

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19053007

研究課題名（和文）マルチスケール手法によるナノ機能元素材料解析

研究課題名（英文）Nanodopant Analysis via Multiscale Numerical Method

研究代表者 鶴田 健二 (TSURUTA KENJI)

岡山大学・大学院自然科学研究科・准教授

研究者番号：00304329

研究代表者の専門分野： 計算材料科学

科研費の分科・細目： 材料工学・金属物性

キーワード： マルチスケール手法, ナノ材料, 格子欠陥, 機能元素, 構造・機能材料

1. 研究計画の概要

本研究課題では、大規模電子状態計算法、古典分子動力学法、粗視化粒子法、Phase-field法、FDTD法並びに異なる計算手法のハイブリッド化技術を高度化・汎用化させ、さらにそれらをシームレスに統合することにより、ナノ領域に局在する機能元素がマクロ物性に及ぼす影響を定量的に予測する新たな計算材料科学パラダイムを構築する。

2. 研究の進捗状況

開発目標とした計算手法の基盤形成の多くを達成し、領域内のナノ計測グループによる実験観察とのシームレスな連携解析が行えるレベルに到達した。個々のスケールでの成果は下記の通り：

(1)ハイブリッド密度汎関数法/古典分子動力学計算手法の高度化により、ダイヤモンド中の欠陥・転位の構造、特に高温下での転位芯の構造安定性に関する新たな知見を得た。さらに転位芯に偏析した水素原子挙動の解析を行い、転位芯内のパイプ拡散のための拡散障壁の見積もりに成功した。また、酸化物セラミックス中の部分転位芯を含む大規模構造の電子状態解析が可能になり、領域内の実験グループによる電子顕微鏡観測データとの詳細な比較を行えるようになった。

(2)粗視化粒子法の多階層化・ハイブリッド化の手法を高度化することで、これまでの単純なモデルシステムでの試験的適用から、半導体やセラミックスへの具体的な適用が可能

となった。

(3)Phase-field法の拡張・高度化を行い、新たに電磁界の方位成分を現象論的に取り入れる手法により、強誘電体の可逆的ドメインダイナミクス of Phase-field計算を行い、近年実験的に確認された熱処理によるチタン酸バリウムの誘電ヒステリシス制御の理論的再現に成功した。

(4)ナノ構造メタマテリアル設計のための並列FDTD計算コードを開発し、前述のプラットフォームへの移植を行った。また、メタマテリアル薄膜の積層構造におけるエバネッセント波増幅効果のシミュレーション、ならびにフォノンニック結晶による負の屈折現象の再現に成功した。

3. 現在までの達成度

②おおむね順調に進展している。

[理由] 開発目標とした各シミュレーション手法の高度化・高精度化と整備を行いつつ、具体的なアプリケーションへの適用を開始し、領域内のナノ計測グループによる実験観察とのシームレスな連携解析が行えるレベルに到達した。計算手法の基盤形成の多くを達成し、残るは原子レベルと粗視化レベルとの整合化、さらにはPhase-Field法による熱力学時間発展を可能とする支配方程式への接手法の開発であり、ほぼ計画通りに進捗している。

4. 今後の研究の推進方策

(1) ハイブリッド密度汎関数 (DF) 法/古典分子動力学 (MD 法汎用化と機能元素探索

これまでに開発・適用研究を行ってきたハイブリッド DF/MD 計算コードをより高度化し、遷移金属を含む偏析元素の電子状態計算を高精度で行えるように擬ポテンシャル計算を改良する。この高度化・汎用化により、本領域内の共通試料であるアルミナの転位芯を事例として、格子不整合領域に偏析させることによって機能化が期待できる元素の探索を行う。

(2) ハイブリッド粗視化粒子 (CGP) 法/古典分子動力学 (MD) 法汎用化と機能元素探索

これまでに開発・適用研究を行ってきたハイブリッド CGP/MD コードをより高度化し、2 元系固体材料およびそこに局在する機能元素の計算への適用を開始する。

(3) Phase-Field (PF) 法と MD 法との接合法の検討・開発

大規模 MD 計算によって計算される応力・歪分布を外力とする Phase-Field シミュレーションを行い、それに基づく機能元素の格子不整合領域への偏析分布を再び MD 計算へ汎用させる逐次型ハイブリッド PF/MD 法を開発し、その精度・適用性を検討する。

(4) 各スケール間ハイブリッド化手法の整備、統合計算プラットフォーム構築

こまでに開発した各要素技術の整備と汎用化を行い、19 年度に導入した PC クラスタシステムを拡張した 4 スケール統合計算システムを構築する。領域内他グループとの共通試料に対する解析に開発手法・計算システムを適用し、組織構造、偏析元素密度、局所電子状態などの直接比較を実施する。

(5) 課題研究総括

微視-巨視マルチスケール解析の総括として、各スケールの観点からの機能性発現因子の解明、ならびに機能設計指針の提案をまとめる。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 16 件)

① R. Kobayashi, T. Nakamura, S. Ogata, “A simple dynamical scale-coupling method for concurrent simulation of hybridized

atomistic/coarse-grained-particle system”, Int. J. Numer. Meth. Engng, Early View (2010). [査読有]

② K. Tsuruta, T. Koyama, and S. Ogata, Classical and Hybrid Density-Functional / Classical Molecular Dynamics Study of Dislocation Core in Alumina Ceramic, Materials Transaction Vol. 50, No. 5, pp.1015-1018 (2009). [査読有]

③ T. Koyama, “Phase-field modeling of microstructure evolutions in magnetic materials”, Science and Technology of Advanced Materials 9, 1: 013006 (2008). [査読有]

[学会発表] (計 47 件)

① K. Tsuruta, “Hybrid Quatum / Classical Approaches to Nano- and Meta-Materials” (Keynote Lecture), International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES'09) (2009.4.8, Phuket, Thailand)

② 鶴田健二, 「機能元素のナノ材料科学に対するマルチスケール計算科学的アプローチ」(基調講演), 日本金属学会 2009 年春期講演大会 (2009. 3. 29 於 東京工業大大岡山キャンパス)