

## 計算化学に基づくマルチスケール有限要素シミュレータの開発

○ 畠山 望<sup>1</sup>、森田祐輔<sup>1</sup>、小野寺 拓<sup>1</sup>、大串巧太郎<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、  
高羽洋充<sup>1</sup>、久保百司<sup>1</sup>、Carlos A. Del Carpio<sup>1</sup>、宮本 明<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

### 【緒言】

原子・分子スケールの化学反応がマクロスケールに大きな影響を及ぼす現象として、自動車エンジンオイルに用いられる潤滑添加剤による摩擦反応や、打ち抜き加工における金属材料せん断面と加工油の化学反応などが挙げられる。このような系に対して、従来の第一原理計算による計算化学的手法では少分子数の理想系しか解析できず、また有限要素法によるマクロ計算では金属繊維などメソレベルで複雑な物性を示す構造を考慮することが困難であった。電子・原子レベルの知見をマクロスケールに反映するためには、階層的な構造解析を可能とする柔軟な計算手法が求められる。本研究では、大規模なモデルの解析を可能とするナノスケール量子分子動力学計算で得られた化学物性をボトムアップして、複雑な異方物性や表面反応などに対応した実践的なマルチスケール計算を実現する、マルチスケール有限要素シミュレータの開発を行った。

### 【計算方法】

独自に開発した有限要素プログラムを用いて、マクロ・メソスケールの階層的な弾塑性構造解析を行う。要素毎に異方的弾疎・熱膨張物性等の設定が可能であり、既存のプログラムでは不十分であった複雑物性へ柔軟に対応できる。原子・分子スケールでは、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を利用して得たパラメータを Tight-binding 近似のハミルトン演算子に適用することにより、電子状態計算の精度を確保しつつ高速な計算を実現可能とした、当研究室開発の量子分子動力学法プログラム Colors [1]を用いる。

### 【結果と考察】

本研究で開発したマルチスケール有限要素シミュレータにより、トライボケミカル反応について解析した例を示す(図 1)。自動車用エンジンオイルに添加剤として用いられる

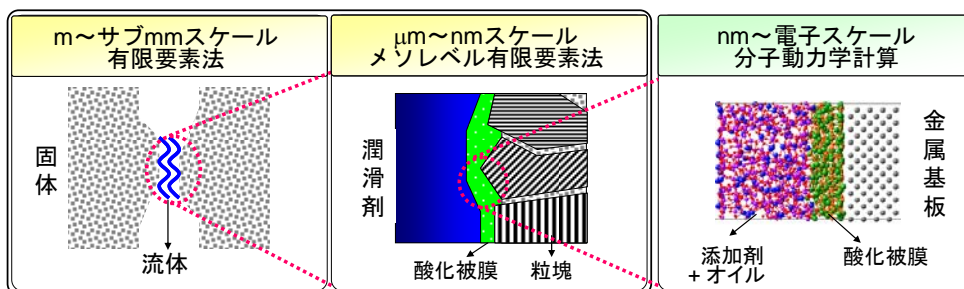


図 1 マルチスケール有限要素シミュレータと分子動力学計算の階層構造

ジアルキルジチオリン酸亜鉛(ZDDP)は、鉄基盤との間にリン酸塩を含むポリリン酸亜鉛層を耐磨耗膜として形成する[2]。高速化量子分子動力学法プログラム Colors による計算で、せん断により破断した酸化鉄粒子がポリリン酸亜鉛に溶け込む現象が観察されている。ここでは、酸化鉄基板は粒塊構造が露出しているとし、その表面に薄い潤滑膜領域を設定したメッシュを構成して、マクロ構造解析を行った。せん断力を加えると、鉄基板の粒塊構造に起因したミーゼス相当応力分布が現れ、降伏条件に従ってき裂の発生・発展が解析できる。潤滑膜が塑性を示して鉄表面の変形に追従するため、破断した酸化鉄粒子が膜に溶け込むことも相まって、ポリリン酸亜鉛層が良好な潤滑膜特性を持っていることが示される。

### 参考文献

[1] M. Elanany et al., *J. Phys. Chem. B*, **107**, 1518 (2003).

[2] J.M. Martin, *Trib. Lett.*, **6**, 1 (1999); C. Minray et al., *Thin Solid Films*, **447-448**, 272 (2004).