

NIMS WEEK 2018

Abstracts

Day 2

NIMS Showcase

2018年10月16日 東京国際フォーラム

主催 | 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 後援 | 文部科学省



目次

ご挨拶	4
NIMS ショーケース 2018 プログラム	5
NIMS 最新成果ポスターセッション 85 リスト	6
招待講演	9
ポスターセッション	13
太陽電池・熱電材料	14
二次電池材料	20
燃料電池材料	23
生体材料	27
センサ材料	32
計測技術	36
構造材料評価技術	41
高温耐熱材料	51
複合材料・特殊機能材料	55
電子磁気材料・デバイス材料	61
マテリアルズ・インフォマティックス	71
共用設備・技術	85
事業紹介	91



国立研究開発法人物質・材料研究機構

理事長 不協 幸和

清秋の候、皆様におかれましては益々ご健勝のこととお慶び申し上げます。

国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）は特定国立研究開発法人として現在3年目を迎えております。NIMSには、第5期科学技術基本計画で掲げる Society5.0（超スマート社会）の実現に向けて、我が国全体のイノベーションシステムを強力にけん引する中核的機関としての役割が期待されています。この期待に応えるべく、NIMSは、基礎基盤力の強化とオープンイノベーションによる我が国の素材・材料産業の競争力強化に取り組んでいます。

そのような取組を学術界・産業界に力強くアピールし、成果の実用化を推し進める為、2018年は10月第3週をNIMS WEEKと称し、学術シンポジウム、企業向け最新成果展示会（於：東京国際フォーラム、千代田区丸の内）、及びラボ公開（於：NIMS、つくば市）を開催しております。

本年の企業向け最新成果展示会「NIMS ショーケース 2018」では、招待講演プログラムとして、ソフトバンク株式会社代表取締役副社長執行役員・CTO の宮川潤一様より「なぜ電池開発に乗り出したのか？携帯電話からその先へ」と題してご講演いただくとともに、前トヨタ自動車株式会社理事、現LIBTEC 常務理事の石黒恭生様よりトヨタ MIRAI や全固体電池で得た経験をもとに「“死の谷”を越える電池開発」と題してご講演いただきます。

また、NIMS 研究者 15名による最新成果講演と過去最大規模のポスターセッションを同時開催し、進化を遂げる NIMS 発の新材料を研究者自らの解説や実物展示を通じて皆様に分かりやすく披露いたします。さらに、本年のラボ公開は70件の研究ラボや共用設備を自由にご覧いただけますと共に、皆様に興味を持っていただけるよう工夫を凝らしたテーマ別ガイド付きラボツアーを企画しております。

NIMS WEEK を通じて「NIMS のチカラ」をより強く体感していただき「材料進化の最前線」を是非ご覧いただきたいと思います。

NIMS WEEK 2018 Day2: 最新成果展示会

NIMS ショーケース 2018 プログラム

10月16日(火) 東京国際フォーラム ホールB7

9:30 - 10:00		開場・受付開始
10:00 - 10:05	5min	開会挨拶（理事長 橋本和仁）
10:05 - 10:10	5min	来賓挨拶（文部科学省 研究振興局長 磯谷桂介）
10:10 - 10:55	45min	招待講演（1） 「なぜ電池開発に乗り出したのか？携帯電話からその先へ」 宮川潤一氏（ソフトバンク株式会社代表取締役 副社長執行役員 兼 CTO）
10:55 - 11:40	45min	招待講演（2） 「死の谷」を超える電池開発—トヨタ MIRAI や全固体電池で得た私見— 石黒恭生氏（前トヨタ自動車株式会社 理事、現 LIBTEC 常務理事）
11:40 - 11:55	15min	NIMS 研究成果講演（1） 「Dy フリーネオジム磁石」 大久保忠勝（磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性材料解析グループ グループリーダー）
11:55 - 13:30	95min	NIMS 最新成果ポスターセッション85 コアタイム（軽食付）
13:30 - 13:45	15min	NIMS 研究成果講演（2） 「リチウム空気2次電池の高性能化」 伊藤仁彦（エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料グループ 主幹研究員）
13:45 - 14:00	15min	NIMS 研究成果講演（3） 「全固体電池の高容量化に向けたシリコン負極開発」 太田鳴海（エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料グループ 主任研究員）
14:00 - 14:15	15min	NIMS 研究成果講演（4） 「IoT デバイス用自立電源に向けた温度差発電素子の研究」 高際良樹（エネルギー・環境材料研究拠点 熱電材料グループ 主任研究員）
14:15 - 14:30	15min	NIMS 研究成果講演（5） 「磁性・スピントロニクス材料を用いた新しい熱制御技術」 内田健一（磁性・スピントロニクス材料研究拠点 スピンエネルギーグループ グループリーダー）
14:30 - 15:00	30min	NIMS 研究成果講演（6） 「センサ・アクチュエータ研究開発とセンサトピックス」 —最先端センサ & AI & 産学官連携で挑む嗅覚センサと超高感度生体磁気センサー 川喜多仁（機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター センター長） 吉川元起（機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター 嗅覚センサーグループ グループリーダー） 中谷友也（磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性材料グループ 主任研究員）
15:00 - 15:15	15min	コーヒーブレイク
15:15 - 15:30	15min	NIMS 研究成果講演（7） 「三次元溶融金属積層プロセスにおける高速現象の定量評価技術」 北野萌一（構造材料研究拠点 接合・造形分野 溶接・接合技術グループ 主任研究員）
15:30 - 15:45	15min	NIMS 研究成果講演（8） 「オペランド水素顕微鏡の開発」 板倉明子（先端材料解析研究拠点 原子構造物性分野 表界面物理計測グループ グループリーダー）
15:45 - 16:00	15min	NIMS 研究成果講演（9） 「超耐熱材料の新展開—自己治癒セラミックスの開発—」 長田俊郎（構造材料研究拠点 設計・創造分野 超耐熱材料グループ 主任研究員）
16:00 - 16:15	15min	NIMS 研究成果講演（10） 「生物の観察に倣う機能性高分子材料群」 内藤昌信（統合型材料開発・情報基盤部門 データ駆動高分子設計グループ グループリーダー）
16:15 - 16:30	15min	NIMS 研究成果講演（11） 「データモデルに基づいた極小熱伝導率を有する断熱薄膜の設計と開発」 徐一斌（統合型材料開発・情報基盤部門 データプラットフォーム プラットフォーム長）
16:30 - 16:45	15min	NIMS 研究成果講演（12） 「計測データの自動収集と材料データプラットフォーム開発」 吉川英樹（統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター 副センター長）
16:45 - 17:30	45min	NIMS 最新成果ポスターセッション85 コアタイム（ドリンク付）

NIMS 最新成果ポスターセッション 85 リスト

カテゴリ	ポスター No.	ページ	ポスタータイトル	発表者
太陽電池・熱電材料	1	14	IoT デバイス用自立電源に向けた温度差発電素子の研究	高際 良樹
	2	15	非鉛系ペロブスカイト太陽電池の開発	Isram Ashraful, Md. Emrul Kayesh
	3	16	新規 Fe 系熱電材料のユニット化に向けた特性評価	渋谷 直哉, 高際 良樹, 篠原 嘉一
	4	17	シリコン - ペロブスカイト 2 端子タンデム太陽電池	野田 武司, 白井 康裕
	5	18	コンビナトリアルスパッタ法により作製した Bi-Te 薄膜の熱電特性評価	佐々木 道子, 後藤 真宏
	6	19	新規高性能化原理熱電変換材料	森 孝雄
二次電池材料	7	20	リチウム空気 2 次電池の高性能化	野村 晃敬, 伊藤 仁彦
	8	21	全固体リチウム電池用シリコン系高容量負極	太田 鳴海
	9	22	Li-ion 電池の新しい電極材料：電子伝導性配位構造体	坂牛 健
燃料電池材料	10	23	天然ガス／水素ガス低温変換への高効率・長寿命「根留」触媒	阿部 英樹
	11	24	高効率発電と安定性両立を可能にする中温作動酸化物形燃料電池材料	森 利之
	12	25	燃料電池・水電解用 Vinylon 複合体ポリマー	金 済徳
	13	26	電池・キャパシタの高性能化実現につながる 2 次元材料の開発	馬 仁志
生体材料	14	27	免疫活性化ポリマー	山崎 智彦
	15	28	噴霧型創傷治療粒子	西口 昭広, 田口 哲志
	16	29	生体内溶解性 Mg 合金のためのリン酸カルシウム被膜の開発	廣本 祥子
	17	30	血漿蛋白質と水溶性シリコン量子ドットミセルの分子間相互作用	Shanmugavel Chinnathambi
	18	31	バイオテクノロジーの未来を変える形状記憶高分子	宇都 甲一郎
センサ材料	19	32	湿潤を測り分けるモイスチャーセンサ	川喜多 仁
	20	33	超高感度磁気センサの開発	中谷 友也
	21	34	高感度磁気センサと非破壊評価の研究	何 東風
	22	35	MSS 嗅覚センサと機械学習の融合によりニオイ指標の定量推定に成功	田村 亮, 柴 弘太
計測技術	23	36	無機・有機・生体ナノ材料開発のためのナノ物性計測装置	新ヶ谷 義隆, 中山 知信
	24	37	触媒のその場 TEM 観察に向けた試料ホールダーシステム	橋本 綾子
	25	38	断面 SPM による実デバイス評価技術	石田 幡之, 増田 秀樹
	26	39	オペランド水素顕微鏡の開発	板倉 明子
	27	40	構造材料・磁気デバイスの中性子透過イメージング	間宮 広明
構造材料評価技術	28	41	融融金属積層プロセスにおける高速現象の定量評価技術	北野 萌一, 中村 照美
	29	42	微小球反発試験機の紹介	宮原 健介
	30	43	簡便な高圧水素ガス環境下力学特性評価法	小野 嘉則, 緒形 俊夫
	31	44	繊維強化熱可塑性樹脂複合材料ロッド／ロープの信頼性評価	小熊 博幸
	32	45	疲労破壊現象を観る－疲労挙動の自動その場観察－	西川 嗣彬
	33	46	レーザ積層造形 Ti-6Al-4V 試料の微細組織と力学特性の相関解明	草野 正大
	34	47	3-D レーザープリンターにより造形した肥大格子構造の機械的性能に関する研究	Christopher Mercer
	35	48	腐食データおよび気象データの機械学習に基づく腐食モデルの構築	片山 英樹
高温耐熱材料	36	49	環境負荷の少ない構造色塗工プロセス	不動寺 浩
	37	50	高酸素腐食促進試験によるモルタル埋設鉄筋の腐食プロセスの検討	土井 康太郎
	38	51	超耐熱材料の新展開－自己治癒セラミックスの開発－	長田 俊郎
	39	52	耐熱高機能 Ti 合金の開発	御手洗 容子
複合材料・特殊機能材料	40	53	耐熱チタン合金の高温酸化メカニズムの理論解明	Somesh Kumar Bhattacharya, 佐原 亮二
	41	54	クリープ特性向上を目指した耐熱鋼中炭化物の相安定性解明の新展開	Maaouia Souissi, 佐原 亮二
	42	55	ZnO コーティングによるボールベーリングの高性能化と産業応用	土佐 正弘, 佐々木 道子, 後藤 真宏, 笠原 章, 本田 博史, 鈴木 裕
	43	56	ランダム配向された長纖維強化熱可塑性樹脂複合材料プレートの品質保証技術	内藤 公喜
	44	57	ジルコニア合金のクリープ特性とその向上方法	松永 哲也
	45	58	バイオマスを用いた機能性樹脂	内藤 昌信
	46	59	カフェイン吸着材料・カフェイン除去システム	田村 堅志, 佐久間 博
	47	60	線材製品のための特殊熱処理技術 －通電加熱と Ga 沸冷による高温非平衡相の凍結－	菊池 章弘

カテゴリ	ポスターNo.	ページ	ポスタータイトル	発表者
電子磁気材料・デバイス材料	48	61	ダイヤモンド高移動度トランジスタ	山口 尚秀, 笹間 陽介
	49	62	Dyフリーネオジム磁石の高保磁力化	大久保 忠勝
	50	63	磁性体を用いたフレキシブル・低熱抵抗汎用熱流センサーの開発	桜庭 裕弥
	51	64	磁性・スピントロニクス材料を用いた新しい熱利用技術	内田 健一, 井口 亮
	52	65	磁気で動作する電気化学デバイス	土屋 敬志
	53	66	高速・簡便半導体ナノ構造製造技術	松村 亮, Wipakorn Jevasuwan, 深田 直樹
	54	67	コンビナトリアル合成による高速薄膜電子材料開発	長田 貴弘
	55	68	ウェアラブル素子を形成する印刷エレクトロニクス	三成 剛生
	56	69	撥水性ゲート絶縁膜への有機半導体薄膜塗布技術	坂本 謙二
	57	70	「液体」エレクトレットの開発	中西 尚志
	58	71	電気化学インピーダンス統合解析ソフトの開発	小林 清
	59	72	DFT計算とインフォマティックスを利用した新規イオン伝導体探索	Randy Jalem
	60	73	データ科学と新DACによる新超伝導体の発見	高野 義彦, 松本 凌, Zhufeng Hou, 寺倉 清之
マテリアルズ・インフォマティックス	61	74	機械学習を用いた光電子収量分光(PYS)の閾値の判定	柳生 進二郎
	62	75	材料探索に革新的アプローチを提供:マテリアルキュレーション®	吉武 道子
	63	76	スペース位相回復アルゴリズムによる特微量イメージング	山崎 裕一
	64	77	マテリアルズ・インフォマティックスを用いた材料設計スキームの構築	袖山 慶太郎, Guillaume Lambard, Watcharop Chaikittisilp
	65	78	測定データの自動収集システム	吉川 英樹
	66	79	文献データからの知識抽出	石井 真史
	67	80	革新的な構造材料開発のためのマテリアルズインテグレーション(MI)システム	源 聰
	68	81	データ科学を活用した鉄鋼材料クリープ特性記述モデルの選択	伊津野 仁史, 櫻井 悅也
	69	82	Information gains from images of typical metallurgical microstructures with machine learning and/or post-processing tools	Dmitry S. Bulgarevich
	70	83	キュリー温度のオントロジー解析	木野 日織, 溝口 理一郎
	71	84	Ultralow thermal conductivity thin film with high interfacial thermal resistance design by machine learning	Yibin Xu, Yen-Ju Wu, Michiko Sasaki, Lie Fang, Masahiro Goto
	72	85	NIMS Open Facility ~利用方法~	技術開発・共用部門
	73	86	NIMS Open Facility ~ユーザースクール~	技術開発・共用部門
	74	87	NIMS Open Facility ~材料分析・構造解析~	技術開発・共用部門
共用設備・技術	75	88	NIMS Open Facility ~材料創製・極限環境~	技術開発・共用部門
	76	89	NIMS Open Facility ~微細加工・ナノバイオ~	技術開発・共用部門
	77	90	NIMS Open Facility ~透過型電子顕微鏡~	技術開発・共用部門
	78	91	革新的センサ・アクチュエータ研究プロジェクト <センサ・アクチュエータ研究開発センター>	川喜多 仁
	79	92	「MSSアライアンス／フォーラム」 嗅覚IoTセンサの業界標準に向けた産官連携	吉川 元起
事業紹介	80	93	NIMS-CAMECA 3DAP ラボの紹介 ～アトムプローブによるナノ組織解析～	埋橋 淳, 大久保 忠勝
	81	94	NIMS クリープデータシート	木村 一弘
	82	95	宇宙関連材料強度データシートの紹介 ～極限環境下における材料特性評価～	小松 誠幸
	83	96	疲労強度の解明(NIMS疲労データシート)	蛭川 寿
	84	97	無機材料データベース「AtomWork-Adv」利用サービス(有償)開始 ～データ駆動型材料開発での利便性向上のため、データのダウンロードや検索機能等を充実～	徐一斌, 細谷 順子, 桑島 功, 坂入 雄大
	85	98	材料データプラットフォーム	門平 卓也

招 待 講 演

招待講演

10:10-10:55

なぜ電池開発に乗り出したのか？

携帯電話からその先へ



宮川 潤一 氏

ソフトバンク株式会社
代表取締役 副社長執行役員 兼 CTO

今年4月、ソフトバンクは次世代蓄電池の本命とされるリチウム空気電池の実用化に向け、NIMSと共同で開発センター設置に関する覚書を締結。なぜ携帯電話会社が自ら電池開発に乗り出したのか。世間を驚かせる策を次々と打ち出しソフトバンクを率いてきた宮川氏本人が、見据えるその先の世界を語る。

招待講演

10:55-11:40

“死の谷”を越える電池開発

—トヨタ MIRAI や全固体電池で得た私見—



石黒 恭生 氏

前トヨタ自動車株式会社 理事
現 LIBTEC 常務理事

トヨタ自動車にて2000年より燃料電池、液系リチウムイオン電池開発を部長として担当し、2010年には全固体リチウムイオン電池を開発する部を東富士研究所に立ち上げ2018年初めまで担当。2014年末に燃料電池車「みらい」を発売し、全固体電池を18年には国家プロジェクト「先進・革新電池評価技術開発（第2期）」が発足できる所まで技術開発を推進。

最先端技術の製品化に至るまでの「死の谷」の渡り方などの経験談をお話しすると共に、製品としてブレークスルーするための基盤技術、材料開発への期待などもお話ししたい。

ポスターセッション

IoTデバイス用自立電源に向けた 温度差発電素子の研究

Research and development of autonomous power supply using small temperature difference



エネルギー・環境材料研究拠点 热電材料グループ

高際 良樹 TAKAGIWA.Yoshiki@nims.go.jp

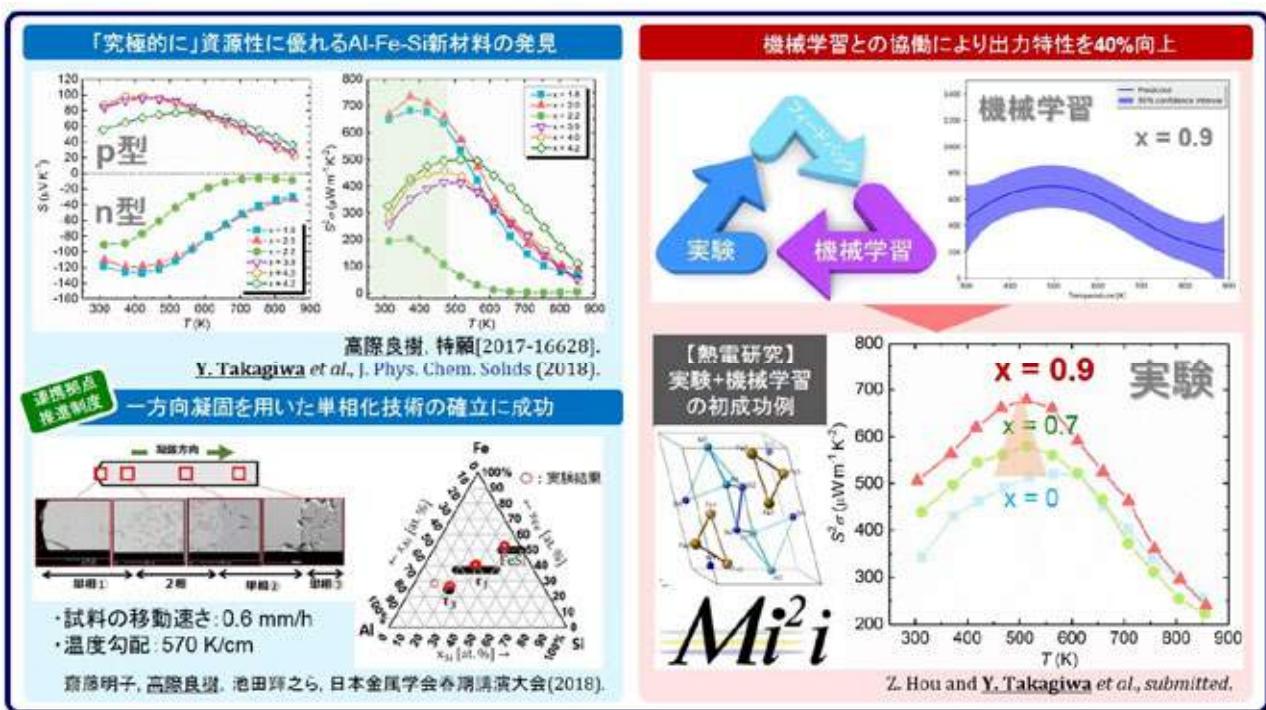
研究の背景

- IoT社会・低炭素社会の実現に向け、200°C以下の廃熱を有効活用する技術の構築
- 大規模な普及に耐えうる、ありふれた元素のみから構成され、化学的安定性・耐酸化性・機械特性に優れる素子
- 僅かな温度差で発電でき、 $100 \mu\text{W/cm}^2$ の出力密度を有するコンパクト発電モジュール

研究の狙い

- 計算科学の手法を用いた、ありふれた元素のみから構成される新規材料の探索・スクリーニング
- 合成プロセス・材料組成の最適化・コンビナトリアル手法を用いた発電特性の最大化
- 機械学習を用いた、最適な材料組成の効率的探索と発電特性の向上

最先端研究トピックス



- (左上図) 第一原理計算から見出したAl-Fe-Si三元系ターゲット材料のゼーベック係数と電気出力因子の温度依存性。
→ 室温から200°Cまでの温度域での微小温度差発電が可能であることを実験により実証。
- (左下図) 一方向凝固を用いて、ターゲット試料の単相化に成功。[NIMS連携拠点推進制度による共同研究成果:茨城大学池田研究室]
- (右図) ベイズ最適化を用いて、中温域での発電特性を40%向上させることに成功。[Mi²i:東京大学津田研究室との共同研究成果]
→ 機械学習による温度差発電素子の発電特性の向上に成功した初めての実証例。

応用分野と今後の展開

- 微小温度差環境を利用した各種センサー用自立電源
- 中温域での未利用熱エネルギーの有効利用
- フレキシブル基板を用いた曲げられる自立電源

実用化へ向けた課題

- 更なる発電特性の向上
- 高信頼性のモジュール化技術(接合技術等)の構築
- システム化と実証試験

非鉛系ペロブスカイト太陽電池の開発

Pb-free perovskite solar cells



Islam Ashraful

Perovskite Solar Cell / Photovoltaic Materials Group
ISLAM.Ashraful@nims.go.jp



Md. Emrul Kayesh

Perovskite Solar Cell / Photovoltaic Materials Group
emrulmseru@gmail.com

Background

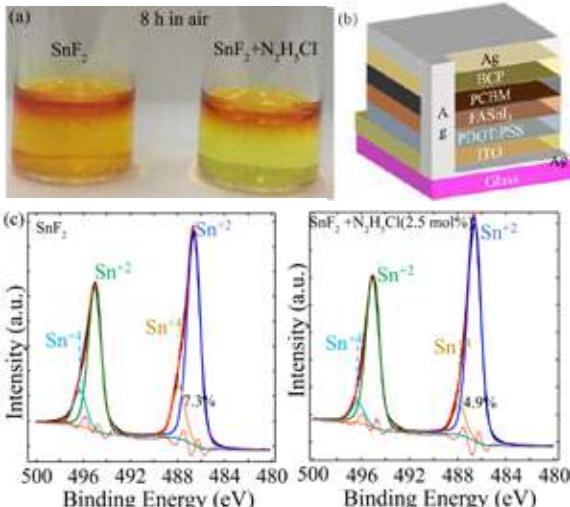
- Sn-based perovskite solar cells (PSCs) have attracted tremendous attention as an alternative to toxic Pb-halide perovskite due to their non-toxic nature.
- However, due to facial tendency of rapid oxidation and inability to form pinhole free films, Sn-based PSCs suffer from poor photovoltaic performance.
- To prevent the oxidation from Sn^{2+} to Sn^{4+} for maintaining favorable optoelectronic properties of Sn-based perovskite films.
- To from pin-holes free, uniform and stable Sn-based perovskite films for efficient devices.
- To bring Pb-free perovskite solar cells (PSCs) from laboratory to the commercial applications.

Aim

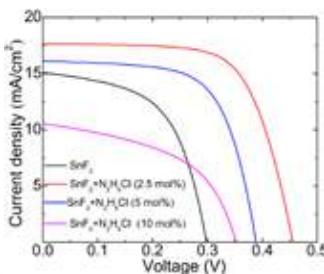
Advanced Research Topics

Enhanced cell performance with reducing coadditive ($\text{N}_2\text{H}_5\text{Cl}$)

Reducing ability of $\text{N}_2\text{H}_5\text{Cl}$

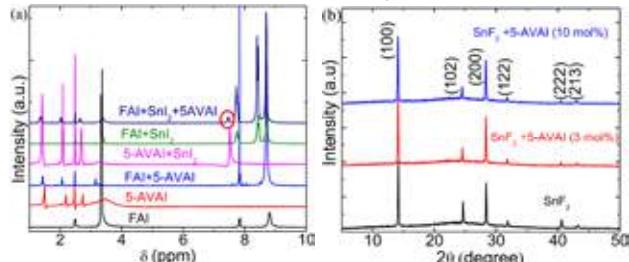


Device performance

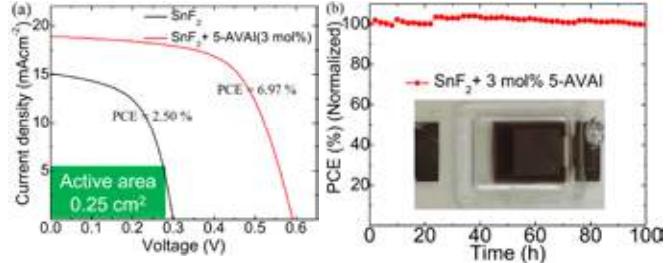


Coadditive (5-AVAI) for efficient and stable device

Coordination of 5-AVAI with FASnI_3



Device performance and stability



Summary

- Reduced the Sn^{4+} content from 55% to 34%.
- Improved optoelectronic properties of Sn-based perovskite films.
- Enhanced Sn-based PSCs device performance and stability.

Research outcome

- Reveal a way to retard the Sn^{2+} oxidation of Sn-perovskite films.
- Low cost and high performance Pb-free PSCs.
- One step forward for eco-friendly Sn-based PSCs applications.

新規Fe系熱電材料のユニット化に向けた特性評価

Characterization for new an Fe-based thermoelectric generation unit



エネルギー・環境材料研究拠点 热電材料G
渋谷 直哉
SHIBUYA.Masachika@nims.go.jp



高際 良樹
TAKAGIWA.Yoshiki@nims.go.jp



篠原 嘉一
SHINOHARA.Yoshikazu@nims.go.jp

研究の背景

- 実社会で利用されている熱全体の約60%ものムダな排熱を利用した熱電発電技術の本格展開に向けた試みの必要性
- ユビキタス系元素を用いた新規熱電材料の開発
- 熱電素子製造コスト削減や、それぞれの熱電素子と電極間の接合技術の未開発

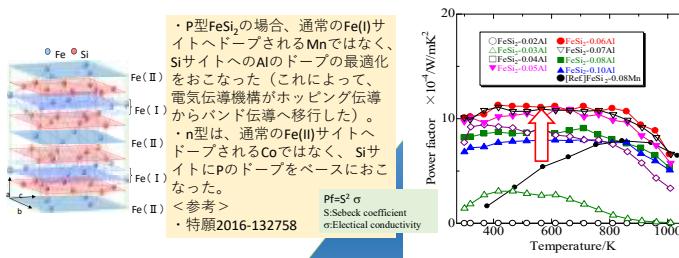
研究の狙い

- 新規熱電材料の中低温領域における性能最適化
- 熱電素子の大量生産技術の開発
- ユニット化へ向けた熱電材料と電極間の接合技術の開発

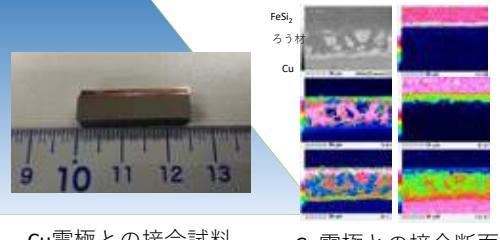
最先端研究トピックス



Fe系熱電材料の性能最適化



熱電素子と電極の接合



応用分野と今後の展開

- 熱電素子の大量生産技術と電極との接合の簡略化技術
- ボイラーなどの排熱を利用した独立電源の開発
- 小型発電モジュールを開発し、センサー電源に利用

実用化へ向けた課題

- クラックのない射出成型試料の脱脂・焼結
- 低い接触抵抗とクラックが発生しない接合技術

シリコン-ペロブスカイト2端子タンデム太陽電池

Perovskite/silicon 2-terminal tandem solar cells



エネルギー・環境材料研究拠点 太陽光発電材料G

野田 武司 NODA.Takeshi@nims.go.jp



エネルギー・環境材料研究拠点 ナノ界面エネルギー変換G

白井 康裕 SHIRAI.Yasuhiro@nims.go.jp

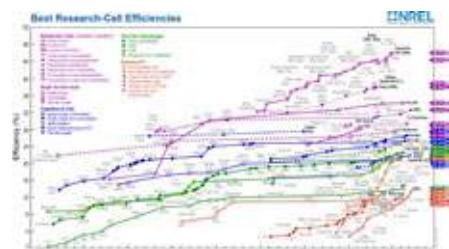
研究の背景

- 低炭素社会に向け再生可能エネルギーとしての太陽電池の普及
- 単一接合太陽電池における効率が理論限界に迫り効率向上のための新たな取り組みの必要性
- 安価でしかも高効率な太陽電池への期待

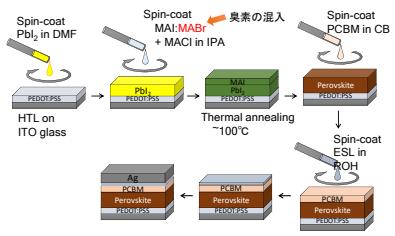
研究の狙い

- タンデム仕様の高開放電圧ペロブスカイト太陽電池の開発
- 透明電極を用いた透明ペロブスカイトセルの開発
- 1cm²級の高耐久性タンデムセルの開発

最先端研究トピックス



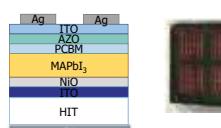
太陽電池の効率向上の推移



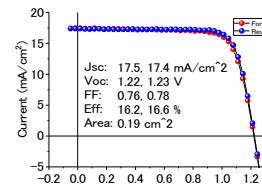
N. Tripathi, et al. J. Mater. Chem. A 2015, 3, 12081



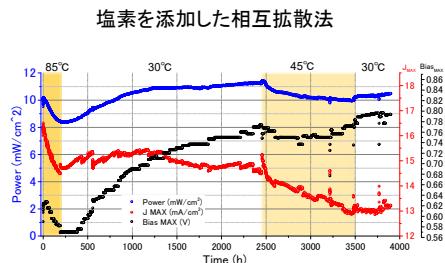
ITOを表面電極とした透明なペロブスカイト太陽電池の写真



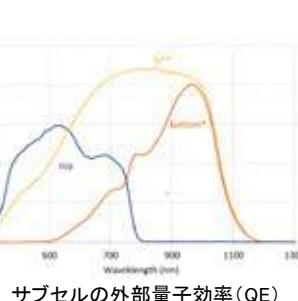
タンデムセルの構造と実際に試作したタンデムセルの写真



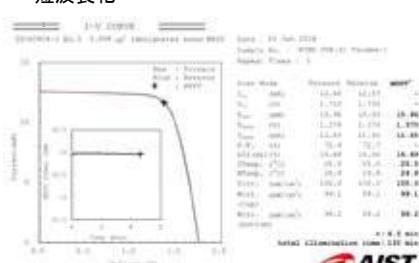
開放電圧1.2 Vのペロブスカイト太陽電池の実現。ヨウ素の一部を臭素で置換しペロブスカイト材料(PVK)のバンドギャップを短波長化



4500時間を超える耐久性



サブセルの外部量子効率(QE)の波長依存性



産業技術総合研究所における計測結果

まとめ

- 透明ペロブスカイトセルの作製
- 開放電圧1.2 Vのペロブスカイトセルの実現
- 1平方センチメートル級のタンデム太陽電池の作製

実用化への目標

- 性能の向上と大面積化
- 劣化抑制による長寿命化
- 潜在的な課題としての無鉛化

コンビナトリアルスパッタ法により作製したBi-Te 薄膜の熱電特性評価

Thermoelectric property of Bi-Te films by combinatorial sputtering method



*1 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点
伝熱制御・熱電材料グループ

佐々木 道子 *1 SASAKI.Michiko@nims.go.jp



*2 エネルギー・環境材料研究拠点 热電材料グループ
後藤 真宏 *1,*2 GOTO.Masahiro@nims.go.jp

研究の背景

- 世界規模で地球環境への負荷が問題となっており、環境負荷が小さい再生可能エネルギーを集め、電力に変換する技術であるエネルギー・ハーベスティングが世界規模で注目されている。
- 日本国内において、一次エネルギーの7割は有効活用されておらず、年間1兆kWhにものぼる熱エネルギーの大半が排熱として捨てられている。このような未利用エネルギーを効果的に再利用することが、エネルギー資源の安定供給を確保する上でも重要である。

研究の狙い

- 熱電発電を社会に大きく普及させるには、更なる性能向上が重要であり、そのためのブレークスルーを狙うには、結晶構造や組成の検討、量子効果を取り入れるなどの材料開発が必要。
- 新規薄膜熱電材料の探査にコンビナトリアル技術を導入することにより、従来よりも新材料探索、材料開発の高効率化を図る。
- 最も一般的な熱電変換の材料であるBi₂Te₃を薄膜化することで、ナノ構造制御を行い、高性能化を目指す。

最先端研究トピックス

熱電材料開発の歴史は長く、1960年代に常温近傍で優れた熱電特性を示すBi₂Te₃が発見されて以降、この温度域では、これを超える画期的な材料は発見されていない。

従来とは異なる視点で、アプローチを行う！
研究・開発をスピーディーに行いたい！

コンビナトリアルスパッタ
コーティング技術の活用！

Bi-Te系をナノレベルで制御を行い、性能向上を狙う。

通常のコンビナトリアル 材料作製



＜大きな問題点＞

- 組成の違いに重点がある
- 良好な組成がわかつても、大面積に展開する手段がない
(材料開発への大きな隔たり)

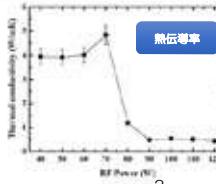
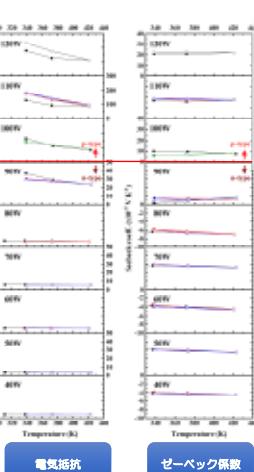
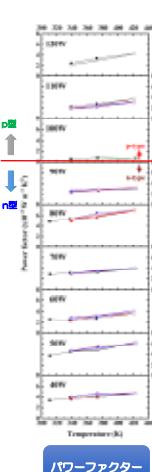
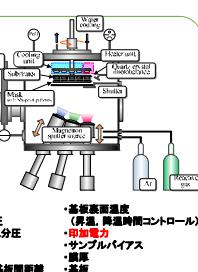
コンビナトリアルスパッタ COSCOMS



＜優れている点＞

- 組成以外のパラメータも変化させられる
- 最適な組成・結晶構造が分かれれば、その薄膜材料の作製に展開可能

研究への
道筋が立つ！



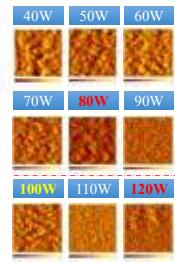
$$ZT = \frac{\alpha^2}{\rho} \times K$$

ZT: 無次元性能指數
(T[K]: 絶対温度)

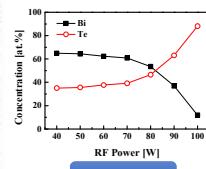
α [V/K]: ゼーベック係数

ρ [Ω·m]: 電気抵抗

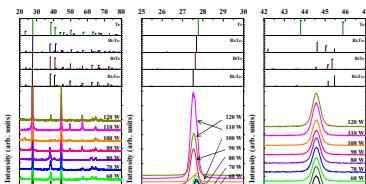
K[W/mK]: 热伝導率



表面凹凸像



表面凹凸像



XRD



表面凹凸像

作製例

まとめ

- コンビナトリアルスパッタ装置を用いてBi-Te系薄膜の作製を行ったところ、微細構造を有す、n型とp型の2種類のBi-Te系薄膜の作製に成功した。
- 印加電力を変えることで、Bi-Te系の無次元性能指數ZTは、最大でn型:0.27(90W)、p型:0.40(120W)の値を得ることができた。
- コンビナトリアルスパッタ装置のモードを使い分けることで、材料探査からデバイス創製まで、幅広く行える可能性を示唆した。

実用化への目標

- 今回は印加電力のみ変化させて検討を行ったが、他のスパッタのパラメータについても検討を行い、更なる性能向上を狙う。
- 常温近傍かつユビキタス元素による、高性能な薄膜熱電材料の開発を行う。
- 薄膜熱電材料の優位性を生かし、フレキシブルデバイスの創製を目指す。

新規高性能化原理熱電変換材料

Thermoelectric materials efficiency enhancement with novel principles



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノマテリアル分野 热エネルギー変換材料グループ
機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター 热環境発電グループ

森 孝雄 MORI.Takao@nims.go.jp

研究の背景

- IoTデバイス・センサー用の自立電源の実現
- 新原理による熱電発電の待望の広範囲実用化への接近
- 室温近傍の高性能、フレキシブルなどの要件

研究の狙い

- 新規なナノ構造制御や磁性を活用した高性能原理の発掘と活用
- NIMSオリジナルのユビキタス元素の高性能材料の開発
- オリジナル鉱物系および半導体プロセスを活用したフレキシブルな熱電発電モジュールの開発

ありふれた元素の高機能化新規原理 Highly functionalizing common elements

熱電材料の必要性
Need for thermoelectrics

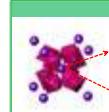
問題点 : Difficulty of conflicting TE prop.
熱電材料の相反する物性要求
(低熱伝導、高電気伝導、高ゼーベック)

性能指標: Figure of merit
 $ZT = \alpha^2 \sigma / k \cdot T$

α = 電気伝導度 (↑) α = ゼーベック係数 (↑)
 k = 熱伝導度 (↓) T = 温度 (↑)

新原理で打開 !

他材料にも活用 !

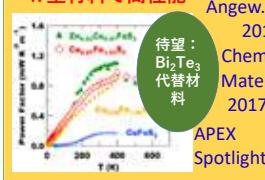


ナノ多孔を生成・制御 !
RE-free
通常 : 高性能を失う

オリジナルナノ構造手法でフォノンの大幅選択散乱に成功!
(nanotech2016大賞 : プロジェクト賞受賞)
Nano Energy 2017



磁気相互作用による高性能化を提言・実現
ありふれた軽元素 n型材料で高性能

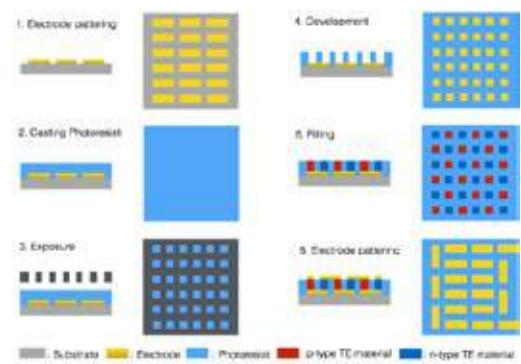


日経新聞1'14 磁性硫化物 p型
Angew. Chem. 2015
Chem. Mater. 2017
金属低性能

J. Mat. Chem. A 2017
磁性イオンドープによる高性能化

熱電発電モジュールの作製と評価 Fabrication and evaluation of power generation modules

モジュール作製デザイン : 半導体プロセスの活用
~Experimental design~ Utilizing semiconductor process



電子機器をブースター回路で駆動できる
 >250 mV@80°Cを発電

Observed >250 mV @ 80 °C
sufficient for booster circuit driving

NIMSオリジナルのユビキタス高性能化材料を用いた
熱電発電モジュールの作製と評価

資源豊富な鉱物をベースにしたオリジナル材料

磁性による熱電増強

n型: CuFeS₂系
p型: CuCr₂S₄系



初期性能 :
 $\Delta T = 88$ K
110 mWの
熱電発電

本材料での出力向上の余地はまだまだ大きい!

まとめ

- 新規なナノ構造制御や磁性を活用した高性能原理によるユビキタス元素のオリジナル高性能熱電材料の開発
- 半導体プロセスを活用した、フレキシブルな熱電発電モジュールのデザインと作製および発電実証
- 資源豊富な鉱物系材料を用いた熱電発電モジュールの作製と発電実証

実用化への目標

- IoTデバイス・センサー用の自立電源の開発
- 元素戦略的な高性能材料やモジュールデザインによる熱電広範囲普及
- 廃熱や未利用熱の有効利用による省エネ
- 高温域の方では火力発電所のtopping cycle、太陽光集光発電など、中高溫域では自動車、船舶応用など

リチウム空気2次電池の高性能化

Development of lithium-air battery



エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料G
野村 晃敬 NOMURA.Akihiro@nims.go.jp



エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料G
伊藤 仁彦 ITO.Kimihiko@nims.go.jp

研究の背景

- 自然エネルギーの活用推進と供給電力平準化を両立する低コスト大容量蓄電技術への社会的要請
- リチウムイオン電池の理論容量を超越する革新的蓄電技術のフィージビリティ明確化要請
- 従来困難とされてきたリチウム金属負極の蓄電池適用の実現等、精密材料制御技術の確立要請

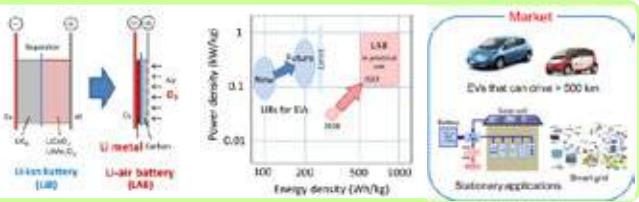
研究の狙い

- 最高の理論エネルギー密度を有する「究極の二次電池」であるリチウム空気二次電池を研究開発
- 電気自動車や太陽電池の広範な普及に必要な抜本的な小型化を実現
- リチウム空気2次電池による蓄電容量の劇的な向上と大幅なコストダウンの可否判断

最先端研究トピックス

リチウム空気2次電池の特徴/目標

- 正極に空気(O_2)、負極にリチウム金属を使用
→従来リチウムイオン電池(LIB)より5~10倍のエネルギー密度
 - 単純な構造で低コスト化が可能
- 課題: 大容量正極の実現、高い充電過電圧の抑制、
金属リチウム制御技術の確立



超高容量正極技術の開発

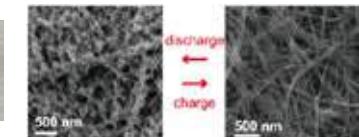
開発技術

- カーボンナノチューブの分散/不織布化技術⇒空孔度最適化
- O_2 供給、Liイオン供給、界面電荷移動の最適化⇒大容量化
- 固体 Li_2O_2 析出機構と容量制限因子の解明に直結

CNTシート空気極

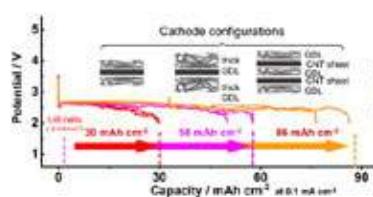


CNTシート空気極のSEM写真



放電生成物(Li_2O_2)
大量析出

充放電特性



リチウムイオン電池(LIB)の15倍超の放電容量

応用分野と今後の展開

- 500 km超走行可能な電気自動車
- 太陽電池と組み合わせた家庭用大型蓄電池

充電過電圧抑制と金属負極界面制御技術

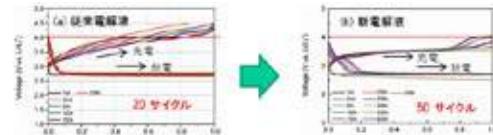
開発技術

- 支持塩としてLiBrとLiNO₃を含む電解液

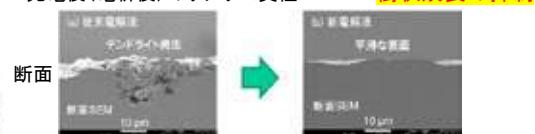
効果

- 充電過電圧を約0.6V低減(エネルギー効率改善)
- 充電反応効率を大幅改善、電解液分解抑制
- 負極にも好影響:リチウム金属表面化学組成制御

充放電特性



充電後(電析後)のリチウム負極



0.6V 過電圧抑制
樹状成長の抑制

断面



表面



Li金属のエピタキシャル成長

実用化へ向けた課題

- サイクル寿命の改善
- 大容量積層型積層セルによる実証
- 小型軽量な水分除去/酸素富化システムの実現

全固体リチウム電池用シリコン系高容量負極

High-capacity silicon-based anodes for all-solid-state lithium batteries



エネルギー・環境材料研究拠点 二次電池材料グループ

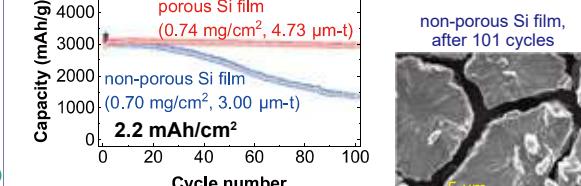
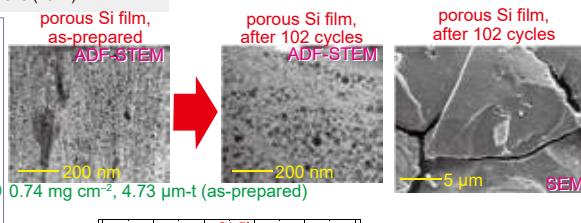
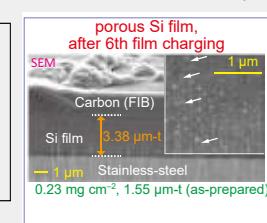
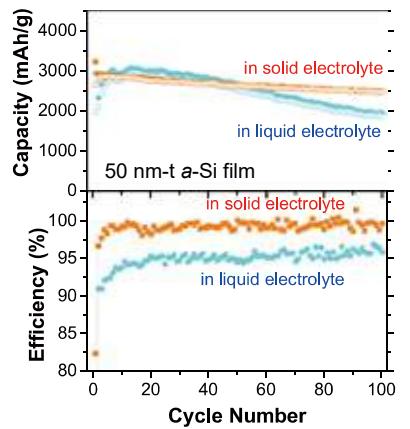
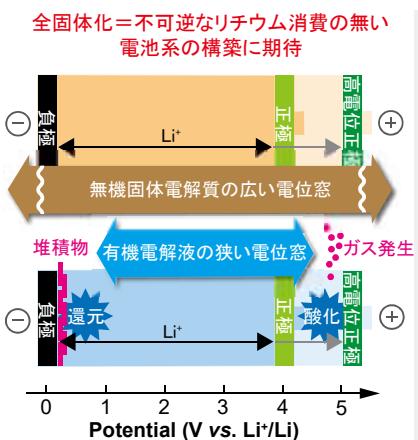
太田 鳴海 OHTA.Narumi@nims.go.jp

- EVシフトを支える車載用リチウム二次電池の高安全化・高性能化が急務
- 可燃性で電位窓の狭い有機電解液利用に起因するリチウム二次電池の高安全化・高性能化への制限
- 不燃性で電位窓の広い無機固体電解質を利用する全固体リチウム二次電池への高まる期待

研究の狙い

- 二次電池の全固体化による高安全化・高性能化
- 電解液利用で高性能化が阻まれている体積変化の大きな高容量負極のサイクル安定化を固体電解質利用で実現
- 電解液利用で実現が不可能な活物質のみによる高容量負極電極体を固体電解質利用で実現

最先端研究トピックス



実用的な容量でのサイクル安定性を獲得するため

X.H. Liu et al., *ACS Nano*, 6, 1522-1531 (2012).
M.T. McDowell et al., *Nano Lett.*, 13, 758-764 (2013).
C.F. Shen et al., *Sci. Rep.*, 6, 31334 (2016).

J. Sakabe, N. Ohta et al., *Communications Chemistry*, 1, 24 (2018).

まとめ

- 電解液で不可避な課題を固体電解質で解決
- 固体電解質利用で高容量負極の容量低下を抑制
- ナノ多孔構造導入で高容量負極の実用容量でのサイクル安定化

実用化への目標

- モデル高容量負極材料から実用材料への転換
- 充放電時の体積変化を抑制/活用する電池システム機構の確立
- 全固体電池への高電位正極の適用

Li-ion電池の新しい電極材料： 電子伝導性配位構造体

New electrode materials for Li-ion battery: metallic conductive coordination frameworks



エネルギー・環境材料研究拠点 ナノ界面エネルギー変換グループ

坂牛 健 SAKAUSHI.Ken@nims.go.jp

研究の背景

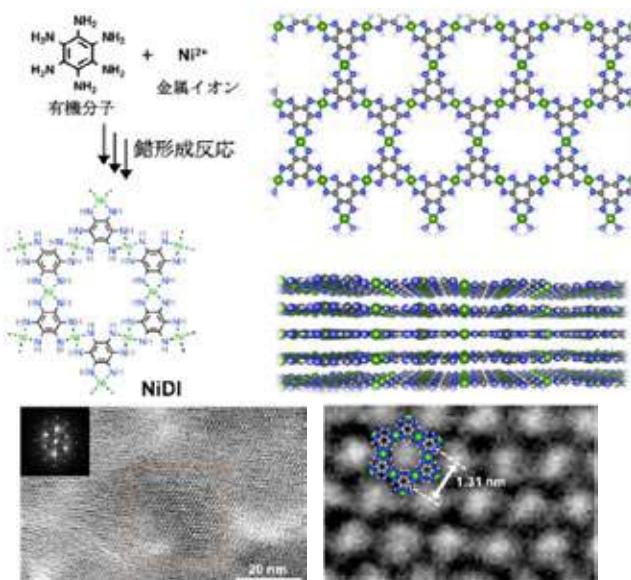
- 持続可能な材料による高効率エネルギー変換・貯蔵が求められている。
- エネルギー変換反応は基礎的な部分で未解明なことが多い。
- 基礎科学で得られた知見を利用して所望の特性を持つ材料を効率よく得る手法が必要。

研究の狙い

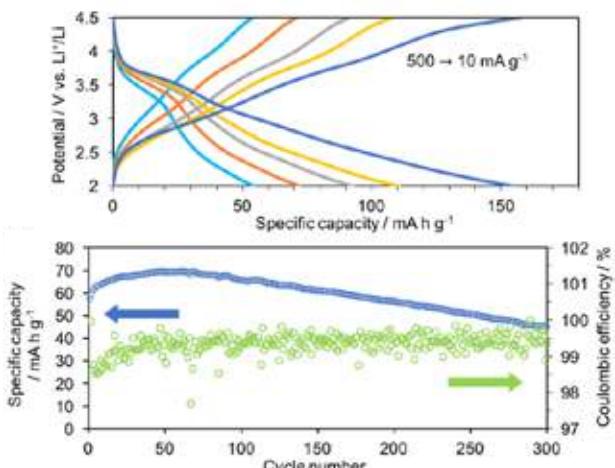
- 二次電池における反応の基礎的理理解。
- 基礎的に反応機構を理解することで“なぜ”特性が高い(低い)のか原理を理解する。
- 原理に立脚した高特性エネルギー材料の合成。

最先端研究トピックス

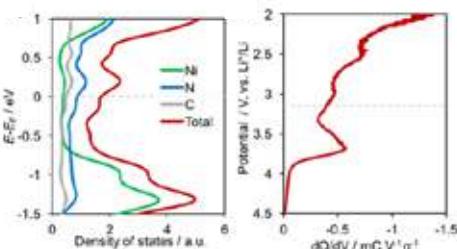
1. 配位構造体の合成



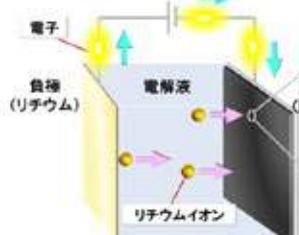
3. 配位構造体正極の電気化学特性



2. DFTによる特性予想と実験の比較



電池の放電時(NiDIの還元反応)



NiDIの還元反応の微視的なイメージ



まとめ

- 電子論からの二次電池電極特性の理解と設計
- 実験と理論の協奏によるより詳細な反応機構の理解が可能

実用化への目標

- 電池電極：体積あたりのエネルギー密度の向上
- より高精度な第一原理計算による反応解析

天然ガス／水素ガス低温変換への 高効率・長寿命「根留」触媒

Rooted catalysts toward the efficient natural gas/hydrogen gas conversions



エネルギー・環境材料研究拠点 水素製造材料グループ

阿部 英樹 ABE.Hideki@nims.go.jp

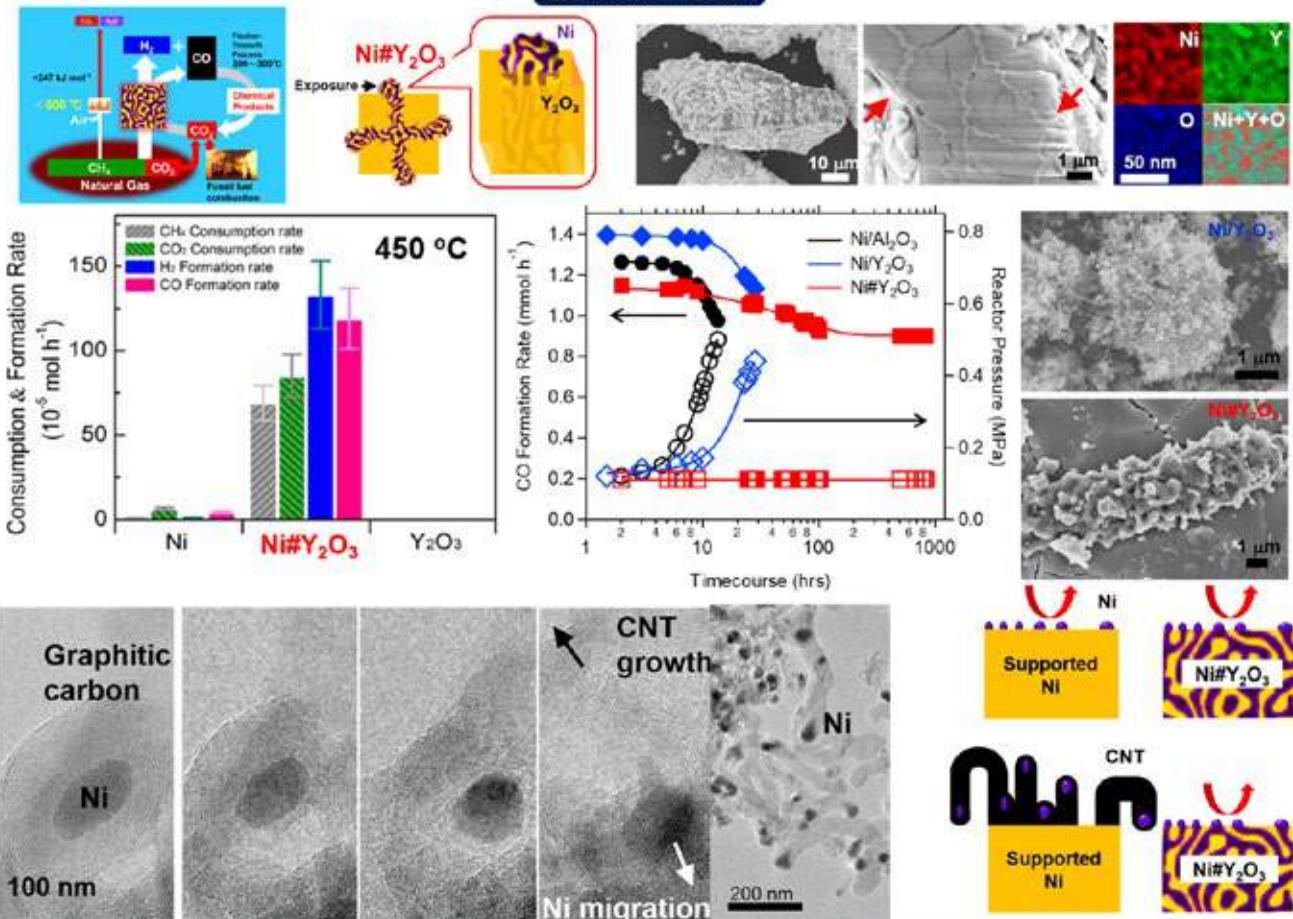
研究の背景

- シェールガスなど非在来型天然ガス資源の市場拡大を前に、天然ガスの主成分をなすメタン(CH_4)や二酸化炭素(CO_2)から水素(H_2)や一酸化炭素(CO)などの高付加価値化製品原料を製造する高効率・長寿命天然ガス変換触媒の開発が急務

研究の狙い

- 高活性「根留触媒」の創成により、従来材料の動作限界温度以下における高効率・長時間安定天然ガス変換を実現

最先端研究トピックス



応用分野と今後の展開

- 天然ガスからの合成ガス($\text{CO} + \text{H}_2$)製造
- 天然ガスからの有用化成原料(エタン・エチレンなど)製造

実用化へ向けた課題

- 触媒材料製造量(現時点: ~10 g/合成)の向上
- パイロットプラントへの搭載
- 触媒材料製造・販売/プラント設計・設置企業との連携

高効率発電と安定性両立を可能にする 中温作動酸化物形燃料電池材料

High quality IT-SOFC device with balance of performance and its stability



エネルギー・環境材料研究拠点 上席研究員
森 利之 MORI.Toshiyuki@nims.go.jp

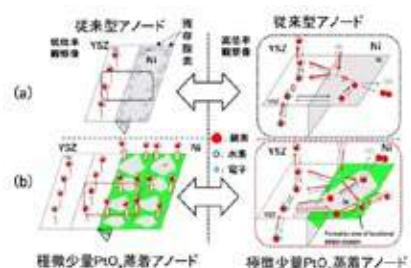
研究の背景

- 超高効率発電システム(理論発電効率:89%)用燃料電池研究開発の必要性
- 中温域動作燃料電池の高性能化と長期安定性両立への期待
- 合成経路設計/マイクロアリナリシス/欠陥構造ミュレーションを組み合わせた高性能デバイス開発

研究の狙い

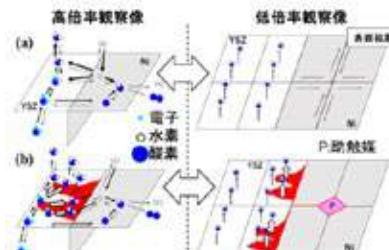
- 従来とは異なるアノード内界面欠陥構造設計による高性能化と安定性改善の達成
- 既報の第一原理計算結果が指示示す燃料電池高性能化への道筋の活用
- 燃料電池分野におけるラジカル・イノベーション達成

【アノード層内Ni上への新規活性サブ設計】



従来型アノード表面における水分子生成反応(a)
と本研究で目指したNi上新規活性サブでの
アノード反応(b)*

【アノード層内YSZ上への新規活性サブ設計】

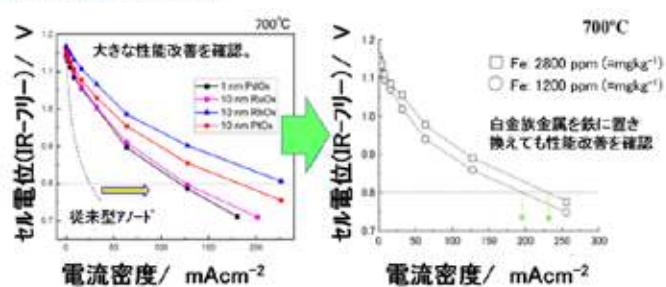


従来型アノード表面における水分子生成
反応(a)と本研究で目指したYSZ上新規
活性サブでのアノード反応(b)

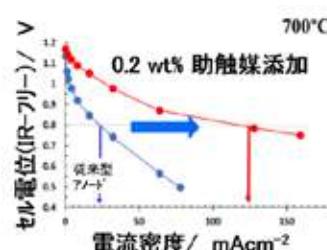
*参考文献

A.Rednyk, T.Mori, et al., 'Design of new active sites on Ni in the anode of intermediate temperature solid oxide fuel cells using trace amount of platinum oxides', *CHEMPlusCHEM*, doi.org/10.1002/cplu.201800170, (2018) open access.

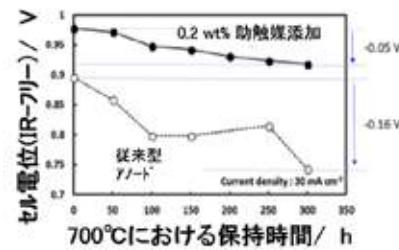
最先端研究トピックス



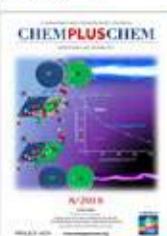
極微量の白金族金属酸化物のアノード上への蒸着と還元により性能の大幅向上を確認(左図)一部は*で公表。表面欠陥構造ミュレーション結果をもとに、PtをFeで置き換えるても性能改善を達成した。



微量の酸化物助触媒を用いて、YSZ上に新たな活性サブを作成し、性能改善を達成(左図)。あわせて、性能の長期安定性改善効果も見出した。



注目研究として
論文誌の表紙
に採用された。



まとめ

- 合成経路設計/微細構造観察/表面欠陥構造シミュレーションを融合することで、従来にない、Ni上又はYSZ上に新規活性サブの作成に成功した。
- 燃料電池分野におけるラジカル・イノベーションへの道筋を見出した。

実用化への目標

- さらなる高性能化と薄膜デバイス研究開発
- 高性能化と長時間性能安定性のバランスをさらに改善する。
- スタック化、発電システムへの応用をすすめる。

燃料電池・水電解用Vinylon複合体ポリマー

Vinylon composite polymer for PEMFCs and water electrolysis



エネルギー・環境材料研究拠点 水素製造材料グループ

金 済徳

KIM.Jedeok@nims.go.jp

研究の背景

- CO₂ゼロのクリーンエネルギー社会の実現
- 自然エネルギーと水素エネルギーの利用によるCO₂ゼロ化社会
- 水電解・燃料電池用水素生成・利用材料の開発

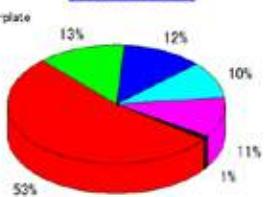
研究の狙い

- 燃料電池・水電解システムの高性能化用各部材の開発
- 高プロトン伝導性、高安定性、低コスト、環境親和用ポリマー電解質の研究
- ポリマーナノ構造の制御、新規ポリマー合成による燃料電池・水電解用電解質膜の開発

最先端研究トピックス

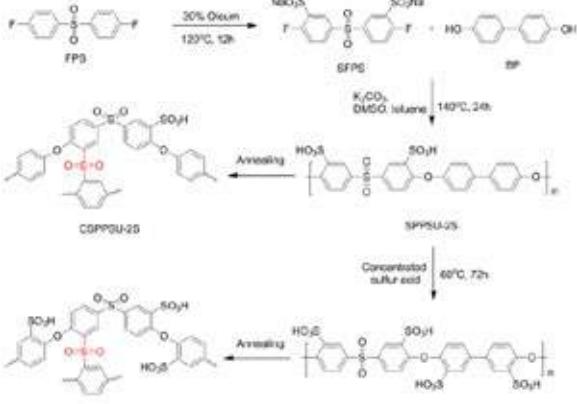
Stack assembly
Electrode catalyst
GDL
Gasket & end-plate
Separator
Membrane

Stack cost



The J. fast cell technology, Japan, 12 (4) 2013 p. 12

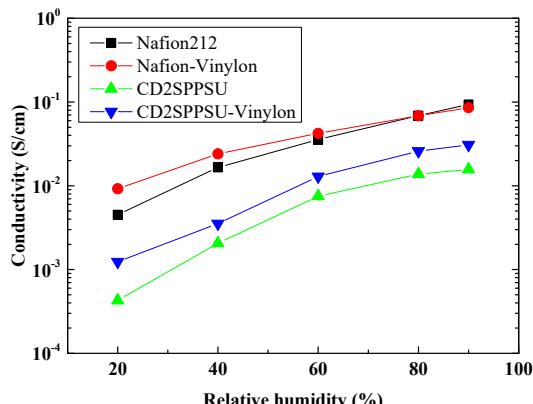
高分子電解質形燃料電池の低成本化



エンジニアリングプラスチックを用いた低成本ポリマー電解質の開発



耐機械的・化学的(酸・塩基)安定性を有するVinylon複合膜の開発



高分子電解質膜の80°CでのRHによる伝導度特性

応用分野と今後の展開

- 高分子形燃料電池と水電解用膜
- レドックスフロー電池用膜
- 電解用分離膜

実用化へ向けた課題

- 伝導度のアップ
- 膜・電極条件の最適化
- 電池性能のアップ

電池・キャパシタの高性能化実現につながる 2次元材料の開発

Developing 2D nanomaterials toward the high-performance battery and capacitor



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノマテリアル分野 機能性ナノマテリアルグループ

馬 仁志 MA.Renzhi@nims.go.jp

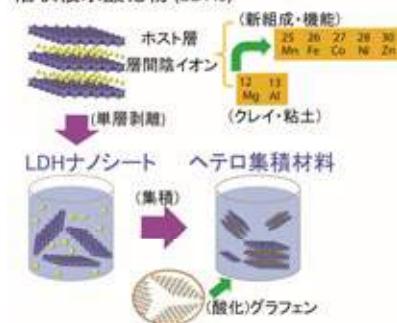
研究の背景

- 高効率なエネルギー貯蔵・変換システムを実現するためにはイオンを高速で伝導させる電解質と高活性な電極触媒が不可欠
- 伝導イオンとして水酸化物イオンを用いるアルカリ性環境の中では、Fe, Co, Ni, Mn等の遷移金属元素による安価な非貴金属電極触媒が使用でき、コストの大幅な低減が可能
- 究極の2次元異方性を持つナノシートを用いた新型水酸化物イオン伝導膜
- 安価な3d遷移金属元素からなる貴金属フリー電極触媒
- 高性能のアルカリ燃料電池及び水電解装置等のエネルギー貯蔵・変換システム

研究の狙い

多様な金属組成を持つ層状水酸化物結晶(LDH)を合成し、高品位ナノシートを誘導

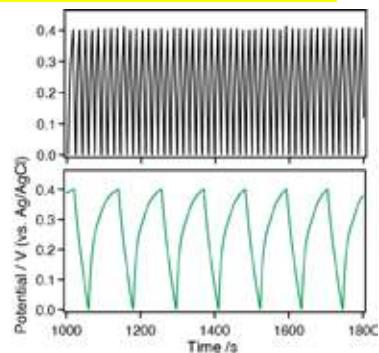
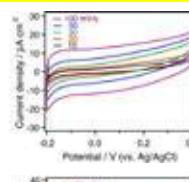
層状複水酸化物(LDHs)



最先端研究トピックス

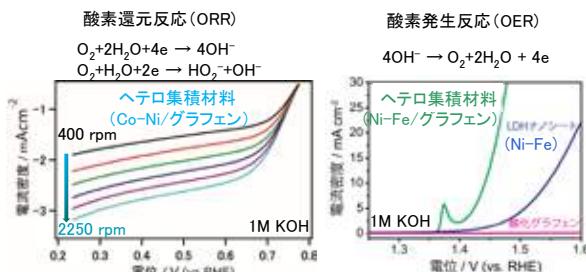
グラフェンの電気二重層容量に水酸化物ナノシートの擬似容量を複合することによって、高い容量の実現が可能(Adv. Mater. 2014等)

グラフェン
約100F/g

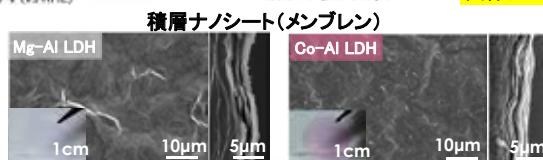
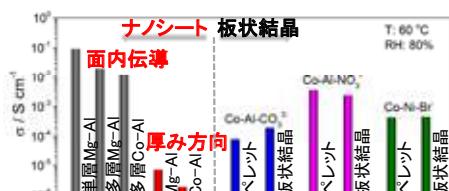


ヘテロ集積材料
約650F/g

ナノシート中の3d遷移金属(Fe, Co, Ni, Mn)のレドックス反応による高性能の電極触媒を開発(ACS Nano 2015等)



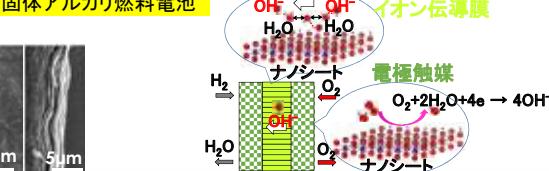
ナノシートが 10^{-1} S/cmに達する世界最高レベルの水酸化物イオン伝導性を示すことを発見(Sci. Adv. 2017)



まとめ

- ナノシート中の遷移金属(Fe, Co, Ni, Mn)のレドックス反応による高性能のキャパシタ及び電極触媒を開発
- ナノシートが 10^{-1} S/cmに達する世界最高の水酸化物イオン伝導性を示すことを発見

固体アルカリ燃料電池



実用化への目標

- ナノシートの2次元異方的イオン伝導機能を最大限発揮させるイオン伝導膜の設計
- 遷移金属電極触媒の最適化及び耐久性評価
- ナノシートを用いた膜・電極集合体(MEA)の創製

免疫活性化ポリマー

Immunostimulatory polymers



機能性材料研究拠点 バイオ機能分野 ナノメディシングループ

山崎 智彦 YAMAZAKI.Tomohiko@nims.go.jp

研究の背景

- アジュバント(免疫賦活剤)は抗原物質と共にワクチンに添加されており、ワクチン接種後の体内での抗体の生産を増強させる物質です。現在アジュバントとして広く使用される水酸化アルミニウムはワクチン接種部位の腫れや痛みなどの副作用を誘引した事例の報告が有り、安全かつ免疫賦活能の高いアジュバントの開発が望まれています。

研究の狙い

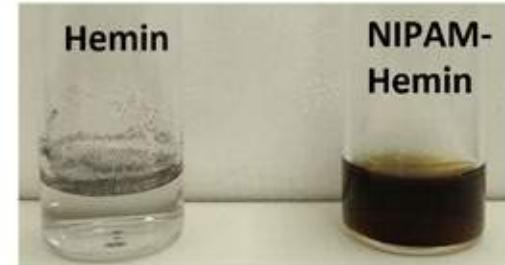
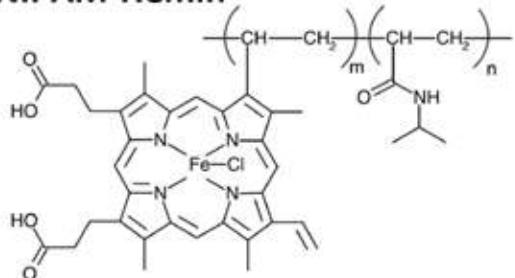
- マラリア原虫が生産するヘムの結晶であるヘモゾインがアジュバント効果を示すことが報告されています。しかしながら、天然のヘモゾインは大量生産が困難で有り、また不溶性物質であることから医薬品に利用することが難しいです。我々はヘモゾインのヘム集合構造に着目し、ヘムから構成されるポリマーの開発とアジュバントへの応用を目的として研究を進めています。

最先端研究トピックス

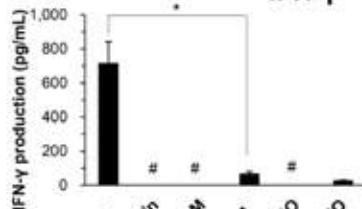
マラリア原虫のヘモゾインを模倣した免疫活性化ポリマーの開発

マラリア原虫由来のヘム結晶であるヘモゾインは抗原に対するIgG2抗体の産出を誘導し、アレルギーの原因物質であるIgE抗体の産出を抑制します。本研究ではヘモゾインのヘム集合構造と免疫賦活能に着目し、免疫活性能を有するヘミン含有ポリマーを開発しました。

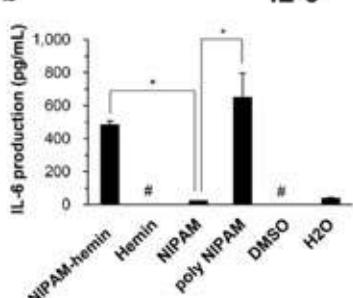
NIPAM-Hemin



a IFN- γ



b IL-6



ヘミン(Hemin)とイソプロピルアクリラミド(NIPAM)から合成したポリマーは水溶性を示し、ヒト免疫細胞において抗体産出を誘導するインターフェロン γ (IFN- γ)とインターロイキン6(IL-6)を誘導することが示されました。ヘミン含有ポリマーはアジュバントの候補分子としてワクチン開発への応用が期待できます。

応用分野と今後の展開

- ワクチニアジュバントへの応用
- 免疫活性化剤、抑制剤としての癌、免疫疾患、アレルギー治療への応用

実用化へ向けた課題

- 実験動物を用いたアジュバント効果の検証
- 体内動態の検討
- 分子レベルでの反応機構の解析
- 医療機関ならびに企業との連携

噴霧型創傷治癒粒子

Sprayable wound healing particles



機能性材料研究拠点 バイオ機能分野 バイオポリマーG
西口 昭広 NISHIGUCHI.Akihiro@nims.go.jp



機能性材料研究拠点 バイオ機能分野 バイオポリマーG
田口 哲志 TAGUCHI.Tetsushi@nims.go.jp

研究の背景

- 内視鏡技術の進歩によって、消化器ガンに対する低侵襲治療が主流となっている。
- 消化器ガン切除後の偶発症(瘢痕拘縮や狭窄)を予防するためには、創傷被覆材による組織再生が重要である。
- 現在使用されている創傷被覆材は、組織接着性や血液凝固能、デリバリー性が低く、組織治癒効果が低い。

研究の狙い

- 消化器ガン治療後に生じる瘢痕拘縮・狭窄を予防する噴霧型創傷治癒粒子を開発した。
- ゼラチンを疎水基で修飾した疎水化ゼラチンを粒子化することで、組織接着性を有する被覆材を開発した。
- 噴霧可能な本粒子は、創部で速やかに接着、ゲル化し、創傷治癒を促進すると期待される。

最先端研究トピックス

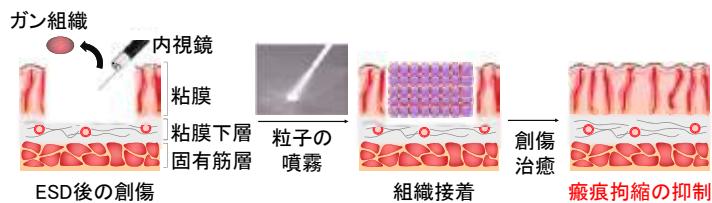
内視鏡的粘膜下層剥離術(ESD)に伴う偶発症



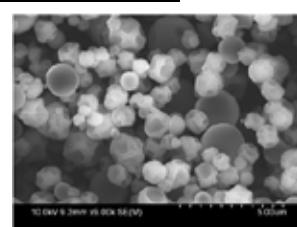
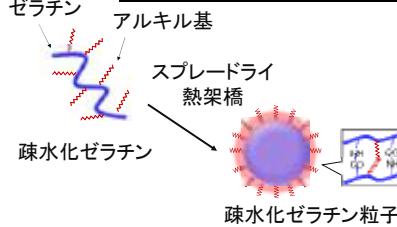
Boston Scientific社 HPより

瘢痕拘縮による狭窄が課題(3/4周ESDで90%以上)

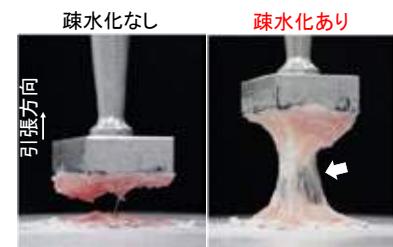
瘢痕拘縮を抑制する創傷治癒粒子による瘢痕拘縮抑制



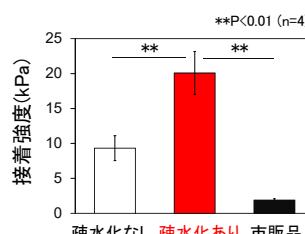
疎水化ゼラチンからなる創傷治癒粒子の創製



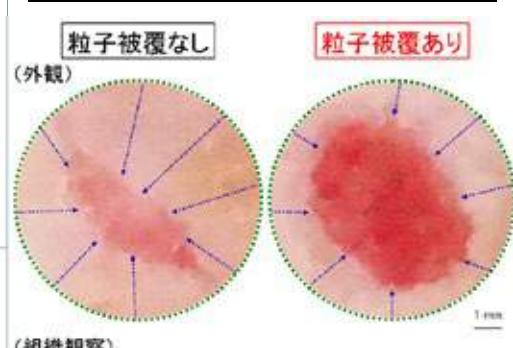
創傷治癒粒子の組織接着性



疎水化ゼラチン粒子の胃粘膜下層組織に対する高い接着性を実証



創傷治癒粒子被覆による瘢痕拘縮抑制効果



疎水化ゼラチン粒子被覆による瘢痕拘縮の抑制を実証

応用分野と今後の展開

- ESD後の創傷治癒の促進による狭窄予防
- 遅発性穿孔などの偶発症予防
- 潰瘍性大腸炎などの炎症疾患への適用

実用化へ向けた課題

- 製造プロセスの最適化
- 滅菌プロセスの確立
- デリバリーデバイスの設計・試作

生体内溶解性Mg合金のための リン酸カルシウム被膜の開発

Development of calcium phosphate coatings for biodegradable Mg alloys



構造材料研究拠点 解析・評価分野 腐食特性グループ

廣本 祥子 HIROMOTO.Sachiko@nims.go.jp

研究の背景

- Mg合金は、軽量化構造材料としてだけでなく、医療用生体内溶解性金属材料として注目されています。
- 生体内溶解性Mg合金には、骨折等の治癒までは強度を保持し、その後は安全に溶解・吸収・消失することが求められます。
- 生体内溶解性Mg合金の表面被覆には、患部の治癒に合わせた腐食速度への制御や生体機能性が求められます。

研究の狙い

- 骨ネジなどの骨固定デバイス用のMg合金には、骨の主成分と類似した組成・構造の水酸アパタイト(HAp)を被覆し、腐食速度の制御だけではなく、骨伝導性などの生体機能を発揮する被膜の開発を行っています。
- 被膜の骨との置換を目指し、より生体アパタイトに近い組成のリン酸カルシウム被膜の開発を行っています。

最先端研究トピックス

生体内溶解性Mg合金の応用が期待されている医療用デバイス

血管拡張用ステント



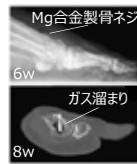
薬物含有生分解性
ポリマー被覆Mg合
金製ステント、欧
州で臨床試験。

骨ネジ、ボーンプレート、髓内釘など



骨ネジ
ボーンプレート
髓内釘

未被覆の骨ネジ、欧洲で臨床試験。



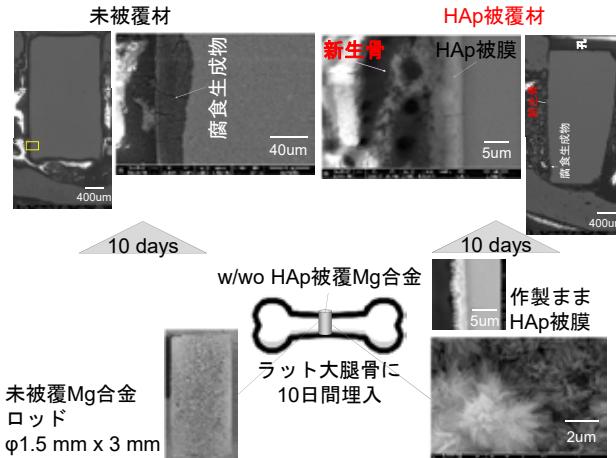
表面被覆による腐食速度制御
骨伝導性の向上→デバイス固定性向上

早期腐食: 7/39 patients

顕著な不具合無し: 6/7 patients
Plaass et al., J. Orthop. Res. Mon. (2016). DOI 10.1002/jor.23241

腐食制御および骨伝導性向上を目指したHAp被膜の開発

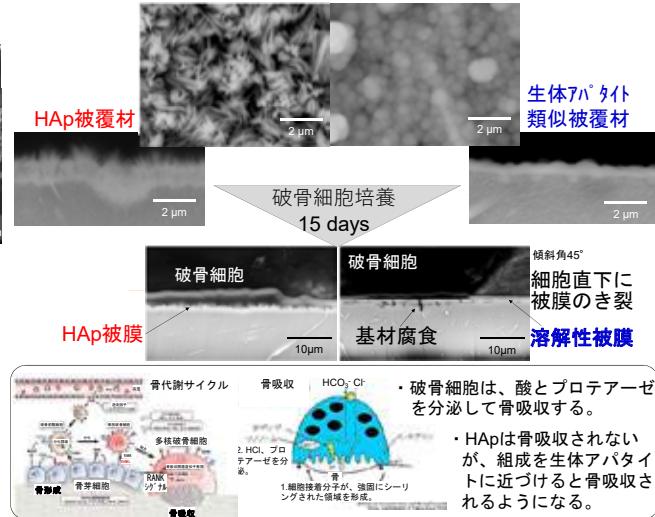
HAp被覆Mg合金のラット大腿骨埋入試験（鹿大-AIST-NIMS共同研究）



- 骨の成分であるHAp被覆により、生体骨内での腐食抑制および骨形成の促進ができた。
- HAp被覆による埋入初期の腐食抑制および骨伝導性向上は、基材Mg合金の組成に依存しなかった。

骨置換を目指した生体アパタイト類似被膜の開発

破骨細胞培養試験（被膜の生体吸収性評価）



- 生体アパタイトに近い組成の被膜を開発した。
- 破骨細胞直下で、被膜の劣化と基材Mg合金の腐食がみられた。破骨細胞による骨吸収が起こったと考えられる。
- 生体アパタイト類似被膜は骨と置換する可能性が示唆された。

まとめ

- HAp被覆はMg合金の生体内での腐食を抑制
- HAp被膜は新生骨形成を促進(皮質骨近傍、骨髄腔内)
- 生体アパタイト類似被膜は、破骨細胞により骨吸収され、骨と置換する可能性有

実用化への目標

- リン酸カルシウム被膜の組成、構造および厚さと、被膜の生体吸収—骨との置換運動の関係を明らかにし、使用部位に適した被膜を開発
- 細胞培養試験および動物試験により、被覆Mg合金の安全性、生体適合性および劣化運動を検討

Molecular interaction between blood plasma proteins and water soluble silicon quantum dot micelles



Shanmugavel Chinnathambi

Biomaterials / International Center for Young Scientists (ICYS)
CHINNATHAMBI.Shanmugavel@nims.go.jp

Background

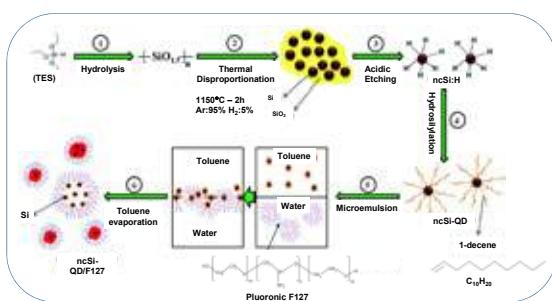
- When designed for drug delivery and imaging, nanoparticle administration likely requires intravenous injections.
- It has been established that upon contact with blood the particle surface is rapidly covered by selected blood plasma proteins, as well as other biomolecules, which form a so called "protein corona".
- The silicon nanoparticle surface can induce conformational changes in adsorbed protein molecules.

Aim

- Production of water soluble silicon quantum dots with higher quantum efficiency.
- Characterization of the quantum dot micelles by fluorescence steady/excited state spectroscopy.
- Detailed study about the blood plasma proteins interaction with silicon quantum dot micelles.

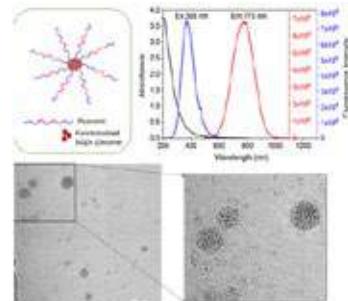
Advanced Research Topics

Schematic illustration of the synthesis of ncSi-QD/F127



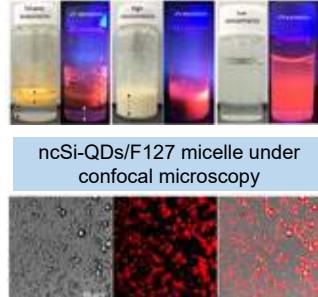
- 1-decene functionalized silicon quantum dot gives 48% quantum yield in chloroform
the surface modification with pluronic F127 reduces quantum yield up to 25% in water.

TEM images of quantum dot micelles



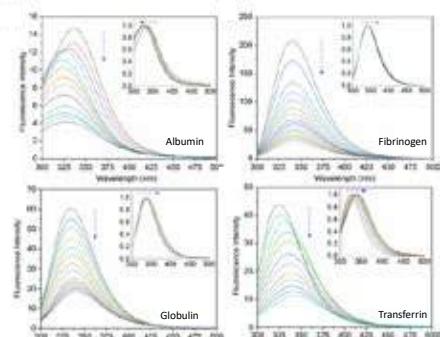
- The sizes of the quantum dot micelle below 100 nm
It will emit light near infra red upon UV light excitation

Fluorescence under UV

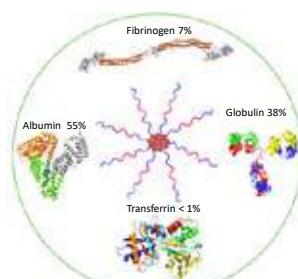


- Emission of the red color under UV light excitation.
Confocal images also support emission comes from micelles

Fluorescence quenching of Plasma proteins

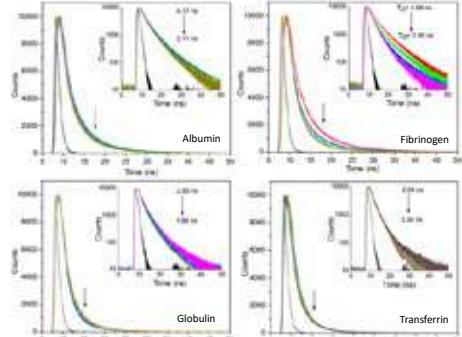


Human blood plasma protein Vs SiQDs micelles



- Schematic illustration of major blood plasma proteins interaction with quantum dot micelles.

Fluorescence lifetime of plasma proteins



- Fluorescence lifetime profile of Human serum albumin, Fibrinogen, Globulin, Transferrin in the absence and presence SiQDs/F127 micelles.

Summary

- We demonstrated a facile method to produce water dispersible Si-QDs.
- Self assembly enabled by the amphiphilic polymer of F127 is employed to encapsulate hydrosilylated Si-QDs in micelles
- We found that the interaction was stabilized via hydrogen bonding, electro static forces and hydrophobic interaction.

Research outcome

- We prepared Nano crystalline silicon quantum dots with surface modified with pluronic F127 with 25% quantum yield in water.
- Well interacted with human blood plasma proteins such as Albumin, Globulin, Fibrinogen and Transferrin.
- Fluorescence quenching and spectral peak shift indicates the strong interaction happened between proteins and micelles.

バイオテクノロジーの未来を変える 形状記憶高分子

Shape memory polymers: Game changer for future biotechnology



若手国際研究センター(ICYS)

宇都 甲一郎 UTO.Koichiro@nims.go.jp

- 国民医療費は国家予算の4割以上を占めており、国民の生活を常に圧迫している
- 医療機器の国内市場規模は約3兆円にも上る一方で、年間1兆円の輸入赤字となっている
- 上記の問題点を開拓するためには、体内・体外で効果的に機能する日本発のスマート医療材料の開発が不可欠
- ナノレベルでの分子・材料設計に基づき、多様な医療ニーズに対応できる未来指向の医療材料の開発
- 体の中で硬さが変化する‘超柔軟性’生分解性高分子材料の開発
- 体の中で形を変化させる‘形状記憶’生分解性高分子材料の開発

最先端研究トピックス

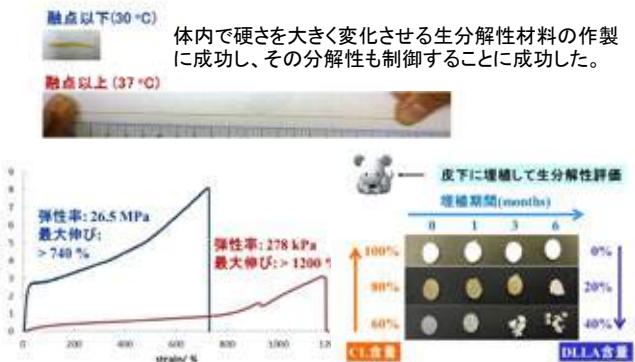
生理学的条件下において物性(弾性や表面形状)を大きく変化させる新規な生分解性材料を開発した。

-ポリカプロラクトン(PCL)とD,L-ラクチドとの共重合体(P(CL-co-DLLA))-

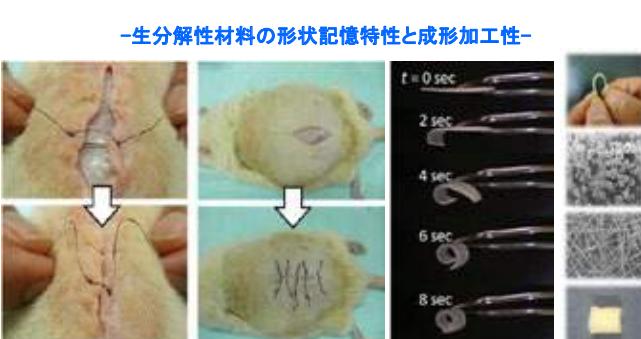


軟組織や可変部位にも適用可能な超柔軟性と形状記憶特性を併せ持つ材料の可能性を検討した。

-材料の力学的特性と生分解性評価-



分岐構造や鎖長を精密に制御したPCLやP(CL-co-DLLA)を化学的に架橋することで、温度変化により結晶状態を変化させる生分解性材料の作製に成功した。



生体環境下で駆動する形状記憶材料は、機能性繊維や三次元形状を変化可能な足場材料としての応用が可能であり、優れた成型加工性を有していた。

まとめ

- 生体環境に応答して駆動する生分解性材料の開発に成功 → 目的に応じて転移温度や分解期間を調節可能
- 生体内で超柔軟性や形状記憶性を有する生分解性材料の開発に成功

実用化への目標

- 力学特性の向上による応用の拡大 (現時点では軟組織に限定的)
- 動物実験による効果・性能の検証 (体内における現象の評価)
- 実用化に向けた臨床研究の開始 (医師・医学部との連携強化)

湿潤を測り分けるモイスチャーセンサ

Moisture Sensor to distinguish between wet and moist



機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター

川喜多 仁 KAWAKITA.Jin@nims.go.jp

研究の背景

- カビやサビ、曇りなどを引き起こす結露の検知では、湿潤(高湿度下における水分)の測り分けが重要
- 従来の湿度計・結露計では微小な水の存在を検知することは不可能
- ナノ/マイクロサイズの水滴を高精度・高感度・高速で検出する小型センサを開発

研究の狙い

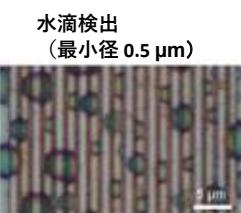
- 微小な水滴を検出: 最小径0.5ミクロン <湿度計では不可能／結露計よりも100倍以上高精度>
- 高速応答: 0.02秒以内 <湿度計よりも10倍以上高速応答>
- センサチップ、計測デバイス、データ収集システム: 提供可能

最先端研究トピックス

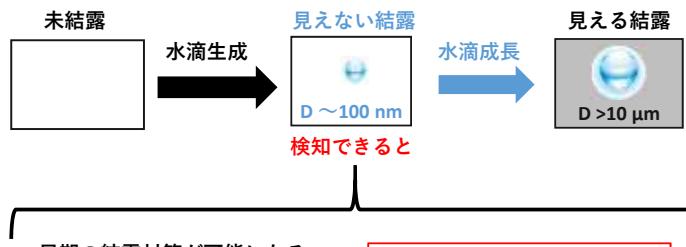
湿潤の測り分け



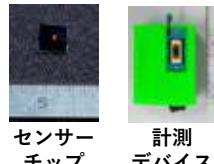
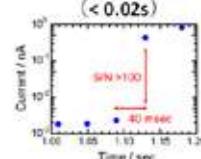
モイスチャーセンサ



結露によって引き起こされる



高速応答
(< 0.02s)



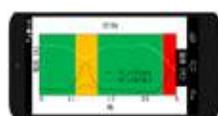
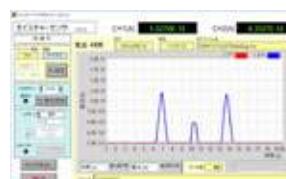
早期の結露対策が可能になる

- 除湿
- 昇温
- 換気／送風
- 拭取り
- etc

メリット

- ✓常時曇らない→視界確保
- ✓常時カビない→衛生向上
- ✓常時サビない→品質向上
- ✓結露対策に要するエネルギーが少ない→省エネ

データ収集用PCソフトウェア & WEBアプリ



評価キット
提供可能

② 湿潤(高湿度下の水の存在)の測り分けが重要

③ 既存の湿度計・結露計では、微小な水を検知できない

応用分野と今後の展開

- インフラ・モビリティ・ハウス／オフィス・ロジスティクス・アグリ・美容・衛生・医療・食料・繊維・紙・プラスチック
- モイスチャーセンサのネットワーク(IoT)化

実用化へ向けた課題

- アンメットニーズのさらなる開拓
- 用途に応じた結露判定アルゴリズム
- センサチップ・計測デバイスのカスタマイズ

超高感度磁気センサの開発

Ultra-high sensitive magnetic sensors



磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性材料グループ / 機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター

中谷 友也

NAKATANI.Tomoya@nims.go.jp

研究の背景

- データストレージのためエネルギー消費とコストの削減にはハードディスクの記録密度増大が必要
- 様々なモノの磁気情報をセンシングし有効活用するIoT社会(Society 5.0)のために磁気センサの特性改善が必要
- 人体の神経活動(特に脳)の磁気センシングにより医療利用やBrain-machine Interfaceへの応用が拓ける

研究の狙い

- 磁気抵抗センサ素子の特性改善のための材料研究、メカニズム解明
- 記録密度2 Tbit/in²を大きく超える次世代ハードディスクの再生ヘッドセンサ技術を開発
- 生体から発生するピコテラヘルツの超微弱磁場を測定できる低ノイズ・高感度磁気抵抗センサの実現

最先端研究トピックス

超高感度磁気センサ

- 微小な空間分解能(10nm程度)
(磁場の大きさはmT以上)
- 微弱な磁場を検出(pT程度)
(必要空間分解能はmm程度)

巨大磁気抵抗(GMR)およびトンネル磁気抵抗(TMR)素子の材料改善により、磁気センサの高感度化を目指す。



スペーサー層
貴金属、半導体、金属-酸化物ナコンポジット

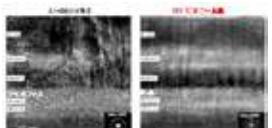
生体磁場センサへの展開

ハードディスク再生ヘッドセンサ



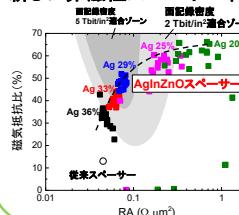
- センササイズ: 20-30 nm
- センサ膜の面積 × 抵抗(RA)の低減+磁気抵抗比の増大が必要。
- 現行のTMRセンサにかわる、面直電流巨大磁気抵抗(CPP-GMR)素子の開発。

低温熱処理で高スピン分極率を実現



Co₂(Mn_{0.6}Fe_{0.4})Geの結晶化により、工業プロセスに適合した多結晶、低温(300 °C)熱処理で、高いCPP-GMRおよびスピン分極率~80%を実現。

新しい非磁性スペーサー材料の開発



- 従来のCuやAgにかわるAgInZnO非磁性スペーサーを開発。金属と酸化物のナノコンポジット構造。
- 飛躍的なCPP-GMR比の改善。
- 磁気記録の究極ともいえる、5 Tbit/in²(現行の4倍)の記録密度へ対応。

磁気抵抗センサのキーマテリアル

完全スピン分極電流
トンネルバリア
MgO, MgAl₂O₄

生体磁場センサへの展開

Society 5.0の一侧面
(内閣府ウェブサイト)



NIMSが培ってきた材料・素子技術

- TMR, GMR特性の改善、ノイズの低減
- センサ実装、回路技術との融合

pT級感度は可能か?

- もし、以下の性能を実現すれば
TMR = 400% at V_{th} = 0.5 V
→ 出力ΔV = 2 V
動作磁場レンジ 0.5 mT(軟磁性材料)
フラックスコンセンターデザイン: 50
→ 感度: 200,000 V/T
ノイズを熱ノイズレベルまで低減: 10 nV/Hz^{0.5}
→ 磁場感度: 0.05 pT/Hz^{0.5}
pT以下の超感度も不可能ではない!



- NIMS横断型プロジェクト
- 平成30年度スタート
- 産業界との連携により、実用化を目指す。

応用分野と今後の展開

- ハードディスク再生ヘッドセンサ
- 小型・安価・室温動作・ウェアラブルな生体磁気センサ
- 産業用、車載用磁気センサへの展開

実用化へ向けた課題

- 再生ヘッドセンサ: より現実的なセンサ素子構造における特性実証
- 生体磁気センサ: MR特性の改善、ノイズ低減のための系統的研究
- 産業界との連携によるニーズ把握

高感度磁気センサと非破壊評価の研究

High-sensitivity magnetic sensor and its application for nondestructive evaluation



何 東風 (Dongfeng He)

Research Center for Structural Materials / Bonding and Manufacturing Field / Integrated Smart Materials Group
He.dongfeng@nims.go.jp

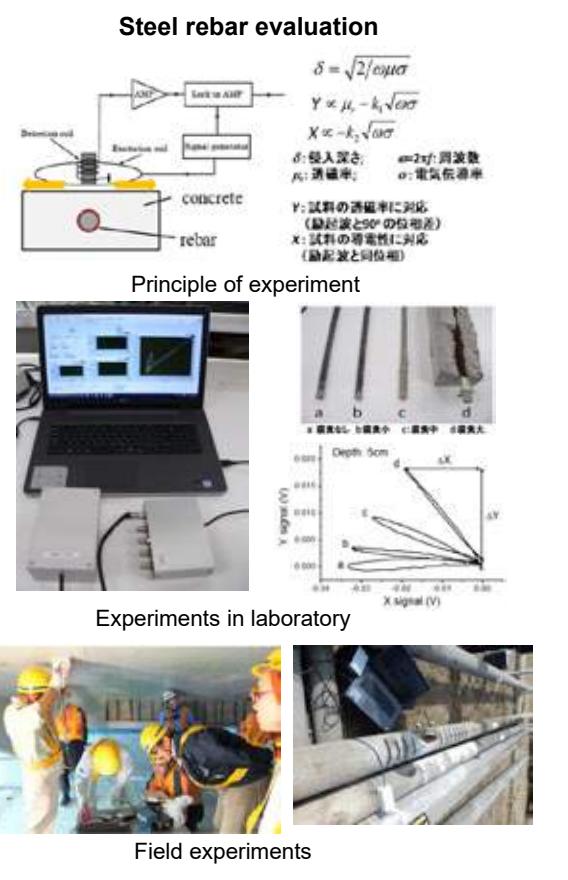
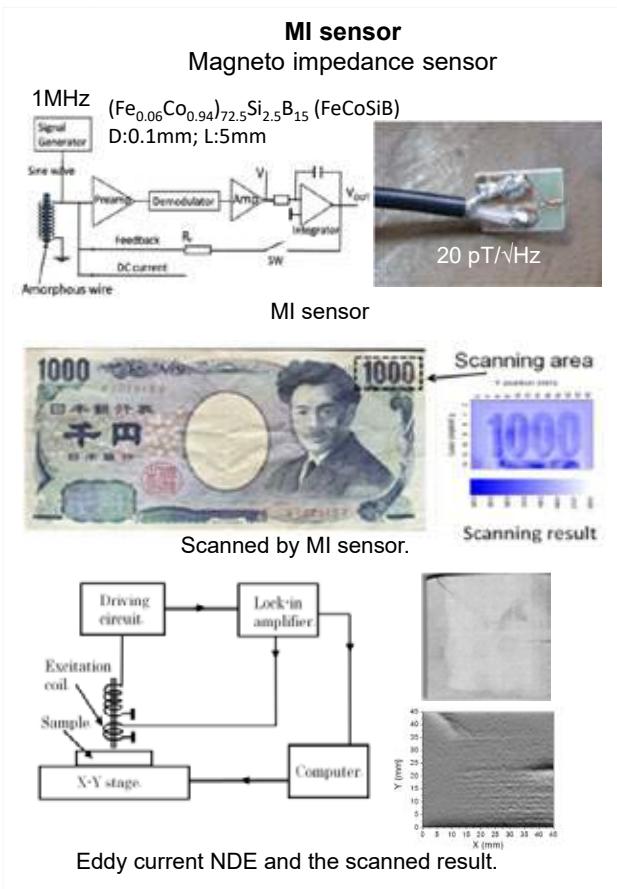
Background

- High sensitive magnetic sensors, such as SQUID, AMR, MI have applications in many fields: NDE, biosensor, geophysics, communication, automobile, aerospace.
- For the nondestructive evaluation, high sensitive magnetic sensor is needed to detect small defect.
- Electromagnetic nondestructive evaluation is an effective method for safety evaluation of infrastructure.

Aim

- Improving the sensitivity of magnetic sensors.
- Developing application systems of magnetic sensors.
- Corrosion evaluation of steel rebar in concrete.

Advanced Research Topics



Summary

- High sensitive MI magnetic sensor were developed.
- Using the sensor, high sensitive eddy-current NDE systems was developed.
- Electromagnetic method was developed to evaluate the corrosion of steel rebar.

Research outcome

- Commercializing the high sensitive magnetic sensor.
- Commercializing the electromagnetic NDE system for the evaluation of steel rebar.

MSS嗅覚センサと機械学習の融合により ニオイ指標の定量推定に成功

Quantitative estimation of specific information on a smell by the combination of MSS olfactory sensor and machine learning

国際ナノアーキテクニクス研究拠点量子物性シミュレーションG
情報統合型物質・材料研究拠点データ科学G

田村 亮 TAMURA.Ryo@nims.go.jp

機能性材料研究拠点センサ・アクチュエータ研究開発センター 嗅覚センサG
国際ナノアーキテクニクス研究拠点ナノメカニカルセンシングG

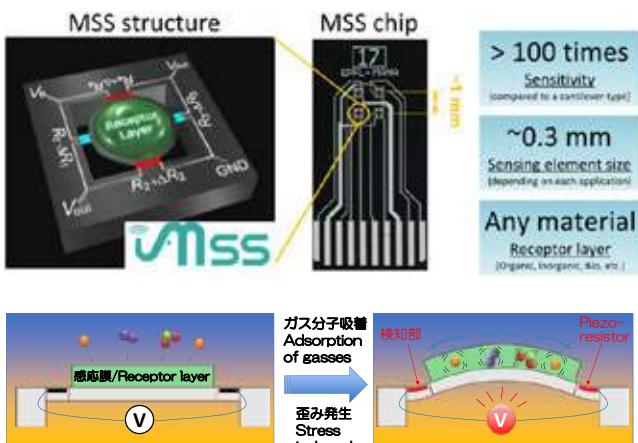
柴 弘太 SHIBA.Kota@nims.go.jp

- 「ニオイ」は時に数千もの化合物からなる非常に複雑な混合気体である。
- 現状では、構成成分や濃度などニオイが有する特定の情報を定量化するには、大型分析装置が必須である。
- 本研究では、種々の機能性感応材料を塗布した超小型・超高感度センサ(MSS嗅覚センサ)と機械学習を融合し、ニオイから特定の情報を手軽に数値化する新たな手法を開発した。

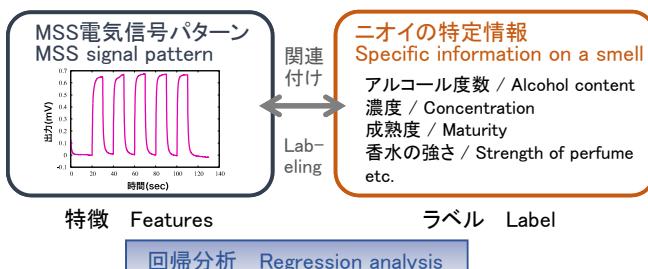
- ニオイ分子を吸着する様々な機能性感応材料をMSSに塗布し、試料のニオイを吹きかけ、電気信号のパターンを収集する。
- 機械学習により、電気信号パターンからニオイの特定情報を推定する予測モデルを構築する。
- 「お酒のニオイに基づくアルコール度数推定」、「ニオイを利用した混合溶液の各成分濃度推定」が行えることを明らかにする。

最先端研究トピックス

MSS嗅覚センサ

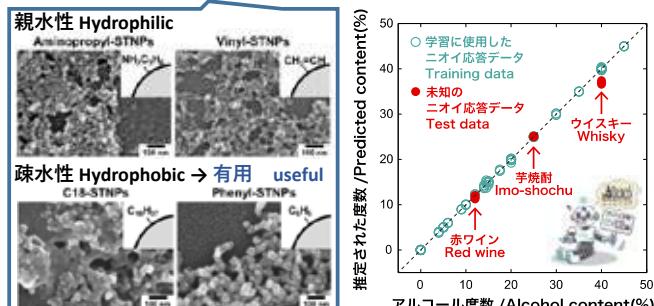


MSS嗅覚センサと機械学習の融合



ニオイ指標の定量推定

- お酒のニオイに基づくアルコール度数推定
(Shiba, Tamura, Imamura, Yoshikawa)



- ニオイを利用した混合溶液の各成分濃度推定 (Shiba, Tamura, et al.)

濃度 Concentration	推定濃度 Predicted concentration		
	水 Water	エタノール Ethanol	メタノール Methylol
1 60 0 40	66.18±5.07	0.79±0.06	34.00±4.23
2 40 60 0	36.55±2.99	55.74±3.47	7.69±3.92
3 0 40 60	2.34±1.30	37.99±1.29	58.65±1.42

まとめ

- MSS嗅覚センサと機械学習を組み合わせることで、「お酒のニオイに基づくアルコール度数推定」、「ニオイを利用した混合溶液の各成分濃度推定」を実証
- 本技術により、業界標準となるIoT嗅覚センサの開発が加速
- 応用先: 食品、農産物、化粧品、医療、環境、犯罪捜査など、ニオイが関連する全ての分野

実用化への目標

- アプリケーションごとに最適な機能性感応材料の合成
- 目的に応じた機械学習手法の開発
- MSSフォーラム(<https://mss-forum.com/>)

無機・有機・生体ナノ材料開発のためのナノ物性計測装置

Nanoscale characterization methods and instruments for developing inorganic/organic/biological nanomaterials



国際ナノアーキテクニクス研究拠点
ナノシステム分野 ナノ機能集積G
新ヶ谷 義隆 SHINGAYA.Yoshitaka@nims.go.jp



国際ナノアーキテクニクス研究拠点
ナノシステム分野 ナノ機能集積G
中山 知信 NAKAYAMA.Tomonobu@nims.go.jp

研究の背景

- 次世代の電子デバイス、高機能・高感度センサの実現に向けた多種多様なナノ材料の活用検討
- ナノワイヤー、ナノシートなど、多くのナノ材料の個々の物性計測は、未だに困難

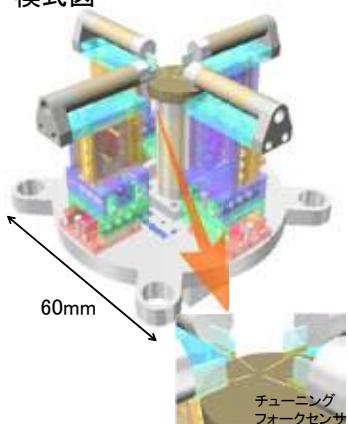
研究の狙い

- ナノ材料の電気物性を蒸着電極なしで直接計測できる4探針走査プローブ顕微鏡の開発
- ナノワイヤ、ナノシートなどのナノ材料の電気特性を理解するため、高空間分解能、非侵襲で計測
- 無機・有機・生体系ナノ材料を、真空中・大気中・溶液中など多様な環境下で計測

最先端研究トピックス

4探針走査プローブ顕微鏡

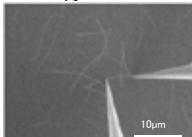
4探針原子間力顕微鏡の模式図



小型SEM



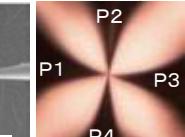
SEM像



光学顕微鏡

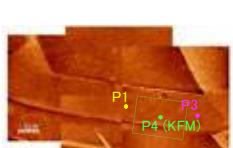


光学顕微鏡像

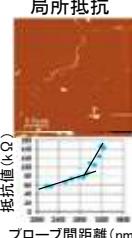


無機ナノ材料の電気計測

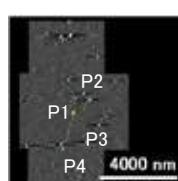
グラフェン(3探針KFM)



MWCNTの局所抵抗

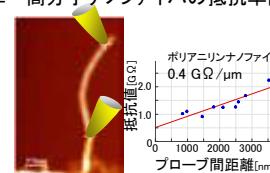


SWCNTの4探針計測

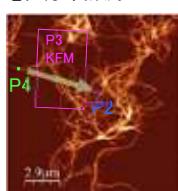


有機ナノ材料の電気計測

単一高分子ナノファイバの抵抗率計測



ナノファイバネットワークの電位分布計測



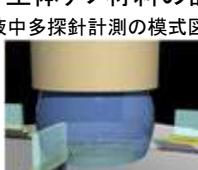
4探針統合制御システム



電位分布計測



液中多探針計測の模式図



液中プローブの光学顕微鏡像



液中プローブの共振曲線



応用分野と今後の展開

- ナノデバイス開発のためのナノ材料計測
- ナノ材料を組み合わせた新規ナノシステムの探索
- ナノバイオテクノロジー

実用化へ向けた課題

- 電気特性取得までに要する時間の短縮
- プローブ位置精密調整および電気計測の自動化
- 自己検知型水晶振動子力検出プローブアセンブリの安定供給

触媒のその場TEM観察に向けた試料ホルダーシステム

Specimen holder system for in-situ observation of catalysts



先端材料解析研究拠点 原子構造物性分野 実働環境計測技術開発グループ

橋本 純子 HASHIMOTO.Ayako@nims.go.jp

研究の背景

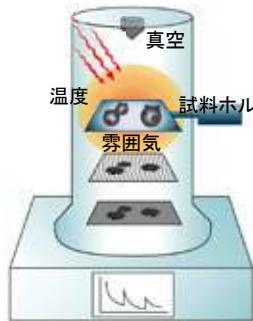
- 透過型電子顕微鏡(TEM)は原子レベルで材料の構造や挙動を観察・分析できる計測手法
- 一般的には、真空、室温での観察となり、材料が実際に使用される環境とは乖離
- 実環境での観察のニーズの高まりにより、その場TEM観察技術が発達

研究の狙い

- 試料ホルダーを用いたその場TEM観察システムの開発
- ガス雰囲気で高温下での、材料の構造や挙動のその場観察
- グラフェン上の触媒ナノ粒子のその場観察

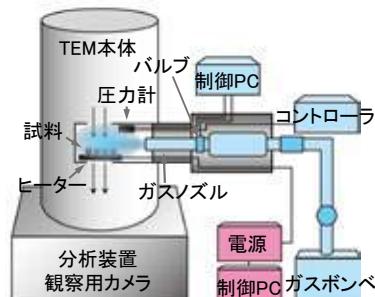
最先端研究トピックス

試料ホルダーを利用したその場観察



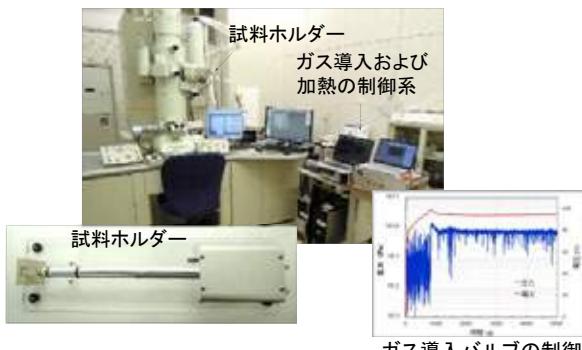
- メリット**
TEM本体とは独立
→既存のTEMを利用可能
→改良・改造が容易
→ガス層の厚さを調節可能
- デメリット**
サイズの制約

触媒材料のその場観察のための試料ホルダーシステム

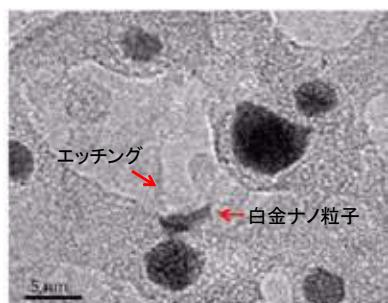


- 触媒材料**
ガス雰囲気・圧力
温度
→ガス雰囲気で
加熱ができる
観察システム

ガス雰囲気下加熱試料ホルダーおよびシステム



グラフェン上の白金ナノ粒子のその場観察



雰囲気: 0.5 Pa空気
温度: 600 °C

白金ナノ粒子
グラフェン上を移動
しながら、グラフェンを
酸化エッティング

文献

- A. Hashimoto and M. Takeguchi, Journal of Electron Microscopy, 61 (2012) 409.
- A. Hashimoto, M. Takeguchi, 18th International Microscopy Congress, September, 2014, Prague, Czechoslovakia, proceeding IT-6-P, 1815.

まとめ

- 触媒のその場TEM観察のための試料ホルダーシステムの開発
- ガス雰囲気中高温下での触媒ナノ粒子の挙動観察
(グラフェン上の触媒ナノ粒子)

実用化への目標

- 制御系の改良による試料ホルダーシステムの安定化
(高分解能観察、EELS分析への期待)
- 環境・エネルギー材料などのその場観察への応用

断面SPMによる実デバイス評価技術

Characterization of actual devices using cross-sectional scanning probe microscopy



先端材料解析研究拠点 極限計測分野 表面物性計測G
石田暢之 ISHIDA.Nobuyuki@nims.go.jp



先端材料解析研究拠点 極限計測分野 表面物性計測G
増田秀樹 MASUDA.Hideki@nims.go.jp

研究の背景

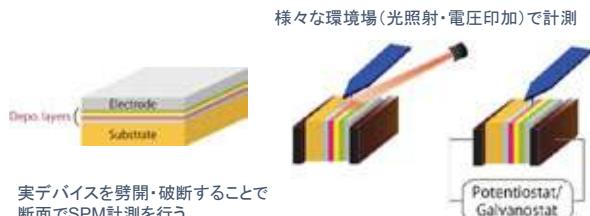
- エネルギー貯蔵・変換デバイス(太陽電池、蓄電池)のさらなる高性能化が求められている。
- そのためには、デバイス動作原理を理解し、試行錯誤に頼らないデバイス作製を行うことが重要である。
- 電子・イオンデバイスの動作原理を支配する最も重要な物性の一つはデバイス内部の電位分布である。

研究の狙い

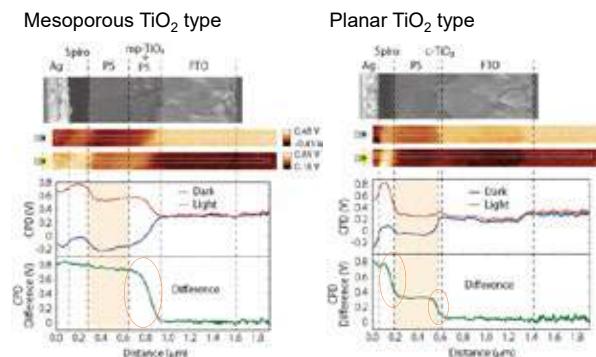
- デバイス実働環境下にてデバイス内部の電位分布を評価する手法の開発する。
- そのために、様々な環境場で動作するSPMの技術を開発し、「実働環境下」かつ「高空間分解能」で物性計測を行う。
- 得られたミクロな情報とマクロなデバイス特性を比較することで、デバイス動作原理の理解を深める。

最先端研究トピックス

断面Kelvin probe force microscopy (KPFM) 計測

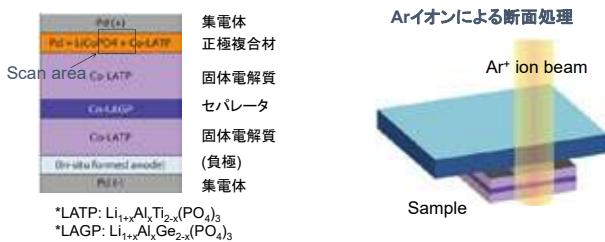


太陽電池の評価 p-n接合の空間認識技術: ペロブスカイト太陽電池への応用

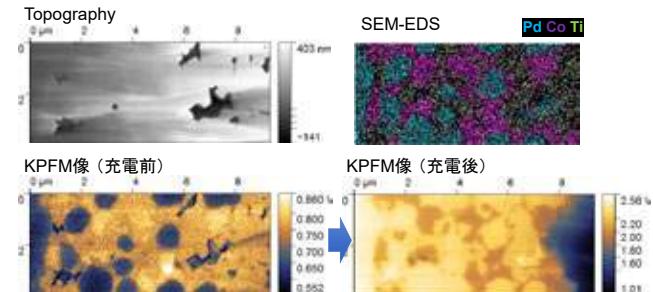


- 光照射・暗状態でそれぞれ電位分布を計測し、その差分プロファイルから電荷分離の生じる箇所を特定することに成功した。
- 得られた結果から、ペロブスカイト太陽電池はそのデバイス構造やペロブスカイト膜の組成によって動作原理が異なることがわかった。

全固体リチウムイオン電池の評価

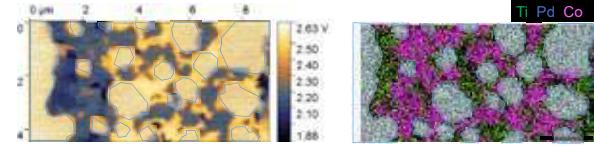


充電前後のKPFM(電位)計測



▶ 電池の充放電に伴う電位分布の変化を明瞭に観察することに成功した。

充電状態の不均一性



▶ 複合正極材料中の不均一な電気化学反応の可視化に成功した。

まとめ

- 様々な環境場で動作する断面KPFM計測システムを構築した。
- 開発したシステムを利用し、太陽電池中で生じる電荷分離の位置を評価することに成功した。
- 充放電によるリチウムイオン電池電極中の電位分布の変化を明瞭に観察することに成功した。

実用化への目標

- 開発した技術を様々なデバイスの評価へと応用し信頼性を高める。
- 得られたミクロな情報とマクロなデバイス特性を比較することでデバイス動作原理の理解を深める。
- デバイス性能向上に資する設計指針を提供する。

オペランド水素顕微鏡の開発

Development of operando microscope for hydrogen mapping



先端材料解析研究拠点 原子構造物性分野 表界面物理計測グループ

板倉 明子 ITAKURA.Akiko@nims.go.jp

- 水素フィルター・水素吸蔵合金・構造材料の水素透過の可視化のニーズがある
- 水素エネルギーをはじめとする水素社会における周辺材料の脆化現象の解明が求められている
- バリア膜や改質表面の機能診断は実験的制約が多く、信頼性確保が難しい

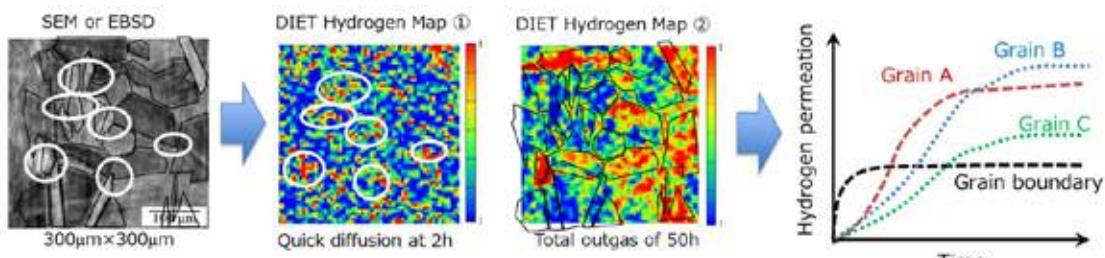
- 実時間で水素透過を可視化し、目的に合わせた水素透過量を実測、材料開発に貢献する
- 脆化起点となる水素のトラップサイトを特定し、脆化抑制研究を加速化する
- バリア膜・封止デバイス・改質表面からのガス放出を実測・積算し、信頼性を確保する

最先端研究トピックス

【装置】電子顕微鏡の中に電子遷移誘起脱離測定(Desorption Induced by Electronic Transition: DIET)機構と、水素ガスの供給ラインを付加した、オペランド水素顕微鏡を開発し、薄板形状の試料のどこを水素が透過するのかを、脱離水素の二次元画像として取得する



【計測例】SEMおよびオペランド水素顕微鏡を用いたSUS316板の水素透過の時間分解測定例、および透過解析の模式図。



DIET水素像①ではオーステナイトの水素透过時間より早く、粒界の位置に水素が現れたが、②の長時間の積算後には、粒からの透过水素に埋没する。各位置の水素量をSEM像やEBSD(Electron Back Scatter Diffraction)像と対応させ、グラフ化することで、各構造・方位での拡散係数をはじめとする水素挙動を把握することができる。

応用分野と今後の展開

- 金属材料・水素環境材料中の水素挙動の調査
- 水素制御の改質表面の欠陥確認
- 水素以外の気体や、金属以外の材料への展開

実用化へ向けた課題

- 高分解能測定用電子線源への改良(SEM機種の変更)
- 汎用性を高める/特定試料に特化した試料ホルダーを開発
- 構造解析との比較と、拡散モデルの構築、材料開発への反映

構造材料・磁気デバイスの中性子透過イメージング

Transmission neutron imaging of structural and magnetic materials



先端材料解析研究拠点 光・量子ビーム応用分野 中性子散乱グループ

間宮 広明 MAMIYA.Hiroaki@nims.go.jp

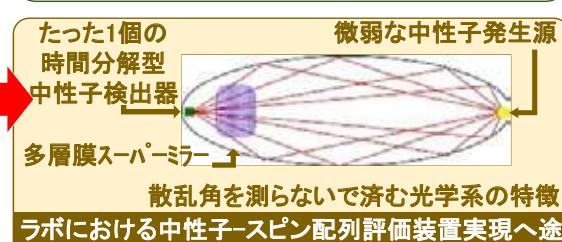
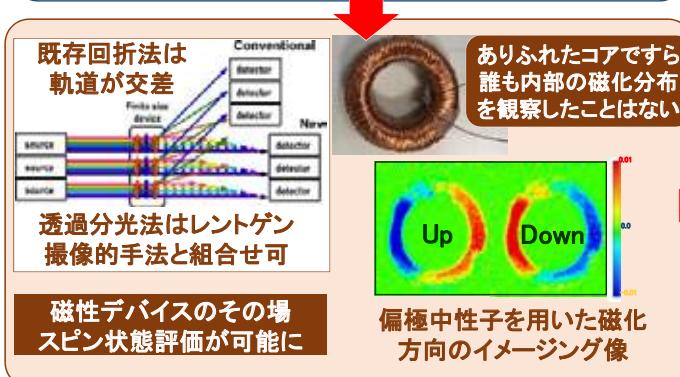
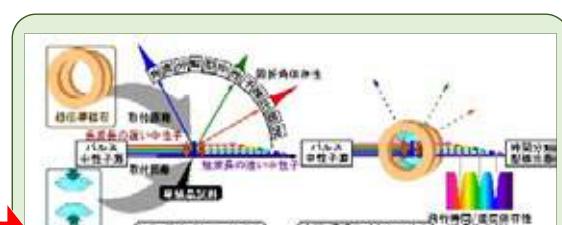
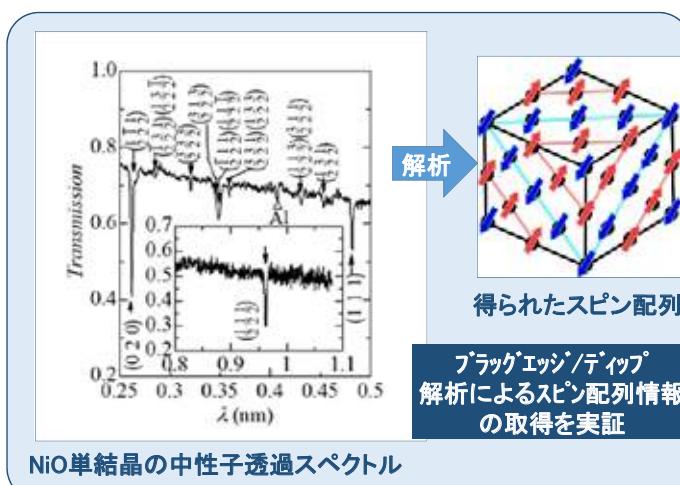
研究の背景

- 羅針盤からモーター、磁気記録に至るまで、全ての電子スピンが一方向にそろった単純な強磁性をそのまま使ってきましたが、個々のスピンやその複雑な配列の特性を複合的に活用する時代へ
- スピンの協力現象を突き詰めるために特化した中性子回折法にもこの変化に合わせた展開を

研究の狙い

- スピン集団の新現象・新機能の発見が期待される極限場環境にそくしたスピン配列評価法の開発
- 新機能の実用化サイクルを加速する超小型中性子源を用いたラボ-スピン配列の評価法の開発
- 新スピン材料の複合的なデバイス化に不可欠な磁気的状態のオペランドイメージング法の開発

最先端研究トピックス



まとめ

- 極限環境でのスピン機能探索範囲を拡大する方法
- 磁性材料開発サイクルを短縮するラボ装置で有効
- 磁気システムのスピン状態イメージングが可能に
- 鉄鋼材料の微細組織研究からも注目

実用化への目標

- 極限環境での有効性の検証
- コンパクト集光光学系のメリットの実証
- 実用デバイス・構造体での有用性の確認

溶融金属積層プロセスにおける高速現象の定量評価技術

Quantitative evaluation of fast phenomena in wire + arc additive manufacturing process



構造材料研究拠点 接合・造型分野 溶接・接合技術G
北野 萌一 KITANO.Houichi@nims.go.jp



構造材料研究拠点 接合・造型分野 溶接・接合技術G
中村 照美 NAKAMURA.Terumi@nims.go.jp

研究の背景

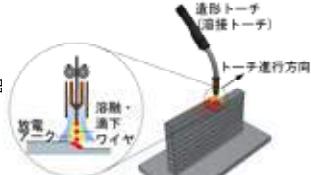
- 溶融金属積層法はアーク放電により金属ワイヤを溶融して積層、造形する三次元造形技術であり、材料コストが安価かつ高速な造形が可能なため、次世代大型金属部材製作法として注目を集めている

研究の狙い

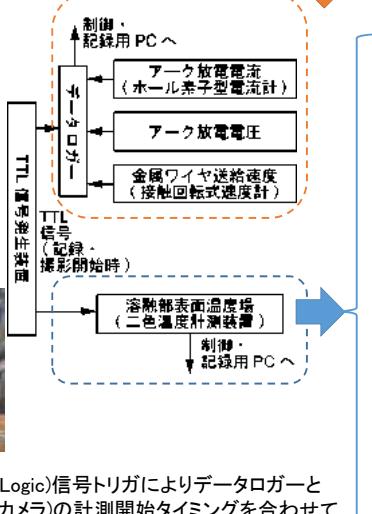
- 造形物の高性能化や積層プロセスの高度化のためにはプロセス中に造形物が受ける温度履歴やアーク放電条件(アーク放電電流、電圧、金属ワイヤ送給速度)を適切に制御する必要がある
- 積層プロセス中に造形物が受ける温度履歴、高速に変化するアーク放電条件を同期計測可能な計測システムの構築
- 造形物の組織や特性に大きな影響を及ぼす積層プロセスにおける温度履歴およびアーク放電電流、電圧、金属ワイヤ送給速度履歴の詳細理解を目指した基礎的評価

-溶融金属積層プロセス-

アーク放電により金属ワイヤを溶融積層することで、三次元形状の金属製部材を製作可能



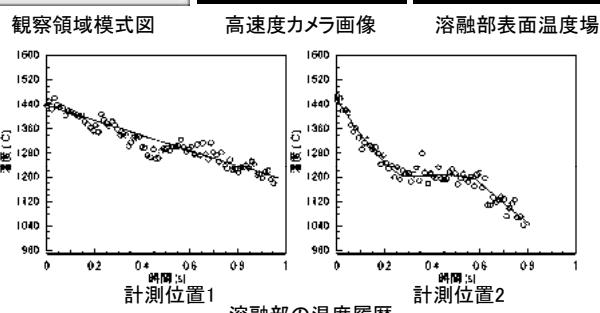
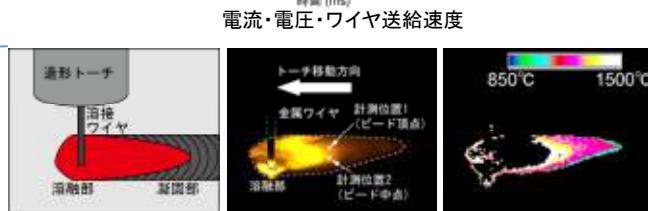
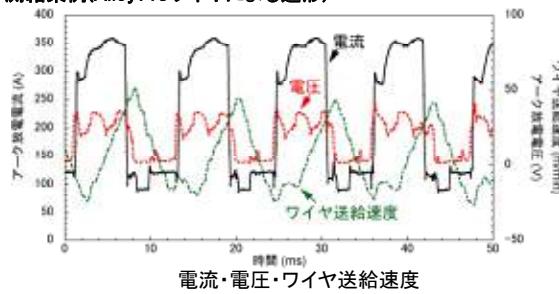
-造形装置およびアーク放電条件・温度場同期計測システム*



TTL(Transistor-to-Transistor Logic)信号トリガによりデータロガーと二色温度計測装置(高速度カメラ)の計測開始タイミングを合わせてアーク放電電流、アーク放電電圧、金属ワイヤ送給速度と溶融部表面温度場を同期して計測

*NIMS-日立金属次世代材料開発センター内設備として整備

-計測結果例(Alloy718ワイヤによる造形)-



造形物の組織や特性に大きな影響を及ぼす溶融部の温度場・温度履歴とアーク放電条件を定量的に評価することができた

まとめ

- 溶融金属積層プロセス中のアーク放電条件・温度場同期計測システムを開発した
- 造形物の組織や特性に大きな影響を及ぼす溶融金属積層プロセス中の高速現象を定量的に評価できた

実用化への目標

- 各種金属ワイヤを用いた場合や種々の造形条件におけるアーク放電条件および温度履歴の評価
- 造形物の高性能化や積層プロセス高度化のための制御法の検討
- インプロセス評価手法の確立とフィードバック機構への適用

微小球反発試験機の紹介

Introduction of small ball rebound tester



構造材料研究拠点 解析評価分野 環境疲労特性グループ

宮原 健介 MIYAHARA.Kensuke@nims.go.jp

研究の背景

- ものづくり現場では、素材・部品・製品を問わず、材料試験が必要とされている。
- 反発式の硬さ試験機は、顕微鏡不要で必要な時にすぐ試験できる現場向きの試験機である。
- 従来の反発試験機は、重いインパクトボディのために小さな試料を正確に測定できない。
- 微小な球単体をインパクトボディに利用することで、より小さな試料も測定できるようになる。
- 光による速度センサにより、硬く、軽量、均一で安価なセラミック球を使える。
- 開発した製品は、持ち運び自由であらゆる向きに試験可能であり、現場で利用しやすい。

研究の狙い

最先端研究トピックス

1. 原理

微小球を試料に衝突させ、行きと帰りの速度をそれぞれ計測する (Fig. 1)。この速度比を反発係数 $e = V_2 / V_1$ という。試料が弾性変形のみの場合、理想的には行きと帰りの速度は同じになり、 $e = 1$ となる。試料が塑性変形する場合は、くぼみの形成に費やされた分だけ微小球の運動エネルギーが失われるため、 $e < 1$ となる。試料が塑性変形しやすいほど、 e は小さくなる。

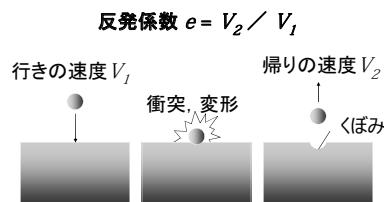


Fig. 1 原理

2. 微小球を使用することのメリット

採用している直径3mmのアルミニウム微小球は約0.06gであり、従来の反発硬さ試験機のインパクトボディの数十～数百分の一と極めて軽い (Fig. 2)。そのため試料に与える影響が小さく、従来の試験機と異なり、試料をしっかりした鋼製の台に固定しなくても正しい反発係数が得られる (Fig. 3)。

3. 製品化

複数の企業と共同で本原理に基づく製品を開発した (Fig. 4)。ポータブルで360° あらゆる向きに試験可能など、現場で利用しやすい試験機となっている。

4. 実際の試験

共同開発した企業が公開している試験の様子(動画)

・「黄銅の曲げ加工前後の硬さ試験」…加工硬化をその場ですぐ確認
<https://www.youtube.com/watch?v=TYSpBoxlls>



Fig. 2 インパクトボディ比較

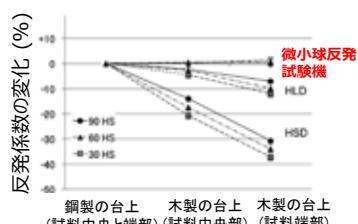


Fig. 3 試料(380g)固定の影響



Fig. 4 微小球反発試験機(製品版)

応用分野と今後の展開

- 研究開発、品質管理、事故調査
- 構造材料、食品、自動車、航空宇宙、原子力等の各分野
- 高温・低温など極限環境への展開

実用化へ向けた課題

- 既に製品化済み (2017)

簡便な高圧水素ガス環境下力学特性評価法

A simple testing method for mechanical properties evaluation under high-pressure hydrogen gas



構造材料研究拠点 解析・評価分野 材料強度基準G
小野 嘉則 ONO.Yoshinori@nims.go.jp



構造材料研究拠点 特命研究員
緒形 俊夫 OGATA.Toshio@nims.go.jp

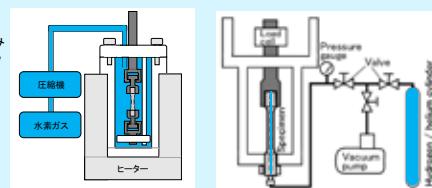
研究の背景

- 【エネルギー基本計画 / 水素基本戦略】 “水素社会”的実現のために戦略的に制度やインフラ整備を進める多様な技術開発や低コスト化を推進し、実現可能性の高い技術から社会実装
- 【水素・燃料電池戦略ロードマップ】 水素St. 整備目標 2020年度までに160箇所程度、2025年度までに320箇所程度 → 燃料電池自動車の導入支援 および St.整備費、運営費、更には水素調達コストの低減に係わる技術開発が重要
- 水素ステーション機器の低コスト化に向けた材料の耐水素性の評価
- 試験費用の低減および試験期間の短縮
- データ取得ならびに延性低下メカニズム解明のための研究加速

研究の狙い

○ 水素ステーション用材料の水素適合性の評価法

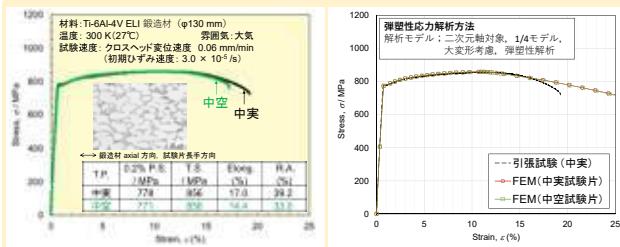
不活性ガス(or 大気)と水素ガス環境でのひずみ速度引張試験(SSRT: Slow Strain Rate Test)結果の比較



	中実試験片方式(従来法)	中空試験片方式(NIMS提案)
得られる絞り比と強度特性	ほとんど同じであるが、定量的相関を確認する必要あり	
高圧ガス容器と付帯設備	必要	不要
設備導入費	高額	従来法の5割程度
維持費	シール部 必要	ほとんど不要
試験温度範囲	-80°C~200°C	-240°C~200°C以上
使用水素量	容器容積×圧力×(300/温度(K))	約100 cc以下
試験片加工費	中空の6割程度	高額

最先端研究トピックス

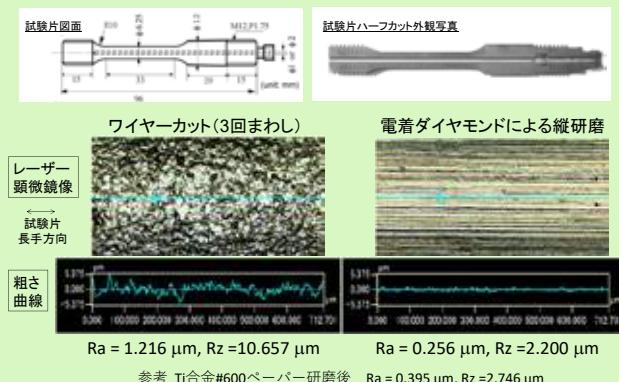
○ 中空試験片と中実試験片の応力-ひずみ線図



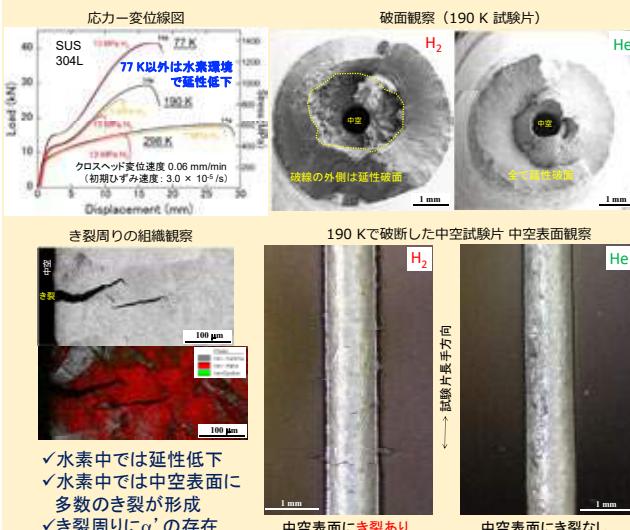
- 0.2%耐力と引張強度は中空と中実でほぼ同じ
- 伸びと絞りは中空の方が小さい
- 一様伸び(引張強さ)を超える付近まで引張試験とFEMとで良く一致
- 中空と中実の差は小さい

○ 中空試験片の内表面の仕上げ例

素材: Ti-6Al-4V ELI



○ 中空試験片を用いた低温水素ガス環境での評価例



応用分野と今後の展開

- 中空試験片を用いたSSRT法の規格化
- 中空試験片を用いた疲労試験法の確立
- 従来試験法では不可能な低温かつ水素環境での特性評価

実用化へ向けた課題

- 中実試験片データとの比較 (同じ素材・同じ試験条件)
- 特性に及ぼす中空表面粗さの影響調査
- 中空試験片の許容形状(外径・内径)の確認

纖維強化熱可塑性樹脂複合材料 ロッド/ロープの信頼性評価

Reliability evaluation system of fiber reinforced thermoplastic composite rods/ropes



構造材料研究拠点 接合・造型分野 高分子系ハイブリッド複合材料グループ

小熊 博幸 OGUMA.Hiroyuki@nims.go.jp

研究の背景

- 纖維強化プラスチック(FRP)は軽量、高強度であり、非磁性や耐食性などの特性を有する。
- FRPの適用は航空宇宙や自動車分野から土木や建築分野へと広がりつつある。
- 土木や建築分野においてはグラウンドアンカーやPrestressed concrete(PC)部材、斜張橋や吊り橋などで「緊張材」として適用することが材料の長所を最大限に活かす方法の一つであると考えられている。

研究の狙い

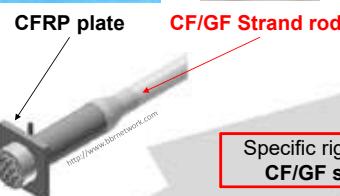
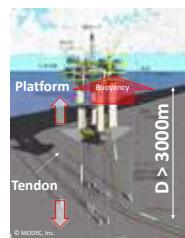
- 実験ならびに観察のデータを系統的に蓄積することにより、強度特性ならびに破壊機構の解明を行う。
- 「界面」に着目して強度特性の支配因子を明らかにした上で、複合材料の強度と信頼性の向上を目指す。
- 既存の材料では実現不可能な長大構造物の製造を高い信頼性を備えた上で可能とする。

Carbon fiber/Glass fiber rod (CABKOMA™)

- CF: Polyacrylonitrile (PAN)-based T700 (Toray Industries, Inc.)
- GF: E-class Glass (Nippon Electric Glass Co., Ltd.)
- Thermoplastic resin (Nagase Chemex Corporation)
→ Difunctional epoxy + Compound

最先端研究トピックス

Core-shell structure
CF GF

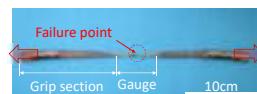
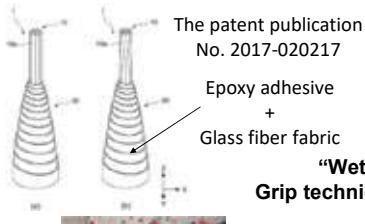


Tension leg platform

Specific rigidity, Specific strength
CF/GF strand rod >> Metal

Mechanical properties

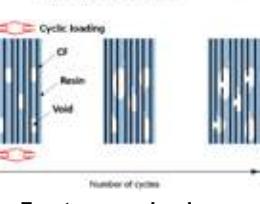
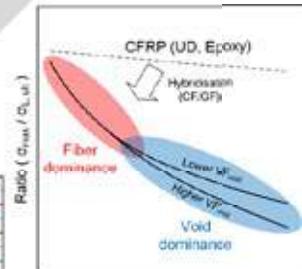
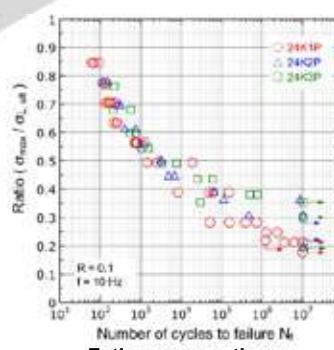
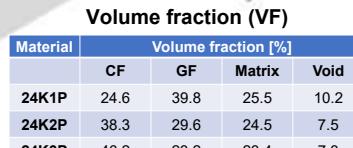
Material	The number of CF	ρ [g/cm³]	E_L [GPa]	$\sigma_{L,ult}$ [MPa]	$\epsilon_{L,ult}$ [%]
24K1P	24,000	1.76	65	1,422	2.18
24K2P	48,000	1.74	87	1,804	2.13
24K3P	72,000	1.70	91	1,837	2.08



Test specimen
Failure point
Grip section Gauge 10cm

"Wet-preg process"
Grip technique for fixing devices

Cross section of the rod
(24K3P)



まとめ

- 纖維強化熱可塑性樹脂複合材料の機械的性質を明らかにするために、強度試験(静的・疲労)ならびに観察を実施した。
- 炭素繊維の体積率の上昇に伴い、弾性率ならびに引張強さが上昇することが確認された。
- ハイブリッド化ならびに材料中の空孔が疲労特性に影響することが明らかになった。

実用化への目標

- 従来の複合材料よりも助長性、耐食性、耐摩耗性および高信頼性を備えた安価な複合材料を開発する。
- 複合材料(特に線材)の性能を最大限に引き出す定着構造体を開発する。
- 複合材料の利用における新たな設計手法(材料・構造)を提案する。

疲労破壊現象を観る -疲労挙動の自動その場観察-

Investigating fatigue fracture phenomena -Automatic in-situ fatigue observation-

構造材料研究拠点 解析・評価分野 疲労特性グループ

西川嗣彬

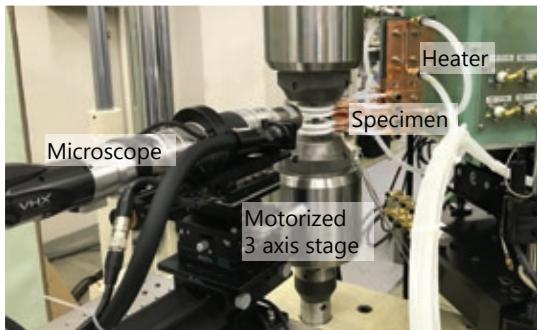
NISHIKAWA.Hideaki@nims.go.jp



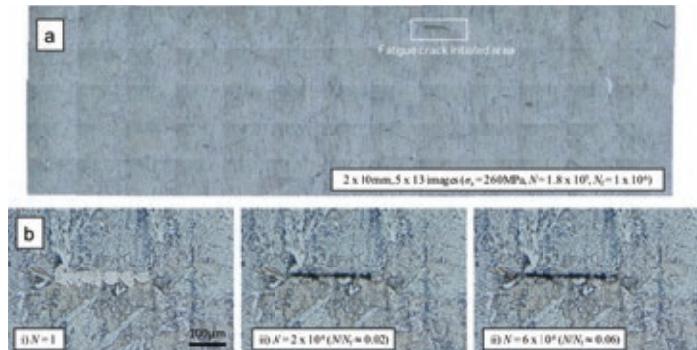
- 疲労破壊はき裂の発生と進展により起こり、材料組織の影響を受けるとされている。
- 微小疲労き裂は、材料の微視組織に敏感とされているが、微小疲労き裂と組織の関係は、未だ十分理解されていない。
- その理由の一つに、観察の難しさや煩雑さによる微小疲労き裂に関する実験データの不足が挙げられる。
- 疲労試験中、自動的、連続的にオートフォーカスでのパノラマ撮影が可能な、顕微鏡その場観察システムを構築する。
- 画像相関法を活用し、微視的な不均質変形データも連続的に収集する手法を構築する。

研究の狙い

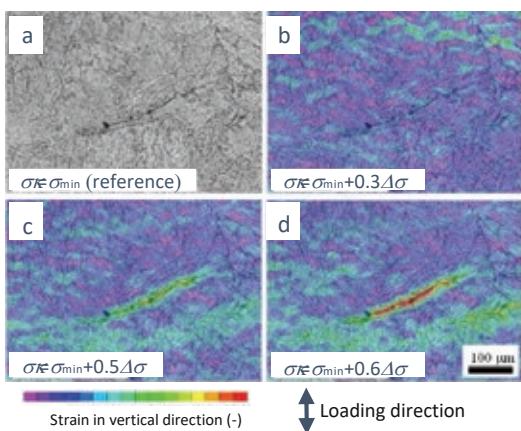
最先端研究トピックス



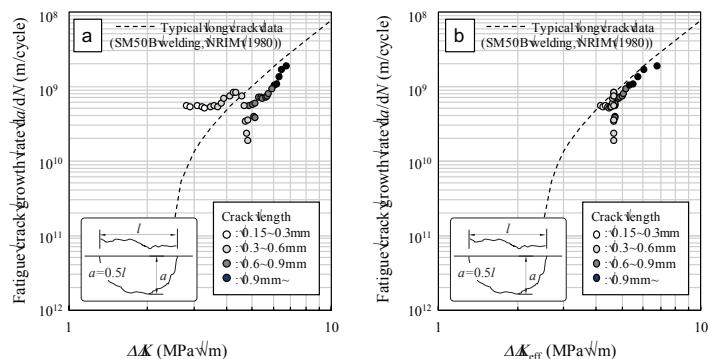
その場観察システム(オートフォーカス、三軸自動ステージ)



疲労試験中、連続的に自動取得したパノラマ画像による、微小疲労き裂発生過程の観察例(熱処理を施した低炭素鋼)



画像相関法を用いた微小疲労き裂開閉口挙動の実測



実測したき裂開閉口挙動を考慮した、微小疲労き裂進展速度の評価

まとめ

- 開発したシステムを用いることで、微小疲労き裂の発生、進展データを自動的に取得できるようになった
- 画像相関法を援用することにより、不均質なひずみやき裂開閉口といった微視的ひずみ分布の可視化が可能となった

実用化への目標

- 開発したシステムによって様々な材料の微小疲労き裂データを収集することで、組織と疲労特性の関係の明確化に繋げる
- 高精度な疲労寿命予測方法の確立と疲労強度の優れた材料の開発への貢献を目指している

レーザ積層造形Ti-6Al-4V試料の微細組織と力学特性の相関解明

Understanding the relationship between microstructure and mechanical properties of Ti-6Al-4V by selective laser melting



構造材料研究拠点 接合・造型分野 積層スマート材料グループ

草野 正大

KUSANO.Masahiro@nims.go.jp

研究の背景

- レーザ積層造形法により、チタン合金などの難加工材料の任意形状製品を成形可能
- 積層造形のチタン合金組織は、非常に微細なマルテンサイトで、高強度だが低延性
- 造形時のレーザ照射条件などによって、空隙率や金属組織が変わり、力学特性に影響

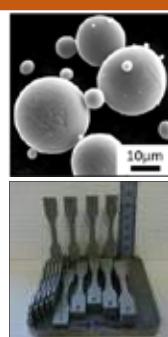
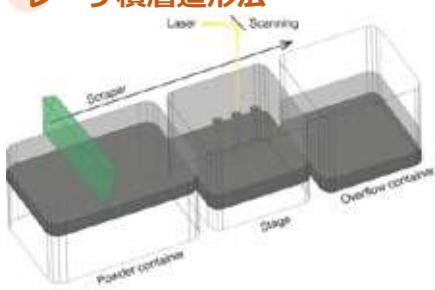
研究の狙い

- 積層造形の金属組織と力学特性の関係を、ナノ～マクロのスケールで評価
- 造形試料の観察と温度シミュレーションにより造形時の組織形成のメカニズムを解明
- 造形条件を変えることで微細組織を制御し、力学特性の最適化を目指す

最先端研究トピックス

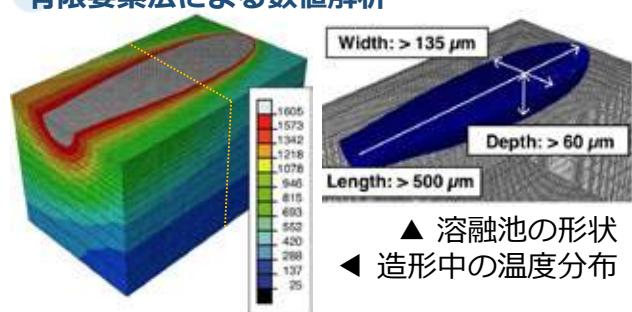
積層造形チタン合金の力学特性と微細組織

レーザ積層造形法



造形中の温度シミュレーション

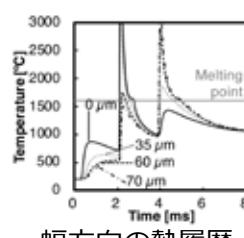
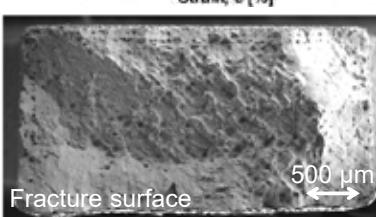
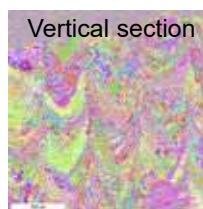
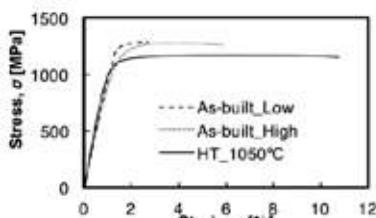
有限要素法による数値解析



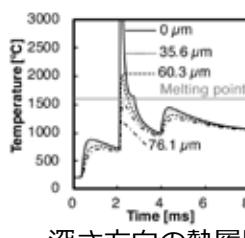
▲ 溶融池の形状

◀ 造形中の温度分布

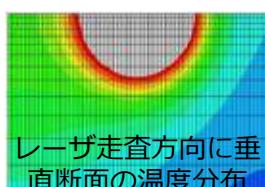
力学特性と微細組織



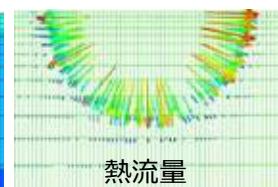
幅方向の熱履歴



深さ方向の熱履歴



レーザ走査方向に垂直断面の温度分布



熱流量

まとめ

- 微細なマルテンサイト組織を観察。レーザの走査パターンも組織に影響を与える。
- 熱解析による凝固速度や温度勾配から、結晶成長方位や微細組織形成が明らかに。

実用化への目標

- 造形条件と力学特性の関係を、造形中の熱履歴や金属組織の観点から解明する。
- 構造材料として十分な力学特性を有する積層造形材料を作る。

Investigation of the mechanical performance of 3-D laser printed auxetic lattice structures



Christopher Mercer

Research Center for Structural Materials / Bonding and Manufacturing Field / Adhesion and Surface Science Group
MERCER.Christopher@nims.go.jp

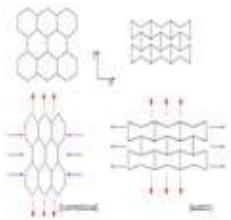
Background

- Auxetic (negative Poisson's ratio) lattice structures exhibit good energy absorption characteristics during dynamic (impact) loading
- This makes them attractive candidates for crash protection components in a variety of potential aerospace and automotive applications
- To fabricate three-dimensional auxetic lattice structures from metallic powders via 3-D laser printing; a very difficult and impractical undertaking using conventional manufacturing methods.
- To study the quasi-static and dynamic mechanical properties of the printed lattice structures under constrained and unconstrained conditions
- To ultimately develop analytical tools that enable the design of structures with optimal mechanical performance

Aim

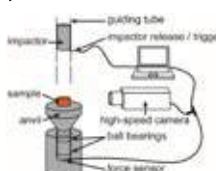
Advanced Research Topics

Auxetic materials and structures exhibit a negative Poisson's ratio and hence expand laterally when loaded in tension, as shown in the schematic below.

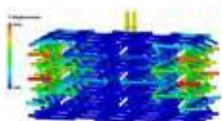


From <https://csmstructures.wikispaces.com/Auxetic+Materials>

The mechanical response of the printed structures under dynamic (impact) loading was evaluated using a drop weight rig coupled with a high-speed camera.

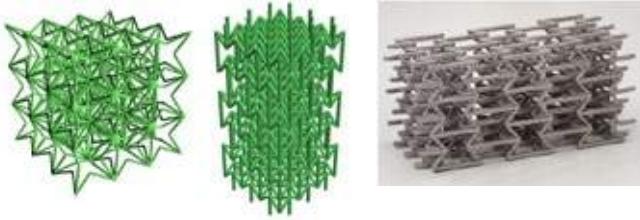


Simulations show the magnitude of displacements during impact loading.



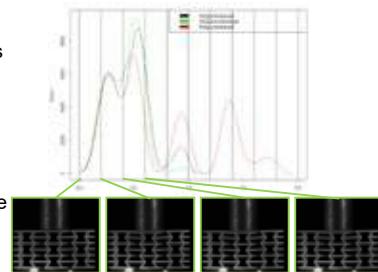
Planned future work is to examine the effects of adding constraint to the lattice. This is to simulate the effects of the surrounding structural components to which the lattice would be attached in service.

Three-dimensional auxetic lattice structures (below left) have been successfully fabricated from Ti-6Al-4V and stainless steel powders via 3-D laser printing (below right).



Force-time plots show a double peak for all testing conditions. Further research is needed to explain this phenomenon.

The printed structures exhibit marked elasticity and robust mechanical behavior during dynamic loading. The structure survived multiple impacts by a 300 g impactor.



Research was performed in collaboration with Marc Thielen, Plant Biomechanics Group, University of Freiburg, Germany

Summary

- Three-dimensional auxetic lattice structures can be fabricated successfully from both Ti-6Al-4V and stainless steel powders via 3-D laser printing
- The structures exhibit robust mechanical behavior and good energy-absorbing characteristics under dynamic (impact) loading

Research outcome

- The comprehensive understanding of the mechanical properties of 3-D auxetic lattice structures fabricated from different materials and optimized for maximum mechanical performance.
- Improved safety (impact resistance/crash protection) in a variety of aerospace and automotive applications.

腐食データおよび気象データの機械学習に基づく腐食モデルの構築

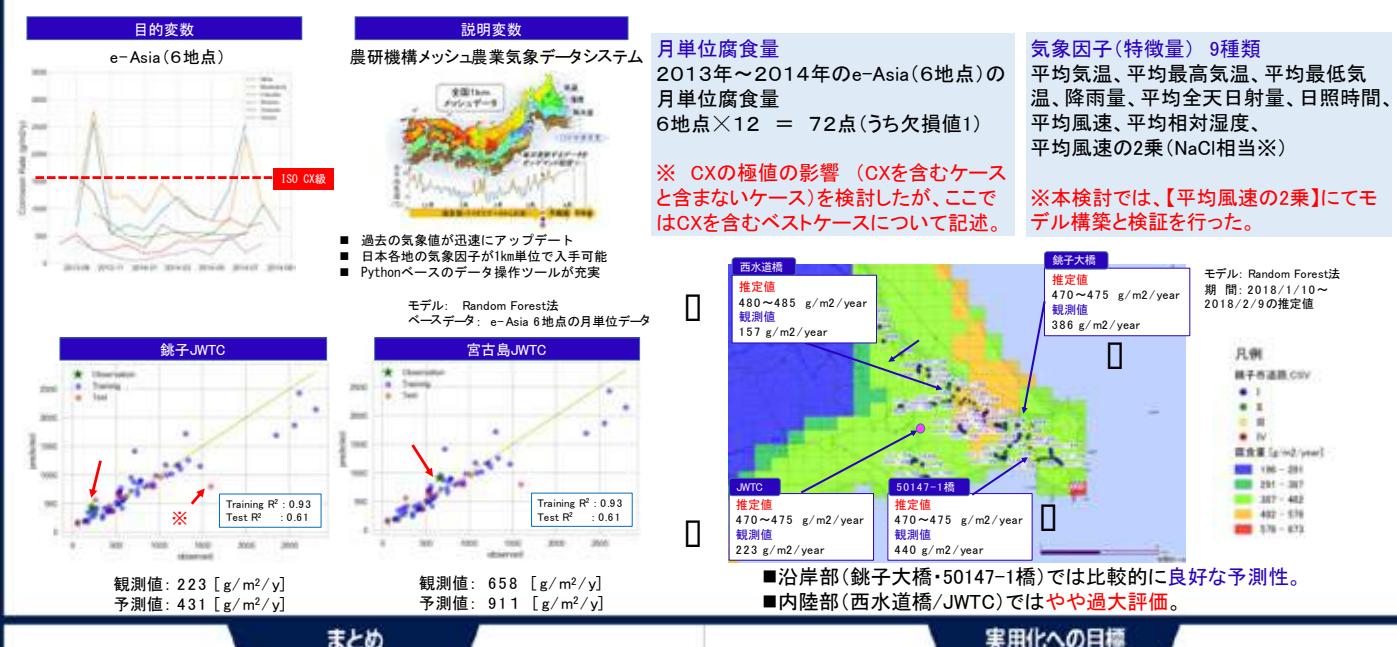
Development of corrosion model based on machine learning of corrosion data and weather data



構造材料研究拠点 解析・評価分野 腐食特性グループ

片山 英樹 KATAYAMA.Hideki@nims.go.jp

- 研究の背景**
- 日本における道路橋は725,907基あり、その内約90%の664,158基の橋梁が地方公共団体が管理している。
 - 多くが高度成長期に建設されており、今後一斉に修繕(場合により廃止)もしくは再建築の投資を実施する必要がある。
 - 約8割は遠望目視であり点検の質に課題がある。町の約5割、村の約7割で橋梁保全業務を行う土木技術者が不在。
- 研究の狙い**
- 従来ある場所の腐食環境や金属材料の耐食性を知るために、その場所で環境測定や暴露試験による重量変化測定を行う必要があったが、実施したい場所で必ずしも測定ができるとは限らない、費用や時間がかかるといった課題があった。本研究では、これらの課題を解決するため、未知な場所でも気象シミュレーションと気象モニタリングによって腐食を予測するための腐食モデルを腐食データと気象データの統合により構築することを狙いとしている。



- まとめ**
- 農研機構メッシュ農業気象データシステムによる1kmデータの収集が可能
 - Random Forestなどのアンサンブルモデルにおいて高い識別率
 - 沿岸部では比較的に良好な予測性(内陸部で過大評価)
- 実用化への目標**
- 検証のための、腐食対象の場所における気象モニタリングが必要(IoT気象センシングが有用)
 - データ数の拡充。特に高腐食量側のデータの補充
 - 【平均風速の2乗】を実際の【NaCl飛来塩】の計算値として検証が必要

環境負荷の少ない構造色塗工プロセス

Environment-friendly coating process of structural color



機能性材料研究拠点 光機能分野 コロイド結晶材料グループ

不動寺 浩 FUDOZI.Hiroshi@nims.go.jp

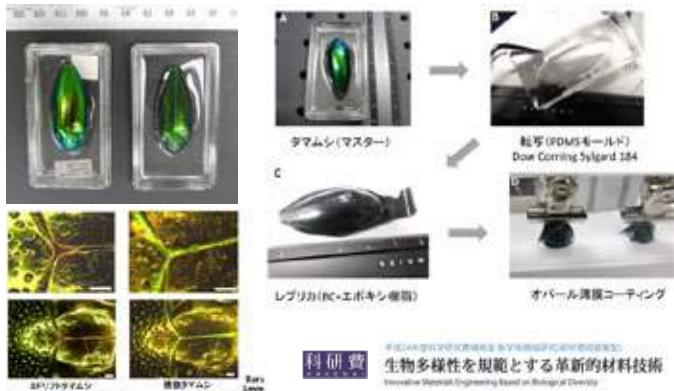
研究の背景

- タマムシ(甲虫)やモルフォ蝶は構造色と呼ばれる可視光の散乱、干渉や回折を利用した発色メカニズムを利用している。
- 粒子径の揃ったコロイド粒子を自己集積プロセスで3次元規則配列することで人工的に構造色を発色させることができる。
- 生物模倣によりariふれた原材料で少ないエネルギー消費で実現するスマート材料や製造法が期待されている。

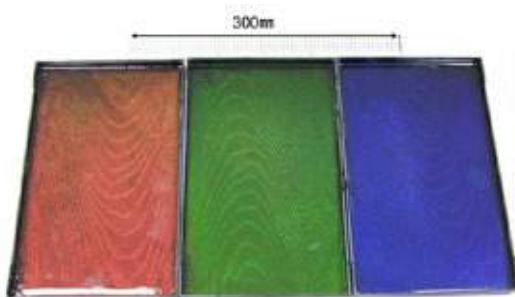
研究の狙い

- 対象物表面に3次元規則配列したコロイド結晶薄膜をコーティングする塗工プロセスを開発する。
- 顔料や色素によらない構造色による新しい“発色メカニズム”。溶媒が水系で室温に近い低環境負荷が期待される。
- 高い反射率による金属光沢調の発色など構造色特有の光学特性を利用した加飾技術の可能性を探求する。

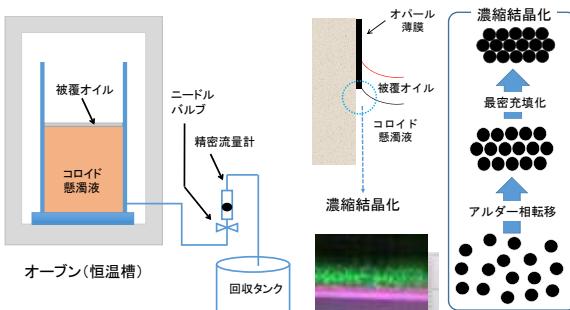
最先端研究トピックス



新学術領域“生物規範工学(H24-29)”で開発された摸倣タマムシの作製方法



コロイド粒子の粒子径を適切に選択で多様な発色
(メラニン樹脂製黒色トレイに赤、緑、青の塗工)



オイル被覆法による濃縮結晶化によるオパール薄膜の成膜過程

滑らかな曲面(カーシェーブ)、湾曲した凹凸表面(お腕)への塗工

応用分野と今後の展開

- 工芸品など中小製造メーカー向けの低環境負荷の塗工技術
- 工業製品の新しい加飾プロセスとして企業への技術移転
- シリカ粒子への代替(マイクロプラスチック問題への対応)

実用化へ向けた課題

- 製造プロセスの量産化・高速化(製造コストの低減)
- 塗工オパール薄膜の耐候性、耐摩耗性など耐久性向上
- 塗工対象の大型化(コロイド懸濁液の合成量のスケールアップ)

高酸素腐食促進試験による モルタル埋設鉄筋の腐食プロセスの検討

**Study on corrosion process of
commercial reinforcing steel in mortar
using hyperbaric-oxygen accelerated corrosion test**



若手国際研究センター(ICYS)

土井 康太郎 DOI.Kotaro@nims.go.jp

研究の背景

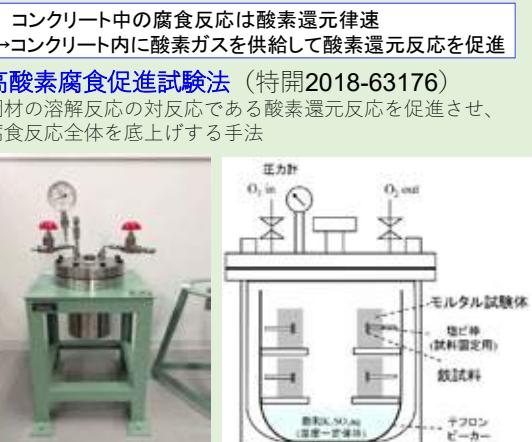
- 鉄筋コンクリートの劣化は、主に埋設された鉄筋の腐食によりコンクリートの内部応力が増加し、ひび割れや剥離が生じることにより進行する。しかし、鉄筋腐食に起因するコンクリートの劣化メカニズムの解明はいまだ完全にはなされていない。その理由として、コンクリート内の鉄筋腐食が非常にゆっくりと進行するため、実験室環境で腐食、特に鉄さび生成の再現が困難であることが挙げられる。これまで、多くの腐食加速試験法が提案されてきたが、実環境の腐食を正確に再現できているとは言い難く、新しいアプローチによる新腐食加速試験法の開発が望まれている。

研究の狙い

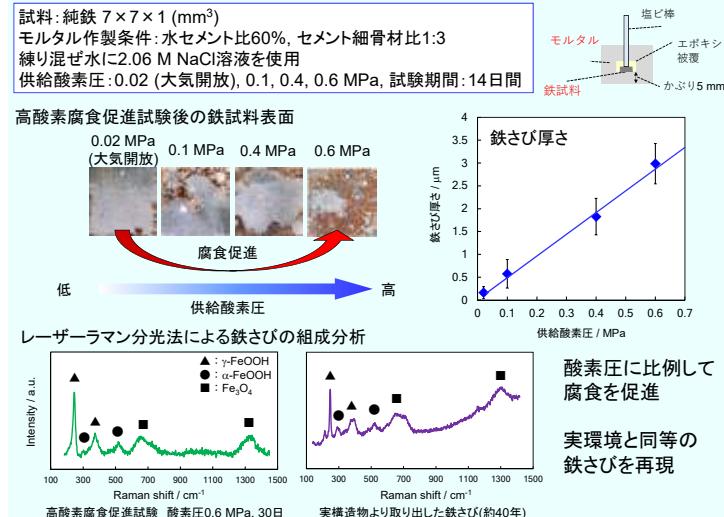
- コンクリート中鉄筋腐食機構解明のための新腐食加速試験法の開発(実環境と同様の鉄さびを迅速に再現)
- 新腐食加速試験法における供給酸素圧と腐食の関係の検討
- 新腐食加速試験法を用いた、市販の黒皮付き鉄筋のモルタル中での腐食プロセスの検討

最先端研究トピックス

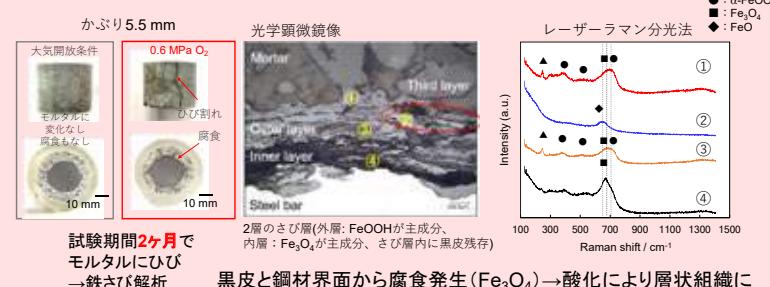
新腐食加速試験法の開発



モルタルに埋設した鉄試料の腐食促進



市販の黒皮付き鉄筋のモルタル中での腐食プロセスの検討



まとめ

- コンクリート中の鉄筋腐食を加速させる手法として、鉄筋表面の酸素還元反応を促進し、腐食反応全体を底上げさせる高酸素腐食促進試験法を開発した。
- 酸素供給圧0.6 MPaまでは、酸素圧に比例して鉄の腐食は促進された。また、生成した鉄さびの組成は実環境で生成した鉄さびの組成と同様であった。
- 高酸素腐食促進試験法が、市販の鉄筋を用いて実環境に近い厚いかぶりに埋設した場合でも、腐食促進に有効であることを示した。

実用化への目標

- より詳細な試験条件の検討(腐食に最適な酸素圧や塩化物イオン量)
- 他の促進試験(乾湿繰返しや中性化)との融合、より効率的な腐食促進
- 様々な環境における腐食プロセスの検討(実環境および実験室環境)

超耐熱材料の新展開 -自己治癒セラミックスの開発-

New challenge for high-temperattrue materials -Development of self-healing ceramics-



構造材料研究拠点 設計・創造分野 超耐熱材料グループ

長田 俊郎

OSADA.Toshio@nims.go.jp

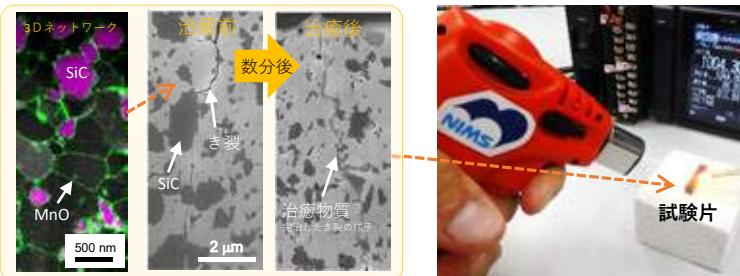
- 航空機市場への挑戦のためには、CO₂排出を大幅に低減するエンジン開発とその要素技術開発が必須。
- タービン翼・ディスクの軽量・高温・無冷却化に資する純国産超耐熱材料の提案を通じた、国内メーカー支援が必要。
- NIMSが今後も世界をリードしていくために、Ni基超合金開発に加え、新たな超耐熱材料を開拓していくことが重要。
- 「自己治癒セラミックス」という新規安全設計概念により、航空機タービン翼の安全性向上を追求します。
- 人の骨と同じ“自己治癒”機能の設計・付与により、セラミックスの“脆さ”的克服に挑戦します。
- タービン翼用単結晶超合金(TMS合金)、ディスク用Ni基超合金(TMW合金・TMP合金)と共に適所適材の設計手法を確立します。

最先端研究トピックス

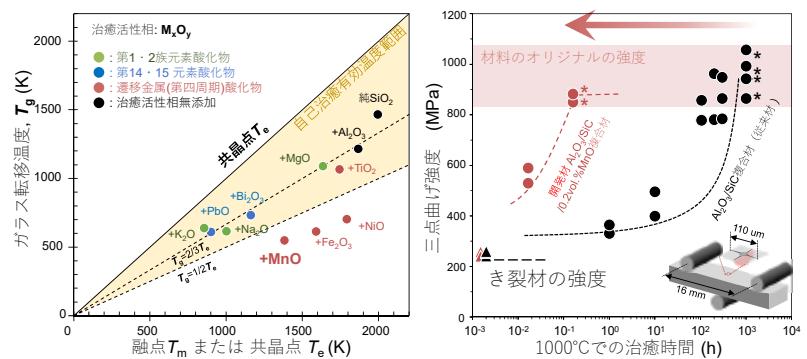
■自己治癒設計（予期せぬ損傷に備える）



■治癒活性相3D元ネットワーク（どこが損傷しても治す）



■治癒活性相設計（どんな環境でも、高速で亀裂を完治）



主要参考文献 : T. Osada, K. Kiichi, M. Mitome, T. Hara, Y. Tamagawa, W. Nakao, T. Ohmura Scientific Reports, 7 (2017) 17853-1.

■NIMS超耐熱材料G（グループリーダー：川岸京子）が提案している超耐熱材料シリーズ

-タービン翼用Ni基単結晶超合金 -ディスク用Ni基超合金（鋳鍛造・粉末冶金）- EQ コーティング 等

まとめ

- 骨の治癒をヒントに、治癒活性相3次元ネットワークという概念を提案。
- MnOを添加により1000°Cで最大1分でき裂を治癒できることを実証。
- 従来比で6万倍の速度でき裂を完治可能なセラミックスを開発。

実用化への目標

- 破壊靭性値(脆さ)を同時に向上する設計手法開発を目指す。
- 自己治癒を部材設計に活用するため、産業現場との議論が必須。
- 計算技術と連携することで実用化促進(対話を促進)を目指す。

耐熱高機能Ti合金の開発

Development of high-temperature functional Ti alloys



構造材料研究拠点 接合・造型分野 耐熱材料設計グループ

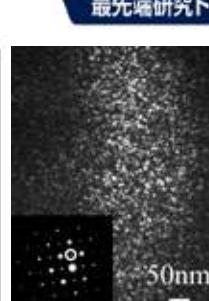
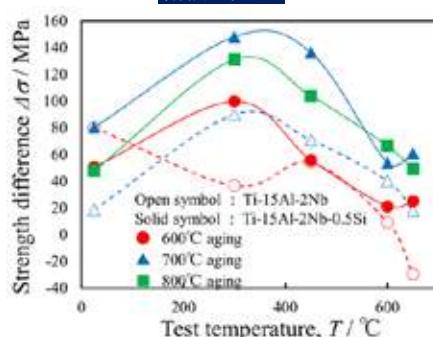
御手洗 容子 MITARAI.Yoko@nims.go.jp

研究の背景

- 航空機ジェットエンジンの効率化には圧縮機に使われている耐熱Ti合金のクリープや耐酸化特性などの耐熱性向上のブレークスルーが必要
- 動的部材に使用されるとエンジン効率をあげると言われている高温形状記憶合金は未だ実用に耐えうる材料がなく、新規開発が必要
- Ti合金のクリープや疲労に影響を及ぼすプロセスや組織因子の抽出による合金設計
- 同時に耐酸化特性を向上させる元素の組み合わせにより力学特性と耐酸化特性のバランスをとった合金開発
- 高温で強度を向上させ、500°C近傍で完全回復する形状記憶合金の設計と開発

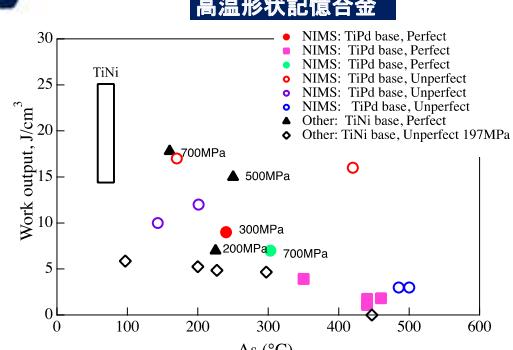
研究の狙い

耐熱Ti合金

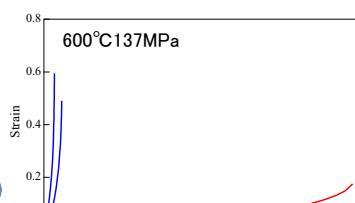
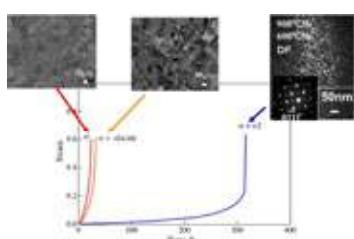


複雑なTi合金の組織から、析出物強化のみを抽出することにより、析出強化の効果を明確化。

最先端研究トピックス

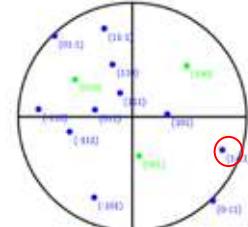
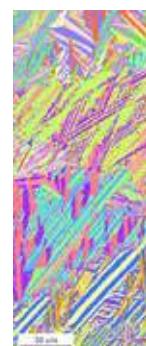


大きな固溶強化を導く元素を組み合わせて400°C以上でもほぼ完全に回復し、TiNi並みの仕事量を有する合金を開発。



クリープについても一つ一つの組織因子の効果を明確化。

組織制御によりクリープ寿命の長期化に成功



組織解析を通して、力学特性だけでなく、組織制御による特性向上にも取り組む。

- 文献
- Y. Yamabe-Mitarai et al., Shape memory and superelasticity, 3, 4 (2017) 381–391.
 - H. Sato, Y. Yamabe-mitarai et al., Mater. Trans. 58, 10 (2017) 1479–1486.
 - K. Shimagami, Y. Yamabe-Mitarai et al., Mater. Trans. 58, 10 (2017) 1404–1410.

まとめ

- 組織因子1つ1つの力学特性に対する効果を明確にし、新Ti合金を開発中
- 固溶強化を最大限引き出して400°C以上で実現可能性が高い高温形状記憶合金を開発

実用化への目標

- プロセスを変えることにより従来材とは異なる組織を生成させクリープ、疲労バランスのとれた合金開発
- 500°C近傍で安定的に動作可能な高温形状記憶合金の開発

First principles molecular dynamics study for oxidation on Ti surface at high temperature



Somesh Kumar Bhattacharya[†] and Ryoji Sahara[‡]

Computational Structural Materials Design Group, Design and Producing Field, Research Center for Structural Materials

[[†] Somesh.Kumar@nims.go.jp & [‡] SAHARA.Ryoji@nims.go.jp]

Takayuki Narushima and Kyosuke Ueda (Tohoku University)

Background

- Oxidation can enhance at high temperature.
- Formation of the oxide layer degrades the mechanical properties.
- For Ti and its alloys, it is particularly significant.
- Oxidation leads to spallation in the thin sections of the jet engine.

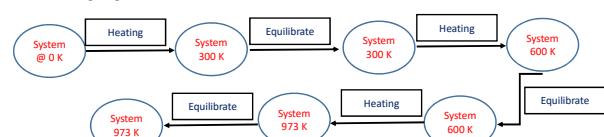
Aim

- Effective methods to enhance the oxidation resistance of Ti alloys.
- Understand the oxidation of the surfaces of the Ti and Ti alloys.

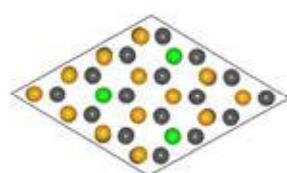
Advanced Research Topics

METHODOLOGY

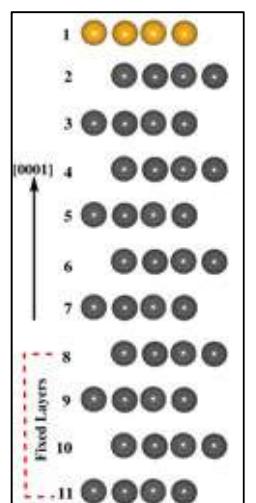
- Ab initio* MD using VASP
- $E_{cut} = 500$ eV
- PAW pseudo potentials
- PBE exchange-correlation
- Single k -point (Γ -point) for MD while BZ sampling for structural relaxations at 0K
- Three different oxygen coverages: 0.5 ML, 0.75 ML and 1 ML
- NVT simulations performed
- MD run at 300K, 600K and 973 K
- For 300K and 600K, 4 ps of equilibration and 10 ps for statistical averaging
- For 973K, about 8 ps of equilibration and 10 ps for statistical averaging



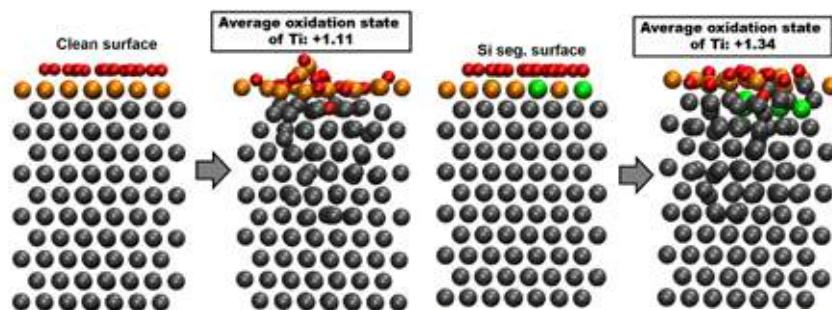
$\alpha\text{-Ti}(0001)$ SLAB MODEL



Top view of Si-segregated $\alpha\text{-Ti}(0001)$



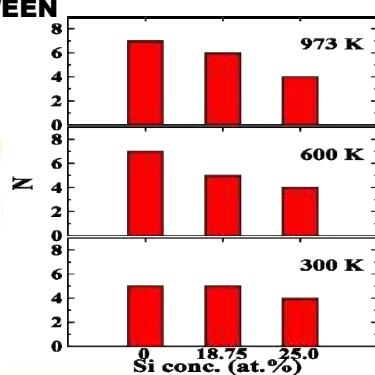
MD SNAPSHOTS



Summary

- Oxidation of Ti surface observed as evident from the Ti_2O or TiO like structure formed on the slab.
- Oxygen penetrates faster in clean surface while it is slower in presence of Si atoms.
- Reduction is oxygen penetration into the slab in presence of Si atoms is a direct evidence of the enhancement of oxidation resistance.

OXYGEN ATOMS BETWEEN LAYERS 1 AND 2



Research outcome

- Oxidation resistance of Ti surface improved by addition of Si.
- Effective design of surface alloy to enhance oxidation resistance at higher temperatures.

A new understanding of complex carbides formation in creep resistant chromium steels



M. Souissi^{1*}, M. H. F. Sluiter², T. Matsunaga^{1,3}, M. Tabuchi¹, M. J. Mills³ and R. Sahara¹

¹ Research Center for structural materials, National Institute for Materials Science (NIMS), Japan.

² Department of Materials Science and Engineering, Delft University of Technology, The Netherlands.

³ Department of Materials Science, The Ohio State University, USA.

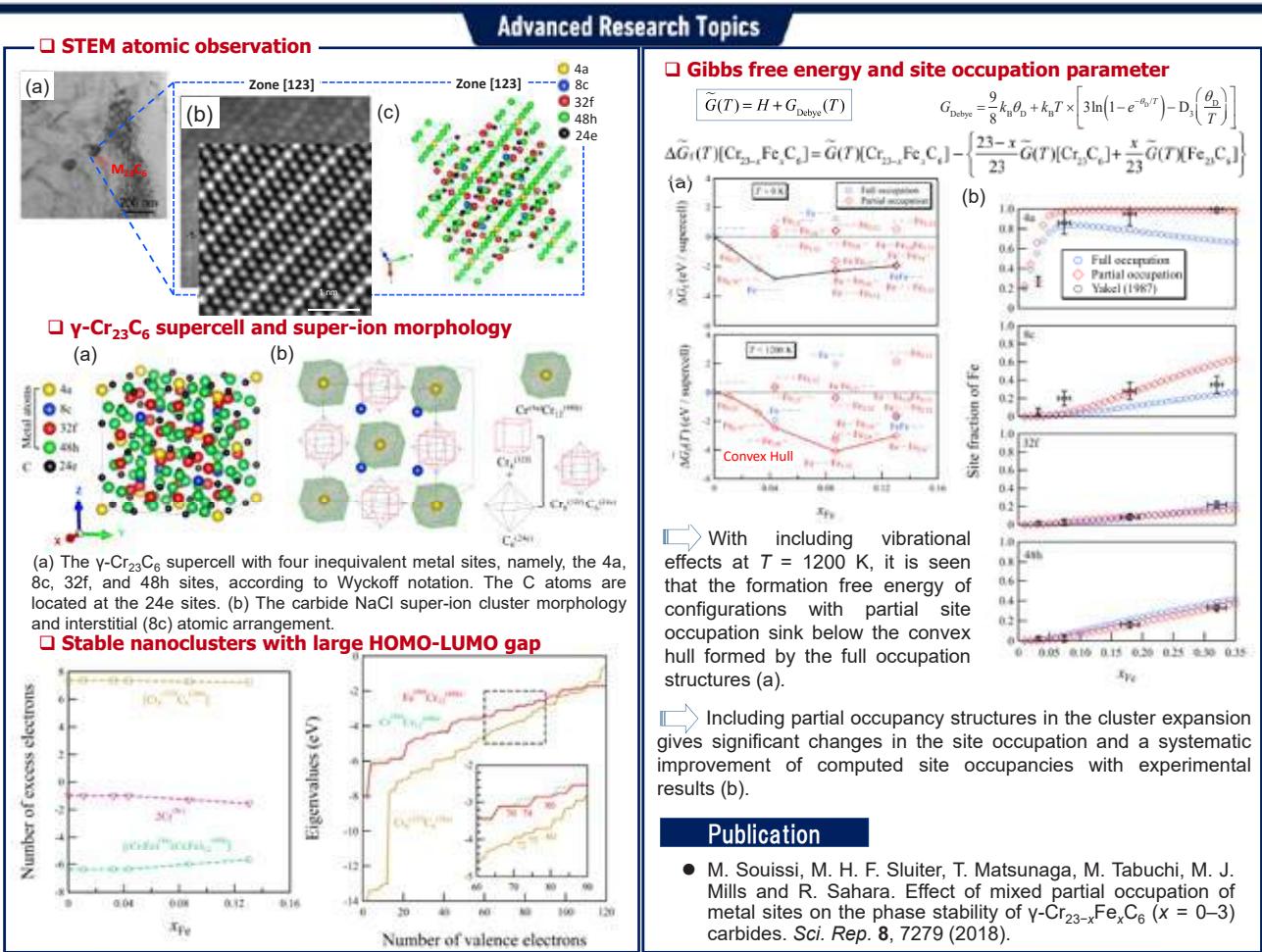
* TEL. +81-29-851-3354 (+ext. 6256), FAX. +81-29-859-2588, E-mail: SOUSSI.Maaouia@nims.go.jp

Background

- $\gamma\text{-M}_{23}\text{C}_6$ carbides are widely used in creep resistant steels, and their thermodynamic stability is an important factor in retaining high strength at elevated temperatures.
- Although these carbides have been known for almost a century, the mechanism that stabilizes the highly regular but complex structure had not been resolved.

Aim

- In this work, ab initio calculations combined with statistical thermodynamics approaches, such as cluster variation method (CVM) within the tetrahedron approximation and the Debye free energy calculations, were used to study the mechanism by considering the effect of the mixed partial occupation of inequivalent metallic sites on the $\gamma\text{-Cr}_{23-x}\text{Fe}_x\text{C}_6$ ($x = 0\text{-}3$) carbide phase stability as function of the temperature and composition.



Summary

- The analysis of the electronic interactions in the microstructure has revealed that these carbides are stabilized by the formation of super-ion clusters in a NaCl type spatial arrangement. The super-ion description not only gives an explanation for the crystal structure formation, but also gives an understanding for the partial site preference of Fe or another alloying element in $\gamma\text{-M}_{23}\text{C}_6$.

Research outcome

- Computation-aided heat resistant structural materials design:** Our strategy could predict the phase stability of carbides with the mixed partial occupation of metal sites, where the *ab initio* calculation gives access not only to free energies but also to non-trivial microstructural properties.
- The aim of the work is to guide experimentalists and draw their attention to consider the site occupation and vibrational effects in developing new high temperature materials.

ZnOコーティングによるボールベアリングの高性能化と産業応用

Development of advanced ball bearings by ZnO tribo-coatings and industrial applications



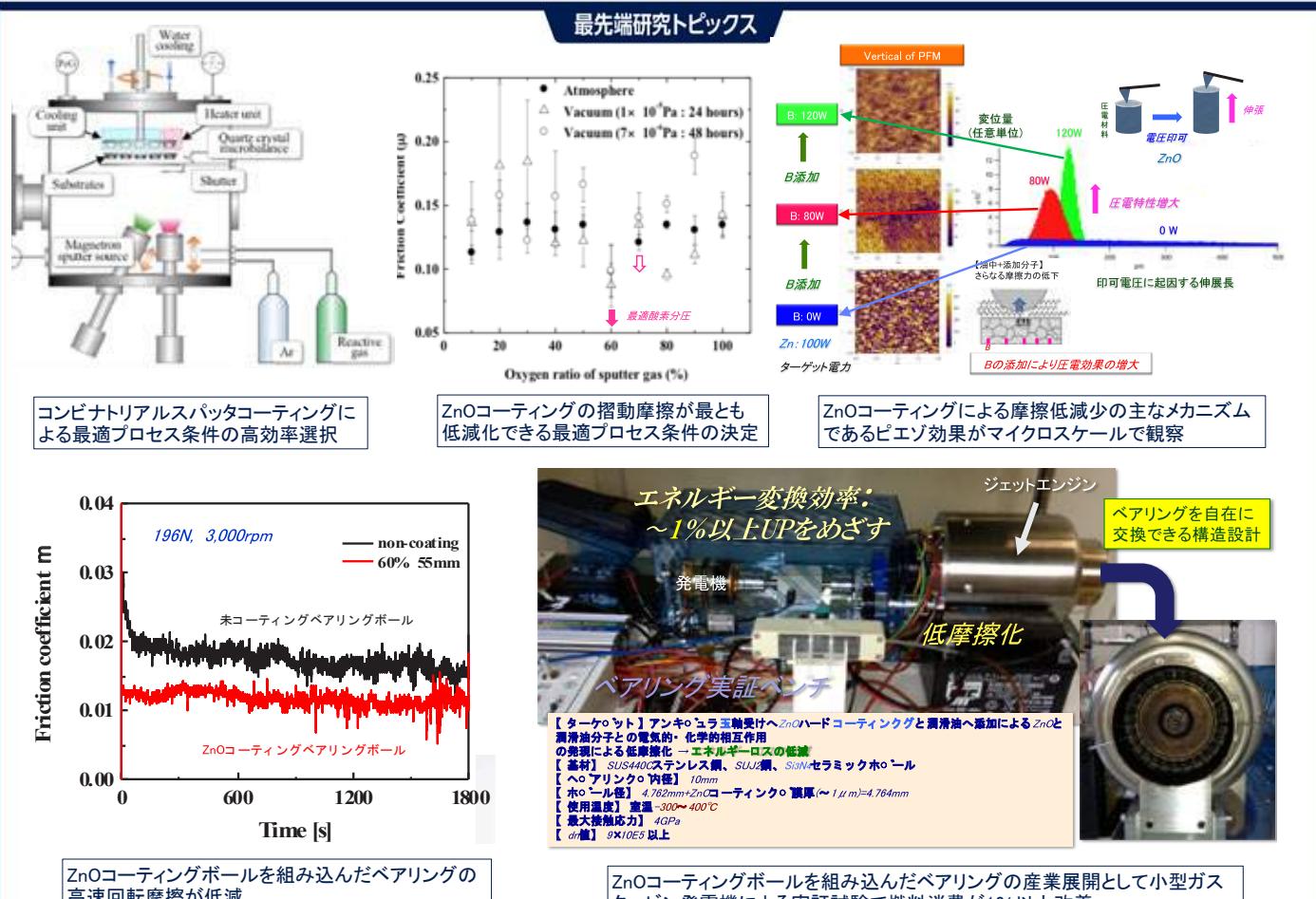
構造材料研究拠点 接合・造型分野 トライボロジーグループ *

土佐 正弘 TOSA.Masahiro@nims.go.jp 佐々木 道子* 後藤 真宏* 笠原 章 本田 博史 鈴木 裕

- 地球温暖化の主要因である二酸化炭素の排出を抑制するために化石燃料の消費量の低減に寄与する技術が重要。
- 燃費改善をはかる技術として内燃機関の駆動機構部品におけるフリクションロスの低減を推し進める。
- 高温駆動中環境下でのトライボロジー特性、特にフリクション(μ)を酸化亜鉛(ZnO)潤滑コーティングにより改善する。

研究の狙い

- 耐環境性に優れ環境に優しく豊富な原料である酸化物系セラミックスとしてZnOを用いた先進潤滑材料を開発する。
- コンビナトリアルスパッタコーティングシステムを駆使して結晶構造配向性の高精度制御によって低摩擦化をはかる。
- ベアリングボール球面など立体造形物への均一かつ一様のZnOスパッタコーティングのプロセス技術を開発する。



ランダム配向された長纖維強化熱可塑性樹脂複合材料プレートの品質保証技術

Quality assurance technology of randomly oriented long-fiber reinforced thermoplastic composite plate



構造材料研究拠点 接合・造型分野 高分子系ハイブリッド複合材料グループ

内藤 公喜 NAITO.Kimiyoshi@nims.go.jp

研究の背景

- 複雑形状に成形可能な賦形性から、ランダム配向された非連続長纖維強化熱可塑性樹脂複合材料に注目が集まっている。
- 纖維配向／異方性に伴う力学特性の変化を把握することが重要である。
- 同程度のものが作れているかという品質保証に関する評価技術の確立が重要である。

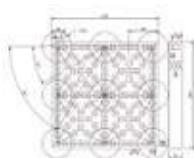
研究の狙い

- 安心して材料を適用するために必要な評価技術を抽出し、材料レベルから製品レベルまでの評価技術を構築する。
- 製品レベルでの品質保証に関する評価技術を確立する。
- 様々なアプリケーションに適用できる新たな構造物マネジメント技術を開発する。

試験片レベルでの評価技術

最先端研究トピックス

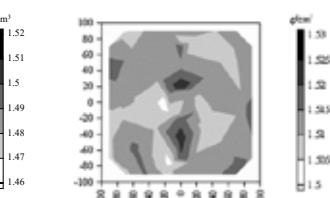
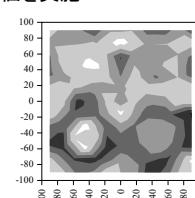
本材料の異方性の程度を調べるために、試験片を切り出し、様々な角度から評価を実施



X線CT 繊維配向を推測

比重測定

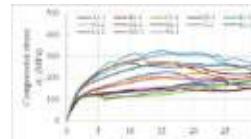
液置換法(エタノール)による比重測定



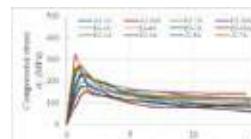
圧縮試験

板厚方向と面内方向で弾性率・強度測定

板厚方向



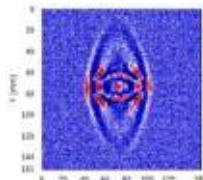
面内方向



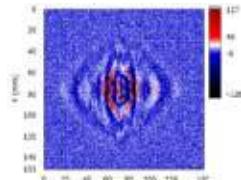
製品レベルでの品質保証評価技術

レーザ加振とアコースティック・エミッション(Acoustic Emission)センサーを用いた測定器での品質保証

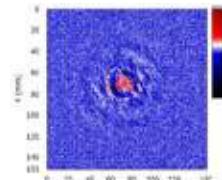
一方向材



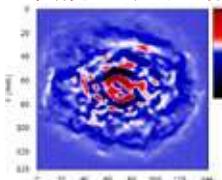
直交異方性材



疑似等方性材



本研究でのランダム材



特願2017-139642 『構造体状態測定方法、品質管理方法、構造体の製造方法および構造体』

応用分野と今後の展開

- 厚肉材ではグランドアンカープレートやジャッキプレート等
- 薄肉材では自動車用のプレート(ボンネット)等
- 更なる応用分野の開拓

実用化へ向けた課題

- せん断方向の力学特性評価
- 疲労・クリープ等の長期耐久性評価
- 耐候性等の環境耐久性評価

ジルコニウム合金のクリープ特性とその向上方法

Improvement of creep property in zirconium alloy



構造材料研究拠点 解析・評価分野 クリープ特性グループ

松永 哲也 MATSUNAGA.Tetsuya@nims.go.jp

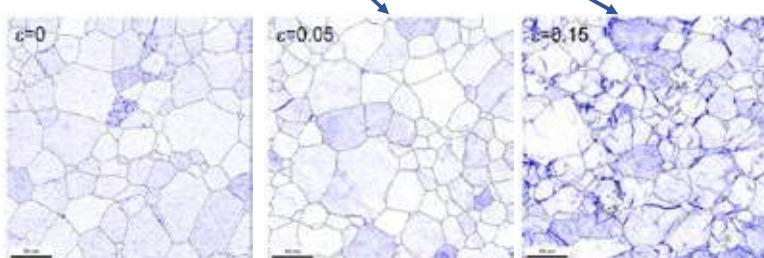
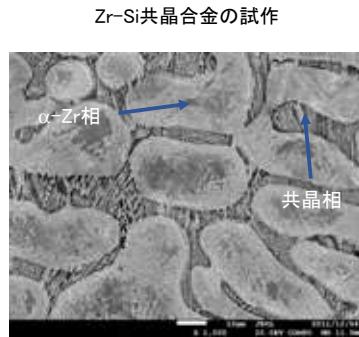
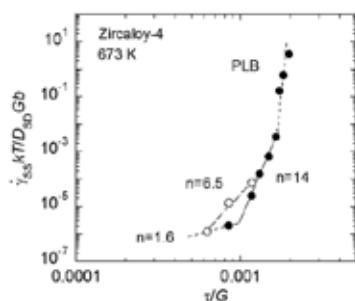
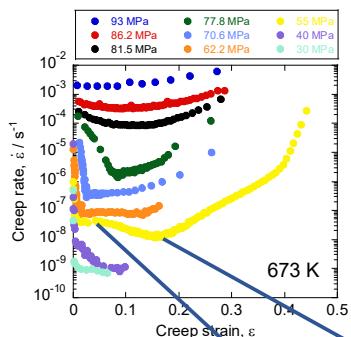
研究の背景

- 一般的に高温クリープは融点の40%以上の温度域で顕著になる。
- 最密六方構造をとるジルコニウム合金は融点の30%以下の低温領域であっても顕著なクリープ挙動を示す。
- 原子炉の冷却水温度は673 K以下だが、クリープの発生温度域であり、詳細なクリープ挙動の解析が安全管理上必須。

研究の狙い

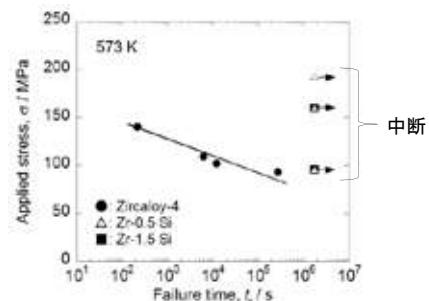
- 低温領域で生じるクリープ機構の解明。低温でもひずみが蓄積する原因の調査。
- 変形機構の解析から、クリープを抑制しうる有効的な手段を提案。
- 原子力用構造材料の安全性向上を図る。

最先端研究トピックス



1段目で顕著な転位組織の発達はみられないが、2段目ではセルの発達が明確に観察された。1回のクリープ試験で、転位組織の発達に伴う2度の定常クリープ挙動が現れた。

融点の30%以下でもクリープ挙動を抑制する合金設計が必須である。そこで、ZrとSiとの共晶を利用したモデル合金を作製し、クリープ試験に供した。(右)



共晶を利用することでクリープ寿命が大幅に増加。

クリープひずみも減少。

粒界に共晶相がわずかに残るZr-0.5Siであっても、クリープ寿命は顕著に増加。

今後、実用合金へのSi添加の影響を調査することで、燃料被覆管の強度レベルへの影響を観察。

まとめ

- Zircaloy-4のクリープ挙動は特異な二段挙動を示した。
- 二段挙動は粒内に導入される転位組織の影響を強く受けた。
- 共晶相を粒界に導入することで、クリープ強度は向上した。

実用化への目標

- 加工性を担保するためにSi添加量の調整。
- 既存合金へのSi添加が組織に及ぼす影響の調査。
- Si添加合金の強度特性評価。

バイオマスを用いた機能性樹脂

Functional resins with biomass



統合型材料開発・情報基盤部門 データ駆動高分子設計グループ

内藤 昌信 NAITO.Masanobu@nims.go.jp

研究の背景

- 日本の文化を背景に開発された日本発の技術である抗菌技術
- 海外でも「KOHKIN」の名称が普及
- 人や環境に優しく高機能を維持できる材料が熱望

研究の狙い

- 安価で高性能な資源として、芳香性バイオマスに注目
- 抗菌などポリフェノールの優れた機能を損なわず変性・加工するコア技術
- 樹脂・塗料・界面活性剤・接着剤等の開発に成功

最先端研究トピックス

機能性材料としての芳香族バイオマス



Tannic Acid (GRAS)

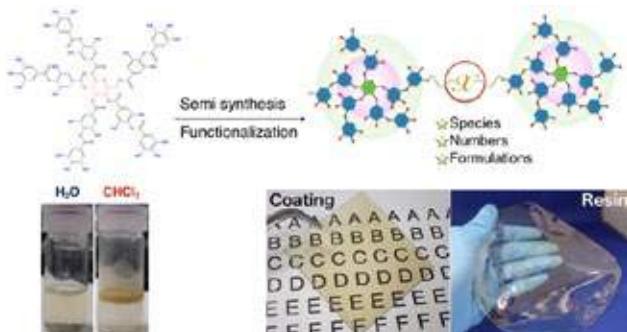
Generally recognized as safe food additives certified by FDA

着眼点：

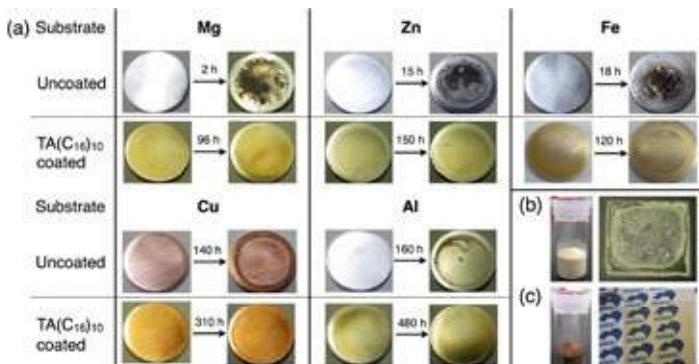
タンニン酸は、安価・高機能な芳香族バイオマスだが、水溶性のため、機能性材料の原料として注目されていなかった。

NIMSのコア技術：

タンニン酸本来の機能は損なわず、抗菌・抗酸化・防錆を有する高強度接着剤や樹脂など、様々な高付加価値機能性材料に改質することに成功



多種多様な機能(抗菌性・抗酸化性・接着性)



(a) Photographs of various (un)coated metal/alloy substrates before and after immersion in salt water for specified time. (b) and (c) Photographs of glass plates ($5 \times 5 \text{ cm}^2$) coated with TA and PATA, respectively. The physical appearance of solid powders of respective samples has also been shown.

Antibacterial test

	Viable cells (cfu / mL)				MRSA	
	<i>E. Coli</i>		<i>Staphylococcus. Aureus</i>		6 h	After 24 h
Control	1.2×10^4	1.4×10^4	1.1×10^4	1.1×10^4	1.2×10^4	1.7×10^4
TA(C ₁₆) ₁₀	1.2×10^4	< 10	1.1×10^4	< 10	1.2×10^4	< 10
TA(C ₁₆) ₁₀	1.2×10^4	2.7×10^3	1.1×10^4	< 10	1.2×10^4	< 10
TA(C ₁₆) ₁₀	1.2×10^4	1.6×10^4	1.1×10^4	< 10	1.2×10^4	< 10

< 10: no colony formation unit (cfu) was observed.

Table 1 Comparison of dynamic contact antibacterial activity of control and different PATA-coated substrates against three types of bacterial strains.

応用分野と今後の展開

- 構造材料・医療・建材・衛生・食品など多分野に適用可能
- 大量合成・企業連携・実用化

実用化へ向けた課題

- コア技術・アイデアを具体的な技術分野に落とし込む必要あり

カフェイン吸着材料・カフェイン除去システム

Caffeine adsorption material · Caffeine removal system



機能性材料研究拠点 機能探索分野 機能性粘土材料G

田村 堅志

TAMURA.Kenji@nims.go.jp



機能性材料研究拠点 機能探索分野 機能性粘土材料G

佐久間 博

SAKUMA.Hiroshi@nims.go.jp

研究の背景

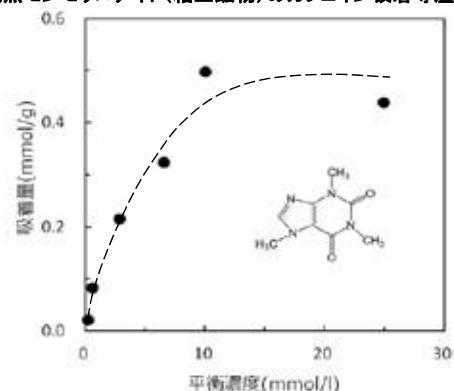
- アルカロイドであるカフェインは、コーヒーや茶などの嗜好飲料の原料である植物に多く含まれる。
- カフェインを過剰摂取すると健康人でも極度の興奮、神経過敏、吐き気、不眠などの有害作用を引き起こす。
- 近年の健康志向の高まりから、飲料などのカフェインを効率的に低減する技術開発が求められている。

研究の狙い

- 安心・安全な物質である天然粘土鉱物の二次元層間を利用して物質選択性に優れた吸着材料を設計する。
- カフェインを吸着する物質の探索を実施する中で、どの粘土鉱物に効率的に吸着するのか調査する。
- カフェインが粘土鉱物の「どこのサイトに」、「どの程度強く」、「どの様な状態」で吸着しているか解明する。

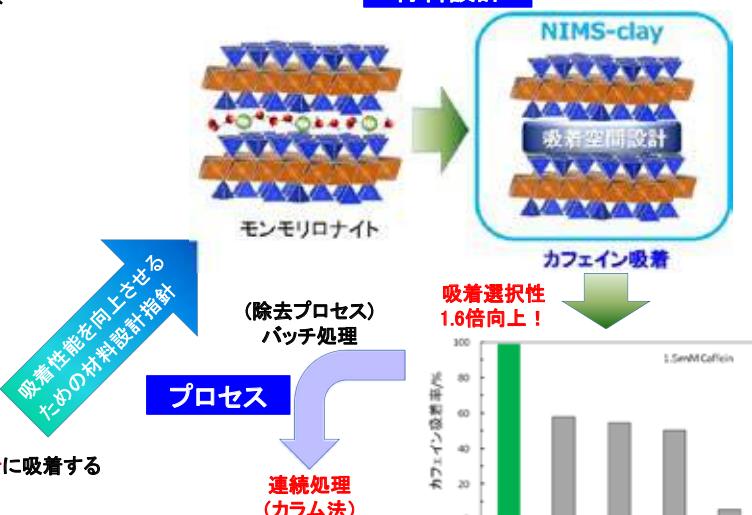
最先端研究トピックス

天然モンモリロナイト(粘土鉱物)のカフェイン吸着等温線



- 活性炭、酸性白土より高い吸着能を示す。
- カフェイン分子は分子面をモンモリロナイト表面と平行に吸着する(約 0.46 nm^2 の専有面積)。
- 吸着可能なエリアの約20%程度が占有されているのみ。

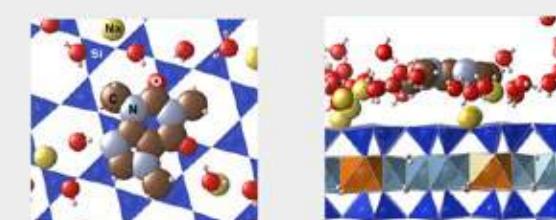
材料設計



分子動力学計算による吸着機構解明

理論的アプローチ

モンモリロナイト(層電荷 0.5)上のカフェイン分子の安定構造



実用物性の改良



カラム透過試験



応用分野と今後の展開

- 飲料分野、医薬分野
- 連続除去分離システムの構築(カラム化)
- 吸着機構の解明と材料の最適化

実用化へ向けた課題

- 吸着特性(特に選択性)の向上
- 経済性を考慮した製造プロセスの開発(吸着材のリユース技術)
- 省エネルギーで低コストな分離プロセスの構築

線材製品のための特殊熱処理技術 —通電加熱とGa浴冷却による高温非平衡相の凍結—

Special heat treatment technology for wire products

—Freezing of the high temperature non-equilibrium phase by joule heating and Ga bath cooling—



機能性材料研究拠点 電気・電子機能分野 低温超伝導線材グループ

菊池 章弘 KIKUCHI.Akihiro@nims.go.jp

研究の背景

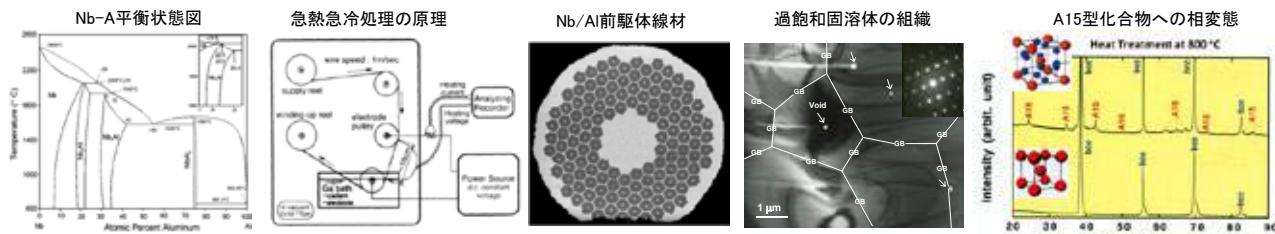
- Nb₃Al超伝導線材のための特殊熱処理技術(急熱急冷処理)
- 通電加熱で約2,000°Cに急速加熱し、金属Ga浴で急冷して過飽和固溶体(高温非平衡相)を合成
- 約2,000°Cの高温熱処理を行うために高真空中で実施することが慣例（高価な装置）

研究の狙い

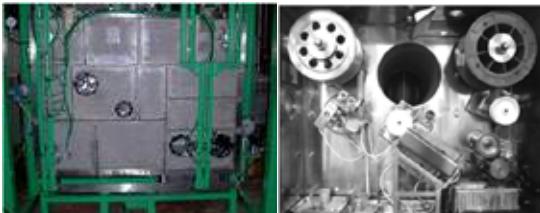
- プロセスの簡素化と汎用性の拡張
- 热処理装置の大幅な低コスト化
- 新規企業の参入の後押し

最先端研究トピックス

【従来】Nb₃Al超伝導線材のための特殊熱処理技術



NIMS保有のキロメートル線材の処理が可能な大型装置(2003)



米国オハイオ州立大学の装置(1998)



イタリア Edison Termoelettrica Spa の装置 (2003)



【最近の成果】大気開放下での急熱急冷処理

核融合炉や加速器など、高磁場・大口径の超伝導磁石では巨大な電磁力に耐える超伝導線材が必要。機械ひずみに強いNb₃Al線材はNIMSの独自製法である「急熱急冷法」により製造される。前駆体線に直接通電し、ジュール自己発熱させて2,000°Cの短時間熱処理を行い、すぐさま約30°Cの金属ガリウムに導いて急冷する。これまで線材が燃焼して溶断しないように、高真空処理が通常であったが、大気中でも問題なく実施でき、同じ特性が得られることを明らかにした。大幅な装置の低コスト化と煩雑なプロセスの簡略化が実現し、メーカー等が着手し易く改良することに成功した。



大気開放

付帯効果

$$\begin{aligned} E \text{ (J/mm}^2\text{)} &= \frac{I_{\text{RMS}} \times V_{\text{RMS}} \times t}{A \times L} \\ &= \frac{I_{\text{RMS}}^2 \times \rho \times t}{A^2} \\ &= \frac{V_{\text{RMS}}^2 \times t}{\rho \times L^2} \end{aligned}$$

● 特許出願 【発明者】菊池章弘等, 【出願番号】特2017-205171, 【出願日】2017年10月24日
【発明の名称】Nb₃Al超伝導線材用の急熱急冷処理済みの前駆体線材、及びNb₃Al超伝導線材用の前駆体線材の熱処理方法



応用分野と今後の展開

- Nb₃Al超伝導線材の実用化の加速
- 他の線材製品への適用・展開
(生体材料、形状記憶合金、超高強度線など)

- より簡素なデモ装置の開発
- 他の液体金属の適用（例えば亜鉛やインジウム）
- 線材表面に生成される酸化物膜の積極的活用法

実用化へ向けた課題

ダイヤモンド高移動度トランジスタ

Diamond high-mobility transistors



国際ナノアーキテクニクス研究拠点
ナノシステム分野 表面量子相物質グループ
山口 尚秀 YAMAGUCHI.Takahide@nims.go.jp



笹間 陽介 SASAMA.Yosuke@nims.go.jp

研究の背景

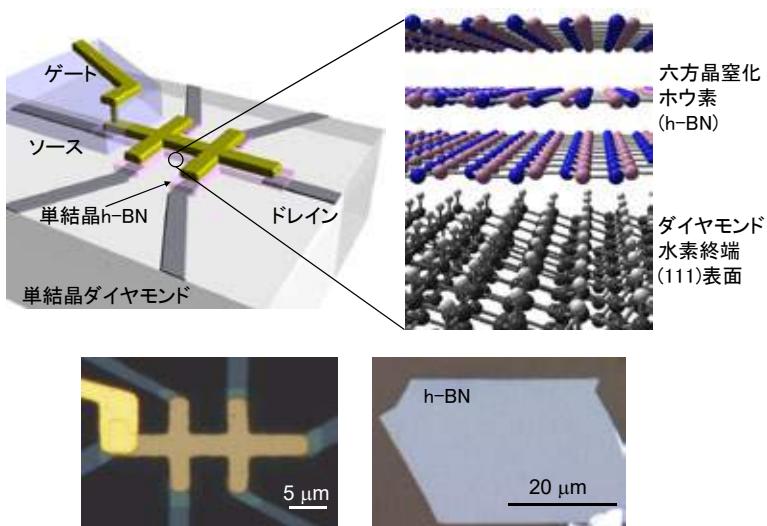
- パワーエレクトロニクス分野でのシリコンからシリコンカーバイド(SiC)への置き換え拡大
- ダイヤモンドはSiCを凌駕する半導体特性(高絶縁破壊電界、高移動度など)をもつ
- ダイヤモンドを使ったハイパワー・高速・省電力素子の実現への期待

研究の狙い

- 単結晶のゲート絶縁体を使うことによるダイヤモンド電界効果トランジスタ(FET)の高性能化
- 電荷キャリアの移動度を上昇させることでエネルギー損失の低減、高速動作の実現へ
- リーク電流の低減と高い電荷キャリア密度(低いオン抵抗)の実現

最先端研究トピックス

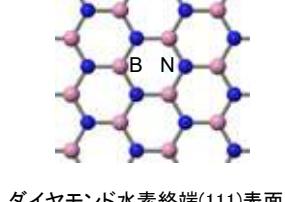
六方晶窒化ホウ素(h-BN)をゲート絶縁体として使ったダイヤモンド高移動度トランジスタの開発



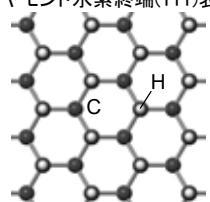
h-BN の低い荷電不純物密度および低いリーク電流という優れた絶縁体特性によって、高い移動度と高いキャリア密度を両立したダイヤモンド電界効果トランジスタ(FET)の開発に成功した。

h-BNは室温で銅に匹敵する高熱伝導度や、1000°C以上の高温に耐える耐熱性も示し、パワーエネルギー用途のFETのゲート絶縁体として理想的。

六方晶窒化ホウ素(h-BN)



ダイヤモンド水素終端(111)表面



h-BNとダイヤモンド(111)面の格子不整合は0.7%と小さい。
(グラフェンとh-BNの不整合は 1.8%)

まとめ

- 単結晶の六方晶窒化ホウ素(h-BN)をゲート絶縁体として用いたダイヤモンド電界効果トランジスタの開発
- 高移動度と高キャリア密度の両立を実現

実用化への目標

- ダイヤモンドFETのさらなる高性能化
- 高温・高出力・高周波・過酷環境・低消費電力で動作可能なダイヤモンドFETの開発

Dyフリーネオジム磁石の高保磁力化

Coercivity enhancement of Dy free Nd-Fe-B permanent magnets



磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性材料解析グループ

大久保 忠勝

OHKUBO.Tadakatsu@nims.go.jp

- 省資源・省エネルギーのニーズから永久磁石材料の用途は今後も拡大。

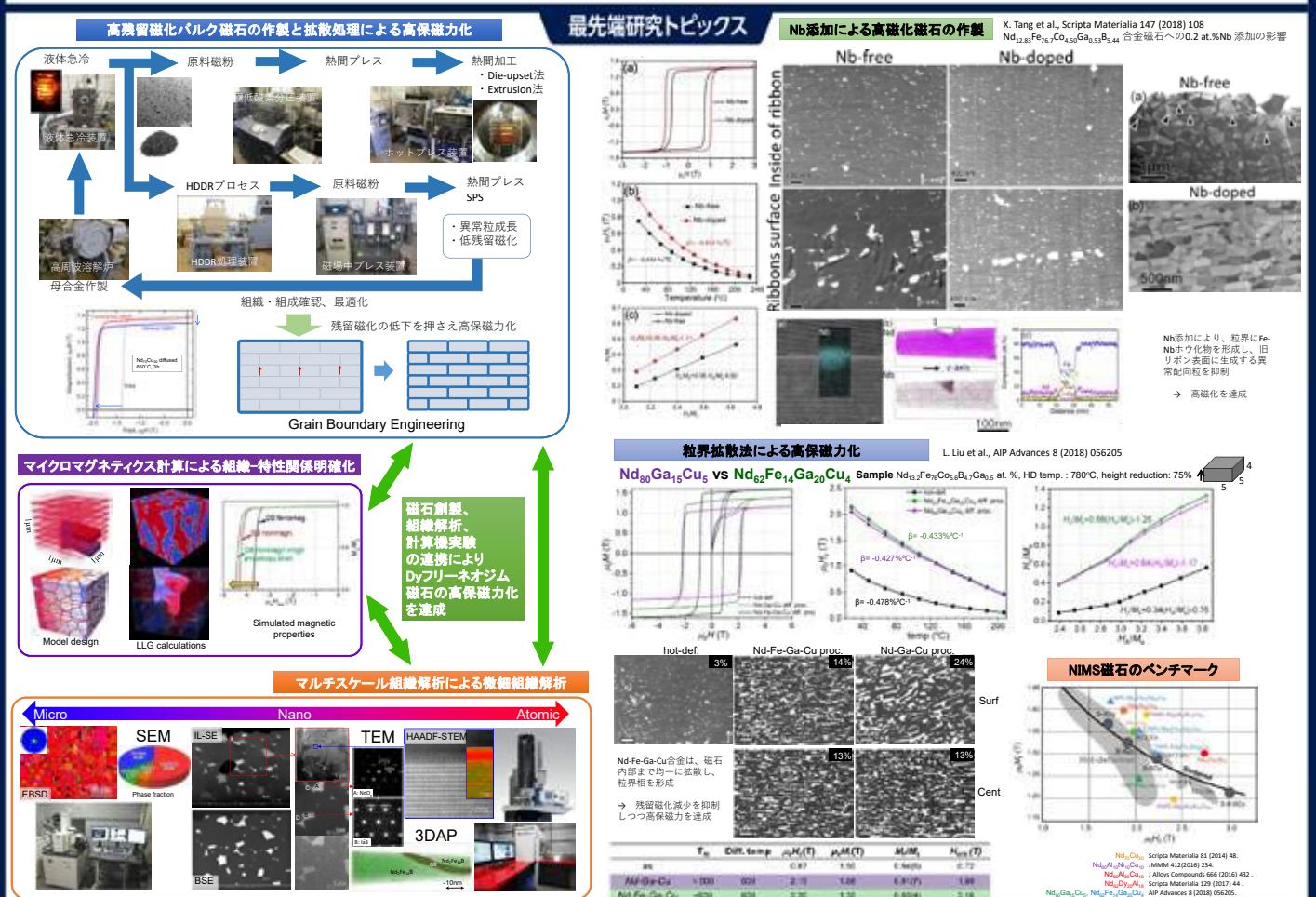
研究の背景

- その小型化、高効率化によって、高特性の材料が求められている。

- ネオジム磁石は、現在、最も優れた特性を有しているが、さらなる特性向上が必要。

研究の狙い

- ネオジム磁石の特性向上のメカニズムを解明し、現行のDy含有磁石と同等以上の磁石特性を実現することを目的。
- 独自に開発したレーザー-アトムプローブに加えて、走査型・透過型電子顕微鏡を活用し、ネオジム磁石の微細組織をミクロから原子レベルのマルチスケールで解析し、特性向上を目指す。



- 磁石創製、組織解析、計算機実験の連携によりDyフリーネオジム磁石の開発を推進
- Nb添加は、高残留磁化に貢献
- Nd-Fe-Ga-Cu合金による粒界拡散法により、残留磁化の減少を抑制しつつ、高保磁力を達成

- 残留磁化の低下を最小限にして $H_c > 2.5$ T を希少元素フリーで実現
- 保磁力の温度依存性の更なる改善
- HV/EV用の希少元素フリーネオジム磁石を開発

磁性体を用いたフレキシブル・低熱抵抗汎用熱流センサーの開発

Development of the flexible and low thermal resistance heat current sensor using magnetic material



磁性・スピントロニクス材料研究拠点 磁性材料グループ

桜庭 裕弥 SAKURABA.Yuya@nims.go.jp

研究の背景

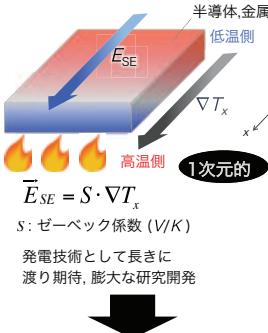
- 熱流センサーは、**熱の流入・流出を高感度かつ高速に検知**できるため、農業・自動車・医療・電気機器・ロボット産業等への貢献が期待
- ゼーベック型熱流センサーは高感度だが、**高熱抵抗・低フレキシビリティ・高コスト**という大きな問題がある
- 磁性体における熱電効果である**異常ネルンスト効果**は、熱流と直交方向に電界を生じさせるため応用上の利便性が高い
- 低熱抵抗・高フレキシビリティ・低価格を実現する**異常ネルンスト効果型熱流センサー**を実現を目指す
- 異常ネルンスト型熱流センサーに向けた**高熱電能材料開拓と、センサーの試作と性能評価**

研究の狙い

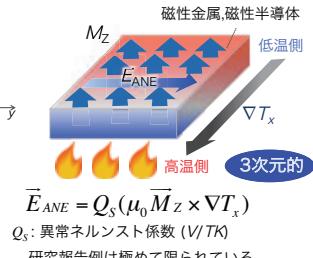


最先端研究トピックス

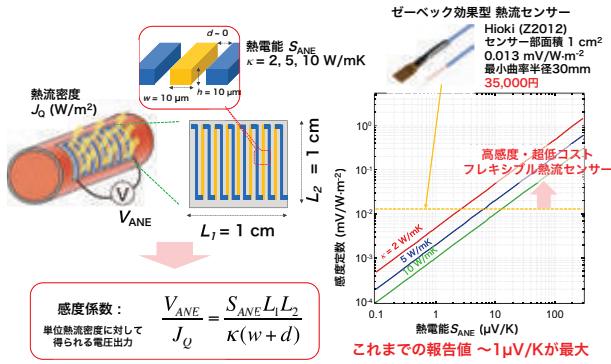
ゼーベック効果 Seebeck effect (SE)



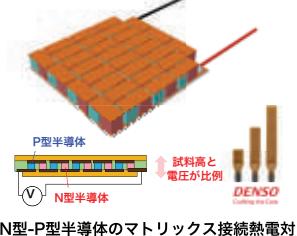
異常ネルンスト効果 Anomalous Nernst effect (ANE)



異常ネルンスト型熱流センサ実現に求められる材料性能



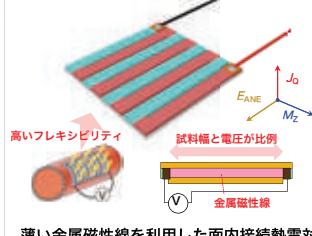
ゼーベック型熱流センサ (従来市販型)



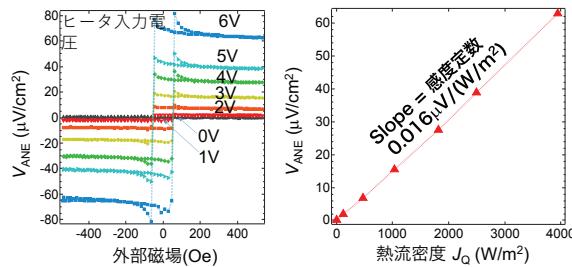
N型-P型半導体のマトリックス接続熱電対

- 大きい熱電能
- 実用デバイス化の実績あり
- × 複雑な構造、作製プロセス
 - 高コスト(市販品3~5万円)。
 - 小面積・大面积センサー作製が困難 (最小 5x5 mm², 最大 9 x 55 mm²)
- × フレキシビリティに限界(曲率半径~30mm)
- × 热抵抗が大きく熱の流れが変化 (市販品 厚さ0.25 mm, 热伝導率0.2W/mK)
- 微細加工法により簡便に作製可能 → 低コスト化、小面積・大面积センサー作製が容易
- 極薄の熱流センサーの実現が可能 → 高いフレキシビリティ(曲率半径<<30mm) 低熱抵抗で熱の流れを防ぐ
- × 热電能が低いことが課題

異常ネルンスト型熱流センサ



薄い金属磁性線を利用した面内接続熱電対



異常ネルンスト効果で、外部磁場ゼロで熱流検出が可能であることを確認

まとめ

- 異常ネルンスト効果は、磁化と熱流の直交方向に電界を生じるため、低熱抵抗・低コスト・高フレキシビリティを併せ持つ汎用的な熱流センサーへの応用が期待
- 異常ネルンスト型熱流センサーの試作と熱流検出のデモに成功

実用化への目標

- 熱伝導率 $\kappa < 10 \text{ W/mK}$ 、熱電能 $10 \mu \text{V/K}$ をゼロ磁場で実現することが熱流センサー実現の目標値
- シーズとニーズの融合による研究開発の加速

磁性・スピントロニクス材料を用いた 新しい熱利用技術

Novel thermal technologies based on magnetic and spintronic materials



磁性・スピントロニクス材料研究拠点スピニエネルギーG

内田 健一

UCHIDA.Kenichi@nims.go.jp



磁性・スピントロニクス材料研究拠点スピニエネルギーG

井口 亮

IGUCHI.Ryo@nims.go.jp

研究の背景

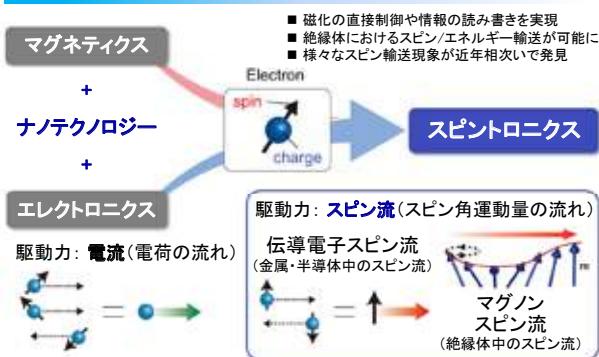
- 電子スピンの自由度を利用した新しい電子技術・エネルギー変換技術が近年急速に発展
- 磁性・スピントロニクス材料に特有の制御性・対称性・整流作用を利用することにより、従来のエレクトロニクスや伝熱工学単独では実現し得なかった新しい熱エネルギー制御原理を創出可能に

研究の狙い

- スピンペルチェ効果：スピン流によって駆動される局所的・異方的・選択的熱エネルギー制御
- 異常エッチングスハウゼン効果：強磁性体を利用した三次元的熱流生成とその制御
- 異方性磁気ペルチェ効果：物質界面を必要としない、単一物質における電子冷却

最先端研究トピックス

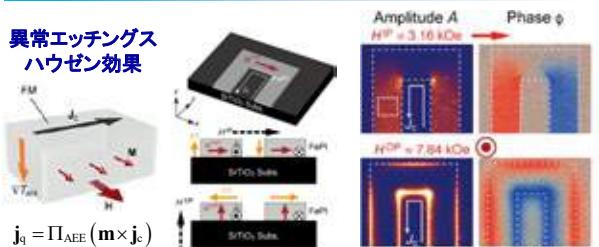
スピントロニクスとスピニ流



スピニ流-熱流変換現象に関する基礎・応用研究



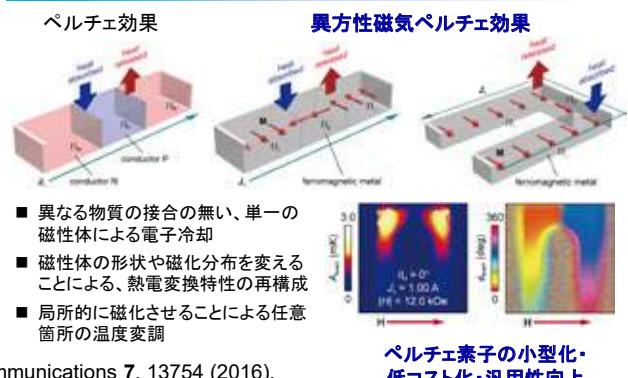
異常エッチングスハウゼン効果の熱イメージング [2]



強磁性体において、磁化と電流の外積方向に熱流が生成される現象

→ 磁化による熱流制御が可能に
(熱流ON/OFF、熱流方向の回転など)

異方性磁気ペルチ効果の世界初の観測 [3]



まとめ

- ロックインサーモグラフィ技術により、従来は観測すら困難だった熱電・熱スピニ変換現象を自在に観測・評価可能に
- 単一の磁性体による電子冷却や熱電変換特性の再構成など、新しい熱エネルギー制御機能を次々と実現

実用化への目標

- 最大の課題は出力向上: 热電・热スピニ変換効率の改善に向けた原理解明と材料探索
- 各熱電・熱スピニ変換効果の特性を活かすための使用用途の検討、デバイス設計

磁気で動作する電気化学デバイス

Electrochemical devices operated by a magnet



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノシステム分野 ナノイオニクスデバイスグループ

土屋 敬志 TSUCHIYA.Takashi@nims.go.jp

研究の背景

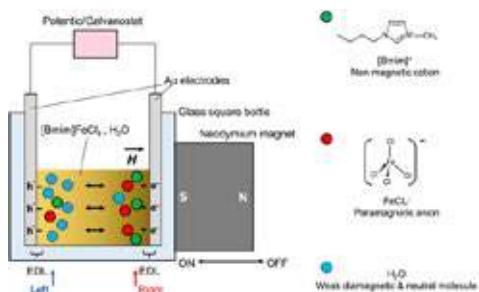
- エネルギー・環境分野、情報通信分野における電気化学デバイス(電池、キャパシタ等)の需要拡大
- 電圧を用いたイオン駆動に起因する動作方法の制限
- 全く新しい原理で動作する電気化学デバイスへの期待

研究の狙い

- 電圧印加でなく磁場印加によるイオン輸送を利用して電気抵抗を制御する新規なトランジスタ
- イオン輸送に伴う可逆的な起電力変化の観察
- 新しい原理で動作する電気化学デバイスの可能性

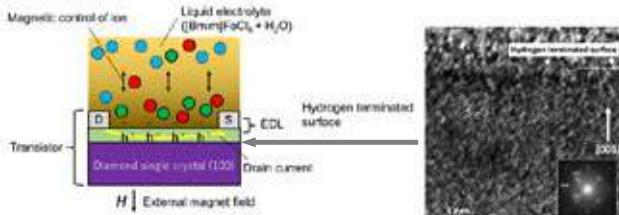
最先端研究トピックス

- 電気化学セル中で磁気によるイオン輸送に伴って生じる起電力変化の観察

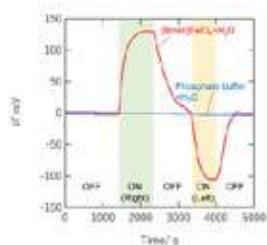


磁場を印加可能な2端子型電気化学セル(左)と、磁性電解質液体に含まれるイオン・分子(右)の模式図。

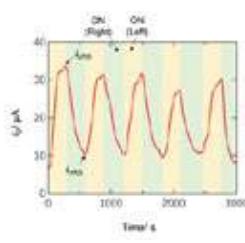
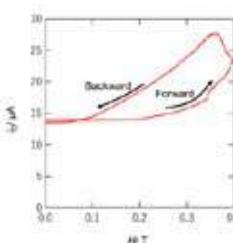
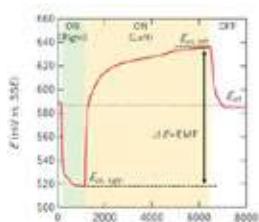
- 磁気によるイオン輸送を用いた水素終端ダイヤモンド型電気二重層トランジスタにおける電気抵抗の制御



ダイヤモンド表面の電気抵抗を電気二重層で制御するトランジスタの模式図(左)と、透過電子顕微鏡による断面写真(右)。



2電極間に生じる起電力の磁場応答(左)と、参照電極を設けた場合のAu電極の電位変化(右)。



磁場強度の変化によるドレイン電流の変化(左)と、磁場印加方向の変化によるドレイン電流の変化(右)。

参考文献 •Takashi Tsuchiya, Masataka Imura, Yasuo Koide, Kazuya Terabe. Magnetic Control of Magneto-Electrochemical Cell and Electric Double Layer Transistor. SCIENTIFIC REPORTS. 7 (2017) 10534-1-10534-9

応用分野と今後の展開

- 切り替えに電圧を使わない低消費電力メモリ
- 表面電荷を利用した磁気センサーや発電装置
- 磁気による電気化学デバイスの遠隔操作

実用化へ向けた課題

- 磁場印加で生じる起電力の増強
- イオン輸送の磁場変化に対する応答速度等の改善
- 様々な工業製品への応用に有利な固体電解質の開発

高速・簡便半導体ナノ構造製造技術

Fast & easy semiconductor nanomaterials fabrication techniques



MANA ナノマテリアル分野 半導体ナノ構造物質G
松村 亮
MATSUMURA.Ryo@nims.go.jp



Wipakorn Jevasuwan
JEVASUWAN.Wipakorn@nims.go.jp



深田 直樹
FUKATA.Naoki@nims.go.jp

Background

- Advantageous quantum confinement by size/shape effects: 1-D and 0-D nanostructures
- Improvement of device performances: exceed state-of-the-art planar transistors
- Cost reduction by reducing the material usage: intelligent assembly of nanostructures

Aim

- Formation of new Si nanostructures: 1-D Si nanowires and 0-D Si nanocrystals
- Control of interfacial defects along the radial direction: functionalization of the nanowire structure
- Development of new Si nanostructure devices: thin-film nanowire transistor on low-cost substrate

Advanced Research Topics

1. Metal-Catalyzed Electroless Etching (MCEE) Method

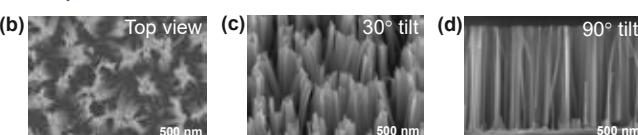


Figure 1. (a) MCEE processes, (b), (c), and (d) SEM images of Si nanowires synthesized by MCEE.

2. Nanoimprint and Bosch Etching Method

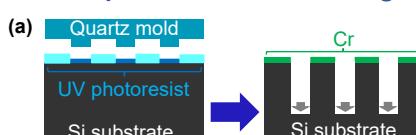


Figure 2. (a) Nanoimprint processes, (b), (c), and (d) SEM images of Si nanowires synthesized by nanoimprint.

3. Chemical Synthesis of Nano-Crystal (nc) Si

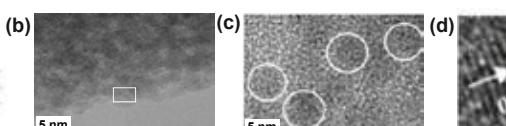
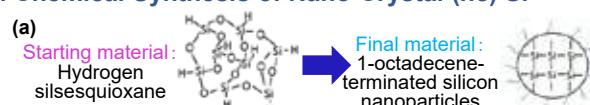


Figure 3. (a) Synthesis materials, (b), (c), and (d) TEM images of nc-Si.

4. Vapor-Liquid-Solid (VLS) Method

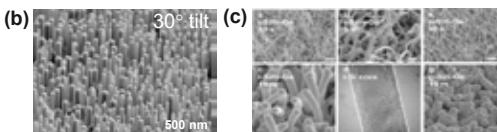
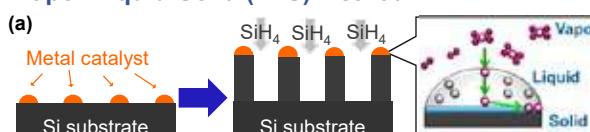


Figure 4. (a) VLS processes, (b), and (c), SEM images of Si nanowires synthesized by VLS.

5. Al Induced Crystallization (AIC) of Polycrystalline Si

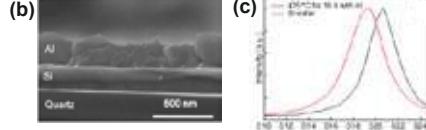


Figure 5. (a) AIC processes, (b) SEM images of Al and Si layers after AIC, and (c) Raman spectrum of AIC poly-Si.

Applied area and future prospects

- Development of next-generation transistors
- Device improvement using Si nanostructures
- Both cost reduction and higher performance

Issues for technology transfer

- Device improvement by interfacial defect reduction
- Optimization of 3D device junction formation
- Multi-combined nanostructures development

コンビナトリアル合成による 高速薄膜電子材料開発

Combinatorial thin film synthesis for developments of new thin film electronics materials



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノマテリアル分野 電子デバイス材料グループ

長田 貴弘

NAGATA.Takahiro@nims.go.jp

- 薄膜材料の多様化に対する高速薄膜材料開発の効率化が必要
- パワー半導体の需要・応用拡大と共に高温環境で安定動作する電子材料の需要拡大
- 既存の酸化物誘電体材料ではワイドギャップと高誘電率の両立が困難

研究の狙い

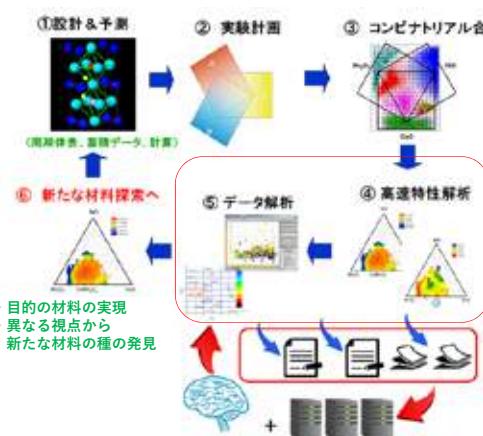
- データ科学と融合した高速材料探索技術の開発
- 高温環境で動作可能な薄膜高誘電体材料の開発
- 非酸化物高誘電体薄膜材料の開発

最先端研究トピックス

コンビナトリアル合成を用いた薄膜材料開発

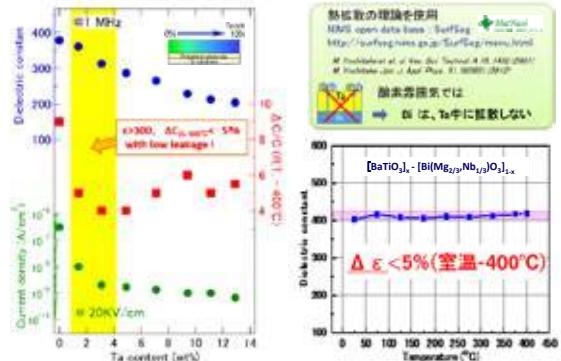


コンビナトリアル薄膜合成法の概略図(左)、コンビナトリアルレーザープレーリング法による三元組成傾斜試料の作製手順(右)



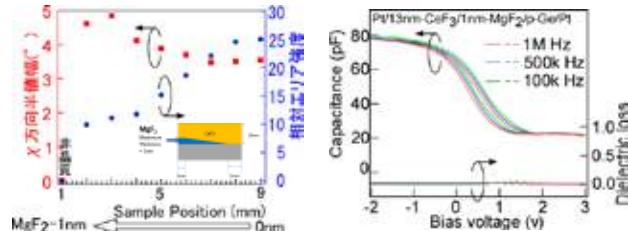
高速薄膜材料開発ループ概略図。データ科学との融合を目指したデータ蓄積・活用を統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)と連携

高温動作高誘電率薄膜材料開発



Biを含むリラクサ強誘電体材料のTa添加組成傾斜試料の電気特性変化(左)、NIMSデータベースによる材料指針決定(右上)、とコンビナトリアル手法による組成・構造最適化後の薄膜試料の誘電率の温度依存性(右下)

非酸化物高誘電率材料開発



XRD構造解析:コンビナトリアル合成によるGe基板上緩衝層の最適化過程(左)。得られた緩衝層によって実現したCeF₃/Geキャバシタ構造の電気特性(右)。

まとめ

- コンビナトリアル合成による高速薄膜材料探索の実現
- 高温動作薄膜高誘電材料の実現
- フッ化物薄膜材料でのワイドギャップ、高誘電率の実現

実用化への目標

- データ科学との連携による高効率材料探索技術の実現
- プロセス効率が良い高温動作高誘電体薄膜材料の探索
- フッ化物/半導体界面制御技術の確立

ウェアラブル素子を形成する 印刷エレクトロニクス

Printable electronics for wearable devices



機能性材料拠点 独立研究者

三成 剛生 MINARI.Takeo@nims.go.jp

研究の背景

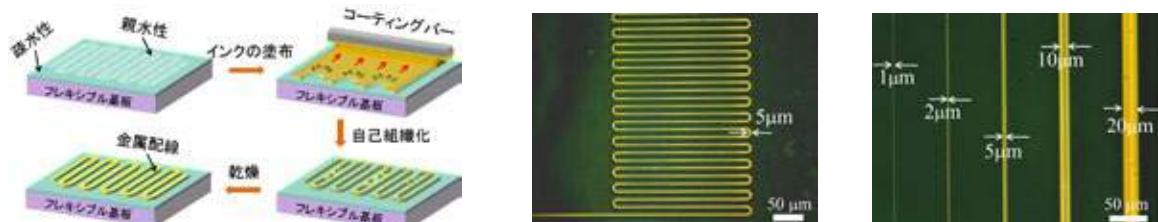
- Society 5.0実現のため、ウェアラブルデバイスを実現したい。
- 低コスト・大面積の製造技術が求められている。
- フレキシブル材料を使うため、プロセスの低温化が必要。

研究の狙い

- 室温印刷によるエレクトロニクスの形成
- 印刷による配線、素子形成、実装技術の開発
- 次世代ウェアラブルデバイス製造の基盤技術とする。

最先端研究トピックス

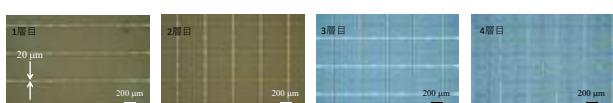
「室温プリンテッドエレクトロニクス」による微細印刷プロセス



全印刷工程による有機トランジスタアレイ



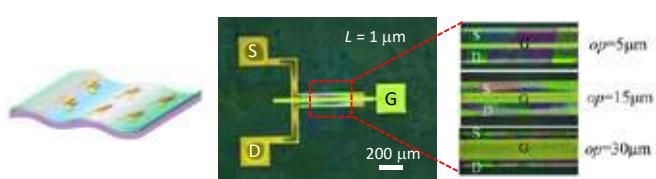
積層による3次元構造の形成



ウェアラブルセンサへの応用



全印刷短チャネル有機トランジスタ



応用分野と今後の展開

- プラスチックに低温で配線と薄膜トランジスタを形成
- ウェアラブルデバイス、IoTデバイス
- 医療、バイオ関連にも応用を検討

実用化へ向けた課題

- 実用化に課題なし
- 近日中に実際のデバイスに適用
- 株式会社プリウェイズより導入支援します

撥水性ゲート絶縁膜への有機半導体薄膜塗布技術

Coating method of organic semiconductor films onto hydrophobic gate dielectrics



機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター 分子機能化学グループ

坂本 謙二 SAKAMOTO.Kenji@nims.go.jp

- 有機半導体は低温・塗布プロセスにより製膜可能で、プラスチック基板上にデバイス作製可能。

研究の背景

- 有機デバイスは低コスト、大面積、軽量、フレキシブルといった特徴をもつ。
- ウエアラブルデバイス、スマートカード、情報タグ、フレキシブルシートディスプレイへの応用が期待。

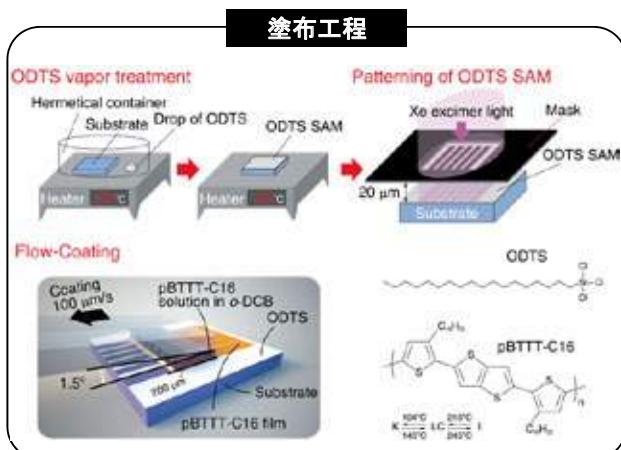
- 有機デバイスの実用化へのキーは、高性能化、高動作安定性、素子特性のばらつきの低減。

研究の狙い

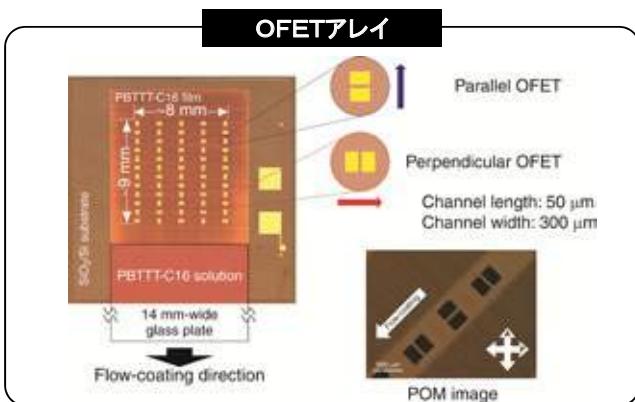
- 分子配向を制御し、高性能かつ高均一な有機薄膜を形成する技術の開発。
- 高動作安定有機電界効果トランジスタ(OFET)を実現するための撥水性ゲート絶縁膜への有機薄膜塗布技術の開発。

最先端研究トピックス

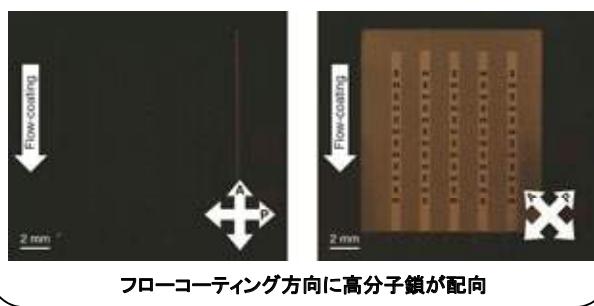
セルフアシテッド・フロー・コーティング法



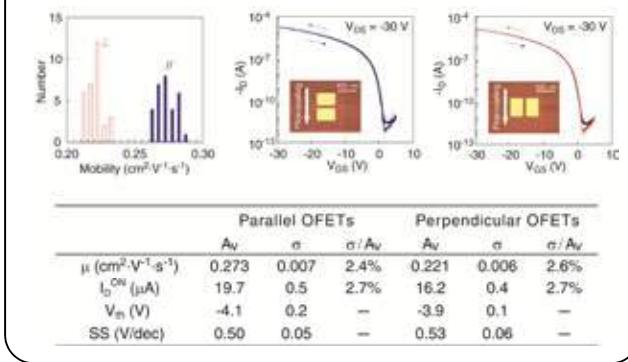
高分子OFETアレイの特性評価



pBTTT-C16薄膜の偏光顕微鏡(POM)写真



OFET特性



応用分野と今後の展開

- プリンタット・エレクトロニクスにおける薄膜形成プロセス
- 高分子有機半導体の高配向化による移動度の増強の実現
- フッ素樹脂ゲート絶縁膜上への分子配向制御塗布技術の開発

実用化へ向けた課題

- 高性能、高動作安定、特性のばらつきの少ない有機トランジスタの実現
- 生産ラインに組み込み可能な分子配向制御塗布技術の開発
- 連続、大面積塗布に対応できる装置の設計・試作

「液体」エレクトレットの開発

Functional liquids toward electret applications



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノマテリアル分野 フロンティア分子グループ

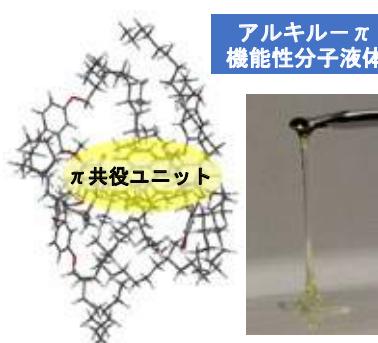
中西 尚志 NAKANISHI.Takashi@nims.go.jp

研究の背景

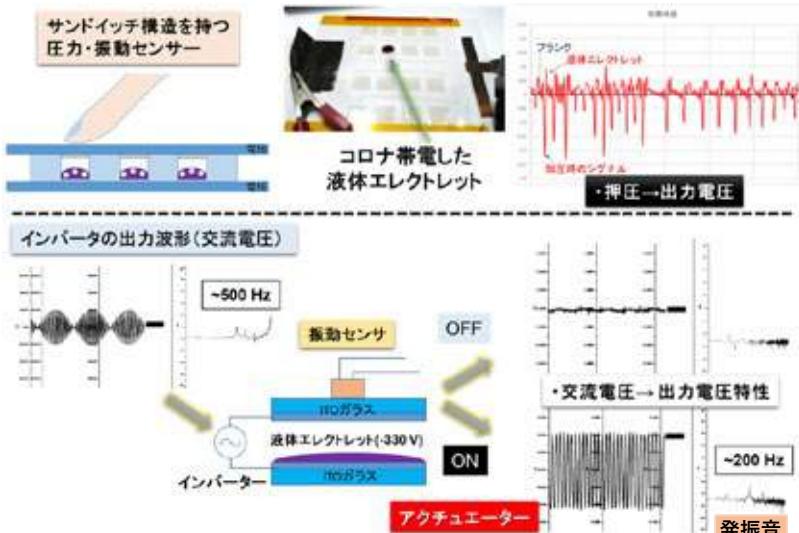
- 有機・高分子材料の最大の利点である素材の「柔らかさ」を活用した斬新な物づくり→液体材料
- 液体物性と π 共役分子固有の光電子物性を兼ね備えた新奇液体材料の設計概念の確立
- ストレッチャブル素子に適応可能(形状に依存しない)であり、安定に機能発現する材料創成
- 柔軟且つ嵩高い分岐側鎖により π ユニットを隔離し、安定に π 分子固有の光電子機能を活用
- 隔離された π ユニットに電荷を注入し、液体エレクトレット(電荷を半永久的に保持)化
- 液体物性とエレクトレット機能を兼ね備えたストレッチャブル・ウェアラブル素子の開発

研究の狙い

最先端研究トピックス



液体エレクトレット素子



機能性液体分子の分子設計概念:

機能性 π 共役ユニットを柔軟且つ嵩高い分岐アルキル鎖により隔離・孤立・安定化させ、同時に融点、粘性の低下。

- ① 青色発光(アントラセン・ビレン)液体
 ② フルカラー、白色発光液体へ改質
 ③ エレクトロクロミズム、スピンドルon-off可能な多機能液体
 ④ フラーレン(ナノカーボン)液体
 ⑤ ポルフィリン・フタロシアニン液体

アルキル化 π 分子液体に電荷注入して得られるエレクトレットを基材とした振動・圧電・センサ(=電池レス電源)(上)、および交流電圧を変調発振するアクチュエータ(=アコースティック素子)(下)。

参考文献

- A. Ghosh, T. Nakanishi, *Chem. Commun.*, **53**, 10344–10357 (2017). Feature Article
 · T. Nakanishi et al., *Chem. Asian J.*, **13**, 770–774 (2018).
 · 吉田学, 末森浩司, 中西尚志, ゴッシュアビット, “電子装置”, 特願2017-124302.

まとめ

- π 共役部位を分岐アルキル鎖で隔離、不揮発性「液体」を創成
- 圧力・振動一発電する液体エレクトレット(電池レス電源)を創成
- アコースティック・アクチュエータ素子を創成

実用化への目標

- 形状加工・環境耐性に秀でた機能性液体の開発
- ストレッチャブル発電・センサ・アクチュエータの開発
- 電池レス電源化→ウェアラブル医療器具応用

電気化学インピーダンス統合解析ソフトの開発

Development of integrated analysis software for electrochemical impedance



機能性材料研究拠点 機能性粉体・セラミックス分野 セラミックスプロセッシンググループ

小林 清 KOBAYASHI.Kiyoshi@nims.go.jp

研究の背景

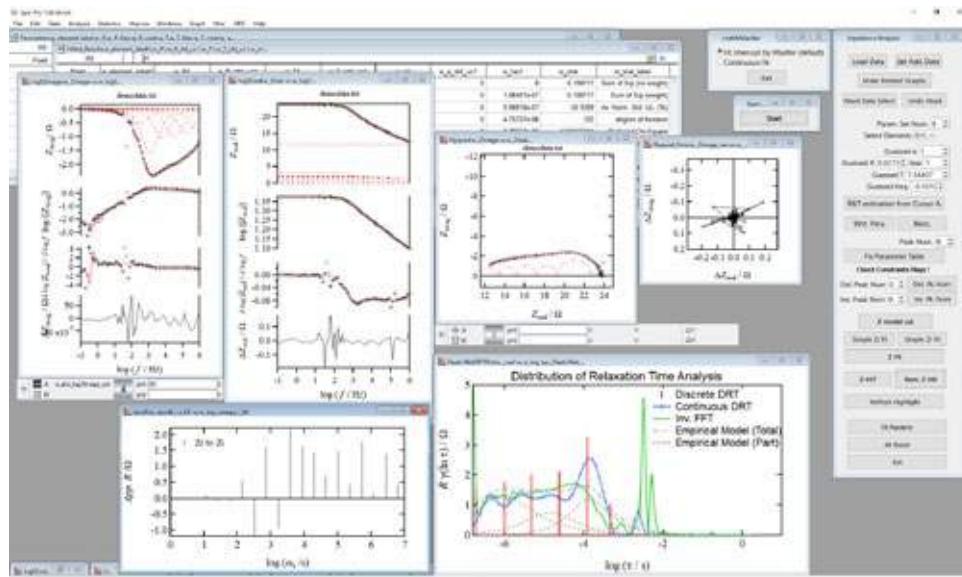
- 電気化学インピーダンス解析における解析モデルの曇昧さ
- 様々な解析法が複数のソフトウェアに分散(解析法ごとに異なるソフトウェア)
- 新規機能実装の遅れ

研究の狙い

- 高機能GUI実装による経験則パラメータ利用の排除:物理解釈が可能なモデル構築
- 様々な解析法を1つのソフトウェアに統合化
- 新機能開発のベースプラットフォームソフトウェア

最先端研究トピックス

All in One Package!



自動解析機能

- 独自の簡易人工知能アルゴリズムを実装

局所モード解析

- 微分インピーダンス解析法を実装

緩和時間分布解析

- 独自の離散緩和時間分布解析
- 連続緩和時間解析

逆フーリエ変換法

境界拘束付きElastic Net正則化最小自乗法

独自に開発したDRT法

二次電池、キャパシタースペクトル対応型

動作環境

- Igor Pro (WaveMetrics, USA) マクロコード, v. 6.36以上, v. 8対応済
- Windows, MacOS対応

主要機能

- ###### グラフィック表示機能
- 全スペクトル情報の並列表示
 - 部分スペクトル自動表示
 - 部分スペクトル強調表示機能

モデル構築支援機能

- GUI型モデル構築支援機能
- グラフとコントロールパネルのドラッグ & クリック操作のみ

スペクトル・フィッティング

- 複素非線形最小自乗法(LM法)

KK変換テスト

- 従来法
- 経験則法
- Z-HIT法
(二次電池、キャパシター対応)

その他、新機能の開発を継続中

応用分野と今後の展開

- 電気化学インピーダンス全般(電池、キャパシター)
- 様々なスペクトルでの解析実績の積み上げ
- スペクトル機械学習解析点の展開

実用化へ向けた課題

- 本ソフトウェアの普及活動
- 解析結果の計算化学へのフィードバック
- 高級言語を用いた独立ソフトウェア化

Combining DFT methods and informatics approaches for efficient search of novel fast ion conductors



Randy Jalem

Center for Green Research on Energy and Environmental Materials / Interface Computational Science Group
JALEM.Randy@nims.go.jp

Background

- Recently, there is a rapidly growing interest in the efficient and systematic screening of novel inorganic fast ionic conductors for battery application by high-throughput (HT) DFT calculations and materials informatics (MI).
- Two of the major issues that have to be addressed are: (1) finding effective material descriptors for predicting material properties and (2) the prohibitive cost of evaluating material properties by HT-DFT calculations.
- To develop material descriptors for training machine models of material properties with sufficient accuracy.
- To find promising inorganic materials as quickly as possible by HT-DFT and MI techniques.
- To screen for inorganic materials that are practical for battery application by checking various material property metrics.

Aim

Advanced Research Topics

General descriptor development for inorganic materials*

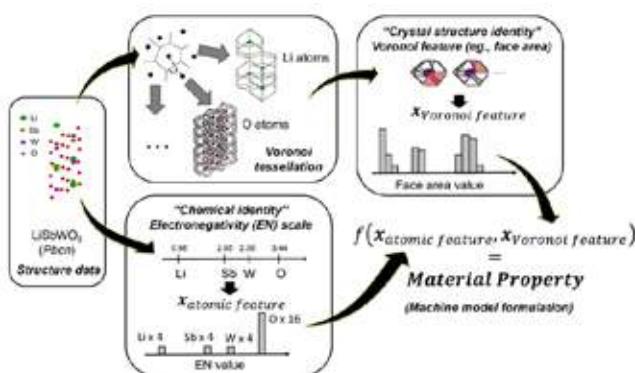


Figure. A general representation scheme for crystalline solids based on Voronoi-tessellation real feature values and atomic property data (EN+VORO descriptors).

Bayesian-Driven First-Principles Calculations for Accelerating Exploration of Fast Ion Conductors for Battery Application**

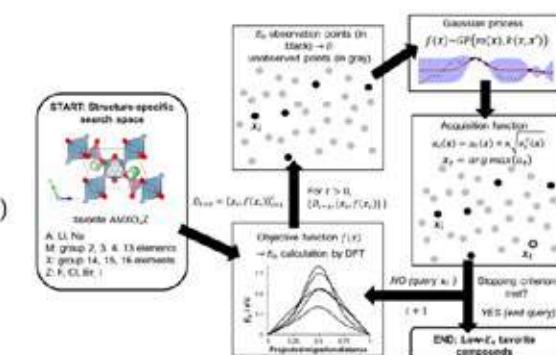


Figure. Schematic workflow for the proposed Bayesian-optimization-driven DFT-calculated migration energy (E_b) search for favorite $AMXO_2$ compounds.

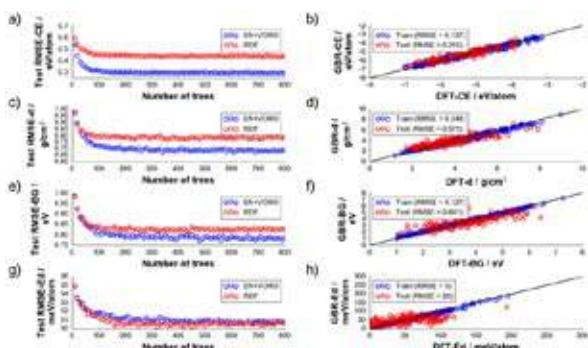


Figure. Test dataset grand average error (from 100 random data splitting) comparison between EN+VORO and RDF-based descriptors for DFT calculated material properties: a) cohesive energy, c) density, e) band gap, and g) decomposition energy by gradient boosting regression. Datasets are comprised with 1000 Li-based oxides from Materials Project.

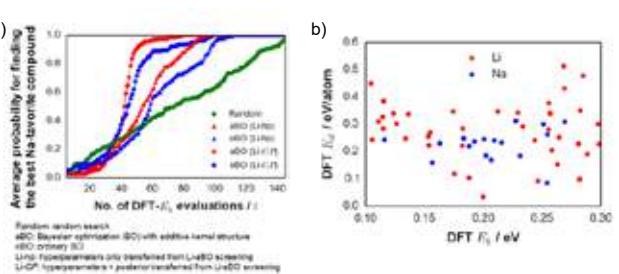


Figure. a) BO-driven material search with transfer learning, from Li-favorite space to Na-favorite space: Performance comparison for additive BO (aBO), ordinary BO (oBO), and random search using Na dataset (averaged from 50 trials). b) DFT-calculated decomposition energy (E_d) of favorite compounds with $E_b < 0.3$ eV.

*Randy Jalem, Masanobu Nakayama, Yusuke Noda, Tam Le, Ichiro Takeuchi, Yoshitaka Tateyama, Hisatsugu Yamasaki, Sci. Tech. Adv. Mater. 2018, 19, 231-242.

** Randy Jalem, Kenta Kanamori, Ichiro Takeuchi, Masanobu Nakayama, Hisatsugu Yamasaki, Toshiya Saito, Sci. Rep. 2018, 8, 5845.

Summary

- The newly proposed EN+VORO descriptors was successfully tested by predicting various material properties.
- A Bayesian-driven DFT-based solid electrolyte screening was realized with transfer learning for favorite-type compounds.

Research outcome

- Encoding crystalline solids using structural descriptors of binned Voronoi-tessellation real feature values and chemical descriptors based on the electronegativity of elements.
- Formulation of an efficient informatics-aided HT-DFT workflow for screening for novel solid electrolyte materials.

データ科学と新DACによる新超伝導体の発見

Discovery of new superconductor by using MI and new DAC



MANAナノフロンティア超伝導材料G
高野 義彦
TAKANO.Yoshihiko@nims.go.jp



MANAナノフロンティア超伝導材料G
松本 凌
MATSUMOTO.Ryo@nims.go.jp



MaDISデータプラットフォーム
HOU, Zhufeng
HOU.Zhufeng@nims.go.jp



CMI²エグゼクティブアドバイザー
寺倉 清之
TERAKURA.Kiyoyuki@nims.go.jp

研究の背景

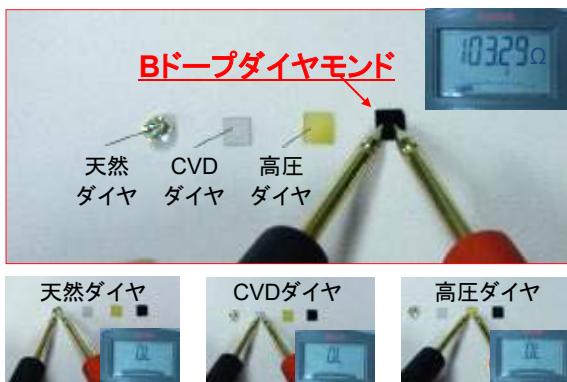
- ガス原料から作製するCVDダイヤモンドは、安価で、導電性の制御可能で、かつ自在なパターニングが可能
- 導電性CVDダイヤモンドは、高温、低温、高圧力、また腐食環境などで安定動作するプローブとして応用可能
- 近年、様々な高性能超伝導体や熱電材料が、高圧力下で実現するという報告

研究の狙い

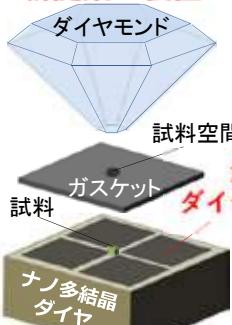
- CVDダイヤモンドの新たな応用先の探索
- データ科学を活用した、新たな機能性材料のデザイン
- デザインした材料を実際に合成する手法のデモンストレーション

最先端研究トピックス

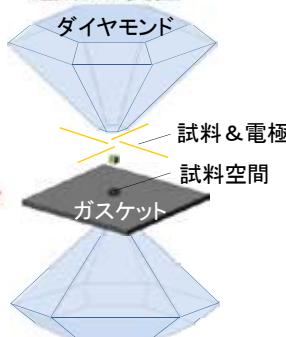
<導電性CVDダイヤモンドの極限環境動作プローブ応用>



新提案の装置



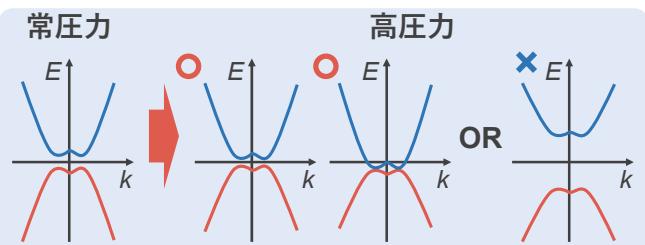
通常の装置



金属ダイヤモンド電極をパターニングした新提案の高圧装置
通常の装置で必須な**試料への電極端子付け**が不要

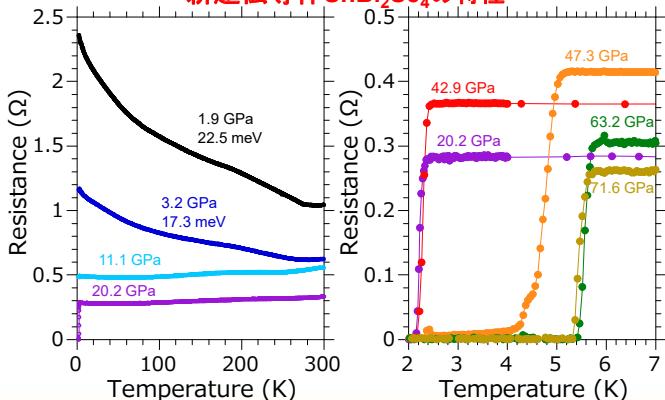
まとめ

- CVDダイヤモンドの導電性制御とパターニングに成功
- 新しい高圧力下物性測定装置の開発に成功
- データ駆動型超伝導体探索の手法の提案と成功例



27個の候補→試料合成→新超伝導体の発見

新超伝導体SnBi₂Se₄の特性



実用化への目標

- ダイヤモンドのパターニングの受け入れ態勢の確立
- 高圧力装置の応用研究への発展
- 超伝導以外(半導体、熱電材料)のデータ駆動的デザイン

機械学習を用いた光電子収量分光(PYS)の閾値の判定

Determination of threshold of photoelectron yield spectroscopy (PYS) using machine learning



国際ナノアーキテクニクス拠点 ナノマテリアル分野 ナノ電子デバイス材料グループ
柳生 進二郎 YAGYU.Shinjiro@nims.go.jp

研究の背景

- 現実空間をデジタル空間で取り扱うデジタルツイン
- 機械学習・深層学習などの手法を用いたデータ駆動型の研究開発
- 大量の計測データを自動処理する解析のニーズ

研究の狙い

- 計測データの自動解析法の開癵
- 比較可能な解析データ
- Dataの収集と利活用

最先端研究トピックス

概要

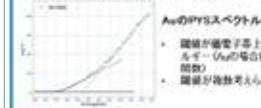
- 光電子放出閾値を自動で判定するアルゴリズムを機械学習により開発
- このアルゴリズムにより、人によるばらつき、解析時間を解消

【背景】

- 有機半導体などの特性評価に光電子収量法(PYS)を利用
- そのスペクトル解析において、人による解析のばらつきや、解析時間が問題

【解析の現状】

- 一つ一つのスペクトルを人が解析
- 解析のばらつき(閾値が複数考えられる場合など)
- 多くの解析時間が必要
- Fittingによる解析も行われているが、人による解析との違いが大きい。

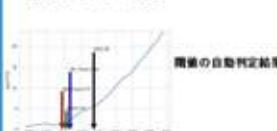


【成果】

- 計算データを利用した機械学習を開発判定に適用
- Fittingによる自動解析より高速でノイズに強い
- 熟練した解析者が解析した結果とほぼ一致

【今後】

- 多くの実験データを用いての検証と機械学習モデルの改良

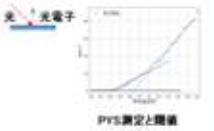


背景

- 光電子放出測定は材料開発において重要
- 解析者による解析ばらつきと解析時間の問題

【現状認識】

- 有機半導体や電極材料開発において、電子ホールが移動する価電子帯エネルギー位置やHOMOレベルが重要
- この値は、光電子分光量分光(PYS)により、光電子放出閾値から求める(PYSの1/2乗強度とバックグラウンドとの交点)
- 閾値解析はスペクトルデータを人によって求めている。そのため、解析者によるばらつき、解析時間が問題
- 自動解析の手法として、機械学習による判定と最小二乗Fitting
- 解析モデルが少ない

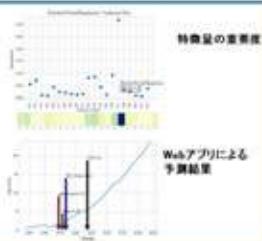


成果・今後

- 決定木アンサンブルモデル(特微量の説明が可能)でよい性能
- 多くの実験データによる検証が必要

【成果】

- 説明変数データの規格化が不要な決定木系のアンサンブル識別機(Random ForestとGradient Boosting)でよい性能
- 特微量の重要度を可視化
- 自動判定ができるWebアプリを開発
- Fittingに比べノイズに対して強く高速



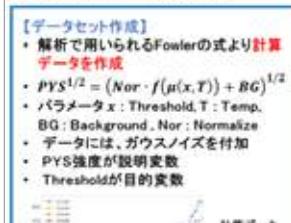
【今後の課題】

- 多くの実験データの収集
- 実験データの検証と、検証結果を踏まえた機械学習モデルのアップデート
- 深層学習モデルの利用
- 新しい解析モデルの構築

説明変数	目的変数
Explanatory variables	Objective value
f1, f2, f3, f4, ..., fn	label
[2, 5, 8, 3, ..., 50]	[4.8]
[3, 8, 5, 10, ..., 30]	[5.5]
[0, 0, 5, 2, ..., 25]	[5.8]

機械学習

- 目的変数(教師データ):光電子閾値
- 説明変数(特微量):スペクトル強度(PYS^{1/2})
- PythonのScikit-learnを利用



データセット作成	データ洗浄
解析で用いられるFowlerの式により計算データを作成	データの数(N個)特微量+目的変数 × セット数
$PYS^{1/2} = (Nor \cdot f(\mu(x, T)) + BG)^{1/2}$	データを、学習データと検証データに分割
パラメータ x : Threshold, T : Temp, BG : Background, Nor : Normalize	PythonのScikit-learnを利用
データには、ガウスノイズを付加	
PYS強度が説明変数	
Thresholdが目的変数	

説明変数(特微量)	目的変数
Explanatory variables	Objective value
f1, f2, f3, f4, ..., fn	label
[2, 5, 8, 3, ..., 50]	[4.8]
[3, 8, 5, 10, ..., 30]	[5.5]
[0, 0, 5, 2, ..., 25]	[5.8]

応用分野と今後の展開

- 計測データの自動解析分野
- 機械学習ベースにした新しい計測法の開発
- 品質検査装置への応用

実用化へ向けた課題

- 予測精度を高めるための、検証データの取得とモデルの改良
- 新しいシミュレーションモデル(物理モデル)の構築
- ソースプログラミングのオープン化と検証

材料探索に革新的アプローチを提供： マテリアルキュレーション®

Revolutionary approach to material research: Materials Curation®



国際ナノアーキテクニクス研究拠点 ナノマテリアル分野 ナノ電子デバイス材料グループ

吉武 道子 YOSHITAKE.Michiko@nims.go.jp

- 革新的な材料を開発するには、常識にとらわれずに、従来の延長線上でない材料を探索する必要。

研究の背景

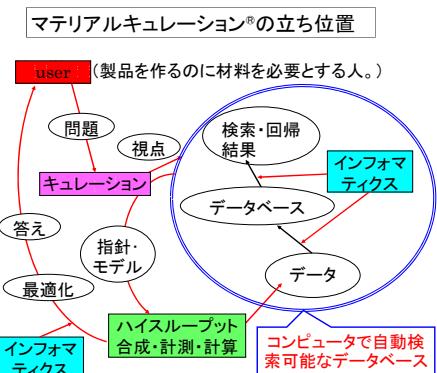
- 一見発想の飛躍と見える発見も科学原理に立脚している。
- 専門分野に囚われずに科学原理を俯瞰することで、従来の延長線上でない材料の探索が可能。

- 物質の多くの性質(電気伝導率、光吸収特性、生成エンタルピーなど)の間には、互いに科学原理に基づいた様々な関係が存在するが、分野が離れていると関係性に気づくことが困難。

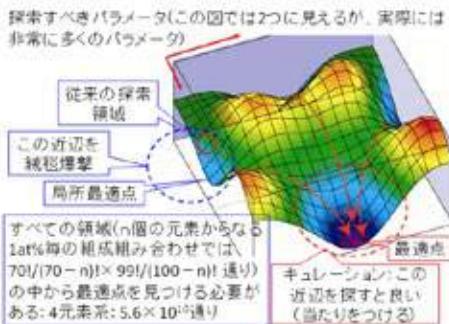
研究の狙い

- MSP物性間の関係性のデータベース化・関係性探索システムの開発により、俯瞰的材料探索を可能に。

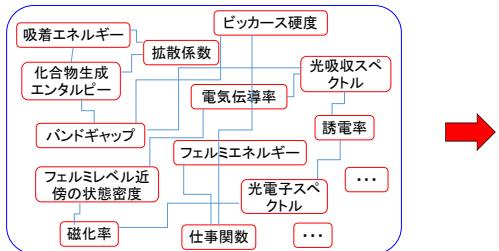
最先端研究トピックス



望む特性を左右するパラメータの種類・数はあらかじめ予測できず、すべてを網羅することは実質的に不可能

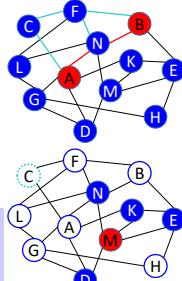


様々な物性間の関係例



2点間の関係性の情報の集合体として、全体の関係性を表現するグラフを作成し、グラフ理論を用いて経路探索することで、分野横断的・俯瞰的に、物性間の関係性を見つける
→ 望みの特性を発現する従来と異なる方法

- ◎ path between (A) and (B)
 - shortest
 - within (i) connections
 - all paths
- ◎ search properties around (M) within (n) connections



デモンストレーション

プロトタイプシステム開発：

自然言語解析による単語間関係性抽出と探索ツール化

(共同研究)富士通株式会社/株式会社富士通総研

文献

- ・吉武道子他, 表面と真空, 61, (2018) 200.
- ・吉武道子, 日本金属学会誌, 80, (2016) 603.
- ・吉武道子, 表面科学, 36, (2016) 533.

応用分野と今後の展開

- 材料探索ツール
- 材料用途開発ツール
- 材料プロセス探索ツール

実用化へ向けた課題

- 物性間関係図の半自動作成技術
- 高度な検索システムの実装

スパース位相回復アルゴリズムによる特徴量イメージング

Imaging of characteristics by coherent x-ray diffraction with sparse phase retrieval algorithm



統合型材料開発・情報基盤部門 材料データ科学グループ

山崎 裕一 YAMASAKI.Yuichi@nims.go.jp

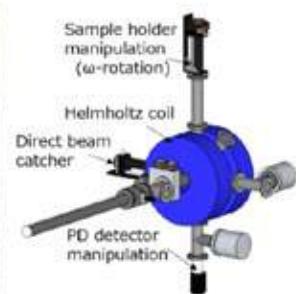
研究の背景

- 共鳴軟X線小角散乱・コヒーレント軟X線回折による実空間イメージング技術の開発
- スピントロニクスなどの新規エレクトロニクスデバイスにおける機能性計測への応用

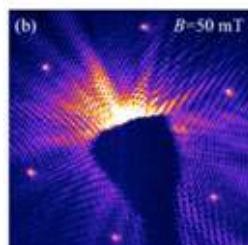
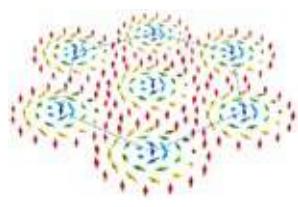
研究の狙い

- 情報科学技術を活用することで必要な情報を効率よく抽出する解析技術の開発
- 情報が欠損したデータやノイズが多いデータからも本質的なデータを抽出
- 時間分割計測や動作環境下オペランド計測への応用

最先端研究トピックス



共鳴軟X線小角散乱装置の開発：計測対象となる元素の吸収端に共鳴するエネルギーの軟X線を使うことで磁気散乱を観測。



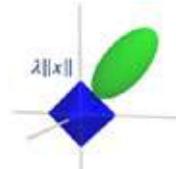
共鳴軟X線小角散乱による磁気スキルミオン格子の観測：
ナノメートルスケールの磁気構造体である磁気スキルミオンを共鳴
軟X線磁気散乱によって観測することに成功。

従来の解析手法

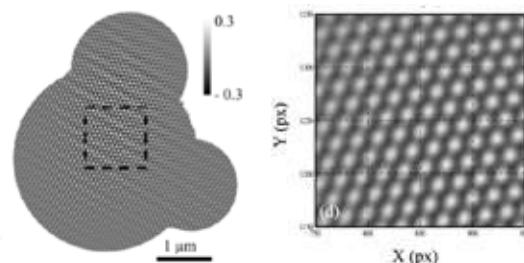
$$x = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left[\frac{1}{2} \|y - Ax\|_{\ell_2}^2 \right]$$

スパースモデリング

$$x = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \left[\frac{1}{2} \|y - Ax\|_{\ell_2}^2 + \lambda \|x\|_{\ell_1}^{\text{ES}} \right] \text{ L1-norm}$$



スパースモデリングを使った位相回復解析手法の開発：反復フーリエ変換法によって最小二乗法を解く従来の解析手法に代わり、計測対象のスパース性に着目したスパースモデリングを活用した解析手法を開発することで、精度が必ずしも良くない計測データから高効率に情報を抽出することに成功。



磁気イメージング：低対称マスクを用いた試料に対してコヒーレント
軟X線回折によって磁気スキルミオン格子の実空間イメージングを
観測することに成功。

文献

- ・山崎 裕一, 中尾裕則, 「共鳴軟X線回折法の新展開」, 放射光, 30 [1] 1-10 (2017)
- ・Victor Ukleev, Yuichi Yamasaki et al., "Coherent resonant soft X-ray scattering study of magnetic textures in FeGe", QUANTUM BEAM SCIENCE, 2 [1] 3(2018)

まとめ

- 低温・磁場下での共鳴軟X線小角散乱手法の開発
- コヒーレント軟X線回折イメージングにより、数十ナノメートルの空間分解能で磁気構造を観測
- 共鳴プロセスによる元素選択的イメージング

実用化への目標

- コヒーレント軟X線回折イメージング技術を、実デバイスのオペランド計測に応用
- スパースモデリングや機械学習を活用した解析技術の開発により高効率な情報抽出

マテリアルズ・インフォマティクスを用いた 材料設計スキームの構築

New energy materials design with materials informatics technique

統合型材料開発・情報基盤部門 エネルギー材料設計G



袖山 慶太郎

SODEYAMA.Keitaro@nims.go.jp



Guillaume Lombard

LAMBARD.Guillaume@nims.go.jp



Watcharop Chaikittisilp

CHAIKITTISILP.Watcharop@nims.go.jp

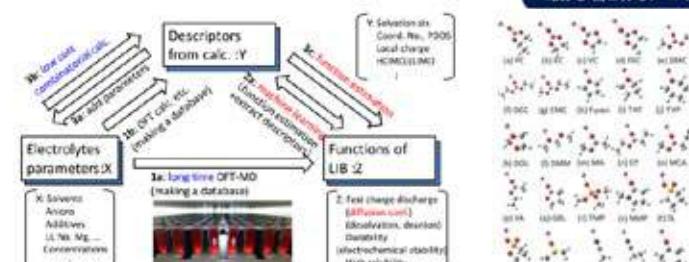
研究の背景

- 既に得られている実験データや計算データから、どのように機械学習手法を用いて新規材料を設計に結びつけるのか
- 新しい機能を発現するような新規材料をどのように見つけるのか
- 機械学習を用いて提案した材料を実際に実験的に合成し、機械学習にフィードバックする

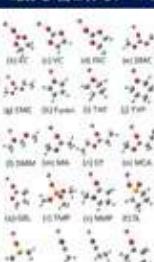
研究の狙い

- 実験データと計算データを組み合わせたデータベースを作成し、機械学習手法を用いて新規材料を設計する
- 機械学習手法を用いて新しい分子材料候補を、機能を絞り込みながら自動的に生成する
- 機械学習を用いて提案した材料を実際に実験的に合成し、結果を機械学習にフィードバックするサイクルを実現する

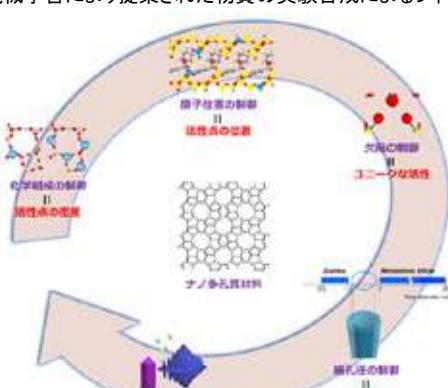
・DFT-MDシミュレーションによる電解液インフォマティクス



最先端研究トピックス

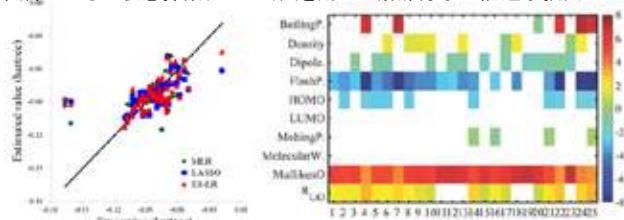


・機械学習により提案された物質の実験合成によるフィードバック



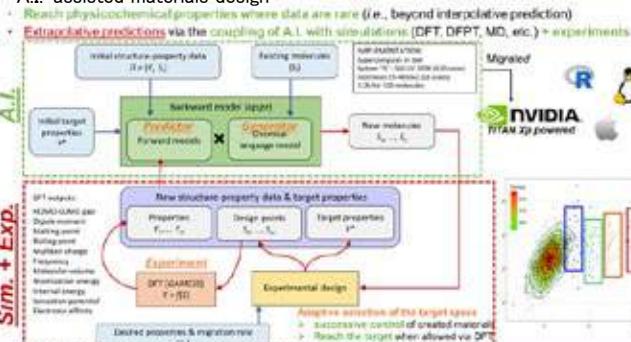
多孔質材料系を例に実験合成
熱による物質の吸着・移動の制御やエネルギー消費の
少ない分離技術などの応用へ

・線形回帰による全状態探索(ES-LiR)法を用いた溶媒分子の記述子抽出

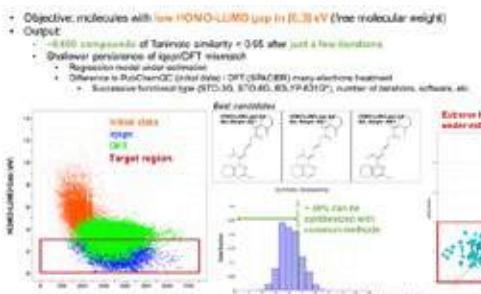


K. Sodeyama, Y. Igarashi, T. Nakayama, Y. Tateyama, M. Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press (2018). DOI: 10.1039/c7cp08280k

・A.I.-assisted materials design



・Objective: molecules with low HOMO-LUMO gap in [0.3] eV (low molecular weight)



まとめ

- 液体分子に関して第一原理計算データと実験値を統合し、機械学習により機能発現に効いている記述子を抽出。
- 機能予測をしながら新しい材料を大量に自動生成。
- 多孔質材料を例に機械学習により予測された材料を実際に合成し、予測ループへのフィードバックを行う。

実用化への目標

- DFT-MDシミュレーションによる大量のトラジェクトリーデータから計算コストのかからない特徴量を抽出し新規材料提案を行う。
- 液体材料提案のため、融点と沸点を制御した材料生成。
- エネルギー消費の少ない分離機能を持つナノ多孔体材料の合成。

測定データの自動収集システム

Automatic measurement data collection system for interoperability



統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター 材料データ解析グループ

吉川 英樹

YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp

研究の背景

- マテリアルズ・インフォマティクス(MI)を実現するための測定データの記録はどのようにすれば良いか?
- FAIR原則とは何か? FAIR原則にあるInteroperabilityを担保したデータ記録はどのようにすれば良いか?
- 計測機器メーカーが機種に強く依存する可読性が悪い略語やフォーマットで記述された測定データをどう記録すれば、共有でき活用し易くなるか?

研究の狙い

- 実験者によるInteroperableな記録を行う際に障害となる問題点の分析
- 実験者の手作業を最小化したメタデータの付与。実験データファイルからのメタデータ情報の自動抽出
- 計測機器メーカーの協力の元に行った、メタデータおよび実験条件/パラメータの語彙の自動翻訳ツールの製作

最先端研究トピックス

データ記録のFAIR原則とは?

Findable	メタデータがあり、検索で見つけられる
Accessible	データやメタデータにアクセスできる
Interoperable	データの相互運用ができる
Re-usable	ライセンスが明確でデータの再利用ができる

Interoperableなデータ記録に要求されること?

- (1) 「記録されていない」又は「分散して記録されている」
メタデータ情報の記録と集約
 - 分散しているメタデータ情報の例とは、
 - データ取得者が命名したデータファイルの名称やそのファイルを格納したフォルダの名称
 - データファイル中に埋め込まれている実験の主要情報
- (2) 「(1)のメタデータ」及び「装置が outputするデータファイル中の実験条件パラメータ」を記述する語彙の統制
 - 実験装置メーカーが機種に強く依存した略語や省略が行われているため可読性が低い
- (3) 多次元の数値データ行列の機械可読性の向上
 - 実験装置メーカーの独自のフォーマットが使用されているため、汎用的な機械可読性に欠ける

手入力する必須のメタデータの例 (ナノテクノロジープラットフォーム事業で推奨した必須メタデータ事例)

Category	Key (Label)	Value
data information	data ID	PXS123450
	previous stage of data ID	PXS098038
	relating data ID	n/a
	date(creation)	March 4, 2018
	person(operator)	Hideki Suzuki
	affiliation of person	NIMS
	source of data	characterization
	status to begin	Contaminated Ag plate
	status of end	Ag plate after surface cleaning by ion beam sputtering
	date (delivery)	March 4, 2018
material	note	PIN 634628, Stock#09178, Lot#L10M37, CAS: 7440-22-4
	instrument	PHI Quanta XRM
	organization of instrument	NIMS
	owner	
	action (category)	X-ray photoelectron spectroscopy
	action (free description)	checking silver sulfide (contaminant) of the sample
	person (operator)	Hideki Yoshikawa
	date (acquisition)	February 23, 2017
	note	field of view 100μm × 100μm
	cite	NIST XPS Database https://srdata.nist.gov/xps/
action	cite	n/a
	cite	n/a
references	cite	
	cite	

Interoperableなデータ記録を実現するには?

上記(1)と(2)に対して

実験装置メーカーの協力の元、実験の主要情報とメタデータ情報の記述を行う語彙の段階的な辞書化をNIMSで行う。ここで言う辞書化とは、「省略の無い標準的な語彙」と「メーカー依存性のある特殊な略語」との間の対応関係表や同義語のテーブルの作成などを指す。

上記(3)に対して

実験装置メーカー毎や実験手法毎に異なるフォーマット群を共通化する手間を避け、個々のフォーマット毎に完全な機械可読性を担保するScheme on Read型の記録を行う。

まとめ

- 実験者によるメタデータの手入力に際して人的ミスが頻発するため、メタデータの手入力は最小限に留めるべきで、代わりに装置が outputするデータからのメタデータの自動抽出が重要。
- 計測機器メーカーの協力を得て、実験の主要条件やメタデータの自動抽出とその翻訳作業(可読化)の自動化、ならびに多次元の数値データ行列のScheme on Read型の可読化を行った。

実用化への目標

- 対象とする計測手法を広げるため、計測機器メーカーへの協力を段階的に広げていく。
- 実験の主要条件やメタデータの自動抽出と自動翻訳のツールの公開。
- 実験データやメタデータを記述する語彙の辞書化のプラットフォームの構築。

文献データからの知識抽出

Knowledge extraction from literature data



統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター 材料データベースグループ

石井 真史

ISHII.Masashi@nims.go.jp

研究の背景

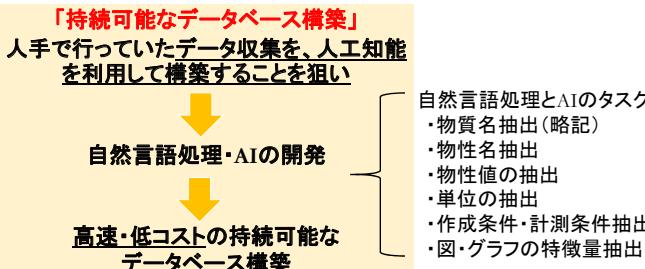
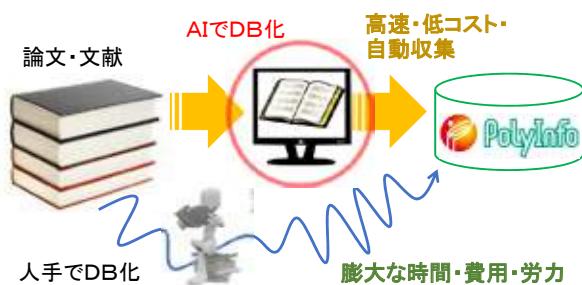
- 従来のデータベース：学術論文をキュレータが閲読。人手によりデータを抽出し、データベース化
- 学術誌数および論文数の増加：データベース維持にかかるコスト（時間・費用・労力）の膨大化
- 第三次人工知能ブーム：深層学習の発明による、知識・知能とコンピュータのランデブー

研究の狙い

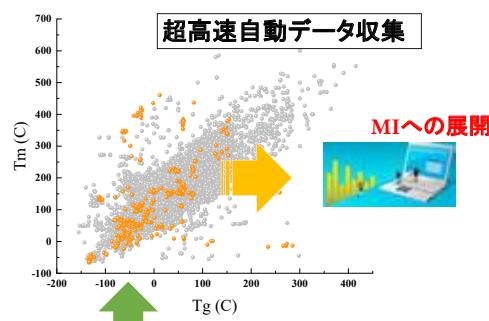
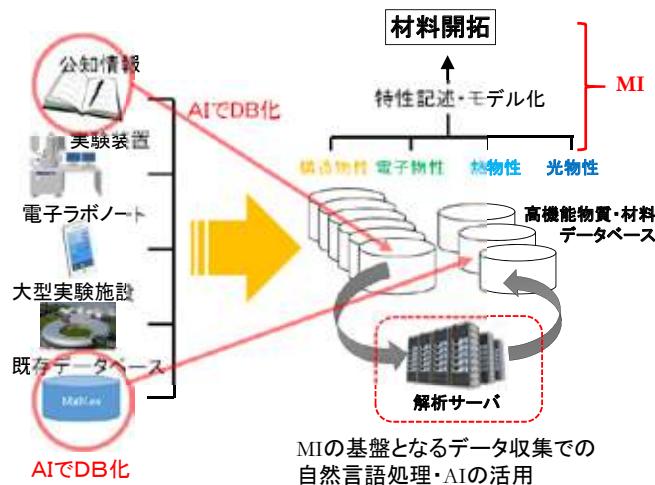
- 持続可能なデータベース構築：自然言語処理に特化した人工知能の導入。データベース維持にかかるコストを削減
- マテリアルズ・インフォマティクスの加速：公知情報からの情報抽出とデータセット化。記述子の自動収集
- ビッグデータによる物質・材料研究の体系化：研究基盤の強化と知識発見を促進するシステム作り

最先端研究トピックス

(1) NIMSデータベース強化



(2) DBからDSへ：マテリアルズ・インフォマティクスの加速



自動抽出成功例：
 - 平均分子量
 - ガラス転移温度
 - 融点
 - 熱分解温度
 - 溶融熱
 ...他

岡・吉澤

応用分野と今後の展開

- あらゆる文献データのオンデマンド抽出（過去の知識力）
- 情報の体系化による材料研究の俯瞰と戦略的強化（現在の知識力）
- 未知材料の開拓・知識発見（未来の知識力）

実用化へ向けた課題

- 文献リソースの確保・文献フォーマットの統一
- AIまたは辞書構築による、言語と表現のゆらぎの吸収
- エラーの最小化による、人手に勝る品質の確保

革新的な構造材料開発のためのマテリアルズインテグレーション(MI)システム

Materials integration (MI) system for the development of innovative structural materials



統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター 材料インテグレーショングループ

源 聰 MINAMOTO.Satoshi@nims.go.jp

研究の背景

- SIPにおける課題「革新的構造材料」では、強く、軽く、熱に耐える革新的な材料を開発し、航空機を始めとする輸送機器・発電等産業機器への実機適用を行うとともに、エネルギー転換・利用効率向上を実現することを目指し、4つの領域(A(高分子、FRP開発), B(耐熱、金属間化合物), C(コーティング), D(MIシステムの開発))で研究を推進している。

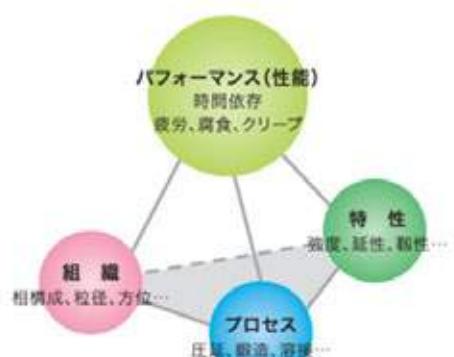
研究の狙い

- 航空機のエンジンおよび機体に用いられる部材を主な対象に、材料開発の大幅な時間短縮を可能にするシステムの開発を目的とする(d)マテリアルズインテグレーション、を研究開発項目を掲げ、研究開発を推進する。

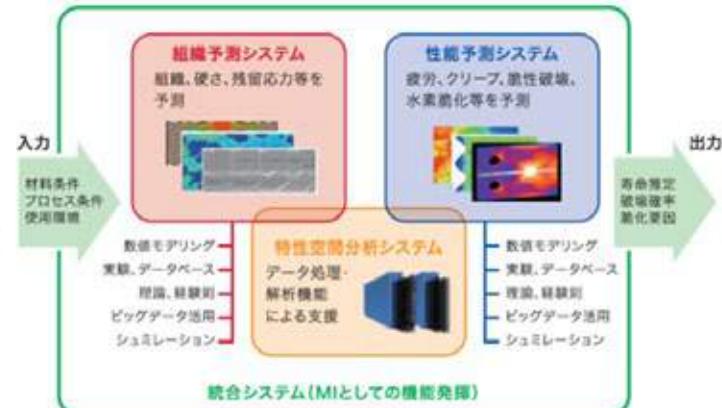
最先端研究トピックス

- これまでの材料科学の成果や経験知の活用と共に、データベース・実験・シミュレーション解析・ビッグデータなどの最先端の情報技術・科学技術を融合し、材料開発を工学的な視点に立って支援する総合的なシステムである「マテリアルズインテグレーション(MI)システム」の開発
- 開発時間の大幅短縮・開発の効率化・コスト削減、材料選択や利用加工プロセスの最適化、構造体の信頼性予測や診断・メンテナンス性の向上などに貢献
- 金属系MI、高分子MI、セラミックスMIの構築
- 研究拠点、人材育成、国際ネットワークの構築にも資するシステムの開発

MI:理論・実験・計算・データの融合



金属材料のMIシステム(高強度鋼の溶接継ぎ手性能を例題として先行実施)



応用分野と今後の展開

- 我が国が強い競争力を有する材料技術を基盤に、裾野産業も含めた航空機産業を育成、拡大させていく。
- さらに航空機材料以外の材料、金属、非金属などへの応用を目指す。

実用化へ向けた課題

- 実用開発を目的とした材料試験データなどの過去の知見の集約が大きな課題。

データ科学を活用した 鉄鋼材料クリープ特性記述モデルの選択

Model selection of creep property description model for steel using data scientific method

統合型材料開発・情報基盤部門 SIP-MI ラボ 特性空間分析チーム



伊津野 仁史 IZUNO.Hitoshi@nims.go.jp



東京大学大学院 工学系研究科 先端学際工学専攻

櫻井 憲也 sakurai-junya530@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

研究の背景

- 高温構造部材ではクリープ変形挙動が部材の性能を左右
- 短時間データからの外挿等を用いた高精度な推定は困難である

研究の狙い

- 取得済みのクリープデータから任意応力・温度での精密なクリープ変形挙動を予測する方法を確立
- 対象鋼種の基底クリープ強度において重要な説明因子を推定する
- 開発した予測手法を高温部材損傷予測モジュールへ展開

研究の背景

最先端研究トピックス

クリープ特性記述

- 高温構造部材評価に必須
- 実験点数が限られる
- 時間・コストの問題

シミュレーションによる特性評価

- 複雑構造にも対応(FEM)
- 逆問題等への拡張性
- 再現性

どのようなモデルを使ったらよいか?

- クリープ変形挙動(Norton則, θ 法...)
- クリープ強化機構(固溶強化, 析出強化, 組織変化)

限られた実験データからのモデル選択の必要性

Bayes自由エネルギー計算によるモデル比較

Bayes自由エネルギー

- 単純な誤差関数最小化→過学習の問題
- Bayes自由エネルギーによるモデル比較
- 過学習を避けることができる

モデルの事前分布 $\varphi(\mathbf{w})$, 測定データ $D = (x_1, x_2, \dots)$ とし,
周辺尤度 $Z(\mathbf{w}, D) = \int d\mathbf{w} p(x_1|\mathbf{w}) p(x_2|\mathbf{w}) \dots \varphi(\mathbf{w})$ を最大化
 \rightarrow Bayes自由エネルギー $F = -\log(Z(\mathbf{w}, D))$ を評価する

モデルが線形問題の場合

$$F = -\ln \left(\int d\mathbf{w} (\sqrt{\beta_1/2\pi})^N \exp \left(-\frac{\beta}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{w}\mathbf{x})^T I_N (\mathbf{y} - \mathbf{w}\mathbf{x}) \right) \right) \left(\sqrt{\beta_1/2\pi} \right)^c \exp \left(-\frac{\beta_1}{2} \mathbf{w}^T I_c \mathbf{w} \right)$$

データとモデルとの誤差 (バイアス)

モデルのデータに対する敏感さ (パリアンス)

Gr.91鋼クリープ構成式選択

非線形モデル $\varepsilon = \varepsilon_0 + A(1 - \exp(-\alpha t)) + \dot{\varepsilon}_s t + B(\exp(\beta t) - 1)$
に対し,

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + Au + \dot{\varepsilon}_s t + Bv; u = 1 - \exp(-\alpha t), v = \exp(\beta t) - 1$$

として u, v, t の線形問題に帰着

ハイパーバラメタ α/β のグリッドサーチを行った

クリープ構成式のBayes自由エネルギー比較

Bayes自由エネルギー値
-1995.57 < -2252.30

グリッドサーチ結果



θ 法(Wilshire, Evans, 1982)
 $\varepsilon = \varepsilon_0 + A(1 - \exp(-\alpha t)) + B(\exp(\beta t) - 1)$

修正 θ 法
 $\varepsilon = \varepsilon_0 + A(1 - \exp(-\alpha t)) + \dot{\varepsilon}_s t + B(\exp(\beta t) - 1)$

炭素鋼STB410の基底クリープ強度説明因子抽出

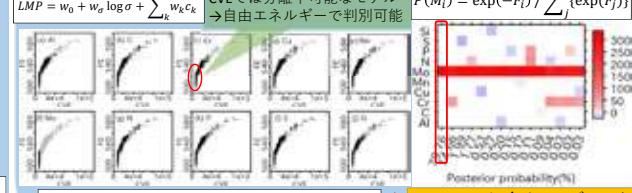
- 基底クリープ強度となる低応力応力域を対象に、クリープ強度の支配因子となる添加元素を探索する
- LMPを応力および組成を説明変数として回帰
- 組成全ての組み合わせからなる2¹⁰-1=1023パターンについて CVE/Bayes自由エネルギーを計算

CVEと自由エネルギーのスコア比較

対象炭素鋼の組成一覧	
Al	0.00~2.00
Si	0.00~2.00
Mn	0.00~2.00
Cr	0.00~2.00
Ni	0.00~2.00
Mo	0.00~2.00
W	0.00~2.00
Co	0.00~2.00
V	0.00~2.00
T	0.00~2.00
P	0.00~2.00
S	0.00~2.00

$$LMP = w_0 + w_{\sigma} \log \sigma + \sum_k w_k c_k$$

CVEでは分離不可能なモデル
→自由エネルギーで判別可能



単独の固溶元素のみに着目する限り
支配因子の判別は難しい

Moのみを含むモデルが
選択された

まとめ

- Bayes自由エネルギーによるモデル選択によりクリープ特性記述モデル選択を行った
- Gr.91鋼のクリープ曲線に対し、定常項を含むクリープ構成式が選択された
- 炭素鋼の基底クリープ強度ではMoが重要な説明因子であることが示唆された

実用化への目標

- 設計に活用できる高信頼性モデル及び予測手法の確立
- MIシステムに組み込むモジュールの高性能化への適用

Information gains from images of typical metallurgical microstructures with machine learning and/or post-processing tools



Dmitry S. Bulgarevich

Research and Services Division of Materials Data and Integrated System / SIP-MI Lab

BULGAREVICH.Dmitry@nims.go.jp

Background

- In metallurgy field, there is a great demand to automate the image processing/analysis on huge data volumes
- Reported image segmentations were not at levels of industrial analytical standards for microstructural phase analysis
- This analysis is greatly important for understanding/predicting of mechanical properties of the metallurgical materials

Aim

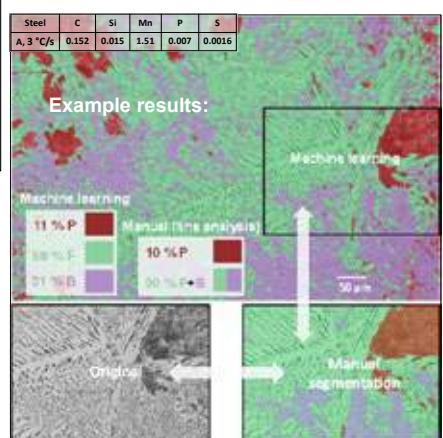
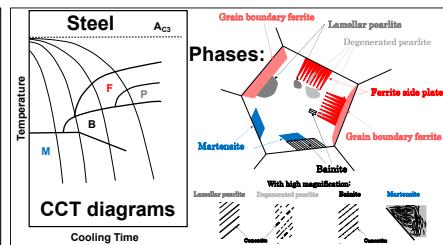
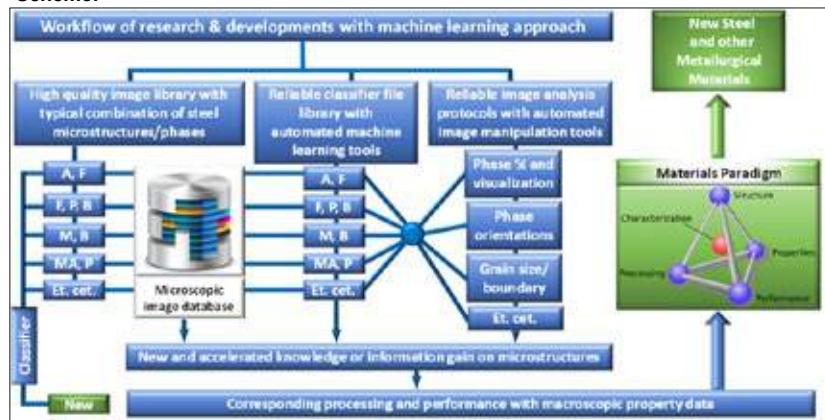
- Develop the application of several image segmentation methods, which are suitable for above challenges
- Test the applicability of Random Forest algorithm of machine learning as a possible core tool for such image analysis
- The automated metal phase segmentation quality must be in pair or better with manual analysis by experts

SCIENTIFIC REPORTS

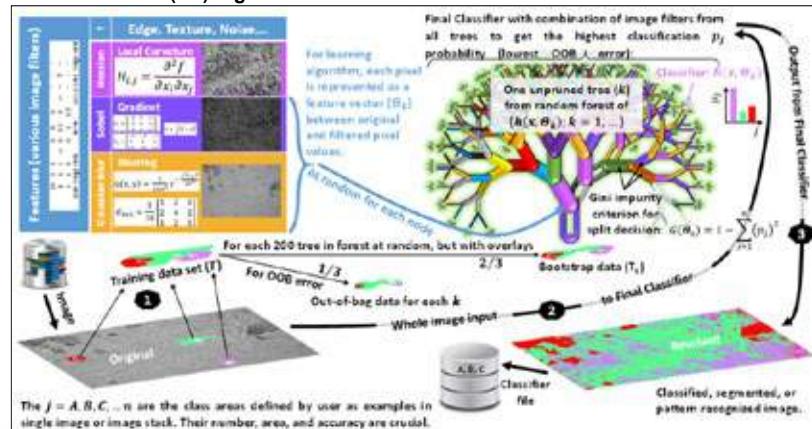
Advanced Research Topics

(2018) 8:2078 | DOI:10.1038/s41598-018-20438-6

Scheme:



Random Forest (RF) Algorithm:



- RF algorithm: ensemble-type supervised learning, most accurate, strong, unbiased, and stable. The trained RF classifier can be used on any number of other images with same classes.
- In combination with Structure Tensor, Euclidian Distance, and other image processing methods, it is an excellent tool for information gaining.

Applied area and future prospects

- Any metallurgical research/analytical laboratory
- Built-in software module in industrial microscopes
- Testing other possible machine learning tools and protocols

Issues for technology transfer

- Classifier robustness to image scale, contrast, and quality
- Supervised learning nature needs smart addressing or revision
- Coding for faster processing with addressing of above issues

キュリー温度のオントロジー解析

Analysis of Curie temperature by functional ontology



情報統合型物質・材料研究拠点 データ科学グループ

木野 日織 KINO.Hiori@nims.go.jp

北陸先端科学技術大学院大学 知識マネジメント領域

溝口 理一郎

- 高キュリー温度は磁石において重要な特性である。
- 従来の理論手法では実験値と一致するキュリー温度を予測するのは難しい。
- データ駆動手法は強力であるが偏りなく記述子を与えることもまた難しい。
- 機能オントロジーにより既存の理論手法とデータ駆動科学とを繋ぐ枠組みを構築したい。
- 希土類遷移金属二元系における重要な記述子を得たい。
- 希土類遷移金属二元系のキュリー温度を高精度に予測したい。

最先端研究トピックス

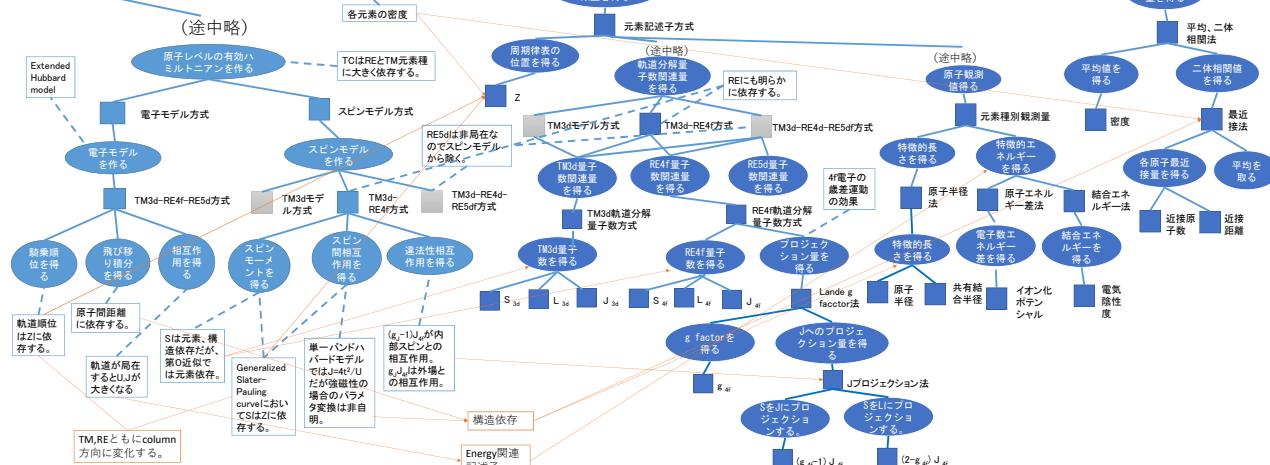
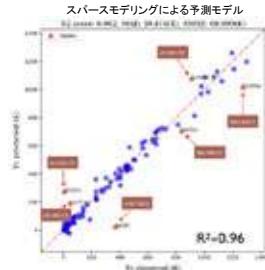
データ駆動科学において記述子選択は解析者に委ねられる。

Domain expertが持つ科学知識をデータ駆動科学の記述子選択に活かす枠組みにより、

Domain expertほど良いモデルの構築が可能になる。

研究者間の意思疎通が容易になる。

スペースモデリングによる物理的解釈を再びDomain expertが活用することが可能になる。



まとめ

- 機能オントロジーによる記述子候補生成枠組みを構築した。
- スペースモデリングにより重要な記述子の特定ができた。
- 高精度回帰モデルを生成した。

実用化への目標

- 多元素系磁石への拡張
- 構造探索

Ultralow thermal conductivity thin film with high interfacial thermal resistance design by machine learning



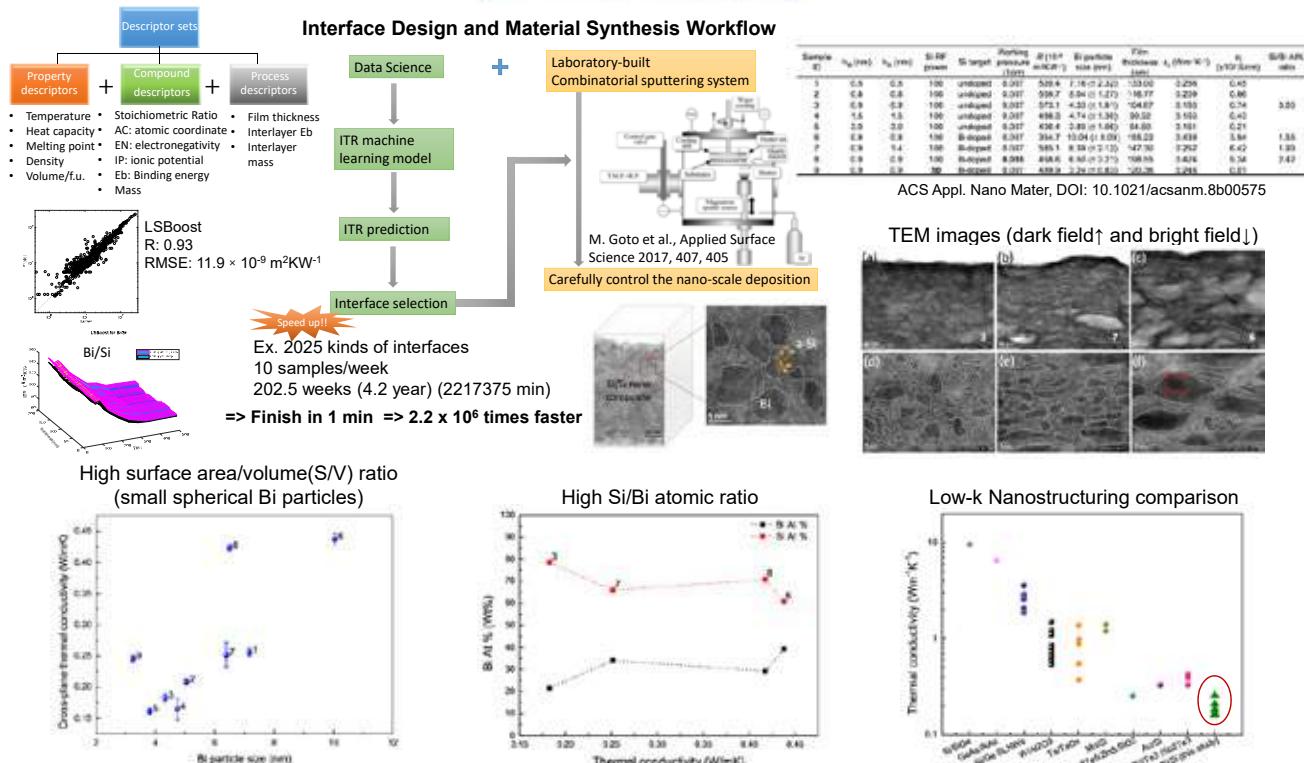
Yibin Xu, Yen-Ju Wu, Michiko Sasaki, Lie Fang, Masahiro Goto
MaDIS, Center for Materials Research by Information Integration
Thermal Management and Thermoelectric Materials Group
XU.Yibin@nims.go.jp

Background

- Ultralow thermal conductivity materials are strongly required by industrial applications of high-efficient-engine coatings, thermal insulating materials and thermoelectric devices.
- Thermal conductivity of nanostructured materials can be greatly decreased by interfacial thermal resistance (ITR), as phonon propagation at an interface is hindered.
- The physical models for ITR prediction, AMM and DMM, has low accuracy of 60% between prediction and experimental values, because ITR prediction is a high-dimensional mathematical problem.
- A more accurate model to predict ITR by machine learning based on experimental data, which taking into account of the physical, chemical and materials factors that may affect ITR.
- Exploration of potential material systems that may have high ITR.
- Inorganic thin films with thermal conductivity lower than $0.2 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, realized by composition design and nanostructure optimization.

Aim

Advanced Research Topics



- The cross-plane thermal conductivity decreases with decreasing particle size, and the lowest thermal conductivity of $0.16 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ is observed for sample 5. In the case where the particle size increases to greater than 10 nm (sample 6), the thermal conductivity substantially increases to $0.44 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.
- The intrinsic thermal conductivity of Bi and a-Si are 8 and $0.93 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, respectively. Thus, BiSi nanocomposites with a higher Si At% tend to exhibit a lower thermal conductivity.
- The Bi/Si thin films in this work have the lowest thermal conductivity reported for an inorganic nanocomposite to date.

Summary

- The combination of a machine learning prediction model and a combinatorically structure optimization method enables the discovery and realization of an electrically conductive, thermally insulating Bi/Si nanocomposite with thermal conductivity as low as $0.16 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.
- The exploration of material systems for thermal management can be greatly accelerated through machine learning with higher accuracy of 93%.

Research outcome

- The materials informatics methods used in this work are also valid to explore and develop other new structural and functional materials.
- Application of the Bi/Si nanocomposite as thermal insulating coating and thermoelectric material is under investigation.

NIMS Open Facility

～ 利用方法 ～

NIMS Open Facility

～ How to Use ～



技術開発・共用部門 部門長
小出 康夫
KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



技術開発・共用部門 副部門長
花方 信孝
HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

利用窓口
事務統括室
chukaku@nims.go.jp

事業の狙い

- NIMSでは、最先端の研究施設・設備を民間企業・大学等・公的研究機関の研究者・技術者の皆様が利用できる環境・体制を提供しています。

NIMS Open Facility の 5つのメリット 5 Advantages of NIMS Open Facility



選べる3つの利用形態

3 Types of Services

機器利用 Share-use

利用者のみで装置を操作します
Users can operate the equipment by themselves.

技術指導 Technical guidance

NIMS職員の指導の下で実験等を行います
Users can operate the equipment with appropriate help from NIMS staff members.

技術代行 Technical substitution

NIMS職員に分析・解析・加工等を依頼します
NIMS staff members rather than users operate the equipment.

文部科学省

ナノテクノロジープラットフォーム

Nanotechnology Platform Japan

も利用できます。

利用報告書 公開 (2年間の公開猶予あり)

**微細構造解析、微細加工、
分子・物質合成** の3つの技術領域

審査があります

利用方法 How to Use

まずはお気軽にご相談ください。



NIMS Open Facility

検索



NIMS Open Facility ～ ユーザースクール～



NIMS Open Facility ～ User School～



技術開発・共用部門 部門長
小出 康夫
KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



技術開発・共用部門 副部門長
花方 信孝
HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

申込窓口
事務統括室
user-school@ml.nims.go.jp

参加者募集！

物質・材料研究機構(NIMS)では、一般の機関では導入が難しい先端的な研究設備をはじめ、多くの研究設備をNIMS外の方に利用開放しております。これらの共用設備を身近なものにしていただくために、平成29年度からユーザースクールを開催し、多くの方にご参加いただいております。平成30年度も引き続き、ユーザースクールを開催しております。

平成30年度は、材料分析、観察・解析、微細加工、ナノバイオの4つの分野で、16講座を上期、下期でそれぞれ1回ずつ講座を開催します。各講座は、少人数制で受講者のレベルに合わせた内容となっております。装置を扱ったことがない初級者はもちろん、すでに基礎は身に着けている中級者、さらには装置や技術を極めたい上級者まで、各人のスキルレベルに合わせて受講できますので、スキルレベルの向上や、今後の研究・開発にお役立てください。

参加費 無料

分野	No	装置・技術	対象	講習形式	開催日	時間	定員	開催場所
材料分析	01	X線回折	初級者	座学と実習	上期： 7月27日（金） 下期： 11月16日（金）	13:00 - 17:00	4名	千現地区
	02	ICP発光分光分析	初級者	座学と実習	上期： 9月28日（金） 下期： 11月22日（木）	13:00 - 17:00	4名	千現地区
	03	TOF-SIMS/XPS	初級者	座学と実習	上期： 6月29日（金） 下期： 11月 8日（木）	13:00 - 16:00	10名	千現地区
	04	SEM+EDS	初級者	座学と実習	上期： 5月31日（木） 下期： 10月11日（木）	10:00 - 16:00	4名	千現地区
観察・解析	05	ローレンツ電子顕微鏡	初級者	座学と実習	上期： 9月13日（木） 下期： 12月13日（木）	13:30 - 16:30	2名	並木地区
	06	透過型電子顕微鏡による 材料解析基礎と応用	初級者	座学と実習	上期： 9月20日（木） 下期： 12月13日（木）	9:00 - 16:30	2名	千現地区
	07	スピニ偏極低エネルギー 電子顕微鏡	初級者	座学と実習	上期： 6月28日（木） 下期： 12月 6日（木）	13:00 - 17:00	2名	千現地区
	08	走査型プローブ顕微鏡	初級者	座学と実習	上期： 6月25日（月） 下期： 12月17日（月）	13:00 - 16:30	2名	千現地区
	09	ガス吸着分析	初級者	座学と実習	上期： 7月26日（木） 下期： 12月 6日（木）	14:00 - 17:00	4名	千現地区
微細加工	10	EB描画(基礎)	初級者	座学と実習	上期： 8月 8日（水） 下期： 12月 5日（水）	10:00 - 17:00	3名	千現地区
	11	EB描画(応用)	中級者	座学と実習	上期： 8月22日（水） 下期： 12月19日（水）	10:00 - 17:00	3名	千現地区
	12	マスクレス露光(基礎)	初級者	座学と実習	上期： 7月11日（水） 下期： 11月 7日（水）	10:00 - 17:00	3名	千現地区
	13	マスクレス露光(応用)	中級者	座学と実習	上期： 7月25日（水） 下期： 11月21日（水）	10:00 - 17:00	3名	千現地区
ナノバイオ	14	LC-MS/MS	初級者	座学と実習	上期： 7月13日（金） 下期： 10月12日（金）	10:00 - 16:00	4名	千現地区
	15	細胞の観察と計測	中級者	座学と実習	上期： 8月 3日（金） 下期： 11月16日（金）	10:00 - 16:00	3名	千現地区
	16	遺伝子発現定量	中級者	座学と実習	上期： 9月14日（金） 下期： 12月 7日（金）	10:00 - 16:00	4名	千現地区

【個別スクール（有償）】

参加者を1機関に限定したスクールを承ります。NIMS Open Facilityに登録されている設備を利用して、個別の課題に対応した講習、ユーザーの試料を用いての実習等を行います。

NIMS Open Facility

～ 材料分析・構造解析～

NIMS Open Facility

～ Materials Analysis & Characterization～



技術開発・共用部門 部門長

小出 康夫

KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



技術開発・共用部門 副部門長

花方 信孝

HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

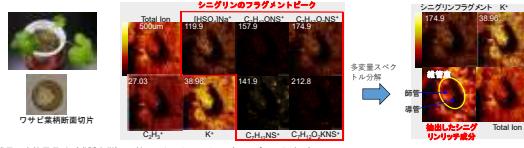
利用窓口

事務統括室

chukaku@nims.go.jp

ワサビ葉柄断面切片のTOF-SIMS分析例 (多変量スペクトル分解)

- ワサビの辛み成分が根由来か葉由来かの解明を目的とする。
- 辛み成分（シニグリン）は製造でき、質量スペクトルも得られる。
- 実際の生物試料では、様々な質量ピークが出現し、解析が困難。
- 多変量解析でシニグリン成分を抽出した結果、管と葉の部分に多く観測。辛み成分は葉で作られることを示唆。

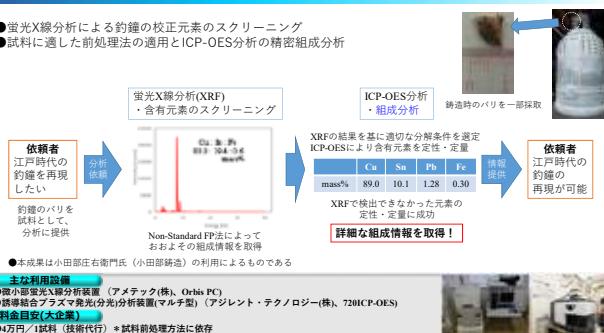


●本成果は青柳里果氏（成蹊大学）の利用によるものである（ナノプラット適用）。

- 主な利用設備**
●走行時間型二元イオン質量分析装置 (TOF-SIMS : アルバック・ファイ TRIFTY nanoTOF)
料金目安(大企業)
●1 6万円／1試料 (技術代行: 質量スペクトル、任意の質量ピークによるイメージング。多変量解析は別途相談)

化学分析で蘇る江戸時代の釣鐘

- 蛍光X線分析による釣鐘の校正元素のスクリーニング
- 試料に適した前処理法の適用とICP-OES分析の精密組成分析

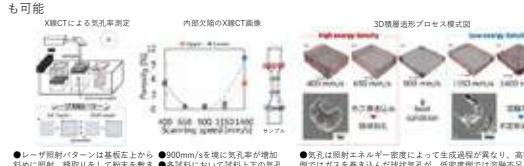


●本成果は小田井庄右衛門氏（小田部鉄造）の利用によるものである

- 主な利用設備**
●蛍光X線分析装置 (アメテック(株), Orts XPC)
●説明結合ラズマ発光分光分析装置(マルチセル) (アレント・テクノロジー(株), 720ICP-OES)
料金目安(大企業)
●1万円／1試料 (技術代行) *試料前処理方法に依存

マイクロフォーカスX線CTを用いたTi-6Al-4V積層造形材の欠陥解析

- サンプル搭載可能最大重量4kg、X線管最大出力160kV、最大分解能0.4nm。
- 3次元データ解析ソフトVG Studio Max (ver. 2.2)を使用した3D観察・欠陥サイズの解析、繊維配向解析なども可能。



●レーザ照射パターンは基板左から →100mm×100mmを横に気泡・増加斜めに照射、縁取りをして末尾を巻き →右側において試料上での気泡移動を防ぐ。左側から斜めに照射という手順を重ねている

●気泡は照射エネルギー密度によって生成過程が異なり、高密度例ではガスを巻き込んだ球状気泡が、低密度例では溶融不純によく気泡が確認

●レーザ照射パターンに合わせて規則的な欠陥が生じている

●本成果は宮川史帆氏（茨城工業大学、NIMS）の利用によるものである

- 主な利用設備**
●マイクロフォーカスX線CT装置

料金目安(大企業)

●950万円／1試料 (時間: 3日間利用の場合)

エネルギーフィルター電子顕微鏡による強磁性半導体の組成分布観察

- 加速電圧 300kV、点分解能 0.17nm
- 鏡体にオメガ型エネルギーフィルターを搭載。組成分布を高分解能で観察可能。（分解能0.5nm for O, 0.7nm for Cu）
- エネルギー分散型X線検出器を搭載。STEM-EDSにより、組成分布を高分解能で観察可能。



●本成果は黒田真司教授（筑波大学）の利用によるものである（ナノプラット通用）

- 主な利用設備**

料金目安(大企業)

●1 6万8千円／1 日 (技術代行)

新規強相関系Mn酸化物誘電体物質の結晶構造と物性発現起源の解明

- 新規機能性物質の結晶性・結晶構造解明からの物性起源の解明
- 各種元素置換に伴い、多種の結晶構造へと変化すると共に、温度に依っても構造相転移を起こす事を明確化
- 構造相転移に伴い、対称性が劇的に変化する事が物性発現起源である事を明確化

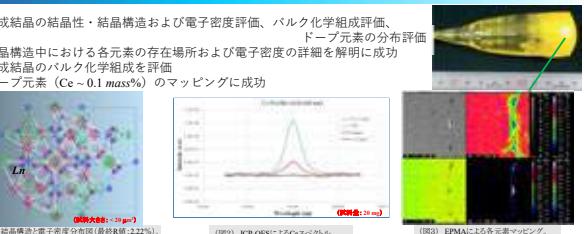


●本成果はベリック・アレクサンダー幹研究員、山浦一成グループ・リーダー (NIMS) からの依頼分析の結果である。

- 主な利用設備**
●走行時間型二元イオン質量分析装置 (TOF-SIMS : アルバック・ファイ TRIFTY nanoTOF)
料金目安(大企業)
●4 0万円／1 試料 (機器利用: 温度ステップに依存)

次世代白色LED用酸化物単結晶の構造、組成分析

- 育成結晶の結晶性・結晶構造および電子密度評価、バルク化学組成評価、ドープ元素の分布評価
- 結晶構造における各元素の存在場所および電子密度の詳細を解明に成功
- 育成結晶のバルク化学組成を評価
- ドープ元素 (Ce ~ 0.1 mass%) のマッピングに成功

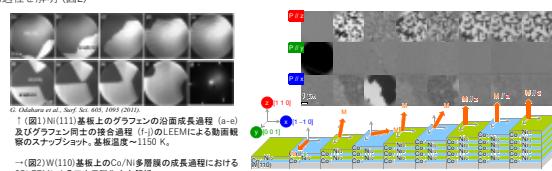


●本成果はビヨウ・ガルバ主任研究員、島村和生グループ・リーダー (NIMS) からの依頼分析の結果である。

- 主な利用設備**
●走行時間型X線回折装置 (XRD : リガクVarimax DW with Sturz)
●説明結合ラズマ発光分光分析装置(マルチセル) (アレント・テクノロジー(株), 720ICP-OES)
●電子放出エネルギープローブマイクロアナライザ装置 (EPMA : 日立電子IXA-8500)
料金目安(大企業)
●1 0万円／1 試料 (各分析方法共通: 機器利用)

スピニ偏極低エネルギー電子顕微鏡を用いた機能性超薄膜の開発

- FEEM / SPLFEEM / 局所領域LEEDを用い、機能性超薄膜（磁性・非磁性）の成長過程における形状や膜厚、結晶構造、磁区構造等を10 nmオーダーの分解能で解明し、デバイスの高性能化や新しいデバイス等の実現を目指した材料開発を推進
- LEEMによる動画観察から、Ni(111)基板上への炭素の表面偏析による單一ドメイングラフェンの成長過程を解明。(図1)
- SPLFEEMによる二次元磁化方向解析・動画観察から、スピントロニクス材料 Co/Ni多層膜における垂直磁気異方性の安定化過程を解明。(図2)

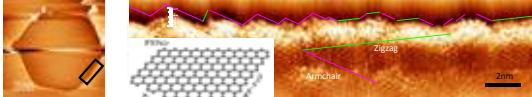


●本成果はオダカ・タケヒ・アラカワ主任研究員、島村和生グループ・リーダー (NIMS) からの依頼分析の結果である。

- 主な利用設備**
●走行時間型X線回折装置 (XRD : リガクVarimax DW with Sturz)
●説明結合ラズマ発光分光分析装置(マルチセル) (アレント・テクノロジー(株), 720ICP-OES)
●電子放出エネルギープローブマイクロアナライザ装置 (EPMA : 日立電子IXA-8500)
料金目安(大企業)
●1 0万円／1 試料 (各分析方法共通: 機器利用)

低温走査型トンネル顕微鏡を用いたグラフェンエッジの構造解析

- 電子デバイス用の新規材料としてナノ加工されたグラフェンのエッジ構造を原子分解能で観察を行った
- SEMやAFMでは直線的なエッジが観察され、シグマ型あるいはアームチャエ型のエッジが形成されていると考えられておりが、原子分解能STM観察の結果、両方のエッジ構造が混在していることが判明した
- トンネル分光を適用すれば、局所的な電子状態測定も可能である
- グラフェンの場合、大気搬送が可能であるため、持ち込み試料の観察に対応できる



●グラフェン以外の観察の場合、試料に導電性単結晶基板を使用する必要がある

- 主な利用設備**
●低温走査型トンネル顕微鏡

料金目安(大企業)

●約1 4万円から 1 日 (技術代行)

～ 材料創製・極限環境 ～

NIMS Open Facility ～ Materials Manufacturing & Unique Facility ～



技術開発・共用部門 部門長
小出 康夫
KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



技術開発・共用部門 副部門長
花方 信孝
HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

利用窓口
事務統括室
chukaku@nims.go.jp

高融点金属Zr合金の試料作製

- 化学的に活性なZr合金への特定酸化物の添加により目標酸素量のインゴット溶製に成功



- 熱間鋳造/圧延・各種熱処理や冷間加工技術により、高酸化性材料を望みの厚さに試料作製



主な利用設備

水冷銅ルツボ高周波誘導溶解設備、鍛造設備、熱間2段ロール圧延機、鍛圧用加熱炉、冷間4段ロール圧延機

料金目安(大企業)
120万円／本案件 (技術代行)



Niフリー高窒素含有合金試験片の創製

- ステンレス鋼中のニッケル代替で窒素を含有させる方法として開発した加圧式ESR溶解法



- 熱間鋳造/圧延加工技術と溶体化処理により、難加工材の高窒素鋼から棒状の試験材を作製

主な利用設備

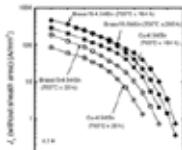
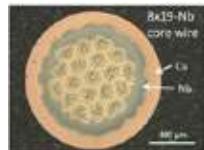
加圧式エレクトロスラグ再溶解設備、鍛造設備、溝口二重圧延機、鍛圧用加熱炉

料金目安(大企業)
60万円／本案件 (技術代行)



強磁場を利用した材料評価・プロセス制御とヘリウム液化機

● 超伝導線材評価



Ref. N.Banno et al., TML annual report (2015).

主な利用設備

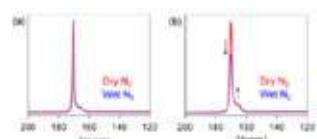
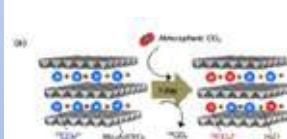
18T汎用超伝導マグネット装置、15T超伝導スプリットマグネット装置、試料振動型磁化測定装置、冷凍機伝導冷却型12T超伝導マグネット装置、高磁場下材料・プロセス観測・制御装置、ヘリウム液化システム

料金目安(大企業)
5万円／1日 (機器利用)



固体NMR測定を用いた固体材料の解析

● Dynamic Breathing of CO₂ by Hydrotalcite



Dynamic exchange of carbonate anions of LDH with atmospheric CO₂.
ISHIHARA et al., J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 18040–18043

(a) ¹³C CP/MAS NMR spectra of ¹³CO₃²⁻-LDH
(b) ¹³C DD/MAS NMR spectra of ¹³CO₃²⁻-LDH

主な利用設備

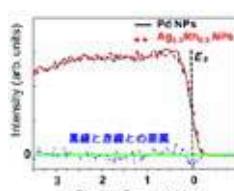
500MHz固体汎用NMRシステム、500MHz固体高分解能NMRシステム、800MHz固体高分解能NMRシステム

料金目安(大企業)
8万円／1日 (成果公開)



固体材料の電子状態の解析・評価

通常の軟X線光電子分光に比べて検出深さが大きい特徴



半導体薄膜の埋もれた界面やナノ粒子全体、いわゆるバルク敏感な価電子帯スペクトル、内殻スペクトルを測定できる。材料の電子状態、電子構造が分かる。図は、グリーン・環境触媒である合金ナノ粒子の評価に利用した例である。

A. Yang, O. Sakata et al., Appl. Phys. Lett. 105, 153109 (2014). DOI: 10.1063/1.4896857

主な利用設備

高輝度硬X線光電子分光装置

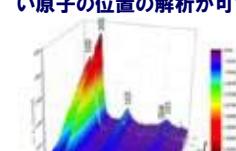
料金目安(大企業)

63,600円(大企業)/8時間(技術代行)



高輝度放射光高分解能粉末X線回折

世界有数の高い角度分解能、時分割回折、異常分散回折
● 精密な結晶構造、物性との相関 / 結晶構造の時間変化 / 電子数の近い原子の位置の解析が可能



20走査不要の検出器配置によるLi₂Oの構造変化を追跡した時分割粉末回折

Y. Katsuya et al., Rev. Sci. Instrum. 87, 016106 (2016).

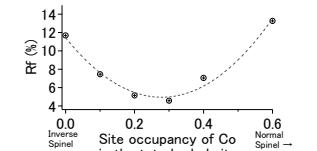
主な利用設備

高輝度放射光高分解能粉末X線回折装置

料金目安(大企業)

63,600円(大企業)/8時間(技術代行)

※8時間で通常の粉末回折データなら20データ取得可能



異常分散回折法によりCo, Feを区別することで信頼度因子を小さく(結晶構造解析精度を上げる)ことができる。四面体サイトのCo席占有率が0.3となる結晶構造が最適と決定。

M. Tanaka et al., AIP Conf. Proceedings, 1741, 050019 (2016).



NIMS Open Facility

～微細加工・ナノバイオ～

NIMS Open Facility

～ Nanofabrication & Nano Bio ～



技術開発・共用部門 部門長

小出 康夫

KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



技術開発・共用部門 副部門長

花方 信孝

HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

利用窓口

事務統括室

chukaku@nims.go.jp

新奇ナノ材料デバイスプロセス開発

- 基板上にランダムに形成されているナノ材料に対して任意の素子構造を作製



● 日本女子大学相川・美花様の支援事例

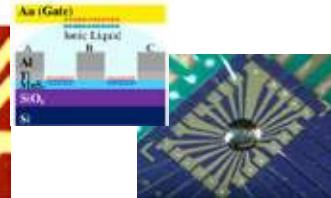
主な利用設備

125kV電子ビーム描画装置、レーザー露光装置、12連電子銃型蒸着装置、超高真空電子銃型蒸着装置、多目的ドライエッティング装置

料金目安(大企業)

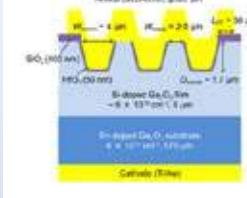
30万円／1試料（非公開・機器利用）

- MoS₂を用いた電気二重層トランジスタ(EDLT)の作製に成功



超低損失ショットキーバリアダイオードの開発

- 難エンチャーニング材料である酸化カリウムのトレンチエンチャーニングに成功



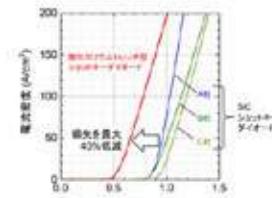
● 株式会社ノベルクリスタルテクノロジー佐々木公平様の支援事例

主な利用設備

化合物ドライエッティング装置、触針式表面段差計

料金目安(大企業)

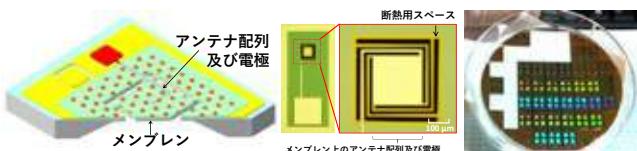
10万円／1試料（非公開・技術代行）*ドライエッティングのみ



波長選択型IRセンサ実証素子の作製

- 熱電型/焦電型の異なる検出方法とメンブレン構造の組み合わせ

- 0.1～0.5μmの分解能で4波長の小型センサチップでの動作を実証



● 物質・材料研究機構長尾忠昭様、 Dao Duy Thang様の支援事例

主な利用設備

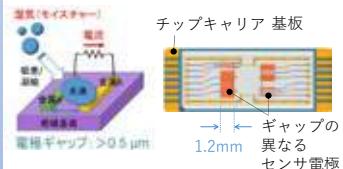
EB描画装置、コンタクトアライナー、電子ビーム蒸着装置、スパッタ1号機

料金目安(大企業)

30万円／1試料（ウエハ、技術代行）

モイスチャーセンサの開発

- 微細ギャップ電極を用い、環境由来の微小な水滴(最小径0.5μm)を検出する技術



● 物質・材料研究機構川喜多仁様の支援事例

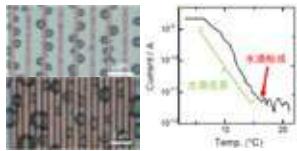
主な利用設備

EB描画装置、電子ビーム蒸着装置

料金目安(大企業)

20万円／1試料（ウエハ、技術代行）

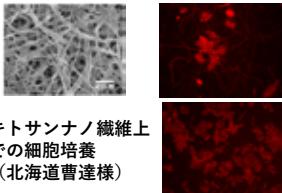
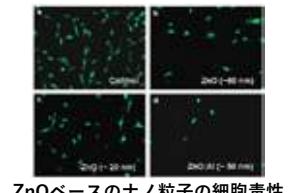
- 水滴の付着に対して高速で応答し、粒子径を判別することが可能



細胞を用いた材料評価

新奇材料の細胞への適合性、毒性、吸収性などを評価

- 材料と細胞を共存させて培養(毒性など)、材料の上に細胞を播種(親和性など)等で試験

キトサンナノ繊維上での細胞培養
(北海道曹達様)

ZnOベースのナノ粒子の細胞毒性

主な利用設備

プレートリーダー・蛍光顕微鏡

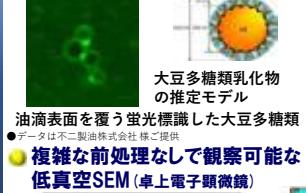
料金目安(大企業)

20万円／1サンプル（機器利用）

種々の顕微鏡観察

細胞、組織切片、有機・無機材料の微細な構造を顕微鏡観察

- 幅広い蛍光に対応
(レーザー走査型共焦点蛍光顕微鏡)

大豆多糖類化物の推定モデル
油滴表面を覆う蛍光標識した大豆多糖類

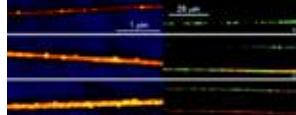
● データは不二製油株式会社 様ご提供

- 複雑な前処理なしで観察可能な低真空SEM(卓上電子顕微鏡)



PIブルー染色後の培養細胞

- ラマンスペクトルピークを顕微鏡像上にマップ可能 (レーザーラマン顕微鏡)



DNAの自己集合を用いて形成される金属ナノファイバのラマン散乱イメージング

Nanoscale, 2012, 4, 6814-6822

主な利用設備

レーザー走査型共焦点蛍光顕微鏡

レーザーラマン顕微鏡

卓上電子顕微鏡

料金目安(大企業)

1万円／1時間（機器利用）

NIMS Open Facility ～透過型電子顕微鏡～



NIMS Open Facility ～TEM～



技術開発・共用部門 部門長
小出 康夫
KOIDE.Yasuo@nims.go.jp



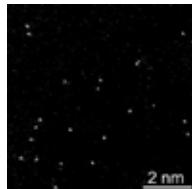
技術開発・共用部門 副部門長
花方 信孝
HANAGATA.Nobutaka@nims.go.jp

利用窓口
事務統括室
chukaku@nims.go.jp

イオン液体中の微細構造解析

液体中の単原子の観察

- 液体中の単原子の観察に世界で初めて成功



金イオンが溶解したイオン液体C₂mimTFSIのADF-STEM像。
白い点が金イオン。
● 東京大学(現在 東北大)宮田智彦様の支援事例

主な利用設備

実動環境対応電子線ホログラフィー電子顕微鏡



料金目安(大企業)

6,000円／時間(機器利用・成果公開)

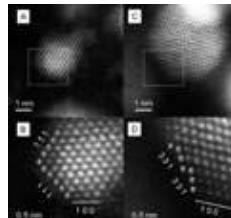
- 連続撮影により、金原子が、溶媒和構造によるトラップとそれが壊れたときに移動するということを繰り返す「ケージ・ジャンプ機構」を明らかに

新規触媒の表面状態の直接観察

Ptナノ粒子の表面構造・状態を原子レベルでの直接観察

- HAADF-STEM像により燃料電池の電極触媒であるPtナノ粒子の表面構造・状態を原子レベルでの直接観察

(A, B):
電気化学的処理を施す前のPt粒子の原子分解能像(HAADF-STEM)。粒子に100および111表面からなる低指数面が観察された



(C, D):
電気化学的処理を施したPtナノ粒子には、311面などの高指数面が観察された



主な利用設備

実動環境対応電子線ホログラフィー電子顕微鏡

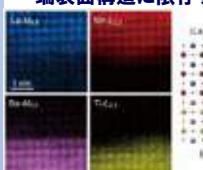
料金目安(大企業)

10万円／1試料(機器利用・成果公開)

ヘテロ接合界面の原子配列の解明

原子分解能STEM-EELS分析

- 強誘電トンネル接合Co/BaTiO₃/(La,Sr)MnO₃では、抵抗スイッチング現象の符号がバリア層の終端表面構造に依存する



● 産業技術総合研究所山田浩之様の支援事例



● 東京大学(現在 東北大)山田浩之様の支援事例

主な利用設備

単原子分析電子顕微鏡

料金目安(大企業)
80万円／1試料(技術代行)

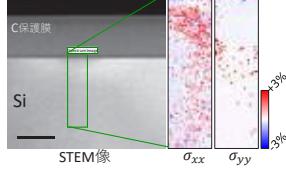
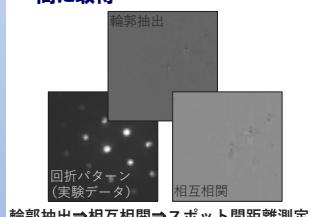
- ヘテロ接合LaNiO₃/LaMnO₃では、遷移金属原子間の電荷移動が界面を中心に非対称に広がる

4D-STEMひずみ解析システム

JEM-F200のμμDIF機能, Gatan OneViewとSTEMxの組み合わせ

- Diffraction imagingデータを短時間で取得

- ひずみを精度良く測定(回折パターンを4k x 4kで取得した場合0.1%程度のひずみを取得可能)



主な利用設備

200kV透過型電子顕微鏡, Gatan OneView, Gatan STEMxシステム, GMS3.2

料金目安(大企業)
351万円(オープンラボプログラム一企業年会費)



電子顕微鏡ステーションオープンラボプログラム

最新鋭の電子顕微鏡をベースに、TEMに関する最新技術・手法の開発や応用研究探索を、参加企業と共に実施するプログラム

- 公的資金ゼロ、参加企業も低成本で最先端装置を使った技術開発が可能

※2018年度の年間利用料351万円(税別)

- 参加企業A
● 参加企業B
● 参加企業C
- 利用
- ナンプラ等の一般ユーザーと共に(既設)
- メーカーへのフィードバック
- 最新技术デモ
- ニーズに応じた装置開発・機能向上
- 高い空間分解能と分析性能
- 多目的に対応
- 初心者から熟練者まで
- ユーザーニーズに応じた手法・技術開発
- アプリケーション探索
- 産学官連携(共同研究等)へ発展
- データ保存 & 将来のMIデータ活用実験

利用可能装置

本プログラム専用装置(新規導入)



2018年度 JEM-F200提供技術

Double 100mm² SDD EDS

高密度組成分析が可能に

OneView-IS+4DSTEM

高密度高速カメラによりオペランド観察や新しい走査像(歪マップなど)取得技術が可能に

オペランド観察+4DSTEM

高密度組成分析(EDS)

高熱 & バイアスホールダー(他装置の共用)

高温とバイアス印加の環境下でのナノスケール変化の観察が可能に

冷却2軸傾斜ホールダー(他装置の共用)

試料を冷却しながらの観察が可能に

革新的センサ・アクチュエータ研究プロジェクト <センサ・アクチュエータ研究開発センター>

Center for Functional Sensor & Actuator



機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター

川喜多 仁 KAWAKITA.Jin@nims.go.jp

事業の狙い

- フィジカル空間とサイバー空間を高度に融合するためのインターフェース
- 生体・構造物の内外からセンシングし、結果としてアクチュエーティング
- 超スマート社会-Society5.0-の実現に寄与

事業の要点

- 材料研究に基づく実働デバイス開発
- 進捗のピアレビューと柔軟な計画変更
- 国内外の機関との研究連携と応用出口開拓

最先端研究トピックス

センサ・アクチュエータの位置づけ



革新的センサ・アクチュエータ研究開発プロジェクト <センサ・アクチュエータ研究開発センター>

センサ開発領域

- 湿潤センサ
- 嗅覚センサ
- 生体磁気センサ
- 生体分子センサ
- 生体ガスセンサ
- 菌類センサ
- 環境影響ガスセンサ

作動機能開拓領域

- 薄膜蓄電
- 熱電発電
- 光発電
- 印刷回路形成

アクチュエータ研究領域

- 超高ストローク材料
- リアクティブストリング
- 高速・大変形ソフトマトリックス

材料研究に基づく実働デバイス開発

- ✓ 国内外の大学
- 公立研究所
- ✓ 民間企業・ベンチャー
- ✓ NIMS内外の研究拠点
- ✓ 国家プロジェクト

進捗のピアレビューと柔軟な計画変更

✓ 医療・農業応用に適したセンサ特性の実現

✓ 電源マネジメント、フレキシブル回路形成技術の高度化

✓ ソフトマテリアルの開発
✓ アクチュエータ機構の解明
✓ 応用に即したアクチュエータ特性と使用環境の拡大

自立型環境・生体情報センサ
ネットワークモジュール

人口筋肉・触覚デバイス・
光スイッチ

「MSSアライアンス／フォーラム」 嗅覚IoTセンサの業界標準に向けた産学官連携

“MSS Alliance/Forum” towards a *de facto* Standard for IoT Olfactory Sensors



機能性材料研究拠点 センサ・アクチュエータ研究開発センター 嗅覚センサグループ

吉川 元起

YOSHIKAWA.Genki@nims.go.jp

事業の狙い

五感センサ最後の砦といわれる嗅覚センサは、食品・農業・医療・環境・安全など様々な分野で、その実用化が切望されている。MSSアライアンスでは、嗅覚IoTセンサに要求される特性を網羅したセンサ素子「MSS」を軸に、各種要素技術の基礎研究開発およびそれらの垂直統合を産学官連携によって行い、多種多様なアプリケーションに適用できるよう業界標準化を推進している。MSSフォーラムは、MSSアライアンスで構築される技術体系の公募型有効性実証実験活動であり、実用化に向けた更なる課題抽出と課題解決に向けた研究開発を深化、加速させている。

事業の要点

- 「MSSアライアンス／フォーラム」は、嗅覚IoTセンサの実現と業界標準化を目指す、世界初・世界最大の産学官連携体制
- 各要素技術をより簡便に製品化構想につなげられるよう、標準規格の策定と部品化・モジュール化・ソリューション化を推進
- 国内外50以上の企業・大学・病院・研究機関等が、各分野でMSS嗅覚IoTセンサ／システムの有効性実証実験を展開

最先端研究トピックス



The MSS logo

MSSを示す文字と、犬以上の嗅覚を持つ家のイメージを重ね合わせている。



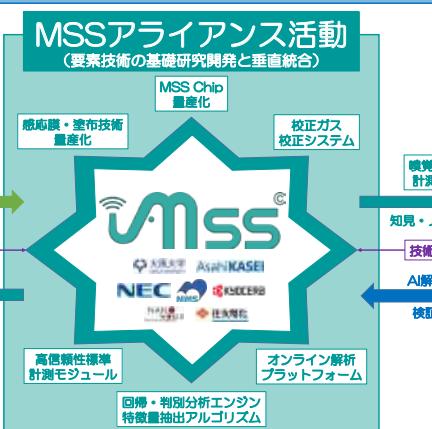
MSSアライアンス 2015年9月発足：NIMS、京セラ、大阪大学、NEC、住友精化、旭化成、NanoWorldの7機関による、超小型超高感度嗅覚センサ素子「MSS」を軸に、最先端要素技術を垂直統合する産学官連携体制

MSSフォーラム 2017年11月発足：MSSアライアンスで構築される嗅覚IoTセンサ技術体系の公募型有効性実証実験活動

MSSフォーラム活動 (公募型有効性実証実験)

活動成果公表
MEMS展2018 @ 幕張メッセ
10/17~10/19

<https://mss-forum.com>



まとめ

- 嗅覚IoTセンサの標準化に向けた世界初・世界最大の産学官連携
- ニオイの測定・識別に必要となる基礎要素技術体系を確立
- 各分野の産学官50以上のメンバーが、標準計測モジュールとクラウド解析プラットフォームによる有効性実証実験活動を展開

実用化への目標

- 温度／湿度など外乱の影響の管理
- アプリケーション毎の最適化
- システムレベルでの再現性確立
- 大量サンプルによる統計的実証
- ビジネスモデルの確立

NIMS-CAMECA 3DAPラボの紹介 ～アトムプローブによるナノ組織解析～

Introduction of CAMECA-NIMS 3DAP Laboratory - Nano-scale characterization by atom probe tomography -



NIMS-CAMECA 3DAPラボ

埋橋 淳 UZUHASHI.Jun@nims.go.jp



NIMS-CAMECA 3DAPラボ長

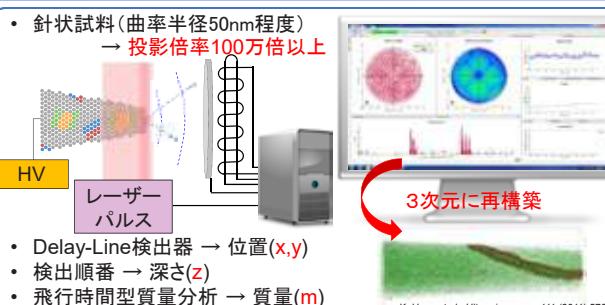
大久保 忠勝 OHKUBO.Tadakatsu@nims.go.jp

- 事業の背景**
- 3次元アトムプローブ(3DAP)は軽元素を含め個々の原子の同定と位置決定ができるユニークな分析装置
 - NIMSではこれまで独自のレーザー-3次元アトムプローブを開発し、応用範囲を広めるための先導的役割を果たしてきた
 - しかしながら、装置が高価格であることや、試料作製にノウハウが必要などの理由により、その普及は限定的だった

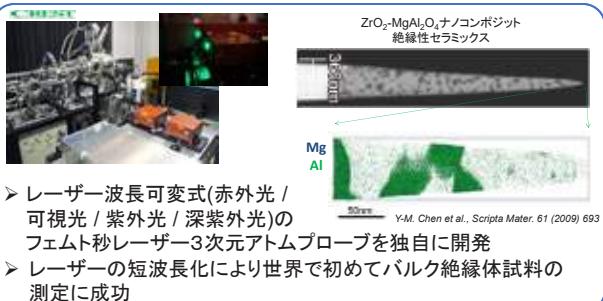
- 事業の要点**
- NIMSとアメテック株式会社CAMECA事業部(以下CAMECA)は啓蒙・普及活動のため「NIMS-CAMECA 3DAPラボ」を発足
 - CAMECAがNIMSに最新鋭の3次元アトムプローブを設置し、外部ユーザーに装置使用の機会を設ける
 - 3次元アトムプローブを企業や大学で標準的な材料解析手法として活用するための技術指導も行う

概要

3次元アトムプローブ法とは？

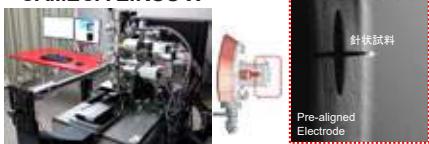


NIMSがこれまで果たしてきた先導的役割

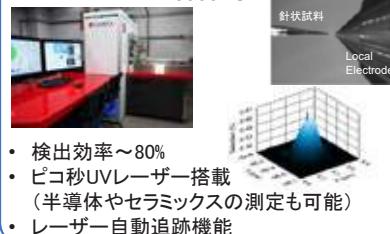


CAMECA最新鋭3次元アトムプローブ

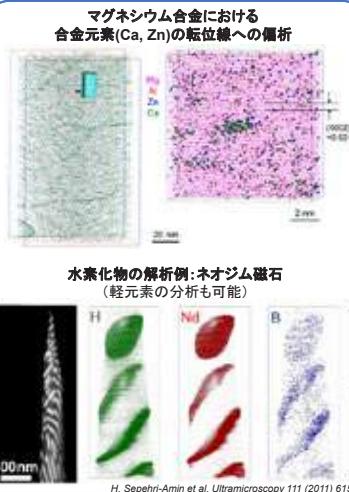
CAMECA EIKOS-X



CAMECA LEAP5000XS

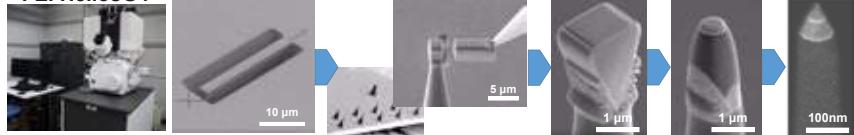


解析例



測定用試料作製方法

FEI Helios G4



お問い合わせ

- 成果公開を前提とした共同研究についてはNIMS-CAMECA 3DAPラボ長まで、成果非公開でのご利用についてはEIKOSコンソーシアム代表まで、お問い合わせ、ご相談下さい。

【EIKOSコンソーシアム代表】

アメテック株式会社カメカ事業部長 趙成洙 Songsu Cho
E-Mail: Songsu.Cho@ametek.com

まとめ

- CAMECAが開発した最新機種のEIKOS-XをNIMSに設置し、外部ユーザーがEIKOSコンソーシアムを通じて利用可能
- 3次元アトムプローブ技術の定期的な講習会に加え、専任オペレーターによる技術指導、試料作製・分析のサポートも実施
- アトムプローブ利用への障壁が下がり、種々の先端材料の原子レベル解析が可能となり、学界、産業界への大きな貢献を期待

NIMSクリープデータシート

NIMS creep data sheet



構造材料研究拠点 構造材料試験プラットフォーム クリープグループ

木村 一弘

KIMURA.Kazuhiro@nims.go.jp

事業の狙い

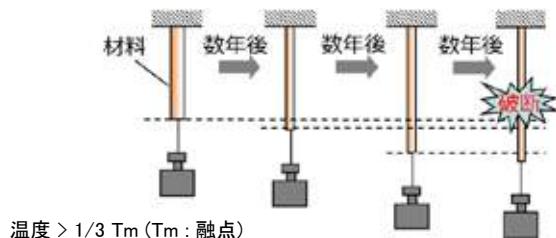
- 発電プラントや化学プラントなどの長期安全性確保への貢献
- 高温機器構造物の強度設計における設計応力の設定や材料選択のための基盤的な材料強度特性データの提供
- 長期間使用された高温機器部材の金属材料の劣化状況の判断や、余寿命評価をする場合の基準的参照データの提供

事業の要点

- 国産耐熱金属材料(規格材)の10万時間(約11.4年)クリープ破断強度の取得とクリープデータシートの発行
- 長時間クリープ試験材の金属組織観察と微細組織写真集の発行
- 取得データや研究成果の設計許容応力や材料規格への反映

最先端研究トピックス

1. クリープ変形・破壊



NIMS千現地区
材料強度実験棟
(単式クリープ試験機)

2. 高温機器の許容応力



発電プラント: 運転時間は数十年

クリープ温度領域での許容引張応力

- a.当該温度で0.01% / 1000hrのクリープを生じる応力の平均値
- b.当該温度で10⁵hrでクリープ破断する応力の最小値の0.8倍
- c.当該温度で10⁵hrでクリープ破断する応力の平均値の0.67倍

○電気事業法
○ASME(米国)

10⁵h = 11.4年

高温構造機器の安全性・信頼性確保には
長時間クリープ強度特性の把握が必要

3. クリープデータシートの概要

目的: 国産の実用耐熱金属材料について、10万時間を超える長時間クリープ試験データを取得し、クリープデータシートを発行する

期間: 昭和41年度(1966)開始

材料: 44材種(1966年当時)… 終了

24材種追加(1988年以降)… 新規開発材料

クリープデータシート発行冊数: 147冊(2018年3月)

長時間クリープ試験材の微細組織写真集: 12冊(2018年3月)

クリープ変形データシート: 2冊(2018年3月)

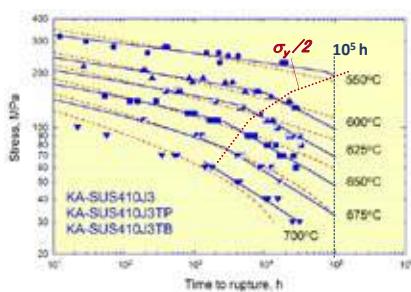
送付先: 国内 367機関、海外 63機関 (2018年3月)

4. 規格・基準への反映

従来法:
長時間クリープ破断強度を過大評価

NIMS提案(領域分割解析法):
0.2%耐力の1/2で領域を分割して、高応力域と低応力域を独立に解析

領域分割解析法の適用



許容引張応力の引き下げや余寿命診断ガイドラインの策定・改訂へ反映
(2005年12月、2007年8月、2014年5月、9月、経済産業省)

宇宙関連材料強度データシートの紹介 -極限環境下における材料特性評価-

Introduction of NIMS space use materials strength data sheet -Evaluation of material properties under extreme environments-



構造材料研究拠点 構造材料試験プラットフォーム
疲労・腐食グループ

小松 誠幸 KOMATSU.Masayuki@nims.go.jp

宇宙関連材料強度データシート担当者

構造材料研究拠点 環境疲労特性G/ 材料強度基準研究G / 疲労・腐食G

早川正夫、長島伸夫 / 小野嘉則 / 木村恵、前田芳夫、由利哲美、今野武志

事業の狙い

- H II A/BおよびH3ロケット開発への貢献
- 極限環境かつ実際の使用環境に近い状況での材料強度特性評価とその信頼性向上
- ロケットエンジンが安全に稼働出来るように使用材料の破壊挙動を把握

事業の要点

- ロケットエンジンの設計・製造に不可欠な極限環境下での材料特性データの提供
- 高温から極低温までの極限環境下での材料強度特性データを取得
- 取得データを宇宙関連材料強度データシートとして発刊（2018年までに27冊のデータシートと破面写真集4冊を発刊）

最先端研究トピックス

オールジャパン体制での活動(2001年～) - 宇宙関連材料強度特性データ整備委員会 -



©JAXA

開発 研究

JAXA
ニーズや明確な適用先の機関
(研究のモチベーション)

NIMS
極限環境下で材料強度特性データ取得
最先端の研究成果の創出

IHI
ロケット製造メーカー

宇宙関連材料強度データ
整備委員会

九州大学
研究機関・専門家

KOBELCO
日本金属㈱合会
材料メーカー

これまで評価した材料と特性

主要元素	材料	特性	試験温度 / K	使用部位
Co	Alloy 188 棒材	引張、高サイクル疲労 (R=1) シャルビー衝撃	77, 293, 760 77, 293	噴射器
Ti	Ti-5Al-2.5Sn ELI [*] 合金 錫造材 (φ 180.160)	引張、破壊脆性、高サイクル疲労 (R=0.01) シャルビー衝撃	4, 20, 77, 293 4, 20, 77, 293	ターボポンプ
	Ti-6Al-4V ELI [*] 合金 錫造材 (φ 300)	引張、破壊脆性、高サイクル疲労 (R=0.01) 疲労き裂進展	20, 77, 293	
Al	A356-T6 錫造材	引張、破壊脆性、高サイクル疲労 (R=0.01) 疲労き裂進展	20, 77, 293	
Fe	Alloy A286 錫造材	引張、高サイクル疲労 (R=0.01) シャルビー衝撃	4, 20, 77, 293, 873 4, 20, 77, 293	ターボポンプ
	304L 錫造材	引張、高サイクル疲労 (R=0.01) シャルビー衝撃	4, 20, 77, 293, 773 4, 20, 77, 293	
Ni	Alloy 718 錫造材	引張、破壊脆性、高サイクル疲労 (R=0.01) シャルビー衝撃	4, 20, 77, 293, 767 4, 20, 77, 293	ターボポンプ
	Alloy 718 精密錫造材	引張、破壊脆性、高サイクル疲労 (R=0.01) 疲労き裂進展	20, 77, 293, 767 20, 77, 293, 767	
Alloy 247LC** 一方向凝固材	Alloy 718 板材 (1228K、1318K、1338K ST) 母材と溶接材	引張、高サイクル疲労 (R=0.01) 高サイクル疲労 (切欠きの影響、R=1)、 疲労き裂進展	293, 800 77, 293, 873	燃焼室、配管、噴射器、マニホールドなど
	Alloy 625 板材 母材と溶接材	引張、高サイクル疲労 (R=1)、破壊脆性、 低サイクル疲労 (三角波)	77, 293, 873	
Cu	Cu-Cr-Zr 錫造材	引張、低サイクル疲労 (三角波) クリープ 低サイクル疲労 (引張保持) 低サイクル疲労 (圧縮保持) クリープ	293, 773, 823, 923 773, 823, 923 773, 823, 923	燃焼室

* : Extra-Low Interstitial **: Low Carbon

データシートには特性データの他 製造履歴、化学組成、組織・破面写真なども掲載。データシートはJAXAとNIMSの共同研究で得られた結果の一部を発刊。

データシートはNIMS物質・材料データベース(Matnavi)でも閲覧可能。<http://mits.nims.go.jp/>

○ 成果の一例

20K(-253°C)ガスヘリウム環境での特性評価を実施
(宇宙関連材料強度データシート No. 23)



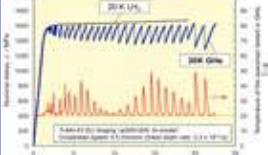
由利哲美
「H28年度文部科学大臣表彰 創意工夫功労者賞」

極低温疲労試験設備(左)

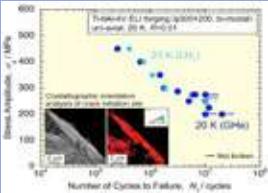
液体ヘリウム(He)の再凝縮装置と温度制御装置を有する。
液体HeやHeガスの補給無しで、液体He温度(-269°C)、
極低温ガス雰囲気(例えば-253°C)を達成し、長時間の
疲労試験が可能。(試験可能温度: -269°C~室温)

液体水素中と20KHeガス中での試験の比較

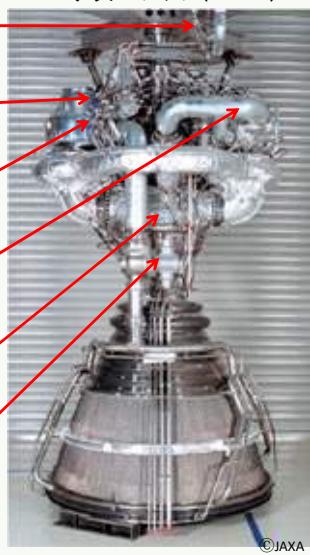
引張試験 20KHe中ではセレーションが発生
変形挙動は異なるが、引張特性に大差なし



高サイクル疲労試験 冷媒による差は無い



ロケットエンジン(LE-7A)



©JAXA

疲労強度の解明 (NIMS疲労データシート)

Study on fatigue strength (NIMS fatigue data sheet)



構造材料研究拠点 解析・評価分野 疲労特性グループ

蛭川 寿 HIRUKAWA.Hisashi@nims.go.jp

事業の狙い

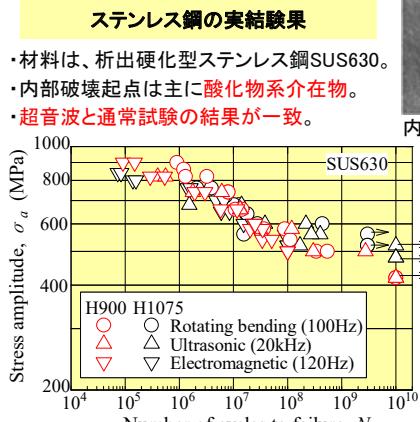
- 疲労データシートは国産材料の基準的疲労特性を提供する目的で1975年に作成を開始
- 材料は40種以上の鉄鋼材料と代表的な非鉄材料を対象、43年に亘り125冊発刊
- 機械や構造物の保守・設計、材料開発、事故低減に活用

事業の要点

- 表面破壊(通常の疲労)では疲労限度が存在し静的強度と良い相関
- 高強度鋼では内部破壊が生じギガサイクル疲労(疲労限度の消滅)が問題
- 本事業ではこのギガサイクル疲労が主要テーマ

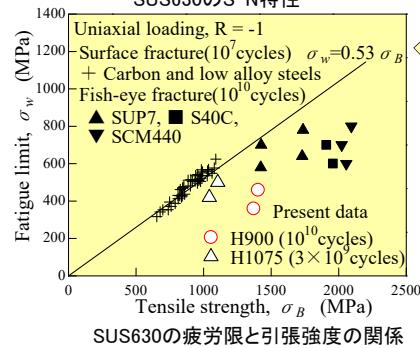
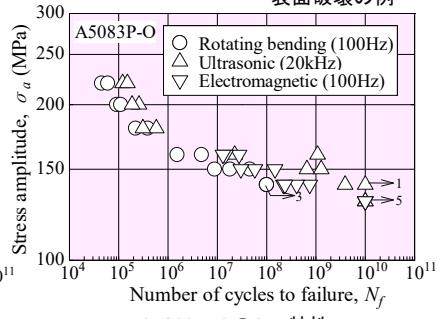
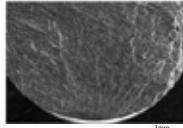
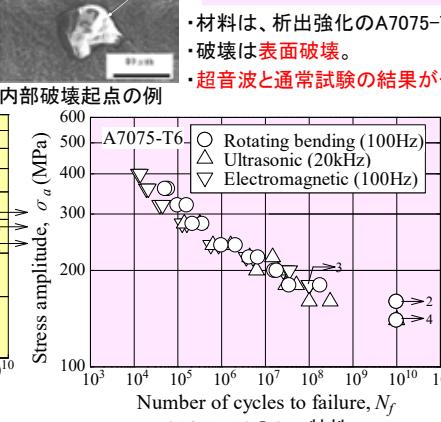
1. 実験方法

- 回転曲げ疲労試験機(100Hz)を用いた、最大繰返し数 10^{10} 回まで3年間の試験(通常試験)。
- 電磁共振式疲労試験機(軸荷重、100~120Hz)を用いた、最大繰返し数 10^8 回まで10日の試験(通常試験)。
- 超音波疲労試験機(軸荷重、20kHz)を用いた、最大繰返し数 10^{10} 回まで1週間の試験(加速試験)。
- これらのデータを比較。

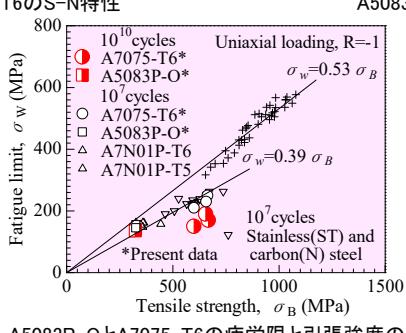


最先端研究トピックス

アルミニウム合金の実験結果



- 10^{10} (100億)回でも
疲労限は不明瞭
-H900の 10^{10} 回
疲労強度が低い



- 10^{10} (100億)回で
A5083P-Oは疲労限
を示す傾向だが、
A7075-T6は不明瞭
-A7075-T6の 10^{10} 回
疲労強度が低い

今後の事業展開

- ステンレス鋼は次期材料として強度レベルの異なる3材種の二相ステンレス鋼の発刊(そのうち、今春にSUS329J3L鋼を発刊)。
- アルミニウム合金は次期材料としてA6061-T6アルミニウム合金を発刊予定。
- その後も今まで網羅していない材料のデータシートを発刊する。

無機材料データベース「AtomWork-Adv」利用 サービス(有償)開始



～データ駆動型材料開発での利便性向上のため、
データのダウンロードや検索機能等を充実～

情報統合型物質・材料研究拠点 データプラットフォーム



徐 一斌

XU.Yibin@nims.go.jp



細谷 順子

HOSOYA.KJunko@nims.go.jp



桑島 功

KUWAJIMA.Isao@nims.go.jp



坂入 雄大

SAKAIRI.Yuta@nims.go.jp

事業の狙い

- 無機材料の結晶構造、特性、状態図等のデータ拡充を行い、ユーザフレンドリーな利用環境を提供する。
- AIや機械学習を駆使したデータ駆動型材料開発を支援する。
- 有償データベースサービスの仕組みを構築し、ハブ拠点の自立化施策を実現する。

事業の要点

- 高機能なWebインターフェイスを備えた無機材料データベース「AtomWork-Adv」の開発した。
- 様々な文献から収集された結晶構造、状態図、特性間の相関性を総合的に検索可能なデータベースを構築した。
- NIMSとしては初めての社会向け有償版材料データベースサービスの提供を開始した。

最先端研究トピックス



AtomWork-Advは、約1,000種類の科学技術ジャーナルの文献から抽出した無機材料の結晶構造、X線回折、特性、状態図に関するデータを収録したデータベースです。

内容	データ	結晶構造 : 303,885件 X線回折 : 550,507件 特性 : 365,517件 (特性種543件) 状態図 : 42,406件 2018年9月時点での件数 (毎年更新予定)
	ツール	検索機能 材料マトリクス 特性チャート
利用方法	Webページにアクセスして利用	
契約形態	無料のトライアルユース(72時間、閲覧のみ) 年間定額(アカデミック割引有)	

結晶構造



物質情報	物質名・化学組成、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・番号
資料情報	原材料、合成方法
結晶構造決定方法	試料形状、実験方法、温度
格子定数決定方法	試料形状、実験方法、スペクトル
結晶構造情報 (標準化後)	格子定数、原子配置
その他情報	原子間距離、参考文献情報など

X線回折



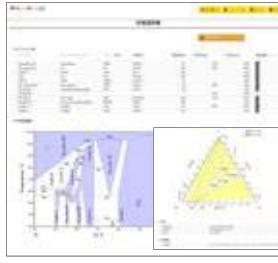
X線源ごとのX線回折グラフ	x軸: 2θ、y軸: インテンシティ
X線回折データ (表形式)	θ、ミラー指数、回折強度、格子面間隔

特性



物質情報	物質名・化学組成、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・番号、結晶構造データへのリンク
指定した特性データ	特性値、温度、文献情報

状態図



概要	状態図種別、成分範囲、温度範囲、作成方法、APDIC
フェーズ一覧	フェーズ、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・空間群番号、上限・下限温度、結晶構造データへのリンク
その他	文献情報

お問い合わせ先：
ユーザー相談窓口 (atomwork-adv@ml.nims.go.jp)
トップページ (<https://atomwork-adv.nims.go.jp>)



材料マトリクス



縦軸・横軸の元素の組合せの収録データ数を色で表すマトリクスを表示します。組成比ごとにマトリクスを確認できます。
色表示は、物質数の他に、最頻出結晶構造、特性平均値、状態図数に変更することができます。

材料データプラットフォーム

Materials data platform



統合型材料開発・情報基盤部門 材料データプラットフォームセンター データシステムグループ

門平 卓也 KADOHIRA.Takuya@nims.go.jp

事業の狙い

- NIMSに蓄積する、高度な研究開発のノウハウ、信頼性の高いデータを利活用できるプラットフォームの形成
- プラットフォームを活用した大学や民間企業との連携・共同研究の促進
- 我が国全体の物質・材料分野の研究開発力を強化するプラットフォーム機能の開発と提供

事業の要点

- 材料データプラットフォームDPFは、革新的材料開発力強化(M³)プログラムを構成するMaterial Research Bankの礎
- 材料R&Dデータの入り口(収集)から出口(サービス)までをカバーする機能の開発
- データ収集、処理、解析、蓄積、管理、公開の各サブシステムが互いに連携して機能提供することを目指す

最先端研究トピックス

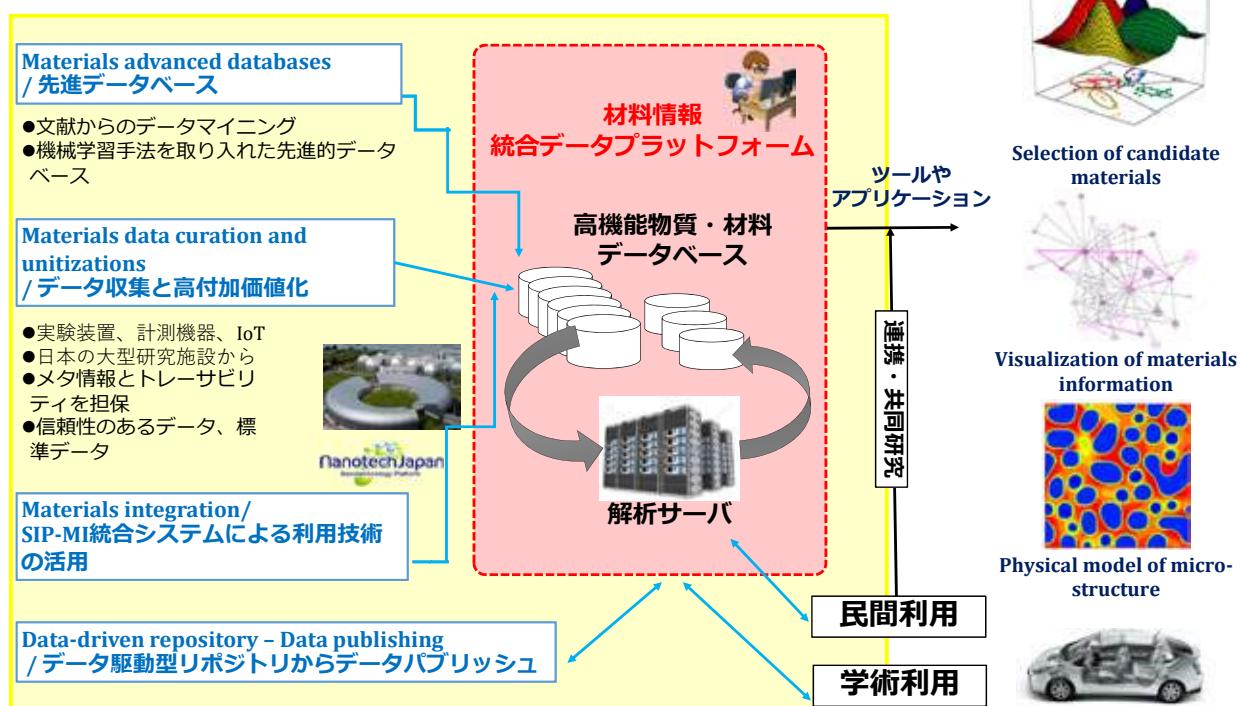
我が国の科学技術イノベーション総合戦略にある「Society 5.0」の具現化策の一つである「統合型材料開発」を現実のものとすべく、NIMSが統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)を発足させ機関的に推し進めるのがM³ (M-cube)/Materials Research Bank (MRB)構想である。

M-cube / MRB構想は、計算、計測、材料創製、モデリングなどの分野ごとに個別に推進する研究を、専門家団体によるチーム研究として統合し、NIMSとして外部に研究力を提供して連携を進めることで、NIMSの研究力、さらには研究企画力を、新たな次元へと展開させようとするものである。その実現には、個別研究に対する横串として機能する、コンピュータを活用したデジタルデータの蓄積と利活用が極めて重要だが、その礎となるのが、データを「つくる」「ためる」「つかう」「見る・引用する」機能をチーム研究に提供する統合型材料データプラット

フォームシステムである。

材料DPFセンターは、上記データプラットフォームの実現をミッションとして、H29年度に発足し、全体構想の検討、ユースケース・ワークフローの調査・検討、要求仕様設計などを昨年度進めてきた。

H30年度は、システム基本設計書を完成させ、それに基づく、機能設計、方式設計の業務を推進している。また、データ収集・高付加価値化、データ間の関連性の記述、高度な検索・マイニング技術の開発、機械学習向けデータの生成システムの実現などを目的とした業務および関連システム開発も並行して進めている。



技術移転のご相談は

国立研究開発法人物質・材料研究機構

外部連携部門 連携企画室 technology-transfer@nims.go.jp まで

NIMS WEEK 2018 Day2：最新成果展示会 NIMS ショーケース 2018

企画委員長 長野 裕子
副委員長 宝野 和博
西村 瞳

Day2 実行委員長 八重 梶章

実行委員 菊池 正紀
阿部 英樹
葛西 伸哉
池田 亜矢子
廣本 祥子
松村 亮

武田 良彦
山下 智
津谷 大樹
小森 和範
飯田 由香



国立研究開発法人 物質・材料研究機構

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1
Email: nimsweek@nims.go.jp