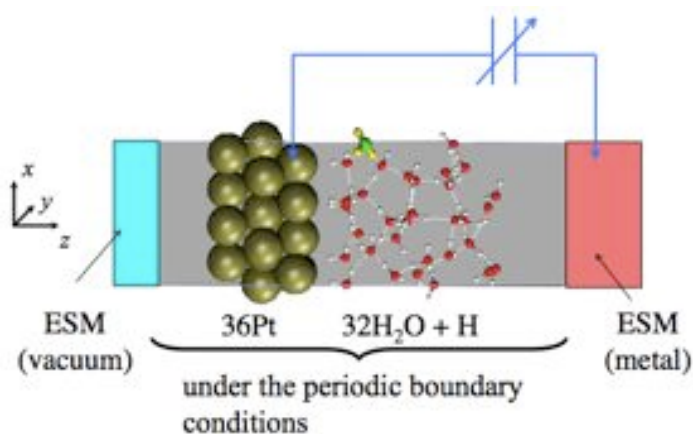


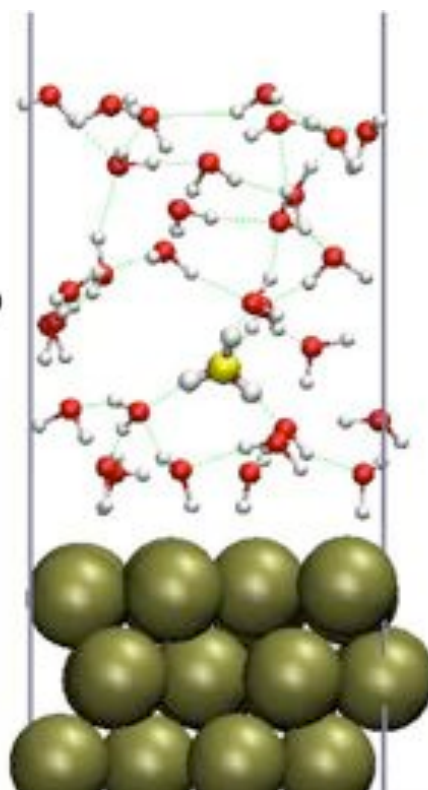
# 電極反応の第一原理シミュレーション (1)



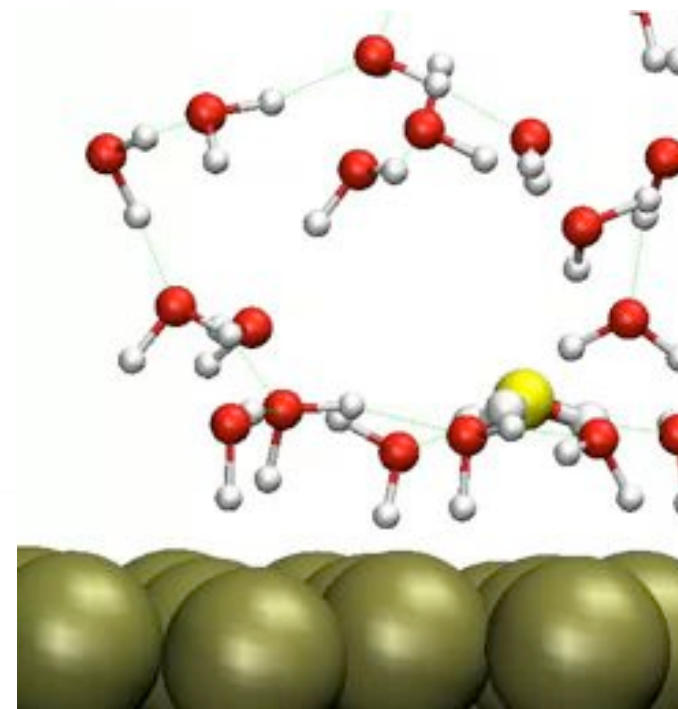
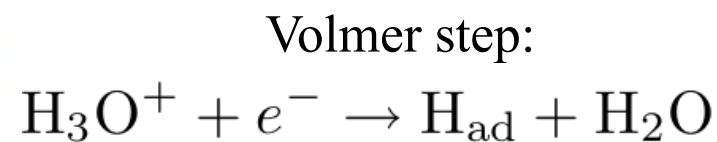
*Phys. Rev. B*, **73**, 115407 (2006)



*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **25**, (2008)

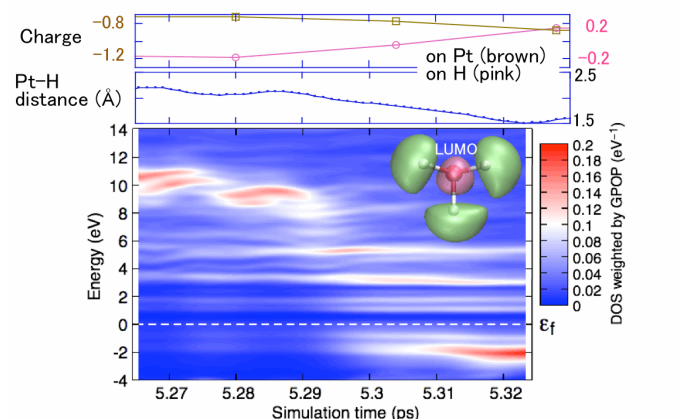


JPSJ Editors' Choice



*J. Phys. Soc. Jpn.*, **77**, 024802 (2008)

# 電極反応の第一原理MDシミュレーション (2)



電荷移動とHOMO-LUMO

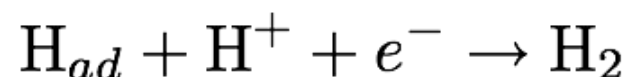
試行錯誤的な電極材料  
開発からの脱却

## 【現状の到達点】

電荷規制電極反応のシミュレーション  
第一ステップのみ

## 【課題】

第2ステップHeyrovsky stepは？



大きな過電圧が必要

電荷移動とd-電子、分子軌道の関係

## 【次世代スパコン

←必要なこと】

全反応

←高速化

溶液の精密化

←大規模化

過電圧の減少

←大規模化

軌道解析

←大規模グラフィクス

反応解析

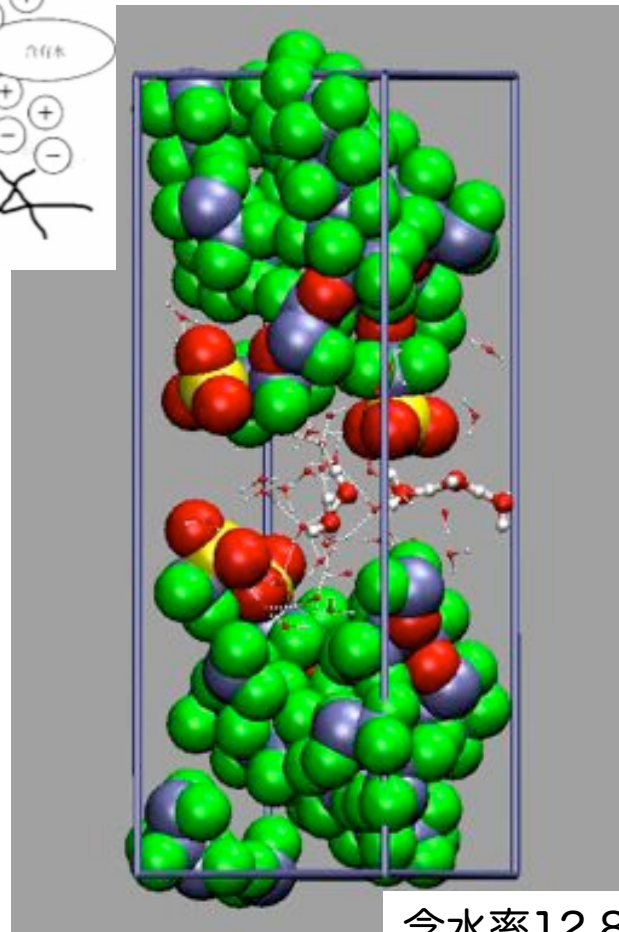
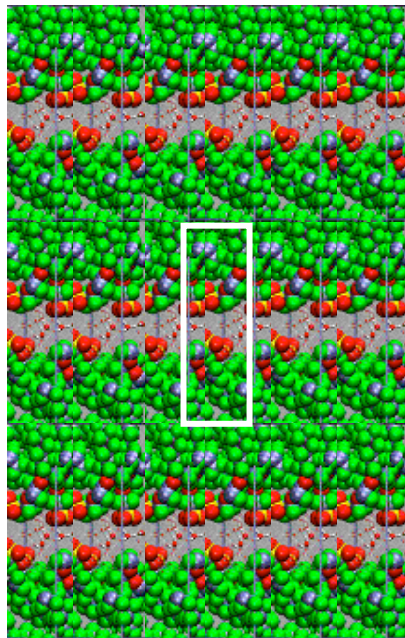
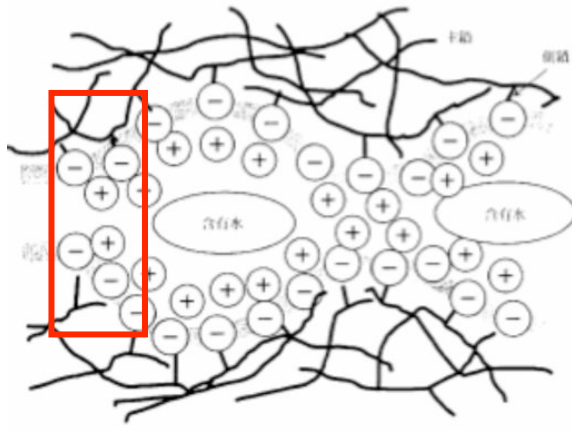
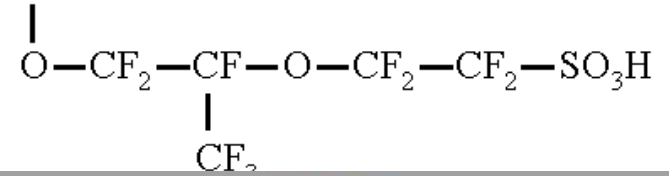
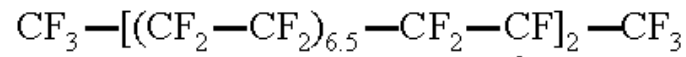
←データ並列

材料探索

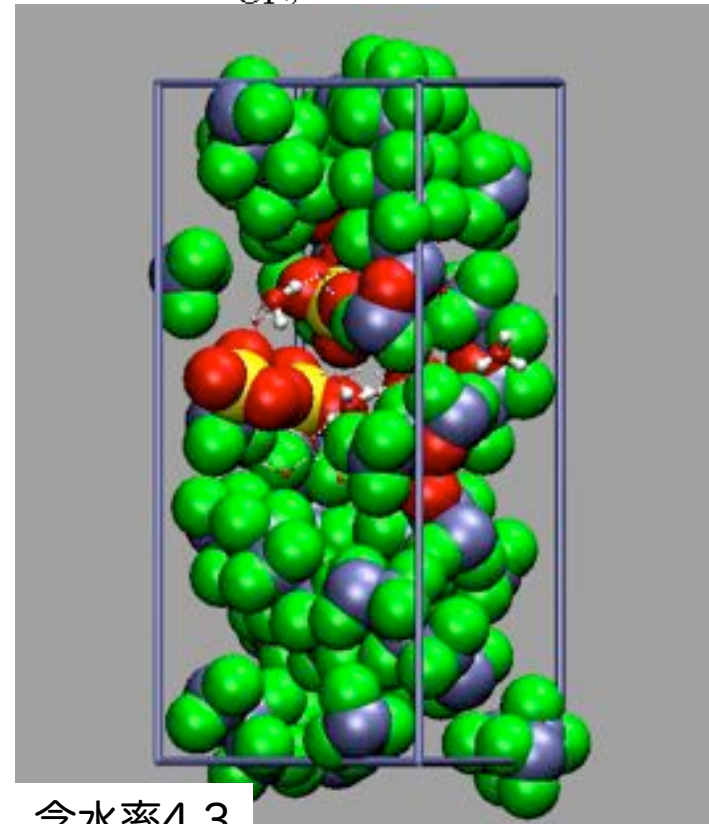
←データ並列

# 電解質膜の第一原理MDシミュレーション (1)

2Nafion segments + nH<sub>2</sub>O ~ 400 atoms

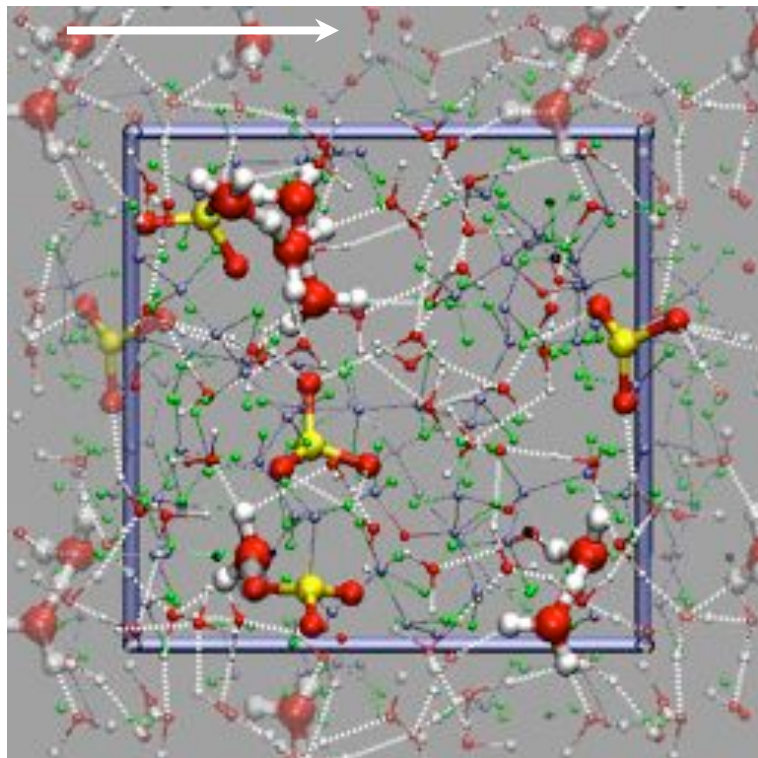
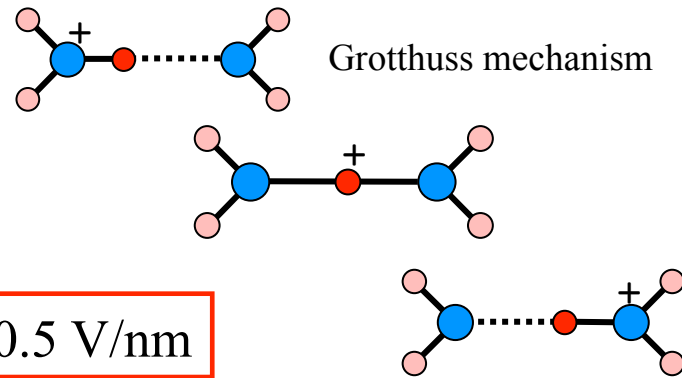


含水率12.8



含水率4.3

# 電解質膜の第一原理MDシミュレーション (2)



## 【現状の到達点】

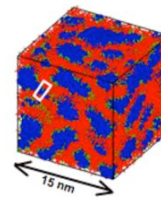
グロタス機構によるプロトン伝導  
 プロトン伝導度 (拡散係数)  
 電気浸透係数 (電場が必要)

## 【課題とその解決策】

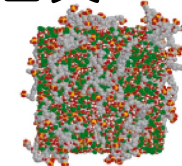
信頼性 ← 長時間  
 ナフイオン以外 ← データ並列  
 (炭化水素系の開発が緊急課題)

## 【次世代スパコン】

複雑な水チャンネルでのプロトン伝導  
 DPD → 古典MD → 第一原理MD



S. Hyodo, *J. Comput. Appl. Math.*, **149**, 201 (2002)



S. Urata, et al, *J. Phys. Chem. B*, **109**, 17274 (2005).



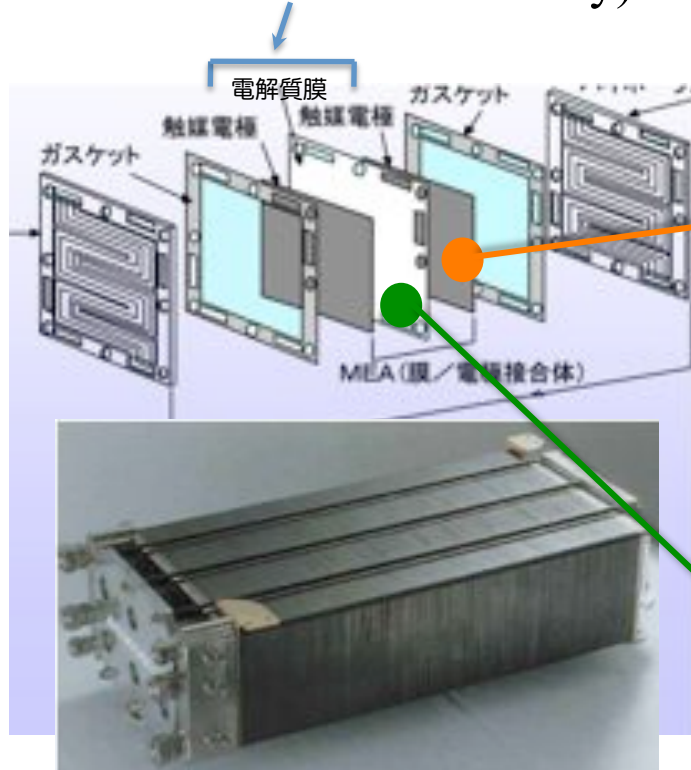
燃料電池における水管理  
 低含水率系の探索指針

Y. -K. Choe, et al., *J. Chem. Phys.* **126**, 154510 (2007).

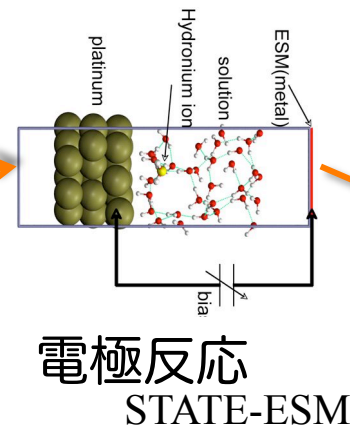
# 燃料電池MEAまるごとシミュレーション

MEA

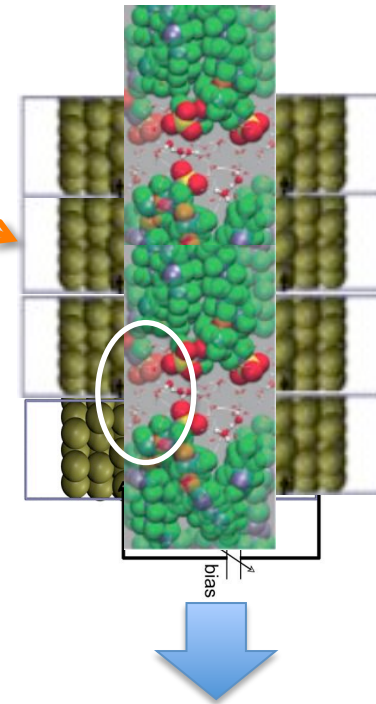
(Membrane Electrode Assembly)



【現状の到達点】



【次世代スパコン】

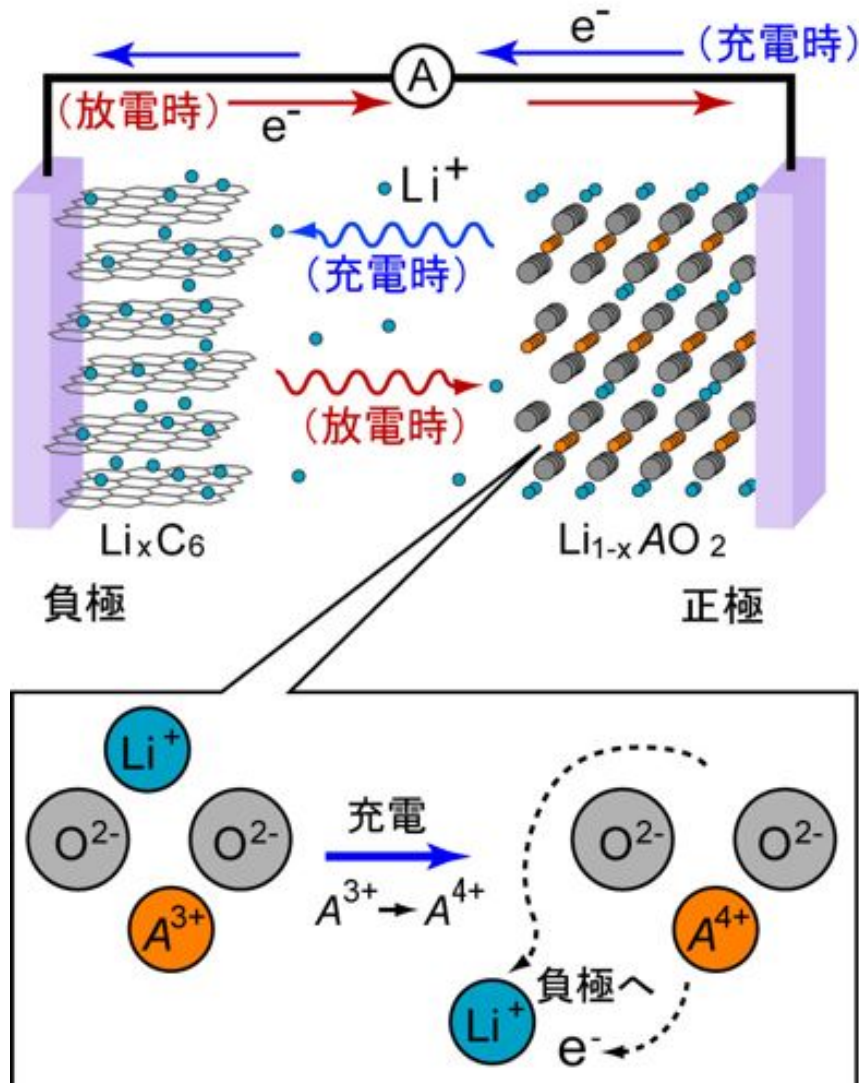


高分子電解質膜  
(ナフィオン)

FEMTECK

膜と電極の相互作用  
過電圧の発生源  
膜の劣化機構の解明  
電池性能の予測

# リチウム電池



## 【目的・背景】

電極容量の増大  
特に負極の新しい材料

## 【知りたいこと】

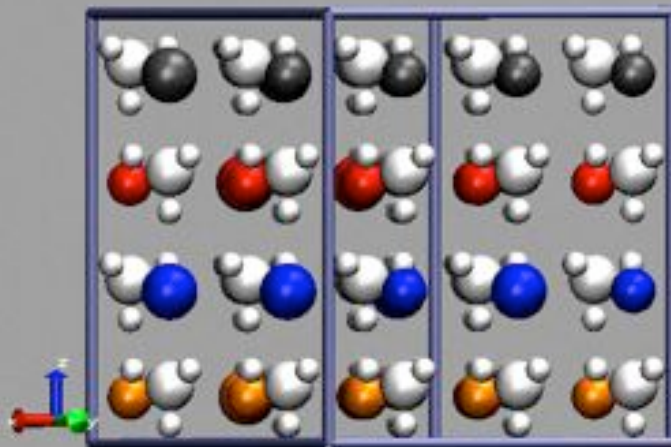
電極膜物質の同定と役割  
最初の充電で生成する  
多くの実験研究者の謎  
Liイオンの挙動

## 【将来展望】

全固体化  
超Liイオン伝導体

# 超Liイオン伝導体 (LiBH<sub>4</sub>)

白：BH<sub>4</sub>  
黒、赤、青、橙：異なる層のLi



## 【背景】

390Kで構造転移して超イオン伝導体へ  
M. Matsuo. et al., *Appl. Phys. Lett.* **91**, 224103 (2007).

## 【現状】

第一原理MDシミュレーション  
~300原子、30ps  
850KでLiイオン伝導を確認

## 【今後】

実用温度でのシミュレーション  
オーダ(N)による大規模化

## 【次世代スパコン】

MEAまるごと  
Li電極からイオン伝導体への移動  
その抵抗

# 今後必要なこと

電子状態計算

高精度化 → 実用デバイスへの適用

統計精度の向上

小さい系での並列性の向上 → 長時間第一原理MD

データ並列計算の推進 → 実験結果との比較

例：MP2 water

情報技術との連携



# MP2 water

## 【目的】

液体水の正確な第一原理MD

## 【背景・現状】

現状のDFT第一原理MDではファン・デル・ワールスカを再現できない。  
DFT第一原理MDで、常温で問題がある。

(サイズ? 量子効果? ファン・デル・ワールスカ? DFT精度? 時間?)  
第一原理MDで水がどこまで正確に表現できているか不明 (相図がない)。

## 【次世代スパコン】

常温の大規模系でのMP2精度のシミュレーションの実行。  
(MP2: ファン・デル・ワールスカをある程度表現できる)  
相図の再現 (沸点、融点) が可能。→ 第一原理相図  
FMO-MDで可能?

cf.

CPMDでは、32分子で0.01秒/step (~1 day/ns)。