

## 摩擦や機能性界面のための分子シミュレーション

情報科学研究科 鷲津 仁志



## キーワード

マルチスケールシミュレーション、トライボロジー、スパコン、水圏機能材料

## 研究概要

当研究室では、「界面の分子集団のダイナミクス」というキーワードをもとに、様々なスケールにおける分子シミュレーションを行っています。主に、固体摩擦、境界潤滑、流体潤滑をはじめとするトライボロジー（摩擦・摩耗・潤滑の科学技術）や、高分子と液体の界面現象、電池材料、などに関わる研究を行っています。これらの系は、工業的に有意義であり、「摩擦の起源」といった物理学の本質にも関わるものですが、複雑かつ動的な現象であるため、理論解明はなかなか進んでいません。我々は、この原理原則からの理論解明を行うとともに、大好きな用語「プラクティカル」を実現すべく数多くの産学連携研究を実施しています。

## アピールポイント

研究はオープンソースのシミュレータも使いますが、使い方に関して独自のノウハウを蓄積しています。また、原子スケールよりも若干大きなメソスケールの現象に関してはスタンダードな方法がないため、粗視化アルゴリズムから作成しています。

## 応用分野

自動車エンジン、変速機、各種の軸受に関する潤滑。金属加工に関する潤滑。重工業製品、電機製品に関する潤滑。最近では、材料表面の水に着目した「水圏機能材料」のプロジェクトにおけるイオン液晶膜や生体適合材料などにも展開しています。

## Multi-Scale Particle Simulation

