

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多岐にわた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、コンピュータは上流の基礎研究から下流の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に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ベイズ推定など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にも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、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向けて、情報科学的アプローチも積極的に取り入れ、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 11 期の 1 年目 (通算 31 年目) を迎えた。令和 2 年度はコロナウイルスによる我々の研究・生活スタイルが大きく変化した年となった。本年度の主な活動は下記の通りである。第 126 回触媒討論会は全てがオンラインでの開催となった。「コンピュータ利用」セッションを企画・開催し、特別講演として江原正博先生 (分子研) に「不均一系触媒の構造と機能に関する理論研究」、依頼講演として石川敦之先生 (物材機構) に「密度汎関数理論と微視的反応速度論を基礎とした触媒活性の理論的予測」をお願いし、それに加え一般講演 8 件というセッション内容で活発な議論が行われた。今回初となったオンライン開催にも関わらず、セッションでは最大 86 名の方にご参加頂けた。さらに、触媒学会の他の 3 研究会と合同で、特別企画「水素+天然ガス+燃料電池+コンピュータ」研究会横断若手シンポジウムを企画し、本研究会からは信州大学・X-Scientia の古山通久先生に「次世代エネルギー技術への計算化学の応用」というタイトルで講演をお願いした。

また、例年開催している令和 2 年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナーは、コロナウイルスの影響を避けるために中止とした。

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、近年発展が目覚ましい情報科学の技術を取り入れることで新しい分野を開拓していく。さらに、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

竹野 貴法

〒470-0111 愛知県日進市米野木町南山 500-1 ㈱デンソー 先端技術研究所マテリアル研究部
TEL: 0561-75-1073 E-mail: takanori.takeno.j5x@jp.denso.com

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、理論に基づく触媒反応予測の研究を中心にご講演頂いた。触媒研究において、原子スケールの現象をマクロな現象に応用するために、原子スケールの反応機構をしっかりと押さえるという、まさに計算化学が貢献すべきテーマであろう。

コンピュータ利用セッションでは、分子研・江原正博先生に合金クラスターの構造、微粒子触媒による NO 還元の新しい反応機構、高分散金属担持触媒についてご紹介頂いた。銅-金属(Cu-M)合金クラスターの構造と電子状態に関して検討したところ、偏析エネルギーはドーピングする金属 M の d 軌道占有数に相関することを見出している。また、微粒子触媒による NO 還元の新しい反応機構に関して、NO-CO 反応が NO 二量化経路で進行することを見出し、価電子バンドのバンドトップや d-バンド中心のフェルミ準位からの位置によって NO 解離が NO 二量化が進行することを明らかにした。さらに、高分散金属担持触媒の触媒活性では、Pd/γ-Al₂O₃ が CO 酸化に高い触媒活性を示すことを見出されている一方で貴金属である Pd を置き換えることが課題となっている。それに対して、種々の元素について DFT 計算を実施したところ、金属として新たに Ni が有効であることを明らかにしている。

同じくコンピュータ利用セッションでは、物材機構・石川敦之先生には、メタンの直接転換における課題である選択率の低下について、CH₄ 活性化の活性サイトの特定、及び、CH₄ の転化率や C₂ の選択率の計算結果をご紹介頂いた。活性化サイトの特定に関して、各種 MgO 表面での CH₄ の C-H 結合解離過程の自由エネルギー曲面を調べることで、Li-doped MgO, MgO(110), stepped MgO が CH₄ を活性化できることが分かった。さらに、ハイブリッド DFT 計算を実施し活性化エネルギーを計算することで、MgO(110)および stepped MgO が活性な表面として有力であることが分かった。これらに対して、微視的反應速度論を用いて触媒活性の予測を行ったところ、stepped MgO が活性サイトとして最も有力であることを示すことができた。以上により、第一原理計算と反應速度論の融合による活性サイトの決定は有効なアプローチであることが分かった。

特別企画の横断若手シンポジウムでは、信州大学・X-Scientia の古山通久先生に、エネルギーに貢献する計算化学の実践活用例の紹介および、今後の展望についてご講演頂いた。特に、実際に電子顕微鏡で観察されるナノ粒子の形状・大きさを考慮した第一原理計算の事例として、PtM(M=Co, Ni, Cu)からなる Pt スキン触媒、PdPt からなるコアシェル触媒の原子配置と安定性に関するもの、分子動力学法の事例としてモバイル機器用補助電源用のキャパシタにおける固液界面構造やその動特性を明らかにしたもの、有限要素シミュレーションの事例として固体酸化物型燃料電池の燃料極三相界面における電極反応の各種素反応に基づいて電流-電圧特性をシミュレーションしたものなど、多岐にわたる事例が紹介された。

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インフォマティクスを取り入れた事例の紹介などを行っていきたい。