

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を energy harvesting に利用しようとする研究の一環で、物質界面近傍の電子移動・イオン移動・クラスター移動などをマルチスケールで解析する必要がある。本年度は、DFTB+パッケージを利用した量子化学計算と LAMMPS による古典分子動力学計算のハイブリッド手法を開発し、PVA (ポリビニルアルコール)/PVC (塩化ビニル) 間の電子移動を 100ps 程度にわたって安定に追跡することができた。国際会議発表 [1] のほか、学術論文を準備中である。

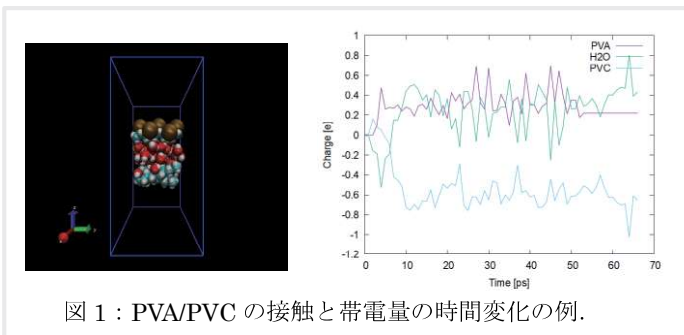


図 1: PVA/PVC の接触と帯電量の時間変化の例。

2. 界面自由エネルギー評価への stochastic thermodynamics の応用: 準静的過程を経ずに自由エネルギーをする評価法として知られる Jarzynski 等式を用いて、過熱液体中の気泡核生成過程での自由エネルギー評価をおこない、古典核生成モデルとの比較を行い、この手法がミクロ系の自由エネルギー評価に有効に使えることを見出した。国際会議で発表 [2] したほか、学術論文を準備中である。今後、この手法を界面吸着自由エネルギーの評価などにも拡張する予定である。

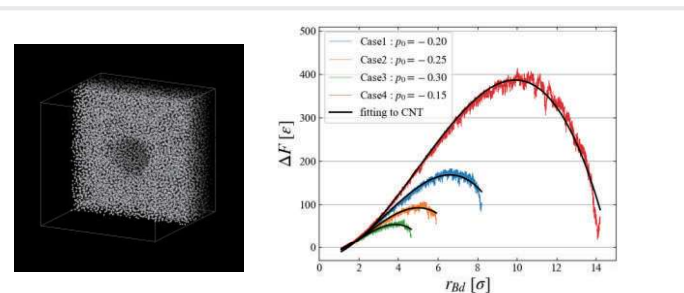


図 2: Lennard-Jones 液体中の気泡核生成と自由エネルギー評価の例。

発表論文(謝辞なし)

- [1] Y. Huang and M. Matsumoto, "Multiscale Investigation of Triboelectric Nanogenerator: Molecular Dynamics Approach Combined with Quantum Calculations" 35th IUPAP Conf. Comp. Phys. (July 7-12, 2024, Thessaloniki, Greece).
- [2] I. Shimizu and M. Matsumoto, "Stochastic thermodynamics: Application to bubble nucleation" 12th Liquid Matter Conference (Sept. 22-27, 2024, Mainz, Germany).