

# 導電性新素材の開発及び結晶構造予測

和歌山大学システム工学部 山門 英雄

(E-mail: yamakado@wakayama-u.ac.jp)



## 研究の概要

### 1. 導電性新素材の開発：

有機物や無機物、あるいは樹脂などを組み合わせ、導電性を示す新規電荷移動錯体や従来には無い特性を持つ新たな素材を開発する研究を行っています。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、帯電防止膜等として産業的に応用できる可能性があると思います。現在研究室では、新規結晶の作成とその結晶構造解析、及び電気伝導度の測定を中心に行っていますが、その先の究極の目標としては、常温付近で超伝導性を示す物質を作製したいと考えています。

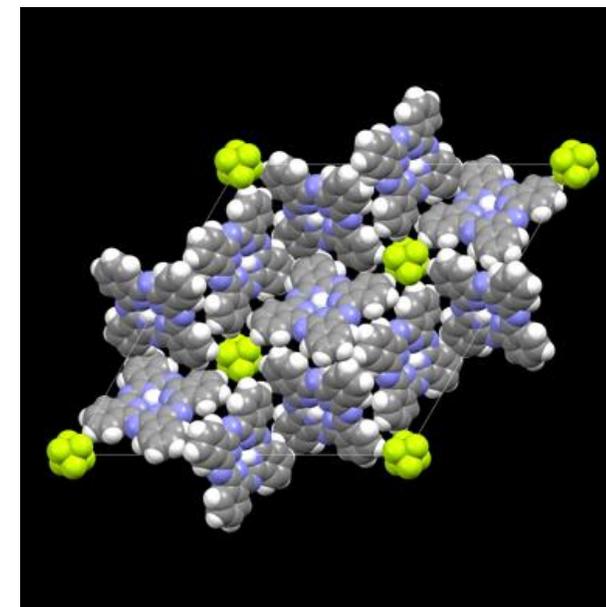


図. これまでに研究室で開発された、「高導電性」・「有機」・「柔軟」・「単結晶」という条件を全て満たす物質の結晶構造

## 2. 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、これに併せて探索する変数の数を大幅に削減するためにRNM (Rapid Nuclear Motion) 法を導入する、また原子や分子中の原子を剛体球的に扱い（なお結合長は制限するが例えば結合角には制限を入れないことにより、分子に柔軟性を持たせた探索も可能）結晶中における充填率相当の関数を極大化することにより結晶構造（の初期構造候補）を高速で探索する試みなどを行っている。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。

なお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、現在私は特定非営利活動法人量子化学探索研究所 (IQCE) の理事をしておりますので、企業からの相談をお取次ぎさせて頂くことも可能かと思えます。（勿論、私を通さずIQCE (<https://iqce.jp/>) に直接連絡を取って頂いてもかまいません。）

### 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)、電力貯蔵・輸送(超電導)、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

広い分野の事柄に関心を持っています。

研究分野： 物理化学、材料科学

研究者の所属部局・職位： 和歌山大学システム工学部材料工学メジャー/和歌山大学大学院システム工学研究科・准教授