

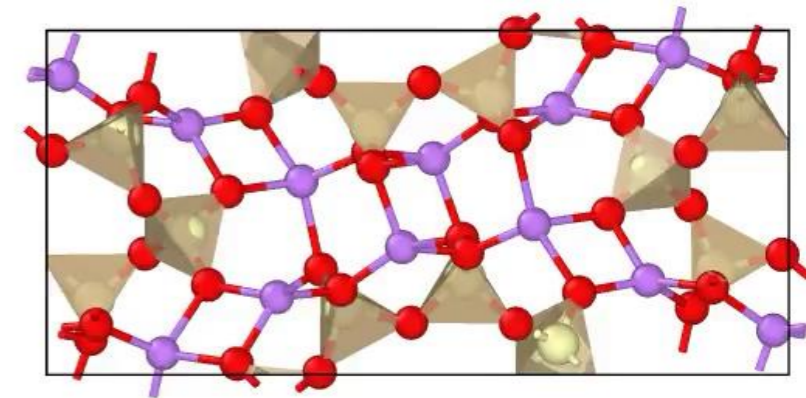
固体電解質材料の原子間力場構築 と分子動力学解析

2020年11月
名古屋工業大学 工学専攻
物理工学系プログラム
助教 小林 亮

従来技術とその問題点

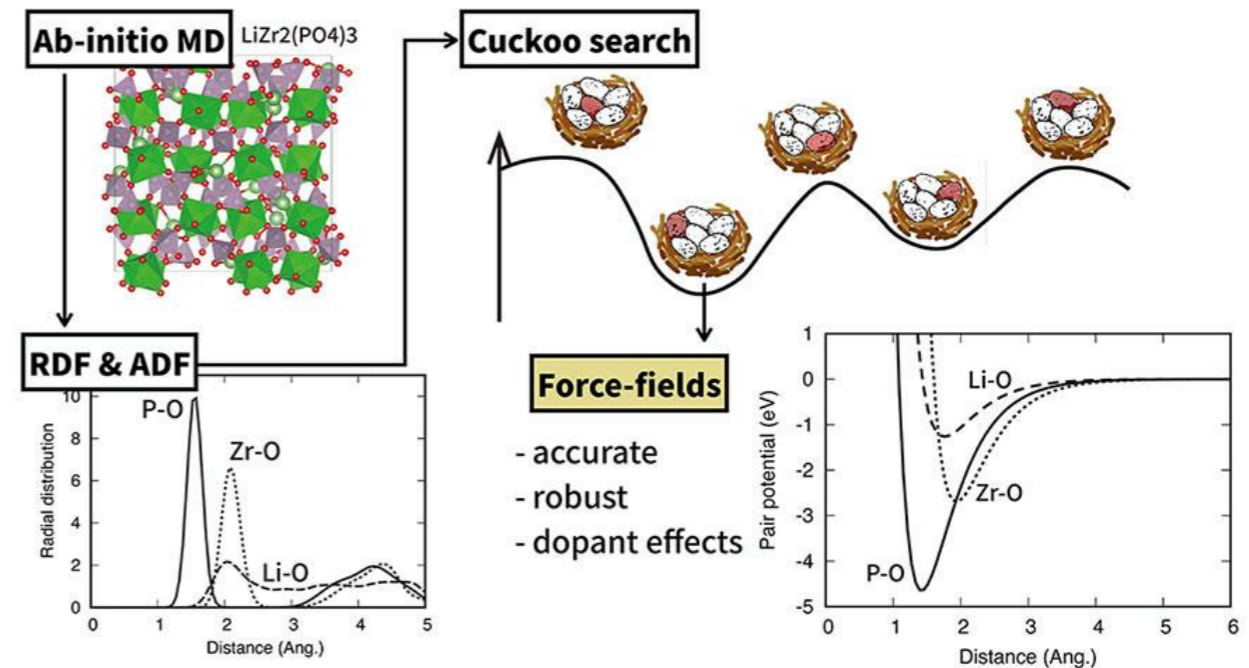
- 固体電解質の新規材料開発において、バルクのイオン伝導だけでなく界面のイオン伝導抵抗が重要.
- **分子動力学シミュレーション**は、界面でのイオンの動きの解析に有用.
- 原子間の相互作用を記述する**力場**が必要だが、それが存在しない新規材料の場合、分子動力学シミュレーションができなかった.
- **力場**の精度が悪いと結果が信用できない.

力場の精度が悪い場合のLPOのシミュレーション. 膨張してしまう.



新技術の特徴・従来技術との比較

- 本技術は、従来の課題であった、**新規材料の高精度な原子間力場を即座に構築**することを可能とした[1].
- 新規候補材料の大規模分子動力学シミュレーションが可能となった.
- 新規候補材料のイオン伝導機構解明, 粒界原子構造, イオン伝導の粒界抵抗の原子スケールのシミュレーションによる解析が可能.

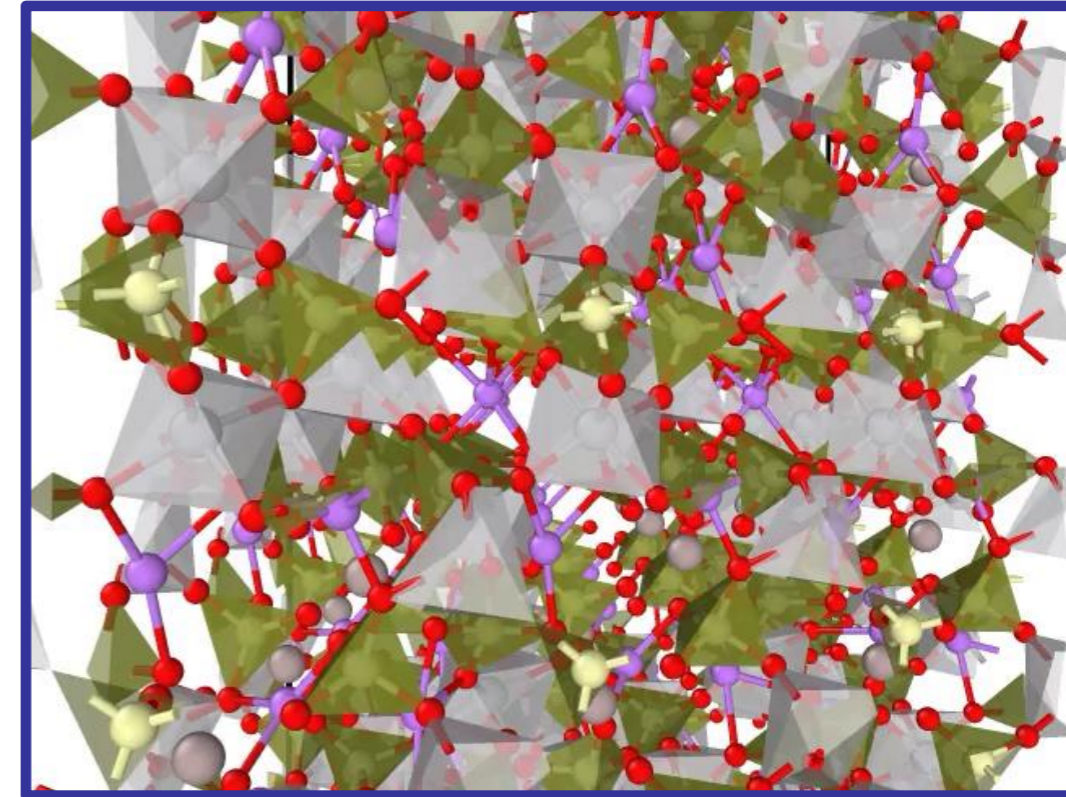


[1] R. Kobayashi, et al., APL Materials 8, 081111 (2020)

想定される用途・実用化イメージ

- 分子動力学シミュレーションを導入して材料研究・開発に活用したい場合.
- すでに分子動力学シミュレーションを活用しているが, 新規材料の力場がないためにシミュレーションできない場合.
- 100万原子以上の原子群の動きを可視化し, イオン伝導のような動的現象のより深い理解と材料設計の効率化につなげる.
- 粒界やヘテロ界面における原子構造やイオン伝導機構の研究を行うことが可能.

LATP内のLiの軌跡



求める連携先とメッセージ

- 蓄電デバイスやその他イオン伝導体の新規材料研究開発を行い、ミクロレベルからの理解を要求する企業。
- バルク特性だけでなく、粒界やヘテロ界面の原子構造やイオン伝導抵抗起源の解明を必要としている企業。
- 上記のような企業には、本技術の導入を是非ご検討いただきたい。



研究者近影



ソフトウェア(nap)

<https://github.com/ryokbys/nap>

本技術に関する情報

試作品の状況

提供可

※提供の際は諸手続が必要となるため、問合せ先までご連絡願います。

研究フェーズ



【お問合せ】

名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627 FAX:052-735-5542

E-mail: nitfair@adm.nitech.ac.jp

URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>