

導電性新素材の開発及び結晶構造予測

研究の概要

< 導電性新素材の開発 >：有機物や無機物、あるいは樹脂等を組合せ、導電性を持つ新規結晶や従来には無い特性を持つ新たな素材を開発することを目指しています。本研究で作製を目指す素材は、その特性を生かして、電子デバイスの構成材料（動作物質、電極、配線材料）としたり、帯電防止膜や電池等に産業的に応用できる可能性があると思います。

< 結晶構造予測 >：任意の原子や分子について、その結晶構造を非経験的に予測する手法の開発に取り組んでいます。現在その核心部分に用いているのは、2004年に大野、前田により開発された超球面探索法、及び2010年に大野、長田、前田により発表された一般化超球面探索法で、RNM(Rapid Nuclear Motion)法の導入や充填率の利用による探索の高速化などを試みています。また、超球面探索法をタンパク質フォールディングの問題に適用することを目指した研究も開始しています。

研究の特徴

研究室ではこれまで主に、< 導電性新素材の開発 >においては、有機物を用いた電荷移動錯体を作成し、その構造と物性を研究してきました。その中では、「高導電性」・「有機」・「柔軟」・「単結晶」という条件を全て満たす珍しい物質も開発してきています。（図参照）

また< 結晶構造予測 >においては、炭素や窒化ホウ素(BN)結晶についての結晶構造予測を試みてきている他、ベンゼン分子の異性体探索やBCNOS分子のポテンシャルマップの研究も行ってきました。広い分野の相互関係に関心を持って研究を進めています。

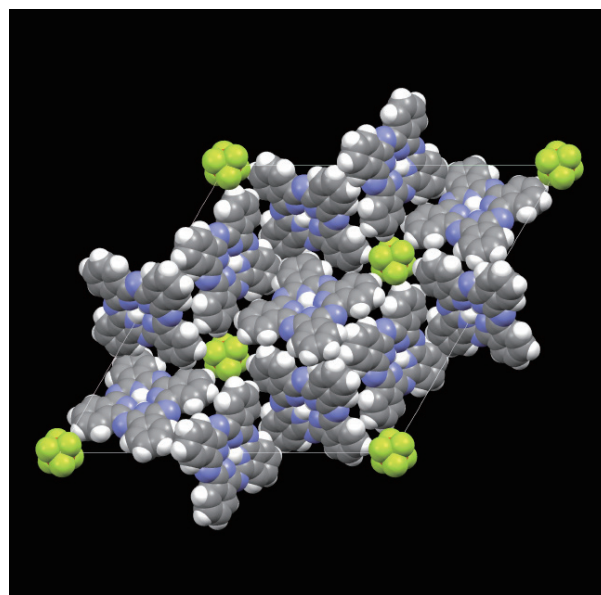


図. これまでに開発された、「高導電性」・「有機」・「柔軟」・「単結晶」という条件を全て満たす物質の結晶構造

実用化が想定される分野

デバイス開発（動作物質・電極等）、印刷・塗装（導電性塗料）、電池（電極等）、製薬（結晶構造予測、タンパク質フォールディング）

研究者からのメッセージ

近年普及が進みつつあるGRRM(<https://iqce.jp/GRRM/>)を用いた反応経路や遷移構造、異性体の探索についての相談を、量子化学探索研究所(IQCE <https://iqce.jp/>)にお取次ぎすることも可能かと思えます。

研究分野：材料科学、物理化学

研究者の所属部局・職位・氏名：和歌山大学システム工学部 応用理工学領域・教授・山門英雄

本件に関するお問い合わせ：liaison@ml.wakayama-u.ac.jp