

シミュレーションを活用した 界面エネルギー輸送現象の解明と制御

#分子シミュレーション

#伝熱制御

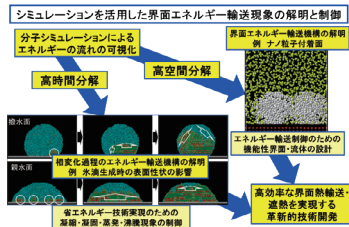
#省エネルギー

#機能性界面・流体

#半導体製造

研究 内容

- 分子シミュレーションによりエネルギーの流れを1原子スケール以下の解像度で可視化する方法を開発して、機能性流体や機能性界面に適用し、流体の熱伝導率を向上あるいは界面熱抵抗を低減するためのメカニズムを解明。
- 分子シミュレーションによりエネルギーの流れを高時間空間分解して可視化する方法を用いて、凝縮・凝固・蒸発・沸騰などの相変化現象を数値解析し、表面性状と界面における熱輸送との関係を解明。
- 分子シミュレーションを用いた触媒ナノ粒子への熱的影響評価や半導体デバイス洗浄過程の解析を実施。



Develop+
応用分野

環境・エネルギー分野、省エネルギー技術、半導体製造技術



芝原 正彦 SHIBAHARA Masahiko

機械工学専攻 教授

熱流動態学講座 マイクロ熱工学領域



論文・解説など

- [1] K. Fujiwara, M. Shibahara, *Scientific Reports*, 9, 13202(2019).
- [2] S. Uchida, K. Fujiwara, M. Shibahara, *J. Phys. Chem.*, 125, 33, 9601-9609(2021).
- [3] Y. Ueki, Y. Tsutsumi, M. Shibahara, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 194, 123004(2022).

連絡先HP



狭隘流路における潤滑圧駆動の熱・物質輸送現象

#潤滑

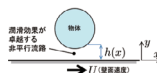
#膜透過

#熱・物質輸送

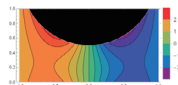
#流体・弾性体相互作用

研究内容

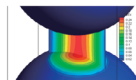
- ・狭隘な隙間の流れにおいて発生する潤滑作用は、隙間の周辺だけでなく広範囲に影響を及ぼすことがある（例：空気中の微小水滴の衝突による積乱雲の発達、血管内の物質輸送）。
- ・狭隘路の流れは実験による計測が困難で数値計算コストも大きい、狭い流路から広い流路まで対象とする潤滑理論を構築し、流路壁面上の低次元圧力情報から壁垂直方向の圧力情報を回復するアイデアを実現した。
- ・潤滑が支配的な流れにおける熱・物質輸送現象へ応用した。
- ・広い範疇の問題へ適用可能な一般性を備えた理論・数値解法の構築を目指す。



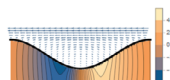
(a) 古典的潤滑解析が困難な広い流路



(b) 拡張潤滑理論による圧力分布



(c) 接近球間流れへの応用



(d) 潤滑圧駆動の膜透過現象への応用

Develop+

応用分野

流体工学分野、バイオメカニクス



竹内 伸太郎 TAKEUCHI Shintaro

機械工学専攻 教授

熱流動態学講座 流体物理学領域



論文・解説など

- [1] Takeuchi, Tazaki, Miyauchi & Kajishima (2019), <http://hdl.handle.net/11094/79018>
- [2] Takeuchi & Gu (2019), <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.4.114101>
- [3] Yamada, Takeuchi, Miyauchi & Kajishima (2021) <https://doi.org/10.1007/s10404-021-02480-5>

連絡先HP



半導体デバイスのモデリング・シミュレーション

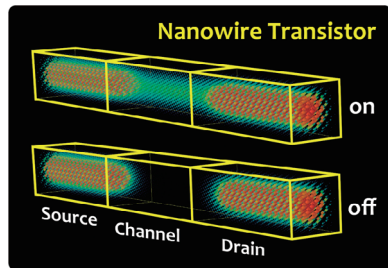
#デバイスシミュレーション

#量子輸送

#脱炭素社会

研究
内容

第一原理計算から経験的モデル、原子論から連続体、量子論から古典論までをつなぐマルチスケール・マルチフィジックスの半導体デバイスのモデリング・シミュレーションを実現。デバイスシミュレータの高速化に向けた高速計算手法も開発。



Develop+
応用分野

次世代トランジスタ開発、パワーデバイス開発、熱電変換デバイス開発



森 伸也 MORI Nobuya

電気電子情報通信工学専攻 教授
集積エレクトロニクス講座
計算量子情報エレクトロニクス領域



論文・解説など

- [1] G. Mil'nikov *et al.*, RSDFT-NEGF transport simulations in realistic nanoscale transistors, *JCEL* 22, 1181 (2023).
- [2] N. Mori *et al.*, Nano-device simulation from an atomistic view, *IEDM* 2013.
- [3] A. K. Geim *et al.*, Resonant tunnelling through donor molecules, *PRB* 50, 8074 (1994).

連絡先HP



電子状態理論による界面反応の解明と制御

#密度汎関数理論

#機械学習

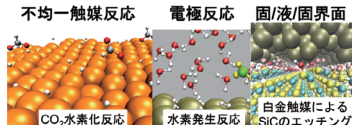
#有機界面

#不均一触媒

#電気化学

研究
内容

量子力学に基づく電子状態計算と統計力学的手法、機械学習法などと組み合わせたマルチスケールシミュレーションにより、物質の持つ電気的、磁氣的、化学的性質の物理的要因を明らかにし、それに基づいてより望ましい性質を持つ物質を設計する指針を与えることを目指しています。具体的な課題としては、不均一触媒反応や電気化学反応、有機デバイスで重要な有機-金属界面など、固体表面や界面での構造や電子状態、化学反応過程の理論的解明とデザインをおこなっています。



Develop+

応用分野

エネルギー、環境、有機半導体



森川 良忠 MORIKAWA Yoshitada

物理学専攻 教授

精密工学講座 計算物理領域

インキュベーション部門 グループ長



論文・解説など

- [1] H. H. Halim and Y. Morikawa, *ACS Phys. Chem. Au*, DOI: 10.1021/acspchemau.2c00017
- [2] T. Ota, M. Alaydrus, H. Kizaki and Y. Morikawa, *Phys. Rev. Mater.*, 6, 015801-1-12 (2022).
- [3] J. I. Enriquez, F. Muttaqien, M. Michiuchi, K. Inagaki, M. Geshi, I. Hamada, and Y. Morikawa, *Carbon*, 174, 36-51 (2021).

連絡先HP



分子シミュレーションによる液体の表面と濡れに関する解析

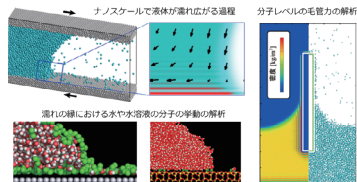
#分子シミュレーション

#濡れ

#表面張力

研究
内容

蛇口から出た水が固体の表面でキャップ状になる様子など、液体が固体の表面を濡らす現象は、私たちの日常のほぼあらゆるところで見られますが、それだけでなく、撥水・親水加工、コーティング、印刷、洗浄など、工学的応用の側面からも重要な現象です。この濡れを中心とした液体の表面がかかわる現象について、分子シミュレーションを中心とした研究を行っており、水溶液を含む水などの表面張力、濡れの解析に加えて、マイクロ・ナノスケールの流路における液体の挙動の予測、抵抗低減法の検討なども行っています。



Develop+
応用分野

液体材料開発、表面加工、撥水・親水



山口 康隆 YAMAGUCHI Yasutaka

機械工学専攻 教授

機能構造学講座 マルチスケール輸送現象領域
山口・辻・鷲野研究室



論文・解説など

- [1] Y. Yamaguchi et al., Journal of Chemical Physics, 150 (2019), 044701 (2025年度日本流体力学会論文賞).
- [2] H. Kusudo, et al., Journal of Chemical Physics (Rapid Commun.), 159 (2023), 161102
- [3] R. Ogawa et al., Journal of Chemical Physics, 161 (2024), 224708

連絡先HP

