

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター 研究成果発表会

2018年3月9日(金) 多治見駅前地区・クリスタルプラザ講義室

国立大学法人 名古屋工業大学

# 先進セラミックス研究センターの活動

井田 隆

# 内容

沿革

拠点・組織

活動

# 沿革

昭和 48 年 (1973 年) 工学部附属窯業技術研究施設創設, 御器所 (鶴舞)

昭和 52 年 (1977 年) 岐阜県多治見市旭ヶ丘に移転

平成 3 年 (1991 年) セラミックス研究施設 (時限 10 年)

平成 13 年 (2001 年) セラミックス基盤工学研究センター (時限 10 年)

平成 14 年 (2002 年) 国立大学名古屋工業大学法人化 (時限失効)

平成 20 年 (2008 年) 旭ヶ丘 A 棟耐震補強工事, 駅前クリスタルプラザ, 御器所地区

平成 22 年 (2010 年) 旭ヶ丘地区・駅前クリスタルプラザ

平成 24 年 (2012 年) 先進セラミックス研究センターとして改組

平成 29 年 (2017 年) 旭ヶ丘地区・多治見駅前地区・御器所地区

# 拠点



# 組織

## 先進機能材料研究部門

環境材料研究グループ 羽田政明 教授, 研究員 1, 技術補佐員 2

材料資源研究グループ 太田敏孝 教授

エネルギー材料研究グループ 白井孝 准教授, 研究員 2, 技術補佐員 5

## 先進材料設計研究部門

材料創製研究グループ 藤正督 教授, 研究員 7, 技術補佐員 3

材料機能研究グループ 安達信泰 教授 (副センター長)

材料設計研究グループ 井田隆 教授 (センター長)

## 技術・事務系スタッフ

石原真裕 技術専門員, 林友美 事務職員,

道村美智子 事務補佐員, 吉永志保 事務補佐員

# 組織

## 客員部門

### 国際連携グループ

Prof. F.Wang, Prof.A. M. Grishin, Prof. P.Hoffmann,, Prof. S.Vaucher

### 地域連携グループ

泉富士夫 客員教授 (NIMS), 奥山雅彦 客員教授 (NTK),

西川治光 客員教授 (シグマ環境工学研究所), 清原正勝 客員教授 (TOTO)

佐合澄人 客員教授 (ノリタケ), 久留島豊一 客員教授 (LIXIL)

## 学生

大学院工学研究科 未来材料創成工学専攻, 生命・応用化学専攻

博士後期課程学生 5 名

博士前期課程 (修士) 学生 26 名

工学部 環境材料工学科, 生命・物質工学科

卒業研究 (4 年) 学生 18 名

研究生 2 名

# 活動

## 研究・社会貢献活動

高度技術研修 「電界放射型走査型電子顕微鏡による材料評価」

高度技術研修 「レーザー回折・散乱法による粒子径分布測定」

日本セラミックス協会東海支部学術研究発表会

界面特性を利用した粒子設計とプロセス開発に関するワークショップ

講演会 「Introduction about Switzerland, Empa and Microwave」

# 活動

## 教育活動

- 小森大輔 (M2) 日本セラミックス協会東海支部学術研究発表会優秀講演賞受賞
- 加藤邦彦 (DI) わかしゃち奨励賞 応用研究部門 優秀賞
- 加藤邦彦 (DI) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム優秀発表賞
- 赤城琢真 (M2) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム敢闘賞
- 野田啓尊 (M2) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム敢闘賞
- 服部美来 (MI) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム敢闘賞
- 清水和加子 (MI) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム敢闘賞
- 岩崎亮太 (MI) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム敢闘賞
- 大橋厚哉 (MI) 日本セラミックス協会秋季シンポジウム奨励賞
- 加藤邦彦 (DI) 東海若手セラミスト懇話会 最優秀発表賞・ベスト質問賞
- 清水和加子 (MI) 東海若手セラミスト懇話会 優秀発表賞
- 加藤邦彦 (DI) FRIMS Award 優秀賞
- 中島佑樹 (D2) 粉体工学会春季研究発表会ベストプレゼンテーション賞

名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター 研究成果発表会

2018年3月9日(金) 多治見駅前クリスタルプラザ

先進材料設計研究部門

# 材料設計研究グループの成果報告

井田 隆<sup>1,2</sup>, 八反大貴 (M2)<sup>1</sup>, 大川原健介 (B4)<sup>1</sup>,

近藤陸弥 (B4)<sup>1</sup>, 野田朋宏 (B4)<sup>1</sup>, 日比野寿<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 名古屋工業大学 先進セラミックス研究センター



<sup>2</sup> 科学技術交流財団 シンクロトロン光センター



AichiSR

<sup>3</sup> 名古屋工業大学 技術部



# 研究内容

## 粉末 X 線回折の方法論研究

同定と定性分析, 定量分析 (近藤), 結晶粒径評価 (野田)

最尤推定構造解析, 逆畳み込み・畳み込みデータ処理

AichiSR BL5S2 粉末 X 線回折ビームラインの支援 (八反)

AichiSR BL2S3 X 線吸収分光 / 粉末 X 線回折ビームラインの建設 (大川原)

実験室型一次元検出器粉末回折測定システムの装置研究 (八反)

ビッグ・データ利用, 人口知能化, ロボット化, 機械学習

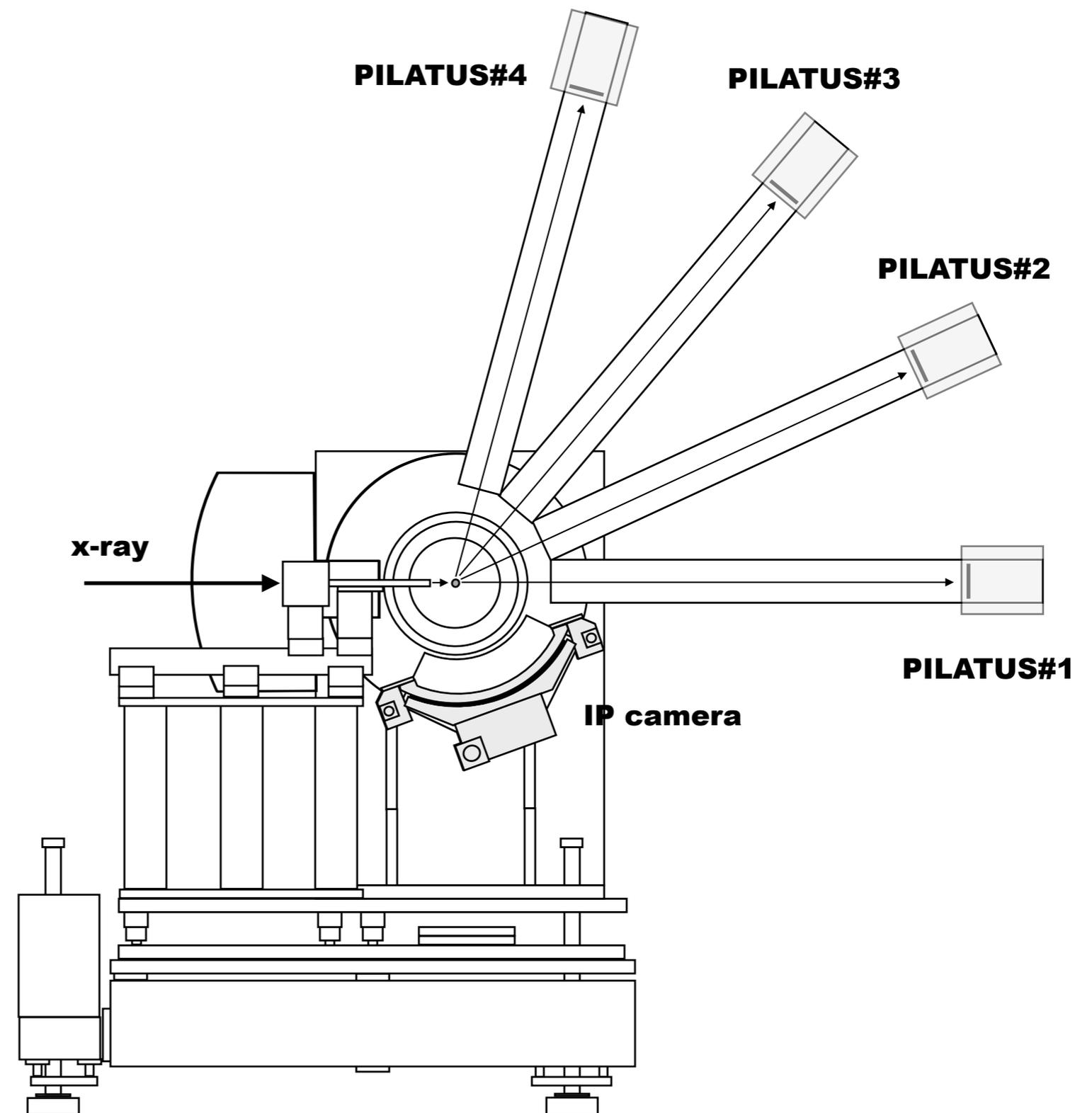
## チタン酸バリウムの構造相転移

AichiSR BL5S2 粉末 X 線回折ビームライン装置利用 (八反)

実験室型一次元検出器粉末回折測定システム利用 (八反)

# 背景 1 AichiSR 粉末回折測定システム半導体二次元検出器化 (2015)

軌道放射光と半導体二次元  
検出器を用いた無収差測定



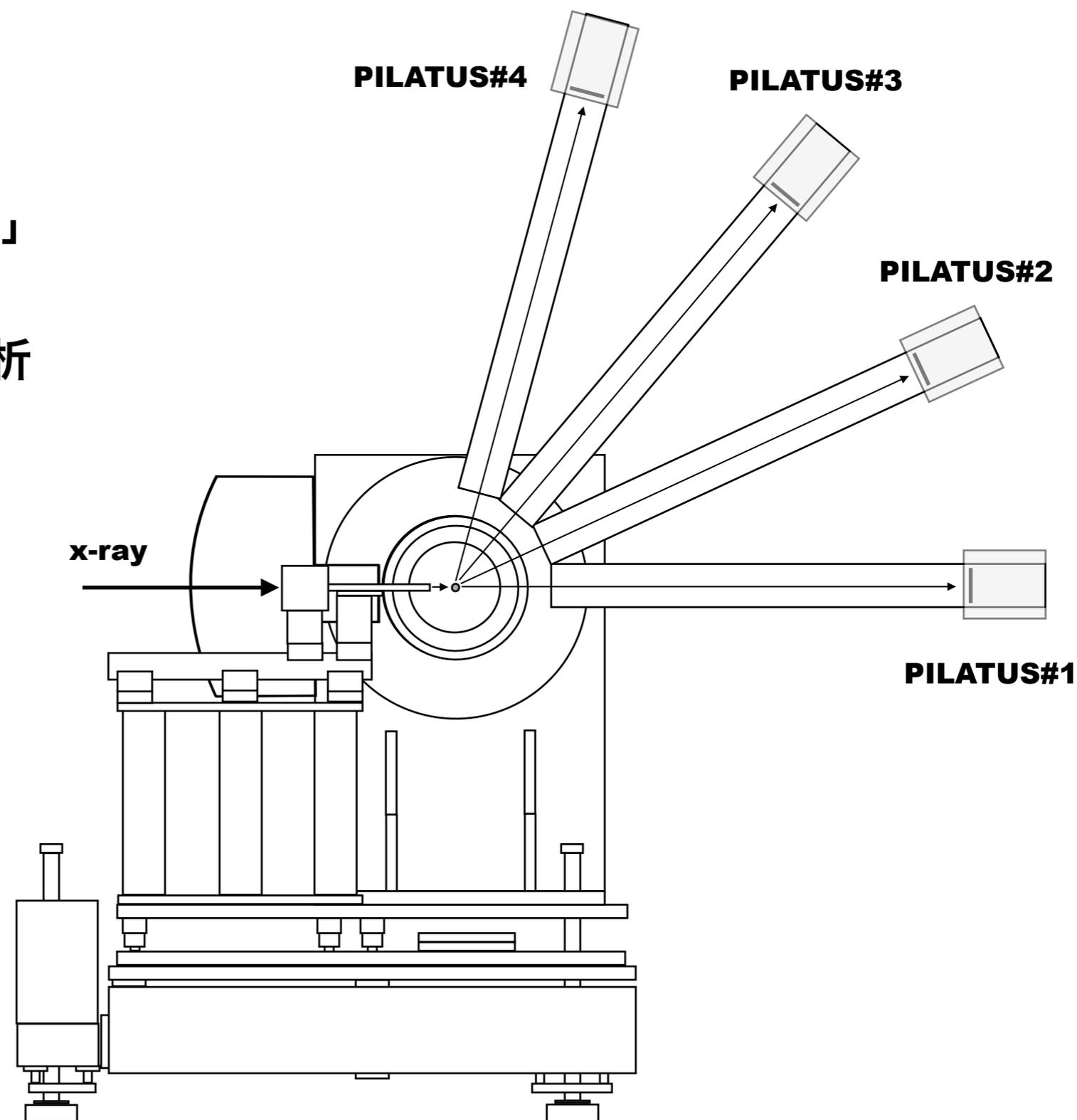
AichiSR  
BL5S2

# 背景 1 AichiSR 粉末回折測定システム半導体二次元検出器化 (2016)

軌道放射光と半導体二次元  
検出器を用いた無収差測定  
実験データ「信頼性情報の提供」

→

Rietveld 法で最尤推定構造解析  
(Ida, 2016)



AichiSR  
BL5S2

# 背景 1 機械学習・人工知能・確率論的情報利用の拡大

## 1. 利点

- ◆ 反復学習・複数回実験から得られる情報をすべて活用できる。
- ◆ 例えば「モデル a が一番もっともらしい」というだけより有効な「モデル a の正しい確率が 95 % 以上, 他のモデル b, c, ... の正しい確率が 5 % 以下」のような情報が得られる。

<例題> 「モデル a が正しくそれを採用すれば 10 円儲かり, 正しくないのにそれを採用したら 100 円損をする」状況だとする。

「モデル a の正しい確率が 95 % 以上」 → モデル a を採用する動機になる。

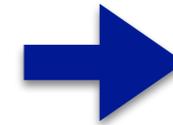
「モデル a が一番もっともらしい」 → モデル a を採用する動機にならない。

## 2. 難点

- ◆ 演算ステップが多くなり, 抱え込む情報が膨大になりがち。
- ◆ 心理的に受け入れがたい。人間が機械に勝てない...
- ◆ ベイズ推定に関する論説のほとんどが怪しいw

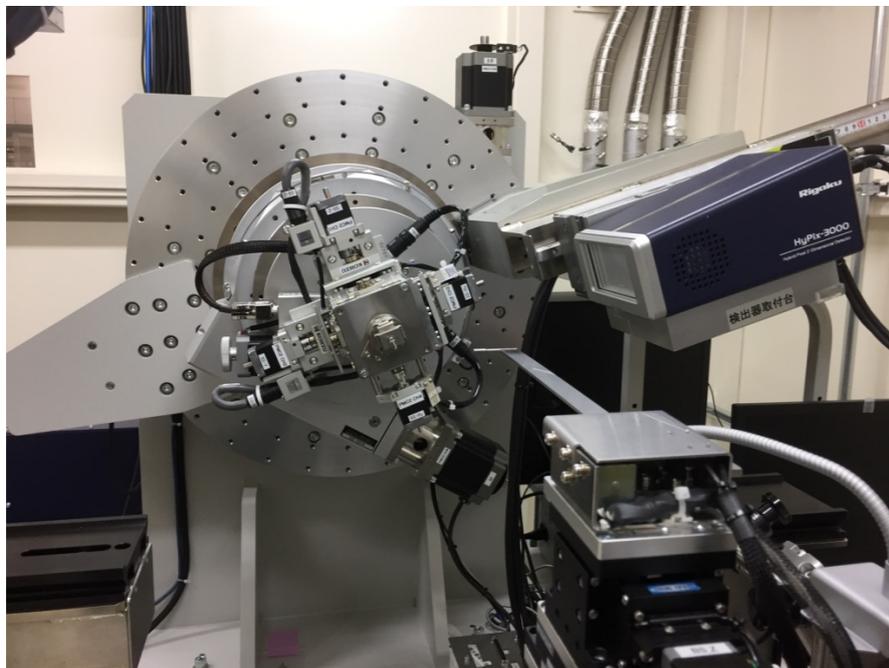
## 背景 2 AichiSR BL2S3 XAS-XRD タンデム型ビームライン (2016)

Denso 専有ビームライン  
X線吸収分光測定と  
X線回折測定の両方に使える。  
無収差測定, 信頼性情報提供,  
Rietveld 法で最尤推定構造解析



**Dectris  
PILATUS 100K**  
(172  $\mu\text{m}$  pixel)

**Rigaku  
HyPix-3000**  
(100  $\mu\text{m}$  pixel)



**AichiSR  
BL5S2**



**AichiSR  
BL2S3**

## 背景 3 実験室一次元X線検出器への対応

### 実験室X線回折計 vs 軌道放射光・二次元検出器無収差回折計

実験室回折計では、装置収差の影響によってピーク的位置がずれ、ピーク形状がゆがむ。

### 逆畳み込み・畳み込み法

粉末回折測定装置の影響が「畳み込み」として表現できれば、「逆畳み込み処理」を施せば装置の影響による「ピーク位置のずれ」「ピーク形状のゆがみ」を除去できる。

**問題点：**粉末回折測定装置の影響を正しく「畳み込み」として表現できていなかった。

→

**解決策：**装置の影響を「畳み込み」として表現する高精度な近似形式を導入した。

# チタン酸バリウム $\text{BaTiO}_3$

## 産業的な重要性

天然に産出されない人工鉱物。

積層セラミックキャパシタに利用される。

## 学術的な関心

構造相転移：

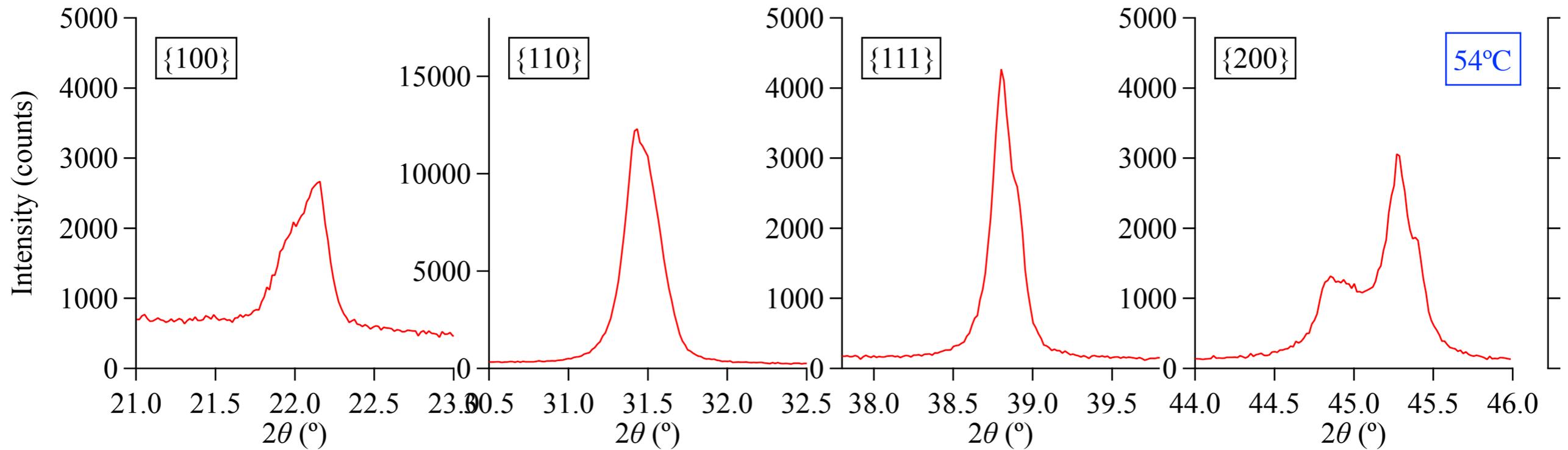
室温：正方晶（強誘電体） $\rightarrow$ （ $120^\circ\text{C}\sim 130^\circ\text{C}$ ） $\rightarrow$ 立方晶（常誘電体）

$P4mm \rightarrow Pm3m$ ？  $I4cm(2\times 2\times 1) \rightarrow I-43m(2\times 2\times 2)$ ？

強誘電性の起源：

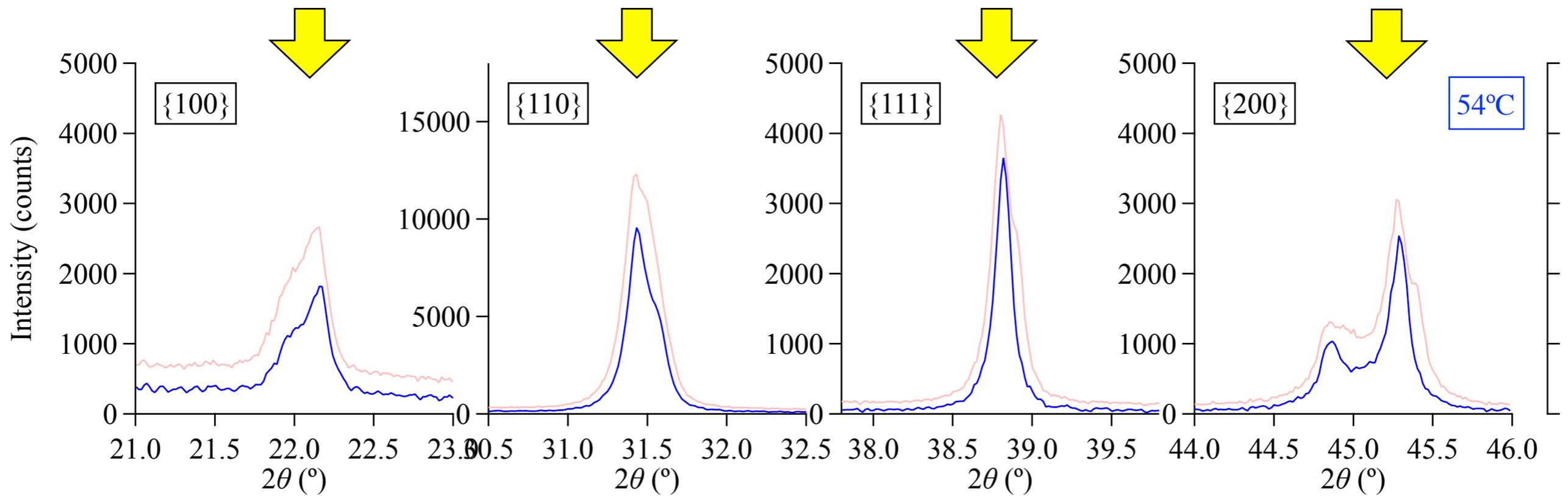
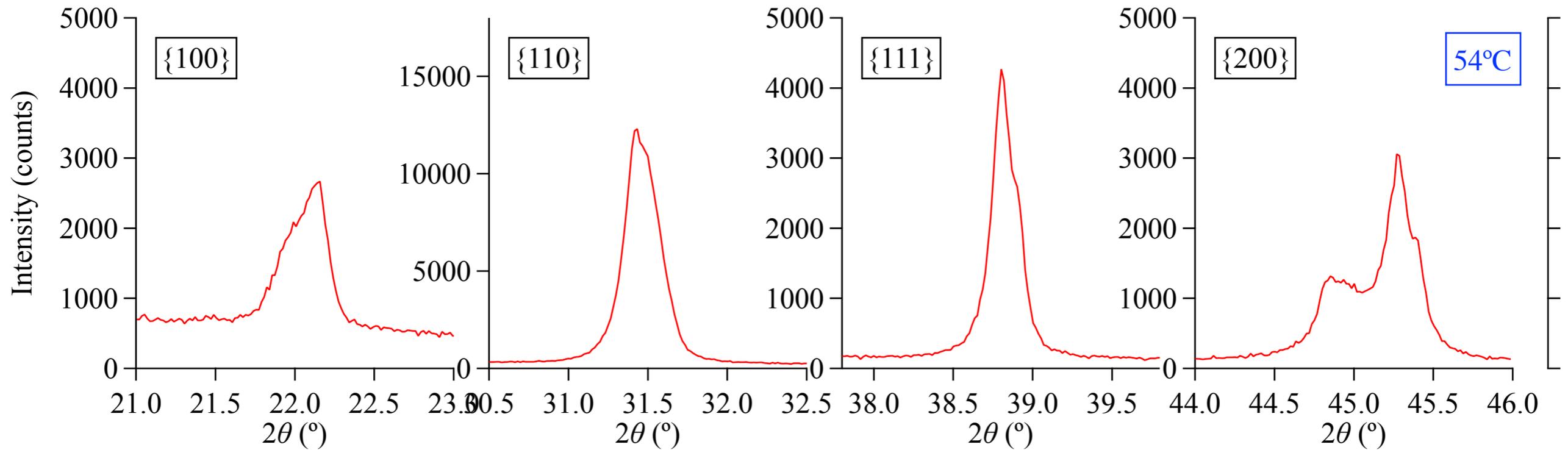
変位型？秩序無秩序型？

# 実測データ



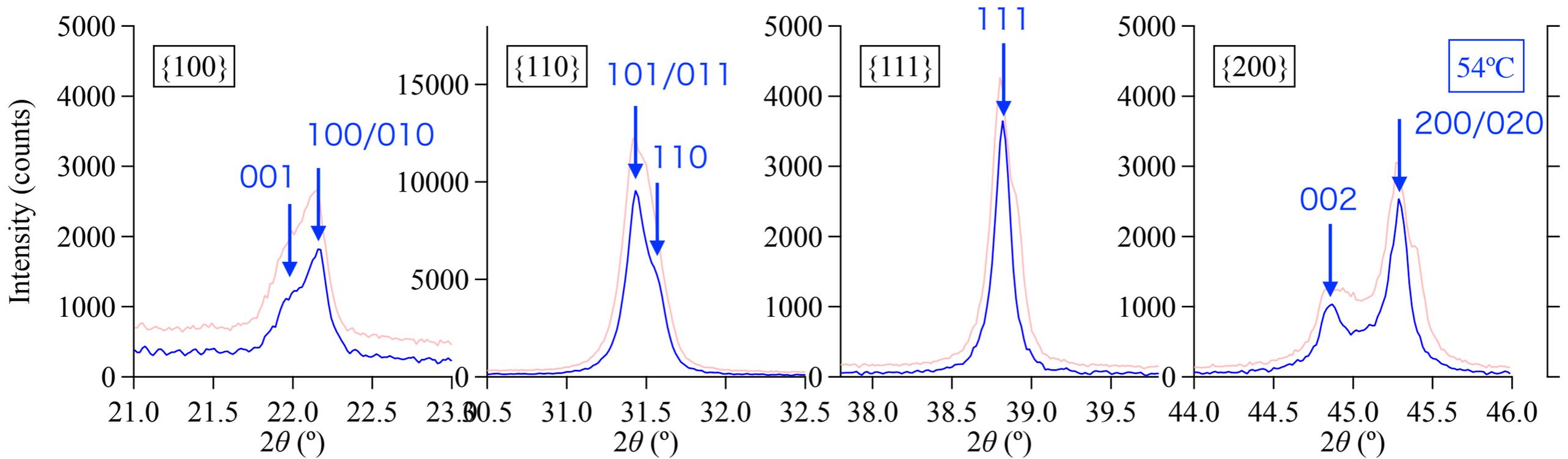
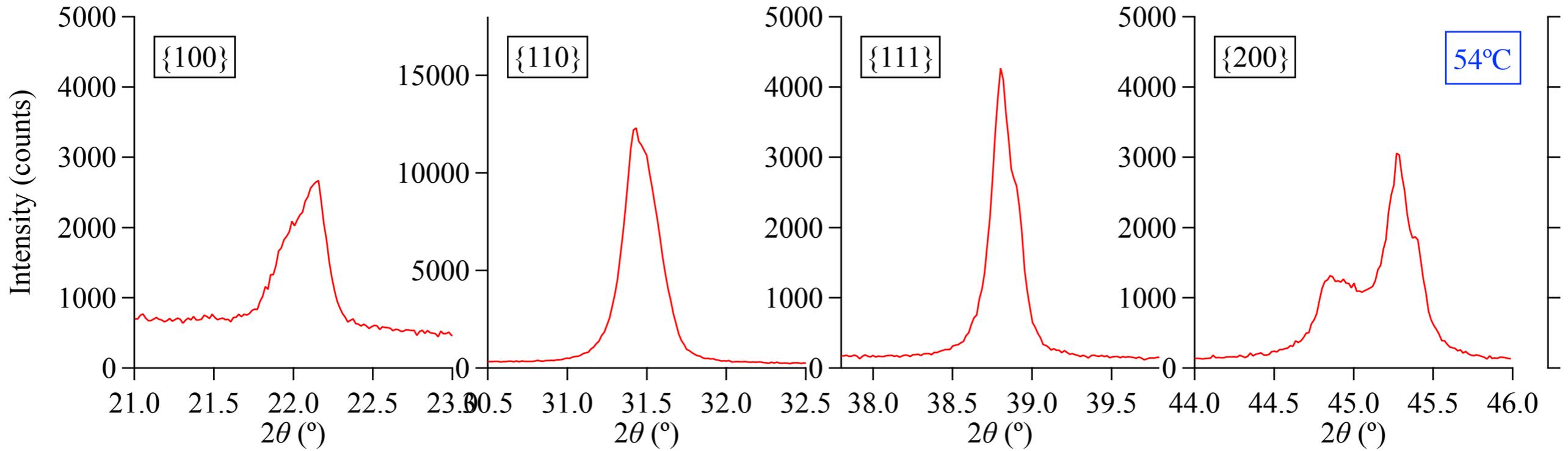
Cu K $\alpha$  X線源 + Ni フィルター + 一次元検出器の  
組み合わせで測定された BaTiO<sub>3</sub> 強誘電相の回折図形

# 実測データ

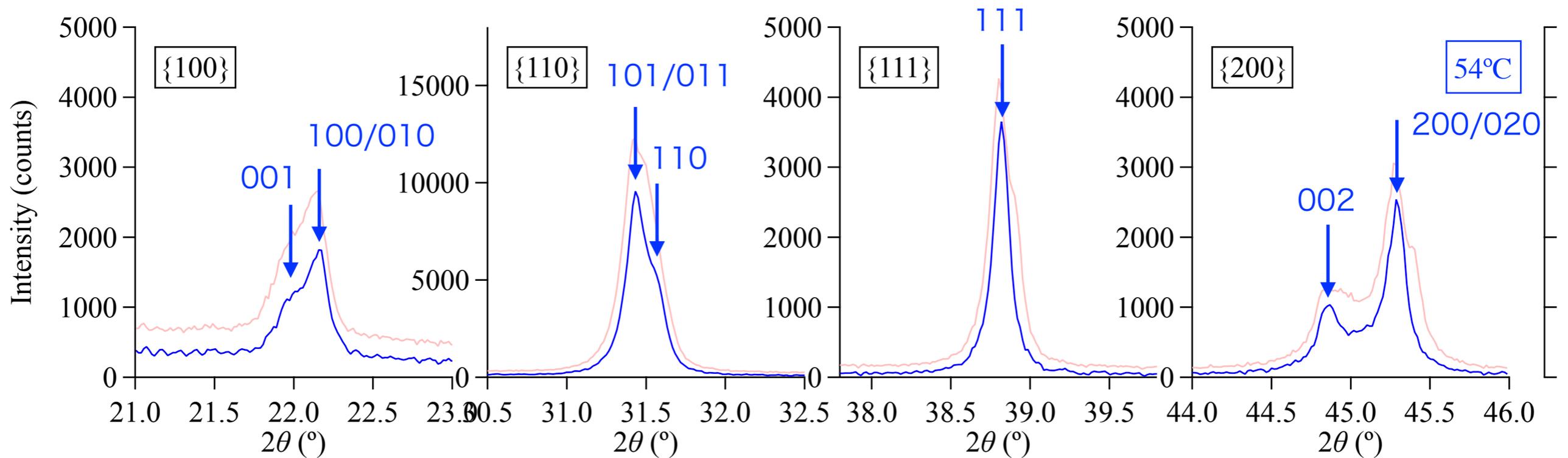
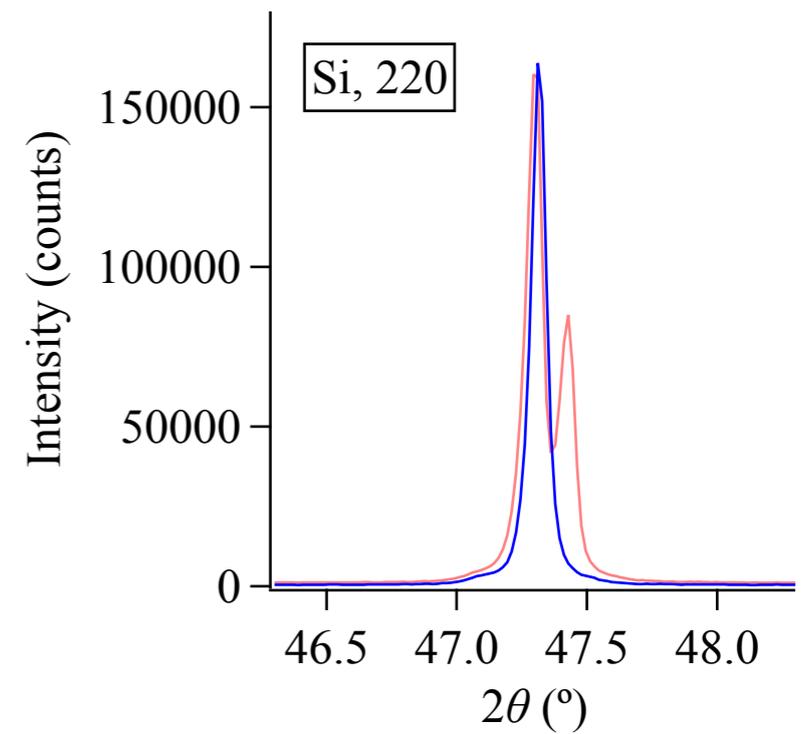
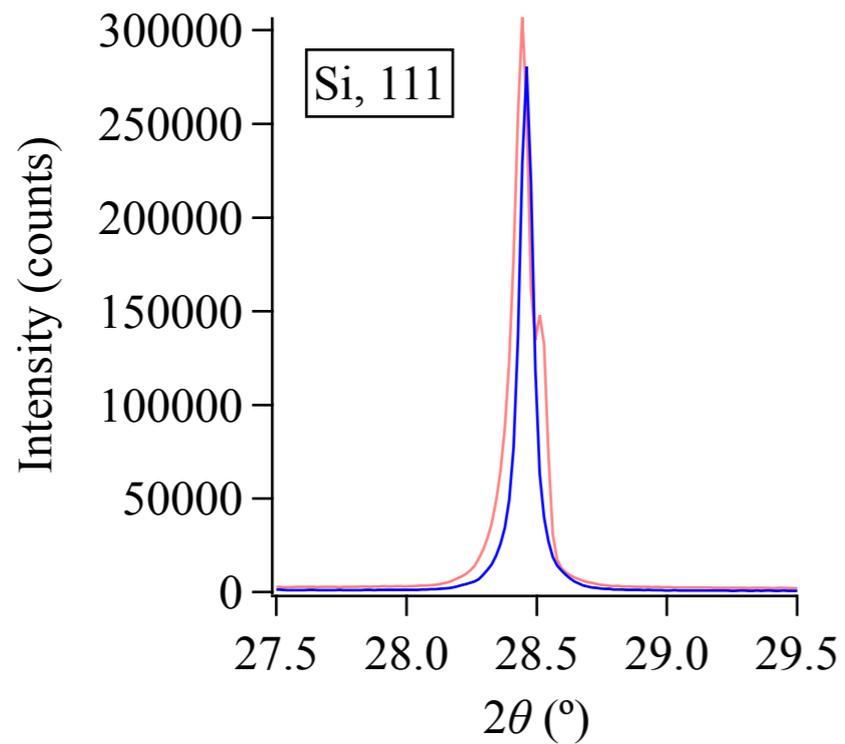


逆畳み込み・畳み込み処理後データ

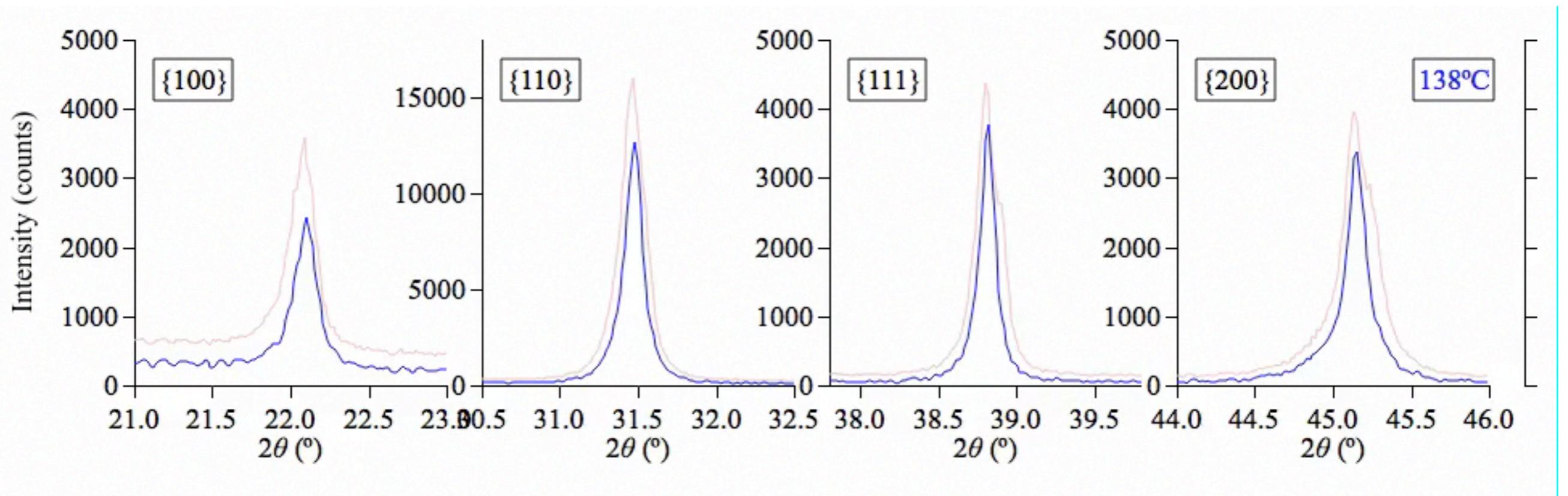
# 実測データ



# 逆畳み込み・畳み込み処理後データ



逆畳み込み・畳み込み処理後データ



逆畳み込み・畳み込み処理後データ

## 「シンクロトロン二次元検出器×線回折装置開発」の展開

- AichiSR BL52 ビームラインで信頼性保証データを提供。
- SPring-8 BL19B2 産業利用ビームラインで予備実験,  
AichiSR BL5S2 で本実験をするユーザーも。
- AichiSR BL2S3 DENSO ビームラインの調整・解析の人口知能化

## 「逆畳み込み・畳み込み法」の展開

- 半導体一次元検出器利用の拡大に伴うユーザーニーズの拡大
- Python でのコーディング→スタンド・アローン化  
(無償提供あるいは市販化についてソフトウェア制作会社と  
調整中)