

計算機マテリアルデザイン 先端研究事例 ～ 水素の豊富な物理とその周辺 ～

笠井秀明, 尾澤伸樹, Tanglaw Roman, Do Ngoc Son,
Wilson Agerico Diño¹, 中西 寛, 国方伸一, 田中玲子
大阪大学大学院工学研究科, 理学研究科¹

本年度からクロアチアと我が国の研究交流事業が始まることを JST の担当者から教えてもらった。(現在、公募中。) そのキックオフのワークショップがザグレブ(Zagreb, Croatia)で6月29-30日に開催され、これに出席した。そこで、グムハルター博士(Branko Gumhalter)やその他の材料科学関係の研究者と会うことができた。中心部にある博物館や日本大使公邸でのディナーも楽しいものであった。クロアチア在住の日本人の方にもお目にかかれて大いに満足した。その一人に高等学校の先輩がいた。まったくの奇遇である。30年以上物性物理学の研究に携わってきたが、ときどき、このような出来事がある。

さて、健全な研究教育環境の維持が難しくなりつつある昨今であるが、水素にかかわる研究で優秀な人材が巣立った。今も彼らに励まされている。今回の発表内容に関係するので、彼らの学位論文の題名を挙げよう。

1. Dynamics of Hydrogen-Solid Surface Reactions, Orientational Effects on the Dissociative Adsorption, Inelastic Scattering, and Associative Desorption Dynamics of Hydrogen on Copper and Palladium Surfaces, Wilson Agerico Diño, 1998
2. 金属表面での水素分子の解離散乱に関する理論的研究, 福井篤, 2000
3. 第一原理量子ダイナミクス計算による水素 - 表面反応の解析, 三浦良雄, 2001
4. 金属表面における水素の量子力学的振る舞いと量子状態の多様性に関する理論的研究, 信原邦啓, 2003
5. Design and control of dynamical quantum processes in ortho-para H₂ conversion on solid surfaces and clusters, Rifki Muhida, 2005
6. Quantum Dynamics Investigations and First Principles Studies of Vibrational Effects on Hydrogen Surface Reactions, Nelson B. Arboleda Jr., 2006
7. Density Functional Investigations on Heme- and Hydrogenase-based Catalysts for Potential Fuel Cell Applications, Eben Sy Dy, 2007
8. 第一原理計算による固体高分子形燃料電池要素材料および水素貯蔵材料のデザイン, 津田宗幸, 2007
9. 遷移金属表面及び表面内部領域における水素原子の量子論的振る舞いに関する理論的研究, 尾澤伸樹, 2008

これに、Do Ngoc Son の学位論文(2009年9月終了予定)やTanglaw Roman の学位論文(2010年3月終了予定)が加わる。当初は「産業応用にかかわりのない学術研究ですね。」との誤ったコメントを頂戴することもあったが、現在も産業応用面で貢献している。最近の計算機性能の飛躍的な向上と量子力学に基づく信頼性の高い第一原理計算手法の開発とが相まって量子シミュレーションによる計算機マテリアルデザイン(CMD)エンジンが実用化研究開発(図1)[1]で機能している。

平成14年度から、このCMDエンジンを援用する燃料電池の実用化研究開発を実施した。NEDO 技術開発機構の固体高分子形燃料電池システム技術開発/固体高分子形燃料電池要素技術開発事業/先導的技術研究開発である。先ごろ、5年間の研究開発の成果報告書を提出した。

平成20年度から家庭用燃料電池の販売が始まっているが、燃料電池自動車に関しては実用化に向けた研究開発が進行中である。[2]

1. 笠井・赤井・吉田 共編: 計算機マテリアルデザイン 入門, 大阪大学出版会, 2005
2. 笠井・津田 共著: 固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計, 大阪大学出版会, 2008

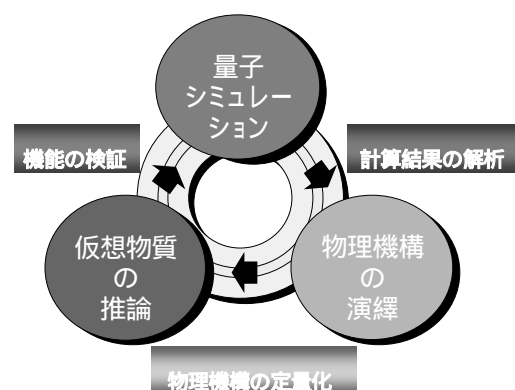


図1. 計算機マテリアルデザインエンジン

