材料開発と計算機材料科学

東京大学国際・産学共同研究センター
安井　至

Material Development and Computer Aided Material Science

Itaru Yasui
Center for Collaborative Research, Univ. of Tokyo

1. はじめに

計算機材料科学は，かなり長い歴史を持っている。しかし，ガラスの分野で言えば，原子・分子レベルのシミュレーションを中心とした方法で，新しい材料が得られたという実績を出せていない。一方，流体力学分野や有限要素法などのマクロレベルシミュレーションは，着実な実績を納めてきた。とはいっても，ガラス分野は，原子・分子レベルの計算機材料科学がもっとも精力的に取り組んできた分野の一つでもある。したがって，今後，計算機材料科学が実用上のブレークスルーを果たすとしたら，薄膜などを含むニューガラス分野が有力候補であるように思える。本稿はそのような期待を込めて，雑感的な記述をしてみたい。もう少々技術的観点からの解説は，別稿を参考にしていただきたい[1]。

2. 材料開発の流れと計算機

歴史的にみると材料開発は偶然を味方につけながら行われてきた。いわゆるセレンディピティーの世界である。すなわち，何か別の目的で実験を行っているときに，偶然新しい現象を発見し，それがその材料の新しい用途に結びつくというプロセスである。これは，材料というものがそれ自身に価値があるわけではなく，使用目的を設定したときに初めて意味をもつタイプの実用品であることとも関連しているものと思われる。

偶然に頼らないで材料開発を効率的に行う方法論があるだろうか。セラミックス系材料合成には多数の元素の組み合わせがあり得る。すべての組み合わせの数はそれこそ無限に近いものになるだろうが，それをすべて試みることが可能であれば，確かになんらかの新しい材料の開発ができるだろう。極めて幸運な人であれば，数回の試みで何か発見をするかも知れない。しかし，そのすべてを網羅しなくてはならないとしたら，それには無限の労力と無限の資金が必要になるだろう。

人間が可能な組み合わせを片っ端から試験することをしばしば「じゅうたん爆撃法」とよび，しばらく前の日本では，特に企業内の研究手法としては，ごく普通のこととして行われてきた。しかし，材料が高度になるにしたがって，より多成分系になると同時に微細組織の制御なども重要になって，じゅうたん爆撃法は実施不可能になりつつある。また，日本人のマインドとしても，そのような方法論は避ける傾向が強

〒106　港区六本木 7-22-1
TEL 03-3402-6231
FAX 03-3479-5042
E-mail: yasui@ccr.u-tokyo.ac.jp

くなってきている。

それでは何か有力な方法論はあるのか？　目を見張るばかりの進歩を遂げた計算機を有効利用する方法はないのだろうか。

3. 概観—計算機材料科学

計算機を使用した科学，特に分子シミュレーションと呼ばれる一連の計算が現れたのは，実はかなり前のことである。モンテカルロ法の創始者と言われるMetropolisは，1953年に論文を発表しており，また，分子動力学は，Alderらによって1955年頃開始されている。1964年に行われたRahmanによる分子動力学計算の結果は，物理化学の標準的な教科書であるMooreの物理化学にも掲載されている。もう一つの方法論である分子力学法のプログラムが生まれたのもほぼ同時期である。

計算機材料科学の手法は，ここに記述した分子動力学，分子力学法，モンテカルロ法に加え，量子力学的方法論，すなわち分子軌道法，バンド計算などがある。これらが，狭義の計算機材料科学手法である。材料の開発を目的としたときには，計算機による材料開発支援という見方が主流であった。計算機のもう一つの能力である大量情報の蓄積とそこからの有用な情報の抽出能，すなわち，データベースの有効利用も材料の開発にとって非常に重要な概念である。

構造物の強度計算などに使用される有限要素法，有限差分法などといった手法が，材料の分野でも使用されることがある。たとえば，ある材料からなる部材の設計，熱や物質の流れの計算を材料の生成過程に当てはめた計算などである。これらの計算は，原子レベルの計算からほど遠いレベルであり，しばしばマクロレベルの計算と呼ばれる。このような計算までを計算機材料科学の分野に入れる場合もある。実際，ガラス製造プロセス，特にガラス溶融窯内のガラスの生地の流れの解析や，ガラス成形プロセスにおける形の形状とガラスの形の関連の解析といったものが実用になっている。

4. 原子・分子レベルからの材料開発支援システムは実現可能か

4-1. イメージ

今後，計算機材料科学が科学から実学に進歩するためには，どのようなシステムが開発されれば使えるのか，そのシステムを使ったときに計算時間と計算コストがどのようになるか，といったことが明らかになる必要がある。ところが，現時点では，このような提案がなされたことがないように思える。そこでイメージを述べることによって，ご批判をいただいてみよう。

まず，システム全体の目標は，「じゅうたん爆撃を行わない材料開発を可能にすること」，とする。取り扱う対象は，それこそ様々であるとは思うが，ここでは広義のニューガラスとする。そしてその機能は，「新組成を入力すると物性の計算ができること」「いくつかの計算結果を組み合わせて，目的物性をもつ最適の組成を示すこと」である。

材料科学の王道に沿った形でこのような機能を持ったシステムを構築するとしたら，「材料の物性は，その構造（広義）に由来する」という原則に従うべきであろう。すなわち，分子動力学などによって，有りそうな構造(原子配列)を再現することを中心に据えたアプローチになるだろう。

となると，このようなシステムは，次のようないくつかのモジュールからなる。

(1) 知識データベースシステム
(2) 原子配列再現システム
(3) 物性推定システム
(4) 組成最適化システム

それぞれについて，若干説明を加えよう。

4-2. 知識データベース—経験者の知識をどう取り扱う

もっとも単純に考えて，このようなシステム

の究極の形態は，まあ計算機中に合成装置と物性測定装置を実現することだろう。そこで，ある基本組成のガラスがあり，そのガラスの物性・特性を変更するためには，どのような元素を添加することが必要かといった課題を用いて，このシステムを作ることを考えよう。現実世界でこのような課題に取り組む場合には，普通，かなり経験を積んだ者がいて，その人が研究方針を決定する。第一の問題点は，このようなシステムにも，経験者の存在を組み込むかどうかである。考え方は二つ有って，第一の考え方は組み込みを拒否することで，それを支持する理由も二つある。一つは，このようなシステムはそもそもエキスパートのための支援システムであって，その使用者が自分の経験を活かせば良いという考え方である。もう一つは，そのような経験のない人の方が，材料開発の歴史的事実が示すように，新しい発想に基づく新しい材料を発掘する可能性が高いということである。これらに対して，第二の考え方は，経験者の発想を組み込むことによって計算時間を大幅に短縮すべきであるという考えである。

もしも経験者の代替品を計算機システムに組み込むならば，今から10年以上前に大きなトピックスとなった「人工知能」的な能力を付加することと思われるかもしれないが，現時点では，当時エキスパートシステムと呼ばれた考え方はすでにほぼ終焉し，むしろより全文データベースを持たせる方向に変化している。これは，「知識」を多くのデータから抽出する困難さにいどむよりは，膨大なデータを直接参照する方がむしろ容易であることと，パソコンなどの小さなシステムであっても，CD-ROM, DVDなどの記憶容量が非常に大きなものになったためである。例えば，このニューガラスの創刊以来の記事であるとか，あるいは，現在刊行準備中であるガラス工学ハンドブックのすべてをシステムの内部に納めて，自由に参照できるといったアプローチがより現代的であると考えられる。

4-3. 原子配列の再現

溶融法で作られるガラスについていえば，その原子配列の再現には，分子動力学，分子力学，モンテカルロ法などを使うことができる。これらの計算には，原子間ポテンシャルが必要である。すなわち，多数の原子からなる材料を分子動力学法などによって解析し，もっとも有りそうな原子配列を再現するには，含まれている原子—原子間に作用するポテンシャルを使える状態にある必要がある。実用的に分子動力学を使用するためには，ポテンシャルがデータベース化してあることが重要である。原子間ポテンシャルが使える状態にない場合には，なんらかの方法でもっともらしい原子間ポテンシャルを作る必要がある。その際に必要となる知識が，現実に存在している各種材料の情報である。すなわち，何も情報のない状態である計算を行ってなんらかの結果が得られるというものではなく，実験的に得られている事実を説明できるようなポテンシャルを探すという作業から行わなければならない。

現状はと言えば，多様な組成に対応できるポテンシャルが統一的に求められ，データベース化された状況からは程遠い。その理由は次のようなものである。

分子動力学を最先端で研究している研究者で，この方法を材料設計に使おうという考え方を持っている人は，恐らく一人もいない。新しいポテンシャルの取り扱いや，そのポテンシャルをどれほど第一原理に近い形で求めるか，といった学術的な興味で研究が進んでいるから，ある意味で当然なのである。そこで，より少ないパラメータで実行可能な分子動力学を行ない，そのデータを蓄積して，未知の組成に対してもある程度使えるようなパラメータセットデータベースを構築するといった地道な努力は，まさに材料屋が自分たちで行うべき作業である。敢えて「作業」と書いたが，それがレベルが低いということを意味するものではない。科学が実学に変貌する段階にとって，そなわち工

学にとって必須な作業である。

通常の溶融法によるガラス以外の材料を計算機材料科学的手法でシミュレーション可能だろうか。例えば，結晶化ガラスの組織制御のような研究課題を果たして分子動力学で解析できるだろうか。これはなかなか難しい。ガラス相からどのような結晶相が出るか，これは核生成剤の影響を大きく受ける。一般に核生成剤はガラスに数%以下しか含まれないから，この成分の添加によって系全体としての熱力学的なエネルギーが大幅に変化している訳はない。これが困難を予想される原因である。分子動力学の本質は，ある熱力学条件の中で，エネルギーミニマムになる構造を求めることであるが，原子数1000程度のアンサンブルでは，計算されるエネルギーの揺らぎが大きすぎて，核形成剤の効果や，ガラスの結晶化によってどの結晶相ができるかといった僅かなエネルギー変化を取り扱うことができそうもない。100万原子程度の計算ができるようになることが必要かもしれない。

スパッタリング法による薄膜の形成についても，実験的にはガラス全圧や酸素分圧などを変化させることによって，得られる薄膜の組織・構造がかなりの影響を受ける。計算としてできない訳ではないし，市販のソフトもあるようだが，実験で得られる結果の微妙さを再現できるほど，計算手法が進歩しているとは思えない。

このように，溶融法のガラス作成以外のプロセスを，分子動力学で取り扱うには，まだまだ基本的な手法開発からとりかからなければならない状況である。

4-4. 物性の推算

以上のような方法で，なんとかして原子配列の再現ができたとして，そのような原子配列をもつ材料の物性がどのようになるかを計算しなければならない。ここにも，分子動力学法などの原子レベルシミュレーション法が使える。これらの方法を用いて，その原子集団を一定の温度に保持して，そのときの個々の原子の動きから計算できる物性がある。拡散係数がその例である。それ以外にも様々な工夫をすることによって，粘性，強度などの推定も可能であるとされている。余り試みられていないものも多い。例えば誘電率がどうか問われれば，電界を掛けたときの原子の移動と，そこに生ずる双極子モーメントを算出しなければならない。バンドギャップがどうなるかと問われれば，それは分子動力学法などからは独立してバンド計算を行わなけらばならない。

このような各種の物性を算出する手法も，完全と言えるものはまだまだ少数である。拡散係数一つにしても，計算で再現できる実時間が余りにも短くて，多数の原子がホッピングを起こす計算を行おうとすると溶融状態に相当する温度になって始めて可能というのが実態である。すなわち，固相中での拡散は，まだまだ再現不能に近いのである。

こんな状況を克服して，必要となる物性がある程度以上の精度で再現できる計算システムをすべて完成させることになるだろう。となると，かなり地道な努力が必要になる。

4-5. 総合的システムの使い勝手

以上のような困難をすべて克服して作ったシステムがあったとして，ユーザはどのような操作が要求されるだろうか。最終的なシステムでは，すでに述べたようにユーザが入力するのは組成だけ，あるいはそれに加えて熱処理履歴だけだろう。システムは，その組成の原子集合を作って，適切な熱処理シミュレーションし，そして要求された物性の推算を行う。

これが非常に短時間に行われれば，そこそこ使えそうなシステムになりそうである。問題は，どうもそのようになりそうもないことである。計算時間が非常にかかるのがこの種の計算の最大の悩みである。特に，第一原理に基づいた分子動力学計算は，100個程度の原子集団であっても，しかも，スーパーコンピュータを用いても，相当長時間を要する。となると，スーパーコンピュータを使うことによる計算コストが問題になるだろう。

このように，現時点で総合的システムができたとしても，その使い勝手はといわれれば，まだまだ課題が無限に近いほど存在していて，計算結果が今一つ信頼できない上に，計算コストとなると「実験した方が安い」だろう。

すなわち，このシステムが完成したとしても，当分の間は，実験ができない状況における材料開発，あるいは，非常にコストの掛かる状況のシミュレーションといった用途に限られるだろう。原子力関係などには，そのような用途も有りそうな気もするが，現在の日本の状況では，難しいかもしれない。

5. 将来展望

シミュレーション法としての有限要素法も，実は，かなり長い間上に述べたような困難な状況にあった。しかし，現時点では，例えば自動車業界においては，開発コスト削減のために，実車を使っての衝突試験の回数を減少させるために有限要素法解析の利用を増やすといった状況が見られるようになっている。したがって，材料開発も将来は，なんらかの形で実用化される可能性が無いわけではない。

課題はまさに無限に近いが，その一つとして，計算コストの減少が急務であろう。それに対しては，一つ面白い方法がある。現在，われわれが使っているパソコンの計算能力は実はかなりのものである。特に，ワープロを使っている程度では，CPU はほとんど遊んでいる。この遊んでいる能力を活用して，もしもある企業内にあるネットワークで繋がった 2000 台程度のパソコンの一つ一つを，並列コンピュータの CPU の一つとして使うことができれば，ほとんどタダで膨大な計算ができるようになるかも知れない。

もう一つ必要なことは，誰かが単純作業を行って，一定量以上の基盤的データを作ることである。例えば，実用ガラスに含まれる可能性のある元素のポテンシャルセットを一通り揃えることである。同時に，ガラスに関係の有りそうな結晶構造を再現できるようなポテンシャルセットも求めておくことが有効かも知れない。これは単純とはいっても，かなり忍耐力を要する作業であり，必ずしもすべてが論文になるようなものでもないから，ある意味で社会奉仕的な感覚を持たざるを得ないかもしれない。

このような作業を推進する人的システムとはどのようなものであるかを考えていたら，ガラスデータベース INTERGLAD を作ったときの協力態勢を思い出した。どうも，計算機材料科学が実学になって，実用レベルに到達するためには，かなり社会奉仕的なスタンスを持った研究者集団を作ることが，まず必要なのかもしれない。

6. おわりに

筆者自身が計算機材料科学に取り組んだのは，実はガラス構造モデルを手以外の方法で求めたかったという動機からであった。しかし，それ以外のことを狙うと，例え熱膨張係数であっても，簡単には求められないのが現状である。しかも，一つの組成に対しても，相当の作業量が必要である。

しかし，最近になって，分子動力学の市販のソフトやフリーウェアが充実してきた。これらを使って，標準的な方法によって計算したデータを集積し，データベースとして公開することによって，将来の実用化が見えてくるかも知れないというほのかな期待も見え始めたようである。

このところ，余り力を入れてこなかったが，もう一度研究体制を整えてみようかと考え始めているところである。

引用文献

1) 安井　至，重里有三，セラミックス計算機材料科学とその動向，セラミックス，30，[6]，469-473 (1995).