

” 金属の計算材料物性” – マルチスケールのアプローチ

シラバス

10/7(火) 14:50- 第1回

題目： マルチスケール計算材料科学の概要

講師： 寺田 弥生（金属材料研究所 CMRI）

全8回の本セミナーの第1回目として、材料科学におけるマルチスケールの考え方の重要性とマルチスケール計算材料科学の概要、マルチスケール計算材料科学と金属物性の関係性を解説する。これまで計算材料科学では特定の時空間スケールに焦点をあてて議論されることが多かった。しかし、マクロな物性を議論するためには、ミクロな領域からマクロな領域にいたるマルチスケールの現象を統合的に理解する必要がある。近年の計算科学やコンピュータの発展に伴い、マルチスケールの現象をシームレスに取り扱うことが可能となりつつある。そこで、まず材料科学の基礎についてレビューした後、材料科学、特に、金属材料において、マルチスケール計算科学の必要性を議論し、現状どのような問題があるのかを概説する。併せて、第2回目以降に、どのような講演が行われるかを紹介する。

10/7(火) 16:30- 第2回

題目： 第一原理計算基礎

講師： 陳 迎（工学研究科）

第一原理計算とは、物質の基本法則である量子力学に基づいて、原子番号のみをパラメーターとして用いる電子状態計算手法である。電子状態解析で得られた物質材料の基底状態、各相の相安定性、相平衡など基礎情報は、物性予測と材料設計の出発点となり、さらに、クラスター展開法 (CEM) により基底状態エネルギーから抽出された原子間有効相互作用エネルギーは、ミクロからメソスケールに渡るマルチスケールシミュレーションの鍵となる。本講義では、多体系の電子構造や物性を電子密度から計算することが可能にした密度汎関数理論の概要を解説するとともに、電子構造から熱力学特性、力学特性、光学特性など物性の導出、また、第一原理計算とクラスター展開法の組み合わせにより合金の基底状態の安定構造の探索、有限温度計算や大規模なシミュレーションへの展開に必要な原子間結合情報の抽出について紹介する。

10/14(火) 14:50・ 第 3 回

題目： 材料の粒界・界面の計算科学

講師： 香山 正憲 (産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門)

多くの金属材料やセラミックスは多結晶体であり、結晶粒子間の粒界が性能のカギを握る。様々な電子デバイスでは、金属/半導体界面など異種物質間界面の理解が不可欠であり、触媒や燃料電池電極では、金属/無機界面やその周辺の電子状態が機能の源である。本講義では、こうした各種材料の粒界・界面の原子・電子構造や諸性質を、「計算科学」を用いて解明し設計するアプローチを紹介する。電子顕微鏡観察など、実験との比較・連携も紹介し、今後の課題、展望を論じる。まず、対応格子理論など、粒界・界面の結晶学的、幾何学的モデルを紹介する。次に、原子間ポテンシャルを用いた全体像のシミュレーション、第一原理計算による安定構造や諸性質の詳細な解明、電子顕微鏡観察等との比較、「第一原理引っ張り試験」による強度の基礎解析、オーダーN法やマルチスケール計算による大規模構造の取り扱い等を紹介する。粒界・界面に適した、新しい第一原理計算手法として、「局所エネルギー法、局所応力法」についても、最近の例を紹介する。

10/14(火) 16:30・ 第 4 回

題目： 強誘電体のマルチスケール計算

講師： 西松 毅 (金属材料研究所)

近年のさらなるコンピュータの高速化と大容量化、理論と計算手法の進歩により強誘電体の実際の規模 (システムサイズ, ~ 100 nm) と時間 (~ 100 ns) での分子動力学シミュレーションが可能になりつつある。ペロプスカイト型強誘電体 ABO₃ の密度汎関数法に基づいた第一原理計算から有効ハミルトニアン H_{eff} を構築し、それに基づき分子動力学計算を行うという手法である。われわれはその強誘電体に特化した分子動力学計算フリーソフトウェア feram (<http://loto.sourceforge.net/feram/>) の開発を続けている。講義では、そこで用いている第一原理計算による H_{eff} の構築方法や分子動力学計算の具体的な手法[1]を解説し、最近の研究

(1) PbTiO₃ の昇温/降温分子動力学シミュレーションと 90° ドメイン構造の発現

(2) 強誘電体の電気熱量効果の分子動力学計算

などを紹介する。

参考文献

1. 西松毅: 強誘電体薄膜キャパシタのヒステリシスループの分子動力学計算, セラミックス, 第 46 巻 6 月号, p.456, 2011 年 6 月.

10/21(火) 14:50- 第5回

題目： 離散系から連続系へ

講師： 毛利 哲夫 (金属材料研究所 計算材料学センター CMRI)

マルチスケール計算では、電子や原子レベルのミクロな情報をよりスケールの大きな階層に伝達する必要がある。しかし、合金の内部組織といわれるメソスケールや、あるいは、日常のマクロな材料スケールにおいて含まれる原子数は膨大であり、これらの電子・原子の個々の振る舞いを厳密に計算することは不可能である。又、たとえこれらを計算し得ても、その全体としての振る舞いを把握するには、別個に解析手法を開発する必要がある。

一般に、小さなスケールの現象から大きなスケールの現象を予測するためには、何らかの形で平均化をする必要がある。しかし、この平均化が、小さなスケールにおいて本質的な物理を平滑化してしまうようなものであればメソスケール、マクロスケールの現象にミクロな情報を反映することはできない。これをより有効に、そして正確に行うのが「粗視化」である。本講義では、粗視化の簡単な数理について論じるとともに、複雑な材料現象への応用例を紹介する。

10/21(火) 16:30- 第6回

題目： 鉄鋼材料の組織形成と変形

講師： 山中 晃徳 (東京農工大学 工学研究院 先端機械システム部門)

本講義では、材料を連続体として取り扱うメゾ・マクロスケールにおける材料組織や変形挙動の数値シミュレーション法を解説する。特に、フェーズフィールド法を用いた鉄鋼材料の相変態による組織形成過程と結晶塑性理論に基づく変形挙動解析に重点を置いた講義を行う。

具体的には、鉄鋼材料の相変態による組織形成のモデリングに必要な基礎知識として、フェーズフィールド法の基本的概念を説明した後、Fe-C合金のオーステナイト→フェライト変態シミュレーション (Fortran プログラム付き) を例に説明する。さらに、弾性ひずみエネルギー評価法としてのフェーズフィールド微視的弾性論 (弾性均一系) についても解説する。一方、結晶塑性理論に基づく変形挙動解析については、結晶塑性理論の基礎を述べた後、有限要素法と高速フーリエ変換法を用いた DP 鋼のイメージベース変形挙動解析を紹介する。

11/7(金) 15:20- 第7回 (配信セミナー)

題目: CALPHAD (計算状態図) の基礎と応用

講師: 大沼 郁雄 (工学研究科 金属フロンティア工学専攻)

CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) 法は、材料の組織を構成する相 (液相, 固溶体相, 化合物相など) の自由エネルギーを近似して, 実用多元系合金の状態図 (相図) や熱力学量を計算する手法である。実験あるいは第一原理計算により求めた合金や化合物の熱力学量, および, 相変態温度や平衡組成など状態図上の相境界の実験データに基づき, 熱力学パラメータを評価し, 熱力学データベースが構築される。さらに, このデータベースを熱力学計算ソフトウェアに取り込み, 様々な熱力学量や状態図を計算し, 実用材料の合金設計に活用される。本講義では, 自由エネルギーの熱力学モデルを理解し, 相の安定性と相平衡を記述するための基礎的な法則に基づく状態図の成り立ちを概説する。また, CALPHAD 法の概要, 熱力学パラメータの評価方法, 簡単な相平衡の計算手法, 合金設計への応用例等を紹介する。

11/7(金) 17:00- 第8回 (配信セミナー)

題目: 鉄鋼材料の魅力と計算材料科学への期待

講師: 潮田 浩作 (新日鐵住金㈱ 技術開発本部)

鉄鋼産業の世界市場規模は約 100 兆円である。他の産業を基盤から支えるという鉄鋼産業の特徴を考慮すると, 社会へのインパクトはさらに大きくなる。

鉄鋼材料は広い範囲の強度をカバーできる特徴があるが, 現状では最も高強度の鋼材でも理想強度の 10~20%程度しか使っておらず鋼材は未だ多くの可能性を秘めた魅力ある材料と言える。

電子顕微鏡, アトムプローブや量子線など物理解析技術の最近の進歩は著しい。一方では, 第一原理計算, フェーズフィールド法や結晶塑性など計算材料科学の進歩も著しい。両者を融合させマルチスケールのアプローチすることは, 鋼材の潜在能力を引き出すためにも今後益々重要となろう。

本講義では, 構造用鉄鋼材料の基礎となる①金属組織, ②特性, ③元素機能について概説し, 鋼材の面白さを伝えたい。その後, マルチスケール計算材料科学の現状及び期待について, ①金属組織形成, ②転位挙動と特性, ③鋼中の水素と脆化挙動, を例に述べる。