

相対論的電子論 NEWS

vol.6



CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」研究領域
研究課題「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」 ニュースレター

理論と実験の架け橋となり、 実際の材料設計に役立つ計算方法を構築したい！

修士課程までは化学の実験分野で研究を行い、その後本格的な相対論的電子論の研究をスタートさせた、お茶の水女子大学の森寛敏准教授。これまでの研究成果と今後の取り組み、そして理論研究者として元素戦略に貢献するための考え方についてもお話しいただいた。



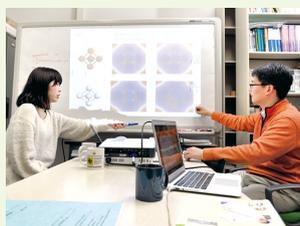
お茶の水女子大学
基幹研究院自然科学系 准教授
森 寛敏

—元々は実験分野にいらしたそうですが、相対論的電子論という「理論」の研究に取り組むようになった経緯を教えてください。

大学4年生の時に、大学のある先生から「ゴールドが金色に見えるのは、相対論的量子化学によって説明できる」という話を聞いたのが、この分野に魅力を感じた最初のきっかけです。修士課程ではレーザー分光の実験をすることになったのですが、やはりしっかりと理論の勉強がしたいと思うようになり、博士課程では改めて相対論的電子論の分野を選択することにしたのです。

—2015年度から本CRESTチームに参加されているそうですが、意気込みは？

このチームに参加されている先生方は、日本の理論化学分野を強力に牽引しておられる方ばかりで、そこに参加させていただいたことを大変光栄に思っています。私に求められていることは「相対論的理論開発」と「機能性材料設計」のつなぎ目となることだと理解しています。これまでは既存の実験事実を上手く説明するための理論計算を行ってきましたが、このチームでは、元素戦略や近年急速に注目を浴びようになったマテリアルズインフォマティクスの観点も積極的に取り入れたいと考えています。相対論的モデルポテンシャル法の理論拡張を行いつつ、レアメタルに依存している各種触媒・電子材料のレアメタルフリー化に挑戦し、社会貢献していきます。



理論研究には欠かせないサーバー
ルーム



有形文化財に登録されている大学本館

—現在はどのような研究をされていますか？

遷移金属の電子状態を、簡易かつ精度良く計算をする方法を研究しています。遷移金属の電子状態を考える時にたくさんある内殻電子のことまで扱うと、とてもじゃないけど計算できません。しかし実際には、遷移金属の電子状態は、ほぼ原子価電子によって決まるため、内殻電子の状態は近似的に省略できます。そこで私たちのチームは、この内殻省略近似と呼ばれる考え方を取り入れることで、素早く結果が得られ、かつ物性はきちんとシミュレーションできる計算方法「相対論的モデル内殻ポテンシャル法(MCP法)」を開発しました。

—それはどのような計算に使われるのでしょうか？

例えば、遷移金属ナノクラスターの水素吸蔵特性の研究で使っています。ナノクラスターは、いろいろな元素を組み合わせることで新しい機能を生み出すことができるため、注目度の高い研究対象です。私たちが特に注目しているのは、白金とパラジウム。これらをナノクラスターにすると、白金の水素吸蔵特性は向上する一方で、パラジウムの方は下がるということがわかりました。白金とパラジウムの原子間距離はほとんど同じなのに、片方には水素が入ることができて、もう片方には入れなくなるということです。そこでMCP法を用いて、ナノクラスターにした白金とパラジウムの電子状態を計算したところ、白金やパラジウムは、入って来ようとする水素の電子状態を変え、その結果、水素吸蔵特性に差が生じるということがわかったのです。

– この研究成果は、今後どう活かされていくのでしょうか？

白金とパラジウムはレアメタルです。その電子状態を知ることで、他の物質でこれらと同じような機能を持つ材料を見出すことができるかも知れません。これは日本の元素戦略を考える上で、重要なことです。ただし、私はMCP法よりも、もっと素早く電子状態を計算する計算方法が必要だと考えています。そうすることで、単に実験結果を説明するためのものではなく、新しい実験の方向性を示すツールになるはずです。

– それは元々、実験分野にいたからこそ感じていることなのでしょうか？

それももちろんあると思いますが、私は理論研究者になってからも実験分野の研究者とはできるだけ関わるようにしてきました。博士課程の時、実験系の研究者にコンタクトを取って、「こういう計算をしたらこうなるということが分かったので、実際にそういう物質を作ってくれませんか？」とお願いしたことがあります。その先生は私の提案を受け入れてくれて、10年後となるつい最近、なんと実際にその物質の合成が成功しました。その時に、実験分野と繋がりを持ち、何かを実現する面白さを実感しました。理論と実験、それぞれの研究者が良い影響を与え合う関係が理想的ですね。

– 今も実験系との関わりをお持ちなのでしょうか？

実験系の研究者が参加するような学会にも積極的に参加するようにしています。理論が今後の実験を設計する上で役に立つものであるということを知っていただきたくて。最初は「誰だあいつは？」といった目で見られていましたが、何回も継続して発表することで、何をしている人なのかを認知してくれるようになりました。それに、今年は私のチームの学生が、ナノ学会で優秀ポスター賞を受賞しました。こうやって、実験の分野にいる人達が、少しでも相対論的電子論のことも興味を持ってくれたら嬉しいです。

– 今後の研究テーマについても、教えていただけますか？

有機レーザーの開発です。これまで、重元素の性質を活用した有機EL材料の電子状態を計算してきたのですが、元素戦略の一環として重金属を使わない有機EL材料が開発されました。

まずはこれをきちんと理論で説明し、さらにそれを応用して有機材料のレーザーが作れないかと考えています。有機レーザーが実現できれば元素戦略的にも意味がありますし、さらに有機分子は置換基を用いることで電子状態を簡単に変えられますから、レーザーの色の調整も簡単にできるはずです。

– 有機レーザーを実現するためのポイントとなるのは？

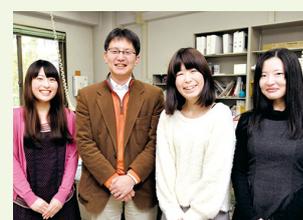
レーザーは非常に多くの電子が同時に励起状態になり、一斉に基底状態に落ちてくることで光を発振します。励起状態になった時、電子がどのような相互作用を起こすのか、そして、どのように基底状態に戻ってくるのかなどを知る必要があります。しかし、励起状態になっているのはほんの一瞬ですから、実験でいろいろなことを調べるのは難しい。そういう時こそ理論の出番で、実験では確認できないことを理論で可視化すれば、元素戦略に大きく貢献できます。

– この分野に興味を持つ人を増やすために、何か取り組まれていることはありますか？

子供たちに興味を持ってもらうことが重要だと考えており、大学の付属小・中学校や区の取り組みなどで、理科教室を開くことがあります。そこではできるだけ分かりやすく噛み砕いて研究内容をお話するようにしていますね。実は、子供たちの中には、薬品を混ぜるような実験だけでなく、シミュレーションによって実験結果を予測するというに興味を持つ子どももたくさんいるんです。少しでも多くの子供たちに、そういう理論の考え方があることを知ってもらい、興味を持ってもらえたらいいなと思っています。

– 最後に、読者にメッセージをお願いします。

「相対論的電子論」という言葉だけを見ると、ハードルが高いと感じてしまう人もいると思いますが、実は材料化学の中でもフロンティアな領域で、面白いことがたくさん詰まっています。それに、身近な化学の現象にも関わっていることが多いので、他の分野の方にも興味を持っていただき、お互いの情報を共有することで、さらに面白い研究分野が切り開いていけるのではないかと考えています。



研究に関わっている学生たちと



森研究室がある理学部3号館

若手研究者より

今回は、水上 渉さん(青木グループ 助教)と、
吉川 武司さん(中井グループ 助教)からメッセージをいただきました。



水上 渉

Wataru Mizukami

青木グループ 九州大学
大学院総合理工学研究院 助教

PROFILE

出身地 東京都

学歴

京都大学工学部 卒業
東京大学大学院工学系研究科
修士課程修了
総合研究大学院大学 博士課程修了
博士(理学)

職歴

ブリストル大学化学科
Marie Curie Research Fellow
理化学研究所杉田理論分子科学研究室
基礎科学特別研究員
九州大学総合理工学研究院 助教

趣味 コーヒー

好きな食べ物 カレー

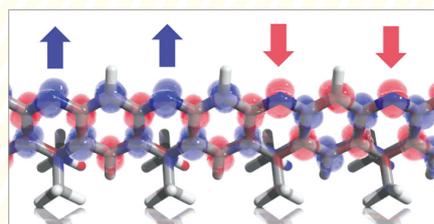
“相対論的電子論は私の研究人生の原点”

私は π 共役系における強相関電子状態の研究で学位を取り、その後ブリストル大学で高精度振動状態理論の開発を、続いて短い間でしたが理化学研究所の杉田主任研究員の元でQM/MMを用いた生体分子の計算をおこなってきました。昨年青木グループのメンバーとなったのを契機に本プロジェクトに加えていただくこととなった次第です。

こう書きますと「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」と私のこれまでの研究とは直接関連がないように見えますが、相対論的電子論は私の研究人生の原点とも言えるものです。事実、卒業研究と修士論文は何れもこのトピックに関するものでした。また学部生時代のことですが、後に直接指導していただくこととなる中嶋先生の著書や資料を通して、一見化学とは関係のない相対性理論が「金が金色である理由」「水銀が常温で液体である所以」といった身近な現象を説明できることを知り、そこから受けた感銘は今も覚えています。期せずして初心に戻る機会を得ましたが、この分野の発展は著しく、当時(2005~2008年頃)はなかった理論やそれを実装したRAQUETやNTChemをはじめとする新しいプログラムが拓いた可能性に心が躍っております。

現在は、制約密度汎関数法を応用することで任意のスピンの配置を効率良く得る方法論を開発して

います。異方性まで考えたモデルハミルトニアンのパラメーターを、スピン依存の項も含んだ第一原理計算から素早く構築できるプロトコルの確立を目指しています。青木グループで開発してきたElongation法と組み合わせることで、擬一次系の中間スピン配置を効率よく記述できるようになる予定です。磁性材料の機能予測、延いてはその設計に資するものになると考えています。



吉川 武司

Takeshi Yoshikawa

中井グループ 助教

PROFILE

出身地 広島県

学歴

早稲田大学理工学部卒業
早稲田大学大学院
先進理工学研究院 博士課程修了

職歴

2015年4月-2016年3月
早稲田大学理工学術院 助手
2016年4月-現在
早稲田大学理工学術院 助教

好きな食べ物 ラーメン(二郎系)

“分割統治法を用いた大規模計算理論の開発に取り組んでいます”

近年では、電子状態計算を用いることで、数千原子を超える大規模系に対して化学現象の正確な予測が可能になりつつあります。それを可能としているのが、並列計算技術と大規模計算理論の発展です。並列計算技術とは、スーパーコンピュータやアクセラレーター等の並列演算機を用いた統合開発環境のことです。現在のコンピュータ開発の主流は、CPU単体の性能を向上させるのではなく、複数のコアを並列に扱うことによって総合的な性能を向上させています。そのため、大規模演算を効率的に実行するには、並列演算を意識したプログラム開発が必要不可欠となります。一方で、大規模計算理論とは、精度を損なわず計算時間やメモリ量等の計算コストを大幅に削減できる手法です。当研究室では、大規模計算理論の一つである分子をいくつかの部分系に分割する分割統治(DC)法の開発を行ってきました。

私は、卒業研究から博士号取得までに、ラジカル分子や励起状態を取り扱えるようにDC法の理

論拡充とプログラムの並列化を行ってきました。これらの方法は、有機トランジスタ、太陽電池や有機エレクトロルミネッセンス等の機能性材料の性能に深く関与しており、材料設計や性能評価に非常に有効であると考えています。本CREST研究領域「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」において、森田チームとのチーム間連携研究を行っています。森田チームが研究しているトリオキシチリアンギレン(TOT)は安定な有機ラジカル分子で、新たな光学・磁気的性質を示します。我々の開発した理論を用いることで、従来の方法では実行することが不可能であったTOT結晶に対して励起状態計算を可能とし、その計算結果は実験値とよく一致しました。

今後は、本研究で開発した種々の理論的手法を簡便に扱えるようブラックボックス化することで、量子化学者だけでなく、実験科学者も大規模量子化学計算を実行できるように日々精進していきたいと思います。

寄稿

CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」

研究領域 領域アドバイザーより

物理と化学の融合について

前川 禎通

Sadamichi Maekawa

日本原子力研究開発機構
先端基礎研究センター長

玉尾先生総括のCREST(玉尾CREST)では、物理のチームと化学のチームがバランスよく入っています。これは玉尾先生の方針によるものと理解しています。

私は学部4年生から修士課程まで量子化学の研究室(阪大、千原研究室)に所属しました。研究室の助教授が物性理論の先生(立木先生)で、私は研究室に入るなり、千原先生より、立木先生の研究指導を受けるように、と指示されました。それ以降、私は物理と化学の間で揺れ動きながら研究を続けています。

物質科学にとって、物理と化学はコインの裏と表だと思えます。しかし、意地悪な見方をすると、同じものだけれどなかなかお互いが見えない、という一面もあると思えます。かなり以前になりますが、「京」コンピュータの設立を目指して、茅孝二先生(当時は分子

研所長)のもとに、物理と化学の研究者が集まりました。玉尾先生もそのメンバーのお一人でした。このグループで物理と化学を如何に融合していくかという議論を進めましたが、そこでメンバー(玉尾先生も私も含めて)を最も驚かせたのが、「電子相関」という言葉の意味です。物理では「電子相関」とは電子間に働くクーロン相互作用で電子を空間に局在させる効果です。一方、化学では「電子相関」とは、電子を遍歴させる効果である、ということ学びました。このように分野で言葉の意味が違う、ある場合には全く逆の意味になっています。そのため、融合のためにはまず、お互いの言葉を理解し整理することから始める必要があります。それ以後(それ以前からかもしれませんが)玉尾先生は物質科学での物理と化学の融合に努力して来られました。私も微力ながら玉尾CRESTをサポートさせていただいています。そして、融合という点で中井先生のチームはその中心です。是非、このCRESTで真の物理と化学の融合を進め、いつの日か、物質科学では物理と化学という言葉が意味をもたなくなることを期待しています。

● 受賞者情報

中野 匡彦 早稲田大学 中井グループ D2

Pacifichem 2015 Student Poster Competition Award
"Relativistic open-shell Hartree-Fock theory with time-reversal symmetry"

Pacifichemは日本、アメリカ、カナダ、ニュージーランド、オーストラリア、韓国、中国の7化学会が主催。5年に一度、世界中から化学者が集う世界最大規模の化学の祭典です。Student Poster Competitionには3645件の応募があり、54名がStudent Poster Competition Awardを受賞しました。今回受賞した研究では、相対論効果の中でも特に重要な「スピン-軌道相互作用」を取り扱うための新たな手法を開発しました。このような大きな国際会議にて評価され、大変光栄に存じます。 — 受賞日 2015年12月18日



中井 浩巳 早稲田大学 中井グループ 研究代表

高度情報科学技術研究機構(RIST) 優秀成果賞

「化学反応シミュレーションによるCO₂分離回収のためのアミン溶液の探索 (hp140164)」

— 受賞日 2015年10月26日

日本化学会 第33回学術賞

「周期表を網羅する線形スケーリングな相対論的量子化学の構築」 — 受賞日 2016年3月26日

中嶋 裕也 早稲田大学 中井グループ D2

APCTCC7 Superior Oral Award

"Implementation of efficient infinite-order two-component relativistic scheme into GAMESS"

このたびThe Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry(APCTCC7)にてSuperior Oral AwardおよびSuperior Poster Awardを頂きましたこと、大変嬉しくまた光栄に思っております。粘り強く進めてきた研究が今回受賞という形で実を結び、改めて、日々研究に進捗することの重要性を実感しております。今後は開発してきた計算手法をさらに発展させ、より実用的な手法とするべく研究に励みたいと思っております。

— 受賞日 2016年1月27日

速水 雅生 早稲田大学 中井グループ D1

APCTCC7 Superior Poster Award

"Efficient evaluation of electron repulsion integral and its derivative for molecules including heavy elements"



● イベント情報

・元素戦略/希少金属代替材料開発
＜第10回合同シンポジウム＞

2016年2月23日(火)
東京国際フォーラム(東京・丸の内)

・第19回理論化学討論会

2016年5月23日(月)-25日(水)
早稲田大学 西早稲田キャンパス

・CREST中井チーム第7回チームミーティング

2016年5月(予定)
早稲田大学 西早稲田キャンパス

・第3回電子状態理論シンポジウム

2016年11月5日(土)
早稲田大学 西早稲田キャンパス

相対論的電子論NEWS



発行日: 2016年4月15日(vol.6)

発行: 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 中井研究室

住所: 〒169-8555 東京都新宿区大久保3-4-1 63号館4-10

TEL: 03-5286-3452 E-mail: nakai@waseda.jp

FAX: 03-3205-2504 WEB: http://www.chem.waseda.ac.jp/nakai/crest