

研究テーマ 金属材料の構造安定性と電子構造の研究

所属 先進アルミニウム国際研究センター(併任)

教授 布村 紀男

研究の背景および目的

計算材料科学は材料設計研究の基盤技術として期待が大きい。まず、量子力学を基礎として少ない仮定で行われる第一原理シミュレーションにより、物性の本質的な理解と新しい特性の探索が挙げられる。次に、経験的な原子間ポテンシャルを用いた現象論シミュレーションや統計熱力学計算の活用で従来の試行錯誤手法に代わる材料研究・開発が可能である。第一原理計算手法である密度汎関数理論(DFT)の成功と計算機の急速な発展により豊富なデータを得ることができるようになり、ここ最近ではデータ駆動型の材料開発も進んでいる。こうした背景の下、多種多様な金属材料の特性の理解、新規材料探索や機能予測を目的として、構造安定性と電子構造に関する理論研究を行っている。

■ おもな研究内容

● Al-Mg系合金の構造安定性に関する計算研究

Mg₁₇Al₁₂の結晶構造は、単位胞に58個の原子を含む複雑な原子配列を持ち、フェルミ面とブリルアンゾーンとの相互作用により安定化すると予想されている。本研究ではMg原子の3つのワイコフ位置 2a, 8c, および24gをAl原子で置換し、電子数変化によるエネルギー安定性と電子構造を明らかにした。

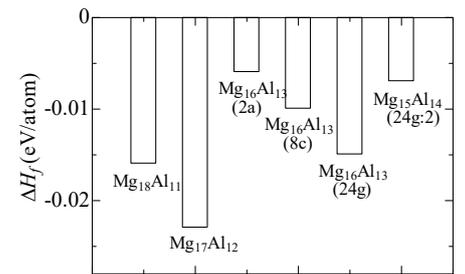


図1 Mg₁₇Al₁₂相の生成エンタルピー

● Al-Mg-Si系合金における時効硬化現象での機械学習

アルミニウムサッシ材や車両用車体材料、溶接構造用材料として注目されているAl-Mg-Si系合金(6000系アルミニウム合金)は時効硬化型アルミニウム合金であり、熱処理や添加元素によって硬度が大きく変化する。本研究では合金の硬度における添加元素などの影響を機械学習を用いて解析し、予測モデルを作成した。

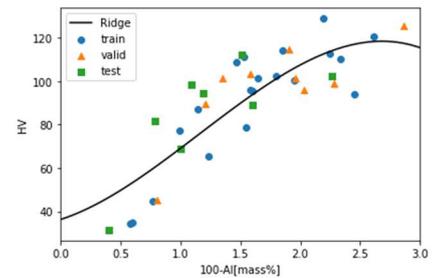


図2 多項式回帰(リッジ)

● 分子動力学法を用いたAl中の水素原子挙動に関する研究

アルミニウムやその合金は軽量性に優れていることから、水素を扱う環境での材料として期待されている。本研究ではアルミニウム中での水素原子の拡散挙動を分子動力学法やNEB法による計算シミュレーションで評価した。

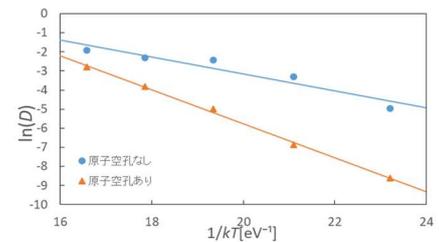


図3 Al中での水素拡散のアレニウスプロット

期待される効果・応用分野

1. 第一原理計算に代表される高精度計算シミュレーションと実験・測定データをデータ科学との連携により、大量の候補材料を高速にスクリーニングが可能
2. 研究者の経験や勘に基づく材料設計、実験評価、設計指針の見直しに係る「時間と費用」の削減
3. スマートシミュレーション活用によるモノづくりの高速化・高度化

■ 共同研究・特許など

共同研究: 第一原理計算による金属表面及び金属複合体の量子現象の研究

アルミニウム合金の応力緩和特性向上に関する研究

研究分野	計算科学, 計算機シミュレーション, 物性理論, 化学物理, 応用物理
キーワード	第一原理バンド計算, 分子動力学法, インフォマティクス, ハイスループット計算

研究室URL: <http://www3.u-toyama.ac.jp/cmdlab/>