

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 Hiroataka	E-mail：	h.kojima@maizuru-ct.ac.jp
職名：	講師	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知見 (参考: researchmap , KAKEN データベース)		

研究内容：

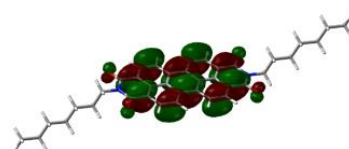
π電子が関与する有機機能性分子は、導電性や熱伝導性などさまざまな性質をもっている。これまでは主に無機材料がこれらの性質を担ってきたが、有機材料特有のフレキシブル性や軽量性などを活かした新素材の開発が期待されている。有機分子の最大の特徴として分子構造の多様性が挙げられる。炭素や水素など少ない元素の組み合わせでできているにもかかわらず、その組み合わせは無限大であり、新しい分子の開発が日進月歩で行われている。

分子の性質は分子1個がもつものばかりではない。複数の分子が組み合わさっ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、構造の周期性や対称性が鍵となり、伝導性や超伝導などの性質を発現する。配向の異方性なども影響する。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、分子間の相互作用が複雑に関与し合い、結晶とはまた異なる性質を示す。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難しい。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ないし、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。

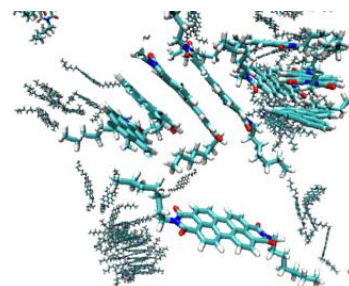
計算機を用いた分子シミュレーションは、実験では見ることが難しい分子の構造や運動に着目した解析を行うことができる。静的な性質から動的な性質まで、分子1個がもつ立体配座や分子振動、電子状態が、集合体における構造予測やフォノンバンド、エネルギーバンドに発展する。こうした階層的な大規模計算は、近年の計算機性能の発展により、ついに手に届くところまでやってきた。21世紀が計算化学の時代と言われる所以である。

これまでに、有機半導体の電気伝導性や、有機熱電変換材料の熱伝導性などを、種々の計算手法を組み合わせる明らかにしてきた。いずれにも共通するのは、電子状態と構造が関与することで物性を発現しているという点である。これには対称性などの静的な性質に限らず、分子振動などの動的な性質も強く影響する。

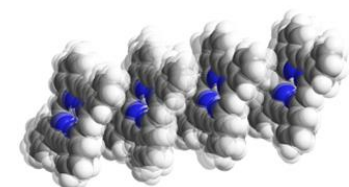
現代の材料研究では、実験研究と計算研究の両輪が揃うことが重要である。計算化学的手法を必要とされる研究は、基礎応用を問わず、ご相談いただければと思う。



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：	
分子動力学計算ソフトウェア(LAMMPS, GROMACS など)	
量子化学計算ソフトウェア(GAUSSIAN など)	
エネルギーバンド計算ソフトウェア	
フォノンバンド計算ソフトウェア(PHONOPY など)	

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