

藤原 邦夫

大阪大学大学院工学研究科  
助教

## 単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析

### § 1. 研究成果の概要

物質・生命に関連する輸送現象は、界面において律速を受けるが、特に界面における熱輸送現象は、現代社会を維持し発展させる上で重要な制御対象である。本研究では、界面内の単原子スケールの局所空間において熱流を分子動学的に検出することで、界面熱輸送現象の新たな描像・原理を解明することを目的とする。そして、単原子スケールで検出された熱流のスペクトル特性に基づき、界面熱輸送を制御する新たな方法論を創出することを目指す。

初年度である本年度は、単原子スケールの熱流を2次元的に可視化する数値解析手法の構築を主に基本的な計算系に限って行った。古典分子動力学法に基づき、固体壁面間(Pt)に流体分子(Ar)が充填されている固液界面系において、界面の単原子スケールの局所で物理量(熱流、応力、温度)を取得し、熱流構造の詳細を明らかにした。また、3次元的に物理量を取得する解析技術の構築にも取り組み、今後の基礎となる技術を構築することができた。また、次年度(2020 年度)の計算機システム導入に向けての、検討・準備を完了した。