

課題名：燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用



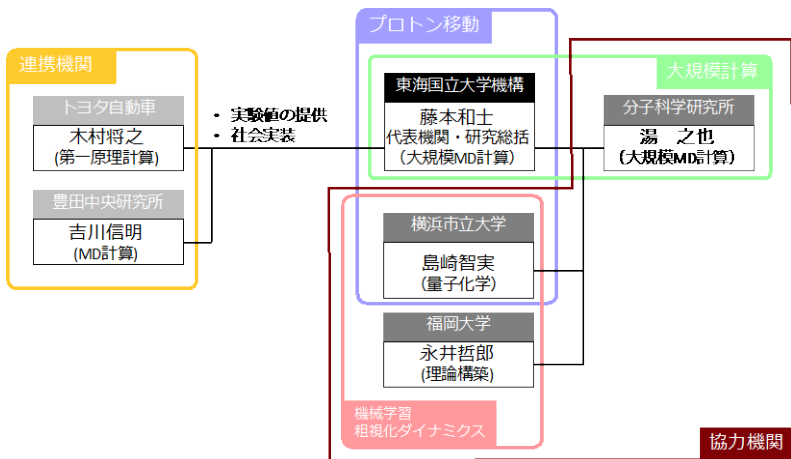
藤本 和士
(関西大学・准教授)

概要・目標

燃料電池触媒層内のプロトン・酸素ガスの物質輸送機構解明のために、量子化学計算、分子動力学計算、機械学習、粗視化ダイナミクスを組み合わせたマルチスケール計算技術を開発し、一つの計算手法では到達することができない、広域な時空間領域での物質輸送機構をスーパーコンピュータ「富岳」を用いて解明する。

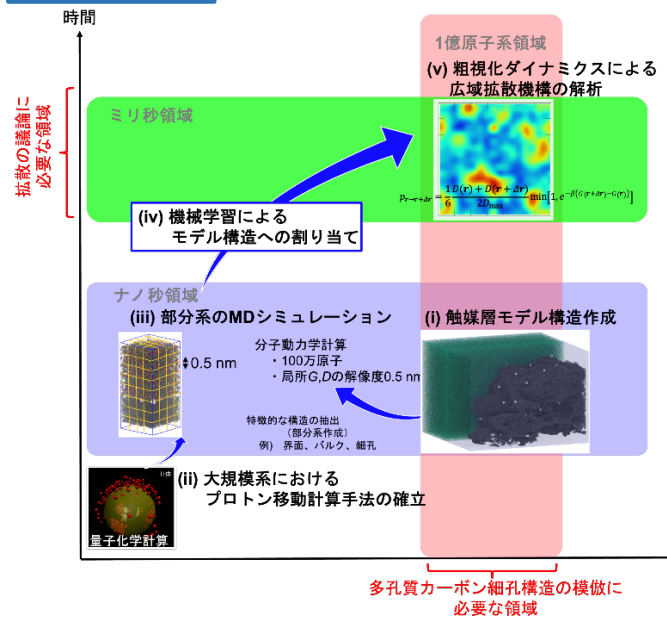
実施体制・関係機関・研究内容

実施体制



アドバイザー：岡崎進（東大）

研究内容



- ◆ 触媒層モデル構築作成と多孔質カーボン内のプロトン分布の計算
- ◆ 核を量子化した量子化学計算
- ◆ 大規模系におけるプロトン移動計算手法の開発
- ◆ 部分系における位置に依存した自由エネルギーおよび拡散係数計算
- ◆ 機械学習モデル構築
- ◆ 粗視化ダイナミクスの実施

想定される具体的成果

- ◆ 粗視化ダイナミクスによる多孔質カーボンも含む燃料電池触媒層内の物質輸送の解明
- ◆ 構築された機械学習モデルの開発品への適用と粗視化ダイナミクスの実施（社会実装）