研究テーマ 金属材料の構造安定性と電子構造

所属 学術研究部 都市デザイン学系

教授 布村 紀男
https://researchmap.jp/cmd6248nn

研究分野	計算科学, 計算機シミュレーション, 材料科学, 物性理論, 応用物理
キーワード	第一原理計算, 分子動力学法, マテリアズインフォマティクス, 機械学習, AI活用

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

研究の背景および目的

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。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，さらに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。



■主な研究内容

●第一原理計算を用いたCo基合金の構造安定性評価

Co基合金は，歯科用金属や人工関節など生体用金属として使われて．特性は，強度，耐食性，耐摩耗性に優れており，様々な規格がある。本研究では，Co-Cr二元およびCo-Cr-Mo三元合金に焦点を置き，fccおよびhcp構造のエネルギー安定性と磁性について明らかにした。

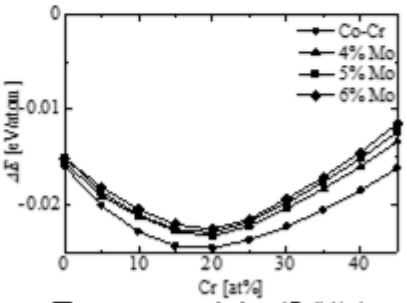


図1 Co-Cr-Mo合金の組成依存

●銅表面上でカルボン酸の吸着構造

銅菅の蟻の巣状腐食の要因として，有機カルボン酸の関与が指摘されているが詳細な機構解明がされていない。本研究では，有機カルボン酸によるCu(111)表面での腐食の影響について，第一原理計算手法を用いて吸着構造と電子状態の理論計算を行った。ギ酸，酢酸について吸着構造および吸着エネルギーの知見を得た。

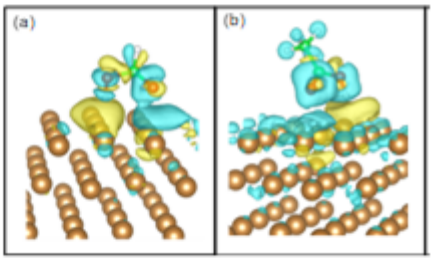


図2 安定吸着構造での電子密度差

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

富山大学研究者プロファイルPure URL：
https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/norio-nunomura/