

第一原理計算と統計的手法による構造解析と特性予測

#材料評価

#材料設計

#電子状態

#構造解析

#特性予測

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。

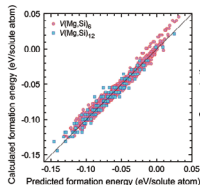


図 1 Al-Mg-Si 合金における空孔 - 溶質原子クラスタの生成エネルギーの予測値と計算値

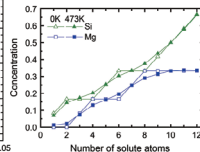


図 2 Al-Mg-Si 合金における空孔 - 溶質原子クラスタの溶質原子数の増加に伴う濃度変化

Develop+

応用分野

材料分野、自動車分野



水野 正隆 MIZUNO Masataka

マテリアル生産科学専攻

附属アトミックデザイン研究センター 准教授

材料物性学講座 量子機能材料設計学領域
荒木研究室



論文・解説など

- [1] M. Mizuno et al., Physical Review Materials 8 (2024) 013601
- [2] M. Mizuno et al., Results in Physics 34, 105285 (2022)
- [3] M. Mizuno et al., Materialia 13, 100853 (2020)

連絡先HP

