

材料デザイン学 第 14 回
研究手法 2/理論・実験・計算を使った研究手法
講義全体のまとめ

岸田 逸平

2015 年 10 月 1 日

目次

1	材料デザインに用いられる計算	2
2	総まとめ	3
2.1	改善したい特性に注目	3
2.2	特性発現の機構・モデル化・理論	3
2.3	特性の強化・改善	4
3	前回小レポート講評	5
4	授業評価アンケート	5
5	小レポート	5
付録 A	想定問題	5

1 材料デザインに用いられる計算

前回は、科学的な研究・開発手法として実験・理論・計算を取り上げ、実際の実験による開発の前に対象を絞り込む事の重要性について論じた。次の材料開発のために、実際に実験をする前の段階で性能を予測し、ある程度評価しておきたい、ということである。理論と計算を組み合わせることによりより予測が可能となる。本節では、材料開発においてよく用いられる計算をいくつか紹介する。

手計算 理論が十分によく確立されている領域や対象が十分に単純である場合には計算機を用いる間でもなく評価が可能である。^{*1}

- 複合材料の密度・機械的特性。
- 材料の元素としての価格。

有限要素法 (Finite Element Method, FEM) 物体を有限の区画に分割し、それぞれの区画ごとに現象を解析する。

モデル化とその理論的背景は、主に連続体力学。

主に _____ スケールの現象の解析に適用される。

- 応力と歪み、物体の変形を解析。
- 磁区と磁性の解析。

分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD) 現象に関係する物質を分子単位で取り扱い、分子の運動を解析する。気体や液体の挙動を解析するのに強みを発揮する。

モデル化とその理論的背景は、主に静電引力を説明する電磁気学と、原子半径を構成する(経験的な)斥力ポテンシャル。

主に _____、 _____ スケールの現象の解析に適用される。
第一原理計算と組み合わせた第一原理分子動力学法もしばしば行われる。

第一原理計算 (First-Principles Calculation¹, Ab-initio Calculation) 物質を、構成する原子核と電子として取り扱い、量子論(第一原理)に基いた原子と電子の挙動を解析する。

モデル化とその理論的背景は、主に量子力学。

主に _____ スケールの現象の解析に適用される。

^{*1} なお、こういった単純な算数は通常、科学的手段としての計算と呼ばれるものに含まれない。

ここに示したものが全てではない。基本的に、理論があればそれに従った計算プログラムが作成可能である。

一般に、小さな系を説明できる理論・計算を用いれば、大きな系での説明ができる筈である。大きな系でのモデル化でそぎ落とされた現象をカバーすることができるからである。しかし、小さな系を説明できる理論・計算で大きな系を扱おうとすると計算コストが莫大になり、現実的な時間で解を得ることができなくなる。体の数は、長さスケールの3乗に比例するのだ。以前紹介した
は、スケールを横断して現象を説明する理論・計算を構築する手法の一つである。

第一原理計算が全てを説明する最も小さな理論ではない。たとえば、第一原理計算では核反応を扱うことが出来ない。

2 総まとめ

2.1 改善したい特性に注目

デバイス 開発の第一歩は現状のデバイスの何を改善したいのかを明確にすることである。実際の開発現場では多くの場合、社会・顧客からのデバイスに対する要求があるだろう。

材料 材料はデバイスを構成する基となる。材料デザインの第一歩は、デバイスとして改善したい性能がどの材料のどのような特性に依存しているかを洗い出す事である。

例

- 機械的特性: _____, _____, _____
- 電池: _____, _____, _____
- その他: コスト低減, 毒性元素・希少元素の使用量削減

「その他」で示されるように、求められる性質は材料物性とは限らない。

2.2 特性発現の機構・モデル化・理論

注目している特性がどのような機構で発現するかを把握する。またどのようにモデル化され、理論が構築されるかを調べる。これらは先行研究によって確立しているかもしれないし、自分で仮説と検証によって構築することもある。

例 金属材料の4つの強化機構:

- _____
- _____
- _____
- _____

電池

- 蓄電容量と、動作電圧。
- 電極材料と充放電の現象。
- 固体電解質のイオン伝導現象と、点欠陥を介したイオン伝導機構、_____ エネルギーによる説明。

ダイオード

- 量子論・バンド理論
- ダイオードの整流作用と、_____ 型・_____ 型半導体。
- ダイオードの発光と _____ 遷移・_____ 遷移
- LED における _____ と半導体のバンドギャップ

その他

- 複合材料の _____ モデルによる弾性率。
- 構造材料の靱性: _____ 機構の粒界による抑制。
- 送電線の伝導度と比重
- 鉛フリーはんだの価格

2.3 特性の強化・改善

望ましい機構を強化するにはどうすれば良いか。あるいは好ましくない機構を抑制するにはどうすれば良いか。多くの場合、調べた理論が参考になる筈である。理論や仮説に基いて、目的を達成するための条件や方法を絞り込む。

最終的には実験しなければならないが、実験する前にどの程度のこと予測できるか、そしてどのくらい候補を絞ることができるか、が重要である。実際に実験をする前の段階で性能を予測し、ある程度評価しておくこと。これが本講義で伝えたかった「材料デザイン」である。材料デザインを行うことで、実験点数を減らし、開発コストを低減させ、よりよい材料開発ができるようになる筈である。これらの考え方自体は、材料開発に限らず、他の対象を研究する際にも有効だろう。

3 前回小レポート講評

細かい数にはこだわらず、あくまでオーダーとして求めれば良い。

全数: $101 \times 101 \times 31 \times 10 = 31310$ 点。 10^4 点のオーダー。

パラメータ毎: $101 + 31 + 10 = 142$ 点。 10^2 点のオーダー。

パラメータ毎で、二分探索を適用: $(\log_2 101 + \log_2 31 + \log_2 10) \times 2 \sim 32$ 点。 10^1 点のオーダー。
オーダーでの議論なので、 $\times 2$ してなくても大した問題ではない。

4 授業評価アンケート

5 小レポート

これまでの授業の内容、もしくは自分のレポートで選んだテーマ内容を踏まえ、試験問題を作れ。問題文、模範解答、その問題の狙いを述べる。なお、出来の良い物はそのまま試験に用いることがある。

付録 A 想定問題

試験問題を作るとしたらこんな感じになるだろう、という例を以下に挙げる。なお、試験問題がこの通りに出題されるとは限らないし、この中から 1 つも出題されないかもしれない。

Ch. 1

問 現代工業における三大材料について、セラミックス、高分子 ともう一つは何か、答えよ。(5 点)

A

問 現代工業における三大材料の相対的な性能比較を大まかにまとめ、「高」または「低」を入れて Table を完成させよ。なお、表の行については、必ず高と低が 1 つずつ入る。(3×5 点・各行完答)

Ch. 2

問 「マクロ、ミクロ、メゾ」の用語を、対象のスケールの大きなものから順に並べよ。大小関係が明瞭になるように不等号 (>) を用いること。

_____ > _____ > _____

性質	A	セラミックス	高分子
強度	高	_____	_____
靱性	_____	_____	高
熱伝導性	_____	中	_____
比重	_____	中	_____
耐食性	_____	高	_____

問 以下の文は 金属材料の 4 つの強化機構の説明である。各々の強化機構の名称を答えよ。

1. _____ : 結晶粒界によって、転位の移動を阻害する。
2. _____ : 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。
3. _____ : 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。
4. _____ : 母組織から析出した微小な粒が、転位の移動を阻害する。

問 表 1 の性質を構造敏感・構造鈍感で分類し、該当する方に _____ を入れよ。

表 1

性質	構造敏感	構造鈍感
密度		
比熱		
融点		
降伏		
破壊		
熱伝導度		
弾性定数		
膨張係数		
加工硬化		
結晶のすべり		

問 構造敏感とは何か？簡潔に説明せよ。

問 構造鈍感とは何か？簡潔に説明せよ。

問 電気抵抗は構造敏感・構造鈍感にどのように分類すべきか？その理由とともに述べよ。

Ch. 3

問 以下の説明に該当する用語を答えよ。

- _____ : 力学的特性が要求され、自重や外力に対して形状・構造を保つことを期待される材料。
- _____ : 力学的特性以外が要求され、電気的特性・光学的特性・磁気的特性といった性質を期待される材料。

問 以下の空欄に適切な語を入れて、文を完成させよ。(4×4点)

オースフォーム鋼は、高温の[1]相において鍛造・圧延などによって[2]された鋼材を焼き入れすることで、高密度に転位が導入された[3]組織が得られる高強度鋼である。

マルエージング鋼とは、[3]変態の後、[4]することで Ni, Ti 金属間化合物などを析出させ、析出強化が働かせて高強度化した高強度鋼である。

1. _____
2. _____
3. _____
4. _____

Ch. 4

問 一般的な材料の亀裂伝播メカニズムについて説明せよ。必要ならば適切な図を描くこと。

問 ジルコニアに Mg を数 % 添加した部分安定化ジルコニアは靱性が向上することが知られている。この機序について説明せよ。ただし、部分安定化ジルコニアの最安定相は正方晶、主な不安定相は単斜晶である。

Ch. 5, 6

問 Table の特性を持つ繊維とマトリックスで、

1. 繊維軸 (L) 方向の引張弾性率が 100 GPa 以上
2. 繊維軸直角 (T) 方向の引張弾性率 5 GPa 以上

の材料を設計したい。繊維強化材料の引張弾性率がスラブモデルに従うと仮定し、これらの条件を満たすのに必要な繊維体積含有率 r の範囲を求めよ。なお、繊維およびマトリックスそれぞれの引張弾性率 E_f, E_m としたとき、 $E_f \gg E_m$ の近似を用いても良い。(スペースが足りなければ裏面に続けて記述せよ。) (21 点)

引張弾性率 [GPa]	
繊維	400
マトリックス	4

Ch. 7

問 各種金属の電気抵抗率、密度、価格が Table 2 と通りであったとする。このとき、各材料を使って 1m あたりの抵抗が $10^{-4}\Omega$ となる断面積を求めよ。また、そのときの 1 m あたりの重量と価格を算出せよ。

表 2 (table20131119b) 電気抵抗率と密度、価格。

抵抗率 [Ωm]	物質	密度 [g/cm^3]	価格 [円/kg]
1.59×10^{-8}	Ag	10.50	75000
1.68×10^{-8}	Cu	8.96	700
2.21×10^{-8}	Au	19.32	4300000
2.65×10^{-8}	Al	2.70	180

Ch. 8

以下の文章の空欄を埋めよ。

結晶に欠陥が含まれない理想的な結晶、すなわち完全結晶ではイオン伝導がほとんど生じない。イオン伝導を生じさせるには電荷のキャリアとして働く _____ などの点欠陥が結晶内に含まれている必要がある。一般にイオン伝導度は _____ に比例することから、結晶中により多くのイオン点欠陥を導入することでイオン伝導性を向上させることができる。

結晶中においてイオンは、その中で最もエネルギーが _____ 状態で落ち着こうとす

る。結晶の中で、各イオンはそれぞれが感じるポテンシャルの谷底付近に存在している。その極小点で原子は静止しているわけではない。温度の効果を受けて、イオンは谷底付近で _____ をしている。そして周囲の峠を越えるだけのエネルギーを持っているものがあれば、それを越えて隣のサイトに行くことができる。この峠が _____ であり、その高さが _____ である。このエネルギーを越えるを持ったイオンのみが隣接サイトへ移動できる。イオンの持つエネルギーはボルツマン分布に従うため、活性化エネルギーと温度によって決まる一定の確率でイオンは隣接サイトに移動できることになる。

Ch. 9

問 金属 Li を負極とした場合の各正極材料候補の動作電圧が Table 3 のようになっていたとする。

- 最もエネルギー密度が高くなると予想される電極物質の組み合わせはどれか。その理由と併せて説明せよ。
- アルカリ乾電池の動作電圧と同じ 1.5 V の電池を構成するにはどのような組み合わせがあるか。

表 3 (table20140123b)

物質	電圧 [V]
A	4.2
B	3.7
C	2.7
D	1.5
E	0.1
Li	0

Ch. 10,11

問 以下は半導体についての文章である。空欄を埋めよ。

n 型半導体について述べる。完全結晶の中により価数の大きな元素を添加すると、その添加元素が _____ を放出し、電気伝導のキャリアとなる。周囲へ電子を提供するので、この添加元素は _____ と呼ばれる。

p 型半導体について述べる。完全結晶の中により価数の小さな元素を添加すると、その添加元素によって電子が不足する。電子が不足した箇所は _____ を生成し、これが電気伝導のキャリア

となる。周囲から電子を受け入れるので、この添加元素は _____ と呼ばれる。

n 型, p 型半導体のいずれも、添加元素の量を増やすほどキャリアが増えて電気伝導性が向上する。これが半導体の電気伝導度が 構造 _____ である主な理由である。このことは、金属材料の電気伝導度が 構造 _____ であるのと対照的である。

問 半導体 Si の他の半導体材料に対する材料設計上の優位性を 3 つ列挙せよ。

- _____
- _____
- _____

問 Si は発光デバイスとして使用できるか？ Si のバンド構造の特徴と併せて説明せよ。

Ch. 12

問 材料元素の政治的リスクとは何か？簡潔に述べよ。

Ch. 13

問 単結晶基板 2 枚を高温接合する際の最適条件を探索する。この時、制御可能なパラメータとその範囲・精度が以下の通りであったとする。

- 接合温度: 800, 900, 1000, 1100, 1200
- 接合時間: 1, 2, 3, 4, 5 時間
- 雰囲気: 大気, 真空

条件を網羅して、全数探索するのに要する実験点数を答えよ。

各パラメータが独立であると仮定した場合の最適条件探索手順を示し、この仮定手順において要する実験点数を答えよ。