

令和4年度高性能汎用計算機高度利用事業

「富岳」成果創出加速プログラム

「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた
計算・データ材料科学研究」

成果報告書

令和5年5月30日

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

館山 佳尚

目次

補助事業の名称	1
1. 補助事業の目的	1
2. 令和4年度（報告年度）の実施内容	1
2-1. 当該年度（令和4年度）の事業実施計画	1
2-2. 実施内容（成果）	6
(1) 研究開発	6
A) 二次電池	6
B) 燃料電池	22
C) データマネージメントに係る取組	32
(2) プロジェクトの総合的推進	35
2-3. 活動（研究会の活動等）	37
2-4. 実施体制	39
別添 学会等発表実績	40
(1) 活動報告	40
(2) 学会等発表実績	60
[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載	60
[2] 学会等における招待講演・口頭発表・ポスター発表	64
① 招待講演	64
② 口頭発表	67
③ ポスター発表	72
[3] プレス発表	74
(3) 特許出願状況	75

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究

1. 補助事業の目的

特定高速電子計算機施設の性能を最大限発揮させ、次世代二次電池・燃料電池開発における産業競争力の強化のため、社会に直接・間接的に還元できる成果を早期に創出することを目的とする。

このため、国立研究開発法人物質・材料研究機構を代表機関とし、国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科、国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター、及び国立大学法人東北大学材料科学高等研究所を協力機関として本事業を実施する。

2. 令和4年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和4年度）の事業実施計画

令和4年度は、ポスト「京」重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを利活用し、世界最高水準の研究開発成果の創出に取り組む。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施する。以下に具体的な事業実施内容について記載する。

(1) 研究開発

本事業における研究開発は、微視的には極めて複雑な充放電・発電過程を電子・イオン・分子レベルで理解するシミュレーション技術および機構解明や材料探索につなげるデータ科学技術を用いた世界水準の計算・データ科学研究を、特定高速電子計算機を最大限利用することで達成することを目標に、以下に記す課題を設定している。

A) 二次電池

難燃性・安定性と高速イオン伝導性を両立する新規電解液や固体電解質の探索、さらに界面における副反応やイオン伝導低下を抑制するための電極—電解質界面設計等を推進する。

サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

二次電池の高エネルギー密度化に向けて、電解液の高性能化・高安全化および電極—電解液界面の高安定化が大きな課題となっている。そのため、電気化学的安定性が高く燃焼リスクを減らせる高濃度電解液等の革新型電解液に関して、電解液構造や電気化学反応性に関する微視的機構の解明に取り組み、新規電解液材料の指針獲得を推進する。

令和4年度においては、本サブテーマを以下の4つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を遂行する。

①大規模計算データと機械学習を組み合わせた新規電解液の材料及び界面指針を提案し、二次電池に関するシミュレーション・データ科学技術の社会実装

stat-CPMD コード等を用いた第一原理 MD サンプリングをさらに推進し、高濃度電解液およびポストリチウムイオン電池 (Mg 金属電池など) 電解液のバルク領域および界面領域における、溶媒と状態、イオン拡散、酸化還元挙動について微視的理解を深化させ、蓄積された電解液データのマテリアルズ・インフォマティクス解析と組み合わせて高安全・高性能電解液の設計指針を獲得し、研究連携する企業等に技術移転する。

②定電位計算による充放電時の大域的界面構造の解明と材料探索指針の提案

定電位 Red Moon 法を用いて、電極分極を考慮した固体電解質相間 (SEI) 膜形成シミュレーションを行い、電極電解質界面の最適化条件を明らかにする。また、その結果を基に、最適な電解液を探索するための指針を提案する。

③充放電に対する高耐久・高効率電極材料・電解液の設計指針の提案

第一原理計算を用いて、充放電過程における正極物質の構造変化がその特性に与える影響を調べる。特に、充放電過程で起こりうる欠陥構造の組み合わせは膨大であるため、クラスター展開法やデータ科学手法などを組み合わせて、安定構造探索の効率化を行う。

④データ科学的手法を適用してイオン伝導を阻害する因子を整理し、電解液・電解質選定の指針を提案

トポロジカルデータ解析の手法を用いて、MD 計算で得られたデータから電解質中のイオン伝導度と相関が強い構造的特徴を抽出し、電解質の設計指針を与える定量的な回帰モデルを作成する枠組みを提案する。具体的には、電解液系二次電池について、Li, BF₄, EC を参照系とする前年度の計算結果からイオン伝導度におけるカチオンの寄与を支配する因子を解明する。また、高分子電解膜を用いた燃料電池について、MODYLAS で生成された Nafion 系の大規模データからプロトン伝導に寄与する構造的特徴を抽出し、側鎖の種類や含水率といったプロセス条件との対応を定量化する。

(研究協力機関：国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学院情報学研究科、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

サブテーマA-2 「二次電池・全固体電池」

硫化物電解質系の全固体電池は、界面における化学的・電気化学的不安定性やイオン伝導抵抗の増大が大きな問題となっている。また、酸化物電解質系については硫化物系に比べて電気化学安定性が高いものの、イオン伝導度が低いことが重要問題となっている。そのため、これらの電解質材料の界面の安定性とイオン輸送に関する微視的機構を明らかにし、実験家・企業への検証提案を行う。

令和4年度においては、本サブテーマは以下の成果を目指して研究を遂行する。

①大規模計算データと機械学習を組み合わせた新規固体電解質の材料及び界面指針を提案し、二次電池に関するシミュレーション・データ科学技術の社会実装

全固体電池の新規固体電解質探索を目標に、イオン伝導度・安定性等を効率的に評価可能な計算・データ科学手法の確立に取り組み、実験家・企業と連携・共同研究しながら材料・設計指針を提案する。また固体電解質／電極界面をはじめとする様々な界面でのイオン輸送・電子移動について高効率サンプリング手法を組み合わせた第一原理計算解析を実行し、イオン伝導度・電気化学的安定性を支配する学理を発展させる。

B) 燃料電池

電極の省白金・脱白金化を果たすための触媒設計・界面設計などの技術的課題の解決、プロトン高速輸送のための安定な高分子膜の設計等を推進する。

サブテーマB-1 「燃料電池の電極界面反応」

正極・負極ともに、白金を主成分とする貴金属合金をカーボンブラックに担持した触媒が使用されており、白金の希少性と高価格によるコスト問題、正極活性が低いことによる内部抵抗の問題、白金の酸性溶液への溶融や負極の一酸化炭素(CO)被毒による劣化問題を克服する必要がある。そのため、シミュレーションから電極構造および電極反応の詳細を明らかにし、低白金化と脱白金という2つの観点から研究を遂行する。

令和4年度においては、本サブテーマを以下の2つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を遂行する。

①担体の欠陥上に強く結合された白金微粒子の酸素還元活性の第一原理分子動力学計算を実施し、実験による担持薄膜との比較を行い、活性向上のための指針を探り連携する実験家の開発指針確立に本質的に寄与する

白金代替電極触媒 ZrO_2 の酸素還元活性の予測のための第一原理計算を行い、担体・異元素ドーピングによる電位勾配や触媒能への影響を調べ、その結果をもとに実験家と議論を行って電極材料の機能性向上に貢献する。

②新たな高活性触媒の理論的設計指針の提案と第一原理計算でのシミュレーションによる実証

令和3年度に引き続き、本年度はN原子がドーピングされたグラフェンエッジに結合した単原子触媒の酸素還元反応、およびCO酸化反応について、グラフェンの担体効果に加えて、溶媒を含めた大規模な第一原理電子状態計算を実行し、実験グループとの協働によりその反応機構の全貌を明らかにする。それとともに、さらに、グラフェン類似の二次元物質の触媒反応性についても探索し、高活性の新触媒設計の指針を与える。

(研究協力機関：国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科)

サブテーマB-2 「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」

電解質膜バルクや電極4相界面そのものがプロトン、酸素、水素といった活物質の輸送を担い、分子レベルの機能としてこれを制御している。このため、電解質膜や4相界面のより一層の高性能化、高耐久性化、薄膜化、コストダウンがさらなる実用化、普及に向けた大きな課題となっている。そのため、全原子 MD シミュレーションによる、高分子電解質膜のプロトンや水素、酸素の輸送係数の予測や力学特性の評価を迅速に行う技術、また燃料電池界面における物質輸送の微視的な機構からの高性能電極界面の設計技術を確立し、企業等へと技術移転を行う。

令和4年度においては、本サブテーマを以下の2つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を遂行する。

①大規模界面モデルでのプロトン、酸素、水素輸送マイクロ機構の解明とそれに基づいた界面設計指針の提案と成果の社会実装

燃料電池電極界面における酸素、水素、プロトン輸送のマイクロ機構を、令和3年度までに構築した 10^6 原子規模の電極四相界面モデルを用いて分子動力学シミュレーションを実施することにより解明する。この計算技術を共同研究先の企業などに技術移転し、社会実装を行う。

②電解質膜分子設計指針の提案と成果の社会実装

令和3年度までに確立した、位置に依存する拡散係数と自由エネルギーに基づいた動的モンテカルロ法を実施し、分子輸送に関わる多数のトラジェクトリーを生成する。この解析から電解質膜バルク中における物質輸送のマイクロ機構を解明する。確立した計算技術を共同研究先の企業などに技術移転し、社会実装を行う。

(研究協力機関：国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

C) データマネジメントに係る取組

材料分野のデータレポジトリを構築している物質・材料研究機構のデータプラットフォームセンター(DPFC)と連携し、データを利活用するシステムの構築を行う。

令和4年度においては、以下の成果を目指して研究を遂行する。

①DPFC が運用するクラウドのデータリポジトリを利用し、シミュレーション・データ科学の研究者間でデータ(シミュレーション結果等)を共有するシステムを構築する。

(研究協力機関：国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科、国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

(2) プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑な運営のため、研究協力機関との実施者会議や統括会議などを開催し、研究協力機関や連携機関の連携・調整にあたる。

国内外の次世代二次電池・燃料電池関連課題との連携や、産業界の実ニーズの把握、実験研究の進展をタイムリーに取り込むために民間企業研究者・実験研究者と定期的に交流する。これらの目的のために、研究会やシンポジウムなどの企画・実施を行う。また、プロジェクトで得られた成果は論文発表・オープンアクセス、シンポジウム・研究会、広報・ホームページや研究活動を通じて積極的に公表する。また HPCI コンソーシアムに参画することで、利用する「富岳」や HPCI システムに関する情報共有を円滑に進め、今後の展開に資する。

また、一般社団法人電気化学界面コンソーシアム(EIS コンソ)への協力、コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン・ワークショップ(CMD-WS)などの開催を通して、本研究課題で用いる計算手法やプログラムの社会実装を推進する。

若手研究員（ポスドク等）については、有能な人材を確保し、育成する計画を継続する。これに伴い、若手研究員の連携、将来のステップアップまで見据えた登用や人材育成の取り組みを継続していく。

本事業の研究推進での計算資源の効率良い利活用のため「富岳」計算資源をマネジメントし、さらに HPCI システムの計算資源追加の検討・調達を実施する。

(研究協力機関：国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科、国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

2-2. 実施内容（成果）

（1）研究開発

令和4年度は、微視的には極めて複雑な充放電・発電過程を電子・イオン・分子レベルで理解するシミュレーション技術および機構解明や材料探索につなげるデータ科学技術を用いた世界水準の計算・データ科学研究を、ポスト「京」重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを用い、特定高速電子計算機を最大限利活用して世界最高水準の研究成果の創出に取り組んだ。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施した。以下に具体的な成果について記載する。

A) 二次電池

サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

①大規模計算データと機械学習を組み合わせた新規電解液の材料及び界面指針を提案し、二次電池に関するシミュレーション・データ科学技術の社会実装

[令和4年度の事業実施計画]

stat-CPMD コード等を用いた第一原理分子動力学(MD) サンプリングをさらに推進し、高濃度電解液およびポストリチウムイオン電池(Mg 金属電池など) 電解液のバルク領域および界面領域における、溶媒和状態、イオン拡散、酸化還元挙動について微視的理解を深化させ、蓄積された電解液データのマテリアルズ・インフォマティクス解析と組み合わせ高安全・高性能電解液の設計指針を獲得し、研究連携する企業等に技術移転する。

[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

現行の Li イオン電池から次々世代となる Mg 金属電池まで普遍的に利用可能な電解液設計指針の構築を行った。まず、各溶媒分子・アニオン分子の酸化還元耐性に加えて、カチオンに対する溶媒和能が重要であることを指摘し、それを考慮した2次元マップを提案した。さらに実際に用いられる混合溶液系に対する第一原理 MD サンプリング研究を行い、本提案の拡張を行った。また電極材料に対して容量や電位に加えてレート特性をも評価すべく第一原理計算レベルでの電子伝導とイオン伝導の同時評価を試み、新たな電極材料設計指針の提案に至った。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

混合溶液系の溶媒和状態記述のためには数百原子レベルのスーパーセルと多数の異なる初期構造を用いた第一原理 MD サンプリングが必要となる。それに対して、「富岳」向けのチューニングを実施してきた CPMD/stat-CPMD を用いることで、並列性・高速性が担保された第一原理 MD 計算が実行可能となっている。電極材料探索においては金属状態を扱うことから、それに適した VASP を用いた。電子伝導度計算においては第一原理計算の結果をもとに Boltzmann 輸送方程式を利用した。

[研究成果]

近年の計算・実験データ量の増加に伴い、現行の Li イオン電池から次々世代となる Mg 金属電池まで普遍的に利用可能な電解液設計指針に関する研究が可能になってきた。そこでは、各溶媒分子・アニオン分子単体の酸化還元耐性の議論が中心となってきたが、カチオンに対して溶媒和しているかどうか酸化還元に効いてくることがわかってきた。そこで我々はまず分子系第一原理計算において酸化還元耐性と溶媒和能を考慮した 2 次元マップを提案し、有望な溶媒・アニオン分子の領域を示唆した。さらに実際に用いられる混合溶液系での溶媒和構造の特定においては第一原理 MD サンプリングが必要となることから、「富岳」向けにチューニングされた CPMD/stat-CPMD を用いた大量サンプリングが有用であることが明らかになった。我々は第一例として $\text{LiPF}_6/\text{EC}:\text{PC}$ 電解液系について第一原理 MD サンプリングを実行し、溶媒割合を変えた場合の溶媒和構造とそのイオン拡散性について知見を得て、現在論文にまとめている。

電解液材料に加えて電極材料探索もいまだに重要な課題である。従来から容量や電位、エネルギー密度の観点の考察は行われていたが、加えてレート特性及びそれに関連する劣化機構も重要なファクターとなっている。しかしレート特性を決める電子伝導とイオン伝導の両者を同時に評価するという試みは少なくとも計算サイドではなかった。そこで我々は第一原理計算レベルでの電子伝導とイオン伝導の同時評価を試みた。電子伝導についてはバンド伝導を仮定した Boltzmann 輸送方程式を、イオン伝導は従来通り MD サンプリングによる平均二乗変位を用いて、代表的な LiCoO_2 と LiNiO_2 について比較を行った (図 2-2-1-A-1)。その結果、 LiCoO_2 がなぜ最適な正極材料となっているか、またその代替正極材料に要求される条件について理論的な提案を行った[2-2-1-A-1]。

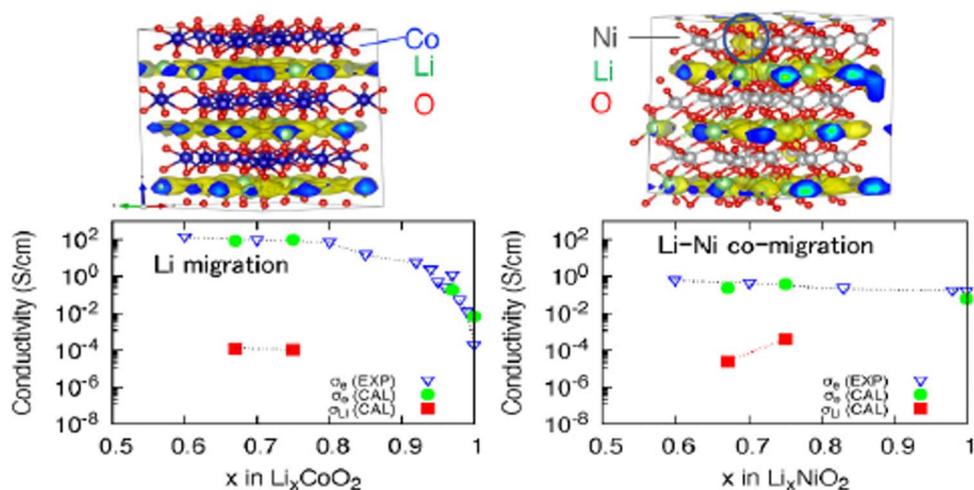


図 2-2-1-A-1. (上) LiCoO_2 及び LiNiO_2 の結晶構造と Li 分布。
(下) 電子伝導度 σ_e (緑丸) とイオン伝導度 σ_{Li} (赤四角) の
充電状態 (Li_xMO_2 ($\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}$)) 依存性。

青三角は電子伝導度の実験値で本計算とよく一致している。イオン伝導度は両材料で類似しているが、電子伝導度は LiCoO_2 の方が 2 桁大きい。これらをうまく表現するために σ_e と σ_{Li} の積と除数が正極材料評価に対して有用な記述であると提案。

[研究成果の社会実装について]

国プロおよび国プロに参画する企業との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ JST ALCA 次世代蓄電池 (ALCA-SPRING) : Mg 金属電池実用化に資する有力電解液の設計指針の提案と混合電解液系への対応
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究> 「蓄電固体界面科学」: 混合導電体である電極内の電子伝導とイオン伝導の同時評価による新たな電極材料設計指針の提案

[参考文献]

- [2-2-1-A-1] Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, “Evaluation of battery positive-electrode performance with simultaneous ab-initio calculations of both electronic and ionic conductivities” , *J. Power Sources*, **569**, 232969 (2023).

②定電位計算による充放電時の大域的界面構造の解明と材料探索指針の提案

[令和4年度の事業実施計画]

定電位 Red Moon 法を用いて、電極分極を考慮した固体電解質相間(SEI)膜形成シミュレーションを行い、電極電解質界面の最適化条件を明らかにする。また、その結果を基に、最適な電解液を探索するための指針を提案する。

[担当責任者] 長岡正隆 (名古屋大学大学院情報学研究科)

[実施概要]

ナトリウムイオン電池(SIB)における SEI 膜の力学的特性に対する炭酸フルオロエチレン(FEC)添加剤濃度依存性を調査した。1.0 vol%で弾性率が最大、つまり SEI 膜が変形に対して最も耐性があることが示された。このことは、SIB に FEC を少量添加すると容量やサイクル特性が大きく向上するという実験結果と対応している。また、リチウムイオン電池(LIB)における SEI 膜の力学的特性に対する充電電位依存性を調査した。電位差 1.0 - 4.0 V の範囲では、SEI 膜は、電位差の増加に伴って変形に対する耐性がより増大することが示された。これは増加に伴って硬い無機成分 CO_3^{2-} がより多く生成して弾性が増大するためと考えられる。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・ナトリウムイオン電池における SEI 膜の力学的特性の FEC 添加剤濃度依存性
FEC が添加されたヘキサフルオロリン酸ナトリウム(NaPF_6)/炭酸プロピレン(PC)系の SIB における Red Moon(RM)シミュレーションによって生成した有機物および無機物からなる SEI 膜
- ・リチウムイオン電池における SEI 膜の力学的特性の充電電位依存性
ヘキサフルオロリン酸リチウム(LiPF_6)/炭酸エチレン(EC)系の LIB における定電位 RM シミュレーションによって生成した有機物および無機物からなる SEI 膜

[研究成果]

(1)ナトリウムイオン電池(SIB)における SEI 膜の力学的特性の FEC 添加剤濃度依存性[2-2-1-A-2]

SEI 膜の充放電サイクル中の安定性は、その微視的弾性率と密接に関係している。そこで、FEC が添加された NaPF_6 /PC 系 SIB における RM シミュレーションによって得られた SEI 膜に対して力学的特性計算を行った。その結果、FEC 添加剤濃度が 1.0 vol%のときに弾性係数の各成分が最大となることが初めて理論的に明らかとなった。弾性係数の FEC 添加剤濃度依存性の解析から、FEC 添加剤低濃度で形成された SEI 膜は引張変形やせん断変形に対してより耐性があることが示された。最適な硬度は FEC 添加剤濃度が増加するにつれて単調に減少するが、低い FEC 添加剤濃度では敏感であることがわかった(表 2-2-1-A-1)。これは、低濃度では小さな空洞を持つ高密度な SEI 構造が形成されるためである。この結果は実験結果と非常によく一致しており、RM シミュレーションによって調製された SEI 膜が、現実の SEI 膜の力学的安定性と、その FEC 添加効果を微視的によくモデル化できていることを示している。

表 2-2-1-A-1. ナトリウムイオン電池における SEI 膜の力学的特性の FEC 添加剤濃度依存性

Voigt Moduli (GPa)	FEC Concentration (vol %)				
	0.0	1.0	3.0	5.0	10.0
Bulk modulus B	9.09±0.87	13.34±0.73	12.07±0.28	11.28±0.78	9.98±0.67
Shear modulus G	3.58±0.29	4.79±0.31	4.44±0.25	4.25±0.29	3.70±0.17
Young's modulus E	9.49±0.88	12.83±0.94	11.88±0.85	11.32±0.83	9.88±0.78

(2) リチウムイオン電池 (LIB) における SEI 膜の力学的特性の充電電位依存性 [2-2-1-A-3]

(1) と同様に、LiPF₆/EC 系 LIB における定電位 RM シミュレーションによって得られた SEI 膜に対して力学的特性計算を行った。その結果、 C_{66} を除く弾性係数の各成分が、電極電位の増加に伴い増加する傾向が示された (表 2-2-1-A-2)。これらの弾性係数の各成分の増加は、電極電位の増加により硬い無機成分 (Li₂CO₃) が増加したことが要因であると考えられる。この硬い無機成分は電解液の溶媒分子の 2 電子還元生成物である。電極電位の増加により負極の負電荷が増加したことで、電解液の還元が促進されたために無機成分が増加したと考えられる。また、物質の延性を表す Pugh 比の値は電極電位の増加に伴い増加傾向を示した。つまり、高電位で形成された SEI 膜はより延性に優れた耐久性のある膜であると言える。

表 2-2-1-A-2. リチウムイオン電池における SEI 膜の力学的特性の充電電位依存性

	potential difference (V)			
	1.0 V	2.0 V	3.0 V	4.0 V
B	26.9±1.1	29.1±1.7	31.9±1.7	32.5±1.3
G	11.6±0.5	11.4±0.6	11.6±0.5	11.5±0.5
E	30.5±1.3	30.3±1.5	30.9±1.4	30.9±1.3
B/G	2.3±0.1	2.5±0.1	2.8±0.1	2.8±0.2

[研究成果の社会実装について]

国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ 文部科学省 元素戦略 研究拠点形成プログラム「触媒・電池元素戦略研究拠点」(ESICB) 「Li イオン電池および Na イオン電池における電極と電解液のマルチスケールシミュレーション」と連携

[参考文献]

- [2-2-1-A-2] Amine Bouibes, Nisrine Sakaki, Masataka Nagaoka, “Microscopic Analysis of Mechanical Stability of SEI Layer Structure Depending on FEC Additive Concentration in Na-ion Batteries: Maximum Appearance in Vickers Hardness at the Lower FEC Concentrations”, *ACS Omega*, **8**, 16570-16578 (2023).
- [2-2-1-A-3] 近藤宙暉、川瀬智元、Sakaki Nisrine、田中佑一、長岡正隆、第36回分子シミュレーション討論会、オンライン、東京工業大学、2022年12月

③充放電に対する高耐久・高効率電極材料・電解液の設計指針の提案

[令和4年度の事業実施計画]

第一原理計算を用いて、充放電過程における正極物質の構造変化がその特性に与える影響を調べる。特に、充放電過程で起こりうる欠陥構造の組み合わせは膨大であるため、クラスター展開法やデータ科学手法などを組み合わせて、安定構造探索の効率化を行う。

[担当責任者] 大谷実（筑波大学計算科学研究センター）

[実施概要]

Hull distance を目的変数とする、クラスター展開法+ベイズ最適化法を開発し、複雑な三元状態図を作成することに成功した。充電時のLi及Oイオンの脱離による結晶構造変化を解析し、高電位領域で、酸素脱離により密な構造をもつ CoO_{2-y} に変化することを明らかにした。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

リチウムイオン電池正極材料の LiCoO_2 を対象にクラスター展開(cluster expansion: CE)法とベイズ最適化(Bayesian optimization: BO)を組み合わせて、熱力学的凸包の構築を行った。 LiCoO_2 のプリミティブセルに対して5倍のスーパーセルを母構造として、第一原理計算にはQuantum ESPRESSOを用いた。

[研究成果]

筑波大学で開発している密度汎関数理論を用いた電子状態計算手法と古典溶液理論による溶媒分布計算手法のハイブリッドシミュレーション技術(ESM-RISM法)に関して、水の誘電的性質を補正するDRISMを新たに導入した。これまでは3D-RISMにおいて、DRISMの有効性が示されてきたが、本研究では、電極と電解液の界面において利用されるESM-RISM法においてもDRISMが正常に動作し、電気二重層キャパシタンスなどが実験結果をよく再現することを見出した[2-2-1-A-4]。

次に、高い理論容量を有する遷移金属硫化物電池は次世代蓄電池として注目されている。本研究では、 VS_4/Li 電池の充放電過程で起こる電解液種に依存した容量低下の原因を理論考察した[2-2-1-A-5]。 VS_4/Li 電池の充放電反応過程で起こる電解液種に依存した容量低下の原因となる副反応を VS_4 電極と有機溶媒分子(EC, PC, DMC)の分解反応と仮定した。それらの分解反応に対して第一原理計算と1D-RISMからその自由エネルギー変化と平衡電位を求めた。得られた平衡電位と電池動作電位の過電圧 η を調べると全て負の過電圧を示し、その絶対値の序列が、 $\eta(\text{DMC}) > \eta(\text{EC}) > \eta(\text{PC})$ となることを見出された。本傾向は実験による電池容量の低下の傾向とよく一致する。バトラー・ボルマー理論によれば、負の過電圧が大きくなると酸化反応が促進されることから、 VS_4 電極/有機溶媒分子間の分解反応による硫黄の流出と溶媒の劣化が電池容量低下の原因と考えられる。

上記の研究に加えて、クラスター展開法にベイズ最適化を組み合わせた安定構造探索プログラム (CE+BO 法) の開発を行い、それをリチウムイオン電池の正極材料である LiCoO_2 の充放電過程における構造変化解析へ適用した (図 2-2-1-A-2、図 2-2-1-A-3) [2-2-1-A-6]。 LiCoO_2 電極は充放電時に Li の移動と共に、高電位領域で酸素脱離が起こると考えられている。酸素脱離まで考慮に入れると、取り得る構造が膨大なため、安定構造を探索し起電力の計算を行うことが難しかった。 CE+BO 法を用いて、安定構造を探索し起電力を計算し実験と良い一致を見ることができた。 また、酸素脱離によって相分離が起こり、不可逆的な CoO_{2-y} が生成されることも明らかとなった。

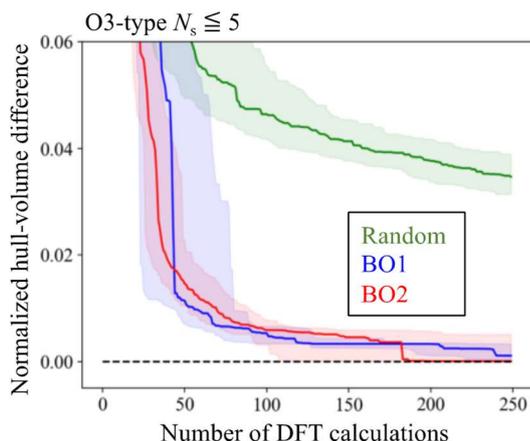


図 2-2-1-A-2. 形成エネルギーの凸包に対する DFT 計算回数との収束挙動。 BO1、BO2 はそれぞれターゲット変数を形成エネルギー、hull-distance としたときのベイズ最適化を表す。

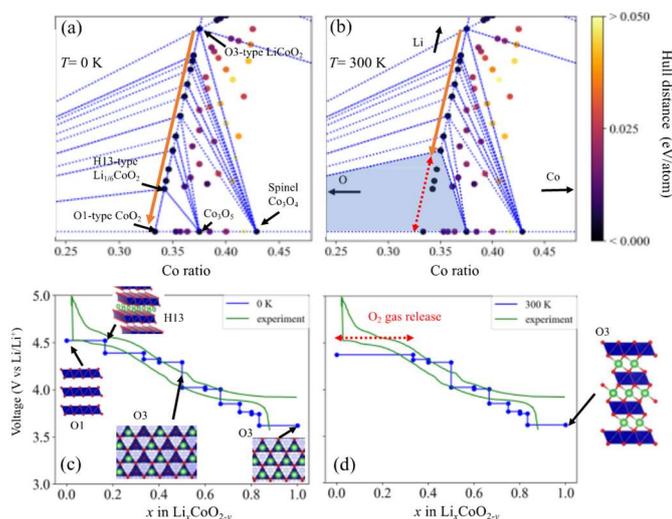


図 2-2-1-A-3. (a) 0 K と (b) 300 K における Li-Co-O 相の凸包、 (c) 0 K と (d) 300 K における電圧プロファイル。 オレンジ色の矢印は LiCoO_2 から CoO_2 への理想電荷反応方向、青色の斜線領域は 3 相分離領域であることを示す。

[研究成果の社会実装について]

- ・複数の企業と個別に 2 件の「富岳」の一般課題に採択されている。本課題で開発している ESM-RISM プログラムを利活用する予定である。
- ・本課題にも参画している電気化学界面シミュレーションコンソーシアムの会員企業と、共通の課題を設定して、より多くの産業界の研究者にシミュレーション技術を共有する。

[参考文献]

- [2-2-1-A-4] Satoshi Hagiwara, Satomichi Nishihara, Fumiaki Kuroda, Minoru Otani, “Development of a dielectrically consistent reference interaction site model combined with the density functional theory for electrochemical interface simulations”, *Phys. Rev. Mater.* **6**, 093802 (2022).
- [2-2-1-A-5] Satoshi Hagiwara, Jun Haruyama, Minoru Otani, Yuki Uemura, Tomonari Takeuchi, Hikari Sakaebe, “Theoretical Consideration of Side Reactions between the VS₄ Electrode and Carbonate Solvents in Lithium-metal Polysulfide Batteries”, *Electrochemistry* **90**, 107002 (2022).
- [2-2-1-A-6] Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, submitted to *npj Computational Materials*.

④データ科学的手法を適用してイオン伝導を阻害する因子を整理し、電解液・電解質選定の指針を提案

[令和4年度の事業実施計画]

トポロジカルデータ解析の手法を用いて、MD 計算で得られたデータから電解質中のイオン伝導度と相関が強い構造的特徴を抽出し、電解質の設計指針を与える定量的な回帰モデルを作成する枠組みを提案する。具体的には、電解液系二次電池について、Li, BF₄, EC を参照系とする前年度の計算結果からイオン伝導度におけるカチオンの寄与を支配する因子を解明する。また、高分子電解膜を用いた燃料電池について、MODYLAS で生成された Nafion 系の大規模データからプロトン伝導に寄与する構造的特徴を抽出し、側鎖の種類や含水率といったプロセス条件との対応を定量化する。

[担当責任者] 赤木和人（東北大学材料科学高等研究所）

[実施概要]

古典 MD 計算とトポロジカルデータ解析を組み合わせて系のマイクロ構造の特徴を定量的かつ網羅的に抽出し、電解液・電解質のイオン伝導度に影響する因子を評価した。Li 系の電解液に関しては、アニオンとの親和性が強い一方で Li イオンとは適度な脱着を許す溶媒分子の選定が有用であることが示唆された。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・約 4000 原子からなる 0.5M-3.0M の濃度の LiBF₄/EC 電解液
- ・第一原理計算を参照系としてパラメータ最適化した AMOEBA 力場を用いた古典 MD 計算
- ・約 20 万原子からなる Nafion 系高分子電解膜の 6 種類の含水構造（岡崎 G の提供）
- ・トポロジカルデータ解析に独自拡張した HomCloud を使用

[研究成果]

令和3年度までに、古典 MD 計算とトポロジカルデータ解析(TDA)を組み合わせて系のマイクロな構造とマクロな物性の相関を調べる手法を構築し、種々の濃度の LiBF₄/EC 系から生成した構造記述子を用いて広い濃度範囲でのイオン伝導度を線型回帰できることを実証した。しかし、非経験的に知見を得るための網羅的な特徴抽出によって、実質的には等価な情報を多重に抽出してしまう問題が残っており、より複雑かつ大規模な系を対象とした回帰モデルや解釈を得る上で困難があった。

令和4年度は、本手法を「富岳」電池課題の他のテーマにも適用できるように、TDA で生成した構造記述子間の相関を考慮しつつ独立な情報を拾うための手法改良を施した。これによりマクロ物性に対するマイクロ構造の影響の解釈が容易になり、Li 系電解液の例では、アニオンとの親和性が強く Li イオンには適度な脱着を許す溶媒分子（とアニオンのセット）の選定がイオン伝導度向上の指針の一つとなることが示された（図 2-2-1-A-4）。

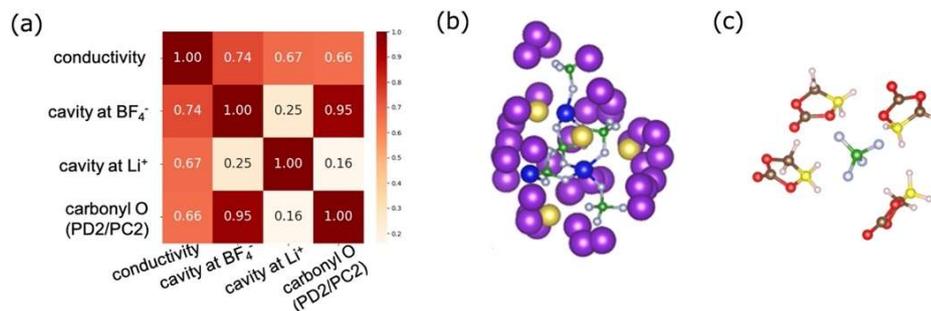


図 2-2-1-A-4. (a) LiBF_4/EC 系におけるマイクロ構造とイオン伝導度の相関マップの例。
 (b) TDA に基づく LiBF_4 クラスタと EC 分子との相互作用点の抽出(青 : Li、緑 : B、白 : F、黄 : cavity を構成する重要な C、紫 : cavity を構成する C)。
 (c) BF_4^- アニオンに対する EC 分子の配位構造(TDA による同定、緑 : B、白 : F、赤 : O、黄 : cavity を構成する重要な C、茶 : C、白 : H)。

次に「富岳」で生成したデータを活用して成果創出を加速するために、NIMS のデータ基盤「MDR closed」にトポロジカルデータ解析(TDA)のための計算サーバを結合し、「富岳」から push した原子座標データを自動処理して構造記述子を生成する枠組みを試作した。これは 100 万原子系の長時間 MD 計算データであっても数 MB 程度のコンパクトなベクトルデータのセットに変換し、その機械学習によって大規模で複雑な系の構造変化や上記のマイクロ-マクロ相関の抽出を可能とするものであり、岡崎グループが生成した高分子電解膜の相分離構造データや高分子材料の引張破壊データを解析して有用性を確認した (図 2-2-1-A-5)。

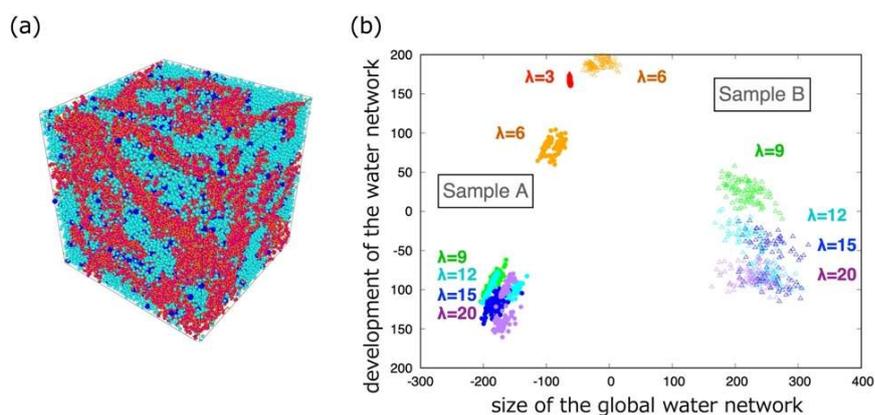


図 2-2-1-A-5. (a) 含水 Nafion の相分離構造 (赤 : 高分子の疎水部、青 : 高分子の親水部、水色 : 水相)。
 (b) 種々の含水量の試料 A、B における大域的な水ネットワークの特徴量空間での定量分類。

さらに汎用性を高めるには系の特徴に応じて若干のパラメータ調整を行う仕組みを実装する必要があるが、今後、電池関連のテーマを含む他の多くのプロジェクトと連携して「富岳」からの膨大な計算データの蓄積と利活用を行うための知見とノウハウは、本課題で十分に得ることができた。

[研究成果の社会実装について]

NIMS のデータ基盤「MDR closed」にトポロジカルデータ解析(TDA)のための計算サーバを結合し、「富岳」から push された原子配列データを自動処理して構造記述子を生成する枠組みの実証を行った。

MD 計算と TDA を組み合わせる手法を応用し、企業との共同研究において半導体製造プロセスにおける成膜課題に取り組んだ。

主宰する「トポロジカルデータ解析コミュニティ」において、40 社超の材料系企業の研究者を対象としたセミナーとチュートリアルを開催し、TDA の手法の社会実装に努めた。

サブテーマA-2 「二次電池・全固体電池」

①大規模計算データと機械学習を組み合わせた新規固体電解質の材料及び界面指針を提案し、二次電池に関するシミュレーション・データ科学技術の社会実装

[令和4年度の事業実施計画]

全固体電池の新規固体電解質探索を目標に、イオン伝導度・安定性等を効率的に評価可能な計算・データ科学手法の確立に取り組み、実験家・企業と連携・共同研究しながら材料・設計指針を提案する。また固体電解質／電極界面をはじめとする様々な界面でのイオン輸送・電子移動について高効率サンプリング手法を組み合わせた第一原理計算解析を実行し、イオン伝導度・電気化学的安定性を支配する学理を発展させる。

[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

固体電解質に不可避となる粒界におけるイオン伝導機構を明らかにするために、最有力酸化物固体電解質へのドーピング効果に着目して第一原理分子動力学(MD)解析を実行し、ドーパントと粒界イオン伝導の相関を明らかにした。また長時間サンプリングが必要となるイオン伝導度計算を第一原理計算レベルでハイスループットに行うためのフローを構築し、Na イオン硫化物電解質群に適用して、あらたな有望固体電解質材料の提案に至った。さらにこの長時間 MD サンプリングを短縮するための新しい非平衡 MD 手法の開発を行った。本手法はイオン相関をより高精度に扱えることから、最先端イオニクス計算を可能にするものとなっている。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

全固体電池は固体系であることと遷移金属を含むことから主に VASP を用いた計算実行を行った。粒界計算については数百原子レベルのスーパーセルと多数の異なる初期構造を用いた第一原理 MD サンプリングが必要なことから、VASP の並列計算効率化を進めた。さらに第一原理 MD サンプリングを用いたイオン伝導度計算のハイスループット化においては各サンプリングにおける並列化に加えて「富岳」の多数ノード特性を十分考慮した並列計算を実行した。

[研究成果]

「富岳」の計算速度、多数ノード性の特徴を活かして、固体電解質に関するこれまでにない大規模な第一原理 MD 計算解析を実行した。さらにその中で浮かび上がってきた課題をもとに、新規イオン伝導度計算手法開発を試みた。

まず固体電解質に不可避となる粒界におけるイオン伝導機構の学理を構築するために、最有力酸化物固体電解質である $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ 系の粒界イオン伝導解析とそのドーピング (Al, Ga, Nb, Ta) 効果について調べた。ドーパントの安定性から安定粒界付近に偏析しうることがエネルギー的に示され、その安定配置に対して第一原理 MD を実行し平均二乗変位から拡散係数を求めた。その結果 Nb, Ta 系では粒界イオン伝導を加速する効果を持つ可能性があり、それは Li イオン伝導経路の連結性と関連することが示された (図 2-2-1-A-6)。また dendrite 形成については抑制効果があ

ることが示唆された[2-2-1-A-7]。

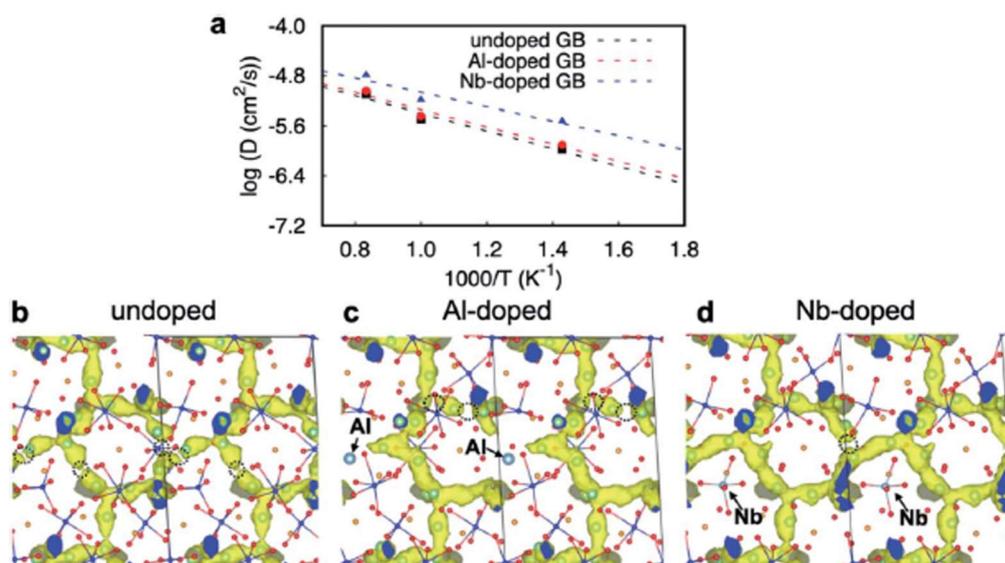


図 2-2-1-A-6. (a) 固体電解質 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ の $\Sigma 3(112)$ 粒界付近のドーパなし、Al ドープ、Nb ドープ系に対する自己拡散係数の計算値。Nb ドープにより自己拡散係数が向上することが示唆された。(b-d) ドープなし、Al ドープ、Nb ドープ系の Li イオン分布。Al ドープ系では Li 伝導パスが切断されている。

また高イオン伝導度固体電解質材料そのものの探索もいまだに限られた材料パラメータ空間で行われている課題があった。これに対して、異なる結晶構造間のイオン伝導度比較を同一基準で行うこと、第一原理計算レベルで見積もりすることを目標として、ハイスループット第一原理 MD サンプルングフローの構築を行った。これにより数千万の原子配置の中から数十の有望な配置を効率的に求められることを実証した。その結果幾つかの有望な Na イオン硫化物電解質の提案に至った。さらに多数の計算データを機械学習にかけることにより、高イオン伝導度のために重要な記述子の抽出も行った (図 2-2-1-A-7)。得られた記述子は、近年提案されている様々な概念とも整合するものとなっており、時間のかかる第一原理 MD を代替できる可能性を秘めている [2-2-1-A-8]。

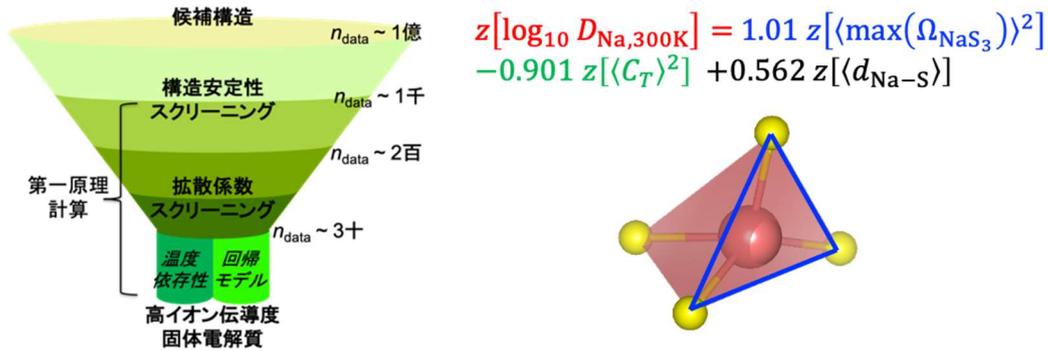


図 2-2-1-A-7. (左) 高イオン伝導度固体電解質探索のためのハイスループットスクリーニングの概略図。

(右) 計算データをもとに得られた Na イオン室温自己拡散係数の回帰式。3つの主要記述子は現象をうまく説明している。

このようなハイスループットイオン伝導度計算が第一原理計算レベルで可能になったが、さらにイオン伝導計算の効率化を図るために我々は非平衡 MD 法のフレームワークの拡張を試みた。電荷としてイオンの実電荷を考慮した設定を行う Chemical Color Diffusion 法を新たに開発し、既存の硫化物固体電解質に適用して妥当性を検証したところ、精度をキープしながら約 10 倍の計算速度向上が図られることが実証された (図 2-2-1-A-8)。本手法はイオン同士の相関をより高精度に扱えることから、最先端イオニクス計算を可能にするものとなっている [2-2-1-A-9]。

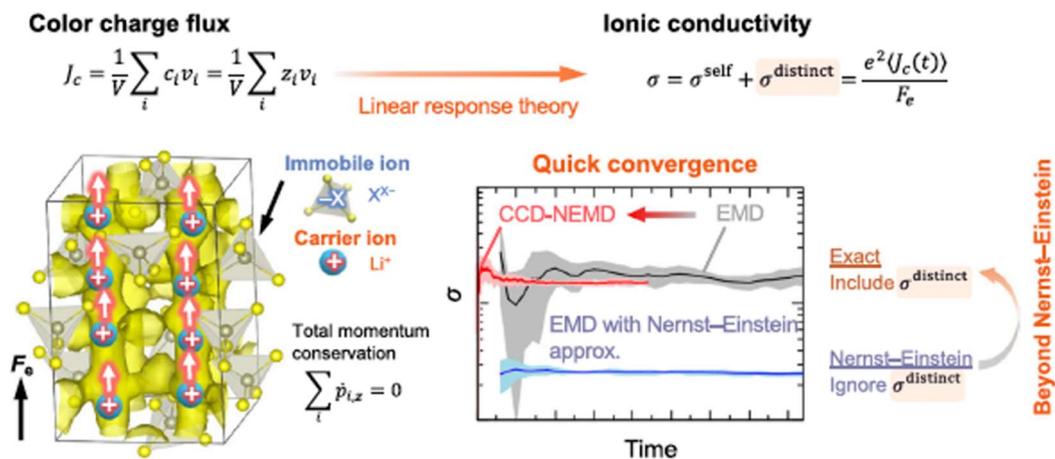


図 2-2-1-A-8. (左) $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ モデル系における Li イオン、アニオンユニットの電荷およびカラー電荷フラックスの定義。

(右) 自己相関およびイオン-イオン相関を考慮したイオン伝導度の定義。

CCD-NEMD によりイオン相関を考慮したイオン伝導度の MD 計算の統計収束性が従来の約 10 倍速くなった。本手法はイオン伝導度解析を促進するものである。

[研究成果の社会実装について]

国プロおよび国プロに参画する企業との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ JST ALCA 次世代蓄電池 (ALCA-SPRING): 酸化物系固体電解質の有力材料探索
- ・ 文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点 (東京大学)」: 高イオン伝導度固体電解質のハイスループット第一原理計算スクリーニングフローの構築とそれを用いたNaイオン硫化物固体電解質の予言
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究>「蓄電固体界面科学」: 様々な固体電解質界面の電子・イオン移動に関わる学理の拡張 (粒界偏析、デンドライト成長、ハイスループットフロー、イオン相関)
- ・ 文部科学省・材料の社会実装に向けたプロセスサイエンス構築事業「全固体電池を実現する接合プロセス技術革新」: 様々な固体電解質界面の高温下でのイオン移動に関する基礎学理構築
- ・ JST CREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」領域「分子結晶全固体電池の創製」イオン相関を考慮した非平衡MD手法の開発

[参考文献]

- [2-2-1-A-7] Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, “Atomistic insight into the dopant impacts at the garnet $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ solid electrolyte grain boundaries”, *J. Mater. Chem. A*, **10**, 10083-10091 (2022).
- [2-2-1-A-8] Seong-Hoon Jang, Yoshitaka Tateyama, Randy Jalem, “High-Throughput Data-Driven Prediction of Stable High-Performance Na-Ion Sulfide Solid Electrolytes”, *Adv. Funct. Mater.* **32**, 2206036 (2022).
- [2-2-1-A-9] Ryoma Sasaki, Bo Gao, Taro Hitosugi, Yoshitaka Tateyama, “Nonequilibrium molecular dynamics for accelerated computation of ion-ion correlated conductivity beyond Nernst-Einstein limitation”, *npj Comput. Mater.* **9**, 48 (2023).

B) 燃料電池

サブテーマB-1 「燃料電池の電極界面反応」

①担体の欠陥上に強く結合された白金微粒子の酸素還元活性の第一原理分子動力学計算を実施し、実験による担持薄膜との比較を行い、活性向上のための指針を探り連携する実験家の開発指針確立に本質的に寄与する

[令和4年度の事業実施計画]

白金代替電極触媒 ZrO_2 の酸素還元活性の予測のための第一原理計算を行い、担体・異元素ドーピングによる電位勾配や触媒能への影響を調べ、その結果をもとに実験家と議論を行って電極材料の機能性向上に貢献する。

[担当責任者] 杉野修（東京大学物性研究所）

[実施概要]

白金代替電極触媒 ZrO_2 上で異元素ドーピングにより酸素還元反応が活性化される機構を解明するため、ドーパントの分布や担体、水溶液の影響を網羅的に考慮した大規模シミュレーションを行った。酸化物表面で多様な結合形態を取る事により、スケーリング則を超えた高活性が現れることが示された。また計算の精度向上、実験との定量的比較、実験家との密接な議論を通じて電極触媒開発への示唆を行った。なお実験家と協議の下、酸化物の課題に注力して研究を行った。

[成果を得るため用いた計算モデル]

計算モデルは、(a)欠陥を含む ZrO_2 スラブ (100-200 原子) を用いた第一原理計算用セル、(b) 1000 原子規模の機械学習ポテンシャル計算用セルであり、この二つを用いてシミュレーションを実施した。(a)の計算では abICs を用いた第一原理計算モンテカルロ計算を行い、その計算に基づき機械学習ポテンシャルを作成し、(b)の計算を 10ns、1000 通りの規模で実施した。

[研究成果]

白金代替電極触媒 ZrO_2 上で異元素ドーピングによる酸素還元反応の活性化機構解明のために、ドーパント分布や担体、水溶液の影響を考慮した計算（計算機実験）を行った。ドーパント分布を得るために第一原理計算モンテカルロ計算を行ったが、途中経過を機械学習して力場ポテンシャルが構築できるので、計算時間を短縮することができる。それでも膨大な計算量が発生するため、「富岳」のような計算機でのみ実行可能となる。計算結果に基づき、酸素空孔は広く分布するが、窒素不純物は界面付近から離れて分布することなど構造に関する特徴を明らかにすることができた。得られた構造を用いて、酸素還元反応機構の計算、水溶液界面の計算をそれぞれ行った。前者の計算のために、まず表面構造の中から重要であると想定される欠陥の分布や反応サイトを全て用い、反応経路の計算を行った（図 2-2-1-B-1）。欠陥ありのモデルと欠陥なしのモデルで最も活性なサイトを比べると、ほとんど違いが現れないことが分かった。この結果は、電極触媒を電子供給能と活性能に分解して考えた時、前者が最も重要な因子であることを示唆するものであり、触媒設計にとって重要な知見となった[2-2-1-B-1], [2-2-1-B-2]。

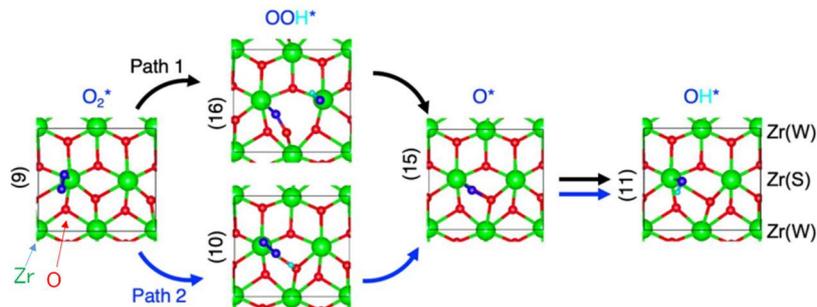


図 2-2-1-B-1. $t\text{-ZrO}_2(101)$ 上での酸素還元反応経路。

多数の酸素空孔と窒素不純物、反応中間体の組み合わせから重要なもの数百通りを網羅的に考慮して反応経路を求めた。多様な結合形態を取る事が活性化に大きな影響を及ぼしている様子が明らかになった。

後者の固液界面の構造の計算のためには、水の初期構造を想定して基づき第一原理分子動力学計算をまず行い、その結果に基づき機械学習力場ポテンシャルの構築を行った[2-2-1-B-3]。さらに力場を用いた 10 ns 規模の分子動力学計算を 1000 通り行い、統計サンプリングを行った。さらに、想定された構造と力場計算から得られた構造が一致するまで自己無撞着計算を行った。このようにして得られた構造から、水分子が部分的に乖離吸着して酸素還元反応をブロックする様子が明らかになった (図 2-2-1-B-2)。

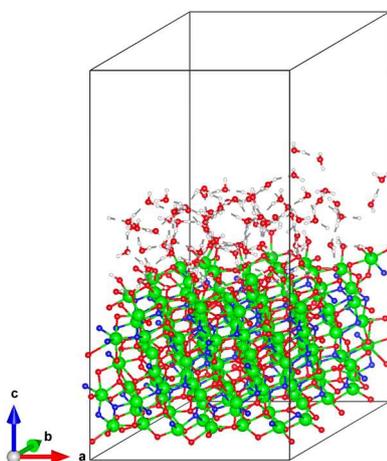


図 2-2-1-B-2. $t\text{-ZrO}_2(101)$ 上での水の構造 (緑 : Zr、赤 : O、青 : O、白 : H)。

固体側の欠陥分布をあらかじめ第一原理計算モンテカルロ計算等で求めた上で表面を水分子で覆い、第一原理分子動力学計算を 1000 通り実施して界面構造を決定した。界面で水が乖離吸着して電気二重層を形成し、酸素還元反応に影響を及ぼす様子が明らかになった。

[研究成果の社会実装について]

研究は酸化カソード触媒の開発のための NEDO のプロジェクトと強く連携して行った。

[参考文献]

- [2-2-1-B-1] Shibghatullah Muhammady, Jun Haruyama, Shusuke Kasamatsu, Osamu Sugino, “Effect of Nitrogen Doping and Oxygen Vacancy on the Oxygen Reduction Reaction on the Tetragonal Zirconia(101) Surface”, *J. Phys. Chem. C*, **126**, 15662-15670 (2022).
- [2-2-1-B-2] 春山 潤, 杉本 敏樹, 杉野 修, “第一原理計算による白金表面の水分子吸着層の解析”, *表面と真空*, **65**, 355-360 (2022).
- [2-2-1-B-3] Ryo Nagai, Ryosuke Akashi, Osamu Sugino, “Machine-learning-based exchange correlation functional with physical asymptotic constraints”, *Phys. rev. res.* **4**, 013160 (2022).

②新たな高活性触媒の理論的設計指針の提案と第一原理計算でのシミュレーションによる実証

[令和4年度の事業実施計画]

令和3年度に引き続き、本年度はN原子がドーピングされたグラフェンエッジに結合した単原子触媒の酸素還元反応、およびCO酸化反応について、グラフェンの担体効果に加えて、溶媒を含めた大規模な第一原理電子状態計算を実行し、実験グループとの協働によりその反応機構の全貌を明らかにする。それとともに、さらに、グラフェン類似の二次元物質の触媒反応性についても探索し、高活性の新触媒設計の指針を与える。

[担当責任者] 森川良忠 (大阪大学大学院工学研究科)

[実施概要]

N原子がドーピングされたグラフェンエッジに結合した単原子触媒の酸素還元反応、およびCO酸化反応の活性を調べるために、これらの反応中間体の安定性を溶媒効果も含めて大規模な第一原理電子状態計算を実行した。そして、実験結果とも詳細に比較検討を行い反応機構の全貌を明らかにした。さらに、グラフェン類似の二次元物質、特にNドーピング Graphdiyne (グラフィジン) の酸素還元反応性についても探索し、高活性の新触媒設計の指針を与えている。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

炭素原子、酸素原子、および水素原子 300 原子程度からなる固液界面電極系をシミュレーションした。アプリケーションとしては、大阪大学で開発して来ている第一原理分子動力学法プログラム Simulation Tool for Atom TEchnology (STATE) を使用した。

[研究成果]

固体高分子形燃料電池では、Pt を主とする合金が電極触媒として用いられている。しかしながら、アノード極ではCO被毒、カソード極は高い過電圧の問題がある。燃料電池を普及させるために、高価なPtの使用量をできる限り減らし、かつ、高い活性を持つ触媒の開発が望まれている。通常、Pt粒子はカーボンブラックと呼ばれる炭素電極に担持したものが用いられる。担持する材料をグラフェンにしたところ、CO耐性が高い事が示された。さらに、単原子のPtをグラフェンに担持した触媒もCO耐性や酸素還元反応に対して高い活性を持つ事が示され、省白金かつ高活性な触媒になり得ると期待されている。しかしながら、その微視的な活性機構は、担持構造を含めてまだ不明な点が多い。そこで、本研究では第一原理電子状態計算手法と機械学習法を組み合わせることにより、Ptがグラフェンに担持されている構造を求め、さらにその構造と反応性の関係を明らかにすることを目指した。本研究により、Ptがグラフェンエッジに担持された構造を、潤安定なものまで含めて多数求めることに成功した。論文投稿中のため、詳細については割愛する。

さらに、グラフェン類似の二次元物質、特にNドーピング Graphdiyne の酸素還元反応性に関して研究を進めた。この系は、新しい炭素の二次元材料で、酸素還元反応に関して高活性を示す新触媒として注目されている。特にNドーピングによって活性が上がる事が報告されている。本研究では

Nがドーピングされる構造について、さまざまな場合を調べ、その反応性を調べた(図 2-2-1-B-3)。最近、別のグループによって、同じ系の研究結果が発表されたが、その結果によると、酸素吸着サイトとして準安定な構造を仮定していた。しかし、本来、最も安定な構造をとるはずであり、その結果には疑問がある。そのため、さらに広範囲に反応性を調べた。その結果、反応性が高くなる条件を明らかにすることができた。本研究の結果は新たな触媒を設計する上で重要な設計の指針を与えると考えられ、論文として発表した[2-2-1-B-4]。

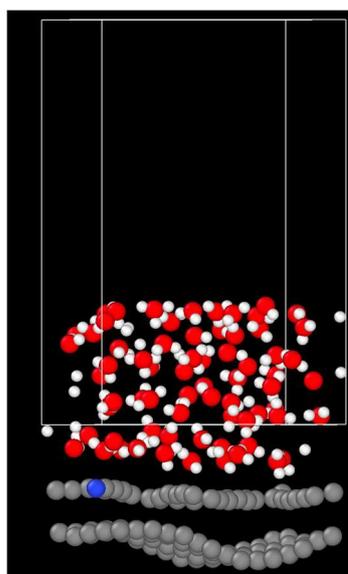


図 2-2-1-B-3. 水/N-doped graphdiyne/graphene でのシミュレーションモデル
(灰 : C、青 : N、赤 : O、白 : H)。

[参考文献]

- [2-2-1-B-4] Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Harry H. Halim, Likai Yan, Yoshitada Morikawa, “DFT investigation of the oxygen reduction reaction over nitrogen (N) doped graphdiyne as an electrocatalyst: the importance of pre-adsorbed OH* and the solvation effect”, *Mater. Adv.*, **4**, 6542–6552 (2023).

サブテーマB-2 「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」

①大規模界面モデルでのプロトン、酸素、水素輸送マイクロ機構の解明とそれに基づいた界面設計指針の提案と成果の社会実装

[令和4年度の事業実施計画]

燃料電池電極界面における酸素、水素、プロトン輸送のマイクロ機構を、令和3年度までに構築した 10^6 原子規模の電極四相界面モデルを用いて分子動力学シミュレーションを実施することにより解明する。この計算技術を共同研究先の企業などに技術移転し、社会実装を行う。

[担当責任者] 岡崎進（東京大学大学院新領域創成科学研究科）

[実施概要]

燃料電池電極界面に対し、カーボン集電材に触媒である白金クラスター、アイオノマー、そして溶媒である水を加えて、現実系を十分精度よく記述しながらモデル電極界面の全原子シミュレーションを実施し、物質輸送のマイクロ機構の解析を行った。この技術に関しては、企業との共同研究を通して社会実装を行っている。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・約65万個および110万個の原子からなる電極4相界面
- ・約1億個の原子からなる実在電極界面
- ・高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLAS[2-2-1-B-5]

[研究成果]

燃料電池電極界面に対し、カーボン集電材に触媒である白金クラスター、アイオノマー、そして溶媒である水を加えて、現実系を十分精度よく記述しながらモデル電極界面の全原子シミュレーションを実施した（図2-2-1-B-4）。計算は、令和3年度までに構築した50~100万原子系の中規模計算による平面界面モデルに対する計算と、1億原子系での実在電極の丸ごと計算からなる。モデル計算においては、実在系に対する酸素と水素ならびにプロトンの分子輸送を記述するための動的モンテカルロ法に必要な位置に依存する自由エネルギーと拡散係数を得るとともに、不均一界面における分子やイオンの物質輸送の理解に必要な基礎的知見を得ている[2-2-1-B-6]。

実在電極の計算では、実在の燃料電池電極に対し、別途協力機関として参加している企業により求められた電子顕微鏡CT測定からの三次元的な電子分布に基づいて、実験と同じ構造を持つカーボン集電材構造を計算機中に再現した。その上で、X線測定から得られた sp^2 、 sp^3 比に基づいて化学結合様式を再現し、O-HやC=O、COOH基等を確率的に配置した。さらに触媒である白金クラスターに関しては、実験から得られたサイズ分布を参考に、仮定した切頂正八面体構造を持つ白金クラスターを、測定された界面での密度にしたがってランダムに集電材中に配置した。これらにより作成した実在の燃料電池電極に対して全原子分子動力学(MD)計算を実施し、界面におけるアイオノマーの凝集構造を明らかにし、その上でモデル系を用いて確立した位置に依存する

自由エネルギーと拡散係数の学習データから AI 技術により実在系環境での値を求め、動的モンテカルロ法による計算を実施するという一連の技術基盤を構築した。

これらの研究は協力機関である複数の企業との共同研究として実施しており、ここで確立した計算科学技術に関しては共同研究を通して企業へと技術移転し、社会実装を行った。

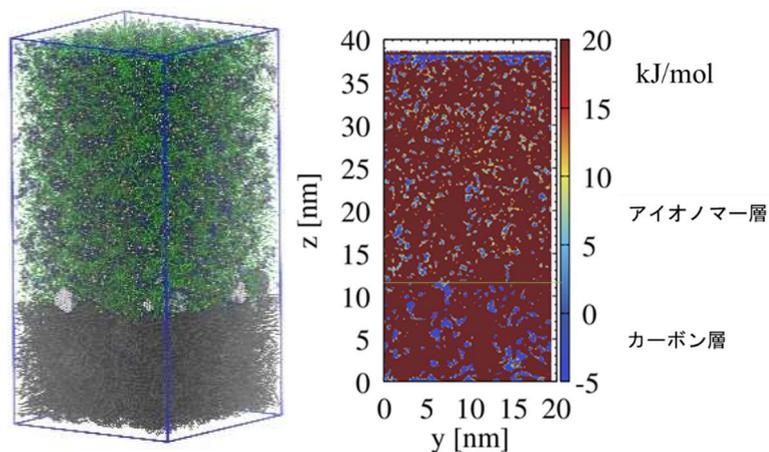


図 2-2-1-B-4. (左) モデル電極界面の全原子 MD 計算、
(右) 界面における酸素原子の位置に依存した自由エネルギー。
 $\lambda = 3$, 原子数約 110 万 (膜厚 24 nm)。

[研究成果の社会実装について]

国プロ・産業界との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・SIP バイオポリマー

分子動力学計算を用いた新規ポリマーの熱特性、力学特性の推算において連携[2-2-1-B-7]。

- ・ムーンショット 二酸化炭素分離膜

分子動力学計算による分離機構の解明に連携。

- ・ムーンショット 海洋プラスチック

マルチロックポリマーの強靱化において、分子動力学計算による力学特性の評価に連携。

- ・産業界

4社との共同研究を通して、社会実装を目指している。

[参考文献]

- [2-2-1-B-5] Yoshimichi Andoh, Shin-ichi Ichikawa, Tatsuya Sakashita, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, Tetsuro Nagai, Zhiye Tang, Susumu Okazaki “An exa-scale high-performance molecular dynamics simulation program: MODYLAS” , *J. Chem. Phys.* **158**, 194803 (2023).
- [2-2-1-B-6] Tetsuro Nagai, Akira Yoshimori, Susumu Okazaki, “Dynamic Monte Carlo calculation generating particle trajectories which satisfy diffusion equation for heterogeneous systems with position-dependent diffusion coefficient and free energy” , *J. Chem. Phys.* **156**, 154506 (2022).
- [2-2-1-B-7] Zhiye Tang, Susumu Okazaki, “All-atomistic molecular dynamics study of the glass transition of amorphous polymers” , *Polymer*, **254**, 125044 (2022).

②電解質膜分子設計指針の提案と成果の社会実装

[令和4年度の事業実施計画]

令和3年度までに確立した、位置に依存する拡散係数と自由エネルギーに基づいた動的モンテカルロ法を実施し、分子輸送に関わる多数のトラジェクトリーを生成する。この解析から電解質膜バルク中における物質輸送のマイクロ機構を解明する。確立した計算技術を共同研究先の企業などに技術移転し、社会実装を行う。

[担当責任者] 岡崎進（東京大学大学院新領域創成科学研究科）

[実施概要]

高分子電解質膜バルク中の水素分子に対し、電解質膜の不均一性よりも大きな空間スケールでの長時間の動的モンテカルロ計算を実施し、そこで得られた 10^4 本を越える軌跡を解析することにより輸送ダイナミクスのマイクロ機構の解析を行った。この技術に関しては、企業との共同研究に加えて、他の国家プロジェクトへの展開を通して社会実装を行っている。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・ 約 65 万個および 110 万個の原子からなる電極 4 相界面
- ・ 約 1 億個の原子からなる実在電極界面
- ・ 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS

[研究成果]

燃料電池電極界面構造の合理的設計のための界面設計指針の獲得に向けて、令和3年度までに開発した新規動的モンテカルロ法に基づいて、通常分子動力学計算では不可能な、高分子電解質膜中での水素分子の長時間にわたる軌跡を 1 万本以上生成し、得られた水素の大量の軌跡から拡散経路の特徴を抽出し、自由エネルギー障壁や分子が頻繁に通る経路上の場所などを解明した（図 2-2-1-B-5）。これらの解析から、電解質膜と溶媒である水の局所的な密度が水素分子の輸送

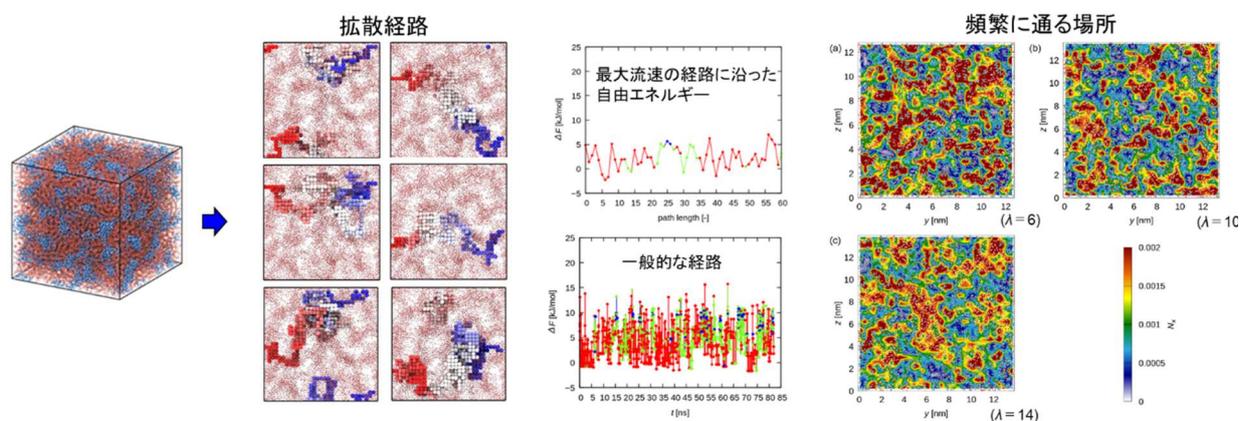


図 2-2-1-B-5. 新規動的モンテカルロ法により生成した水素分子の高分子電解質膜中の大域的な軌跡と、軌跡から抽出した拡散経路の特徴。

を決定する大きな因子であることを明らかにし、電解質膜設計のひとつの指針を得た [2-2-1-B-8]。

この技術に対しては、企業との共同研究や、ムーンショットプロジェクトなど他の国家プロジェクトへの展開等を通して社会実装を行った。

[研究成果の社会実装について]

国プロ・産業界との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・SIP バイオポリマー
分子動力学計算を用いた新規ポリマーの熱特性、力学特性の推算において連携。
- ・ムーンショット 二酸化炭素分離膜
分子動力学計算による分離機構の解明に連携。
- ・ムーンショット 海洋プラスチック
マルチロックポリマーの強靱化において、分子動力学計算による力学特性の評価に連携。
- ・産業界
4社との共同研究を通して、社会実装を目指している。

[参考文献]

- [2-2-1-B-8] Tetsuro Nagai, Susumu Okazaki, “Global diffusion of hydrogen molecules in the heterogeneous structure of polymer electrolytes for fuel cells: Dynamic Monte Carlo combined with molecular dynamics calculations”, *J. Chem. Phys.* **157**, 054502 (2022).

C) データマネジメントに係る取組

①DPFC が運用するクラウドのデータリポジトリを利用し、シミュレーション・データ科学の研究者間でデータ（シミュレーション結果等）を共有するシステムの構築

[令和4年度の事業実施計画]

DPFC が運用するクラウドのデータリポジトリを利用し、シミュレーション・データ科学の研究者間でデータ（シミュレーション結果等）を共有するシステムを構築する。

[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

材料データプラットフォームセンター(DPFC)がクラウド上に構築し運用するデータリポジトリ(MDR-Closed)を利用し、データを格納する際にトポロジカルデータ解析(TDA)によって自動生成したコンパクトなメタデータを付与することで、「富岳」で生成された大量のデータの利活用を促進するシステムを構築した。

構築したシステムを用い、「富岳」の大量の大規模分子動力学計算データから高分子電解質系の相分離構造や高分子材料の引っ張り変形に対し有益な知見を得た。

[実施成果]

「富岳」で生成されたシミュレーションデータをデータ科学研究等で活用するため、DPFC がクラウド上に構築し運用するデータリポジトリである MDR-Closed を利用し、データを共有し利活用を促進するシステムを構築した（図 2-2-1-C-1）。

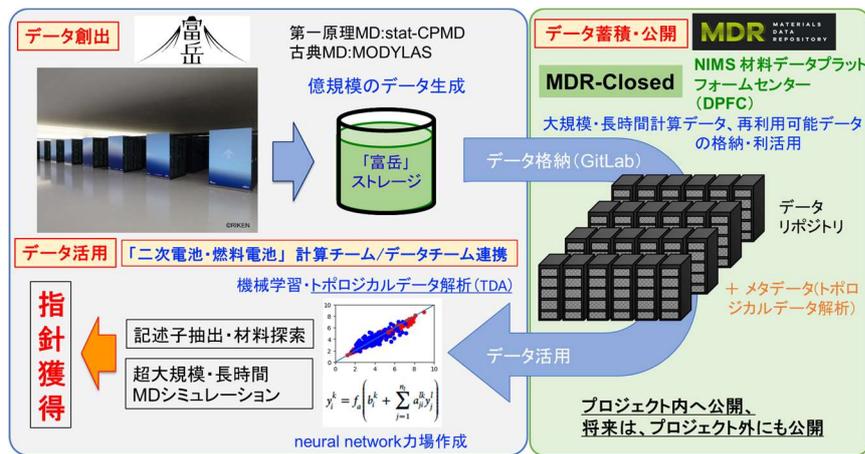
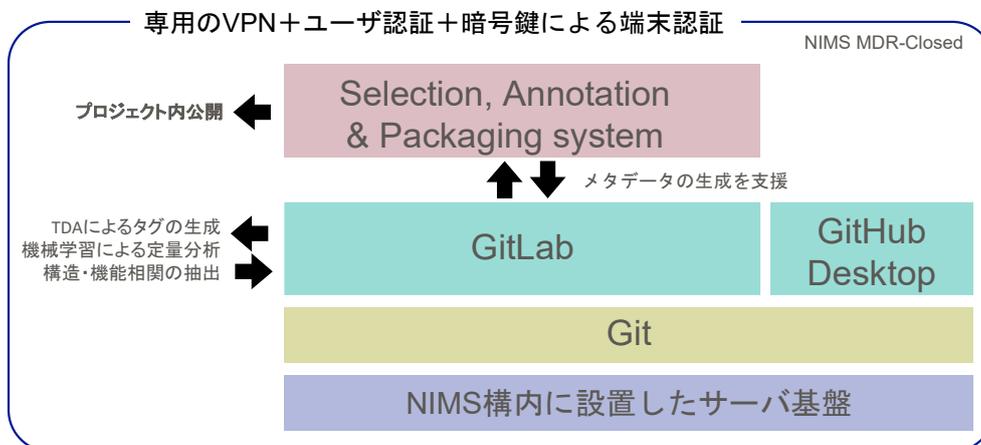


図 2-2-1-C-1. MDR-Closed を用いた計算・データ科学連携。

大規模な構造データをデータリポジトリ(MDR Closed)に格納する際に TDA によって自動生成したコンパクトなメタデータを付与するため、GitLab の継続的インテグレーション(CI)/継続的デリリース(CD)機能を担う runner を利用して、MDR-closed に TDA のソフトウェア基盤 HomCloud 処理系を接続した。これにより、大規模な構造データに TDA に基づくコンパクトな 2 次データを自

動生成してメタデータとして付与し、MDR Closed に格納することが可能となった（図 2-2-1-C-2）。

NIMSのMDR-Closedを介したデータ科学的アプローチ



「富岳」で生成した複雑かつ大規模な構造情報

トポジカルデータ解析 (TDA) で直観的に理解しやすい形に定量化 (巨大なデータに対する利便性の高いタグ (メタデータ) を生成)

機械学習による構造-物性関連の抽出を支援

図 2-2-1-C-2. TDA によるデータ科学アプローチ。

構築したシステムを用い「富岳」の大量の大規模分子動力学計算データに TDA を適用し、800 万粒子の高分子電解質系の相分離構造や高分子材料の引っ張り変形に対し有益な知見を得た（図 2-2-1-C-3、図 2-2-1-C-4）。

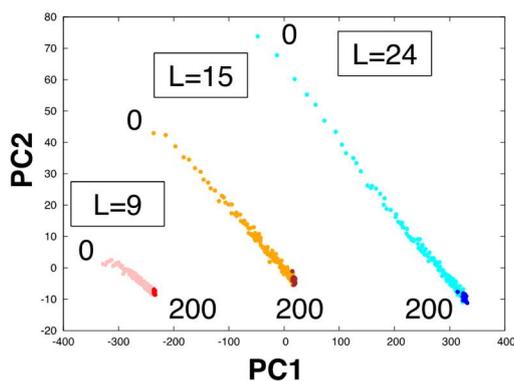


図 2-2-1-C-3. 800 万粒子の高分子電解質系 (DPD モデルによる MD 計算) における相分離構造の収束状況。

含水量の異なる 3 つの系において、各スナップショットの 1 次のホモロジーを第 1 主成分 (横軸) と第 2 主成分 (縦軸) で定量化した。

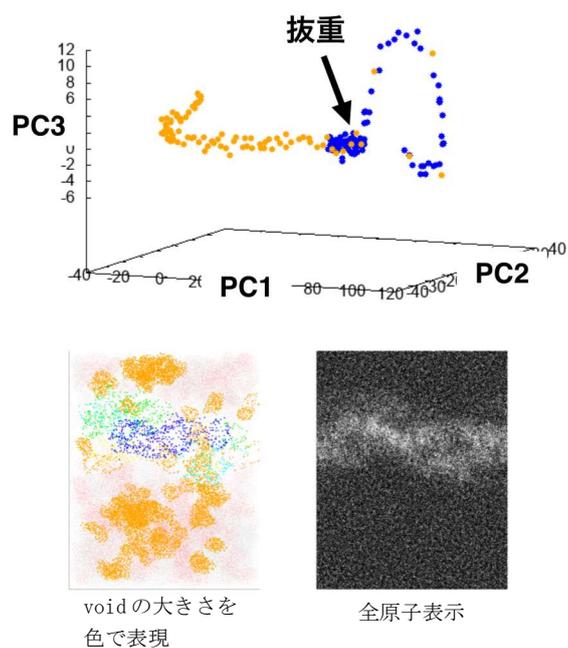


図 2-2-1-C-4. MODYLAS による高分子材料の引っ張り変形の MD 計算データに TDA を適用して 3 つの主成分値で可視化。
 特異な曲率を示す箇所で大変な構造変化が起きたと見当がつく。微小な裂け目が繋がって大変形を起こし、抜重が生じたことが分かった。

(2) プロジェクトの総合的推進

本課題全体の連携を密としつつ円滑な運営のため、以下のように研究協力機関との実施者会議や統括会議などを開催し、研究協力機関や連携機関との連携・調整を実施し事業を推進した。

- 統括会議：4/1、5/10、5/12、6/29、12/23 開催
- 実施者会議：4/8、5/17、7/5、10/7、1/5、3/22 開催

国内外の次世代二次電池・燃料電池関連課題との連携や、産業界の実ニーズの把握、実験研究の進展をタイムリーに取り込むために民間企業研究者・実験研究者と定期的に交流した。これらの目的のために、以下のように研究会やシンポジウムなどを企画・実施した。

- 理論計算研究フォーラム（第7回）：8/3 開催
- 理論計算研究フォーラム（第8回）：1/21 開催
- 第3回公開シンポジウム（成果報告会）：1/5 開催
- 第14回材料系ワークショップ（共催）：10/26 開催
- 第15回材料系ワークショップ（共催）：2/16 開催

また、プロジェクトで得られた成果は論文発表（16報）・オープンアクセス、シンポジウム・研究会、広報・ホームページや研究活動を通じて積極的に公表した。

- 第3回公開シンポジウム（成果報告会）：1/5 開催
- 第2回「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム ポスター発表：12/21
- 第2回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 講演・ポスター発表：3/7-8
- 第9回 HPCI システム利用研究課題成果報告会 ポスター発表：10/27-28
- 研究成果の「富岳」電池課題ホームページ掲載

HPCI コンソーシアムに参画することで、利用する「富岳」や HPCI システムに関する情報共有を円滑に進め、今後の展開に資した。

- 令和4年度通常総会 出席：5/26
- 次世代計算基盤に係る調査研究に関する合同ワークショップ ～次世代高性能計算基盤の開発に向けて～ 参加：2/22

また、一般社団法人電気化学界面コンソーシアム（EIS コンソ）への協力、コンピューターショナル・マテリアルズ・デザイン・ワークショップ（CMD-WS）などの開催を通して、本研究課題で用いる計算手法やプログラムの社会実装を推進した。

- 第41回コンピューターショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD）ワークショップ共催：9/5-9
- 第42回コンピューターショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD）ワークショップ共催：2/20-24
- スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2022 秋 基調講演：9/28
- 第8回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム 基調講演：9/30

若手研究員（ポスドク等）については、有能な人材を確保し、育成する計画を継続した。これに伴

い、若手研究員の連携、将来のステップアップまで見据えた登用や人材育成の取り組みを継続した。

- HPC 研究と先端的データ科学アプローチを議論するタスクフォース（第1回）：6/28 開催
- 理論計算研究フォーラム（第7回）：8/3 開催
- 理論計算研究フォーラム（第8回）：1/21 開催

本事業の研究推進において計算資源の効率良い利活用のため、「富岳」計算資源をマネジメントし HPCI システムの計算資源追加の検討・調達を実施した。「富岳」の計算資源を有効利用し、光熱費の急激な高騰に伴う 50,688 ノード（33.3%）の運用停止（7/27 16:00 - 11/8 17:45）にもかかわらず、特別運用（4月-5月）利用の 571 万ノード時間を含めて年間配分の 91.6%を使用した。また、HPCI システムの計算資源等を追加導入し利用した。

2-3. 活動（研究会の活動等）

[シンポジウム・研究会等主催・共催・出展など]

日程	行事名	開催場所等
4/ 1	第17回統括会議	メール審議
4/ 8	第16回実施者会議	メール審議
5/10	第18回統括会議	Webミーティング
5/12	第19回統括会議	メール審議
5/17	第17回実施者会議	メール審議
6/28	HPC研究と先端的データ科学アプローチを議論する タスクフォース（第1回）	東大物性研 大講義室＋オンライン開催
6/29	第20回統括会議	メール審議
7/ 5	第18回実施者会議	メール審議
8/ 3	理論計算研究フォーラム（第7回）	オンライン開催
9/ 5-9	第41回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD）ワークショップ（共催）	オンライン開催
9/28	スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー 2022 秋（基調講演）	オンライン開催
9/30	第8回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム（基調講演）	秋葉原UDX NEXT-1、NEXT-3
10/ 7	第19回実施者会議	Webミーティング
10/26	第14回材料系ワークショップ（共催）	秋葉原UDX＋オンライン開催
10/27- 28	第9回HPCIシステム利用研究課題成果報告会（ポスター発表）＜同時開催＞第5回HPCIコンソーシアムシンポジウム	オンライン開催
12/21	第2回「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム（ポスター発表）	オンライン開催
12/23	第21回統括会議	Webミーティング
1/ 5	第3回公開シンポジウム（成果報告会）	NIMS 並木WPI-MANAオーディトリウム＋オンライン開催
1/ 5	第20回実施者会議	NIMS 並木WPI-MANAオーディトリウム
1/21	理論計算研究フォーラム（第8回）	ステーションコンファレンス東京＋オンライン開催
2/16	第15回材料系ワークショップ（共催）	秋葉原UDX＋オンライン開催

日程	行事名	開催場所等
2/20-24	第42回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップ (共催)	オンライン開催
3/ 7-8	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 (講演・ポスター発表)	オンライン開催
3/22	第21回実施者会議	Webミーティング

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) 研究開発	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
サブテーマA-1「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
	① 国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
	② 国立大学法人 東海国立大学機構	名古屋大学大学院情報学研究科 教授 長岡 正隆
	③ 国立大学法人 筑波大学	計算科学研究センター 教授 大谷 実
	④ 国立大学法人 東北大学	材料科学高等研究所 准教授 赤木 和人
サブテーマA-2「二次電池・全固体電池」	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
	① 国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
サブテーマB-1「燃料電池の電極界面反応」	国立大学法人 東京大学	物性研究所 教授 杉野 修
	① 国立大学法人 東京大学	物性研究所 教授 杉野 修
	② 国立大学法人 大阪大学	大学院工学研究科 教授 森川 良忠
サブテーマB-2「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」	国立大学法人 東京大学	大学院新領域創成科学研究科 特任教授 岡崎 進
	① 国立大学法人 東京大学	大学院新領域創成科学研究科 特任教授 岡崎 進
	② 国立大学法人 東京大学	大学院新領域創成科学研究科 特任教授 岡崎 進
データマネージメントに係る取組	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
(2) プロジェクトの総合的推進	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚

別添 学会等発表実績

(1) 活動報告

活動報告 K01	
会議名称	「富岳」電池課題 第17回統括会議
日時	令和4年4月1日(金)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 令和4年度「富岳」計算資源の配分・運用について 2. その他

活動報告 K02	
会議名称	「富岳」電池課題 第16回実施者会議
日時	令和4年4月8日(金)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	1. 令和4年度「富岳」計算資源の配分・運用について 2. その他

活動報告 K03	
会議名称	「富岳」電池課題 第18回統括会議
日時	令和4年5月10日(火) 11:00 ~ 12:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトとの連携について 2. 「富岳」電池課題の令和4年度研究推進について 3. その他

活動報告 K04	
会議名称	「富岳」電池課題 第19回統括会議
日時	令和4年5月12日(木)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 令和4年度「富岳」計算資源の上期追加配分について 2. その他

活動報告 K05	
会議名称	「富岳」電池課題 第17回実施者会議
日時	令和4年5月17日(火)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	1. 令和4年度「富岳」計算資源の上期追加配分について 2. その他

活動報告 K06	
会議名称	HPC 研究と先端的データ科学アプローチを議論するタスクフォース（第1回）
日時	令和4年6月28日(火) 16:00 ~ 20:00
場所	東大物性研 大講義室 + オンライン開催
参加者	12名

プログラム（敬称略）



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」
HPC研究と先端的データ科学アプローチを議論するタスクフォース(第1回)

日時: 2022年6月28日(火) 16:00 ~ 20:00

場所: 東大物性研 大講義室 + Webミーティング

プログラム ※1

「富岳」電池課題 HPC研究と先端的データ科学アプローチを議論するタスクフォース(第1回)				
16:00 - 16:10	物質・材料研究機構	館山 佳尚	タスクフォース開催趣旨	
16:10 - 16:30	物質・材料研究機構	館山 佳尚	海外研究会の動向	
16:30 - 16:50	山形大学 理学部	笠松 秀輔	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
16:50 - 17:10	東京工業大学 物質理工学院	佐々木 遼馬	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
17:10 - 17:30	日本原子力研究開発機構	志賀 基之	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
17:30 - 17:40	休憩			
17:40 - 18:00	福岡大学 理学部	永井 哲郎	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
18:00 - 18:20	名古屋大学 大学院工学研究科	藤本 和士	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
18:20 - 18:40	名古屋大学 大学院情報学研究科	吉田 紀生	研究における先端的データ科学アプローチ状況、利用アプリ情報や関連動向	
18:40 - 18:50	休憩			
18:50 - 19:50	総合討論			
19:50 - 20:00	物質・材料研究機構	館山 佳尚	まとめと次回開催について	

※1 プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願い致します。

活動報告 K07	
会議名称	「富岳」電池課題 第20回統括会議
日時	令和4年6月29日(水)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 「富岳」計算資源の実施者グループ配分の見直しについて 2. その他

活動報告 K08	
会議名称	「富岳」電池課題 第18回実施者会議
日時	令和4年7月5日(火)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	1. 「富岳」計算資源の実施者グループ配分の見直しについて 2. その他

活動報告 K09	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第7回）
日時	令和4年8月3日(水) 13:30～17:10
場所	オンライン開催
参加者	26名

プログラム（敬称略）



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」
理論計算研究フォーラム(第7回)

日時: 2022年8月3日(水) 13:30～17:10

場所: Webミーティング

プログラム ※1

「富岳」電池課題 理論計算研究フォーラム(第7回)

13:30 - 13:40	東京大学物性研究所	杉野 修	第7回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:40 - 14:10	物質・材料研究機構	館山佳尚	機械学習ポテンシャルに関する動向
14:10 - 14:20	休憩		
14:20 - 14:40	山形大学学術研究院(理学部担当)	中西章尊	ジルコニウム酸窒化物と水界面におけるニューラルネットワークポテンシャル
14:40 - 15:00		出席者	討論
15:00 - 15:10	休憩		
15:10 - 15:50	名古屋大学大学院情報学研究科	長岡正隆	二次電池におけるSEI膜形成シミュレーションと特性解析
15:50 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:30	休憩		
16:30 - 17:00		出席者	総合討論
17:00 - 17:10	東京大学物性研究所	杉野 修	まとめと次回開催テーマについて

※1 プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願い致します。

活動報告 K10	
会議名称	第41回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップ (共催)
日時	令和4年9月5日(月) ~ 9月9日(金)
場所	オンライン開催

COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN(CMD®) WORKSHOP
LIVE! ONLINE

第41回 コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ
41st Computational Materials Design(CMD®) Workshop

ナノサイエンス・ナノテクノロジー・学際教育研究訓練プログラム ナノマテリアルズ・ナノデバイスデザイン学 2022年秋季集中講義・実習 — Autumn 2022

本コース希望者は、下記参加条件と事前準備を満たすように各自のPCのセットアップができることを必須とします。
X Window Systemを含めたLinux環境及びPCを各自で準備できる方 (実習は阪大ナノセンターのPCクラスターで行います。公開鍵認証が必須。)
受講のためWeb会議システムでアクセスできる方 (Cisco Webexを基本とする。)
チャットツールSlackにアクセスできる方
WebexやSlackは参加確定者をこちらから招待いたしますので、事前にアカウントを作っていた必要はありません。
CMDワークショップ オンライン受講環境準備: [PDFダウンロード](#)

Those who can prepare a PC and install Linux environment including X Window System by yourselves.
(The hands-on will be conducted using the PC cluster at INSD, Osaka University. Public key authentication must be required.)
Those who can access to the web conference system to participate the lectures and hands-on. (We mainly use Cisco Webex.)
Those who can access to Slack (business communication tool).

The confirmed participants will be invited to the Webex meeting and Slack workspace, so it is not necessary to create an account in advance.
[Preparation_Linux Download](#)

開催期間 (WHEN): 2022年9月5日(月) ~ 9月9日(金) (5th September - 9th September, 2022)

場 所 (VENUE): 大阪大学 大学院基礎工学研究科 (豊中キャンパス)
(Graduate School of Engineering Science, (Toyonaka campus) Osaka Univ.)
[Access Map](#)

定 員 (MAX.PARTICIPANTS): 40名程度 (40 participants)
申し込み書記載内容による選考があります
(Participants will be considered based on the essay content written in the application form.)

参加費 (EXPENSES): 受講費無料 (No registration fee)

申込期限 (APPLICATION DEADLINE): 2022年7月24日(日) (24th July, 2022)

活動報告 K11	
会議名称	スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2022 秋（基調講演）
日時	令和4年9月28日(水) 13:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	166名

スーパーコンピュータ ソリューションセミナー

SUPERCOMPUTER SOLUTION SEMINAR 2022 秋

Manufacturing
Simulation
Society 5.0
Environment, Energy

Medical Treatment, Health
AI
Big Data
Disaster Prevention

最先端から実践活用まで多彩な講演者

- ・国立研究開発法人 物質・材料研究機構 副拠点長
- ・株式会社 神戸製鋼所 技術開発本部長
- ・FOCUSスパコン利用ユーザ(医療・環境・ものづくり)

9/28

水

参加費
無料

13:00～17:30 (受付開始12:30)

会場 神商ホール(神戸商工会議所)
神戸商工会議所会館内 3F

対象 企業の経営者層・技術部門幹部、
企業の研究者・技術者等

定員 会場60名(定員150名のところ)
オンライン150名 [HPからお申し込みください](#)

●直接会場とオンラインで同時開催します。
遠方で神戸に来ることが難しい方も、
ぜひオンラインでご参加ください。

【主催】 公益財団法人計算科学振興財団 (FOCUS)、神戸商工会議所
【共催】 兵庫県、神戸市
【後援】 文部科学省、経済産業省、
国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター、
一般社団法人高度情報科学技術研究機構、一般社団法人HPCコンソーシアム、
一般社団法人日本経済団体連合会、日本商工会議所、
公益社団法人関西経済連合会、東京大学生産技術研究所、
公益財団法人ひょうご科学技術協会、
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、
特定非営利活動法人CAE懇話会、
特定非営利活動法人/バイオグリッドセンター関西、
一般社団法人オープンCAE学会

プログラム

第1部 13:00

開会挨拶・来賓挨拶

基調講演
「カーボンニュートラル社会の実現に向けた
電池材料の最先端計算・データ科学と「富岳」の活用」
国立研究開発法人 物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点 (GREEN) 副拠点長 船山 佳尚 氏

特別講演
「神戸製鋼グループにおける計算科学の活用」
株式会社神戸製鋼所 執行役員 技術開発本部長 後藤 有一郎 氏

休 憩 (20分)

第2部 (FOCUS事例集から) 15:30

事例講演1
「血流シミュレーション心臓手術設計支援」
株式会社 Cardio Flow Design 解析部 マネージャー 鈴木 康平 氏

事例講演2
「鉄道車両走行時の窓開けによる
車内換気の数値シミュレーション」
公益財団法人 鉄道総合技術研究所 計算力学研究室長 中出 季次 氏

事例講演3
「東洋紡の素材のモデル化とシミュレーション」
東洋紡株式会社 総合研究所 コーポレート研究所
シミュレーションセンター 住山 琢哉 氏

問い合わせ先
公益財団法人 計算科学振興財団
TEL : 078-599-5024 Email : fukyu@j-focus.or.jp

<https://www.j-focus.or.jp/>

申込は
裏面参照

活動報告 K12

会議名称	第8回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム（基調講演）
日時	令和4年9月30日(金) 9:30～17:30
場所	秋葉原 UDX NEXT-1、NEXT-3
参加者	71名

プログラム（敬称略）

9:00	受付開始	
9:30-10:10	第1セッション:施設と登録機関の現状	座長:社本 真一(CROSS)
9:30-9:40	開会挨拶 5分×2	雨宮 康幸(JASRI) 柴山 充弘(CROSS)
9:40-10:10	施設と登録機関の紹介 10分×3 1-1 SPring-8/JASRI 1-2 J-PARC/CROSS 1-3 HPCI、富岳/RIST	木村 遼(JASRI) 鈴木 淳市(CROSS) 吉澤 香奈子(RIST)
10:10-10:30	休憩(Coffee Break)	
10:30-12:15	第2セッション(計算科学):二次電池と燃料電池の計算科学の概観	座長:吉澤 香奈子(RIST)
10:30-11:15	2-1 基調講演1「スパコンがもたらす蓄電池現象の新たな理解」(講演概要 )	館山 佳尚(物質・材料研究機構)
11:15-11:45	2-2 招待講演1「固体内酸素レドックス反応を利用したリチウムイオン電池と第一原理計算」(講演概要 )	中山 将伸(名古屋工業大学)
11:45-12:15	2-3 招待講演2「酸化物電極の触媒活性の計算予測」(講演概要 )	杉野 修(東京大学)
12:15-13:30	ランチ	
13:30-16:00	第3セッション(実験):二次電池と燃料電池の実験研究の現状	座長:筒井 智剛(JASRI)
13:30-14:15	3-1 基調講演2「放射光×線と中性子線を用いた燃料電池の階層的構造・機能解析」(講演概要 )	犬飼 雅治(山梨大学)
14:15-14:45	3-2 招待講演3「燃料電池のモデリングに役立つマルチスケール構造解析」(講演概要 )	原田 雅史(株式会社豊田中央研究所)
14:45-15:30	3-3 基調講演3「レアメタルフリー高性能二次電池の開発」(講演概要 )	多々良 涼一、駒場 慎一(東京理科大学)
15:30-16:00	3-4 招待講演4「放射光を用いた二次電池内部におけるイオン分布現象の可視化」(講演概要 )	折笠 有基(立命館大学)
16:00-16:20	休憩(Coffee Break)	
16:20-17:30	第4セッション:パネルディスカッション	座長:原田 雅史(株式会社豊田中央研究所)、杉野 修(東京大学)
16:20-17:20	「電池研究の課題解決に向けた大型実験施設とスーパーコンピュータの連携利用」	基調講演者、招待講演者、陣内 亮典(株式会社豊田中央研究所)
17:20-17:30	開会挨拶	田島 保英(RIST)
17:30	閉会	

プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K13	
会議名称	「富岳」電池課題 第19回実施者会議
日時	令和4年10月7日(金) 13:30 ~ 15:30
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題の令和4年成果説明資料について 2. 令和4年度「富岳」計算資源の利用状況について 3. MDR Closed の利用について 4. 「富岳」電池課題のアプリケーションプログラムについて 5. 令和4年度設備備品購入について 6. 第3回公開シンポジウム開催について 7. 令和5年度A期「富岳」利用研究課題(第一回目)、Society5.0 推進利用課題について 8. 「富岳」電池課題の今後の運営について 9. その他

活動報告 K14

会議名称	第14回材料系ワークショップ ～ポスト「富岳」を見据えた計算物質科学の未来～ (共催)
日時	令和4年10月26日(水) 10:00～17:30
場所	秋葉原UDX+オンライン開催
参加者	257名(内、企業147名)会場22名、オンライン235名

プログラム(敬称略)

司会：山本海(産応協,東レ株式会社)/須永泰弘(高度情報科学技術研究機構)

10:00-10:05	開会挨拶 草間 義紀(高度情報科学技術研究機構)
10:05-10:20	「富岳」を含むHPCI利用研究課題の募集と利用支援 齊藤 哲(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:20-10:40	「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況 吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:40-11:15	実空間第一原理計算ソフトRSDFTと「京」、「富岳」、「????」 岩田 潤一(株式会社 Quemix) (発表資料 [PDF] )
11:15-11:50	高分子材料の分子シミュレーション 藤本 和士(名古屋大学) (発表資料 [PDF] )
11:50-13:00	<ランチタイム>
13:00-13:35	国プロおよび企業における計算物質科学の適用と次世代計算機への期待 青柳 岳司(旭化成株式会社) (発表資料 [PDF] )
13:35-14:10	次世代の高性能計算機システムの可能性と開発に向けた課題 近藤 正章(慶應義塾大学,理化学研究所) (発表資料 [PDF] )
14:10-14:45	ポスト富岳にむけた計算科学ロードマップ 藤堂 真治(東京大学) (発表資料 [PDF] )
14:45-15:20	データ駆動型物質・材料研究開発とHPC～マテリアル創成デジタルツイン 伊藤 聡(計算科学振興財団,理化学研究所) (発表資料 [PDF] )
15:20-15:45	<休憩>
15:45-17:15	パネルディスカッション「ポスト「富岳」を見据えた計算物質科学の未来」 モデレータ：古宇田 光(計算物質科学協議会,東京大学) パネリスト：青柳 岳司(旭化成株式会社)/近藤 正章(慶應義塾大学,理化学研究所)/藤堂 真治(東京大学)/伊藤 聡(計算科学振興財団,理化学研究所)/茂本 勇(産応協,東レ株式会社)
17:15-17:30	HPCI・アプリケーション利用相談(希望者のみ)

*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K15

会議名称	第9回 HPCI システム利用研究課題成果報告会 (ポスター発表) ＜同時開催＞第5回 HPCI コンソーシアムシンポジウム
日時	令和4年10月27日(木) 13:30 ~ 16:45、28日(金) 10:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	497名

■ プログラム

10月27日(木)

時間	プログラム(敬称略)	
13:30 - 13:45	<ul style="list-style-type: none"> ● 主催者挨拶: 田島 保英(一般財団法人高度情報科学技術研究機構 理事兼) ● 共催者挨拶: 冨田 浩文(一般財団法人HPCIコンソーシアム 理事兼) ● 共催者挨拶: 松岡 聡(国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター長) ● 共催者挨拶: 河原 卓(文部科学省 研究開発局 参事官(情報部))付計算科学技術推進室 室長) 	
13:45 - 14:25	基調講演: 市村 湧(東京大学・地産研究所 教授) 「データ・コンピューティングによる高速解析・地産シミュレーション例に」 (7/7/17)→: 堀 高純(海洋研究開発機構・海城地産山産門地産浄化予測研究開発センター)	
14:25 - 15:05	基調講演: モハマド ヴヒブ(理化学研究所・計算科学研究センターチームリーダー) 「AI-for-Scienceを加速しその先へ導く初のエクサスケールスーパーコンピューター」 (英語) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら (7/7/17)→: 橋田 理央(東京工業大学・学術国際情報センター)	
15:05 - 15:15	第5回 HPCI コンソーシアムシンポジウム <休憩>	ポスター発表
15:15 - 16:45	パネル・ディスカッション「次世代計算基盤～「裏面」の次は?」 コーディネーター: 青木 尊之(東京工業大学・学術国際情報センター 教授) パネリスト: 文部 実樹(慶應義塾大学・理工学部 教授) 池野 博(東京大学・情報基盤センター 教授) 牧野 芳一(神戸大学大学院・理学研究科 教授) 辻藤 正史(理化学研究所・計算科学研究センターチームリーダー) 田邊 隆次(東京大学・情報基盤センター 教授) コメンテーター: 合田 憲人(国立情報学研究所 教授) 伊藤 宏幸(ダイキン工業 テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター)	

10月28日(金)

時間	プログラム(敬称略)	
10:00 - 10:05	ブレイクアウトセッション説明	
10:05 - 10:25	ブレイクアウトセッション1	
	講演セッション1: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 山下 晃一(横浜市立大学)	
10:25 - 10:50	2Dフレイバー-電子QC0D master fieldを囲む理論実験を結ぶ物理的探査 (h210112)PDF	山崎 朝(筑波大学) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
10:50 - 11:15	テンソルネットワーク法を用いた素粒子物理学の研究 (h210074)PDF	秋山 浩一郎(東京大学) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
11:15 - 11:25	<休憩>	
11:25 - 11:45	ブレイクアウトセッション2	
	講演セッション2: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 赤井 久次(大阪大学)	
11:45 - 12:10	水素分子イオンを持つ結晶中の第一励起シミュレーション法の開発 (h210077) PDF	立川 仁真(慶応市立大学) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
12:10 - 13:05	<昼食>	
13:05 - 13:25	ブレイクアウトセッション3	
13:25 - 13:35	<休憩>	
13:35 - 13:55	ブレイクアウトセッション4	
	講演セッション3: 特別基調講演 ファシリテーター: 小柳 義夫(高度情報科学技術研究機構)	ポスター発表
13:55 - 14:35	山本 剛(日本電気株式会社 セキュリティシステムプラットフォーム研究所 主席研究員) 「超伝導量子コンピュータ」(h210101) PDF	<ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
14:35 - 14:45	<休憩>	
14:45 - 15:05	ブレイクアウトセッション5	
	講演セッション4: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 廣瀬 肇(海洋研究開発機構)	
15:05 - 15:30	拡張アンサンブル法による生体分子輸送の解析 (h210107) PDF	大田 貴央(理化学研究所) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
15:30 - 15:55	伝導性有機分子の三次元配位構造計算 (h210144) PDF	飯島 博久(名古屋大学) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
15:55 - 16:05	<休憩>	
16:05 - 16:25	ブレイクアウトセッション6	
	講演セッション5: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 牧々木 大輔(金沢工業大学)	
16:25 - 16:50	伝導性有機分子の三次元配位構造計算 (h210144) PDF	池崎 航夫(TOTO株式会社) <ul style="list-style-type: none"> ● 講演動画はこちら
16:50 - 17:15	自動変換力・構造の多目的最適化と材料学習によるセロゲートモデルの構築 (h210106) PDF	中島 卓司(広島大学)
17:15 - 17:25	表彰・講演: 小柳 義夫(成果報告会プログラム委員会 委員長)	
17:25 - 17:30	閉会挨拶: 森 善博(一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター長)	

- 開催内容は変更となる場合があります
- 成果報告会の発表資料、動画は、講演者の意向により、一部編集している場合があります。

活動報告 K16

会議名称	第2回「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム（ポスター発表）
日時	令和4年12月21日(水) 11:00～17:30
場所	オンライン開催

program

ご挨拶

11:00
11:05

 文部科学省研究振興部長
森 健児

成果創出加速プログラム概要紹介

11:05
11:20

 「富岳」成果創出加速プログラム 第1編編纂/
東京大学 大学院理学系研究科 教授
常行 真司

特別講演

「富岳」による地震シミュレーション

11:20
11:50

 東京大学 地殻研究所 計算地殻科学研究センターセンター長
市村 強

地震を考える際に、数100～1000kmの大きな領域や複雑な都市や構造物などを対象とする場合がある。対象が巨大・複雑すぎるため、「実験によって、どのようなことが起きるのか?どのようなメカニズムのかなどを検討する」ことは難しい。このような時に、「富岳」のようなスーパーコンピュータによる数値実験（シミュレーション）が有効だ。本講演では、「富岳」の性能を発揮するシミュレーション手法の研究開発を行うことで、初めて実現された地震の大規模なシミュレーションを先端的な読みも含めて紹介する。
OHPコマンド「富岳行状」→<https://yokaku100.net/jp/maae09/>

昼休憩 (11:50～13:30)

講演① 防災・減災

線状降水帯

線状降水帯を知る ―そのメカニズムと予測について―

13:30
14:00

 気象庁気象研究所 気象観測研究課 室長
川原 拓矢

近年、集中豪雨による洪水や土砂災害が頻発している。日本では台風による直接的な影響を除くと、集中豪雨の約60%が線状降水帯と呼ばれる現象によってもたらされていると言われている。線状降水帯とは、積乱雲が数時間にとどまり、豪雨をもたらす現象だ。現在の天気予報技術では予測することは困難とされている。本講演では、線状降水帯とはどのような現象なのか、スーパーコンピュータ「富岳」を用いてどのようにこれを予測し、豪雨被害軽減に貢献するのか、ということについてお話しする。

講演② ものづくり

クリーンエネルギー

カーボンニュートラル社会実現に向けた「富岳」の役割 ―洋上風力開発を例として―

14:00
14:30

 東京大学 大学院工学系研究科 教授
吉村 忍

2050年のカーボンニュートラル社会実現に向けては、脱炭素化エネルギー源の研究開発や、運輸、生産などの様々な人間活動における脱炭素化の取り組みの加速が必要であり、そこには新たなイノベーションも要求される。本講演では、カーボンニュートラル社会における主力電源の一つとして大きな期待を集める大規模洋上風力発電の研究・開発・運用・低コスト化において「富岳」の果たす役割について、事例を交えて、わかりやすく説明する。

講演③ ライフ

個別化医療

「富岳」を用いた脳循環の数値再現

14:30
15:00

 東京医科大学システムデザイン学 専任教授
伊井 仁志

脳活動は主にグルコースの酸化代謝により支えられているが、脳組織の一部を除き代謝基質の貯蔵機構が存在しないため、脳血流からのグルコースと酸素の持続的な供給を必要としている。また、血液以外でも、脳内には脳脊髄液や間質液が存在しており、それらの循環が脳機能を維持する上で重要であると考えられている。これらの循環が障害されると、アルツハイマー型認知症などの様々な脳の病気の発症に繋がると考えられているが、詳細は分かっていない。脳循環の恒常性維持の物理メカニズムを正しく理解することができれば、その破綻から病状移行へのメカニズムの理解、さらに予防戦略に繋がっていくことが期待できる。本発表では、特に脳血流を中心として、「富岳」を用いた脳循環の数値再現の取り組みを紹介する。

講演④ 宇宙・素粒子

基本法則から元素の生成

原子核の中はどうなっている？陽子の中は？

15:00
15:30

 高エネルギー加速器研究機構 超原子核研究所 理論センター 教授
橋本 省二

水素、酸素、炭素、…。私たちの体をつくる元素は、もとをたどれば小さな原子核、さらには陽子・中性子に分解できる。ではそれらはどんなふうになっているのだろうか。思い当たるに、小さな一点にすぎないと思われるこれらの小さな粒子、中を調べる多様な世界が広がっている。さらに、それらはどこでどうやって作られたのか、そんな謎を解明するために使われているのは、巨大な加速器とスーパーコンピュータ「富岳」なのである。

講演⑤ 材料

光エネルギー変換材料

デジタル技術が拓く新規光エネルギー変換材料開発

15:30
16:00

 奈良先端科学技術大学院大学 教授
藤井 幹也

現在、我々の生活を支えるエネルギー源は化石燃料に寄るところが大きく、環境持続性や地政学のリスクを考えると様々なエネルギー源を確立しておくことが必要である。その候補の一つに太陽エネルギーを電気エネルギーに変換する太陽電池や、化学エネルギーに変換する光触媒がある。これらにおいて直接的にエネルギー変換を行うのは、無機化合物内の電子であり、その状態や運動は量子力学に支配される。そこで、我々は「富岳」によって量子力学の支配方程式を膨大な無機化合物に対して解くことや、機械学習・深層学習を用いることで新たな材料候補を探している。当日は、我々の取り組みの詳細を発表する。

休憩

パネルディスカッション

「夢の形～未来のコンピュータ～」

16:00
16:10

登壇者

 Microsoft
Cloud Developer Advocate
千代田 まどか (6じまど)

 東京大学 大学院情報科学研究科
気候システム研究室
気候モデリング研究部門
特任助教
高須賀 大輔

 工学系研究科
助教
山田 英之

 東京大学 大学院情報科学研究科
教授
鈴木 豊太郎

コーディネータ

 「富岳」成果創出加速プログラム 第1編編纂/
気象庁気象研究所 計算地殻科学研究センターセンター長
朴 泰祐

クロージング

17:20
17:30

 「富岳」成果創出加速プログラム 第1編編纂/
東京大学 大学院理学系研究科 教授
常行 真司

活動報告 K17	
会議名称	「富岳」電池課題 第 21 回統括会議
日時	令和 4 年 12 月 23 日(金) 13:00 ~ 14:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題成果取りまとめについて 2. その他

活動報告 K18	
会議名称	第3回公開シンポジウム（成果報告会）
日時	令和5年1月5日（木）13:00～17:45
場所	NIMS 並木 WPI-MANA オーディトリウム+オンライン開催
参加者	申込者数 278 名（内、企業 143 名） 参加者数 226 名（内、企業 105 名）



Battery & Fuel Cell

次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた
計算・データ材料科学研究（「富岳」電池課題）
第3回公開シンポジウム（成果報告会）実施報告

1. 開催趣旨

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」（「富岳」電池課題）は2020年4月の発足から約3年が経過し、本年度が最終年度となります。本第3回公開シンポジウム（成果報告会）では、「富岳」電池課題の3年間の成果概要を課題責任者から、詳細な成果について実施者グループからご報告いたします。併せて、トヨタ自動車（株）射場英紀様から特別講演を賜ります。成果の公開・展開の機会といたしたく、皆様のご参加、宜しく願いいたします。

2. 実施概要

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構 「富岳」電池課題
 協賛：公益社団法人 電気化学会 電池技術委員会
 一般社団法人 日本固体イオニクス学会
 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点
 後援：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）
 公益財団法人 計算科学振興財団（FOCUS）
 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構（RIST）
 日時：2023年1月5日（木）13:00～17:45
 形式：物質・材料研究機構 並木WPI-MANAオーディトリウムとオンラインのハイブリッド開催
 参加費：無料
 参加申込者：278名（内、企業143名）
 参加者：226名（内、企業105名）

3. 第3回公開シンポジウム（成果報告会）プログラム

プログラム

13:00-13:05 開会挨拶：館山 佳尚（物材機構）
 13:05-13:10 来賓挨拶：河原 卓（文部科学省）
 13:10-13:20 「富岳」電池課題成果概要：館山 佳尚（物材機構）
 13:20-14:05 招待講演 計算・データ科学と革新電池の材料研究とのつながり
 ：射場 英紀（トヨタ自動車（株））
 14:05-14:20 休憩
 14:20-14:45 全原子分子動力学シミュレーションソフトMODYLASの開発ならびにそれを用いたMD計算と動的MC計算の組み合わせによる燃料電池高分子電解質膜中の物質輸送の研究：岡崎 進（東大院新領域）
 14:45-15:10 非白金電極材料の計算予測：杉野 修（東大物性研）
 15:10-15:35 ドープされた炭素系電極触媒の構造と燃料電池電極界面反応：森川 良忠（阪大院工）
 15:35-15:50 休憩
 15:50-16:15 二次電池電極界面構造の充電電位依存性と力学特性の研究：長岡 正隆（名大院情）
 16:15-16:40 電極/電解液界面における反応解析手法の開発と「富岳」を用いたシミュレーション技術の社会実装：大谷 実（筑波大計算科学研究センター）
 16:40-17:05 NIMSデータプラットフォームを介した「富岳」計算データの利活用
 ：赤木 和人（東北大材料科学研）
 17:05-17:40 第一原理MDを用いた蓄電池のイオン伝導計算手法の開発と応用
 ：館山 佳尚（物材機構）
 17:40-17:45 閉会挨拶：杉野 修（東大物性研）

活動報告 K19	
会議名称	「富岳」電池課題 第20回実施者会議
日時	令和5年1月5日(木) 18:00 ~ 20:00
場所	NIMS 並木 WPI-MANA オーディトリウム
参加者	館山、杉野、長岡、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題の令和4年成果説明資料について 2. 令和4年度「富岳」計算資源の利用状況について 3. その他

活動報告 K20	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第8回）
日時	令和5年1月21日(土) 14:00～19:30
場所	ステーションコンファレンス東京+オンライン開催
参加者	11名

プログラム（敬称略）



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」
理論計算研究フォーラム（第8回）

日時： 2023年1月21日(土) 14:00～19:30
場所： ステーションコンファレンス東京 6階 605-A 会議室とWebミーティング

プログラム ※1

「富岳」電池課題 理論計算研究フォーラム（第8回）

14:00 - 14:20	物質・材料研究機構	館山佳尚	第8回理論計算研究フォーラム開催趣旨
14:20 - 15:00	物質・材料研究機構	館山佳尚	「富岳」電池課題の成果
15:00 - 15:30		出席者	討論
15:30 - 15:45	休憩		
15:45 - 16:25	筑波大学	大谷 実	「富岳」電池課題 次世代二次電池の成果
16:25 - 16:55		出席者	討論
16:55 - 17:10	休憩		
17:10 - 17:50	山形大学	笠松 秀輔	「富岳」電池課題 次世代燃料電池の成果
17:50 - 18:20		出席者	討論
18:20 - 18:35	休憩		
18:35 - 19:20		出席者	総合討論
19:20 - 19:30	物質・材料研究機構	館山佳尚	まとめ

※1 プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願い致します。

活動報告 K21	
会議名称	第15回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和5年2月16日(木) 10:00～17:30
場所	秋葉原UDX+オンライン開催
参加者	363名（内、企業221名）会場35名、オンライン328名

▼ プログラム（敬称略）発表資料をアップロードしました。

司会：山本海（産応協, 東レ株式会社）/ 須永泰弘（高度情報科学技術研究機構）

10:00-10:05	開会挨拶 齊藤 哲（高度情報科学技術研究機構）
10:05-10:20	「富岳」を含むHPCIの課題募集と利用支援 齊藤 哲（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] 
10:20-10:30	「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] 
10:30-11:00	機械学習による物性予測～分子動力学計算データを用いた事例～ 泰岡 頌治（慶應義塾大学）（ 発表資料 [PDF] 
11:00-11:30	強結合高温超伝導と量子流体 —「富岳」から見える現実物質の強相関基礎科学への展望 今田 正俊（早稲田大学, 豊田理化学研究所）（ 発表資料 [PDF] 
11:30-12:00	計算・実験連携によるデータ統合型磁性材料研究 三宅 隆（産業技術総合研究所）（ 発表資料 [PDF] 
12:00-13:00	<ランチタイム>
13:00-13:35	量子ビーム計測と計算との統合によるデータ駆動型研究の展望 小野 寛太（大阪大学）
13:35-14:10	SPring-8データセンター構想 初井 宇記（理化学研究所）（ 発表資料 [PDF] 
14:10-14:45	MIとDX～材料研究への潜在空間の活用～ 庄司 哲也（トヨタ自動車株式会社）（ 発表資料 [PDF] 
14:45-15:20	HPCIを活用したFMOデータベースの構築 渡邊 千鶴（理化学研究所）（ 発表資料 [PDF] 
15:20-15:40	<休憩>
15:40-17:15	パネルディスカッション「計算・計測のデータ統合による材料開発の革新」 モデレータ：古宇田光（データ創出活用型マテリアル研究開発プロジェクトデータ連携部会, 東京大学） パネリスト：初井 宇記（理化学研究所）/ 庄司 哲也（トヨタ自動車株式会社）/ 渡邊 千鶴（理化学研究所）/ 泰岡 頌治（慶應義塾大学）/ 今田 正俊（早稲田大学, 豊田理化学研究所）/ 茂本 勇（産応協, ダイキン工業株式会社）
17:15-17:30	展示（HPCI利用相談、情報交換会）

*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K22	
会議名称	第42回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD) ワークショップ (共催)
日時	令和5年2月20日(月) ~ 2月24日(金)
場所	オンライン開催

コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ
LIVE! ONLINE 講習

第42回 コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ
42nd Computational Materials Design(CMD®) Workshop

ナノサイエンス・ナノテクノロジー・学際教育研究訓練プログラム ナノマテリアルズ・ナノデバイスデザイン学 2023年春季集中講義・実習 — Spring 2023

本コース希望者は、下記参加条件と事前準備を満たすように各自のPCのセットアップができることを必須とします。
 X Window Systemを含めたLinux環境及びPCを各自で準備できる方 (実習は阪大ナノセンターのPCクラスターで行います。公開鍵認証が必須。)
 受講のためWeb会議システムでアクセスできる方 (Cisco Webexを基本とする。)
 チャットツールSlackにアクセスできる方
 WebexやSlackは参加決定者をごちから招待いたしますので、事前にアカウントを作っておいただく必要はありません。
 CMDワークショップ オンライン受講環境準備: [PDFダウンロード](#)

Those who can prepare a PC and install Linux environment including X Window System by yourselves.
 (The hands-on will be conducted using the PC cluster at INSD, Osaka University. Public key authentication must be required.)
 Those who can access to the web conference system to participate the lectures and hands-on. (We mainly use Cisco Webex.)
 Those who can access to Slack (business communication tool).

The confirmed participants will be invited to the Webex meeting and Slack workspace, so it is not necessary to create an account in advance.
[Preparation_Linux_Download](#)

開催期間 (WHEN): 2023年2月20日(月) ~ 2月24日(金) (20th February - 24th February, 2023)

場 所 (VENUE): Online 講習

定 員 (MAX.PARTICIPANTS): 40名程度 (40 participants)

申し込み書記載内容による選考があります

(Participants will be considered based on the essay content written in the application form.)

参加費 (EXPENSES): 受講費無料 (No registration fee)

申込期限 (APPLICATION DEADLINE):

活動報告 K23

会議名称	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会（講演・ポスター発表）
日時	令和5年3月7日(火) 9:30～18:00、8日(水) 9:30～17:45
場所	オンライン開催

DAY1 03/07(火) program		
タイムスケジュール	時間	プログラム
9:30～9:40	10分	オープニング（文部科学省・領域総括）
9:40～9:50	10分	事務連絡
AI・データ科学セッション Part 1 -MDとAI・データ科学-		
9:50～9:55	05分	趣旨説明：チェア（領域総括 常行 真司 氏）
9:55～11:55	120分	（講演20分×4本）+質疑応答・ディスカッション（40分） ・埼玉大学 松永 康佑 氏（ライブ） ・統計数理研究所 吉田 亮 氏（材料） ・慶應義塾大学 泰岡 顕治 氏（材料） ・ENEOS㈱ 小瀧 浩毅 氏（材料）
11:55～13:00	65分	昼休憩
ポスターセッション <次世代研究者>		
13:00～13:05	05分	趣旨説明：チェア
13:05～13:10	05分	投票方法の説明、誘導
13:10～14:10	60分	Aグループ（20名）：フラッシュトーク、ポスター発表
14:10～15:10	60分	Bグループ（19名）：フラッシュトーク、ポスター発表
15:10～15:20	10分	休憩・投票
「富岳」高度化セッション Part 1 -チューニング/アルゴリズムの高度化-		
15:20～15:25	05分	趣旨説明：チェア（領域総括 高橋 桂子 氏）
15:25～17:55	150分	（講演20分×5本）+質疑応答・ディスカッション（50分） ・筑波大学 吉川 耕司 氏（宇宙素粒子） ・ジャパンメディカルデバイス㈱ 千葉 修一 氏（ライブ） ・東京大学 藤田 航平 氏（防災・減災） ・理化学研究所 奥野 恭史 氏（ライブ） ・物質材料研究機構 山地 洋平 氏（材料）
17:55～18:00	05分	事務連絡

DAY2 03/08(水) program		
タイムスケジュール	時間	プログラム
9:30～9:35	05分	事務連絡
「富岳」高度化セッション Part 2 -大規模並列処理/広い意味でのI/O-		
9:35～9:40	05分	趣旨説明：チェア（領域総括 朴 泰祐 氏）
9:40～12:10	150分	（講演20分×5本）+質疑応答・ディスカッション（50分） ・東京大学 岡崎 進 氏（材料） ・理化学研究所 金森 逸作 氏（宇宙素粒子） ・名古屋大学 前山 伸也 氏（宇宙素粒子） ・東京大学 加藤 千幸 氏（ものづくり） ・電気通信大学 山崎 匡 氏（ライブ）
	60分	昼休憩
AI・データ科学セッション Part 2 -設計とAI・データ科学-		
13:10～13:15	05分	趣旨説明：チェア（領域総括 常行 真司 氏）
13:15～14:45	90分	（講演20分×3本）+質疑応答・ディスカッション（30分） ・東北大学 下山 幸治 氏（ものづくり） ・九州大学 草場 彰 氏（材料） ・産業技術総合研究所 三宅 隆 氏（材料）
14:45～15:00	15分	休憩
AI・データ科学セッション Part 3 -流体・乱流とAI・データ科学/学習・人工知能-		
15:00～15:05	05分	趣旨説明：チェア（領域総括 藤井 孝龍 氏）
15:05～17:05	120分	（講演20分×4本）+質疑応答・ディスカッション（40分） ・神戸大学 坪倉 誠 氏（ものづくり） ・大阪大学 和田 成生 氏（ライブ） ・海洋研究開発機構 中野 満寿男 氏（防災・減災） ・東京医科歯科大 宮野 悟 氏（ライブ）
次世代研究者賞 授与式		
17:05～17:15	10分	次世代研究者賞 発表、授与式
17:15～17:35	20分	受賞者講演（10分×2）
17:35～17:45	10分	クロージング（領域総括）
		アンケート記入

活動報告 K24

会議名称	「富岳」電池課題 第 21 回実施者会議
日時	令和 5 年 3 月 22 日(水) 15:00 ~ 17:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題成果取りまとめについて 2. 文部科学省事後評価ヒアリング説明について 3. その他

(2) 学会等発表実績

[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載

項番	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
1	Theoretical prediction of pH-dependent electronic spectra in aqueous solution: A combinational application of QM/MM calculations and constant-pH simulations with configuration-selection scheme	Carlos Bistafa, Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka	Chem. Phys. Lett. 798 , 139624 (2022).	令和4年4月	国外
2	Atomistic insight into the dopant impacts at the garnet $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ solid electrolyte grain boundaries	Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	J. Mater. Chem. A, 10 , 10083 (2022).	令和4年4月	国外
3	Structures of liquid and aqueous water isotopologues at ambient temperature from ab initio path integral simulations	Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	Phys. Chem. Chem. Phys. 24 , 10851 (2022).	令和4年4月	国外
4	不均一系における物質輸送に関する分子論的研究の展開	永井哲郎、岡崎進	アンサンブル（分子シミュレーション学会誌） 24 , 160-166 (2022).	令和4年7月	国内
5	Global diffusion of hydrogen molecules in the heterogeneous structure of polymer electrolytes for fuel cells: Dynamic Monte Carlo combined with molecular dynamics calculations	Tetsuro Nagai, Susumu Okazaki	J. Chem. Phys. 157 , 054502 (2022).	令和4年7月	国外
6	All-atomistic molecular dynamics study of the glass transition of amorphous polymers	Zhiye Tang, Susumu Okazaki	Polymer, 254 , 125044 (2022).	令和4年7月	国外
7	Artificial neural network-based path integral simulations of hydrogen isotope diffusion in palladium	Hajime Kimizuka, Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	J. Phys. Energy 4 , 034004 (2022).	令和4年7月	国外

項番	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
8	Favorable Role of the Metal-Support Perimeter Region in Electrochemical NH ₃ Synthesis: A Density Functional Theory Study on Ru/BaCeO ₃	Atsushi Ishikawa, Fumiya Murase, Yoshitaka Tateyama, Junichiro Otomo	ACS Omega 7 , 26107–26115 (2022).	令和 4年 7月	国外
9	Tuning the Electronic, Ion Transport, and Stability Properties of Li-rich Manganese-based Oxide Materials with Oxide Perovskite Coatings: A First-Principles Computational Study	Zizhen Zhou, Dewei Chu, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama, Claudio Cazorla	ACS Appl. Mater. Interfaces 14 , 37009–37018 (2022).	令和 4年 8月	国外
10	Path integral Brownian chain molecular dynamics: A simple approximation of quantum vibrational dynamics	Motoyuki Shiga	J Comput Chem 43 , 1864–1879 (2022).	令和 4年 8月	国外
11	Effect of Nitrogen Doping and Oxygen Vacancy on the Oxygen Reduction Reaction on the Tetragonal Zirconia (101) Surface	Shibghatullah Muhammady, Jun Haruyama, Shusuke Kasamatsu, Osamu Sugino	J. Phys. Chem. C 126 , 15662–15670 (2022).	令和 4年 9月	国外

項番	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
12	Theoretical Consideration of Side Reactions between the VS ₄ Electrode and Carbonate Solvents in Lithium-metal Polysulfide Batteries	Satoshi Hagiwara, Jun Haruyama, Minoru Otani, Yuki Uemura, Tomonari Takeuchi, Hikari Sakaebe	Electrochemistry 90 , 107002 (2022).	令和4年9月	国内
13	High-Throughput Data-Driven Prediction of Stable High-Performance Na-Ion Sulfide Solid Electrolytes	Seong-Hoon Jang, Yoshitaka Tateyama, Randy Jalem	Adv. Funct. Mater. 32 , 2206036 (2022).	令和4年9月	国外
14	Development of a dielectrically consistent reference interaction site model combined with the density functional theory for electrochemical interface simulations	Satoshi Hagiwara, Satomichi Nishihara, Fumiaki Kuroda, Minoru Otani	Phys. Rev. Mater. 6 , 093802 (2022).	令和4年9月	国外
15	(Pyridylamido)Hf(IV)-Catalyzed 1-Octene Polymerization Reaction Interwoven with the Structural Dynamics of the Ion-Pair-Active Species: Bridging from Microscopic Simulation to Chemical Kinetics with the Red Moon Method	Nana Misawa, Kentaro Matsumoto, Yuichi Suzuki, Soumen Saha, Nobuaki Koga, Masataka Nagaoka	J. Phys. Chem B, 127 , 1209-1218 (2023).	令和5年1月	国外

項 番	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学 会誌・雑誌等名）	発表 した 時期	国 内 ・ 外 の 別
16	Accurate description of hydrogen diffusivity in bcc metals using machine-learning moment tensor potentials and path-integral methods	Hyukjoon Kwon, Motoyuki Shiga, Hajime Kimizuka, Takuji Oda	Acta Mater. 247 , 118739 (2023).	令和 5年 1月	国 外

[2] 学会等における招待講演・口頭発表・ポスター発表

① 招待講演

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
第一原理計算による蓄電池界面現象の見える化	館山 佳尚	電気化学会電池技術委員会 新電池構想部会第116回講演会 オンライン	令和4年 4月	国内
電気化学界面シミュレーション技術の発展と産学連携	大谷 実	第24回理論化学討論会	令和4年 5月	国内
STATISTICAL MECHANICS THEORY OF BIOMOLECULAR SOLVATION	Norio Yoshida	25th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE25) Khon Kaen University, Thailand.	令和4年 6月	国外
The Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems - The Red Moon Approach	Masataka Nagaoka	12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2020) Vancouver, Canada	令和4年 7月	国外
Chloride's Allosteric Regulation of Hemoglobin by Time Series Clustering Method	Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka	12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2020) Vancouver, Canada	令和4年 7月	国外
Ion and Electron Transfer at Solid-Solid Interface: DFT Calculation Study with Explicit Interface Model	Yoshitaka Tateyama	23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI-23)	令和4年 7月17 日-22日	国外

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
イオン伝導度の粒子系理論計算の最先端	館山 佳尚	第16回固体イオニクス セミナー オンライン	令和4年 8月7日 -9日	国内
密度汎関数法と溶液論のハイブリッド法を用いた電気二重層キャパシタの電極界面シミュレーション	大谷 実	2022年電気化学秋季大会	令和4年 9月	国内
電気化学界面における化学反応路探索	大谷 実	シンポジウム化学反応経路探索のニューフロンティア	令和4年 9月	国内
固液界面における電気化学反応シミュレーション技術の開発と応用	大谷 実	第130回触媒討論会	令和4年 9月	国内
トポロジカルデータ解析を活用した実材料の性能予測	赤木 和人	日本応用数理学会 2022年度年会	令和4年 9月	国内
カーボンニュートラル社会の実現に向けた電池材料の最先端計算・データ科学と「富岳」の活用	館山 佳尚	スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー 2022秋	令和4年 9月	国内
スパコンがもたらす蓄電池現象の新たな理解	館山 佳尚	第8回大型実験施設とスーパーコンピューターとの連携シンポジウム	令和4年 9月	国内
第一原理計算による全固体電解質のイオン伝導解析	館山 佳尚	第83回応用物理学会秋季学術講演会	令和4年 9月20日-23日	国内
Battery Electrolyte Exploration via Machine Learning Techniques Coupled with High-Throughput DFT Calculations	Yoshitaka Tateyama	73rd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (73rd ISE) online	令和4年 9月12日-16日	国外
白金は何故高活性なのか	杉野 修	第13回宿泊セミナー	令和4年 11月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
酸化物電極の触媒活性の計算予測	杉野 修	電気化学会九州支部シン ポジウム	令和4年 11月	国内
Molecular Solvation Theory for Material Design	Norio Yoshida	2022 International Conference on Materials Research and Innovation (4th ICMARI) The Emerald Hotel, Bangkok, Thailand	令和4年 12月	国外
Theoretical Study of Hydrogenation Process of CO ₂ on Metal Catalysts	Yoshitada Morikawa	Surface Science Discussion 2023, Modern trends in surface science studies, Organized by NanoBioMedical Center, Adam Mickiewicz University in Poznan, Poland Online	令和5年 1月17 日-18日	国外
A Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems: Red Moon Approach	Masataka Nagaoka	Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) Quy Nhon, Vietnam	令和5年 2月	国外
Topological Data Analysis for Computational Materials Science - A powerful tool to quantify the "shape" in data -	Kazuto Akagi	42nd Computational Materials Design (CMD®) Workshop オンライン	令和5年 2月	国内
シミュレーションデータのマイクロな 「形」とマクロなイオン挙動をつなぐ	赤木 和人	第2回計算イオニクス研 究会（第83回固体イオ ニクス研究会）	令和5年 3月	国内

② 口頭発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
Topological network analysis of thin ionomer membranes	Kazuto Akagi	AIMR-Cambridge Workshop on Theoretical, Mathematical, Data-Driven Approaches in Materials Science	令和4年 4月	国内
GPU を用いた配置選択定 pH 法 (CS-CpH) の高速化と応用	田中 佑一, 近藤 宙暉, 稲垣 泰一, 長岡 正隆	第24回理論化学討論会 ハイブリッド開催（金沢商工会議所）	令和4年 5月	国内
位置に依存する拡散係数とポテンシャルを持つ拡散方程式に従う分子の軌跡を生成する動的モンテカルロ法の新規アルゴリズム	岡崎 進	第24回理論化学討論会、金沢商工会議所（金沢市）	令和4年 5月	国内
3D-RISM 理論を基盤としたマルチスケール手法の開発と展開	吉田 紀生	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム	令和4年 5月	国内
Pt 表面の H ₂ O 吸着層構造の第一原理計算による解析	春山 潤, 杉本 敏樹, 杉野 修	物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の展開」	令和4年 5月	国内
Standard Electrochemical Potential Analysis Based on DFT Interface Calculation: Microscopic Electrochemistry Framework	Yoshitaka Tateyama	31st Topical Meeting of the ISE: Theory and Computation in Electrochemistry	令和4年 5月15日 -19日	国外
高分子電解質膜におけるガス透過の分子シミュレーション研究	永井 哲郎, 岡崎 進	令和4年度九州地区高分子若手研究会・夏の講演会（オンライン）	令和4年 7月	国内
Gas transportation in inhomogeneous systems studied using large-scale molecular dynamics simulation and dynamic Monte Carlo method	Tetsuro Nagai, Susumu Okazaki	the 37th International Conference on Solution Chemistry (online)	令和4年 7月	国外

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
Tuning Oxygen Reduction on Monoclinic and Tetragonal Zirconia Surfaces Using Oxygen Vacancy and Nitrogen Doping: A Density-Functional Study	Shibghatullah Muhammady	ECS Meeting	令和4年 7月	国外
Influence of nitrogen dopants and oxygen vacancies on oxygen reduction on tetragonal zirconia (101) surface: A first-principles study	Shibghatullah Muhammady, Jun Haruyama, Shusuke Kasamatsu, Osamu Sugino	The IUPAP 33rd Annual Conference on Computational Physics (CCP2022)	令和4年 8月	国外
Adsorption Energies and Vibrational Properties of Water Adsorption Layer on Pt(111) Surface	Jun Haruyama, Toshiki Sugimoto, Osamu Sugino	Psi-k conference	令和4年 8月	国外
DFT based ion transfer across interface in battery and microscopic electrochemistry concept	Yoshitaka Tateyama	Psi-k 2022	令和4年 8月22日 -25日	国外
化学反応と分子シミュレーション —素反応から複合反応へ、そして実在 反応系へ—	長岡 正隆	第16回分子シミュレーション スクール（岡崎コンファレンスセン ター）	令和4年 9月	国内
多孔性配位高分子（PCP/MOF）ナノ細 孔内重合が与える高分子鎖配向状態の 理論的解析	饒 子禎, 高柳 昌芳, 長岡 正 隆	第16回分子科学討論 会 慶應義塾大学矢上キャン パス	令和4年 9月	国内
高分子電解質膜中で生じるガスの輸送 に関する大規模分子動力学計算と動的 モンテカルロ法による研究	永井 哲郎, 岡 崎 進	第16回分子科学討論 会, 慶應義塾大学矢上 キャンパス（横浜市）	令和4年 9月	国内
大規模分子動力学計算と拡散方程式を 満たす動的モンテカルロ法の組み合わせによる高分子電解質膜中のガス透過 の研究	永井 哲郎, 岡 崎 進	日本物理学会 2022年 秋季大会、東京工業大 学（大岡山）	令和4年 9月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
高分子電解質膜で生じる物質輸送の大規模分子動力学計算と動的モンテカルロ法による解明	永井 哲郎, 岡崎 進	第 71 回高分子討論会、北海道大学（札幌市）	令和 4 年 9 月	国内
Tuning Oxygen Reduction on Monoclinic and Tetragonal Zirconia Surfaces Using Oxygen Vacancy and Nitrogen Doping: A Density-Functional Study	Shibghatullah Muhammady	日本物理学会年次秋季大会	令和 4 年 9 月	国内
First-principles approach of oxygen reduction on tetragonal zirconia (101) surface: Influence of nitrogen doping and oxygen vacancy	Shibghatullah Muhammady, Jun Haruyama, Shusuke Kasamatsu, Osamu Sugino	日本物理学会 2022 年 秋季大会	令和 4 年 9 月	国内
Li イオン電池正極材料 LiCoO ₂ の充放電過程における構造変化に関する研究：クラスター展開とベイズ最適化の複合的アプローチ	黒田 文彬, 萩原 聡, 大谷 実	日本物理学会秋季大会	令和 4 年 9 月 6 日- 8 日	国内
密度汎関数法+古典溶液理論による層状粘土鉱物のカチオン吸着構造と水和構造の研究	萩原 聡, 安藤康信, 後藤 佑太, 篠木 進, 大谷 実	日本物理学会秋季大会	令和 4 年 9 月 6 日- 8 日	国内
分子シミュレーションに基づいた溶解拡散モデルの再考	岡崎 進	第 44 回溶液化学シンポジウム、鹿児島大学（鹿児島市）	令和 4 年 10 月	国内
高分子電解質膜におけるガス輸送の分子動力学計算と新規な動的モンテカルロ法による研究	永井 哲郎	第 44 回溶液化学シンポジウム、鹿児島大学（鹿児島市）	令和 4 年 10 月	国内
分子動力学計算と新規モンテカルロ法による不均一系における物質輸送の研究	永井 哲郎	第 44 回溶液化学シンポジウム、鹿児島大学（鹿児島市） プレシンポジウム	令和 4 年 10 月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
新規動的モンテカルロ法の多粒子系への展開—溶解拡散モデルの検証	岡崎 進	第36回分子シミュレーション討論会、東京工業大学（大岡山）	令和4年 12月	国内
全原子分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS の開発ならびにそれを用いた MD 計算と動的 MC 計算の組み合わせによる燃料電池高分子電解質膜中の物質輸送の研究	岡崎 進	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
ドーピングされた炭素系電極触媒の構造と燃料電池電極界面反応	森川 良忠	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
非白金電極材料の計算予測	杉野 修	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
NIMS データプラットフォームを介した「富岳」計算データの利活用	赤木 和人	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
電極/電解液界面における反応解析手法の開発と「富岳」を用いたシミュレーション技術の社会実装	大谷 実	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
二次電池電極界面構造の充電電位依存性と力学特性の研究	長岡 正隆	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内
第一原理 MD を用いた蓄電池のイオン伝導計算手法の開発と応用	館山 佳尚	「富岳」電池課題第3回公開シンポジウム（成果報告会） ハイブリッド開催	令和5年 1月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
Histidine Protonation State Regulates the Structural Stability of R state Hemoglobin	四谷 悠, 田中 美帆, 北村 勇 吉, 長岡 正隆	Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC- 10), Quy Nhon, Vietnam	令和5年 2月	国外
First-principles study of second- order nonlinear susceptibility of water adsorption layer on Pt(111) surface	Jun Haruyama, Toshiki Sugimoto, Osamu Sugino	APS March Meeting 2023	令和5年 3月	国外
全原子分子動力学シミュレーションソ フト MODYLAS の開発	岡崎 進	第2回「富岳」成果創出 加速プログラム 研究 交流会 オンライン	令和5年 3月	国内
Analysis of Massive Molecular Dynamics Simulation Based on Topological Data Analysis	Gao Xichan, Kazuto Akagi	第70回 応用物理学会 春季学術講演会 東京／ハイブリッド	令和5年 3月	国内
Pt(111)/表面 H ₂ O 吸着層の二次非線 形感受率の第一原理計算	春山 潤, 杉本 敏樹, 杉野 修	日本物理学会 2023 年 春季大会	令和5年 3月	国内
機械学習による交換相関汎関数の構築	永井 瞭	日本物理学会 2023 年 春季大会	令和5年 3月	国内

③ ポスター発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・ 外 の別
Li イオン電池における SEI 膜の力学的特性に対する電極電位の影響	近藤 宙暉, 川瀬 智元, 田中 佑一, 長岡 正隆	第 24 回理論化学討論会 ハイブリッド開催（オンライン）	令和 4 年 5 月	国内
(Pyridylamido)Hf 触媒による連鎖移動型オレフィン共重合の全原子シミュレーション：モノマー挿入に対する触媒とポリマーの立体効果	八十島 克尚, 三澤 奈々, 鈴木 雄一, 長岡 正隆	第 24 回理論化学討論会 ハイブリッド開催（オンライン）	令和 4 年 5 月	国内
Electron and Ion Transfer at Solid-Solid Interface: DFT-based Electrochemistry with Explicit Interface Model	Yoshitaka Tateyama	IMLB 2022	令和 4 年 6 月 26 日-7 月 1 日	国外
(Pyridylamido)Hf 触媒と Bis(phenoxy-imine)Zr 触媒による可逆的連鎖移動重合の全原子シミュレーション：触媒構造変化とその反応性への影響	藤田 雅也, 八十島 克尚, 鈴木 雄一, 古賀 伸明, 長岡 正隆	第 16 回分子科学討論会 慶應義塾大学矢上キャンパス	令和 4 年 9 月	国内
ESM-RISM 法を実装した Quantum ESPRESSO の高度化	大谷 実, 本山 裕一, 萩原 聡, 吉見 一慶	日本物理学会秋季大会	令和 4 年 9 月 6 日 -8 日	国内
Li イオン電池における SEI 膜の力学的特性に対する電極電位依存性	近藤 宙暉, 川瀬 智元, Sakaki Nisrine, 田中 佑一, 長岡 正隆	第 36 回分子シミュレーション討論会 ハイブリッド開催（オンライン）	令和 4 年 12 月	国内
GPU を用いた配置選択定 pH 法 (CS-CpH) の高速化と応用	稲垣 風花, 北村 勇吉, 四谷 悠, 長岡 正隆	第 36 回分子シミュレーション討論会 ハイブリッド開催（オンライン）	令和 4 年 12 月	国内

Histidine Protonation State Regulates the Structural Stability of R state Hemoglobin	四谷 悠, 田中美帆, 北村 勇吉, 長岡 正隆	Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10), Quy Nhon, Vietnam	令和5年 2月	国外
Research for lithium-ion battery applications based on genetic algorithm parameterized force field and topological data analysis	Gao Xichan, Kazuto Akagi	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和5年 3月	国内
ハイスループットスクリーニングが引き出す高性能固体電解質の材料探索	Seong-Hoon Jang	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和5年 3月	国内
大規模分子動力学計算による燃料電池触媒層の物質輸送機構解明	湯 之也	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和5年 3月	国内
量子・古典融合理論と反応経路自動探索法を組み合わせた電気化学界面シミュレーション手法の開発	萩原 聡	第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和5年 3月	国内

[3] プレス発表
特になし。

(3) 特許出願状況

補助事業名

「富岳」成果創出加速プログラム

次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究

代表機関名

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

実施 年度	発明の名称	発明者	出願登録 区分	出願番号 (出願日)	出願区分	出願国	登録番号 (登録日)	メモ
04	なし							