

産学共創プログラム「ヘテロ構造制御」 評価結果

1. 研究課題名： ハミルトニアンからの材料強度設計

2. 研究代表者：毛利 哲夫（北海道大学 大学院工学研究院 教授）

3. 研究概要

従来の経験的手法に基づいた構造材料の開発から脱却し、基礎理論の集積とそれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた材料設計を実現するために、第一原理からの(1)原子配列と内部組織の設計と制御（ヘテロ構造の創成）、(2)離散格子と連続体を対象にした変形・破壊強度の評価（ヘテロ構造の測定）、を骨子とする設計手法を提案することを目的としている。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

研究代表者のリーダーシップにより、計算科学の各要素技術に関するチーム間の適切な連携のもとに研究が行われている。産学共創の場における産業界からの要請に関してもマイルストーンの中に適切に取り込み、第一原理計算から有限要素法解析に至る各スケールでの要素技術において先端の計算科学技術を Fe-Si 実用系に適用することで、多くの基礎研究による知見を得たことは高く評価される。

各スケールにおける要素技術において精緻な計算手法を確立している。Fe-Si 系に関して、第一原理計算から状態図計算の基本となる原子間相互作用を求めるとともに、原子配置のスケールでの内部組織の設計手法を構築した。さらに、剛性率(G)と体積弾性率(B)の比(B/G)を計算し、Fe-Si 合金が脆化する組成近傍で B/G 値が急激に減少するという新知見を得た。加速 MD 法による結晶粒界からの転位射出挙動の解析は、従来の MD 法では不可能なものである。また、内部組織を取り込んだ有限要素法モデリング手法の開発などで成果を挙げており、研究目標・マイルストーンを着実に達成している。強度と磁性の関係、鉄の粒界構造、らせん転位と Si の相互作用などに関する新知見は、基礎研究における大きな成果であり、論文等の成果発表も活発に行われている。

しかしながら、個々の研究の統合へ向けた道筋と、その結果がどのようなブレークスルーをもたらすかについては、まだ見えていない。研究代表者が提案するように、単純な系に関する厳密な計算結果からの重要情報の抽出と複雑な多元系への適用法の検討など、各スケールの精度が損なわれない統合の手法開発は重要であるが、その際、最先端の原子スケールでの解析を得意とする実験グループとの有機的な連携が研究進展に飛躍をもたらす可能性もあるので、検討をお願いしたい。

4-2. 今後の研究に向けて

材料強度設計を第一原理計算から実材料のスケールまで一貫して行う壮大なテーマに関す

る挑戦的研究であり、従来の金属組織学を超える指導原理の構築により構造材料設計に大きく貢献することが期待されている。

本研究の現状は、各要素技術において最先端の基礎的研究成果を挙げている段階である。今後は、各要素技術をリンクさせたマルチスケール化が最重要課題である。ただし、本プログラムでの研究課題としては平成25年度末までなので、効率的なマルチスケール化を目指していただきたい。産業界とのさらに詳細な議論も有益であろう。また、稼動を開始したスーパーコンピュータ「京」における大規模計算プロジェクトへの展開も検討されており、本研究との相補的な発展が期待される。

各スケールでの要素技術の統合と同時に、各要素研究の深化もまた重要である。たとえば、Fe-Si系の脆化に関しては、B2相やD0₃相などの規則構造が生成することが報告されており、その影響について、さらに検討する必要がある。

4-3. 総合評価

総合評価 A

材料強度設計を第一原理計算から実材料のスケールまで一貫して行う挑戦的研究である。研究代表者のリーダーシップにより、計算科学の各要素技術に関するチーム間の適切な連携のもとに研究が行われている。産学共創の場における産業界からの要請に関しても、Fe-Si系を共通合金系として着実に実施しており、各要素技術ごとに当初目標を上回る成果を挙げている。

今後、大規模計算に基づいた新指導原理を構築するためには、各要素技術をリンクさせたマルチスケール化が必須になる。本研究チームには、優れた計算材料科学者からなっているので、それだけ研究成果に対する産業界および学界の期待も大きい。マルチスケール化は真に挑戦的な課題であり、残りの1年間で完成することは困難であろうが、実験グループとの有機的な連携や産業界との議論を有効に活用して、最大限の努力をお願いしたい。また、稼動を開始したスーパーコンピュータ「京」における大規模計算プロジェクトへの展開と、本研究との相補的な発展についても期待している。

以上