

「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

H27 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、H27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」と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」に加えて、さらに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」を進め、自由エネルギー曲面探索プロトコルとして、FEG法とエネルギー表示(ER)法とを組み合わせたFEG-ER法を開発し、凝縮系における自由エネルギー的な平衡構造を得る手法としての効率性を示した。また研究項目Ⅱの研究実施項目Ⅱ－2「錯体触媒による重合反応の選択性制御」と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」を継続して実施した。特に多孔性金属有機構造体の細孔内のラジカル共重合反応を取り上げ、細孔表面に空間的に固定されている単量体群を利用して、共重合体の配列制御を取り扱うための力場の開発とアルゴリズムを確立した。また当初計画していた研究実施項目Ⅱ－1「均一系錯体触媒による選択的結合生成反応」の代わりに、新しくⅡ－1として取り上げた「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」の研究に着手した。さらに、研究項目Ⅲの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」を継続して実施した。Ⅲ－1では、混合MC/MD反応シミュレーション法の更なる実用化には拡散過程の取り扱いが重要であることが分かった(図)。Ⅲ－2では、プロピレンカーボネート(PC)電解液中では、フルオロエチレンカーボネート(FEC)がSEI膜形成に重要な意義があることが期待される一方、ジフルオロエチレンカーボネート(DFEC)は有効な効果を及ぼさないことが示された。

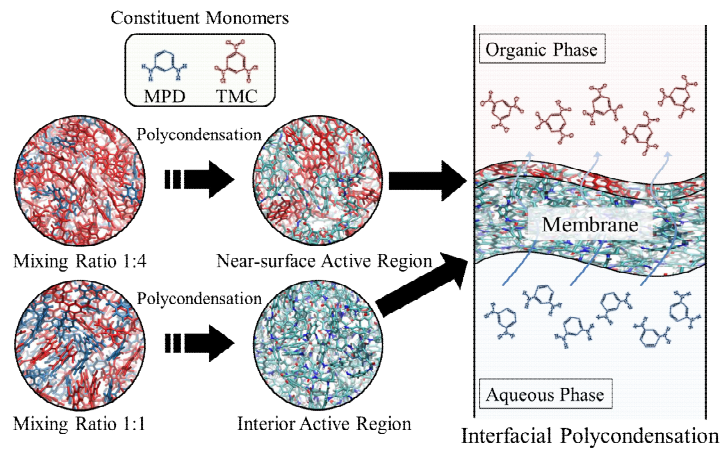


図 FT30 膜生成の実験的取り扱いにおける界面重合における反応機構の模式図。拡散過程の取り扱いの重要性が分かる。