



東京大学工学系研究科総合研究機構 第七回次世代ジルコニアセミナー

計算材料科学的アプローチによるジルコニア 粒界偏析および熱伝導度メカニズムの解明

吉矢 真人

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 教授

いうまでもなくジルコニア基セラミックス材料（以降、ジルコニア）は、高靱性を備えた構造材料から酸素センサー、高温ヒーターの熱源や航空機エンジンのタービン翼に施される遮熱コーティングまで、現在までにすでに多彩な応用が知られている。また様々な機能性特性と優れた機械特性から、その潜在的な更なる応用の拡大が期待されている。長きにわたるジルコニアの応用・開発からその特性制御の試みは様々為されているが、個々の特性がいかようにして発現しているか、学術的な観点からの特性の発現メカニズムの解明は長きに渡り実用を追っている状況と言えよう。

昨今のコンピューターの高速化やソフトウェアの発展により、計算による研究が誰にでもできる時代が既に到来している。巨視的な有限要素法から原子レベルの第一原理計算や分子動力学法も例外ではない。しかし多くの場合は、理論値を計算することで実験との一致不一致を議論することに留まっているケースも多い。他方、計算材料科学的アプローチはそれに留まらず、様々な使い方がある。

本講演では、「使う」という観点からジルコニアに対する研究の例を2点紹介する。すなわち、多結晶体の特性発現に大きな影響を及ぼす結晶粒界への構成元素偏析、そして航空機のCO₂削減の為に更なる高温作動を可能にする遮熱コーティング材料としてのジルコニアの熱伝導メカニズム解明である。

分類の仕方は様々あろうが講演者の私見によれば、計算には文字通り模擬（シミュレート）をするコンピューターシミュレーションのみならず、理論計算・予測、計算機実験という別の使い方がある。これに加えて昨今発展が著しいデータ科学を基にした研究への同一条件での俯瞰的学習データを与えることも付け加わるであろう。その言葉により誤解が多いが、上述の理論計算では、物理学的な基層となる量子力学や古典力学（量子力学の古典極限）の理論を使いながら、物性理論は使わない。すなわち数値計算による既存の数理理論に基づいた理論値となる。

本講演では、計算材料科学的アプローチでの数値計算により、如何に既存の数理理論を越えた理解が得られるかを紹介し、今後ますます発展する計算材料科学的アプローチと実験的アプローチによる更なる密な協働を加速させるために、盛んなディスカッションを行いたい。

日時：2022年2月22日（火） 13:30~15:00 Zoom 開催
主催：東京大学「次世代ジルコニア創出」社会連携講座

問合せ先：ngzirconia@gmail.com