

# 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た。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。密度汎関数法 (DFT)、post Hartree-Fock 法、分子動力学法 (MD)、モンテカルロ法、第一原理分子動力学法、Tight-Binding 量子分子動力学法はもとより、粗視化手法、ニューラルネットワークなど多様な手法が活用されている。さらに急速な進歩を遂げている機械学習やディープラーニングなどの情報科学と計算化学の融合によるマテリアルズ・インフォマティクス、つまり触媒材料のハイスループットスクリーニングに大きな期待が高まっている。このような背景のもと、当研究会では、コンピュータを利用した触媒研究の発展を目指して、原子レベルの電子状態計算による触媒反応機構の検討から、メソ・マクロスケールの触媒層の物理化学的描像の解明、原子レベルの現象がマクロスケールの触媒機能や触媒劣化に影響を与えるマルチスケールシミュレーションへの展開に関して、国内外における講演会の開催などを通して議論を行うとともに、実験系の講演会との共催による計算化学と実験の融合および実際のものづくりへの発展を推進することを目的とする。

## 2. 研究会活動の概略、動向、展望

今年度で第 10 期の 3 年目 (通算 30 年目) を迎えた。令和元年度の主な活動は下記の通りである。第 124 回触媒討論会「コンピュータ利用」セッションに参加し、特別講演として田中秀樹先生 (信州大) に「計算科学的手法を援用した多孔性固体のモデル化と吸着特性評価」、依頼講演として蒲池高志先生 (福岡工業大) に「メタン活性化を目指した触媒インフォマティクスの展開」をお願いし、それに加え一般講演 10 件というセッション内容で活発な議論が行われた。また、令和元年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナーを、令和元年 12 月 20 日に三菱重工横浜ビルにて開催した。中山哲先生 (東京大) による「固体酸化物/液相界面における触媒反応解析」、高木成幸先生 (東北大) による「計算材料科学を用いた水素化物研究」、そして石村和也先生 (株式会社クロスアビリティ) による「大規模並列量子化学計算オープンソースソフトウェア SMASH の開発と応用計算」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。

第 11 期では、前期に引き続き、コンピュータ利用における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く。

## 3. 世話人代表

馬場 好孝

〒230-0045 神奈川県横浜市鶴見区末広町 1-7-7 東京ガス株式会社 基盤技術部

TEL: 045-500-8819 FAX: 045-505-8821 E-mail: baba@tokyo-gas.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

今年度ご依頼した先生方には、計算の精度向上や高速化に関する研究を中心にご講演いただきました。触媒研究において実験結果の再現およびリーズナブルな計算コストは必要不可欠であり、まさに計算化学が貢献すべきテーマであろう。

触媒討論会では、田中秀樹先生に計算科学的手法を援用した多孔性固体のモデル化と吸着特性評価についてお話いただいた。分子動力学法を用いたゼオライト鑄型炭素 (zeolite templated carbon : ZTC) の合成シミュレーションとグランドカノニカルモンテカルロ法によるメタン貯蔵能評価を行い、圧縮天然ガスと同等のメタン貯蔵量を有する BEA 鑄型の ZTC を見出された。またフレキシブル Metal-Organic Framework における CO<sub>2</sub> ゲート吸着挙動に関する研究では、CO<sub>2</sub> 包摂構造の決定と、包摂メカニズムについての自由エネルギー解析、CO<sub>2</sub> 吸着時の発熱の一部を、構造が広がることによる吸熱で相殺する自己熱補償能の評価についてご説明いただいた。蒲池高志先生には、メタン活性化を目指した触媒インフォマティクスの展開についてご講演いただいた。メタンを Ni(111)で開裂させると CH<sub>2</sub>\*や CH<sub>3</sub>\*で止まらず CH\*が再安定になり、メタノール等に直接変換することはできない。そこで、まず CH\*が安定な理由を明らかにされ、合金を用いて非対称な反応点を導入することによる CH\*の不安定化を提唱された。その結果、4種の有望な合金を発見され、現在実験で確認中である。

研究会主催セミナーでは、中山哲先生に固体酸化物/液相界面における触媒反応解析と題して、不均一系の界面について、酸化セリウムを例に研究成果をご紹介いただいた。酸化セリウム表面に酸塩基点があり、格子内酸素により酸化還元能も高い。水との界面には酸化セリウム表面でプロトンホッピングが起きるため研磨剤として有用なことや、水和反応においてジルコニアと違い水が乖離吸着し活性点が減少することなく高活性を維持できること、酸化セリウムの CO<sub>2</sub> 変換技術への応用についても自由エネルギー解析により示された。高木成幸先生には、計算材料科学を用いた水素化物研究についてご講演いただいた。これまで Mo, W, Nb, Ta は水素結合しないとされていたが、計算と高温高压合成による実験で検証した結果、高水素配位錯イオンを含む4種の新規物質を発見し、その一つが超電導物質であることを見出された。また全固体電池向けに固体電解質に水素化物を活用する研究についてもご紹介いただいた。石村和也先生には大規模並列量子化学計算オープンソースソフトウェア SMASH の開発と応用計算についてご紹介いただいた。分子サイズが大きくなると計算量、データ量、通信量が急増することから、スパコンに対応すべく、高速化と並列化を取り入れられた。現時点で HF, DFT (B3LYP), MP2 の計算が可能であり、数百原子のナノサイズ分子の計算が容易となった。今後は振動計算や遷移状態計算など機能を拡張するとともに、Windows 版 SMASH の配布等をしていく予定である。

本研究会では、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いききたい。