

超高速化量子分子動力学法に基づくマルチレベル

トライボロジーシミュレータの開発

Development of Multi-level Tribological Simulator
based on Ultra-accelerated Quantum Chemical
Molecular Dynamics

宮本 明 (MIYAMOTO AKIRA)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授



研究の概要

潤滑添加剤・磨耗防止剤の機能の本質解明のためには、ナノ摩擦界面における被膜形成過程など化学反応をともなう現象解明が必須であり、トライボケミカル反応を解明可能な手法の確立が強く求められている。これまでトライボケミカル反応シミュレータ及び超高速量子分子動力学法プログラムの開発に成功した申請者は、この計算速度の格段の進歩とこれまで得られている成果を組み合わせることで、量子論に基づいたマイクロとメソ、マクロを含む、世界初の「マルチレベルトライボロジーシミュレータ」を開発する。

研究分野：機械工学

科研費の分科・細目：機械材料・材料力学

キーワード：マルチレベル、量子分子動力学、トライボケミカル、シミュレータ、摩擦

1. 研究開始当初の背景

高信頼性・低環境負荷の自動車・機械装置の開発に向けて、高機能かつ無リン・無硫黄の潤滑添加剤・磨耗防止剤の開発が急務である。それら潤滑添加剤・磨耗防止剤の機能の本質を解明するためには、ナノ摩擦界面における被膜形成過程など化学反応をともなう現象解明が必須であり、トライボケミカル反応を解明可能な手法の確立が強く求められていた。

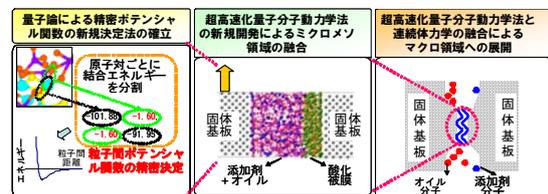
2. 研究の目的

研究代表者ら独自の手法である超高速量子分子動力学法などをベースに、量子論に基づいたマイクロからメソ、マクロまでを含むマルチレベルトライボロジーシミュレータの開発することで、世界初の「マルチレベルトライボロジーシミュレータ」を開発し、新しい研究領域を切り開く。

3. 研究の方法

マルチレベルトライボロジーシミュレータ(参考図1)を実現するため、超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータ、メソスケール・反応表現付トライボロジーシミュレータ、時間発展加速化理論、化学反応表現付連続体力学シミュレータを開発し、エンジン添加剤のトライボケミカル反応

に適用して、その反応機構解明への有効性を検証する。



参考図1 マルチレベルトライボロジーシミュレータの構想図

4. これまでの成果

(1) 超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータの開発

研究代表者らが本研究開始以前に開発した超高速化量子分子動力学法は、従来の第一原理的手法よりも5000倍以上高速化されており、他に例を見ない独自の手法である。本研究では、上方から系の一部を一定の圧力で圧縮する機能、および摩擦・せん断方向に一定の速度で系の一部をスライドさせる機能を実装し、トライボロジー分野に特化した超高速量子分子動力学法計算を実現した。

(2) メソスケールでトライボロジー現象を解明可能な反応表現付トライボロジーシミュレータの開発

研究代表者らは本研究開始以前から、非平衡古典分子動力学トライボロジーシミュレ

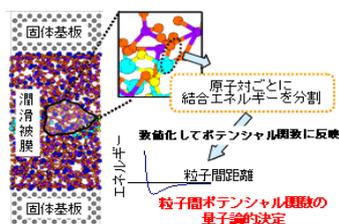
ータと Tight-Binding 量子分子動力学シミュレータを統合したハイブリッド量子分子動力学シミュレータを開発、応用してきた。本研究では、より大規模なトライボロジーモデルに応用するため、最も計算時間のかかる反応過程の計算を確率論的手法に置き換え、大幅に高速化したメソスケール・反応表現付トライボロジーシミュレータを開発した。

(3) 時間発展加速化理論の開発

上記(2)のメソスケール対応シミュレータでも、速度定数の遅い化学反応の取り扱いが困難である。そこで新たに遷移状態理論を導入し、上記シミュレータの結果をマイクロ秒など実際の時間スケールに対応付けることができる、時間発展加速化理論を開発した。

(4) 粒子間相互作用ポテンシャル精密決定の自動化プログラムの開発

研究代表者らは、より大規模なトライボケミカル反応シミュレーションを実現するため、量子化学計算から原子間相互作用ポテンシャルを精密に決定し、古典分子動力学法に用いる手法を開発していた(参考図2)。本研究では、これを自動化するプログラムを開発し、より高速で安定な計算を実現した。



参考図2 相互作用の決定方法

(5) 化学反応表現付連続体力学シミュレータの開発

マクロレベルの視点では摩擦面以外は一般に連続体近似が可能であることから、有限要素法(FEM)による弾塑性体計算および数値流体力学(CFD)による流体計算へ、界面における化学反応の計算に上述の超高速化量子分子動力学法を導入することで、実験と直接連携可能な化学反応を取り入れたハイブリッド化マクロレベル連続体力学シミュレータFEMおよびCFDプログラムを実現した。

(6) エンジン添加剤のトライボケミカル反応機構解明への適用による有効性検証

実在系の計算対象として、フリクション低減用添加剤であるジアルキルジチオカルバミン酸モリブデン(Mo-DTC)に代表される様々な潤滑油添加剤のトライボケミカル反応をとりあげ、上記で開発されたシミュレータを適用し有効性を確認した。

5. 今後の計画

引き続き様々なトライボロジー分野へ適用性検証を行うと共に、必要に応じてシミュレータの改良などを行っていく。

6. これまでの発表論文等(受賞等も含む)

1. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ryo

Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Fabrice Dassenoy, Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Momoji Kubo, Jean-Michel Martin, Akira Miyamoto, "A computational chemistry study on friction of h-MoS₂. Part II. Friction anisotropy", J. Phys. Chem. B, 114, 15832-15838, 2010

2. Tasuku Onodera, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Akira Miyamoto, "Development of a quantum chemical molecular dynamics tribochemical simulator and its application to tribochemical reaction dynamics of lubricant additives", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18, 034009, 2010

3. Onodera T, Morita Y, Suzuki A, Sahnoun R, Koyama M, Tsuboi H, Hatakeyama N, Endou A, Takaba H, Del Carpio CA, Deka RC, Kubo M, Miyamoto A, "Tribochemical Reaction Dynamics of Molybdenum Dithiocarbamate on the Nascent Iron Surface: A Hybrid Quantum Chemical/Classical Molecular Dynamics Study", J Nanosci Nanotechnol, 10, 2495-502, 2010

4. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Fabrice Dassenoy, Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Jean-Michel Martin, Akira Miyamoto, "A Computational Chemistry Study on Friction of h-MoS₂ Part I: Mechanism of Single Sheet Lubrication", The Journal of Physical Chemistry B, 113, 16526-16536, 2009

5. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Momoji Kubo, Akira Miyamoto, "Influence of Nanometer Scale Film Structure of ZDDP Tribofilm on Its Mechanical Properties: A Computational Chemistry Study", Applied Surface Science, 256, 976-979, 2009

ホームページ等

<http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/>