

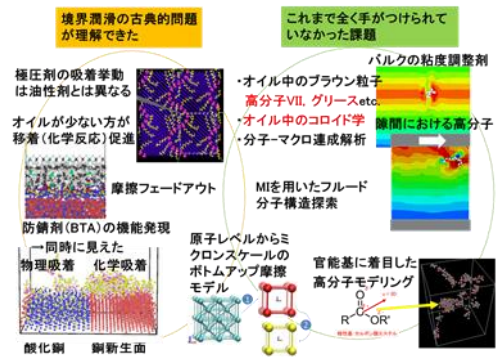
機能性界面のナノシミュレーション

シミュレーション学研究所 鷲津 仁志

キーワード トライボロジー、分子シミュレーション、電池、高分子

研究概要

当研究室の要素技術、着眼点は“界面の分子集団の物理化学”です。材料の特性は表面の状態によって多様になります。たとえば、我々の体はイオン性の高分子(高分子電解質溶液)から出来ていますが、分子同士が長距離クーロン力を適切に使うことにより、生命現象のような高度な物質・エネルギー変換が成立しています。工業的には、潤滑や電池に関係する材料では、表面の機能性が重要となります。分子シミュレーションは統計力学に基盤を置いており、また、流体力学との接点があり、計算手法の開発が終わっていません。具体的な系の研究に加え、こうした、電子～原子～流体といった階層的なシミュレーション手法の提案も大きなテーマです。



アピールポイント

自動車を対象としたトライボロジーのシミュレーションを長らく手がけており、固体摩擦や流体潤滑の起源から、実際のエンジンや変速機材料まで、原理原則に基づく研究を行って参りました。スパコンに関しては、次世代スパコンプロジェクトにおける超並列計算など高速ソフトウェアを開発いたしました。最近では、分子スケールより巨視的な摩擦系、イオン界面の流動などを手がけています。

応用分野

トライボロジー全般(固体材料, コーティング, 基油, 添加剤)、二次電池、燃料電池、生体分子系などに関係する材料シミュレーション。とくに機械特性、電気特性の予測。