

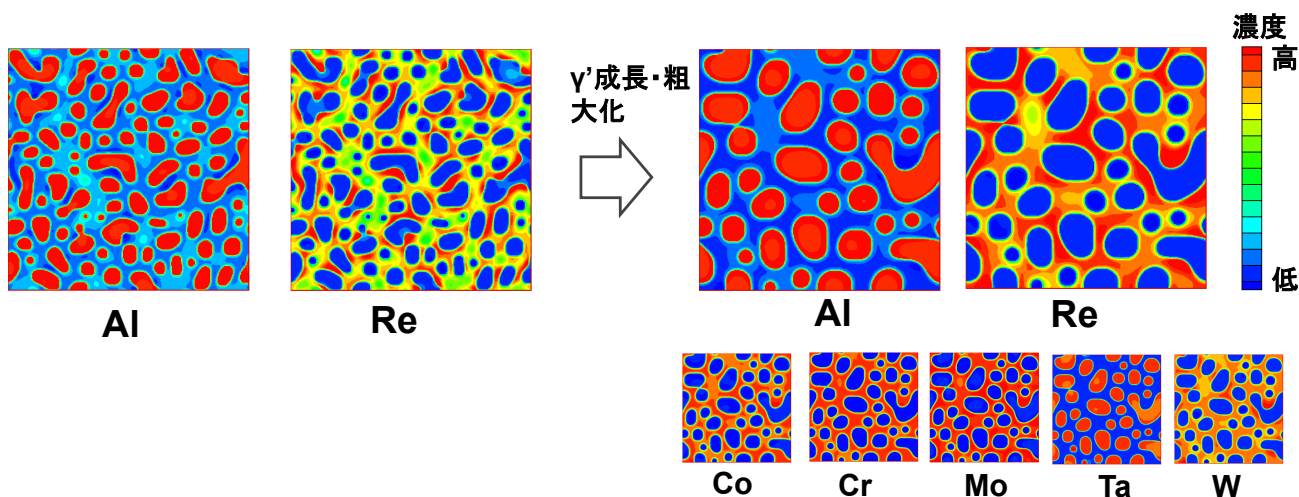


数値シミュレーションを利用した材料設計

Key Words; 材料設計、数値シミュレーション、マルチフィジックス

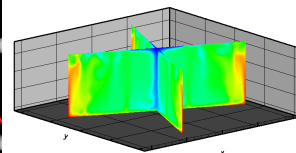
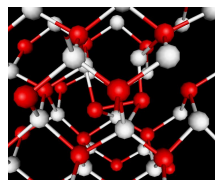
材料設計・開発において、経験式を含む数値計算は必要不可欠である。従来の経験的な計算とナノスケールからマクロスケールまでのマルチスケール・マルチフィジックスに基づいた理論計算を融合する。また、現実的な材料設計を行うために、実験による検証も行っている。これらにより、未説明現象のメカニズムを解明すると同時に、高性能材料を論理的に設計し、ブレークスルーを狙う。

図はPhase-field法とCalphad法を連成し、8元系Ni基超合金における γ' 相析出の過程をシミュレートしたものである。従来は最大3元系までしかモデルが報告されていなかったが、新規モデルを開発し、10元系ほどの実用合金の組織変化の計算が可能となった。



その他の計算

- ・分子動力学法を用いた格子欠陥の解析
- ・熱流体連成計算を用いた凝固プロセスの解析
- ・クラスター変分法を用いた相平衡と相界面の解析



現在のシミュレーションのターゲット

- ・変形転位の運動
- ・高温酸化プロセス



北嶋 具教

TOMONORI KITASHIMA

先進高温材料ユニット 構造機能融合材料グループ

KITASHIMA.Tomonori@nims.go.jp