

○ 瀬戸川浩<sup>1</sup>、今野聖絵<sup>1</sup>、大坂玲子<sup>1</sup>、高橋ちさと<sup>1</sup>、三浦隆治<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、  
久保百司<sup>1,2</sup>、宮本 明<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07）

<sup>2</sup> 科学技術振興機構さきがけ（〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8）

<sup>3</sup> 東北大学未来科学技術共同研究センター（〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 10）

### 【緒言】

地球温暖化対策、省エネルギーなど地球環境に優しい機械・装置の開発は、これからの産業界にとって非常に大きな課題である。また、機械・装置には、必ず摩擦が生じ、この摩擦の熱量をいかに効率よく逃がすかは、潤滑剤の熱伝導率に大きく影響する。微少な領域での熱伝導を実験的に解明することは困難であり、デバイスの微小化に伴い、理論計算に基づく熱伝導率の予測手法の確立が求められている。そこで、本研究室では計算化学手法を用いて熱伝導率を計算するプログラム“THERMOSIM”の開発を行った。

### 【方法】

本研究室で開発済みの分子動力学計算プログラム“RYUDO”に対して熱伝導率を求めることが出来るように、特定の原子・分子に一定の温度を与える機能を追加することで“THERMOSIM”を開発した。

モデルとしては、有機分子を潤滑剤として鉄基板で挟み込み、上部と下部の鉄基板を特定の温度に保つようにした。潤滑剤が鉄基板から奪った又は与えた運動エネルギーを熱量として積算し、下記の計算式を用いて潤滑剤の熱伝導率 $\lambda$ を求めた。

$$\lambda = \frac{Q \times L}{\Delta T \times S \times \Delta t} \quad (1)$$

ここで  $Q$  は 1step あたりの移動した熱量、 $L$  は高温部から低温部までの距離、 $S$  は表面積、 $\Delta T$  は高温部から低温部の温度差、 $\Delta t$  は 1step の時間を表わす。

### 【結果】

モデルとしてアセトンを使用した場合について説明する。まず、アセトン液体の分子動力学計算を行った後、上下を鉄基板で挟み込み、潤滑剤の密度を実験値に近づける為に、上下から 10 気圧をかけ、モデルを作成した（図 1）。その後、高温部（50℃）と低温部（0℃）を設定し、“THERMOSIM”で計算を行った。移動した熱量の積算値を図 2 に示す。ここでは、熱量の移動が安定した 2 万 step から積算を開始した。図中の High Energy は高温部の熱量の積算値、Low Energy は低温部の熱量の積算値を表わす。それぞれの 1step あたりに移動した熱量を求めて、上記の（1）式により熱伝導率を得た。得られたアセトンの熱伝導率は 0.127[W/mK] であり、文献値の 0.161[W/mK] とよく一致していることから、本開発シミュレータにより定量的な熱伝導率の予測が可能であることが示された。他に、水、ヘキサン、ヘキサデカン、ジエチルエーテルの熱伝導率を計算し、同様に実験値とよく一致した結果を得た。

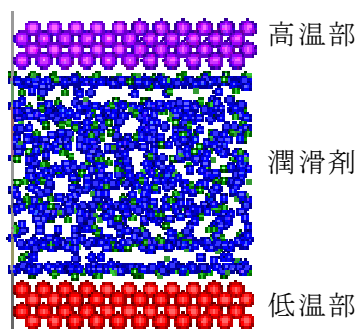


図 1 アセトンを鉄で挟み込んだモデル

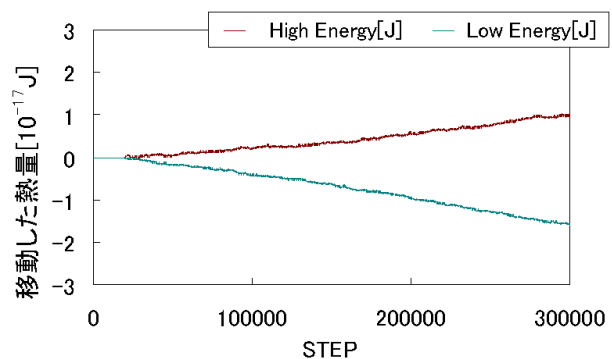


図 2 高温部と低温部の熱量の変化