

〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-1

合金の複雑な構造をパラメータ無しで予測

ー 世界初の革新的マルチスケールシミュレーション新技術 ー

本研究のポイント

- ・合金の複雑な微細構造をパラメータ無しで予測することに世界で初めて成功
- ・計算機シミュレーションによる合金設計の道が初めて開かれる

【研究概要】

文部科学省ポスト『京』重点課題の一環として、横浜国立大学の^{大野}かおる教授らは、物質・材料研究機構の^{佐原}亮二主幹研究員と共同で、航空機ジェットエンジンのタービンなどに使用される NiAl 合金の複雑な微細構造を様々な Ni と Al の混合比に対して一切のパラメータを使用せずに物理の基本法則のみから正確に予測することに成功しました。これにより、計算機シミュレーションによる合成設計の道が初めて開かれました。この研究成果は、国際学術雑誌 Nature Communications に 2019 年 8 月 1 日 18 時（日本時間）にオンライン掲載されます。

【研究成果】

世界初の革新的マルチスケールシミュレーション新技術として「第一原理フェーズフィールド法」を開発し、NiAl 合金の複雑な微細構造を様々な Ni と Al の混合比に対して一切のパラメータを使用せずに物理の基本法則のみから正確に予測することに成功した。得られた結果は実験と大変良く一致している。局所応力分布も簡単に求まるため、機械強度も予測できる。

【計算手法】

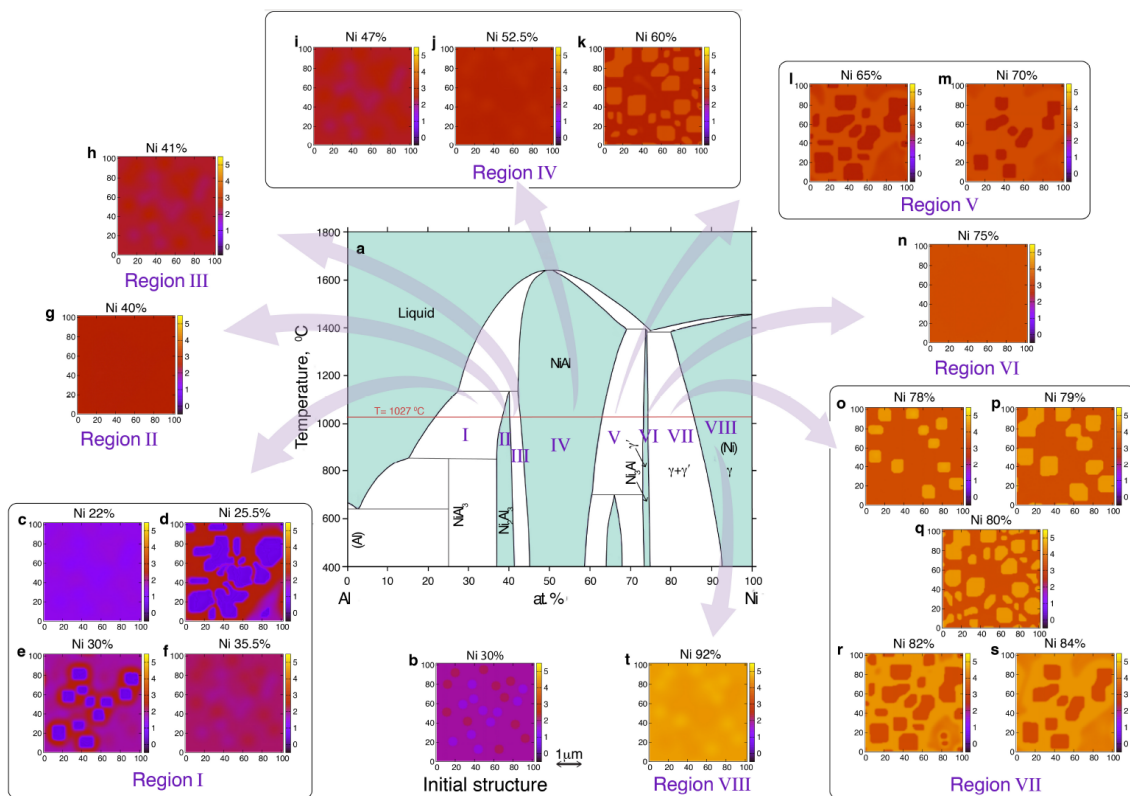
ナノスケール(第一原理計算)からマクロスケール(フェーズフィールド)まで異なるスケールの計算手法を、ポテンシャル繰り込み理論とクラスター展開理論を併用して、従来法のような連続的なものではなく、階段的な自由エネルギー関数を求めることにより、パラメータ無しに元素分布を求める新手法「第一原理フェーズフィールド法」を開発した。

【社会的な背景】

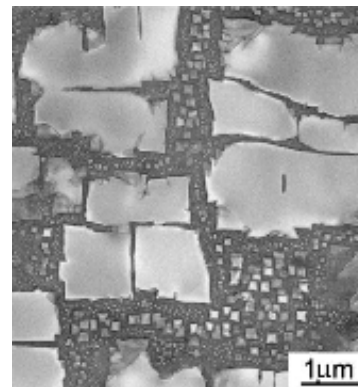
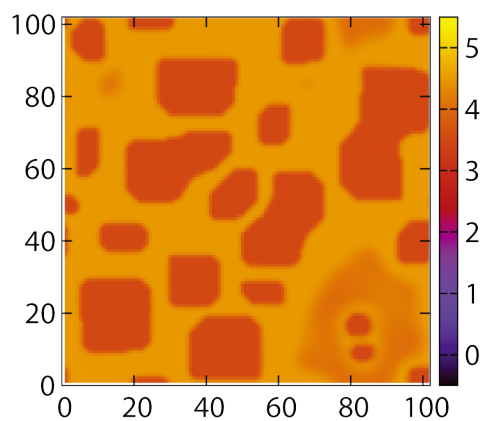
現代社会では、理論設計指針に基づく効率的な新材料生産に導く技術の創生が望まれている。特に、材料理論の殆どが実験・観察結果から導き出された現象論のため、ナノスケールの信頼性の高い第一原理計算に立脚したマルチスケールシミュレーション技術を開発して、第一原理計算を材料の機械的特性や合成技術に繋げる成果に期待が集まっている。

【今後の展開】

本手法は多元合金に応用可能である。今後は鉄鋼材料やその他の多元合金の第一原理フェーズフィールドシミュレーションにより、微細構造と局所応力分布の組成比依存性を計算し、それぞれの特徴を明らかにしていく予定である。これにより、今まで経験則でのみ議論されてきた鉄鋼材料やその他の合金の本質が解明でき、強度や靱性、延性、塑性、軽量性などの必要な特性を最大限に実現できる合金をいち早く設計する理論予測技術となる。



NiAl 合金の様々な組成比 (Ni %) のシミュレーション結果 (1027 °C)



*D. Li et al., Intermetallics 16, 1317 (2008).

Ni 82% (Al 18%) の組成の場合のシミュレーション (左) と実験* (右)

【掲載論文】

題目 : A first-principles phase field method for quantitatively predicting multi-composition phase separation without thermodynamic empirical parameter
 著者 : Swastibrata Bhattacharyya, Ryoji Sahara, and Kaoru Ohno
 雑誌 : Nature Communications
 DOI : 10.1038/s41467-019-11248-z

【特記事項】

本研究は、文部科学省ポスト「京」重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」（CDMSI）および理化学研究所計算科学研究センターのスーパーコンピュータ「京」HPCI システム利用研究課題（課題番号: hp170268, hp180125）における成果である。

【用語解説】

（1）第一原理計算

物理の基本法則である量子力学に則り、多数の電子と原子核からなる物質の電子の状態を精密に予測する計算技術。扱う電子数を N とすると、高い計算精度と信頼性の場合の計算量は N の 3 乗に比例するため、スーパーコンピュータを用いても扱える原子数は千個程度が限界である。

（2）クラスター展開法

合金の構成元素を格子点上に配列する方法は無限に多く、全てを扱えないため、合金全体を数個の原子のクラスターに分割し、1 個のクラスター内の原子配置のみを扱い、そのセルが周期的に配列していると仮定する近似法。4 個の原子で構成される四面体近似を用いるのが一般的である。

（3）ポテンシャル繰り込み理論

温度が高くなると原子が格子点位置からずれる効果が重要になるので、クラスター展開法を直接用いて第一原理計算から合金の状態を調べると、相転移温度を数 100K も過大評価してしまう。本研究グループは、格子間隔より短い長さのスケールの原子変位の自由度を統計力学的に消去し、局所自由エネルギーを求める「ポテンシャル繰り込み理論」を提案し、この問題を解決した。

（4）フェーズフィールド法

マイクロメートル（1mm の千分の 1）のスケールでの合金の微細構造組織を計算機シミュレーションで扱うための理論計算手法。従来法はランダウの自由エネルギー展開式を用いて濃度や秩序度などの連続自由度を扱うため、得られる構造が実験に合うようにパラメータを決めていた。そのため、予測能力を持たない。本研究の「第一原理フェーズフィールド法」は質的に異なり、自由エネルギーの連続関数ではなく、第一原理計算から得られる階段関数を用いることで一切のパラメータを用いずに微細構造を予測することに成功した。

本件に関するお問い合わせ先

※研究内容については発表者にお問い合わせ下さい。

<発表者>

横浜国立大学 大学院工学研究院 教授 大野かおる

電話 045-339-4254 Mail ohno@ynu.ac.jp

物質・材料研究機構 構造材料研究拠点 主幹研究員 佐原亮二

電話 029-859-2207 Mail sahara.ryoji@nims.go.jp

<機関窓口>

横浜国立大学学長室広報・渉外係 電話 045-339-3027

物質・材料研究機構広報室 電話 029-859-2026