

第一原理計算を利用した材料研究

国立研究開発法人産業技術総合研究所
エレクトロニクス・製造領域 製造技術研究部門
センシング材料研究グループ 研究員

平田 研二

1. はじめに

私は2018年3月に九州工業大学大学院生命体工学研究科生命体工学専攻にて博士(工学)の学位を取得し、現在は国立研究開発法人産業技術総合研究所で研究員として勤務しています。これまでの研究について感じたことや、学んだことを述べさせていただきます。

2. これまでの研究内容

九州工業大学における学部時代は講義で接する機会の多かった状態図の研究がしたいと考え、4年次に大谷博司教授(現：東北大学多元物質科学研究所)のもとで状態図の熱力学解析に取り組みました。状態図計算法はCALPHAD(CALculation of PHase Diagrams)と呼ばれ、実験値を参考に熱力学パラメータを決定し、相平衡を計算することが可能になります。一方で、実験値が少ない合金系では熱力学パラメータの決定が困難となり、いまだに熱力学データベースが整っていない合金系もあります。私が取り組んだ合金系もその一つであり、少ない相平衡の実験値を補完するために第一原理計算で求めた化合物の生成エンタルピーをCALPHAD法に導入していました。この研究で初めて第一原理計算を知ったことがきっかけとなり、後述する博士課程での研究につながったのだと思います。

修士課程では実験の研究もしたいと考え東北大学大学院に進学し、貝沼亮介教授のもとでCo基ホイスラー合金のマルテンサイト変態に関する研究に従事しました。Co基ホイスラー合金では形状記憶合金の報告がほとんどなく未開拓の状態でしたが、私は幸運にもCo-Cr-Al-Si合金で初めての超弾性を見出すことができました(図1)⁽¹⁾。

現在では他のCo基ホイスラー合金でも形状記憶効果が発見され、応用へ向けた研究が取り組まれています。また、第一原理計算を利用する機会もあり、他のホイスラー合金の相安定性を評価したときに大変興味深い経験をしました。第一原理計算では基本的に結晶構造や構成元素の情報しか利用しませんが、その結果が見事に先行研究の実験結果と符合していたのです。当時の私には何の実験報告も参考とせず、実験結果を再現する結果を示したことが印象に残りました。このとき、第一原理計算が材料設計の強力なツールであり、計算予測しながら材料を開発する時代にあるのだと確信しまし

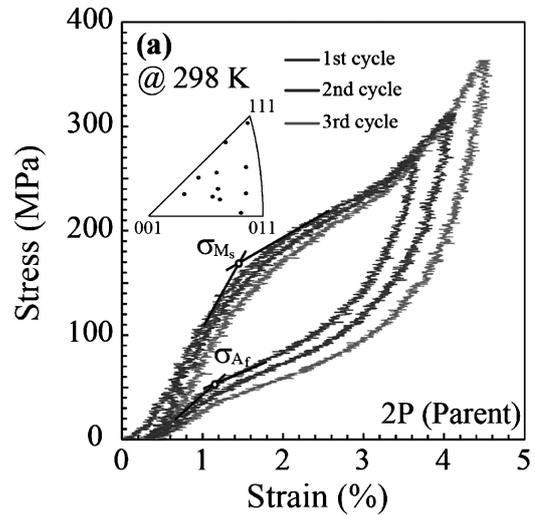


図1 室温におけるCo-Cr-Al-Si合金の圧縮試験結果⁽¹⁾。

た。修士課程修了後はメーカーに就職しましたが、もう一度、計算科学を利用して材料の研究がしたいと考え、博士課程に進学することにしました。

博士課程では、九州工業大学大学院の飯久保智准教授のもとで計算科学的な手法によるFe-Ti-S3元系状態図の作成や、鉄中の水素の拡散挙動を評価する研究に取り組みました。第一原理計算で求められる物性値は化学量論組成や絶対零度の条件下であるなど、材料特性として評価するには注意を要します。これらは第一原理計算の弱点と捉えられますが、多方面でその克服も盛んに試みられています。ここで、私の状態図計算の成果の一部としてNiAs型TiS化合物の熱的安定性を紹介します。この化合物ではこれまでにFeの固溶に関して相分離/全率固溶の相反する実験報告がありました。私は第一原理計算とクラスター展開・変分法により有限温度の自由エネルギーを計算し、TiS化合物にFeが全率固溶することを初めて明らかにしました。さらに、作成した熱力学データベースは実験値との整合性も良好で信頼性が高く、鉄鋼材料の材質予測への利用が期待できると考えています。

現在は産業技術総合研究所にて窒化物圧電材料の研究に携わり、第一原理計算などの計算科学的手法を利用して新規材料の開発に取り組んでいます。対象とする材料はこれまでの金属材料とは異なるセラミックスになりますが、今までの計算および実験の研究経験を活かし、新しい研究手法も取り込みながら精進していく所存です。

3. おわりに

学生生活を振り返ってみると本当に多くの方々に支えられて今の私が形成されていると思います。私を成長させて下さった九州工業大学および東北大学の先生方、研究室の先輩や同期、後輩の皆様には大変感謝しております。今後はこれまで培ってきた専門性をさらに深化・拡大させ、微力ながらも材料工学の発展に貢献していきたいと思ひます。

文 献

- (1) K. Hirata, X. Xu, M. Nagasako, T. Omori and R. Kainuma: J. Alloys Comp., **642**(2015), 200-203.
(2018年4月24日受理)[doi:10.2320/materia.57.392]
(連絡先: 〒841-0052 鳥栖市宿町807-1)