

ナノ計測を基盤とした材料設計

我国の産業は、高性能、高機能な新素材の開発とともに発展してきたといっても過言ではない。人間社会がさらに高度化、複雑化するに伴い、材料に対する要求は益々高くなり、これに応えるべく革新的な材料の創出が切望されている。そのための最も有効な方法の一つは、材料機能を決定している普遍的原理を解き明かし、それに基づいた合理的な材料設計・開発を進めることである。しかし、これまでの多くの既存技術は、研究者や技術者の経験や勘に頼っていたのが実情であった。たとえばセラミックスを焼結する際、多くの場合焼結助剤を添加する。焼結体の出来栄や諸特性は、助剤の成分や状態、添加量や焼結温度によって大きく異なることはよく知られている。しかし、その助剤はどのようにして選択されているのであろうか？最も多い選択理由は、これまでに長年蓄積されてきた経験と勘、いわゆる焼結技術のノウハウの中にある。

しかし、材料への要求がさらに高度化するにつれ、経験や勘、ノウハウに頼る材料開発ではもはや対応しきれなくなっているのもまた事実である。さらに、莫大な時間と労力を伴うノウハウを得るための絨毯爆撃的な開発方法も現在の我国の実情にはなじまない。これをブレイクスルーし、今後の材料技術をさらに発展させるためには、マテリアルズサイエンスに立脚した合理的な材料開発・物質開発が必ず必要になるものと思われる。すなわち、物質の根元にまでさかのぼって新たに材料開発を見直すことが肝要である。物質・材料の根元を考える場合、まずはその最小構成単位である原子や電子から出発するのが自然であろう。したがって、原子や電子の構造や状態を直接観察し、その離合集散状態を計測し、さらに材料としてどのような機能を発現するかを理解することこそが合理的な材料設計への第一歩となる。再度セラミックスの焼結助剤を例にとると、助剤成分を構成する元素が材料中のどこに存在し、どのような役割を担うのか明確にした上で、材料開発に取り組むべきである。助剤は微量であっても材料の粒界や界面に偏在し、そのマクロな特性を大きく変化させるケースが多い。たとえば、酸化亜鉛や高靱性窒化ケイ素セラミックスなどは、焼結助剤である希土類元素が粒界へ偏析する現象を効果的に利用した構造・機能材料といえよう。しかしこれまでは、これら助剤成分元素が材料中のどのサイトに存在し、どのような役割を果たすのかについては、よく分かっていなかった。その理由は、ナノ計測の分解能や理論計算との融合が不十分であったことに起因している。

近年のナノ計測技術の進展には目覚ましいものがある。たとえば球面収差補正技術を駆使した最新の走査透過電子顕微鏡法を適用すると、粒界や界面に存

幾原 雄一

東京大学大学院
工学系研究科総合研究機構 教授・ナノ工学研究センター長
財団法人フラインセラムセラミックスセンターナノ構造研究所 主管研究員
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 教授

在する原子一個一個について、その位置や元素の識別のみならず、局所的な電子状態の解析まで可能となりつつある。さらにプローブ顕微鏡法など他のナノ計測手法も様々な技術革新があり、局所的に遍在する元素の状態などこれまでは不明であった構造解析を原子スケールで行うことが可能になってきている。また、理論計算においても大きな進展があった。たとえば、従来は絶対零度の状態でしか計算できなかった第一原理計算も、温度効果を取り入れることが可能となり、材料特性との相関性も理解されつつある。さらにスーパーコンピュータなど計算速度の飛躍的な向上により、より現実に近い大きな系での計算も可能になりつつある。

このように近年進展しつつあるナノ計測手法と計算手法を材料の局所的原子構造、電子状態、機能の問題に適用し、得られた結果をタイムリーに材料プロセス技術にフィードバックすることができれば、材料開発分野に新たなブレークスルーを引き起こすことができるものと考えている。たとえば、希土類元素を微量添加したアルミナセラミックスは耐クリープ性が高いが、これは添加した希土類元素が粒界に偏析し、粒界での共有結合性を上げることで粒界結合力を高めていることに起因していることが解明されつつある。また、酸化亜鉛にプラセオジウムを添加すると、やはりこれが粒界に偏析し、粒界近傍の亜鉛空孔を誘発することで、ショットキーバリアが形成され、優れたバリスター特性を示すことも分かってきた。これらの設計指針を用い、アルミナの焼結ではさらに共有結合性を高める添加元素を、酸化亜鉛の場合だと亜鉛空孔の形成エネルギーをさらに下げる添加元素をそれぞれ見出せば、それこそ目的とする助剤を合理的に選択できることになる。まさにナノ計測を基盤とした材料設計によって、セラミックスの焼結助剤でさえも合理的に探索できる時代がすぐそこまでやってきているのである。このような手法は、セラミックスのみならず、金属、半導体などにも今後広く活用され、企業における材料開発やものづくり産業に大きく貢献していくことが期待される。



略歴

- 1988年 九州大学大学院総合理工学研究科
博士課程修了（工学博士）
財団法人ファインセラミックスセンター
試験研究所入所（研究員）
- 1991年 米国ケースウエスタンリザーブ大学
材料科学科客員助教授
- 1993年 財団法人ファインセラミックスセンター
試験研究所構造解析部統括部長代理
- 1996年 東京大学大学院工学研究科
材料学専攻助教授
- 2003年 東京大学大学院工学系研究科
総合研究機構教授
- 2005年 東京大学大学院工学系研究科
総合研究機構長
- 2007年 財団法人ファインセラミックスセンター
ナノ構造研究所主管研究員（兼任）
東北大学原子分子材料科学
高等研究機構教授（兼任）
（現在に至る）

主な受賞歴

- 2001年 日本セラミックス協会学術賞
- 2007年 日本顕微鏡学会瀬藤賞
- 2010年 フンボルト賞(独アレクサンダー・
フォン・フンボルト財団)
本多フロンティア賞
- 2011年 米国セラミックス学会フェロー
- 2013年 文部科学大臣表彰科学技術賞
- 2014年 世界セラミックスアカデミー会員
- 2015年 ロバートB.サスモン賞
(米国セラミックス学会)
- 2016年 紫綬褒章 など多数

参考文献

- 1) 機能元素特集, セラミックス, 47巻7月号, 日本セラミックス協会, 2012年
- 2) 幾原雄一, 「セラミックス界面の原子直視と軽元素観察—収差補正 STEM 法と理論計算融合—」,
応用物理, 81巻9号, 753-759頁, 応用物理学会, 2012年
- 3) 「ナノ材料解析の実際」, 米澤徹, 朝倉清高, 幾原雄一編著, 講談社サイエンティフィック, 2016年