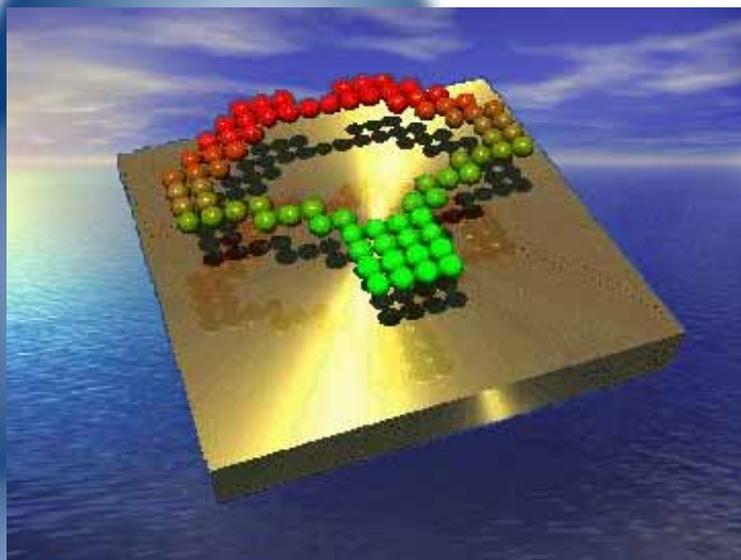


# マテリアルデザイン



笠井秀明

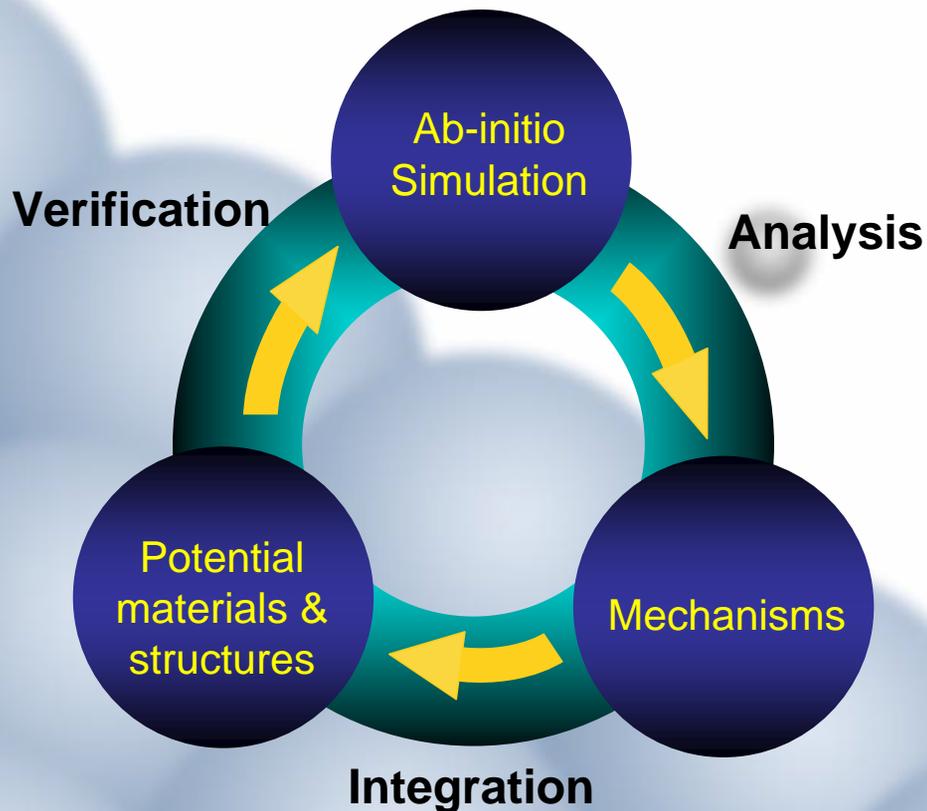
大阪大学大学院工学研究科  
精密科学・応用物理学専攻

[www.dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp](http://www.dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp)



# 計算機マテリアルデザイン

## 逆問題をフィードバックループで解く



**Fossil fuel depletion · Global warming · Air pollution**

## 水素を中心とした新しいエネルギー形態

- ・生物圏の循環系と調和したクリーンエネルギー

排出物 : 水  $\text{H}_2\text{O}$  のみ



- ・高効率

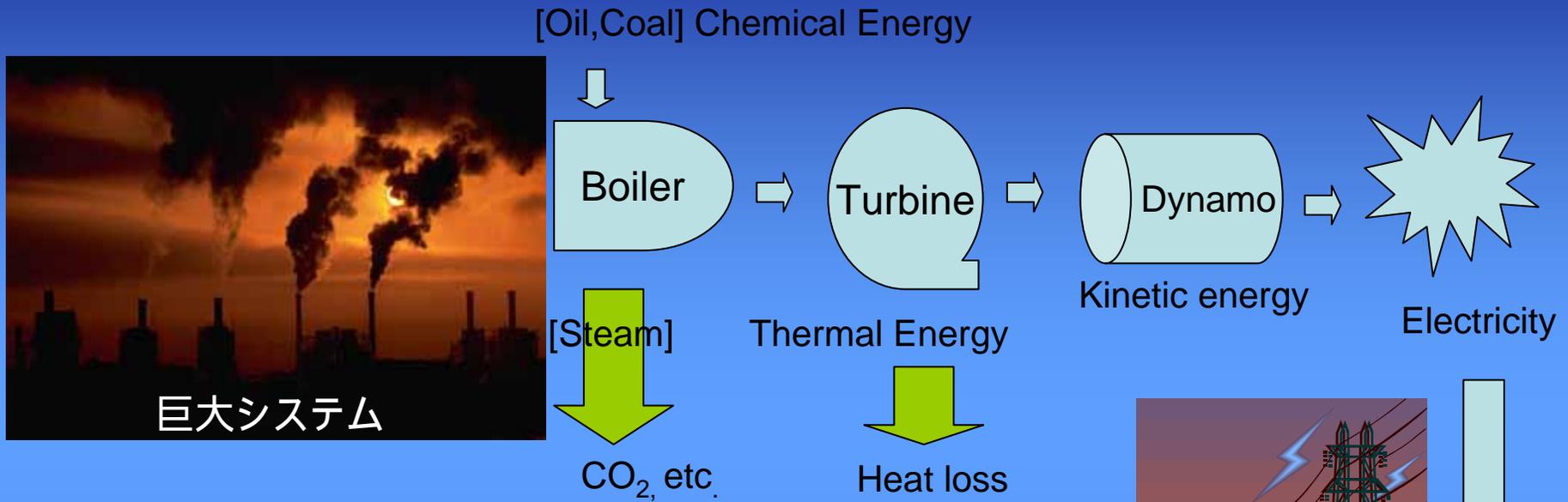
- ・ 化学エネルギーを、直接電気エネルギーへ変換

- ・ 小型システム 消費地での発電

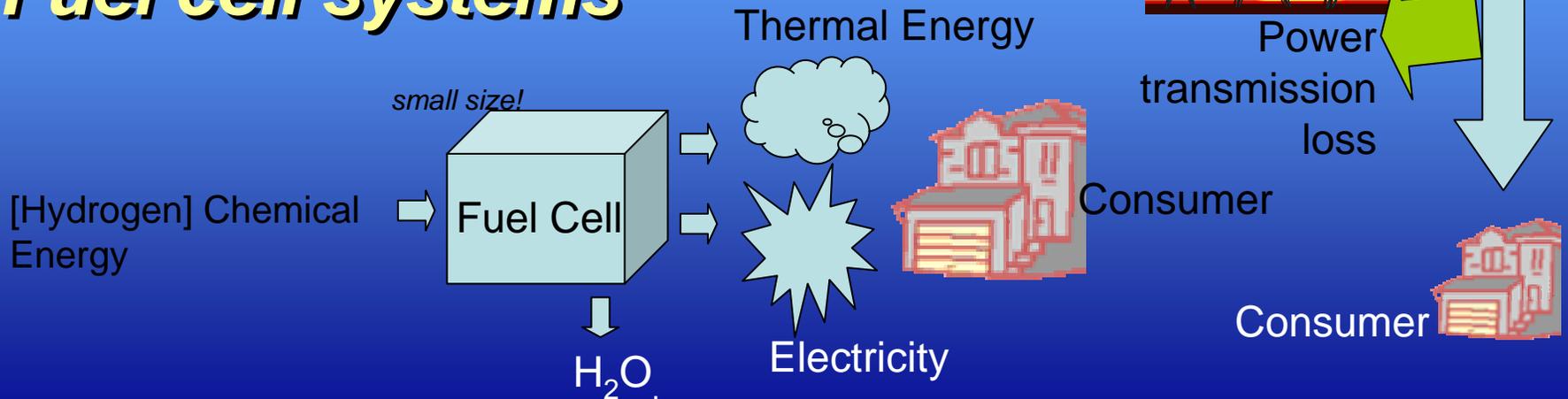
熱の利用 コージェネレーション



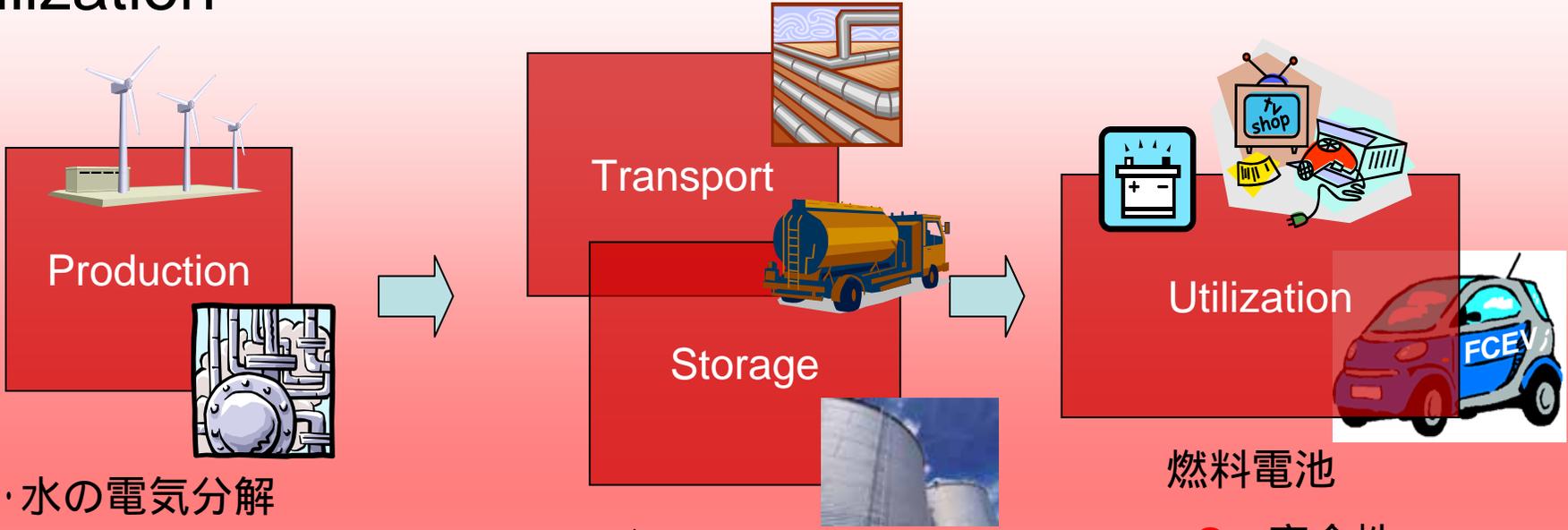
# Conventional power generation systems



## Fuel cell systems



# Problems in hydrogen production, transportation, and utilization



- ・水の電気分解
- 太陽光発電
- 風力発電
- 核融合・・・他

- ・燃料改質
- 有機燃料
- (アルコール、天然ガス・・・)

Q. 再生産可能なエネルギー源、

- ・ガス
- ポンベ、パイプライン
- ・液化水素
- ・水素吸蔵物質
- ・改質前燃料で輸送

消費地で改質

Q. 安全性、効率

燃料電池

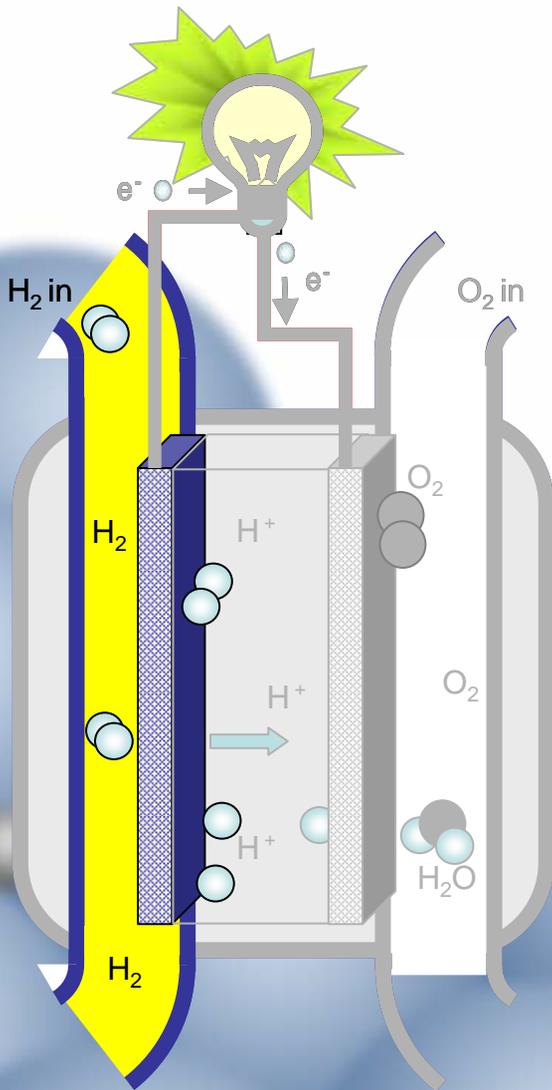
- Q. 安全性
- Q. 耐久性
- Q. 材料資源

Pt: プラチナ  
Pd: パラジウム



# Elementary reactions in the fuel cell electrode

## *Atomic scale description*

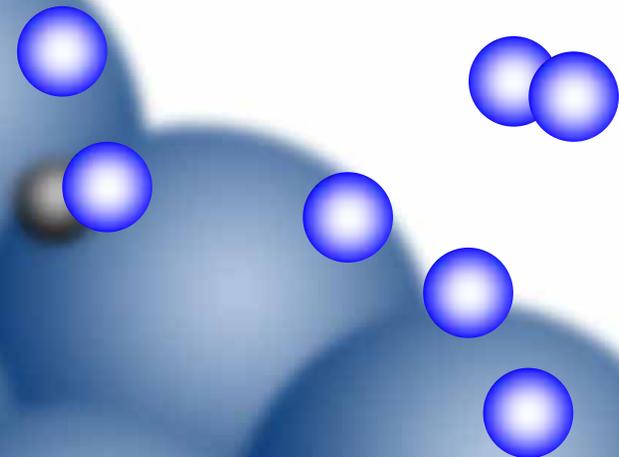
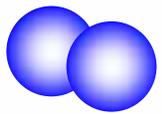


Dissociative adsorption of hydrogen molecules on the Pt surface: reaction dynamics

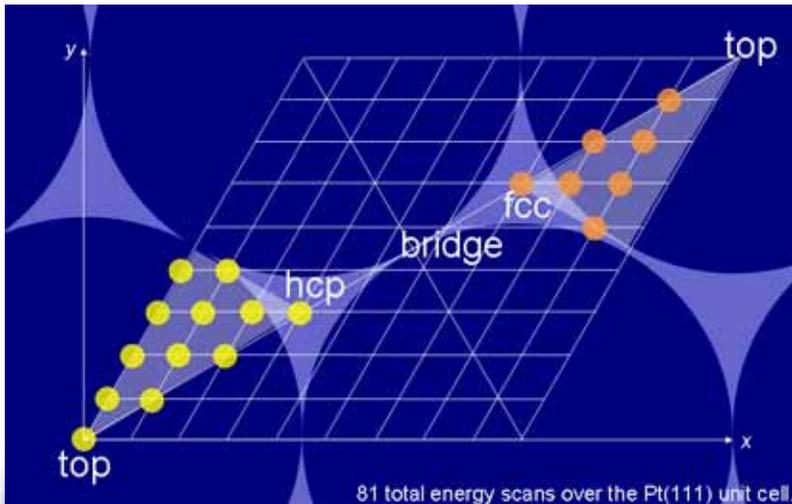
Dynamics of hydrogen atom diffusion on the Pt surface

Dynamics of proton liberation from the Pt surface

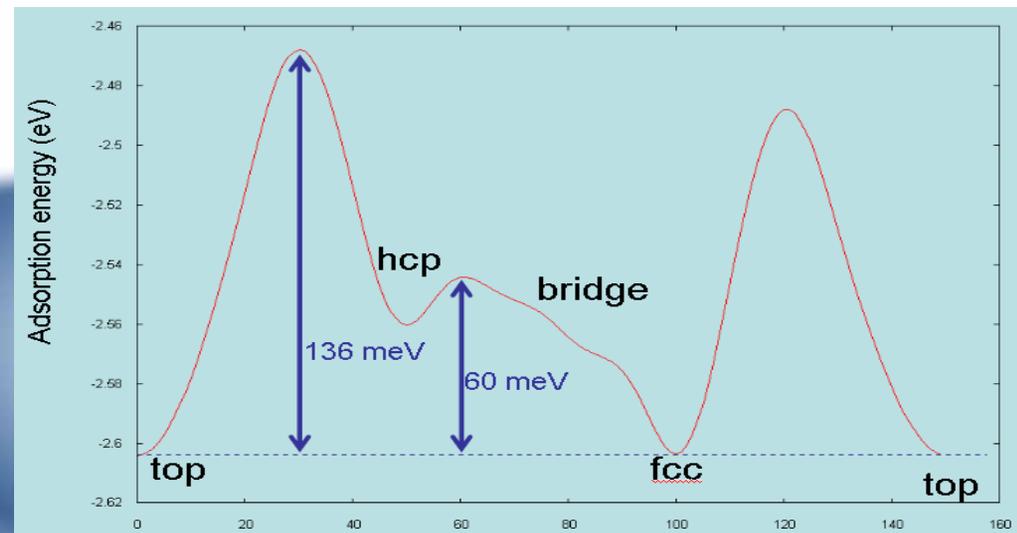
, ...



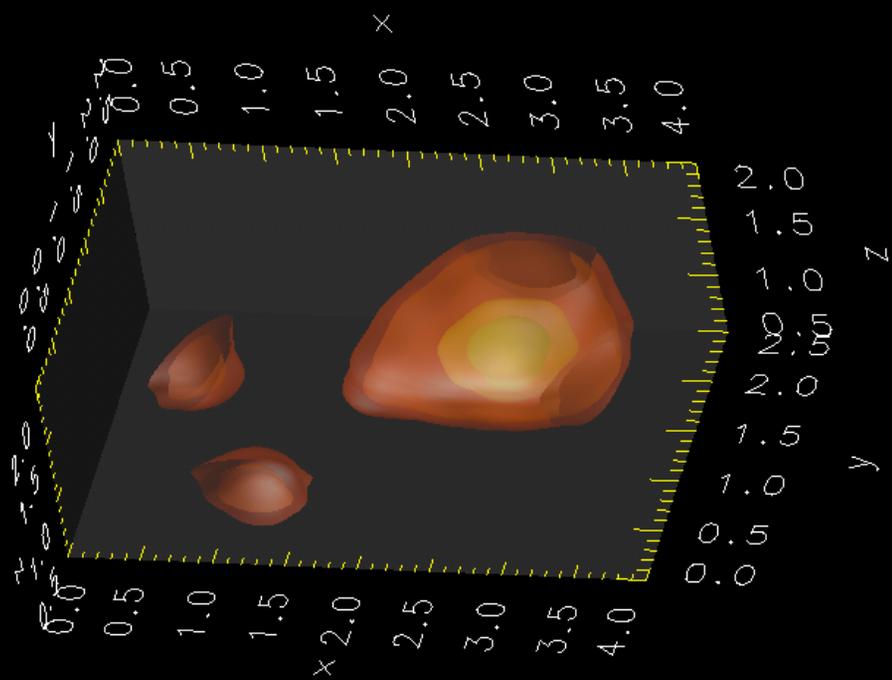
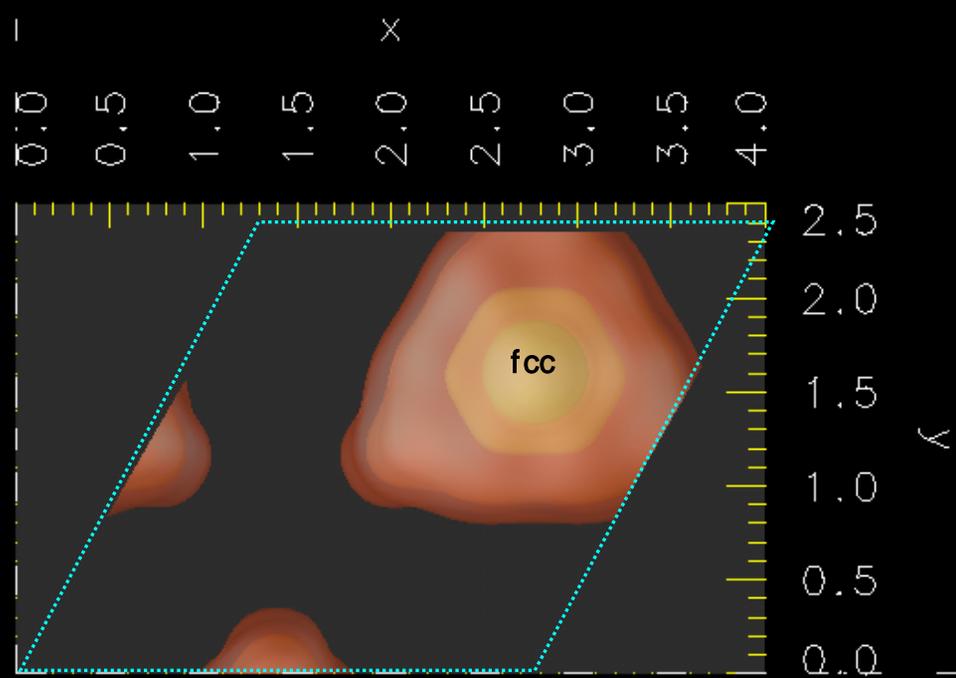
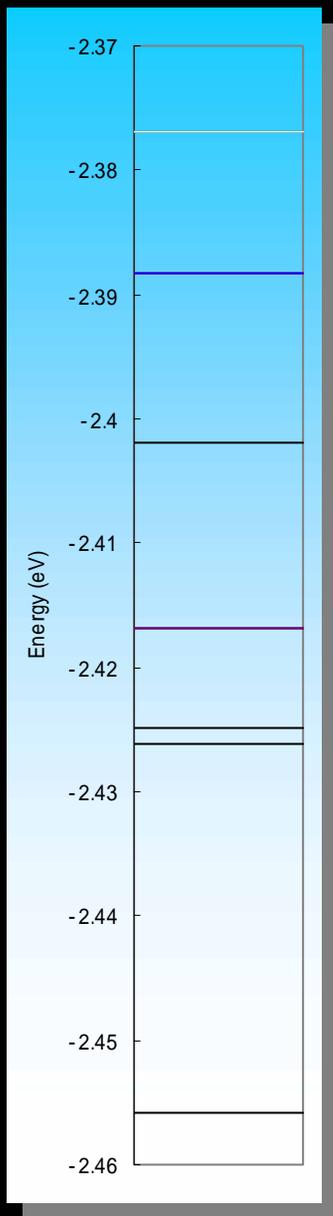
# Adsorption and Diffusion



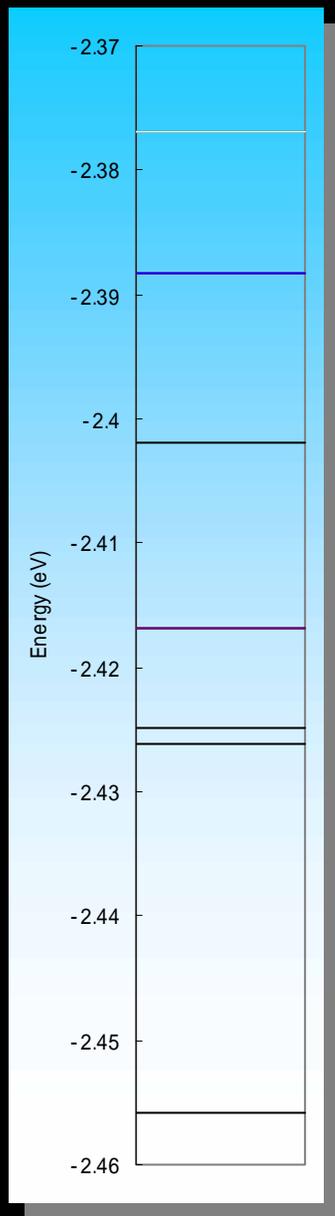
の解離吸着過程により原子状態となった水素が、白金(111)面上でいかなる量子状態をとりうるか、また、そこから表面拡散について、どのように振舞うかを解析する。



# Ground state



# 1<sup>st</sup> Excited state



8<sup>th</sup> + 9<sup>th</sup>

6<sup>th</sup> + 7<sup>th</sup>

5<sup>th</sup>

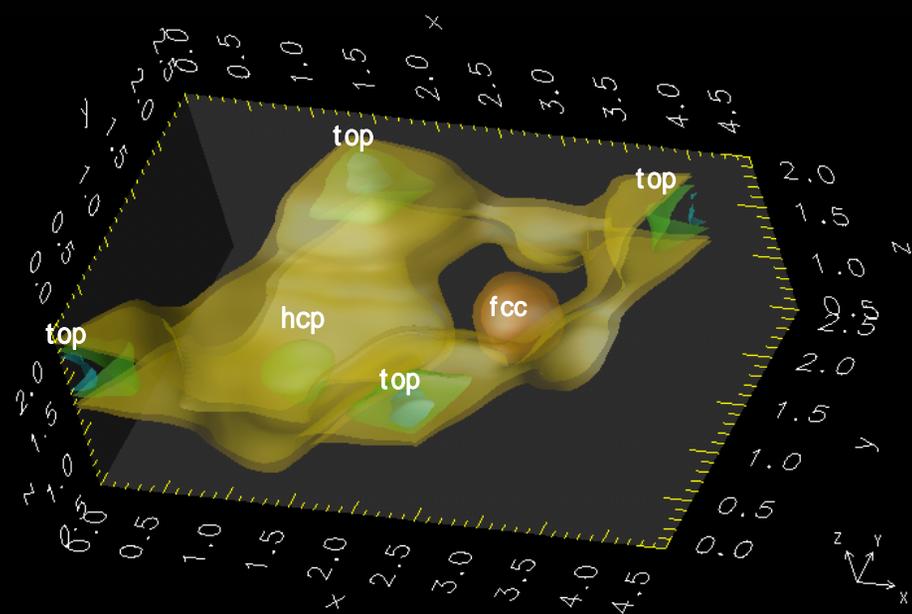
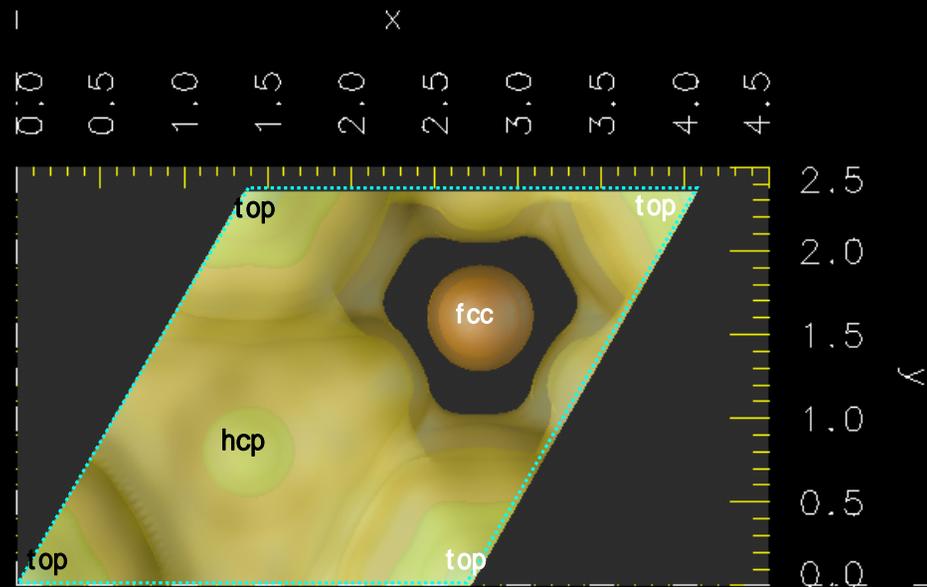
3<sup>rd</sup> + 4<sup>th</sup>

2<sup>nd</sup> 1<sup>st</sup>

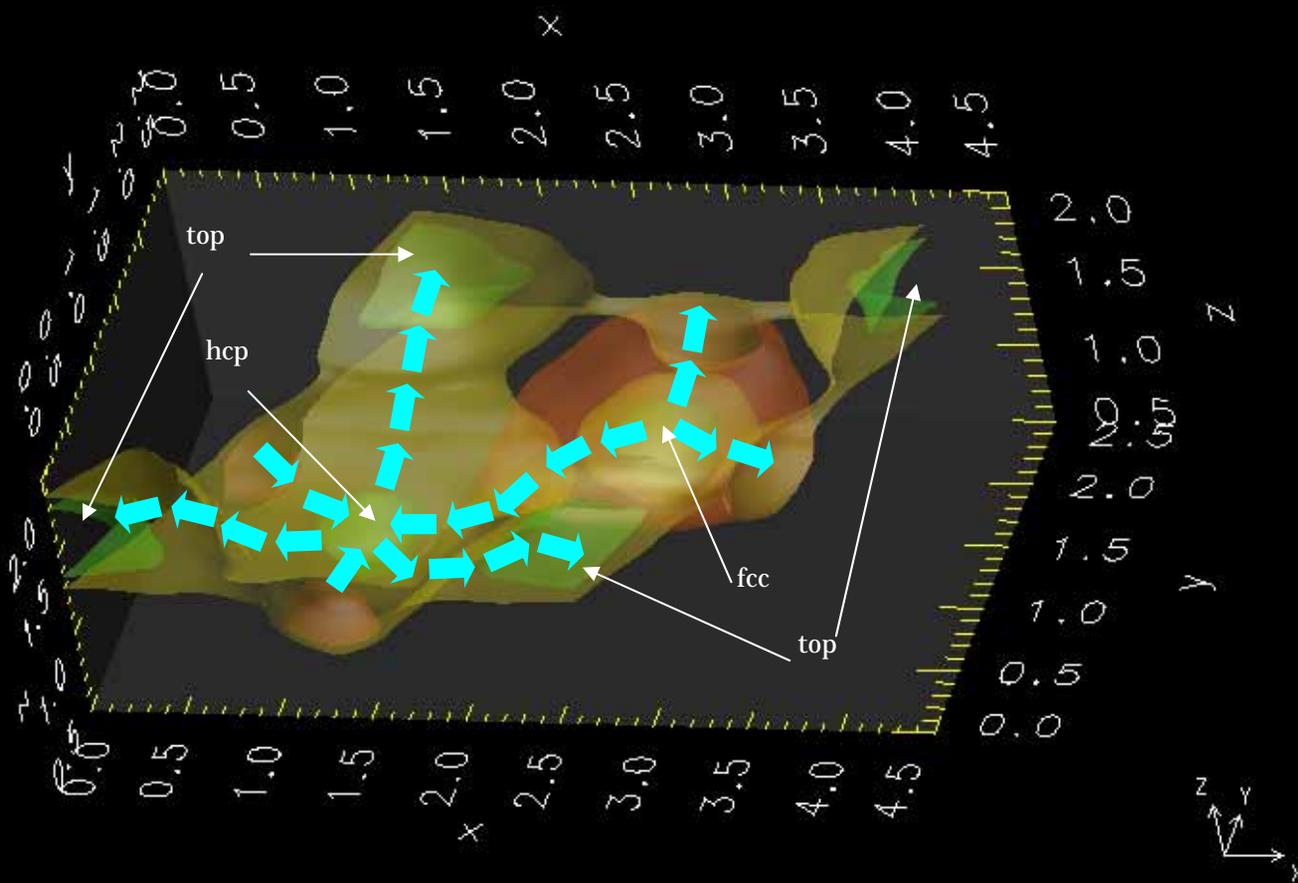
Delocalized!

30 meV above the  
ground state

ground state



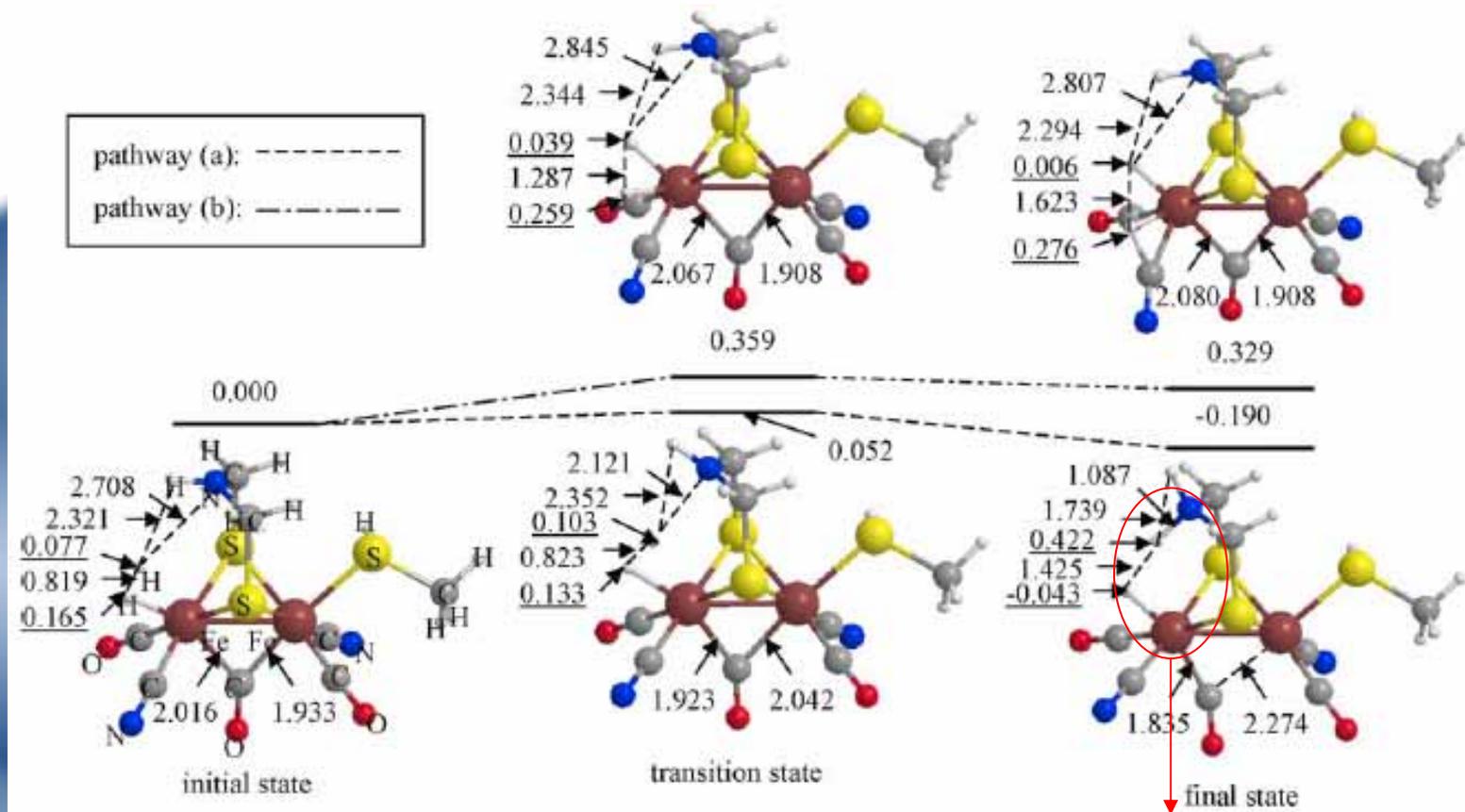
# Diffusion process



拡散経路の古典的描像(青の矢印)。赤い部分は、基底状態、緑-黄色部分は第一励起状態の波動関数を表す。

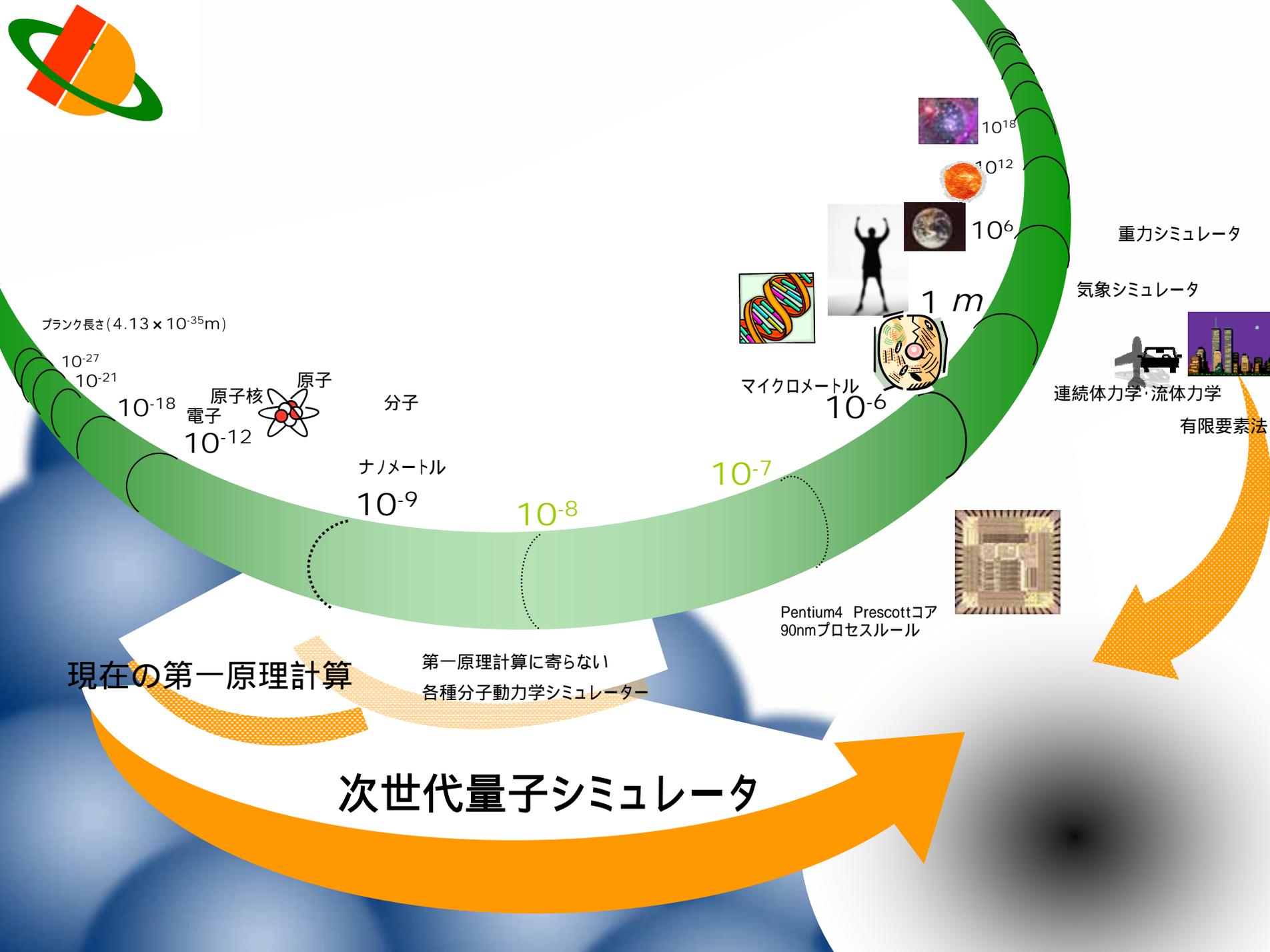


# H<sub>2</sub> dissociation from singlet DdHase-H<sub>2</sub> adduct



Fe-H ··· H + -N 'dihydrogen bond'





プランク長さ ( $4.13 \times 10^{-35} \text{m}$ )

$10^{-27}$   
 $10^{-21}$

$10^{-18}$

電子



原子

原子核

分子

ナノメートル

$10^{-9}$

$10^{-8}$

$10^{-7}$

マイクロメートル

$10^{-6}$

1 m

$10^6$

$10^{12}$

$10^{18}$

重力シミュレータ

気象シミュレータ

連続体力学・流体力学

有限要素法

現在の第一原理計算

第一原理計算に寄らない  
各種分子動力学シミュレータ

次世代量子シミュレータ

Pentium4 Prescottコア  
90nmプロセスルール

# 生物体の研究開発

- 三つの機能を併せ持つバーチャルな生物体
  - 機械系機能
  - 生理機能
  - 情報機能
- 超地球シミュレータ計画
- (例)
  - 生物(人体)実験が今後難しい世界的環境下で、計算機の中で作った生物体で実験を行うことを可能とするなど(薬害…)
  - 機械系機能が先行…ロボット



# QE (Quantum Engineering) デザイン

!! WARNING !!

## グローバル市場経済状態の諸問題

- ・世界的規模での知・富の偏在化および格差の増大、
- ・国内の産業空洞化、知の流失

- ・21世紀の高効率社会、知識基盤社会での優位性
- ・安全・安心性、環境調和性、高効率性
- ・ナノ・量子・ITベース

## Quantum Engineering (QE)

開発

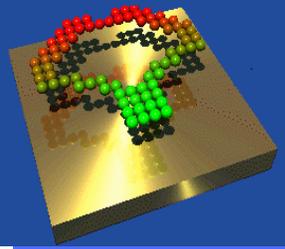
公開

人材育成

支援

互いに互角のプレーヤーとして  
アジア諸国との強力な  
パートナーシップの実現



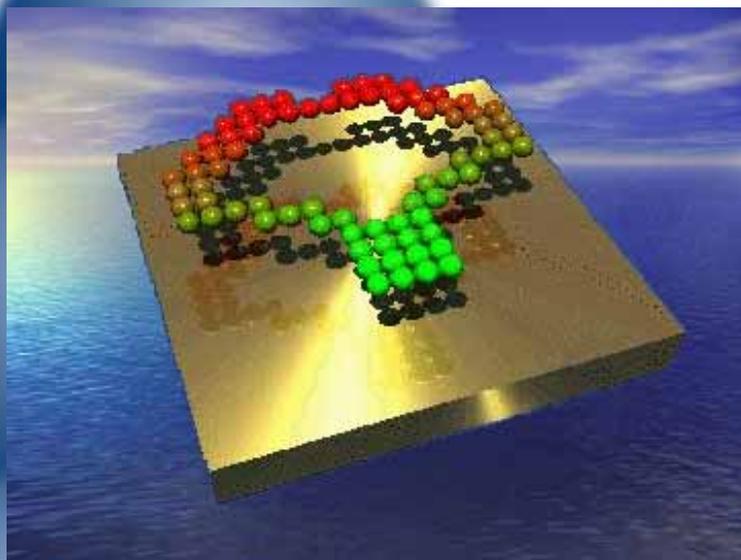


# RESEARCH COLLABORATORS

- 中西 寛(Hiroshi Nakanishi)
- Rifki Muhida – *Indonesia*
- 岸 智弥(Tomoya Kishi)
- 津田宗幸(Muneyuki Tsuda)
- Nelson Arboleda, Jr. – *Philippines*
- Md. Mahmudur Rahman – *Bangladesh*
- 尾澤伸樹(Nobuki Ozawa)
- 寺田武司(Takeshi Terada)
- 西 真友子(Mayuko Nishi)
- Henry Setiyanto – *Indonesia*
- Romel Raganas Mozo – *Philippines*
- Do Ngoc Son – *Vietnam*
- Eben Sy Dy – *Philippines*
- Melanie Yadao David – *Philippines*
- 南谷英美(Emi Minamitani)
- 宮本敬太(Keita Miyamoto)
- 花房真浩(Masahiro Hanafusa)
- Tanglaw Abat Roman – *Philippines*
- 福村修士(Syuji Fukumura)
- 篠部賢二(Kenji Sasabe)
- 笠井宏一郎(Koichiro Kasai)
- 国方伸一(Shinichi Kunikata)
- 松本茂野(Shigeno Matsumoto)
- Wilson Agerico Diño – *Philippines*



# マテリアルデザイン



笠井秀明

大阪大学大学院工学研究科  
精密科学・応用物理学専攻

[www.dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp](http://www.dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp)

