

第34回 フェロー研究報告会

日時: 2023年10月27日(金) 13:00~14:50

主催: 公益財団法人豊田理化学研究所 協賛: 株式会社豊田中央研究所

13:00 開会

13:05~13:35

第一原理計算に基づく理論状態図の構築と準安定物質創成に関する研究
大谷博司 (豊田理研フェロー)

Construction of Theoretical Phase Diagrams Based on First-Principles Calculation and Study
on Metastable Phase Formation

Hiroshi OHTANI

本研究では第一原理計算に基づく理論状態図の構築を行い、目的の相が他の相に対して有する相対的安定性を計算する手法と準安定性を克服する方法論の確立に取り組むことを目的としている。これまでの研究により理論状態図においては 1kJ/mol 前後のわずかなエネルギーの差が相平衡を大きく左右することがわかった。そこで、このエネルギー差を極限まで縮小するための計算条件の検討を行った。その中でも特に固溶体の原子振動の影響が大きいことから、クラスター変分法におけるクラスター有効相互作用エネルギーにこの効果を取り入れる手法を新たに開発した。図1はこの影響を考慮した Ni-Si 二元系理論状態図を熱力学的解析による状態図と比較したものである。固溶体の出現範囲や化合物の生成領域などにまだ考察の余地があるものの、原子番号だけを入力源とする理論状態図は現実の相平衡の特徴をかなりよく再現することが明らかとなった。

理論状態図

熱力学的解析による状態図

T. Tokunaga et al.: CALPHAD 27(2003)161-168.

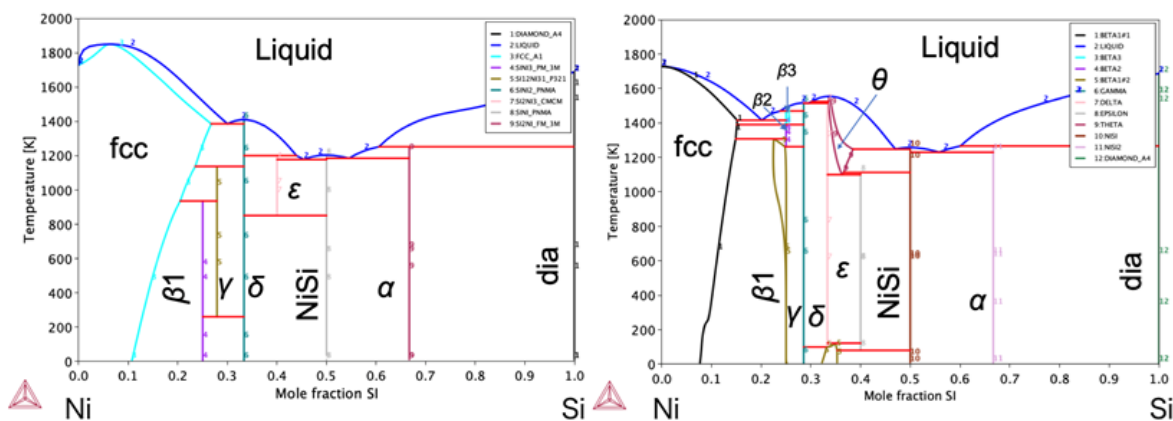


図1 Ni-Si 二元系理論状態図と熱力学的解析による状態図の比較

13:35~14:05

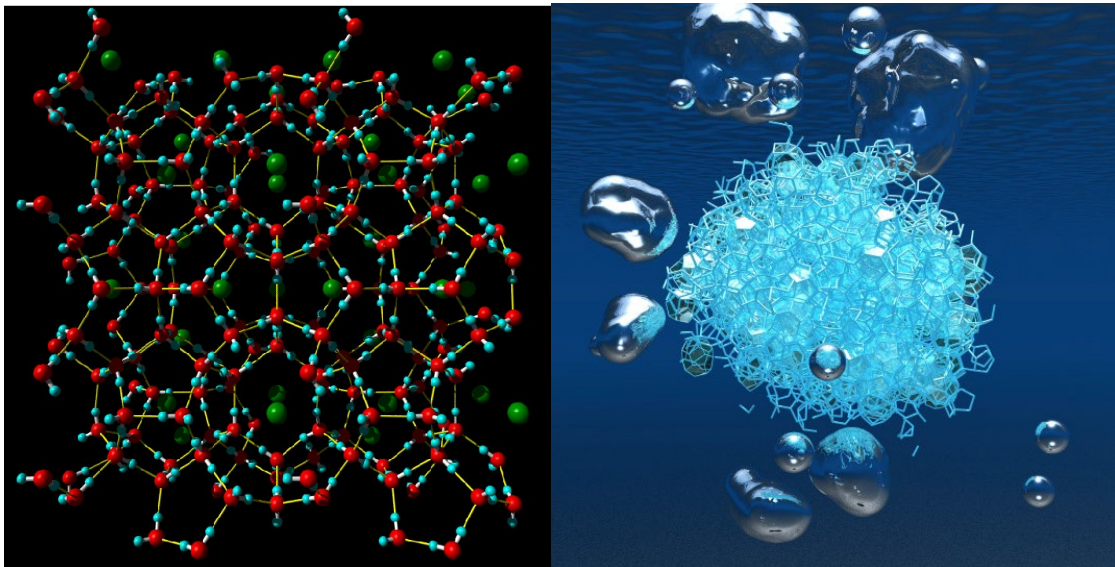
CH₄ハイドレートのCO₂への置換効率とエネルギー収支

田中秀樹（豊田理研フェロー）

Efficiency and Energy Balance for Substitution of CH₄ in Hydrates with CO₂

Hideki TANAKA

CH₄-CO₂ ハイドレートに関する多くの研究が、比較的クリーンなエネルギー資源としての CH₄ の回収と CO₂ の廃棄を目指して行われてきた。しかしながら、外部条件の曖昧さによって、CH₄-CO₂ ハイドレートの平衡特性の理解さえも不十分なのが現状である。ここでは、CO₂ が導入され CH₄ が回収されるときの可能な反応を提案する。そのために、3 相共存と 2 相共存下における置換スキームを取り上げる。置換反応に関与する全ての相における各成分の化学ポテンシャルから、CH₄ 抽出効率を計算する方法を示し、またその結果を議論する。



水と CH₄ 分子からなるハイドレート構造(左)とシミュレーションによるメタンハイドレート解離(右)。

14:05～14:35

超伝導の未解決問題に挑む
前野悦輝（豊田理研フェロー）

Challenging the Unresolved Problem in Superconductivity
Yoshiteru MAENO

ストロンチウム・ルテニウム酸化物 Sr_2RuO_4 の超伝導性の解明が山場を迎えている。この物質は前野らが約 30 年前に超伝導を発見し、純良な単結晶試料を世界の研究者に供給して研究を先導してきた。「量子物質」の典型とされ、長年に渡り世界的に盛んに研究されている。2019 年になってそれまでの超伝導性の理解を覆す実験成果が出たが、それを踏まえてもまだ完全解明には至っていない。この問題をどのように解決に導くのかの見通しを平易に解説する。なお、最近この物質で観測した「パインズの悪魔」についても簡単に紹介する。



育成中の Sr_2RuO_4 の単結晶。上部の多結晶原料棒の直径は 5.5 mm；下部は単結晶。

14:35～14:50 閉会挨拶

14:50 閉会