

分子の設計請け負います

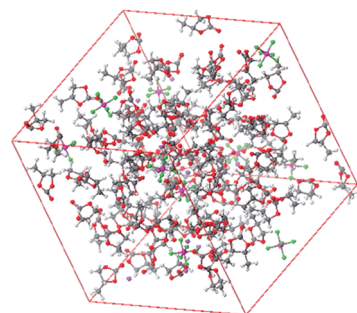
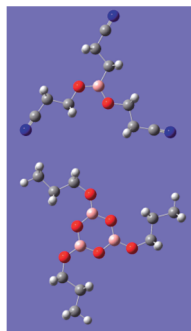
—「勘と経験」に「理論計算」も加えた材料設計へ—

Keyword： 分子設計、リチウムイオン電池添加剤、量子化学計算、分子動力学法

研究の概要

分子設計、特にリチウムイオン電池の電解質、リチウム塩、電解質添加剤、レドックスシャトル分子、負正極活物質、液晶分子、有機EL分子等々、特に有機分子の理論計算を請け負います。合成する前に理論計算を行なうことで、目的生成物の物性(酸化電位、還元電位、色、溶解度、分子の体積、各種スペクトル)を予測する事が可能です。つちかってきた勘と経験に加えて、理論計算の助けを借りて材料を設計する事で、無駄な合成を避けることができ、材料合成の著しい効率化をはかる事が可能になります。

下の図の左に示した分子構造を有する材料は、われわれの研究室で開発した分子です。左上の分子は高い酸化分解電位を持つ電解質として働きます。電解質の酸化分解電位が高いとリチウムイオン電池のサイズを小さく、重さを軽くする事ができます。左下の分子は、ごく少量リチウムイオン電池に添加するだけで、リチウムイオン電池の寿命が長くなる事が判明しています。右の図に分子の集団を扱う計算の結果を示しています。リチウムイオン電池の電解液などの溶液や電極などの結晶構造を扱うことができ、リチウムイオンの溶液中や固体中での動きやすさや、電極の標準電極電位などを見積もることができます。



未知の分子の化学構造をコンピュータ上に描画して、理論計算を行なう事で種々の物性が予測できますが、描画(入力)にも「経験と勘が」必要になってきます。

・特筆すべき研究ポイント:

近年の計算プログラムの開発、グラフィック・ユーザー・インターフェース(GUI)の開発、ハードの性能向上と価格低下により、理論計算が実用レベルに成りつつあり、かつ誰でも手が出せる様になりつつあります。われわれは長年の理論計算の実績を有し、さらに有機合成を中心とした分子の合成も行なう事から、理論計算が本当の分子の物性を反映しているかどうかを身をもって体験してきています。われわれの答えは、「理論計算はつかえる!」です。

・新規研究要素:

さすがに世界初あるいは日本初などはありませんが...

・従来技術との差別化要素・優位性:

「理論屋さん」と「合成屋さん」の融合は少しだけ先駆的だと思います。

・特許等出願状況:

・リチウムイオン電池に関する特許 10件

・特願2009-223373号、特願2011-533083号、特願2011-071248、特願2013-507682号など

アピールポイント

■ 技術相談に応じられる関連分野

- ・リチウムイオン二次電池に関して全般
- ・材料、とくに電池材料の設計、合成、評価
- ・上記材料設計のための各種理論計算法(分子軌道計算、密度汎関数法、分子動力学計算)
- ・有機合成化学
- ・各種分光法(NMR, IR, UV-Vis, 発光分析、円二色性分光、質量分析)

■ その他の研究紹介

- ・理論円二色性スペクトルと実測円二色性スペクトルによる光学活性分子の絶対配置決定(D= or L-)に関する研究
- ・超分子化学, 分子認識化学, 分子間相互作用に関する研究



田中 康隆

学術院工学領域
電子物質科学系列
准教授