

量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケール シミュレータの開発とシステム・材料設計への応用

○久保百司

東北大学金属材料研究所(〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

【緒言】

近年のナノテクノロジーの発展により、ナノスケールで起こる「化学反応」がマクロスケールでの機械特性・性能に大きく影響を与えるようになり、重厚長大な機械システムといえども「化学反応」の電子レベル制御が必須となってきている。さらに、機械システムは、「動き」によって初めて機能が発現することから、「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マルチフィジックス現象の電子レベルでの深い理解とそれに基づく設計が重要課題となっている。

これまで機械分野においては、マルチフィジックス現象の理論的検討には、有限要素法、流体力学などの連続体理論が活用されてきた。しかし、「化学反応」の解明には電子を取り扱うことが必須であり、電子を考慮していない連続体理論をいくら発展させても、「化学反応」を含むマルチフィジックス現象の解明は不可能である。そこで著者らは、機械分野に量子化学を導入するという異分野融合の発想に至り、第一原理分子動力学法、**Tight-Binding** 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開発を進めてきた(図)。また、開発した第一原理分子動力学法と**Tight-Binding** 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を用いて、燃料電池、太陽電池、トライボロジー、エレクトロニクス、マイクロマシン、電気自動車、航空・宇宙機器、クリーンエネルギー、発電プラント、水素ステーションなどエネルギー・環境に係わる広範囲な研究分野において、システム・材料設計を実現してきた[1-7]。

さらには、上記の第一原理分子動力学シミュレーション、**Tight-Binding** 量子分子動力学シミュレーションに加え、粗視化分子動力学シミュレーション、連続体力学シミュレーションまでの幅広いシミュレーション技術を融合したマルチスケールシミュレーション技術の開発を推進してきた。本講演では、「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マルチフィジックス現象・マルチスケール現象に対して、上記で開発したシミュレータを応用した研究例について紹介する。

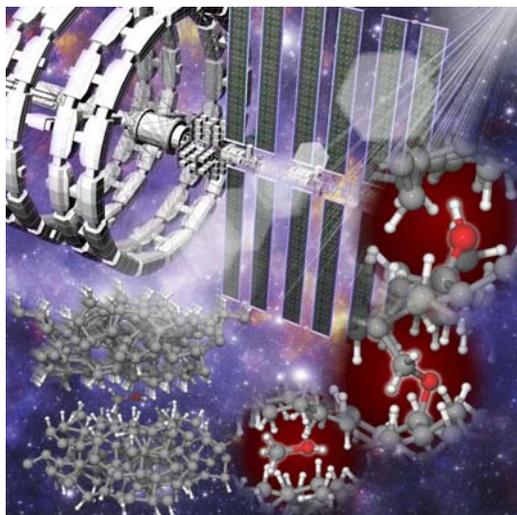


図 機械分野におけるマルチフィジックスシミュレーションのコンセプト図(論文[7]の表紙絵に採択)

- [1] T. Kuwahara, M. Kubo et al., *Sci. Rep.*, 5 (2015) 9052.
- [2] H. Ito, M. Kubo et al., *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 21580.
- [3] T. Onodera, M. Kubo et al., *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 11820.
- [4] S. Bai, M. Kubo et al., *RSC Adv.*, 4 (2014) 33739.
- [5] T. Onodera, M. Kubo et al., *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 5390.
- [6] T. Kuwahara, M. Kubo et al., *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 15602.
- [7] K. Hayashi, M. Kubo et al., *Faraday Discuss.*, 156 (2012) 137.