

「実験科学」、**「計算科学」** および **「逆問題解析」** を融合させた材料研究

マテリアル生産科学工学専攻 マテリアル科学コース
教授 多根 正和

1. はじめに

私は、2024年4月1日付で工学研究科マテリアル生産科学専攻マテリアル科学コースの教授に着任いたしました。まず、これまでの略歴を簡単に紹介させていただきます。私は、2004年3月に大阪大学大学院基礎工学研究科システム人間系専攻の博士後期課程を修了し、博士(工学)の学位を取得しました。その後、同大学産業科学研究所に助手、助教および准教授として勤務し、2021年4月に大阪市立大学大学院工学研究科に教授として着任しました。2022年4月には大阪市立大学と大阪府立大学の統合により、所属先が大阪公立大学大学院工学研究科となり、2024年3月には、大阪公立大学の杉本キャンパスから中百舌鳥キャンパスへの工学研究科のキャンパス移転に伴う研究室(居室および実験室)の移転を経験しました。このキャンパス移転直後の2024年4月から再び大阪大学に勤務することとなり、3年間で複数の環境の変化(居室、実験室の移転および所属の変更)を経験することになりました。さらに、私は、大学入学以降、学生および教員として大阪大学に所属していたため、3年間という短い期間ではありますが、大阪大学ならびに大阪大学の学生および教員・職員に他大学の教員として外側から接するという経験をすることになりました。これは、大阪大学について改めて考える機会となり、結果として大阪大学の良さおよび重要性に対する認識が深まったと感じております。今後は、このような経験も積極的に活かしながら基礎学問を重視した教育および研究を実施することにより、本学の発展に貢献できればと考えております。本記事では、これまで行ってきた研究内容の概略を紹介し、今後の教育および研究に対する抱負を述べさせていただきます。

2. 「実験科学」、**「計算科学」** および **「逆問題解析」** を融合させた材料研究

私の研究対象は、構造材料および生体材料の弾性特性を中心とした材料の力学特性、相転移現象およびそれらを対象とした計算・解析手法の構築であり、「実験科学」、「計算科学」および「逆問題解析」を融合させた材料研究の推進というコンセプトに基づいて、材料の力学特性・機能の発現を支配する相転移・微細組織形成挙動の解明、微細組織・構造に起因した力学特性の支配因子の解明ならびに独自の力学計算・解析手法の構築を行ってきました。

2004年には、一方向に伸びた多数の微細気孔を有するポーラス金属の弾性変形挙動に対して研究を行い、Eshelbyの等価介在物理論、Mori-Tanakaの平均場近似およびBruggemanの有効媒体近似を組み合わせ、弾性異方性および弾性不均質性の強いポーラス材料や複合材料の巨視的な弾性特性を高精度で計算可能な独自のマイクロメカニクス理論(Effective-mean-field理論)を構築しました。

さらに、独自に構築したEffective-mean-field理論を基軸とした非線形重回帰分析と超音波共鳴法による高精度弾性率測定を組み合わせ、他の手法では実測が極めて困難な炭素繊維単体の弾性異方性を記述するための全弾性スティフネスを決定しています。加えて、炭素繊維の微細組織に対する新規な力学モデルの構築と非線形重回帰分析を組み合わせ、炭素繊維の弾性異方性および高ヤング率の起源を解明しています。

2013年には、数ミリメートル程度の大きな単結晶の育成が困難な材料においても、凝固・加工プロセスによって、結晶配向性を制御した多結晶材料が作製可能であることに着目し、結晶配向性を有する多結晶材

料の異方的な巨視的弾性率から、それを構成する単結晶の弾性率を決定可能な逆問題解析手法(inverse Voigt-Reuss-Hill 近似:図 1)を構築しました。考案した逆問題解析手法を用いて、単結晶の育成が困難なため、これまで実測例のなかった長周期積層型規則(LPSO)構造を有する Mg-Zn-Y 合金単結晶の弾性特性を初めて明らかにし、LPSO 構造中に存在する 1 nm 程度の短範囲規則クラスターの熱的安定性が弾性特性の支配因子であることを示しています。加えて、Eshelby の等価介在物理論と Bruggeman の有効媒体近似に基づいて、多結晶内の結晶粒の形状および弾性異方性を反映した結晶粒間の弾性相互作用を考慮することにより、強い弾性異方性を有する単結晶で構成された多結晶材料の巨視的弾性率から、それを構成する単結晶弾性率を高精度で決定可能な非線形重回帰分析に基づく逆問題解析手法(inverse Self-consistent 近似)の構築も行っています。

「実験科学」、「計算科学」および「逆問題解析」を融合させた研究手法は、生体材料研究にも生かされています。

例えば、低弾性率化が必要とされる生体用 bcc 系チタン合金において、単結晶の弾性特性を明らかにし、結晶弾性異方性を利用して、生体骨と同程度の理想的な低ヤング率を有する生体インプラント材料の開発が可能であることを、初めて提唱しています。さらに、独自の逆問題解析手法である inverse Voigt-Reuss-Hill 近似を利用して、1963 年に存在が発見されて以来、実測例のなかった純 Ti のオメガ相単相・単結晶の弾性特性を解明することに成功しています。最近では、bcc 系の生体用チタン合金の弾性率が室温時効下で増加するという特異現象を発見し、弾性・擬弾性緩和計測、独自の Effective-mean-field 理論および熱・統計力学に基づくゆらぎの熱力学理論等を用いた解析により、特異な弾性率増加が「無拡散等温オメガ変態」という凍結合金組成ゆらぎによって誘起される新たな相転移に起因していることを明らかにしています。さらに、この新規な相転移の制御が弾性率制御において極めて重要であることも示しており、詳細な相転移機構の解明、相転移による微細組織形成と力学特性との相関関係の解明を基軸とした微細組織および力学特性の制御法の構築に取り組んでいます。

3. おわりに

最後に、今後の教育および研究に対する抱負を述べさせていただきます。今後も、「実験科学」、「計算科学」および機械学習に基づく「逆問題解析」の融合研究を基軸とした材料研究の推進という教育・研究方針を掲げて、学部生および大学院生への教育および研究に従事していきたいと考えています。こうした融合研究を通じて、結晶弾性論、マイクロメカニクス理論およびそれに基づくモデル計算、原子論的モデリング、擬弾性緩和理論、材料組織学、熱・統計力学、機械学習および各種実験・計測に対する教育が実施できると考えています。これにより、材料における相転移および力学現象の物理を理解し、かつ力学計算・機械学習(逆問題解析)手法を構築することで、微細組織・構造制御によって発現する力学特性・機能を探求することができる人材の育成に貢献したいと考えています。

(大阪大学 基礎工学部 機械工学科 2000 年卒業

大阪大学 基礎工学研究科 システム人間系専攻 2002 年前期修了 2004 年後期修了)

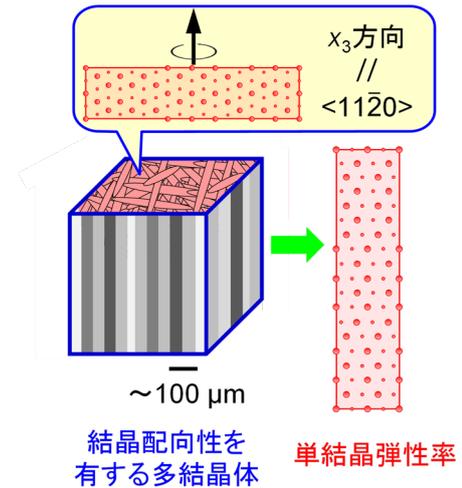


図 1: 結晶配向性を有する多結晶体の巨視的な弾性特性を解析することにより、多結晶体を構成する単結晶の弾性率を決定する方法 (inverse Voigt-Reuss-Hill 近似)の概略図。