

原子・電子シミュレーションによる材料科学研究

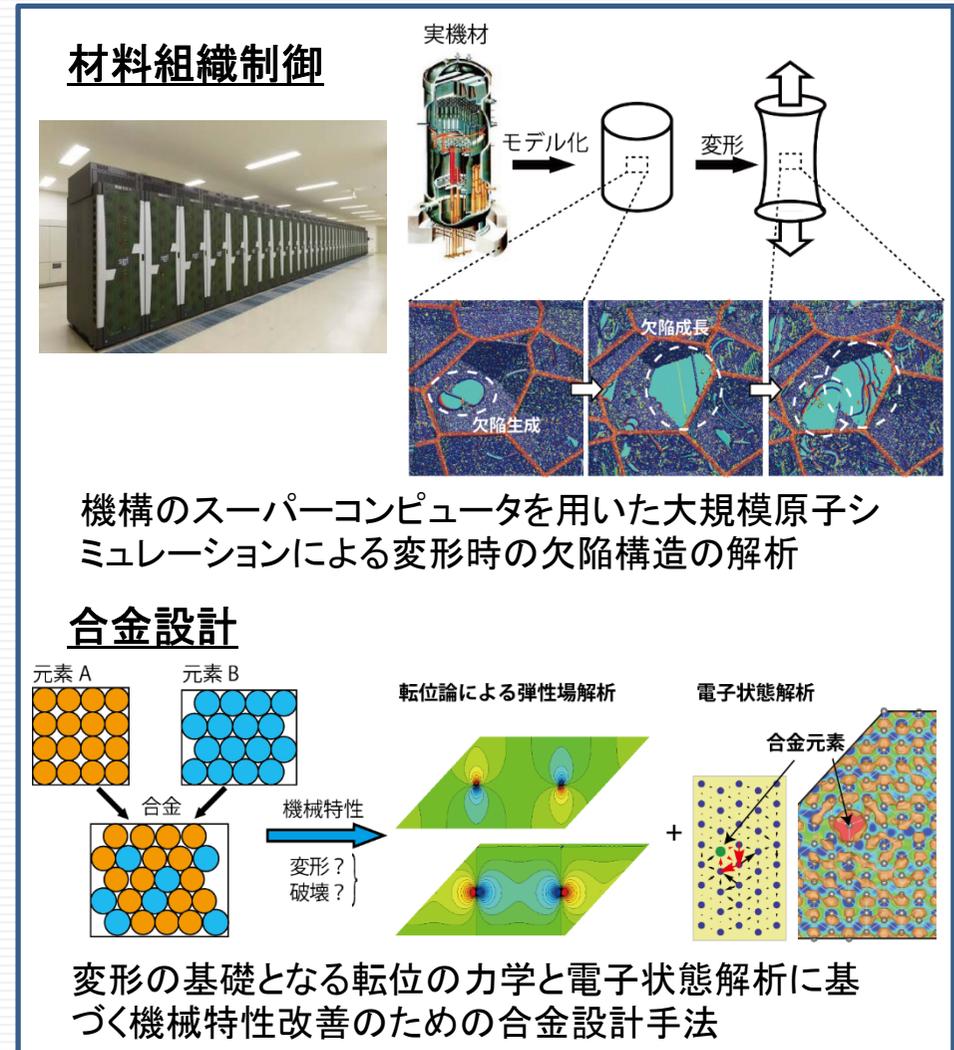
研究開発の目的

強さ・伸び・ねばさは構造材料における最も重要な性質であり、これらの機能を向上するために加工による「材料組織制御」と「合金化」が広く行われて来た。材料設計は経験的な知見に頼ることが多かったが、材料内部の微視的スケールの現象と理解が不可欠である。計算科学手法に基づく材料組織および合金化による材料評価手法の開発に注力し、欠陥構造の生成と発展を記述する大規模シミュレーション手法を開発するとともに、欠陥構造の電子構造解析に基づく機械特性向上のための合金設計手法を構築する。

成果貢献の内容

計算科学により構造材料の特性を予測・評価することを可能にし、新たな材料開発やコストの低減に貢献すると同時に機能向上のための材料設計に重要な役割を担うと期待される。

- T. Tsuru, H. Somekawa and D. C. Chrzan, Acta Mater. 151 (2018), 78.
- 都留智仁, までりあ, 56-1 (2017), 5.
- T. Tsuru, Physical Review Materials, 1 (2017), 033604 (Editors' Suggestion).
- T. Tsuru, Y. Aoyagi T. Shimokawa, Mater. Trans., 57 (2016), 1476.
- T. Tsuru, Y. Shibutani and T. Hirouchi, AIP Advances, 6 (2016), 015004.
- T. Tsuru and D. C. Chrzan, Scientific Reports, 5 (2015), 8793.



計算科学に基づく材料研究の枠組み

材料の研究開発

欠陥力学

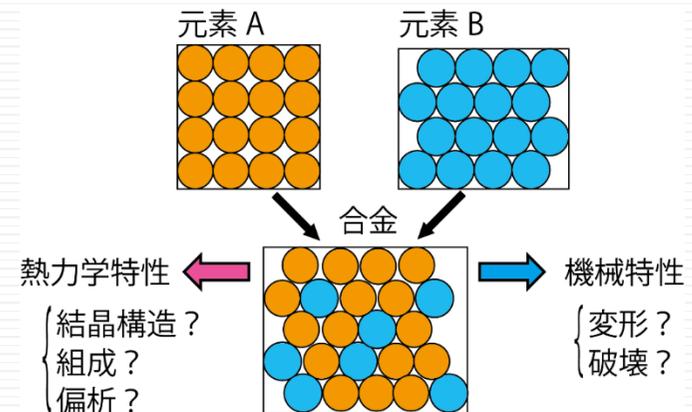
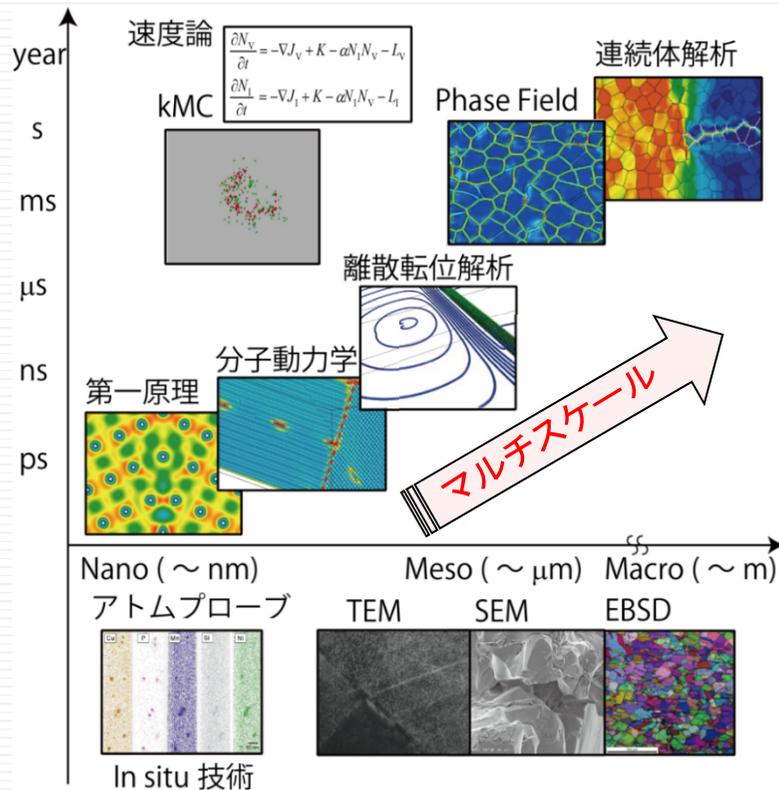
マイクロ～マクロの
集団欠陥挙動

合金設計

熱力学・
力学特性

マルチスケール・マルチフィジクス

マテリアルズ・インフォマティクス



物理的背景

メカニズム

データ駆動研究

元素、組成、構造、
諸々の物性