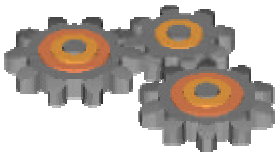


機械工学科

計算物理学による物性解析と材料設計

コンピュータを用いたシミュレーションによって，各種合金材料等の物性解析・予測を行い，新しい材料の設計開発を目指しています。

■ 計算物理学とは…

計算物理学は，実験・理論につぐ，第三の方法として理工系，生物系などの分野で広く用いられ，産業界においても，コストの削減，開発期間の短縮などに大きな効果があり，応用分野が急速に展開，発展しています。

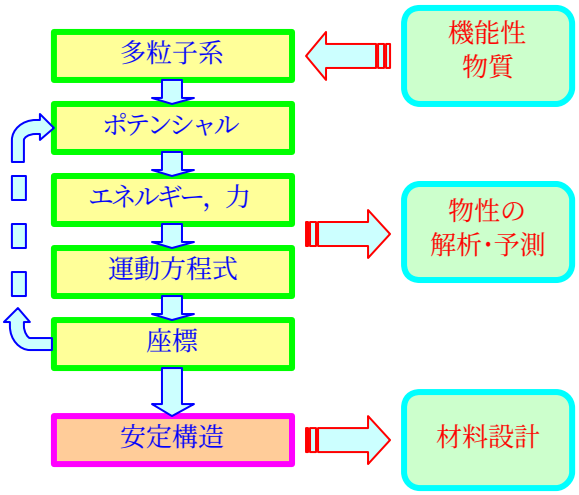
近年の，ニューマテリアルなどの開発は目覚しく，コンピュータの性能向上，計算アルゴリズムの開発及び，物性物理学，量子化学，材料科学などの諸分野における基礎理論の発展と共に，コンピュータ・シミュレーションによる，物質・材料開発が可能と成って来ています。

■ 分子動力学シミュレーション

分子動力学シミュレーションは，材料の構成要素である原子や分子レベルの観点に立ち，それらの多粒子の微視的な運動を追跡することによって，ミクロあるいはマクロな物理量の評価を行います。

この多粒子系の運動は，経験的あるいは，非経験的（第一原理的）ポテンシャルを用いて計算される力による運動方程式を数値解法によって求めることが出来ます。

さらに，統計力学の手法により，様々な物理量の解析が可能となると共に，安定構造の予測により，新しい材料設計へと応用できます。

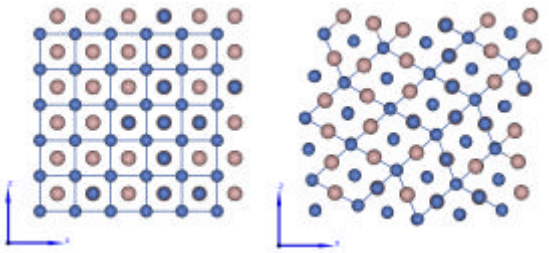


物性解析と材料設計

■ 合金材料の相転移現象と物性解析

近年大きな関心を持たれている機能性材料は，知的機能・傾斜機能など様々な分野に応用されています。なかでも，形状記憶効果や超弾性効果などを持つ合金系材料は，非拡散型相転移であるマルテンサイト変態と関連してその物理的な発現機構は大きな関心が寄せられています。

これらの材料設計の基礎として，経験的ポテンシャルである修正原子挿入法を用いた，分子動力学シミュレーションにより，それらの相転移・相変態現象など解析・予測を行い，新しい材料の設計開発を目指して研究を行っています。



（母相）　（マルテンサイト相）

NiAl 系のマルテンサイト相変態の様子

石田　博明（いしだ　ひろあき）

ishida@ishikawa-nct.ac.jp

076-288-8100

【生年月】1961 年 04 月
【職名】講師
【学位】
【学位論文名】
【学歴・職歴】金沢大学理学部物理学科卒業(1984)，石川工業高等専門学校機械工学科助手(1984)，同講師(2001)
【専門分野】応用物理学，計算科学
【研究課題】分子動力学シミュレーションによる金属材料の物性評価，固体材料の相転移現象，金属材料の量子化学と合金設計
【キーワード】計算物理学，分子動力学，コンピュータ・シミュレーション，固体物理，材料設計，物性解析，量子化学，金属材料