

材料デザイン学 第 14 回

講義全体のまとめ

岸田 逸平

Last-modified: 2016/02/12 13:17:10.

1 総まとめ

1.1 「材料をデザインする」とはどういうことか？

(第 1 回 テキスト再掲)

design: デザイン, 意匠; 図案, 下絵, 素描; 設計図; 模様, ひな型 (pattern).
(リーダーズ英和辞典)

design とは日本語で「設計」となる。設計と云ったら、絵を描いて製品の形を決める、というイメージが強いだらう。形ではなく、材料をデザインする、とはどういうことだろうか？講義名の「材料デザイン学」というのは「線形代数学」や「微分積分学」といったキッチリした学問体系の名前ではなく、やや緩やかな定義の言葉である。世間一般で「材料デザインとは何ぞや」という定義があるわけではない。本講義は「材料開発の為に重要な何か」を伝えるような内容になる。

本講義では、「材料のデザイン」という言葉は「材料の性質・性能に着目し、工業製品として目的を達成するために最大限の性能を発揮するためのアプローチ」を指すことにする。

諸君は数年後には卒業・あるいは大学院を修了し、社会に出て、研究者・技術者として活躍することになる。その際により効率的な開発を行うための基礎的な知識を紹介していく。その内容は個々の精細な知識ではなく、開発のための手段選択・方法論といったものだ。

1.2 「材料をデザインする」とはどういうことだったのか？

この授業で言うところの「材料デザイン」とは、デザインの意味の中の「設計図」に近い。実際にそれを製造する前に、コストの安い設計図において機能や性能の評価・検討をすることである。言わば、実際の商品開発の手法を、それを構成する材料開発に適用したものととも言える。

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。

1.3 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

1.4 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。理論や仮説に基づいて、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なかった「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。

2 その他

2.1 試験

試験には、手書き A4 用紙 1 枚 (両面書き込み可) で、それのみ持ち込みを認める。ただし、解答と併せて提出してもらおう。試験 1 週間後以降、2 月中の間に B525 に来れば、持ち込んだ資料を返却する。学籍番号、氏名を記入しておくこと。

分かっていると思うけれど、コピーやプリンタの痕跡があったら不正行為なので、後期の全ての科目の評点がゼロになる。持ち込まない方がマシ、ということになるのでご注意ください。

電卓持ち込み可。カラー液晶のものは不可。スマホ不可。

2.2 授業評価アンケート

オンラインのものは全学的なものようだ。前回せっかくオンラインで記入してもらったが、この授業に対する君たちの真摯な意見が大学事務から私まで届くか今一つ確信が持てない。確実を期すのならば機械工学科で準備したアンケートに記入してほしい。体制側の都合で二度手間させるな、というのならまさにその通りだ。無理にとは言わない。

2.3 冬休みの宿題レポート講評

課題の問題文に以下のように書いてあった。

それについて、材料の研究・開発によってその改善に寄与できることを述べてもらいたい。

減点理由

- 材料とほとんど関係がないテーマ設定・記述
- 開発指針に具体性が欠ける
- 不正確な表現・明確な誤り
- 広範すぎる学問分野
 - － 材料科学・材料工学は材料を扱う広範な学問領域を指す言葉なのでほぼ全てに当て嵌り、述べる意味がない。
- 調査・記述が不十分

- 論理の不整合
- 誤字・脱字
- 分かり難い図、図の不使用
- 「だ・である」「です・ます」の混在

テーマ選択の内訳を Table 1 に示す。

表 1 (table20150120a)

テーマ	2015	2016
CPU	1	
LED	1	
誘起 EL	1	
イヤホン	1	
ガスセンサ	1	
電子レンジ	1	
PTC サーミスタ	1	
電動アシスト自転車	1	
水質浄化装置	2	
ガラス	2	
排気ガス触媒	3	
電池	3	
USB メモリ		1
燃料電池	2	1
3 D プリンタ		1
カーボンナノチューブ		1
ゴム		1
ターボチャージャー		1
液晶		1
加湿器		1
強誘電体・誘電体		2
HDD, 磁石, 永久磁石	3	2
太陽電池	7	15

2.4 前回小レポート講評

特になし。

2.5 今回小レポート課題

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こと。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 2 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。

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

表 2

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		

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 3 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。

Ch. 8

以下の文章の空欄を埋めよ。

表 3 (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

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 4 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 4 (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。