

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析

2. 個人研究者名

藤原 邦夫（大阪大学大学院工学研究科 助教）

3. 事後評価結果

本研究では、界面近傍における単原子スケールといった局所空間の熱流を古典分子動力学法に基づいて記述し、原子スケールの熱輸送過程を可視化すると同時に分子運動の周波数毎の熱流（熱流スペクトル）により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的として行われた。

その結果、古典分子動力学法に基づいて単原子以下の空間分解能で熱輸送を記述し、熱流束を原子構造の三次元分布として可視化する新しい解析モデルを構築し、原子スケールの熱流構造に基づいた界面熱輸送を操作する新しい方法論の構築とその応用へも展開し、今後の発展への足がかりを築いている。この成果は高く評価できる。

この数値シミュレーションが“new normal(新しい通常)”としてモデルベースデベロップメントの主流となることを期待したい。