



ナノスケール材料とは、材料寸法が数ナノメートル[nm] ($=10^{-9}[m]$) であったり、特徴的な構造がnmレベルに存在するような材料です。材料寸法が小さくなると相対的に原子一つ当たりが占める割合が大きくなるので、材料を原子の集合体として評価する必要があります。そこで本研究室では、原子間に生じる相互間力から原子の運動を追跡する分子動力学法という計算手法を用いて、材料の変形をシミュレーションすることで、ナノスケール材料の変形メカニズムについて検討しています。



准教授 西村 正臣

2009年 神戸大学大学院自然科学研究科 博士課程 修了
信州大学工学部助教、講師を経て、2017年4月より現職
研究分野は分子動力学、計算固体力学、材料力学

>> 私の学問へのきっかけ

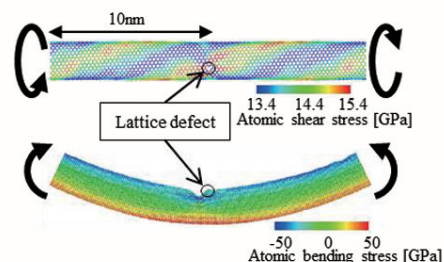
大学に入ったものの、機械工学の中で興味がある専門分野を決めきれずにいました。そんな中、ものを作るためには材料がなくては始まらない。材料力学、固体力学は機械工学の土台であるといった講義に感銘を受けました。それまで、材料研究は機械工学の中でも地味なイメージしか持っていませんでしたが、その言葉に導かれ研究を始めてみると、実験やシミュレーションによる材料特性の評価、予測など非常に興味深いものでした。

>> 研究から広がる未来

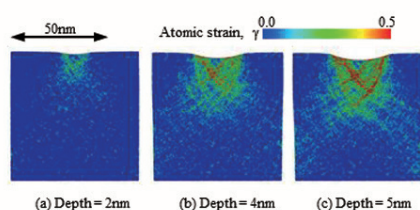
西村研究室では、計算機シミュレーションにより、様々なナノスケール材料を検討しています。まだ実用化が困難な新素材や、機械的特性が十分に理解されていない材料が、我々の身近な材料となることで、より便利で安全な未来が期待されます。

>> 卒業後の未来像

卒業生の進路は、自動車メーカーや家電メーカーなどと多岐にわたります。本研究室で培われる材料の機械的特性の理解力・考察力や計算機を用いたシミュレーション技術の体得は、社会に出てからも役に立ちます。



実際には見ることが出来ないナノスケールの変形を計算機実験により検討できる。図は、欠陥を有するCNTのねじり・曲げ解析



材料内部で生じる複雑な原子構造変化なども、計算機シミュレーションによって解明できる。図は、金属ガラスに対する押し込みシミュレーションにおける原子ひずみ分布

先鋭融合

機械物理

知能機械

研究キーワード

計算固体力学・分子動力学・不安定性解析・カーボンナノチューブ・炭素複合材料・金属ガラス・無機ガラス・アモルファス材料

研究シーズ

- カーボンナノチューブの座屈特性に関する不安定性解析
- ナノ炭素/ポリマー複合材料に関する分子動力学解析
- 金属ガラスにおける変形の局所化の解明
- シリカガラスにおける変形および熱依存性に関する原子シミュレーション

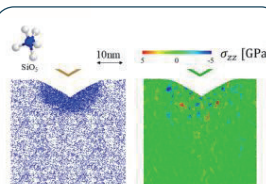
共同研究・外部資金獲得実績

- 炭素繊維破壊のシミュレーションとメカニズム解明（民間企業との共同研究）
- 金属ガラスの変形・破壊の分子動力学シミュレーション：局所格子不安定性による検討（科研費（特別研究員DC1））
- レーザー超音波を用いた多層構造燃料電池セルの密着強度・靱性評価法の開発（科研費（基盤研究A）分担）
- 局所不安定性解析を用いた欠陥を有する多層カーボンナノチューブの座屈特性評価（科研費（若手研究B））
- 多層カーボンナノチューブの局所座屈と全体座屈を評価するための不安定性解析の構築（科研費（基盤研究C））
- CFRPの長期信頼性向上を目的とした材料設計・評価システムの開発（JST未来社会創造事業（探索研究）分担）
- 分子動力学法によるカーボンナノフレキシブルシャフトの基礎的特性評価（科研費（基盤研究C））
- エポキシ樹脂の原子レベルでの不均一変形挙動を理解するための局所靱性評価（科研費（基盤研究C））

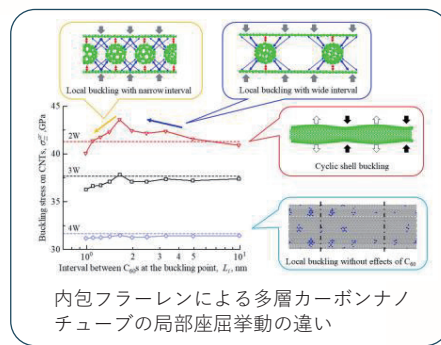
最近の研究トピックス



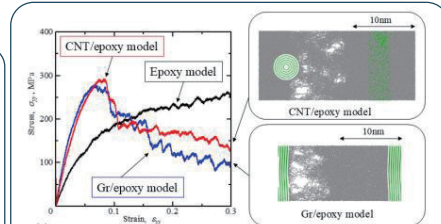
研究室計算機



シリカガラスの押し込み解析における残留応力分布



内包フラーレンによる多層カーボンナノチューブの局所座屈挙動の違い



ナノ炭素/エポキシ樹脂複合材料の引張挙動とボイド形成

Mechanical Systems Engineering Division

Solid Mechanics on Nanometre-scale Materials using Atomic Simulations



We study deformation mechanisms of nanometre-scale materials ($[nm] = 10^{-9}[m]$) by molecular dynamics (MD) simulations. MD can simulate the movement of each atom in a material. Using MD, we perform deformation simulations of various materials such as carbon nanotubes and bulk metallic glasses to reveal the deformation properties in atomic scales.



**Associate Professor
Masaomi Nishimura**

2009, Dr. Eng., Kobe University, Graduate School of Science and Technology.
Field of study: Molecular Dynamics simulation, Solid Mechanics.

>> Beginnings of my path to academia

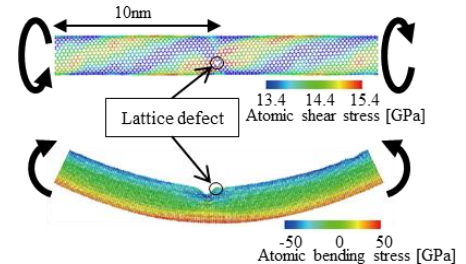
"To create anything, you need materials to begin with." I was deeply impressed by lectures stating that materials science and solid mechanics form the foundation of mechanical engineering. Until then, I had only viewed materials research as a rather unremarkable field within mechanical engineering. Then, I found evaluating and predicting material properties through experiments and simulations to be incredibly fascinating.

>> In the Future

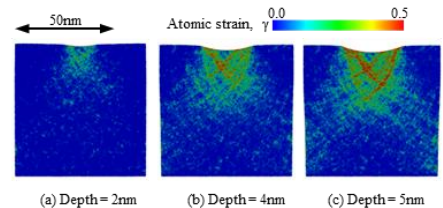
We study nanometre-scale materials using computational simulations. Carbon nanotubes and bulk metallic glasses are new materials discovered recently. We have to understand the properties of materials in order to use them in various products. Our studies reveal essential deformation properties of these new materials.

>> After Graduation

Graduates are working in broad fields such as auto and electronics industries. In this laboratory, students acquire the computation-simulation skill and the knowledge in solid materials, which will be very useful in your future jobs.



We can discuss deformation mechanisms in nanometre-scale materials by computer experiment. This figure shows torsional or bending deformation analysis of a defective carbon nanotube.



Computational simulations reveal complex changes of atomic structure in materials. This figure shows distributions of atomic strain under the indentation simulation on bulk metallic glasses.