

プロジェクト名	計算科学と巨大ひずみ加工プロセスの融合による次世代高機能材料の創製
代 表 者	材料エネルギー学部 助教 唐 永鵬
達成に資する SDGs 目標	SDGs 目標 7：エネルギーをみんなにそしてクリーンに SDGs 目標 9：産業と技術革新の基盤をつくろう SDGs 目標 13：気候変動に具体的な対策を
プロジェクト の意義、成果 及び波及効果	【SDGs 目標 7：エネルギーをみんなにそしてクリーンに】 本プロジェクトでは、密度汎関数理論（DFT）計算と巨大ひずみ加工プロセス（SPD）の組み合わせにより、ペロブスカイト系エネルギー材料（MASnI_3 等）の電子構造・欠陥特性・光吸収特性を原子スケールで解明する。DFT 計算によって最適な組成・構造設計指針を導出し、実験的な SPD 加工によって結晶粒微細化および欠陥制御を実現することで、高効率・低コストな太陽電池材料・蓄エネルギー材料の開発を推進する。これにより、再生可能エネルギーの普及と安定供給に貢献し、クリーンエネルギーへのアクセス拡大を社会実装レベルで支援する。本研究の成果は、エネルギー変換効率の飛躍的向上につながり、SDGs 目標 7 の達成に直接貢献するものである。 【SDGs 目標 9：産業と技術革新の基盤をつくろう】 DFT 計算と SPD 加工技術の融合アプローチにより、Al 合金・Mg 合金・Ti 合金等の軽量高強度構造材料の設計・製造プロセスを革新する。DFT 計算によって転位挙動・析出強化・界面エネルギーを定量的に予測し、その知見に基づいて SPD 加工条件を最適化することで、従来製法では達成困難な超微細粒組織と優れた力学特性を有する金属材料の実現を目指す。これらの高性能材料は、航空宇宙・自動車・電子機器等の先端産業における軽量化・省エネ化に直結し、製造業の技術基盤強化と国際競争力の向上に貢献する。また、本研究で確立される計算科学と実験加工学の統合的方法論は、次世代材料開発のための革新的プラットフォームとして広く産業界に展開可能であり、本学の研究拠点としての機能強化にも大きく資する。 【SDGs 目標 13：気候変動に具体的な対策を】 本プロジェクトで開発される軽量高性能金属材料（Al・Mg・Ti 合金）は、輸送機器の軽量化を通じて CO_2 排出量の大幅削減に寄与する。さらに、ペロブスカイト系エネルギー材料の高性能化は、太陽光発電の変換効率向上と製造コスト低減を実現し、化石燃料に依存しないクリーンエネルギー社会への転換を加速させる。DFT 計算による材料設計の高精度化は、試行錯誤的な実験を減らし、研究開発プロセス自体のカーボンフットプリント削減にも貢献する。これらの相乗効果により、気候変動緩和に向けた技術的基盤の構築と、持続可能な低炭素社会の実現に具体的かつ直接的に貢献する。 【社会・本学への波及効果】 本研究の成果は、学術論文として国際的に発信されるとともに、産学連携を通じて実用化・事業化につなげることが可能である。また、DFT 計算と SPD 加工を統合した研究手法の確立は、本学における計算材料科学と先進加工工学の研究基盤を強化し、関連分野の若手研究者育成にも貢献する。さらに、エネルギー・環境・製造という複数の重要分野にまたがる本研究の展開は、本学の SDGs 研究拠点としての国際的プレゼンスを高め、外部資金獲得や国際共同研究の推進にも寄与するものと期待される。