

電子・原子論的シミュレーションによる 機能性材料の創出

#電子状態計算

#分子動力学法

#水素エネルギー材料

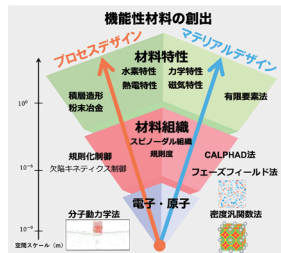
#磁性材料

#金属 3D プリント

研究
内容

金属材料の諸特性はミクロスケールで見れば原子、さらに小さいスケールで見れば電子の振る舞いによって支配されているため、このようなミクロスケールから材料機能を発現させるためのマテリアルデザイン・プロセスデザインに関する研究を行っています。

電子状態計算や分子動力学法などの計算機シミュレーションを活用し、材料中の電子・原子のミクロスケールでの振る舞いを理解するとともに、熱力学や統計力学に基づいてマクロに現れる材料特性とのつながりを統一的に捉えることで、新たな材料機能の創出を目指しています。



Develop+

応用分野

カーボンニュートラル、水素社会、エネルギーハーベスティング



三津原 晟弘 MITSUHARA Akihiro

マテリアル生産科学専攻 助教

材料エネルギー理工学講座

材料設計・プロセス工学領域 小泉研究室



論文・解説など

- [1] A. Mitsuhashi et al., J. Membr. Sci., 734, 124401 (2025)
- [2] A. Mitsuhashi et al., Acta Mater., 289, 120838 (2025)
- [3] A. Mitsuhashi et al., J. Hydrog. Energy, 48, 35997-36009 (2023)

連絡先HP

