

令和 4 年 5 月 23 日現在

機関番号：24506

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K18813

研究課題名（和文）境界潤滑油膜形成の新規概念の探求

研究課題名（英文）A new concept of the formation process of boundary lubrication films

研究代表者

鷲津 仁志（Washizu, Hitoshi）

兵庫県立大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：00394883

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：分子動力学を用いた境界潤滑油膜の物理吸着初期過程の解析手法を提示した。油性剤については、物理吸着過程の解析手法を確立した。極圧剤は常温常圧においては安定した逆ミセル構造を作り、油性剤のように容易に吸着しないことも判った。添加剤の金属表面への化学吸着プロセス解析について、銅酸化防止添加剤について反応力場を用いた解析を実施し、酸化銅および銅を有するハイブリッド表面において選択的吸着が生じることを示し、この手法を極圧剤にも拡張し、実験と比較をした。有機系ソフトマターのMIの適用のため、パーシステント・ホモロジーによる構造予測法を提案し、機械学習の評価関数として利用可能であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

潤滑油の添加剤を分子レベルから設計することは、トライボロジストの夢であった。境界潤滑が重要とされる現象、たとえば自動車エンジン、モーター部品、空調機のコンプレッサー、圧延等の金属加工過程、風力発電機の軸受・増速機や発電所のタービンといった大型機器など、幅広い分野とサイズの異なる潤滑条件において幅広く適用可能である。現在、軸受、オイル、金属、電機、重工、自動車、素材などの企業に社会還元すべく産学連携研究に本手法を適用している。

研究成果の概要（英文）：We made molecular dynamics scheme to analyze physical adsorption of lubricant additives on a metal surface. For the oiliness agents, we show structure dependence of base oil on the oiliness additives. For the extreme pressure additives, we found the molecules form stable reverse micelle and do not adsorb in room temperature. For the chemical adsorption process on metal surfaces, we made metal and metal oxidized hybrid surface model to show selective adsorption using reactive force field. The method is extended for extreme pressure additives and compared with experiments. In order to apply Machine learning for organic soft materials, we introduced structure analysis using persistent homology and showed it is useful for evaluation function.

研究分野：界面の分子集団の大規模分子シミュレーション

キーワード：トライボロジー 潤滑油 物理吸着・化学吸着 分子動力学 防錆剤 極圧剤 油性剤 反応力場

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

油性剤や極圧剤などの有機系添加剤は、自動車等のエンジン油、鍛造などに用いる金属加工油など幅広い産業分野で用いられており、その有機系単分子吸着膜の形成による固体間接触の防止および境界摩擦の低減機構解明はトライボロジーの主たる課題である。これら添加剤は基油中に数 % 添加されるが、従来は基油と添加剤のアルキル鎖長が等しいときに耐焼きつき性が向上する「チェーンマッチング」という概念が支配的であった。

最近、応募者らは、大規模分子動力学を用いて基油分子の運動を陽に含む計算により、まず基油分子が金属表面に横方向の吸着膜を形成し、その層により添加剤の吸着が律速されるという結果を得た。さらに、異なる基油の分子構造において、添加剤の吸着の時定数が変わることを見出した。これは、基油と添加剤の組み合わせによって境界潤滑膜の形成過程を制御できる可能性を示すものである。チェーンマッチングは出来上がった膜の安定性には寄与するだろうが、膜の形成初期過程には関係がない、あるいは負の影響がある。

2. 研究の目的

油性剤や極圧剤などの有機系添加剤の作用機構、とくに基油と添加剤との親和性についての理論予測は幅広い産業分野で求められている。報告者らは、計算量の膨大な基油分子の運動を露わに取り入れた分子動力学シミュレーションにより、基油が金属表面に層状構造を生成し、潤滑膜の生成の時定数を定めることを見出した。これは 50 年来の指針であった「チェーンマッチング」機構とは異なる添加剤の新作用機構である。本研究では、さらなる大規模計算、実験との比較、MI (マテリアルインフォマティクス) により、この境界潤滑の新概念の確立を目指す。

3. 研究の方法

(1) 複数種類の添加剤および基油について検討するためのユニバーサルな方法論の確立

全原子分子動力学を用いて、物理吸着過程を解析する手法において、シミュレータとして並列化効率に優れた LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) を用いているが、初期状態の作成方法、固体基板-有機分子間の長距離クーロン力の計算方法などを決定している。溶媒効果が弱い場合には Langevin 動力学として添加剤分子の挙動を扱うことも考えられる。本研究ではさらに、一般的な基油および添加剤において、物理吸着過程を適切にシミュレートするための条件を検討し、ユニバーサルな方法論として確立することを目指す。

(2) 金属面との相互作用の詳細検討のための反応力場を用いた化学吸着プロセス手法の構築
添加剤 (油性剤および極圧剤) の境界潤滑膜形成においては、添加剤および基油の組み合わせのみならず、固体 (金属) 表面との相互作用も重要である。しかしながら、表面との相互作用は化学変化を伴うため、これまでは量子化学的な方法を用いなければ検討できないとされてきた。応募者らは、反応力場 ReaxFF を用いることにより、固体表面におけるトライボ化学反応の計算も可能であることを示した。本研究では、この手法を拡張し、添加剤の化学反応を伴う吸着過程のシミュレーションの実現を目指す。

(3) 吸着ダイナミクスの理解のための解析手法の深化

添加剤の吸着プロセスの解析において、応募者らはまず基油分子集団の構造に着目し、分子分布関数および Fourier スペクトル、基油分子集団の拡散係数分布などに関する解析を実施した。本研究ではさらに、吸着自由エネルギーに着目した解析手法や、吸着ダイナミクスのより詳細な解析手法の確立を目指す。添加剤は二量体や Y 字の分岐構造を有する状態で吸着することもあり、それぞれの容態に応じた解析を行う必要がある。

(4) 連携研究グループから提供された実験系に対応する大規模実証計算

現在、応募者らと共同研究を行っているグループからは、リン酸系添加剤における鎖長および分岐構造の吸着膜安定性に関する実験、アルミ基板におけるカルボン酸系添加剤の吸着挙動に関する実験、などの実験データをいただいている。これらの系に対して、 γ の場合は鎖長および分岐構造を違えた分子動力学解析により吸着挙動の違いについて説明する。 β に関しては、固体との相互作用が主要点となるため、ReaxFF による反応力場分子動力学の計算に関して、密度汎関数法、分子軌道法および第一原理分子動力学を含む量子力学計算と比較することにより妥当性を検証し、その上で化学吸着挙動に関する大規模実証計算を実施する。

(5) MI による最適組成の探求

MI による材料探索を実施する。上記シミュレーション手法の妥当性を、数十組成の添加剤とオイルの組み合わせ実験により検証した上で、数千ケースの組成の吸着特性に関して機械学習の

教師データとする。これを基に、数万ケースの組成の吸着特性を予測し、得られた数種類の最適組成に関して実験検証を行う。すなわち、シミュレーションを介することにより、数十組成の実験を行うだけで、数万組成の吸着特性を予測することが可能となる。

4. 研究成果

(1) 複数種類の添加剤および基油について検討するためのユニバーサルな方法論を確立については、油性剤について原著論文を発表し、境界潤滑油膜の物理吸着初期過程の解析について、スタンダードとなる解析手法として提示した。

これのみならず、極圧剤についても同様の手法が有効であることを示した。リン系極圧剤は、表面において特徴的な物理吸着構造を作ること、それが強い官能基間相互作用によることを示した。

さらに、リン系極圧剤に関して更なる興味深い結果を得た。すなわち、極圧剤は常温常圧においては安定した逆ミセル構造を作り、油性剤のように容易に吸着しないということが判った。また、表面粗さを有する固体に挟み、摺動を印加した場合に、この逆ミセル構造が壊れることがわかった。これは、パウデン-テーバーの境界潤滑における「油性剤は室温などマイルドな状況で表面を保護し、極圧剤は高温・高せん断下で効果を発揮する」ということを、はじめて分子論的に明らかにしたものである。この研究に関しては、2019年 日本トライボロジー学会学生奨励賞（受賞者：井池祐貴）を受賞した。

複数種類の添加剤および基油について検討するためのユニバーサルな方法論を確立については、リン系極圧剤に関して更なる結果を得た。すなわち、極圧剤の逆ミセル構造において、平衡状態における拡散について検討したところ、短時間の拡散については添加剤の分子構造の違い（リン酸基に対して1本鎖か2本鎖か）によって違ったが、長時間の拡散係数については変化が小さかった。これは、短時間の拡散については分子鎖が多い方が周囲の溶媒（基油）分子との絡み合いが重要になるのに対して、長時間については逆ミセルという会合体集団として動き、その際の会合体の流体力学半径は大きく異なるためだと解釈できる。これらの結果から、通常は水中において議論されるコロイド学の方法が、油中においては異なること、油中におけるコロイド学の創成が必要であることを示した。

(2) 金属面との相互作用の詳細検討のための反応力場を用いた化学吸着プロセス手法については、銅酸化防止添加剤について反応力場を用いた解析を実施し、酸化銅および銅を有するハイブリッド表面において選択的吸着が生じることを示した。これまで、銅酸化防止剤については精密な量子化学計算は行われてきたものの、分子集団の吸着という観点からは研究が行われてこなかった。これについては、2018年 日本トライボロジー学会学生奨励賞（受賞者：西川航平）、2018年 日本機械学会情報・知能・精密機器部門ベストプレゼンテーション表彰（受賞者：西川航平）、2018年 第9回トライボロジー秋の学校 優秀ポスター賞（受賞者：西川航平）を受賞し、原著論文を発表した。

金属面との相互作用の詳細検討のための反応力場を用いた化学吸着プロセス手法については、本年度は反応力場を用いたリン系極圧剤の鉄表面への吸着プロセスに関する分子動力学解析を実施し、当初は物理吸着が起こること、その後、電荷の移動を伴う化学吸着へと移行することを初めて見出した。この研究に関しては、2019年 第10回トライボロジー秋の学校 優秀ポスター賞（受賞者：本間睦己）を受賞した。

金属面との相互作用の詳細検討のための反応力場を用いた化学吸着プロセス手法については、昨年度開始した反応力場を用いたリン系極圧剤の鉄表面への吸着プロセスに関する分子動力学解析をさらに詳細解析を行い、吸着する部位によるダイナミクスの違いや、分子内における電荷分布の変化の違いが明らかとなった。

(3) 吸着ダイナミクスの理解のための解析手法の深化、については、(2)の化学反応を伴う系に関して、固体表面の電荷移動、吸着分子の分極率の変化に関する解析、吸着部位の解析、配向の解析など、新規解析手法を提案し、基油も含む現象に拡張するなど更に多くの系に展開した。

(4) 連携研究グループから提供された実験結果に対応する大規模実証計算、については、高分子系の材料について京コンピュータを用いた解析を実施した。また、(1)の極圧剤に関しては、出光興産の実験結果と照合した解析を実施し、少なくとも定性的に実験結果を再現することに成功した。

(5) MIによるオイルと添加剤の最適組成の探索、と併せて有機系ソフトマターのMIの適用性について検証を実施し、この研究に関しては2019年 第33回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞（受賞者：清水陽平）を受賞した。MIの評価関数として用いることができることが分かったパーシステント・ホモロジーに関して、さらに解析を行い、高分子の高次構造の違いを表す指標として適切であることを証明し、この研究に関してSci. Rep.の論文が出版され、プレスリリースを出した。パーシステント・ホモロジーに着目した研究を、さらに界面系に適用した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Shimizu Yohei, Kurokawa Takanori, Arai Hirokazu, Washizu Hitoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Higher-order structure of polymer melt described by persistent homology	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 11901
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-021-80975-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 鷲津 仁志	4. 巻 66
2. 論文標題 分子シミュレーションで解明されたトライボ現象	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 258～266
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.18914/tribologist.66.04_258	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Konishi Masakazu, Washizu Hitoshi	4. 巻 149
2. 論文標題 Understanding the effect of the base oil on the physical adsorption process of organic additives using molecular dynamics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Tribology International	6. 最初と最後の頁 105568～105568
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.triboint.2019.01.027	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 K. Nishikawa, H. Akiyama, K. Yagishita, H. Washizu	4. 巻 21
2. 論文標題 Molecular dynamics analysis of adsorption process of anti-copper-corrosion additives to the copper surface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Jurnal Tribologi	6. 最初と最後の頁 63-81
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Van Sang Le, Yano Akihiko, Osaka Ai I., Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 70
2. 論文標題 Addition of Solid Oxide Particles for Friction Reduction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Tribology Letters	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11249-022-01600-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Van Sang Le, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 165
2. 論文標題 Graphene as solid lubricant vertically buried into iron contact surface by annealing for superlubricity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Tribology International	6. 最初と最後の頁 107288 ~ 107288
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.triboint.2021.107288	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Osaka Ai I., Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 144
2. 論文標題 Smoothed Particle Hydrodynamics and Discrete Element Method Coupling for Influence of Hexagonal Boron Nitride Lubricant Particle on Friction of Elastic Coarse-Grained Micronscale Iron	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4050711	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yashiro Naoki, Oohira Kouya, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 16
2. 論文標題 Improvement of Discrete Element Simulation Accuracy of Steel Powder Filling Behavior by Optimization of Contact and Friction Parameters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Tribology Online	6. 最初と最後の頁 16 ~ 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2474/trol.16.16	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 143
2. 論文標題 Influence of the Alumina Ceramic Coating on Friction and Stability of the Iron Contacts	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Tribology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4048272	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sang Le Van, Yano Akihiko, Osaka Ai, Sugimura Natsuko, Washizu Hitoshi	4. 巻 15
2. 論文標題 Adaptive Smoothed Particle Hydrodynamics for Study of Friction of Silica at Micronscale	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Tribology Online	6. 最初と最後の頁 259 ~ 264
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2474/trol.15.259	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計55件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 18件)

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションでわかる目から鱗のトライボロジー
3. 学会等名 トライボロジー研究会 第31回講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションによる基油・添加剤の解析
3. 学会等名 2020 石油製品討論会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. Washizu,
2. 発表標題 Molecular and Meso Simulations for Solid Friction and Boundary Lubrication
3. 学会等名 Special livMatS symposium on Tribology, University of Freiburg, Germany (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 河北恭佑, 石井良樹, 甲嶋宏明, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法による分子集団としてのリン酸エステルの特異性の解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2020 秋 別府 (オンライン)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kyosuke Kawakita, Yoshiki Ishii, Hiroaki Koshima, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Analysis of the Stability of Organophosphate Aggregates in Oil by Molecular Dynamics
3. 学会等名 2020 STLE Tribology Frontiers Virtual Conference, USA (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Mutsuki Homma, Hiroaki Koshima, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of the Chemical Adsorption of Phosphate Esters on Metal Surfaces
3. 学会等名 2020 STLE Tribology Frontiers Virtual Conference, USA
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジーを記述子としたポリマー高次構造の解明と電気特性の回帰予測
3. 学会等名 020年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会, オンライン開催
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu
2. 発表標題 Estimation of higher order structure of model polymer using persistent homology and machine learning
3. 学会等名 第 69 回高分子学会年次大会, 福岡
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Origin of Limiting Shear Stress of Elastohydrodynamic Lubrication Oil Film
3. 学会等名 3rd Czech-Japan Tribology Workshop, Vinice Hnanice, Czech Republic (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジーを用いた大規模シミュレーションによるポリマー高次構造の推定
3. 学会等名 第 68 回高分子討論会, 福井大学, 福井 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Colloid Science in Oil Environment
3. 学会等名 Tribochemistry Hakodate 2019, Hakodate, Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Molecular simulations for additives and coatings
3. 学会等名 46th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Valpre, Lyon, France (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 ソフトマター界面におけるマルチフィジックスシミュレーション
3. 学会等名 つくばソフトマター研究会2019, 高エネルギー加速器研究機構(つくばキャンパス), 筑波(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 高分子溶液のせん断下のマルチフィジックス解析
3. 学会等名 日本伝熱学会関西支部 第26期 第2回 講演討論会, 同志社大学, 京都(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジと機械学習を用いたポリマー電気特性の予測
3. 学会等名 2019年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会, DIC, 東京 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 鷲津仁志
2. 発表標題 パーシステントホモロジと大規模シミュレーションを組み合わせたポリマーの高次構造の推定
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会, 名古屋市公会堂, 名古屋
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中江理緒, 鷲津仁志
2. 発表標題 固体間摩擦機構における炭化水素分子の重合プロセス解析
3. 学会等名 第10回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松岡諒, 鷲津仁志
2. 発表標題 層状グラフェン移着片の摩擦挙動の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第10回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本間睦己, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法によるリン酸エステルの鉄表面への化学吸着過程の解析
3. 学会等名 第10回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 清水陽平, 鷲津仁志
2. 発表標題 「京」の大規模シミュレーション及び機械学習を用いた最適ポリマー材料探索
3. 学会等名 兵庫県立大学知の交流シンポジウム 2019, 神戸商工会議所会館, 神戸
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rio Nakae, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Polymerization in Solid Friction using Reactive Force Field
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shintaro Takata, Masakazu Konishi, Hirotohi Akiyama, Eiji Tomiyama, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Adsorption Behavior of Organophosphate Additives in Ester Oil onto Metal Surface
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuki like, Hiroaki Koshima, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Adsorbing Process of Organophosphate onto Metal Surface
3. 学会等名 International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Koshima, Yuko Murakami, Hiroshi Tokairin, Yuki like, H. Washizu
2. 発表標題 Tribological Characteristics and Structure of Organophosphate on Metal Surface
3. 学会等名 Tribocchemistry Hakodate 2019, Hakodate, Japan (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井池祐貴, 甲嶋宏明, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学法によるリン酸エステルの基油中における吸着挙動の解析
3. 学会等名 日本機械学会 2019 年度 年次大会, 秋田大学, 秋田
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本間睦己, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学法によるリン酸エステルの鉄表面への化学吸着過程の解析
3. 学会等名 第 23 回分子シミュレーション学会 夏季研究会, 蘭亭, 仙台
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松岡諒, 鷲津仁志
2. 発表標題 層状グラフェン移着片の摩擦挙動の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第 23 回分子シミュレーション学会 夏季研究会, 蘭亭, 仙台
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Nakae, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Organic Molecular Polymerization in Solid Lubrication using Reactive Force Field
3. 学会等名 46th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Valpre, Lyon, France (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Iike, H. Koshima, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Initial Adsorbing Process of Organophosphate on Metal Surface
3. 学会等名 46th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Valpre, Lyon, France (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井池祐貴, 甲嶋宏明, 鷲津仁志
2. 発表標題 極圧添加剤と油性剤の分子集団の挙動からみた違い
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 京都大学, 京都
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中江理緒, 鷲津仁志
2. 発表標題 摩擦フェイドアウト系における高分子生成初期過程の解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 京都大学, 京都
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Surface Adsorption and Chemical Reaction of Additives Studied by Molecular Dynamics
3. 学会等名 74th STLE Annual Meeting and Exhibition, Omni Nashville Hotel, Nashville, Tennessee, USA (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井池祐貴, 甲嶋宏明, 鷲津仁志
2. 発表標題 金属表面におけるリン酸エステルの初期吸着過程の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議 2019 春 東京, 国立オリンピック記念青少年総合センター, 東京
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中江理緒, 鷲津仁志
2. 発表標題 固体間摩擦における有機分子重合の反応力場分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議 2019 春 東京, 国立オリンピック記念青少年総合センター, 東京
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Washizu
2. 発表標題 Molecular simulations for boundary lubrication under specific conditions
3. 学会等名 Hydrogen Energy and Fuel Cell Forum in Kyushu & International Hydrogen Energy Development , Kyushu Univ., FukuokaForum 2019 (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学を用いた摩擦現象解析
3. 学会等名 2019 年 1 回極限ナノ造形・構造物性研究会, 東北大学東京サイト, 東京(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 分子シミュレーションによる固液界面のダイナミクスの解析
3. 学会等名 2018 年日本表面真空学会学術講演会, 神戸国際会議場, 神戸(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 潤滑界面での分子設計評価
3. 学会等名 高分子材料系におけるLAMMPS ReaxFF計算の活用セミナー, 大阪大学, 大阪(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 清水陽平, 黒川貴則, 新井大和, 鷲津仁志
2. 発表標題 大規模シミュレーションによるブレンド系ポリマーの比誘電率推定
3. 学会等名 2018年度 高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会, 大阪大学 中之島センター, 大阪
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 鷲津仁志
2. 発表標題 固体潤滑の分子レベルからの理論的アプローチ
3. 学会等名 トライボロジー会議2018秋, 伊勢, C10
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井池祐貴, 甲嶋宏明, 鷲津仁志
2. 発表標題 分子動力学法によるリン酸エステルの金属表面への吸着過程の解析
3. 学会等名 トライボロジー会議2018秋, 伊勢, E10
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 甲嶋宏明, 村上祐子, 東海林弘, 井池祐貴, 鷲津仁志
2. 発表標題 リン酸エステルの金属表面における摩擦摩耗特性とその構造
3. 学会等名 トライボロジー会議2018秋, 伊勢, E9
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西川航平, 秋山博俊, 八木下和宏, 鷲津仁志
2. 発表標題 銅表面における防錆剤吸着過程の電荷移動ダイナミクス
3. 学会等名 トライボロジー会議2018秋, 伊勢, E8
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Nishikawa, H. Akiyama, K. Yagishita, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Simulation of adsorption process of anti-corrosion additives
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling, p. 663, Osaka International Convention Center, Osaka (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井池祐貴, 鷲津仁志
2. 発表標題 リン酸エステルの金属表面への吸着過程の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第9回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西川航平, 秋山博俊, 八木下和宏, 鷲津仁志
2. 発表標題 防錆剤の金属表面に対する吸着過程解析
3. 学会等名 第9回トライボロジー秋の学校 in 愛知, あいち健康プラザ, 愛知
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Nishikawa, H. Akiyama, K. Yagishita, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular dynamics analysis of anti-copper-corrosion additives in solution
3. 学会等名 The 6th Asia International Conference on Tribology (ASIATRIB2018), Hilton-Kuching, Sarawak, Malaysia (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Washizu, H. Akiyama, M. Konishi, K. Nishikawa
2. 発表標題 Molecular Simulations for Complex Boundary Lubrication
3. 学会等名 The 6th Asia International Conference on Tribology (ASIATRIB2018), Hilton-Kuching, Sarawak, Malaysia (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井池祐貴, 鷺津仁志
2. 発表標題 リン 酸エステル の 金属表面へ吸着過程の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第22回分子シミュレーション夏の学校, 三国観光ホテル, 三国町, 福井
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西川航平, 八木下和宏, 秋山博俊, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる銅腐食防止添加剤の銅表面への吸着機構解析
3. 学会等名 日本機械学会 2018 年度年次大会, 関西大学, 大阪
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Washizu, H. Akiyama, M. Konishi, K. Nishikawa, S. Usui, T. Kawate
2. 発表標題 Dynamics of complex liquids under boundary lubrications
3. 学会等名 45th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, University of Leeds, Leeds, UK, 33.4. (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Nishikawa, H. Akiyama, K. Yagishita, H. Washizu
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Adsorption Process of Anti-Corrosion Additives on Copper and Oxidized Copper Surfaces
3. 学会等名 Proceedings of the 2018 ASME Information Storage & Processing Systems and Micromechatronics for Information and Precision Equipment (ISPS/MIPE 2018), San Fransisco, USA, ISPS-MIPE2018-8538 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西川航平, 八木下和宏, 秋山博俊, 鷺津仁志
2. 発表標題 防錆剤による金属表面への化学吸着と物理吸着の同時解析
3. 学会等名 関西潤滑懇談会 7月例会ポスター発表会, 関西大学, 大阪
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 西川航平, 秋山博俊, 八木下和宏, 鷺津仁志
2. 発表標題 分子動力学法による腐食防止添加剤の銅および酸化銅表面への吸着特性解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2018 春 東京, 国立オリンピック記念青少年総合センター, 東京, 301
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 鷲津仁志, 小西正和, 井池祐貴, 中江理緒, 甲嶋宏明
2. 発表標題 リン酸エステルの金属表面への吸着過程の分子動力学解析
3. 学会等名 トライボロジー会議 2018 春 東京, 国立オリンピック記念青少年総合センター, 東京, 270
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 鷲津仁志	4. 発行年 2020年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 12ページ
3. 書名 高分子材料のトライボロジー制御	

〔産業財産権〕

〔その他〕

兵庫県立大学大学院情報科学研究科鷲津研究室 http://washizu.org/lab/index.html 高分子材料の高次構造を表現する新規手法を大規模分子シミュレーションにより発見 https://www.u-hyogo.ac.jp/outline/media/press/2021/monthly/2021_01.html スパコンで解き明かす摩擦のシミュレーション学 https://www.youtube.com/watch?v=CeV0bfQ1rP8
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	レ ヴァンサン (Le Van Sang)	兵庫県立大学・大学院情報科学研究科・特任講師 (24506)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	杉村 奈都子 (Sugimura Natsuko) (00563959)	兵庫県立大学・大学院情報科学研究科・客員准教授 (24506)	
研究協力者	石井 良樹 (Ishii Yoshiki) (20806939)	兵庫県立大学・大学院情報科学研究科・特任講師 (24506)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関