

# コンピュータの利用研究会

## 1. 研究会の目的

コンピュータは現在あらゆる分野において利用され、我々の生活にも深く関わりを持つようになってきた。触媒研究においても例外ではなく、基礎研究から生産現場に至るまで不可欠な道具となってきている。このような情勢を背景に発足した本研究会は今年度で第9期の2年目(通算26年目)を迎えた。この間に触媒におけるコンピュータの利用は益々活発化し、計算化学による新しい触媒の設計などの飛躍的進歩が見られるとともに、新たなコンピュータの利用方法も増えてきた。例えば、密度汎関数法、post Hartree-Fock 法、第一原理分子動力学法、分子動力学法、モンテカルロ法、粗視化手法、ニューラルネットワーク、インフォマティクスなどの多様な手法が活用されている。特に最近では、電子レベルから  $\mu\text{m}$ スケールまでのマルチスケールでの触媒解析が重要となってきている。第9期では、前期に引き続き、実験との融合・実際のものづくりへの発展を意識しつつ、様々な学びの場やツールを提供するとともに、大学・研究機関など基礎・応用研究の現場と企業など技術開発の現場との連携・交流に繋がるイベントも企画していきたい。

## 2. 研究会活動の概略、動向、展望 (敬称略)

平成27年度の主な活動は下記の通りである。第116回触媒討論会「コンピュータ利用」セッションに参加し、依頼講演として2件、杉本 学先生(熊本大)「水素化物を資源化する触媒反応に関する第一原理シミュレーション」と山中正浩先生(立教大)「有機分子触媒反応における立体制御機構に関する理論的研究」にお願いさせて頂き、それに加え一般講演19件というセッション内容で活発な議論が行われた。また、平成27年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナー～マイクロからマクロへの橋渡し～を、平成27年11月27日(金)に三菱重工横浜ビルにて開催した。下川智嗣先生(金沢大)による「ナノ組織金属材料の力学特性に対する粒界の役割：原子シミュレーションによる検討」、米谷 慎先生(産総研)による「金属-配位子結合による自己組織化のシミュレーション」、そして森口晃治先生(新日鐵住金)による「ワイドギャップ半導体における不等価積層多形の静的エネルギー論」という招待講演3件による講演会を行った。参加者約20名で活発な議論が行われた。また、平成27年9月13日～15日に、日光で開催された Tribochemistry Nikko 2015 に共催した。

## 3. 世話人代表

亘 紀子

〒230-0045 神奈川県横浜市金沢区幸浦1-8-1 三菱重工業 総合研究所

TEL: 045-775-2437(内線9149) FAX: 045-771-3879 E-mail: noriko\_watari@mhi.co.jp

事務局 久保百司

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学金属材料研究所

TEL: 022-215-2050 FAX: 022-215-2051 E-mail: momoji@imr.tohoku.ac.jp

## 4. トピックス ～学際化～

触媒のシミュレーションに用いられるソフトには、基本的には原子レベルの計算を行う量子化学計算・分子動力学計算・第一原理分子動力学計算・粗視化シミュレーション、データベースに基づく詳細化学反応解析や平衡計算等、様々な種類がある。シミュレーションの方法だけでなく、その前処理であるモデリングも複雑化し、モデルを作成すること自体が重要な研究テーマになっている。後処理もまた同様で、特に分子動力学計算のように大量の自由度を扱う計算では、大量の情報からいかに意味のある情報を抜き出すかが研究のポイントになる。これは昨今IT業界で注目を浴びているビッグデータ処理と同じ本質をもつものである。ケモインフォマティクスで明示的な研究テーマであるデータ処理は、分子動力学法のポスト処理でもバックグラウンドのテーマであると言える。プリポスト処理には、化学だけではなく、統計学や位相幾何学といった数学の適用が顕著である。真ん中のシミュレーション本体についても、物理学や冶金学などの硬い材料を扱うもの、高分子や製薬などソフトマターを扱うものとの境界線が年を追う毎にぼけるといふ発展の方向性が明らかになっている。

触媒討論会では、杉本 学先生に Ru 担持 MgO 触媒によるアンモニアからの水素発生過程とグラファイト型窒化炭素触媒を用いた光照射による水からの水素発生過程の解析をご紹介いただいた。光励起して初めて活性が顕れる触媒反応過程の精密なモデリングの好例である。山中正浩先生には  $\alpha$ -アミノホスホン酸エステルの不斉合成触媒である BINOL-リン酸触媒の立体制御機構に関する理論研究をご紹介いただいた。 $\alpha$ -アミノホスホン酸エステルは、生体活性化化合物原料として製薬的に重要であり、生体活性物質としての要請から構造異性体制御が欠かせない。遷移状態計算により触媒の設計指針が明らかにされた。

研究会主催セミナーでは、下川智嗣先生に金属材料の力学特性に対する原子単位の動力学シミュレーションからの検討をご紹介いただいた。金属粒界の強度特性に及ぼす影響など従来は定性的議論にとどまっていた事柄が、精緻なモデリングと結果の卓越した可視化方法によって、理論的定量的に議論できるようになってきている。米谷 慎先生には、Metal Organic Framework; MOF という近年研究頻度の高い触媒活性のある自己組織化構造の、自己組織化過程について分子動力学シミュレーションで検討した例をご紹介いただいた。自己組織化の過程は実物質による実験の時間として1時間程度を要する。原子レベルのシミュレーションに必要な時間刻み fs( $10^{-15}$ s) で計ると 100 京(京は 10 の 16 乗)ステップオーダーが必要であるため、普通にモデリングしては模擬することはほぼ不可能である。それを溶媒との相互作用の省略・原子間ポテンシャルと熱浴の工夫による原子間結合組み換え頻度を増大するモデリングにより、その過程が明らかにされた。森口晃治先生には、パワーデバイスの半導体基板として重要な SiC のポリタイプの 620 万種にも及ぶ多形結晶についてエネルギー計算を行った例についてご紹介いただいた。ポリタイプとは、化学組成は同じで積層順序が異なることにより積層方向にのみ異なった原子配列を示す構造のことである。ダイヤモンド, BN, Si, GaN, InN, AlN 等、同様な半導体の中でなぜ SiC のみが多くの積層多形を持つのかについて、解析が行われた。数学的なモデリングと、第一原理計算と Ising モデルの併用によるエネルギー見積りの適用により、数百万種にも及ぶ物質の計算が可能になっている。

本研究会は、次年度も引き続き分野にとらわれない学際的シミュレーションやシミュレーションの新しい適用方法の紹介を行って行きたい。