

# 第一原理計算に基づくMg合金の力学特性の起源解明

准教授・圓谷 貴夫

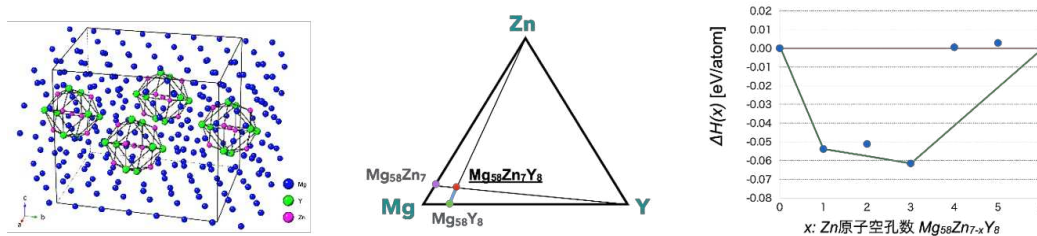
先進マグネシウム国際研究センター 第一原理計算分野

## ▶ 研究内容

### 【技術紹介】

第一原理電子状態計算手法に基づき、物質・材料(固体)系で発現する物性と機能を理論的に予測する研究を行っています。近年、計算機能力とシミュレーション精度の飛躍的な向上により、材料科学分野における計算科学の重要性が高まっています。熊本大学ではKUMADAIマグネシウム合金が示す長周期積層秩序(LPSO: Long Period Stacking Order)構造の形成メカニズムを電子論的な立場から明らかにすることを目標に研究を進めています。

熊本大学で開発されたLPSO構造を有するMg-Zn-Y合金は、組成によっては溶質原子(Zn, Y)が原子クラスターを形成していることが電子顕微鏡による観察から明らかとなっています。しかし、LPSO構造の形成メカニズムについては不明な点が多く残されています。本研究では、LPSO構造を有するMg合金の構造安定性の起源を解明することを目標に、第一原理電子状態計算手法に基づき、溶質原子の数や配置がLPSO構造相の安定性にどのような影響を及ぼすかを調べています。材料の強度はミクロな電子の挙動や原子間結合に起因し、メソスケールにおける内部組織や欠陥挙動によって支配されています。本研究ではスケールが異なる計算手法間をつなぐ手法を開発し、原子・分子の電子の振る舞いから塑性変形の素過程を演繹することを目標に研究を進めています。



T. Tsumuraya et al. Applied Physic Express 15, 075506 (2022)

物質・材料研究は予期せぬことが多く、単純な内挿や外挿で新たな材料特性を予測することは困難です。次の一手のためにはからくりを知る必要性があると考えています。第一原理計算手法は汎用的で、非経験的な計算手法です。研究対象とする物質や性質に研究手法が依存せず、多様な材料系を扱うことができます。第一原理計算では1つのシュレディンガー方程式を解くことで多様な物理量が得られるため、得られるデータの精度にばらつきが非常に小さく、データ科学的手法に基づく物質材料設計(マテリアルインフォマティクス)の重要な基盤技術となっています。

## ▶ キーワード

電子状態 相安定性 第一原理計算 熱力学 量子力学 化学結合 格子欠陥 原子空孔 金属 金属ガラス electronic state compatibility first-principles calculations thermodynamics quantum mechanics chemical bond lattice defect atomic vacancy metal metallic glass 工学領域 材料工学 金属物性・材料

《ご連絡先》 コーディネータ 中井 真澄 TEL 096-342-3966 FAX:096-342-3300 mail:m-nakai@jimu.kumamoto-u.ac.jp