

計算熱力学および計算組織学に基づく安定相・安定組織の材料デザイン

Materials Design of Stable Phases and Stable Microstructures

Based on Computational Thermodynamics and Microstructure Simulations

名大工¹, °小山 敏幸¹

Nagoya Univ.¹, °Toshiyuki Koyama

E-mail: koyama@material.nagoya-u.ac.jp

新奇な物質・材料の探索には、しばしば準安定状態や非平衡状態に着目する方法論が活用されてきた。新材料発見の観点において、このアプローチは正攻法であるが、工学的に有用な材料は、安定相また安定組織から構成される場合が多い。これは材料に種々のプロセスを施す自由度が増すためである。例えば希土類磁石の分野において $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 相は、ネオジム磁石として広く知られているが、B 添加は単相の磁気特性向上とはさほど関係がなく、B 添加の本質的役割は、 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 相を高温まで安定な平衡相とした点にあることが、最近、第一原理計算にて議論されている。つまり $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ が平衡相でその結晶粒界を液相で被覆するプロセスが可能になったことが、今日のネオジム磁石実現の要諦である（もし $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 相が準安定相や非平衡相であったならば、液相に接触した瞬間、平衡相へ変化してしまうので）。他方、安定組織に関しては、ジェットエンジンに使用される Ni 基耐熱合金の γ' 析出組織がその典型例であろう。 γ' 析出組織は二相組織で、母相が fcc の固溶体相、析出相が L_{12} 構造の金属間化合物である。サブマイクロスケールの γ' 析出粒子が極めて精緻に配列した内部組織が形成され、この組織は粗大化しにくいことが知られている。高温材料であるので通常、固体内の原子拡散により、析出相は粗大化し材料強度は低下するが、 γ' 組織の場合、析出相間の弾性相互作用により、隣接した析出粒子が互いに同サイズになろうとするため粗大化が遅れる。その結果、高温であっても長時間、安定な組織が出現しやすい。

以上のように、安定相であること、安定組織であること、またいかに安定化させるか、を理解・予測する方法論は、広く社会を支える材料の開発において、その根幹に位置するノウハウであろう。近年、材料における相の安定性、および複雑な組織形態形成を扱う理論計算体系が整備され、それぞれ、計算熱力学および計算組織学と呼ばれている。計算熱力学で使用される手法が CALPHAD (Calculation of Phase Diagram) 法であり、計算組織学で使用される手法がフェーズフィールド法である（これら両者は相補的な関係にある）。さらに最近では、機械学習のノウハウと、計算熱力学および計算組織学を結びつけた解析法が進展している。安定相や安定組織で、単純な材料はすでにほとんど発見されていると考えられるが、ハイエントロピー材料に代表されるように、多成分系および多相組織において未開拓な安定相および安定組織が多数存在することが昨今、明らかとなってきた。多成分系および多相組織では組合せ爆発が容易に生じるため、材料探索は容易ではない。そこで計算熱力学、計算組織学、および機械学習の連携が、これを打破する方法論として注目を集めている。本講演では、当該分野における最近の発展に関して解説するとともに、安定相および安定組織の視点から眺めた今後の材料設計について議論させていただきたい。

謝辞：本研究の遂行には、新学術領域研究 ハイエントロピー合金(課題番号 18H05454)、および JST SIP(統合型材料開発システムによるマテリアル革命)のご支援をいただきました。