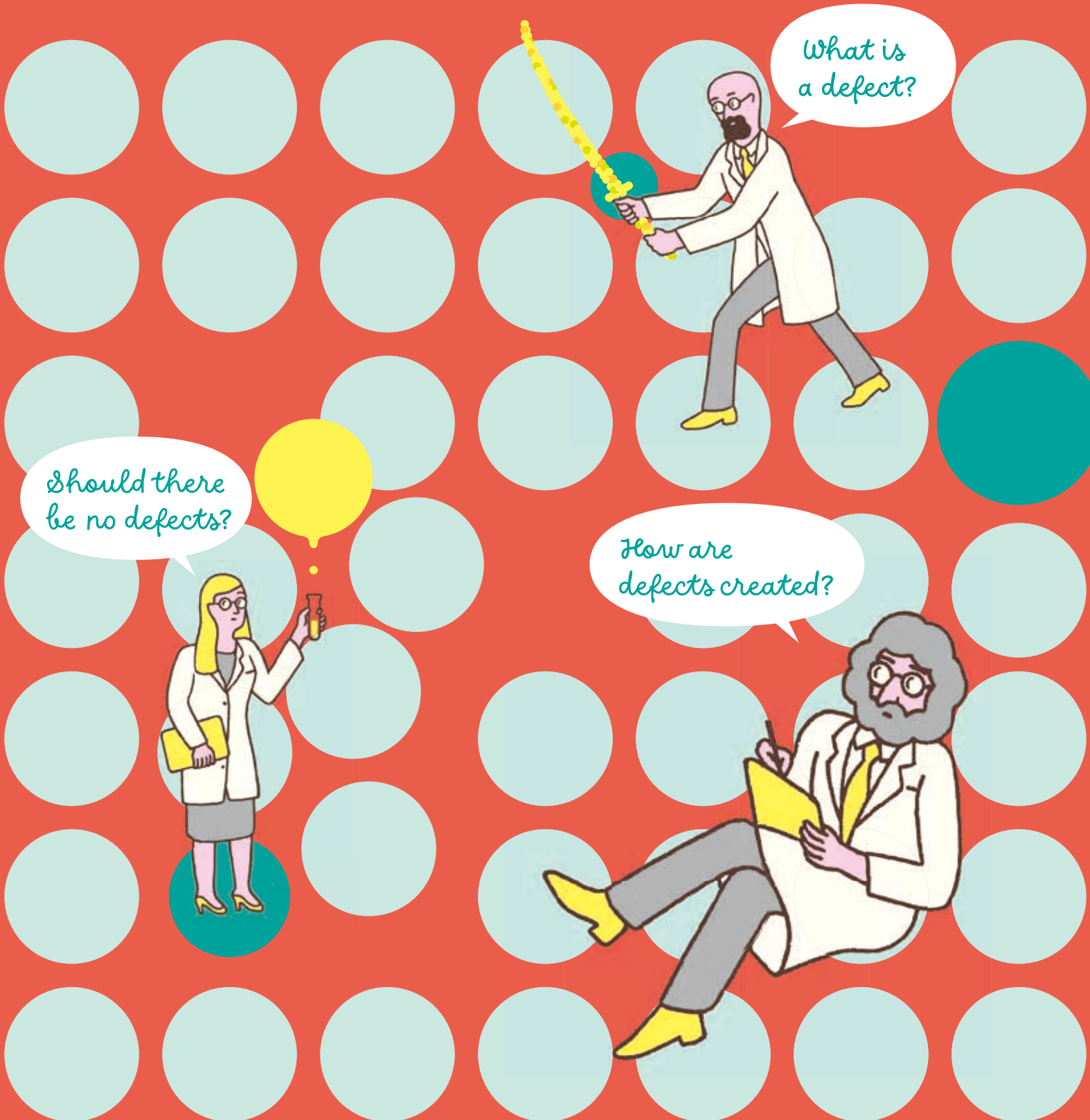


NIMS NOW No. 6

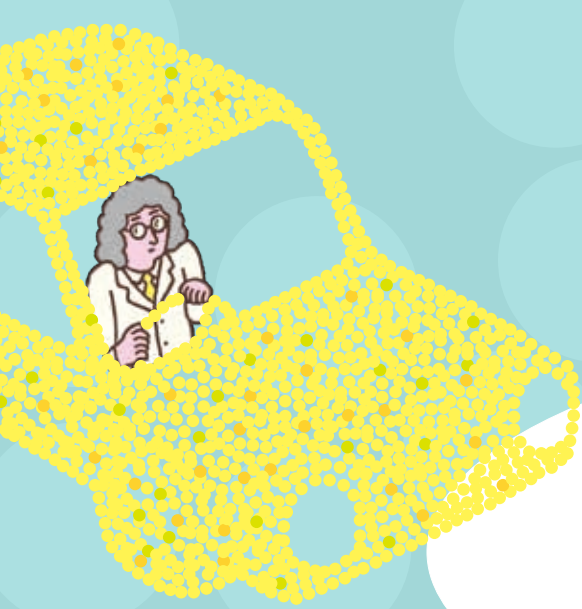
欠陥を活かすサイエンス



What is a defect?

Should there be no defects?

How are defects created?



「欠陥」ってなに？

What is a defect?

あつてはいけないの？

Should there be no defects?



どうして生まれるの？

How are defects created?



「欠陥」。

その言葉からはマイナスのイメージばかり受けますが、

「欠陥」をプラスに転じさせようと新しい工夫が生まれたりするなど、

材料研究者にとっては新しいチャレンジに遭遇するチャンスでもあります。

そればかりか、時には「欠陥」があることで性能がよくなることもある……

材料開発においては、「欠陥」によってサイエンスがますます発展しているのです。

材料を語る上で、避けることができない「欠陥」。その意外な素顔に迫ります。

材料の魅力を引き出す「欠陥」とは？

鉄鋼材料や半導体、柔らかい高分子まで
実は多くの材料で「欠陥」をうまく使うことで優れた性能を引き出していたんです。
「欠陥」と向き合う材料開発の取り組みを各分野のエキスパートが語り合いました。

1950年代、電子顕微鏡の使用で
欠陥が見えるようになった

かしいと考えるようになって、ようやく見えるようになったのが1950年代。電子顕微鏡が使われるようになってからのことです。

金属の形を変えるには、鍛造加工、塑性加工、切削加工などがありますが鍛造加工以外の加工には全て格子欠陥*が働いています。そのことを知らないと上手に加工ができません。格子欠陥の中でも形を変えるのに役立っているのが転位です。

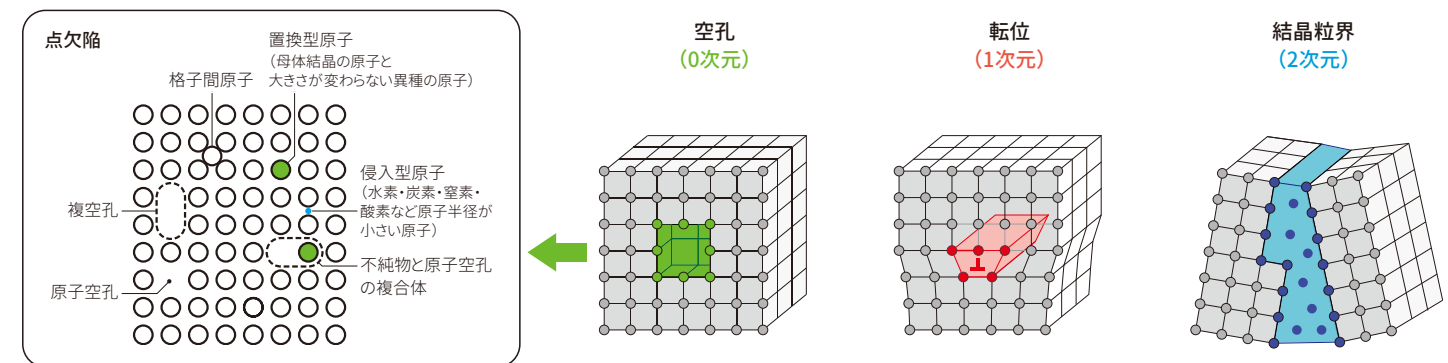
知京 半導体における欠陥は、大きいものでは転位、小さいものでは点欠陥が主に関係しています。点欠陥には原子空孔、格子間原子があります。

今、金属シリコン不足が大きな問題になっていますね。金属シリコンというのは、シリコンに不純物が入っていて電気伝導性に寄与しているものです。半導体の結晶の歴史は純度を上げることにあって、今ではイレブンナイン、つまり99.99999999%という非常に高純度の状態になっています。

けれども実はその状態だと使うことができません、ほんの少しの不純物や欠陥を与えることによって電気伝導性を制御しているんです。

シリコン結晶の中から、原子が1個抜けたところが原子空孔という欠陥です。抜け出てきた原子はシリコンの間をウロウロしています。そこに不純物としてリンやボロン(硼素)などを入れると、それが結晶の格子に入って電子を発生したり、プラスの電荷を持つものを作るようになるんです。

内藤 こうしてお話を聞いていると、欠陥といってもそれぞれ見ている景色が違うと感じます。知京さんは主にナノレベルの点欠陥の話。津崎さんは主にもう少し大きなマイクロ組織の話。材料の機能・物性に直結する欠陥のスケールがある。では、高分子材料の機能に及ぼすクリティカルな欠陥サイズは？と言われたら、ナノから目に見えるサイズまで全てのスケールが対象になります。高分子の階層構造は、全ての段階で欠



画像：九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所提供

*格子欠陥
「金属や合金は一般に規則正しく原子が配列した結晶状態ですが、変形すると格子から原子が抜けた点欠陥(空孔)、原子面が抜けた時に配列がずれた線欠陥(転位)、原子配列方向が異なる領域が交わった面欠陥(結晶粒界)が形成されます。大量に加工した時に、このような欠陥も大量にできることになります」(津崎)

鉄鋼材料に欠陥はなくてはならないもの。欠陥があるからこそ、鉄鋼は形を変えることができます。その仕組みを理解することが次世代のものづくりにつながります

電子デバイスの歴史は欠陥との闘いでもあります。半導体分野で欠陥の制御は最後の挑戦課題。その半面、なくてはならない欠陥もあってうまくつきあうことが大切です

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) デバイス材料設計グループ 特命研究員、グループリーダー
ちきょう とよひろ
知京 豊裕

NIMSフェロー (構造材料研究拠点)
つざき かねあき
津崎 兼彰

<構造材料>分野
(鉄鋼材料)

<半導体>分野

高分子は欠陥だらけの素材。あったらあったでうまく使い道を探します。リサイクル問題が顕在化する今、欠陥を自在に操ることが腕の見せどころかもしれません

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
ないとう まさのぶ
内藤 昌信

<高分子>分野



陥を含みうるので、あらゆるスケール、あらゆるプロセスレベルで欠陥とつきあっていかななくてはならない欠陥だらけの材料なんです。ナノレベルの構造欠陥制御も難しく、目に見える大きなクラックも存在する。高分子には100%結晶というのがなく、結晶部と非晶部が混在しているんですが、構造の違いからその間も欠陥になります。特に球晶という変わった形の結晶では、高分子が折りたたまれた結晶部と、その間をアモルファス（非晶部）が繋ぎ止めている

のですが、非晶部が切れてしまうとクラックになってしまうんです。

知京 アウトドア衣料素材などで有名なゴアテックス*も欠陥と思われがちな材料から生まれたんですね。

内藤 そうです。PTFE（フッ素樹脂「テフロン™」）を延伸することで、水蒸気は通すけれど水は通さないという機能が生まれたわけです。ミクロンレベルでの欠陥の有効活用ですね。

津崎 鍛冶屋さんレベルの話に戻りますと、欠陥というのは素材の形を変えるのに役立つわけですが、同時に欠陥を多く含むことで強くなるという性質もあります。欠陥と欠陥がお互い邪魔しあってぐにゃっと曲がるような形の変化が起こらないようになるのです。

だとすれば、強くするためにはどんどん欠陥を入れればいいはずですが、ところが欠陥を入れて強度が増すと、今度はそこに亀裂ができた時、自己修復できなくなり、ちょっと力がかかっただけでポキッと折れてしまう。研削する際にも、硬いものは薄くしても強いけれど、たまたま傷が入るとパリッと割れてしまう。硬いものは傷に弱く壊れやすいのです。

材料はどんどん強くしたい、そして製品を軽くしたい。けれども壊れやすくては困る。

そのために、格子欠陥の分布と密度をコントロールする必要があります。

金属において形を作るということは、内部のミクロ組織を作ることです。強いけれど粘り気があって壊れにくい金属素材を作るにはどうしたらいいか。今の最先端のサイエンスは、単に材料を強くするという段階を超えて、壊れるときの壊れ方を一生懸命研究しています。そのような研究開発の結果生まれた素材が、たとえばハイテン*です。

半導体にとって最後の欠陥は水素 有用なときもあれば悪いときもある

知京 半導体は、欠陥を制御しながら進化してきました。もともとのシリコンはとても脆いのですが、それを強くしているのは酸素です。単結晶基板に酸素が1%ほど入ることによって強くなるんですね。そのおかげで、直径300ミリもある大きいシリコンウエハ*が丈夫に持ち歩けるようになっています。

一方、半導体の製造工程の中で金属の粉が紛れ込んだり、あるいは予期しない不純物、たとえば空気中のナトリウムや硫黄などがくっついたりすると半導体はだめになってしまう。わずかの不純物が入っただけで電気伝導性ががらりと変わってしまうんです。

それを制御するために、ウエハの底部に鉄などを加えて意図的に欠陥領域を作り、デバイスから離れた場所に不純物を吸着させてしまうゲッターリングという仕組みが考えられました。最近は純度が上がってきたのであまり使われなくなってきましたが、少し前までは万が一を考え保険の意味合いで使われていました。そして、半導体にとって最後の欠陥として有名なのは水素です。

津崎 そうなんですか。私も、鉄中の水素のことで今まさに研究を続けています。

知京 シリコンの中の水素は、有用なときもあれば悪いときもあります。シリコンは完全結晶といってもところどころに穴が空いている。特に異なる材料で構成される界面では結合していない結合（未結合手／ダングリングボンド）に水素がくっついてくれることで安定して、電気的な中性を保つことができるんですね。その意味では、非常に有用です。ですから、デバイスを作った後に水素処理（シンタープロセス）を行い、デバイスを生き返らせる処理を施します。けれども、水素による還元作用で酸素が抜けてしまい、性能が不安定になるという働きもあります。これは絶対に起こさせないようにしないといけない。そのために窒化膜という壁のようなものを作って、水素が侵入しないように制御する箇所もある。最近は半導体製

造工程も高純度化して必ずしもこのような工程を必要としないデバイスも出てきています。

水素は見えにくくて動きが速いので、いかにそれを制御するかが半導体分野のラストフロンティア、最後の挑戦です。

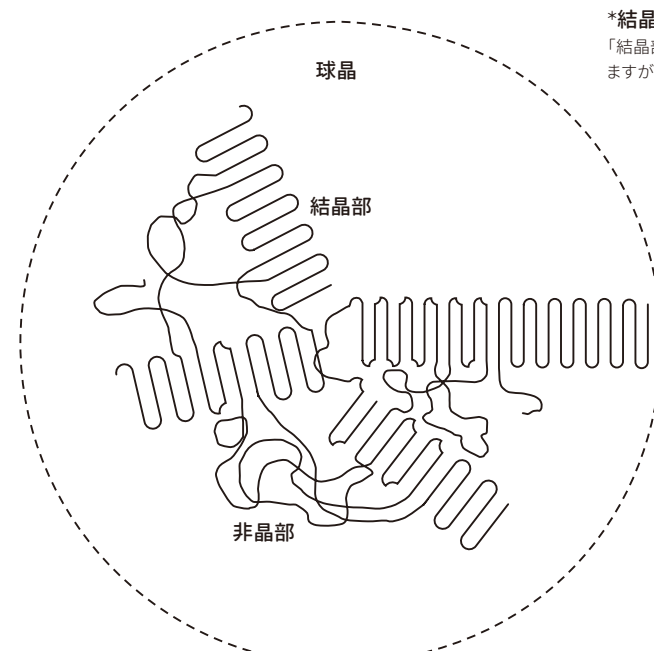
津崎 金属材料の分野でも、水素が入ると大抵のものはもろくなってしまいます。傷ができた時に金属は壊れやすくなるとお話ししましたが、水素が入ればもっと壊れやすい。水素が金属と金属の原子の結合性を弱めるんですね。ですから、いかに材料中に水素が入らないようにするか、入っても無害化するかはチャレンジングな取り組みなんです。まさかシリコンでも重要な挑戦だとは知らなかったんですが、今、知京さんのお話を聞きながらググって見たらたくさん出てきて驚いています。

合成からプロセスレベルまで 欠陥とつきあっていく高分子材料

内藤 高分子材料では先ほどもお話ししたように、合成からプロセスレベルまで欠陥とつきあっていかななくてはならないんですが、最近、材料単体だけではなく非常に注目されているのが接着です。

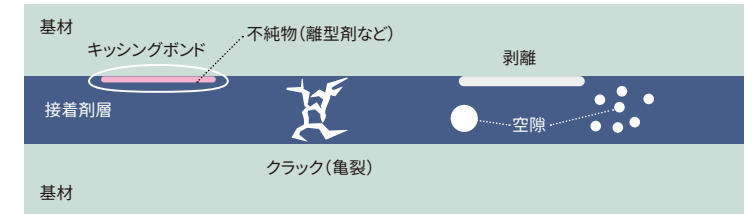
たとえば車体の素材として、鉄鋼分野か

らハイテンという粘り気のあるとても強い鉄が出てくる一方、炭素繊維で強化された樹脂、CFRP（炭素繊維強化プラスチック）も使われるようになってきました。そうすると、それらをくっつけなくてはならないわけですが、金属と樹脂を接着するとその界面にさまざまな欠陥が発生し、接着不良の原因になります。たとえば、キッキングボンド*という欠陥は、物理的にはくっついているけれど、まったく相互作用はなくて接着していない。見た目くっついているので欠陥には見



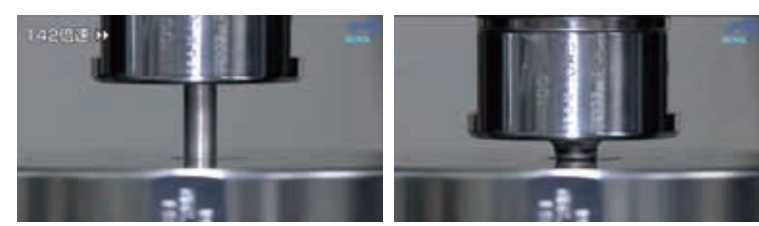
***結晶部と非晶部**
「結晶部の間をアモルファス（非晶部）が繋ぎ止めていますが、それが切れるとクラックへと進展します」（内藤）

***キッキングボンド**
「金属と樹脂などの異種材料を接着した際の界面にボイドなどの欠陥が生まれ、一見接合しているように見えて相互作用はない現象をキッキングボンドと言います」（内藤）



***粒界**
「色々な向きに結晶がたくさん集まった多結晶性、ポリクリスタルでは、格子配列が変わるところに結晶粒界という面欠陥が存在します。その仕組みがよくわかるのがこの映像です」（津崎）

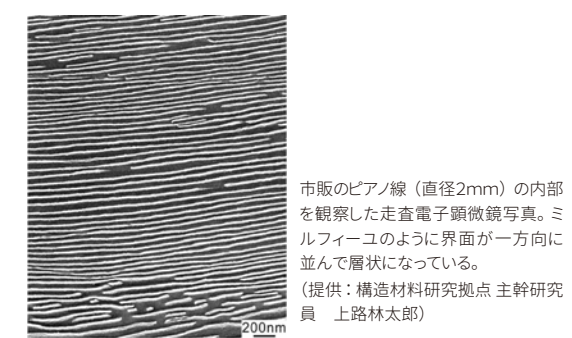
粒界をうまくつかった材料開発の例はこちらをご覧ください。
マグネシウム合金の開発は、結晶粒界での破壊を、マンガンを追加することで滑らせて防ぎ、塑性加工のしやすさを高めます。



★ほかにも事例を多数紹介中。
NIMS YouTubeチャンネル [まてりある's eye]をチェック！

- 亀裂を自分で修復するセラミックス
- 竹のようにしなやかな鉄
- 原子の立体配置が見える！

***ピアノ線**
通常の針金より強度の高い鋼線。もともとはピアノの弦に使われており、ハンマーでその部分を叩くことで音を出す仕組み。極細で強度の高いピアノ線が作られたことで、高音域を出すことが可能になった。現在音楽用には専用のものが用いられ、通常ピアノ線という工業用のものを指す。





丈夫なんですね。

内藤 構造材料としての接着剤はさまざまな分野で使われ始めていますが、万が一に備えてボルト止めも併用されています。津崎さんのお話にもありましたが、材料の強さを上げることはできるのですが、材料の信頼性を高めること、安定して性能を出すことも重要です。たとえば、自動車に使われている接着剤は構造の安定化に加え、振動の軽減による乗り心地改善の機能も担っています。

知京 半導体では加速試験をしています。デバイスを120℃や150℃というように温度帯を変えて動かしていつまでもつかを見る。では室温ならどのくらい大丈夫かと予測することで信頼性が担保されます。津崎さんにお聞きしたいのですが、ピアノ線*のように組織自体が変わっているものだと、長く使用することでそこに欠陥が集中するものなんですか。

津崎 そうですね。面欠陥の粒界では、界面の並び方や密度が重要なんですが、その最たる例がピアノ線です。普通、界面は様々な向きで並ぶんですが、ピアノ線では一方向に並んでいるんです。クロワッサンや Milfie のようなイメージですね。非常に高密度の界面が一方向に並んでいる、その方向には強度は高いんです。

知京 ピانو線といえば、1800年頃にピアノ線が登場したことで音楽が変わったと言われているんです。モーツァルトの時代の楽器で出せる音域は狭かったんですが、ピアノ線ができたことでピアノフォルテ、つまり今のピアノが生まれて、音域が広がった。だから、ベートーベンを端境期として、ブラームス以降の交響曲は格段に音域が広がっているんです。欠陥制御がうまくいったことで、音楽までも変えてしまったんですね。

津崎 材料によって音楽が変わり、世界が変わったという話ですね。自動車も、材料が変わって進化したことで世界が飛躍的に変わり、経済も成長してきました。こういう現象は材料に関わっているものにとって、ある意味醍醐味です。

知京 そう考えると、欠陥って本当に面白いですね。

サーキュラーエコノミーに関わる研究がますます盛んに

津崎 昔も、鍛冶屋さんレベルでできるものはノウハウで作れていたんです。けれども第一次産業革命時、蒸気機関車や鉄の橋のような大型構造物を作ることになって、大型化、大量生産化されるようになりました。工芸品から工業品へ。いかにして作

るかはその当時の大きなチャレンジだったんですね。その頃は光学顕微鏡の世界でした。それがだんだん内部のマイクロ組織までわかるようになってきた。内藤さんは、今まさにそのマイクロ組織の顔つきを見ているんですね。

内藤 高分子の分野では、欠陥があればあった構わない、あったら何かしら使い道がある。うまく使いまわしていこうというのが高分子材料の懐の深いところなんです。例えば、サーキュラーエコノミーの観点から注目されている生分解性ポリマーは、結晶化度が高く、分岐構造があるほど生分解されにくいという傾向があります。つまり、材料の強靭さには結晶性が高い方がいいが、生分解するためには、非晶性の欠陥部位が多い

方がいい。ではどんな環境で、どのくらいの期間で分解されるのがいいか。土中ではどうか、水中ではどうか、北極に持って行ったらどうかなど、さまざまな条件下で欠陥と機能のバランスを考えながら生分解性を制御することが大切になってきます。サーキュラーエコノミーに関わる研究はこれからますます盛んになりそうです。
津崎 格子欠陥の存在を認識してその特徴を理解するようになったのが1950年頃とすると、それからまだ70年。その間に、欠陥の捉え方もずいぶん変わってきましたし、これからはまた今までとは違う場の中で欠陥を理解していかないとけないでしょう。

さまざまな状態で欠陥の動きを理解しないと、次のものづくりに貢献することはで

きません。ですから、環境が変われば学ばべきところが必ずまた出てくる。地球の最後の日まで格子欠陥の研究は続くということですね。

知京 欠陥は忌み嫌うものではなく、うまく利用する時代なんですね。欠陥との闘いは決してなくなりません。何かを解決すれば、また新しい挑戦が出てくる。欠陥は「ちょっと癖の強い、でも優秀で、いないと困る研究仲間」みたいな感じでしょうか。

内藤 そうですね。今後は欠陥を自在に操ることが、材料研究者の腕の見せどころになってくるかもしれません。

(2021/11/8 NIMSにて)

材料の魅力を引き出す「欠陥」とは？



*ロータスエリーゼ
「イギリスのロータス社から1995年に誕生したロードスター型のスポーツカー。軽量化を目指してきたロータス社ならではの発想で、ボディを接着剤で接合するという斬新なアイデアで軽量化を実現し、話題になりました」(知京)

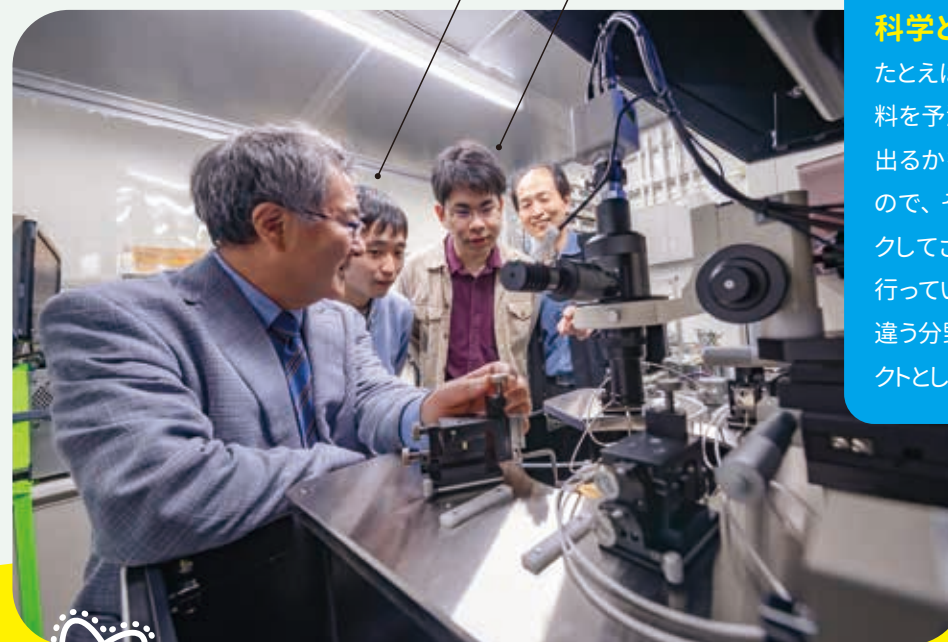
*ゴアテックス……………p13参照
*ハイテン……………p12参照
*シリコンウエハ……………p13参照



NIMS招聘研究员
(东京大学大学院)
川井 森生

「内藤先生は研究に対する視野が広く、今やっていることが何に生きるかというセンサーが常に立っているというイメージです。リサイクルプラスチックというテーマも先生にアイデアを出してもらい、研究しているところです」

「最近主に手がけているのは、**接着剤**の開発や**サーキュラーエコノミー**に利用できるような**材料**の開発。分解にまでリサイクルをコントロールできるような構造材料を作れば良いと考えて研究しています。詳しいことはまだまだ企業秘密ですね」(内藤)



NIMSジュニア研究员
(明治大学大学院)
森田 雅也

NIMSジュニア研究员
(明治大学大学院)
大門 祐貴

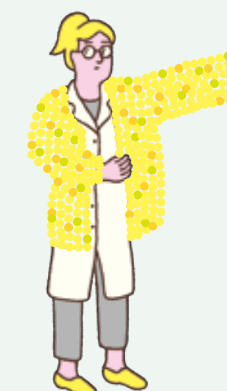
「僕たちが手がけているのは**データ駆動型材料科学とハイスループット材料合成の融合**。たとえば新しい誘電体を作る時、データによって材料を予測し、実際にできたものから予想された特性が出るかを検証する。欠陥があれば誘電率が変わるので、それを制御してまた製膜、結果をフィードバックしてさらに新しいモデルを作るというようなことを行っています。データ駆動チーム、実験チームなど、違う分野の人たちと協力しながら、ひとつのプロジェクトとして共同研究をしています」(知京)

統合型材料開発・情報基盤部門
デバイス材料設計グループ 主幹研究员
小山 幸典



長田 貴弘
機能性材料研究拠点
ナノ電子デバイス材料グループ
グループリーダー

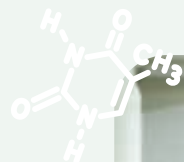
木野 日織
統合型材料開発・情報基盤部門
デバイス材料設計グループ
主任研究员



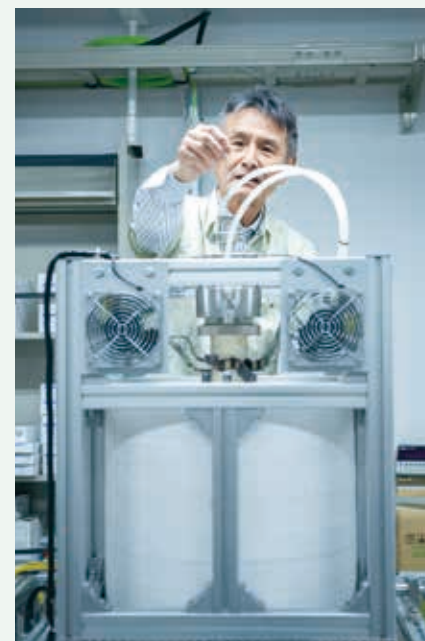
ラボ訪問

新しい材料研究中!

「欠陥」の魅力を熱く語った材料研究者の面々。今、何を研究中?
千葉スワッグや学生とのラボツアーコマをご紹介しましょう。



「今、主に研究しているのは**マルテンサイト変態と水素脆化**について。鉄鋼材料を熱してできたオーステナイト組織を急冷することで、非常に硬いマルテンサイト組織になる。ミクロ組織の変化や格子欠陥の様子を顕微鏡で観察しています。強い鉄鋼素材を生み出すには、このマルテンサイト変態が不可欠ですが、水素が入ることによって脆くなりやすい。いかに水素脆化しにくいマルテンサイトを作るかを考えています」(津崎)



利用したり 制御したり

知っていましたか？

欠陥から生まれた プロダクト

歴史を振り返ると、新しい材料が生まれることで、
さまざまな製品が実用化され、今につながっています。
次世代にはどんな製品が生まれしていくのでしょうか。



Kanazaki Tsuzaki

日本刀

「日本刀は焼入れという熱処理を行うことによって様々な格子欠陥を導入して強度を高めています。日本刀の刃の部分にはマルテンサイトと呼ばれるとても硬いマイクロ組織です。昔は加熱温度や冷却水の温度は秘伝とされ、すべて刀匠の経験に基づいて行われてきました。貴重な日本刀をサンプルとして使うことができないため、日本刀(古刀)のサイエンスの解明はなかなか難しいものです」(津崎)

(鋒) (刃先)



反射電子像観察でわかる日本刀の断面。刃となる先端部分がマルテンサイト組織。(提供: 日本電子(株) 塚本一徳氏、木村隆氏)

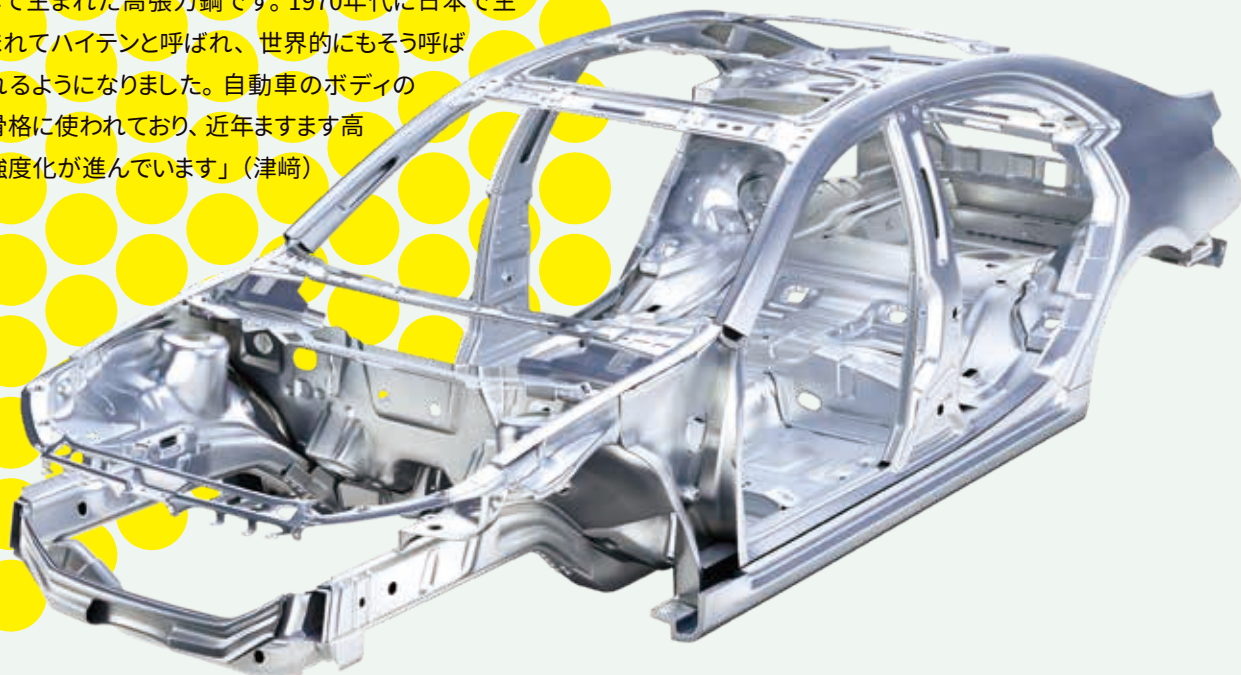


デュラミン

「1906年にドイツで生まれた非常に強度の高いアルミニウム合金。これを発明した人が、土曜日に熱処理した金属の硬度測定を途中まで行い続きを週明けに行ったところ、異常に硬くなっているのに気づいたというエピソードが有名です。合金を焼入れした後、時間を置くことで硬くなる時効硬化という現象が発見されたきっかけになりました。内部には構造の異なるナノ結晶が多くあり、転位の運動を妨げる効果があります」(津崎)

ハイテン

「通常の鉄鋼よりも引張強度の高いHigh Tensile Strength Steel、略してハイテンは格子欠陥をうまく利用して生まれた高張力鋼です。1970年代に日本で生まれてハイテンと呼ばれ、世界的にもそう呼ばれるようになりました。自動車のボディの骨格に使われており、近年ますます高強度化が進んでいます」(津崎)

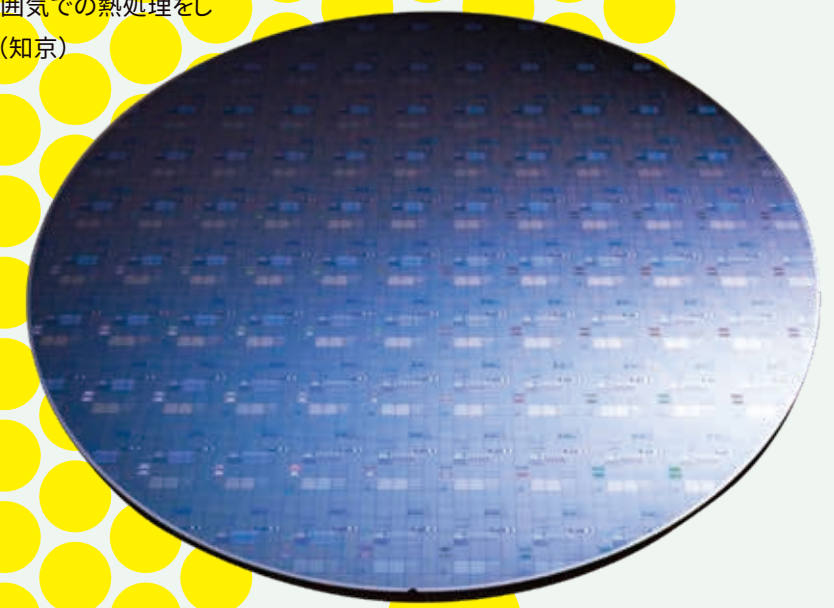
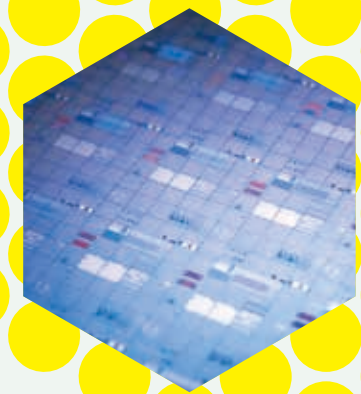


半導体シリコンウエハ

「300mm基板の上に作製した集積回路の例です。微細加工線幅が30ナノメートル。現在、一般的に広く使われている世代のものです。カラフルに光って肉眼で見える細かいパターンよりもっと細かい線で構成されています。精密になればなるほど欠陥制御が重要になり、製造工程の最後に450℃ 10分程度の水素雰囲気での熱処理をして欠陥を終端する場合があります」(知京)



Toyohiro Chikyo



Masanobu Naito

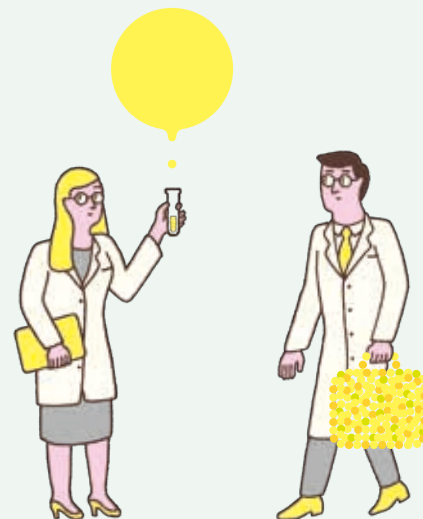
ゴアテックス® 知られるポリマー 「ePTFE」

「水蒸気を通すのに水を通さないことで知られるゴアテックスは、PTFE(フッ素樹脂「テフロン™」)を延伸加工したものです。棒状のPTFEを伸ばそうとしても破損してしまうくらいしかなかったが、ある時勢よく引っ張ったところ多くの孔を含みながら10倍もの長さに伸びることを発見。欠陥と思われがちな多数の孔がありながらも、実際には高い有用性を持つ素材として、衣料品から医療器具、電子ケーブル等多くの分野で活用されています」(内藤)



欠陥を拓く研究者たち

「欠陥」を起点として、
新しい材料開発にチャレンジしている若き材料研究者。
それぞれ研究する素材の実用化に向け、
メカニズムの解明を続けています。



ネットワーク構造の特殊な原理を解明し、 さまざまな素材に応用して強い材料を作る



Kazuaki Kato



かいプラスチックを曲げると白くなりますが、それは微小なポイドが
無数にできて光を散乱するから。硬いプラスチックに力を加えると、
その小さなポイドができた瞬間に割れてしまうことが多いのです。

ポイドの発生を抑えることは困難ですが、どのようにポイドが
できるのかなどがわかれば、さらに強い材料を作ることにつながる
でしょう。

私が今研究しているポリロタキサンガラスという素材は、硬質で
ありながら小さなポイドができて割れず、ポイドの周辺が強くなる
という特殊な性質を持っている可能性があり、その解明を進めてい
るところです。他にも丈夫な素材はありますが、高分子はX線や電
子顕微鏡を使っても詳しい構造を調べることは困難です。その点ポ
リロタキサンは、環状の分子にひも状の高分子が通ったネットワーク
のような構造で、2つの成分があることで解析がしやすい。ポイド周
辺の強化メカニズムを解明すれば、他の高分子素材にも応用し
てさまざまな材料を強くできると考えています。

高分子はそばのような長いひも状分子が絡み合っ
てできています。そこに力を加えるとナノサイズの欠陥(ポ
イド)ができます。たとえばクリアファイルのような柔ら



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
主任招聘研究員
(東京大学大学院新領域創成科学研究所
物質系専攻 講師)
かとう かずあき
加藤 和明

Masato Wakeda



機能性材料研究拠点
分子機能化学グループ 主幹研究員
こばやし ゆか
小林 由佳



プロトンを抜く発想で「欠陥」をデザイン。 新しい有機伝導性材料を開発

有機物は基本的に絶縁体で実用的な
伝導性材料とは無縁だったのですが、
その常識を一気に変えたのが2000年に
ノーベル賞を受賞された白川英樹先生
の導電性ポリマーでした。けれども、それ
は安定した分子に他の分子を加えてい
る(ドーピング)ため、化学的に最安定状
態ではなく、熱などの環境的変化によ
って伝導性が変化する特徴があります。も
っと伝導状態を安定化させるためには
何かを加えるのではなく、何かを抜けば
いいのではないかと。そう考えて、水素結
合を利用してプロトンを1個抜き、欠陥を
分子中に安定にデザインすることによ
って生まれたのが私の開発している新し
い有機伝導性材料です。欠陥がうまく電
荷の調整役になってくれるという感じで
すね。

そもそも有機物にとって欠陥はあってはならないものとい
うイメージが強かったため、この考えはなかなか受け入れられ
なかったのですが、実際には太陽電池などの過酷な条件にお



いても安定性を保ち、かなり有効であることが徐々に分かって
きました。このアイデアを使えば、半導体から金属まで幅広く
応用することができ、たとえば希少金属を使用するITO電極の
代替が出来る可能性もあります。しかも、溶液を滴下するドロ
ップキャスト法で電極を作ることができるため、産業化におい
て無機物では難しいような利用法も期待され、将来的な実用
化も視野に入れた基礎学術研究を続けています。

原子シミュレーション 「欠陥」のメカニズムを解明する

転位という格子欠陥が動くとき、他の格子欠陥によって
動きを邪魔されることで金属材料は強くなり、変形しにく
くなるという性質があります。私が主に研究しているの
は、その格子欠陥の相互作用。計算機を使って、その動
きを原子シミュレーションで調べています。

現在、構造材料の開発ではより強いもの、ねばりのあ
るものを作ることが求められています。実際に強い材料
は生まれているのですが、原子スケールで一体何が起き
ているのか、欠陥がどのような影響を及ぼしているのか、
わからないことがたくさんあります。そのメカニズムを明
らかにするために適しているのが原子シミュレーション。
格子欠陥の根本に迫ることで、優れた特性をもつ材料の

開発をより効率的に行えるようになるのではないかと考
えています。

近年、計算機の性能が向上したこともあり、かなり精度
の高い計算ができるようになったことから、その重要性も
高まってきました。実験と計算では、お互いにそれぞれ長
所をもっているため、それを組み合わせることでより深く
現象を理解することができるようになります。格子欠陥の
挙動は本当に小さなスケールで起きる現象ですが、とて
も奥が深く、研究対象としての興味は尽きません。



構造材料研究拠点
高強度材料グループ
主任研究員
わけだ まさと
譯田 真人



NIMS NOW vol.21 No.6 通巻191号 2021年12月発行
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 TEL 029-859-2026 FAX 029-859-2017 E-mail inquiry@nims.go.jp Web www.nims.go.jp
定期購読のお申し込みは、上記FAX、またはE-mailにて承っております。 禁無断転載 © 2021 All rights reserved by the National Institute for Materials Science
イラスト：上田よう (vision track) 撮影：石川典人 デザイン：Barbazio株式会社 編集：嵯峨佳生子 (Lasant) 文：嵯峨崎文香



古紙配合率 70% 再生紙を
使用しています



植物油インキを使用しています

ISSN 2436-3502