

無機材研ニュース

第155号

平成8年1月

目次

新年のご挨拶..... 1	粘土鉱物の国際的な現状 —EUROCRAY'95に参加して— 6
第一原理計算で物質設計ははたして可能か？ (擬ポテンシャルデータベースの構築) 2	プラズマ材料科学の海外における研究動向 —プラズマ化学からプラズマプロセス科学へ— 7
Mexico, Sonora州, Hermosillo市からの 新年のメッセージ..... 4	外部発表(投稿)・メモ..... 8

新年のご挨拶



所長 猪股 吉三

平成8年の年頭にあたり、一言ご挨拶申し上げます。
調和のとれた、豊かな社会の実現には、知的・経済的な力を蓄える必要があります、その基盤は、科学技術に大きく依存しています。昨年の「科学技術基本法」の制定に見られるように、この認識は益々強くなることと思います。

今日の社会は、日常生活も含めて、セラミックスから大きな恩恵を受けています。当研究所は、本年、設立30周年を迎えますが、この間のセラミックス材料の発展は実に目覚ましいものでした。

合成、物性、キャラクタリゼーションの3分野の研究者の連携によって新物質の創製を中心にしたグループ研究を繰り返し、設立以来これまでに100種を越える物質に関する基礎研究を行ってまいりました。

このグループ研究を通じて、こうして得られた成果は、当所の超高压力ステーション、未知物質探索センター、先端機能性材料研究センターでの研究成果と合わせ、新材料開発や新たな研究の展開によく貢献しているものと自負しております。

時代の進展に伴い、次第にセラミックスの高度な機能

性への期待が高まり、今後更に高機能セラミックス創製に向けて独創性豊かな研究が必要になると思います。

現在、平成3年度から進行中のCOE育成研究等を通じて新しい力を獲得しつつありますが、この力を活かし、セラミックス研究に新たなステップを刻んでいきたいと考えております。特に材料の性質と物質内の電子状態や原子配列が示す超微細構造とが関わる研究の発展から、新セラミックス創製の糸口を見いだすことを夢見ております。

今年、物質・材料系科学技術の研究開発基本計画のフォローアップが科学技術会議において本格的に実施されることになっています。このフォローアップの動向を踏まえつつ新セラミックスの創製に向けて、新物質の合成に関する研究、物質創製のプロセス技術の開拓、計算手法を駆使した未知物質の探索等、未踏物質研究を積極的に展開する所存です。

研究を進めるに当たり、内外の研究者の方々、研究機関との協力を一層拡大致したく存じますので、本年も、皆様のかかわらぬご支援をよろしくお願い申し上げます。

第一原理計算で物質設計は、はたして可能か？

(擬ポテンシャルデータベースの構築)



未知物質探索センター
研究員 小林 一昭

1. はじめに

近年、第一原理電子状態計算は目覚ましい進歩を遂げた。[第一原理とは何ら実験データを参照しないという意味である。このため計算に関しては十分な精度が要求され、必要とする計算資源も大きくなる。]

第一原理電子状態計算法としては大きく2つの方法に分けられる。価電子のみを考える擬ポテンシャルを使用し、波動関数の基底を平面波で記述するものと、内殻電子も含めた(all-electron)ポテンシャルを用いて、基底関数は平面波以外(または平面波とそれ以外のものとの混合)のものを使用するものである。後者の方法の代表が(FP-)LAPW、LMTO、KKR法などである。

本ニュースで話すのは前者の擬ポテンシャル+平面波の方法である。当然、擬ポテンシャルも第一原理的に求められたものを使用する。

2. 擬ポテンシャルデータベース

ノルム保存擬ポテンシャル^{1, 2)}をもとに基底関数を平面波とした第一原理電子状態計算は、1985年のカー・パリネロ法³⁾の出現によってその重要度が増し、多くの研究者がこの方法に注目した。この方法では、構造最適化とその電子状態の計算が効率良く行うことができる。そのためには原子に働く力の計算ができなければならない、平面波を使った方法ではこの力の計算が比較的容易であった(当時としては唯一と言ってよかった)。

カー・パリネロ法の出現によって、それまで不可能だった多数の原子からなる系(大体100から数百原子のオーダー)を扱うことが可能となったが、問題もいくつか存在する。

まずカー・パリネロ法では通常擬ポテンシャルが用いられるが、第二周期の元素(炭素、窒素、酸素など)や遷移金属などはポテンシャルが深いため、平面波での記述が難しくなる。このため必要となる平面波の数が大量となり、消費する計算時間やメモリーが莫大なものとなる。この問題に関してはTM⁴⁾による最適化擬ポテンシャル⁵⁾を使用することによって、ある程度改善される。(TMの方法以外にもアプローチはあり、特にVanderbiltの方法⁶⁾はノルムの保存の条件を必要としないので、TMの方法より更に平面波の数が少なくてすむ。ただし従来の擬ポテンシャルとの互換性がなく既存のプログラムを大幅に変更する必要がある。)

更に擬ポテンシャルを扱う時、計算の高速化のため

KB分離⁷⁾という近似を行うが、このときしばしば電子状態計算においてゴーストバンド(本来存在し得ないバンド)が生じる。明確に何の試行錯誤も無しにゴーストバンドが出ないようにポテンシャルを作ることは不可能で、パラメーターの調整や判定条件⁸⁾による検討の上で慎重に作られるのが現状である。

この問題に対する解決法として最もエレガントなものは新しい画期的な擬ポテンシャル作成法を開発することである。しかし、ノルム保存という条件とKB分離という近似を行っている限り、深いポテンシャルとゴーストの問題は本質的であり、これを解決することは非常に困難と言える。

少々泥臭いが、現実的なアプローチは擬ポテンシャルに対するデータベースを用意することである。当然用意された擬ポテンシャルに関して、ゴーストバンドはなく、平衡格子定数、体積弾性率、バンド構造等が計算してあり、十分他の理論計算値や実験結果と一致するものでなければならない。

そこで著者は、擬ポテンシャルに関するデータベースを作成してみることにした。既に、H、Li、B、C、N、O、Na、Mg、Al、Si、P、Sc、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Y、Zr、Nb、Mo、Tc、Ru、Rh、Pd、Ag、Cd、In、Sn、Sbの擬ポテンシャルを作った。Li、Na、Si、Mg、Al、PはBHSの方法²⁾で作成された。それら以外はTMの方法⁴⁾で作られている。ほぼ全てのポテンシャルに関して、単体または化合物としての計算を行い、平衡格子定数、体積弾性率、バンド構造等を求めてある。当然ゴーストバンドがないことをバンド構造から確認している。平衡格子定数は大体1、2%の範囲で他の理論値、実験値と一致するが、2、3の元素(Pd、Feなど)では2%以上の実験結果との差がある。体積弾性率はフィッティングの仕方に大きく依ることと、カットオフエネルギーやk点の取り方にも依存するので、必ずしもよく一致していない場合もあるが、あまり深刻な問題ではない(大体10から20%の範囲で一致している)。最近計算した遷移金属、貴金属と一部それらの合金のバルクに関するデータを表1に示す。左側が今回の計算結果、中央がMJW⁹⁾(all-electron計算)による理論値、右側のデータがキッテル¹⁰⁾に載っている実験値である。()内の数値%は格子定数についての本計算と他の計算値、実験値との差である。

このデータベースの特徴として以下のものが挙げられる。

- (a) 擬ポテンシャル作成の際に利用する原子ポテンシャルの計算は、相対論効果¹¹⁾を考慮しており、重い遷移金属(4d、5d)にも対応できる。
- (b) 必要なものには部分内殻補正¹²⁾が考慮されている(擬ポテンシャルでは価電子しか扱わないことによって無視される局所密度近似¹³⁾における非線形効果に対する補正)。具体的には、格子定数がそのままの計算では過小評価されるアルカリ金属とInに対してと、磁気モーメントが過大に評価されるNi、Co、Feに対して部分内殻補正が考慮されている。

このデータベースの問題点としては、擬ポテンシャルにおけるtransferabilityがある。これは擬ポテンシャルが周りの環境の変化(バルク、表面、界面、クラスター、不純物、欠陥等)に正しく対応する能力があるかどうかを表しており、それについての十分なテストは一部を除いて行われていない。

また、この擬ポテンシャルはKB分離形のみに対応しており、それ以外での形式で使用することはデータの内容を相当理解していないと困難である。加えてこの擬ポテンシャルの形式に対応した第一原理電子状態計算のプログラムが用意できなければ、このデータベースは何の意味も持たない。

表1 遷移金属の格子定数(Å)と体積弾性率(Mbar)

	present work	MJW	Exp
Ti(bcc)	3.254 1.183		3.327(2.2%)
Ti(fcc)	4.064	4.00 (1.6%)1.16	
V(bcc I)	2.961 1.819	2.932(1.0%)1.64	3.03 (2.3%)1.619
V(bcc II)	2.999 1.833	2.932(2.3%)1.64	3.03 (1.0%)1.619
Cr(bcc)	2.81 2.931	2.805(0.2%)2.70	2.88 (2.4%)1.901
Cu(fcc 81Ry)	3.622 1.62	3.577(1.3%)1.55	3.61 (0.3%)1.37
Cu(fcc 144Ry)	3.64 1.43	3.577(1.8%)1.55	3.61 (0.8%)1.37
Zr(fcc)	4.448 0.954	4.403(1.0%)0.94	
Nb(bcc)	3.266 1.81	3.281(0.5%)1.68	3.3 (0.1%)1.702
Mo(bcc)	3.144 2.78	3.117(0.9%)2.51	3.15 (0.2%)2.725
Cd(fcc 81Ry)	4.519 0.506	4.445(1.7%)0.461	
Cd(fcc 144Ry)	4.507	4.445(1.4%)0.461	
Pd(fcc)	3.99 1.7	3.93 (1.6%)1.7	3.89 (2.6%)1.808
Ag(fcc)	4.157 1.04	4.122(0.8%)1.02	4.09 (1.6%)1.007
Sc(fcc)	4.499 0.52	4.493(0.1%)0.57	
Y(fcc)	4.896 0.44	4.884(0.2%)0.33	
Tc(fcc)	3.884 3.26	3.852(0.8%)2.93	
Fe(bcc, P)	2.759 3.14	2.725(1.2%)3.06	2.87 (3.9%)1.68
Co(fcc, P)	3.453 2.61	3.412(1.2%)2.84	
Ni(fcc, P)	3.511 2.28	3.466(1.3%)2.20	3.519(0.2%)1.86
Ru(fcc)	3.833 3.38	3.810(0.6%)2.89	
Rh(fcc)	3.867 2.93	3.831(0.9%)2.61	3.800(1.8%)2.70
NiAl(CsCl, P)	2.854 1.64	2.868(0.5%)	(ASW)
NbMo(CsCl, 8)	3.196		3.203(0.2%)
NbMo(CsCl, 48)	3.195 2.52		3.203(0.2%)

3. バンド計算プログラムについて

ここでは、このデータベースを利用可能な第一原理電子状態計算(第一原理分子動力学法)プログラムについて説明する。本プログラムはユニットセル内の原子に働く力、およびユニットセルそのものに働く圧力(ストレ

ス)を計算することが可能で、原子位置及び結晶の構造そのものに対する構造最適化が可能である。これをもとに未知の物質の安定構造を探索することが可能である。(扱える規模や探索範囲は当然、人的資源、計算機資源、資金力に強く依存する。)

本プログラムは、まだ非公開であり、可読性、汎用性に大分問題があるが、本擬ポテンシャルデータベースに最も相性が良いプログラムである。また、d non-localの計算も可能であり、原子間に働く力の他に、圧力(ストレス)の計算(部分内殻補正によるストレスに対する補正も考慮してある)も可能である。これを使って制限はあるが定圧条件下での構造最適化が可能である。もし使用の希望があれば内外を問わずできる範囲で相談には応じる。(電話での相談は不可)

4. まとめ

最後に物質設計についてであるが、研究者の責任として、あまり非現実的な夢物語を語るべきではないと考えている。そういう意味で、普通の人がかかるような(第一原理計算による)物質設計用のエキスパートシステムは、今後5年、10年で実現することはまず不可能である。(あっと驚く新手法が出てくるか、アポロ計画並の意気込みと人的資源、計算機資源、資金があれば話は別かもしれないが……)

しかし、もっと現実的で、狭い範囲に限れば物質設計は不可能ではなくなりつつある。この擬ポテンシャルのデータベースは、これを用いてバンド計算を行える環境さえあれば、計算機資源と時間と予算の許す範囲内で、用意してあるポテンシャルの任意の組み合わせの上で多様な結晶構造に対する構造最適化、電子状態計算が可能である。周期的境界条件という制限があるが、不純物や表面、界面、クラスターなどを扱うことも可能である。(当然計算機資源という制約が伴う。)精度に十分気をつけて計算を遂行すれば新物質の探索は十分に可能と考えられる。そういう意味で、この擬ポテンシャルデータベースが物質設計の第一歩と言える。

尚、本擬ポテンシャルデータベースの名前はNCPS95(Norm-Conserving Pseudopotential 19-95)とする。

既に、このデータベース中の擬ポテンシャルの一部が他の研究者によって利用されている。東大物性研の常行先生のグループでは本データベースでの炭素、水素などの擬ポテンシャルを用いて第一原理分子動力学計算(プログラムが来年度には公開されるとのことである。)を行っている。

また、本研究所研究員の新井正男氏は、同じく炭素、酸素を用いて、実空間における第一原理電子状態計算を行っている。また、協力研究員の山本一雄氏は、InSb/Sn界面の計算¹⁴⁾を行っているが、このIn、Sb、Snの擬ポテンシャルも本データベースによるものである。

NCPS95は近々正式公開の予定(96年度中)であり、現在試用版(β版)を作成している。もし入手希望があれば、筆者に問い合わせを欲しい。

(電話での問い合わせはご遠慮願いたい。)

(連絡先: FAX 0298-52-7449、

e-mail: kobayak@nirim. go. jp)

内外の状況を見ると、国外においては、いくつかのグループがバンド計算のプログラムを公開しており、それに擬ポテンシャルのデータも付随するものがある。特に、英国のケンブリッジ大学の第一原理分子動力学法のコード(CASTEPI)¹⁵⁾は有名で、それにはKB形式でのポテンシャルのデータベースがある。当然おおもとはBHSによる有名なノルム保存擬ポテンシャルに関するテーブルがある。また他にも最適化擬ポテンシャルのテーブルが存在する¹⁶⁾。

この擬ポテンシャルデータベース作成に際して、TM型の擬ポテンシャル作成プログラムは東大物性研の森川良忠氏(現融合研)が作成したものである。(リチウム、炭素、酸素の擬ポテンシャル作成も手伝ってもらった。)また、擬ポテンシャル作成のために必要な原子ポテンシャル計算プログラムは新潟大学の長谷川彰先生が作成したものである。

参考文献

- 1) D.R. Hamann, M. Schluter and C. Chiang, Phys. Rev. Lett., 43 (20), 1494 (1979)
- 2) G.B. Bachelet, D.R. Hamann and M. Schluter, Phys. Rev. B26 (8), 4199 (1982)
- 3) R. Car and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett., 55, 2741 (1985)
- 4) N. Troullier and J.L. Martins, Solid State

- Commun. 74, 13 (1990)
- 5) A.M. Rappe, K.M. Rabe, E. Kaxiras and J.D. Joannopoulos, Phys. Rev. B41, 1227 (1990)
- 6) D. Vanderbilt, Phys. Rev. B41, 7892 (1990)
- 7) L. Kleinman and D.M. Bylander, Phys. Rev. Lett., 48 (20), 1425 (1982)
- 8) X. Gonze, R. Stumpf and M. Scheffler, Phys. Rev. B44, 8503 (1991)
- 9) V.L. Moruzzi, J.F. Janak and A.R. Williams: "Calculated Electronic Properties of Metals" (Pergamon, New York 1978)
- 10) C. キッテル「固体物理学入門」
- 11) D.D. Koelling and B.N. Harmon, J. Phys. C: Solid State Physics 10, 3107
- 12) S.G. Louie, S. Froyen and M.L. Cohen, Phys. Rev. B26, 1738 (1982)
- 13) LDA(局所密度近似)に関してはE. Wigner, Phys. Rev. 46, 1002 (1934), J.F. Janak, L. Moruzzi, J.F. Janak and A.R. Williams, Phys. Rev. B12, 1257 (1975), J.P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B23, 5048 (1981)など多数存在する。
- 14) Phys. Rev. B, 1996 に掲載予定
- 15) M.P. Teter, M.C. Payne and D.C. Allan, Phys. Rev. B40, 12255 (1989)
- 16) R. Stumpf, X. Gonze and M. Scheffler (unpublished)、欧米では複数のグループが電子状態計算のプログラムと擬ポテンシャルのデータを公開している。

Mexico, Sonora州, Hermosillo市からの新年のメッセージ

JICA専門家

Mexico, Sonora大学、高分子・材料研究所
君塚 昇

1994年10月から上記の州立大学の研究所で大学院学生の研究指導と教育のために働いています。研究テーマは太陽エネルギーの有効利用です。皆様ご承知のように、メキシコ北部とUSAの南西部は砂漠地帯です。太陽エネルギーの有効利用のためには、願ってもない場所といえるでしょう。既に多くの方法による試みが太陽エネルギーの有効利用のためになされていますが、我々は、NIRIMで数年前に新しく合成された透明かつ電気伝導性のある無機複合酸化物を利用しようと考えています。そのためには、まずこちらでも、物質作りから始めなけ

ればなりません。そのための電気炉作りから始めています。最近ようやく、炉が動き始め、合成が始まりました。

当地のキャンパスには、二万人強の学生がいます。医学部はありませんが総合大学(1942年創立)です。筆者が勤務する研究所のスタッフは三人です。若い研究員と大学院学生が合わせて12人います。カルコゲン化合物の薄膜の合成とその物性、配位化合物の結晶構造解析などの研究が、USAのArizona州立大学等との共同研究によって進められ、研究成果は国際的な学術誌に発表されています。当地で筆者に期待されていることは、比較的

高温度での無機化合物の合成、構造解析、および物性などを研究するための基礎を作ることです。昔の日本の山間地の分教場を思い起こして下さい。そこの先生は、何でも教えなければなりませんでしたが、筆者は、熱化学、結晶構造、固体物理などを教えなければなりません。

ところで、メキシコの科学・技術への貢献の割合はどのくらいでしょうか？そしてその将来は？

1995年10月、メキシコ出身のMIT教授がメキシコ人として始めてノーベル化学賞を授与されました。日本の湯川秀樹博士が同物理学賞を授与された年に遅れること約半世紀ですが、ノーベル賞受賞者が生まれたことは、メキシコの研究者に、現在には大きな自信を将来には大きな希望を与えたと確信しています。メキシコには、三つの国立大学 (Universidad Nacional Autonoma de Mexico, Universidad Autonoma Metropolitanaおよび Instituto Politecnico de Nacional) と三十一ある州に州立大学があります。無機材料関連分野の研究は、これらの大学以外にも、Petroleos Mexicanos (メキシコ石油) などの政府の研究所が行なっています。1995年の夏に“International Conference on Advanced Materials”がMexico Cityで開催されました。これは1993年東京で開催された会議をひきつぐものでした。このプログラムをご覧になれば、メキシコ国内の機関がどんな研究を行なっているか大体的見当がつくかと思われまゝ。また、1994年フランスのパリで開催された電子顕微鏡の国際会議は次回メキシコで開催される予定です。これらのことは、メキシコもようやく世界各国から研究者をお招きし、討論して頂くための舞台と人を準備出来る段階に達したのではと解釈したいと思っています。

GATTおよびOECDへの加盟、NAFTA成立などメキシコは対外的には背伸びをしているように見えますが、全就業者の中で農業に従事する人の割合は、約23%、全輸出品に占める製造業製品の割合は51% (1991年) に達しています。メキシコ人にとって最も重要な食糧の一つである“とうもろこし”は自給出来なくなり一部をUSAから輸入しなければならぬ状態になりました。国民の識字率は98%。農業労働者数の割合は減少し、都市生活者数の割合が増えています。一人の婦人が一生の間に出生する子供の数は、6.6人 (1970年) から3.8人 (1986年) へと減少しています。中産階級に属する人々の割合も増大、1994年に選出された現在の大統領は、中産階級出身者です。メキシコの産業・社会構造は着実に変化しています。メキシコの科学・技術の水準は恐らくこのような経済・社会の変化と共に進展して行くものと筆者は考えています。

さて、本紙を通し、日本の研究者の皆様を期待していることを一言述べたいと思います。日本のGNPは世界の中で十数%を占めています。国際的な学術誌に発表され

る日本からの投稿論文の割合も (正確な数字が書けないのが残念ですが) 着実に増えています。これらの事は、筆者に、十九世紀末から二十世紀の始めの頃の新大陸の科学・技術の発展状況を思い起こさせます。主としてヨーロッパ大陸からの移民によって成立した植民地国家からの科学・技術への貢献がヨーロッパ大陸からのそれを凌駕し始めた時期が二十世紀の始めの頃です。粗鋼を始めとする基礎材料の新大陸に於ける生産高がヨーロッパの国々のそれを初めて凌駕した時期でもあります。この時期に生きた新大陸出身の世界的な科学者の一人に、熱力学の化学への応用に大きな貢献をしたYale大学のJ.W. Gibbsがあげられると思われまゝ。新大陸は、世界中からの移民を受け入れながら、それ以来現在に至るまでリーダーシップをとっています。はたして、日本は科学・技術の面において、嘗ての新大陸が経験した道をこれから二十一世紀にかけて取ることが出来るでしょうか？ 科学を大聖堂 (cathedral) にたとえた、J.W. Gibbsは以下のように彼の著書“Thermodynamics”の序文で述べています。“大聖堂を建立するためには a few architectures and many workersが必要である。”と。科学にも同じことがあてはめられるのではないのでしょうか？ A few architectures and many workersが必要でありましょ。日本の研究者の皆様には、a few architecturesのなすべき仕事を担当して頂けたらと希望致します。なかなか近ずき難いところの仕事を日本の皆様はなすことが出来る立場に近い場所に位置しているのではと思われるからです。

ところで日本の皆様は一般のメキシコ人が日本および日本人に対してどのようなイメージを持っているかをご存知ですか？美しい自然に恵まれた国、人々は礼儀正しく、きちんと約束を守る。高性能な電子機器および自動車を製造し世界に供給、大変なお金持ちの国というイメージです。そして、メキシコ人は、日本及びドイツを世界の国々の中で最も尊敬しています。また日本は大好



mezquite (メキシコ原産豆科インガ属) の下、大学院学生、技術者、秘書及び筆者。

きな国の一つです。大変な親日国であると言って過言ではないでしょう。その一つの具体例は、皆様まだご記憶にあるかもしれませんが第一次、二次石油危機の際に、メキシコが日本に対してとった態度です。原油産出国であるメキシコは日本に対して最大限の協力をしたことは両国の関係者の間では広く知られています。また、メキシコが経済危機に陥った際には、常に、日本はUSAに次ぐ最大の援助国であります。石油以外にも、銀、銅、鉛、亜鉛等の鉱物資源をもち、もちろん、日本にも輸出されています。当分の間、メキシコと日本の間には緊密な相

互補完の関係の時代が続くと思われます。

最後に、イザヤ書を引用し、皆様への新年のご挨拶にかえたいと思います。

“こうして彼らは、その剣を打ちかえて、鋤とし、その槍を打ちかえて鎌とし、国は国に向かって剣をあげず、彼らはもはや戦いのことを学ばない。” “遙かなる者も、近き者も、平安、平安。”

日本の研究者の皆様にご挨拶を送る機会を与えて下さった本誌の編集委員会に感謝いたします。

(E-mail address: nkimizuk@guaymas.uson.mx)

粘土鉱物の国際的な現状 —EUROCLAY'95に参加して—

第5研究グループ

主任研究官 藤田 武敏



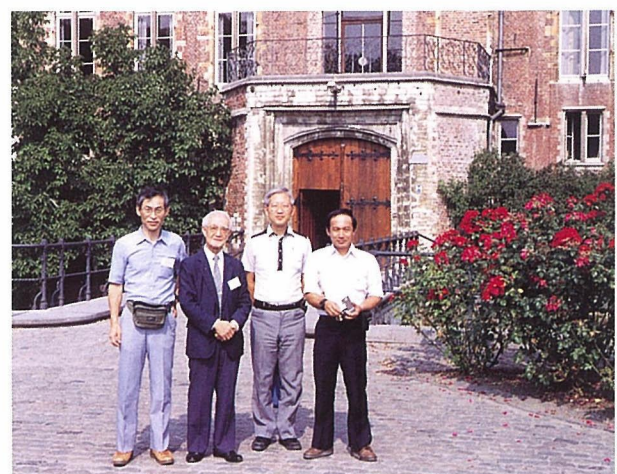
EUROCLAY (ヨーロッパ粘土会議) は、ヨーロッパ粘土グループ協会により4年毎に開催される会議で、粘土科学ではこれと2年ずれた周期で開かれる国際粘土学会に次ぐ大きな会議です。今回はベルギーのルーベン市 (Leuven) で開催されました。ルーベンはブリュッセルの東約25kmに位置する人口10万人あまりのこじんまりとした町です。ブリュッセルからは鉄道で20~30分と近いのですが、途中は森と畑あるいは牧草地の緑で覆われ家屋は殆どなく、言葉もブリュッセルではワロン語 (フランス語方言) がやや優勢なのに対しフラマン語 (オランダ語) 圏へと変わります。

会議はルーベンスリック大学で行われました。1425年に設立されたベルギーで最古の大学で学生数が2万5千人とベルギーでは最大とのこと。大学の職員及びその家族を合わせると町の半分近くが大学関係者になり、オックスフォード、ケンブリッジのような大学都市です。事実、旧市街には大学関係の施設であることを示すブルーの銘板の建造物・施設が至る所にあり大学の中に町があるような印象でした。

口頭発表は招待講演を含め一日に最大4件に限られ合計20件以下、他の250件の発表はポスター形式で行われました。従って、会議はポスターを主体としたものであり発表者と直接の接触が中心となります。このようなチャンスを増やすための配慮か、ポスターの掲示は朝から夕方まで連続でした。私は、ローダミン色素の膨潤性雲母層間での包接挙動についてのポスター発表を行ったが、何人かが熱心に説明を求めてきました。その中の2人はこの研究をする過程で読んだ論文の筆者でした。内1人はこの会議の組織委員会会長のSchoonheydt教授、もう1人はスペインのLopets教授で論文を読んで彼らの名

前は強く心に刻まれていたので初めて会った気がしませんでした。最も分野の近い2人と直接話げできたのは望外の幸せでした。こうして論文で名前を知っている人と直接知り合うことは国際会議に出席する大きな意義です。単なる文通では得られないものがあります。採用試験に面接が欠かせないのと同じでしょう。人柄を知った後は、彼らの論文が違って読めてきますし、研究交流もしやすくなります。

会議では、いつもながら新しい方法論 (粘土科学分野にとって) の適用例の紹介に焦点が当てられていました。すなわち、電界放射型の走査型電子顕微鏡 (FESEM) を粘土に富む堆積物の観察に用いた微視的な構造解明への有効性についての紹介、NMRの粘土界面の極性分子への適用等が紹介されました。また、光学系が一部異なるが無機材質研究所で開発されたものと同様なX線顕微鏡が分解能20nmとして発表され参加者の興味を引きました。一般にヨーロッパの研究者は、公害・環境問題



への意識が高く真剣なことを感じます。発表件数は少ないものの、農薬の徐放性を高めることによる過剰散布の防止、有機液相反応に粘土触媒を適用するクリーンテクノロジーの提言などがありました。もちろん新たな粘土関連化合物の合成も関心の的であり、有機物で修飾した粘土／有機粘土複合体を一段の水熱合成で合成する方法が紹介された。私の研究に近い分野では、色素のスペクトルをプローブ、手掛かりとして色素の粘土表面での挙動や粘土表面そのものの触媒能の評価に使っている研究に興味を持ちました。

機会を得てSchoonheydt教授の関係する研究施設の見学をしました。教授の研究室は界面化学研究部に属します。この研究部は、表面化学・触媒センターとコロイド化学研究室から成る7人の教授と70人のスタッフがいる

大きな組織です。従って、研究室の数も多いのですがどこも、非常に清潔で整然としていたのが印象的でした。床の掃除は専門の人がするのですが、実験台等の整理・整頓は研究者が当番となってやっているとのことでした。合成設備、評価装置共に豊富で例えばガスクロマトグラフ装置は40台ほどが並んでいました。こうした設備は系統的に配置され研究効率が考慮されています。また、一般に大学の装置は日本に限らず古びたものが多いのですが、ここの装置は新しいものが多いのに驚きました。それは、この研究部の研究が世界最高レベルにあってベルギーのCOEに指定されていること、石油会社を始めとする企業からの資金が流れてくることから例外的に良い研究環境とのことでした。高いレベルの研究成果が良い循環を生んでいました。

プラズマ材料科学の海外における研究動向 —プラズマ化学からプラズマプロセス科学へ—

先端機能性材料研究センター
主任研究官 石垣 隆正



プラズマ化学の重要な会議の一つである“プラズマ化学に関するゴードン会議”が、その名称を“プラズマプロセス科学に関するゴードン会議”に変えて今年から再スタートする。この変更は、プラズマ化学が材料合成プロセスのような、より具体的な内容を扱えるようになったこと、あるいは扱おうという意思を反映している。プラズマ化学のもう一つの重要な会議である「プラズマ化学国際シンポジウム」の第12回が昨年8月米・ミネアポリスで開かれた (ISPC-12)。この会議は、低圧プラズマおよび熱プラズマ (大気圧付近で発生する高圧プラズマ) の、発生、モデリング、計測、応用といった多岐にわたる内容に関するもので今回は500人強の参加があった。本稿ではISPC-12での発表をもとに、筆者の携わっている熱プラズマの研究を中心にプラズマ材料科学の最近の動向を述べる。

基調講演の最初は、米・イリノイ大学Kushner教授 (低圧プラズマ中の粒子のエネルギー分布等、放電状態のモデリングを精力的に行ってきたことで知られている) で、講演題目の次のOHPには、curiosityの追求からapplicationを考慮した研究へというテーマが書かれていた。その説明の冒頭でアメリカの軍事予算があてにできなくなったことに触れたので、やれやれapplicationを考えないと研究費もとれないなんて話を基調講演からするのかと思っただけ、新たなneedsを求めてプラズマ研究を進めるにあたり、モデリングのレベルがプラズマプロセスへの応用に役立つほどになったというのが講演全体として

の意図であった。これは、もちろんコンピュータの進歩に負っており、例えば現実のプラズマ反応容器に即してモデル化するとき、従来電磁場を一次元で取り扱っていたのを二次元にする必要があったりしてより複雑になるが、この様な問題の解がリーズナブルな時間で得られるようになり、実験室にも納めできる視覚化した内容を示すことが可能になった。

計測の分野では、米・アイダホ国立工業研究所 (INEL) のFincke博士 (熱プラズマに関して、光学計測を中心にすえて研究を行ってきた唯一のグループ) がレーザーを用いた熱プラズマのdiagnostics—LIF、CARS、レーザー散乱等—によるプラズマ状態の解析結果を示した。また、現在熱プラズマの応用分野の一つとして活発に研究がおこなわれているプラズマスプレー



「ISPC-12」と「I Love Plasma!」

コーティングの制御に、光学計測により得たプラズマおよびプラズマ中の溶射粒子の温度、流速をフィードバックしてからコーティングプロセスを制御する試みも報告した。従来の制御は、電流、電圧の変動をモニターしてプラズマ発生電源へフィードバックというものであったので、プロセス制御に本格的な計測結果を利用するという意味で注目された。筆者は会議終了後INELを訪問したが、上記の研究は材料プロセスを中心に研究を行なっているグループと共同で行なっていた。

カナダ・シャールブルック大学Boulos教授(高周波熱プラズマの数値解析の先駆者として知られる)は、プラズマの温度、流れ分布とともにプラズマから反応容器への熱伝導、冷却水の流速等を考慮した新しい数値解析法に基づいて設計した高構造高周波プラズマトーチの開発について発表し、いろいろな材料合成プロセス、廃棄物の分解のような環境問題への適用など熱プラズマプロセスの可能性を示した。その発表内容には、プラズマの放射ロスの問題に関して仏・ポールサバティエ大学の原子物理のグループ、プラズマインピーダンスに関して金沢大学の放電工学のグループ、材料合成への応用に関して無機材研との共同研究の結果が含まれていた。

以上のように、モデリング、計測技術、反応装置と、プラズマプロセスの道具立ては整備されてきた。だれも

が興味ある材料プロセスの出現を待っている。そのためには、プラズマプロセスに携わるいろいろな分野の研究者の協力が必要なが強調された。

筆者らは、高周波熱プラズマ処理セラミックス粉末の形態、微構造、化学組成の変化を調べて、プラズマとセラミックス粒子の熱的・化学的相互作用を評価することを試みている。今までに、モデル物質として、アルミナ(多種類の準安定相を持つ)とチタンカーバイド(広い不定比組成を持つ)を取り上げ、現在はモリブデンシサイド(組成変化と関連して準安定相が生成する)粉末のプラズマ修飾を行なっている。これらの研究では、Sherbrooke大学、東工大と共同でプラズマ反応装置中の温度、流れ、化学種の分布をもとめたことがプロセス理解に有効であった。また実際に、今までにない複合粒子の合成も可能になった。

従来、熱プラズマはその高エンタルピーゆえ熱的な側面が強調されてきたきらいがある。低圧プラズマ同様、熱プラズマでも高い化学反応性を積極的に利用すれば、セラミックス材料の界面・粒界制御といった従来にないプラズマの使い方が期待できる。新しいプロセスに対して異なる立場からの研究が活発になったとき、プラズマ材料科学のような学際的な研究分野はさらに成長することが期待される。

外部発表

投稿

登録番号	題 目	発 表 者	掲 載 誌 等
3491	Floating zone growth of TiB ₂ single crystals using SHS rods	大谷 茂樹・石沢 芳夫	International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis 3,1, 93-97, 1994.
3492	Structural analysis of the nitrogen-adsorbed NbC (111) Surface	速水 渉・左右田龍太郎 相沢 俊・大谷 茂樹 石沢 芳夫	Physical Review B 50, 11074-11078, 1994.
3493	Synthesis and crystal structure of hollandite-related vanadium-deficient solid solution BaV _{10-x} O ₁₇ (0.10 ≤ x ≤ 0.65)	菅家 康・室町 英治 加藤 克夫・小須田幸助	Journal of Solid State Chemistry 113, 125-131, 1994.
3494	β型窒化ケイ素焼結体中のコア/リム構造の電子顕微鏡観察	広崎 直登・谷村 誠 岡本 祐介・秋宗 淑雄	Journal of the Ceramic Society of Japan qs 102, 9, 857-879, 1994.
3495	Crystallizing process of amorphous thick films of ferroelectric lead germanate family	播野 純・向川 友徳 上原 宏行 A.L. Gruverman 高橋紘一郎・雪野 健	Japanese Journal of Applied Physics 33, 5521-5524, 1994.

人 名

人事異動

スリカンス バラナシ(超高压カステーション主任研究官)

辞職

(以上平成7年10月30日付)

山下 信雄(科学技術政策局政策課企画室専門職)

管理部企画課に併任

(以上平成7年12月7日付)

吉川 英樹

超高压カステーション研究員に採用

(以上平成7年12月1日付)

外国人の来所

1. 来訪日 平成7年10月18日
来訪者名 フランス科学研究庁と民間企業の共同研究所所長
Dr. Eerve Arribert 他2名
2. 来訪日 平成7年10月26日
来訪者名 JICA研修員
Mr. Md. Sayduzzaman 他3名
(バングラデシュ科学技術省研究員)

研究発表会

第23回無機材質研究所研究発表会が、11月13日（月）つくば市・研究交流センターにおいて、外部研究機関、大学及び民間企業等から多数の参加者を得て開催された。



最近の刊行物

- 無機材質研究所研究報告書
 - 第82号 スメクタイトに関する研究
 - 第83号 テルル酸塩ガラスに関する研究
 - 第84号 超高压力技術に関する研究（第4報）
 - 第85号 逆向型ラジカル源を用いた薄膜化技術に関する研究
 - 第86号 超伝導マルチコアプロジェクト研究（新物質探索コア）
 - 第87号 超伝導マルチコアプロジェクト研究（単結晶育成コア）
 - 第88号 超伝導マルチコアプロジェクト研究（結晶構造解析コア）
- 無機材質研究所年報（平成6年度）

研究会

年月日	研究会名	題目
7. 10. 19	第3回ペロブスカイト研究会	材料研究におけるコンピューターシミュレーション技術の役割
7. 10. 30	第8回バナジン酸塩研究会	銅酸化物における準粒子の平均自由行程とジョセフソンプラズモン
7. 11. 7	第8回焼結研究会	セラミックスにおけるソフト化学の可能性
7. 11. 9	第5回化学結合・反応予測研究会	客員研究官および未知物質探索センターメンバーの研究の紹介と討論
7. 11. 13 7. 11. 14	第14回無機・有機複合体研究会	珪酸塩マクロモレキュルの合成とキャラクタリゼーション
7. 11. 14	第5回ガラス・非晶質状態研究会	非晶質前駆体の性質
7. 11. 15	第9回希土類多ホウ化物研究会	・フラーレン研究の最近の進展 ・低密度炭素新結晶“カーボライト”の創製と物性
7. 11. 21	第7回微細構造研究会	先端材料解析のための電子顕微鏡技術

海外出張

氏名	所属	期間	行先	用務
道上 勇一	第8研究グループ	7.10.1～8.9.30	連合王国	イオン導電体の合成と評価に関する研究
左右田龍太郎	第12研究グループ	7.10.6～7.11.4	ドイツ連邦共和国	セラミックス超薄膜の物性に関する共同研究
加茂 睦和	先端機能性材料研究センター	7.10.15～7.10.26	イスラエル国	隣ドーブダイヤモンドの評価に関する研究打ち合わせ
松田 伸一	第1研究グループ	7.10.16～7.12.16	ブラジル連邦共和国	ブラジル材料開発プロジェクトの短期専門家としての研究協力
田中 順三	第10研究グループ	7.10.18～7.10.19	大韓民国	材料研究の国際会議・第3回アジア国際会議出席及び招待講演
堀内 繁雄	特別研究官	7.10.19～7.10.28	中華人民共和国	第6回北京国際機器分析会議出席及び招待講演並びに中国科学院金属研究所訪問
板東 義雄	第3研究グループ	7.10.23～7.11.1	中華人民共和国	第6回北京国際機器分析会議出席及び招待講演並びに中国科学院金属研究所訪問
岡村富士夫	第10研究グループ	7.11.1～7.11.5	ドイツ連邦共和国	超短波長フォトン及び γ 線による固体電子状態の高精度・高分解能解析法に関する国際ワークショップの事前打ち合わせ
北村 健二	第10研究グループ	7.11.6～7.11.24	スイス国	非線形光学材料の欠陥構造制御に関する共同研究
青柳 祥昭	管理部研究支援室	7.11.16～7.11.23	スイス国	非線形光学材料の欠陥構造制御に関する研究設備の運用及び研究支援体制についての調査
柳田 治行	管理部企画課	7.11.16～7.11.23	スイス国	研究企画関係者との意見交換及び材料研究に対するニーズ調査
岡村富士夫	第10研究グループ	7.11.20～7.11.25	タイ国	国際結晶学連合高価値物質に関するスクール講師及びAsCA'95(アジア結晶学連合国際会議)出席及び研究発表
関田 正實	第4研究グループ	7.11.21～7.11.30	連合王国 フランス共和国	ナノ秒レーザーによる表面周波法を用いた分子吸着状態に関する調査及び意見交換
松井 良夫	第4研究グループ	7.11.21～7.11.25	タイ国	AsCA'95(アジア結晶学連合国際会議)出席及び研究発表
藤田 武敏	第5研究グループ	7.11.21～7.11.25	タイ国	AsCA'95(アジア結晶学連合国際会議)出席し、最新の材料合成に関する情報を取得する
沢田 勉	第13研究グループ	7.11.21～7.11.25	タイ国	AsCA'95(アジア結晶学連合国際会議)出席し、最新の材料合成とキャラクタリゼーションに関する情報を取得する
山本 昭二	第11研究グループ	7.11.21～7.11.25	タイ国	AsCA'95(アジア結晶学連合国際会議)出席及び研究発表
佐藤 忠夫	第6研究グループ	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
堀内 繁雄	特別研究官	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
佐々木高義	第8研究グループ	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
菱田 俊一	第1研究グループ	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
末原 茂	第9研究グループ	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
斎藤 紀子	第1研究グループ	7.11.26～7.12.3	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会に出席し、最新の材料合成に関する情報を取得する
田中 高穂	第12研究グループ	7.11.26～7.12.6	アメリカ合衆国	米国材料科学会1995年秋季年会出席及び研究発表
岡村富士夫	第10研究グループ	7.11.26～7.12.11	マレーシア国	平成7年度マレーシア国第三国研修(セラミックス解析計測化)において、研究指導を行う

発行日 平成8年1月1日 第155号

編集・発行 科学技術庁 無機材質研究所

NATIONAL INSTITUTE FOR RESEARCH IN INORGANIC MATERIALS

〒305 茨城県つくば市並木1丁目1番

電話 0298-51-3351

FAX 0298-52-7449