

構造材料データベースの自動×超高速生成システムの開発に成功

～大規模データセット構築を 7 年から“13 日”に。超合金の開発加速に期待～

NIMS は、航空機エンジン用超合金を対象に、プロセス条件・マイクロ組織・降伏強度に関する数千点の実験データセットをわずか 13 日間で収集できる、自動×超高速評価システムを開発しました。本システムは従来法と比べ 200 倍以上高速で、単一のサンプルから完全な「プロセス-構造-特性」データセットを生成可能です。大規模データを用いることでデータ駆動型材料設計の超高速化が期待できます。この成果は、6 月 20 日付で国際学術誌 Materials & Design に掲載されました。

研究成果の概要

■従来の課題

高精度な実験データは、マテリアル分野におけるメカニズム解明、理論・モデル構築、数値シミュレーション、AI・機械学習を支える基盤情報であり、材料イノベーションの源泉です。特に、耐熱超合金は多数の元素で構成されるうえ、複雑なマイクロ組織構造を有するため、構造・プロセスの最適化には、多量かつ高精度なプロセス-構造-特性データベースが必要になります。しかしながら、実験データベース構築には長い年月をかけた地道な実験と膨大な資源投入が必要であり、合金開発の障壁となっていました。

■成果のポイント

今回、本研究チームは、航空機エンジンタービンディスク用途として NIMS が開発した Ni-Co 基超合金を例題に、プロセス（熱処理温度）、構造（析出物情報）、特性（降伏応力）に関する数千点のデータセットを自動×超高速で取得可能な新規評価システムを開発しました。熱処理は、独自開発した温度傾斜熱処理炉を用いることで、単一サンプル内に幅広い温度での熱処理を行うことが可能です。析出物情報および降伏応力は、Python 言語により自動化された走査型電子顕微鏡およびナノインデンテーションを連携させ、温度傾斜サンプルの各座標において高速評価・ポスト処理することにより取得可能です。最終的に、従来は取得に 7 年 3 か月を要するプロセス-構造-特性データセットの情報量を、わずか 13 日で取得できることを実証しました。

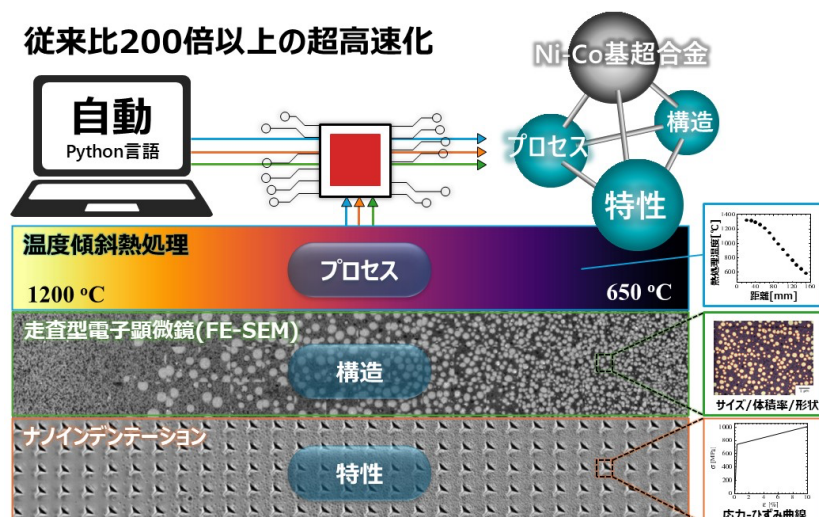


図 1： 構造材料データベースの自動×超高速生成システムの概略

■ 将来展望

今後、本成果を NIMS が提案する様々な超合金のデータベース構築に展開するとともに、高温降伏応力やクリープ特性取得への新規技術開発を進めていく予定です。さらに、得られたデータベースを活用し、材料設計に欠かせない多元系平衡状態図^[1]の構築やデータ駆動型新合金探索を進め、カーボンニュートラルに貢献する新たな耐熱超合金の創製につなげていきます。

■ その他

- 本研究は NIMS 構造材料研究センター 高信頼性耐熱材料グループの Thomas HOEFLER（トーマス ヘーフラ）ポスドク研究員、長田俊郎グループリーダー、超耐熱材料グループの池田亜矢子研究員、川岸京子グループリーダー、微細組織解析グループの原徹上席研究員、および同センターの大村孝仁センター長からなる研究チームによって、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度 JPJ004596（タイプ S）「多元組成傾斜バルク材を用いた高温構造材料の網羅的な高効率探索」（責任者：大村孝仁）の一環として行われました。
- 本研究成果は、2025 年 6 月 20 日に国際学術誌 Materials & Design のオンライン版に掲載されました。

研究の背景

航空機エンジンや発電用ガスタービンの高効率化、さらには水素燃料の活用等、カーボンニュートラル社会実現に向けた技術革新が世界各国で進んでいます。耐熱材料の研究分野はこれらの技術革新に貢献する重要な要素技術であり、その国際競争はますます激化しています。NIMS はこれまで、独自開発した予測システムである「合金設計プログラム」^[2]を活用した高速計算・高速探索により、数多くの Ni 基超合金^[3]を世界に先駆け提案してきました。その最たる例が、英国ロールス・ロイス社製航空エンジンへの TMS 合金^[4]の搭載であり、計算科学により生み出された合金が航空機エンジン高圧タービン部に搭載された好例として国際的にも高い評価を受けています。一方で、プログラムの高速探索と予測精度の両立の実現には、実験データの質と量が鍵となります。これには NIMS において長年蓄積してきた高精度かつ広範囲な「プロセス-構造-特性」実験データベースが重要な役割を果たしてきました。しかしながら、データベースの整備には、データ点数に対応する回数の casting、熱処理、研磨、組織観察、機械加工、および強度試験が必要であり、従来の方法で人的・予算的資源に勝る他国に対し国際競争力を維持することは困難な状況になりつつあります。これらの課題を解決する手段の一つが、「自動×超高速データベース生成システム」の開発です。

研究内容と成果

NIMS は、航空機エンジンタービンディスク用途として NIMS が開発した Ni-Co 基超合金^[5]を対象に、従来手法では 7 年 3 か月を要する量のプロセス条件-ミクロ組織構造-降伏強度に関する数千点のデータセットを、わずか 13 日間で収集できる自動×超高速評価システムの開発に成功しました。

- 緩やかに傾斜した温度条件で熱処理が可能な、「温度傾斜熱処理炉」を新たに独自開発し、単一試料を数千点の異なる条件で熱処理することが可能となりました。従来は温度ごとに合金サンプルを用意し、個別に熱処理する必要がありましたが、本熱処理炉の開発により、熱処理実験に要する時間を大幅に短縮できます。
- 本研究では走査型電子顕微鏡（SEM）^[6]およびナノインデンテーション（NI）^[7]を Python 言語により自動化・連携させた新たな自動×超高速評価システムの開発に成功しました。本システムは、温度傾斜サンプルの各座標において NI により硬さを評価後、SEM 内において、座標・フォーカス・倍率等の各種設定を自動で実施して各 NI 測定位置における高解像度組織写真および圧痕の 3 次元形状写真を超高速で撮影することが可能です。
- 得られた各種情報が自動でポスト処理され、組織設計に重要な構造情報（析出物のサイズ・体積率・形状）、強度設計に重要

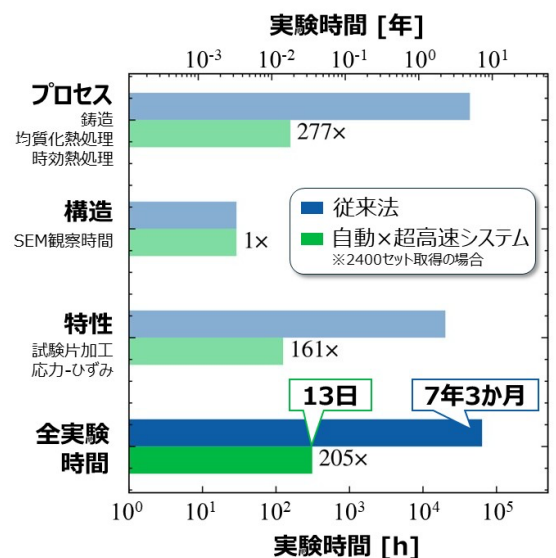


図 2：開発システムの高高速化への寄与

な特性情報（応力-ひずみ曲線^[8]、降伏応力、ヤング率、加工硬化係数）へと高速変換されることも、本システムの重要な特徴です。特に硬さ情報は、NIMS が先行開発した逆解析手法によって、合金設計や部品設計にとってより重要な応力-ひずみ曲線に変換することが可能であり、これによる大幅な高効率化が実現できます。

- 以上、一連の手法により得られた大規模データ群は、析出物の成長モデルや析出強化モデルの高度化に貢献します。

今後の展開

今後、本成果を NIMS が開発を進める様々な超合金のデータベース構築に展開するとともに、高温降伏応力やクリープ特性取得への新規技術開発を進めていく予定です。一方で、今回はシステムの優位性実証として温度傾斜サンプルのみに着目しましたが、本技術は組成傾斜試料に対しても実施可能です。今後は、温度-組成を同時に傾斜させた試料を対象にビッグデータ取得を進めることで、材料設計に欠かせない多元系平衡状態図-強度特性のデータベース構築を進めていく予定です。さらに、得られた大規模実験データベースを活用し、データ駆動型新合金探索を進めていきます。これらの合金設計技術を通して、カーボンニュートラルに貢献する新たな耐熱超合金の創製を目指します。

■掲載論文

題目	Automated System for High-throughput Process-Structure-Property Dataset Generation of Structural Materials: A γ/γ' Superalloy Case Study
著者	Thomas Hoefler, Ayako Ikeda, Toshio Osada, Toru Hara, Kyoko Kawagishi, and Takahito Ohmura
雑誌	Materials & Design
DOI	10.1016/j.matdes.2025.114279
掲載日	2025 年 6 月 20 日（オンライン）

■用語解説

- [1] **平衡状態図**：物質が特定の組成や温度、圧力条件下で、どの相（固相・液相・気相）として安定に存在するかを示した図であり、合金設計において地図のような役割を果たしている。含まれる元素数が増えると調べなければならない条件が増大するため、多元系合金の平衡状態図の構築には膨大な量の実験データが必要となる。
- [2] **合金設計プログラム**：NIMS が独自開発した多元系 Ni 基超合金用の特性予測プログラムです。Ni 基超合金を構成する元素の組成や使用温度・応力を入力することで、組織やクリープ特性を高速で計算可能なプログラムです。
- [3] **Ni 基超合金**：ニッケル（Ni）を主成分として、コバルト（Co）、クロム（Cr）、タングステン（W）、モリブデン（Mo）、アルミニウム（Al）、チタン（Ti）、タンタル（Ta）、ハフニウム（Hf）、ニオブ（Nb）、レニウム（Re）、ルテニウム（Ru）等の元素を含む多元系超合金の一種です。高温強度・耐環境性に優れるため、航空、宇宙、エネルギー分野等、幅広い領域で使用されています。
- [4] **TMS 合金**：NIMS が開発した Ni 基単結晶超合金の商標名です。NIMS の前身である旧金属材料技術研究所の所在地が東京都目黒区にあったことから、Tokyo-Meguro Single-crystal superalloy の頭文字をとって TMS®と名付けられました。航空機エンジンへの搭載事例を有し、今後も次世代ガスタービンへのさらなる実用化が期待されています。
※プレスリリース：<https://archive.nims.go.jp/news/press/2006/06/p200606300.html>
- [5] **Ni-Co 基超合金**：Ni 基超合金と Co 基合金を融合し設計された NIMS 開発合金です。次世代航空機エンジンや発電用タービンの高圧タービンディスクへの実用化が期待されています。
※プレスリリース：<https://archive.nims.go.jp/news/press/2009/03/p200903130.html>
- [6] **走査型電子顕微鏡**：電子顕微鏡の一種であり、電子ビームを走査（Scan）しながら試料に照射し、試料中の各座標から放出される二次電子情報から像を構築することで、試料表面の組織像を高解像度で取得可能な顕微鏡です。
- [7] **ナノインデンテーション**：三角錐形状のダイヤモンド圧子を微小荷重で試料に押し込むことにより、材料のナノ領域における力学特性を評価する技術です。圧子を押し込む荷重と変位の関係から、材料の硬さやヤング率を評価することが可能です。
- [8] **応力-ひずみ曲線**：材料に引張または圧縮応力を負荷した際に得られる、応力とひずみの関係を示した曲線です。弾性

変形能、弾性変形限界および塑性変形能をそれぞれ示す機械的特性であるヤング率、降伏応力および加工硬化指数を用いて記述できます。部品設計に必要となる最も重要な力学特性の一つです。

本件に関するお問い合わせ先

研究内容について	NIMS 構造材料研究センター 高信頼性耐熱材料グループ グループリーダー 長田俊郎 E-mail : OSADA.Toshio@nims.go.jp TEL: 029-589-2208 URL: https://samurai.nims.go.jp/profiles/osada_toshio?locale=ja
	NIMS 構造材料研究センター センター長 大村孝仁 E-mail : OHMURA.Takahito@nims.go.jp TEL: 029-859-2164 URL: https://rcsm.nims.go.jp/
報道・広報について	NIMS 国際・広報部門 広報室 〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1 E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

NIMS とは？

NIMS（ニムス）は、国内で唯一、物質・材料科学の研究に特化した国立研究開発法人です。世界を構成する様々な「物質」。その中で私たちの生活を支えているのが「材料」です。その材料も、大きくは有機・高分子材料、無機材料に分類でき、無機材料はさらに金属材料とセラミックス材料とに分けられます。石器時代から産業革命を経て現代まで、人類の発展はこの材料の進歩とともにありましたが、近年では、地球規模の環境や資源問題の解決手段のひとつとしても注目が高まっています。NIMS はその物質・材料に関する研究に特化した国立研究開発法人として、「材料で、世界を変える」をテーマに、未来を拓く物質・材料の研究に日々取り組んでいます。

【NIMS を掴む参考ページ】

NIMS はこんな研究所！ <https://www.nims.go.jp/nims/introduction.html>

NIMS ビジョン <https://www.nims.go.jp/nims/profile.html#vision>