

【構成員】

教授：浅見 勝彦、 助教授：スライター マーセル ヘンリカス フランシスカス、 助教授：宍戸 統悦、 助教授：張 偉、
助教授：木村 久道、 助手：水関 博志、 助手：山浦 真一、 助手：湯蓋 邦夫、 助手：山本 篤史郎
その他（客員教官 2名、 技官 11名、 技術補佐員 3名、 事務補佐員 2名）

教授(兼)：花田 修治、 教授(兼)：井上 明久、 教授(兼)：川添 良幸、 教授(兼)：後藤 孝、
教授(兼)：中嶋 一雄、 教授(兼)：松原 英一郎、 教授(兼)：高梨 弘毅、 教授(兼)：宇田 聡、
助教授(兼)：奥 正興、 助教授(兼)：米永 一郎、 助教授(兼)：正橋 直哉、 助教授(兼)：長谷川 正、
助教授(兼)：折茂 慎一

I-1. 開発研究部 : ナノ構造制御機能材料研究部

【研究成果】

強靱性と優れた機能性を具備するガラス合金を得るために合金の高純度化、鑄造方法の改変、および添加元素効果を検討することにより、ガラス金属のナノメートルスケールでの構造制御について研究した。得られたバルク形状のガラス金属の高分解能電子顕微鏡観察から、ナノスケールでの原子配列を明らかにし、その材料の優れた特性との相関性を明らかにした。更に実用化に向けた合金開発として、Pd 合金に代わる高性能・低コストの水素透過膜を開発することを目的として、水素透過膜に非晶質材料の適用を試み、水素脆化の抑制のために Ni を、高い水素透過性を得るために Nb 及び Zr を混ぜ合わせた Ni-Nb-Zr 三元合金を開発した。

1. H. Kato, K. Yubuta, D.V. Louzguine, A. Inoue and H.S. Kim
Influence of Nanoprecipitation on Strength of $\text{Cu}_{60}\text{Zr}_{30}\text{Ti}_{10}$ Glass Containing $\mu\text{m-ZrC}$ Particle Reinforcements
Scripta Materialia, **51** (2004), 577-581.
2. Y. Yokoyama, K. Fukaura and A. Inoue
Effect of Ni Addition on Fatigue Properties of Bulk Glassy $\text{Zr}_{50}\text{Cu}_{40}\text{Al}_{10}$ Alloys
Mater. Trans., JIM, **45** (2004), 1672-1678.
3. W. Zhang, D.V. Louzguine and A. Inoue
Synthesis and Magnetic Properties of Fe-Pt-B Nanocomposite Permanent Magnets with Low Pt Concentrations
Appl. Phys. Lett., **22** (2004), 4998-5001.
4. S. Yamaura, Y. Shimpo, H. Okouchi, M. Nishida, O. Kajita and A. Inoue
The Effect of Additional Elements on Hydrogen Permeation Properties of Melt-Spun Ni-Nb-Zr Amorphous Alloys
Mater. Trans., **45** (2004), 330-333.

【研究計画】

金属ガラスの実用材料としての信頼性をより一層高めるために、様々な試験を多角的に行っていく。ガラス合金の品質保証方法の確立を目指して、ガラス構造を原子レベルで制御できる新しい凝固制御プロセスを開発する。走査透過電子顕微鏡観察と EDS および EELS 法を併用した元素マッピング法を用いて、金属ガラスの原子配列構造および材料中の元素分布を明らかにし、その特性との相関を考

察していく。水素透過膜については、組成探査によって高水素透過性と高耐水素脆化を両立するガラス合金を開発すること、および実際の透過流量を向上させるため、本合金膜のさらなる薄帯化および薄膜化を試みる予定である。

I-2. 開発研究部：ミクロ組織制御材料合成研究部

【研究成果】

高性能なエネルギー材料、電子情報材料および生体福祉材料などの開発を目指した基礎研究を行い、2004年度では次のような研究成果を得た。

(1) Cu 基バルク金属ガラスの耐食性に及ぼす添加元素の影響を調べ、Cu 基合金の耐食性が少量の Nb 添加により大幅に向上することを明らかにした。(2) 燃料電池用水素透過膜・セパレータに使用できる幅広 Ni-Nb-Zr 系金属ガラス・アモルファス合金薄帯を開発した。(3) Zr-Al-Ni-Cu バルク金属ガラスの構造安定性に及ぼす強圧縮応力負荷の影響について調べ、本金属ガラスの構造は強度の加工変形に対し極めて安定であることを明らかにした。この結果に基づいて、ショットピーニング用 Fe 基金属ガラス粉末を開発した。(4) 急冷凝固 Fe-Pt-B アモルファス合金材のリーチング処理により強磁性 Fe-Pt ナノ粒子の生成に成功した。(5) 体内埋入用チタン材料の骨伝導性能をチタン酸カルシウム被覆により向上させることに成功した。(6) 約 30%IACS の導電率を持つ Cu 合金において、商用の Cu-Be 合金の最高の引張強度を上回る Cu-Zr 合金を開発した。(7) 準結晶粒子分散型の高比強度・高耐熱 Al-Fe-Cr-Ti-Co 合金押出し材を開発した。

1. K. Asami, C.-L. Qin, T. Zhang and A. Inoue
Effect of Additional Elements on the Corrosion Behavior of a Cu-Zr-Ti Bulk Metallic glass
Mater. Sci. Eng., **A375-377** (2004), 235-239.
2. S. Sobu, H. Kimura, D.V. Louzguine and A. Inoue
Formation, Thermal Stability and Mechanical Properties of Aluminum-Based Glassy Alloys Containing Boron
Mater. Trans., **45** (2004), 1204-1209.
3. T. Yamamoto, M. Taya, Y. Sutou, Y. Liang, T. Wada and L. Sorensen
Magnetic Field-induced Reversible Variant Rearrangements in Fe-Pd Single Crystals
Acta Mater., **52** (2004) 5083-5091.

【研究計画】

本年度も 2004 年度の研究成果に基づいて、新物質の探査、および高性能なエネルギー材料、電子情報材料、生体福祉材料などの開発研究を行う。具体的には、(1) 軟磁性 Fe 系金属ガラスにおける構造と超低保磁力との関係の解明、(2) Fe 系および Co 系金属ガラスのフラックス法による大バルク化の実現、(3) 水素透過性能に優れた金属ガラス・アモルファス合金の開発、(4) 小型電子機器の筐体用などの金属ガラスの開発、(5) Zr 基金属ガラスの過冷却液体領域の安定性に及ぼす添加元素の影響、(6) アモルファス相のナノ結晶化・リーチング処理により作製した強磁性 Fe-Pt ナノ粒子の磁気的性質の向上、(7) 超急冷法による Fe-Pt-M-B 系ナノ L1₀ 相の直接創製、(8) チタン酸カルシウム被覆による骨伝導性能向上のメカニズムの解明、(9) 良好な導電率を持ち高強度特性を示す Cu-Zr 合金線材の開発、(10) 準結晶粒子分散型高比強度・高耐熱 Al-Fe-Cr-Ti-Co 合金押出し材の開発、および (11) Fe-Pd 強磁性形状記憶合金単結晶におけるゴム弾性発現メカニズムの解明などを行う。

I-3. 開発研究部 : 材料設計研究部

【研究成果】

集積回路の高密度化は細線化によって達成されてきた。しかしこのペースで高密度化が進むと、ムーアの法則と言われるデバイスの進化は製造過程、物理的制限にぶつかると予測されており、新しいパラダイムシフトが必要になってきた。我々のグループでは第一原理計算を用いてナノスケールのデバイスである分子デバイスの研究を行っている。研究対象は分子整流器、超分子被覆分子、有機分子と金属電極の接合、ビルディングブロックとしての小さな分子の導電性、シリコン基板上の自己組織化細線、曲げたカーボンナノチューブなどであり、これらのナノ材料の安定構造と導電性に関する知見を得た。

1. R. V. Belosludov, A. A. Farajian, H. Mizuseki, K. Ichinoseki and Y. Kawazoe
Electron Transport in Molecular Enamel Wires
J. J. Appl. Phys., **43** (2004), 2061-2063.
2. M. Khazai, A. A. Farajian, G-H Jeong, H. Mizuseki, T. Hirata, R. Hatakeyama and Y. Kawazoe
Dynamical Criteria for Cs Ion Insertion and Adsorption at Cap and Stem of Carbon Nanotubes: Ab Initio Study and Comparison with Experiment
J. Phys. Chem., **B108** (2004), 15529-15535.

【研究計画】

金属ガラスの構造、動的、熱力学的性質をリバースモンテカルロ法、分子動力学法、格子動力学法などのシミュレーション手法を用いて明らかにする。この複数のシミュレーション手法を組み合わせたアプローチは従来のものに比べてより高精度に、より詳細にガラス固体の性質を記述できる。スーパーコンピュータの利用で可能となるスーパーセルを用いた計算によりランダムな原子分布からなる金属液体の初期状態モデルを構築する。このような初期状態から実験で得られている密度をリバースモンテカルロ法により再現する。このあと、過冷却状態を再現する分子動力学モデルを次の手順で構築する。まず、合金などの構造最適化とエントロピー、エンタルピーなどの熱力学定数を実験温度で得て、スーパーセル用のパラメーターの温度依存性を作成する。次に体積を小さくすることにより、原子位置を圧縮し、低温における構造を最適化する。この計算プロセスをある温度間隔で繰り返し、冷却する。負の振動数を持つ構造を取り除くために CG 法により金属ガラスを構造最適化する。この結果を動径分布関数と比較し、新しい金属ガラスモデルを完成させる。

II-1. 応用研究部

【研究成果】

今後迎える超高齢化社会に向けて金属系生体材料が関係する医療において安心安全を確立するために細胞毒性の懸念される V や Ni を含まない多機能生体用 Ti-Nb-Sn 合金の開発に成功した。

- (1) 形状記憶 Ti-Nb-Sn 合金では合金組成と時効熱処理条件の最適化により体温で超弾性を発現させることができるようになったことから、歯列矯正用アーチワイヤへの適応について具体的な検討を開始した。
- (2) インプラント用 Ti-Nb-Sn 合金では、加工熱処理による組織制御により、低弾性率 (40~50GPa)

と延性を維持した状態で強度を 1000MPa 近くまで増加させるプロセスを開発した。この低弾性率・高強度 Ti-Nb-Sn 合金は、冷間加工性に優れ、これまでに開発されている生体用 Ti 合金の中で世界最高レベルの弾性率/強度バランスを示す。そのため人工関節、骨折治療用内固定具などのインプラント用生体材料として企業との共同研究を行なっている。

1. T. Ozaki, H. Matsumoto, S. Watanabe and S. Hanada
Beta Ti Alloys with Low Young's Modulus
Mater. Trans., **45** (2004), 2776-2779.

【研究計画】

生体用 V フリー Ti-Nb-Sn 合金の更なる高機能化を達成するために下記事項を中心として研究を行う。

- (1) 超弾性用 Ti-Nb-Sn 合金についてマルテンサイト変態特性は比較的低温の時効により著しく影響されることから、時効中の構造変化について調査して、超弾性発現機構を解明する。
- (2) 生体硬組織代替材料用 Ti-Nb-Sn 合金について低ヤング率化・高強度化の要因を微視的な組織構造の変化を調査することにより解明する。それに基づいて人体組織に対してより力学的適合性に優れた Ti-Nb-Sn 合金の開発を目指す。

III. 研究ステーション

【研究成果】

研究ステーションは物質合成、性能評価、結晶作製の三つより構成される。これら三つのステーションの成果の代表例を挙げる。

(1) 物質合成ステーション

β -アルミナ型化合物の多くは高いイオン伝導性を示すことから有用である。不定比化合物 $\text{Ba}_{1-0.25x}\text{Mg}_x\text{Al}_{10+x}\text{O}_{17+0.25x}$ を $x=0-1$ の範囲の組成で調製し、帯域溶融 (FZ) 法で単結晶化させた。組成と酸素分圧が良電導面およびそれに垂直な面の導電性にどのように影響を与えるかを明らかにした。

(2) 性能評価ステーション

生体材料開発において、疑似体液中での評価は欠かせない。特に試料表面の情報は重要である。マウス線維芽細胞 L929 培養条件下でのチタニウムの表面酸化皮膜の組成を XPS により調べ、リン酸カルシウムの析出を観測したが、ハンクス液などの中におけるよりも析出量は少ないことを明らかにした。

(3) 結晶作製ステーション

高濃度ホウ化物 AlMgB_{14} および AlMgB_{22} の単結晶を Ar ガスフローの下、熔融 Al をフラックスとして得た。これらのホウ化物の最適育成条件を決定するとともに、超硬物性、耐酸化性を中心に性質を明らかにした。

1. A. Y. Zhang, T. Akashi and T. Goto
Electrical Conductivity of Nonstoichiometric Ba β -alumina Single Crystals Prepared by a Floating Zone Method
Solid State Ionics, **166** (2004), 77-82.
2. S. Hiromoto, T. Hanawa, K. Asami

Composition of Surface Oxide Film of Titanium with Culturing Murine Fibroblasts L929
Biomaterials, **25** [6] (2004), 979 –986.

3. S. Okada, K. Kudou, T. Shishido, I. Higashi, N. Kamegashira, K. Nakajima and T. Lundstrom
Crystal Growth of Aluminum Magnesium Borides from Al-Mg-B Ternary System Solutions and Properties of the Crystals
Mater. Sci. Forum, **449-452** (2004), 368.

【研究計画】

三つのステーションは本センターの内外の研究グループと更に積極的に共同研究を行い、新機能を有する物質の合成、有用な単結晶材料の開発、それらの性能評価を推進する。新しく計画し、研究に着手しつつあるテーマのうちの主要なものを列挙する。

(1) 物質合成ステーション

1. 軟磁性 Fe 系金属ガラス、Fe 系および Co 系金属ガラスのフラックス法による大バルク化、高水素透過性ガラス合金などの高性能エネルギー材料および電子情報材料の開発
2. 液体原料噴霧 ECR プラズマ CVD 法によるジルコニアの成膜

(2) 性能評価ステーション

1. X線光電子分光法および微小電子線プローブ分析法などによるバルク金属ガラスの耐食性評価
2. X線光電子分光法およびオージェ分光法などによる生体材料の評価

(3) 結晶作製ステーション

1. 浮遊帯域溶融(FZ)法による β -Ga₂O₃単結晶の育成と窒化処理による GaN 形成
2. 水熱法による高品位 ZnO 単結晶の作製