

## Seeds

キーワード:分子シミュレーション、セラミックス、ガラス

セラミックス結晶やガラスの構造・特性解析シミュレーション

Naoya Sawaguchi



しくみ解明系領域  
先端マテリアル工学ユニット

さわぐち なおや

澤口 直哉 准教授

Phone:0143-46-5673 Fax:0143-46-5673

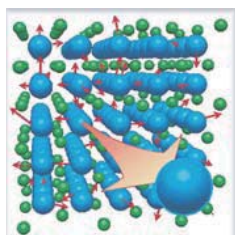
E-mail:nasawa@mmm.muroran-it.ac.jp

URL <http://www.muroran-it.ac.jp/>



## 材料特性向上のための材料設計

### 研究の目的

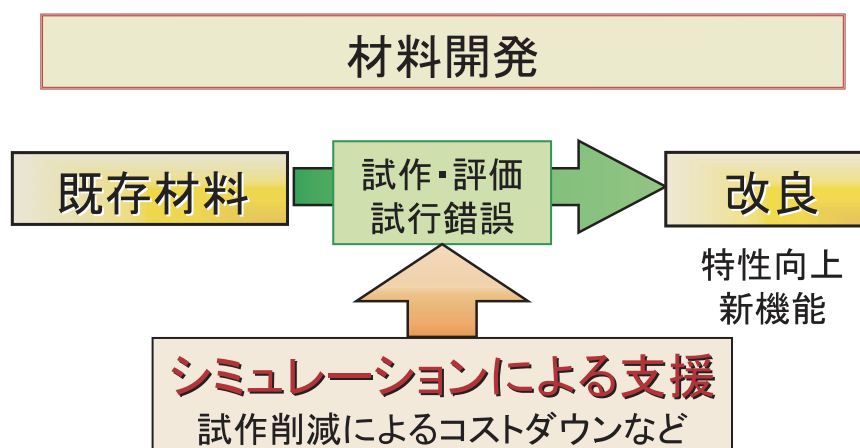


セラミックスは多種多様であるが、多くの場合製造過程に高温を要するため焼結や偏析の機構はあまり明らかになっていない。機能性材料の特性に影響を及ぼす原子や電子の挙動を究明し、製造過程で生じる現象の理解を深める。材料特性向上を目指した材料設計を支援するため、材料中の原子の挙動を分子シミュレーションで解析するしくみの研究・開発に取り組んでいる。

### 研究の概要

酸化物ガラスの  
特性向上を  
目指す

酸化物ガラスは用途が広い重要な材料の一つである。そこで、ガラスの密度や構造を再現可能な分子シミュレーションを実現するための研究を進めている。セラミックス中を移動するリチウムイオンや酸化物イオンの様子を分子シミュレーション(分子動力学法)で追及、セラミックスの組成変化に応じたイオンの挙動の相違を扱えるようになってきた。計算機支援によるガラスの特性の向上への寄与を目指す。

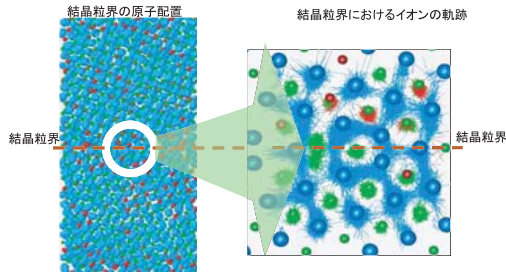


# Seeds セラミックス結晶やガラスの構造・特性解析シミュレーション

## 研究(開発)のアピールポイント

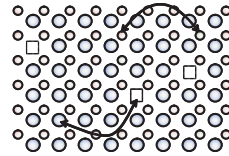
### ◆研究の新規性、独自性

ソフトウェアの一部は研究室で開発しているため、用途に応じて変更できる。

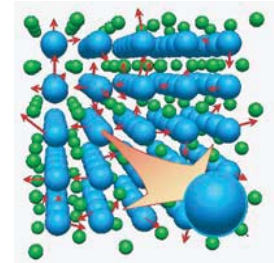


### ◆従来研究(技術)と比べての優位性

結晶粒界の偏析状態など、不均一性を考慮したシミュレーションが可能。モンテカルロと分子動力学法の併用で、より正確なシミュレーションを行う。



偏析のモンテカルロシミュレーション(概念図)



イオン挙動の分子動力学シミュレーション(概念図)

### ◆研究に関連した特許の出願、登録状況

なし

## 研究(開発)のビジョン、ステージ

### ◆適応分野

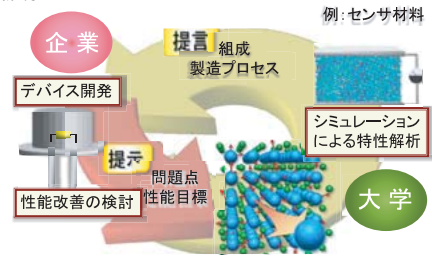
イオン伝導性セラミック中のイオン電導シミュレーション、酸化物ガラスの構造解析、特殊な格子振動を有する結晶の振動解析など幅広く対応可能。

### ◆研究のステージ

基礎研究 応用段階

### ◆製品化、事業化のイメージ

材料開発設計支援。



企業との連携イメージ

## 企業等へのご提案、メッセージ

### ◆研究(開発)に関連して、あるいはそれ以外に関われる業務

材料に関する評価・分析相談、酸化物ガラスの作製とXRDによる評価、ISOの国内委員(水素関連技術)経験あり。

### ◆利用可能な設備、装置など

### ◆教員からのメッセージ

材料関連のご相談に応じます。他の計算機シミュレーションの分野の専門家への橋渡しもできます。

澤口直哉

