



アラカルト

若手研究者・技術者へのメッセージ-12

一金属学者から若手研究者・ 技術者へのメッセージ

Message for Young Researchers and Engineers
from Old Professor of Metallurgy

森永正彦

名古屋大学 名誉教授

Masahiko Morinaga



1 はじめに

未曾有の東日本大震災があり、これまで人々が延々と築いてきた営みが、一蹴のうちにすべて消し去られたような自然の怖さを感じている。震災や原子力発電所の事故の問題に向き合い、今後、科学技術はどうあるべきかを考える時なのかもしれないが、私はその答えを未だ見出せないでいる。

それでも、難しい時代であるからこそ、約40年の教育・研究人生を顧みつつ、若い人達に一金属学者の思いを伝えるために小文を書こうと思う。学生時代、教師時代にした研究や、その時に思ったこと、考えたことなどをここに書き留めて、若い人達へのメッセージにしたい。蛇足になるのかもしれないが、今後の材料研究についても私見を述べてみたい。

2 学生時代

私の研究は、1968年、京都大学工学部冶金学科の村上陽太郎研究室において、X線小角散乱法によるアルミニウム合金のスピンノーダル分解の研究から始まった。ちなみに、スピンノーダル分解で著名なJ.W.Cahn先生が、今年(2011年)、京都賞を受賞された。準結晶をAl-Mn合金で発見したD.Schechtman先生も、今年、ノーベル化学賞を受賞された。お二人の材料分野の先生方のご受賞は、私たち材料研究者にとって喜びであり、励ましでもある。

私は学生紛争の最中に、大学を卒業した。その後、大学院の修士課程、博士課程へと進学したが、意を決して、1972年にアメリカへ留学した。当時は1ドルが360円の固定為替レートの時代で、日本は経済の高度成長に向かって全力で走り始めていた。小説「坂の上の雲」に描かれているような昔のことではないが、私なりに青雲の志をもって渡米した。

シカゴ近郊のノースウエスタン大学のJ.B.Cohen先生の

研究室でX線の勉強をした。Ph.D.論文のテーマは、「Atomic Arrangements in Ordered and Disordered VOx」(VOxの規則相と不規則相の原子配列)である。X線散漫散乱を測定して、多量の原子空孔があるVOxの局所原子配列を調べた。大きな単結晶を苦勞して作り、数カ月をかけて、コンピュータ制御のX線ディフラクトメータを使って、強度がたいへん弱い散漫散乱を根気よく測定した¹⁾。学位を取得後、引き続きポスドクになり、安定化ジルコニアの局所構造の研究を続けた²⁾。

J.B.Cohen先生から学んだことは、プロフェッショナルの研究の仕方である。「その時にできることは、徹底的に研究し尽くし、他の研究者の介入、批判を許さない」という研究姿勢である。これは日本人の穏やかな研究姿勢とは違い、たいへん厳しいものである。私はこの姿勢をそれ以来堅持し、重要と思うところは、徹底的に調べるようにしている。

ところで、ノースウエスタン大学は、1950年代に世界で初めて「材料科学科」が創設された大学である。材料科学科には、創設者で析出・相変態のM.E.Fine先生、スピノーダル分解のJ.E.Hilliard先生、転位論のJ.Weertman先生がおられた。日本人の飯井政博先生もおられ、透過型電子顕微鏡の明解な授業を受けた。土木工学科には、マイクロメカニクスで有名な村外志夫先生がおられ教えを受けた。このほか、日本から森勉先生(現、東工大名誉教授)や足立裕彦先生(現、京大名誉教授)らが来られていた。村先生が、「Cohen先生は、自分の研究室の学生の悪口を一度も言ったことがない」と、感心しておられたことを思い出す。若い時に、このような多士済々ともいえる恵まれた環境のもとで勉強ができたことを感謝している。

私の経験によれば、先生のレベルを通して学生は自分のレベルを知ることができる。すなわち、先生の社会的な学問的評価と、その先生に対する学生自身の直接評価から、学生は

自分が学問の世界でどの程度の位置にいるのかがわかる。そして、自分の位置が高ければ、自信になる。この「学生への道標」が、大学の先生の重要な役割の一つであると思う。私自身、ノースウエスタン時代には、X線散漫散乱の分野ではトップに立ったような気がしていた。今から考えると錯覚であり、冷や汗ものであるが、若い人にはこのような体験をしてもらいたい。

3 大学教員時代

3.1 X線から合金設計へ

1979年春に、米国から日本に帰り、新設間もない豊橋技術科学大学に講師として奉職した。共同利用が始まったばかりの筑波のシンクロトン放射光施設 (Photon Factory) へ行き、ニオブ炭化物 (NbC) やチタン合金のオメガ相からの散漫散乱の測定をしていた。

しかし、同じ学科の教授から、基礎研究だけではなく、「役に立つ研究をしなさい」と言われ、いろいろ悩んだ末、「分子軌道法に基づく合金設計」の研究に踏み入った。1983年頃のことである。若い研究者は研究に悩み、それに打ち勝っていかなければならない。

今では言い古されて陳腐な感じがする「合金設計」も、当時は実に新鮮な響きがあった。X線は物質中の電子を見ているので、電子密度分布を調べることができる。X線の実験結果と比べるために、既に、DV-X α 分子軌道計算法を使ってジルコニア (ZrO₂) の電子状態を計算していた。幸いにも、当時、兵庫教育大学におられた足立裕彦先生がこの計算方法を開発されていたので、スムーズにこの分野に入っていた。科学研究においても、新しい研究を行う上で、人的ネットワークは大切である。

私のような実験屋にとっては、電子構造の理論計算は難しいと思っていたが、ジルコニアの計算を通して、その明快さに驚いた。たとえ不案内な領域でも入ってみるものである。合金設計のための最初の計算は、ニッケルクラスター中に合金元素を入れたもので、「合金元素の個性を表す2つの合金パラメータ」を求めた。金属の古い歴史にもかかわらず、合金効果を表すパラメータがなかったので計算から求めたのである。この新しいパラメータを用いて、これまで理論的な取り扱いが難しかった遷移金属 (Fe, Niなど) の合金固溶体の元素の固溶限を定量的に評価した。そして、1984年に、New PHACOMP (Phase Computation: 相計算) を提唱した³⁾。これは、ニッケル合金中に脆化相を生成させない合金組成の新しい予測法であり、今では世界に広まっている。これを基に、「d電子合金設計法」を提唱した⁴⁾。

1994年秋に、豊橋技術科学大学から名古屋大学へ移った。

その後も、上記の設計法を用いて、ニッケル基単結晶超合金をはじめとして、いろいろな合金を開発した。東北大の新家光雄先生らは、優れた生体用チタン合金 (Ti-29Nb-13Ta-4.6Zr) を開発している。最近、発見された多機能ゴム金属 (チタン合金) も、2つの合金パラメータがある値を示すときにのみ現れるらしい。

鉄鋼材料では、ボイラー用とタービンロータ用の2種類の高クロムフェライト系耐熱鋼を開発した。ボイラー用耐熱鋼では、硫黄 (S) を50ppm程度残留していると、高温での耐水蒸気酸化特性が改善した。鋼表面にできるスケールの厚さが、硫黄を殆ど含まれていない鋼に比べ半減した⁵⁾。これまで専ら有害元素として扱われてきた硫黄 (S) も、有用な不純物元素なのである。このことは、鋼のスーパークリーン化に対する一つの警鐘であるかもしれない。一方、タービンロータ用耐熱鋼では、650℃での長時間クリープ強度を高めるためのクロムの最適組成が8.5～9.0mass%であることを示した⁶⁾。

これらの多くは産学共同研究で得られた成果であり、企業研究者の発想と優れた技術に依るところが大きい。共同研究を通して、日本のものづくり技術 (製錬、鋳造、加工、結晶成長、表面処理) の素晴らしさを知るとともに、これら生産基盤技術のさらなる発展と次世代への継承の必要性を痛感している。このことについて、若手研究者・技術者の理解を得たい。

3.2 材料設計への新たな取り組み

まだまだ、やらなければならない材料研究がたくさんある。例えば、最近の材料科学の分野では、物質の全エネルギー計算はごく普通に行われている。しかし、WignerとSeitzが1955年に予言したように、全エネルギー計算のみでは、多くの場合、実験から分かっていることを確認しているのみである。全エネルギーのさらなる解析が望まれている。最近、私は、物質の化学結合を「エネルギースケール」で表現する方法を、開発している。すなわち、エネルギー密度解析法を用いて、電子系の全エネルギーを物質中の構成原子に分配して、各構成原子の「原子化エネルギー」(物質中の構成原子を、気体のようにバラバラにするために要するエネルギー) を求めている。本解析を通して、全エネルギー計算のみでは不明であった「構成原子の顔」が見えてくるので、材料設計に応用できる。エネルギースケールで化学結合を表すので、イオン結合、共有結合などの従来の分類はもはや必要ない。

これを水素貯蔵材料として注目されている金属系、無機系、有機系の水素化物に適用し、これらを一枚の「原子化エネルギー図」の中で整理した⁷⁾。面白い図なので、ご参考までに、Fig.1に示す。縦軸は水素化物中の水素の原子化エネルギー ΔE_H で、横軸は金属の原子化エネルギー ΔE_M である。

多様な化学結合を持つ全ての水素化物を、この一枚の図の中で比較できる。例えば、金属系水素化物はこの図の上方にあり、水素の持つエネルギー ΔE_H が大きい。下方に、無機系（錯体系）水素化物があり、有機系の水素化物（すなわち炭化水素）もその近くにある。炭化水素 (C_mH_n)（例：シクロヘキサン C_6H_{12} ）では、実に巧妙な化学結合が形成されているようである⁷⁾。この分野でよく使われている炭素-炭素間の結合が、1重、2重、あるいは3重結合であるという表現は、原子化エネルギーを使えば、もはや必要ない。

この原子化エネルギーのアプローチは、「触媒設計」に応用できる。例えば、マグネシウム水素化物の脱水素化反応 ($MgH_2 \rightarrow Mg + H_2$) を促進させるために用いる種々の金属酸化物（例： Nb_2O_5 ）の触媒効果を定量的に評価できる⁸⁾。金属酸化物中の酸化物イオン (O) が持つエネルギー ΔE_O によって、金属酸化物の触媒能を整理できる。詳しくは原論文⁹⁾を見ていただきたい。この研究は面白いので、現在も続行している。

以上でこれまでの研究の話を終え、若い人達に、研究テーマの選択について一言したい。一金属学者の意見として聞いてほしい。私たちが研究をしている時に、「隣人の研究テーマ

が良く見える」ことがしばしばある。しかし、自分が熟考して決めた研究テーマであれば、それを容易に変えないでほしい。その時々の流行をあまり追わないでほしい。一つの喩えとして、煉瓦を積み上げて家を作るときを考えてみると、もし途中で気が変わり、方針がぶれると家は建たない。ぶれることなく、一個一個煉瓦を積み上げて、個性的な自分の家を建ててほしい。私は、常々、研究の成否は研究者の個性で決まると思っている。流行だからという理由のみで、自分の個性を発揮できない研究テーマを選ばないでほしい。

4 今後の研究について

最後に、今後の研究について言及したい。3つの研究が面白いと考えている。

第一は、「原子化エネルギーによる合金解析」である。純金属のことはかなりよくわかっているが、合金になると途端に難しくなり、不明な点が多い。合金の固溶、析出現象を基礎的な立場から見直し、ひずみ、濃度ゆらぎ、界面、遷移金属、典型元素等をキーワードとして、原子化エネルギーの新しい切り口から、合金の成り立ちを理解することが望まれる。

第二は、「不純物の材料科学」である。先に述べたように、鋼の高温での耐水蒸気酸化特性は微量の硫黄があれば大幅に改善する。改善のために、パラジウム (Pd) や白金 (Pt) のような高価な元素を使う必要はない。不純物を機能修飾のために利用する効果は大きく、省資源の観点からも、不純物の利用と制御が重要である。金属のみならず、半導体やセラミックスでも、多くの不純物効果が発見されている。例えば、p型 GaN が作りにくかった理由は、結晶中に不純物として水素が存在し、それがドナーとして作用して、アクセプターが有効に機能しなかったためである。加熱して水素を抜けば、p型になることはよく知られている。今後の不純物の材料科学の進展に期待したい。

第三は、「金属とセラミックス等の学際領域の新展開」である。例えば、高温金属材料では、高温使用中に表面に酸化物層が形成される。材料の耐酸化性を向上させるには、表面酸化物層の成長を抑制することが必須であり、そのためには、当然、酸化物層中の原子の拡散を支配する「格子欠陥構造」を知り、それを制御する必要がある。一例として、Fig.2に耐熱材料表面に形成される酸化物である SiO_2 と Al_2O_3 の欠陥構造を示す¹⁰⁾。欠陥の生成エネルギーの計算によれば、 SiO_2 の格子欠陥はOのフレンケル欠陥 (O原子空孔と侵入型O原子のペア) であり、一方、 Al_2O_3 のそれはAlのフレンケル欠陥 (Al原子空孔と侵入型Al原子のペア) である。その結果、実験から分かっているように、酸化が進行する時には、 SiO_2 中ではOが拡散し、 Al_2O_3 中ではAlが拡散する。これはほんの一例で

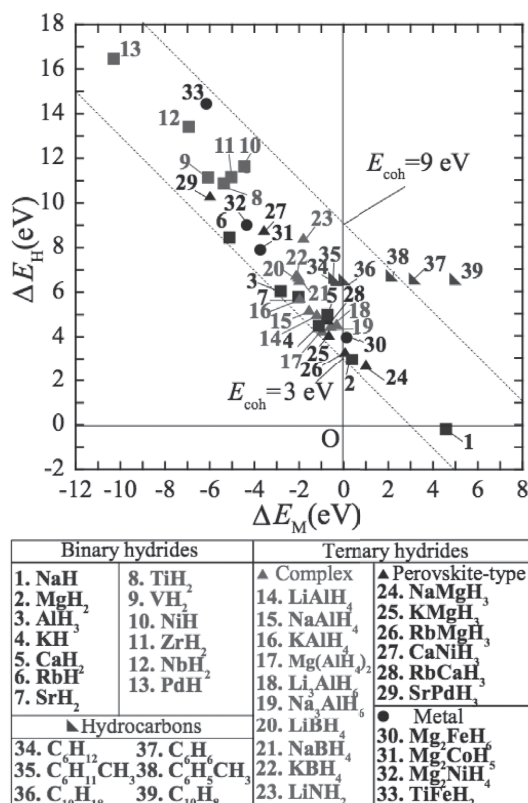


Fig.1 Atomization energy diagram for hydrides and hydrocarbons, where $E_{coh}(=\Delta E_H + \Delta E_M)$ is the cohesive energy per hydrogen atom. All the hydrides and hydrocarbons are located on this diagram, despite significant differences in the nature of the chemical bond between atoms among them.

ある。我われ金属屋は、優れた金属材料を開発するため、酸化物を含めセラミックス等の学際領域の研究にも目を向けるべきであろう。

5 おわりに

私の研究は、それなりに成果も出ているかもしれないが、まだまだ、道半ばである。金属科学・工学のあるべき姿を求めて、今後も研究していきたいと思っている。

今の私にとって一番の誇りは、研究室から優秀な研究者・技術者が育っていることである。難しい時代なので、若い人達は研究に悩むかもしれない。しかし、ノーベル賞クラスの研究テーマが、石ころのようにあちこちに転がっているような気もする。それを拾うため、たとえ不案内な研究領域でも足を踏み入れて下さい。独自の哲学を持ち、個性豊かな研究に挑戦して下さい。

若手研究者・技術者、頑張れ！

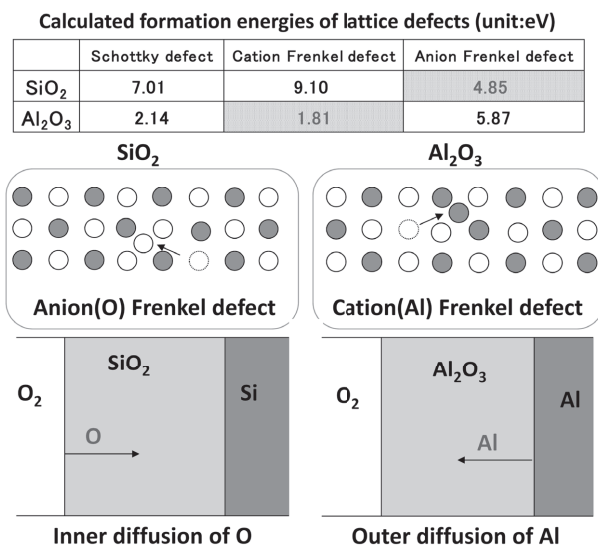


Fig.2 Lattice defects in SiO₂ and Al₂O₃: There are anion (O) Frenkel defects in SiO₂ and cation (Al) Frenkel defects in Al₂O₃. Following this defect structure, inner diffusion of O occurs in SiO₂ but outer diffusion of Al occurs in Al₂O₃ during oxidation in air.

参考文献

- 1) M.Morinaga and J.B.Cohen : The Defect Structure of VO_x, II. Local Ionic Arrangements, Acta Cryst. A35 (1979) , 975.
- 2) M.Morinaga, J.B.Cohen and J.Faber Jr : X-Ray Diffraction Study of Zr (Ca, Y) O_{2-x}, II. Local Ionic Arrangements, Acta Cryst. A36 (1980) , 520.
- 3) M.Morinaga, N.Yukawa, H.Ezaki and H.Adachi : New Phacomp and Its Applications to Alloy Design, Superalloys 1984, Eds. M. Gell et al., The Metallurgical Society of AIME, (1984) , 523.
- 4) 森永正彦, 湯川夏夫, 足立裕彦: 鉄と鋼, 71 (1985) , 1441.
- 5) M.Morinaga, Y.Murata, R.Hashizume and Y.Sawaragi : ISIJ Int., 41 (2001) , 314.
- 6) 橋詰良吉, 三木一宏, 東司, 石黒徹, 村田純教, 森永正彦: 鉄と鋼, 88 (2002) , 793.
- 7) Y.Shinzato, H.Yukawa, M.Morinaga, T.Baba and H.Nakai : Acta Materialia, 55 (2007) , 6673.
- 8) H.Hirate, Y.Saito, I.Nakaya, H.Sawai, Y.Shinzato, H.Yukawa, M.Morinaga, T.Baba and H.Nakai : International Journal of Quantum Chemistry, 109 (2009) , 2793.
- 9) H.Hirate, H.Sawai, H.Yukawa and M.Morinaga : International Journal of Quantum Chemistry, 111 (2011) , 2251.
- 10) M.Yoshino, Y.Shinzato and M.Morinaga : Materials Science Forum, Proceedings of the 3rd International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials (ISAEM-2003) , 449-452 (2004) , 713.

(2011年10月13日受付)