

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

H29 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、H29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。とくに数桁上の空間階層まで広がって進展する複合化学反応過程を取り扱う計算分子技術(Red Moon(RM)方法論)の基本的な設計を進めた。またマルチスケールRM法を開発しその有効性を示した。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、一層、集中的に取り組んだ。本CRESTで開発してきた計算分子技術を適用して、昨年度明らかにした活性部位開放機構を通してHf錯体触媒がエチレン重合反応を促進することを初めて示した。(図)同時に、Zr錯体触媒についての反応機構解析を開始した。さらに、研究項目Ⅲの研究実施項目Ⅲ-2「二次電池の界面構造の解明と高容量化」に関して継続して進めた。特に、昨年度から引き続いて高濃度電解液系Liイオン二次電池の固体電解液相間(SEI)膜の微視的形成機構を解明するための計算分子技術を開発した。またプロピレンカーボネート(PC)系電解液におけるSEI膜形成に対する添加剤フルオロエチレンカーボネート(FEC)の添加濃度依存性について実験結果を再現すると共にその微視的起源を明らかにした。

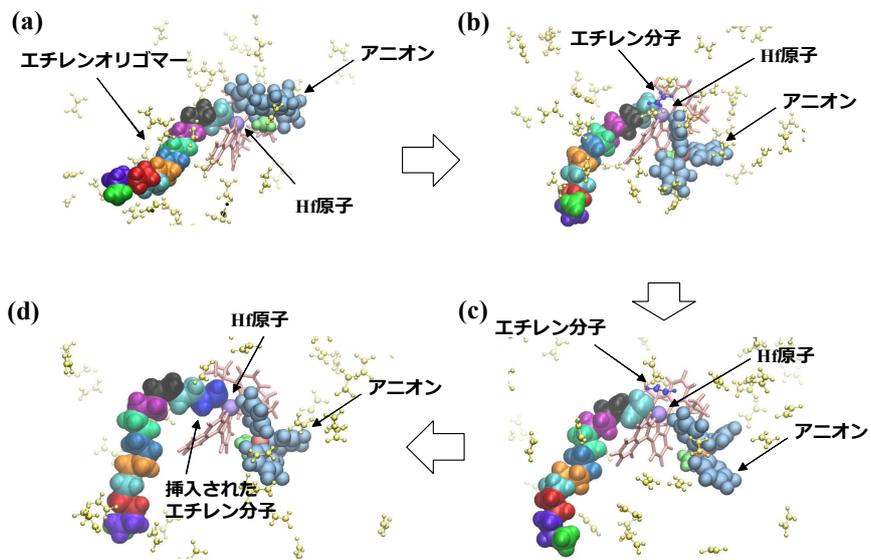


図 新しい計算分子技術 (Red Moon 法) によって初めて実現した Hf 触媒によるエチレン重合反応シミュレーション: (a) 最初、活性部位はアニオンで占有されていて伸長反応は起こらないが、(b) エチレン分子が活性部位に近づきアニオンが脱離して反応条件を満たす (活性部位開放機構) と (c) エチレン分子が反応を試行し活性部位に挿入する。(d) そのエチレン挿入の反応試行が採択され伸長反応が完了する。