


平成18年 2月 28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17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 工学部5号館734号室	
申請時点での 学年	博士課程2年	
研究題目	計算化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	
指導教員の所属・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『計算化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に予測すべく、計算化学的なアプローチの活用を念頭に置き、研究を進めている。以下に、これまでに得られた成果の概要を示す。

ゼオライトのようなナノ細孔膜の透過性能を決定づける物性値の 1 つとして、細孔内ゲスト分子の拡散係数が挙げられる。従って、膜性能を予測する上では、拡散係数の定量が不可欠となる。しかしながら、分子動力学(MD)計算に代表される通り、既存的手法では未解決な技術的課題が山積しており、高精度な定量が可能な段階に到達しているとは言い難い。とりわけ問題となるのは、計算に要する時間コストが過大になる点である。すなわち、現在の計算機性能では、拡散という動力学現象を追跡するに十分な計算速度を達成できない。よって現在、こうした仮想計算上の計算速度の大幅な向上を実現するような、革新的なアプローチが強く求められている。

本プロジェクトでは、その第一候補として、遷移状態理論(TST)に基づく新規な拡散係数予測法の開発を進めている。TST を活用する事で、自由エネルギーを定量すれば、拡散係数の予測が可能となる。本研究では、MD 計算によって、自由エネルギーの定量を行った。ただし、先述したように、MD 計算をそのまま適用する限り、十分な計算速度など達成する事は出来ない。そこで、まず系を昇温する事で、拡散速度を大幅に向上させた。昇温すれば、少なくとも拡散係数の定量に十分な計算速度は達成できる。しかし一方で、温度変化に伴う自由エネルギーの大幅な挙動変化も生じてしまう。この問題に対処するため、統計力学理論に基づき、高温で定量した自由エネルギーを低温に変換する。変換後に得られた自由エネルギーを用いれば、TST により、従来型の計算手法では予測不能な領域の系についても、拡散係数の定量が実現する。

以上の方法論に基づき、現在、LTA 型ゼオライト中におけるゲスト分子の拡散係数を対象に、系統的な定量化を進めている。その結果、ゲスト分子の種類に応じて、予測の精度に相違が生じる事も判明しつつある。従って、今後も様々な系について、本手法の妥当性を検証する予定である。

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

『加速化動力学法を利用したゼオライト細孔内拡散係数の高速計算』

化学工学会 第37回秋季大会

岡山大学 津島キャンパス

2005年9月15-17日)

○南雲 亮、高羽 洋充、中尾 真一

『ゼオライト細孔内拡散現象への加速化動力学法の応用』

第19回 分子シミュレーション討論会

自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

2005年11月29-12月1日