金属素描 ~マンガン~
 特集「材料組織形成における 計算材料科学の最前線」
 科学・技術と社会の関係を考える -3. 科学技術の制御—
 先達からのお便り 森永正彦先生(名古屋大学名誉教授)
 春期講演大会プログラム(別冊付録)





# <sup>卓上型手動研磨/ポリッシング機</sup> サファイア 250 M1

# ドイツのマイスターが選んだ高品質・高性能な製品をお手ごろな価格で



# 特長

- 作業ホイールの可変速(無段)
- 時計方向および半時計方向の回転
- スピンサイクル機能
- 作業ホイールを外すだけで容易なボウル内洗浄
- 手動給水量調節
- 引き出せる給水栓
- 耐衝撃プラスチック製ボウル
- 標準付属のスプラッシュリングおよびカバー
- 強固なアルミニウム筐体と粉体塗装

# 寸法



# 主な仕様

研磨盤	Ø 200/250 mm
モーター回転数	30 - 600 rpm, 無段階調節
接続電力	1.0 kVA
駆動電力(主軸)	0.55 kW (S1)
電源 ①	200-240V/50-60Hz (1Ph/N/PE)
電源 ②	100-120V/50-60Hz (1Ph/N/PE)
寸法 (W x H x D)	511 x 265 x 710 mm
重量	25 - 30 kg
給水管	水道に接続用1本、半径0.5インチ、 最大圧力6バール
研削液注入装置 (オプション)	Topas M

定価 ¥ 700,000~ (税別)

# ヴァーダー・サイエンティフィック株式会社

東京本社 〒160 – 0022 東京都新宿区新宿 5-8-8 TEL:03-5367-2651 FAX:03-5367-2652 info@verder-scientific.co.jp

大阪営業所:〒559-0031 大阪市住之江区南港東8丁目2番52号 TEL:06-6655-0003 Fax:06-6629-8080

名古屋営業所:〒460-0003 愛知県名古屋市中区錦 2-9-14 伏見スクエアビル 5F TEL:090-9002-5421 Fax:03-5367-2652(東京本社)

# Materia Japan

https://www.jim.or.jp/journal/m/



2020 まてりあ Vol.59 No.3

	集 「材料組織形成における計算材料科学の最前線」
	企画にめたって 
	八塚 誠 杉佃友丁 同山直倒 守平武可 総小返丁 山平剛公 小口貝紀 12/
	は品界面インフェマティクス・構造決定と構造機能相関
	凝固組織のハイパフォーマンス・コンピューティングとクロススケール・
	アプローチへの新展開 大野宗一 澁田 靖 高木知弘
	機械学習を活用した SiC 高品質結晶成長条件のデザイン
	原田俊太 林 宏益 角岡洋介 朱 燦 鳴海大翔 沓掛健太朗 宇治原 徽
プロムナード	科学・技術と社会の関係を考える ―3. 科学技術の制御― 衆田 清153
先達からのお便り	材料研究を始めて50年 森永正彦
思い出の教科書,この一冊!	工業電解の化学 竹田 修
はばたく	地元貢献を目指して 久慈千栄子
スポットライト	スポットライトを浴びる日はいつか必ずくる! 上原昂大
	金属樹の生成と電解電流の関係について
	奥本大貴 三木孝馬 塩田悠介 山口 快 角村 仁
研究室紹介	理論計算による原子・電子レベルにおける格子欠陥の材料科学 横井達矢164
本会記事	会告
	支部行事
	揭示板
	新入会員

 今月の表紙写真
 Al-5 at%Si 合金における一方向凝固の超大規模フェーズフィールド・シミュレーション結果. 一辺が約 3 mm の 3D システムにおいて, 温度勾配 10 K/mm, 冷却速度 0.3 K/s の条件で, 底部から成長した柱状デンドライト組織.

 (大野宗一 澁田靖 高木知弘 著 140頁 図1より掲載)

表紙デザイン:北野 玲 複写をご希望の方へ

<sup>坊</sup> 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複写に関する権利を再委託している団体) と包括復写許諾契約を締結している場合にあっては、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 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.





# 2020 ANNUAL BOOK

# 内容紹介

- ○日本規格協会は ASTM の旧来からのビジネスパートナーであり、ASTM により正式に認められている日本の販売代理店です。<sup>※1</sup>
- OANNUAL BOOK OF ASTM STANDARDS とは

Section 1 ~ 15 で構成され、全85 冊・約 13,000 規格を収録した ASTM 規格の規格集です。金属・石油・ ゴム・プラスチックからエレクトロニクス・原子力まで各セクションに分類。最適な材料の選択基準、国際的 な標準試験方法として各界で広く活用されています。

※1 当協会による ANNUAL BOOK OF ASTM STANDARDS 販売収益は、ASTM 規格、国際(ISO,IEC)規格、JIS の開発に役立てられます。

# 特 典

○各セクションをセットでご購入いただく場合は、単品価格合計の約25%OFF にて、ご提供!

○全セクション(全85冊)をご購入いただく場合は、単品価格合計の約 50%OFF にて、ご提供!

# 各セクションの内容

- ・Sec.1 鉄鋼製品 (Vol01.01~01.09)
- ・Sec.2 非鉄金属製品 (VolO2.01~02.05)
- ・Sec.3 金属試験方法及び分析方法 (VolO3.01~03.07)
- Sec.4 建築材料 (VolO4.01~04.13)
- ・Sec.5 石油製品・潤滑剤及び化石燃料 (Vol05.01~05.06)
- ・Sec.6 塗料・塗覆装及び香料 (VolO6.01~06.04)
- Sec.7 繊維 (Vol07.01~07.02)
- Sec.8 プラスチック (Vol08.01~08.04)
- Sec.9 ゴム (Vol09.01~09.02)
- ・Sec.10 電気絶縁・エレクトロニクス (Vol10.01~10.04)
- ・Sec.11 水及び環境管理技術 (Vol11.01~11.08)
- ・Sec.12 原子力・太陽エネルギー・地熱エネルギー (Vol12.01~12.02)
- Sec.13 医療機器・医療サービス (Vol13.01~13.02)
- ・Sec.14 一般試験方法及び計測 (Vol14.01~14.05)
- ・Sec.15 一般製品,化学特殊製品及び最終製品(Vol15.01~15.12)

# ご案内

# オンラインでの閲覧もおすすめ! JSA ライブラリサーバ

OASTM の個別規格単位もしくは Annual Book 単位で契約できます。(年間契約となります。) Oその他の規格(JIS、ISO、IEC、BS)にも対応。 Oサンプルサイト: https://library.jsa.or.jp/

> お気軽にお問い合わせ下さい! お問合せ先:csd@jsa.or.jp

# ご注文について

2020 ANNUAL BOOK OF ASTM STANDARDS のご注文は、JSA Webdesk から承っております。 JSA Webdesk 各種会員にご登録いただき、お申込みください。

※有料会員の方は、JSA Webdesk(https://webdesk.jsa.or.jp)からお申込みの場合、割引が適用されます。また、JSA Webdesk 会員(無料)にご登録いた だければ、JSA Webdesk からもご予約いただけます。ご予約中は請求書決済可能です。

ご注文は JSA Webdesk(https://webdesk.jsa.or.jp/) または右のコードよりお願い致します。







元素名: Manganese, 原子番号:25, 質量数:54.94, 電子配置: [Ar]3d5 4s2, 密度:7.473 Mg·m<sup>-3</sup>(293 K), 結 晶構造:α-Mn立方晶(~1000 K), β-Mn立方晶(1000~1373 K), γ-Mn立方晶(1373~1411 K), δ-Mn立方晶 (1411 K~融点), 融点:1519 K, 沸点:2334 K<sup>(1)</sup> 【写真】電解金属マンガン,純度99.9%(新日本電工 写真提供)

地球環境下で酸化物や炭酸塩として安定で、軟マンガン鉱  $(MnO_2)$ や菱マンガン鉱  $(MnCO_3)$ などとして産出され、 MnO としてのクラーク数は0.10 mass%である.比較的反応 性の高い金属で、粉末状にすると空気中の酸素や水などと反 応する.二酸化マンガン  $(MnO_2)$ を触媒とする過酸化水素  $(H_2O_2)$ の水と酸素への分解反応は、理科実験の定番であ る.蒸気圧が高く、アーク溶解などで合金化しようとすると 組成がずれやすい.また、ハース上に堆積した Mn の微粉 末が大気暴露した際にパチパチと火花が出てびっくりした経 験を持つ人もいるのでは?

単体において相が4種も存在することから,Mnが絡む状 態図には複雑なものが多い.磁気的性質も, $\alpha$ -Mnは反強磁 性, $\beta$ -Mnはパウリ常磁性, $\gamma$ -Mnは基底状態では反強磁性,  $\delta$ -Mnはその存在する温度では常磁性であろうが,基底状態 における理論計算では常磁性,もしくは強磁性や反強磁性と も報告されている.Mnを含む合金・化合物となると,配位 子など周囲の環境によって,Mnの磁気モーメントはゼロに 近いほどの小さな値から4 $\mu$ Bを超えるまで広い範囲に渡 る.また,原子間距離によって反強磁性にも強磁性にもなり 得るというから,如何にその磁性が多彩であるかが伺える. Cu<sub>2</sub>MnAlはドイツ人のホイスラー(Fritz Heusler, 1866– 1947)が発見した物質であるが,室温で強磁性を示さない元 素から構成されているにも関わらず,合金化することで Mn-Mn 原子間距離が引き延ばされ, 3.7 μ<sub>B</sub>/f.u. ほどの大き な磁気モーメントを有する強磁性体となる<sup>(2)</sup>.

マンガン単体が金属材料として用いられることはほとんど なく、マンガン鋼の原料や、フェロマンガンとして鋼材の脱 酸素剤・脱硫黄剤などに使用される.鉄鋼用途で耐磨耗性, 耐食性、靭性を付加するために、マンガンが添加される.一 番有名な用途は、二酸化マンガンがマンガン乾電池やアルカ リ乾電池の正極に使われることであろう.また、近年はリチ ウムイオン電池の正極材料として研究されている.磁性材料 としては MnZn フェライトがインダクタやトランスのコア 材料として用いられ、磁気ヘッドの交換結合素子中では Mn-貴金属系反強磁性体が実用されている.ごく最近では、 Mn系反強磁性体がスピントロニクスの分野で注目されてお り<sup>(3)</sup>、実用材料としてさらなるポテンシャルを発揮すること が大いに期待される.

# 文 献

- (1) 金属データブック改訂4版,日本金属学会,丸善(2004).
- (2) F. Heusler: Verhandl. Deut. Physik. Ges., 5(1903), 219.
- (3) S. Nakatsuji, N. Kiyohara and T. Higo: Nature, **527**(2015), 212.

次号 金属なんでもランキング! No. 8 イオン化エネルギー

# C A



# 「金属素描」「金属なんでもランキング!」

2019 年 1 月から「まてりあ」にそれぞれ隔月で掲載している「金属素描」と「金属なんでもラン キング!」が https://jim.or.jp/everyone/top\_ranking.html より閲覧できます。





金属の物理的・化学的特徴, 製法, 用途等に ついて紹介しています. 意外に知らない事実だ けでなく, 読んで楽しく, かつ, 具体的に役立つ 情報を纏めています. 合わせて, 様々な形態の 金属の写真を掲載しています.

- No.1 チタン
- No.2 ジルコニウム
- No.3 ハフニウム
- No.4 コバルト
- No.5 クロム
- No.6 マグネシウム
- No.7 ナトリウム

金属なんでもランキング!

物性等, 金属にまつわる様々な数値をグラフ にして「見える化」しています. 金属全体に渡っ てデータを整理することによって, 全体像がわか るようになっています.

- No.1 地殼存在量
- No.2 密度
- No.3 融点·沸点
- No.4 電気伝導度
- No.5 熱伝導度
- No.6 比熱
- No.7 デバイ温度

~ See you next metal! ~



材料組織形成における計算材料科学の最前線

# 企画にあたって

# 大塚 $誠^1$ 杉浦夏子<sup>2</sup> 高山直樹<sup>3</sup> 寺本武司<sup>4</sup> 徳永透子<sup>5</sup> 山本剛久<sup>6</sup> 木口賢紀<sup>7</sup>

2019年に再編された日本金属学会第3分野では,熱力 学・状態図・相平衡,拡散・相変態,合金・アモルファス・ 準結晶,組織制御技術,再結晶・粒成長点,集合組織,組織 観察・分析,計算材料科学・材料設計,データ科学など材料 工学の基盤となる幅広い分野を対象とする.原子,分子,結 晶構造に加え,拡散,転位論,界面・粒界,相変態など様々 な物理と化学との複雑な絡み合いによって形成される材料組 織やその形成機構を扱う点こそが物理でも化学でもなく金属 工学,材料工学の特徴と言えるだろう.金属材料の根幹をな す社会基盤材料の加工,接合,強度,破壊を考える上で材料 組織学は不可欠であり,磁性,スピントロニクス,電子伝 導,イオン伝導,触媒,太陽電池などIoT 社会の発展に不 可欠な機能材料においても材料組織学の重要性に変わりない.

材料の研究は、どことなく泥臭さを伴う分野であるが、今 世紀に入って20年が経った現在、コンピュータの著しい進 歩に伴って計算材料科学が急激な発展を遂げつつある.既 に、材料研究に従事する実験系の研究者にも広く普及しつつ あり、本紙読者においても注目を集めるところと思われる. 小規模な分子、結晶構造の比較的小規模な構造モデルの第一 原理計算や分子動力学法であれば、専門家でなくとも計算可 能である.一方、材料組織学においては、膨大な原子数から なる構造モデルに対する計算が必要となり、億を超えるよう な超巨大構造モデルが必要となってくる.そのため、数百原 子スケールを扱う第一原理計算と組み合わせたマルチスケー ル計算として、Phase Field 法をはじめとする様々な材料組 織形成に関する計算材料科学が発展してきた.しかし、実験 系の読者にとっては新規参入の障壁はまだ高いのではないだ ろうか.

本紙では、分子軌道法やバンド計算など第一原理計算に関 する特集(例えば、本誌53巻第9号(2014年))や多くの解説 記事が掲載されている.近年、マテリアルズインフォマティ クスと呼ばれるデータ駆動型の材料科学が興隆し、一大学術 分野を形成しつつある.この様な世界的潮流の下、材料科学 に従する実験系研究者であっても何らかの形で避けては通れ ない状況となってきた.最近では、足立吉隆教授による「マ テリアル・プロセス・計測インフォマティクスを一層推進す るための最新数学・情報工学の基礎と材料工学の適用例」と 題した特集が本誌58巻第1号(2019年)に組まれており、主 に理論的側面から最近の動向が解説されている.しかし、そ の対象となる学術は多様であるとともに、材料組織学の分野

において具体的にどのような応用に活用できるのか?どこに 限界があるのか?より具体的な研究事例に重点を置いた特集 も、実験系研究者が多いと思われる本誌読者にとって有益で あろう.そこで、本企画では、上記特集号と関連性を持たせ つつ独立した記事となるよう配慮し、材料組織形成の具体的 な研究に計算材料科学がどのように貢献するかという観点か ら,溶質クラスター,粒界構造,凝固におけるミクロ偏析, 結晶成長といった様々なスケールでの組織形成に関する最新 の研究成果について, 第一線で活躍する4名の研究者に解 説していただいた. 宮本吾郎准教授(東北大学)には,「鉄鋼 材料における侵入型溶質原子—置換型溶質原子のナノクラス タリング」と題して、表面窒化処理による鉄鋼材料の硬化挙 動と、それに関わる窒素原子―置換原子のナノクラスター形 成の起源について,実験と第一原理計算により明らかになっ た成果について解説していただいた. 溝口照康教授(東京大 学)には、「結晶界面インフォマティクス:構造決定と構造機 能相関」と題して、仮想スクリーニングやベイズ最適化を用 いた機械学習による粒界構造決定法と界面の構造機能相間に ついて解説していただいた.大野宗一教授(北海道大学)に は、「疑固組織のハイパフォーマンス・コンピューティング とクロススケール・アプローチへの新展開」と題して、スー パーコンピューターを駆使した、超大規模分子動力学法によ る均一核生成や超大規模フェーズフィールド法による凝固組 織形成に関する最新の研究成果、そしてミクロからマクロま でのマルチスケールをシームレスに融合するクロススケー ル・アプローチについて今後の展望を解説いただいた. 原田 俊太講師(名古屋大学)には,「機械学習を活用した SiC 高品 **質結晶成長条件のデザイン**|と題して,次世代パワーデバイ ス半導体として期待される SiC について、溶液成長よる高 品質結晶成長の大型化の課題と機械学習と数理最適化を活用 した結晶成長の最適化方法について解説していただいた.

本特集が、本紙読者の皆様にとって材料組織形成における 計算材料科学に足を踏み入れるきっかけとなれば幸いであ る.最後に、本特集号へのご執筆をご快諾下さいました執筆 者の先生方に厚く御礼申し上げます.



<sup>1</sup>東北大学多元物質科学研究所;准教授<sup>2</sup>日本製鉄株式会社;上席主幹研究員<sup>3</sup>JFE スチール株式会社;主任研究員<sup>4</sup>神戸大学大学院工 学研究科;助教<sup>5</sup>青森県量子科学センター;コーディネータ<sup>6</sup>名古屋大学大学院工学研究科;教授<sup>7</sup>東北大学金属材料研究所;准教授 Preface to Special Issue on Cutting Edge of Computational Materials Science on Microstructure Keywords: *computational materials science, materials informatics, microstructure, interface, defect* 2020年1月28日 受用に付け12220(meteria 50.127]

2020年1月28日受理[doi:10.2320/materia.59.127]





# 1. はじめに

析出強化は金属材料の強化機構の一つであり,他の強化機構に比べ,大きな強化量が得られることが知られている<sup>(1)</sup>.特に,Al合金やMg合金では溶質原子が局所的に濃化した G-Pゾーンやナノクラスターを積極的に利用して高強度化が図られている<sup>(2)(3)</sup>.一方,鉄鋼材料では固相変態を利用した組織制御が広く用いられているが,ナノクラスターの利用はそれほど進んではいないのが現状である.

著者らは、 $\alpha$ -Fe(bcc 構造)合金の窒化処理において、窒 素原子(N)と置換型原子(s)が濃化したクラスターが形成さ れ、大きな硬化が生じることを見出している<sup>(4)(5)</sup>.このN-s クラスタリングは、N-s間の引力相互作用によって引き起こ される.そこで、本稿では窒化材で観察されているN-sク ラスタリングと硬化挙動を紹介した後、N-s相互作用の実測 と理論評価ならびにクラスタリングシミュレーションに関し て、JST CREST「軽元素戦略に基づく鉄鋼材料のマルチス ケール設計原理の創出」(2011-2015年度、研究代表:古原 忠)、JST 産学共創プログラム「ナノクラスタリング・ナノ 析出の学理に基づく鉄鋼材料の表面硬度分布制御と摩擦摩耗 特性向上の指導原理確立」(2016-2019年度、研究代表:宮 本吾郎)にて得られた成果を中心に紹介する.

# 2. 窒化処理における N-s クラスタリングと表面硬化

窒化処理は,機械構造部材や金型等の耐摩耗性,疲労強 度,耐食性を向上させるために用いられ,マルテンサイト変 態を利用した浸炭処理や高周波焼入れと比べ,処理ひずみが 小さく高精度部材の表面硬化に適していることから,窒化処 理における表面微細組織制御に改めて注目が集まっている.

窒化処理では、試料表面からN原子が侵入、拡散し、母 相中に固溶しているs原子と微細な合金窒化物を形成するこ とで表面近傍の硬さが上昇する.通常,窒化鋼には窒化物生 成元素である Cr, Al, V, Mo, Ti が添加されており, 窒化処 理における元素の役割を理解するため、Fe-s 二元フェライ ト(*α*)合金を用いてその窒化挙動が多く調べられている. Fe-Cr 合金の窒化処理では CrN(B1 構造)が比較的短時間か ら形成されて表面硬化する一方, Fe-Al 合金の窒化処理では 準安定な AlN(B1 構造)が徐々に析出し,長時間処理後に安 定な AlN(ウルツ鉱型構造)へと遷移するため、通常の窒化 時間では表面硬化が小さいことが明らかになっている(5). 一 方,Fe-Ti合金の窒化では短時間の窒化処理でも大きな表面 硬化が得られ、X線回折や TEM による歪コントラスト解 析,内部摩擦といった間接的な手法により,図1に示したよ うな{001}<sub>α</sub>面上にTi原子が1層並びその周囲にNが結合 しているクラスターモデルが提唱されている(6). このクラス ターモデルは N-s 原子の規則化を伴う bcc 中での相分離と

Keywords: solute clustering, solute interaction, nano-precipitation, precipitation strengthening, first principles calculation, steel 2019年11月29日受理[doi:10.2320/materia.59.128]

<sup>\*</sup> 東北大学金属材料研究所;1)准教授 2)教授(〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

<sup>\*\*</sup> 大阪府立大学大学院工学研究科;教授

<sup>\*\*\*</sup> 東北大学多元物質科学研究所;1)助教 2)教授

<sup>\*\*\*\*</sup> 大阪府立大学大学院人間社会システム科学研究科;准教授

Nano Clustering of Interstitial and Substitutional Solute Atoms in Steels; Goro Miyamoto\*, Hiroshi Numakura\*\*, Masanori Enoki\*\*\*, Tokuteru Uesugi\*\*\*\*, Hiroshi Ohtani\*\*\* and Tadashi Furuhara\*(\*Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai. \*\*Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University, Sakai. \*\*\*Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Sendai. \*\*\*\* Graduate School of Humanities and Sustainable System Sciences, Osaka Prefecture University, Sakai)





 図2 823 K で 16 h 窒化した Fe-s 二元合金の断面硬さ 分布と窒化層で観察される溶質原子クラスタ ー,ナノ窒化物の TEM 写真<sup>(4)</sup>.(オンラインカラー)

も捉えられる.また,クラスター内の N-s 原子配列は,B1 構造の{001}面内のものと同じであるため,クラスターから B1 構造への遷移は3次元的な積層発達と考えることもでき る.

著者らの一人は,高分解能電子顕微鏡を用いてTiやVを 添加したFe-s二元合金を窒化すると,図2に示すように $\alpha$ -Fe の{001}面に沿った一原子層のN-s クラスターが形成さ れることを直接確認している<sup>(4)</sup>. クラスターが生成する Ti やV添加材は,数原子層厚さを持つ平衡窒化物(CrN)が生 成するFe-Cr 合金と比べても表面硬度が著しく増加するこ とから,クラスターは大きな強化能を有していることが分か る<sup>(4)</sup>. 一方,第一原理計算によるとB1型構造を持つ窒化物 の中でAIN は VN や CrN よりも熱力学的に安定である<sup>(7)</sup>に も関わらず,Fe-Al 合金を窒化しても,AIN は析出しにく く,表面硬化はほとんど見られない. この理由は次節で説明 するように N-Al 原子間相互作用の特異性にあると考えられ る.

クラスターを母相と結晶構造は同じで組成の異なる領域と 定義すると、α-Fe中でN原子とs原子が濃化した領域と欠 乏した領域への二相分離によってクラスタリングが発現する ものと考えられる.二相分離が発現するためには自由エネル ギー曲面に上に凸の屈曲が現れることが熱力学的な必要条件 である.図3(a)に示すように、N-s間に引力相互作用が働 くと、N-sが濃化した固溶体は安定化するため、FeとN-s を通る断面において上に凸の屈曲が生じ、二相分離が起こる



可能性がある. Thermo-Calc (データベース:TCFE2)を用 いて Fe-(N-s)断面における  $\alpha$ -Fe の自由エネルギーを計算 した結果<sup>(4)</sup>,図3(b)に示すように,Fe-Ti-N系や Fe-V-N 系,Fe-Cr-N系の bcc 相では実際に上に凸の屈曲が現れる ことが確かめられている.しかしながら、 $\alpha$ -Fe 中に N が高 濃度に固溶した bcc 相の自由エネルギーが経験的な熱力学 計算により適切に評価できているかどうかは疑念があり、他 の実験や理論的な評価による検証が望まれる.そこで、次節 以降に述べる  $\alpha$ -Fe 中の N-s 相互作用の実測や N-s クラス タリングの理論的評価を実施した.

# 3. N-s 相互作用の実験的評価

Numakura<sup>(8)</sup>は  $\alpha$ -Fe 中の侵入型溶質元素(i)の応力誘起拡 散による力学損失に及ぼす s 原子の影響および, i 原子の固 溶度に及ぼす s 原子の影響を調べることで,  $\alpha$ -Fe における i-s 相互作用を系統的かつ定量的に評価してきた. 図4(a) は,力学損失測定の一例であり,Fe-N二元合金で約300 K に現れるスネークピークとは別のピークが,微量 Cr 添加に より約320 K の位置に現れている<sup>(8)</sup>.これは,Cr 原子近傍 のサイトにある N 原子のジャンプの障壁が増加しているこ とを表しており,N-Cr 間の引力相互作用を示唆している.



図4 (a) 窒化した Fe-Cr 合金のスネーク緩和<sup>(8)</sup>, (b) 等 N 活量の窒化により試料に吸収された N 量の Cr 濃度依存性<sup>(9)</sup>. (a) 中記載の数値は, Cr 濃度 (mol%)を表す.(オンラインカラー)

一方, Cr 添加量が増加すると, 300 K よりも低温側に第3 のピークが現れるようになる. このピークは Cr 添加量が増 加すると顕著になることから, Cr 原子が複数個集まったク ラスターに隣接した侵入型位置における N 原子のジャンプ に対応すると考えられる.

図4(b)は等しいN活量で焼鈍したFe合金に吸収される N濃度のCr濃度依存性を測定した結果である<sup>(9)</sup>.その際, 窒化処理中の合金窒化物析出を避けるため,元素添加量を極 微量として析出駆動力を低減させ,さらに,窒化処理中のs 原子の拡散距離がs原子間の距離を大きく超えないように窒 化温度と時間を設定し,合金窒化物が速度論的に生成しえな い条件でN原子を添加している.これを見ると,Cr量が増



35 回俗伎側走により計画した(a) N-S, (b) C-S 原 子間の相互作用係数<sup>(8)</sup>.(オンラインカラー)

加するほど N 濃度が増加しており, N-Cr 間には引力相互作 用が働くために, N の固溶量が増加していることが分かる.

同様の固溶度測定により、種々の置換型溶質元素(s:V, Cr, Mn, Ni, Al, Si, P)とN, 炭素(C)の相互作用係数を実験 的に評価した結果を図5<sup>(8)</sup>に示す.図5(a)を見ると、周期 律表で Fe よりも左側にある元素は N に対して引力相互作用 を持ち, Feから左に離れるほど引力が強くなることが分か る. 右側にある元素(Ni, Al, Si, P)は相互作用が小さいか, 反発の相互作用を有する.一方,Cと置換型元素間の相互作 用は、Nに比べて小さく、周期律表でFeよりも左側にある 元素であっても, 強い引力相互作用は示さない. また, 最近 では、TiやNbとNの相互作用も測定され、これらの原子 は V と同等もしくはそれ以上の引力相互作用を有すること が明らかとなっている<sup>(10)</sup>.これらNに対して強い引力相互 作用を有する元素はいずれも窒化処理において N-s クラス ターを形成することから、N-s原子間の強い引力が N-sク ラスタリングを引き起こしていると考えられる.一方,前述 したように Al は安定な窒化物を形成するにもかかわらず, N-Al 間の相互作用係数は小さい. さらに、Al 添加によって α-Fe 格子が膨張し、その結果見かけの固溶度が増加する効 果を考慮すると、N-Al 間の相互作用エネルギーはむしろ反 発となることが最近示されている(11). このことから, 固溶 状態ではNとAlは隣接して存在しにくいため, N-Alクラ スターや Al 窒化物が生成しにくく, Fe-Al 合金の窒化では 表面硬化が生じないものと理解できる.

# 4. N-s クラスタリングの理論的評価

近年,計算機の能力が向上し,第一原理計算が相安定性や 溶質相互作用,粒界や界面,表面の構造評価に広く利用され るようになっている.しかしながら,第一原理計算を用いた α-Feにおける C-s 相互作用の評価に関しては,実験で引力 型相互作用が確認されている元素であっても,引力相互作用 が過小評価される場合や斥力型となる場合が多く,実験と計 算で乖離が生じることが指摘されている<sup>(12)(13)</sup>.その原因と して第一原理計算時の緩和条件の影響が議論されてい る<sup>(14)</sup>.実験と計算の乖離の他の要因として,今回の取り組 みでは溶質原子のクラスタリングに注目した.従来の計算で は、Nとsを一原子ずつ含む系においてN-s相互作用が評 価されていたが、N-s間に引力相互作用が生じる場合にはN とsを複数含んだクラスターも一定程度存在していると考え られる.そこで、複数のN原子ならびにs原子から構成さ れる多体クラスターを考慮して、二通りのアプローチでN-s 相互作用の理論評価を行った.

一つ目が,第一原理計算に基づくクラスター展開法である.系に含まれる N,s 原子の数や配置を変えた第一原理計算により得られた各種規則構造のエネルギーを再現するように,種々の溶質原子数からなるクラスターの有効クラスター 相互作用を決定した.その際,クラスターの体積を純鉄と同じとする体積緩和なし条件および最もエネルギーが安定となるよう体積を緩和させたエネルギーを用いる体積緩和条件の



図 6 (a) 体積緩和条件でのクラスター展開法により求 めた Fe-Ti-N 系における自由エネルギーの等高 線図,(b) 体積緩和条件および(c) 体積緩和なし 条件で評価した Fe-TiN 断面における自由エネ ルギー曲線<sup>(15)</sup>.(オンラインカラー)

二通りを用いた.

図6(a)に、Fe-Ti-N系において体積緩和条件で評価した α-Feの自由エネルギーを示す<sup>(15)</sup>. Nの原子分率が50%以 上では不安定であるため、50%以下の組成領域のみ示して いる.Fe側からTiNクラスター側にエネルギー曲面は急峻 に降下し、Ti:N=1:1の領域でエネルギーが最も低くな っている.Fe-TiN断面における自由エネルギー(図6(b)) を見ると、1000K,4000Kともに上に凸の形状をしてお り、強い二相分離傾向があることが分かる.一方、体積緩和 なし条件では、弾性的効果によってTiNクラスター分率の 増加に伴い自由エネルギーが増加するが、500Kでは上に凸 の形状となり、二相分離傾向を示す.

評価した有効クラスター相互作用に基づき, Fe 原子と Ti 原子ならびに N 原子と侵入型空孔の位置を交換するモンテ カルロ(MC)シミュレーションを行った. その際, N原子の 拡散は Ti 原子に比べて著しく速いことを簡易的に取り入れ るため、原子位置の交換判定は、Fe 原子と Ti 原子は隣接す る原子対を選択するのに対して、N原子と侵入型空孔の場 合にはセル中に含まれる全ての組み合わせの中から選択し た. また,置換型サイトのFe原子とTi原子あるいは侵入 型サイトのN原子と空孔の原子位置交換を全溶質原子に対 して行う過程を1モンテカルロステップ(MCS)とした.ク ラスター形状がほぼ定常状態となった 4000 MCS 後の Ti お よび N 原子の分布を図7に示す(15).1000 K における体積 緩和条件では、球状クラスターが形成することが分かる(図 7(a)). 一方, 体積緩和なし条件では 1000 K では, 明瞭な クラスター生成は認められず,500Kで計算すると,{001} 面に沿った一原子層の Ti-N クラスターが形成されることが 明らかとなり、実験で見られた Ti-N クラスターをよく再現 する結果が得られた.このことより,弾性的効果が板状クラ スター生成には大きく影響していることが分かる.また、今 回の計算では実際の窒化温度よりもかなり低い温度でのみ Ti-N クラスターが生成する結果となったが、原子位置の局 所的な緩和を考慮することで現実に近い温度においてもクラ スターが生成し、さらに他の添加元素におけるクラスタリン





Spherical Ti-N cluster

II-N cluster Mon

Mono-layer Ti-N cluster on 001<sub>α</sub>plane

図7 MC シミュレーションにより得られた 4000 MCS 後の Ti-N クラスター(a) 体積緩和条件,(b) 体 積緩和なし条件<sup>(15)</sup>.組成は1 at%Ti-1 at%N で あり,大きい球が Ti 原子を,小さい球が N 原子 を表し,Fe 原子は表示してない.(オンラインカラ ー) グ挙動についても MC シミュレーションで再現できること が最近確認されている.

二つ目のアプローチとして、多体クラスターにおける N-s 相互作用を陽に検討するため、 $\alpha$ -Fe中の一個の s 原子(s: Al, Ti および V) と 1~4 個の N 原子からなるクラスターの 相互作用エネルギーを第一原理計算により評価した<sup>(16)</sup>. N 原子と s 原子の配置は、図8(a)に示すように実験ならびに MC シミュレーションで観察されている{001}面上に存在す る第二近接位置の関係を優先して計算を行った. bcc 単位胞 を 4×4×4に拡張したスーパーセルで計算を行い、第一原 理計算で得られた孤立溶質原子のエネルギーを基準にクラス ターのエネルギーを算出し、クラスターのエネルギーの N 原子数に対する差分を多体クラスターと N 原子間の相互作 用エネルギーとした.



図8 (a) スーパーセル法で計算した N 原子と s 原子 の配置,(b) クラスターの全エネルギーの N 原 子数による変化,(c) 多体クラスターにおける相 互作用エネルギーの N 原子数による変化<sup>(15)</sup>.(オ ンラインカラー)

図8(b), (c)に全クラスターエネルギーおよび相互作用エ ネルギーのN原子数による変化を示す<sup>(16)</sup>.N-Ti, N-Vク ラスターの場合には、全クラスターエネルギーはほぼ単調に 低下し,引力相互作用はN原子数増加に伴い増加する.一 方,興味深いことにN-Alの全クラスターエネルギーはN 原子数が2までは増加することから, N-Al間には反発の相 互作用が働き,N原子数が3以上では引力型に転じてい る. 固溶度から評価した N-Alの相互作用係数は単体対に近 い状況ではほぼゼロ、すなわち相互作用はほとんどないのに 対して,N数が増えるほど窒化物の安定性に近づき,N原 子とAl原子は引き寄せ合うものと理解できる. TiやVを 添加した合金の窒化とは異なり、Fe-Al 合金の窒化では N-Al クラスターや Al 窒化物が析出しにくい(図 2<sup>(4)</sup>)のは, N 原子と Al 原子がクラスタリングする初期段階では反発しあ い,Al 窒化物の析出初期段階でエネルギー障壁を乗り越え 得る必要があるためと考えることで、定性的に理解できる.

TiやVをFe-Al合金に複合添加すると初期にTi-N,V-N クラスターが生成しAlN析出が促進されて顕著な表面硬化 が発現することも見出されており<sup>(17)(18)</sup>,一種類のs原子と N原子それぞれ複数個から成る多体クラスターに加えて, 元素種の異なるs原子が混在した多体クラスターにおける N-s相互作用の解明も鉄合金におけるクラスタリング制御に おける重要な課題として挙げられる.

# 5. 終わりに

本稿では、α-Fe中でのN-s相互作用に起因するN-sクラ スタリングに関して得られている知見を概説した.N-s間に 強い引力相互作用が働くと、α-Fe中での二相分離により N-sクラスターが生成することが実験、理論両面から明確に なっている.更に、クラスターの大きな強化能や、多体化に よって相互作用が反発から引力へと変わるという興味深い結 果が得られている.非鉄金属の高強度化に有効活用されてい るナノクラスターを鉄鋼材料でもより積極的に活用していく ために、溶質元素間の相互作用のより精緻な解明および相互 作用に立脚した溶質原子ナノクラスタリング制御の指導原理 確立を目指して研究を進めてゆきたい.

本研究は JST CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料 の革新的機能の創出」および JST 産学共創基礎基盤研究プ ログラム「革新的構造用金属材料創製を目指したヘテロ構造 制御に基づく新指導原理の構築」による成果であり、ここに 謝意を表します.

# 文 献

- (1)牧 正志:鉄鋼の組織制御:その原理と方法,内田老鶴圃,
   (2015).
- (2) 里 達雄:まてりあ, 56(2017), 338-345.
- (3) H. Okuda, M. Yamasaki, Y. Kawamura, M. Tabuchi and H. Kimizuka: Sci. Rep., 5 (2015), 14186, 1–6.

- (4) G. Miyamoto, Y. Tomio, H. Aota, K. Oh-ishi, K. Hono and T. Furuhara: Mater. Sci. Tech., 27 (2011), 742-746.
- (5) 宮本吾郎, 富尾悠索, 末次祥太郎, 古原 忠: 熱処理, 51 (2011), 128-133.
- (6) D. S. Rickerby, S. Henderson, A. Hendry and K. H. Jack: Acta Metall., 34(1986), 1687-1699.
- (7) 上杉徳照, 私信.
- (8) H. Numakura: Arch. Metall. Mater., **60**(2015), 2061–2068.
- (9) H. Numakura, Proc. 3rd Int. Symp. Steel Science (ISSS2012), Iron and Steel Institute of Japan, 2012, 19-28.
- (10) 沼倉 宏,石井朝晃,林 思龍,宮本吾郎:日本金属学会秋 期講演大会予稿集, (2018), 246.
- (11) 宮本吾郎, 沼倉 宏, 榎木勝徳, 上杉徳照: JST ヘテロ構造 制御公開シンポジウム予稿集, 2018年9月.
- (12) J.-D. Kamminga, T. P. C. Klaver, N. Nakata, B. J. Thijsse and G. C. A. M. Janssen: J. Comp. Mater. Design, 10(2003), 1-11.
- (13) 澤田英明, 川上和人, 杉山昌章:日本金属学会誌, 68(2004), 977-982.
- (14) M. H. F. Sluiter: Proc. Int. Symp. Steel Science 2012 (ISSS2012), 29-39.
- (15) 榎木勝徳, 大谷博司:鉄と鋼, 105(2019), 334-342.
- (16) 上杉徳照, 瀧川順庸: CAMP-ISIJ, **31**(2018), 748.
- (17) G. Miyamoto, S. Suetsugu, K. Shinbo and T. Furuhara: Metall. Mater. Trans. A, 46A(2015), 5011-5020.
- (18) 朱 萌, 宮本吾郎, 古原 忠: 鉄と鋼, 105 (2019), 324-333.

#### \*\*\*\*\* 宮本吾郎

2006年 京都大学大学院工学研究科博士後期課程修了 2006年12月-20012年6月 東北大学金属材料研究所 助手(後に助教に名称

変更) 2012年7月-現在 同研究所 准教授 専門分野:金属材料の微細組織制御

◎熱力学および結晶学に基づく相変態・析出を用いた組織制御法の確立なら びに特性改善に取り組み,新規組織解析法の開発も行っている.

\*\*\*\*\*



宮本吾郎







大谷博司

古原 忠



上杉徳照

沼倉 宏



# 結晶界面インフォマティクス: 構造決定と構造機能相関

大谷龍剣\*,\*\* 清原 慎2\*\*,\*\*\* 溝口照康3\*

# 1. 緒 言

近年情報科学を物質科学に組み合わせた「マテリアルズイ ンフォマティクス」に関する研究が盛んに行われており,す でに公開されている Materials Project<sup>(1)</sup>や NOMAD<sup>(2)</sup>, Mat Navi<sup>(3)</sup>などのデータベースを活用することで,原子構 造,形成エネルギーやバンドギャップなどの諸物性,さらに 拡散の活性化エネルギーや,XANES スペクトル等の情報を web 経由で容易に取得することができる.

一方で、それらデータベースが与えてくれるのは完全結晶 の情報のみである.工業的に使用されている結晶材料の多く は、多結晶体であり、界面や表面、転位や空孔など無数の格 子欠陥がその内部に存在しており、格子欠陥は材料組織や材 料機能に決定的な役割を果たしている.つまり、多結晶材料 機能を包括的に理解するためには、そのような格子欠陥の構 造を系統的に決定し、その機能と構造の相関性を理解して機 能の設計指針を確立する必要がある.

本研究で主に対象としている結晶粒界は,2つの相対する 結晶から構成され,それらの相対方位に応じて多彩な物性を 示すため材料設計の重要な要素となっている.一方で,粒界 を記述する幾何的な自由度は巨視的なもの,微視的なものを 合わせて9つあり,1つの粒界構造の決定についても膨大な 計算が必要となる.界面の基礎研究においては,9つの自由 度をすべて決めることは困難なため,モデル化された対応格 子(CSL: Coincidence site lattice)理論に基づくCSL 粒界が 粒界の基礎研究で良く用いられる<sup>(4)</sup>. CSL 粒界は粒界を構 成する結晶粒の相対的な方位差から決まる幾何学的な数値を 有しており,シグマ(Σ)と数値を用いてΣ3やΣ5などとあら される. CSL 粒界はモデル化されているものの,結晶の回 転軸や粒界面の違いによって多様な構造を示す.

このモデル化された CSL 粒界は方位関係が決まっている ものの,残る微視的自由度の一部である剛体ずれ変位を決定 する必要がある.その決定プロセスにおいてもまだ数百~数 万個の候補構造が存在し,それらすべてに対して構造緩和計 算を行い,最も粒界エネルギーが低い最安定構造を決定する 必要がある.さらに,粒界物性の設計指針を確立するために は,最安定界面における各原子サイトの物性を計算もしくは 計測し,構造と物性との相関性(構造機能相関)を理解する必 要がある.

っまり,界面の機能設計を実現するためには,結晶界面の 構造を決定するためのプロセスを加速することが不可欠であ る.これまでに,遺伝的アルゴリズム<sup>(5)</sup>や Random Structure Searching<sup>(6)</sup>などの効率的手法の提案がなされているも のの,それらの手法においても数百回の試行計算が必要にな る.

当研究グループでは仮想スクリーニングやベイズ最適化を 用いたクリギング,転移学習といった機械学習に基づいた効 率的な結晶界面構造の決定手法を提案してきた<sup>(7)-(10)</sup>.本稿 ではそのような粒界構造決定に関する手法の紹介をしたのち に,界面における構造機能相関を調べた研究成果について紹 介する.

# 2. 仮想スクリーニングによる界面構造決定

まず, CSL 粒界の構造決定における具体的なプロセスを

\*\*\* 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 Interface Informatics: Structure Determination and Structure-property Relationship; Ryuken Otani, Shin Kiyohara and Teruyasu Mizoguchi(\*The University of Tokyo, Tokyo. \*\*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Tokyo. \*\*\*Laboratory for Materials and Structures, Tokyo Institute of Technology, Yokohama) Keywords: machine learning, interface, structure-property relationships, materials infromatics, grain boundary 2019年11月15日受理[doi:10.2320/materia.59.134]

<sup>\*</sup> 東京大学大学院工学系研究科;大学院生

<sup>\*\*</sup> 東京大学生産技術研究所;1)大学院生 2)日本学術振興会特別研究員 3)教授(〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1)

説明する.図1に従来行われてきた粒界構造決定法を模式的 に示す.粒界構造を決定するためには結晶の剛体変位(x, y, z 方向)と粒界端面の計4つの自由度が網羅する候補構造の 中から安定な構造を決める必要がある.CSL 粒界の一つの 構造を決定するために、粒界をはさんだ結晶粒の剛体変位を 網羅的に変えた候補構造を作成する.これらの候補構造は構 造緩和前のものであり、これら一つ一つに関して第一原理計 算(DFT)や分子動力学計算(MD)を行う(図1中の縦の矢 印).その結果,緩和構造と、粒界エネルギーが得られる. この粒界エネルギーが最も低いものが最安定粒界となる.こ のDFT/MD計算により粒界エネルギーと緩和構造を得るに



図1 CSL 粒界構造を決定するための従来方法. 剛体変 位を変えた候補構造を網羅的に作成し, DFT/ MD計算により緩和構造と粒界エネルギーを得 る. (オンラインカラー)

は、一つの候補構造当たり数分~数時間を要する.著者ら も、これまでセラミックスや半導体の界面の構造を決定する ために、数百~数万個の候補構造に対してDFT/MD計算を 網羅的に行い、数週間から数か月かけて一つの物質の一つの CSL 粒界の構造を決定する研究を行ってきた<sup>(11)-(14)</sup>.

情報科学的視点から見れば同手法は、3次元の剛体変位から構成される3次元空間における最適値(最安定値)探索問題と見なすことができる.情報科学ではこのような膨大な自由度の組み合わせから最小・最大値を探索する手法が種々存在する.

ここで紹介する仮想スクリーニング(Virtual Screening)で は、まず現在手元にあるデータベースから予測モデルを構築 し、その予測モデルをもとに探索空間全体の数値や物性を予 測する.観測データがない領域に関しても予測モデルをもと に「仮想的」に物性値や性能を知ることができる.つまりす べての計算・実験を行わなくとも所望の値を持つ点を予測す ることが可能となり、大幅な計算コストの削減を実現でき る.我々はこの手法を粒界構造決定に利用した<sup>(7)</sup>.

仮想スクリーニングを図2で模式的に説明している.図1 の手法では、すべてのCSL粒界に対して、DFT/MD計算 を実施する必要があるが、その代わりに予測モデルを構築す ることができれば、効率的な粒界構造決定が実現できるはず である.

予測モデル構築のために、いくつかの粒界(図2の $\Sigma$ GB<sub>1</sub>,  $\Sigma$ GB<sub>2</sub>)に関してはこれまでと同様にDFT/MD計算による 網羅的計算を行い、計算前の原子配置情報(原子間距離や密 度など)と粒界エネルギー( $E_{1,1} \sim E_{1,i}, E_{2,1} \sim E_{2,j}$ )の関係を機 械学習によりモデル化(=回帰)した.

本手法の鍵となるのが,本来は DFT/MD 計算後に得られ る粒界エネルギーを,候補構造(計算前)から予測するための 記述子の選択である.そこには著者らの研究グループがこれ



図2 仮想スクリーニングの模式図.一部の CSL 粒界に対して網羅的手法を実施し,予測モデルを構築する.他の 粒界は予測モデルを用いて候補構造から粒界エネルギーを予測する.(オンラインカラー)

まで行ってきた界面研究の経験が生かされている.具体的に は、候補構造における粒界近傍の第一・第二近接原子間距離 や、原子密度、最長原子間距離や最短原子間距離など数十種 類を用いた.予測モデルの構築には非線形回帰法の一種であ るサポートベクトル回帰を用いた.機械学習の分野では、サ ポートベクトル回帰の他にニューラルネットワークやランダ ムフォレストなど、様々な回帰手法が用いられており、手法 の詳細や原理は専門書や web 等の解説を参考にしていただ きたい.ここでは「複雑なデータをうまく回帰してくれる手 法」という理解で十分である.

計算前の原子配列情報のみから粒界エネルギーを予測する ことができるため,最安定と予測された候補構造のみに対し てのみ DFT/MD 計算を行えばよい.つまり膨大な数の候補 構造から,最安定構造を与えると予測される有力候補を予測 モデルが提案してくれるため,シミュレーションによる計算 コストを大幅に削減することができる.

ここでは、面心立方構造を有する Cu の CSL 粒界を対象 とした. 粒界を形成する二つの結晶の回転軸により、多様な 構造が形成される. 今回は最もシンプルに、両結晶とも [001]軸を回転軸とし、さらに対称的に結晶を回転させた粒 界([001]軸対称傾角粒界)に対して本手法の適用を試みた. 訓練データとしてΣ値や粒界面が異なる4つの粒界を選択 し、予測モデルを構築した. 同予測モデルをテストした後 に、訓練にもテストにも用いなかった計12種類の CSL 粒界 に適用した. 図3(a)に予測したエネルギーを示す. 同図の 横軸は各粒界をつくるための回転角を用いており、各角度に おいて異なる CSL 粒界が現れる. 縦軸は粒界エネルギーで ある. 回転角に対して上に凸な関係であり、粒界エネルギー が急峻に低下する点(cusp)の位置など、過去の報告と一致 していることが分かる<sup>(15)(16)</sup>.

たとえば,Σ37粒界に関して安定構造と予測された構造を 図3(b)に示す.予測された安定構造は六員環構造がジグザ グに配列している特徴的な構造であった.これを実際に網羅 的計算により決定した安定構造(図中白丸)と比べてみると, 良く一致していることがわかる.つまり,仮想スクリーニン グを用いることで,界面エネルギーと界面構造の両方を非常 に高精度かつ効率的に決定できることが分かる<sup>(7)</sup>.

図3(a)のすべてのCSL 粒界の候補構造は85万個ほどある. それらをすべて計算することなく,各粒界あたり数回の DFT/MD計算のみで安定粒界構造を決定することができる 仮想スクリーニングは,粒界構造決定のプロセスを飛躍的に 加速することができる.

一方で、仮想スクリーニングでは予測モデルを構築するために網羅的な計算を少数ながら実施する必要があり、さらに 予測モデル構築に用いる界面によって予測精度も変化するこ とがわかっている<sup>(17)</sup>.そのような予測モデルを構築する必 要のない別の手法も提案している.それが、ガウス過程回帰 とベイズ最適化を組み合わせたクリギング(Kriging)による 界面構造決定である<sup>(9)(10)</sup>.クリギングは仮想スクリーニン グと比較して計算効率は劣るものの、導入や自動化も容易な ため実際の界面構造決定には非常に有効と考えている.ま た、転移学習という機械学習の手法をクリギングに組み合わ



図3 (a) 仮想スクリーニングで得られた各 CSL 粒界 の粒界エネルギーと過去の文献値との比較.(b) 仮想スクリーニングで得られた Σ37粒界の構造と 網羅的計算で得られた構造(白点)との比較.(オン ラインカラー)

せることで構造決定の効率が向上することも確認している(8).

# 3. 界面における構造機能相関の理解

以上のように、機械学習を用いることで結晶界面の構造を 高速かつ高精度に決定することができ、結晶界面構造のデー タベースを効率的に構築することができる.さらに、データ ベース内の粒界構造をもとに種々の粒界物性を計算すること で、界面の計算物性データベースを構築することも出来る. そのような界面のデータベースを解析することで、構造と物 性との相関性(構造機能相関)を調べることも可能となる.こ こでは、上述の Cu 粒界における点空孔の偏析エネルギーを 網羅的に計算した.計算においては、粒界とバルク粒内の点 空孔形成エネルギー差を空孔の偏析エネルギー(*E*<sub>v</sub>)とし た.粒界における空孔偏析は粒成長や粒界移動など、材料組 織形成の素過程において重要な役割を果たす.

Cu[001]軸対称傾角粒界と[011]軸対称傾角粒界の66種類 の粒界に対して,界面近傍の約11763サイトの $E_v$ を網羅的 に計算した.さらに,その $E_v$ を目的変数,空孔サイト近傍 の幾何学的な情報(最近接距離,第二近接距離,短/長結合本 数,結合欠損数など計41個)を説明変数として,回帰分析を 行った.回帰にはランダムフォレスト回帰を用いた.ランダ ムフォレスト回帰も複雑なデータを回帰できる手法の一種で あり,後述のように説明変数の相対的な重要度を調べること ができる.

図4(a)に、[001]軸対称傾角粒界における $E_v$ で学習(train)した予測モデルを、[001]軸対称傾角粒界の(学習で用いなかった)別のサイトの $E_v$ を予測(test)した結果を示す. Train および test ともに対角線上に点が分布しており、学習と予測がうまくいっていることがわかる.次に、同じ[001]軸対称傾角粒界で構築した予測モデルを、[011]軸対称傾角粒界の $E_v$ を予測するために利用した結果を図4(b)に示す. 予測結果(Test:青点)が、対角線から大きく外れており、予測精度が悪いことがわかる.

同様に、[011]軸対称傾角粒界の $E_v$ で構築した予測モデルは、[011]軸対称傾角粒界の $E_v$ の予測はうまくいくが(図4(c))、[001]軸対称傾角粒界の $E_v$ を予測することはできないことがわかる(図4(d)). これらの結果は、各回転軸で構築された予測モデルは、別の回転軸の粒界に利用することが





できず,汎用的でないことを表している.

回転軸によらない汎用的な予測モデルを構築できれば,よ り多くの粒界物性を包括的に予測できるはずである.そこ で,[001]軸と[011]軸の両方からランダムに選択した $E_v$ を 用いて新たな予測モデル([001]+[011])を構築した.この 際の学習データの数は,上記の各粒界での学習と同数であ る.予測結果を図4(e)(f)に示す.新たに構築した[001]+ [011]の予測モデルを用いることで,[001]と[011]の両方の  $E_v$ を高精度に予測できていることがわかる.このような結 果から,汎用的な予測モデルを構築するための指針を得るこ とが出来た.

また、ランダムフォレストでは、各説明変数の重要度を調べることができる。今回の予測モデルの重要度を比較した結果、最接原子間距離が $E_v$ を決定する重要な因子であることが明らかとなった<sup>(17)</sup>.

一方で、材料科学的な観点からみると、[001]軸対称傾角 粒界で構築した予測モデルを使って、[011]軸対称傾角粒界 の $E_v$ を予測できなかったこと(その逆も)は非常に興味深 い.回転軸が異なるために、粒界構造が異なることは容易に 想像できるが、[001]軸対称傾角粒界と[011]軸対称傾角粒 界はともに多様な構造を有しており、その多様性が類似して いれば、異なる回転軸の粒界の $E_v$ も予測できたはずであ る、今回の予測できなかったということは、[001]軸対称傾 角粒界と[011]軸対称傾角粒界の"構造の多様性"が異なる ことを示唆している、具体的には、粒界における結合距離 (ひずみ)の分布や、平均的な結合本数などが異なることが予 想される.

そこで、[001]軸と[011]軸対称傾角粒界で得られたすべ ての $E_v$ を調べた.図5には、[001]軸と[011]軸粒界におけ るすべてのサイトの $E_v$ をプロットしている.同図の横軸は サイトの index であり、[011]軸粒界において多くの粒界近 傍サイトで偏析エネルギーを計算している.また、縦軸は  $E_v$ の値であり、多くの粒界近傍サイトがマイナスの $E_v$ を示 しており、界面に空孔が偏析しやすいことがわかる.一方 で、[001]軸粒界(赤点)と[011]軸粒界(青点)の縦軸方向の



図5 [001]および[011]軸粒界の*E*vの値.(オンラインカ ラー)

分布を比較すると、[001]軸粒界では 0 eV~-1.3 eV 付近 まで幅広く分布しているのに対し、[011]軸粒界では一部を 除いて  $E_v$ が-0.4 eV ぐらいまでに集中的に分布しているこ とがわかる. このことは、[011]軸粒界と比較して[011]軸 粒界では、一部を除いて空孔偏析が生じにくいことを示して いる.

さらに,そのような[001]軸粒界と[011]軸粒界の違い を,定量的に解析するために,回帰に用いた説明変数を比較 した.説明変数は記述子とも称され,界面における構造の "特徴を記述する"値であるため,上記のような空孔偏析挙 動の違いが,どのような構造的な特徴から生じているか解析 できるはずである.その結果,構造のひずみ(バルクよりも 短い結合や長い結合,さらに結合欠損数など)が,[011]軸 粒界と比較して[001]軸粒界のほうが有意に大きいことが明 らかとなった.つまり,[001]軸粒界のほうが[011]軸粒界 よりも多くの構造的なひずみ(上述の短い結合や長い結合, さらに結合欠損数など)を有しているために,多様な空孔形 成挙動をしめしたと理解することができる.

そのような回転軸による物性の違いや、構造の特徴的な違いは、粒界構造の見た目だけで発見することは困難である. 今回の機械学習を利用した研究により「気づき」が与えられ、 その原因を特定することができた.

# 4. まとめ

本稿では,機械学習を活用した界面構造探索決定について 紹介した.粒界では結晶内部と異なるドーパントの偏析現象 が生じることが知られており,そのようなドーパントの界面 偏析構造を決定する上でも機械学習は非常に有効であ る<sup>(18)(19)</sup>.

また,著者らはシミュレーションに加えて,透過型電子顕 微鏡を用いた原子分解能計測も得意分野としており,結晶界 面に加えて,アモルファス<sup>(20)(21)</sup>や液体<sup>(22)-(24)</sup>の中の単一原 子動的観察や,気体の振動解析<sup>(25)</sup>も行っている.最近で は,内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の解析に機 械学習を利用しており,スペクトルの予測やスペクトルの解 釈,さらにはスペクトルから原子配列や物性を直接決定する ための手法も開発している<sup>(26)(27)</sup>.

機械学習は材料探索のほかに、本稿で紹介したような材料 解析、さらにプロセスにも非常に有効である.機械学習を有 効活用することで、多大な労力と時間を費やしてきた作業を 飛躍的に効率化することができる.本稿が「マテリアルズイ ンフォマティクス」のさらなる発展の一助となれば幸いであ る.

本稿で紹介した結果は,東京大学院生(当時)の小田尋美氏 と菊池駿氏との共同研究成果である.また,本研究はJST さきがけおよび科研費のサポートによって実施された.ここ に謝意を表する.

# 文 献

- (1) https://www.materialsproject.org/
- (2) https://nomad-coe.eu/
- (3) https://mits.nims.go.jp/
- (4) A. Sutton and R. Balluffi: Interfaces in Crystalline Materials, Oxford University Press, n.d.
- (5) A. L.-S. Chua, N. A. Benedek, L. Chen, M. W. Finnis and A. P. Sutton: Nat. Mater., 9(2010) 418–422.
- (6) G. Schusteritsch and C. J. Pickard: Phys. Rev. B, **90**(2014), 035424.
- (7) S. Kiyohara, H. Oda, T. Miyata and T. Mizoguchi: Sci. Adv., 2 (2016), e1600746–e1600746.
- (8) H. Oda, S. Kiyohara, K. Tsuda and T. Mizoguchi: J. Phys. Soc. Japan, 86 (2017), 123601.
- (9) S. Kiyohara, H. Oda, K. Tsuda and T. Mizoguchi, Jpn. J. Appl. Phys, 55 (2016), 045502.
- (10) S. Kikuchi, H. Oda, S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Phys. B Condens. Matter, 532(2018), 24–28.
- (11) M. Imaeda, T. Mizoguchi, Y. Sato, H.-S. Lee, S. D. Findlay, N. Shibata, T. Yamamoto and Y. Ikuhara: Phys. Rev. B, 78 (2008), 245320.
- (12) H.-S. Lee, T. Mizoguchi, J. Mistui, T. Yamamoto, S.-J. L. Kang and Y. Ikuhara: Phys. Rev. B, 83 (2011), 104110.
- (13) H. S. Lee, T. Mizoguchi, T. Yamamoto, S. J. L. Kang and Y. Ikuhara: Phys. Rev. B, 84 (2011), 000.
- (14) H. Yamaguchi, H. Hiramatsu, H. Hosono and T. Mizoguchi: Appl. Phys. Lett., 104(2014), 153904.
- (15) D. Wolf: Acta Metall. Mater., **38**(1990), 781–790.
- (16) G. Hasson, J.-Y. Boos, I. Herbeuval, M. Biscondi and C. Goux: Surf. Sci., **31**(1972), 115–137.
- (17) H. Oda, S. Kiyohara and T. Mizoguchi, J. Phys. Mater., 2 (2019), 034005.
- (18) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Phys. B Condens. Matter, 532 (2018), 9–14.
- (19) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: J. Chem. Phys., 148(2018), 241741.
- (20) T. Mizoguchi, S. D. Findlay, A. Masuno, Y. Saito, K. Yamaguchi, H. Inoue and Y. Ikuhara: ACS Nano, 7(2013), 5058–5063.
- (21) G. A. Rosales–Sosa, A. Masuno, Y. Higo, H. Inoue, Y. Yanaba, T. Mizoguchi, T. Umada, K. Okamura, K. Kato and Y. Watanabe: Sci. Rep., 5(2015), 15233.
- (22) T. Miyata and T. Mizoguchi: Ultramicroscopy, **178**(2017), 81– 87.
- (23) T. Miyata, F. Uesugi and T. Mizoguchi: Sci. Adv., 3(2017), e1701546.
- (24) Y. Sugimori, T. Miyata, H. Hashiguchi, E. Okunishi and T. Mizoguchi: RSC Adv., 9(2019), 10520–10527.
- (25) H. Katsukura, T. Miyata, M. Shirai, H. Matsumoto and T. Mizoguchi: Sci. Rep., 7(2017), 16434.
- (26) S. Kiyohara, M. Tsubaki, K. Liao and T. Mizoguchi, J. Phys. Mater., 2(2019), 024003.
- (27) S. Kiyohara, T. Miyata, K. Tsuda and T. Mizoguchi: Sci. Rep., 8(2018), 13548.

#### **★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★**★★★★★ 大谷龍剣

- 2018年3月 京都大学工学部物理工学科卒業
- 2018年4月-東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 在籍中
- 専門分野:材料データ科学,結晶粒界 ◎界面における構造機能相関を理解することを目的とし,機械学習を用いた

界面物性解析手法の開発に従事.

\*\*\*\*\*





清原 慎

溝口照康

特



# 材料組織形成における計算材料科学の最前線



# 1. はじめに

材料組織の形成過程をコンピュータ・シミュレーションに よって観察・予測する試みは、1990年代頃から本格的に始 まり,現在までに多くの研究が行われてきた.実験事実を定 性的または定量的に再現することを目的とした研究に加え て,近年では,既存の実験科学では扱いが難しい現象の解明 や,製造プロセス条件の最適化などに組織形成シミュレーシ ョンを実際に活用するケースが徐々に増えており<sup>(1)</sup>,研究ア プローチとしての有用性を確立しつつあるといえる.これは 計算モデルの高精度化・高度化に加えて,コンピュータの性 能と計算技術の発展によるところも大きい.

スーパーコンピュータの演算速度は、一般のコンピュータ と比べて15年ほど進んでいると言われている.つまり、単 純に計算規模のみを考えるのであれば、スーパーコンピュー タを使うことで一般のコンピュータを用いたときの約15年 先の研究成果が得られることになる.著者らのグループは、 HPCI 戦略プログラム分野(2)とポスト「京」重点課題(7)の 中で、金属の凝固現象を原子レベルの手法である分子動力学 (Molecular Dynamics, MD)法と組織レベルの手法であるフ ェーズフィールド・モデルの超大規模計算によって研究して きた<sup>(2)</sup>.その中では、原子レベルと組織レベルのそれぞれの スケールにおいて、金属の凝固の計算としては現状で世界最 大規模の計算も実施した<sup>(3)</sup>.本稿ではそれらの研究成果を中 心に凝固組織シミュレーションの最近の進展について紹介す る.そして、この取り組みの先に見えてきたクロススケー ル・アプローチという新しい展開についても言及したい.

# 経固組織の超大規模フェーズフィールド・シミュ レーション

実用金属材料の高品質化や高機能化,さらには歩留り向上 や低コスト化を達成するために,鋳造・凝固プロセスで形成 する凝固組織を高精度に予測して制御することが求められて いる.材料組織を計算する強力なモデルとしてフェーズフィ ールド・モデルが発展している<sup>(4)(5)</sup>.以下,このモデルを簡 潔に説明して凝固組織の大規模計算を紹介する.

フェーズフィールド・モデルは, 異相界面や粒界を厚みの ある境界(diffuse interface)として表現し,組織変化を計算 する方法である.この方法では,相の結晶構造や方位を区別 する秩序変数を導入して,その空間分布で組織を表現する. 具体的には,秩序変数が均一な領域をバルク(相・結晶粒), そして急峻かつ連続的に変化する領域を異相界面や粒界と定 義する.これによって,フェーズフィールド・モデルにおい ては,異相界面や粒界といった境界の移動を陽に追跡する必 要がなくなる.秩序変数の時間発展方程式を解けば Gibbs-Thomson 効果が再現され,その方程式と熱拡散方程式や溶 質拡散方程式を連立して解けばステファン条件が自然に成立 する.バルク中でも境界中でも同じ微分方程式を解くこと で,複雑なマルチフィジックスの界面ダイナミックスが記述 されることになる.言い換えると,フェーズフィールド・モ デルとは自由境界問題を簡便に解く手法である.

フェーズフィールド・モデルでは, diffuse interface によ

<sup>\*</sup> 北海道大学大学院工学研究院; 教授(〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目)

<sup>\*\*</sup> 東京大学大学院工学系研究科;准教授

<sup>\*\*\*</sup> 京都工芸繊維大学 機械工学系;教授

High Performance Computing of Solidification Microstructures and Emergence of Cross-scale Approach; Munekazu Ohno\*, Yasushi Shibuta \*\* and Tomohiro Takaki\*\*\*(\*Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo, \*\*Department of Materials Engineering, The University of Tokyo, Tokyo, \*\*\*Faculty of Mechanical Engineering, Kyoto Institute of Technology, Kyoto) Keywords: *phase-field model, molecular dynamics simulation, solidification, high performance computing, dendrite, data assimilation, cross-scale modelling* 

<sup>2019</sup>年10月18日受理[doi:10.2320/materia.59.139]



 図1 Al-5 at%Si 合金における一方向凝固の超大規模 フェーズフィールド・シミュレーション結果<sup>(6)</sup>.
 約3×3×3 mm<sup>3</sup>のサイズの3Dシステムにおいて,温度勾配10 K/mm,冷却速度0.3 K/sの条件で、システムの底部に置いた固相の seed から成長した柱状デンドライト組織.

って界面形態をなめらかに表現するため、複雑形態の界面に おいても Gibbs-Thomson 効果が正確に再現される.しか し、その反面、界面厚さよりも細かな差分格子で数値計算を 行う必要があるために計算コストが高い. 例えば, 一般のコ ンピュータを用いた場合,三次元(3D)計算で扱えるデンド ライトはせいぜい数本程度に限られる. そのため, 複数のデ ンドライトが関わる実問題の現象を理解することは困難であ った. そこで, 著者らのグループは, フェーズフィールド・ モデルによる超大規模計算を実施し、百本以上のデンドライ トの競合成長をシミュレートした.その結果の例を図1に示 す<sup>(6)</sup>. これは Al-5 at%Si 合金の一方向凝固を対象に,図の 上下方向に温度勾配をつけて底部から冷却した際の凝固組織 の計算結果である.固相(fcc固溶体)のみを示しており、そ の〈100〉と温度勾配の方向との角度差 θによってデンドライ トを色分けしている.東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME2.0を用いて Graphics Processing Unit (GPU)に よる並列化を行い,一辺約3mmの3Dシステムを約4000<sup>3</sup> 個の差分格子に分割して実施した超大規模計算の結果であ る. 百本以上の柱状デンドライトが底部から上部に向かって 競合成長している. このような大規模計算が可能になったこ とにより、デンドライト競合成長における選択則の妥当性(7) やデンドライトー次アーム配列の対称性<sup>(8)</sup>の解明など、多く の成果が得られるようになった.

# 3. 定量的フェーズフィールド・モデル

上述の通り、フェーズフィールド・モデルは、自由境界問 題を簡便に解くモデルである.しかし、通常のフェーズフィ ールド・モデルでは界面において非物理的な効果が生じてし



図2 Al-3 mass%Cu 合金の初晶 fcc 固溶体におけるミ クロ偏析の解析結果<sup>(14)</sup>.冷却速度1.3 K/s で凝固 したデンドライト組織におけるミクロ偏析をラン ダムサンプリング法によって整理した結果.

まい,自由境界問題における Gibbs-Thomson 効果とステフ ァン条件が正しく再現されないことが知られている.これを 解決したモデルが定量的フェーズフィールド・モデル<sup>(9)(10)</sup> として凝固の分野で開発され、現在この分野においては定量 的モデルを使うことが標準的となっており、大規模計算でも 活用されている. 定量的モデルにおいては, 秩序変数の移動 度が拡散場と関連付けられている点、そして拡散方程式に秩 序変数との新しいカップリング項(anti-trapping current)が 導入されている点が従来のモデルとは異なる. これらの修正 によって自由境界問題が正しく再現される. 初期の定量的モ デルは,固相内拡散が無視できる二元系合金の等温凝固のみ に適用可能であったが、著者らのグループは固相内拡散を考 慮した多元系合金の非等温凝固の解析、つまり実用合金の凝 固の解析に適用可能な定量的モデルの開発を行った<sup>(10)</sup>.さ らに、従来の定量的モデルは方程式の漸近解析に基づく発見 的な方法でしか構築できなかったが、著者らのグループはこ れを熱力学ポテンシャルに基づく変分原理で導出できること を見出し(11)(12),定量的モデルの熱力学的な妥当性を実証す るとともに、定量的モデルを定式化するための方法論を発展 させた.

定量的モデルは,界面厚さが界面の曲率半径よりも小さければ,その計算結果は差分格子間隔等の数値計算の条件に依存せず,自由境界問題を正しく再現することが知られている<sup>(13)</sup>.バルクの熱力学量や界面物性値等,実測可能な物性値のみを入力パラメータとし,任意に調整するような現象論的パラメータを扱う必要はない.定量的モデルは,多くのケースにおいて高精度に凝固組織を予測することが可能である.例えば,Al-3 mass%Cu 合金のミクロ偏析の解析結果を図2に示す<sup>(14)</sup>.図中のプロットは実験データであり,鋳造後の凝固組織におけるCu 濃度をランダムサンプリングによって分析した後,そのデータを初晶中のCu 濃度と固相割合の関係に整理した結果である.そして,3D 定量的フェーズフィールド・シミュレーションによって得られた同様の結

果を実線で表した.さらに,これらとの比較のために,ミク ロ偏析の解析でよく用いられる一次元(1D)の拡散解析の結 果を破線で示している.まず,1D拡散解析の結果は,全体 的に Cu 濃度を過小評価しており,実験データを精度良く予 測できていないことがわかる.一方,定量的モデルの結果は 実験結果と非常に良く一致している.なお,この定量的モデ ルの計算結果は,フィッティングパラメータなどは一切用い ずに,文献で報告されている物性値と実験と同じ凝固条件を 入力することで得られたものである.そして,このような一 致は偶然のものではなく,合金組成を変えた場合,さらには Fe-Mn合金におけるミクロ偏析の場合にも計算結果と実験 結果は良く一致することが示されている<sup>(14)</sup>.つまり,定量 的フェーズフィールド・シミュレーションによってミクロ偏 析を高精度に予測可能である.

# 4. 定量的モデルの高度化

上述のように定量的モデルは凝固組織を高精度に予測可能 である.しかし,最新の定量的モデルにおいても考慮されて いない因子がいくつかある.例えば,凝固収縮,界面物性の 濃度・温度依存性,そして固相の変形の影響などは考慮され ていない.さらに,液相中の流動は凝固組織の時間変化に影 響を及ぼすことが知られているものの,過去の多くの計算に おいてその影響は無視されてきた.その一番の原因は計算コ ストの高さにある.ナビエ・ストークス(Navier-Stokes, NS)方程式の計算コストが高く,フェーズフィールド・シミ ュレーションと連成させると,対象にできる現象が著しく限 られてしまう.

そこで著者らのグループは,格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM) と定量的フェーズフィールド・モ デルを組み合わせた手法を開発し,液相流動を伴う凝固組織 の時間変化を高速に計算することを可能にした. LBM は計 算流体力学の比較的新しい手法であり、この手法においては 離散化されたボルツマン方程式(格子ボルツマン方程式)を解 くことでNS 方程式と同じ計算結果が得られる.NS 方程式 の数値解法と異なり、LBM には収束計算が必要ないため、 その計算は高速であり、並列計算にも向いている.図3に示 したのは、Al-3 mass%Cu 合金の一方向凝固における液相 流動の影響を調べた例である(3)(15). 凝固に伴って界面で溶 質分配が生じて液相内の溶質濃度が不均一になり、その濃度 差に応じて液相の密度変化が生じる. さらに温度変化によっ ても液相の密度変化が生じることから、凝固中は液相の密度 は不均一になる.したがって,重力の影響を受けて液相流動 が生じる.図3(a)は重力が凝固の進行方向と反対の向き(図 の下向き)に働く場合,図3(b)は重力の影響がない場合,そ して図3(c)は重力が凝固の進行方向と同じ向き(図の上向 き)に働く場合の計算結果である.重力の有無と、その向き によって液相流動が変化するため,凝固組織も変化する.重 力方向が凝固の向きと反対の場合(図3(a))には、重力がな い場合に比べて柱状デンドライトの間隔がやや不均一にな



図3 Al-3 mass%Cu 合金の一方向凝固におけるデンド ライト成長に及ぼす溶質対流の影響を調査した結 果<sup>(3)(15)</sup>.(a)下向き重力,(b)重力無し,(c)上向 き重力のもとでのデンドライト成長形態を表す. 384×384×1536 mm<sup>3</sup>のシステムにおいて,温度 勾配50 K/mm,引抜速度100 mm/s として計算し た結果であり,Cu 濃度の分布を表している.Cu 濃度の低い液相は透明になっている.



 図4 透明有機物質(SCN-3 mass%acetone)の等軸晶凝 固における沈降現象の2Dシミュレーション結 果<sup>(3)(16)</sup>.約2×2mm<sup>2</sup>のシステムにおいて,過 冷度1.37Kの過冷液相中で等軸晶が成長しながら 図の下部に沈降する様子を示した結果.

る.一方,重力方向が凝固方向と同じの場合(図3(c))には, Cu 濃度の濃い液相が高温側(図上部)に流れることで,凝固 が不安定になり,チャンネル状の偏析帯が形成する傾向が現 れている.このように,従来無視されてきた液相流動の影響 も高速計算技術によってシミュレートすることが可能になっ てきた.

鋳塊内部では温度勾配が小さく、等軸晶が形成しやすい.
等軸晶は液相中を自由に運動するが、それをシミュレートするためには、定量的モデルとLBMをカップリングしたモデルに、固相の運動方程式を導入する必要がある。その計算例を図4に示す<sup>(3)(16)</sup>.これは透明有機物質における等軸晶の沈降現象のシミュレーション結果である。溶湯の上部でランダムに発生した固相が成長しながら重力によって沈降する様子が計算されている。特に、凝固中の固相の沈降によって液相流動が生じ、それが固相の成長と運動に影響を及ぼしている。このような等軸晶の運動は鋳塊のマクロ偏析の形成に関与しているほか、柱状晶-等軸晶遷移にも関わる。今後、このモデルを実プロセスにおける組織形成の解析に応用することが求められる。

上記の通り,定量的モデルにより組織形成シミュレーションの高精度化が進み,さらに流動や固相の運動の導入などモ

デルの高度化も進められている.これらの発展と大規模計算 技術の進展が相まって,凝固組織シミュレーションの有用性 が著しく増している.ただし,定量的モデルであっても核生 成を記述できる段階にはない.核生成を取り扱ったフェーズ フィールド・シミュレーションは過去に多く報告されている が<sup>(17)</sup>,核生成を定量的にシミュレートする方法が十分に確 立されているとは言い難い.現在,MDシミュレーションが 核生成現象を理解する非常に強力な手段となっており,その 内容を次に説明する.

# 超大規模 MD シミュレーションによる均一核生成 の解析

MDには大きく分けて第一原理 MDと古典 MD がある が,ここでの対象は古典(半古典) MD である.この手法は, 経験的もしくは半経験的に求めた原子間ポテンシャルを使っ て,ニュートンの運動方程式に基づいて多数の原子の運動を シミュレートする手法であり,原子レベルのダイナミックス を理解するための有効な手法である<sup>(18)</sup>.

凝固をはじめとする一次の相変態は核生成によって開始す るが、上述の通りフェーズフィールド・モデルでは現状これ を定量的に扱うことが難しい. 一方, MD シミュレーション によって、様々な相変態における核生成現象が以前から解析 されてきた.しかし、対象とできる時間・空間スケールが小 さな領域に限られることから、一つもしくは数個の核の挙動 のみに解析が制限され、金属の凝固における核生成の統計的 な側面を明らかにすることは困難であった. そこで著者らの グループは multi-GPU の並列計算技術を駆使し、100万原 子系<sup>(19)</sup>,1000万原子系<sup>(20)</sup>,そして10億原子系のMDシミ ュレーション<sup>(21)</sup>によって、純鉄の過冷液体からの均一核生 成挙動を調査し,均一核生成に関する新しい知見を得てき た.著者らが最近行った最も大きな規模の計算結果を図5に 示す<sup>(22)</sup>. これは100億原子系の MD シミュレーションの結 果であり、図5(a)に示すように一辺が約1µmの平板状の システムにおいて生じる純鉄の過冷液体からの均一核生成を シミュレートしたものである.図5(b)では、核生成した bcc 固相の結晶方位と座標軸の角度を色分けしており、保持 後250 ps および500 ps 経過した際の組織に関しては、その 拡大図も示している. 過冷液体から bcc の核が発生し, そ の後微細な多結晶組織が形成している.なお、このシミュレ ーションでは核生成を誘発するような操作は一切行っていな い. 等温・等圧の条件で過冷液体を保持したときこのような 核生成が MD では自然にシミュレートされる. ここでは詳 細を割愛するが、このシミュレーションから、均一核生成で 形成した直後の組織における粒径分布や隣接結晶粒間の方位 差の頻度分布など、均一核生成の統計的な側面が解析可能と なっている(22).

ここで示したように、大規模計算によって MD が扱える 系の空間スケールが大幅に拡張されている.図5で例示し た系は一辺1µm レベルであり、小さな材料組織のレベルに



図5 100億原子系の MD シミュレーションによる純鉄 の過冷液体からの均一核生成の解析結果<sup>(22)</sup>.

まで到達している. また,最近では加速 MD 法の発展で見 られるように<sup>(23)</sup>, MD が扱える時間スケールを拡張する手 法の発展も進んでいる. この手法は今後様々な材料組織の形 成過程の解析に活用されることが期待される.

# 6. クロススケール・アプローチへの展開

上記の通り、著者らは原子レベルの MD と組織レベルの フェーズフィールド・モデルの二種類のアプローチによっ て、金属の凝固をマルチスケールの視点で解明することを試 みてきた. ここで,図6(a)にミクロ,メゾ,マクロスケー ルの手法が対象とする時間・空間スケールの模式図を示し た.通常、ミクロ、メゾ、マクロスケールの手法が扱える時 間・空間スケールにはギャップがある.小さなスケールの手 法からボトムアップの形で,このギャップの間に如何に橋渡 しをするのかが、マルチスケール・モデリングの一つの要諦 といえる.現在,組織の計算に必要な物性値を全て MD か ら求めることが可能であり(18),原理的には原子間ポテンシ ャルの情報のみから凝固組織の計算が可能である. これもボ トムアップ的なマルチスケール・アプローチの一種である. しかし、物性値の受け渡しのみでは、フェーズフィールド・ モデルが立脚する自由境界問題の解を逸脱するような現象を 予測することは不可能であり、わざわざマルチスケールで現 象をモデリングする意義もそれほど大きくないと考えられ る.原子レベルのダイナミックスを直接的に組織変化の過程 に取り入れるようなアプローチの開発が重要である. この点 に関して、新しい試みが始まっていることを以下に述べる.

大規模計算技術のおかげで, MD が扱える時空スケールは 組織レベルに達しつつあることをすでに述べた. 言い換える と, MD とフェーズフィールド・モデルの両手法が全く同じ



図6 各計算手法が対象とする時空スケール領域の模式図.(a)従来型のマルチスケール・アプローチと(b)新しいクロススケール・アプローチにおける関係.MD:分子動力学法,MC:モンテカルロ法,PFM:フェーズフィールド法,CA:セルオートマトン法,CFD:計算流体力学に基づく鋳造解析.

現象を解析できるユニークな時空スケールが存在するように なった. 大規模計算技術によって, それぞれのアプローチが 対象とできる時空スケールの関係は、従来議論されてきた図 6(a)の形から図 6(b)のように変化している. ミクロとメゾ スケールの手法が対象とできる領域に重なりが生じており, 同様のことはメゾとマクロの手法の間でも生じている. これ らの領域においては、今までにない新しい取り組みが可能で ある. 例えば, MD から計算される組織変化をフェーズフィ ールド・モデルの結果と直接比較することや<sup>(24)</sup>, MDの組 織をフェーズフィールド・モデルの計算の初期組織にするこ とも可能である(22).特に、データ科学を使えば、二つの手 法をもう一段階進んだ形で融合することができる. 例えば, データ同化に基づいて MD とフェーズフィールド・シミュ レーションを"同化"させれば,MDの結果を自由境界問題 の枠組みで理解することや、フェーズフィールド・モデルに 原子レベルのダイナミックスを"on the fly"で導入するこ とが可能である.紙面の都合で詳細は述べられないが、この 方法によって、現在まで十分に理解されてこなかった非平衡 状態の界面物性が解明されることが期待される.著者らは, ミクロとメゾ、もしくはメゾとマクロスケールの手法を同一 スケールで融合するアプローチをクロススケール(crossscale) · アプローチと呼んでいる<sup>(3)</sup>. このクロススケール · アプローチの発展と応用が今後の重要課題である.

以上のように、大規模計算技術は、ミクロ、メゾ、マクロ スケールの個々のスケールでの優れた成果の創出につながる ことに加えて、クロススケール・アプローチという新しい展 開をもたらしている.

# 7. おわりに

コンピュータの性能の向上によって、数値シミュレーショ ンの有用性が増している、という趣旨の文章を本稿の冒頭と 途中で記した.この趣旨の表現は少なくとも20年以上前か ら本稿のような特集記事や解説記事で頻繁に見かけるもので あり、計算材料科学に携わる様々な研究者がその時々で実感 してきたことである.ここでは大規模計算技術を駆使した組 総形成シミュレーションの最前線の一部を紹介したが,ここ で紹介した計算は,将来一般のコンピュータで十分実施可能 になるものと期待される.材料開発の現場で組織形成シミュ レーションがどの程度活用できるのか,または材料組織の学 理をどこまでコンピュータ上で再現して新たな発見に繋げら れるのか,これらの点に関して将来"当たり前"にできるこ とを本研究が適切に先取りしていると信じたい.また,ここ では言及できなかったが,凝固組織を観察する実験技術は近 年飛躍的に発展しており<sup>(25)</sup>,実験科学と計算材料科学の最 先端において両者がより密接に連携することで,本分野が今 まで以上に加速度的に発展することが期待されている.

本研究の一部は, 文部科学省の「HPCI 戦略プログラム・ 分野2"新物質・エネルギー創成"」,「ポスト「京」重点課 題7"次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の 創成"」の一環として実施したものです.また,本研究の一 部 は , JSPS 科 研 費 No.17H01237, No.16H04490, No.19H02486の助成を受けたものです.ここに感謝申し上 げます.

# 文 献

- (1)小山敏幸,大野宗一,山中晃徳,糟谷正,塚本 進:まて りあ,58(2019),494-497.
- (2) https://cdmsi.issp.u-tokyo.ac.jp/sub/e.
- (3) Y. Shibuta, M. Ohno and T. Takaki: Adv. Theory Simul., 1 (2018), 1800065.
- (4) W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann and A. Karma: Annu. Rev. Mater. Res., 32(2002), 163–194.
- (5) N. Provatas and K. Elder: Phase–Field Methods in Materials, Science and Engineering, Wiley–VCH, New York, (2010).
- (6) T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A. Yamanaka and T. Aoki: J. Cryst. Growth, 382(2013), 21–25.
- (7) T. Takaki, M. Ohno, T. Shimokawabe and T. Aoki: Acta Mater., 81 (2014), 272–283.
- (8) T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta, T. Shimokawabe and T. Aoki: Acta Mater., 118(2016), 230–243.
- (9) A. Karma: Phys. Rev. Lett., 87 (2001), 115701.
- (10) 大野宗一:まてりあ, 53(2014), 458-461.
- (11) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: Phys. Rev. E, 96 (2017), 033311.

- (12) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: Phys. Rev. E, 93 (2016), 012802.
- (13) M. Ohno, T. Takaki and Y. Shibuta: J. Comput. Phys., 335 (2017), 621-636.
- (14) M. Ohno, M. Yamashita and K. Matsuura: Int. J. Heat Mass Transf., 132(2019), 1004-1017.
- (15) T. Takaki, S. Sakane, M. Ohno, Y. Shibuta and T Aoki: Comput. Mater. Sci., 171(2020), 109209.
- (16) T. Takaki, R. Sato, R. Rojas, M. Ohno and Y. Shibuta: Comput. Mater. Sci., 147(2018), 124-131.
- (17) L. Gránásy, G. I. Tóth, J. A. Warren, F. Podmaniczky, G. Tegze, L. Rátkai and T. Pusztai: Progress in Materials Science, 106 (2019), 100569.
- (18) Y. Shibuta: Mater. Trans., 60(2019), 180-188.
- (19) Y. Shibuta, K. Oguchi, T. Takaki and M. Ohno: Sci. Rep., 5 (2015), 13534.
- (20) Y. Shibuta, S. Sakane, T. Takaki and M. Ohno: Acta Mater., 105(2016), 328-337.
- (21) Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, S. Okita, T. Takaki and M. Ohno: Nat. Commun., 8(2017), 10.
- (22) Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki and M. Ohno: Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 27 (2019), 054002.
- (23) 石井明男:アンサンブル, 19(2017), 151-157.
- (24) E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta and M. Ohno: Comp. Mater.

Sci., 152(2018), 118-124.

(25) H. Yasuda, K. Morishita, N. Nakatsuka, T. Nishimura, M. Yoshiya, A. Sugiyama, K. Uesugi and A. Takeuchi: Nat. Commun., 10(2019), 3183.

#### \*\*\*\*\* 大野宗一

- 2004年3月 北海道大学 大学院工学研究科 博士後期課程修了
- 2004年4月 クラウスタール工科大学 博士研究員
- 2009年11月 北海道大学 大学院工学研究科 准教授
- 2019年4月 現職
- 専門分野:計算材料科学,材料組織学
- ◎フェーズフェールド・モデルの開発と応用を中心に計算材料科学に基づい た材料組織学の研究に従事.

# \*\*\*\*\*



大野宗·



高木知弘



# 材料組織形成における計算材料科学の最前線

# 機械学習を活用した SiC 高品質結晶成長条件のデザイン

原田俊太<sup>\*</sup><sub>1</sub>,<sup>\*\*</sup> 林 宏益<sup>\*\*</sup> 角岡洋介<sup>\*\*</sup> 朱 燦<sup>\*</sup><sub>2</sub> 鳴海大翔<sup>\*\*\*</sup> 沓掛健太朗<sup>\*\*\*\*</sup> 宇治原 徹<sup>\*</sup><sub>3</sub>,<sup>\*\*,\*\*\*\*</sup>

# 1. はじめに

パワーデバイスは、電力変換に用いられる半導体デバイス であり、省エネルギーの観点から、その高効率化が求められ ている.炭化ケイ素(SiC)は、シリコン(Si)をはるかに上回 るパワーデバイス特性を有し、次世代のパワー半導体材料と して期待されている<sup>(1)</sup>.SiCパワーデバイスは、すでにエア コンなどの家電製品や、鉄道車両用インバータに使用され、 次世代新幹線 N700S の駆動システムにも採用されており、

社会実装が進められている.SiCは同一の組成で多様な積層 構造をとる結晶多形を呈する物質であり,3C,4H,6H,15R などの多形を有することが知られている<sup>(2)</sup>.中でも4H-SiC は,バンドギャップが3.27 eVと大きく,移動度も比較的高 いため,SiCパワーデバイスの研究開発は,4H-SiCを中心 として進められている.SiCパワーデバイスには,昇華法に より作製されたSiC単結晶基板上に化学気相成長(CVD)に よりエピタキシャル膜を成長したものが用いられる.昇華法 では,原料となるSiC粉末を2000℃以上の高温において昇 華させ,種結晶上に成長させる<sup>(3)</sup>.この方法により,6イン チのウエハが製造され市販されており,R&Dでは8インチ が実証されている.昇華法SiC結晶の品質は着実に向上し ているが<sup>(4)</sup>,無転位が前提であるSiウエハと比較すると, 結晶品質が良いとは決して言えない.昇華法SiCウエハに は、貫通らせん転位(Threading screw dislocation: TSD), 貫通刃状転位(Threading edge dislocation: TED), 基底面転 位(Basal plane dislocation: BPD)がそれぞれ、 $10^{2}$ - $10^{4}$  cm<sup>-2</sup>,  $10^{3}$ - $10^{5}$  cm<sup>-2</sup>,  $10^{2}$ - $10^{4}$  cm<sup>-2</sup> 程度存在する<sup>(3)</sup>. 基板中の欠陥 はエピタキシャル膜に伝播し、デバイス劣化や、信頼性の低 下をもたらすことが知られており、転位密度の低い高品質の SiC ウエハが求められている<sup>(5)(6)</sup>.

これに対して、SiC 溶液法は、高品質の結晶成長を実現す る方法の一つとして注目を集めている(7). バルク結晶成長に 関しては, Top-seeded solution growth (TSSG)法の研究が 行われており、2インチ、3インチのバルク SiC 結晶成長が 報告されている<sup>(8)-(11)</sup>.溶液法は,熱力学的平衡状態に近い プロセスであるため、高品質化が期待されており、これまで の研究において、溶液成長過程においてマイクロパイプと呼 ばれる中空状の欠陥が閉塞することや(12),成長に伴い転位 密度が減少することが報告されている(7). 我々は, これまで の研究において,溶液成長過程における転位の伝播挙動を, 放射光を用いた X線トポグラフィ法などにより詳細に調べ てきた<sup>(13)-(22)</sup>. その中で, SiC 溶液成長過程において, マク ロステップが沿面成長をするとマクロステップとの相互作用 により、貫通転位が基底面の転位に変換することを見出して いる(14)(18).また、欠陥変換を用いることにより高品質の結 晶成長に成功している<sup>(23)-(25)</sup>.現在,我々は溶液法による 高品質化技術を3インチ,4インチ,さらには6インチ,8

<sup>\*</sup> 名古屋大学未来材料・システム研究所;1)講師 2)特任助教 3)教授(〒464-8601 名古屋市千種区不老町)

<sup>\*\*</sup> 名古屋大学大学院工学研究科;1)講師 2)大学院生(†現在ローム株式会社) 3)教授

<sup>\*\*\*</sup> 名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリ;博士研究員(\*\*現在京都大学大学院工学研究科;助教)

<sup>\*\*\*\*</sup> 理化学研究所革新知能統合研究センター;研究員

<sup>\*\*\*\*\*</sup> 産業総合研究所 窒化物先進デバイスオープンイノベーションラボラトリ;副ラボ長

Design of High-quality SiC Solution Growth Condition Assisted by Machine Learning; Shunta Harada\*.\*\*, Hung-Yi Lin\*\*, Yosuke Tsunooka\*\*, Can Zhu\*, Taka Narumi\*\*\*, Kentaro Kutsukake\*\*\*\* and Toru Ujihara\*.\*\*.\*\*\*\*(\*Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University, Nagoya. \*\*Department of Materials Process Engineering, Nagoya University, Nagoya.(\*Now at ROHM Co., Ltd., Kyoto.) \*\*\*Venture Business Laboratory, Nagoya University, Nagoya.(\*\*Now at Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, Kyoto.) \*\*\*\*Center for Artificial Intelligence Project, RIKEN, Tokyo. \*\*\*\*\*GaN Advanced Device Open Innovation Laboratory, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Nagoya.) Keywords: *silicon carbide, solution growth, machine learning neural network, mathematical optimization, dislocation, power device* 2019年12月 3 日受理[doi:10.2320/materia.59.145]

インチの結晶成長に応用するために,欠陥変換による高品質 化と両立する大型結晶成長技術の研究と,結晶成長条件最適 化の研究を行っている.本論では,溶液法による高品質結晶 成長の大型化の課題と,機械学習および数理最適化を活用し た結晶成長の最適化方法について解説する.

# 2. 結晶成長条件の最適化

結晶成長に限らず,製造プロセスの最適化は極めてタフな 作業である.プロセスの最適化の中には,プロセス中の温度 や濃度といった値だけではなく,それらの時間変化,さらに は用いる部材の形状や材質,試料の前処理なども含まれ,研 究開発のリードタイムを律速している.結晶成長プロセスに おいては,状態図などの熱力学データや,高品質化のメカニ ズムが明らかになったからと言って,直ちに良質な結晶が得 られるとは限らない.例えば,チョクラルスキー(C2)法に おいてネッキングを行うことにより無転位の結晶が得られる ことを,1959年にDashは報告しているが<sup>(26)</sup>,現在,集積 回路製造プロセスの主流である 300 mm のウエハサイズを 実現するまでに,実に40年近くの時間を要している<sup>(27)</sup>.こ の間,段階的に大型化が進み,その都度多くの時間と労力が 費やされてきた.

結晶成長条件を最適化する従来の方法では、結晶成長の基 礎的な知見,経験則やノウハウなど,研究者の知識を基に, 結晶成長条件を決定し、得られた結晶を観察し、その結果を 次の成長条件の決定に反映する、という事を繰り返す(図1 (a)). この場合,いかに優れた研究者であっても,ある程度 繰り返し実験を行う必要があり、装置やサイズが変わった時 にしばしばこれまでの知見を活かすことができず、結晶成長 条件の最適化をやり直す必要がある.これに対して,最近で は結晶成長条件の設計に、伝熱、流体、電磁気など複数の物 理現象を組み合わせて考慮するマルチフィジックスシミュレ ーションが用いられる(28)(29).この場合,研究者の知識をも とに、結晶成長において好ましい温度分布や濃度分布などを 想定し、そのような状況をシミュレーション上で実現する成 長条件を探索し、実験を行い得られた結晶の観察結果をフィ ードバックする、という事を繰り返す(図1(b)). この場合、 シミュレーションにより、成長条件をある程度絞り込むこと ができるため従来よりも少ない実験回数で最適な条件が得ら れる場合が多い.一方で、1回のシミュレーションに1-10 時間程度を要し、条件を探索するのに逐次シミュレーション を行うため、多くの時間が必要となる.また、成長条件のパ ラメータは一般的に複数あり、多次元のパラメータ空間にお いて真の最適条件を探索することはほぼ不可能である. そこ で、我々は機械学習を用いたシミュレーション結果の高速予 測と、数理最適化を用いた成長条件の設計に取り組んでいる. この場合、結晶成長において好ましい状況を目的関数により 定義することで定量化し、数理最適化のアルゴリズムによ り、目的関数が最小となる成長条件パラメータの組合せを取 得し、結晶成長実験を行い、その結果を目的関数の定義に反

#### (a) Traditional method



# (b) Conventional method assisted by simulation



図1 結晶成長パラメータの決定法.(a)従来法,(b) シミュレーションを援用した最近の方法,(c)本 研究で用いる機械学習と数理最適化を活用した 方法.(オンラインカラー)

映する、という事を繰り返すことになる(図1(c)). この場 合には、一度機械学習モデルを構築すればシミュレーション 結果を1sec以下で得られるため、全パラメータ空間の中か ら最適な条件を探索することが可能となる. また、装置やサ イズが変わっても同様の目的関数をベースとして用いること ができるため、効率的に成長条件を最適化することができる.

# 3. 高品質 SiC 溶液成長

図2にTSSG法によるSiC溶液成長の概略図と結晶成長 炉の外観写真を示す<sup>(30)</sup>.TSSG法による溶液成長では,黒 鉛坩堝の中でSiを含む溶媒を溶融し,種結晶を張り付けた 黒鉛軸を浸漬させ,結晶成長を行う.高温部分において黒鉛 坩堝から炭素が溶媒に溶出し,低温部分に配置した種結晶上 にSiC単結晶を成長させる.坩堝や溶液内などにおけるSiC の晶出を抑制するためには,溶液内の温度分布を適切に制御 する必要がある.また,表面モフォロジーは,溶液の流れと ステップ進展方向の関係によって大きく変化するため,溶液 内の流動を制御することも必要となる<sup>(31)</sup>.バイポーラ型の



図2 (a) SiC 溶液成長の模式図と (b) SiC 溶液成長炉 の外観写真<sup>(30)</sup>. (オンラインカラー)

SiC パワーデバイスのオン抵抗を低減するためには,SiC 基 板の電気抵抗率を低減することが必要となる.n型のドーピ ングには窒素が,p型のドーピングにはアルミニウムが用い られるが,SiC 溶液成長においては,結晶成長雰囲気に窒素 ガスを混合することにより窒素ドーピングが,溶媒にアルミ ニウムを混合することにより,アルミニウムドーピングを行 うことが可能である<sup>(32)</sup>.

4H-SiC の結晶成長は(0001)面または,(0001)面から [11-20]方向に数度傾斜したオフ角種結晶が用いられる場合 が多い<sup>(3)</sup>. SiC は極性を有し,Si と C で終端する(0001)面 が存在し,それぞれ Si 面,C面と呼ぶ.SiC バルク結晶を 目指した SiC 溶液成長においては,長時間の結晶成長を実 現するために,C面で結晶成長を行うことがほとんどであ る.これは,C面での結晶成長が Si 面と比較して,平坦な 結晶成長面となりやすいためである<sup>(33)</sup>.また,オフ角を設 けた種結晶上においては容易に溶媒の巻き込みが生じるとの 報告もあり<sup>(7)</sup>,種結晶にオフ角を設けない,C面(0001)面 種結晶上の結晶成長が溶液成長の主流となった.C面 onaxis 種結晶上の結晶成長においては,これまでの研究か ら,貫通らせん転位,貫通刃状転位は種結晶から伝播し,基 底面欠陥は結晶成長中に形成されにくいことが報告されてい る<sup>(7)</sup>.

これに対して、オフ角を設けた Si 面種結晶上での溶液成 長においては、成長表面にマクロステップが形成することに より貫通転位の基底面欠陥への変換が生じやすい.特に貫通 らせん転位は 10 µm 程度の成長で99%以上が基底面の欠陥 に変換することが明らかとなっている<sup>(14)(16)</sup>.変換した基底 面の欠陥は側面に向かって伝播し、成長とともに外部に掃き 出されるため、成長とともに結晶中の転位密度は減少し、厚 膜化により高品質の結晶成長を実現することが可能である.

実際に,オフ角 Si 面種結晶上での結晶成長において,貫通 転位密度が大幅に低減することが示されている<sup>(23)(24)</sup>. これ までに,10 mm 角の結晶成長において,貫通らせん転位密 度が11 cm<sup>-2</sup>,貫通刃状転位密度が385 cm<sup>-2</sup>,基底面転位 密度が28 cm<sup>-2</sup>である転位密度の極めて低い高品質結晶を 得ることに成功している.

Si 面での結晶成長はマクロステップによる欠陥変換によ り高品質化が可能である一方,マクロステップの過剰な発達



 図3 一方向のステップフロー成長において (a) 外向 流と (b) 内向流で溶液成長を行う場合の模式
 図.(オンラインカラー)

を抑制しなければ、バルク成長は困難である. 溶液成長では ステップの進展方向と、溶液流れの方向によって、マクロス テップの高さが変化することが知られている<sup>(31)</sup>.溶液の流 れとステップの進展方向が同一の場合にはマクロステップの 発達が促進されるのに対して、溶液の流れとステップの進展 が逆方向の場合にはマクロステップの発達が抑制されること が明らかとなっている.このため、オフ角を設けた種結晶を 用いて大口径の結晶成長を軸対称の環境下で行う場合、ステ ップフローの上流または下流において溶液の流れがステップ フローと同一となる領域が生じてしまい、結晶全面において マクロステップの発達を抑制することが困難となる.図3 に、外向きの流れと内向きの流れで、オフ角を設けた種結晶 上において一方向のステップフローで結晶成長を行う場合の 模式図を示す.溶液の流れが外向き(外向流)の場合、ステッ プフローの上流部分では溶液の流れとステップフローの方向 は逆向きになるため、マクロステップの発達が抑制される が、下流部分では同一方向となり、マクロステップの発達が 促進されると考えられる.一方,溶液の流れが内向き(内向 流)の場合には、逆に、下流部分においてはステップフロー と溶液流れの方向が逆向きとなるが、上流部分では、同一方 向となってしまう.実際に、外向流で結晶成長を行うと、ス テップフロー下流部分においてマクロステップが発達し溶媒 の巻き込み(インクルージョン)が発生することが明らかとな っている.

結晶全面において、マクロステップの過剰な発達を抑制す るために、我々は異なる溶液流れを組み合わせて結晶成長を 行うスイッチングフロー成長を考案した<sup>(34)</sup>.スイッチング フロー成長では、内向流と外向流の条件を交互に切り替えて 結晶成長を行う.ルツボやホットウォールの厚さなどにも依 存するが、高周波誘導電流による電磁攪拌により内向流が、 結晶の回転による強制対流により外向流が形成しやすい.シ ミュレーションにより内向流と外向流をそれぞれ実現する結 晶成長条件を決定し、二つの条件を切り替える.これまでに スイッチングフロー成長により、結晶全面においてマクロス テップの過剰な発達を抑制することを実証している.

以上のように、オフ角 Si 面種結晶上の成長における欠陥

変換を利用した高品質 SiC 溶液成長においては,溶液の温度,過飽和度,スイッチングフローによる溶液流れなど複数の分布を最適化する必要がある.

# 4. 機械学習を用いたシミュレーション結果の高速予測

近年,機械学習は様々な学術領域に応用されつつある.材 料科学の分野においては、実験・シミュレーションデータと 機械学習を組み合わせることにより材料探索を行うマテリア ルズインフォマティクスが主流である.本研究では、機械学 習の手法の一つであるニューラルネットワークを用いて、成 長条件パラメータを入力すると、シミュレーション結果が出 力される非線形の回帰式を作製する.詳細は専門書に譲る が<sup>(35)</sup>,ニューラルネットワークの学習と、最小二乗法は類 似の方法であり,機械学習の中の「教師あり学習」に分類さ れる. 最小二乗法による線形回帰を機械学習の言葉で記述す ると、「複数の入力と出力データの組み合わせ(x<sub>i</sub>, y<sub>i</sub>)を学習 データとして、二乗和誤差が最小となるようにy = ax + bの 重み(係数:(a,b))を決定(学習)することにより、未知の入 力xに対して出力yを予測する回帰式を作製する.」となる. ニューラルネットワークは、神経回路と似た構造で線形と非 線形の変換を繰り返すことにより表現力の高い関数となって いることが最小二乗法による線形回帰との大きな違いであ り、多くの係数を決定する必要があることや、学習データへ の過学習(Over fitting)が起こらないように正則化を行う場 合があること,二乗和誤差以外の誤差関数を用いる場合があ るなど、他にも異なる点が多くあるが、「深い関数を使った 最小二乗法である」という説明は, 直感的には分かりやす V1(36).

ニューラルネットワークの学習は、Google が開発し、オ ープンソースで公開している機械学習ソフトウェアライブラ リ TensorFlow などを用いて行うことができる<sup>(37)</sup>. 学習デ ータの容量にもよるが、本論文で取り上げるような学習であ れば、ノートパソコンの CPU でも十分に実行できる. さら に、機械学習は並列処理が可能であるため、GPU を用いる ことで計算速度を高めることができる.

機械学習による結晶成長シミュレーション結果の予測モデ ルの構築は以下のような手順により行う<sup>(38)</sup>.まず初めに, 結晶成長パラメータの範囲を決めてランダムに変化させ, 100個程度のシミュレーションを行い,溶液内の流れの分 布,温度分布,濃度分布の計算を行う.ここでは一例とし て,種結晶の回転速度( $\omega_s$ ),るつぼの回転速度( $\omega_c$ ),るつ ぼの内径( $D_c$ ),メニスカス高さ(h),ルツボの高周波コイル に対する相対位置( $z_c$ )を成長条件パラメータとして,**表1**の 範囲でパラメータを変化させる.得られたシミュレーション 結果から,位置に対して溶液流れと濃度の値を抽出する.こ れにより,例えば100個のシミュレーション結果に対して, 溶液内において100箇所の値を抽出するとすれば,100×100 =10,000個のデータが得られることになる.機械学習では, 一般的にデータ数が多いほど精度が向上するが,学習データ 表1 学習データとして用いるシミュレーションの成 長条件パラメータの範囲.

Parameters	Symbol	Lower limit	Upper limit
Seed rotation (rpm)	ωs	0	50
Crucible rotation (rpm)	$\omega_c$	-50	50
Crucible diameter (mm)	$D_c$	96	125
Meniscus height (mm)	h	0	5
Position of crucible (mm)	zc	100	180



を増すためには時間がかかるため、データの特徴をニューラ ルネットワークの構造に反映することや、感度の低い入力パ ラメータを入れないようにするなどの工夫を行い、限られた データで十分な精度を出すことが必要となる. 転移学習やデ ータ拡張などデータサイエンスにおいても少ないデータでも 学習が可能となる手法があるが、これらの手法を用いる場合 も、そうでない場合にも、データの特徴を把握し、機械学習 のアルゴリズムに反映することが極めて重要である.次に, 抽出したデータを学習データとしてニューラルネットワーク の学習を行う.この時に、図4のように結晶成長パラメータ に加えて、溶液の位置(r, z)を入力し、流れ  $U = (U_r, U_{\theta}, U_{\theta})$  $U_z$ ), 温度 T, 過飽和度  $\sigma$  を出力するニューラルネットワー クの構造とする.ニューラルネットワークでは入力するデー タを入力層と呼び,層から層へと値を変換していき,データ を出力する.最後の層を出力層と呼び,入力層と出力層の間 の層を中間層もしくは隠れ層と呼ぶ. 隠れ層において変換さ れた値をノードと呼び、隠れ層の数とノードの数によりニュ ーラルネットワークの構造が決められる. 各ノードでは前の 層の値に重みを付けてバイアスと合わせ、非線形の活性化関 数により変換する. 例えば n 個の入力変数  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ が *m* 個のノードを有する中間層に変換され  $y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)$ ym)となることを数式で表現すると下記の通りである.

$$y_i = A\left(\sum_{k=1}^n w_{k,i} x_k + b_i\right)$$
 (*i*=1, 2, ...*m*) (1)

ここで, 
$$A(x)$$
は活性化関数,  $\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} w_{1,1} \cdots w_{n,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1,m} \cdots & w_{n,m} \end{pmatrix}$ は, 重み行



列, **b**=(b<sub>1</sub>, b<sub>2</sub>, …, b<sub>n</sub>)は,バイアスパラメータである.活性 化関数には,ロジスティックシグモイド関数や正規化線形関 数(ReLU)などが解析の対象に合わせて用いられる.(1)式 のような変換を複数回繰り返したものがニューラルネットワ ークであり,複数の中間層を有するニューラルネットワーク を用いたものを深層学習(ディープラーニング)と呼ぶ.ここ では,隠れ層を3層として,各層のノード数を128個とし, 活性化関数にはシグモイド関数を用いた.ニューラルネット ワークの学習では,二乗和誤差のような誤差関数が最小とな るように重み行列 Wとバイアスパラメータ**b**を最適化す る.最後に,学習させたニューラルネットワークの精度を, 学習には使用していないデータにより検証する.

一度精度の良い学習済みのニューラルネットワークを構築 すれば、ニューラルネットワーク自体の計算コストは低いた め、直ちに計算結果を出力することができる.本研究の場 合、成長条件パラメータと位置を入力すると、温度、過飽和 度、溶液流れが出力される.したがって、すべての位置に対 して成長条件パラメータを入力することにより、温度、過飽 和度、溶液流れの分布が得られ、シミュレーション結果を高 速で予測することができる.図5に学習には用いていないシ ミュレーションの結果と、ニューラルネットワークによる予 測結果を比較したものを示す.過飽和度の分布はほぼ一致し ており、溶液の流れの分布も流れの強さに違いがある部分は あるものの、大まかな傾向をつかむことができている.シミ ュレーションが約 10<sup>4</sup> sec かかるのに対して、ニューラルネ ットワークによる予測は 10<sup>-1</sup> sec 以下であり、10<sup>5</sup>倍以上高 速でシミュレーション結果を得ることができている.

# 5. 結晶成長条件の最適化

高速でシミュレーション結果を出力することができると、 結晶成長において好ましい条件を目的関数により定量化すれ ば数理最適化の手法を用いて結晶成長条件を設計することが できる.結晶成長の駆動力である種結晶直下の過飽和度 $\sigma$ を一様にある値 $\sigma_1$ に設定したい場合、例えば、次式のよう に目的関数を設定する.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i}^{N} (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}_{i}, \mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}_{1})^{2}$$
(2)

ここで、 $r_i$ は種結晶直下の位置ベクトルである. 過飽和度 $\sigma$ 



図6 多目的最適化におけるパレート最適解(破線).

は、位置と成長条件パラメータを並べたベクトル xの関数 となっており、目的関数は、成長条件パラメータベクトル xの関数である.全ての位置において過飽和度が $\sigma_1$ となると きに、目的関数は0 で最も小さくなり、成長条件パラメー タベクトル空間においてf(x)が最小となる点が、「種結晶直 下の過飽和度 $\sigma$ を一様にある値 $\sigma_1$ である」という条件を最 もよく満たすことになる.ニューラルネットワークによる結 晶成長シミュレーションの高速予測を用いれば、成長条件パ ラメータxを入力すると、目的関数f(x)を直ちに計算する ことができる.このため、勾配法や遺伝的アルゴリズムとい った繰り返しの数値計算を行う数理最適化の手法により、 f(x)が最小値をとるxを求めることができる.

結晶成長条件を最適化する際には、トレードオフの関係に ある複数の目的を同時に満たす条件を探索する必要がある場 合が多い.このような場合には多目的最適化を用いる.例え ば、トレードオフの関係にある二つの目的関数 $f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})$ がある場合に、これらが同時に最適化される解(パレート最 適解)は、一つではなく、図6のようなパレートフロントと 呼ばれる曲線状の最適解の集合となる.図6において、(a) の最適解は目的関数 $f_1(\mathbf{x})$ の値の寄与が大きく、(b)の最適 解は目的関数 $f_2(\mathbf{x})$ の値の寄与が大き、(c)の最適解は目 的関数 $f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x})$ 両方がバランスよく最適化された値とな る.実際には、パレート最適解を確認し、その中からバラン スよく条件を満たしている成長条件を選択している.この際 に、パレート最適解を実現する成長条件パラメータの組み合 わせを、k-平均法や混合ガウスモデルなどクラスター分類 の手法を用いて、分類することなども行っている.

最適化の計算にはニューラルネットワークの予測を用いて いるため、最適条件の候補となった成長条件パラメータで改 めてシミュレーションを行い、確認を行う.この時に、精度 が不十分であると、シミュレーションでは最適とならない場 合がある.このような場合には確認のために行ったシミュレ ーション結果を学習データに追加し、改めて最適化を行うこ とで、パレート解近傍のニューラルネットワークの精度が上 昇し、最適化の精度も上昇する. ここで説明した方法では、機械学習により成長条件が自動 的に決まるのではなく、目的関数の設定と、パレート最適解 からの成長条件の選択は、研究者によって行われる.つま り、これら二つにこれまでの実験結果や結晶成長の基礎的知 見を反映させられるかが、重要となる.

# 6. 結晶成長条件の最適化の実際

実際に結晶成長条件を最適化するためには、ある程度結晶 成長実験を行い、どのような目的関数を設定するかを決める 必要がある.ここでは、4章で示した機械学習モデルを用い て結晶成長条件の最適化を試みた一連の結果を例として示す.

まず初めに、目的関数を設定するためにこれまでの結晶成 長実験の知見も踏まえながら、3回の実験を行った(図7)#1 の実験条件では、シミュレーション上の過飽和度は正の値で あったが,種結晶全面が溶解し成長していなかった.これ は、シミュレーションで用いている溶液物性が実際とは異な っているためだと考えられる.これに対しては,正しい溶液 物性を与えることと、シミュレーションにおける過飽和度の 絶対値は正確ではないが相対的な傾向が正しいと考えて条件 を決定する、二つのアプローチが考えられる.本研究では後 者の方法で最適化を進めるが、我々は、実験を再現する溶液 物性パラメータをニューラルネットワークのモデルを用いて 推定することも行っている(39). #1の実験結果を受けて、次 の実験では、結晶成長位置を変化させることにより、過飽和 度を増加させることにした. #2の実験条件で得られた結晶 の外周部分は溶解し、中央付近はわずかに成長をしていた. このことから、さらに過飽和度を増加させることが必要であ ると考え、次の実験ではさらに結晶成長位置を変化させた.

同時にるつぼの強度を上げるためにルツボ内径を小さくし, 攪拌による溶質輸送を増加させるために上軸の回転速度を増 加させた.その結果(実験条件 #3),結晶全面が成長したも のの,成長表面に多結晶 SiC (Heterocrystal)が付着した.以 上3つの実験結果と、成長表面モフォロジーをスイッチン グフローにより安定化させることを念頭に置き,表2のよう に目的関数を設定した.目的関数 $f_1(\mathbf{x})$ は,結晶全面が成長 し、多結晶の成長が起こらないように、結晶成長位置近傍の 過飽和度が1%から2%となるようにするものである.目的 関数 f<sub>2</sub>(x)は結晶成長位置近傍の過飽和度の分布を均一にし て,成長膜厚を均一にするためのものである.また,同じ目 的のために、温度の均一性に関する目的関数  $f_3(\mathbf{x})$  も加えた.  $f_4(\mathbf{x}) \ge f_5(\mathbf{x})$ は,スイッチングフローに関するものであり, 結晶成長位置近傍の溶液の流れが内向きまたは外向きで動径 方向 0.02 cm/sec 以上,溶液流れの絶対値が 0.02 cm/sec と なるように目的関数を定義した.最後に、ルツボ壁での多結 晶 SiC の形成を抑制するために、溶液内の温度差が10℃以 下となるように目的関数  $f_6(\mathbf{x})$ を設定した.ここで, ReLU および softplus は、下記のような関数である.

$$ReLU(x) = \max(0, x) \tag{3}$$

$$softplus(x) = \log(1 + e^x) \tag{4}$$

目的関数を減らすために、多目的最適化は、下記に示すよう に、過飽和度に関する目的関数  $F_1(\mathbf{x})$ 、温度に関する目的関 数  $F_2(\mathbf{x})$ 、溶液流れに関する  $F_3(\mathbf{x})$ に対して行った.

$$F_1(\boldsymbol{x}) = f_1(\boldsymbol{x}) + f_2(\boldsymbol{x}) \tag{5}$$

$$F_2(\mathbf{x}) = f_3(\mathbf{x}) + f_6(\mathbf{x})$$
(6)

$$F_3(\mathbf{x}) = f_4(\mathbf{x}) + f_5(\mathbf{x})$$
(7)

4章で示したニューラルネットワークを用いて多目的最適 化を行った結果を**表3**に示す.ここでは、実験上の制約から

Conditi	on #1	Condition #2			Conditio	n #3
Parameters	values	Parameters	values		Parameters	values
<i>z</i> <sub>c</sub> (mm)	100	<i>z</i> <sub>c</sub> (mm)	110		<i>z</i> <sub>c</sub> (mm)	115
$D_c$ (mm)	124	$D_c$ (mm)	124		$D_c$ (mm)	120
$\omega_s(rpm)$	5	$\omega_s(rpm)$	5		$\omega_s(rpm)$	10
$\omega_c$ (rpm)	-15	$\omega_c$ (rpm)	-15		$\omega_c$ (rpm)	-15
	20 mm		20 m	nm -		20 mm
Mel	t	Partly (	grow	F	attachm	ent
σ<1	%	σ > 1	%		σ>2	%
		σ: Ca	alculated	l supersat	uration nea	r crystal

図7 各条件で成長を行った結晶の外観.(オンラインカラー)

Objective	Function
Suppression of hetero crystal and growth	$f_1(\mathbf{x}) = \sum_{i}^{N} ReLU(\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{x}) - 0.02) - ReLU(\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{x}) - 0.01)$
Homogenous growth thickness	$f_2(\mathbf{x}) = \text{softplus}\left(\max_{r_i}(\sigma(r_i, \mathbf{x})) - \min_{r_i}(\sigma(r_i, \mathbf{x}))\right)$ $f_3(\mathbf{x}) = \text{softplus}\left(\max_{r_i}(T(r_i, \mathbf{x})) - \min_{r_i}(T(r_i, \mathbf{x}))\right)$
Switching flow	$f_4(\mathbf{x}) = \sum_{i}^{N} ReLU(U_r(\mathbf{r}_i, \mathbf{x}) - 0.02) \text{ for outer flow}$ $f_4(\mathbf{x}) = \sum_{i}^{N} ReLU(0.02 - U_r(\mathbf{r}_i, \mathbf{x})) \text{ for inner flow}$ $f_5(\mathbf{x}) = \sum_{i}^{N} ( U(\mathbf{r}_i, \mathbf{x})  - 0.02)^2$
Suppression of polycrystal on crucible	$f_6(T) = \text{softplus}\left(\max_{r_j} \left(T(r_j, \boldsymbol{x})\right) - \min_{r_j} \left(T(r_j, \boldsymbol{x})\right) - 10.0\right)$
$\sigma$ : supersaturation, T: ter	nperature (K), $U = (U_r, U_{\theta}, U_z)$ : solution flow (m/sec),

表2 設定した目的関数.

表3 多目的最適化により提案された結晶成長条件 (#4)と,それまでに行った結晶成長条件(#1-3).

	Experimental conditions			
	#1	#2	#3	#4
$\omega_{\rm seed}[{ m rpm}]$	5	5	10	6.2 & 8.5*
$\omega_{ ext{crucible}}[ ext{rpm}]$	-15	-15	-15	-1 & -13.5*
$h_{\rm meniscus}[{ m mm}]$	2	2	2	2
$D_{ m crucible}[ m mm]$	124	124	120	120
$z_{\rm crucible}[{ m mm}]$	100	110	115	101

\*Conditions for switching flow

 $r_i$ : positions near the crystal,  $r_j$ : positions on crucible

メニスカス高さとルツボ内径は固定して、結晶成長条件の探 索を行っている.また、パレート最適解の中から分布を確認 して最終的には実験条件 #4 を選択した.実験者が経験的に 条件を決める場合に、#2 と #3 の間に最適な解があると考え るが、機械学習を利用した最適化では、ルツボ位置は結晶全 面が溶解した #1 とほぼ同じ位置であるが、結晶とルツボの 回転が全く異なる組み合わせとなっている.また、パレート 最適解の中には、これらとは全く異なる成長条件のものも含 まれていた.このことから、結晶成長条件のように多次元空 間で多峰的な関数に対して最適化を行う場合には従来方法で は限界があり、成長条件パラメータ空間から候補を提案する 本手法の有用性がうかがえる.#4 の実験条件で成長した結 晶の外観写真と成長表面モフォロジーを図8に示す.成長結 晶の外周部の一部は解けているものの、成長表面は平坦であ り、多結晶の付着などは完全に抑制されている.以上のよう



図8 機械学習と数理最適化により設計した条件で成長 した結晶の(a)外観写真と(b)光学顕微鏡像. 外観写真において表面に付着しているのは溶媒が 凝固したものであり,酸処理により取り除くこと ができる.(オンラインカラー)

に、本手法により成長条件の効率的な探索が可能であること が分かる.

我々は、機械学習による条件設計を用いながら、転位変換 と厚膜化を両立する結晶成長を実現しつつあり、これまでに 3 インチn型およびp型の高品質 SiC 結晶成長において、約 5 mmの厚膜成長に成功している.本手法により結晶成長条 件パラメータの設計を効率的に行うことで、高品質 SiC 溶 液成長大型化のリードタイムは確実に短縮されており、更な る大口径化・厚膜化の研究開発にも威力を発揮することが期 待される.

# 7. おわりに

本論文では,機械学習を活用した高品質 SiC 溶液成長条件の設計方法とその効果を示した.本手法は SiC 溶液成長

だけではなく、シミュレーションを援用して成長条件を決定 している、様々な結晶成長に直ちに応用することができる. また、結晶成長プロセスのみではなく、他のプロセスや構造 最適化にも応用することが可能である.本手法では誤差の少 ないデータを多く生成することが可能であるため、シミュレ ーション結果を学習データとして用いているが、大量のデー タを取得できる場合には実験結果や計測結果を学習データに 用いることもできる.実験において大量のデータ取得ができ ない場合には、ガウス過程回帰のような別の機械学習手法を 用いることもできる.

機械学習は,結晶成長に限らずあらゆる製造プロセスを効率的に最適化する上で極めて有用な方法であると考えられる.これを実現するには,本手法でも見たように,プロセスの特徴や知見を,例えば「目的関数の設定」というような形で機械学習アルゴリズムに搭載することが重要である.即ち,当然のことではあるが,各々が必要とするプロセス最適化の機械学習アルゴリズムは,各々で構築する必要がある,という事である.人工知能,機械学習が自動的にやるわけではない.

# 文 献

- (1) T. Kimoto: Jpn. J. Appl. Phys., 54(2015), 040103.
- (2) H. Jagodzinski: Acta Crystallogr., 7(1954), 300.
- (3) T. Kimoto: Prog. Cryst. Growth Charact. Mater., **62**(2016), 329–351.
- (4) S. G. Müller, E. K. Sanchez, D. M. Hansen, R. D. Drachev, G. Chung, B. Thomas, J. Zhang, M. J. Loboda, M. Dudley, H. Wang, F. Wu, S. Byrappa, B. Raghothamachar and G. Choi: J. Cryst. Growth, **352**(2012), 39–42.
- (5) T. Kimoto, A. Iijima, H. Tsuchida, T. Miyazawa, T. Tawara, A. Otsuki, T. Kato and Y. Yonezawa: in 2017 IEEE Int. Reliab. Phys. Symp. (IEEE, 2017), 2A–1.1–2A–1.7.
- (6) T. Watanabe, S. Hino, T. Iwamatsu, S. Tomohisa and S. Yamakawa: IEEE Trans. Device Mater. Reliab., 17(2017), 163–169.
- (7) K. Kamei, K. Kusunoki, N. Yashiro, N. Okada, T. Tanaka and A. Yauchi: J. Cryst. Growth, **311**(2009), 855–858.
- (8) M. Kado, H. Daikoku, H. Sakamoto, H. Suzuki, T. Bessho, N. Yashiro, K. Kusunoki, N. Okada, K. Moriguchi and K. Kamei: Mater. Sci. Forum, **740–742** (2013), 73–76.
- (9) K. Kusunoki, N. Okada, K. Kamei, K. Moriguchi, H. Daikoku, M. Kado, H. Sakamoto, T. Bessho and T. Ujihara: J. Cryst. Growth, **395**(2014), 68–73.
- (10) H. Daikoku, M. Kado, A. Seki, K. Sato, T. Bessho, K. Kusunoki, H. Kaidou, Y. Kishida, K. Moriguchi and K. Kamei: Cryst. Growth Des., 16 (2016), 1256–1260.
- (11) T. Mitani, N. Komatsu, T. Takahashi, T. Kato, S. Harada, T. Ujihara, Y. Matsumoto, K. Kurashige and H. Okumura: J. Cryst. Growth, 423 (2015), 45–49.
- (12) R. Yakimova and E. Janzén: Diam. Relat. Mater., **9**(2000), 432–438.
- (13) T. Ujihara, S. Kozawa, K. Seki, Alexander, Y. Yamamoto and S. Harada: Mater. Sci. Forum, **717–720**(2012), 351–354.
- (14) Y. Yamamoto, S. Harada, K. Seki, A. Horio, T. Mitsuhashi and T. Ujihara: Appl. Phys. Express, 5(2012), 115501.
- (15) Y. Yamamoto, S. Harada, K. Seki, A. Horio, T. Mitsuhashi and T. Ujihara: Mater. Sci. Forum, 740–742 (2013), 15–18.
- (16) S. Harada, Y. Yamamoto, K. Seki, A. Horio, T. Mitsuhashi, M. Tagawa and T. Ujihara: APL Mater., 1(2013), 022109.

- (17) S. Harada, Y. Yamamoto, K. Seki and T. Ujihara: Mater. Sci. Forum, **740–742** (2013), 189–192.
- (18) S. Harada, Y. Yamamoto, K. Seki, A. Horio, M. Tagawa and T. Ujihara: Acta Mater., 81 (2014), 284–290.
- (19) S. Harada, Y. Yamamoto, S. Xiao, D. Koike, T. Mutoh, K. Murayama, K. Aoyagi, T. Sakai, M. Tagawa and T. Ujihara: Mater. Sci. Forum, 821–823 (2015), 3–8.
- (20) S. Xiao, S. Harada, K. Murayama and T. Ujihara: Cryst. Growth Des., 16(2016), 5136–5140.
- (21) S. Xiao, S. Harada, K. Murayama, M. Tagawa and T. Ujihara: Cryst. Growth Des., 16(2016), 6436–6439.
- (22) X. Liu, C. Zhu, S. Harada, M. Tagawa and T. Ujihara: CrystEngComm, (2019), accepted.
- (23) Y. Yamamoto, S. Harada, K. Seki, A. Horio, T. Mitsuhashi, D. Koike, M. Tagawa and T. Ujihara: Appl. Phys. Express, 7 (2014), 065501.
- (24) K. Murayama, T. Hori, S. Harada, S. Xiao, M. Tagawa and T. Ujihara: J. Cryst. Growth, 468 (2017), 874–878.
- (25) K. Murayama, S. Harada, F. Fujie, X. B. Liu, R. Murai, C. Zhu, K. Hanada, M. Tagawa and T. Ujihara: Mater. Sci. Forum, 924(2018), 60–63.
- (26) W.C. Dash: J. Appl. Phys., 30(1959), 459-474.
- (27) G. Fisher, M. R. Seacrist and R. W. Standley: Proc. IEEE, 100 (2012), 1454–1474.
- (28) Y. Mukaiyama, M. Iizuka, A. Vorob'ev and V. Kalaev: J. Cryst. Growth, 475(2017), 178–185.
- (29) T. Umezaki, D. Koike, S. Harada and T. Ujihara: Jpn. J. Appl. Phys., 55(2016), 125601.
- (30) S. Harada, C. Zhu, Y. Tsunooka, K. Kutsukake and T. Ujihara: J. Flux Growth (in Japanese), 14(2019), 13–17.
- (31) C. Zhu, S. Harada, K. Seki, H. Zhang, H. Niinomi, M. Tagawa and T. Ujihara: Cryst. Growth Des., 13 (2013), 3691–3696.
- (32) K. Kusunoki, K. Kamei, K. Seki, S. Harada and T. Ujihara: J. Cryst. Growth, **392**(2014),.
- (33) N. Komatsu, T. Mitani, Y. Hayashi, T. Kato, S. Harada, T. Ujihara and H. Okumura: J. Cryst. Growth, 458(2017),37–43.
- (34) T. Endo, C. Zhu, S. Harada, H. Koizumi, M. Tagawa and T. Ujihara: in Book of Abstract of European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (2018).
- (35) ビショップC.M.: パターン認識と機械学習,丸善出版 (2012).
- (36) Twitter@ymatsuo: (2019), https://twitter.com/ymatsuo/status/1098115962061041664
- (37) TensorFlow: https://www.tensorflow.org
- (38) Y. Tsunooka, N. Kokubo, G. Hatasa, S. Harada, M. Tagawa and T. Ujihara: CrystEngComm, 20(2018), 6546–6550.
- (39) K. Ando, H. Lin, Y. Tsunooka, T. Narumi, C. Zhu, K. Kutsukake, S. Harada, K. Matsui, I. Takeuchi, Y. Koyama, Y. Kawajiri, M. Tagawa, T. Ujihara: in Book of Abstract of 19th Internatioanl Conference on Crystal Growth and Epitaxy (2019)



- ワイドギャップ半導体,酸化物をはじめとする結晶 材料の欠陥制御による特性向上,新奇機能発現の研 究に従事している.
- \*\*\*\*

# 

本連載の第一回目では科学と技術の融合による科学技術の 誕生,第二回目では科学技術における知識の正統性について 述べた.今回は,社会における科学技術のプラスおよびマイ ナス両面の影響の増大に伴って,科学技術をどのように発展 させていくか,その方法について考えてみたい.なお,科 学・技術と科学技術とは区別して考えなければならないとい うのが本連載における基本的な考えではあるが,本稿では便 宜上,特に断らない限り,両者を区別せず「科学技術」とい うことにする.

# 1. 科学技術の政策的な推進

国家が研究活動に投資することは古くから行われていたと みられる.たとえば、大航海時代の幕をひらいたポルトガル のエンリケ航海王子は「王子の村」という航海術や造船、地 図製作の研究村を作ったといわれる.我が国では、明治政府 が教育文化政策と別に国営の産業技術の研究事業をはじめた し、技術官僚たちは第二次世界大戦前から「科学技術」政策 の確立を図っていた.世界的に科学と技術の一体化が進行 し、科学技術の社会に対する影響力が強まってくる過程にお いて、科学技術がどのように政策的に誘導されてきたのかか ら振り返ってみたい.

# (1) リニアモデルによる基礎科学振興

話を第二次世界大戦直後のアメリカからはじめる.マサチューセッツ工科大学(MIT)の副学長・工学部長を務め,科 学行政官となっていた V. ブッシュは大統領の諮問に応える かたちで,1945年に「Science: The Endless Frontier」を発 表した.そこで,彼は国家による基礎研究支援が重要であ り,その基礎研究が自ずと応用開発に繋がると主張した.基

# 柴田 清\*

礎研究が応用研究を生み,それが製品開発に繋がり,国民の 幸福や国家の安全保障に貢献するという一連の流れを「リニ アモデル」という.その流れを円滑に進めるためには,一元 的な研究助成が望ましく,単一の研究助成機関を創設する必 要があること,行政から独立した科学研究と科学教育の専門 家によってその助成機関のメンバーを構成することが有効で あるとした.

この提案が当時の東西冷戦の激化,ソ連の宇宙開発での先 行(1957年のスプートニク・ショック)を背景に国家威信高 揚を求める政策と一致し,基礎科学の推進力として働いた. 結果として,多額の軍事予算が宇宙開発とともに物理学や基 礎医学等自然科学の基礎研究に流れた.民間企業においても 中央研究所の設立等基礎研究重視の投資が盛んに行われた.

後述のように、我が国をはじめ多くの国で、リニアモデル は現在でも一定の説得力を持っているように思われる. 我が 国においては、戦後復興から高度成長期までは外国の先進的 な技術を導入し、それをカイゼンして競争力のある形に適合 させていくことで精一杯だった.基礎研究に大きく投資する 余裕は無く、科学技術政策は産業振興政策に呑みこまれてい た. ところが、二度のオイルショックを乗り越えると、日本 製品は国際的な競争力を獲得し、企業にも将来へ向けて投資 できる余裕が出た.折からの貿易摩擦に起因する「基礎研究 ただ乗り批判」に応じる形で、基礎研究を重視した研究開発 投資が盛んに行われ,民間企業において中央研究所が数多く 設立された. 1995年からの科学技術基本計画第一期でも, 「国は、基礎的・独創的研究等、民間において十分な取組が 期待できない研究開発を積極的に実施することが必要であ る.」というように、リニアモデルへの信仰が感じられる政 策がとられた.

\* 千葉工業大学社会システム科学部;教授(〒275-0016 習志野市津田沼 2-17-1)

Interaction among Science, Technology and Society —3. Governance of Science and Technology—; Kiyoshi Shibata(Chiba Institute of Technology, Narashino)

Keywords: governance, science & technology policy. technology assessment, public participation, science communication 2019年11月26日受理[doi:10.2320/materia.59.153]

# (2) リニアモデルの衰退

アメリカではこのようなリニアモデルに基づく基礎研究重 視の科学技術政策が続けられたものの、1970年代以降製造 業の衰退が見られるようになり、リニアモデルは実態に合わ ないのではないかと疑われるようになった.折から、アポロ 計画の終了、公害問題の顕在化、石油危機を契機とした「成 長の限界」の認識、公民権運動、ベトナム戦争・学園紛争・ 消費者保護運動等に関連した反体制・反科学技術思想が浸透 していた.冷戦下の軍事支出増大が財政赤字の拡大を招いて いたこともあり、政府の研究開発投資の方向は宇宙開発を含 む軍事技術や原子力から社会問題の解決へと変わっていった.

従来,アメリカ政府は市場に対してあまり介入しない傾向 をもつが,知的財産保護を重視したバイ・ドール法の制定 (1986年),製造業の競争力回復に向けたヤングレポートの 提出(1985年)等を経て,基礎研究重視から政府資金による 直接的な産業育成に方針転換が図られている.また,同時期 には技術そのものよりも,その普及を支える政策や教育等の 社会の仕組みによって経済発展の仕組みが変わってくること に注目したイノベーションシステム論(National System of Innovation)が注目されるようになっている.そしてソ連, 東欧の崩壊により冷戦が終結すると,基礎科学への投資は根 拠を失うことになった.この頃の北米は,大企業の中央研究 所のリストラ等基礎研究縮小の時期にあたる.

このように、欧米では産業振興政策に転換が図られた時期 に、我が国ではまだバブル景気の中、課題解決志向のモード 2的な動きは始まっていたものの、政策的にはリニアモデル 信仰が力を持ち、基礎研究が重視されるような逆向きの動き があった.1990年代末頃から民間企業の中央研究所の閉 鎖、基礎研究の縮小がはじまったが、これはバブル崩壊後の 長引く不況による業績悪化対策に短期的視野の経営判断が採 られた結果である.

# (3) 科学技術基本計画の時代

1995年から科学技術基本法に基づいて科学技術基本計画 が5年毎に立てられ,それに基づいた科学技術の発展の方 向性が示されてきた.計画の策定には内閣府の総合科学技 術・イノベーション会議(当初は科学技術会議)の議を経なけ ればならないとされる.基本計画では,本政策と推進体制, 人材育成や教育環境の整備,産学共同研究・受託研究や研究 成果の事業化等,地域振興,知的財産の体制整備や国際標準 化への対応等,大型研究施設や知的情報基盤の整備,研究開 発資金制度,研究開発や機関評価等の施策方針が示される.

過去の期毎の中心的な施策は以下の通りであった.第1 期(1996~2000年)では、ポストドクター等1万人支援計画 や任期付任用制度が導入された.第2期(2001~2005年)で は基礎研究の推進に加え、ライフサイエンス、情報通信、環 境、ナノテクノロジー・材料の4分野に優先的に資源配分 がなされた.第3期(2006~2010年)では、重点推進4分野 および推進4分野(エネルギー、ものづくり技術、社会基 盤,フロンティア)が継続された.第4期(2011~2015年)で は、「震災復興」「グリーンイノベーション」「ライフイノベ ーション」「国として取り組むべき重要課題」のように課題 達成型に重点課題が設定された.そして第5期(2016~2020 年)では、ベンチャー支援を行うことが明記され、「超スマー ト社会」(Society 5.0)の実現も掲げられた.

2014年に総合科学技術会議が総合科学技術・イノベーション会議に改組され,産業競争力会議,未来投資会議が成長 戦略の司令塔として科学技術イノベーション総合戦略を決定 するようになった.この戦略は実質的には成長戦略の下に位 置づけられ,出口志向の態勢は更に強まった.ただし,ここ でのイノベーションは研究開発成果の実用化であり,イノベ ーションそのものではない.また,IT,海洋,宇宙,健 康・医療等については司令塔となる政府本部組織が総合科学 技術・イノベーション会議とは別に存在する.

現在,第6次の計画策定作業が始まっていると聞くが, 国際的な産業競争力や大学ランキングの低迷が危惧されてい る現状では,これらの政策がその目的に沿ったものとなって いるか,再点検が必要かもしれない.

# (4) イノベーション政策

前節で述べた我が国の「基本計画」では第4期から「イ ノベーション」という言葉が前面に出てきた.「イノベーシ ョン」はしばしば,「技術革新」であると誤解されている. その過程については,小林<sup>(1)</sup>や隠岐<sup>(2)</sup>に詳しい.

「イノベーション」とはそもそも1926年に経済学者のシュ ンペータが,経済発展のきっかけとなる「新結合を遂行する こと」として導入した概念である.①新しい商品の導入,② 新しい生産方法の導入,③新市場の開拓,④原材料・中間生 産物の新しい供給源の獲得,⑤新しい産業組織の形成の5 つの項目の組合せによる経済活動上の「新結合」のことであ り,科学技術の革新は必ずしも必要条件ではない.①は商品, ②はプロセス,③~⑤はビジネスの改革であり,①と②が技 術革新に当たる.小林によれば,元々シュンペータが「経済 発展論」で提示したのはドイツ語で「新結合:neuren Kombinationen」であり,それを後に英語による改訂版で「Innovation」と言い換え,更にそれをドイツ語訳するときに,そ のまま英語の Innovation を使ったという<sup>1)</sup>.それを我が国に おいては,インベンション(Invention)のような単なる技術 的発明にまで当てはめているように思える.

2010年頃から政府の音頭で経済活性化のためにイノベー ションの推進が注目されることになった.内閣府の総合科学 技術会議が総合科学技術イノベーション会議に衣替えされた のは2014年である.もっとも,2006年の第3期科学技術基 本計画から「イノベーション」が政策文書でとりあげられる ようになったが,その定義は「科学的発見や技術的発明を洞 察力と融合し発展させ,新たな社会的価値や経済的価値を生 み出す革新」としており,まだ技術革新に近いニュアンスを 残していた.それが,2011年の第4期科学技術基本計画で は「科学技術政策に加えて,関連するイノベーション政策も 幅広く対象に含めて、その一体的な推進を図っていくことが 不可欠である.」とされ、技術革新ではない本来の広い意味 で用いられるようになった.とはいえ、科学技術が経済再生 の切り札的に見られていることに変わりはない.

ところで、「オープンイノベーション」という言葉がある. これは、企業が自前の資源を用いた開発(クローズドイノベ ーション)の代わりに、組織の外にある技術・知識・人材を 積極的に利用し、イノベーションに繋がるような技術革新を 進めることである.この背景には、顧客ニーズの多様化、製 品ライフサイクルの短期化、グローバル化による競争構造の 変化によってモノづくりに求められるスピードが増大し、従 来のやり方では競争に勝てないという認識があったと思われ る.前述した1980-90年代におけるアメリカ企業の中央研究 所の縮小・閉鎖もこの動きの中にある.

# 2. 市民参加による科学技術の制御

前節では科学技術の政策的なコントロールの動向について 述べたが、同時に科学技術に対する不安から、市民の側から も科学技術に対して異議申し立ての声があがることになっ た.公害の時代には技術による解決が主であり、それなりに 科学技術に対する素朴な期待があったが、科学技術やそれを 利用する社会システムの複雑化は、市民に科学技術推進に関 する不安を与えることになった.我が国において1990年代 半ばに起こった、兵庫県南部地震による高架高速道路の倒 壊、オウム真理教事件における理系高学歴者の関与、原子力 関連施設で相次いだ「事象」やその隠蔽は、科学技術に対す る市民の認識の転機となった.

(1) テクノロジー・アセスメント

科学技術の発展が社会に物質的な豊かさをもたらしてきた のは紛れもないことだが、一方で人の健康や自然環境にマイ ナスの影響を与えただけでなく、社会習俗にも大きな変化を もたらしてきた.更に技術システムが大規模・複雑化し、そ の影響が読みにくいうえに、一つの些細なミスが大きな災害 に繋がることもある.意図的な悪用に対する防止対策も必要 となる.更に、科学技術の進展のスピードが速く、人々の意 識が追い付けない.副作用の技術的解決はさらなる副作用を 生む.そこで、このような科学技術による社会的影響を公正 に評価するためのテクノロジー・アセスメントが求められる ようになった.

1972年に米国で議会に技術評価局(Office of Technology Assessment)が設立され,議員に向けて報告書を発行したのが,政府組織によるテクノロジー・アセスメントの始まりとされる.(1995年に財政難を理由に廃止された.)小林によれば,テクノロジー・アセスメントの内容としては;①いつ頃までに何が実現できるか,②技術が実現される場合に,どのような社会的問題の解決に貢献しうるか,③どのような利用を,あらかじめ回避すべきか,④社会の側からみた開発の優先順位づけと技術発展の可能性のすり合わせ,⑤安全性や

リスクとして考慮すべき点の明確化と適切な規制基準,利用 方法等の検討,⑥技術が実現した場合に,それを社会で有効 に利用するための仕組みの設計,とされている<sup>(3)</sup>.

欧州でも、1980年代に欧州議会や各国の国会にテクノロ ジー・アセスメント機関が設立された. 我が国では、1970 年代にテクノロジー・アセスメント活動の導入が試みられた が、制度化には至らなかった. 我が国の場合,設置が検討さ れたのは立法機関ではなく行政機関としてであったようで, 社会的影響の予測よりも、むしろ新技術の普及促進にとって の障害を検討したり、将来的な技術開発ターゲットの予測に 役立てようという意図があったといわれている.

#### (2) 科学技術の信用問題

前節で述べたテクノロジー・アセスメントは基本的に科学 技術の専門家によって実施されるものであったが,そこに市 民の参加が求められるようになってきた.

1980年代にイギリスでは若者をはじめとする一般大衆の 科学技術に対する関心の低下が顕著になり、産業競争力の低 下が危惧されていた<sup>(4)</sup>.具体的な例としては,遺伝子組み換 え作物の栽培に対する反対や、医療におけるインフォームド コンセントに対する戸惑いがある.公害問題等の科学技術の もたらした負の社会的影響、科学技術の発展が必ずしも人間 に幸福をもたらさない現実、更には反体制的運動に向かう当 時の若者文化の影響もあっただろう.しかし,そこで市民の 科学技術の受容性低下の原因として考えられたのは、そもそ も市民が科学技術に関する十分な知識を有していないという ことであり、市民が正確で十分な知識を身につければ解決す るという診たてであった.この考え方を「欠如モデル」とい う.市民が遺伝子組み換え作物に反対するのは,遺伝子操作 等の科学技術の知識が不足しているためであり、安全性等に 関わる正しい知識を与えれば、受容は進むはずで、そのため には正しい知識を分かりやすく伝える努力をすればよいとい うことになる. 言わば啓蒙的アプローチであり、これに基づ いて公衆の科学的知識の増進活動(Public Understanding of Science: PUS)が進められた.

そこに起こったのが牛海綿状脳症(Bovine Spongiform Encephalopathy: BSE,俗にいう狂牛病)騒動である.当初イギ リス政府はBSEが人には感染しないという科学者の答申を 信用し,市民へ安心情報を流した.しかし,結果として世界 で200人近い患者が発生することになり,科学やPUSに対 する信頼性を失墜させることになった.このような事態の背 景には,専門家が市民に専門家と同じような科学の理解を期 待した一方で,市民側の科学あるいはその影響に関する理解 の仕方が専門家のそれとは必ずしも一致していなかったこと がある.

#### (3) サイエンスコミュニケーション

1970年代までは社会全体で科学に対する期待は大きく, 科学的知識の確かさに信頼も置かれていたため,市民も啓蒙 される立場に納得していたと思われる.しかし,その期待が 更に大きくなり,しかも税金からの投資額が大きくなると, 使途の妥当性,成果の適格性に厳しい目が向けられるように なる.そこに不祥事があれば,科学技術知識に対する尊敬や 信頼が一気に揺らぐことになる.遺伝子組換作物や BSE の 経験から,市民が科学をどのように理解しているかは,科学 的知識の量だけではなく,市民が有するその問題に関連する 価値観・世界観やローカル知に依存することが明らかになっ てきた.科学技術の専門家は理想系での普遍的な現象理解を 追求するのに対し,市民はそれぞれの多様な条件下で,それ ぞれの価値観に基づいて技術の取捨選択をする.科学技術の 利用に関する意思決定には,市民の価値観や世界観に寄り添 い,対話を重視しながら情報を交換する,すなわちコミュニ ケーションが双方に有益であると認識されるようになった. そのための手段として開発されたのが,サイエンスカフェや サイエンスショップである.

サイエンスカフェは、喫茶店や居酒屋等のような学術の世 界とは離れた雰囲気の場所で、科学技術に関わる話題につい て専門家が話題提供をしたのち、一般人と対話を繰り広げる という催しである.我が国でも2005年以降急速に普及・拡 大している.講演会のような堅苦しい雰囲気を作らないこと がポイントと言われている.また、サイエンスショップは、 大学等で学生が市民等からの相談・依頼を受け付ける窓口を 設置し、依頼に応えて調査研究等を行い、問題解決や公共的 な活動のサポートをするものである.

なお、サイエンスコミュニケーションにおいて、欠如モデ ルが完全に誤りであるということではない.一定の科学的知 識はあった方が望ましいが、それ以上に専門家側に市民の思 考方法に関する理解が必要なことが多い.双方向性のコミュ ニケーションを実現するには、科学技術の専門家には社会リ テラシー、非専門家には科学リテラシーが必要である.

# (4) 市民参加型テクノロジー・アセスメント

2-(1)節で述べたテクノロジー・アセスメントはあくまで 専門家によるものであり、検討結果は政策立案のためのもの であった.それに対して、サイエンスコミュニケーション同 様にテクノロジー・アセスメントにおいても市民参加が求め られるようになってきている.

平川はテクノロジー・アセスメントに市民が参加する意義 として,政治参加が民主主義社会における市民の当然の権利 であるという規範的意義,多様な立場の人々が参加すること が対立を減らし参加者間の合意や信頼を得やすくするという 道具的意義,政策決定に必要な知識が科学技術の専門知識に 限らず,市民のさまざまな知識,経験,価値観が加わること によって決定の質が高まるという実質的意義,という三つが あるとしている<sup>(5)</sup>.

専門家や行政主導の意思決定では受容か拒否の二者択一に なりがちで、市民側は拒否するとその代案提示を求められる ことになり、参画を躊躇することになりかねない.しかし、 市民参加型テクノロジー・アセスメントでは必ずしも単一の 合意に達することが求められるわけではない. 参加型のテクノロジー・アセスメントとしてコンセンサス 会議,市民陪審,市民フォーサイト,フューチャーリサー チ,シナリオワークショップ,討論型世論調査等様々な方式 が提案されている.参加する市民に多様性を求めるか,当事 者性を求めるか,アウトプットにどれだけの拘束力を持たせ るか,専門家と市民との討論をどれだけ持つか等による違い がある.本稿ではそれらを代表してコンセンサス会議につい て実施方法を紹介する.<sup>(3)(6)-(8)</sup>.

コンセンサス会議は元々はアメリカで医療技術の開発者等 の間でその技術を評価するための会議手法として開発された が、1986年にデンマークの技術委員会(Danish Board of Technology)が社会的な対立や紛争を引き起こしている科学 技術に対して、市民の集団が専門家との対話を通して対策を 提言する活動として整備し、欧米に広まった.

コンセンサス会議は運営委員会、事務局、専門家パネル、 市民パネルで構成される.標準的な方法としては,運営委員 会がテーマとスケジュールを設定し、利害関係者に対すると アリングをしながら専門家パネルメンバーを決定する. そし て、性別、年齢、地域性の分布を考慮しながら「市民パネル」 のメンバーを公募により15から20人選ぶ.その後,専門家 パネルから市民パネルメンバーへの基礎知識の提供が行わ れ,市民パネルは2回の週末をかけた準備会議を行い,コ ンセンサス会議としての論点を構成する「鍵となる質問」を 作成する.この準備会議は非公開で行われる.運営委員会は 鍵となる質問に答える専門家を選び,3ないし4日をかけて 行う本会議においてその専門家が鍵となる質問に答え、市民 パネルとの間で討議を行う.この本会議は公開で実施され, そのあと市民パネルが、この技術の内容、予想される問題、 その対策等考えと提案をまとめたコンセンサス文章を非公開 で作成し、専門家は必要に応じてコメントや事実関係の訂正 をする.

我が国においては、1998年に遺伝子治療、1999年に高度 情報化社会をテーマに試行され、2000年以降遺伝子組み換 え作物等について実施されている.

専門家と市民パネルの討議においては、ファシリテータの 重要性が指摘されている.また、コンセンサス文書の作成以 外にも、専門家同士の意見の食い違いが明らかになったり、 専門家が普段気づかない視点の指摘を受けたりする点は、想 定外のメリットと言われる.

# (5) オープンサイエンス,市民科学の期待

科学技術に対する市民参加という点では,オープンサイエ ンスや市民科学が注目される.オープンサイエンスの定義は まだ定まっていないようだが,科学技術の知識生産過程への 参画,成果へのアクセスや利用等を従来の枠組みを離れてオ ープンに行うことと考えられる<sup>(9)</sup>.そこに市民が主体的に関 わるのを市民科学(シティズン・サイエンス)という.たとえ ば,学術論文誌のオープンアクセス化や市民によるフィール ドデータの収集が分かりやすい例であるが,天文観測や野鳥 等の自然生物調査では長い歴史があり,我が国では高木学 校<sup>(10)</sup>や市民科学研究室<sup>(11)</sup>の活動が優れた先行事例であると 考えられる.

新しい展開の可能性として、プレプリントサーバによる論 文公開は、読者に審査をゆだねる等の研究の品質保証システ ムの新しい在り方を示しているし、クラウドファンディング やインターネットを活用した市民のデータ取集や解析への参 画は、単に科学技術の理解・普及に貢献するだけでなく、経 済力や権力に拠らない共創型のイノベーションを期待させる.

次回はこのような科学技術のコントロールの状況を踏まえ て、科学技術の責任について考えてみたい.

# 文 献

- (1) 小林信一:科学, 88(2018), 416-423.
- (2) 隠岐さや香,中島秀人編:ポスト冷戦時代の科学技術,第3
   章,岩波書店,(2017).
- (3)小林信一,小林傳司,藤垣裕子:社会技術概論,放送大学教 育振興会,(2007).
- (4)小林傳司:トランスサイエンスの時代,NTT 出版,(2007).

- (5) 平川秀幸,藤垣裕子編:科学技術社会論の技法,東京大学出版会,(2005).
- (6) 若松征男:科学技術政策に市民の声をどう届けるか,東京電 機大学出版局, (2010).
- (7) 平川秀幸,土田昭司,土屋智子:リスクコミュニケーション 論,大阪大学出版会,(2011).
- (8)小林傳司:誰が科学技術について考えるのか,名古屋大学出版会,(2004).
- (9)林 和弘:学術の動向, (2018), 23-11, 12-29
- (10) 高木学校, http://takasas.main.jp/(2019.11.19参照)
- (11) 市民科学研究室, https://www.shiminkagaku.org/(2019.11. 19参照)



柴田 清

1980年 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻博 士前期課程修了 新日本製鉄,東北大学素材研,海上技術安 全研究所などを経て2007年より千葉工業大 学教授,博士(工学)

\*\*\*\*

専門分野:材料プロセス工学,環境工学,リスク科 学,科学技術社会論

◎鉄鋼・非鉄製錬および関連環境技術の研究開発に携わったのち、環境などの技術リスクにかかわる研究に従事する一方で、科学技術と社会の関係に関心を持ち続けている.

<sup>\*\*\*\*</sup> 

、先達からのお便り

# 材料研究を始めて50年

名古屋大学名誉教授 森永正彦

1969年に大学を卒業してから、本年(2019年)で丁度50年 になります.昭和,平成,そして令和に至る半世紀もの間, 材料の研究に携わってきました.昨年の11月に,一冊の本 "A Quantum Approach to Alloy Design"(合金設計の量子論 からのアプローチ)を Elsevier から出版し,永年の合金設計 の研究をまとめました.この機会に,研究を通して体験した こと,考えたことなどを振り返ってみようと思います.

# 1. X線による材料の局所構造の研究

私は、京都大学工学部冶金学教室の村上陽太郎先生の研究 室で材料研究を始めました.修士論文のタイトルは、「X線 小角散乱による Al-6.8 at%Zn 合金のG.P.ゾーンの研究」 でした.アルミニウム合金の初期析出過程が、核生成・成長 によるのかスピノーダル分解によるのかを調べました.

しかしながら,米国のノースウエスタン大学のJ.B. Cohen 先生が発表された論文 "Al-5 at%Ag 合金のG.P. ゾ ーンの構造"(Acta Metall., 19(1971),507-519)の中のX線 散漫散乱の解析法がよく分かりませんでした.幸運にも,周 りの先生方のお勧めとご支援を頂き,博士課程の途中から, 米国のノースウエスタン大学に留学しました.研究室の先輩 の村上正紀先生(京都大学名誉教授)が,UCLA に留学され ていましたので,それが刺激になりました.当時は,まだ為 替レートが1ドル=360円の時代でした.司馬遼太郎氏の小 説「坂の上の雲」に描かれているような大昔ではありません が,私なりに青雲の志をもって留学しました.

ノースウエスタン大学は、シカゴの北のミシガン湖畔のエ バンストンにあります.世界で初めて材料科学科(Department of Materials Science)が創設された大学です. Cohen 研 究室には、コンピュータで制御された GE 社の X 線回折装 置が幾台も並んでいて、良い装置で良い実験をする研究環境 が整っていました. Ph.D. 論文のテーマは、"Atomic Arrangements in Ordered and Disordered VO<sub>x</sub>" (VO<sub>x</sub> の規則相と 不規則相の原子配列)です. NaCl 型構造をもつバナジウム酸 化物 VO<sub>x</sub> 単結晶(0.89 ≤ x ≤ 1.28)を、マサチューセッツ工科 大学(M.I.T.)の Lincoln 研究所のトリ・アーク炉を使って作 製しました.余談になりますが、このとき M.I.T.の食堂で ニクソン大統領のウォーターゲート事件による辞任演説を聴 いたことを覚えています.

上記のトリ・アーク炉にはアーク棒が3本あり,溶解中の試料温度を均一に保つ工夫がされています.チョクラルス キー法を用いて, VO<sub>x</sub>の単結晶を作りました.この炉本体 の径は約15 cm,高さは約30 cmの小さなもので,Lincoln 研究所では机の上に設置されていました.これを創られた T.B. Reed 博士(私の Ph.D. 論文の審査員の一人)のセンス の良さに驚きました.大きな単結晶を用いて数か月間,X 線散漫散乱を根気よく測定して,多量の原子空孔がある  $VO_x$ の局所原子配列を調べました.学位を取得後,引き続 きポスドクとして大学に残り,Argonne 国立研究所のJ. Faber Jr.博士と安定化ジルコニアの局所構造の研究をしま した.今から考えますと,金属から酸化物の研究への転進 は,私の材料分野の間口を広げたような気がします.

Cohen 先生ご自身も,若い頃にフランスのA. Guinier 先 生のところへ留学されていました. Cohen 先生から学んだ ことは,プロフェッショナルな研究の仕方です. それは,そ の時にできることは徹底的に研究し尽くし,他の研究者の介 入,批判を許さないという厳しい姿勢です. 私もこの姿勢を 貫こうと努力していますが,まだまだ不十分です.

Cohen 先生は, 1999年に本学会の名誉員になられました. また, ノースウエスタン大学の他学科に, マイクロメカニ クスの村 外志夫先生がおられました.先生が夜遅くまで大 学の研究室で仕事をされていたことを覚えています.学問に 対する厳しい姿勢を強く感じました.日本に帰国後一度, 村 先生に夏の1カ月間雇っていただきましたが, これもたい へん貴重な経験でした.理論の先生の研究姿勢をぼんやりと ですが,知ることができました.最近,海外へ留学する日本 の学生.研究者数が減っていると聞いています.これはたい へん残念なことです.できるだけ若いときに,レベルの高い 海外の大学や研究所で勉強することをお勧めいたします.日 本では決してできない貴重な体験を通して,ものの見方や考 え方が変わる可能性があります.

1979年春に、米国から日本に帰り、新設間もない豊橋技 術科学大学に奉職しました. Cohen 先生は、私のために、 「シンクロトロン放射光によるニオブ炭化物(NbC<sub>x</sub>)の散漫散 乱の測定」に関する日米共同研究を立ち上げてくれました. これは強度の強いシンクロトロン放射光を用いて、弱い散漫 散乱を測定した最初の研究です. 米国のコーネル大学の高エ ネルギー放射光施設(Cornell High Energy Synchrotron Source, CHESS)や、共同利用が始まったばかりの筑波のシ ンクロトロン放射光施設(Photon Factory)で実験を行いまし た.

# 2. 分子軌道法による合金設計の研究

しかし,基礎的なX線研究だけではなく,実際に役に立 っ合金の研究をしてはとの周りからの要請があり,いろいろ 悩んだ末,「分子軌道法による合金設計」の研究に足を踏み 入れました.1982年頃のことで,当時,私は35歳前後でし た.若い研究者は研究に悩み,それに打ち勝っていかねばな らないと思います.

今では言い古されて陳腐な感じがする「合金設計」も,当時は実に新鮮な響きがありました.ただし,誰も合金設計が できるとは考えていませんでした.このとき合金設計の分野 へ私を導いて下されたのは,故湯川夏夫先生でした.

X線は物質中の電子を見ていますので,既に,DV-Xα分 子軌道法を使ってジルコニア(ZrO<sub>2</sub>)の電子構造を計算して いましたので,このような看板を挙げたわけです.当時,兵 庫教育大学におられた足立裕彦先生(京都大学名誉教授)が, この計算方法を開発されていましたので,スムーズにこの計 算分野に入っていけました.実は,足立先生もノースウェス タン大学に来ておられましたので,個人的に良く知っていま した.ジルコニアの計算を通して,その明快さに驚きまし た.たとえ不案内な領域でも入ってみるものです.当時,ほ ぼ毎土曜日に,豊橋から岡崎にある分子科学研究所の大型計 算機センターへ出かけ,計算を行いました.この計算を通し て,物理・化学分野の多くの研究者の方々と交流ができ,も のの見方や考え方が少しは広がりました.科学の分野でも, やはり人的ネットワークは大切だと思います.人との繋がり を大切にしてください.

合金設計の話に戻りますが、金属の古い歴史にもかかわら ず、合金効果を表すパラメータがなかったので計算から初め て求めました.合金設計のための最初の計算は、ニッケルク ラスター中に合金元素を入れたもので、合金元素の個性を表 す2つの合金パラメータを分子軌道計算から求めました. 実際の格子定数を持つニッケルクラスーの中に合金元素を入 れて、現実に近い化学環境のもとで計算しました.現実に近 いクラスターモデルを使って計算していますので、合金効果 を的確に表す合金パラメータが導出できるわけです.新しい 合金パラメータを使って、1984年に、New PHACOMP (Phase Computation:相計算)を提唱しました.その後、い ろいろな合金へ計算を拡張し、理論的な合金の設計と開発に 取り組みました.

1994年秋に名古屋大学に移り,水素貯蔵材料の研究を開始しました.水素貯蔵材料には金属系,無機錯体系,有機系の多様な物質が候補材料としてありますが,これらを同じ土 俵の上で扱える新しい材料設計法を模索していました.そして、早稲田大学の中井浩巳先生が開発されたエネルギー密度 解析法(Energy Density Analysis)があることを知りました.最近の材料科学の分野では、物質の全エネルギー計算は ごく普通のことのように行われていますが,私はエネルギー 密度解析法を使って,全エネルギーを構成原子に振り分けて、構成原子の原子化エネルギーを求めました.この原子化 エネルギーは、固体の中の構成原子を気体のようなバラバラ な孤立原子にするのに要するエネルギーのことです.物質中 の構成原子の原子化エネルギーの総和は、凝集エネルギーに なりますので、構成原子の原子化エネルギーは、凝集エネル ギーの成分に対応します.

この解析を通して、全エネルギーの計算のみでは分からな かった「構成原子の顔」が初めて見えてきますので、材料設 計に応用できます。例えば、触媒設計に利用できます。触媒 において、どの構成原子が触媒活性であるかを知ることが重 要ですが、それも原子化エネルギーを使えば、ほぼ予測でき ます。この外、化学結合状態が大きく異なる各種の遷移金属 化合物の化学結合の成り立ちも,原子化エネルギーを使えば,エネルギー・スケールで相互に比較することができます.

そうこうするうちに2010年春になり,名古屋大学を定年 退職しました.それぞれ15年半いました豊橋技術科学大学 と名古屋大学の研究室から多くの優れた卒業生が育ち,大 学,高専,企業で活躍していることは私の誇りです.この年 齢になって,Cohen 先生が,「研究成果はもちろん大事であ るが,人を育てたことがもっと重要である」と言っておられ たことを思い出します.

# 3. 原子空孔と合金元素の近傍の局所格子歪の研究

定年後しばらくして, (公益財団法人)豊田理化学研究所で 研究を続ける機会を得ました.現在の研究テーマは、「金属 中の原子空孔および合金元素近傍の局所格子歪と合金物性| です. 合金元素と母金属原子の間の原子サイズが違うと, 合 金元素近傍の母格子に局所歪が導入されることは昔から良く 知られていますが、どの程度の大きさの局所格子歪が導入さ れるかほとんど分かっていません. 空孔の周りの局所格子歪 についても,これまで定量的な研究がありません.そこで, 擬ポテンシャル法を用いて、いろいろな金属中の合金元素や 原子空孔の周りの局所格子歪を計算しています。例えば、原 子空孔の計算から, bcc 金属の局所格子歪エネルギーの大き さは、最稠密構造の fcc 金属や hcp 金属に比べて約1桁も大 きく,とりわけ, bcc Fe や bcc Ti のようなマルテンサイト 変態を起こす bcc 金属で大きいことが分かっています.こ の格子歪エネルギーは決して小さな値ではなく、熱エネルギ - k<sub>B</sub>T(k<sub>B</sub>はボルツマン定数,Tは絶対温度)に匹敵する大 きさです.従って,温度によって変わる多くの合金物性 (例:強度,相安定性)に影響を与えます.この局所格子歪の 問題は、これまでほとんど研究されていない未知の分野です ので,現在,興味を持って研究を続けています.

材料研究を始めてから50年が瞬く間に過ぎましたが,ま だまだ重要な研究テーマが残っているようです.新しい研究 を展開するうえで最も大事な資質は,研究者の「個性」だと, 私は常々思っています.学生諸君,若い研究者の皆様,どう か独自の個性を磨いてください.ノーベル賞クラスの研究テ ーマも,石ころのようにあちらこちらに転がっているように も思います.たとえ未知の分野の研究テーマであっても,果 敢にそれを拾い上げて,新しい研究に挑戦されることを願っ ています.

(2019年9月3日受理)[doi:10.2320/materia.59.158]



森永正彦



著者の手元に、この本のコピーがある.紙のファイリング ケースに挟まっており(写真1)、何度も開け閉めしたため表 紙の縁がボロボロになっている.コピーした日付がペンで記 されており、2006年7月21日(金)とある.著者にとって博士 課程終盤の時期であり、学位をはたして頂けるのか重圧を感 じ、暗澹たる気持ちであった気がする.ちなみに、この本の 第1版発行は1979年、著者が生まれた翌年である.ほぼ同 じ歳月をこの世で過ごしており、勝手に親近感を覚えている.



■写真1 今でも使い続けている愛用のファイル.

教科書というにはやや専門性が高く,大学の学部教育の範 囲を考えると発展的な内容である.しかし,今回,教科書を 一冊紹介させて頂く機会を得た時,真っ先にこの本が思い浮 かんだ.材料科学の分野で電気化学に携わり始めた学生諸君 に,ぜひ目を通してもらいたいからである.一言で言うと, 電気化学を利用して実際にモノをつくる場合には,電解シス テム全体を俯瞰して見ること,その上で電解要素が適切に機 能・進行するよう緻密に検討することが大事であることを述 べている.

著者がこの本を手にとった当時は,化学熱力学(平衡論)を 拠り所にして製錬プロセスを学んでいるところで,電気化学 はほぼ素人であった.しかし,原理の異なる製錬プロセス間 で金属の生産速度を比較検討するため,電気化学に思考法を 求めこの本を開いた.おかげで課題は無事解決し,さらに副 産物も得た.それまで著者の電気化学の知識は断片的で,頭 の中で電極反応と電解システム全体を上手く繋げられなかっ た.しかし,この本では「電極電位」ではなく一般工学上の 概念の「電位」を用いて電解システムを統合的に記述してお り,そのおかげで電解要素を統合してシステム全体を理解す





ることができた.

当時は思いもよらなかったことだが、時が経ち、縁があっ て電気化学の基礎を教える身となった.自分が電気化学の専 門家であるのか?と自分自身に問うと冷汗が出るが、職務で あるのでやらざるを得ない.今もこの本を読み、参考にしな がら教壇に立っている.

さて、個人的な想い出は切り上げ、本教科書の内容を紹介 する.本書は、まず、電解プロセスの全体観を掴ませるため に、具体的な工業電解プロセス(銅の電解精製、アルミニウ ムの電解製錬、ソーダ電解)を例示している.伝統的な教科 書では、電位の熱力学的定義から入り、溶液論に雪崩れ込む のが常套手段だが、初学者にとっては目に見えない電位が直 観的に掴めず、始めからつまずきやすい.本書では実態のあ るシステムを通して抽象的な概念を学んでゆくので、堅固な 土台を基に着実な理解が期待できる.

その後,電解システム中の電気の流れを理解するために, 物理学や電気工学の概念である電位を用いて,各電解要素に 与えられる電圧を記述している.この解析法で特に良いこと は,電解浴中での電位降下(オーム降下)を明確に記述し,槽 電圧に組み入れられることであり,電極電位と完全に整合・ 統合することができる.これによって槽電圧の電圧構成が明 確になり,電解システムのどこに問題・課題があるのか把握 することができる.

電解システムでは電気の流れと共に、物質の流れが重要で ある.これも具体例(銅電解精製等)を示しながら電極/電解 浴界面近傍のイオンの動きを記述しているため、頭の中でイ メージがし易く見通しがよい.電解エネルギー論でも、物質 生産単位量(ここでは1トン)あたりに必要とする理論電気 量,電力消費量を丁寧に導き、省エネルギーのための技術的 課題点を把握する基礎を与えている.

以上は第1章で述べられていることで、たった29頁の中 に工業電解の化学のエッセンスが詰められている. 無論、後 の各論も広範かつ精緻に解説されおり、そちらも精読すべき であるが、まずは第1章を反芻して理解することが重要で あると思う.

著者が本書をコピーしたのも、当時既に絶版になっていた ためであり、とても残念である.しかし、各所の図書館には この名著が収蔵されていることと思う.電気化学を学ぶ全て の若い人に、ぜひ本書を手に取ってもらいたい.

(2019年5月20日受理)[doi:10.2320/materia.59.160]



# 地元貢献を目指して

公益財団法人いわて産業振興センター ものづくり振興部産学連携室;研究支援員, 東北大学大学院工学研究科 博士課程後期課程1年 久 慈千栄子

# 1. はじめに

私は,2016年3月に東北大学大学院工学研究科機械シス テムデザイン専攻 博士課程前期2年の課程(修士課程)を 修了し,2016年4月より,富士フイルム株式会社 R&D統 括本部生産技術センターにて子会社工場の工程改善に務めて おりました.2018年9月より,現職である公益財団法人い わて産業振興センターにUターン転職し,2019年4月より 東北大学大学院工学研究科機械機能創成専攻 博士課程後期 3年の課程(博士課程)に社会人ドクターとして進学.現在は 博士号取得を目指しながら,研究支援員として地元貢献のた めの研究に取り組んでおります.私の研究生活の中で金属材 料に携わっている機会は少なく非常に恐縮ではございます が,この度ご縁がありまして「はばたく」執筆の貴重な機会 をいただきましたので,これまでの経験を振り返り,現在の 研究活動について述べさせていただきます.

# 研究生活と企業経験

まずは,学生時代から現在までご指導をいただいている, 厨川常元教授の研究室をご紹介させていただきます.研究室 では、切削加工や旋削加工、レーザー加工やプレス加工な ど,幅広い加工分野においてナノ精度の機械加工を行い,加 工表面に任意の機能を発現する微細 3D 構造を創成するな ど、新たなものづくり技術の可能性を探求しております. そ の中で私は、学部4年生から修士課程2年生までの3年 間、パウダージェット加工を用いた新たな歯科治療法に関す る研究に取り組んでおりました.本研究では、ヒト歯と同様 の成分を持ち, 生体親和性の高いハイドロキシアパタイト Ca<sub>10</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>6</sub>(OH)<sub>2</sub>というセラミクス材の微粒子を歯に直接 衝突させることにより、虫歯の除去や新たな歯質の創生を目 指しています.先行研究により、この除去加工と付着加工を 左右するメインファクターの特定と、最適加工条件選定の検 討が行われておりましたが、材料の破壊や付着のメカニズム 解明の検討は行われておりませんでした. そこで私は, 延性 の小さいセラミクス材の変形を再現するため、平滑化粒子法 (SPH法)を用いて粒子の衝突時の応力分布や破壊挙動を解 析し、分子動力学解析を併用することで原子結合により付着 する領域の特定を行いました<sup>(1)</sup>.しかし,研究活動は上手く いくことだけではなく、従来付着するとされていた加工条件 であっても粒子が付着せず、試行錯誤する日々が続きまし た.先生方と議論し,先輩と試行錯誤を行う中,東北大学金 属研究所 今野豊彦教授のもと, TEM による粒子の観察を 行う事で、衝突させる粒子の十分な結晶成長が必要であるこ とを明らかにしました<sup>(2)</sup>.研究活動はスムーズに進むことだ けではありませんでしたが、材料加工の原理原則を掴むため には、根気よく様々な視点から材料自体の理解を深めること



図1 公益財団法人いわて産業振興センター.

が重要であることを学び,材料研究へ対する興味もより強く なっていきました.

修士課程の修了後は企業に就職し、生産技術センターに所 属しました. 企業時代は主に子会社工場の工程改善を担当 し、ものづくりの現場に密着した業務を行いました. 製造能 力強化の任務を遂行する中で、日々の製造やトラブル対応と 並行して QCD(Quality(品質) · Cost(コスト) · Delivery(納 期))を担保するものづくり体制を確立していくには、製造部 や設計部門など、様々な関係者との協力が必要不可欠となり ます. それぞれの専門が異なる集団で意思疎通を行う難しさ や、何よりも研究室で行う研究とリアルなものづくり現場の ギャップを肌で感じ、自分の経験不足・知識不足を痛感しま した.しかし、様々な立場の人間が意見を出し合うことで自 分一人では思いつかない考えやアプローチが生まれる面白さ も体感し、製造現場の方々の生の声を聞いていく中で、研究 員としてもっと現場に寄り添ったものづくり技術の開発をし てみたい,という気持ちが生まれていきました.そのために は、自分の専門分野の間口を広げ、より多くの企業の方々と 接していくべきだと感じ,転職を決意しました.

# 3. 研究支援活動について

現在は、地元岩手県の公益財団法人いわて産業振興センタ ー(図1)に所属しております. 幣センターは, 県内の産業振 興を推進するため、県内中小企業に対し経営相談や販路開 拓,金融支援,研究開発における産学官連携のためのマネジ メント等の総合支援を行う県の中核的支援機関です. 今年度 から、新たな試みとして「若手専門人材確保支援事業」を創 設,2名の研究員をセンター内に直接配置し、県内大学や企 業の研究活動のサポートを行っております. 私はこの研究員 として機械加工分野を担当しています.また,新たな技術を 県内企業に移転するための研究テーマを模索し、自身の担当 する分野では、「難加工材料であるアモルファス金属の加工 に関する研究」、「各金属材料に対する高効率放熱表面創生の 研究」の2つの基礎研究を推進しています.金属材料に対 する加工については経験が少なく, 暗中模索の日々ですが, 企業の方々にご助力いただきながら研究活動を行える環境に やりがいを感じております.岩手県は自社に研究開発部門を 置く企業はまだ多いとは言えませんが、開発した技術を企業 へ移転する事で微力ながら地元の技術力向上に貢献できるよ う邁進して参ります.

最後になりますが、この場をお借りしまして日頃研究をご 指導いただいております東北大学の先生方、地方独立行政法 人岩手県工業技術センターの職員様、ご助力頂いております 企業の皆様に深く御礼申し上げます.

文 献

- (1)水谷正義,久慈千栄子,大久洋幸,西村俊亮,水谷公一,赤 塚 亮,佐々木啓一,徐少林,嶋田慶太,厨川常元:砥粒加 工学会誌,61(2017),28-33.



~第2回「高校生・高専学生ポスター発表」優秀賞 受賞~

# スポットライトを浴びる日は いつか必ずくる!

札幌日本大学高等学校 科学部 2年;上原昂大

私が所属している科学部は、部員数が40名を超える大き な部であり,毎年,学外活動に活発に取り組んでいます.本 校は SSH(Super Science High School)であり、部員のほと んどは SS(スーパーサイエンス)選択者として、科学部の活 動に加え,SSH活動にも取り組んでいます。毎週のように 部員の誰かが海外研修に出かけたり、国内外の学会主催の発 表会に参加したりしています. 一緒に活動している仲間が皆, 1年生のときから学外発表を沢山経験しているのに、私には なかなかそのチャンスが巡ってきません. こつこつと一人で 放課後、残って実験に取り組んでいるのですが、データもバ ラツキが大きく、自信を持って人前で発表できるものとはい えず、実験方法に改良を加えても上手くいかずに試行錯誤す る毎日でした.先輩のアドバイスも受けながら磁石球の N-S方向が落下方向に一致するように磁石球へのおもりの付け 方などを工夫して金属管材料の抵抗率測定を行っているうち に、データのバラツキが小さくなり、少し自信の持てるデー タがとれるようになってきました. それから, 少しずつやる 気も出てきて、私も他の人達のように発表してみたいという 気持ちが湧き出てきました. その頃, 顧問の先生から声をか けられ,今度,金属学会があるからそこで発表してみないか と言われました. 放課後,毎日粘り強く取り組んできた結 果、そして自分も発表してみたいという気持ちが、今回の初 めての学外発表と優秀賞の受賞、さらに大きな大会への出場 につながったように思います(図1).

私が入学時から取り組んでいる課題研究について簡単に紹 介します.私のテーマは金属管材料の抵抗率を測定すること です. 高等学校の物理基礎で登場する抵抗率です. 金属の抵 抗率は非常に小さく、例えば、銅の抵抗率は約1.6×10<sup>-8</sup>Ω・ m(0℃)という値になります. もちろん, これを測定する実 験方法は教科書には書かれていません. でも、教科書に値が 載っているので測定はできるはずです. 調べてみると, 百万 円以上もする高価な測定装置を使うと高い精度で測定できる ことがわかりました.私に与えられた課題は,高価な装置を 使わずに抵抗率を測定する方法を確立せよ、というものでし た. これまで、科学部の先輩達が7年前からネオジム磁石 の研究を継続して行ってきた結果、ネオジム磁石を用いて金 属管材料の抵抗率を求めることができるということが理論的 にはわかっていました. これを実際に実験で証明することが 次の課題です.理論および実験方法については、Y. Levin らの論文(1)を参考にしました. その実験方法は、ネオジム磁 石のN-S方向が鉛直方向になるようにして、金属管中を落 下させ,その終端速度の測定から論文(1)に記載されている理 論式を用いてその金属の抵抗率を求めるというものです.先 輩達が3~4年前に詳しく調べた結果,Y.Levinらの理論式 は、実験結果とは一致しないことがわかり、このままでは抵 抗率の測定はできないことがわかっていました.そして,2 年前から実験結果の再現性、理論式の修正も含め、何度も理





図2 ネオジム磁石球の質量と銅管終端速度との関係.

論式と実験結果を見直す作業が始まりました.これが1年 前までのできごとです.

今回の発表の要旨は次の通りです、「外部電源を用いずに, 金属管材料の抵抗率 $\rho$ を測定する方法について検討しまし た.内径 12 mm の銅管中を落下する直径 10 mm のネオジ ム磁石球の終端速度は,肉厚が 1.5 mm 以下では,Y. Levin らの理論式とほぼ一致することがわかりました(図2).ま た,この結果から求めた銅管材料の抵抗率は,低抵抗・抵抗 率計を用いて測定した結果とほぼ一致しました.」因みに, Y. Levin らの理論式は次式の通り,非常に複雑な式です が,私たちは導出過程<sup>(2)</sup>をチェックし,管の肉厚 wが管の 内径 a より非常に小さいところ( $w \ll a$ )では彼らの理論式が 成り立つことを見出しました.

$$v = \frac{1024 \ m_{\rm M}g\rho a^4}{45 \ \mu_0^2 M^2 w}, \quad (M = \frac{md}{\mu_0}, \ d \ll a, \ w \ll a)$$

ここで、vは磁石の終端速度、 $m_M$ は磁石の質量、gは重力 加速度、 $\mu_0$ は真空の透磁率、Mは磁石の磁気モーメント、mは磁石の磁気量、dは磁石の磁極間距離です。

少しずつですが、この研究は多くの方に興味を持ってもら えるような中身になってきたように思います. 札幌日大高校 に入学したときには、学会発表など経験できるとは全く想像 もしていませんでした. 初めて学会でポスター発表をする機 会を与えて頂き、賞まで頂けたことに深く感謝しています. その後、私は高校生科学技術チャレンジ(JSEC)最終審査会 で発表することになり、同僚も日本学生科学賞中央最終審査 で入賞しましたが、共に国際科学技術フェア(ISEF)出場は 果たせませんでした. 最後に、日々頑張っている科学部の後 輩全員が、世界の舞台でスポットライトを浴びて発表する日 が来ることを願っています.

# 文 献

- (1) Y. Levin, F. L. da Silveria and F. B. Rizzato: Am. J. Phys., 74 (2006), 815–817.
- (2) 高野良紀, 中原雅則:まぐね, 13(2018), 102-105.

(2019年12月6日受理)[doi:10.2320/materia.59.162]



~第2回「高校生・高専学生ポスター発表」優秀賞 受賞~

# 金属樹の生成と電解電流の 関係について

大阪府立天王寺高等学校

奥本大貴	三木書	影馬	塩田悠	东介
	山口	快	角村	仁

私たちは、金属樹であるスズ樹の生成と電解電流の関係に ついて研究しています. 金属樹とは二種類の金属のイオン化 傾向の差によって、イオン化傾向が小さい金属が大きい金属 の周りに樹枝状に生成したものです. 金属樹の一種であるス ズ樹は通常主軸(既に析出しているスズ樹の生成方向を主軸 とする)に対しておよそ90度方向に生成されます<sup>(1)</sup>.そこで どのような条件下でもスズ樹がその形で生成されるのかにつ いて興味を持ち研究を始めました. 今回の研究では, 亜鉛板 と塩化スズ(Ⅱ)溶液でスズ樹を生成しました.磁石を用いて 磁場をかけたり電解電流を流したりと外部条件を変化させな がら実験していくうちに, 電解電流をかけながらスズ樹を生 成させた際に、スズ樹の形に変化が起きたことを発見しまし た. このことから電解電流とスズ樹の生成との関係に絞って さらに実験を行いました.今回の研究では図1に示す実験装 置を用いました. 溶液は 0.10 mol/L の SnCl<sub>2</sub> 水溶液を 8.0 mLにCH<sub>3</sub>COOH(99 mass %以上)を2.0 mL加えて調整 し, 亜鉛板は厚さ1.0 mm, 長さ20.0 mm, 幅3.0 mm に切 断し、切断面を80番の紙やすりで研磨しました. 亜鉛板を プレパラートの真ん中に置き、そして亜鉛板を覆うように溶 液を2.0 mL 程度滴下しました.そこに亜鉛板を左右から挟 む形でステンレス板を電極として置き、電解電流を1.0 mA, 3.0 mA, 5.0 mA でそれぞれ10分間ずつ流しました. その状 態で生成したスズ樹を光学顕微鏡で観察しました. 観察結果 を図2に示します.電解電流を流したところ,図2,3のよ うなスズ樹の生成方向が直角でない、今までの報告にない新 規の形(以下Y型)のスズ樹が亜鉛板のまわりに生成されま した. Y型は図2に示すようにスズ樹の先端に多数見られ ました.また,Y型が生成された先に直角あるいはY型の 金属樹が更に生成されることも確認できました. また電解電 流を大きく流せば流すほどY型の数は増加し,スズ樹が生 成するスピードも速くなることが分かりました.次に、電解 電流を流す際に電極を寝かせて、亜鉛板に対して電場の方向 がより一様になるようにして実験を行い,Y型の生成方向 が電場方向と関係があるのかどうかを調べたところ、現段階 ではY型の生成方向と電場の方向には関係がないという結 果になっています.

今回のポスター発表の際,教授の方から「手で電極を押さ えていたら,電解電流に微妙な変化が起きたり,実験が持続 しにくかったりするのではないのか」と指摘を頂きました. 頂いたアドバイスをもとに更に装置に改良を加えたいと思い



図1 作製した装置の(a)模式図と(b)外観写真(鉛直方向).



図2 生成されたY型スズ樹と電解電流の関係.(オン ラインカラー)



図3 電解電流 5.0 mA で生成したスズ樹の拡大写真.

ます.加えて先ほどの電場と生成方向の関係について,より 多くのデータをとり,陰極方向にスズ樹があまり成長しなか った理由や,電解電流とスズ樹の成長速度の関係を定量的に 測定することや,電場の方向とY型の生成方向との関係を より正確に突き詰める実験をしていきたいです.またスズ以 外の金属はこれまで実験を行っていないので,それも実験し たいと思います.今回発表させて頂いた際に,私たちが初め て行った研究で始めて間もない時だったにも関わらず,沢山 の方々が発表を真剣に聞いて下さりました.また大学生や社 会人となった私たちの学校の先輩にもアドバイスを頂けてと ても刺激を受けました.発表を通して私たちの研究を発信で きただけでなく,他の方の研究やアドバイスも吸収でき,と ても良い経験になりました.

# 文 献

 (1) 鹿児島県立国分高等学校「金属樹の成長の条件とその形状について」:国立研究開発法人科学技術振興機次世代人材育成 事業中高生の科学研究実践活動推進プログラム報告書 (2017), https://www.jst.go.jp/cpse/jissen/pdf/houkoku/ SG160035\_matome2017\_002.pdf

> (2019年11月29日受理)[doi:10.2320/materia.59.163] (連絡先:〒545-0005 大阪市阿倍野区三明町 2-4-23)



# 理論計算による原子・電子レベル における格子欠陥の材料科学

名古屋大学大学院工学研究科物質科学専攻;助教(松永研究室) 横井達矢

実材料中に存在する点欠陥,転位,粒界,表面といった格 子欠陥は,機械的特性や電気的特性,熱的特性を含む様々な 材料特性・機能性に影響を及ぼします.また格子欠陥によ り,バルク材にはない特異な物性が発現する場合もありま す.従いまして格子欠陥に起因する物理現象と局所物性の理 解は,高度かつ複合的な材料特性が要求される現代の材料設 計において不可欠な課題といえます.私たちの研究室では理 論計算と実験により格子欠陥に関する研究を展開しています (図1).

結晶粒界を対象とした研究では、第一原理計算や分子シミ ュレーションにより、粒界における原子構造と局所物性(電 子的特性,熱的特性,拡散特性など)の解析を行っていま す. 第一原理格子動力学法を用いて酸化物粒界の熱力学的安 定性を解析した研究では、個々の粒界によって過剰エントロ ピーは様々な値をとり、それに起因して粒界間の熱力学的安 定性が温度によって変化する可能性を示しました. また最近 では従来の計算手法と機械学習的手法を組み合わせること で、化合物半導体や酸化物の粒界に適用可能な原子間ポテン シャルの開発も進めています. 粒界モデルを含む第一原理計 算結果を用いて人工ニューラルネットワークを学習し,構造 最適化手法や分子動力学法,反応経路探索法と統合すること で、高精度かつ高速で粒界物性が解析可能な計算手法の構築 を達成しています. 今後は原子間ポテンシャルパラメータを 充実させ、またプログラムの高速化を進めることで、様々な 物質における一般粒界を想定した、大規模計算方法の構築を



図1 松永研究室の集合写真.最前列右から1番目が著者.

計画しています.

また化合物半導体である ZnS を対象とした研究では,実 験と理論計算を組み合わせることで転位テクノロジーの新た な可能性を見出しています.光環境を精緻に制御した圧縮変 形試験を行い,これまで脆性材料と考えられてきた物質が暗 室下では数十%に及ぶ塑性変形が可能であることを明らかに しました.またそのような大変形に伴い,バンドギャップが 20%程度減少することを見出しました.そして第一原理計 算による転位芯のモデリングにより,極性をもつ転位芯構造 が光照射により生じた電子・ホールを捕獲して再構成するこ と,また転位芯構造を起源とする欠陥準位がバンドギャップ 中に存在する可能性を示しました.現在,光塑性効果の根本 的な理解に向けて,種々の化合物半導体を対象に同様の解析 を行っています.

上記で示した研究以外にも,第一原理計算と溶媒イオンを 連続体として表現する陰溶媒モデルを用いた生体材料表面に おける陽イオン置換と表面荷電状態の解析や,小角粒界にお ける転位を利用して電子伝導度と伝導経路を意図的に制御す る試みなど,様々な物質の格子欠陥に着目して,それらの物 理現象の理解と制御方法の確立に向けて研究しています.

> (2019年12月16日受理)[doi:10.2320/materia.59.164] (連絡先:〒464-8603 名古屋市千種区不老町)

# 本会記事

会告 第15回 JIM/TMS Young Leader International Scholar
Program 募集案内
第66回日本金属学会賞 候補者推薦依頼
第1回日本金属学会フロンティア研究助成募集166
2020年春期(第166回)講演大会参加申込みについて167
2020年春期講演大会併催企業説明会への学生参加者の募集
第9回ランチョンセミナー開催
第12回男女共同参画ランチョンミーティング開催168
令和2年 春季 全国大学材料関係教室協議会講演会ご案内
2020年秋期講演大会外国人特別講演·招待講演募集168
日本金属学会主催国際会議企画提案募集
新設「研究会」発足のお知らせ
欧文誌編集委員会からのお知らせ
支部行事
揭示板
新入会員

事務局 涉	₅ 外 · 国際関	]係:secgnl@jim.or.jp
슬	会サービス会	≧般:account@jim.or.jp
	会費·各種支	支払:member@jim.or.jp
	刊行物申込	み:ordering@jim.or.jp
セミナーシン	ポジウム参加申ジ	しみ:meeting@jim.or.jp
	講演大	会:annualm@jim.or.jp
統	診務・各種	賞:gaffair@jim.or.jp
学術情	「報サービス会	≧般 : secgnl@jim.or.jp
	調査・研	究:stevent@jim.or.jp
	まてりあ・広	云告: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 https://jim.or.jp/

・投稿規程・出版案内・入会申込はホームページをご利用下さい.

会告(ホームページもご参照下さい)

# 第15回 JIM/TMS Young Leader International Scholar Program 募集案内

本会では,若手研究者及び技術者の活動の活性化を図り,併せてTMSとの国際交流を促進させることを目的にJIM/TMS Young Leader International Scholar Program を設けており, TMS への派遣者を募集いたします.

決定した派遣者は2021年 TMS 春期大会(2021年 3 月14日~3 月18日:米国 Florida 州 Orlando)に金属学会の Young Leader International Scholar として派遣し,講演発表をしていただきます.また,大会前後に関連機関の訪問も可能です.

# 募集要領

- 応募資格 ①日本金属学会の正会員で派遣時点に満35歳以下であり,本会活動に熱意のある人. ②日本金属学会の機関誌に論文が掲載されたか,または講演を発表した経験があり,かつ英語で講演発表ができる人. ③日本金属学会の若手世代の代表として,責任ある行動がとれる人.
- **派遣人数** 若干名(1~2名)/1回
- 応募手続 所定の様式(ホームページよりダウンロードして下さい)により必要事項を記入の上,下記 E-mail アドレスにご送信下さい.
- **応募書類**(推薦書)

①推薦理由(400字程度)
 ②論文および講演発表の業績リスト:5編程度,国際口頭発表リスト:5編以内
 ③TMS 主催の講演大会で発表予定の論文タイトルとアプストラクト(英語で400word 程度)
 ④本会における若手研究者活動の活性化に対する抱負(英語で400word 程度)
 ⑤TMS 主催の講演大会に参加・発表して,得られると期待される成果(英語で300word 程度)
 ⑥米国での大学・研究所・企業などの訪問計画予定(先方との事前コンタクトは不要)と目的

本会補助 派遣費用上限30万円.ただし,TMSへの派遣に合わせて北米内の大学・研究機関等を訪問する場合は上限40万円.

# 推薦書締切日 2020年4月10日(金)

- 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「Young Leader」係
    - ☎ 022-223-3685 E-mail: gaffair@jim.or.jp

# 第66回日本金属学会賞 候補者推薦依頼

#### 推薦要領

- 主 旨 金属およびその関連材料の学術および科学技術の振興に顕著な貢献をした者に授賞するものです.
- 推薦資格 本会代議員
- 審査基準
   この賞の審査基準は、下記の通り
   (1)当該分野を切り開く先導的な役割を果たしたか
   (2)学術上重要な発見をしたか
   (3)効果が大きい重要な発明をしたか
   (4)学術や技術の進歩に大きく貢献したか
   (5)金属およびその周辺材料の科学技術の振興に貢献したか
   (6)研究や開発ならびに育成や啓発によって社会へ貢献したか
   (7)金属学会の活動に貢献したか
- **推薦方法** <u>所定の様式</u>(ホームページよりダウンロードして下さい)により <u>E-mail: award@jim.or.jp 宛に「学会賞推薦」と明記の上,送信下</u> <u>さい.</u>

# 推薦書類提出締切 2020年5月1日(金)

推薦書提出先 (公社)日本金属学会 学会賞係

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

☎ 022-223-3685 🕅 022-223-6312 E-mail: award@jim.or.jp

# (新設!)第1回日本金属学会フロンティア研究助成募集

この度本会では、教育・研究機関での金属およびその関連材料分野の学術研究および技術研究の発展や若手研究者の育成や奨励を主な目的 とした、金属およびその関連材料分野に関連する材料又はプロセスに関する研究に対しての助成金を交付する事業を新設いたしました. 下記の通り第1回目の助成の対象となる研究を募集いたしますので、ご検討の上、応募下さい.

| 募集期間:2020年2月1日(土)~3月31日(火)まで|

# 募集要項

# 応募資格

応募者(代表者)は、2020年4月1日時点で45歳以下の日本の教 育機関または公的研究機関に所属し、日本国内で研究に従事する 者(学生・大学院生および企業との兼務者を除く)であること.た だし、共同研究者は国外でも可とする.

応募は一人一件とします.同一研究室からの複数応募は可能です が,新規採択は1件とします.

活動開始時には,非会員は会員になることが望ましい.

# 助成の対象となる研究

金属およびその関連材料分野に関連する材料又はプロセスに関す る調査,試験,研究および開発とする.

- 研究期間 助成研究の実施期間は,原則2年間とする.研究開始 日が年度途中となる場合は,年度をまたいだ2年間と する.
- 助成件数 年間10件以下
- 助成金額 1件あたり,150万円

#### 助成金の使途

研究等に直接必要な費用および所属組織の必要最低限の間接経費 に充当すること.研究者の人件費(臨時雇用の研究補助者等の費 用を除く)には充当できないものとする.

# 助成金の交付方法および交付期間

研究助成金の交付方法は,原則として,助成実施者が所属する組 織に対する奨学寄付の形とする.共同研究者が別の組織に所属す る場合は,複数の組織に交付することは可能です.

研究助成金の交付期間は,原則として,理事会決定以降12月31 日までの間とします.研究実施者は,速やかに助成金受領のため に助成金交付の手続き(奨学寄附受付窓口の連絡等)を行うこと

# 応募方法

#### (1)提出書類

所定様式の「研究助成金申請書」に必要事項を記入し,提出する.申請書は,本会のホームページからダウンロードできます.

必要事項:応募者,研究題名,研究分担者(共同研究者がある場合),予算(費目,金額),研究目的(背景,必要性,意義,価値,成果活用の見込み等),研究計画(実施計画,成果目標等),報告 予定,該当する分科,研究業績,金属学会での活動実績等

(2)作成要領

「研究助成金申請書」に記載された作成要領に従って日本語(専門 語等で部分的に外国語を使用することは可)で作成すること。申 請書については、作成要領に明記されたページ数制限を遵守する こと。制限ページ数を超えた申請は受け付けません。

#### (3)提出方法

作成した研究助成金申請書を, E-mailの添付ファイルで提出し て下さい.なお,ファイルは MS-Word 形式として下さい. Fax や紙での申請は受け付けません.

提出書類等は,採否にかかわらず返却しません.

# 【遵守事項】

研究助成金の交付を受ける際には,研究実施者(応募者および共 同研究者)は,次の事項を遵守下さい.

- ①助成研究は、あらかじめ本会に提出した助成研究実施計画に従っ て実施すること.
- ②助成研究の実施過程において助成研究実施計画を変更する必要が 生じた場合(中止する場合を含む)は速やかに報告し、重大な変更 については本会と対応を協議すること。
- ③助成実施者が所属している組織から別の組織に異動する場合は、 本会と対応を協議すること.

④研究終了6ヶ月後までに,終了報告書(A4様式1枚)および成果 報告書を日本語(専門語等で部分的に外国語を使用することは 可)で作成し,原則としてE-mail添付にて提出すること.

なお,成果報告書は「まてりあ」への成果報告(2頁)の投稿に 代えるものとする.

⑤本会から求められた場合は、実施状況を報告すること.また本会が研究施設への訪問を希望した場合は、可能な範囲で対応すること.

- ⑥研究実施者又は研究実施者の所属する組織は、帳簿を備え、助成 研究に係わる経理を他の経理と明確に区別し、本会から照会があった場合はこれに応ずること。
- ⑦研究成果は研究開始時から研究完了後1年までの間に本会の講 演大会における発表2件および本会の欧文誌又は会誌に論文を 投稿すること。
- ⑧研究成果を学会・学術論文誌・新聞等に発表する場合は、事前に本会に連絡するとともに、本会から資金援助を受けたことを明記すること。
- ⑨実施計画に記載した研究を実施しなかった場合,提出期限後1 年を経過しても研究成果(中間)報告書の提出がない場合又は研 究実施者が研究中止の申し出をした場合には,研究助成金の全 額又は残額を返還すること.

#### 【留意事項】

- 機器・設備等の帰属
- 助成金により取得された機器・設備等は,原則として研究実施者 の所属する組織に帰属します.

2. 助成研究の成果の帰属

助成研究の成果として得られた特許等の知的財産権は,原則として研究実施者に帰属します.

3. 助成研究の成果の公表等

成果報告は、この法人の会報およびホームページ上で一般の閲覧 に供します.

- 4. 申請書記載情報の取り扱い
- 申請書に記載された研究情報については,審査・選考以外の目的 には一切使用しません.

また,個人情報については,本会外へは一切漏洩しません.

- 5. その他留意事項
- ①採否の事由は非公開とし、これに関する問い合わせにはお答えし ません。
- ②研究助成金の申請後,何らかの理由により研究を実施できないこ とが判明した場合,速やかに本会に報告すること.
- 問合・申請先 申請書は下記 E-mail アドレスに提出下さい. 2,3 日過ぎても受理返信通知のない場合は、ご連絡下 さい. (公社)日本金属学会フロンティア研究助成係

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

# 2020年春期(第166回)講演大会参加申込みについて

- 会期:<u>2020年3月17日(火)~3月19日(木)</u>
- 会 場:東京工業大学大岡山キャンパス(〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

懇親会: 2020年3月17日(火)18:00~20:00

会場: 八芳園(〒108-8631 東京都港区白金台1-1-1 ☎ 03-3443-3111(代))

参加申込:当日受付(事前受付終了)

講演発表プログラム:本号付録およびホームページに掲載

詳細:本号付録またはホームページ→講演大会→2020年春期講演大会案内をご参照下さい.

# 2020年春期講演大会併催企業説明会への学生参加者の募集

2020年春期講演大会に合わせ、学生のキャリアサポートの一環として本会主催により、日本金属学会・日本鉄鋼協会講演大会併催の第6 回企業説明会を東京工業大学大岡山キャンパスにて開催します.本説明会は、学生にできるだけ多くの素材・材料関連企業に接してもらい、 進路選択に役立ててもらおうというものです.日本金属学会学生員および日本鉄鋼協会学生会員並びに東京工業大学の学生を対象に募集しま すので、奮ってご応募下さい.詳細は、本会ホームページ(2020年春期講演大会)をご覧下さい.

開催日時 2020年3月19日(木)(春期講演大会の3日目) 開催場所 東京工業大学大岡山キャンパス(東京都目黒区大岡山 2-12-1) 催 公益社団法人日本金属学会 Ŧ 催 一般社団法人日本鉄鋼協会 共 参加企業 素材,材料関連の企業35社 スケジュール 11:00~16:45 ブース説明会(企業ブースでの対面説明) \*出入り自由. 昼食(軽食)提供(先着順). 17:00~18:30 参加企業担当者との交流会(立食懇談,参加無料) \*ブース説明会のみ・交流会のみの参加も可. 応募資格 日本金属学会学生員,日本鉄鋼協会学生会員,東京工業大学学生 応募方法 本会ホームページ上の参加申し込み画面(https://data.jim.or.jp/jim/kigyou/)から申し込む. 切 2020年3月11日(水) 締 問合せ先 (公社)日本金属学会 企業説明会担当 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

☎ 022–223–3685 🕅 022–223–6312 E-mail: jim.company2020@jim.or.jp

# 第9回ランチョンセミナー開催

春期講演大会の会期中に,第9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,参加者の皆様に講演大会の昼食時間を 利用して昼食をとって頂きながら,企業による最新の技術情報を聴 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.

- 主 催 公益社団法人 日本金属学会
- 企 画 株式会社 明報社
- 日時 2020年3月18日(水) 12:05~12:45
- 会場 東京工業大学大岡山キャンパス 日本金属学会講演会場
- 参加費 無料 昼食を無料提供いたします.
- 参加方法 3月17日(火)より参加券を「機器展示会場」にて配布致します.金属学会,または鉄鋼協会の大会参加証をご提示下さい.引き換えにご希望のセミナー参加券をお渡し致します.時間になりましたら、参加券をご持参の上,セミナー会場までお越し下さい. ※予定数に達し次第,配布は終了致します. ※ランチョンセミナーは同業者様等のご入場(セミナー参加券をお持ちの場合でも)をお断りする場合がございます.予めご了承下さい.

#### 参加企業:

- ○<u>オックスフォード・インストゥルメンツ㈱</u>(D 会場)
- 「新しい EBSD データ解析ソフトの応用例」: 森田博文 〇カールツァイス㈱(J 会場)
- 「金属研究における分析・相関顕微鏡法のイノベーション」 : 小田武秀
- ○(耕新興精機(M 会場)「材料内部の3次元像の取得と解析方法」
- ○㈱ TSL ソリューションズ(A 会場)

「SEM(EBSD)および TEM(PED)を用いた弾性歪測定の現 状について」:代表取締役 鈴木清一

- ○㈱東陽テクニカ(K 会場)
- 「ナノインデンテーションの概要と微細構造の硬度の可視 化,および高速加工 Ga フリー FIB のご紹介」
- :ナノイメージングセンター 岩田敏一
- ○ヴァーダーサイエンティフィク㈱(C 会場)

「金属組織解析用試料作製の新製品のご紹介」

~ 皆様のご参加をお待ちしております!! ~

# 

金属材料分野でのキャリアパスとしてどのようなものがあるでしょうか.企業,大学,独法研究機関など様々です.また,一言で企 業といっても様々な分野で活躍可能です.金属材料を学んだ先輩達 がどのような進路で活躍しているか話を聞いてみませんか. 仕事のこと,キャリアの積み上げ方,家庭のこと,気になるいろい ろなことを,お昼を食べながら,気楽に質問してみて下さい.学生 さん,若手の研究者,技術者の方,若い方にエールを送りたい方, 大勢の方のご参加をお待ちしております.

- **主 催** 日本金属学会·日本鉄鋼協会男女共同参画委員会
- **協 賛** 男女共同参画学協会連絡会
- 日 時 2020年3月19日(金)12:00~13:00
- 会場 東京工業大学 大岡山キャンパス 本館1階 H114室(鉄鋼

協会13会場)(東京都目黒区大岡山2-12-1)

参加費 無料 <u>弁当30人分までは無料提供</u>. (講演大会参加申込の有無にかかわらず,このミーティン グに参加できます!!)

プログラム

- 司会 尾崎由紀子(九州大学)
- 12:05~12:10 開会の挨拶
- 男女共同参画委員会委員長 奈良女子大 松岡由貴 12:10~12:40 講演「共働きでの子育ての経験から(難しかった
- 事,良かった事)」 JFE スチール㈱スチール研究所主任研究員(課長)小澤純仁
- 12:40~12:50 総合討論
- 12:50~12:55 閉会の挨拶

男女共同参画委員会副委員長 九大 尾崎由紀子

# 令和2年 春季 全国大学材料関係教室協議会 講演会のご案内

日 時 2020年3月19日(木) 15:00~16:00

場 所 東京工業大学 大岡山キャンパス 西9号館「W935」

講演会 15:00~16:00 基礎研究力強化:政府の取り組み,NIMSの取り組み 国立研究開発法人物質・材料研究機構 理事長

橋本和仁 先生

# 聴講料 無料

# 2020年秋期講演大会外国人特別講演·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をもとに、国際学術交流委員会において審 議採択し、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.2020年秋期講演大会の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.

# 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×5日(上限日数)
- •その他:大会参加費免除,懇親会招待

# 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

#### 推薦用紙

<u>所定様式</u>(ホームページからダウンロードして下さい)により,下 記 E-mail アドレスに「外国人特別講演推薦」と明記し送信下さい. 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.

# 推薦書提出期日 2020年5月29日(金)

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 [M] 022-223-6312
 E-mail: stevent@jim.or.jp

# 日本金属学会主催国際会議企画提案募集

本会が主催する国際会議につきまして、ダイナミックな国際化の 動きに即したタイムリーな企画を選定するため、次の方針で提案募 集を行います.2022年度以降開催の国際会議が対象です.ご参照 の上、期日までに有意義な企画をご提案下さいますようお願いいた します.

# 提案締切日 2020年5月29日(金)

- **提案要項** 下記事項を記載した文書(<u>提案書</u>:ホームページよりダ ウンロードして下さい)(A判)をもって,本会会長宛に 申請して下さい.
  - (1) 会議の名称(和文名・英文名)
  - (2) 会期
  - (3) 開催地・会場予定
  - (4) 会議の目的・特徴
  - (5) 日本開催の経緯と意義
  - (6) 計画概要
  - a. 協賛, 後援団体
  - b. 主要準備日程
  - c. 使用語
  - d. 参加予定国(国名·国数)
  - e. 参加予定者数(国内外)
  - f. 著名な国内外参加予定者(氏名・所属・役職)
  - g. パラレルセッション数およびポスターセッションの有無
  - h. プロシーディングスの出版(出版元・予定頁数, 製作部 数・頒価・配布方法)
  - i. 予算(収入·支出明細)
  - (7) 準備委員会委員(氏名·所属·役職)
  - (8) 提案(連絡)責任者(氏名·所属·役職·住所·電話·E-mail)
- **提案書送付先 〒980-8544** 仙台市青葉区一番町 1-14-32 (公社)日本金属学会 国際会議募集係

#### 一公益社団法人日本金属学会主催国際会議実施方針(2013年12月改訂抜粋)---

#### 1. 基本的要件

- (1) 開催要望が国内外で高まっており、かつ本会会員からも要望 されていること.
- (2) 関係国内学協会の協賛が得られること.
- (3) 会議の計画内容が本会主催の会議としてふさわしいと認められること.
  - 1-1 会議の構成,主要題目,日程,使用語が適切である.
  - 1-2 参加国数および国外参加者が10カ国50名以上予定され ていること.
  - 1-3 参加予定国および参加予定者は確実な根拠に基づいて 推定されていること.
  - 1-4 当該分野における国内外の代表的研究者の参加が予定 されていること.
- (4) 会議の Proceedings を刊行する場合は、多重投稿等ミスコン ダクトが生じないよう対策をとること、実施する対策を事前 に届け出て本会の承認を得ること。

# 2. 本会主催国際会議の区分と規模

- (1) JIMIS: 国際シンポジウム-参加者150名未満
- (2) JIMIC: 国際コンファレンス-参加者150名以上
- (3) その他の国際会議: 国際的要請に基づいて主催する国際集会等
- 3. 開催頻度 必要に応じて随時開催する.
- 4. テーマの公募, 選定方法
  - (1) 「まてりあ」会告で定期的に企画提案を募集する.
  - (2) 提案された企画案は、まず分科会企画委員会において検討、 優先順位を付けて、国際学術交流委員会に提示する.
  - (3) 国際学術交流委員会において実施企画,会議の区分,貸与金

(内定)を決定して,理事会に答申する.

- (4) 理事会において正式決定し,提案責任者に対して文書により 決定通知と開催準備推進の依頼を行う.
- **5. 財 源** (1) 参加費
  - (1) 参加員(2) 文部科学省補助金
  - (3) 地方公共団体補助金
  - (4) 民間財団補助金
  - (4) 以间则凹油叻亚
  - (5) 本会国際学術交流資金からの<u>補助金(上限350万円,残余は</u> <u>会議後返却)</u>
  - (6) 寄付金

#### 6. 業務処理の会計処理

本会の「国際会議開催準備マニュアル」と「国際会議会計処理マ ニュアル」に準拠する(これらの資料は採択決定後に提案責任者に 送付する).

# 新設「研究会」発足のお知らせ

本年3月から新たに下記の研究会が発足いたします.メンバー として登録を希望される方は、氏名、勤務先、連絡先(E-mail address 含む)を明記の上、世話人宛にお申込み下さい.研究会の活 動期間は1期5ヶ年以内です.

継続更新の場合は,延長期間1期3年以内,最長活動期間は2期8 年以内です.

(研究会新設募集:7号会告予定/申請締切日:9月1日)

# ■83. 高温材料の変形と破壊研究会

活動期間 1期5年間(2020年3月~2025年2月)

世界的に、二酸化炭素排出量の削減が強く要請されている状況下 で、発電プラントや輸送媒体の高温部では従来以上の高効率化が必 須となっている.高効率発電・輸送媒体を支えるのは高温材料であ り、その長寿命化や更なる高強度化のためには、変形、破壊および 両者の関連性を基礎的な観点から改めて議論することが必要であ る.高温材料の種類が多岐に渡っており、議論の場が細分化されて いることから、できるだけ広い範囲の高温材料に関する知見を共有 する場を作ることも求められている.特に若手研究者の人材育成と いう観点からもこのような場を提供することが重要である.

本研究会では、年1回の研究会を開催し、様々な材料における 高温変形と破壊、また、高い力学特性を生みだす材料の内部組織に 注目し、実験的ならびに計算的研究成果について基礎的な観点から 討論し、高温材料の長寿命化・高強度化のための原理・原則を改め て見直すことにより、高温材料設計指針の再構築を目指す.

代表世話人 澤田浩太

E-mail: sawada.kota@nims.go.jp

# ■84. ソフト磁性研究会

活動期間 1期5年間(2020年3月~2025年2月)

現在の軟磁性材料はケイ素鋼板,ソフトフェライトが多くを占め ており,新たなソフト磁性材料の開発によるデバイスのさらなる高 周波化や広帯域化,新規高周波磁気デバイスの創製が期待されてい る.ソフト磁性材料においては,これまで主として議論されてきた ハード磁性材料と異なり,磁壁移動を始めとする磁化の動的挙動が 磁気機能を支配する.しかしながら,ソフト磁性材料の動作周波数 領域での磁化の動的挙動は,磁壁移動,あるいは,渦電流によるエ ネルギー散逸のみで説明可能かなど,学術的にも不明な点が多い. すなわち,磁壁移動速度より高速,かつ,強磁性共鳴周波数には満 たない周波数領域(数百 kHz から GHz 帯)での磁化の動的挙動を学 術的見地から体系化することは,磁気物理の観点だけにとどまらず 工学的応用の観点からも重要である.本研究会では,上記の周波数 領域における磁化の動的挙動を学術的に体系化し、ケイ素鋼板、ソフトフェライトに代わる新しいソフト磁性材料の開発指針を示すことを目指す.

 代表世話人 遠藤 恭 東北大学大学院工学研究科准教授
 ☎ 022-795-3781
 E-mail: endo@ecei.tohoku.ac.jp

# 欧文誌編集委員会からのお知らせ

# 特集企画の投稿募集

下記テーマに関する特集企画の投稿を募集いたします.

# ■Structural Analysis and Measurements of Physical Properties on Advanced and Fundamental Materials (先端材料創製およびそれらの構造解析と物性測定)

高度化した情報化社会を支え,SDGs(Sustainable Development Goals,持続可能な開発目標)を意識した社会基盤材料に焦点を当て,最先端の材料開発,特に金属材料,セラミックス,機能性材料を主体とした社会基盤材料の創製に対して,構造解析ならびに物性 測定,対応するデータサイエンスの最前線について,最新の研究成 果を集積した特集号を企画する.

上記テーマに関する特集を, Materials Transactions 62巻3号 (2021年3月発行)に予定しております. 多数ご投稿下さいますよ うお願いいたします.

**掲載予定号**:第62巻第3号(2021年) 原稿締切日:2020年9月1日(火)

- 投稿に際しては、日本金属学会欧文誌投稿の手引・執筆要領(本会 Web ページ)に従うこと.
- •通常の投稿論文と同様の審査過程を経て、編集委員会で採否を決 定する.
- 著者は,投稿・掲載費用をご負担願います.
- 問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32
   (公社)日本金属学会 欧文誌編集委員会
   ☎ 022-223-3685 「払」 022-223-6312
   E-mail: editjt@jim.or.jp

支部行事



# 2020年度春季講演会

[共催] 日本鉄鋼協会九州支部

- 日 時 2020年3月9日(月)13:20~16:30
- 場 所 九州工業大学戸畑キャンパス 図書館4階 AVホール (〒804-8550 北九州市戸畑区仙水町1-1)

プログラム

- 13:20~14:20 湯川記念講演会 ナノ組織制御による高臨界電流超伝導材料の開発 九州工業大学 大学院工学研究院 物質工学研究系 教授 松本 要
- 14:30~16:30 講演討論会
- テーマ:環境・エネルギー調和機能材料の高性能化
- 熱電材料の高性能化へのアプローチー構造・組成制御を中心に 茨城大学 大学院理工学研究科 物質科学工学領域 教授 池田輝之
- ペロブスカイト薄膜の熱電特性とその応用 九州工業大学 大学院工学研究院 機械知能工学研究系 教授 宮崎康次
- 3. REBa2Cu3Oy 超伝導体の薄膜線材化 九州大学 大学院工学研究院 材料工学部門 准教授 寺西 亮

# 参加費 無料

- 定員 70名
- 問合先 九州工業大学 大学院工学研究院 物質工学研究系
   徳永辰也
   ☎ 093-884-3379

E-mail: tokunaga@post.matsc.kyutech.ac.jp



全国8支部では,講演会を始め様々な活動を行って-おります.会告やホームページをご覧頂き,是非ご参加 下さい.



〈公募類記事〉
無料掲載:募集人員,締切日,問合先のみ掲載.
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
<b>〈その他の記事〉</b> 原則として有料掲載.
<ul> <li>原稿締切・掲載号:毎月1日締切で翌月号1回掲載</li> </ul>
・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: [11] 022-223-6312 E-mail:materia@jim.or.jp

集会

# ◇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 教授 岡部 徹
- ■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 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・問合せ 岡部研 レアメタル研究会事務担当 宮嵜智子(okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp)

令和元年度レアメタル研究会のご案内 (2020.1.11現在) ■ 第90回 2020年3月6日(金)(2019年度 最終回)
■第90回 2020年3月6日(金) 14:00~ 生産技術研究所 An 棟2階コンベンションホール テーマ:産業と SDGs と素来社会
午後 2:00~
■講演会プログラム(敬称略)
資源循環と環境問題と SDGs(仮)(60分)
JX 金属株式会社 特別理事 (前代表取締役社長)
大井 滋 講師
循環経済と IT プラットフォームと未来社会(仮)(60分)
東洋大学 情報連携学部(経営学) 教授
廣瀬弥生 講師
未来社会デザインとメタラジー(仮)(60分)
大阪大学 統括理事 副学長/日本鉄鋼協会 会長
田中敏宏 講師
★講演の順序は変更する可能性があります★
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* https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/rc40_j.html



(2019年12月21日~2020年1月20日)

正	員

青柳拓也

姉崎正治

池田陽一

江本秀幸

大国秀行 勝山秀信

株式会社日立製作所	神名麻智	広島大学
産業技術短期大学	郭 素霞	東北大学
東北大学	小幡卓眞	国立研究開発法人物質・材料研究機構
デンカ株式会社	佐々木博之	株式会社豊田自動織機
	高橋 仙一	防衛装備庁航空装備研究所
茨城県産業技術イノベーションセンター	玉岡武泰	九州大学超顕微研究解析センター

邊 明 哲 国立研究開発法人産業技術総合研究所
 武 蔵 安 里 東京大学
 吉 田 果 歩 東京大学
 吉 田 佳 典 岐阜大学

# 学生員

青山拓実	熊本大学	梅本好日古	東北大学	桐 澤 一 輝	東北大学
赤石謙太	東京大学	江藤 敬	熊本大学	沓掛あすか	岐阜大学
赤木夏帆	早稲田大学	大 村 航 暉	京都大学	工藤洋俊	弘前大学
阿部喜史	山形大学	岡 ゆきみ	北海道大学	黒木大暉	立命館大学
阿 部 来 紀	東北大学	岡 野 航 佑	愛媛大学	小泉 聖	芝浦工業大学
荒 木 海 璃	兵庫県立大学	小野寺優太	一関工業高等専門学校	古泉隆佑	東北大学
磯野佑輔	大阪大学	表西昂也	早稲田大学	小林綾斗	豊橋技術科学大学
板橋央樹	東北大学	梶原康輔	早稲田大学	齊 藤 賢 士	大阪大学
伊藤あゆみ	東京工業大学	霞 裕幸	東北大学	酒井 優	熊本大学
井上森平	大阪大学	鐘ヶ江壮介	大阪大学	相 模 暢 孝	大阪府立大学
井 上 裕 理	神戸大学	鎌田航平	東北大学	坂本瞭太	茨城大学
岩田壮一郎	名古屋工業大学	鎌田雅貴	仙台高等専門学校	佐々木廉太	愛媛大学
岩 村 泰 樹	京都大学	上村 悠 華	大阪大学	佐藤優斗	仙台高等専門学校
上田直希	茨城大学	亀谷長諒	豊橋技術科学大学	猿渡ちひろ	関西大学
上村 遙	京都大学	川 島 健 太	千葉工業大学	塩田晃央	東北大学
内田徳之助	山形大学	木村功輝	東北大学	四之宮新	東北大学
内海伶那	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構	木村真也	兵庫県立大学	嶋田太一	京都大学

俊 和希	大阪大学	橋本倫也	兵庫県立大学	松浦祐樹	名古屋大学
陣場優貴	東北大学	長谷川裕斗	千葉工業大学	松下 彩	熊本大学
助川隆哉	茨城大学	長谷川陽祐	富山大学	松下隼也	大阪大学
須藤泰河	東北大学	畠 山 美 樹	東北大学	丸山凌平	名古屋大学
関 航 太 朗	東北大学	早坂 燿	千葉工業大学	三浦栄一	東海大学
宋 瑞瑞	東北大学	林 竜也	宇都宮大学	水元 希	東北大学
髙 島 憂 美	兵庫県立大学	林田将汰	大阪大学	三井嘉人	富山大学
髙塚祐理子	茨城大学	原田寛大	東北大学	宮地拓也	東京大学
竹田圭佑	東海大学	日吉憲祐	東京大学	村田啓太	東北大学
立松 涼アレ	∕ックス 富山大学	平尾航希	富山大学	森下文寛	京都大学
谷保大樹	北見工業大学	平野 凉	近畿大学	守田竜二	富山大学
張 文 鋭	東京工業大学	福岡 樹	豊橋技術科学大学	八幡陽典	大阪教育大学
陳 睿明	東北大学大学院	福島 武	東北大学	山口華歩	千葉工業大学
豊福朋也	久留米工業高等専門学校	福田晃大	名古屋工業大学	山口彰太	東京大学
鳥居辰太郎	弘前大学	藤井智 華	兵庫県立大学	山 崎 泰 成	富山大学
中川康太朗	茨城大学	舟根啓宏	北見工業大学	山下愁斗	富山大学
中筋悠斗	同志社大学	古 澤 皐 平	山形大学	横 田 克 哉	大阪大学
永友 慶	東京理科大学	星 大輔	千葉工業大学	吉田和生	芝浦工業大学
中西賢斗	久留米工業高等専門学校	堀田睦広	東京工業大学	吉田竜輝	兵庫県立大学
仲野暁登	北海道大学	堀内涼太郎	茨城大学	米 倉 友 哉	茨城大学
西 島 琢 磨	九州大学	前 原 薫 靖	兵庫県立大学	涌井拓人	富山大学
沼田大輝	芝浦工業大学	正岡佳純	茨城大学	涌谷佑太郎	東海大学
登林兼丸	早稲田大学	增子直之	東北大学	渡 邊 翔 眞	富山大学
萩原遼太郎	東京工業大学	松井将都	東京工業大学	渡 邉 亮 介	仙台高等専門学校

# 外国一般会員

# KWON EUI PYO

Korea Institute of Industrial Technology Mohammadi Abbas 九州大学 wang chen Centre of Excellence for Advanced Materials

# 外国学生会員

BANOTH SANTHOSH Tokyo Metropolitan University Chen Zhen University of Science & Technology Beijing FAN Chung-Ting 京都大学 HU Bin University of Science and Technology Beijing JEONG Yeon Beom 東北大学 Li Shaohui University of Science and Technology Beijing Nong Xiaodong University of science and technology, Beijing Park hyeontae

Korea Institute of Industrial Technology/Jeonbuk national University

yingbo Zhang

Xi'an University of Architecture and Technology 朱 燦 名古屋大学 シン リニ Hiroshima University

 Rong Xuequan
 X

 University of Science and Technology Beijing
 X

 SUHUI su
 Taiyuan University of Science and Technology
 X

 Sun Mingyu
 T

 University of Science and Technology Beijing
 X

 Tian Chang
 Z

 University of Science and technology Beijing
 X

 Utami Lidyana
 Tokyo Institute of Technology

 wei lujie
 Z

 University of Science and Technology Beijing
 X

 WU XIANGYU
 東北大学

Xie Yaoshu 東京大学 YU Yishuang University of Science and Technology Beijing YU Xinguang 早稲田大学 デイ 広島大学 ウ 小 豊 京都大学 Ŧ ZHU Linye 東北大学 曹 妟 鑒 東京大学 宇 暘 鄭 東北大学 李 楽 京都大学 LIU WENCHUANG 広島大学 劉 文チヤン 広島大学

🖌 住所変更等の手続きは,ホームページ:入会・会員→会員マイページをご利用下さい.

# 日本金属学会誌掲載論文 Vol. 84, No. 3 (2020)

──特集「固体中の水素と材料特性Ⅳ」──

特集「固体中の水素と材料特性Ⅳ」によせて 市川貴之 宮岡裕樹 日野 実 堀川敬太郎 金谷輝人

純アルミニウムの水中表面摩擦による水素侵入および その引張特性に及ぼす影響 堀川敬太郎 小林秀敏

A5052-H14 および A2017-T4 アルミニウム合金の疲 労特性に及ぼす表面処理の影響

城戸竜太 桑野亮一 日野 実 村山敬祐 黒坂成吾 小田幸典 堀川敬太郎 金谷輝人

無電解 Ni-P めっきによる高強度鋼の水素脆性に及ぼ すP含有量の影響 日野 実 土居悠帆 桑野亮一 小田幸典 堀川敬太郎

硫酸浴から各種亜鉛系めっきされた高強度鋼の水素脆 性に及ぼすベーキングの効果

日野 実 向井駿介 島田丈寛 岡田孝輝 堀川敬太郎

電解水素チャージ環境における SCM435の回転曲げ 疲労特性 川上 遼 窪田和正 松永久生

Ti-Mn-V系水素吸蔵合金の水素化特性

久保和也 伊藤秀明 秋葉悦男 林 灯

 チクソモールド成形された AM60B および AZ91D マ グネシウム合金の機械特性と水素発生に及ぼすカーボ ン添加の影響
 橋本嘉昭 日野 実 柳屋岳彦 山口 毅 水戸岡 豊 金谷輝人

# Materials Transactions 掲載論文

Vol. 61, No. 3 (2020)

—Regular Article—

**Materials Physics** 

AC Impedance Measurement and Electron Holography of Ionic Liquid in a Transmission Electron Microscope Yoh Iwasaki, Ken Harada, Keiko Shimada, Manabu Shirai and Daisuke Shindo

**Microstructure of Materials** 

Ductility Improvement Mechanism of Ti-6Al-4V+ O Sintered Material

> Kento Kamiyama, Shota Kariya, Mizuki Fukuo, Junko Umeda and Katsuyoshi Kondoh

Elemental Distribution near the Grain Boundary in a Nd–Fe–B Sintered Magnet Subjected to Grain-Boundary Diffusion with  $Dy_2O_3$ 

M. Itakura, M. Namura, M. Nishida and H. Nakamura

Effect of Ultrasonic Radiation on the Grain Refinement of High Purity Aluminum

Ruiquan Wang and Haijun Huang

Deposition-Temperature Dependence of Vortex Pinning Property in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>+BaHfO<sub>3</sub> Films

Tomoya Horide, Kenta Torigoe, Ryusuke Kita, Ryota Nakamura, Manabu Ishimaru, Satoshi Awaji and Kaname Matsumoto

Effect of Homogenization and Extrusion on Microstructure and Mechanical Properties of Cladding Billet by Cladding Casting

Pin-Feng Jia, Xing Han, Wenbin Li, Hai-tao Zhang and Jian-Zhong Cui

Formation of Spherical, Rod- and Branch-Shaped Colloidal In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nanocrystals through Simple Thermolysis of an Oleate Precursor Satoshi Tsukuda, Hideo Uesugi, Masao Kita and Takahisa Omata

**Mechanics of Materials** 

Effect of Laser Patterning Preprocessing on Fatigue Strength of Adhesive Bonded Joints Using Thin Steel Plate Katsuki Shikimoto, Shogo Ishida,

Wataru Jinnouchi, Yuki Ogawa, Hiroyuki Akebono and Atsushi Sugeta

Tribological Behaviors of  $B_6O/Si_3N_4$  and  $B_6O/Al_2O_3$  Sliding Pairs in Water

Takashi Murakami, Atsushi Korenaga and Tsuguyori Ohana

Crystallographic Orientation and Microstructure Dependences of Surface Potential for Annealed S45C Steel Using Combined Scanning Kelvin Force Probe Microscopy and Electron Backscatter Diffraction Analyses

Yoshiharu Murase, Hiroyuki Masuda and Hideki Katayama

Materials Chemistry

Effect of W Content on the Oxidation and Electrical Behaviors of Co-W Coatings for SOFC Interconnects Fabricated by Electrodeposition

Lu Gan, Hideyuki Murakami and Isao Saeki

Effect of Organic Additives on the Electrodeposition Behavior of Zn from an Alkaline Zincate Solution and Its Microstructure

Kenta Fukumoto, Satoshi Oue, Yoshiharu Kikuchi, Shinya Akamatsu, Tomio Takasu and Hiroaki Nakano

Effect of Cations on Protective Properties of Rust Layer Formed on Carbon Steel during Wet/Dry Cyclic Corrosion Kyung-Tae Kim, Hiroaki Tsuchiya, Koushu Hanaki, Masato Yamashita and Shinji Fujimoto

Materials Processing

Effect of Bending Method on Tube Hydroforming Masaaki Mizumura and Yukihisa Kuriyama

Effects of Interactions between Nodule Count of Spheroidal Graphite and Retained Austenite on Tensile Properties of Austempered Ductile Cast Iron Heat Treated from  $(\alpha + \gamma)$  Range

Tatsuo Inoue, Atsushi Ito and Shiro Torizuka

Effects of Reduced Pressure, Casting Design and Heat Transfer Resistance of Liquid Resin on Mold Filling in Expendable Pattern Casting Process of Aluminum Alloy Sadatoshi Koroyasu

**Engineering Materials and Their Applications** 

Improved Absorption and Desorption Kinetics of Mg–Ni–Ce Alloy Activated under Elevated Hydrogen Pressure Lishuai Xie and Man Xu

Formation of Mullite Coating by Aerosol Deposition and Microstructural Change after Heat Exposure Toshiki Shibuya, Taisuke Mizuno, Atsuhisa Iuchi and Makoto Hasegawa

# Environment

Spark Sintering of TiB<sub>2</sub> Reinforced Fe Matrix Composites with Both High Thermal Conductivity and Hardness, and Their Microstructural Characterizations Yujiao Ke, Kazuhiro Matsugi, Zhefeng Xu,

Yongbum Choi, Mingzhi Wang and Jinku Yu

*—Express Rapid Publication—* Conduction Path Formation Mechanism of Solderable Polymer Composites with Low-Melting-Point Alloy/High-Melting-Point Alloy Mixed Filler

Byung-Seung Yim, Jae Woo Lee and Jong-Min Kim



書 評

「物理科学計測のための統計入門一分光スペクトルと化学分析への応用」を読んで

本書では、科学計測における測定値の取り扱い、スペクトルのデ ータ処理(スムージング、ピーク分離等)などの基本を分かり易く解 説している.アグネの「金属」に掲載された内容をペースに46節 で構成されており、おおむね前半はデータの統計的取扱いの概略に 関して書かれている.さらに具体的なデータ解析について学ぶとき には、数学の統計や各種のスペクトル解析に関する書籍等を参考に すると良いであろう.例えば、スペクトルのコンボリューションや デコンボリューションの具体的な処理等を行うときには、真のスペ クトル、装置関数の実測、各種関数等が出てくる.それらは実験デ ータの種類等に依存するため、各分光法によるスペクトルの特徴を 知る必要がある.また、本書の後半には、化学分析等の研究に従事 してきた著者等の経験が書かれており、エッセイ的な内容も含まれ ている.例えば、各種の分析法や分析機器の標準化について取り上 げ、その中には齟齬のようなことも含まれているとしている.分析 河合 潤 田中亮平 今宿 晋 国村伸祐 著

機器には多くの種類があり、それらで多くの用語や表現が使われている. ISO(国際標準規格)で出てくる用語や表現は、JIS(日本工業 規格)で出てくるものは必ずしも一貫しておらず、例として EPMA (electron microprobe analyzer)について書かれている. その邦訳は 電子プローブ(または電子線)マイクロアナライザーが一般的である が、ここでは電子プローブX線マイクロアナライザーと呼び、原 理に踏み込んだ表現となっている. このように、英語-日本語の表 現は標準化の担当分野等によって少し異なることもあるが、一つの 文書の中では一貫性を持たせたほうが良い.本書を細かく読むとそ れらの齟齬だけでなく社会の多様性の大切さも考えさせてくれるの で、一読を薦めたい.

# (東北大 鈴木 茂)

〔2019年 A5版 アグネ技術センター 182頁 2,600円+税〕

開催日	名称·開催地·掲載号	主催	問合先	締切
2020年3月				
2	腐食防食部門委員会第333回例会(大阪)	日本材料学会	TEL 075–761–5321 jimu@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
5	第1回世界エンジニアリングデイ記念シンポジ ウム(東大)	日本工学会	TEL 03-6265-0672 eng@jfes.or.jp http://www.jfes.or.jp/	
6	第34回軽金属セミナー「アルミニウム合金の組 織 一応用編(加工・熱処理による組織変化)」 (第6回)(芝浦工大)	軽金属学会	TEL 03-3538-0232 http://www.jilm.or.jp/	定員 40名
6	第45回組織検査用試料の作り方(組織の現出)講 習会「鉄鋼材料・非鉄金属材料・表面改質処理お よび異常組織材」(千葉工大)	材料技術教育研究 会	TEL 047-431-7451	2.28
6	第90回レアメタル研究会(東大生産技研) (本号171頁)	レアメタル研究会	TEL 03–5452–6314 okabelab@iis.u-tokyo.ac.jp https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/ japanese/rc40_j.html	
8~11	COMPSAFE2020(第3回安心・安全・環境に関 する計算理工学国際会議)(神戸)	COMPSAFE2020 実行委員会	secretary@compsafe2020.org http://www.compsafe2020.org	
9	2020年度春季講演会(九工大)(本号170頁)	九州支部	TEL 093-884-3379	
12~14	2019年度量子ビームサイエンスフェスタ(水戸)	高エネルギー加速 器研究機構物質構 造科学研究所, J- PARC センター 他	https://mlfinfo.jp/sp/qbs-festa/2019	
17~18	第23回 電磁気応用部門・磁粉・浸透・目視部 門・濡れ試験部門合同シンポジウム「表面探傷技 術による健全性診断,品質検査」(東京)	日本非破壞検査協会	TEL 03-5609-4015 nakamura@jsndi.or.jp http://www.jsndi.jp/	参加 2.21
17	第3回「高校生・高専学生ポスター発表」(東工 大)(1号57頁)	日本金属学会	TEL 022–223–3685 annualm@jim.or.jp	
17~19	日本金属学会春期講演大会(東京工業大学大岡山 キャンパス)(東京)(本号167頁)	日本金属学会	TEL 022–223–3685 FAX 022–223–6312 annualm@jim.or.jp	
17~19	第11回日本複合材料会議(JCCM-11)(大阪)	日本材料学会,日 本複合材料学会	TEL 075–761–5321 jimu@jsms.jp http://www.jsms.jp/	
18	第9回ランチョンセミナー(東工大)(本号168頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685	
19	第12回男女共同参画ランチョンミーティング「金 属材料分野での多様なキャリアパス」(東工大) (本号168頁)	男女共同参画委員 会	TEL 022-223-3685	
19	企業説明会(東工大)(本号167頁)	日本金属学会	TEL 022-223-3685 jim.company2020@jim.or.jp	参加 3.11
19	令和2年 春季 全国大学材料関係教室協議会 (東工大)(本号168頁)	全国大学材料関係 教室協議会		
27~31	The International Conference on Sintering 2021 (Sintering 2021国際会議)(岐阜)	Sintering 2021 国 際会議組織委員会	info@sintering2021.org https://www.sintering2021.org/ wakai.f.aa@m.titech.ac.jp	
2020年5月		ſ		
19~20	新時代 Active Materials 自己治癒するセラミックス・金属―その特性と応用 (神奈川)	神奈川県立産業技 術総合研究所	TEL 044-819-2033 ed@newkast.or.jp https://www.kanagawa-iri.jp/learn/resear- cher/edu_r02/ed02_seminar_2/	
19~20	第36回希土類討論会(札幌)	日本希土類学会	TEL 06-6879-7352 kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp http://www.kidorui.org/	発表 1.24
22~24	軽金属学会第138回春期大会(香川大)	軽金属学会	http://www.jilm.or.jp/	参加 4.16
25~27	トライボロジー会議2020 春 東京(東京)	日本トライボロ ジー学会	TEL 03–3434–1926 jast@tribology.jp http://www.tribology.jp	
25~27	日本顕微鏡学会第76回学術講演会(大阪)	日本顕微鏡学会	TEL 03-6457-5156 jsm-post@microscopy.or.jp http://conference.wdc-jp.com/microscopy/ conf2020/index.html	
27~29	ナノ学会第18回大会(横浜国大)	ナノ学会	nano18@mtg-officepolaris.com http:/mtg-officepolaris.com/nano18/	
29	第5回マルチスケール材料力学シンポジウム(電気通信大)	日本材料学会	http://www.jsms.jp/	講演 2.3
2020年6月				
11~12	<b>弗13</b> 回核融台エイルキー連台講演会(八尸)	ノフスマ・核融合 学会,日本原子力 学会	http://rengo13.roku.qst.go.jp	
$12 \sim 14$	2020年度塑性加工春季講演会(名工大)	日本塑性加工学会	https://www.jstp.or.jp	
18~19	第25回動力・エネルギー技術シンポジウム(北 大)	日本機械学会	TEL 03–5360–3505 https://www.jsme.or.jp/	

開催日	名称·開催地·掲載号	主催	問合先	締切
28~7.3	炭素材料国際会議(CARBON2020)(京都)	炭素材料学会,日 本学術会議	TEL 03-6824-9376 CARBON2020@bunken.co.jp http://www.tanso.org/carbon2020/	
29~7.3	PTM2020(8th International Conference on Solid-Solid transformations in Inorganic Materials)(中国西安)	中国金属学会	ptm2020@csm.org.cn http://www.ptm2020.com	
2020年7月				
$7 \sim 9$	第57回アイソトープ・放射線研究発表会(東大)	日本アイソトープ 協会	TEL 03-5395-8081 gakujutsu@jrias.or.jp http://www.jrias.or.jp/	
16~17	第54回 X 線材料強度に関するシンポジウム(東北 大)	日本材料学会	TEL 078–795–3212 nishida@kobe-kosen.ac.jp http://www.jsms.jp/	講演 3.27
2020年9月				
16	The 15th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics (Slovenia)	日本実験力学会	TEL 025–368–9310 office–jsem@clg.niigata–u.ac.jp https://www.jsem.si/15th–ISEM2020– Ljubljana/	
16~18	日本金属学会秋期講演大会 (富山大学五福キャン パス) (富山)	日本金属学会	TEL 022–223–3685 FAX 022–223–6312 annualm@jim.or.jp	
2020年10月				
19~22	The 8th conference of Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT8)第8回アジア結晶成長・結 晶技術国際会議(宮崎)	アジア結晶成長お よび結晶技術学会 他	TEL 06-6879-8730 yamanoi-k@ile.osaka-u.ac.jp https://www.opt.miyazaki-uac.jp/hikari/	
27~30	第1回地球環境のための炭素の究極利用技術に 関するシンボジウム(奈良)	日本鉄鋼協会	TEL 075-223-2311 http://web.apollon.nta.co.jp/CUUTE-1/ cuute-1@nta.co.jp	
2020年11月				
15~19	The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9)(高松)	日本表面真空学会	isss9@jvssjp https://www.jvss.jp/isss9/	参加 9.22
2020年12月		•		
7~11	Materials Research Meeting 2020 (MRM2020) (横浜)	日本 MRS	TEL 03-6264-9071 info_mrm2019@jmru.org https://mrm2020.jmru.org	
8~29	Mate2020第26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/mate2020/src/	
2022年7月				
$5 \sim 8$	The 7th International Conference on the Charac- terization and Control of Interfaces for High Qual- ity Advanced Materials (ICCCI2022) (富士吉田)	紛体工学会	http://ceramics.ynu.ac.jp/iccci2022/index. html iccci2022@ynu.ac.jp	



	2019, 2020年度会報編集委員会	(五十音順, 敬称略)	
委員長 大年 員長 竹戸 委員員 人 大 行 月 天 近 杉 田 徳 長 宮 山 「 で 谷 山 で 一 の で の で の の の の の の の の の の の の の の	<ul> <li>家 誠</li> <li>部 該</li> <li>路 該</li> <li>路 該</li> <li>路 首</li> <li>6 古本卓也 井田駿太郎</li> <li>7 百本卓也 井田駿太郎</li> <li>8 百子 小幡亜希子 木口賢 記</li> <li>8 百子 小幡亜希子 木口賢 記</li> <li>8 百子 齊藤信雄 齊藤敬高</li> <li>7 齊藤信輝 商島克利</li> <li>7 下澤 祐介 周日谷貴夫</li> <li>8 百子 提 祐介 永井 崇</li> <li>第 市 二 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一 一</li></ul>	上田恭介 梅津理恵 大石 郁 北村一浩 小畠淳平 小柳禎彦 佐藤紘一 佐藤豊人 高山直樹 田中秀明 趙 研 寺西 亮 寺本武司 土井康太郎 長岡 亨 中村篤智 野山義裕 細川裕之 本間智之 三井好古 脇田元彰 森戸春彦 諸岡 聡 吉矢真人 吉年規治 李 海文	
まてりあ第59巻第3 発行所 公益社団法人日 〒980-8544 TEL 022-22	<b>号(2020)</b> 発行日 2020年3月1日 <b>本金属学会</b> 発行 仙台市青葉区一番町一丁目14-32 印刷 3-3685 FAX 022-223-6312 発売	<b>定価(本体1,700円+税)送料120円</b> 人 山村英明 所 小宮山印刷工業株式会社 所 丸善雄松堂株式会社 〒160-0002 東京都新宿区四谷坂町 10-10	



# 機関誌(まてりあ・会誌・欧文誌)掲載記事・論文の引用(転載)許可の改訂について

会報・会誌・欧文誌編集委員会

本会では,機関誌(まてりあ・会誌・Materials Transactions)の転載許可業務の一部を,(一社)学術著作権協会に委託することといたしました.該当する場合には,本会にお申込みいただいた後でご案内いたします.

また,これに伴い,許諾の要不要および許諾費用について改訂いたしましたので,下記の通りお知らせいたします.ご理解を何卒宜しくお 願いいたします.

尚,いずれの場合でも,引用(転載)する場合は,必ず出典を明記するようにして下さい.

#### 1. 許諾の要不要および許諾費用

- 1.1. 著作者本人が引用する場合
- 適切な引用の範囲の場合

転載先刊行物の種類	許諾の要不要	費用
非営利目的	不要	無料
営利目的	必要	有料(5図面まで5,000円,6図面以上は1図あたり1,000円)
文章のみの場合(営利・非営利問わず)	不要	無料

② 適切な引用の範囲を超える場合(論文全体の転載,リポジトリ登載含む)

転載先刊行物の種類	許諾の要不要	費    用
非営利目的	必要	有料(1論文あたり30,000円※)
営利目的	必要	有料(1論文あたり60,000円~,発行部数・公開方法等による)

※ 無料公開論文のものを引用・転載する場合は無料,また,博士論文,科研費申請書類等は無料とする.

1.2. 著作者本人以外(出版社含む)が引用する場合

① 適切な引用の範囲の場合

転載先刊行物の種類	許諾の要不要	費用
非営利目的	必要	無料
営利目的	必要	有料(事務局へ問い合せ下さい)
文章のみの場合(営利・非営利問わず)	不要	無料

② 適切な引用の範囲を超える場合(論文全体の転載,リポジトリ登載含む)

転載先刊行物の種類	許諾の要不要	費用
営利・非営利問わず	必要	有料(事務局へ問い合せ下さい)

# 2. 営利·非営利の具体例

転載先の種類	転載先の種類 非営利とみなす例	
学術ジャーナル(オンラインジャーナル含む)	すべて非営利とみなす	なし
研究報告書	学会の事業報告,企業の技報,大学紀要,博 士・修士論文,科研費申請書・報告書類	なし
国際会議プロシーディングス, Abstract 集	すべて非営利とみなす	なし
講習会等テキスト・スライド	無料もしくは実費相当程度の価格のもの(学 協会,公的機関主催のもの)	収益を目的とした価格のもの(企業主催のもの)
カタログ・パンフレット	収益を目的としない会合・集会等で配布する 研究紹介,研究者プロフィール等	企業の製品カタログ・パンフレット等
単行本	実費相当程度の価格のもの(学協会,公的機 関発行のもの)	収益を目的とした価格のもの(商業出版社発 行のもの)
Web サイト・Web データベース	機関リポジトリ,研究内容の紹介等利用料が 無料のもの	利用料が有料のもの

問合せ先 〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会 転載許可担当

☎ 022-223-3685 🕅 022-223-6312 E-mail: kyoka@jim.or.jp







# **Clean Chamber**

は中却さ2

# はやぶさ 2」の新たなミッションを遂行すべはやぶさ」帰還後の経験と実績を礎に、

**『社のクリーンチャンバーは進化」** 



# 東京営業所 新社屋完成

2018 年 6 月、東京営業所社屋の建て替えにより新社屋が完成いたしました。 今後ともより一層のご指導とご支援を賜りますようお願い申し上げます。 なお、電話・FAX 番号、メールアドレスに変更はございません。



●各種グローブボックス
 ●方ス循環精製装置
 ●クリーンオーブン
 ●ドライルーム
 ●封止装置
 ●ラミネート装置
 ●高気密恒温恒湿室
 ●大型システム
 ●クリーンチャンバー
 ●その他特殊試験,製造装置の制作いたします。

※当社のすべての製品は、日本国内でのみご利用いただけます。



本社·工場 〒567-0028 大阪府茨木市畑田町11番50号 TEL:072-625-1138 FAX:072-625-1178 東京営業所 〒101-0042 東京都千代田区神田東松下町32番地 TEL:03-5256-1138 FAX:03-5256-1145 URL:http://www.miwass.co.jp E-mail:info@miwass.co.jp