

# 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)

## 【概要】

近年、環境・エネルギー対策、ダウンサイジング等の要請から微小領域での摩擦・潤滑、いわゆるナノトライボロジーの重要性が高まっている。これに対し、研究代表者らは分子動力学法に基づき、原子レベルでトライボロジー現象の解明を可能とするトライボロジーシミュレータ TRIBOSIM を開発し、潤滑剤の定量的な物性値予測、摩擦・潤滑メカニズムの解明を可能にした。一方、特に最近では化学反応を含むトライボロジー現象、いわゆるトライボケミカル反応の電子レベルでの解明に対する要求が強くなってきた。しかし、世界的に見てもトライボケミカル反応を解明可能な理論計算プログラムは皆無である。そこで本研究では、研究代表者らが開発してきた分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータ TRIBOSIM と SCF-Tight-Binding 近似に基づく高速化量子分子動力学プログラム Colors を統合化し、トライボケミカル反応ダイナミクスを解明可能なトライボケミカル反応シミュレータ Tribo-Colors を世界に先駆けて開発することを目的とする。さらに開発プログラムを活用し、電子レベルでのトライボロジー材料・プロセスの理論設計を行う。

## 【期待される成果】

「化学反応」と「機械的摩擦」の両方を扱わなくてはならないトライボケミカル反応を理論的に解明可能なシミュレータは世界的に見ても例がなく、本研究により世界に先駆けて、トライボケミカル反応シミュレータ Tribo-Colors が完成される。これにより、トライボケミカル反応が重要な役割を果たす多様な系において、電子レベルでのトライボロジー材料・トライボロジープロセスの理論設計が可能になる。一方、学問的には、従来、化学の分野で発展してきた「量子分子動力学的手法」を機械工学の分野において活用する全く新しい学問体系の創出が実現する。

## 【関連の深い論文・著書】

- (1) H. Zhou, P. Selvam, K. Hirao, A. Suzuki, D. Kamei, S. Takami, M. Kubo, A. Imamura, and A. Miyamoto, Development and Application of a Novel Quantum-Chemical Molecular-Dynamics Method for Degradation Dynamics of Organic Lubricants under High Temperatures and Pressures, Tribology Lett., 15 (2003) 155-162.
- (2) D. Kamei, H. Zhou, K. Suzuki, K. Konno, S. Takami, M. Kubo, and A. Miyamoto, Computational Chemistry Study on the Dynamics of Lubricant Molecules under Shear Conditions, Tribology Intern., 36 (2003) 297-303.

【研究期間】 平成 16 ~ 20 年度

【研究経費】 87,400 千円

【ホームページ】

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