

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. セルロース分子の親溶媒性評価: 両親媒性を持つと言われるナノセルロース結晶を対象として、水／油界面における吸着自由エネルギーを評価した。主として古典分子動力学計算ソフトウェア LAMMPS により、界面近傍でのナノセルロース分子にはたらく力とトルクの長時間平均から図 1 のような自由エネルギー曲面を得た。既に報告されている吸着状態に加えて、2～3 個の水分子をはさんで水相側から吸着する新たな吸着形態を見つけた。こうした結果は、官能基修飾等によるナノセルロースの乳化作用向上などの分子設計に寄与することが期待される。この成果は学術論文として公表した[1]。

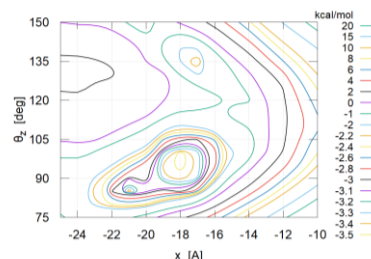


図 1: 水／油界面におけるセルロース分子の界面吸着自由エネルギーの例: 界面からの位置 x と回転角 θ_z に対する 2 次元マップ。

2. 酸化チタン成膜過程の量子計算: シリコン型太陽電池の passivation 層として注目されている酸化チタン薄膜について、シリコン結晶表面への酸化チタン前駆体 (titanium tetraisopropoxide, TTIP) 分子の衝突・解離過程を調べた。主として DFTB+パッケージによる量子計算により、TTIP 分子が結晶表面に衝突する際の反応や自由エネルギー地形を詳細に解析しつつある。成果の一部は国際会議で発表した[2]ほか、学術論文を準備中である。

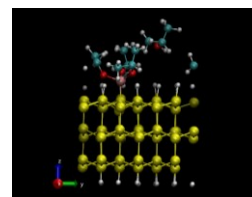


図 2: Si 基板と TTIP 分子の反応例。

発表論文(謝辞あり)

[1] K. Ito and M. Matsumoto, “Adsorption free energy of cellulose nanocrystal on water-oil interface,” *Nanomaterials*, 12, 1321 (2022), DOI: 10.3390/nano12081321

発表論文(謝辞なし)

[2] K. Sotoyama and M. Matsumoto, “TiO₂ layer fabrication on c-Si surface: Quantum simulation,” *Int. Conf. Materials* (Dubai, December, 2022)