

新機能創出を目指した分子技術の構築
平成 25 年度採択研究代表者

H28 年度 実績報告書

長岡 正隆

名古屋大学 大学院情報科学研究科
教授

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 -複合化学反応・立体
特異性・集合体構造の分子制御-

§ 1. 研究実施体制

(1)「長岡」グループ

① 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)

② 研究項目

- ・研究項目Ⅰ：マクロ化学現象シミュレーションの分子技術の確立
- ・研究項目Ⅱ：計算分子技術と精密合成技術による凝集系化学反応の立体化学制御
- ・研究項目Ⅲ：計算分子技術と精密合成技術による環境・エネルギー材料の開発

§ 2. 研究実施の概要

■研究構想：“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。その際、あくまでも原子・分子情報を保持したままで、マクロ化学現象シミュレーションの分子技術基盤を確立する。具体的には、精密合成技術者の助言やデータベース・従来法も活用して、複合化学反応の微視的制御と凝集系化学反応の立体化学制御や、超ナノ階層の集合体・複合体の制御に関する分子論的指針も探り、新機能環境・エネルギー材料の設計・創成を目指したい。最終的に、マクロ化学現象シミュレーションの計算分子技術を汎用化する。

こうした研究構想の下で、H28年度は、研究項目Ⅰの研究実施項目Ⅰ－1「混合MC/MD反応シミュレーション法の開発」、Ⅰ－2「自由エネルギー計算分子技術とデータベースとの統合化」、Ⅰ－3「マクロ化学現象シミュレータの開発と実行環境の整備」の3つを進めた。とくに複雑な化学反応過程に対するMC/MDサイクルの実時間解釈を与える変換理論を実証するために、モデル系H₂-I₂系に適用して、混合MC/MD反応シミュレーション法（Red Moon法）における複合化学反応系の反応進行時間の見積もりが可能であることを示した。研究項目Ⅱでは、Ⅱ－3「多孔性金属有機構造体や生体高分子内における特異現象」を継続して実施すると共に、H27年度から新たに開始したⅡ－1「可逆的連鎖移動によるオレフィンブロック共重合体の反応制御」の研究に集中的に取り組んだ。とくにHf錯体での対アニオンの解離とエチレンの配位過程の分子機構（活性部位開放機構）が本CRESTで開発してきた一連の計算分子技術を通して明らかになった。さらに、研究項目Ⅲの研究実施項目Ⅲ－1「ポリアミド膜の水透過性の向上と高機能化」について纏める一方で、Ⅲ－2「二次電池の界面構造の解明と高容量化」を継続して進めた。とくにⅢ－2では、プロピレンカーボネート(PC)系電解液にFEC類似の添加剤ジフルオロエチレンカーボネート(DFEC)を添加した場合に知られているFEC-DFECミステリに着目して研究すると共に、高濃度電解液系Liイオン二次電池では、SEI膜形成過程で反応生成物の溶媒和が起こり難いことが、より高密度なSEI膜が形成されるという事実につながるという知見を得た。