

課題番号: GR010
助成額: 130百万円

グリーン・イノベーション

理工系

平成23年2月10日
～平成26年3月31日

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

久保 百司 東北大学大学院工学研究科 教授
Momaji Kubo



専門分野

マルチフィジックス
計算科学

キーワード

CAE・CAD/トライボロジー/安全・安心設計/信頼性設計/材料設計・プロセス・物性・評価/第一原理分子動力学法/マルチフィジックスシミュレーション

WEBページ

<http://www.kubo.rift.mech.tohoku.ac.jp/NEXT/>

研究背景

多様なエネルギーシステムにおいて、CO₂排出量の低減が世界的に急務となっている。特に、機械システムの開発においても、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」などが複雑に絡み合った現象を電子レベルで理解することが重要である。しかしそれを可能とするシミュレーション手法は世界的にも未開発である。

研究目的

独自考案したシミュレーション手法を発展させることで、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」が複雑に絡み合った現象を電子レベルで明らかにすることが可能なシミュレータを世界に先駆けて開発し、CO₂排出量の低減を可能とする自動車エンジン、原子力発電、燃料電池、ディスプレイの理論設計を実現する。

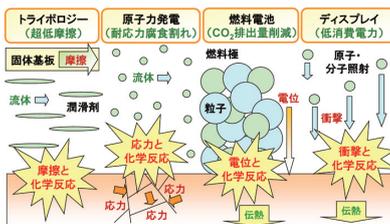
実績

代表論文: J. Phys. Chem. C, 117, 15602-15614, (2013)
受賞: 日本化学会学術賞、日本化学会 (2013年3月)
特記事項: 英国王立化学会発行の Faraday Discussions 誌 (Impact Factor: 5.0) の表紙に成果論文の図が採用された。

研究成果

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

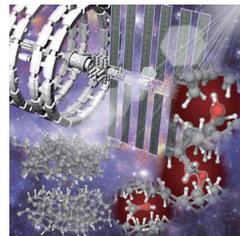
開発済みの第一原理分子動力学法を進展させ、「摩擦と化学反応」、「衝撃と化学反応」、「応力と化学反応」、「電位と化学反応」の4種類のマルチフィジックスシミュレータを開発した。さらに当初の計画には無い「電磁波と化学反応」のマルチフィジックスシミュレータの開発にも成功した。



開発した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概念図

量子論に基づくマルチフィジックス現象の解明と理論設計

機械工学の教科書には、「摩擦係数は荷重に依存しない」との記述があるが、これは摩擦界面での化学反応を想定していないためであり、「摩擦界面で化学反応が起こる場合には摩擦係数は荷重に依存する」という教科書を書き換える成果を得た。さらに、摩擦下での化学反応を積極的に活用することでCO₂排出量の低減が可能な方法を提言し、実証された。



Faraday Discussions 誌 (Impact Factor: 5.0) の表紙に採用された宇宙機器における「摩擦と化学反応」のマルチフィジックス現象

2020年の
応用展開

開発シミュレータの適用範囲は非常に広範囲であることから、機械工学のみならず医学、薬学、化学、物理、電気など多様な分野において、「量子論に基づくマルチフィジックス現

象の深い理解」とそれに基づく理論設計が実現され、それによりシステム・プロセス・材料開発の方法論が一新されるイノベーションの実現が期待される。