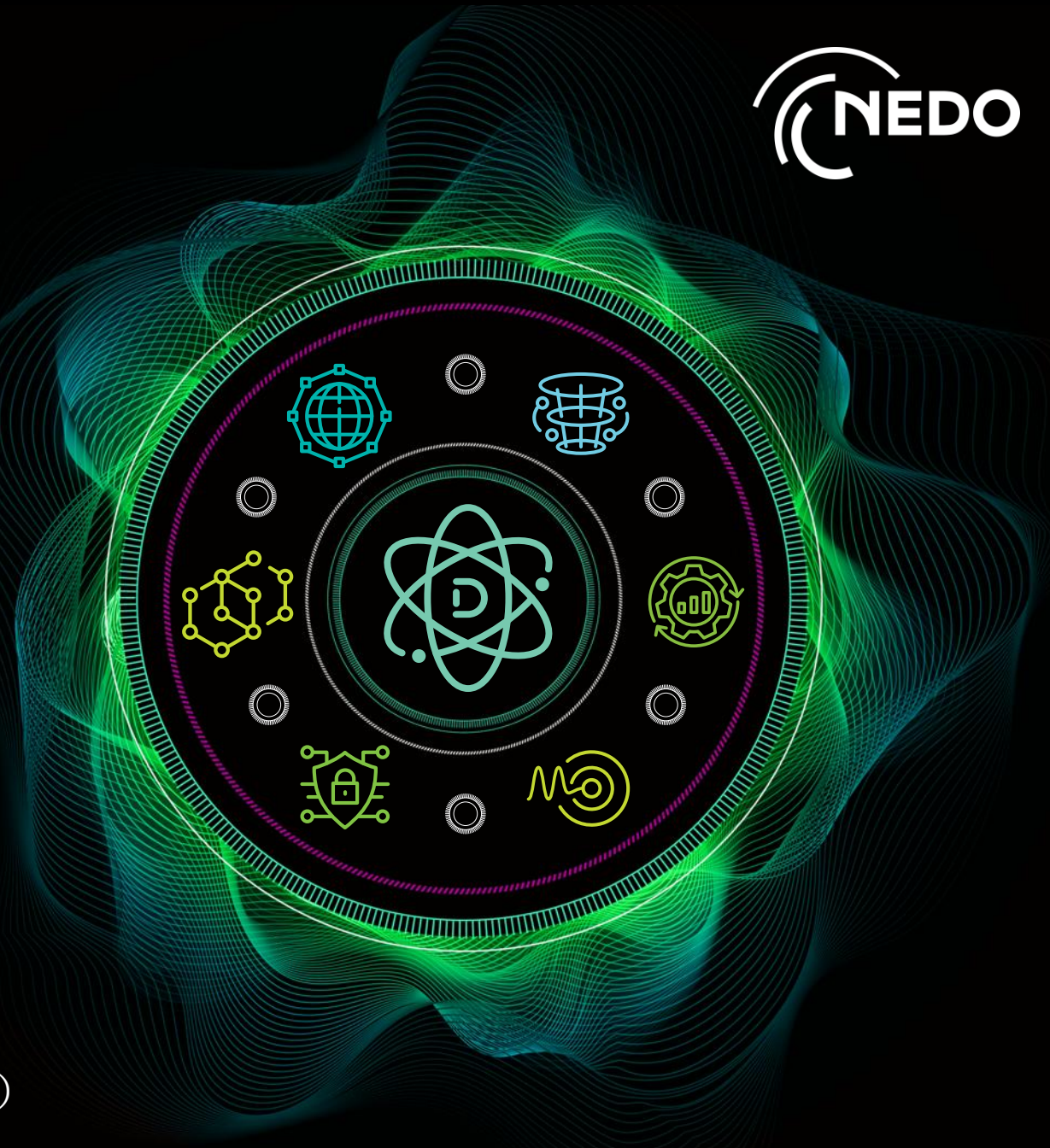
量子コンピューティング ユースケース集

自動車の燃料電池開発における酸素還元反応のモデル化

BMW



国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

BMW：自動車の燃料電池開発における酸素還元反応のモデル化 【2022/12】 検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

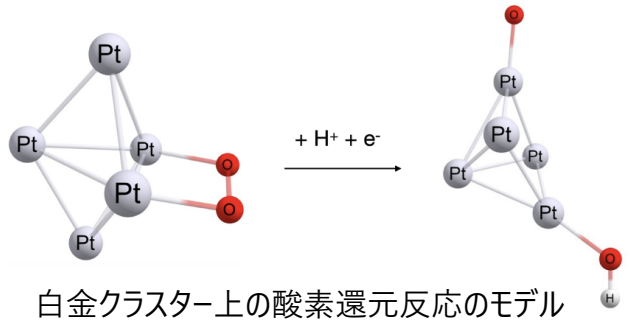
- 自動車に用いられる新しい燃料電池技術**の開発において、酸素還元反応（ORR）の速度の鈍さが重要な課題**としてある
- ORRのような触媒化学反応および電気触媒化学反応の原子モデリングに関する研究の多くでは、密度汎関数理論（DFT）を用いて計算を行うが、**計算精度に限界**がある
- 金属錯体（金属と非金属の原子が結合した構造を持つ化合物）や遷移状態などの強い（静的な）電子相関が関与する系に対しては、**DFT計算が失敗**することが知られている

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピューターを活用することで、DFTなどの近似的手法を用いて精度を落とすことなく、**複雑な系を第一原理で正確に計算できることが期待**されている
- BMWでは、**白金クラスター上の酸素還元反応を対象して、ORRのメカニズムを実証**した

量子コンピューターとしての問題設定

- 白金クラスター上の酸素還元反応を対象とし、白金クラスターと酸素の相互作用に関して、**量子コンピューターを活用して基底状態エネルギーを計算**する
- 本ユースケースでは、**Quantinuum社の量子計算科学ソフトウェアプラットフォームであるInQuantoを用いて、AWSの量子コンピューティングサービスであるAmazon Braketの量子シミュレーションを活用**している
  - ✓ 量子化学計算を行うため、**ゲート方式（シミュレーション）を活用していると想定**



白金クラスター上の酸素還元反応のモデル

期待されるビジネス効果

- **白金クラスター上で起こる反応ステップの最小モデルを構築し、その基底状態エネルギーの探索的計算を実行**できた
- 本ユースケース集は、**将来的に車両の燃料電池設計に適用される可能性**があるため、BMWにとって興味深い結果となった

参考：AWS「Exploring computational chemistry using Quantinuum's InQuanto on AWS」（https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/exploring-computational-chemistry-using-quantinuums-inquanto-on-aws/）

*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。