

2023 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的な材料

2023 年度採択研究代表者

石井 良樹

北里大学 未来工学部

講師

ハイブリッドソフト材料の集合体物性を切り拓くナノ構造計算化学

研究成果の概要

優れた物理・化学的耐久性を示すソフトマテリアルとして、カーボン系材料より長寿命なケイ素骨格をもつ有機ケイ素系ハイブリッドマテリアルが挙げられ、様々な産業分野への応用が検討されてきた。しかし有機ケイ素系をはじめとするハイブリッドソフトマテリアルでは、有機化合物系と無機化合物系の相互作用モデルの互換性が乏しく、分子シミュレーションの適用に大きな障壁が存在し、分子集合形態と物性発現メカニズムの理論的考察が難しい。そこで本研究では、申請者がこれまで設計してきた有機・無機化合物それぞれの計算モデル技術の知見を統合し、有機ケイ素系ハイブリッドソフトマテリアルの相互作用モデルの新規開発に着手した。特に量子計算からケイ素と共有結合する原子の相互作用を網羅的に解析したところ、エーテル結合の炭素が一つでもケイ素原子に置換されると非調和性が極めて大きくなり、調和振動子近似を用いた変角運動表現の関数モデルが全く適用できないことを明らかにできた。さらにこの運動モードは、無機系ケイ酸化合物に類似した挙動であることを見出し、有機ケイ素がもつ無機化合物的性質について見出すことができた。本課題ではその相互作用モデルを用いて有機ケイ素系ポリマーの分子モデルを新たに設計することで、有機ケイ素系化合物がもつ熱力学特性を解析し、実験値と良い一致が得られたことから、有機ケイ素系化合物の新規全原子モデルを確立することに成功した。次年度にはそのモデルを用いた大規模系の分子シミュレーションからメソスケールの分子集合特性と機能探索を展開する。また本年度は、統計力学的手法を用いたカゴ状分子がもつホスト・ゲスト相互作用の分子間力解析や無機化合物の相互作用モデル設計も進められたことから、次年度にはそれらの方法論を用いてハイブリッドソフトマテリアルの分子吸着性と力学特性の探索へと展開予定である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. Ishii, S. Kiko, N. Ohtori, Analysis of the Transport Properties of Alkaline-earth Halides MX_2 (M = Ca, Sr, Ba, and X = F, Cl, Br) by Simulation with a Polarizable Ion Model, *Electrochemistry*, **92**, 043024-pp.1-7 (2024).