

1991 No. 3

金材技研

ニュース

科学技術庁

金属材料技術研究所

「材料設計」特集

「材料設計の現状と展望／自然言語で入力する材料設計システム／ $\alpha_2$ 相で強化した新Ti合金／窓関数の補正で格子定数差を精密測定」

## 究極の材料研究—材料設計の展開

— プロセスはマクロからマイクロへ —

材料科学の専門家の間ではかなり定着してきた材料設計という言葉も、一般にはまだなじみが薄い。希望の特性を持った材料を得るために必要な、材料の組成とプロセスを提示するのが材料設計である。ちょうど、好みに合った住宅を建築する際に、①どのような建材を使用し、②どのような間取りに、③どのような工法で組立てるかを明示した設計図を作るのと似ている。材料設計技術が完成した暁には、希望の特性をコンピュータに入力するだけで必要な組成とプロセスが打ち出され、あるいはそのような要求を満足する材料は存在しないことが表示されるようになるであろう。

当研究所は、材料設計技術を確立することが材料研究の究極の姿であると考えて、永年にわたり主としてニッケル基超耐熱合金とチタン合金の設計法の研究を続けている。そして、ナショナル・プロジェクトに参画して高効率ガスタービンのブレードに使用する新合金を材料設計法により開発するなど、多くの成果を挙げてきている。

冒頭で述べたような材料設計は、材料の組成とプロセスを与えたときにどのような組織が得られるかという第1段の推論と、そのような組織の材料はどのような特性を持つかという第2段の推論を組合わせて行われる。この第1段の推論は、基礎理論のみから行える状況には達していないが、熱力学的あるいは統計熱力学的な手法でかなりの

予測が可能になりつつある。第2段の推論は第1段の推論よりもさらに困難で、現在は特性値を組織の関数として表わす経験式を作る段階である。

一方、材料の研究自体がマクロからマイクロへと進んでいるので、材料設計の対象もマイクロへと向っていくのは当然である。材料の特性は、①その材料を構成している原子の種類、②その配列、および③それらの結合状態によって決まるので、原子を1つ1つ積み重ねて材料の微細な構造や微細な組成分布などを制御するマイクロなプロセスを用いた新素材の開発にも、将来は材料設計法が適用されることになろう。

しかし、このような基礎的で長期間を要する研究課題を1機関、1か国のみで実施するのは能率的ではない。こうしたことから、当研究所等の提案による日英共同研究「新素材の原子配列設計制御」が、我が国の新技術事業団を推進機関として、英国の理工学研究会議の協力の下、平成2年3月から開始された。原子・分子レベルでの材料設計手法に関して基礎的に研究するこのプロジェクトは、英国のケンブリッジ大学とインペリアル・カレッジ（ロンドン大学）を実施の場所としている。

当研究所は、この国際共同研究において代表研究者やグループリーダーとして重要な役割りを分担するとともに、研究者も派遣してプロジェクトの推進に大いに寄与している。

# 進む材料設計のコンピュータ化

——知的機能を代行する発想支援システムが完成——

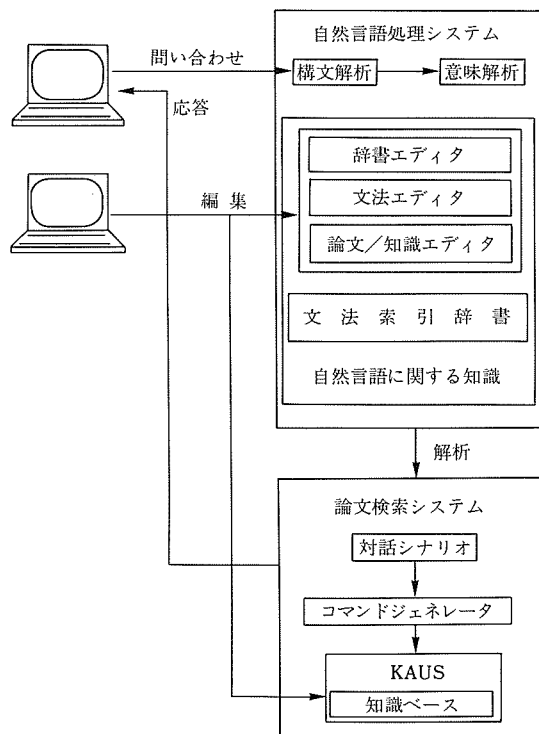
近年のコンピュータ技術においては、スーパーコンピュータに代表される高速化とともに、コンピュータに人間の知的機能を代行させようとする努力がなされている。ファクトデータベースの利用は既に進んでいるが、従来は単純な事項の検索がほとんどであって、材料設計のような知的判断が必要な場合への利用は、まだまだ研究段階である。当研究所では、昭和61年度から科学技術振興調整費により「化学物質設計等支援のための知識ベースシステムに関する研究」(金材技研ニュース、1989年、No. 5 参照)を進めてきた。このシステムは、利用者が自然言語によって質問ができ、その質問に対してコンピュータが論理的な判断を加味した解答を行い、さらに矛盾する知識を反意語の検出により指摘するなどの機能を持っている。このプロジェクトも最終年度を迎え、システムも一応の完成をみた。

今回完成したシステムは、ニッケル基超耐熱合金の開発に関する研究論文の内容を知識として持っている。その構成は図に示したようになっており、利用者がキーボードから自然言語によって質問を入力すると、システムが言語解析を行い、自分の持っている知識を解答として利用者に提示する。開発当初のシステムは関連する知識の検索だけを行うものであったが、現在ではさらに複雑な推論機能を加えて、基礎的な知識を加味した判断も行わせるように改良した。また、知識ベースの管理も全体の知識のほかに、利用者個人の知識ベースを付け加えて推論させることもできて、利用者の個性に合った使い方ができるようにしてある。

知識ベースでは推論機能の優れていることが最重要であるが、さらに知識の量と質も大きな問題である。そこで、新しい知識の入力はもちろんのこと、語彙を豊富にするための単語登録や言葉の理解力を向上させるための文法登録などのために、利用者が容易に作業できるようなエディタを用意した。これらのうち知識については、コンピュータが論理的な処理を行えるような形式で記述される必要がある。しかし、自然言語で表現された文

章の論理的な構造解析は技術的にも難しい問題を含んでいる。したがって、今回完成したシステムでは、知識エディタを通してコンピュータと利用者との対話をしながら知識の論理構造を決定し、入力するようになっている。しかしながら、コンピュータは知識の収集や判断の早さなどの点で、まだまだ人間には太刀打ちできない。したがって、このような対話形式の知識入力には膨大な手間と時間が必要であり、これがシステム構築上の最大の難関となっている。

最初のほうで“一応の完成”と書いたのは、現状ではすべてを自動的に行えるまでには至っていないからである。したがって、このシステムを本当の完成に近付けるためには、知識を自動的に抽出する研究が、次の重要な研究課題であろうと考えている。



材料設計支援システムの構成図

# $\alpha + \alpha_2$ 型耐熱チタン合金の開発

## —— 材料設計が生み出す新型合金 ——

現在使用されている耐熱チタン合金は、六方晶構造の  $\alpha$  型合金が主流である。チタン合金では、アルミニウムの含有量が 8% を超えると金属間化合物の  $Ti_3Al$  をベースとする  $\alpha_2$  相が析出し、脆くなると考えられていた。このため、実用合金では  $\alpha_2$  相の析出を避けるように合金組成が調整されている。しかしながら、 $\alpha_2$  相による延性低下の程度はその析出量と形態に依存することから、 $\alpha_2$  相の析出量と形態を精密に制御するような設計ができれば、高温強度特性が優れている  $\alpha_2$  相を強化相として利用することも可能になる。こうしたことから、当研究所は材料設計に関する研究の一環として、 $\alpha_2$  相を積極的に利用した  $\alpha + \alpha_2$  型耐熱チタン合金の開発を進めている。

$\alpha + \alpha_2$  型耐熱チタン合金の精密な設計には、まず、 $\alpha$  相と  $\alpha_2$  相の平衡関係を詳しく知る必要がある。そこで、Ti-Al-Sn-Zr 系合金について  $\alpha$  相と  $\alpha_2$  相の平衡を熱力学的に解析して、各元素間の相互作用係数などのパラメータを求めた。これらのパラメータで  $\alpha$  領域と  $\alpha + \alpha_2$  領域の境界を計算した結果、図 1 のように文献に発表されている実験値とよく一致しており、求めたパラメータは妥当なものであることがわかった。

つぎに、この熱力学パラメータを使用して  $\alpha_2$  相

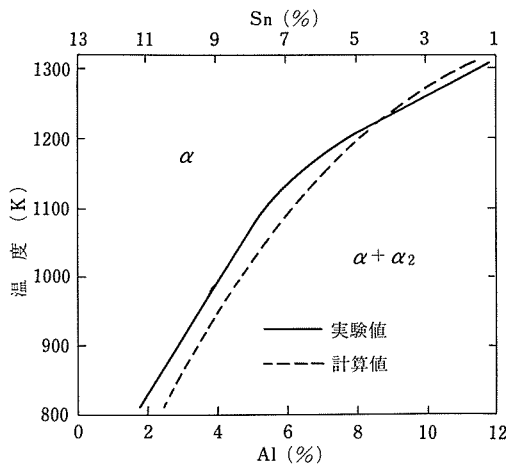


図 1 85Ti-2Zr-13(Al+Sn)合金における  $\alpha$  領域と  $\alpha + \alpha_2$  領域の境界

の析出量と  $\alpha$  相の固溶強化度を精密に制御した多数の Ti-Al-Sn-Zr 系合金を設計し、この設計に基づいて合金を製造してその機械的特性を調べた。溶体化後に炉冷した各設計合金の特性に及ぼす  $\alpha_2$  相析出量 (873K に対する計算値) の影響を図 2 に示した。0.2% のクリープひずみを生じる時間は  $\alpha_2$  相の析出量が多い合金ほど長時間であり、 $\alpha_2$  相がクリープ特性の向上に著しい効果を有することが確認された。

一方、0.2% 耐力は  $\alpha_2$  相の析出量によってはあまり変化しないが、室温の延性は  $\alpha_2$  相の析出量が 10vol.% を超えると急激に低下した。以上の結果から、 $\alpha + \alpha_2$  型耐熱チタン合金の最適設計条件は、 $\alpha_2$  相の析出量を 10vol.% 前後にすることであると判断された。

今後、熱処理で制御される組織因子 (結晶粒径や  $\alpha$  相と  $\beta$  相の比率など) や強化元素の影響を解明し、これらを合金設計に取込むことにより、さらに特性の優れた合金の開発を目指している。

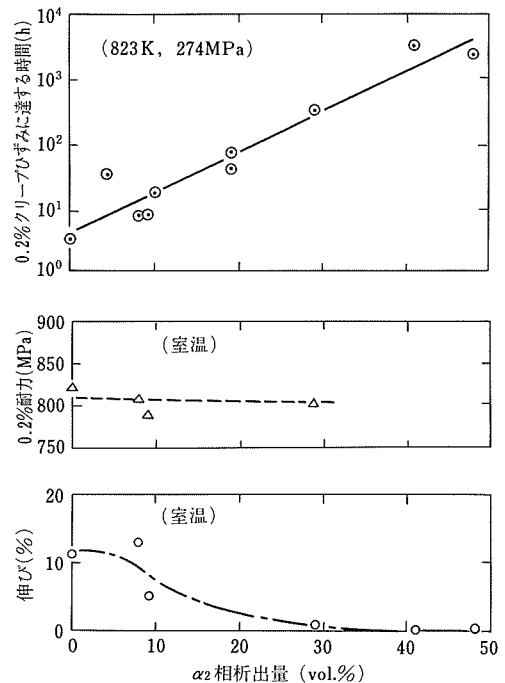


図 2 設計合金の特性と  $\alpha_2$  相析出量 (計算値) の関係

# X線回折の収差を精密に補正

— 0.4° 差のピークを明瞭に識別 —

当研究所が開発を進めてきたニッケル基超耐熱合金は、面心立方晶の $\gamma$ 相と同じ面心立方晶の $\gamma'$ 相とから構成されている。この合金のクリープ特性は、 $\gamma$ 相と $\gamma'$ 相の格子定数の差に密接に関係し、この差がある値のときに最良の結果が得られる。このような合金の材料設計においては、格子定数の正確な情報が必要であり、そのためには格子定数の正確な測定技術が不可欠である。

格子定数は、通常X線回折パターンのピークの位置から求められる。ところが、上述のニッケル基超耐熱合金では $\gamma$ 相と $\gamma'$ 相の格子定数の差が極めて小さいために、X線回折装置の光学系の収差（これを窓関数という）によるボケの中に隠れてしまって、ピークを区別することができない。しかし、近視や乱視の人でも適切な眼鏡を使えば細かい物がはっきり見えるように、X線回折装置でも適切な窓関数を使ってデータを補正すれば、近接したピークの識別が可能になる。この窓関数は、装置ごとに異なるのみでなく測定条件によっても変わるために、ニッケル基超耐熱合金の $\gamma$ 相と $\gamma'$ 相のピークを識別できるような窓関数の精密な測定は、行われていなかった。

当研究所は、結晶構造が既知で、ひずみや結晶子の大きさによる回折ピークの広がりが無視できるシリコン標準（NBS-640B）を標準物質に選定してX線回折を行い、得られた測定データに複雑な数値計算を施して、正確な窓関数を求めた。そ

の一例が図1である。ニッケル基超耐熱合金をX線回折したときの生のデータを図2の(a)に実線で示したが、統計変動による誤差を除去しても、点線のように $\gamma'$ 相から回折された $\text{CuK}\alpha_1$ と $\text{CuK}\alpha_2$ に相当する2つの幅広いピークが認められるだけである。ところが、先に求めた窓関数を用いた数値計算によりこのデータに補正を加えると、図2の(b)に示したように、 $\gamma$ 相からの2つのピークが現われてきた。

これにより、わずか0.4°ほどしか離れていないピークをはっきり区別できるので、 $\gamma$ 相と $\gamma'$ 相の格子定数とその差を、容易にしかも正確に計算することが可能になった。この手法を利用すれば合金中の $\gamma'$ 相の格子ひずみの測定も可能であり、合金設計に必要な重要な情報を得ることができる。

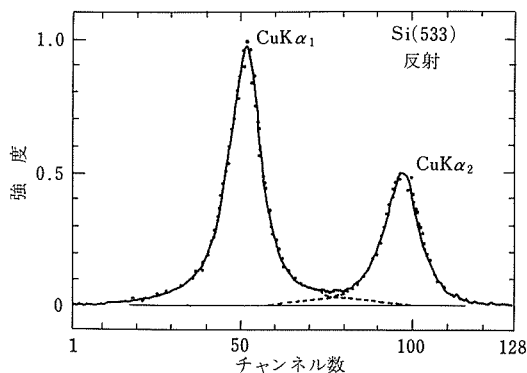


図1 窓関数の測定例

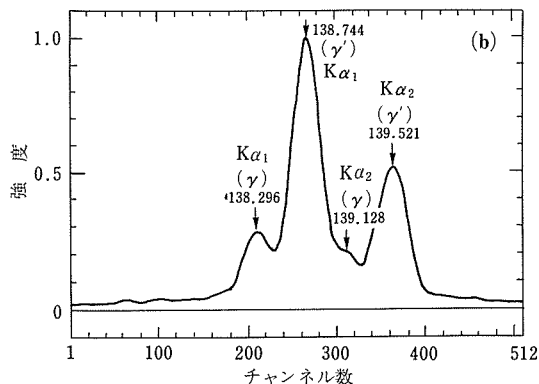
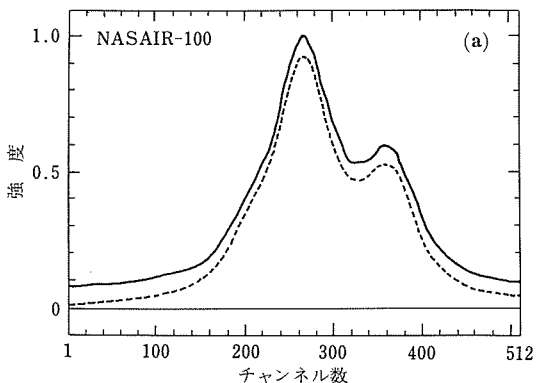


図2 X線回折の生データのパターン(a)と窓関数による補正後のパターン(b)

## 4月の研究発表（国内分）

学・協会名	開催期間	発 表 題 目	発表者（所属）
日本機化学会 (東京：武蔵工業大学)	4.1	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. データベースを用いた疲労強度特性の予測</li> <li>2. 電気化学STMによる水溶液中の金属表面のその場観察</li> </ol>	<p>今野武志（第5）ほか 升田博之（損傷）ほか</p>
日本鉄鋼協会 (東京：東京大学)	4.2～4.4	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 改良したニッケル基粒子分散超合金のクリープ特性</li> <li>2. <math>\alpha+\alpha_2</math>型耐熱Ti合金(Ti-Al-Sn-Zr-Nb-Si系)の設計</li> <li>3. CaOをつばで溶解したTiAlの機械的性質</li> <li>4. SUS316のレプリカ法によるクリープ余寿命評価</li> <li>5. Ni-26Cr-17W合金の粒界クリープ損傷計測に基づくクリープ破断強度評価</li> <li>6. 1.3Mn-0.5Mo-0.5Ni鋼のクリープ曲線及び破断寿命の修正<math>\theta</math>法による評価</li> <li>7. Ti-Al二元化合物の組織及び機械的性質に及ぼす組成の影響</li> <li>8. 12Cr鋼-1Mo-1W-0.3V鋼の高温クリープ変形に伴う材質劣化</li> <li>9. 12Cr鋼の高温クリープ変形に伴う材質劣化</li> <li>10. CCDモアレ法によるひずみ分布のその場測定システムの開発</li> </ol>	<p>川崎要造（設計）ほか 小野寺秀博（設計）ほか 三井達郎（組織）ほか 田中秀雄（環境）ほか 大場敏夫（環境）ほか 久島秀昭（環境）ほか 信木 稔（第3）ほか 渡部 隆（第5）ほか 渡部 隆（第5）ほか 本郷宏通（第5）ほか</p>
日本金属学会 (東京：東京大学)	4.2～4.4	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 分子動力学法による粒界のアモルファス化のシミュレーション(II)</li> <li>2. <math>YBa_2(Cu_{1-x}M_x)_4O_8</math> (M=Ni, Fe, Co)酸化物超電導体の圧力効果</li> <li>3. 静水圧応力下のNi基超耐熱合金中の<math>\gamma/\gamma'</math>平衡計算</li> <li>4. Ti-TiC傾斜機能膜中のTiC粒子の微細構造</li> <li>5. Fe-Mn-Si-Ni-Cr合金の形状記憶特性に及ぼす繰り返し変態の影響</li> <li>6. 短繊維を含む複合材の配向性に関する一考察</li> <li>7. 二元系合金における変態反応情報のデータベース</li> <li>8. <math>Ni_3Al</math>の一方向凝固組織</li> <li>9. 遷移金属界面での電子状態</li> <li>10. <math>Bi_2Te_{2.85}Se_{0.15}</math>単結晶の熱伝導率とHgBr<sub>2</sub>添加量の関係</li> <li>11. SUS304ステンレス鋼拡散接合における接合部の形成と接合面組成との関係</li> <li>12. 高分解能電子顕微鏡による<math>Y_2O_3</math>の結晶構造観察</li> <li>13. Cu-Vメカニカルアロイング合金のEXAFS解析</li> <li>14. Fe-Ni-Cr鋼におけるパルスイオン照射による過渡的歪減少効果</li> </ol>	<p>楠 克之（物性）ほか 山田 裕（物性）ほか 榎本正人（物性）ほか 池野 進（機能）ほか 大塚秀幸（機能）ほか 今井義雄（機能）ほか 横川忠晴（設計）ほか 平野敏幸（反応）ほか 菅 誠一郎（組織）ほか 磯田幸宏（計測）ほか 大橋 修（組織）ほか 小川一行（計測）ほか 桜井健次（計測）ほか 岸本直樹（計測）ほか</p>

学・協会名	開催期間	発表題目	発表者(所属)		
日本金属学会 (東京：東京大学)	4.2～4.4	15. $Kr^+$ イオンおよび電子線を照射したFe-Ni-Cr合金における転位ループの成長速度	木本高義(計測)ほか		
		16. 分散 $Y_2O_3$ による微量元素の拡散抑制	池田雄二(損傷)ほか		
		17. 金属間化合物TiAlの高温酸化に及ぼす表面状態の影響	笠原和男(第3)ほか		
		18. TiAl系化合物材料の機械的性質に及ぼす環境の影響	中村森彦(第3)ほか		
		19. TiAl基合金の延性・加工性改善手法	辻本得蔵(第3)ほか		
		20. 一方向凝固TiAlの組織に及ぼす成長速度の影響	竹山雅夫(第3)ほか		
		21. 共通データ処理環境を用いた分光器特性の把握	吉原一紘(第4)ほか		
		22. 鉄超微粉の表面分析	打越哲朗(第4)ほか		
		23. 超音波疲労試験法のセラミックス材料への適用	堀部進(力学)ほか		
		24. 積層スパッタ法によるBi-Sr-Ca-Cu-O薄膜のX線解析	羽多野毅(表面)ほか		
		25. 積層スパッタ法によるBi-Sr-Ca-Cu-O膜の作成条件と電気的, 磁気的性質	中村恵吉(表面)ほか		
		26. Nb膜中のTiの高速拡散現象に及ぼす膜作成法の影響	吉武道子(表面)ほか		
		27. 引上げ法による固溶体ガーネット単結晶での格子定数変化の最小化	木村秀夫(第1)ほか		
		28. $Nb_3Al$ 生成に及ぼす銀の添加効果	竹内孝夫(第1)ほか		
		29. 層流プラズマ溶射法による $Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_x$ 皮膜作製と超電導特性	吉田勇二(第1)ほか		
		30. 超電導テープ線材の $J_c$ 異方性	熊倉浩明(第1)ほか		
		31. Bi-2212/Ag超電導テープの溶融-凝固後の熱処理による特性変化	戸叶一正(第1)ほか		
		32. 銀シースBi系超電導体原料粉末への銀, 銅金属粉末添加の効果	浅野稔久(第1)ほか		
		33. $Nb_3Sn$ 線材の臨界温度及び上部臨界磁界の歪依存性	黒田恒生(第1)ほか		
		溶接学会 (東京：虎ノ門教育会館)	4.10～4.12	1. プラズマ溶射粒子の衝突・凝固過程と急冷応力	黒田聖治(組織)ほか
				2. 304ステンレス鋼溶接継手のクリープ挙動におよぼす試験片の寸法・形状について	村松由樹(組織)ほか
				3. レーザースペックル法による歪測定 of 溶接への適用	村松由樹(組織)ほか
				4. SUS304鋼のひずみ制御及び荷重制御疲労特性	鈴木直之(環境)ほか

◆特許速報◆

●出 願

発 明 の 名 称	出 願 日	出 願 番 号	発 明 者 名
複合磁性材料	2. 11. 22	02-316225	中谷 功, 小澤 清, 土方政行
溶媒置換磁性流体の製造法	2. 11. 22	02-316226	中谷 功
磁性体微粒子の配列格子構造	2. 11. 22	02-316227	中谷 功, 土方政行
酸化物超電導体厚膜の製造方法 (旭硝子㈱との共同出願)	2. 11. 27	02-321276	戸叶一正, 熊倉浩明, 前田 弘, ほか3名
浮上溶解装置 (富士電機㈱との共同出願)	2. 11. 30	02-335978	福沢 章, 櫻谷和之, 渡辺敏昭 ほか1名

●登 録

発 明 の 名 称	登 録 日	登 録 番 号	発 明 者 名
金属微粒子製造装置 (バイオニア㈱との共有)	2. 12. 27	1594485	宇田雅広, 大野 悟, ほか4名

◆短 信◆

●外国人研究員の受入れ

氏 名 Sumalee Vongchan  
 所 属 タイ王国 チュラロンコン大学  
 テーマ 有機被覆に関する表面処理に関する研究  
 期 間 平成3年1月7日～平成3年2月27日

氏 名 Brenard Chenevier  
 所 属 フランス共和国 グルノーブル国立物理  
 高等学校  
 テーマ 酸化物超電導体の高分解能電子顕微鏡による研究  
 期 間 平成3年1月11日～平成4年7月10日

氏 名 Sermkiat Kulkowit  
 所 属 タイ王国 タイ科学技術研究所  
 テーマ 防食技術及び機器分析に関する研究  
 期 間 平成3年1月14日～平成3年4月26日

氏 名 Puneet Mahajan  
 所 属 インド モンタナ州立大学  
 テーマ シンクロトロン放射による材料評価に関する基礎研究  
 期 間 平成3年1月15日～平成4年1月14日

●海外出張

氏 名	所 属	期 間	行 先	用 務
楠 克之	基礎物性研究部	3. 2. 3～3. 2. 10	フランス・スイス	計算材料科学に関する調査
馬場 晴雄	環境性能研究部	3. 2. 4～3. 2. 28	タイ	日・アセアン科学技術協力プロジェクトによる短期専門家派遣
青木 晴善	基礎物性研究部	3. 2. 13～3. 2. 18	アメリカ	日本鉄鋼協会依頼による国際ワークショップ出席
緒形 俊夫	第1研究グループ	3. 2. 14～3. 2. 23	アメリカ	科学技術振興調整費による材料学会出席
福沢 章	反応制御研究部	3. 2. 15～3. 3. 1	スウェーデン	科学技術振興調整費による研究調査
櫻谷 和之	反応制御研究部	3. 2. 16～3. 2. 23	アメリカ	科学技術振興調整費による材料学会出席
戸叶 一正	第1研究グループ	3. 2. 16～3. 3. 3	アメリカ	日米超電導研究協力に伴う研究調査

# 金属材料技術研究所科学技術週間行事のお知らせ

当研究所は、「科学技術に関して広く一般国民の関心と理解を深め、我が国の科学技術の振興を図る」という科学技術週間の趣旨ののっとり、下記の行事を実施致します。多数の御来場を、お待ちしております。

## (1) 研究所の一般公開

当研究所が行っている先端研究の成果を、パネルと試料の展示により詳しく説明します。また、おもな研究設備・施設も公開します。なお、科学技術ビデオを放映し、来訪者からの技術相談に応じる相談コーナーも開設します。

### ●本所（東京都目黒区中目黒2-3-12）

日時：4月16日(火)、13時～17時

おもな展示・公開内容：表面改質／界面接合／超微粒子／磁性流体／レーザ超音波顕微鏡／耐環境性金属間化合物／一方向凝固用溶解炉／色彩異方性材料／色記憶合金／単結晶多層材料／非接触溶解／光筋起精製／超精密磁界マグネット／画像処理の応用／合金の設計／超精浄空間技術／結晶成長のCG／連続鑄造／材料強度試験／材料の寿命予測／超電導材料データベース

問い合わせ先：管理部庶務課庶務係 (03)3719-2271 (内線229番)

### ●筑波支所（茨城県つくば市千現1-2-1）

日時：4月19日(金)、10時～16時

おもな展示・公開内容：先端材料の溶解／セラミックスの疲労／超急凝固粉／合金の設計法／量子井戸箱の作製／中赤外半導体レーザ／イオン注入の応用／X線マイクロCT／サブナトロン／極低温材料試験機／超電導体の薄膜／超電導体の線材／超強力マグネット

問い合わせ先：管理課管理係 (0298)51-6311 (内線223番)

## (2) SCIENCE NOW '91 への出展

科学技術庁が主催するSCIENCE NOW '91展において、当研究所が特に力を入れている新材料の開発と材料信頼性の確保に関する研究を中心に、当研究所のおもな研究成果をパネルと試料でわかりやすく紹介します。

場所：テクノロジー・ジャパン'91展（晴海・東京国際見本市会場）内

日時：4月10日(水)～4月13日(土)、10時～16時30分

おもな展示内容：超電導材料／磁気冷凍作業物質／色彩異方性材料／色記憶合金／熱電素子／半導体レーザ／磁性流体／燃焼合成線材／単結晶材料／複合材料／積層材料／超耐熱合金／超塑性合金／超微粒子／超急凝固粉／合金の設計／インテリジェント構造材料／40Tハイブリッドマグネット模型

問い合わせ先：管理部企画課普及係 (03)3719-2271 (内線278番, 314番)

発行所 科学技術庁金属材料技術研究所  
(本所) 〒153 東京都目黒区中目黒2-3-12  
TEL(03)3719-2271, FAX(03)3792-3337  
(筑波支所) 〒305 茨城県つくば市千現1-2-1  
TEL(0298)51-6311, FAX(0298)51-4556

通巻 第387号 平成3年3月発行  
編集兼発行人 真鍋 烈  
印刷所 株式会社 三興印刷  
東京都新宿区西早稲田2-1-18