

# — 目 次 —

## 序

|                                                         |                |
|---------------------------------------------------------|----------------|
| <b>1 序 論</b> .....                                      | 1              |
| 1. 材料開発の歴史 .....                                        | (岩田修一) 3       |
| 2. 材料設計の目的 .....                                        | (石野 栞・岩田修一) 13 |
| 3. 材料設計手法確立への過程 .....                                   | (岩田修一) 14      |
| <b>2 材料設計の基礎</b> .....                                  | 19             |
| 1. 材料特性発揮のための基本的手法 .....                                | 21             |
| 1.1 高温強度 .....                                          | (後藤正治) 21      |
| 1.1.1 結晶性材料の強度                                          | 21             |
| 1.1.2 転位の運動抵抗                                           | 21             |
| 1.1.3 異相分散による強化                                         | 24             |
| 1.2 耐食性 .....                                           | (細井祐三) 29      |
| 1.2.1 耐食性の特徴                                            | 29             |
| 1.2.2 耐食性向上の基本的考え方                                      | 29             |
| 1.2.3 不動態化の促進                                           | 29             |
| 1.2.4 組織の均一化                                            | 32             |
| 1.2.5 局部腐食対策                                            | 32             |
| 孔食 / 粒間腐食 / 応力腐食割れ                                      |                |
| 1.2.6 おわりに                                              | 38             |
| 1.3 延 性 .....                                           | (丹羽直毅) 39      |
| 1.3.1 はじめに                                              | 39             |
| 1.3.2 延性の支配因子                                           | 40             |
| 第2相 / 不純物 / 応力状態 / 集合組織 / 温度・環境 / その他                   |                |
| 2. 状態図の予測とその利用 .....                                    | (鈴木朝夫) 46      |
| 2.1 実験状態図と計算状態図                                         | 46             |
| 2.1.1 状態図の研究                                            | 46             |
| 2.1.2 計算状態図                                             | 47             |
| 理想溶体近似 / 単純正則溶体近似 / 拡張した正則溶体近似 / その他の補正項 / クラスター<br>変分法 |                |
| 2.1.3 多成分系への拡張                                          | 57             |
| 2.2 合金化学的・結晶化学的予測 .....                                 | 60             |
| 2.2.1 化学と金属学と物理学                                        | 60             |
| 2.2.2 化合物の分類と相安定性を支配する因子                                | 60             |
| 2.2.3 Engel-Brewer 説                                    | 62             |

|       |                                                    |           |
|-------|----------------------------------------------------|-----------|
| 2.2.4 | Miedema による合金の生成熱の予測                               | 64        |
| 2.2.5 | 各種の相の安定性                                           | 66        |
|       | 1 次固溶体 / 電子化合物 / GCP 相 / TCP 相 / その他の化合物           |           |
| 2.2.6 | 化合物相の出現予測                                          | 74        |
| 3.    | オーステナイト系合金の d 電子合金設計法と新しい PHACOMP                  | 79 (湯川夏夫) |
| 3.1   | はじめに                                               | 79        |
| 3.2   | PHACOMP の生い立ちとその現状                                 | 79        |
| 3.3   | DV- $X\alpha$ クラスタ法による d 電子パラメータの導出                | 86        |
| 3.3.1 | DV- $X\alpha$ のクラスタ計算法とクラスタモデル                     | 86        |
| 3.3.2 | 電子の状態密度とレベル構造                                      | 87        |
| 3.3.3 | イオン価と結合次数                                          | 89        |
| 3.3.4 | d 電子準位と金属半径                                        | 89        |
| 3.4   | d 電子合金設計法と新しい PHACOMP                              | 90        |
| 3.4.1 | 3 元系合金における $\gamma/\gamma +$ 金属間化合物相境界の $Md$ による表示 | 91        |
| 3.4.2 | 実用耐熱合金の相安定性の $Md$ -PHACOMP による評価                   | 93        |
|       | ニッケル基耐熱合金 / コバルト基耐熱合金 / 鉄基耐熱合金                     |           |
| 3.4.3 | $e/a$ , $N_v$ と $Md$                               | 97        |
| 3.4.4 | d 電子合金設計法による材料物性の評価                                | 99        |
|       | 硬度 / Fe-Cr-Ni 系合金の照射損傷                             |           |
| 3.5   | おわりに                                               | 100       |

## 3 材料設計各論 .....105

|       |                                                                   |            |
|-------|-------------------------------------------------------------------|------------|
| 1.    | 有機高分子材料                                                           | 107        |
| 1.1   | 高分子材料の新しい分子設計と構造設計                                                | 107 (瓜生敏之) |
|       | —— 高弾性率・高強度繊維 ——                                                  |            |
| 1.1.1 | 高強度繊維の分子設計                                                        | 107        |
|       | 剛直鎖高分子の合成 / 共重合による超強力繊維の設計 / 耐熱および耐炎アラミド繊維 / 高弾性率・高強度の芳香族ポリエステル繊維 |            |
| 1.1.2 | 高分子材料の構造設計による高強度化                                                 | 116        |
|       | 直鎖状高分子の構造と強度 / 高分子鎖の高配向と高弾性率・高強度繊維の製造                             |            |
| 1.2   | ゴム材料の設計                                                           | 120 (藤本邦彦) |
| 1.2.1 | はじめに                                                              | 120        |
| 1.2.2 | ゴム系複合材料の 2 相複合効果                                                  | 120        |
|       | 設計 / ゴム系複合材料の特徴 / ゴム 2 相複合の構造・機能・物質マトリックス図                        |            |
| 1.2.3 | 多相複合によるゴム材料設計                                                     | 128        |
|       | 多相複合効果 / 多相複合による疲労, 破壊の制御                                         |            |
| 1.2.4 | おわりに                                                              | 133        |
| 2.    | 鉄鋼材料                                                              | 134        |
| 2.1   | 鉄鋼材料設計の考え方                                                        | 134 (岡田秀彌) |
| 2.1.1 | はじめに                                                              | 134        |

|       |                                                                   |                  |
|-------|-------------------------------------------------------------------|------------------|
| 2.1.2 | 材料設計の意義                                                           | 136              |
|       | 材質設計上の基本的考え方 / 真の要求材質の確認                                          |                  |
| 2.1.3 | 各種要求性能と冶金学的因子の関係と設計のシステム化                                         | 138              |
| 2.1.4 | 材質設計上の諸問題とその対応                                                    | 139              |
| 2.2   | Dual Phase (複合組織) 鋼の開発と合金設計                                       | (古川 敬) .....140  |
| 2.2.1 | Dual Phase 鋼とは                                                    | 140              |
| 2.2.2 | 開発の経緯                                                             | 141              |
| 2.2.3 | 合金設計                                                              | 142              |
| 2.2.4 | おわりに                                                              | 145              |
| 2.3   | 制御圧延ラインパイプの開発と合金設計                                                | (大須賀立美) .....146 |
| 2.3.1 | はじめに                                                              | 146              |
| 2.3.2 | ラインパイプに要求される特性                                                    | 146              |
|       | 強度 / 靱性および延性 / 溶接性 / 耐食性                                          |                  |
| 2.3.3 | 合金設計および製造技術                                                       | 147              |
|       | 合金元素の機能および成分設計 / 製造技術                                             |                  |
| 2.3.4 | おわりに                                                              | 151              |
| 2.4   | 耐食性低合金鋼の開発と合金設計                                                   | (乙黒靖男) .....152  |
| 2.4.1 | はじめに                                                              | 152              |
| 2.4.2 | 耐候性鋼                                                              | 152              |
| 2.4.3 | 耐海水性鋼                                                             | 153              |
| 2.4.4 | 耐硫酸露点腐食鋼                                                          | 154              |
| 2.4.5 | おわりに                                                              | 156              |
| 2.5   | 高張力鋼の開発と合金設計                                                      | (山戸一成) .....156  |
| 2.5.1 | 高張力鋼の分類と製造法                                                       | 156              |
| 2.5.2 | 高張力鋼に適用される鋼の強化機構                                                  | 157              |
|       | 固溶強化 / 細粒化 / 焼入れ硬化(マルテンサイト硬化) / 分散強化(析出硬化) / 加工硬化                 |                  |
| 2.5.3 | 各種合金元素の添加の影響                                                      | 158              |
| 2.5.4 | 高張力鋼に要求される溶接性                                                     | 158              |
|       | 溶接熱影響部(HAZ)の硬化性, 耐溶接割れ(低温割れ)性 / 耐ラメラテア性 / SR 割れ / HAZ の脆化 / SR 脆化 |                  |
| 2.5.5 | 高張力鋼の合金設計                                                         | 159              |
|       | 合金設計の考え方 / 非調質高張力鋼 / 調質高張力鋼                                       |                  |
| 2.6   | 析出硬化型ステンレス鋼の開発と合金設計                                               | (藤田利夫) .....161  |
| 2.6.1 | 析出硬化型ステンレス鋼設計の基本                                                  | 161              |
| 2.6.2 | 析出硬化型ステンレス鋼の合金設計                                                  | 161              |
| 2.7   | マルエージ鋼の開発と合金設計                                                    | (河部義邦) .....163  |
| 2.7.1 | 開発の経過                                                             | 163              |
| 2.7.2 | 合金設計                                                              | 164              |
|       | 基質構成元素 / 析出硬化元素 / その他の元素                                          |                  |
| 2.7.3 | おわりに                                                              | 167              |

|                                                           |                 |
|-----------------------------------------------------------|-----------------|
| 3. 非鉄金属材料                                                 | 168             |
| 3.1 非鉄金属材料設計の考え方                                          | (岩田修一) 168      |
| 3.1.1 はじめに                                                | 168             |
| 3.1.2 非鉄金属材料の分類                                           | 169             |
| 周期表を基にした分類 / 構造による分類 / 製造法による分類                           |                 |
| 3.1.3 資源的観点からの合金設計                                        | 173             |
| 3.2 アルミニウム合金の開発                                           | (村上陽太郎) 177     |
| 3.2.1 アルミニウム合金における強化機構とクラック発生機構                           | 177             |
| 3.2.2 時効硬化性合金の組成と添加元素                                     | 182             |
| 3.2.3 時効硬化性合金の開発例                                         | 185             |
| 溶接構造用 Al-Zn-Mg 3 元合金の開発 / 自動車用 30-30 合金の開発 / AL-Li 系合金の開発 |                 |
| 3.2.4 おわりに                                                | 186             |
| 3.3 チタン合金の開発                                              | (木村啓造) 187      |
| 3.3.1 チタン                                                 | 187             |
| 3.3.2 チタンに対する合金元素の効果                                      | 189             |
| 3.3.3 チタン合金の材料性能                                          | 191             |
| 3.3.4 実用チタン合金                                             | 194             |
| 3.4 銅合金の設計                                                | (三島良績) 196      |
| 3.4.1 ペアロイ 701                                            | 196             |
| 3.4.2 非鉄硬さ基準片材の開発                                         | 198             |
| 3.5 その他の非鉄合金設計                                            | (三島良績・岩田修一) 204 |
| 4. 耐熱材料                                                   | 217             |
| 4.1 耐熱金属材料設計の考え方                                          | (田中良平) 217      |
| 4.1.1 耐熱金属材料に要求される性質                                      | 217             |
| 4.1.2 高温耐食性                                               | 218             |
| 4.1.3 高温強度                                                | 219             |
| 固溶強化 / 析出強化 / 粒界強化                                        |                 |
| 4.1.4 PHACOMP                                             | 223             |
| 4.1.5 合金設計指針のまとめ                                          | 223             |
| 4.2 弱析出型ニッケル基耐熱合金                                         | (渡辺力蔵) 225      |
| 4.2.1 はじめに                                                | 225             |
| 4.2.2 合金設計の目的                                             | 225             |
| 4.2.3 合金設計の手法                                             | 225             |
| 4.2.4 Ni-Co-Cr-Mo-W 5 元系合金                                | 226             |
| 組織要因の分析 / 製造要因の分析 / 組織要因の範囲限定 / 組成演算 / 実験的検討              |                 |
| 4.2.5 Ni-Cr-W 3 元系合金                                      | 228             |
| 4.2.6 Ni-Cr-Mo 3 元系合金                                     | 228             |
| 4.2.7 開発合金の特性                                             | 229             |
| 4.2.8 おわりに                                                | 229             |
| 4.3 強析出型ニッケル基耐熱合金                                         | (山崎道夫) 230      |
| 4.3.1 はじめに                                                | 230             |
| 4.3.2 γ' 析出型ニッケル基合金の利用形態                                  | 231             |

|       |                                                                   |            |
|-------|-------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.3.3 | 筆者ら以前の合金開発手法                                                      | 233        |
| 4.3.4 | 筆者らの合金設計(Ⅰ)                                                       | 234        |
| 4.3.5 | 筆者らの合金設計(Ⅱ)                                                       | 234        |
| 4.3.6 | 開発合金の特性と2, 3の考察                                                   | 238        |
| 4.3.7 | 合金設計に対する反省(結言として)                                                 | 239        |
| 4.4   | 原子炉用耐熱合金                                                          | (近藤達男) 240 |
| 4.4.1 | 原子炉材料の選択                                                          | 240        |
|       | 汎用工業材料の手用 / 原子力における耐熱合金の位置づけ                                      |            |
| 4.4.2 | VHTRの高温部耐熱合金の設計と開発                                                | 241        |
|       | 高温ガス炉高温部材料の開発状況 / VHTR 高温部構造用合金開発の注目点 / 高温部炉心材料開発上の注目点 / 新合金開発の状況 |            |
| 4.5   | 耐熱鋼の合金設計                                                          | (藤田利夫) 257 |
| 4.5.1 | はじめに                                                              | 257        |
| 4.5.2 | 高クロム系耐熱鋼の合金設計                                                     | 257        |
|       | ボイラ管用高クロム系耐熱鋼 / 超々臨界圧タービン・ロータ用高クロム系耐熱鋼 / オーステナイト系耐熱鋼の合金設計         |            |
| 4.5.3 | おわりに                                                              | 263        |
| 5     | 半 導 体                                                             | (権田俊一) 264 |
| 5.1   | はじめに                                                              | 264        |
| 5.2   | バンド構造と特性                                                          | 264        |
| 5.3   | 必要な物性パラメータ                                                        | 265        |
| 5.4   | パラメータのモデル化                                                        | 266        |
| 5.4.1 | 格子定数のモデル化                                                         | 266        |
| 5.4.2 | 禁制帯幅のモデル化                                                         | 267        |
| 5.4.3 | バンド不連続について                                                        | 268        |
| 5.4.4 | 屈折率のモデル化                                                          | 269        |
| 5.4.5 | その他のモデル化と問題点                                                      | 270        |
| 5.5   | 材料の選択, 簡単な設計例                                                     | 270        |
| 5.6   | 作製の問題                                                             | 271        |
| 5.6.1 | 固 溶 性                                                             | 272        |
| 5.6.2 | 作製法の問題                                                            | 273        |
| 5.7   | おわりに                                                              | 274        |
| 6     | 超電導材料                                                             | (伊原英雄) 275 |
| 6.1   | 超電導材料の開発課題                                                        | 275        |
| 6.2   | 材料設計法                                                             | 276        |
| 6.2.1 | 高 $T_c$ 超電導材料の開発方針                                                | 277        |
| 6.2.2 | 超電導材料の設計プロセス                                                      | 279        |
|       | 結晶構造の経験則 / 組成の経験則 / $T_c$ の評価                                     |            |
| 6.3   | 高 $T_c$ 超電導体の設計例                                                  | 284        |
| 6.3.1 | 従来材料の延長の場合                                                        | 284        |
|       | $Nb_3Si$ の場合 / $NbC_xN_{1-x}$ / $Nb_3Sn_{1-x}Al_x$ / $MoN$        |            |
| 6.3.2 | 新種の超電導材料の場合                                                       | 287        |

|       |                                              |                 |
|-------|----------------------------------------------|-----------------|
| 6.3.3 | 作製法の問題点                                      | 288             |
| 6.4   | 新機構超電導体の設計例                                  | 289             |
| 6.4.1 | 電荷密度波 (CDW) による超電導                           | 289             |
| 6.4.2 | 空間分離型電子-正孔対 (エキシトン) 超電導                      | 290             |
| 6.4.3 | 電子対形成による超電導                                  | 291             |
|       | エキシトン超電導体 / プラズモン超電導体 / 光誘起超電導体              |                 |
| 7     | 磁気光学材料                                       | (腰塚直己) 296      |
| 7.1   | はじめに                                         | 296             |
| 7.2   | 磁気光学材料の種類と要求される特性                            | 296             |
| 7.3   | 磁性ガーネット膜の設計                                  | 298             |
| 7.3.1 | 構造と磁気特性                                      | 298             |
|       | ガーネットの構造と磁化 / 磁気異方性エネルギー / キュリー温度 / 不純物と格子定数 |                 |
| 7.3.2 | 磁気光学特性                                       | 301             |
|       | ファラデー回転 / 光吸収損失                              |                 |
| 7.3.3 | 薄膜導波路におけるモード変換と複屈折                           | 303             |
| 7.4   | おわりに                                         | 305             |
| 8     | 触媒                                           | (御園生 誠) 307     |
| 8.1   | はじめに                                         | 307             |
| 8.2   | 触媒設計の方法論                                     | 307             |
| 8.3   | 工業触媒の構成と分類                                   | 309             |
| 8.4   | 触媒に要求される基本特性                                 | 309             |
| 8.5   | 特性と構造・組成の相関                                  | 310             |
| 8.6   | 触媒特性と構造・組成の相関                                | 311             |
| 8.6.1 | 吸着                                           | 311             |
| 8.6.2 | 酸化物触媒-酸化                                     | 311             |
| 8.6.3 | 固体酸塩基触媒                                      | 312             |
| 8.6.4 | Dowden Pattern                               | 313             |
| 8.6.5 | 分子形状選択性と分子雰囲気選択性                             | 313             |
| 8.6.6 | $\phi_R$ 効果                                  | 313             |
| 8.6.7 | マルチメタリック触媒                                   | 313             |
| 8.7   | 触媒物性と特性の相関                                   | 316             |
| 8.8   | 触媒設計と計算機                                     | 317             |
| 8.9   | これからの触媒設計                                    | 318             |
| 9     | セラミックス—固溶体およびヘテロ接合形成法による材料設計—                | (柳田博明・河本邦仁) 320 |
| 9.1   | はじめに                                         | 320             |
| 9.2   | 固溶体の考え方と分類                                   | 320             |
| 9.3   | 固溶体形成による材料物性の制御                              | 321             |
| 9.3.1 | 導電性の付与                                       | 321             |
| 9.3.2 | 相変態の安定化                                      | 322             |
| 9.3.3 | スピネル固溶体                                      | 324             |
| 9.3.4 | 光学特性                                         | 325             |

|                                                      |     |
|------------------------------------------------------|-----|
| 9.3.5 材料研究における固溶体形成の寄与                               | 326 |
| 9.4 ヘテロ接合形成による新機能の発現                                 | 327 |
| 9.4.1 セラミック半導体ヘテロ接合によるガス検知                           | 327 |
| 9.4.2 イオン導電性—絶縁体界面における伝導促進                           | 328 |
| 9.5 おわりに                                             | 330 |
| 10. ガラスの材料設計 (安井 至)                                  | 331 |
| 10.1 基本的な考え方                                         | 331 |
| 10.2 ガラスの組成設計                                        | 331 |
| 10.2.1 ガラスにおける組成設計の例—古典的考え方                          | 332 |
| ガラスの密度 / ガラスの熱膨張率 / ガラスの粘性 / 光学ガラスの物性 / 古典的組成設計の基本思想 |     |
| 10.2.2 ガラスの組成設計の未来像                                  | 335 |
| 古典的方法論の拡張—現在から近未来 / シミュレーションの導入                      |     |
| 10.3 まとめ                                             | 336 |
| 11. 炭素・黒鉛材料 (高橋洋一)                                   | 338 |
| 11.1 材料としての発展の歴史                                     | 338 |
| 11.2 炭素材料の特徴                                         | 338 |
| 11.2.1 結合論的特殊性と異方性                                   | 339 |
| 11.2.2 集合構造的性                                        | 339 |
| 11.3 炭素・黒鉛材料の開発の例                                    | 341 |
| 11.3.1 熱分解炭素 (熱分解黒鉛)                                 | 341 |
| 11.3.2 等方性高密度黒鉛                                      | 342 |
| 11.4 おわりに                                            | 343 |
| 12. 複合材料                                             | 345 |
| 12.1 歴史 (三浦維四)                                       | 345 |
| 12.1.1 複合材料とは何か                                      | 345 |
| 12.1.2 複合材料の歴史的流れ                                    | 345 |
| 12.1.3 複合材料の設計                                       | 348 |
| 12.2 現状 (島村昭治)                                       | 349 |
| 12.2.1 設計することの意義                                     | 349 |
| 12.2.2 材料の設計か、構造の設計か                                 | 350 |
| 12.2.3 一方向並列複合材の特性 (長さ方向)                            | 351 |
| 12.2.4 一方向並列複合材の力学的特性 (一般)                           | 353 |
| 基本弾性係数 / 弾性係数の方向性 / 繊維方向の強度 / 強さの方向性                 |     |
| 12.2.5 積層板の弾性係数                                      | 356 |
| 12.2.6 積層板の強度                                        | 357 |
| 12.2.7 回転円板の最適設計                                     | 358 |
| 13. コンポーネント設計 (岩田修一)                                 | 362 |
| 13.1 システム設計と材料設計                                     | 362 |
| 13.2 原子力におけるコンポーネント設計                                | 363 |
| 13.2.1 全体的な課題                                        | 363 |
| 13.2.2 機能による用途の分類と課題                                 | 364 |

核燃料・親物質 / 燃料被覆材・第一壁 / その他の炉心構造材 / 原子炉計装・制御用材料 /  
炉心以外の構造材 / 核燃料サイクルに関連した材料

|                                |            |
|--------------------------------|------------|
| 13.3 燃料設計 .....                | 371        |
| 14. プロセス設計 .....               | (岡田秀彌) 372 |
| 14.1 急凝固法 .....                | 372        |
| 14.2 アモルファス合金 .....            | 375        |
| 14.2.1 アモルファスになりやすい合金系 .....   | 375        |
| 14.2.2 アモルファス合金の性質 .....       | 375        |
| 機械的性質 / 化学的性質 / 磁氣的性質 / その他の性質 |            |
| 14.2.3 実用上の問題点 .....           | 380        |
| 14.3 超微粒子 .....                | 380        |
| 14.4 イオン注入 .....               | 382        |
| 14.4.1 イオン注入法 .....            | 382        |
| 14.4.2 イオン注入による皮膜 .....        | 382        |
| 14.4.3 イオン注入法による新材料開発 .....    | 384        |
| 14.5 超 高 圧 .....               | 385        |
| 14.6 Nongravity .....          | 386        |

## **4** 材料の評価/選択/設計 ..... 391

|                                                   |            |
|---------------------------------------------------|------------|
| 1. 材料の選び方 .....                                   | (岩田修一) 393 |
| 1.1 はじめに .....                                    | 393        |
| 1.2 材料データシステムの現状——これまでのデータ活動—— .....              | 393        |
| 1.2.1 ハンドブック .....                                | 393        |
| 1.2.2 ペーパーシステム .....                              | 394        |
| 1.2.3 計算機化された材料データシステム .....                      | 395        |
| 1.3 材料データワークショップ .....                            | 395        |
| 1.4 材料データシステムの開発に向けての動き .....                     | 399        |
| 1.5 材料設計のためのデータ .....                             | 400        |
| 2. 材料設計における定量組織学 .....                            | (中田栄一) 401 |
| 2.1 材料設計と定量組織学 .....                              | 401        |
| 2.2 組織の定量化における Stereology 的基礎 .....               | 401        |
| 2.2.1 組織解析における主なパラメータ .....                       | 402        |
| 2.2.2 組織解析における主なパラメータの測定 .....                    | 403        |
| 点分析法 / 線分析法                                       |            |
| 2.3 金属組織のキャラクタリゼーションとテクスチュア解析 .....               | 403        |
| 2.3.1 テクスチュア .....                                | 403        |
| 2.3.2 統計的アプローチについて .....                          | 404        |
| 自己相関関数による方法 / フーリエ変換による方法 / テクスチュアのエッジによる方法 /     |            |
| ラン・レンジス法 / 画像のベクトル表示による方法 / マルチ・レベル変換             |            |
| 2.4 金属組織の画像処理——ケーススタディー .....                     | 406        |
| 2.4.1 SiC / Al 短繊維強化複合材料における SiC 繊維の配向性について ..... | 406        |



|       |                                                                 |     |
|-------|-----------------------------------------------------------------|-----|
| 2.4.2 | 黒鉛モデルに関する解析                                                     | 408 |
|       | パワースペクトルの算出 / パワースペクトルパターンの特徴抽出 / K-L 系解析による特徴抽出 / データベースによる鳥瞰図 |     |
| 2.4.3 | 片状黒鉛鑄鉄のパーライトの粗さの定量化—空間格子のフィルターの応用                               | 416 |
| 2.4.4 | 片状黒鉛鑄鉄のパーライトの方向性の定量化                                            | 423 |
| 2.4.5 | 破面の定量解析の例                                                       | 423 |
|       | おわりに                                                            | 426 |
| 3.    | データベースシステム                                                      | 427 |
| 3.1   | データベース管理システム (鷹尾洋一)                                             | 427 |
| 3.1.1 | はじめに                                                            | 427 |
| 3.1.2 | データベース出現の経緯                                                     | 428 |
| 3.1.3 | データモデル                                                          | 429 |
| 3.1.4 | 階層モデルとネットワークモデル                                                 | 431 |
| 3.1.5 | 関係モデル                                                           | 433 |
| 3.1.6 | 関係データベースの照会                                                     | 438 |
| 3.1.7 | データベース管理システム                                                    | 440 |
| 3.1.8 | データベース利用環境                                                      | 442 |
| 3.2   | 材料データベース (野上敦嗣・岩田修一)                                            | 444 |
| 3.2.1 | 材料データベースシステムの対象とするデータ                                           | 444 |
| 3.2.2 | 材料データベースのシステム構成                                                 | 448 |
|       | データベース・知識システム管理システム群 / 利用者支援システム群 / データエントリシステム群                |     |
| 3.2.3 | 材料データベースシステムの実現例                                                | 450 |
| 3.2.4 | データベース登録データの編集                                                  | 455 |
| 3.2.5 | 材料データベースシステム開発上の問題点                                             | 456 |
| 4.    | 材料設計システム                                                        | 460 |
| 4.1   | 電子材料設計支援システム CAMS (山崎正人)                                        | 460 |
| 4.1.1 | 電子材料設計のプロセス                                                     | 460 |
| 4.1.2 | 高温超電導材料の設計支援システム CAMS-SP                                        | 461 |
|       | 超電導材料データベース / 設計目標の設定 / 設計出発材料の選択 / 特性の改善                       |     |
| 4.1.3 | 化合物半導体材料の設計支援システム CAMS-CS                                       | 467 |
|       | 半導体材料モデルの構成 / 格子定数のモデル / 禁制帯幅のモデル / 材料モデルによる検索 / ヘテロ接合の設計       |     |
| 4.1.4 | おわりに                                                            | 473 |
| 4.2   | 合金設計支援システム (岩田修一)                                               | 474 |
| 4.2.1 | 合金設計システムの目標                                                     | 474 |
| 4.2.2 | 合金設計における推論過程                                                    | 475 |
| 4.2.3 | ADAM & EVE システムの概略                                              | 480 |
| 5.    | 知識システムによる支援 (大須賀節雄)                                             | 486 |
| 5.1   | 序—技術開発分野での計算機利用状況                                               | 486 |
| 5.2   | 技術の発展段階と情報処理                                                    | 487 |
| 5.3   | 研究・開発時に生ずる情報の形式                                                 | 489 |

|        |                                                         |     |
|--------|---------------------------------------------------------|-----|
| 5.3.1  | 手 続 き                                                   | 491 |
| 5.3.2  | 定形的データ集合                                                | 491 |
| 5.3.3  | 言語的記述                                                   | 491 |
| 5.3.4  | モデル表現                                                   | 491 |
| 5.4    | 情報処理の観点から                                               | 492 |
| 5.5    | 情報の表現——外部表現と内部表現                                        | 493 |
| 5.6    | 知識工学                                                    | 495 |
| 5.7    | エキスパート・システムの動作原理                                        | 496 |
| 5.8    | エキスパート・システムの例                                           | 497 |
| 5.8.1  | DENDRAL                                                 | 497 |
| 5.8.2  | MYCIN                                                   | 498 |
| 5.8.3  | HEARSAY-II                                              | 499 |
| 5.9    | 知識情報処理の基礎技術                                             | 500 |
| 5.9.1  | 知識表現                                                    | 500 |
|        | プロダクション・ルール / セマンティック・ネットワーク / 述語論理 / フレーム・システム (手続型知識) |     |
| 5.9.2  | 各種知識表現の比較                                               | 502 |
| 5.9.3  | 推 論                                                     | 502 |
| 5.10   | 開発支援システムの実現を目指して                                        | 503 |
| 5.10.1 | システム化技術                                                 | 503 |
|        | 複合知識ベース・システム / 既存システムとの統合                               |     |
| 5.10.2 | モデル構築                                                   | 504 |
| 5.11   | おわりに                                                    | 506 |

## 5 材料設計手法の組織化 (岩田修一) 509

|     |                     |     |
|-----|---------------------|-----|
| 1.  | データとモデル             | 511 |
| 1.1 | データの意味              | 511 |
| 1.2 | 形態の表現               | 511 |
| 1.3 | 構造表現                | 514 |
| 1.4 | 構造とモデル              | 515 |
| 2.  | 知識の獲得               | 516 |
| 3.  | 組織化への道程             | 520 |
| 資 料 |                     | 523 |
| 表-A | 主な金属の資源量            | 524 |
| 表-B | エネルギー技術課題と材料データベース  | 528 |
| 表-C | 計算機可能な工業材料のデータベース一覧 | 544 |

|     |     |
|-----|-----|
| 索 引 | 547 |
|-----|-----|