

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

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的设计
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

【研究目的】

グリーン・イノベーションの創生と持続可能な社会の発展には、機械工学が関わる多様なエネルギーシステム・デバイスにおける低炭素技術の確立が強く求められている。具体的に低炭素社会の実現には、(1)低摩擦を実現するトライボロジーシステム、(2)長期信頼性を有する原子力発電システム、(3)CO₂の排出量を低減する燃料電池、(4)低消費電力を実現する家電製品の開発などにおいて革新的ブレークスルーの実現が必須である。特に、近年のナノテクノロジーの発展により、機械システム的设计・開発においても、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」などが複雑に絡みあったマルチフィジックス現象の原子レベルでの深い理解が重要となっている。従来、マルチフィジックス現象の理論的検討には、有限要素法や流体力学などの連続体力学シミュレーションが活用され、マクロスケールでの議論しか行われてこなかった。しかし、「化学反応」の解明には量子論的アプローチが必須であり、連続体力学の発展だけでは「化学反応を伴うマルチフィジックス現象の解明」というブレークスルーの実現は不可能である。

これに対し、研究者はオリジナルに考案した SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に基づき、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象を解明可能なマルチフィジックスシミュレータの開発に成功し、エッチング、化学機械研磨など様々な Si 半導体プロセスへの応用を実現した。しかし本手法は経験的なパラメータが必要なため未知の系に応用できず、さらに Si 半導体など限定的な系にしか応用できない問題点があった。一方、研究者は最近、経験的パラメータを使用せず、さらに対象系を限定せずに「化学反応ダイナミクス」を高精度に解明可能なオリジナルに考案した GFT 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、上記の開発シミュレータをハイブリッド化することで、第一原理分子動力学法に基づき非経験的に「化学反応」を扱いながら、「摩擦、衝撃、応力、電位、流体、伝熱」とのマルチフィジックス現象を解明可能なマルチフィジックスシミュレータを世界に先駆けて開発する。これにより、従来、機械工学で活用されてきた有限要素法や流体力学などの連続体力学シミュレーションでは不可能な、多様なエネルギーシステム・デバイスにおける「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」の

解明というブレークスルーを実現する。さらに、複雑なマルチフィジックス現象の解明には、従来の単純系に対する第一原理分子動力学法に比較し長時間計算を必要とする。そこで、独自に考案した高速計算手法を上記シミュレータに導入し、100倍以上の高速計算を実現する。さらに、(1)低摩擦を実現するトライボロジーシステム、(2)長期信頼性を有する原子力発電システム、(3)CO₂排出量を低減する燃料電池、(4)低消費電力を実現するプラズマディスプレイの4課題を重要ターゲットとして、従来は不可能であった「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」の量子論的理解に基づく低炭素化機械システムの理論設計を実現する。

【総合評価】	
<input type="radio"/>	特に優れた成果が得られている
<input type="checkbox"/>	優れた成果が得られている
<input type="checkbox"/>	一定の成果が得られている
<input type="checkbox"/>	十分な成果が得られていない

【所見】
① 総合所見
<p>第一原理分子動力学法に基づく4種類のマルチフィジックスシミュレータを開発し、これらのシミュレーションの高速化に成功した。さらに、トライボロジー、原子力発電、燃料電池、プラズマディスプレイの重要4課題における低炭素化機械システムの設計を実現し、アルコールを活用した低摩擦システムなど理論的に設計した機械システムの実験的検証を行った。また、当初の研究計画には無かった「電磁波と化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発をし、さらに、Liイオン電池におけるマルチフィジックス現象の解明、水素製造装置の作動条件の設計、低燃費タイヤの設計をも実現した。このように本研究で開発したマルチフィジックスシミュレータの有効性が実証された。</p> <p>以上、本研究で、かなりチャレンジングな目標であ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を開発し、その有用性を実証した。本成果は広い分野でブレークスルー、イノベーションを生み出し、社会に大きなインパクトを与えるものである。</p>

② 目的の達成状況
<p>・所期の目的が <input checked="" type="checkbox"/> 全て達成された ・ <input type="checkbox"/> 一部達成された ・ <input type="checkbox"/> 達成されなかった)</p> <p>当初目標の4種類のマルチフィジックスシミュレータを開発し、それぞれの現象を解明というかなりチャレンジングな目標を達成しており、さらに、当初の計画になかった、電磁波と化学反応のシミュレータの開発も行われた。</p> <p>本研究課題の機械工学分野において「化学反応を伴うマルチフィジックス現象」を解明可能な電子を考慮した計算手法の導入は世界にも例が無く、さらに、電磁波と化</p>

学反応のマルチフィジックス現象についても新たにシミュレーション法を開発した。具体的にその有効性が示されており、当初目標以上の成果がえられた。これにより、新しい学問分野の創出、今後の発展が見込まれる。

③ 研究の成果

・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が
(ある ・ ない)

・ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が
(創出された ・ 創出されなかった)

・当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

本研究において、当初目標になかったものを加え5種類のマルチフィジックスシミュレータの開発を行い、その高速化を達成し、計算精度の検証をした。本手法を用いて、トライボロジー、原子力発電、燃料電池、ディスプレイ、水素製造装置、低燃費タイヤ等の分野で理論設計に成功し、具体的な技術課題の解決を図ることができることを示した。このように量子論に基づく化学反応を含むマルチフィジックス現象の深い理解が、低炭素化機械システムの設計にとって必須であることを世界的に初めて提示した。よって、その優位性は明らかである。今後、種々の化学反応と機械的・電気的現象のマルチフィジックスに関連する多方面の分野での課題解決のためのブレークスルーとなり、機器の飛躍的な性能向上に貢献すると考えられる。

④ 研究成果の効果

・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

開発したシミュレータを活用し、「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「電位と化学反応」さらに「電磁波と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明を実現した。これにより、トライボロジー、原子力発電、燃料電池、プラズマディスプレイ、リチウムイオン電池、水素製造等多方面の分野における省エネルギー・高効率化の実現に貢献することが期待され、多くの分野でグリーン・イノベーションの創出に貢献するものと考えられる。さらに、本シミュレーション法は全く新しい手法によるものであり、研究の成果は関連する研究分野の進展に大きく寄与すると見込まれる。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

・適切なマネジメントが (行われた ・ 行われなかった)

研究補助員と優秀な助教を確保し、研究実施体制を構築し、優れた成果を上げており、また、たずさわった研究員の具体的なキャリアアップにつながっており、適切なマネジメントが行われている。

雑誌論文発表（掲載済み（査読有り））14件、でありその論文はインパクトファクター5レベルの雑誌の収容論文として公表されている。その他、多数の国内外の会議で発表されている。また、本プロジェクトの成果を発信するための専用のホームページを立ち上げ情報発信を行っている。3回開催した市民講座の様子をインターネットテレビCAT-Vから広く国民に配信した。以上成果の公表は適切に実施された。