

むきざい、NOW



科学技術庁
無機材質研究所

JULY 1999 No.176

[小特集]

計算科学 体験学習感想文

CONTENTS

小特集 計算科学

- 1 電子はどこまで見えるようになったか
- 2 物質の性質を計算機で予測する
- 3 無機材研での電子状態計算の現状
- 4 受賞コーナー：金属イオン交換分離に関する研究
- 5・6 青少年は理科離れしている？
 - 7 ニュース
 - 7 編集後記

電子はどこまで見えるようになったか

第一原理計算によるアプローチ

島根大学
総理工学部物質学科
田中宏志

「見てきたような話をする」と良く言いますが、物性研究者ほど見てきたような話をする人はいないかもしれません。電子は雲のように原子核の周りに広がっていると学校で習いますが、直接見た人はいないわけです。しかし近年の理論計算の発達により見たこともない電子雲をかなり正確に描くことが可能になってきています。

電子はシュレディンガー方程式と呼ばれる方程式に従って運動します。そのためこの方程式をきちんと解いてやれば、見たことも無い電子雲も描けるわけです。しかしシュレディンガー方程式は形は簡単ですが解くのが難しく、そのために多くの研究者がより正確に解く方法をいまでも考えています。昨年ノーベル賞を受賞したコーンとポープルもこうした人々です。この様に実験の助けを借りずに、シュレディンガー方程式のみから電子構造を計算する方法を第一原理計算と呼びます。

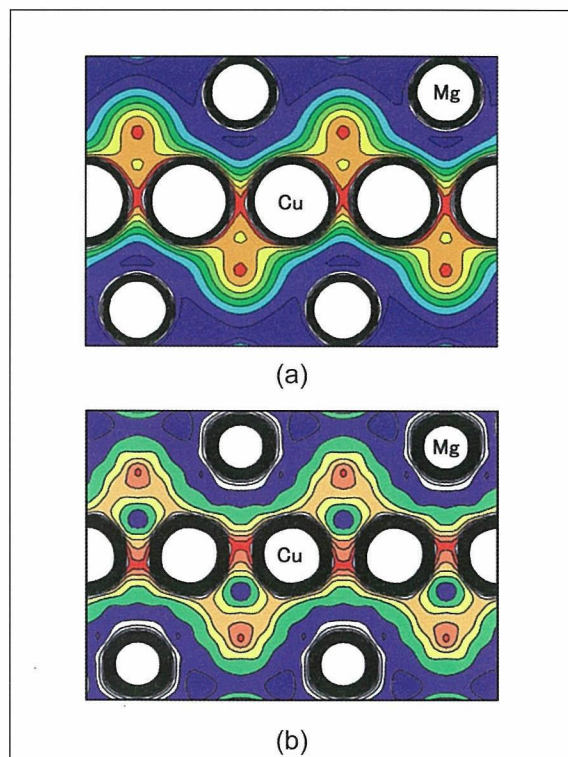
一方、実験による電子密度解析の分野でも近年大きな進展があり、X線回折データを最大エントロピー法により解析することで、原子構造ばかりでなく、詳細な電子密度が観測できるようになってきました。

右の図は、ラーベス相と呼ばれる結晶構造を持つMgCu₂合金をある面で切った時の電荷密度分布を等高線で表したもので、第一原理電子構造計算から求めたもの(a)を、最大エントロピー法を用いて実験的に求めたもの(b)と比較したものです。第一原理計算では実験から得られる情報を一切用いていないにもかかわらず、実験結果を非常に良く再現していることが解ります。もう少し詳しく見ると、計算結果と実験結果の両方において、Cu原子をつなぐ線上で電荷密度が高くなってい

て、これはCu原子間に結合があることを示しています。「金属では、電子は結晶内を自由に運動している」と教科書では習いますが、実際は原子間の結合に参加しているものもあるわけです。

理論計算でどこまで電子を見ることができるようになってきたかという話をしてきました。最近では一部の物質において、原子の種類と数さえ指定してやれば安定な原子構造も自動的に計算してくれるようになってきています。計算機だけで新しい材料を設計できるようになる日もそう遠くないでしょう。

最後に、最大エントロピー法による実験データを快く提供していただいた、名古屋大学の坂田誠先生、大阪女子大学の久保田佳基先生、島根大学の高田昌樹先生に感謝いたします。



第一原理計算(a)ならびに最大エントロピー法(b)で求めたラーベス相MgCu₂の電荷密度分布

物質の性質を計算機で予測する

第一原理電子構造計算

未知物質探索センター
主任研究官 新井正男

計算機によって、物質の性質を予測して新しい機能性材料を設計することは、計算材料科学の目標の1つであり、そのための方法論の確立が進められています。「第一原理電子構造計算」は物質内の電子の挙動を計算する手法ですが、この方法により物質の性質を予測することが可能になってきました。

材料科学に対して計算機を利用する方法には、既存の物質に対する知見を集約したデータベースを構築して経験的に新物質の性質を予測する手法から、まったくパラメーターを用いずに物質の性質を決定する非経験的手法まで、様々な種類があります。これらのなかには残念ながら万能な方法はなく、それぞれに固有の問題点を抱えています。したがって、考える物質、対象に応じて取捨選択する必要があります。本稿では「第一原理電子構造計算法」について説明します。

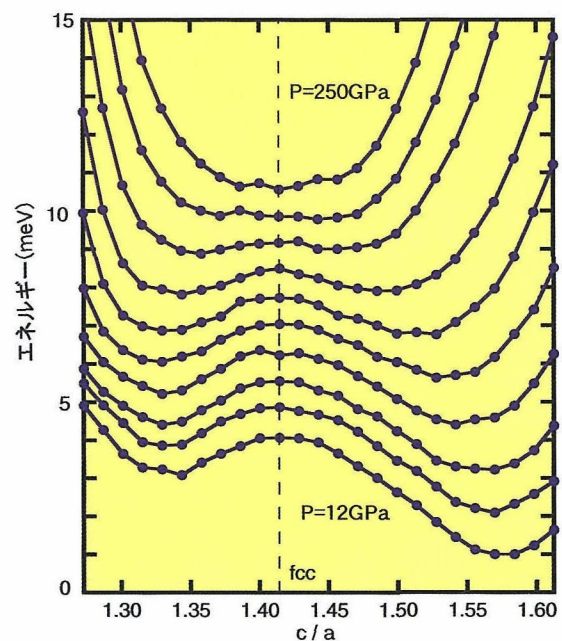
物質の性質は、その中に含まれる電子の挙動によって決まります。電気伝導などの電子が直接関与する性質に関しては当然ですが、磁石の持つ磁気モーメントも微視的には電子に起因し、ある物質が強い磁石になるかどうか、その電子状態がわかれば判明します。機械的な性質として、物質にはダイヤモンドのように非常に硬いものもあれば、金属のように引っ張ってもすぐには割れないものもあります。この性質の違いも物質内の電子状態に起因しています。したがって、物質内の電子の挙動を計算機によって求めることができれば、物質の性質をある程度予測できるはずです。それを可能にする手法が「第一原理電子構造計算法」です。

物質内の電子は量子力学によるシュレディンガー方程式によって記述できます。計算機が発達する以前は、数値的にさえシュレディンガー方程式を解くことは困難でしたので、物質内の電子状

態はパラメーターを用いて経験的に計算されてきました。この方法では、物質の性質を解釈することはできますが、予測することはできません。

80年代以後の計算機の進歩により、ある近似のもとではありますが、実験で決定されるパラメーターを用いずに物質内の電子状態を計算することが可能になりました。このような計算を「第一原理電子構造計算」と呼びます。さらに、90年代のCPUの発達により、以前はスーパーコンピュータでなければ不可能であった計算が、各研究者の机にあるパソコンや安価なワークステーションでも実行可能になりました。

例として、圧力下Ga(bct)の全エネルギーを軸比を変えて計算した結果を図に示します。この計算により圧力下でのGaの軸比を求めると実験とよい一致を示しました。また、低圧下では軸比を変えると2つの極小値を持つことがわかりました。このように「第一原理電子構造計算」は物質の性質を定量的に評価したり、実験によっては得られない知見を得るために利用することができます。



無機材研での電子状態計算の現状

現状と将来への一研究者の意見

未知物質探索センター
主任研究官 小林一昭

以前、筆者はまだ“むぎざいNow”が“無機材研ニュース”と言われていた頃、「第一原理計算で物質設計は、はたして可能か？」（無機材研ニュース、第155号、平成8年1月、2頁）という題目で記事を書いたことがあります。それから3年経って、第一原理計算の世界の現状をみると、着実に進歩はしていると言うのが本当のところ。既に物質設計を支援するシステム（第一原理には限定せず）がいくつか登場し始めていて、“物質設計”というキーワードを含んだ会合、会議もそこそこでよく見受けられるようになりました。更に、1998年のノーベル化学賞に「密度汎関数法」のW. Kohn先生が受賞したことは、この分野が着実に実りある成果を上げてきたことをはっきりと示しています。

翻って無機材研の現状はどうでしょうか？ 仮想的な世界とも言えるウェブ（WWW）の世界では、筆者ウェブページ（<http://www.nirim.go.jp/~kobayak/>）は、質的な面は不問としてもその情報量という点では、おそらく日本で公開されている第一原理バンド計算に関する国内最大級のサイトということに誰も異論は指し挟まないでしょう。因みに、筆者ウェブページのトップページを図1に掲載しておきます。トップページは出来るだけアクセスし易いことを目的として、1バイトでもサイズを小さくするという方針で作成しています（昔は画面数ページ分にも及んでいた）。このため見た目は大変地味なものになっています。

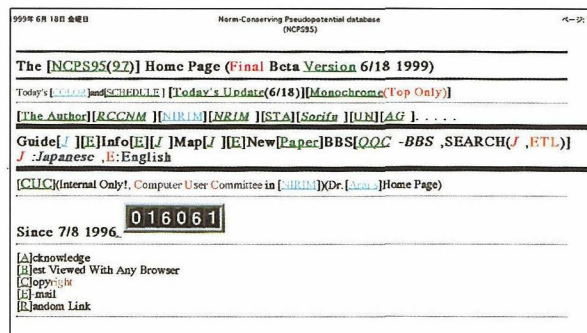
本ウェブサイトは、基本的に第一原理バンド計算に携わる研究者を専らの対象としたもので、その中には、“バンド計算入門”、“バンド計算関連重要論文”、“バンド計算関連新着論文”、“バンド計算関連用語集”、“日本バンド計算屋さんマッ

プ”、などなど多種多様なバンド計算に関係した情報のページを取り揃えてあります。他にも、擬ポテンシャルデータベース（NCP S97）に関してのページ、バンド計算プログラムの作成方法、デバッグの仕方、高速化の方法、並列化の方法（ノウハウ）などを扱っています。

最近、筆者が特に日本のバンド計算界隈で望んでいることは、「バンド計算プログラム、データ（入力、出力）の共通互換規格を作ろう。」です（詳細は、<http://www.nirim.go.jp/~kobayak/INFO/announce.html>をご参照下さい）。

最後に、無機材研の理論計算部門の将来について考えてみます。何事も先行きの不透明な世情において、未来をどう語るかと言うのは難しいものがあります。理論計算部門の将来というより、非常に正直に筆者個人が望むことを述べるのを許して頂くのなら、優先度の高い順から、人的資源の充実、時間としてのゆとりの確保、計算機資源の充実の三つを挙げる事ができます。昨今の現状では本当に夢のような話ではあります（これらの三つの望みすべてを叶えることは大変困難なことから）。

その代償的な意味もこめて、仮想的な世界（WWWの世界）での電子状態計算（バンド計算）の情報拠点として、筆者は日々ウェブページを更新している訳です。



金属イオン交換分離に関する研究

平成10年度日本イオン交換学会 学会賞受賞



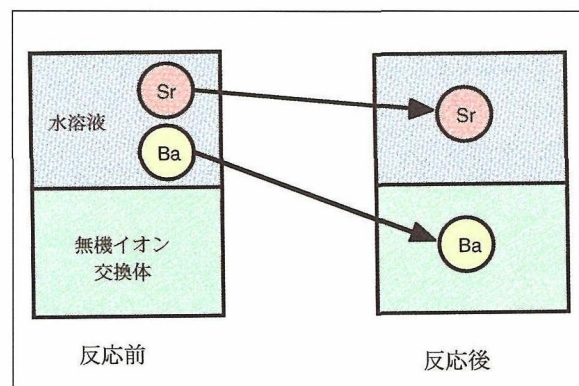
第7研究グループ
主任研究官 小松 優

金属イオン交換反応に関する研究成果で、平成10年度日本イオン交換学会の学会賞を受賞した。

我が国では、総発電量の40%程度を原子力発電に依存しております。この原子力発電によって生じる高レベル放射性廃液中には、数多くの放射性核種が含まれております。現在、これらの危険核種の長期保存には、ガラス一括固化法が採用されております。すなわち全廃棄物を一括して処理する方法です。このため、長寿命核種（半減期が28～30年）であるセシウムやストロンチウムの放射能が減衰するまで安全に生活圏から隔離しておく必要があります。狭い国土の日本では保管場所などの問題が生じております。また、ガラス固化法では使用しているガラスをコンクリートなどでカバーしないと、長期間保管する場合に非晶質であるガラスが結晶化することによる放射能漏出の危険もはらんでおります。現在多量に蓄積されている廃棄物に関しては、処理法が確立されているガラス一括処理法が有効ですが、今後処理場確保などを解決する必要があります。この問題解決のためには、原子力発電などの放射性廃棄物発生源を断つ、廃棄物量減容化を図るなどの工夫が迫られております。このため、既に多量に抱えている放射性廃棄物に関しては、これらの安全保管とともに減容化に関する研究が必要です。今回の日本イオン交換学会賞の受賞対象となった本研究では、長寿命と短寿命の核種を分離し、長寿命核種のみを安全に保管する方法を考案しました。アルカリ金属イオン群からセシウムを、アルカリ土類金属イオン群からストロンチウムをイオン交換分離することを試みました。当研究所で合成された層状構造を持つ結晶質四チタン酸を無機イオン交換体として利用することにより、セシウムとストロン

チウムは共に同族イオンと分離することが出来ました。しかし、セシウムとストロンチウムを捕獲したイオン交換体は、捕獲後もイオン交換能を保持しております。このため、このままでは酸性条件下でこれらの金属イオンが再流出する恐れがあり、安全とは言えません。そこで、この結晶質四チタン酸ストロンチウムを特殊な条件下で熱処理することにより、ペロブスカイト型構造を有するチタン酸ストロンチウムへと構造変換し、ストロンチウムの侵出率を測定しました。この結果、過酷な条件下（高圧、高温）でもストロンチウムが安全に固体中に留まることが確認できました。セシウムの場合にも、類似の方法で固体中にとどめることが出来ました。

最後に、今回の受賞に対して協力いただいた所内外の共同研究者に厚くお礼申し上げます。



水溶液中に共存する2種類の金属イオンの中で、半径の大きいバリウムイオン（Ba）が固相に移動し、小さいストロンチウムイオン（Sr）が水相に残るため、二つの金属イオンを分離できる。

青少年は理科離れしている？

中学生のための「体験学習」感想文

広報委員会

理科に対する興味をはぐくむための「体験学習」が、つくば市内の中学生38名を対象として広報委員会により主催されました。本年度は「炭素-驚異の材料」をテーマとして、以下のプログラムを実施しました。

1. 黒鉛、ダイヤモンド構造の講義と模型制作
2. 体験実験

- (1) ダイヤモンドを燃やそう：ダイヤモンドの燃焼と金槌による粉碎
- (2) 硬さを測ろう：ビッカース硬度の測定
- (3) 活性炭：活性炭による水の浄化
- (4) 黒鉛：摩擦と潤滑の実験

実施に当たっては、生徒が自分の手を使って体験するという点を最も重要視しました。参加者の感想文からも分かるように、この取り組みは、十分に応えてもらうことができたようです。「青少年の理科離れ」に悲観せず、今後も同様な取り組みを継続していきたいと考えています。

中学生「体験学習」感想文*

今回の見学では、とてもいい体験をすることができたと思っています。どの実験もとてもおもしろかったです。その中でも、実験1のダイヤモンドを燃やすことと、金槌でたたいて粉々にすることが心に残っています。いくらダイヤモンドが炭素からできているからといって、燃えてなくなってしまうなんて思いもしませんでした。「火事的时候はもって逃げなさい」と言われましたが、まったくその通りだと思いました。母もこのことを聞いて、驚いていました。それに、ダイヤモンドというものは、世界で最も硬い鉱物と知られているのに、突然の衝撃には弱いということも分かって、何だかダイヤモンドが違う物のように見えて

きました。

もともと実験は好きなので、機会があればまた見学に行かせてもらいます。ありがとうございました。
稲田弦（常総学院中学校）

この無機材質研究所に来たのは初めてです。一番おもしろかったのは、ダイヤモンドの硬さについての実験です。ダイヤモンドに関しては私は何も知らなかったのですが、特に興味をもちました。ガラスと同じように見えても、傷をつけられるところがおもしろいと思いました。他にも、鉄、プラスチックなどいろいろなものをこすってみたいと思います。

もう一つおもしろかったのは、構造模型を作ったことです。これを作ることによって、初めて「どこから見ても同じ」ということを知りました。最初のスライドでも説明がありましたが、少し難しく話についていけなくなり、あきってしまったところがありました。でも、模型のように実際に見てみることによって、この体験学習に参加できてよかったと感じました。今回の体験学習によって、また科学についての興味が深まったと思います。来年もこの体験学習に参加してみたいと思いました。
末武ゆきの（竹園東中学校）

私はこういった研究所の体験学習というのは初めてで、少し緊張していました。だけど講師の皆さんが、とても分かりやすく教えてくれて、またこういった機会があったら行ってみたいと思いました。今回の体験学習のなかで一番おもしろいと思ったのは、「ダイヤモンドを燃やそう」です。ピンク色になって溶けるように燃えるダイヤモンドを見て「こんなふうにもえるのか。」と感心してしまいました。他の実験も楽しくて、もう一度やってみたいと思いました。



今回の体験で、私はほかにももっと違った実験もしてみたいと思ったし、将来こういった実験などできる仕事についてみたいと考えています。今回の体験学習は、いろいろな意味でためになりました。本当にありがとうございました。

高島みのり（常総学院中学校）

私がこの体験学習に参加したのは、前に行った農林団地の一般公開がとてもおもしろかったからです。しかし炭素のことは全然知らなかったもので、講義の内容が分かるか心配でしたが、担当の方が分かりやすく説明してくれて、模型も作ったので理解できてとてもおもしろかったです。実験で一番楽しかったのは、活性炭の実験です。活性炭については家庭科で勉強したけど、真っピンクに染まっていた水が、あんなにきれいになって出てきたのには驚きました。それと、学校では班みんなでする実験を、最初から最後まで全部自分一人でやったので、とても良い気分でした。残念だったのは、プラズマ合成装置が見られなかったことです。でも超圧力合成装置もなかなか見応えがありました。しかし、あんな装置を使わないと作れないダイヤモンドが自然にできてしまう大自然は不思議です。今度また機会があれば無機材研でどんなものを研究したり、作ったりしているのか知りたいです。

貴重な体験をさせて頂き、ありがとうございました。
中村絵美（茗溪学園中学校）

今日は無機材質研究所の特別公開をうける。いろいろな実験を行うようだが、ぼくが一番楽しみにしているのは「ダイヤを燃やそう!？」という実験だ。この実験は、地球上で最も硬いダイヤの弱点である熱で燃やしてしまおうというものである。てっきり大きなダイヤを使うのかと思ったら、

ものすごく小さなダイヤだったので、少しがっかりだった。ものすごく小さなダイヤは熱プレートの上のにせられて燃えた。まわりからだんだんはがれるように燃えていった。ダイヤは構成がしっかりしているの、少しずつしか燃えないらしい。「硬い」と「燃えやすい」は違うことなのだと思います。でも、こんなことよりも、もっと強く思ったこと、それは「もったいない」だ...

この見学で上のことだけでなく、ダイヤと鉛筆の芯がなぜ同じものなのかなどのことも分かったし、とても良かった。もっと深く知りたいし、もっと別の物のことについても知りたいので、高校生対象の特別公開を行ってほしいと思った。

西村耕野（茗溪学園中学校）

この体験学習はとてもおもしろかったと思います。ふだんから「勉強、勉強」って言われていて、なかなかできない実験もできたし、模型とか人工ダイヤとかいろいろもらって、とてもお得な気分です。一番興味を持ったのは、「活性炭」です。色素の中に入れるだけでろ過すれば透明って、これは不思議に思いました。しかもエタノールを使ってろ過すると、色素復活するには、びっくりしました。一人一人実験すると、見てるだけだと楽しくないことも、楽しくなってくると思います。それに、学校では絶対にやれない、ダイヤを燃やしたりとか、すべりやすさとか、硬さとか、いろいろ見せてもらって、タメになったと思います。

来年も開くのなら、ぜひぜひ呼んでください。絶対に行きます。今度は時間を長めにとってもらって、ゆっくり見学したいです。

渡邊未緒（常総学院中学校）

(*一部、割愛した部分があります。)



◆ ニュース

■ 科学技術週間（一般公開・特別公開）を開催

平成11年科学技術週間（4月12日～18日）に、「無機材質研究所一般公開」及び「無機材質研究所特別公開」を開催した。

一般公開については4月15日（木）に行われ、314名（うち、青少年204名）の来場者があり、超高分解能超高压電子顕微鏡など5施設を公開した。

特別公開については4月17日（土）に行われ、つくば市内に通う中学生38名を対象に、「炭素－驚異の材料」をテーマにした4つの体験実験等を行った。



■ 表彰

日本電子顕微鏡学会論文賞（平成11年5月19日）

超微細構造解析ステーション	JST流動特別研究員	D. Golberg
〃	総合研究官	板東 義雄
超高压カステーション	COEフェロー	M. Eremets
〃	主任研究官	竹村 謙一
〃	主任研究官	遊佐 斉
管理部研究支援室		倉嶋 敬次

科学技術庁長官賞

業績表彰（平成11年5月19日）

第4研究グループ	総合研究官	羽田 肇
超高压カステーション	主任研究官	竹村 謙一
第10研究グループ	研究員	菊池 正紀
研究支援室	表面計測技術係長	堤 正幸

日本セラミックス協会学術賞（平成11年5月21日）

超高压カステーション	総合研究官	赤石 寛
------------	-------	------

日本セラミックス協会進歩賞（平成11年5月21日）

第9研究グループ	主任研究官	轟 眞市
----------	-------	------

1998J CerSJ 優秀論文賞（平成11年5月21日）

第10研究グループ	総合研究官	田中 順三
-----------	-------	-------

■ 行事

サイエンスキャンプ'99

期 間 平成11年7月27日（火）～29日（木）
場 所 無機材質研究所
参加者 高校生及び高等専門学生を対象に10名
応 募 財団法人科学技術振興事業団（TEL03-3212-8487）

◆ 編集後記

計算機能力の発展にともない、実験によって直接検証することが難しい原子や分子の振る舞いを、数値シミュレーションによって予測しようとする計算科学という分野の重要性が高まってきました。今回は、この計算科学についての小特集を組んでみました。セラミックスは、一般に構成元素の数が多く、構造も複雑なものが多いため、計算科学の適用にはそれなりの工夫が必要です。無機材研におけるこの方面への取り組みは、必ずしも十分ではありませんでした。計算機だけでなく情報ネットワークの急速な普及と高速化は、材料研究の進め方にも大きな変化をもたらしつつあります。無機材研においても、この新しい道具を活用が急務となっています。

（計算科学小特集編集担当：赤羽 隆史）

むぎざいNOW 発行日 平成11年7月1日 第176号
編集・発行 科学技術庁 無機材質研究所



〒305-0044
茨城県つくば市並木1丁目1番 TEL.0298-51-3363
FAX.0298-55-2142
ホームページ <http://www.nirim.go.jp>