

# 材料デザイン学 第2回 特性発現機構とスケール

岸田 逸平

2015年10月6日

## 目次

1	デバイスと材料、性能	2
2	注目するスケール	2
2.1	マクロ・メゾ・ミクロ	3
2.2	ミリ・マイクロ・ナノ	4
3	金属材料の強化機構	5
4	マルチスケールモデリング	6
5	ナノテクノロジー	6
6	構造敏感・構造鈍感	8
7	小レポート	9
7.1	前回の講評	9
7.2	今回の課題	9

## 1 デバイスと材料、性能

自分の興味のあるデバイス・工業製品を想像してみよう。たとえば、

- 携帯電話
- 電気自動車
- デジタルカメラ

私の場合は電池に興味があり、電池の研究をしている。なのでここでは例として電池が関係するものが挙がっている。諸君はどういうものに興味があるだろうか？導入なので対象は何でも良い。自動車でもいいし、パソコンでもいい。自分の興味があるものを考えよう。何にも思い付かなければ、前回の小レポートで選んだ題材を考えよう。

そのデバイスのどの性能を上げるとより便利になるか考えてみよう。たとえば、携帯電話はもうちょっと軽くなったらもっと嬉しいかもしれない。電池がもっと持てばもっと嬉しい。処理がサクサク動けばもっと嬉しい。前面ガラスが割れ難ければもっと嬉しい。自動車の場合は車体が軽ければ加速力・登坂力が上がるし、燃費も良くなる。電気自動車では電池容量が増えれば航続距離が伸びる。デジカメでも同様だが、デジカメの場合は暗いところで綺麗な写真を取るために受光感度が高いと嬉しいだろう。この観点では、「重視」した性能ではなく「弱点」も重要になる。良い所を伸ばすか、弱点を克服するか。まず、「どうなったら嬉しいか」という妄想を沢山しよう。

さてその性能の改善は、具体的にどのようにしたら実現できるだろうか？先の妄想は、実現可能でなければ工学的には意味がない。そこで、その妄想を実現するためにはその性能が実はどのような機序で実現されているのかを深く知る必要性がある事に気付くだろう。

開発コスト 工業製品に使われる材料は決まった材料を決まったプロセスで処理することで生産される。材料開発とは、天文学的な数にも及ぶ素材とプロセスの組み合わせの中から、1つを絞り込む作業と言える。その性能がどのように発現するのかについて理解しておかなければ場当たりの開発となり、開発はなかなか進まない。

同じ成果を出すのなら時間・コストが低い方が良いのは言う間でもない。時間が短ければライバルが開発している間に自分は完成させ、先に販売することができる。開発コストが低ければその分価格を抑えることができ、消費者にとっての購買意欲に繋がる。

## 2 注目するスケール

注目する特性がこれらのどのスケールに起因するのかに注意する必要がある。

たとえばメガネのつるの部分のように、肌触りを考えるのならば、 $10\ \mu\text{m} \sim 1\ \text{mm}$  のスケールの形状が影響を及ぼすだろう。

たとえば「電池の保ちがよくなって欲しい」という要求を考える。電池に蓄えられるエネルギー容

量は、物質量に比例する量である。単三乾電池より単一乾電池の方がエネルギー容量が大きい。単純にエネルギー容量を増やしたければ、大きな電池を作れば良いというマクロスケールの問題である。エネルギー容量は軽量化とトレードオフの関係にある。この要求は実はエネルギー容量そのものではなく単位体積あたりのエネルギー容量を増やしたい、という欲求であるということが分かる。単位体積あたりのエネルギー容量は、結晶構造から決まる電子状態というミクロスコピックな状態によって決まり、この非常に小さな単位に注目して調べるべきである。注目する機能ごとに、その性能を議論する最適なサイズ感覚というものがある。

## 2.1 マクロ・メゾ・ミクロ

材料開発においては学術的にも、工学的にも、他者とのコミュニケーションを取ることが重要である。学会で発表する、特許を出願するといった場面で自分だけ異なる定義の言葉を使っているのは意思疎通もままならない。

材料のスケールは大きく2つに分類すると、マクロ・ミクロに分けることができる。そしてその中間領域を「メゾ」として別に取り扱うことも一般的である。それぞれの領域は「このサイズからこのサイズまで」とデジタルに定義されているわけではないが、材料科学の分野でよく使われるスケール感覚では大まかに Table 1 のようになる。<sup>\*1</sup>

表 1 (table20111003a) 材料科学でよく使われるスケールの用語。なお、これらのスケールはあくまで参考の値。対象によって実際のスケールは大きく異なる。たとえば、-ポアのサイズ。(後述)

ミクロ	~ 10 <sup>-6</sup> [m]
メゾ	~
マクロ	~ 10 <sup>-3</sup> [m]

これらの語は基本的に接頭辞であり、後ろに何らかの語が続くことが多い。よく使われる語を Table 2 に示す。

-スコピック (scopic) マクロスコピックだと巨視的、ミクロスコピックだと微視的、というように対象を「観察」するときの大きさ感覚。なお、scopic は scope (照準望遠鏡、観測機) に由来。microscope は顕微鏡である。

-スケール (scale) 対象の大きさ。こちらは観察を前提としない。なお、scale は物差し、目盛。

<sup>\*1</sup> 分野や注目する対象によってスケールが異なりうる。半導体などでは原子一個のサイズで物性が制御されるため、ミクロンオーダーのサイズでもミクロスケールとは言い難い。ダムやビルなどの大規模構造物を見る場合にはミリオーダーのスケールでも「ミクロに見ると」という表現がなされる。「マクロ経済学」「ミクロ経済学」などのように、科学・工学の範囲以外にも使われる。

表 2 (table20111013a) マクロ・メゾ・マイクロ

	-スコピック	-スケール	-ポア
マクロ-			
メゾ-			
マイクロ-			

-ポア (pore) 多孔性材料の持っている孔のサイズ。マイクロポアなら小さな孔、マクロポアなら大きな孔という具合。「-ポーラス (porous) 材料」のように形容詞化して使うこともある。

IUPAC (国際純正・応用化学連合) における定義:

- マクロポア: 50 nm 以上。、濾過、イオン交換体。
- メソポア : 2 ~ 50 nm。酵素 (タンパク質) 担体。
- マイクロポア: 2 nm 以下。ガス吸着体。

## 2.2 ミリ・マイクロ・ナノ

SI 単位系において基本単位の前に尽けられる接頭辞 (SI 接頭辞)。

- m (ミリ): \_\_\_\_\_
- $\mu$  (マイクロ): \_\_\_\_\_
- n (ナノ): \_\_\_\_\_

「mm オーダー」, 「 $\mu$ m オーダー」, 「nm オーダー」, と言えば、それぞれ対応するサイズをおおまかに示す。

マイクロもマイクログラムも英語では micro で同じものである。しかし、日本語のカタカナ語としては、それぞれの意味によって別の発音で使う事が多い。マイクロスコピック・マイクログラムはどちらでも言える。マイクロメートルとは言うが、ミクロメートルとは滅多に言わない。英語の発音としては「マイクロ」に近い。とりあえず「マイクロ」が正確な表現だと捉えておき、個々に「ミクロ」を使う単語だけそのように覚える、という立場を取るのが無難。

なお、「ミクロン」は  $10^{-6}\text{m} = \mu\text{m}$  のことだが、現在学術的に用いられる正式な用語ではない。

### 3 金属材料の強化機構

機械的強度とはマクロスコピックに見ると塑性変形のしにくさであるが、この実体は現象をミクロスコピックに捉えると転位の移動のしにくさである。そのため、機械的強度を理解するためには、まずこの転位の移動を阻害するための機構がどのようになっているかを把握する必要がある。

そこでまず、金属材料の強度を向上させる代表的な 4 つの手法をリストアップしてみよう。

- \_\_\_\_\_ : 母材以外の合金元素が入ることで、原子配置のスケールで転位の移動を阻害する。
- \_\_\_\_\_ : 母組織から析出した微小な粒が、転位の移動を阻害する。
- \_\_\_\_\_ : 前もって導入された転位によって、転位の移動を阻害する。
- \_\_\_\_\_ : 結晶粒界によって、転位の移動を阻害する。

金属材料学の教科書等によく挙げられるのは上記の 4 つであるが、この他にも以下の方法がある。

- 複合材料化 (e.g., 鉄筋コンクリート, 繊維強化プラスチック): 異なる機械的特性を持つ材料と組み合わせることで変形を抑止する。
- 表面制御 (e.g., アルマイト, 木彫のニス): 強度の高い皮膜や粒界として作用する多層膜を表面に作ることで強度を向上させる。

特定の材料の強度改善のみを目的とする場合、その材料での強度を支える機構を調べるのが第一歩である。伸ばすべきを伸ばし、さらに使われていない機構があればそれを利用することを考える。これらの強化機構をスケールに注目して分類すると Fig. 1 のようになる。

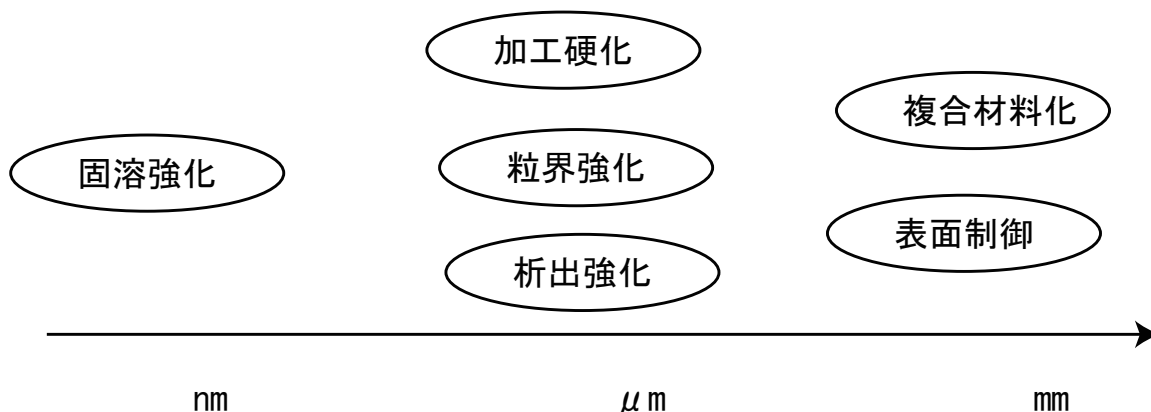


図 1 (fig20131007a)

## 4 マルチスケールモデリング

機械的性質のように、ミクロからマクロまでの広いスケール範囲での現象が特性に影響を与える物性については、詳細な解析をミクロスケールから順にマクロスケールへと、範囲を広げて研究を行うことがしばしばある。

例: 原子炉構造材料の寿命予測 構造物の寿命予測は産業上非常に重要である。特に人の足場や生活を支える大規模構造材料ではその重要性が高い。例として、橋梁や原子炉材料が挙げられる。同じコストで作っても、その寿命が尽きるギリギリまで使用してそれから作り直したいものだ。

10年保つのか、20年保つのか。最適な保守計画を立てる為に、材料の劣化を予測する必要がある。原子炉は通常鉄系金属材料で構成されるが、原子炉内部で生じる中性子線により原子が弾き出され、結晶構造に変化が生じる。これが転位の運動に変化を生ぜせしめ、機械的強度と靱性に影響を与える。あまりに長期間放置すると材料が脆化し、破壊に至り、密閉すべき放射性物質が炉外へ放出される。

機械強度的な劣化とは、結晶の原子配列の乱れによって生じるものである。よってその原子配列の乱れがどのように生じるか、進展するかを知ることができれば劣化の経時変化を知ることができる。中性子照射による機械的性質の劣化をスケールに注目して順序立てると以下のようなになる。

1. (pm オーダー) 核反応過程
2. (nm オーダー) 原子衝突過程
3. ( $\mu\text{m}$  オーダー) 欠陥拡散・成長過程 (Fig. 3)
4. (mm オーダー) マクロ過程

大きなスケールの現象は、より小さなスケールの現象に依存している。ということは、最小オーダーの現象から正確に追っていけばマクロスケールの現象も解析できることになる。この考えに基づいてミクロスケールからマクロスケールまで広範囲の現象を正確に追うという試みがマルチスケールモデリングである。(Fig. 2)

手順の概略:

1. 小さな領域について計算を行って情報を抽出する。
2. 得られたデータを使って、より大きな領域の解析のための計算を行う。
3. これらを繰り返し、マクロな機械的性質を得る。

## 5 ナノテクノロジー

ミクロスケールの中でも、サイズのオーダーがナノメートル程度のものを特にナノスケールと呼ぶことがある。ナノスケールはおおよそ原子 数個程度のサイズになるため、このスケールの制御には

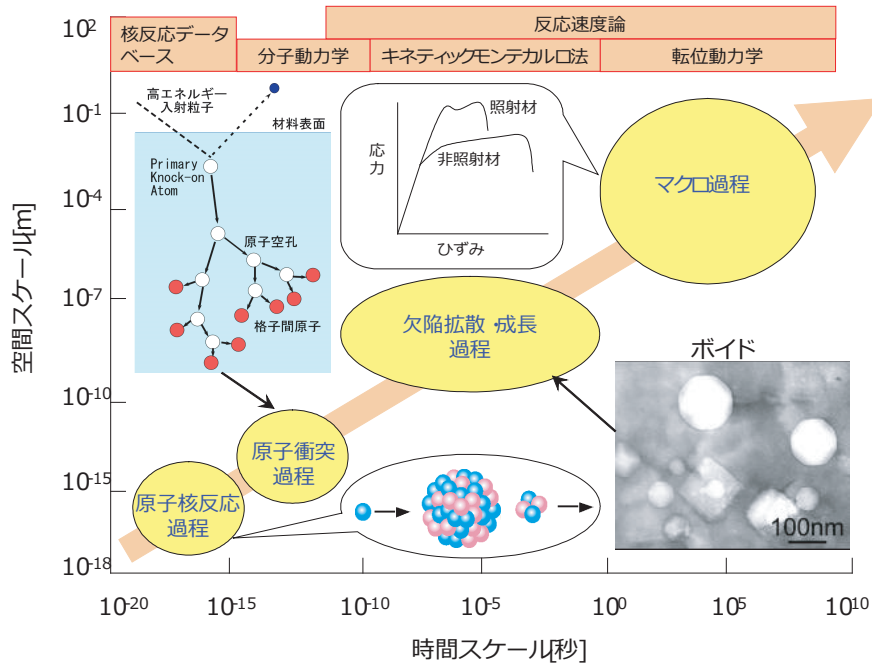


図2 (fig20111011a) 中性子照射損傷に対するマルチスケールモデリングの概念図。

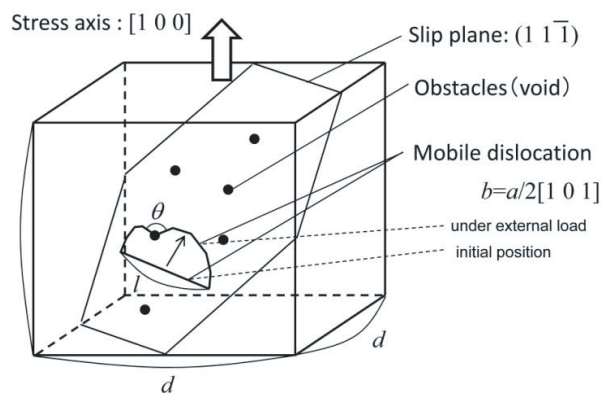


Fig. 15 A schematic illustration of a model crystal for the DDD simulations.

図3 (fig20111011b)

原子 1 個ずつを扱う程度の精度が必要になる。ナノマテリアルによって、電子・光デバイスの飛躍的な性能向上あるいは、まったく新しい性質の物質創成につながる可能性がある。たとえば、

- 電子回路のトランジスタ: コンピュータの CPU の性能向上
- 量子効果の利用
- 力学的・熱的・触媒・光学特性の変化
- フラーレン・カーボンナノチューブなどの新素材
- 太陽電池や照明などの従来デバイスの改善

既に確立している技術:

- 走査型トンネル顕微鏡
- 原子間力顕微鏡
- 電界イオン顕微鏡

今日では、原子 1 個 1 個を観察・操作することが可能となっている。なお、原子 1 個ずつを手作業で操作することは可能だが、そうやって作ったものは恐ろしく高価格になる。勿論、その価格に見合う性能が望まれる場合にはそれでも良いが、可能ならば勝手にナノ構造体を作れるような手法が望まれる。

たとえば、数十 nm オーダーのサイズでマクロポアを形成し、それを封孔処理したいとする。酸化物でこのような組織を作れば、金属組織を酸化から守り、かつ耐磨耗性や装飾性が向上する。いわゆる「表面制御」(Fig. 1) の一種である。さあ、諸君ならどのように作るだろうか？工業的に安価に作る方法の一つが \_\_\_\_\_ である。アルミニウムを陽極酸化することで蜂の巣状の孔が生成される。これを加圧水蒸気で封孔処理をすることで、数十 nm ~ 数百 nm オーダーの組織が出来上がる。これにかかるコストは極めて低く、家庭用の製品 (やかん、鍋など) にも使われるくらいである。

## 6 構造敏感・構造鈍感

理想的な完全結晶はこの世に存在しない。この世界に存在する材料と付き合うということは、同時にそこに内包される欠陥とも付き合わなければならないことを意味する。材料開発者が第一に注目すべきは、注目している材料特性が欠陥に強く依存しているか否かということである。その依存の強さを以って、おおまかに「構造敏感・構造鈍感」という言葉で分類される。これらの考え方も、特性改善のために注目するスケールの絞り込みに有効である。

- 構造敏感 (structure-sensitive): 結晶中の欠陥によって強く影響を受ける性質。
- 構造鈍感 (structure-insensitive): 結晶中の欠陥によってあまり影響を受けない性質。

以下の性質を構造敏感・構造鈍感で分類してみよう。



1. 加工硬化 \_\_\_\_\_
2. 結晶のすべり \_\_\_\_\_
3. 降伏 \_\_\_\_\_
4. 弾性定数 \_\_\_\_\_
5. 熱伝導度 \_\_\_\_\_
6. 破壊 \_\_\_\_\_
7. 比熱 \_\_\_\_\_
8. 膨張係数 \_\_\_\_\_
9. 密度 \_\_\_\_\_
10. 融点 \_\_\_\_\_
11. 電気抵抗 \_\_\_\_\_

## 7 小レポート

### 7.1 前回の講評

窓ガラスの靱性を挙げている人が多かった。さて、現実の窓ガラスはそんなに靱性が高いだろうか。これを重視してガラスが選ばれているのだろうか。「重視される」と「望ましい」を混同してはいけない。

眼鏡のレンズには、プラスチックレンズとガラスレンズがある。重量、靱性のほかに屈折率という差がある。高屈折率の材料を使うことでレンズの厚さを抑えることができる。

例以外の対象 ノック式ボールペン/ ハンマー/ フライパン/ 机/ 携帯電話の充電ケーブル/ 自転車/ 自動車のアクスル部品

指摘 窓側黒板付近のカーテンを閉めて欲しい/ 黒板の時が読めない。

### 7.2 今回の課題

さて、導入部分で考えたデバイスについて、自分なら何を改善したいか。そのためには何から調べるべきだろうか。どのスケールで発現する機能だろうか。自分の知る限りの知識で構わないので、想像して述べよ。スマホなど情報端末が使えるのならば、調べられることは調べて構わない。