

プロフィール

森川 良忠(もりかわ よしただ)



【現職】

大阪大学 産業科学研究所 准教授

【略歴】

1994 東京大学大学院理学系研究科
博士課程修了

1992 日本学術振興会特別研究員(DC, PD)

1995 通商産業省 工業技術院
産業技術融合領域研究所 研究員

1998 同研究所 主任研究官

2001 独立行政法人 産業技術総合研究所
主任研究員

2004 大阪大学 産業科学研究所 助教授

2009 大阪大学 大学院工学研究科 教授

【専門分野】

固体電子論、量子シミュレーション、
特に触媒や有機デバイス、燃料電池など、応用上重要な
表面や界面での電子状態や反応過程の解明とデザイン。

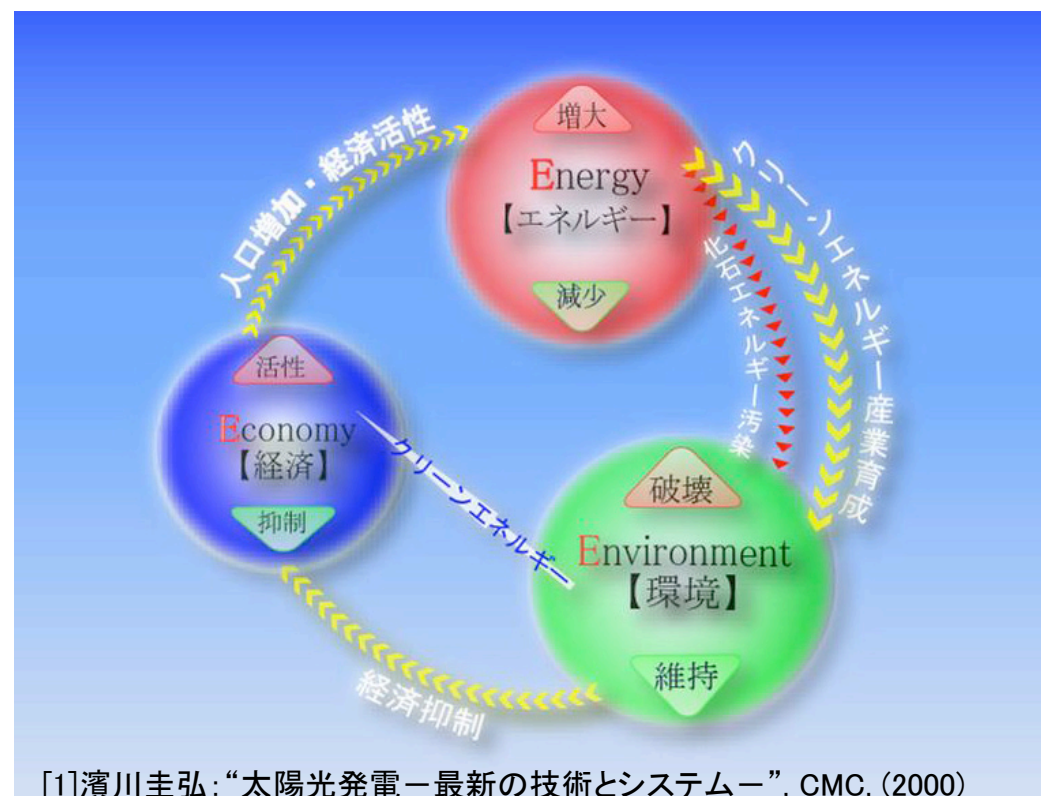
ペタコン利用による挑戦的課題

大阪大学大学院工学研究科

森川良忠

3Eのトリレンマ

- 経済(Economy)の発展
- エネルギー(Energy)の消費
- 地球環境(Environment)維持



問題解決のキーマテリアル : 不均一触媒

自動車の排気ガス浄化

- 三種類の生成物を同時に処理



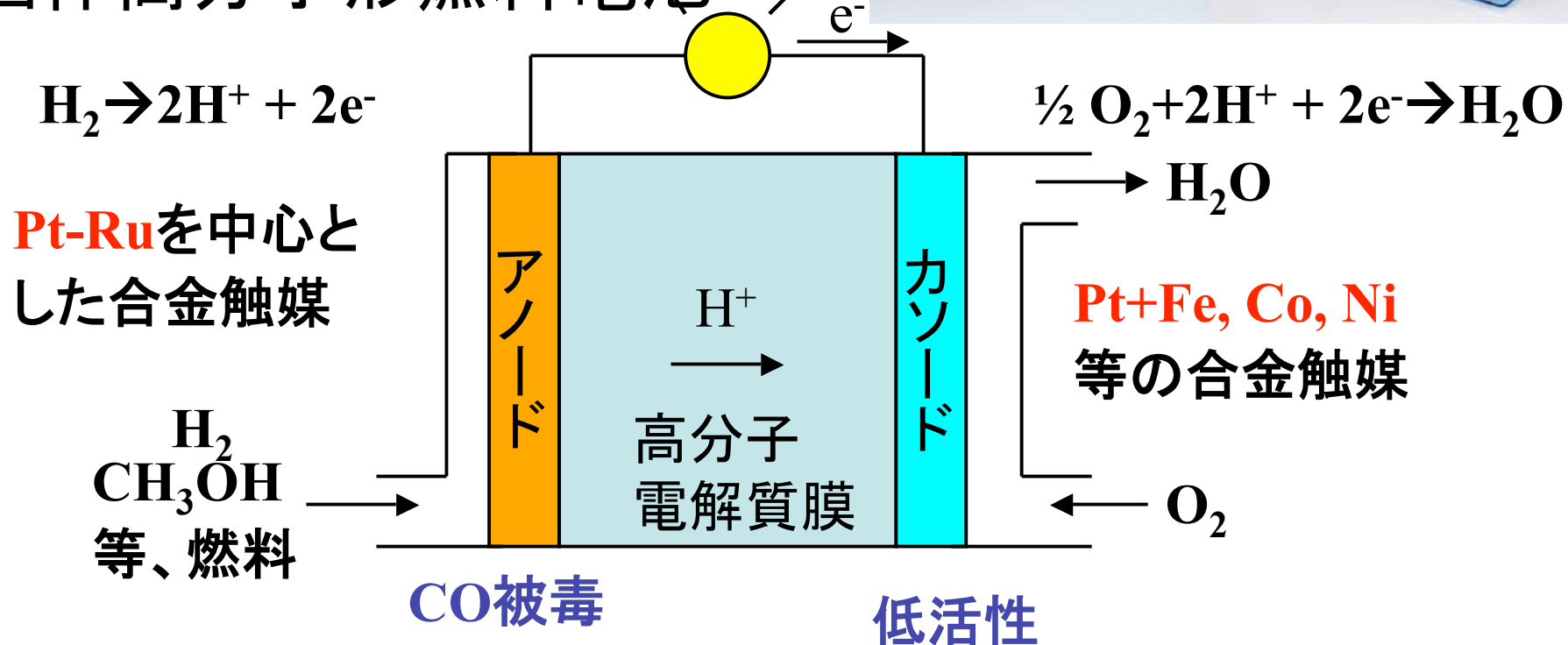
- 三元触媒 (Three Way Catalyst)
- Pt・Rh(10:1)、Pt・Pd・Rh、Pd・Rh、Pdなど
- Rhは資源的に厳しい。
- Pt: 南ア74%、ロシア14%
- Pd: 南ア25%、ロシア70%
- Rh: 南ア67%、ロシア17%
- 近年、排ガス規制がさらに厳しくなっている。
- インド・中国等、新興国での車の需要増大

燃料電池

- 高効率なエネルギー変換
- クリーン
- 携帯性



固体高分子形燃料電池



光触媒： $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$

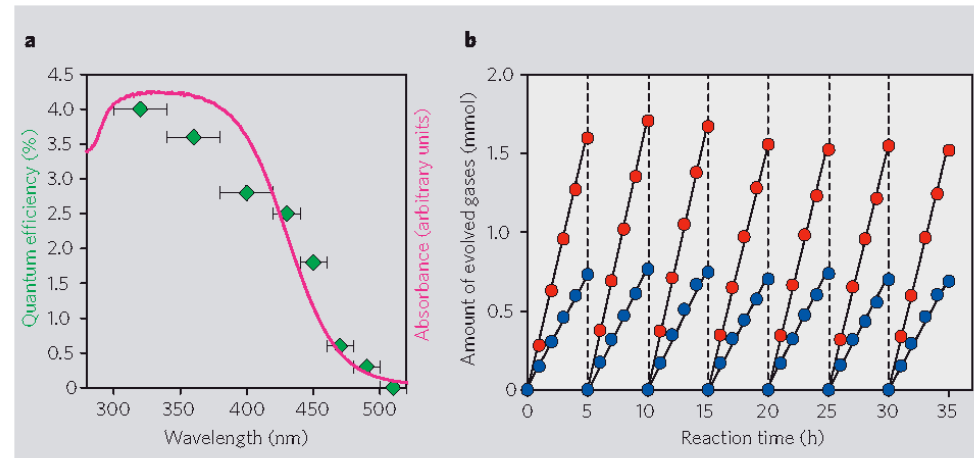


Figure 1 | Photocatalytic performance of the photocatalyst $(\text{Ga}_{1-x}\text{Zn}_x)(\text{N}_{1-x}\text{O}_x)$ loaded with mixed oxides of rhodium and chromium in overall water splitting. **a**, Quantum efficiency of the photocatalyst (sample C, see supplementary information) plotted as a function of wavelength of the incident light. Quantum efficiency was estimated by using several cut-off filters; each plot is in the middle of two cut-off wavelengths (for methods, see supplementary information). **b**, Time course of overall water splitting under visible light (of wavelength longer than 400 nm) on the photocatalyst (sample B, see supplementary information). The reaction was continued for 35 h, with evacuation every 5 h (dotted line). Red circles, hydrogen; blue circles, oxygen.

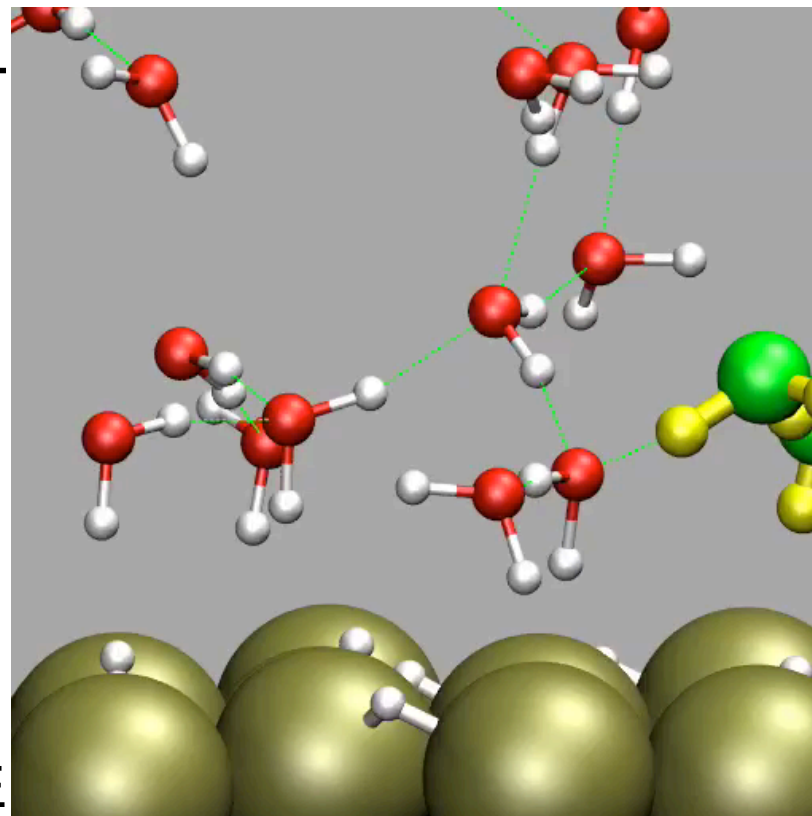
D. Lu, T. Takata, N. Saito, Y. Inoue, and
K. Domen, Nature, 440, 295 (2006).

現状と課題

- 単位胞当たり水32分子、Pt36原子
- ～数十ps程度のシミュレーション
- 電極反応前後で電位が0.2～0.4V程度変化

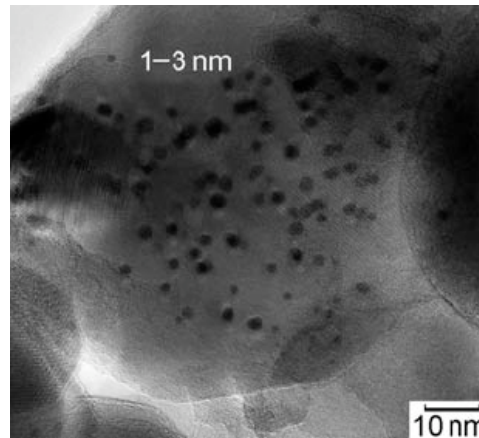
ペタコンによる挑戦的シミュレーション

- 実空間PAW法による超並列計算
- 水100～200分子, Pt100原子程度用いた定電位シミュレーション
- 自由エネルギー障壁の電位依存性
- 反応性の電極材料依存性を調べ、最適材料の探索

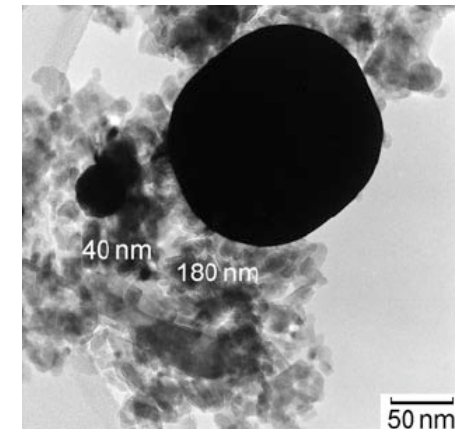
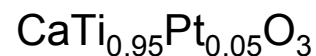


インテリジェント触媒

- 自動車排ガス触媒
- 雰囲気ガスの組成、温度によって触媒の構造、反応性が変化、



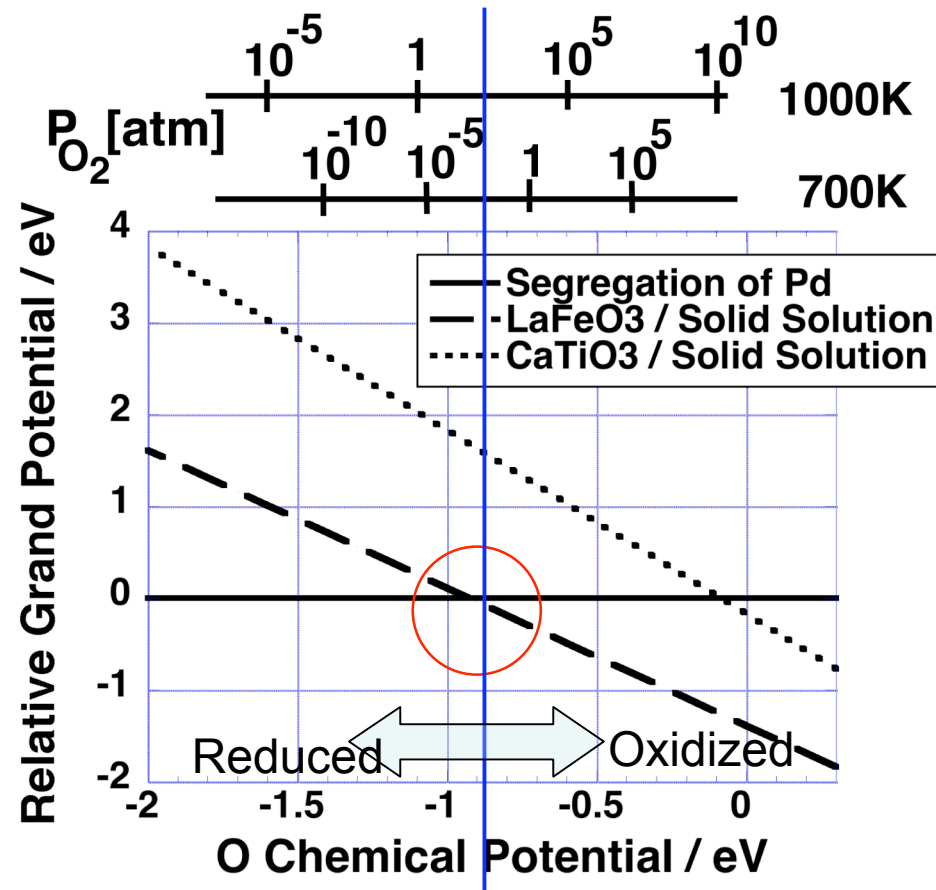
Intelligent Catalyst



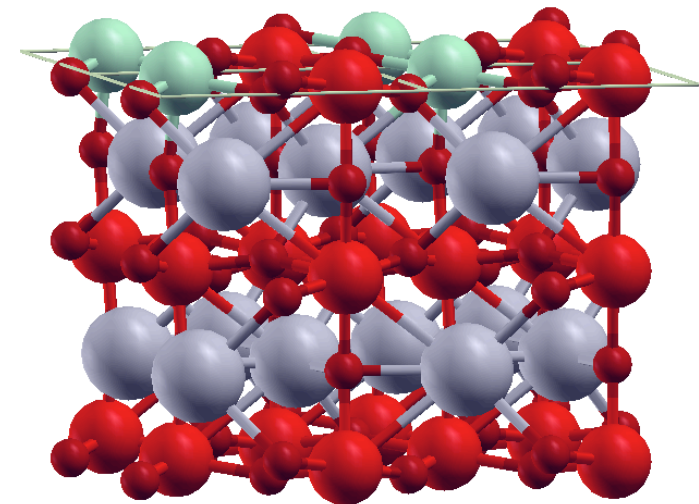
Conventional Catalyst

Angew. Chem. Int. Ed. **45**, 5998 (2006)

触媒反応シミュレーションの現状と課題



- 第一原理熱力学計算により触媒構造の変化は予測可能。
ペタコンを用いたシミュレーション
- 環境によって変化した触媒構造を考慮した反応シミュレーション、触媒設計。

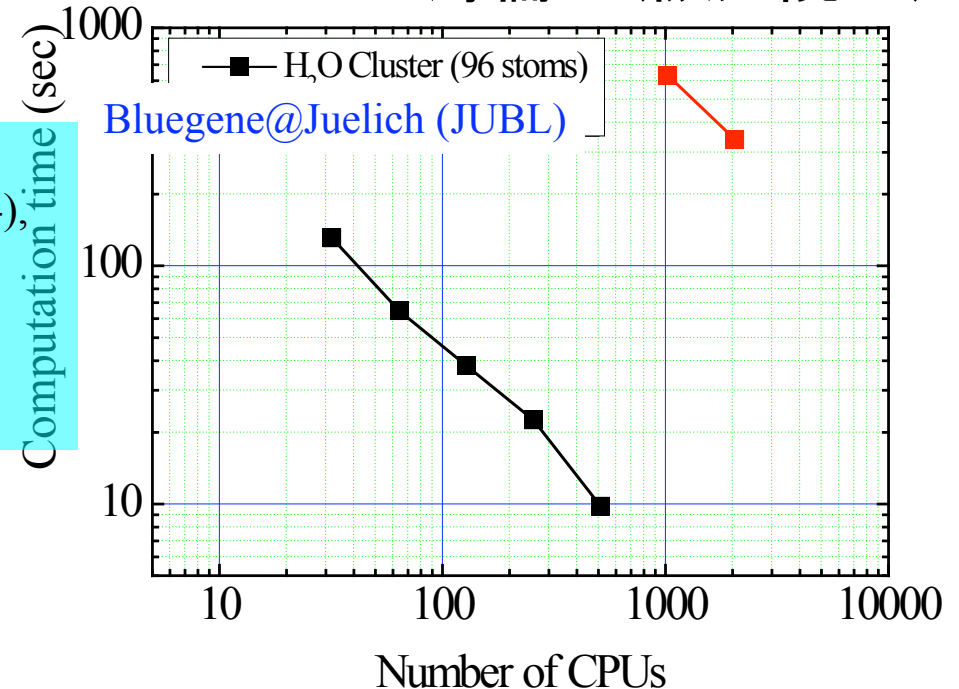


$\text{LaFe}_{1-x}\text{Pd}_x\text{O}_3$ surface

より現実に近い環境をシミュレート： Real Space Finite Difference(RSFD) with PAW

Highly efficient and accurate simulation 小野倫也(阪大院工)

References of the RSFD approach, .e.g.,
J. R. Chelikowsky *et al.*, Phys. Rev. B **50**, 11355 (1994),
T. Ono & K. Hirose, Phys. Rev. Lett. **82**, 5016 (1999),
K. Hirose & T. Ono, Phys. Rev. B **64**, 085105 (2001),
T. Ono & K. Hirose, Phys. Rev. B **72**, 085105 (2005),
T. Ono & K. Hirose, Phys. Rev. B **72**, 085115 (2005).



Structural energy differences between different bulk phases of Iron.

	NM hcp	NM fcc	NM bcc	FM bcc
Real space + PAW pseudopotential	0	+75	+410	+133
Plane wave + PAW pseudopotential	0	+71	+412	+139
FLAPW (All electron calculation)	0	+79	---	+133
Plane wave + Ultrasoft pseudopotential	0	+70	+413	+81

分野連携、人材育成

情報科学分野と

- 並列ライブラリの開発 (FFT, 対角化, 直交化)
- 可視化ソフト開発

量子化学分野と

- 分子、溶液/固体界面、分子と固体の両方に適したエネルギー汎関数の開発

人材育成

- CMDワークショップ