

金属材料の研究と計算科学

研究開発法人 物質・材料研究機構
 マテリアルズ・インフォマティクスプラットフォーム
 統括マネージャ

小野寺 秀 博

経歴：1974年 3月 京都大学工学部卒業
 1979年 3月 京都大学大学院工学研究科博士課程
 金属加工学専攻修了
 1979年 8月 科技厅金属材料技術研究所研究員
 2001年10月 (独)物質・材料研究機構
 計算材料科学研究センター長
 2008年 4月 同企画調整室長
 2004年 4月 横浜国立大学大学院工学研究院客員教授
 2007年 4月 茨城大学マテリアル工学科非常勤講師

1. はじめに

筆者は大学卒業以来、金属材料の研究に従事してきました。高温強度の優れたNi基耐熱合金、軽量で強度が高く、加工性に優れたTi合金の研究開発、従来の試行錯誤による研究開発に代わる計算科学を活用した合金設計法の開発等に携わってきました。

近年の電子計算機、情報処理技術の発達は目覚ましいものがあり、計算科学シミュレーション技術は大規模化・高精度化を押し進め、物質・材料分野においても計算科学手法は益々大きなものとなってきました。

そこで、本稿では、金属材料の特徴と用途について簡単に紹介した後、計算科学と材料開発の状況について紹介します。

2. 金属の特徴と用途

金属は、陽子が格子を組み、その隙間を自由に飛び回る電子による特有な結合をしています。このため、下記のような性質が現れ、様々な用途に利用され、生活に不可欠な材料になっています。

- ・展性、延性に富む
- ・電気伝導性と熱伝導性に富む
- ・正電荷イオンとなる
- ・金属光沢を持つ
- ・常温で固体である（水銀を除く）

図1の周期表に示すように、元素全体の2/3が金属に分類されます。銅 (Cu)、鉄 (Fe)、アルミニウム (Al) などは、その加工のしやすさから、古くから刃物、食器、装飾品、建築、機械などの

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H											非金属					He	
2	Li	Be	金属									B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	*2	*1:ランタノイド *2:アクチノイド														

■図1 周期表。元素全体の内2/3が金属元素分類されます。

材料として用いられています。また、銅やアルミニウムは電気の良導体であることから、電気・電子部品としても不可欠となっています。

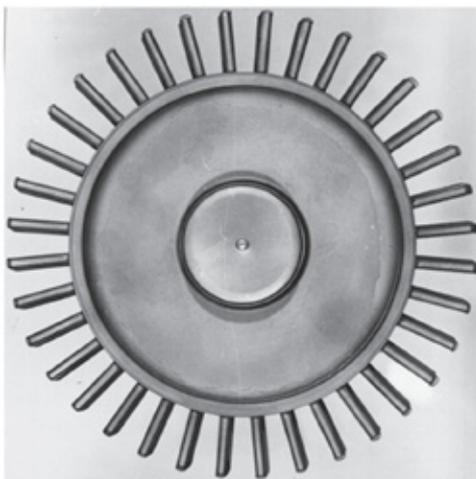
経済的な観点から最近注目されたのが、電子材料・磁性材料の性能向上に不可欠とされていたレアアースメタル（ネオジウム (Nd)、ジスプロジウム (Dy) など）です。希少で、中国に偏在している元素ですが、中国が重要戦略的資源に指定し輸出数量制限したため、国際的に高騰しました。しかし、最近、再利用技術や代替技術開発が大きく進展し、需要が急激に低下し、価格は暴落しました。

3. 金属の研究と計算科学

金属はその特徴から、様々な分野で必要不可欠な材料となっています。各分野の発展と製品の性能向上のためには、用いられる材料の性能向上が必要です。自動車や航空機などの輸送機器ではより軽くて強い材料が求められ、発電設備やエンジン部品などではより高温での強度が高い材料が必

要とされており、そのための研究開発が継続的に進められています。

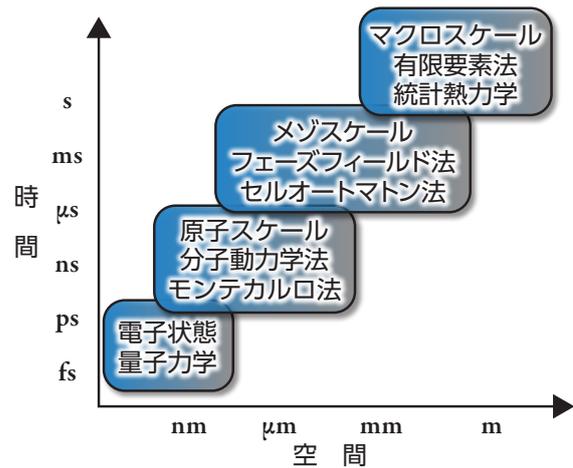
従来の材料開発の研究手法は、鉄などの基盤となる金属に、様々な元素を添加することにより性能を改善する試行錯誤的な方法で、多くの時間とコストが必要でした。そこで、計算機を活用して合金の特性を予測し、有望な合金組成についてのみ実験を行うことにより効率的な材料開発を目指す、合金設計の研究が進められてきました。筆者らはチタン合金の合金組成と変形能や高温強度の関係式を実験データの回帰分析により求め、得られた関係式に基づいて合金設計法を構築しました。図2はこの合金設計法により開発された、変形能に優れ、かつ高温強度の高いチタン合金で作製したタービンディスクの試作品です。



■図2 開発チタン合金を用いて、鍛造により作製した直径150mmのタービンディスク (M. Yamauchi, et al., Proc. 6th World Conf. on Ti, (1989).)

最近の計算科学シミュレーション技術の進展は著しく、材料中で生じる様々な現象の機構解明や特性の予測に活用され始めています。

計算科学手法は対象となる物質のサイズと現象の時間スケールでみて、図3に示すように大まかに分類されます。電子の状態を量子力学に基づいて計算する第一原理計算法は、物性の本質的な理解が可能です。原子や分子の集団運動を扱うのが分子動力学法やモンテカルロシミュレーションで、様々な物性値の計算や、変形挙動の解明に適用されています。実用的なバルク材料を対象とす



■図3 計算科学手法の時間及び空間スケール

る有限要素法や統計熱力学計算、ミクロとマクロの間でその間を繋ぐメゾスケールを扱うフェーズ・フィールド法などの種々の方法が開発され、各スケールでの現象のシミュレーション、機構解明に用いられています。

しかし、各スケール間を繋ぐのは、計算機の容量の問題を初めとして容易ではなく、解決すべき大きな課題となっています。

4. 今後の展開

合金開発、合金設計の研究に30年以上携わってきました。この間、材料科学の分野でも理論シミュレーションの果たす役割はますます大きくなっています。

米国においては、「マテリアルズゲノム」が国家戦略として出され、実験、シミュレーション、ビッグデータ解析等を統合した材料開発システムによる材料開発期間とコストの低減を目指しています。

日本においても、国家プロジェクト、「革新的構造材料 (2014 - 18)」の中で、構造体の性能や寿命等を、理論、経験則、計算科学、データベース等を融合して予測するシステムの開発が取り上げられています。

今後とも、理論シミュレーション、実験、データ解析を融合させて材料開発を促進させようとする試みは世界的な流れと思われます。