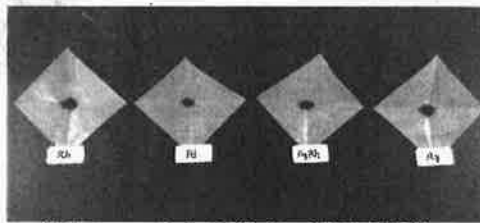


計算で合金の機能予測

物質・材料研究機構高輝度放射光ステーションの坂田修身ステーション長と京都大学北川宏教授、九州大学古山通久教授らのグループは、人工

果が一致し、合金の機能予測や調合を計算できることを証明した。水素吸蔵などの機能性合金を狙って作るためのデータベース作りを始める。「元素間融合」という技術を使い原子番号45のロジウム（Rh）と47の銀を原子レベル混ぜ合わ

せ、46のパラジウム（Pd）の水素吸蔵機能を持つ合金を開発した。その電子状態を解析して、合金がRhや銀とは異なり



銀とロジウムの合金（京大提供）

Pdと似ていることを証明した。合金の水素吸蔵の機能を定める電子状態を特定したことになる。今後、この電子状態を作れば銀とRh以外の組

み合わせでも水素吸蔵合金を作れる可能性がある。計算シミュレーションで電子状態を予測でき、そのため、合金の調合比率を網羅的に計算すること

が可能。測定データを増やして計算精度を高め、元素間融合で自在に機能性合金を作るためのデータベースを整えていく。

再転載禁止

日刊工業新聞 22面
2014年10月20日(月)