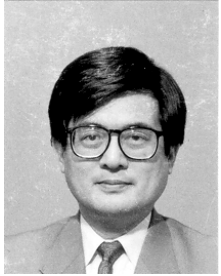


「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」

文部科学省 科学技術振興調整費 新興分野人材養成プロジェクト



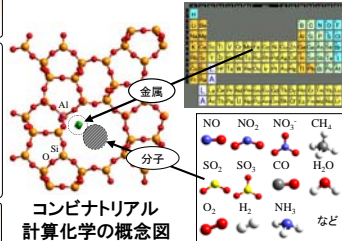
プロジェクト
リーダー

東北大学未来科学技術
共同研究センター
宮本 明

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

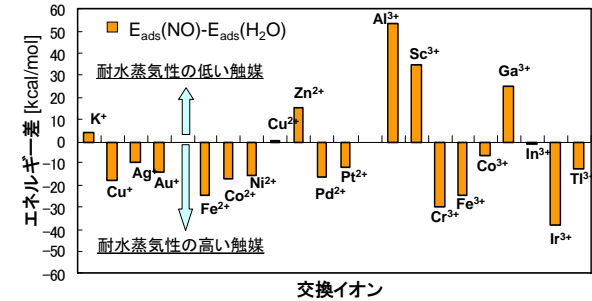
「コンビナトリアルケミストリー」の概念を**計算化学に導入**
周期表のありとあらゆる元素の機能を計算化学により高速に予測することで、**計算化学を材料開発のための高速スクリーニング手法として活用**する新しい方法論。

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**触媒の有効性が三菱重工業と早稲田大学により別々に実験的に実証**された。

日本再生のKeyとなる戦略的産業分野における人材養成プロジェクト

人材養成プロジェクトの具体的な内容

プロジェクトリーダー
未来科学技術共同研究センター
工学研究科応用化学専攻
宮本 明(教授)

プロジェクト推進者
工学研究科応用化学専攻
Carlos A. Del Carpio(助教授)
久保百司(助教授)
高羽洋充(助教授)
遠藤 明(助教授)
古山通久(助手)
坪井秀行(助手)
宮本研究室の多数のスタッフ

プロジェクト協力者
工学研究科 加藤康司(教授)
工学研究科 庄子哲雄(教授)
理学研究科 平間正博(教授)
環境科学研究科 吉岡敏明(教授)
環境科学研究科 服部徹太郎(教授)

戦略的産業分野

エレクトロニクス材料
半導体材料

触媒材料
電池材料

環境材料
エネルギー材料

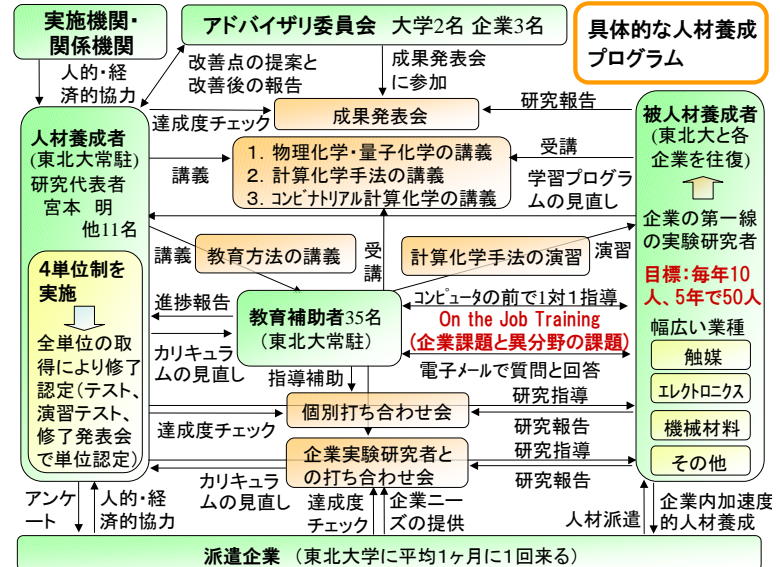
セラミックス材料
バイオ・有機材料

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



「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」 オリジナルに開発した計算化学ソフトウェア

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

コンビナトリアル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】

- コンビナトリアル計算化学用高速化量子分子動力学計算プログラムColors
- 大規模コンビナトリアル計算化学用ハイブリッド量子分子動力学計算プログラムHybrid-Colors
- コンビナトリアル計算化学用希土類対応高速化量子分子動力学計算プログラムColors-Rare Earth
- コンビナトリアル計算化学用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
- コンビナトリアル計算化学用分子動力学計算プログラムNEW-RYUDO
- コンビナトリアル計算化学用モンテカルロ計算プログラムMONTA
- コンビナトリアル計算化学用トライボロジーシミュレータTRIBOSIM (計算理論については、特許出願済み)

【コンビナトリアル計算化学グラフィックスエンジン】

- コンビナトリアル計算化学用グラフィックスインターフェイスNEW-RYUGA
上記のコンビナトリアル計算化学システムで計算した結果を3次元的にビジュアルに表示可能。複雑な軌道、電子密度などのビジュアライゼーションも容易であり、初心者でも使いやすい。
- コンビナトリアル計算化学用モデリングプログラムNEW-RYUKI
上記のコンビナトリアル計算化学システムの初期構造を簡便に作成。ビジュアルにモデリングできるので、初心者でも使いやすい。

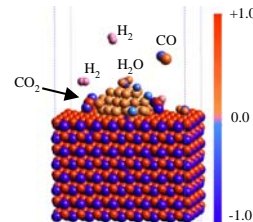
適用分野

セラミックス材料、半導体、発光材料、超伝導材料、エレクトロニクス材料、トライボロジー材料、電池材料、固体触媒、錯体触媒、吸着材、吸蔵材料、膜分離材料など様々な材料設計・開発において「コンビナトリアル計算化学ソフトウェア」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上での動作確認済み。
- 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

コンビナトリアル計算化学により可能となった大規模量子分子動力学計算



メタノール合成用Cu/ZnO触媒の高速スクリーニング

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11-28-38 東京ダイヤビル3号館3階
TEL: 03-3553-9206, FAX: 03-3553-9207

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. 無機・有機ハイブリッド材料用分子動力学法(MSPORT)
2. 結晶成長シミュレータ(MOMODY)
3. トライボロジーシミュレータ(応力の考慮)(TRIBOSIM)
4. グランドカノニカル分子動力学法(化学ポテンシャルの考慮)
5. 非平衡分子動力学法(濃度勾配の考慮)(DEMD)
6. EAM分子動力学法
7. 粗視化分子動力学法(大規模用)(Dual-MOMODY)
8. 統合化分子動力学システム(NEW-RYUDO)

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. 化学反応を含む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)
5. 化学反応を含む半導体のケミカル洗浄シミュレータ
6. 触媒反応器シミュレータ

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
4. Blue-Moon量子分子動力学法
5. 部分対角化量子分子動力学法
6. CMP(ケミカルメカニカルポリッシング)シミュレータ
7. プラズマプロセスシミュレータ
8. エッチングプロセスシミュレータ
9. 電場を考慮した量子分子動力学法

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. UNIX、Linux用3次元グラフィックインターフェイス(MOMOVIE, MOMONGA)
2. パーチャルリアリティ統合化3次元グラフィックスプラットフォーム(New-RYUGA)
3. Windows用3次元グラフィックインターフェイス(WRYUGA)
4. 構造モデリングプログラム(New-RYUKI)

機器分析のシミュレーション—物性予測と実験との対応
1. EXAFSシミュレータ
2. AFMシミュレータ(ACCESS)
3. IRシミュレータ
4. 電気伝導度シミュレータ
5. 熱伝導度シミュレータ
6. 粘性係数、摩擦係数、トラクション係数シミュレータ
など多数の物性値予測

生体システムシミュレータ
1. 生体内薬物動態グラフィカルシミュレータ(PKSim)
2. 携帯電話用アルコール代謝シミュレータ

マテリアルインフォマティクス—高速な材料設計の実現
1. ニュールネットワーク(Hirono)
2. 遺伝的アルゴリズム
3. 構造活性相関
4. パラメータ自動決定プログラム

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/sales>

エレクトロニクス材料の理論設計
1. Si、ダイヤモンド、BNの結晶成長
2. ケミカルメカニカルポリッシング
3. シリコンのエッチング、酸化、窒化
4. 青色・紫外レーザー発光素子
5. Al-リフロー、Al-CVD、W-CVDプロセス
6. プラズマディスプレイ
7. 半導体のケミカル汚染物質除去
8. 電気伝導特性、熱伝導特性

触媒材料の理論設計
1. 自動車用排ガス処理触媒
2. ダイオキシンの分解触媒
3. フロン分解触媒
4. 発電用排ガス処理触媒
5. 光触媒による汚染物質分解
6. 脱硫触媒、燃焼触媒
7. メタノール、DME合成触媒
8. フィッシャートロプシュ合成触媒
9. ポリオレフィン合成触媒
10. 擬似生体光触媒

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. 金属微粒子の形成過程
4. メタロセン触媒の選択性予測
5. 担持金属触媒、酸化物触媒のシタリング
6. ゼオライト合成とゾルゲルプロセスのダイナミクス

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. 酸化物人工超格子
3. ヘテロ界面接合
4. バッファー層の設計
5. 超伝導酸化物・強誘電体
6. 酸化物量子ドット構造
7. 強磁性体、スピントロニクス
8. ナノガラス(光学材料)
9. 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

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
2. ナノトライボロジー
3. トラクションオイル、エンジンオイル
4. フラウン誘導体の潤滑特性
5. ハードディスク用、エアコン用潤滑剤
6. 摩擦時における潤滑剤の劣化反応

分離膜・吸着剤の理論設計
1. フロンの吸着・回収
2. 高温二酸化炭素分離膜
3. カーボンナノチューブの吸着特性
4. Pd水素透過膜
5. 水素吸蔵合金
6. ゼオライト膜
7. 高分子膜

その他材料の理論設計
1. 超臨界抽出過程
2. 層状粘土化合物
3. バイオセラミクス
4. 電気粘性流体
5. マグマ内鉱物の物性予測
6. 自己組織化現象

電池材料の理論設計
1. 燃料電池(電極、電解質含む)
2. Liイオン二次電池
3. 酸化物プロトンイオン伝導体
4. 酸素イオン伝導体
5. ナフィオン(高分子電解質)

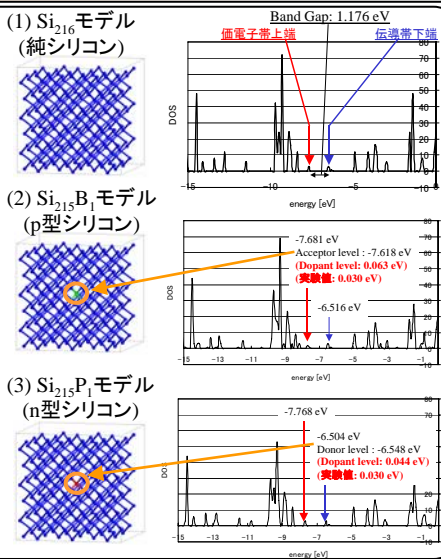
「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」

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)

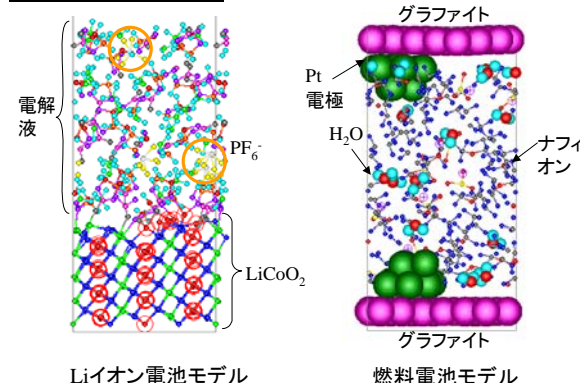
従来は不可能であった現実的大規模モデルによる高速かつ高精度計算が可能

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

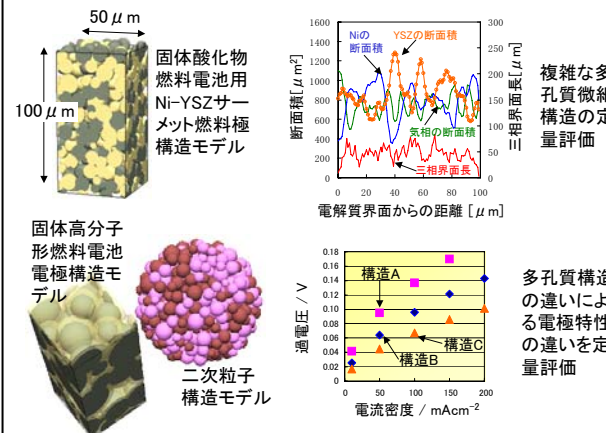
複雑系ダイナミクス



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

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

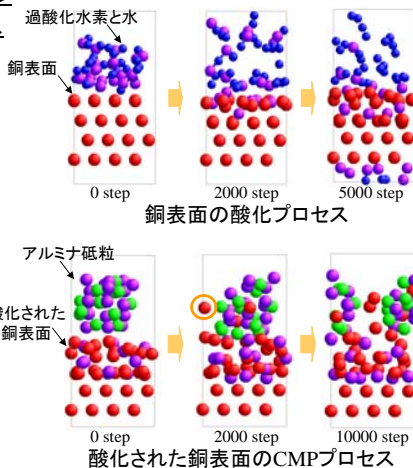


従来は不可能であったマイクロ物性とマクロ特性をつなぐ実践的マルチスケールシミュレーションの実現

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

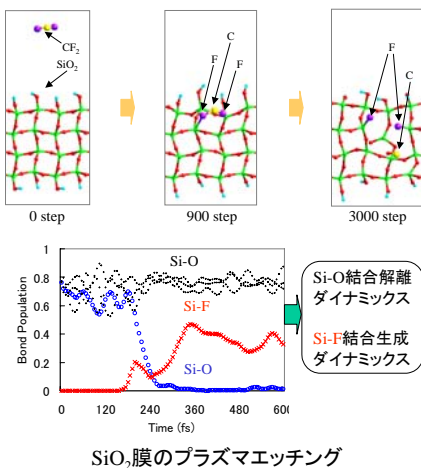
従来は不可能であったケミカルおよびメカニカルの超複雑系ダイナミクスを現実的大規模モデルにより電子状態の変化とともに追跡可能



プラズマプロセスシミュレータ

表面反応ダイナミクス

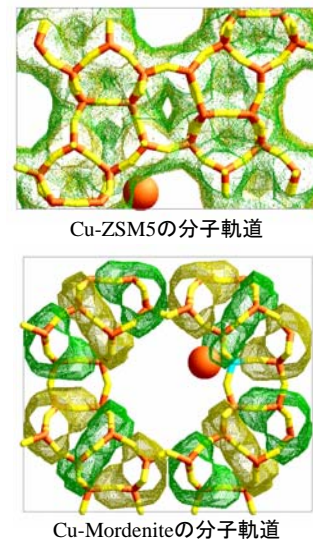
第一原理分子動力学法では困難なプラズマプロセスの化学反応ダイナミクスが計算可能



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

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

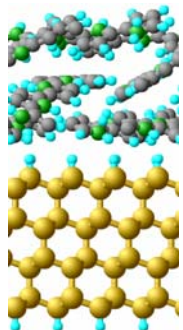


「日本再生のためのコンビナトリアル計算化学」

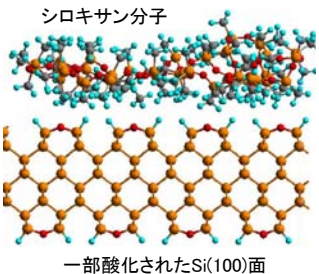
宮本研究室で開発したオリジナル計算化学プログラムが約束する世界的な競争力を持つ新しいモノづくり技術

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



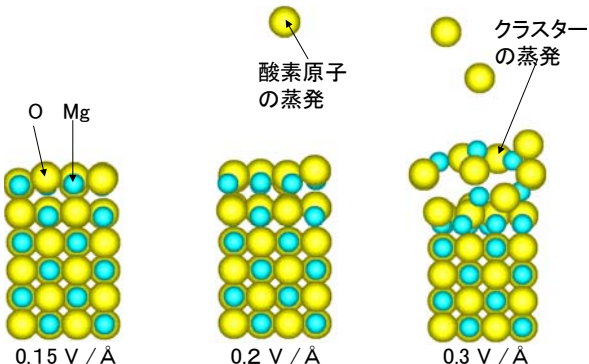
Si表面におけるケミカルコンタミネーションの解明



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

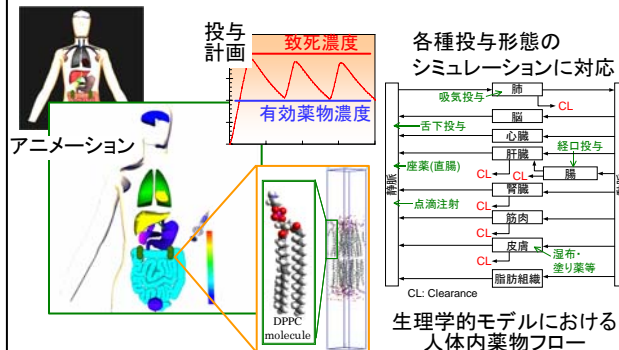
プラズマディスプレイにおける電場下でのMgO保護膜の劣化ダイナミクス



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

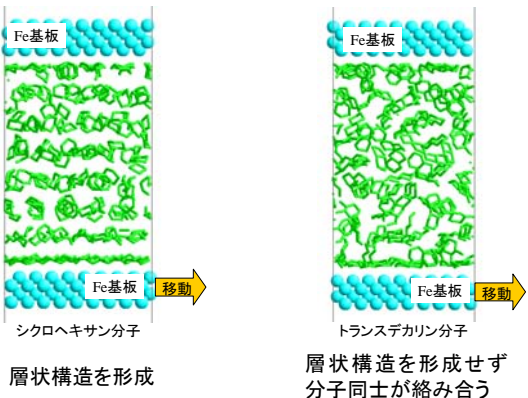
薬物の生体内の分布をシミュレーション
三次元モデルによる可視化



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

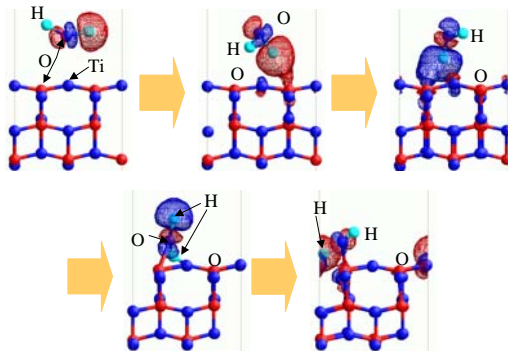
摩擦現象ダイナミクス



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

光励起ダイナミクスシミュレータ

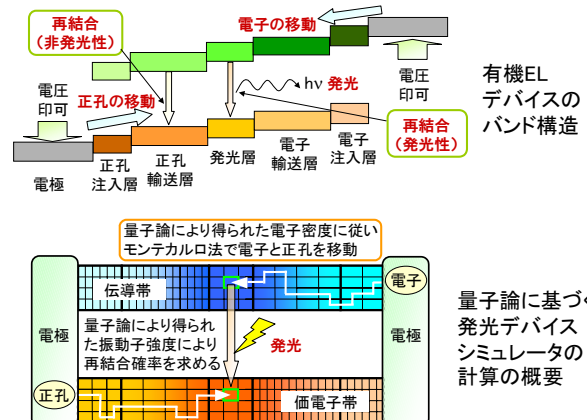
アナターゼ型TiO₂触媒による水の光分解ダイナミクス



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

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



従来は不可能であった量子論に基づく有機ELデバイス特性の解明が可能