

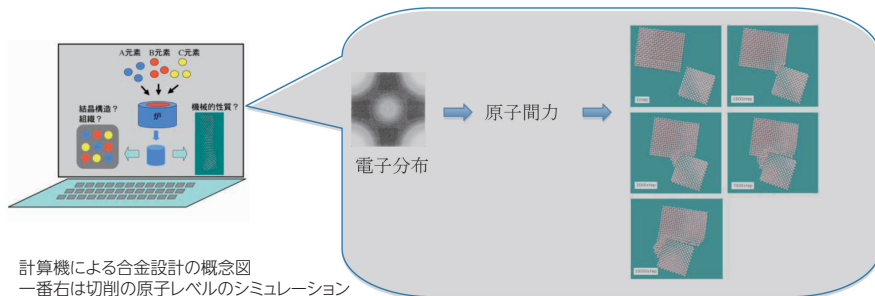
# 計算機による合金設計技術の開発



## 研究概要

キーワード 合金設計 / 第一原理計算 / 分子動力学法

合金(金属材料)は成分がわずかに変化するだけでも特性が大きく変化することがある。ユーザのニーズに応じた性質を持つ合金成分や熱処理条件を提案することが合金設計であり、近年開発コストを削減するために計算機による合金の開発手法が注目されている。本研究では、新しい合金を計算機上で設計する計算機シミュレーション技術を開発することを目的として、右記の項目について研究を行っている。



計算機による合金設計の概念図  
一番右は切削の原子レベルのシミュレーション

- ①第一原理に基づき電子レベルで合金の構造、熱的性質、機械的性質、磁性を評価する技術
- ②分子動力学法により原子レベルでの相変態、変形、破壊などの動的な性質を評価する技術
- ③第一原理に基づく原子間相互作用を分子動力学に効率よく取り入れる方法

## 今後の展開やメッセージ

合金の結晶構造や磁性を予測する計算コードを開発しています。これを用いて低磁化率合金の設計や水素脆化機構の解明に取り組んでいます。これからも様々な応用事例に取り組みたいと考えております。是非、お気軽にお問い合わせください。

## 研究者情報



高野 則之 教授・博士(工学)

工学部 機械工学科  
所属研究所：医工融合技術研究所(所長)、  
高信頼理工学研究センター、  
先端材料創製技術研究所

研究者情報URL

<https://www.kanazawa-it.ac.jp/kyouinroku/a/JBAB.html>  
<https://researchmap.jp/read0032014>  
<https://www.kanazawa-it.ac.jp/tlab/>