

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、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。

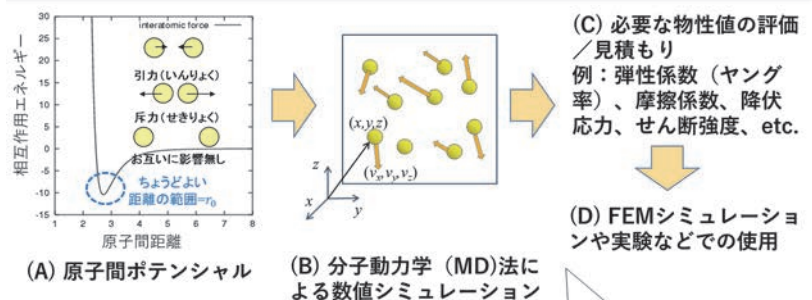


図1 新規技術の概要
(原子間ポテンシャルとMD法の説明)

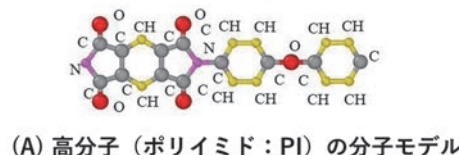


図2 新技術の例：ポリイミド(PI)分子と金属(銅)界面でのせん断強度評価のMDシミュレーション

特許・論文

- 発表：新技術説明会(2019.2.28, JST)動画配信
<https://www.youtube.com/watch?v=fYvVGp0Q634>
- 論文：K.Saitoh, et al., *Batteries*, Vol.8, No.27 (2022), 8030027. (DOI:[10.3390/batteries8030027](https://doi.org/10.3390/batteries8030027))※電池材料(電解液)の特性評価と新規分子の発掘

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