

MERIT インターンシップ（国内）報告書

理学系研究科物理学専攻
MERIT 9 期生
天野智仁

1 インターンシップ概要

期間

2022/3/1-2022/3/31

受け入れ先

JSR 株式会社 JSR・東京大学協創拠点 CURIE

2 実習概要

本インターンシップは東大本郷キャンパス内にある JSR CURIE オフィスにて対面とオンラインを交えて実施した。インターンシップ期間中は毎日 1 時間程度の報告を行い、計算の進捗や今後やるべきことについて議論を行った。インターンシップは毎日 8 時間程度行った。インターン期間中には四日市工場の方々へオンラインで中間報告会を行いフィードバックを受けた。CURIE と四日市工場に対して最終報告会を行った。また、期間中には JSR の Bioscience and informatics R&D center (BiRD) の見学と統計数理研究所の吉田教授のセミナーを聴く機会をいただいた。

3 研究内容

3.1 背景

高速大容量通信を実現する 5G・6G 通信では典型的に 1THz またはそれ以上の電気信号を扱う。したがって 5G・6G 通信で使用するデバイスには高周波シグナルの減衰を防ぐために誘電損失の小さい材料を用いる必要がある。そのために材料分子の設計としては極性基の導入を避ける、導入する場合はお互いに打ち消すように分子内で逆方向に配置するなどの配慮が求められる。全ての候補分子を実験で測定するためには資料の作成などに時間がかかるため、計算機シミュレーションによる誘電損失の正確な予測が可能になれば材料開発の高速化に寄与すると考えられる。そこで本インターンでは基本的な有機分子の誘電損失のシミュレーションに取り組んだ。

3.2 方法・結果

THz 領域のスペクトルは、時間に換算するとピコ秒からサブピコ秒程度のダイナミクスの情報を含んでいる。このうち Libration と呼ばれる運動は、液体中の分子が周囲の分子に動きを制約されて重心をほとんど動かさずに揺れるものである。Libration 運動による誘電損失は多くの液体で観測することができ、例えば水では 500cm^{-1} 程度に Libration 由来のピークを持つ。ベンゼンは永久双極子を持たないため誘電損失が小さいことが期待されるが、実際には Libration 由来の誘電損失を持つことが知られている。そこで分子動力学計算によってベンゼンの誘電損失の計算を行った。分子動力学計算と実験値の一致が良好であることを確認した上で、さらにこの手法を永久双極子を持つ系にも拡張した。四日市工場の方々の意見も伺いながら複数の分子に対して誘電損失のシミュレーションを実施した。

4 所感

今回のインターンシップでは有機分子の誘電損失の計算に取り組みました。物理系の私にとってはあまり馴染みのない分野だったためにインターンシップ開始直後は躓くことも何度もありましたが、担当者の方々の親切なご指導によって課題には一通り取り組むことができ、量子化学についてさまざまな知見を得ることができました。インターンシップ中は複数回四日市工場の方々とディスカッションする機会をいただいて開発を行っている方々の貴重な意見を頂くことができ充実したインターンシップになったと考えています。また、感染対策に配慮した上で新しい研究所である BiRD の見学を実施していただき実際に企業での研究開発の現場を体感する良い機会になりました。

5 謝辞

本インターンシップを実施する機会をくださった JSR 株式会社みなさまに感謝申し上げます。特に本インターンシップの実施にご協力いただいた JSR CURIE 室長 Itti Rittaporn 様、インターン期間中直接ご指導していただいた JSR CURIE 山崎民雄様、他 CURIE メンバーのみなさまには大変お世話になり、深く御礼申し上げます。四日市工場の方々には研究結果について丁寧に議論いただき感謝申し上げます。また、本インターンシップを実施することを快諾してくださった指導教員の常行真司教授、本インターンシップの実施を承認してくださった副指導教員の有田亮太郎教授に感謝いたします。最後に、このような素晴らしい機会をご提供くださった MERIT プログラムに感謝申し上げます。