

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 転位芯の局所自由度を有する力学理論に基づく新奇機能の創出

2. 個人研究者名

都留 智仁（日本原子力研究開発機構原子力科学研究部門 研究主幹）

3. 事後評価結果

金属材料の塑性変形は、原子レベルの欠陥である転位の運動により生じる。本研究は、第一原理解析の結果を参考にしつつ電子結合の寄与や局所構造などの転位の自由度に着目して、個々の転位構造を理解してその運動を支配する原子レベルのメカニズムや力学因子を解明することを目的としている。また、それに基づいて有限温度における転位運動を合理的にシミュレーションできる技術も開発する。

転位芯近傍の弾性場から得られる変位場を導入した原子系モデルを作成し、転位芯と合金元素の相互作用エネルギーやPeierlsポテンシャルなどの転位運動に関する基礎特性を簡便に評価できることを示した。また、転位運動をキンクの形成と運動の2つの熱活性化過程の複合とするモデルを提案し、合金元素の種類や濃度に対しての転位運動を予測することを可能にした。複雑な力学過程を明らかにした本成果を高く評価する。さらに、転位運動を高速でシミュレーションできる手法も開発し、今後の発展性が期待できる。

合金の物性を左右する合金元素近傍の転位運動を解析することに成功し、元素の種類や濃度による特性への影響を明らかにした。これは、合金の材料設計に大きく寄与できる基盤を確立したことを意味し、その成果は高く評価できる。

今後の展開と期待

通常の合金に対してねらい通りの多くの成果が得られており、有用性が高い。本研究をベースとして、具体的な合金設計指針としての発展が望まれる。また、大規模なシミュレーション等による大域的な解析への発展方向もある。

一方、近年の進展が著しい多元系固溶体合金は、合金構造自体の複雑性の中に存在する原子レベル欠陥構造（転位構造）の解析となる。本研究の手法はベースになるものの、複雑性のレベルは格段に高い。このような高度に複雑な多元系化学組成の組合せは、材料力学の発展方向のひとつである複雑性の本質を内包している。その機能特性を解析する手法を開発するために、合金材料構造の複雑性と欠陥周辺構造複雑性を整理するなど、新たな考え方やアプローチへの挑戦を望む。ただし、興味が発散しないようにしたい。それに必要な優れた解析能力と他研究者との高いコミュニケーション能力を有しており、分野の開拓をリードすることを望む。