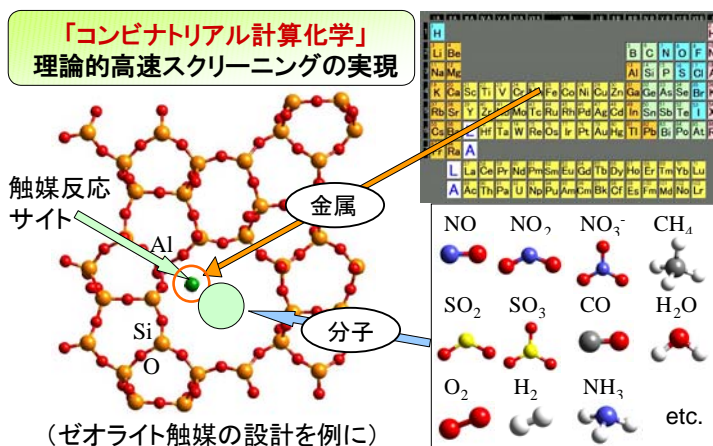


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	3. 計算化学
中項目	3-4. 材料設計
小項目	3-4-6. コンビナトリアル計算化学

概要（200字以内）

より高度な制御が求められる次世代の触媒開発技術として、触媒材料の高速スクリーニングを可能とするコンビナトリアル計算化学技術、電気化学反応・メカノケミカル反応・光触媒反応などを解明可能なマルチフィジックスシミュレーション技術、電子レベル～ $\mu\text{m}$ スケールまでを統合的に解明可能なマルチスケールシミュレーション技術の確立が強く求められている。最近、日本において上記を可能とするコンビナトリアル・マルチフィジックス・マルチスケール計算化学のためのシミュレータ開発など先駆的研究が行われており、早急な発展が求められる課題である。



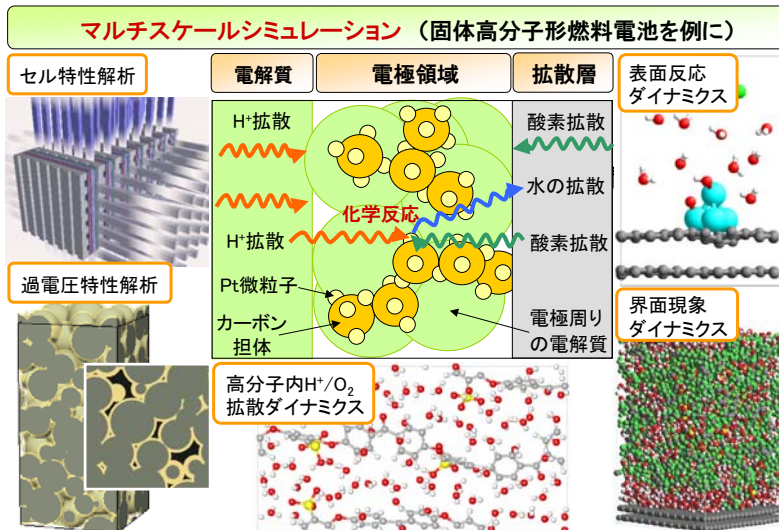
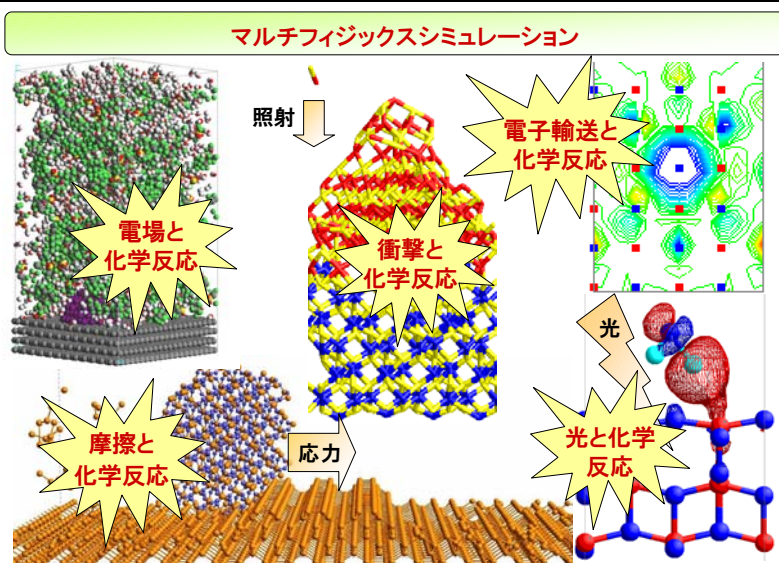
現状と最前線

近年の理論化学、計算化学の発展は目覚しく、触媒開発・設計にとって計算化学シミュレーションは不可欠のものとなりつつある。具体的には、第一原理計算を用いた反応機構解析・触媒活性評価、分子動力学法を用いた拡散・吸着ダイナミクス解析、モンテカルロ法を用いた吸着量・吸着分布解析などが幅広く行われ、定量的な理論解析が可能なレベルになってきている。しかし現状では、計算化学によって設計された触媒が次々と実用化されるレベルには至っていない。上記の課題に対して、計算化学を活用した多成分触媒材料の高速スクリーニング技術、触媒反応と電場、摩擦、光、流体、衝撃などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象のシミュレーション技術、電子レベル～ $\mu\text{m}$ スケールまでを統合的に解明可能なマルチスケールシミュレーション技術など複雑多体系の触媒シミュレーション技術の確立が求められている。

最近、日本において活性金属、担体、助触媒などの多成分から構成される触媒材料を高速にスクリーニングするコンビナトリアル計算化学手法の開発、SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に基づき電気化学反応、メカノケミカル反応、光触媒反応などを解明可能なマルチフィジックスシミュレータの開発、量子分子動力学法、分子動力学法、化学工学、流体力学などをシームレスに統合化したマルチスケールシミュレーション技術の開発など先駆的な研究が行わ

れている(右図)[1]。今後、高速計算・大規模計算技術の発展によるコンビナトリアル計算化学手法の精密化、触媒反応と電場、光、流体、摩擦、衝撃、伝熱などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象の高精度シミュレーション技術の開発、異なる計算手法間の更なるシームレス化、ハイブリッド化によるマルチスケールシミュレータの高度化などコンビナトリアル・マルチフィジックス・マルチスケール計算化学技術のさらなる発展が強く求められている。

[1]久保百司、古山通久、宮本 明、表面科学、25(2004) 690.



将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

多成分触媒材料の高速スクリーニングを可能とするコンビナトリアル計算化学手法の開発  
 SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発  
 扱うサイズ・時間の異なる計算手法の中間サイズ・時間を計算可能なシミュレータの開発

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

第一原理分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発

異なるシミュレーション手法をシームレス化、ハイブリッド化したマルチスケール手法の開発

キーワード

コンビナトリアル計算化学、マルチフィジックスシミュレーション、マルチスケールシミュレーション、触媒設計

(執筆者:久保百司、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos A. Del Carpio、宮本 明)