

分子シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクスを組み合わせた高密着界面の高効率設計

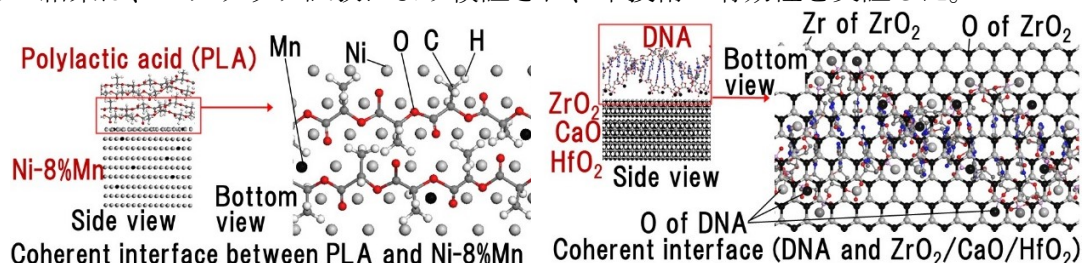
(株式会社日立製作所) ○岩崎 富生

Efficient design of strong interfaces by combining molecular simulation and materials informatics (¹*Hitachi, Ltd*) ○Tomio Iwasaki

Following the trend toward the needs of environmental and biological compatibility of materials used in devices, various materials will be used in the future. Accordingly, many different-materials interfaces will be formed in devices. So, we have developed a technology for efficiently designing strong interfaces by use of molecular simulation and materials informatics. This technology has been used to design strong interfaces between various materials such as resins, metals, ceramics, and biomaterials. This technology was applied to the design of metals with strong adhesion to polylactic acid (PLA), which is one of bio-based resins for carbon neutrality, and Ni-8%Mn was found to have the strongest adhesion to PLA. Next, ceramics with the strongest adhesion to DNA were designed, and a multilayer ($\text{ZrO}_2/\text{CaO}/\text{HfO}_2$) was found the best. Furthermore, ceramics with the strongest adhesion to peptides were designed, and Ca-9%NiO was found the best. Because these results were confirmed by scratch testing, the materials informatics technology was considered effective.

Keywords : *Materials Informatics; Molecular Simulation; Adhesion Interface; Biomaterial*

今後のデバイスには、高性能・高機能化に加え、使用させる材料の環境・生体への適合性も求められる傾向にあることから、多種類の材料が使われるようになり、様々な異種材料界面が構成されるようになる。そこで、分子シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクスを組み合わせて、密着強度の高い界面を効率的に設計する技術を開発した。この技術を、樹脂、金属、セラミックス、生体材料の界面設計に適用した例を紹介する。はじめに、カーボンニュートラル向けのバイオ由来樹脂のひとつであるポリ乳酸 (PLA) との密着性に優れた金属材料を設計した結果、Ni-8%Mn が最も強く接着することを導いた。また、生体適合性と環境適合性を備えた DNA 材料との密着性に優れたセラミックスを設計した結果、 $\text{ZrO}_2/\text{CaO}/\text{HfO}_2$ を積層したセラミックスが最も強く接着することを明らかにした。さらには、ペプチド材料との密着性に優れたセラミックスを設計した結果、Ca-9%NiO が最適であることを示した。これらの結果は、スクラッチ試験により検証され、本技術の有効性を実証した。



1) Materials informatics has been reported. T. Iwasaki, *J. Mater. Sci., Japan*. **2017**, 66, 427.