

○久保百司

東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

【緒言】

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・デバイスにおいて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発電システム、(3)CO₂排出量を削減する燃料電池システム、(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、流体、電場、伝熱」などが複雑に絡み合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。そこで本研究では、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、流体、電場、伝熱」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を目的とした (図1)。

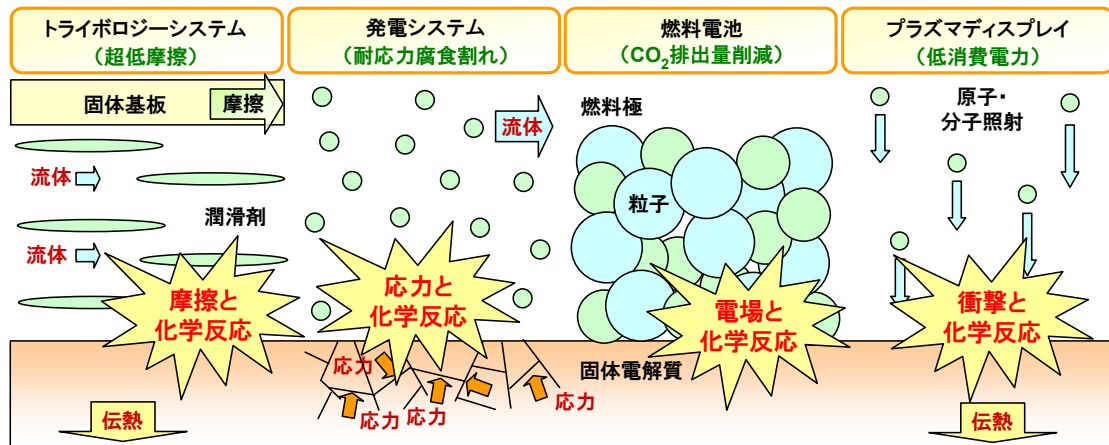


図1 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの概要

【結果と考察】

開発した量子分子動力学シミュレータを自動車エンジンに応用した研究例を紹介する。摩擦によるエネルギー消費は、国民総生産の約3%と言われており、さらに自動車エンジンの出力エネルギーの約30%が摩擦に消費されていることから、低摩擦システムの開発が強く求められている。そこで近年、自動車エンジンの潤滑剤として期待されているダイヤモンドライクカーボン(DLC)の摩擦化学反応ダイナミクスについて検討を行った (図2)。摩擦過程においてDLCを終端していたH原子が化学反応を起こし、H₂分子が生成する様子が確認された。

さらに、H₂分子の生成により、基板間距離が広がり、低摩擦係数0.07が実現できることが明らかとなった。このように量子分子動力学法を活用することで、化学反応により機械特性が大きく変化するダイナミクスを解明することに成功した。講演では開発シミュレータの多様な応用例について紹介する。

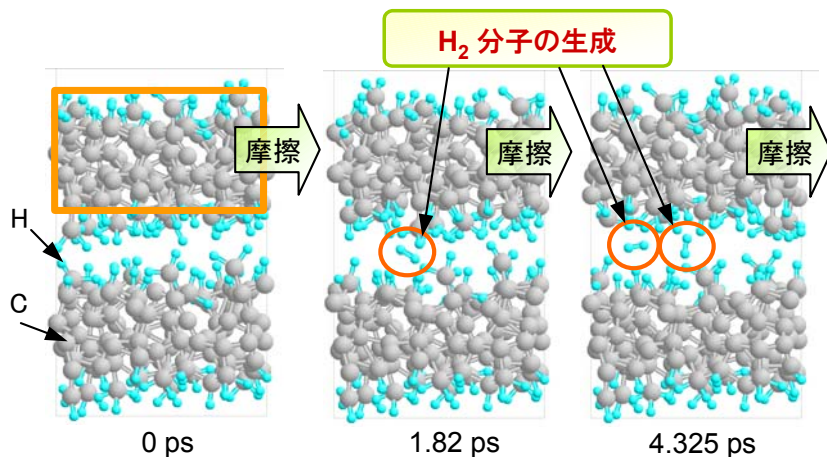


図2 ダイヤモンドライクカーボンの摩擦化学反応