

企画にあたって

大塚 誠¹ 杉浦夏子² 高山直樹³ 寺本武司⁴
 徳永透子⁵ 山本剛久⁶ 木口賢紀⁷

2019年に再編された日本金属学会第3分野では、熱力学・状態図・相平衡、拡散・相変態、合金・アモルファス・準結晶、組織制御技術、再結晶・粒成長点、集合組織、組織観察・分析、計算材料科学・材料設計、データ科学など材料工学の基盤となる幅広い分野を対象とする。原子、分子、結晶構造に加え、拡散、転位論、界面・粒界、相変態など様々な物理と化学との複雑な絡み合いによって形成される材料組織やその形成機構を扱う点こそが物理でも化学でもなく金属工学、材料工学の特徴と言えるだろう。金属材料の根幹をなす社会基盤材料の加工、接合、強度、破壊を考える上で材料組織学は不可欠であり、磁性、スピントロニクス、電子伝導、イオン伝導、触媒、太陽電池などIoT社会の発展に不可欠な機能材料においても材料組織学の重要性に変わりない。

材料の研究は、どこことなく泥臭さを伴う分野であるが、今世紀に入って20年が経った現在、コンピュータの著しい進歩に伴って計算材料科学が急激な発展を遂げつつある。既に、材料研究に従事する実験系の研究者にも広く普及しつつあり、本紙読者においても注目を集めるところと思われる。小規模な分子、結晶構造の比較的小規模な構造モデルの第一原理計算や分子動力学法であれば、専門家でなくとも計算可能である。一方、材料組織学においては、膨大な原子数からなる構造モデルに対する計算が必要となり、億を超えるような超巨大構造モデルが必要となってくる。そのため、数百原子スケールを扱う第一原理計算と組み合わせたマルチスケール計算として、Phase Field法をはじめとする様々な材料組織形成に関する計算材料科学が発展してきた。しかし、実験系の読者にとっては新規参入の障壁はまだ高いのではないだろうか。

本紙では、分子軌道法やバンド計算など第一原理計算に関する特集(例えば、本誌53巻第9号(2014年))や多くの解説記事が掲載されている。近年、マテリアルズインフォマティクスと呼ばれるデータ駆動型の材料科学が興隆し、一大学術分野を形成しつつある。このような世界的潮流の下、材料科学に従事する実験系研究者であっても何らかの形で避けては通れない状況となってきた。最近では、足立吉隆教授による「マテリアル・プロセス・計測インフォマティクスを一層推進するための最新数学・情報工学の基礎と材料工学の適用例」と題した特集が本誌58巻第1号(2019年)に組まれており、主に理論的側面から最近の動向が解説されている。しかし、その対象となる学術は多様であるとともに、材料組織学の分野

において具体的にどのような応用に活用できるのか?どこに限界があるのか?より具体的な研究事例に重点を置いた特集も、実験系研究者が多いと思われる本誌読者にとって有益であろう。そこで、本企画では、上記特集号と関連性を持たせつつ独立した記事となるよう配慮し、材料組織形成の具体的な研究に計算材料科学がどのように貢献するかという観点から、溶質クラスター、粒界構造、凝固におけるミクロ偏析、結晶成長といった様々なスケールでの組織形成に関する最新の研究成果について、第一線で活躍する4名の研究者に解説していただいた。宮本吾郎准教授(東北大学)には、「鉄鋼材料における侵入型溶質原子—置換型溶質原子のナノクラスタリング」と題して、表面窒化処理による鉄鋼材料の硬化挙動と、それに関わる窒素原子—置換原子のナノクラスタ形成の起源について、実験と第一原理計算により明らかになった成果について解説していただいた。溝口照康教授(東京大学)には、「結晶界面インフォマティクス:構造決定と構造機能相関」と題して、仮想スクリーニングやベイズ最適化を用いた機械学習による粒界構造決定法と界面の構造機能相関について解説していただいた。大野宗一教授(北海道大学)には、「凝固組織のハイパフォーマンス・コンピューティングとクロススケール・アプローチへの新展開」と題して、スーパーコンピュータを駆使した、超大規模分子動力学法による均一核生成や超大規模フェーズフィールド法による凝固組織形成に関する最新の研究成果、そしてミクロからマクロまでのマルチスケールをシームレスに融合するクロススケール・アプローチについて今後の展望を解説いただいた。原田俊太講師(名古屋大学)には、「機械学習を活用したSiC高品質結晶成長条件のデザイン」と題して、次世代パワーデバイス半導体として期待されるSiCについて、溶液成長による高品質結晶成長の大型化の課題と機械学習と数値最適化を活用した結晶成長の最適化方法について解説していただいた。

本特集が、本紙読者の皆様にとって材料組織形成における計算材料科学に足を踏み入れるきっかけとなれば幸いです。最後に、本特集号へのご執筆をご快諾下さいました執筆者の先生方に厚く御礼申し上げます。



大塚 誠 杉浦夏子 高山直樹 寺本武司 徳永透子 山本剛久 木口賢紀

¹東北大学多元物質科学研究所; 准教授 ²日本製鉄株式会社; 上席主幹研究員 ³JFE スチール株式会社; 主任研究員 ⁴神戸大学大学院工学研究科; 助教 ⁵青森県量子科学センター; コーディネータ ⁶名古屋大学大学院工学研究科; 教授 ⁷東北大学金属材料研究所; 准教授

Preface to Special Issue on Cutting Edge of Computational Materials Science on Microstructure

Keywords: *computational materials science, materials informatics, microstructure, interface, defect*

2020年1月28日受理[doi:10.2320/materia.59.127]