

量子化学計算による IRスペクトルの予測 ～新材料の開発を目指して～

研究・開発機関 : [バンドー化学株式会社](#)
 利用施設 : FOCUSスパコン
 計算規模 : 1~12時間(Fシステム1ノード使用時)
 利用ソフトウェア : Gaussian 16

Before

- 化学物質の構造解析に用いられる赤外分光(IR)スペクトルは実測に基づく手法です。これを用いることにより、有機化合物を特性づける官能基情報は得られますが、標準物質の実験結果がないと詳細な構造推定まで至るのは困難でした。
- そのため、この手法だけでは化学的性質の変化は確認できませんが、より詳細な化学構造は不明で、新材料の開発は容易ではありませんでした。

After

- 化学構造の情報を用いれば、量子化学計算によりIRスペクトルを高い精度で計算可能になります。
- 本開発により複数の構造解析結果から対象とする材料の構造情報の推定ができ、その特性評価をより詳細に行うことができるようになりました。
- このように量子化学計算により、変性による化学構造の変化が詳細に分かるようになり、材料改良の指針が理論的に得られるようになりました。

■背景と目的

近年、弊社製品に求められる特性が変化しており、更なる環境安定性、長寿命化が要求されています。これに応える候補材料であるエチレン-プロピレン-ジエン三元共重合体(EPDM)は、接着性が従来ポリマーに比べて低いという問題点があり、EPDMを変性させ、他材料との接着性を改善するという方法の検討を行っています。社内で作製した変性EPDMのIRスペクトル測定により変性は確認できますが、他材料との接着性や物性を考慮した材料設計まで行うためには詳細な化学構造を明らかにすることが必要でした。

量子化学計算では入力した化学構造より振動エネルギーを計算し、波数換算することでIRスペクトルを求めることができます。そこで、その妥当性を確認すべく、無水マレイン酸(CAS No. 108-31-6)を標準物質として、測定したIRスペクトル(黒色)と量子化学計算により得られたIRスペクトル(水色)とを比較したところ(図1)、無水マレイン酸基のC=O結合の伸縮振動吸収ピークの出現範囲である1700-1900cm⁻¹の範囲(赤破線枠)で、両者は高い精度で一致したので、このIRスペクトル予測手法を用いて無水マレイン酸変性EPDMの構造推定を試みることにしました。

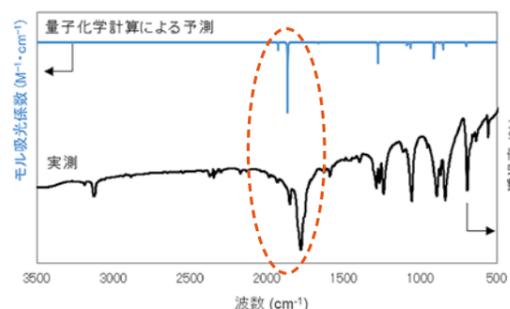


図1 無水マレイン酸の実測/予測IRスペクトル

量子化学計算により得られたIRスペクトル(水色)とを比較したところ(図1)、無水マレイン酸基のC=O結合の伸縮振動吸収ピークの出現範囲である1700-1900cm⁻¹の範囲(赤破線枠)で、両者は高い精度で一致したので、このIRスペクトル予測手法を用いて無水マレイン酸変性EPDMの構造推定を試みることにしました。

■利用成果

今回、構造を推定する方法として、図2のような異なる構造的特徴を持つ無水マレイン酸変性EPDMの分子モデル(①、②)を作成し、それらの分子モデルに対して構造最適化計算により安定構造を得たのち、計算値のIRスペクトルを得るための量子化学計算を行いました。計算値と実測値における無水マレイン酸基のC=O結合の伸縮振動の吸収ピーク位置を比較することで、詳細な化学構造を推定するという手法を取りました。

計算コストを考慮してポリマーであるEPDMを図3のように低分子量のオリゴマーに近似する手法を取りました。

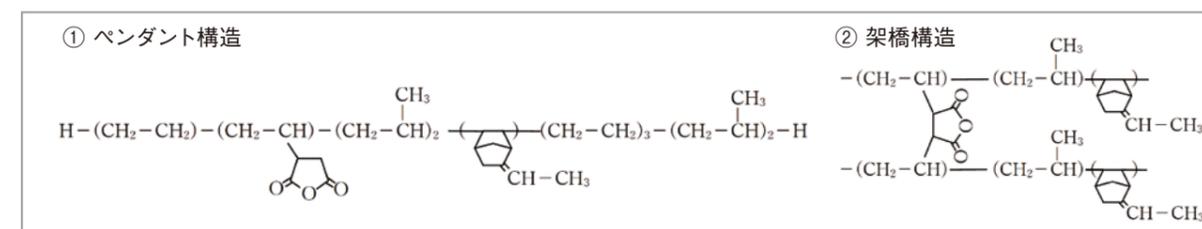


図2 作成した量子化学計算用分子モデルの化学構造の一例(2種類)

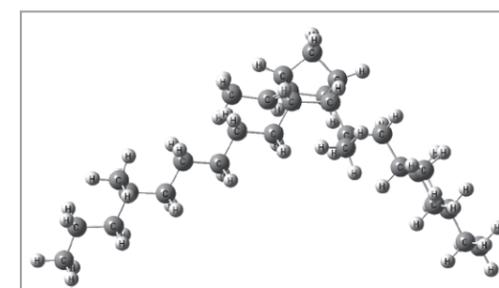


図3 構造最適化したEPDM分子モデル

量子化学計算により得られたIRスペクトルを図4に示します。この結果から、無水マレイン酸のグラフト(接ぎ木)構造がペンダント構造か架橋構造かで吸収ピークの波数位置が変化することが分かりました(図4星印)。また、量子化学計算では予測したIRスペクトルの各吸収ピークから振動モードの帰属(赤外吸収と振動モードの対応関係)が判別できるので、化学構造の違いによる波数位置の変化を明確に捉えることができます。このように得られたIRスペクトル

を補正後、図4、5を用いて計算と実測の無水マレイン酸変性EPDMのIRスペクトルと比較すると、実際には上記のような複数の化学構造が形成されている可能性があることが分かりました。

今後、他の手法とも組み合わせて構造解析ツールとしてブラッシュアップを図るとともに、さらには無水マレイン酸変性EPDMの物性解明へのアプローチと照らし合わせて、物性発現メカニズムの解明、性能向上の指針を得るための材料設計ツールとして活用を推進していきます。

このように、量子化学計算を含む計算化学を新材料の開発に活用することにより、従来の知見、経験に基づいた材料設計の方法から、試作の前に材料物性の予測、絞り込みを行うアプローチを組み入れることにより、変量範囲の制約緩和、メカニズムの解明につながる新たな材料設計方法の構築を目指します。

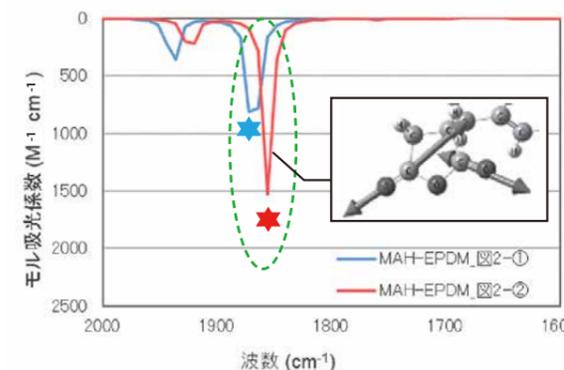


図4 量子化学計算により求めたIRスペクトル(分子モデル中の矢印は振動モードを表す。)

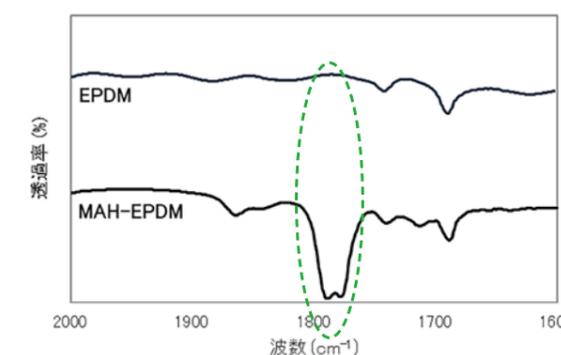


図5 実測のIRスペクトル