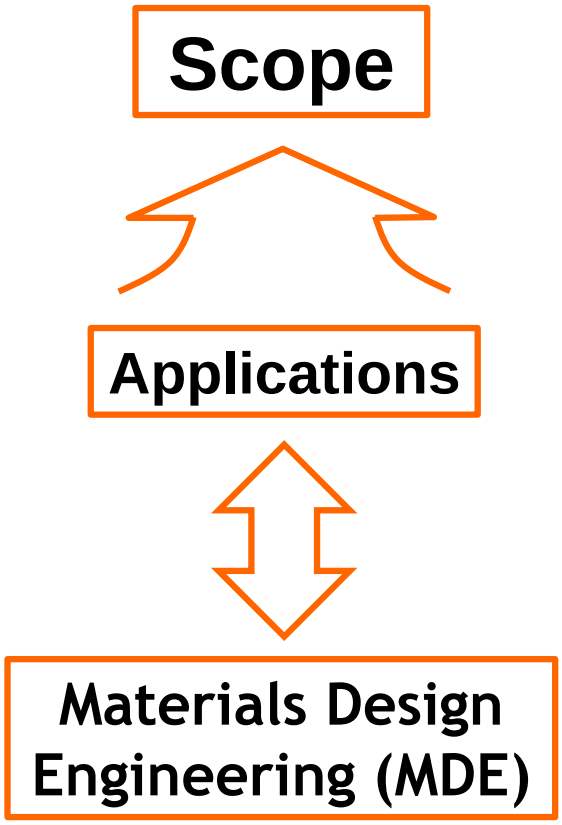
# An Introduction:

# What is Materials Design Engineering ?



# “新しい材料を探す旅へ！”

材料はすべてを支える大地のようなものです．培われた肥沃な大地には実りが多いでしょう．材料は常に新しい時代を切り拓いてきました．先端分野や未踏分野のいずれにおいても新しい材料が必要となります．材料の歴史は長く，関連する学問分野が多様であり，その面白さや奥深さを理解できるようになるには少し時間がかかるかもしれません．まず「材料デザイン工学」 (Materials Design Engineering)の全体像（アウトライン）を理解し，それから自分が興味を持った材料の分野にじっくりと深化しましょう．

**あわてず，なまけず，コツコツと．**

**(1) 材料を意識する．**

材料は人類にとって不可欠なものであり，古くからいろいろな用途に用いられてきました．あまりにありふれているため，私たちはその存在や重要性に気づかないことがほとんどではないでしょうか．まずは日々の生活で材料を意識してみましょう．

**(2) 材料は時代を超える．　“天然の材料から人工の材料へ”**

材料といえば，古くは取り出した天然の原料（鉱石や岩石）を加工していただけでした．エジプトでのいにしえの例として，女性がアイシャドウに使っていた黒い粉末 $Sb_2S_3$ (三硫化アンチモン)や装飾品に利用した天然のシリカ ($SiO_2$)ガラスがあります．

時代とともに人工の新しい材料が作られており，同じ成分が含まれていても材料としての形態やその用途が変化することで，材料は時代を超えます．現代社会のハイテク分野などあらゆる場面で種々の材料が使われています．例えば，アンチモン (Sb)はプラスチックの難燃剤 ($Sb_2O_3$)や DVD, Blu-ray 光記録用 Ge-Sb-Te 薄膜に用いられています．高純度シリカガラスファイバーは光通信の伝送媒体として欠かせないものです．

水銀 (Hg)は，古くは鳥居の赤色塗料（辰砂）や仏像への金コーティングのために欠かせない材料でした．現在は世界的な環境規制により，ある特殊な用途のみに使われています．世界に目を向けると，途上国の違法金山での採掘には，簡便な水銀アマルガム法が用いられており，水銀による環境汚染が深刻な問題となっています．

**(3) これから不可欠な材料とは？　“持続可能な循環型社会の実現に向けて”**

グローバル社会となった現在では，多くの災害被害や環境・資源・エネルギーに関する未解決課題が地球規模で山積しています．持続可能な開発目標（SDGs: Sustainable Development Goals)を達成し，循環型社会を我々の手で作り上げるためには，あらゆる分野で新しい材料が必要となります．例えば，エネルギーという形のないものを使いやすい形態（例えば電気）で効率良く生み出すためには，形のある材料（例えば，太陽電池材料など）が不可欠です．

料理をすれば生ごみが出るのと同じで，火力発電や原子力発電でエネルギーを作り出すと廃棄物や不要物が発生します。太陽光発電や風力発電はクリーンなエネルギーを作り出すものですが，原材料から発電に用いる機能材料を作るプロセスでたくさんの廃棄物（Waste)が出ています．種々の廃棄物をどのように安定にかつ安全に固定化していくのか，未利用資源（Unused resource)から有用な成分を効率良くリサイクルし材料開発につなげていくか，などについても私たちが今後取り組むべき課題です（図 1)．

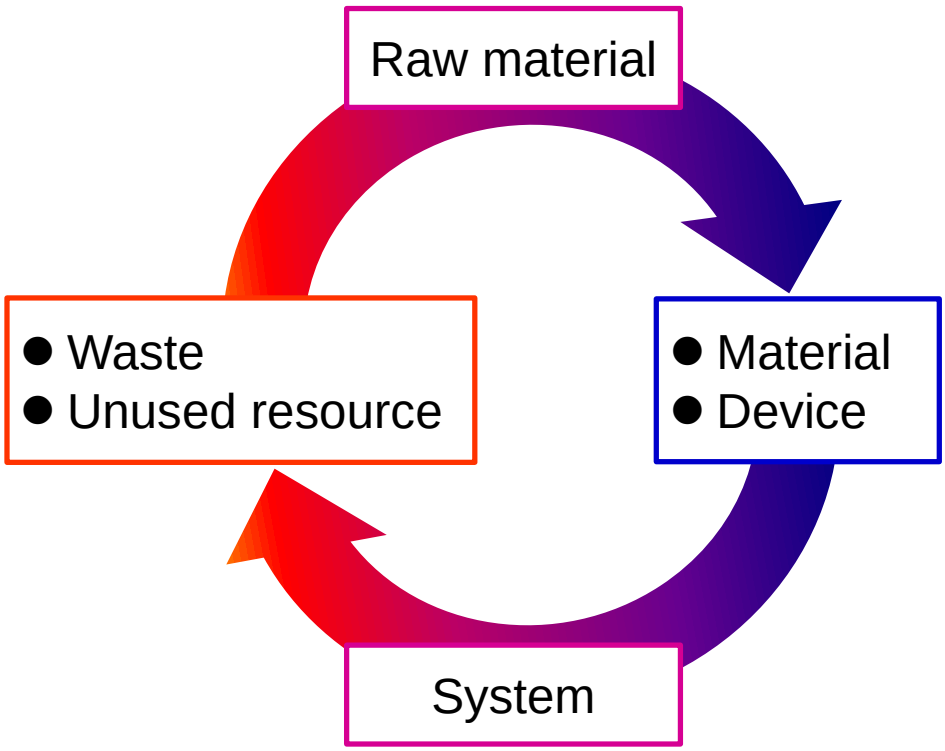



図 1　循環型社会における材料研究．

# 1. イントロダクション

## 1.1 材料デザイン工学とは？

これまでの材料工学 (Materials Science and Engineering)は，材料が原子，イオン，電子から構成されていることを理解し，作られた材料がどのような応用(Applications)に使われるのかを考えていくものでした.

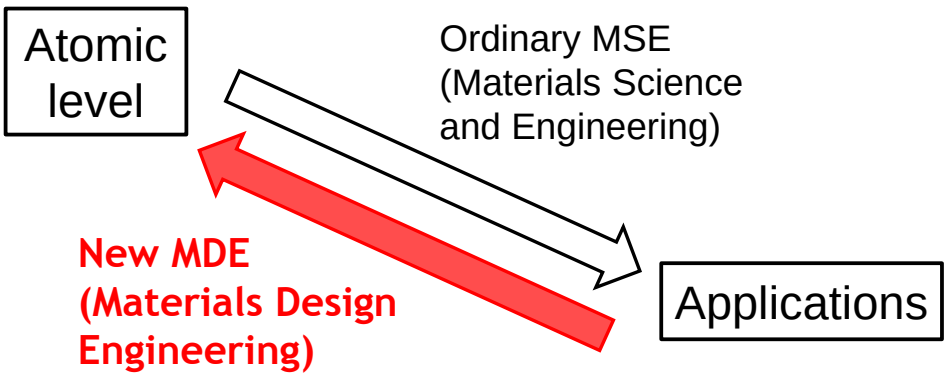



図 2　材料デザイン工学 (Materials Design Engineering)とは？

これからの**材料デザイン工学 (Materials Design Engineering)**は，新しい応用を見据えて，その応用を実現するために「最適な材料とは何か？」を考え，デザイン思考に基づき効率よく，革新的な材料を開発していくことになります．そときに闇雲に試行錯誤を繰り返すのではありません。

**材料デザイン**として，**[組成]－[構造]－[特性]** (Composition–Structure–Properties Relationship)の三本柱（図 3, p5）から革新的材料の視点を整理し，どこを明らかにすればよいか？、どこに革新のポイントがあるか？を考え見つけ出し，アプローチ (Approach)します．もし材料デザインで生み出した革新的材料について，関連する基礎科学に新しい点が見つかれば，そこを深化するのもよいでしょう (Materials Design Engineering and Science)．これらのスタンスにより，未解決課題の解決，最新技術や未踏分野への速やかな対応が可能です.

## 1.2 材料へのアプローチ

材料は，ある目的のために，優れた機能（特性）を有するものです．優れた機能を有する材料は，ミクロからマクロまでの構造を設計し制御することで実現可能となります．材料は，［化学組成］(Chemical Composition) により原子・イオンの種類と関連する電子構造及びそれらの割合を決定し，さらに製造プロセ

スにおいて［(微視的) 構造］ (Microscopic Structures)（図 8, p9）を制御することで，優れた［特性］ (Properties)を実現しています．ここで構造は，電子構造 (Electronic Structure)，結晶構造(Crystal Structure)／非晶質構造 (eg., Glass Structure)，欠陥構造 (Defect Structure)及び微細構造 (Microstructure)に分類されます．

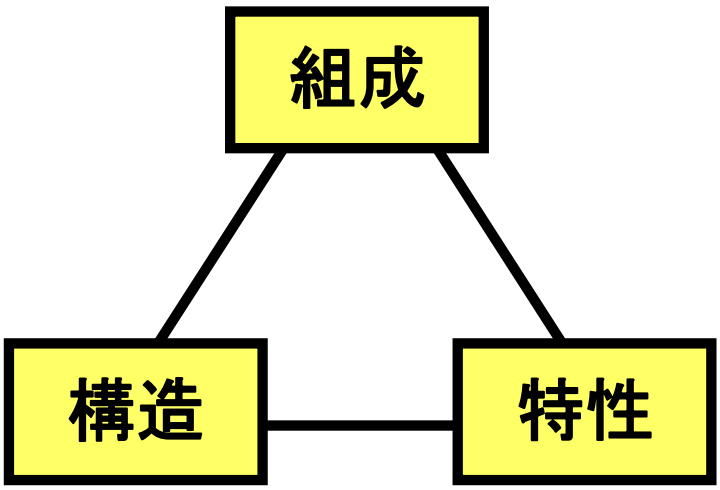



図 3　材料デザインの視点．［組成］－［構造］－［特性］の関連性の理解に基づく．

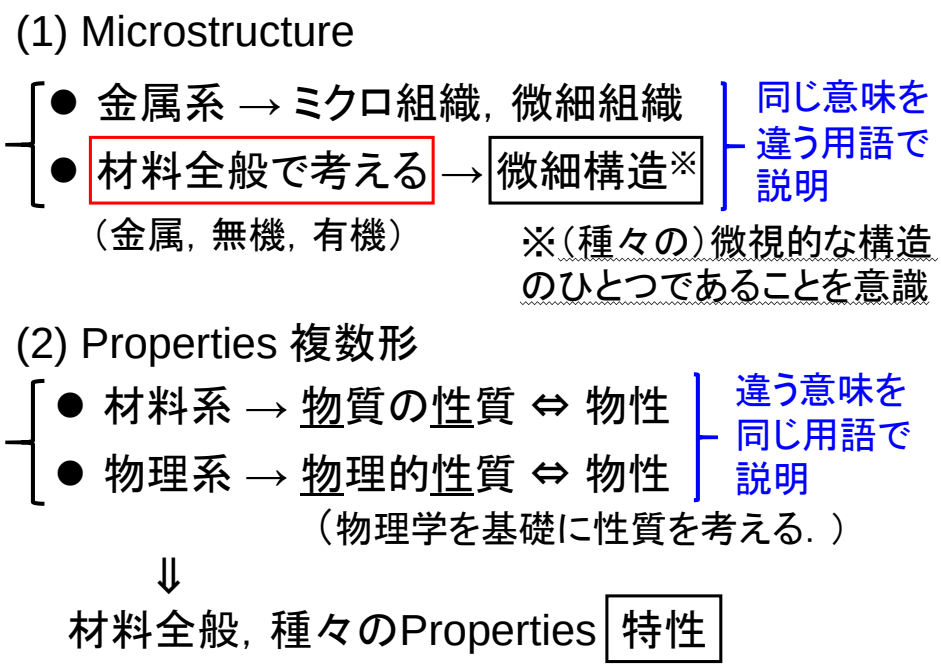



図 4　Microstructure と Properties の表現．

ここで専門分野が異なると，材料に関する専門用語が異なることがあります．例えば，[構造]のひとつである微細構造 (Microstructure)や[特性] (Properties)の使い方は，各専門分野で同じ意味のことを違う表現で表したり，違う意味のものを同じ表現で使ったりすることがあるので，注意しておきましょう（図 4, p5）．

### 1.3　材料スコープ工学

持続可能な循環型社会の実現に向けて，環境，資源，エネルギー，輸送，情報処理，セキュリティ，医療技術，健康，生活，食物，栄養，スポーツなど種々の分野で新しい革新的材料の開発と関連するプロセス開発が求められています．

その例は環境浄化材料，環境調和型貴金属リサイクル，レアアースフリーナノコンポジット磁石，低温作動型燃料電池，全固体型アルカリ電池，高信頼性の高強度軽量金属合金，環境調和型光ファイバーセンサ，ドラッグデリバリーシステム，表面処理人工骨，バイオアクティブガラスなど，多種多様なものとなっています．

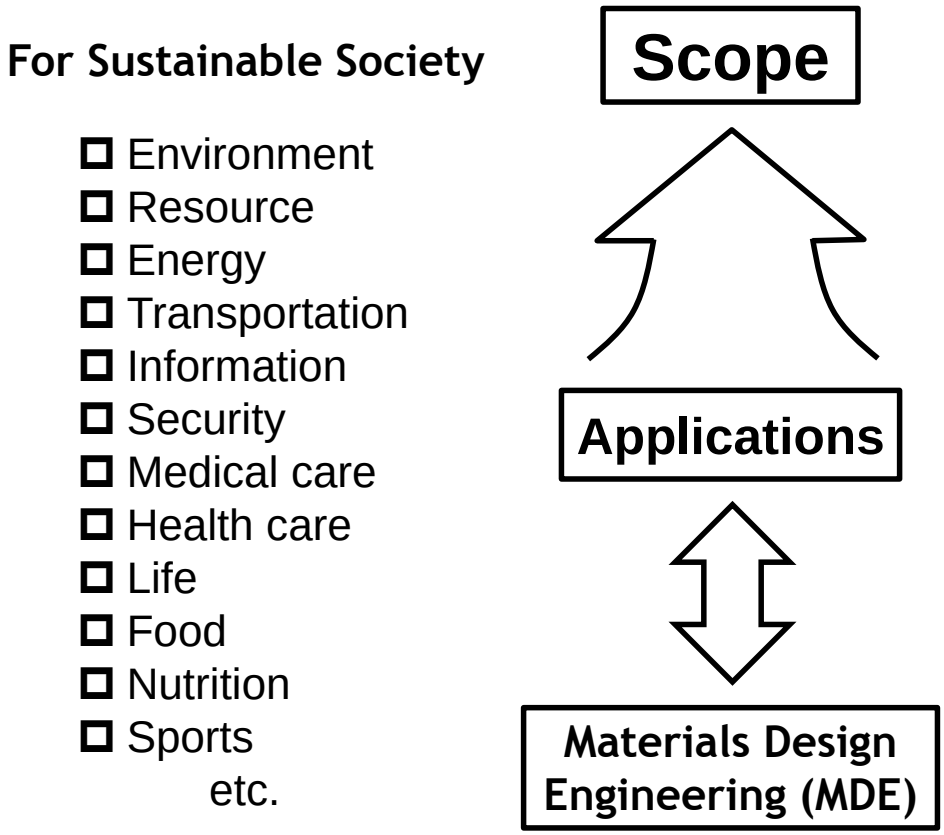



図 5　材料スコープ工学.　“材料が新しい時代を拓く”.

スコープ*1 とはその対象が影響を及ぼすその範囲や広がりを意味し，歴史が証明しているように，あらゆる分野の基礎（大地）となる材料で革新 (Innovation) が起これば，飛躍的な進歩や新しい展開を実現可能です.

それでは広範囲な分野・産業へのスコープへ飛躍的な進歩をもたらす多種多様な革新的材料へどのようにしてアプローチしたら良いのでしょうか？その答えは材料デザインとして，[組成]－[構造]－[特性]を基礎に自分のオリジナルな視点を持つということにあります.

*1 スコープ Scope :
1. 範囲，限界，視野，2. 余地，自由，機会，3. 広さ，広がり，長さ，4. ((古))目的，意図，目当て，5. スコープ （例. Microscope）


図 6　MDE (Materials Design Engineering)へのアプローチ. ［組成］－［構造］－［特性］の三本柱と真珠 (Pearl)*の貝殻を付けた T シャツ. 真珠貝殻の微細な層状構造が真珠の虹色を生み出す. *愛媛県南予地区（宇和島市他）は全国一位の真珠養殖用アコヤガイ貝殻の生産量を誇る.

## 1.4　材料デザインへのアプローチ

[組成]－[構造]－[特性]を三本柱として材料をデザインするために，これらの関係性について考えてみましょう．材料の［化学組成］が決まれば，構成する原子・イオンの種類と量（割合）が決まります．もちろん製造プロセスによっては不純物が混入し，不純物の種類と量が材料の特性に影響を及ぼすことも考えられます．

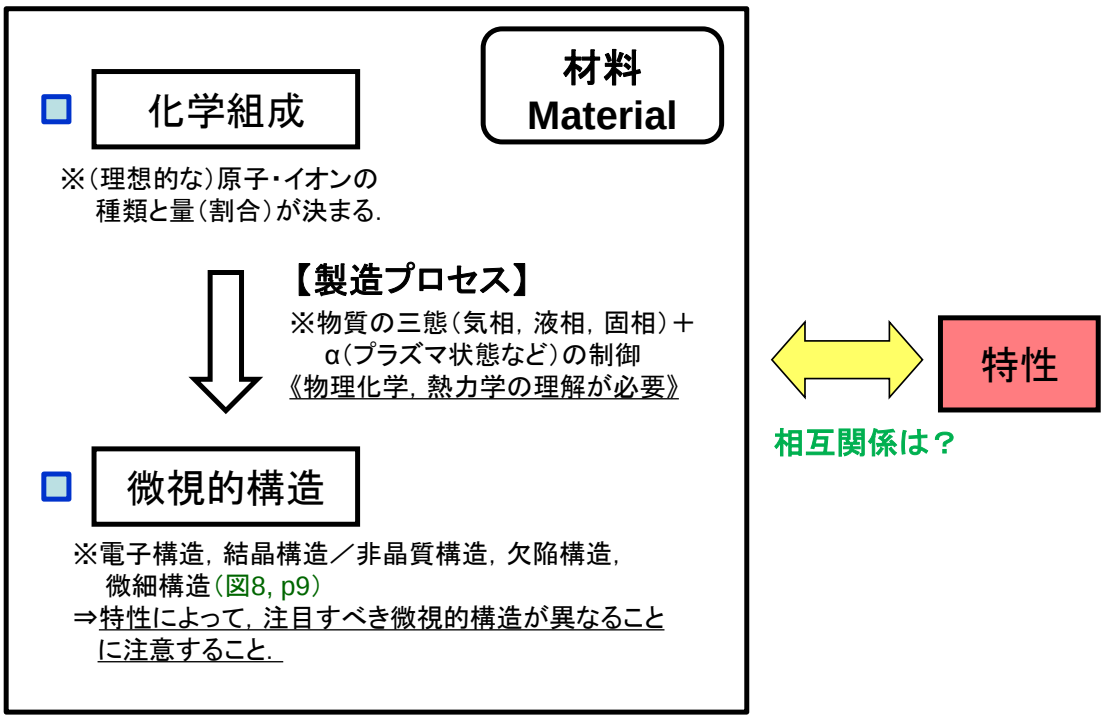



図 7 材料デザインへのアプローチ.

ある化学組成が決まれば，それで一義的に材料の特性が決定されるわけではありません．化学組成に加えて，電子構造，結晶構造／非晶質構造，欠陥構造，微細構造などの［微視的構造］（図 8, p9）が設計された後，製造プロセスにおいて制御されます．製造プロセスは，応用に対応した，ナノ・ミクロからマクロレベルでの材料の形状（例えば，板，管，繊維（ファイバ），微粒子，膜など）を制御する過程でもあります．気相，液相，固相という物質の三態を経由し，場合によってはプラズマ状態などの励起状態を経て材料の製造が行われます．材料の製造プロセスには相変化や化学反応を伴うため，これらの化学的な現象を物理的な視点から理解すること【物理化学】が必要です．

* 原子核の階層構造を取り扱う学問分野は原子物理学である．我々は材料の最小の構成単位が原子・イオン・電子であるとして理解を進める．

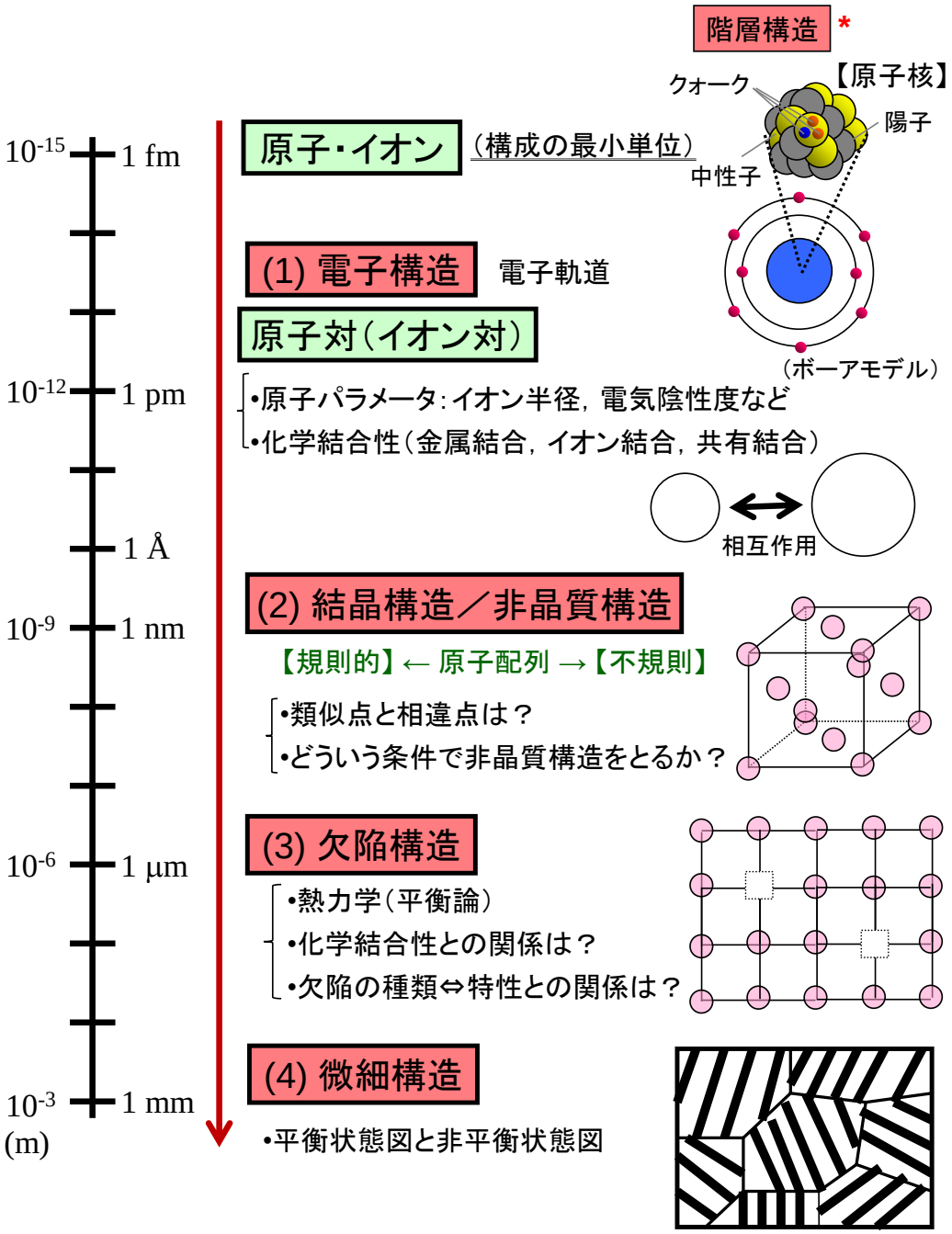



図 8 材料の微視的構造と決定因子.

［化学組成］と［微視的構造］を設計・制御することで得られた材料の特性はどのように決定されるのでしょうか？

**［特性］**とは密度を除き，熱，応力，光，磁界，水など外部の刺激に対する材料の応答 (response)です．材料の特性の理解には，微視的構造と特性の相関性を知ることが重要です．特性には外部刺激の種類により，例えば熱的特性（外部刺激は熱），機械的特性（応力），光学特性（光）など様々なものが存在します．外部刺激の種類，言い換えると特性の種類により，注目すべき・支配的な因子となる微視的構造の対象が異なることに注意する必要があります．

“材料をデザインする”ということは，言い換えると，デザイン思考に基づき革新的材料を生み出していくことは，ある応用を見据えて，微視的構造と特性の関係を理解しながら行うことになります．また，種々の分析方法を用い，材料が均質な構造か，不均質な構造を有するのかを多面的に評価解析することが材料を知ること（材料の特徴付けを行うこと）につながっていきます．

**【Case study I】DVD, Blu-ray 光記録膜**：
［組成］Ge-Sb-Te，［構造］結晶質／非晶質構造，［特性］光反射率

我々が身近で利用している DVD, Blu-ray-RW (Re-writable，書き換え可能の意)の光記録膜を［**組成］–［構造］–［特性］の視点から考えて**みましょう．[組成]は Ge–Sb–Te カルコゲナイド系です．厚さ～30 nm の薄膜にレーザー光を集光し，<1 μm（=$10^{-6}$ mm）の光記録スポットを短時間（<<1s）にて形成することで光記録を達成します．光記録前は[結晶質]の膜ですが，レーザー光により局所的に微小部分が加熱され溶融した後，レーザー光をオフすることで急速に冷やされ，[非晶質]となります．ここで，微視的な[構造]としては結晶質／非晶質構造の相変化を利用しています．この構造の違いを[特性]としては[光反射率]の違いとして読み取ることが可能となります．デジタル記録としては，音声や画像を表す波を非常に短い時間単位で切り分け，出力等を数値化し，その数値を二進法で表すため，[0]と[1]という二つの異なる状態を作ればよいことになります．光記録膜では，[結晶質領域]と[非晶質スポット]で二つの（光反射率が）異なる状態を作り出しています．この結晶質固体－融体－非晶質固体間の短時間での相変化を利用することで，光記録を達成しています（相変化型光記録膜）．光記録した内容を消去したい場合，記録スポットをレーザー光で加熱し結晶化させることで，初期状態の結晶質部となります．このことが RW (Re-writable)の所以です．