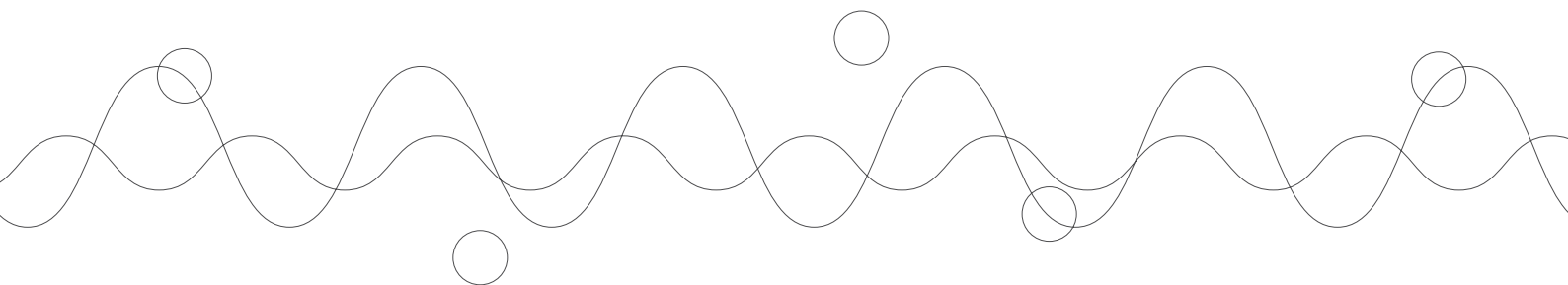


**「見えないものを見る
—ObservationとModelingとの協奏—」
科学技術の未来を展望する戦略ワークショップ報告書
(平成21年1月8日開催)**



Executive Summary

科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）実環境4D計測チームでは、信頼性保証と劣化解明の材料科学創出を目指して、「シミュレーション法との協奏による動的界面現象の解明を目標とした先端計測機器群の開発」という研究開発戦略を検討してきた。戦略立案にあたり、対象とする“動的界面現象”を具体的に明確化し、技術的ボトルネック（解像度、時間分解能、速度など）、および、これらを克服するための研究課題を洗い出すことを目的として、深掘ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」を開催した。

ワークショップでの討論を通じて、以下のような様々な先端計測技術の進歩が起きていることが明らかになった。

（１）界面計測技術の進歩

a. 時間分解・高感度計測技術

- ・時間分解ラマン分光装置：ピコ秒（ps； 10^{-12} 秒）からフェムト秒（fs； 10^{-15} 秒）単位のラマンシフトの観察が可能になった。
- ・CCDの性能向上：時間分解能がマイクロからナノ秒の応答速度で得られるようになった。感度は過去3年間で1,000倍になっている。
- ・増強ラマン技術：多重増強ラマンなどの技術開発が進んでおり、空間においても数十万倍の高感度化が期待できる。
- ・X線ピンポイント構造計測：SPRING-8の強力な放射光X線により、X線ナノビーム化が実現し、高速で起きる構造変化と機能発現挙動のプロセス解析に使うことが可能になった。
- ・電子顕微鏡を用いた電子線ホログラムの観測：実時間で構造変化に対応した電子状態試料変化が観測可能になりつつあり、電氣的・磁氣的な機能を利用した材料やデバイスの開発に役立つ。
- ・球面収差補正技術を用いた高角度散乱暗視野法（通称Zコントラスト）：単一原子カラムごとの原子・電子構造分析により、界面などで微量添加原子が果たす機能の解析が可能レベルに到達しつつある。
- ・イメージング技術の進歩により、目に見えない微小領域や高速現象でも、より直観力に訴えるデータが得られるようになってきている。

b. 実環境における計測技術の進展

- ・携帯が可能なラマン分光装置によって、製造現場での原材料や製造プロセス中における素材のミクロからマクロへの変化挙動をスペクトルとしてリアルタイムに測定することも可能になってきた。
- ・環境制御型TEM：試料の使用環境や製造環境に近い環境（ガス中、高温中など）を電子顕微鏡内に作り出し、その環境変化に伴う原子や電子の構造変化を観察・解析を行うことも可能になっている。

- ・電子顕微鏡内で応力を印加することによって材料の破壊や変形のその場観察が原子レベルで可能である。
- ・パルスレーザーを用いた Dynamic-TEM：空間分解能は通常のTEMより劣る（2 nm程度）が、マイクロ～ピコ秒という時間分解能を実現し、ナノスケールの構造変形が見えるようになってきている。
- ・電子顕微鏡の試料作製技術の進展：集束イオンビーム（FIB）加工装置を用いて、試料を観察しながら、任意の位置での微細加工が可能である。

（2）原子分子レベルとマクロレベルをつなぐメソスケール・シミュレーション

- ・SPH法（Smoothed Particle Hydrodynamics）：相互作用を持つ粒子の集合体として流体を表現することにより、非常に複雑なマクロスケールの動的形状変化を表現することができる。
- ・メソスケール・シミュレータ SNAP（Structure of NAno Particles）：ナノ粒子を含む高分子液体が乾燥してナノ粒子を含む膜を形成するプロセスのシミュレーションが可能である。
- ・実践的マルチスケール/マルチフィジックス（MS/MP）シミュレーション：量子論をベースとした原子・イオンレベルのシミュレーション法が、実プロセスレベルのサイズまで拡大される可能性が見えてきている。

進歩する界面計測技術と原子分子レベルからメソスケールまでの実構造に基づくシミュレーション技術を戦略的に組みあわせることにより、実際に起きている原子分子あるいは微小粒子や微小液滴、さらには、界面で起きている“見えない現象”をダイナミックに見る道筋は見え始めていると考えられる。

目 次

Executive Summary

1. ワークショップの概要	1
1. 1. 開催趣意.....	1
1. 2. 議論の進め方.....	2
2. 講演要旨および資料.....	3
2. 1. 「見えないものを見る」 ObservationとModelingの協奏	3
2. 2. ナノ挙動の手応え感を育む動的計測 — “ナノを見る” “ナノ挙動を知る” “ナノを操るものづくり” —.....	5
2. 3. 液液、固液界面の動的接触に関するマクロ、ナノスケールシミュレーション ..	10
2. 4. 高分子溶液などのラマン計測で把握できる分子・格子レベルの情報と動的 物性指標との高い相関性紹介 — 最先端ラマン分光法の高感度高速性の紹介と応用展開例 —	16
2. 5. 先端放射光構造計測の可能性 To See Invisible.	19
2. 6. 電子線ホログラフィによるミクロ～ナノ領域の電場・磁場の観察 ～ 電氣的・磁氣的機能の直視 ～	24
2. 7. 界面元素の可視化と材料設計への展開.....	27
2. 8. 微粒子分散系塗布・乾燥プロセスのメソスケール・シミュレーション.....	33
2. 9. シミュレーションの専門的な見地からあるべきナノ計測との連動方法産学 の間の「死の海」を乗り越えるために必要な方向性.....	38

Appendix

1. ワークショップの開催日時・場所	42
2. 参加者一覧	42
3. プログラム	43

1. ワークショップの概要

1.1. 開催趣意

科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）は、JSTの研究開発戦略を立案するとともに、我が国が重点的に推進すべき研究開発領域・課題を戦略プロポーザルとして提案し、研究開発を推進することをミッションとしている。

実環境4D計測チームでは、「シミュレーション法との協奏による動的界面現象の解明を目標とした先端計測機器群の開発」というテーマで、具体的な研究開発戦略を検討している。戦略立案にあたり、対象とする“動的界面現象”を具体的に明確化し、技術的ボトルネック（解像度、時間分解能、速度など）、および、これを克服するための研究課題を洗い出すことを目的として、本ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」を開催した。

先端計測の目指すべき方向は、と問われれば、それはいままで見えなかったものが見えるようにすることである。したがって、このワークショップの題名そのものは、あまり意味がないことなのかもしれない。しかし、先端計測分野では、従来の装置をより高感度・高分解能にするといった差別的な進歩を目指すことは常時行われているものの、今まで見えなかったものを、他の分野との協奏によって、見えるようにするという意識は比較的希薄であるように思える。

協奏すべき他の分野としては、情報関係のすべてが対象になりうるが、ここでは、広義のモデリングを協奏する対象として取り上げる。それは、実社会のニーズとして、次のようなものがあると考えからである。

例1：可逆的なアモルファスの結晶化を利用した光記録デバイスがあるが、これをさらに高速化・高密度化しようとする、界面の移動を原子レベルの動的な現象を反射率変化と相関させながら見る必要がある。

例2：高強度セラミックス材料は、粒子界面での破壊挙動が信頼性の鍵を握る。その解明には、界面での原子の挙動と強度の関係をみる必要がある。

例3：次世代太陽電池として有機系太陽電池が注目を集めている。しかし、高分子材料ゆえに、水や光の影響を受けることによって、寿命の点で十分とは言えない。構造や環境の変化と機能の相関から信頼性、劣化とは何か、確実に見る必要がある。

これらの例のように、これまで見えていないもの、あるいは、見えにくかったものを、観察能力の向上によって見えるようにする努力はいつでも必要である。しかし、最初に見えるものはかなりぼんやりとした像かもしれない。この場合、原子・分子レベルでの挙動をモデル化し、もし、観察が可能になったとしたら、どんな見え方をするのか。これをあらかじめ予測しておくことにより、実際に観察されたぼんやりした

像が本物かどうかを判定することが可能になるだろう。

本ワークショップでは、「観察とモデリングを協奏させることによって、これまでの“見える限界を乗り越える”ことが可能かどうか」、「現状で、どのような限界が阻害要因となっているか」、さらに、「もしも可能であるとしたら、どんなファンディングを行うことがもっとも効果的なのか」という課題に対して議論を行い、新しい知見を共有することを目指した。

1. 2. 議論の進め方

“見える限界を乗り越える”という課題は、さまざまな分野に存在しているが、全ての分野を取り扱うことは困難である。そこで、(1) 材料分野ではモデリングに関する理論面がある程度進展している、(2) 材料分野で界面に関わる計測技術が特に必要とされている、ことを踏まえ、以下のキーワードに深く関連する分野を対象に、検討を行うこととした。

キーワード：転移、界面、実プロセス、動的観測、動的モデリング、ミクロレベル、ナノレベル、原子・分子レベル

また、本ワークショップの主旨を理解し、議論の方向性を揃えるため、事前に下記のアンケートを送付し、講演において発表していただいた。

事前アンケート 質問一覧表

1. ご専門とする研究分野で用いている手法は何ですか。
2. その主な特徴は何ですか。
3. 今回のワークショップのキーワードを組み合わせ、どのような研究開発課題を推進したいと考えますか。
4. その研究課題の結果、得られる像（情報）の確実性について述べてください。

2. 講演要旨および資料

2. 1. 「見えないものを見る」 ObservationとModeling の協奏

■安井 至 (JST研究開発戦略センター 上席フェロー)

要 旨

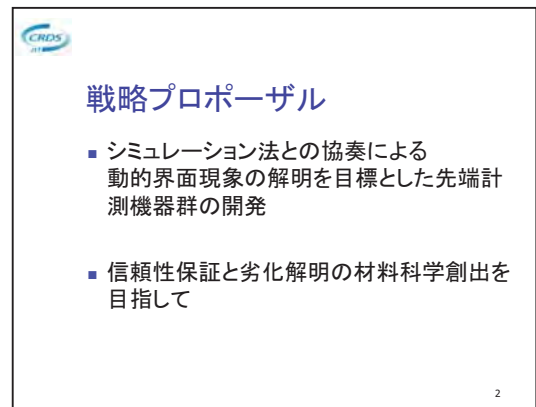
実環境と計算機材料科学という二つの世界の間には、大きなギャップが存在する。界面の空間的な分解能の向上は、プローブ型顕微鏡などの発展によって格段の進展を見たが、この方法は基本的に「走査」を必要とするので、実用レベルの面積に応用することが難しい。また、界面を接合する時間は数秒から数分にも及ぶが、そこで起きている原子分子レベルの現象を解明するには、数フェムト秒 (fs; 10^{-15} 秒) レベルでの現象の理解を必要とする。この間にある大きなギャップを埋めるためには、二つの世界が協奏して、見えない現象を見るという試みが必要不可欠ではないか。また、実環境プロセスの計測ニーズは産業界には幾らでも存在しているが、表にはなかなか出てこない。計測とシミュレーションと実用といったようなものをつなぐためには、実現象の本質を備えた公開可能なメタモデルが必要である。

資 料



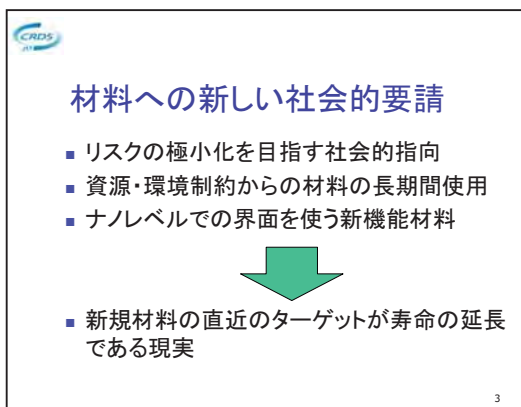
ワークショップ
「見えないものを見る」
Observation と Modeling の協奏

実環境4D計測チーム
01.08.2009



戦略プロポーザル

- シミュレーション法との協奏による動的界面現象の解明を目標とした先端計測機器群の開発
- 信頼性保証と劣化解明の材料科学創出を目指して

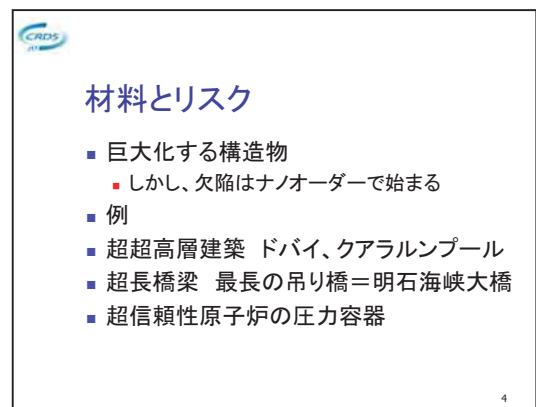


材料への新しい社会的要請

- リスクの極小化を目指す社会的指向
- 資源・環境制約からの材料の長期間使用
- ナノレベルでの界面を使う新機能材料

↓

- 新規材料の直近のターゲットが寿命の延長である現実



材料とリスク

- 巨大化する構造物
 - しかし、欠陥はナノオーダーで始まる
- 例
- 超超高層建築 ドバイ、クアラルンプール
- 超長橋梁 最長の吊り橋＝明石海峡大橋
- 超信頼性原子炉の圧力容器

[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix

機能性材料と信頼性・長寿命化

- 最近の商品は1mというオーダー
- 例
 - 現在は、液晶用
 - 有機ELが実用化されれば
 - 有機太陽電池
- しかし、欠陥のサイズは？

5

2つの世界の大きなギャップ

実用の世界と計算機シミュレーションの世界

- エネルギーの分布
- エネルギーの違い
- 粒子数
- 時間
- 位置
- 頻度

6

大きなギャップ

高感度実時間計測法

実材料・実環境・劣化

計算機材料科学

← 10¹⁸ 倍: 原子数 →

← 10¹⁰ 倍: 時間 →

← 10⁶ 倍: 位置 →

← 10¹⁵ 倍: 頻度 →

← 10¹⁸ 倍: ΔH →

2つの世界の大きなギャップ

- 先端計測技術でこのギャップが埋まるか？
- 計測技術の条件
 - 実時間で測定
 - 実用レベルの面積を測定
 - 非スキャン型の技術

8

キャノンの話

by 生駒元センター長

- インクジェットプリンター
- インクと紙の相互作用のシミュレーション
- しかし、結果を外部にすべて出すことは考えられない。

9

キャノンの話

by 生駒元センター長

- インクジェットプリンター
- インクと紙の相互作用のシミュレーション
- しかし、結果を外部にすべて出すことは考えられない。

9

公開モデルの必要性

- 現象として誰でも知っている。したがって、企業秘密にはなり得ない。
- しかし、現象の本質を含んでいるため、モデルとして解析することが有用である。
- 黒田氏の提案:「ミルククラウン」
- こんな公開モデルがありませんか？

11

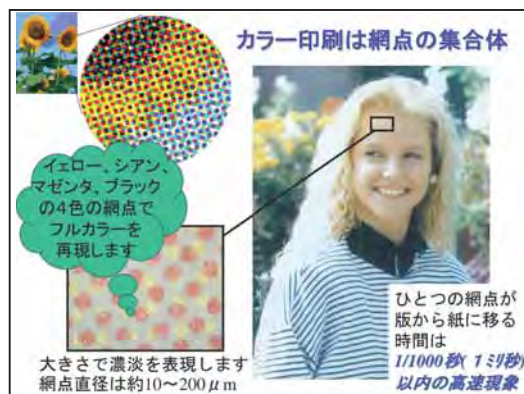
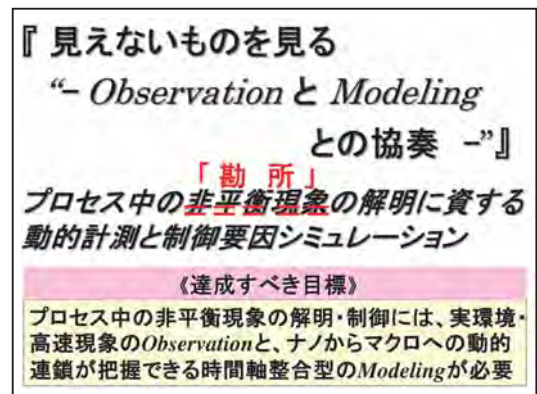
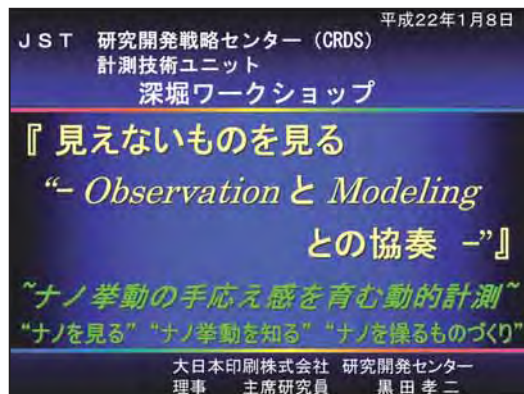
2. 2. ナノ挙動の手応え感を育む動的計測 — “ナノを見る” “ナノ挙動を知る” “ナノを操るものづくり” —

■黒田 孝二（JST研究開発戦略センター 特任フェロー/大日本印刷(株) 理事）

要 旨

ものづくりの現場において、表面から数10 nmの組織構造をいかにつくるかという技術は必要不可欠なものであり、ナノテクノロジーは既得技術として現場に潜在している。見えないナノプロセスは、現場における熟練者の「勘所」に支えられて操られているのが実態であるが、これを計測により“見える”ようにすれば、人間の思考は飛躍的に活性化され、新しい知恵が生まれていくだろう。プロセス中の非平衡現象の解明・制御を可能にするためには、実環境・高速現象のObservationと、ナノからマクロへの動的な連鎖が把握できる時間軸整合型のModelingの両輪の開発が必要である。

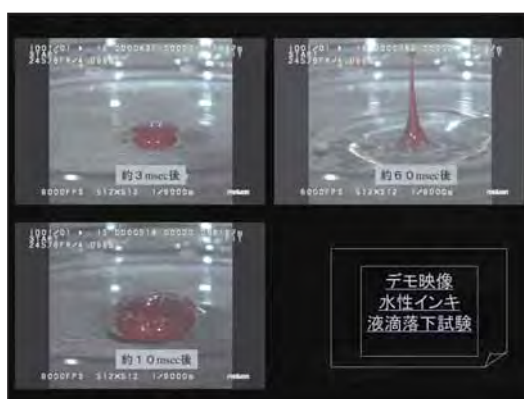
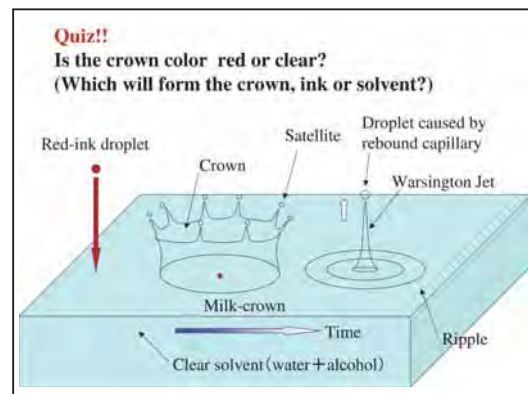
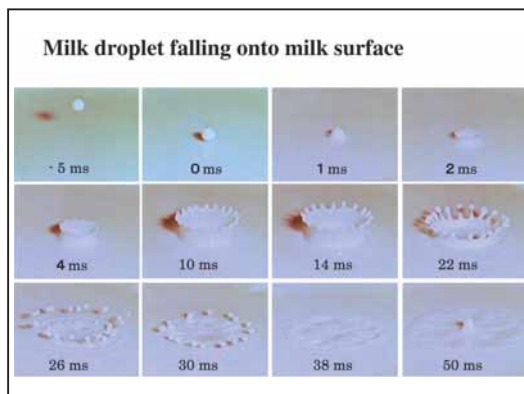
資 料



[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix



2008.7.7.

ご提案

一新経済成長を目指して—
「ナノ～マクロ俯瞰プロセス技術の構築」

～産業知と科学知の融合を基盤とする
21世紀型プロセス技術イノベーション～

大日本印刷株式会社 研究開発センター 理事 黒田孝二

ご提案「ナノ～マクロ俯瞰プロセス技術の構築」(黒田孝二)

1. 目的

日本の強みである製造技術を一層飛躍させて新経済発展を遂げるには、プロセス技術をナノからマクロへの複雑な玉突きと捉えて作用規序の全容を解明し、材料・プロセスと機能の因果関係を俯瞰する知識体系基盤を整える必要がある。

このためには産業知の源泉である現場プロセス環境下でナノ材料がダイナミックにマクロ組織に発展する全過程を追跡する、高精細、高速、高安定の動的計測技術開発が必要である。

これにより暗黙知である産業知と形式知である科学知が融合した共通知識基盤が実現し、環境・エネルギー、レアメタル、安全安心などの21世紀の材料・プロセス課題に産官学の総力を結集することができ、次世代へのものづくり技術の継承と俯瞰知識を持つ人材育成を果たすことができる。

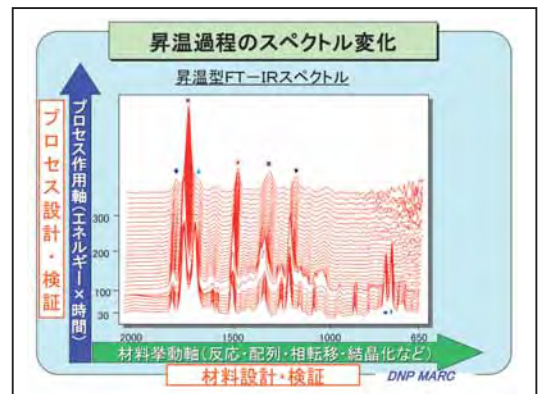
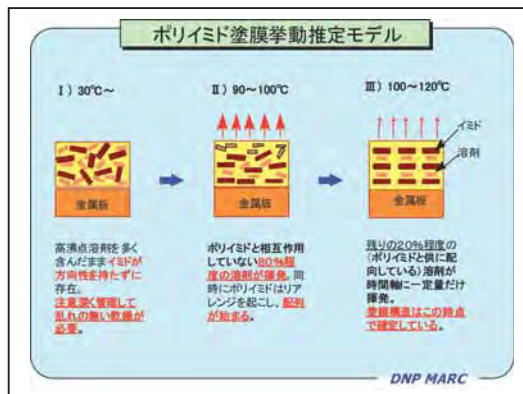
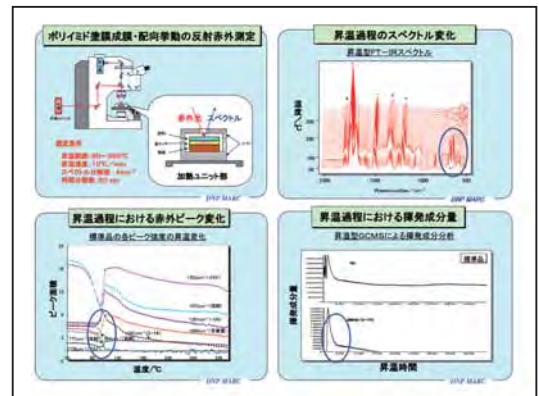
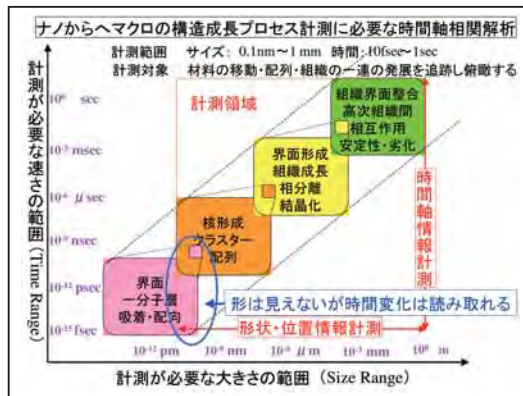
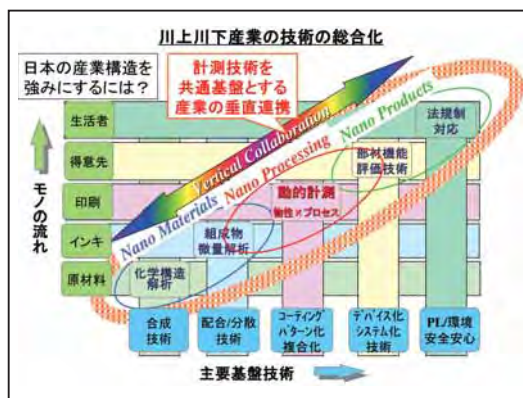
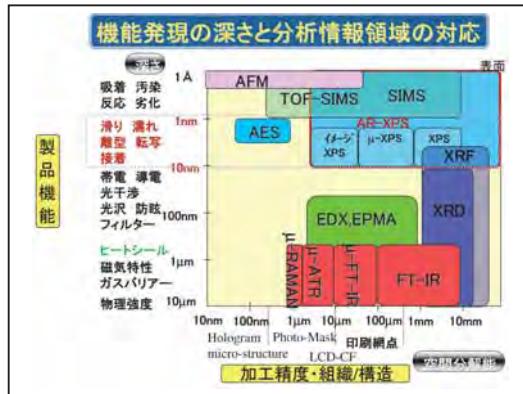
ご提案「ナノ～マクロ俯瞰プロセス技術の構築」(黒田孝二)

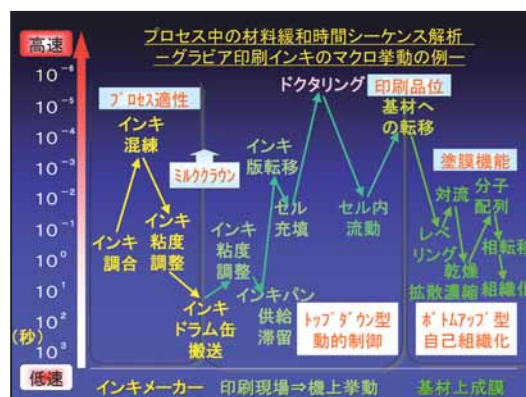
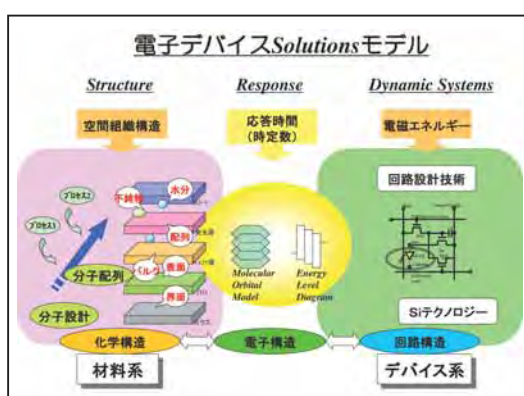
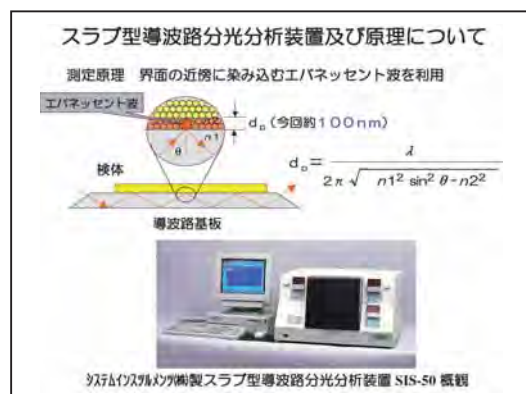
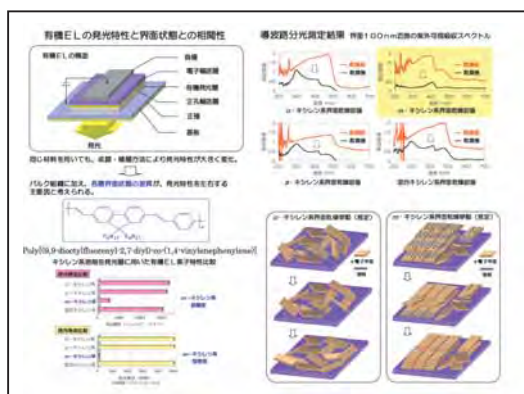
2. 動的計測・解析技術開発目標

①ナノからマクロまでを俯瞰する空間分解能と高速度計測
* ナノからマクロまでの動的挙動を0.1nm～1mmまたはpsec～1secで連続して計測することを目指す俯瞰型の計測システム

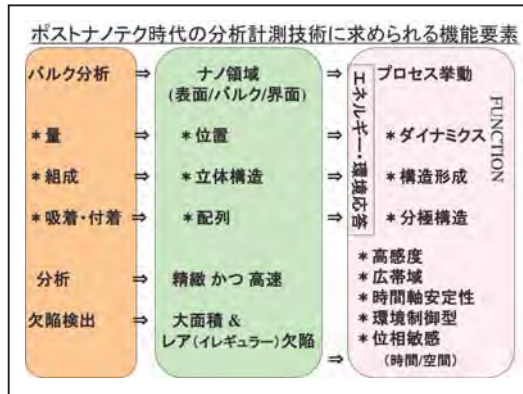
②実プロセスに相当する試料室環境制御と加工機能
* 環境制御: 温度、湿度、酸素、風速など
* 加工機能: 塗布、乾燥、光・熱反応、熱転移、焼結など

③ナノとマクロ現象間の動的変化の(多次元相関)因果解析
* 空間変化: 移動追跡、組成・組織変化、空間微分・空間位相など
* 時間変化: 時間軸変化、時間微分、時間位相など
* 状態変化: 映像変化、スペクトル変化、電子状態変化など
* 相関解析法: 多変量解析や統計、時間・空間微分、位相解析など





[1] ワークショップの概要



動的計測技術とモデリングの体系化により期待される効果

- 1) 動的計測技術開発のフロー
ナノ構造を見極める準静的計測技術で、現象の前後を詳細に把握し、その間を高速計測技術でリアルタイムに追跡して、挙動変化の「動」を把握する。
- 2) 試料環境づくり技術
モノづくり現場に環境とエネルギー投入を試料環境に再現する。これを前項の両計測技術が共有することによって、産業技術と動的サイエンスの飛躍的発展に貢献できる。
- 3) 現場型センサー開発
現場型センサーへのMEMS導入は本格化し、安定高感度、リアルタイムが実現する動きが顕在化しており、研究室の現場化の進展とともに分析計測機器の変革も進むと考える。
- 4) 動的データ解析とシミュレーション技術
動的データの複合時間軸解析技術開発に基づき、現状の静的ポテンシャルモデルを見直し、次の挙動予測可能な動的モデルへの変革を積極的に進める必要がある。特に時々刻々変化する未知現象の計測から、主要動要因を抽出するには多変量解析の活用が重要なポイントとなると予測され、日本の遅れを取り戻す必要がある。
- 5) ヒューマンインターフェイス技術の重要性
益々短時間に専門性の高いデータが大量に発信される時代を迎え、専門的知見を反映しつつ、キーバースンに的確な判断を求めるためのヒューマンインターフェイス技術開発が大量データを得る動的計測に必須となるので集中的な技術開発が必要である。
- 6) 新たな知的財産基盤の形成
動的計測で産業の暗示知を形式知とし、いち早く知的技術基盤を構築する必要がある。
- 7) 動的現象を解明するサイエンスの構築
動的ナノ現象の計測データをもとに、動的サイエンスへの変革を進める必要がある。
- 8) 現場からサイエンスまでの広い視野を持つ人材育成
動的計測は、現場感性を育みサイエンス知見を融合できる次世代の育成に貢献する。

「科学する心と技」を発展、継承させるのは「人間の感性」である

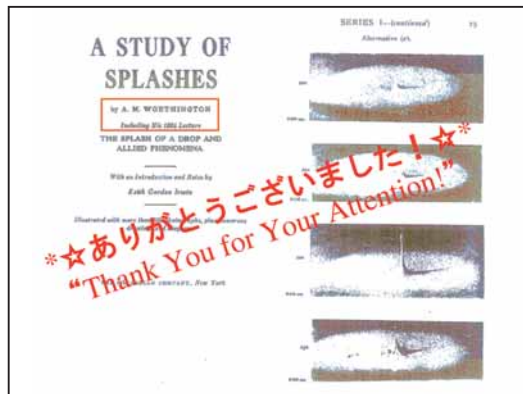
そして、人間の科学する夢を膨らませるのは道具の発明・進化である
ミルクラウンの12万コマ/秒の高速VTRの世界の不可思議！

⇒ 113年前 1894年に何と初期の写真技術で撮影の報告！

科学する心は繋がっている

Fig. 2 ①水性塗料(水性顔料)新現象) ②塗料滴の落下直前
③塗料滴の落下直後
Fig. 3 ①油性塗料(油性顔料)新現象) ②塗料滴の落下直前
③塗料滴の落下直後
Fig. 4 ①水性塗料(水性顔料)新現象) ②塗料滴の落下直前
③塗料滴の落下直後
Fig. 5 ①油性塗料(油性顔料)新現象) ②塗料滴の落下直前
③塗料滴の落下直後

[2] 講演要旨および資料



[3] Appendix

2. 3. 液液、固液界面の動的接触に関するマクロ、ナノスケールシミュレーション

■山口 康隆（大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻 准教授）

要 旨

流体界面の接触に際する非平衡過程の動的モデリングと、原子・分子レベルの振る舞いがマクロスケールの動的な実挙動に及ぼす影響のモデリングを目指している。手法としては、自由界面の大規模な大変形を伴う流体現象を取り扱うことが可能なSPH法(Smoothed Particle Hydrodynamics)と、数百万から億単位の原子レベルで非平衡の動的挙動の解析が可能な分子動力学法を用いている。液体を液体に滴下するミルククラウン現象では、SPH法を用いて実時間・実空間スケールでほぼ一致したシミュレートに成功した。信頼性のあるシミュレーション法が開発されれば、何が現象のキーファクターなのかを解明し、現象を予測していくことが可能である。

資 料

Osaka University

液液、固液界面の動的接触に関するマクロ、ナノスケールシミュレーション

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 山口 康隆

Collaborators:
大日本印刷株式会社
黒田 孝二, 中島 恒, 大野 浩平, 藤村 秀夫
大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻
西尾 直人, 小川 和也, 秋山 直也, 山名 健太郎, 稲葉 武彦

2008.04.08

CRDS 京都大学・コンピュータ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

1. 専門とする研究分野で用いている手法は何ですか。

- SPH(Smoothed Particle Dynamics)法
→マクロスケールの流体シミュレーション法

自由噴流の解析 液滴衝突のシミュレーション 液層への液滴落下の解析

0ms 0.00ms

連続問題の解析

京都大学ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

2. その主な特徴は何ですか。

利点:

- 自由界面の大規模大変形を伴う流体運動を取り扱う。
- 連続問題の解析が容易(ex. 流動励起振動)

→ 固液気相界面のダイナミクスの取り扱いが可能

課題:

- 定性的に一致する「それらしい」結果は得られるが、定量的な評価が難しいため、現象の説明に止まり現象の予測には適さない。

2009.01.08

CRDS 京都大学・ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

1. 専門とする研究分野で用いている手法は何ですか。

- 分子動力学法
→ナノスケールのシミュレーション法 ①炭素系

C₆₀薄膜へのイオン衝突過程(classical) 炭素ナノ粒子の超高速衝突(classical)

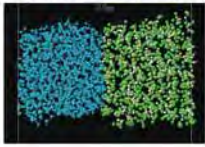
炭素クラスター成長のシミュレーション(TBMD) 高温引張下におけるカーボンナノチューブの超塑性挙動(classical)

2009.01.08

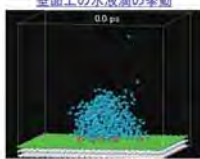
CRDS 京都大学・ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

・分子動力学法
→ナノスケールのシミュレーション法 ②水、溶液

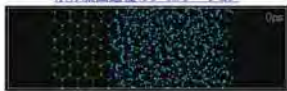
水-アルコールの混合過程



壁面上の水液滴の挙動



水の凝固過程のシミュレーション



2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 5

2.その主な特徴は何ですか。

利点:

- ・ナノ秒～マイクロ秒スケール and/or 数百万～数千万原子レベルでの非平衡の動的挙動の解析が可能。

課題:

- ・経験的ポテンシャルによるモデリングでは、多くの場合、電子状態の変化を反映しない。
- ・分子レベルの解析法としては原子数、時間スケールで最多、最長レベルのものが扱えるが、依然として実時間、空間スケールとは隔たりがある。

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 6

3. このWSのキーワードを組み合わせ、どのような研究開発課題を推進したいと考えますか。

キーワード: 転移、界面、実プロセス、動的観測、動的モデリング、ミクロレベル、ナノレベル、微・分子レベル

- ・界面の接触に際する非平衡過程の動的モデリング
- ・原子・分子レベルの振る舞いがマクロスケールの動的な実挙動に及ぼす影響のモデリング

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 7

マクロスケール (流体力学、機械系の視点)

分子スケールで見ると... (化学系の視点)

対象を巨視的にとらえ、基本的に空間微分可能な連続体と考える。

それ以上分割できない分子が存在し、その集団としてのふるまいが連続体挙動として現れる。

液液界面接触

液液接触時、即ち時間ゼロで、ステップ関数的な物理量の分布が、拡散混合と対流混合により時間的、空間的に連続的な関数として変化。この物理量の分布が駆動力

異なる分子で構成される集団が、非平衡な接触状態から平衡状態に向けて、結合を組み替えて行く。

物理量: 密度、濃度、表面張力、粘性、拡散係数、etc.

固液界面接触

表面エネルギーの静的バランス

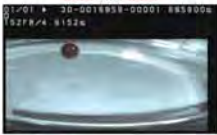
ファンデルワールス力、クーロン力、分子の配向の変化、etc. (少なくとも1パラメータでは無い)

→Youngの式に基づく接触角の1パラメータ

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 8

液滴液膜衝突過程 [大日本印刷㈱提供]

water onto water



IPA (isopropyl alcohol) onto water



toluene onto water



親水性、疎水性、分子配向、密度差、表面張力差、粘性→ Key Factorは一体??

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 9

液滴の固体面接触挙動の違い [大日本印刷㈱提供]



水は一度弾かれている??

Youngの式に基づく「接触角」の1パラメータで、そもそもクーロン力の影響を大きく受ける水の動的接触現象が説明できるか??



2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 10

液滴液膜衝突過程のマクロスケールシミュレーション



親水性・疎水性・分子配向、密度差、表面張力、粘性→ Key Factorの特定

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 11

SPH法 (Smoothed Particle Hydrodynamics)

カーネル関数により表現される、広がりのある物理量の情報を持つ有限個の疑似粒子の集団として連続体である流体を表現する

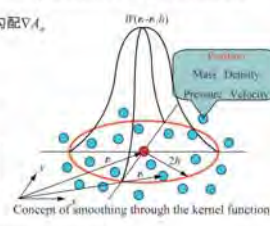
C_f : 無限個のデルタ関数による空間表現

u の位置における物理量 A_i とその勾配 ∇A_i

$$A_i = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} W(r_{ij} - r_i, h)$$

$$\nabla A_i = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} \nabla W(r_{ij} - r_i, h)$$

Ex. 密度: $\rho_i = \sum_j m_j W(r_{ij} - r_i, h)$



Concept of smoothing through the kernel function.

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 12

カーネル関数

3D cubic smoothing kernel

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi h^3} \begin{cases} 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{h} \right)^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{r}{h} \right)^3 & 0 \leq r \leq h \\ \frac{1}{4} \left(2 - \frac{r}{h} \right)^3 & h \leq r \leq 2h \\ 0 & 2h \leq r \end{cases}$$

Smoothing length

- Smoothing length: $h = 1.3s_0$ (s_0 : Initial particle separation)
- Long smoothing length: $H = 1.5h$
- Pressure and viscous term: $W(r, h)$
- Surface tension term: $W(r, H)$

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

13

支配方程式

$$\text{Navier-Stokes方程式: } \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \nabla^2 v + f$$

SPH粒子の運動方程式

$$\frac{dv}{dt} = -\sum_s m_s \left(\frac{P_s}{\rho_s^2} + \frac{P_s}{\rho_s^2} \right) \nabla_s W_{ss}^h + \sum_s m_s \left(\frac{\mu_s}{\rho_s^2} + \frac{\mu_s}{\rho_s^2} \right) \nabla_s (r_{ss} \cdot \nabla_s W_{ss}^h) + r_{ss} (\nabla_s \cdot \nabla_s W_{ss}^h) + \frac{a}{r_{ss}^2} + g$$

$$\text{密度: } \rho_s^h = \sum_s m_s W_{ss}^h \quad \text{圧力: } P = P_s \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^{\gamma} - 1 \quad \rho_s = \frac{\rho_s^h}{\rho_s^0} = \frac{100 \rho_s^h}{\rho_s^0}$$

表面張力項

$$a_s = \sum_s m_s \left(\frac{r_{ss}}{\rho_s^h} + \frac{r_{ss}}{\rho_s^h} \right) \nabla_s W_{ss}^h \quad \text{表面張力テンソル: } T_{ss} = \alpha \sigma_m (\delta_{ss} - \hat{n}_s \hat{n}_s)$$

$$\text{カラー関数: } c_s = \sum_s \frac{m_s}{\rho_s^h} W_{ss}^h \quad \text{法線ベクトル: } n_s = \sum_s \frac{m_s}{\rho_s^h} (c_s - c_s) \nabla_s W_{ss}^h$$

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

14

表面張力項

- 表面張力テンソル $T_{ss} = \alpha \sigma_m (\delta_{ss} - \hat{n}_s \hat{n}_s)$

- 表面張力項 $(a_s)_i = \sum_s m_s \left(\frac{r_{ss,i}}{\rho_s^h} + \frac{r_{ss,i}}{\rho_s^h} \right) \nabla_s W_{ss}^h$

- カラー関数 $c_s = \sum_s \frac{m_s}{\rho_s^h} W_{ss}^h$

- 法線方向 $n_s = \sum_s \frac{m_s}{\rho_s^h} (c_s - c_s) \nabla_s W_{ss}^h$

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

15

計算条件

Impact velocity, U_0 (m/s) (corresponding to free falling height)	2.42 (30mm), 3.13 (50mm)
Film thickness, F (mm)	10
Density, ρ (kg/m ³)	1100
Viscosity, μ (mPa·s) (water + glycerol mixture)	3.5
Surface tension coefficient, σ (N/m)	0.070
Droplet diameter, d (mm)	3.75
Calculation region, $X \times Y$ (mm ²)	40 × 40
Number of particles	1,200,000

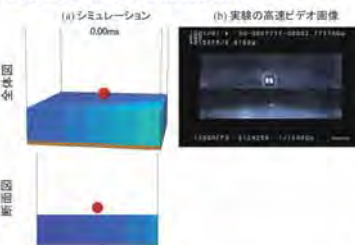
Parallel coding (Library: MPICH2)

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

16

シミュレーションと実験の比較

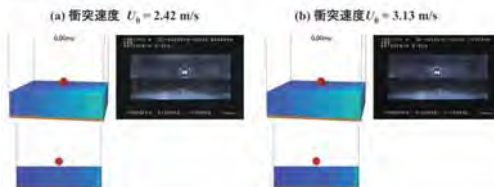
Impact velocity $U_0 = 3.13$ m/s, film thickness $F = 10$ mm.

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

17

衝突速度の影響



いずれも時間、空間スケールで一致

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

18

定量的比較

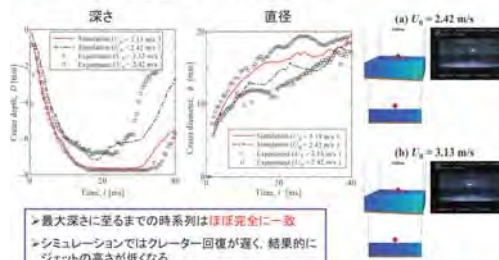


2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」

19

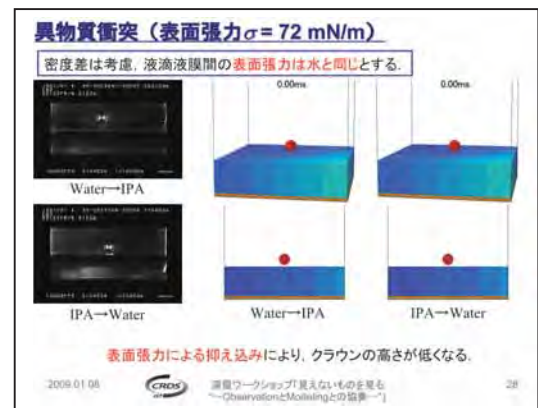
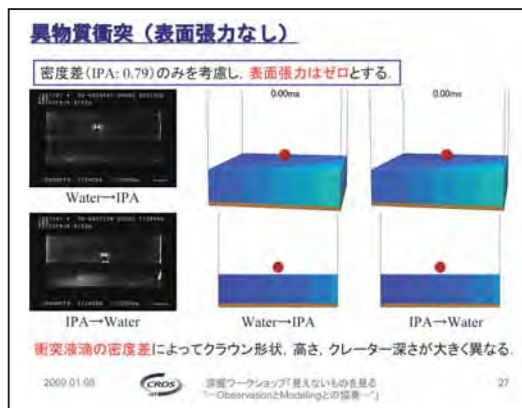
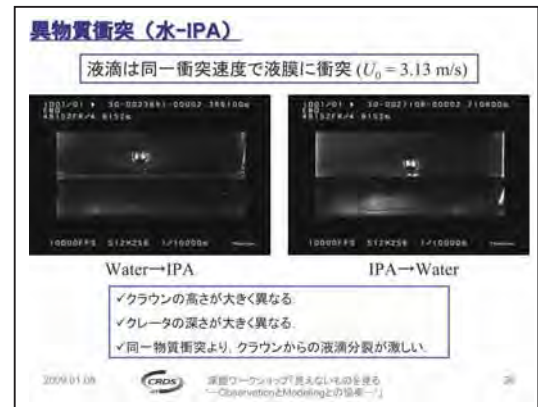
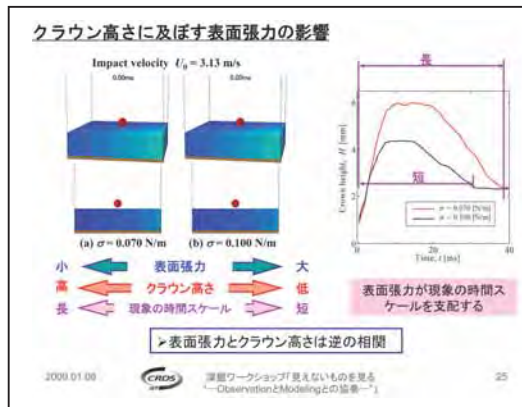
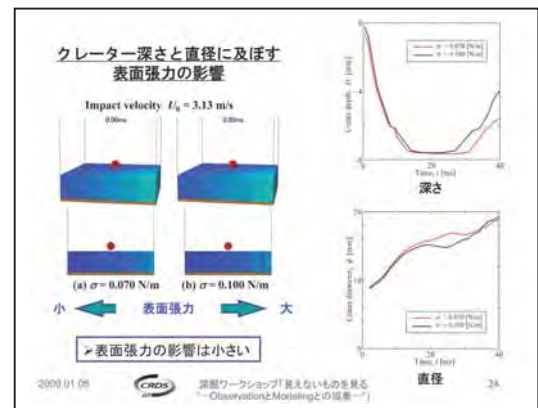
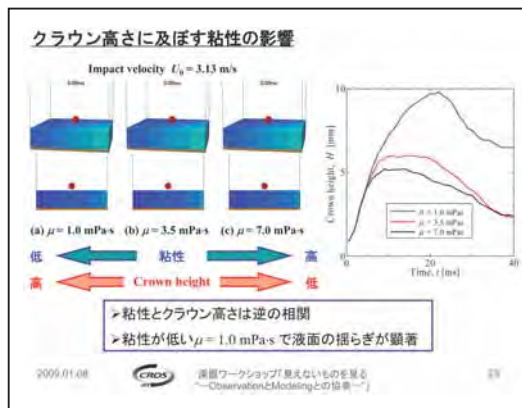
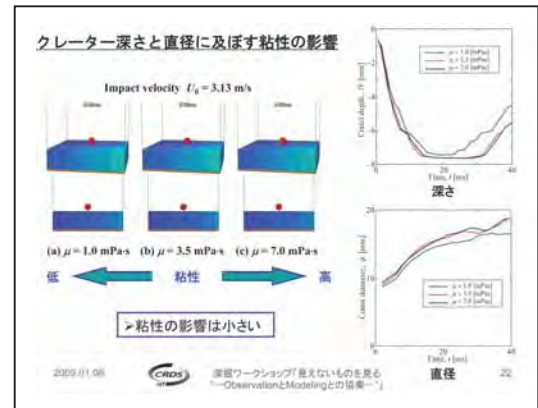
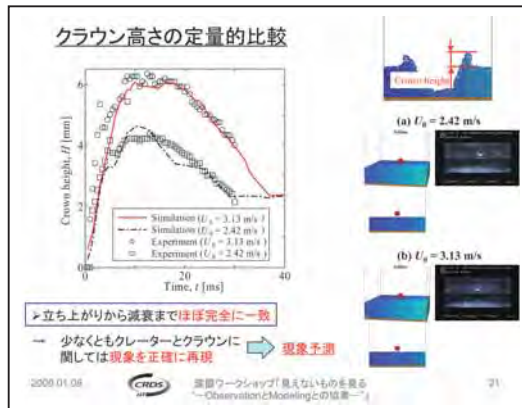
クレーター深さと直径の定量的比較

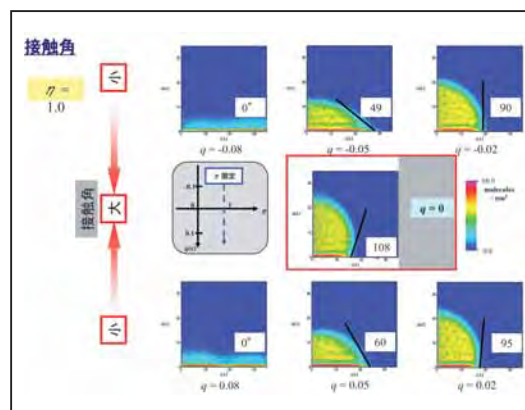
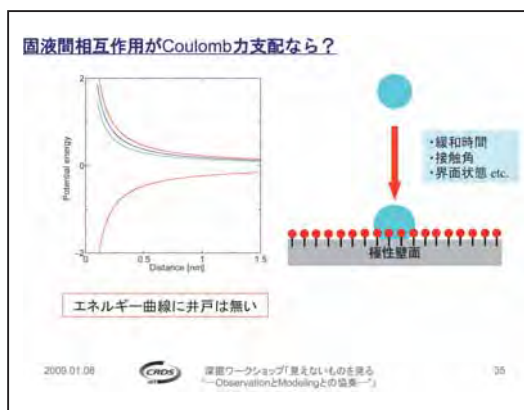
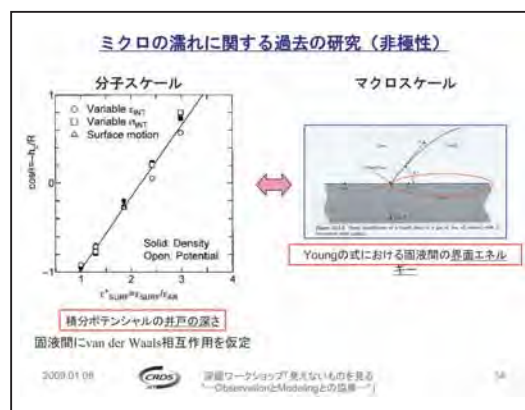
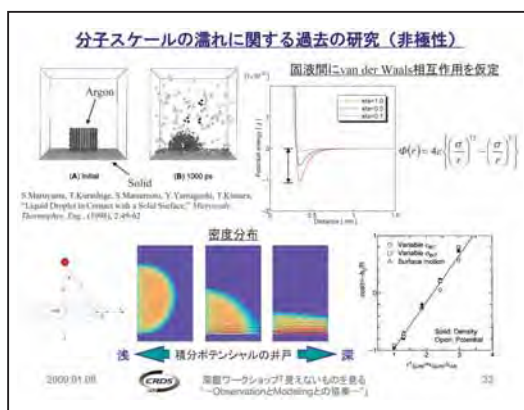
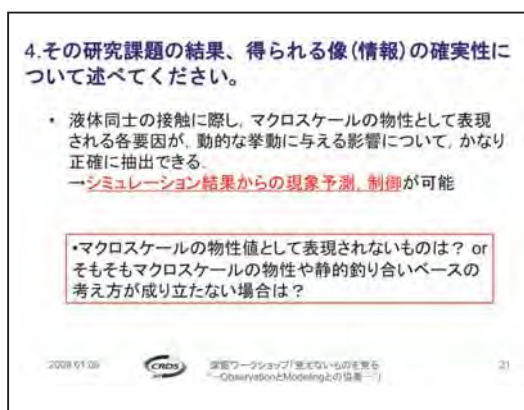
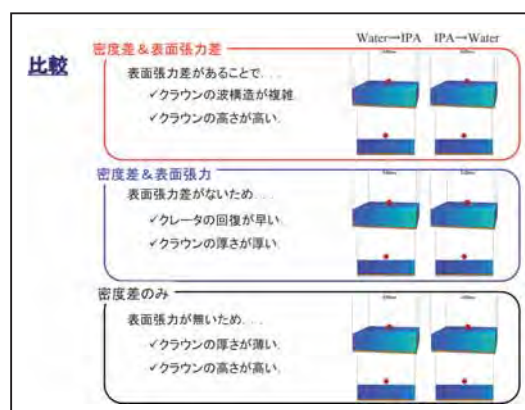
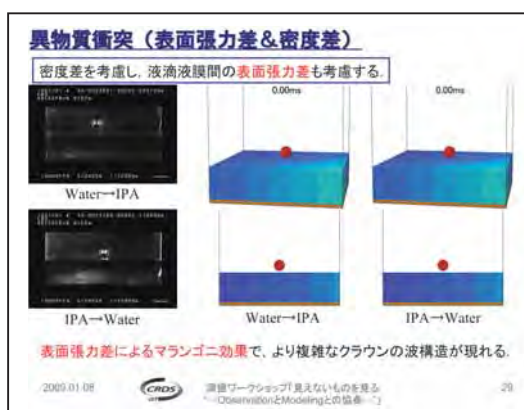


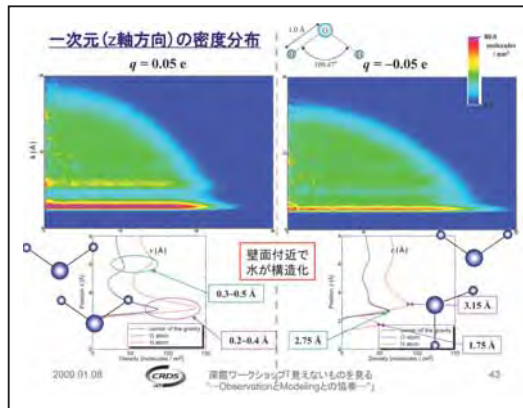
2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る
— ObservationとModelingとの協奏 —」 Time profile of the crater diameter.

20







4.その研究課題の結果、得られる像(情報)の確実性について述べてください。

- ・ マクロスケールの物性が現れる分子スケールのメカニズムを明らかにすることで、アクティブな現象制御の可能性が開ける。
- ・ 「構造変化」とそれに要する「緩和時間」の概念を導入可?

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」 45

[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix

2. 4. 高分子溶液などのラマン計測で把握できる分子・格子レベルの情報と動的物性指標との高い相関性紹介 ― 最先端ラマン分光法の高感度高速性の紹介と応用展開例 ―

■小名 俊博（九州大学大学院農学研究院 森林資源科学部門 准教授）

要 旨

ラマン分光測定装置は、高い空間分解能を持ち、前処理や調整をほとんど行わずに試料の構造的特徴と分極状態を測定できる。また、時間分解ラマン分光装置を用いれば、ピコ秒（ps； 10^{-12} 秒）からフェムト秒（fs； 10^{-15} 秒）という高速で動的な構造変化情報が得られる。この装置を用いて、ナノレベルの動的現象観測を行い、高分子の実プロセスを模した界面形成や相転移などの研究を推進したい。さらに、多変量解析（人工知能）を用いてラマンスペクトルデータを動的にモデリングし、高分子の実プロセスの作用機構解明を、エンドプロダクトである製品までつなぐ研究開発を推進したい。

資 料

高分子溶液などのラマン計測で把握できる
分子・格子レベルの情報と動的物性指標との
高い相関性紹介

最先端ラマン分光法の高感度高速性の紹介と
応用展開例

九州大学大学院 小名 俊博

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る ― ObservationとModelingとの協奏 ―」

1. ご専門とする研究分野で用いている手法は何ですか。

- ・ ラマン分光法ー計測
- ・ 多変量解析(人工知能)ーモデリング

計測 モデリング



2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る ― ObservationとModelingとの協奏 ―」

2. その主な特徴は何ですか。

ラマン分光法

- ・ 水に影響されない
- ・ 不均一な試料の測定が容易である
- ・ 試料の構造的特徴の測定が容易
- ・ 3 km程度の光シグナル送信が可能
- ・ 複数に一台の分光計で対応可能
- ・ 高分解能
- ・ 迅速な測定(数秒から数分)
- ・ 時間分解測定が可能(数フェムト秒まで)

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る ― ObservationとModelingとの協奏 ―」

2. その主な特徴は何ですか。

ラマン分光法

- 石油精製プラント
精製度、オクタン価、硫黄含有量
- ポリマー合成プラント
官能基導入率(反応率)、結晶化度、ブレンド率
- 半導体製造プラント
シリコンウェハーの欠陥チェック
- 錠剤製造プラント
不純物チェック

2009.01.08 CRDS 深層ワークショップ「見えないものを見る ― ObservationとModelingとの協奏 ―」

2. その主な特徴は何ですか。

多変量解析(人工知能)

- 統計とコンピュータの使用を前提として、複数の変数に関するデータをもとにして、これらの変数間の相互関連を分析する統計的技法の総称
- 予測式(関係式)の発見
- 量の推定
- 標本の分類
- 質の推定
- 多変量の統合整理(減らす)
- 変数の分類
- 代表変量の発見

2009.01.08



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

5

2. その主な特徴は何ですか。

多変量解析(人工知能)

- データマイニング(データベース技術+機械学習)
- ニューラルネットワーク
- 画像認識(画像理解+画像処理)
- 感性処理
- 進化的計算(遺伝的アルゴリズム+群知能)

2009.01.08



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

6

自動車用水系塗料の粘度



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

水系塗料の粘度

塗料は物質の上をコーティングすることによって、非常に多くの性能を請け負う物質である。

また、環境下での使用において、構造が変化するため、構造分析においては組成分析技術のみでなく、環境因子による変化情報も必要になる。

そこで本研究は、近赤外 FT-Raman 分光法と多変量解析を組み合わせた手法で、有機溶媒を大気放出せず環境に好ましい水性塗料の物性、特に粘度についての検討を行った。



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

基本組成

Resin	Poly- styrene	Polymethyl- methacrylate	n-Butyl acid	2-Hydroxy- ethyl methacrylate	6-Hexa- del diacrylate	Acetic Acid	Ethylene glycol butyl ether	Propylene glycol butyl ether	2-Ethyl alcohol	Solid content / %
WSA-1	5	40	25	25	5	20	41.1	—	—	22
WSA-2	40	5	25	25	—	9	25	41.1	—	22
L-1	5	40	30	15	4	1	—	—	—	30
L-2	40	5	35	15	4	1	—	—	—	30
MFR	—	—	—	—	—	—	—	—	20	80

WSA: Water soluble acrylics, L: Latex, MFR: Melamine formaldehyde resin



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

試料

Sample	Average / mPaS	Standard deviation / mPaS	Minimum / mPaS	Maximum / mPaS
All (n = 50)	120.2	110.1	18.0	372.6
A series: WSA-1 + L-1 + MFR (n = 14)	158.8	78.7	43.9	289.2
B series: WSA-1 + L-2 + MFR (n = 12)	128.1	149.9	16.0	372.6
C series: WSA-1 + L-2 + MFR (n = 13)	111.5	128.7	17.9	361.2
D series: WSA-2 + L-1 + MFR (n = 11)	72.6	45.0	22.9	144.0

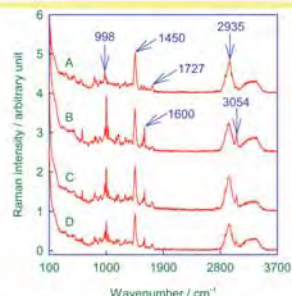
WSA: Water soluble acrylics, L: Latex, MFR: Melamine formaldehyde resin

Viscometer: E-type viscometer VISCONIC ED
Temp: -22°C



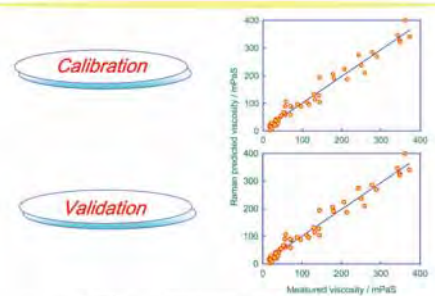
深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

ラマンスペクトル



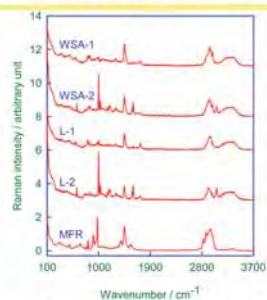
深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

検量と検定



深層ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

基本組成のラマンスペクトル



深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

基本組成のラマンスペクトル

Raman shift (cm⁻¹)	WSA-1	WSA-2	L-1	L-2	MFR	Possible assignment
343	w	w	w	w	nd	C-C skeletal vib. of aliphatic chains n=3-12 in poly(methylmethacrylate)
909	m	s	m	s	nd	C-H in-plane def vib. of benzene ring in polystyrene
1003	m	s	m	s	nd	C-H in-plane def vib. of benzene ring in polystyrene
1458	s	m	s	m	s	CH ₂ CH ₂ def vib. in poly(methylmethacrylate) and in MFR
3278	s	m	s	m	w	OH str vib. of hydrogen bonding (intermolecular) and of water in dilute solution
3299	s	m	s	m	w	OH str vib. of associated carboxylic acids
3302	s	m	s	m	w	OH str vib. of hydrogen bonding (intermolecular) and of water in dilute solution
3302	s	m	s	m	w	OH str vib. of associated carboxylic acids
3305	s	m	s	m	w	OH str vib. of hydrogen bonding (intermolecular) and of water in dilute solution
3305	s	m	s	m	w	OH str vib. of associated carboxylic acids
3325	s	m	s	m	w	OH str vib. of hydrogen bonding (intermolecular) and of water in dilute solution

WSA: Water soluble acrylics, L: Latex, MFR: Methylene formate/methyl methacrylate resin, S: strong, m: medium, w: weak, nd: not detected, str: stretch, vib: vibration

深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

時間分解ラマン分光法

時間分解ラマン→
超高速現象の観察・・・超高速？

普通認識する最も短い時間・・・瞬→まばたき

10分の1秒程度

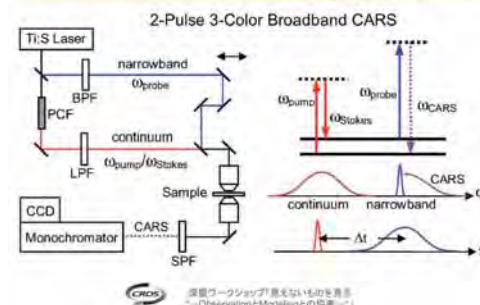
超高速現象・・・ピコ秒(10^{-12} 秒)からフェムト秒(10^{-15} 秒)の世界

・ピコ秒、フェムト秒単位でのラマンシフトの観察

深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

時間分解ラマン分光法のシステム例

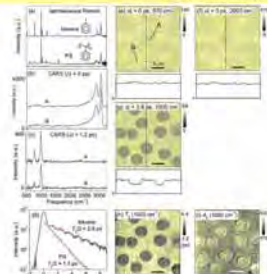
Lee et al. Appl. Phys. Lett. 92, 041108 (2008)



深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

時間分解ラマン分光法の結果例

Lee et al. Appl. Phys. Lett. 92, 041108 (2008)



深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

3. このWSのキーワードを組み合わせ、どのような研究開発課題を推進したいと考えますか。

(キーワード: 転移、界面、実プロセス、動的観測、動的モデリング、ミクロレベル、ナノレベル、量子・分子レベル)

- 動的現象の観測をナノレベルで可能にする時間分解ラマン分光装置を用い、高分子の実プロセスを模した界面や分子の転移などの研究開発を推進したい。
- さらに、得られた結果を多変量解析(人工知能)を用いることによる動的モデリングから、高分子の実プロセスの作用機構解明を、エンドプロダクトである製品まで含めて行う研究開発を推進したい。

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

19

4. その研究課題の結果、得られる像(情報)の確実性について述べてください。

- 実プロセスを模することにより、また各パラメーターを変え検討することにより、得られる情報は確実になると考えられる。

2009.01.08

深層ワークショップ「見えないものを見る」
— ObservationとModelingとの協奏 —

19

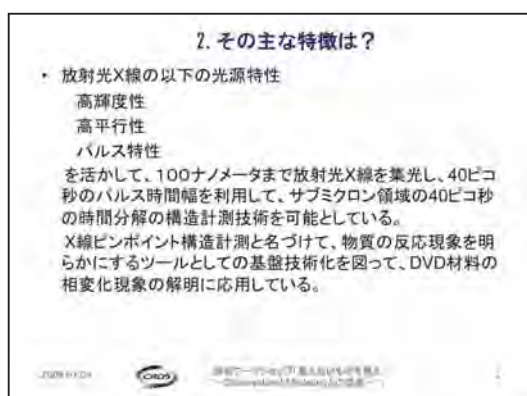
2. 5. 先端放射光構造計測の可能性 To see invisible.

■高田 昌樹（理化学研究所 播磨研究所 高田構造科学研究室 主任研究員）

要 旨

今や放射光X線は、非常に精度が高く、非常に小さく、非常に速く現象を捉える、ナノビームの領域に入っている。空間分解能100 nm（将来的には20 nm）、時間分解能40ピコ秒（ps； 10^{-12} 秒）という定量的なビームを用いて、X線ピンポイント構造計測が可能となった。これにより、アモルファスから結晶への相変化現象、光励起現象、単結晶の形成過程の構造解析などが可能になっている。X線データから単に配向などの構造パラメータを示すだけでなく、界面構造や階層構造において原子・分子レベルのダイナミクスが計測できれば、より正確なシミュレーションで構造の動的モデルを実空間で映像化することが期待できる。また、深さ分解XAFS法を用いて、原子・電子構造の深さ方向（3-5 nm）の情報を、原子層分解能で直接的に解析することが可能になった。

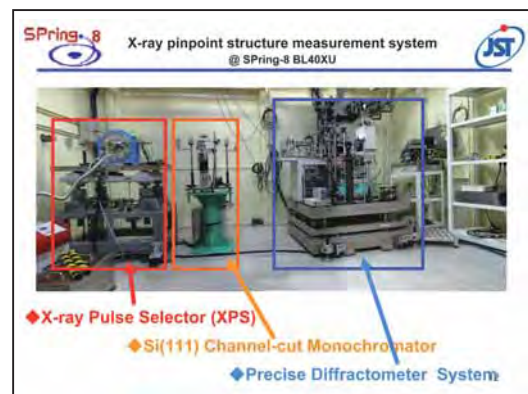
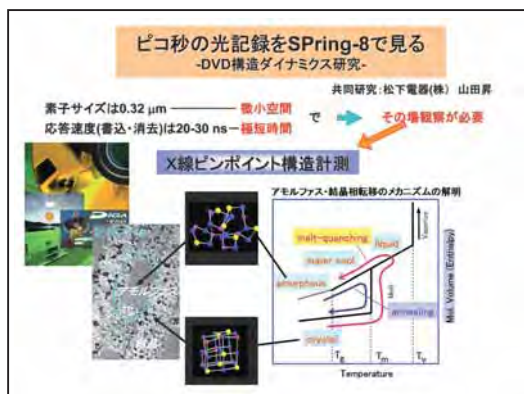
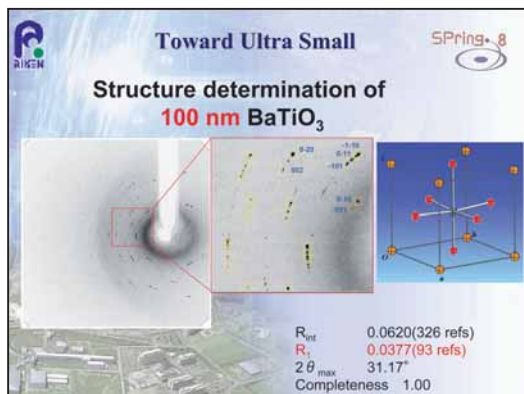
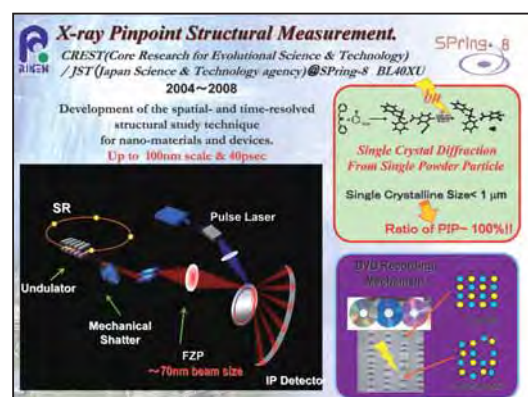
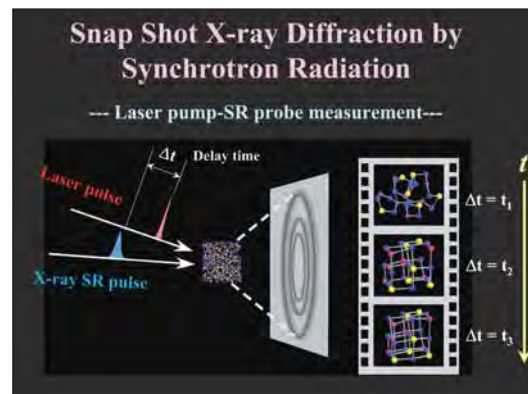
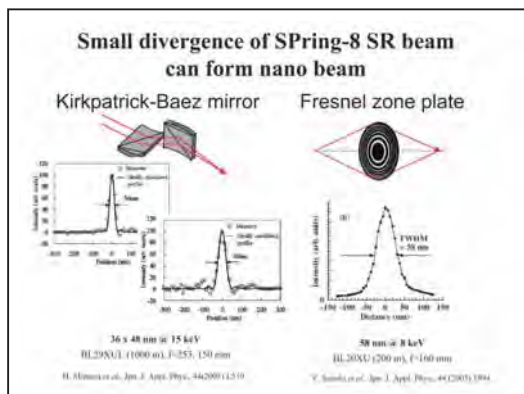
資 料

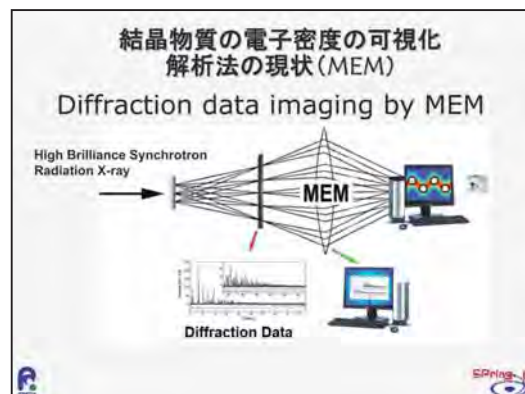
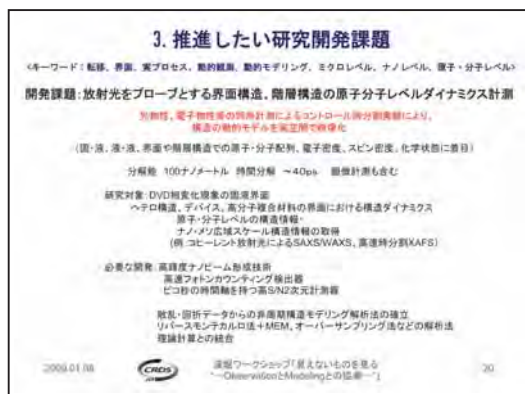
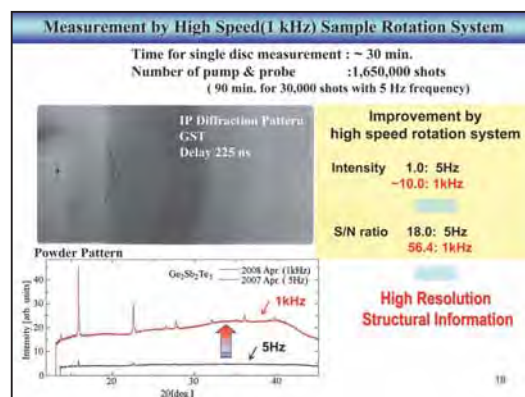
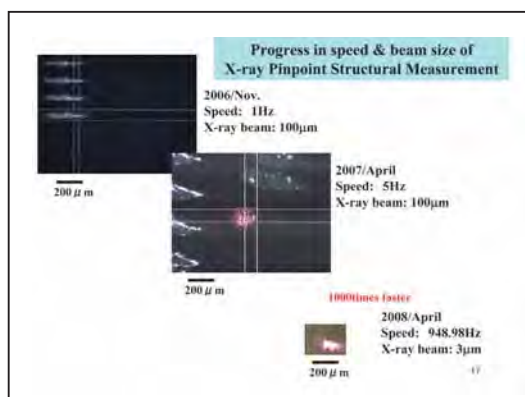
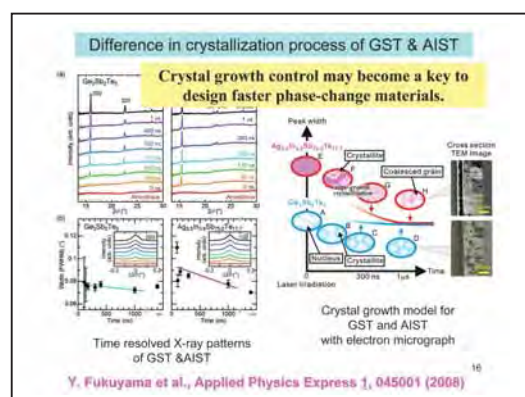
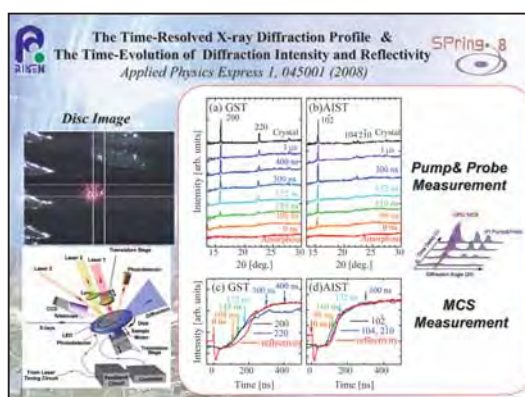
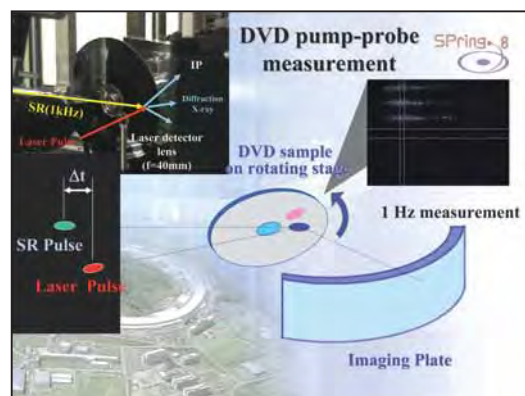
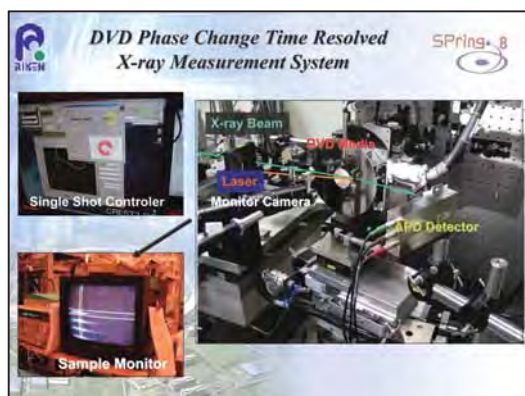


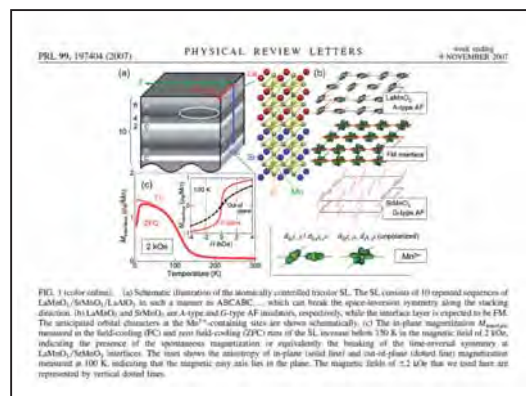
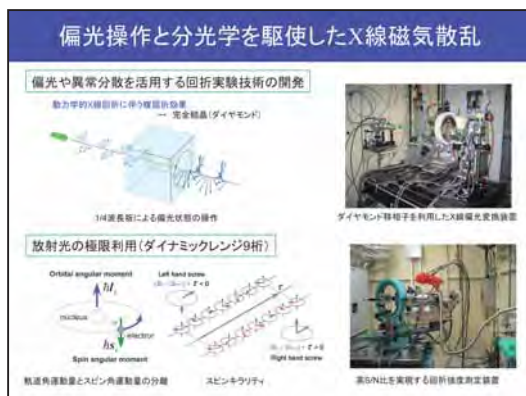
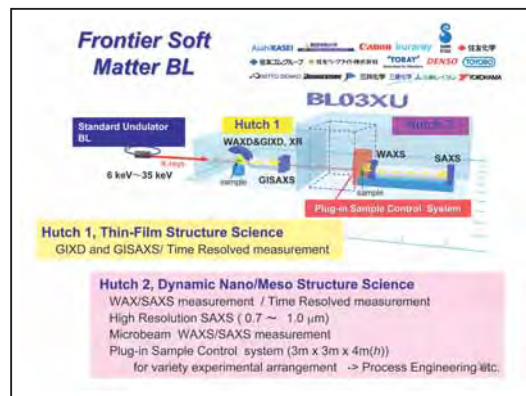
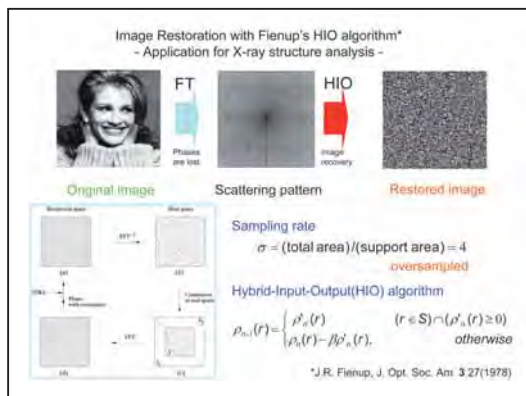
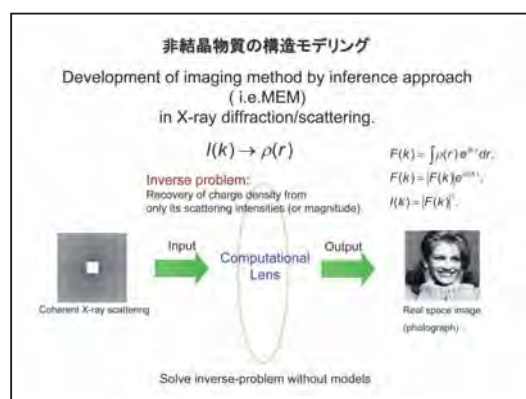
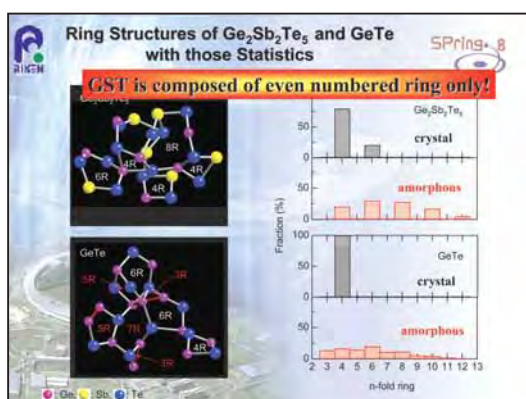
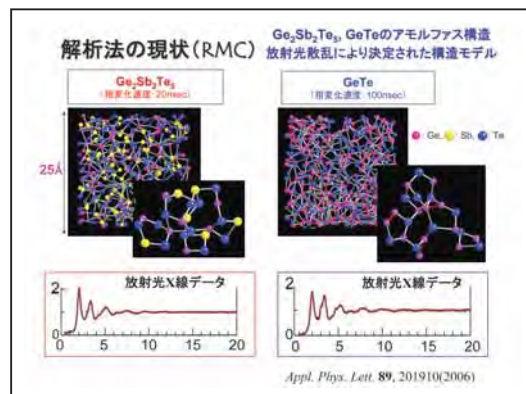
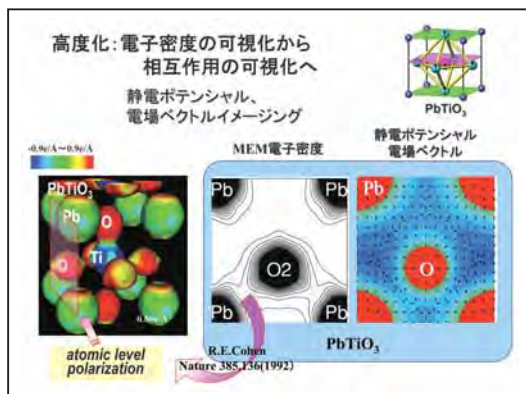
[1] ワークショップの概要

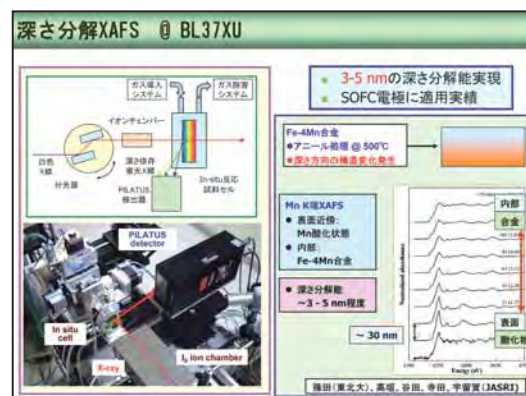
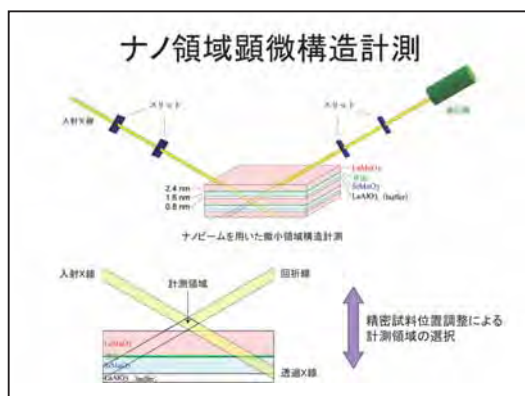
[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix









4. その研究課題の結果、得られる像(情報)の確実性

構造物性相関研究：原子レベルまでは可能
電子レベル(密度・静電ポテンシャル・スピン密度)
の解明へは、さらに高い輝度の
コヒーレントな新しい光源が必要か。

深さ方向の界面構造の顕微計測
深さ方向の極局所構造計測
100nm 領域で 40ps で可能
深さ方向は 3-5 nm

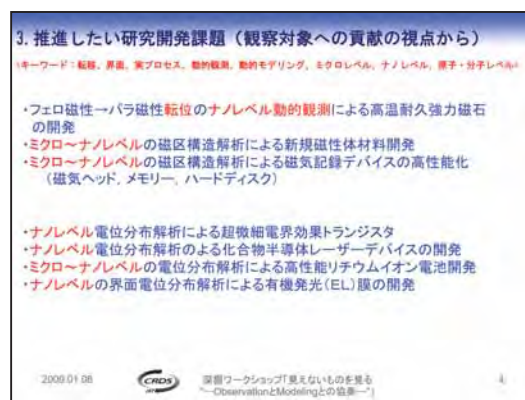
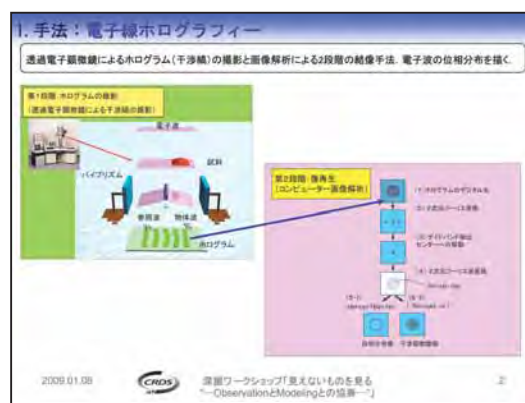
2. 6. 電子線ホログラフィによるミクロ～ナノ領域の電場・磁場の観察 ～電氣的・磁氣的機能の直視～

■平山 司（ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 所長代理 主幹研究員）

要 旨

透過電子顕微鏡による電子線ホログラム（干渉縞）技術で、フーリエ変換を中心にした画像解析を用いて、コンピュータ上で位相分布像を再生する。これにより、ミクロ～ナノの電場、磁場を直接観察することが可能である。多くの電氣的・磁氣的な機能を利用した材料やデバイスの開発に非常に役立ち、ドーパントの分布解析や有機ELの品質管理などで利用されている。誘電体や磁性等の基本的な計算が第一原理計算でできるようになってきたため、電子線ホログラフィ観測と第一原理計算との連携が期待できる。モデリングにより材料の構造・機能を予測する手法と顕微鏡による観測がうまくつながって、新しい材料科学が進展することが重要である。

資 料



高温耐久性超強力磁石の開発

【研究目的】 高温でも磁力低下の少ない高性能磁石を開発する。

【開発方法】 逆磁場の発生源を特定し、発生源を生じないプロセスを設計。

【製品】 強力モーター

自動車用強力磁石 (ハイブリッド車のモーター等)

- ・高温耐久性のある磁石
- ・自動車の軽量化
- ・低燃費化

電子線ホログラフィーによる磁石微粒子の磁力線 (磁力線を可視化することができる)

高温での磁力劣化のメカニズム

逆磁場発生源 (前出物など)

磁力劣化の始まり - 逆電場の発生

○ spherical particle
○ uniform magnetization

Phase distribution outside ($\sqrt{x^2 + y^2} \geq a$)

$$\phi_{\text{outside}}(x, y) = -\frac{4\pi}{3} \frac{ca^3 Is}{h} \frac{y}{x^2 + y^2} \cos \theta$$

inside ($\sqrt{x^2 + y^2} \leq a$)

$$\phi_{\text{inside}}(x, y) = -\frac{4\pi}{3} \frac{ca^3 Is}{h} \frac{y}{x^2 + y^2} \left[1 - \left\{ 1 - \frac{1}{a^2} (x^2 + y^2) \right\}^{3/2} \right] \cos \theta$$

T. Hirayama, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 34 (1995) 3294

a b

Experimental Simulated

magnetic flux distribution of single-domain barium ferrite particle

T. Hirayama, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 34 (1995) 3294

Modeling for calculation of magnetic images

Yamamoto et al.

Q. P-N接合部の電位差計測は産業的に役に立つの？
A. Yes! 横方向の不純物拡散を見ることができる。

ゲート

ソース As ドレイン As

B : $10^{15}/\text{cm}^2$

(a) 1 μm

n As p As n

(b) 1 μm

3. 推進したい研究開発課題 (手法の視点から)

(キーワード) 転写、集積、実プロセス、動的観察、動的モニタリング、ミクロレベル、ナノレベル、電子・分子レベル

材料・デバイス解析への応用展開

半導体内不純物分布の2次元解析
磁性体微小磁区構造の解析

リアルタイム化
ダイナミックデジタル電子線ホログラフィーシステム

高精度高感度化
位相シフトホログラフィー

3次元観察
電子線トモグラフィックホログラフィー

基礎的電子線ホログラフィー技術

2009.01.08

リアルタイムデジタル電子線ホログラフィーシステムの概念図

ホログラフィー電子顕微鏡 動画再生コンピュータ

Electron source
Condenser lens
Objective lens
Specimen
Aperture
Hologram
TV Camera

動画ホログラム 動画再生像

2009.01.08

CRDS

深堀ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 —」

11

パーマロイ薄膜磁壁の動的観察

a a' b b' c c'

(a) $H=0$ A/m,
(b) $H=1600$ A/m,
(c) $H=0$ A/m

4. 得られる像(情報)の確実性：
～原理がはっきりしており非常に確実～

Schrödinger equation

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla^2 + eA(r)^2 \right\} \psi(r) = E \psi(r)$$

$$\psi(r) = A(r) \exp i \{ k \cdot r + \phi(r) \}$$

$$E = \nabla V(r) = i \frac{\partial}{\partial x} V(r) + j \frac{\partial}{\partial y} V(r) + k \frac{\partial}{\partial z} V(r)$$

$$B = \text{rot}(A(r))$$

$$= \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) i + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) j + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) k$$

2009/01/08



課題「フーリエ変換」見えないものを見る
～「ObservationとModelingとの協奏～」

13

4. 得られる像(情報)の確実性：
～原理がはっきりしており非常に確実～

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla^2 + eA(r)^2 \right\} - eV(r) \right\} \psi(r) = E \psi(r)$$

Solving the equation using

- WKB approximation
- Assumption that $E_{\text{scat}} \gg eV$

Phase shift by electric potential $\Delta\phi = \frac{\pi}{\lambda E} \int V(x, y, z) dz$

Phase shift by magnetic flux $\Delta\phi = -\frac{e}{\hbar} \int B(x, y, z) \cdot dS$

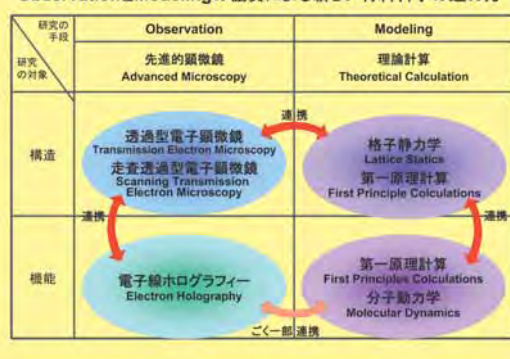
2009/01/08



課題「フーリエ変換」見えないものを見る
～「ObservationとModelingとの協奏～」

14

ObservationとModelingの協奏による新しい材料科学の進め方



2. 7. 界面元素の可視化と材料設計への展開

■幾原 雄一（東京大学 東京大学大学院工学系研究科 総合研究機構 教授）

要 旨

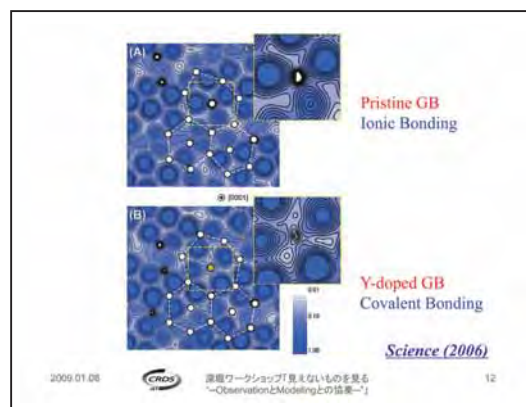
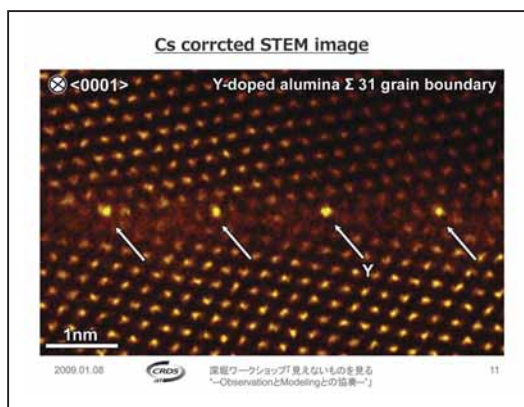
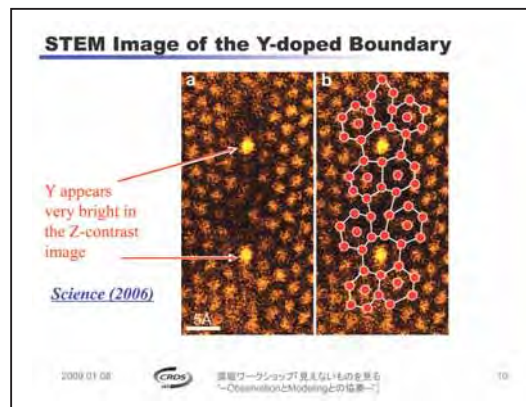
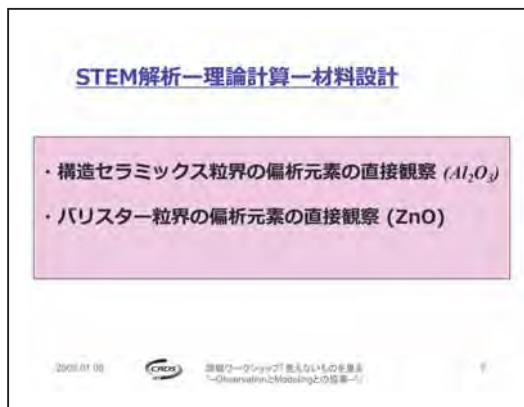
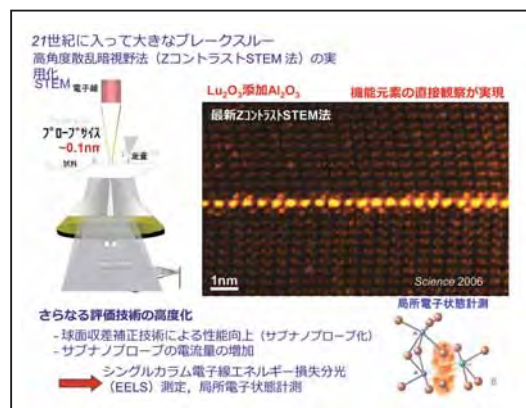
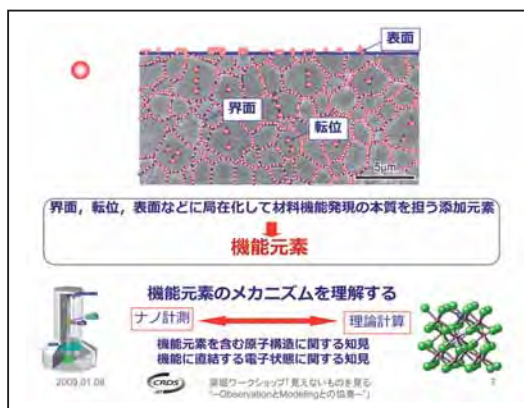
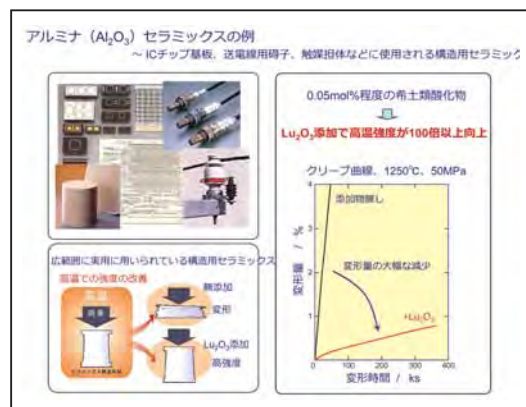
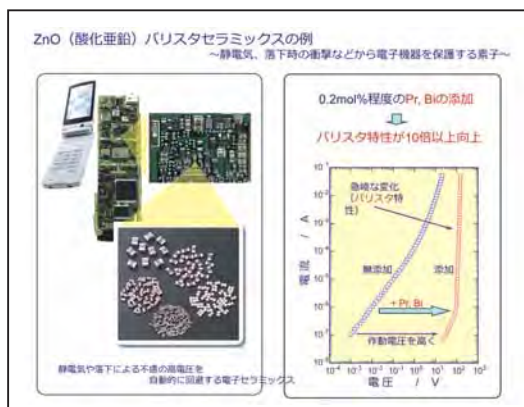
微小なドーパントは界面、転移、表面などに局在化して、材料機能発現の本質をドラスティックに制御しており、材料設計にはこの機能元素のメカニズムを理解することが必要不可欠である。球面収差補正技術を用いた高角度散乱暗視野法（通称Zコントラスト）により、今や単一原子カラムごとの原子・電子構造分析が可能なレベルに到達しつつある。ナノ計測技術によってもたらされた情報と、第一原理計算などの理論計算とが連携することにより、界面を制御した材料設計が可能となるだろう。また、このようなスタティックな解析方法の次なるステップとして、応力・腐食化、温度・雰囲気などをトータルした環境下で材料特性・材料プロセスをみる動的計測技術が必要である。

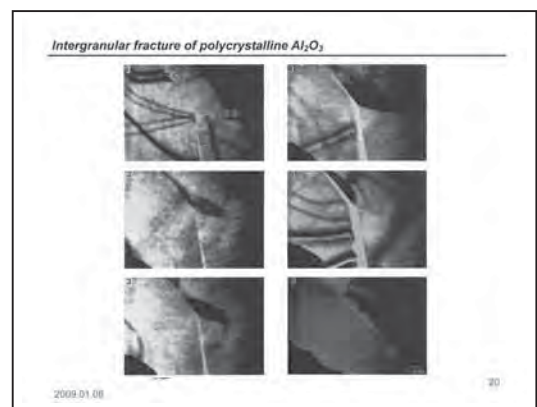
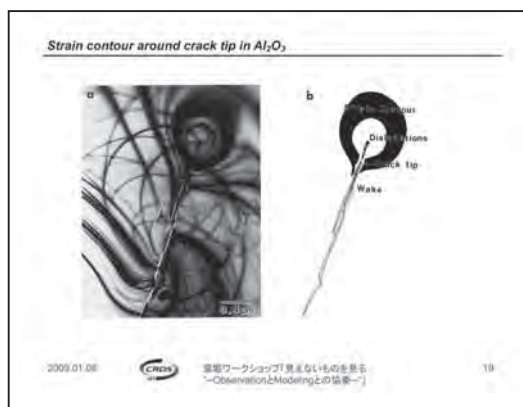
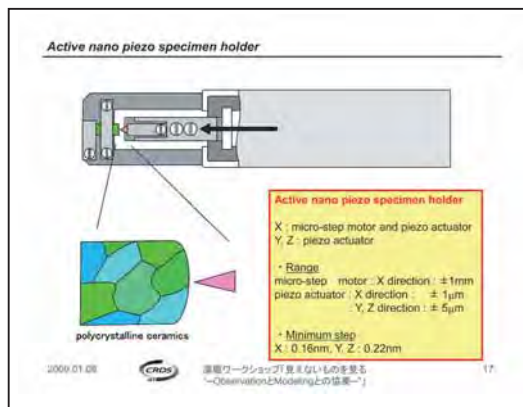
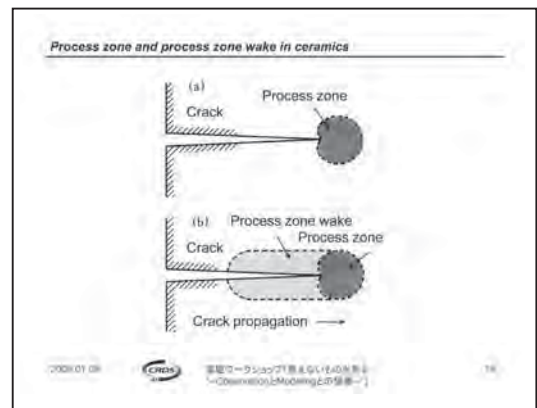
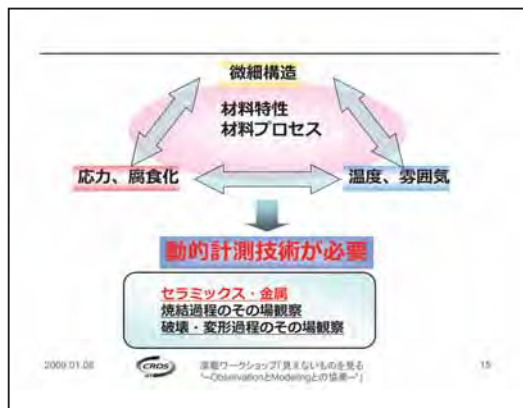
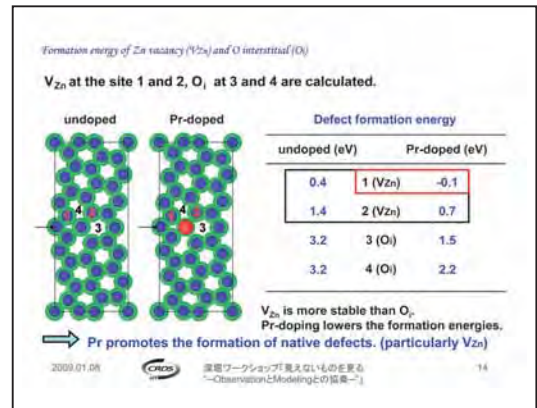
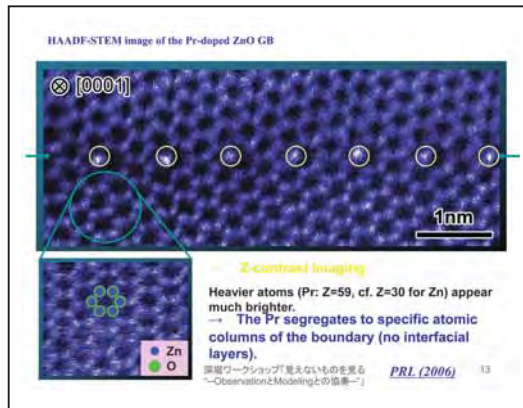
資 料

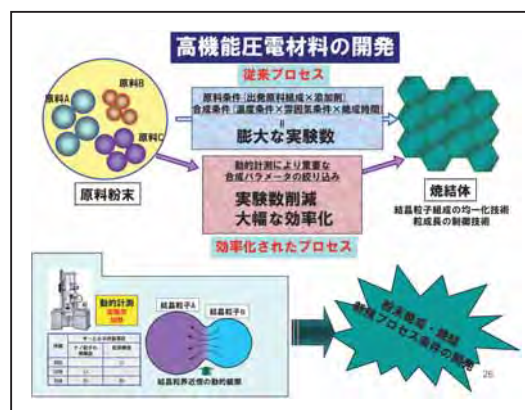
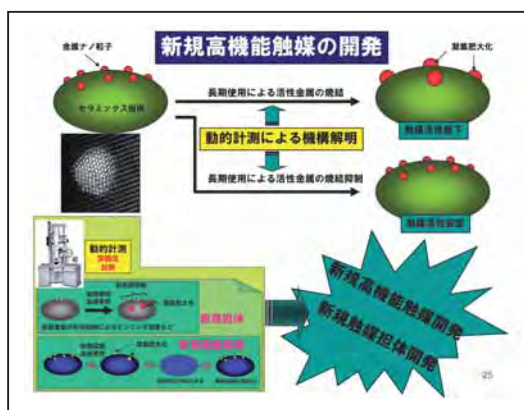
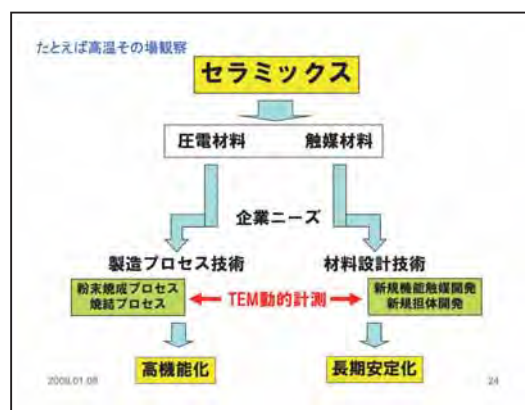
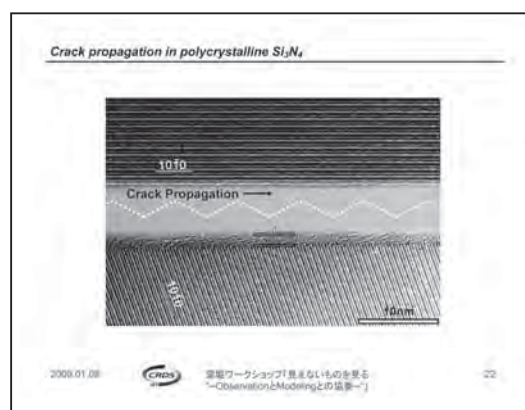
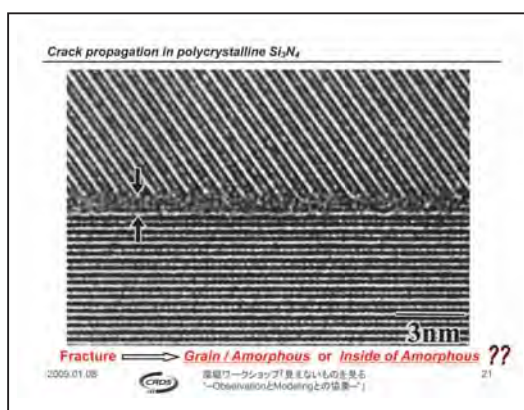
[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix







END

2009.01.08

 深層ワークショップ「見えないものを見る
～ObservationとModelingとの協奏～」

29

4. その研究課題の結果、得られる像(情報)の確実性について述べてください。

- ・ 原子カラムの可視化(0.1nm分解能)
- ・ 微小領域の組成および状態分析(0.1nm分解能)

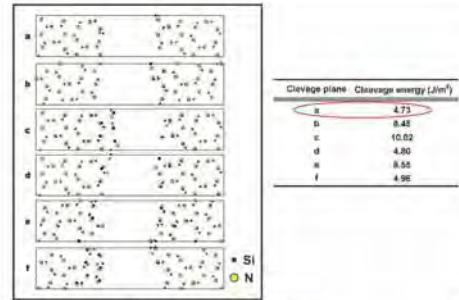
2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

29

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4



2009.01.08

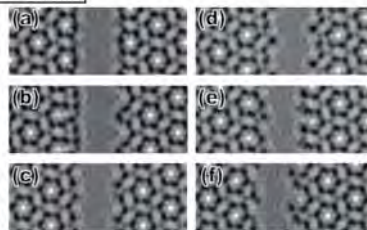


演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

30

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4

Relaxation model



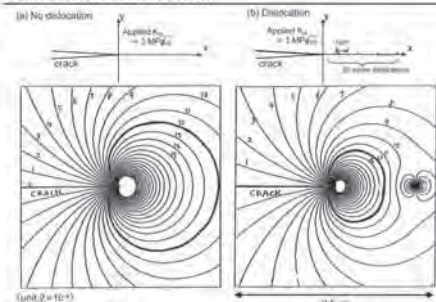
2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

31

Strain distribution around a crack



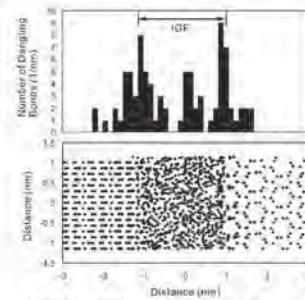
2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

32

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4



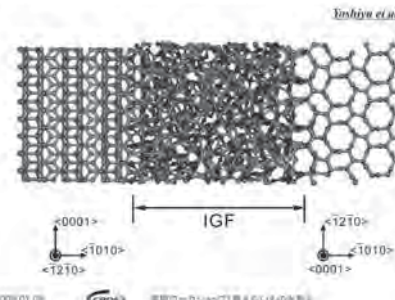
2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

33

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4



2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

34

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4



2009.01.08



演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

35

Crack propagation in polycrystalline Si_3N_4



2009.01.08



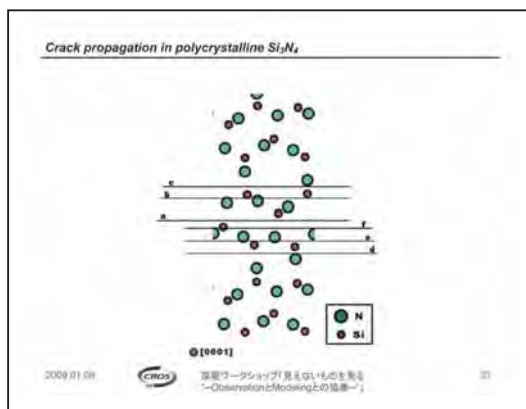
演習ワークショップ「見えないものを見る」
「ObservationとModelingとの協奏」

36

[1] ワークショップの概要

[2] 講演題目および資料

[3] Appendix



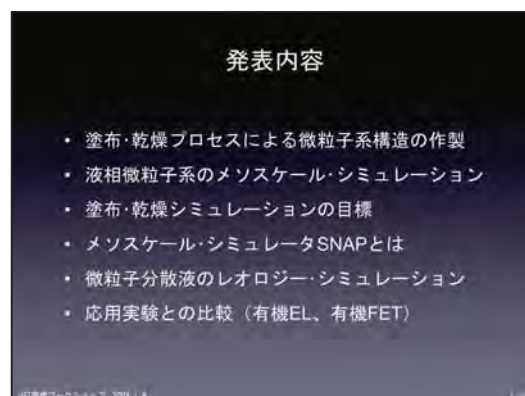
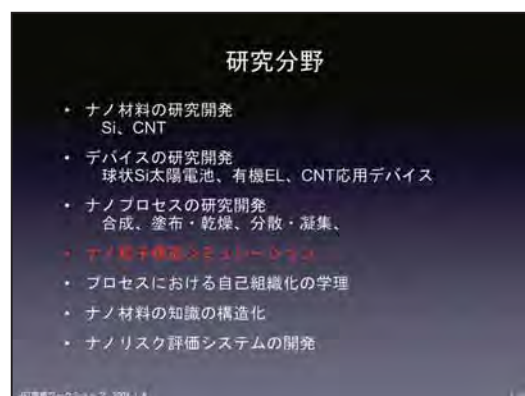
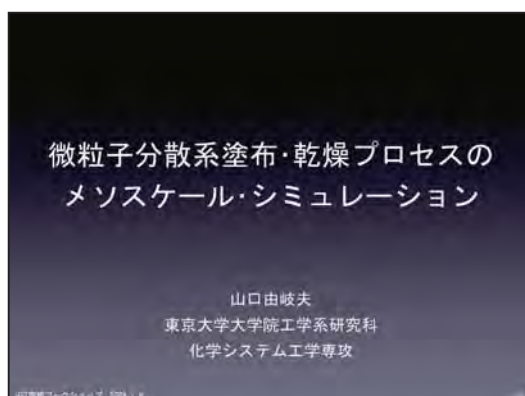
2. 8. 微粒子分散系塗布・乾燥プロセスのメソスケール・シミュレーション

■山口由岐夫（東京大学 大学院工学系研究科 化学システム工学専攻 教授）

要 旨

分子動力学と流体力学の間をつなぐメソスケール・シミュレーションである SNAP (Structure of NAno Particles) を開発している。マルチスケールの物理化学現象の本質を捉えられる格子解像度（100 nm程度）を有しつつ、高性能パーソナル・コンピュータで実行可能な効率をもつよう現象を粗視化した数値モデルであり、塗布・乾燥プロセスの設計や制御を支援するために、産業の現場で利用されることを念頭においている。ものづくりを強化するためには、産業プロセスにおけるナノ・レオロジーの共通部分を横断的に取り上げ、知恵を集積化することが必要であるが、産学連携においてどこまで共通基盤としていけるかは難しい課題である。

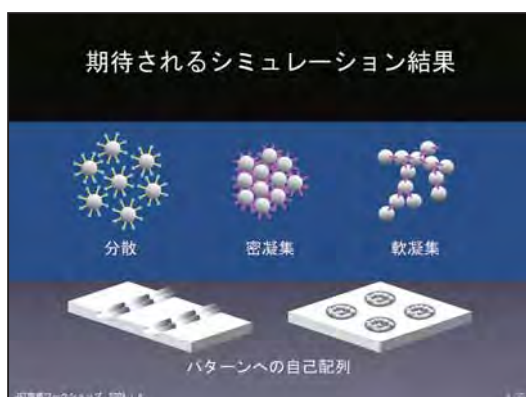
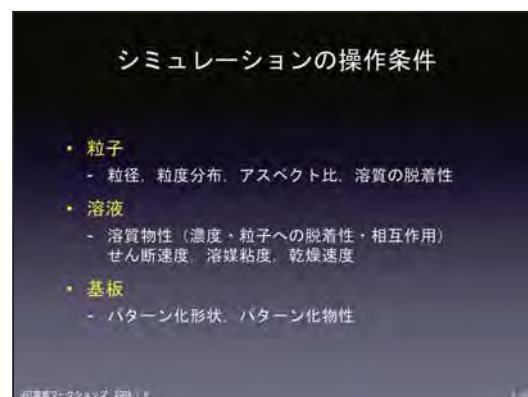
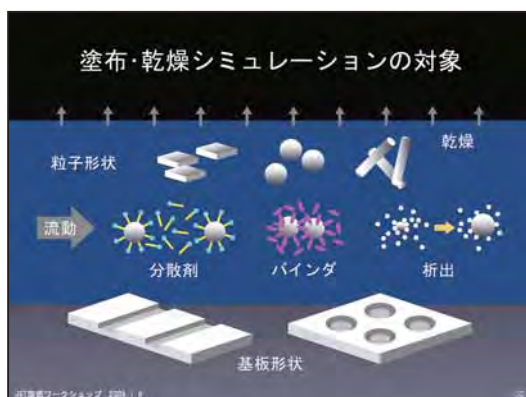
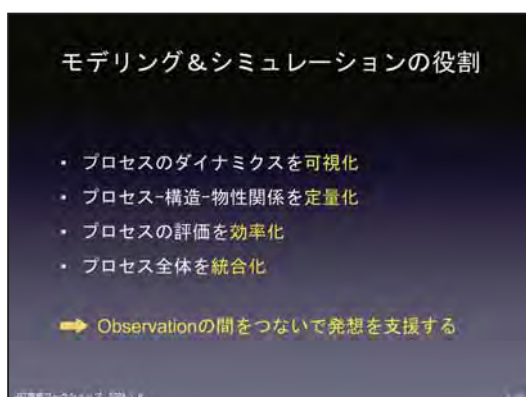
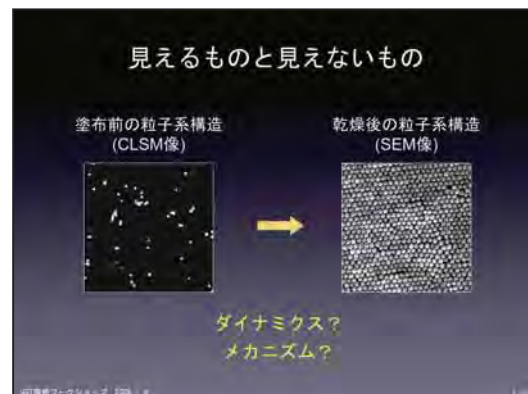
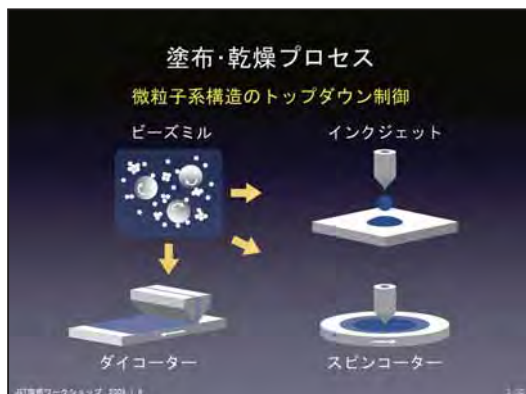
資 料

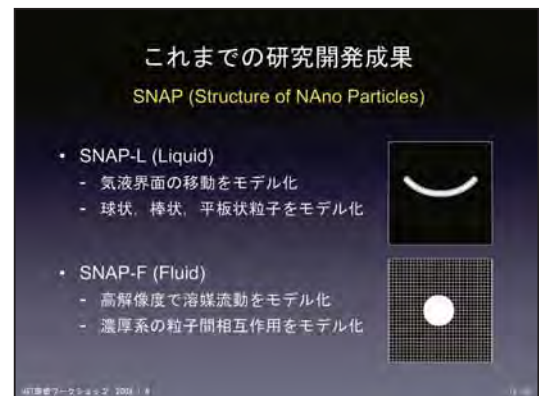
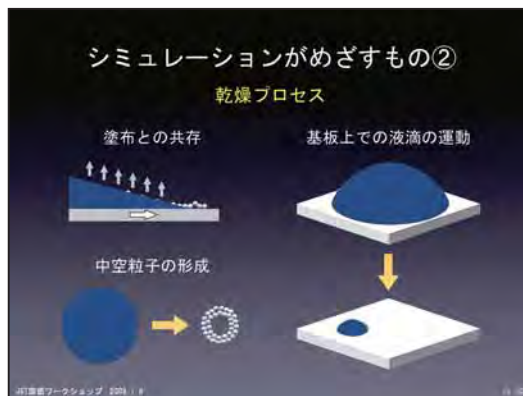
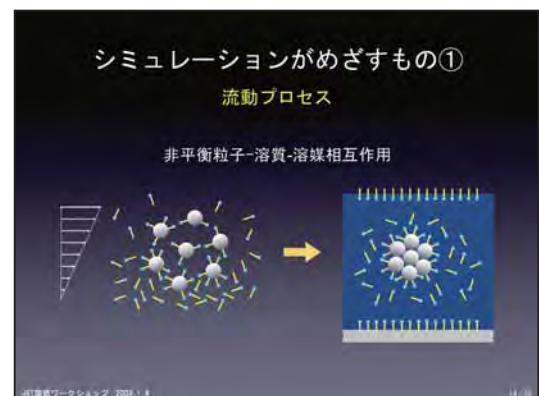
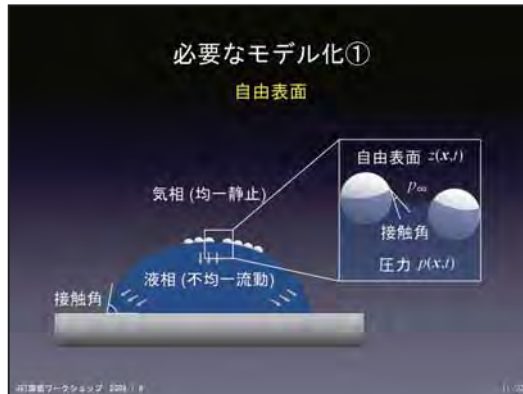


[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix





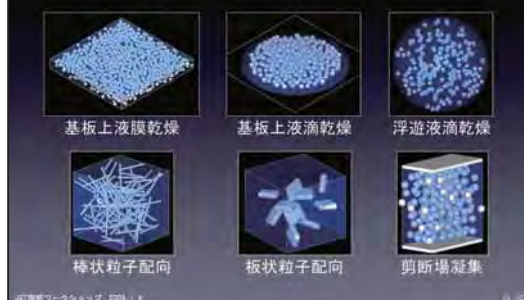
汎用流体シミュレータとの比較

微粒子分散液への適用性

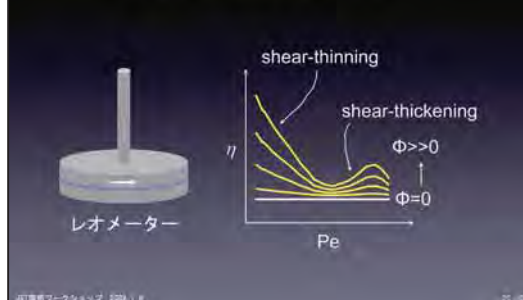
	濃厚系粒子-流体作用	粒子のブラウン運動	粒子衝突と凝集	粒子間DLVO作用
SNAP	✓	✓	✓	✓
FLUENT	✓ (option)	✓		
STAR-CD			✓	
PHOENICS				



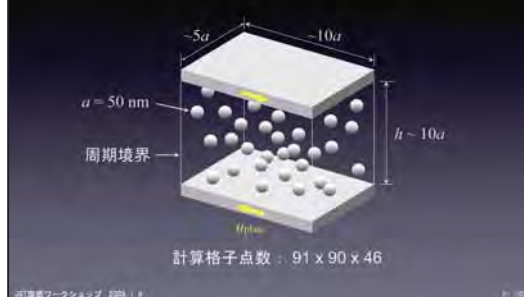
SNAPを用いたシミュレーション



微粒子分散液のレオロジー



シミュレーション領域

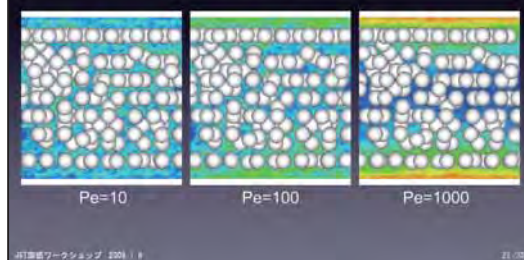


シミュレーション条件

- ・ 粒子
直径 50 nm, 濃度 20 vol%, ζ 電位 -50 mV
 - ・ 流体
常温の水, 電解質濃度 10^{-4} mol/l
 - ・ 移動平板
 ζ 電位 -50 mV, $Pe=10, 100, 1000$
- $$Pe = \frac{\dot{\gamma} r^2}{D} \quad D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}$$

粒子系構造の変化

配位数による色づけ



粒子系構造の定量評価 - NBA

Nondimensional Boundary Area

凝集・分散度合い

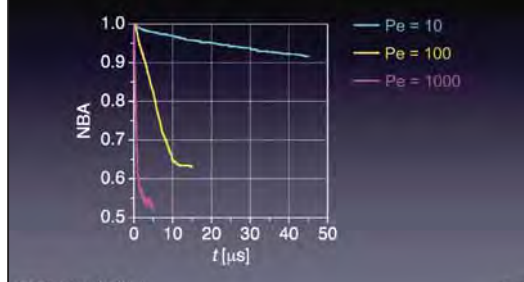
$$= \frac{\text{凝集体の表面積}}{\text{粒子の表面積の総和}}$$

$$NBA = \frac{1}{12N} \sum_{k=1}^{12} \left\{ (12-k)n(k) \right\}$$

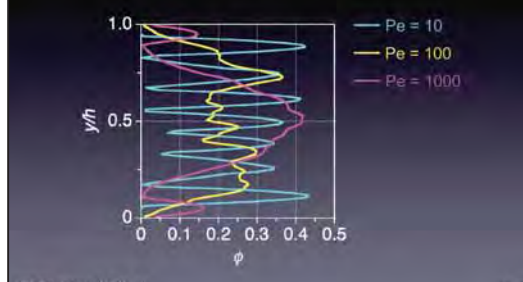
k : 配位数
 $n(k)$: 配位数 k の粒子数
 N : 全粒子数

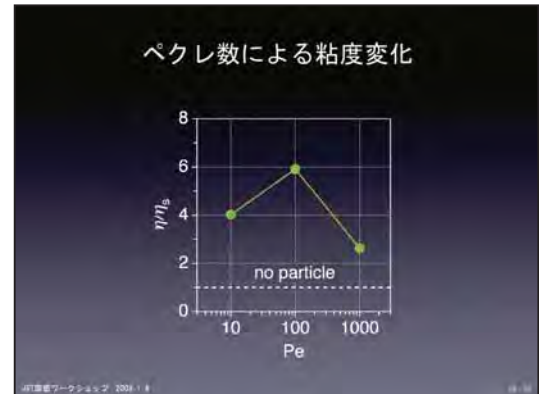
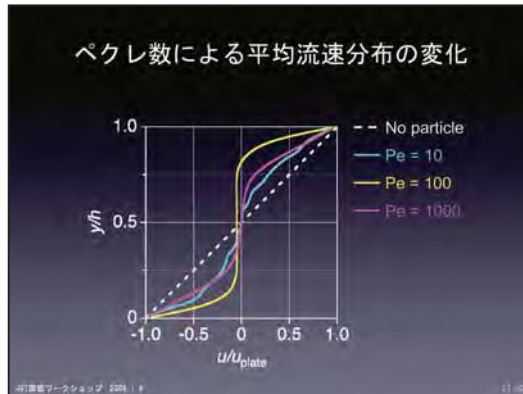
→ $NBA = 1$: 完全分散
 $NBA = 0$: 最密充填

NBAの時間変化



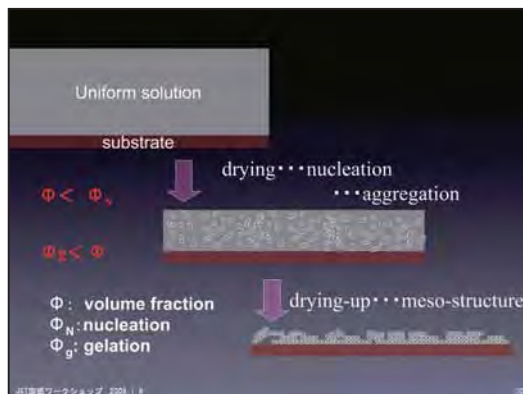
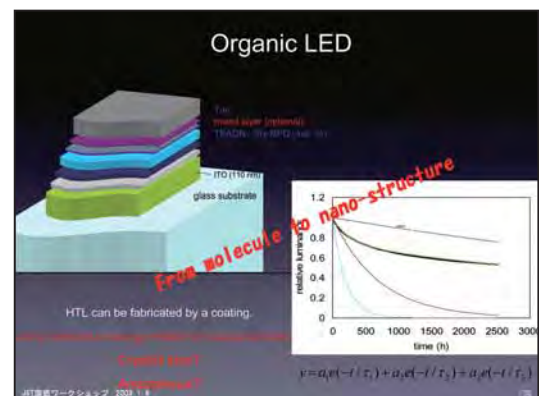
平均粒子濃度分布





有機EL

- ・ プロセス～ナノ構造～性能の関係理解
- ・ 製膜実験: スピンコート、ダイコート
- ・ 薄膜解析: ラマン、XRD、エリプソ
- ・ 性能評価: 電圧・電流特性
- ・ モデリング: 核発生の予測
SNAPと比較



まとめ

- ・ シミュレーションによってナノ粒子のダイナミクスを可視化し、人間の発想を支援する
- ・ メソスケール・シミュレータSNAPを高度化する
- ・ 応用実験（有機EL）と対応させる

[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix

2. 9. シミュレーションの専門的な見地からあるべきナノ計測との連動方法産学のための「死の海」を乗り切るために必要な方向性

■宮本 明 (東北大学 未来科学技術共同研究センター 教授)

要 旨

コンピュータ支援分子設計・材料設計方法の研究開発にシミュレーションの見地から取り組んでいる。用いている手法は、量子論をベースとした実践的マルチスケール/マルチフィジックス (MS/MP) シミュレーションである。これは、古典原子論をベースに、すべての物理過程とすべてのスケールを全てコンピュータで処理し、理論的な原子・分子構造を描き出すものである。このシミュレーション結果を自然界に存在する実物に近づけるため、ナノ計測シミュレーション技術による実験と融合させることが必要である。また、MS/MPシミュレーションを産業に応用するため、製造方法、耐久性、安全性を含む商品開発のすべてを学問化し、シミュレーションの多様性を高めて商品の多面性に対応することが求められる。つまり、MS/MPシミュレーションとMS/MP計測の協奏が、産業に大きな力を与えて、学問と産業の強力な結合を促進すると考えられる。

資 料

事前アンケート

東北大学未来科学技術共同研究センター
宮本 明

1月9日WS当日に、USBフラッシュメモリで直接データをご提出ください。
 ・このファイルをそのまま用いて、20分でご発表ください。
 ・時間を超過しない範囲で、適宜ページの追加をお願いします。
 ・当日、発表用のPC(WinXP)はこちらでご用意いたしますが、ご自身のPCをお使いいただいても結構です。

2009.01.08 CRDS 演習ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 — 」

シミュレーションの専門的な見地からあるべきナノ計測との連動方法産学の間の「死の海」を乗り切るために必要な方向性

東北大学未来科学技術共同研究センター
工学研究科化学工学専攻・応用化学専攻
附属エネルギー安全科学国際研究センター
宮本 明、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、
坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、
Carlos A. Del Carpio、久保百司

2009.01.08 CRDS 演習ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 — 」

コンピュータ支援分子設計・材料設計の方法

- 1 電子論: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 古典原子論: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 化学反応ダイナミクス: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 メソ・マクロモデリング: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 インフォマティクス: 人工知能(AI)、ニューラルネットワーク(NN)、データベース(DB)
- 6 可視化: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 実験融合コンピュータ化学(本物シミュレーション)

2009.01.08 CRDS 演習ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 — 」

宮本 明
東北大学未来科学技術共同研究センター・工学研究科化学バイオ系専攻

1967-1989(23年間)
(鈴鹿高専、東北大学、名古屋大学、京都大学)
固体触媒を中心とする実験研究

1987-2009(22年間)
(京都大学、東北大学)
コンピュータ支援による分子設計・材料設計
(産業革新のための新しい化学の方法論の確立を目指して)

2009.01.08 CRDS 演習ワークショップ「見えないものを見る — ObservationとModelingとの協奏 — 」

[illegible]

目次

「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」
オリジナルに開発した高速化量子分子動力学法で広がる無限の可能性

バンド構造の超精密計算(系系)	トータルシステムシミュレータ	光触媒反応メカニクスシミュレータ
結晶は半導体である。半導体の性質は、結晶の電子状態に由来する。 計算精度と物理的性質の一致	複雑な分子系 1-1000原子の分子系 従来の半導体電子計算法では電子状態を体系的に計算可能	光子-電子相互作用による光触媒反応メカニクス 従来の第一原理計算動力学法では困難な入射光子の吸収過程の解明が可能
OMPプロセスシミュレータ 高圧下の分子系 結晶は半導体である。半導体の性質は、結晶の電子状態に由来する。 5000原子の大規模分子系 電子状態計算は、分子系に適用可能 従来の第一原理計算動力学法では困難な入射光子の吸収過程の解明が可能	プラズマプロセスシミュレータ 高圧下の分子系 第一原理計算動力学法では困難な入射光子の吸収過程の解明が可能	分子軌道・電子触媒ダイナミクス 光子-電子相互作用による光触媒反応メカニクス 従来の第一原理計算動力学法では困難な入射光子の吸収過程の解明が可能

4. その研究課題の結果、得られる像(情報)の確実性について述べてください。

赤外線動スペクトル

X線回折

中性子回折

実測

計算

原子分子動力学により計算された水(4,400原子)

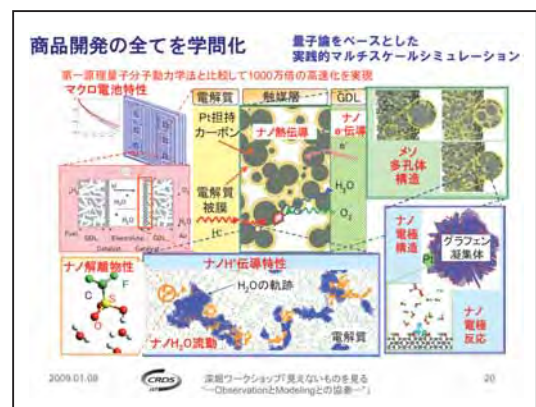
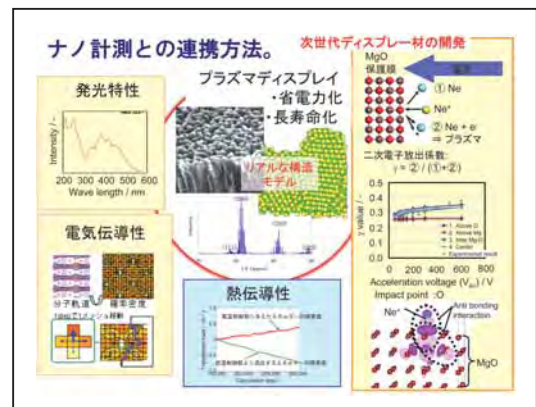
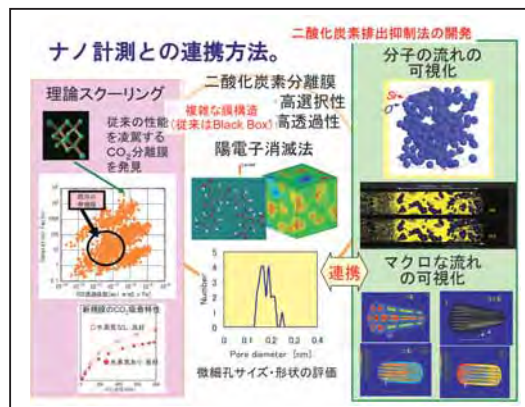
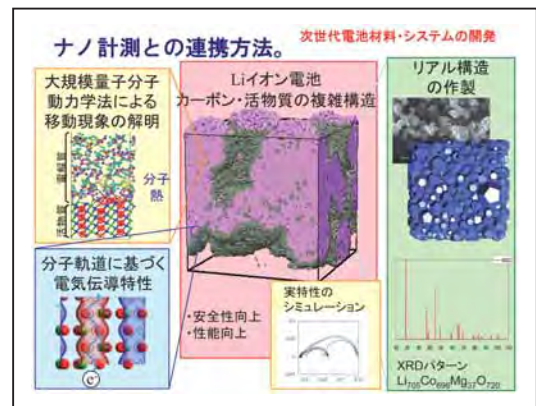
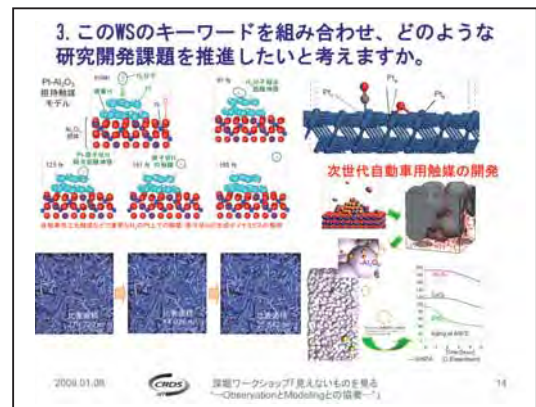
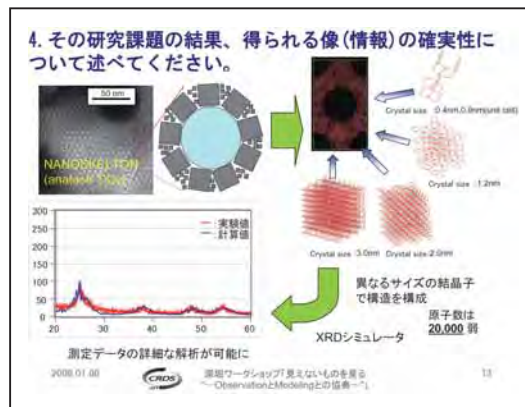
大規模量子計算により、アモルファスでも「本物」モデルが構築可能

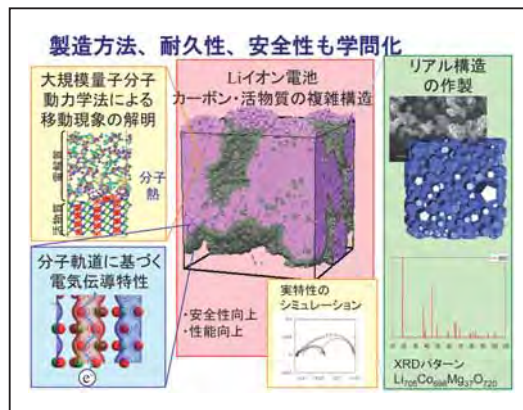
2009.03.08

CRDS

深部フーワッソンPT 見えないものを捉え
— Observation & Modeling との協奏 —

12





[1] ワークショップの概要

[2] 講演要旨および資料

[3] Appendix

Appendix

1. ワークショップの開催日時・場所

日時： 平成21年1月8日(木) 13:00 ~ 19:00

会場： JST研究開発戦略センター 2階大会議室

2. 参加者一覧

	氏 名	所 属・役 職 (敬称略)
コーディネーター	黒田 孝二	JST/CRDS (計測技術U) 特任フェロー/㈱大日本印刷 理事
講 演 者	平山 司	(財)ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 所長代理・主幹研究員
	高田 昌樹	理化学研究所 播磨研究所 高田構造科学研究室 主任研究員
	山口 康隆	大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻 准教授
	山口由岐夫	東京大学 大学院工学系研究科 化学システム工学専攻 教授
	宮本 明	東北大学 未来科学技術共同研究センター 教授
	幾原 雄一	東京大学 東京大学大学院工学系研究科 総合研究機構 教授
	小名 俊博	九州大学 大学院農学研究院 森林資源科学部門 准教授
コメンテーター	酒井 啓司	東京大学 生産技術研究所 基礎系部門 准教授
	永井 康介	東北大学金属材料研究所附属 量子エネルギー材料科学国際研究センター 准教授
実環境4D計測 チーム(事務局)	安井 至	JST/CRDS 計測技術ユニット 上席フェロー
	武内 里香	JST/CRDS 計測技術ユニット フェロー
	沼田 真也	JST/CRDS 臨床医学ユニット フェロー
オブザーバー	田中 一宣	JST/CRDS ナノテクノロジーユニット 上席フェロー
	石森 義雄	JST/CRDS ナノテクノロジーユニット フェロー
	豊蔵 信夫	JST/CRDS ナノテクノロジーユニット フェロー
	永野 智己	JST/CRDS ナノテクノロジーユニット フェロー
	石原 聰	JST/CRDS 物質・材料ユニット フェロー
	中山 智弘	JST/CRDS 物質・材料ユニット フェロー
	西木 玲彦	JST/CRDS 物質・材料ユニット フェロー
	波多腰玄一	JST/CRDS 物質・材料ユニット フェロー
	大川 司	JST/CRDS 環境技術ユニット フェロー
	丸山 浩平	早稲田大学 先端科学・健康医療融合研究機構 准教授

3. プログラム

13:00 — 13:10 挨拶・趣旨説明

・安井 至 (10分)

「見えないものを見る」ObservationとModelingの協奏

13:10 — 13:30 趣旨説明

・黒田 孝二 (20分)

「ナノ挙動の手応え感を育む動的計測

— “ナノを見る” “ナノ挙動を知る” “ナノを操るものづくり” —

13:30 — 14:50 第一部

・山口 康隆 (20分)

「液液、固液界面の動的接触に関するマクロ、ナノスケールシミュレーション」

・小名 俊博 (20分)

「高分子溶液などのラマン計測で把握できる分子・格子レベルの情報と動的物性指標との高い相関性紹介 — 最先端ラマン分光法の高感度高速性の紹介と応用展開例 —」

・高田 昌樹 (20分)

「先端放射光構造計測の可能性 To see invisible.」

・質疑応答 (20分)

14:50 — 15:20 意見交換タイム (コーヒブレイク)

15:20 — 17:00 第二部

・平山 司 (20分)

「電子線ホログラフィによるミクロ～ナノ領域の電場・磁場の観察
～電氣的・磁氣的機能の直視～」

・幾原 雄一 (20分)

「界面元素の可視化と材料設計への展開」

・山口由岐夫 (20分)

「微粒子分散系塗布・乾燥プロセスのメソスケール・シミュレーション」

・宮本 明 (20分)

「シミュレーションの専門的見地からあるべきナノ計測との連動方法。産学の間
の「死の海」を乗り切るために必要な方向性。」

・質疑応答 (20分)

17:00 — 19:00 総合討論 (90分)

19:00 — 懇親会

[1]
ワークショップの概要

[2]
講演要旨および資料

[3]
Appendix

■ 実環境 4D計測チーム ■

安井 至	上席フェロー (計測技術ユニット)
黒田 孝二	特任フェロー (計測技術ユニット)
武内 里香	フェロー (計測技術ユニット)
沼田 真也	フェロー (臨床医学ユニット)

*お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

「見えないものを見る－ObservationとModelingとの協奏－」
科学技術の未来を展望する戦略ワークショップ 報告書

CRDS-FY2008-WR-10

独立行政法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター

平成21年3月
計測技術ユニット

〒102-0084 東京都千代田区二番町3番地
電話 03-5214-7485
ファクス 03-5214-7385
<http://crds.jst.go.jp/>

©2009 JST/CRDS

許可なく複写／複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

