

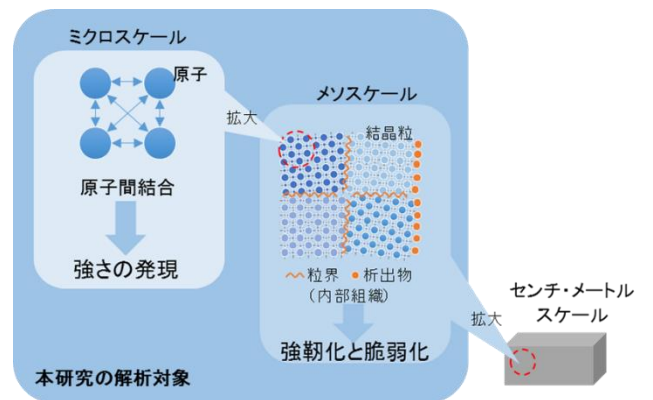
スパコンが明らかにする電子の状態、原子の配列と材料強度の関係
 - 材料の強さをマルチスケールで解析 効率的な材料設計を可能に -



1

2

Fe-Si



概要図: 実材料の強度には、電子・原子のふるまいと内部組織の両方が影響する。

npj Computational Materials-Nature
 2017 3 10

「材料の強さ」は、電子の動きによる原子間結合がきっかけとなるが、「実材料の強度」には結晶粒の間の界面（粒界）や析出物などの原子構造よりもう少しスケールの大きな内部組織が影響する（概要図参照）。このため、先端構造材料の強度の設計・制御は内部組織の制御を介して行われている。例えば、鉄鋼材料の強度を飛躍的に向上させるために結晶粒を超微細化したり、耐熱特性を改善するために高温材料の析出物を制御するという研究が挙げられる。結晶粒や析出物の典型的な大きさがミクロンのレベル程度であることを考えると、これら内部組織は、電子・原子のスケールであるナノスケールと、実材料のスケールであるセンチ・メートルスケールの中間に位置し、強度の発現は、ミクロな電子・原子の挙動に端を発し、メソスケールの内部組織を介して支配される典型的なマルチスケール現象である。

しかし、材料開発の基本的な手法は実験式や蓄積データに基づいた経験的手法であり、新しい材料の開発に対してはそれらデータから導き出した計算式から予測することが一般的である。しかしこの手法では労力・経済の両面から非効率であり、基礎理論の集積とこれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた設計手法の確立が必要とされていた。

2

1. Fe Fe

2.

	Fe	Fe	Si	Si	
		1 3		1	
()			()	2	Fe
			1		
3		()			
		2			

本研究では、実験データやパラメーターを用いずに、計算のみから強度を予測したり解析する手法を提案した。本成果は、基礎理論の集積とこれを具現化する高速・大容量の大規模計算に基づいた設計手法の確立に大きく貢献し、今後、現場の材料開発を支援する強力な新しい手法として注目され得る。今後は、さまざまな材料に適用して、より汎用的な手法へと詳細を調整することが課題である。

図1

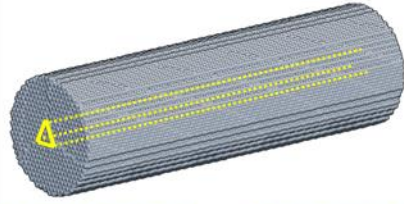


図1: 材料の内部における原子の配列と結晶中の転位(線状の原子配列の乱れ)を黄色で示す。

図2

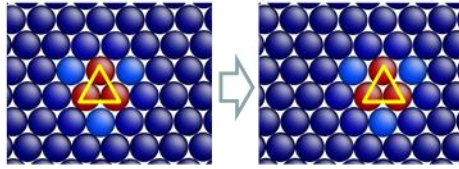


図2: 図1の断面図。転位が動く前後の原子配列の変化を示す。

原子が左から右に移動

図3

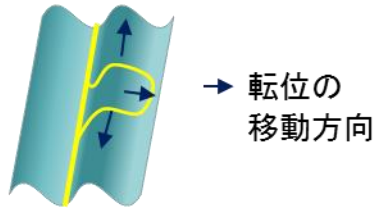


図3: 転位の運動。黄色で示した転位の一部分がエネルギーの山を乗り越え、隣接する部分が横方向に動くことで、転位の全体が前進し、変形が生じる。

npj Computational Materials-Nature (2017) 3:10

Mechanical properties of Fe-rich Si alloy from Hamiltonian

Tetsuo Mohri, Ying Chen, Masanori Kohyama, Shigenobu Ogata, Arkapol Saengdeejing, Somesh Kumar Bhattacharya, Masato Wakeda, Shuhei Shinzato and Hajime Kimizuka

DOI ; doi:10.1038/s41524-017-0012-4

1

()

2

○

JSTC

計算材料科学を専門とする 5 は特にマイクロからメソスケールを対象を絞り、このスケール域に取り組んだ 4 機関の成果です。

TEL 022-215-2327

Email tmohri@imr.tohoku.ac.jp

TEL 022-215-2144 FAX:022-215-2482

Email pro-adm@imr.tohoku.ac.jp