次世代自動車のための 計算化学とAIの活用

<u>畠山 望</u>, ボノー・パトリック, 三浦隆治, 鈴木 愛, 宮本直人, 宮本 明

東北大学 未来科学技術共同研究センター



Miyamoto Lab. Present Collaborators

Prof. A. Miyamoto Assoc. Prof. N. Hatakeyama Assist. Prof. A. Suzuki Assist. Prof. R. Miura Assist. Prof. P. Bonnaud Sen. Res. Fellow T. Yotsuyanagi Sen. Res. Fellow T. Inoue Sen. Res. Fellow H. Koinuma Visit. Prof. H. Fukui Visit. Prof. K. Nishijima Visit. Prof. O. Okada Visit. Prof. M. Ippommatsu Visit. Prof. M. C. Williams Visit. Prof. J. Amano Visit. Prof. M. Hisatake Visit. Prof. M. Kohno Visit. Prof. K. Omata Visit. Prof. P. Selvam Visit. Prof. K. Ara Assoc. Visit. Prof. K. Ueno Adjunct Prof. A. Uehara Res. Fellow. S. Kozawa Res. Fellow. Y. Sekine Res. Fellow. H. Munakata



Visit. Assoc. Prof. N. Aoki Visit. Assoc. Prof. H. Sato

Visit. Assoc. Prof. K. Itaka

7

18

Researcher Techn. Staff Secretaries

Total 59 members

New Industry Creation Hatchery Center (Bldg. II)



産業革新のためのコンピュータ化学



従来の計算手法及び計算コスト



✓可能な限り計算コストを抑える ✓化学反応を扱うことが出来る ✓普通のパソコンレベルで計算が出来る

このような手法があれば非常に有用!

計算方法: 超高速化量子分子動力学法 (UA-QCMD)*

電子状態 Tight-binding量子化学計算(パラメータ)DFTにより非経験的に決定)



従来より1000万倍高速な量子化学シミュレーションを実現

*M.K. Alam et al., J. Phys. Chem. C, 113, 7723 (2009); F. Ahmed et al., ibid., 113, 15672 (2009).

パラメータ自動化手法の一例

特長 ・焼きなまし法(乱択アルゴリズム)を使用 ・変数の変化方向や変化量は乱数により決定 →多次元の系へ応用可能 ・評価値が改善した場合、および温度に応じ た確率で変数を変化する →局所的な最適解への収束を回避

評価関数

 $Cost = a \bullet de + b \bullet dE + c \bullet dC$ a, b, c は任意の定数

- ・電子数、エネルギー、電荷のそれ
 ぞれの距離の和を求める
- ・Costが0に近いほど目標値に近い 結果が得られている

		目標値	結果	距離
電子数	s軌道	ts	rs	ds = ts - rs
	p軌道	tp	rp	dp = tp - rp
				$de = ds + dp + \dots$
エネルギー		tE	rE	dE = tE - rE
電荷		tC	rC	dC = tC - rC

計算結果の一例



	Total	Charge	2s	2p	4s	4p	3 d	s[%]	p[%]	d[%]
0	6.28	-0.28	1.78	4.51	-	-	-	28.29	71.71	-
Ti	3.43	0.57	-	-	0.49	0.33	2.61	14.34	9.56	76.10

UA-QCMD

	Total	Charge	2s	2p	4s	4p	3 d	s[%]	p[%]	d[%]
0	6.21	-0.21	1.69	4.52	_	-	-	27.16	72.84	-
Ti	3.58	0.42	_	-	0.73	0.61	2.25	20.36	16.90	62.74

多様な化合物に対する高い計算精度

金属

	Colors	DFT	Thermo	DFT/Colors	Thermo/Colors
	[kcal/mol]	[kcal/mol]	[kcal/mol]	[%]	[%]
Mo	18247.60	18734.08	20132.60	102.67	110.33
Mg	1706.12	1706.79	1687.53	100.04	98.91
C	94142.30	93131.46	87701.15	98.93	93.16
Р	9835.11	9609.01	9682.37	97.70	98.45
Li	5072.21	5031.54	4873.31	99.20	96.08
Ni	23802.40	23818.80	26290.80	100.07	110.45
Cu	19322.20	19196.34	20643.48	99.35	106.84
Zn	7232.57	7249.32	6731.77	100.23	93.08
Ga	2125.40	2093.64	2080.26	98.51	97.88
Ge	5408.82	5006.20	5690.11	92.56	105.20
Mn	16700.10	15668.81	17174.35	93.82	102.84
Fe	11572.60	11591.92	12735.45	100.17	110.05
Ru	35966.90	39445.02	36865.27	109.67	102.50
Si	25069.50	27144.99	23230.80	108.28	92.67
Ta	45307.50	46538.03	46724.50	102.72	103.13
AI	18729.80	17028.69	20190.72	90.92	107.80
Sb	4366.18	4144.92	4513.66	94.93	103.38
Sc	5917.12	6298.89	5778.82	106.45	97.66
Hf	8641.74	9461.50	9471.28	109.49	109.60

酸化物

	Colors	DFT	Thermo	DFT/Colors	Thermo/Colors
	[kcal/mol]	[kcal/mol]	[kcal/mol]	[%]	[%]
NiO	22938.00	22821.00	-	99.49	-
Cu ₂ O	15543.00	14162.40	14101.10	91.12	90.72
ZnO	31700.50	29693.14	31408.90	93.67	99.08
Ga ₂ O ₃	14033.96	13578.02	13655.70	96.75	97.30
GeO2	37246.10	35854.68	37437.72	96.26	100.51
Mn ₂ O ₃	8441.73	8450.29	8672.83	100.10	102.74
Fe ₂ O ₃	29050.60	28854.74	27790.56	99.33	95.66
RuO ₂	34159.50	35208.71	31105.61	103.07	91.06
SIO2	101435.00	103393.46	99528.78	101.93	98.12
MgO	7894.65	8574.56	7632.00	108.61	96.67
a AliOi	52529.20	51542.51	53057.43	98.12	101.01
Nd ₂ O ₃	24527.81		24555.43		100.11
Pr ₂ O ₃	24191.77	-	24996.72	-	103.33
Sb2O1	7120.89	6895.10	-	96.83	-
PtO	16161.00	17139.72		106.06	
LizO	30739.92	30961.65	30089.05	100.72	97.88
MoP ₂ O ₃	40583.20	44303.42	-	109.17	-
SO ₂	264.86	283.50	256.30	107.04	96.77
ZrOz	17527.90	17216.32	16885.25	98.22	96.33
CO ₂	437.65	433.78	384.46	99.12	
Ta ₂ O ₅	56816.00	56560.81	62671.54	99.55	110.31
MoO3	20312.39	18791.11	17842.11	92.51	87.84

窒化物

	Colors [kcal/mol]	DFT [kcal/mol]	Thermo [kcal/mol]	DFT/Colors [%]	Thermo/Colors [%]
N ₂	-244.64	-241.76	-225.71	98.82	92.26
AIN	-21049.80	-21776.98	-17134.58	103.45	81.40
GaN	-16251.55	-18140.45	-13081.14	111.62	80.49
SinNa	-50041.71	-46882.49	-45707.89	93.69	91.34
InN	-15639.60	-14784.13	-	94.53	-



8

リチウムイオン電池電極界面のダイナミックス計算



H. Zheng et al., J. Power Sources, 207 (2012) 134.

リチウムイオン電池充放電シミュレーション



電極多孔質構造も考慮するマルチスケールシミュレーション

NCM/人造黒鉛の負荷特性の比較



◆0.33C ■0.50C ▲1.00C ×2.00C *3.00C ●5.00C

Estimation of Future Cars of the World

図3-1 世界の車種別の将来予測(ETP2012)



http://www.meti.go.jp/press/2014/11/20141117003/20141117003.html

Internal combustion engine(ICE) cars in 2050 will be still more than half of total

Three Way Catalyst(TWC) for Gasoline Car



Reactions of TWC

	EM	Reaction	Catalysts	Productions
6	HC	Oxidation	Pt, Pd	$H_2O + CO_2$
	СО	Oxidation	Pt, Pd	CO ₂
	NOx	Reduction	Rh	$N_2 + CO_2 + H_2O$

HC, CO and NOx are simultaneously removed by TWC converter system by keeping the theoretical ratio of Air by Fuel(A/F)

World Use of PGMs in 2013



Almost 40 to 80% of Pt, Pd & Rh are used for automobile catalysts, thus it is difficult to raise the use amount of PGMs to meet the emission regulation.

<u>Multiscale, Multiphysics Computational</u> Chemistry Simulator for Automotive Catalysts

