

# 分子シミュレーションによる材料の構造と機械特性に関する研究

■ 工学部 知能機械工学科 助教 三澤 賢明

○ 研究分野：物性物理学、計算材料科学

○ キーワード：計算機シミュレーション、第一原理計算、分子動力学法

## I 研究概要

本研究室では、計算機シミュレーションを用いて物質・材料のもつナノスケールの構造や機械特性を明らかにする目的で様々な研究テーマに取り組んでいる。以下に最近の研究例を示す。

### 1. 硫化銀の延性の起源の解明



無機半導体は一般的に脆い材料が多く、薄く延ばしたり曲げたりして加工することが困難である。そんな中、硫化銀( $\text{Ag}_2\text{S}$ )という材料は無機半導体でありながら室温環境下で金属のような延性を示すことが最近になって明らかとなり、薄型・柔軟な電子デバイスへの応用に期待が寄せられている。硫化銀のもつ延性の起源を解明することができれば、その理論に立脚して、より優れた電子特性と機械特性を両立する革新的な新規半導体材料を創出できる可能性がある。我々は物質を構成する原子1つ1つの運動を計算する「分子動力学法」に基づく計算機シミュレーションにより、せん断応力下における硫化銀の構造変化の様子を詳しく解析し、結晶中に存在する硫黄副格子の対称性を起源とする新たな延性変形のメカニズムを見出した。[Misawa et al., Sci. Rep. 12, 19458 (2022)]

### 2. 二酸化珪素の破壊に伴う構造変化機構の解明



二酸化珪素( $\text{SiO}_2$ )はガラスやセラミックスなど幅広い材料に応用されている、工業的に重要性の高い物質の1つである。超高温・超高压下で形成される二酸化珪素の結晶相であるスティショバイトは、極めて高い硬度を有する反面、衝撃に対する耐久性(破壊靱性)が低く、このことが構造材料としての応用に向けてのボトルネックとなっていた。この問題に対し、スティショバイトをナノサイズの粒径をもつ多結晶体に加工することで破壊靱性を飛躍的に向上させるという方法が提案された。この破壊靱性向上の起源には、亀裂の先端にかかる引張応力によって引き起こされる局所的な構造変化(破壊誘起構造変化)が深く関係することが示唆されている。我々は量子化学計算と分子動力学法を組み合わせ「第一原理分子動力学法」に基づく計算機シミュレーションにより、スティショバイトの破壊誘起構造変化の原子論的メカニズムとエネルギー特性を明らかにするとともに、数ピコ秒( $10^{-12}$ 秒)という極めて短い時間スケールで構造変化が起こり得ることを理論的に示した。

[Misawa et al., Sci. Adv. 3, e1602339 (2017)]

## I 利点特徴

多種多様な物質に関する様々な現象を原子スケールで調べられる

## I 応用分野

フレキシブルデバイス、高強度セラミックス材料等

