

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)
実施状況報告書(平成22年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	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
研究機関・ 部局・職名	東北大学・大学院工学研究科・教授
氏名	久保百司

1. 当該年度の研究目的

研究者は既に、SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に基づき「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータを開発し、Si 半導体の化学機械研磨プロセス、自動車用 MoS₂ 潤滑剤のトライボケミカル反応などへの応用を実現した。一方、研究者は最近、経験的パラメータを使用せずに、「化学反応ダイナミクス」を高精度に解明可能な第一原理分子動力学法の開発に成功した。そこで本研究では、上記2種類の開発シミュレータをハイブリッド化することによって、第一原理分子動力学法に基づき、非経験的に「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックス現象を解明することが可能なマルチフィジックスシミュレータを開発することを目的とした。これにより、低摩擦を実現するトライボロジーシステムの高精度な理論的設計を実現することができる。

2. 研究の実施状況

開発済みのSCF-Tight-Binding量子分子動力学法に基づく「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックスシミュレータと、同じく開発済みの第一原理分子動力学シミュレータをハイブリッド化することによって、第一原理分子動力学法に基づき、非経験的に「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックス現象を解明することが可能なマルチフィジックスシミュレータを開発することに成功した。本シミュレータは、3次元周期境界条件を採用し、温度制御はNose法とBerendsen法から選択することが可能である。また、密度汎関数法の汎関数数としては、局所密度近似(LDA)としてSVWN、一般化勾配近似(GGA)としてBLYPから選択することができ、基底関数としてはDouble-zeta、Triple-zetaを使用することが可能である。また、内核電子の記述には、Effective Core Potential を使用することができる。プログラム開発にはC++言語を使用し、Linux系のOS上で開発を行った。

具体的に、開発シミュレータでは2枚の摩擦基板をモデル化し、その片方の基板のみを横方向にスライドさせることによって、「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックス現象をシミュレーションすることが可能となっている。また、摩擦係数は強制移動させている原子のスライド方向にかかる力の値を、それに対して垂直な方向の力の値で割ることによって求めることが可能となっている。さらに、基板に与える加重を変化させて、シミュレーションを行うことが可能であり、加重が「摩擦」と「化学反応」のマルチフィジックス現象に与える影響を解明することも可能である。

様式19 別紙1

3. 研究発表等

雑誌論文 計〇件	(掲載済み一査読有り) 計〇件 (掲載済み一査読無し) 計〇件 (未掲載) 計〇件
会議発表 計〇件	専門家向け 計〇件 一般向け 計〇件
図書 計〇件	
産業財産権 出願・取得状 況 計〇件	(取得済み) 計〇件 (出願中) 計〇件
Webページ (URL)	該当なし
国民との科 学・技術対話 の実施状況	該当なし
新聞・一般雑 誌等掲載 計〇件	
その他	該当なし

4. その他特記事項

該当なし

実施状況報告書(平成22年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

1. 助成金の受領状況(累計) (単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額
直接経費	100,000,000	0	33,680,000	66,320,000
間接経費	30,000,000	0	10,104,000	19,896,000
合計	130,000,000	0	43,784,000	86,216,000

2. 当該年度の収支状況 (単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を 除く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度 執行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額
直接経費	0	33,680,000	0	33,680,000	399,300	33,280,700
間接経費	0	10,104,000	0	10,104,000	180,000	9,924,000
合計	0	43,784,000	0	43,784,000	579,300	43,204,700

3. 当該年度の執行額内訳 (単位:円)

	金額	備考
物品費	397,300	ハードディスク、ノートパソコン
旅費	0	
謝金・人件費等	0	
その他	2,000	学会参加登録費
直接経費計	399,300	
間接経費計	180,000	
合計	579,300	

4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
				0		
				0		
				0		