

演 題	分子動力学法による炭酸エステルシミュレーション	
発 表 者 (所 属)	中島 孝憲 ・ 林 治尚 ・ 山名 一成 ・ 中野 英彦 (姫路工大・工)	
連 絡 先	〒671-2201 姫路市書写 2167 姫路工業大学工学部応用化学科	
キ ー ワ ー ド	Molecular simulation, SHAKE, DMC	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	分子動力学 (Molecular Dynamics) 法により , 炭酸エステルシミュレーションの運動を再現し、それらの特性と動的挙動を考察する。	
環 境	適 応 機 種 名	Fortran77 搭載機種
	O S 名	UNIX , TURBOLINUX
	ソ ー ス 言 語	Fortran77
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

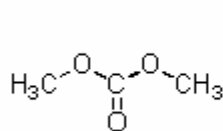
1. 緒言

炭酸エステル類の中でも、炭酸ジメチル(Dimethyl carbonate ; DMC)は、環境への負荷が小さくホスゲンの代替物質として最も有望であり、その他にメチル化剤、カルボニル化剤、オクタン価構造剤として需要が期待される物質である。また最近、Li 電池などに用いられる有機溶媒としても活用されている、きわめて有用な化合物である。そういった性質などを分子単位で解析することは物性の解析や証明などに貢献する。

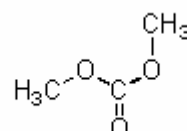
本研究では、炭酸ジメチルの動的特性と溶液構造を解明するために、分子間相互作用と2つの分子内二面角分布の関係に着目し、分子動力学法を用いてシミュレーションした。

2. 方法

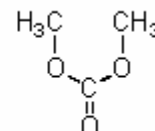
DMC は図のように各粒子の質量を考慮した 6 質点系として扱い、結合角・結合距離は、SHAKE アルゴリズムを用いて拘束したモデルを用いている。分子内の二面角に関しては、その分子内の状態に関しては図のように、カルボニル酸素に対してどのような状態にあるかを考慮し、cis-cis 型、cis-trans 型、trans-trans 型の 3 つの状態を与えた。



cis-cis 型



cis-trans 型



trans-trans 型

図： DMC のシミュレーションモデル

ポテンシャル関数として分子間相互作用は 12-6 Lennard-Jonse ポテンシャルを与え、各ポテンシャルパラメーターは Gaussian94 による ab initio 計算によって与えられた値を用いた。二面角回転による分子内ポテンシャルには以下の式で与えられる値をもちいた。

$$V(\alpha) = c_0 + c_1 \cos \alpha + c_2 \cos^2 \alpha + c_3 \cos^3 \alpha + c_4 \cos^4 \alpha + c_5 \cos^5 \alpha + c_6 \cos^6 \alpha$$

($\alpha = \pm 180^\circ$ cis 型, $\alpha = 0^\circ$ trans 型)

表：ポテンシャルパラメーター

c_0 (kJ/mol)	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
17.987	0.063	0.063	- 49.670	- 65.994	0.870	12.318

対象分子として、DMC の純溶液を扱った。NVT アンサンブルで、温度・密度を数条件下で分子動力学計算を行う。その結果を元に、Okimasa の実験による溶液構造と動的挙動の結果と比較・考察する。

3. 参考文献

- [1] Allen M.P. and Tildesley D.J., "Computer Simulation of Liquids", Oxford (1987).
- [2] 「コンピュータシミュレーション」上田 顕, 朝倉書店, など
- [3] URL <http://www.questconsult.com/~jrm/thermot>
- [4] Hayashi.H, PhD Thesis, (1994)
- [5] Okimasa.O, Molec. Phys., **93**, 1(1998)