

ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-4. 材料設計
小項目	3-4-3. 高分子材料物性

<p>概要（200字以内）</p> <p>高分子材料設計は分子レベルから行われているが、残念ながら現状は、分子レベルの情報から高分子材料物性を定量的に予測できるまでには至っていない。高分子が平衡状態、即ち自由エネルギーが最も低くなる状態に達するまでシミュレーションするには、大規模計算が必要とされる。これを実現するためには、ハード面ではグリッドコンピューティング技術、ソフト面では効率的な並列化アルゴリズムの開発が必要である。</p>	
<p>現状と最前線</p> <p>近年高分子材料設計の分野において、メソ領域のシミュレーション技術は目覚ましい進歩を遂げている。例えば、経済産業省および NEDO の出資による「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」（通称「土井プロジェクト」）にて開発された「ソフトマテリアルのための統合シミュレータ：OCTA」は、数多くの産学の研究者に利用されている。</p> <p>一方、実際の材料設計は原子・分子レベルから行われており、メソと原子・分子レベルを繋ぐという課題は依然として残っている。例えば、古典的密度汎関数法や散逸粒子動力学法などはブロックポリマーのマイクロ相分離構造や両親媒性分子が形成するミセル構造の研究において活用事例が増えている。しかし、これらのシミュレーションで必要とされる Flory-Huggins の <math>\chi</math> パラメタは、格子モデルに基づく理論的な意味づけはなされているものの、実際には様々な効果を包括したパラメタである。実験結果を厳密に再現するために実験結果に対してフィッティングして決めるべきものであって、計算だけから求められるようなものではない。また、粗視化分子動力学法では、粗視化レベルにより分子描像をどこまで残すかが決められるが、1つあるいは複数のモノマーユニットを1つの球として表したような場合、表面電荷の分布や3次元構造上の非対称性を考慮に入れることはできない。</p> <p>原子・分子レベルの情報を反映させたシミュレーションとして、古くから分子動力学計算が用いられており、高分子材料の設計にも活用されている。しかし、アモルファス状態は不定形で</p>	

あるが故、平衡状態に達したか否かを既知の構造と比較して確認するといったことができない。そのためこれまでは、平衡状態に達したかというより、計算時間の制約から計算条件を決定してきた感がある。平衡化の不十分性を補うため、初期構造をいくつか発生させ、それぞれから分子動力学計算を行い平均をとるという方法も良く使われる。しかし実際筆者は、初期構造の違いによる誤差（分散）が大きいと、異なった分子で比較しても差が有意とはならないといったことをしばしば経験している。

残念ながら現状は、モノマーや添加剤の分子レベルの情報から、高分子材料の PVT（圧力-体積-温度）曲線、溶解度や拡散係数、弾性率といった極めて基礎的な物性さえ定量的に予測できるまでには至っていない。また、高分子材料を特徴付ける因子には、モノマーの種類以外に分子量（重合度）がある。重合度の影響は統計力学から解析的には求められているものの、シミュレーション上で重合度を実際のポリマーと対比した形で考慮した例はほとんどない。

高分子が平衡状態、即ち自由エネルギーが最も低くなる状態に達するまでシミュレーションするには、実は蛋白質のフォールディングと同程度の大規模計算が必要ではないかと考えている。これを実現するためには、ハード面ではグリッドコンピューティングが欠かせない。また、ソフト面では効率的に並列化するアルゴリズムに加え、multi-time-step 法などの高速化手法や、end-bridging モンテカルロ法などの効率的な構造緩和方法の発展が望まれる。

また、分子動力学計算の精度を決めるもう 1 つの重要な因子は、原子間の相互作用を記述する力場パラメタである。従来は原子団毎にパラメタが固定されていたが、実際には結合様式（例えば環の一部など）により同種の原子団でも異なったパラメタを割り付けるべきことがある。さらに、機能性高分子材料は、一般的ではない原子団を含むことが多く、力場パラメタがないため計算できないといったことも起こる。これらの問題に対処すべく、近年量子化学計算に基づき力場パラメタを決める方法が開発されている。

高精度の力場パラメタと十分な系の大きさ、時間的長さの分子動力学計算により、種々の高分子物性を精度良く予測することが可能となれば、高分子材料開発をより論理的かつ効率的に進められるようになり、産業へのインパクトも非常に大きいものとなる。

#### 将来予測と方向性

- ・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

10 万～100 万原子、数～数 10ns の分子動力学計算が日常的に行える。

- ・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題

100 万～1000 万原子、数 10～数 100ns の分子動力学計算が日常的に行える。

#### キーワード

高分子、材料設計、分子動力学、グリッド、並列計算

(執筆: 寺石 和夫 )