

産業革新のための実践的コンピュータ化学

—未来に向けた発展方向—

○宮本 明、畠山 望、鈴木 愛、三浦隆治

東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字
青葉 6-6-10)

1. 緒言

コンピュータの進歩とともに、永年実験的研究が主体であった化学・もの造りの分野でも、理論化学、情報技術を基礎とする新しい化学、コンピュータ化学が生まれてきている。それを、基礎の学術領域だけに止めることなく、産業革新のための新しい学問、強力な手法にまで育むことが重要である。

2. 方法

量子化学、分子動力学、量子分子動力学など原子・分子レベルの計算手法に加え、メソ・マクロレベルのシミュレータを開発することにより、製品レベルの予測、マルチスケールシミュレーションも可能となる。さらに、電気伝導、熱伝導、摩擦・機械強度、発光・吸光、化学反応、電気化学反応、光化学反応、プラズマ反応などマルチフィジックスシミュレーション手法を開発することにより、化学産業だけでなく、半導体、自動車、電機、機械、医療、原子力など多彩な産業分野への応用、産学連携の道が拓ける。

3. 結果

本講演では、触媒(図1)、トライボロジー(図2)、電池、半導体、エレクトロニクスなど具体的な応用を述べるとともに、産業の場にもどのように成果が生かされ、また産業の進歩をどのようにコンピュータ化学に取り入れることにより、コンピュータ化学システムの発展に繋がるのかを紹介する。

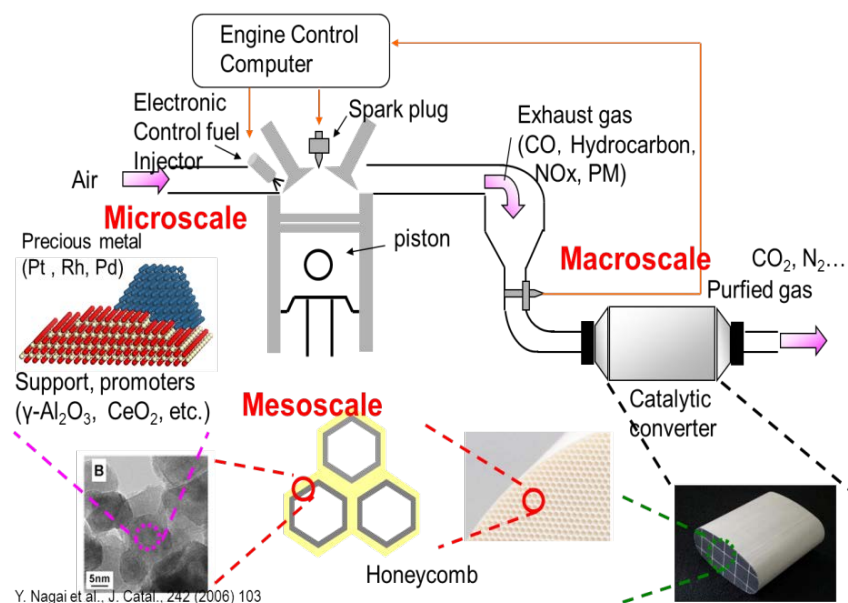


図1 自動車用触媒についてのマルチスケール・マルチフィジックス計算化学システム

4. 今後の展望

私自身は、約20数年の固体触媒に関する実験研究を経て、26年くらい前に、コンピュータ化学の世界に飛び込んだ。コンピュータ化学のもつ大きな可能性を感じ取ったからである。実際に多くの優れた共同研究者、スタッフに恵まれたこともあり、大きな発展を経験することが出来た。一時は、200名を超えるメンバーを擁したこともあった。管理運営・教育面での定年を迎えた後も、教授として、研究室をもち、今も多くのメンバーとともに、多様な活動を続けることが出来ているのもコンピュータ化学という分野に携わったお蔭と感謝している。

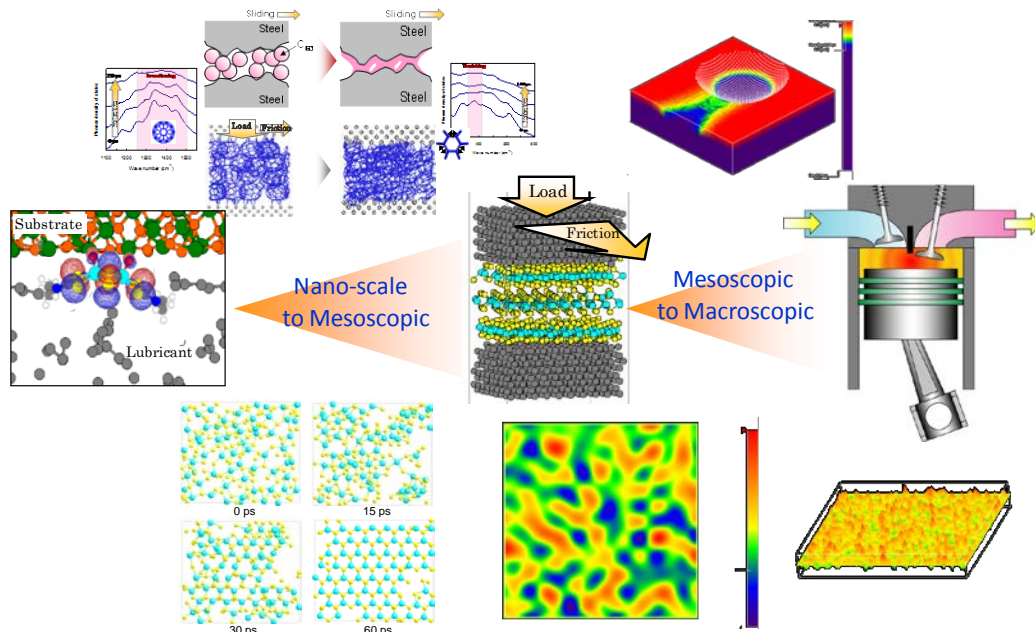


図2 自動車用トライボロジーについてのマルチスケール・マルチフィジックス計算化学システム

コンピュータ化学は、30-40年くらい前にドラッグデザインから出発し、現在では、触媒、高分子、セラミックス、バイオ素材など多様な分野への応用が進められている。基礎化学の分野では、密度汎関数法など量子化学計算手法の進歩により、計算化学の利用は既に実験結果の妥当性の検証のためにも不可欠なものとなっている。ただ、これからがもっと大きく発展するものと考えており、自分自身も出来るだけ貢献出来ればと考えている。それらをキーワードの形で紹介する。

- (1) 計算化学による予測精度の向上による、実験結果、仮設の検証
- (2) マルチスケール計算化学：原子、分子のマイクロ、粒子、組織のメソ、部材、製品のマクロをシームレスに計算する。多くのソフトを的確に繋ぐことにより実現する。
- (3) マルチフィジックス計算化学：電気伝導、熱伝導、プロトン伝導、拡散、化学反応、電気化学反応など多くの物理現象の的確な計算により実現。
- (4) ミクロ、メソ、マクロ物性予測：上記物理現象に関する物性値をマイクロ、メソ、マクロレベルで精度よく予測できるプログラムの開発により、計算化学に基づく定量的な予測手法となる。
- (5) コンビナトリアル計算化学：実験でも何千、何万、何千万という実験を一度に行うコンビナトリアル化学が進められているが、それを計算化学により実現する方法。高価な元素、危険な素材、超高温、超高压条件も計算化学では容易にスクリーニングできる。
- (6) 実験融合計算化学：X線回折、赤外分光など計測シミュレーションを通して、実験材料そのものをモデル化する方法。実験情報そのものも計算化学に包含することにより、より実践的な手法となる。
- (7) 安全技術、劣化予測など技術リスク予測：劣化、トラブル予測など技術リスク予測へのニーズが高い。
- (8) CAD, CAM, CAEとの融合：マルチスケール計算化学、マルチフィジックス計算化学、マイクロ、メソ、マクロ物性予測、実験融合計算化学の進展により加速される。
- (9) イノベーションの中核：マテリアルインフォマティクス、可視化技術とも連携して、計算化学は今後多様な産業分野での実用性を高め、発展を加速する。多くの特徴ある人・企業・組織が連携して新しいビジネスを推進するオープン・イノベーションの時代においては、強力なシミュレーション技術としての実践的計算化学は差別化の手法としての期待も広がっている。

参考文献

宮本 明、応用物理、80、(2012)、594；宮本 明、畠山 望、鈴木 愛、三浦隆治、化学工学、77、(2013)、382；トライボロジスト、58、(2013)。