

課題名： 第一原理分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と低炭素化機械システムの設計

氏名： 久保百司

機関名： 東北大学

1. 研究の背景

グリーン・イノベーションの創生には、機械工学が関わる多様なエネルギーシステム・デバイスにおいて、CO₂の排出量を低減する低炭素化技術の開発が世界的に急務となっている。特に、近年のナノテクノロジーの発展により、機械システムの設計・開発においても、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」などが複雑に絡み合った現象を、電子・原子レベルで理解することが重要となっている。しかし、それを可能とするシミュレーション手法は世界的にも開発されていない。

2. 研究の目標

「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」が複雑に絡み合った現象を電子・原子レベルで明らかにすることが可能なシミュレータを世界に先駆けて開発し、CO₂排出量の低減を可能とする自動車エンジン、原子力発電、燃料電池、ディスプレイの理論設計を実現する。

3. 研究の特色

独自に考案した電子・原子レベルのシミュレーション手法を発展させることで、これまでは不可能であった「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」が複雑に絡み合った現象を明らかにし、その知見に基づき高精度かつ迅速に低炭素化機械システムの設計を実現する。

4. 将来的に期待される効果や応用分野

低摩擦エンジンを実現した自動車、長期信頼性を有する原子力発電、エネルギー効率が低い燃料電池、低消費電力を実現するディスプレイなどの開発、実用化が期待できる。

第一原理分子動力学法に基づく マルチフィジックスシミュレータの開発

マルチフィジックス現象

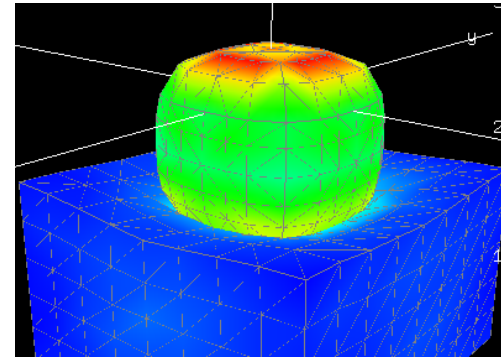
従来法一連続体力学

重厚長大な機械システム

問題点

X 化学反応

不可能



摩擦

衝撃

応力

複雑な
絡みあい

伝熱

流体

電位

化学反応
の重要性

本研究のアイデア

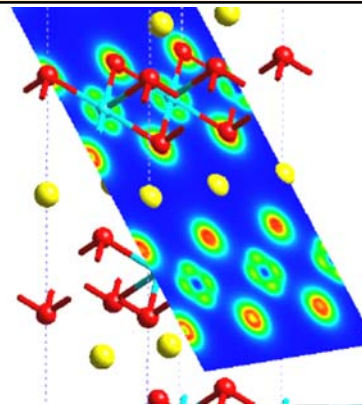
新機能の創出

低炭素化の実現

量子化学

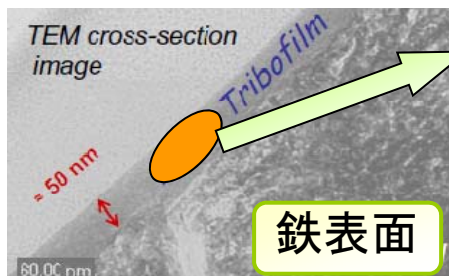
導入

機械システム



「機械工学」と「化学」の
異分野融合によるブレークスルー

例:自動車エンジン



摩擦下での化学反応
で生成した潤滑膜

低摩擦の実現

第一原理分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの低炭素化機械システムへの応用

トライボロジー
(超低摩擦)

原子力発電
(耐応力腐食割れ)

燃料電池
(CO₂排出量削減)

ディスプレイ
(低消費電力)

固体基板

摩擦

流体

潤滑剤

摩擦と
化学反応

流体

応力と
化学反応

応力

応力

応力

燃料極

粒子

電位と
化学反応

伝熱

電位

原子・
分子照射

衝撃

衝撃と
化学反応

伝熱

「場の制御によって材料の壁を越える」ブレイクスルー