

## 研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		開殻系第一原理分子動力学法の開発とその応用によるレアメタル溶媒和化学の新展開			
研究テーマ (欧文) AZ		New frontier on rare-metal solvation chemistry: Development of <i>ab initio</i> open-shell molecular dynamics method and its application			
研究氏 代表 者	カタカナ CC	姓)モリ	名)ヒロトシ	研究期間 B	2010 ~ 2012 年
	漢字 CB	森	寛敏	報告年度 YR	2012 年
	ローマ字 CZ	MORI	HIROTOSHI	研究機関名	お茶の水女子大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		お茶の水女子大学 お茶大アカデミック・プロダクション・特任助教			
<p>概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)</p> <p>我々の生活を支える電子機器、排ガス浄化触媒システムには、「レアメタル」が多用されている。レアメタルの産地は、中国・アフリカ・南北アメリカに偏在し、我が国の生活・経済はこの点において、外国に依存している。我が国が、今後も産業競争力を維持していくため、大量に廃棄されるスクラップ(都市鉱山)から、有用元素を上手くりサイクルする技術の開発が求められている。</p> <p>本研究では、レアメタルの溶媒和化学を明らかにするシミュレーション技術として、特にランタニドの溶媒和に着目し、モデル内殻ポテンシャル法を基盤とした開殻系第一原理分子動力学法の開発を行った。ランタニドは <math>(4f)^n(5d)^{1,2}(6s)^{1,2}</math> のような原子価電子構造を取り、空間的広がり狭い 4f 軌道に開殻電子が集まっていることが特徴である。開殻電子状態をもつランタニドの計算は、電子相関・相対論効果により強く支配され、その取り扱いが困難とされてきたが、我々は、4f 軌道の空間的広がりが 5d, 6s 軌道に比べ明らかに小さく、周囲の溶媒の揺らぎに露に影響されないことに着目し、4f-電子を擬内殻軌道として取り扱った 4f-in-core モデル内殻ポテンシャルを開発した。本手法の開発により、開殻電子状態をもつランタニド溶媒和系を、電子相関・相対論効果を含めた高精度計算が簡便に行える閉殻系として取り扱うことができるようになった。この手法をランタニドイオンの水和に応用し、前期ランタニドでは9水和、後期ランタニドでは8水和の水和構造をとることを理論的に示した。</p>					
キーワード FA	開殻系	レアメタル	ランタニド	溶媒和構造	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）										
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>	4f-in-core model core potentials for trivalent lanthanides								
	著者名 <sup>GA</sup>	T.Fujiwara, H. Mori et al.	雑誌名 <sup>GC</sup>	Chem. Phys. Lett.						
	ページ <sup>GF</sup>	261~266	発行年 <sup>GE</sup>	2	0	1	1	巻号 <sup>GD</sup>	510	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>									
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>							
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>		
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>									
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>							
	ページ <sup>GF</sup>	~	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>		
図書	著者名 <sup>HA</sup>	森寛敏（監修（独）物質・材料研究機構 元素戦略センター長 原田 幸明）								
	書名 <sup>HC</sup>	レアメタル・希少金属リサイクル技術の最先端，計算科学によるレアメタル抽出錯体設計の課題（第六章）								
	出版者 <sup>HB</sup>	フロンティア出版	発行年 <sup>HD</sup>	2	0	1	1	総ページ <sup>HE</sup>	20 頁	
図書	著者名 <sup>HA</sup>	Yuto K., Mochizuki Y., Nakano T., <a href="#">Mori H.</a>								
	書名 <sup>HC</sup>	Recent advances in fragment molecular orbital-based molecular dynamics (FMO-MD) simulation in Molecular Dynamics								
	出版者 <sup>HB</sup>	InTech	発行年 <sup>HD</sup>	2	0	1	2	総ページ <sup>HE</sup>	23 頁	

#### 欧文概要 <sup>EZ</sup>

Rare metals are often used in electronic devices that support our lives, e.g. in the exhaust gas purification catalyst system. Origin of rare metals are unevenly distributed in the Americas, Africa and China. In this regard, the economic life of our country is dependent on foreign countries. For our country's industrial competitiveness in the future, large amounts of scrap to be dropped from (urban mining), there is a need to develop the technology to recycle useful elements well.

In this study, we have carried out the development of the first principle molecular dynamics-based open-shell as simulation technology to reveal the chemical solvation of rare metals. We especially focused on the solvation of lanthanides and developed new simulation technique, 4f-in-core Model Core Potential. Lanthanides have  $(4f)^n(5d)^{1,2}(6s)^{1,2}$  valence electronic structure, and open-shell electrons are gathered in a narrow 4f orbits. It has been considered difficult to treat the open shell electronic structure of lanthanides in ab initio manner. However, the spatial distribution of 4f electrons are very narrow, thus, we could treat them as pseudo-core electrons. With this idea, we developed new pseudo potential calculation method, 4f-in-core model core potential. With the newly developed 4f-in-core MCP, we could tread lanthanides as a pseudo closed shell system, and we could apply them on the problem of lanthanides solvation. By performing ab initio molecular dynamics with 4f-in-core MCP, we could concluded that early lanthanides has 9 coordination structure, on the other hand late lanthanides has 8 coordination structure.