

ファインメカニクス

Finemechanics



教授
祖山 均



助教
中居 倫夫

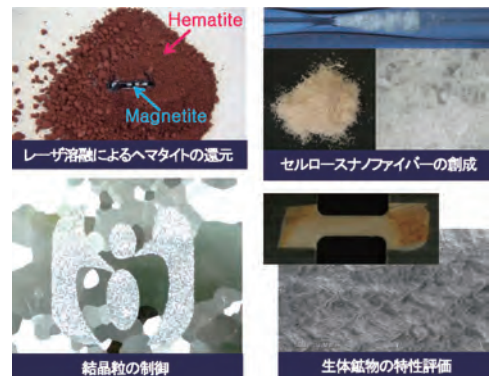
祖山・中居 研究室

材料メカニクス講座
知的計測評価学分野

<https://web.tohoku.ac.jp/ism/>



表面力学設計に基づいた材料強化およびその知的評価



新機能材料の創成

表面力学設計による機器・構造物の信頼性向上

低環境負荷かつ安全・安心な社会の構築のため、当該分野において開発したキャビテーションテクノロジーに基づいたサステナブル表面改質を用いた表面力学設計により機器・構造物に高機能表面層を付与し、疲労寿命の改善や水素脆化の抑止を目的として研究を行っている。表面層は力学的、化学的に苛酷な環境に曝されているため、表面力学設計により材料特性を大きく向上できる。昨今問題となっている橋梁などのインフラ構造物の老朽化に対する保全技術として適用できる一方、自動車などの移動体の構成材料を強化することで軽量化に繋がる。また、環境負荷低減を目的とした水素社会実現において水素を使用する際に懸念される水素脆化が障壁となっているが、サステナブル表面改質によって表面層の耐水素脆化性を向上でき、構造材料に対して水素脆化抑止効果を付与することができる。

CWLレーザを用いた酸化鉄の3次元積層造形

火星や月での構造物・機器の製造を目的として、酸化鉄を用いたレーザ溶融型3次元積層造形について、NASA ジョンソン宇宙センターと共同研究を行っている。これまでに、酸化鉄を原材料としてCWレーザを用いて3次元積層造形が可能であることと、レーザ溶融による3次元積層造形時に、ヘマタイトがマグネタイトに還元して酸素を得られることを明らかにしている。

サステナブル表面改質による生体材料の高機能化

高齢化社会を支える生体材料には高い信頼性が求められる。特に脊椎固定器具はロッドと固定器具の間に生じるフレット疲労が問題となっており、その耐性の改善が喫緊の課題である。そこで当研究室では、サステナブル表面改質により脊椎固定用インプラントロッド表面層に高機能層を創成し、フレット疲労に対する耐性を劇的に改善する研究を行っている。

流動キャビテーションによる セルロースナノファイバーの創成

再生可能かつ持続可能な材料への需要の高まりから、セルロースナノファイバーが注目されており、生化学的改質、変換が困難な天然セルロースを効率的にナノファイバー化する技術が求められている。そこで当分野では、ベンチュリ管の絞り部でキャビテーションを発生させる流動キャビテーションを活用して、セルロース系バイオマスから効率的に製造するための研究を実施している。

3D-Metal (金属製3次元積層造形材)の 機械的改質による疲労強度向上

3D-Metalは、CAD/CAMデータから直接造形できるなどの利点から、生体インプラントや航空機部品等への適用が期待されている。しかし、積層造形時の不完全溶融の金属粒子が表面に残存するために、表面が著しく粗く、疲労強度がバルク材の半分程度である。BOEING、オックスフォード大学、NTUなどと3D-Metalの疲労強度向上に関する国際共同研究を行っている。

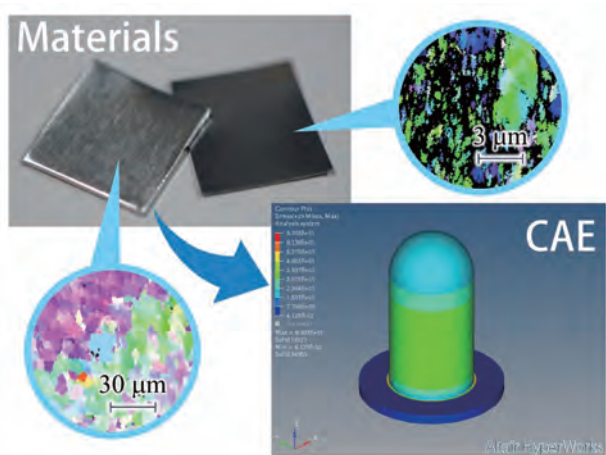
青柳 研究室

材料メカニクス講座
機械材料設計学分野

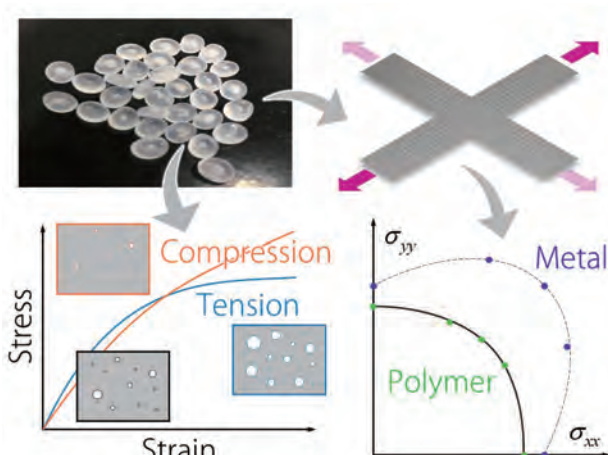
<https://web.tohoku.ac.jp/aoyagi/>



准教授
青柳 吉輝



超微細粒金属材料の微視構造を考慮した力学挙動の予測



熱可塑性高分子材料の力学非対称性・異方性評価

最先端材料に関する実験的マルチスケールメカニクス

我々の日常生活に必要不可欠な鉄、鋼、アルミニウムといった金属材料および樹脂、繊維、ゴムといった高分子材料は、過酷な状況下での使用や構造物の軽量化を目的として日々進化を続けています。構造材料としてのみならず、汎用性の高い最先端材料の成型性や信頼性を高めるために、その力学特性を材料の微視的挙動から理解し、変形挙動をより的確に表現可能な数理モデルの構築に期待が寄せられています。本研究室では、結晶構造に関する原子スケールと、構造体を巨視的に捉える連続体スケールといった異なるスケールの現象を同時に表現する理論体系、すなわちマルチスケールメカニクスに基づき、材料の複雑な振る舞いを計算シミュレーションによって解析していきます。さらに実験によって得られたデータと計算的研究とを融合させ、新しい知見を生み出すことを目的とします。

粒界・粒内転位源に基づくUltraFine-Grainedメタルの転位挙動シミュレーション

金属材料の結晶粒径を小さくしていくと機械的力学特性が向上することが経験的に知られています。しかしながら、結晶粒径が1μm以下という「UFGメタル」の微視的メカニズムについては十分に解明されていないのが現状です。本研究では、転位源としての粒界の役割を考慮したFEM解析を粒径の異なるAl多結晶に対して実施し、粒径の減少に伴う降伏挙動の変化について検討します。

結晶性・非晶性ポリマの微視的変形機構に基づく高分子塑性論の構築

結晶性高分子材料は、分子鎖が規則正しく配列されている結晶質およびランダムコイル構造を有する非晶質部分を有します。このような材料に関する研究に対して工業的な要請は強いものの、各相の特性について全く未知な部分が多いのが現状です。本研究では、球晶の変形挙動に関する実験観察に基づき、結晶質部分と非晶質部分の混在する結晶性高分子塑性モデルを構築します。

微細組織から力学挙動を予測する実践的CAEシステムの創成

構造解析用CAEに使用する降伏関数を数値解析的に予測します。その際に、実験観察・測定から得られる材料の微視構造の情報に基づいて変形挙動を記述する実験的マルチスケールメカニクスを用います。汎用の構造解析用ソフトウェアに求めた降伏関数を組み込むことによって、CAEによる材料設計から開発、実用までの一連のプロセスをシームレスにつなぐことを目的としています。

熱可塑性複合材料におけるトランスクリスタルの影響

結晶性高分子材料を母材とする熱可塑性複合材料においては、強化繊維のまわりにトランスクリスタル(TC)と呼ばれる結晶組織が形成されます。本研究では、成形時の熱条件および強化繊維の材質を変えて、異なる組織のTC層を持つ熱可塑性複合材料を作成します。組織観察や機械特性の測定を行うことによって、TC層が熱可塑性複合材料に与える影響について評価します。



教授
山口 健

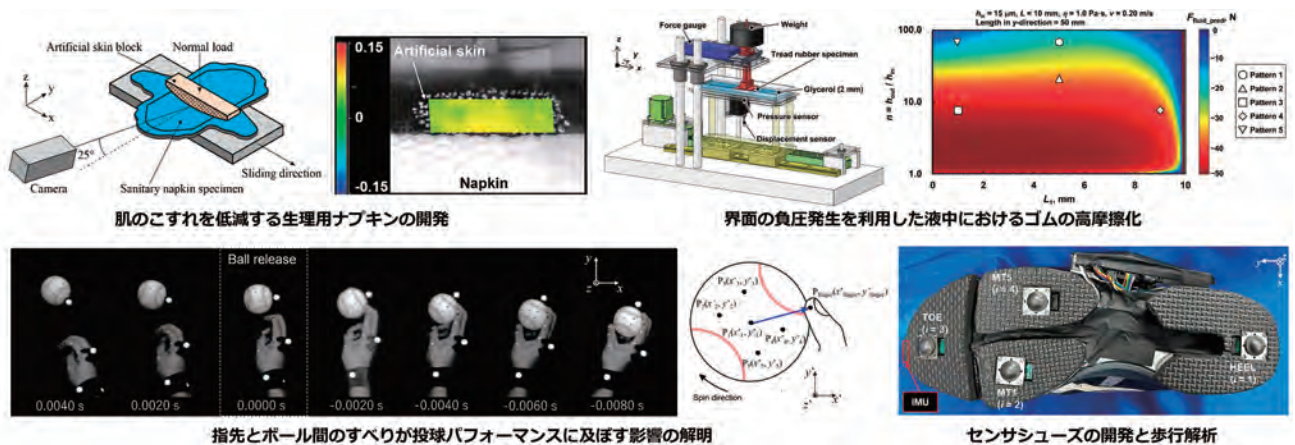


助教
石塚 新太

山口・石塚 研究室

ナノメカニクス講座
ソフトメカニクス分野

<https://web.tohoku.ac.jp/yamaguchi/>



ソフトメカニクスによるライフサポートイノベーション創成

山口・石塚研究室では、皮膚やゴムなどのやわらかな材料（ソフトマテリアル）の摩擦制御と人間の運動解析を基盤に研究を進めています。これらの知見を靴底、自動車タイヤ、スポーツ用品といった多様な応用に展開することで、安全・安心な生活環境の実現、スポーツにおけるパフォーマンス向上、障害予防へとつなげ、生活・生命支援（ライフサポート）分野における新たなイノベーション創出を目指しています。さらに、人間の歩行やスポーツ動作における身体運動と「すべり」の関係を解明し、転倒予防やリハビリテーション支援、スポーツ科学への応用を通じて、人々の健康と豊かな生活に貢献する研究を展開しています。

ソフトマテリアルの高摩擦化に関する研究

当研究室では皮膚やゴムなどのソフトマテリアルにおける摩擦発現メカニズムを解明し、高摩擦化を実現する研究を進めています。特に液中や湿润環境で摩擦が著しく低下する課題に対し、材料変形に伴う界面の負圧発生を利用し、高摩擦を安定的に発現させることを目指しています。本研究成果は、自動車タイヤ、靴底、医療機器など安全・安心を支える幅広い分野への応用が期待されています。

すべり・つまずき転倒の防止に関する研究

転倒事故は高齢者の寝たきりや労働災害の主要な原因となっており、解決すべき喫緊の課題です。転倒事故の多くは「すべり」や「つまずき」によって発生しています。当研究室では足底と床面間の摩擦に着目し、安定的に歩行するために必要な足底と床面間の摩擦条件を実験的・理論的に解明するとともに、すべりやつまずきによる転倒を防止するための技術開発に取り組んでいます。

スポーツにおける摩擦とその知覚がパフォーマンスに及ぼす影響に関する研究

人間の運動と外界との接触・摩擦、さらにそれに対する知覚との相互作用については、従来、経験的・感覚的な理解にとどまっているのが現状です。当研究室では、野球の投球動作を対象に、ボールと指先の摩擦の大小やその知覚が動作をどのように変容させるのか、またそれがパフォーマンスや障害発生にどのような影響を及ぼすのかを明らかにする研究に取り組んでいます。

産学連携の取り組み

当研究室では、産学連携を通じて研究成果の「社会還元・社会実装」に積極的に取り組んでいます。これまでに、東京五輪ボランティアシューズ、パリ五輪陸上競技・日本代表およびオランダ代表選手団用ウェア、さらには肌のこすれを低減する生理用ナプキンの開発・実用化に貢献してきました。その他の研究内容や成果については、当研究室のホームページをご覧ください。



教授
高 偉



助教
佐藤 遼

高・佐藤（遼）研究室

ナノメカニクス講座
精密ナノ計測学分野

<https://web.tohoku.ac.jp/nanometrology/>



多自由度運動のナノ計測制御

当研究室では、精密加工品の形状及び精密機械の運動を必要な精度で計測するという精密ものづくり計測の研究に取り組んでいる。独自の計測原理に基づき、グレーティングなどの微細格子と波動光学系を組み合わせることによって、超精密ものづくり計測の基本道具となる高精度かつコンパクトな多軸変位、角度センサ（サーフェスエンコーダシステム）を提案してきた。本システムでは、回折光干渉型3軸変位センサとオートコリメーション法を原理とする3軸角度センサを組み合わせることで、1つのレーザープローブで、平面ステージの超精密位置決め利用可能な最大6自由度の位置・姿勢検出を可能としている。また、これを並進および回転姿勢変化の多自由度を有するサーフェスモータステージと組み合わせ、簡便な構成で多自由度の位置・姿勢を制御可能なステージシステムの研究も行っている。

精密ナノ位置目盛り創成のための 微細格子作製に関する研究

3次元微細形状は、計測基準面、マイクロレンズアレイなど様々な分野において用いられている。本研究では、レーザー干渉リソグラフィ手法として非直行型ロイドミラー干渉計による大面積微細格子の創成法を検討している。創成した微細格子をサーフェスエンコーダにおける精密ナノ位置目盛りとして用いることで、上記サーフェスエンコーダシステムを提案することを可能としている。

感度安定化角度センサの研究

レーザーオートコリメーション法を原理とする光学式角度センサは光スポット径が光源の光周波数ゆらぎに従い変動するため、長時間の角度計測の場合にはセンサ感度が安定しないという欠点があった。本研究ではフェムト秒レーザを光源とし、その周波数スペクトルである光コム（Optical Comb）の性質を利用してセンサ感度を安定化させることを目的とした角度センサの開発を行っている。

超高精度自律校正法の研究

サーフェスエンコーダの精密ナノ位置目盛りに用いられる微細格子のピッチ間隔ゆらぎはセンサ出力の確からしさ揺らぎにつながる。本研究では、格子ピッチ間隔を上記角度センサとの組合せによって高精度校正する手法を検討している。さらに、サーフェスエンコーダに限らずセンサ出力が有する不確からしさを上位校正機器を必要とせず自律的に校正可能とする手法の研究を行っている。

非線形光学に基づく超精密位置・角度計測に関する研究

短時間に高強度光を発振するフェムト秒パルスレーザの特徴によって、非線形光学現象を発生させることでこれまでにない新たな計測法の検討を行っている。非線形光学現象の一つである第二高調波発生現象を応用し位置と角度を同時に取得可能とする集束光プローブを開発した。さらに、機械学習との組み合わせにより高精度・高確度計測を可能とする信号処理法の研究を行っている。

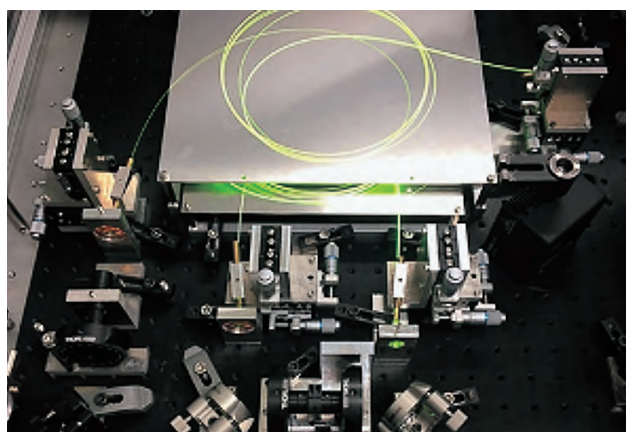
松隈 研究室

ナノメカニクス講座
精密ナノ計測学分野

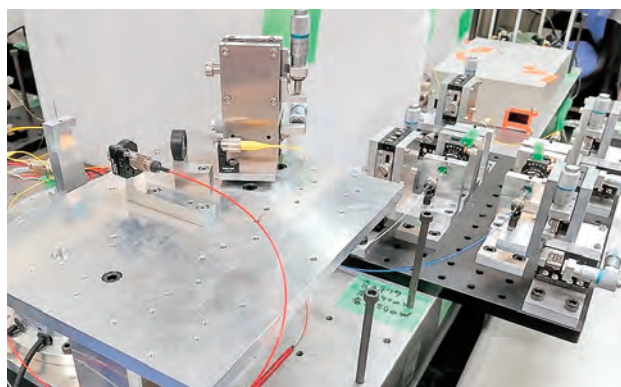
<https://web.tohoku.ac.jp/nanometrology/>



准教授
松隈 啓



中赤外ファイバーレーザーシステム



運動計測光センサ光学系

先進レーザー光によるものづくりのための計測技術の開拓

測れないものは作れない、という言葉があります。これは、測定ができるということがものづくりの根幹であることを示しています。半導体などの益々精密になるナノメートル精度製品の生産や、新しい材料の物性評価などを実現するために、計測学が重要な役割を果たしてきました。こういった物体の動きや形状を測定するためには、計測原理が必要であり、またそれを実現する測定装置・センサが必要です。

私たちの研究室では、これまで誰もできなかった測定に挑戦するために、新しい測定原理を創出し、それを深化させる研究を行っています。また、そのために必要な超短パルスレーザーや光周波数コム、中赤外線レーザーといった先進的なレーザー光源や、2軸スケール回折格子などの計測のために必要な道具を自らの手で設計・製作する方法についても研究し、これらを応用した測定にも挑戦しています。

光周波数コムによる運動および形状計測用センサ

近年、光周波数コムと呼ばれる周波数を精密に制御したレーザーを用いた光計測が盛んに行われています。私たちは、光周波数コムの精密な周波数を利用して、物体の運動および形状を桁違いに正確に測定する方法を研究しています。最近では、光周波数コムを2台用いたデュアルコム分光法に取り組み、極めて正確な角度の計測法の創出について研究しています。

中赤外線レーザーによる粗面の角度運動計測センサ

リニアガイドのような直線運動を行う装置の運動誤差(曲がって動いていないか)を測定するために、物体の回転運動を測定する装置が必要になります。従来、平滑面に対して可視光レーザーを用いた角度測定装置が用いられてきました。私たちは平滑面が得られない状況でも測定が可能となるよう、粗面を測定対象として可視光より波長の長い中赤外線レーザーによる測定センサを研究しています。

レーザー加工法の開拓

レーザー加工は従来の機械加工法では困難であった様々な加工を実現しています。例えば機械加工法では困難な難削材の加工、レーザーの高いエネルギー密度を利用したピンポイントの高効率加工などが挙げられます。私たちは干渉リソグラフィ法による微細形状形成や、透明加工材料の高エネルギー加工、はつ水加工や導波路形成などの機能性表面・デバイスを付与するための加工を行っています。

レーザー光源の研究・開発

レーザー光は計測・加工に対して非常に有効であり、新しいレーザー光源が普及すると新たな学術分野・工学応用に広がられます。新しいレーザー光源を作る際のパラメータは光の波長、パルス幅、光エネルギー、偏光状態などがあり、これらの中から実現可能かつ応用範囲の広そうなレーザー光源の開発に挑戦しています。上記の研究の多くは、開発・設計したレーザー光源を用いて行っています。



教授
燈明 泰成



助 教
木村 由斉

燈明・木村 研究室

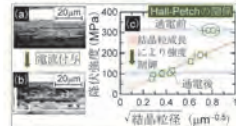
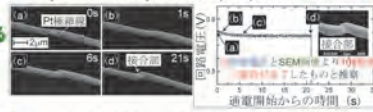
ナノメカニクス講座
材料システム評価学分野

<https://web.tohoku.ac.jp/tohmyoh/index.html>

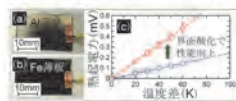


↑原子拡散現象を利用して様々な金属・半導体ウイスカを作製
T.H.Ludwig & H. Tohmyoh: J. Cryst. Growth **574** (2021) 126311.
Y. Kimura & H. Tohmyoh: Scr. Mater. **210** (2022) 114469.

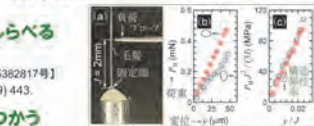
↑金属細線に一定直流電流を付与して生じるジュール熱により、細線同士を高確度で接合【特許第5124770号】
H. Tohmyoh, et al.: Scr. Mater. **57** (2007) 953.
H. Tohmyoh & S. Fukui: Phys. Rev. B **80** (2009) 155403.



↑結晶粒を成長させた細線の降伏強度を評価【特許第5362817号】
H. Tohmyoh, et al.: J. Soc. Mater. Sci., Jpn. **68** (2019) 443.



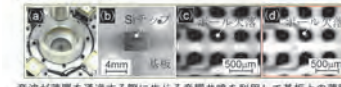
↑毛髪や爪の力学特性を定量的に評価【特許第5804549号】
H. Tohmyoh, et al.: Acta Biomater. **76** (2018) 108.
H. Tohmyoh, et al.: J. Mech. Behav. Biomed. Mater. **113** (2021) 104166.



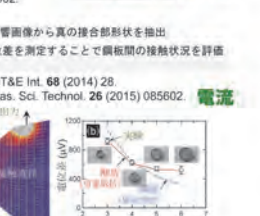
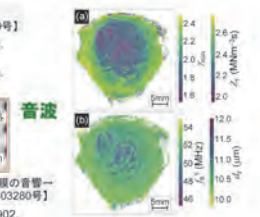
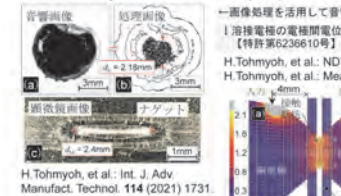
↑薄膜や細線を利用した熱電変換素子により低温度差から発電
H. Tohmyoh & T. Daimon: Microelectron. Eng. **159** (2016) 38.
N. Ogi & H. Tohmyoh: Jpn. J. Appl. Phys. **58** (2019) SDD105.

微細な材料をつくる・つなぐ・しらべる・つかう

↑水とサンプルとの間に音響結合層として機能する薄膜を介して高周波超音波を高効率に伝達する手法を開発【特許第5709559号】
H. Tohmyoh & M. Saka: IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. **50** (2003) 661.
H. Tohmyoh & M. Saka: IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. **51** (2004) 423.



↑音波が薄膜を透過する際に生じる音響共振を利用して基板上の薄膜の音響インピーダンス (a) と膜厚 (b) を可視化することに成功【特許第4403280号】
H. Tohmyoh & Y. Sakamoto: Rev. Sci. Instrum. **85** (2014) 024902.
H. Kim & H. Tohmyoh: Rev. Sci. Instrum. **93** (2022) 064901.



音波や電流を利用した材料システムの先進評価

新しい材料システムを創るために～微細な材料をつくる・つなぐ・しらべる・つかう～

本研究室では学際的なアプローチにより新しい材料システムを創出するための研究を行っている。具体的に、優れた物理的諸特性と幾何学的特徴を有する微細材料を活用するための周辺技術に係る一貫した研究(材料をつくる・つなぐ・しらべる・つかう)を展開している(図1)。微細な材料同士の接触部に一定直流電流を付与した際、接触部がジュール熱により局所的に熔融する現象を支配する因子を発見して材料同士を高確度で接合可能にしている。また原子拡散現象を利用して作製した金属／半導体ウイスカ等の力学特性を評価してこれを制御、あるいは電気特性を評価してこれを活用したセンサを開発している。微細材料に関する独自の実験技術を駆使して毛髪や爪の研究も展開している。さらに次世代材料システムの性能と信頼性の鍵を握る接合界面や薄膜を音波や電流を用いて検査する手法を開発している。

微細材料の力学／電気特性評価とその活用

微細材料を有効に活用するためにはその物理的諸特性を正確に把握する必要がある。極微小力を計測する荷重センサを開発して微細材料の力学特性を評価すると共に、ジュール熱により材料の結晶粒を成長させてその強度を制御することに成功している。また表面にナノワイヤを有する薄膜の電気特性を評価すると共に、その特性を活用して溶液の濃度を高感度に検知する液体センサを開発している。

毛髪や爪の力学特性評価と形状の理解

日々成長する毛髪や爪の物理的諸特性や形状には様々な分野で活用できると期待される有益な情報が含まれている。多層構造を有する毛髪や爪の外形寸法に依らない引張や曲げに対する変形能を表す構造弾性率を提案し、シャンプー・コンディショナー処理やマニキュア塗布が毛髪や爪の変形能に及ぼす影響を評価することに成功している。また毛髪の形状を決定づける因子の解明に取り組んでいる。

薄膜や細線を利用した熱電変換素子の作製

鉄薄板の表面にアルミニウム薄膜を蒸着して異種金属界面を形成することで、薄板の長手方向の温度勾配に起因して起電力が生じる薄板型熱電変換素子を開発している。また身の回りの温度差を有効に活用すべく、鉄薄板の表面を酸化する、あるいは素子を積層する等して高出力化を図っている。さらに同様の原理に基づく熱電変換マイクロワイヤを作製し、極微小領域の温度計測を可能にしている。

音波や電流を利用した材料システムの先進非破壊評価

水と被検査物との間に薄膜を介して高周波数超音波を伝達するドライ超音波法を開発し、これにより電子部品の水非接触下における高分解能内部可視化に成功している(図2)。また当該超音波伝達系で生じる音響共振を利用した映像法を開発し、各種薄膜の物性値や膜厚を可視化することに成功している。さらに音波や電流を利用して材料システムの要である接合部を評価する手法を開発している。

白須 研究室

ナノメカニクス講座
材料システム評価学分野

<https://web.tohoku.ac.jp/tohmyoh/index.html>



准教授
白須 圭一



循環材料設計学が拓くグリーンマテリアルシステム

本研究室では、熱可塑性樹脂、炭素繊維やナノフィラーを含有した熱可塑性樹脂複合材料およびそれらのリサイクル材の物性評価や先端計測（物性・構造を観る）およびシミュレーションを利用した新材料の設計と、それに基づく新材料の創製を網羅する循環材料設計学を構築・開拓し、グリーンマテリアルシステムの創成に向けた研究開発を行っている。3D 積層造形による付加製造や異種材料への直接接合を進めることで、切削・接合工程の削減が可能となる。また、素材のリサイクルを考慮した材料設計も重要であり、NanoTerasu 等を利用した放射光計測により、熱可塑性樹脂の溶融・固化による材料劣化挙動の理解を進める。これらの研究を通して、プラスチックのライフサイクルを作り替え廃棄やロスのない部材で資源循環できる仕組みを構築し、循環型社会形成に向けた取り組みに貢献していく。

3次元積層造形による熱可塑性樹脂複合材料/ 金属の異種材料接合技術開発

3D プリンタを用いた樹脂、金属、複合材料の造形技術により、高強度・高剛性な材料が短時間で立体造形できる。本研究では、金属基板上に炭素繊維 / 熱可塑性樹脂複合材料を直接造形したハイブリッド材料を開発し、接着剤を使わずに高い接着強度を発現させることに成功している。金属基板の3D 造形や表面化学修飾による化学的・物理的相互作用の制御についても検討している。

マルチマテリアル材料の界面接合強度評価

無機材料と接着剤（熱硬化性樹脂）との界面強度を、新規に開発した接着強度試験法と有限要素解析により評価することに成功している。接着基板の凹凸形状による物理的相互作用の影響についても検討している。また、この評価手法を熱可塑性樹脂複合材料 / 金属ハイブリッド材にも展開し、異種材料間の接着・剥離メカニズムの解明を目指している。

再生プラスチックの物性・構造相関分析と新材料創製

製造業の再生プラスチック使用量に目標設定・使用実績の報告義務化が進められており、高品質な再生プラスチックの需要が急速に高まっている。本研究では、物性評価や放射光 X 線計測により再生プラスチックの物性・構造が変化するメカニズムを観て理解し、分子シミュレーションを活用しながら劣化抑制や機能性付与を志向した新材料の創製を目指している。

熱可塑性樹脂複合材料の高効率リサイクルに向けた 母材樹脂劣化挙動評価

熱可塑性樹脂を母材とした繊維強化複合材料の高効率リサイクルの実現に向けて、リサイクル工程を繰り返すことに伴う母材樹脂の物性・構造、繊維の長さや配向分布の変化を、赤外分光法や放射光 X 線回折・CT によって評価する。ここで得られる数値データをシミュレーションに入力して複合材料の力学特性を解析することで、樹脂や繊維の劣化に伴う力学特性発現メカニズムを明らかにする。

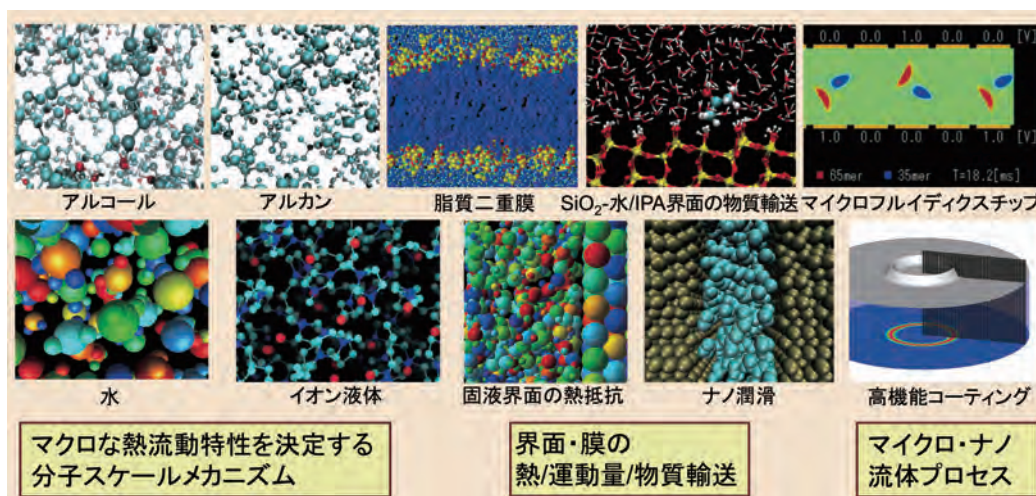


教授
小原 拓

小原 研究室

協力講座
分子熱流動研究分野

<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/mht/jp/index.html>



分子熱流体工学

流体が示す熱・運動量・物質の輸送特性を、物性値や界面特性などのマクロな概念を越えて理解することは、近年のナノテクノロジーにおいて問題となる微細スケールにおける熱流動現象を理解するだけでなく、マクロな熱流動特性を決定する分子スケールのメカニズムを知って希望の特性をもつ流体や界面を設計することにつながる重要なステップである。液体・ソフトマターやこれらと固体壁面との干渉を主な研究対象として、熱伝導率や粘性などマクロ熱流体物性、輸送物性の異方性、固液界面の熱抵抗や物質輸送など、現象の解明と問題解決に取り組んでいる。これらの実践を通じて、ミクロ・マクロな熱流動特性を分子運動で表現するための学理と分子動力学シミュレーションとを主な道具に用い、物理化学的手法を機械工学における熱流体研究に組み入れた新しい体系の構築をめざす。

流体の構造と熱・運動量の分子スケール輸送特性

液体中には様々な構造が存在し、その動特性が液体中の熱・運動量・物質輸送現象を支配している。液体構造の輸送特性を解析することにより、なぜその液体の輸送物性値はその値なのか、希望の輸送物性をもつ流体はどのような分子構造をもっているべきか、などの疑問を解明する。また、脂質二重膜などソフトマターの構造と非等方性輸送現象を解析し、新しい材料としての応用をめざす。

固液界面における熱・物質輸送特性

固体・液体が接する界面における熱・物質輸送現象は、NEMSや多孔質体など微細構造系の総括的特性を支配している。また、半導体製造工程のウェットプロセスなど微細加工では、製品の成否を決定する鍵となっている。界面近傍の液体中に発現する特異な構造や、固体分子-液体分子間のエネルギーの伝搬を解析する分子動力学シミュレーションにより、現象のメカニズムを解明している。

液体分子の熱エネルギー伝搬特性データに基づく熱媒流体の設計

エネルギーの高効率利用や熱機器の高機能化において、熱媒流体は大きな役割をもつ。分子を構成する様々な官能基など原子群がなす力学的エネルギー伝搬への寄与を解析し、それらが集積して発現する熱エネルギー伝搬特性のデータに基づいて、様々な使用条件に対して最適な熱媒を実現する分子を予測する。これにより、流体や熱流動現象の設計法を確立する。

高機能コーティング

コーティングは、気液・固液の界面現象とマイクロ・ナノスケールの流動現象が連成した複雑な応用技術である。半導体製造過程のレジスト塗布など、分子スケール膜厚のコーティングに要求される条件はますます厳しくなる一方、塗布膜分子の配向制御や塗布分子の吸着脱離を制御するダイナミックコーティングなど、新しい課題も出現している。分子熱流動解析の応用によりこれらを解決する。

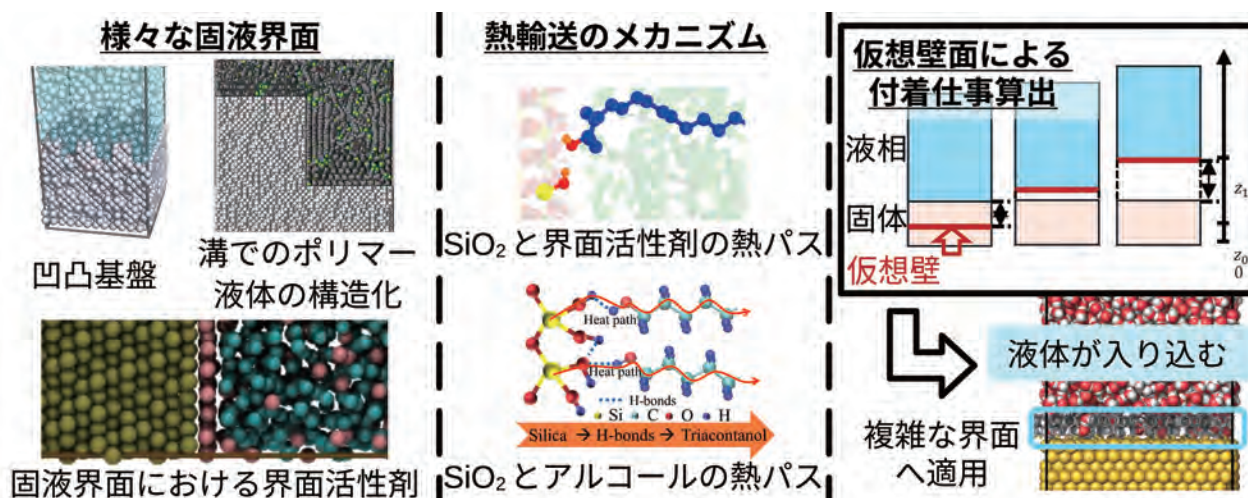
Surblys 研究室



准教授
SURBLYS Donatas

協力講座
分子熱流動研究分野

<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/mht/jp/index.html>



数値顕微鏡でみる分子スケールの熱流体とその界面

近年、電子デバイスやエネルギー変換システムの高性能化に伴い、その熱マネジメント技術の発展が社会的課題となっている。特に半導体デバイスの高集積化やバッテリー技術の進化によって、ナノスケールでの熱輸送制御が工業的に重要性を増している。分子動力学シミュレーションという「数値顕微鏡」を用いて、物質のバルクや界面における熱輸送特性、濡れ現象などを原子・分子レベルで解析している。これにより、実験的観測が困難なナノスケールでの熱の流れや分子の振る舞いを可視化し、新たな物理的洞察を得ることが可能になり、新材料開発及び省エネルギー技術の基盤の開発につながる。さらに、分子動力学シミュレーションの解析手法そのものの拡張や新開発、使いやすい形での提供によって熱物性を扱う数値計算分野全体の水準の引き上げを目指している。

多様な界面の濡れ性評価法の開発

固液界面において濡れ性は大変重要な指標であり、界面の熱輸送特性とも深く関連している。マクロスケールでは固体表面上の液滴の接触角を測れば済むところ、ナノスケールではそれは困難となる。そこで、濡れ性を表す付着仕事（固体と液体をはがす仕事）を仮想壁面を使うなど分子動力学ならではのやり方によって求めた。適用可能な界面を広げべく、手法のさらなる拡張に努めている。

複雑な形状を有する固液界面の熱輸送特性評価

ナノデバイスや冷却技術の進化によって、複雑な形状を持つ固液界面での熱輸送現象の理解は不可欠である。分子動力学シミュレーションを用いて、原子・分子レベルでの熱エネルギー移動を直接追跡し、界面熱抵抗や局所的熱流の挙動を解明している。さらに、界面の形状や構成が複雑になると、従来の解析手法が適用困難になることから、新たな解析手法も開発している。

現実的で複雑な計算系における厳密に正しい応力・熱流束の算出方法

近年の計算機の進歩によって、より現実的な計算系の分子動力学シミュレーションが可能になっており、当然ながら、力やエネルギーを算出する式も煩雑になってきた。その副作用として、応力や熱流束といった基本的な輸送量ですら計算が困難になってきた。複雑な多体ポテンシャルを有する系でも、比較的簡単に応力・熱流束を計算する方法を開発することで、より精密な解析が可能となった。

計算モデルの熱輸送特性の精度向上

分子動力学シミュレーションに使われる計算モデルは主に構造や熱力学的性質の再現を目的として開発され、密度汎関数理論計算や実験値との整合性から調整されてきた。しかし、これだと熱伝導率などの輸送特性の再現が不十分であることが課題である。培ってきた熱輸送に関する解析手法を生かし、熱輸送特性の高精度再現に重点を置いて、既存のモデルの調整や新たな作成を目指している。

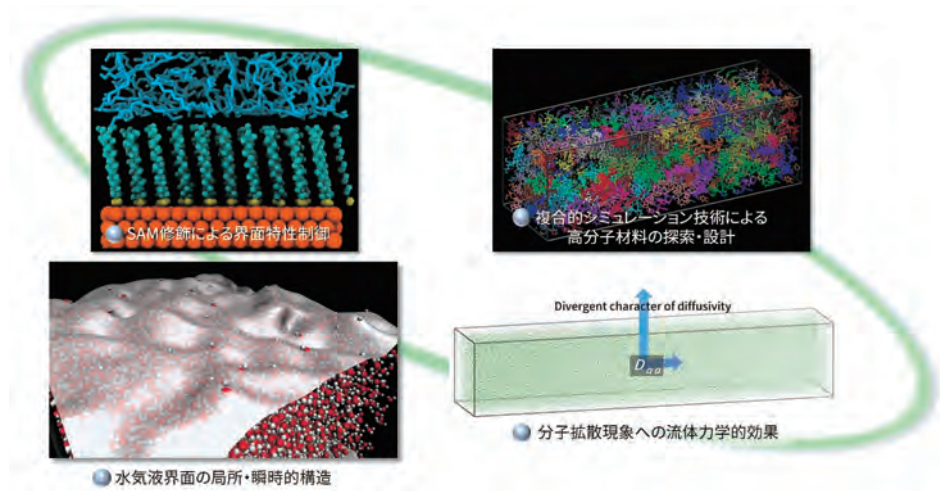


教授
菊川 豪太

菊川 研究室

協力講座
分子複合系流動研究分野

<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/mht/>



分子シミュレーションを用いた
分子複合システムの解析

複合的なシミュレーション技術を用いた分子熱流体现象の解明

ナノスケールからマクロスケールに渡る多くの工業・産業プロセスにおいては、分子レベルの物理が複合的に関与する熱流動現象が数多く見られる。特に、デバイス表面での放熱性能の向上による次世代半導体デバイスの限界性能向上、熱流動特性や機械特性の最適化による新規高分子素材の探索・設計には、界面での熱流動特性や不均質媒体における分子スケール構造と輸送特性の相関など、複合的な視点での現象理解が不可欠となっている。そこで、分子動力学法をはじめとした大規模数値シミュレーションにより、熱流体工学におけるミクロスケールの熱・物質輸送現象およびマクロな熱流体物性を支配するミクロスケールメカニズムの解明を目指して研究を行っている。また、複数のスケールに渡る数値解析技法の統合によってマルチスケール性を有する熱流動現象の解析を目標としている。

有機分子膜による表面修飾の研究

自己組織化単分子膜 (SAM) をはじめとした有機分子による表面修飾技術は、固体表面の物理化学的特性を制御する技術として、種々のプロセスやデバイスへの応用が進んでいる。有機分子薄膜の自己組織化や自発的構造形成を利用したボトムアップの表面修飾技術によって、特異な界面特性を得ることができる。これら界面の界面親和性や界面を介した熱・物質輸送特性を明らかにしている。

高分子材料の熱流動特性

産業的にも広く利用が進んでいる高分子材料の開発には、内部の分子スケール構造や相分離構造の制御によって、力学的・化学的特性のみならず熱流動特性を設計することが必要とされている。分子スケールからマクロスケールに至るスケール複合的な解析手法やデータ科学の技術を駆使して、有用な熱流動特性や機械特性を有する高分子材料の探索・設計を目指している。

不均質媒体/制限空間内の流体における輸送現象

流体やソフトマター界面、ナノスケール構造によって形成される制限空間内の閉じ込め液体においては、界面近傍における液体中の不均質 (ヘテロ) な構造発現に伴い、特異な熱・物質輸送特性が現れる。本研究を通じて、均質なバルク液体中と大きく異なる閉じ込め液体の分子輸送特性を明らかにし、それらに基づくマクロな熱流体解析への橋渡しとなる物理モデルの構築を目指している。

分子拡散現象に対する流体力学的効果の解明

分子拡散現象は、多孔質体やナノ細孔、生体高分子を介した物質移動などナノ・バイオ工学レベルで広く重要な要素となっている。これらミクロスケールの拡散現象においては、流体力学的効果によって分子ダイナミクスが強く影響を受けることが明らかになっている。ヘテロな構造における輸送現象の本質的理解を目指し、流体力学と分子動力学の融合的な研究を行っている。

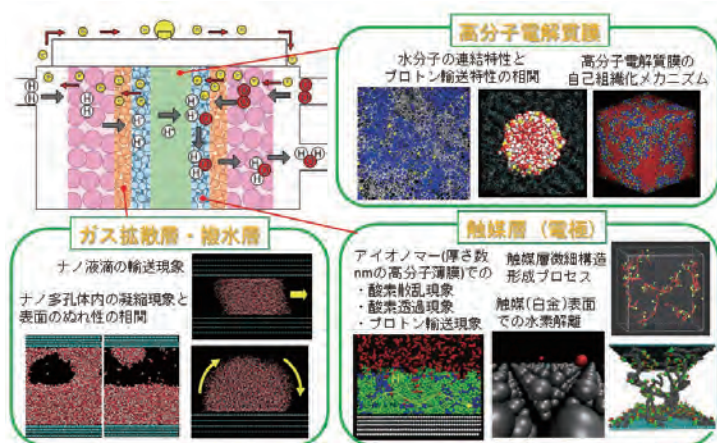
徳増 研究室



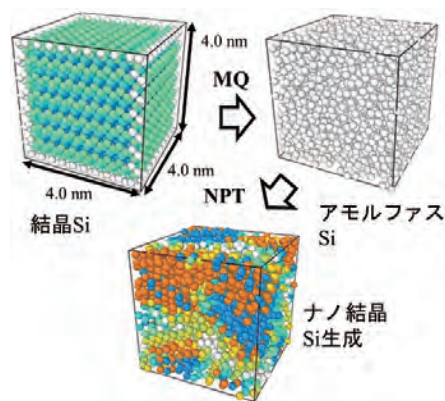
教授
徳増 崇

ナノ流動学講座
量子ナノ流動システム研究分野

<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/nanoint/jpn/index.html>



燃料電池内部の様々な場所で見られる物質輸送現象の分子動力学シミュレーション



太陽電池薄膜内部のSiナノ結晶成長の分子シミュレーション

物質の量子性が影響する分子スケール熱流動現象の解明と次世代電池開発への応用

原子・分子スケールの熱流動現象を考えると、原子・分子の持つ「量子性」が流れの特性に影響を及ぼすことがしばしば見受けられます。たとえば水素は分子の質量が軽いこと位置と速度の不確定性が大きく、この影響により熱流動現象の数値予測が困難になることが知られています。また水素イオン（プロトン）の移動には結合の離解や再結合を伴う移動機構が発現し、そのため水分子よりも遙かに速い速度で液体・固体内を拡散します。化石燃料に変わるエネルギー源として重要な水素関連機器や電池を設計する際にはこのような現象を考慮して機器内部で生じる熱流動現象を解析する必要があります。当研究室では流体分子の「量子性」が熱流動現象に影響を及ぼす系を対象にして、その量子効果を取り込んだ様々な手法を用いてその性質を解明し、工学的に応用することを目的として研究を行っています。

固体高分子形燃料電池内部の反応物質輸送現象に関する研究

固体高分子形燃料電池は水素と酸素を反応させて電気を取り出す装置で、次世代のエネルギー源として期待されています。この燃料電池の発電効率を向上させるには反応物質（プロトン、酸素）をいかに速く流すかが重要になります。当研究室では、燃料電池内部の物質の動きを大規模分子動力学シミュレーションにより解析し、その特徴や性質をとらえることを目的として研究を行っています。

全固体Liイオン電池内部のLiイオン輸送現象に関する研究

現在のLiイオン電池の電解液を固体電解質に置き換えた全固体Liイオン電池は、次世代の二次電池として期待されています。当研究室では、この固体電解質内部やLiイオンを蓄える活物質内部でのLiイオンの輸送現象を分子動力学シミュレーションにより解析することで、イオン伝導性の高い材料や電池内部のナノスケール構造の特徴を捉えることを目的として研究を行っています。

高性能Si系太陽電池材料内のSiナノ結晶成長過程に関する研究

近年、極薄の酸化シリコンをパッシベーション膜として用いた太陽電池が注目されています。そのさらなる効率向上を目的として、この膜内部にSiナノ結晶を形成して膜の導電性を増加させる研究が進められています。本研究では、効率向上に最適なSiナノ結晶を薄膜内部に形成することを目的として、その成長過程を分子論的な手法を用いて解析しています。

原子層堆積法および化学気相堆積法における成膜メカニズムの分子動力学的研究

半導体製造において、成膜プロセスは膜厚誤差 $\pm 0.5\text{\AA}$ という原子層レベルの制御が求められています。このような最先端の需要を実現可能な成膜手法として化学気相堆積法および原子層堆積法が広く利用されています。そのため本研究では、拡散現象および反応現象を融合した反応性力場分子動力学シミュレーションを実施し、成膜メカニズムの普遍的な理解を目指しています。



教授
遠藤 和彦

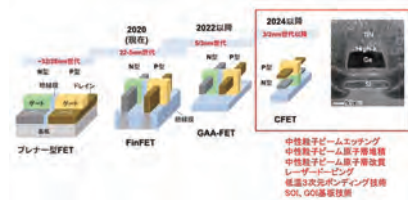


助 教
大堀 太介

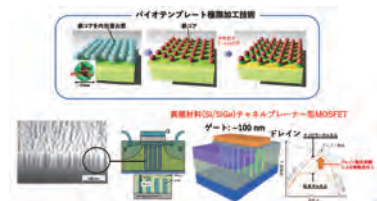
遠藤・大堀 研究室

グリーンナノテクノロジー研究分野

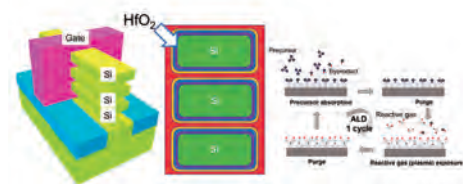
<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/gnt/endo/>



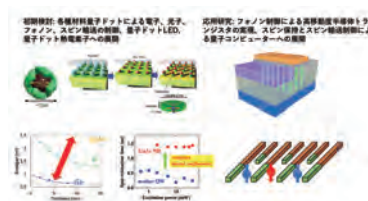
Si/Ge 異種チャネル集積プラットフォームの構築



フォノン場制御を用いた高移動度半導体素子



ナノデバイスのための原子層堆積制御技術



バイオテンプレート極限加工による設計制御可能な量子ドット作製技術

超低損傷プロセスによる革新的グリーンナノデバイス開発

次世代ナノスケールデバイスにおける高精度ナノプロセスを目指し、プラズマプロセス、ビームプロセスや原子操作プロセスにおける活性種（電子、正負イオン、原子・分子、ラジカル、フォトン）と物質との相互作用（エッチング、薄膜堆積、表面改質）に関する研究や、これら原子分子プロセスに基づいた先端バイオテンプレート極限加工技術に関する研究を進めています。さらに、実験と計算（シミュレーション）を融合し、原子層レベルの制御を実現できるインテリジェント・ナノプロセスの構築を目指しています。

2nm世代向けの

Si/Ge異種チャネル集積プラットフォームの構築

中性粒子ビーム無欠陥原子・分子レベルの高精度ナノ加工技術によって、2nm 世代向けの Si/Ge 異種チャネルプラットフォームを、日本・台湾間で構築しました。中性粒子ビームと最先端の半導体プロセスを組み合わせることで、集積回路の3次元化による高集積化により、大幅な集積化とデバイスの高速化を目指して研究を行っています。

無欠陥ナノ周期構造による

フォノン場制御を用いた高移動度半導体素子

バイオテンプレート技術と無損傷中性粒子ビーム技術の融合によるバイオテンプレート極限加工技術を提案しました。この手法を用いて、高密度・無欠陥・規則的なナノアレイ構造の形成に成功しています。この手法を使って、フォノン場（熱）を制御したトランジスタの作製を目指しています。

ナノデバイスのための原子層堆積制御技術

微細なナノデバイスや複雑な立体構造に薄膜を堆積するための原子層堆積制御技術の研究を行っています。新規の原子層プロセスのための原料とダメージレス酸化技術を組み合わせ、ナノデバイスのための高誘電率ゲート絶縁膜の堆積技術に関する研究を行っています。

バイオテンプレート極限加工による

設計制御可能な量子ドット作製技術

バイオテンプレート極限加工技術を用いて、量子ドット構造を作製することができます。サブ10nmで構造を制御することが可能な加工技術を用いて、電子や光の振る舞いを制御してきました。これらの基盤技術を応用することで、スピン保持とスピン輸送制御による量子コンピュータへと展開していく研究を行っています。

矢代・亀沢 研究室

協力講座
次世代検出法スマートラボ

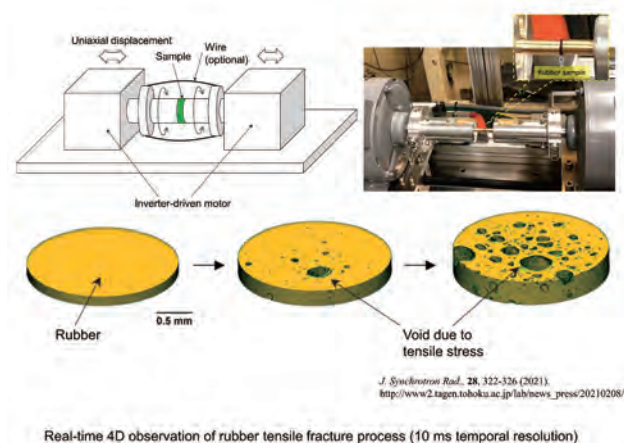
<https://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/yashiro/html/>



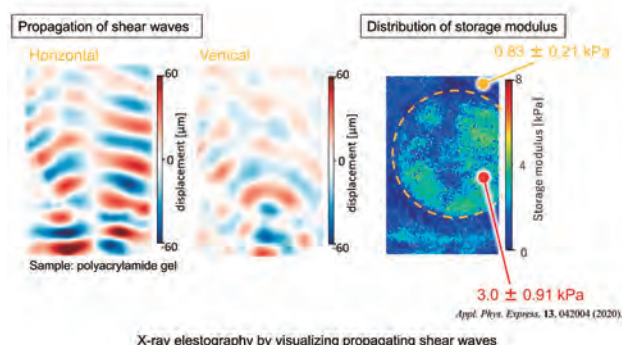
教授
矢代 航



助教
亀沢 知夏



Real-time 4D observation of rubber tensile fracture process (10 ms temporal resolution)



X-ray elastography by visualizing propagating shear waves

4D世界のフロンティアを拓く

私たちは三次元(3D)＋時間という「4Dの世界」に生きていますが、 μm 以下かつms以下の4D時空間領域には、最先端の計測テクノロジーでもアクセスできない広大な未知の世界が広がっています。本研究室では、X線などの高エネルギービームの量子性と、先端的なマイクロ・ナノファブリケーション技術、データサイエンス技術を駆使することで、従来の限界を超える新たなイメージング技術を開発し、未開の4D世界の開拓に挑んでいます。

本研究室で開発しているイメージング技術は、物質・生命科学における様々な非可逆・非平衡系(例えば、流動性のある材料や、生きた生物など)の新たな理解につながるだけでなく、持続可能社会の実現に向けた材料・マイクロマシンシステム開発や、病変の早期発見につながる医療診断機器の開発など、一般社会にも多様な波及効果を生むと期待しています。

ミリ秒時間分解能4DX線トモグラフィの開発・応用

世界に先駆けて、ミリ秒時間分解能のX線トモグラフィ(CT)に成功しています。最近、シンクロトロン放射光をマルチビーム化する光学素子を開発し、圧縮センシングと呼ばれるデータサイエンス技術を駆使して、試料を回転することなく1ミリ秒でX線CTが実現できることも実証しています。本技術の高度化とその応用により、未知の4D時空間領域の開拓を目指しています。

X線エラストグラフィの開発

—ソフトマテリアル内部の「硬さ」の4D可視化—

X線イメージングにより試料内部の弾性率の分布を三次元的(さらには4Dで)高空間分解能で可視化する技術の開発を行っています。例えば、生体内の弾性率の分布を可視化することにより病変を検出する医療診断機器の開発や、機能性ソフトマテリアルのダイナミクス研究への応用など、様々な波及効果が期待されています。

マイクロ・ナノファブリケーション技術による X線・中性子のための光学素子の開発

先端的なマイクロ・ナノファブリケーション技術により、従来の限界を超えるX線イメージング(あるいは中性子イメージング)を実現するための光学素子(高アスペクト比X線・中性子光学素子)の開発を行っています。物質・材料研究だけでなく、医療診断機器や天文衛生の開発など、様々な分野への波及効果が期待されます。

新たなモダリティの開拓

X線による表面・界面構造解析と、先端的なX線干渉計による(X線の位相を利用した)X線イメージング技術の融合により、表面・界面の構造パラメータの空間分布を可視化するなど、量子現象を利用した新たなモダリティの開拓にも挑戦しています。究極的には「X線無被曝イメージング」のような夢のテクノロジーの開発も目指しています。



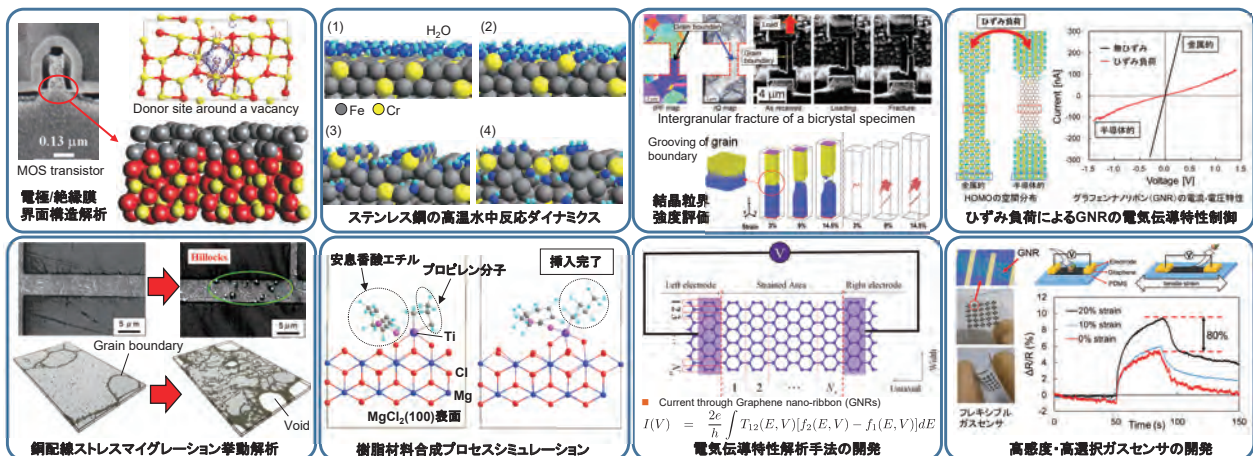
教授
鈴木 研



客員准教授
王 蕾

鈴木 研究室

ソフト・機能マテリアル研究部門
材料機能信頼性設計学分野



原子レベルシミュレーションを活用した材料機能・信頼性設計

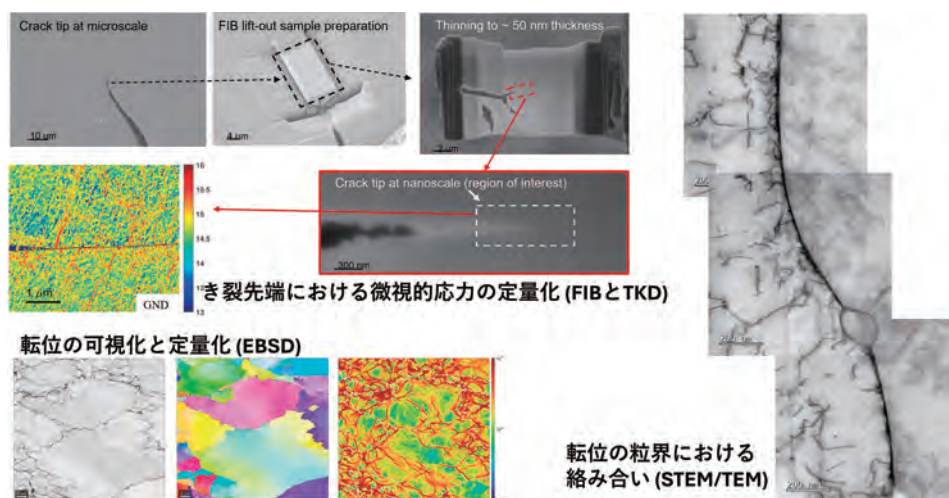
原子レベルシミュレーションによる材料特性評価と信頼性設計

王 研究室

先進機械材料科学講座
先進機械材料科学分野
<http://wang.rift.mech.tohoku.ac.jp/>



准教授
王 子豪



最先端の顕微解析技術を用いた機械材料の劣化解析

脱炭素社会における多様な機械材料の経年劣化メカニズムに対する理解を深めることを目的として、当研究室では最先端のナノスケール解析技術を活用し、高温環境下における材料の構造特性をマルチスケールで探求しています。STEM、EELS、TKD、GNDなどの最先端その場観察・試験手法を駆使し、材料の破壊プロセスを力学的観点から解明・可視化することで、現行の最先端技術を凌駕する新たな知見の創出を目指します。

極限環境下における高温合金と水素の 機械的破壊メカニズム評価

次世代の水素エネルギー社会の実現に向けて、本研究室では、高温・高圧といった極限環境下におけるその場計測技術の開発に取り組んでいます。併せて、水素と金属材料の極限環境下での力学的・化学的挙動を系統的に解明しています。さらに、最先端の構造解析・物性評価技術を融合させることで、水素と材料とのマルチスケールでの相互作用を深層的に理解し、将来の水素エネルギー利用に資する科学的基盤の構築を目指しています。

耐食高温合金開発に関する第一原理計算

機構解明に基づく合金開発は、次世代のエンジニアリング材料を創出するための重要な手段です。本研究では、第一原理計算を用いて、新規合金組成の耐酸化性および水素脆化抵抗性を評価します。東北大学がMASAMUNE- 式次世代スーパーコンピュータの計算資源を活用し、各種合金元素が材料の本質的特性に及ぼす影響をミクロなスケールで詳細に解明します。さらに、微細構造解析との連携により、実験と計算を相互補完的に活用し、次世代の高温合金の開発を推進します。



教授 千葉 大地 准教授 野村 光 講師 金井 康 助教 河野 竜平

千葉・野村(光) 研究室

国際連携スマートラボ

<https://chibalab.sris.tohoku.ac.jp/>



スピンエラストロニクス、ナノエラストロニクスによる新たな社会

マテリアルの潜在能力を引き出す

マテリアルは人類の生活を根底から支える、いわば空気のような存在です。我々科学者には、既存の概念を覆す革新的マテリアル機能を創出して人類に貢献し、持続可能な社会を創造する使命があります。流動的で未来予測が困難な VUCA 時代にある現代社会において、世界の趨勢変動を的確に捉え世界を変える日本創発のイノベーションを生み出すために、我々は、あらゆる計測手段の利活用と国際連携研究を推進し、新たな学術領域を開拓します。アプローチは無数にありますが、以下に主なものを挙げます。

1. ナノエラストロニクスの開拓

原子間隔は、固体マテリアルの性質を決定づける最も根源的なものです。巨大な原子間隔変化をリバーシブルに引き起こせれば、未知の物性や新機能を後天的に獲得できます。伸縮自在なナノ超薄膜に注目し磁気的性質を中心に、物性制御原理の提案や、ナノテラスを活用した背景サイエンスの理解、社会実装につながる力学センシング技術の開拓を進め新たな学術領域を開拓します。

2. ひずみをトリガーとする二次元層状物質を用いた汎用的物性制御手法の探索

グラフェンに代表されるような原子レベルで薄く広がる二次元層状物質は、膜厚方向の自由度を失う代わりに平面方向での自由度を許容します。つまり、大きなひずみをかけても材料が壊れません。原子の間隔を大きく操作できるということですが、原子間隔こそが材料の性質を決定します。我々は二次元層状物質の性質を機械的操作により可逆的に操る技術の確立を目指して研究を進めています。

3. 無電力演算素子の開発

ナノ磁性体は情報記録に用いられていますが、それらの磁気的相互作用を活用し、「知的に振る舞うナノ磁性体」を実現できます。これまで記憶素子として用いていた素子に演算能力を付与することで、記憶と演算を同一箇所で行うヒトの脳に似た素子を実現できます。我々は、さらに、磁性体のセンサとしての能力も加え、感じ・記憶し・考える素子の研究を進めています。

社会実装とナノテラスの活用

1～3の取り組みを通して、スピントロニクスの社会実装範囲を飛躍的に拡大し、分野にゲームチェンジをもたらします。同時に、計測・制御技術の発展に貢献します。ナノテラスの光と他の計測手法の融合や、シミュレーションとの融合による物理現象理解、計測・制御の DX 化を強く推し進め、新たなユースケースを開拓します。これにより、持続可能な社会の創造へ貢献していきます。