

ESISM 構造材料研究拠点

(ESISM: 京都大学)

代表研究者 田中 功 Isao Tanaka

ESISMの到達目標

- ▶ 元素添加ではなく微構造制御による革新的な材料創製
- ▶ 強度と延性が両立する材料の開発に必要な学理構築と産業応用への貢献
- ▶ 次世代を担う若手人材の育成と基礎研究ネットワークの中核拠点の構築

研究体制

これまでの主任研究員、アドバイザー

統括・企画運営 代表研究者 田中 功 企画マネージャー 落合 庄治郎 企画マネージャー補佐 大石 毅一郎 (-2019FY) 橋爪 寛 (2019FY) 川口 利奈 (2019FY)	電子論グループ GL 田中 功 京都大学 第一原理計算 尾方 成信 大阪大学 力学計算 常行 真司 東京大学 第一原理計算 (-2015FY) 香山 正憲 AIST 第一原理計算 (-2015FY) 山口 正剛 JAEA 第一原理計算 (-2015FY)	解析評価グループ GL 乾 晴行 京都大学 マイクロビラー力学実験 幾原 雄一 東京大学 電子顕微鏡・原子スケール実験 星 健夫 鳥取大学 第一原理計算 (2013FY-2014FY) 鶴田 健二 岡山大学 第一原理計算 (2013FY-2015FY)	材料創製グループ GL 辻 伸泰 京都大学 ハルクナノメタル 大村 孝仁 NIMS 鉄鋼材料 (2016FY-) 佐々木 泰祐 NIMS マグネシウム合金 (2019FY-) 田中 将己 九州大学 破壊制御 (2020FY-) 松原 秀彰 JFCC・東北大学 セラミクス (-2015FY) 津崎 兼彰 九州大学・NIMS 疲労特性
---	---	---	---

拠点教員 41名 (所属機関 23)
 学内兼任教員 14名
 特定教員・研究員 28名

ロードマップ

高強度で延性に富む構造材料を実現するための学理構築と材料開発を先導してきた。

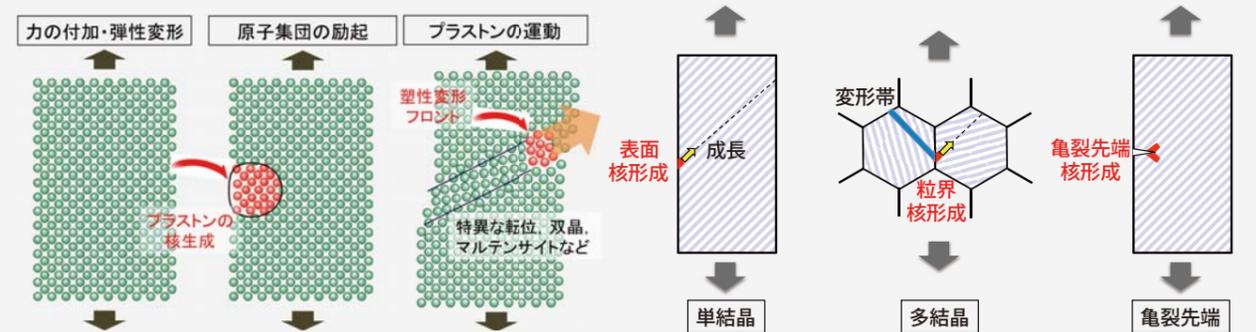
年度	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
課題解決・材料開発	バルクナノメタル化による強度と延性両立機構の解明 材料設計の基本指針の構築					新概念に基づく強度・延性両立新材料の実現 鉄鋼、マグネシウム合金、チタン合金				
	マイクロビラー力学特性試験技術の開発					新概念プラストンの追究・学理構築				
基礎研究	中性子、放射光、電子顕微鏡を活用した新しい実験技術の開発・応用研究									
	第一原理フォノン計算技術の開発・応用研究とデータベース構築									
	加速分子動力学シミュレーション法の開発・応用研究									
産学連携	京都大学拠点研究員制度と国際・産学連携室@NIMSを構築して積極的に活用									
府省連携	内閣府SIPおよび経済産業省ISMAとガバナリングボードを共有して密接に連携									

若手人材育成と基礎研究
ネットワークの中核拠点

新しい基盤学理の創出

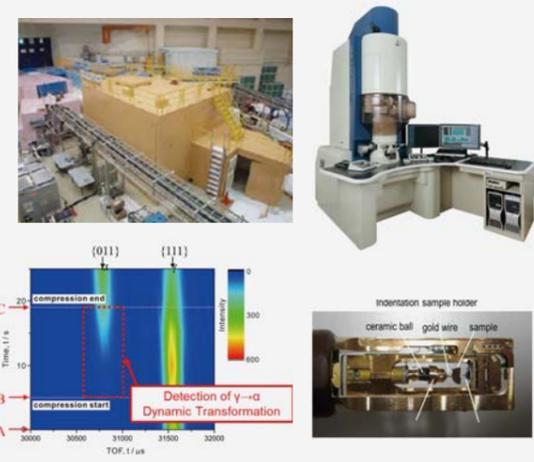
ESISMでは変形子=プラストンという構造材料研究における新しい概念を提示した。プラストンとは固体材料における塑性変形の素過程である。応力下で集団励起された原子集団が核形成し、その運動により塑性変形が起こる。プラストンは、結晶表面(単結晶)や結晶粒界(多結晶)、亀裂先端

端で優先的に核形成し、結晶方位、応力レベル、変形速度・温度などに応じて、種々の転位、双晶やマルテンサイトなどに進展する。したがって、プラストンを制御することで高強度材料に延性を付与することや、脆性破壊を抑制することが可能になる。



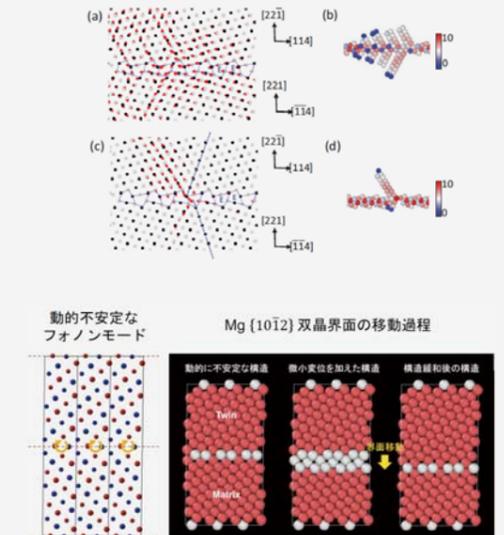
新しい実験技術の開発と活用

新しい研究ツールが出現することで、サイエンスは飛躍的に進歩する。ESISMでは材料組織や格子欠陥を解析するために、中性子や放射光、透過型電子顕微鏡などを利用したさまざまな実験技術を開発・活用した。



新しい計算技術の開発と活用

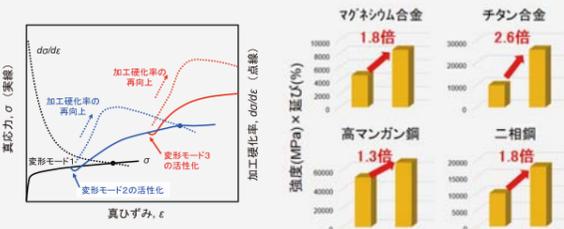
計算機シミュレーションは、実験結果を解釈するだけでなく、的確な実験をデザインするために不可欠である。ESISMでは加速分子動力学法や第一原理フォノン計算技術を開発・活用した。



社会実装につながる成果

新概念に基づく材料開発

プラストンを制御することで、多結晶材料が塑性変形する際に、種々の転位、双晶やマルテンサイトなどさまざまな変形モードを活性化し、延性を大幅に向上させることができる。これを多くの材料系で実証し、従来の常識を凌駕する革新的材料の創製に成功した。

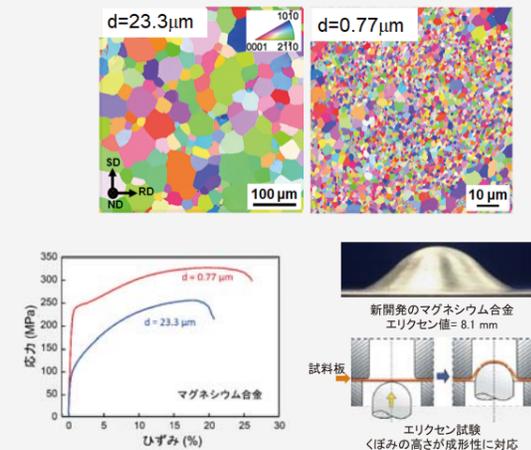


プラストン誘起塑性変形が確認された完全再結晶バルク金属材料

材料	活性化された変形モード
マグネシウム合金	c + a 転位
チタン合金	
高マンガン鋼	
銅合金	変形双晶
ハイエントロピー合金 (FCC)	
単安定オーステナイト鋼	マルテンサイト

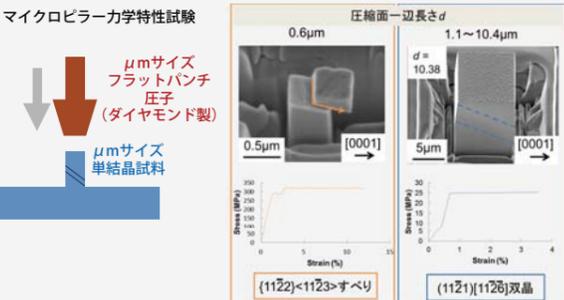
展伸用マグネシウム合金の開発に成功

プラストン概念に基づき、マグネシウム合金では、これまで皆無であった産業利用できる展伸用合金の開発に成功した。これは商用アルミニウム合金(6000系)に匹敵する強度と成形性を有し、アルミニウムに比べて35%軽量になる。



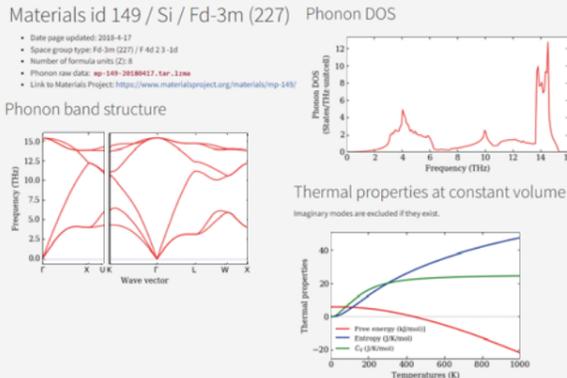
多様な化学結合を有する材料での力学特性の解明

ESISMではマイクロピラー単結晶を用いた力学試験技術を開発した。その結果、これまで不明であった金属間化合物やセラミックス材料についての変形モードの臨界せん断応力の評価に成功し、定量的な材料設計に道を開いた。



第一原理フォノン計算コードとデータベースの構築

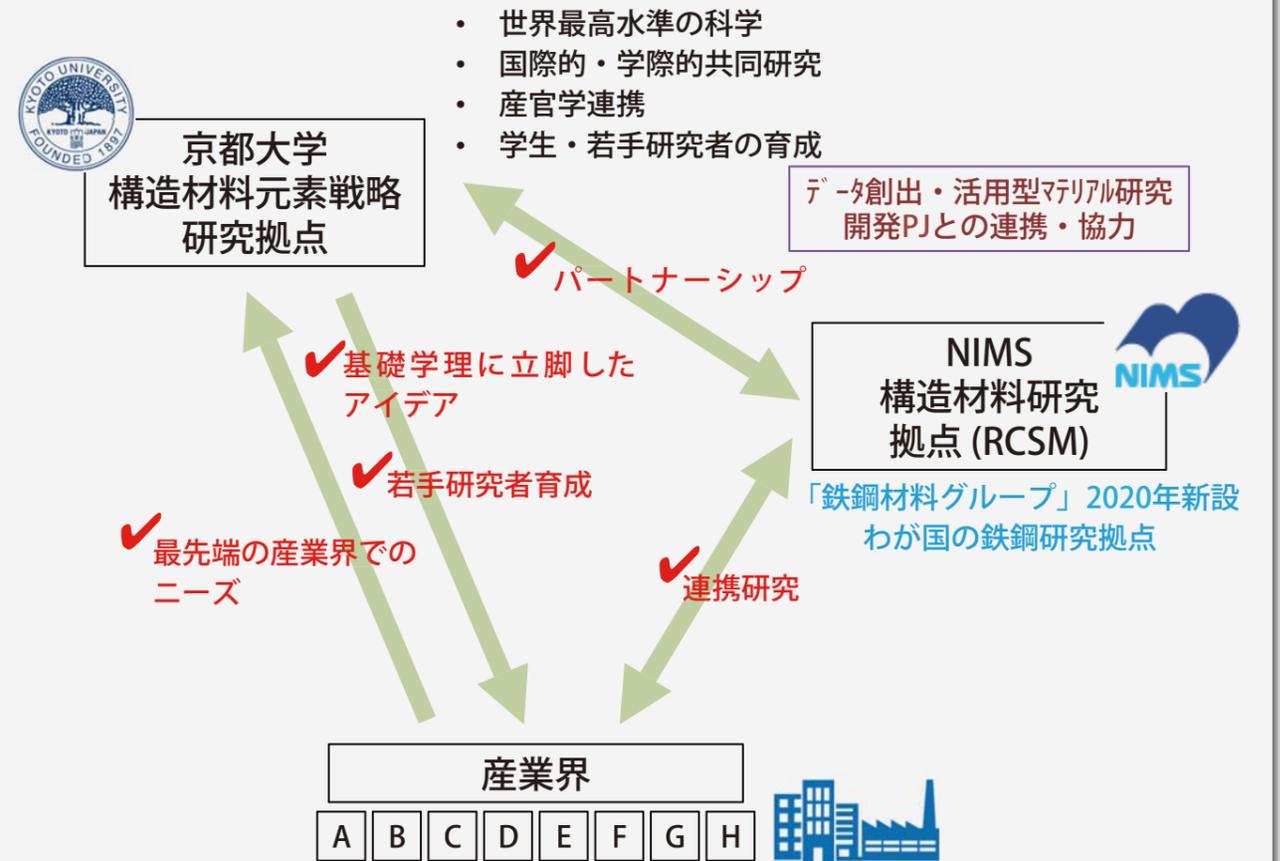
ESISMが開発した第一原理フォノン計算コード phonopyおよびphono3pyは、世界中で事実上の標準として広く利用されている。また、約1万種類の物質についてデータベースphonondbを構築し公開している。これは人工知能(AI)による材料開発に貢献している。



プロジェクトのバトンをつなぐ

ESISMで挙げられた基礎研究の成果と多分野にわたる研究ネットワークは、プロジェクトの終了後も継続していくことが産業界からも求められている。その

ためにNIMS構造材料研究拠点(RCSM)、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとの連携・協力を進めていく。



新概念プラストンについての書籍を出版

ESISMでは、プラストン概念についての英文での解説書を、世界で初めてSpringer社から2022年1月にオープンアクセスとして出版した。

