

【理工系（工学I）】

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

みやもと あきら  
宮本 明

（東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授）

【研究の概要等】

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る。申請者はこのような、化学反応を理論的に議論できる「量子論に立脚したトライボロジー研究」に対する産学界からの期待を背景に、「化学反応」と「機械的摩擦現象」の両方を取り扱うトライボケミカル反応シミュレータHybrid-Colorsの開発に成功してきた。一方、最近、従来のTight-Binding量子分子動力学法よりも1000万倍も高速な、超高速量子分子動力学法プログラムの開発に成功した。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、量子論に基づいたミクロとメソ、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。

【当該研究から期待される成果】

本研究では、これまで開発してきた「化学反応」と「機械的摩擦現象」の両方を取り扱うことが可能なトライボケミカル反応シミュレータHybrid-Colorsに、粒子間相互作用ポテンシャル精密決定のための自動化プログラムなどのシミュレータ、および最近予備的に開発した「超高速量子分子動力学法」を融合させることで、ミクロからメソスケールまでのトライボロジー現象を量子論に基づいて解析することができる「マルチレベルトライボロジーシミュレータ」が開発される。また、自動車用エンジンオイル添加剤などの実在系のメカノケミカル反応に適用し、実験結果との比較からその有効性が検証される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ Michihisa Koyama, Jun Hayakawa, Tasuku Onodera, Kosuke Ito, Hideyuki Tsuboi, Akira Endou, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, and Akira Miyamoto, “Tribochemical Reaction Dynamics of Phosphoric Ester Lubricant Additive by Using a Hybrid Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 17507-17511.
- ・ Yusuke Morita, Tasuku Onodera, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Carlos A. Del Carpio, Takatoshi Shin-yoshi, Noriaki Nishino, Atsushi Suzuki, Akira Miyamoto, “Development of a New Molecular Dynamics Method for Tribochemical Reaction and its application to formation dynamics of MoS<sub>2</sub> tribofilm”, Appl. Surf. Sci., in press.

【研究期間】 平成20年度－24年度

【研究期間の配分（予定）額】

153,600,000 円（直接経費）

【ホームページアドレス】

<http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/index-j.html>