



# 最先端・次世代研究開発支援プログラム..機械系から六件採択

## 第一原理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と低炭素化機械システムの設計

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、低炭素化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超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プラント、③太陽電池、燃料電池などの新エネルギー・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なブレイ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、自動車エンジンのトライボケミカル反応、発電プラントの応力腐食割れなど多様な機械システムにおいて、ナノスケールで起る「化学反応」がマクロスケールでの機械特性・性能に大きな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」の実験によるエネルギー損失の低減は、電力、ガソリンの消費量を大幅に削減します。ゆえに、機械エネルギー損失の多くを占める摩擦の低減技術は、エネルギー源の利用効率を向上させ、低炭素社会構築に対し大きな役割果たします。

以上を背景に、本研究では「低摩擦機械システムの構築」及びそのための「トライボロジー」の知識に立脚した機械設計論

に基づくことが多くが現状です。これに対し、本研究では、三つの低摩擦発現システムの摩擦界面に存在する数々の現象の解明は不可能である。そこで著者らは、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから、

「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つて深い理解とそれにに基づく理論設計が強く求められている。

これまで機械工学分野においては、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、電子を考慮していなかった連続体力学を発展させても

「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。

そこで著者は、機械工学分野に量子化学を導入するという新しい異分野融合の発想に至り、

平成22年度に採択された日本学術振興会の最先端・次世代研究開発支援プロ

ト램において、第一原理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開発している。

具体的には、著者の研究室で開発した第一原理分子動力学シミュレータを発展させることで、量子化学に基づき「化

学反応ダイナミクス」を扱いながら、

摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱

電子レベル制御が必須となってきた。

さらに、機械システムは「動き」によつて初めて機能が発現されることから



