

平成17年3月 1 日

氏名 南雲 亮 

## 21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科  
応用化学専攻、化学システム工学専攻、  
化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成16年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	なぐも りょう 南雲 亮	生 年 月 日
所属機関名	大学院工学系研究科 化学システム工学専攻 中尾研究室	
所在地	東京都文京区本郷7-3-1	
申請時点での 学 年	博士課程1年	
研究題目	計算法学的手法を利用した ゼオライト膜炭化水素混合系分離システムの開発	
指導教官の所属・氏名	化学システム工学専攻 中尾 真一教授	

## I 研究の成果 (1000 字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

COE 研究プロジェクト『計算法学的手法を利用したゼオライト膜炭化水素混合系分離システムの開発』の一環として、平成 16 年 10 月より研究を開始した。ゼオライト膜の分離選択性能を高精度かつ系統的に予測すべく、計算法学的手法の活用を念頭に置き、研究を進めている。これまでに、今後いかなる研究計画に基づいてプロジェクトを遂行すべきであるか、その骨子を具体化したので、以下にその概要を示す。

一般に、ゼオライトのようなナノ細孔膜の透過性能は、『吸着・拡散機構』によって説明される。この機構では、透過するゲスト分子のナノ細孔内における『吸着性』および『拡散性』こそが、膜透過性能の決定因子となる。換言すれば、この 2 つの因子の定量化により、膜性能の予測が実現する。『吸着性』の推算に関しては、実験および計算の両面からのアプローチの進展に伴い、高精度な予測が可能となりつつある。それに対し『拡散性』は、未解決の技術的課題が山積しており、高精度に予測可能な段階に到達しているとは言い難い。とりわけ、計算法学的手法の活用を指向する際に大きな問題となるのは、計算に必要な時間コストが過大になる事の 1 点に尽きる。すなわち、計算上の仮想空間において拡散現象を追跡するためには、マイクロ秒オーダーの計算時間が求められる場合が多い。しかしながら、現在の計算機の性能では、せいぜいナノ秒オーダーの計算が可能であるにすぎない。従って現在では、こうした現実系と計算系との時間オーダーの隔たりを連結するような、革新的なアプローチが強く求められている。

こうしたアプローチの第一候補として、本プロジェクトでは、『遷移状態理論(TST)』を活用する事とした。TST では、ナノ細孔内のゲスト分子の拡散現象を、ホッピング速度定数によって表現する。従って、TST に基づいて定量化されたホッピング速度定数から、ゲスト分子の拡散性を予測する事が可能となる。こうして得られた結果から、『吸着・拡散機構』に基づいたゼオライト膜性能の系統的な予測も可能となる。

現在、以上に示した研究目標を念頭に置き、『ナノ細孔内拡散性予測プログラム』の開発を進めている。今後 3 ヶ月程度のプログラム開発期間を経た後、ゼオライト膜性能の系統的な予測を進める予定である。

氏 名 南雲 亮

- Ⅱ (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)  
共著の場合、申請者の役割を記載すること。  
(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

氏 名 南雲 亮

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文

(共同研究者 (全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

○南雲 亮、高羽 洋充、中尾 真一

『分子シミュレーションを利用したゼオライト膜透過性の予測』

第18回分子シミュレーション討論会 (京都大学、2004年12月14-16日)