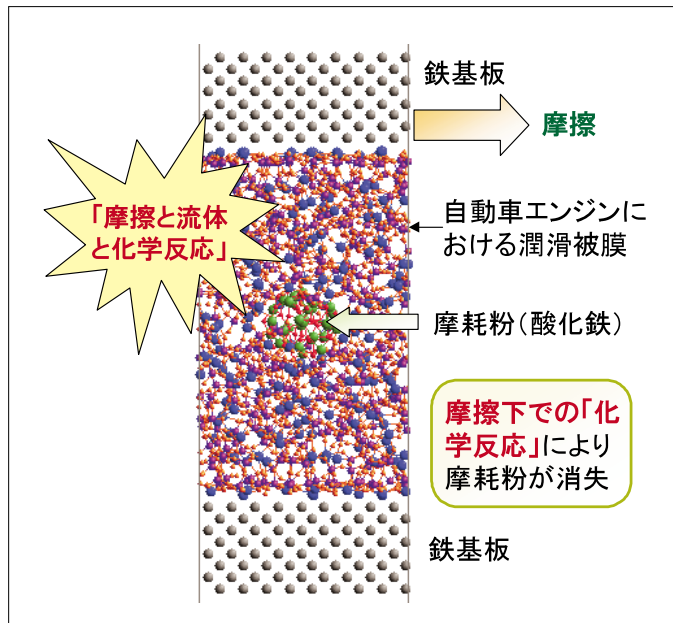


従来、摩擦・摩耗・潤滑というトライボロジー分野で活用されてきた流体力学および連続体力学では全く説明不可能な「摩擦と流体と化学反応」が複雑に絡み合ったトライボケミカル反応ダイナミクス(注1)の解明を世界で初めて実現した

自動車業界ではエンジンオイル用添加剤に含まれる硫黄分とリン分が排出ガス浄化用触媒を劣化させるとして問題となっているが、本シミュレータを用いると量子論に基づく無硫黄・無リン添加剤の理論設計が実現可能です。

- 環境・省エネルギー対策に対する強い要請から摩擦・摩耗・潤滑に対する社会的要請が厳しさを増しているのに対して、この要請に答える、理論に基づく迅速かつ高度な材料設計を可能とする世界初めてのシミュレーション技術です。



▲Zn-DTP潤滑被膜による摩耗粉の溶解反応ダイナミクス

今回開発したシミュレータを活用して、摩耗防止剤Zn-DTPからの摩擦下での潤滑被膜の生成反応ダイナミクスと生成した潤滑被膜による摩擦下での摩耗粉の溶解反応ダイナミクスを世界で初めて解明した。

競合技術への強み

	摩擦ダイナミクスシミュレーション	化学反応ダイナミクスシミュレーション	摩擦下での化学反応ダイナミクス(エンジンオイル用添加剤の設計)
流体力学・連続体力学シミュレーション	○ (これまで広く活用されてきた)	× (原理的に不可能)	× (原理的に不可能)
第一原理分子動力学法	△ (計算時間がかかるため前例が無い)	○ (高精度計算が可能)	△ (計算時間がかかるため前例が無い)
本研究で開発したシミュレーション手法	○ (短時間で計算可能)	○ (短時間で計算可能)	○ (短時間で計算可能)

▲シミュレータに関する従来技術と本技術の比較

ポロロジーシミュレータと上記SCF-Tight-Binding量子分子動力学法を融合することで、従来の方論では不可能であったトライボケミカル反応ダイナミクスの解明と添加剤の理論設計が可能になるという着想に至り、予備的なシミュレータの開発を開始。

2005年：予備的な開発が進んできた量子論に基づくトライボケミカル反応シミュレータを基礎に、産業技術研究助成に応募し、採択される。独自のアイデアに基づく部分対角化法、動的ハイブリッド法を導入し、大規模、長時間計算が可能なトライボケミカル反応シミュレータが完成。トライボロジー分野に量子論を導入する新技術を高く評価してくれた連携企業との共同研究を開始。

2006年：開発したトライボケミカル反応シミュレータを活用し、リン酸トリエステル系添加剤、Zn-DTP添加剤、Mo-DTC添加剤などのトライボケミカル反応ダイナミクスの解明に成功し、世界的にも初めて「摩擦と流体が化学反応に与える影響」を量子論的に解明。特に、潤滑被膜の形成反応ダイナミクスのみならず、摩耗粉の溶解反応の解明により潤滑被膜の機能解析も可能に。

2007年：潤滑被膜の組成や機能などについて実験結果と一致する定量的なシミュレーション結果が得られるようになり、計算手法の妥当性が証明された。また、無リン添加剤の理論設計にも成功。トライボロジーの実験研究で世界的に著名なフランスリヨン工科大学のMartin教授からの依頼で、共同研究を開始。これは、世界的にも添加剤の理論設計が可能なのは、我々以外に皆無であることを示している。

2008年：開発シミュレータの更なる発展と実験との共同により、添加剤の無硫黄化・無リン化の設計指針の提言に成功。開発した量子論に基づくトライボケミカル反応シミュレータをベカサソフトウェア(株)と(株)変化システムの2社から市販化を開始。

■サクセス・キー

東北大学化学系に所属する久保(研究代表者)と東北大学機械系に所属する足立(研究分担者)というバックグラウンドの全く異なる研究者の出会いによって、量子論に基づくトライボロジーシミュレーションという従来は存在しなかった全く新しい技術の開発が実現しました。

上記の共同研究成果を様々な学会で発表するうちに、トライボロジー分野に量子論を導入した新技術

を高く評価してくれる企業の研究者が多数現れ、企業との共同により研究が大いに進展しました。

■ネクスト・ストーリー

本研究で対象とした自動車エンジンオイル用添加剤の設計のみならず、ハードディスク、宇宙機器、半導体などにおける「摩擦と流体と化学反応」が複雑に絡み合ったトライボケミカル反応ダイナミクスの解明と、より多様な分野での材料設計・プロセス設計に幅広く展開していきます。

本研究の成果により、化学系の准教授から機械系の教授に転身・昇任したことから、トライボロジーに限らず、様々な機械工学分野に化学を導入し、メカノケミカル、ケモメカニカルという新規融合分野の開拓を量子論に基づき精力的に展開していきます。

(注1) 従来のトライボロジーに関する理論的研究では、マクロスケールの機械工学のアプローチが用いられてきたため、「摩擦下での化学反応ダイナミクス」が解明できなかった。この「摩擦下での化学反応ダイナミクス」をトライボケミカル反応ダイナミクスと言う。

ここがポイント

研究代表者が開発済みのSCF-Tight-Binding量子分子動力学法と非平衡古典分子動力学法を融合することで、化学反応を含むトライボロジー現象を解明可能なトライボケミカル反応シミュレータの開発に成功しました。さらに、この開発シミュレータを活用し、摩耗防止剤Zn-DTPとフリクション低減剤Mo-DTCからの摩擦下での潤滑被膜の生成反応ダイナミクスの解明に成功しました。また、Zn-DTP潤滑被膜の耐摩耗作用の本質である摩擦下での摩耗粉の溶解反応ダイナミクスも解明しました。これらの計算成果と実験研究との共同により、Zn-DTP添加剤からリン分の減量を実現する方法として、リン酸亜鉛とホウ酸カルシウムの混合潤滑被膜が有効であることを明らかにしました。また、鉄基板ではなく酸化鉄基板を用いることにより、無硫黄添加剤が有効に機能することを新たに提言しました。このように、本開発シミュレータが無硫黄・無リン添加剤の理論設計に非常に有用な方法論であることが示されました。

ブレイクスルーへの道のり

1995~2002年：世界に先駆けて非平衡古典分子動力学法に基づくトライボロジーシミュレータの開発に成功し、潤滑剤の理論設計を可能とする。しかし、摩擦下での化学反応が機能の本質である添加剤の設計には対応できず。

2003年：オリジナルに考案したSCF-Tight-Binding理論により、従来の第一原理分子動力学法よりも5000倍以上の高速計算が可能な量子分子動力学法の開発に成功。

2004年：非平衡古典分子動力学法に基づくトライ



プロジェクトID・研究テーマ名・年度

05A28003d「環境適応型潤滑システムの電子レベル設計を可能とするトライボケミカル反応シミュレータの開発と実験研究との連携による無硫黄・無リン添加剤の開発」(平成17年度第1回公募)

代表研究者・所属機関・所属部署名・役職名

久保 百司 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 教授