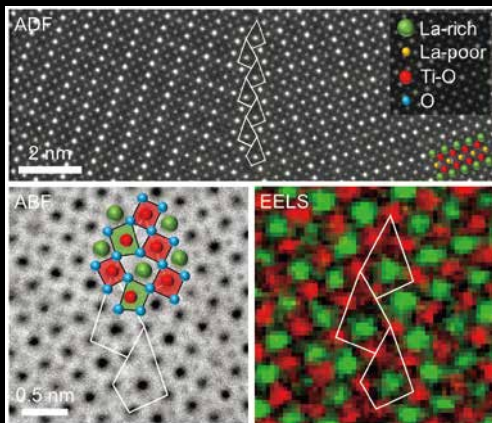


# Materia Japan

まてりあ Vol.61

MTERE2 61 (5) 247~318 (2022)

No.5  
2022



## ・ 金属素描 ～パラジウム～

表彰 受賞者紹介 (春)

記念講演 材料数学としてのクラスター変分法

記念講演 永久磁石の高性能化にみる複合組織制御

## ・ 2022 年秋期講演大会講演募集

その鉄の名は、電磁鋼板。

エアコン、冷蔵庫、電気自動車などのモーターの鉄心をはじめ、発電所内や送電の変圧器にも使われ「電気があるところ電磁鋼板あり」といわれる高機能な鉄。

国際社会が脱炭素に向かうなか、いっそう需要が高まっています。

日本製鉄は、世界最高水準のエネルギーロス低減を実現し、さらなる省エネ・CO<sub>2</sub>削減に貢献するハイグレードな電磁鋼板を開発。

あなたの暮らしのそばで、世界中で、エコを加速していきます。

エコをさらにエコにする鉄、  
知っていますか。

 **NIPPON STEEL**

電磁鋼板についての  
製品情報はこちら





5

2022  
Vol.61  
No.5

まてりあ

|               |   |     |
|---------------|---|-----|
| 金属素描          | No. 22 パラジウム(Palladium) 佐藤剛一  | 247 |
| 表彰            | 第67回学会賞受賞者  | 249 |
|               | 第63回技術賞受賞者  | 250 |
|               | 第28回増本量賞受賞者   | 250 |
|               | 第61回谷川・ハリス賞受賞者  | 251 |
|               | 第80回功績賞受賞者  | 252 |
|               | 第53回研究技能功労賞受賞者  | 253 |
|               | 第72回金属組織写真賞受賞者  | 255 |
|               | 名誉員推戴者  | 257 |
|               | 第5回フェロー認定者  | 258 |
|               | 第38回優秀ポスター賞受賞者  | 258 |
|               | 第7回高校生・高専学生ポスター賞受賞者   | 259 |
|               | 第30回奨学賞受賞者  | 261 |
|               | 第72回金属組織写真賞受賞作品   | 262 |
|               | 選評  | 264 |
| 学会受賞記念講演      | 材料数理学としてのクラスター変分法 毛利哲夫  | 265 |
| 本多記念講演        | 永久磁石の高性能化にみる複合組織制御 杉本 諭   | 275 |
| 新進気鋭          | 金ナノ粒子-酸化チタン/ポリアニリンハイブリッド電極を用いたグルコースセンサー性能の向上 邱 琬婷   | 283 |
| 談話室           | Last Experiment—カドミウム同位体を用いたBNLのHFBR 最後の中性子非弾性散乱実験とニューヨークの思い出あれこれ— 大庭卓也                                     | 288 |
| 思い出の教科書、この一冊! | “An Introduction to Statistical Thermodynamics”<br>T. L. Hill(著), Dover Publications; Revised 版, 1987年 横井達矢 | 290 |
| はばたく          | 転位動力学法の概説とこれからと 井原史朗  | 291 |
| スポットライト       | 銅を介したスズの析出 山崎英磨 川嶋結己  | 292 |
|               | 電気分解による平面的スズ樹の作製Ⅱ 松本凜太郎 横井風羽  | 294 |
|               | タンタルコンデンサの熱分解によるタンタル焼結体の回収 清水梨穂   | 296 |
| 本会記事          | 会告  | 297 |
|               | 2022年秋期講演大会講演募集   | 297 |
|               | 掲示板   | 313 |
|               | 新入会員  | 315 |
|               | 会誌・欧文誌5号目次  | 316 |
|               | 次号予告  | 316 |
|               | 行事カレンダー   | 317 |
|               | 金属学会パンフレット  | 巻末  |

## 今月の表紙写真

リチウムイオン電池の固体電解質である(Li, La)TiO<sub>3</sub>の $\Sigma 5$ 粒界から取得したADF, ABF-STEM像およびEELS元素マップである。 $\Sigma 5$ 粒界は原子配列の乱れが小さく、バルクに近い原子構造・配位環境を有することが明らかとなった。(佐々野 駿 石川 亮 太田裕道 柴田直哉 幾原雄一著 262頁 図2より掲載)

表紙デザイン: ビーコン コミュニケーションズ株式会社 グラフィックスタジオ

複写をご希望の方へ

本会は、本誌掲載著作物の複写に関する権利を一般社団法人学術著作権協会に委託しております。本誌に掲載された著作物の複写をご希望の方は、(一社)学術著作権協会より許諾を受けて下さい。但し、企業等法人による社内利用目的の複写については、当該企業等法人が社団法人日本複写権センター((一社)学術著作権協会が社内利用目的の複写に関する権利を再委託している団体)と包括複写許諾契約を締結している場合にあつては、その必要はありません。(社外頒布目的の複写については、許諾が必要です。) 権利委託先 一般社団法人学術著作権協会  
〒1107-0052 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。

## 付設展示会(オンライン版) レポート



日本金属学会2022年春期講演大会は、当初、東京大学駒場キャンパスでの開催を目指していたが、新型コロナウイルス感染症の急拡大を受け、感染拡大防止の観点から、オンラインでの開催となった。開催期間は、3月15日から17日、22日の4日間であった。

大会参加数は1,227名、また、講演数も685件となり、前回同様に盛会となった。大会のオンライン開催に伴い、付設展示会を大会ホームページ上にてオンライン版として開催した。5社の出展(掲載)があったので、以下に出展内容を紹介する。

### ・(株)池上精機

精密試料の自動仕上げ研磨機IS-POLISHERシリーズ3機種を紹介。人の手による研磨の課題解決を提案。

動画での操作説明や研磨事例の資料も掲載した。

### ・オックスフォード・インストゥルメンツ(株)

CMOS搭載EBSD検出器、最新EBSDデータ解析ソフトウェア、ライブEDS分析システム、非鉄金属介在物自動分析システムを紹介。展示ページでの動画や資料掲載の他、技術セミナー(動画版)でも詳細な解説があった。

### ・(株)TSLソリューションズ

EBSD法をベースとしたSEM/TEMを用いた材料組織観察およびその解析技術に関連した製品の輸入販売、開発・設計・製作・技術サポートを展開する事業内容を紹介。

OIM結晶方位解析装置、EBSD観察用insituステージ、TEM方位マップの資料を掲載した。

### ・日本テクノプラス(株)

世界で唯一の共振法応用の弾性率、内部摩擦、疲労試験などの総合物性測定装置メーカーというストロングポイントを紹介。

### ・(株)モルシス

材料設計支援統合システムを中心に分子シミュレーションソフトウェアを紹介。チュートリアルの動画や資料も掲載した。

前回に続き「オンライン展示」となった。

展示会ページは、製品、ロゴ等画像掲載や動画の埋め込み等の新しい掲載要素を加え、より閲覧率や製品・サービスの訴求力を向上させる仕掛けを施した。また、展示ページへの入り口を増やし、大会参加者の閲覧率増加を狙った。

オンライン展示会には下記のメリットがある。

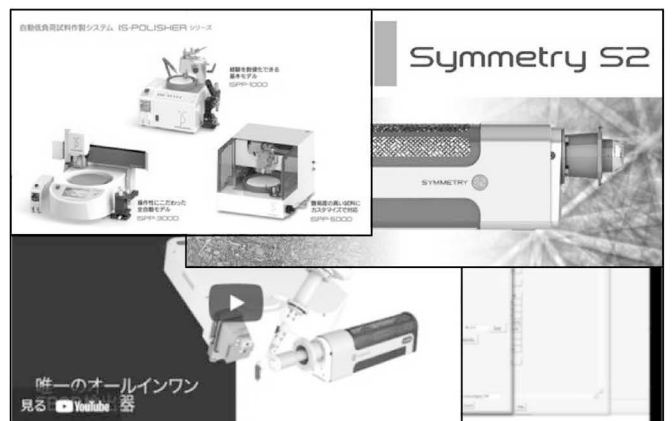
- ・ 時間や場所の制約を受けない=参加者のアクセスが容易  
(展示会場に向かなくてよい)
- ・ 出展コストが抑えられる  
(人件費、ブース装飾、他経費)
- ・ 天候や災害の影響を受けにくい
- ・ ZOOM等のシステムの導入により、Web上での面談も可能

本機器展示への問い合わせのあった企業の多くはオンライン開催になったことで、出展を断念したようであり、対面形式での展示を希望する企業が多い感触を得た。次回の講演大会では対面で展示会を開催できることを願うばかりである。

次頁からは、「誌上展示会」として、材料研究に役立つ機器等の情報を掲載する。オンライン展示に掲載していない製品情報も掲載したので、是非ご一読頂き、今後の研究開発にお役立て頂きたい。

付設展示会 (オンライン版)

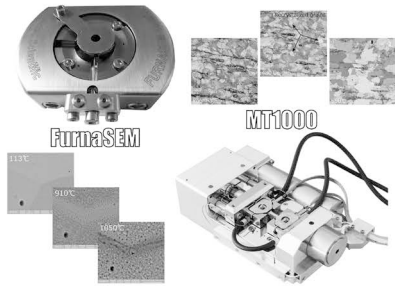
<https://confit.atlas.jp/guide/event/jim2022spring/exhibitorslist/ja>





# まてりあ「誌上展示会」

## 環境制御型SEM向け 材料特性試験ステージ



### FurnaSEM~加熱ステージ~

- 加熱温度:~1000℃、~1300℃
- 熱電子軽減フィルター
- 高温下化学反応・組織変化のその場観察

### MT1000~材料特性試験ステージ~

- 加熱温度:~1000℃(ダブルオープン)
- 牽引力:引張時最大10kN(圧縮や屈曲への変換ツール)
- 高温下材料特性のその場観察

### オプション

- 実験支援ソフトウェア、EBSD観察対応
- ガス注入キット、冷却対応
- 事前テスト用真空チャンバーセット、SEM用光学観察キットなど

## 株式会社アド・サイエンス

〒273-0005 千葉県船橋市本町2-2-7 TEL.047-434-2090 FAX.047-434-2097  
URL: <https://www.ads-img.co.jp/> E-mail: [ads-contact@ads-img.co.jp](mailto:ads-contact@ads-img.co.jp)

## 自動低負荷試料作製システム IS-POLISHER ISPP-3000

アルミとセラミックの硬軟質材の積層構造でできた「MLCCの良品・故障解析」、アルミや銅を使用したICの「ボンディングの密着性評価」、微細な構造を持つ電子部品の「構造解析及び故障解析」、CFRPのような「硬軟複合材料の構造解析」など、低荷重・低負荷による試料研磨を行えるIS-POLISHERの需要が益々増加しています。

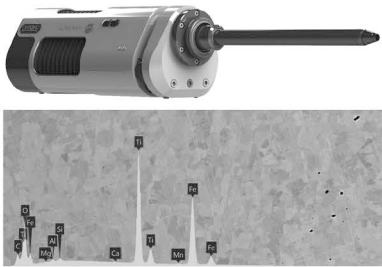
### 【IS-POLISHERの特長】

- 25g~300gまでの低荷重研磨ができます
- 低負荷による研磨がEBSD観察を可能にします
- 研磨条件を共有することで、人による仕上りのバラつきをなくします
- 研磨条件の数値化とメモリ機能が技術の継承を容易にします

## 株式会社 池上精機

〒223-0057 神奈川県横浜市港北区新羽町543-1-2F TEL.045-717-5136 FAX.045-717-5137  
URL: <https://is-polisher.com> E-mail: [sales@ikegamiseiki.com](mailto:sales@ikegamiseiki.com)

## 鉄鋼介在物自動分析システム「AZtecSteel」



AZtecSteelは、電子顕微鏡に搭載したエネルギー分散型X線システム(EDS)を使った自動粒子解析機能を応用し、鉄鋼介在物を自動で解析するシステムです。母材と介在物の反射電子コントラストの違いから介在物の位置と形状を計測し、電子ビームを全ての介在物に照射してEDSスペクトルを収集し、組成を分析します。測定された介在物は、カスタマイズ可能なスキームによって自動で分類され、ASTME2142やISO4967等の国際標準に従って結果を出力します。最新の大面積SDDセンサーを搭載した、「UltimMax」検出器により、1粒子あたりのスペクトル収集時間を短縮し、高いスループットでの分析が可能です。また独自のEDSスペクトル処理アルゴリズム「Tru-Q」を内蔵し、正確な介在物の組成分析を実現します。

## オックスフォード・インストゥルメンツ株式会社

〒140-0002 東京都品川区東品川3-32-42 ISビル URL: [nano.oxinst.jp](http://nano.oxinst.jp)  
TEL.03-6732-8967 FAX.03-6732-8939 E-Mail: [na-mail.jp@oxinst.com](mailto:na-mail.jp@oxinst.com)

## Velocity 検出器



EBSD測定は時間がかかるという今までの概念を覆す、CMOSセンサー搭載の高速型EBSD検出器です。最大測定スピードは1秒間に4500点となります。高速処理を目的とした測定ソフト「APEX」との組み合わせによりEDAX社製EDS検出器との同時分析がより一層、簡便になります。

また、解析機能がさらに向上した「OIMAnalysis8.6」がリリースされました。EBSDパターンの再指数付け機能の追加、パターンが弱いピクセルを周りのピクセルで補完し再指数付けする「NLPAR」、シュミレーションパターンを使用した指数付け「OIMMatrix」など新機能が多数追加されております。

また、自社開発のSEM内EBSD用1000℃加熱ステージ、1500N引張ステージにも対応しております。

## 株式会社TSLソリューションズ

〒252-0131 神奈川県相模原市緑区西橋本5-4-30SIC2-401 URL: <https://www.tsljapan.com/>  
TEL.042-774-8841 E-mail: [info@tsl-japan.com](mailto:info@tsl-japan.com)

# まてりあ「誌上展示会」



## 共振式弾性率等物性測定装置一覧

1. 汎用型高精度ヤング率/剛性率、内部摩擦測定装置 JE,JG型
2. 高温弾性率等同時測定装置 EG型:高温測定で威力発揮
3. 薄板・細線ヤング率、内部摩擦測定装置 TE型:数十 $\mu$ m厚、径まで
4. インパクト式ヤング率・内部摩擦測定装置 IE型:大型試料や現場測定に
5. 縦共振式ヤング率、内部摩擦測定装置 VE型:数cmの円柱や角柱測定に
6. メカニカルスペクトロメーター MS型:強制振動式内部摩擦測定
7. 共振式薄板疲労試験装置 RF型:数百 $\mu$ m厚・径の薄板・細線の疲労試験に

## 日本テクノプラス株式会社

〒532-0012 大阪市淀川区木川東 3-5-21 第三丸善ビル TEL/FAX : 06-6390-5993/06-6390-4698  
URL : <https://nihon-tp.jp/> E-mail : [info@nihon-tp.com](mailto:info@nihon-tp.com)

## 材料設計支援統合システム MedeA

MedeAは、原子スケールのシミュレーションによって材料開発を行うための統合環境です。第一原理計算や分子動力学計算を基に、構造評価・機械特性・熱力学特性・電子伝導性・磁性といった材料の様々なプロパティを予測することができます。

### ■MedeAで評価できる物性例

- 機械特性:弾性定数、ヤング率、ピッカース硬さ、音速
- 熱力学特性:自由エネルギー、フォノン振動、線膨張係数
- 電子状態:バンド構造、電気伝導率、ゼーベック係数、磁性

## 株式会社モルシス

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジョオ八丁堀 URL : <https://www.molsis.co.jp/>  
TEL/FAX : 03-3553-8030/03-3553-8031 E-mail : [support@molsis.co.jp](mailto:support@molsis.co.jp)

## 次回予告

# まてりあ11月号・広告特集「誌上展示会」

### まてりあ「誌上展示会」

**自動恒負荷試験製作システム IS-POLISHER ISPP-1000**  
手拭磨の作業負担を減らします

- ◆研磨に時間を取られたくない
- ◆研磨者の技能を継承しない
- ◆研究に時間を費やさない
- ◆人によって仕上がりに差がある
- ◆研磨者の育成に時間がかかる
- ◆研磨に時間を取られたくない
- ◆研磨者の作業を自動化したい
- ◆研削速度を上げたい

株式会社 池上精機  
〒225-0237 神奈川県横浜市磯子区磯辺1-4-12-1  
TEL:045-717-5156 URL: <http://www.ikagami.co.jp>

**CMOS 超高速 EBSD 検出器「Symmetry」**

超高速 EBSD 検出器「Symmetry」は、従来の EBSD 検出器に比べて、検出速度が約 10 倍速く、検出精度も向上しています。また、検出器のサイズが小さく、設置場所も柔軟です。また、検出器の寿命が長いため、メンテナンスも簡単です。

株式会社 オーディオインストールマン株式会社  
〒146-0002 東京都品川区品川3-32-15 TEL:03-5561-1111 FAX:03-5561-1112  
TEL:03-5561-1111 FAX:03-5561-1112 E-Mail: [info@audiomans.com](mailto:info@audiomans.com)

**海外観サーモグラフィ** 観測体の温度分布を視覚的に捉えてみるぞうぞう

- H9000 (観測小径領域 1,100mm $\times$ 1,100mm)
- 高速度 (フレームレート 100fps/秒) (観測温度 温度分解能 25mK)
- 非接触 (観測距離 最大 100m) (観測距離 最大 100m)
- 15,100W (観測小径領域 1,000mm $\times$ 1,000mm)
- 観測のサーモグラフィは、非接触で温度分布を捉えることができます。
- 観測の精度が非常に高いです。
- 観測の精度が非常に高いです。

日本アピオニクス株式会社  
〒224-0002 神奈川県横浜市磯子区磯辺1-4-12 TEL:045-717-5156 FAX:045-717-5157  
E-Mail: [info@apionix.com](mailto:info@apionix.com) URL: <http://www.apionix.com>

まてりあ誌上展示会、  
次回は5月号で掲載予定。

**1枠 ¥28,000(税別)**

付設展示会のアフターフォローに！  
展示会会場者の記憶を喚起します！

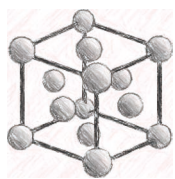
材料研究に関わる  
製品やサービスの情報を  
資料形式で一挙掲載します。

1枠 ¥28,000 (税別)

お問合せ・お申込み

## 株式会社 明報社

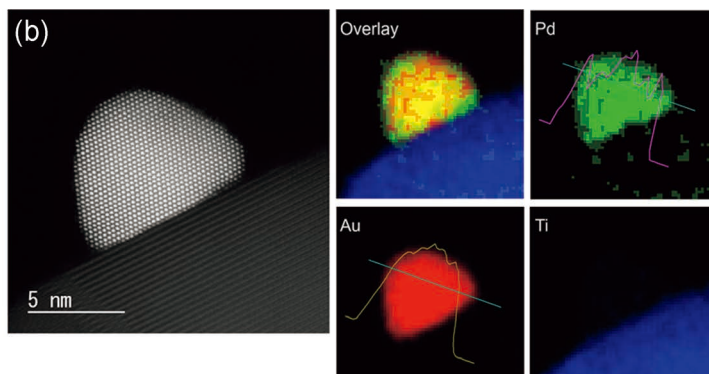
〒104-0061 東京都中央区銀座七丁目12-4 友野本社ビル  
TEL (03) 3546-1337 FAX (03) 3546-6306  
E-mail [info@meihosha.co.jp](mailto:info@meihosha.co.jp)  
ホムハ°ジ [www.meihosha.co.jp](http://www.meihosha.co.jp)



シリーズ「金属素描」

# No. 22 パラジウム (Palladium)

産業技術総合研究所 佐藤 剛 一



元素名：Palladium，原子番号：46，質量数：106.42，電子配置：[Kr]4d<sup>10</sup>，密度：11.995 Mg·m<sup>-3</sup>(295 K)，結晶構造：面心立方(室温～融点)，融点：1825 K，沸点：3150 K<sup>(1)</sup>，地殻存在量：1.5 ng·g<sup>-1</sup><sup>(2)</sup>。【写真】(a)Pd 水素透過膜(田中貴金属工業株式会社 写真提供)，(b)0.97%Au-0.22%Pd/TiO<sub>2</sub> 触媒の HAADF-STEM 像と同一粒子の EDS マッピング(産総研 三村直樹氏，日吉範人氏写真提供)

貴金属の一つであるパラジウムはイギリスの化学者、物理学者である W. H. Wollaston によって1803年に発見され、その前年に発見された小惑星パラスにちなんで命名された。用途として最も身近なのは歯科材料だろう。治療に使われる銀歯は金-銀-パラジウム合金であり、硬度調整、銀の硫化防止、耐食性などからパラジウムが 20 mass% 以上含有されている<sup>(3)</sup>。

工業用としては、触媒として利用価値の高い金属である。2010年にパラジウム触媒によるクロスカップリング反応で、鈴木、根岸、ヘックの3氏がノーベル化学賞を受賞したように、有機合成や水素化などの化学工業プロセスに、錯体や塩、担持微粒子などの形で用いられる。

もう一つ重要な触媒用途が自動車排ガス処理で、パラジウム需要の実に80%以上を占めている<sup>(4)</sup>。ガソリンエンジン用の3元触媒は、白金、ロジウム、パラジウムの微粒子を、アルミナ等をコートしたハニカム状のセラミックまたは金属の支持体に分散担持したものであり、排ガス中の炭化水素と一酸化炭素を酸化し、窒素酸化物を還元する。この中でパラジウムは主に酸化触媒として作用し、現在の3元触媒では欠かせない成分となっている。高温など過酷な環境にさらされるため、高分散した金属粒子のシンタリング(焼結)など耐久性や寿命が大きな課題であるが、例えばダイハツ工業(株)は、ランタン、鉄のペロブスカイト型複合酸化物結晶にパラジウムを置換し、還元雰囲気ではナノサイズ粒子として結晶外に析出し、酸化雰囲気ではペロブスカイトに固溶する自己再生メカニズムを利用して粒子の肥大化を防ぎ、長寿命化とパラジウム使用量の削減を図っている<sup>(5)</sup>。

パラジウムは水素吸蔵能を有する金属としても知られ、この性質を活用した例が水素分離膜である。金属格子中を拡散

できる原子は大きさから水素に限られるので、超高純度水素を分離することができる。化学反応と同時に水素分離を行う膜型反応器などの研究も進められている<sup>(6)</sup>。近年では、パラジウムの水素の吸収について、表面を金との合金とすることで吸収速度が促進されるといった報告がある<sup>(7)</sup>。水素の吸着には活性を示さない金と合金化することでの相互作用は興味深い。また、金とパラジウムの組み合わせは触媒としても関心が高い対象である<sup>(8)</sup>。ゼロエミッション、カーボンニュートラルがうたわれる社会情勢において水素利用への期待は大きく、パラジウムの研究もその一端を担うものと考えられる。

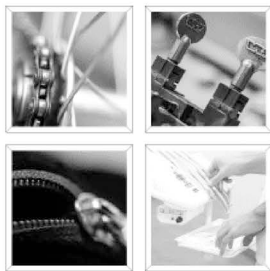
ところで、比較的安価な貴金属として利用されてきたパラジウムだが、ここ数年、価格が急騰しており、現在では白金や金よりも高い価格となってしまった。主な理由は、ガソリン自動車用排ガス触媒の需要増加に対し、ニッケルや白金の副生物として産出されるため増産が難しいという需給ギャップであるという<sup>(4)</sup>。自動車の電動化が進むとガソリンエンジンの生産が頭打ちになるときが来るかもしれない。そのときパラジウムの需要と価格はどうなるであろうか。

## 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) R. L. Rundnick and S. Gao: "The Crust", Elsevier Ltd., (2004), 1-64.
- (3) 日本工業規格：JIST6106, "歯科铸造用金銀パラジウム合金".
- (4) 野尻大介：ペトロテック，**43** (2020), 833.
- (5) H. Tanaka, *et al.*: Top. Catal., **16/17**(2001), 63-70.
- (6) 佐藤剛一：まてりあ，**50**(2011), 11-18.
- (7) K. Namba, *et al.*: Proc. Natl. Acad. Sci., **115**(2018), 7896-7900.
- (8) N. Mimura, *et al.*: Catal. Lett., **144**(2014), 2167-2175.

次回！ 金属素描 No. 23 ニッケル



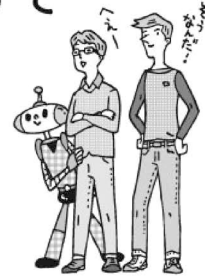


## 金属は身近なところで活躍しています

どこで?

どんなふうで?

身の回りにあふれている金属製品。ただ、知っているようで知らない事が多いかも!? 一緒にのぞいてみよう!



**金属の活躍現場**  
身近なところで活躍。え!こんなところにも! [もっと知りたい](#)

**金属が製品になるまで!**  
鉱石▶板▶製品 [もっと知りたい](#)

**性格いろいろ 金属大解剖**  
基礎編 金属って? 合金って?  
応用編 金属を調べてみよう

**現場の声を徹底取材**  
金属の仕事をしているのはこんな人 [もっと知りたい](#)

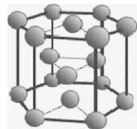
**金属いろいろ 金属素描・金属なんでもランキング**

**もっと金属について 詳しく知りたい** [関連 HP へ](#)

## 「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](https://jim.or.jp/everyone/top_ranking.html) より閲覧できます。

### 金属素描



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
- No.8 マンガン
- No.9 ガリウム
- No.10 インジウム
- No.11 鉄
- No.12 アルミニウム
- No.13 銅
- No.14 タングステン
- No.15 ネオジム
- No.16 モリブデン
- No.17 白金
- No.18 ニオブ
- No.19 タンタル
- No.20 ルテニウム
- No.21 イリジウム
- No.22 パラジウム

### 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きます。

- No.1 地殻存在量
- 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
- No.8 イオン化エネルギー
- No.9 宇宙の元素組成
- No.10 磁化率
- No.11 電気陰性度
- No.12 電子半径
- No.13 超伝導転移温度
- No.14 中性子散乱長
- No.15 融解熱
- No.16 蒸発熱
- No.17 純物質液体の表面張力
- No.18 海中の元素存在量

~ See you next metal! ~

～2022年3月15日(火)、下記の方々が本会の賞を受賞されました。おめでとうございます。今回は賞状の発送をもって、贈呈式に代えさせていただきます。～

## 第67回 日本金属学会賞受賞者

(2022年3月15日)

北海道大学 名誉教授・JST シニアフェロー 毛利哲夫君



毛利哲夫君は、金属材料の相平衡・相変態の理論研究の分野において、電子、原子、そして組織レベルのそれぞれの階層におけるアプローチを融合した独創的研究を行い、新規な相平衡の発見や相安定性の起源解明、さらに相変態経路安定性や原子レベルからの内部組織変化の理解など、マルチスケールの視点に基づく相平衡・相変態の学理の発展に大きく貢献し、材料数理学なる分野を構築しつつある。成果は以下の4項目に分類し得る。

### (1) 第一原理に基づく合金相平衡の解明

統計力学の手法であるクラスター変分法(Cluster Variation Method, CVM)に基づく広範囲の原子間相関を導入した高精度エントロピー形式と、密度汎関数法の電子論計算から求めた原子間相互作用力によるエネルギー形式を組み合わせ、原子番号の情報のみから合金相平衡を計算する手段を発展させた。これをAu-Cu, Cu-Agなどの貴金属系の二元系合金やIII-V族半導体の状態図計算に応用し、有限温度における規則相や固溶体相の安定性の起源を、原子間相関と原子間相互作用力、さらには電子状態密度にまで遡って明らかにした。特に、Fe-Ni実験状態図で未解明のL1<sub>0</sub>相の安定化の発見は、第一原理計算の威力を発揮した成果と評価される。

### (2) 規則合金の安定性と規則化 kinetics の理論研究

CVMを時間軸に拡張した経路確率法を世界で初めてfcc系合金に適用し、長距離規則度のみならず短距離秩序の緩和挙動も含めた、L1<sub>0</sub>相やL1<sub>2</sub>相の規則化の変態経路の詳細を解明した。これに加え、Cahn-Hilliardのスピノーダル分解理論を、規則合金系を対象にしたスピノーダルオーダーリング理論へと拡張し、第一原理からCuおよびFe系規則相のスピノーダルオーダーリング温度を算出したことは極めて先駆的な研究である。

### (3) 連続変位型空間格子に基づく相平衡の理論計算

CVMを初めとする従来の相平衡理論がrigidな空間格子を前提とするのに対し、同君は連続変位CVMを用いることで局所緩和による規則-不規則変態温度の低下を示し、従来の理論計算の問題点を明らかにした。この連続変位CVMの考え方を変位型相変態や有限温度磁性の解析に拡張し、ZrO<sub>2</sub>の立方晶-正方晶変態やNiのキュリー温度の第一原理計算へも適用した。又、経路確率法の経路の自由度を配列の自由度に置き換えるというユニークな手法を展開し、空孔型機構による規則化の第一原理 kinetics 計算の端緒を開いた。

### (4) 材料組織の第一原理計算法の開発

離散格子モデルのCVMと連続体モデルのフェーズフィールド法の混成アプローチを考案し、原子間相互作用力の情報のみからの組織変化計算手法を開発して電子論計算と組み合わせ、Fe-Pd合金やFe-Pt合金における逆位相規則ドメイン構造の第一原理計算に成功した。これは規則化に伴う長距離・短距離規則の不均一分布の時間発展、さらには逆位相境界エネルギーやその異方性が原子レベルの情報から詳細に記述できる画期的な手法であり、第一原理からの組織予測のためのマルチスケールモデリングの先駆的研究である。

これらの業績により、相変態分野のオリンピックともいべき国際会議PTM等、数多くの国際会議の基調講演に招待されてきた。さらに、APDIC(状態図国際委員会)Chairmanや日本学術振興会・第172委員会委員長などを歴任し、国内外における本分野の発展にも貢献してきた。本会においても3期の理事在任、分科会委員長としての調査・研究事業を推進、また講演大会の運営にもあたった。加えてスーパーコンピュータ「京」やポスト「京」プロジェクトにおいては材料科学分野の代表として、我が国の計算材料科学研究の地歩を固めるとともに、本分野の人材育成にも多大な貢献があった。現在はJST-SIP(戦略的イノベーション創造プログラム)「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」サブプログラムディレクターとして、日本の素材産業のさらなる国際競争力の強化に貢献している。

(50音順)

## [分光分析による鉄鋼の耐環境性向上に関する研究開発]



日本製鉄㈱先端技術研究所 主幹研究員 土井 教史 君

受賞者は、構造用鋼の健全性、信頼性向上のための腐食や酸化機構解明や、性能向上のための評価、分析技術の開発に取り組んできた。開発材の腐食生成物や酸化層/母材界面に対して動的、非破壊的な観察技術を駆使し、低合金鋼さびの鋼材保護性や、ガス改質プラント材の信頼性に対し、その材料の機能や特性発現メカニズムを明らかとするとともに、成分最適化に資する成果を挙げた。これら研究成果は、材料の耐環境性能向上に貢献するものである。

## [高強度鋼とその製造プロセスメタラジーに関する研究開発]



日本製鉄㈱技術開発本部 主幹研究員 西畑 敏伸 君

受賞者は、一貫して高強度鋼とその製造プロセスメタラジーに関する研究開発に従事し、特に、ホットスタンプ(HS)用 1.5 GPa 級鋼板の国内実用化に貢献、さらに世界初となる HS 用 1.8 GPa 級鋼板の開発実用化に成功した。加えて、Ms 点以下で生じるオートテンパー現象、オーステナイト( $\gamma$ )中の炭素拡散現象、 $\gamma$ 化を伴うセメントライト溶解反応に対する理解を深化させた。これらの業績は、工学、工業的価値が極めて高く、鉄鋼組織制御に対する有益な学問的指針を与えるものである。

## [高機能銅合金に関する研究開発と実用化]



三菱マテリアル㈱中央研究所 上席研究員 牧 一誠 君

受賞者は、高機能銅合金の開発と実用化、高性能化、金属成分と微細組織が特性に及ぼす影響の研究開発を通して、非鉄金属材料分野の発展に大きく貢献してきた。特に、Mg を溶質元素とした固溶強化によって固溶強化型銅合金の大幅な高強度化、高導電率化、耐熱性向上を実現できることを明らかにし、高強度 Cu-Mg 過飽和固溶合金、ならびに高導電性 Cu-Mg 希薄固溶合金を開発、実用化しており、電子・電気機器の発展に大きく貢献した。これら一連の業績は工業的見地のみならず学術的にも優れたものである。

## [ステンレス鋼および自動車用高強度鋼板の高性能化]



JFE スチール㈱薄板セクター部 主任部員 横田 毅 君

受賞者は、鉄鋼メーカーの研究者としてステンレス鋼および自動車用薄鋼板の研究開発に従事し、集合組織制御を活用したフェライト系ステンレス鋼の高加工性化、銀添加によるステンレス鋼への抗菌性の付与など高機能なステンレス鋼の開発・実用化を達成した。また、980-1470 MPa 級の自動車用高強度冷延鋼板の開発・実用化に携わり、自動車用部品の軽量化を通して CO<sub>2</sub> 削減に貢献してきた。

## [医療用金属材料を含む構造・機能性金属材料の力学特性と加工プロセスに関する研究]



東北大学金属材料研究所 教授 千葉 晶彦 君

受賞者は、Ni-Al 系金属間化合物、Ti 合金などの力学的特性に関する研究、高強度・高弾性 Co-Ni 基合金や医療用 Co-Cr-Mo 合金の高温加工プロセスに関する研究、電子ビーム方式を中心とする金属積層造形に関する研究において業績を挙げている。とりわけ、Co-Ni-Cr-Mo-Fe 基合金では機械式腕時計用動力ゼンマイとして実用化された。また、医療用 Co-Cr-Mo 系合金は人工股関節用ステムとして事業化を達成した(商標名: COBARION 合金)。歯科鑄造用 Co-33Cr-5Mo 合金(COBARION EX)を開発し、国内の大手歯科材料メーカーにより販売されている。



## 第 61 回 日本金属学会谷川・ハリス賞 受賞者(2名) (2022年3月15日)

(50音順)

[医療用金属材料を含む構造用金属材料の力学特性と加工プロセスに関する研究]

東北大学金属材料研究所 教授 千葉 晶彦 君



受賞者は、高温構造用金属間化合物、Co-Ni 基超合金、生体用 Co-Cr-Mo 合金、および Ti 合金などの力学的特性・高温強度、高温加工プロセスに関する研究を行ってきた。特に、熱間鍛造技術に基づくインテリジェント鍛造技術の開発、国内では先駆となる電子ビーム積層造形(EBAM)技術に関する研究に注力し、世界最高性能の EBAM 装置開発を推進し、EBAM による造形技術とその最適化手法のための基礎学理の確立を目指し研究開発に取り組み、構造用金属材料研究の発展に大きく貢献した。

[構造用金属材料の加工熱処理によるナノ・マイクロ組織制御とその力学特性に関する研究]

京都大学大学院工学研究科 教授 辻 伸泰 君



受賞者は、構造用金属材料の加工・熱処理によるナノ・マイクロ組織制御と、その力学特性の発現機構に関する基礎的研究を継続して行い、「金属材料の動的再結晶・動的相変態」、「バルク金属材料の結晶粒超微細化法」、「バルクナノメタルの力学特性の解明と高強度・高延性化」などで優れた研究成果を挙げている。特にバルクナノメタルに関しては世界をリードする研究者として数多くの論文を発表するとともに、研究人材育成、大型研究プロジェクトの実行、学会活動などを通じて分野の活性化にも寄与している。

### ◇日本金属学会春賞の概要◇

|  |  |
|--|--|
| 学会賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Gold Medal Award  | 金属及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国際的学者に対する授賞。   |
| 技術賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Industrial Achievement Award  | 金属及びその関連材料に関する工業技術の進歩発展に貢献した者に対する授賞。   |
| 金属組織写真賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Metallography Award (Best Prize, Excellent Prize, Fine Work Prize)    | 金属および周辺材料に関する学術上または技術上有益と認められる組織写真に対する授賞(最優秀賞, 優秀賞, 奨励賞)。<br>1. 光学顕微鏡部門<br>2. 走査電子顕微鏡部門(分析, EBSD 等を含む)<br>3. 透過電子顕微鏡部門(STEM, 分析等を含む)<br>4. 顕微鏡関連部門(FIM, APFIM, AFM, X線 CT 等)部門 |
| 研究技能功労賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Technical Skill Award   | 多年にわたり卓越した技術により金属の試験及び研究上欠くべからざる装置の製作、資料調整、測定及び分析などを通じて他の方々の研究成果に大いに貢献した、いわゆる「かけの功労者」に対する授賞。<br>対象：授賞時に満 50 歳以上で通算 30 年以上実務に従事したもの。  |
| 功績賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Meritorious Award   | 金属学及びその関連材料分野の学術又は工業技術の進歩発達に寄与する有益な論文を発表したもの又は有益な特許を取得したもので、将来を約束されるような新進気鋭の研究者、技術者に対する授賞。<br>対象：技術部門を除いて 5 月末時点で 45 歳以下の研究者<br>部門：学術部門, 技術部門                                  |
| 谷川・ハリス賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Tanikawa-Harris Award   | 構造材料分野又は高温プロセスに関連する金属及び関連材料分野の学術又は工業技術の発展に貢献することが大であると認められたものに対する授賞。   |
| 増分量賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials Masumoto Hakaru Award  | 機能材料分野で卓越した新素材の創出又は発明により貴重な研究業績を上げて、同分野の学理又は技術の進歩発展に貢献することが大であると認められたものに授賞する。  |
| 日本金属学会・日本鉄鋼協会 奨学賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials & The Iron and Steel Institute of Japan Young Student Award | 材料分野の発展への貢献が期待できる学生(大学は学士課程 4 年に在学する学生, 高等専門学校は専攻科 2 年に在学する学生)の奨励を目的に日本金属学会・日本鉄鋼協会が奨学賞を設け、授賞。  |
| 優秀ポスター賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials The Best Poster Award   | ポスターセッション発表者を対象に、優秀なポスターおよび発表者に対して授賞する。  |
| 高校・高専学生ポスター賞<br>The Japan Institute of Metals and Materials The Best High School Poster Award                                | 高校生・高専学生ポスターセッション発表者を対象に優秀なポスターおよび発表者に対して授賞する。   |

(部門別 50 音順)

## [学術部門]

## [Mg 合金の変形・破壊メカニズムとその高機能化に関する研究]

東北大学大学院工学研究科 准教授 安藤 大輔 君



受賞者は、Mg 合金をはじめとする軽金属材料に対して、結晶構造変態を利用した機能性付与を主眼とする研究に従事してきた。特に、hcp 構造を有する既存 Mg 合金を超越するため bcc 型の Mg-Sc 合金に着目し、相変態制御を駆使した時効硬化現象や、マルテンサイト変態による形状記憶特性を世界に先駆けて見出し、既存の Mg 合金にはない機能性という新しい性能を付与する事に成功し、軽量・高比強度以外の用途開拓に繋がる成果を挙げ、今後の更なる発展が期待される。

## [マルチスケール組織解析による金属材料の高特性化に関する研究]

物質・材料研究機構磁性・スピントロニクス材料研究拠点 主幹研究員 佐々木 泰祐 君



受賞者は、3DAP, 収差補正 STEM, FIB/SEM を併用したマルチスケール解析を種々の金属材料に適応して微細構造と特性の関係を解明し、高特性材料の開発まで行ってきた。これまでに 6000 系アルミニウム合金並みの強度-成形性バランスを有する熱処理型展伸 Mg 合金の開発や、ネオジム磁石の保磁力メカニズム解明などの研究で、インパクトのある業績を挙げてきた。今後も、マルチスケール組織解析を軸足において種々の金属材料の高特性化に向けた研究の展開が期待される。

## [電流-スピン流-熱流の高効率変換に資する材料創製に関する研究]

東北大学金属材料研究所 准教授 関 剛 斎 君



受賞者は、スピントロニクスデバイスの高性能化と多機能化を目指し、電流-スピン流-熱流の相互変換のための材料創製に取り組んできた。主な業績として、強磁性規則合金における電流-スピン流変換の観測および電流-熱流変換の可視化、スピン流の高効率な創出を可能とする非平衡合金の発見、金属人工格子を用いた電流-熱流の変換効率の増大などがある。これらはスピントロニクス材料開発の更なる発展に大きく貢献するものであり、今後の幅広い研究展開が期待される。

## [金属の微細組織と腐食挙動の関係解明による表面機能化・高耐食化に関する研究]

物質・材料研究機構構造材料研究拠点 主席研究員 堤 祐介 君



受賞者は、電気化学、腐食工学、および生体材料学分野に関連した研究に取り組んできた。金属表面での電気化学反応を利用したインプラント材料表面へのさまざまな生体機能の付与を実現する表面処理を開発した。また、レーザーを用いた先端プロセスや電気化学的処理との融合により、金属材料の耐食性を飛躍的に向上させる技術開発にも取り組み、着実に成果を挙げている。これらの研究業績は構造材料や生体材料の発展に大きく貢献するものであり、今後の幅広い研究展開が期待される。

## [金属のナノポーラス化技術開発とその応用に関する研究]

東北大学金属材料研究所 准教授 和田 武 君



受賞者は、その素材の性質上ポーラス化が難しいとされてきた金属材料をナノポーラス化する研究に取り組んでいる。主な成果として、金属溶湯中での合金固体からの成分溶出現象を利用した金属溶湯脱成分技術を確立し、従来は作製不可能であった数々のナノポーラス金属を創出した一連の研究が挙げられる。それらを蓄電デバイスに応用してその性能を大きく向上させた。更に金属溶湯脱成分技術を利用したナノ複合材料創製や表面改質技術開発にも研究を展開しており、今後の更なる発展が期待される。

(50音順)



造幣局研究所研究開発課 天野和久君

受賞者は、入局以来37年間、貨幣製造工程の一つである検査および成形作業に従事後、研究開発部門に在籍し、貨幣等への微細加工に関する研究開発などを行い、例として、レーザー加工機や電子線描画装置による貨幣用金型への微細加工技術の開発、実用化に至るまで長きにわたって貢献を続けてきた。これらの微細加工技術は、記念貨幣のデザイン性の向上や貨幣に対する国民の信頼維持には欠かせない偽造防止技術の高度化に寄与し、貨幣製造に関する研究開発および社会貢献への功績は顕著である。



東北大学金属材料研究所 板垣俊子君

受賞者は、長年にわたり多くの無機材料の元素分析だけではなく標準化関連の分析等も行い、広く元素定量分析業務に従事してきた。特に、ICP発光分光法、原子吸光法、吸光度法による元素分析技術、それらに必要な化学的試料前処理に関する幅広い技術や専門知識を基に、鉄鋼、非鉄合金、セラミックス等の多岐にわたる元素分析技術の基盤を構築した。分析では材料中の構成元素から微量元素まで対象にし、的確で最適な手法により高度で正確な分析業務を行い、関連研究分野の発展に大きく貢献した。



日鉄テクノロジー㈱尼崎事業所解析技術部 小笠原重明君

受賞者は、奉職以来、金属材料の成分分析に携わり、材料の研究開発や材料評価技術の発展に大きく貢献してきた。中でも金属材料中の微量不純物元素の定量分析に用いるグロー放電質量分析(以下GD-MS)においては、通常では分析困難な形状の試料の分析手法や定量方法の考案および技術確立を行い、GD-MS分析分野の進歩ならびに金属材料分野の産業発展に貢献した。現在も新たな分析手法確立に向けて検討しつつ、新たな技術者育成に向けた指導も積極的に行っている。



日鉄テクノロジー㈱九州事業所研究試験部 香月恵介君

受賞者は、約30年間にわたって、精錬試験、真空溶解試験、熱間圧延試験、冷間圧延試験、熱処理試験、ステンレス鋼評価試験および軌条評価試験に携わり、上工程から下工程まで鉄鋼製造技術・製品開発の支援業務に従事してきた。その幅広い知識と深い見識に基づいた安定かつ高精度なデータは、実用化された多くの技術の礎となった。さらに、若手の技能系社員や技術者の育成にも力を注ぎ、研究環境整備や体制構築、安全管理に大きな貢献を果たしており、その多岐にわたる研究開発への功績は顕著である。



㈱日本製鋼所新事業推進本部金属材料事業推進室 河野博君

受賞者は、1981年に日本製鋼所に入社して以来、大学卒研究員を補助する実験員・研究技術員として、鉄鋼材料、セラミックス材料、水素貯蔵合金など様々な材料開発およびその応用システムの開発に従事した。特に、水素貯蔵合金を用いたアクチュエータの心臓部および駆動部の開発・改良に貢献し、応答性が高く信頼性に優れた新規構造を考案するなど顕著な成果を挙げた。また、マイクロ水素貯蔵合金タンク、大型容器への合金充填方法の最適化の応用システム開発にも携わるなど、水素貯蔵技術の進展への功績は顕著である。



愛知製鋼㈱材料試験技術部 木下隆行君

受賞者は、入社以来33年間にわたり機械試験や試作溶解部門で研究開発の支援業務に従事してきた。特に「エンジン部品の疲労試験方法開発」、「実働応力測定機構を付与した高速回転曲げ疲労試験機開発」、「同一溶解複数鋼種製造時の成分コントロール方法開発」の業績は自動車用鋼開発のスピード向上に大きく貢献した。また、高度な試験精度を維持するための試験機保全や日常管理手法の伝承にも取り組んでおり、その多岐にわたる研究開発への貢献と功績は顕著である。



東京大学工学系研究科 木村久雄君



受賞者は、奉職以来、35年以上にわたり、在職した研究室および所属組織での技術指導、支援を通じて、大学における研究教育活動に貢献してきた。具体的な研究技術支援では、高温融体材料研究、磁性材料研究等に従事し、研究成果は日英学術論文誌に10編、国際会議発表15件、国内学会発表20件で報告している。また、学生への実験の技術指導、支援を行い、特に化学分析技術においては、機器分析以外にも容量法、重量法などの基本となる分析法について指導教育するなど、研究教育への貢献は顕著である。

兵庫県立大学姫路工学キャンパス経営部 城井一正君



受賞者は、旋盤、フライス盤、研削盤、鋳造装置、溶接装置等の機器に精通し、学生の機械工作実習の指導と研究および実験機器の製作を一貫して担当してきた。機械工作実習に関しては、溶接、鋳造、仕上げ研磨の三分野のリーダーとして活躍し、安全第一で学生に決して怪我をさせないことを第一に指導を行ってきた。学生の教育、研究者の機器作製支援で多くの実績を上げ、教育・研究に果たした役割は、非常に大きく、その功績は顕著である。

JFE スチール(株)スチール研究所研究企画部 平良洋一君



受賞者は、入社以来30年以上にわたって製鋼分野の精錬および鋳造プロセスの技術開発のため、ラボ実験、品質評価、各種実験・評価装置の製作および工場実験支援に従事し、広く製鋼プロセス技術の開発に貢献した。特に精錬プロセスの研究開発で中心的役割を果たし多大な業績を残している。その後、長年培った経験知識をもとに、研究所の安全や資産・設備管理、研究所若手への技術・自主改善活動等への支援を担当し、研究活動のレベルアップに大きく貢献し、研究開発における功績は顕著である。

日本製鉄(株)技術開発本部尼崎研究支援室 永正市君



受賞者は、入社以来、鉄鋼材料、磁性材料、半導体材料等の材料開発に従事してきた。特に、粉体物性が深く関与する結晶材料開発において熱電素子用Siクラスレート材料の開発、深紫外レーザー用基板として注目されているAlN単結晶基板の育成、溶液からのSiC単結晶育成技術の開発に取り組み成果を挙げた。その結晶育成技術は、水素社会化に資する高機能性結晶材料の合成に貢献するものであり、社外からの評価も高い。職場の人材育成にも大きく貢献しており、その功績は顕著である。

日鉄テクノロジー(株)東日本事業所研究試験部 早坂英之君



受賞者は、入社以来31年間にわたり、薄鋼板材料の各種試験設備導入と評価試験法確立の研究開発支援業務に従事してきた。自動車の車体軽量化ニーズに呼応した980MPaを超える超ハイテン材を対象とした各種特性評価技術の考案と適用に優れた能力を発揮し、自動車用薄鋼板の研究開発に大きく貢献した。さらに、若手作業者の安全性・作業性を考慮した試験・実験方法を考案した。これらは、薄鋼板新商品開発の陰の功労者として高く評価される功績である。

JFE スチール(株)スチール研究所研究企画部 村元保彦君



受賞者は、入社以来39年にわたり、各種鋼板に関し圧延加工、材料評価、溶接性評価まで幅広く対応・遂行し、低温特性に優れた厚鋼板、大型海洋構造物に使用される極厚鋼板、方向性電磁鋼板などの新材料・商品開発に貢献してきた。FCAWやSAW等の各種溶接装置の導入・運用に加え、各溶接工場での溶接トライを成功させた実用化への貢献は特筆できる。また、現場力を維持・向上させるため後進に向けての技能伝承に精力的に尽力した。以上のように、研究技能の上に果たした役割は多大であり、その功績は顕著である。



東北大学工学部 山崎 二男 君

受賞者は、36年間、沖電気工業㈱、勸半導体研究振興会半導体研究所および東北大学において半導体プロセス開発と材料評価および人材育成・安全管理の面で研究開発支援を行ってきた。具体的には半導体メモリーの高集積化、半導体の品質管理に必須の各種分析装置と解析技術の創意工夫などで、研究者の開発支援に大きな貢献をしてきた。また若手技術者育成や、半導体関連施設の維持にも尽力するなど、企業・研究所・大学における材料研究活動を支え、材料科学発展に貢献した功績は顕著である。



長岡技術科学大学技術支援センター 吉井 一夫 君

受賞者は、奉職以来32年間、機械工作実習等の教育、工作機械利用者への安全教育・技術指導、研究に必要な治具や装置の製作など、教育研究の支援を行ってきた。特に、材料試験に用いる試験片の加工においては、材料や工作機械の特性を考慮したうえで、適正な工具や切削油、および加工パラメータを選定することで、試験片表面の組織変化を極力抑制しつつ高い寸法精度の加工を行い、信頼性の高いデータを得ることに大きく貢献してきた。以上のように、これら教育研究への功績は顕著である。

第72回 日本金属学会金属組織写真賞 受賞者

(2022年3月15日)

最優秀賞 1件(5名)

【第3部門】透過電子顕微鏡部門

「(Li, La)TiO<sub>3</sub> 対応傾角粒界における局所イオン伝導測定および原子構造解析」



東京大学工学系研究科  
特任研究員  
佐々野 駿 君



東京大学工学系研究科  
特任准教授  
石川 亮 君



北海道大学電子科学研究所  
教授  
太田 裕道 君



東京大学工学系研究科  
教授  
柴田直哉 君



東京大学工学系研究科  
教授  
幾原雄一 君

【優秀賞】 2件(10名)

【第1部門】光学顕微鏡部門

「ポリアニリンによるNiの粒界を優先拡散する水素の可視化」



東北大学金属材料研究所

柿沼 洋 君



東北大学金属材料研究所  
助教

味戸 沙 耶 君



東北大学金属材料研究所  
助教

北條 智 彦 君



東北大学金属材料研究所  
准教授

小山 元 道 君



東北大学金属材料研究所  
教授

秋山 英 二 君

【第3部門】透過電子顕微鏡部門

「Pt<sub>3</sub>Co 合金触媒粒子表面 Pt skin 層の精密原子間距離計測」



ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所

大森 雄 貴 君



ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所

黄 馨 慧 君



ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所  
上級研究員

仲山 啓 君



ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所  
上級研究員

小林 俊 介 君



ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所  
主席研究員

桑原 彰 秀 君



(50音順)



京都大学 特任教授・京都大学 名誉教授・大阪大学 名誉教授 白井 泰治 君

白井泰治君は、1979年京都大学大学院工学研究科博士課程を単位修得退学後、京都大学工学部助手に採用され、京都大学助教授を経て1996年に大阪大学教授、2008年に京都大学教授に就任した。2016年京都大学を定年退職し、同年京都大学特任教授となり現在に至っている。この間、材料物性学に関して多くの業績を挙げ、同時に学生の教育と研究者の育成に尽力してきた。

主な研究業績は、材料中の格子欠陥に関する研究、新たな原子空孔形成機構の発見、新しい陽電子消滅測定装置の発明などである。

同君は、高温その場で陽電子寿命を計測する新たな手法を開発し、世界で初めて純鉄中の高温熱平衡原子空孔の融点直下までの測定に成功するなど、多くの純金属・合金・金属間化合物・半導体・金属酸化物中の原子空孔とその集合体の挙動を、広範かつ系統的に明らかにした。

代表的な水素吸蔵合金であるLaNi<sub>5</sub>において、常温で水素を吸蔵させるだけで極めて高濃度の原子空孔が形成されることを発見した。また、金属合金の規則・不規則変態、時効析出、内部酸化でも未知の原子空孔形成現象を発見し、これらすべてを包括的に説明する新たな原子空孔形成機構として「相変態誘起空孔」を提唱している。

同君は、日本で初めて $\beta^+\gamma$ 同時計測陽電子寿命測定装置を開発し、各種材料の陽電子寿命高温その場測定を可能にする一方、固体素子(アバランシェフォトダイオード)による陽電子の検出に世界で初めて成功し、陽電子寿命計測装置の大幅な小型化・軽量化にも成功した。

一方、日本陽電子科学会会長、日本物理学会領域代表などを務め、また日本金属学会会長、Materials Transactions誌編集委員長、日本金属学会誌編集委員長として、本会の発展のために尽力した。

筑波大学 名誉教授 宮崎 修一 君



宮崎修一君は、1979年に大阪大学大学院博士課程修了後、同年筑波大学講師に採用され、1998年教授に就任し、2015年名誉教授となり引続き特命教授を5年間務めた。

主な研究業績は、マルテンサイト変態に伴う結晶学的側面と形状記憶効果および超弾性に関する力学挙動と材料組織学的側面について、数多く先駆的成果を挙げたことである。

Ti-Ni合金の特性が、合金組成の他に内部組織に極めて敏感である事を明らかにし、形状記憶特性を飛躍的に改善するための組織制御の方法を確立すると共に超弾性を実現した。現在世界中で供給されているTi-Ni系形状記憶合金の加工熱処理法の基本技術である。

歪み焼鈍法によるTi-Ni合金単結晶作製に成功し、マルテンサイト相の結晶構造を決定すると共に、変態に伴う結晶学的知見(晶癖面、結晶方位関係、変態歪みの方位依存性等)を実験的に明らかにし、形状記憶効果の機構を解明した。さらに菱面体相(R相)変態についても、同様に基本特性を解明し、Ti-Ni合金の基礎を先駆的に確立した。

Ti-Ni合金スパッタ薄膜に微細な内部組織を作る熱処理方法を発見し、駆動力を実用レベルに到達させた。さらに、Ti-Ni-Pd合金薄膜ダイアフラム型マイクロアクチュエータで、100 Hzの応答性を実現し、強力大変位マイクロアクチュエータ材料の開発に成功した。

貴金属を含まないTi-Ta-(Sn, Al)系合金やTi-Ni-Zr-Nb合金で加工性の良好な合金開発が可能であることを実証し、新たな高温形状記憶合金の可能性を見出した。

NiフリーのTi基超弾性合金の開発が望まれ、Ti-Nb系、Ti-Mo系、Ti-Zr系を基本とする、三元系、四元系、五元系など多くのTi基合金を開発した。また、酸素を含むTi基合金のゴムメタル特性には、ナノドメインの変態が関わることを見出し、変形機構を解明した。

これらの研究業績に対して、山崎貞一賞(2002)、文部科学大臣賞(2004)、つくば賞(2014)、本多記念賞(2015)などを授与され、本会においては学会賞(2014)、村上記念賞(2012)、功労賞(2010)、増本量賞(2010)、谷川・ハリス賞(2009)、功績賞(1995)などを受賞するほか、2012年には本多記念講演を行い、また日本金属学会会長を務め、本会の発展に貢献した。



物質・材料研究機構  
特別研究員

広沢 哲君

第38回 優秀ポスター賞受賞者 17名 (2022年3月23日授賞)  
(五十音, アルファベット順)



1 差方位角分布図による粒界三重線周りの結晶粒間における方位関係の解析 (P17)

東京工業大学 綾 文哉君, 東京工業大学(現:トヨタ車体㈱) 吉増郁人君, 東京工業大学 宮澤直己君, 尾中 晋君



2 酸素原子が吸着したPdZn(111)表面構造の第一原理計算 (P71)

鹿児島大学 岩村和哉君, 鹿児島大学(現:㈱RKKCS) 大谷友輔君, 中央大学 石井 靖君, 鹿児島大学 野澤和生君



3 Cr添加酸化チタンにおける面欠陥不規則配列の形成 (P1)

名古屋大学 位田麻衣君, 杉本峻也君, 服部泰河君, 田川美穂君, 名古屋大学, 産業技術総合研究所 宇治原徹君, 名古屋大学, JST さきがけ 原田俊太郎君



4 Cu/Fe積層材の焼鈍による超微細粒組織の形成 (P64)

金沢大学 加藤琉聖君, 古賀紀光君, 渡邊千尋君



5 分子動力学法による炭素硬質系皮膜の形成過程における残留応力発生機構の解明 (P23)

京都工芸繊維大学 亀谷憲嗣君, 同志社大学 中村守正君, 岐阜大学 屋代如月君, 京都工芸繊維大学 高木知弘君



6 ベイルアウトしたポリプの基盤密着に及ぼす表面形態の影響 (P77)

関西大学 上坂菜々子君, 中嶋志保君, 上田正人君, 池田勝彦君



7 Fe置換およびCu置換したMnCoGeにおける構造転移障壁の第一原理計算による評価 (P46)

鹿児島大学 高岡大晴君, 三井好古君, 小山佳一君, 藤井伸平君



8 電子ビーム粉末床溶融結合法で作製したβ相含有TiAl合金の微細組織と疲労特性の関係 (P16)

大阪大学 田中幸樹君, 趙 研君, 安田弘行君, 東京工業大学 竹山雅夫君, 大阪大学 中野貴由君



9 走査型青色レーザー電解顕微鏡を用いたFeの組織と透過水素の表面分布の関連性 (P88)

関西大学 野川心路君, 春名 匠君



10 エレクトロスピンニング法を用いたTi上における真珠貝粉末含有ファイバーの作製と評価 (P76)

愛媛大学 藤井 基君, 岡野 聡君, 小林千悟君



11 AE測定によるbimodal組織を有するMg合金の引張変形挙動の解明(P85)  
 熊本大学 堀口皓匠君, 山崎倫昭君,  
 名古屋工業大学 萩原幸司君, 徳永透子君,  
 熊本大学 眞山 剛君,  
 Charles University Daria Drozdenko 君,  
 Kristian Mathis 君



12 パルス強磁場を用いた(Ni-Co)<sub>50</sub>-Mn-Sn系合金のメタ磁性相転移の実験的調査(P55)  
 東北大学 宮川寅矢君, 東京大学 三宅厚志君,  
 東北大学 許 晶君,  
 東京大学 徳永将史君, 東北大学 大森俊洋君,  
 貝沼亮介君



13 Ni基超合金の再凝固組織形成におよぼす溶解前組織の二次デンドライトアーム間隔と溶解過程の影響(P29)  
 九州大学 山本大貴君, 森下浩平君,  
 京都大学 安田秀幸君,  
 九州大学 宮原広郁君



14 Nucleation preference of coherent and semi-coherent nanoprecipitates in Al-Cu alloys based on atomistically-informed classical nucleation theory(P62)  
 大阪大学 LIAO Heting 君,  
 三菱電機 三好 宙君,  
 名古屋大学 君塚 肇君,  
 大阪大学 石井明男君,  
 大阪大学, 京都大学 尾方成信君



15 金属四ホウ化物 MnB<sub>4</sub> の合成と熱電材料としての可能性(P44)  
 長岡技術科学大学 TSOGTBAYAR MISHEEL 君, 馬場将亮君, 武田雅敏君



16 Microstructure changes of SiC fiber due to impurities induced internal oxidation(P86)  
 東北大学 袁 欣偉君, 近藤創介君,  
 物質・材料研究機構 下田一哉君,  
 東北大学 余 浩君, 奥野泰希君, 笠田竜太君

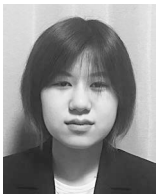


17 Ridge キングにおける区分的に均一なキング列による回位の緩和(P82)  
 東京工業大学 張 雪禹君, 松村隆太郎君, 篠原百合君, 稲邑朋也君

## 第7回高校生・高専学生ポスター賞受賞者(最優秀賞1件, 優秀賞19件)

(2022年3月23日授賞)

### 最優秀賞



1. アルミニウム合金表面への耐傷性表面層の形成による高耐食性化(HSP37)  
 旭川工業高等専門学校  
 福澤果純君,  
 千葉 誠君(指導教員)

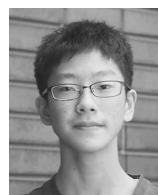


2. 果実の劣化過程におけるビタミンC量の簡易測定法の検討とその利用(HSP2)  
 青森県立弘前中央高等学校  
 小林七海君, 小野菜々子君, 柴田匠美君, 佐藤望愛留君,  
 柴田大毅君(指導教員)

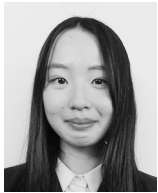
### 優秀賞



1. アルギン酸-酸化チタン系光触媒材料の活性評価(HSP1)  
 青森県立弘前中央高等学校  
 喜多島悠暉君, 藤田 耀君, 佐藤琉生君,  
 柴田大毅君(指導教員)



3. 水系溶媒でのケミカルライトの検討(HSP4)  
 東京都立小石川中等教育学校  
 一瀬陽日君,  
 加藤優太君(指導教員)



4. Zn 金属葉～成膜のコントロールと構造解明～(HSP6)

茨城県立水戸第二高等学校

臼井智加君, 遠藤理紗君,  
富澤英士君(指導教員)



5. カプセル分散型自己修復性電着塗膜の開発とその耐食性(HSP9)

旭川工業高等専門学校

江口侑里君,  
千葉 誠君(指導教員)



6. 金属の大気暴露環境における腐食速度とその外観変化(HSP10)

旭川工業高等専門学校

西田奎将君,  
千葉 誠君(指導教員)



7. ダニエル電池の負極に Mg を用いると? (HSP13)

兵庫県立宝塚北高等学校

山本大樹君, 三浦幸太君, 曾田旺宏君,  
藤原悠太郎君,  
運天 修君(指導教員)



8. GdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> 超伝導体の減圧による磁気浮上時間の変化(HSP14)

福岡県立筑紫丘高等学校

熊井悠介君, 九州大学 原口顕輔君,  
清原悠生君,  
九州大学 寺西 亮君(指導教員)



9. おがくず培地におけるヌメリツバタケの子実体形成(HSP16)

宮崎県立宮崎北高等学校

石崎ひなた君, 佐々木星空君, 加藤実莉君,  
水元菜南君,  
菊池高弘君(指導教員)



10. タンタルコンデンサの熱分解によるタンタル焼結体の回収(HSP19)

東京都立科学技術高等学校

清水梨穂君,  
森田直之君(指導教員)



11. 炭酸カルシウム系廃棄物を用いた金属イオンの吸着と回収(HSP26)

青森県立弘前中央高等学校

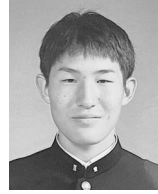
中居佑太君,  
柴田大毅君(指導教員)



12. 落下リングのマテリアルリサイクル～アップルペクチンのキレート作用の評価～(HSP27)

青森県立弘前中央高等学校

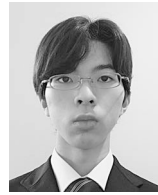
嘉手苅日向大君, 竹内裕生君,  
柴田大毅君(指導教員)



13. ガルバニック腐食の腐食スピードに影響を与える因子(HSP29)

兵庫県立加古川東高等学校

佐々木華凜君, 示野嘉章君, 三浦賢亮君,  
谷口正明君(指導教員)



14. 劣化しない化学マジックの開発(HSP31)

東京都立小石川中等教育学校

三田倫太郎君,  
加藤優太君(指導教員)



15. マイクロ波加熱による酸化タンゲステンの水素還元挙動(HSP32)

福岡県立明善高等学校

中島 克君, 九州大学 飯田純直君,  
新莊幹大君, 王 子銘君,  
九州大学 大野光一郎君(指導教員)



16. 河川・湖沼中のリン酸濃度測定器の開発(HSP34)

鹿児島県立国分高等学校

染谷真心君, 堀永晴南君, 佐藤竜樹君,  
河野裕一郎君(指導教員)



17. 二酸化炭素測定器の開発～換気効果を簡単に測定～(HSP36)

鹿児島県立国分高等学校

日原梨華君, 原田 結君, 山下凜玖君,  
河野裕一郎君(指導教員)



18. 接地面に水がある場合の時間経過による摩擦係数の変化(HSP38)

岡山県立津山高等学校

瀬畑勇誠君, 近藤竜輝君, 中島天悠君,  
春名陽向君,  
小田夏海君(指導教員)



19. 銅を用いた赤色ガラスの作製～銅赤に適した還元雰囲気を作るには～(HSP41)

千葉県立佐倉高等学校

蜷川千里君,  
古賀昭平君(指導教員)

第30回 日本金属学会・日本鉄鋼協会 奨学賞 受賞者 46名 (2022年3月)

(50音順)



群馬大学理工学部  
赤石 瑞季 君



秋田大学理工学部  
五十嵐 優樹 君



東北大学工学部  
石川 立 君



室蘭工業大学工学部  
伊瀬 公哉 君



愛媛大学工学部  
今田 真未 君



豊橋技術科学大学工学部  
今堀 弘佑 君



横浜国立大学理工学部  
今村 光佑 君



鈴鹿工業高等専門学校専攻科  
江口 直暉 君



近畿大学理工学部  
大田 尚輝 君



東京理科大学先進工学部  
岡田 茉佑子 君



鹿児島大学工学部  
鬼丸 翔伍 君



東北大学工学部  
皆瀬 陽平 君



芝浦工業大学工学部  
勝木 健太 君



京都大学工学部  
加藤 由大 君



東海大学工学部  
金田 修一 君



関西大学化学生命工学部  
亀岡 優翔 君



九州工業大学工学部  
黒木 優成 君



名古屋大学工学部  
小泉 知也 君



九州大学工学部  
近藤 謙太郎 君



北海道大学工学部  
坂牧 知紘 君



兵庫県立大学工学部  
塩木 貴也 君



熊本大学工学部  
塩山 貴大 君



富山大学都市デザイン学部  
四宮 悠成 君



岩手大学理工学部  
菅原 大 君



大阪大学工学部  
瀬口 侑右 君



東京大学工学部  
高原 泉 君



島根大学総合理工学部  
田中 弘樹 君



金沢大学理工学域  
棚田 大輔 君



仙台高等専門学校専攻科  
千葉 ありさ 君



東京工業大学物質理工学院  
唐 若娜 君



京都大学工学部  
中川 颯互 君



金沢工業大学工学部  
中林 直哉 君



名古屋工業大学工学部  
成川 皓泰 君



東北大学工学部  
根本 菜摘 君



長岡技術科学大学工学部  
橋本 裕朔 君



東京工業大学物質理工学院  
原 巧 君



千葉工業大学工学部  
久恒 圭人 君



香川大学創造工学部  
日野 直人 君



名古屋大学工学部  
深津 義士 君



大阪大学工学部  
藤田 達也 君



九州大学工学部  
藤原 陸 君



大阪府立大学工学域  
本田 このみ 君



早稲田大学基幹理工学部  
馬 潤勇司 君



茨城大学工学部  
萬波 馨 君



北海道大学工学部  
南 達哉 君



東京大学工学部  
山下 諒将 君



〔第3部門〕 (Li, La)TiO<sub>3</sub> 対応傾角粒界における局所イオン伝導測定および原子構造解析

東京大学 佐々野 駿 君 石川 亮 君

北海道大学 太田 裕 道 君

東京大学・ファインセラミックスセンター 柴田直哉 君 幾原雄一 君

(Li, La)TiO<sub>3</sub>(LLTO)は結晶粒内において高いイオン伝導度を示すため、リチウムイオン電池における固体電解質の有力な候補物質である<sup>(1)</sup>。しかし、多結晶特有の粒界における大きな抵抗が実用化に向けた障害となっている。本研究では、LLTOが示す粒界抵抗の起源を原子レベルで明らかにするため、粒界方位を高度に制御した2種類のLLTO双結晶薄膜(Σ5, Σ13)を作製し、粒界の伝導度計測および原子構造解析を行った<sup>(2)</sup>。

図1は、LLTO Σ5 および Σ13 双結晶薄膜から取得した ESM イオン伝導度マップである。Σ5 粒界における伝導度はバルクと同程度であるのに対し、Σ13粒界近傍では伝導度が著しく低下している様子が観察された。また、図2にΣ5粒界から取得した ADF, ABF-STEM 像および EELS 元素マッピングを示す。Σ5 粒界は原子配列の乱れが小さな単一の構造ユニットで構成されており、バルクに近い原子構造・配位環境が保持されることで、バルクと同程度の伝導度を示すことが示唆された。これに対してΣ13粒界では、図3に示した ADF, ABF-STEM 像および EELS 元素マッピングの結果、構造ユニットごとに原子配列が大きく異なっており、一部のTiに対して酸素配位数が減少していることが明らかとなった。このような原子レベルでの構造変化が、粒界抵抗を誘起していると考えられる。

文 献

- (1) Y. Inaguma, C. Liqun, M. Itoh, T. Nakamura, T. Uchida, H. Ikuta and M. Wakihara: Solid State Commun., **86**(1993), 689.
- (2) S. Sasano, R. Ishikawa, G. Sánchez-Santolino, H. Ohta, N. Shibata and Y. Ikuhara: Nano Lett., **21**(2021), 6282.

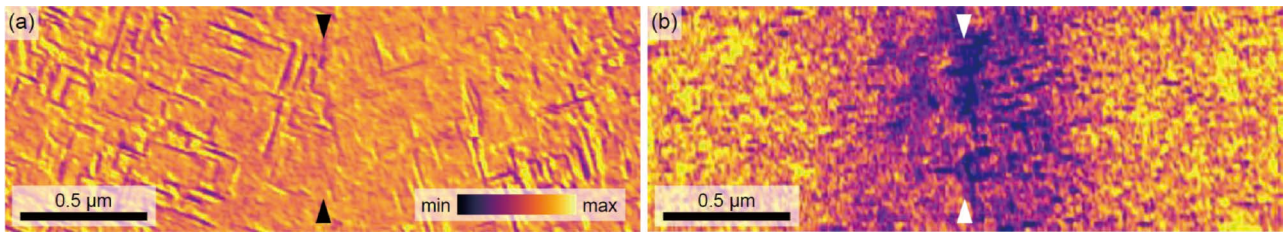


図1 (a)Σ5および(b)Σ13粒界から取得したESMイオン伝導度マップ。

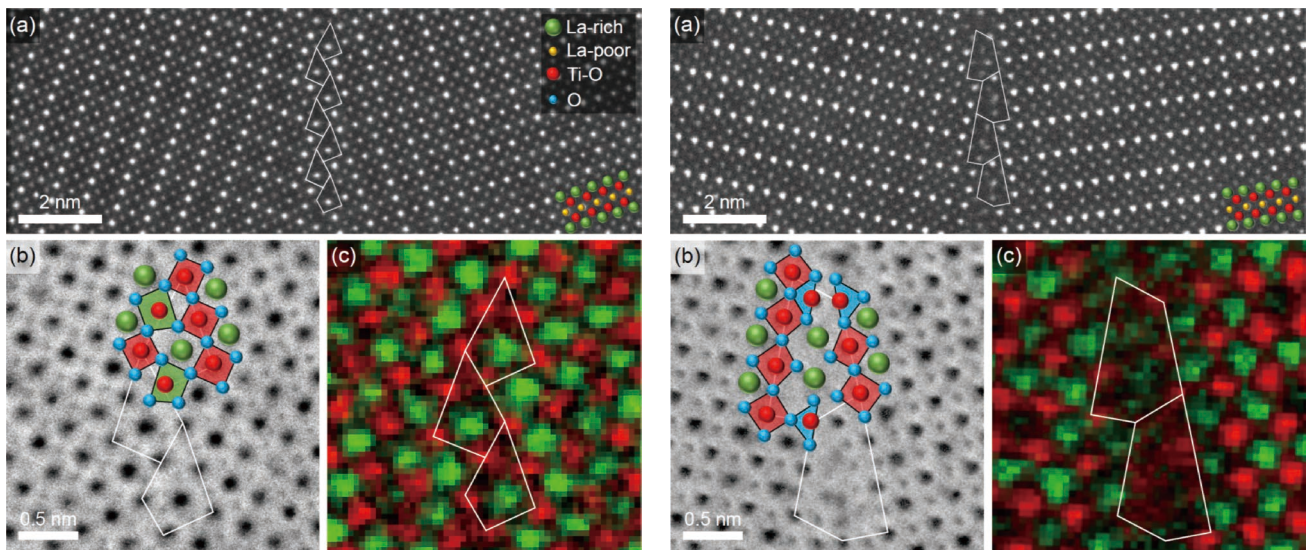


図2 (a)Σ5粒界から取得したADF-STEM像。粒界コアから取得した(b)ABF-STEM像, (c)EELS元素マッピング：Ti(赤), La(緑)。

図3 (a)Σ13粒界から取得したADF-STEM像。粒界コアから取得した(b)ABF-STEM像, (c)EELS元素マッピング：Ti(赤), La(緑)。

〔第1部門〕 ポリアニリンによる Ni の粒界を優先拡散する水素の可視化

東北大学金属材料研究所 柿沼 洋君 味戸沙耶君 北條智彦君 小山元道君 秋山英二君

金属材料の水素脆化機構解明には材料中の水素の分布を把握することが重要だが、広範囲の水素分布を高感度かつ高分解能で観察することは困難であった。そこで、我々は金属材料中の水素原子に感応して色調が変化するポリアニリン<sup>(1)</sup>を用いて、純Ni(99.9%)中の水素分布の可視化を試みた。厚さ0.11 mmの純Niの片面にポリアニリン膜を成膜し、反対側から陰極チャージにより水素を導入した。図1(a), (b)はそれぞれ水素チャージ試験開始前と試験開始から44時間経過後のポリアニリンの光学顕微鏡写真である。試験開始前は全体が均一な紫色だが、水素チャージにより局所的に白く変色した。図1(c)は、図1(a), (b)と同一視野の電子線後方散乱回折(EBSD)測定結果である。図中の黒い線はΣ3~19の対応粒界、赤い曲線はランダム粒界を示している。図1(b), (c)から、ポリアニリンの色調変化は主にランダム粒界で生じたことが分かる。ポリアニリンは金属材料中の水素原子と反応すると色が明るくなる。よって、図1(b), (c)の結果は、純Niのランダム粒界では水素が優先拡散することを示唆している。

文献

(1) H. Kakinuma, S. Ajito, T. Hojo, M. Koyama and E. Akiyama: Adv. Mater. Interfaces, (2022) 2101984.

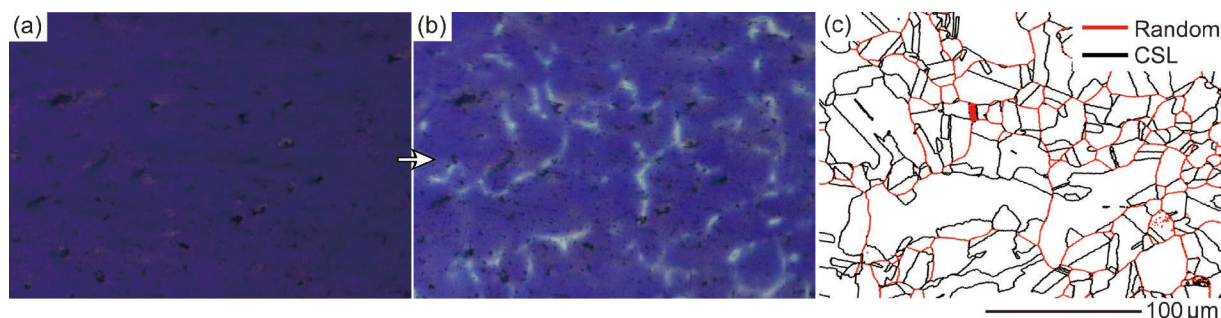


図1 ポリアニリンの光学顕微鏡写真(a) 試験前, (b) 試験開始から44時間後. (c) 試験後のEBSD測定結果.

〔第3部門〕 Pt<sub>3</sub>Co 合金触媒粒子表面 Pt skin 層の精密原子間距離計測

ファインセラミックスセンター 大森雄貴君 黄 馨慧君 仲山 啓君  
小林俊介君 桑原彰秀君

燃料電池の電極に用いられるPt系粒子の触媒性能は表面の原子間距離変化の影響を受ける。このことから触媒粒子の性能評価において、粒子表面の構造情報を得ることは重要である。本研究では走査透過電子顕微鏡を用いた高精度画像取得・解析技術により、Pt<sub>3</sub>Co合金触媒粒子表面の原子間距離が表面状態によって変化することを明らかにした。

図1にPt<sub>3</sub>Co触媒粒子の観察結果を示す。図2(a)に示す(111)表面において、明るいコントラストを示す3原子層程度の領域ではPt被覆層を形成していることをEDS分析により確認した。図2(b)に示す原子間距離の計測結果から、欠陥形成に伴って低原子密度と推察される領域(図2(a)矢印箇所)では合金粒子表面の原子間距離は収縮し、欠陥の少ない結晶面では膨張することが分かった。本結果は、表面の欠陥形成によって原子間距離が変化し、触媒活性へ影響を与える可能性を示唆している。

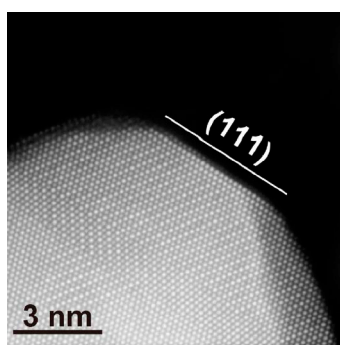


図1 Pt<sub>3</sub>Co合金触媒粒子のHAADF STEM像.

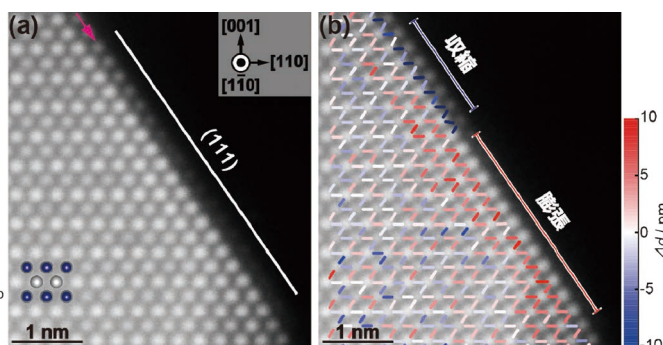


図2 Pt<sub>3</sub>Co合金触媒粒子(111)表面近傍の(a) HAADF STEM像と(b) (111)表面に対して鉛直方向の原子間距離変化マップ.

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(JPNP20003)及びJSPS科研費(21K18196)の助成の結果得られたものである。



〔第4部門〕同一視野3DAP/STEM解析によるp型GaN中の転位ループへのMg偏析の観察

物質・材料研究機構 埋橋 淳君 Ashutosh Kumar 君  
 富士電機 田中 亮君 高島信也君 江戸雅晴君  
 物質・材料研究機構 大久保忠勝君 宝野和博君

次世代パワーデバイスとして有力視される窒化ガリウム(GaN)だが、Mgイオン注入によるp型GaN作製技術の確立がデバイス実現において必要不可欠な課題となっている。ここでは最初に、結晶格子歪みに敏感な低角環状暗視野(LAADF-)走査型透過型電子顕微鏡(STEM)法を用いて3次元アトムプローブ(3DAP)試料を観察し、そのうち同一試料から3DAP分析を行うことで、転位ループや微小欠陥にMgが偏析している様子を3次元かつ定量的に解明した<sup>(1)</sup>(図(a)(b)(c))。Mg偏析はp型特性を悪化させるため、Mg偏析を抑えるイオン注入条件最適化がp型GaN作製技術確立への鍵となる。なお、ここに示したGaNへのMg注入量は $1E19\text{ cm}^{-3}$ (約0.01 at%)であり、微量添加元素の分布をサブnmの空間分解能で3次元に可視化できる点は、3DAPならではの点である。同一視野において3DAP法とSTEM法の特長を掛けあわせることで、飛躍的に精緻なナノ組織解析が可能となる。

文献

(1) A. Kumar, J. Uzuhashi, T. Ohkubo, R. Tanaka, S. Takashima, M. Edo, and K. Hono: J. Appl. Phys., **126** (2019), 235704.

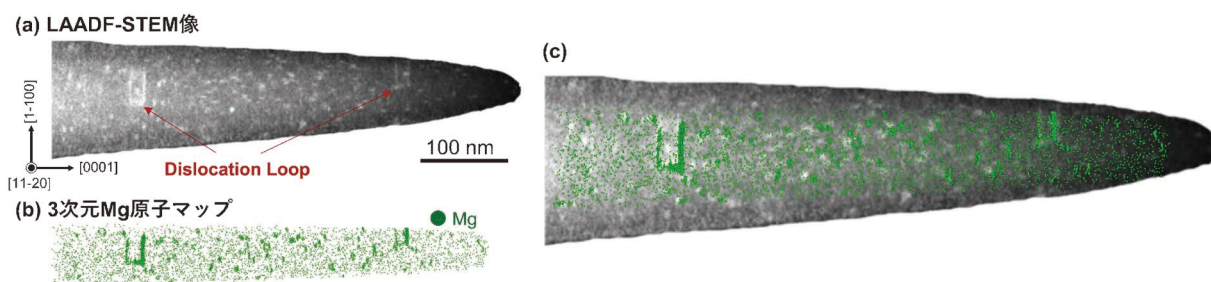


図 (a) 転位ループを含むMgイオン注入GaNの3DAP試料のLAADF-STEM像。  
 (b) 3DAP分析により得られたMg原子マップ(c) LAADF-STEM像とMg原子マップの重ね合わせ。

第72回 金属組織写真賞応募作品 選評

本年度の応募件数は1. 光学顕微鏡部門2件, 2. 走査電子顕微鏡部門2件, 3. 透過電子顕微鏡部門3件, 4. 顕微鏡関連部門2件の計9件であった。

選考委員会での事前評価結果を理事会において報告し、金属組織写真賞規則に従って、最優秀賞1件、優秀賞2件、奨励賞1件の授賞を決定した。

Web審査を踏襲し、選考委員20名に順位点と評価点(5点満点)、および評価の高い作品については選定理由の記載を依頼した。その結果、透過型電子顕微鏡部門から最優秀賞1件、光学顕微鏡部門と透過型電子顕微鏡部門から優秀賞2件、顕微鏡関連部門から奨励賞1件が選ばれることとなった。

最優秀賞「(Li, La)TiO<sub>3</sub>対応傾角粒界における局所イオン伝導測定および原子構造解析」(3. 透過電子顕微鏡部門)は、電気化学歪み顕微鏡法(ESM)、走査透過型電子顕微鏡法(STEM)、電子エネルギー損失分光法(EELS)を組み合わせ対応粒界のイオン伝導度を可視化し、その原子構造を詳細に解析することで粒界におけるイオン伝導性の変化を原子レベルで明らかにしたものであり、卓越した最先端顕微鏡技術であると同時に学術的価値の高い作品として評価された。

優秀賞(部門別, 受付番号順) 1件目「ポリアニリンによるNiの粒界を優先拡散する水素の可視化」(1. 光学顕微鏡部門)は、世界で初めて導電性高分子であるポリアニリン膜を使った金属材料中の水素分布の可視化する技法を示したものであり、従来の可視化技法に比べて広範囲にわ

たってリアルタイムで可視化が可能であることから、昨今、注目を集める材料中の水素の影響を調査・検討する上でも極めて重要な技法の確立であるとして高く評価された。

優秀賞2件目「Pt<sub>3</sub>Co合金触媒粒子表面Pt skin層の精密原子間距離計測」(3. 透過電子顕微鏡部門)は、高角度散乱暗視野(HAADF)による走査透過電子顕微鏡法(STEM)にて、ピコメートルスケールの計測精度を実現し、これまで実測不可能だったPt<sub>3</sub>Co合金触媒粒子の表面Pt skin層の原子間距離の変化を明らかにした。これによって、表面制御による合金系触媒の設計指針を明確にしたことの意義は大きく、学術的成果についても高く評価された。

奨励賞「同一視野3DAP/STEM解析によるp型GaN中の転位ループへのMg偏析の観察」(4. 顕微鏡関連部門)は、低角度散乱暗視野(LAADF)による走査透過電子顕微鏡法(STEM)の観察視野において、転位ループや微小欠陥にMgが偏析している様子を3次元アトムプローブ(3DAP)で定量的に解明したことで、Mgイオン注入を伴うGaNパワーデバイス実現に向けて重要な技術的知見のみならず優れた学術的知見が得られたことが評価された。

今回の選に惜しくも漏れた作品も、レベルの高い力作が多かった。他の学会に類を見ない独自性と学術性を重んじてきた金属組織写真賞の継続と発展のために、今後もますます優れた組織写真が応募されることを期待したい。

金属組織写真賞委員会委員長 吉見享祐(東北大学)

# 材料数理学としてのクラスター変分法\*

毛利 哲夫\*\*

## 1. はじめに

離散格子から連続媒体に至るまで、計算材料科学にはモンテカルロ法、分子動力学法、有限要素法などを始めとして数多の手法がある。問題に応じて、「適材適所」これらの手法を使い分け、より精確に、より効率よく問題を解くことが計算材料科学に期待されることである。そして、多くの手法に習熟しながら、スパコンから PC 迄の計算機を使い分け、可視化手法を援用し、通常の実験では届かないところを明らかにする、あるいは、観える(視える)ようにするところに計算材料科学の役割が望まれている。一方、計算物質科学を構成する計算物理学や計算分子科学が、その背後に物性論や量子化学の長い歴史を有し、紙と鉛筆で問題を解く、どうしても解けないところに数値計算を行うという伝統の上に成り立ってきたのに対し、材料科学においては元より理論材料科学などというものは存在しておらず、理論を具体化し、実証・検証するという動機が希薄な中で、計算ありきの風潮がいつの間にか助長されていることに一抹の不安を拭えないでいる。材料科学で扱う対象は、極めて非一様な媒体であり、それゆえにスケール間での非線形性が強く、そして、多くは非平衡状態にある。そこには物性科学や分子科学とは異質の難しさがある。原理原則の集積の仕方さえも曖昧模糊としており、統一的であるよりも統一的であることに重点が置かれる。現実の問題を解くときにこれは大切なことであるが、一方において学問の発展を考えると、学理の整合的な集積の上に計算が遂行されることが必要である。表題の材料数理学とは、強度や相変態、組織等、材料科学に固有の問題の背後にある数理を系統化したいという筆者の思いを造語にしたものであり、計算材料科学はその延長線上に存在すると考えてい

る。本稿では、材料数理学の強力な理論であるクラスター変分法を取り上げ、離散格子から連続体に至る相安定性・相平衡・相変態が如何に統一的に論じ得るかを示したい。

## 2. クラスター変分法

クラスター変分法(Cluster Variation Method; CVM)<sup>(1)</sup>は故菊池良一先生(図1)によって相互作用をする多粒子系の統計力学的手法として開発された。これが材料科学の分野で注目を集めたのは、1973年に van Baal<sup>(2)</sup>によって平衡状態図の計算に応用されてからである。その後、故 de Fontaine(図2)、Sanchez(図3)、といった菊池先生の協同研究者の精力的な努力と、多量の変数を扱うに十分な計算機の進展と軌を一にして CVM は発展を遂げた。

極簡単に言えば、CVM はエントロピーの近似法とってよからう。合金中における原子はランダムに配列しているのではなく、原子間の相互作用力の下で最も安定な配列をしている。注意すべきは、原子の配列は原子間の相互作用力以上に遠くまで(あるいは、大きく)広がっているということ



図1 菊池良一先生。  
(オンラインカラー)

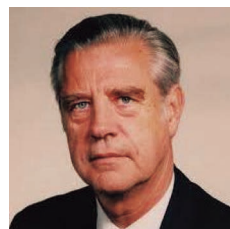


図2 Professor D. de  
Fontaine. (オンライン  
カラー)



図3 Professor J.  
M. Sanchez. (オン  
ラインカラー)

\* 2022年3月15日、オンラインにおける日本金属学会第170回春期講演大会にて講演。

\*\* 北海道大学；名誉教授，JST(科学技術振興機構)；シニアフェロー(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

Cluster Variation Method as a Powerful Tool for Theoretical and Computational Materials Science; Tetsuo Mohri>(\*Professor Emeritus, Hokkaido University, Sapporo & Senior Fellow, Japan Science and Technology Agency, Tokyo)

Keywords: cluster variation method, path probability method, phase field method, cluster expansion method, continuous displacement cluster variation method, first-principles cluster variation method, first-principles phase field method

2021年11月26日受理[doi:10.2320/materia.61.265]

ある。図4は、一次元の原子配列を示したものである。いま、原子間の相互作用力が最近接対に限定されていること、異種原子間の相互作用力が同種原子間のそれよりもはるかに大きい(絶対値が大きい)ことを仮定すると、図に示すように一次元の規則配列ができる(ここではA-B二元系を仮定し、白丸をA原子、黒丸をB原子とする)。ここで、 $n$ 番目の格子点は何故B原子があるかを考えてみると、直接には、 $n-1$ 番目の格子点にA原子が存在しており、この原子から受ける異種原子間の相互作用力のためであると考えることができる。それでは、何故、 $n-1$ 番目にA原子があるのか?それは $n-2$ 番目の格子点にB原子が存在したからである。では、何故 $n-2$ 番目にB原子があるのか…この議論を続けていくと、とりもなおさず1番目の格子点にA原子があったことに帰着する。原子間の相互作用力を最近接対に限定したことを考えると、原子の配列の影響は原子間相互作用以遠にまで及んでいることがわかる。これを配列の相関、あるいは原子間相関という。(より厳密には、一次元系 Ising model の相関は指数関数的に減少することを容易に示すことができる。)原子間相互作用(interaction)と原子間相関(correlation)の関連を図5に模式的に示した。原子間相関、即ち、配列の自由度を書き表す際には、原子間相互作用力の及ぶ範囲以上にこれを考慮する必要があることがわかっていく。この配列の自由度こそがエントロピーである。原子間の相関は元来、無限大に及んでおり、従って、これを有限の大きさで書き表すのは近似である。CVM ではエントロピー項中の最大クラスターを basic cluster と称しており、これが最大限考慮し得る原子間相関であるが、図6に示すように basic cluster はヒエラルキー構造を構成しており、basic cluster のサイズが大

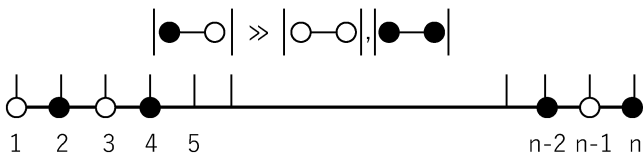


図4 A-B二元合金の一次元規則配列。1. 異種原子間相互作用エネルギーが同種原子間のそれよりもはるかに大きいこと、但し、2. 相互作用は最近接にしか及ばない、という2点を仮定する。

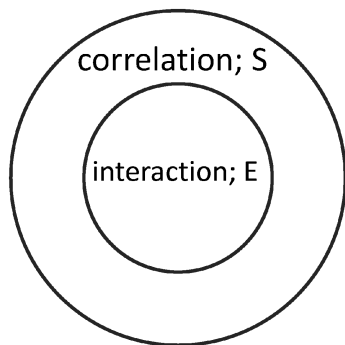


図5 原子間相互作用エネルギー(E)と原子間相関(S)の空間的広がり模式的図。

きければ大きいほど近似がよくなる。

図7(a)<sup>(3)</sup>に四面体近似<sup>(4)</sup>の、そして(b)<sup>(5)</sup>に一番近似度の低い点近似(Bragg-Williams近似<sup>(6)</sup>, point approximationとも称する)の平衡状態図を示した。これはfccの不規則相とL1<sub>2</sub>(1:3及び3:1)規則相、L1<sub>0</sub>規則相(1:1)の相平衡を算出したものであり、プロトタイプとしてはCu-Au系が対応する。共に原子間相互作用力は最近接対に限定されている(厳密には<sup>(3)</sup>小さな多体力が含まれている)。同一のエネルギーでも、basic clusterの大きな四面体近似が相境界線の正しい形状を与えていることがわかっていく。但し、「相境界線の形状」は主観的なものであるため、変態次数や変態温度を正確に比較する必要がある。いくつかの規則相と相分離に対して、CVMの各近似から得られる相変態点と厳密解の比較が文献(7)になされているが、basic clusterの大きさに応じて変態温度が厳密値に近づいていくことを確認できる。

CVMのエントロピー公式として、不規則相に対する点近似(pt)、対近似(Bethe近似<sup>(8)</sup>, pair)と四面体近似(tetra)を下に記した。

$$S_{pt} = k_B \cdot \ln \frac{N!}{\prod_i (N x_i!)} \quad (1)$$

$$S_{pair} = k_B \cdot \ln \frac{(\prod_i (N \cdot x_i!)^{2\omega-1}}{(N!)^{\omega-1} \cdot (\prod_{i,j} (N \cdot y_{ij}!)^{\omega}} \quad (2)$$

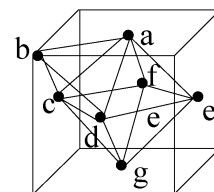
$$S_{tetra} = k_B \cdot \ln \frac{(\prod_{i,j} (N \cdot y_{ij}!)^6 \cdot N!}{(\prod_i (N \cdot x_i!)^5 \cdot (\prod_{i,j,k,l} (N \cdot \omega_{ijkl}!)^2)} \quad (3)$$

$N$ は全格子点数、 $x_i$ はある格子点に原子種*i*を見出す確率で点確率と称するが、格子点中の*i*原子濃度と等価である。同様に、 $y_{ij}$ は*i-j*最近接原子対の対確率(対濃度)、 $\omega_{ijkl}$ は最近接四面体上に*i, j, k, l*種の原子配列を見出す四面体確率

Bragg-Williams 近似=点近似

Bethe 近似=対近似

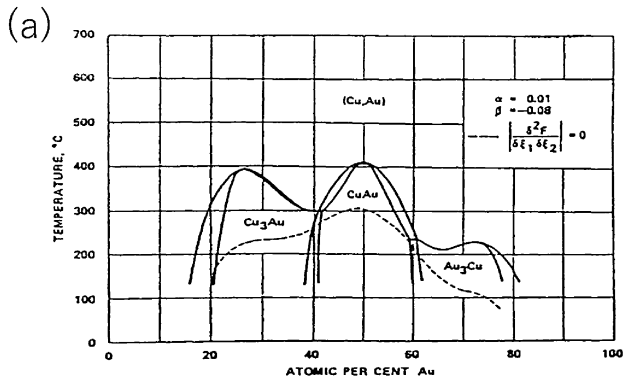
四面体近似



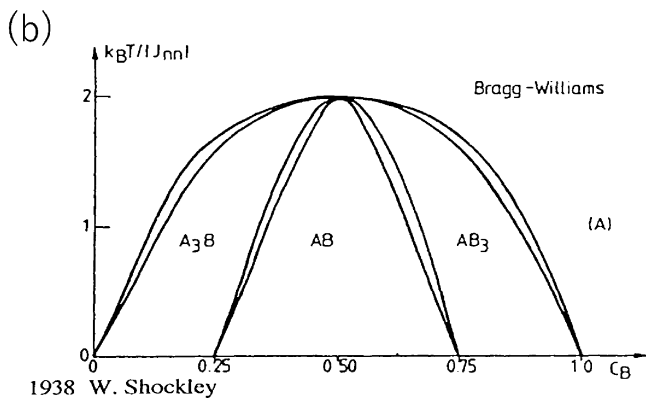
四面体-八面体近似

図6 fcc格子における basic cluster.





1979 R. Kikuchi & D. de Fontaine



1938 W. Shockley

図7 不規則-L1<sub>0</sub>-L1<sub>2</sub>規則相 相平衡状態図。(a)<sup>(3)</sup>四面体近似(CVM), (b)<sup>(5)</sup> Bragg-Williams 近似.

(四面体濃度)である。これらを配列変数(あるいは, クラスター確率, クラスター濃度)と称する。又,  $\omega$  は最近接格子点数(配位数)の1/2である。これらの式をみると, 点近似では配列変数は濃度  $x_i$  のみであるが, 対近似や四面体近似では対濃度  $y_{ij}$  や四面体濃度  $w_{ijkl}$  を含む。つまり単一格子点以上の配列の相関が考慮されている。平衡状態を求めるためにはこれらの配列変数によって自由エネルギーの最小化を行う必要がある。従って, 配列変数が増えれば増えるほど極小化は数学的に煩雑になる。一般に配列変数は規格化条件や幾何学条件<sup>(9)</sup>によって関連付けられており, 相互に独立ではない。

これに対して, 相関関数<sup>(7)(9)</sup>は後の6章で詳述する配列空間(thermodynamic configuration space)の中で, 相互に直交する独立変数を形成する。 $n$ 個の格子点で構成されるクラスター上の点  $p$  に対して,  $\sigma(p)$  なる変数(厳密にはスピン演算子<sup>(9)</sup>と称される演算子である)を割り当て,  $p$  が A(B)原子で占有されているなら  $\sigma(p)$  に +1(-1)を与えると,

$$\xi_n(p_1, p_2, \dots, p_n) = \frac{\sum_{p_1} \sum_{p_2} \dots \sum_{p_n} \sigma(p_1) \cdot \sigma(p_2) \dots \sigma(p_n)}{N(n)} \quad (4)$$

が  $n$  体相関関数を定義する。 $N(n)$  は  $n$  体クラスターの個数である。そして,  $m$  個の格子点でできた  $m$  体クラスターのクラスター濃度は1体から  $m$  体までの相関関数  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$  の線形結合によって書き表すことができる。このように

原子配列はクラスター濃度と相関関数の双方で表現でき, 従って, 式(1)~式(3)までのエントロピー公式は,  $S_{pt}(\xi_1), S_{pair}(\xi_1, \xi_2), S_{tetra}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$  のようにシンボリックに書くこともできる。

### 3. 経路確率法

図8を見てみよう。これが図中①の格子点の周囲に12個の最近接格子点を含む fcc 格子であることはすぐにわかる。さて, 拡散の問題を論じるときに, フィックの法則が多用される。フィックの第2法則では濃度の時間変化は

$$\frac{dx_i}{dt} = D \cdot \nabla^2 x_i \quad (5)$$

と書かれる。 $D$  は拡散係数であり, 又, CVM との関連を明らかにするために  $i$  原子の濃度を  $x_i$  と表記したが, 2元系に対しては多くの教科書で  $c$  と記されている。式(5)は図8の中心①における原子  $i$  の存在確率の時間変化を表しているが, 周囲の原子の影響はどのように考慮すればよいのだろうか? 当然, 上式(5)は点確率の時間変化のみを記述するものであり, 周囲の原子の影響は考慮できないが, 例えば図中の四面体クラスター(①②③④)のクラスター濃度の時間変化  $w_{ijkl}(t)$  を記述できれば周囲の原子配列の影響を考慮することができる。つまり, フィックの法則を Bragg-Williams 近似と考えるなら, このようなクラスター濃度の時間変化を考慮するのは CVM の時間領域への拡張, 即ち, kinetics version とみることができる。これが経路確率法<sup>(10)</sup> (Path Probability Method; PPM)である。

PPM が CVM を時間領域へ拡張したものであることは次の経路確率関数(Path Probability Function),  $P = P_1 \cdot P_2 \cdot P_3$ , の定式化からもわかる。ここで  $P_1$  は

$$P_1 = (\theta \cdot \Delta t)^N \cdot (X_{1,1}^a + X_{1,1}^b + X_{1,1}^c + X_{1,1}^d)^{1/2} \cdot (1 - \theta \cdot \Delta t)^N \cdot (X_{1,1}^a + X_{1,1}^b + X_{1,1}^c + X_{1,1}^d)^{1/2} \quad (6)$$

と与えられ,  $\theta$  は spin flip probability で, 単位時間に up

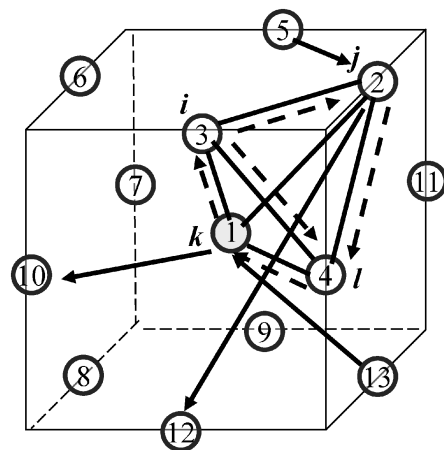


図8 fcc 格子中の四面体クラスター(①②③④)における原子の移動パス。破線は四面体クラスター内の, 実線矢印は四面体クラスターから(へ)のいくつかのパスの模式図。

(down)-スピンの down(up)-スピンに向きを変える頻度,  $X_{i,j}(t, t+\Delta t)$  は無限小時間  $\Delta t$  の間に, 時刻  $t$  における配列  $i$  が  $j$  に変化する時間遷移を記している. 但し, 上式では  $i$  と  $j$  は up- と down-スピンに対して, それぞれ, 1 と -1 をとることを仮定している. つまり, 上式の右辺第一項(第二項)は全格子点(全格子点数は  $N$ )でスピンの反転する(反転しない)確率を表している.  $P_2$  は,

$$P_2 = \exp\left(-\frac{\Delta E}{2k_B T}\right) \quad (7)$$

と書くことができるが, 全系におけるスピンのフリップに伴う内部エネルギーの変化,  $\Delta E$ , に対する熱活性化確率である. 最後に  $P_3$  は

$P_3 =$

$$\frac{\left\{ \prod_{i,j,kl} (N \cdot Y_{ij,kl}^{\alpha\alpha})! \right\} \left\{ \prod_{i,j,kl} (N \cdot Y_{ij,kl}^{\alpha\beta})! \right\}^4 \left\{ \prod_{i,j,kl} (N \cdot Y_{ij,kl}^{\beta\beta})! \right\}}{\left\{ \prod_{i,j} (N \cdot X_{i,j}^{\alpha})! \right\}^5 \left\{ \prod_{i,j} (N \cdot X_{i,j}^{\beta})! \right\}^5 \left\{ \prod_{ijkl,mnop} (N \cdot W_{ijkl,mnop}^{\alpha\alpha\beta\beta})! \right\}^2} \quad (8)$$

と与えられる.  $Y_{ij,kl}$  と  $W_{ijkl,mnop}$  は  $X_{i,j}$  について記したように, それぞれ最近接対と最近接四面体上の配列の  $t$  から  $t+\Delta t$  における時間遷移を表す. 又, 下付き文字が原子種を区別するのに対し, 上付き文字が副格子を表しており, 上式は  $L1_0$  規則相に対して定式化したものである. これらの  $X_{i,j}$ ,  $Y_{ij,kl}$ ,  $W_{ijkl,mnop}$  を path variable (総称して  $A$  と表す) と称している.

PPM において重要なのは  $P_3$  項(8)であり, 式(3)の CVM エントロピー項と非常によく似た形をしていることに気づく. つまり, CVM のエントロピーが配列自由度を表現しているのに対して,  $P_3$  は配列の時間変化の自由度を表現している. さらに, 経路確率関数の対数をとれば, まさしく, これが平衡系に対する熱力学関数(自由エネルギー)と同様な形をしていることがわかる. 即ち, 平衡状態を求めるには自由エネルギーをクラスター濃度で最小化するが, ある平衡状態への最も確からしい遷移経路は経路確率関数を path variable  $\{A\}$  によって最大化することで

$$\frac{\partial P[\{A\}]}{\partial \{A\}} = 0 \quad (9)$$

から求めることができる.

注意すべき点を二つ述べる. 一つは, 上の定式化はスピン系<sup>(11)</sup>について行ったが, 合金系の素過程は原子の位置交換であり, これには直接交換<sup>(12)</sup>, 空孔媒介型があり,  $P_1$  項と  $P_3$  項がそれぞれで異なるということである. 多くの合金系において一般的なのは空孔媒介型であるが, 原子種以外に空孔を考慮する必要があること, さらに, 図8に示すような原子移動(四面体クラスター内の経路を破線で, 四面体クラスターに(から)流入(流出)する経路の一部を実線で示した)の経路が煩雑になることから, 定式化自体が極めて困難である. 詳細を記すだけの紙数がないが, 後に述べる連続変位クラスター変分法の考え方を援用して, 配列経路の自由度を多粒子系の原子配列に置換することで空孔媒介型の計算が可能

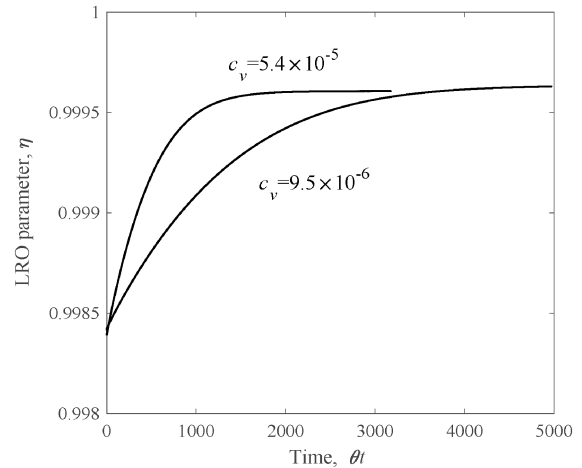


図9  $\text{Ni}_3\text{Al}$  の  $\gamma'$  規則相の安定領域において, 1273 K から 1073 K に急冷-保持した場合の規則-規則緩和挙動(長距離規則度)の経路確率法による計算.  $c_v$  は空孔濃度を意味し,  $5.4 \times 10^{-5}$  と  $9.5 \times 10^{-6}$  はそれぞれ, 1273 K および 1073 K の平衡空孔濃度で CVM により独立に算出した<sup>(13)(15)</sup>.

となった<sup>(13)-(15)</sup>. 二つ目は, PPM には自由エネルギー関数が陽には用いられていないことである. このことは, PPM が near-equilibrium のみならず, far-from-equilibrium の相変態や拡散過程に適用できることを示唆している.

計算結果の一例を図9<sup>(13)(15)</sup>に示した. これは  $\text{Ni}_3\text{Al}$  の  $\gamma'$  の安定領域において, 1273 K から 1073 K に急冷して保持したときの長距離規則度の時間変化を示している. 長距離規則度  $\eta$  は以下のように定義をした.

$$\eta = \frac{x_{\text{Al}}^{\alpha} - x_{\text{Al}}^{\beta} + x_{\text{Ni}}^{\alpha} - x_{\text{Ni}}^{\beta}}{2} \quad (10)$$

$\alpha$  と  $\beta$  は, それぞれ,  $\gamma'$  相の Al と Ni の優先サイトを表す. この計算では, 空孔濃度を予め CVM を用いて算出した急冷前と急冷後の平衡濃度  $5.4 \times 10^{-5}$  (1273 K) および  $9.5 \times 10^{-6}$  (1073 K) に固定した. いずれの場合も長時間極限で, CVM を用いて独立に算出した 1073 K の  $\eta$  の平衡値に収束することや, 空孔濃度の高い方が緩和時間の短くなることを確認した.

但し, この計算では, 単一原子の隣接空孔位置へのジャンプの活性化エネルギーを陽に見積もっていない. 従って, 時間軸(横軸)に絶対値を導入することはできない. フォノン計算や電子状態計算からの入力が必要であり今後の課題である. しかし, 相変態の原子過程に対する第一原理 kinetics 計算が実行可能な段階にあることがわかっていく.

#### 4. 連続変位クラスター変分法

通常の CVM は変形の不能(rigid)な, もしくは変形が一樣な膨張収縮のみに限定される格子を仮定している. 従って, 大きな(小さな)原子の周囲での膨張(収縮)のような格子の局所変位の効果が考慮されていない. つまり, 計算結果は未だ完全に平衡状態に達しておらず, 励起状態にある. 特に, 大

きさの異なる原子が不規則に配列する不規則相では、この効果を取り入れないと自由エネルギーが過大に評価されることになり、規則-不規則変態の変態温度は過剰に見積もられる(不規則相の自由エネルギーが過大に評価されるために不安定となる。)という問題が生じる。格子の局所緩和を取り入れる計算は古くから Kanzaki<sup>(16)</sup>や Khachaturyan<sup>(17)</sup>によって試みられており、局所緩和のエネルギーを結晶の様な変形に要する弾性エネルギーから分離して、

$$E_{\text{local}} = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \mathbf{f}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}) \cdot \Delta c(\mathbf{r}') + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} A_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot v_i(\mathbf{r}) \cdot v_j(\mathbf{r}') \quad (11)$$

と与えている。ここで、 $\mathbf{f}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は $\mathbf{r}'$ 点にある溶質原子が $\mathbf{r}$ 点にある母相原子に及ぼす力、即ち Kanzaki force であり、 $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ は $\mathbf{r}$ 点における母相原子の局所変位、即ち Bravais 格子点からのずれである。又、 $\Delta c(\mathbf{r}')$ は $\mathbf{r}'$ 点における溶質原子の平均存在確率(平均濃度)からのズレを、そして $A_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は Born-von Karman tensor で、これをフーリエ変換したものが dynamical matrix である。Khachaturyan は上式をフーリエ変換して、 $\mathbf{k}$ -空間での elastic Hamiltonian を導出し局所変位を求めているが、Bravais 格子点の周囲での原子分布によるエントロピー変化を陽には考慮していない。

格子点周囲の変位自由度をエントロピーとして取り入れることは極めて難しい問題である。Kikuchi はこの問題に対して、図10<sup>(15)</sup>に示すように、格子点周囲にいくつかの候補点(quasi lattice point; 擬格子点)を準備し、それぞれを別の原子種とみなして、各擬格子点に変位した原子をその点に割り当てられた原子種があたかも Bravais 格子点にあるかのように取り扱うことで、変位の自由度を多元系粒子の配列の自由度に置き替えるという手法を提案した。これが連続変位クラスター変分法(Continuous Displacement Cluster Variation Method; CDCVM)<sup>(18)</sup>である。

単純のため、通常 rigid な格子における対近似を考え、新たに  $L(X) = X \cdot \ln X - X$  を導入すると、エントロピー式(2)は

$$S_{\text{pair}} = k_B \cdot \left\{ (2\omega - 1) \cdot \sum_i L(x_i) - \omega \sum_{i,j} L(y_{ij}) + (\omega - 1) \right\} \quad (12)$$

と書き直すことができる。これに対して、CDCVM の対近似のエントロピー項は

$$S_{\text{pair}}^{\text{CDCVM}} = \frac{2\omega - 1}{2} \left( \sum_i \int d\mathbf{r}_i \cdot L(f_i(\mathbf{r}_i)) + \sum_j \int d\mathbf{r}'_j \cdot L(f_j(\mathbf{r}'_j)) \right) - \omega \sum_i \sum_j \int d\mathbf{r}_i \int d\mathbf{r}'_j \cdot L(g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j)) - (\omega - 1) \quad (13)$$

である。上式(13)の右辺第1項が

$$\frac{2\omega - 1}{2} \left\{ \sum_i \int d\mathbf{r}_i \cdot L(f_i(\mathbf{r}_i)) + \sum_j \int d\mathbf{r}'_j \cdot L(f_j(\mathbf{r}'_j)) \right\} = (2\omega - 1) \cdot \sum_i \int d\mathbf{r}_i \cdot L(f_i(\mathbf{r}_i)) \quad (14)$$

であることを考えると、式(12)と(13)を比較したとき、離散格子点上の点確率 $x_i$ が擬格子点 $\mathbf{r}_i$ における点分布関数

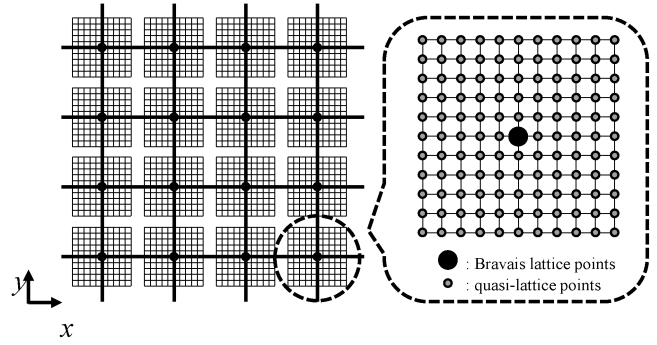


図10 二次元正方格子における通常の Bravais 格子(太線)とそれぞれの格子点の周囲の擬格子点<sup>(15)</sup>.

$f_i(\mathbf{r}_i)$ に、そして対確率 $y_{ij}$ が対分布関数 $g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j)$ に、クラスター濃度が連続体の分布関数に置き換えられていることがわかる。

エネルギー項についてはこれまで言及しなかったが、 $\mathbf{r}$ 点の $i$ 原子と $\mathbf{r}'$ 点の $j$ 原子間に対相互作用エネルギー $\phi_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j)$ を仮定した場合、CDCVM の内部エネルギーは

$$E^{\text{CDCVM}} = \omega \cdot \sum_i \sum_j \int d\mathbf{r}_i \int d\mathbf{r}'_j \cdot \phi_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j) \cdot g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j) \quad (15)$$

と書ける。これを式(13)と組み合わせると自由エネルギーはシンボリックに

$$\Phi = E^{\text{CDCVM}} - T \cdot S_{\text{pair}}^{\text{CDCVM}} \quad (16)$$

と書き表すことができ、対分布関数で最小化

$$\frac{\partial \Phi}{\partial g_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_j)} = 0 \quad (17)$$

を行うことで平衡状態を導くことができる。但し、格子の対称性を考慮した条件式を Lagrange multiplier として $\Phi$ に導入することが極めて重要であることを断っておく。

CDCVM を用いた計算結果の一例を記すと、二次元正方格子の規則-不規則変態点が、図11<sup>(19)</sup>に示すように CDCVM では通常 CVM よりも減少していることがわかる。これ

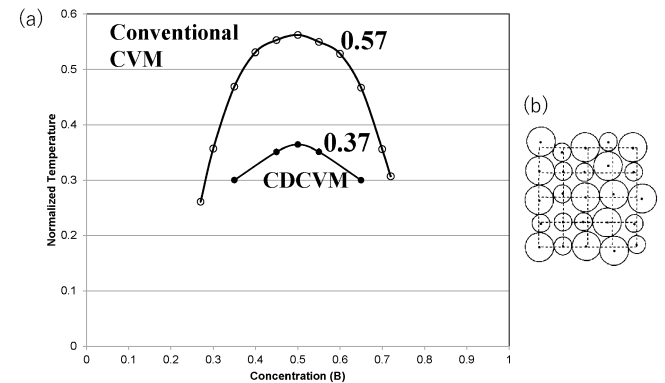


図11 (a) 二次元正方格子の規則-不規則平衡状態図<sup>(19)</sup>. 上の相境界線は通常 CVM による計算結果、下は連続変位 CVM (CDCVM) による結果. 1 : 1 組成における変態温度(A-A の対相互作用エネルギーで規格化)は前者では0.57、後者は0.37である. (b) 不規則相における原子の局所的な変位の模式図.

は、局所緩和を許すことによって、(b)図に示すように大きさの異なる原子が相互に混合しやすくなるが、この効果は不規則相において顕著であり、従って不規則相が規則相よりも安定化するためである。

CDCVM の意義は、単に相変態の温度を厳密に評価し得るというだけではなく、合金の内部自由度を配列の自由度に変換する点にある。内部自由度として、局所変位を取り上げたが、これは一つの応用例と考えることができよう。これ以外に、磁性合金の磁気スピンも内部自由度<sup>(15)</sup>であり、また、変位型相変態を生じる原子の集団変位<sup>(20)</sup>も一例である。これらについての総合報告は文献(15)に詳しい。

## 5. フーリエ空間のクラスター変分法

図12を見てみよう。規則-不規則相変態は、実空間中での原子配列の時間変化過程と捉えることができると同時に、不規則相中のある方向へある波長で進行していく波の励起・増幅・伝播の過程と考えることができる。そして、この方向と波長が低温領域における規則相を特徴づけている。このような波の描像は  $k$ -空間、即ちフーリエ空間で表現するのがわかりやすい。不規則相中の波を濃度波あるいは、特に規則相の生成に関わる波を規則波と称したときに、規則波の励起による規則-不規則相変態は、不規則相中に励起する規則波による自由エネルギーの変動を定式化することで解析できる。

$$\delta F = F - F_0 = \frac{1}{2} \sum_{l,l'} \sum_{p,p'} f_{ll'}(p, p') \delta \xi_l \cdot \delta \xi_{l'} \quad (18)$$

ここで  $\delta \xi_l$  は平衡状態の格子点  $p$  における相関関数  $\xi_l^{(eq)}$  の揺らぎ  $\xi_l(p) - \xi_l^{(eq)}$  を示す。この揺らぎにより系の自由エネルギー  $F$  は一様な不規則相(揺らぎのない)の自由エネルギー  $F_0$  から  $\delta F$  だけ変動し、 $f_{ll'}(p, p')$  は  $\delta F$  の2階微分を示す。不規則相の並進対称性を考慮すると、式(18)は以下のようにフーリエ変換することができる。

$$F_T\{\delta F\} = \frac{1}{2} \sum_{l,l'} \sum_k F_{ll'}(\mathbf{k}) \cdot \delta X_l^*(\mathbf{k}) \cdot \delta X_{l'}(\mathbf{k}) \quad (19)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_l \sum_k A_l(\mathbf{k}) |\delta Z_l(\mathbf{k})|^2 \quad (20)$$

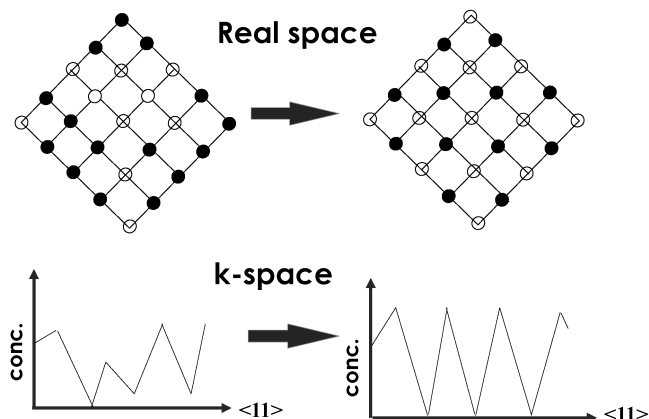


図12 不規則相の規則化過程の実空間と波数空間の模式図。

但し、 $F_{ll'}(\mathbf{k})$  と  $\delta X_l(\mathbf{k})$  は、 $f_{ll'}(p, p')$  および  $\delta \xi_l$  をフーリエ変換したものであり、 $F_{ll'}(\mathbf{k})$  のエルミート性を用いて式(20)のように対角化を行って固有値  $A_l(\mathbf{k})$  を抽出した。

高温の不規則相中ではすべての固有値が正であるが、温度が下がるとある固有値  $A_n(\mathbf{k}_0)$  が負になる。あるいは行列値  $Det.F_{ll'} | (\mathbf{k}_0, c, T_0) | = 0$  が消滅する。このような負の固有値に対応する波  $\mathbf{k}_0$  の励起によって2階微分は負になるが、これはまさしく系の安定性の自発的な消滅を意味する。これがスピノーダルオーダーリング<sup>(21)(22)</sup>であり、波長が無大の波に対する安定性の消滅が相分離に対する不安定性の励起、即ちスピノーダル分解である。後者は自由エネルギーの点近似式、即ち濃度に関する2階微分の消滅条件を考慮すればよいが、前者は規則波を取り扱うためにクラスター確率のフーリエ変換を必要とする。数学的にフーリエ変換が可能であるためには並進対称性が保証されている必要があるが、不規則相では濃度(存在確率)の並進対称性は保たれるものの、クラスター濃度の並進対称性を保障するためにはクラスターの取り方に工夫が必要である。例えば、単一の最近接四面体では空間を覆いつくすことはできない。最近接四面体が2つ連結したクラスターが必要である。このことは実空間の平衡状態の計算に四面体近似を用いても、 $k$ -空間のそれには単一の四面体クラスターでは不十分であることを意味する<sup>(22)</sup>。

自由エネルギーの2階微分の消滅するものが2次相変態と考えるのは誤解であることを注意しておく。2階微分は安定性の目安であり、相変態の条件は1階微分により与えられる(この消滅条件が相境界線を決定する)。従って、1階微分と2階微分の消滅条件が一致するところで系は安定性を消失して相変態が自発的に起こり、これが2次相変態である。相境界線と2階微分の消滅条件が一致しない場合は変態は1次変態である。

図13<sup>(23)</sup>に計算結果の一例を示した。これはFe-Niのdisorder-L1<sub>0</sub>相境界線(実線)とスピノーダルオーダーリング線(破線)の第一原理計算であるが、濃度50%ではスピノーダルオーダーリング線は相境界線のはるか下に位置しており、L1<sub>0</sub>変態が1次変態であることを示している。一方、下向きの矢印で示したNi濃度60%近傍では、二つの線が一致しており、不規則-L1<sub>0</sub>変態が2次変態として生起する。

濃度50%においては、不規則相を相変態点とスピノーダルオーダーリング温度の間の温度域に急冷した場合には、L1<sub>0</sub>規則相の核発生-核成長の過程で規則化が進行し、スピノーダルオーダーリング温度よりも下の温度では、無限小の規則波の揺らぎにより、L1<sub>0</sub>規則波が励起・増幅・伝播することにより規則相への変態が生じる。また、濃度60%で温度420 Kの相変態点直上(矢印)で計算した短範囲規則散漫散乱強度<sup>(22)</sup>を図中に示した。これは  $F_{ll'}(\mathbf{k})$  の逆行列から求まるものであり、散乱実験の結果と比較することができる。又、Brillouin zoneの積分強度は自己相関関数に外ならず、一定値に保たれるはずであるが、クラスター変分法にせよ、Bragg-Williams近似にせよ、近似式を用いると低温になると発散する。この発散現象は高近似式になるほど抑制される

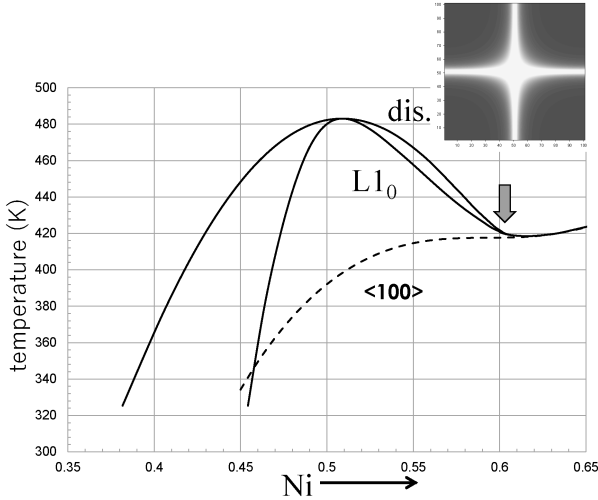


図13 実線はFe-Ni系のdisorder-L1<sub>0</sub>相境界線、破線は<100>スピノーダルオーダーリング線、右上の挿入図は440 K, 60 at%での短範囲規則散漫散乱強度。これらは全て、一本の第一原理CVM自由エネルギー式から算出した結果である<sup>(23)</sup>。

のでこれが近似度の目安になる<sup>(22)</sup>。

## 6. variable 基底のクラスター展開とクラスター変分法

クラスター展開法(Cluster Expansion Method; CEM)は、規則相の全エネルギーからクラスター有効相互作用力を導出する手法として、CVMのような統計力学的手法と電子状態計算を組み合わせて相平衡や熱力学量の第一原理計算を行う際に汎用されている。エネルギーのクラスター展開は

$$E^{(m)} = \sum_j^{j_{\max}} v_j \cdot \xi_j^{(m)} \quad (21)$$

と書き表されるが、ここで $E^{(m)}$ はある相 $m$ のエネルギーであり、 $v_j$ がクラスター $j$ の有効相互作用エネルギー、 $\xi_j^{(m)}$ は相 $m$ におけるクラスター $j$ の相関関数である。相関関数は既に式(4)で定義した。上式(21)で $E^{(m)}$ は電子状態計算などから得られる既知の量、また電子状態計算は絶対零度を対象とするために相 $m$ の原子配列は一義的に決まっておき、相関関数 $\xi_j^{(m)}$ も既知の量である。従って、有効相互作用エネルギー $v_j$ は以下のように求めることができる。

$$v_j = \sum_m \{ \xi_j^{(m)} \}^{-1} \cdot E^{(m)} \quad (22)$$

CEMでは複数の相に対してエネルギーを計算するために $E^{(m)}$ はベクトルであり、相 $m$ 中の複数のクラスター $j$ (エネルギー計算の対象とする相と同じ数にするのが一般的である)の原子配列を相関関数で考慮するために $\{ \xi_j^{(m)} \}$ は行列である。式(21)(22)はいわゆるConnolly-Williamsのクラスター展開法<sup>(24)</sup>といわれるものである。

CEMは、展開の基底、相関関数の直交性と完備性の厳密な議論の上に成り立っており、数理的側面はSanchez-Ducastelle-Gratias(SDG)の論文<sup>(25)</sup>に詳述されている。Connolly-WilliamsのCEMを始めとする大部分のCEMの展開

の基底は式(4)で導入したスピン変数 $\sigma$ である(注意; $\sigma$ は $\pm 1$ をとることが前提にされているが、どのような数値でも構わない。)が、これを上の論文ではSDG基底と称している。

これに対してSanchezがvariable基底に対するCEM<sup>(26)</sup>(Variable Basis CEM; VBCE)を提唱した。このvariable基底は単一格子点に対しては

$$\varphi^\mu(\sigma) = \frac{\sigma - \tanh \mu}{\sqrt{1 - (\tanh \mu)^2}} \quad (23)$$

で与えられる。 $\mu$ は化学ポテンシャルであり、これを適宜与えることによって基底(基底関数)が変化する。これがvariable基底の由来である。そして、 $\mu=0$ のとき、 $\varphi^\mu(\sigma) = \sigma$ となってSDG基底に一致することがわかる。複数個の格子点で形成されるクラスター $\alpha$ に対する基底は $\varphi^\mu(\sigma)$ の積として、

$$\phi_\alpha^\mu(\sigma) = \prod_{p \in \alpha} \varphi^\mu(\sigma_p) \quad (24)$$

のように与える。ここで $\alpha$ はクラスターを、 $p$ は格子点を表す。いま、 $\alpha$ と $\beta$ の二つのクラスターに対して、基底関数の配列に関する平均をとると、

$$\langle \phi_\alpha^\mu \phi_\beta^\mu \rangle = \sum_\sigma \kappa_N^\mu[\xi_1(\sigma)] \cdot \phi_\alpha^\mu(\sigma_\alpha) \cdot \phi_\beta^\mu(\sigma_\beta) = \delta_{\alpha,\beta} \quad (25)$$

となることが確認できる。ただし、

$$\kappa_N^\mu[\xi_1(\sigma)] = \left[ \frac{e^{\mu \xi_1}}{2 \cosh \mu} \right]^N \quad (26)$$

であり、 $\xi_1$ は点相関関数である。この式(25)がまさしく配列空間(configurational space)における基底の直交性(orthogonality)を与えている。次に、同一のクラスター $\alpha$ 上の原子配列 $\sigma_\alpha$ と $\sigma'_\alpha$ に対して

$$\sum_\alpha \phi_\alpha^\mu(\sigma_\alpha) \cdot \phi_\alpha^\mu(\sigma'_\alpha) = \frac{\delta_{\sigma_\alpha, \sigma'_\alpha}}{\kappa_N^\mu[\xi_1(\sigma)]} \quad (27)$$

が成り立っていることも容易に確認できる。これが空間の完備性(completeness)である。この両者が成り立っているが故にクラスター展開が可能になるのである。例えば、配列 $\sigma$ に依存するある物理量 $f(\sigma)$ は

$$f(\sigma) = \sum_\alpha j_\alpha^\mu \cdot \phi_\alpha^\mu(\sigma) \quad (28)$$

と展開することができるが、 $f(\sigma)$ が全エネルギーであれば $j_\alpha^\mu$ はクラスター $\alpha$ の有効相互作用エネルギーであり、基底 $\phi_\alpha^\mu(\sigma)$ の直交性により、

$$j_\alpha^\mu = \langle f, \phi_\alpha^\mu \rangle_\mu \quad (29)$$

となる。また、異なる基底 $\phi_\alpha^\mu$ と $\phi_\beta^\mu$ の変換式は

$$\phi_\alpha^\mu(\sigma) = \sum_\beta \langle \phi_\alpha^\mu \cdot \phi_\beta^\mu \rangle_\mu \cdot \phi_\beta^\mu(\sigma_\beta) \quad (30)$$

と与えることができるため、 $j_\alpha^\mu$ は基底変換に伴って

$$j_\alpha^\mu = \sum_{\beta \ni \alpha} \Gamma_{\alpha\beta}^{\mu\mu'} j_\beta^{\mu'} \quad (31)$$

と変換される。但し、

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu\mu'} = \frac{[\cosh \mu]^{n_\alpha}}{[\cosh \mu']^{n_\beta}} (\tanh \mu' - \tanh \mu)^{(n_\alpha - n_\beta)} \quad (32)$$

である。又、 $n_\alpha(n_\beta)$ はクラスター $\alpha(\beta)$ に含まれる格子点数である。



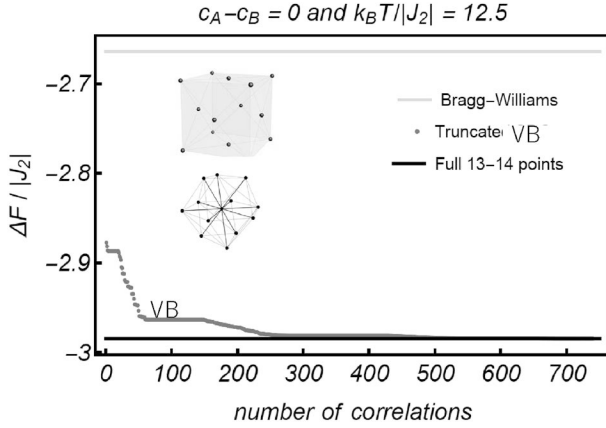


図14 13-14点クラスター(図中の挿入図)を用いた濃度50%, 温度12.5(対相互作用エネルギーで規格化)のイジングモデルに対する生成自由エネルギーの計算結果. 比較のため, Bragg-Williams 近似(一番上の直線)と完全な13-14点クラスター CVM の結果(一番下の黒い直線)も示す. VB は完全な13-14点クラスター(総計741の独立変数を含む)から相関関数の数を truncate した(打ち切った)本計算結果で, 用いた相関関数の個数を横軸に示す(27).

かかる基底の変換の応用例の一つを取り上げる. VBCE では式(23)における  $\tanh \mu$  を点相関関数  $\xi_i = \langle \sigma_p \rangle$  と等値するので自由エネルギーの独立変数は一つ減少する. さらに, 詳細は原著論文にゆだねるが, SDG から VBCE への基底変換と CVM と組み合わせたときにクラスター展開の truncation (式(21)の  $j_{\max}$  よりも小さな cluster で展開を打ち切る)を行って自由エネルギーの独立変数を減らすことができ, 極小化の操作が極めて簡単になる. 図14(27)に示したのはクラスター変分法の面心立方格子に13-14点近似(basic cluster を図中に示した)を用いた場合の truncation の比較である. 13-14点近似は741個の独立変数を含むクラスターであるが, 図に示すように, 僅かに数十個の変数で打ち切っても完全な13-14点近似計算(741個の独立変数全てを用いて極小化を行う)の結果の約90%に達する. これは高近似の CVM の計算効率を図る上で極めて重要である.

## 7. 第一原理フェーズフィールド法

フェーズフィールド法(28)は内部組織の計算において極めて強力な手法である. その起源は以下の Cahn-Hilliard 方程式(29)と Allen-Cahn 方程式(30)である.

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta F_{\text{chem}}}{\delta \eta_i} \right) \quad (33)$$

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = - \sum_j L_{ij} \frac{\delta F_{\text{chem}}}{\delta \eta_j} \quad (34)$$

ここで  $\eta_i$  は  $i$  番目の field variable と呼ばれる変数で, Cahn-Hilliard 方程式では保存量を取り扱うために濃度が典型例である. これに対して Allen-Cahn 方程式は非保存量に対する時間発展方程式であり, field variable として長距離規則度などが対象となる.  $M$  は mobility,  $L_{ij}$  は relaxation

constant, そして  $F_{\text{chem}}$  は化学自由エネルギーで

$$F_{\text{chem}} = \int \left( f_0[\{\eta_i\}] + \sum_i \kappa_i (\nabla \eta_i)^2 \right) dV \quad (35)$$

と与えられ,  $f_0[\{\eta_i\}]$  は一様系の自由エネルギー,  $\kappa_i$  は勾配エネルギー係数 (gradient energy coefficient) であり, 一般には一定の値を与える. いうまでもなく, 一様系の自由エネルギー  $f_0[\{\eta_i\}]$  が平衡状態図計算に用いられるものであり, これまでの章で議論してきた自由エネルギーも  $f_0[\{\eta_i\}]$  である. 上式(35)の積分内第2項は一様媒質中に濃度や規則度の揺らぎが生じたときのエネルギー変化であり, 濃度や規則度の空間勾配の2乗として与えられることが導かれる.

第一原理フェーズフィールド計算を行うためには, CVM や CEM を援用して自由エネルギー  $f_0[\{\eta_i\}]$  を第一原理から記述すればよいが, 内部組織は原子スケールよりも大きなスケール域で定義されているものであり, 離散格子上的第一原理自由エネルギーを単に空間平均をとってスケールアップするだけでは第一原理フェーズフィールド計算を実現できない. 空間スケールの変化に対して分配関数を不変に保つような適切な粗視化が必須である.

図15(31)に示すように結晶を粗視化領域に分割し, 各粗視化領域を表す座標系  $\{R_n\}$  と, 各粗視化領域内の原子面を表す座標系  $\{r_m\}$  を導入する. そして, 相関関数を  $\xi_i(R_n + r_m)$  のように位置の関数として書き表し, これを粗視化領域の中心座標の周囲に Taylor 展開を施す.

$$\xi_i(R_n + r_m) \cong \xi_i(R_n) + r_m \cdot \nabla \xi_i(R_n) + \frac{1}{2} (r_m)^2 \cdot \nabla^2 \xi_i(R_n) \quad (36)$$

このとき, 全系の自由エネルギー  $F$  は各粗視化領域  $n$  の各格子面  $m$  からの寄与の和として,

$$F \cong \sum_{n,m} f_{\text{CVM}}(r_m, \{\xi_i(R_n)\}, \{\nabla \xi_i(R_n)\}, \{\nabla^2 \xi_i(R_n)\}) \quad (37)$$

と書ける. 次に,  $F$  を一様系の周囲に

$$F \cong \sum_n \left\{ \sum_m f_{\text{CVM}}(\{\xi_i(R_n)\}) + \sum_{m,i} \frac{\partial f_{\text{CVM}}}{\partial (\nabla \xi_i)} \Big|_0 \times (\nabla \xi_i) + \sum_{m,i} \frac{\partial f_{\text{CVM}}}{\partial (\nabla^2 \xi_i)} \Big|_0 (\nabla^2 \xi_i) + \frac{1}{2} \sum_{m,i,i'} \frac{\partial^2 f_{\text{CVM}}}{\partial (\nabla \xi_i) \partial (\nabla \xi_{i'})} \Big|_0 (\nabla \xi_i) (\nabla \xi_{i'}) \right\} \quad (38)$$

のように展開を施す. ここで一様系とは相関関数の空間勾配

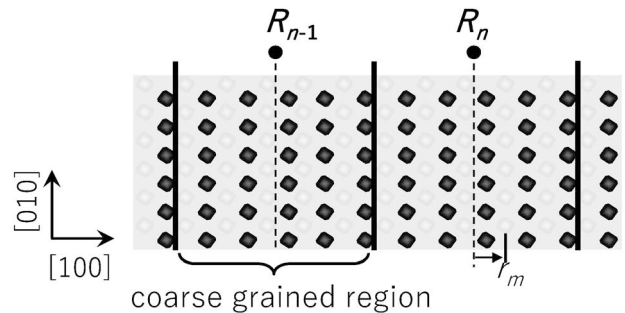


図15 粗視化に用いる2つの座標系.  $R$  は結晶中の粗視化領域,  $r$  は粗視化領域内の原子面を示す座標系(31).

項  $\nabla \xi_i, \nabla^2 \xi_i$  が消滅する状態である。これをさらに整理すると

$$F = \frac{1}{L} \int \left\{ N' \cdot f_{\text{CVM}}[\{\xi_i\}] + \sum_{i,i'} \kappa_{i,i'} (\nabla \xi_i) \cdot (\nabla \xi_{i'}) \right\} \quad (39)$$

と書き換えられるが、ここで大切なことは、エネルギー勾配係数はもはや定数ではなく、 $\kappa_{i,i'} = \kappa_{i,i'}(T, r_m, \alpha, \{J\})$  のように、温度  $T$ 、座標  $r_m$ 、クラスター相互作用エネルギー  $\{J\}$  の関数になることである。この定式化に対して、CVM の対近似に基づいて Kikuchi-Cahn<sup>(32)</sup> が先駆的な貢献をしたが、大野<sup>(31)</sup> により四面体近似 CVM へと一般化された。

粗視化に際して、相関関数を  $\xi_i(R_n + r_m)$  のように位置の関数として書き表したが、結晶をある方向から見た場合、注目している結晶面より前にも後ろにも結晶面が存在する。この面上やこれらの複数の面にわたるクラスターの相関関数を書き表すためには、着目している結晶面の面間距離を  $a$  として  $\xi_i(R_n + r_m + h(a))$  と書くのが厳密である。 $h(a)$  は一般に  $a$  の分数である<sup>(31)</sup>。

図16<sup>(33)</sup> に計算結果の一例を示した。これは濃度50%の Fe-Pd 系不規則相を、規則相の安定な880 K に急冷・保持したときの  $L1_0$  規則相の時間発展過程を計算したものである。CVM の四面体近似の自由エネルギー  $f_0[\{\eta_i\}]$  に、電子状態計算から導いたクラスター有効相互作用エネルギー<sup>(34)</sup> を導入し、一切の補正パラメータを用いることなく、Fe と Pd の原子番号26と46から導いた計算結果である。黒い部分が不規則相、白い部分が  $L1_0$  規則相であり、逆位相境界 (Anti Phase Boundary) の形成されていく様子がわかる。APB は  $[100]$  方向に強い異方性を有しているが、原著論文<sup>(31)(33)</sup> ではこれが最近接対相互作用エネルギーの効果であることを示した。特筆すべきは、図中に示すように結晶方位や単位長さのスケールを一義的に決定し得たことである。但し、時間は緩和係数で規格化している。時間の絶対値を定めるためには経路確率法を用いることが有用と思われる<sup>(35)</sup>。又、本計算に先立って、不規則- $L1_0$  相平衡状態図も  $f_0[\{\eta_i\}]$  を相関関数  $\{\eta_i\}$  で微分極小化することで第一原理から導いており<sup>(34)</sup>、変態温度の誤差が10 K 以下であったことを補足しておく。現在、より詳細な考察を Fe-Pt 系に対して試みている。又、内部組織の形成には弾性エネルギーの寄与が極めて大きい、これは長距離力であり本計算の範疇では取り扱わないが、 $F$  にこれを導入することで化学エネルギーと弾性エネルギーの協調・競合する相変態を取り扱うこと

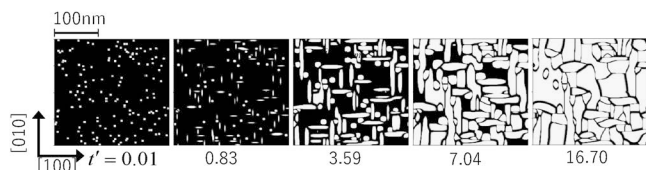


図16 Fe-Pd 系の濃度50%の不規則相を880 K ( $L1_0$  規則相の安定域)まで急冷し、時効したときの規則化過程の第一原理フェーズフィールド計算。黒い部分は不規則相もしくは逆位相境界を、明るい部分は  $L1_0$  規則相を示す。結晶方位と単位長さが一義的に決定されていることに注意。但し、時間は緩和係数で規格化してある<sup>(33)</sup>。

が可能である。

## 8. 材料強度学

離散格子上の相安定性・相平衡から原子 kinetics, 相変態, そして連続媒体上での内部組織形成へ、クラスター変分法の本の自由エネルギー表式からこれらが統一的に導き出されることを記した。厳密な理論が帰結する一本の数式には豊饒な情報が凝集されている。このような理論を構築し、異分野との間に共通の数理を介して連関を探りながら統一的な描像を結ぶこと、これが材料数理学であり、これを材料科学固有の問題に精緻なシミュレーションによって視覚化・具象化すること、これが計算材料科学であると定義したい。

本稿では相変態論を対象にしたが、材料科学におけるもう一つの大きな分野は強度学であり、筆者の元々の問題意識も強度学・転位論にあった。その大きな契機は学生時代に Morris 先生(図17)の転位運動の一連の論文を読んだことにある。点状の障害物がランダムに存在するすべり面上を運動する単一転位の挙動と、臨界剪断応力には Friedel 統計<sup>(36)</sup> なる関係があり、障害物濃度  $c$  に対して臨界剪断応力が  $c^{1/2}$  則に従うことが知られていた。1970年代、直接、これを計算機シミュレーションによって検証することが複数のグループでしのぎを削って行われたが、これが材料科学における計算機シミュレーションの先駆けの一つであったと思われる。しかし、Morris ら<sup>(37)(38)</sup> のアプローチは、Poisson 分布、branching process などの確率論に基づく緻密な議論を先行させ、極限まで数理を抽象化した上で、紙と鉛筆の尽きるところに初めてコンピューターシミュレーションで具象化を行うというものであり、材料科学にこのような研究者のいることに筆者は大きな夢を感じた。Morris は Khachaturyan と共に相変態の理論構築にも大きな寄与をしたが、彼の材料強度学に対するアプローチは、材料数理学、計算材料科学のあるべき姿を教えてくれる。強度学に関する材料数理学を別の機会に紹介できればと思う。多くの先駆者の足跡の上に若い人々が更なる材料数理学の構築を目指すことを願って本稿を閉じる。最後に、2章から7章までの内容は文献(15), (39) に詳述していることを付記する。



図17 Professor J. W. Morris, Jr. (オンラインカラー)



# 永久磁石の高性能化にみる複合組織制御\*

杉本 諭\*\*

## 1. はじめに

著者の学生時代に金属組織学の講義をしていただいていた西澤泰二先生から、「君たちは素材と材料の違いはわかりますか?」と聞かれたことがある。先生によると「材料には機能があり、特に金属材料では組織を制御することによってその機能が生み出されている」との説明であった。その後、本間基文先生の研究室の門をたたき、永久磁石材料の研究を長年行ってきたが、まさに永久磁石は単相ではなく、二相からなる複合組織を制御して磁気特性を生み出す材料であるといえる。本稿では、永久磁石におけるその複合組織の制御に用いられるプロセスと磁気特性との関係をまとめてみたいと思う。

## 2. 永久磁石の歴史と高性能化への条件

図1<sup>(1)</sup>に近年における永久磁石の強さの変遷を示した。本会の関係者ならご存じの通り、本多光太郎先生によるKS鋼の発明が人類初の人工的磁石の発端となっている。それから100年余りが経過するが、その間十数種の磁石材料が開発されてきており、永久磁石の歴史はまさに新しい材料の開発と磁気特性の向上の歴史であったといえる。永久磁石の高性能化を図2<sup>(2)</sup>で示すような飽和磁気分極 $J_s$ と残留磁束密度 $B_r$  (または残留磁気分極 $J_r$ )の差はなく保磁力 $H_{cJ}$ において磁化反転が起きるような減磁曲線で規定される理想的な場合で考えると、その強さである最大エネルギー積 $(BH)_{max}$ は式(1)で示すように $J_s$ または $B_r$ の値によって規定されるため、

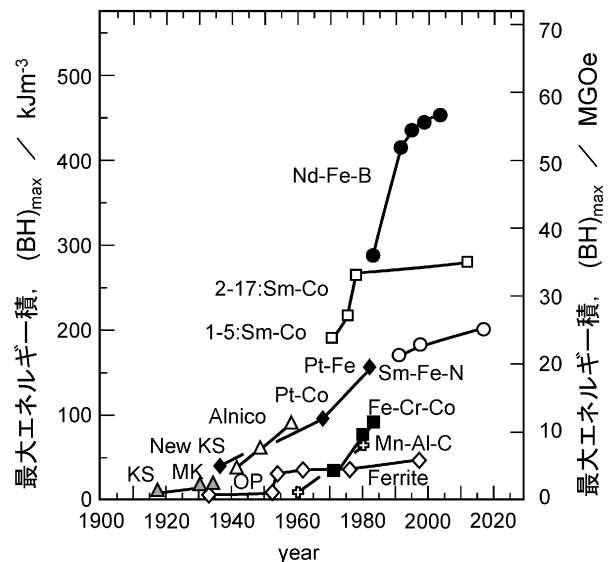


図1 永久磁石の強さの変遷<sup>(1)</sup>(文献(1)を元にアップデート, © IOP Publishing. Reproduced with permission. All rights reserved).

$J_s$ の高い物質を利用しなければならない。

$$(BH)_{max} = \frac{J_s}{2} \cdot \frac{J_s}{2\mu_0} = \frac{J_s^2}{4\mu_0} \left( = \frac{B_r}{2} \cdot \frac{B_r}{2\mu_0} = \frac{B_r^2}{4\mu_0} \right) \quad (1)$$

一方、図2のような理想的な状況が成り立つのも、永久磁石に外部磁界によって磁化反転が生じないよう高い $H_{cJ}$ があってこそである。結晶磁気異方性で考えると $H_{cJ}$ の理想値である異方性磁界 $H_A$ は式(2)で表され、この値が高いほど $H_{cJ}$ は高くなる。なお、式(2)中の $K_u$ は一軸結晶磁気異方性定数である。

\* 2022年3月15日、オンラインにおける日本金属学会第170回春期講演大会にて講演。

\*\* 東北大学大学院工学研究科知能デバイス材料学専攻; 教授(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-02)

Dual-Phase Microstructure Control for Improving the Magnetic Properties of Permanent Magnets; Satoshi Sugimoto (Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai)

Keywords: Saturation magnetic polarization, coercivity, maximum energy product, magnetic single domain, magnetic decoupling, two-phase decomposition, HDDR (hydrogenation, disproportionation, desorption, recombination), Nd-rich

2021年11月5日受理[doi:10.2320/materia.61.275]

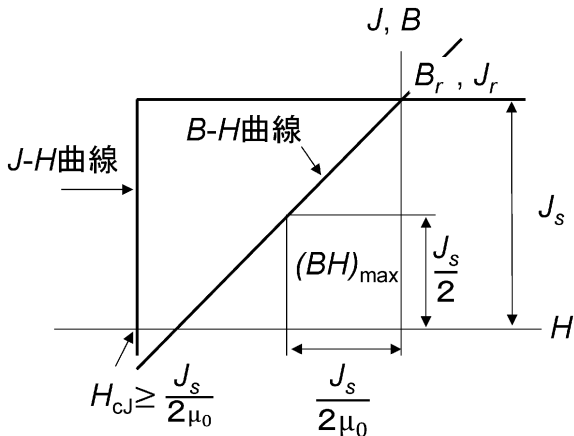


図2 理想的な減磁曲線と $(BH)_{\max}$ の関係<sup>(2)</sup>.

$$H_A = \frac{2K_u}{J_s} \quad (2)$$

しかし、この式(2)を見ると分母に $J_s$ があり、 $(BH)_{\max}$ を高めるため $J_s$ が高い物質を選ぶと、逆に $H_A$ と $H_{CJ}$ が低くなってしまふことがわかる。

すなわち、永久磁石は $J_s$ (または $B_r$ )と $H_{CJ}$ という相反する磁気特性を両立させるために複合組織を制御している材料であり、それを実現させるための製造プロセスは近年において目覚ましい発展を見せた。KS鋼の約60倍の強さを有し佐川真人博士によって開発されたNd-Fe-B系磁石<sup>(3)</sup>は、この複合組織を制御して今や究極の磁石材料となり、電子・電気製品、電気自動車、さらには次世代航空機や風力発電などに利用され、政府が掲げるカーボンニュートラルの実現に欠かすことのできない材料となっている。

### 3. 磁気特性と複合組織との関係

#### (1) 残留磁束密度と角形性

それでは永久磁石において、飽和磁気分極 $J_s$ や残留磁束密度 $B_r$ と保磁力 $H_{CJ}$ の両立をどのように実現するのか考えてみる。 $B_r$ と $J_s$ には式(3)の関係がある。

$$B_r = J_s \cos \theta \quad (3)$$

ここで $\theta$ は、最も磁化されやすい方向である磁化容易軸方向と永久磁石を機能させる際の外部磁界方向となす角度であり、これらを一致させることによって図2で示したような角形性の高い減磁曲線が得られる。永久磁石において磁化容易軸方向を揃えて図2のような高い $(BH)_{\max}$ を目指すのが異方性磁石であり、磁化容易軸方向がランダムなのが等方性磁石である。同時に保磁力より低い印加磁界で磁化反転が起きるような箇所があると角形性が低くなり磁気特性も低いものとなる。

#### (2) 保磁力

##### (a) 単磁区粒子の場合

一方で保磁力の発現に関しては様々な機構が唱えられてき

表1 代表的な元素、化合物における磁気特性と単磁区粒子サイズ<sup>(4)</sup>.

| 物質名   | 飽和磁気分極, $J_s$ (T) | 異方性磁界, $H_A$ (MAm <sup>-1</sup> ) | 単磁区粒子臨界径, $D$ (nm) |
|---|-------------------|-----------------------------------|--------------------|
| Fe  | 2.15              | 0.05                              | 12                 |
| Co  | 1.81              | 0.6                               | 8                  |
| SmCo <sub>5</sub>                               | 1.07              | 32.1                              | 1500               |
| Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B              | 1.60              | 6.1                               | 210                |
| Sm <sub>2</sub> Fe <sub>17</sub> N <sub>3</sub> | 1.57              | 11.2                              | 380                |

た。結晶粒を微細にしていくと磁壁が入らず一つの磁区である単磁区粒子となったほうがエネルギー的に安定となるが、まず、この磁化反転によって保磁力が決まる場合を考えてみよう。単磁区粒子の大きさは材料の持っている磁気異方性によって異なり、表1<sup>(4)</sup>のように各種材料の単磁区粒径は異なっている。これを見ると希土類元素を含む希土類磁石化合物の方が大きく、Fe、Coなどの遷移金属元素の方が小さいことがわかる。また、磁気異方性も希土類元素を含む材料の磁気異方性が化合物の結晶磁気異方性に起因する一方、Feなどの遷移金属元素の場合には形状によって生じる反磁界を利用した形状磁気異方性によるものであるため、その異方性磁界 $H_A$ は結晶磁気異方性を利用した希土類磁石化合物の方が大きいことがわかる。

単磁区粒子の場合、単磁区粒子の自発磁化(飽和磁気分極 $J_s$ )は磁化容易軸方向に向いている。その方向と反対向きの外部磁界をかけた際、自発磁化が徐々に回転して磁化容易軸方向から外れ、磁気分極の値がゼロになった時の外部磁界の大きさが保磁力に相当する。結晶磁気異方性を利用したNd-Fe-B系磁石などの希土類磁石では、保磁力の理論値は先に述べたように式(2)で示される $H_A$ であり、 $J_s$ が低く一軸結晶磁気異方性定数 $K_u$ の大きな化合物ほど保磁力が高くなる可能性がある。一方、形状磁気異方性の場合には高い飽和磁気分極をもつ材料の単磁区粒子の形状を細長くすることによって磁化反転しづらい粒子となる。このような単磁区粒子を形成させることが磁石の性能を上げることに重要である。ただし、この磁石特性を生み出す単磁区粒子の相よりも低い外部磁界で磁化反転してしまうような相が出現してしまうと保磁力は劣化するので、その出現を抑えて均一性の高い組織形態とすることも重要となる。

ただ、以上の単磁区粒子に基づく保磁力機構は磁氣的に孤立した単磁区粒子に成り立つ理論であることから、永久磁石の保磁力を発現させるためには、単磁区粒子が孤立するような組織形態を作り上げる必要がある。すなわち、この組織がまさに本稿で述べる複合組織であり、マトリックスを非強磁性相、孤立した単磁区粒子を強磁性相とする複合組織が相当する。

一方で非強磁性相であるマトリックス相の体積分率が高く



なると保磁力は高くなるものの、永久磁石全体の飽和磁気分極が低下するため、式(1)で示す最大エネルギー積 $(BH)_{\max}$ も低下してしまう。その意味で単磁区粒径が小さい遷移金属化合物で保磁力を発現させようとする、相対的にマトリックス相の体積分率を高くせざるを得ないというデメリットが出る。また、単磁区粒子の磁化容易軸が一方向に揃っていないと異方性磁石にならず、これも $(BH)_{\max}$ が低くなる。すなわち永久磁石は上述した複合組織を如何に制御して上述した残留磁束密度 $B_r$ と保磁力 $H_{CJ}$ を両立させて高い最大エネルギー積を得るかを絶えず求めている材料である。

### (b) 多磁区粒子の場合

次にこの強磁性の単磁区粒子が非強磁性相に分断されず孤立されていない組織の場合を考えてみよう。例えば単磁区粒子がつながって連続体になってしまった場合などがこれに相当する。この場合では磁気異方性が小さい材料ほど強磁性相が連続体となって磁壁が入りやすくなり、その磁化反転も単磁区粒子の回転による磁化反転ではなく磁壁移動による磁化反転となって低保磁力となる。一方、磁壁が入るサイズになっても、一旦高い磁界を印加して(着磁磁界： $H_{\text{ex}}$ )粒内の磁壁を掃き出してしまえば、単磁区粒径よりも大きな粒子径でも単磁区粒子と同じ状況を作り出すことができる。逆向きの外部磁界が印加されても、もし、この状態を維持できるならば高い保磁力を得ることができる。この場合の保磁力は磁壁が粒内に入ってしまうときに印加されている逆向きの外部磁界の値で決まり、その磁界がKronmüllerの式(式(4))で表される核生成磁界 $H_n$ である。同時にこの保磁力機構が核生成機構である。なお、 $\alpha$ は $H_A$ の低下を示す係数であり、 $N_{\text{eff}}$ は局所的反磁界係数である。

$$H_n = \alpha H_A - \frac{N_{\text{eff}} J_s}{\mu_0} \quad (4)$$

この機構において高保磁力を得るには、外部磁界を印加して磁壁を掃きだし、単磁区粒子となった粒子の周りを非強磁性相で取り囲んで、再び磁壁が入らないようにした複合組織形態を作ることが重要であることは単磁区粒子の場合と同じである。式(4)からすると異方性磁界 $H_A$ が大きな希土類磁石化合物が有利であることがわかるが、注意しなければならないのが磁壁を完全に掃くための着磁磁界 $H_{\text{ex}}$ と異方性磁界 $H_A$ の関係である。すなわち、 $H_A$ が大きすぎると $H_{\text{ex}}$ の大きさが十分でない場合には、磁壁が粒内から完全に掃きだされずに逆磁区として残存して、高い保磁力が得られなくなる。この意味でどのような永久磁石をどのくらいの着磁磁界で利用するかは用途によって検討しなければならない。

一方、磁壁が入っても析出物などによってその磁壁移動を妨げることができれば高保磁力を得ることができ、この保磁力機構は磁壁のピンニング機構と呼ばれている。図3に(a)核生成機構、(b)磁壁のピンニング機構の永久磁石における初磁化曲線と減磁曲線を示した。核生成型の初磁化曲線は磁界印加すると急に磁化が立ち上がるが、十分な磁界を印加しないと高い角形性と高い保磁力からなる減磁曲線は得られな

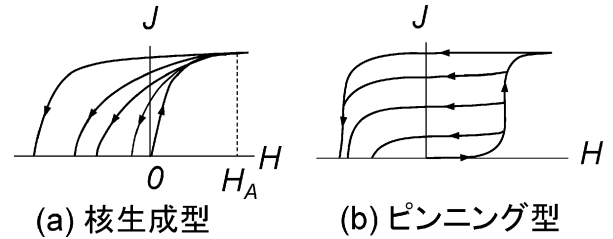


図3 初磁化曲線と減磁曲線。(a)核生成型、(b)ピンニング型<sup>(2)</sup>。

い。これが上述した $H_A$ と $H_{\text{ex}}$ の関係である。一方で磁壁のピンニング型の初磁化曲線は磁界を印加しても磁気分極は急には立ち上がらず高くないが、保磁力はある程度発現する。

最近まで、核発生機構と磁壁のピンニング機構の違いを明確に説明することができなかったが、後述の元素戦略磁性材料拠点(ESICMM)における物質・材料研究機構(NIMS)を中心とした解析により、上述の複合組織におけるマトリックス(粒界相)の磁性によって変わることが明確になった。この意味で永久磁石の理論が大きく進歩したといえる。

以上をまとめると磁気異方性を生み出す相を単磁区粒子として磁化容易軸を揃え、さらにその体積分率を高くしながら非強磁性相中に分散させる組織からなる複合組織を自然界に即して形成させるのが永久磁石材料の作製プロセスとなる。以下では著者らの研究を中心にその複合組織を実現させている事例について紹介する。

## 4. Fe-Cr-Co 系磁石

1971年に金子秀夫教授、本間基文教授ら<sup>(5)</sup>によって開発されたFe-Cr-Co系磁石は、スピノーダル分解によって非強磁性のCr-rich相( $\alpha_2$ )内に単磁区粒子サイズの強磁性FeCo-rich相( $\alpha_1$ )を出現させた複合組織を形成させて磁気硬化させる材料である。高温の $\alpha$ 単相領域で溶体化処理した後、二相分離面以下の温度で磁界を印加させながら熱処理するとFeCo粒子は静磁エネルギーを下げようとして磁界方向に伸長することから、その保磁力機構は形状磁気異方性と位置付けられる。さらに多段時効処理、続く連続冷却処理を施すと $\alpha_1$ 粒子は形状を保ちながら成長し、 $\alpha_1$ 相はよりFeCo-richに $\alpha_2$ 相はよりCr-richと両相の組成差が拡大する。それぞれの相のキュリー温度( $T_c$ )を見てみると二相分離面直下では $\alpha_1$ 相、 $\alpha_2$ 相とも室温以上の $T_c$ を持ち強磁性であるが、連続冷却処理後では $\alpha_1$ 相の $T_c$ はさらに高温に上がってより強磁性、逆に $\alpha_2$ 相の $T_c$ は室温以下となり非強磁性となる。この現象は、初磁化曲線をアナログ式装置で計測し、本系またはアルニコ磁石の研究に携わった経験者であれば気づいているように、高温での磁界中時効処理後に急冷した試料の初磁化曲線が核発生型であるのに対し、連続冷却処理後では磁壁のピンニング型の初磁化曲線を示すことでもわかる。すな

わち連続冷却処理で組成差が拡大することによって強磁性 FeCo-rich ( $\alpha_1$ ) 相の単磁区粒子が非強磁性の Cr-rich ( $\alpha_2$ ) 相に囲まれる複合組織形態をとり磁氣的に孤立化が図られていることになる。さらに Fe-Cr-Co 系合金の二相分離面は磁気変態の影響により分離曲線が非対称となって FeCo 側に移行して尾根、すなわち Nishizawa Horn<sup>(6)</sup>を形成しているため、二相分離面直下の高温での熱処理では副相であった  $\alpha_1$  相が連続冷却処理後の低温では体積分率の高い主相へと変化する。すなわち  $\alpha_1/\alpha_2$  の量比が逆転し、 $\alpha_1$  相が単磁区粒子サイズで非強磁性の  $\alpha_2$  相によって囲まれながらも主相として存在する複合組織を得ることができる<sup>(7)</sup>。

本系磁石合金における Cr 組成を増加させると非強磁性で

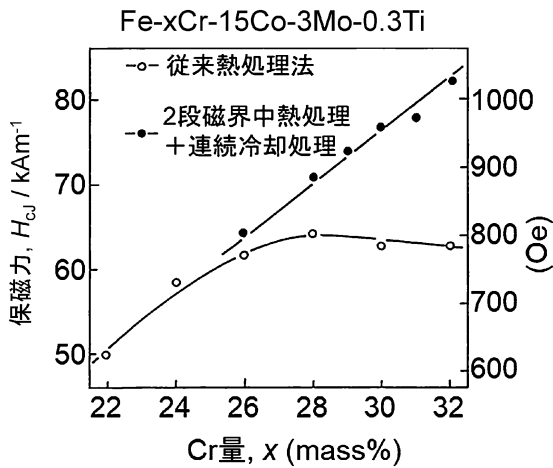


図4 Fe-Cr-Co 系磁石における Cr 量(非強磁性相量)による保磁力依存性<sup>(8)</sup>。

ある粒界に存在する  $\alpha_2$  相が増え、 $\alpha_1$  相の磁氣的孤立化が進んで保磁力を増加させることができる。著者ら<sup>(8)</sup>は、磁界中時効処理ならびに連続冷却処理を工夫することにより図4のように Fe-Cr-Co 系磁石の保磁力が Cr 量とともに単調に増加することを明らかにしている。

また、本系合金への Mo 添加は  $\alpha_1$  相と  $\alpha_2$  相の格子定数のミスマッチを広げるため、スピノーダル分解における  $\alpha_1$  粒子の  $\langle 100 \rangle$  への異方的分解を促進され、 $\alpha_1$  粒子の軸比も増加して高保磁力が得られる。従って Mo を添加した  $\langle 100 \rangle$  単結晶および柱状晶を用いると高い磁気特性が得られる。著者ら<sup>(9)-(11)</sup>は、これに加えて本系磁石合金が現有の永久磁石の中で唯一冷間加工できる材料であることを利用し、電磁鋼板と同じように再結晶組織を形成させて高性能化を図っている。この方法は本系合金の二相分離面以上の温度で出現する  $\alpha$ ,  $\alpha+\gamma$ ,  $\alpha+\gamma+\sigma$  相間の相変態と冷間圧延を組み合わせることによって、図5のように最近の鉄鋼材料でも注目されている数 mm 以上の異常粒成長からなる  $\langle 100 \rangle$  再結晶組織が形成できることを示した方法であり、その磁気特性も単純な铸造したままの合金の場合よりも格段に高い。

以上、Fe-Cr-Co 系磁石は Fe 系合金で知られている相変態をうまく利用して必要な複合組織を形成させ磁気特性を発現させている永久磁石といえる。

### 5. 二相分離型 Sm-Co ( $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ ) 系磁石

二相分離型 Sm-Co ( $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ ) 系磁石は、1968年 Nesbitt<sup>(12)</sup>、Tawara と Senno<sup>(13)</sup>により、 $\text{RCo}_5$  化合物 (R: 希土類元素) の Co の一部を Cu で置換した組成合金において、イ

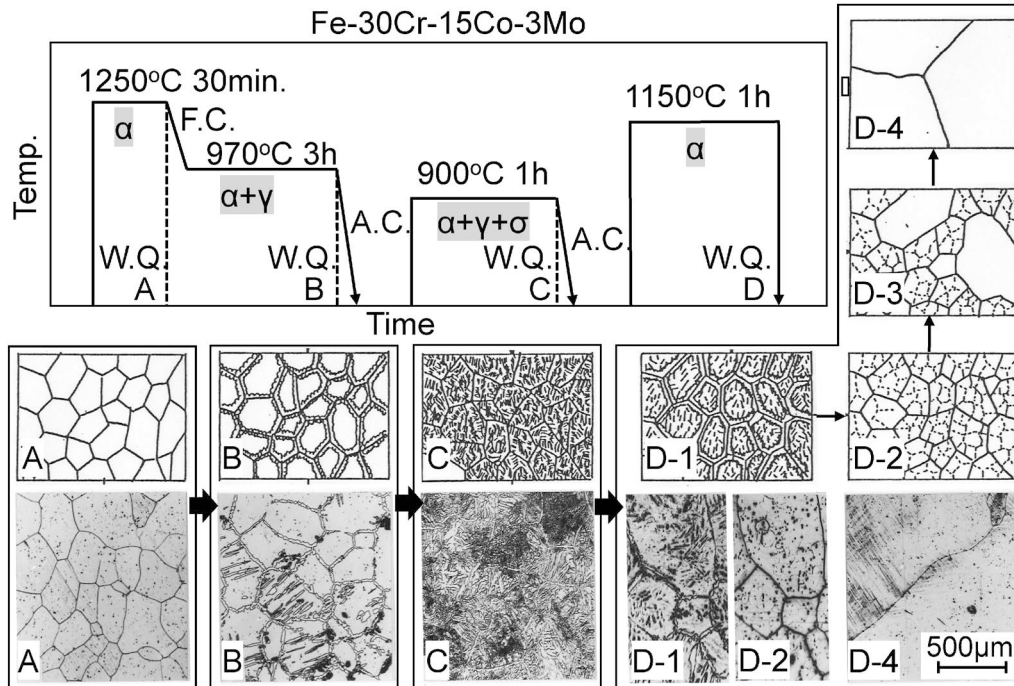


図5 Fe-Cr-Co 系磁石における異常粒成長過程<sup>(9)-(11)</sup>。

ンゴット状態でも熱処理によって高保磁力が得られると報告されたことに端を発する。その後、CoをFeで置換し、R量を低下させ、Zr, Hf, Tiの添加によってFeの含有量を増加させて特性の向上を図ってきた<sup>(14)</sup>。さらに最近ではNd-Fe-B系磁石で培われてきた作製プロセスを応用し、その磁気特性は再び向上してきている<sup>(15)</sup>。

本系永久磁石の製法上の特徴は熱処理にある<sup>(16)</sup>。すなわち1200°C近傍で焼結させ、そのまま1130~1170°Cの溶体化処理、さらに750~850°Cで等温時効処理した後400°C以下まで連続冷却処理する熱処理である。焼結ではSm-richの液相が出現するために磁性相の充填率が上がる。一方、その温度から数十°C下げた温度で行う溶体化処理は、液相を消し、その後の等温時効処理ならびに連続冷却処理で後述の均一なセル状の二相分離組織を形成させるために必要な処理で、Cu, Feが固溶したSm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>相(Th<sub>2</sub>Zn<sub>17</sub>型構造またはTbCu<sub>7</sub>型構造)単相からなる過飽和固溶体を形成させる熱処理である。また、Zrなどの添加元素は溶体化処理時に形成させる過飽和固溶体の固溶領域を広げるために重要な添加元素であり、これによってFe量を増加させることができる<sup>(17)</sup>。等温時効処理はセル構造の組織の大きさを決めるものであり、その後の連続冷却処理は二相間の組成差の拡大に重要な役目を担っている。図6に著者ら<sup>(18)</sup>が学生時代に観察した等温時効処理後と連続冷却処理後のTEM組織を示した。その形態は数百nmのSm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>相を数nmのSmCo<sub>5</sub>相が取り囲むセル状の二相分離組織を示すが、等温時効処理後と連続冷却処理後の両者には組織形態の差はないものの、保磁力の値には差が見られる。これは等温時効処理時にセル状組織は形成されるが、連続冷却処理中にFeとCoはSm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>相中へ、CuはSmCo<sub>5</sub>相中へと拡散が進み、SmCo<sub>5</sub>相

の飽和磁気分極が低下して異方性磁界が増加した、もしくはキュリー温度が低下して非強磁性となったことが関係していると考えられる。結果、そのSmCo<sub>5</sub>相によって単磁区粒子サイズのSm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>相がとり囲まれて磁氣的孤立化が進み、連続冷却処理した試料では高保磁力を示して、その初磁化曲線も磁壁のピンニング型となるものと推察される。今後、連続冷却処理前後におけるこのセル界面に存在するSmCo<sub>5</sub>相の磁性は研究の対象となるであろう。一方で溶体化処理がしっかりできずに液相が三重点などに残ると、三重点は液相の最終凝固箇所となるため、そこに酸化物が形成されたり、その近傍の結晶粒内ではセル状組織が形成されなかったりする。このため、三重点近傍の結晶粒内ではSm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>相が磁氣的に孤立化した単磁区粒子となるようなセル状組織形態が得られず、強磁性の連続体となってしまっていて結晶粒界や三重点が逆磁区の核生成サイトのように観察される。まさに二相分離型Sm-Co(Sm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>)系磁石は、Fe-Cr-Co系磁石と同様、溶体化処理とその後の時効処理、連続冷却処理における組成差拡大によって理想的な複合組織を形成させて保磁力を発現させている永久磁石材料といえる。

## 6. Nd-Fe-B系 HDDR 磁石

Nd-Fe-B系磁石において単磁区粒子の形成で保磁力を発現させる方法として、液体急冷法にてアモルファスを形成させ、その後の熱処理によって微結晶化<sup>(19)</sup>させる方法がある。一方でHDDR法<sup>(20)</sup>と呼ばれ水素との反応を用いて結晶粒を単磁区粒子サイズまで微細化し、高保磁力粉末を得る方法が報告されている。Nd-Fe-B系磁石の主相Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B化合物は650~1000°Cの水素中熱処理(Hydrogenation)によりNdH<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>B, Feの三相に分解する不均化反応を生じる(Disproportionation)。この分解温度域において熱処理雰囲気の水素から真空に切り換え強制的に脱水素すると、NdH<sub>2</sub>から水素が放出(Desorption)され、それと同時に再結合反応(Recombination)を起こしてサブミクロンオーダーのNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B化合物相が形成する。また、HDDR中に原料粉末中に存在していた過剰のNd-rich相が液相となって結晶粒界に浸透し、再結合したNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B化合物相が磁氣的に孤立化して保磁力が高くなる。HDDR法は液体急冷法とは異なり、水素との反応の制御によって磁化容易軸方向を一方にそろえることが可能であるため、高性能Nd-Fe-B系ボンド磁石用粉末の作製方法として知られている。

著者らは図7<sup>(21)</sup>のようなHDDR現象が生じる水素圧と温度の関係を熱力学的に求め、これに基づいて水素圧を制御しながら(減圧水素下で)HDDR処理をすることによって異方性粉末が作製できることを見出した。この水素圧を制御した処理(d-HDDRと呼ばれている)では、水素の吸収、放出反応で生じる発熱反応や吸熱反応が抑制され、結果、HDDR過程で出現するFe, NdH<sub>2</sub>, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B間の結晶学的方位関係も維持されており、著者らはこの維持が粉末内の結晶方位が揃った異方性粉末の作製メカニズムには重要であると考え

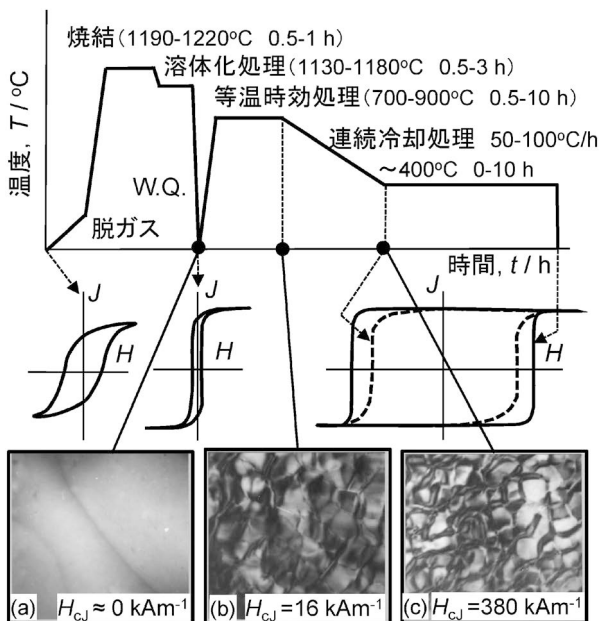


図6 二相分離型Sm-Co系磁石合金における熱処理過程による磁気特性とセル状組織変化(文献(16)を参考に作成)<sup>(16)</sup>(18)。

た<sup>(22)</sup>。また、不均化組織が Fe と NdH<sub>2</sub> 相が成すラメラ状の組織であると結晶方位関係が維持され、NdH<sub>2</sub> 粒が球状化すると結晶方位関係が失われることも見出し、両組織の制御が異方性発現の鍵であることも指摘した<sup>(22)</sup>。さらに原料粉末内のマイクロクラックならびに粒界近傍では、不均化反応後に NdH<sub>2</sub> が球状化した組織が多く存在することも明らかにした。

これらの知見に基づき、HDDR 用の Nd-Fe-B 系原料粉末の作製では、インゴットを 700°C 近傍で熱処理して Nd-rich 相を粒界に這わせ、さらに水素解砕を 500°C 近傍の高温で行って粒界破壊のみを生じさせ、マイクロクラックが少な

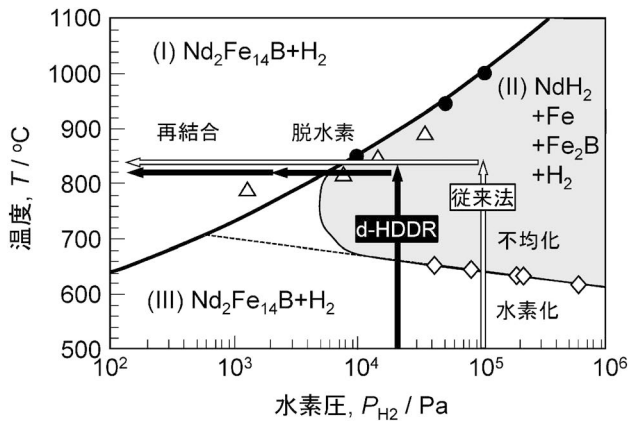


図7 Nd-Fe-B系磁石の HDDR 処理における水素圧と温度の関係図<sup>(21)</sup>。

く Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相の単結晶からなる粉末を得るプロセスを考案した。この原料粉末を用いて d-HDDR 処理を施したところ、現在までにおいて最高の磁気特性を示す Nd-Fe-B 系 HDDR 粉末の作製に成功している<sup>(23)</sup>。これらの組織変化をまとめて図 8 に示した。現在、この磁石粉末を用いたボンド磁石は、後述の焼結磁石を用いた場合と異なり、渦電流損失によって生じるジュール熱の発生を少なくできるため、次世代電動アクスル用モータの磁石として期待されている。

## 7. Nd-Fe-B 系焼結磁石

液体急冷法や HDDR 法を用いない希土類磁石では、結晶粒径が単磁区粒子サイズよりも大きくなるため、磁壁が結晶粒内に入り磁化反転が起こりやすくなる。このような代表例として Nd-Fe-B 系焼結磁石があるが、単磁区粒子から構成されていない材料の場合には、式(4)に示したように如何に逆磁区を結晶粒内に入れないようにするかがポイントとなる。これを決定するのが結晶粒を構成する主相の①異方性磁界  $H_A$ 、磁石を利用する際の②着磁磁界  $H_{ex}$ 、③結晶粒サイズ  $D$ 、そして粒界相の④存在形態とその⑤磁性である。①  $H_A$  が大きい磁石では、利用する前に施す主相結晶粒から磁壁を掃いて単磁区化させるための②着磁磁界  $H_{ex}$  が大きくする必要があるので、 $H_{ex}$  に十分な大きさが無い逆磁区が残存してしまう。Nd-Fe-B 系磁石では主相の Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 相の異方性磁界  $H_A$  が 6.1 MAm<sup>-1</sup><sup>(4)</sup> と現在利用されている着磁器で達成できる磁界なので利用できるが、Sm-Fe-N (Sm<sub>2</sub>

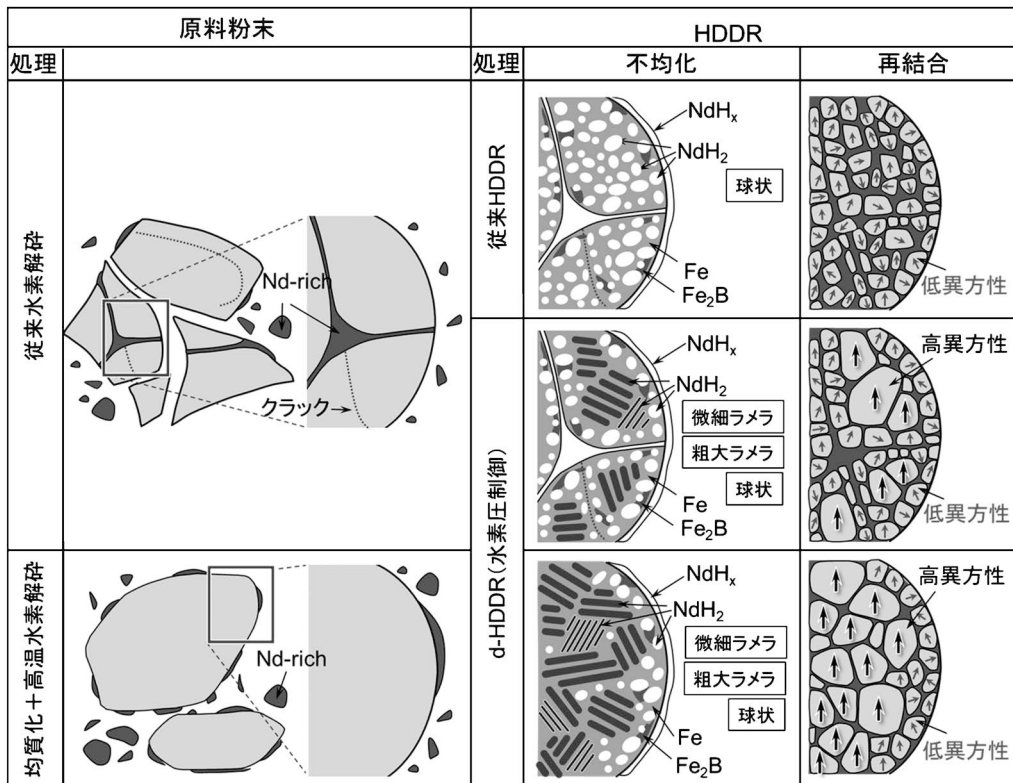


図8 Nd-Fe-B系磁石の HDDR 処理における組織変化の模式図<sup>(23)</sup>。

Fe<sub>17</sub>N)系磁石やSmCo<sub>5</sub>磁石のH<sub>A</sub>はNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相より一桁大きいことから、これらの磁石を利用する場合には、H<sub>ex</sub>の大きさは検討すべきものとなっている。

一方、③結晶粒サイズDが小さくなれば単磁区になっている確率が増えるため、逆磁区が存在する確率が減り高保磁力につながる。これが、著者らが経産省、NEDOの希少金属代替材料開発プロジェクトにおいてNd-Fe-B系磁石の開発者である佐川博士<sup>(3)</sup>と取り組んだHeジェットミルなどで粉末粒径を細かくし、焼結磁石における結晶粒を微細化した研究の指導原理である。結果、1μm程度の粉末粒径にすればDyフリーでも当時の磁石レベルで高保磁力を得て省Dyが可能となる技術につながった<sup>(24)(25)</sup>。ただ、焼結磁石においてはこの粉末粒度が均一でないで磁壁の入り方が粉末粒径によって異なってしまうため、保磁力の値に分散ができてしまうという問題があった。著者ら<sup>(26)(27)</sup>は、先述したHDDR法と本粉砕法を組み合わせることにより、図9のようにNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相の単磁区粒径サイズで粒度分布のよい粉末を作製することに成功している。しかし、逆に粒界相であるNd-rich相の量や分布形態、すなわち粒界相の④存在形態を制御するまでには至れず、高保磁力は得られてはいない。

この結晶粒微細化を進めて改善したものにNd-Fe-B系熱間加工磁石がある<sup>(28)</sup>。これは液体急冷法で作製した急冷薄帯を熱処理した後にホットプレス、熱間押し出しなどの熱間加工によって、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相の磁化容易軸方向であるc軸方向を一方向に揃えた異方性磁石であり、Hiokiら<sup>(29)(30)</sup>によって重希土フリーのNd-Fe-B系熱間加工磁石がハイブリッド自動車の駆動モータに利用されたことが報告されている。また、La, Ceの利用によって低コスト化が図られた報告も最近ではなされている<sup>(31)</sup>。なお、この異方性のメカニズムは熱間加工中に粒界相のNd-richが液相になり、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B結晶粒が回転、さらにはNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相の結晶粒成長がc軸よりもa軸方向の方が速いため優先的な結晶粒成長が生

じるためと考えられている。

一方、このように結晶粒を微細化されても、最終的には結晶粒の周りに粒界相がどのように存在しているか、その④存在形態によって保磁力の発生状況が変わる。②の着磁プロセスにおいて単磁区としても、この単磁区粒子が磁的に孤立した状態でないと高保磁力は得られない。すなわち、上述したFe-Cr-Co系磁石と同じようにマトリックスが非強磁性で、強磁性の磁石相を取り囲むような組織形態を形成させる必要がある。Nd-Fe-B系磁石において、この役割を果たすのがNd-rich相である。したがって、Nd-rich相を如何に均一にかつNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相との結晶粒界にいきわたらせるかがポイントとなる。これが図9において説明した我々が作製した単磁区粒子サイズの粉末を利用した焼結磁石において高保磁力が得られなかった理由の一つと言える。

また、Nd-rich相は酸化しやすく三重点で酸化物などの欠陥を形成したり、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相との界面にFeなどのソフト磁性相を出現させやすくしたりするため、その酸化は防がねばならない。最近の研究で、粒界相のNd-rich相には酸素含有量によって異なるdhcp-Nd, fccのNd-O, hcpのNd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>などがあること、Gaなどの添加によって粒界相が変化することなどがわかってきている<sup>(32)</sup>。さらに本系焼結磁石におけるDy削減方法として知られる粒界拡散法<sup>(33)</sup>を応用してNdで行う浸透拡散法<sup>(34)(35)</sup>によってNd-rich粒界相の幅が広くなり、Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B主相の磁気的な孤立化が進んで、さらに高保磁力になることが報告されている。しかし、Nd-rich相は主相のNd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B相よりも飽和磁気分極の値が低いことから、多く出現させると磁石全体の飽和磁気分極が下がり、結果的には(BH)<sub>max</sub>も低下してしまうので、その体積分率、すなわち磁石組成の検討は必要となる。

最近、この粒界相について、その⑤磁性が保磁力に影響を及ぼすことがNIMSを中心とした元素戦略磁性材料拠点(ESICMM)の研究で明らかにされている<sup>(36)</sup>。そのひとつに放射光を利用して粒界相であるNd-rich相がFeを多く含むため強磁性であり、その組成におけるFe量を下げることが保磁力増加の指針であることを示したことが挙げられる。さらに浸透拡散法などで、その磁性を非強磁性に近づけることによって、初磁化曲線や磁化反転挙動が磁壁のピンニングタイプ型から核生成型に変化すること、さらにそれをマルチスケール組織観察、保磁力の角度依存性、計算機シミュレーション、保磁力の温度係数、などの解析技術から明確にした報告もある。これらの結果は長年、永久磁石材料で難しいとされていた保磁力機構に対し、統一見解を明解に示した重要な研究と考えられる。すなわち、いずれの永久磁石でも単磁区粒子が磁的に孤立している複合組織形態を作り上げ、それを如何に保持するか、ここに高保磁力化の指針があることを明確にしたものであると言える。

## 8. ま と め

本稿では、永久磁石の磁気特性を向上させるための複合組

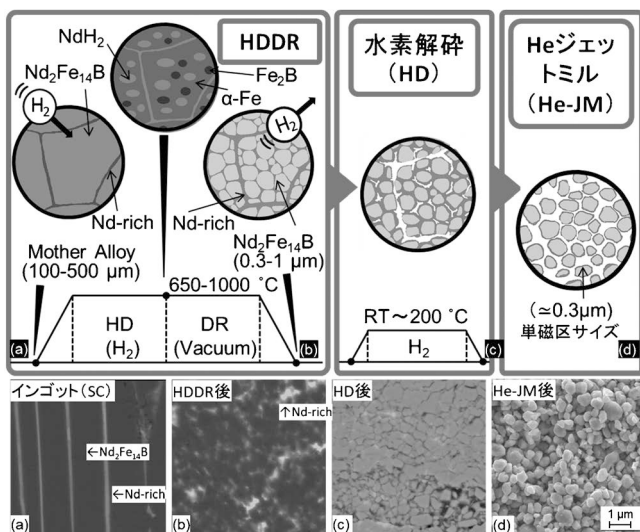


図9 Nd-Fe-B系磁石における単磁区粒子サイズの粉末作製法<sup>(26)(27)</sup>。

織の形成について示した。今、振り返るとその製造プロセスの改善の歴史は、無意識ながらもこれに基づいてなされてきたものと言える。今後も本分野が新たな材料の開発も含めて発展していくことを期待したい。

## 文 献

- (1) S. Sugimoto: J. Phys. D: Appl. Phys., **44**(2011), 0604001.
- (2) 杉本 論, 加藤宏朗: 永久磁石 ―材料科学と応用― 第3章 永久磁石の基礎物性, (佐川真人, 浜野正昭, 平林真編), アグネ技術センター, (2007), 114.
- (3) M. Sagawa, S. Fujimura, N. Togawa, H. Yamamoto and Y. Matsuura: J. Appl. Phys., **55** (1984), 2083-2087.
- (4) 広沢 哲: 図解 希土類磁石(佐川真人, 浜野正昭 編), 2-2 節希土類磁石が高特性を発揮するメカニズム, 日刊工業新聞社, (2012), 37.
- (5) H. Kaneko, M. Homma and K. Nakamura: AIP Conf. Proc., **5** (1972), 1088-1092.
- (6) T. Nishizawa, M. Hasebe and M. Ko: Acta Met., **27**(1979), 817-828.
- (7) M. Homma, M. Okada, T. Minowa and E. Horikoshi: IEEE Trans. Magn., **MAG-17**(1981), 3473-3478.
- (8) S. Sugimoto, J. Honda, Y. Ohtani, M. Okada and M. Homma: IEEE Trans. Magn., **MAG-23**(1987), 3193-3195.
- (9) S. Sugimoto, M. Okada and M. Homma: J. Appl. Phys., **63** (1988), 3707-3709.
- (10) S. Sugimoto, H. Satoh, M. Okada and M. Homma: IEEE Trans. Magn., **27**(1991), 3412-3419.
- (11) S. Sugimoto, H. Satoh, M. Okada and M. Homma: Mater. Trans., **JIM**, **32**(1991), 557-561.
- (12) E. A. Nesbitt, R. H. Willens, R. C. Shenvood, E. Buehler and J. H. Wernick: Appl. Phys. Lett., **12**(1968), 361-362.
- (13) Y. Tawara and H. Senno: Jpn. J. Appl. Phys., **7**(1968), 966-967.
- (14) T. Ojima, S. Tomizawa, T. Yoneyama and T. Hori: IEEE Trans. Magn., **MAG-13**(1977), 1317-1319.
- (15) Y. Horiuchi, M. Hagiwara, M. Endo, N. Sanada and S. Sakurada: J. Appl. Phys., **117**(2015), 17C704.
- (16) K. J. Strnat: 2. R-Co Permanent Magnets, Ferromagnetic Materials, **4**, (ed. by E. D. Wohlfarth and K. J. Buschow), North Holland, (1988), 131.
- (17) 盛田芳雄, 梅田高照, 木村康夫: 日本金属学会誌, **50**(1986), 235-241.
- (18) 杉本 論: 東北大学修士論文(1984).
- (19) J. J. Croat, J. F. Herbst, R. W. Lee and F. E. Pinkerton: J.

- Appl. Phys., **55**(1984), 2078-2082.
- (20) I. R. Harris and P. J. McGuiness: Proc. 11th Int'l. Workshop on R. E. Magnets & Their Applications, Pittsburgh, U.S.A., (1990), 29-48.
- (21) S. Sugimoto, H. Nakamura, K. Kato, D. Book, T. Kagotani, M. Okada and M. Homma: J. Alloys Compd., **293-295**(1999), 862-867.
- (22) T. Horikawa, M. Yamazaki, C. Mishima, M. Matsuura and S. Sugimoto: AIP Advances, **9**(2019), 035244.
- (23) T. Horikawa, M. Yamazaki, M. Matsuura and S. Sugimoto: Sci. Technol. Adv. Mater., **22**(2021), 729-747.
- (24) 宇根康裕, 佐川真人: 日本金属学会誌, **76**(2012), 12-16.
- (25) R. Goto, M. Matsuura, S. Sugimoto, N. Tezuka, Y. Une and M. Sagawa: J. Appl. Phys., **111**(2012), 07A739.
- (26) M. Nakamura, M. Matsuura, N. Tezuka, S. Sugimoto, Y. Une, H. Kubo and M. Sagawa: Appl. Phys. Lett., **103**(2013), 022404.
- (27) S. Sugimoto, M. Nakamura, M. Matsuura, Y. Une, H. Kubo and M. Sagawa: IEEE Trans. Magn., **51**(2015), 2101004.
- (28) R. W. Lee: Appl. Phys. Lett., **46**(1985), 790-791.
- (29) K. Hioki, A. Hattori and T. Iriyama: J. Magn. Soc. Jpn., **38** (2014), 79-82.
- (30) K. Hioki: Sci. Technol. Adv. Mater., **22**(2021), 72-84.
- (31) M. Ito, M. Yano, N. Sakuma and H. Kishimoto: AIP Advances, **6**(2016), 056029.
- (32) 佐々木泰祐, 大久保忠勝, 宝野和博: 日本金属学会誌, **81** (2017), 2-10.
- (33) H. Nakamura, K. Hirota, M. Shima, T. Minowa and M. Honshima: IEEE Trans. Magn., **41**(2005), 3844-3846.
- (34) C. Mishima, K. Noguchi, M. Yamazaki, H. Mitarai and Y. Honkura: REPM'10 Proc. 21<sup>st</sup> Workshop on Rare-Earth Permanent Magnets and their Applications, Bled Slovenia, (Ed. Spomenka Kobe and Paul McGuiness, the Jožef Stefan Institute), (2010), 253-256.
- (35) H. Sepehri-Amin, T. Ohkubo, T. Nishiuchi, S. Hirosawa and K. Hono: Scr. Mater., **63**(2010), 1124-1127.
- (36) J. Li, H. Sepehri-Amin, T. Sasaki, T. Ohkubo and K. Hono: Sci. Technol. Adv. Mater., **22**(2021), 386-403.



杉本 論

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
1984年 東北大学大学院金属材料工学専攻博士課程  
前期2年の課程修了  
1984年4月 東北大学 工学部 助手  
1992年3月 東北大学 工学部 助教授  
2006年4月一現職  
専門分野: 磁性材料学  
©永久磁石, 高周波磁性材料の開発と応用に従事。  
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★



# 金ナノ粒子-酸化チタン/ポリアニリンハイブリッド電極を用いたグルコースセンサー性能の向上

邱 琬 婷\*

## 1. はじめに

この度、日本金属学会・奨励賞をいただき、大変光栄に思っております。著者はこれまで、グルコースセンサーなどに使用される金属の化学的な面を研究してきました。また、現在は化学的な面に限らず、物理的、機械的にグルコースセンサーと同じく生体材料に応用できる形状記憶合金の開発に取り組んでいます。本稿では、非酵素型グルコースセンサーの感度、選択性、長期安定性などの問題点を改善するために、著者らがこれまで開発を行ってきた金ナノ粒子-酸化チタン/ポリアニリン(AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI)複合電極材料を紹介いたします。さらに、その複合電極材料における三つの材料の相互作用による感度、選択性、長期安定性などの向上のメカニズムに関する著者の最近の研究<sup>(1)(2)</sup>について紹介いたします。

人体中のグルコース濃度を測定できるグルコースセンサーは、糖尿病患者の日常検査、健康維持のために、近年盛んに研究開発が行われている<sup>(3)(4)</sup>。病気の早期発見が重要視される中、高感度、高選択性、高安定性のグルコースセンサーが求められている。装置の観点では(1)侵襲型および(2)非侵襲型に二分されるが、現在は利便性の向上に向けて非侵襲型に対する注目が高まっている。一方、材料の観点では、グルコースセンサーは大まかに(1)酵素型グルコースセンサーおよび(2)非酵素型グルコースセンサーに二分される<sup>(5)(6)</sup>。酵素型では、グルコース酸化酵素(Glucose oxidase; GO<sub>x</sub>)やグルコース脱水素酵素(Glucose dehydrogenase; GDH)が必要である。一方、非酵素型では、金属や金属化合物(例: 酸化物、硫化物など)などがよく利用されている。これまで実際に応用されてきたのは感度の高い酵素型グルコースセン

サーであるが<sup>(7)</sup>、GO<sub>x</sub>、GDHなどの酵素の低温度安定性、低化学安定性、酵素の拘束工程の複雑さ、高価格などの問題がある<sup>(8)(9)</sup>ことから、現在は非酵素型グルコースセンサーが有望視されており、その電極材料の研究開発が活発に行われている<sup>(10)-(12)</sup>。しかし、現時点においては感度や選択性などが酵素型よりも劣るため、これらの問題点を改善することが必要となっている。

非酵素型グルコースセンサーは、通常、電気活性のある材料(例: 金属、金属化合物など)と支持材(例: 導電性ポリマ、炭素質など)で構成されている。その中で、電気活性のある材料はグルコースを酸化する役として必要であり、一方、支持材は電極材料の比表面積の増大や複合電極材料の安定性の向上などのために使用されている。また、電気活性のある材料を最大限利用するために、比表面積の高いナノ活性材料および構造が複雑で細かい支持材が追求されている。

非酵素型グルコースセンサーの感度を向上するために、電気活性のある材料の構造調整<sup>(13)</sup>、材料の複合化<sup>(14)</sup>、結晶方位の制御<sup>(15)</sup>、比表面積の増大<sup>(16)</sup>などが行われてきた。また、選択性の改善のために合金化によるグルコースの酸化電位の微調整<sup>(17)</sup>や、電極材料の長期安定性の向上のために支持材の構造の最適化<sup>(18)</sup>など、様々な基礎研究が行われている。

## 2. AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI 複合電極材料の作製および解析

定電圧による沈着により、ポリアニリン(PANI)を白金基板上に合成した。制御電圧は1.05 Vとし、0.1 M アニリン単量体が含まれる0.5 M 塩酸水溶液を用いた。本稿では、

\* 東京工業大学・科学技術創成研究院; 助教(〒226-8503 横浜市緑区長津田町4259-R2-27)  
Enhancement of Glucose Sensing Performances via Gold Nanoparticle-TiO<sub>2</sub>/Polyaniline Hybrid Electrode; Wan-Ting CHIU (Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Yokohama)  
Keywords: gold nanoparticles, chemical sensor, glucose sensor, non-enzymatic, polyaniline, titanium dioxide  
2021年12月17日受理[doi:10.2320/materia.61.283]

Ag/AgCl(飽和 KCl 水溶液)の標準電極を基準にして電圧を表示している。また、白金板材を対電極として使用した。累積電荷量が 20 mC に達した際にポリアニリンの合成を停止した。その後、様々な酸化チタン( $\text{TiO}_2$ )濃度(例: 5.000, 1.000, 0.500, 0.100, 0.050, 0.025, 0.000 g/L)の懸濁液 100  $\mu\text{L}$  をポリアニリンの沈着した白金基板に滴下し、40°C で 1 h の乾燥を行って、 $\text{TiO}_2$  粒子を白金電極表面に修飾した。最後に、 $10^{-5}$  M のテトラクロリド金(III)酸( $\text{HAuCl}_4$ )を前述の複合材料に滴下し、40°C で 1 h 乾燥させ、金ナノ粒子(Au nanoparticle; AuNPs)を析出させた。

その結果、図 1 に示すように、 $\text{TiO}_2$  粒子を修飾した白金電極(図 1(a)と(b))では、修飾しない場合(図 1(c)と(d))と比べ、AuNPs の粒子径がより小さくなった。図 1(b)と(d)はそれぞれ、図 1(a)と(c)を拡大したものである。この粒子

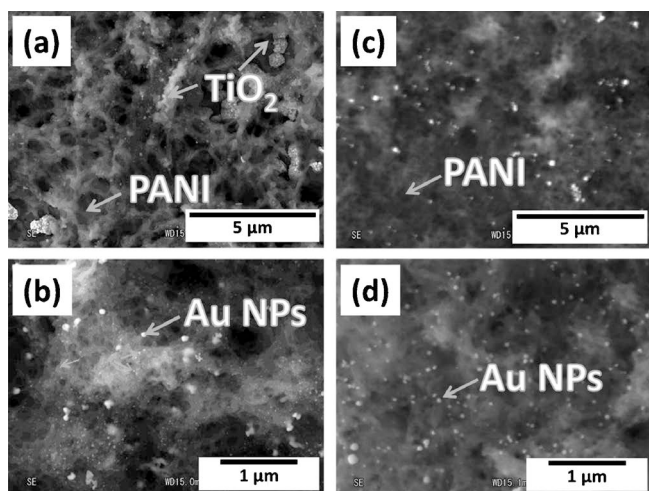


図 1 走査型電子顕微鏡写真: (a) AuNPs- $\text{TiO}_2$ /PANI 複合電極材料, (b) 図(a)の拡大図, (c) AuNPs/PANI 複合電極材料, (d) 図(c)の拡大図。

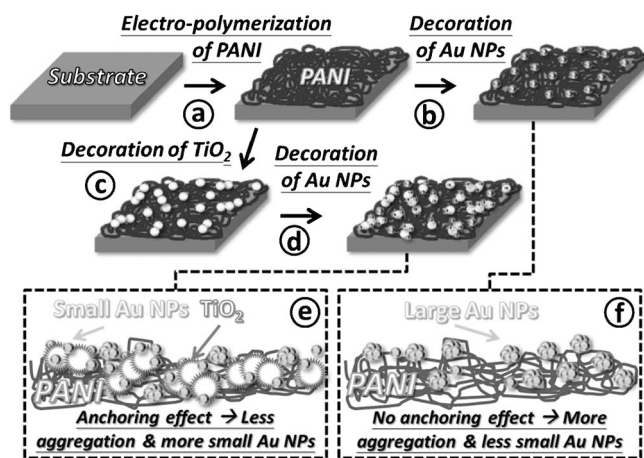


図 2 (a) ポリアニリンを電気化学的手法により白金基板に合成するプロセス, (b) AuNPs の修飾工程, (c)  $\text{TiO}_2$  粒子の修飾工程, (d)  $\text{TiO}_2$  で被覆した電極への AuNPs の修飾工程, (e)  $\text{TiO}_2$  粒子によるアンカー効果でより小さい AuNPs の修飾ができることの模式図, (f)  $\text{TiO}_2$  粒子で基板を被覆しない複合電極材料の微小構造の模式図。

微小化の機構は、アンカー効果<sup>(1)</sup>として知られている。 $\text{TiO}_2$  粒子がアンカーとして AuNPs の堆積を阻害したため、より小さい AuNPs が合成できた(図 1(b)の小さい矢印で示す)。すなわち、 $\text{TiO}_2$  粒子が金の足場を奪うことで金が凝集するのを防いでいる現象である。前述したアンカー効果のメカニズムは図 2 に示した。このように、 $\text{TiO}_2$  粒子を基板表面に修飾して得られた複合電極では、比表面積がより大きくなることで、高い電気活性を示す AuNPs を合成できることがわかる(図 2(e))。作製した複合材料の特性(例: 感度、選択性、長期安定性など)の詳細について、次のセクションに述べる。

### 3. $\text{TiO}_2$ 粒子による感度、選択性、長期安定性の向上

#### (1) $\text{TiO}_2$ で基板を被覆しない複合電極

図 3 に示すように、複合電極の特性を評価するためのサイクリックボルタンメトリー(CV)を行った。図 3(a)はグルコースを添加しない場合の、図 3(b)は 10 mM のグルコースを添加した場合の、各々 0.1 M の NaOH 水溶液中における  $\text{TiO}_2$  被覆無しの複合電極の CV 曲線を示す。

水溶液にグルコースを添加しない場合は図 3(a)に示すように、複合電極の酸化還元反応の電流ピークしか観察されない。 $-0.8$  V から  $-0.5$  V までの電流ピークは、電極表面での水素の吸着と脱着反応によるものである。ポジティブスキャンにおいて、 $-0.5$  V から  $0.6$  V までの電流は、複合電極全体(例: 白金, AuNPs など)の酸化反応に対応する。一方、ネガティブスキャンでは、 $0.1$  V および  $-0.3$  V の電流ピークはそれぞれ、AuNPs および AuNPs と白金基板の還元反応に対応する。

水溶液にグルコースを添加した場合は図 3(b)に示すように、グルコースを添加しない場合とは異なった CV 曲線を示し、明らかに増大した反応電流が観察された。 $-0.8$  V から  $-0.5$  V までの a と a' の反応は、図 3(a)と同様、複合電極の

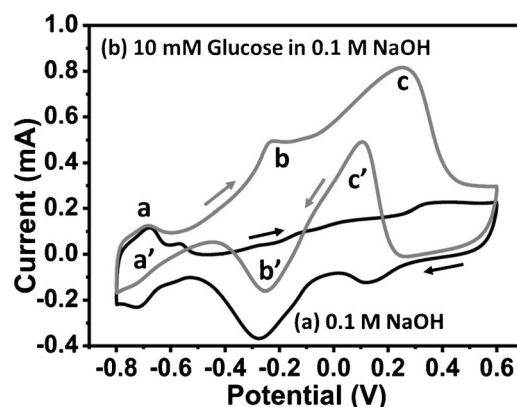


図 3  $\text{TiO}_2$  被覆の無い AuNPs/PANI 複合電極材料に対してスキャン速度  $50 \text{ mVs}^{-1}$  で測定した CV 曲線。(a) グルコース無添加の 0.1 M NaOH 水溶液の場合、および、(b) 10 mM のグルコースを添加した 0.1 M NaOH 水溶液の場合。

表面での水素の吸着と脱着反応である。ポジティブスキャンにおいて、bで示す通り、約-0.3 VでAuNPsの化合物、すなわち、グルコースを酸化するAuOH<sub>ads</sub>(メディエーター)が生成された。続いて、ポジティブスキャン中の約0.2 Vでは、グルコースの酸化を示す電流ピークが現れた(cと表記)。一方、ネガティブスキャンにおいては、約0.1 Vで金の氧化物(AuO<sub>x</sub>など)がAuOH<sub>ads</sub>に還元される電流およびグルコースが再び酸化される電流が再度現れた(c'と表記)。続いて、約-0.25 Vでは(b'と表記)AuOH<sub>ads</sub>がAuNPsまで還元されるとともに、白金基板の還元反応も含めた複合電極全体にわたる還元反応による電流が観察された。

## (2) TiO<sub>2</sub>で基板を被覆した複合電極材料

TiO<sub>2</sub>で複合電極基板表面を被覆した場合、水酸基(OH<sup>-</sup>)のスピルオーバー効果により、更なるグルコースの酸化反応を促進できることが報告されている<sup>(1)</sup>。しかし、金属より導電性の低いTiO<sub>2</sub>は複合電極の導電性を低下させるため、添加量を最適化する必要がある。図4に、10 mMのグルコースを添加した0.1 M NaOH水溶液に種々の濃度のTiO<sub>2</sub>を混合して作製した複合電極のCV曲線を示す。図4(a)に示すように、TiO<sub>2</sub>被覆の無い電極のCV曲線において、0.2 Vでのグルコースの酸化反応では、TiO<sub>2</sub>によるスピルオーバー効果がないため、最も小さい酸化電流ピークが観察された。続いて、TiO<sub>2</sub>の添加濃度が5 g/Lから0.05 g/Lまで減少するとともに酸化反応による電流が増大した(図4(b)-(f))。しかし、その濃度が0.05 g/Lより少なくなると、グルコースの酸化電流は低下した(図4(g))。このことから、最適のTiO<sub>2</sub>の添加濃度は0.05 g/Lであることが示唆された。TiO<sub>2</sub>の添加濃度の最適化により、グルコースの酸化電流を約6倍に向上することができ、TiO<sub>2</sub>を添加したAuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI複合電極を採用することにより、グルコースセンサー

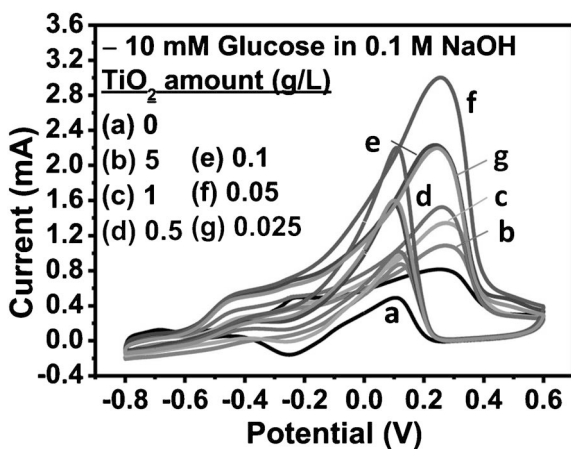


図4 種々の濃度のTiO<sub>2</sub>を添加したAuNPs-(TiO<sub>2</sub>)/PANI複合電極材料によるCV曲線。(a) TiO<sub>2</sub>無添加, (b) 5 g/L, (c) 1 g/L, (d) 0.5 g/L, (e) 0.1 g/L, (f) 0.05 g/L, (g) 0.025 g/L。スキャン速度は50 mVs<sup>-1</sup>, スキャン電位範囲は-0.8 Vから0.6 Vまで、測定温度は室温である。

の感度を向上させることができた。

## (3) 複合電極化による感度、選択性、長期安定性等の向上

図5の定電圧測定法に示すように、電圧を0.2 Vに固定し、グルコースを測定水溶液に滴下し、グルコースを酸化する電流密度を測定した。AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI複合電極材料により高感度のグルコースセンサーを実現でき、グルコース濃度が約3 mMから8 mMまでの範囲(人体にあるグルコースの一般的濃度<sup>(19)</sup>)においては、グルコースを酸化する電流密度との間で線形関係も達成できた。さらに、線形計算式で算出した検出下限は0.15 μMであり、感度の面においてもグルコースセンサー用電極として十分に適切と考えられる。

複合電極材料としての選択性を測定するため、0.1 MのNaOH水溶液中で電極を0.2 Vに保持した状態で、1 mMのグルコース、0.1 mMの尿酸(UA)、ドーパミン、アスコルビン酸(AA)、塩化ナトリウム(NaCl)、蔗糖(Sucrose)、乳糖(Lactose)、果糖(Fructose)、尿素(Urea)をそれぞれ水溶液に添加し、反応電流の時間経過に伴う変化を観察した(図6)。グルコースの添加により、明らかな酸化反応の電流が観察された(30 sおよび210 s)。一方、上記の干渉物を添加し

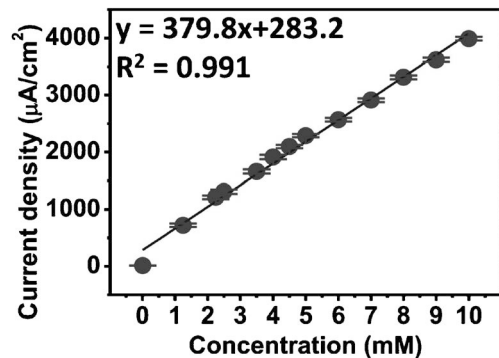


図5 最適化したAuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI複合電極材料における電流密度とグルコース濃度の相関。グルコース濃度の測定範囲は0 mMから10 mMまで、測定温度は室温である。

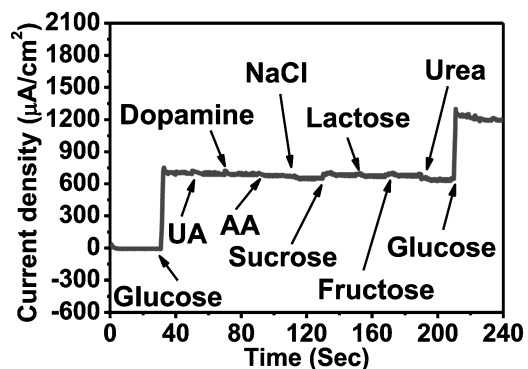


図6 グルコース(1 mM)および尿酸、ドーパミン、アスコルビン酸、塩化ナトリウム、蔗糖、乳糖、果糖、尿素などの干渉物(0.1 mM)を各0.1 MのNaOH水溶液に添加した場合の反応電流の時間変化。測定電圧は0.2 Vで、測定温度は室温である。

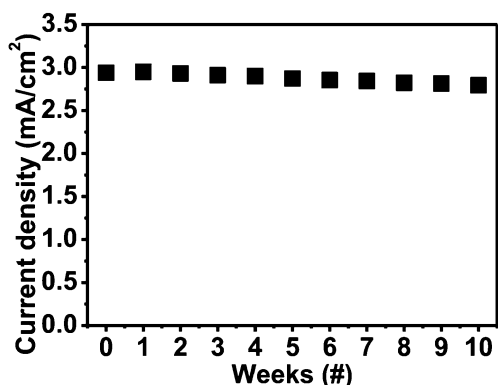


図7 最適化した AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI 複合電極材料における10週間にわたる電流密度の推移。測定温度は室温である。

た場合は、酸化反応による反応電流はほとんど観察されなかった(40 s から 200 s までの範囲内)。よって、選択性の面においても、最適化した AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI 複合材料はグルコースセンサーの電極材料として適するといえる。

非酵素型のグルコースセンサーに対しては、前述した感度と選択性以外に、長期安定性も重要なファクターと考えられている。長期安定性の評価のために、図7に示すように毎週1回のCV測定を継続した結果、10週間経過後もピーク電流密度が95%以上の値が得られており、本電極材料が高い長期安定性を有することが示唆された。また、表1に示すように、金と関連したグルコースセンサーに関する先行研究<sup>(20)-(28)</sup>で述べられている他の金基の複合電極と比較して

も、本研究で開発したグルコースセンサーは感度、検出下限、反応時間、安定性などの点で優れている。したがって、本稿で紹介した高感度、高選択性、および長期信頼性に優れた AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI は将来の実用が望めるグルコースセンサー用電極材料として期待できる。

#### 4. おわりに

本稿では、グルコースセンサーへの応用を目指し、取り組んだ金ナノ粒子-酸化チタン/ポリアニリン(AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI)複合電極材料に関する研究を紹介した。TiO<sub>2</sub>の添加濃度を調整し、基板被覆量を最適化したことにより、高感度、高選択性、高長期安定性を達成できた。AuNPs-TiO<sub>2</sub>/PANI 複合電極材料はグルコースセンサーとして有望な材料であるが、さらに、貴金属の比表面積を増大させることや、電気活性の高い結晶方位を利用すること、貴金属の使用量をより削減することなどが、今後の重要な課題といえる。著者は現在、同じく生体材料である形状記憶合金のβチタン基合金や、銅基合金、強磁性 NiMnGa 基合金などに関する研究を行っている。過去の電気化学の研究経験を生かし、化学的、および機械的に優れた様々な生体材料の開発に取り組んでいる。

本稿で紹介した研究は、東京工業大学・細田秀樹教授、曾根正人教授、Tso-Fu Mark Chang 准教授、および東大生産技術研究所・年吉洋教授、Agnès Tixier-Mita 准教授と共同で遂行されました。また、本研究の一部は、科学研究費補助

表1 本稿のグルコースセンサーと文献にある金元素が含まれる電極材料の性能の比較。

| 電極材料  | 感度                                   | 検出下限          | 線形範囲       | 反応時間 | 安定性  | 電圧    | 参考文献 |
|---|--------------------------------------|---------------|------------|------|------|-------|------|
|   | $\mu\text{A cm}^{-2} \text{mM}^{-1}$ | $\mu\text{M}$ | mM         | sec  | days | V     |      |
| TiO <sub>2</sub> -NW/PAPBA/Au NPs             | 66.8                                 | 9.3           | 0.5-11     | -    | -    | -     | [20] |
| EANi(OH) <sub>2</sub>                         | -                                    | 0.37          | ~0.002     | -    | -    | 0.6   | [21] |
| Nanostructured TiO <sub>2</sub> /Au composite | 185                                  | 10            | 6-45       | -    | -    | -     | [22] |
| AuNP-FLG nanohybrids                          | 0.195                                | 1             | 0.006-28.5 | 8    | 14   | 0     | [23] |
| Bimetallic Pd-Au cluster                      | -                                    | 0.6           | 0.004-1.12 | -    | 20   | -0.15 | [24] |
| Au NPs/PANI/CC                                | 150                                  | 3.08          | 0.0126-10  | -    | 15   | -     | [25] |
| Au-graphene nanocomposites                    | 4.56                                 | 25            | 2-16       | 3    | 30   | 0.0   | [26] |
| N-GR-CNTs/AuNPs                               | 0.9824                               | 0.5           | 0.002-19.6 | 5    | -    | 0.2   | [27] |
| AuNPs-MWCNTs-CS                               | 27.7                                 | 0.5           | 0.001-1    | -    | 60   | 0.2   | [28] |
| Au NPs-TiO <sub>2</sub> /PANI                 | 379.8                                | 0.15          | 0.01-10    | < 3  | 70   | 0.2   | 本稿   |

金(特別研究員奨励費19F19048)の支援により実施されました。ここに深く感謝の意を表します。本稿で再利用した図の著作権は、エルゼビア社より取得した。

## 文 献

- (1) W.-T. Chiu, T.-F. M. Chang, M. Sone, A. Tixier-Mita and H. Toshiyoshi: *Talanta*, **212**(2020), 120780.
- (2) W.-T. Chiu, T.-F. M. Chang, M. Sone, A. Tixier-Mita and H. Toshiyoshi: *Sens. Actuators B Chem.*, **319**(2020), 128279.
- (3) J. Kim, A.S. Campbell and J. Wang: *Talanta*, **177**(2018), 163-170.
- (4) W.-T. Chiu, T.-F. M. Chang, M. Sone, H. Hosoda, A. Tixier-Mita and H. Toshiyoshi: *Electrochem.*, **2**(2021), 347-389.
- (5) G. Wang, X. He, L. Wang, A. Gu, Y. Huang, B. Fang, B. Geng and X. Zhang: *Microchim. Acta*, **180**(2013), 161-186.
- (6) S. Park, H. Boo and T. D. Chung: *Anal. Chim. Acta*, **556**(2006), 46-57.
- (7) H. Lee, Y. J. Hong, S. Baik, T. Hyeon and D.-H. Kim: *Adv. Healthc. Mater.*, **7**(2018), 1701150.
- (8) H. Karimi-Maleh, K. Cellat, K. Arıkan, A. Savk, F. Karimi and F. Şen: *Mater. Chem. Phys.*, **250**(2020), 123042.
- (9) R. Ahmad, N. Tripathy, M.-S. Ahn, K. S. Bhat, T. Mahmoudi, Y. Wang, J.-Y. Yoo, D.-W. Kwon, H.-Y. Yang and Y.-B. Hahn: *Sci. Rep.*, **7**(2017), 5715.
- (10) R. Ayranci, B. Demirkan, B. Sen, A. Şavk, M. Ak and F. Şen: *Mater. Sci. Eng. C*, **99**(2019), 951-956.
- (11) Y. Zhang, J. Xu, J. Xia, F. Zhang and Z. Wang: *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **10**(2018), 39151-39160.
- (12) S. Lin, W. Feng, X. Miao, X. Zhang, S. Chen, Y. Chen, W. Wang and Y. Zhang: *Biosens. Bioelectron.*, **110**(2018), 89-96.
- (13) Z. Zhuang, X. Su, H. Yuan, Q. Sun, D. Xiao and M. M. F. Choi: *Analyst*, **133**(2008), 126-132.
- (14) Y. Su, H. Guo, Z. Wang, Y. Long, W. Li and Y. Tu: *Sens. Actuators B Chem.*, **255**(2018), 2510-2519.
- (15) J.-S. Ye, C.-W. Chen and C.-L. Lee: *Sens. Actuators B Chem.*, **208**(2015), 569-574.
- (16) S. Liu, Z. Wang, F. Wang, B. Yu and T. Zhang: *RSC Adv.*, **4**(2014), 33327-33331.
- (17) L. Lin, S. Weng, Y. Zheng, X. Liu, S. Ying, F. Chen and D. You: *J. Electroanal. Chem.*, **865**(2020), 114147.
- (18) S. Masoomi-Godarzi, A. A. Khodadadi, M. Vesali-Naseh and Y. Mortazavi: *J. Electrochem. Soc.*, **161**(2014), B19-B25.
- (19) Y. Ding, Y. Wang, L. Su, M. Bellagamba, H. Zhang and Y. Lei: *Biosens. Bioelectron.*, **26**(2010), 542-548.
- (20) N. Muthuchamy, A. Gopalan and K. Pill-Lee: *RSC Adv.*, **8**(2018), 2138-2147.
- (21) A. L. Rinaldi and R. Carballo: *Sens. Actuator. B Chem.*, **228**(2016), 43-52.
- (22) K. Grochowska, J. Ryl, J. Karczewski, G. Śliwiński, A. Cenian and K. Siuzdak: *J. Electroanal. Chem.*, **837**(2019), 230-239.
- (23) T. D. Thanh, J. Balamurugan, J. Y. Hwang, N. H. Kim and J. H. Lee: *Carbon*, **98**(2016), 90-98.
- (24) C. Shen, J. Su, X. Li, J. Luo and M. Yang: *Sens. Actuator. B Chem.*, **209**(2015), 695-700.
- (25) M. Xu, Y. Song, Y. Ye, C. Gong, Y. Shen, L. Wang and L. Wang: *Sens. Actuator. B Chem.*, **252**(2017), 1187-1193.
- (26) H. Shu, G. Chang, J. Su, L. Cao, Q. Huang, Y. Zhang, T. Xia and Y. He: *Sens. Actuator. B Chem.*, **220**(2015), 331-339.
- (27) H. Jeong, D. M. Nguyen, M. S. Lee, H. G. Kim, S. C. Ko and L. K. Kwac: *Mater. Sci. Eng. C*, **90**(2018), 38-45.
- (28) T. Kangkamano, A. Numnuam, W. Limbut, P. Kanatharana and P. Thavarungkul: *Sens. Actuator. B Chem.*, **246**(2017), 854-863.



邱琬婷

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
 2018年9月 東京工業大学大学院総合理工学研究科博士後期課程 修了  
 2018年10月 東京大学生産技術研究所 日本学術振興会・外国人特別研究員PD  
 2020年2月 東京工業大学科学技術創成研究院 助教  
 2022年4月 現職  
 専門分野：電気化学、形状記憶合金、状態図  
 ◎NiMnGa強磁性形状記憶合金を中心に研究開発に従事。  
 ★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★

## 談話室

### Last Experiment —カドミウム同位体を用いた BNLのHFBR最後の 中性子非弾性散乱実験と ニューヨークの思い出あれこれ—

島根大学 次世代たたら協創センター；特任教授  
島根大学名誉教授

大庭卓也

私がニューヨーク州マンハッタンの東、ロングアイランド島のアプトンにあるBNL (Brookhaven National Laboratory)のHFBR (High Flux Beam Reactor)へ中性子非弾性散乱の実験に出かけたのは、1994年12月と1996年12月二回である。それぞれ三週間余り、二週間余りである。BNLのHFBRは、中性子散乱で1994年にノーベル賞を受賞したBertram N. Brockhouseも一時期実験を行った施設である<sup>(1)</sup>。実は私がBNLについて書くのは二度目である。以前、中性子コミュニティー情報誌「波紋」に2000年に書かせてもらった。中性子科学会の沿革を見てみると1991年1月に中性子コミュニティーの情報誌「波紋」を刊行とあり、2001年4月に中性子科学会誌「波紋」へ移行しているの、中性子コミュニティー情報誌としての「波紋」の最後の年に書かせてもらったようだ。今回は少し詳しく書いてみようと思う。

BNLへ行くきっかけになったのは国際会議である。当初、筑波大学でAuCdの研究を行っており、マルテンサイトの単結晶を用いて未知であった結晶構造の解析に成功した。結果からマルテンサイト変態のメカニズムを考察し、フォノンのソフト化という考え方で説明できるという論文を書かせてもらった。最初に学会で発表した時に、ある先生に、しばらくは確かめられませんね、と言われたのを記憶している。しばらくは確かめられませんね、と言われた意味は瞬時には理解できなかったが、その先生には、Cdは中性子の吸収材だから中性子散乱実験が難しいということが、すぐに浮かんだのであろう。当時、私はX線の回折を中心に行っており、物質の相変態のメカニズムについて、格子振動の特定の振動モードがソフト化し、原子の変位が戻らなくなり低温の構造へ変態するという考え方には、とても興味を持っていた。しかし中性子の性質まではすぐに頭が働かなかった。

1992年にアメリカ、モントレイで開催されたマルテンサイト変態の国際会議ICOMATでAuCdの結晶構造解析の話も含めて“Recent Work on the Determination of Crystal Structure”というタイトルで、上司であった大塚先生が私と共著という形でKey Note Lectureで話をされた。それを聞いたBNLのShapiroが我々の結果に興味を持って、声を

かけてくれたのだ。Cdは中性子の吸収材だけど、Cdの同位体が手に入ったのでAuCdで中性子非弾性散乱の実験をやらなかったというものだった。Cd入手の詳しいことはわからないが、ソビエトが崩壊したのが1991年のことである。私が大学院生の時にBNLのShiraneやShapiroの論文も目にしてはいたが、論文上の素晴らしい人々でしかなかった。会議での発表がきっかけになって次の研究につながる。コロナ禍の中でWeb会議が行われる昨今ではなかなか考えにくい。

私がBNLにでかけられたのは1980年に始まった「日米協力中性子散乱事業」のおかげである。日米協力事業については、遠藤先生や藤井先生の記述に経緯が詳しく述べられている<sup>(2)-(4)</sup>。アメリカ側ではBNLで白根元先生が中性子散乱で多くの成果を上げられ、日本では星埜禎男先生、山田安定先生、藤井保彦先生らの貢献が大きい。Shapiroからの話を受けた当時、私は筑波大学から栃木県宇都宮市に新しくできた帝京大学理工学部に移っていた。確か申請書を書いて採択され、(当時の記録を読みだそうと昔のHDDを読みだそうとしたが、残念ながら読みだせなかった。)筑波大学で単結晶を作製してもらい、アメリカへ出かけた。

出かけるまでは大変で、BNLで放射線管理区域に入るため試験を受け、確かその結果が80点以上でなければならなかった。試験のための資料が多量に送られてきた。まだまだ新米の助教授だったが、助手(当時は助教ではなく助手)のころと違って、私立大学では授業を結構持っていたので、資料を十分に読み込むことはできなかった。成田発のアメリカへの飛行機はオーバーブッキングしていたようで、ビジネスクラスに席を移らされて、なかなか良い待遇だったはずだが、試験勉強にフライト時間のほとんどを費やし、ビジネスクラスを満喫したという思いはない。結局ほとんど眠れないまま、ニューヨーク、ケネディー国際空港に着いた。

ケネディー国際空港に降り立ち、BNLからの迎えの車に乗り、車で高速道路495号を東へ。今はどうなのかは知らないが、当時、車からの風景に、昼間なのに煌々とハイウェイの電灯がともし、なんてもったいないと思った記憶がある。BNLに入構するにはチェックが必要で、少し特別な気がして、わくわくしていた。いろいろな手続きのため、構内の物理系の建物へ行き、迷いながら別の建物へも出かけた。物理系の建物の北側には丸いドーム状の原子炉棟(HFBR)がある。翌日試験があることを聞き、宿舎に入った。試験で80点取らなければ施設に入れず、実験ができないという笑い話になるので、宿舎に入ってからも試験勉強をしていた。結局二日ほど寝ていない状態だったと思う。

BNLの構内はとても広く、近所にすぐ店があるわけでもなく、車が合ったほうが良いというのでレンタカーを借りた。一人では広すぎる宿舎に泊まり、朝、物理棟、HFBRへ出かけ実験をした。夜は時々宿泊エリアにあるコインランドリーで洗濯し、土日はカフェテリアが休みだったので、買い物に約6.5 km(4マイル)ほど離れたキング・カレンのスーパーマーケットに出かけた。巨大なスーパーだったが日本にはすでにあったレトルト食品がなく、仕方なく簡単に作れそ



うなパスタを買うと大量にできてしまい、毎食同じものを食べる羽目になった。キング・カレンの巨大な駐車場に面して、テイクアウトできる中華屋さんもあり、一人分の中華を買って帰り、夕食にしたこともあった。他人よりも食べると自負していたのだが、なかなかの量に参ってしまった。アメリカ人の胃袋に敬服。外食にはポートジェファーソンへ行ったりもしたが、一人で入るのに気後れして、入りやすい店に入ったり、ステーキが食べたいと思って入ったらとても硬いステーキだったりしたこともある。ロングアイランド島の東の端まで行って灯台を見に行ったりもした(写真が見つからない!)。アプトンから南に下って島の南側に沿って伸びている砂州まで行ったこともある。

ある晩、Shapiroに言われて音楽を聴きに行ったことがある。レンタカーで高速道路495号線を西に走り、マンハッタンの北にあるリンカーンセンターに行った。その冬初めての雪が散らつき始め、不安を感じながらミッドタウントンネルを抜け、マンハッタンに入った。一方通行の多い道を車で北上して、リンカーンセンターの近所の駐車場に車を置いて(白根先生に教えてもらって出かけたような記憶がある)会場で音楽を聴いた。しかし、雪が散らついていたのが気になって、後ろ髪を引かれる思いで、途中で帰ることにした。後で知ったことだが、私が帰りにミッドタウントンネルを通った後、雪のためトンネルが封鎖になったと聞いた。通常は1時間半程度の距離だが、高速道路に雪が積もり、途中で乗り捨ててある車も多数見かけながら、宿舎に帰りついたのは夜中の2時だった。翌日、Shapiroに聞くと心配していたらしい。携帯電話などない時代である。

ロングアイランド鉄道でマンハッタンに出かけたこともある。車でマンハッタンに行った経験もあり、車で行こうと思うと言うと、その日は鉄道がいいと言うのでその助言に従って、最寄りの駅まで車で行き、車をそこに置き、鉄道で出かけた。ロングアイランド鉄道に乗ってマンハッタンまで行くと終着駅はペンシルベニア駅。駅を出てエンパイア・ステート・ビルも近くにあり、5番街を北に向かって歩き、時節柄ロックフェラーセンターのクリスマスツリーも目にし、トランプタワー(当時はトランプ氏のことなど知っていたとは思えないので、情報をもらっていてビルに入ったのだろう)、ティファニー、FAOシュワルツという巨大なおもちゃ屋があった。今グーグルの地図を見て見ると、確かこの辺に思っていた場所には巨大IT企業が。Webで検索してみると、「FAO Schwarzは2015年にニューヨーク5番街にあったフラッグシップ店が惜しまれながら閉店し、2018年11月にロックフェラープラザに新店舗がオープン」とある。あれから25年以上経ったのだからと納得。白根先生にマンハッタンのデリカテッセンを教えてください、そこを目指して歩き、昼食をとったのだが、30cmはあろうと思われるバーガーが出てきて、どうやって食べようかと思案した。

さて、実験の話に戻ろう。毎回放射線のチェックをして

HFBRの入退室を行い、実験が順調に進んでいるかチェックし、データ整理を行いながら日々を過ごした。データがたまっていくと期待通りにソフト化が見え、うれしかったのも記憶している。当時、放射光の実験では、真夜中に実験条件を変えるという生活パターンになじまないこともよく行っていた。しかし中性子の実験では生活パターンに合うように実験を行うことができ、感心したものだ。夜、測定を仕掛け、一晩の測定ランにして、翌朝次の測定を仕掛ける。94年は順調に実験を終え帰ってきた。次の機会には特別のことを経験することになった。HFBRの退避訓練の後、クリスマス休暇に入った。退避訓練に合わせて実験を終了し、宿舎へ戻って、「クリスマス休暇があるんだ」と思い、なんとなく寂しい気持ちになった記憶がある。実験の終了とともに日本へ帰ってきた。1996年の12月の末である。しかし、思ってもみなかったことに、汚染水の水漏れが発見され、しばらくの間、原子炉の稼働ができなくなったという報告をもらった。実験の機会をもらい、いいデータも取れたので、私も再稼働への働きかけの手紙を書いたが、1999年に永久にシャットダウンということになってしまった。ということは、私の実験がHFBRでの最後の実験となったのである。もちろん多くのテーマが走っているのだから、最後の実験はいくつもあるはずだが、何か運命的なものを感じる。

私は島根大学総合理工学部を退職し、現役最後の年に、立ち上げに携わった<sup>(5)</sup>次世代たたら協創センター(NEXTA)<sup>(6)</sup>で現在特任教授をしているが、改めてこのエピソードを書く機会を与えてくださった方々に感謝します。また、BNLに出かける機会を与えてくださった方々、実験に協力いただいた方々に、改めてこの場を借りて感謝します。論文上のすばらしい先生だった白根先生と直接話ができて、ご自宅でのパーティーにも呼んでいただき幸運でした。この研究を通じて出会った海外の方々と、その後もお付き合いがあり、その後いろいろな機会に恵まれたのも幸運でした。BNLでポストドクをしておられ、帰国後、将来を期待され若くして阪大教授になられたが、残念ながら亡くなられた廣田和馬氏には、その後も東海村の原研でのTiNiの実験でもお世話になりました。

## 文 献

- (1) Brookhaven National Laboratory HP <<https://www.bnl.gov/bnlweb/history/nobel/>> 閲覧日2022年2月1日
- (2) 遠藤康夫：日本物理学会誌，**70**(2015)，694-701.
- (3) 藤井保彦：日本の結晶学(II)，日本結晶学会編(2014)，58-60.
- (4) 遠藤康夫：日本物理学会誌，**60**(2005)，655.
- (5) 大庭卓也，荒河一渡，三浦哲也，秋重幸邦：産学連携学，**17**(2021)，17-23.
- (6) 次世代たたら協創センター HP <<https://tatara.shimane-u.ac.jp/>> 閲覧日2022年2月22日

(2022年2月1日受理)[doi:10.2320/materia.61.288]  
(連絡先：〒690-0816 松江市北後町2番地)

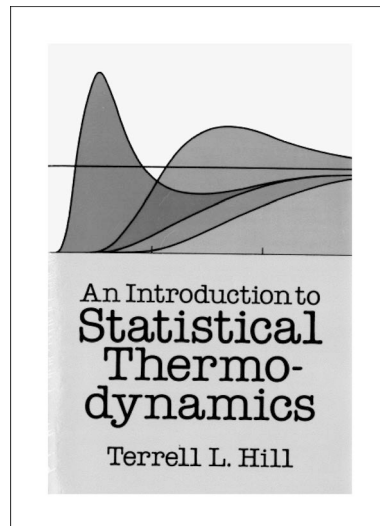
## “An Introduction to Statistical Thermodynamics”

T. L. Hill (著), Dover Publications

Revised 版, 1987年

名古屋大学大学院工学研究科物質科学専攻

横井達矢



■教科書の表紙.

この参考書は、筆者が修士の時に研究室内の輪講で使用していたものです。筆者は修士課程から大阪大学吉矢研究室に所属し、修士・博士課程を修了しました。当時、研究室では学生を中心とした輪講が行われていました。扱う内容も学生が決めており、筆者が修士1年の時は、学部生の頃に学んだ基礎科目を英語で読み理解を深めることになりました。内容は統計力学と量子力学でしたが、統計力学の学習に使用した参考書が、今回紹介する「An Introduction to Statistical Thermodynamics」になります。

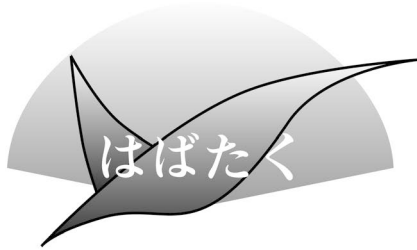
この参考書の長所は、統計力学の基礎的な内容が順を追って丁寧に書かれており、解説が豊富な点だと思います。例えば、統計力学の導入やアンサンブルの考え方が分かりやすい表現で書かれており、またアンサンブル平均と熱力学的な値との繋がりに関する導出も詳細に書かれています。今思えば、筆者が学部生の時に統計力学の基礎的な内容を理解できていなかったのもありますが、当時この参考書を読んでいたときは、なるほどと思うことが多々ありました。また平易な英語で書かれている点も長所のひとつだと思います。統計力学を一度学習したことがある修士課程の学生であれば、前半の重要な部分は読み進められると思います。英語表現も英語論文に通じる書き方なので、英語論文を読む力もつくと思います。その他の長所は、500ページを越える参考書ですが値段は3000円程度(電子書籍だと2000円前後)と安価である点です。Dover出版は、絶版になった物理や数学の参考書を多数安価で再出版しており、この参考書も1960年に出版された本の再出版になります。当時この本を輪講の参考書に選ん

だ理由として、安価であったことも少なからずありました。

この本の構成は、1-3章が統計力学の導入であり基礎的な重要な内容となります。著者が特に重要と思う章について簡単に紹介します。まず1章では熱力学、統計力学、量子力学の関係が書かれています。そしてエルゴード仮説、アンサンブル、等確率の原理について述べられています。その後、カノニカルアンサンブルについて簡単な例とともに述べられています。そこでは分配関数から、熱力学的な値との関連の定式化まで、順を追って示されています。そしてそれをもとにグランドカノニカルアンサンブル、ミクロカノニカルアンサンブル、その他のアンサンブルの性質と熱力学的な値の関連が説明されています。2章では、統計力学・量子力学の観点から熱力学第2、第3法則の解釈がされており、この部分も統計力学の理解を深める上で非常に有用と思います。3章では独立系、同種粒子、縮退した系に関する分配関数の扱いが詳細な説明とともに述べられています。6章では古典力学と統計力学の関係が述べられており、位相空間やハミルトニアンと分配関数のつながりについて基本的な理解の助けになると思います。4、5、7章は理想気体や単元素の固体に対する統計力学の適用例が述べられています。いずれも基本的で重要な内容で、理解が深められると思います。

一度統計力学を学んでおりさらに理解を深めたい学生や、英語の参考書にトライしようとしている学生には、是非読んでもらいたい一冊です。

(2022年2月7日受理)[doi:10.2320/materia.61.290]



## 転位動力学法の概説とこれから

九州大学先導物質化学研究所；助教  
井原史朗

2021年4月から九州大学先導物質化学研究所にて勤めております。井原と申します。所属先は主として化学を専門とされる方々が多い附置研であるため、金属学会員の皆様にとってはあまり聞き慣れないかもしれません。私は学生時代には転位動力学法や場の理論を中心とした研究(例えば<sup>(1)</sup>)を、現在は主に電子顕微鏡に関わる機械学習を行っております<sup>(2)</sup>。本小記事においては、転位動力学法について概説し、それに関連した研究の展望についても述べさせていただきます。

塑性変形が転位の運動によって担われることは多くの方がご承知だと思われま。変形の素過程である因子が解明されているのであれば、金属の変形は全て予測できるのではないかと考えてしまいますが、未だに単結晶であっても物理的描像に基づく、特に大変形域の予測モデルの確立は困難です。その原因の一つに、転位同士が相互作用することで組織化し、転位運動の様相を変えてしまうことが挙げられ、転位動力学法は、組織としての転位を解析する際に有効となります。

転位動力学法では転位を張力のある弦としてモデル化し、転位の応力場や外力等も考慮した運動方程式を解くことで、転位の運動を予測します。転位が掃いた面積と塑性ひずみとの関係性を利用して、クリープ曲線や応力-ひずみ曲線等を作ることができ、これを基にして転位組織が与えるマクロ応答への影響を考えることができます。解析例を図1に示します。ここでは、傾角粒界モデル(図中破線)および回位対モデル(図中実線)を作成し、一定の応力を加え、それぞれの組織が転位の運動に与える影響を、ひずみ速度の差異から検証しています。図1より、同じような刃状転位列同士であっても、回位対モデルの方では転位運動が抑制され、その影響がマクロなひずみ速度の低下に表れていることがわかります。この結果だけで回位対が硬化に寄与すると結論付けることはできませんが、例えばこのような解析を通して、転位組織が力学的応答に与える影響を定量化できます。分子動力学法でも似たことはできるかもしれませんが、転位動力学法はより大きな時間・空間スケールを取り扱えるため、幅広い転位組織や現象を解析しやすいという長所があります。

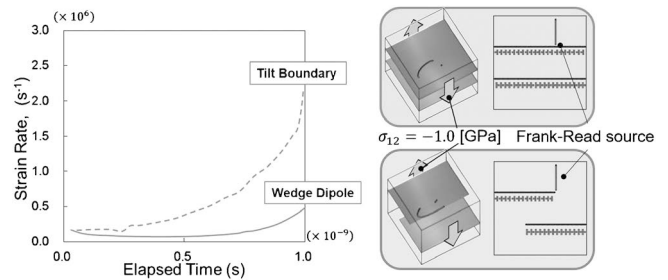


図1 転位動力学による解析例。

では転位動力学法で塑性変形の全てを解析できるかと言うと、そう簡単ではありません。例えば、転位が増殖すると計算量もそれに比例して増大するため、数%のひずみを超える解析は困難になります。また、転位の生成を自然に扱える訳ではなく、加えて転位間相互作用は転位同士のBurgersベクトルや線方向の組み合わせで決まるため、解析結果は初期に設定した転位に依存しやすいです。このことから組織形成の過程から解析することは容易ではありません。

結局の所、現状の転位動力学法も万能な解析手法ではないため、短所と向き合いつつ長所を生かしていく必要があります。本手法の場合、その長所は転位組織の応力場といった、マクロ応答に寄与するミクロな場を低コストで計算でき、更に転位運動の予測もできる点にあると考えられます。また、実験的に転位の3次元分布を手に入れられれば、上に挙げた初期設定依存性の問題を克服できると推察されます。

冒頭にある通り、現在の所属では電子顕微鏡像と機械学習をテーマとした研究を中心としております。電子顕微鏡観察技術の発展は目覚ましく、例えば試料内の転位の3次元再構成も一般的な技術になりつつあります。さらに、透過電子顕微鏡内その場力学試験や加熱試験も普及していると言っても過言では無いです。また、画像処理と機械学習との相性が良いことから、電子顕微鏡像においても機械学習を適用する研究が盛んに行われています。我々のグループでも機械学習を用いた電子顕微鏡像のノイズ除去等も行っております<sup>(2)</sup>。こうした観察・画像処理技術を組み合わせることで、転位の3次元形状およびその時間発展も観察可能になるでしょう。さらにこの観察結果を、例えば転位動力学法に反映させることで、電子顕微鏡観察だけでは解析困難なミクロの力学場の観点から、組織としての転位をより詳細に解析できると期待されます。このように、実験と計算とを直接結びつけていくことが、今後の転位組織における力学解析においても可能になってくると考えられます。その潤滑油としての機械学習も上手く活用していくことが今の自分にとっての課題だと認識し、まだまだ発展途上ではありますが、日々精進しております。

### 文 献

- (1) S. Ihara and T. Hasebe: Int. Jnl. of Multiphysics, **13**(2019), 253-268.
- (2) Y. Zhao, S. Koike, R. Nakama, S. Ihara, M. Mitsuhara, M. Murayama, S. Hata and H. Saito: Sci. Rep., **11**(2021), 20720. (2022年2月1日受理)[doi:10.2320/materia.61.291] (連絡先: 〒816-8580 春日市春日公園6-1)

## 銅を介したスズの析出

東京都立日比谷高等学校2年

山崎英磨 川嶋結己

私たちは、所属している化学探究部で活動をする中で、異種の金属樹を介して金属樹を析出させるとどのような形状になるのかということに興味を持ちました。そこで、銅樹を介してスズを析出させる実験を行うと、メッキとして析出する(銅樹の表面にスズの被膜が形成される)場合と金属樹として析出する(銅樹の先からさらにスズが樹状に析出する)場合の2種類があることを発見しました。本研究では、析出したスズがメッキである場合と金属樹である場合の条件の違いを明らかにすることを研究目的としました。

私たちは、次の2つの仮説を立てました。仮説1:電流値によって析出するスズの形状が変化するのはないか。仮説2:銅の形状によって析出するスズの形状が変化するのはないか。

まず、私たちは実験準備として、2 mol/L 塩化銅(II)水溶液 2 mL と、2.1 mol/kg・H<sub>2</sub>O L-アスコルビン酸水溶液 0.5 mL の混合溶液を、直径 70 mm のろ紙にしみこませ、鉄板(純度99%, 10 mm×10 mm)を中央に置いて鉄板からおおよそ 20 mm 以下の範囲に銅樹を析出させました。その後、銅樹の形状を崩さないようにろ紙を純水で洗浄しました。

次にこの銅樹をろ紙とともに、セロハンの半透膜付きの小容器に入れ、それに 0.5 mol/L 塩化スズ(II)水溶液(5.0 mol/L 塩化スズ(II)水溶液 1.0 mL に 6.0 mol/L の塩酸 1.0 mL と純水 8.0 mL を加えて調製したもの)を入れました。その後、別のプラスチック容器に亜鉛板(45 mm×150 mm, 純度98.5%)を入れて飽和食塩水に浸したのち、前述の半透膜付きの小容器をさらにそのプラスチック容器に入れました。最後に、亜鉛板と銅樹を導線でつなぎました(図1)。すると、正極である銅樹にスズが析出しました。このとき、外部回路に流れた電流を変化させると析出するスズの形状がどのように変化するかを調べました。次に、ろ紙上の銅樹を銅板(純度99.9%, 10 mm×10 mm)に変えて同様の実験を行い

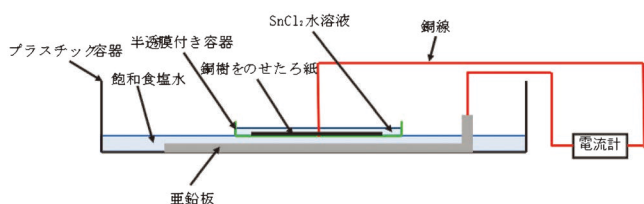


図1 実験装置の模式図。(オンラインカラー)

ました。電流の大きさの調節は負極と正極の距離を変えることで実施しました。実験結果は次のようになりました。

銅樹からスズを析出させた場合、電流が大きい(初期電流約 70 mA 以上)ときはスズ樹として析出し、電流が小さい(初期電流約 60 mA 以下)ときはスズメッキとして析出しました。これは、仮説1と一致しています。銅板からスズを析出した場合においても、銅樹からスズを析出させた場合と同様に、電流値が大きいときにスズ樹として析出し、電流値が小さいときにスズメッキとして析出しました。しかしながら、異なる点として、銅樹を介した場合はスズメッキとして析出する電流値が約 60 mA 以下だったのに対して、銅板を介した場合は約 10 mA まで下げなければスズメッキとして析出しませんでした。私たちはこれらの結果に対して、電流量とスズの析出量は比例し、電流が小さい場合はスズの析出量が少なく、ゆっくりと析出が進み整然とメッキ状に析出するが、電流が大きい場合は逆に急激に析出が進み、樹木状の結晶を形成するのではないかと考察しました。しかし、なぜ銅板を介してスズメッキを析出させるには銅樹を介したときよりも電流値を下げる必要があるのかについては、それぞれの表面の状態や表面積の違いが考えられますが、明確には決定できていません。また、銅樹を介した場合と銅板を介した場合の両方において、スズ樹として析出したときは電流値が時間とともに増加し、スズメッキが析出したときは電流値が時間とともに減少するという傾向がありました(図2)。私たちはこの結果に対して、スズ樹は比表面積が大きいので、成長と共に表面積が急激に増大し、電極反応が起こるサイトが増え電流値が増加するが、メッキの場合は銅表面の細孔がふさがることで表面積が減少し、電極反応が起こるサイトが減り電流値が減少するのではないかと考察しました。これらの結果から、私たちは、電流値や銅の形状が銅を介して析出するスズの形状に影響を与えていると結論づけました。

私たちは、新型コロナウイルスの流行のために学校に行くことができない時期があり、その間十分に実験をすることができませんでした。そこで、自宅でも実験をするために、python というプログラム言語を用いたシミュレーションを行い、別の角度から本実験を考察してみることにしました。二次元平面と三次元空間の2種類の場合におけるスズイオンの挙動を、モンテカルロ法を用いてシミュレートすると、

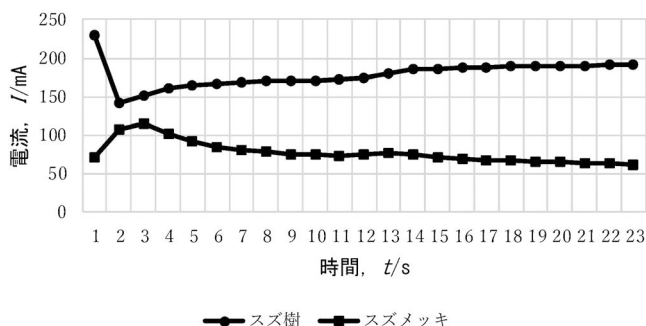


図2 スズ樹あるいはスズメッキとして析出した場合の電流値の経時変化。

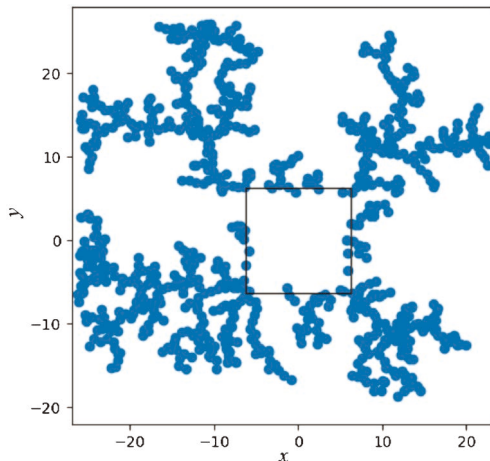


図3 二次元平面において、正方形の種板を中央に設置した場合のシミュレーション結果。(オンラインカラー)

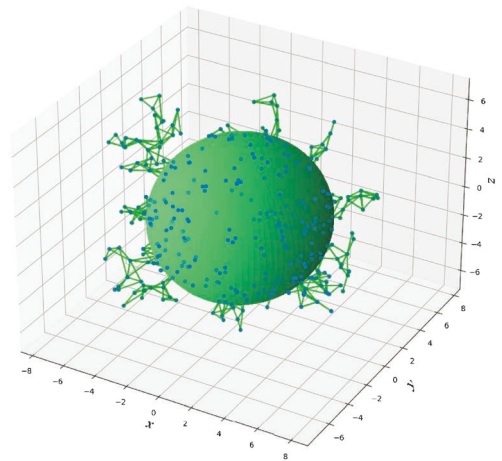


図4 三次元空間において、球の種板を中央に設置した場合のシミュレーション結果。(オンラインカラー)

図3や図4のようなシミュレーション結果を得ました。私たちは、スズイオンに見立てた粒子の挙動に関して、重力やクーロン力、水の流動性等は考慮せず、ランダムウォークしか設定していなかったのにも関わらず、図のような樹に似た形状を確認することができました。この結果から私たちは、スズイオンの挙動はランダムウォークに近いものであり、ブラウン運動などのランダムウォークが樹状に析出する原因ではないかと考察しました。三次元空間におけるシミュレーションにおいても、重力やクーロン力を考慮せずとも実際のスズ樹に近い形状を得られたことから、ランダムウォークが二次元だけでなく三次元においてもスズ樹の特徴的な形状を構成する要因であると考えられます。

新型コロナウイルスの流行のために、私たちは研究発表の機会をあまり得ることができず、今回が初めての発表となりました。そのため、説明にも慣れておらず、聴者にうまく伝えられるかが不安でした。また、発表資料の作成に手間取っ

てしまったり、発表練習で何度か失敗をしてしまったりして、初めての経験に四苦八苦しました。しかし、今回の発表を通じて、私たちの実験の内容や熱意を自分なりに伝えることができ安心しています。また、質疑応答の中で先生方から多くの助言を頂くことができたので、これからの研究にぜひとも活かしていこうと思っています。不慣れゆえに失敗することも数多くありましたが、私たちは今回の発表を経て、研究の楽しさを再確認するとともに、研究の動機や目的等について深く考える良い機会を得ることができました。また、これまでの経緯を振り返ったことで、これからの研究方針や目標についても改めて設定することができました。しかし、発見した課題も多くあり、これからの研究でそれらを解決していきたいと思っています。

(2021年12月6日受理)[doi:10.2320/materia.61.292]

(連絡先：〒100-0014 東京都千代田区永田町 2-16-1)



# スポットライト

～第6回「高校生・高専学生ポスター発表」優秀賞～

## 電気分解による平面的スズ樹の作製Ⅱ

東京都立小石川中等教育学校 5年

松本凜太郎 横井風羽

本校の先輩の平面的スズ樹の研究の実験<sup>(1)</sup>を見て、私たちはスズ樹の性質に大変興味を持った。その研究では、スズよりもイオン化傾向が大きい金属をスズイオンが含まれる溶液に入れる方法や、負極に亜鉛を用いたダニエル電池をつくり、正極からスズ樹を析出させる方法によってスズ樹を作製していたが、私達は電気分解によってもスズ樹を作製できると考えて挑戦し、実際に作製に成功した(以後、電気分解型スズ樹と記す)。電気分解による析出では電流や電圧を制御して実験できる利点があり、調べる価値が大いにあると感じ、研究を始めた。

研究は、スズ樹の形状、太さ、成長速度などを自由に制御することを目標とした。そのために、溶液の濃度、電圧、電流といった条件を変えて実験した。

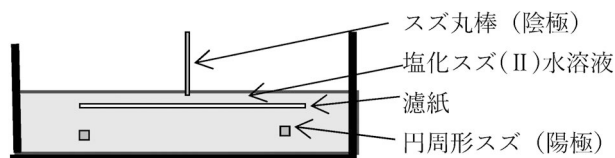
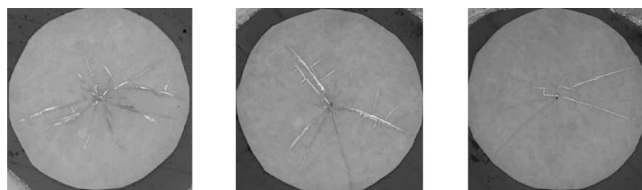


図1 電気分解型平面的スズ樹の実験装置。

図1に示すように、容器(直径190 mm、高さ30 mm)にろ紙(直径55 mm)をのせ、その上に円周形スズ板(陽極)(外径95 mm、肉厚8 mm)と丸棒形のスズ(陰極)(直径1 mm、長さ20 mm)をのせ、容器に塩化スズ(Ⅱ)水溶液( $0.20 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ , 40.0 mL)と濃塩酸( $12 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ , 1.0 mL)を入れ、陽極と陰極を直流電源と接続した。0.70 Vの電圧を印加すると中心の陰極から、周囲の陽極に向かってスズ樹が放射状に成長した。イオン化傾向型の析出では約1時間で直径55 mmにスズ樹が成長した<sup>(1)</sup>が、電気分解型で0.7 Vの電圧を印加した場合は、160 sで直径55 mmにスズ樹が到達した。この時点で電源を切り、到達時間をスズ樹の成長時間とした。また、デジタルマルチメーターを用いて電流を連続的に記録して考察に用いた。

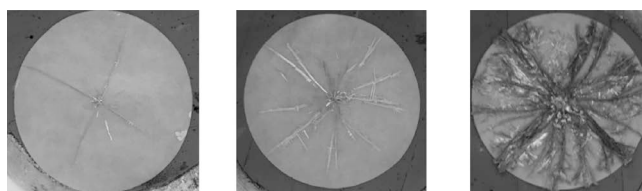
図2に示すように、塩化スズ(Ⅱ)水溶液の濃度が $0.20 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ より $1.0 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ の方が、スズ樹は細く析出し、直径55 mmに到達する時間が短かった。濃度が高いほど析出・成長方位が限定される傾向があった。



① 0.20 mol/L 55 mm 到達時間: 160 s  
② 0.30 mol/L 55 mm 到達時間: 117 s  
③ 0.50 mol/L 55 mm 到達時間: 41 s

図2 スズ樹の析出形態の塩化スズ(Ⅱ)濃度依存性。(電圧制御, 電圧: 0.70 V)

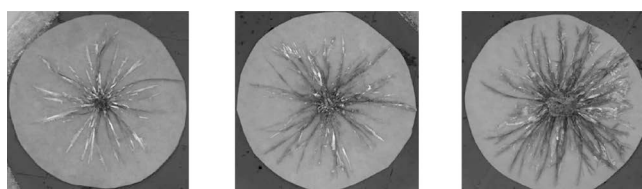
図3に示すように、電圧は0.50 Vより5.00 Vがスズ樹の枝幅は太くなったが、成長速度はあまり変わらなかった。



①0.50 V 55 mm 到達時間: 166 s 平均電流: 0.0266 A  
②1.00 V 55 mm 到達時間: 141 s 平均電流: 0.0589 A  
③5.00 V 55 mm 到達時間: 102 s 平均電流: 0.522 A

図3 スズ樹の析出形態の印加電圧依存性。(塩化スズ(Ⅱ)水溶液の濃度:  $0.20 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ )

図4に示すように、定電流電源装置を用いて電流値の影響を比較すると、電流値が大きいほどスズ樹の枝幅が太く成長したが、成長速度は変わらなかった。電圧・電流を変えたときの結果は極めて似ているため、どちらも電流の変化に伴うスズの析出量の変化による影響だと考察した。



①0.10 A 55 mm 到達時間: 137 s 平均電圧: 1.52 V  
②0.20 A 55 mm 到達時間: 94 s 平均電圧: 2.39 V  
③0.30 A 55 mm 到達時間: 100 s 平均電圧: 3.96 V

図4 スズ樹の析出形態の電流依存性。(塩化スズ(Ⅱ)水溶液の濃度:  $0.20 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ )

スズ樹の成長の様子に与える濃度と電流の影響が異なっていることに注目して、デジタルマイクロスコープを用いて微細な結晶形態の違いを調べた。その結果、濃度が高くなると、スズ樹の進む向きと直角方向に伸びる枝結晶が少なくなることがわかった。(図5)



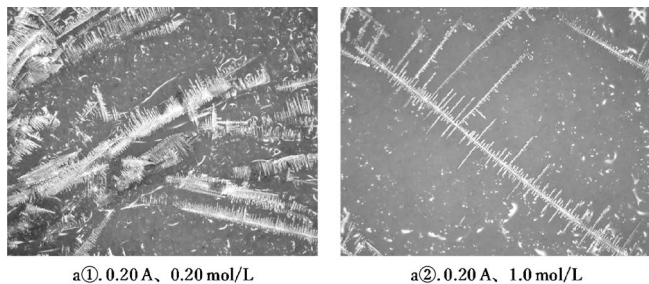


図5 スズ樹結晶の微細構造の濃度依存性.

電流を大きくすると、スズ樹の進む向きと直角方向に伸びるスズ樹が多くなることわかった。(図6)

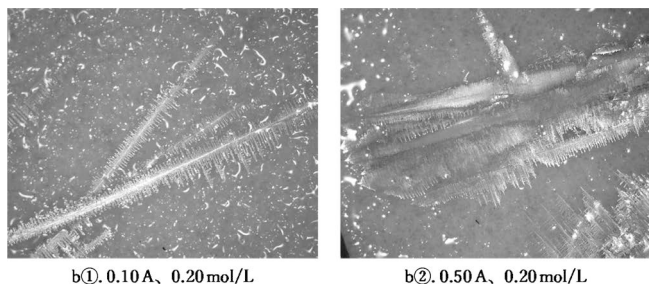


図6 スズ樹結晶の微細構造の電流依存性.

金属学会のポスター発表では、『オリジナリティは何か.』『スズ樹の微細な成長の様子を細かく観察した方が良い.』など、的確な講評やアドバイスをいただき、研究を進めるため大いに役立てることができたことを感謝しております.

同時に、伝える技術の難しさやプレゼンの準備や練習が不十分であったことを感じたため、この経験を今後の研究発表に活かしていきたいと思っています.

## 文 献

- (1) 萩原千尋, 口石美咲, 興石真結子: 平面的に成長するスズ樹の研究Ⅱ, 2019年度日本学生科学賞東京都最優秀賞作品. (2021年12月27日受理)[doi:10.2320/materia.61.294] (連絡先: 〒113-0021 東京都文京区駒込 2-29-29)

# スポットライト

～第6回「高校生・高専学生ポスター発表」優秀賞～

## タンタルコンデンサの熱分解による タンタル焼結体の回収

東京都立科学技術高等学校

清水梨穂

私はタンタルコンデンサ(Tantalum Capacitor, TC)からタンタル焼結体を回収することを試んでいます。TCとは希少金属であるタンタルを使ったコンデンサで現代の私たちの生活には必要不可欠なものとなっています。私たちが日常的に使っている高性能電子機器であるスマートフォンやタブレットに使われています。このタンタルコンデンサの素子原料であるタンタルの2020年における最大産出国はコンゴ民主共和国です<sup>(1)</sup>。コンゴ民主共和国では、2013年に終結したとされていますが、タンタルやズブなどを含む鉱物資源であるコルタン(Coltan, Columbite-Tantaliteの略称)を巡って民族間の紛争や人権侵害などが長らく続いてきました。このような背景からタンタルの需要は伸びるものの価格は安定せず、産出も不安定な要素を抱えているためリサイクルが望まれています<sup>(2)</sup>。この研究を始めたきっかけは高校入学後に指導教員である先生の研究テーマの説明を聞いたときに「やらなくてはならないテーマだ」と思ったからです。私もスマートフォンを使っていますが、内蔵されているタンタルが人権侵害を経て作られたものではないと断言はできなかったからです。しかし、TCのリサイクルでは大きな課題が2点あります。まず、TCは耐熱性が求められるため化学的・物理的に安定なABS樹脂がモールド樹脂として使われています。そのため非常に硬く、物理的な破壊が困難であること。次に臭素系難燃材が添加されているため、熱処理の際の温度条件によってはハロゲン化合物が発生し有毒であることです。私は過去の文献<sup>(3)</sup>や先輩の研究<sup>(4)</sup>を調べ、アルミニウムとマグネシウムの複合水酸化物であるハイドロタルサイト(HT)に注目しました。HTは塩基性であり、陰イオン吸着効果を持っており、医薬品に利用されているものです。近年では触媒としても注目されています。そのため、添加条件を変えながら、TCにHTを添加して電気炉を用いて、大気下、550°C(毎分5°Cの昇温)で熱分解を行いました。熱分解は一般的に600-800°Cで行われますが、添加物を加えているため触媒作用を期待して比較的低温で行うこととしました。質量比でTC:HT=2:1, TC:HT=4:1の条件でモールド樹脂を燃焼・分解することができました。熱分解後にTCを水に入れスターラーで攪拌し、完全に破壊できるかを確認しました(図1・図2参照)。

TCを熱分解で破壊し、タンタル焼結体を回収できた理由として、HTは層間に水を保持しています。モールド樹脂であるABS樹脂は水がある環境では劣化反応(加水分解)が起きやすいこと、生成するハロゲン(Br<sub>2</sub>)は酸であるため塩基であるHTと酸・塩基反応(中和反応)が起き、回収することができたことと考えています。しかし、HTの調製にはアルミニウムとマグネシウムの配合比、粒径の大きさなどさまざまなパラメーターが存在しています。今回は協力していた協和化学工業株式会社のKW-1000というHT(Mg/Al=4.5)を使用しましたが、TCの破壊に最適なHT

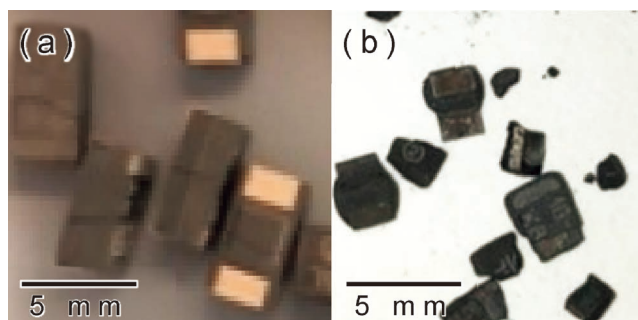


図1 条件TC:HT=2:1の実験結果。(a)熱分解直後のTC, (b)スターラーでの解体処理後のTC。(オンラインカラー)

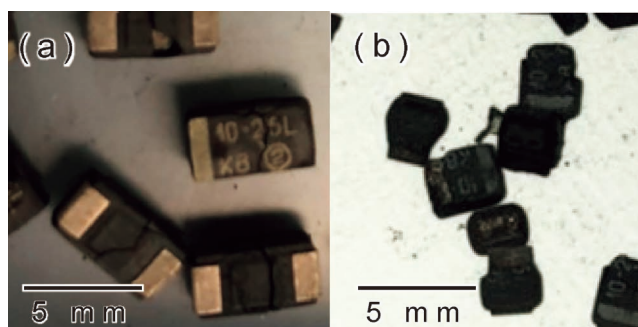


図2 条件TC:HT=4:1の実験結果。(a)熱分解直後のTC, (b)スターラーでの解体処理後のTC。(オンラインカラー)

が存在していると考えています。また、HTは450°C程度でその構造の特徴である層構造が崩れるとされています。今回も熱分解後のHTをX線構造回折(XRD)で分析したところ層構造が崩壊していることが考察できました。しかし、HTによってTCを容易に破壊することができました。これらの要因とともにさらに熱分解温度、HTの構成比による違いなどの検証を進めていきたいと考えています。新型コロナウイルスの影響で入学後、休校期間や放課後の部活動に制限もありました。思うように研究が進められないこともありましたが、先生方の協力で始業前に実験の準備を行い、授業時間中に熱分解をし、下校時刻までに翌日の準備を行うというようなスケジュールで実験を行うことができました。今回の発表はオンラインでしたが、ぜひ対面で行いたいと希望しています。私は対面での発表を経験していません。指導教員の先生は「オンラインでわかったことがある」と言っています。それは「対面で行うと余白があるんだ」と。私もぜひ、その余白というものを体験してみたいと考えています。今後も継続して金属学会で発表させていただけたらと考えています。その後の進捗についても随時、報告していきたいと考えています。

## 文 献

- (1) Tantalum in Mineral Commodity Summaries 2022, U.S. Geological Survey, Reston, Virginia, (2022), 166-167.
- (2) D. I. Bleiwas, J. F. Papp and T. R. Yager: Shift in Global Tantalum Mine Production, U. S. Geological Survey, Reston, Virginia, (2015), 2015-3079.
- (3) T. Kameda, M. Nakamura and T. Yoshioka: J. Environmental Science and Health, **47**(2012), 1146-1151.
- (4) K. Hanazawa, M. Toritsuka and N. Morita: Int. J. Chem. Eng. App., **12**(2021), 7-11.

(2021年12月13日受理)[doi:10.2320/materia.61.296]

(連絡先: 〒136-0072 東京都江東区大島1-2-31)

# 本 会 記 事

|        |                        |          |     |
|--------|------------------------|----------|-----|
| 会 告    | 2022年秋期講演大会講演募集および参加募集 | 297      |     |
|        | 会誌・欧文誌編集委員会からのお知らせ     | 312      |     |
|        | 欧文誌編集委員会からのお知らせ        | 312      |     |
|        | 国際会議提案募集               | 312      |     |
|        | 2022年春期講演大会記録          | 314      |     |
| 掲示板    | 313                    | まてりあ次号予告 | 316 |
| 新入会員   | 315                    | 行事カレンダー  | 317 |
| 会誌・欧文誌 | 5号目次                   | 316      |     |

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

## 会 告 (ホームページもご参照下さい)

## 日本金属学会のパンフレットを作成しました！

金属学会の概要や活動、会員特典等を紹介し、金属学会を知ってもらって、入会してもらうことを目的として金属学会のパンフレットを新たに作成しました(本号巻末をご覧ください)。お近くの方にご紹介いただいて、入会を勧めていただけると幸いです。パンフレットには紙版(巻末に添付しているもの)とpdf版があります。必要でしたら事務局までお申し出下さい。

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

## 2022年秋期(第171回)講演大会講演募集

©2022年秋期講演大会を下記の通り開催しますので講演を募集いたします。

募集講演：一般講演，公募シンポジウム，共同セッション，ポスターセッション

開催会期：2022年9月20日(火)～9月23日(金・祝)

開催場所：福岡工業大学(〒811-0295 福岡県福岡市東区和白東 3-30-1)

(新型コロナウイルス感染症の状況によってはオンライン開催に変更になる場合もあります。)

募集講演：高校生・高専生(3年生以下)ポスターセッション

開催会期：2022年9月28日(水)

開催方法：オンライン(Zoom 利用)

### 講演を申込される前に下記をご確認下さい

- 非会員でも大会参加費と登壇費を前納すれば、講演申込ができます(詳細は「講演申込要領」の「講演資格」参照。)
- 講演申込は同時に大会参加の事前予約が必要です。期日までに参加費を納入下さい。期日までに参加費を納入しない場合は講演を認めず、欠講として取り扱います。
- 講演申込と講演概要提出は同時に行うこと。(同時に行わない場合は、講演申込は受理されません)
- 原則、講演申込者＝講演発表者であること。(「講演申込要領」5.を参照)
- 会員資格での申し込みには会員番号とパスワードが必要です。パスワードを紛失または忘れた方は、本会ホームページより再発行を行って下さい。セキュリティ上、電話やメールでの発行は出来ません。

- ① 最新の概要原稿フォーマットを利用し、PDFに変換後、アップロードをして下さい。
- ② お一人2件の講演を申込みできるようになりました。ただしポスターセッションの2件申込は不可。
- ③ 同一研究室の3件以上の連続講演は認められておりません。
- ④ 事前参加申込者(講演者含む)へは参加申込み締切後に、講演概要ダウンロードIDとパスワードを配信いたします。
- ⑤ 「参加証」は郵送いたしません。各自「大会マイページ」から印刷して下さい。

## 講演申込先及び申込期限

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 講演申込ウェブサイト url  |                         |
| https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn/                                |                         |
| 講演申込みおよび概要原稿提出期限(締切厳守!)   |                         |
| 講演種別  | 講演申込期間                  |
| 一般, 公募シンポジウム, ポスター, 共同セッション   | 5月25日(水)13時~7月8日(金)17時  |
| 高校生・高専生ポスター   | 5月25日(水)13時~7月15日(金)17時 |
| 講演についての問合せ先: 講演大会係 <a href="mailto:annualm@jim.or.jp">annualm@jim.or.jp</a> |                         |

### これから入会して講演申込をされる方へ

- 下記の入会申込期限までに入会申込を行い, 年会費を納入下さい。
- 年会費納入期限までに会費の払込がない場合は, プログラムに掲載されていても, 講演不許可の措置をとります。
- 下記の入会申込みサイトから入会を申込み下さい。入会申込後に ID(会員番号) と パスワード が即日メール返信されます。

|            |  |
|------------|--|
| 入会申込 URL   | https://www.jim.or.jp/member/mypage/application.php            |
| 入会申込期限     | 7月6日(水)  |
| 年会費納入期限    | 7月31日(日)   |
| 入会・会費の問合せ先 | 会員サービス係 <a href="mailto:member@jim.or.jp">member@jim.or.jp</a> |

### オンライン開催となった場合の注意

- オンライン開催の場合, 通常とは異なる発表形式となります。
- 下記注意事項をご確認頂き, 十分ご注意ください講演のお申込みをお願いいたします。

#### オンライン開催に伴うリスクについての注意

講演大会での発表には, 現地開催とオンライン開催とにかかわらず, 以下のようなリスクがあります。ところが, オンライン開催では, 密室から参加することが可能で講演会場のような衆人監視が行われないこと及び講演が Web 上で配信されることから, これらのリスクが高まる懸念されます。本会では, リスクの高まりに対処するために, 考えうる対策を取りますが, 最後は参加者のモラルに訴えざるを得ません。これらを理解の上, 十分に注意して講演の申し込み及び発表をして頂きますようお願いいたします。

<発表に伴うリスク>

- 研究情報を不正に取得される  
不正聴講, 講演の録画・録音・撮影(スクリーンショットを含む)が行われてしまう  
※パスワード発行によって参加者を限定するとともに, 録画・録音・撮影等の禁止を周知徹底しますが, 最終的には参加者にモラルを守っていただくこととなります。  
※本大会で使用するオンライン会議ツールでは録画機能は使えません。
- 著作権を侵害してしまう  
他人が著作権を持つ音声, 映像, 画像, 写真の安易な使用(引用)により, 著作権を侵害してしまう  
※文献などはこれまでの講演大会と同様, 適切な引用がされていれば問題ありません。

## 講演申込要領

※一般講演およびポスターセッションの申込は, 講演セッションキーワード一覧から, 第1希望および第2希望のセッションキーワードを選択する。キーワードおよび内容を参考に講演するセッションを確定します。

※申込方法について: 申込はすべて WEB 申込とする。

※講演時間・概要サイズについて: すべての概要原稿のサイズは A4 版縦 1 ページ。

| 講演種別      | 概要サイズ                        | 申込方法   | 発表件数                         | 講演資格   | 講演時間    | 討論時間   |
|-----------|------------------------------|--------|------------------------------|--|---------|--------|
| 公募シンポジウム  | A4 版 1 頁<br>(必ずテンプレートを使用のこと) | WEB のみ | 最大 2 件。<br>ポスター発表<br>2 件は不可※ | <ul style="list-style-type: none"> <li>個人会員</li> <li>非会員は登壇費が必要</li> </ul> | 10分~20分 | 5分~10分 |
| 一般        |                              |        |                              |  | 10分     | 5分     |
| ポスターセッション |                              |        |                              |  | ...     | ...    |
| 共同セッション   |                              |        |                              |  | 15分     | 5分     |

- ※ **発表件数**: 1人2件応募可。ただし, ポスターセッションでの2件申込は不可とする。  
受賞講演, 基調講演, 招待講演等の特殊講演は上記の適用外とする。

## 1. 発表内容

- (1) 内容：未発表のもので、講演としてまとめたものに限る。
- (2) 言語：日本語もしくは英語。

## 2. 講演資格

講演者は、年会費および参加費納入済の本会個人会員(登壇費不要)、非会員および個人会員ではない維持員会社社員は下記大会参加費と登壇費の前納を条件とし、講演申込ができる。ただし、個人会員で期日までに年会費の支払いのない場合は、申込の講演を不許可とする。

### 会員の申込方法：

| 会 員 資 格  | 事前参加申込<br>(5月25日～9月2日) | 後期(当日)申込<br>(9月8日～9月28日) |
|--|------------------------|--------------------------|
| 正員・維持員会社社員、シンポジウム共催・協賛の学協会会員・鉄鋼協会会員<br>(本会非会員) | 10,000円                | 13,000円                  |
| 2022年3月1日時点で65歳以上の個人会員*                        | 無 料                    | 無 料                      |
| 学生員**  | 6,000円                 | 7,000円                   |

・お支払後の取消は、準備の都合上ご返金いたしかねますのでご了承下さい。

\* **65歳以上の個人会員**：会員情報に生年月日のご登録がない場合は、課金されますのでご注意ください。会員情報に生年月日をご登録されていない方は、大会参加申込みの前に [annualm@jim.or.jp](mailto:annualm@jim.or.jp) まで会員番号・お名前・ご連絡先・生年月日をお知らせ下さい。

\*\* **学生員**：卒業予定変更等により会員種別に相違がある場合、事前に**会員種別の変更手続き**を行ってから、大会参加をお申込下さい。会員情報に登録された卒業年次を超えると、自動で正員となっています。

### 非会員の申込方法：

「講演申込」の各講演メニューにある「新規登録」の「非会員の方はこちらからお申込み下さい」から講演申込ができます。

|                      |     | 年 会 費 | 大会参加費      | 1 講演登壇費 | 合 計     |
|----------------------|-----|-------|------------|---------|---------|
| 非会員                  | 一 般 | —     | 前納 24,000円 | 10,000円 | 34,000円 |
|                      | 学 生 | —     | 前納 14,000円 | 5,000円  | 19,000円 |
| 非会員(個人会員ではない維持員会社社員) | 一 般 | —     | 前納 10,000円 | 10,000円 | 20,000円 |

※非会員(個人)の参加申込者には、1年間の会員資格を付与します。ただし特典は重複して付与いたしません。

## 3. 講演者変更および講演取消しについて

- (1) 申込後の安易な講演者変更や取り消しは認めない。
- (2) やむを得ない理由により講演者を変更する場合は、事前に事務局に連絡する。当日、変更が生じる場合は、座長の了解を得ること。ただし、変更可能な講演者は概要著者(共同研究者で且つ会員)であること。

## 4. 連続講演の希望について(下記条件全てを満たす申込のみ配慮する。)

- (1) 同一のセッション名で申込みすること。
- (2) 申込備考欄に連続希望する講演の順番、発表者名、タイトル、(可能なら受理番号)を記入する。
- (3) 申込締切前の希望であること。(備考欄に記入しているあること。)
- (4) 原則、同一研究室内で3件以上の連続講演は認めない。

## 5. 講演日の希望

申込時に備考欄に記入のこと。ただし、セッションの日程上、希望に添えないこともある。申込締切後の希望は受付けない。

## 6. 講演発表の際の注意事項

- (1) 講演時間はご自身で管理し、厳守する。
- (2) 発表者マニュアルに沿って講演を行うこと。

## 7. プログラム：プログラムは8月3日頃ホームページに掲載予定

### ポスターセッションについて

1. 発表方法：8月にホームページに掲載する最新の「ポスター発表資料作成要領」を参照のこと。
2. 優秀ポスター賞：エントリー制です。発表を審査員が審査採点して優秀ポスターを選出し、「優秀ポスター賞」を贈呈する。

### エントリーの要件

- ①発表時点で、30歳以下の学生および30歳以下の若手研究者。
- ②過去にこの賞を授賞していない者。

3. 代理発表について：発表者が病欠等でやむを得ない場合、申し出があれば代理発表は可能。その旨を事前に事務局へ連絡する。ただし、優秀ポスター賞の授賞対象から外れる。

## 鉄鋼協会との共同セッションについて

本会と日本鉄鋼協会とは下記の共同セッションを実施する。プログラムは両会のプログラムに掲載します。

- ① 「チタン・チタン合金」(2022年秋の会場は鉄鋼協会会場)
- ② 「超微細粒組織制御の基礎」( “ 金属学会会場)
- ③ 「マルテンサイト・ベイナイト変態の材料科学と応用」( “ 金属学会会場)

## 講演概要原稿作成・投稿方法

テンプレート(WORD)を用いて作成した講演の題目・著者・本文の完成版をPDFに変換して、アップロードして下さい。(概要作成には、大会受付システムトップページ(WEB画面)のテンプレートの最新版をダウンロードして使用下さい。)

講演申込と講演概要原稿提出は同時に行って提出下さい。(※同時に行わない場合は、講演申込として受理されません)

使用言語：日本語または英語。

原稿サイズ：A4 判縦1頁(必ず最新のテンプレートを使用して作成のこと)

原稿提出要領：

- (1) 原稿をPDFへ変換する際は、フォント埋め込み作業を必ず行うこと。
- (2) 発表者氏名の前に必ず○印を付けること(WEB申込画面上で講演者をチェックして下さい)。
- (3) アップロードの際には、文字、図表等の品質を確認したうえでアップロードすること。

提出原稿の修正：原則として提出期限後の原稿の修正・差替えは認めない。

講演概要の公開日：2022年9月6日(火)

特許関係の手続きは、公開日までにお済ませ下さい。

【留意点】本留意点は、作成の際は削除下さい。Please delete unnecessary words from template.

日本語の方は見出しの英訳(Introductionなど)を削除して下さい。If you would write in English, please remove heading Japanese words like “緒言、実験方法、結果”。

- タイトル、著者名はWeb入力の登録データと同一のものを入力して下さい。
- タイトル、著者名、所属は可能な限り日本語・英語併記が望ましいです。
- キャプションは日本語・英語どちらかで結構です。
- ポイントサイズは自由ですが、タイトル、著者、所属、本文、図面をA4縦サイズ1枚に収めて下さい。
- 本文フォントは明朝とTimes Romanを推奨します。
- 図面のカラー作成可能です。
- 最終的にはPDFファイルに変換しアップロードして下さい。
- アップロードされたまま公開されますので、PDF作成の際はご注意ください。
- ファイルをPDF形式へ変換する際は、フォントの埋め込み作業を必ず行って下さい。

サンプル：概要原稿テンプレートで作成できます

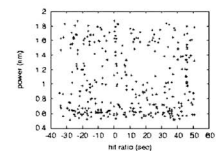
### 日本金属学会講演題目

Title of Abstract of The Japan Institute of Metals and Materials  
勤務先所属略称<sup>1</sup>、勤務先所属略称<sup>2</sup> ○発表者氏名(M2)<sup>1</sup>、共同研究者氏名<sup>2</sup>、…  
Kinzoku Univ.<sup>1</sup>, Inst. of Kinzoku<sup>2</sup>, Speaker (M2)<sup>1</sup>, co-author<sup>2</sup>, …

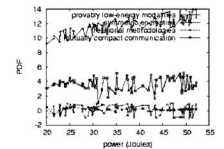
※学生表記区分(記載例：姓名(M2)<sup>1</sup>)

学部生：B、修士課程：M、博士課程：D、ポストドク：P

【緒言 Introduction】\*\*\*\*\*



【実験方法 Experimental】\*\*\*\*\*



【結果 Results】\*\*\*\*\*



## 講演大会概要の投稿要領

講演大会概要への投稿を公正かつ適切に行うため、下記の投稿要件に従って講演概要を作成願います。

### (投稿要件)

- (1) 未発表でかつオリジナリティがあること。
- (2) 金属とその関連材料の学術および科学技術の発展に寄与するものであること。
- (3) 軍事研究であると判断される内容を含んでいないこと。
- (4) 作成方法に基づいて作成された原稿であること。
- (5) 著作権をこの法人に帰属することに同意すること。
- (6) ミスコンダクトをしないことおよびミスコンダクトをした場合は、この法人の定めるところにより処分または措置を受けることに同意すること。
- (7) 宣伝や商用目的とする内容でないこと。

## 講演大会概要の査読

講演大会概要に投稿された全ての概要は、査読基準に基づき、その分野の専門家が査読する。査読者は次の項目を考慮し、採否を判定する。査読結果が「掲載不相当」に該当する場合は、理由を示して著者に返却する。

### (査読の基準)

- (1) 講演大会概要の投稿の要件に準拠していること。
- (2) 内容が正確で、記述に問題がないこと。
- (3) 軍事研究であると判断される内容を含んでいないこと。
- (4) 題目が妥当であること。
- (5) 研究不正行為及び不適切行為をしていないこと。
- (6) 誹謗中傷に類する内容を含まないこと。

## 会誌2022年秋期大会講演精選論文原稿募集 欧文誌 Selected Papers from JIM Autumn Meeting (2022)原稿募集

◎日本金属学会誌「2022年秋期大会講演精選論文」87巻4号および5号(2023年)掲載

Materials Transactions「Selected Papers from JIM Autumn Meeting(2022)」64巻4号および5号(2023年)掲載

◎原稿締切 2022年11月15日(火)

◎予備登録、投稿および審査方法は、一般投稿論文に準ずる(ホームページの会誌・欧文誌投稿の手引き・執筆要領参照)。

◎欧文誌掲載論文は投稿掲載費用を必ず負担する。(会誌掲載論文は投稿掲載費用無料)

☆すべての講演申込がインターネット申込となりますので、  
ご協力をお願い申し上げます。ご不明な点はお問合せ下さい。

連絡先：TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312

E-mail: [annualm@jim.or.jp](mailto:annualm@jim.or.jp)

(公社)日本金属学会 講演大会係

## 講演申込・概要原稿提出手順

入力された情報および登録された概要原稿は、プログラムにそのまま反映されますので、お間違えのないようにご登録下さい。

申込者は、講演者本人に限る。ID(会員番号)、パスワードを使用して、金属学会「大会受付システムトップページ(<https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn/>)から申込みする。なお、申込締切日の3日前から申込みが集中殺到し、回線が混雑するので、早目に申込み下さい。

秋期講演大会受付システムトップページ → ID 認証画面※1 → 講演申込 → 内容確認・修正 → 登録 → メール通知(申込受理通知)

※1: 本会会員のID(会員番号), パスワード

### 《講演内容の確認・修正》

概要提出期間内に WEB 画面の内容確認・修正で変更した場合は、講演大会概要に反映される。

秋期講演大会受付システムトップページ → 講演大会 MyPage → ID 認証画面※2 → 内容確認・修正 → 登録 → メール通知(修正受理通知)

※2: 申込受理通知に記載された、秋期講演大会用の参加登録番号, パスワード

|                            |  |
|----------------------------|--|
| 講演の分類                      |  |
| セッションキーワード<br>(一般, ポスターのみ) | セッション名はまてりあ第61巻第5号303頁の講演セッションキーワード一覧から <b>第1希望(必須)</b> および <b>第2希望(必須)</b> のセッションキーワードを選択する。<br>セッションキーワードへの申込数および内容を参考に最終的に組入れるセッションを確定する。                                       |
| シンポジウム講演                   | まてりあ第61巻第5号306頁のテーマ要旨を参照の上、応募するシンポジウム番号を選択する。  |
| キーワード                      | <ul style="list-style-type: none"> <li>• キーワードを1語以上入力する。(最大10語入力可.)</li> <li>• 特に対象とする材料, 物質, 合金名をキーワードの中を含める。</li> </ul>  |
| 申込研究者数<br>所属機関数            | 共同研究者人数: 最大15名まで, 所属機関数: 10施設まで  |
| 申込研究者一覧                    | インターネット申込は、「申込者」が「講演者」となるようにチェックする。<br>共同研究者は非会員でも可。   |
| ローマ字氏名                     | 名姓の順で、フルネームで記入する。  |
| 所属機関略称                     | <u>慣用の略称で記入</u> する。研究場所と現勤務先が異なる場合は両方記入する。<br>[例: 東北大工(現日立中研)]<br><ul style="list-style-type: none"> <li>• 大学院生と学生の区別: それぞれ(院生), (学生)と所属の後に表示する。</li> </ul> [例: 東北大工(学生) 東北大工(院生)] |
| 講演題目                       | 和文題目は150バイト(全角75文字)まで, 外国人講演の英文題目は200バイトまで。<br>大概要原稿の題目と同一のもの。   |
| 要旨                         | プログラム編成の参考となる内容を記入する。<br>要旨欄に入力できるのは100文字(全角)まで。   |
| 概要原稿                       | <b>全講演 A4 版 1 頁。WORD(テンプレートあり)で作成し, PDF に変換する。</b> アップロードする概要原稿の内容と申込欄に入力した題目・著者名が同じになるようにすること。ファイルを PDF 形式へ変換する際は、フォント埋め込み作業を必ず行う。<br>内容変更の場合は概要原稿の修正版を <u>期日内に</u> 再提出する。        |
| その他・備考欄                    | <ul style="list-style-type: none"> <li>• 連続講演を希望する場合(条件有り)は、連続を希望する講演の順番, 発表者名, タイトル, (可能なら受理番号)を記入し, 同一のセッションキーワード名で申込みをする。申込締切後の希望は受け付けない。</li> <li>• その他の連絡事項など。</li> </ul>     |
| 会員番号                       | 講演者は必ず会員番号(ID)を記入する。<br>共著者はわかる範囲で可。   |
| 著作権                        | 同意できない場合は申込出来ない。   |
| プログラム公開                    | 同意できない場合は申込出来ない。   |
| 講演概要の WEB 公開               | 講演概要の WEB 公開に同意できない場合は、申込出来ない。<br>公開は開催日 2 週間前に参加申込者のみに公開。   |

講演大会セッション（委員専門分野）

| 新分野  | 大分類         | 中分類         | No      | セッションキーワード   | キーワード   |
|------|-------------|-------------|---------|--|---|
| 1分野  | 1.材料と社会     | 材料と社会       | 1.1     | 教育   | 専門教育、共通教育、企業での教育、生涯教育、小・中・高校生への教育、カリキュラム、授業の実際、教材・教育の評価、社会人教育   |
|      |             |             | 1.2     | 歴史・材料考古学   | 金属学・材料科学の歴史、金属技術の歴史・変遷、材料考古学、文化財保存  |
|      |             |             | 1.3     | 技術革新・技術伝承  | IoT、マテリアルインターフェース、マテリアルソフトウェアエンジニアリング、材料情報、知的所有権、その他の金属学・材料学に関連した新分野・境界分野   |
|      |             |             | 1.4     | 環境   | LCA、リスクマネージメント、資源経済、環境・資源政策、材料の環境信頼性評価、製造物責任、環境低負荷材料、易リサイクル材料・設計、易解体設計、マテリアルセレクト、省材料設計、高寿命材料・設計、材料のリサイクルシステム、材料資源環境システム、再資源化用途開発、土壌浄化、環境修復                                      |
|      |             |             | 1.5     | ダイバーシティ  | 男女共同参画、LGBTI、国際化、学際協力、世代間・業種間融合   |
|      |             |             | 1.6     | 新領域・その他  |   |
|      | 12.先進機能材料   | 先進機能材料      | 12.1    | 萌芽材料   |   |
|      |             | 12.2        | 新領域・その他 |  |   |
| 2分野  | 2.物性        | 物性          | 2.1     | 磁気機能・磁気物性  | 磁気的性質、磁気光学的性質、電子状態、熱磁気効果（スピンゼーベック効果、異常ネルスト効果、磁気熱量効果、磁気ハイパーサーミア等）、核物性等   |
|      |             |             | 2.2     | 半導体機能・電気物性   | 誘電的性質、光学的性質、電子輸送、薄膜・表面・界面物性、熱的性質（ゼーベック効果、ヘルチエ効果等）、原子輸送、金属絶縁体転移等   |
|      |             |             | 2.3     | 構造物性   | 結晶成長、結晶構造、準結晶構造、非晶質固体構造、格子ダイナミクスと安定性、相転移（変態）、不整合・整合構造、格子欠陥、粒界等  |
|      |             |             | 2.4     | 物性評価   | 照射効果、ナノスケール量子効果、トンネル効果、メスパウアー効果、核磁気共鳴、分光・発光・回折一般等   |
|      |             |             | 2.5     | 新領域・その他  |   |
|      | 9.電気・磁気関連材料 | 電気・電子・光関連材料 | 9.1     | 伝導・実装材料  | 電気伝導材料、電極材料、電子実装材料、配線材料、マイクロ接合材料、フラーレン、カーボンナノチューブ、熱伝導材料等  |
|      |             |             | 9.2     | 半導体・誘電体材料  | 半導体材料、誘電体材料、圧電体材料、センサー材料、太陽電池、High-k材料、低次元物質、ナノ粒子・（超）微粒子、原子クラスター等   |
|      |             |             | 9.3     | 光・電磁波関連材料  | 光学結晶材料、光記録材料、液晶材料、光ファイバー材料、光学ガラス材料、テラヘルツ等   |
|      |             |             | 9.4     | 強相関電子系材料   | 超伝導材料、トポロジカル絶縁体、強相関電子系材料、マルチフェロイック材料等   |
|      |             | 磁性材料        | 9.5     | ソフト・ハード磁性材料  | ソフト磁性材料（高透磁率材料（合金系、フェライト系、アモルファス、ナノ結晶等）、永久磁石材料（希土類系、合金系、フェライト系等）、電波吸収体・ノイズ抑制体材料等  |
|      |             |             | 9.6     | スピントロニクス・ナノ磁性材料  | 磁気抵抗効果（AMR、GMR、TMR等）材料、スピンメモリー・センサー材料、スピンカロリトロニクス材料、スピン注入技術、スピン流制御技術、スピン（軌道）トルク制御技術、磁気記録・磁気デバイス用材料、磁性（超）薄膜・多層膜・磁性金属人工格子、磁気スキームオン等   |
|      |             | 9.7         | 磁気機能材料  | 磁歪材料、磁気冷凍材料、フラストレーション材料、反強磁性材料、相転移誘起材料（磁場誘起相変態等）等  |   |
|      |             | 9.8         | 新領域・その他 |  |   |
| 3分野  | 3.組織        | 相安定性・相変態    | 3.1     | 熱力学・状態図・相平衡  | 熱力学、状態図、相平衡、準安定、非平衡、相転移、金属間化合物、規則-不規則転移、磁気転移等   |
|      |             |             | 3.2     | 拡散・相変態   | 拡散、偏析、析出、拡散変態、規則-不規則変態、不連続析出、粒界・相界面上析出等   |
|      |             |             | 3.3     | マルテンサイト変態・変位型相変態   | マルテンサイト変態、変位型相変態（ベイナイト変態含む）、形状記憶・超弾性材料、磁性形状記憶合金、TWIP・TRIP、エージング・テンパリング、双晶変形、熱・応力・磁場・電場誘起相変態、組織制御、組織形成と機械的性質、プロセス（粉末冶金・複合材料含む）、SMAアクチュエータ・応用、マルテンサイト変態に関わる材料機能（タンピング、磁気・弾性熱量効果等） |
|      |             |             | 3.4     | 合金・アモルファス・準結晶  | アモルファス、金属ガラス、準結晶、高エントロピー材料等   |
|      |             | 組織制御        | 3.5     | 組織制御技術   | 時効・析出、熱処理、加工、加工熱処理、合金元素添加、急冷凝固、メカニカルアロイング、界面接合強さ、複合化、多層化、薄膜、積層造形、ミクロ構造、コーティング、シミュレーション等   |
|      |             |             | 3.6     | 再結晶・粒成長・集合組織   | 回復・再結晶、集合組織、粒成長、粒界、異相界面、双晶等   |
|      |             |             | 3.7     | 組織観察・分析  | 電子顕微鏡、STM、AFM、FIM、3次元アトムプローブ、X線・中性子線回折、EPMA、XPS、イメージング・マッピング技術、放射光等   |
|      |             | 分析・解析・評価    | 3.8     | 計算材料科学・材料設計  | 理論、シミュレーション等  |
|      |             |             | 3.9     | 新領域・その他  |   |
|      | 11.計算科学     | 構造・組織・特性・物性 | 11.1    | 計算材料科学・材料設計  | 計算材料科学・材料設計、第1原理電子論計算、分子シミュレーション、分子動力学法、モンテカルロ法、CALPHAD法、フェーズフィールド法、有限要素法、境界要素法、セルラーオートマトン、マルチスケール解析、マルチフィジックス解析等   |
| 11.2 |             |             | データ科学   | マテリアルズインフォマティクス、マテリアルズインテグレーション、機械学習、深層学習、強化学習、転移学習、逆問題、データ同化、ニューラルネット、最適化、データベース、ビッグデータ、人工知能等 |   |
|      |             |             | 11.3    | 新領域・その他  |   |

| 新分野 | 大分類      | 中分類                 | No      | セッションキーワード          | キーワード   |
|-----|----------|---------------------|---------|---------------------|---|
| 4分野 | 4.力学特性   | 力学特性の基礎             | 4.1     | 強度・力学特性             | 力学（格子欠陥、弾性、塑性、破壊力学、有限要素法、分子動力学、マイクロメカニクス等）、転位の基本的特性（運動、増殖、相互作用等）、転位と各種格子欠陥の相互作用、変形（弾性、擬弾性、塑性、粘性、粒界、粒界、変形双晶等）、各種強化機構、破壊機構（き裂やポイド発生・成長・合体等）   |
|     |          |                     | 4.2     | 塑性・疲労・破壊            | 延性、韌性、静的および動的破壊、破壊靱性値、疲労、応力腐食割れ、水素脆性、遅れ破壊、寿命  |
|     |          |                     | 4.3     | 高温変形・クリープ・超塑性       | 高温変形、クリープ、クリープ疲労、超塑性  |
|     |          |                     | 4.4     | 力学特性評価              | 力学特性の評価法、力学的挙動の予測（応力-ひずみ曲線、クリープ曲線等の予測、寿命予測等）、合金設計、複合材料（材料システム）設計、データベース   |
|     |          | 力学特性と組織             | 4.5     | 欠陥と組織               | 転位組織、転位セル、変形帯、強加工、双晶、ポイド、亀裂   |
|     |          |                     | 4.6     | 多結晶組織               | 粒成長、再結晶、双晶、偏析、粒界析出、粒界反応型析出  |
|     |          |                     | 4.7     | 金属間化合物              | 金属間化合物、規則相、高温変形   |
|     |          |                     | 4.8     | 超微細粒組織              | 微細粒、バルクナノメタル、強化機構   |
|     |          |                     | 4.9     | 新領域・その他             | プラストン、キンク変形、ディスクリネーション、ミルフィユ構造  |
| 5分野 | 5.材料化学   | 耐食性・耐酸化性            | 5.1     | 腐食・防食               | 水溶液腐食、電気化学測定、表面皮膜、腐食環境解析、孔食、すき間腐食、応力腐食割れ、大気腐食、高温高圧水腐食、水素脆化、異種金属接触腐食、エロージョン・コロージョン、腐食事例、耐食合金、耐食コーティング、腐食抑制・防錆剤、電気防食、等  |
|     |          |                     | 5.2     | 高温酸化・高温腐食           | 高温ガス腐食、溶融塩腐食、水蒸気酸化、エロージョン・コロージョン、超臨界環境等、耐熱材料、耐熱コーティング、超合金、金属間化合物、セラミクス材料、酸化物の特性   |
|     |          | 表面・界面・触媒            | 5.3     | 湿式表面処理・湿式めっき        | 電解・無電解めっき、アノード酸化、エッチング、化成処理、イオン液体、電気化学的な成膜、ぬれ性、摩擦・摩耗・潤滑等  |
|     |          |                     | 5.4     | 気相プロセス・薄膜・厚膜作製技術    | PVD、CVD、スパッタリング、プラズマプロセス、イオン注入・イオン打込み、イオンミキシング、コーティング、クラスター制御、表面処理、表面改質等、エッチング、アッシング、リソグラフィ、マイクロ・トライボロジー、マイクロ・マシニング、マイクロ・ボンディング、ケミカルメカニカルポリッシング（CMP）、溶射、肉盛り、拡散浸漬処理、ぬれ性、摩擦・摩耗・潤滑等              |
|     |          |                     | 5.5     | 表界面反応・分析            | 表面物性・反応、表面の構造と結晶学、吸着・脱離、表面の熱・統計力学、表面の電子状態およびエネルギー・計算科学、電気化学反応、表面・界面の作製技術、表面分析法（各種化学分析・機器分析、極微量分析、極小領域分析、状態分析、プローブ顕微鏡、顕微分光、環境やプロセスのその場分析、成分画像解析等、各種分析装置の開発、化学センサー、モニタリング法等）、コロイド材料             |
|     |          |                     | 5.6     | 触媒材料・触媒反応           | 触媒材料（貴金属・卑金属触媒、金属間化合物触媒、ナノ構造触媒、規則性多孔体、有機金属、光触媒等）、触媒反応（酸化、水素製造、C-H活性化、クロスカップリング、界面分子変換、排気ガス浄化等）、触媒技術と反応プロセス開発、触媒理論   |
|     |          |                     | 5.7     | 新領域・その他             |   |
| 6分野 | 6.材料プロセス | 環境・リサイクルプロセス        | 6.1     | 環境・リサイクル技術          | LCA、リスクマネジメント、資源経済、環境・資源政策、材料の環境信頼性評価、製造物責任、事故解析、材料安全など、環境低負荷材料、易リサイクル材料、易リサイクル設計、易解体設計、マテリアルセレクション、省材料設計、高寿命材料、高寿命設計など、分離プロセス、再資源化プロセス、材料のリサイクルシステム、材料資源循環システム、リサイクル化学、クローズドプロセス、再資源化用途開発など、 |
|     |          | 溶融・凝固プロセス<br>高温プロセス | 6.2     | 製・精錬の物理化学           | 資源・原料、各種および新製・精錬法、冶金熱力学、化学反応工学、移動速度論、高温プロセス解析、数値流体力学、高純度化、分離・回収・精製、環境・リサイクル等  |
|     |          |                     | 6.3     | 融体・高温物性             | 熱力学的諸量、融体物性、モデリング等  |
|     |          |                     | 6.4     | 凝固・結晶成長・ casting 技術 | 結晶成長、過冷却、非晶質、準結晶、輸送現象、高純化、鑄造、鋳物、ダイキャスト、単結晶製造技術、半溶融加工、溶射、反応性溶射、溶射素過程、等   |
|     |          | 固相プロセス<br>固相・溶接プロセス | 6.5     | 塑性変形・塑性加工技術         | 塑性加工、高ひずみ速度加工、強加工プロセス、極限環境プロセス等   |
|     |          |                     | 6.6     | 粉末・焼結・造形技術          | 粉末製造、超微粉、粉体成形・粉末冶金（焼結プロセスを含む）、メカニカルアロイング、焼結合成プロセス、粉末射出成形（金属射出成形、セラミック射出成形）、3次元造形（3Dプリンター）、コールドスプレー、スプレーフォーミング、エアロゾルデポジション、アトマイズ等  |
|     |          |                     | 6.7     | 接合・溶接・実装・接着・複合技術    | メカニカルプロセス、常温接合、拡散接合、超音波接合、摩擦圧接、摩擦攪拌接合、爆発圧接、電磁圧接、溶接、ろう付け、接着、精密接着、メッキ・プロセス、はんだ付け、実装、マイクロ接合、力学特性、信頼性等  |
|     |          | 材料評価、プロセス評価技術       | 6.8     | 材料評価技術              | 非破壊検査、非破壊定量評価、残留応力解析、センシング技術、信頼度評価等、各種プロセス・シミュレーション、テラヘルツ   |
|     |          | 6.9                 | 新領域・その他 |                     |   |

| 新分野 | 大分類          | 中分類         | No   | セッションキーワード                        | キーワード   |
|-----|--------------|-------------|------|-----------------------------------|---|
| 7分野 | 7.生体・医療・福祉   | 生体材料基礎・生体応答 | 7.1  | 細胞機能・組織再生                         | 細胞機能、細胞間相互作用、シグナル伝達、細胞・生体組織評価、細胞増殖・分化、組織修復 (Tissue Engineering)、DDS (Drug Delivery System)、ゲノム解析・編集、細胞適合性、細胞配向、代謝回転、恒常性、石灰化、各種臓器、骨・歯牙、血管、骨芽細胞、破骨細胞、OCY (オステオサイト)、骨系細胞、細胞外基質、がん、細胞小器官、RNA、DNA、遺伝子組み換え、細胞培養、骨形態計測法、染色法、足場材料、機能性タンパク質等 |
|     |              |             | 7.2  | 構造生体機能化                           | 機能発現、バイオメカニクス、計算科学、金属組織・組織制御、弾性・塑性変形機構、力学機能発現 (弾性率、強度、延性、疲労、破壊)、スキャフォールド、インプラント、双晶変形、生体組織、組織配向性、人工関節、人工歯根、熱処理、多孔化、機能・組織評価法、Co-Cr合金、ステンレス鋼、生体用セラミックス、リン酸カルシウム系材料、PEEK、整形外科用材料等   |
|     |              |             | 7.3  | 表界面生体機能化                          | 生体/材料界面、表面修飾、ナノ表面・界面、感染防御・制御、表界面機能、骨伝導・骨誘導、バイオセンサー、抗菌性、タンパク質吸着、コーティング、化学処理、表面分析・評価、PVD、CVD、コーティング材料等  |
|     |              | 生体材料設計開発・臨床 | 7.4  | 生体・医療・福祉材料                        | バイオマテリアルサイエンス、生体情報・計測、リハビリテーション医学、ユニバーサルデザイン、バリアフリー、生体機能代替、福祉用具・支援機器、ウェアラブル、IoT、AI、非磁性・低磁性、低弾性・高弾性、生体活性ガラス、生分解性材料、耐摩耗性材料、歯科用合金、生体用ハイエントロピー合金等   |
|     |              |             | 7.5  | 生体用Ti・Ti合金                        | Ti・Ti合金、低弾性率、形状記憶、超弾性、オッセオインテグレーション、集合組織、人工骨・関節、相変態・組織制御、機能評価法、電子顕微鏡、β型Ti合金、ユビキタス元素、計算機シミュレーション等  |
|     |              |             | 7.6  | Additive Manufacturing・テララメード医療材料 | 付加製造、3Dプリンタ、金属積層造形、金属粉末、異方性/等方性、形状/組織制御、力学特性、残留応力、生体モデリング、形状計測、格子構造、薬物送達システム、マイクロマシン、マスカスタマイゼーション、テララメード医療、遠隔地診療、レーザービーム、電子ビーム、順シミュレーション・逆問題解析、溶融池シミュレーション、リアルタイムモニタリング等  |
|     |              |             | 7.7  | 生体安全性・有効性評価                       | 医用画像・バイオイメージング、生体シミュレーション、レギュトリーサイエンス、生体情報・計測、医療技術倫理、細胞毒性、疾病、代謝異常、骨吸収、金属アレルギー、耐食性、疲労、疾病治療、医療機器、臨床研究、臨床応用、GLP等   |
|     |              |             | 7.8  | 新領域・その他                           |   |
| 8分野 | 8.構造材料       | 金属材料        | 8.1  | Fe・Fe合金                           | Fe・Fe合金の原理・原則、鉄鋼材料、ステンレス合金、相変態 (パーライト、ベイナイト、マルテンサイト、マツブ等)、組織制御、力学特性、計算材料科学  |
|     |              |             | 8.2  | Cu・Cu合金                           | Cu・Cu合金の原理・原則、配線材料、熱伝導材料、相変態、組織制御、力学特性、計算材料科学   |
|     |              |             | 8.3  | Ti・Ti合金                           | Ti・Ti合金の原理・原則、相変態、組織制御、強化機構、成型性、ゴムメタル、耐食性、表面処理、計算材料科学   |
|     |              | 軽金属材料       | 8.4  | Mg・Mg合金                           | Mg・Mg合金の原理・原則、相変態、長周期積層構造、組織制御、強化機構、キンク変形、ミルフィーユ構造、成型性、集合組織、耐食性、計算材料科学  |
|     |              |             | 8.5  | Al・Al合金                           | Al・Al合金の原理・原則、相変態、GPゾーン、クラスター、組織制御、強化機構、成型性、集合組織、耐食性、計算材料科学   |
|     |              | セラミックス材料    | 8.6  | セラミックス材料                          | セラミックス材料の原理・原則、相変態、構造転移、焼結、組織制御、機能材料、強化機構、破壊、成型性、耐熱性、計算材料科学   |
|     |              | 耐熱材料        | 8.7  | ジェットエンジン・ガスタービン耐熱材料               | 耐熱鋼、超合金、耐熱合金、高融点金属、金属間化合物、セラミックス、超高温材料、金属基複合材料、金属間化合物基複合材料、セラミックス基複合材料、プラスチック基複合材料、炭素繊維強化型複合材料、SiC繊維強化型複合材料、ジェットエンジン、ガスタービン、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース                    |
|     |              |             | 8.8  | 蒸気発電耐熱材料                          | 耐熱鋼、超合金、耐熱合金、蒸気タービン、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース  |
|     |              |             | 8.9  | 耐熱特性                              | 耐熱合金、耐熱セラミックス、超高温材料、耐熱複合材料、コーティング、組織制御、相安定性、状態図、拡散、粒界、クリープ、疲労、破壊、寿命予測、高温酸化・腐食、熱機関、燃焼、熱伝導、熱膨張、熱衝撃、熱遮蔽、鍛造、粉末冶金、積層造形、熱間プロセス、計算材料科学、データベース  |
|     |              | 機能性構造材料     | 8.10 | 機能性構造材料                           | アモルファス材料、金属ガラス材料、準結晶材料、制振材料、インテリジェント・スマートマテリアル、積層造形、計算材料科学  |
|     |              | 複合材料        | 8.11 | 複合材料                              | 複合材料、スポーツ用品材料、積層造形、接合、組織制御、トポロジー最適化、力学特性、熱特性、電磁気特性、計算材料科学   |
|     |              |             | 8.12 | ポーラス材料                            | ポーラス材料、積層造形、接合、組織制御、トポロジー最適化、力学特性、熱特性、電磁気特性、計算材料科学  |
|     |              |             | 8.13 | 新領域・その他                           |   |
| 9分野 | 10.エネルギー関連材料 | 原子力材料       | 10.1 | 原子力材料                             | 原子炉材料、核融合炉材料、ビーム関連材料、照射損傷、照射効果  |
|     |              | 熱電材料        | 10.2 | 熱電材料                              | 熱電変換、熱電素子、ゼーベック効果、ペルチェ効果、熱伝導、電気伝導、など  |
|     |              | 水素・電池関連材料   | 10.3 | 電池材料・イオン伝導材料                      | 電極材料、電解質材料、イオン伝導材料、電池設計、電池関連物性、など   |
|     |              |             | 10.4 | 水素化合物・水素貯蔵・水素透過・水素関連物性            | 金属水素化合物、錯体水素化合物、水素貯蔵、水素透過、水素脆化、水素利用、水素関連物性、機能・プロセス、金属-水素相互作用、同位体効果、など   |
|     |              | 新領域・その他     | 10.5 | 新領域・その他                           | センサー材料、熱伝導材料、など   |

# 2022年秋期講演大会公募シンポジウムテーマ要旨

秋期講演大会(福岡工業大学)におけるテーマ公募によるシンポジウム講演は、下記9テーマで実施することになりました。講演申込要領は前記のとおりです。多数の有益な講演と活発な討論を期待いたします。

## S1 ハイエントロピー合金の材料科学(VIII) Materials Science and Technology in High-Entropy Alloys (VIII)

近年、ハイエントロピー合金(HEA)が世界的な注目を集め、その研究が盛んに行われている。2004年にHEAの基礎概念が考案されて以降、関連する出版物の数は急増しており、各国で大型プロジェクトが立ち上がっている。我が国でも、新学術領域研究「ハイエントロピー合金」が継続中であり、この分野における最新知見の共有および情報発信は、日本金属学会の会員にとって有益と考える。本研究テーマにて2018年秋期講演大会以降、系統的にシンポジウムを開催しており、今回がその第6弾となる。本公募シンポジウムを開催してHEAの基礎・応用、実験・理論など幅広い研究トピックの講演を募り、研究者間の活発な議論の場を堅持するとともに、ウィズコロナ時代において難しい状況になる学術連携の再強化をはかりたい。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

東北大学金属材料研究所教授 古原 忠

E-mail: furuhara@imr.tohoku.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

京大 乾 晴行 京大 辻 伸泰 阪大 尾方成信

東北大 加藤秀実 名大 小山敏幸

## S2 計算科学および新規腐食解析に基づく腐食現象の解析・可視化と機械学習による腐食予測 Analysis, Visualization and Prediction of Corrosion Phenomena via Computational Science, Machine Learning and Novel Characterization Techniques

腐食は関与する因子が多く、現象が複雑であるため、数値計算が腐食現象の予測や測定結果の検証に応用されている例は限られている。しかしながら計算機技術の発展や計算手法の開発によって、近年、腐食・防食の分野においても数値計算や機械学習の活用がなされるようになった。本公募シンポジウムでは腐食による損傷の程度や腐食環境における金属材料の寿命に関する数値計算や機械学習による腐食寿命予測、腐食反応の根幹をなす電気化学反応の第一原理計算など計算科学と腐食現象のミクロ・マクロ計測の両輪から腐食現象の解析・可視化と腐食予測を深化させる機会としたい。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

大阪大学准教授 土谷博昭

E-mail: tsuchiya@mat.eng.osaka-u.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

東北大 武藤 泉 東工大 多田英司

JFE スチール 大塚真司 名工大 星 芳直

物材機構 土井康太郎

## S3 特異反応場における時間/空間応答を利用した新奇材料構造創成 II Tailoring of novel-structured materials using spatio-temporal responses under exotic reaction fields II

非平衡状態を利用したナノ・マイクロ組織を有する材料の開発や物性に関する議論において、極限反応場や特殊環境下における化学反応場の単なる実現だけでなく、その緩和過程に代表される時間的変化をも利用した\*エキゾチックな\*時間的・空間的応答の理解・制御が重要であることが新たに分かってきた。これを受け、2022年春に新規開催したシンポでは13件の一般講演申し込みがあり、会員がおおいに興味を持っていることが分かった。そこで、2022年秋も同趣旨で継続してシンポを開催し、高エネルギー照射や超高压などでの極限場における時間/空間応答の利用による新規材料開発について議論を深める。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

筑波大学数理物質系物質工学域准教授 谷本久典

E-mail: tanimoto@ims.tsukuba.ac.jp

東北大 森戸春彦 榎GCE インスティテュート 中村貴宏

大阪府立大 堀 史説 東北大 田中俊一郎

若狭湾エネルギー研究センター 岩瀬彰宏

## S4 機能コアの材料科学 III New Materials Science On Nanoscale Structures and Functions of Crystal Defect Cores, III

多くの先進材料において、材料内部に存在する点欠陥や粒界、界面、転位等の結晶欠陥が、機能発現の起源となっている。したがって、結晶欠陥を高度に制御し、その機能を最大限に引き出すことができれば、材料研究における大きなブレークスルーとなると期待できる。また、近年のナノ計測技術や理論計算における分解能や精度の著しい進歩により、結晶欠陥の電子・原子レベル構造とそこに局所する機能に関する新規な知見が次々と得られるようになってきた。この流れを受け、結晶欠陥の特異な機能と各種外場との相互作用に着目し、令和元年から新学術領域「機能コアの材料科学」が立ち上がった。3回目となる本シンポジウム「機能コアの材料科学 III」では、結晶欠陥(機能コア)に関する最新の研究成果を議論し、今後の課題と方向性について意見交換する場とした。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

大阪大学大学院工学研究科教授 吉矢真人

E-mail: yoshiya@mat.eng.osaka-u.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

名大 松永克志 東大 溝口照康 阪大 中村篤智

東工大 平山雅章 名大 丹羽 健 東大 馮 斌



## S5 Additive Manufacturing の材料科学 Materials Science of Additive Manufacturing

Additive Manufacturing (AM) は、医療・福祉、航空・宇宙の分野での導入が進むとともに、一般産業分野にも広がっている。最近では、形状制御だけでなく材質の制御さらには新材料創成のプロセスとしても認識されつつある。こうした中、材料科学の観点から AM を議論し、AM による特異組織形成への理解や、素材となる粉粒体の挙動、熱源となる量子ビームと材料の相互作用といった視点からの造形プロセスの理解が必要であり、AM の特殊環境での結晶成長に注目した科研費学術変革領域「超温度場 3DP」などのプロジェクトも立ち上がっている。本シンポジウムでは、金属学研究者を中心に、実験科学、計算科学、データ科学の各分野、さらには、異種材料、レーザなどの関連分野の研究者にも基調講演をいただき、AM における未解明問題解決と新たな可能性についての認識を深め、新たな材料科学を開拓するための議論、討論を行う。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

大阪大学教授 小泉雄一郎

E-mail: ykoizumi@mat.eng.osaka-u.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

阪大 中野貴由 関西大 上田正人 東北大 野村直之  
富山大 石本卓也 阪大 伊藤和博 東北大 山中謙太  
川崎重工 日比野真也

## S6 材料変形素過程のマルチスケール解析 (V) Multi-scale analysis of elementary processes in plasticity (V)

近年、ナノ・マイクロ機械試験法や原子分解能電子顕微鏡法をはじめとする最先端の実験手法、第一原理計算を中心とした計算材料科学の急速な発展により、材料の変形・破壊挙動を支配する転位や変形双晶といった塑性変形の素過程について、実験、理論の両面においてマルチな時間・空間スケールでの横断的な解析が行われ、様々な興味深い現象が見出されるようになってきている。本公募シンポジウムは2018年秋期大会(第1回)、2019年秋期大会(第2回)、2020年秋期大会(第3回)、2021年秋期大会(第4回)において開催された。第4回は平均50名弱の聴講者数であり、毎回多くの参加者と活発な議論が交わされており、同テーマに関する第5回シンポジウムを企画する。本シンポジウムでは、引き続き各種材料の塑性変形の素過程に関する最新の実験・理論研究に関して特に若手研究者を中心に広く講演を募り、大学、研究所、企業の研究者間の塑性変形に関する議論の場を提供するとともに、これら研究者間の新たな連携を促進することを目的とする。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

金沢大学教授 下川智嗣

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

(シンポジウム co-chairs) :

京大 岸田恭輔 名大 君塚 肇 九大 田中将己  
名大 高田尚記

## S7 ソフト磁性材料研究の新たな展開—組織設計・制御による次世代材料開発に向けて— New developments of research on soft magnetic materials ~ Toward next-generated material developments by structure design and control ~

ソフト磁性材料は、古くから磁気デバイス的一端を担い、最近では例えばパワエレ用受動素子への応用に向けた研究開発が積極的に進められている。材料特性の更なる向上のためには、単なる現状と課題の整理による考察にとどまらず、これまでの本研究分野の枠を超えて、金属材料学的な視点からプロセス・結晶組織・材料特性の関連付けを行い、組織設計・制御指針を見出していくことが重要である。本シンポジウムでは、ソフト磁性材料に適用できる計測・観察手法に焦点を当てつつ、材料特性だけでなくプロセス・結晶組織との紐づけについて議論し、マテリアルデザインに向けた課題を整理する場を提供する。特に、本分野以外の基盤技術研究者や、若手・中堅の研究者が、新たに本材料の研究開発に参加するための動機付けにつなげたい。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

東北大学大学院工学研究科准教授 遠藤 恭

E-mail: yasushi.endo.c1@tohoku.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

産総研 尾崎公洋 藤田麻哉 東大 柴田直哉  
阪大 白土 優 日立金属 西内武司

## S8 ワイドギャップ結晶の材料学と高温プロセス ングⅣ Materials Science and high temperature processing of widegap materials IV

ワイドギャップ結晶は、省エネ・環境負荷低減に寄与するパワーデバイスや短波長光デバイスへの研究開発が進められてきた。特に SiC デバイスは本格的な量産が進み、GaN も LED のみならずパワーデバイス用基板の生産が進められつつある。今後の各材料・デバイスの応用展開には、高品質結晶の育成技術の確立とデバイス化技術のさらなる効率化を行う必要がある。これまで3回のシンポジウム開催で研究・開発の最新動向を議論してきた。

そこで本シンポジウムでも引き続き、SiC や窒化物材料、酸化物材料等ワイドギャップ結晶について、①結晶育成プロセスと成長界面制御に関する基礎検討、ならびに、②結晶中の欠陥とその分析・制御技術について、金属材料学・冶金学の観点でのアプローチを検討することを目的とする。

### テーマ責任者

(シンポジウム chair) :

東京大学生産技術研究所准教授 吉川 健

E-mail: t-yoshi@iis.u-tokyo.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

東北大 福山博之 名大 宇治原徹  
信越化学工業 美濃輪武久

**S9 ミルフィーユ構造の材料科学V**  
**Materials Science of Mille-feuille Structure V**

これまでの研究により、硬質層と軟質層が積層した「ミルフィーユ構造」を有する金属およびセラミックス材料にキンク変形帯・キンク界面を導入すると、顕著な強度上昇が発現（キンク強化）することが明らかとなってきた。キンク強化の発現機構の解明と理論構築が進展すれば、我が国発の材料強化手法が確立でき、新たな学問分野の創出が期待できる。そこで、本シンポジウムでは、金属のみならず、セラミックス材料や高分子材料にも対象を拡げ、過去4回の公募シンポジウムでの議論をさらに発展・深化させ、ミルフィーユ構造を有する多様な材料のキンク強化の議論を深めたい。

本シンポジウム開催にあたっては、数件の基調講演とともに、広く会員からの一般講演を募ることとしたい。また、本シンポジウムを本会「キンク研究会」の活動の一環としても位置づけ、研究会活動の活性化も図りたい。

**テーマ責任者**

(シンポジウム chair) :

熊本大学教授 山崎倫昭

E-mail: yamasaki@gpo.kumamoto-u.ac.jp

(シンポジウム co-chairs) :

東大 阿部英司 熊本大 河村能人 九大 中島英治  
北大 三浦誠司 JAEA 相澤一也 東工大 藤居俊之  
東京農工大 斎藤 拓

**日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会**  
**第8回「高校生・高専学生ポスター発表」募集案内**

**申込締切日：2022年7月15日(金)**

本会では最新の研究成果を発表・討議する場として毎年春秋2回の「講演大会」を開催しており、2022年9月28日(水)にオンラインにて2022年秋期(第171回)講演大会高校生ポスターセッションを開催します。

この講演大会に於いて、若い学生に金属および材料学分野に対して興味や理解を高めてもらうため「高校生・高専(3年生以下)学生ポスター発表」のセッションを開催いたします。

ポスター発表は、生徒の研究成果の発表を大学の教授や企業の研究者等の専門家に直接聴いてもらい、質疑応答が受けられる貴重な機会であり、さらにポスターの出来栄や発表の受け答えなどを審査して、優秀な発表には会長による賞を授与します。金属および材料学分野に興味があり、本講演大会でポスター発表していただける生徒がおられましたら、奮ってご応募下さい。

発表者と指導教員には本大会の参加費を無料で参加いただき、研究者の最新の研究成果の発表を聴講いただけます。詳細は、「高校生・高専学生ポスター発表要領」でご確認下さい。

**「高校生・高専学生ポスター発表」要領**

学 会 名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会

行 事 名 「高校生・高専学生ポスター発表」

開催方法 オンライン

開催予定日時 2022年9月28日(水) 13:00~17:30の間で2時間程度を予定

対 象 者 高校生および3年以下の高専学生

発表方法 オンライン(Zoom 利用)

テ ー マ 材料に限定せず、フリーテーマです。(課題研究の成果、科学技術の取組等)

ポスター発表資料作成について：別途連絡

講演申込 <https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn>

講演概要原稿 不要

参加費および講演聴講

- ① 発表者、共同研究者および指導教員の参加費を免除し、講演大会の発表を聴講できる。
- ② 希望があれば、高校生・高専ポスター発表の関係者(親、友人)5名程度までの参加費を免除し、講演大会の発表を聴講することができる。
- ③ (現地開催の場合)指導教員は、事前に参加者リストを提出する。(別途用紙を送付予定)
- ④ 指導教員宛てに、参加者用 ID とパスワードおよびプログラム1部を事前送付する。

優秀ポスター賞 優秀な発表には最優秀ポスター賞および優秀ポスター賞を授賞します。

問合せ・連絡先：公益社団法人日本金属学会 講演大会係

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312 E-mail: annualm@jim.or.jp

## 2022年秋期(第171回)講演大会の案内および参加申込みについて

2022年秋期講演大会は、9月20日(火)から23日(金・祝)まで福岡工業大学にて開催いたします。(新型コロナウイルス感染症の状況によってはオンライン開催に変更する場合があります。)高校生・高専学生ポスターセッションは9月28日(水)にオンラインにて開催いたします。

尚、参加申込みは、すべてインターネット申込みとなります。詳細は、下記参加申込要領をご覧ください。

| 日 程   |                          |
|---|--------------------------|
| 日 時   | 行 事                      |
| 9月20日(火)<br>13:00～                              | ポスターセッション                |
| 9月21日(水)<br>9:00～ 9:40<br>10:00～17:00<br>18:30～ | 贈呈式<br>学術講演<br>懇親会(検討中)  |
| 9月22日(木)<br>9:00～17:00                          | 学術講演                     |
| 9月23日(金・祝)<br>9:00～17:00                        | 学術講演会                    |
| 9月28日(水)  | 高校生・高専学生ポスターセッション(オンライン) |

### 参加申込要領(参加申込みは全てウェブサイトからとなります)

#### 大会参加申込期間および URL

(事前申込)2022年5月25日～2022年9月2日

<https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn/>

(後期(当日)申込)2022年9月8日～9月28日

[https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn\\_after/](https://www.jim.or.jp/convention/2022autumn_after/)

#### ◆大会参加費(講演概要ダウンロード権含む)※年会費とは異なります。

参加費・懇親会の消費税抜については、ホームページ(一覧表 PDF)をご参照下さい。

| 会 員 資 格  | 事前参加申込<br>(締切日:9月2日) | 後期(当日)申込<br>(9月8日～9月28日)<br>クレジット決済のみ |
|--|----------------------|---------------------------------------|
| 正員・維持員会社社員、シンポジウム共催・協賛の学協会会員・鉄鋼協会会員<br>(本会非会員) | 10,000円              | 13,000円                               |
| 2022年3月1日時点で65歳以上の個人会員*                        | 無 料                  | 無 料                                   |
| 学生員**  | 6,000円               | 7,000円                                |
| 非会員*** 一般                                      | 24,000円              | 27,000円                               |
| 非会員*** 学生(大学院生含む)                              | 14,000円              | 16,000円                               |

- お支払後の取消は、準備の都合上ご返金いたしかねますのでご了承下さい。
- 領収書は、決済完了後に申込画面(講演大会 Mypage)からダウンロードし、印刷して下さい。
- 参加方法や講演概要ダウンロードについては、下記をご参照下さい。

\* **65歳以上の個人会員** : 会員情報に生年月日のご登録がない場合は、課金されますのでご注意ください。会員情報に生年月日をご登録されていない方は、大会参加申込みの前に [annualm@jim.or.jp](mailto:annualm@jim.or.jp) まで会員番号・お名前・ご連絡先・生年月日をお知らせ下さい。

\*\* **学生員** : 卒業予定変更等により会員種別に相違がある場合、事前に**会員種別の変更手続き**を行ってから、大会参加をお申込下さい。会員情報に登録された卒業年次を超えると、自動で正員となっています。

\*\*\* 非会員の参加申込者には、1年間の会員資格を付与します。ただし特典は重複して付与いたしません。

#### ◆支払方法

事前申込のお支払いはクレジットカードおよびコンビニ振込決済をご利用頂けますが、後期(当日)申込はクレジット決済のみとさせていただきます。事前予約申込は9月2日(金)の入金日をもって事前参加申込完了となります。

#### ◆参加方法

(事前参加申込みの方)参加申込みをされ、参加費を納入された方へは、概要公開日に講演概要閲覧等に必要な参加者個別認証 ID とパスワードを配信いたします。

(後期(当日)申込の方)参加申込受理通知に記載の「登録番号」および「パスワード」が講演概要閲覧に必要な個別認証 ID とパスワードになります。

#### ◆講演概要の WEB 公開

講演概要の公開日は、大会 2 週間前の**2022年 9 月 6 日(火)**です。特許関係のお手続きは、公開日までにお済ませ下さい。講演大会公開サイトにログイン後、講演概要の閲覧ができます。

#### ◆参加証

大会マイページにて「参加証」を印刷し、来場の際提示下さい。

#### ◆講演概要集購入について

講演概要集 DVD は作成いたしません。全講演概要は、本大会 Web サイトで公開をします。これまで概要集 DVD のみ購入をされていた方も、通常の参加登録をして頂き、概要の閲覧をお願いします。

#### ◆懇親会について

日時 **2022年 9 月21日(水) 18:30-20:30(予定)**

\*開催検討中。詳細は決まり次第お知らせします。



# 2022年秋期講演大会 開催予定の各種シンポジウム

## 公募シンポジウム9テーマ

- S1 ハイエントロピー合金の材料科学(Ⅷ)
- S2 計算科学および新規腐食解析に基づく腐食現象の解析・可視化と機械学習による腐食予測
- S3 特異反応場における時間/空間応答を利用した新奇材料構造創成Ⅱ
- S4 機能コアの材料科学Ⅲ
- S5 Additive Manufacturing の材料科学
- S6 材料変形素過程のマルチスケール解析(V)
- S7 ソフト磁性材料研究の新たな展開—組織設計・制御による次世代材料開発に向けて—
- S8 ワイドギャップ結晶の材料科学と高温プロセッシングⅣ
- S9 ミルフィーユ構造の材料科学Ⅴ

## 企画シンポジウム5テーマ

### K1 若手科学者に贈る研究のヒントⅤ～未踏領域へ到達するために～

Gifts from pioneers to young scientists V: ~To hitch your wagon to star~

人材育成を趣旨とする啓蒙的な内容の企画シンポジウムの第5弾であり、今回は第8分野が中心となって開催する。独創的な研究成果に到達するためには、どのような姿勢で研究に臨むべきかや、キャリアパスの形成にあたって転機をどのように迎え、成功に導くかなど、著名なベテラン研究者や活躍が著しい若手指導者に講演を頂き、そのヒントを得ることを目的とする。講演者の業績や経歴に触れつつ、研究者、指導者としての心構えや自己実現の方法などについて学ぶことで、特に若手会員への刺激になれば幸いである。講演後は、双方向のパネルディスカッションを開催し、さらに議論を深める場を提供する予定である。

### K2 材料化学におけるイノベーションの役割と工業製品への展開Ⅲ

Innovations in materials chemistry and their effects on industry III

この企画シンポジウムは、毎年春の講演大会で開催している「水溶液腐食」「高温酸化」「陽極酸化」「めっき・化成処理」「触媒」の各学術分野を包括した公募シンポジウムと対をなし、工業製品としての金属材料の開発・生産の最前線における「材料化学」の役割と研究・開発事例や課題を、主に企業研究者に講演していただくことを趣旨として、2020年度よりシリーズ化している。今年度の企画シンポジウムにおいても、前年度からの内容を引き続き、めっき、化成処理、腐食、高温酸化、触媒など広範囲にわたる内容を、各産業分野で活躍されている技術者・研究者の視点から、現在直面している課題や将来展望を紹介いただき、基盤となる学理を発展させるヒントや、産学官の連携強化のきっかけとしたい。

### K3 材料技術史から見るこれからの技術展開Ⅴ —鉄

Future growth expected from technological history of materials V—Iron and Steel

持続可能な社会の実現には、材料特性の向上だけではなく、高効率・低環境負荷プロセスの開発が必要である。時代に沿ったプロセスの変遷、合金開発や応用展開、更には環境問題も含め、鉄が人間社会にとっていかに身近な存在であったか、どのような技術革新をもたらしてきたのかを振り返り、更に今後の可能性を考える。

第1回：チタン材料(2018年秋期)、第2回：製錬およびリサイクル技術(2019年春期)、第3回目：アルミニウム合金(2020年秋期)、第4回：分析機器(2022年春期)に続き、鉄と所縁の深い福岡の地で『鉄』の技術史と今後の展望について議論する。

### K4 医用材料・医療機器開発の最前線(Ⅲ)～光を用いる生体情報センシング～

Frontier in development of biomaterials and medical devices(Ⅲ): Advanced Bioimaging Technologies

半導体材料のバンドギャップや非線形光学特性、静電誘導特性をベースに実現している紫外・可視から赤外、テラヘルツ・ミリ波までの各種光源を用いることで物性研究のための計測技術や加熱や溶融の材料プロセスが実現している。3回目となる今回も第2分野と第7分野が連携し、これらの光技術から展開される生体情報センシングを議論する。具体的には最近の光源開発として、光学結晶を高周波で動作する半導体デバイスの高度な制御で実現する波長だけでなくパルス幅、繰り返し周波数も可変になるレーザ光源開発から、生体情報センシングの実例としては薬効にも影響がある有機結晶の多形や欠陥を非破壊で検出するテラヘルツレーザ分光やレーザ照射により発生するバブルのナノ粒子集積をプロセスとするバイオデバイス開発、レーザ光の照射により生じる軽元素の微粒子を回収する質量分析の生体組織観察を取りあげる。生体情報センシングに必要となる光技術から、これからの半導体材料研究を模索する。

### K5 モビリティの未来を支える材料技術の最新動向

(自動車技術会・日本鉄鋼協会・日本金属学会合同シンポジウム)

The latest trend of the materials R&D for the future Automotive

近年の自動車を取り巻く環境は、従来からの課題である環境負荷低減、軽量化、燃費向上などに加え、電動化、安全性、自動運転、そしてカーボンニュートラルなどに代表される課題への対応も求められ、自動車を大変革させる必要があると言っても過言ではない。日本金属学会では、多くの材料を利用し日々進化している自動車技術に焦点を当て、その技術の革新を基盤から支える材料技術における最新の動向について、日本鉄鋼協会、自動車技術会と合同でシンポジウムを2018年度から企画してきた。本シンポジウムでは日本金属学会からの講演者に加え、自動車技術会および日本鉄鋼協会から自動車および鉄鋼メーカーの製造関係者ならびに材料研究者も迎えて最新の研究動向を講演していただき、自動車用材料技術の方向性を共有するとともに、講演大会参加者の研究における一助となることを目的とする。

## 参加申込・問合せ

〒980-8544 仙台市青葉区一番町 1-14-32

(公社)日本金属学会

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

機械翻訳を利用した和訳のお勧めと、  
Materials Transactions 掲載論文の  
日本金属学会誌への投稿お誘い

会誌・欧文誌編集委員会

Materials Transactions に掲載された論文は、その日本語訳を日本金属学会誌に投稿することが可能です(オンラインでの公開から2年以内、かつ本会が著作権を保持している場合)。英文論文を和文にして掲載することは、優れた論文を幅広い研究者・技術者に読んでもらうことに繋がり、研究成果のさらなる周知・普及に寄与することになります。

しかし、和訳といえども、それに要する労力から和訳投稿を断念されていた方も多いのではないのでしょうか。そこで、近年翻訳性能が著しく向上している機械翻訳アプリケーション(「DeepL」,「みんなの自動翻訳」)をご紹介します。

つきましては、このような翻訳アプリをご利用いただき、Materials Transactions に掲載された論文を日本金属学会誌へ和訳投稿されてはいかがでしょうか。

◆ 機械翻訳アプリケーションは下記のサイトでお試しいただけます(本委員会で、確認済みサイトとなりますが、もちろん、これら以外のサイトを利用して翻訳されても構いません)。

- DeepL(無料版, 5000字まで)  
<https://www.deepl.com/ja/translator>
- みんなの自動翻訳(無料)<https://mt-auto-minhon-mlt.ucr.jgn-x.jp/>

なお、DeepLの無料版では修正や本文コピーなどの機能が利用できません。和訳投稿を希望される方には、編集委員会より修正やコピーが可能な全文ファイルをご提供します。(費用は編集委員会にて負担します。)

◆ 日本金属学会誌は投稿・掲載費用が無料です(カラー図面を掲載する場合は料金が発生します)。また、公開後すぐにどなたでもオンラインで全文閲覧・ダウンロードが可能となります。

問合せ先 (公社)日本金属学会会誌・欧文誌編集委員会  
☎ 022-223-3685 FAX 022-223-6312  
E-mail: sadoku@jim.or.jp

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。

■Kink-Strengthening of Mille-Feuille Structured Materials(ミルフィーユ構造材料のキンク強化)

従来の常識を覆す高強度を示したLPSO構造型Mg合金で発見された「キンク強化現象」を、微視的な硬質層・軟質層の相互積層により構築される「ミルフィーユ構造」全般へと適用可能な普遍的原理としての確立を目指す。Mg系にとどまらず、Ti系、Al系を含む新規軽量合金系、さらには高分子系材料への展開を図る論文を歓迎する。

上記テーマに関する特集を、Materials Transactions 64巻4号(2023年4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64巻第4号(2023年)  
原稿締切日 2022年10月3日(月)

- 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 FAX 022-223-6312  
E-mail: sadoku@jim.or.jp  
<https://jim.or.jp/>

日本金属学会主催国際会議企画提案募集

提案締切 2022年5月31日(火)  
詳細 までりあ3号180頁 または ホームページ「イベント」→「国際会議」  
問合せ先 (公社)日本金属学会 国際会議募集係  
stevent@jim.or.jp





〈公募類記事〉

無料掲載：募集人員，締切日，問合せのみ掲載。  
 有料掲載：1/4頁(700～800文字)程度。  
 「あたりあ」とホームページに掲載；15,000円+税  
 ホームページのみ掲載；10,000円+税  
 〈その他の記事〉原則として有料掲載。  
 原稿締切・掲載号：毎月1日締切で翌月号1回掲載。  
 原稿提出先：電子メール(受け取りメールの確認をして下さい)  
 E-mail: materia@jim.or.jp

助 成

(公財)泉科学技術振興財団  
 2022年度研究助成等の募集

**研究助成** (高度機能性材料およびこれに関連する科学技術の基礎研究分野における真に独自の発想に基づく新しい研究に対する助成)  
 助成金額：1件100万円以下，38件  
**研究集会スタートアップ及びその飛躍への助成**：助成金額：1件50万円以内/年，5件以．  
**募集期間** 2022年4月1日～6月15日(必着)  
**応募方法** 詳細は下記ホームページをご参照下さい。  
**連絡先** 公益財団法人 泉科学技術振興財団  
<http://www.izumi-zaidan.jp/>  
 ☎ 06-6373-1811  
 E-mail: info@izumi-zaidan.jp

掲示板はホームページにも掲載されて  
 おりますのでご活用下さい。

公 募

◇千葉大学大学院融合理工学府  
 機械工学コース 教員公募◇

公募人員 助教1名(テニュアトラック)

採用後3年目に中間評価を実施し，5年経過した後のテニュア審査に合格すれば任期のない教員となります。審査は，研究，外部資金獲得(取得のための努力)，教育，及び学内活動など，多角的な視点で行います。

**所 属** 千葉大学大学院融合理工学府 機械工学コース  
 材料・強度・変形教育研究領域

**専門分野** 材料組織と機械的特性を主とする各種物性の相関を明らかにする研究分野に取り組み，それらの構造・組織制御によって革新的構造材料の創製と多機能化を，主に実験的手法で開拓していただけるような人材を求めます。例えば透過型電子顕微鏡観察や先端的解析技術を駆使して，機能・特性の発現機構の解明に取り組み，分野横断的に学内外の研究者と協力できる協調性に富んだ人材を求めます。強い意欲があれば，これまでの専門分野を問いません。

**担当科目** 機械工学実験，演習科目や卒業研究など。

**応募資格** 博士の学位取得者あるいは学位取得見込みの方。

**着任時期** 令和4年12月1日以降のできるだけ早い時期。

**給 与** 千葉大学の規程に基づきます。

**公募締切** 令和4年7月29日(金)必着

**提出書類** (1)履歴書，(2)研究業績，(3)学会および社会における活動等，(4)競争的研究資金の獲得状況，(5)産学連携などの実施状況，(6)受賞歴，(7)これまでの研究の概要，(8)教育歴，(9)今後の研究計画，(10)教育と研究に対する抱負，(11)代表的な論文の別刷，(12)応募者について意見を伺える方の氏名と連絡先。

**応募書類の送付先**

〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町 1-33  
 千葉大学大学院融合理工学府 機械工学コース長  
 比田井洋史 宛

**問合せ先**

材料・強度・変形教育研究領域 教授 糸井貴臣  
 E-mail: itoi@faculty.chiba-u.jp

\*応募をされる場合は，事前に上記問い合わせ先にEメールで連絡をお願いします。

詳細は，[https://jim.or.jp/bulletin\\_boad/keijiban.html](https://jim.or.jp/bulletin_boad/keijiban.html) をご覧下さい。



## 2022年春期(第170回)講演大会記録

2022年春期講演大会は、3月15日(火)から17日(木)、22日(火)にオンライン(Zoom)で開催した。

- 3月15日(火) 9:30~9:35 開催の辞  
9:40~10:40 第67回学会賞受賞記念講演  
10:50~11:50 第67回本多記念講演  
12:20~12:50 第13回技術セミナー  
13:00~17:20 一般講演、各種シンポジウム講演、受賞講演、共同セッション  
18:30~20:30 懇親会
- 3月16日(水) 9:00~17:20 一般講演、各種シンポジウム講演、受賞講演、共同セッション
- 3月17日(木) 9:00~17:30 一般講演、各種シンポジウム講演、受賞講演、共同セッション、学生キャリアサポートセミナー
- 3月22日(金) 10:00~17:00 第38回ポスターセッション、第7回高校生・高専学生ポスターセッション  
17:00~18:00 高校生ポスター指導教員交流会
- 常時開設 オンライン展示会、技術セミナー(動画版)、学生キャリアサポートセミナー(動画版)

### 開会の辞(3月15日)

中野貴由会長より春期講演大会オンライン開催にあたっての挨拶があった。

### 第67回学会賞受賞記念講演(3月15日)

「材料数理学としてのクラスター変分法」

北海道大学名誉教授・JST シニアフェロー 毛利哲夫 君

### 第67回本多記念講演(3月15日)

「永久磁石の高性能化にみる複合組織制御」

東北大学大学院工学研究科教授 杉本 諭 君

贈呈式 オンライン開催のため下記授賞の贈呈式は開催せず、開会の辞の前後に受賞者氏名をスライドで表示した。

- 第67回学会賞 1名(受賞者;本誌249頁)  
第63回技術賞 4名(受賞者;本誌250頁)  
第28回増本量賞 1名(受賞者;本誌250頁)  
第61回谷川・ハリス賞 2名(受賞者;本誌251頁)  
第80回功績賞 5名(学術部門5名)(受賞者;本誌252頁)  
第53回研究技能功労賞 14名(受賞者;本誌253頁)  
第72回金属組織写真賞 最優秀賞1件、優秀賞2件(受賞者;本誌255頁)  
名誉員推戴者 2名(受賞者;本誌257頁)  
第5回フェロー認定者 1名(受賞者;本誌258頁)

### 大会参加者

1,227名(一般644名 学生329名 非会員40名(一般26名 学生14名)、維持員会社社員38名、協賛学協会参加者8名、名

誉員・65歳以上69名、受賞講演者12名、非会員基調講演者・招待講演者20名、高校生ポスター参加者49名、オンライン展示企業・技術セミナー・学生キャリアサポートセミナー企業18名)

※オンライン開催のため日本鉄鋼協会との相互聴講は実施しなかった。

※2020年秋期講演大会より開催当年3月1日時点で65歳の会員は参加費無料とした。

### 学術講演会(3月15日~17日,22日)

最終講演件数685件

欠講1件(講演番号:高校生ポスター HSP18)

第67回学会賞受賞記念講演1題

第67回本多記念講演1題

公募シンポジウム講演9テーマ167題

企画シンポジウム2テーマ15題

一般講演356題(功績賞受賞記念講演5題、谷川・ハリス賞受賞講演2題、増本量賞受賞記念講演1題、技術賞受賞記念講演4題、招待講演1題含む)

共同セッション10題

ポスターセッション88題

高校生ポスター 47題

講演会場 15会場(A~O会場)

### 第38回ポスターセッション(3月22日)

第1部 10:00~11:30

第2部 13:00~14:30

88件のポスター発表を2部制の時間帯に分けて行い、優秀ポスター賞審査対象となっている82件の内容・発表についてオンラインにより審査が行われた。ポスターは事前に発表者から提出されたポスター画像をポスター掲示システム上に掲載し、当日はポスターの閲覧をし、各講演ルームへ訪れた聴講者に発表を行った。

3月23日「優秀ポスター賞」17名が決定し、3月23日に受賞者を本会春期講演大会公開サイトに掲載した。(本誌258頁)

### 第7回高校生ポスターセッション(3月22日)

前半14:45~15:45

後半16:00~17:00

47件の高校生・高専学生(3年生以下)ポスター発表は同時に審査も行われた。審査結果は3月23日に最優秀賞1件、優秀賞19件が決定し、3月23日に受賞者を本会春期講演大会公開サイトに掲載した。(本誌260頁)

ポスターセッションと同様、事前に発表者から提出されたポスター画像をポスター掲示システム上に掲載した。熱心に取り組んだ研究内容の発表がなされ、審査員や聴講者は興味深く質疑する様子が見受けられた。発表した学生は大学教員等からのアドバイスを熱心に聞き、今後の研究の視野が広がったと喜ぶ姿が見受けられた。他校の発表を聴講する高校生発表者もあり、高校生同士の交流も行われていた。また、今回も指導教員との交流会を実施し、情報交

換の場を設けた。

### 金属学会・鉄鋼協会共同セッション

「チタン・チタン合金」9題(金属3題, 鉄鋼6題)は3月17日に金属学会F会場で開催した。

「超微細粒組織制御の基礎」2題(金属2題, 鉄鋼0題)は3月15日に金属学会O会場で開催した。

「高温溶融体の物理化学的性質」12題(金属5題, 鉄鋼7題)は3月16日に鉄鋼協会会場1(オンライン会議ツールWebex 利用)で開催した。

### オンライン機器・カタログ等展示会(第51回)

機器展示5社の出展の協力を得た。各社のご厚意に感謝いたします。

### 第13回技術セミナー(現地開催時の名称:企業ランチョンセミナー)(3月15日および動画)

講演大会参加者に最新の技術情報を聴講してもらう企業セミナーを開催した。

以下の企業・団体がオンライン会場または動画にて30分程度のセミナーを行った。

3月15日(火)

- ・マルバーン・パナリティカル スペクトリス株式会社 動画版
- ・オックスフォード・インストゥルメンツ株式会社

### オンライン学生キャリアサポートセミナー(3月17日および動画)

企業が学生会員に向けて、会社概要、今後の採用情報、インターンシップ募集情報、研究開発動向等を紹介する企画を実施した。以下の企業が動画またはオンライン会場で30分程度のオンライン説明会を行った。参加学生は熱心に聴講していた。

- 曙ブレーキ工業株式会社
- 株式会社UACJ
- 合同製鉄株式会社
- 日立金属株式会社
- 東邦チタニウム(動画版)
- 住友金属鉱山(動画版)

### 懇親会

当初予定していなかった懇親会をバーチャルオフィスアプリoViceを用いて開催した。38名の参加があった。

### 大会雑記

本来は東京大学駒場キャンパスでの春期講演大会開催であったが、新型コロナウイルス感染拡大防止のため、2022年春期講演大会もオンライン会議ツールZoomを利用したオンライン形式での開催となった。ポスター発表は、オンライン上でポスターを閲覧し、聴講したいポスター発表があれば、各発表のZoom会場へ入室し聴講および質疑応答を行えるシステムを利用した。

講演大会二日目の3月16日夜に福島県沖震源のマグニチュード7.3の地震があり、金属学会事務局所在地の宮城県も最大震度6強の大きな揺れがあった。幸いに通信や電気が止まることがなかったため、通常通りオンラインで講演大会を続行することができた。地震による講演の欠講はなかった。

2022年春期講演大会オンライン開催にあたり、座長、会場系の皆様、また参加者の皆様には事前のマニュアル確認や事前操作テストなど万全な準備を行いご参加くださり誠にありがとうございました。また座長の皆様には地震発生後の講演変更等について臨機応変にご対応頂き無事に開催できましたこと、衷心より厚くお礼申し上げます。

## 新 入 会 員

(2022年2月22日~2022年3月22日)

### 正 員

|                  |                 |                    |
|------------------|-----------------|--------------------|
| 埋橋 淳 物質・材料研究機構   | 清水 嘉 東北大学       | 山崎 二男 東北大学         |
| 大森 雄貴 日本電子株式会社   | 胎中 香亮 株式会社神田熱処理 | 山下 和秀 株式会社東京軽合金製作所 |
| 蔭井 慎也 三井金属鉱業株式会社 | 中村 浩一郎 大和製罐株式会社 |                    |
| 倉富 俊行 株式会社リケン    | 吹上 拓            |                    |

### 学 生 員

|              |             |             |
|--------------|-------------|-------------|
| 石井 裕樹 茨城大学   | 小泉 知也 名古屋大学 | 深津 義士 名古屋大学 |
| 勝木 健太 芝浦工業大学 | 高田 凌平 東京大学  | 細田 昌希 大阪大学  |
| 亀岡 優翔 関西大学   | 原 碩亮 東海大学   | 森崎 陸 京都大学   |
| 黒木 優成 九州工業大学 | 半田 優斗 千葉大学  |             |

### 外国一般会員

元 容 哲

日本金属学会誌掲載論文

Vol. 86, No. 5 (2022)

— 論 文 —

摩擦圧接時の回転数と接合時間がポラス Al/熱可塑性樹脂の接合強度に及ぼす影響

松島慶幸 半谷禎彦 三ツ木寛尚 藤井英俊

水素チャージ下引張試験における Ni-Cr 合金の局所塑性発達および破壊挙動に及ぼす Cr の影響

小林直弘 小山元道 山村実早保 北條智彦 秋山英二

訂正

Materials Transactions 掲載論文

Vol. 63, No. 5 (2022)

— Review —

Copper Materials for Low Temperature Sintering

Masamu Nishimoto, Rintaro Tokura, Mai Thanh Nguyen and Tetsu Yonezawa

— Regular Article —

Materials Physics

Glass Forming Ability of Zr-(Ni, Cu) Based Ternary Metallic Glasses Based on Bond Parameter Function and Formation Enthalpy Model

Shuang Yang, Chun Zhang, Kaiyan Cui, Bangwei Zhang and Shuzhi Liao

Mechanics of Materials

Orientation Dependence on Bending Deformation Behavior of Pure Zinc Single Crystals

Sho Furukawa, Kenta Oka, Masayuki Tsushida, Hiromoto Kitahara and Shinji Ando

Statistical Analysis of Influential Factors on the Stability of Retained Austenite in Low Alloy TRIP Steel

Norimitsu Koga, Takayuki Yamashita, Keisuke Ogawa and Osamu Umezawa

Oxidation Behavior and Mechanical Strength of Mg<sub>2</sub>Si Added with TiB<sub>2</sub>

Yoshinobu Nakada

Synthesis of Biohybrid Material Based on Magnetic Zn-Al Hydrotalcite and Cellulase: Structural and Enzymatic Activity Characterizations

Tran B. An, Duong H. T. Linh, Nguyen P. Anh, Tran T. T. An and Nguyen Tri

Materials Chemistry

The Effect of Base Oil Viscosity on the Corrosion Preventive Properties of the Rust Preventive Oils

Mochisuke Kume, Daisuke Iwashima, Masahiko Hatakeyama and Satoshi Sunada

Geometrical Determination of Surface Atom Diffusion Paths

Yoyo Hinuma and Kohsuke Mori

Effect of Sigma Phase on Corrosion Behavior of Duplex Stainless Steel

Koichiro Nagae, Kento Ejiri, Jyunichi Hirabayashi, Yuichi Yamamoto, Masahiko Hatakeyama and Satoshi Sunada

Materials Processing

Dissolution Mechanism of Intermetallic Layer by Iron Erosion in Aluminum-Based Molten Binary Alloys

Ikuzo Goto, Kota Shirai, Rei Ohyama and Kengo Kurosawa

Role of Matrix Structure on Impact-Wear Resistance of As-Quenched 27%Cr Cast Iron

Ngo Huynh Kinh Luan, Koreaki Koizumi, Kuniaki Mizuno, Yutaka Yamada, Tetsuya Okuyama and Masaru Nakayama

— Technical Article —

Single-Step Synthesis of Silver Nanoparticles Supported on Cellulose Nanofibers Using a High-Pressure Wet-Type Jet Mill and Their Catalytic Activities

Eiji Fujii, Mitsuaki Furutani, Yoshihiko Kimura and Kota Ogura

Erratum



まてりあ第61巻6号 予告

[新役員紹介] 2022年度役員紹介  
[最近の研究] 水素を利用した高強度・高延性構造用合金の創製  
およびこれに関わる新知見 ……九大 小川祐平  
[最近の研究] 常温におけるダイヤモンドと異種材料の直接接合  
……大阪公立大 梁 剣波 大野 裕 重川直輝  
[材料教育] 金属鑄造と砂型：1. その歴史と最近の進展  
……柏井茂雄 兼吉高宏 永瀬丈嗣  
浅野和典 北村一浩

[実学講座] 金属材料実験の手引き 1. 組織観察  
1-6 透過型電子顕微鏡の構造と仕組み  
……名大 山本剛久  
— 他 —

～編集の都合により変更になる場合があります～

# 行事カレンダー

太字本会主催(ホームページ掲載)

| 開催日              | 名称・開催地・掲載号   | 主催                          | 問合せ先   | 締切         |
|------------------|--|-----------------------------|--|------------|
| <b>2022年5月</b>   |  |                             |  |            |
| 11~12            | 第38回希土類討論会(熊本)   | 日本希土類学会                     | TEL 06-6879-7352<br>kidorui@chem.eng.osaka-u.ac.jp<br>http://www.kidorui.org/                                | 発表<br>1.21 |
| 11~13            | 日本顕微鏡学会第78回学術講演会(郡山+Web開催)   | 日本顕微鏡学会                     | TEL 03-6457-5156<br>jsm-post@microscopy.or.jp<br>http://conference.wdc-jp.com/microscopy/conf2022/index.html |            |
| 14~11.5<br>(全7回) | セラミックス大学2022(CEPRO2022)(Web開催)   | 日本セラミックス協会                  | TEL 03-3362-5231<br>cersj-kyouiku@cersj.org<br>https://www.ceramic.or.jp/ikyoku/cepro2022/index.html         |            |
| 17~6.3           | 第422回講習会「生体機能を工学する!バイオミメティクス」(Web開催)   | 精密工学会                       | TEL 03-5226-5191<br>https://www2.jspe.or.jp/form/koshukai/koshukai_form.html                                 |            |
| 20, 6.3          | 第243・244回西山記念技術講座「基礎から振り返る先端鉄鋼材料学」(早稲田・Web開催)                                      | 日本鉄鋼協会                      | TEL 03-3669-5933 educact@isij.or.jp<br>https://isij.or.jp/event/event2022/nishiyama243.html                  |            |
| 23               | 腐食防食部門委員会 第342回例会(大阪)  | 日本材料学会                      | TEL 075-761-5321 jimuj@jsms.jp<br>https://www.jsms.jp  | 申込<br>5.16 |
| 23~25            | トライボロジー会議2022 春 東京(東京・(同期型))   | 日本トライボロジー学会                 | TEL 03-3434-1926<br>jast@tribology.co.jp<br>https://www.tribology.jp/  |            |
| 27~29            | 第142回春期大会(大阪大学)  | 軽金属学会                       | https://www.jilm.or.jp/  |            |
| 29~31            | 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第7回マルチスケール材料力学シンポジウム)(大阪)                               | 日本材料学会                      | http://www.jsms.jp   |            |
| <b>2022年6月</b>   |  |                             |  |            |
| 1~3              | 第27回計算工学会講演会(秋田)   | 日本計算工学会                     | TEL 03-3868-8957 office@jcses.org<br>https://www.jcses.org/koenkai/27/                                       |            |
| 3                | 第140回学術講演会(早稲田大)   | 環境資源工学会                     | TEL 03-6459-2203<br>info@rpsj.org https://www.rpsj.org/  | 参加<br>5.18 |
| 3~5              | 2022年度塑性加工春季講演会(Web開催)   | 日本塑性加工工学会                   | http://www.jstp.or.jp  |            |
| 10               | 第87回技術セミナー 表面処理による防食技術(東京)   | 腐食防食学会                      | TEL 03-3815-1161<br>naito-113-0033@jcorr.or.jp<br>https://www.jcorr.or.jp/                                   |            |
| 22~23            | 2022年度 溶接入門講座(WEB開催)   | 溶接学会                        | TEL 03-5825-4073<br>jws-info@tg.rim.or.jp<br>http://www.jweld.jp/  | 申込<br>6.15 |
| <b>2022年7月</b>   |  |                             |  |            |
| 6                | 第25回課題研究成果発表会(大阪+Web開催)  | 軽金属奨学会                      | TEL 06-6271-3179<br>grant@lm-foundation.or.jp  |            |
| 6~8              | 第59回アイソトープ・放射線研究発表会(東京)  | 日本アイソトープ協会                  | TEL 03-5395-8081<br>gakujutsu@jrias.or.jp<br>http://www.jrias.or.jp/   |            |
| 7~8              | 第14回核融合エネルギー連合講演会一(Web開催)  | 日本原子力学会核融合工学会部会, プラズマ・核融合学会 | TEL 052-735-3185<br>plasma@jspf.or.jp  |            |
| 12~8.2           | 第424回講習会「環境対応と脱炭素の動向~工作機械と要素技術, 新たな規格まで~」(Web開催)                                   | 精密工学会                       | TEL 03-5226-5191<br>https://www2.jspe.or.jp/form/koshukai/koshukai_form.html                                 |            |
| 13~14            | 2022年度粉末冶金入門講座I(ハイブリッド開催)  | 粉体粉末冶金協会                    | TEL 075-721-3650<br>info@jspm.or.jp<br>https://www.jspm.or.jp/   | 6.22       |
| 13~14            | 第26回動力・エネルギー技術シンポジウム(佐賀)   | 日本機械学会                      | TEL 03-4335-7615<br>https://www.ioes.saga-u.ac.jp/ex-event/PES26/index.html                                  |            |
| 21~22            | 第56回X線材料強度に関するシンポジウム(京都)   | 日本材料学会                      | TEL 075-761-5321 jimuj@office.jsms.jp<br>https://www.jsms.jp/  | 講演<br>4.1  |
| 24~29            | The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9)(福岡) | 触媒学会                        | atakagak@cstf.kyushu-u.ac.jp<br>https://tocat.catsj.jp/9/  |            |
| 27~29            | 第28回結晶工学スクール(2022年)(ハイブリッド開催予定)  | 応用物理学会                      | TEL 03-3828-7723<br>fukui@jsap.or.jp<br>https://annex.jsap.or.jp/kessho/contents/2022/school220727.html      | 参加<br>7.15 |
| 29               | 第101回レアメタル研究会(東大生産技研/Web開催)  | レアメタル研究会                    | TEL 03-5452-6314<br>tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp<br>https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html     |            |
| <b>2022年8月</b>   |  |                             |  |            |
| 3~6              | ICYRAM2022(福岡)   | MRS-Japan                   | TEL 092-802-2755<br>mtanaka@chem-eng.kyushu-u.ac.jp<br>https://icyram2022.wixsite.com/official-site          |            |

| 開催日             | 名称・開催地・掲載号   | 主催                        | 問合せ先   | 締切                       |
|-----------------|--|---------------------------|--|--------------------------|
| 24～26           | 日本実験力学会2022年度年次講演会(鳥取大)  | 日本実験力学会                   | TEL 025-368-9310<br>office-jsem@clg.niigata-u.ac.jp<br>https://jsem.jp/event/Annual22/index.html         | 5.10                     |
| <b>2022年9月</b>  |  |                           |  |                          |
| 4～8             | 第18回アルミニウム合金国際会議(ICA18)(富山)  | 軽金属学会                     | http://www.icaa18.org/   |                          |
| 4～9             | 第18回液体及びアモルファス金属国際会議(LAM18)(広島)  | 第18回液体及びアモルファス金属国際会議組織委員会 | TEL 082-424-6555<br>masinui@hiroshima-u.ac.jp<br>https://lam-18.hiroshima-u.ac.jp/                       |                          |
| 7～9             | 2022年度工学教育研究講演会(関東地区大学とWeb開催)  | 日本工学教育協会                  | TEL 03-5442-1021<br>kawakami@jsee.or.jp<br>https://www.jsee.or.jp/event/conference/                      |                          |
| 9               | 第102回レアメタル研究会(東大生産技研/Web開催)  | レアメタル研究会                  | TEL 03-5452-6314<br>tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp<br>https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html |                          |
| 11～16           | The 22nd International Vacuum Congress(IVC-22)(札幌)   | 日本表面真空学会<br>日本学術会議        | TEL 03-3812-0266 ivc22@jvss.jp<br>https://ivc22.org/   |                          |
| 20～23           | 日本金属学会秋期講演大会(福岡工業大学)(予定)(本号297頁)   | 日本金属学会                    | TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312<br>annualm@jim.or.jp   | 講演<br>7.8<br>参加予約<br>9.2 |
| 28              | 日本金属学会秋期講演大会第8回「高校生・高専学生ポスターセッション」(オンライン開催)(本号308頁)  | 日本金属学会                    | TEL 022-223-3685 FAX 022-223-6312<br>annualm@jim.or.jp   | 7.15                     |
| <b>2022年10月</b> |  |                           |  |                          |
| 19～21           | 第41回電子材料シンポジウム(EMS41)(榎原)  | 電子材料シンポジウム運営委員会           | TEL 03-5841-3840<br>kazu-n@g.ecc.u-tokyo.ac.jp<br>https://ems.jpn.org/                                   |                          |
| <b>2022年11月</b> |  |                           |  |                          |
| 4               | 第103回レアメタル研究会(チタン関係シンポジウム)(東大生産技研/Web開催)   | レアメタル研究会                  | TEL 03-5452-6314<br>tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp<br>https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html |                          |
| 7～9             | 第43回 超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム(同志社大)   | 超音波エレクトロニクス協会             | TEL 042-443-5166 h.nomura@uec.ac.jp<br>https://www.use-jp.org/   |                          |
| 11              | 第24回ミレニアム・サイエンスフォーラム(東京)   | ミレニアム・サイエンス・フォーラム         | TEL 03-6732-8966<br>msf@oxinst.com<br>http://www.msforum.jp/   |                          |
| 22～25           | The 1st International Symposium on Iron Ore Agglomerates (SynOre2022)(第1回鉄鉱石塊成鉱に関する国際シンポジウム)(島根) | SynOre2022 組織委員会, 日本鉄鋼協会  | TEL 03-6369-9984<br>synore2022@issjp.com<br>https://synore2022.com/index.html                            |                          |
| <b>2022年12月</b> |  |                           |  |                          |
| 1～2             | 2022年度粉末冶金入門講座II(ハイブリッド開催)   | 粉体粉末冶金協会                  | TEL 075-721-3650<br>info@jspm.or.jp https://www.jspm.or.jp/  | 11.10                    |
| <b>2023年1月</b>  |  |                           |  |                          |
| 6 or 13         | 第104回レアメタル研究会(貴金属シンポジウム)(東大生産技研/Web開催)   | レアメタル研究会                  | TEL 03-5452-6314<br>tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp<br>https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html |                          |
| <b>2023年3月</b>  |  |                           |  |                          |
| 10              | 第105回レアメタル研究会(東大生産技研/Web開催)  | レアメタル研究会                  | TEL 03-5452-6314<br>tmiya@iis.u-tokyo.ac.jp<br>https://www.okabe.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/index_j.html |                          |



2022年秋期講演大会講演申込が今月より始まります。ご確認をお願いします(本号297頁)。

まてりあ 第61巻 第5号(2022) 発行日 2022年5月1日 定価1,870円(本体1,700円+税10%)送料120円

発行所 公益社団法人日本金属学会

〒980-8544 仙台市青葉区一番町一丁目14-32

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

発行人 山村英明

印刷所 小宮山印刷工業株式会社

発売所 丸善雄松堂株式会社

〒160-0002 東京都新宿区四谷坂町10-10

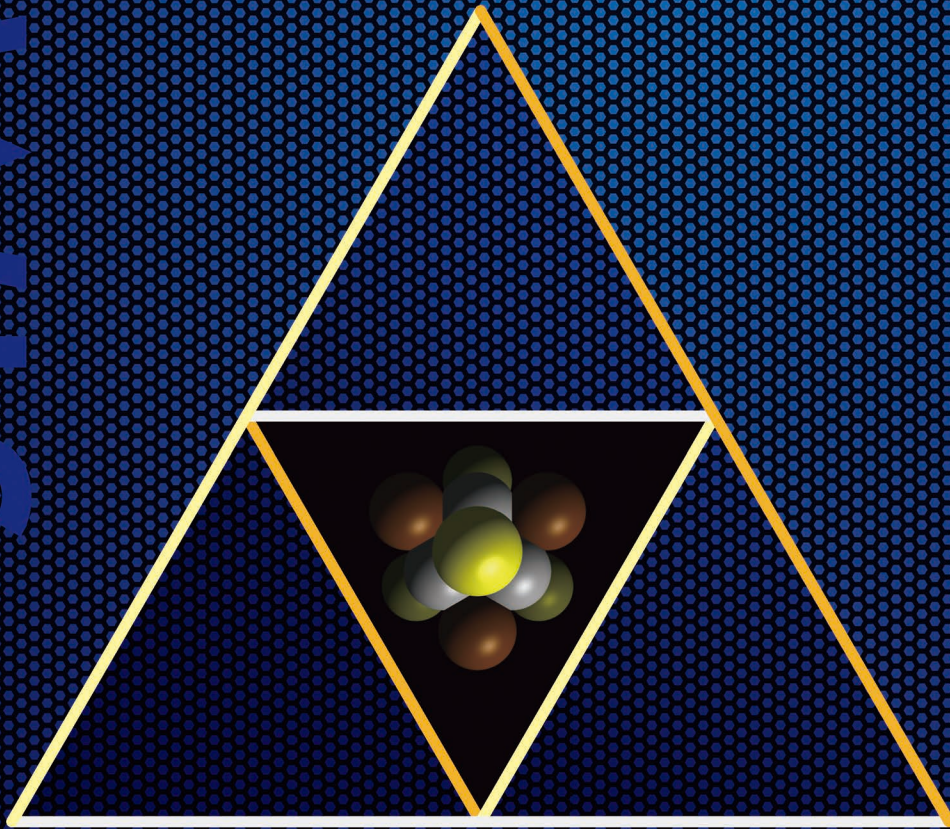




# JIMM

The Japan Institute of Metals and Materials

公益社団法人  
日本金属学会



The Japan Institute of Metals and Materials

<https://jim.or.jp/>

🔍 日本金属学会

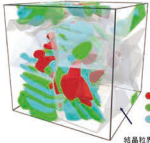


# 日本金属学会について

公益社団法人日本金属学会は、『金属に関する理論ならびに工業の進歩発達をはかること』を目的とした学術団体として、本多光太郎先生のご提唱により1937年(昭和12年)2月14日に創設され、2013年(平成25年)3月1日に公益社団法人に移行しました。本会は現在に至るまで、金属及びその関連材料に関する研究成果を世界に発信する学会として活発な活動を展開しています。近年は、社会基盤材料をはじめエネルギー関連材料、電子・情報・光関連材料、生体・福祉材料、材料と社会、環境・リサイクルプロセスや計算科学等へと対象分野も拡大し、基礎から応用までを幅広くカバーする材料科学・材料工学の中心的学会となっております。材料分野のリーディング学会として活動しています。

## 日本金属学会の研究分野

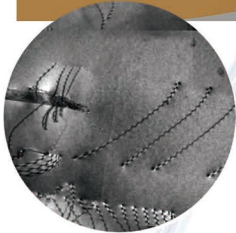
### 組織・計算科学



- 相安定性・相変態
- 組織制御
- 分析・解析・評価
- 計算材料科学・データ科学

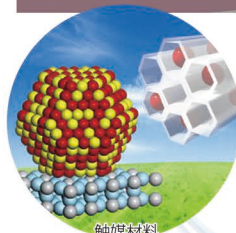
相変態  
フェーズフィールドシミュレーション結果  
鉄鋼中のfcc-bccマルテンサイト変態

### 力学特性



- 強度・変形・疲労・破壊
- 欠陥と組織
- 多結晶組織・超微細粒組織
- 金属間化合物

### 材料化学



- 耐食性・耐酸化性
- 表面・界面・触媒
- 腐食・めっき

触媒材料

### 材料と社会 先進機能材料

- 教育・ダイバーシティ
- 歴史・材料考古学
- 技術革新・技術伝承
- 環境 ● 萌芽材料



### 物性 電気・磁気 関連材料

- 磁気・電気・構造物性
- 電気・電子・光関連材料
- 磁性材料



### 基礎

### 材料プロセッシング

- 環境・リサイクルプロセス
- 高温・溶解・凝固プロセス
- 固形プロセス・溶接プロセス

### 応用

### エネルギー 関連材料

- 原子力材料
- 熱電材料
- 水素・電池関連材料



各分野の詳細は  
こちらから



### 構造材料

- 金属材料
- 軽金属・セラミックス材料
- 耐熱材料
- 機能性構造材料・複合材料



### 生体・医療・福祉

- 生体材料基礎・生体応答
- 生体材料設計開発・臨床



## 関連する新学術(学術変革)領域研究

日本金属学会に関連した以下の研究が現在進められています。



### ミルフィーユ構造の材料科学

(2018年度～2022年度)

<https://www.mfs-materials.jp/index.html>



### ハイドロジェノミクス

(2018年度～2022年度)

<https://www.hydrogenomics.jp/index.html>



### ハイパーマテリアル

(2019年度～2023年度)

<https://www.rs.tus.ac.jp/hypermaterials/index.html>



### ハイエントロピー合金

(2018年度～2022年度)

<https://highentropy.mtl.kyoto-u.ac.jp/>



### 機能コアの材料科学

(2019年度～2023年度)

<https://www.core.mp.pse.nagoya-u.ac.jp/>



### 超温度場3Dプリント

(2021年度～2025年度)

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/super3dp/>

など



## △ 機関誌

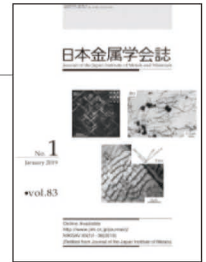
### まてりあ

会員の情報交換や啓発・教育を目的として、様々な材料の基礎から応用に至るまでの研究開発を総合的に支援する日本金属学会の会報誌です。主な記事として「入門講座」「講義ノート」「解説」「最近の研究」があります。



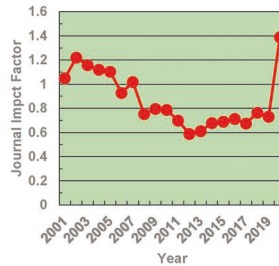
### 日本金属学会誌

1937年に創刊し、金属・材料に関する幅広い分野の研究成果を対象とする貴重な和文学術論文誌であり、研究成果を日本語で情報発信しています。投稿は無料です。



## MATERIALS TRANSACTIONS

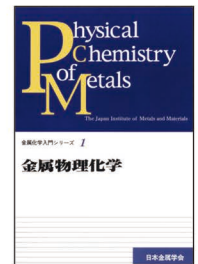
1960年にTransactions of The Japan Institute of Metalsとして創刊し、2000年に材料系学協会との共同刊行を開始してMaterials Transactionsと誌名を改め、現在は材料系14学協会が参加している金属・材料に関する研究成果を広く国内外に情報発信している英文学術論文誌です。



Materials Transactionsのインパクトファクターの推移

## 図書類

金属化学入門シリーズや現代の金属学といった教科書や金属データブック、金属工学シリーズなどの専門書を刊行しています。



## △ 調査・研究事業

### 分科会

関連が深い専門分野の研究者や技術者が集う分科を2019年に再編し、9分科で「調査研究委員会」の活動を行っています。先端領域や学際的領域の研究を促進する目的で「研究会」や「若手研究グループ」が活動しています。

### フロンティア研究助成

金属及びその関連材料分野の学術研究及び技術研究の発展や若手研究者の育成や奨励を目的に研究費を助成しています。

### 国際連携

米国、韓国等の海外の学協会との交流、研究者の相互派遣や国際会議の開催を行っています。今後、インドやASEAN諸国との連携を強化する予定です。

## △ 講演大会

最新の研究成果を発表・討議するとともに、会員間の交流を図ることを目的として、毎年春秋2回の「講演大会」を開催しています。一般セッション講演やポスターセッション講演の他、特別講演やシンポジウム講演、日本鉄鋼協会との共同セッション講演、高校生・高専生ポスター発表等を合わせて約900件の講演があり、約1500名が参加しています。会員間の交流を図るために懇親会を開いています。また、講演大会は日本鉄鋼協会と同じ日程・場所で開催しています。



## △ セミナー・シンポジウム

専門知識の普及や啓発、教育を目的として「セミナー」「シンポジウム」や「講習会」を開催しています。国際会議もこれまでに25件を本会主催で開催しています。



### 過去のセミナー

「熱力学と組織形成の基礎」「高温酸化腐食の基礎」「転位を知る」「材料の力学特性向上を目指して」「状態図および相変態の基礎と応用」「状態図・相変態の基盤と実践的ノウハウ」「半導体における点欠陥と拡散」など

## △ 表彰・奨励

優れた研究や技術開発の成果を挙げた者や当該分野の発展に寄与した者の表彰や今後の貢献が期待される者の奨励を目的として、毎年17件の表彰・奨励を行っています。



### 各種賞

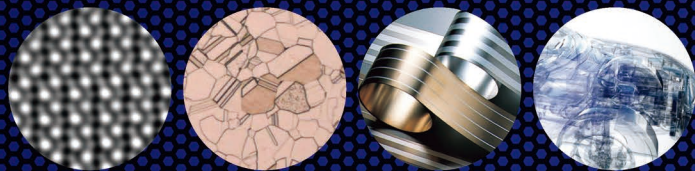
学会賞、村上記念賞、技術賞、増分量賞、谷川・ハリス賞、功績賞、研究技能功労賞、村上奨励賞、奨励賞、技術開発賞、金属組織写真賞、論文賞、新進論文賞、まてりあ賞、優秀ポスター賞など

## △ 支部活動

全国の8支部も活発に活動しており、各支部で独自に講演会・講習会(支部講演大会、本多光太郎記念講演会、セミナー)、研究会、見学会などを実施しています。



# 金属×挑戦＝革新 金属で未来を拓く・創る！



## △ 入会案内

本会は、金属及びその関連材料分野の学術および科学技術の振興を目的として、学術誌や学術図書の刊行、講演会や講習会の開催、調査・研究、表彰・奨励の事業を行っています。基礎、応用に関わらず、社会基盤材料をはじめエネルギー材料、電子・情報材料、生体・福祉材料、材料と社会、プロセス開発等の分野でご活躍の研究者、技術者、学生の皆様、当該分野に関心のある方への入会をお待ちしております。若手や学生の会費は他の半額以下となっています。

## △ 会費

| 会員種別(個人会員)    |       | 入会金(円) | 年会費(円) |
|---------------|-------|--------|--------|
| 正員・<br>外国一般会員 | 31歳以上 | 1,000  | 10,000 |
|               | 30歳以下 | 1,000  | 5,000  |
| 学生員・外国学生会員    |       | 不要     | 4,000  |

会員にはまてりあが配付されます。また、外国会員の方はまてりあ、会誌、Materials Transactionsのいずれかを選択できます。

## △ 維持員（団体会員）

- 企業等の法人や団体は維持員として入会できます。
- 維持員の社員や職員は本会主催の各種イベント等の参加や本会発行の刊行物の購入が会員価格となります。
- 年会費：一口5万円(複数口の申し込み可)

## 日本金属学会事務局

〒980-8544 宮城県仙台市青葉区一番町1丁目14番32号  
 フライハイトビル2階  
 TEL:022-223-3685 FAX:022-223-6312  
 Email: member@jim.or.jp

## 会員特典

### I 刊行物購読・論文投稿

- 会報「まてりあ」の無料提供
- 機関誌や教科書等の刊行物の会員価格での購入
- Materials Transactionsの投稿料の割引
- 米国ASM Internationalの刊行物を会員価格で購入可能

### II イベント参加

- 講演大会への会員参加費での参加及び登壇費の免除
- 本会主催や協賛のセミナー・シンポジウム・講習会等への会員割引価格での参加が可能
- 各支部の行事に優先的に参加が可能
- 鉄鋼協会の講演大会に会員料金で参加が可能

### III 研究支援

- 各分野の専門家集団で構成される分科会の活動に参加が可能
- 最先端の研究を討議する研究会が開催する研究集会に参加が可能
- 研究会や若手研究グループの設置が可能
- 研究助成の受給が可能

### IV 交流促進

- 講演大会や研究集会での情報交換や人脈の形成が可能
- 講演大会の懇親会に参加が可能

### V キャリア形成・ステータス向上

- 本会主催の企業説明会に参加が可能
- 多様な表彰・奨励を受けることが可能
- 本会外の表彰への推薦が可能

入会は  
こちらから



URL:[https://jim.or.jp/INTERNET/member\\_index.html](https://jim.or.jp/INTERNET/member_index.html)



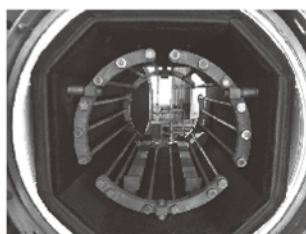


# 高断熱+省エネ

URL:<http://www.mechanical-carbon.co.jp/>

- 高純度カーボングラファイト部品(純度5ppm以下)
- C/C(カーボン・カーボン)材による精密加工
- カーボン成形断熱材、カーボンフェルト
- 回転式アルミ脱ガス装置用ローター
- 高温真空炉 炉内メンテナンス、カーボンヒーター
- メカニカルシール、パッキン等の摺動部品修理・改造

高温真空炉



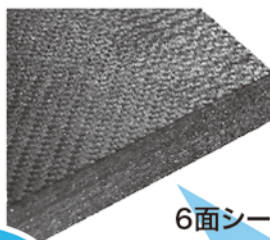
カーボンヒーター



シール



6面シート  
貼り



カーボンフェルト



## CO<sub>2</sub>削減



## メカニカルカーボン工業株式会社

本社:247-0061 神奈川県鎌倉市台5-3-25 TEL.0467-45-0101 FAX.0467-43-1680  
工場:新潟工場・本社工場・野村工場(愛媛)・広見工場(愛媛) 事業所:郡山・東京・大阪・松山・周南・福岡  
お問い合わせEメール [mck@mechanical-carbon.co.jp](mailto:mck@mechanical-carbon.co.jp)



# 日本金属学会発行誌 広告のご案内

## まてりあ (会報)

前付) 1色1P ¥100,000 (税別) 1/2P ¥60,000 (税別)

後付) 1色1P ¥95,000 (税別) 1/2P ¥55,000 (税別)

※表紙回り、カラー料金等お問い合わせ下さい。

## 春・秋期講演大会プログラム

後付) 1色1P ¥70,000 (税別) 1/2P ¥40,000 (税別)

広告ご掲載についてのお問い合わせ・お申込み

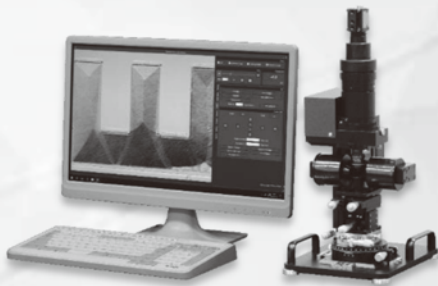
株式会社 明 報 社

〒104-0061 東京都中央区銀座7-12-4 友野本社ビル

TEL (03) 3546-1337 FAX (03) 3546-6306

E-mail [info@meihosha.co.jp](mailto:info@meihosha.co.jp) HP [www.meihosha.co.jp](http://www.meihosha.co.jp)

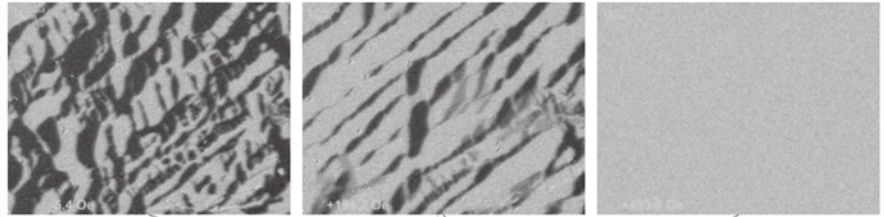
## データ取得時間 最短10秒！ 小型磁区観察顕微鏡



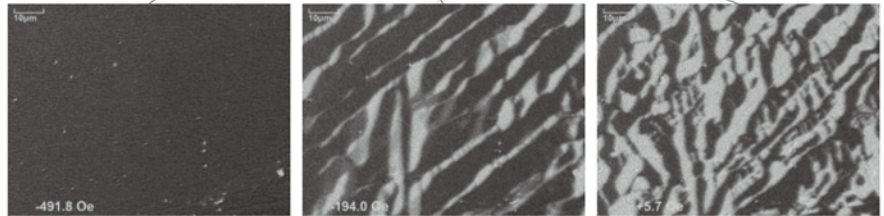
- 面内磁場掃引下における磁区構造変化をリアルタイムに観察
- LED光源採用による低ランニングコスト。お求めやすい低価格設定
- 試料加熱(200℃)のご要望がございましたらぜひご相談ください

### 磁場掃引下 電磁鋼板 研磨面 磁区構造変化の様子

画像輝度変化より取得した磁気履歴曲線  
(付属観察ソフトウェアにて取得) (取得画像120枚から各所画像抜粋)



\*50倍対物レンズ使用  
取得画像: 計120枚  
取得時間: 10秒



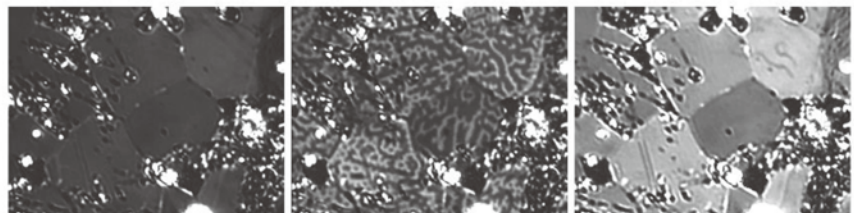
## 最大2T！ 高磁場印可対応 磁区観察顕微鏡



- 最大±2Tの磁場掃引下の磁区挙動観察に対応
- 観察試料の加熱オプション(室温→200℃)など、豊富な製作事例を基に多様なご要望にお応えします

### 磁場掃引下 Nd磁石研磨面 磁区構造変化の様子

#### ● 垂直方向磁場掃引

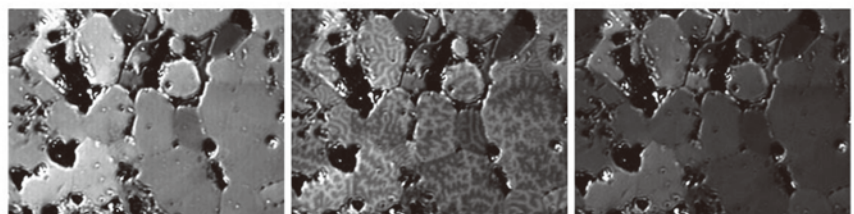


-1.7 T

0 T 近傍

+1.7 T

#### ● 面内方向磁場掃引



-1.5 T

0 T 近傍

+1.5 T

詳細については下記Eメールまたは電話番号へお問合せをお願いいたします。

**NEOARK** **ネオアーク株式会社**  
URL <http://www.neoark.co.jp>

- Eメール [info@neoark.co.jp](mailto:info@neoark.co.jp)
- 営業部 〒192-0015 東京都八王子市中野町2062-21 (TEL: 042-627-7432)
- 大阪支店 〒541-0056 大阪市中央区久太郎町2-3-8-201 (TEL: 06-6271-5123)
- 本社第1工場・第2工場 (東京都八王子市中野町)