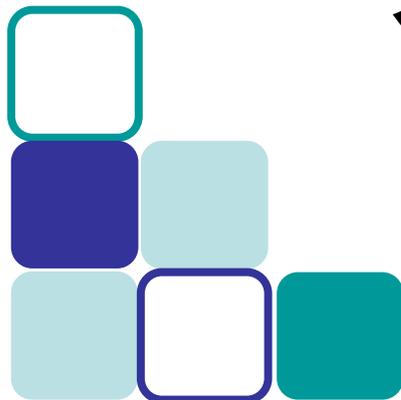


次世代スパコンフォーラム2008年9月17日

**計算科学者、計算機科学者、実験化学者および産業の接点
と人材育成ーナノ統合ソフトについてー**

界面科学（化学）実験科学者の立場から

**東北大学多元物質研究所
栗原和枝**

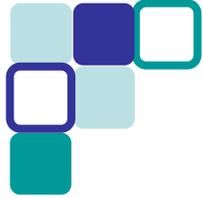




統合ソフト：異分野融合の視点から

3

- **（実験科学研究者と）計算科学研究者との共同研究による「ナノ分野」の研究発展の可能性**
- ⇒ **ナノ科学・技術は従来巨視的に考えてきた現象を分子・原子レベルで考えるパラダイムシフトを引き起こしている。これら複雑系の現象の理解・一般化には計算科学が必要である。**
- **実験研究者の中に「計算科学」の若手を育成していく必要性 → 後記**



計算と実験の共同研究： 界面分子マクロクラスターの例

実験：界面分子マクロクラスター（非極性溶媒中）の発見
界面の分子組織構造：水素結合、長距離、
（ex. エタノールのガラス上吸着）長距離引力とダイナミクス

計算：目的

クラスターの構造，系の動的性質を調べ，マクロクラスターの性質を微視的視点で理論的に理解する。

計算としての課題

- ・ 固体表面の現実的なモデリング
- ・ 大規模分子動力学 (MD) 計算

分子動力学専用計算機MD-GRAPE2, MDGRAPE

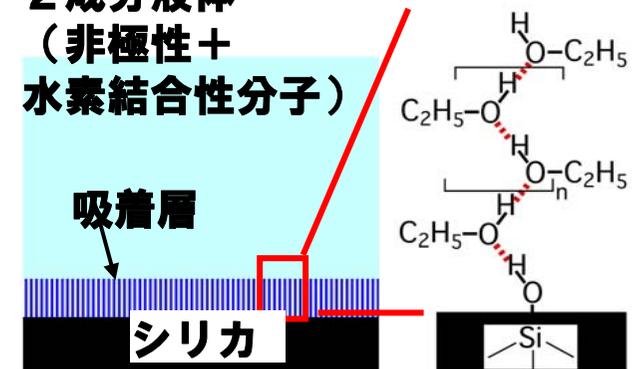
-3 (理研) を使用

汎用計算機の250倍の計算速度

界面分子マクロクラスター （例：エタノール）

水素結合による直鎖状構造

2成分液体
（非極性+
水素結合性分子）



厚さ：約 15 nm

計算：慶應義塾大学泰岡顕治准教授との共同研究



1. シリカ表面-エタノール分子相互作用のモデル化

- ① 第一原理電子状態計算により、表面-エタノール分子間相互作用を評価
- ② 相互作用パラメータを調整し、表面-エタノール分子間相互作用をモデル化

2. シリカ表面のSiOH基およびエタノール間のH⁺解離を考慮

表面を正(+Q)、負(-Q)に帯電させ、中性条件下と比較 ここで $Q = 4.53 \times 10^{-5} \text{ q/\AA}^2$ を最大とし、Qを変化させて計算を行った。

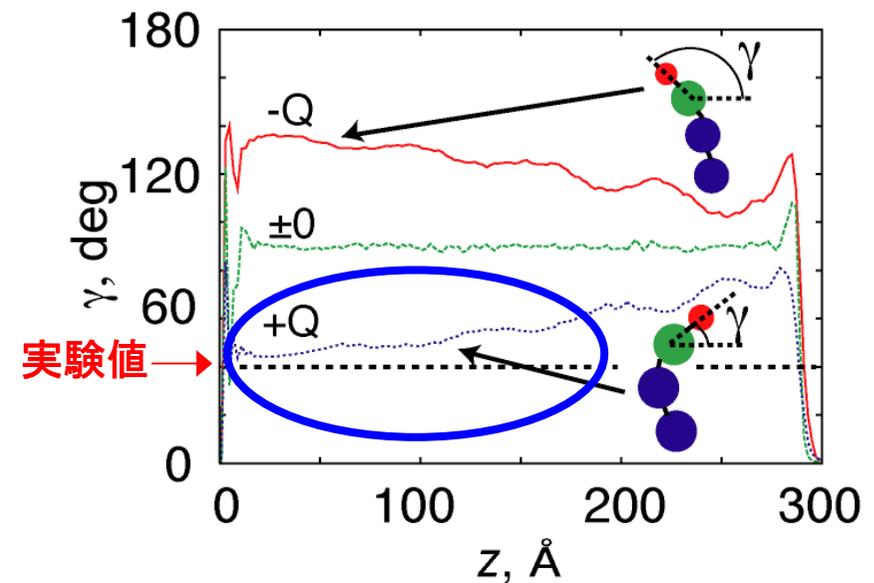
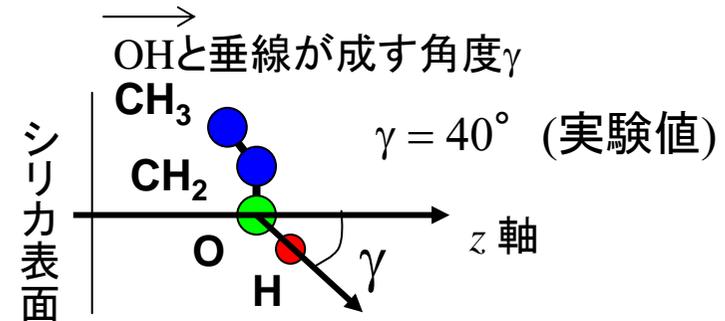
結果: 正の表面(+Q)で実験値を再現

使用した分子間相互作用モデルおよび計算条件

エタノール: OPLS-UA, シクロヘキサン:

Lennard-Jones6サイトモデル, NVT一定, $T = 298.15 \text{ K}$

計算結果 エタノールのOH基の向き

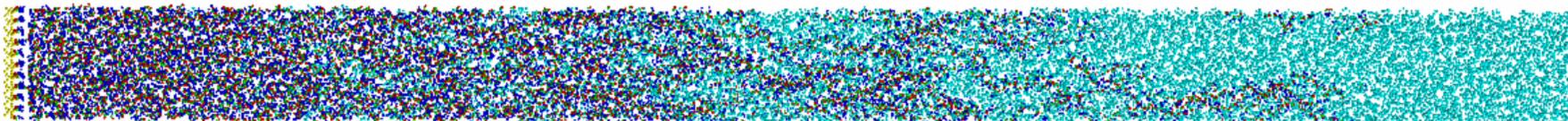




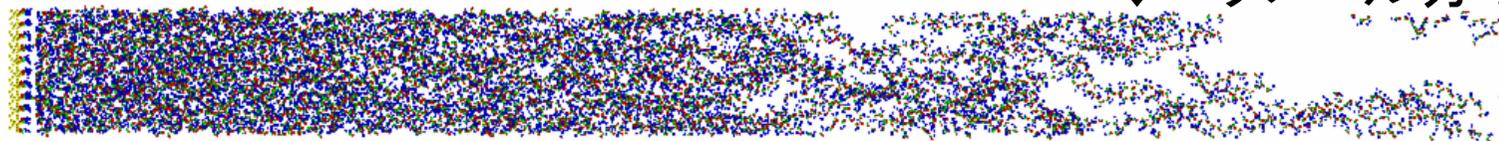
結果のまとめ

6

- 表面に電荷を与えることにより表面の酸性を取り入れた計算を行い、実験で得られたエタノール分子の配向を再現することができた。
- エタノール分子は絶えず水素結合を組み替えている。マクロクラスターは平均7~9分子程度が集合する直線的なクラスターの集合体。
- 固液界面に近いクラスターほど直線的になりやすい。またエタノールモル比が低いほど特に直線的になりやすい。
- 自己拡散係数、水素結合持続時間も計算した。これらの値はシリカガラス表面からの距離およびエタノールモル比に強く依存する。



↓ エタノール分子のみ表示





まとめ

—共同研究による「ナノ分野」の研究発展の可能性—

□ 実験による計算の発展

実験との共同研究により、現実的なモデルの構築が可能。

複雑系の場合、パラメータが多く、また現象の法則化が不十分。そこで、実験との対比により、はじめて計算に取り入れるべき因子が明らかになる。

□ 計算による実験の発展

複雑系の現象は、微視的挙動、特にダイナミクスに関しては、具体的な分子レベルの描像を描きにくい。計算により、これらの描像が描けると共に、一般化が可能となる。

—実験研究者の中に「計算科学」の若手を育成していく必要性—

対象を理解するために、物質に対し実感できることが必要。それは実験により養われる感覚であり、複雑な物質を対象とする場合には、実験研究者の中にも「計算科学」の若手を育成することにより、研究のさらなる発展が期待できる。