

第31期Cammフォーラム2月本例会
2018/2/2 at 東京・表参道「アイビーホール」

第一原理計算と熱力学を組み合わせた組織 形成予測

格子欠陥について最近の研究から

西谷 滋人

情報科学科, 関西学院大学

第19期Cammフォーラム1月例会
2006年1月13日(金)
東京「虎ノ門バストラル」

第一原理計算による自 由エネルギー計算

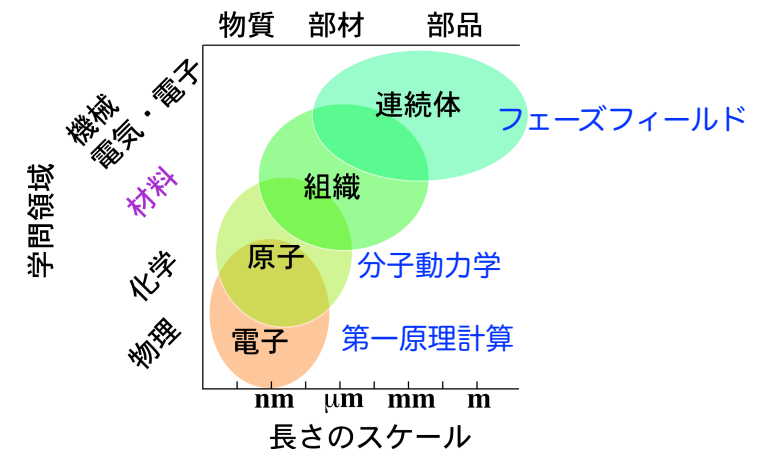
関西学院大学
理工学部情報科学科教授
西谷 滋人



- ・ 講演日: 2006年1月13日/19期
- ・ 演題: 「第一原理計算による自由エネルギー計算」
- ・ 固体物性の有限温度シミュレーションにおいては, 熱振動の自由エネルギーと配置のエントロピーを分離して取り扱うことが可能である. これによって第一原理計算をもちいて, 精度よく自由エネルギー変化を求めることが可能である. ...析出現象の核生成の活性化エネルギーを第一原理計算により直接求めた結果を...
- ・ 1988京都大学金属加工学科, 急冷凝固, 準安定平衡.
- ・ 1988-1995 レーザー照射, 金属間化合物
- ・ 1991-1993 Oxford大材料学部D.G.Pettifor
- ・ 材料の計算機シミュレーションの研究に従事
- ・ 2004- 関西学院大学理工学部情報科学科教授



マルチスケール・シミュレーション



組織制御に必要なデータ, 計算

	連続体 モデル	経験データ (材料レベル)	分子動力学 (原子レベル)	第一原理計算 (電子レベル)
熱力学	入力	◎	入力	?
拡散	入力	◎	○	可能
界面エネルギー	入力	×	入力	◎
歪	入力	○	入力	?
熱膨張	入力	△	入力	○
核生成	×	○	?	?
成長	◎	○	△	×

◎,○,△,×:データ, シミュレーション結果の信頼性の指標.

Today's agenda...

- 材料の計算・研究での
 - 視点移動, 手法変更
 - generalなモデル vs specificな対象
 - 平衡 vs 速度
- Fe-Cu系の核生成
 - 核生成の自由エネルギー, 添加元素, 空孔
 - キネティックMC (速度論との接続), 熱振動
- SiCの液相成長
 - 凝固, 準安定平衡, 振動計算の失敗例
- Mg系合金のLPSO相の形成過程
 - 熱振動計算が動機, キネティックMC
- 小傾角粒界の粒界エネルギー
 - 転位論?

general vs specific,
OK or finite temp.
slow or fast

Researches going on Team Nishitani

