

# 産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学

## 実践的計算化学: 産業革新のための新しい化学の方法論を目指して

東北大学未来科学技術  
共同研究センター  
センター長

教授 宮本 明

1967年～1989年

鈴鹿高専、東北大学、  
名古屋大学、京都大学  
・固体触媒を中心と  
する実験研究

1987年～現在

京都大学、東北大学  
・コンピュータ支援による  
分子設計・材料設計



## 産学連携と学術発展の実践的融合 (東北大NICHe宮本研モデル)

産業課題の実践的解決と多額の民間資金の獲得

- ・現実課題に役立つ独自の計算化学ソフトウェアの開発
- ・開発ソフトウェアの市販化による資金獲得と新規産業の創出
- ・持続可能な組織運営の実現

経済的価値

知的価値

産学連携  
の推進

社会的・  
文化的価値

新規学問領域の創生と  
若手リーダーの育成

- ・世界最先端の研究教育環境
- ・次世代の研究の発展
- ・次世代の教育者
- ・競争的資金の獲得

社会貢献

- ・地域雇用の創出
- ・外国人研究者受入による国際交流
- ・産業界の人材養成
- ・社会人の再教育

## 産学連携と学術発展の実践的合 の推進体制の確立

リーダー: 宮本 明(教授)

中核メンバー:

(准教授) 高羽洋充、遠藤 明、畠山 望、坪井秀行

(助教) 鈴木 愛、三浦隆治、南雲 亮

宮本研究室の多数のスタッフ

客員教授・准教授: 15人

顧問: 3人

協力研究者: 10人

研究員: 2人

技術補佐員: 28人

秘書: 4人

学生: 27人

社会人博士: 3人

博士課程: 10人

修士課程: 9人

学士課程: 4人

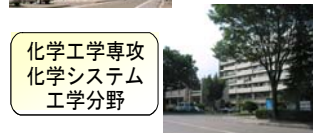
研究生: 1人

Part time Programmer: 53人

合計 150人(2010. 4. 1)



未来科学技術  
共同研究センター



化学工学専攻  
化学システム  
工学分野

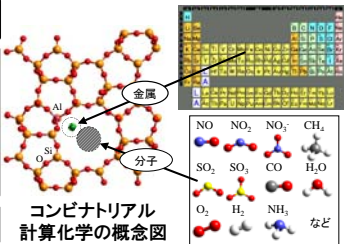


コンビナトリアル  
計算化学寄附講座

## プロジェクトリーダーによる 「コンビナトリアル計算化学」の提唱

### コンビナトリアルケミストリー

1回の合成実験で化合物を1つ作る従来法に対し、試薬の組み合わせと反応場の制御により100～10000以上の化合物を系統的に合成し、目的とする化合物を高速かつ効率的に探索することを可能にした。



### コンビナトリアル計算化学

「コンビナトリアルケミストリー」の概念を計算化学に導入  
周期表のありとあらゆる元素の機能を計算化学により高速に予測することで、計算化学を材料開発のための高速スクリーニング手法として活用する新しい方法論。

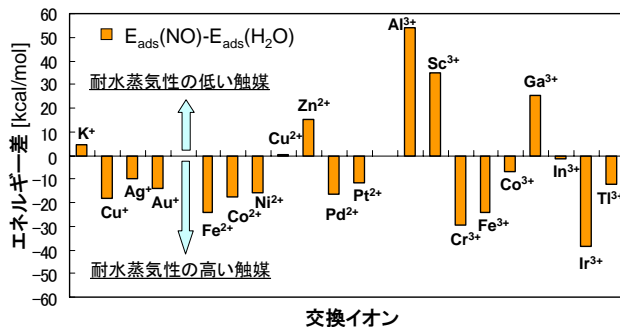
### 計算化学による高速スクリーニング

高速スクリーニングを実現するための様々なソフトウェアを開発し、市販化している。

日本企業が国際競争力を回復するために最も必要な技術として認識されつつある。

## IrZSM-5-コンビナトリアル計算化学によって設計された新触媒

触媒の耐水蒸気性をNOと水の吸着エネルギー差で評価



Pd、Fe、Coなどが高い耐水蒸気性を持つことは以前の実験結果と一致し、新触媒としてIr-ZSM-5が設計された。この予測の後にIr触媒の有効性が早稲田大学により実験的に実証された。

## 戦略的産業分野における 実践的計算化学研究者の養成

戦略的  
産業分野

エレクトロクス材料  
半導体材料

触媒材料  
電池材料

環境材料  
エネルギー材料

セラミックス材料  
バイオ・有機材料

トライボロジー材料  
機械技術

人材養成の  
対象者

民間の第一線で  
働く実験研究者

半導体企業  
電機企業  
化学企業

自動車企業  
機械企業  
重工業企業

石油企業  
電力企業  
ガス企業

医薬品企業  
ソフトウェア企業  
など多数

### 講義カリキュラム

システマティックな講義と演習カリキュラムにより基礎知識を習得

### on the Job Training

エレクトロニクス、触媒、エネルギー、バイオ、機械など各企業の課題に応じた個別指導、個別演習

### インターネットを最大限に活用

各企業に居ながら宮本研究室の最新の講義・演習資料の入手、最新プログラムやコンピュータを活用

### 加速度的人材育成

養成した研究者が企業にて計算化学者を加速度的に養成することが可能

- 日本の国際競争力の大幅な飛躍
- 新しい市場・産業の創出

# 「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」 オリジナルに開発した計算化学ソフトウェア

分子動力学法—外場、濃度勾配、成長など多様な系のダイナミクス

1. 統合化分子動力学システム (NEW-RYUDO)
2. トライボロジーシミュレータ (応力の考慮) (TRIBOSIM)
3. 化学反応対応型分子動力学法 (NEW-RYUDO-CR)
4. 結晶成長シミュレータ (MOMODY)
5. グランドカノニカル分子動力学法
6. 非平衡分子動力学法 (濃度勾配の考慮) (DEMD)

モンテカルロ法—大規模系の平衡状態と化学反応ダイナミクス

1. 統合化グランドカノニカルモンテカルロ法 (MONTA)
2. 非平衡モンテカルロ法 (濃度勾配の考慮) (DEMC)
3. 化学反応を含むKineticモンテカルロ法 (数百万原子)
4. 微粒子成長、薄膜成長シミュレータ (数百万原子)

第一原理分子動力学法、量子分子動力学法—化学反応ダイナミクス、電子移動ダイナミクス

1. 高速化量子分子動力学法 (Colors)
2. 動的ハイブリッド第一原理分子動力学法
3. ハイブリッド高速化量子分子動力学法 (Hybrid-Colors)
4. 部分対角化量子分子動力学法
5. CMPシミュレータ
6. エッチングプロセスシミュレータ
7. トライボ化学反応シミュレータ

販売元  
ペガサスソフトウェア(株)  
http://www.psinc.co.jp  
(株)菱化システム  
http://www.rsi.co.jp/

物性値量子測シミュレータ

1. 電気伝導シミュレータ (Colors-Cond)
  2. 格子振動による熱伝導シミュレータ (THERMOSIM)
  3. 伝導電子による熱伝導シミュレータ (TEHRMO-Colors)
  4. 粘性係数シミュレータ
  5. IRシミュレータ
- など多数の物性値予測

実践的マルチスケール計算化学の実現

1. 三次元多孔質シミュレータ
2. ELデバイスシミュレータ
3. マクロ電気伝導シミュレータ (Macro-Cond)
4. シンタリングシミュレータ
5. 生体内薬物動態グラフィカルシミュレータ

宮本研究室で開発した  
統合化コンビナトリアル  
計算化学システム

グラフィックユーザーインターフェイス (GUI)—簡単な操作でモデル化、計算、解析が可能

1. 統合化3次元グラフィックスプラットフォーム (NEW-RYUGA)
2. 構造モデリングプログラム (NEW-RYUKI)

エレクトロニクス材料の理論設計

1. イオンインプラネーション
2. 化学機械研磨プロセス
3. Siのエッチング、酸化、窒化
4. 青色蛍光体
5. 有機EL
6. プラズマディスプレイ
7. 電気伝導特性、熱伝導特性
8. 結晶成長ダイナミクス

触媒材料の理論設計

1. 自動車用排出ガス処理触媒
2. 脱硫触媒、燃焼触媒
3. ポリオレフィン合成触媒
4. フィッシュアトロブシ合成触媒
5. TiO<sub>2</sub>光触媒
6. メタノール、DME合成触媒
7. センサー電極触媒

触媒・吸着分子のダイナミクス

1. ゼオライト中の分子の吸着・拡散
2. ヘテロポリ酸中のプロトンダイナミクス
3. 担持貴金属触媒、酸化物触媒シンタリング
4. 規則多孔性触媒

セラミックス材料の理論設計

1. 酸化物薄膜の成長過程
2. メソ多孔性セラミックス
3. ヘテロ界面接合
4. バッファ層の設計
5. 強誘電体
6. 透明酸化物電極
7. イオン伝導性セラミックス
8. 磁気テープ、透明磁石

宮本研究室における多様な  
研究領域、融合領域への  
コンビナトリアル計算化学の展開

分離膜・吸着剤の理論設計

1. Pd水素透過膜
2. 水素吸蔵合金
3. カーボンナノチューブの吸着特性
4. ゼオライト膜
5. 透析用高分子膜

機械材料・トライボロジー材料の理論設計

1. ナノ微細加工・ナノトライボロジー
2. エンジンオイル
3. 固体潤滑材料 (ZnDTP, MoDTC, DLC)
4. ハードディスク用潤滑剤

その他材料の理論設計

1. 絶縁破壊特性
2. 熱電変換材料
3. 生体触媒
4. カーボン材料
5. 色素材料
6. 自己組織化現象

ペガサスソフトウェア(株)及び(株)菱化システム  
から販売中の開発ソフトウェアパンフレット

## 実践的産学連携のための 計算化学ソフトウェア

エレクトロニクス材料、セラミックス、触媒など各種機能材料の理論的高速スクリーニング

【コンビナトリアル計算化学エンジン】

- 高速化量子分子動力学計算プログラムColors
- ハイブリッド量子分子動力学計算プログラムHybrid-Colors
- シュ土類対応高速化量子分子動力学計算プログラムColors-Rare Earth
- 励起状態対応高速化量子分子動力学計算プログラムColors-Excite
- 電気伝導シミュレータColors-Cond
- マクロ電気伝導シミュレータMacro-Cond
- 統合化分子動力学計算プログラムNEW-RYUDO
- 化学反応対応型分子動力学計算プログラムNEW-RYUDO-CR
- モンテカルロ計算プログラムMONTA
- トライボロジーシミュレータTRIBOSIM
- 3次元多孔質シミュレータ

【計算化学グラフィックスエンジン】

- 計算化学用グラフィックインターフェイスNEW-RYUGA
- 計算化学用モデリングプログラムNEW-RYUKI

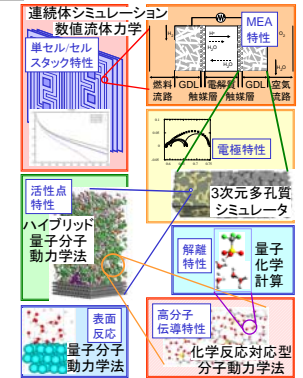
独自計算化学ソフトウェア  
により可能となった実践的  
マルチレベルコンビ計算化学

適用分野

セラミックス材料、半導体、発光材料、エレクトロニクス材料、トライボロジー材料、電池材料、センサー材料、担持触媒、固体触媒、錯体触媒、吸着材、吸蔵材料、膜分離材料、多孔性材料、生体材料など様々な材料設計・開発において開発ソフトウェアの有効性を確認済み。

動作環境

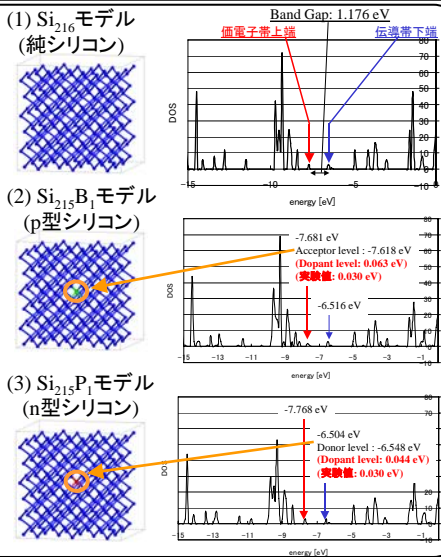
○ Silicon Graphics社、ヒューレットパッカード社、サンマイクロシステムズ社、コンパック社、IBM各社のワークステーション。  
○ パソコンのLinux上においても動作確認済み。  
○ グラフィックスエンジン以外はパソコンのWindows上でも動作確認済み



開発元: 東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室  
〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉6-6-10  
TEL: 022-795-7233, FAX: 022-795-7235, E-mail: miyamoto@aki.che.tohoku.ac.jp  
問い合わせ先: ペガサスソフトウェア株式会社  
〒104-0032 東京都中央区八丁堀4丁目2番2号共同ビル5階  
TEL: 03-3553-7211, FAX: 03-3553-7212  
問い合わせ先: 株式会社菱化システム  
〒104-0033 東京都中央区新川1-28-38 東京ダイヤビル3号館3階  
TEL: 03-3553-9206, FAX: 03-3553-9207

# 「産業革新のための実践的マルチレベルコンビ計算化学」 オリジナルに開発した高速化量子分子動力学法で広がる無限の可能性

## バンド構造の超精密計算(Si系)

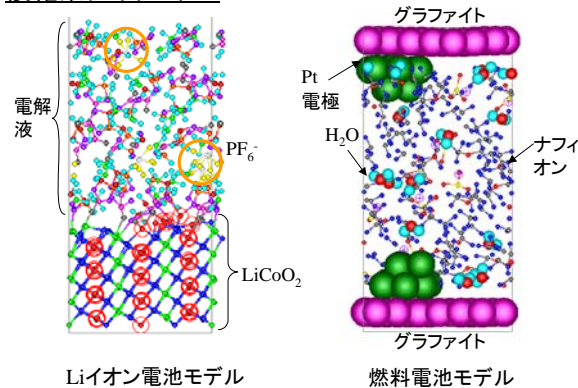


従来は不可能であった現実的大規模モデルによる高速かつ高精度計算が可能

バンドギャップ、不純物準位が実験値と精度良く一致

## トータルシステムシミュレータ

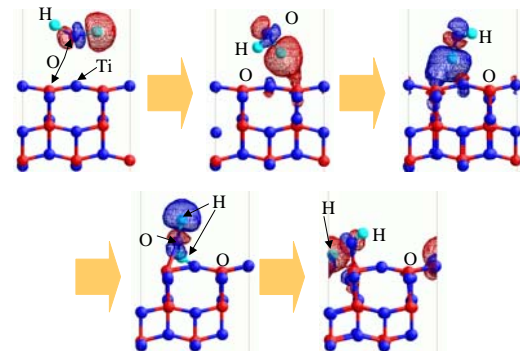
### 複雑系ダイナミクス



従来は不可能であった電池システム全体のような多成分かつ複雑大規模系での化学反応ダイナミクスが計算可能

## 光励起ダイナミクスシミュレータ

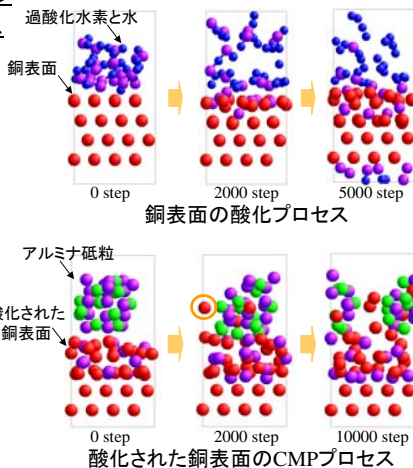
### アナターゼ型TiO2触媒による水の光分解ダイナミクス



従来の第一原理分子動力学法では困難な大規模複雑系の光励起ダイナミクスの解明が可能

## CMPプロセスシミュレータ

### ケミカルメカニカル反応ダイナミクス

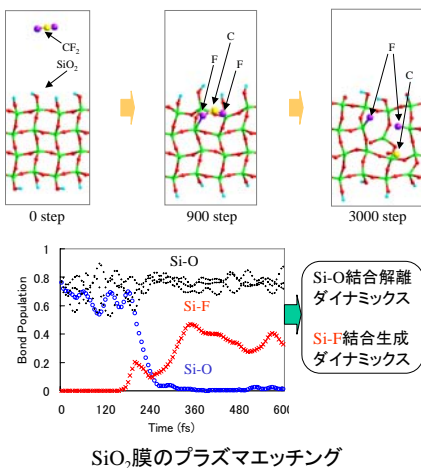


従来は不可能であったケミカルおよびメカニカルの超複雑系ダイナミクスを現実的大規模モデルにより電子状態の変化とともに追跡可能

## プラズマプロセスシミュレータ

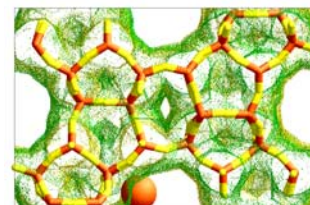
### 表面反応ダイナミクス

第一原理分子動力学法では困難なプラズマプロセスの化学反応ダイナミクスが計算可能



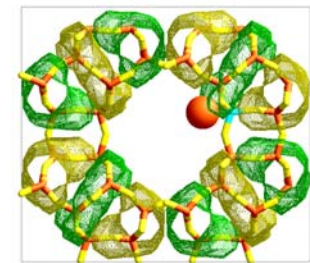
## 分子軌道・電子状態ダイナミクス

従来は不可能であった複雑な構造の酸化物結晶、表面について分子軌道ダイナミクス・電子状態ダイナミクスが高速に計算可能



Cu-ZSM5の分子軌道

開発した3次元グラフィックインターフェースNEW-RYUGAにより高速な解析が可能



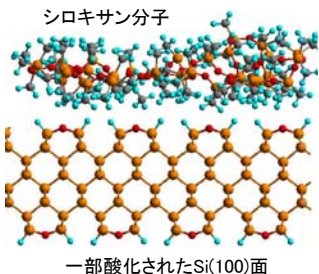
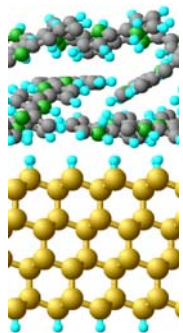
Cu-Mordeniteの分子軌道

# 「産業革新のための実践的マルチレベル計算化学」 宮本研究室で開発したオリジナル計算化学プログラムが約束する 世界的な競争力を持つ新しいモノづくり技術

## モンテカルロシミュレータMONTA

Si表面への導電性  
有機分子の吸着状態

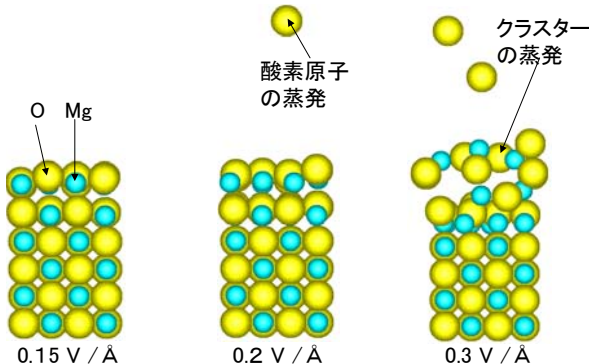
Si表面におけるケミカル  
コンタミネーションの解明



従来は不可能であった大規模複雑系のモンテカルロシミュレーションが高速・高精度に計算可能

## 電場ダイナミクスシミュレータ

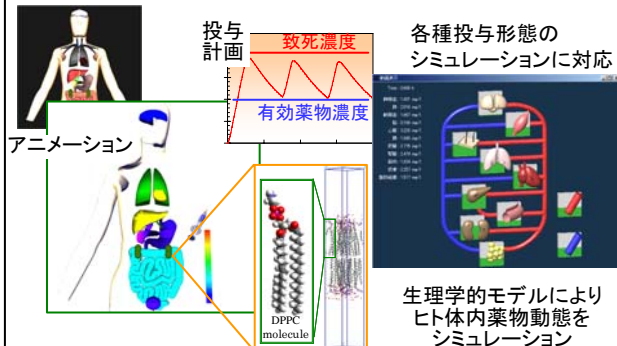
プラズマディスプレイにおける電場下での  
MgO保護膜の劣化ダイナミクス



従来は不可能であった電場がかかった状態での量子ダイナミクスの解明が可能

## 薬物動態シミュレータ

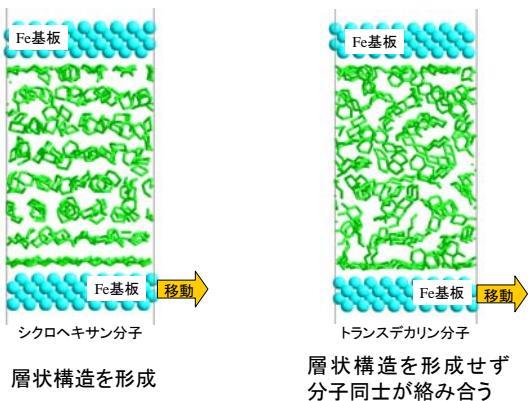
薬物の生体内の分布をシミュレーション  
三次元モデルによる可視化



生体内の薬物動態を計算・三次元モデルを可視化することによりテーラーメイド医療用のマルチスケールヒューマンインターフェイスを実現

## トライボロジーシミュレータTRIBOSIM

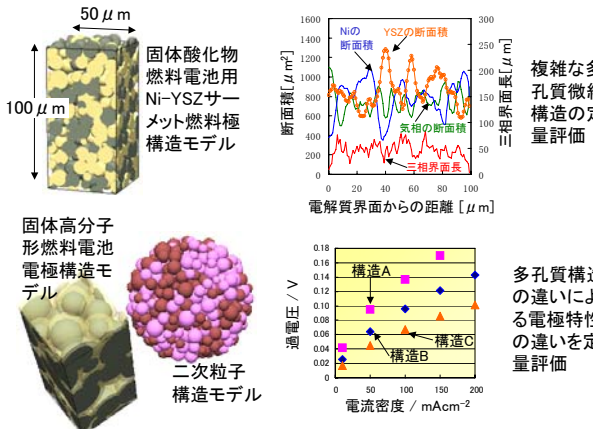
摩擦現象ダイナミクス



従来は不可能であった大規模複雑系の摩擦現象ダイナミクスの解明が可能

## 実践的マルチスケールシミュレーション

三次元多孔質シミュレータ



従来は不可能であったマイクロ物性とマクロ特性をつなぐ実践的マルチスケールシミュレーションの実現

## 有機ELデバイスシミュレータ

量子論に基づく有機ELデバイスシミュレーション

