ナノテクノロジー・
材料

未実現の材料特性を推定できる
原子間ポテンシャルを用いたシミュレーション技術

用途・応用分野

新素材の開発分野での未実現材料の特性や物性値の推定ができる。また、既存材料を組み合わせる際、設計・シミュレーション・実験で用いたい入力値の計測自体が難しい場合でも、分子レベルの挙動シミュレーションから必要な入力データを推定し、利用できる。

本技術の特徴・従来技術との比較

従来技術：実験で確認された入力値を用いて、シミュレーションなどを行うため、未実現の材料に対してはシミュレーション（有限要素解析など）が実行できない問題点があった。

本技術：使用したい材料の原子（元素）・分子や実現したい構造を決めることで、原子間ポテンシャルを設定することで分子動力学（MD）シミュレーション等を行い、材料内の原子・分子レベルの挙動や巨視的な物性値が理論的に（計算のみによって）見積もれるようになる。

技術の概要

金属、セラミックス、プラスチックス、生体材料など問わず、どのような材料でも原子（元素）の種類や構造（配置）を決めることで、原子間ポテンシャルの理論的モデルを設定できる。そして、分子レベルの挙動を、例えば、分子動力学（MD）法のようなシミュレーション手法で、忠実に再現することができる（図1）。

また、設定した材料が有する構造・強度・機能に関する物性値が定量的に評価できる。さらに、有限要素法（FEM）解析を行う際に必須になる、材料パラメータ（弾性、塑性、粘性、摩擦、などの性質）も直接得られるため、より精密なシミュレーションを実施して材料挙動（メカニズム）の評価が行える。

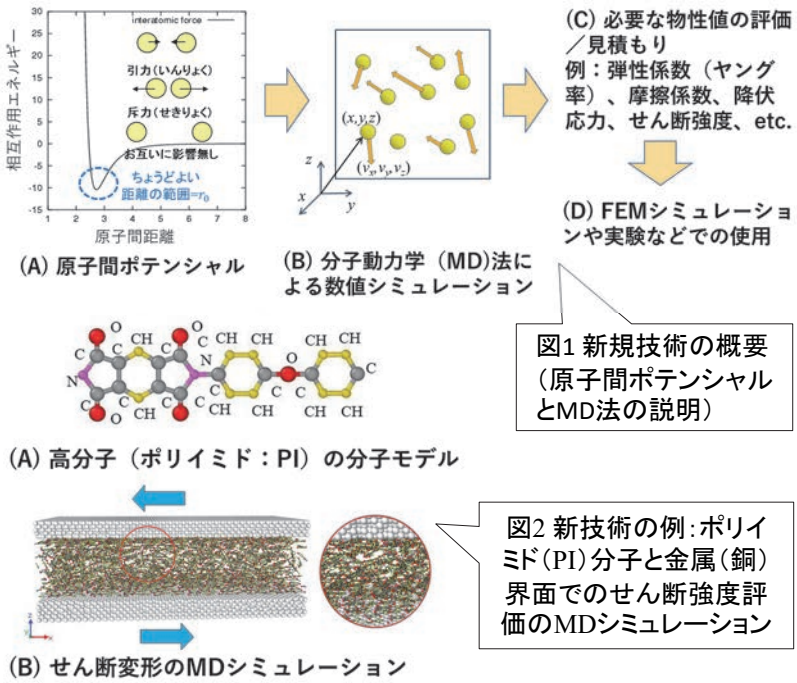

図1 新規技術の概要（原子間ポテンシャルとMD法の説明）

図2 新技術の例：ポリイミド（PI）分子と金属（銅）界面でのせん断強度評価のMDシミュレーション

特許・論文

＜論文＞

K.Saitoh, et al., *Batteries,* Vol.8, No.27 (2022), 8030027. (DOI:10.3390/batteries8030027)※電池材料（電解液）の特性評価と新規分子の発掘

＜発表＞

新技術説明会（2019.2.28, JST）動画配信
https://www.youtube.com/watch?v=fYvVGp0Q634

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

お問合わせ先　関西大学 社会連携部 産学官連携センター
TEL：06-6368-1245
MAIL：sangakukan-mm@ml.kandai.jp