

「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

H25 年度
実績報告

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 (研究機関別)

① 研究代表者: 長岡 正隆 (名古屋大学情報科学研究科、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

“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、初年度H25年度は、本研究課題立ち上げのための組織整備を進めると共に、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」を中心に、研究項目Ⅱと研究項目Ⅲの中から、研究実施項目Ⅱ-2「錯体触媒による重合反応の選択性制御」、Ⅲ-1「ポリアミド膜の水透過性の向上と高機能化」、Ⅲ-2「二次電池の界面構造の解明と高容量化」の研究に着手した。

Ⅰ-1では、混合 MC/MD 反応法の基本アルゴリズムを確定すると共に、素反応としての化学反応そのものに加えて、分子凝集状態における拡散過程を希少事象として取り扱う枠組みを検討した。また混合 MC/MD 重合法を開発した。Ⅱ-2では、混合 MC/MD 重合法を具体的な対象系へ適用するために、分子力場の調査を進めると共に、分子力場開発の検討を行った。Ⅲ-1では、混合 MC/MD 重合法を適用して、典型的なポリアミド膜を調製し、不均質な立体構造を再現できることを確認した。Ⅲ-2では、具体的な対象系として、炭素系電極とエチレンカーボネート(EC)系電解液からなるリチウムイオン電池(LiB)とプロピレンカーボネート(PC)系電解液からなるLiBを取り上げ電極界面の生成物の構造を調査した。

§ 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

論文詳細情報(国内)

なし

論文詳細情報(国際)

1

Masayoshi Takayanagi, Ikuo Kurisaki, and Masataka Nagaoka, "Non-site-specific Allosteric Effect of Oxygen on Human Hemoglobin under High Oxygen Partial Pressure", *Scientific Reports*. (DOI: 10.1038/srep04601)

2

Miyabi Hiyama, Hidefumi Akiyama, Kenta Yamada, and Nobuaki Koga, "Theoretical Study of Fluorescence Spectra Utilizing the pKa Values of Acids in Their Excited States", *Photochem. Photobiol.*, 2014, vol. 90, No. 1, pp.35-44, 2014 (DOI: 10.1111/php.12156)

3

Andrea Renzetti, Nobuaki Koga, and Hiroshi Nakazawa, "Si-CN Bond Cleavage of Silylcyanides by an Iron Catalyst. A New Route of Silylcyanide Formation", *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, vol. 87, No. 1, pp. 59-68, 2014 (DOI 10.1246/bcsj.20130206)

4

Satoru Iuchi and Nobuaki Koga, "An Improved Model Electronic Hamiltonian for Potential Energy Surfaces and Spin-Orbit Couplings of Low-lying d-d States of $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ", *J. Chem. Phys.*, vol. 140, No. 2, pp.024309-1-024309-11 (DOI: 10.1063/1.4861229)

5

Miyabi Hiyama, Hidefumi Akiyama, Toshimitsu Mochizuki, Kenta Yamada, and Nobuaki Koga, "Analysis for Photo Excitation Energy Dependence in Fluorescence Spectra of Firefly Luciferin", *Photochem. Photobiol.* (in press). (DOI: 10.1111/php.12243)