

計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測

Investigation of thermal and transport properties of organic and inorganic compounds

京都大学大学院工学研究科 機械理工学専攻 熱物理工学分野 松本充弘

研究成果概要

本研究は、量子論的效果を考慮した分子モデルに基づき、さまざまな物質の凝縮相の性質（相変化挙動、輸送現象など）を分子シミュレーションにより評価することを目的としている。主として、密度汎関数法と強結合近似に基づくオープンソースパッケージの DFTB+ を利用しており、研究室所有の計算機や化研スパコン等に独自にインストールして計算を進めている。

今年度は、シリコン系半導体材料の物性評価や有機分子の化学反応機構の研究を実施した。その成果の一部は、国内学会や国際会議等で発表した。

1. SiC ナノチューブの電子物性評価 [1]:カーボンナノチューブの電子物性については数多くの報告があるが、それ以外の半導体の1次元系ナノ材料については未解明の点が多い。SiC ナノチューブをターゲットとして、そのサイズ（直径）や *chirality* がバンド構造に与える影響を調べる (Fig. 1)とともに、側面への H 原子吸着によるフェルミレベル変化を詳細に調べた。

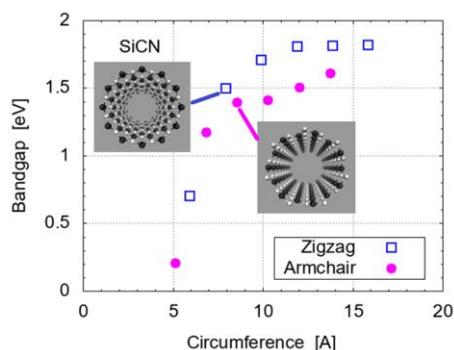


Fig. 1: SiC ナノチューブのバンドギャップ

2. 超臨界水中のセルロース加水分解の機構 [2]:木材などからセルロース

ナノファイバーを製造する際には、酸触媒による加水分解や機械的な解繊が行われるが、新たな手法として超臨界水中での加水分解が提案されている。量子 MD 計算に

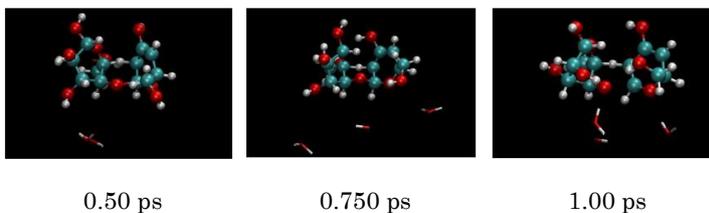


Fig. 2: 臨界点近傍 (650K) の水中でのグリコシド結合開裂の例

よりその反応機構を調べたところ、大きな運動エネルギーを持つ水分子が開裂部位に接近し、グリコシド結合の C 原子から電子を奪うことで反応が開始される (Fig. 2) ことを見出した。

発表論文(謝辞なし)

- [1] Q. Luo, M. Matsumoto, “Quantum simulation of SiC nanotubes,” *4<sup>th</sup> Int. Conf. Theoretical and Applied Nanoscience and Nanotechnology* (Online, Nov. 2020), paper 134.
- [2] T. Oku, M. Matsumoto, “Hydrolysis of cellulose in supercritical water: Quantum simulation,” *4<sup>th</sup> Int. Conf. Theoretical and Applied Nanoscience and Nanotechnology* (Online, Nov. 2020), paper 132.