

原子レベルでの理論解析からの 新規機能材料の物性予測・解明

用途・応用分野

- ・ 新規な機能性材料の開発において、予め理論的な性能予測をすることができる。
- ・ 材料設計の指針を与えて開発の効率化が図れる。

よって、「素材の表面改質や接合界面の設計指針」、「ナノ材料開発やナノスケール加工」、「原子的なメカニズムの解釈に基づいた新規材料の物性予測」などが可能。

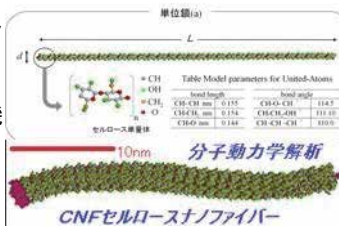
本技術の特徴・従来技術との比較

- ・ 実験データの未だ無い新規材料であっても物性の評価が可能。構造解析(有限要素法FEMなど)が必要となる、ヤング率や熱膨張係数の値などが原子レベルの理論解析で取得できる。
- ・ 複合材料では、既存の物性データの組合せだけでは予測できないであろう隠れた性能を発見する可能性がある。
- ・ 原子的なメカニズムを解明することで、材料の性質を深く理解することができる。

技術の概要

様々な材料の特性を経験的な知識を用いずに予測する技術を提供する。主に分子動力学法や第1原理計算のソフトウェアを開発し解析(ケースによっては提供)する。金属、セラミックス、プラスチック、生体材料など問わず、どのような材料も構成原子の相互作用に関する基本情報のみを入れることによって、それら材料の持つ本来の極限的機能性が見積もられ(強度評価や微細構造を含む)、また組み合わせた構造での機能や物性の予測ができる。

(例:下記論文では、今後発展が期待される、セルロースナノファイバー(CNF)(右図)の機械的強度(ヤング率や引抜き強度)を原子レベル計算によって明らかにしている。)



- ✓ 材料中の界面強度の原子論的解明
- ✓ ナノ粒子の焼結シミュレーションと温度依存性
- ✓ 材料接触での摩擦・摺動シミュレーション
- ✓ ナノ材料の設計(ナノチューブ、ナノピラーetc.)
- ✓ 金属の塑性加工での結晶欠陥の解析
- ✓ 新型形状記憶合金の開発
- ✓ ゴム系材料の架橋性能と強度の関係
- ✓ 原子レベルの固体熱伝導・熱伝達解析
- ✓ 液体・固体・気体の連成解析
- ✓ 金属材料の水素脆化シミュレーション
- ✓ セルロースナノファイバー(CNF)の理論強度・剛性の解析
- ✓ 生体内コラーゲン原線維の機械的性質
- ✓ 原子レベル理論解析の深化:分子動力学(MD)法、第1原理計算(*ab initio*)の発展
- ✓ セラミックス・金属複合材料の設計
- ✓ シリコン・SiC材の加工の原子レベル評価
- ✓ 原子レベルの熱流動解析(金属、高分子や水)

特許・論文

<論文>

"Structure and Mechanical Behavior of Cellulose Nanofiber and Micro-Fibrils by Molecular Dynamics Simulation" (Saitoh,K., et al., Soft Nanoscience Letters, Vol.3, (2013), pp.58-67. (DOI: 10.4236/snll.2013.33011))

研究者

齋藤 賢一

システム理工学部 機械工学科
材料工学研究室