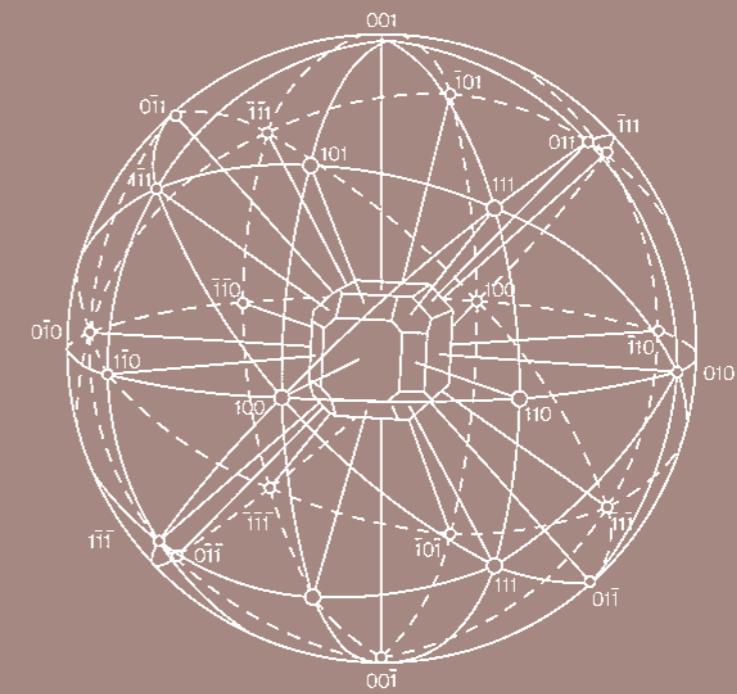


# 材料科学

*Materials Science*

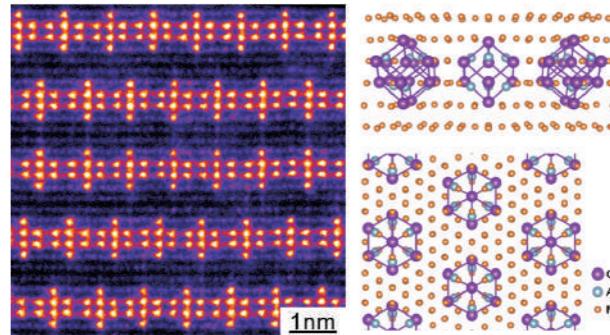


京都大学大学院工学研究科材料工学教室  
<http://www.ms.t.kyoto-u.ac.jp/>

# [材料科学]

## 新材料の登場は既存概念を変える！

我々は、物質が本来有する物性を「機能」として発揮するよう  
に、電子・原子・分子・結晶格子・組織構造という様々な階層  
レベルで設計し、全く新しい「材料」を創造する理論・技術を  
構築しています。このような新材料開発は革新技術の発展にお  
いてパラダイムシフトを引き起します。



新規高強度・高韌性 Mg 合金中の析出相 (LPSO 相) の結晶構造。最新の高分解能走査透  
過電子顕微鏡 (STEM) を用いた構造解析(左)とともに原子配列構造を決定し、理論計算に  
より安定構造を確認しました(右)

## CONTENTS

一材料工学への誘いー	2
材料設計工学	4
表面処理工学	6
物質情報工学	8
ナノ構造学	10
量子材料学	12
結晶物性工学	14
構造物性学	16
先端材料物性学	18
磁性物理学	20
材質制御学	22
機能構築学	24
非鉄製鍊学講座（寄附講座：三菱マテリアル）	26
材料工学教室の移り変わり	28
材料工学専攻修士課程修了者就職先	30

材料科学・材料工学は、新たな材料を作り出し、未だ世にない新しい  
物を作るため必要な材料を創造する学問・技術です。そのままだと錆  
びてしまいぼろぼろになる鉄も、錆びにくくステンレス鋼というものが  
創りだされ、世の中の機械・建築構造物の設計を大幅に変更するこ  
とがきました。高強度特性をもてば建造物のデザインもスマートになり、  
高層ビルや複雑なタワーなどが建設できるので、美術にこだわった意匠  
性までが変わります。また、1000°Cまで耐えられる既存のタービンブ  
レードが、将来的に2000°Cまで耐えられる材料に置き換えられたなら、  
ガスのエンタルピー落差をより大きく使えるため熱・仕事の変換効率は  
格段に上がりますし、そもそも1000°Cまでガス温度を落とすような余  
分な配管なども必要ありません。このように、新材料の登場は、機械や  
建築の設計概念を変えてしまう力を持っているのです。ハイテク機器用  
の機能性材料についても同様です。材料の機能性を使っている例として、  
磁性を利用した記録装置、また磁気抵抗効果を利用して磁気記録の読み  
取り装置、アモルファスと結晶の反射率の差を利用してDVDやBlu-  
ray用光相変化材料、半導体バンドギャップを利用した太陽電池用パネ  
ルや青色発光ダイオードなど、多くのデバイス機器が開発されてきました。  
このようなデバイス開発の背景には、新材料の発見・開発が必ず潜  
んでいます。また、エネルギー関連事業にも多大な貢献をしています。  
変換効率の高い半導体デバイスの開発、中温で作動する燃料電池用のブ  
ロトン伝導体や酸化物イオン伝導体の開発、エネルギー貯蔵用リチウム  
イオン電池用の電極材料開発や新型蓄電池の開発など、多岐にわたる材  
料研究がおこなわれています。

# －材料科学・材料工学への誘い－

高校生、大学生をはじめとする一般のみなさん、材料科学・材料工学と聞いてピンとくるでしょうか？多くの人はイメージが湧かないと思います。それもそのはずです。まず高校生までの物理や化学の授業において、「材料」という言葉にあまり馴染みがないので、その意味がわかりにくく、物理なのか化学なのかもわからないし、更にそれを科学するとか工学するとか、もっと意味が分からずと思われるからです。ここでは、「材料科学コースでは、一体何をやってるんだ？」という疑問を解消することを目的とし、我々の仕事である「材料科学・材料工学」の意味をみなさんにお伝えしたいと思います。

まず、「材料」と「物質」の違いを説明しましょう。世の中には、100以上程度の元素が存在しますが、それらの組み合わせで地球上に存在する物を「物質」と呼びます。例えば水素H原子2個で水素分子 $H_2$ 、炭素原子Cと酸素O原子2個で二酸化炭素 $CO_2$ 分子ができ気体として存在しますし、多数のMg原子あるいはFe原子が集合して結晶格子を形成し、マグネシウム金属あるいは鉄金属の塊となります。ところが、それらが即座に「材料」となるわけではありません。物質には、それぞれ必ず何らかの性質があります。例えば、重い・軽い、固い・柔らかい、光沢がある・くもる、電気を通す・通さない、熱を伝えやすい・伝えにくい、磁石にくっつく・くっつかない、透明・不透明、など種々の性質が備わっており、それらを「物性」と呼びます。そして、物質の本来有する物性を人類・地球にとって役立つ「機能」として發揮するように設計された物質を「材料」とよび、このような材料を創るために理論・技術を構築することを材料科学・材料工学といいます。京都大学工学部物理工学科・材料科学コースでは、このために必要な基礎学問（量子力学・量子化学・固体物理学、熱力学・統計熱力学・電気化学、材料強度学・転位論、材料組織学・状態図学、構造解析・化学分析法、そしてそれらを学ぶために必要なフーリエ変換・ラプラス変換・複素解析などの工業数学）を学び、進学先の大学院工学研究科・材料工学専攻では、材料工学分野に身を置き、実際に実験を行ったり、

論文を書いたりして、材料工学分野の一端を修得することになります。

これでもまだ、材料科学・工学というものがイメージににくいと思いますので、直感的な理解として、物理工学科における材料工学と機械工学の関係を、みなさんにも馴染み深い「料理」における素材と調理法の関係に対比させ、「おいしい料理を作る」ことを例にして説明してみましょう。料理において素材や具材のことを「材料」、英語では「Material」と言います。すでに具材が準備されており料理法を考案することは、今の例では機械工学とよく似ています。おいしい料理を作るには、洗練された素晴らしいレシピ（設計）が必要ですね。素晴らしい料理はまさに機械の美しさにも似ています。しかし、よく考えてみると、素材や具材がダメだと、いくらレシピや料理人の腕が良くてても、作られた料理の味にはおのずと限界がありますよね。もし素材や具材そのものをより高い品質のものにする、あるいは新たな優れた素材に抜本的に変えることができれば、同じレシピで作られた料理でも、飛躍的においしくなるはずです。このように、料理文化の発展には、品種改良された材料を使う、新しい素材を発見する、またその素材に適切な料理自体が新たに創作されるなど、多種多様な過程や方法があるでしょう。機械工学を料理のレシピ作りに比喩させるならば、材料工学はこの品種改良やその新たな具材の発見・創作に比喩させることができます。

さて本題に戻りましょう。上の関係性で言えば、機械工学は既存の材料を使用して機械構造の設計をする分野ですので、大胆に言ってしまえば、図面の作成と主に力学分野における数学的な解析技術を修得する必要があります。一方、材料科学・材料工学（英語でMaterials Science and Engineering）というのは、既存の材料の改良は勿論のこと、それだけではなく、それらを基礎として全く新たな材料を作り出し、未だ世にない新しい物を作るために必要な材料を創造する仕事と言えます。例えば、ヒッタイト時代に作り出された鉄と現在の鉄鋼業で造り出されている鉄鋼の品質は

全く異なることは容易に想像ができるでしょう？そのままだと錆びてしまいぼろぼろになる鉄も、クロム元素を添加することにより（何故この元素を入れるかという点は学問的に面白い問題ですが）錆びにくいステンレス鋼というものが創りだされ、世の中の機械・建築構造物の設計を大幅に変更できました。高強度特性をもてば建造物のデザインもスマートになり、高層ビルや複雑なタワーなどが建設できるので、美術にこだわった意匠性までが変わります。また、1000°Cまで耐えられる既存のタービンブレードが、将来的に2000°Cまで耐えられる（高温と遠心力に負けない）材料に置き換えられたなら、ガスのエンタルピー落差をより大きく使えるため熱・仕事の変換効率は格段に上がりますし、そもそも1000°Cまでガス温度を落とすような余分な配管なども必要ありません。このように、新材料の登場は、機械や建築の設計概念を変えてしまう力まで持っているのです。以上は、材料の構造性に着目した材料科学の特徴を述べてみましたが、ハイテク機器用の機能性材料についても同様です。材料の機能性を使っている例として、磁性を利用した記録装置、また磁気抵抗効果を利用して磁気記録の読み取り装置、アモルファスと結晶の反射率の差を利用したDVDやBlu-ray用光相変化材料、半導体バンドギャップを利用した太陽電池用パネルや青色発光ダイオードなど、多くのデバイス機器が開発されてきました。このようなデバイス開発の背景には、必ず新材料の開発が潜んでいるのです。例えば、磁気記録において面内磁化を利用していたものから、垂直磁気異方性のある材料が開発されたことにより垂直磁気記録方式に変更され、その結果、記録密度を大幅に上げることができ、光相変化材料は光誘起でナノ秒レベルの高速構造変化が可能であることを利用しているのです。また磁気特性の異なる多層膜を作製することにより巨大磁気抵抗が発現することが発見されたことにより、磁気記録の読み取りに利用できる素子が発案されました。発光ダイオード(LED)の発光色は、バンドギャップ（電子のエネルギー準位において電子が占有できない禁制帯）の大きさに依存するのですが、なかなか青色を発光できるバンドギャップ（2.5 eV程度）を有する半

導体が作製できない状態が続いていましたが、よく知っているように青色半導体GaNが開発され、RGBという色の三原色が揃ったことにより、信号機なども省エネであるLEDに置き換わりました。エネルギー関連事業にも多大な貢献をしております。太陽光発電用の変換効率の高い半導体デバイスの開発、中温で作動する燃料電池用のプロトン伝導体や酸化物イオン伝導体の開発、エネルギー貯蔵用リチウムイオン電池用の電極材料開発や新型蓄電池の開発など、多岐にわたる研究展開が行われています。新材料開発は新技術の開発においてパラダイムシフトを引き起こすのです。

人類が単なる「物質」ではなく機能を有する「材料」を利用するようになります。私たちの生活がどれだけ豊かになります、どれだけ活動範囲が広がったか、材料が果たしてきた文明・文化への寄与がどれほど大きいものかを想像することはそれほど難しくないでしょう？材料科学というのは、物理と無機化学の融合分野であり、この現代社会において、「材料」はあらゆる産業の基幹をなすとともに、革新的な技術の源流となっており、その果たす役割はますます重要になっております。この観点から、材料科学・材料工学を制するものが技術を制し、未来を開拓するでしょう。わが国は、世界の「材料科学・工学」の中心的役割を担っており、その中でも京都大学材料工学専攻は、自由な学風と発想のもとで100年以上にわたって多彩な人材を輩出し、わが国の材料科学分野を基礎学問と産業応用の両面で常に牽引してきました。全く新たな次世代の革新材料を創造し、社会の変革に寄与したいと思っているみなさん、真の材料研究を、材料科学コースでやってみませんか？

# 原子～ナノ構造の解明から特性の理解と設計へ

## 材料設計工学

Materials Design based on Structures and Properties

奥田 浩司、黒川 修

放射光／量子線および走査トンネル顕微鏡を用いたナノスケールの材料組織・特性評価から新しい材料の設計を目指します

### 「放射光による階層的な相転移現象の研究」

材料の構造は原子スケールからマクロスケールまで多くの階層から出来上がっており、それぞれのスケールでの構造の特徴が材料全体の特性を決めています。例えば軽量Mg合金であるMg-Y-Zn合金では、長周期積層秩序構造(LPSO構造)と呼ばれる複雑な構造を含むことで軽くて強いという優れた特性を示すようになります。放射光を利用したその場測定をおこなうことにより、LPSO構造が形成される過程は、その部分構造がYとZnのクラスターとして成長し、それがさらにひとつの分子のように振舞って高次の秩序構造を組み立てるという階層的相転移過程をとることが明らかになりました。さらに元素の組み合わせを変えることによってLPSO構造が組み立てられていく仕組みがどのように変化するかを調べ、このような風変わりな秩序が作られていく理由と、その制御方法について明らかにしていきます。

### 「量子ビームを利用した薄膜中の秩序構造の分布と形成過程の評価」

基板の表面にトレンチや円柱状のキャピラリーなどの微細な周期構造を形成したり、ナノ粒子を分散させる技術は材料表面の特性制御(吸着、微粒子固定、フォトニック結晶など)に利用できます。その方法のひとつに基板表面に薄膜を形成し、その自己組織化過程を利用するというものがあります。例えばブロック共重合体のミクロ相分離を利用して薄膜の内部構造を制御する場合、分子量、体積率、温度を選ぶことにより種々の構造が実現できることが知られています。しかし薄膜であるために表面や界面などの影響を強く受け、状態図から期待されるとおりの構造が実現されるとは限りません。X線を基板すれすれの角度で入射することにより、薄膜内部のナノ構造を深さ分解評価することができます。特に透過能が小さいtender X線と呼ばれる1～2keVのエネルギーのX線を利用することにより、薄膜内部の構造形成、あるいは構造破壊がどこから始まるのか、どのように進行するのか、といった課題に取り組んでいます。

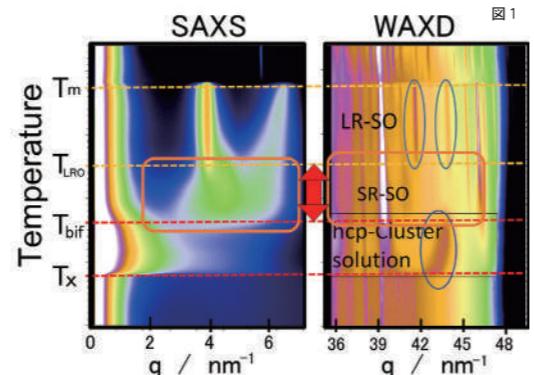


図1 放射光でMg85Y9Zn6アモルファス試料の昇温中のナノ構造(左)と原子配列(右)の変化を同時に実時間で計測した結果。過飽和hcp結晶から短範囲積層秩序(SR-SO)が形成され、その後長周期積層秩序(LR-SO=LPSO)が出現することを示している。Y8Zn6クラスター分布の面内・面間の距離分歧は短範囲積層状態で生じる。

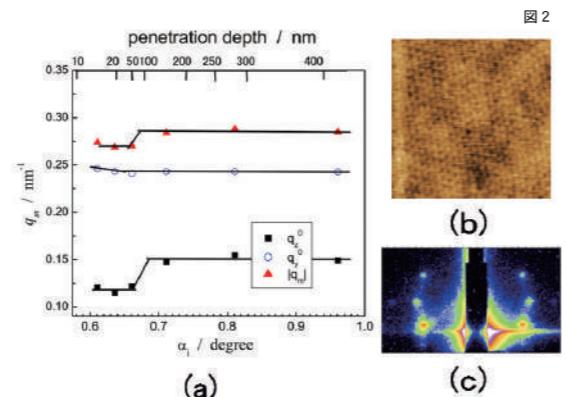


図2 軟X線によるすれすれ入射X線散乱像と、高分子の作る秩序構造の深さによる変化。(a)秩序構造の格子定数の深さ依存性。(b)同じ膜の表面のSPM像。(c)すれすれ入射散乱パターン。ミクロ相分離により形成された格子定数が表面近傍で緩和していることが示された。

### 「走査トンネル顕微鏡による表面原子分解能観察」

走査トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscopy: STM)は先端が非常に尖った探針でトンネル電流を検知しながら表面を走査する顕微鏡です。

表面の原子一つ一つをイメージすることができるためナノテクノロジーを支える重要な観察手法として多くの研究分野に応用されています。

我々の研究室ではSTMの非常に高い空間分解能を生かして表面ナノ構造の原子分解能での観察を行っています。図3はAg(111)上に少量の炭素イオン入射を行った表面のSTM像です。観察されている構造のうち一番大きなものの直径は約0.55nmで形状が完全に揃っています。これは下地Ag(111)の影響を受けて構造が生成したからであると考えられ、STMによってこのような微小な炭素の構造の形成過程を研究することで、新奇な構造を持った材料を生成できるようになる可能性があります。またカーボンナノチューブやフラーレンの形成過程の理解に繋がるものと考えられます。

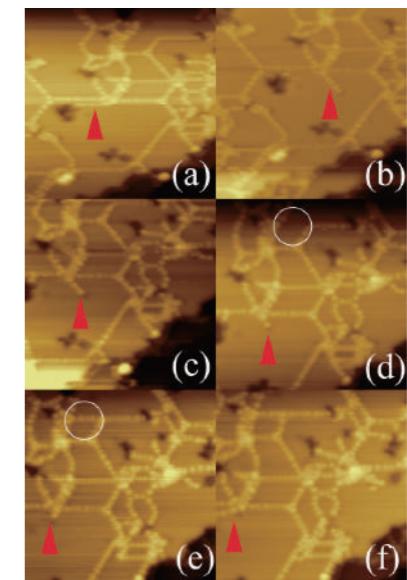


図3 (a)～(f)は同じ領域を数分おきにイメージングした結果。印を付けたところで炭素ナノ構造が自発的に配列を変化させていることがわかる。

### 「走査トンネル顕微鏡によるバルク材料中の組織観察」

STMは観察に適した表面の作製が可能であればバルク材料中の原子配列の研究に使用することも可能です。この場合、STMが表面敏感な測定手法であることから、非常に局所的な構造の変化・乱れを観察することができます。図4(a)にはMg-Y-Zn合金中に現れるLPSO構造のSTMによる観察結果が示されており、この構造中に存在するY,Znからなるクラスターの位置を一つ一つ計測することができます。我々はこのような観察からこの合金の生成プロセスの一端を明らかにすることができます。

ここに示したようにSTMによるバルク試料内部の観察は他の手法では得られない情報を提供できる場合があります。最近では試料全体の平均的な情報が得られる放射光を用いた測定結果とSTM観察の結果を比較検討することで、材料中の組織に関するより正確な情報を得るための試みを進めています。さらに当研究室ではより広範な試料に対してSTM観察を行うための新しい試料準備のための手法の研究も行っています。

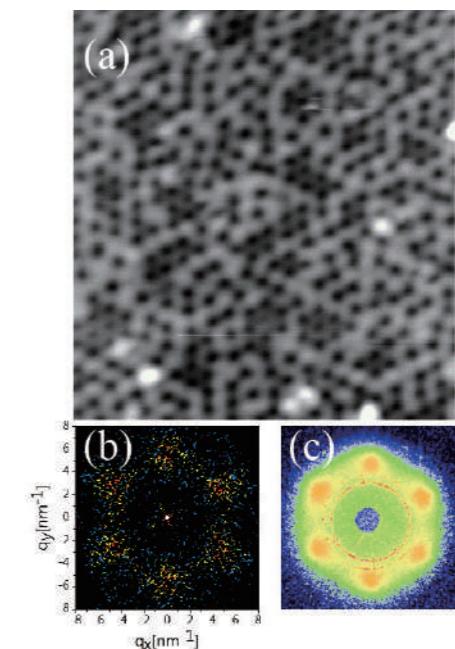


図4 Mg-Y-Zn LPSO合金のSTM観察の結果。(a)暗くイメージされているスポットが個々のZn-Yクラスターに対応している。(b)STM像のフーリエ変換の結果。(c)放射光による回折パターン。(b)の結果と比較することで材料組織のより正確な把握が可能になる。

# 電気化学・熱力学に立脚した 環境に優しい材料開発 表面処理工学

Design of Sustainable Materials and Processing

宇田 哲也、豊浦 和明、畠田 直行、岸本 章宏

電気化学・熱力学に立脚した物理現象の理解を通じて  
金属、セラミックス材料を用いた環境に優しい材料の物性探求  
および製造プロセスの開発に取り組んでいます。

## プロトン伝導性電解質を用いた中温型燃料電池

燃料電池は、化学エネルギーを効率よく電気エネルギーに変換でき、特に、固体電解質を用いた燃料電池は、小型化、高集積化が容易であり、その将来性が有望視されています。なかでも、中温域(400–600°C)で高いイオン伝導性を有するプロトン伝導性電解質を使用すれば、低温型(PEMFC)のように高価な白金系触媒を使用せず、高温型(SOFC)よりも安価な構造材を使用した中温型燃料電池が実現する可能性があります。当研究室では、プロトン伝導性電解質のひとつである、アクセプターをドープしたバリウムジルコネート(BaZrO<sub>3</sub>)について研究を行っています。これまでの研究により、600°Cで30mS/cmの大きな伝導度を実現し、さらに、水素極支持型燃料電池を試作した結果、開回路起電力1.03V、ピーク電力172mW/cm<sup>2</sup>を実現しました。現在、燃料電池のさらなる高性能化および高耐久性の実現を目指し、燃料電池作製プロセスおよび電極に関する研究を遂行しています。

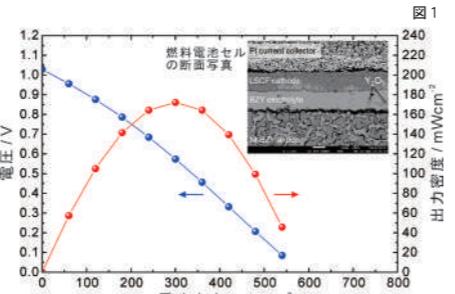


図1 プロトン伝導性固体電解質(BaZrO<sub>3</sub>)を用いた燃料電池の発電試験結果。挿入図は、燃料電池セルの断面写真。

## 固体イオニクス材料の高精度・高効率スクリーニング

固体内のイオン伝導性を理論的に予測するひとつ的方法として、伝導キャリアのポテンシャルエネルギー曲面(PES)マッピングがあります。これは、ホスト結晶中に細かいグリッドを導入し、各グリッド点でキャリアのPE計算を網羅的に行うものであり、その計算コストは結晶の対称性低下とともに急激に増大します。当研究室では、第一原理計算に機械学習技法のひとつであるベイズ最適化を組み合わせることで、高速かつ高精度でPESを評価する方法論を構築しました。具体的には、イオン伝導を支配する領域は結晶全体の一部分であることに着目し、その支配領域のみを選択的に評価するものです。この手法を用いてプロトン伝導性を有する立方晶ペロブスカイト型 BaZrO<sub>3</sub> の PES を評価したところ、全1768点のグリッド点のうち 30点程度の PE 評価でプロトン長距離伝導に対するポテンシャル障壁を精確に見積もることに成功しました。さらに、伝導に異方性のある正方晶シーライト型 LaNbO<sub>4</sub> に対しても同様の評価を行ったところ、高々 100点程度で ab 面内および c 軸方向のポテンシャル障壁を見積もることができました。開発手法を用いれば、無機結晶構造データベース(ICSD)に収録されている膨大数の多元系材料を高速かつ高精度でスクリーニングでき、理論計算主導の固体イオニクス材料探索が実現できます。

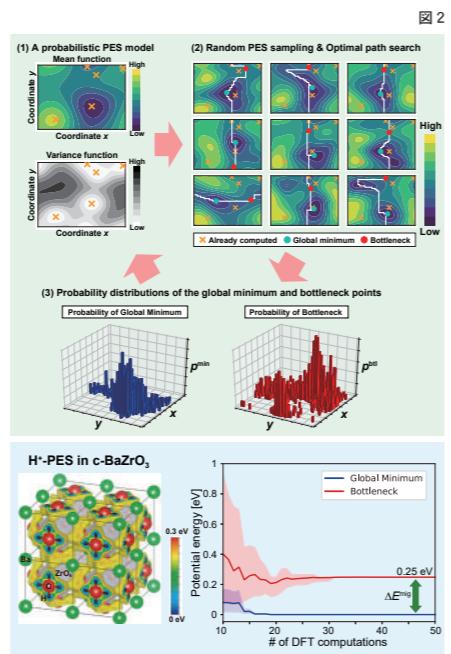


図2 (上図) 第一原理計算と機械学習を組み合ったPESマッピング手法のフローチャート。(下図) 立方晶ペロブスカイト型酸化物 BaZrO<sub>3</sub> 中におけるプロトンのPESに提案手法を適用した例。

## チタンの新製鍊プロセス

チタン(Ti)は軽く強靭な上に海水中で抜群の耐食性を示し、さらに資源量が豊富な金属です。しかし、Tiの製鍊と加工には特殊な方法と時間を要するために鉄やアルミニウムと比べて高コストとなり、その結果としてTiの用途は限られています。そこで、我々のグループではTiのコストの削減を目指し、2種類の新しい製鍊プロセスを研究しています。

1) チタン原料(TiCl<sub>4</sub>)をBi-Mg合金によって還元するという独自の方法により、まずはBi-Ti液体合金を生成します。その後、合金中のTiを濃縮し、真空蒸留によってTiとBiに分離します。このプロセスはTiの高速生産による低コスト化に加えて、Ti粉末の製造への応用が期待されています。これまでの研究で各工程の実証実験に成功しており、現在はより効率的な合金中のTiの濃縮や蒸留の高速化に取組んでいます。

2) 平滑電析を利用してTi板およびTi箔の直接製造プロセス

高温で溶融させたMgCl<sub>2</sub>やNaCl、KCl等の混合物(溶融塩)にTiCl<sub>4</sub>を添加した電解浴を用いて電気分解を行います。このとき、カソードではTi<sup>2+</sup>を還元してTiを平滑に析出させ、これをカソード基板から剥離することでTi板およびTi箔を直接製造します。当グループでは簡易な装置でもパルス電解法によるTiの平滑電析が可能であることを実証し、さらに析出したTi箔をカソード基板から剥離することに成功しました。

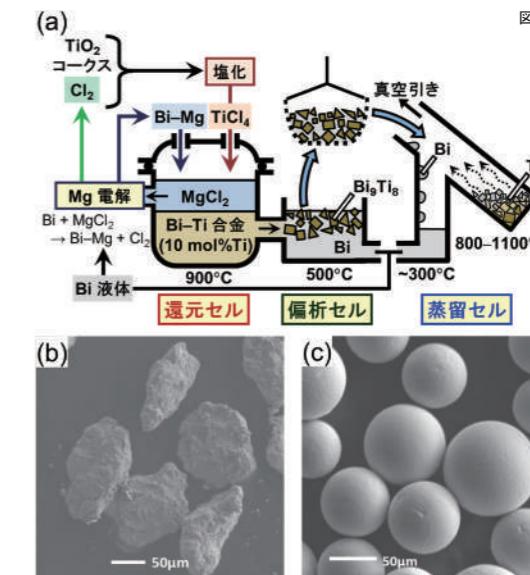


図3 (a) Biを用いたTiの新製鍊プロセス、(b) Bi-Ti合金の真空蒸留後に粉碎して得られたTi粉末、(c) (b)に球状化処理を行った球形Ti粉末。



図4 溶融塩中での電気分解によってMo基板上に析出させた後、基板から分離して得られたTi箔。

## 排熱の有効利用のための化学蓄熱材料

現在、工場や発電所では250°C以下の低温排熱が多量に捨てられています。蓄熱技術により排熱を蓄え、必要な場所・時間において有効利用できれば、化石燃料の使用量が低減できる可能性があります。そこで、化学反応の反応熱を利用した蓄熱技術に着目しています。その実現に向けては、排熱温度に適した反応温度と高い反応速度、十分な蓄熱密度を有する化学反応を探し出す必要があります。当研究室では、希土類硫酸塩の水和・脱水反応が100–250°C程度の温度域で高速に進行することを初めて見出しました。実験と計算機シミュレーションにより、この物質の脱水・水和反応は結晶構造中に水分子が脱挿入されることで進行しており、珍しい現象であることがわかりました。現在、この反応のメカニズムを詳細に調査するとともに、得られた知見に基づいて新しい化学蓄熱材の開発を目指しています。

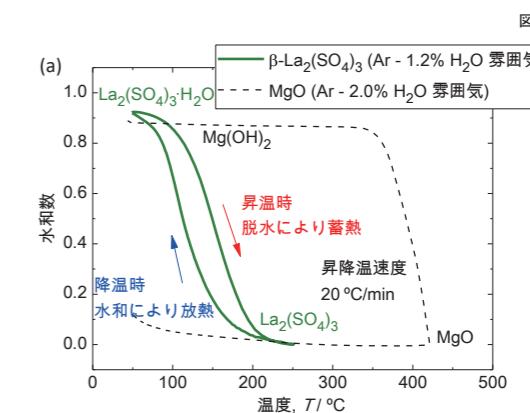


図5 (a)(b) 硫酸ランタン粉末の熱重量曲線と写真。昇温により脱水反応と水和反応が可逆的に起こっていることがわかります。(c) 硫酸ランタン1水和物の結晶構造。図の奥行方向に水(H<sub>2</sub>O)分子の拡散経路(通路)があることがわかります。

# 次世代の材料プロセス作り 新物質創生のための物理計測法の開発と材料科学への応用 物質情報工学

Materials Informatics

河合 潤、田中 亮平

多様な物質・材料を製造する過程で必要となる物質情報の計測・解析手法、デバイスの開発を行っています。

## 高精度・迅速分析のための携帯型分析装置の開発

現在の組成分析は大型の装置を利用して専用の分析室で行うことが一般的です。リサイクル現場、土壤や河川水などの環境試料測定など、測定したい場所に持ち込んで分析を行うためには分析装置のより一層の小型化が求められます。私たちは片手で持ち運ぶことができる全反射蛍光X線分析装置や偏光光学系蛍光X線分析装置、乾電池式電子発生装置の開発とそれを用いた手のひらに載る超小型の電子プローブマイクロアライザの開発、金属材料などに含まれる微量元素分析への応用に関する研究を行っています。また当グループでは、機械加工による金属部品と3Dプリンタによる樹脂部品を組み合わせることで、種々の光学系を有する分光装置の試作に取り組んでいます。3Dプリンタで用いる入力データは数値制御による機械加工で用いられるデータと同形式の3D-CAD(Computer Aided Data)形式であり、今まで機械加工で行っていた装置製作を3Dプリンタによる簡単な方式にそのまま置き換えることができます。金属部品から生じる妨害ピークを低減するための樹脂製部品、X線管や検出器を固定するためのホルダ、本格的な設計の検討を行うためのプロトタイプの製作に3Dプリンタを活用し、製作条件が分析精度・感度に及ぼす影響について評価を行なっています。また、鉄鋼材料分析におけるサンプリング量や試料形状を含めた試料調製法、X線の偏光性など光学系の影響、配管などのその場分析で想定される高温試料測定、遠隔分析の際の装置間の信号伝達処理など、種々の測定環境から生じる誤差因子を明らかにし、それらを装置開発に反映することで迅速かつ高精度な分析手法の確立を目指しています。

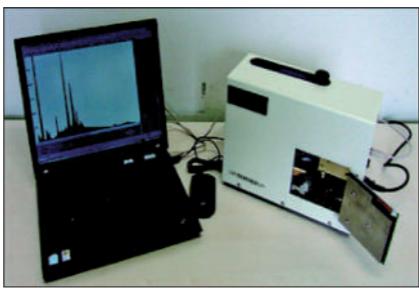


図1

図1 小型全反射蛍光X線分析装置  
従来の1000分の1程度の出力である5ワットのX線管から発生する白色X線を用いることで、装置の小型化に成功し、シンクロトロン放射光に迫る検出感度を得ることができます。

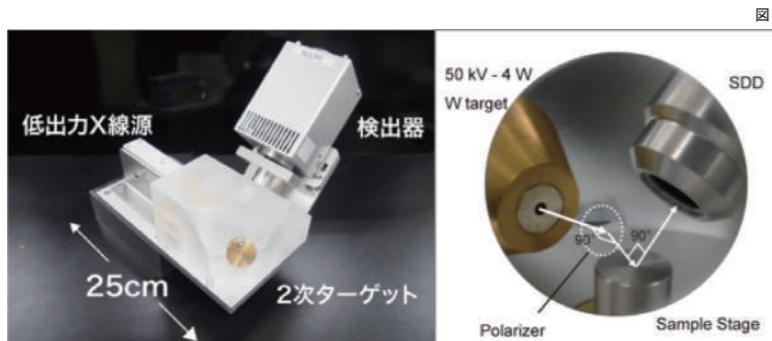


図2

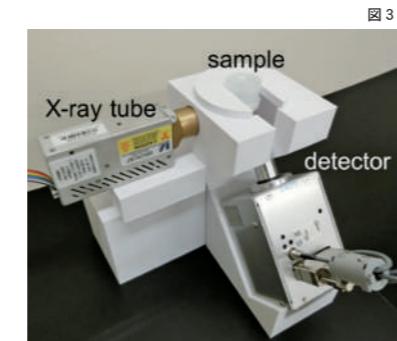


図3

図3 3Dプリンタで用いて製作した偏光光学系蛍光X線分析装置  
図2と同様の3D-CADを用いて製作した偏光光学系蛍光X線分析装置です。ホルダ内部に空洞を設けることで、高感度分析の妨げになる散乱線を低減しました。3Dプリンタで用いることで、このような設計の変更を容易に行なうことができます。

## 偏光蛍光X線分析の基礎研究

蛍光X線分析において、偏光したX線を入射X線として用いることで、スペクトル中のバックグラウンドを著しく低減できることが知られています。当グループでは、電子のスピン・軌道相互作用の観点に基づくX線スペクトルに対する偏光の影響の解明やコンプトン散乱における反跳電子のドブロイ波を利用したX線偏光子の開発を目指し研究を行っています。軽元素偏光素子からのコンプトン散乱を利用することで、数ワットのX線管から放射される白色X線をそのスペクトル領域全域にわたって同時に偏光する方法を考案、偏光素子において散乱されるX線強度の検出角度依存性を利用し、検出器とX線の偏光方向のなす角が0度および90度のときの散乱X線強度を測定することでX線の偏光度を評価できる簡易装置を作製しました。作製した装置を用い、弹性散乱断面積とコンプトン散乱断面積の比が異なる元素で構成される偏光素子からの散乱X線の偏光度を測定することで、X線偏光度と弹性・コンプトン散乱断面積比との間に相関があることを明らかにしました。

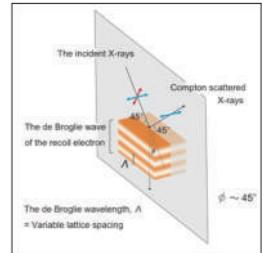


図4 Compton散乱における反跳電子のdeBroglie波を回折格子とみなしたときの偏光X線生成模式図

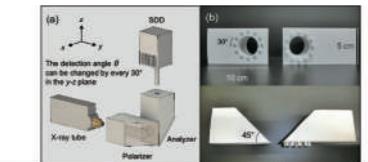


図5

図5 3Dプリンタで製作したX線偏光度測定装置。  
(a)3D-CAD、(b)装置概観、検出角度が(c)30度(d)60度(e)90度のとき。

## ED-XRFにおける高精度第一原理定量法に関する研究

迅速・多元素同時分析が可能なエネルギー分散型蛍光X線分析(ED-XRF)装置は、小型化・低価格化が加速し簡易分析可能な装置として普及しています。その一方、分析精度の悪化やアナログ信号処理方式からデジタル方式への転換に伴う分析装置の“ブラックボックス”化が進んでいます。当グループでは分析装置の信号処理過程における“ブラックボックス”を詳らかにすることで、ED-XRFを用いた簡易・迅速・精密な分析を目指しています。鉄鋼の工程管理分析などの高い精度が要求される分析には、上記の“ブラックボックス”を理由に定量補正法の議論を行なうことが難しいED-XRFは用いられず、分析元素に応じた分光結晶を複数台配置した波長分散型蛍光X線分析(WD-XRF)装置を用いた検量線法に基づく方法が用いられており、このWD-XRFによる定量法は日本独自の高精度鉄鋼分析手法として規格化されています。一方で、蛍光X線分析の主流がWD-XRFからED-XRFへ置き換わった現在、ED-XRFで得られた蛍光X線スペクトルを基に定量を行なった場合、鉄鋼分析の定量値がどの程度の精度や正確さを有するかを評価しておくことは重要であると考えられます。そこで当グループでは、標準試料を用いずに物理定数のみから蛍光X線の理論強度を計算し絶対定量値を得ることのできる第一原理計算法(ファンダメンタルパラメータ法)とED-XRFで測定した蛍光X線スペクトルを基にステンレス鋼中に含まれる元素の定量を行うことで、ED-XRFを用いた鉄鋼分析の精度と確度を評価しています。また、その際定量に用いる計算プログラムとXRF装置を自作し、理論強度計算式や入射X線スペクトルなどの入力パラメータを変更した場合の定量結果を比較し、計算過程と定量精度の関係について調べることで、ED-XRFにおける“ブラックボックス”的解消を目指しています。

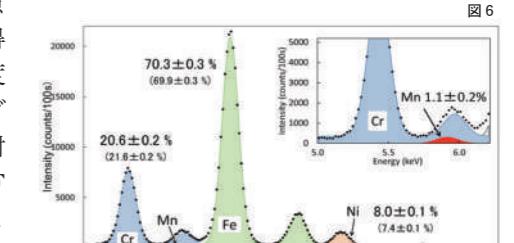


図6 自作の蛍光X線定量プログラムによるステンレス鋼材の定量分析。

## 物理計測・化学分析のためのデータ解析に関する研究

物理計測では検出器で測定したアナログ信号がデジタル化された時系列データとして計算機に取り込まれます。そのような計測において、信号強度や分光器の分解能などの計測におけるパラメータを適切に設定することや、得られたデータをどのように表示するべきかについての基礎的な理解は、正しい物質情報を得るために不可欠です。当グループでは、モンテカルロシミュレーションなどの数値計算に基づき、半導体検出器を用いた際に生じるサムピーク強度の試料濃度・検出器の時間分解能に対する依存性に関する解析や、分析方法に応じた適切なサンプリング数と測定精度の関係などについての基礎的な検討を行なっています。また、最大エントロピー法に基づく測定スペクトルのスムージングや高分解能化といったスペクトルデータ処理についての研究も行っています。

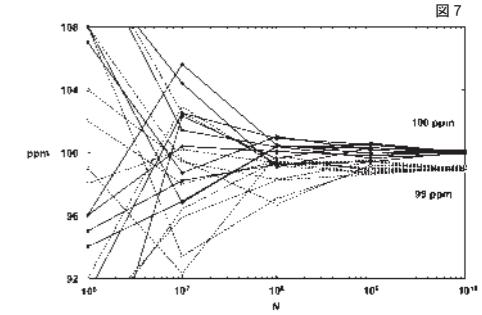


図7 不純物原子を100ppm(実線)および99ppm含む試料に対するサンプリングのモンテカルロシミュレーション。濃度差が109個以上の原子をサンプリングする必要があることが簡単な数値計算からわかります。

# 材料をナノレベルで理解・制御し、創エネ材料開発へ —結晶育成からデバイス設計、ナノ構造の統計力学まで— ナノ構造学

Nanostructural design of advanced materials

野瀬 嘉太郎、弓削 是貴

従来の冶金学の学理、知見を半導体を含む先端材料に応用し、環境調和型の新規材料を探索するとともに、  
新規デバイス構造の構築を通じて、材料科学の立場からエネルギー・環境問題の解決に取り組みます。  
また、空間上の幾何学に基づく統計力学の立場から、ミクロの相互作用とマクロの物性をつなぐ架け橋の探求や、  
材料科学における逆問題等の諸問題を解決するための基礎理論の開発と応用にも取り組んでいます。

## 多元系化合物半導体の成膜プロセス開発

化合物半導体はシリコンに比べて大きな光吸収係数を持つため薄膜化が可能であり、化合物半導体太陽電池は低コスト・省資源の面から期待されています。化合物半導体太陽電池を実用化するためには、薄膜作製プロセスの確立は必要不可欠です。我々のグループではリン化物半導体を中心として種々の成膜手法の確立に取り組み、化合物形成過程を詳細に調べることにより、既存プロセスの高度化や新プロセスの提案に繋げていきます。特に、気相を用いた成膜方法の場合、主に凝縮相を取り扱っている状態図では化合物の形成メカニズムを考察することが困難です。そこで当グループでは、従来金属製錬分野で主に用いられてきた化学ポテンシャル図を用い、新しい切り口でメカニズムの解明に取り組んでいます。

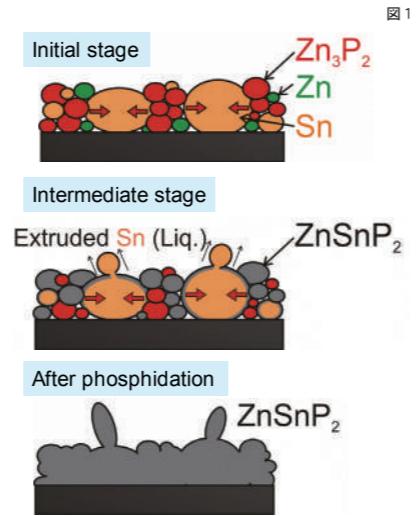


図1 リン化法によるZn-SnP<sub>2</sub>成膜における突起物形成モデル。Zn-SnP<sub>2</sub>系化学ポテンシャル図に基づく考察とリン化過程を調査した実験結果が合致することにより、リン化メカニズムを解明し、モデルを提示しました。

## 創エネデバイスにおける界面構造の理解と制御

太陽電池などの創エネデバイスには、様々なヘテロ（異相）界面が存在します。デバイスの高性能化のために、それを構成している各種材料の物性制御に加えて、材料間の界面における構造・特性の最適化が必要です。たとえば太陽電池デバイスにおいては、pn接合を構成する2つの材料（光吸収層材料とバッファ層材料）の界面における伝導帯下端の準位が適切に接続されるような材料を選択する必要があります。当グループでは、光電子分光法などの手法を用いてこれらの準位関係を明かにし、デバイス設計指針を明確にします。また、電極となる金属と光吸収層材料との界面も重要です。この界面においてはオーミック接合となるように設計する必要があります。適切な材料を選択することに加えて、熱力学に基づいて界面における反応を解析し、デバイスの高性能化に繋げていきます。

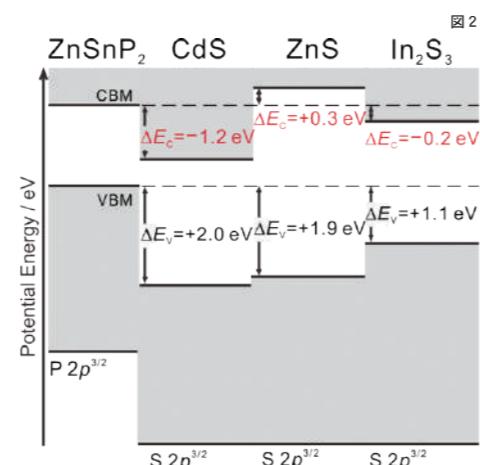


図2 光吸収層材料であるZnSnP<sub>2</sub>と各種バッファ層材料との伝導帯下端(CBM)準位の関係。CdSの場合に比べてIn<sub>2</sub>S<sub>3</sub>、ZnSを用いた場合は準位の差(ΔE<sub>v</sub>)が小さいことがわかります。

## 新規太陽電池の創成

現在、太陽電池材料としてはシリコンが主流ですが、太陽電池の普及のためにはさらなる高効率化および低コスト化が求められています。このような背景の下、様々な材料について太陽電池への応用が検討されていますが、現在、実用化されている無機化合物太陽電池にはインジウムなどの希少元素（レアメタル）や毒性の強い元素が用いられています。そこで、私たちはこれらの元素を用いない亜鉛-リン系の化合物半導体に着目して研究を行っています。従来のリン化物半導体太陽電池の問題点を明確にし、これを解決していくことに加えて、新規材料を用いた太陽電池の創成を目指し、太陽光発電のさらなる普及に貢献していきます。

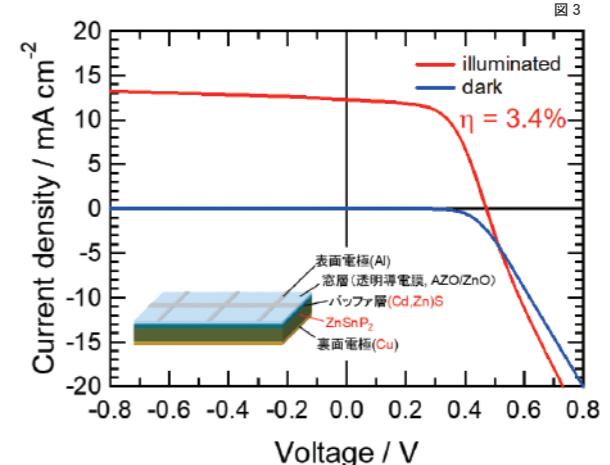


図3 ZnSnP<sub>2</sub>のバルク結晶を用いた新しい太陽電池とその電流密度-電圧特性。3.4%はZnSnP<sub>2</sub>太陽電池の世界最高変換効率です。

## マクロの性質とミクロの相互作用をつなぐ幾何学

熱力学的平衡状態に対応する微視的状態は、成分数のサイズの増加と共に指数関数的に増加します。私たちは系の構成粒子が作る空間上の幾何学的性質に着目し、平衡状態の物理量を特徴付ける特殊な微視的状態を解明しました。そこでは、構造の自由度における調和性という新しい概念が中心的役割を果たします。現在、この新規理論の拡張と応用のための研究を進めています。

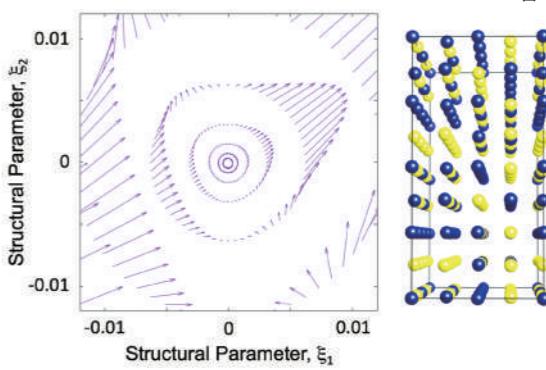


図4 構造自由度における調和性のDiagram(左)と平衡状態の性質を特徴付ける特殊な微視的状態(右)。

## 構造の柔軟な記述から新奇物性探索へ

材料科学において、系のナノレベルでの構造は局所的な情報を組み合わせた空間で表すのが一般的です。一方で局所的情報で表すのが難しい物理量を扱う場合、トポロジーのような別の構造の捉え方が重要になってきます。私たちは両方の利点を保持した上ででの記述の統一に成功し、物理量を表現する新しい枠組みを構築する基礎研究を進めています。

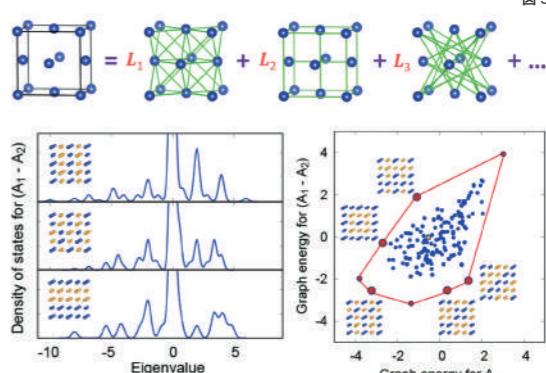


図5 結晶格子の離散化ラプラスיאンへの分解(上)による規則構造のスペクトル表示(下左)、およびそこから得られる特徴的な物性を示す規則構造の候補の探索(下右)。

# 新材料の発見と創出を目指す 量子材料設計 量子材料学

Materials Design through Quantum Theory

田中 功、世古 敦人、林 博之

量子論に基づき、目的とする機能に応じて  
元素の組み合わせや並べ方をコンピュータ上で探索する  
量子材料設計法のパイオニアです。

## 勘と経験に頼る材料開発から、量子材料設計へ

近年、量子論に基づいた計算技法の進歩とコンピュータの演算能力の飛躍的な向上により、元素の組み合わせや並べ方を決めた時にどのような性質が現れるか、実際にその物質を合成しなくてもシミュレーションによって予測することが可能になってきました。目的とする機能を最大限に引き出すための設計図をコンピュータ上で描くことができるようになりつつあり、私たちはこれを量子材料設計法と呼んでいます。合理的かつ経済的な材料探索を可能とする量子材料設計法は、近い将来、材料開発に革新をもたらすこととなるでしょう。私たちはその先鞭をつける仕事をしています。



図1

図1 高速並列演算用PC  
クラスタ  
量子材料設計のための高精度なシミュレーションを可能とします。

## 幅広い分野での機能設計—電池からレーザーまで

材料が示す電気的、光学的、磁気的、機械的性質や相変態、化学反応などの現象は、もとをたどればすべて電子の挙動により決定されます。量子材料設計法では、電子レベルでの理論計算を通じて材料や現象を区別することなく横断的に取り扱うことができます。私たちはこの手法をリチウムイオン二次電池や燃料電池の電極・電解質材料、固体レーザー材料、電子セラミックスなどの様々な無機材料に適用し、全く新しい観点から機能設計に取り組んでいます。

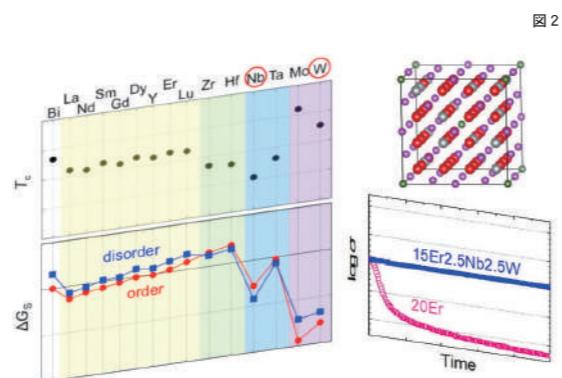


図2

図2 高温で長時間安定な酸化物イオン伝導体の材料設計と実証  
燃料電池や酸素分離膜などへの応用が期待される酸化物イオン伝導体である立方晶酸化ビスマスを高温で安定化させる添加元素を理論予測しました。その結果500°Cで100時間連続使用した後の酸化物イオン伝導度が、既存のものに比べて5倍高い材料を発見しました。

## 分光実験による理論予測の検証

量子材料設計を成功させるためには、単に計算の精度を上げるだけでなく、実験とうまく連携させることが大切です。最近の透過型電子顕微鏡法やX線・電子分光法などを用いれば、材料の構造が原子や電子のスケールで見えてきます。私たちはこのような実験によりシミュレーションの結果を検証し、得られた情報をフィードバックすることで、現実に即した理論予測を進めています。また、X線・電子分光スペクトルを精确に解釈するための計算手法を開発しています。これを実験と組み合わせることにより、理論と実際の材料がつながります。

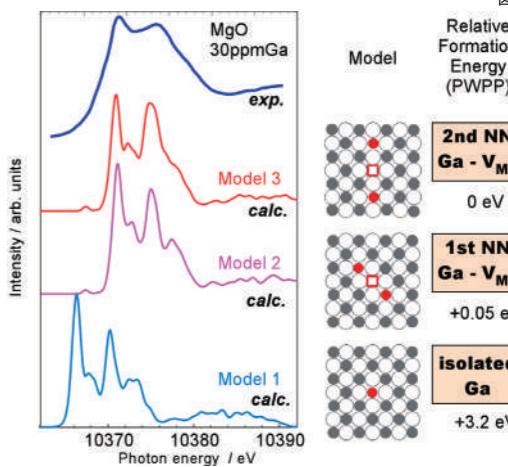


図3 セラミックス中のX線吸収スペクトルとその理論的解説  
セラミックスの特性は微量添加元素に左右されます。私たちはX線分光実験と量子論計算を組み合わせることにより、酸化マグネシウムセラミックス中のガリウム不純物についてppmレベルでの存在形態を定量的に調べることに成功しました。これは材料設計を行う上で極めて重要な情報となります。

## 結晶の乱れを活かした材料設計

材料を構成する結晶の中で原子は完全に規則正しく並んでいるのではなく、原子の欠損や異種元素との置換（点欠陥）、しづ（転位）、境界（界面）のような乱れが多く存在します。このような乱れは電子の状態にまで及び、固体全体が示す特性を左右します。材料科学のひとつの大きな目標は、この乱れを理解し、制御し、さらにはその特徴をうまく使って新たな機能を創出することにあるわけです。私たちは量子論計算と実験により結晶の乱れを原子・電子スケールで理解し、これを基に材料の新しい機能を引き出そうとしています。

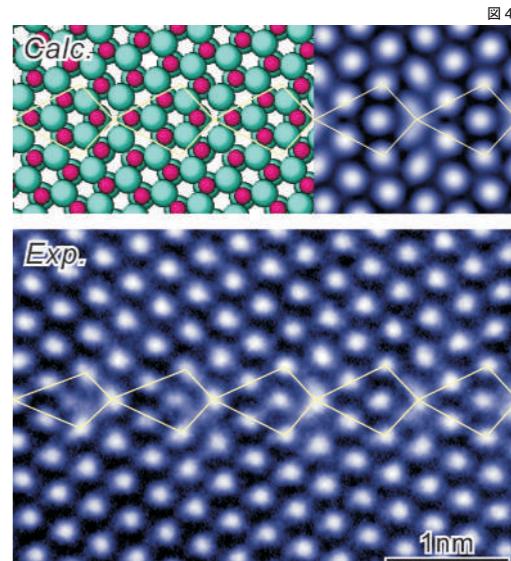


図4 酸化亜鉛中の結晶粒界面の原子配列  
理論計算によって予測された界面での原子の並び（上図）が、高分解能電子顕微鏡像（下図）によって確認されました。界面では構造の乱れに伴って電子の振る舞いも変化し、興味深い特性が生じます。

## 量子材料設計に基づいた新材料の創製

量子論計算や分光実験により新機能材料を見つけるための手がかりが得られれば、次のステップはその材料を創ることです。私たちは、パルスレーザー堆積法や超高压合成法などによって自分たちが理論予測した材料を合成し、構造や特性の評価を行っています。薄膜法や高压法を用いれば、常温、常圧下では見られない特殊な結晶構造をもった物質の合成も可能です。未知の材料も容易に扱える量子材料設計法とこれらの合成法を組み合わせることにより、これまでにない斬新な材料の発見や創製の可能性が広がります。



図5 パルスレーザー堆積装置  
レーザー照射によって原料から飛び出した粒子を基板上に堆積することにより、様々な材料の高品質膜をつくることができます。

# エネルギー・環境材料の高機能化 - 結晶欠陥の評価と制御

## 結晶物性工学

Property Control of Crystalline Materials

乾 晴行、岸田 恭輔、新津 甲大

結晶性材料の特性はナノ・スケールの結晶欠陥により左右されます。このようなナノ・スケール結晶欠陥そのものの特性(Defect Properties)を評価し、それらの構造や配列を制御することにより材料の特性向上を図る基礎研究(Defect Engineering)を行っています。

### 高効率のエネルギー利用のために

健全な未来を創造するためには、環境を保全しつつエネルギーをどのようにして確保するかが重要な問題となっています。そのためには既存の熱機関の高効率化を図るとともに、廃熱利用、高効率蓄電などの技術の実現が有効です。このような技術を実用化レベルに引き上げるには、既存材料よりもはるかに特性に優れた新しい軽量耐熱材料や、電池材料、熱電変換材料などの環境調和型高機能材料の開発が不可欠です。一般に材料の特性は、材料の結晶構造や内部に含まれるナノ・スケールの結晶欠陥により左右されます。私たちの研究室では、金属間化合物というユニークな物質群をターゲットとし、最新の電子顕微鏡法を用いた材料中のナノ・スケールの結晶欠陥そのものの特性の評価、ならびにマクロ物性との相関の解明を通じて、各種材料の特性向上のための構造設計法の確立を目指しています。

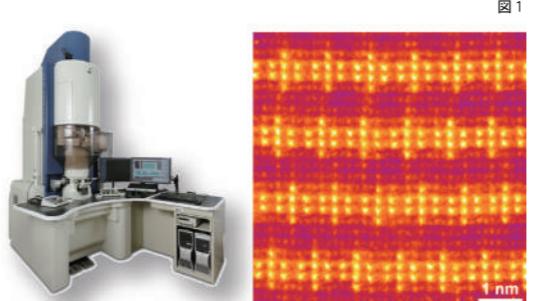


図1. 球面収差補正走査透過電子顕微鏡(STEM)の外観と長周期積層構造を有するマグネシウム合金の暗視野STEM像。もっとも明るい点はガドリニウム(希土類)原子、暗い点はマグネシウム原子に対応している。マグネシウム中で希土類元素が規則的に配列した結晶構造を有していることがわかる。

### 新しい機能の探索—豊かな可能性を持つ金属間化合物材料

金属間化合物とは2種類以上の金属または半金属元素から構成されている化合物です。一般に性質が異なる異種元素同士が強い原子間結合によって結び付けられているため、金属間化合物はその成分金属又は半金属とは著しく異なるユニークな物性を示します。たとえば図のニッケル(Ni)とアルミニウム(Al)が結合してNiAlという化合物になれば、この化合物は2つの成分金属の融点をはるかに超える高い融点を持つことになります。なぜNiAlの融点がこのように高くなるのか、金属間化合物中の電子の性質に注目して研究されていますが、まだよくわかっていません。金属間化合物の世界にはこのような興味のつきないフロンティアが広大な未開の原野のように広がっています。

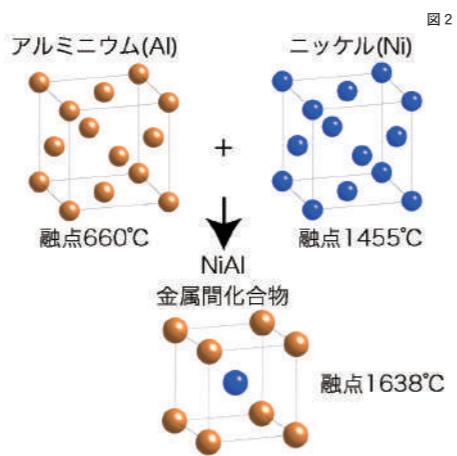


図2. 金属間化合物の原子構造

### 耐熱構造材料の研究

航空機用ジェットエンジンや発電用ガスタービンのエネルギー効率は、Ni基超合金と呼ばれるタービン翼材の高温強度特性と密接につながっています。つまり、より高温で安定に使用できる材料や、より軽量な材料が開発されると、確実にエネルギー効率の向上が図れることになり、その結果として、排出CO<sub>2</sub>の大幅な削減も見込めます。現在用いられているNi基超合金の高温強度特性は、材料内部の組織形態に強く依存しているため、その高度な制御が材料のパフォーマンスを向上させます。我々は材料の内部組織と高温強度特性の相関について実験と理論の両面から研究し、材料特性の向上を目指しています。

さらに既存のシステムよりも優れた次世代型システムを創造するためには、そのシステムを支える新しい材料、すなわち、従来のNi基超合金より軽く、より過酷な雰囲気で使用が可能な軽量耐熱高温材料が必要不可欠です。このような材料の候補に、遷移金属のアルミナイト、シリサイド、ボライドなどの金属間化合物があります。前節でも述べましたが、異種原子間の強い結合を持った金属間化合物は、その強い結合に由来するさまざまな特性、中でも高温に耐える材料として大変魅力ある特性を備えています。たとえばNiAlのようにアルミニウムを多く含む高融点化合物は、高温における強さと共に耐酸化性にも優れています。金属間化合物の中には、温度が上がれば上がる程むしろ強くなり、普通の金属や合金では考えられないような特性を示すものも含まれていますから、金属間化合物の高温力学物性は大変興味深く、実用的にも重要な研究テーマになっています。

現在私たちは、融点が高く、高温強度に優れた有望なシリサイド同士を組み合わせた複相材料に着目し、旧来合金では達成できない燃焼温度1800°C級ガスタービンでの使用に耐える超耐熱高温材料の開発を目指しています。

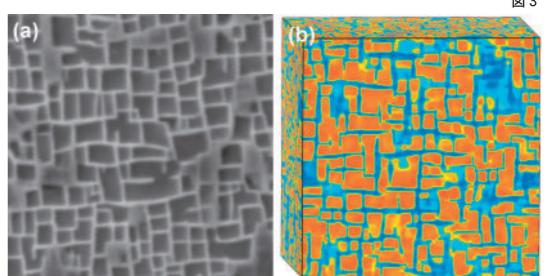


図3. Ni基超合金の微細組織の(a)走査電子顕微鏡像および(b)フェーズフィールド法によるシミュレーション結果。



図4. チタンアルミニド(TiAl)製のスポーツカートーピオチャージャーローターと排気バルブ

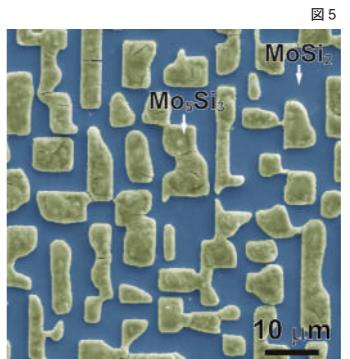


図5. MoSi<sub>2</sub>/Mo<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> 2相ラビンス共晶合金の微細構造。MoSi<sub>2</sub>母相中にMo<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>が析出し、迷路ラビンス状の組織を形成している。

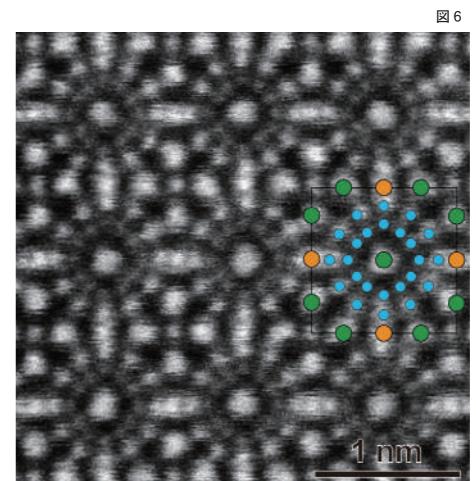


図6. 热電変換クラスト化合物の走査透過電子顕微鏡像

### 高機能エネルギー・環境材料の研究

金属間化合物は異種原子の組み合わせにより構成されていますから、その組み合わせは無限にあるといつても過言ではありません。このため金属間化合物の中には機能材料として優れた特性を示すものが多く、電池材料や熱電変換材料としてすでに私たちの生活の中でふんだんに活用されている一方、次世代型のリチウム二次電池や燃料電池などの分野での利用が期待される有力な候補材料も多数存在しています。近い将来、このような新しい材料を使ったシステムを組み合わせることで、自動車のエンジン廃熱、排ガス熱を熱源として電気を生み出したり、高効率で蓄電することでシステム全体の燃料消費効率を高め、環境への負荷を低減することが期待されています。

# 安全・安心で環境にやさしい社会基盤のための構造用金属材料の革新

## 構造物性学

Structure and Properties of Materials

社会の基盤を支えるために重要な構造用金属材料の革新を目指し、材料のナノ・ミクロ組織・構造とその形成機構、そして力学特性を発現する基本原理と組織との相関に関する基礎研究を行なっています。

### バルクナノメタルの創製と特異な力学物性

我々が用いているバルク金属材料のほとんどは多結晶です。従来は、その平均結晶粒径をせいぜい  $10\text{ }\mu\text{m}$  程度までしか微細化することができませんでした。我々は、種々のプロセスを独自に開発し、超微細粒・ナノ組織の創製に成功しています。このようにして作られた結晶粒径  $1\text{ }\mu\text{m}$  以下の超微細結晶粒金属バルク体（バルクナノメタル）は、粒径数十  $\mu\text{m}$  以上の従来金属とは大きく異なる常識はずれの力学特性を示します。我々はバルクナノメタルの特異な力学特性を基礎的に解明し、その成果をもとに、従来は困難だった高強度と大きな延性を兼ね備えた夢の構造材料を実現しつつあります。バルクナノメタルの高強度化には合金元素の添加を必要としないことから、環境負荷軽減の観点からも好ましく、バルクナノメタルは次世代の革新的構造材料として大いに期待されています。

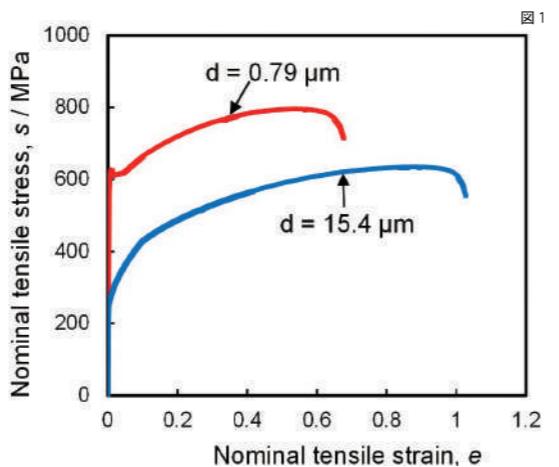


図1 冷間圧延・焼純処理により作製された31Mn-3Al-3Si TWIP 鋼の応力-ひずみ曲線。結晶粒径  $1\text{ }\mu\text{m}$  以下の超微細粒材は、従来粒材よりも高い強度と大きな延性を示す。

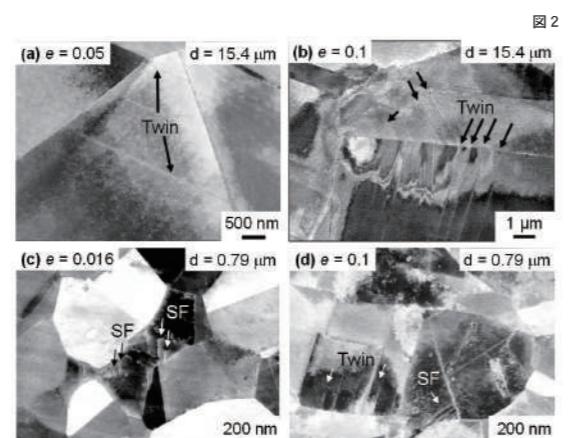


図2 31Mn-3Al-3Si TWIP 鋼の種々の引張ひずみでのSEM-ECC像。超微細粒材では変形初期 ((c), (d)) に変形双晶 (twin) のほかに積層欠陥 (stacking fault, SF) が生成しており、その塑性変形メカニズムが従来粗大粒径材 ((a), (b)) とは大きく異なることが明らかとなった。

### 相変態・析出・再結晶現象の基礎学理の追及

金属材料の力学物性は、内部のナノ・ミクロ組織によって大きく変化します。相変態・析出・再結晶現象は、金属材料の力学特性を向上させる組織制御にとって非常に重要な固相反応です。しかし、相変態・析出・再結晶現象には、数多くの未解明な問題が残されています。我々は、相変態・析出・再結晶によって形成されるミクロ組織と力学物性の相関を電子顕微鏡、中性子回折 (J-PARC)、放射光 X 線回折 (SPring-8)、3 次元アトムプローブ解析などを駆使して明らかにし、優れた力学物性を有する金属材料作製のための新たな材料設計概念の確立も目指しています。

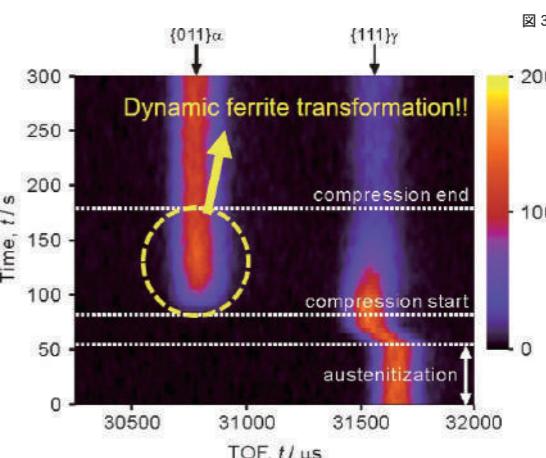


図3 J-PARC/MLFのビームライン19 (TAKUMI) に導入した中性子その場回折実験用加工熱処理シミュレータを用いた高温圧縮加工中の2Mn-0.1C鋼の中性子回折プロファイル。加工開始後に動的フェライト変態が生じており、動的フェライト変態の発現をその場で捉えることに成功した。

### 材料のミクロ/マクロ局所変形挙動の定量解析

金属結晶の塑性変形は、本質的に不均一です。しかし、こうした不均一な変形が積み重なって、材料の平均的な強度や延性を決定しています。変形の不均一性は、結晶の構造やミクロ組織と強く相関していると考えられます。しかしながら、一般的な力学試験では、平均的な強度や延性しか評価することができません。我々は、引張試験時の二方向その場外形変化測定システムや、画像相関ひずみ解析法 (digital image correlation: DIC)などを駆使して、変形の不均一性とマクロな力学物性との関わりを基礎的に明らかにすることを目的とした実験研究を行なっています。

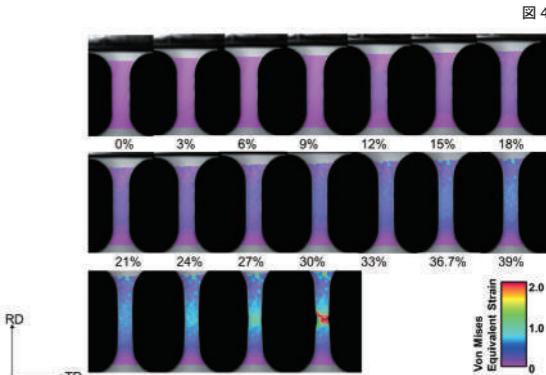


図4 純チタン引張試験片中の変形に伴うひずみ分布。画像相関法 (DIC) により局所ひずみを可視化・定量化できる。

### 金属材料の破壊挙動と微視組織の関係

通常、金属材料は延性を有し、数%～数十%の塑性変形を示します。しかし、特定の変形条件や環境下では、材料が塑性変形を伴わずに破壊する、いわゆる脆性破壊が生じてしまう場合があります。脆性破壊は重大な事故を引き起こす可能性があるため、その抑制が必要不可欠です。我々は、金属材料、特に鉄鋼材料の水素脆性破壊や低温脆性破壊におけるクラック伝播経路とミクロ組織の相関を電子顕微鏡や電子線後方散乱回折 (electron back scattering diffraction: EBSD) 等を用いて解析し、脆性破壊のメカニズムの解明や、脆性破壊を抑制するための新たな材料設計概念の確立を目指して研究を行なっています。

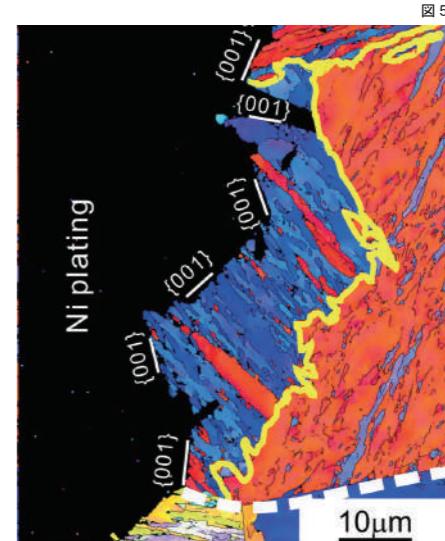


図5 低炭素マルテンサイト鋼の低温脆性破面のEBSD方位マップ。低温脆性破壊はマルテンサイトの [001] 面に沿って生じていることがわかった。

# 材料の構造・組織を実証的に理解し、新しい材料・材料プロセスの開発へ

## 先端材料機能学

Properties of Advanced Materials

安田 秀幸、鳴海 大翔

放射光などの最先端のツールを利用して、材料の組織形成過程やナノレベルの構造を実証的に解明し、組織・構造の制御原理の確立、材料機能の発現機構の解明、さらに材料プロセスの創成に取り組んでいます。

### 放射光を利用した時間分解・その場観察手法の開発

多くの材料は凝固・結晶成長プロセスにより製造されており、凝固・結晶成長過程における組織制御は材料の機能発現に重要です。可視光に対して不透明であり高融点の金属材料の凝固現象は、これまで凝固後の組織観察から推測されてきました。しかし、従来手法には限界があり、複雑な凝固現象を実証的に理解することが望まれています。そこで、SPring-8をはじめとする第3世代放射光施設で利用可能な10keV以上の硬X線領域の高輝度単色光を駆使して、金属材料を対象とした凝固・結晶成長現象の時間分解・その場観察手法を開発しています。

X線の透過像を時間分解でその場観察する手法は、金属合金の凝固・結晶成長過程のデンドライト成長などのダイナミクスを把握することを実現し、金属合金の凝固・結晶成長をありのまま理解することができます。また、4D-CTと呼ばれる時間分解・三次元その場観察では、多数の透過像から三次元構造を再構成することにより、三次元空間における材料の組織形成のダイナミクスを把握することができます。さらに、X線回折や蛍光X線分析と組み合わせることにより、材料の組織形成に加えて、成長している結晶の方位分布や固液界面付近の濃度分布も直接的に計測できるようになります。

これらの手法を駆使し、金属合金の凝固ダイナミクスを実証的に解明し、物理モデルの構築、さらにシミュレーションへの展開を通じて、材料プロセスの発展に寄与することを目指しています。

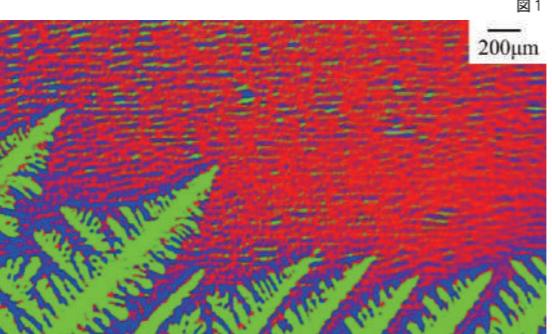


図1 1500°C付近での金属材料(Fe-Si合金)のデンドライト成長の観察。デンドライトの形態だけでなく、濃度分布(疑似カラー)の情報も得られ、材料組織の形成を直接知ることができます。

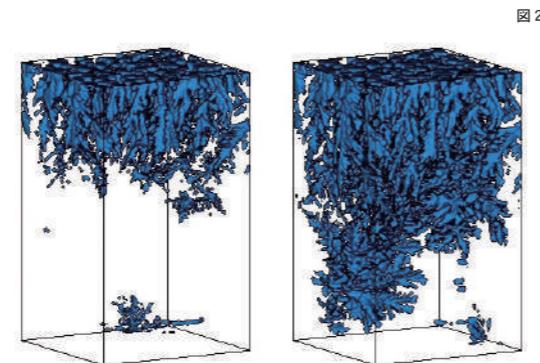


図2 Al-Zn合金のデンドライト成長の時間分解・三次元観察。4D-CTと呼ばれる時間分解CT(Computed Tomography)により、三次元空間での組織形成のダイナミクスを直接知ることができます。

### 凝固ダイナミクス、マイクロアロイングの科学

凝固・結晶成長現象では、マクロスケールの熱輸送、液相の流動と拡散によるミクロからマクロにわたる物質輸送、成長界面におけるキネティクスが相互に影響し、材料組織が形成されます。先に述べた時間分解・その場観察手法を駆使し、材料組織の形成機構から材料組織に立脚した力学にわたる学理の構築を行っています。

凝固ダイナミクスのひとつに、凝固過程における固液共存体(固相と液相が共存・混合した状態)に特有の力学挙動があります。固液共存体の変形機構を材料組織スケールで解明し、材料組織・プロセスの制御への応用を目指しています。

また、特定の元素の微量添加(マイクロアロイング)は材料組織の微細化などに寄与することが知られていますが、その機構には不明な点が多くあります。放射光を用いた計測技術を利用し、微量元素の存在位置・状態を把握して、マイクロアロイングの科学的基盤の確立を目指しています。

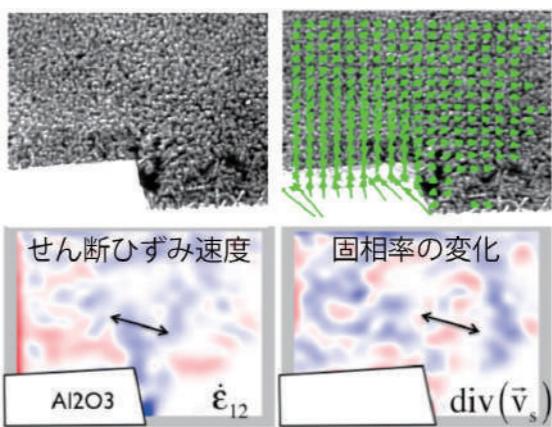


図3 固相と液相が混合した固液共存状態における変形のその場観察と画像解析による変形の定量化の例。固体とも液体とも違う変形機構を直接知ることができます。

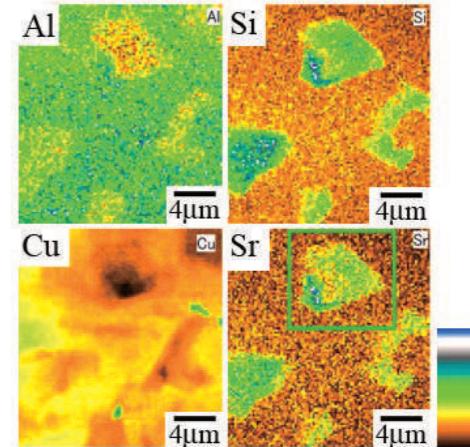


図4 放射光を利用した蛍光X分析(元素マッピング)により、Al-Si合金に微量添加されたSrの存在位置を把握し、微量元素の組織形成への寄与を直接知ることができます。

### 磁場を利用した凝固組織制御とプロセスへの応用

磁石などの強磁性の物質では磁気効果を容易に体験することができますが、常磁性や反磁性など弱磁性と呼ばれる物質も磁場に対する応答があり、この応答を利用したプロセスは、金属材料やセラミックスから有機物、タンパク質までの応用が期待されます。凝固・結晶成長では、規則組織の形成、模擬微小重力の実現など多様な応用があり、磁気効果を積極的に利用した磁気科学と凝固・結晶成長工学の融合を目指しています。

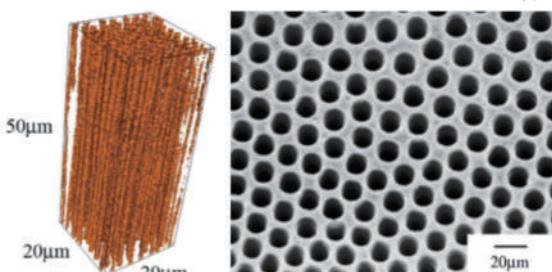


図5 磁気効果を利用した組織制御の例。磁場中結晶成長における規則組織形成を利用して、数100nmから数10μmの穴が規則的に配列した多孔体が製造できる。

# 物質の磁性 新しい量子現象の探索 磁性物理学

Magnetism and Magnetic Materials

中村 裕之、田畠 吉計、和氣 剛、  
太田 寛人（工学基盤教育研究センター）

磁性物理学は量子力学の最も基礎的な展開であり、新たな量子現象や新概念の宝庫です。  
量子現象の探求を通して物質科学の発展を縁の下から支えています。

## 磁性物理学

磁性体は、ほとんどの電気製品や多くの日用品で使われ、現代のテクノロジーを支える代表的な機能材料です。ただし、磁気にまつわる現象を理解するのは容易ではなく、現在の最先端の物理学をもってしてもその全てを説明することはできません。むしろ、磁性物理学の進歩と新しい機能の開発は表裏一体で、基礎研究における物質の新現象の発見が物理学の進歩を促し、それが全く新しい原理に基づく機能の展開を生み、さらに人々の生活を豊かにするという構造になっています。私たちは、3d遷移金属や希土類元素を含む物質を作製し、その性質を基礎的な観点から調べ、未知の量子現象を見つける努力を続けています。

例えば、右に示したものは、「スカーミオン格子」と呼ばれる最近発見された新しい磁気状態です。スカーミオンは元々素粒子物理で提唱された概念ですが、近年、物質中の原子の磁気モーメントがそのスカーミオンが格子状に並んだ状態として記述できることが示されました。スカーミオンは原子の磁気モーメントの渦状構造であり、それが格子を組んだのがスカーミオン格子です。素粒子物理の概念が遙かに低エネルギーの現象である物質中の磁気現象にも適用されることから、スカーミオン格子は自然のもつ「普遍性」を示す格好の例であり、基礎物理の観点から非常に興味深い現象です。それに留まらず、スカーミオン1つ1つを情報のビットとして取り扱うことも考えられており、磁性体の機能の新たな応用の可能性を秘めた現象でもあります。

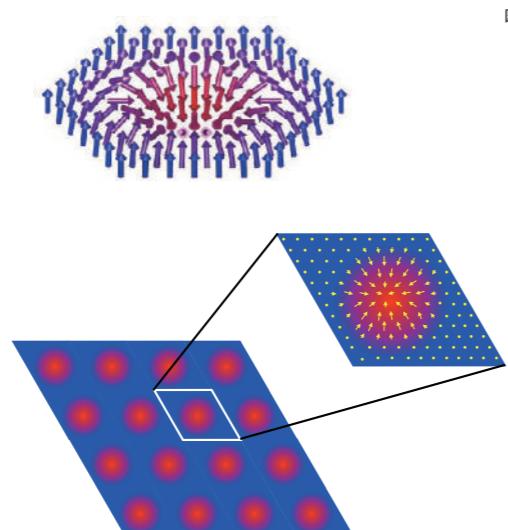


図1

図1 磁気モーメントが渦状構造をとった「スカーミオン」(上)とスカーミオンが格子を組んだ「スカーミオン格子」(下)の模式図。スカーミオン状態では、磁気モーメントは全方位をくまなく向いている。

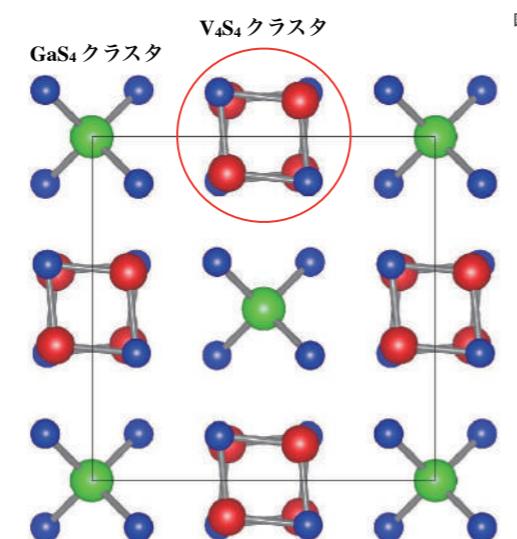


図2

図2.  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  の欠損スピニル型結晶構造。 $\text{GaS}_4$  クラスターと  $\text{V}_4\text{S}_4$  クラスターが  $\text{NaCl}$  型に配列したクラスター化合物で、 $\text{V}_4\text{S}_4$  クラスターが  $S=1/2$  のスピンをもち、低温で図1に示したスカーミオン格子を形成する。

## 中性子散乱による磁性研究

中性子は陽子とともに原子核を構成する素粒子で、電荷0、スピン1/2を持ちます。量子力学的には粒子であると同時に波であるため、X線と同様に、その散乱を調べることで物質の構造やダイナミクスをることができます。特に、中性子はスピンをもつため、原子の配列のみならず、原子が持つ磁気モーメントも見ることができます。そのため、中性子散乱実験は物質の磁的性質を微視的に調べるために非常に強力な研究手段です。私たちは、茨城県東海村にある研究用原子炉 JRR-3 や加速器施設 J-PARC に設置された装置を利用して、磁性体の磁気構造やそのダイナミクスの研究を行っています。海外の実験施設(フランスのILLなど)も必要に応じて利用します。



図3

図3 J-PARC の物質・生命科学実験施設 (MLF) の実験ホール内に写真。たくさんの中性子散乱装置が並んでいる。

## NMR

電子や磁気モーメントを実際に見ることはできません。しかし電子が原子核と相互作用し、さらにその原子核が電磁波と相互作用することを利用して、電子の振る舞いを知ることができます。これが核磁気共鳴(NMR)です。NMRは微視的な測定手段なので、それを通してミクロな世界を映し出すことができます。医学の分野で利用されているMRI(磁気共鳴断層撮影装置)も同じ原理に基づいています。NMRの装置は電子と対話するための小さな無線局のようなもので、私たちは様々な条件下で物質の静かなささやきにいつも耳を澄ましています。

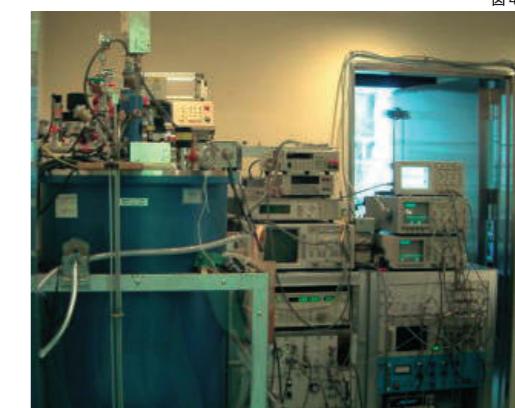


図4

写真4 超伝導マグネットと固体の磁性を測定するためのNMR装置

## 永久磁石材料の微視的な評価

永久磁石は広く日常生活に用いられていますが、特に発電や動力目的のモーターへの利用が重要です。より効率的なエネルギーの変換のため、高性能な永久磁石の開発が今なお盛んに行われています。開発した材料の評価が更なる性能向上につながりますが、当研究室では、核磁気共鳴、メスバウア分光、中性子散乱といった微視的なプローブを駆使し、マクロスコピックな性能と構成元素のミクロスコピックな電子状態を関連付けることで、材料設計の指針構築に貢献しています。

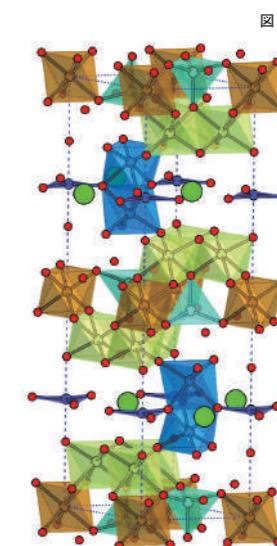


図5

図5 現在広範に利用されている酸化物系永久磁石M型フェライトの結晶構造。構成元素の少量の置換で性能が大きく変化するが、結晶構造が複雑で、置換元素の役割が未だに解明されきておらず、今なお精力的に多方面からの研究がなされている。

# 溶液系の電気化学と熱力学に基づく 材料プロセッシング 材質制御学

Electrochemistry and hydrometallurgy

邑瀬 邦明、深見 一弘、北田 敦

水溶液系とイオン液体系の電気化学、溶液化学、ならびに化学熱力学に立脚し、基礎から応用にわたる様々な表界面の湿式機能化プロセスを研究しています。

## 水溶液系の薄膜形成とその熱力学

電解質水溶液から酸化還元反応や酸塩基反応によって固相薄膜を析出させる電析法や化学浴析法は、常温常圧下のソフト溶液プロセスとして、湿式製錠や耐食性表面処理に代表されるマクロスケールから、電子デバイスの実装技術のようなマイクロスケール、単分子・単原子膜レベルの表面機能化のようなナノスケールに至る幅広い守備範囲をもつ要素技術です。私たちの研究室では、CdTe 化合物や酸化亜鉛 ZnO のような太陽電池用薄膜形成や、Ni-Mo 合金めっきのような耐食性表面処理技術を研究してきました。ここでは、トライアル・アンド・エラーによる従来型の条件探索に加え、電位-pH 図を描くことで電解諸条件の熱力学的理解と総括的制御を可能にし、得られる皮膜のモルフォロジーや半導体物性の評価、ガルバニック接触法による新しい製膜法の提案など、幅広い研究を展開しています。

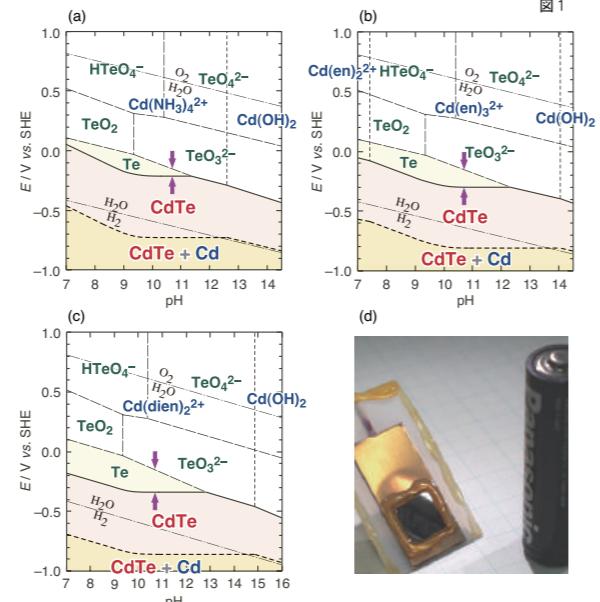


図1 (a) アンモニア、  
(b) エチレンジアミン、  
(c) ジエチレントリアミンを配位子として含む場合の Cd-Te-H<sub>2</sub>O 系電位-pH 図。テルルの安定領域幅(図の矢印の部分)の違いが、電析浴設計の指針となる。(d) はアンモニア性浴からの電析 CdTe の写真。

## 湿式製錠技術の開発と高効率化

私たちの暮らしは三大材料と呼ばれる金属、セラミックス、高分子により主として支えられています。このうち金属原料は、鉄やアルミニウムのように高温の乾式冶金プロセスで生産されるものと、銅や亜鉛のように乾式プロセスに水溶液系の湿式冶金プロセスをうまく組み合わせて生産されるものがあります。水溶液を用いる湿式冶金は常温常圧で操業される環境にやさしいプロセスであり、最近では金属リサイクリングする手法としても期待されています。私たちの研究室では、新しい銅の電解採取プロセスの開発や、現行の銅電解精製プロセスの高効率化に関し、非鉄製錠各社との共同研究を進めています。

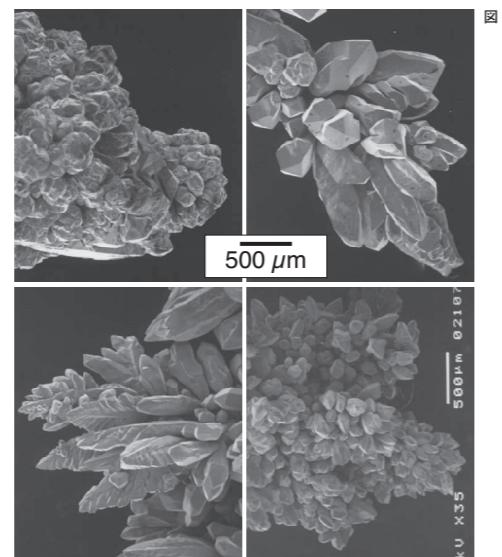


図2 1価の銅イオンを含む水溶液から採取した銅デンダライト。電析電位(SHE 基準)は 0 mV(左上)、-50 mV(右上)、-100 mV(左下)、-150 mV(右下)。

## 新しいイオン液体の探索

イオン液体(Ionic Liquids, IL)は、水や通常の有機溶媒のように電荷をもたない中性の分子ではなく、陽イオンと陰イオンからなる室温付近でも液体(溶融)状態の塩です。図3のように構成イオンは多様であり、その組み合わせによる物性のコントロールが可能です。イオン液体となる構成イオンの条件は、サイズが大きい(=電荷密度が小さい)か、対称性が低いことです。私たちの研究室では、新しい構成イオンを見出し、新しいイオン液体を提案しています。

図4は、私たちが新規合成したイオン液体の構造式です。単独では小さすぎて構成イオンとならないイオン種でも、キレート配位(溶媒和)によって実効サイズを大きくすることでイオン液体状態を実現できます。また、従来にない特徴として非金属であるヒドロニウム(H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>)イオンを配位したことによって、強酸性となり、従来のイオン液体における酸度の記録を更新しました。酸触媒や燃料電池としての応用が期待されます。

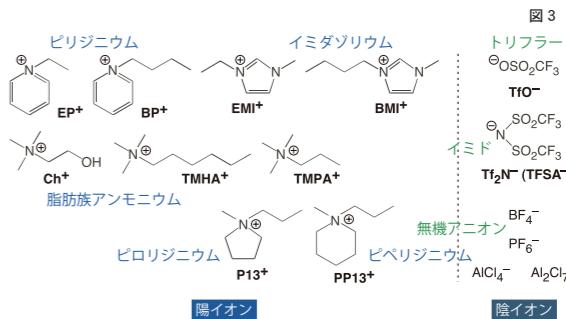


図3 イオン液体を構成する主要なイオン種。多くの場合、サイズの大きな1価の陽イオンと陰イオンの組み合わせることで、イオン間のクーロン相互作用が弱まり、室温で融解した「イオン液体」が得られる。

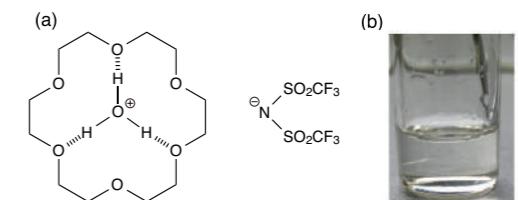


図4 当研究室で新たに合成した、「ヒドロニウム溶媒和イオン液体」の(a)構造式および(b)溶融状態での写真。ヒドロニウム(H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>)イオンをクラウンエーテルで配位してイオンサイズを大きくすることで、イオン液体が得られる。

## 新しい金属電池負極の開発

太陽電池や風力発電など、自然エネルギーに依存した社会の構築には、不安定な電力を蓄えるための容量の大きな化学電池(いわゆる「電池」)の開発が求められています。化学電池は電極/電解質界面での金属イオンの酸化還元を用いたデバイスであり、その充放電反応はまさに金属の電析反応と同列のものです。私たちの研究室では、マグネシウムやアルミニウムなど平衡電位の低い多価の金属を用いる電池負極の基礎研究を行っています。ここでは、種々のイオン液体や有機溶媒など、酸化還元耐性にすぐれた溶媒を用います。また、電気化学的手法によって新しい電池活性物質を調製する研究にも取り組んでいます。



図5 電池をやイオン液体の研究に使用するグローブボックス装置。内部は水分および酸素がいずれも1ppm以下のアルゴン雰囲気で保たれている。

## 多孔質電極の電気化学

多孔質材料は高い比表面積を有するため触媒担体や電池の電極材料などに幅広く利用されています。高い比表面積を十分に生かすためには、細孔内の微小空間における化学反応の制御が必要です。私たちは、シリコン表面の電気化学溶解による多孔質材料の創製とその利用について研究を行っています。多孔質化したシリコンの細孔内に金属ナノ粒子触媒を充填し、微小空間における触媒反応の高効率化に取り組んでいます。また、細孔内に存在する溶媒分子の影響を物理化学的観点から調べ、微小空間における化学反応の新たな制御法に関する研究も進めています。

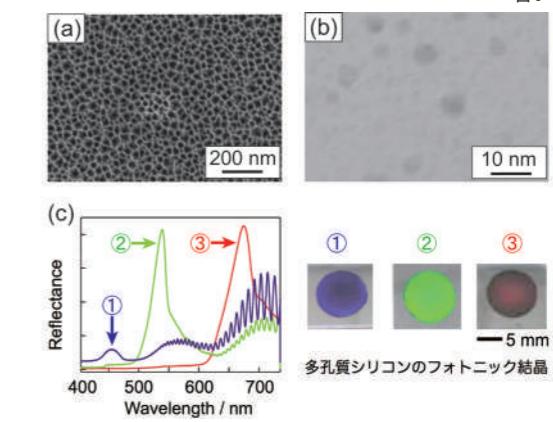


図6 (a) 多孔質化したシリコンウェーハの表面SEM像。ナノメートルサイズの細孔が無数に形成されている。(b) 多孔質化したシリコン電極に電析した白金ナノ粒子のTEM像。様々な化学反応の触媒に利用できる。(c) 周期変調した電流密度で作製した多孔質シリコンの反射スペクトルとそれぞれの試料の外観。電流変調の周波数に応じて反射スペクトルの異なるフォトニック結晶が作製できる。

# 自己集積化による薄膜形成と微細加工 その科学と技術を極める 機能構築学

Nanoscopic Surface Architecture

杉村 博之、一井 崇、宇都宮 徹

『微小部品を組み立てるように物質を集積化し機能を構築する』というアプローチで、材料表面の機能化に関する研究に取り組んでいます。

## 自己集積化による薄膜材料の創製

分子同士が自発的に集合して分子集合体薄膜を形作る、自己集積化-セルフアセンブル (Self-Assemble)による薄膜材料形成の研究を行っています。反応環境下に固体基板を一定時間放置するという簡単なプロセスで、膜厚・層厚が1分子レベルに正確に制御された有機単分子膜 (Self-Assembled Monolayer, SAM) や有機-無機積層膜を作製することができます。このような超薄膜を従来の手法で作製するには、超高真空等の特殊な環境で精密に成長条件を制御する必要がありました。さまざまな自己集積化薄膜材料のなかから、有機シラン分子・有機リン酸分子・有機カルボン酸分子等の自己集積化を取り上げ、材料表面処理と微細加工技術分野への応用展開を図っています。

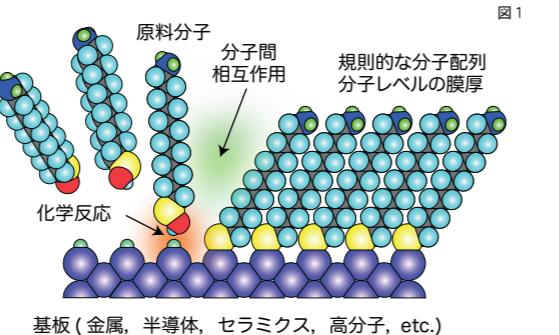


図1 自己集積化による单分子膜形成。反応性分子が固体表面と化学反応し吸着する過程で、吸着する有機分子同士間が相互作用し、分子の配向性が拘って規則的に配列した薄膜が形成されることがあります。吸着分子種と固体基板材料を正しく選択し、反応条件を整えることで、膜厚が分子一層で正確に制御された超薄膜を形成することができます。

## ナノカーボン材料の光還元と化学修飾

炭素の同素体であるグラフェンは、炭素原子が  $sp^2$ 結合で蜂の巣状に繋がった、炭素原子1個分の厚さしかない2次元物質で、その特異な物性が基礎応用両面から注目されています。研究室では、グラフェンの誘導体である酸化グラフェン (Graphene Oxide, GO) をベースにした機能材料の研究開発を行っています。水溶性の GO は、液相プロセスで薄膜化できる、酸化サイトを起点にさまざまな分子で化学修飾できる等の利点があります。

GO に真空紫外光 (Vacuum Ultra-Violet, VUV 光) 照射すると、酸素が選択的に除去され還元体 (reduced GO) となり、導電性が回復します。この VUV 酸素トリミング技術を基盤に、GO の物性制御と微細加工へと展開しています。また、GO ナノシートの自己集積化薄膜形成、GO/rGO の化学修飾とトライボロジーへの応用を目指す国際共同研究も推進しています。

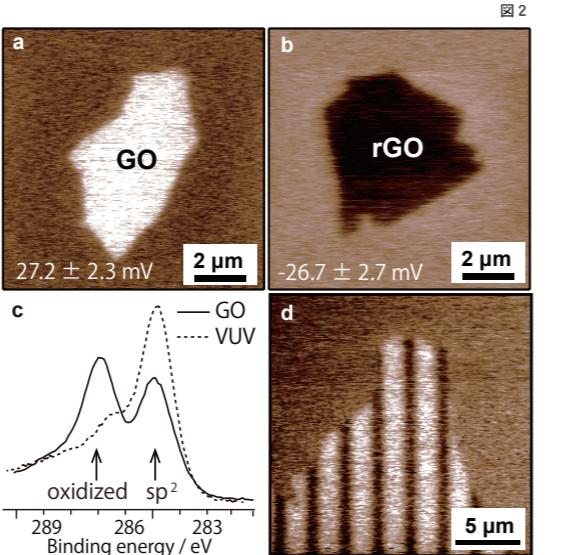


図2 VUV酸素トリミングによる酸化グラフェンの還元。(a) GOシートの表面電位像 (基板Siより27mV高電位)、(b) VUV照射により還元したrGOシートの表面電位像 (基板Siより27mV低電位)。還元による電子状態の変化を示す。(c) GOとrGOのC1s-XPS。VUV照射により酸素が脱離し、 $sp^2$ 炭素成分が增加了。(d) フォトマスクを用いたVUV照射による還元微細加工。GOシート上にsub- $\mu$ mレベルのrGOパターンを転写可能。導電性回路パターンの描き込み等への応用展開を考えています。

## 有機分子と半導体材料の化学接合

代表的な半導体材料であるシリコンの表面に有機分子を化学的に固定化し、その有機-半導体接合界面の物性を調べる研究を行っています。これも、自己集積化单分子膜-SAM の一種です。具体的には、水素終端化シリコン表面の熱励起あるいは光励起により有機分子と反応させ、導電性、絶縁性、光活性、電気化学活性等のさまざまな機能を有する有機分子とシリコンとを共有結合によって接合します。無機ナノ粒子の表面を反応性 SAM で被覆すれば、ナノ粒子をシリコン表面に化学的に固定化することも可能です。有機分子と半導体との間の電子移動という基礎的にも興味深い研究課題であるばかりでなく、半導体材料と有機分子材料、無機材料を融合化した新しい電子材料へと発展するものと期待しています。

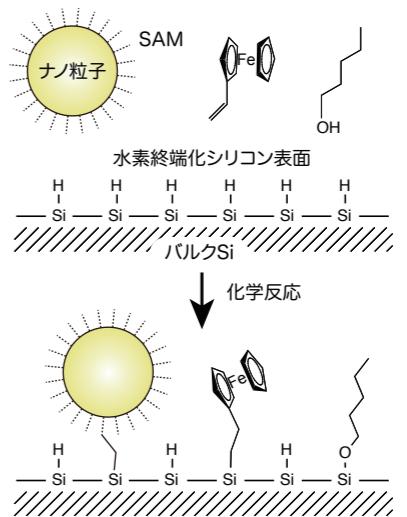


図3 有機分子とシリコンの接合。不飽和炭化水素、アルコール分子等を水素終端化シリコンと反応させ单分子膜を形成します。シリコンと有機分子が共有結合によって接合されます。ナノ粒子の場合は、その表面をビニル基やアルコール性水酸基で包むように SAM で被覆することで、水素終端化シリコンと反応させます。

## 固液界面高分解能解析のための原子間力顕微鏡の開発

固-液界面は電気化学、自己集積化、結晶成長等の各種反応場として重要であり、私たちはそれを原子レベルで解析可能な周波数変調原子間力顕微鏡 (Frequency modulation atomic force microscopy, FM-AFM) (図4a) の開発をすすめています。図4bは、水溶液中において、マイカ表面の原子像を FM-AFM 観察した結果を示しています。水溶液だけでなく、新規機能性溶媒として注目を集めているイオン液体についても研究を進めています。固-液界面で起こる様々な反応を原子レベルで観察することで、その反応メカニズムを明らかにし、優れた表面機能化プロセスを開発することを目指しています。

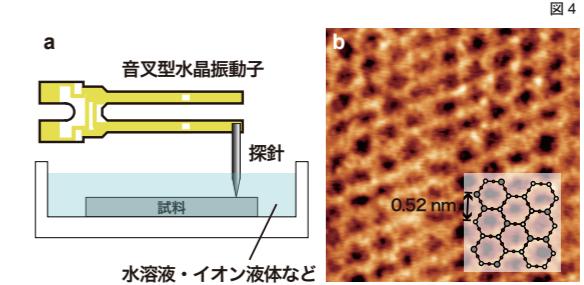


図4 固液界面解析用原子間力顕微鏡。(a) 探針を振動させその振動周波数変化を検出することで、探針先端の受ける力を計測するFM-AFM。音叉型水晶振動子を用いることで、イオン液体の様な高粘性液体中でも、安定した動作が可能になりました。(b) マイカ劈開面のAFM像。マイカ基板は特徴的なハニカム構造を有していますが、それがそのまま画像化されていることがわかります。

## 光活性化によるプラスチックの低温接合

医療診断や生化学検査への応用が期待されるマイクロ流路デバイスの汎用化には、プラスチック化によるコスト低減が必要不可欠です。その実現には、接合技術の開発が重要な技術課題となっています。私たちは、プラスチックが熱変形しない低温で、接着剤を使わずにプラスチックを接合する、光活性化接合の研究に取り組んでいます。これまでに、シクロオレフィン、ポリメチルメタクリレート、ポリカーボネート、シリコーン樹脂等の、同種/異種間の光活性化接合ができるこことを示してきました。実際に、マイクロ流路プレートを試作し、実用化を目指して研究を続けています。最近では、この技術を基に、異種材料接合（無機材料とプラスチック／金属とプラスチックの接合）へと、展開しています。

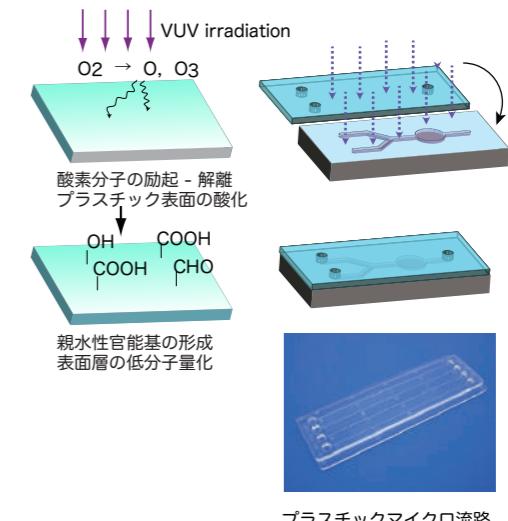


図5 酸素分子存在下で波長172nmの真空紫外光をプラスチック表面に照射すると、プラスチック高分子の光励起と同時に酸素分子の解離・活性化反応が誘起されます。励起高分子と活性化酸素との化学反応によって、プラスチック表面に、反応活性が高く低分子量化により流动性が増した親水性ナノ薄層が形成されます。この活性化表面層が接着剤として働き、熱変形温度より十分低い温度でプラスチック板を接合できます。写真は、実際に作製したマイクロ流路です。中に水を流して、漏れがないことを確認しています。

# 非鉄製錬学の永続を目指して ～产学連携による教育志向の活動～

## 非鉄製錬学講座 (寄附講座: 三菱マテリアル)

Non-ferrous Extractive Metallurgy  
(Endowed Chairs: Mitsubishi Materials Corporation)

宇田 哲也 (兼任)、安田 幸司、岸本 章宏 (兼任)

三菱マテリアル株式会社の寄附によって設立された講座です。  
資源循環型社会の実現を担う人材を育成するため、非鉄金属の製錬・リサイクルに関する教育志向の活動を行っています。

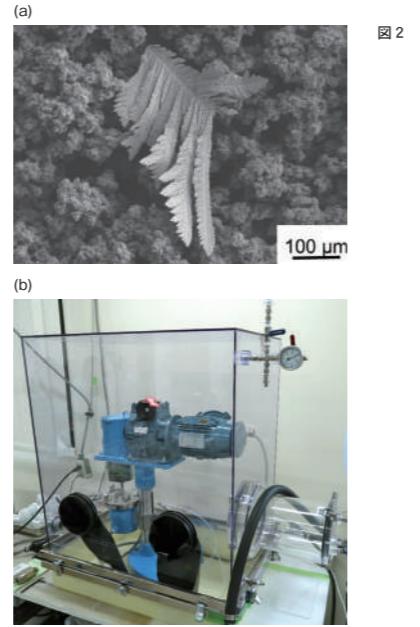
### 非鉄製錬学

非鉄製錬学は、銅、亜鉛、鉛、貴金属などを含む原料からこれら有価金属を抽出する技術に関する学問であり、長い歴史を有する分野の一つです。また、非鉄金属やレアメタルの製錬・リサイクルに関する産業は、循環型社会の実現に不可欠な基幹産業です。特に近年では、エネルギー消費の少ない製錬プロセスの開発に加え、レアメタルを高濃度に含む都市鉱山からの有用資源の分離技術の開発の必要性が増しており、産業技術の開発と革新、それを支える基礎学問の発展や強力な人材の育成が世界的に求められています。

本講座は、これらの社会的要請に応えるため、三菱マテリアル株式会社の寄附のもと 2017年4月に新設された講座です。現行プロセスで起こる現象の理解の深化や長期スパンでの資源循環型社会への貢献を目指した基礎研究と、社会人や大学生、高校生に対する教育・啓蒙活動を行っています。教育志向の活動を通じて、非鉄製錬学の永続的な発展への貢献、そして本分野の産学の未来を担う人材の育成を目指しています。

### 未来型非鉄製錬の実現に向けた基礎研究

非鉄製錬で起こる現象の理解の深化をはかるとともに、現行プロセスの課題の把握、長期スパンでの資源循環型社会への貢献を目的に、非鉄金属の製錬・リサイクルプロセスに関する基礎研究を行っています。非鉄金属の製錬・リサイクルでは、多様な元素を分離回収するため、種々の化学反応や物理現象が利用されています。しかし、それらの機構については、定性的あるいは経験的な理解の段階であり詳細が明らかにされていない点が多く残っています。本講座では、浸出や電析、濡れといった幅広く利用されている化学的・物理的現象に注目し、それらの原理をより深く理解するための研究を行っています。例えば、亜鉛の電解採取について、酸性浴とアルカリ浴における電析物の組織形成のメカニズムの解明に取り組んでいます。また、使用済みリチウムイオン二次電池（廃 LIB）を安全に失活解体する新規湿式リサイクル技術の開発に取り組んでいます。このような基礎研究こそが、講座スタッフの物性、平衡、反応に対する理解を深め、学生や社会人に対する教育活動にも活かされると考えています。



### 社会人向けWeb講座

製錬・リサイクル産業で働く技術者向けの教育活動として、社会人向け Web 講座を開講しています。製錬・リサイクルに関するプロセス技術の開発・革新には、その根底にある基礎理論の理解が重要です。また、学問分野の多様化にともない、製錬プロセスに携わる技術者の出身学科も多様化しています。産業界の人材育成、特に若手技術者の人材育成として、基礎学問の習熟の重要性が高まっています。社会人向け Web 講座は、このような要望に大学から応える新たな取り組みであり、本専攻の教員を講師とするオンデマンド講義やほぼ毎週のレポートの提出を通じて、産業プロセスの根底にある理論を体系的に学ぶことができる 1 年間の教育プログラムです。

2017年秋に第1期プログラムを開始し、2020年7月現在では非鉄製錬分野をはじめとする各社から計17名の受講者を迎えて第3期のプログラムが進行しています。本プログラムは、熱力学や電気化学に関する4つの科目で構成されており、受講生はインターネットを利用して必要なときに何度でも講義を視聴することができます。また、前期・後期の最後には、京都大学や京都近郊のセミナーハウスにて期末試験が行われ、各科目の習熟度を確認できることも特徴です。産業界の明日を担う若手技術者にとって、基礎学問を深く学ぶ場であるとともに、会社の枠を超えた交流の場となっています。2020年の秋からは、第4期プログラムを開始する予定です。



【前期講義】  
化学熱力学基礎(全14回) 講師: 宇田哲也  
状態図と組織形成(全14回) 講師: 安田秀幸、豊浦和明  
【後期講義】  
冶金電気化学(全14回) 講師: 邑瀬邦明、深見一弘  
パソコンによる化学ボテンシャル図の書き方と運用(全7回)  
講師: 畠田直行

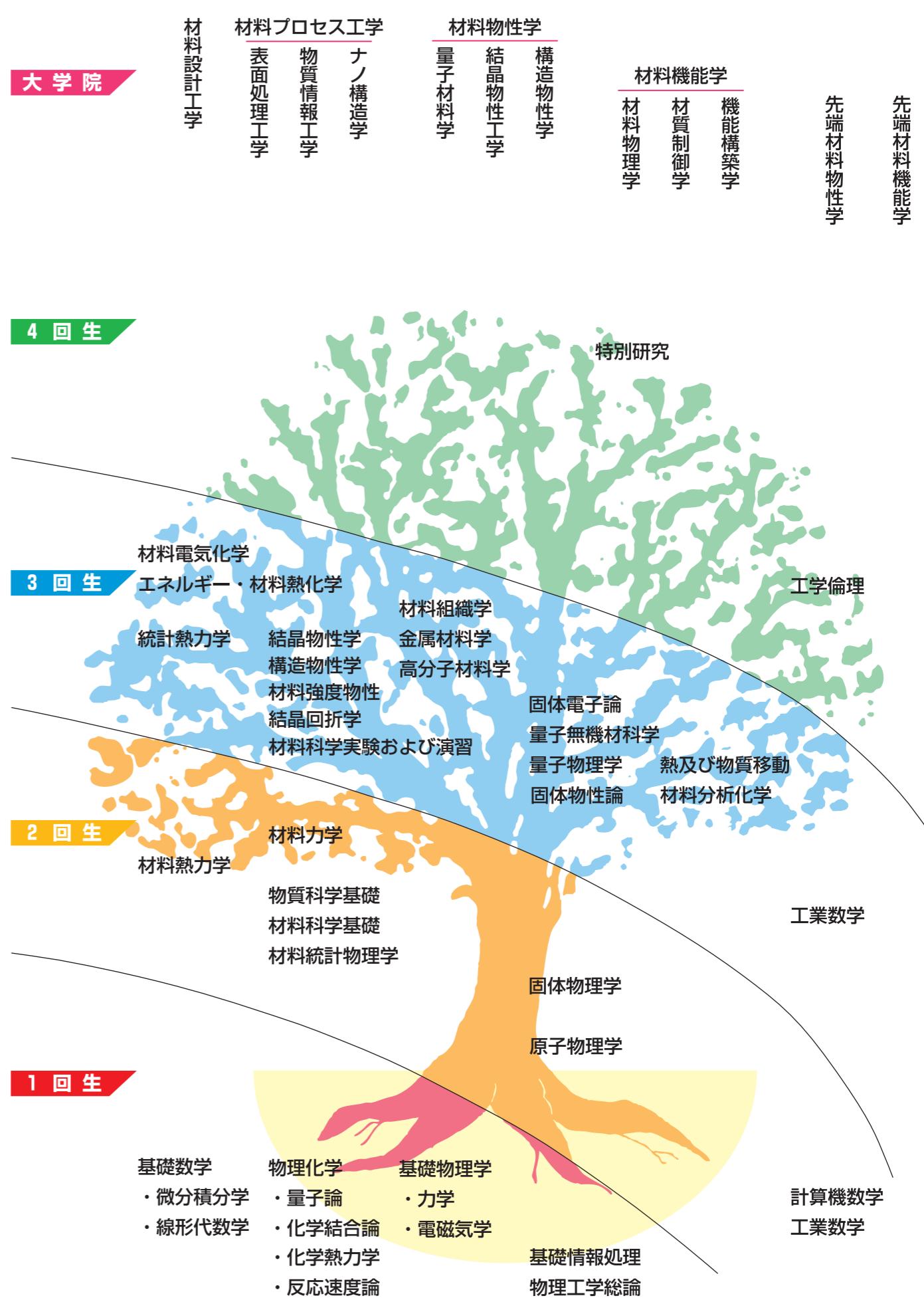
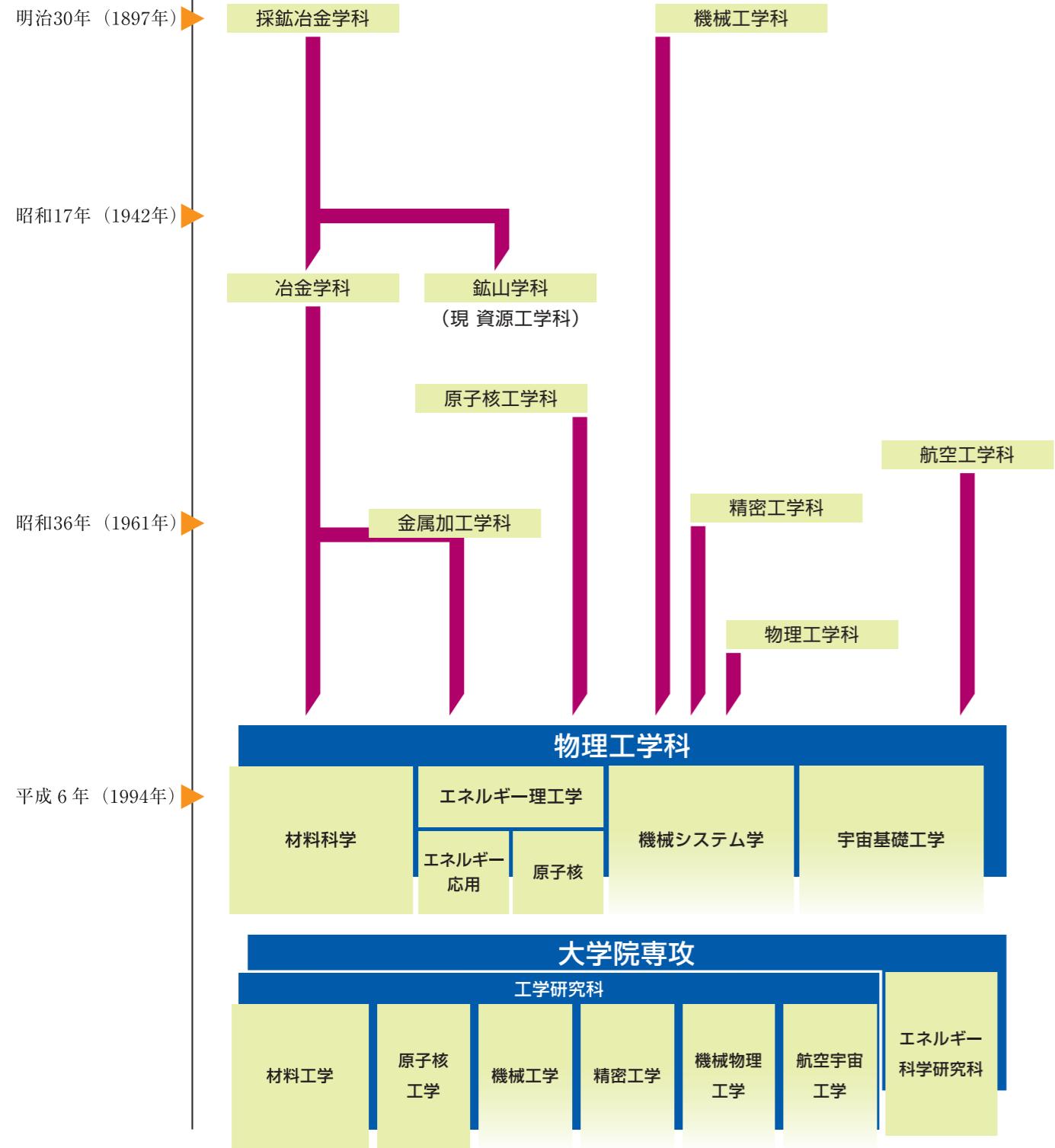
### 高校生のための出前授業・実験教室

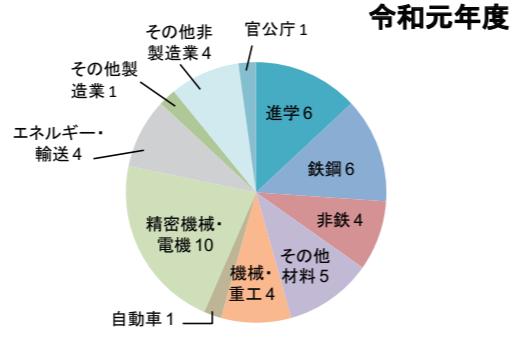
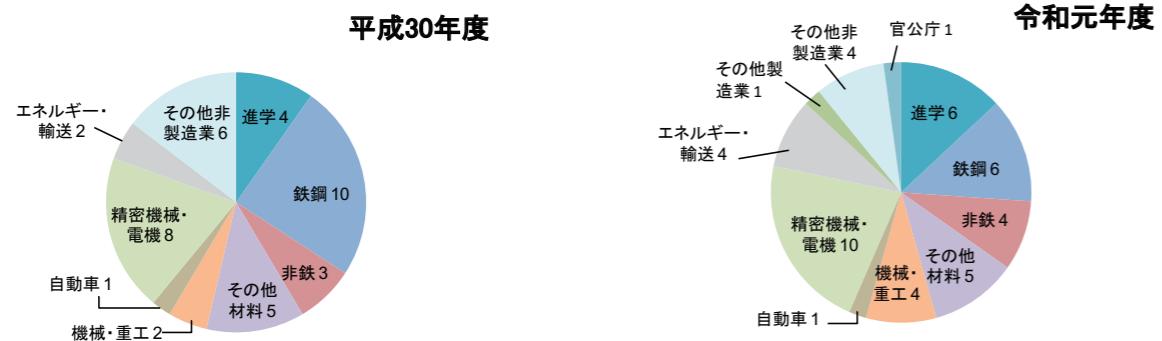
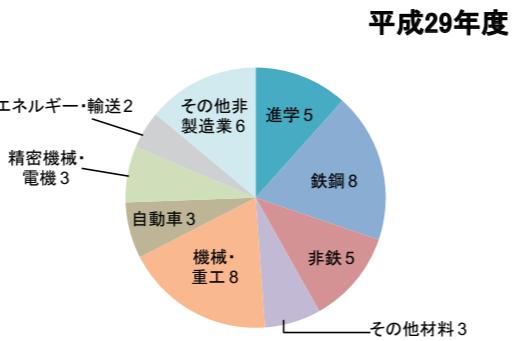
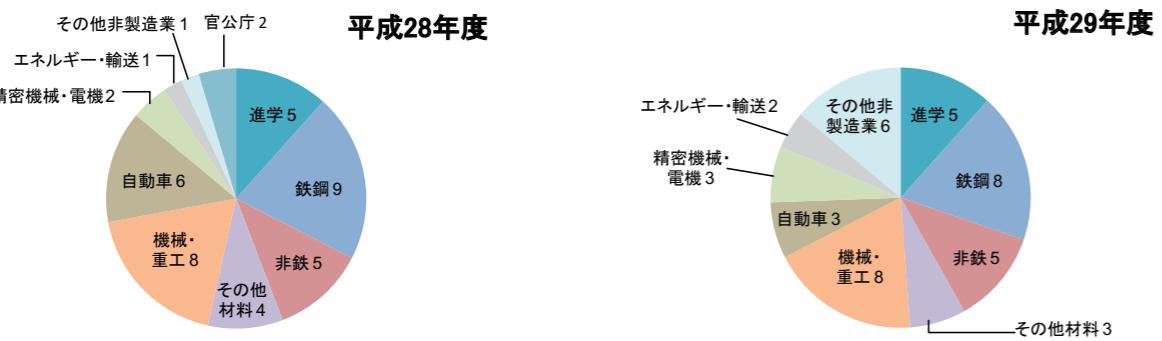
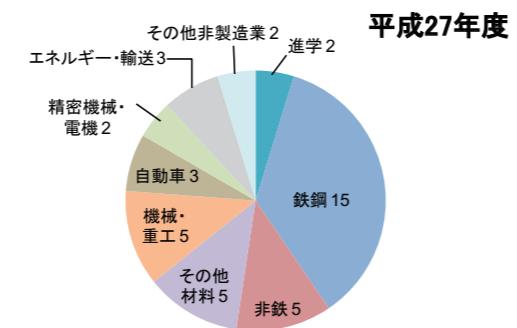
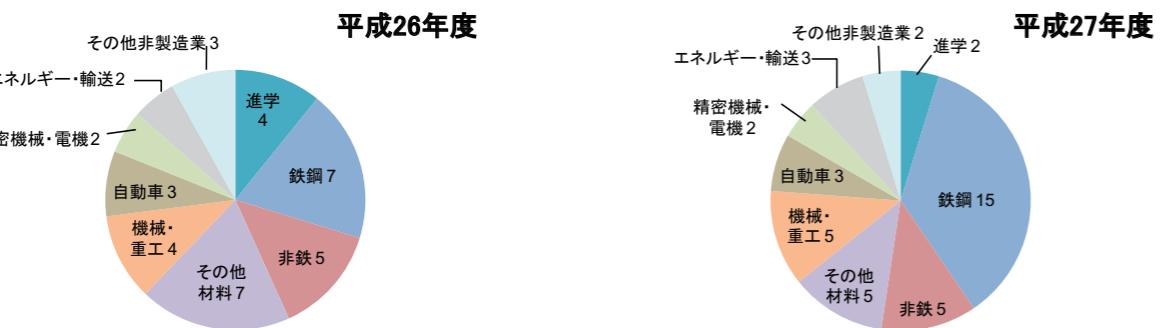
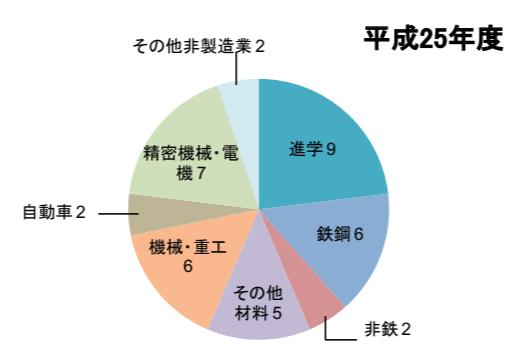
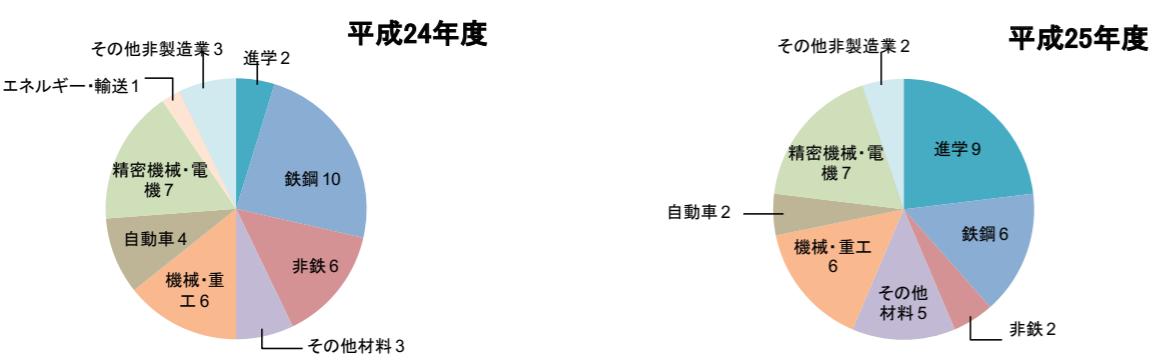
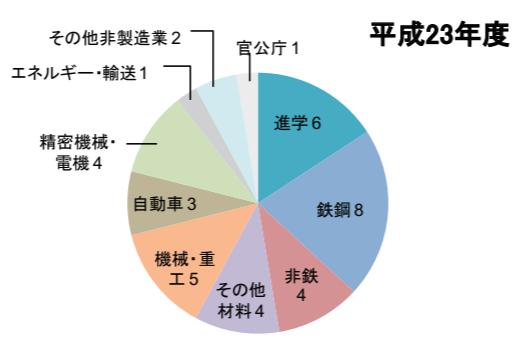
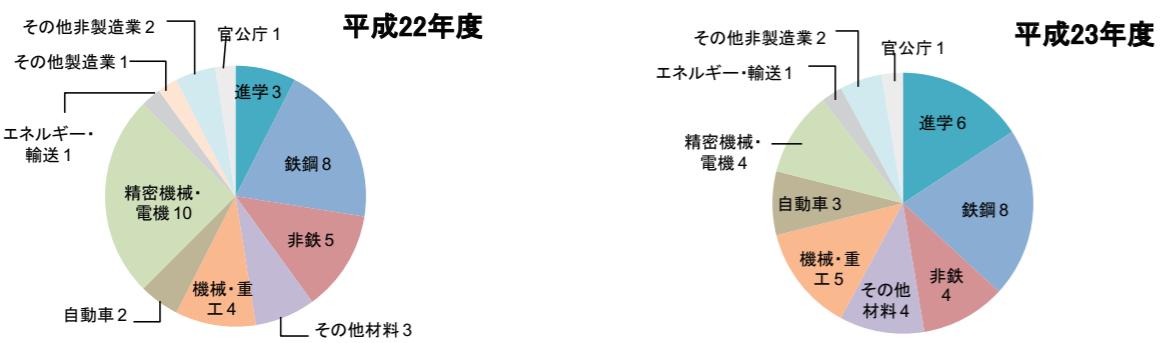
本講座では、未来を担う人材の育成のために、高連携の教育・啓蒙活動にも力を入れています。スマートフォンやパソコン、自動車などのハイテク製品を製造するには、銅、鉛、亜鉛、金、銀など多種多様な非鉄金属が必要不可欠です。日本国内の製錬所では、海外から輸入した鉱石を原料として、様々な非鉄金属が製造されています。また、これらの非鉄金属の製錬所は、都市鉱山のリサイクルや廃棄物の処理にも重要な役割を果たしています。非鉄金属の製錬・リサイクルは、私たちが現在享受している豊かな生活、そして未来の高度資源循環型社会の実現のために無くてはならない産業ですが、普段の生活ではどのようなことを行っているか目に見える機会はありません。そこで、国内製錬所における非鉄金属の製造方法とその高い技術、および非鉄金属産業が資源循環型社会に果たす役割を知ってもらうため、出前授業や実験教室などを実施しています。



図3 社会人向けWeb講座。  
産業プロセスの根底にある理論を体系的に学ぶことができる1年間の教育プログラムです。第1期は、非鉄製錬に関連する各社から計14名の参加者を迎えてスタートしました。

# 材料工学教室の移り変わり





(修了年度)