

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： マクロ化学現象シミュレーションに向けた計算分子技術の構築
2. 研究代表者： 長岡 正隆（名古屋大学大学院情報科学研究科 教授）
3. 中間評価結果

本研究では“分子凝集状態”で起こる化学現象、とくに複合化学反応・立体特異性・集合体構造の理解と制御のために、新しい計算分子技術を構築して科学技術イノベーションを図ることを目標としている。マクロ化学現象解明に向けた新しい計算分子技術として、モンテカルロ(MC)法と分子動力学(MD)法とを併用する混合 MC/MD 反応シミュレーション法 (Red Moon 法) の技術開発を加速した。具体的な応用例として、二次電池電解液の性質や逆浸透膜の不均一性に関する、実験では得られない、新しいマイクロ情報を得ることに成功した。現在、Hf 錯体触媒によるオレフィン重合の反応制御に向けた研究を展開しており、概ね想定通り進捗している。Red Moon 法により、実用用途において興味深い理解が計算化学で得られていることは大変に素晴らしいが、1つの応用課題に機動的に対応し、もう少し短い期間の検討で答えがでないのか、新しい材料や触媒を提案できないのか、など計算分子技術へのさらなる期待も大きい。具体的な応用に関しては、企業との共同研究や他の予算に引継ぎ、本研究課題では基本的な手法のさらなる飛躍（例えば AI との複合化）を進めることも考慮頂きたい。