

分子シミュレーションとは何です
か？

分子シミュレーションとは何ですか？

Q:分子シミュレーションで解析ができると聞きましたが中身がわからないので教えてください

A: トライボロジー現象を分子シミュレーションで表すことができれば、複雑な摩擦面の解析が進むのではとの思いで2000年前後に検討を開始.

摩擦現象の理解



想像力⇒ミクロ決死隊（図）



摩擦現象をさらに理解するためには分子レベルの解析が必要

まず言葉を理解するところから始めた。

手法	特徴	メリット	デメリット
古典分子動力学法	電子の動きを無視し、原子間の力を数式（力場パラメータ）で近似する手法。	計算が高速。数万～数百万個の大規模な原子系や、長い時間のシミュレーションが可能。	化学反応（結合の切断・生成）を原則として表現できない。
第一原理分子動力学法	量子力学に基づいて、その都度電子の状態を計算して原子に働く力を求める手法。	パラメータに頼らず精度が高い。化学反応や電子状態の変化を正確に再現できる。	計算コストが非常に高く、扱える原子数（数百個程度）やシミュレーション時間が短い。

しかし、トライボロジー解析には化学反応を表現する必要があると考え、当時量子分子動力学法を提唱されていた東北大学宮本明先生と共同研究をスタートさせ、低 μ 潤滑油添加剤の代表であるMoDTCのトライボケミカル反応を解析した。結果、MoDTCから低 μ 分子MoS₂が分離される解析に成功。ある程度分子シミュレーションで表現可能であると結論づけた（次ページ）。

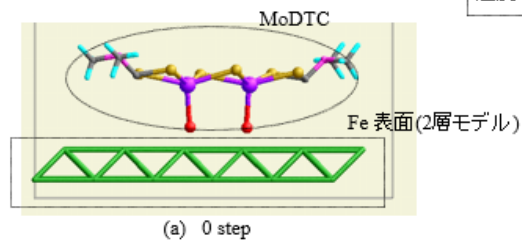
一方、分子シミュレーションはごく狭い範囲の解析の域を出ない限界があることが分かった。実際の摩擦面の状態を計算しようとしても計算時間がかかりすぎるので実際の摩擦現象をそのまま分子シミュレーションでは表現できないことも分かった。これを前提に利用を検討されることを推奨する。

モデル(1)
Fe(001)_72原子(固定) + MoDTC

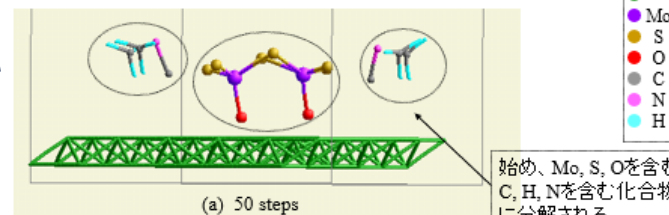
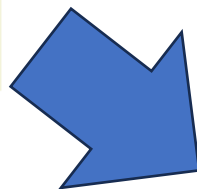
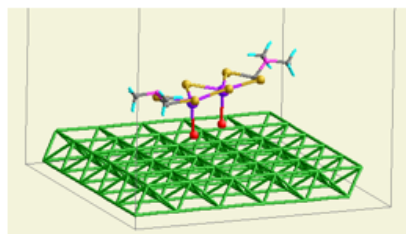
計算条件

温度 : 573[K], NPT, $\Delta t = 1.0$ [fs]

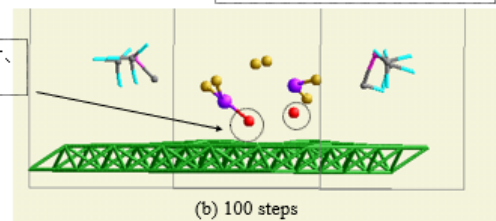
● Fe
● Mo
● S
● O
● C
● N
● H



Fe表面は2層モデルで、
下層(36原子)を固定している



O原子はFe表面との反応を受け、
次第にFe表面から離れていく



こんな反応が起こっているのでは?!と理解ができた