

**未来科学技術共同研究センター(NICHE)
での産学連携研究：
実践的コンピュータ化学研究を通してみた
成果と課題**

**東北大学
未来科学技術共同研究センター**

宮本 明



Present collaborators

- Prof. A. Miyamoto
- Assoc. Prof. N. Hatakeyama
- Assoc. Prof. A. Suzuki
- Assist. Prof. R. Miura
- Assist. Prof. P. Bonnaud
- Sen. Res. Fellow T. Yotsuyanagi
- Sen. Res. Fellow T. Inoue
- Sen. Res. Fellow H. Koinuma
- Visit. Prof. H. Fukui
- Visit. Prof. K. Nishijima
- Visit. Prof. O. Okada
- Visit. Prof. M. Ippommatsu
- Visit. Prof. M. C. Williams
- Visit. Prof. J. Amano
- Visit. Prof. M. Hisatake
- Visit. Prof. M. Kohno
- Visit. Prof. P. Selvam
- Visit. Prof. K. Ara
- Adjunct Prof. A. Uehara
- Res. Fellow S. Kozawa
- Res. Fellow H. Sekine
- Visit. Assoc. Prof. N. Aoki
- Visit. Assoc. Prof. H. Sato
- Visit. Assoc. Prof. K. Itaka
- Adjunct Assoc. Prof. K. Ueno



Researcher	10
Techn. Staff	20
Secretaries	7
Part-time	
Programmer :	22

New Industry Creation
Hatchery Center

Total 81 members



Collaborators(2007)

Prof. : A. Miyamoto
Assoc. Prof. : C.A. Del Carpio
Assoc. Prof. : M. Kubo
Assoc. Prof. : H. Takaba
Assoc. Prof. : A. Endou
Assoc. Prof. N. Hatakeyama
Assoc. Prof. H. Tsuboi
Assist. Prof : M. Koyama
Assist. Prof. R. Sahnoun
Assist. Prof. A. Suzuki
Vist. Prof. : T. Inoue
Vist. Prof. : H. Koinuma
Vist. Prof. : A. Okuwaki
Vist. Prof. : H. Fukui
Vist. Prof. : K. Nishijima
Vist. Prof. : O. Okada
Vist. Prof. : M. Ippommatsu
Vist. Assoc. Prof. : N. Aoki
Vist. Assoc. Prof. M. Shibata
Vist. Assoc. Prof. H. Sato
Advisor A. Imamura
Researcher : 6
Tech. Assist. : 69
Secretary : 4



Students 33
Ph.D. 16
M.Sc. 9
B.Sc. 5
Research
Student 3
(Japan, China, India,
Korea, Turkey,
Sri Lanka, Egypt)
Part-time
Programmer : 80

Total 220



Endowed Chair,
Combinatorial
Computational
Chemistry



Molecular Materials
Design,
Dept. Appl. Chem.



New Industry Creation
Hatchery Center

宮本 明(1947年5月3日生(新憲法施行の日))

1963.4 国立鈴鹿工業高等専門学校入学(2期生)

1968.3 同校工業化学科卒業

1968.4 東北大学工学部応用化学科編入学(1期生)

1975.3 同大学工学研究科博士課程修了(化学工学専攻)

1975.4 名古屋大学工学部合成化学科助手

1985.5 京都大学工学部石油化学科助教授

1992.4 東北大学工学部分子化学工学科教授

(工学研究科(材料化学専攻、応用化学専攻、化学工学専攻))

2002.4 同大学未来科学技術共同研究センター教授

2008-2011 同大学ディスティンクティブ教授

2009-2011 同大学未来科学技術共同研究センター長

2012.3 同大学定年退職

2012.4 引き続き、同大学未来科学技術共同研究センター教授

宮本 明

東北大学未来科学技術共同研究センター

1967-1989(23年間)

(鈴鹿高専、東北大学、名古屋大学、京都大学)

実験化学: 固体触媒を中心とする実験研究

環境保護のための触媒化学

1987-2017(31年間)

(京都大学、東北大学)

コンピュータ化学: コンピュータ支援による分子設計・
材料設計

産業革新のための新しい化学

憲法50歳 ともに育った

環境保護で理念生かす

宮本 明さん

東北大教授



憲法が施行されて3日で、まる50年になる。施行の日に生まれた同い年の人たちに、ともに「戦後」を過ごしてきた憲法についての思いを語ってもらった。

施行日生まれの50歳にきく

東北大の博士課程を終えて一九七五年に名古屋大の助手になった。教授から与えられたテーマは、火力発電所から出る有害物質を取り除く触媒の研究だった。光化学スモッグや四日市ぜんそくなど公害が社会問題になっていた時代でも、モノ作りに直接結びつかない環境保護のための研究は傍流だった。それを生涯のテーマにしていけるのかどうか。迷った時、憲法の施行日に生まれた偶然を意識した。「平和憲法の理念を技術に生かすのが自分の使命」と考え、迷いが吹っ切れた。

技術が一方で、爆薬の原料も作り出し、ドイツが第一次世界大戦に参戦する引き金にもなった。「技術を扱う我々に求められるのは、倫理性だと思う」。約百四十人の学生に語りかけた。

平和で安全な技術に徹すること、日本独自の先進的研究を模索したいと思う。

四月二十一日にあった今年度最初の講義で、空中窒素の固定技術について話した。農業用肥料に貢献した

Agenda

1 東北大学未来科学技術共同研究センター(NICHE)における産学連携研究

2 コンピュータ化学による産学連携研究:成果と課題

3 日本工学アカデミーへの期待

ごあいさつ

産学連携活動の新たなモデル作りを
挑戦的に進めることを
主眼としています。



未来科学技術共同研究センター(NICHe:ニッチェ)は、大学の知的資源をもとに、社会の要請に応える新しい技術・製品の実用化並びに新しい産業の創出を社会へ提案することを目指し、産業界等外部との連携により、先端的かつ独創的な開発研究を行うことで、広く国内産業・地域産業の活性化に資することを目的に、平成10年4月に設置されました。特に、平成17年にリエゾン機能を産学連携本部へ分離した後は、企画機能を充実し、中央省庁との連携強化を

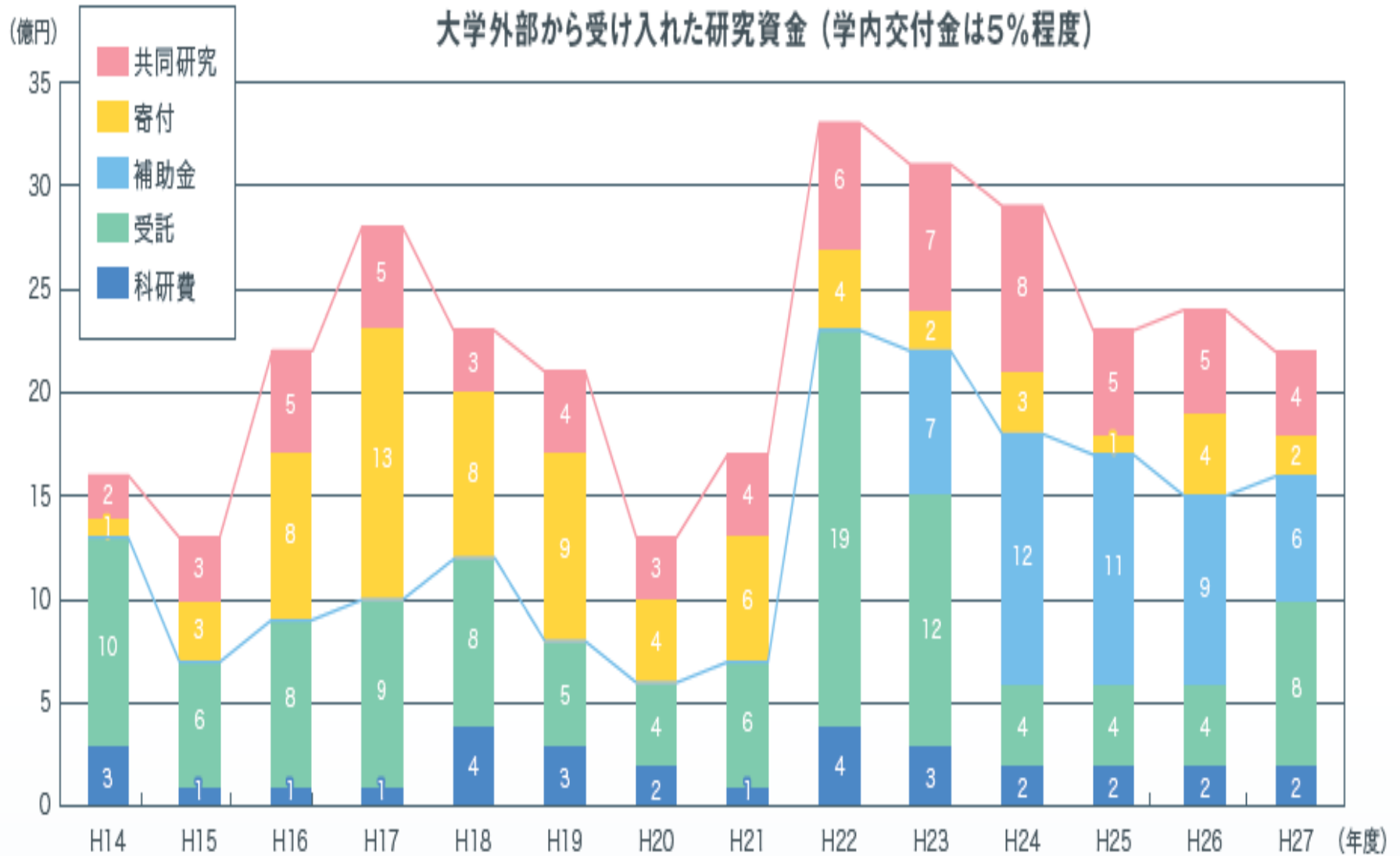
パンフレットでの説明

<http://www.niche.tohoku.ac.jp/wp-content/uploads/2016/07/10cf749ce3ff84560811a13e8f07bad0.pdf>

プロジェクト研究資金の推移

産学連携研究は資金的に不安定・変動リスク大
運営面での知恵・工夫が重要となる

大学外部から受け入れた研究資金（学内交付金は5%程度）





Tadahiro Ohmi 大見忠弘 Profile

東京工業大学助手、東北大学助手
助教授、教授を経て1998年4月より
新設された未来科学技術共同研究
センター教授を2002年3月定年退官
2002年4月より現職

「知的機能を備えた超LSI」、「高性能
半導体プロセス技術」、「半導体製造
装置技術」等半導体電子工学の研究
開発に従事。現在、研究プロジェクト
“DIIN(ディーン)” “HALCA(はるか)”
“熊本県地域結集型共同研究事業”
の牽引役として活躍中。

科学への興味...

ページをクリックしてご覧下さい

P. 01 ▶ P. 02 ▶ P. 03 ▶ P. 04 ▶ P. 05

東北大学名誉教授
未来科学技術共同研究センター
客員教授

インタビュアー 福西 浩(理学研究科教授)
アシスタント/Web 浦部 敦子(理学部広報)



未来情報産業研究館

概要

この建物は、我が国の半導体・平板ディスプレイ分野に革命的飛躍をもたらすべく、東北大学が展開する“新半導体・ディスプレイ産業創製プロジェクト”の趣旨に賛同いただいた産業界の方々のご支援により建てられました。

特徴

徹底した省エネルギー対策とともにナノメートルレベルの超微細加工・超高精密計測を実現するために電源電圧の変動、微振動などあらゆる汚染、ゆらぎ、変動を徹底的に制御し、設計から製造、テストまで一貫して行える研究施設となっています。

地下1階から4階までにそれぞれ605㎡と692㎡のクリーンスペースを有するクリーンルームが2層あり、5階は教授室、会議室、6階は設計CAD、測定評価室および研究者のための居室となっております(6階建、約6,400㎡)。

Agenda

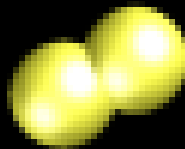
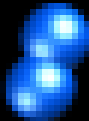
1 東北大学未来科学技術共同研究センター(NICHE)における産学連携研究

2 コンピュータ化学による産学連携研究:成果と課題

3 日本工学アカデミーへの期待

実践的コンピュータ化学のための方法論

- 1 **電子論**: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 **古典原子論**: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 **化学反応ダイナミクス**: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 **メソ・マクロモデリング**: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 **インフォマティクス**: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 **可視化**: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 **実験融合コンピュータ化学** (計測シミュレーション)



量子化学

Hamiltonian

Energy eigenvalue

$$H\Psi = E\Psi$$

Wave Function

Hatree-Fock, PostHF法 (ab-initio法)

Gaussian etc

密度汎関数法 (DFT法)
(第一原理計算)

Dmol³ ADF etc

周期表の全ての元素に対する非経験的定量計算が実現

Periodic Table

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
3	Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
	L	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
	A	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

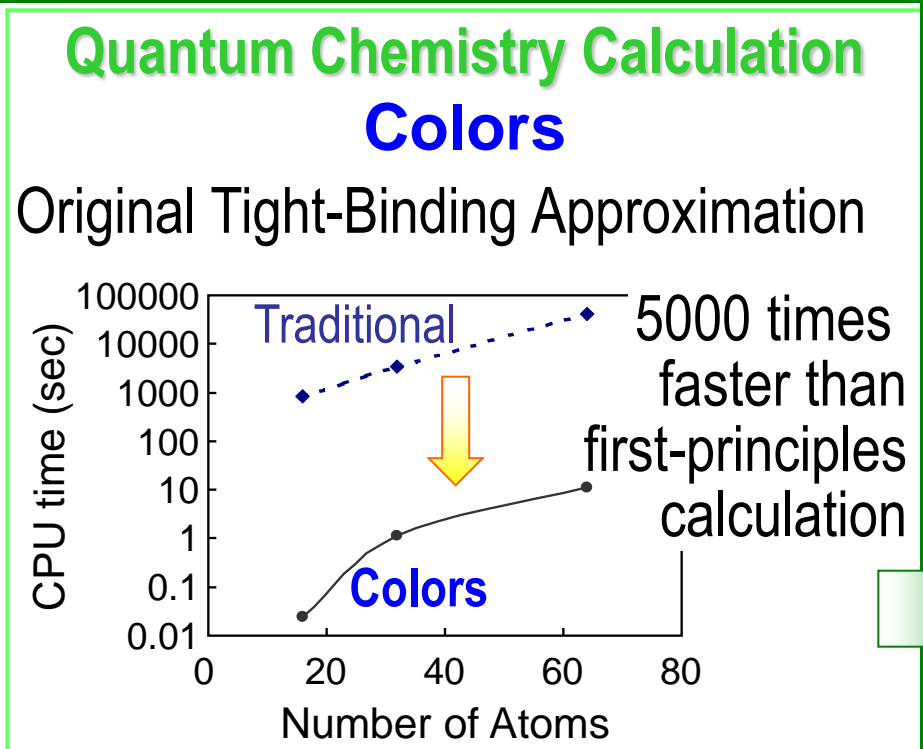
- 典型金属元素
- 半金属元素
- 非金属元素
- 遷移金属元素
- 希ガス

実践的コンピュータ化学のための方法論

- 1 **電子論**: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 **古典原子論**: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 **化学反応ダイナミクス**: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 **メソ・マクロモデリング**: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 **インフォマティクス**: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 **可視化**: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 **実験融合コンピュータ化学**(計測シミュレーション)

Ultra Accelerated QCMD Method: 優れた要素手法の開発

New Scheme based on Tight-Binding Quantum Chemistry Method



Potential Function Determination

$$E = \sum D_{ij} (1 - \exp(\beta(r_{ij} - r_0)))^2 + \sum H_{ijk} (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \sum H_{ijkl} (1 + \cos(n\phi - \phi)) + \sum (A_{ij}/r_{ij}^{12} - B_{ij}/r_{ij}^6) + \sum (Z_i Z_j e^2 / r_{ij})$$

Chemical Nature: Quantum Chemistry
Bond E, Charge, etc.

Atomic Motion: Potential Function

Chemical Reaction

Time Evolution (Quantum Chemistry-based Molecular Dynamics)

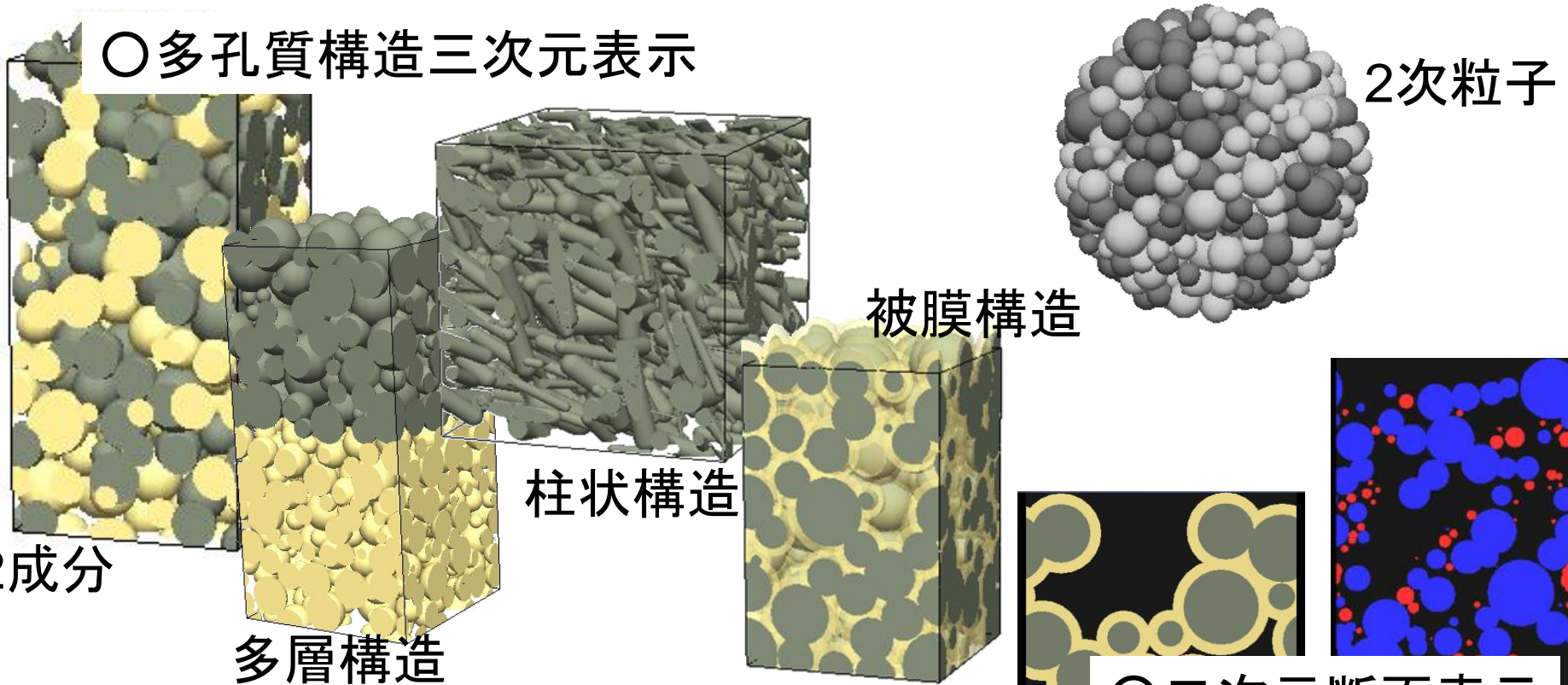
10,000,000 Times Acceleration Compared with First-Principles MD

実践的コンピュータ化学のための方法論

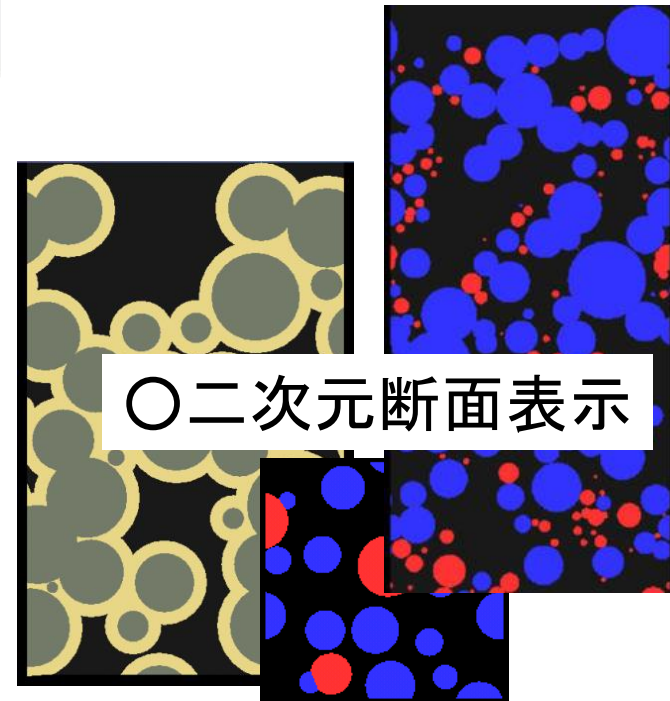
- 1 **電子論**: 量子化学(QC)、量子力学(QM)
- 2 **古典原子論**: 分子動力学法(MD)、分子力学法(MM)、モンテカルロ法(MC)
- 3 **化学反応ダイナミクス**: 量子分子動力学法(QCMD; Car-Parinello法)
- 4 **メソ・マクロモデリング**: 動的モンテカルロ法(Kinetic MC)、反応工学、機械工学的手法(FEM, CFD)
- 5 **インフォマティクス**: 人工知能(AI)、ニューラルネット(NN)、データベース(DB)
- 6 **可視化**: コンピュータグラフィックス(CG)、バーチャルリアリティ(VR)
- 7 **実験融合コンピュータ化学** (計測シミュレーション)

三次元多孔質構造シミュレータPOCO²

○多孔質構造三次元表示



○二次元断面表示

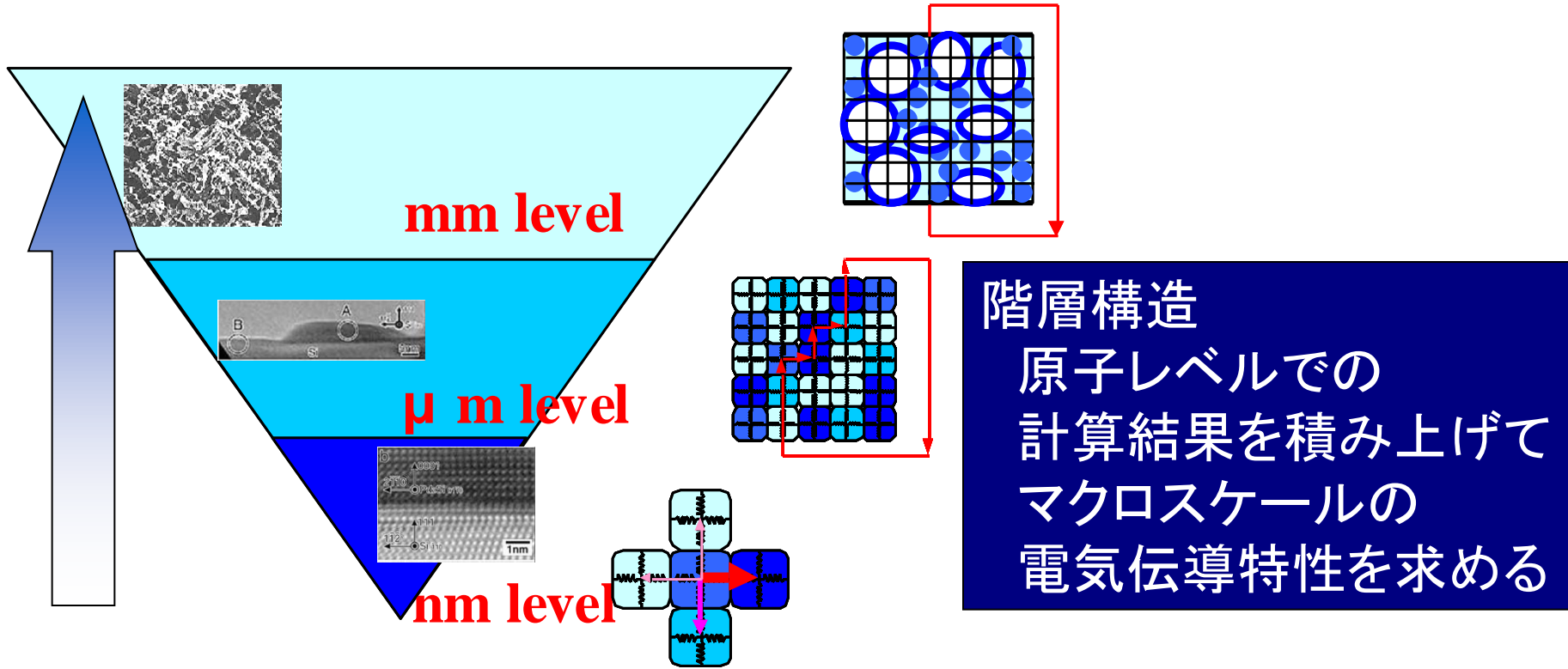


「粒子」を基本単位
として様々な多孔質
構造を再現

μm ・ mm スケールの電気伝導シミュレーション

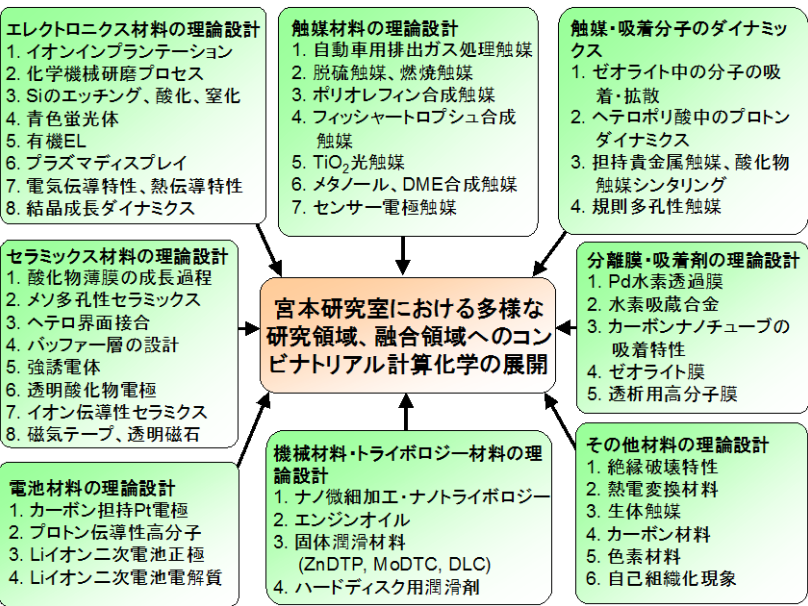
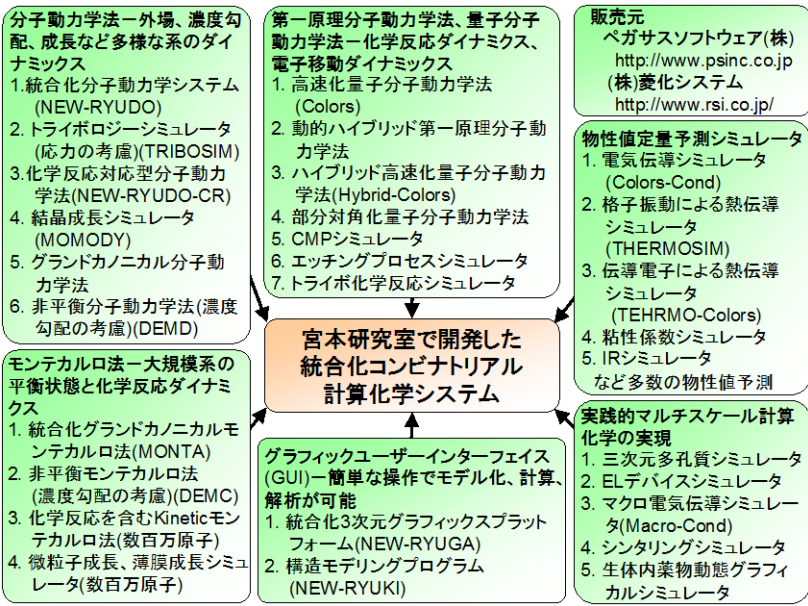
計算方法

- 各セルの電気伝導特性を数値化してブロック化 \Rightarrow 多層構造



「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

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
 - 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
 - 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

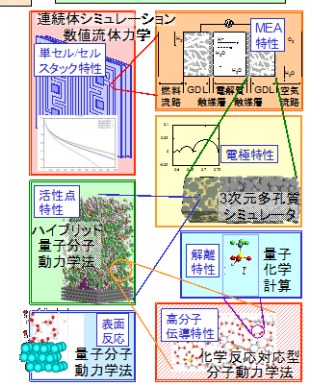
- 【計算化学グラフィックスエンジン】**
- 計算化学用グラフィックインターフェイスNEW-RYUGA
 - 計算化学用モデリングプログラムNEW-RYUKI

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

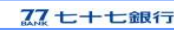
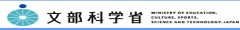
○Silicon Graphics社、ヒューレットパッカード社、サンマイクロシステムズ社、コンパック社、IBM各社のワークステーション。
○パソコンのLinux上においても動作確認済み。
○グラフィックスエンジン以外はパソコンのWindows上でも動作確認済み



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 東京都中央区八丁塚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ピュータ化学

東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室



長寿命・高信頼性・省エネ自動車・機械部品、材料開発を先導するマルチレベル・トライボロジーシミュレータ

マルチレベル計算化学の発展

量子力学
分子軌道
電子スケール

分子動力学
 $\sim 10^7$
ナノメートルスケール

連続体力学
実機・実デバイススケール

化学・機械工学融合領域の発展

深電機用圧縮機
Oscillator (1000 Hz)

医工学領域への展開

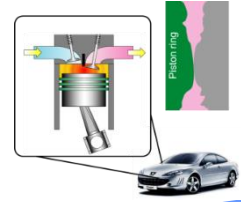
安全・安心社会・低環境負荷・省エネルギー社会への貢献

フリクションフリー技術：
超低燃費自動車

http://www.mssc-corp.co.jp/iss161694.html

http://car.nifty.com/less/view/car/motorshow/detail/a_5228.htm

しゅう動部長期安定性：
故障・不具合フリー技術



自動車エンジン、後処理システム開発を強力に支援する マルチレベルハニカム触媒シミュレータ

Engine Control Computer

Electronic Control fuel injector

排気管 (CO, Hydrocarbon, NOx)

貴金属触媒 (Pt, Rh, Pd)

セラミックス (Y-Al₂O₃, CeO₂, etc.)

マクロレベル

ミクロレベル

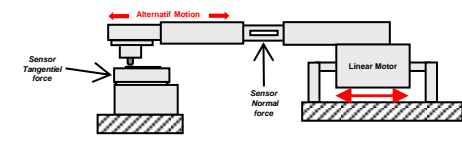
メソレベル

ハニカム状

CO₂, N₂... 浄化されたガス

コンバータ

Y. Nagai et al. ChemSusChem (2004) 103



自動車企業

自動車部品企業

化学企業

機械企業

重工業企業

電力企業

石油企業

ガス企業

医薬品企業

水処理企業

ソフトウェア企業

オリジナルなソフトウェア群による国内外の多彩な企業との豊富な連携実績

- 分子動力学シミュレーション**
- 自動車用燃料電池のイオン交換膜の分子動力学シミュレーション (Molecular Dynamics Simulation)
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
- 分子動力学シミュレーション**
- 自動車用燃料電池のイオン交換膜の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション
 - 自動車用燃料電池の電極材料の分子動力学シミュレーション

蓄電池・燃料電池・太陽電池など次世代自動車に不可欠な電池開発、設計を支援するマルチレベル電池シミュレータ

大規模量子分子動力学法によるLiイオン電解質反応機構の解明

電極多結晶構造

熱・機械特性

本物構造の作成

本物構造の作成

電極測定シミュレータ

電極測定シミュレータ

電極測定シミュレータ

電極測定シミュレータ

電解質

電極触媒層

拡散層

電気伝導

Pt表面反応

H₂O拡散

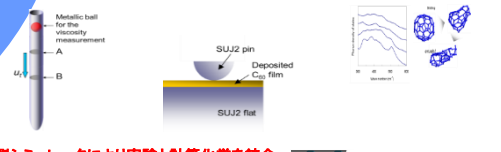
H⁺拡散

H⁺解離

H⁺/O₂拡散

活性点特性

計測とモデリング技術を融合し、実材料の開発に不可欠な界面、表面の構造解析を推進



多数の教員、研究員、技術スタッフ、プログラマーが協力して産学連携を必ず成功に導く強力な支援体制

各種計測シミュレータにより実験と計算化学を統合

X線回折シミュレータ

中性子線回折シミュレータ

ラマン分光シミュレータ

赤外分光シミュレータ

紫外可視分光シミュレータ

AFMシミュレータ

STMシミュレータ

TEMシミュレータ

SEMシミュレータ

EXAFSシミュレータ

「本物」の原子・分子構造を描き出す。本物シミュレーションの実現

企業の皆様へ

多くの企業と永年の連携で培ってきた世界的にも競争力をもつソフトウェア技術・ノウハウを、産学官金連携により地域の発展にも役立てられたらと期待しています。

宮本 明

東北大学未来科学技術共同研究センター

1967-1989(23年間)

(鈴鹿高専、東北大学、名古屋大学、京都大学)

実験化学: 固体触媒を中心とする実験研究

環境保護のための触媒化学

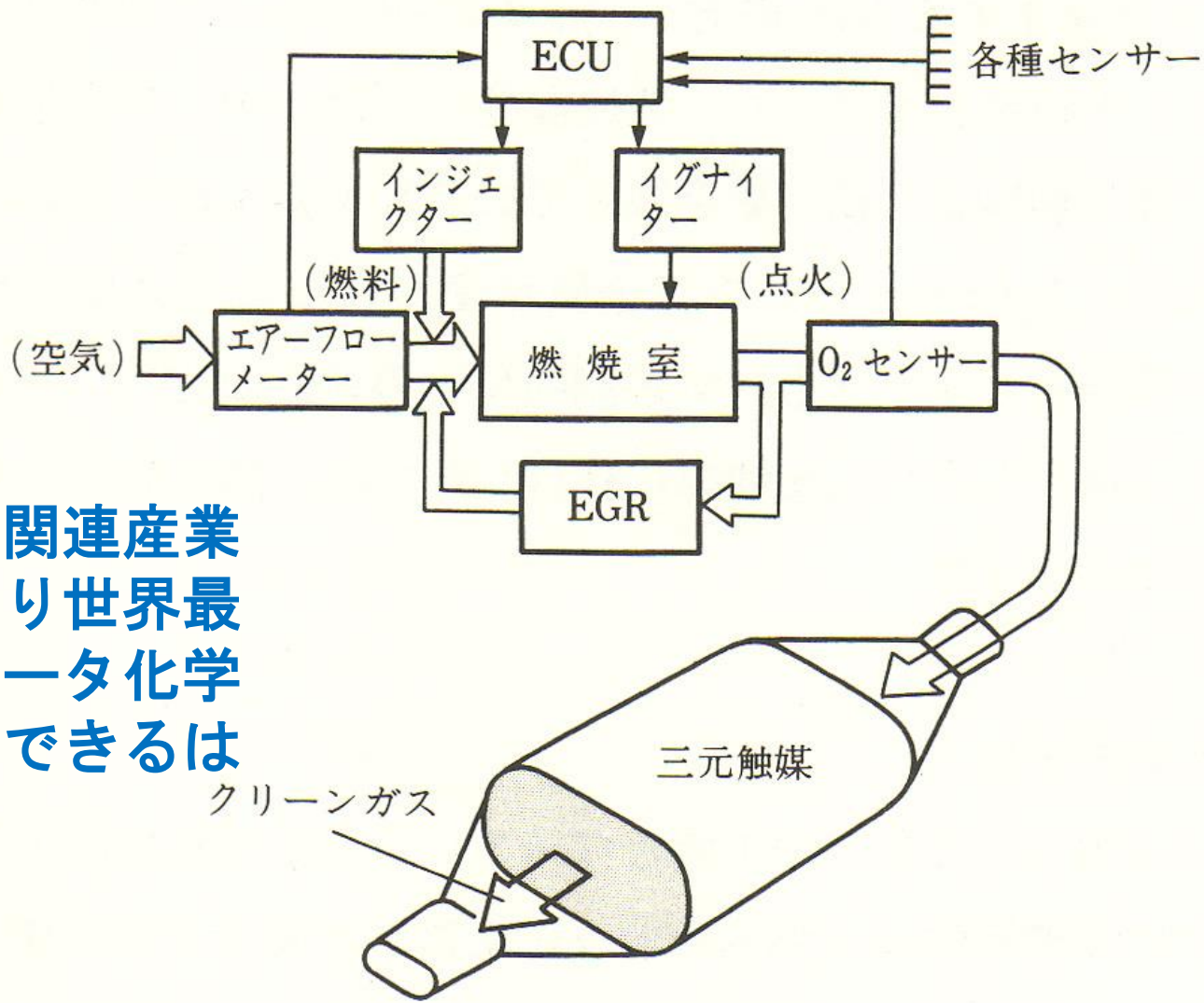
1987-2017(31年間)

(京都大学、東北大学)

コンピュータ化学: コンピュータ支援による分子設計・
材料設計

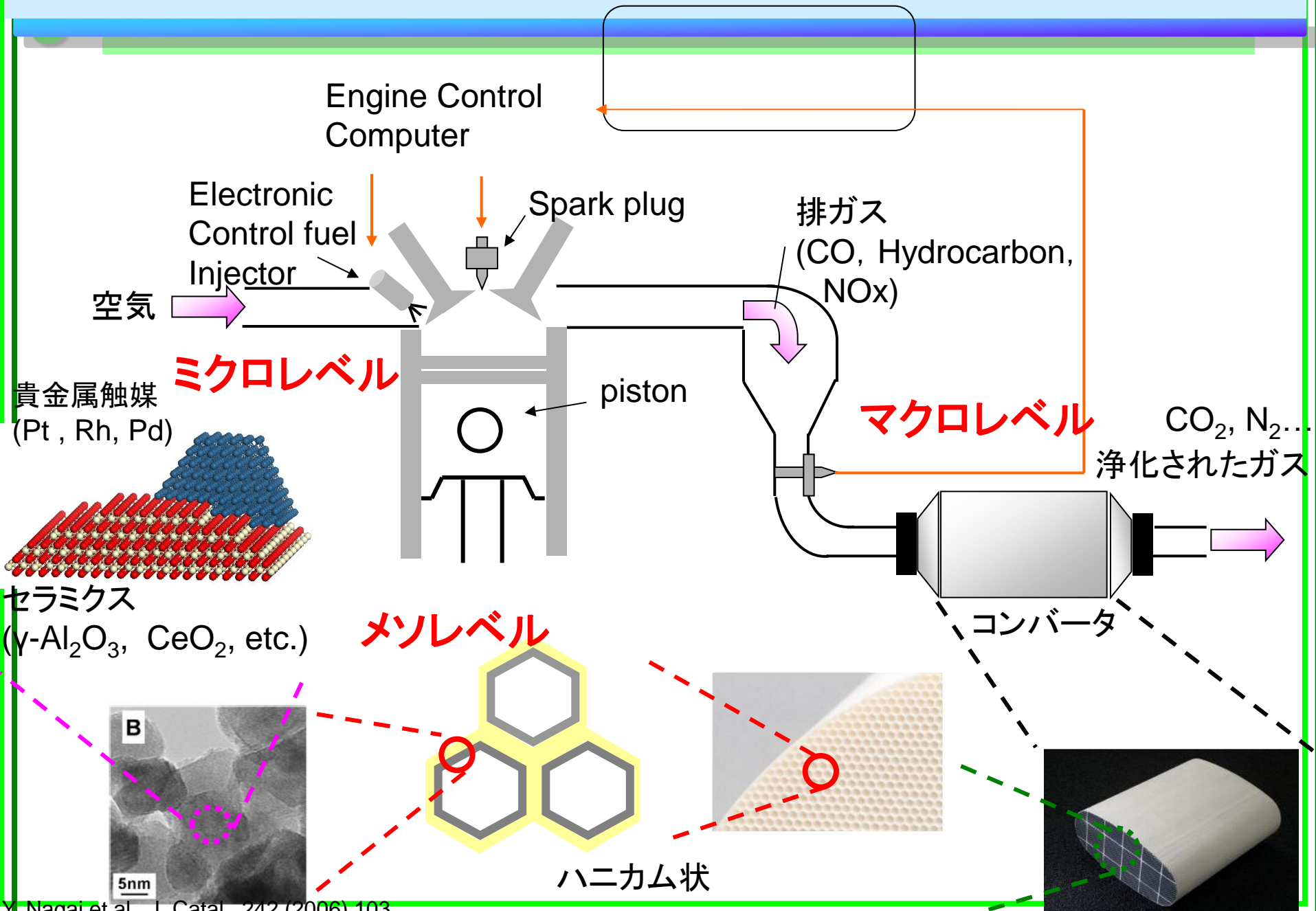
産業革新のための新しい化学

自動車排気ガス浄化のための三元触媒システム



日本の自動車関連産業との連携により世界最強のコンピュータ化学システム構築できるはず

トヨタ自動車の世界に先駆けて実用化（1977年）



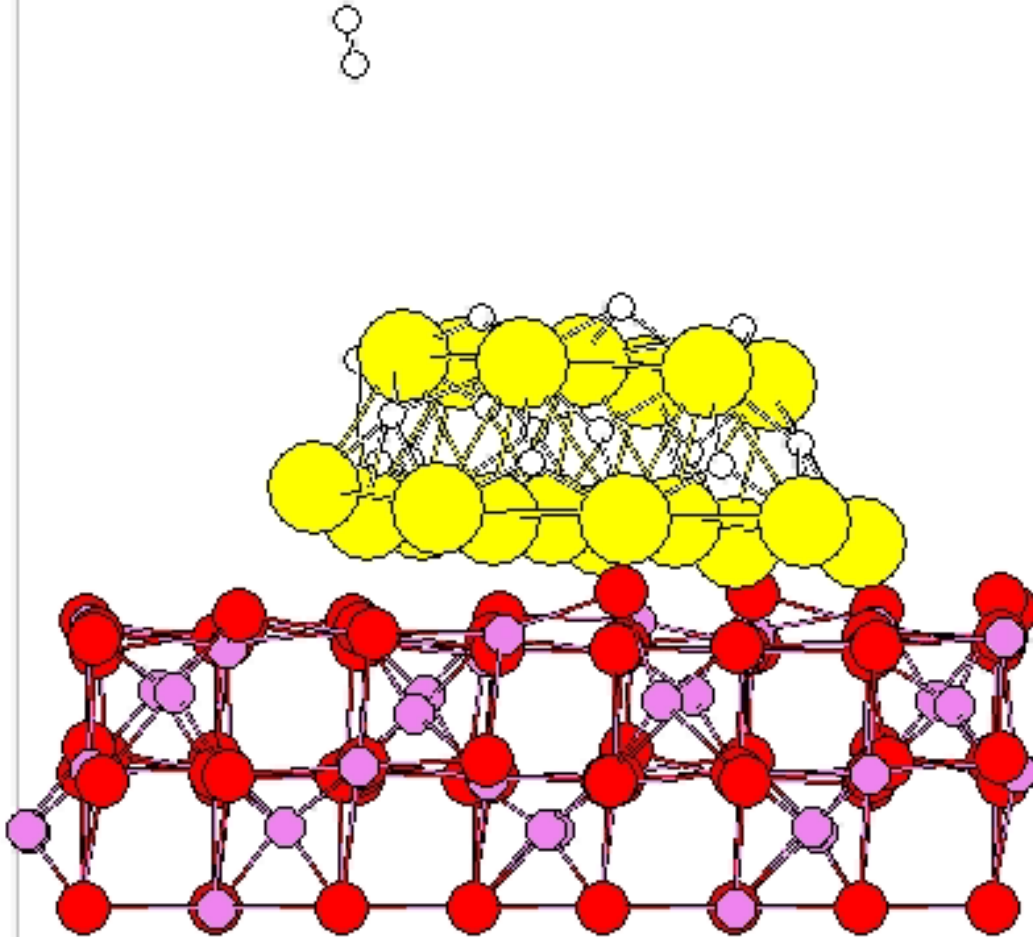
貴金属の優れた機能の解明: 水素のスピルオーバー現象

どこまで貴金属を削減できるか

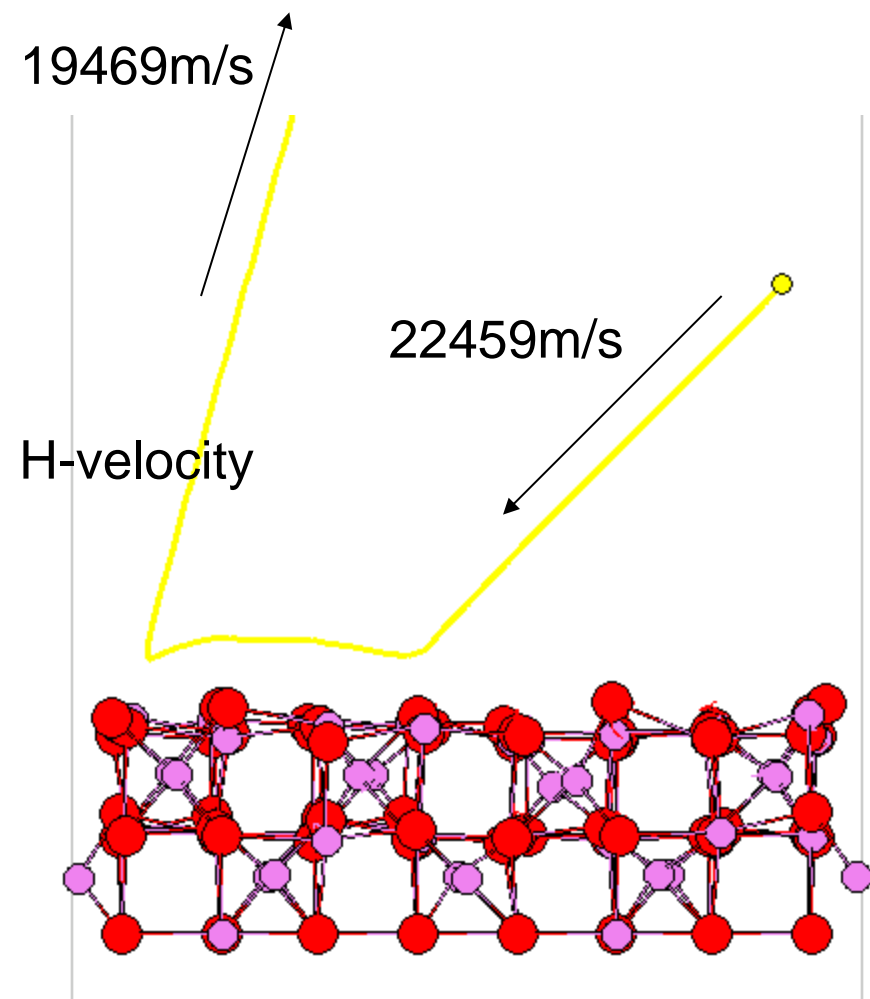
H₂からの
原子状Hの生成

Pt₁₉ cluster

Al₂O₃



Effects of γ -Al₂O₃ supports on H adsorption

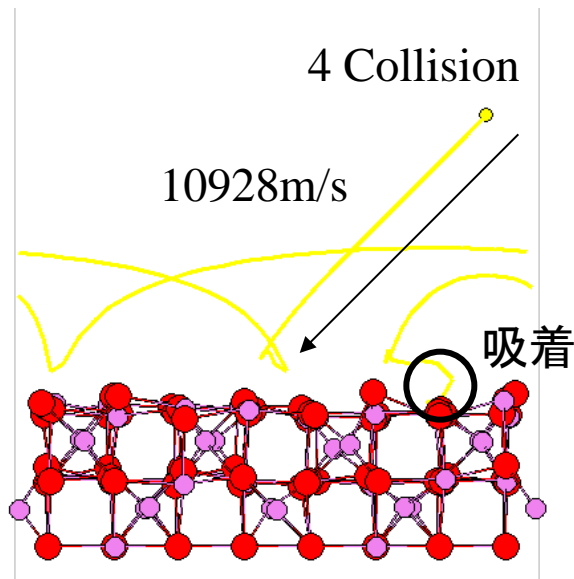
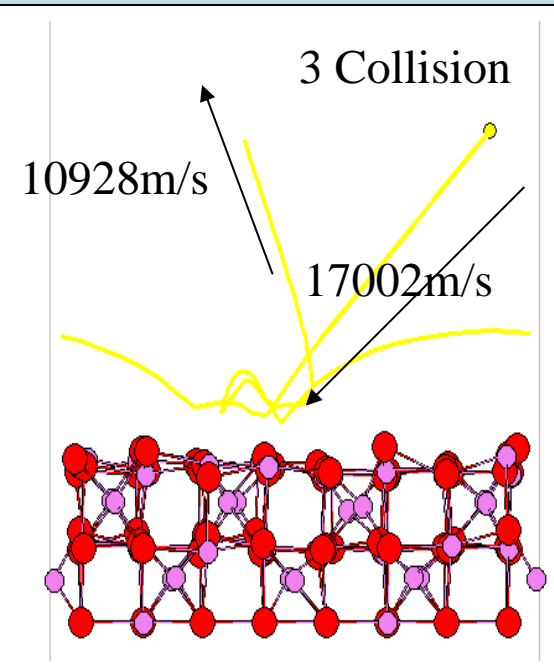
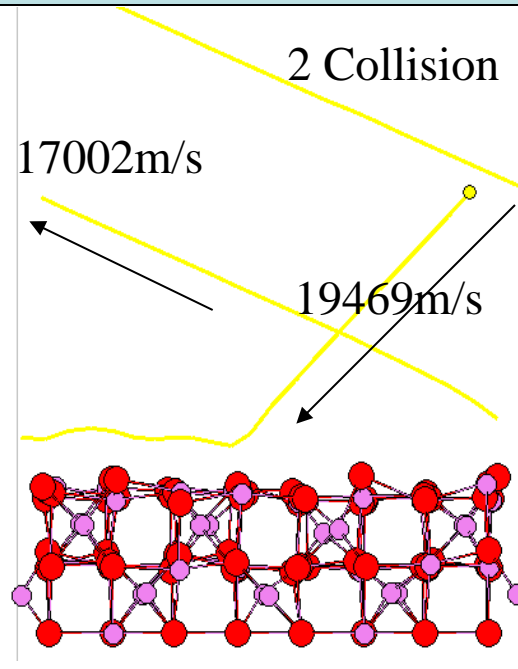
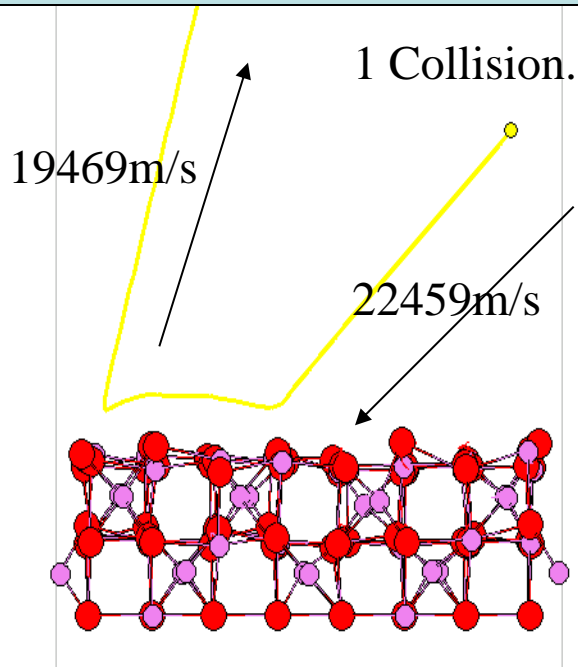


Parameter used between H-Al₂O₃

Morse 7.8[kcal/mol] 1.98[1/Å] 1.98[Å]

Initial rate of H
22459 m/s

MD calculation & adsorption of spillover H atom in Al₂O₃ surface



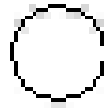
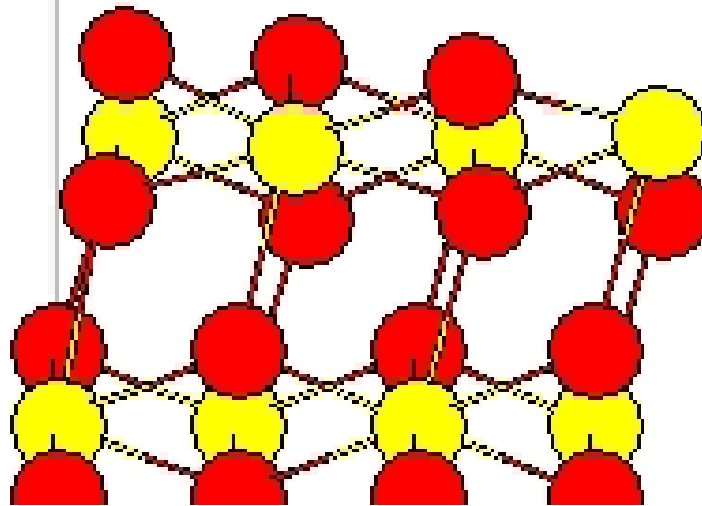
It decelerated little by little whenever colliding and it adsorbed on the Al₂O₃ surface after the fourth collision

Movies

3900 m.

Spilt-over
hydrogen atoms
are very reactive and
reduce CeO_2 and
produce H_2O and
oxygen vacancy.

CeO_2



H

O

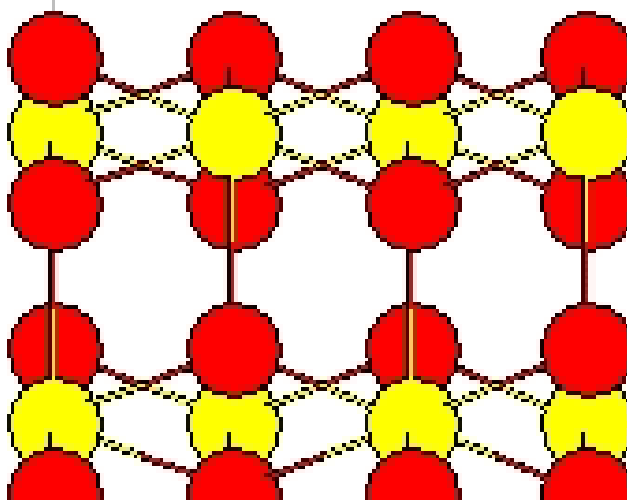
Ce

Movie

Molecular H_2
cannot reduce
 CeO_2 easily even
a temperature as
high as 873 K

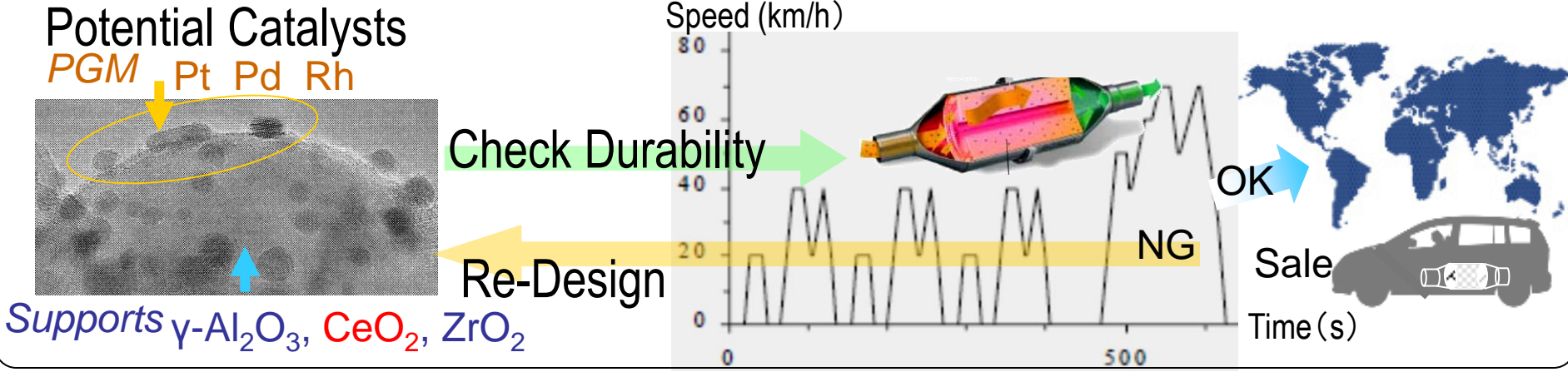
3900 m/s

CeO_2

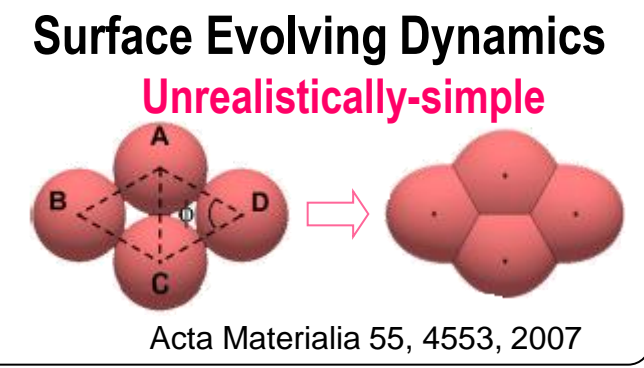
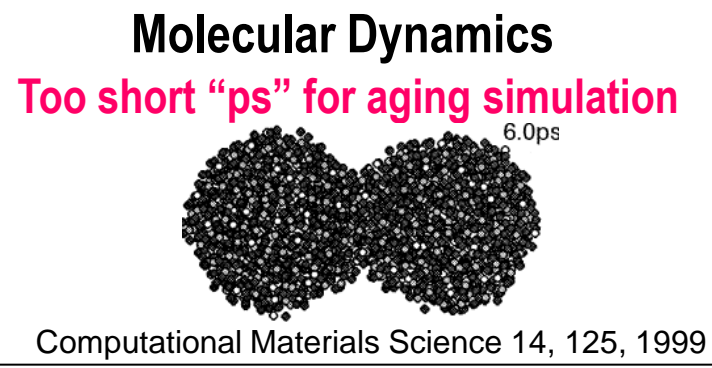
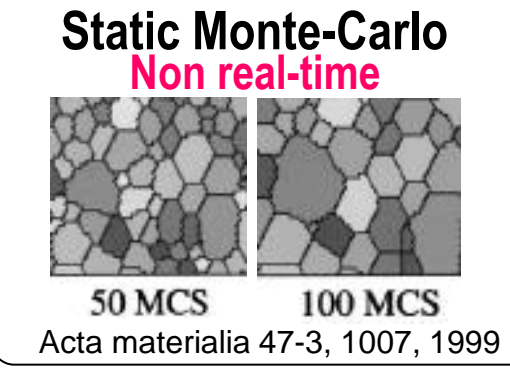


H_2

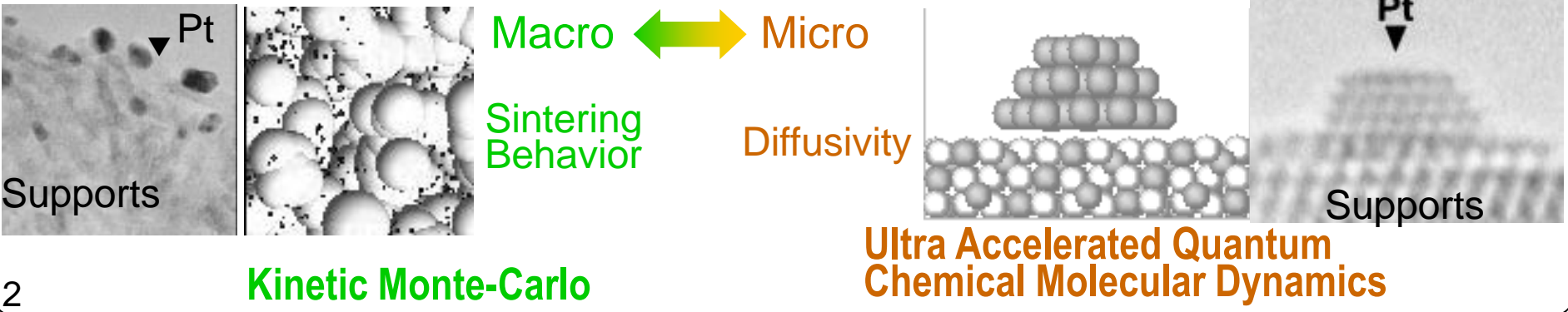
貴金属、レアアース等有効利用のための自動車触媒シミュレーション手法開発



Theoretical Works Background



Aim Multi-scale Simulation is applied for theoretical study on durability of catalyst.

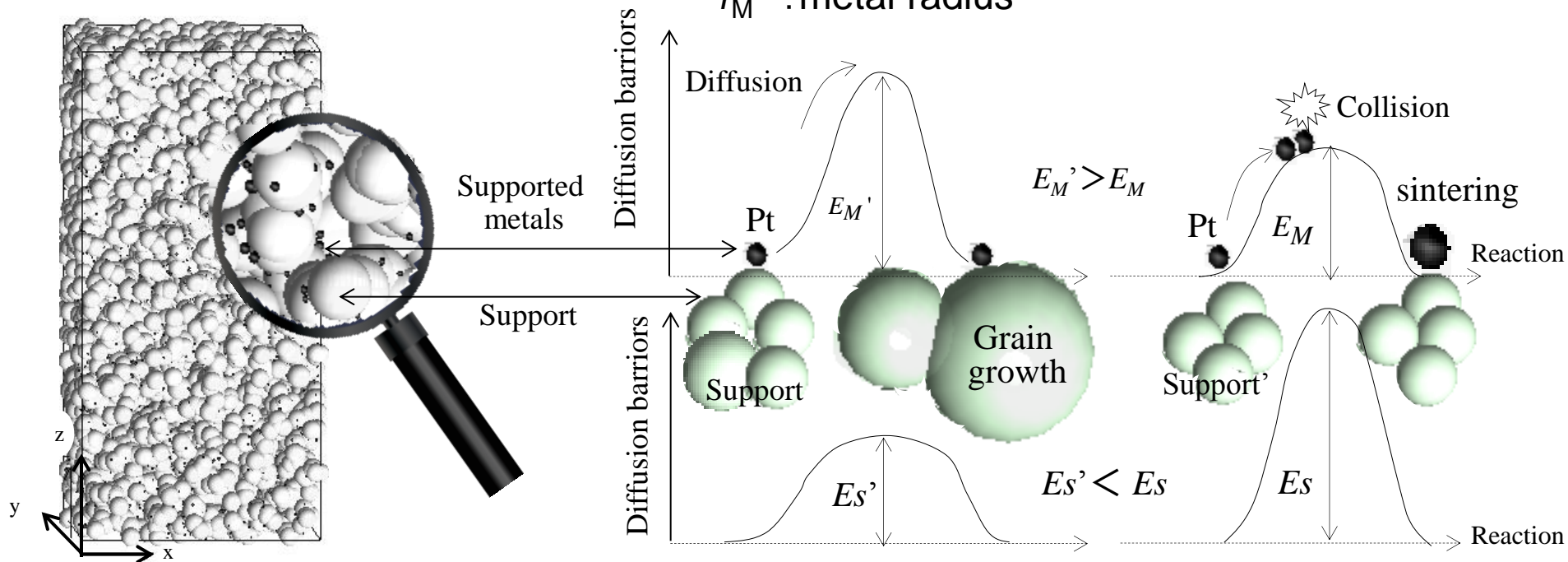


自動車触媒の劣化予測シミュレータ開発

Diffusion of Supported Metals: Pt, Pd, Rh

$$D_M(r) = D_{M0} (2r_M)^{-n} \exp\left(-\frac{E_M}{RT}\right)$$

D_{M0} : Diffusion coefficient of supported metals
 E_M : Activation energy for sintering of metals
 r_M : metal radius



Diffusion of Supports: Al_2O_3 , ZrO_2 , CeO_2

$$D_S(r) = D_{S0} (2r_S)^{-n} \exp\left(-\frac{E_S}{RT}\right)$$

D_{S0} : Diffusion coefficient of supports
 E_S : Activation energy for grain growth of supports
 r_S : support radius

n : Grain-size exponent R : Universal gas constant T : Absolute temperature

Algorithm of 3D-Sintering Simulator; *SINTA*

Modeling 3D support metal oxides + Support precious metals on the support

Read coordinates of Supports and Supported Metals

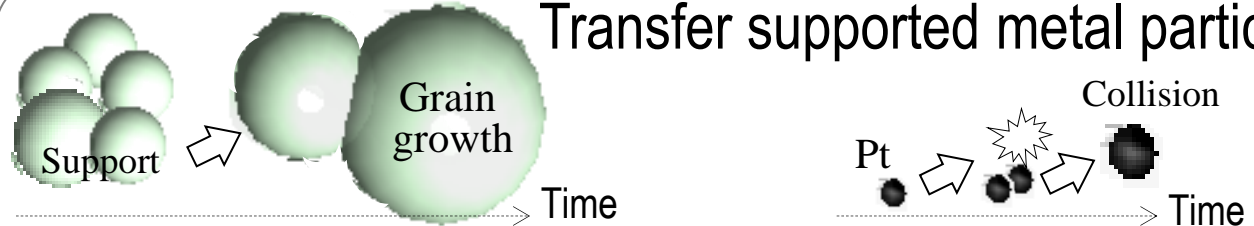
Decide diffusion direction of supported particles and supports by random number

Average migration distance of supported metals

$$\Delta xp = \sqrt{D(r)\Delta t}$$

D [m²/sec] : Diffusion Coefficient
 r [nm] : Radius of supported particles

Transfer supported metal particles



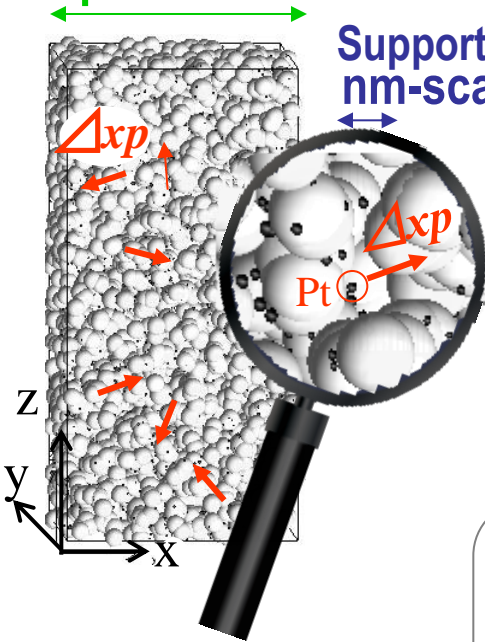
Judge Agglomeration of supported metals

Continue for set steps
unit of Hour, Day
for realistic aging scale

Output of calculation results

Support Metal Oxides
μm-scale

Supported Metals
nm-scale



Model & Condition for Macro-Scale Sintering Simulation

Model cell size $x=0.1\mu\text{m}$, $y=0.2\mu\text{m}$, $z=0.2\mu\text{m}$

Supported Pt amount: 2wt%

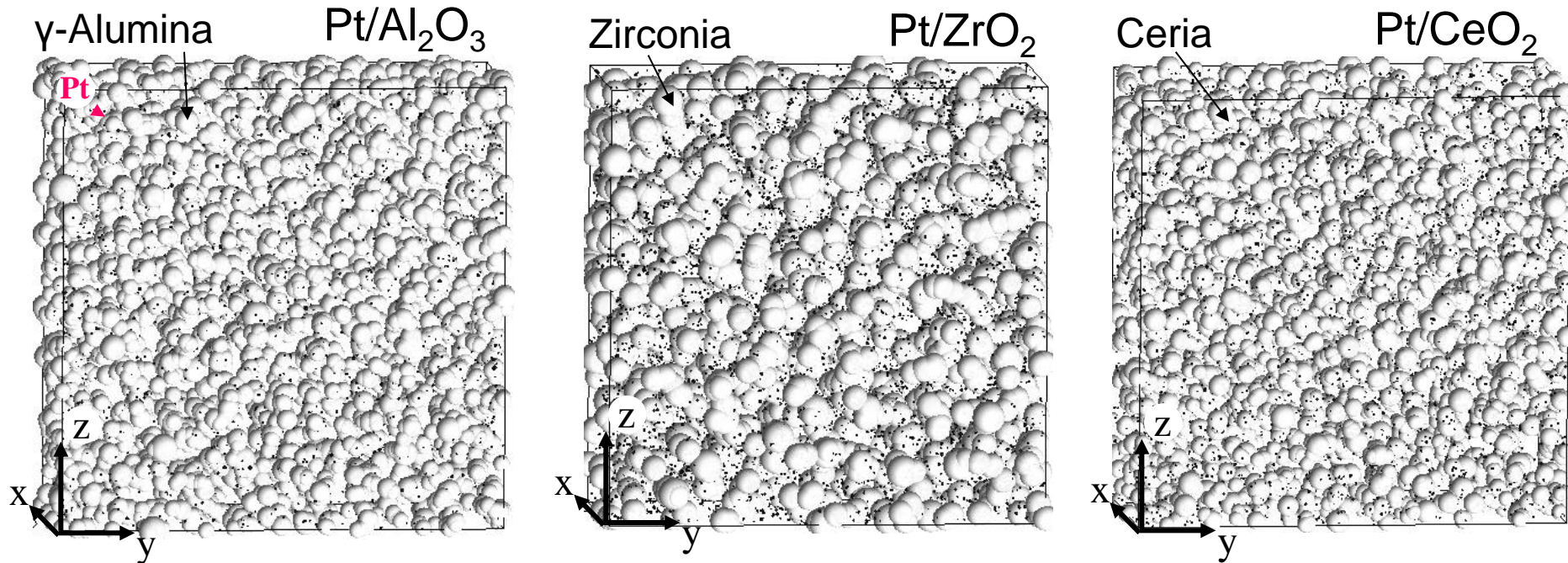


Table. Parameter for sintering simulation at $800.0\text{ }^\circ\text{C}$, 5 hours with $\Delta t=0.01\text{ s/step}$

$$D_S(r) = D_{S0}(2r_S)^{-n} \exp(-E_S / (RT))$$

	[m ² /s]	[kJmol ⁻¹]		[m ² /s]	[kJmol ⁻¹]		[m ² /s]	[kJmol ⁻¹]
D_{s0}	7.0E4	E_S 567	$D_{s0_tetragonal}$	2.9E4	E_S 506	D_{s0}	46	E_S 458
			$D_{s0_monoclinic}$	1.0E4	E_S 360			

$$D_M(r) = D_{M0}(2r_M)^{-n} \exp(-E_M / (RT))$$

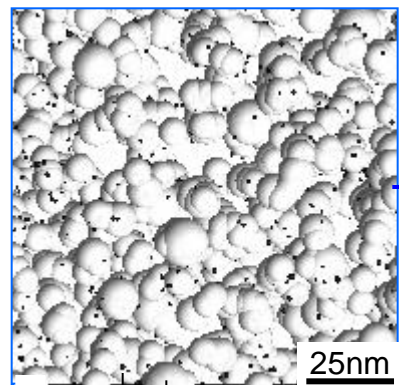
D_{M0}	1.0E-16	E_M 108	D_{M0}	1.8E-10	E_M 113	D_{M0}	1.0E-20	E_M 124
----------	---------	-----------	----------	---------	-----------	----------	---------	-----------

Pt/ γ -Al₂O₃ Sintering Behavior

Experimentally estimated by CO pulse method

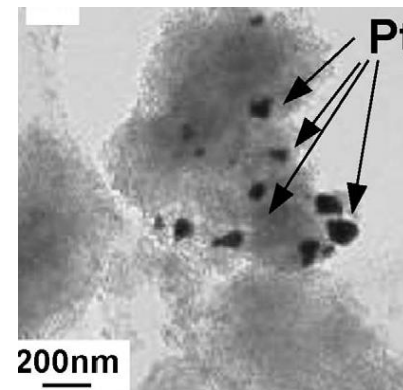
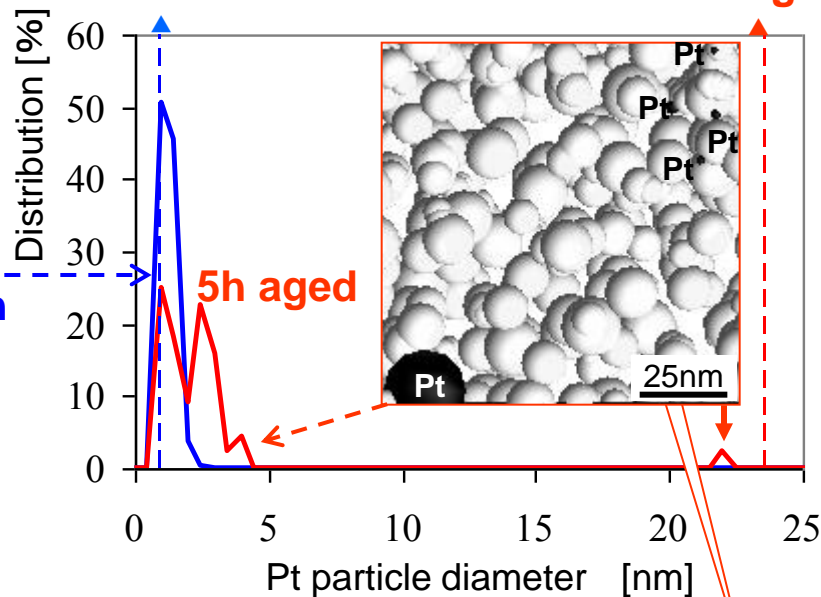
Fresh 1.0 nm

Aged 23.6 nm



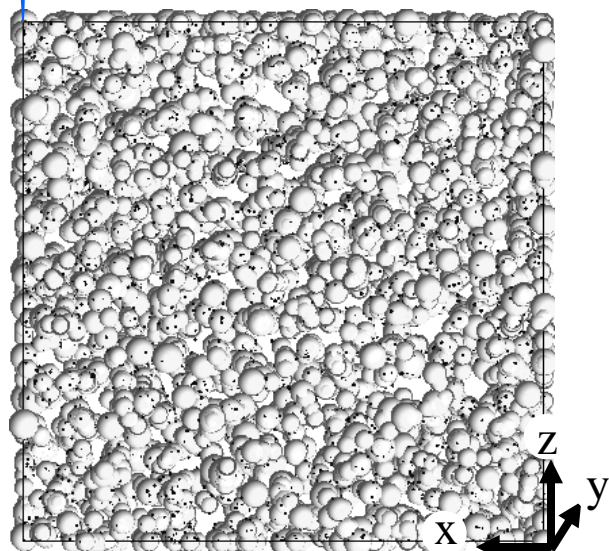
Pt γ -Alumina

Fresh

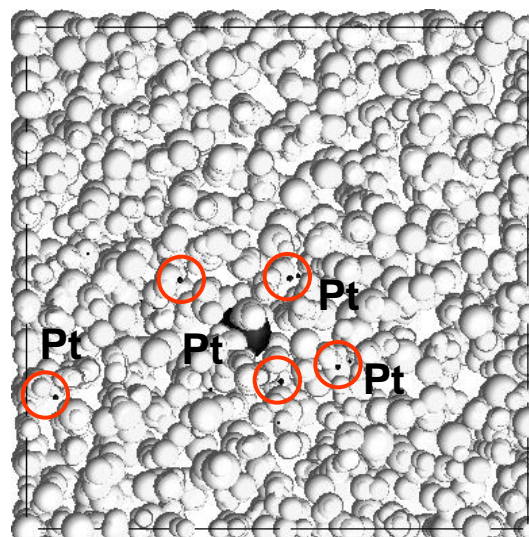


Journal of Catalysis
242 (2006) 103–109

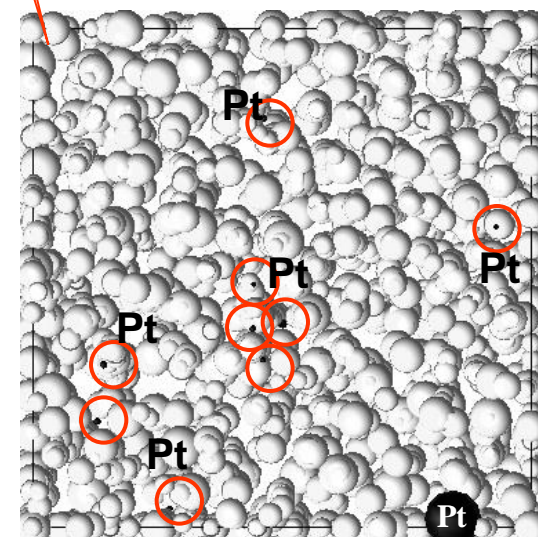
TEM images of Pt/ γ alumina
after air aging at 1073K



Fresh



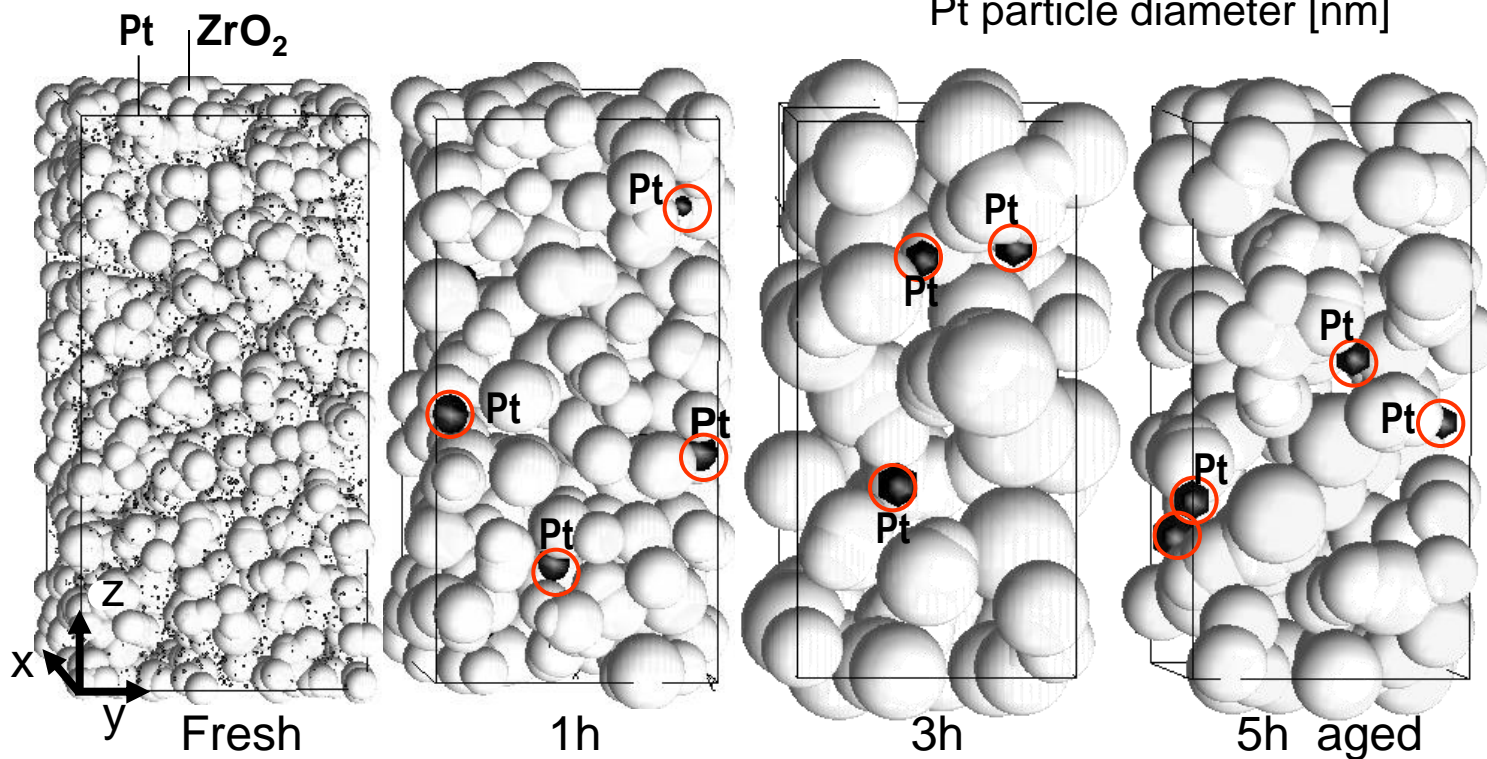
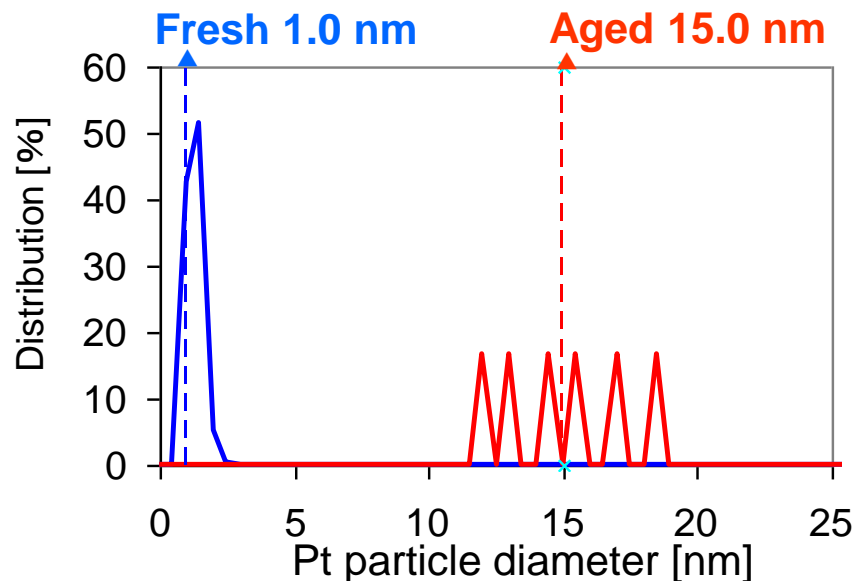
3 h



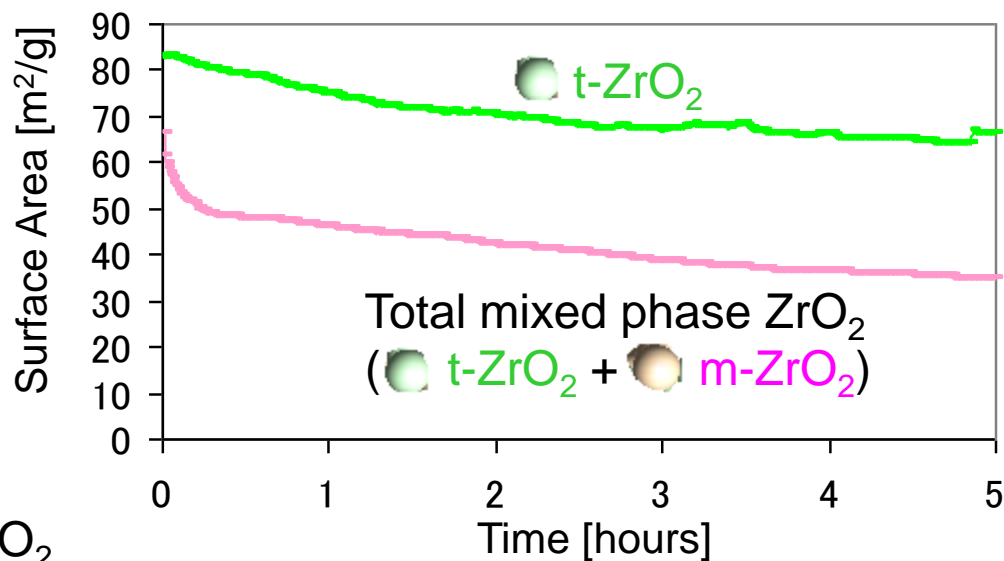
5 h aged

Pt/ZrO₂ Sintering Behavior

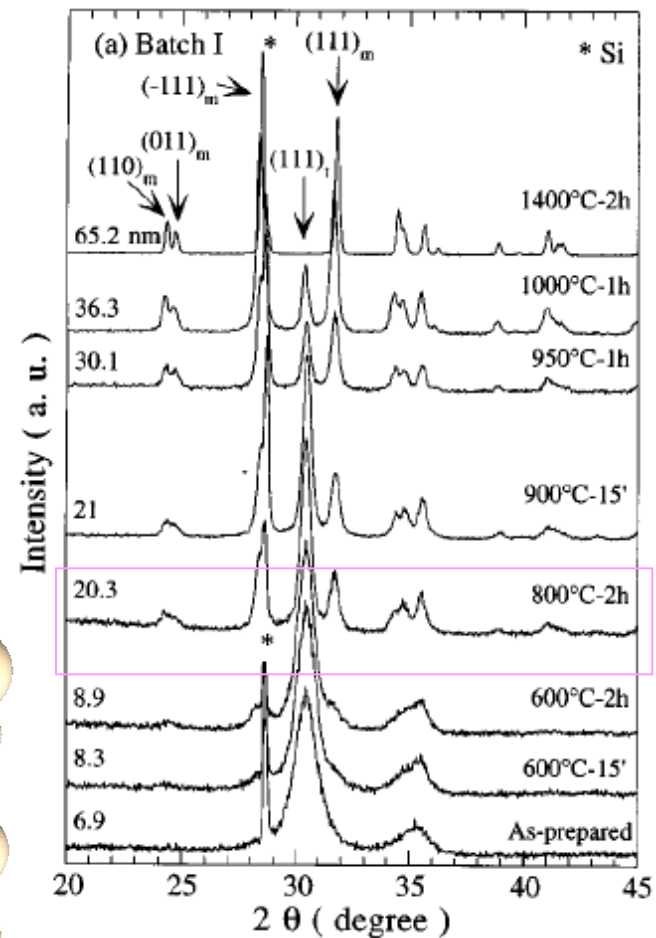
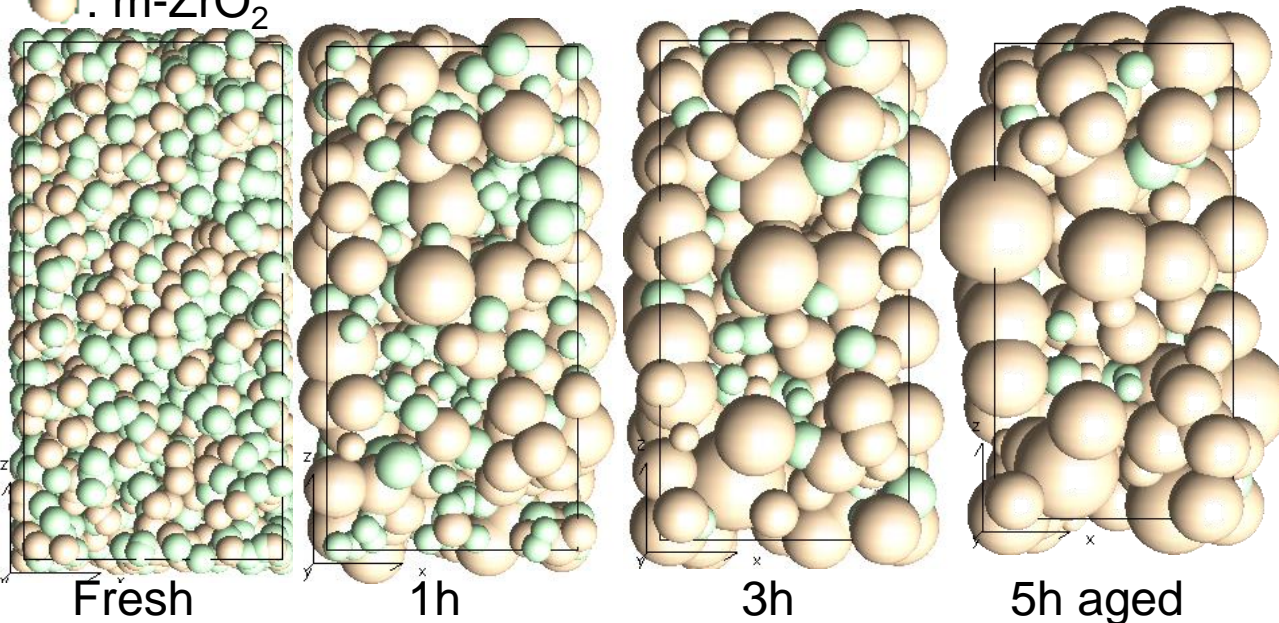
Experimentally estimated by CO pulse method



Multi Component ZrO_2 (t- ZrO_2 + m- ZrO_2) Grain Growth Behavior



● : t- ZrO_2
● : m- ZrO_2

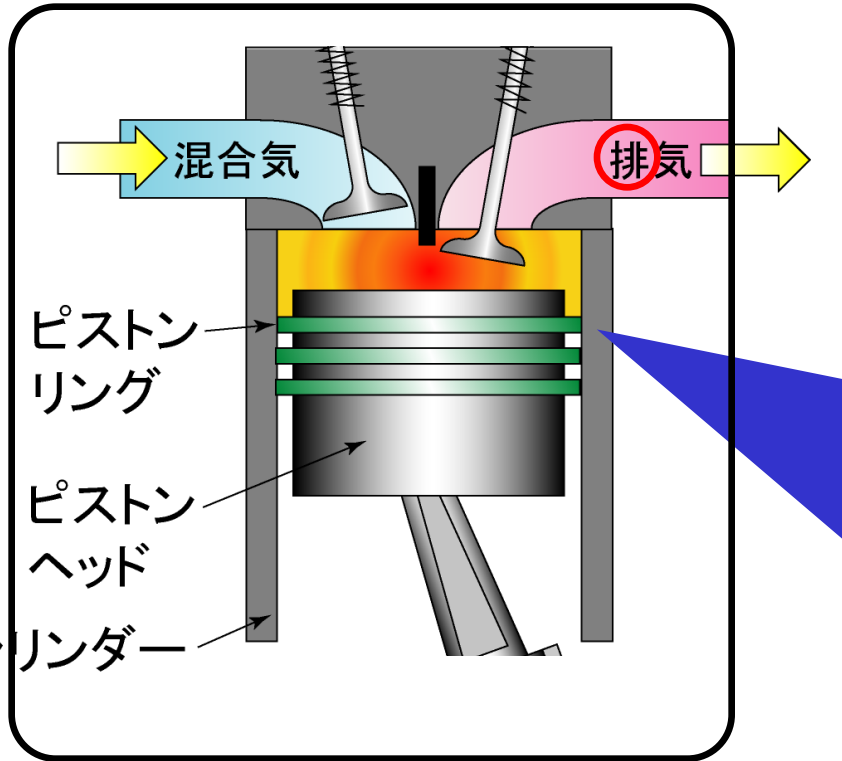


XRD of t-, and m- ZrO_2
versus crystallite size increase

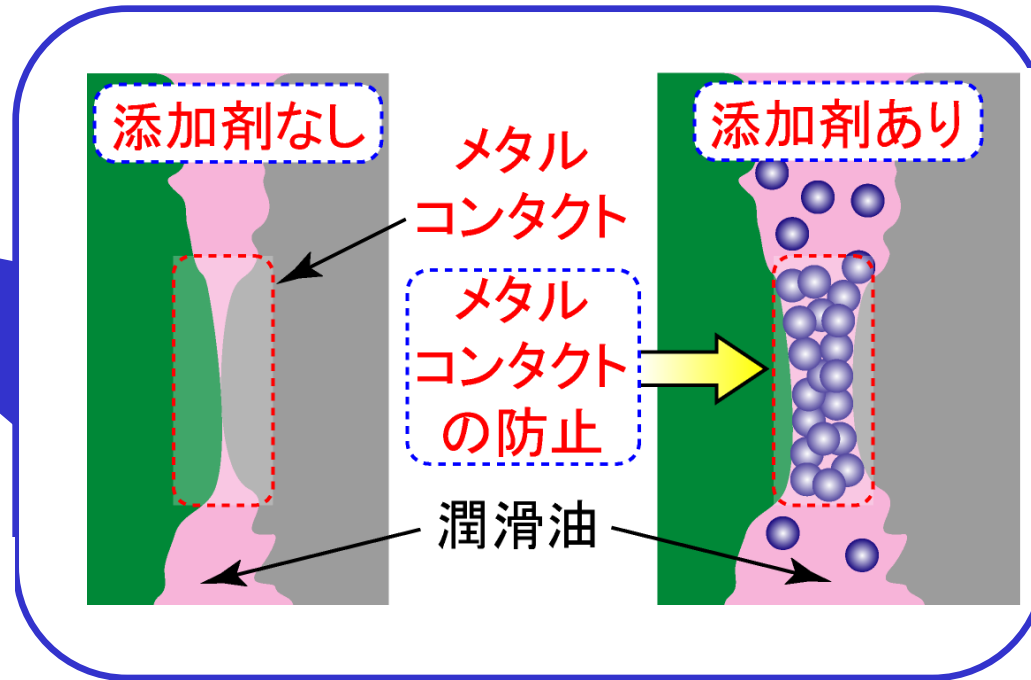
Journal of solid state chemistry
149, 399 (2000)

■ 自動車エンジンと摩擦・摩耗

—エンジン内部—
ピストンリングとシリンダーの
接触部

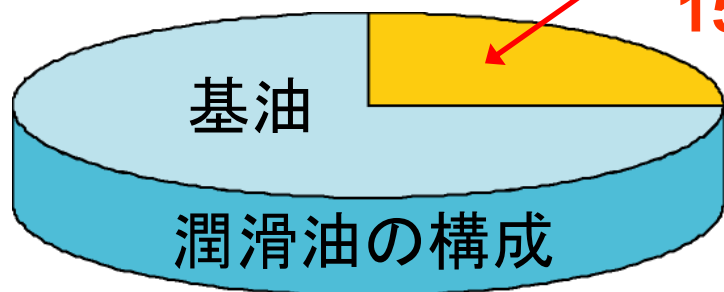


境界潤滑条件



エンジンを摩擦・磨耗から守る潤滑油添加剤

■ 潤滑油添加剤

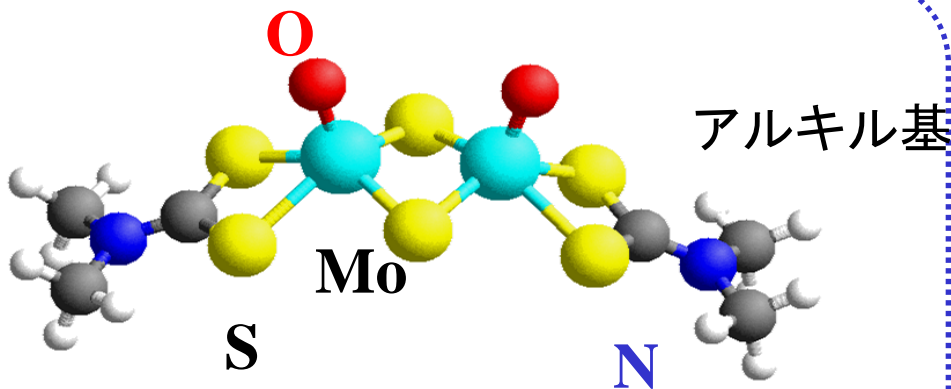


添加剤の種類

- 酸化防止剤
- 清浄分散剤
- 粘度指数向上剤
- 摩擦低減剤**
- 摩耗防止剤

モリブデンジアルキル

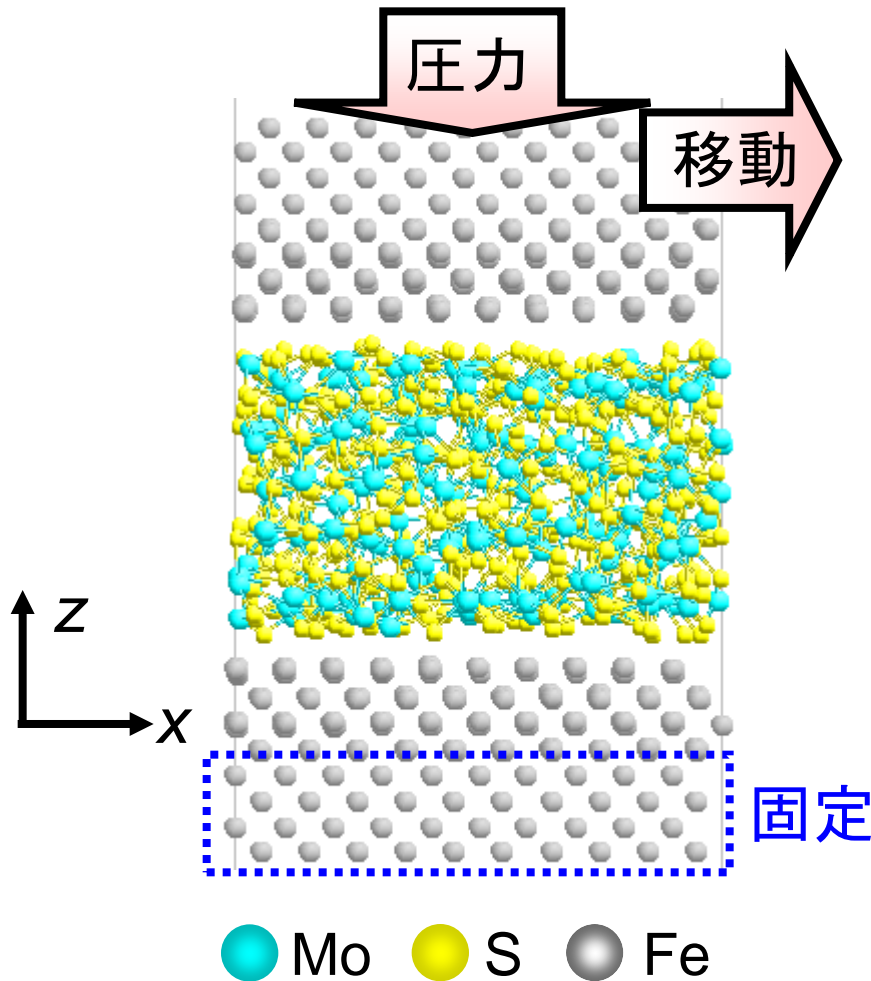
ジチオカルバミン酸 (MoDTC)



通常はオイル(基油)中に溶けているが、厳しい摩擦表面上で分解し、 MoS_2 を超低摩擦表面を形成、エンジンを守ると言われているがよく分かっていなかった。

摩擦・磨耗専用シミュレータ(Tribosim)の開発と応用

分子動力学法に多くの新しい手法を加え、摩擦・磨耗を原子・分子レベルで的確に解析できるように工夫



摩擦係数 (μ)

$$\mu = \frac{F}{W} = \frac{\text{摩擦力}}{\text{垂直加重}}$$

温度 : 300 K

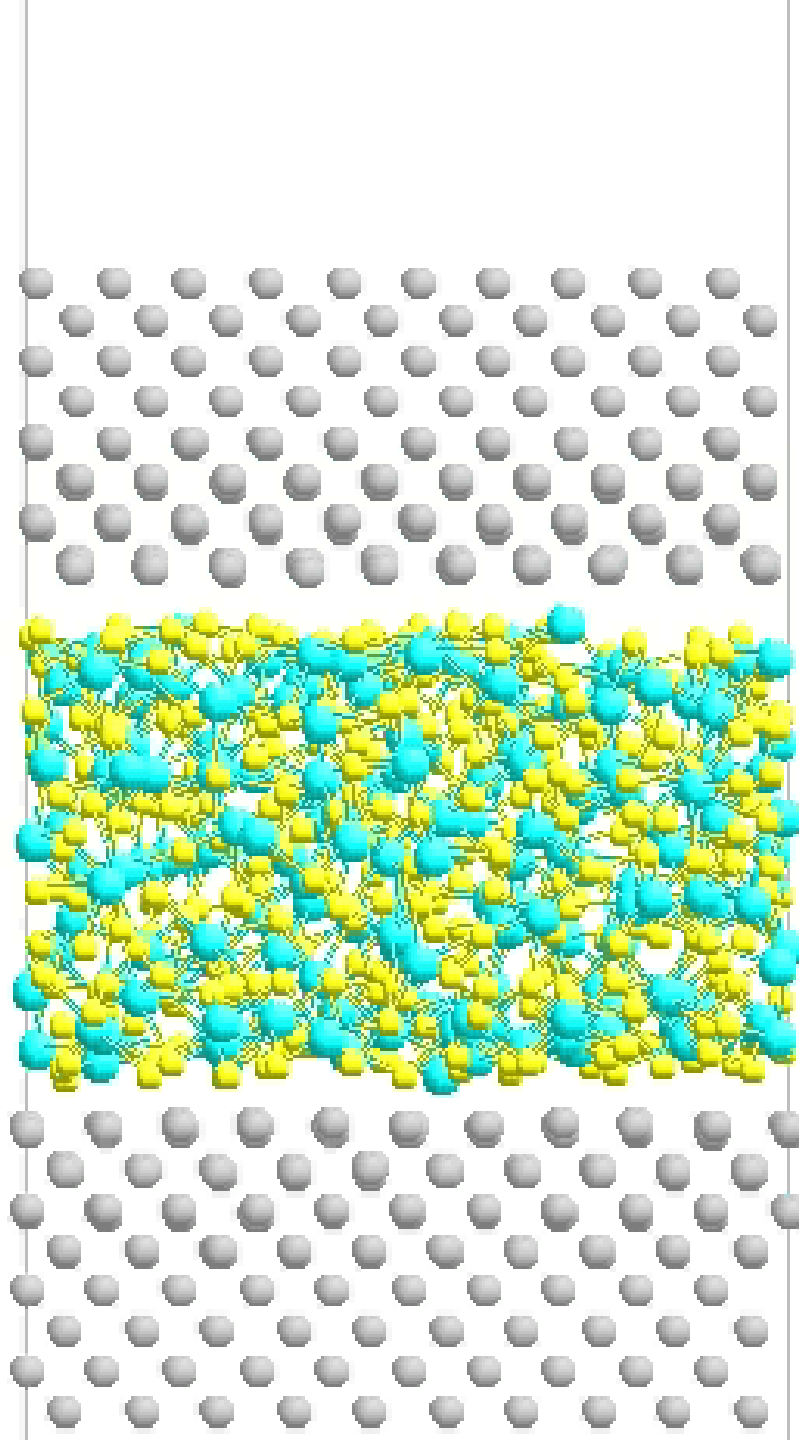
圧力 : 0.5 GPa

移動速度 : 100 m/s

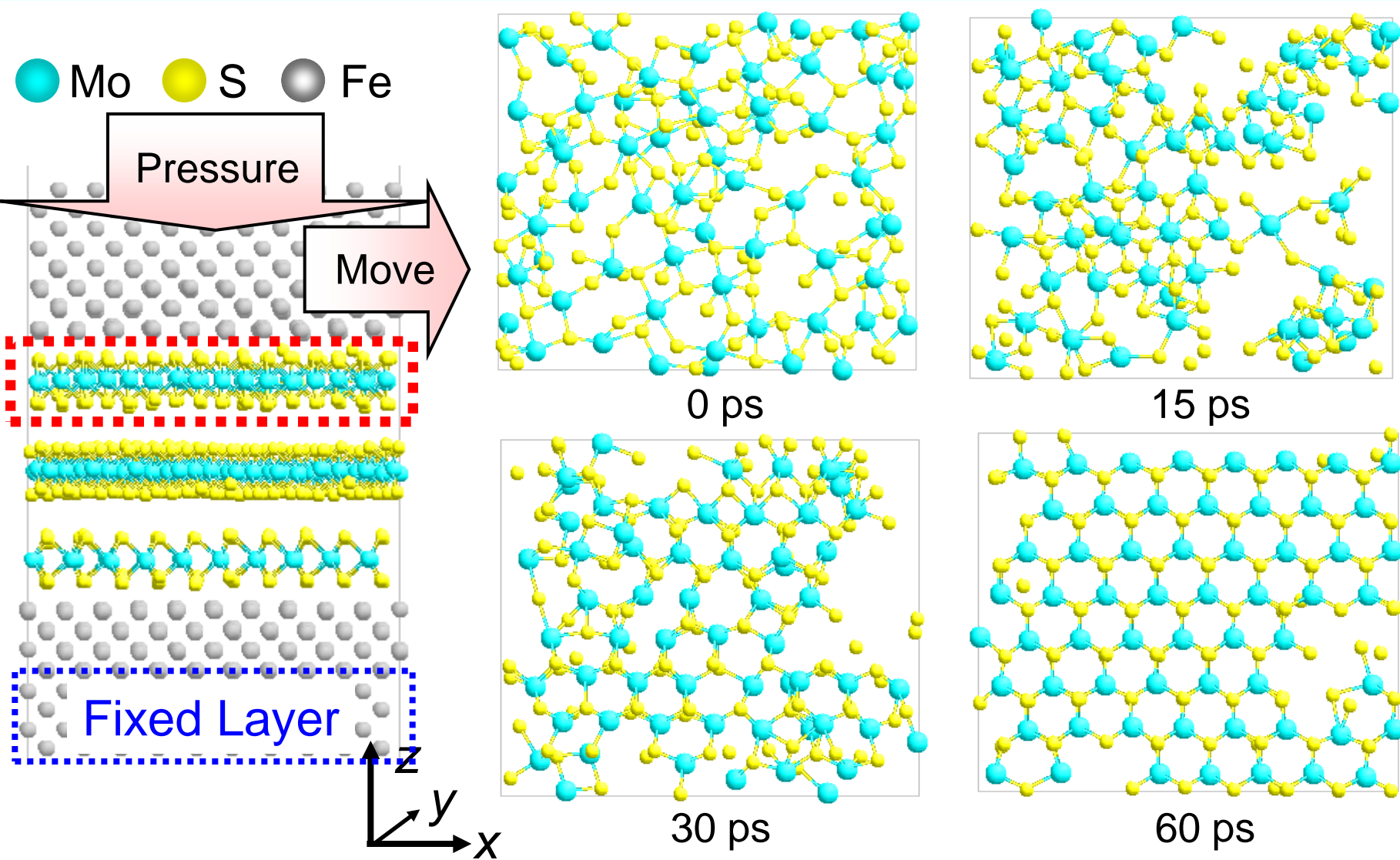
Mo

S

Fe

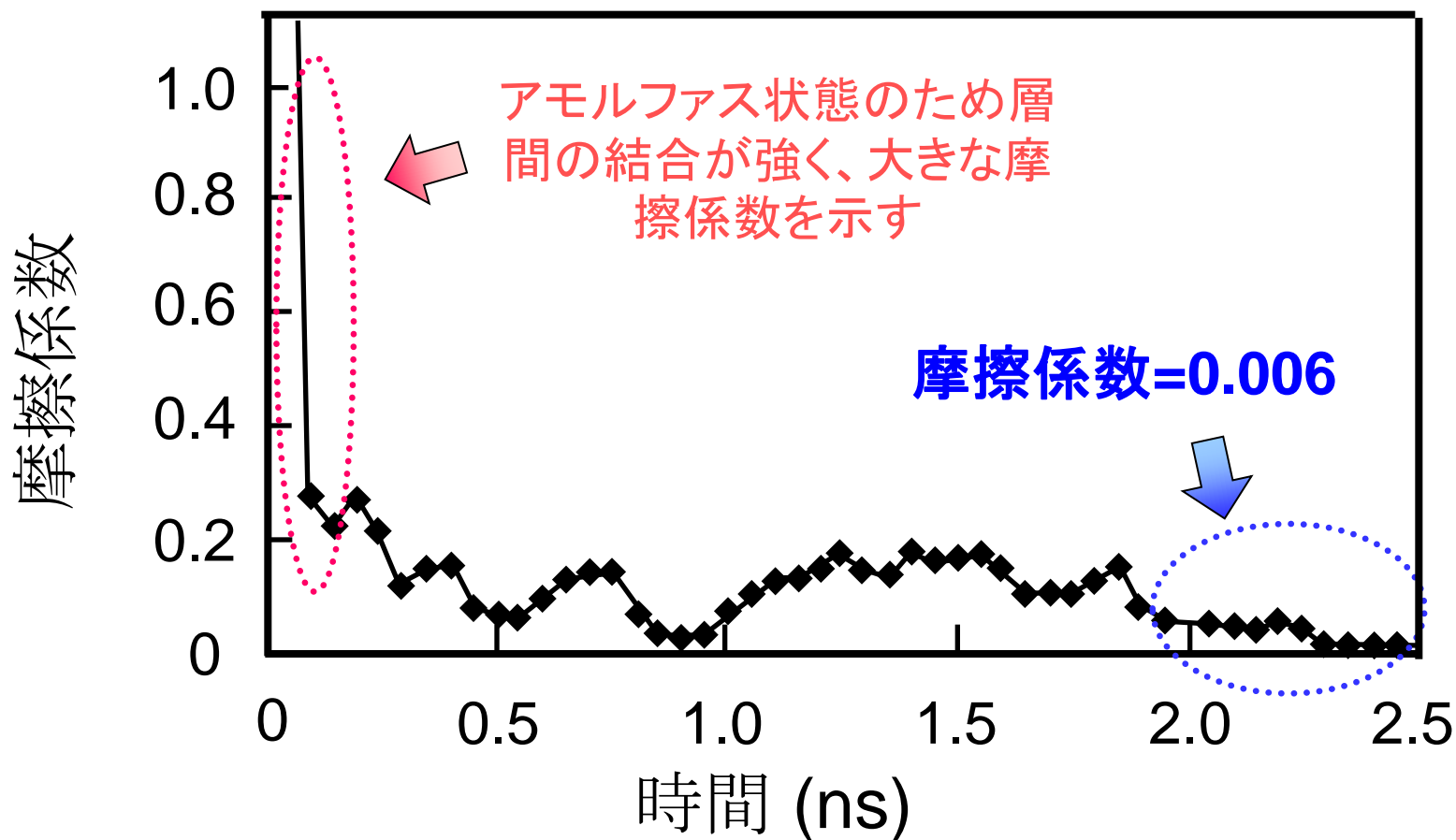


層状 MoS_2 Tトライボ薄膜の形成ダイナミックス



MoS₂分子間のトライボ化学反応により6方晶結晶構造が形成される。

超低摩擦状態形成過程のシミュレーション



摩擦環境下で徐々に MoS_2 潤滑被膜が形成され、超低摩擦状態が形成されて行く

機械工学・自動車分野へのインパクト

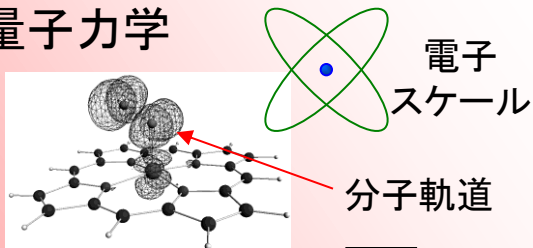


マルチレベルトライボロジーシミュレータの開発

トライボロジー分野における
マイクロ・メソ・マクロ連携マルチレベルシミュレーションの実現

マルチレベル 計算化学の発展

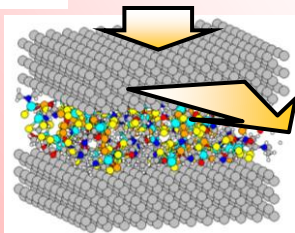
量子力学



分子動力学

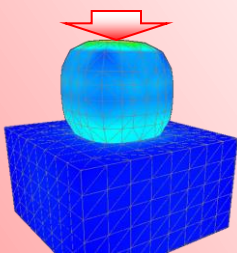
~10¹

ナノメートル
スケール



連続体力学

実機・実デバイス
スケール



化学・機械工学 融合領域の発展



医工学領域への展開



安全・安心社会、
低環境負荷・
省エネルギー社会への貢献

フリクションフリー技術：
超低燃費
自動車



[http://www.mssc-corp.co.jp/
isots16949.html](http://www.mssc-corp.co.jp/isots16949.html)

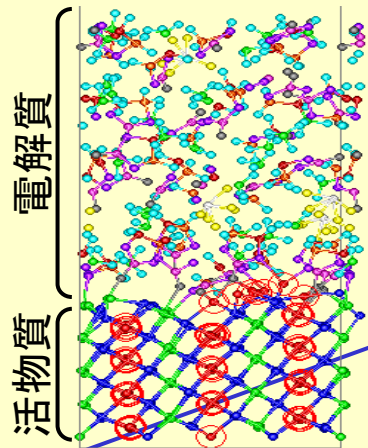
[http://car.nifty.com/ess/view/car/
motorshow/detail/a_5228.htm](http://car.nifty.com/ess/view/car/motorshow/detail/a_5228.htm)

しゅう動部長期安定性：
故障・不具合フリー技術

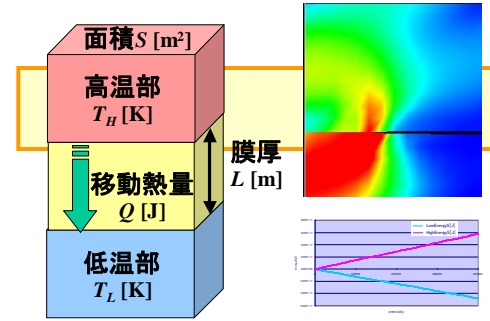
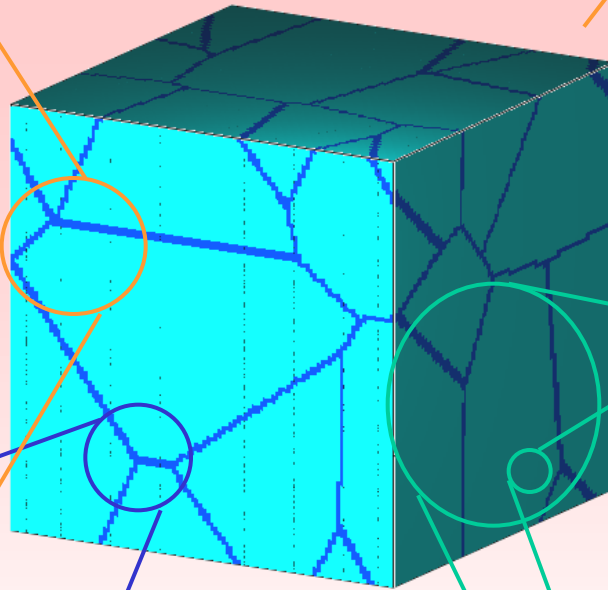
マクロ

熱・機械特性

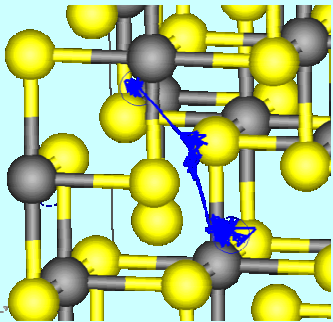
大規模量子分子
動力学法による
Liイオン拡散・反
応機構の解明



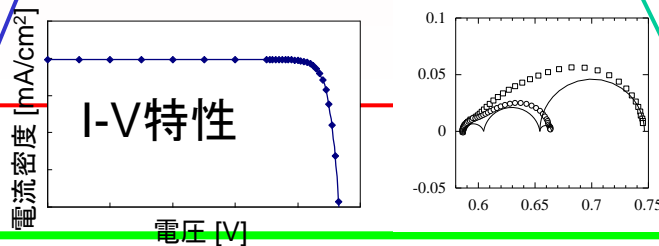
電極多結晶構造



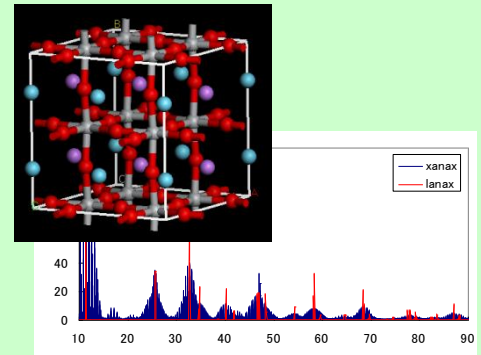
単結晶/多結晶
拡散係数



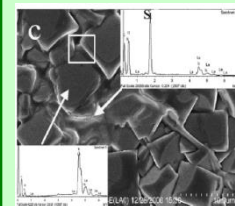
ミクロ物性・複雑な多結晶
構造に基づく実特性の
シミュレーション



本物構造の作製



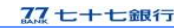
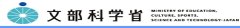
機器測定シミュレータ



焼結シミュレータ

産業革新のための実践的マルチレベルコンピュータ化学

東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室



長寿命・高信頼性・省エネ自動車・機械部品、材料開発を先導するマルチレベル・トライボロジーシミュレータ

マルチレベル計算化学の発展

量子力学
分子軌道
電子スケール

分子動力学
 $\sim 10^7$
ナノメートルスケール

連続体力学
実機・実デバイススケール

化学・機械工学融合領域の発展

深電機用圧縮機
Oscillator (10000 rpm)

安全・安心社会・低環境負荷・省エネルギー社会への貢献

フリクションフリー技術：
超低燃費自動車

http://www.mssc-corp.co.jp/iss161694.html

http://car.nifty.com/less/view/car/motorshow/detail/a_5228.htm

しゅう動部長期安定性：
故障・不具合フリー技術

自動車エンジン、後処理システム開発を強力に支援する マルチレベルハニカム触媒シミュレータ

貴金属触媒 (Pt, Rh, Pd)

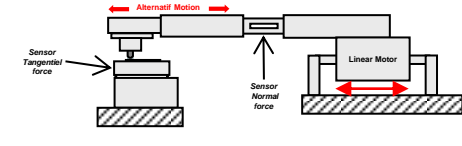
セラミックス (Y-Al₂O₃, CeO₂, etc.)

マクロレベル

ミクロレベル

モノレベル

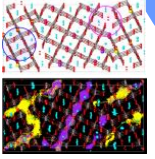
Y. Nagai et al., ChemCatChem (2004) 103



自動車企業
自動車部品企業
化学企業
機械企業
石油企業
ガス企業
電力企業
重工業企業
オリジナルソフトウェア群による国内外の多彩な企業との豊富な連携実績

<p>分子動力学・材料、実機、実デバイススケールでの高精度なシミュレーション</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 自動車用エンジン部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 2. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 3. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 4. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 5. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 6. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 	<p>第一原理計算力学・量子力学</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 2. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 3. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 4. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 5. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 6. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 	<p>ソフトウェア開発</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 2. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 3. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 4. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 5. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 6. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 	<p>触媒材料の触媒設計</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 2. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 3. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 4. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 5. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 6. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 	<p>触媒-自動車部品の設計</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 2. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 3. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 4. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 5. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD) 6. 自動車用部品 (Piston, Ring, Valve) の高精度なシミュレーション (MD/CFD)
--	--	---	--	--

蓄電池・燃料電池・太陽電池など次世代自動車に不可欠な電池開発、設計を支援するマルチレベル電池シミュレータ



大規模量子分子動力学法によるLiイオン電解質反応機構の解明

電極多結晶構造

熱・機械特性

本物構造の作成

模擬測定シミュレータ

模擬シミュレータ

電極多結晶拡散係数

ミクロ物性・複雑な多結晶構造に基づく実特性のシミュレーション

Li特性

電解質
電極触媒層
拡散層
電気伝導
Pt表面反応

H⁺拡散
H₂O拡散
電子伝導
Pt持たるカーボン
電解質コーティング
H⁺拡散
H⁺解離
高分子内H⁺/O₂拡散
活性点特性

計測とモデリング技術を融合し、実材料の開発に不可欠な界面、表面の構造解析を推進

多数の教員、研究員、技術スタッフ、プログラマーが協力して産学連携を必ず成功に導く強力な支援体制

各種計測シミュレータにより実験と計算化学を統合

×線回折シミュレータ

中性子線回折シミュレータ

ラマン分光シミュレータ

赤外分光シミュレータ

紫外可視分光シミュレータ

AFMシミュレータ

STMシミュレータ

TEMシミュレータ

SEMシミュレータ

EXAFSシミュレータ

「本物」の原子・分子構造を描き出す。本物シミュレーションの実現

企業の皆様へ
多くの企業と永年の連携で培ってきた世界的にも競争力をもつソフトウェア技術・ノウハウを、産学官金連携により地域の発展にも役立てられたらと期待しています。

成果と今後の課題

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
- ・女性、高齢者の活躍
- ・社会人の再教育

- ・若い世代による更にインパクトのある学術研究、産学連携研究、社会貢献
- ・新しい社会ニーズ、トレンドへの先進的対応

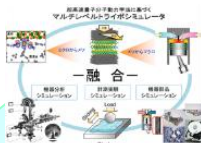
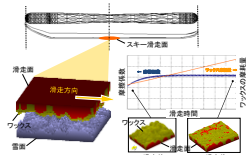
グローバル・ローカルな研究の進展と環境・安全・安心分野への展開

東北大学未来科学技術共同研究センター宮本研究室



地域企業との連携を推進

宮城県、地域企業と次世代自動車触媒に関する応用研究を実施。ハニカムコート実習などを通じ、大学の最先端技術のノウハウを宮城県産業技術センターと共有。
スキー競技のワックスを製造しているガリウム(仙台市)との共同研究では、実験・計測技術に計算化学を取り入れた「実験融合計算化学」をスキー用ワックスに適用するなど地域の産学官連携を推進している。

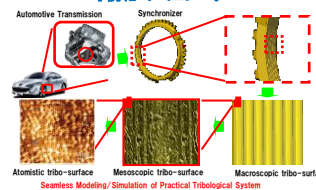


世界企業との連携を推進

国内に拠点を置く企業との連携については、引き続き多彩な分野で強力な連携を進めているが、海外に拠点を置く世界企業との連携も進んでいる。例として、フランスTOTAL社とは、共同でエンジンオイルに関する応用研究を実施。若手研究者を研修生として受け入れ、独自に開発したマルチトライボシミュレータの知識、ノウハウを伝授している。

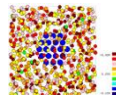
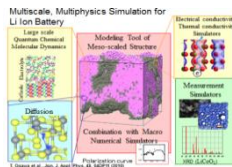


マイクロ-メソ-マクロ シームレスシンクロナイザ
可視化・シミュレータ



教員、研究員、技術スタッフ、
プログラマーの強力な支援体制による
産学官連携の推進

環境・安全・安心シミュレーションの展開



東日本大震災を契機に、様々な分野で環境・安全・安心への関心が広がっている。自動車産業、エネルギー産業など多彩な分野の環境・安全・安心シミュレーションを推進している。



JAEA
その他企業

共同

宮本
研究室

東日本大震災により原子力発電は大きな事故を引き起こしたが、それからの復旧は最重要な課題である。同時に、原子力システムの安全・安心を飛躍的に向上させることにも取り組んでいる。

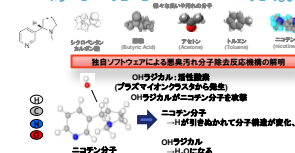
Post-Project 未来への展望

人工知能融合
マルチスケール・マルチフィジクス
コンピュータ化学による
新しい東北・活力ある日本への貢献

世界的な展開が不可欠な自動車産業、エネルギー産業分野などに加え、日常にある製品の汚れ、悪臭、耐久性、安全性などにもコンピュータ化学を活用し、地域の製品の世界的なブランド力の向上にも貢献する。



汚れや悪臭を
原子・分子レベルで分解



Agenda

1 東北大学未来科学技術共同研究センター(NICHE)における産学連携研究

2 コンピュータ化学による産学連携研究:成果と課題

3 日本工学アカデミーへの期待

産学連携研究の飛躍的な発展 のための課題

- 大きな社会、経済インパクトを実現するための(長期的な)戦略
- 世界からもっと大きな研究資金を獲得するための組織的な戦略、国際的なアライアンス実現

工学アカデミーへの期待