

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

本研究は各種の機能性ナノ物質の機能発現機構の解明を目的として、量子力学計算や分子動力学法などの計算化学的手法によるアプローチをおこなうものである。本年度は、主としてナノセルロース結晶を対象として、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの利用による大規模分子シミュレーションをおこなった。

ナノセルロースは、その両親媒性より乳化剤などへの応用が検討されている。両親媒性はセルロース分子の構造に由来し、通常のセルロース繊維材料をナノスケールまで解繊することで、その両親媒性はより強く発現すると考えられている。本研究では、水/油界面へのナノセルロース結晶の吸着挙動を調べた。右図に示すように、水/油(ここではオクタンを用いた)界面に対してナノセルロース結晶の中心軸を平行に配置し、界面からの距離  $x$  と軸周りの回転角  $\theta$  を自由度として、質量中心に作用する  $x$  方向の力  $F_x$  と軸周りのトルク  $T_z$  を求める。それらを積分することで、吸着に関する自由エネルギー曲面  $A(x, \theta)$  を評価した。滑らかな自由エネルギー曲面を得るために、自由度  $(x, \theta)$  に関する多くのサンプリング点と長時間の時間平均が必要であり、スーパーコンピュータシステムを活用した多数の並列計算を実施した。分子動力学計算のソフトウェアとしては、LAMMPS を利用した。

得られた自由エネルギー曲面を右図に示す。結果として、既に報告されている安定な吸着状態のほかに、薄い水液膜をはさんで水相側から吸着する新たな吸着形態が見つかった。こうした結果は、乳化作用向上のためのナノセルロースの分子設計(官能基置換など)の提案につながる事が期待される。

なお、本結果の一部は国内学会で発表した[1]ほか、学術論文を準備中である。

発表論文(謝辞なし)

- [1] 伊藤憲哉・松本充弘, 水/油界面におけるセルロースの振舞い, 第 35 回分子シミュレーション討論会(岡山, 2021 年 11 月) 114P.

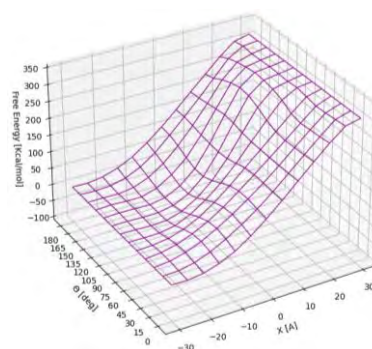
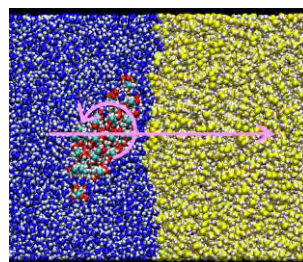


Figure: Snapshot and obtained free energy surface.