

2004

## 超高速化量子分子動力学に基づくマルチレベルトライボシミュレータ

○畠山 望<sup>1</sup>、森田祐輔<sup>1</sup>、小野寺 拓<sup>1</sup>、敖敦其木格<sup>1</sup>、鈴木 愛<sup>2</sup>、Riadh Sahnoun<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、Carlos Del Carpio<sup>1</sup>、Ramesh C. Deka<sup>2</sup>、久保百司<sup>3</sup>、宮本 明<sup>1,2</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)

<sup>3</sup>東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター  
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

### 【緒言】

これまで当研究室で開発してきた Tight-binding 量子分子動力学(MD)法を更に発展させ、従来の第一原理的手法と比較して約 1000 万倍の高速化を達成した超高速化量子 MD 法の開発に成功した。本手法により、量子論に基づく大規模な分子レベルシミュレーションが可能となるため、ナノ物性を精度良く求められるようになった。得られた分子レベルの力学物性を、有限要素法(FEM)などマクロシミュレータのパラメータに反映することにより、マルチレベルシミュレータへと展開することができる。スーパーコンピュータシステムも利用した、トライボケミカル反応を伴う大規模系に適用した結果について報告する。

### 【計算方法】

ナノトライボ物性を計算する超高速化量子 MD 法は、Tight-binding 量子 MD プログラム Colors[1]と、高速 MD プログラム NEW-RYUDO[2]を組み合わせることにより実現される。Tight-binding 近似のパラメータは、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により求められた結合エネルギー、電子状態、結合次数を精度良く再現するように決定されている。化学反応や機械的ひずみにより電子状態が変わる毎に Colors を用いて電子状態計算を行い、得られた電荷や結合エネルギーを忠実にポテンシャルに反映して NEW-RYUDO による MD 計算を行うことで、超高速化を達成している。マクロレベルでは、各種実試験結果と直接対応できるように、FEM やキネティックモンテカルロ(KMC)法を用いた摩擦・加工試験シミュレータを開発している。

### 【結果と考察】

純鉄基板間に挟まれて摩擦状態にある、自動車用エンジンオイル添加剤のジアルキルジチオリン酸亜鉛(ZDDP)境界膜中の酸化鉄磨耗粉を、スーパーコンピュータ NEC SX-8 上で超高速化量子 MD 法により計算した結果を示す。図 1(a)に示すように、全 3315 原子、20970 軌道の大規模量子 MD 計算に成功している。酸化鉄近傍のみを量子論的に解析するハイブリッド手法により、磨耗粉が摩擦運動により分解される様子が観察されている。本研究ではトライボシステム全体を量子論的に計算するため、摩擦特性に大きな影響を及ぼすことが予想される、基板-境界膜界面も同時に解析できる。実際、図 1(b)および図 1(c)に示すように、界面で Fe-O 間の結合エネルギーが大きくなる一方 Zn-O 間では小さくなっており、結果として Fe 近傍に O が近付き Zn が離れていく様子が観察された。

参考文献

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

[2] P. Selvam et al., Rev. Chem. Eng., 22 (2006), 377.

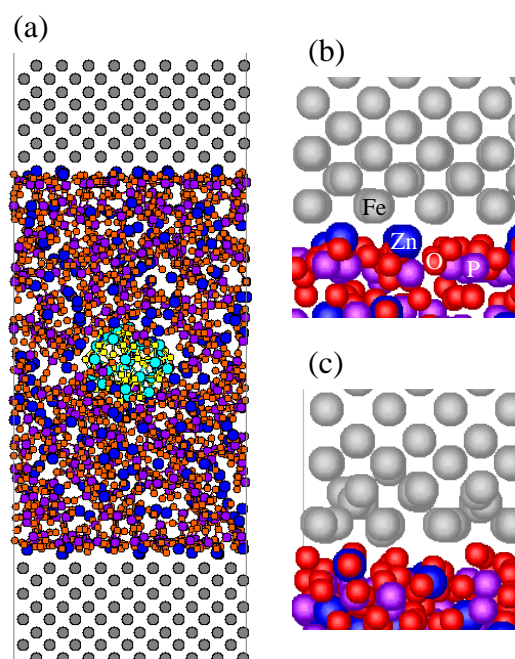


図1 鉄基板間 ZDDP 境界膜中の酸化鉄粒子の大規模量子分子動力学計算。(a)全体と(b)0fs および(c)650fs における界面。