

第一原理計算と統計的手法による 構造解析と特性予測

キーワード 材料評価、材料設計、電子状態、構造解析、特性予測

水野 正隆 MIZUNO Masataka

附属アトミックデザイン研究センター/マテリアル生産科学専攻 准教授
材料機能学講座 材料評価学領域 荒木研究室

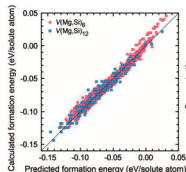


図1 Al-Mg-Si合金における空孔-溶質原子クラスタの生成エネルギーの予測値と計算値

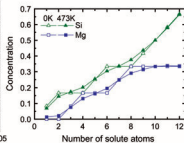


図2 Al-Mg-Si合金における空孔-溶質原子クラスタの溶質原子数の増加に伴う濃度変化

ここがポイント!【研究内容】

- 物質の構造や安定性について精度の高い計算が可能である第一原理計算に、統計的手法による精度の高いモデリングや解析を適用します。
- 自動車ボディパネルに利用される Al-Mg-Si 合金において強度に寄与する空孔-溶質原子クラスタについて、重回帰分析による予測式を適用し安定構造を明らかにしました。
- 近年注目されている5種類の元素がランダムに混じりあった CrMnFeCoNi 高エントロピー合金について、ランダムな構造を統計的手法によりモデリングを行い、原子番号が大きな原子ほど拡散の活性化エネルギーが高くなることを明らかにしました。



応用分野

材料分野、自動車分野

論文・解説等

- [1] M. Mizuno *et al.*, *Results in Physics* 34, 105285 (2022)
- [2] M. Mizuno *et al.*, *Materialia* 13, 100853 (2020)
- [3] M. Mizuno *et al.*, *Computational Materials Science* 170, 109163 (2019)

連絡先 URL

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/mse4/MSE4-HomeJ.htm>

