

計算機シミュレーションによる 有機分子の屈折率・誘電率の予測

キーワード：分子物性シミュレーション、屈折率、誘電率、量子化学計算、分子動力学計算

はじめに

計算機シミュレーションによって分子の物性を予測することは、有機材料の開発コストを低減させる上で有効な手段です。一方で様々な計算手法に習熟し、運用するには人的コストも高く、導入には障壁があるのが実情です。

当研究所森之宮センターでは、煩雑な作業が必要な計算プロセスを、予測したい物性毎に自動化・パッケージ化し、ご依頼に応じて結果を報告する計算サービスを行なっています。これにより多数の分子の物性をまとめて素早く予測することが出来ます(図1)。ここでは、量子化学計算と分子動力学計算を組み合わせた屈折率と誘電率の予測について紹介します。



図1 森之宮センターの計算サービス

屈折率の予測

有機分子の屈折率は、分極率と密度から Lorentz-Lorenz の式により予測することが出来ます。分極率は孤立分子の量子化学計算により得られます。密度は通常、原子半径を基にした精度の低い推算法を用いますが、当センターでは多数の分子からなる凝集体の分子動力学シミュレーションを利用しています。これによ

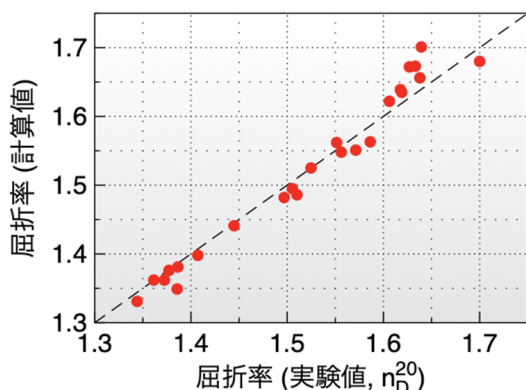


図2 屈折率の実験値と計算予測値の比較

り精度の高い密度の予測値が得られます。これらを自動的に連続して計算することで、一分子当たり 15 分程度で実験値との整合性の高い屈折率を予測することが可能です(図2)。

誘電率の予測

同様に誘電率も量子化学計算による分極率と、分子動力学計算で得られる凝集体の双極子モーメントの揺らぎを用いて予測することが出来ます。誘電率は屈折率に比べ予測精度は落ちますが、広い範囲で相関性の高い予測値が得られました(図3)。誘電率に関しては、当センターでは一分子当たり 30 分程度で連続自動計算することが可能です。

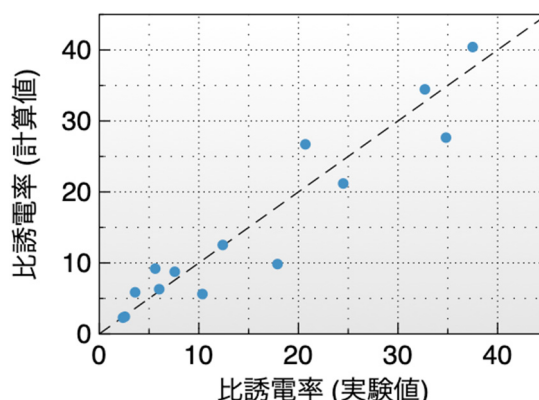


図3 比誘電率の実験値と計算予測値の比較
計算機シミュレーションの利点

計算機シミュレーションでは、自動化技術により一度に多数の分子の物性予測が可能となるだけでなく、安定性が低い化合物や粘着性の分子など、測定が困難な分子の物性予測が可能です。また高温・高圧条件など測定コストや安全性が懸念される実験の代替手段としてシミュレーションを利用することが出来ます。

おわりに

以上のように、当センターでは計算機シミュレーションによる物性予測を手軽に製品開発に活用していただけるように、計算項目の拡充を順次進めています。他にもこのような物性の予測がしたい、というご要望があれば是非お問い合わせ下さい。