



計算科学的手法による低次元ナノ材料系の反応ダイナミクスの解明

自然科学系・化学領域

太田 靖人

准教授 OHTA Yasuhito

博士(理学)(金沢大学)

■研究キーワード 分子動力学 量子化学 グラフェン

■主な所属学会

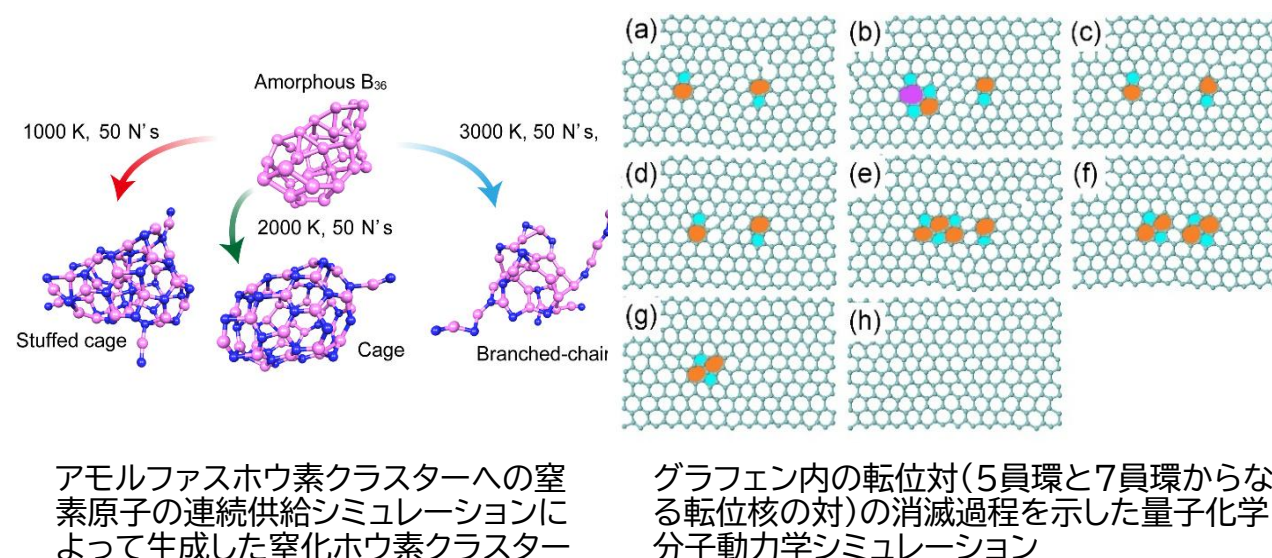
■研究者総覧 <https://koto10.nara-wu.ac.jp/profile/ja.5953956cb3e82f94520e17560c007669.html>



研究者総覧

研究概要

私たちの研究室ではカーボンナノチューブやフラーレン、グラフェンといった低次元ナノ材料系を主な研究対象としています。これらのナノ材料系自体の自発的な構造変化や、化学修飾に用いられる分子との反応ダイナミクスをコンピュータシミュレーションを通じて解明することを目指しています。シミュレーションでは、量子化学計算と分子動力学法を結合させた量子化学分子動力学法を計算手法の基軸とし、原子レベルで反応ダイナミクスの実時間追跡を行います。最近の研究としては、窒素とホウ素が交互に結合してできたかご状分子である窒化ホウ素フラーレンの生成機構に関する研究やグラフェン内に存在する転位の消滅機構の解析を、新しい理論計算の開発とともに精力的に行っています。



研究のプロセス・研究事例

1. ホウ素クラスターからのBNフラーレン生成過程の解明

これまで全く未解明であったアークプラズマ溶融によるホウ化イットリウムからの窒化ホウ素(BN)フラーレン生成における原子ダイナミクスの解明を目的として、ホウ素クラスターからの窒化ホウ素(BN)フラーレン生成の非平衡分子動力学シミュレーションを行った。高温環境下(2000K)でアモルファス状のホウ素クラスター(B36)に窒素原子を連続的に供給すると、驚くべきことにホウ素と窒素が交互に配列したかご状構造のBNフラーレンが自発的に生成することを量子分子動力学シミュレーションで初めて示した。この研究は海外の研究グループで再現・応用され、窒化ホウ素ナノチューブの生成シミュレーションにも展開された。

2. グラフェン内の転位の消滅ダイナミクスにおける面外歪みの効果

グラフェン内の転位の移動機構の一つとして、「すべり移動」が知られている。この運動は局所的な結合回転を通じて、転位が移動するものであるが、複数の転位が含まれる場合、転位間に複雑な相互作用が働くため、構造発展ダイナミクスについては不明な点が多く残されている。本研究では転位のすべり移動を解析するためのグラフェンモデルを構築し、密度汎関数強結合法に基づいたサブナノ秒の量子分子動力学シミュレーションを遂行した。その結果、転位と転位で挟まれた領域は結合交替の様相を呈する特異な結合状態を有し、これに起因して特定のC-C結合の回転障壁が比較的低くなり、すべり移動が起こりやすくなるだけでなく、新たな転位対の生成が促進されることがわかった。また量子力学的結合解析によって転位の時間発展とグラフェンの面外歪みが密接に関連していることを明らかにした。この研究は、グラフェンの欠陥ダイナミクスの解明と応用的展開に向けた基盤づくりのための重要な足がかりとなっている。