

第8回 生体医歯工学公開セミナー

「第一原理計算の最近の展開と生体材料開発へ展望」

日時：2017年6月22日（木曜日）17:00～18:30

場所：すずかけ台キャンパスR2棟6F 大会議室

量子力学に基づく非経験的計算手法である第一原理計算が急速に進歩し、近年の材料開発において有力な研究手段となっています。本セミナーでは、金属材料における第一原理計算の第一人者である大阪府立大学工学研究科物質・化学系専攻准教授である上杉徳照先生をお招きし、第一原理計算の基礎から最近の展開までについてご講演頂くと共に、同研究室博士課程学生南大地氏により、生体用形状記憶合金の合金設計に関する最新の研究結果までご講演頂けることになりました。皆様のご参加をお待ちしております。

プログラム

16:40開場, 17:00開始

招待講演1 「新合金開発の効率化に貢献する第一原理計算」

○上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司

概要

合金の諸々の特性を決定する原子の結合そのものを量子力学(第一原理)に基づいて計算することで、合金元素が持つべき役割を明らかにする技術が認知されつつある。本講演では、この技術により延性、クリープ、防食性などに優れた新合金の成分決定の時間が大幅に短縮されることを、開発例を含めて説明する。延性であれば粒界脆化・強化パラメータ、クリープであれば積層欠陥エネルギー、防食性であれば仕事関数のように、特性向上に効果的な記述子を設定することが重要であることを踏まえつつ、形状記憶・超弾性特性に必要な記述子を紹介する。

招待講演2 「第一原理計算を用いた生体用Ti-Nb基形状記憶合金の予測」

○南大地, 上杉徳照, 瀧川順庸, 東健司

概要

β 型Ti基合金はNiフリーの生体用形状記憶合金として注目されており、形状記憶特性の改善に向け多くの研究がされている。本講演では、第一原理計算により大きな変態ひずみを持つ β 型Ti基合金形状記憶・超弾性合金の合金成分設計を行った研究結果を紹介する。Ms点、変態ひずみ、 ω 相安定性に着目し、第一原理計算によりそれぞれの特性に及ぼす合金元素の影響の評価法について説明するとともに、実際にTi-Nb-X形状記憶合金において合金成分設計を行った結果について報告する。

～18:30閉会

なお、本講演に関する研究の一部は、生体医歯工学共同研究拠点活動および科学研究費基盤研究(S26220907)によるものです。

司会・問い合わせ：

東京工業大学 未来産業技術研究所 教授 細田秀樹

Email: hosoda.h.aa[at]m.titech.ac.jp ([at]を@に置き換えてください)

