

課題番号	研究課題名	研究代表者	評価結果
16106003	ハイブリッド量子分子動力学法に基づくトライボケミカル反応シミュレータの開発	宮本 明 (東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授)	A
<p>本研究において、誰でも考えつくが実現するのは容易でない、化学反応を扱うシミュレータと摩擦現象を扱うシミュレータを統合したことは評価できる。</p> <p>リン酸トリメチルのトライボケミカル反応や Mo-DTC の分解反応、ZDDP の耐摩耗膜形成反応などによるサンプル検討でその有用性を確かめ、トライボ材料・潤滑剤の界面に働く機構の理解を助ける重要な手段を実現した。また、トライボ材料や潤滑剤の開発に新しい手法を提供できる可能性を示した。しかし、確認は定性的に一致している範囲にとどまっており、研究目的で言うような汎用性を保証するものではないと考える。化学反応をどこまで正確に計算しているのか、あるいは、どこにどの程度の近似を使っているのかが不明であり、また、分子動力学を適用するにあたり、どこをどの様にモデル化したかの詳細も知ることができない。採用された分子動力学のモデルが全体の系との相互作用から見て、どの程度妥当なものであるかが、本研究成果の適用限界を知る上で重要であるが、それについてはあまり述べられていない。本研究成果の有効性の範囲を明らかにすることが重要である。</p> <p>シミュレータの開発を目的とした本研究の趣旨からは、ほぼ期待されていたとおりの研究進展があったと判断できる。</p>			