

学位論文内容の要旨

学位申請者	黒木 菜保子 【理学専攻 平成28年度生】	要 旨
論文題目	フラグメント化の手法に基づく分子シミュレーション法を用いた機能性液体の物性研究	流体輸送・分離抽出・ガス吸収等の化学プロセスの設計において、物質の状態や物理化学的性質に関する知見は必須である。本論文には、種々の機能性液体の物性予測のための、精度と効率を兼備した第一原理分子シミュレーション法（有効フラグメントポテンシャル分子動力学法：EFP-MD）の確立を目指した研究成果が6章に亘り纏められた。EFPとは、分子間相互作用を相互作用するフラグメント分子の波動関数によりコンパクトに記述する手法である。
審査委員	(主査) 准教授 森 寛敏	第1章では、研究背景が分子論の観点から述べられ、流体の分子間相互作用に関する従来の理論的手法が概観された。第2章では、本論文で用いたEFP-MD および関連する各種分子シミュレーション法と分子軌道理論の詳細が述べられた。続く第3-5章では、EFP-MD シミュレーションを応用して機能性液体の物性を予測した例が具体的に述べられた。第3章では、EFP-MD 法による電池電解液等に適用されるイオン液体の溶液構造予測可能性を議論した。最も簡単なカチオン（1,3-ジメチルイミダゾリウムカチオン）とハロゲン単原子アニオンから成るイオン液体イオン液体に関するEFP-MD シミュレーション結果と中性子線回折実験データを比較することで、EFP-MD 法がイオン液体の溶液構造を半定量的に予測する能力をもつことが示された。第4章では、水-メタノール二成分混合系を例として、EFP-MD 法による中性分子混合溶媒の過剰熱力学物性の予測可能性が調査された。従来の古典MD法では、当該系のような極簡単な混合系であっても、その過剰熱力学物性のモル分率依存性を定性的にさえ再現できない。一方、EFP-MD はコンパクトな手法でありながら分子フラグメント波動関数を基とした手法であるため、混合モル分率変化に対する非線形な分子間相互作用変化を精度良く記述出来ることが示された。第5章では、EFP-MD 法の超臨界流体物性記述可能性が検討された。超臨界NH ₃ を対象としたEFP-MD シミュレーションの結果、EFP-MD は超臨界状態における溶液構造のみならず、自己拡散係数などの動的溶液物性についても、実験を半定量的に再現できることが分かった。 第6章では、各章の研究結果を総括し、今後の展望が記された。EFP-MD法により、新たな機能性溶媒の物理化学的性質を理論的に制御し、デザインできる可能性が拓かれた。
	教授 鷹野 景子	
	教授 益田 祐一	
	教授 近藤 敏啓	
	教授 由良 敬	
	(査読)	