性は、バンドギャップと有効質量である。強相関系を除いた標準的な電子構造の半導体においては、これらの物性を一電子あるいは準粒子のバンド構造から予測することができる。第一原理計算に用いられる近似の中でも、密度汎関数理論(density functional theory: DFT)の枠組みでの標準的な近似である局所密度近似(local density approximation: LDA)<sup>(7)(8)</sup>や一般化勾配近似(generalized gradient approximation: GGA)<sup>(9)(10)</sup>を用いると、バンドギャップが過小評価されることが知られている。例えば、Siで

\* 東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所; 教授(〒226-8503 横浜市緑区長津田町4259 R3-7)

\*\* 東京工業大学元素戦略研究センター; 1)教授 2)特任准教授

\*\*\* 物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門情報統合型物質・材料研究拠点; 特別研究員(兼任)

\*\*\*\* 千葉大学先進科学センター; 特任助教

\*\*\*\*\* 科学技術振興機構; さきがけ研究者(兼任)

Prediction of Fundamental Properties of Semiconductors and Materials Exploration Using First-Principles Calculations; Fumiyasu Oba<sup>\*,\*\*\*\*</sup>, Yoyo Hinuma<sup>\*\*\*\*,\*\*\*</sup> and Yu Kumagai<sup>\*\*,\*\*\*\*\*</sup> (\*Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Yokohama. \*\*Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology, Yokohama. \*\*\*Center for Materials Research by Information Integration, Research and Services Division of Materials Data and Integrated System, National Institute for Materials Science, Tsukuba. \*\*\*\*Center for Frontier Science, Chiba University, Chiba. \*\*\*\*\*PRESTO, Japan Science and Technology Agency, Kawaguchi)

Keywords: *first-principles calculations, semiconductors, point defects, surfaces, interfaces, materials exploration*

2017年7月11日受理[doi:10.2320/materia.56.554]

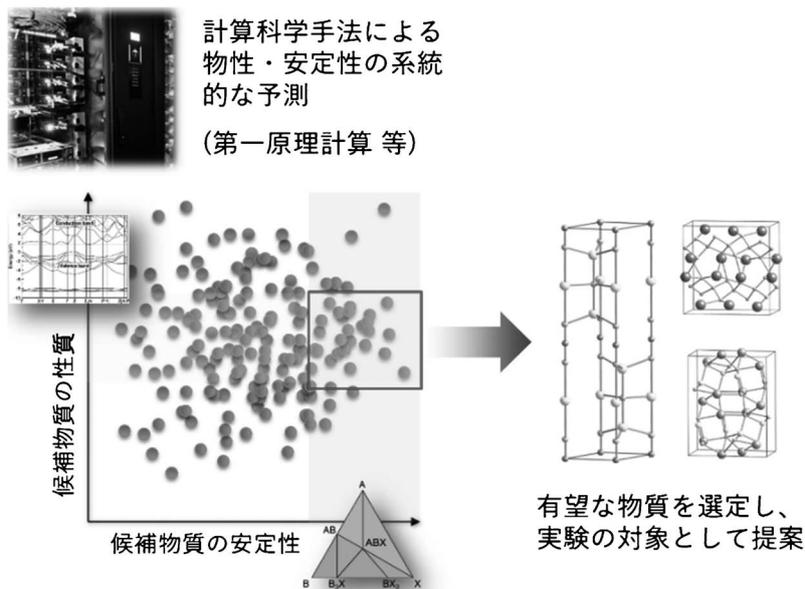


図1 計算科学手法を用いた候補物質のスクリーニングによる物質探索の概念図。

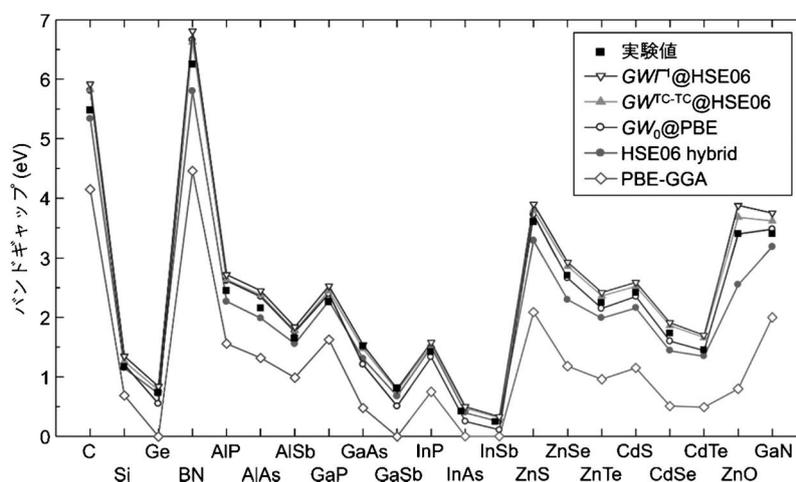


図2 半導体のバンドギャップの計算値と実験値の比較<sup>(1)(2)</sup>。PBE-GGAは密度汎関数理論への標準的な近似、HSE06 hybridは半導体の計算に適したハイブリッド汎関数による計算結果を示す。GW<sub>0</sub>@PBEは多体摂動論に基づく標準的なGW近似での計算結果(PBEによる波動関数及びRPAレベルの遮蔽されたクーロン相互作用Wを使用)、GW<sup>TC-TC</sup>@HSE06はWにパーテックス補正を加えた結果(HSE06による波動関数を使用)、GW<sup>Γ¹</sup>@HSE06は更に自己エネルギーの1次のパーテックス補正を加えた結果である。

は実験値の半分程度、ZnOでは1/4程度になってしまう。そこで、LDAやGGAにHartree-Fock交換項を混合することにより電子構造の再現性を向上したハイブリッド汎関数<sup>(11)-(14)</sup>や、多体摂動論に基づいたGW近似<sup>(15)(16)</sup>が広く用いられるようになってきた。

例として、図2にPerdew-Burke-Ernzerhof(PBE)型のGGA<sup>(10)</sup>、Heyd-Scuseria-Ernzerhof(HSE06)型のハイブリッド汎関数<sup>(13)(14)</sup>及びGW近似を用いて計算された半導体のバンドギャップを示す<sup>(1)(2)</sup>。GW近似については、random phase approximation(RPA)レベルの標準的なGW<sub>0</sub>、遮蔽されたクーロン相互作用Wへのパーテックス補正を加

えたGW<sup>TC-TC</sup>、さらには自己エネルギーへの1次のパーテックス補正を加えたGW<sup>Γ¹</sup>近似の結果を示している。なお、本稿で紹介する計算結果は、VASPコード<sup>(17)(18)</sup>に実装されたprojector augmented-wave法<sup>(19)</sup>を用いて得たものである。

HSE06型のハイブリッド汎関数は、ZnO等のバンドギャップを過小評価しているものの、PBE-GGAに比べて半導体の電子構造をかなり改善することがわかる。ZnOのようなワイドギャップ系に対しては、近年提案された誘電率依存型のハイブリッド汎関数を用いることで、バンドギャップの再現性が向上することが報告されている<sup>(6)(20)-(24)</sup>。

一方、 $GW$  近似は全物質に対してバンドギャップをバランス良く改善している。ここで、 $GW^{TC-TC}$  及び  $GW^I$  近似がバンドギャップをやや過大評価する傾向が見られるが、本計算では電子-フォノン相互作用<sup>(25)</sup>や格子分極の電子間相互作用の遮蔽への寄与<sup>(26)</sup>を考慮しておらず、これらがバンドギャップを低下させることを踏まえると<sup>(25)(26)</sup>、過大評価は好ましい結果であると考えられる。ハイブリッド汎関数や  $GW$  近似の計算コストは LDA や GGA の数十倍から数千倍程度とかなり高くなるが、最近のコンピュータを使えばユニットセルが数十原子からなる物質の計算もできるようになっている。実験値が報告されていない物質を対象に理論予測を行う際、これらの近似による計算が威力を発揮する。とくに高精度と高速の両立には、ハイブリッド汎関数を non-self-consistent に適用する手法<sup>(6)</sup>が有効と考えており、現在このアプローチにより既知物質の系統的な計算とその結果のデータベース化を進めている。

有効質量の算出については、標準的な電子構造の半導体に対しては LDA や GGA を用いても実験値に近い値が得られる場合が多い。これは、バンドギャップが過小評価されていても、価電子帯内、伝導帯内それぞれの電子構造が比較的よく再現されるからである。しかし、Cu や Zn を含む化合物等では、空間的に局在した  $3d$  オービタル由来のバンドと他のバンドとの位置関係が適切に表現されず、その結果として有効質量の再現性も悪くなる。これを改善するためには、一般にハイブリッド汎関数や  $GW$  近似のような、より高レベルの近似の適用が必要になる<sup>(1)</sup>が、LDA や GGA における  $3d$  オービタルのオンサイト・クーロン相互作用をハバードモデルに基づいて簡便に補正した LDA/GGA+ $U$ 法<sup>(27)</sup>を用いることも有効である。

なお、バンドギャップや有効質量の算出には、バンド構造の作図が必須になる。従来、多様な結晶を対象として多くの作図を行うには多大な労力を要してきたが、最近では結晶学の慣習に則した全結晶系のバンド経路作成プログラムが利用できるようになっている<sup>(28)</sup>。

### 3. 表面・界面におけるバンドアライメント

半導体ヘテロ構造を用いた電子・光電子デバイスや太陽電池等を設計する際、界面を構成する2つの物質の価電子帯上端あるいは伝導帯下端の位置関係(バンドオフセット)が重要なパラメータになる。このバンドオフセットは、界面に形成されるダイポールの寄与を含むことから、本質的に界面の方位、組成、原子・電子構造等に依存する量である。一方、半導体表面におけるバンド位置は、触媒や光触媒等の表面機能を考える上で重要であるだけでなく、半導体ヘテロ界面におけるバンドオフセットの概算にも利用できる。真空準位から測った価電子帯上端のエネルギーはイオン化エネルギーあるいはイオン化ポテンシャル(ionization potential: IP)、伝導帯下端のエネルギーは電子親和力(electron affinity: EA)と呼ばれ、これらは真空準位とフェルミ準位の差に相当する

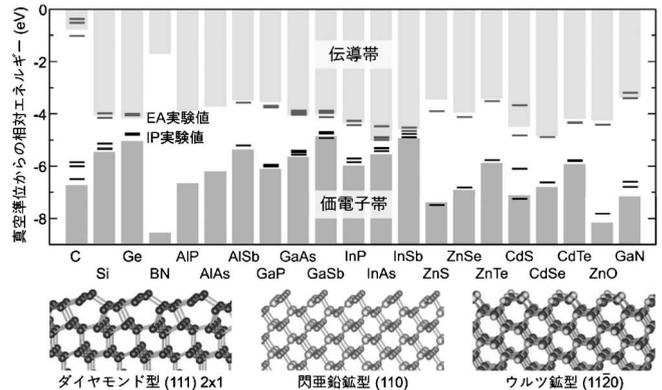


図3 半導体のバンドアライメント<sup>(1)(2)</sup>. 各半導体の無極性表面について  $GW^I@HSE06$  による計算結果を、イオン化ポテンシャル(IP)及び電子親和力(EA)の実験値<sup>(29)</sup>と比較して示す。

仕事関数と区別される。IP 及び EA も本質的に表面のダイポール、すなわち表面の種類や状態に敏感な量であるため、物質によっては理想的な表面に対する値を得ることが困難である。そこで、第一原理計算により IP 及び EA をできる限り正確に予測するための手法開発を進めている。

図3に様々な半導体の無極性表面について  $GW^I$  近似により計算されたバンドアライメント<sup>(1)(2)</sup>を実験値<sup>(29)</sup>と比較して示す。一般的に実験値がよく再現されていることから、この計算手法を用いれば、実験値が報告されていない物質についても信頼性の高い予測が可能であると考えられる。ただし、この手法は計算コストが非常に高く、現状ではユニットセルの大きな物質に適用するのは現実的でない。そこで、著者らは上述のバンドギャップと同様に、non-self-consistent 誘電率依存型ハイブリッド汎関数によるアプローチにより、高精度と高速を両立したバンドアライメントの算出を進めている<sup>(6)</sup>。また、任意の結晶について、無極性表面を自動的に選定し、第一原理計算用のスラブモデルを作成するアルゴリズムを提案している<sup>(30)</sup>。

典型的な半導体のヘテロ界面におけるバンドオフセットについては、バンド位置のエラーのキャンセルにより、LDA や GGA を用いても比較的よい結果が得られる場合が多い<sup>(2)</sup>。一方で、界面を構成する2つの物質の化学結合状態が大きく異なる場合は、このようなエラーのキャンセルが十分に起こらないため、一般に高レベルの近似を用いるのが望ましい<sup>(31)</sup>。このヘテロ界面バンドオフセットの算出においても、non-self-consistent 誘電率依存型ハイブリッド汎関数によるアプローチが有効である<sup>(6)</sup>。

### 4. 点欠陥とドーピング

半導体中の点欠陥としては、透明導電膜のように縮退するほどの高濃度ドーピングを施す場合を除き、希薄な固有点欠陥やドーパントが主な対象になる。この場合、欠陥間の相互作用が弱いことを踏まえると、孤立した点欠陥のモデルがよ

い出発点になる。しかし、点欠陥をスーパーセル法により扱う場合、3次元周期的境界条件に由来する荷電欠陥間並びに荷電欠陥-補償電荷間の静電相互作用が大きな問題となる。そこで、この相互作用を補正するための手法の開発が進められている<sup>(3)(32)-(34)</sup>。

図4に、様々なホスト物質中の点欠陥について、著者が開

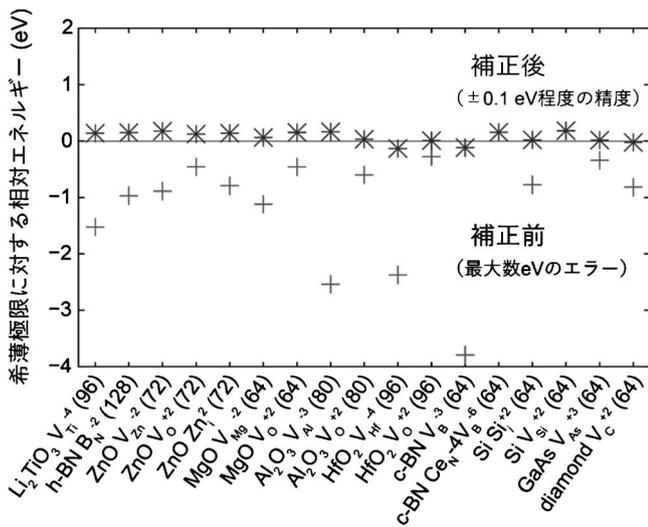


図4 点欠陥形成エネルギーへのセルサイズ補正の効果<sup>(3)</sup>。各物質中の点欠陥について、括弧内に示した原子数のスーパーセルにより算出した補正前後の形成エネルギーを、希薄極限(セルサイズ無限大の極限)への外挿値に対する相対値として示す。

発した補正法の効果を示す<sup>(3)</sup>。本手法は、異方性のある結晶や格子緩和後の点欠陥についても精度良く補正ができるように、Freysoldtらの手法<sup>(33)</sup>を拡張したものである。60~100原子程度からなる典型的なサイズのセルを用いた場合、補正なしでは多くの欠陥種についてeVオーダーのエラーが見られるが、これに補正を加えることで、全ての欠陥についてエラーが概ね0.1 eV程度に低減されることがわかる。このような静電相互作用によるエラーはセルサイズに対してゆっくり収束するため、補正なしでは数千原子からなるセルを用いても不十分な場合が多い。したがって、希薄な点欠陥の性質を正確に予測するためには、セルサイズ補正が不可欠である。

著者らは、このようなセルサイズ補正法を適用することで、 $\text{SnS}_x$ <sup>(4)</sup>、 $\text{ZnSnP}_2$ <sup>(35)</sup>、 $\text{Zn}_3\text{N}_2$ <sup>(36)</sup>等、様々な化合物半導体中の固有点欠陥及びドーパントの性質やキャリア生成・補償への寄与を予測している。図5に、新規太陽電池光吸収層材料として期待されている $\text{Sn}_2\text{S}_3$ のp型ドーピング法を提案した例を示す<sup>(4)</sup>。様々な固有点欠陥及びドーパントの検討から、Snや陽イオンドーパントが広い格子間サイトに挿入されてドナーとして働くことにより、 $\text{Sn}_2\text{S}_3$ がn型の指向性を示すことが示唆された。そこで、ドーパントとしてサイズの大きなKを選択すると、図5に示すように格子間サイトへの挿入が抑えられてSnサイトを優先的に置換し、Kがアクセプタとして有効に働くことが予測される。

## 5. 物質探索への展開

上述のような基礎物性・欠陥特性や安定性に関する第一原

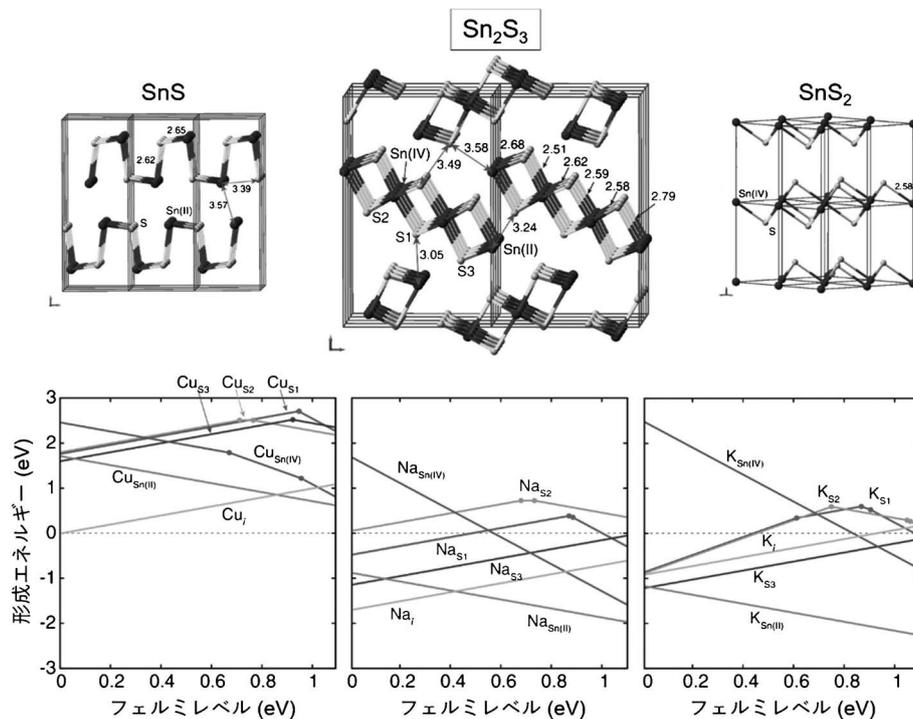


図5  $\text{Sn}_2\text{S}_3$ のp型化のためのドーパントの理論的検討<sup>(4)</sup>。 $\text{Sn}_2\text{S}_3$ 及び $\text{SnS}$ 、 $\text{SnS}_2$ の結晶構造(上)とCu, Na, Kドーパントの形成エネルギーのフェルミレベル依存性(下)。

理計算を多くの候補物質を対象に実行し、スクリーニングをかけることで物質探索が可能になる。計算精度の向上は一般に計算コストの上昇を伴うため、対象物質の数と精度のトレードオフを考慮して手法を選択することが重要になる。例えば、まず計算コストの低い LDA や GGA で予備的なスクリーニングを行い、有望と考えられる物質に候補を絞ってから、より高精度な計算に進むといった手順を経ることで、スクリーニングプロセスを効率化できる。

第一原理計算に基づいた半導体のスクリーニングは、米国コロラド大の Zunger ら<sup>(37)(38)</sup>、NREL の Zakutayev と Lany ら<sup>(38)</sup>、ベルギー UCL の Hautier ら<sup>(39)(40)</sup> が先駆的に進めており、計算により提案された物質を実際に合成した例も報告されている<sup>(37)(38)(40)(41)</sup>。筆者らも第一原理計算により基礎物性、熱力学的安定性、格子欠陥の特性を系統的に評

価するためのハイスループットスクリーニング基盤を構築し、様々な物質の探索へと展開している。その一例として、最近、約600種類の候補物質のスクリーニングにより、**図6**に示す11種類の新規窒化物半導体を提案している<sup>(5)</sup>。このうち、**図7**に示す  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  は、地球上に豊富に存在する元素のみで構成され、赤色発光が期待できる直接遷移型のバンド構造や小さな電子とホールの有効質量を持つことから、有望な新物質と考えられる。共同研究者が  $1200^\circ\text{C}$ 、5 GPa での高圧合成によりこの  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  を合成し、予測された結晶構造や光学物性を実証することに成功している<sup>(5)</sup>。

## 6. おわりに

第一原理計算による半導体の物性の予測と物質探索への展開について、我々の最近の研究を中心に紹介した。計算手法の進展により、様々な基礎物性や格子欠陥の特性が高精度かつ高速に予測可能になってきており、これを活かしてハイスループットスクリーニングを実行することで、有望な物質を効率的に見いだせると考えている。このような先進計算科学を駆使したアプローチは、近年進展の著しいデータ科学手法との相性もよく、マテリアルズ・インフォマティクスの発展並びにその材料開発への応用において、今後一層重要な役割を果たすであろう。

本稿で紹介した研究は、ウィーン大学の Andreas Grüneis 氏、Georg Kresse 氏、京都大学の田中功氏、東京工業大学

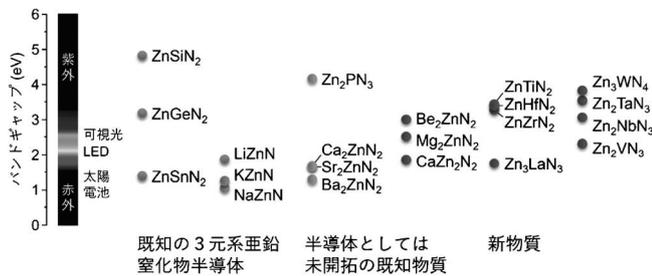


図6 第一原理計算を用いたスクリーニングにより約600種類の候補物質から選出された21種類の窒化物半導体<sup>(5)</sup>。

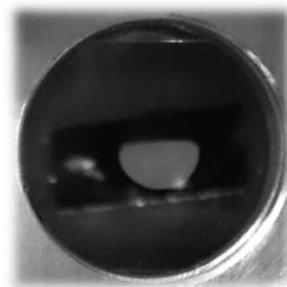
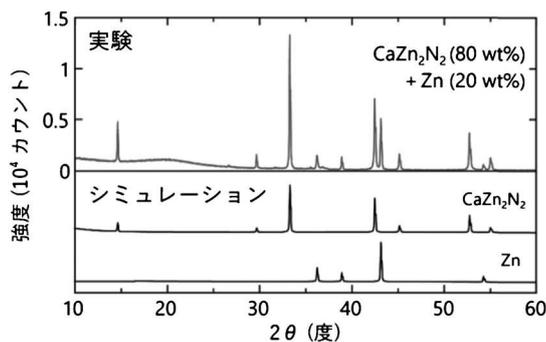
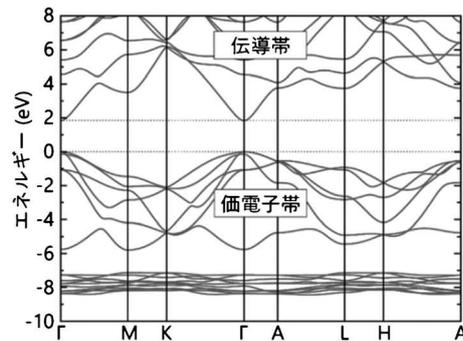
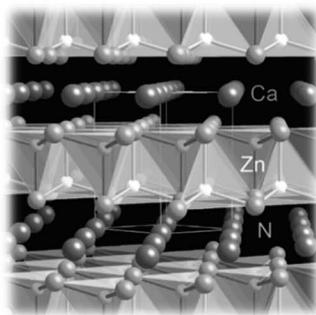


図7 第一原理計算により予測された新物質  $\text{CaZn}_2\text{N}_2$  の結晶構造、バンド構造と高圧合成により得られた多結晶試料の X 線回折パターン及び赤色フォトルミネッセンス像<sup>(5)</sup>。



# 熱電特性データベースの構築と実験値 マテリアルズ・インフォマティクスへの展開

桂 ゆかり\*

## 1. はじめに

### (1) 機械学習の特性と可能性

人工知能や機械学習という言葉をよく耳にするようになり、「将来、仕事が人工知能に奪われる」という懸念の声も聞こえる。しかし、これは表計算ソフトや検索エンジンのようなただの便利なツールである。よって、その特性を生かして自分の一部として利用することで、よりよい材料を早く開発して普及させることを目指すことが求められる。

数値計算がコンピュータによる理論科学の補助だとしたら、機械学習はコンピュータによる「長年の勘」の補助である。長年の勘とは、特に理論的裏付けはなくとも、膨大な経験をもとに「こうしたらこうなる」と予測する能力である。優れた勘を持つ人は、予想に反した結果を得るたびに、自分の中の予測式を改善することで予測精度を上げている。機械学習はこれを人間の処理能力をはるかに超えた数のデータに対して行う技術であり、人間が混乱するほどの情報を整理するのに役立つと期待できる。

機械学習では、多数のデータ(目的変数)とその「記述子(関係しうるデータ項目)」のセットを機械に与えることで、プログラムが自動的にデータ間の関係式を導く。このため、細かい場合分けのような明示的なプログラミングを行う必要がないのが利点である。

成功の秘訣は、どれだけ良いデータセットを作り、どんな記述子を指定してプログラムに「考え方」を指示するかというセンスが問われる。百程度のデータ数では意味のある結果が出ないことが多く、数千、数万というデータを解析していくことで初めて、そこそこ良い予測ができるようである。

### (2) マテリアルズインフォマティクス(MI)の可能性

材料科学の情報学である Materials Informatics (MI) は、

アメリカを中心に近年、急速な発展を遂げている。自動第一原理計算によって得られた数万件の電子構造データを世界に公開し、これを基軸に様々な機能材料の特性予測が進められている<sup>(1)</sup>。日本でも第一原理計算の研究者の一部は、早くから MI の可能性に気づいて近年目覚ましい成果を挙げている。物質・材料研究機構が2015年に立ち上げた情報統合型物質・材料研究拠点(MI<sup>2</sup>I)では、そんな全国の MI の科学者と、新規に MI に参入する材料系研究者・情報系研究者の相互交流を通して、手探りでの MI プロジェクトが進んでいる。このプロジェクトに筆者も参画させていただいており、第一原理計算による新規熱電材料探索に取り組んだ経験を生かして、新たな MI のフィールドを切り開く研究に取り組んでいる。

### (3) 次世代の MI : 実験値 MI の可能性

現在、世界で行われている MI の多くは第一原理計算データを使用するものである。これは、第一原理計算研究者がプログラミングに強いこと以外にも、自動計算スクリプトによって大量のデータを同じフォーマットで生成することが容易なためである。だが第一原理計算から材料物性のすべてが完全に予測できるわけではない。

MI の世界における未開拓分野は、実験データの活用にある。これがなかなか進まないのは、実験データを大量に取得することが難しいためである。難しいと言っても、データ収集作業そのものは複雑な実験や計算に比べたらはるかに簡単なのである。難しいのは、データ収集を行うためのインセンティブの確保にある。

そこで、本記事では筆者が日本熱電学会において取り組んでいる、熱電特性データベースの作成プロジェクトについて紹介する。本格的なデータ収集活動はこれからであるが、他の金属材料分野に対しても何らかのヒントになれば幸いである。

\* 東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻; 助教(〒277-8561 柏市柏の葉5-1-5), 国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)情報統合型物質・材料研究拠点(CMI<sup>2</sup>); 特別研究員  
Construction of Thermoelectric Database and Its Application for Experimental Data Materials Informatics; Yukari Ktamura (\*Tokyo University, Kashiwa)

Keywords: materials informatics, database, thermoelectric materials, thermoelectric properties, web system

2017年5月31日受理[doi:10.2320/materia.56.560]

## 2. 熱電特性への実験値 MI 導入の必要性

### (1) 熱電材料開発の一般的な手法とその課題

本題に進む前に、熱電材料について簡単に紹介する。熱電材料とは、温度差と電位差を相互変換する材料であり、発電素子やペルチェ冷却素子としての応用が期待されている<sup>(2)</sup>。比較的高い性能を示す  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  や  $\text{PbTe}$  はすでに実用化されているが、希少元素の  $\text{Te}$  や毒性元素の  $\text{Pb}$ ,  $\text{Te}$  を用いる必要があるため、環境調和元素から構成された新規熱電材料の発見が望まれている。

実は、熱電材料の候補物質はかなり多い。これは、熱電特性はほぼすべての半導体および金属が示すものであり、作製法によっても特性を大きく変化させられるためである。しかし逆に、どれが有望な材料なのか判断が難しくなっている。1つの物質の有望性を調べるにも、膨大な数の試料を作製して判断する必要があるためである。

熱電発電と冷却の効率を、無次元性能指数

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_{\text{el}} + \kappa_{\text{ph}}} \quad (1)$$

が大きいほど高くなる。 $S$ は熱起電力(ゼーベック係数)、 $\sigma$ は電気伝導率、 $\kappa_{\text{el}}$ は電子熱伝導率、 $\kappa_{\text{ph}}$ はフォノン熱伝導率である。変換効率が8%に達する  $ZT > 1$  が実用化の目安だと長く言われてきた。なお、 $ZT \rightarrow \infty$  でカルノー効率に達する。

式(1)を単純に読み解くと、 $S$ と $\sigma$ が高く、 $\kappa_{\text{el}}$ と $\kappa_{\text{ph}}$ が低い材料が有望であるということになる。しかしこれらは物質ごとに決まった値が定義できるわけではない。 $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa_{\text{el}}$ はキャリアドープ量  $n$  によって大きく変化する。たとえば  $n$  を大きくすると、 $\sigma$ が上昇し、 $S$ が低下する。この結果、 $ZT$ は  $n$  に対して山なりのカーブを描く。このカーブの全貌を見るため、材料研究者は、不純物ドープによって  $n$  の調整を試みる。

式(1)では独立パラメータに見える  $\kappa_{\text{ph}}$  も、フォノン散乱頻度によって大きく変化する。このため不純物ドープや結晶粒の微細化、格子欠陥の導入によって  $\kappa_{\text{ph}}$  の低減に取り組んでいる。うまく行くと、 $\kappa_{\text{ph}}$  は数分の1~数十分の1に低減させることができる。

このようにさまざまな条件で膨大な実験を行った結果、 $ZT = 1$  を超える明らかな高特性試料が1つでも見つければ有望だとわかる。だが  $ZT = 1$  を示すと言われている試料を実際に自分で作ってみても、 $ZT = 0.1$  にしかならなかったということは、熱電分野ではよくある事象である。

### (2) 第一原理計算による熱電特性予測の限界

筆者はこれまで、第一原理計算による熱電特性の予測研究に取り組んできた<sup>(3)</sup>。しかし第一原理計算では一般にバンドギャップの計算誤差が大きく、 $S$ の予測値に大きな誤差が出てしまった。また、ボルツマン輸送方程式を使って解くと、 $\sigma$ と $\kappa_{\text{el}}$ の計算に未知パラメータである電子緩和時間  $\tau_{\text{el}}$  が含まれてしまい、予測が難しかった。熱伝導率の計算も、フォノン緩和時間  $\tau_{\text{ph}}$  の情報が必要になるため難しい。 $\sigma$ ,  $\kappa$ を直接計算する手法も研究が進められてはいるものの、計算でき

るのは純粋物質であり、不純物元素の多い実用熱電材料に適用するのは困難であった。

### (3) 実験値 MI 導入にむけたデータベースの必要性

そんな複雑な熱電材料研究のデータを解析するには、実験データを用いた機械学習が適していると考えられる。熱電材料の実験系論文には、標準的に  $S$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  の温度依存性のグラフが掲載されている。これらのデータの相互関係は人間の頭で把握するには複雑だが、機械学習であれば対処できる可能性がある。

問題は、過去に発表された熱電特性の実験データのほとんどは、画像ファイルの形で論文 PDF の中に眠っていることである。そこで、大量の論文から実験データを収集する活動に取り組むことにした。

## 3. 日本熱電学会におけるデータ収集プロジェクト

### (1) データベース作成のインセンティブ

グラフ画像や文章などの表現物をコピー・転載することは著作権の侵害となりうるが、科学的な数値データの転載は、著作権には抵触しない<sup>(4)</sup>。

データベース作成作業は従来「研究成果にならない雑用」と見なされ、研究者自身は行わない文化があったが、Scientific Data などのデータジャーナルの創刊により、きちんと整理されたデータセットがあれば、新発見がなくても論文同等の研究成果にできるようになった。そこで、自発的なデータ収集サイクルの実現のため、作業の面倒くささをゼロに近づけ、データベースに収録されるメリットがそれを上回る仕組みを作ればよいと考えた。

### (2) 熱電特性データベース WG の設立

文献からのデータ収集は、一人で行うには膨大過ぎる作業であるが、実現すれば多くの研究者の役に立つ。そこで筆者は2015年に、日本熱電学会において熱電特性のデータベース化プロジェクトを提案し、理事会での協議を経て、日本熱電学会熱電特性データベースWG(ワーキンググループ)を設立した<sup>(5)</sup>。この概要を図1(次頁)に表した。

このチームで行うデータベース作成作業は、学会の事業とはせず、学会に所属する研究者による「共同研究プロジェクト」と位置づけた。これにより、研究のためのさまざまな制度(電子ジャーナル、研究費、エフォートなど)を利用できるようにして、各参加者の研究成果につなげられるようにした。これは、事業化による有償化やアクセス制限などによる使い勝手の低下を防ぐ効果もあると考えた。

最初の取り組みとして、2016年3月に日本熱電学会の研究會「計算&データ研究会」を1泊2日の日程で開催した。厳密にはデータ科学には第一原理計算は関係ないのだが、プログラミングに強い研究者に興味を持ってもらえる思える研究会にすることを目指してテーマを設定した。この結果、本データ収集プロジェクトについて知っていただけるきっかけにすることができた。

この後、全国各地の大学や研究機関で本WGの説明会を

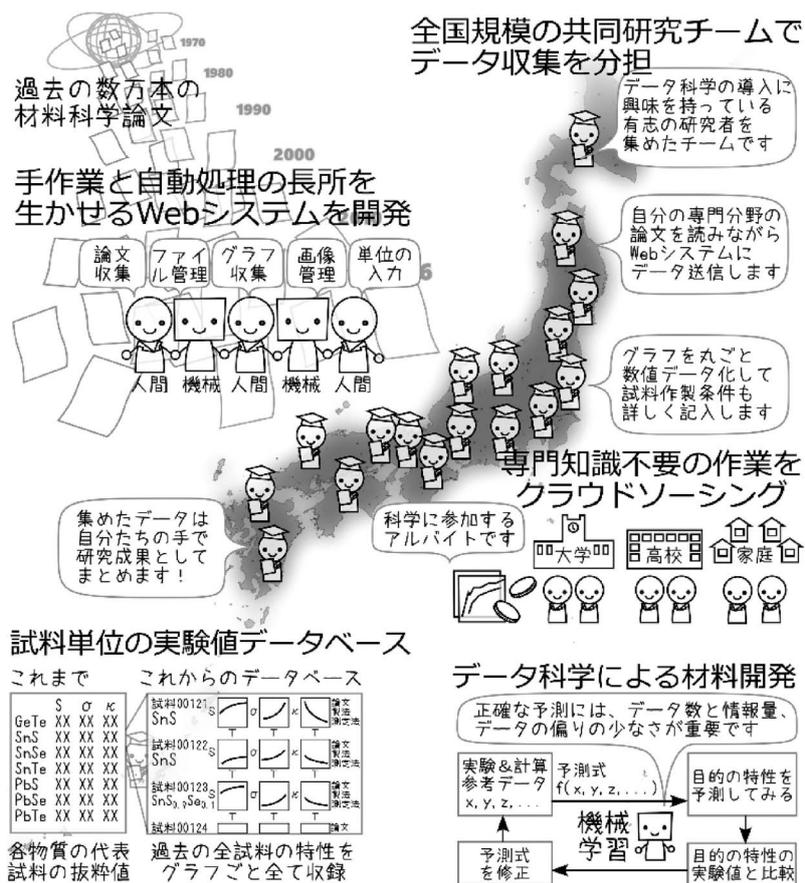


図1 本プロジェクトにおける文献データ収集のアプローチ。

開催し、興味を持っていただける研究者や学生さんを集めた。この時、できるだけ強制にならず、各個人の自発的な意志で参加するよう心がけることで、良い雰囲気のグループの構築に努めた。半年間の説明会で47名のWGメンバーを集めることができた。各メンバーが個々の研究で忙しいことを考慮すると、決して十分な人数とは言えないものの、面白いチームになっていくことを期待している。

#### 4. 具体的なデータ収集の方法

データ収集作業の効率化に最も有効なのは、作業そのものの自動化ではなく、データ収集作業の前後にかかる無駄な時間の削減であると考えている。このため、グラフ上の点をクリックする作業を自動化するよりも、その前後でやらなければならない面倒なファイルとデータの管理を自動化することが有効である。もし今後その作業を代替しうる人工知能プログラムができた場合も、いきなりプログラムに任せるとチェックが必要になり二度手間になるので、作業者の入力補助という形で導入するのがベストであると考えている。

##### (1) 実験値 MI 専用データベースの設計

従来の材料特性データベースには、ほしい情報を簡単に調べるためのレファレンスとしての役割が期待されていた。このため、実験条件などは詳しく書かず、1つの物質の特性を1試料に代表させ、その中の測定値を1点記録しておけば良

かった。

だがこのようなデータベースを使い、どの物質が最も良いか比較しても、物質間のフェアな戦いは実現できない。最高特性試料が選定された物質と、純粋すぎて特性は良くない単結晶試料が選定された物質と、研究され始めたばかりでまだ特性の悪い試料しか報告されてない物質が、同じ土俵で戦う状況になるためである。

これを防ぐ単純なアプローチは、データの選定は試みず、目的の物性が載った論文があれば、そこに掲載されているすべての試料を収集対象とすることである。化合物単位ではなく、試料単位で収録することで、互いに矛盾するデータがあっても気にする必要がなくなる。これは、データ収集者の心理的負担を大きく減らすことにもつながる。

もちろんデータ選定をしないことで、信頼できないデータが混入する可能性もある。だが、信頼性の有無は主観で判断するよりも、データに基づいて判断の方が科学者として真摯な態度であるとも言える。このため、明らかに間違っているものを除いて、基本的には収録すべきデータだと考えている。

##### (2) データ収集対象論文の選定

過去の全文献をデータベース化するには、大量の論文ファイル入手する必要がある。そこでまず、対象論文のリストを作成した。Scopus<sup>(6)</sup>を利用して、論文の書誌情報を一括ダウンロードした。これを表計算ソフトで開き、著者やタイト

ル、雑誌名や DOI(Digital Object Identifier), フルテキストのダウンロードページへのリンクなどの情報を一括取得した。

はじめに, “Thermoelectric” というキーワードで検索をかけ, 約48000件分の論文リストを取得した。だが, これだけでは材料特性以外の論文が多く含まれてしまい, 検索キーワードによるそれらの除外が困難であった。そこで, タイトル中に何らかの物質名(化学式, 元素名, 鉱物名など)を含む論文を自作のスク립トで抽出することにより, 論文のリストを約22000件まで縮めた。

### (3) 論文フルテキストのダウンロード作業

このリストに基づき, 研究業務員2名の力を借りて, 手作業で1本ずつPDFファイルをダウンロードした。進捗管理のため各論文に独自のIDを設定し, 保存時のファイル名も予め決めておくことで, ダウンロード作業が効率化できた。一部, 所属機関からアクセスできない論文もあったが, 9か月で約15000本弱の論文を収集できた。

なお, プログラムによる論文の自動ダウンロードは, テキストマイニングAPIを除き, 出版社から禁止されていることが多い。時間当たりのダウンロード数を厳しく監視している出版社もあり, 万一不自然なアクセスだと認識されると, 自分のIPアドレスからのアクセスがブロックされるリスクがある。今回のダウンロード作業ではブロックされることはなかったものの, ダウンロード作業が速すぎないように注意した方がよい。一括ダウンロード機能を搭載する論文検索システムであっても, 同様の注意が必要である。

### (4) 論文からのグラフ画像とデータの抽出

論文中のグラフ画像を独立した画像ファイルとして保存すると, データの抽出と管理が容易になる。そこで, 自動と手動の2種類の画像抽出法を用意した。自動抽出では思うようにいかない論文(ロゴマークや文字など本文に関係のない画像の多い論文, 短冊状や格子状に分割された画像から構成される論文, 図表を構成する円や線などの図形パーツが独立に検出されてしまう論文, 目的のグラフ画像がなぜか検出されない論文など)である。手動抽出ソフトは, 論文PDFのスナップショット画像からクリップボードを経由してPNG形式の画像ファイルを保存するソフトを開発した。論文やグラフ情報を含めたファイル名の設定を補助することで, 手動画像抽出も効率化できた。

### (5) データ収集 Web システムの開発

本研究では, グラフからのデータ収集作業を全国規模で共有・分担できる Web システムを開発した<sup>(7)</sup>。Web システムとすることで, 作業側でのソフトウェアの更新が不要となり, Windows, Macintosh, Linux 以外にも iOS や Android などのタブレットの利用が可能となった。

開発は, 日本熱電学会の会員である熊谷将也氏(2015年当時博士課程2年)が引き受けてくれた。彼は実験と計算による熱電材料開発の研究をしていたが, データ科学と Web プログラミングの知識も持っている。論文をまたがって同じ作

業を繰り返せる仕様とすることで, 最小限のクリック数でデータを収集できるようにすることを目指した。試料情報を論文単位で管理することで, 別のグラフに同じ試料が登場した場合も, 同じ試料のデータとして関連付けて登録できる。

### (6) 試料情報の記入フォーマット的设计

実験値データベースのフォーマットには, まだ世界標準が存在しないため, 自分たちで設計する必要がある。収集した論文をテキストマイニング技術で解析し, 情報を体系化するところから始める予定である。学会内の幅広い分野の材料研究者で検討して, 「自分たちの研究に最もしっくりくるフォーマット」を設計することが重要である。

## 5. 終わりに

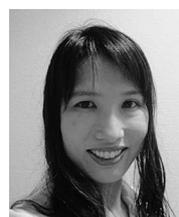
過去の大量の論文上の実験データをデータベース化するという仕事を誰よりも早く達成すれば, それを用いたデータ科学研究という形で, 材料科学のフロンティアを切り開ける可能性がある。熱電材料のデータ収集をモデルとしてデータ収集方法が確立できたら, 他の材料科学分野でのデータ収集に広がっていきたく考えている。

もし他の金属材料分野で, 同様のデータベース化を進めたい方がいらっしゃれば, 技術やノウハウ, データの共有を通して, ぜひ連携して進めたいと思う。

文献データ収集 Web システムの開発に大きくご貢献して下さった熊谷将也氏と, 論文PDFのダウンロードを手伝っていただきました今井庸二氏と郡司咲子氏に深く感謝申し上げます。熱電特性データベースWGのメンバーと, 日本熱電学会理事会の先生方の温かいサポートに, この場を借りてお礼申し上げます。本研究は, 科学研究費補助金(挑戦的萌芽研究16K14379)と, 科学技術振興機構(JST)のイノベーションハブ築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI2I)」から支援を受けたものです。

## 文 献

- (1) A. Jain, K. A. Persson and G. Ceder: APL Mater., 4(2016), 053102.
- (2) G. J. Snyder and E.S. Toberer: Nat. Mater., 7(2008), 105.
- (3) 桂ゆかり: 日本金属学会誌, 79(2015), 633-637.
- (4) R. Elliott: Learned Publishing, 18(2005), 91-94.
- (5) 桂ゆかり: 日本熱電学会誌, 12(2016), 16-22.
- (6) Scopus, Elsevier (2012). URL: <https://www.scopus.com/>
- (7) 桂ゆかり, 熊谷将也, 今井庸二, 郡司咲子, 木村 薫: 粉体および粉末冶金, 64(8)(2017).



桂 ゆかり

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
2009年3月 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了  
2009年4月-2012年8月 理化学研究所 基礎科学特別研究員  
2012年9月-2015年7月 東京大学 特任研究員  
2015年8月 現職  
2015年7月 物質・材料研究機構 特別研究員(兼任)  
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



## 「高信頼性鋼」を支える特殊鋼製造技術と材料開発

山陽特殊製鋼株式会社；シニアマネージャー

高須 一郎\*

山陽特殊製鋼は1933年創業の特殊鋼専業メーカーです。特殊鋼と言っても学生の皆さんにはあまり馴染がないかも知れませんが、実は皆さんの身近な所でも、自動車、新幹線、スマートフォン、ハードディスクドライブなどの中の重要な部材として使用されています。特殊鋼は、熱や摩耗・衝撃などに強いといった特性から、自動車や鉄道などの軽量化や長寿命化など、社会の発展に貢献しています。その中で山陽特殊製鋼は、不純物を極限まで低減させることのできる高纯净度鋼製造技術をベースに高品質の特殊鋼を安定的に提供しています。特に、主力製品の軸受用鋼は、他社よりも高い品質と信頼性で、世界各国で高い評価を受けています。

顧客ニーズが多様化する現在、そのニーズに応える製品開発や製造技術の向上は不可欠であり、本報では商品開発や製造技術開発を進める上で活用している評価・解析技術について紹介します。

軸受部品は、滑らかな動力伝達をする機械ユニットでのパワーロス軽減を図る役目があり環境負荷軽減に寄与しています。その中で、軸受用鋼は、環境問題の加速を背景とした自動車用をはじめとする各種機械ユニットの機構革新や、大幅な小型軽量化の影響を受け、従来にはない過酷な環境で、従来と同等以上の寿命特性を発揮することが求められています。軸受部品の長寿命化には、潤滑や機械設計に関連する方策が有効ですが、環境問題の高まりを受けて改善要求レベルは高まっており、材料への期待も大きくなっています。これに対し山陽特殊製鋼は、溶鋼中の非金属介在物を極限まで少なく、また小さく制御し、その纯净度を極限まで高める超高纯净度鋼操業技術を確立しています。鋼中の非金属介在物の低減が寿命延長をもたらすことが知られており、このことが、軸受部品の機能として最も重視される転がり疲れにおける耐久性の発揮を担っています。

ところで、品質向上のための製造技術改善を図る上で、指標となる評価技術が重要となりますが、適切な評価手法を持っていないとユーザーの求める品質の造り込みができません。

纯净度評価については、従来から鋼中の酸化物系介在物の総量を表す酸素値を基準にしてきました。ここで酸素値に現れる介在物の大きさは数 $\mu\text{m}$ 程度以下で、この酸素値とL10

寿命と呼ばれる疲労寿命とは良い相関が得られていました。ところが、纯净度に対する要求も高度化して行き、単に酸化物系介在物の総量を減らすだけでは対応できなくなってきました。そこで、介在物自体を小径化するニーズが出てきます。これに対し、単位被検面積あたりの最大介在物に着目するという観点で、極値統計法による介在物評価方法が開発されました。これにより、酸素分析の被検重量は1g程度に対して、数g~20g程度となり、評価対象の介在物サイズも、10数 $\mu\text{m}$ レベルとなりました。この値を基準に高纯净度化検討することにより、SNRP操業という当社独自の超高纯净度鋼製造技術を開発しています。そこから、さらに信頼性を向上させるというニーズに対応して、より大体積を試験可能な超音波探傷法による介在物評価方法を開発。これにより被検重量をkgオーダー以上に拡大させ、この指標も取り入れて、更なる高纯净度化を図っています。

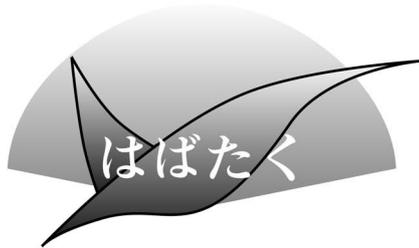
もちろん、纯净度を高めるための製鋼操業改善案を考案するには、前述の評価技術開発や現場実験によるデータ取得だけでなく、材料や熱力学、反応速度論等の知識も総動員して、それらを駆使する必要があります。それらの知識は、会社に入ってから取得するものが多く必ずしも学生時代の知識がそのまま役に立つとは限りませんが、そのベースとなる材料の知識は学生時代に取得したものでしょうし、それらの知識が役立つことも多いと思います。その意味で、学生時代に少しでも良いので視野を広げておくことが大事だと思います。

また、商品開発や製造技術開発を支援するものとして、各種シミュレーション技術があります。山陽特殊製鋼でも、合金設計や材質予測に活用している熱力学計算や材質データ予測、製鋼・铸造から圧延・熱処理および顧客での加工や処理に対するソリューション提供に至るまで、各種シミュレーションソフトウェアを導入して対応しています。ここで重要となってくるのは、シミュレーション計算で得られる結果の妥当性とそれらをどのように解釈するかです。妥当性確保には、ラボ実験による材料データや製造現場で取得した各種データとの合せ込みを行い検証しているのですが、計算に用いるモデルや取得データの信頼性が重要になってきます。例えば製造現場で起こっている現象を解析し信頼性の高いデータを得るためには、実際に現場に行き、実際の現象をよく観察する必要があります。また、シミュレーション結果の解釈を含めて、材料科学の原理原則に基づき考えることも重要です。

特殊鋼を対象として、山陽特殊製鋼における「高信頼性鋼」の評価技術やシミュレーション技術の一部を紹介しました。当社には、特殊鋼材の他に、素形材製品や粉末製品を製造しており、実際の業務では幅広い分野での技術開発を進めています。これらに対しても、基本的な材料の知識が役立っており、ひいては信頼性の高い特殊鋼を安定的に世に送り出すことを通じて、産業界の発展に貢献しています。

(2017年6月28日受理)[doi:10.2320/materia.56.564]

(連絡先：〒672-8677 姫路市飾磨区中島3007番地)



## 「配向」と「ランダム」の融合

大阪大学特任助教；大学院工学研究科  
マテリアル生産科学専攻

李 誠 鎬

### 1. はじめに

私は、2016年3月に名古屋工業大学大学院工学研究科未来材料創成工学専攻にて博士(工学)の学位を取得し、同4月より大阪大学大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻の生体材料学領域にて、特任助教として研究活動を行っております。「異方性の材料科学」をキーワードに「骨を材料として捉え、BAp(生体アパタイト：骨の主な無機成分)配向性という骨質パラメータを導入し材料工学的観点から骨にアプローチする」という非常に独創的な骨研究を行う中野貴由教授の研究室において、骨質・骨量の両方を早期に回復可能とする材料の創製を目指しています。私はこれまで、生体活性ガラスを中心とし、材料から溶出するイオンを積極的に活用し、骨形成を促進可能な材料の創製を行ってきました。以下のこれまでの研究概要について紹介させていただきます。

### 2. 生体材料におけるリン酸塩ガラス

博士(工学)取得まで、名古屋工業大学で春日敏宏教授の指導の下、生体用リン酸塩インバートガラスの研究に取り込みました。インバートガラスとは、ガラスの網目形成酸化物( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{P}_2\text{O}_5$ 等)より網目修飾酸化物(カチオン等)が多く含まれる組成のガラスを言います。春日敏宏教授が考案した、リン酸塩インバートガラスは、中間酸化物である $\text{TiO}_2$ を少量添加することで、短いリン酸グループ同士を $\text{TiO}_x$ 多面体がクロスリンクした構造をしています。このリン酸塩インバートガラスをコーティングしたチタン合金は動物実験にて優れた生体活性を示しました。当時、私が研究対象として取り組んだのは、リン酸塩インバートガラスに骨形成を促進するイオンの添加による生体活性向上を目標とし、ガラス構造を解析・制御することで、イオン溶出挙動の制御を目指しました。様々な骨形成促進イオンの中、 $\text{Mg}^{2+}$ イオンに注目しました。 $\text{Mg}^{2+}$ イオンは、骨芽細胞において細胞接着性を向上させ、その後の細胞増殖・分化・石灰化まで促進します。更に、ガラス中では中間酸化物として働き、ガラス網目構造形成を補助し、ガラス形成能を向上させることが可能です。リン酸塩インバートガラスに $\text{MgO}$ を導入すると、ガラス形成能が向上し、イオン溶出能も向上するという、従来のメタ組成リン酸塩ガラスでは示さなかった、相反する性質を同時に持つガラスの作製に成功しました<sup>(1)</sup>。さらなるイオン溶出能向上のため、リン酸含有量を少なくし、 $\text{MgO}$ を導入することで、オルトリン酸(リン酸の一番小さいユニット)のみから形成され

た、溶出能が非常に高いガラスの作製に成功しました<sup>(2)</sup>。このガラスは、網目構造を形成するユニットが小さいことから、従来のガラスではリン酸とケイ酸は容易に分相しますが、オルトリン酸とオルトケイ酸の小さい網目形成ユニットを $\text{Mg}^{2+}$ イオンがクロスリンクすることで、分相することのない、均一なインバートガラスの作製にも成功しました<sup>(3)(4)</sup>。

### 3. 他研究グループ・企業での経験

修士・博士課程中では、他研究グループで研究をする貴重な経験を得ることができました。修士では、産業総合技術研究所の加藤且也グループ長の指導の下、6ヶ月間、セラミックスナノ粒子が細胞に及ぼす影響についての研究に取り組み、細胞培養の基礎を学び、結果を論文投稿しました<sup>(5)</sup>。博士では、Imperial College LondonのJulian Jones教授の指導の下、3ヶ月間、生体用ゾルゲルガラスの研究に取り組み、ゾルゲルプロセスの基礎を学び、結果を論文として残しました<sup>(6)</sup>。修士修了後は、一旦、研究の現場を離れ、サムスン電機で専門研究員として3年間、新製品の開発に取り組み、材料が量産に至るまでの経験を積むことができました。他研究グループ・企業で、研究・開発に取り組み学ぶことにより、研究者としての幅広い視野を得ることができたと考えています。

### 4. 現在

生体骨の結晶学的異方性微細構造に材料工学からアプローチする中野貴由教授の下、骨異方性構造を早期に回復可能な材料の創製を目指しています。骨の力学特性は骨量より骨組織の配向に支配的に影響され、骨芽細胞を配向させることで骨配向構造の形成が可能で、そこで、生分解性ポリマーであるポリ乳酸と、生体活性ガラスのコンポジットを用いた配向化ファイバーマットを作製し、細胞配向の制御をポリ乳酸からなるスキャフォールドで行い、Bioglass<sup>®</sup>を中心とした生体活性ガラスから溶出するイオンにより骨形成を促進させる材料の研究に取り組んでおります。

### 5. おわりに

中野研究室の研究方針である「異方性の材料科学」をキーワードに「配向」したスキャフォールドと「ランダム」構造を持つガラスを融合した、異方性材料の研究を自由にさせて頂いております。従来の骨量のみを回復させる生体材料でなく、材料から積極的に働きかけることにより、本来の異方性構造を有した生体組織を誘導可能な生体材料を創製することを目標に、材料工学研究者として社会に貢献できる材料の創製に挑戦していきたいです。

### 文 献

- (1) S. Lee, H. Maeda, A. Obata, K. Ueda, T. Narushima and T. Kasuga: *J. Non-Cryst. Solids*, **438**(2016), 18–25.
- (2) S. Lee, A. L. B. Macon and T. Kasuga: *Mater. Lett.*, **175**(2016), 135–138.
- (3) S. Lee, T. Nakano and T. Kasuga: *J. Non-Cryst. Solids*, **457**(2017), 73–76.
- (4) S. Lee, K. Ueda, T. Narushima, T. Nakano and T. Kasuga: *Biomed. Mater. Eng.*, **28**(2017), 23–30.
- (5) S. Lee, T. Kasuga and K. Kato: *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **118**(2010), 428–433.
- (6) A. L. B. Macon, S. Lee, G. Poologasundarampillai, T. Kasuga and J. R. Jones: *J. Mater. Sci.*, **52**(2017), 8858–8870.  
(2017年7月10日受理)[doi:10.2320/materia.56.565]  
(連絡先: 〒565-0871 吹田市山田丘2-1)

# 本 会 記 事

会 告	会費改訂のお知らせとお願い	566
	会費の自動振替制度のご案内	566
	2017年秋期講演大会ご案内	566
	2017年秋期講演大会講演概要集 DVD の販売について	566
	日本金属学会・日本鉄鋼協会講演大会相互聴講のお知らせ	567
	2017年秋期講演大会企画シンポジウム開催のお知らせ	567
	第4回ランチョンセミナー開催	567
	2018年春期講演大会の外国人特別講演および招待講演募集	567
	講演大会の参加費および登壇費の改訂のお知らせとお願い	568
	第41回技術開発賞募集	568
	第68回金属組織写真賞作品募集	568
	研究集会	569
支部行事	新入会員	570
掲示板	次号予告	572
会誌・欧文誌9号目次	行事カレンダー	575

事務局 渉外・国際関係: secgnl@jim.or.jp  
 会員サービス全般: account@jim.or.jp  
 会費・各種支払: member@jim.or.jp  
 刊行物申込み: ordering@jim.or.jp  
 セミナー・シンポジウム参加申込み: meeting@jim.or.jp  
 講演大会: annualm@jim.or.jp  
 総務・各種賞: gaffair@jim.or.jp  
 学術情報サービス全般: secgnl@jim.or.jp  
 分科会: stevent@jim.or.jp  
 まてりあ・広告: materia@jim.or.jp  
 会誌・欧文誌: editjt@jim.or.jp

公益社団法人日本金属学会  
 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32  
 TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312  
<http://jim.or.jp/>

## 会 告 (ホームページもご参照下さい)

### 会費改訂のお知らせとお願い

2017年9月1日

公益社団法人日本金属学会会長 中島英治

2017年4月24日に開催された定時社員総会におきまして会員の会費改訂が決議され、2018年より会費を改定いたしますので、お知らせいたします。ご承知のように、本会の会員数は減少が続いており、特に次世代を担う若い会員の減少が顕著となっています。そこで、金属及び関連材料を学ぶ学生に会員になっていただくとともに、就職後も引き続き会員を継続していただくために、学生員の会費を現在の2/3に値下げするとともに、30歳以下の正員の会費を正員会費の半額とすることといたします。

一方、本会の会費は1982年から35年間据え置いてきており、その間に消費税が導入され、その分の経費負担が増加しており、さらに2019年には消費税は10%に増税されることが予定されています。そこで、上記の若手の会費値下げによる減収と消費税による経費負担増の一部を補うために正員の会費を約4%値上げさせていただくことにいたします。

以上の事情と趣旨をご理解いただき、現在会員の皆様には引き続き会員として、また若い方々には会員となっていただきますようお願い申し上げます。

#### 〈会費改訂の内容〉

会員種別	改訂後会費	改訂前会費
正員(31歳以上)	10,000円	9,600円
正員(30歳以下)	5,000円	9,600円
学生員	4,000円	6,000円

### 会費の自動振替制度のご案内

2018年度会費自動振替制度のご案内を下記の通り申し上げます。ご利用の方は、お手続きを宜しくお願いいたします。

ホームページ: 会費自動振替制度のご案内

2018年度会費自動振込申込締切 **2017年10月6日(金)**

#### 問合せ・申込書送付先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32  
 (公社)日本金属学会 会員サービス係 宛  
 ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312 E-mail: member@jim.or.jp

### 2017年秋期(第161回)講演大会のご案内

会 期 2017年9月6日(水)～9月8日(金)  
 会 場 北海道大学(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

### 2017年秋期講演大会講演概要集 DVD の販売について

2017年秋期講演大会講演概要集 DVD を販売しております。  
 ご購入希望の方は、下記をご記入の上、E-mailまたはFAXでご注文下さい。請求書を添えて送付いたします。  
 ①件名を「2017年秋期講演大会講演概要集 DVD 購入申込」  
 ②申込者氏名、③会員資格(会員番号も併記)、④申込数  
 ⑤送付先ご住所

会員価: 本体3,810円+税 定価: 本体10,000円+税 送料: 360円

問合せ (公社)日本金属学会 E-mail: ordering@jim.or.jp  
 ☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

## 日本金属学会・日本鉄鋼協会講演大会相互聴講のお知らせ

### 申込方法：当日受付

鉄鋼協会の講演を聴講する場合は、金属学会で従来の参加受付を済ませた後、鉄鋼協会受付で相互聴講の申込をする。

(注) 金属学会で講演発表(共同セッション含む)する場合は、金属学会の正規大会参加申込みが必要です。

料 金：一般・学生・非会員を問わず同一料金

聴講のみ(概要集無し)	3,000円
聴講と概要集(1冊)	6,000円

## 2017年秋期講演大会企画シンポジウム開催のお知らせ

### ■企画シンポジウム

#### 2017年度科学研究費補助金申請勉強会

日時 2017年9月6日(水)9:50~12:00

場所 北海道大学工学部 オープンホール

### ■18th KIM/JIM Symposium

日時 2017年9月6日(水)10:00~17:05

場所 北海道大学工学部 オープンホール

### ■企画シンポジウム

#### Ti合金の構造材料としての現状と今後の展望

日時 2017年9月7日(木)9:00~11:00

場所 北海道大学工学部 (金属学会 Q 会場)

### ■日本金属学会創立80周年記念シンポジウム

#### 日本金属学会創立80周年記念特集

#### 「材料科学の変遷と展望～社会からの要求に添えて～」

日時 2017年9月7日(木)13:00~16:50(大会2日目・午後)

場所 北海道大学工学部 オープンホール

### ■日本金属学会・日本鉄鋼協会

#### 第7回女性会員のつどい

日時 2017年9月8日(金)12:00~13:00

会場 北海道大学工学部「物工系会議室(A1-17)」

### ■平成29年度秋季全国大学材料関係教室協議会講演会

日時 2017年9月7日(木)14:30~15:30

場所 北海道大学工学部 フロンティア応用科学研究棟2階セミナー室

### ■日本金属学会・日本鉄鋼協会男女共同参画委員会

#### 10周年記念シンポジウム

#### 「企業・大学での女性活用とダイバーシティ推進を考える」

日時 2017年9月9日(土)9:30~12:05(講演大会の翌日です)

場所 北海道大学工学部 オープンホール

## 第4回ランチョンセミナー開催

秋期講演大会の会期中に、第4回ランチョンセミナーを開催いたします。このセミナーは、企業による製品の紹介や技術情報を聴講いただく企画です。参加無料です。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

企画 株式会社明報社

日時 2017年9月7日(木)12:05~12:45

会場 北海道大学・札幌キャンパス工学部 B棟・C棟(講演会場)

参加費：無料 昼食を無料提供いたします。

〈ランチョンセミナー開催企業・講演テーマ・演者予定〉

■A会場(B棟1階 B11講義室)

株式会社TSL ソリューションズ

「TEMを用いた結晶方位マップ及び相マップの作成~ASTAR/TopSpinの機能と特徴のご紹介~」 鈴木清一

■B会場(B棟1階 B12講義室)

オックスフォード・インストゥルメンツ株式会社

「Symmetry~世界初のEBSD用CMOS検出器の世界~」

■H会場(C棟2階 C212講義室)

日本テクノプラス株式会社

「弾性率測定：等方体から異方体へ」 児玉 功

■J会場(C棟2階 C214講義室)

名古屋大学 未来材料システム研究所 超高压電子顕微鏡施設

「超高压電子顕微鏡で見る金属の世界」 荒井重勇

■M会場(C棟3階 C310講義室)

物質・材料研究機構 材料データプラットフォームセンター

「世界のトレンドに見る材料系ジャーナルの将来」 谷藤幹子

参加方法：9月7日(木)8:30より参加券を「機器展示会場(工学部 A棟1階)」にて配布致します。

## 2018年春期講演大会の外国人特別講演 および招待講演募集

春秋講演大会における外国人研究者による特別講演と招待講演については会員からの推薦のもと、毎年6月と12月に開催される国際学術交流委員会において審議採択いたし、講演実施細目については講演大会委員会で決定いたします。2018年春期講演大会における特別講演と招待講演を募集いたしますので、下記要領によりご推薦下さい。

### 1. 特別講演

- ・講演者：著名な外国人研究者とする。
- ・講演時間：30分(討論10分)
- ・採択件数：3~4件
- ・滞在費補助：10,000円
- ・その他：大会参加費免除、懇親会招待

### 2. 招待講演

- ・講演者：有益な講演が期待される国内に滞在する外国人研究者とする。
- ・講演時間：15分(討論5分)
- ・採択件数：5件程度
- ・滞在費補助：なし
- ・その他：大会参加費免除

### 3. 推薦用紙

所定様式(ホームページからダウンロード下さい)により、下記メールアドレス宛に「外国人特別講演推薦」と明記しお送り下さい。送信後2~3日過ぎても受理メールの無い場合は、お問合せ下さい。

### 4. 推薦書提出期日 2017年11月20日(月)

### 5. 照会：推薦書提出先

〒980-8544 仙台市青葉区一番町1-14-32

(公社)日本金属学会 国際学術交流委員会宛

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: gaffair@jim.or.jp

## 2018年春期講演大会からの参加費および登壇費の改訂のお知らせとお願い

2017年9月1日

講演大会委員会委員長 杉本 諭

2018年春期講演大会より講演大会の参加費および登壇費を改訂いたしますので、お知らせいたします。本会では、より魅力ある講演大会にするため、各種施策の実施を行ってきておりますが、ご承知のように、会場使用料金の上昇に伴う減収が生じております。これを補うため、正員の講演大会の参加費ならびに非会員の講演大会参加費および登壇費を、以下の表に示すように値上げさせていただくことになりました。ただし、学生員の事前申込みの参加費は据え置きとするとともに、正員の値上げ幅を非会員のものに比べて低く抑えさせていただいております。これによって、これまで非会員で講演大会に参加されていた方の本会への入会および事前参加申込も促したいと存じます。

なお、非会員の参加者には、会員への移行を促すため、1年間、「まてりあ」を寄贈するとともに、会員価格でイベント等に参加できる特典を付与いたします。

以上、ご理解いただきますようお願い申し上げます。

### 参加費の改訂内容

	改訂後参加費		改訂前参加費	
	事前申込み	当日申込み	事前申込み	当日申込み
正員	10,000円	13,000円	9,000円	10,000円
学生員	6,000円	7,000円	6,000円	6,500円
非会員一般	24,000円	27,000円	19,000円	20,000円
非会員学生	14,000円	16,000円	14,000円	15,000円

### 登壇費の改訂内容

	改訂後登壇費	改訂前登壇費
非会員一般	10,000円	6,000円
非会員学生	5,000円	3,000円

### \*維持員会社の正員登録者以外の社員が講演発表する場合

	改訂後の参加費・登壇費	
	事前申込み	当日申込み
参加費は正員扱	10,000円	13,000円
登壇費は非会員扱	10,000円	10,000円
合計	20,000円	23,000円

### 第41回技術開発賞 「新技術・新製品」記事募集

応募締切：2017年10月31日(火)

賞の名称 第41回公益社団法人日本金属学会技術開発賞  
賞の対象 まてりあ「新技術・新製品」記事に掲載(1号から)された記事が選考対象となります。

表彰 2018年9月の秋期講演大会

原稿問合せ先 まてりあ E-mail: [materia@jim.or.jp](mailto:materia@jim.or.jp)

詳細 まてりあ 8号519頁 or ホームページ：本会賞の募集

申込 URL <http://gijutsu.jim.or.jp/entry>

技術開発賞の問合せ先

(公社)日本金属学会各賞係

☎ 022-223-3685 E-mail: [gaffair@jim.or.jp](mailto:gaffair@jim.or.jp)



### 第68回金属組織写真賞作品募集

応募締切：2017年10月20日(金)

賞の名称 第68回公益社団法人日本金属学会組織写真賞  
募集部門

「写真賞部門」

1. 光学顕微鏡部門
2. 走査電子顕微鏡部門(分析, EBSD等を含む)
3. 透過電子顕微鏡部門(STEM, 分析等を含む)
4. 顕微鏡関連部門(FIM, APFIM, AFM, X線CT等)

注：光学顕微鏡と透過電子顕微鏡写真、走査電子顕微鏡と透過電子顕微鏡写真等の組写真を応募する場合、応募者が最も適切と判断する部門を選択すること。

申込要領 下記 URL から入力し、写真作品データを提出する。

#### 【写真作品】

- ①写真データの解像度は A2 版サイズを前提に 400 dpi 以上とする。
- ②写真データは PDF または画像ファイル(jpg など)で提出する。  
(それ以外はプレビュー表示が出来ない)
- ③写真と図の組み合わせでも提出は可(写真, 図への挿入文字は小さすぎないこと)。
- ④作品には、応募者名、共同研究者名を記載しない。
- ⑤応募作品数には制限を設けない。
- ⑥他学協会等の同様の賞を受賞していない作品であること。

詳細 までりあ 8号520頁 or ホームページ：本会賞の募集

申込 URL <http://picture.jim.or.jp/entry>

問合先 (公社)日本金属学会 各賞係

☎ 022-223-3685 E-mail: gaffair@jim.or.jp

## 研究集会

### 研究会 No. 69

#### 第5回 エレクトロニクス薄膜材料研究会 「電子・情報・エネルギー素子と機能材料の最近の研究(5)」

〔協賛〕公益社団法人 応用物理学会

低炭素化社会の為に次世代電子・情報・エネルギー素子として、従来の半導体材料及びプロセスに踏襲されない革新的機能を有する電子デバイスが要求されている。本研究会では、革新的機能を有する電子デバイスに繋がる新たなエレクトロニクス材料について検討する。

日時 2017年11月2日(木)13:00~18:00

場所 兵庫県立大学姫路工学キャンパス A棟1階101(JR, 山陽電鉄姫路駅下車 神姫バス乗車「県立大工学部」下車(姫路駅より約30分)) (〒671-2280 姫路市書写2167)

#### プログラム

- 13:00-13:10 開会の挨拶  
兵庫県立大工 工学研究科長/工学部長 川月喜弘
- 13:10-13:40 (招待講演)「Eu 添加 GaN 波長超安定・狭帯域赤色 LED の新展開」  
大阪大学院工 藤原康文, 稲葉智宏, 朱婉新, 館林潤
- 13:40-14:10 (招待講演)「ダイヤモンド結晶および電子デバイスの現状と展望」  
物材機構 理事 小出康夫
- 14:10-14:40 (招待講演)「電子デバイスにおける原子層堆積技術の有効性」  
物材機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 生田目俊秀
- 14:40-15:10 (招待講演)「半導体基板上で膜タンパク質が機能するナノバイオデバイスの構築」  
兵庫県立大学院工 住友弘二  
— 休 憩 —
- 15:20-15:50 (招待講演)「金属酸化物薄膜の機能性と新規電子デバイスへの展開」  
兵庫県立大学院工 奈良英雄
- 15:50-16:20 (招待講演)「金属元素の添加による鉄酸化物薄膜の高機能化」  
電磁研新機能材料創生部門 阿部世嗣
- 16:20-16:50 (招待講演)「半導体結晶によるナノとマクロの協奏—原子レベルの結晶制御によるテラヘルツ波の高出力発生と社会インフラに対する非破壊検査応用—」  
東北大学院工 田邊匡生, 小山 裕
- 16:50-17:20 (招待講演)「印刷プロセス太陽電池：色素増感型太陽電池, CIGS, ペロブスカイト, シリコン」  
兵庫県立大学院工 伊藤省吾
- 17:20-17:50 「DNA/Si MOSFET の電気特性とその応用」  
兵庫県立大学院工 松尾直人, 高田忠雄, 部家 彰, 山名一成  
広島大ナノデバイス・バイオ融合科学研 横山 新
- 17:50-18:00 閉会の挨拶  
兵庫県立大学院工 松尾直人
- 企画責任者 松尾直人(兵庫県立大院工)
- 参加費 無料
- 申込・問合先 11月1日(水)までに FAX または E-mail にて氏名・所属・電話番号を明記してお申込み下さい。  
〒671-2280 姫路市書写2167 兵庫県立大学大学院  
工学研究科 材料・放射光学専攻 松尾直人  
FAX 079-267-4907  
E-mail: nmatsuo@eng.u-hyogo.ac.jp

### 研究会 No. 70

#### 第7回 プラストンに基づく変形現象研究会 ～疲労き裂研究の新機軸：微小き裂とマイクロ組織～

〔共催〕京都大学 構造材料元素戦略研究拠点 SIP 革新的構造材料 D67九州大学拠点

近年、転位の概念だけでは必ずしも理解しきれない変形現象が顕在化しつつある。回位(disclination)の運動によるナノ結晶材料における複数の結晶粒の協調的なせん断や回転、原子のシャフリングを要する六方晶や金属間化合物における変形双晶、マルテンサイト変態、粒界すべりなどがこの範疇に属し、材料の変形現象を包括的に理解する上位概念として変形子(プラストン)が提案されている。本研究会は新規な挑戦的概念であるプラストンを題材に新たな視点から材料の変形と破壊についての基礎的議論を行うために企画された。今回は、金属疲労において寿命の大半を占めるとともにマイクロ組織の影響を強く受ける微小き裂段階のき裂進展挙動を対象として、鉄鋼やチタンなどの構造金属材料の変形と破壊に関する活発な意見交換を行いたい。

日時 2017年9月26日(火)13:00~16:40

場所 キャンパスプラザ京都 第1会議室(京都駅前)

(<http://www.consortium.or.jp/about-cp-kyoto/access>)

#### プログラム

- 13:00~13:30  
(1) 疲労と破壊の科学：その挑戦と目指すもの  
九大工 津崎兼彰
- 13:40~14:30  
(2) 力学からの挑戦：金属疲労の常識と課題  
九大工 野口博司
- 14:30~14:50 — 休憩 —
- 14:50~15:40  
(3) 計測からの挑戦：3D/4D でわかることわかったこと  
九大工 戸田裕之
- 15:50~16:40  
(4) 計算からのアプローチ：き裂/界面相互作用の結晶塑性モデリング  
北見工大 大橋鉄也
- 企画責任者 乾 晴行(京大・工)
- 参加費 無料(参加人数確認のため可能な限り事前参加申し込み下さい)
- 申込・問合先 9月19日(火)までに E-mail または FAX にて氏名、所属、電話番号を明記してお申し込み下さい。  
〒606-8501 京都市左京区吉田本町  
京都大学 構造材料元素戦略研究拠点  
大石毅一郎  
☎ 075-753-5573 FAX 075-753-5578  
E-mail: admin@esism.kyoto-u.ac.jp



## 第1回 金属・無機・有機材料の結晶方位解析と応用技術研究会 参加募集

まてりあ第56巻第6号会告で講演募集しました「金属・無機・有機材料の結晶方位解析と応用技術研究会」を下記の通り開催いたします。今回が本研究会の最初の講演会となります。様々な結晶性材料の結晶方位にご興味のある方はふるってご参加下さい。なお、本研究会は軽金属学会「アルミニウムの再結晶集合組織形成モデル化研究部会」との共催により行います。

開催日 2017年10月5日(木), 6日(金)

場所 下呂市下呂交流会館アクティブマルチスタジオ  
(〒509-2202 下呂市森2270-3)

☎ 0576-25-5000 <http://www.gero-k.jp/>

JR 名古屋駅→(JR 高山本線)約1時間30分(ワイドビューひだ)→JR 下呂駅

下呂駅から濃飛バス合掌村線「下呂交流会館」下車

参加費 資料代として当日1,000円をお支払い下さい(学生は無料)

懇親会 10月5日 下記宿泊所と同じ

※宿泊所の夕食と同じため、宿泊と別申込不可、領収書は別発行6,480円

宿泊 10月5日 下呂温泉 紗々羅(基本的に相部屋設定(3-5名), 1名利用は要相談)

紗々羅館: 1泊朝食8,100円, 森山館: 1泊朝食5,940円(女性は少人数割引あり)

申込方法 氏名, 所属, 連絡先(TEL・E-mail)を明記の上, 9月15日(金)までに下記世話人宛にご連絡下さい。正式な参加申込書をお送りしますので, ご記入の上, ご返送願います。ただし, 研究会のみのお申込(懇親会不参加, 宿泊不要)に限り, 当日でも参加可能です。なお, 10月1日以降の宿泊取消は上記宿泊施設に直接ご連絡下さい。

申込先 〒599-8531 大阪府堺市中区学園町 1-1

大阪府立大学大学院工学研究科マテリアル工学分野  
井上博史

☎ 072-254-9316 FAX 072-254-9912

E-mail: inoue@mtr.osakafu-u.ac.jp

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂駅前12:40→下呂交流会館12:48)

## 10月5日(木)

13:20~13:25 閉会の挨拶 代表世話人 宇都宮大 高山善匡

13:25~14:00 (1) Fe-Mn-Si-Cr 形状記憶鋼による優先動的結晶粒成長機構の実験的検討と形状記憶特性の向上

横浜国大 中島 格(院生 現: 新日鐵住金エンジニアリング), 岡安和人  
茨城大フロンティア応用原子科学研究センター 小貫祐介  
横浜国大(現: 放送大学) 〇福富洋志

14:00~14:35 (2) BCC 鉄系合金における圧延変形微視組織の形成と優先結晶方位の発達

九大工 〇森川龍哉, 田中将己

14:35~15:10 (3) 集合組織制御による FeCo 合金磁性材料の創製

滋賀県立大 〇本庄さおり, 宮村 弘,

バラチャンドラン ジャヤデワン

滋賀県立大 菊池潮美, 東北大 佐久間昭正, 秋田大 石尾俊二

—休 憩—

15:25~16:00 (4) 分散粒子起因による異常粒成長の Phase-field シミュレーション

新日鐵住金 〇諏訪嘉宏, 新日鐵住金(現: 金沢大) 潮田浩作

16:00~16:35 (5) Potts-MC シミュレーションで作成した結晶粒組織の3次元観察 東大 名誉教授 伊藤邦夫

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂交流会館16:48→下呂温泉16:52)

18:00~20:00 懇親会(紗々羅)

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂温泉9:11→下呂交流会館9:18)

## 10月6日(金)

9:40~10:15 (6) 中性子回折を利用した高温その場合集合組織測定システムの構築

茨城大フロンティア応用原子科学研究センター 〇小貫祐介, 星川晃範

茨城大工 佐藤成男, 茨城大フロンティア応用原子科研セ 石垣 徹

10:15~10:50 (7) 中性子回折を用いた複層鋼板の集合組織と残留応力テンソル測定

日本原子力研究開発機構 〇徐平光, 東大 井上純哉

日本原研 W. ゴン, S. ハルヨ, 鈴木裕士, 秋田貢一

10:50~11:25 (8) Mg 量の異なる Al-Mg 合金の冷間圧延における内部局所塑性ひずみ分布

豊橋技科大 〇小林正和, 青葉知弥, 三浦博己

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂交流会館11:48→下呂温泉11:52)

—昼 食—

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂温泉12:41→下呂交流会館12:48)

13:00~13:35 (9) アルミニウムのせん断変形と焼鈍による優先方位形成

宇都宮大工 〇高山善匡, 金丸友和, 荒川卓弥, 渡部英男

13:35~14:10 (10) AZ61Mg/Ti クラッド薄板レーザ突合せ溶接材の組織と集合組織

大阪府大工 〇井上博史, 奥野雅士(学生)

14:10~14:30 【討論会】金属・無機・有機材料の集合組織解析

14:30~14:35 閉会の挨拶 世話人 大阪府大工 井上博史

(参考: 濃飛バス 合掌村線 下呂交流会館14:48→下呂駅前14:55)

## 支部行事



## 東北支部地区講演会

[共催] 日本鉄鋼協会東北支部, 秋田大学理工学部

日時 2017年11月17日(金) 14:30~16:50

場所 秋田大学理工学部 3号館(材料系教室)319室  
(秋田市手形学園町 1-1)

<http://www.akita-u.ac.jp/honbu/access/>

テーマ 新しい金属材料の開発と評価法

閉会の挨拶 日本金属学会東北支部長 鈴木 茂

講演 座長 秋田大 原 基, 大口健一

講演 1(14:35~15:35)

ひずみ加速指数によるクリープ曲線の再現

弘前大理工 教授 佐藤裕之

講演 2(15:45~16:45)

金属溶湯中の脱成分反応を利用したポーラス金属の開発

東北大金研 教授 加藤秀実

閉会の挨拶 秋田大理工 麻生節夫

参加費 無 料

懇親会 17:30~19:30 秋田大学学生会館(会費: 3,000円)

懇親会の申込締切 11月10日(金)

詳しくは下記連絡先までお問い合わせ下さい。

連絡先 秋田大学理工学部物質科学科・材料理工学コース 原 基

E-mail: haramoto@gipc.akita-u.ac.jp

☎ 018-889-2414 FAX 018-837-0403

## 第16回 日本金属学会東北支部研究発表大会

日時 2017年11月22日(水) 13:30-18:00

会場 東北大学さくらホール(〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1)

参加費 無料

プログラム(予定) 13:30~13:40 支部長挨拶  
13:40~16:20 基調講演  
16:30~18:00 ポスター発表  
18:00~19:30 懇親会

懇親会費 3,000円(学生2,000円)程度を予定しています(当日徴収)

参加申込締切 11月17日(金)(懇親会参加の有無もお知らせ下さい)

講演申込要項

募集講演 ポスター発表

申込方法 下記内容を E-mail でお知らせ下さい。

1. 題目
2. 氏名・所属(全員、発表者に○印)
3. 連絡先・電話・E-mail アドレス
4. 懇親会参加の有無

申込締切 10月27日(金)

予稿原稿締切 11月13日(月)

予稿原稿作成

A4 版1頁(PDF ファイルを E-mail でご送付下さい)

作成要領は発表者に後日連絡いたします。

ポスターサイズ

A0(縦)を超えないこと

講演申込・予稿原稿送付先

〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1

東北大学 多元物質科学研究所 中川原淳子

☎ 022-217-5177

E-mail: j-gawara@tagen.tohoku.ac.jp

問合せ先

東北大学 多元物質科学研究所 篠田弘造

☎ 022-217-5624

E-mail: shinoda@tagen.tohoku.ac.jp



## 第129回金属物性研究会 「高温材料用金属材料の展望」

〔共催〕島根県, 島根大学たたらナノテクプロジェクトセンター

高温材料はエネルギー産業において重要な構造材料です。また、高温材料は航空機などの輸送機器にも多く使われています。この材料の耐熱温度が上がるほどエネルギー効率は上がりますが、靱性が足りなかったり欠陥があったりするとボイラーやエンジンが破壊し大事故につながります。そのためこのような高温材料には靱性に優れた金属がよく使われています。今回はこのような高温用金属材料の基本から最近の利用のされ方まで幅広く御講演をいただきます。

日時 2017年10月20日(金) 13:00~17:00

場所 くにびきメッセ 401会議室(〒690-0826 松江市学園南1-2-1)

プログラム

13:00~13:05 開会の挨拶 島根大 森戸茂一

座長 島根大 森戸茂一

13:05~13:15

特殊鋼産業クラスター高度化推進事業について

島根県商工労働部産業振興課 産業クラスター育成スタッフ調整監 中澤信善

13:15~14:05

金属における格子欠陥の高温挙動の透過型電子顕微鏡法による研究 島根大 荒河一渡

14:05~14:15

高窒素フェライト鋼の創製と高温強度

九州大 中島英治

14:15~15:10 一休—

座長 島根大 大庭卓也

15:10~16:00

航空機に使われる耐熱 Ti 合金の開発史と最近の研究

物材機構 御手洗容子

16:00~16:50

航空機エンジン用 TiAl 合金と三次元積層造形

阪大 安田弘行

16:50~17:00 閉会の挨拶

島根大 大庭卓也

※講演内容はホームページ→支部行事でご覧頂けます。

参加申込 氏名・所属・連絡先(E-mail アドレス)を明記のうえ、9月28日迄に E-mail で下記の申込先へお申込下さい。

参加費 無料

※下記の工場見学会に参加される場合は、島根県の旅費規程に基づき交通費及び宿泊費が支給されます。(概ね10名程度)

〈特殊鋼関連企業工場見学会〉

日時 2017年10月21日(土) 8:30~12:30

日程 7:50 松江駅発(送迎バス)

8:30~12:30 工場見学

見学先

- ・(株)日立メタルプレジジョン
- ・株式会社キグチテクニクス
- ・秦精工株式会社(「SUSANOO」参画企業)

※詳細は同上のホームページ→支部行事をご覧下さい。

申込・問合せ先 島根大学大学院 総合理工学研究科 森戸茂一

☎ 0852-32-6398

E-mail: tatarata@riko.shimane-u.ac.jp



# 掲 示 板

## 〈公募類記事〉

無料掲載：募集人員，締切日，問合せのみ掲載。

有料掲載：1/4頁(700～800文字)程度。

・「まてりあ」とホームページに掲載；15,000円＋税

・ホームページのみ掲載；10,000円＋税

〈その他の記事〉 原則として有料掲載。

・原稿締切・掲載号：毎月1日締切で翌月号1回掲載

・原稿提出方法：電子メールとFAX両方(受け取りメールの確認をして下さい)

・原稿送信先：FAX 022-223-6312 E-mail: materia@jim.or.jp

## ◇金沢大学 理工研究域 機械工学系 教員公募◇

公募人員 准教授 もしくは テニユアトラック助教 1名

所 属 理工研究域 機械工学系

<http://www.me.se.kanazawa-u.ac.jp>

専門分野 機械材料，構造・機能材料，生体材料，エネルギー関連材料等の分野で，金属学を基礎に研究活動できる方  
着任後は【階層的・多角的アプローチによる革新的機械材料の創成と付加価値の創出】研究課題グループに所属し，知的材料システム研究室の教員と協力して金属材料分野の研究を展開して頂きます。

教育担当 理工学域 機械工学類，フロンティア工学類

大学院自然科学研究科博士前期課程 機械科学専攻

大学院自然科学研究科博士後期課程 機械科学専攻(准教授のみ)

担当科目 学類・大学院での上記専門分野に関する科目，ならびに製図，実験などの実習科目(英語による授業を担当していただく場合があります)

勤務形態 准教授：常勤，任期なし

テニユアトラック助教：常勤，任期5年

※テニユア付与基準の概略

- (1)国内外で，分野における研究成果が特に優れていると認められること
- (2)適正に計画された研究計画が達成されていること
- (3)十分な競争的研究資金を獲得していること
- (4)学生に対する教育成果(研究指導，講義内容)が優れていると認められること

※研究経費として初年度80万円程度を措置する予定

給 与 年俸制が適用されます。

応募資格 着任時に博士の学位を有する研究者。研究，教育に熱意を有し，産学連携等への積極性があること。

着任時期 2018年4月1日

提出書類

- (1) 履歴書(写真添付，現住所，連絡先[電話番号，メールアドレス]，学歴，研究歴，職歴，所属学会，賞罰)
- (2) 研究業績(学位論文，査読付原著論文，国際会議プロシーディングス，総説・解説，著書，特許等に分類し，共著者名，発表機関，巻(号)，最初と最後のページ，発表年を記載する)
- (3) 主要論文の別刷(5編以内，コピー可)
- (4) 学会および社会における活動
- (5) 科学研究費補助金，受託研究，共同研究，寄附金などの外部資金の獲得状況
- (6) これまでの研究活動および教育活動とその状況(A4用紙，1,000字程度)
- (7) 教育・研究に対する抱負(A4用紙，1,000字程度)
- (8) 応募者に関して意見を伺える方1名の氏名，連絡先

応募締切 2017年10月2日(月)必着

選考方法 第一次審査：書類審査

第二次審査：面接(プレゼンテーション，英語での模擬授業等)(面接のための旅費支給はありません)

書類提出先 〒920-1192 石川県金沢市角間町

金沢大学理工研究域機械工学系 教授 喜成年泰

問合せ先 〒920-1192 石川県金沢市角間町

金沢大学理工研究域機械工学系 教授 石川和宏

☎ 076-234-4950

E-mail: ishikazu@se.kanazawa-u.ac.jp

その他

- (1) 応募書類は，封筒表面に「教員公募書類」と朱書きの上，簡易書留にて郵送して下さい。なお，応募書類は原則として返却しません。
- (2) 就業規則に関する規程については，下記 URL をご覧下さい。  
<http://www.kanazawa-u.ac.jp/university/administration/regulation/rules>
- (3) 金沢大学では，教員の英語による教授能力の向上と，英語による開講科目の増設等を前提とした英語教育に取り組んでいます。下記 URL をご覧下さい。  
<http://sgu.adm.kanazawa-u.ac.jp/kusgu/project.html>
- (4) 金沢大学では男女共同参画を推進しています。詳しくは下記 URL をご覧下さい。  
<http://cdl.w3.kanazawa-u.ac.jp/>

## 集 会

### ◇独日本学術振興会 産学協力研究委員会 合金状態図第172委員会「第11回状態図・熱力学セミナー 開催案内」◇

〔主催〕独日本学術振興会 第172委員会

〔協賛〕日本金属学会，日本鉄鋼協会，軽金属学会，資源・素材学会 趣旨

状態図は，「材料設計の地図」であると形容されるように，目的のミクロ組織を得るため，製造プロセスの最適化のための重要な役割を持っている。CALPHAD法は，状態図計算・評価手法として広く行われており，現在では多くの熱力学計算ソフトウェア，熱力学データベースが市販・公開され，材料開発に用いられている。

本セミナーでは，一日目に状態図・熱力学計算の基礎となる熱力学基礎と CALPHAD法の基礎を取り上げ，二日目により実践的な内容である実験による状態図の決定や熱力学量の測定手法の詳細と CALPHAD法による熱力学解析の概略までを解説する。

日 時 11月27日(月)～11月28日(火)

場 所 名古屋大学 野依記念学術交流館1階(名古屋大学 東山キャンパス)

アクセス <http://www.nagoya-u.ac.jp/access-map/index.html>

定 員 40名

プログラム

一日目

熱力学基礎

東京工業大学 梶原正憲

カルファド法基礎

物質・材料研究機構 阿部太一

二日目

状態図の実験的決定

物質・材料研究機構 大沼郁雄

熱力学計算演習

物質・材料研究機構 阿部太一

申し込み方法

下記ウェブサイトから申込書を入力し必要事項を記入後，メール添付にて阿部(abe.taichi@nims.go.jp)までお送り下さい。

<http://www.nims.go.jp/CSMD/members/Seminar/11thPDSeminar.htm>

世 話 人 阿部太一(NIMS)，梶原正憲(東工大)，

大沼郁雄(NIMS)

問合せ先 物質・材料研究機構 構造材料研究拠点 計算構造材料設計グループ 阿部太一

☎ 029-859-2628 E-mail: abe.taichi@nims.go.jp

◇非鉄製錬におけるマイナーメタルに関する  
シンポジウム◇

- 主催 東京大学 生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付  
研究部門(JX 金属寄付ユニット)
- 協力 東京大学 生産技術研究所 持続型エネルギー・材料統  
合研究センター, レアメタル研究会
- 参加登録・お問い合わせ 岡部研 学術支援専門職員 宮寄智子  
E-mail: okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp  
FAX 03-5452-6313

■日程 2017年11月10日(金)

シンポジウム 10:25-17:10

交流会 17:30-19:30

■会場 東京大学生産技術研究所 An棟2F コンベンションホール  
(〒153-8505 目黒区駒場4-6-1)(最寄り駅:駒場東大  
前, 東北沢, 代々木上原)

■会費 シンポジウム:資料代として3,000円(一部企業関係  
者), 交流会:無料

■プログラム【敬称略】:

- 10:25-10:30 趣旨説明  
東京大学生産技術研究所 JX 金属寄付ユニット特任教授 中村 崇
- 10:30-11:00 循環型社会における非鉄製錬業における物理選別技  
術(仮)  
早稲田大学 理工学術院 教授 所 千晴
- 11:00-11:30 神岡鉱業における Bi 回収  
神岡鉱業株式会社 金属リサイクル工場 加藤雅樹
- 11:30-12:00 レニウムの現状と製錬・リサイクル  
東京大学大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻 八木良平
- 12:00-13:00 一休憩—
- 13:00-13:50 特別講演 非鉄金属資源の動向(仮)  
経済産業省 鉱物資源課 課長 大東道郎
- 13:50-14:20 製錬副産物からの Sn, Sb 回収(仮)  
DOWA 金属マイン株式会社 技術部 鈴木一成
- 14:20-14:50 HPAL ニッケル精製プロセスからのクロマイトの回  
収  
住友金属鉱山株式会社 金属事業本部 海外プロジェクト推進室 尾崎佳智
- 14:50-15:20 銅電解におけるマイナーエレメントの挙動(仮)  
JX 金属株式会社 技術開発センター 岡本秀則
- 15:20-15:50 一休憩—
- 15:50-16:30 By-products recovery possibilities in zinc processing  
Research Manager, Boliden Dr. Justin Salminen
- 16:30-17:10 The state of the art in Recycling: An European View  
Corporate Research Development & Innovation  
(Tentative)  
Aurubis AG, Dr. Mario Lobbs
- 17:10-17:20 シンポジウムを終えて  
東京大学 生産技術研究所 JX 金属寄付ユニット 特任教授 前田正史
- 17:30-19:30 交流会  
東京大学 生産技術研究所 An棟1階 レストラン アーベ

◇レアメタル研究会◇

- 主催 レアメタル研究会
- 主宰者 東京大学生産技術研究所 岡部 徹 教授
- 協力 (一財)生産技術研究奨励会(特別研究会 RC-40)
- 共催 東京大学マテリアル工学セミナー  
レアメタルの環境調和型リサイクル技術の開発研究会  
東京大学生産技術研究所 持続型エネルギー・材料統  
合研究センター  
東京大学生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付  
研究部門 (JX 金属寄付ユニット)
- 協賛 (公社)日本金属学会 他
- 開催会場 東京大学生産技術研究所  
An棟2F コンベンションホール  
(〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1)  
(最寄り駅:駒場東大前, 東北沢, 代々木上原)
- 参加登録・お問い合わせ  
東京大学 生産技術研究所  
岡部研究室 レアメタル研究会事務担当 宮寄智子  
E-mail: okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp

〈平成29年度 レアメタル研究会開催予定のご案内〉(2017.7.30現在)

- 第77回 2017年9月15日(金)  
寄付ユニット特別シンポ「非鉄におけるマイナーメタル」  
11月10日(金)
- 第78回 2017年11月17日(金)
- 第79回 2018年1月12日(金)
- ★貴金属シンポジウム(第5回)+新年会★(合同開催)
- 第80回 2018年3月9日(金)
- ★前田正史教授が熱く語る特別シンポジウム+慰労会★(合同開催)

- 第77回 2017年9月15日(金)14:00~ An棟2F コンベンションホール  
テーマ:非鉄業界の動向, 産学連携, 人材育成, 大学・学会のミッ  
ション  
時間:午後2:00~  
講演:  
・非鉄分野における産学連携の在り方(仮)(60分)  
早稲田大学理工学術院 創造理工学部環境資源工学科 教授  
東京大学 生産技術研究所 客員教授 大和田秀二 講師  
・産学連携に関する大学における新しい展開(仮)(30分)  
東京大学 生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付研究部門 特任教授  
岡部 徹 講師  
・MITにおける産学連携の紹介(仮)(30分)  
Massachusetts Institute of Technology, Research Scientist 大内隆成 講師  
・理論創りからもの造り, そして思いの橋渡し(60分)  
住友金属鉱山株式会社 顧問 土田直行 講師  
午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(An棟2F ホワイエ)

- 第78回 2017年11月17日(金)14:00~ An棟2F コンベンションホール  
テーマ:チタンの将来  
時間:午後2:00~  
講演:  
・海とチタン—エンジニアの挑戦(仮)(60分)  
~海洋土木と船舶分野へのチタンの適用~  
一般社団法人日本チタン協会 木下 和宏 講師  
・低コストチタンの製造の可能性と課題(仮)(30分)  
東京大学 生産技術研究所 教授 岡部 徹 講師  
・燃料電池車開発から見たチタンとその製造革新への期待(仮)(60  
分)  
トヨタ自動車株式会社  
FC技術・開発部 プロフェッショナル・パートナー 高橋和彦 講師  
午後6:00~ 研究交流会・意見交換会(An棟2F ホワイエ)

---

■第79回 2018年1月12日(金)14:00～ An棟2F コンベンションホール  
★貴金属シンポジウム(第5回)+新年会★(合同開催)  
テーマ: 貴金属の製錬・リサイクル  
時 間: 午後2:00～  
講 演: 貴金属の製錬・リサイクル技術に関する講演  
・講師依頼中  
午後6:00～ ポスター発表 兼 研究交流会  
(An棟1F レストラン アーペ(予定))

---

■第80回 2018年3月9日(金)14:00～ An棟2F コンベンションホール  
★前田正史教授が熱く語る特別シンポジウム+慰労会★(合同開催)  
テーマ: 前田先生の研究と活動, 非鉄業界と研究の将来展望  
時 間: 午後2:00～  
講 演:  
・講師依頼中  
・非鉄金属リサイクルプロジェクトと産官学連携(仮)(60分)  
東京大学 生産技術研究所 教授 前田正史 講師  
午後6:00～ 研究交流会・意見交換会(An棟2F ホワイエ)

---

\*レアメタル研究会ホームページ\*  
[http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40\\_j.html](http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html)

---

★備考: 関連研究会  
<米国版レアメタル研究会(RMW)のご案内>  
■RMW13 Workshop on Reactive Metal Processing (Reactive Metal Workshop)  
March 16 (Fri)-17 (Sat), 2018, Cambridge, MIT  
\*Reactive Metal Workshop のHP\*  
<http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/core-to-core/rmw/>

---

◎掲示板はホームページにも掲載しております。  
そちらもご活用下さい。



## 書評

### 光メタマテリアル入門

田中拓男 著

今日の科学技術の発展には言うまでもなく「材料開発」が大きな役割を果たしてきた。一方、メタマテリアルは「人工的に導入した構造体によって物質の特性を制御し、単なる複合体の限界を超える特殊な性質を付与した擬似物質」(本書抜粋)として定義されており、今日における計算科学や微細構造作製手法の発展に伴い新たに登場した「材料」であると言える。光学周波数領域で機能する光メタマテリアルを応用することで、自然界の物質には見られない特異的な光学機能を有する「偏光無依存ブリュースタ素子」や「透明マント」などを実現できる可能性があると言われ、大きな注目を集めている。

このような背景の中で発行された本書は、光メタマテリアルあるいはその関連分野に興味のある読者に強く勧めることのできる一冊である。光メタマテリアルだけでなくそれを理解するための光学基礎、光メタマテリアルの動作原理と歴史、各種作製手法から応用まで、国内における光メタマテリアル研究の第一人者である理化学研究所の田中拓男氏によりまとめられたものであり、同分野に関する知識のない読者にとっても、はじめから読み進めることによってそ

の概要を理解することのできる優れた入門書となっている。

本所の最大の特徴は各項目が見開き2頁にまとめられている点である。これにより目次から興味がある項目を選択して読み進めることもできる。解説記事・著書等を執筆したことのある経験がおありの方にとっては容易に理解できることと思うが、頁数が制限された中で内容を簡潔かつ読者に分かり易く伝えるための工夫が感じられる。また、紙面の都合上説明されなかった項目に関しても、さらなる理解を助けるための参考文献が数多く紹介されており、まさに入門書としてふさわしい内容となっている。

一方、光メタマテリアル構造の微小化に伴うサイズ効果や、表面形態あるいは結晶構造などの違いによる物性変化なども予測され、光メタマテリアル研究発展のためには材料学の貢献も必要となってくるものと思われる。

光メタマテリアルに興味のある方、新たに光メタマテリアル研究に関わる方々には、はじめに手に取って頂きたい本である。

(東北大学多元物質科学研究所 中村貴宏)

[2016年 A5版 丸善出版株式会社 163頁 3,000円+税]

日本金属学会誌掲載論文  
Vol. 81, No. 9 (2017)

——特集「先進エネルギープラント用高温耐食材料の  
高温酸化機構と試験・評価方法の新展開」——

特集「先進エネルギープラント用高温耐食材料の高温  
酸化機構と試験・評価方法の新展開」によせて

川原雄三 原 基

水素センサーおよび酸素ポンプ・センサーを用いた  
Fe-Cr 合金の水蒸気酸化挙動の検討

福本倫久 赤堀昂太 園部 博 原 基

Fe-Ni-Cr 合金の700°Cにおける大気中および水蒸気  
中の高温酸化挙動

林 重成 高島 大 河内礼文 西山佳孝

析出物形成元素を添加したオーステナイト系ステンレ  
ス鋼の耐水蒸気酸化性に関する熱力学的考察

河内礼文 西山佳孝

汎用 18Cr-8Ni ステンレス鋼の水蒸気酸化によって形  
成する内層スケールの微細構造における顕微オージェ  
分光分析

南口 誠 牛腸 彰

微量 NaCl 蒸気を含む空気中における Ni-5, -8, およ  
び-10 at%Al 合金の高温腐食

佐藤芳幸 川邊健太 菅原功司 原 基

Materials Transactions 掲載論文  
Vol. 58, No. 9 (2017)

——Regular Articles——

Materials Physics

Influence of Fluorine on Structure, Morphology,  
Optical and Photocatalytic Properties of ZnWO<sub>4</sub>  
Nanostructures

Nguyen Manh Hung, Le Thi Mai Oanh, Danh Bich Do,  
Ngoc Diep Lai, Nguyen Thi Thao, Du Thi Xuan Thao and  
Nguyen Van Minh

Mechanics of Materials

Microstructure and Mechanical Properties of an  $\alpha$   
+  $\beta$  Type Ti-4V-0.60 Alloy

Masahito Omiya,  
Kiyosuke Ueda and Takayuki Narushima

Stress Corrosion Cracking and Corrosion  
Resistance of Mg-6%Al-1%Zn-2%Ca Extruded  
Magnesium Alloys

Motohiro Yuasa, Eitaro Yukutake, Xinsheng Huang,  
Kazutaka Suzuki, Naobumi Saito and Yasumasa Chino

Energy Analyses for the Imaging Technique of  
Bonded Regions and Delaminations in a Thin Plate

Takahiro Hayashi and Shogo Nakao

Materials Chemistry

Atmospheric Corrosion Estimation of Welded Low  
Alloy Steel in Wet and Dry Condition Containing  
Chloride Ions

T. Nishimura

Removal of Surface Scale from Titanium Metal by  
Etching with HF-HNO<sub>3</sub> Mixed Acid

Minoru Mizuhata, Shintaro Yamamoto and Hideshi Maki

Alloying Effects of Molybdenum and Niobium on  
Chromium Bearing Low Alloy Steel for Water Bal-  
last Tank

Young-Woong Shin, Sol-Ji Song and Jung-Gu Kim

Materials Processing

Prediction and Experimental Validation of Cool-  
ing Rate Dependence of Viscoplastic Properties in  
a Partially Solidified State of Al-5 mass%Mg Al-  
loy

Rei Hirohara, Yasutaka Kawada, Ryosuke Takai,  
Mitsuhiro Otaki, Toshimitsu Okane and Makoto Yoshida

Interfacial Reaction and Bonding Strength of  
Ti<sub>50</sub>Ni<sub>50</sub> and Inconel 600 Dissimilar Brazed Joints

Ren-Kae Shiue, Shyi-Kaan Wu, Chun-Kai Liu and  
Chuan-Yu Dai

Graphite Foil-Incorporated PAN/Pitch/Phenolic-  
Derived Carbon/Carbon Composite and Prelimina-  
ry Hermetic Sealing Test in Molten Fluoride Salt

Hsun-Yu Lin, Kuo-Jung Lee, Jiin-Huey Chern Lin and  
Chien-Ping Ju

Zr-Based Metallic Glass Coating for Corrosion  
Resistance Improvement of 45 Steel

Yunzhuo Lu, Hongge Li, Hao Zhang, Guokun Huang,  
Huidong Xu, Zuoxiang Qin and Xing Lu

Numerical Investigation on Influence of Fan  
Speed and Swirling Gas Injection on Thermal-  
Flow Characteristics in Nitrocarburizing Furnace

Hyung Ju Lee, Jaeyong Park and Seong Hyuk Lee

Engineering Materials and Their Applications

The Improvement of Corrosion Resistance of Sen-  
sitized Alloy 82 Welds Using Laser Surface Melt-  
ing

Hwa-Teng Lee and Te-Chen Liu

Environment

Phosphorus Speciation in Sludge from Nickel  
Electroplating

Takashi Fujimori, Hideo Hayashi and  
Kenichi Nakajima

◇オンラインジャーナルは、毎月25日に  
公開しております。是非、ご活用下さい。

# 新 入 会 員

(2017年6月21日～2017年7月20日)

## 正 員

堀江和也 長岡技術科学大学	山下正太郎 大阪大学	中崎盛彦 山陽特殊製鋼株式会社
中津川 勲 国立研究開発法人産業技術総合研究所	平山憲司 日鐵住金建材株式会社	桜田新哉 株式会社東芝
周 偉偉 東北大学	田中栄一 株式会社淀川製鋼所	土本和明 JFE スチール株式会社
八木雄太 株式会社ナカボーテック	下川康志 日本金属株式会社	

## 学 生 員

石河瞭一 名古屋工業大学	中村直人 富山大学	高須賀亮介 芝浦工業大学
樋口宗隆 東北大学	竹本寛太 富山大学	木下ゆりな 芝浦工業大学
高村美和 東北大学	森 雄基 大阪府立大学	王 誠 東北大学
太田明光 東北大学	八島悠太 北海道大学	大槻祐介 京都大学
猪俣 茜 九州大学	守部雄生 長岡技術科学大学	倉田宗明 東北大学
岩本孝信 九州大学	中島正太郎 長岡技術科学大学	岡田直道 岡山大学
瀧山勇平 愛媛大学	岡崎俊樹 筑波大学	金 浩赫 東京大学
山口智哉 九州大学	一ノ瀬佑希 熊本大学	平塚 耀 首都大学東京
木田嶺介 九州大学	富山雄太 名古屋大学	高村龍星 千葉工業大学
濱崎亮吾 宇部工業高等専門学校	長谷川綾乃 東京工業大学	崔 讚揚 大阪大学
河野芳輝 九州大学	明德昌志 愛媛大学	鈴木啓義 秋田県立大学
扇 一輝 九州大学	樋口 響 早稲田大学	松崎悠弥 熊本大学
近都康平 京都大学	有富翔大 九州大学	渡邊光彦 日本大学
宮田知征 大阪府立大学	前田透真 北海道大学	大島幹央 愛知教育大学
矢崎 衛 千葉工業大学	加藤久善 東京工業大学	塚谷洸太 大阪大学
松崎隆洋 北海道大学	永松光明 北海道大学	片山知瞭 富山大学
小松裕人 北海道大学	山口奎太 芝浦工業大学	
木村響之介 横浜国立大学	石川晃平 名古屋大学	

## 外国一般会員

GESLIN Pierre-Antoine Tohoku University	魏 家科 東京大学	Long Bai Chongqing University
朱 修賢 東北大学	Ariyawong Kanaparin 東京大学	SHIH Donald 熊本大学

## 外国学生会員

バンド アルテニス 富山大学	白 明学 北見工業大学	金 振謙 京都大学
----------------	-------------	-----------



### まてりあ 第56巻 第10号 予告

<p>[解説] 水溶液プロセスによる酸化亜鉛ナノロッドアレイの製膜 .....品川 勉</p> <p>[最近の研究] 次世代生体材料開発に向けた設計指針の構築 .....當代光陽</p> <p>亀裂先端転位と脆性-延性遷移 .....田中将己 定松 直 東田賢二</p>	<p>整数論的手法による粒界原子構造予測 .....井上和俊 斎藤光浩 小谷元子 幾原雄一</p> <p>[新進気鋭] 希土類系金属ガラスにおける動的緩和挙動の支配因子 .....山崎由勝 一他一</p>
---	--

～編集の都合により変更になる場合がございます～

# 行事カレンダー

太字本会主催(ホームページ掲載)

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
<b>9月</b>				
4～5	2017電気化学セミナー3「初心者のための電気化学測定法-実習編」(東京農工大)	電気化学会	TEL 03-3234-4213 ecsj@electrochem.jp http://electrochem.jp/promotion/index.html	8.21 定員 45名
4～5	SPring-8 シンポジウム2017 高性能化を目指すSPring-8の将来(広島大)	SPring-8 ユーザー協団体 (SPRUC)他	TEL 0791-58-2785 sp8sympo2017@spring8.or.jp http://www.spring8.or.jp/ja/science/meetings/2017/sp8sympo2017/	
5～6	第33回分析電子顕微鏡討論会(幕張メッセ)	日本顕微鏡学会	TEL 0774-38-3057/0774-38-3055 bunseki33@eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp http://eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp/bunseki2017/	事前参加 8.29
6～7	第39回安全工学セミナー物質危険性講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
6～8	日本金属学会秋期講演大会(北海道大学)(札幌)(8号513頁)	日本金属学会	<b>annualm@jim.or.jp</b> <b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312</b>	事前参加 8.7
7～8	第8回「塗装入門講座」(東京)	日本塗装技術協会	TEL 03-6228-1711 tosou-jimukyoku@jcot.gr.jp http://jcot.gr.jp/	
8	第74回技術セミナー:非鉄金属材料の防食技術-実用化金属の代表である銅・アルミニウム・チタンの最新動向-(東京)	腐食防食学会	TEL 03-3815-1161 ysm.hng_113_0033@jcorr.or.jp	定員 70名
8	平成29年度秋季 全国大学材料関係教室協議会講演会			
9	日本金属学会・日本鉄鋼協会男女共同参画委員会10周年記念シンポジウム「企業・大学での女性活用とダイバーシティ推進を考える」(北大)(8号515頁)	<b>ISIJ/JIM 男女共同参画委員会</b>	<b>TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312</b> <b>gaffair@jim.or.jp</b>	
12	関東支部講習会「金属材料強度試験法-より信頼されるデータとは-」(東工大)(6号409頁)	関東支部・多賀(東工大)	<b>TEL 03-5734-3136</b> <b>jim-kanto@mtl.titech.ac.jp</b>	<b>9.1</b>
12～14	第226回塑性加工技術セミナー「はじめての塑性力学(準備編・基礎編・応用編)」(芝浦工大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 90名
15	第77回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号573頁)	レアメタル研究会・宮崎(東大生産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html	
16～18	第30回計算力学講演会(近畿大)	日本機械学会	cmdconf17@jsme.or.jp http://www.jsme.or.jp	
19～21	高温変形の組織ダイナミクス研究会「平成29年度夏の学校」(浦郡)(6号409頁)	研究会 No. 76・峯田(弘前大)	<b>TEL/FAX 0172-39-3643</b> <b>mineta@hirosaki-u.ac.jp</b>	発表 7.21 参加 8.10
19～21	日本セラミックス協会第30回秋季シンポジウム(神戸大)	日本セラミックス協会・山口	TEL 03-3362-5232 fall30@cersj.org http://www.ceramic.or.jp/ig-syuki/30th/	
20～21	第8回社会人のための表面科学ベーシック講座(東京理科大)	日本表面科学会	TEL 03-3812-0266 shomu@sss.org http://www.sss.org	9.14
21～22	平成29年度軽金属基礎技術講座「アルミニウムの製造技術」(掛川)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 50名
22	第105回シンポジウム「軽量化を実現する異種材料接合技術」-軽金属材料と異種材料の複合化-(東工大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 80名
25	第97回金属のアノード酸化皮膜の機能化部会(ARS)例会(首都大学東京秋葉原)	表面技術協会・金属のアノード酸化皮膜の機能化部会(ARS)	ars@sfj.or.jp	9.15
25	女子大学院生・ポスドクと産総研女性研究者との懇談会 in 名古屋(名古屋)	産業技術総合研究所ダイバーシティ推進室	https://unit.aist.go.jp/diversity/ja/event/170925_div_event.html	9.15
26	第7回プラスチックに基づく変形現象研究会～疲労き裂研究の新機軸:微小き裂とミクロ組織～(京都)(本号569頁)	研究会 No. 70・大石(京大)	<b>TEL 075-753-5573 FAX 075-753-5578</b> <b>admin@esism.kyoto-u.ac.jp</b>	<b>9.19</b>
26～30	資源・素材&EARTH 2017(札幌)	資源・素材学会	info@mmij.or.jp	
27～28	第153回塑性加工学講座「板材成形の基礎と応用～応用編～」(大同大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 40名
28～29	平成29年度「デジタルラジオグラフィに関する技術講習会」(東京)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/	定員 48名
28～30	第53回熱測定討論会(徳島大)	日本熱測定学会	TEL 03-5821-7120 netsu@mbd.nifty.com http://www.cats2017-53netsu.com/	
29	第323回塑性加工シンポジウム「IoTを活用した未来のものづくりに向けて」(刈谷市)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 100名

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
29～10.1	持続性社会のための材料とシステムに関する国際会議2017(名古屋大)	ICMaSS2017名古屋大学未来材料・システム研究所	TEL 052-789-4219 icmass2017@intergroup.co.jp http://www.icmass.nagoya-u.ac.jp/	
<b>10月</b>				
2～3	平成29年度「デジタルラジオグラフィに関する技術講習会」(大阪)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/	定員 48名
3	第69回白石記念講座「金属材料の弾塑性変形のマクロ・ミクロモデルの進歩」(早大)	日本鉄鋼協会・植岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mu0yiwlnf	
4～6	オータムスクール2017 in 大阪「非線形有限要素法による弾塑性解析の理論と実践」(阪大)	日本計算工学会	TEL 03-3868-8957 office@jsces.org http://www.jscs.org/	9.20
5～6	第1回金属・無機・有機材料の結晶方位解析と応用技術研究会(下呂)(本号570頁)	研究会 No. 79・井上(大阪府立大)	TEL 072-254-9316 FAX 072-254-9912 inoue@mtr.osakafu-u.ac.jp	9.15
10～11	第6回フラクトグラフィ講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
10～14	第3回材料WEEK(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
11～13	1st International Conference on Energy and Material Efficiency and CO <sub>2</sub> Reduction in the Steel Industry (EMECR2017)(神戸)	日本鉄鋼協会	emecr2017@issjp.com	
12	第1回EBSD法による損傷評価講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp/	8.25
12～13	第30回初心者のための疲労設計講習会(京都)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp http://www.jsms.jp	定員 40名
13	第15回 機械・構造物の強度設計, 安全性評価に関するシンポジウム(京都)	日本材料学会	FAX 075-761-5325 design15@jsms.jp/ http://www.jsms.jp/	講演 7.3
13～14	第12回材料の衝撃問題シンポジウム(京都)	日本材料学会	ymda@nda.ac.jp http://www.jsms.jp	
16	第72回塑性加工技術フォーラム(プロセス・トライボロジー分科会第152回研究会)(刈谷)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 60名
17～18	第64回表面科学基礎講座(阪大)	日本表面科学会	TEL 03-3812-0266 shomu@sss.jp.org http://www.sss.jp.org	10.11
18～19	第45回日本ガスタービン学会定期講演会(松山)	日本ガスタービン学会	TEL 03-3365-0095 gtsj-office@gtsj.org http://www.gtsj.org/	
18～19	第39回安全工学セミナー危険現象講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
18～20	ADMETA Plus 2017(Advanced Metallization Conference 2017: 27th Asian Session)(東大)	応用物理学会	TEL 03-6801-5685 jimukyoku@admeta.org	
20	第129回金属物性研究会「高温材料用金属材料の展望」(松江)(本号571頁)	中国四国支部・森戸(島根大)	TEL 0852-32-6398 tatara@riko.shimane-u.ac.jp	9.28
20	早稲田大学各務記念材料技術研究所オープンセミナー(早大)	早稲田大学各務記念材料技術研究所	TEL 03-3203-4782 zaikenjimuj@list.waseda.jp	10.13
20～21	第73回 塑性加工技術フォーラム「プレス成形技術の高度化と課題」(諏訪)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	定員 70名
24	二相ステンレス鋼の溶接施工ガイドラインについてのシンポジウム(東京)	日本溶接協会	TEL 03-5823-6324 http://www.jwes.or.jp/	9.15
24	第49回 エンジニアリングセラミックスセミナー(東工大)	日本セラミックス協会	http://www.ceramic.or.jp/bkouon/index_j.html encera@cersj.org	定員 100名
25～27	第38回 超音波エレクトロニクス基礎と応用に関するシンポジウム(多賀城)	超音波エレクトロニクス協会	TEL 045-924-5598 onodera@iuse.or.jp http://www.use-jp.org/	講演 7.24
26～27	講習会「もう一度学ぶ機械材料学」—機械・製造技術者のための基礎講座—(東京)	日本機械学会	TEL 03-5360-3506 araki@jsme.or.jp http://www.jsme.or.jp/	
26～27	第53回 X線分析討論会(徳島大)	日本分析化学会 X線分析研究懇談会	TEL 088-656-7263 takashi-yamamoto.ias@tokushima-u.ac.jp http://web.ias.tokushima-u.ac.jp/xbun53/	事前参加 10.13
26～27	第10回トライボロジー入門西日本講座(名城大)	日本トライボロジー学会	TEL 03-3434-1926 jast@tribology.jp http://www.tribology.jp	10.13
31	第324回塑性加工シンポジウム「板材加工における残留応力」(日大)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	10.24
<b>11月</b>				
1～4	The 12th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics (12th ISEM '17-Kanazawa)	日本実験力学会	TEL 025-368-9310 office-jsem@clg.niigata-u.ac.jp http://www.jsem.jp	
2	第5回エレクトロニクス薄膜材料研究会「電子・情報・エネルギー素子と機能材料の最近の研究(5)」(兵庫県立大)(本号569頁)	研究会 No. 69・松尾(兵庫県立大)	FAX 079-267-4907 nmatsuo@eng.h-hyogo.ac.jp	11.1
2～6	第53回熱測定討論会と8th International and 10th Japan-China Joint Symposium on Calorimetry (CATS-2017)(福岡大)	日本熱測定学会	TEL 03-5821-7120 netsu@mbd.nifty.com http://www.cats2017-53netsu.com/	
4～5	軽金属学会第133回秋期大会(宇都宮大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	予約 10.5

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
5～10	第18回核融合炉材料国際会議(ICFRM-18)(青森)	第18回核融合炉材料国際会議	secretariat@icfrm-18.com http://www.icfrm-18.com/contacts.html	
5～10	第18回材料集合組織国際会議 18th International Conference on Textures of Materials (ICOTOM 18) (St George, Utah, USA)	ICOTOM 18・井上(大阪府立大)	TEL 072-254-9316 inoue@mtr.osakafu-u.ac.jp http://event.registrarat.com/site/icotom2017	アブストラクト 2016.11.15
7	第231回西山記念技術講座「破壊力学」の進展とインフラ・構造物の信頼性～安全、安心を管理するフラクチャー・コントロール～(東京)	日本鉄鋼協会・樋岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mubicwtwx	
7～9	第38回日本熱物性シンポジウム(つくば)	日本熱物性学会	TEL 03-5734-2435 jstp@op.titech.ac.jp http://jstp2017.org/index.html	事前参加 8.1
8～10	第64回材料と環境討論会(沖縄)	腐食防食学会	TEL 03-3815-1161 ysm.hng-113-0033@jcorr.or.jp	
8～10	第58回高圧討論会(名大)	日本高圧力学会	TEL 070-5658-7626 touronkai58@highpressure.jp http://www.highpressure.jp/new/58forum/	講演 7.3
8～10	第36回電子材料シンポジウム(EMS-36)(長浜)	電子材料シンポジウム運営・実行委員会	TEL 03-5841-7131 deura@dpe.mm.t.u-tokyo.ac.jp http://ems.jpn.org/	
10	第391回講習会 加工技術の進化を追い！～AM(アディティブ・マニファクチャリング)と切削ハイブリッドによる複雑形状加工～(東京理科大)	精密工学会	TEL 03-5226-5191 http://www.jspe.or.jp/	定員 100名
10	非鉄精錬におけるマイナーメタルに関するシンポジウム(東大生産研)(本号573頁)	東京大学生産技術研究所 非鉄金属資源循環工学寄付研究部門(JX 金属寄付ユニット)	FAX 03-5452-6313 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp	
10	平成29年度溶接工学専門講座 ものづくり力伝承講座～溶接プロセスの可視化を極める～(東京)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	定員 50名
10	第20回ミレニアム・サイエンスフォーラム(東京)	ミレニアム・サイエンス・フォーラム	TEL 03-6732-8966 msf@oxinst.com http://www.msforum.jp/	
10～11	第68回塑性加工連合講演会(福井)	日本塑性加工学会	http://www.jstp.or.jp	
12～16	第11回亜鉛および亜鉛合金めっき表面処理鋼板に関する国際学会(Galvatech2017) 11th International Conference on Zinc and Zinc Alloy Coated Steel Sheet (Galvatech2017)(東京)	GALVATECH2017・事務局	TEL 03-5657-0777 galvatech2017@jtbcom.co.jp http://www.galvatech2017.jp/	
14～16	日本磁気科学会 第12回年会(京大)	日本磁気科学会	TEL 075-753-4723 MSSJ2017kyoto@gmail.com http://www.device.energy.kyoto-u.ac.jp/mssj12/index.html	
15～16	第39回安全工学セミナープラント安全講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
15～18	トライボロジー会議2017秋 高松(高松)	日本トライボロジー学会	TEL 03-3434-1926 jast@tribology.jp http://www.tribology.jp	
16～17	平成29年度 磁性流体連合講演会(首都大東京)	磁性流体研究連絡会	h29jsmfr@tmu.ac.jp http://jsmfr.on.arena.ne.jp/	
17	第46回 薄膜・表面物理基礎講座(2017)ビッグデータを活用した新材料研究(名大)	応用物理学会 薄膜・表面物理分科会	TEL 03-3828-7723 oda@jsap.or.jp http://www.jsap.or.jp/	参加 11.8
17	日本金属学会東北支部地区講演会(秋田大)(本号570頁)	東北支部・原(秋田大)	TEL 018-889-2414 haramoto@gipc.akita-u.ac.jp	懇親会 11.10
17	第1回機械材料・材料加工部門 若手ポスターシンポジウム(早稲田大)	日本機械学会	http://mp-poster.org/2017/	講演 8.31
17	第78回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号573頁)	レアメタル研究会・宮嶺(東大生産研副部研)	TEL 03-5452-6314 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html	
17～19	日本銅学会 第57回講演大会(富山大)	日本銅学会	TEL 03-3836-8801 m-kurihara@copper-brass.gr.jp https://www.copper-brass.gr.jp/	
20	日本希土類学会 第35回講演会(東京)	日本希土類学会	TEL 06-6879-7352 kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp http://www.kidorui.org/lecture.html	11.6
20～21	平成29年度溶接入門講座(広島)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 jws-info@tg.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	定員 60名
20～22	INCHEM TOKYO 2017(東京)	化学工学会, 日本能率協会	TEL 03-3434-1988 inchem@jma.or.jp	
20～24	Plasma Conference 2017(姫路)	応用物理学会他	TEL 052-735-3185 mnhmt@meijo-u.ac.jp	
21	溶接部の腐食トラブル防止事例講習会(阪大)	溶接学会	TEL 03-5825-4073 s_kogure@tt.rim.or.jp http://www.jweld.jp/	定員 70名

開催日	名称・開催地・掲載号	主催・担当	問合せ先	締切
22	第16回日本金属学会東北支部研究発表大会(東北大)(本号571頁)	東北支部・篠田(東北大)	TEL 022-217-5624 shinoda@tagen.tohoku.ac.jp	10.27
27~28	第11回状態図・熱力学セミナー(名大)(本号572頁)	日本学術振興会 産学協力研究委員会 合金状態図第172委員会	abe.taichi@nims.go.jp	11.15 定員 40名
27~29	第46回結晶成長国内会議(JCCG-46)(浜松)	日本結晶成長学会	TEL 070-5047-3339 jaccg-46@jacg.jp http://www.jacg.jp/	
28	第232回西山記念技術講座「破壊力学」の進展とインフラ・構造物の信頼性～安全、安心を管理するフラクチャー・コントロール～(大阪)	日本鉄鋼協会・植岡	TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp https://www.isij.or.jp/mubicwtwx	
30	実用表面分析セミナー2017(神戸大)	日本表面科学会関西支部	TEL 06-7670-4168 tanaka-hajime@nsst.jp http://www.sssj.org/Kansai/kansai_jitsuyou20.html	
<b>12月</b>				
3~8	第11回新物質及び新デバイスのための原子レベルキャラクタリゼーションに関する国際シンポジウム(ハワイ)	日本学術振興会マイクロビームアナリシス第141委員会	alc17@jsps141.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp http://alc.surf.nuqe.nagoya-u.ac.jp/alc17/	
5~6	溶接構造シンポジウム2017「超スマート社会を支える基盤溶接技術」(阪大)	溶接学会溶接構造研究委員会	TEL 072-254-9345 http://www.jwri.osaka-u.ac.jp/~conf/wmd2017/	
5~7	第43回固体イオニクス討論会(天童)	日本固体イオニクス学会	TEL 022-795-6976 http://ceram.material.tohoku.ac.jp/ssij43/ssij43-org@ceram.material.tohoku.ac.jp	事前参加 11.10
6~8	第44回炭素材料学会年会(桐生)	炭素材料学会	FAX 03-3368-2827 tanso-desk@bunken.co.jp	講演 8.21
7~9	第55回高温強度シンポジウム・第18回破壊力学シンポジウム(熊本)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 http://www.jsms.jp/	講演 9.1
11~12	第14回ノートパソコンで出来る原子レベルのシミュレーション入門講習会～分子動力学計算と電子状態計算～(大阪)	日本材料学会	TEL 075-761-5321 jim@jsms.jp http://www.jsms.jp	
14	第4回 初心者にもわかる信頼性工学入門セミナー(大阪)	日本材料学会	http://sinrai.jsms.jp/	
15~16	第30回記念信頼性シンポジウム-安心・安全を支える信頼性工学の新展開(大阪)	日本材料学会	RESYMPO2017@jsms.jp http://sinrai.jsms.jp/	
<b>2018年1月</b>				
12	第79回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号573頁)	レアメタル研究会・宮嵩(東大生産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html	
15~16	第39回安全工学セミナー-安全マネジメント講座(東京)	安全工学会	TEL 03-6206-2840 jsse-2004@nifty.com http://www.jsse.or.jp	定員 30名
30~31	Mate 2018第24回「エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術」シンポジウム(横浜)	スマートプロセス学会他	TEL 06-6878-5628 mate@sps-mste.jp http://sps-mste.jp/mate/	
<b>2018年3月</b>				
9	第80回 レアメタル研究会(東大生産研)(本号573頁)	レアメタル研究会・宮嵩(東大生産研岡部研)	TEL 03-5452-6314 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp http://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html	
19~21	日本金属学会春期講演大会 千葉工業大学新習志野キャンパス(本年11号会告予定)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jim.or.jp	
<b>2018年7月</b>				
9~12	The 6th International Conference on the Characterization and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials (ICCCI2018)(倉敷)	紛体工学会	TEL 045-339-3959 http://ceramics.ynu.ac.jp/iccci2018/iccci2018@ml.ynu.ac.jp	
<b>2018年8月</b>				
5~8	15TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON FUNCTIONALLY GRADED MATERIALS -Structural Sector Approaches for New Functionalities and Durability-(北九州)	傾斜機能材料研究会	TEL 052-735-5293 fgms_2018@f-jast.or.jp http://www.fgms.net/isfgms2018	abstract 2018.1.20
<b>2018年9月</b>				
19~21	日本金属学会秋期講演大会(東北大学川内北キャンパス)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312 annualm@jim.or.jp	



まてりあ 第56巻(2017) 第8号 503-507頁

入門講座 RIETAN-FP・VENUS システムと外部プログラムによる粉末構造解析  
—3. 構造モデルの導出と電子・散乱長密度の三次元可視化—

泉 富士夫

編集上の不注意により誤りを生じました。お詫びして訂正申し上げます

507頁 右段 第3段落 3行目

(誤) 渾然一体となった当該コンテンツ

↓

(正) 渾然一体となった[巨大]コンテンツ



事務局からのお知らせ

- 本号566頁にて会告しました通り、来年2018年度より会費が改訂となります。皆様のご理解を宜しくお願いいたします。
- 講演大会の参加費等につきましても、来年2018年の春期講演大会より改訂されます（本号568頁会告）。こちらのご理解も宜しくお願いいたします。
- 今号での2017年秋期講演大会プログラム（別冊付録）の同封はございません。お手数ですが、本会ホームページ：講演大会→2017年秋期講演大会をご覧ください。

2017, 2018年度会報編集委員会 (五十音順, 敬称略)

委員長	山本剛久						
副委員長	大塚誠						
委員	赤瀬善太郎	足立望	安達正芳	池尾直子	池田賢一	石本卓也	
	上田恭介	梅津理恵	榎木勝徳	大野直子	大森俊洋	小幡亜希子	
	木口賢紀	北村一浩	高坂典晃	近藤亮太	齊藤敬高	榊浩司	
	佐々木秀顕	佐藤紘一	佐藤幸生	下島康嗣	杉浦夏子	杉田一樹	
	芹澤愛	高木成幸	竹田修	武田雅敏	田中智仁	田中秀明	
	田中康弘	田辺栄司	趙研	佃論志	堤祐介	寺井智之	
	寺西亮	寺本武司	土井康太郎	永井崇	長岡亨	中川鉄水	
	仲村龍介	野山義裕	萩沢武仁	長谷川誠	春本高志	本間智之	
	水本将之	宮崎秀俊	宮澤知孝	森田敏之	盛田元彰	森戸春彦	
	諸岡聡	山中謙太	横田智之	横山賢一	吉矢真人	吉年規治	
	李海文	和田武					

まてりあ 第56巻 第9号 (2017) 発行日 2017年9月1日 定価(本体1,700円+税)送料120円  
年間機関購読料金52,400円(税・送料込)

発行所 公益社団法人日本金属学会

〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32

TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312

発行人 山村英明

印刷所 小宮山印刷工業株式会社

発売所 丸善雄松堂株式会社

〒105-0022 東京都港区海岸 1-9-18



## ～ 刊行物のご案内 ～



● **日本金属学会誌（月刊）** <http://www.jim.or.jp/journal/j/>

学術論文，技術論文，ラピッドパブリケーション，オーバービュー論文，レビュー論文，特集など多彩な論文を掲載。  
投稿掲載費用が無料です。



● **共同刊行欧文誌：Materials Transactions（月刊）** <http://www.jim.or.jp/journal/e/>

14学協会の共同刊行による英文の投稿学術論文誌です。海外からの投稿を含めたWorldwideな論文を数多く掲載。インパクトファクター上昇を目指します。Advance Viewシステムで論文をいち早く公開できます。



● **日本金属学会会報「まてりあ」（月刊）** <http://www.jim.or.jp/journal/m/>

解説，最近の研究記事を主軸に，ミニ特集企画や講義ノートなど，会員の啓発を促すバラエティに富んだ論文，記事を掲載。

### 〈本会発行学術図書類出版案内〉

- |              |                 |                 |
|--------------|-----------------|-----------------|
| ● 金属化学入門シリーズ | ● 講座・現代の金属学 材料編 | ● 講座・現代の金属学 製錬編 |
| ● 金属工学シリーズ   | ● セミナーテキスト      | ● シンポジウム予稿集     |
| ● 講演大会概要集DVD | ● 国際会議プロシーディングス | ● 金属博物館紀要       |
|              |                 | ● 単行本           |

### ◇日本金属学会春秋講演大会 開催予定◇

★2018年3月19日（月）～21日（水）  
千葉工業大学～新習志野キャンパス～

★2018年9月19日（水）～21日（金）  
東北大学



熱気溢れるポスター発表

～ ご入会をお待ちしております。 <http://jim.or.jp/> ～

# 高純度 GfG

最高温度2,800℃

純度5PPM以下

## 汚れや飛散のないカーボン材料

■真空、高温炉内材料一式

■炉内部品取替工事

■炭素繊維高温材料

- カーボンヒーター
- 炭素繊維断熱材
- 炉内サポート治具
- 機械用カーボン
- 連続鑄造ノズル
- ホットゾーン改修工事



## メカニカルカーボン工業株式会社

本社・工場：〒247-0061 神奈川県鎌倉市台 5-3-25 TEL.0467(45)0101 FAX.0467(43)1680代  
事業所：東京 03(5733)8601 大阪 06(6586)4411 福岡 092(626)8745  
周南 0834(82)0311 松山 0899(72)4860 郡山 024(962)9155  
工場：広見工場 0895(46)0250 野村工場 0894(72)3625 新潟工場 0254(44)1185  
<http://www.mechanical-carbon.co.jp> E-mail: [mck@mechanical-carbon.co.jp](mailto:mck@mechanical-carbon.co.jp)

# EAG

LABORATORIES

### 各種表面分析受託サービスなら

ナノサイエンス株式会社(EAGの日本支社)にお任せください。

## GDMS分析 世界シェア No.1



高感度不純物分析手法 GDMS ICPとは異なり固体のまま最小限の試料処理で直接分析ができます。

測定対象試料

高純度金属	合金・超合金	特殊金属	レアメタル・レアアース
カーボン及び黒鉛製造品	酸化物・炭化物・窒化物・硫化物などのセラミックス	各種半導体材料	太陽電池用シリコン

“世界の分析リーダー”の技術を日本で——

**NANO ナノサイエンス株式会社**

〒170-0013 東京都豊島区東池袋1-10-1 住友池袋駅前ビル7F

TEL.03-5396-0531(代) FAX.03-5396-1930

[E-mail] [analysis@eag.com](mailto:analysis@eag.com)

お問い合わせ・見積り・分析お申込みはHPから… <http://www.nanoscience.co.jp>

www.carbolite-gero.jpで温度帯毎に製品をご紹介します!

必ず見つかる!あなたが必要とする電気炉とオープン

# 最高温度3000°Cの電気炉

75年以上の歴史を持つ英国カーボライト社とドイツの高温炉ゲロ社が一緒になり、カーボライト・ゲロになりました。金属・セラミック粉末射出成形用炉、真空・加圧炉、各種管状炉等、材料研究に最適な30°C~3000°Cの電気炉を600機種以上を取り揃えています。カスタマイズも承りますので、お気軽にご連絡ください。



## 電気炉、チャンバー炉、灰化炉、管状炉ロータリーキルン 幅広い温度帯のカーボライト・ゲロ

最適な灰化处理のための最高の一台を

- 樹脂・オイル・ゴム・石炭の灰化試験には

→アルミナの内張がヒータを守る

### AAF シリーズ

- 灰化の他に金属などの熱処理もしたい

→最高 1200°C、大容量

### AAF 12/18

- 無塵 (アルミナ・シリカダスト)・強酸を用いた灰化

→熔融石英の内張がダストを抑える

### GSM 11/8

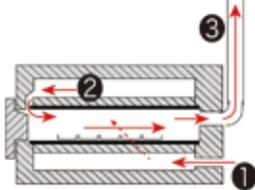
- 灰分が少なく多量の煤煙が発生する

→高温のアフターバーナが煤煙を処理

### ABF 8/28

効率的な灰化をしたい

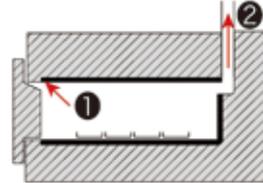
AAF 11/3・AAF 11/7



- ①空気取入口
- ②予備加熱
- ③煙突

無塵条件下・強酸を用いたい

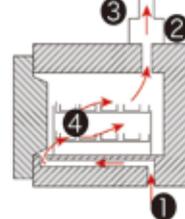
GSM11/8



- ①内張(熔融石英)
- ②煙突

熱処理も行いたい

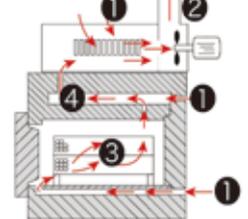
AAF 11/18・AAF 12/18



- ①空気取入口
- ②プレナム
- ③煙突
- ④2段ラック

煙の発生を抑制したい

ABF8/28



- ①空気取入口
- ②煙突
- ③2段ラック
- ④アフターバーナ

**CARBOLITE**  
**IGERO** 30-3000°C

part of **VERDER**  
scientific

ヴァーダー・サイエンティフィック株式会社

本社: 〒1600022 東京都新宿区新宿5-8-8  
Tel: 03(5367)2651 Fax: 03(5367)2652  
E-mail: info@verder-scientific.co.jp  
大阪: 〒5500013 大阪府大阪市西区新町4-19-3 東洋ビル1F  
Tel: 06(6534)0621 Fax: 06(6534)0622