

## 平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰（若手科学者賞）

### 「格子欠陥ダイナミクスに基づく構造材料の計算科学研究」

受賞者 都留 智仁

（日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門

原子力基礎工学研究センター 燃料・材料工学ディビジョン

照射材料工学研究グループ 研究副主幹）

#### 業績

強さと粘り強さは構造材料において最も重要な性質であり、これらの機能を向上するために加工による材料組織制御や合金設計が広く行われて来ました。

受賞者は、金属材料の機械的性質は材料内部のきれいに並んだ格子状の配置からのずれ（転位や空孔、放射線の照射の影響などの「欠陥」）の構造によって決まることに着目して、多様な欠陥構造を原子レベルで再現する手法を開発しました。原子力機構のスーパーコンピュータを用いた数億個の原子シミュレーションにより材料内部の複雑な欠陥が変形によって変化していく様子を動的に追跡することを可能にしました（図 1）。そして、材料内部の欠陥の運動や相互作用が強度などの機械特性に及ぼす影響を明らかにしました。

また、希少元素を用いない合金のための設計図作り（元素戦略）として、転位や欠陥周辺の歪み（弾性場）及び電子構造に基づく手法を提案しました（図 2）。これによって、ある特定の合金で材料の機械的特性が向上する効果が明らかになり、計算機シミュレーションを有効に活用した材料設計が可能になると考えています。

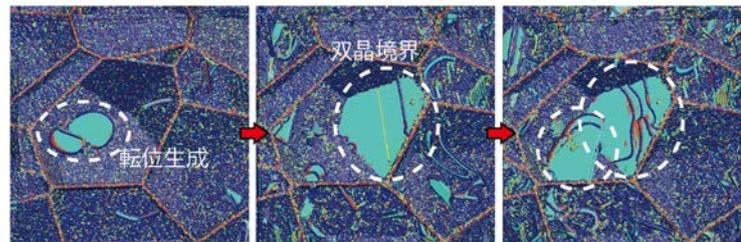


図 1. 多結晶材料の欠陥の動的変化

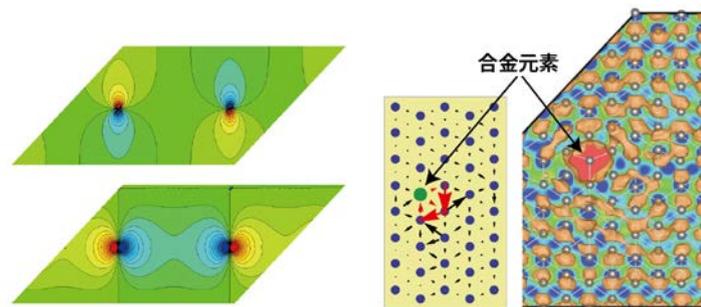


図 2. 転位芯（欠陥）周りの弾性場と合金元素の影響

主要論文：「Influence of competition between intragranular dislocation nucleation and intergranular slip transfer on mechanical properties of ultrafine-grained metals」Materials Transactions 誌、vol.54-9, p1580～1586、2013 年 9 月発表  
「Effect of Solute Atoms on Dislocation Motion: An Electronic Structure Perspective」、Scientific Reports 誌、vol.5-8793, p1～8, 2015 年 3 月発表、「Origin of dramatic oxygen solute strengthening effect in Titanium」、Science 誌、vol.347、p635～639、2015 年 2 月発表