



ORIST

分子物性シミュレーション

キーワード：分子動力学シミュレーション、圧縮率、弾性率、熱膨張率

はじめに

有機材料の開発では、分子構造は製品の性能を決める重要な要素です。そのため、分子構造がどのように物性に影響するかを予め知ることが出来れば、合成候補を絞り込み、開発期間やコストを削減することが可能になります。

当研究所森之宮センターでは、科学技術計算システムによる分子設計支援サービスを行っています(図1)。ここでは分子動力学シミュレーションを用いた有機分子の圧縮率/弾性率、熱膨張率の予測について紹介します。



図1. 計算システムを用いた分子設計支援

分子動力学シミュレーション

分子動力学法とは、分子内の各原子に働く様々な力を経験的なパラメータとして設定し、古典的なニュートン運動方程式により原子集団の時間的な運動をシミュレートする手法です(図2)。数フェムト秒の極めて短い時間単位で計算を行うので、実験としては数十ナノ秒程度の時間内の物理的な変化を知ることが可能です。これにより、一定の条件における分子の凝集体の様々な物性の予測値が得られます。



図2. 分子動力学法による原子運動の計算

圧縮率/弾性率、熱膨張率

物質に外部から圧力が加わると、体積が変化します。そのときの変化率を圧縮率といい、その逆数を体積弾性率と呼びます。共に材料の硬さに関係する指標として広く用いられています。また同様に外部から熱を加えたときの体積の変化を熱膨張率といい、製品を設計する上で

重要な指標となっています。

シミュレーションでは、設定した圧力・温度で分子の凝集体を運動させ、系が平衡に達したときの体積を算出します。これを複数の条件で繰り返すことで体積の変化率を計算します。

シミュレーション結果

グリセリンの分子動力学計算の結果を図3に示します。得られたデータに線形回帰を行うことで圧縮率や熱膨張率が得られます。

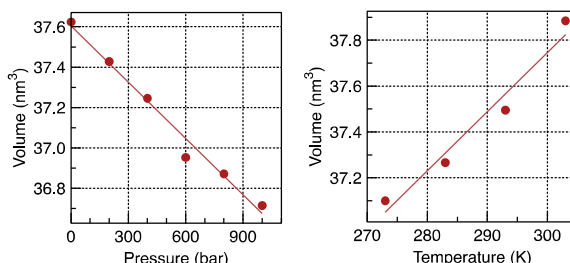


図3. 凝集体の圧力・温度に対する体積変化

シミュレーションでは煩雑な作業が必要ですが、本センターでは自動化技術により迅速に結果が得られるシステムを構築しています。

各種溶媒分子の実測データとの比較

各種溶媒分子の体積弾性率と熱膨張率の予測値は、実測値と良い相関を示しました(図4)。

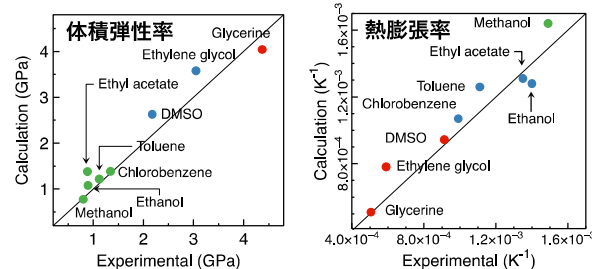


図4. 計算による予測値と実測値の比較

おわりに

以上のように、分子構造から圧縮率/弾性率や熱膨張率を予測することで、実際に合成を行う前に分子設計に反映させることが可能になります。その他の分子物性シミュレーションについても下記までご相談下さい。