最近の研究

鉄の相変態および界面諸物性に対する 分子論的アプローチ

1. はじめに

材料プロセスにおける組織形成過程の理解のために,原 子・分子レベルでの粒界や界面諸現象に関する知識の蓄積が 不可欠である.長年にわたる実験的アプローチに加え,近 年,分子レベルでの数値解析手法が開発されつつある.ここ では,原子・分子レベルの数値計算手法の一つである古典分 子動力学法の概要を説明し,組織形成過程に関連した固液相 変化や相変態過程での界面・粒界近傍原子の挙動を取り扱っ た数値計算例を紹介してみたい.具体的には,固液界面での 融解・凝固過程,ナノ微粒子での融点のサイズ依存性,対称 傾角粒界の粒界エネルギーとその温度依存性,鉄 fcc-bcc 変 態における界面速度の結晶方位依存性等の諸現象に対する最 近の研究結果を紹介し,分子動力学法計算が持つ長所・短所 について考えてみたい.

2. 分子シミュレーション

原子・分子レベルの数値計算といっても、その計算手法は 多岐に渡る⁽¹⁾. 化学反応をより正確の再現するために、電子 状態を厳密に計算するほど、取り扱える原子数および時間ス ケールが限られるというジレンマがあり、その目的によって 適切な手法を選ばなくてはいけない.動力学に着目した主な 手法としては、電子の波動関数を時間依存の問題として解く 時間依存密度汎関数法、定常の密度汎関数法に原子の動力学 を含めたカー・パリネロ法、第一原理計算の行列要素の一部 分を経験的パラメータで与えて簡略化したタイトバインディ ング分子動力学法、原子間相互作用をポテンシャル関数とし て与える古典分子動力学法などがある.順に原子間相互作用 の精度は劣るが、計算負荷は軽くなり、取り扱える原子数と **澁田**靖*

時間スケールが大きくなる.本稿では,長時間,大規模な計 算が可能な古典分子動力学法を用いた計算例を紹介し,その 長所と短所について議論したい.

古典分子動力学法では,得られる計算精度は原子間相互作 用を表すポテンシャル関数に依存する.一般的にポテンシャ ル関数は,二体(ペア)ポテンシャルと多体ポテンシャルに分 類される.二体ポテンシャル *U_{ij}*を用いると,以下のように 全エネルギー*U*を二原子間の距離*r_{ij}*のみで記述でき,取り 扱いが容易である.

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} U_{ij}(r_{ij}) \tag{1}$$

代表例として, Lennard-Jones ポテンシャル⁽²⁾や Morse ポ テンシャル⁽³⁾が挙げられる. 鉄やその他の遷移金属に関して Morse ポテンシャルのパラメータが提案されているが⁽⁴⁾, 二体ポテンシャルでは,弾性定数に関して Cauchy の関係 ($C_{12} = C_{44}$)を満たしてしまうことや(遷移金属の実験値は $C_{12} \neq C_{44}$),表面や欠陥での振舞いを正しく表現出来ないなどの 問題が知られている⁽⁵⁾. そこで,多体効果を記述できるポテ ンシャルの提案がなされ,遷移金属に関しては,現在では原 子挿入法(Embedded Atom Method, EAM)⁽⁶⁾が主流となっ ている.

EAM では、全エネルギー Uは二体項(クーロン相互作用) V_{ij} と電子密度 ρ_i の汎関数からなる埋め込み関数 Fの項で記 述される.

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i} F(\rho_i)$$
 (2)

$$\rho = \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}) \tag{3}$$

電子密度 p_i は、原子iを除く近傍の原子が原子iの位置に作る電子密度であり多体的な効果を記述できる.具体的な関数形については、Daw と Baskes によるオリジナルの EAM⁽⁶⁾

 ^{*} 東京大学助教;大学院工学系研究科マテリアル工学専攻(〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)
Numerical Approach to the Phase Transformation of Iron and Related Properties at the Interface by Molecular Simulation; Yasushi Shibuta(Department of Materials Engineering, The University of Tokyo, Tokyo)
Keywords: *molecular dynamics simulation, iron, phase transformation, interface, kinetics* 2008年9月2日受理

に始まり、多元系への拡張が容易な generalized GEAM (GEAM)⁽⁷⁾や、角度依存を考慮した Modified EAM (MEAM)⁽⁸⁾などが開発されている.より精度が高いポテン シャル関数になるにつれ、関数系が複雑になり、計算機負荷 も大きくなるというジレンマがここでも存在する.また Finnis-Sinclair (FS)ポテンシャル⁽⁹⁾は、EAM と同様な全エ ネルギーの記述を取り、簡便な関数形と、短距離相互作用の みで bcc 金属の物性を良好に再現できることから、頻繁に 用いられてきた.本稿で紹介する計算も、簡便ながら bcc 金属の物性を良好に再現できる FS ポテンシャルを採用して いる.その他、ポテンシャル関数についての詳細は文献(1) を参考にしていただきたい.

以下の章において,FSポテンシャルを用いた古典分子動 力学法による固液界面での融解・凝固過程,ナノ微粒子での 融点のサイズ依存性,対称傾角粒界の粒界エネルギーとその 温度依存性,鉄fcc-bcc変態における界面速度の結晶方位依 存性を解析した例を紹介する.本稿で紹介する分子動力学法 の具体的な計算手法としては,運動方程式の数値積分には蛙 飛び法を用い,時間刻みは 2.0 fs とした.系の温度制御には Berendsen 法⁽¹⁰⁾を用い,圧力制御には Andersen 法⁽¹¹⁾を用 いた.その他の詳細は,以下の章で適宜説明する.

FS ポテンシャルの融点の見積りと固液界面の挙 動⁽¹²⁾

分子動力学計算で用いられるポテンシャルパラメータは, 第一原理計算(もしくは実験値)で求めた格子定数,体積弾性 率、エネルギー曲線といった力学的特性にフィッティングす る形で構築されるのが一般的である.そのため融点等の熱力 学的特性までカバーしていないことが多く、温度の定量的議 論には注意を要する. そこで始めに, FS ポテンシャルのバ ルクの融点を以下の方法で算出した⁽¹²⁾.鉄原子20500個を 体心立方格子(bcc)構造に配置した周期境界条件セルを, 1000 K および 4000 K で, NVT 一定の条件で 100 ps 熱緩 和し、固相および液相の構造を得た.これを図1(a)に示す ように(100)bcc 面を介して結合させたものを初期構造とし, 様々な制御温度で NPT 一定の条件で 50 ps の間熱緩和し た. なお、周期境界条件の為、固液界面はセルの中心と端の 二箇所に存在している. さらに温度制御を止めて(NPH 一 定の条件), 950 ps の間緩和計算を行った. 初期制御温度が 融点より低い場合、凝固が起こり固液界面は液相側に移動す る(図1(b)). その際, 潜熱の放出により系の温度が上が る.一方,初期制御温度が融点より高い場合,融解が起こり 固液界面は固相側に進行する(図1(c)).その際,潜熱の吸 収により系の温度が下がる. 最終的にある一定の温度で収束 し、これを融点とみなすことができる. FS ポテンシャルを 用いた bcc 鉄の場合,いずれの初期温度からでも 2400±10 K に収束した⁽¹²⁾.よって,FS ポテンシャルの bcc 鉄のバル ク融点はおよそ2400Kと見積られ、実験値1808Kと30% 程度のずれがあることが分かった.温度に関して直接的に実 験と比較することは FS ポテンシャルを用いる限り困難であ



図1 固液界面を有するバルク系における融解・凝固過 程.(a)初期条件.(b)融点より低い場合.(c)融 点より高い場合.

る.本稿では粒界近傍原子の挙動の温度依存性に関しては, 上記で求めた融点で規格化した温度, $T_N = T/2400$ で表現し た.また,FSポテンシャルのA3およびA4変態点は明確 に定義できないためfcc-bcc変態過程についての温度依存性 などの議論はしない.これらの問題点は,個々の原子間の相 互作用のみをパラメータとする分子論的手法に特有の問題で あり,多数の原子が集まって初めて定義できる物性値(融点 や変態点)を陽的なパラメータとする現象論的数値解法と大 きく異なる点である.

4. 鉄ナノ微粒子の融解・凝固過程⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾

次に、半径1.5-5.0 nmの鉄ナノ微粒子について、その融 解・凝固過程の振舞いや融点のサイズ依存性について検討し た.具体的な計算方法⁽¹⁴⁾として、まず原子数 2n³ 個(n=10-25)の鉄 bcc 結晶を真空下で、1 ns の間 3000 K で加熱し、 様々な大きさの液滴を準備する.これを 3000 K から 0 K ま で 2 K/10 ps の割合で冷却し、液滴からの凝固過程を観察し た.さらに得られた鉄ナノ微粒子を 2 K/10 ps の割合で 3000 K まで再加熱し、鉄ナノ微粒子の融解過程を観察し た.図2 に凝固・融解過程の31250原子(n=25)からなる鉄 ナノ微粒子の断面図を示す、図中、赤色の原子は bcc 配位 を持つ原子、白色の原子はそれ以外を示す、凝固過程では、 液滴の表面近傍で初期核が発生した後、凝固が液滴全体に伝 播していく様子が観察された、一方、融解過程では、鉄ナノ



図2 31250原子からなる鉄ナノ微粒子の凝固および融解過程.赤色の原子は bcc 配位をとる原子,白色の原子はそれ以外を表す.



図3 鉄ナノ微粒子の冷却および加熱過程における結 合揺らぎの二乗平均.

微粒子は表面から均一に融解していく様子が分かる.また融 解の直前では,固液共存のいわゆる表面融解(surface melting)の状態が確認された.

ナノ微粒子の凝固・融解温度は、それぞれ冷却・加熱過程 における結合揺らぎの二乗平均(Lindemann Index)⁽¹⁵⁾ δ を 調べることで確認できる.結合揺らぎの二乗平均は、

$$\delta = \frac{2}{n(n=1)} \sum_{i < j} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{\langle r_{ij} \rangle} \tag{4}$$

で表される. 〈〉は時間平均を表す. 図3に冷却・加熱過程 における原子数 $2n^3$ 個 (n=10-25)の鉄ナノ微粒子の結合揺 らぎの二乗平均を示す. 結合揺らぎの二乗平均は温度が上昇 するにつれて大きくなるが, 固相から液相に相転移する際に 不連続的に変化する. よって図3において δ が不連続に変 化する温度から,各サイズの鉄ナノ微粒子の凝固および融解 温度(融点)が分かる. この結果より,鉄ナノ微粒子の凝固温 度は融点より 500-1000 K も低いことが分かった. これは, 冷却過程では核生成障壁を考慮するため過冷却が起こるが,



図4 鉄ナノ微粒子の融点および核生成温度のサイズ 依存性.

加熱過程では障壁がないため過加熱が起こらず平衡融点で融 解するという実験的経験と一致している.なお,結合揺らぎ の二乗平均の他に,比熱からも融点を見積ることができ る⁽¹⁴⁾.凝固・融解は潜熱を伴う一次の相転移であり,相転 移温度において比熱はピークを示す.比熱がピークを示す温 度は結合揺らぎの二乗平均が不連続になる温度と対応してお り,これら二つの指標より,鉄ナノ微粒子の融点を定義でき る.

図4に,鉄ナノ微粒子の融点および核生成温度のサイズ依存性を示す.融点は微粒子のサイズが小さくなるにつれ単調減少するが,核生成温度については,基本的にはサイズの減少とともに低下するが,過冷却液滴中での初期核発生確率との関連から,温度依存性に多少偏差が生じているのが特徴である.なお,融点の低下は,半径の逆数に比例しており, Pawlow モデル⁽¹⁶⁾と合致している.

5. 鉄対称傾角粒界の粒界エネルギーと予融解⁽¹²⁾⁽¹⁷⁾

鉄対称傾角粒界に関して、その粒界エネルギーの傾角依存 性についての計算例は数多く存在する(18)-(20)が、それらの ほとんどは0Kで静的に評価したものである.一方,実験 においては、高温下で界面の移動が促進された状態で、複数 の界面の熱力学的な釣り合い状態から粒界自由エネルギーを 算出している.静的なエネルギー計算による粒界エネルギー にはエントロピー項の効果が含まれておらず、厳密には実験 値と直接対応していない.しかし,数値計算によりエントロ ピー項の効果を検討することは、手法、計算機能力の両面に おいて困難であるのが現状である.本稿では,有限温度下 で、対称傾角粒界を有する系を緩和し、粒界を有しない同原 子数の系との内部エネルギー差から, 粒界エネルギーを算出 した例⁽¹²⁾を紹介する.この方法を用いると、粒界エネルギ ーの温度依存性、および高温下における界面近傍原子の挙動 等が可能である.しかし、エントロピー項の効果を検討する ためのツールとしての必要十分性は満たしておらず、さらな る物理的考察が必要な事を明記しておく.

図5に,鉄bcc構造において、〈100〉,〈110〉,〈111〉,〈111〉,〈112〉方位を回転軸とした対称傾角粒界の粒界エネルギーの 傾角依存性を示す.図中,粒界エネルギーはステレオ極点図 に投影された面指数上に三次元的に表現している.粒界エネ ルギーは有限温度下で導出したが、FSポテンシャルの融点 が実験値とずれているため,ここでは3章で求めたバルク の融点で規格化した温度, $T_N = T/2400$ で表現している.そ の他,詳細な計算条件は文献(12)をご参考いただきたい. 粒界エネルギーは傾角に大きく依存し,特に(112) Σ 3面で 大きなエネルギーカスプが確認された.一方,同じ Σ 値を 持つ(111) Σ 3面ではエネルギーカスプは確認されなかっ た. また(221) Σ 9, (310) Σ 5, (210) Σ 5 面などに小さなエネル ギーカスプが確認された. これらの傾向は,0K下での静的 なエネルギー計算に導出された粒界エネルギー⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾と合致 している.

有限温度下での分子動力学法を用いる利点は,高温下での 界面近傍の原子の挙動を直接観察できることである. 図 6は,(111) Σ 3 および(112) Σ 3 面の粒界を含む bcc 結晶を, 規格化温度0.416および0.916で 1000 ps 緩和した際の粒界近 傍原子の軌跡を示したものである. 図中の軌跡は,500 ps から1000 ps 間の10 ps 毎の原子位置をたどったものであ る.規格化温度0.416では,どちらの粒界面においても,原 子が平衡位置近傍で振動し,対称傾角粒界の形を保っている が,規格化温度0.916では,(111) Σ 3 面近傍で構造の乱れが 観察された.これは一種の予融解(premelting)状態と考えら れ,高温下において,粒界エネルギーが上昇する因子である と考えられる⁽¹²⁾.予融解は図5で計算されたほとんどの粒



図5 α(bcc)鉄対称傾角粒界の粒界エネルギーの傾角 依存性.



図 6 (111) 23 および (112) 23 面の粒界を含む bcc 結晶を,規格化温度0.416および0.916で緩和した際の粒界近傍 原子の軌跡.

界面で観察されたが、大きなエネルギーカスプを示した (112)23面でのみ観察されなかった.また面心立方格子 (fcc)構造についても同様に、〈100〉、〈110〉、〈111〉、〈112〉 方位を回転軸とした対称傾角粒界の粒界エネルギーを求めた が、大きなエネルギーカスプを示した(111)23面でのみ、 高温下で予融解が確認されなかった⁽¹²⁾.このような、融点 近傍での粒界近傍原子の振る舞いの傾角依存性は、実験で優 先的に観察される方位や、複数の界面の釣り合い状態での方 位関係などと密接に関連しており、興味深いトピックの一つ である.

6. 鉄 fcc-bcc 変態における界面のキネティクス⁽²¹⁾

鉄 fcc-bcc 変態過程における界面のキネティクスやその結 晶方位依存性については,長年にわたる実験的研究およびそ れを裏付ける理論により,多くの知識が蓄積されてき た⁽²²⁾⁽²³⁾.そのような背景のもと,分子スケールの数値解析 が新たに貢献できる方法を考えてみたい.これまでに何度か 述べてきたように分子動力学法の利点は,界面や粒界近傍の 原子の挙動を直接観察できる点であり,*in situ* で見ること が困難な実験に対し有効な方法である.固相変態過程に関 し,実際に界面のキネティクスを分子スケールで議論するこ とは実験的には未だ困難である.そこで,ここでは様々な方 位の鉄 fcc-bcc 界面を有する系を熱緩和し,fcc-bcc 異相界 面近傍の原子の挙動を直接観察することで,界面のキネティ クスを検討してみた.

bcc と fcc の異相界面としては、 $(110)_{bcc}//(111)_{fcc}$ の関係 を満たす界面のうち、 $[001]_{bcc}//[110]_{fcc}$ を満たす西山-Wasserman (N-W)方位関係、 $[111]_{bcc}//[110]_{fcc}$ を満たす Kurdjumov-Sachs(K-S)方位関係が良く知られている.K-S 方位関係は N-W 方位関係から $[111]_{fcc}$ 軸に対し5.26°回転さ せた関係にあたる.ここでは、N-W,K-S方位関係およ び、これらの中間であるK-S方位関係から $[111]_{fcc}$ 軸に対 し2.00°,4.00°だけ回転させた方位関係の4つの条件に対 し、これらの界面を有する系を作成し、系全体を規格化温度 0.5で熱緩和させた場合の界面の移動速度およびその優先方 位について比較した.

図7(a)に,鉄47640原子で構成されるN-W方位関係の界 面を有する系の熱緩和過程を示す.図中,界面の伝播過程を 見やすくするためにbcc配位の原子のみを表示している. 茶色の原子がバルクのbcc配位(考慮している原子の隣も bcc配位を満たす場合)を,橙色の原子がbcc以外の原子 (fcc等)と接するbcc配位の原子である.N-W方位関係の 場合,界面が初期配置の方位関係を保ったまま,平面的に fcc側に進行する様子が確認された.界面ではレッジとよば れる階段状の乱れはあるものの,N-W方位関係を持った界 面は基本的に平面状に伝播していくことが分かる.図7(b) に99910原子で構成されるK-S方位関係の界面を有する系 の熱緩和過程を示す.K-S方位関係の場合,最初のうちは N-W関係同様,界面は平面的にfcc側に伝播するが,だん だん界面の乱れが大きくなり,途中で特定の方位に向かい針





図7 (a)西山-Wasserman 方位関係,(b)Kurdjumov-Sachs 方位関係にある fcc-bcc 異相界面を有する 系の熱緩和過程.



図8 西山-Wasserman (N-W) および Kurdjumov-Sachs(K-S)方位関係における整合領域の分布の 違い.

状に優先的に成長した.このスケールで針状成長の速度を正確に算出することは難しいが,針状成長の先端位置から見積ったおおよその速度は,平面成長の速度に比べ約10倍早くなっている.針状成長は,K-S関係方位,およびN-Wから4.00°回転させた界面にのみ観察され,N-WおよびN-Wから2.00°回転させた界面では確認されなかった⁽²¹⁾.また,各方位関係における平面成長中の界面伝播速度を比較するとN-W方位関係から[111]_{fcc}軸に対する回転角度が大きくなるほど,界面伝播速度が遅くなることが分かった⁽²¹⁾.

図8にN-WおよびK-S方位関係を満たすfcc-bcc界面 の原子配列を示す.N-W方位関係では,界面原子の整合性 の高い部分(図中青点線で囲んだ部分)が網目状に,K-S方 位関係では整合性の高い部分が縦長に現れ,N-WとK-S方 位関係の間で,整合領域の分布に違いがあることが確認でき る.上記の熱緩和過程の計算では,整合性の高い部分から優 先的に,bcc配位からfcc配位へと変化していることが確認 されており⁽²¹⁾,K-Sでは縦長な整合性の高い部分が他の部 分に比べ優先的に変態が進行するため,途中で針状成長に変 化したと考えられる.一方,N-W方位関係では整合性の高 い部分が網目状に分布しているため,これがレッジ構造を含 む平面成長の原因になっていることが考えられる.

以上,鉄fcc-bcc変態過程のシミュレーションは,使用し たポテンシャルの信頼性等の問題から現段階では定量的な議 論をすることは難しいが,実験的に直接観察することが難し い領域に新しいアイデアを提供してくれることは間違いな い.現在,固相変態過程を正しく再現できるポテンシャル関 数を,ベインの格子変形パスや各相の熱膨張率等に着目しな がら開発中であり,近いうちに定量的な議論が可能になると 信じている.

7. おわりに

以上,駆け足ではあるが,古典分子動力学法を用いた鉄の 界面諸現象に対する計算例として,固液界面での融解・凝固 過程,ナノ微粒子での融点のサイズ依存性,対称傾角粒界の 粒界エネルギーとその温度依存性,鉄 fcc-bcc 変態における 界面速度の結晶方位依存性を紹介した.紙面の都合上,計算 手法や議論の細部まで述べることができなかったので,詳細 は個々の文献を参考にしていただきたい.

一般に,古典分子動力学法は,電子物性論に基づく第一原 理計算に比べ厳密性が劣る反面,いわゆる現象論的数値解法 のように,実験と直接比較できるほど時空間スケールは大き くなく,その「帯に短し襷に長し」的な側面を欠点として指 摘する声は多い.しかし,私個人的には,これを逆手にとり 積極的にその側面を利用することで,各計算手法が学問的に 独立に発展を続けることから生じる「ニッチ市場」を新たに 開拓できると考えている.ここで紹介した例はそれらの試み の一環であり,固液相変化や固相変態過程における界面や粒 界近傍の原子の挙動を数値解として提供することで,キネテ ィクスに関連した実験や理論の解釈のお手伝いができれば幸 甚である. ここで紹介した結果は、東京大学の鈴木俊夫先生ご指導の 下、大学院生の鷹本真弥君(現:トヨタ自動車株式会社)、立 山真司君のご尽力により得られたものであり、紙面を借りて 深く御礼申し上げます.また、本研究に関してご指導やご助 言をくださった、東京大学の長汐晃輔先生、熊谷知久先生、 原祥太郎先生、ケンブリッジ大学ジェームズ・エリオット先 生に厚く御礼申し上げます.

本研究の遂行にあたり,科学研究費補助金・若手研究(A) (No. 18686017),萌芽研究(No. 20656036)および文部科学 省「ナノテクノロジー・材料を中心とした融合新興分野研究 開発研究」複層鋼板プロジェクトの支援を受けました.

文 献

- S. Yip (Ed.): Handbook of Materials Modeling, Springer, Dordrecht, (2005), 449–1068.
- $(\ 2\)\$ J. E. Lennard–Jones: Proc. Phys. Soc., $43(1931),\ 461–482.$
- (3) P. M. Morse: Phys. Rev., 34(1929), 57-64.
- (4) L. A. Girifalco and V. G. Weizer: Phys. Rev., **114**(1959), 687–690.
- (5)川添良幸,三上益弘,大野かおる:コンピュータ・シミュレ ーションによる物質化学,共立出版,(1996),65-66.
- (6) S. Daw and M. I. Baskes: Phys. Rev. B, ${\bf 29}(1984),\,6443\text{--}6453.$
- (7) X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson, D. J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A. K. Petford–Long, G. D. W. Smith, P. H. Clifton, R. L. Martens and T. F. Kelly: Acta Mater., 49 (2001), 4005–4015.
- (8) M. I. Baskes: Phys. Rev. B, 46(1992), 2727–2742.
- (9) M. W. Finnis and J. E. Sinclair: Philo. Mag. A, 50(1984), 45– 55.
- (10) H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola and J. R. Haak: J. Chem. Phys., 81 (1984), 3684–3690.
- (11) H. C. Andersen: J. Chem. Phys., 72(1980), 2384–2393.
- (12) Y. Shibuta, S. Takamoto and T. Suzuki: ISIJ Int., 48(2008), 1582–1591.
- (13) Y. Shibuta and T. Suzuki: Chem. Phys. Lett., 445 (2007), 265– 270.
- (14) Y. Shibuta and T. Suzuki: J. Chem. Phys., 129(2008), 144102.
- (15) F. A. Lindemann: Phys. Z., **11**(1910), 609.
- (16) P. Pawlow: Stoechiom. Verwandtschaftsl., 65(1909), 1.
- (17) Y. Shibuta, S. Takamoto and T. Suzuki: Comp. Mater. Sci., doi: 10.1016/j.commatsci.2008.07.013.
- (18) D. Wolf: Philo. Mag. A, 62(1990), 447.
- (19) 中島英治·竹内宗孝:鉄と鋼,86(2000),357-362.
- (20) A. P. Sutton and R. W. Balluffi: Interfaces in Crystalline
- Materials, Oxford University Press, Oxford, (1995), 384–386. (21) S. Tateyama, Y. Shibuta and T. Suzuki: Scripta Mater., **59**(2008), 971–974.
- (22) 谷野 満, 鈴木 茂:鉄鋼材料の科学 鉄に凝縮されたテク ノロジー,内田老鶴圃, (2001).
- (23) 榎本正人:金属の相変態 材料組織の科学入門,内田老鶴 圃,(2000).



満田 靖

- 2004年4月 日本学術振興会特別研究員(PD)
- 2005年4月 東京大学大学院工学系研究科助手(2007 年4月より助教)
- 専門分野:分子動力学,計算材料学,相変化を伴う諸 現象の数値解析
- 鉄固相変態からカーボンナノチューブ生成過程まで,
- 原子分子レベルでの解釈が求められる幅広い現象につ いて,理論(theoretical)でなく数値的(numerical)に アプローチする手法を模索する日々.

URL: http://www.mse.t.u-tokyo.ac.jp/shibuta
