

メソスケールでの不均一構造形成シミュレーションと不均一構造中の局所構造の電子状態計算

(株) 豊田中央研究所 ○兵頭志明、山本智、山川俊輔

様々な巨視的シミュレーションによってシステム設計、構造設計といったレベルの計算予測が盛んに行われるようになってきている。材料の力学特性や熱特性などを複雑な境界条件の下で数値的に計算することによって巨視的な系の特性を予測する計算である。これらの計算では、系を構成する物質の物性値をパラメータとして扱う。このとき、構成する材料は物性パラメータの数値によって指定される。従って、このような計算結果から具体的な分子設計を行うことは極めて難しい。特に新規材料の開発が要求される場合には、材料開発におけるトライ・アンド・エラーの繰り返しが避けられない。多くの材料の使用環境は不均一であり、材料物性に与える影響は複合的であることがほとんどである。このため、均一環境を想定した孤立系や周期系での分子レベルの計算から得られる情報には限界があると考えておく必要がある。

材料の構造や物性を規定する最も基本的な情報は電子状態から得られると考えて良い。電子状態計算そのものについては、理論の精密化と効率的な計算アルゴリズムの開発によって計算精度と計算規模の飛躍的な拡大が進められてきている。しかし、上述したような不均一環境下での電子状態計算の手続きについてはまだ十分な検討が成されているとは言えず、巨視的なスケールで構成されるシステムの中での材料の振る舞いを計算予測するには電子状態計算の大規模化とは別の検討が必要であると考えられる。この際に、システム構成によって規定される境界条件との整合性が取れるような方法が必要となるが、電子状態計算が意味を持つスケールとは懸け離れたスケールでの境界条件になるために、巨視的なシミュレーションで行われるような単純な連成問題としての解法によってアプローチできる問題ではないと考えられる。

電子状態計算が意味を持つスケールと巨視的なスケールとの中間的なスケールを考えることは自然な方法であると考えられる。分子動力学から連続体力学に至る階層的計算については土井プロジェクトで開発された Octa による検討なども報告されており、必要に応じて中間スケールの階層を考えてやれば良い。メソスケールでの不均一構造が適切に計算でき、その構造によって規定される不均一場の下での電子状態の計算を行えば、上記の問題に対する適切なアプローチになると考えられる。

本講演では、高分子電解質膜のメソスケールでの不均一構造形成シミュレーションと電解質膜中におけるヒドロニウムイオンの電子状態計算を中心に、上述した階層的な材料シミュレーションの考え方とその実例を紹介する。電解質高分子の分子構造を粗視化し、電解質高分子-水系のメソスケールでの不均一構造をシミュレートした。さらに、この不均一構造によって形成される静電場を外場として与えることにより、不均一構造中でのヒドロニウムイオンの電子状態計算を行った。不均一構造形成シミュレーションには粗視化動力学計算の一種である散逸粒子動力学法を、電子状態計算には不均一場との整合性が良いと考えられる有限要素法を用いている。膜中の水クラスターのサイズやイオンの水和構造など、実測値が得られているいくつかの物理量を計算し、実施した計算の正当性を確認した。当日は、このような階層的な材料シミュレーションの発展性も含めた議論を行いたい。

○ひょうどう しあき・やまもと さとる・やまかわ しゅんすけ