

研究タイトル：

π 共役有機機能性材料の分子シミュレーション



氏名：	小島 広孝 KOJIMA Hirofumi	E-mail：	h.kojima@maizuru-ct.ac.jp
職名：	准教授	学位：	博士(工学)
所属学会・協会：	応用物理学会, 分子科学会		
キーワード：	分子動力学計算, 量子化学計算, バンド計算, 有機半導体材料, 有機熱電変換材料		
技術相談 提供可能技術：	・分子設計などの, 分子科学, 計算化学, 有機合成に関連する多角的見解 ・有機機能性材料の静的または動的性質に関する計算化学的アプローチ (参考: researchmap , KAKEN データベース , ORCID , こじまはかせの有機物ラジオ)		

エネルギー

環境

材料

生産・製造

計測・制御

情報・通信

防災減災

 医療福祉
 バイオ

文化・都市計画

研究内容：

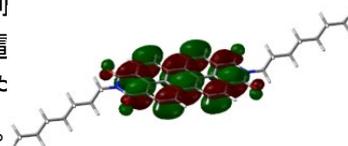
π 電子が関与する有機機能性材料は、導電性や熱伝導性、光特性などの様々な性質をもっている。これまでは主に無機材料がこれらの性質を担ってきたが、有機材料特有のフレキシブル性や軽量性を活かした新素材の開発が期待されている。有機分子の最大の特徴として、分子構造の多様性が挙げられる。炭素や水素など少ない元素の組み合わせでできているにもかかわらず、その組み合わせは無限大であり、新しい分子の開発が日進月歩で行われている。

分子の性質は単独の分子がもつものばかりではない。複数の分子が組み合わせられてきた分子集合体において発現するマクロな性質もある。たとえば分子が整然と配列した結晶構造においては、構造の周期性や分子の配向などの対称性が鍵となり、電気・熱の伝導や超伝導などの性質を発現する。規則性の乏しいバルク集合体（薄膜や粉末など）であっても、分子間相互作用が複雑に影響し、結晶とも異なる性質を示す。これらの構造に由来する物性は、実験で観測したり制御したりすることは現実的には限界がある。例えば、どんなに理想的な結晶であっても欠陥のない構造はつくれず、薄膜などに至っては全く同じ構造を再現することは不可能である。

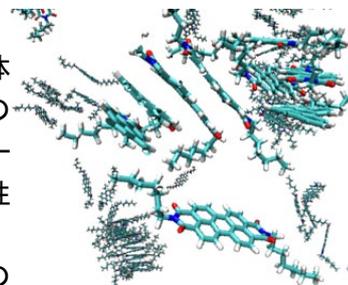
計算機を用いた分子シミュレーションは、実験では見ることが難しい分子や集合体の構造や、電子状態や分子運動に着目した解析なども行うことができる。たった1個の分子がもつ分子構造・分子軌道・分子振動が、集合体における構造予測やエネルギーバンド、フォノンバンドに発展する。こうした階層的な大規模計算は、近年の計算機性能の発達により手に届くところまできている。計算化学の時代と言われる所以である。

これまでに有機半導体の導電性や、有機熱電変換材料の熱伝導性などを、種々の計算手法を用いて明らかにしてきた。いずれにも共通するのは、分子や集合体の構造と電子状態が関与することで物性を発現しているという点である。これには分子構造の対称性などの静的な性質のみに限らず、分子振動などの動的な性質も強く影響する。

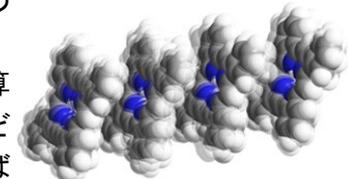
現代の材料研究では、実験研究と計算研究を両輪で進めることが重要である。計算設備と並行して、実験環境も整備を進めている。特に有機機能性材料の分子設計などにおいて多角的見解を必要とされる研究は、基礎応用を問わず、ご相談いただければと思う。



電子状態の第一原理計算



分子集合体シミュレーション



分子振動解析

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
化学計算用 GPGPU 計算機：	紫外可視分光光度計(UV-Vis) UV-1800(島津製作所)
分子動力学計算ソフトウェア LAMMPS, GROMACS など	紫外可視近赤外分光光度計(UV-Vis-NIR) UV-3150(同上)
量子化学計算ソフトウェア GAUSSIAN など	フーリエ変換赤外分光光度計(FT-IR) FT/IR-4600(日本分光)
エネルギーバンド計算ソフトウェア	真空蒸着装置, 昇華精製装置, スピンコーター, 融点測定装置
フォノンバンド計算ソフトウェア PHONOPY など	化学実験用真空ライン, 局所排気装置, 溶剤インクジェットプリンタ