

新素材の原子配列設計制御プロジェクト 追跡調査報告書要旨

第1番目の国際共同研究事業である「新素材の原子配列設計制御プロジェクト」は、代表研究者山崎道夫以下、日英の著名な材料物性学者3名の連携のもと、「原子レベルからの材料設計」をキーワードとして、原子レベルの物質に関する基礎理論をもとに、計算材料科学的視点からコンピュータシミュレーションを行い、物質の構造や特性を理論的に予測するとともに、原子レベルの実証実験を合わせ行なって、新素材、新物質創出への道筋を明らかにする事を目的として、金属材料研究はケンブリッジ大学、半導体材料研究はロンドン大学インペリアルカレッジを拠点として推進された。その結果、熱力学・動力学的計算による材料中の原子配列や規則性、組織形成過程等の予測を可能とするシミュレーション法(モンテカルロ法¹、クラスタ変分法²)の確立、Ni基耐熱超合金、鉄鋼等へのシミュレーション法と構造解析技術の適用による特性向上のメカニズムと指針の明確化、および、GaAs等の半導体材料への適用による結晶のエピタキシャル成長³機構の解明、新合金の提案、原子一層毎のエッチング方法の発明等々、原子レベルからの材料設計制御実現の基礎となる多彩な成果を蓄積した。

これらの結果は、シミュレーションによる構造や特性予測手法の定着とそれによる設計・開発の効率化など、新材料の設計を原子レベルから考える世界的潮流の形成に寄与した。同時に、シミュレーションによる材料設計を含めて、エピタキシャル成長、量子ドット⁴など、ナノテクノロジーの基礎となる部分を多く包含しており、ナノテクノロジーの先触れになったとも言える。

これら一連の活動はプロジェクト終了後も独自の展開を見せている。クラスタ変分法とフェイズフィールド法⁵の組み合わせ、モンテカルロ法と第一原理電子状態計算⁶の組み合わせ等シミュレーション法の高度化、新タイプのニューラルネットワーク法⁷の新溶接材料開発への展開、原子一層毎のエッチング技術とエピタキシャル成長の組み合わせによる半導体デバイスの新微細加工法の開発等が図られた。また、産業面では、Ni基超合金に用いるシミュレーション法の計算プログラムの企業での活用等がある。

学術面、産業面での波及効果として、Ni基超合金の耐熱性向上メカニズムや指針をベースとした物質・材料研究機構の新世紀耐熱プロジェクトにおける次世代高耐熱超合金の開発とその高効率ジェットエンジンへの展開、ケンブリッジ大学におけるユニバーシティテクノロジーセンターの設立等がある。

社会面では、次世代高耐熱超合金のガスタービンへの展開による、省エネルギーやCO₂削減への取り組みが挙げられる。更に、特筆すべき波及効果として、メンバ20人の教授・助教授・講師(教授9人、助教授3人、講師8人)への就任等人材の育成への大きな寄与が挙げられる。

本プロジェクトで蓄積された多くの成果は、原子レベルから新材料の設計・開発を行う考

えの普及を促し、その結果として、具体的な高性能新素材の創出につながった点で高く評価される。

1. 乱数を利用してシミュレーションを行う技法の総称。複雑な現象をシミュレーションする方法として有力であり、電子計算機の発達によって利用が可能になった。
2. 格子の中に四面体や八面体のクラスターをとって、統計熱力学的な方法により配置エントロピーを計算する方法。
3. 一つの結晶が他の結晶の表面上にある定まった方位関係をもって成長する状態。
4. ド・ブroy波長程度の幅のドット状の領域に電子を閉じこめることにより作製される人工的な0次元電子系。
5. フィールド変数と呼ばれる場の変数により、系の自由エネルギー汎関数を計算し、求められたエネルギー汎関数に基づき系の時間発展を計算するシミュレーション法の総称。
6. 分子や固体の性質を非経験的に、すなわち、電子状態に基づいて計算する方法。
7. データ処理やモデリングの技法で、種々の非線形関数を組み合わせて非常に複雑な関数を構築することが出来る特長を有し、複雑な現象の処理に適している。