

(20) 長鎖分子物質を用いた分子エレクトロニクス素子に関する基礎研究

研究代表者 理学部 山本 隆

研究目的

近年、大きな有機分子を集合させ様々な機能（電子物性、界面物性、など）を実現しようという試みに強い関心が持たれている。究極的には高度な生体類似機能の実現をも目指した21世紀科学の大きな知的挑戦である。高度な機能を発現するには、分子構造の設計と同時に、分子集合様式の設計と制御が必要である。しかし、複雑な分子構造を有する大きな分子の構造形成のメカニズムの解明は現在でも極めて難しい問題である。我々は、長鎖状の分子や巨大分子の構造形成機構（単分子膜形成、高次構造形成、など）の解明と構造制御を目指して、実験的研究やコンピュータ・シミュレーションを用いた研究を行っている。

研究成果

1. 結晶内長距離拡散の直接観察（論文1）

大きな有機分子が結晶などの秩序相においても活発に運動し興味深い動的挙動を示すことは様々な実験事実から良く知られている。局所的な分子運動に対しては様々な検出手段（NMR, IR, 等など）が開発されているが、長距離の分子拡散に対してはトレーサーを用いた方法以外あまり存在せず、特に直接的なその場観察は難しい。我々は最近、*n*-アルカンの相転移現象を利用して結晶内長距離拡散を直接的に観察する手法を見出した。この手法を用いて、結晶内での拡散係数の決定、特異な異方的拡散の存在、結晶内欠陥によると思われる拡散の制御現象、などを見出した。

2. 融液表面での自発的膜形成（論文2）

単分子膜（L膜）や多分子膜（LB膜）、更に生体二分子膜など、長鎖状有機分子の膜形成は良く知られている。これらは、両親媒性分子が異なる物質との界面で形成する膜である。最近、*n*-アルカン（両親媒性でない）や*n*-アルコールが、自分自身の融液表面で単分子膜を形成すること（Surface Freezing現象）が発見され、膜形成機構の解明に新たな視点を与えるものとして大きな関心を集めている。基本的なシナリオとして、分子鎖端効果による理論と分子運動特性による膜安定の理論が提出されている。

またSurface Freezingの分子鎖長依存性や分子末端効果などが実験的に調べられている。最近我々は、Surface Freezing現象がコンピュータ・シミュレーションを用いて再現できることを明らかにした。更に現在、分子特性（剛直性、鎖端構造、鎖長）を変えて、出現する融液表面構造を系統的に調べている。

3. 長鎖分子結晶の構造変化（論文3、4）

単分子膜や結晶など、長鎖分子凝集系における典型的な動的構造は、結晶内において極めて明瞭に観測することが出来る。結晶では高精度の構造解析が可能であり、その解明は他の系での分子運動の理解にも必須である。我々は、*n*-アルカン結晶において観測される典型的な構造変化（回転相転移）をX線回折、光学観察、熱分析などを用いて研究している。最近我々は、計算機実験や光学観察などを用いて、回転相の構造、相転移の機構、相転移の速度論、などを明らかにした。

4. 巨大分子の折れ畳結晶化 (論文5)

タンパクや合成高分子などの巨大分子は、極めて複雑な構造形成過程を示す。しかし、その素過程を実験的に明らかにすることには原理的な難問が存在する。最近我々は、分子動力学シミュレーションがこれら巨大分子の構造形成の解明に大きな可能性を秘めていることを明らかにした。

産業技術への貢献の可能性

1. 拡散制御による有機分子アロイの開発。微視的 (ナノスケール) クラスターの埋め込み。
2. 新たな薄膜形成機構の開発と探索。
材料の表面構造の制御。
3. 薄膜物性の解明。
薄膜機能の温度による制御。
4. 巨大分子の高次構造の制御。
新規高分子の開発。

研究発表

学会誌等

- 1) T.Yamamoto, H.Aoki, S.Miyaji, and K.Nozaki, In situ Optical Observation of the Chain Diffusion in an n-Alkane Crystal : Temperature Dependence of the Chain Diffusivity, Polymer 38, 2643-2647 (1997)
- 2) M.Kawamata and T.Yamamoto, Molecular Dynamics Simulation of Surface Ordering in Liquid n-Alkanes, J. Phys. Soc. Japan 66, 2350-2354 (1997)
- 3) K.Nozaki, T.Yamamoto, and M.Hikosaka, Energy Consideration of Molecular Layer Stacking in n-Alakne Crystal, J. Phys. Soc. Japan 66, 3333-3336 (1997)
- 4) K.Nozaki, M.Hikosaka, Kinetic Study on the Rotator Phase Transition in n-Alkane :

Growth of the Rotator Phase, Jpn. J. Appl. Phys. (will appear)

- 5) T.Yamamoto, Molecular Dynamics Simulation of Polymer Crystallization through Chain Folding, J. Chem. Phys. 107, 2653-2663 (1997)

口頭発表

- 1) T.Yamamoto, Molecular Dynamics Simulation of Polymer Ordering ; Chain Folded Crystallization and Crystal Thickening, 213th ACS National Meeting, April (1997) San Francisco.
- 2) 川俣 真、山本 隆、n-アルカン融液表面の分子動力学シミュレーション : Surface Freezing、高分子学会第46回年次大会、5月 (1997) 東京
- 3) 山本 隆、高分子鎖の折れ畳結晶化のモレキュラーダイナミクス、高分子学会第46回年次大会、5月 (1997) 東京
- 4) 野崎浩二、山本 隆、彦坂正道、n-アルカン結晶の回転相転移のカイネティクス、高分子学会第46回年次大会、5月 (1997) 東京

グループメンバー

氏名	所属	職 (学年)
山本 隆	理・自然情報	教授
原	理・自然情報	教授
野崎 浩二	理・自然情報	助手

連絡先

TEL : 0839-33-5693 FAX : 0839-33-5768
E-mail : yamamoto@yamamoto.phy.sci.
yamaguchi-u.ac.jp