

ハイブリッド量子古典法を用いた リン酸トリクレジルと酸化鉄との反応シミュレーション

Reaction Simulation of Tricresyl Phosphate and Iron Oxide by Hybrid Quantum-Classical Method

名工大, °(M2) 林 宗汰, 尾形 修司, 浦長瀬 正幸

Nagoya Institute of Technology, °Sota Hayashi, Shuji Ogata, Masayuki Uranagase

E-mail: cmm12055@stn.nitech.ac.jp

【研究目的】

エンジンオイル性能の向上のため, リン酸トリクレジル (TCP) が極圧添加剤として加えられる. TCP は高压高温下で酸化鉄と反応して皮膜を形成し潤滑を保つ. この反応について, 原子レベルでの実験解析が難しく, メカニズムの詳細はわかっていない. 我々は, ハイブリッド量子古典法に, 応力付与のために新たに考案した粗視化粒子法を組み合わせたシミュレーションにより, その反応の初期過程を明らかにし, さらに見出した反応過程のバリアエネルギーを明らかにする.

【シミュレーション手法】

アモルファス FeO のスラブ上に, 基油分子として 2,4-ジメチルヘキサンを 25 個, TCP 分子 (Fig. 1) を 3 個混ぜた液体をおく (Fig. 2). ハイブリッド量子古典法を採用し, 化学反応が顕著な量子領域に実空間グリッド DFT コード[1] (交換関数ポテンシャル PBE-GGA) を適用し, その他の古典領域には Universal Force Field を用いる. 応力は粗視化粒子法を用いて加える. 様々な設定で多数のシミュレーションを行ない, TCP と酸化鉄との反応が生じる条件と, その反応素過程を明らかにする. さらに反応素過程に関して, 関係する複数の原子間距離を制御する方法でバリアエネルギーを求める.

【結果】

温度 600 K, 圧力 10GPa の高压高温下で, TCP と酸化鉄との反応が短時間に生じた (Fig. 3). その反応では, TCP の C-O ボンドが切れ, その C は基板 O とボンド形成し, O は二重結合状態に変化し, さらに二重結合状態であった O が一重結合的となり基板 Fe とボンドを形成する. バリアエネルギーの計算は, 当日報告する.

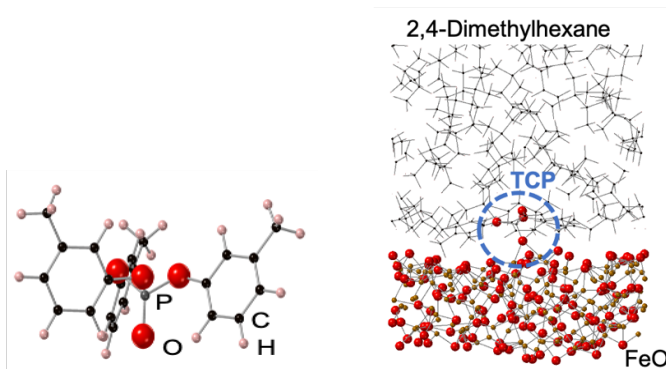


Fig 1: TCP.

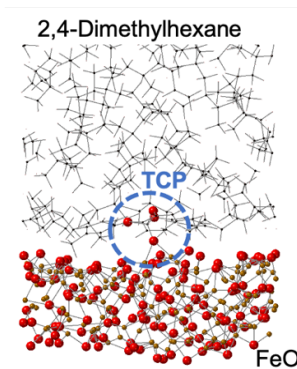


Fig 2: Simulation system.

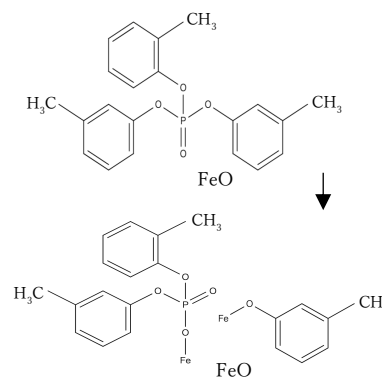


Fig. 3: Reaction process.

[1] N. Ohba, S. Ogata et al., Comp. Phys. Commun. 183 (2012) 1664- 1673