

「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

H26 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、H26 年度は、本研究課題を遂行するための組織整備を完成すると共に、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」に 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」を加えた2つを中心に、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」を継続すると共に、新しく 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」の研究にも着手した。また、III-1「ポリアミド膜の水透過性の向上と高機能化」と III-2「二次電池の界面構造の解明と高容量化」の研究を継続した。

I-1では、これまでに確定した混合 MC/MD 反応法の基本アルゴリズムを混合 MC/MD 重合法へと展開し、I-3では、凝集系における基準振動解析法を開発した。また II-2では、具体的なオレフィン重合の対象系を取り上げ、混合 MC/MD 重合法を適用するための力場開発をほぼ完成した。さらに産業的必要性が高い対象系についての力場開発にも着手した。II-3では、昨年までの非部位特異的アロステリック効果に関する研究を展開してカチオンサイズに注目し、酵素・基質会合体への非結合 Na カチオンの効果を調査した。III-1では、混合 MC/MD 重合法を適用してポリアミド膜の高機能化に向けた新しい知見を得た。III-2では、炭素系電極とプロピレンカーボネート系電解液からなる Na イオン電池における添加剤効果を取り上げ SEI 膜の形成過程を調査し新しい微視的知見を得た。