



マルチスケールモデリング による材料開発



Kwansei Gakuin University

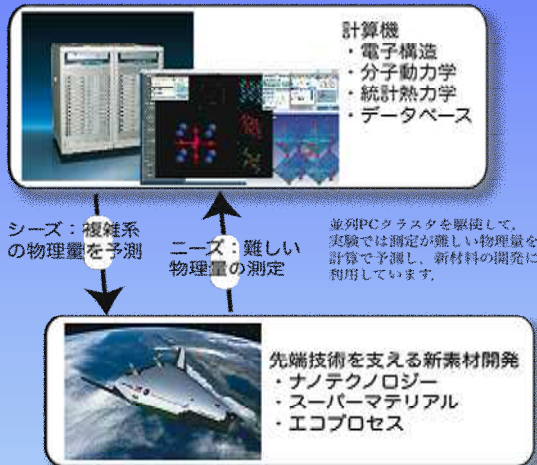
関西学院大学 工学部情報科学科 教授 西谷 滋人

キーワード

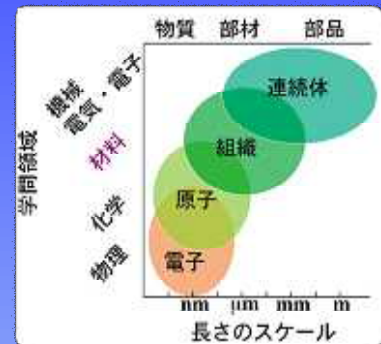
新規材料開発 コンピュータシミュレーション マルチスケールモデリング

研究の概要

試行錯誤の多い材料開発研究において、理論によって指針を得ることは、錬金術師以来の長年の夢であった。ナノテクから航空宇宙材料まで、現代の高性能な物性が要求される現実の新規材料開発においては、広いスケールにわたって複雑なシミュレーションが必要とされている。



マルチスケールモデリング



この研究では、量子力学・熱統計力学などの物理学的基礎理論と、状態図・転位論などの冶金学的な知識とを融合して、スーパーコンピュータによる大規模プログラムの開発・実行をおこない、ナノ構造物生成を予測、制御する手法の開発と、実際の工業材料への適用を目指している。

研究の応用分野

- 析出核生成自由エネルギー：次世代構造用材料開発のキーとなるFe中Cuの析出核生成自由エネルギーを第一原理計算により理論的に解明。
- Tiのbcc-hcp変態：同素変態を起こすTiの有限温度での電子自由エネルギーの精密計算。
- 状態図：新規デバイス材料の単結晶作成プロセスを準安定平衡状態図や原子レベルシミュレーションで解明。

関連業績（特許・文献）

- 西谷滋人, バルク中でのナノサイズ熱力学と相安定性 までりあ, 46巻3号(2007), pp.216-219.
- 特願2007-077439 単結晶炭化ケイ素の液相エピタキシャル成長方法、単結晶炭化ケイ素基板の製造方法、及び単結晶炭化ケイ素基板

研究室ホームページ

<http://ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/>

関西学院大学 研究推進社会連携機構

<http://www.kwansei.ac.jp/kenkyu/>

Tel. 079-565-9052 / Fax. 079-565-7910 E-mail: ip.renkei@kwansei.ac.jp