

# スパコン プロフェッショナル

Series Supercomputer Professionals

## No.13

日時：平成30年 **5月29日** (火)  
14:00～15:30

場所：金属材料研究所 2号館 1階ラウンジ  
※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

### 「第一原理フェーズ・フィールド法の提案」


横浜国立大学大学院工学研究院


**大野かおる** 教授



材料の巨視的性質の制御を目指して合金の微細組織を予測する先進計算技術の開発が望まれている。第一原理計算は高精度だが、計算時間が膨大で、典型的な  $10\mu\text{m}$  の長さスケールは扱えない。フェーズ・フィールド法は熱力学的、力学的な情報を含む物質パラメータにより微細組織を模倣するが、多くのパラメータは経験的で実験に合うように決めるため、新材料研究には信頼性を欠く。我々は第一原理に基づいて一切のパラメータを用いずに合金の組織構造を求める新手法を提案する。空間を微細グリッドに分割し、密度汎関数理論、クラスター展開、ポテンシャル繰り込みを用いて自由エネルギーを算出する。本手法は合金の局所組成を明確に区別できる、世界初のパラメータ不要の第一原理フェーズ・フィールド法であり、我々は 1300K での Ni-Al 合金の微細組織の発達の再現に成功した。結果は実験 Ni-Al 相図に精密に対応している。

■ 主催  **CCMS**  
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 計算材料学センター  
Center for Computational Materials Science

■ 協賛  計算物質科学  
人材育成コンソーシアム

 **CBSM**  
Challenge of Basic Science  
ポスト「京」萌芽的課題  
「基礎科学の挑戦」

■ お問い合わせ 計算材料学センター TEL : 022-215-2411 E-mail : ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp