

(巻頭言)

## 「材料組織・特性の予測と計測」特集の発刊にあたって

坂本浩一 (工学博士)

執行役員 鉄鋼アルミ事業部門

### Prediction and Measurement Technologies for Material Structures and Properties in Kobe Steel Group

Dr. Koichi SAKAMOTO



#### 1. 素材産業を取り巻く環境変化

日本の素材産業は、自動車や電子部品向けを中心に構造材から機能材に至るまで高シェア製品を有し、その高い技術力を源泉に強い産業競争力を有してきた。しかしながら、新興国の技術レベルの急速な向上とそのコスト競争力により、製品がコモディティ化・安価化しており、競争力低下が顕在化しつつある。

また、気候変動・環境問題に対応した持続可能性社会への意識の高まりから、カーボンニュートラルやサーキュラーエコノミーの潮流が加速しており、単に素材・部材製品としての品質・機能だけでなく、その製造から廃棄までのライフサイクル全体の環境負荷低減にも注目が集まりつつある。加えて、デジタル化の飛躍的進展により、「ものづくり」のあり方も大きく変容しつつあり、少子・高齢化、人口減少による内需減少、さらにコロナ禍もあいまって、大きな構造変化が起きつつある。

このような環境変化により、お客様が素材や部材に求めるニーズは、さらに多様化・複雑化・高度化するとともに、新技術、新製品の開発競争も激化し、開発期間や製品ライフサイクルはより一層短縮化する傾向にある。

このような激しい変化にどのように対応していくかは、当社グループが直面している経営課題でもある。内需減少・外需伸長に向けた事業体制を整えながら、ソリューション提案力を磨き、社会的要請や産業構造の変化に迅速に対応することが重要である。その一つが当社素材系事業の基盤強化であり、それはすなわち「ものづくり力」の強化であり、材料設計力、材料開発力の強化でもある。

#### 2. 素材系事業における「材料組織・特性の予測と計測」の意義

当社素材系事業においては、鋼材、アルミ板、鋳鍛鋼品、アルミ鋳鍛品、チタン材、アルミ押出材、サスペンション、銅板、鉄粉、溶接材料などの分野において、特徴ある製品メニューを開発・上市し、その生産技術、利用技術の開発も含めて競争力を維持してきた。今後は、多様化・複雑化・高度化するニーズにより短期間で応え、お客様の製品の競争力強化に寄与し、社会課題の解決に貢献する必要がある。そのためには、材料の本質に関わる深い理解に基づいた材料設計力・材料開発力の強化と開発期間の短縮が課題となる。これまでの経験やノウハウをベースに仮説を立て、実験検証、実機検証、工程化を進める開発手法だけでは、お客様が求める画期的な特性向上は難しくなっている。また、従来の開発手法は多大な時間と費用を要することになるため、抜本的な対策が必要である。

この課題に対する解決策の一つが、計算材料科学に基づく「材料組織・特性の予測」である。計算材料科学は、

理論やデータに基づいた材料設計の基盤技術であり、物性の本質的理解、新たな特性の発現や特性向上策の探索、従来の試行錯誤法に代わる効率的な材料開発への貢献が期待できる技術である。

金属材料は微量元素の添加や製造プロセス、お客様での最終製品への加工プロセスにより特性が変化する。この特性変化こそが幅広いニーズに対応できる源泉であり、ニーズの変化に応じて新たな材料開発が求められる理由でもある。この特性変化はおおむね材料の組織構造に基づいており、どのような組織構造にすれば所望の特性を発現できるかを探索し、これをどのように造り込むかを予測・制御することがポイントになる。

#### 3. 「材料組織・特性の予測と計測」における近年の進歩

計算材料科学は演繹的なアプローチであり、対象となる物質のサイズと現象の時間スケールにより分類される。ミクロ計算としては、原子1つ1つをモデリングし、原子周りの電子状態から各種物性を計算する第一原理計算、原子間に働く相互作用を近似して数万原子規模の原子集団の運動を扱う分子動力学法 (MD) やモンテカルロシミュレーション (MC) がある。これら粒子系の計算に対して、実用部品形状において塑性変形や温度履歴を評価できる有限要素法 (FEM)、ミクロとマクロをつなぐメソスケール領域でのフェーズフィールド法 (PFM)、結晶塑性解析など連続体系の計算手法が近年盛んに活用されている。

いっぽう、近年はデジタル技術の革新により、計算材料科学はデータサイエンスと呼ばれる技術へと急速にシフトしている。マテリアルズインフォマティクス (MI) は系統的に蓄積されたデータから材料特性と組織・構造との相関関係を帰納的に抽出し、新たな材料設計指針とするものであり、材料科学と情報科学の融合領域である。本手法により、特性予測が極めて迅速に行えるため、組織と特性の関係を把握するための手段として急速に開発や応用が進んでいる。競争力の源泉は良質データの大量蓄積にあるため、金属組織の画像解析にも機械学習や人工知能が活用され、画像の特徴量を同定する取り組みも進んでいる。データをめぐる覇権争いが激化している分野でもある。

また、特性を支配する組織構造因子が未明の分野では、それが何であるかの知見獲得が競争力の源泉となる。したがって、これまで観察できなかった状態や現象を「計測」する必要があり、従来の走査型電子顕微鏡、透過型電子顕微鏡観察から、より高分解能を求めて、放射光を用いた高輝度X線、高い透過性を有する中性子線、これらを用いたその場観察の開発や活用が進んでいる。

本特集号では、これらの最新の取り組みについて紹介

する。

#### 4. 「材料組織・特性の予測と計測」の今後の方向性

2014年から開始された内閣府のプロジェクト（戦略的イノベーション創造プログラム）では、「マテリアルズインテグレーション」構築の取組みが進められている。マテリアルズインテグレーションとは、材料工学を主体に、理論、実験、シミュレーション等の計算科学手法、データベース、マテリアルズインフォマティクスなどの情報科学を自由に組み合わせるとともに、不足している知見を俯瞰し、材料使用時のパフォーマンスを知るためのツールである。材料や部材の研究開発時間の大幅短縮に寄与するとともに、物質・材料・構造・組織・パフォーマンスの様々なレベルでの関連性を知ることができ、製造や品質工程設計にも活用できるツールとなる。当社も同プロジェクトに参画しているが、このような理論、計算科学手法、システム、データベースなどの進化する

技術については産学協同プロジェクトなどを活用して遅滞なく取り込みを図っていかなくてはならない。競争力の源泉となるデータについては、既に蓄積しているデータは最大限活用するとともに、新たに必要となるデータは自ら獲得して、技術を磨き、提案力を強化していく方向性が求められる。

#### 5. まとめ

当社グループでは、課題を解決する技術を融合し、ソリューション提案力を磨き、社会的要請や産業構造の変化に迅速に対応することにより、お客様や社会にとって「かけがえのない存在」としてあり続けるとともに、「安全・安心で豊かな暮らしの中で、今と未来の人々が夢や希望を叶えられる世界」を目指している。当社グループの素材系事業においては、材料開発における最新技術を取り込みながら、自らが得意とする素材・部材を中心に、材料設計力、材料開発力を強化していく所存である。