

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 1 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究 (S)

研究期間：2008 ~ 2012

課題番号：20226005

研究課題名 (和文) 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

研究課題名 (英文) Development of Multi-level Tribological Simulator based on Ultra-accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

研究代表者

宮本 明 (MIYAMOTO AKIRA)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

研究者番号：50093076

研究分野：機械工学

科研費の分科・細目：機械材料・材料力学

キーワード：マルチレベル、量子分子動力学、トライボケミカル、シミュレータ、摩擦

1. 研究計画の概要

高信頼性・低環境負荷の自動車・機械装置の実現には、高機能かつ無リン・無硫黄の潤滑添加剤・磨耗防止剤が重要であり、潤滑添加剤・磨耗防止剤の機能の本質を解明するため、ナノ摩擦界面における被膜形成過程などトライボケミカル反応の解析手法が求められている。本研究では、研究代表者ら独自の手法である超高速量子分子動力学法などをベースに、量子論に基づいたマイクロからメソ、マクロまでを含むマルチレベルトライボロジーシミュレータの開発することで、世界初の「マルチレベルトライボロジーシミュレータ」を開発し、新しい研究領域を切り開くことを目的とする。

2. 研究の進捗状況

(1) 超高速化量子分子動力学法トライボロジーシミュレータの開発：研究代表者らが開発した従来の第一原理的手法に比して 5000 倍以上高速化されている超高速化量子分子動力学法に、上方から系の一部を一定の圧力で圧縮する機能、および摩擦・せん断方向に一定の速度で系の一部をスライドさせる機能を新たに実装し、トライボロジー分野に特化した超高速量子分子動力学法計算を実現した。

(2) メソスケールでトライボロジー現象を解明可能な反応表現付トライボロジーシミュレータの開発：研究代表者らが開発したハイブリッド量子分子動力学シミュレータにおいて、最も計算時間のかかる反応過程の計算を確率論的手法に置き換え、シミュレーションのさらなる高速化・大規模化によるメソ/マクロ領域への展開を実現した。

(3) 時間発展加速化理論の開発：メソスケール

対応シミュレータでも困難な速度定数の遅い化学反応を取り扱うため、遷移状態理論を導入することで反応表現付きシミュレータの結果を実際の時間スケールに対応付けることができる時間発展加速化理論を開発した。

(4) 粒子間相互作用ポテンシャル精密決定の自動化プログラムの開発：研究代表者らが開発した量子論から古典分子動力学法の原子間相互作用を精密に決定する手法を、新たにプログラムとして自動化することにより、従来の第一原理的手法に比して最高 1000 万倍の高速化と計算の安定化を実現した。

(5) 化学反応表現付連続体力学シミュレータの開発：マクロレベルの視点では、摩擦面以外は一般に連続体近似が可能であることから、有限要素法(FEM)による弾塑性体計算および数値流体力学(CFD)による流体計算に、超高速化量子分子動力学法を適用した界面化学反応計算を導入することで、量子論に基づいたマクロトライボロジーシミュレータを開発した。

3. 現在までの達成度

① 当初の計画以上に進展している

(理由)

現在までに学術論文 51 件、招待講演 14 件、学会発表 76 件という研究開始時点の予想を大きく上回る成果が得られており、トヨタ自動車やリヨン工科大学・Martin 教授らとの共同研究など国内外との連携も飛躍的に進展している。

4. 今後の研究の推進方策

実在系の計算対象として、フリクション低減用添加剤であるジアルキルジチオカルバ

ミン酸モリブデン (Mo-DTC) に代表される様々な潤滑油添加剤のトライボケミカル反応をとりあげ、上記で開発されたシミュレータを適用し有効性を検証するとともに、さらなる改良を行ってゆく。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 51 件)

1. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ryo Nagumo, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Fabrice Dassenoy, Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Momoji Kubo, Jean-Michel Martin, Akira Miyamoto, "A computational chemistry study on friction of h-MoS₂. Part II. Friction anisotropy", J. Phys. Chem. B, 114, 15832-15838, 2010, 査読有
2. Tasuku Onodera, Ryuji Miura, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Akira Miyamoto, "Development of a quantum chemical molecular dynamics tribochemical simulator and its application to tribochemical reaction dynamics of lubricant additives", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18, 034009, 2010, 査読有
3. Onodera T, Morita Y, Suzuki A, Sahnoun R, Koyama M, Tsuboi H, Hatakeyama N, Endou A, Takaba H, Del Carpio CA, Deka RC, Kubo M, Miyamoto A, "Tribochemical Reaction Dynamics of Molybdenum Dithiocarbamate on the Nascent Iron Surface: A Hybrid Quantum Chemical/Classical Molecular Dynamics Study", J Nanosci Nanotechnol, 10, 2495-502, 2010, 査読有
4. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai Suzuki, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Fabrice Dassenoy, Clotilde Minfray, Lucile Joly-Pottuz, Jean-Michel Martin, Akira Miyamoto, "A Computational Chemistry Study on Friction of h-MoS₂ Part I: Mechanism of Single Sheet Lubrication", The Journal of Physical Chemistry B, 113, 16526-16536, 2009, 査読有
5. Tasuku Onodera, Yusuke Morita, Ai

Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Ramesh C. Deka, Momoji Kubo, Akira Miyamoto, "Influence of Nanometer Scale Film Structure of ZDDP Tribofilm on Its Mechanical Properties: A Computational Chemistry Study", Applied Surface Science, 256, 976-979, 2009, 査読有

[学会発表] (計 90 件)

1. 宮本 明, "Multi-level Computational Chemistry Methods for Green and Sustainable Chemistry", 鳥取大学講演会、2010年11月13日、鳥取県鳥取市鳥取大学
2. Akira Miyamoto, "Enabling and investigative tools: theory, modeling, and simulation Moderators", Long-term Impacts and Future Opportunities for Nanotechnology US-Japan-Korea-Taiwan Workshop、2010年7月26日、茨城県つくば市つくば国際会議場
3. 宮本 明, "Computational Chemistry as Practical Solution to Industrial Problems: Present States and Future Prospects", The 13th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis、2010年6月21日、宮城県宮城郡松島町松島一の坊
4. 宮本 明, 「賢材料と計算化学」、新素材技術部会講演会、2010年2月10日、東京
5. Akira Miyamoto, Takanori Kuriaki, Yusuke Morita, Tasuku Onodera, Ai Suzuki, Riadh Sahnoun, Michihisa Koyama, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Carlos A. Del Carpio, Momoji Kubo, "New Horizons in Tribology: The Computational Chemistry Paradigm", World Tribology Congress 2009, 2009年9月9日、京都市 国立京都国際会館

[図書] (計 4 件)

1. 高羽洋充、宮本 明、化学同人、「革新的な多孔質材料」、2010年、129-134

[その他]

ホームページ

http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/gyouseki_top.htm