

「炭素材料高分子界面のモデル化と物性評価」
業務仕様書

2024 年 4 月

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

1. 実施目的

一般財団法人高度情報科学技術研究機構 (RIST) では、防衛装備庁の「安全保障技術研究推進制度」による研究課題「実験・計算科学の融合による革新的塗膜創製と機序解明の基礎研究」(代表：株式会社 G S I クレオス柳澤隆博士) の分担研究機関として、計算科学シミュレーションによって低摩擦と高耐久を同時に発現する機構の解明に取り組んでいる。

本業務では炭素材料と高分子鎖の界面構造を量子化学計算および古典分子動力学計算によってモデリングする作業を行っていただく。

2. 作業内容

- A) CSCNT (参考論文 1) を内径 2 nm 外径 3 nm 高さ 2 nm 程度の全原子モデルで近似し、3 層以上重ねたカップスタック構造を構築する。
- B) A) で作成した構造の zigzag 端および armchair 端炭素に水酸基あるいはカルボキシル基を付加し、安定構造を量子化学計算を用いて求め、その生成エネルギーを評価する。その際 CNT 外径の zigzag 端と armchair 端それぞれに対し、何個までの水酸基あるいはカルボキシル基が結合可能か調べる。
- C) B) で求めた妥当な水酸基あるいはカルボキシル基が付加された CSCNT について、高分子モノマー (pHBA: p-ヒドロキシ安息香酸, 4,4'-ビスフェノール, TPA: テレフタル酸, BPA: ビスフェノール A, BPF: ビスフェノール F, ECH: エピクロロヒドリン) を化学結合したときの安定構造を量子化学計算を用いて求め、その生成エネルギーを評価する。
- D) C) で求いた構造および関連する高分子モノマーを用いて、CSCNT 一層に高分子鎖がモノマー単位で 2 つ程度重合した炭素材料高分子鎖界面の LAMMPS による分子動力学計算を行うための力場を OPLS-AA を基に作成する。その際 moltemplate を用いるための It ファイルを作成する。
- E) ①CSCNT を 10 層重ねた構造, ②高分子鎖が化学結合した CSCNT を 10 層重ねた構造, ③高分子鎖が物理吸着した CSCNT を 10 層重ねた構造, ④エポキシ樹脂が化学結合した CSCNT を 10 層重ねた構造, ⑤エポキシ樹脂が化学結合した CSCNT を 10 層重ねた構造, の 5 つについて分子動力学計算を実施し、平衡化構造を作成する。積層数は自在に変えられるような moltemplate テンプレートを作成する。
- F) E で作成した①~⑤の平衡化構造に対して、CSCNT 軸方向と軸に垂直な方向にそれぞれ外力をかけ、せん断応力から動摩擦係数 μ を算出する。

参考文献: Hayashi et al. *Nanoscale*, 2013, 5, 10212-10218

3. 成果物

上記 A) から F) の結果を含む実施作業報告書を提出する。

4. 作業体制

作業途中において、RIST 担当者との打ち合わせができる作業体制であること。

5. 技術要件

量子化学計算・古典分子動力学計算，特に moltemplate および LAMMPS を用いたせん断応力の計算実施の経験があり，熟知していること。

6. 納品物

実施作業報告書

1 式

7. 検収条件

作業内容に対する結果が作業実施報告書に記載してあることを確認し，検収の完了とする。

8. 納期

2024 年 6 月 28 日（金）

9. 納品場所

東京都港区浜松町 1-18-16

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部

10. 一般的注意事項

本作業の実施に際して，RIST が機密に属する事項として伝えた情報についてはこれを厳守すること。

11. その他

A) 本作業の実施に当たっては，RIST 担当者と十分な協議のもとに進めること。

B) 受注者は，当財団が定める競争的資金等の使用に係る不正防止計画に則り，「一般財団法人高度情報科学技術研究機構との取引において遵守すべき事項について」を遵守すること。（「一般財団高度情報科学技術研究機構との取引において遵守すべき事項について」は、当財団ホームページのメニュー「競争的資金の取扱」に格納している「競争的資金等の使用に係る不正防止計画(pdf)」の最終ページに掲載してあるので確認のこと。）

12. RIST 担当者

計算科学技術部 城野 亮太