

HU-ACE NEWS LETTER

Advanced Core for Energetics, Hiroshima University

Vol. 49
2021.1

研究拠点の動き

- | | |
|---------------|---------------------------------|
| 2021年1月8日 | 知を鍛える-広大名講義100選-に秋教授の講義が選ばれました。 |
| 2021年1月12日 | 第91回広島大学バイオマスイブニングセミナーを共催しました。 |
| 2021年1月14-29日 | JICA研修「バイオマス利用技術」を共催しました。 |
| 2021年1月15日 | 第54回拠点拡大運営会議を開催しました。 |
| 2021年1月27日 | 第55回拠点全体ミーティングを開催しました。 |

カーボンリサイクルに拠点も協力しています。

2020年10月、菅首相の所信表明演説における「2050年に温室効果ガス排出ゼロ」を宣言を受けて、カーボンリサイクル技術に注目が集まっています。また、広島大学は1月26日に「2030年までにカーボンニュートラルの実現」を宣言しました。カーボンリサイクルとは、二酸化炭素の削減を目標として二酸化炭素を原料としてとらえ有用な化学品や燃料へと転換する技術です。エネルギー超高度利用とは切っても切り離せない密接な関係があります。本拠点も多くのメンバーが広島大学におけるカーボンリサイクルの研究開発に関する取り組みに協力しています。

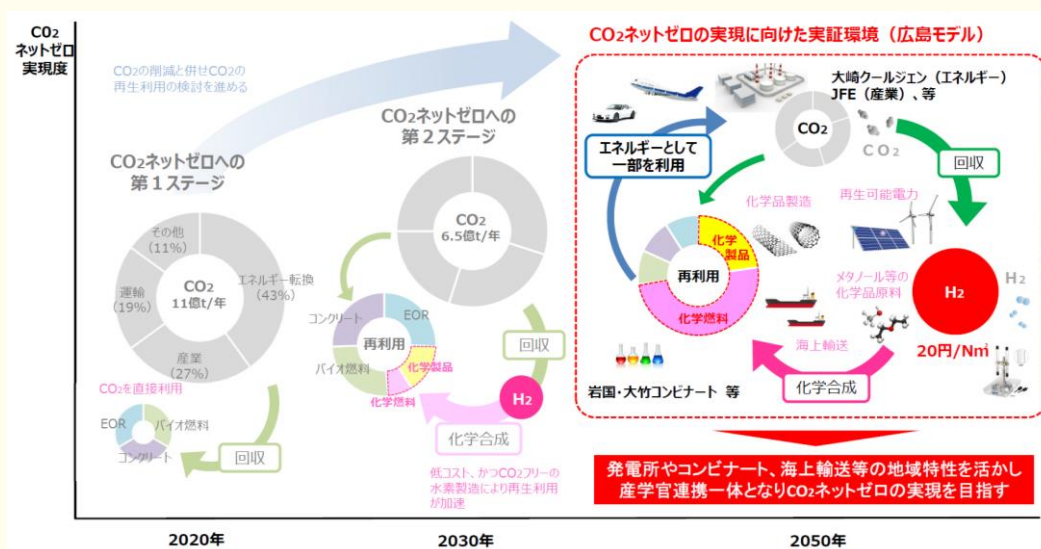


図 カーボンリサイクルによる化石燃料のゼロエミッション化への道筋



[編集・発行]
広島大学 エネルギー超高度利用研究拠点

研究相談、共同研究など大歓迎です!

〒739-8511 広島県東広島市鏡山1-3-2
広島大学学術・社会連携室 URA部門内 HU-ACE拠点事務
e-mail: hu-ace-info@ml.hiroshima-u.ac.jp, tel:082-424-4425
拠点ホームページ: <https://hu-ace.hiroshima-u.ac.jp/>

研究拠点関係者紹介

古山 通久

広島大学大学院先進理工系科学研究科 客員教授

研究分野：計算化学、計算材料科学、エネルギー工学、化学システム工学

研究キーワード：材料MBR、機械学習、脱炭素社会、水素製造、経済合理性



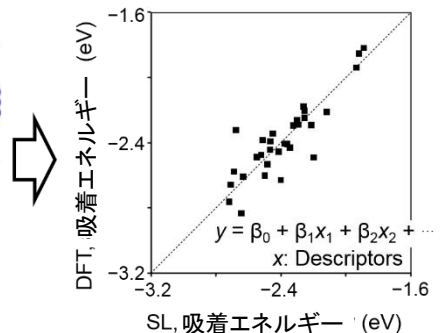
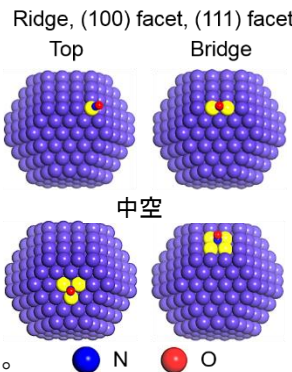
研究概要

材料モデルベースリサーチ(MBR)の基盤となる計算化学・情報科学

私が所属する次世代自動車技術共同研究講座先端材料研究室は、2016年10月に発足し、将来の自動車のエネルギー効率、乗り心地、走行安定性などの性能を飛躍的に向上するための革新材料の研究開発を行っています。特に、電子・原子・分子スケールまで踏み込み“モデル化”することで根本のメカニズムから機能を制御し、自動車の性能向上を目指すモデルベースリサーチの基盤となる先端研究に取り組んでいます。

自動車排ガス処理触媒には、希少で高価な白金族元素が用いられており、希少な元素の機能を最大限活用することが求められています。スーパーコンピュータを用いた並列化第一原理計算によってRh, Pt, Pd, Ag, Irなど各種貴金属ナノ粒子に対するNO(一酸化窒素)の吸着特性を明らかにし、機械学習による特性の予測を実現しました[1]。

様々な材料系において合成・計測との協働も進めており、革新的な材料の創製を目指しています。

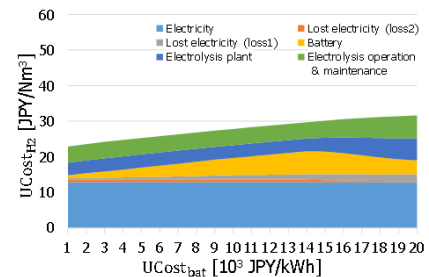
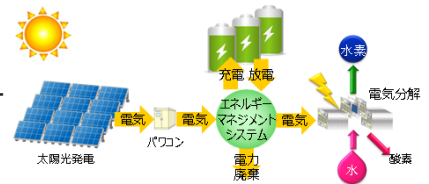


脱炭素社会の実現に向けた将来システムの設計

脱炭素社会の実現のためには、再生可能エネルギーの活用は不可欠ですが、出力が変動する再生可能エネルギーを活用するためには、蓄エネルギーが必須です。水素は長期の貯蔵に適していると考えられますが、再生可能エネルギーからの水素製造は高コストであることが知られています。

私たちは、膨大な探索空間の中から効率的に最適解を見出すアルゴリズムを活用し、適切なシステム化によって経済合理的な水素製造が可能であることを示すことに成功しました[2]。

このシステムは国内においても有効なシステムです。活用がなかなか進まない地域資源を活用し、同時に地域課題も解決するようなシステムを構築していくことを目指して、NPOや金融と連携して社会実装を目指して活動しています。



文献

[1] Nanba, Y.; Koyama, M.: NO Adsorption on 4d and 5d Transition Metal (Rh, Pd, Ag, Ir, and Pt) Nanoparticles: Density Functional Theory Study and Supervised Learning, *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 28114 (2019).
 [2] Kikuchi, Y.; Ichikawa, T.; Sugiyama, M.; Koyama, M.: Battery-assisted low-cost hydrogen production from solar energy: Rational target setting for future technology systems, *International Journal of Hydrogen Energy*, **44**, 1451 (2019).