

| | |
|----------|------|
| ディビジョン番号 | 12 |
| ディビジョン名 | 触媒化学 |

| | |
|-----|--------------------------------|
| 大項目 | 9. 計算化学 |
| 中項目 | 9-1. マルチフィジックス・マルチスケールシミュレーション |
| 小項目 | 9-1-2. マルチフィジックスシミュレーション |

概要（200字以内）

次世代の触媒開発技術の実現には、化学反応のより高度な電子・原子レベル制御が強く求められている。その実現には、第一原理計算が可能とした単純な化学反応解析のみならず、「化学反応と電場、光、摩擦、流体、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が必須課題である。最近、日本において 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。

エレクトロカタリシス
 フォトカタリシス
 メカノカタリシス
 触媒合成プロセス

電場と化学反応
 光と化学反応
 摩擦と化学反応
 流体と化学反応

電子輸送
 量子分子動力学法で計算
 伝熱
 他にCVD合成における「衝撃と化学反応」等

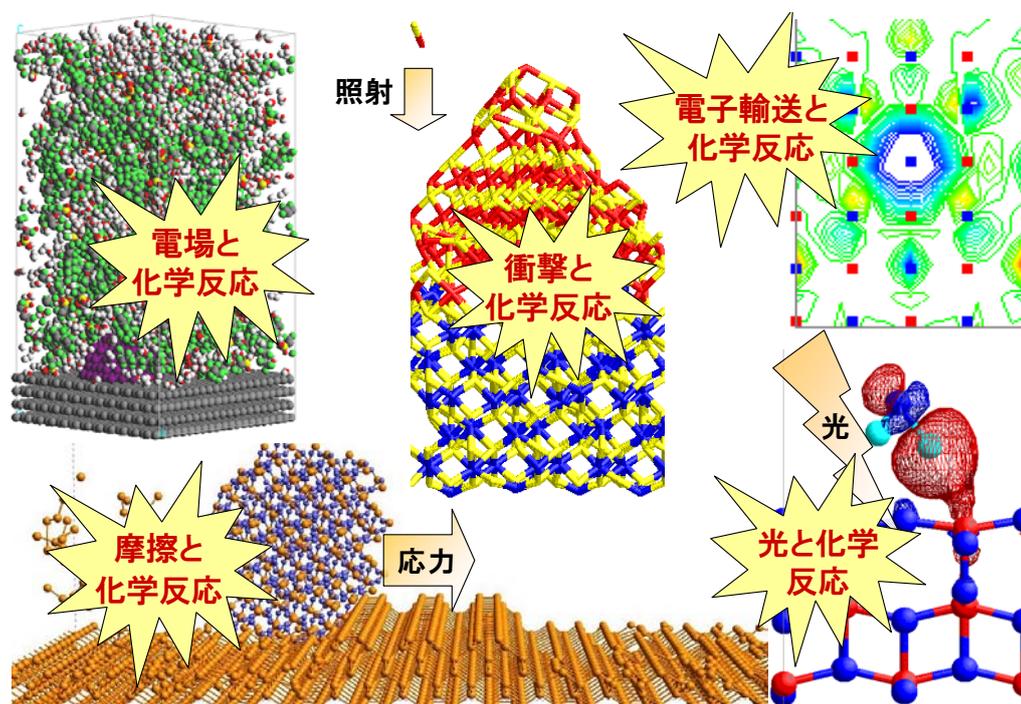
現状と最前線

次世代の触媒開発技術として、理論化学・計算化学を活用した高効率かつ高精度な触媒設計手法の確立が求められている。特に、より高度化が求められる昨今の触媒開発技術においては、化学反応ダイナミクスより精密な電子・原子レベル制御が強く求められている。これまで、第一原理計算手法が活性点近傍における触媒反応機構解析、触媒活性評価、触媒機能解析などに大きな貢献を果たしてきた。しかし、より高度な触媒反応制御には、第一原理計算が可能とした単純な化学反応解析のみならず、「化学反応と電場、光、摩擦、流体、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が必須課題である。例えば、燃料電池触媒の設計には「化学反応と電場と流体」、光触媒の設計には「化学反応と光」、メカノケミカル触媒の設計には「化学反応と摩擦」、触媒合成反応の設計には「化学反応と流体」、「化学反応と衝撃」などのマルチフィジックス現象の解明が必須課題である。しかし、現状ではこのようなマルチフィジックス現象を解明可能なシミュレーション手法はほとんど確立されていない。

最近、日本において 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

シミュレータの開発という先駆的な研究開発が開始されている[1]。具体的に、下図に示すような化学反応を含むマルチフィジックス現象が重要な役割を果たす燃料電池、光触媒、触媒合成などへの応用展開が図られている。特に、第一原理分子動力学法では困難な大規模計算を実現するために、SCF-Tight-Binding 理論、部分対角化法、動的ハイブリッド法などの独自理論が開発され、飛躍的な高速計算が実現されている。今後、更なる高速計算技術、大規模計算技術の発展とともに、化学反応と電場、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を高精度にシミュレーションする技術の確立が求められる。

[1] 久保百司、坪井秀行、古山通久、宮本 明、応用物理、74 (2005) 1052-1059.



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

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

数千原子からなる大規模系の量子分子動力学計算を可能とする高速・大規模計算理論の開発

励起状態ダイナミクスを大規模系で計算可能な量子分子動力学法の開発

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

数万原子からなる大規模系の量子分子動力学計算を可能とする高速・大規模計算理論の開発

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

キーワード

マルチフィジックスシミュレーション、SCF-Tight-Binding 量子分子動力学法、高精度シミュレーション、触媒設計、電子・原子レベル制御

(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)