



材料で生じる多様なマルチスケール・マルチフィジックスな現象を解明し、新しい機能やより高い性能を持つ材料を設計することを目指しています。電子・原子レベルの計算科学手法を用いて、構造材料の力学特性に関係する格子欠陥の振る舞いや異なる材料間の界面特性など、材料物性の微視的なメカニズムの研究を行っています。研究テーマによっては、機械学習・データサイエンスの手法、ナノインデンテーションやマイクロ力学試験などの実験も行っています。



教授 松中 大介

日本学術振興会特別研究員、大阪大学大学院工学研究科助教、信州大学学術研究院工学系准教授を経て、2022年4月より現職。
研究分野は、計算材料科学、固体力学、物性理論。

>> 私の学問へのきっかけ

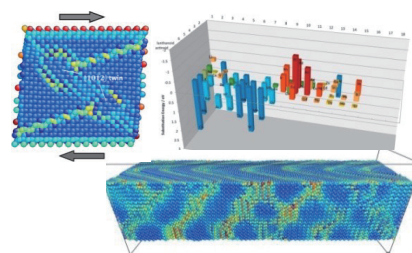
大学では学ぶ世界が飛躍的に広がります。先人たちが築き上げてきた学問の奥深さに触れることができます。一方で、未解明の問題が数多く残されていることを知ります。学問の発展や新しい発見に立ち会うことになるかもしれません。そうした学びの中で興味を持つ分野が見つかるはず（私も4年生の研究室配属からこれまでに多くの面白さに触れてきたことが「学問へのきっかけ」と言えるかもしれません）。そして、習得した知識や技術が血肉となって考える基盤が作られていきます。

>> 研究から広がる未来

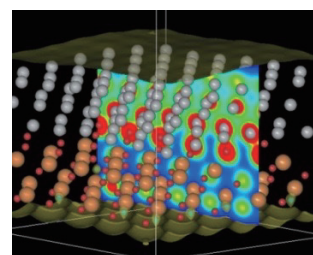
あらゆる材料は電子や原子核から構成されていますが、現実の材料との間には大きなスケールのギャップがあります。マルチスケールな視点から材料特性を解明して、電子や原子のレベルから新しい材料を設計する革新的なもののづくり手法の開発を目指しています。

>> 卒業後の未来像

ものづくりの基盤を担う材料力学や材料工学から最先端の計算科学や物性物理までを研究活動を通して身につけ、新材料を研究する分野や材料の特性を活かした製品を開発する分野で活躍できる人材を育成します。



分子動力学法によるマグネシウムの変形に関する解析と第一原理計算による合金元素探索マップ：原子レベルでの変形メカニズムの理解と合金元素候補の提案を行っている



第一原理計算による金属と酸化物の異種材料界面の電子状態：異なる材料の界面では複雑な結合が生じていることを明らかにした

先鋭融合

機械物理

知能機械

研究キーワード

計算材料科学・固体力学・材料力学

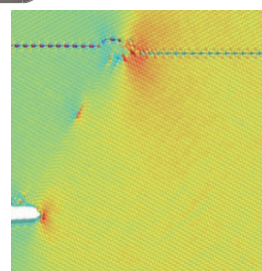
最近の研究トピックス

研究シーズ

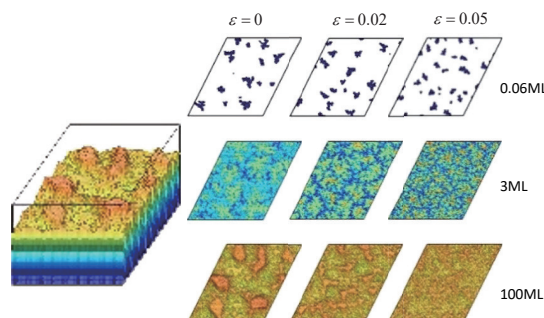
- 第一原理計算に基づくマテリアルデザイン
- 分子動力学シミュレーションによる欠陥ダイナミクス解析
- 機械学習原子間ポテンシャルの開発
- ナノ異材界面の原子論的解析
- 結晶成長・表面反応の原子モデリング
- ソフトマターの局所力学評価

共同研究・外部資金獲得実績

- 表面反応に関する動的モンテカルロ解析（民間企業との共同研究）
- 固体電解質のシミュレーションに関する研究（民間企業との共同研究）
- ナノ組織制御Mg合金のマルチスケールモデリングの研究（民間企業との共同研究）
- 薄膜界面特性評価システムの構築に関する研究（民間企業との共同研究）
- 第一原理原子エネルギー計算が実現するオートノマス機械学習分子動力学法の創成（科研費基盤B（分担者））
- 第一原理機械学習手法によるナノ異材界面の力学特性の解明（JSTさきがけ）
- 機械学習を用いた高精度原子間ポテンシャルに基づくMg合金の欠陥挙動の解明（科研費基盤C）
- 第一原理計算に基づくミルフィーユ構造のフォノン物性の解明（科研費新学術公募研究）
- 計算科学的手法とマイクロ材料試験によるマグネシウム合金の変形機構解明（科研費基盤C）
- ソフトインデンテーションの構築（科研費萌芽（分担者））



マグネシウムのき裂-双晶-転位の欠陥間相互作用のMD解析



表面成長におけるひずみの効果に関するKMCシミュレーション

Mechanical Systems Engineering Division

Elucidating mechanisms of material properties by atomistic simulations



Our laboratory aims at understanding material properties and phenomena from electronic and atomic levels. Utilizing state-of-the-art atomistic calculations, we study mechanisms of material properties, such as defect dynamics associated with plastic deformation and fracture in crystalline materials, and mechanical strength of interfaces between dissimilar materials.



**Professor
Daisuke Matsunaka**

Research area:
Computational materials
science, Solid mechanics,
Theoretical condensed
matter

>> Beginnings of my path to academia

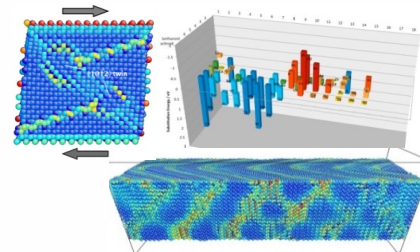
Your world of learning expands greatly at university. You will encounter the depth of knowledge built by pioneers, while also realizing that many questions remain unsolved. You may even witness new discoveries and the growth of academic fields. Through this journey, you are sure to find an area that excites your curiosity. The knowledge and skills you gain will form the foundation for your way of thinking.

>> In the Future

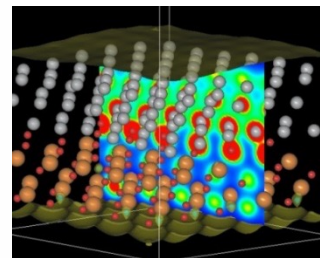
Materials consist of electrons and nucleus. it is a challenging problem to link microscopic behavior to macroscopic properties. We study material properties from the multi-scale viewpoint, toward a future manufacturing technology to design new materials from electronic and atomic levels.

>> After Graduation

All members in our laboratory are promising candidates of researcher and engineer developing new materials and utilizing materials for functional products, due to their skills and knowledge acquired through research activities.



Molecular dynamics simulations of deformation in magnesium and density functional calculations of effects of alloying elements on defect energies.



Electronic states of an interface between metal and oxide materials by density functional calculations.