

公益財団法人 立松財団 御中

様式 2021A1,A2,B

2025 年 3 月 24 日

所属: 岐阜大学工学部
化学・生命工学科

氏名: 宇田川 太郎



2024 年度 助成

研究 経過 ・ 終了 報告書

※ゴシック文字で記入下さい。

研究テーマ	重水素の理解を深めるための量子化学計算手法の拡張
研究の結果	本研究では、これまで申請者の研究室で開発してきた水素原子核の量子力学的な性質(量子ゆらぎ)を含めた理論計算手法(PIMD 法)を、分子性結晶にも対応できるようにプログラムを拡張した。これにより、これまでは基礎的な性質すら本質的な理解が追いついていない重水素(D)の役割についての理解を深めることを本研究の目的とした。この 1 年間で以下の研究項目を遂行し、目的の達成に大きく貢献できる成果を得た。 研究項目 1. PIMD-VASP プログラムの開発およびテスト計算 申請者の研究室で開発している PIMD プログラムと量子化学計算プログラムである VASP を組み合わせた PIMD-VASP プログラムを実装した。そのテスト計算として、ポリエチレン($(\text{CH}_2)_n$)と重水素化ポリエチレン($(\text{CD}_2)_n$)の構造を解析し、重水素化による構造変化が物性値に影響を与える可能性を示した。 研究項目 2. 分子性結晶に対する PIMD シミュレーションの実施 開発したプログラムを用いて、分子性結晶である LiOH(D)の PIMD-VASP シミュレーションを実施した。LiOH 結晶のような水素結合型の分子性結晶は、圧力の変化によって強誘電性から反強誘電性へと相転移することが知られている。また、水素結合ネットワーク中の H を D に置換するだけで、相転移に至る圧力が大きく変化することも報告されている。しかし、LiOH 結晶は、どの程度の圧力で相転移が発生するのかについて、実験的な研究がまだ行われておらず未解明のままであった。それに伴って、重水素化の影響に対するデータも不足していた。そこで、本研究では高圧下におけるシミュレーションを通じて、LiOH(D)結晶の相転移に関する新たな知見を得ることに成功した。 研究項目 3. 水素結合構造に着目した解析 本研究では特に、水素結合ネットワーク中の H/D 原子の位置や状態に注目した解析を行い、相転移に対する D 原子の役割について解明に取り組んだ。図 1 に LiOH と LiOD の約 500 GPa における原子座標プロットを示す。図 1 から、H 原子は水素結合ネットワークの中心付近に分布しているのに対して、D 原子は H 原子ほど明確に中心に分布していないことが確認された。この結果から、H/D 原子の振る舞いの違いが水素結合ネットワークの構造に影響を与えていることが明らかになった。今後は、水素結合ネットワークの構造変化に伴う物性値の変化についても解析を進める予定である。 本研究により、量子ゆらぎを考慮できる計算手法が分子性結晶系にも適用可能になった。これにより、これまで未知であった化学分野における重水素の役割についても本質的な理解が大きく加速すると期待される。 本研究の成果をもとに、国際論文への投稿の準備を進めている(現在英文校閲が終了し、投稿直前段階である)。また、学会発表も予定している。
研究発表 (実績)	

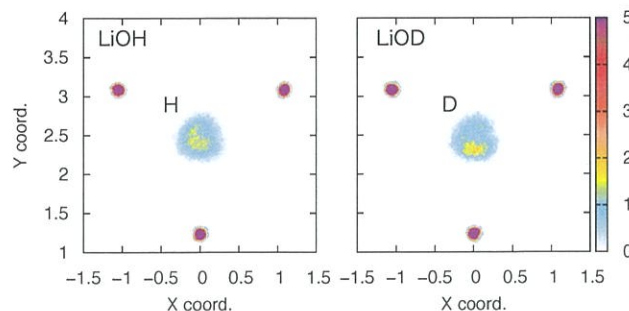


図1. 500Gpa における水素結合ネットワーク中の LiOH(D)の原子座標プロット図。

提出期限：研究期間終了後、すみやかに助成金の「必要経費使途明細書」「領収書」と合わせて提出下さい。
年度をまたぐ場合は毎年3月末日までに、途中経過をご記入の上、報告願います。