

分子シミュレーション法による ナノスケール現象の研究

(財)豊田理化学研究所
フェロー 樋渡 保秋

目的

ナノメータ・スケールで生じる諸現象について分子シミュレーションの方法により解明する。

- (1) メッキの分子シミュレーション
- (2) ガラス転移や相転移現象

方法

分子シミュレーション (Molecular Dynamics, Monte Carlo) とは

- (1) 古典力学や量子力学などを用いて物質の諸現象を探るための方法論
- (2) 原子・分子集団系の安定構造など物質の特性を分子レベルで解明する。従って、原子・分子などミクロな性質からナノ・マクロ物質の物性の予測などが可能。

分子シミュレーションをナノメータ・スケール現象に適用するメリット

- (1) 実験が困難な現象にも適用可能
- (2) 分子レベルの解明が可能
- (3) 多角的な解析・情報の取得
(ダイナミカルな物理量も) が可能

期待する結果

- メッキの分子シミュレーションから得られるもの
 - (1) メッキ表面および内部構造の制御
 - 静的および動的構造 -
 - (2) 添加剤の効用
 - 抑制剤、促進剤、平滑剤 -
- ガラス転移や相転移現象の分子動力学シミュレーションから得られるもの
 - (1) 静的・動的構造などに関する多元的・多角的な情報の取得
 - (2) 転移温度など基礎物性値の予測・制御
 - (3) 転移に関わる普遍性の解明

