

産業科学研究所高次制御材料科学部門 材料機能物性分野



研究室紹介

弘津 禎彦*

1. 研究室の概要

本年4月より新しい指針「未来の産業・学術を拓くための材料・情報・生体の先端的研究」を掲げて、大阪大学産業科学研究所の大がかりな改組がスタートした。研究組織は従来の4研究部・21部門制から、新たな分野を加えた6部門・24分野制へと移行する。また、3つの研究分野を持つ高次インターマテリアル研究センターも同時スタートし、産業科学研究所は大きく変わろうとしている。当研究室は改組により、高次制御材料科学部門のうちの材料機能物性分野を担当することとなった。改組前の当研究室は金属・合金の相変態に関する結晶学的研究を行う金属結晶部門担当の研究室であった。金属結晶部門の前身は1940年に発足した金属材料部門であり、先の4研究部制が施行される1964年の前年に金属結晶部門と改められた。この部門は金属のマルテンサイト変態の結晶学的研究で世界的に有名であり、西山善次教授—清水謙一教授と引き継がれて来た。改組直前の昨年4月に著者が長岡技術科学大学から転任し、伝統ある金属結晶部門を1年間ではあるが担当した。改組を目前にしたこの1年は準備期間でもあり、私にとっては有り難い1年であった。

当研究室は現在、私と唯木助教授、中田助手、大久保助手のスタッフ、大学院生5名(博士課程1, 修士課程5)から構成されており、また、毎年、中国からの研究者を迎えている。産業科学研究所内では小人数の研究室に属する。高次制御材料科学部門内での当分野の研究の位置づけとしては、「金属などを対象として、物質・材料の機能発現の根幹となる構造およびその動的変化の解明や、構造と機能物性との相関の解明についての基礎的研究を行うこと」である。そのための具体的対象としては、「アモルファス合金」、「ナノ粒子・原子クラスター」、「金属および金属/セラミック積層膜」を選び、これらの「構造ゆらぎ」、「相変態」、「原子拡散」、「局所歪」、「磁性」、「電子状態」についての研究を進めている。構造および構造変化、電子状態の実験的研究は主として高分解能電子顕微鏡法、(ナノビーム)電子回折法、イメージングプレート強度測定法、電子エネルギー損失分光法などにより行っており、構造・物性予測は分子動力学、モンテカルロ計算、バンド計算法などにより始めている。以下、最近のいくつかの研究を紹介する。

2. 研究紹介

(1) 非晶質相の研究

液体、気体からの超急冷により、多くの物質は非平衡な相あるいは非晶質相へと変態する。我々は特に非晶質相について、その局所構造に注目した高分解能電子顕微鏡観察、電子線回折強度解析を行っている。非晶質物質(合金、セラミックス)の局所構造としては、原子の中範囲規則(Medium Range Order: MRO)構造が存在することが解ってきており、この規則領

* Yoshihiko HIROTSU

1945年1月9日生

昭和44年東京工業大学大学院理工学研究科修士課程修了

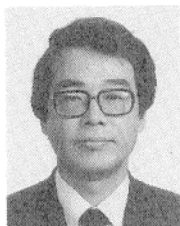
現在、大阪大学産業科学研究所、教授、工学博士、電子線結晶学、材料科学

TEL 06-879-8430

FAX 06-879-8434

E-Mail hirotsu@sanken.

osaka-u.ac.jp



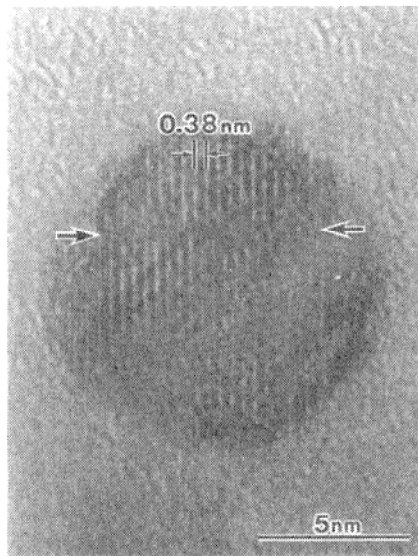


図1 Cu₃Au規則合金ナノ粒子の格子像

域の構造，広がり材料強度，磁性・電気的性質などに大きく影響すると考えられる．従来，非晶質物質の構造は最密無秩序充填 (Dense Random Packing) の原子構造を基準として解析されてきていたが，高分解能電顕の発達により原子レベルでの局所構造観察が可能となり，MRO構造が見いだされて来ている．我々は1980年代前半から各種合金，セラミックス非晶質相についてこの局所構造の課題に取り組んで来ており，最近では高分解能電子顕微鏡観察，電子線回折強度解析 (原子動径分布解析，ナノビーム構造解析) を併用し，より詳細な非晶質構造の解析および結晶化過程での構造変化についての研究を進めている．また，MRO構造やMRO領域の広がりの程度と物性との相関を調べるため，電子エネルギー損失分光法を利用した研究も進めている．

(2) ナノ粒子の研究

材料の機能特性の飛躍的な向上あるいは従来にはない全く新しい機能特性の発現を図るには材料の微細組織を緻密に制御することが必要となる．微細組織の究極的な構造の単位がナノメートルスケールの原子集合体であろう．ナノ粒子の機能特性を理解し予測するには，それらの原子的・電子的構造や相変態の詳細な研究が不可欠である．我々はこのような研究が全く新しいタイプの機能特性 (特に電気的・磁気的) をもつ金属材料の研究に発展することを期待してお

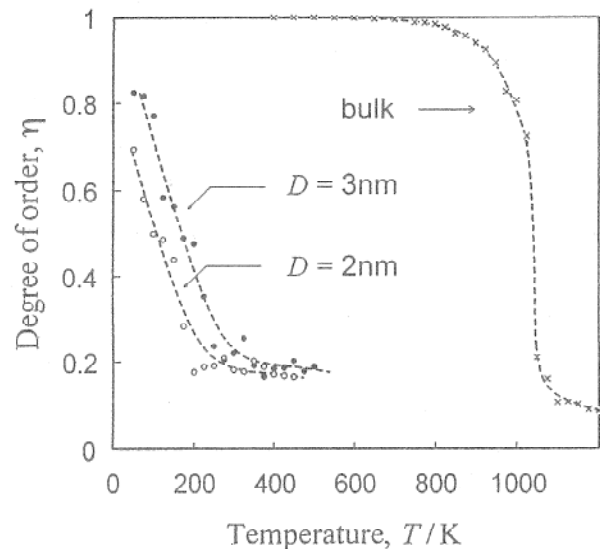


図2 Cu₃Au規則合金ナノ粒子における規則度の温度変化のモンテカルロ計算機シミュレーション結果

り，現在は主として高分解能電顕法による合金ナノ粒子の原子的構造とその加熱・冷却過程での構造変化，電子状態および磁気的性質の変化を調べる研究を行っている．ここでその一部を紹介する．図1はCu₃Au規則合金ナノ粒子の格子像を示す．一連の観察から得られた重要な結論の1つは，ナノ粒子における規則-不規則転移温度は粒径の低下とともに低下するということであるが，この観察結果はモンテカルロ計算機シミュレーションによっても如実に再現された．図2はCu₃Au規則合金ナノ粒子における規則度の温度変化のシミュレーション結果をバルクと比較して示す．

(3) 原子配置と相変態温度の研究

金属・セラミックスの機能性材料には，温度変化や圧力変化などによって結晶構造が変化するいわゆる相変態を利用したものが多い．相変態温度は添加元素により変化することが判っているが，その原因を実験的に明らかにすることは，相の安定性を支配する因子を知る意味で重要である．我々は，マルテンサイト変態をする種々の合金系に対してALCHEMI法 (電子線のチャネリング効果により発生する特性X線の強度を解析することにより原子位置が既知の規則合金，金属間化合物などに添加された元素の原子位置を決定する方法) を適用し，原子位置決定を行った．Cu-Zn-Al合金では低温相

での時効中に変態温度が上昇することが知られているが、この合金では時効中にCu原子とZn原子の相互拡散が起こっていること、Cu-Al-Ni合金では、時効による母相の変態温度の上昇が、母相の第2近接原子間の規則性に依存することなどを明らかにした。また、Ti-Ni-X合金系では、第3元素Xの占有サイトを調べ、Xの添加に伴う各サイトの荷電子数の変化量に応じて変態温度が低下することがわかった。この系の添加元素と相安定性については、電子論計算も行っている。

(4) 局所構造の計算機シミュレーション

高分解能電顕観察などから得られる原子の配列がどのような過程で形成されたのかを知る目的で、分子動力学法、モンテカルロ法などにより、物質の原子配列と、その動的な変化の過程のシミュレーションを行っている。例えば、合金を液体状態から急冷して得られるアモルファス構造では、数原子距離にわたる規則化領域が

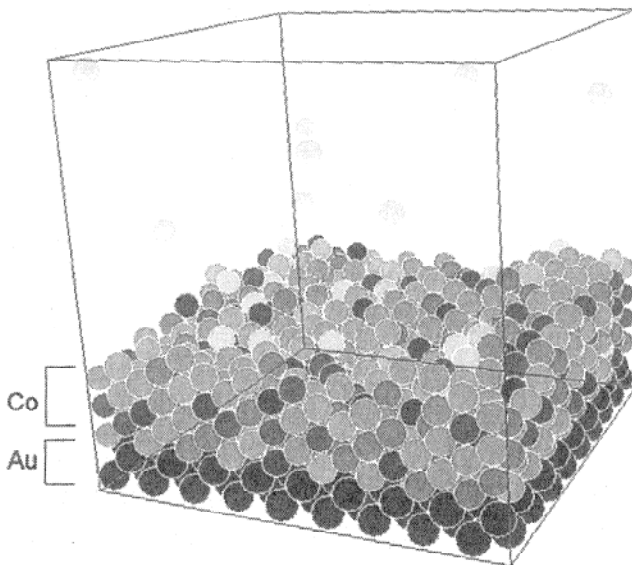


図3 Au(001)基板上でのCoのエピタキシャル成長の分子動力学シミュレーション。非平衡構造のbcc-Coの成長が見られる。(基板温度:500K)

電顕により観察されている。その構造について調べるために、分子動力学法による超急冷凝固シミュレーションを行い、電顕像と比較するとともに、規則化領域の組成、冷却速度依存性、生成過程での構造変化などについての解析を試みている。また、これら計算物理の手法を利用して、単結晶基板上に基板構成原子と異なる種類の原子集団を蒸着した場合を想定し、成長過程のシミュレーションを行っている(図3例)。成長様式に与える基板とのミスフィット率、基板温度、蒸着温度などの影響について調べ、物性を予測し、新材料設計への反映を試みている。

3. おわりに

原子レベルまで構造を制御する技術が機能材料開発に要求され始めている。そのためには、材料の局所構造、電子状態を正確に知る事のできる解析手法が不可欠となる。当研究室では、上述したように、主として電子線を利用した極微構造解析手法を適用して物質の機能特性に直接関与する構造形態、電子状態を探る一方、計算物理学的手法を用いた極微構造の予測、物性の予測なども併せて行い、金属・セラミックス材料の機能特性の更なる向上、新しい機能の発現などを旨とした研究を行っている。我々の分野での研究は、(a)既存の手法を利用して、機能性材料の持つ特異な結晶構造、組織形態や電子状態などを明らかにすること。(b)新しく出てきた手法について、構造研究分野における適用先を探ること。(c)構造研究分野で必要となる新たな研究手法・装置の開発を行うこと。などに分けられる。(a),(b)は我々の研究室も含め、通常行われていることであるが、(c)の研究で真にオリジナルな研究は非常に少ない。将来的には研究室がこの研究分野でも活躍することを心に描いている。

