

ディビジョン番号	12
ディビジョン名	触媒化学

大項目	9. 計算化学
中項目	9-1. マルチフィジックス・マルチスケールシミュレーション
小項目	9-1-1. マルチスケールシミュレーション

概要（200字以内）

次世代の触媒開発技術として、電子・原子レベル、メソスケール、マクロスケールなどの異なる階層レベルで発生する開発課題を総合的に考慮した設計手法の構築が強く求められている。その実現には、従来は全く異なる学問分野として発展してきた量子化学、分子動力学、化学工学、流体力学などのシミュレーション手法をシームレスに統合化したマルチスケールシミュレーション技術の開発が必須課題である。最近、日本において燃料電池におけるマルチスケールシミュレータの開発など先駆的研究が行われており早急な発展が求められる課題である。

**多孔質シミュレーション**  
μmスケールの過電圧特性

**マルチスケールシミュレーション手法の確立**  
量子分子動力学法に他の計算手法を融合  
電極反応、界面現象、電子移動、拡散、伝熱が絡み合った現象

**キネティックモンテカルロ法**  
サブμmスケールの拡散ダイナミクス

**全体モデル**

**固体高分子形燃料電池を例に**

電解質膜層	電極触媒層	ガス拡散層
電解質 プロトン拡散	電解質 プロトン拡散	カーボン 酸素拡散 電極周りの電解質 水の拡散 酸素拡散 カーボン担体 Pt微粒子

**分子動力学法**  
界面現象ダイナミクス  
吸着現象ダイナミクス

**量子分子動力学法**  
化学反応ダイナミクス  
電子移動ダイナミクス

**流体力学シミュレーション**  
流れ、濃度分布、温度分布

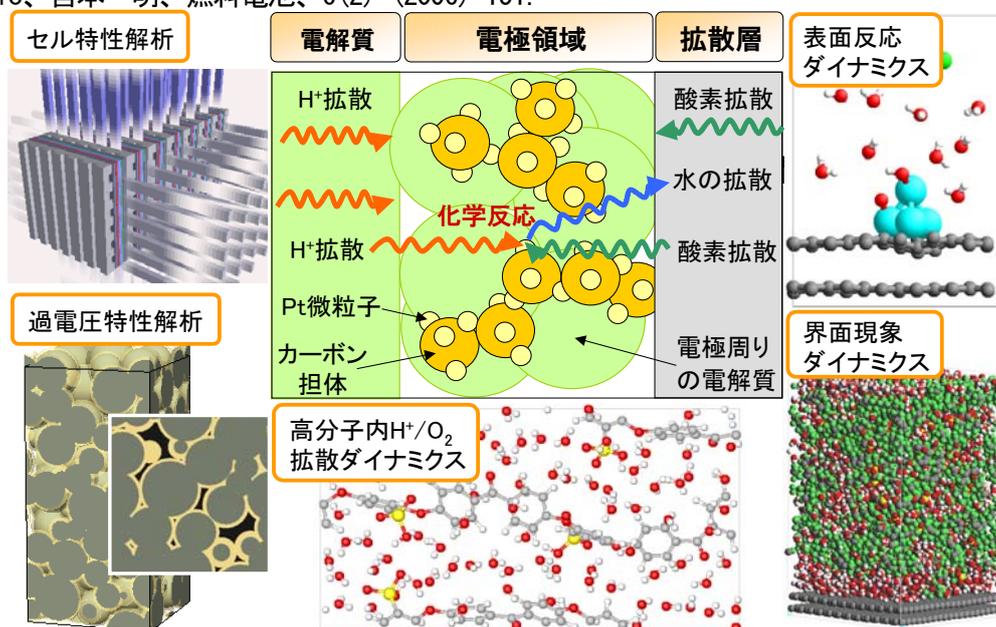
現状と最前線

より高度な制御が求められる次世代の触媒開発技術として、電子・原子レベル、メソスケール、マクロスケールの異なる階層レベルで発生する開発課題を総合的に考慮した設計手法の構築が強く求められている。例えば、固体高分子形燃料電池が抱える問題点は、触媒活性、プロトン伝導、電解質劣化、水分管理など、電子・原子レベルからマクロレベルまで幅広いスケールに及び、各々の課題は異なる階層レベルの開発課題と密接に絡み合っている。そこで、上記のような複雑に絡み合った課題を解決するために、従来は全く異なる学問分野として発展してきた量子化学、分子動力学、化学工学、流体力学などのシミュレーション手法をシームレスに統合化したマルチスケールシミュレーション技術の開発が必須課題となっている。

最近、日本において固体高分子形燃料電池におけるマルチスケールシミュレータの開発など先駆的な研究が開始されている[1]。具体的には、次ページの図に示すように量子分子動力学

法を活用した Pt/カーボン担体上での電極反応ダイナミクスの解明、分子動力学法を活用した電解質/電極界面ダイナミクス・プロトン拡散ダイナミクスの解明、多孔質シミュレータを活用した過電圧特性予測、流体力学を活用したセル特性評価などマルチスケールでの燃料電池特性の検討が実現されている。特に、量子分子動力学法、分子動力学法で得た計算値を多孔質シミュレータの入力値として使用するなどのシームレス化が具体化されている。今後、異なるシミュレータ間のさらなるシームレス化、ハイブリッド化、統合化の促進により、燃料電池のみならずあらゆる触媒系において電子・原子レベルからマクロレベルまでを総合的に設計可能なマルチスケールシミュレーション技術の確立が求められる。

[1]古山通久、服部達哉、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio、宮本 明、燃料電池、6(2) (2006) 151.



### 将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

量子分子動力学法、分子動力学法、化学工学、流体力学などの異なるシミュレータ間をシームレスに接続するインターフェース技術の開発

扱うスケール・時間の異なるシミュレータ間の中間スケール・時間を計算可能なシミュレーション技術の開発

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

量子分子動力学法、分子動力学法、化学工学、流体力学などの異なるシミュレータを直接的にハイブリッド化したマルチスケールシミュレータの開発

### キーワード

マルチスケールシミュレーション、触媒設計、シームレス化、ハイブリッド化、統合化

(執筆者: 宮本 明、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos A. Del Carpio)