

産学共創プログラム「ヘテロ構造」事後評価結果

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（東北大学 金属材料研究所 教授）

3. 研究概要

従来の経験的手法に基づいた構造材料開発から脱却し、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ことが本研究の目的である。壮大な研究テーマのため、真に目的を達成するためには、乗り越えるべき課題がまだ多く残されてはいるが、第一原理計算法、クラスター変分法、分子動力学法、有限要素法などの原子スケールからマクロスケールに至る個々の要素技術において新規性の高い優れた成果が得られた。さらに、そこに留まらず、要素技術同士を結びつけたマルチスケール計算材料科学の実現に向けても、大きな第一歩を踏み出した。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

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、目標通りの成果が得られたといえる。産学共創の場における産業界からの要請をマイルストーンの中に適切に取り込み、各スケールの要素技術において最先端の計算科学技術を実用 Fe 系合金にも適用し、精緻な計算手法を確立した。

たとえば 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て、この脆化が磁気体積効果と DO_3 規則化の複合効果であることを第一原理計算とクラスター変分法による解析から明らかにした。ほかにも Si の粒界偏析と粒界強度の関係、加速分子動力学法による転位挙動と強度の解析など、各要素技術で多大な成果を挙げて、研究目標・マイルストーンを着実に達成した。

さらに、第一原理計算と分子動力学計算で求めた材料定数を有限要素法解析に用いて Fe-Si 系多結晶体の応力-ひずみ曲線を導出し、Si 添加による降伏応力の上昇を再現した点は、ミクロスケールの手法とマクロスケールの手法を結びつけるマルチスケールアプローチの先駆的な成果といえ、近い将来、計算科学を駆使した構造材料設計が可能になることを期待させる成果である。

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

関する挑戦的研究課題であったが、研究代表者のリーダーシップの下で優れた成果を挙げることができた。とくに、ミクロからマクロに至る各スケールでの要素技術の追究とともに、それらを統合させたマルチスケール化にも果敢に挑戦した点は世界的にも注目されるであろう。現在は個々のスケールでの計算精度を損なわずにマルチスケール計算に統合するための問題点を抽出している段階であるが、今後も各共同研究グループ間の連携を密に保って、高精度なマルチスケール計算手法の実現に向けて、さらに研究を深化させていただきたい。そのためには、産業界からのインプットも重要と考えられるので、企業との共同研究なども積極的に模索していただきたい。

研究代表者は東北大学金属材料研究所の計算材料科学研究拠点の代表者として、スーパーコンピュータ「京」を利用した大規模計算のプロジェクトを展開している。また、複数の共同研究者が構造材料元素戦略研究拠点のメンバーとして活躍している。本プログラムで得られた成果が、これらのプロジェクトを通じてさらに発展することも大いに期待している。

4-3. 総合評価

総合評価 A

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、さらに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取り入れ、当初の目標を上回る成果を挙げてきた。また、各要素技術をリンクさせたマルチスケール化についても、すでにその試みを開始し、着実な成果が得られつつある。

本研究チームは我が国を代表する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からの期待も大きい。今後も、実験グループとの連携や産業界との連携を継続して、新しい材料強度設計の指導原理を構築していただきたい。さらに、構造材料に関する他の大型プロジェクトで、本研究の成果を活用・発展されることも期待している。

以上