

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	3-4-4. 高分子挙動

概要（200字以内）

計算化学を分子集合体の材料設計に適応するには、現状下記諸問題の解決が必須である。

1. 多様な分子間相互作用力を正しく評価できる高精度力場の構築
 2. 高分子結晶を取り扱える新たな計算手法の確立
 3. 分子量分布に代表される不均質系の特性を解明出来る計算手法の確立
 4. 非平衡状態の分子挙動を、耐え得る計算時間内で妥当性を持って再現できる手法の確立
- 一方で、人材育成に積極的に適応できる総合的システムの構築が望まれる



(図は、計算時間などの問題解決のために各所で提案されている粗視化の取組み例、不連続である。)

現状と最前線

機能発現の主体が特定の分子構造に依存する電子・光学的性質に関しては、ab initio 計算手法の発展や計算機能力の向上により、計算化学の果たす役割は大きく進捗している。しかしながら、計算規模の大きい高分子・集合体の計算には分子力学・動力学の適用が不可欠であり、妥当性のある分子間相互作用を考慮した高次構造の構築が必須なため、下記の問題が存在する。

1. 多様な分子間相互作用力を正しく評価できる高精度力場の構築

分子構造を再現するための力場の構築には、ab initio 計算に基づいた手法などが確立されており、信頼性も向上しているが、高分子・集合体にこの手法は適用できない。従って、イオン性置換基や金属元素を含んだ系の計算は現状信頼性を著しく欠いたものとなっている。

2. 高分子結晶を取り扱える新たな計算手法の確立

実際に用いられている高分子材料には微結晶あるいは球晶が存在しており、これらの各種物性値に与える影響は非常に大きいものがある。しかしながら現状高分子鎖から高次高分子結晶構造体を再現できる計算手法は確立しておらず、大きなボトルネックとなっている。

3. 分子量分布に代表される不均質系の特性を解明出来る計算手法の確立

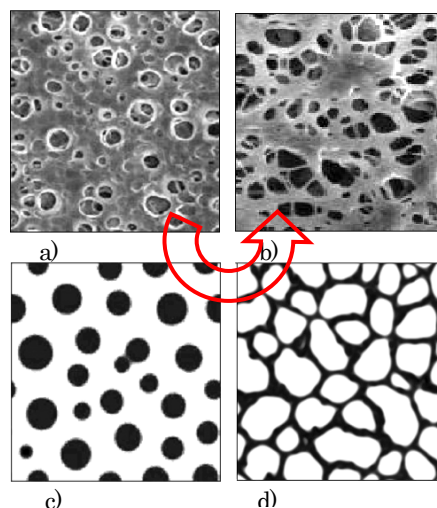
現実の高分子材料は上記結晶も含めた種々の構造体の複合体であり、また分子量分布依存性も無視できない特性である（単分散高分子は異なる物性値を示すことが精密高分子合成（NEDO

など)で明らか)。現実の不均質な系を取り扱える計算手法の確立が望まれる。

4. 非平衡状態の分子挙動を、耐え得る計算時間内で妥当性を持って再現できる手法の確立

上記課題も含め、集合体・高分子系で最も大きな問題は計算に要する時間が実時間よりも長いということである。例えば通常の PC 環境では実時間で nsec の結果を得るために数週間の計算時間を必要となる。その結果として高分子系における計算化学は、材料設計ではなく計算結果の妥当性の評価に留まっている場合が多い。これらを鑑みて種々の粗視化手法が開発されているが、個性を活かすと全体が見えず、全体を見ると個性が消滅するという悪循環からはまだ逃れてはならず、計算手法の確立が望まれる。

上記のような問題点がある一方で、計算化学は非平衡状態での高分子挙動を可視化し、その特異性を示唆してくれるツールでもある。この特性を有効に利用することで、効率的な材料設計を行うことが可能である。例えば左図は高分子多孔膜の材料設計に応用した例である。上段は実験例、下段は計算例である。a)のような構造であった多孔膜が、計算で分子量が不足した c)に相当し、高分子量化で d)のような構造になることが示唆され、この結果を利用して高分子量化することで求めるべき b)の構造を得ることが出来た。



このように計算化学を非平衡状態での高分子の特異的な物性を理解するために用いることで、研究者独自の視点を活かした材料設計の強力なツールとして用いることが出来る。計算機自身はデータベース機能やインターネットを通じた通信機能も充実しているため、文献情報検索などと併せた統合的システムを構築することで長足の進展を見込むことが出来る。シミュレーションは所詮はアボガドロ数分の1の結果であるため、これを現実性のあるものとして結論付けるだけの力量が、研究者には要求される。逆にこのようなシステムを構築することで、材料設計能力のある研究者の育成に積極的に用いることが可能であり、そのための施策が望まれる。

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

- ・ 球晶など、高分子の高次結晶構造を再現する計算手法の確立
- ・ イオン性置換基や金属などが取り扱える、複雑な相互作用力を評価できる高精度力場の確立
- ・ 研究者の人材育成に積極的に適応できる総合的システムの構築と材料設計の方法論の検討

10年後までに解決・実現が望まれる課題

- ・ 分子構造から集合体まで統一的に取り扱える計算手法および環境の普及
- ・ 材料設計の方法論の確立

キーワード

高分子結晶、高精度力場、非平衡状態、人材育成、材料設計

(執筆者： 八尾 滋)