

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、さまざまな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、主として次の2つのテーマについて、本スーパーコンピュータシステムを利用した大規模分子シミュレーションによる研究を行った。

1. 量子計算による接触帯電現象の解析:異なる物質の接触や摩擦に伴う帯電現象は古くより知られており、様々なタイプの TENG

(triboelectric nano-generator) への応用

が試みられている。一方、その原理として

は、界面近傍の電子移動・イオン移動

・クラスター移動などのナノスケール

機構が提案されているが、定量的評価

の報告は乏しい。本研究では、いくつか

の高分子間の接触帯電現象を、

DFTB+パッケージを利用した量子計算

により解析した。ここで扱った高分子は

いずれも数 eV 以上のエネルギーギャップ

をもつため、単なる接触での電子移動

は極めて小さいが、摩擦などの局所的励起を

想定したエネルギー励起により、大きな電子

移動が起こること(図)、またその移動方向(帯電の符号)が、各高分子の第一イオン化ポテン

シャルと強く相関することを見出した。国際会議発表 [1] のほか、学術論文を準備中である。

2. 界面現象の自由エネルギー評価への stochastic thermodynamics の応用:準静的過程によ

らない自由エネルギー評価法として、「ゆらぎの熱力学」に基づく Jarzynski 等式などが知られ

ているが、精度を上げるためには多数回の分子動力学シミュレーションによる集団平均が必要

であり、従来あまり利用されていなかった。本研究では、LAMMPS パッケージを利用し、過熱

液体中の気泡核生成や両親媒性分子の水油界面吸着をテスト系として  $10^2 \sim 10^3$  回の集団平均

をとることで自由エネルギー評価ができることを見出している。本テーマは次年度も継続予

定である。

発表論文(謝辞なし)

[1] K. Yamazaki and M. Matsumoto, "Time-dependent quantum simulation of contact

electrification," WCNSN2023 (Oct 23-24, 2023, Bangkok).

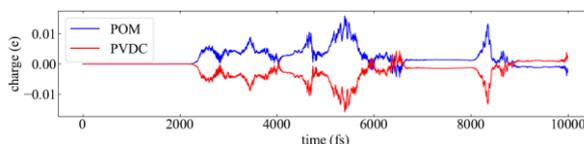
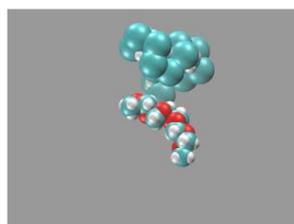


図: 高分子の衝突と帯電量の時間変化の例。  
Polyoxymethylene と polyvinylidene chloride