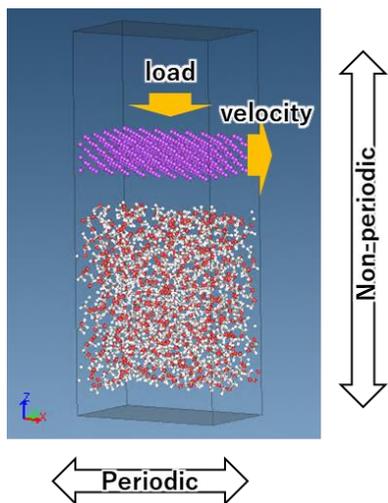


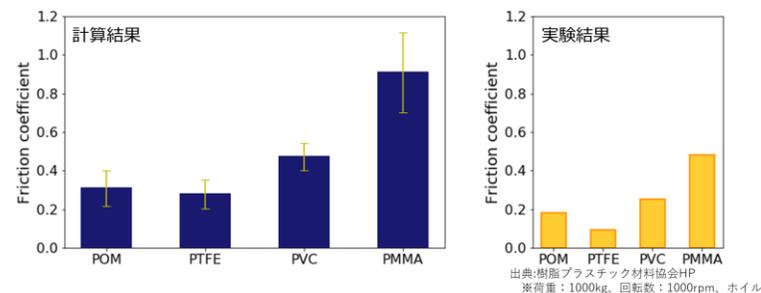
# 全原子シミュレーションによる 高分子トライボロジーシミュレーション

摩擦によるエネルギー消費は、全世界の消費量の20%に達すると推定されており、高分子の摩擦の影響も小さくない。高分子材料は産業界で広く利用されているが、その摺動メカニズムには未解明な部分が多い。本取り組みでは分子レベルで高分子の摺動メカニズムを解明するため、全原子分子動力学(MD)シミュレーションを用いて摩擦性の評価を進めている。

計算モデル：樹脂-金属(Fe)の摩擦試験を模擬

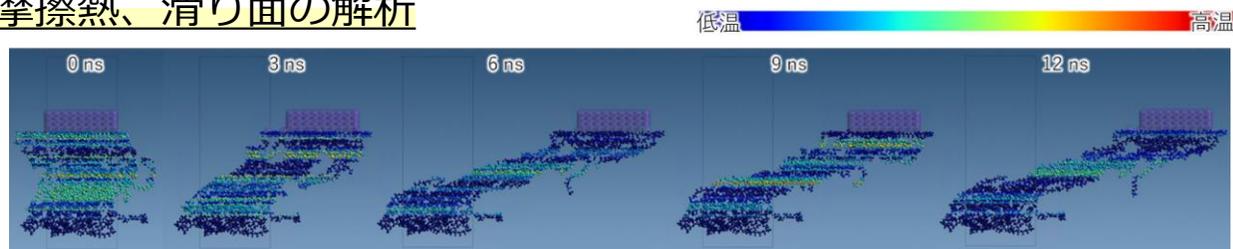


摩擦係数の計算と実験の比較



4種の汎用ポリマーの摩擦係数を定性的に予測可

摩擦熱、滑り面の解析



高分子の摺動は、樹脂-金属界面だけでなく、樹脂バルク層でも滑りが生じている

全原子MDシミュレーションでは詳細な分子描像を明らかにでき、高機能な新規材料の設計・開発が分子レベルで可能となる