

## 自己評価報告書

平成23年 4月15日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008 ～ 2011

課題番号：20560053

研究課題名（和文） カーボン・ナノチューブを添加した高分子複合材料に関する熱伝導解析

研究課題名（英文） Thermal conductivity in a polymer-carbon nanotube composite

## 研究代表者

寺尾 貴道 (TERAO TAKAMICHI)

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号：40271647

研究分野：計算物理工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎・工学基礎

キーワード：シミュレーション工学、ナノ材料、ナノチューブ・フラーレン、  
高分子構造・物性、熱工学

## 1. 研究計画の概要

固体高分子の中にカーボン・ナノチューブを分散させた複合材料は、母体となる高分子材料と比較すると弾性的な強度が増す事が知られている。この複合材料における熱伝導率の振る舞いは、工学的に重要な問題である。単体のカーボン・ナノチューブは、極めて高い熱伝導率を示す一次元熱伝導体である事が従来の研究から知られているが、高分子複合材料における熱的な性質については未解決の問題が数多い。本研究においては、高分子にナノチューブを添加した複合材料における熱的性質について、数値シミュレーションの立場から明らかにする事を目的とする。

## 2. 研究の進捗状況

平成20年度においては、高分子複合材料を数値的に取り扱う上で必要となる、系のモデル化に関する研究を行った。平成21年度においては本研究課題に関連して、非平衡分子動力学シミュレーションの計算手法に関する理論的研究を行った。具体的には、高分子材料における非平衡シミュレーションに適した計算手法の拡張を行い、その有効性、及び計算精度について定量的に明らかにした。また、非平衡分子動力学計算において並列化手法を適用する事により、原子数の多い系のシミュレーションにおける高速化に成功している事を確認した。

平成22年度においては、本研究課題で扱っている系について、熱伝導現象を解析する上で重要となる系の振動モードに関する解析を行った。具体的には、系の速度自己相関

関数について数値的に調べた。また、系のパワースペクトルの解析を行い、熱伝導に寄与するフォノンの物理的性質について定量的に明らかにした。本研究課題で扱っている系の振動ダイナミクスは、調和近似に基づく記述では妥当ではなく、非調和項の効果（非線形性）が強く影響している。この問題に関連して、非線形性を有する物理系におけるモード解析に適した、新たな数値計算手法の開発を行った。過去の研究において、炭化水素系における分子シミュレーションを行う際に用いられる力場は、数多く提案されている。しかし、それらの多くは室温における物理的性質を再現するという条件下で最適化されたものであり、より高温領域における系の挙動を記述する上で妥当なものか否かは必ずしも自明ではない。本研究では上記の観点から、高温領域における原子間の力場に関しても考察を行った。

## 3. 現在までの達成度

現在までの達成度は以下の通りである。

②おおむね順調に進展している。

理由：

- i) 独自の手法に基づく、非平衡分子動力学の計算手法に関する開発に成功している。
- ii) また、OpenMPを用いた効率の良い並列化を行い、シミュレーション・プログラムの高速化に成功している。

#### 4. 今後の研究の推進方策

平成20年度から平成22年度にかけて行われた研究成果を基にして、本研究課題に関する大規模計算機シミュレーションを遂行する。また、実験研究によって観測される熱物性、及び界面熱抵抗の影響等について定量的に評価する。

#### 5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

① Takamichi Terao,

“Layering transitions in a Gaussian-core model under geometrical confinement”, *Soft materials* **8**, 63-71 (2010). (査読有)

② Takamichi Terao,

“Computing interior eigenvalues of nonsymmetric matrices: Application to three-dimensional metamaterial composites”, *Phys. Rev. E* **82**, 026702-1 -- 026702-6 (2010). (査読有)

③ Takamichi Terao,

“Nature of interacting electron states of Coulomb glass in local energy minima”, *Philos. Mag.* **89**, 405-411 (2009). (査読有)

④ Takuya Kuze and Takamichi Terao,

“Molecular simulation of binary colloidal mixtures: Gelation and aging phenomena”, *Colloid surf. A* **312**, 142-147 (2008). (査読有)

⑤ Takamichi Terao, Enrico Lussetti, and Florian Mueller-Plathe,

“The thermal conductivity of amorphous polymers calculated by non-equilibrium molecular dynamics simulation”, *AIP conference proceedings* **982**, 486-490 (2008). (査読有)

[学会発表] (計 6 件)

① Takamichi Terao,

“Monte Carlo simulations of a Gaussian-core model under geometrical confinement”, *International Conference on Nanoscopic Colloid and Surface Science (NCSS2010)*, Chiba (平成22年9月20日).

② Takamichi Terao,

“Monte Carlo simulation of polymer-nanoparticle composites”, *International Bunsen Discussion Meeting on Polymer Interfaces: Science & Technology*, Darmstadt (平成21年9月1日).

③ 寺尾 貴道,

「ソフトコロイド系における分子シミュレーション解析」第62回コロイド界面化学討論会, 岡山理科大学 (平成21年9月19日).

④ Takamichi Terao,

“Effective interaction between soft colloidal particles”, *Juelich Soft Matter Days 2008*, Bonn (平成20年11月13日).

⑤ Takamichi Terao,

“Crystallization of soft colloidal systems”, *Modeling Lab for Nanostructures and Catalysis (Molnac)*, University of Salerno (平成20年9月10日).

⑥ Takamichi Terao and Takuya Kuze,

“Effective interaction between colloidal particles with grafted polyampholytes”, *5th International Conference Interfaces Against Pollution 2008*, Kyoto (平成20年6月2日).