

研究タイトル：

## 計算材料科学による原子間相互作用解析と合金設計

氏名：	安里 光裕 / Mitsuhiro ASATO	E-mail：	asato@mec.niihama-nct.ac.jp
職名：	教授	学位：	博士(工学)
所属学会・協会：	日本金属学会、日本物理学会、日本物理教育学会		
キーワード：	第一原理計算、密度汎関数法、KKR-Green 関数法、金属中の原子間相互作用		
技術相談 提供可能技術：	KKR-Green 関数法を利用した第一原理計算について 合金の原子間相互作用とそのメカニズム解明について 第一原理計算による合金状態図計算について		



### 研究内容： 第一原理計算による合金の原子間相互作用と原子構造および合金状態図

#### 【研究概要】

第一原理計算と呼ばれる量子力学に基づく計算機シミュレーション技法を用いて、材料研究、および設計支援を目指した計算手法の開発とその計算プログラム作成を目的とした研究活動を行っている。

現在、金属(合金)中の原子間相互作用エネルギーや格子欠陥相互作用エネルギーの計算とそれらの相互作用メカニズムの解明、格子歪効果等に関する研究を展開中である。

#### 【合金の原子間相互作用と原子構造】

合金は添加元素の選択により多様な原子構造をとることが実験からわかっている。

本研究では、添加元素や不純物元素等との相互作用を KKR-Green 関数法と呼ばれる第一原理計算を用いて原子構造の安定化のメカニズムを調べることができる。

#### 【合金状態図】

状態図を理論から求めるためには、対象とする系の自由エネルギーを計算する必要がある。本研究では、実験や経験的に得られるデータを用いることなく第一原理から自由エネルギーを計算する手法の開発を行っている。

#### 【研究テーマの例】

- ・アルミニウム合金 AIX (X=Sc-Zn)の原子間相互作用の第一原理計算と原子構造(図1)
- ・Fe 中の原子間相互作用エネルギーと状態図予測(図2)
- ・ホイスラー合金 X2YZ(X=Fe, Co, Ni, Cu, Y=Mn, Z=Si, Alなど)の電子構造・磁性と格子欠陥効果
- ・超硬合金中の不純物原子間相互作用のメカニズム解析と硬さに及ぼす効果(図3)

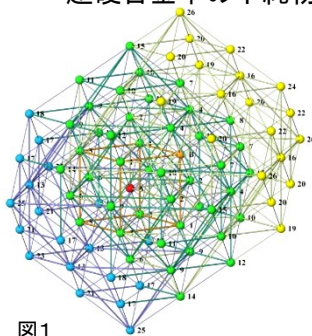


図1

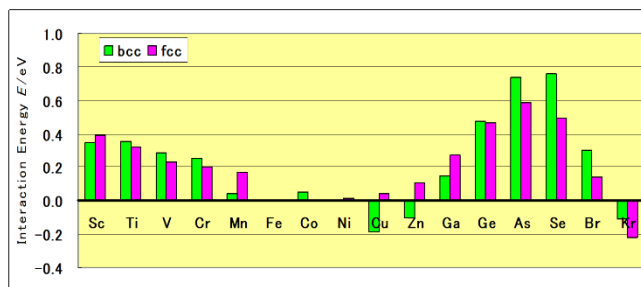


図2 Fe 中の X-X (X=Sc-Kr) 相互作用エネルギー

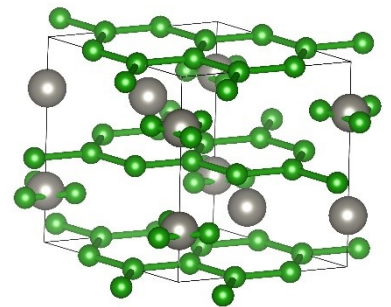


図3

#### 提供可能な設備・機器：

##### 名称・型番(メーカー)

名称・型番(メーカー)	