

| | | | | | |
|---|---------------------------|--|----------|----------------|---------|
| 研究テーマ | 界面の力学挙動を第一原理計算（量子力学）で予測する | | | | |
| 担当教員・連絡先 | 准教授 松井 和己 kzm@ynu.ac.jp | | | | |
| 研究室 Web | http://www.cml.ynu.ac.jp | | | 定員: EP から各 1 名 | |
| 共同研究の有無 | EP 内複数教員で指導 | | EP 横断で指導 | ○ | 企業と連携 ○ |
| <p>テーマ概要:</p> <p>構造物レベルでは一様だと考えられる材料であっても、顕微鏡などでその組織を観察すると非常に複雑な内部構造を有していることがわかっています。実験・観察技術の進歩は、これら材料の微視構造レベル（数ナノ m~数マイクロ m）での実験や観察を可能にして、より精細な材料特性が計測できるようになってきました。</p> <p>しかしながら、現代の技術をもってしても微視領域に存在する「界面」の力学特性を計測することは困難です。対象領域が小さいことももちろんですが、材料や場所によって界面やその近傍での原子配置そのものが複雑に変化していることが、「そもそも界面とは？」というレベルからの議論を必要としています。</p> <p>本テーマでは、実際に原子を配置しながら界面をモデル化して、量子力学に基づくシミュレーション（スーパーコンピュータ上での第一原理計算）を駆使して、界面のエネルギー状態を評価しながら、界面の力学特性に換算することに挑戦します。界面における原子のすべりや原子空孔を生じるために必要なエネルギー障壁を評価することで、材料の強度を支配する素過程レベルのメカニズムを解明します。</p> | | | | | |
| <p>履修済みであることが望ましい科目:</p> <p>材料の物性などを取り扱う科目、量子力学・量子化学に関連する科目など</p> | | | | | |
| <p>スキル:</p> <p>3次元空間での位置関係を把握するのが得意だったり、キーボードを叩くことに抵抗がなかったりすると取り組みやすいかもしれませんが、取り組んでいるうちに慣れます（笑）</p> | | | | | |
| <p>その他:</p> <p>第一原理計算については物理工学 EP の Raebiger 准教授と KISTEC（神奈川県立産業技術総合研究所）の研究者が、セラミックス材料の界面構造については化学応用 EP の多々見教授、炭素鋼の界面構造については機械工学 EP のマツイ准教授が対応しますが、4者での共同指導で実施します。</p> | | | | | |

