

産 総 研

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

TODAY

2

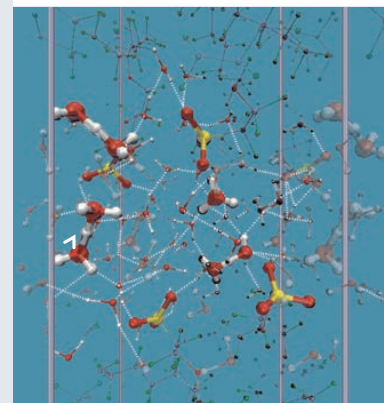
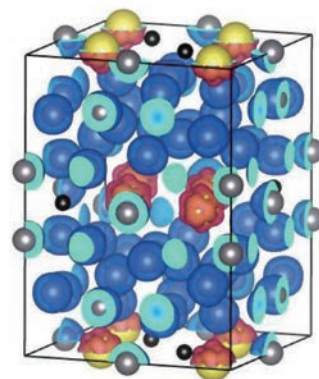
2013
February

Vol.13 No.2

特 集

02 計算シミュレーション技術の活用と産業普及への取り組み

ナノシステム研究部門における理論シミュレーションと実験との協働
 計算シミュレーションの産業普及とスパコン「京」の活用
 新規磁性材料開発へ向けた第一原理電子状態計算プログラムQMAS
 未利用熱の活用を目指したフレキシブル熱電材料と蓄熱・断熱材料の理論・シミュレーション設計
 燃料電池用高分子材料のシミュレーション
 動作電圧の極低電圧化を目指した抵抗変化型メモリーのオン・オフ機構の理論解明
 Technology CADによる次世代電子デバイス設計と第一原理計算
 次世代タイヤ材料開発を目指した粗視化シミュレーションの利用
 液晶材料における新しい秩序構造の発見



リサーチ・ホットライン

- 12 盗聴やフィッシング詐欺を防御する認証技術
証明可能安全性をもち効率のよいパスワード認証
- 13 強磁性ナノコンタクト素子によるミリ波発振
ナノスケールの電流制御型発振素子を理論提案

パテント・インフォ

- 14 回転楕円体面鏡を用いた光散乱測定装置
散乱光を正反射率と拡散反射率に分解可能な測定を実現
- 15 印刷製造によるフレキシブル熱電変換素子
身の周りに存在する熱エネルギーを電力に変換

テクノ・インフラ

- 16 ベアリング用窒化ケイ素の寿命および破壊特性評価
適切な特性評価による新素材の普及および競争力強化への貢献
- 17 誰もが地質図を利用できる仕組みを提供
地質情報表示ウェブサイト「地質図Navi」の公開

シリーズ

- 18 進化し続ける産総研のコーディネーション活動(第37回)
研究者だからできるプロジェクトマネージャーを目指して


 National Institute of
 Advanced Industrial Science
 and Technology
AIST

技術を社会へ
 Integration for Innovation

計算シミュレーション技術の活用と産業普及への取り組み

ナノシステム研究部門における理論シミュレーションと実験との協働

2012年はアラン・チューリングの生誕100年にあたり、国内外で多くの記念行事が開催されました。チューリングは英国が生んだ天才的な数学者で、計算機科学分野のノーベル賞と言われるチューリング賞にその名を残しています。今日のコンピューターの原型となるチューリング・マシンの考案から生物の形づくりを解き明かすチューリング構造の発見に至るまで、その業績は多岐にわたっています。チューリングが活躍した時代の計算機は甚だお粗末なものでしたが、計算速度はその後指数関数的に増大し、2012年には1京回/秒に達して、科学技術はビッグデータの時代へと突入しまし

た。飛躍的に進歩したシミュレーションによって科学技術の質そのものがいま大きく変わろうとしています。

分子・原子やその集団を対象とするナノテクノロジーは、計算科学や理論シミュレーションの恩恵を享受できる分野の一つです。理論シミュレーションと実験・開発現場との協働は、今世紀に入ってますます重要性を帯びるようになりました。このトレンドを受けて2010年に設立されたナノシステム研究部門は、計算科学とナノテクノロジーの融合をミッションとして、さまざまな分野の研究開発に取り組んでいます。

この特集では、材料開発における理

論シミュレーションの最新成果をご紹介します。言うまでもないことですが、理論シミュレーションにおいては、プログラムや計算アルゴリズムの開発のみならず、物理モデルの精緻化やパラメータ値の設定、計算結果の評価なども不可欠です。また、高分子や液晶に代表されるソフトマターでは、大胆な粗視化を行ってその本質に迫らねばなりません。これらはいずれも研究者の創意と協働の見せ所でもありますので、成果とあわせてご高読いただければ幸いです。

ナノシステム研究部門
研究部門長
やまぐち ともひこ
山口 智彦

計算シミュレーションの産業普及とスパコン「京」の活用

コモディティ化（汎用品化）の影響を受けにくい部素材開発分野の重要性が増すにつれ、材料探索指針の導出を理論シミュレーションに期待する傾向が産業界でも大きくなっています。産業競争力懇談会（COCN）の2012年度のテーマの一つとして「材料シミュレーション」が大きく取り上げられていることもその一例でしょう。一方で、この分野の理論シミュレーションは定量化しておらず、基礎的な課題を解決しながら、同時に産業普及を図らなければいけないという状況にあります。計算シミュレーションの理論手法はこれまで、大学・研究機関を中心に発展してきましたので、企業事業部の現場でのリアルな問題との乖離が時として問題になります。そこで、企業との共同

研究の経験をもつと同時に、基礎研究にも大きなポテンシャルをもつ産総研にノウハウを集積すると同時に、現実の産業ニーズなどを踏まえた“泥臭い”問題に真面目に取り組む産総研をハブとして計算シミュレーションの産業普及を行っていく必要があります。さらに、スーパーコンピューター（スパコン）“京”に係る文科省プロジェクト“HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」～基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ～”の協力機関として同プロジェクトの産官学連携推進を担い、同時に多くの課題研究を支えていることから、産総研が果たすべき役割は非常に大きいと考えております。

*産総研は以下の課題を担当している；

①電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究（三宅・分担）②新材料探索（石橋、土田・分担）③ポリモルフから生起する分子集団機能（篠田・分担）④太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算（宮本・分担）⑤高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究（大谷・代表）⑥ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション（浅井・代表、中村・分担）。産総研は産官学連携小委員会の委員長機関でもある。

ナノシステム研究部門
副研究部門長
あさい よしひろ
浅井 美博

新規磁性材料開発へ向けた 第一原理電子状態計算プログラム QMAS

背景

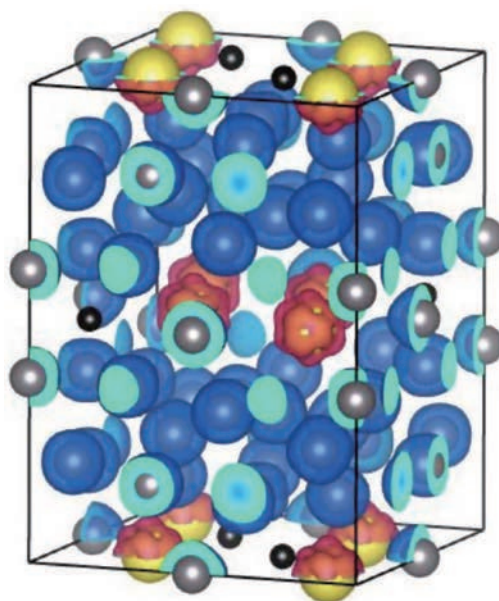
国内総電力の50 %以上はモーターによって消費されており^[1]、高性能磁石の開発は低消費電力社会の実現のための重要課題に位置づけられます。また近年ハイブリッドカーや電気自動車に用いる磁石材料の需要が急速に伸びています。しかし最強磁石のネオジム(Nd)磁石は温度特性が悪く、自動車での使用温度(200℃程度)では必要な保磁力が得られません。耐熱性を改善するためにジスプロシウム(Dy)を添加しますが、これにも問題があります。希土類の中で比較的豊富なNdと比べてDyは産出量が1桁小さい希少金属で、産出国が偏在しているため元素戦略上の問題も抱えています。また耐熱性が改善される一方で、性能指数は悪化してしまいます。

磁石材料の量子シミュレーション

磁石特性を特徴づける物性値として、磁化、磁気異方性、キュリー温度が挙げられます。ネオジム磁石の主役は鉄(Fe)とNdの電子です。前者が大きな磁化の主因で、後者が強い磁気異方性の源泉です。キュリー温度はFe-Fe間、Fe-Nd間の交換結合により決定づけられます。これらの物性パラメータに加えて、磁石の性能を決定する保磁力は材料パラメータで、粒界の構造・磁気特性によって支配されています。

産総研で開発してきたQMAS(Quantum Materials Simulator, [http://](http://qmas.jp/)

qmas.jp/)は密度汎関数理論に基づいた第一原理計算プログラムで、遷移金属化合物の磁気パターンと磁気異方性、酸化物界面の構造と電子状態など、これまで多くの物質系に適用されてきました。平面波基底とPAW法を採用しており、数値的に高精度であること、構造最適化に適していること、磁気異方性の起源であるスピン軌道相互作用が扱えること、など種々の特長を備えています。ナノシステム研究部門は、経済産業省「次世代自動車向け高効率モーター用磁性材料技術開発」プロジェクトに参画し、計算科学研究を担当してい



密度汎関数理論に基づいた第一原理計算によるネオジム磁石の電子スピン密度
赤と青がスピン密度の等高面で、色は符号の違いを表す。黄色、灰色、黒の玉は、それぞれネオジム、鉄、ホウ素である。ネオジムと鉄の周囲でスピンが逆向きである様子が確認できる。

ます。文部科学省・元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>磁石領域では電子論研究の中核拠点に選定されています。希土類磁石の磁気物性値の第一原理計算、特にその界面系の磁気異方性を基に保磁力の温度依存性の支配要因を解明し、自動車で使用可能な脱/省Dy希土類磁石の開発を目指します。

ナノシステム研究部門
ダイナミクスプロセスシミュレーショングループ
兼エレクトロニクス材料シミュレーショングループ

みやけ たかし
三宅 隆

エレクトロニクス材料シミュレーショングループ
いしばし しょうじ
石橋 章司

エネルギー材料シミュレーショングループ
てづか あきのり
手塚 明則

関連情報

[1] 新機能素子研究開発協会のデータでは、2005年の総電力使用量の57.3 %がモーターに消費されている。(日経エレクトロニクス2011年6月23日)

未利用熱の活用を目指したフレキシブル熱電材料と蓄熱・断熱材料の理論・シミュレーション設計

未利用排熱の活用技術の現状

省エネ技術を駆使しても不可避免的に発生してしまう排熱を有効利用することにより、エネルギー利用効率をさらにあげることが期待できます。そのような未利用排熱の活用技術として重要なものは、断熱技術や蓄熱技術、ヒートポンプ、熱電変換技術などです。これらの多くの技術では部材性能がシステム性能の律速となっていて、革新的な部材の開発が成されればこれら技術の飛躍の向上が予想されます。候補部材の探索において理論・シミュレーションを有効に活用することが大いに期待されています。

フレキシブル熱電材料

最近、産総研では有機材料を用いたフレキシブルな有機熱電シートを開発しました^[1]。これらの有機熱電シートには、発熱体との接触面の大面積化によるモジュール全体としての性能向上や、手に入れ易い材料を用いているために大量生産が容易であるといった利点があります。モジュールを高温と低温領域で挟んだ時、熱が電力に変換されますが、その変換効率は、熱電変換性能指数 ZT という物質材料固有の量で特徴づけられます。 T は高温と低温領域の平均温度です。具体的には、電子からの寄与(電気伝導度 G 、ゼーベック係数 S 、電子熱伝導度 κ_e)と、分子・格子振動からの寄与(フォノン熱伝導度 κ_{ph})を用いて $ZT = S^2 G / (\kappa_e + \kappa_{ph})$ と表されます。大きな ZT を得るためには①フォノン熱伝導度 κ_{ph} を小さくし、②残りの電子からの寄与を最大化することが必要です。有機材料の場合、分

子は金属電極の格子振動と比べて、分子振動の振動数が高く、両者の振動数に大きな差が生じます。振動数の観点からは材料と電極との接触が悪く(電極効果)①を満たしやすいという利点があります。

近年、量子輸送理論に基づいてゼーベック係数、電気伝導度、電子熱伝導度、さらにはフォノン熱伝導度を第一原理的に計算することが可能となっています。最初の3つは、まず、2電極間に挟まれた試料を電子が透過する確率 τ を電子のエネルギー E の関数として求め、これからそれぞれの量を計算します。同様にフォノン透過確率 T_{ph} を用いてフォノン熱伝導度を計算することができます。現状の計算機

性能とソフトウェア性能では計算サイズは数十ナノメートル程度の薄膜に限定されます。バルク体の性質は膜厚依存性を外挿して厚膜体の性質から推定します。従来の計算では、バンド計算から S 、古典ボルツマン方程式から G と κ_e 、古典分子動力学計算から κ_{ph} というように、ばらばらな理論適用による近似量を集めて ZT を求めていましたが、量子輸送理論による第一原理計算では、一貫した理論と近似を用いて ZT を評価できます。最近の理論計算から、透過確率のエネルギー依存性カーブの急峻な肩の位置に電極のフェルミ準位が位置する時に ZT が最大化するということがわかりました(図1)。これはゼーベック係数が、透過確率の

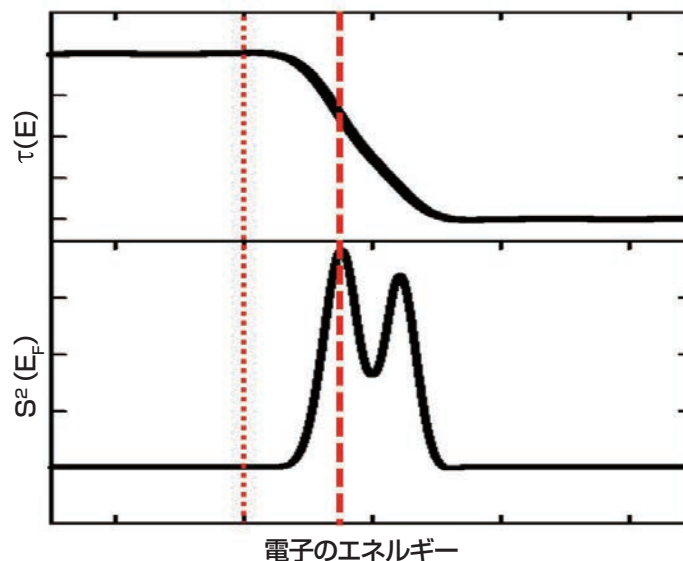


図1 電子透過確率 τ とゼーベック係数 S の2乗の電子エネルギー依存性。電極フェルミ準位が透過係数が平坦な領域(点線)から肩の急峻な変化領域(破線)にシフトしたとき、ゼーベック係数の増大により ZT が増加することがわかる。

計算シミュレーション技術の活用と 産業普及への取り組み

フェルミ単位での、エネルギーに対する対数微分に比例する： $S \sim \partial \log(\tau) / \partial E$ ことから理にかなった振る舞いです。次にルテニウム (Ru) を含む有機金属錯体分子多層膜に第一原理計算をテスト適用しました。その構造と ZT の温度依存性の概略図を図2に示します。今後、さまざまな試料・電極材料の組み合わせ探索を行います。

断熱材料・蓄熱材料

熱伝導度 ($\kappa_e + \kappa_{ph}$) を小さくしなければいけないという点では、断熱材料と熱電材料の開発目標は共通点があります。断熱材料は絶縁体なので κ_e は無視でき、 κ_{ph} のみを計算すればよいのですが、ナノ発泡などの局所構造をもつ断熱材料が多いため、分子動力学法を用いた大規模計算や粗視化分子動力学計算を行うことが必要です。「水」は最も身近な蓄熱材料です。糖アル

コール類も良く知られていますが、これらの物質を超える蓄熱密度をもち、100 ~ 200 °C で機能する蓄熱材料は知られていません。自動車排熱を利用した触媒暖機や給湯システムのコンパクト化などのために高密度蓄熱材料が求められていますが、そのためには新規な蓄熱材料開発が必要です。蓄熱材料は相転移現象を介して熱を貯蔵しますが、融解現象を支配する主要因は分子内に存在する水素結合エネルギーであり、物質中の水素結合密度と共に蓄熱密度を決定しています。分子シミュレーション手法を用いてこれら分子性液体の融解・凝固現象を支配する分子論的要因を同定し新規候補物質を探索します。化学反応を利用した蓄熱現象(化学蓄熱)の利用も重要な課題ですが、複雑な素反応解析にも分子シミュレーション技術を活かした設計が必要です。

将来展望

これらの熱マネジメント材料を用いることで、例えば自動車排熱、化学工場廃熱、住環境の未利用熱活用に大きく貢献しうると期待されます。計算機シミュレーションを活用したチャレンジングな新規部素材探索が、その基盤を支えることにつながると期待されています。

プレス発表

[1] 2011年9月30日「印刷して作る柔らかい熱電変換素子」

ナノシステム研究部門
エレクトロニクス材料シミュレーショングループ
なかむら ひさお
中村 恒夫

分子シミュレーショングループ
いしだ とよかず
石田 豊和
あさい よしひろ
浅井 美博

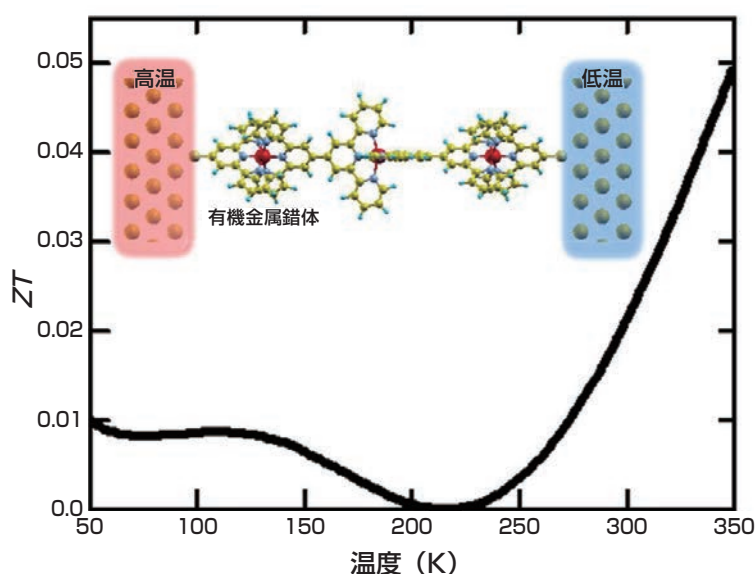


図2 Ru核有機金属錯体分子膜の第一原理による ZT 計算。錯体分子層を3層重ねたモデルに対して計算を行った。

燃料電池用高分子材料のシミュレーション

固体高分子形燃料電池（PEFC）について

PEFCは燃料電池の一つであり、さまざまな燃料電池の中でも小型化が可能であること、起動がスムーズであることなどの理由により、自動車や携帯端末、家庭用の電源としての応用が期待されています。PEFCでは燃料である水素ガス（ H_2 ）が燃料極でプロトン（ H^+ ）と電子に分かれ電子が電流として移動します。またプロトンは高分子電解質膜を通して空気極に移動し、ここで酸素と反応し最終的には水が生成されます。現在PEFCはクリーンな動力源として注目されていますが、いまだ高価であり、さらなる開発が必要です。

ナフィオン®のシミュレーション

PEFCに用いられる高分子電解質膜としては、デュポン社の製品であるナフィオンが有名です。ナフィオンは化学的、機械的安定性が高く、優れたプロトン伝導特性を示しPEFC用の電解質膜に適しています。PEFCの性能に影響を及ぼすナフィオン中でのプロトン伝導機構に関してはさまざまな研究が行われてきており、いくつかのモデルが提案されていますが、その分子レベルでの詳細なプロトン伝導機構は明らかではありません。それらの詳細を調べるため、ナノシステム研究部門で開発したFEMTECKというプログラムを用いてシミュレーションを行いました^{[1][2]}。

図1はシミュレーション結果を可視化したものです。丸一つ一つは原子を表しており、シミュレーションの結果

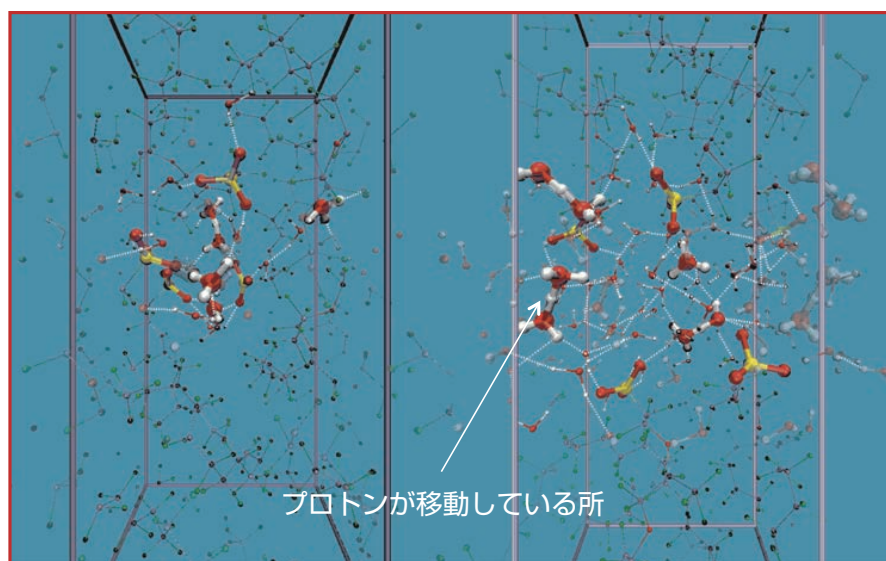


図1 ナフィオン膜中での水分子およびプロトンの様子。左側は低含水率、右は高含水率の時原子の色は、赤：酸素、白：水素、緑：フッ素、黒：炭素、黄：イオウ。
ナフィオンの骨格の部分は薄く表示してある。四角い箱は計算の時に設定したユニットセル。

から電解質膜中の水分子やプロトンの様子を“直接”見ることができます。実験結果からプロトンの伝導にはグロートス機構*が提案されていました。私たちのシミュレーションの結果もこれをサポートするもので、実際にプロトンがジャンプして動くことをシミュレーションでも確認できました。一方、膜が低含水率の時はビークル機構**が提案されていました。私たちのシミュレーション結果ではビークル機構のような単純な形でプロトンが移動しないことがわかり、これがこれまでのプロトン伝導モデルではいくつかの実験結果を説明できなかった原因であることを明らかにしました。さらに、シミュレーションの結果から一次元の水

のネットワークを作ると少ない水の量で高いプロトン伝導を達成できるとの知見を見いだすことができ、このような知見は今後新しい膜の設計に有益になると考えられます。

アルカリ電解質形燃料電池（AMFC）用電解質膜のシミュレーション

PEFCの開発が行われる一方で、イオン伝導体がプロトンでなく水酸化物イオン（ OH^- ）であるAMFCの開発も現在活発に行われています。AMFCのメリットとしては高価な白金触媒を用いなくてもよいので、白金触媒を多用するPEFCに比べ低コスト化が原理的に簡単である点が挙げられます。しかし、AMFCではナフィオンのよう

計算シミュレーション技術の活用と 産業普及への取り組み

な化学的、機械的耐久性が高い電解質膜がまだ開発されていません。AMFC用の電解質膜には膜の末端に通常アルキルアンモニウム ($-N(CH_3)_3^+$) のような (+) 電荷をもつ官能基が付いて、この部分を中心にして水分子が集まり、その集まった水分子が作るチャネルの中を水酸化物イオンが伝導されます。しかし水酸化物イオンの高い反応性のためにアルキルアンモニウム基はさまざまな反応経路で分解されてしまいます。私たちは現在、実験グループと協

力しながらより耐久性の高いカチオン官能基の探索を行っています。その一つとしてアルキルアンモニウムの代わりにグアニジニウム基をもつ膜の劣化研究を紹介します。図2はAMFC用電解質膜の末端部分に相当するベンジリックグアニジニウムが水酸化物イオンとの反応でどの様に化学的に劣化していくのかをシミュレーションした結果です。水酸化物イオンがグアニジニウムの隣にある炭素原子と結合し、グアニジニウムと炭素原子との結合が切

れていくのがわかります。また、この反応以外に引き抜き反応などによりグアニジニウムが劣化することが計算からわかりました。さらに、シミュレーションの結果からグアニジニウムの隣の炭素原子の部分の水酸化物イオンと反応しないように制御すれば劣化をある程度制御できるとの知見を得ることができました。

用語解説

* グロータス (Grötthuss) 機構：含水した膜中の水のチャネル中に水分子が作る水素結合ネットワークができ、プロトンがそのネットワーク上をジャンプしながら移動する機構。

** ビークル (vehicle) 機構：プロトンが H^+ のままではなく、 H_3O^+ の形で、プロトン以外の金属カチオンと同じように伝導する機構。

参考文献

- [1] Yoong-Kee Choe et al.: *J. Phys. Chem. B*, 112(37), 11586-11594 (2008).
[2] Yoong-Kee Choe et al.: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11, 3892-3899 (2009).

ナノシステム研究部門
エネルギー材料シミュレーショングループ

ちえー ゆんき
崔 隆基
おおたに みのる
大谷 実

ダイナミックプロセスシミュレーショングループ

つちだ えいじ
土田 英二

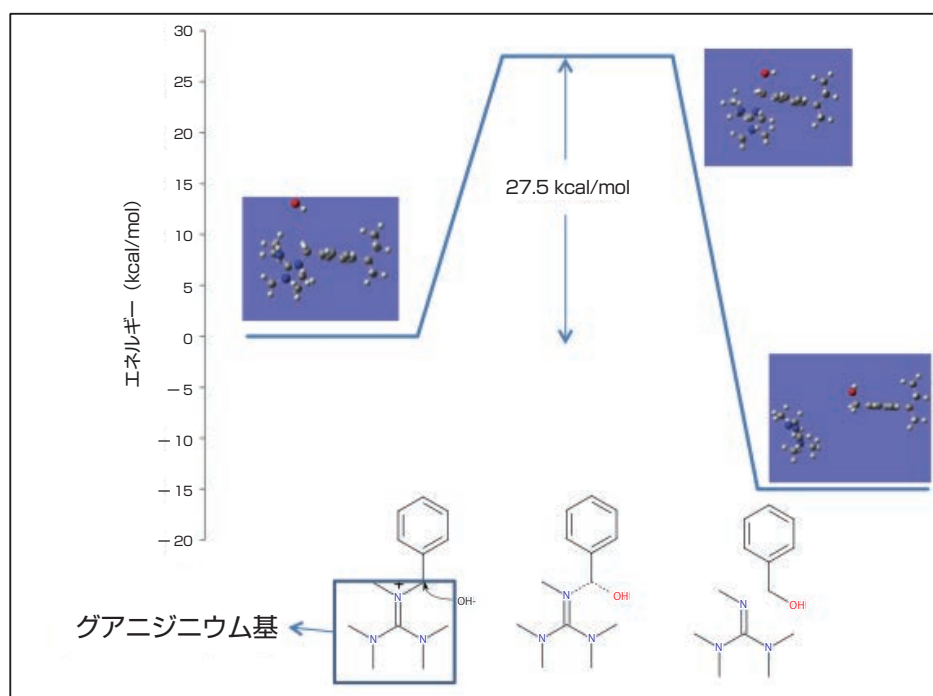


図2 ベンジリックグアニジニウムが水酸化物イオンとの反応により劣化していく様子
一番左の状態が反応物であり、真ん中のような遷移状態を経て、一番右の生成物が生成される。

動作電圧の極低電圧化を目指した抵抗変化型メモリーのオン・オフ機構の理論解明

消費電力抑制と高速動作を両立する抵抗変化型メモリー

不揮発性抵抗変化ランダムアクセスメモリー (Resistance Random Access Memory: ReRAM) は、金属電極で絶縁性酸化物をサンドイッチした構造をしています (図1)。その製造プロセスはシリコンテクノロジーとの整合性が高く、メモリー動作起源となる抵抗変化が高速かつ巨大で、巨大な抵抗変化比を保ったまま極微細化できるという特徴を備えています^[1]。ReRAMはビットコスト競争力に優れていることから、次世代メモリーとして実用化に向けた研究開発が活発に行われており、さらなる低消費電力化と高信頼性化を図るために、計算科学的アプローチによる原子レベルでの抵抗変化現象の解明と素子設計のための技術開発のニーズが高まっています。

構造最適化から電流電圧特性まで第一原理計算でモデリング

こうしたニーズにこたえるため、私たちは、第一原理非平衡グリーン関数法を用いて効率よく電流電圧特性を計算する技術^[2]と高誘電率材料の構造を正確にモデリングする技術を組み合わせることにより、ReRAMの電極とスイッチング領域を一体として扱い、材料構造から輸送特性までを一貫して第一原理計算でモデリングするスキームを構築しました。このスキームのテストを兼ねて、立方晶ハフニア (HfO_2) を電極で挟んだモデル構造に対して印加電圧 $\pm 1 \text{ V}$ の範囲での電流値を計算しました。タンタル (Ta) が電極の場合、ハフニア中の酸素欠損の有無に応じ

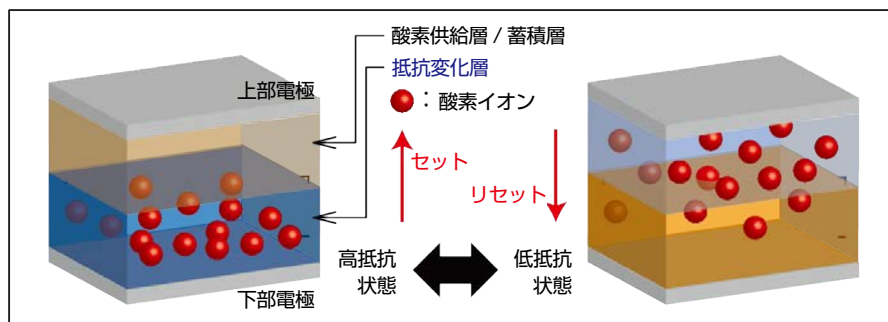


図1 ReRAMにおける不揮発性抵抗変化のモデル

実際のメモリーセルでは、酸素の供給と蓄積を担う酸化物層と抵抗変化を担う酸化物層の積層構造が採用されており、その間の酸素イオンのやりとりによって不揮発性の抵抗変化が起きる。

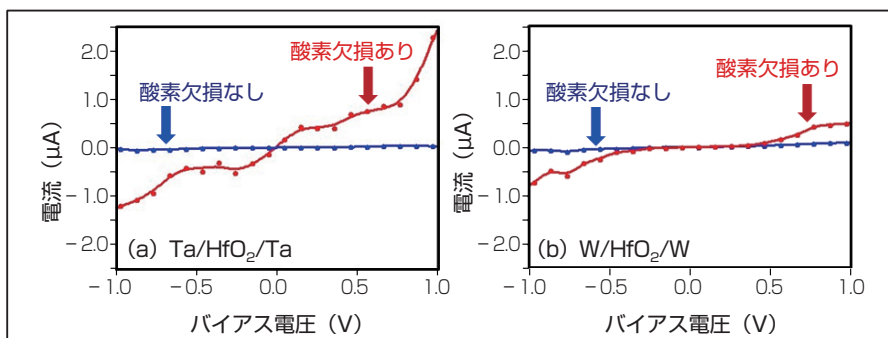


図2 電極/ハフニア/電極接合に対する電流電圧特性の計算結果

(a) 電極がタンタルの場合 (b) 電極がタングステンの場合

てオンとオフ状態が発生しました (図2 (a))。一方タングステン (W) 電極ではハフニアに酸素欠損があっても $\pm 0.5 \text{ V}$ の範囲でオフ状態のままでした (図2 (b))。電子状態解析の結果、タングステン電極とハフニアとの相互作用がタンタル電極を用いた場合の1%にも満たないことがわかりました。

今後の課題

これらの結果から、ReRAMの低電圧でのオン・オフ状態はスイッチング領域と電極材料の組み合わせに敏感であることがわかります。しかし、ReRAMのスイッチング機構は科学的にもとてもチャレンジングな問題を含んでおり、この計算の結果はその第一

歩にすぎません。今後、アモルファス構造の高誘電率材料における酸素原子の挙動が電流電圧特性に与える影響をモデリングする予定です。

参考文献

- [1] H. Akinaga and H. Shima: *Proc. IEEE* 98, 2237 (2010).
- [2] H. Nakamura et al.: *J. Phys. Chem., C* 115, 19931 (2011).

ナノシステム研究部門
エレクトロニクス材料シミュレーショングループ
みやざき たけひで なかむら ひさお にしお けんご
宮崎 剛英、中村 恒夫、西尾 憲吾

ナノシステム研究部門
あさい よしひろ
浅井 美博
ナノデバイスセンター
事業推進室
しま ひさし
島 久

ナノデバイスセンター
あきなが ひろゆき
秋永 広幸

Technology CAD による次世代電子デバイス設計と 第一原理計算

トンネルFETとは

私たちの暮らしを支えるLSIの中には、無数のトランジスタが回路を形成しています。トランジスタの微細化により、扱える情報量が膨大になり、計算機の高速化、家電や携帯電話などの進化・発展にもつながっています。一方でLSIの消費電力も増大したため、持続可能なエコな暮らしを実現するためには、LSIの低消費電力化が大きな課題となりつつあります。

これまでのLSIを支えるトランジスタは、ほとんどがシリコンを使ったMOSFET（Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor）と呼ばれるものですが、その微細化・低消費電力化の限界を越えるために、新しい原理のトランジスタが研究されています。その一つがトンネルFETとよばれる新しい原理のトランジスタです。トンネルFETは、量子力学で有名なトンネル現象をトランジスタのオン・オフに使うトランジスタで、MOSFETより低電圧での動作が期待できます。図1はトンネルFETの動作概念を示しています。

トンネルFETの設計と物理モデル

MOSFETにせよ、トンネルFETにせよ、ナノメートルレベルの精度で無数のトランジスタを整然と作る必要があるため、製造条件の最適化と、その結果得られるトランジスタの性能を予測する技術が必要です。そのための計算機CADのことを半導体の世界ではTechnology CADと呼んでいます。これまで使われてきたMOSFETについてはTechnology CADの中に、長年培ってきた物理モデルが組み込まれて

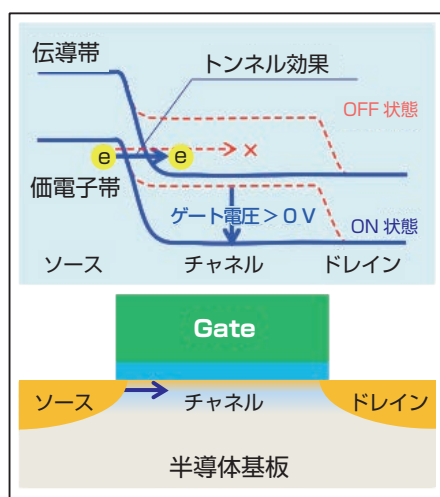


図1 トンネルFETの構造と動作概念

いるため、精度良く計算ができましたが、トンネルFETについてはその物理モデルが不十分なので、新たに開発してTechnology CADに組み込む必要がありました。図2は私たちが開発した物理モデルを組み込み、Technology CADで予測したトランジスタの電流電圧特性を、開発中のトンネルFETの測定結果と重ねたものです。物理モデルを高精度化したことで、実測と同等の予測精度が得られるレベルになりました。

今後の展開

今後はこの物理モデルを組み込んだTechnology CADを用いて、トンネルFETのデバイス構造を最適化するとともに、第一原理計算という材料の性質を予測するシミュレーションと組み合わせることにより、シリコン以外の材料で性能のよいトンネルFETができるかどうかを探索します。これによりトンネルFETを用いた低消費電力

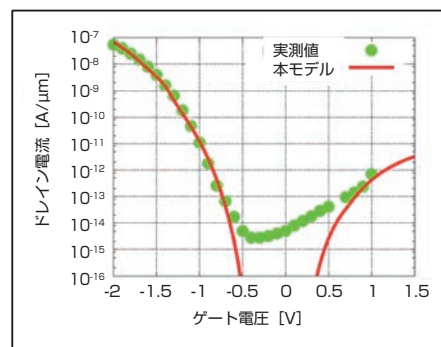


図2 トンネル電流の測定値と、開発した物理モデルの比較。ゲート電圧0 V前後の差異は、測定したデバイスのリーク電流によるもので本質的なものではない。

LSIの早期実現を目指しています。またこれからは新デバイスの研究開発と同時に、そのデバイスの物理モデルを開発する必要性が高くなるため、Technology CADと第一原理計算をベースに、そのような要望にこたえるモデリングプラットフォームを構築していく予定です。

*トンネルFETについては、最先端研究開発支援プログラム（FIRST）のプロジェクト「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」（中心研究者 横山 直樹）の成果です。

ナノデバイスセンター
設計評価室
ふくだ こういち
福田 浩一
いのうえ やすお
井上 靖朗

ナノシステム研究部門
エレクトロニクス材料シミュレーショングループ
みやざき たけひで
宮崎 剛英
いしばし しょうじ
石橋 章司

次世代タイヤ材料開発を目指した粗視化シミュレーションの利用

ゴム材料開発へのシミュレーションの活用の動き

シミュレーションソフトウェア OCTA^[1]が名古屋大学（当時）の土井正男教授らにより2002年に公開された後、国内におけるソフトマテリアルシミュレーションの利用が劇的に広がりました。当初はOCTAプロジェクトに参加した化学メーカーがOCTAを利用していましたが、近年、ゴム業界が研究開発に積極的に利用を進めています。ゴム業界では、従来から有限要素法などを用いて製品設計シミュレーションがなされてきました。さらにアジア発の安い製品の出現、厳しい環境適用条件が課される低燃費タイヤの要求など、開発がますます厳しくなっています。これらの問題を解決する一つの手段として、ゴム材料の設計・開発に対して、粗視化シミュレーションの利用が進んでいます。

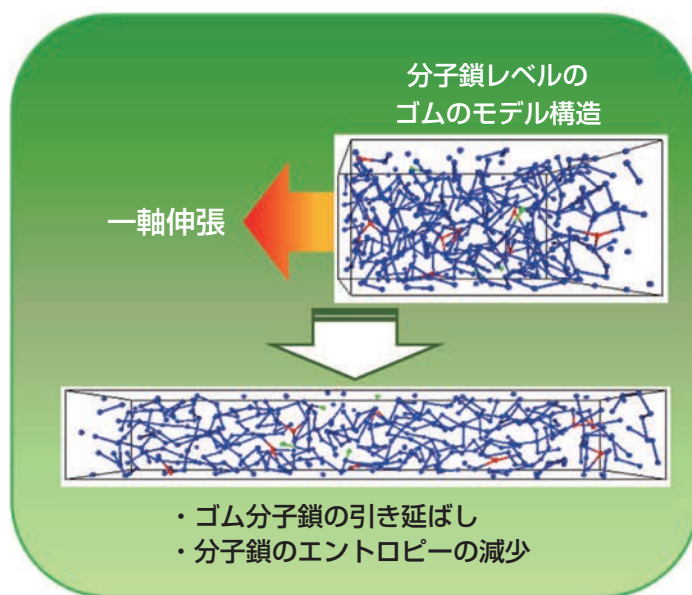
粗視化シミュレーション利用による死の谷の問題

このような社会情勢の中、粗視化シミュレーションの利用においても課題が山積しています。OCTAという道具はあります。しかし、ゴム材料に適用しようとする、どのようなモデル化をすればゴムを扱えるのか、どのようなパラメーターを用いればゴム状態を記述できるのか、どのように結果を評価すればいいのかなど、まさに「死の谷」の問題に遭遇します。この「死の谷」への遭遇は、導入を試みている各社に共通に起こることで、私たち産総研が取り組ま

なくてはならない課題です。

コンソーシアム立ち上げによるオープンイノベーション

私たちは、ゴム・エラストマー材料シミュレーションにおいて、産総研がイノベーションハブとしての役割を果たすために、共同研究コンソーシアム「ゴム・エラストマーにおける理論・シミュレーション基礎研究会」を2012年4月に立ち上げました。このコンソーシアムでは、現在国内の7社の企業が参加し、ゴム製造の上流から下流のメーカーまでさまざまな企業が集まり、ゴム・エラストマーの材料の基礎的なシミュレーション方法について研究を進めています。現在は、ゴムの架橋構造を作成する



架橋ゴムのモデルと一軸伸張シミュレーションのスナップショット

など、基礎的な研究を進めています。今後も基礎の範疇^{はんちゆう}において、ゴムに関係するシミュレーション方法における業界標準を作ることを目指し、この粗視化シミュレーション技術を材料開発に直結して役立てることができるよう活動していく予定です。

関連情報

[1] <http://octa.jp>

ナノシステム研究部門
ソフトマターモデリンググループ
もりた ひろし
森田 裕史

液晶材料における新しい秩序構造の発見

液晶材料の面白味

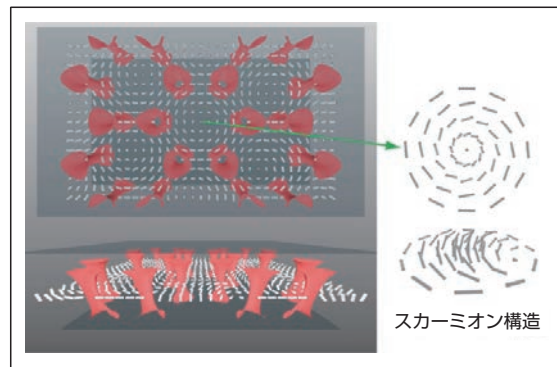
液晶材料はコンピューターや携帯端末のディスプレイに用いられることで現代の情報社会に貢献していることはよく知られていますが、そこでは液晶が示す電氣的に制御可能な自己組織化構造と、その光学的性質が有効に用いられています。液晶は自己組織的な秩序構造を示すソフトマテリアルの典型例として、これまで基礎科学と工学的応用の両方の観点から盛んに研究されてきました。また液晶が示す秩序構造には豊富な未開拓領域が予想されることから、魅力的な研究対象として実験、理論、シミュレーションの複合的研究が世界的に進められています。産総研発の研究結果として、以下に二つの例を示します。

薄い空間に閉じ込めた液晶中に 誘起されるスカーミオン格子の発見

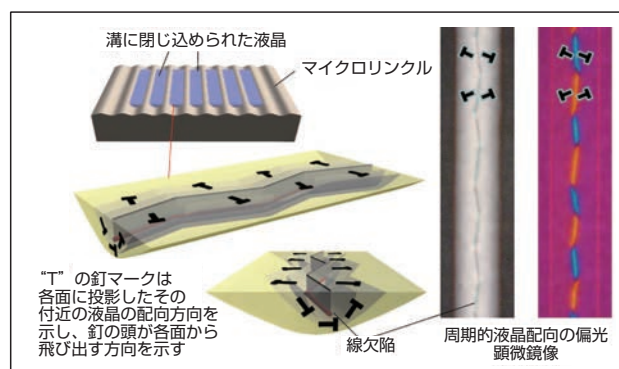
強磁性体などの固体系などでその役割が注目されているスカーミオンと呼ばれる渦状の構造からなる格子を、薄い空間に閉じ込めた液晶という固体系とは全く異なる系が形成しうることを、シミュレーションを用いて理論的に初めて発見しました。この結果は、液晶がこれまで知られているよりもはるかに豊かな秩序構造をとることを示すものです。それらの新しい秩序構造は、液晶の新しい機能や応用の可能性をもたらすことが期待されます^{[1][2]}。

マイクロリンクルの溝に閉じ込めたネマチック液晶に誘起されるジグザグ線欠陥の発見

マイクロリンクルと呼ばれる表面



薄い空間に閉じ込めた液晶において、ベクトル的に表現される液晶の配向秩序が形成する渦状構造（スカーミオン構造）が規則的に並び、スカーミオン格子を形成している。



マイクロリンクルの溝に閉じ込められた液晶の自己組織化による周期的な配向構造

座屈凹凸構造の溝に液晶を閉じ込めると、溝の方向に周期的な液晶配向構造が形成されることを実験的に発見しました。この構造の形成には、液晶を閉じ込めた効果と液晶弾性異方性が重要であることを理論的に明らかにしました。また、この液晶配向構造は内部にジグザグ状の線欠陥を含みますが、その構造に周期的に微粒子を捕捉することができるともわかりました。この

結果は、液晶の自己組織化に基づいた、微粒子など微小物体の簡便なパターンニング、捕捉操作、光学素子、センサーなどへの応用展開が期待されます^{[3][4]}。

ナノシステム研究部門
ソフトマターモデリンググループ

ふくだ じゅんいち
福田 順一

ナノシステム研究部門
ソフトメカニクスグループ

おおぞの たくや
大園 拓哉

参考文献

- [1] J. Fukuda and S. Žumer: *Nature Communications*, 2, 246 (2011).
- [2] 主な研究成果 2011年4月6日「液晶の新たな秩序構造を発見」
- [3] T. Ohzono and J. Fukuda: *Nature Communications*, 3, 701 (2012).
- [4] プレス発表 2012年2月29日「微細な溝に閉じ込めた液晶が作り出す新たな配向構造」

盗聴やフィッシング詐欺を防御する認証技術

証明可能安全性をもち効率のよいパスワード認証



辛 星漢

しん せんはん (右)
seonghan.shin@aist.go.jp

セキュアシステム研究部門
セキュアサービス研究グループ
研究員
(つくばセンター)

産総研に入所以来、情報漏えい、端末の紛失・盗難、フィッシング詐欺などに強い相互認証技術とそれらの応用技術の研究開発に従事してきました。現在はより広いインターネットサービスを安全に実現するための要素技術や応用技術に関する研究課題に取り組んでいます。

古原 和邦

こばら かずくに (左)
k-kobara@aist.go.jp

制御システムセキュリティ研究グループ
研究グループ長
(つくばセンター)

産総研に入所以来、情報セキュリティの基礎理論から応用・実用化に至るまでの研究に従事し、2010年4月には産総研技術移転ベンチャー会社の設立も行いました。2012年4月からは重要インフラをサイバー攻撃から防護するための包括的なセキュリティ対策の研究に取り組んでいます。

関連情報：

● 参考文献

S.H. Shin, K. Kobara:
IETF RFC (Request for
Comments), 6628, 1-20
(2012).

● 用語説明

*オフライン全数探索：通信路を盗聴するなどして入手したデータに対して、攻撃者がサーバーやクライアントと通信することなくパスワードを試す攻撃。

● プレス発表

2012年9月4日「盗聴やフィッシング詐欺などを防衛する認証技術の開発と国際標準化」

●この研究開発の一部は、科学研究費助成事業「よりよい効率性と厳密な安全性証明を有する新しいパスワード認証方式に関する研究開発」(2010～2012年度)の支援を受けて行いました。

パスワード認証の問題点

インターネットなどの公衆回線上でサーバーがユーザーを認証する方法として、パスワードが広く使われています。しかし、現在普及しているパスワード認証は、以下のいずれかの問題を抱えており、それらへの解決策が求められてきました。

- 古いシステムなどではパスワードが暗号化されずに公衆回線にそのまま流れる。
- 公衆回線上の通信が暗号化してあっても、パスワードのオフライン全数探索*により復号できる場合がある。
- フィッシング詐欺によりパスワードを盗まれる場合がある。
- サーバーからパスワードなどを含むデータが漏えいした場合、オフライン全数探索を適用することなく、即座に利用者になりすませる場合がある。

AugPAKEの開発

これらの問題を解決するためにいくつかの提案が行われていますが、これまでの方法では、既知の攻撃方法のみを回避する修正が提案されるとそれに対する新たな攻撃方法が発見され、そしてまた、その修正が提案されるといった小手先の対応が繰り返されてきました。これに対して近年では、提案方式の安全性が数学の難問と等価であることを証明することによって解説

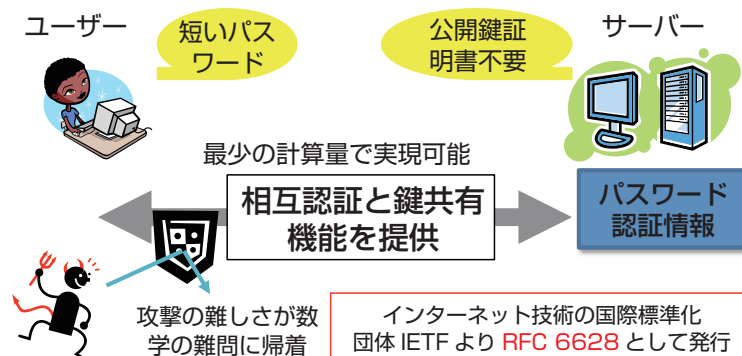
が事実上困難となることを示す方法が学会や標準化団体において主流となってきました。このような考えにより示された安全性は、証明可能安全性と呼ばれており、新たな方式を提案・選定したりする際の必要条件の一つになりつつあります。

今回私たちは、オフライン全数探索が適用された際に、正しいパスワードが試された状態と、そうでない状態の識別を困難にするために必要な最小限の数学的な構造の研究を行い、その構造を整数論に基づいた難問を用いることで構成できることを示しました。そして、その構造を応用したパスワード認証方式(AugPAKE)の提案および開発を行いました(図)。

AugPAKEをインターネットの標準的な認証鍵交換モジュール IKEv2 (Internet Key Exchange Protocol version 2) へ適用した場合の仕様を国際標準団体 IETF (Internet Engineering Task Force) に提案し、2012年6月に RFC 6628 として承認・出版されました。

今後の予定

引き続き学会、標準化団体、各種実装プロジェクトなどにおける発表や広報などを通じてこの方式の利点を主張していくとともに、共同研究などを通して実装ノウハウの提供を続けていきます。



研究開発したパスワード認証技術の特徴

強磁性ナノコンタクト素子によるミリ波発振

ナノスケールの電流制御型発振素子を理論提案



今村 裕志

いまむら ひろし
h-imamura@aist.go.jp

ナノスピントロニクス研究センター
理論チーム
研究チーム長
(つくばセンター)

超高密度磁気記録、不揮発性磁気メモリ (MRAM) などナノ構造中の電子スピンを用いた情報処理デバイスの理論開発を行っています。解析的な理論手法やコンピュータシミュレーションを駆使してナノ構造中の電子スピンの振る舞いを明らかにし、新しい動作原理に基づくナノスピントロニクスデバイスを世の中へ送り出すことを目指しています。

関連情報：

● 共同研究者

佐橋 政司 (東北大)、荒井 礼子、塚原 宙 (産総研)

● 参考文献

H. Arai *et al.*: *Appl. Phys. Lett.*, 101, 092405 (2012).

● 用語説明

*ナノコンタクト: ナノメートルサイズの金属電極接点のこと。金属電極接点が強磁性体であるとき、特に強磁性ナノコンタクトと呼ぶ。

● プレス発表

2012年8月27日「強磁性ナノコンタクト素子によるミリ波発振」

●この研究開発は、独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託事業、省エネルギー革新技術開発事業/挑戦研究「チップ間信号伝送用マイクロ波発振素子の開発」(2009～2011年度) および独立行政法人 日本学術振興会の科学研究費助成事業、基盤研究(S)23226001の支援を受けて行っています。

強磁性体を用いた発振素子の課題

近年の微細加工技術の急激な進歩によって、強磁性体を用いたナノメートルサイズの素子の作製が可能になり、情報記録技術分野での応用が進む一方、磁性体中の電子スピンのマイクロ波に対応する周波数で振動する歳差運動を利用した発振・受信素子などの開発も行われています。しかし、巨大磁気抵抗素子や強磁性トンネル接合素子による発振は、発振周波数が数十GHz程度と低く、ミリ波の発振周波数が必要なセンサーやレーダーへの応用は難しいと考えられてきました。また、無線通信技術へ応用するには、制御可能な周波数範囲が狭いことが課題となっていました。

強磁性ナノコンタクト素子の発振性能

私たちは今回、強磁性ナノコンタクト*素子に直流電流を流すことにより5～140 GHzの発振が可能であることを理論的に示しました。シミュレーションに用いた強磁性ナノコンタクトは、側面が絶縁体で覆われた1辺4ナノメートルの立方体であり、上下は強磁性体の金属電極で挟まれています(図1)。上側の強磁性電極(固定層)のスピンは一方向に固定されており、一方、下側の強磁性電極(自由層)のスピンは自由に運動できます。外部磁場を加えて自由層と固定層のスピンを反平行にそろえると、強磁性ナノコンタクト内に磁壁と呼ばれるねじれたス

ピン構造を閉じ込めることができます。その状態で固定層側から電子を注入すると、スピンの方向がそろった電流(スピン電流)がナノコンタクト内を流れますので、スピントルクによってナノコンタクト内のスピンが回転運動を始め、強磁性ナノコンタクトと接する自由層にスピン波が生じます。

シミュレーションによって得られたスピン波の発振周波数の電流依存性は、特徴的な3つの領域(A、B、C)に分けられます(図2)。スピン波の空間的な広がり、領域A、Cでは自由層全体に広がっているのに対し、領域Bではナノコンタクト近くに局在していました。このことから、領域A、Cの発振では自由層の性質で発振周波数が決まってしまうのに対し、領域Bの発振ではナノコンタクトに閉じ込められた磁壁の歳差運動によって発振周波数が決まっていることがわかりました。ナノコンタクト内の磁壁のスピン構造はナノコンタクトを流れるスピン電流の値によって変化するため、領域Bではスピン電流密度を変化させることで発振周波数を5 GHz～140 GHzの範囲で連続的に制御できます。

今後の予定

今後は、今回の理論提案に基づいた高周波発振素子の試作・評価、受信素子の研究開発を行い、強磁性ナノコンタクトを用いた無線通信システムの実現に向けて研究を進めていきます。

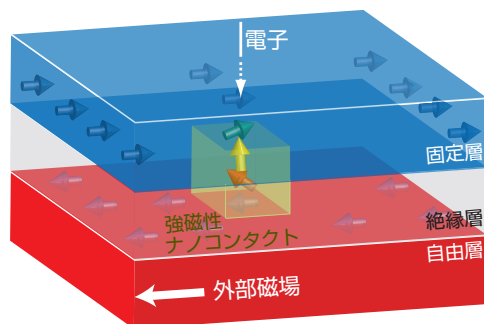


図1 強磁性ナノコンタクトと強磁性電極の模式図
強磁性ナノコンタクトの中には磁壁を閉じ込めることができる。

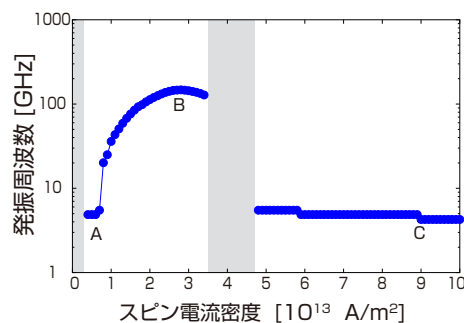


図2 発振周波数の電流密度依存性
特徴的な3つの領域(A、B、C)に分類できる。
発振しない領域はグレーで示した。

回転楕円体面鏡を用いた光散乱測定装置

散乱光を正反射率と拡散反射率に分解可能な測定を実現

国際公開番号
WO2012/121323
(国際公開日: 2012.9.13)

研究ユニット:

電子光技術研究部門

適用分野:

- 粗面や曲面の反射率と透過率の同時測定
- 研磨面や塗装面の正反射率と拡散反射率の分離測定
- 太陽電池などの光学特性評価のためのヘイズ率測定

目的と効果

この発明者は、鏡面試料の絶対正反射率・透過率測定装置（特許 3637393 号）をすでに製品化しました。今回の発明の目的は、粗面や曲面の反射率・透過率も精度良く測定できる装置の開発です。粗面や曲面に入射した光は、散乱的に反射・透過されます。このために、散乱光の空間分布を測定する必要があります。既存の測定装置はゴニオ反射率計で、測定空間を細分化して各点で反射測定をしています。長い測定時間と膨大なデータ量で、直感的ではありません。この発明では、2 台の楕円面鏡を用い、検出系を工夫することで、ゴニオ反射率計に代わる短時間で直感的な測定が可能となりました。

技術の概要

この発明の光散乱測定装置を図 1 に示します。帯形状（E1）と 1/4 形状（E2）の 2 つの回転楕円体面鏡からなります。E1 楕円面鏡の最初の焦点に設置したミラーの回転と、E1 自身の回転により、共通焦点に設置した試料へ入射するビームの天頂角度と方位角度を任意に設定できます。E2 楕円面鏡は、試料からの散乱光を、第三焦点に設置した CCD カメラに集光します。既存のゴニオ反射率計では多数回で測定しましたが、この装置では空間分布を 2 回で測定できます。測定時間は短縮され、

得られた画像データは直感的で定量的です。図 2 に鏡面と 2 種類の粗面（#240 と #1500）からの散乱光の測定結果を示します。入射面に直交する面内の散乱光の分布図 2（c）と（d）のように、表面の粗さは、図中赤、緑線で示される半値幅の広がりやテールの増加に反映されることがわかりました。

発明者からのメッセージ

反射測定の対象試料は、粗面や研磨面、平面や曲面、紙、生地、皮膚のような構造を持つ表面などです。反射測定は、研磨や染色や塗装等の制御など多方面に用いられます。最近、ヒートアイランド現象の解明・緩和のために構造物表面の正反射率と拡散反射率を分離できる測定が重要であると聞き、今回の発明が役立つのではないかと考えています。

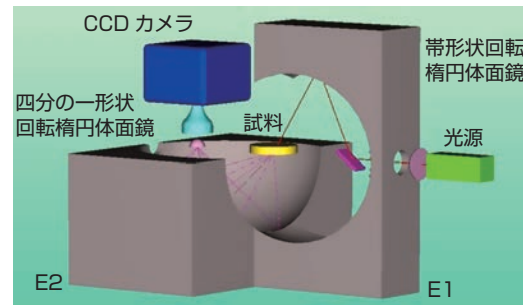


図 1 光散乱測定装置の 3 次元構造図
光源、2 個の楕円体面鏡、CCD カメラからなります。

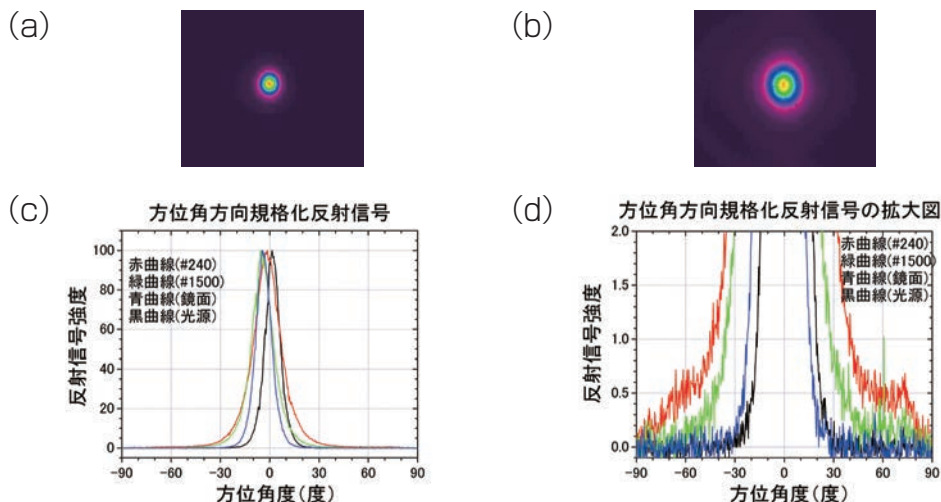


図 2 光散乱測定装置の特性を示す実験例

(a) 鏡面からの散乱光の CCD カメラ画像、(b) 粗面（#240）からの散乱光の CCD カメラ画像、(c) 鏡面と各種粗面の規格化された反射信号強度、(d) 図 2 (c) のテール部分の拡大図。

Patent Information のページでは、産総研所有の特許で技術移転可能な案件をもとに紹介しています。産総研の保有する特許等のなかにご興味のある技術がありましたら、知的財産部技術移転室までご連絡なくご相談下さい。

知的財産部技術移転室

〒305-8568
つくば市梅園 1-1-1
つくば中央第 2
TEL: 029-862-6158
FAX: 029-862-6159
E-mail: aist-tlo-ml@aist.go.jp

印刷製造によるフレキシブル熱電変換素子

身の周りに存在する熱エネルギーを電力に変換

国際公開番号
WO 2012/121133
(国際公開日：2012.9.13)

研究ユニット：

フレキシブルエレクトロニクス研究
センター

適用分野：

- 熱電変換
- エネルギーハーベスティング
(環境発電)
- 自立分散電源

目的と効果

排熱などの熱エネルギーは熱電変換素子によって電力に変換することができます。現在用いられている熱電変換素子は、ビスマスやテルルなどのレアメタルが主原料であることや、平板形状で柔軟性に乏しいこと、大面積化が難しいことなど、使用利便性の低さが原因で多種多様な排熱源に利用するには適していません。熱電変換素子の使用利便性をさらに向上させるため、希少元素を含まない熱電変換材料を用いて、フレキシブルフィルム上に、大面積化が容易な印刷法により熱電変換素子を作製しました。これにより、曲面を有する熱源など、これまでは設置が困難であった熱源へも熱電変換素子の設置が可能となります。

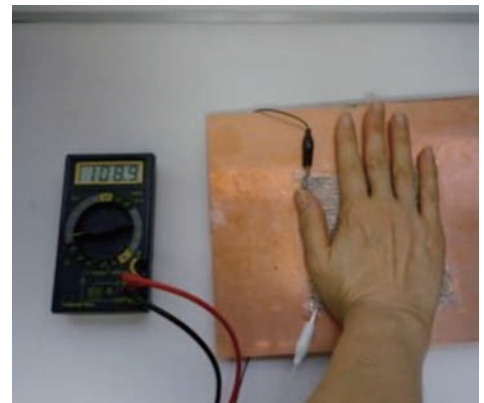
技術の概要

レアメタルを含まず、構造柔軟性をもち、低コスト・高生産性素子製造プロセスである印刷法を適用できる熱電変換材料の探索を行った結果、カーボンナノチューブ (CNT) と高分子

材料を微細に混合させた CNT - 高分子複合材料が、高い熱電変換性能を示すことを見いだしました。上記の CNT - 高分子複合材料の溶液をインクとして用い、厚さ 20 μm のプラスチックフィルム基板上に印刷法で CNT - 高分子複合材料のパターンを形成して、フレキシブルな熱電変換素子を作製しました (写真)。試作した熱電変換フィルムは曲率半径 5 mm 程度に折り曲げても機械的な損傷は見られず、曲面・球面形状への設置に対する高い適応性が確認されました。

発明者からのメッセージ

今回作製した熱電変換素子は、レアメタルフリー、軽量、フレキシブルなどの特徴から、高い使用利便性を有します。また、印刷製造が可能のため大面積化も容易です。今後、材料の高性能化などを通じて発電能力を向上させることで、身近に存在する排熱や体温など、さまざまな熱源からの電力の生成が可能になると考えています。



印刷法により作製したフレキシブル熱電変換フィルム (左) とその発電能力 (右)

約 10 $^{\circ}\text{C}$ のプレート上に設置した試作素子に、手を置くことで温度差を加えた結果、108.9 mV の電圧が発生している。

Patent Information のページでは、産総研所有の特許で技術移転可能な案件をもとに紹介しています。産総研の保有する特許等のなかにご興味のある技術がありましたら、知的財産部技術移転室までご連絡なくご相談下さい。

知的財産部技術移転室

〒305-8568
つくば市梅園 1-1-1
つくば中央第 2
TEL : 029-862-6158
FAX : 029-862-6159
E-mail : aist-tlo-ml@aist.go.jp

ベアリング用窒化ケイ素の寿命および破壊特性評価

適切な特性評価による新素材の普及および競争力強化への貢献



兼松 渉

かねまつ わたる

w.kanematsu@aist.go.jp

計測フロンティア研究部門
不均質性解析研究グループ
研究グループ長
(中部センター)

1984年に旧名古屋工業技術試験所入所以来、構造用セラミックスの機械的特性評価に関わる研究に従事し、これまで本件(転動疲労)を含め特性評価に関するJIS 1件、ISO 2件の発行に直接関わってきました。今回の規格発行までには、本格的な研究に着手してからだけでも7年以上が必要でした。改めて標準化は息の長い仕事であることを感じています。



宮崎 広行

みやざき ひろゆき

h-miyazaki@aist.go.jp

先進製造プロセス研究部門
セラミック組織制御プロセス研究グループ
主任研究員
(中部センター)

入所以来、セラミックスの機械的および熱的特性に関する研究を行ってきました。これまでの機械試験手法では評価が難しい、ベアリングボールや放熱基板など小型のセラミックス製品を対象とした機械特性測定法の国際規格化に向けた研究を進めています。これら日本製品の品質保証や優位性の証明に役立つ標準的な試験手法の開発を通して、産業界への貢献をしたいと考えています。

関連情報:

- 参考文献

兼松 渉: 産総研 TODAY, 10(8), 6-7 (2010).

標準化の背景

ボールベアリングなどの転がり軸受を構成する部品には、構造材料の中でも特に高品質の材質のものが用いられますが、真空中や高温中、毎分数千回転を超える超高速回転など特殊環境では、近年、既存の金属系材料に代わって、耐熱性や耐摩耗性に優れたセラミックスの使用が進められています。なかでも窒化ケイ素は耐久性・強度などの点でほかのセラミックスよりも優れており、ベアリング用材料としての普及が期待されています。そのため2005年には材料分類規格(ISO26602)が発行されましたが、どのように材料特性を評価するかまでは明らかにされていませんでした。そこで産総研では、同年から経済産業省の基準認証研究開発制度の下で特性評価法に関する研究開発を行い、この度、その成果を基にした二つのISO規格が発行されました。

転動疲労特性の評価(ISO14628)

ベアリング用材料の耐久性を評価するには、繰り返し転がり接触を受ける時の材料の挙動(転動疲労特性)を調べる必要があります。この規格では、平板試験片に対して一定時間経過する毎に試験荷重を階段状に増加させる手法(ス

テップワイズ荷重方式ボールオンフラット試験)を採用することで、これまでよりも短時間で転動疲労特性の優劣を判定できるようにしました(図1)。この評価手法を用いて、ベアリング用に開発された窒化ケイ素材料と、汎用の窒化ケイ素材料とでは、同じ窒化ケイ素でも、明確な差が現れることを明らかにしました。

破壊じん性の評価(ISO14627)

短時間の荷重に対する材料の壊れにくさの指標としては破壊じん性があり、ベアリング用窒化ケイ素の等級分類にも用いられています。この規格では、ベアリングボールなどの小さい部品の評価が可能となるように圧子圧入(IF)法を採用しました。硬さ試験機を用いて試験片にダイヤモンド製の四角錐圧子(ビッカース圧子)を圧入し、発生したき裂の長さを半経験式に代入することで破壊じん性(破壊抵抗)を算出します(図2)。

これらの規格発行によって、窒化ケイ素の材料としての優秀性を客観的に示すことが可能となりました。窒化ケイ素ベアリングを安心して使えるようになり、材料特性に優れた窒化ケイ素の普及が一層加速されると期待されます。

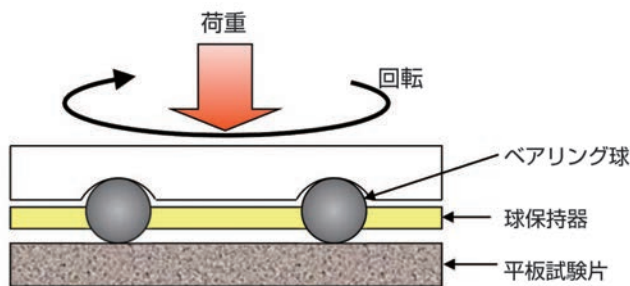


図1 ボールオンフラット試験による転動疲労特性評価

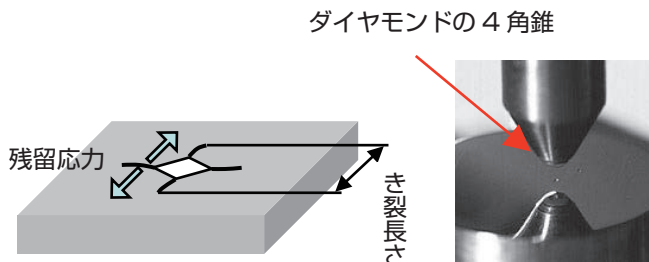


図2 IF法による破壊じん性評価

誰もが地質図を利用できる仕組みを提供

地質情報表示ウェブサイト「地質図Navi」の公開



内藤 一樹

ないとう かずき

naito-k@aist.go.jp

地質情報研究部門
シームレス地質情報研究グループ
主任研究員
(つくばセンター)

野外調査に基づく岩石学の研究をベースに、地質屋の視点から地質情報のデータベース化、地質情報の利用技術などの開発を行っています。

関連情報:

● 用語説明

* WMS : Web Map Service.
インターネットを通じて地図を配信するサービスの国際規格。

● 地質図 Navi

<http://gsj-seamless.jp/geonavi/>

● 主な研究成果

2012年12月6日「国内の地質図を誰もが簡単に利用できるウェブサイトを提供」

地質図の利用を広めるために

地質調査総合センターは、これまでに数多くの地質図を発行してきました。地層の分布や性質、地盤の成り立ちを表した地質図は、防災対策や土地利用などに不可欠な情報です。地質図の種類は多岐にわたり、1/5万や1/20万など各縮尺の地質図幅、海洋地質図、火山地質図など、各種合わせて千枚以上になります。これらの膨大な地質情報を、誰もが利用しやすい形で提供できれば、地質とかわる企業や教育現場などでの地質情報の利用が促進され、さまざまな活動の品質向上が期待できます。

地質図表示ウェブサイトの開発

そこで、一般の方にも使いやすく、地質図などの地質情報を表示できるウェブサイトとして「地質図Navi」を開発しました。これは、数多くの地質図の中から着目した地域に関する地質図を簡単な操作で選び出し表示することができるものです。地質図は、地域により地質に違いがあったり、地質図の作成時期により地質の解釈が変わったりするため、それぞれ地層の区分や色分けが違います。地質図を読むためには、表示された地質についての地質凡例や断面図などの付属情報を参照する必要があります。地質

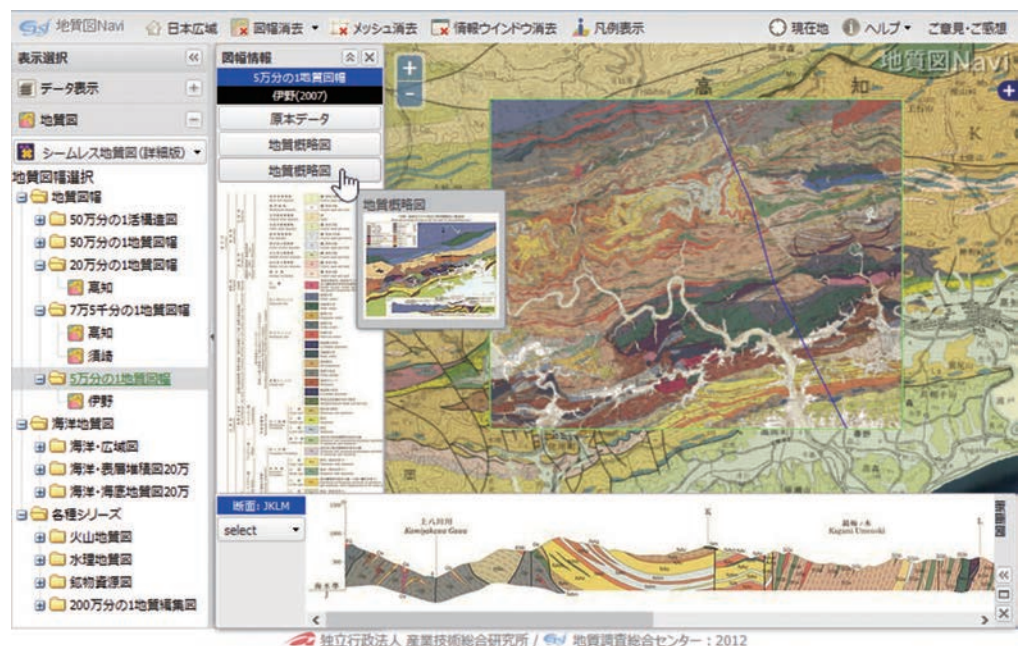
図Naviでは、地質図を表示すると同時にそれらをリスト表示することで、地質図を読むために必要な情報を提供します。

地質図Naviは、上記の地質図のほか、1/20万日本シームレス地質図や、活断層・第四紀火山の情報を表示できます。また、WMS*などで配信されている地理空間情報を地質図と合わせて表示する機能も持ちます。現状では、重力図や地球化学図などが利用可能になっています。これにより、地質図と重力図を組み合わせて地下構造を検討したり、地質と地表の元素濃度の分布の関係から環境の変化を検討するなどさまざまな地質情報を扱うための基盤としての役割が期待できます。

今後の展開

地質情報を利用しやすい環境で提供することにより、これまで地質情報を扱っていなかった人が地質情報に接する機会が生まれます。さまざまな視点からの利用の中から、新しい地質情報の活用方法が生まれることも期待できます。

今後は、これから公開される地質系データベースに加えて新たな情報の利用機能の追加や機能向上を進めることで、さらに充実した地質情報の提供を進めていく予定です。



地質図 Navi での地質図情報の表示例

シリーズ：進化し続ける産総研のコーディネーション活動(第37回) 研究者だからできるプロジェクトマネージャーを目指して

東北産学官連携センター

イノベーションコーディネータ 南條 弘 なんじょうひろし

イノベーションコーディネータへの道

小さいころから研究者になることが夢でした。念願がかなってからは大きなインパクトを目指し、着実に論文を発表してきました^{[1][2]}が、後進に道を、との話から連携の仕事を始めました。生涯一研究者を目指していましたが当初はがっかりしましたが、連携の仕事の中にはプロジェクトマネージャーになれる産総研の内部制度「戦略予算」や産学官連携が優遇される「イノベーション拠点立地推進事業」など、コーディネータがその能力を発揮することにより、良い提案・強い提案が可能な制度が次々と制定されるようになってきました。実際に自分が手を動かさないもどかしさはありませんが、東北の企業と全産総研をつなぐ「東北コラボ100」連携事業での企業訪問や学会参加などから得られるアイデアやコーディネータならではの俯瞰的知見を選びすぐりの研究者に紹介することができます。言い換えれば、実際に手を動かさないだけで、研究者とほとんど同様のことができる時代がやってきました。さらに価値創造に向けて全産総研の研究者2,300名の中から、あるいは企業・大学から必要な研究者を集めて産学官連携の先導プロジェクトを立案することが研究者よりもやりやすくなっています。

コーディネーション活動の基盤

上記の考えに至った最初の大仕事は、分野研究戦略に従ってコーディネータらが技術研究組合TASCグラフェン事業部を分野研究企画室とともに立ち上げたことでした。レアメタルを使わない透明導電膜として世界中が開発競争にしのぎを削っているグラフェンを日本においても大規模プロジェクトとして推進することになりました。それに応募すべく、コーディネータが多くの企業の方々と面談し、分野研究企画室や

研究ユニットと討議しながら、特に高い開発ポテンシャルをもち、グラフェンを低温で大量合成する技術を開発する志の高い企業と組合を作り上げました。その後はプロジェクトの方向性を討議し、参画組合員の持ち寄り研究ではなく、一本の太い幹を打ち出した提案骨子をまとめ上げることに成功しました。現在は二つのNEDOプロジェクトで図1に示すマネージャーと運営委員長・研究委員・発明委員として、世界に先駆けてグラフェンの実用化を目指しています。

更なる飛躍に向けて

コーディネータの基本はお見合いのセッティングですが、仲人と違うのは両者の特長技術をコーディネータ独自の視点で吟味し、一段と高い共同研究を企画することにあります。図2に示すように研究者は実験結果と理論に基づきボトムアップで研究を積み上げていくのに対し、企業は製品化や社会ニーズからのトップダウンに基づき開発を掘り下げていきます。方向が180度異なるベクトルの終点を一致させる提案は目利きコーディネータの腕の見せどころです。研究者上がりが、研究者魂を維持しながら、研究開発者とともに研究を推進することは研究者と全く同じ面白さを含んでいます。時には自分だけでは不可能な研究でさえ、精鋭を結集させて先頭を切って推進することも可能です。そんなコーディネータを大学も産総研も待ち望んでおり、研究者も効果的に研究に専念するために活用 of 価値を見いだし始めています。彼らの期待に応えるべく一層腕を磨いていきたいと思っています。

参考文献

- [1] H. Nanjo et al.: *Nature*, 320, 516 (1986).
- [2] H. Nanjo et al.: *J. Electrochem. Soc.*, 158, C379 (2011).

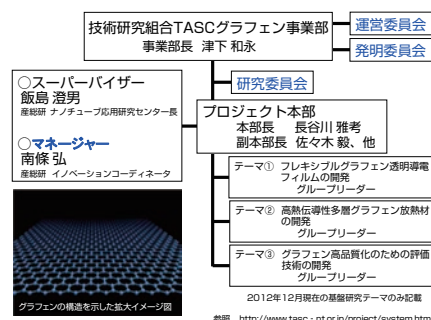


図1 技術研究組合TASCグラフェン事業部のプロジェクトマネジメント体制

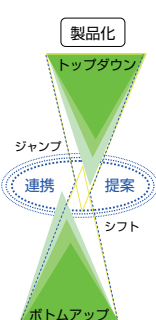


図2 シフト・ジャンプ 終点の合致

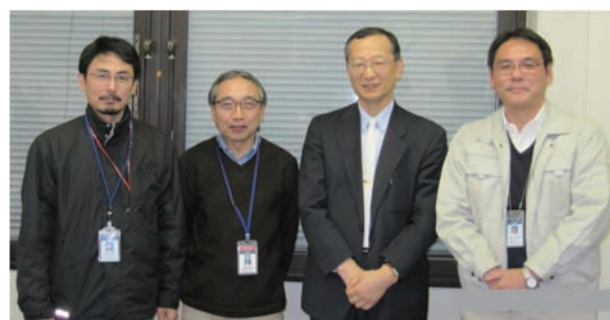


図3 グラフェン事業部研究委員会を終えて 右から2人目が筆者

グリーンケミカル研究所内覧会

報告

2012年11月27日に産総研北海道センターにおいて、グリーンケミカル研究所（GCC）の内覧会が開催されました。GCCは、公益財団法人北海道科学技術総合振興センター（ノーステック財団）が、北海道の自治体、経済団体、企業などからの出資の下に経済産業省補助金により北海道センターの敷地内に建設した「植物工場」です。内覧会は、経済産業省、北海道、札幌市、北海道経済連合会、北海道農業協同組合中央会、関連企業、各研究機関などからのご参加を得て、開催されました。

近藤ノーステック財団理事長からの開会あいさつに続き、高橋北海道知事（代読）、上田札幌市長、増山北海道経済産業局長からの祝詞とGCCにかける期待についてのスピーチがありました。次いで、常俊ノーステック財団

専務理事より、産総研が有する閉鎖型組換え植物工場研究の成果を基盤として実用化を促進するためにGCCを建設した経緯およびGCCの概要、入居予定企業と研究題目について紹介されました。最後に、野間口産総研理事長が閉会あいさつとして、GCCの建設にご協力いただいた各機関への御礼とともに、今後産総研としてGCCに協力していくことを表明しました。式典

後は、5班に分かれてGCCの内部見学を行いました。

北海道の主要機関のほとんどが参加することとなった式典に加え、当日午後にも式典に入りきらなかった希望者の見学会も行われ、産総研北海道センターの植物バイオ研究に対する関心の高さとGCCにかける期待の高さがうかがえました。



内覧会来賓



GCCの概要説明の様子

第9回バイオマス・アジアワークショップの開催

報告

2012年12月3日～4日、第9回バイオマス・アジアワークショップが、イイノホールにて、経済産業省、産総研、新エネルギー財団（NEF）、科学技術振興機構（JST）、バイオマス・アジアリサーチコンソーシアムの主催により開催されました。

アジアの11カ国、さらに二つの国際機関からの講演があり、国内外の企業関係者も含め約300名が参加しました。

野間口理事長、間宮経済産業省省エネルギー・新エネルギー部政策課長、近藤NEF代表理事、眞峯JST理事の主催者あいさつに続いて、内閣府総合科学技術会議相澤議員より基調講演が、その後、和坂新エネルギー・産業技術総合開発機構理事や、国際エネルギー機関、農林水産省、産総研な

どより特別講演があり、バイオマスエネルギーの実用化に向けた各機関の取り組みなどが紹介されました。

その後、2日間にわたり、アジアを中心としたバイオマスエネルギー利用技術の研究開発とその実証・実用化について40件の発表が行われ、参加者も含めた意見交換が行われました。さらに、併催されたポスター展示では、研究担当者より最新の研究成果が紹介されました。

（参考）「バイオマス・アジアワークショップ」について

2004年度の第1回より2009年度の第6回までは、JST科学技術振興調整費による事業の一環として開催。東アジア12カ国をメンバーとするバイオマス・アジアネットワークの構築に貢献してきた。第7回からはメンバー国が持ち回りで開催しており、今回はインドネシア、ベトナムに続き3回目の開催。（URL：www.biomass-asia-workshop.jp/）



野間口理事長のあいさつ

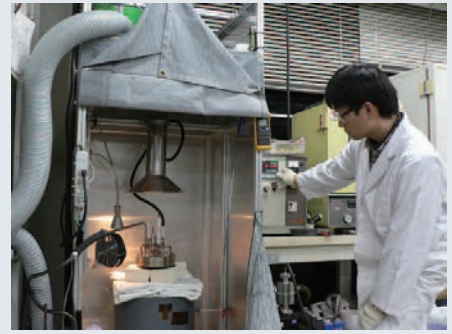


集合写真

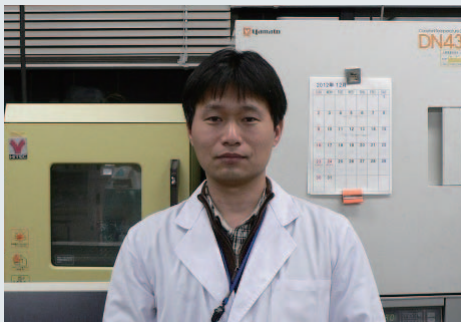
効率的な金属リサイクル技術の開発

環境管理技術研究部門 金属リサイクル研究グループ 大石 哲雄（つくばセンター）
おおいし てつお

環境管理技術研究部門は、産業の発展と安全・安心な環境を両立させるため、環境技術産業の振興や創出、関連政策の立案や実効に貢献する研究をしており、「レアメタル等金属・化成品の有効利用・リサイクル技術の開発」を重点課題の一つとして掲げています。金属リサイクル研究グループでは、化学的な手法を用いた効率的なリサイクル技術開発に取り組んでおり、対象物は使用済み製品や産業廃棄物などさまざまです。また、ますます重要になる資源確保のため、熱水鉱床など未利用の一次資源を対象とした製錬技術開発にも力を入れています。



実験室にて



大石さんからひとこと

私は、銅、希土類金属、タングステンなどのリサイクルプロセスを研究しており、最近では太陽電池のリサイクルにも興味を持っています。リサイクルプロセスの開発においては、コストや環境負荷を常に意識する必要があります。使用済み製品が対象であればその収集方法および含まれる金属の種類や量、さらには各金属資源の需給動向など、さまざまな要素が関係してきます。これがリサイクル技術開発の難しいところであり、面白い部分でもあります。実効性のある技術開発を通じてリサイクル率の向上に貢献したいと考えています。

EVENT Calendar

イベントの詳細と最新情報は、産総研のウェブサイト（イベント・講演会情報）に掲載しています
<http://www.aist.go.jp/>

2013年2月 → 2013年3月

1月23日現在

期間	件名	開催地	問い合わせ先
2 February			
5～6日	産総研・産技連LS-BT合同研究発表会	つくば	029-862-6032
15日	化学物質の安全管理に関するシンポジウム	東京	03-3581-9265
19日	つくば産産学連携促進市 in アキバ	東京	03-5298-2005
19日	産総研 環境・エネルギーシンポジウムシリーズ	つくば	029-862-6792
3 March			
8日	デジタルヒューマン・シンポジウム2013	東京	03-3599-8512
12日	産総研 福島新拠点 再生可能エネルギーシンポジウム	郡山	029-862-6041
13日	最先端研究開発支援プログラム2013年成果報告会	東京	029-862-6123

表紙

上：密度汎関数理論に基づいた第一原理計算によるネオジム磁石の電子スピン密度（p.3）
 下：ナフィオン膜中での水分子およびプロトンの様子（p.6）

産 総 研
TODAY

2013 February Vol.13 No.2

（通巻145号）
 平成25年2月1日発行

編集・発行
問い合わせ独立行政法人産業技術総合研究所
広報部広報制作室

〒305-8568 つくば市梅園1-1-1 中央第2

Tel: 029-862-6217 Fax: 029-862-6212 E-mail: prpub-ml@aist.go.jp

ホームページ

<http://www.aist.go.jp/>

● 本誌掲載記事の無断転載を禁じます。● 所外からの寄稿や発言内容は、必ずしも当所の見解を表明しているわけではありません。