

計算化学を活用した材料開発支援

—地方公設試における地元企業振興に向けた取り組み—

和歌山県工業技術センター 化学産業部

森 一

hmori@wakayama-kg.jp

はじめに

計算機によるシミュレーションは、各種材料開発におけるトライアンドエラーを低減し、開発スピードを向上させるための有効な手法の一つとなっています。

近年、計算機能力の向上に伴って、高精度な計算を比較的容易に行えるようになり、計算化学を活用した材料開発が広く普及してきています。

一方、和歌山市のエリアは歴史的に日本の有機化学工業発祥の地として認められている地域で、和歌山県では現在もその地域を中心に多くの中小の化学系企業が集積し、発展を続けています。今後もそれぞれの県内企業が独自の技術を持ってさらなる発展を続けてゆくため、開発を加速化させる新しい技術などの導入が必要となってきています。

そのような背景のもと和歌山県では計算化学に基づくものづくりの効率化を「ケミカルスマートものづくり」と命名し、県内化学系企業での計算化学の利用促進に関する取り組みを実施してきました。

和歌山県工業技術センターは県内の中小企業に対して技術支援を行う県の中核機関として位置づけられ、「ケミカルスマートものづくり」に関する取り組みを中心的に推進してきました。具体的には、利用環境の整備として和歌山県工業技術センター内に量子化学計算および分子動力学計算が可能な計算化学システムを導入するとともに、県内企業での計算化学の利活用促進、人材育成への取り組みとして計算化学初心者を対象とした講演会、スクールなども開催してきました。

また現在では導入した計算化学システムを工業技術センター職員以外も利用できる環境を整えております。

本稿では、和歌山県工業技術センターの山下宗哲主査研究員と筆者が中心として実施してきた計算化学に関連した上記の企業支援の取り組み事例について詳しく紹介します。

計算化学システムの導入

県内企業への計算化学の利用促進を推進するにあたり、まず工業技術センター内に計算化学システムの導入を行いました。具体的には低分子化合物の構造、各種スペクトル、反応性などを予測、考察できる量子化学計算システムおよび高分子材料の各種物性や複合材料の界面状態等のシミュレーションが可能な分子動力学システムを導入しました。

ソフトウェアとしては量子化学計算では SPARTAN を中心とした計算システムで、一方分子動力学計算の方は J-OCTA を利用した計算システムとなっています。ソフトウェアの選定に際しては、必要とされる計算モードが備えられていることはもちろんですが、GUI 環境が整備され初心者でも利用しやすいプラットフォームとなっている点も基準としました。

また計算機はワークステーション 2 台を導入し、比較的ストレスなく計算できる環境を整えました。SPARTAN についてはホストコンピューターに対してサブコンピューターを 2 台接続し、複数の利用者が同時に利用できる環境も整えました (図1)。



図 1. 導入したコンピューターシステムの一部
(ホスト PC (左) とサブ PC (右) の様子)

キックオフセミナーの開催

計算化学の啓蒙、普及にあたり、計算化学に対する敷居を下げつつ、しっかりとした基礎知識を習得してもらうことを目的として、計算化学を実際に体験できるスクールを企画しました。スクールの実施に先立ち、企業活動での計算化学の有用性を知ってもらうため「キックオフセミナー」を開催しました(図2)。セミナーでは計算化学に対する和歌山県の取り組みを紹介するとともに企業活動での計算化学の有効利用例の紹介として、2名の講師から実例も交えてご講演をいただきました。具体的にはセミナーの冒頭に「ケミカルスマートものづくり」の概要について説明をさせていただいた後に、元カネカ 先端材料開発研究所の毛利文仁氏から量子化学計算の活用事例として「化学企業における量子化学計算の活用について」(一何ができるか、有効に活用するにはどうしたらよいか)と題して講演していただきました。講演では、量子化学の基礎から実際の活用事例、さらにはご自身のこれまでの経験から企業において計算化学を有効に活用するための提言までしていただきました。またもう一人の講師の花王株式会社解析科学研究所 久保宏記氏から「化学企業における材料シミュレーション」と題して、材料開発における分子動力学計算の活用事例について紹介していただきました。

上記セミナーは平成 28 年 9 月 28 日に和歌山市内のダイワロイネットホテル和歌山で開催され、県内企業 15 社の技術者を含む 45 名の参加がありまし

**ケミカルスマートものづくり
計算化学スクール
キックオフセミナー**

理論計算によるシミュレーションを有効活用した製品開発が加速化しています。和歌山県では計算化学に基づくものづくりの効率化を「ケミカルスマートものづくり」と命名し、本年度県内化学系企業での計算化学の利用促進に関する取り組みを実施します。具体的には計算化学を実施可能な環境の整備を行い、さらには皆様に計算化学に触れ、活用いただくための「計算化学スクール」を実施いたします。スクール開催にあたり、計算化学がどのように活用されているかを知っていただくためキックオフセミナーを開催し、企業で実際に利用している技術者からその魅力と利用例についてご紹介いたします。

プログラム
 開催挨拶 和歌山県工業技術センター 所長 和坂 貞雄 氏
 事業内容紹介 (13:35~13:45)
 和歌山県工業技術センター 化学産業部 部長 前田 拓也 氏
 計算化学の活用事例紹介 (13:45~17:00)
 ①量子化学計算の活用事例
 「化学企業における量子化学計算の活用について」
 (一何ができるか、有効に活用するにはどうしたらよいか) 元 株式会社カネカ 先端材料開発研究所 毛利 文仁 氏
 休憩
 ②分子動力学計算の活用事例
 「化学企業における材料物性シミュレーション」
 花王株式会社 解析科学研究所 久保 宏記 氏
 事務連絡 (17:00~)
 計算化学スクール応募についての注意事項

**平成 28 年 9 月 28 日(水)
13:30~17:30
ダイワロイネットホテル和歌山
4 階フランチ**
参加費：無料
募集定員：60名(先着順)
 同様の内容は下記ホームページからも確認できます。
http://www.kishi-td.co.jp/chemical_school.html
 ※本事業は平成 27 年度補正予算 地方創生加速化交付金で実施しています。

アクセス

図 2. キックオフセミナーの案内用チラシ

た。講演会終了後には、参加者からの質問等もあり、計算化学に関する地元企業での関心の高さが伺われました。

計算化学スクールの実施

上記「キックオフセミナー」参加企業の技術者のうち、県内企業の計算化学初心者を対象に、計算化学スクールを開催しました。計算化学に慣れ親しんでもらうことを目的としているため、計算化学ソフトに触れ、実際に操作する実習を重視したカリキュラムとしました。実習でのきめ細やかなサポート体制という観点等もあり、参加者は 10 名に限定して実施しました。

スクールは、全 10 回で前半の 5 回を量子化学計算 (SPARTAN を利用)、後半の 5 回を分子動力学計算 (J-OCTA を利用) としました(図3)。

量子化学計算ソフト SPARTAN を用いた「化合物物性、反応性予測計算講座」では、基礎講習および分子モデリング演習として下記の内容を実施していただきました。

- (1) 基礎講習…計算化学でなにができるかの習得
計算化学のための基礎知識
分子構造の入力 (3D モデルの作成)

**ケミカルスマートものづくり
計算化学スクール**

計算化学は、化成品製造時の反応解析や新薬材料設計に有効活用されています。本スクールでは、化成品原料などを製造する際の反応解析や、新薬材料の設計などに活用可能なソフトウェアを用いた計算化学について、基礎から応用まで、初心者向けとした講習会を開催します。なお、今年度は工業技術センターが導入し、貸付機として関数計算機の「計算化学ソフトウェア」を用いて講習を行いますので、ご利用を希望される方はこの機会に受講ください。

スクール実施期間・内容
平成28年10月4日～平成29年1月27日
全10回（13:00～16:30 予定）
・化合物物性、反応性予測シミュレーション講座（使用ソフト：SPARTAN'16）
量子化学計算でわかること、安定構造の求め方、スカラーポラリザビリティ
・材料物性予測シミュレーション講座（使用ソフト：J-OCTA）
分子動力学計算でわかること、高分子物性の求め方、界面構造の予測等

スクール会場
和歌山県工業技術センター 和歌山市小倉60番地
<http://www.wakayama-kg.jp>

募集対象
・和歌山県内に事業所を有する者で、工業製品の製造、開発関連業務に従事されている方
・有機化合物の化学構造を理解できる方
・全10回受講可能な方※
・アンケートにお答えいただける方
・パソコン/Windowsの基本操作を理解されている方
・別途講習の内容に同意いただける方
※一定の理由が認められる場合、前半5回（化合物物性、反応性予測シミュレーション講座）と後半5回（材料物性予測シミュレーション講座）を各々受講することも可能です。応募書類の添付欄に受講者名とその理由を記載してください。

募集定員
10名様
応募多数の場合は前につき1名とし、抽選にて受講者を決定させていただきますので、予めご了承ください。

費用
無料

応募方法
受講をご希望の方は、応募用紙に必要事項をご記入の上「株式会社 貴志」宛にFAXでご応募ください。（受講者には後ほど別途案内書をお送りいたします）
※お申し込みは平成29年2月27日（金）までです。
http://kishi-hd.co.jp/chemical_school

お申し込みに関するお問い合わせ
株式会社 貴志 担当：田嶋
連絡先：TEL 073-431-5131
E-Mail info@kishi-hd.co.jp

スクール内容に関するお問い合わせ
和歌山県工業技術センター 化学産業部 担当：藤一、山下
連絡先：TEL 073-477-1271
E-Mail info@kishi-hd.co.jp または info@kishi-hd.co.jp
※本事業は平成27年度補正予算 地方創生加算化交付金で実施しています。

図3. 計算化学スクール案内用チラシ

(2) 分子モデリング演習

- …配座解析と基礎的計算手法の習得
- …遷移状態の構造探索の習得
- …各種スペクトルの作成方法習得
- …計算結果の可視化の習得

一方、分子動力学計算ソフト J-OCTA を用いた「材料物性予測分子シミュレーション講座」でも同様に、基礎編および発展編に分けて高分子材料のシミュレーション方法について JSOL (株)の方に講習していただきましたが、ここでは詳細は省かせていただきます。

これらの内容は先に述べたように 講義形式の座学での実施 (図4) だけでなく、ノートパソコンを用いた実習 (図5) でも充分時間を割いて行われました。

さらにスクールでは、疑問点の克服、習熟度の向上を目的に講習終了後、毎回受講者にアンケートを実施しました。実際のアンケートでは、計算手法の基礎的な質問から社内で検討予定材料の計算シミュレーションの可能性など幅広い質問、意見をいただきました。アンケート内容については、講師の方に可能な限り次回の講習で反映、回答してもらうようお願いしました。

全10回のスクール終了後、改めて受講者および



図4. 座学での講習の様子

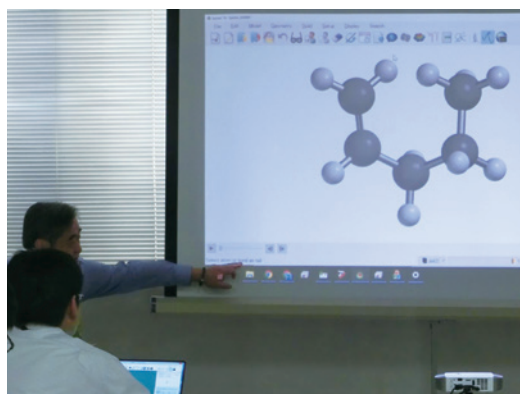


図5. PCを利用した実習での説明

その上司にアンケートを実施した結果、概ね半数の企業で今後の企業活動での計算化学の実施に前向きな回答が得られ、中小企業においても様々な場面で計算化学の利用を進めようとしていることを確認できました。

ステップアップセミナーの開催

上記計算化学スクール終了後に、最先端の計算化学の活用方法を知ってもらう目的で「ステップアップセミナー」を開催しました (図6)。セミナーでは、SPARTAN を活用した量子化学計算の事例の紹介として東京工業大学の川内進先生から「量子化学計算による化学反応の研究手法」と題して講演していただきました。内容としては量子化学計算の基本要素についての説明と川内先生の研究内容の紹介としてジシランシクロブテンとアセチレンとの反応についての反応経路探索事例などについて紹介いただきました。

**ケミカルスマートものづくり
計算化学スクール
ステップアップセミナー**

計算化学による効率的なものづくりを知っていただく「ケミカルスマートものづくり」ステップアップセミナーを開催いたします。本セミナーでは、利用促進の取り組みの発展型として、計算化学のより高度な活用事例をご紹介します。計算化学スクールにご参加の企業の方はもちろんですが、最先端の材料開発ツールに興味のある県内企業の方々の積極的なご参加をお待ちしております。

STEPUP

プログラム

開会挨拶
計算化学の活用事例紹介
講演 1 (13:40 ~ 14:50)
「量子化学計算による化学反応の研究手法」
東京工業大学工学部 理工学研究所 准教授 川内 進氏

講演 2 (14:50 ~ 16:00)
「分子会合と“SPARTAN”を用いる“do-it-yourself”計算化学」
大阪大学 名誉教授 柳田 祥三氏

休 息 (16:00 ~ 16:10)

講演 3 (16:10 ~ 17:20)
「OCTAを用いた高分子材料シミュレーション事例」
国立研究開発法人 産業技術総合研究所 研究チーム長 森田 裕史氏

閉会にあたって (17:20 ~)

平成29年2月22日(水)
13:30~17:30
ダイワロイネットホテル和歌山
4階プラザエ
参加費：無料

募集定員：60名(先着順)

同様の内容は下記ホームページからも確認できます。
http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical_school/stepup
※本事業は平成27年度補正予算 地方創生加速化交付金で実施しています。



図 6. ステップアップセミナー案内用チラシ

また大阪大学名誉教授の柳田祥三先生からは「分子会合と“SPARTAN”を用いる“do-it-yourself”計算化学」と題して、DFT 計算によるベンゼンの会合状態の考察や金属錯体合成時における会合種の考察事例などについて紹介いただきました。

さらに分子動力学計算の計算事例として産業技術総合研究所の森田裕史氏から「OCTA を用いた高分子材料シミュレーション事例」と題して、高分子の界面剥離、界面破壊の状況のシミュレーション事例やリソグラフィプロセスに関する事例などについて紹介していただきました。

ステップアップセミナーにはスクール参加生はもちろんですが、それ以外の企業からも参加もあり、活気に満ちた講演会となりました。

利用環境の整備

工業技術センターに導入された量子化学計算システム (SPARTAN) および分子動力学計算システム (J-OCTA) は、現在工業技術センターの設計支援室内に集中的に配置されています (図7)。上記システムについては平成 29 年 4 月から県内企業の技術者などの外部



図 7. 計算化学システム全体図

利用者にも利用できる環境を整えております (詳細は和歌山県工業技術センターホームページ参照：<http://www.wakayama-kg.jp>)。また SPARTAN については、複数の利用者の同時利用にも対応できる環境を整備しております。ただ情報セキュリティの観点から、机の配置や画面の覗き見防止措置、ログイン ID による利用者の管理など、利用者間での情報漏洩などが無いよう配慮しながら実施しています。

終わりに

中小企業での計算化学の活用促進に向けた活動として、和歌山県での取り組み事例について紹介させていただきました。平成 29 年 4 月以降、県内の複数の企業から計算化学システムを利用いただき、また問い合わせも多数頂いております。今後共、県内企業での計算化学利用促進のため、引き続き啓蒙、普及活動を続けてゆきたいと考えています。

本稿で紹介した内容は平成 27 年度補正予算地方創生加速化交付金を活用して実施しました。上記紹介内容の内、セミナー、スクールなどの一部の内容は事業委託先として(株)貴志の皆様へ運営いただきました。

最後になりましたが、計算化学スクールの講師として和歌山まで何度も講習にきていただきました Wavefunction, Inc. 日本支店 内田典孝様、渡邊裕介様、JSOL (株)の皆様、さらに各セミナーでご講演いただきました講師の皆様へ厚くお礼申し上げます。



米国法人 WAVEFUNCTION, INC. 日本支店
〒102-0083 東京都千代田区麹町3-5-2 BUREX麹町
Tel 03-3239-8339 Fax 03-3239-8340
E-mail iaopan@wavefun.com