

序 文

実体を持つ全ての“ものづくり”の根底には「材料」があり、新材料の開発や既存材料の性能改善は、ものづくりの根幹を支えるとともに、製品・デバイスの競争力を高める源泉である。近年、日本学術会議材料工学委員会において、材料工学が「材料の創製と高機能化を極める工学」と定義された。“創製”とは新材料の開発、また“高機能化”とは既存材料の改良であり、まさにこれら両輪を“極める工学”が「材料工学」である。“極める”ためには方法論が必要であり、現在の主流は、「実験」、「理論」、「シミュレーション」、および「データベース」の組み合わせであろう。少し前までは、実験・理論に続く第3の手法としてシミュレーションがクローズアップされた時代があったが、最近では、“ビッグデータ”という言葉に象徴されるように、データベースも大きな地位を占めるに至った。以上の四者は、分野によってウェイトが異なるのが通常であるが、機械・材料工学の特徴は、対象の挙動が複雑系に属す場合が多いため、これら四者がバランスよく必要であるという点にある。すなわち、四者全てが調和しつつ発展してこそ、“極める”方法論が、真の意味で確立される。

本書は、日本学術振興会第176委員会「加工プロセスによる材料新機能発現」(以下「176委員会」と記す)の編纂によるものであり、当委員会は加工・変形プロセスを用いて、ナノ・メゾレベルで金属、セラミックスおよび高分子材料の構造・配列を調整することにより、新たな材料機能を発現させることを目的として設置されている。176委員会の特徴は、七つのサブグループ：「加工プロセス」、「三次元可視化」、「シミュレーション」、「金属材料」、「セラミックス材料」、「高分子材料」、および「医療材料」の連携にあり、当委員会において、最近の上記四者：「実験」、「理論」、「シミュレーション」、および「データベース」の発展が、種々の材料を横断しつつ具体的手法をも含めて議論されてきた。特に176委員会第II期(平成21年10月より5ヵ年)における一連の議論を通して、まさに現在、「材料工学自体が従来の枠組みを越えて、次の新しいステージへとシフトしようとしている」ことを肌で感じるとともに、この動

きを、次世代を担う研究者・技術者と共有することを目的に本書を企画させていただいた次第である。

なお、対象は極めて多岐にわたり、全てを網羅することは、主題が薄れるように思われるので、本書では、近年大きな進展を見せている「三次元(3D)材料組織・特性解析」を中心に、その基礎から最新の応用までを取り上げることとした。また、材料特性については、176委員会「加工プロセスによる材料新機能発現」のメインテーマである「力学特性」に重点を置き解説している。

本書が、材料工学・機械工学の新時代を担う実践的な研究者・技術者にとって、少しでもお役に立つところがあれば望外の喜びである。当該分野の人材が社会で活躍することにより、我国の世界に冠たる材料・加工・解析技術が、今後もその国際的先端性・競争力を持続できるとともに、新しい「ものづくりの実践的知的基盤」の創出により、科学技術分野がさらに進歩することを希望している。

最後に、本書の経費の一部は、(社)日本工業倶楽部から独立行政法人日本学術振興会事業推進のための「学術振興特別基金」へ寄せられたご厚志のなかから充てさせていただいたことをご報告するとともに、(社)日本工業倶楽部に対し感謝申し上げる次第です。

2014年4月

新家 光雄

日本学術振興会第176委員会 委員長
(東北大学金属材料研究所 教授)

本書の背景と目的

最先端的な分析手法を駆使して得た実験情報をより効率よく活用し、ハイスループット材料開発につなげるには、実験とモデリングの融合が重要ということが長年認識されてきたが、いまだそのギャップが大きいのも事実である。当該分野における最近の潮流として、材料組織観察が三次元(3D)化されたことや、幅広いスケールの組織中の弾性ひずみ・塑性ひずみを測定する手法が普及し始め、これは材料内部の各種不均一情報がデジタル化されたことを意味しており、実験とモデリングとのマッチングは近年飛躍的に向上し始めている。直近では、フェーズフィールド法と微視的弾性論を連携させたモデリング手法において、組織形成過程から応力-ひずみ曲線の予測まで可能になりつつあり、実験で得た材料組織のデジタル情報と組み合わせれば、実験とモデリングの融合が現実的に可能になる状況にある。

このような環境の中、3D 材料組織可視化手法(3D 顕微鏡の独自開発を含む)、位相・微分幾何学に基づく3D 像の定量解析手法、各スケールでのひずみ測定的手法(中性子線、電子線利用)の構築が精力的に進められ、同時にフェーズフィールド法を中心とした組織形成モデリングとマイクロメカニクス(微視的弾性論)による機械的特性予測モデリングにより組織形成から応力-ひずみ曲線までのモデリング法構築が進められた。これら先端的3D 形態解析・モデリング手法の開発が同時進行したことにより、定量評価された3D 材料組織、組織内ひずみ測定の実験結果と、プロセス・特性をモデリング(フェーズフィールド、(結晶塑性)有限要素法、マイクロメカニクス(微視的弾性論)など)により結び付け、プロセス-組織-特性(-性能)の関係を効率的に関連付ける「組織材質予測・解析・理解の総合モデルの構築」が現実的なものとなってきている。

しかし、以上の個々の分析・解析・計算法の進展は大きいものの、実際に力学特性と組織情報の関連性を真に定量的に検証するには、実験と計算の両面からの、種々の材料における組織形態情報と力学特性情報の集積が必要であるという新たな課題が浮上した。これを受けて、現在、3D 材料組織のデジタル

(数値)化技術の普及と階層的ひずみ測定技術の拡大、および組織形態情報と力学特性情報の集積を実現すべく、日本学術振興会第 176 委員会内の「材料ゲノムアーカイブ化 WG」において、3D 組織のデータベース化(拠点：鹿児島大学)の受け皿づくりが開始されている。

本書は、この流れに密接に連携し、「3D4D 材料組織ベースのモデリング技術(当該分野は最近、“材料インフォマティクス”と呼ばれている)の基礎と応用」について、広く情報を共有することを意図したものであり、当該分野における 3D 材料組織解析法および不均一な 3D 材料組織形態情報を直接考慮したイメージベースの材料特性解析に関する、実験とシミュレーションの両面からの、我国初の入門的解説書である。

本書の構成は以下のようにまとめられる。第 I 部は実験編で、当該分野における最新の実験手法と解析手法の解説である。第 II 部は計算編で、フェーズフィールド法を軸足とした不均一組織形態のモデル化法および組織形態を直接活用した材料特性計算法に関する説明である(なお章番号については、第 I 部と第 II 部でそれぞれ独立に付してあるので注意されたい)。付録には、3D 組織に関するアーカイブ情報および 3D 組織シミュレーションのプログラム情報等を集録した。実践的な研究・業務に役立つと思う。本書をきっかけとして一人でも多くの方々に、3D 材料組織解析について興味をお持ちいただければと願う次第である。

最後に、本書執筆にあたり、学振 176 委員会からの出版をお勧め下さいました新家光雄先生はじめ学振 176 委員会のメンバー各位に心からお礼申し上げます。また内田老鶴圃の内田学氏からは、常に暖かい激励をいただきました。あらためて各氏に深く感謝いたします。本書で引用した図面の多くは共同研究で得たものであり、共同研究者各位に敬意を表します。

2014 年 4 月

足立 吉隆・小山 敏幸