技術展望・技術解説

アルミニウムにおける計算材料技術の発展とその産業利用

岩村 信吾*

Development of Computational Material Engineering and Industrial Application on Aluminum Fabrication

Shingo Iwamura*

Keywords: ICME, microstructure modeling, aluminum

1. はじめに

アルミニウムの工業生産が開始されて以来,凝固, 加工硬化,回復/再結晶,固溶/析出などの冶金理論に 基づいた組織制御技術により、多様なアルミニウム合 金が開発されてきた。また、この新材料開発に併せて、 TEM (transmission electron microscope) やSEM-EBSP (scanning electron microscope-electron backscatter diffraction pattern) など, 理論の検証を行 うための実験技術も進歩してきた。しかしながら、工 業製品の複雑な製造プロセスを検討する際には、トラ イ&エラーに頼らざるを得ないのが常であった。この 状況に変化が現れたのは、1970年代にコンピュータの 利用が始まってからである。コンピュータを利用する ことで、複雑な加工熱履歴で製造される工業製品に冶 金理論を適用する道が開けた。初期の検討は、実験式 による単純な予測から始まったが、約40年間の研究を 経て,近年では多種の冶金理論(加工硬化,再結晶,固 溶/析出)を組み合わせた総合的な計算モデルが開発さ れるに至っている^{1), 2)}。

このような予測技術の発展は、金属組織のみに限っ たものではない。他にも、計算状態図による合金設計、 FEM (finite element method) による空間情報を含めた 計算、機械的性質の予測モデルなど、計算による予測 技術は様々な方面から開発が進んでいる。さらに、こ れらの技術を組み合わせて使うことで、製造工程から 製品特性までを総合的に予測・設計することができ る。近年では、この研究分野は統合計算材料技術 (ICME: integrated computational material engineering) として広がりを見せている³⁾。

本報では、まず組織予測技術の歴史と概要を解説し、 さらにはそれを用いた広義のICMEの現状と今後の展 望について述べる。

2. 組織予測技術

2.1 金属組織研究の小史

近年提案されている組織予測モデルは,個々の冶金 現象(加工硬化,再結晶,固溶/析出)を組み合わせる "Physics-Based Model"が主流である。したがって,予 測技術の開発には,まず基本原理の理解が必要である。 ここでは,各分野の技術の発展を金属組織研究の略年 表(Table 1)に沿って簡単に紹介する。

(1) 実験手法

冶金研究において最も重要な実験手法は,1853年に Sorbyによって開発された光学顕微鏡による金属組織 観察であろう。これにより,金属材料が単一の塊では なく,複雑なミクロ組織を持つことが認識され,金属 組織の研究が始まった。さらに,示差熱分析,電気抵 抗測定,比熱測定,X線回折法などの実験手法により, 金属組織が材料特性に影響を及ぼすことが明らかにな ってきた。そのような物理性質と金属組織の相関を研 究する分野は,物理冶金学と呼ばれるに至った。1930 年代になると,電子線を用いた観察装置としてTEMと SEMが開発された。TEMの性能向上に伴い,X線回 折法などの間接的な手法でしか確認できなかったGPゾ ーンや転位を観察することが可能になった。SEMは EBSDと組み合わされ,集合組織と再結晶を関連付け

* (株) UACJ 技術研究開発所 名古屋センター 第三部 No.3 Department, Nagoya Center, Research & Development Division, UACJ Corporation

Experimental technique	Thermodynamics (Phase diagram)	Precipitation	Recrystallization	Work hardening	
1853 Sorby: Microstructure observation	1873 Gibbs: Thermo dynamics	1855 Fick: Diffusion law	1829 Savart: Softening by annealing		
1887 le Chatelier: DTA	1889 Arrhenius: Thermal activation law	1906 Wilm: Age hardening			
1912 Laue&Bragg: X-ray diffraction		1926 Volmer&Webwer: Nucleation theory		1926 Bailey: Work hardening	
1931 Ruska: TEM	1936 Hansen: Phase diagram	1935 Becker: Nucleation theory	1937 Jhonson&Meal: JMAK equation on boundary	(1930's –Bailey, Orowan, Taylor: Dislocation theory)	
1935 Knoll: SEM		1937 Guinier&Preston: G.P. zone	1948 Mclean: Solute segregation theory 1948 Zenner&Smith: Zener pinning	1946 Orowan: Orowan mechanism	
		1949 Zener: Growth law		1953 Cottrell: Cottrell atmosphere	
(1950's - Commercial SEM)	(1970's - CALPHAD)	1960 Wagner: Ostwald ripening			
(1960's - Commercial TEM)		1961 Chan&Hilliard: Spinodal decomposition		1976 Kocks: MTS mode	
1984 Dingley: SEM-EBSD	1991 Hillert: ThermoCalc	1982 Kempman&Wagner: KWN		1996 Nes: MMP model	
		inouci		2000 Gottstein: 3IVM model	

Table 1 Research progress in material science.

る重要な実験手法として発達した。

このような観察・測定技術により得られる実材料の 組織情報は,理論の発展をもたらしてきた。組織予測 技術に対しても同様で,2000年以降も様々な実験手法 (例えば三次元アトムプローブ法,陽電子消滅法,放射 光X線回折法,熱起電力測定など)が確立され,既にこ れらの手法を計算に組み込んだ組織予測モデルも報告 されている。

(2) 熱力学・状態図

1800年代の産業革命の際、蒸気機関の研究を軸に熱 力学が発達した。これをミクロ組織に適用したGibbs の熱力学は、例えば析出核生成や再結晶速度論など、 様々な冶金現象を考察するベースとなっている⁴⁾。ま た、Gibbsの熱力学は状態図研究に繋がり、1800年代 後半から実験状態図の研究が盛んに行われ、1936年に はHansenの状態図集にまとめられるに至った。ただ し、元素の組み合わせは無限にあるため、実験による 状態図研究はせいぜい4元系合金までであった。この 状況は、1970年代以降に計算状態図の研究が始まるこ とで打開された。特に、1991年に公表されたThermo-Calc⁵⁾により、計算状態図の有用性は広く認知される ようになった。現在では、FactSage、Thermosuite、 Pandat、CaTCalcなど、多種の市販ソフトウェアによ り状態図計算が可能となっている⁶⁾。

(3) 再結晶

焼鈍により軟化するという現象そのものは古くから 知られていたが、再結晶が速度論としてまとめられた のは、1937年に提唱されたJMAK式 (Johnson-Mehl-Avrami-Klomogorov equation)^{7).8)}が最初であった。再 結晶の研究は核生成と粒界移動を主に議論されたが、 いずれにも影響するのが固溶/析出状態である。粗大 な粒子は変形の局所化により核生成を促進するはたらき (PSN: particle stimulated nucleation⁹⁾)が,固溶元素あ るいは微細粒子は粒界移動を抑止するはたらき (Solute drag¹⁰⁾, Zener pinning¹¹⁾)が見出されている¹²⁾。また, 再結晶の駆動力となるのは加工により形成する下部組 織である。したがって,再結晶挙動の検討は,加工組 織や固溶/析出組織との相互作用を考えることが必要 であった。

(4) 固溶/析出

固溶析出の研究は、1906年のWilmによるジュラル ミンの時効硬化の発見から始まった。それ以降、2度に わたる世界大戦で航空機用高強度アルミ合金が求めら れたこともあり、固溶/析出の研究は理論・開発双方 から盛んにおこなわれた。理論面では、Volmerと Weber¹³⁾ およびBecker¹⁴⁾ らにより提唱された古典的核 生成理論と、Zener^{15),16)}の粒子成長理論が重要である。 その後、スピノーダル分解¹⁷⁾や、粒子粗大化理論(LSW: Lifshitz-Sliozof-Wagner理論^{18),19)}) などが提唱された。 近年では、6000系合金、7000系合金などを中心に、析 出物の前駆段階であるクラスターの研究が多く行われ ている^{20),21)}。

(5) 加工硬化

加工硬化は、冶金現象の中で発展が遅れている分野 である。転位の存在や挙動については、1930年代から 転位論として理論化されていた²²⁾。1950年代になる と、HirshらによってTEMによる転位の直接観察が行 われた。そのような転位単体の挙動の理解は進んでき たが、より実践的な現象である加工硬化に結び付く段 階に難しさがあった。すなわち、加工中におこる動的 回復や、加工に伴う下部組織、すなわち転位-転位セ ル-サブグレインの発達の取り扱いである。動的回復 に関しては、1972年にKocksにより提案されたMTP (mechanical threshold strength)モデル以降に進展がみ られるが、下部組織の発達については、未だ統一的な 見解は固まっていないのが現状である¹⁾。

2.2 冶金理論のモデル化

前項に述べたように,各々の冶金現象は古くから多 くの検討が行われ,理解と定式化が進歩してきた。そ の後,これら冶金理論に基づいた数値モデル化が試み られてきた。個々の冶金現象の代表的な計算手法を以 下に示す。

(1) 再結晶

Cellular Automaton法²⁴⁾は、ミクロ組織を微小要素 に分割し,各要素の時間的発展を求めるモデルである。 Fig. 1に示すように、各要素を再結晶組織か加工組織 かで区別し、加工組織の要素を再結晶組織に書き換え ることで再結晶の進行を表現する。この時の書き換え 確率は、簡単なモデルではアレニウスタイプの熱活性 化確率により与えられるが、近年の高度化したモデルで は、再結晶の駆動力や粒界移動速度など、物理冶金に即 した再結晶速度論で書き換え確率が計算される²⁴⁾。同様 に、Phase-Field法²⁵⁾も微小要素に分割して計算する方 法である。この手法では、各要素には再結晶率が与え られ、再結晶速度論に基づいて再結晶率の時間変化が 計算される。いずれの方法も3次元の空間軸を持つた め、例えば加工方向に伸長したパンケーキ状の再結晶 粒など、空間的な情報を表現するのに優れている。一 方,広大な空間を準備すると計算に長時間を要するた め、統計的に十分な結果を得るのが難しい。

Vertex法²⁷⁾は、組織中に存在する亜粒界や粒界が構成する4重点の安定性を計算し、4重点がどう移動していくかを求めるモデルである(Fig. 2)。4重点が合体す

1	1	1	1	1	1	1	1/	2	2	2	9	9	9	9	9	9
1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	9	9	9	9	9
1	1	1	1		2	2	2	2	2	2	2	9	9	9	9	9
1	1	1	7	2	2	2	2	2	2	2	2		9	9	9	9
1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	$\mathbf{\lambda}$	9	9	9
1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	8	6	6	6
4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	6	6	6	6	6
4	4	4	4	2	2	2	2	2	2	5	6	6	6	6	6	6
4	4	4	4	4	4	2	2	2	Ň	7	6	6	6	6	6	6
4	4	4	4	4	4	4	77	7	7	7	À	6	6	6	6	6

Fig. 1 Microstructure representation in the cellular automaton.¹²⁾ Cells with same integer compose one grain.

ることにより,結晶粒界が減少し,より安定な組織に 近づいていく。このモデルにおいては,初期の加工組 織を亜粒界の集合体としてとらえ,亜粒界の移動の積 み重ねが,最終的に再結晶組織へと発展する。4重点の 座標計算のみなので,前述のCellular Automaton法な どよりも計算量は少ないが,物理的な意味を捉えにく いという欠点もある。

JMAK方程式^{7),8)}は最も古典的であるが、その簡便 さから、利用例は多い。JMAK法は、組織中に一定数 の再結晶核を与え、それぞれの核の時間的成長を計算 していく方法であるが、他の再結晶粒との重なり合い (Hard Impingement)を拡張体積の概念を用いて表現 することが特徴である。一つの式のみで反応の開始か ら終了までを記述できるという簡便さが最大の長所で あるが,全ての結晶粒が同じサイズと成長速度を持ち, 均一に析出するという単純な仮定に基づいているので. 全体の反応量や平均サイズといった、簡単な情報しか 得られない。それでも、取り扱いが難しいHard Impingementを平易に計算できるというメリットは大 きく、工業的なモデルに多く利用されている。この場 合,核生成数や再結晶粒の成長速度は,物理冶金に基 づいて, PSN, Solute drag, Zener pinningなどを組み 込んで計算するのが主流である²⁸⁾。



Fig. 2 Recrystallization from transition band calculated by the vertex model, (a) initial state composed of subgrains, (b) partial recrystallized microstructure after annealing.²⁷⁾

(2) 固溶/析出

熱処理に伴う固溶/析出状態の推移を計算する方法 としては、スケールが小さい順に、第一原理計算²⁹⁾、 分子動力学法, Phase-Field法^{25), 26)}, KWN法 (Kampmann-Wagner Numerical method) ^{31), 32)}, JMAK方程式^{7),8)}などがある。これらのうち,第一原 理計算と分子動力学法は,原子オーダーの現象を記述 できる一方, 計算量が多く, 予測できる空間・時間の 範囲が限られる。したがって、これらは工業目的より も、原理原則を求めるアカデミックなアプローチの研 究に用いられることが多い。固溶/析出における Phase-Field法は、2Dあるいは3Dの計算空間に溶質濃 度分布を与え、系全体が安定になる過程の時間的発展 を計算する (Fig. 3)。空間座標下での計算なので、例 えば粒子の形状などの幾何学的な検討ができるが、そ の分計算量が多く、広範囲におよぶ現象を記述するに は不向きである。

KWN法は、固溶/析出の基礎的な理論を用いて、粒 子サイズ分布 (PSD: Particle Size Distribution)の時間 的発展を計算する方法である (Fig. 4)。この方法は空 間座標を持たず、材料全体の粒子の分散状態を計算す るため、統計的な粒子サイズ分布が求められる上に、 計算時間も遥かに短い。また、固溶/析出の基礎理論 に基づく方法であるため、挙動の理解やモデルの応用 もしやすい。後述するように、近年の工業的な検討例 ではKWN法の利用例が多く報告されている。一方、 粒子数の空間的バラツキや粒子形状など、幾何学的な 情報を含めるのが難しいことが短所である。

JMAK方程式も析出予測に利用されることが多かっ たが、析出反応においては粒子のサイズ因子が重要で あるため、平均情報しか取り扱えないJMAK法はむし ろ実験式という位置づけであろう。

(3) 加工硬化

結晶粒や析出物が球という単純な形状で近似できる のに対し,線である転位は幾何学的に複雑である。ま



Fig. 3 3D-simulations of the phase decomposition of Fe-30at%Mo alloy aged at 773K.²⁶⁾

た,加工量の増加に伴い,転位が絡み合って転位セル になり,さらには動的回復によりサブグレインになる という変化をたどる。すなわち,各ステージに応じた 速度論を使い分けねば定量的に考えることはできな い。このような難しさが,加工硬化の理解とモデル化 を妨げている。そのため,総合モデルの中で加工硬化 挙動の予測を行う際には,いわゆるn乗硬化則に類す る実験式を用いて平易に予測する研究者も多い。

一方、加工硬化のモデル化の試みも行われている。 1972年にKocksらは、転位、セル、サブグレインなど が混在する加工組織を全て総転位密度として捉え、加 工による増加と動的回復による現象を記述するMTPモ デル³³⁾を提案した。特に,動的回復は温度と時間によ って起こるのではなく、歪速度と加工量によって起こ るというアイデアが画期的であった。この考え方は後 の加工硬化モデルにも引き継がれている。中でもNes らのMMP (microstructure metal plasticity) モデル³⁴⁾ は、加工硬化のステージごとに異なる取り扱いを適用 し、応力ひずみ曲線の記述を試みている (Fig. 5)。ま た, Gottsteinらの3IVM (three internal variables model)^{35),36)}は、転位の移動を素過程とし、可動転位、 セル内の不動転位, セル壁の不動転位の3種類の転位 の密度を計算している (Fig. 6)。いずれにせよ, 研究 者によって取り扱いが異なっており、世界標準と言え るような方法は未だ確立されていないようである。以 上のように、物理冶金に即した加工硬化モデルは研究 途上にある。

2.3 組織予測技術の発展

再結晶,固溶/析出,加工硬化といった個々の冶金 現象は,まず実験的に発見・確認され,次いで理論化・



Fig. 4 Calculated evolution of the particle size distribution (PSD) during isothermal holding at 500°C in an 3003 alloy (after heating at 20°C /s)²⁾

定式化され、さらにモデル化がすすめられてきた。モ デル化の利点のひとつとして、複数のモデルを組み合 わせることで、それぞれの冶金現象の相互作用を考慮 し、金属組織を総合的に考察できるようになることが 挙げられる。例えば、加工組織は再結晶の駆動力とな り, 再結晶の速度論には固溶/析出状態が影響し, 加 工組織中の転位やサブグレイン粒界は不均一析出サイ トとなる。このような複合的な相互作用は、実材料で は常に起こることであるが. 組織予測モデルの開発に よって、はじめて検討できるようになった。もうひと つの利点は、多パス熱延、熱間押出、熱間鍛造など、 複雑な製造プロセスに対応できるようになったことで ある。従来の冶金理論は工業生産には定性的にしか利 用されていなかったことが問題であったが、モデル化 によって定量的に検討できる素地が整い、ようやく本 格的に産業と繋がる筋道ができたと言えるだろう。

3. ICME: 材質予測技術の工業利用

前章で組織予測技術について解説したが、コンピュ ータを用いた予測技術は、様々な方面、例えば計算状 態図、FEM、材料特性予測モデルから開発が進められ ている。これらを組み合わせて計算することで、温度 や歪などの製造条件から金属組織を予測し、さらに強 度や成形性などの製品特性を検討することができる。 この研究分野はICMEと呼称され、近年、活発に研究 されている。ここでは、ICMEの現状と今後の展望を 述べる。



Fig. 5 Stress-strain curve of an Al-1.0Mg calculated by using the MMP model at various temperatures and strain rate.³⁴⁾

3.1 ICMEの狙いと研究動向

工業製品の開発においては、目指す製品特性を得る ために、合金成分と製造工程の最適な組み合わせを模 索することが行われる。また、これら製造プロセスと 製品特性の仲立ちをするのが金属組織である。この一 連の流れをFig.7に示す。従来、このような製品開発 の流れは、ラボと実機での試作評価による実験的検討 および冶金理論に基づく考察の積み重ねが主であっ た。この手法は基本的に今後も変わらないと思われる が、「コンピュータによる検討」という第三の手法を加 えることで、開発の質と速度を向上させることができ る。これがICMEの狙いである。

最も成功を収めているのが、合金成分の検討方法で ある。Thermo-Calc⁵⁾を始めとした多元系合金の計算状 態図を利用することで、工業的な複雑な合金成分でも 平衡相や溶解温度などの予測が可能となった。この方 法は既に商用化され、学術的にも工業的にも広く受け 入れられている。続く圧延、押出、鍛造などのプロセ ス検討においては、FEMが有効に活用されている¹⁾。



Fig. 6 Schematic drawing of the arrangement of the three dislocation classes considered in 3IVM: mobile dislocation ($\rho_{\rm m}$), immobile dislocation in the cell wall ($\rho_{\rm i}$) and immobile dislocation in the cell walls ($\rho_{\rm w}$).³⁵⁾



Fig. 7 Linkage of material development.

材料内の形状,変形量,熱量の分布を計算することで, 荷重や加工発熱の予測が可能となり,品質や生産性の 向上に利用できる。また,FEMにより得た材料内のひ ずみ量や温度のマクロ的な分布は,前述の組織予測技 術を適用することで,材料内の各位置での組織予測に 展開できる。また,近年では,転位論に基づく加工硬 化特性や集合組織など,素材そのものの金属組織を組 み込んだFEM計算も行われている。以上のようにして 求められた金属組織に基づき,製品特性のシミュレー ション計算が行われる。将来的には各種特性に波及し ていくと思われるが,現在は構造材料の設計上重要な 強度や成形性に関する検討が多いようである。

3.2 ICMEの利用例

続いて, ICMEを工業生産に活用した検討例を示す。 いずれの例も,実製品の課題をターゲットにした検討 例であることが伺える。

(1) 圧延のスループロセスモデル

Englerら³⁷⁾により,飲料缶ボディ材に用いられる 3104板材のスループロセスモデリングが報告されてい る。まず,均質化処理においては,熱力学データベー スとリンクした析出モデルを用いて, a Al₁₂ (Mn, Fe) ₃Siおよびβ Al₆ (Mn, Fe)の体積率および分散状態が予 測された。続く熱間圧延においては,FEMによって表 層から中心にかけての歪量,歪速度および温度が求め られ,均質化処理で形成する固溶/析出状態と併せて, 再結晶速度が計算された。特に,4タンデムの仕上熱延 においては,圧延速度や入側温度がパス間再結晶に及 ぼす影響が検討されている(Fig.8)。タンデム熱延の パス間での金属組織は,実験的に調査することが非常 に難しく,ICMEが有効に活用されている例と言える。 また,このモデルは集合組織計算を含み,冷延板の耳 率予測にも結晶塑性FEMが行われている。合金成分や 製造工程など,実機製造に即した条件になっており, 実生産に活用されていることが伺える検討例である。

(2) 押出コスト計算

Myhrら³⁸⁾から、3000系合金押出材について、金属 組織、特性に加え、製造コストを同時に予測するモデ ル"PRO^{2 TM} (Product and Process Optimization)"が報 告されている。PRO^{2 TM}を用いることで、様々な製造 条件で製品特性とトータルコストを予測し、その中か ら特性・コスト両面から最適な条件を選ぶことができ る (**Fig. 9**)。これら製品特性やコスト計算は、金属組 織に基づいて予測される。例えばFig. 9に示すように、 押出速度は粒子数密度の関数として表されている。 PRO^{2 TM}のシステム概略図 (**Fig. 10**)には、顧客の希望 に対して最適な解を探索するためのツールというコン セプトが現れている。

(3) 破壊挙動の予測

引張強さは素材の代表的な強度を示す極めて重要な 製品特性であるにもかかわらず,予測が難しいとされ てきた。引張強さを予測するためには,引張試験片の 局所的なくびれや,それに伴う破断の起点と進展を考 慮しなければならないためである。この問題に関して, Sandia National Laboratoryでは,ICMEによる破壊挙 動の予測が試みられている³⁹⁾。様々な形状の引き裂き 試験を行い,FEM解析と組み合わせて,破断の起点の 発生と進展経路をモデリングした。破断挙動のモデリ ングに基づき,引張試験のFEM解析を行い,耐力のみ ならず,引張強さや破断伸びの予測に成功している (**Fig. 11**)。この破断挙動のモデリングは,他の事例に も適用されている。例えば,部品形状での破断予測に



Fig. 8 Simulation of a four-stand tandem mill for two different operating conditions.³⁷⁾ Development of (a) temperature, T, and (b) recrystallized volume fraction, X (t), during process time, t. Labels S1, ..., S4 denote the rolling passes on stands 1 to 4.



Fig. 9 Example of the calculated results by $PRO^{2 \text{ TM}, 38}$ (a) Predicted yield stress (σ_y) as a function of the total cost, which includes material and extrusion costs. (b) Predicted ram speed (v_{RAM}) as a function of dispersoid density.



Fig. 10 Outline of the simulation concept in PRO^{2 TM 38)}



Fig. 11 Nominal stress-strain curve in consideration of stress localization.³⁹⁾ Curve exhibits a noticeable change in slope after 0.08 nominal strain (point A) by necking effect and ruptures at nominal strain of 0.16 (point B).

おいては、第一原理計算や分子動力学法といった原子 オーダーの転位モデリングで単結晶の結晶塑性を計算 し、それをデータベースとして多結晶のFEM計算に結 晶塑性を導入し,破断限界を検討している。

この一連の取り組みは広範囲にわたる研究であり, 研究メンバーが多い。参画する研究者は,(原子,単結 晶,多結晶,部品)×(プロセス,構造,特性,パフォ ーマンス)のセグメントで分けられたチームに所属し, 役割分担を確認しながら研究全体の整合性がとられて いる。

3.3 近年のICMEの研究動向

ICMEの研究は欧州と米国で意欲的に進められてき た。特に,2000年~2004年に欧州で実施された共同研 究プロジェクト(VIR [*]^{1),2),3),40)}にて,大きな発展を 遂げた。VIR [*]は,約20億円の予算で,欧州のアルミ ニウム業界をけん引する大学・研究機関・企業が集結 したプロジェクトである。プロジェクトは,鋳造,加 工熱処理(圧延,押出),製品特性(成形性)を検討する 3つのグループから構成された。また,企業と大学がパ ートナーシップを組み,各テーマの解決に当たった (Table 2)。構築された各工程の組織予測モデルを連結 することで、鋳造から製品までの金属組織の変化を、 さらには製品特性までを一貫して予測できるスループ ロセスモデルとなった。結果、VIR [*] プロジェクトに より、ICMEは飛躍的な発展を遂げた。

また、米国でも2011年から素材戦略プロジェクト (MGI: Material Genome Initiative) が進められてい る。本プロジェクトは米国企業が現在の2倍のスピー ドで先端材料を発見・開発・製造・導入することを可 能にする研究,訓練,インフラに1億ドル強を投資す る米国政府のプランであり、2012年7月にはホワイト ハウスでキックオフミーティングが開催されている。 ひとつの開発に対し、発見-開発-最適化-統合-検証-製 造-展開という一連の開発ステップを行う従来型の開発 に対し、MGIでは、実験-理論-計算を統合することに よって円環的な開発スタイルへの転換を目指している (Fig. 12)⁴¹⁾。その他、インドの素材戦略プロジェクト でも、ICMEを軸にした研究体制の整備が目的として 挙げられている⁴¹⁾。このようにICMEは国際的に重要 度を増しており、それに伴い、ICMEに特化した国際 会議も始まっている³⁹⁾。

3.4 ICMEがもたらすもの

欧州のVIR [*] と米国MGIは、いずれもICMEの発展とそれによる工業技術の進歩が主目的としているが、 プロジェクトにより得られる波及効果³⁾についても類 似点が多くみられる。ICMEは理論を工業生産に適用 する試みであるというのが要点である。

これまでのアルミニウムの研究開発は、原理・原則 の解明については大学などの研究機関が、製品を作る ための実践的な検討は企業の開発従事者が主に行って きたのに対し、VIR [*] プロジェクトでは、大学と企業 がペアを組んで共通の課題に取り組む (Table 2) こと で、両者の知識共有を深めることに成功した。特に、 このパートナーシップが "Extraordinary Collaborative" な雰囲気²⁾の中でなされたことは重要である。この取 り組みを通して培った欧州のパートナーシップは、プ



Fig. 12 Change in development scheme proposed in MGL⁴¹⁾

ロジェクトが終了した後も続いており、活発に共同研 究が行われている。米国のMGIやインドの国家プロジ ェクト⁴¹⁾でも類似のパートナー関係構築が謳われてお り、VIR*の成功例に続けという意図が読み取れる。ま た、いずれのプロジェクトにも共通してみられる狙い が、人材育成である。産学の連携は、互いに不足する 情報を交換する場となり、よりハイブリットな研究者 が養成される土壌となる。また、ICMEは基礎理論の 集合体でもあるので、初学者が理論を学ぶ教育プログ ラムとしても有効に機能する。例えば、2000年ごろか ら欧州の企業と大学が中心となってオンライン学習シ ステム "AluMATTER" が整備されている⁴²⁾。金属の基 礎から加工や接合まで幅広くカバーしており、欧米や インドなどから、年間40万人、1日1500人が利用して いる。また、高度な計算には、より高度な実験情報が 必要となるので、ICMEの注力は、必然的に研究設備 の拡充と高機能化という研究インフラ整備を促す。ひ いては、実験的研究のレベルアップも期待されている。

以上のように、ICMEの研究を推進することで、技術的なメリットだけではなく、多方面での波及効果が 期待されている。

4. おわりに

ICMEは、企業の産業活動と大学の研究活動を繋ぐ

Industrial R&D	Main activities		Academic partner	Main activities	
Corus	PSC, lab/plant rolling (TPM)	⇔	NIMR	Microchemistry (TEP)	
Alcan	Characterization, FEM simulation	⇔	IMMPETUS	FEM simulation	
Pechiney	Characterization (particles)	⇔	EMSE	Particlebreak-up	
SAPA	Characterization (recrystallization)	⇔	SIMR	Characterization	
Hydro	Simulation, experiments (extrusion)	⇔	NTNU	AlFlow / AlSoft (TPM)	
VAW	Simulation, experiments (TPM)		IMM	3IVM, GIA, StaRT (TPM)	
			IBF	FEM simulation, interface	
Raytek	Temperature sensor (proto type)	⇔	(Uni. Brandenburg)	New temperature sensor	

Table 2 The VIR [*] industry and academic partnerships and their main activities.³⁾

分野である。古くから培われてきた理論を工業生産に 展開することがICMEの主目的であるが、その他にも、 産学連携の強化、研究インフラの整備、産業と理論に 精通した人材の育成など、波及効果は幅広い。そのよ うなことから、今、世界で多くの研究者が本分野に集 まり始めていることは自然な流れであるように思われ る。ICMEは、学問と工業を結びつける研究分野とし て、今後も発展していくものと思われる。

参考文献

- 1) J. Hirsch: Virtual Fabrication of Aluminum Products, VCH, (2006).
- 2) Aluminum, 80 (2004) VIR[*] conference 2004 special edition
- J. Hirsch and K. F. Karhausen: 1st World Congress on ICME, TMS, (2014), 203-210.
- 4) 西沢泰二:ミクロ組織の熱力学,日本金属学会(2005).
- 5) Thermo-Calc: http://www.thermocalc.com/
- 阿部太一:材料設計計算工学 計算熱力学編,内田老鶴圃 (2011).
- W. A. Johnson and R. F. Mehl: Trans. ALME, 135 (1939), 416-458.
- 8) M. Avrami: J. Chem. Phys., 7 (1939), 1103-1112.
- M. Ferry and F. J. Humpherys: Acta Met., 44 (1996), 3089-3103.
- 10) K. Luecke and K. Detert: Acta Met., 5 (1957), 628-637.
- 11) C. Zener: Trans. Met. Soc. AIME, 175 (1948), 15-51.
- 12) F. J. Humphreys and M. Hatherly: Recrystallization and Related Annealing Phenomena, Elsevier, (1995).
- M. Volmer and A. Weber: Z. Phys. Chem., 119 (1926), 277-301.
- 14) R. Becker: Ann. Phys., 24 (1935), 719-752.
- 15) C. Zener: J. App. Phys., 20 (1949), 950-953.
- 16) H. B. Aaron and G. R. Kotler: J. Appl. Phys., 41 (1970), 4404-4410.
- 17) J. W. Cahn: Acta Mat., 9 (1961), 795-801.
- 18) C. Wagner: Electrochem, 65 (1961), 581-591.
- I. M. Lifshitz and V. V. Slyozov: Phys. Chem. Solids, 19 (1961), 35-50.
- 20) 例えば、山田健太郎、里達雄、神尾彰彦:軽金属,51 (2001)、 215-221.
- 21) 例 え ば, C. R. Hutchinson, F. Geuser, Y. Chen and A. Deschamps: Acta Met., **74** (2014), 96-109.
- 22) 木村 宏:材料強度の原子論,日本金属学会,(2005).
- 23) 小林正和: 軽金属, 54 (2004), 159-165.
- 24) C. Schaefer: Ph. D thesis, RWTH Aachen, (2011).
- 25) V. Tikare, E. A. Holm, D. Fan and L. Q. Chen: Acta Met., 47 (1999), 363-371.
- 26) T. Miyazaki, T. Komiya and T.Kozakai: Mat.Sci.Eng., A312 (2001), 38-49.
- 27) F. J. Humphreys: Mat. Sci. Tech., 8 (1992), 135.
- 28) H. E. Vante, T. Furu, R. Ørsund and E. Nes: Acta Met., 44 (1996), 4463-4473.
- 29) 例えば、上杉徳照、東健司:軽金属、54 (2004), 82-89.
- 30) D. Fan, S. P. Chen, L. Q. Chen and P. W. Voorhees: Acta Met., 50 (2002), 1895-1907.
- R. Kampmann and R.Wagner: Mat. Sci. Tech., 5 (1991), 213-303.
- 32) O. R. Myhr and Ø. Grong: Acta Mat., 48 (2000), 1605-1615.

- 33) U. F. Kocks: J. Eng. Mat. Tech, Trans. ASME, 77 (1976), 76-86.
- K. Marthinsen and E. Nes: Materials Science and Technology 17 (2001), 376-388.
- 35) F. Roters, D. Raabe and G. Gottstein: Acta Met., 48 (2000), 4181-4189.
- 36) V. S. S. Prasad: Ph. D thesis, RWTH Aachen, (2007).
- 37) O. Engler, L. Löchte and J. Hirsch: Acta Met., 55 (2007), 5449-5463.
- 38) O. R. Myhr, R. Østhus and T. Furu: Mat. Sci. Forum, 794-796 (2014), 676-681.
- 39) B. L. Boyce et al.: Int. J. Fract., 186 (2014), 5-68.
- 40) 岩村信吾:住友軽金属技報,54(2013),243-249.
- TMS2014, 2014 Materials and Manufacturing Innovation (2014).
- 42) AluMATTER: http://aluminium.matter.org.uk/



岩村 信吾 (Shingo Iwamura) (株) UACJ 技術研究開発所 名古屋センター 第三部