

【基盤研究 (S)】  
理工系 (工学)



研究課題名 現物モデリングによる実験・計測融合マルチレベルトライボロジーシミュレータの開発

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

みやもと あきら  
宮本 明

研究分野： 機械工学

キーワード： トライボロジー、計算化学

【研究の背景・目的】

これまで培ってきたマルチレベルトライボロジーシミュレータに加え、最近ではトライボロジー分野の機器分析、計測試験方法が飛躍的に進歩している。そのような研究の進歩を背景に本研究では、マルチレベルシミュレーションとトライボロジー分析、トライボロジー計測、トライボ部品シミュレーションを融合した実験融合マルチレベルトライボシミュレータ (図1) を世界に先駆けて開発する。実験研究者との連携を推進するシームレス可視化・シミュレーション手法とともに、トライボロジーに係る研究開発手法を飛躍的に革新する。実物材料・実物条件を扱う実験研究と量子化学を中心とする理論研究が協奏・融合することにより、初めて、未来のトライボロジー技術開発を支える強力な方法論が構築されることになる。



図1 シミュレータ概念図

【研究の方法】

本研究では、(1) 実験トライボロジーで現れる実構造・本物構造のコンピュータモデリング手法の開発、(2) 実構造・本物構造モデルからのトライボロジー物性の理論予測手法の開発、(3) 原子レベルからの積上げによるトライボ計測・トライボ試験結果予測手法の開発、(4) 原子レベルからの積上げによるトライボ部品・トライボ機器摩擦・摩耗挙動予測手法の開発、(5) 実験研究者との共同を加速するためのヒューマンインターフェースの開発、(6) 実験研究者との共同による開発シミュレータの有効性の検証と課題抽出という6つの課題を、長年の実践的コンピュータ化学の経験を有する研究代表者と、こ

れまで共同で研究を進めてきた研究分担者が、それぞれの特色、持ち味を生かしつつ、多くの産官学の実験研究者と協力しながら遂行する。

【期待される成果と意義】

既存の第一原理分子動力学法により1000万倍も高速な「超高速化量子分子動力学法」に基づき開発したマルチレベルトライボシミュレータからさらに先に進み、トライボ分析、トライボ計測、トライボ部品などの実験的手法をも融合した新しい研究手法「現物モデリングによる実験・計測融合マルチレベルトライボロジーシミュレータ」を確立する。これは、世界的にみても全くなく、本研究の独創的な点である。学術的な面での特色、独創性をもつだけでなく、本研究によって、多様な計測・実験融合マルチスケールトライボシミュレータが完成すれば、次世代自動車、医療機器などトライボロジーが関与する社会的に重要な課題を電子・原子レベルから解析し設計できる強力なツールを提供するだけでなく、今後の機械工学研究の在り方に大きな影響を与えるものと考えている。トライボロジーは学問と社会ニーズがリンクした領域であるので、他の重要産業領域へのインパクトも拡がるものと期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ J. M. Martin, T. Onodera, M.-I. De Barros Bouchet, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, "Anit-wear Chemistry of ZDDP and Calcium Borate Nano-additive. Coupling Experiments, Chemical Hardness Predictions, and MD Calculations," Tribol. Lett., 50, 95-104, (2013).
- ・ Y. Morita, S. Jinno, M. Murakami, N. Hatakeyama, A. Miyamoto, "A Computational Chemistry Approach for Friction Reduction of Automotive Engines," Int. J. Engine Res., (2013), in press.

【研究期間と研究経費】

平成25年度-29年度  
167,400千円

【ホームページ等】

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