

# 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 2 年目 (通算 29 年目) を迎えた。平成 30 年度の主な活動は下記の通りである。第 122 回触媒討論会「コンピュータ利用」セッションに参加し、特別講演として常田貴夫先生 (NIMS) に「反応軌道エネルギーダイアグラムによる軌道論解析の高度化」、招待講演として原祥太郎先生 (千葉工業大) に「SOFC 製造プロセスシミュレーションによる電極構造設計への取り組み」をお願いし、それに加え一般講演 7 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 30 年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナーを、平成 30 年 12 月 14 日に三菱重工横浜ビルにて開催した。森寛敏先生 (お茶の水女子大) による「電子状態・分子間相互作用評価のための精度と効率を兼備した有効ポテンシャル：モデル内殻ポテンシャルおよび有効フラグメントポテンシャル」、小松徳太郎先生 (日本大学) による「合金触媒の簡易スクリーニングと樹脂の劣化解析」、そして大脇創先生 (株式会社日産アーク) による「日産アークの計算科学技術の紹介」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 10 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いた。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、常田貴夫先生に反応軌道エネルギーダイアグラムによる軌道論解析の高度化についてお話いただいた。長距離補正密度汎関数法 (LC-DFT) により得られる定量的な分子軌道エネルギーに基づき、触媒反応を含むあらゆる化学反応の軌道論解析を可能にする反応解析理論とその反応ダイアグラムを開発された。Diels-Alder 反応を例に、フロンティア軌道ダイアグラムの誤りやマリケンのポピュレーション解析の限界も示された。励起状態への適用は今後の検討となる。原祥太郎先生には、固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の製造プロセスシミュレーションについてご講演いただいた。メソレベルで燃料極の電極構造をシミュレーションし、三相界面量やイオン導電率とそれぞれ関係する粒径と屈曲度について、FIB-SEM の結果をほぼ再現した。同様に空気極の設計も実施しており、セルの発電性能を予測することも可能である。さらに電極界面の考慮や粒成長等実運転条件を模擬することで、耐久性予測の確度が向上し Powder to Power シミュレーションが完成に近づくであろう。

研究会主催セミナーでは、森寛敏先生に電子状態・分子間相互作用評価のための精度と効率を兼備した有効ポテンシャルと題して、モデル内殻ポテンシャル法 (MCP) および有効フラグメントポテンシャル法 (EFP) に関する研究成果をご紹介いただいた。擬ポテンシャル法に、開発した MCP を導入することで、全電子計算の結果をより忠実に再現することができ、遷移金属や分子、さらには励起状態まで適用可能であることを示された。また予め力場フィットが不要で量子化学計算の結果を良好に再現する EFP を用いた MD は、第一原理 MD と遜色のない精度を担保し、計算時間を 200 倍以上高速化できる。適用例として、イオン液体を用いた CO<sub>2</sub> 吸収材についてご紹介いただいた。小松徳太郎先生には、合金触媒の簡易スクリーニングと樹脂の劣化解析についてご講演いただいた。特に前者では、ナノ合金の DOS エンジニアリングによる例として、直感的に Density of States (DOS) を予測できない Rh-Cu 合金の三元触媒としての活性の高さを、理論的にも実験的にも示された。大脇創先生には第一原理計算に基づく電気化学表面系の計算・解析技術および Li イオン電池への適用に関する研究成果をご紹介いただいた。実験と結びつける大規模 MD 計算や高スループット技術の重要性を示され、今後は材料の安定配置を効率的に探索するための機械学習の適用や、触媒設計への展開も考えられている。

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。