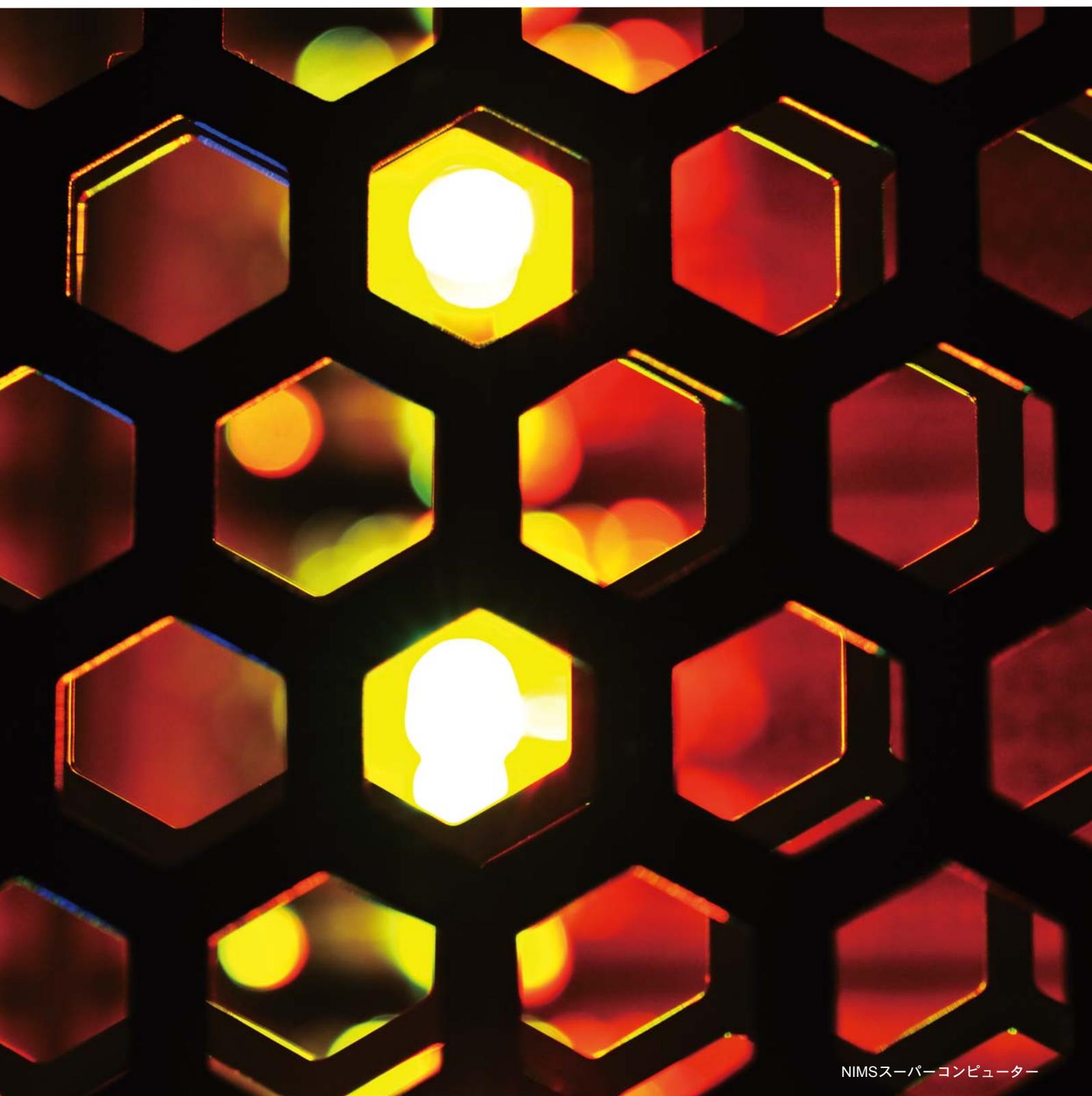


NIMS

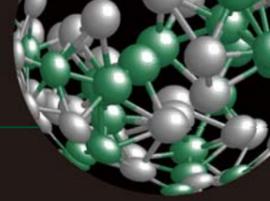
2010年 4月号

NOW

計算科学が映す
材料の未来



計算科学が映す材料の未来



計算科学の進展

計算科学センター センター長
ナノ材料科学環境拠点 拠点マネージャー
大野 隆央

計算科学は、自然界の現象を基礎方程式に基づいて、ありのまま、あるいは、極限状態や理想状態などの制御された環境の下で数値的にシミュレートし理解するもので、第三の科学と呼ばれ、理論、実験と並んで21世紀の科学を支える大きな柱です。物質・材料分野においては、分子の光による電子励起や表面における化学反応などミクロなものから、巨大構造物の機械的特性の経年変化などマクロなものまで、時間的にも空間的にも幅広いスケールにわたる現象があり、物質・材料の性質や特性を理解するには、そのスケールに適した計算科学手法の開発が必要です。私たちは、量子力学に基づき電子や原子の挙動を扱う第一原理計算、原子・分子スケールを扱う古典的な分子動力学やモンテカルロ手法、ナノ・メソ領域を扱う現

象論的なフェーズフィールド法、マクロ領域を扱う有限要素法や統計熱力学などの手法を研究開発し、様々な物質・材料の物性・特性を解析、理解し、優れた物性・機能をもつ物質・材料を探索しています。

計算科学の進展には、解析理論や数値解析手法の進歩とともに、計算機パワーの進展が不可欠です。実際、計算機の性能は3年で約10倍という速度で向上しており、現在では、ピーク性能10 PFLOPS級(1ペタフロップスは、1秒間に 10^{15} 回の浮動小数点演算を実行する演算性能)の「次世代スーパーコンピューター」の開発が進められています。このような計算機環境を活用して、計算科学は、高度な数値シミュレーションにより複雑な現象の裏に潜む基礎原理を解明し、物質・材料研究を大きく進展させるものと期待されています。

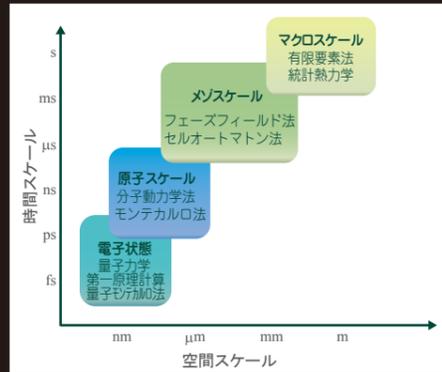


図 計算科学手法の時間及び空間スケール



NIMSスーパーコンピューター

大規模第一原理計算手法の開発

表面、界面での原子の挙動を明らかにすることは、環境技術の基盤研究において極めて重要です。量子論に基づき、原子、分子の振る舞いを電子レベルから明らかにすることができる第一原理計算は、物質・材料科学の様々な分野において重要な役割を果たしてきました。複雑な表面、界面における現象をシミュレートする為には、多くの原子を含む系に対する計算を実現する必要があります。優秀な第一原理計算プログラムの普及、計算機速度の向上により、最近では数百原子程度を含む系に対する第一原理計算は容易に行えるようになりました。しかし、通常用いられている手法では原子数が数百を超えると、原子数Nの増加に対して計算量がNの3乗に比例して急激に増加するという問題があり、一千原子以上を含む巨大系に対する第一原理計算の実現は極めて困難で

す。私たちは、英国UCL(ユニバーシティ・カレッジ・ロンドン)の研究グループとの共同研究により、計算量がNに比例して増加するオーダーN法第一原理計算手法の開発を行いました。私たちのプログラムは並列化効率や計算の安定性で世界をリードし、半導体表面ナノ構造や複雑な生体系において、一万原子以上を含む巨大系に対する第一原理計算を実現しています。この手法は、現実の複雑な表面、界面反応を明らかにする強力な研究基盤技術になると期待されています。

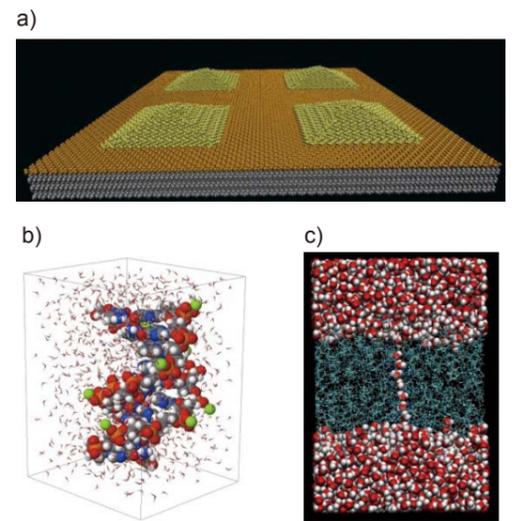


図 オーダーN法第一原理計算で理論研究を行っている系の例。 a) Si(001)表面上に成長したGe 3次元島構造。 b) 水溶液中のDNA。 c) 脂質二重層中のイオンチャネルと水分子の配列。

表面ボラフェンへのアプローチ

計算・実験・理論のコラボレーション

近年、NIMSの実験研究グループにより新しいボラフェン相が金属二ホウ化物(MB₂)表面で発見されました。ボラフェンはグラフェン(六角形格子構造の1原子厚さの炭素原子シート)と同様の骨格をもつホウ素のネットワークであり、高融点、高硬度、超伝導性などの特異な性質をMB₂に与えています。これまで、5族MB₂(M=Nb, Ta等)ではボラフェン表面が安定、4族MB₂(M=Zr, Hf等)では金属表面が安定であると考えられてきました。しかし、後者の系においても未知のホウ素表面が安定に存在することが、表面構造の周期を調べる電子線回折や、その固有振動(フォノン振動)を測ることのできる高分解能電子エネルギー損失分光測定などから明らかになったのです。ただし、これらの実験から詳細な原子配置を知ることが容易ではありません。また実験事実から、物理化学的に興味深い表面構造の安定性の起源を理解することも非常に困難です。このような場合には、実験に頼らず構築

された第一原理計算手法との組み合わせが大変有効です。図に第一原理計算で明らかになった表面ボラフェンの構造とフォノン分散を示しました。実験と計算のフォノン分散の一致は、計算モデルの妥当性を表しています。また電子状態の計算結果から、表面構造の安定性の起源を明らかにすることもできました。さらに、これらの計算結果と熱統計力学の理論とを組み合わせ、有限温度での構造安定性を議論し、熱物性値(比熱・エントロピーなど)を導き出すこと

計算科学センター 第一原理反応グループ
末原 茂

もできました。第一原理計算は、実験や理論と連携することで物質に関わる様々な事象の輪郭をより明瞭にし、物質・材料科学の内容をますます豊かにする手法の一つなのです。

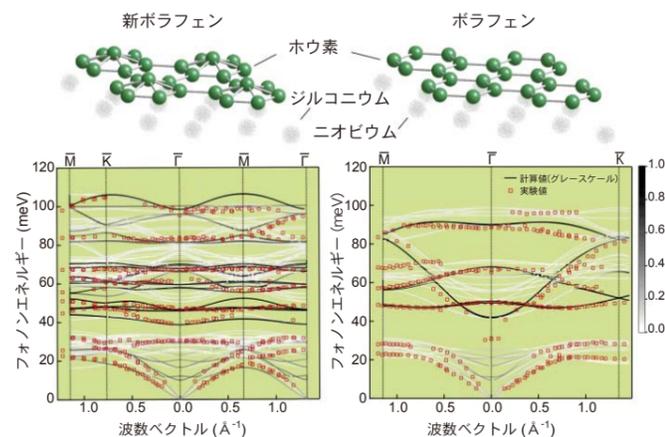


図 表面ボラフェンの構造と表面フォノン分散 [S. Suehara, T. Aizawa, T. Sasaki, Phys. Rev. B81,085423 (2010)より]

酸化還元反応の第一原理計算

MANA/ナノ材料科学環境拠点 環境拠点計算グループ
館山 佳尚

光触媒や燃料電池・太陽電池など、環境・エネルギー問題解決の切り札と目されている技術の中心プロセスは“酸化還元反応”すなわち化学結合変化を伴う電子移動反応(例えば水素生成 $2H^+ + 2e^- \leftrightarrow H_2$, 酸素還元/水分解 $O_2 + 4H^+ + 4e^- \leftrightarrow 2H_2O$ など)によるエネルギー授受から成っています。この酸化還元反応の定量的シミュレーションを行うためには、電子移動過程とそれに伴う構造変化の高精度な記述が必要です。私たちはこの酸化還元反応に関する自由エネルギー変化、反応経路を定量的に求めるための密度汎関数理論(物質の電子状態を求めるための量子力学的理論)をベースにした第一原理分子動力学手法の開発・実証を行ってきました。その結果、電子移動に関する代表的理論であるMarcus理論と調和した、非常にユニバーサルな計算手法の構築に成功しました。最近では触媒や電池の主要な反応場である固体-液体界面に

おける酸化還元反応に向けた拡張に取り組んでいます。そして界面構造を変化させることにより、水や有機物分解の酸化還元反応効率がどのように変化するかを半定量的

に見積もることができつつあるところで、将来的には、これらの計算手法をもとに界面酸化還元反応の理論的設計が可能になることが期待されます。

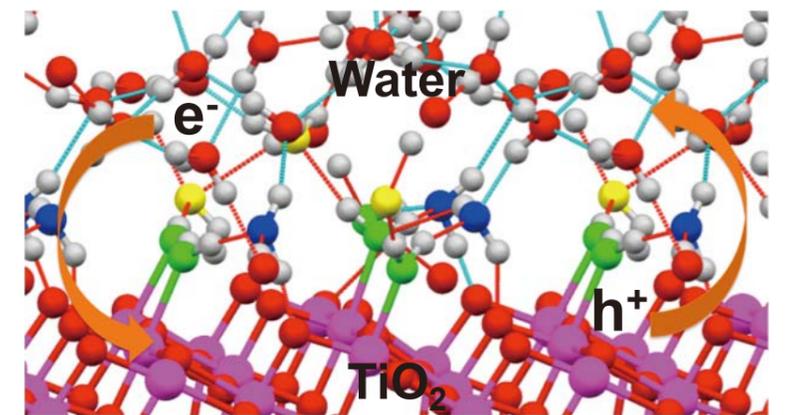


図 光触媒系(二酸化チタン/水界面)の原子モデル

分子動力学法シミュレーションでナノ構造を探る

電子顕微鏡などミクロの世界を見る実験技術は日々進歩していますが、個々の原子を目で見るように捕えるのはまだ難しい段階です。一方、分子動力学法と呼ばれるシミュレーションでは、コンピューター内に仮想実験室を作り、その中に配した原子1個1個の動きを追跡してゆくため、材料の中でどのように原子が位置し、それら原子の配置や運動が材料の特性とどう関係するかといった、実験では得がたい情報を得ることができます。

物質がほぼ液体のまま固まった状態をガラス状態と呼び、窓ガラスはその一例です。金属でガラス状態を作った場合、通常の金属(原子が整然と並んだ結晶状態)と比べて大きく異なる物理的・電磁気的特性を示すことから、新しい材料として注目されています。ただ、金属がガラス状態でのような原子構造をとっているのか、電子顕微鏡でもよく分かっていませんでした。そこで分子動力学シミュレーションを用いて仮想実験室内で液体金属を急冷することでガラス

を作成し、その原子レベルの構造を解析しました。すると、ガラス状態であっても原子がでたらめに並んでいるのではなく、図のように原子が正20面体型のクラスターを形成し、しかもそれらが繋がってネット

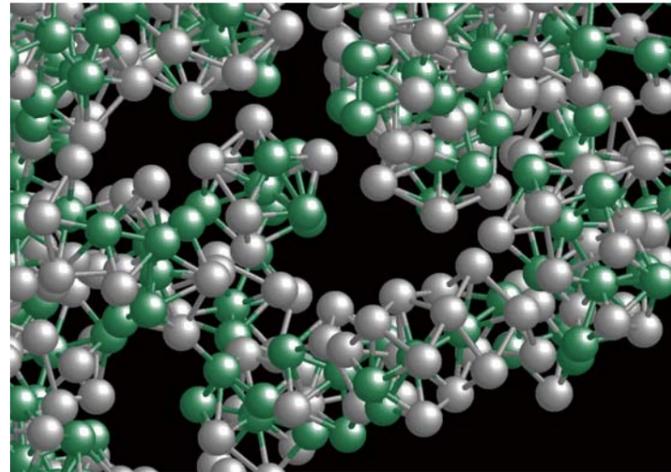


図 ZrCu金属ガラス中に見られる正20面体クラスターのネットワーク構造 (灰色: Zr原子, 緑色: Cu原子)

計算科学センター 粒子・統計熱力学グループ
下野 昌人

ワークを構成していることが分かりました。このように、シミュレーションを用いて新規物質のナノ構造を解明することで、その特性との関連を探り、材料開発に役立てています。

CALPHAD法によるLiCoO₂の規則-不規則変態モデリング

反応熱や比熱などの実験データと第一原理手法により推定した安定・準安定結晶構造の種々の熱力学量を合わせて、必要な(しかし比較的簡単な)熱力学モデルを基に最も実験データが良く再現できるギブスエネルギー(物質の持つエネルギー)関数を求める計算、これをCALPHAD法(Calculation of Phase Diagrams: 状態図計算)による熱力学評価と呼びます。熱力学モデルに立脚しているため、温度や組成条件を大きく変えた場合でも、そのモデルの精度内でギブスエネルギーの推定値を与えることができ、これらギブスエネルギー関数は、フェーズフィールド法などの動的シミュレーションに必須の基礎データとなります。ここではLi-ion(リチウムイオン)二次電池の陽極材料として広く実用に供されているLiCoO₂(コバルト酸リチウム)の相変態への適用例を示します。

LiCoO₂は充電に伴ってLi原子が陽極から陰極へ移動し、後にはLi原子が抜けた穴(空孔)ができます。このときLi原子と空孔はLiCoO₂内でランダムに分布するのではな

く、ある温度・組成範囲では規則配置(二次の規則-不規則変態)をすることが分かっています。この系に関する種々の熱力学量を最も良く再現できるようにギブスエネルギーを決定し(図1参照)、それを基に計算した二次変態点を図2に示します。ここからLi-ion電池の起電力の組成・温度変化を

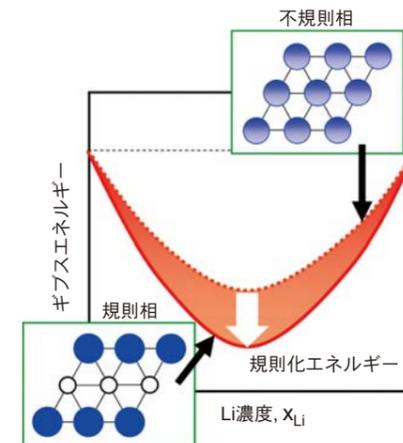


図1 規則相と不規則相のギブスエネルギー
○: 空孔, ●: Li原子, ●: ランダム混合

計算科学センター 粒子・統計熱力学グループ
NIMS-トヨタ次世代自動車材料研究センター

阿部 太一 小山 敏幸

求めることができ、またLiCoO₂にNi(ニッケル)やMn(マンガン)などの元素を添加した時の自由エネルギー変化を推定する場合があります。本研究成果はNIMS-トヨタ次世代自動車材料研究センターにおけるトヨタ自動車との共同研究によって得られたものです。

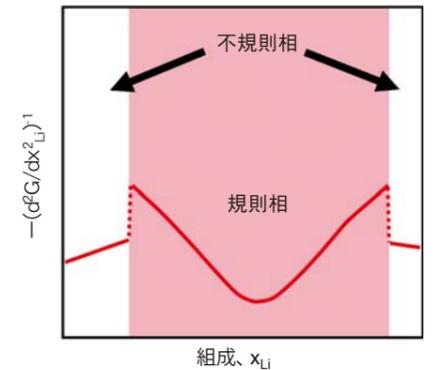


図2 ギブスエネルギー(G)の二階微分とLi濃度の関係。両側の角は二次の相変態点を表している。

フェーズフィールド法による凝固ミクロ組織シミュレーション

肉眼では「のっぺらぼう」に見える金属材料を顕微鏡で観察すると、様々なパターンを見ることができます。これらは「ミクロ組織」と呼ばれ、材料特性に大きな影響を及ぼします。ミクロ組織の多くは、材料を溶かして固める時に形作られます。その代表的な組織の一つに「共晶組織」と呼ばれるものがあります。これは均一濃度の液相から、濃度の異なる2つの固相が同時に晶出する「共晶凝固」によって作られる組織で、2つの固相が周期的な層状のパターンを作ります。図はこの共晶凝固をフェーズフィールド法によって計算したものです。

フェーズフィールド法は、複雑なパターン形成を手軽に計算できる手法です。一般にパターンは「境界線」によって特徴づけられますが、例えば凝固組織の場合「固相」と

「液相」の界面がそれに当たります。「相」の界面はトータルの長さを最短にしたいという特徴を持っています。一方で、凝固プロセスでは固相の体積を増やしたい、なるべく早く増やしたい、という力も固液界面に働きます。この二つの力のバランスが複雑なパターンを作り出します。フェーズフィールド法では、この二つの力の釣り合いをシンプルに、かつ既存の理論と矛盾しないよう式が導出されました。ミクロ組織と呼べるものはほとんどすべて、フェーズフィールド法でその形成過程を計算することができるため、様々な分野での利用が期待されています。

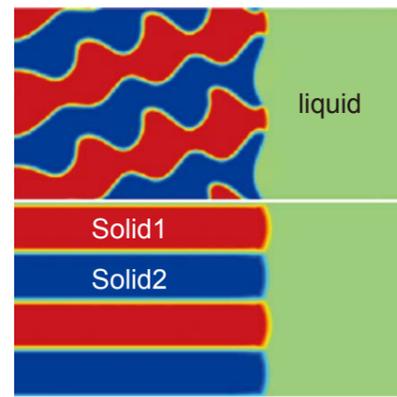


図 共晶組織パターン計算例。上: 界面エネルギー-0.02J/m², 下: 0.1J/m²。界面エネルギーの僅かな違いがパターン形成に大きく影響している。

計算科学センター 粒子・統計熱力学グループ
大出 真知子

原子配置を考慮した合金設計

合金中では、原子間に相互作用が働くため長範囲や短範囲の規則配列が存在し、これが相の安定性や材料特性にも影響を与えています。私たちは、必要とされる特性を持つ合金の化学組成と構造の予測を目的に合金設計の研究を進めており、原子配置の観点から熱力学解析を行い、フェライト鋼の長時間クリープ強度(基底クリープ強度)がフェライト中に固溶したMn(マンガン)やMo(モリブデン)とC(炭素)が形成する原子対によって支配されていること、チタン-アルミニウム(Ti-Al)合金の変形機構に及ぼす短範囲規則度の影響などについて明らかにしてきました。

また、バナジウム-水素(V₂H)化合物の体心立方正方構造における水素のオダリング現象についてクラスター変分法に

よる解析を進めています。バナジウム-水素系は体心立方型水素貯蔵合金の基本系であり、材料設計、材料開発の基盤を確立する上で、水素のオダリング機構を解明することが重要です。規則化した状態で水素は図に示すO₂₁サイトを占め、不規則化するとO₂₁とO₂₂の両サイトをランダムに占めます。両サイトは、バナジウムの体心立方構造中で体心立方の配置となっており、クラスター変分法の四面体近似による規則-不規則変態の解析を行った結果、水素の規則化の臨界温度は図中のa_{2L}結合に対する水素と空孔(V_a, 格

計算科学センター 粒子・統計熱力学グループ
小野寺 秀博

子間サイト)の有効相互作用エネルギーによって支配されていることを明らかにしました。

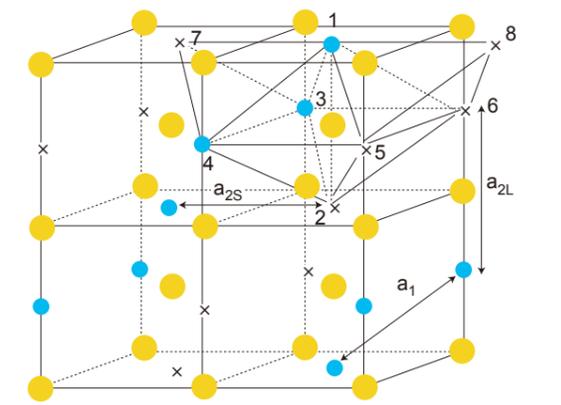


図 V₂Hにおける6種類の基本四面体クラスター(●: V, ●: 水素, (O₂₁サイト), x: 空格子間サイト, (O₂₂サイト))。数字はクラスター構成サイト位置を示す。

ナノ材料科学環境拠点と計算科学

私たちが直面する環境問題は、人類が利用するエネルギーの総量が地球の許容量に迫りつつあることに起因しています。豊かな生活を維持するためには、環境への負担を少なくする技術を開発することが重要な課題です。

このような状況の中、2009年10月、文部科学省の「ナノテクノロジーを活用した環境技術開発プログラム」において、NIMSを中核とするオールジャパンの拠点形成を目指す「ナノ材料科学環境拠点(ICNSEE)*」計画が採択されました。

ナノ材料科学環境拠点では、太陽光から出発するエネルギーフローに関わる材料技術、すなわち、太陽光発電、光触媒、二次電池、燃料電池のエネルギー変換システムをターゲットに、環境・エネルギー問題を解決する新しい材料の創出に貢献するための基礎盤研究を行います。ここでは、計算科学技術が、ナノ計測技術とともに重要な役割を果たします。従来の試行錯誤的な材料探索から脱却し、先端的な計算科学技術とその場測定技術を駆使し理論と実験を連携して、エネルギー変換技術における共通課題である“表面・界面現象”の理解と制御技術を確立することによって、環境・エネルギーに関する材料技術のブレークスルーを目指します。

太陽光発電、光触媒、二次電池、燃料電池などのエネルギー変換システム内には、電極、電解質溶液、色素分子、燃料ガスなどの異なる物質相から構成される多様なヘテロ界面が存在し、そこで生じる電荷移動やイ

オン拡散などにより機能が発現します。

例えば、色素増感型の太陽光発電では、色素分子の光励起により生成した電子・生孔対が電荷分離し、電子は電極表面に移動して外部回路を通して反対電極に移動しヨウ素イオンを還元し、還元されたヨウ素イオンは電解質中を移動して色素分子により酸化されます。この一連の物理・化学過程によって光エネルギーが電気エネルギーに変換されます。燃料電池では、水素や酸素などの燃料ガスが電極表面との間で電子をやり取りして、燃料ガスの化学エネルギーを電気エネルギーに変換します(図1)。

このように、エネルギー変換システムにおいて発現する機能は、表面・界面における光励起、電子移動、電荷分離、原子・イオン移動などの多くの物理・化学過程が関与するマルチスケール・マルチフィジクスな複雑現象ですが、現状では十分に理解されておらず、それが高性能材料開発の大きなネックとなっています。エネルギー変換効率の飛躍的な向上などのブレークスルーには、計算科学技術と先端解析技術を駆使して、表面・界面現象の理解と制御技術の確立に取り組むことが重要です。

P2~P4で紹介したように、私たちは、物質・材料研究のための計算科学技術を開発し、新しい物性の解明や新規物質の設計などを進めてきました。ICNSEEでは、第一原

計算科学センター センター長
ナノ材料科学環境拠点 拠点マネージャー
大野 隆央

理分子動力学法、時間依存密度汎関数法、フェーズフィールド法、マルチスケール手法など、ナノ表面・界面における構造、物性・機能を原子スケールからメソスケールまで高精度に解析・予測する計算科学技術を用いて、(1)ナノ表面・界面における電荷分離、電子移動、酸化還元などの“電子ダイナミクス”、(2)原子・イオン拡散や触媒反応などの“原子ダイナミクス”、(3)実材料のナノ組織形成とナノ組織における原子の“マクロ・ダイナミクス”を解析し、固液界面などを含む多様なナノ表面・界面における物理・化学現象の機構解明に取り組めます(図2)。

具体的に、計算科学として取り組むべき研究課題として、(1)太陽光発電材料と光触媒材料に対しては、無機・有機界面、固液界面などのナノ表面・界面における光励起、電子移動、電荷分離などの電子的・構造的・動的な解析、(2)二次電池材料と燃料電池材料に対しては、遷移金属酸化物などのナノ表面・界面、及びバルク内におけるイオン伝導などの構造的・動的な解析、があります。次世代スーパーコンピュータに代表される高度な計算機環境を活用して得られる信頼性のある解析結果を基礎に、エネルギー変換システムに共通する基礎原理である表面・界面現象の理解を目指すとともに、それに基づいた新材料の設計指針の構築を図っていききたいと思います。

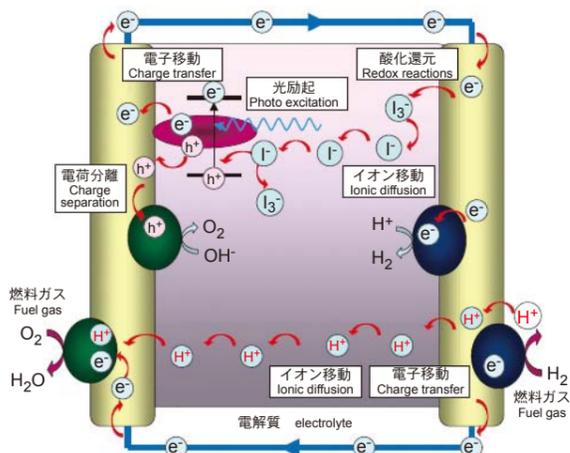


図1 エネルギー変換システムの共通基礎原理

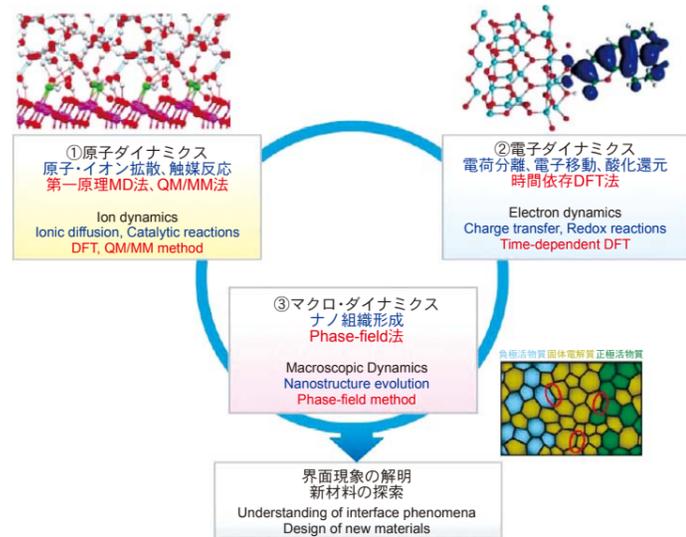


図2 拠点における計算科学的アプローチ

* Innovative Center of Nanomaterials Science for Environment Energy

発見者に聞く カーボンナノチューブの現在・過去・未来

名城大学 教授 飯島 澄男



1991年、飯島澄男博士によって発見されたカーボンナノチューブ(CNT)は、炭素だけで構成されているながら、物質としてさまざまな特性を備えているため、ナノテクノロジーの寵児として注目を集め、今や世界中の科学者の研究対象になっています。

どんないきさつでカーボンナノチューブを発見することができたのか、この物質を材料として実用化するためにはどんな障壁が存在するのかなどについて、発見者の飯島澄男博士にうかがいます。

1991年に発見されてもう20年近くが過ぎました。カーボンナノチューブもずいぶん知られるようになりましたね。

二つの見方があるんですね。純粋なサイエンスの面白さについて言えば及第点かなと。研究者も多くなって、これでドクターを取った人もずいぶんいる。その点で科学には貢献したことになる。ところが実用ということになると、残念ながらまだ儲かったという話は聞いたことがない。でも、材料ですから、しょせん役に立ってナンボなんですね。誰かがやらなければならない。時間もかかるんですが、エコノミーの壁を破ろうという努力は、大学の先生は特にですが、産総研やNIMSのような独法でも企業に比べると甘いんです。論文になりませんからね。

最近面白いのは、フラーレン、ナノチューブ、グラフェンと続いて、この系列の材料に期待感が集まっていることです。もっと新しいものも出てくるかもしれませんね。

材料化の研究をうまく推進するしくみなどは考えられないでしょうか。

そうですね。私は材料研究というのは一人のアイデアを伸ばすのが本道であって、手をつないで皆で仲良くやるものではないと思っています。研究は真剣勝負で戦いの場なんです。分担しないと進められないバイオ研究などはちょっと違うんです。

先生ご自身が力を入れている応用はどのようなものですか。

言い出しっぱの私としては何かしなければいけないので、現在スーパーキャパシタの電極として使おうとしています。民間企業と産総研が協力して既存のものに対抗できるかどうかを試しているところですが、ライフタイムやパワー密度など、勝るとも劣らないものが実現しています。ただ、CNTの当面の敵は活性炭で、活性炭は1kgあたり千〜数千円ですが、CNTは数万円かかります。活性炭に対抗するには性能の圧倒的な優位性が必要なんです。

さて、それではカーボンナノチューブ発見のいきさつをおうかがいしたいと思います。

電子顕微鏡が1932年に発明されてから、ケンブリッジを中心とした金属組成学が進歩し、金属の転位や欠陥の研究は完成し、原子を直接見ようという機運が高まってきました。シリコンなどの表面を見る、クラスター(微粒子)を見る、そしてナノチューブ、原子分子1個、さらに元素分析へ、というのが電顕の観察対象の流れです。

私はクラスターサイエンスをやっていたのですが、クロトー(ノーベル化学賞受賞者)にけしかけられてカーボン材料を観察することにしました。ちょうどフラーレンの大量合成が成功して、超伝導になるというので世界中が騒いでいたころです。名城大の安藤先生のところでアーク放電でつくったカーボンがあったので、それをもたらってきて電顕で観察したところ、CNTが見つかったんです。いわば偶然ですね。

偶然といっても準備された偶然ですね。まさにセレンディピティではありませんか。

そこで私は若い研究者にも「果敢に挑戦せよ」と言いたいんです。そしてダメならいさぎよく撤退する。戻ってきて出直せばいいんです。

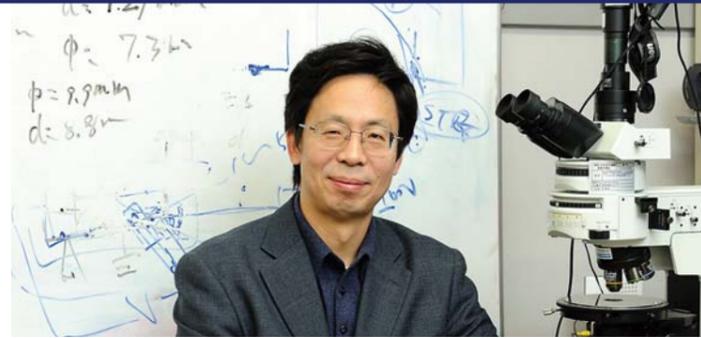
タナからポタモチというか、下手な鉄砲も数撃ちや当たると。ただ狙うべきところを狙わないとうまくいきませんが.....。

電子顕微鏡に関する研究では、①スマートに先が読めること、②人さまの持たないような装置をつくること、③改造した道具を使って(丸腰ではいけない)人と違うことをやる、の三つのタイプがありますが、私の場合は③です。

若い研究者にも、自ら装置を作るくらいの意気込みで、果敢に挑戦していつてもらいたいと思っています。

鉛を使わない 高性能圧電材料の開発

センサ材料センター センサ物理グループ



グループリーダー
任 暁兵
(ニンギョウヘイ)

有毒な鉛を大量に含有するPZT

電圧を加えると伸縮し、逆に力を加えると電圧が発生する現象を利用した圧電材料は、電気エネルギー(電荷と電圧)と機械エネルギー(力と変位)の相互変換に用いられ、現代社会の幅広い分野で応用されています。携帯電話、パソコン、テレビ、自動車などの家庭用製品からハイテク製品にまで使用され、圧電材料がなければ私たちの生活は成り立たないほどです。

しかし、そこに使用されているのは、ほとんどが有害な鉛を含有するチタン酸ジルコン酸鉛(PZTと略される圧電材料)です。PZTの優れた圧電特性は1950年代に発見され、低い製造コストも加わって半世紀にわたり圧電材料として一般的に使われ続けています。

近年、環境問題が顕在化し、環境意識が高まる中、世界規模で有害元素の利用規制が厳しくなりつつあり、鉛も規制の対象になっています。しかし、PZTの性能に匹敵する非鉛圧電材料が存在しないため、PZTは暫定的に規制が免除されており、この有害な材料に頼らざるを得ないのが現状です。

鉛を使わずにPZTの性能を超える

私たちは、高い圧電効果を得る新しい理論を提唱しました。この理論によると、圧電材料の組成-温度の状態図に立方晶相-菱面晶相-正方晶相の三重点(この三重点は不連続相転移から連続相転移へ移行する三

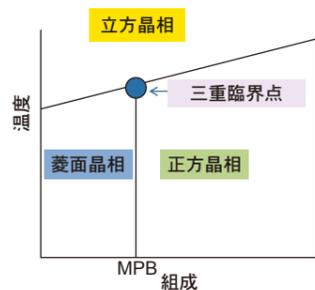


図1 高い圧電効果を得るための条件:組成-温度状態図に三重点を持つ境界(MPB)が存在すること。この条件を満たせば、非鉛圧電材料でもPZT並の圧電特性が期待される。

重臨界点でもある)を持つ場合(図1)、菱面晶相-正方晶相の境界組成(MPBと呼ばれる)で高い圧電特性を示します。この条件を満たす全ての圧電材料系に高い圧電効果が期待され、PZTはこの条件を満たした一つの例に過ぎません。これまでの非鉛圧電材料系は三重臨界点を持っていないため、MPBがあってもPZTのような高い圧電効果は実現できませんでした。

この理論に基づいて、新しい非鉛系BZT-BCT(Ba(Zr,Ti)O₃-(Ba,Ca)TiO₃の略)を設計しました。この系の状態図に三重臨界点が存在しており、MPB組成の50% BCTにおいて室温での圧電定数d₃₃は620pC/Nという非常に大きな値が得られました。図2で示したように、この値はこれまでの非鉛圧電材料(図2の左側)より2倍以上大きくなります。また、PZT鉛系(図2の右側)と比較してもこれまで最高圧電特性を持つソフトPZT(PZT-5H)を超える最高水準です。

今回の新しい理論は、今後さらに高性能非鉛圧電材料の設計開発に指針を与えると考えられます。また、今回の研究で発見された高性能非鉛圧電材料はPZTの鉛禁止法律における免除待遇を外すことに繋がる可能性もあり、世界的規模でPZTの代替に拍車をかける可能性が期待されます。

参考文献:
W.F. Liu and X.B. Ren, Physical Review Letters, 103, 257602 (2009)

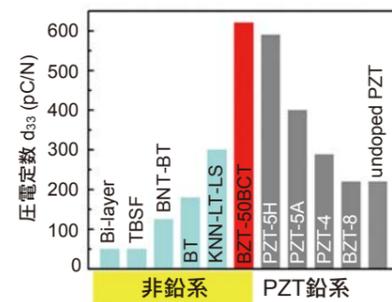
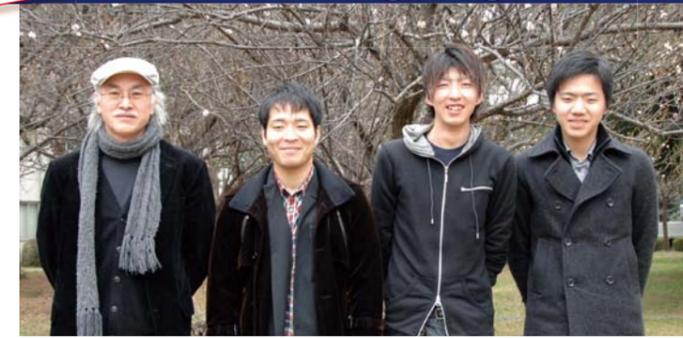


図2 新規非鉛圧電材料BZT-50BCT(即ち50%BCT)の圧電定数d₃₃とこれまでの非鉛系圧電材料(左側)およびPZT鉛系材料との比較(右側)。PZT系はハード材(d₃₃が低いが、ロスも少ない)からソフト材(d₃₃が高いがロスも大きい)までである。

BN/Siヘテロダイオード 太陽電池の試作に成功

半導体材料センター
ワイドバンドギャップ半導体グループ
東京工業大学*1
日本大学*2



グループリーダー
小松 正二郎 佐藤 祐平*1 平野 大輔*2 中村 拓也*2
(こまつしょうじろう) (さとう ゆうへい) (ひらの だいすけ) (なかむら たくや)

電子デバイスBN薄膜作製の課題

ダイヤモンド的な構造のBN(sp³-結合性BN)は、ダイヤモンドの次に硬く、かつ不燃性であり、応用的に魅力のある物質です。しかしsp³-結合性BNは、本来、高压法により1万気圧・数千度程度の極端な環境の下で合成されるため、産業的な普及には不向きな面がありました。そこで、エネルギーの大きなイオンビームやプラズマ状態を利用したプロセスにより、原料のホウ素と窒素を含む気体から蒸着し、薄膜として作製する気相法が研究されてきました。

BNを電子材料として用いるためには、結晶構成原子を置換する位置に微量不純物を導入(ドーピング)しなければなりません。これは高压法では実現されており、仁科賞受賞の三島ら(NIMS)が紫外発光ダイオードを試作しています。しかし、気相法では、ダイヤモンド的な構造の実現とドーピングが背反する傾向があり、電子デバイスとして機能するBN薄膜の作製は難しいのが現状でした。

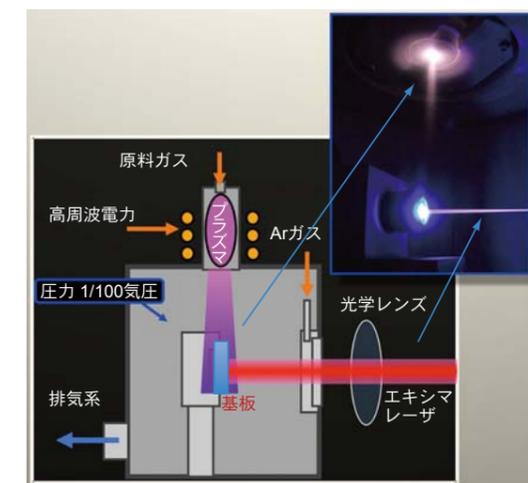


図1 BN薄膜合成の方法。プラズマ化した原料ガスがシリコン基板上にBN薄膜として堆積する一方、レーザー照射によりダイヤモンド的な構造への結晶化が進みます。

世界初・耐久性に優れたBN/Siヘテロダイオード太陽電池

私たちは気相法において、プラズマに加えて紫外レーザーを併用する独自技術により、sp³-結合構造を持ちかつ半導体として機能するBN薄膜の開発に成功しました。これは、従来熱的に励起される表面反応を紫外レーザー光で励起することにより、熱励起とは異なる反応経路を経ることで、新しい物質の合成が可能になる手法です。本手法により新規結晶構造(5H-BN)も発見され、International Center for Diffraction Dataに登録されました。また、小林(NIMS)により電子材料として重要な情報である5H-BNのバンド構造と空間群も決定されました。紫外レーザー照射により励起・促進されるドーピングと、同時に高密度sp³-結合相が形成される機構は基礎的にも興味深く、研究を進めています。

さらにその応用として、p型BN薄膜をn型シリコン基板上に成長させたヘテロ接合太陽電池の試作に成功しました。可視光が対象の地上用太陽電池では、BNのバンドギャップは大きすぎるため、今回はバンドギャップの小さいシリコンとの併用を試みました。変換効率は試作段階で2-4%程度ですが、BNは極めて頑強な物質であり、かつ可視領域で透明ですので、宇宙や砂漠などの過酷な環境で活躍する太陽電池や、窓ガラスなどに貼り付けられる透明な太陽電池、等々が将来実現できる見込みです。

*1、*2の肩書きは2009年3月のものです。



図2 BN/Siヘテロ接合太陽電池の仕組み。透明なサファイア基板とITO電極を透過した太陽光がBN薄膜/シリコン基板ヘテロ接合構造部に到達し、光励起により発生した電位差が上下の透明ITO薄膜電極間から光起電力として取り出されます。

● 第9回 NIMSフォーラム開催報告

「社会ニーズに応える物質・材料研究」

NIMSでは、研究とその成果をより多くの方々に知っていただくため、技術移転に重点を置いた「NIMSフォーラム」を、設立以来開催しています。

9回目の今回は、「社会ニーズに応える物質・材料研究」をキーワードに、環境・エネルギー問題の要求に応えるナノテクノロジー、バイオ技術、最先端分析技術などを紹介しました。

また、文部科学省の「ナノテク材料を活用した環境技術開発プログラム」で採択され、活動を開始した『ナノ材料科学環境拠点(ICNSEE)』の設置と取り組む研究について報告しました。

ナノ材料科学環境拠点では、4つの分野に力点を置いて研究を行うことになっています。エネルギー変換システムは、表面や界面のさまざまな物理化学過程が関与しますが、その状態を計算科学を用いて解明し、そうした基盤にもとづいて色素増感太陽電池の高効率化、可視光光触媒材料の開発、高性能二次電池の実現、燃料電池に関わる材料の開発などをすすめます。

成果報告の内容は次のとおりです。

社会ニーズを実現する環境・エネルギー材料

- 1) ナノ材料科学環境拠点と計算科学の可能性(大野 隆央/計算科学センター 写真上)
- 2) 色素増感太陽電池の高効率化(韓 礼元/次世代太陽電池センター 写真下)
- 3) 高性能二次電池を目指して(高田 和典/MANAナノグリーン分野)
- 4) 水素製造および燃料電池に関わる材料の開発(西村 睦/燃料電池材料センター)
- 5) ビスマス系高温超伝導線材高性能化と将来展望(北口 仁/超伝導材料センター)



環境浄化へのナノテクノロジーの適用

- 1) 多孔性ナノシートを用いて有機分子の超高速濾過を実現(一ノ瀬 泉/ナノ有機センター 写真)
- 2) ナノ光触媒 – その可能性へのチャレンジ(葉 金花/光触媒材料センター)



ナノテクノロジー研究の進展

- 1) 原子間力顕微鏡法による原子単位のナノ構造化(Oscar Custance/ナノ計測センター 写真)
- 2) プラズモンナノ共振器から生まれる新しい光機能(宮崎 英樹/量子ドットセンター)
- 3) 固有ジョセフソン接合 – 結晶に内蔵された超高速・超低消費電力・三次元集積素子(羽多野 毅/ナノテクノロジー基盤萌芽ラボ)
- 4) 単分子を識別・検出するナノプローブセンサーの開発(中山 知信/MANA ナノシステム分野)



潮田 資勝NIMS理事長

物質・材料研究ニーズに対応した最先端分析技術

- 1) 材料研究の懸案課題を打開する強磁場固体NMR(清水 禎/ナノ計測センター 写真)
- 2) レーザーアトムプローブによる3次元ナノ組織解析(大久保 忠勝/磁性材料センター)
- 3) 見えない半導体界面を可視化する – 太陽電池から次世代半導体まで(関口 隆史/半導体材料センター)



バイオ研究の展開

- 1) 生体と調和する高分子と医用金属とのハイブリッドによる薬剤溶出性ステントの開発(田口 哲志/生体材料センター 写真)
- 2) 配向連通多孔質アパタイト人工骨(末次 寧/生体材料センター)
- 3) バイオトランジスタによる生体分子認識の検出(宮原 裕二/生体材料センター)



つくばナノテクノロジー拠点(NIMS・産総研・筑波大学・民間企業等連携)の報告

報告
(中村 和夫/企画部 戦略室長 写真)



NIMSフォーラムWebサイト <http://www.nims.go.jp/nimsforum/>

● nano tech 2010 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議

nano tech 2010 は2月17日(水)から2月19日(金)までの3日間、東京ビッグサイトで開かれました。海外19ヶ国、600を超える企業、大学、公的機関が出展するnano tech 2010は、現在世界最大のナノテク展といわれ、4万人以上の入場者を集めて、世界中の注目を浴びています。

今年のテーマは「グリーンナノテクノロジー 10⁻⁹がつくる環境力」です。NIMSは、ポスター、実物展示、ミニ講演などに工夫をこらした独自ブースで高い評価を得、nano tech大賞2010の材料・素材部門賞を受賞。潮田理事長がnano tech実行委員会の丸山副委員長から盾を授与されました。

3日間を通じて、NIMSのブースにはひっきりなしに多くの人々が詰めかけ、実物やパネル展示などに熱心に目を注ぐと同時に、NIMSの職員に鋭い質問を浴びせていました。

また、NIMSの研究を紹介するミニ講演会や、グリーンナノテクノロジーに関する特別シンポジウム、ナノ材料科学環境拠点創設についての特別講演などにも、多数の聴衆が詰めかけていました。

nano tech 2010の催しを通じて学んだたくさんの方のことを、今後の研究開発、そしてNIMSの運営に活かしていきたいと考えています。

nano tech 2010 Webサイト <http://www.nanotechexpo.jp/>



NIMSブースの様子



NIMSブースには多くの方が訪れました。



nano tech実行委員会 丸山 瑛一 副委員長(左)と潮田 資勝 NIMS理事長



Green Nanotechnology 特別シンポジウム「ナノ材料科学環境拠点での取り組み」ナノ材料科学環境拠点 西村 睦 運営総括室長



来場者はミニ講演にも熱心に聞き入っていました。

● JAPAN NANO 2010 第8回 ナノテクノロジー総合シンポジウム

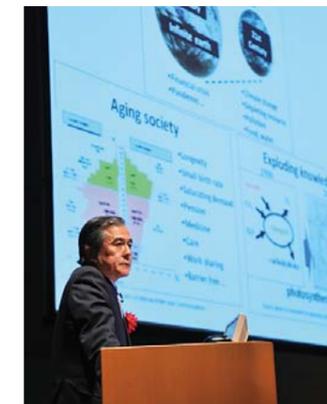
2月19日(金)にはJAPAN NANO 2010を開催し、ナノテクノロジーによるエネルギー、環境に関わる最新の研究開発の展望についてシンポジウムを行いました。

(株)三菱総合研究所理事長 小宮山 宏氏の「低炭素社会構築の課題とナノテクノロジーへの期待」と題する基調講演を皮切りに、米・仏・シンガポールから招へいた海外からの参加者を含めて12テーマの講演が行われ、多くの聴衆に深い感銘を与えました。

いずれも極めて先見の内容を含んでいましたが、特に九州大学中嶋 直敏教授の「カーボンナノチューブを素材とする新しい燃料電池触媒」、東京大学大久保 達也教授の「ありふれた元素から構成された新規エネルギー貯蔵材料の創出」、京都大学矢野 浩之教授の「セルロースナノファイバーの製造と利用」などが注目を集めました。



JAPAN NANO 2010 会場の様子



(株)三菱総合研究所小宮山 宏理事長による基調講演

JAPAN NANO 2010 Webサイト <http://nanonet.mext.go.jp/japannano/2010/>

第3回MANA国際シンポジウムを開催

平成22年3月3日(水)～5日(金)、WPI(世界トップレベル研究拠点)MANA(国際ナノアーキテクニクス研究拠点)は、つくば国際会議場において第3回MANA国際シンポジウムを開催し、2009年度のMANAの研究成果を発表しました。

シンポジウムは、WPIプログラム委員会プログラムディレクターの黒木登志夫東京大学名誉教授、同プログラムオフィサーの齋藤軍治名城大学教授による挨拶、ノーベル物理学賞受賞者でMANAアドバイザーのハインリッヒ・ローラー博士の特別講演、インドのジャワハルラール・ネルー先端科学技術研究所所長のラオ教授による基調講演で開始され、引き続き、MANAのナノマテリアル、ナノシステム、ナノバイオ、ナノグリーン各研究分野および若手国際研究センター(ICYS)の研究発表が3日間にわたって行われました。

ナノテクノロジー研究分野の著名な招待研究者10名の発表とともに、MANAの主任研究者、研究者、独立研究者、ICYS研究員計28名による口頭発表、および99件のポスター発表では、昨年を上回る350名超の参加者との活発な質疑応答や意見交換が行われ、MANAの着実な進展と関心の高まりをうかがうことができました。



シンポジウム参加者(つくば国際会議場において)

文部科学省 情報ひろばにて 「環境・エネルギーを支える材料研究」が開催中

東京・霞が関の「文部科学省 情報ひろば」では、NIMSの協力による特別展示『環境・エネルギーを支える材料研究』を7月末まで開催しています。

展示室全体は「エネルギーと材料」「環境と材料」「ナノテクと材料」のエリアに分かれており、ジェットエンジンに使用される超合金やLED照明用の蛍光体、超伝導材料などの材料研究が展示されています。

また、ナノテクノロジーをわかりやすく紹介した「ナノの冒険」上映や、来場者が実際に触って楽しめる金属の名前当てクイズなどのコーナーもあります。詳しくは下記アドレスをご覧ください。

<http://www.mext.go.jp/joho-hiroba/sp/>



文部科学省 情報ひろば 展示の様子

NIMS一般公開、開催間近!

平成22年度科学技術週間にあわせ、今年もNIMS一般公開を4月15日(木)千現・並木・桜・目黒地区で行います。また18日(日)には千現地区のみで青少年特別行事を行います。

15日は各地区の実験棟でさまざまな実験、体験、紹介が行われます。つくば各地区ではアトムプローブを使用したナノワールド観察、ダイヤモンド燃焼実験ほか(千現地区)、MANAの紹介、クリーンルーム体験、カラー電子ペーパー実演ほか(並木地区)、“水が浮く”電磁誘導実験、イオンビーム照射ほか(桜地区)をお見せします。また東京・目黒地区ではクリープ実験紹介などをごいただけます。

18日は千現地区で参加型の青少年特別行事が開かれます。形状記憶合金を使った遊びや酸化鉄系顔料を使ったミネラルファンデーションづくり、金属の名前当てクイズなど子供から大人まで一日楽しめるプログラムが満載です。ふだんは立ち入ることのできない、世界トップレベルの研究所に触れることのできるチャンスです。ぜひお越しください。

