

jh180082-MDHC

牛島知彦(日本ゼオン(株); JACI 次世代CCWG代表)

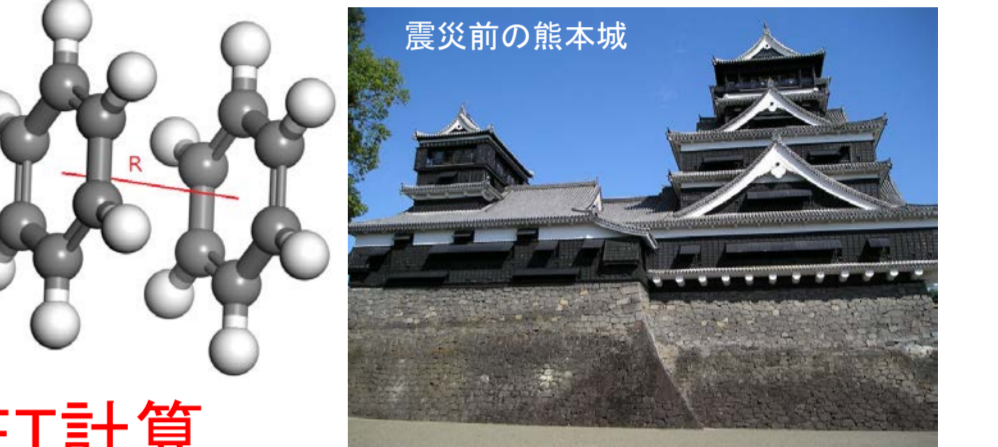
生体高分子内・分子間における弱い相互作用の検討から触媒設計への応用

共同研究者 千田範夫(クロスアビリティ(株)) 佐藤孝雄(連絡責任者) 橋本智佳子他10名

(コンピュータケミトリ分科会・次世代ワーキンググループ(CCWG)・(公社)新化学技術推進協会(JACI))



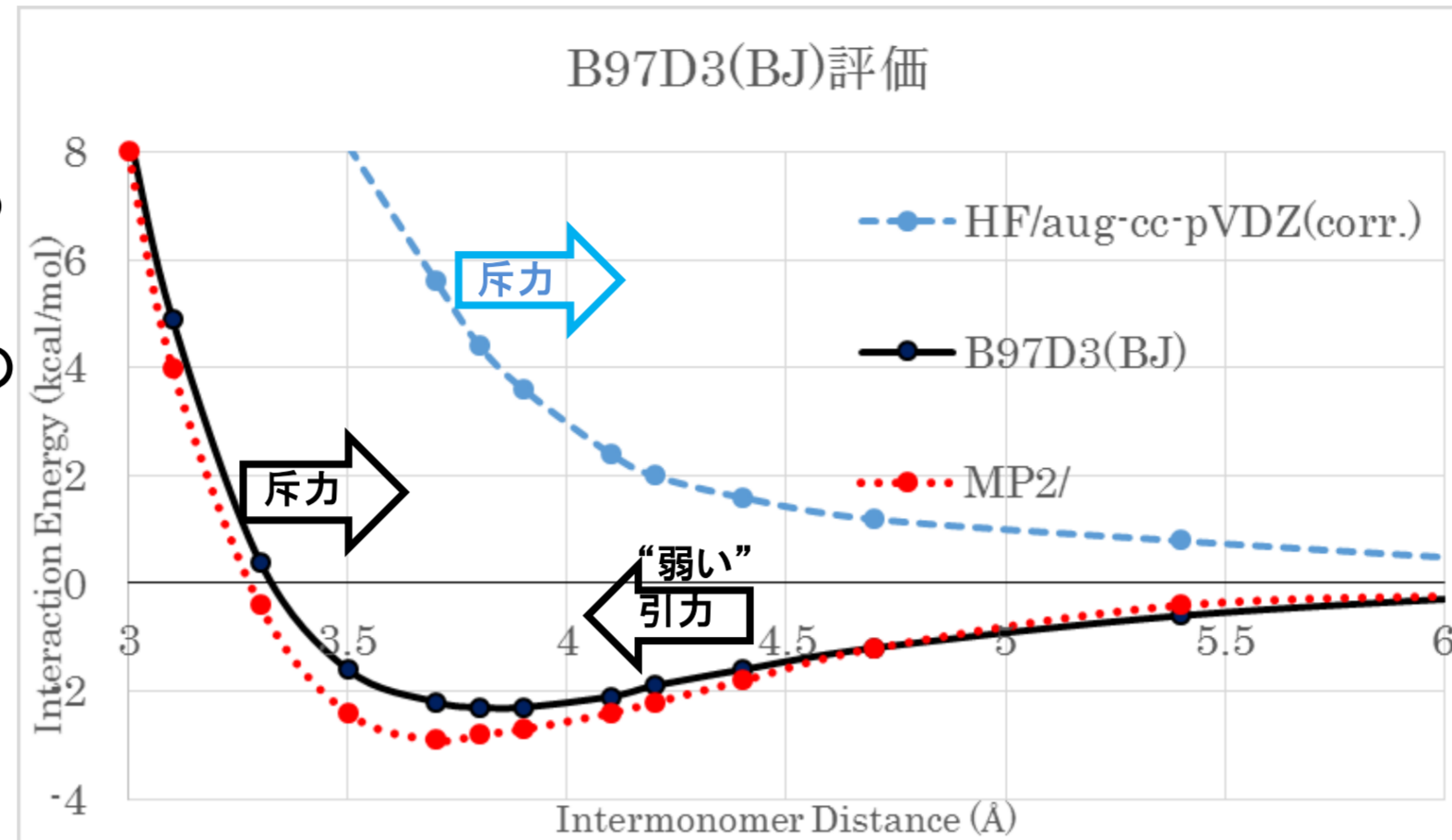
震災のため現在修復中 ©2010熊本県くまモン #K29590



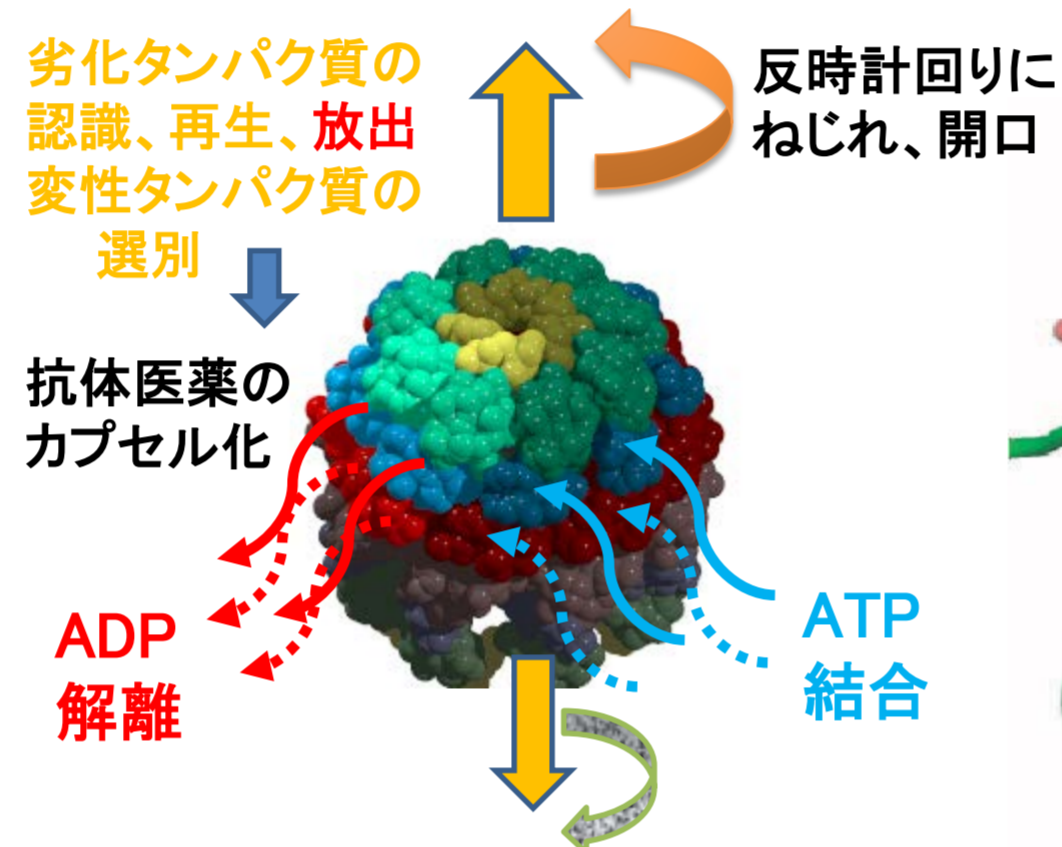
有機色素の分子設計

I) ベンゼン二量体の分子間相互作用

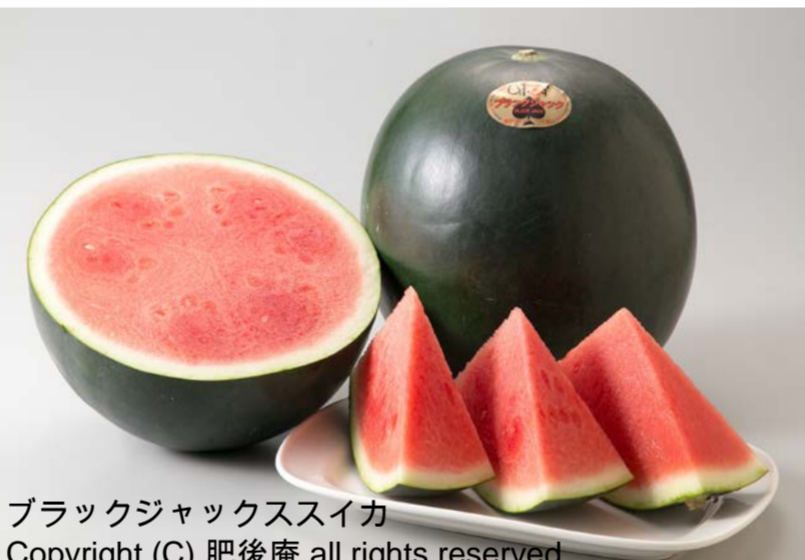
- 従来のHartree-Fock(HF)法やDFT法では...
BLYP-D2法などDFT-D法を用いることで短時間での評価が可能になりつつある
これらの手法を最適化し、従来計算困難であった“弱い”相互作用(引力)を評価できる条件を見出す
現時点では多変量解析による予測で、B97D3(BJ)/aug-cc-pVTZ辺りが有用だと考えられ、これらの手法を他の課題にも適応する予定



II) BSSE補正できるCP計算法によるサブユニット間相互作用エネルギー

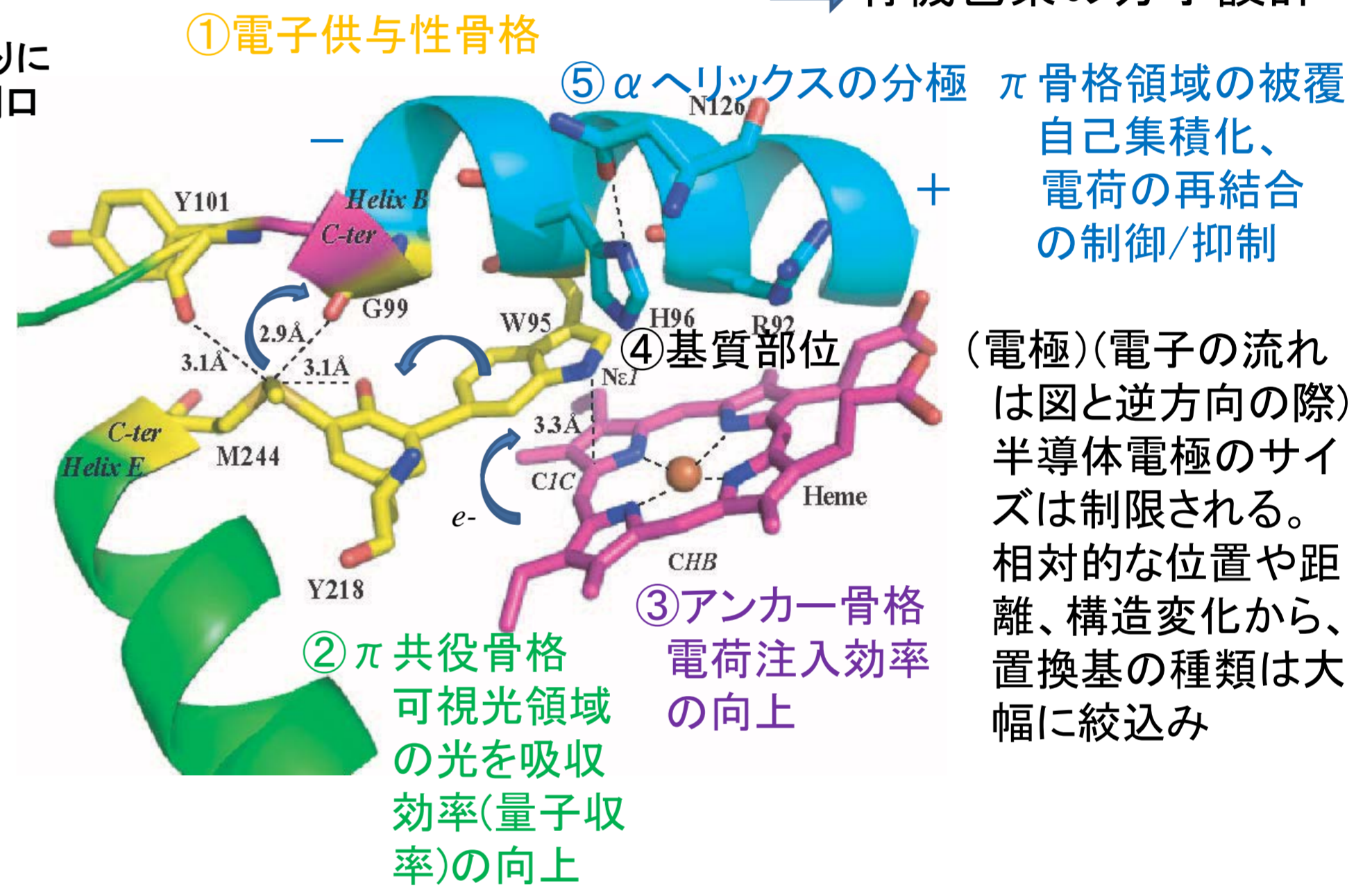


熊本県はスイカ生産量日本一



ブラックジャックスイカ Copyright (C) 肥後庵 all rights reserved.

III) 酵素内電荷移動のEET計算



(電極)(電子の流れは図と逆方向の際)半導体電極のサイズは制限される。相対的な位置や距離、構造変化から、置換基の種類は大幅に絞込み

VI) Winmostar™とは?

分子モデリングから量子化学計算・分子動力学計算・固体物理計算の実行、および計算結果の表示・可視化までをPC上で実現するソフトウェアです。

Winmostar™の機能

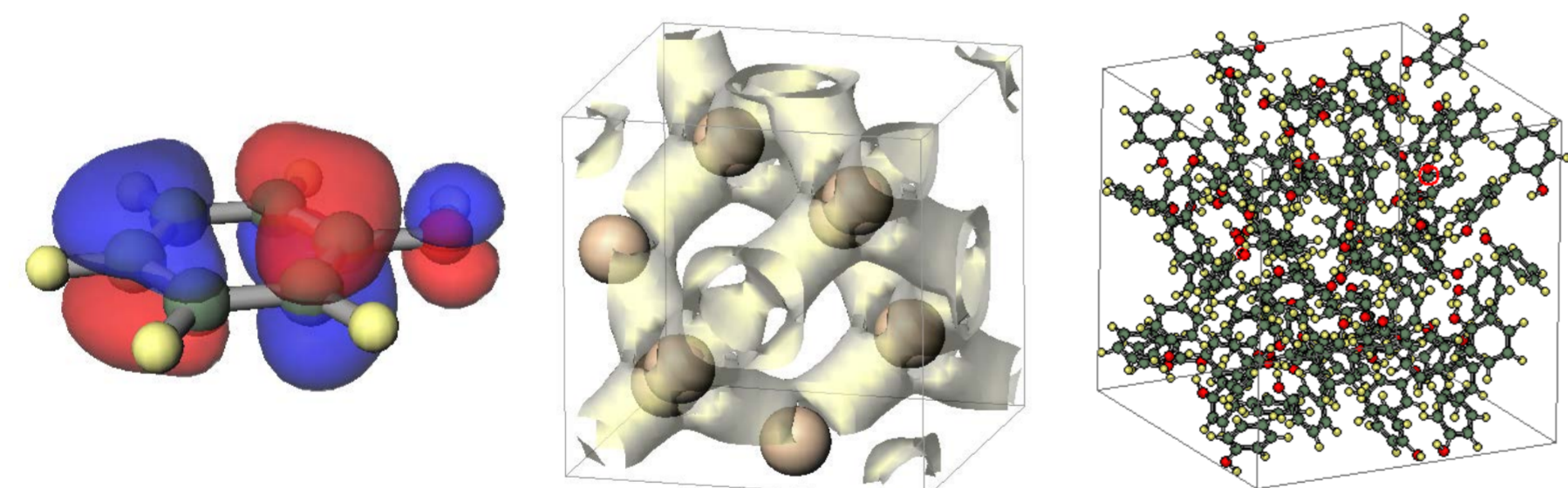
- モデリング・可視化等の基本機能に以下が加わっています。
ポリマービルダ(モノマー登録、ポリマービルダ、ポリマーセルビルダ)
界面ビルダ
結晶ビルダ、表面切り出し、スラブ作成(真空層挿入)
点群解析(対称化および非対称単位抽出)
Balloonを活用した簡易配座探索
SMILESによる分子構造入力
分子表面積/体積、アスペクト比算出
Sterimolパラメータ算出

#2018年1月12日現在、自動車・電機・化学・素材・医薬品メーカー、国研・大学など644ユーザのシングルライセンス、42機関での年間ライセンス契約があります。

2018/01/15 Copyright (C) 2008-2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved. 1

VII) 実行できる計算の種類

- 量子化学計算
固体物理計算
分子動力学計算



- 電子密度、分子軌道、点電荷、静電ポテンシャル、IR・ラマン、UV-Vis、NMRスペクトル、反応座標(IRC)解析、遷移モーメント
格子定数、電子密度、点電荷、静電ポテンシャル、XAFSスペクトル、仕事関数、バンド図、DOS計算、有効遮蔽媒質(ESM)法
モル体積、熱膨張係数、比熱、体積弾性率、エンタルピー、自己拡散係数、動径分布関数、散乱関数、溶解度パラメータ、χパラメータ、溶媒和自由エネルギー

2018/01/15 Copyright (C) 2008-2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved. 2

VIII) リモートジョブ投入機能

お手元のPC上でリソースが足りなくなってきたら、リモートサーバ上で計算を行うことができます。



©2010熊本県くまモン #K29590

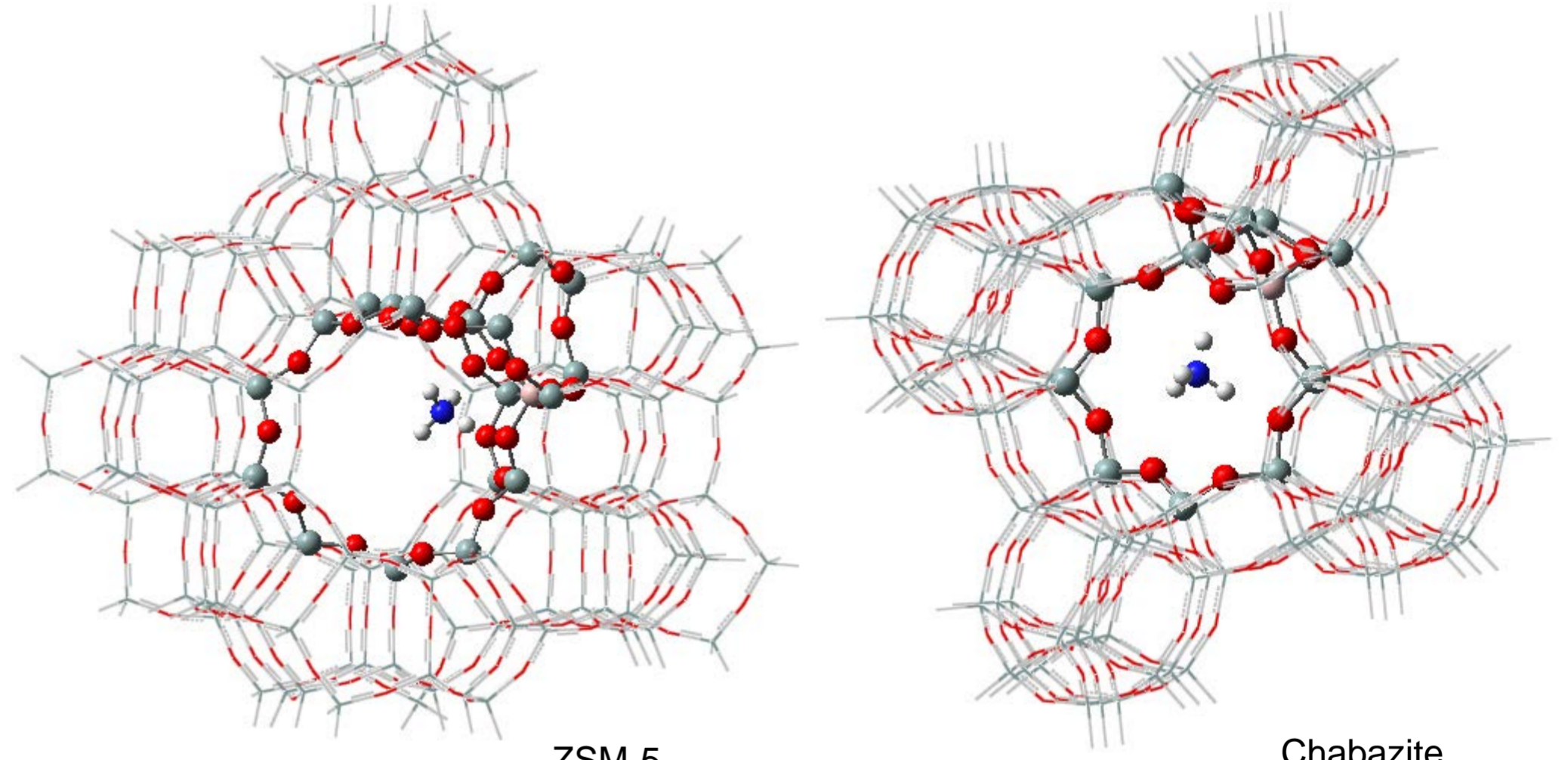


2018/01/15 Copyright (C) 2008-2018 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved. 3

対応サーバ(Linuxクラスター) FOCUS, TSUBAME2.5, 京\*, 等
対応キューイングシステム LSF, PBS, SLURM, SGE, NQS, ShareTask等

IV) ゼオライト触媒の酸点強度とアルカンの熱分解反応への影響

- ゼオライト触媒の酸点強度を評価し、アルカンの熱分解反応への影響を分子レベルで確認
量子化学計算法による分子配位エネルギー算出で触媒酸点の強度を評価
触媒から生成アルケンへプロント供与されカルボカチオンが生成する反応機構も考慮
これらの評価を各反応部位にて実施し、ゼオライト触媒全体の評価を行う



ZSM-5

Chabazite

V) 今後の研究予定・期待される成果と波及効果

- アルカンの熱分解性能と酸強度の効果により、目的性状に合った触媒、例えば、不安定な水素化物アニオンを生成する酸触媒、を効率的に設計出来る様な知識集約化産業を目指し、商品開発の加速化が期待される。
脱炭酸酵素のONIOM法による酸-塩基触媒モデルの解明研究に寄与。
脱資本集約型産業を目指し、環境・社会・企業統治(Environment, Social, Governance)に配慮した企業を選別して行うESG投資を呼込む戦略の立案
HPCI共用ストレージ利用(HPCIシステム30年度B期~試行予定)
「TSUBAME3.0」のシステム活用を支援するGUIの作成
T3のグループディスク利用(H30年5月1日~)。
リカレント教育による企業の材料デバイス開発能力のさらなる向上。