

# 分子動力学

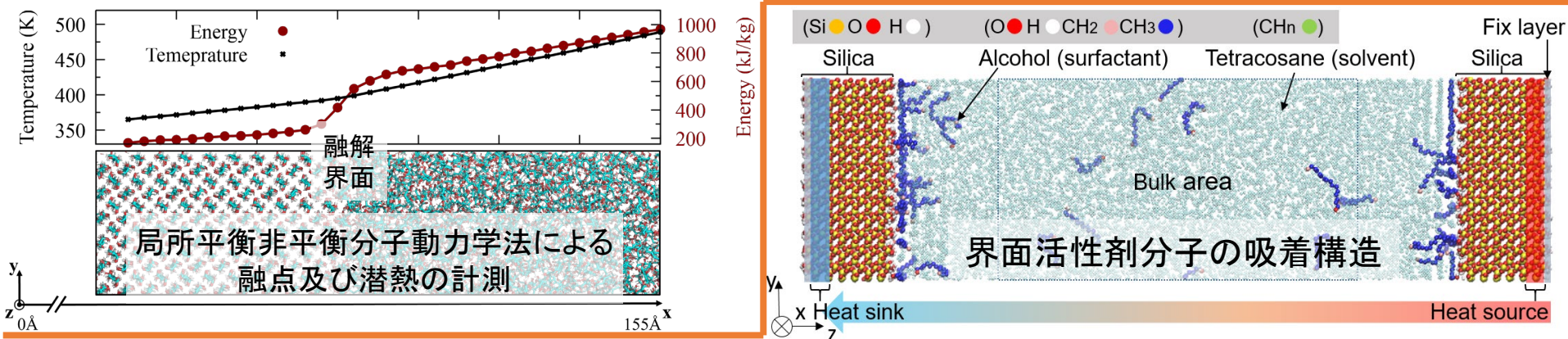
## 相変化材料の熱物性と分子動力学機構に関する研究

相変化材料は蓄熱などエネルギーの有効利用において重要であり、その融点や潜熱、熱伝導率など熱物性を決定するメカニズムが関心を集めている。分子動力学解析により、将来の「熱物性の設計」に寄与する知識基盤を構築する。

東北大学小原 拓 教授 (ohara@tohoku.ac.jp), Surblys Donatas 助教 (donatas@tohoku.ac.jp)

Shukai Chen (D1,cheng.shukai.p8@dc.tohoku.ac.jp)

研究室HP ([https://www.ifs.tohoku.ac.jp/jpn/research/dv\\_nfrd/mhtl/](https://www.ifs.tohoku.ac.jp/jpn/research/dv_nfrd/mhtl/))



## 界面活性剤の吸着による固液界面修飾の界面熱抵抗低減効果

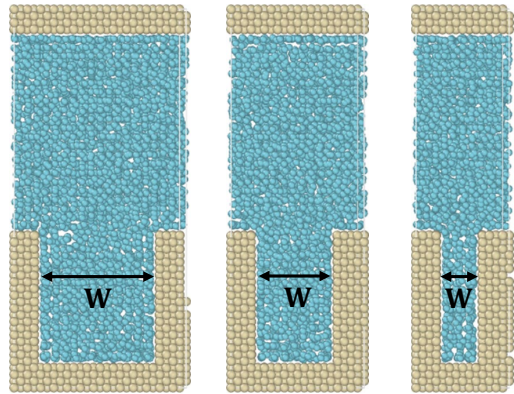
パワーモジュールの熱マネジメントに関連して、固液界面の熱抵抗低減が求められている。固体と液体を強い親和性で接続する界面活性剤の吸着は、吸着分子が液体中に伸長して熱輸送に貢献する「フィン効果」により、大きな熱抵抗低減を実現する。

東北大学小原 拓 教授 (ohara@tohoku.ac.jp), Surblys Donatas 助教 (donatas@tohoku.ac.jp)

京都大学 Guo Yuting 助教 (guo.yuting.3f@kyoto-u.ac.jp)

# 分子動力学

## 半導体デバイス製造のための局所熱物質輸送現象の解明



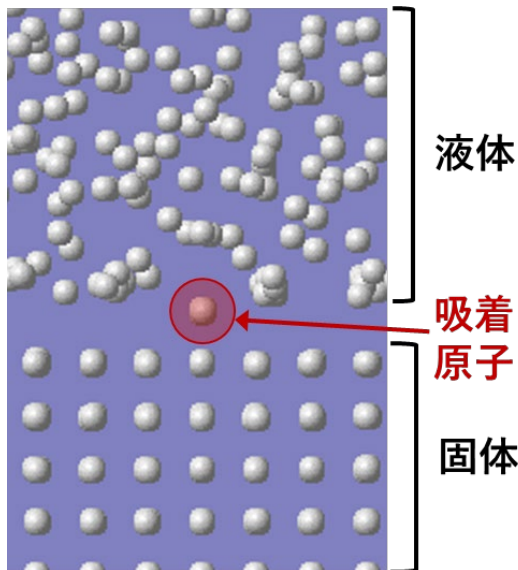
半導体デバイスの微細化に伴い、より高度な半導体洗浄プロセスの開発が求められています。そのための基礎研究として、ナノメートルスケールの超微細構造近傍における局所拡散や相変化時の構造表面への作用力について、分子動力学シミュレーションを用いて詳細に現象解明を行っています。

大阪大学 芝原 正彦 教授 (siba@mech.eng.osaka-u.ac.jp)  
藤原 邦夫 准教授 (k.fujiwara@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

研究室HP (<http://mte.mech.eng.osaka-u.ac.jp/>)

## 単原子スケール熱流体輸送現象に関する研究

原子スケールの熱流体輸送現象（濡れ、エネルギー輸送、相変化等）の解明は、現代社会のエネルギー問題解決のために重要です。主に理論や分子シミュレーションを用いて、実験では解明が特に難しいスケール（単原子）に着目し、物質・エネルギー輸送のメカニズムの解明と制御を目指して研究しています。



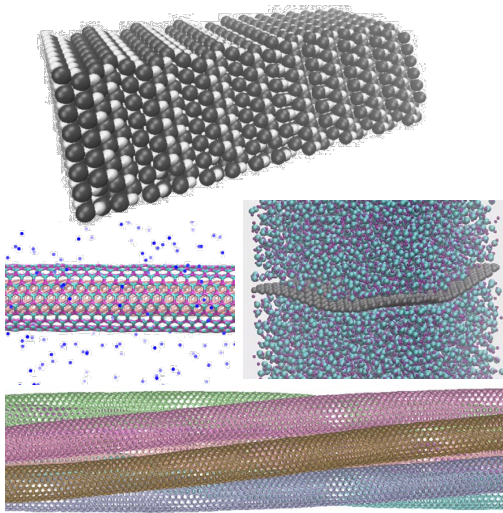
大阪大学 藤原 邦夫 准教授 (k.fujiwara@mech.eng.osaka-u.ac.jp)  
研究室HP (<http://mte.mech.eng.osaka-u.ac.jp/>)

# 分子動力学

## 新半導体材料の伝熱現象の解明

情報技術の発展を支える半導体材料への、ナノカーボンを始めとした新材料による代替が試みられています。それらの新材料への通電によって生ずる熱の除去を効率的に行う環境・条件を明らかにするために、分子シミュレーションによって伝熱現象を解明します。

東京農工大学 堀 琢磨 准教授 (hori@go.tuat.ac.jp)  
研究室HP (<https://web.tuat.ac.jp/~htlab/>)

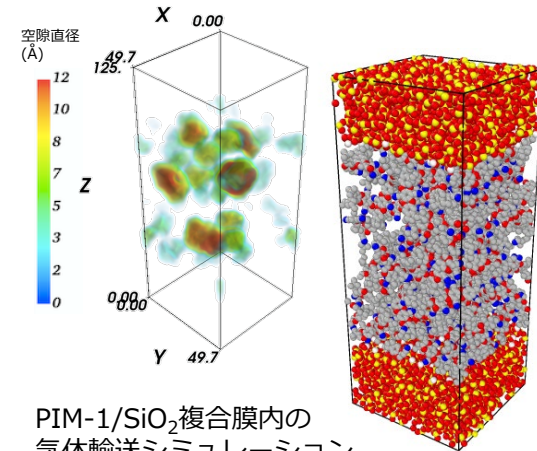


# 分子動力学

## 高性能CO<sub>2</sub>分離膜の気体輸送機構に関する研究

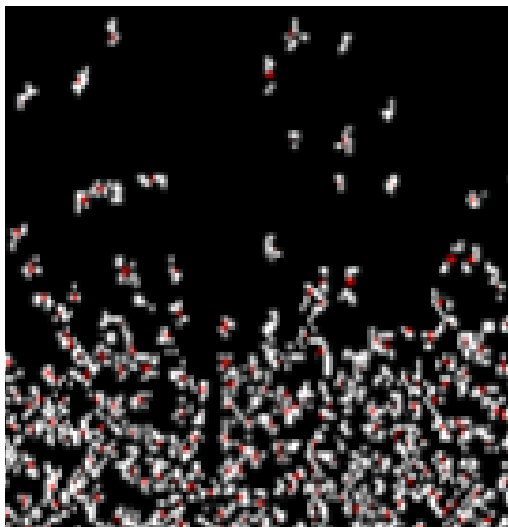
我々の研究室では、二酸化炭素の分離、回収を目的とする高分子膜内における気体分子の輸送機構を分子シミュレーションにより明らかにし、透過性と選択性のトレードオフの関係を打破する高性能な材料設計への指針を与えることを目指しています。

東京大学 杵淵 郁也 准教授 (kine@fel.t.u-tokyo.ac.jp)  
研究室HP (<https://www.mnf.t.u-tokyo.ac.jp/>)



# 分子動力学

## 液体水素の気化速度に関する研究

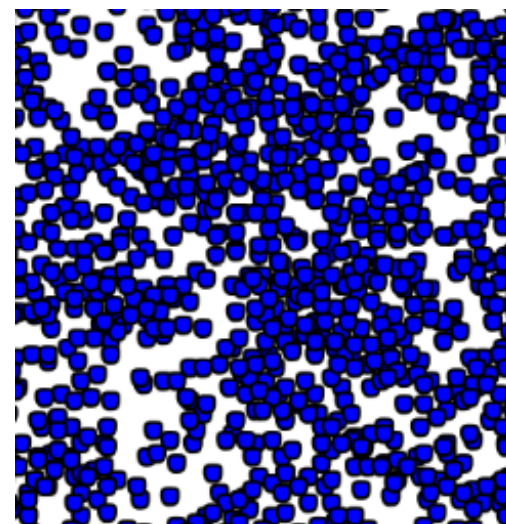


クリーンエネルギーの一形態である液体水素の産業利用が急速に進められていますが、その標準的な温度は約 $-250^{\circ}\text{C}$ と非常に低く、周囲からの入熱によりすぐに気化してしまう問題があります。本研究では液体水素の性質を模擬できる分子シミュレーション手法を用いて、水素の気化速度の特性を解明する研究を行っています。

九州大学 津田 伸一 准教授 (tsudashin@mech.kyushu-u.ac.jp)  
研究室HP (<https://mech.kyushu-u.ac.jp/~flow/index.html>)

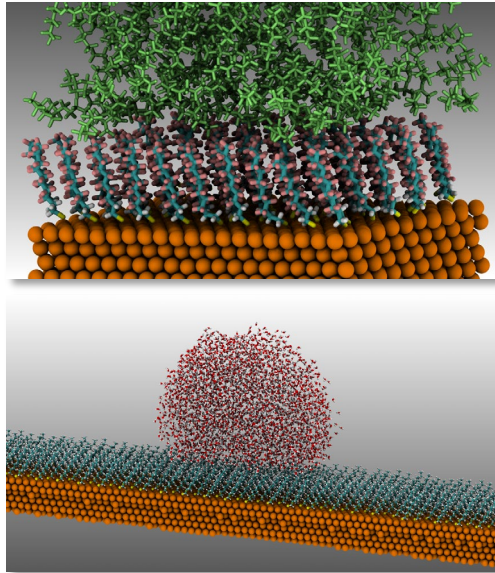
## 超臨界流体の特異的物性の制御に関する基礎研究

超臨界と呼ばれる高温高圧の流体の溶媒や冷媒としての有効利用が加速しておりますが、超臨界では比熱の増大や音速の低下など、特異な物性の変化を示す条件があります。このような特異性を不純物の添加などにより有効に制御するための知見獲得を目指した分子シミュレーションを行っています。



九州大学 津田 伸一 准教授 (tsudashin@mech.kyushu-u.ac.jp)  
研究室HP (<https://mech.kyushu-u.ac.jp/~flow/index.html>)

# 分子動力学



## 有機分子修飾膜における界面輸送特性の解明

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自在に制御する技術として研究が進んでいます。半導体デバイス冷却技術や機能性表面の創出を志向し、有機分子膜による界面親和性・濡れ性、界面を介した熱輸送特性を解明します。

東北大学 菊川 豪太 准教授 (kikugawa@tohoku.ac.jp)

研究室HP (<https://www.ifs.tohoku.ac.jp/mcf/>)