

研究タイトル:

## 計算物理学による物性解析と材料設計



氏名: 石田 博明 / ISHIDA Hiroaki E-mail: ishida@ishikawa-nct.ac.jp

職名: 教授 学位: 博士(理学)

所属学会・協会: 日本物理学科, 日本機械学会, 分子シミュレーション研究会, 日本工学教育協会, 米国物理学会

キーワード: 計算物理学、シミュレーション、物性解析、材料設計、機能性材料、固体物理、量子化学

技術相談  
提供可能技術:  
・計算物理学による物性解析と材料設計  
・機能性材料のシミュレーション  
・シミュレーション科学

### 研究内容:

#### ■ 計算物理学

計算物理学は、実験・理論につぐ、第三の方法として理工系、生物系などの分野で広く用いられ、産業界においても、コストの削減、開発期間の短縮などに大きな効果があり、応用分野が急速に展開、発展しています。

近年の、ニューマテリアルなどの開発は目覚しく、コンピュータの性能向上、計算アルゴリズムの開発及び、物性物理学、量子化学、材料科学などの諸分野における基礎理論の発展と共に、コンピュータ・シミュレーションによる、物質・材料開発が可能と成って来ています。

#### ■ 分子動力学シミュレーション

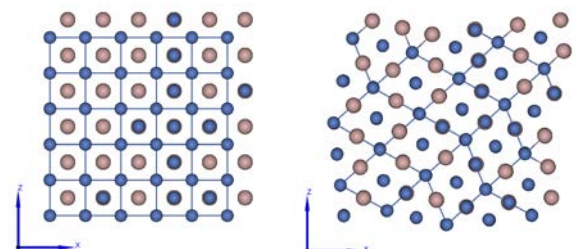
分子動力学シミュレーションは、材料の構成要素である原子や分子レベルの観点に立ち、それらの多粒子の微視的な運動を追跡することによって、ミクロあるいはマクロな物理量の評価を行います。

この多粒子系の運動は、経験的あるいは、非経験的(第一原理的)ポテンシャルを用いて計算される力による運動方程式を数値解法によって求めることが出来ます。さらに、統計力学の手法により、様々な物理量の解析が可能となると共に、安定構造の予測により、新しい材料設計へと応用できます。

#### ■ 機能性材料の物性解析と材料設計

近年大きな関心を持たれている機能性材料は、知的機能・傾斜機能など様々な分野に応用されています。なかでも、形状記憶効果や超弾性効果などを持つ合金系材料は、非拡散型相転移であるマルテンサイト変態と関連してその物理的な発現機構は大きな関心が寄せられています。

これらの材料設計の基礎として、経験的ポテンシャルである修正原子挿入法を用いた、分子動力学シミュレーションにより、それらの相転移・相変態現象など解析・予測を行い、新しい材料の設計開発を目指して研究を行っています。



(a) 母相

(b) マルテンサイト相

図1 NiAl系のマルテンサイト相変態の様子

### 提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	
RF インピーダンス・アナライザ	hp-4191A (Agilent)
インピーダンス/ゲイン・フェーズアナライザ	hp-4194A (Agilent)

Subject for study:

## Physical property analysis by the computational physics



Name	ISHIDA Hiroaki	E-mail	ishida@ishikawa-nct.ac.jp
------	----------------	--------	---------------------------

Status	Professor
--------	-----------

Affiliations	JPS (The Physical Society of Japan), JSME (The Japan Society of Mechanical Engineers), MSSJ (The Molecular Simulation Society of Japan), JSEE (Japanese Society for Engineering Education), APS (American Physical Society)
--------------	---

Keywords	Computational physics, Simulation, Physical property analysis, Material design, Functional material, Solid state physics, Quantum chemistry
----------	---

Technical Support Skills	<ul style="list-style-type: none"> <li>Physical property analysis and Material design by computational physics</li> <li>Simulation of the functional material</li> <li>Computational Science</li> </ul>
--------------------------	---

### Research Contents

#### ■ Computational physics

The Computational physics is widely used in fields, such as a science-and-engineering system and a biological system, as the third method of pouring an experiment and theory. Moreover, also in the industrial world, there is a big effect in reduction of cost, shortening of a development period, etc., and the applicable field develops and is quickly developed. The substance and material development by computer simulation were attained by the development of the high performance computer, and the development of a computational algorithm and material science, quantum chemistry, and materials science.

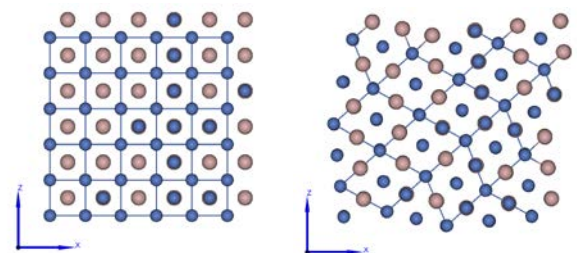
#### ■ Molecular dynamics simulation

The molecular dynamics simulation evaluates micro or macroscopic physical quantity by pursuing microscopic movement of those many particles from a viewpoint of the atom or a molecular level which is a component of material. The movement of this multi-particle system can ask for the equation of motion by the force calculated using experiential or un-experiential (ab initio) potential by a numerical solution method. Furthermore, while various physical quantities becoming analyzable with the technique of statistical mechanics, we can apply to a new materials design by prediction of stable structure.

#### ■ Physical property analysis and Material design of the functional material

A functional material by which big concern is held is applied to various fields, such as an intelligent function and a gradient function, in recent years.

With the molecular dynamics simulation procedure, we perform analysis and prediction, such as those phase transition phenomena, and are inquiring aiming at design development of a new material.



(a) Mother phase (b) Martensitic phase

Fig. 1 Situation of martensitic phase transformation of NiAl system

### Available Facilities and Equipment

RF Impedance Analyzer hp-4191A (Agilent)	
Impedance/Gain-Phase Analyzer hp-4194A (Agilent)	