

令和5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
「物理-化学連携による持続的成長に向けた
高機能・長寿命材料の探索・制御」
成果報告書

令和6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5年度（報告年度）の実施内容	1
2-1. 当該年度（令和5年度）の事業実施計画	1
2-2. 実施内容（成果）	7
(1) 研究開発	7
A) 電池・触媒材料	7
B) 磁性材料	27
C) 高分子材料	36
D) 構造材料	45
E) AI・データ科学	51
(2) プロジェクトの総合的推進	54
2-3. 活動（研究会の活動等）	56
2-4. 実施体制	58
別添 学会等発表実績	61
(1) 活動報告	61
(2) 学会等発表実績	81
[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載	81
[2] 国際会議・シンポジウムにおける招待講演・口頭・ポスター発表	84
① 招待講演	84
② 口頭発表	93
③ ポスター発表	102
[3] プレス発表	109
(3) 特許出願状況	110

補助事業の名称

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

(次世代超高速電子計算機システム利用の成果促進)

「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」

体系的番号： JPMXP1020230325

1. 補助事業の目的

電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野について、ミクロスケールからの材料開発ブレークスルーを目指し、物理・化学の基本原理に立脚した「富岳」を最大限活用する計算/データ科学研究を実行することで、世界最高水準の基礎研究遂行と我が国の産業競争力強化への貢献を達成する。

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、国立大学法人筑波大学 計算科学研究センター、国立大学法人山形大学 学術研究院、国立大学法人北海道大学 大学院理学研究院、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東京大学 大学院工学系研究科、国立大学法人大阪大学 大学院基礎工学研究科、学校法人慶應義塾、学校法人関西大学、国立大学法人東北大学 金属材料研究所、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研究課題を実施する。

2. 令和5年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和5年度）の事業実施計画

令和2年度-令和4年度「富岳」成果創出加速プログラムにて開発・「富岳」向けに高度化したアプリケーションソフトウェアを利活用し、電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野について、ミクロスケールからの材料開発ブレークスルーを目指し、「富岳」を最大限活用する物理-化学の基本原理に立脚した計算/AI・データ科学研究を実行することで、世界最高水準の基礎研究を遂行しつつ、産業界との連携による我が国の産業競争力強化と Society 5.0・カーボンニュートラル社会の実現貢献に取り組む。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。以下に令和5年度の具体的な事業内容について記載する。

(1) 研究開発

本研究課題は、電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野を対象としており、これらの材料開発には重要な共通点がある。それは準安定状態と熱平衡状態であり、材料の準安定状態を機能の発現に用いている場合が多い。例えば蓄電池の充電は電気エネルギーにより材料を不安定化させることで蓄えられる一種の励起エネルギーが放電時に使われる。この高機能準安定状態は外部刺激等がなければ速度論的に保持されるものの、次第に熱平衡状態に向かって変化する。これは度々劣化・破壊といった現象として現れ、高機能材料の寿命制御・長寿命化には解明が必要な現象である。この「準安定と熱平衡」という熱力学的・速度論的視点と「高機能と長寿命」という産業的視点の両者を包括的に取り扱う課題を、サブ課題として以下のとおり設定している。

A) 電池・触媒材料

蓄電池・電極触媒をミクروسケールで見た場合、共に表面・界面反応が重要な役割を果たし、基本的に電気化学反応によってエネルギーの授受が行われる。いずれの場合も反応サイトや表面・界面構造の変化が反応性（機能）や劣化（寿命）に大きく関わっている。その制御のために界面被膜・コート層導入が行われているがそのメカニズムにはまだ不明な点が多い。また反応物・生成物（イオンや分子）が反応場である表面・界面まで・界面から、どのように拡散するかといった物質輸送の問題も存在する。そのため、速度論的アプローチと熱平衡アプローチの両方面から研究開発を進めていく。

令和5年度においては、以下の6項目について、それぞれの項目に示す成果を目指して研究を遂行する。

①次世代蓄電池（主に全固体電池）の電極・電解質界面の準安定状態サンプリングと構造・電子状態データの解析

ヘテロ界面 CALYPSO 法等を用いた電極材料-コート層-固体電解質界面の準安定構造探索を様々な系で実行し、Li 原子の安定性、界面反応性および界面電子状態に関する統一的理解を推進する。

②DFT レベル MD による固体電解質の拡散係数・イオン伝導度のハイスループット計算の実行

固体電解質の安定性解析コードをさらに効率化し、多様な固体電解質群の拡散係数ハイスループット計算を実行することで、固体電解質内のイオン伝導度を支配する記述子の理解をより高度化する。

③CONQUEST におけるマルチサイト法による大規模第一原理計算の速度検証と効率化

金属ナノ粒子触媒の大規模第一原理計算にはマルチサイト法を用いる必要があり、CONQUEST に実装されているマルチサイト法の効率化へ向けて「富岳」での速度検証を行う。

④ESM-RISM における、NEB 計算と MD 計算の電圧制御コードの速度検証と効率化・同一の化学組成式を持つ材料に対する格子振動効果を含む自由エネルギー計算検証

電気化学界面における反応機構及び電極劣化機構の解明に向けて、ESM-RISM 法と電圧制御した NEB 法を組み合わせた計算法を Quantum ESPRESSO に実装し、その計算速度検証と効率化を行う。動作に問題がなければ、実際の電気化学反応に応用し、その実用性を示す。自由エネルギー検証では、電極材料に対するフォノン計算を行い、有限温度での振動効果が電極構造の安定性に与える影響を調べる。また、CE+B0 法による振動効果を含む自由エネルギー凸包計算プログラムの開発を行う。

⑤abICS フレームワークへの超並列モンテカルロ計算（population annealing）実装・イオン伝導体バルクおよび界面のイオン分布の解析

不規則材料に対応した abICS の高度化と電池材料への適用に向けて、Population annealing 法を abICS に実装し、超並列実行が可能か検証を行い、並列性能の評価を行う。また、これを用いたイオン伝導体バルクおよびその界面の統計熱力学シミュレーションを実施し、イオン分布の解析を行う。

⑥ハイスループット計算の実行による触媒表面吸着データの蓄積

表面及び吸着構造モデルに対するハイスループット量子化学計算により、表面吸着電子構造データベースを作成する。また、次年度以降の高精度及び大規模計算に向けて、分割統治計算プログラムの「富岳」向けの整備を行う。

(研究協力機関：国立大学法人筑波大学 計算科学研究センター、国立大学法人山形大学 学術研究院、国立大学法人北海道大学 大学院理学研究院)

B) 磁性材料

磁性材料には、磁化、キュリー温度、磁気異方性、スピン偏極率、輸送係数等の様々な物理量を目的変数とした材料設計が求められる。また、磁性材料にはレアアースやコバルト等の希少金属が用いられるため、資源リスクを考慮する必要がある。本サブ課題では、AkaiKKR コードを用いたハイスループット第一原理計算を実行し、データ科学も活用して上記の問題に取り組む。

令和5年度においては、以下の3項目について、それぞれの項目に示す成果を目指して研究を遂行する。

①磁性体の第一原理計算手法の高度化、永久磁石材料のデータ創出

第一原理計算により遷移金属合金の計算を実行する。組成、磁気構造などを変えた系統的計算を行い、全エネルギー、磁気モーメント、キュリー温度のデータを創出する。

②スピントロニクス材料の電気抵抗率を対象としたハイスループット計算とデータ蓄積

AkaiKKR コードを用いたハイスループット計算の高度化を行い、物性ビッグデータを自動創出する。また、フォノンやマグノンの影響を考慮するための計算手法の開発を行い、スピントロニクス材料をターゲットとしたユニークなデータベースを構築する。

③磁気メモリ材料における有限温度の磁気・伝導特性を定量的に評価する手法の開発

第一原理計算を用いた時期メモリ材料の特性データ創出の一環として、磁気メモリ材料の設計に向け、デバイス動作温度における物性の予測を行う。特に、有限温度磁性や電気伝導特性の予測手法の開発を行う。また、ヘテロ界面構造を用いた磁気メモリ材料における有限温度の磁気抵抗比を定量的に評価する手法を開発する。

(研究協力機関：国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東京大学 大学院工学

系研究科)

C) 高分子材料

高分子材料の劣化は、加水分解などの分解反応が起こりうる官能基の周辺または界面への水のような不純物の侵入や外部からの強い剪断応力の印加によって引き起こされる。そのため、高分子材料の長寿命化には、劣化要因となる不純物の侵入の阻害や金属などの異種材料との接触界面における破壊の抑制が必要となる。現実の材料開発は化学合成に基づいており、また、実用に供される高分子材料はしばしばアモルファスの準安定状態にある。そこで、化学的手法と相性の良い全原子モデルを用いて準安定状態をモデリングするとともに異種分子の侵入や界面の破壊を解析し、劣化をもたらす分子間相互作用を同定することにより、高分子材料の長寿命化の課題に取り組む。

令和5年度においては、以下の3項目について、それぞれの項目に示す成果を目指して研究を遂行する。

①エステルなどの分子内サイト近傍に対する水の侵入の全原子自由エネルギー解析

高分子集合系に侵入し劣化の要因となりうる不純物（水やガス、イオン）など小分子の溶解および吸着の自由エネルギーを、高分子を構成する原子団に沿って空間を分割した上で計算し、小分子の侵入を規定する分子間相互作用成分を検討する。

②機械学習を用いた高分子内における水分子の長時間ダイナミクス解析

高分子内における水分子の分子動力学シミュレーションを実施し、その短時間の時系列データを用いてGANを取り入れた機械学習MD-GANを活用して、長時間ダイナミクスを解析する。

③低分子溶液や油脂の溶解自由エネルギーを計算する。また、高分子鎖が溶液に溶けた状態の安定性の解明

高分子が低分子溶液または油脂に溶けた際の安定性の自由エネルギーを計算する。自由エネルギー計算にはエネルギー表示法や熱力学的積分法を用いる。自由エネルギーを要素に分割することで安定化の分子論を解明する。

(研究協力機関：国立大学法人大阪大学 大学院基礎工学研究科、学校法人慶應義塾、学校法人関西大学)

D) 構造材料

高性能なジェットエンジンや高効率な発電所などの過酷な環境下においても安全性を担保できる高機能な構造材料が強く求められている。特に、耐腐食性や疲労限度は構造材料の信頼性や寿

命に強く関わる重要な要素であり、性能の向上が求められている。また、構造材料の破壊・腐食は、応力負荷、環境因子、化学反応などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象であり、ミクロスケールの化学反応からメソスケールの材料組織構造が関与するマルチスケール現象である。この破壊・腐食について原子スケールのメカニズムの解明に取り組む。

令和5年度においては、以下の2項目について、それぞれの項目に示す成果を目指して研究を遂行する。

①構造材料の応力腐食割れメカニズムの解析

構造材料の劣化現象の解明に向けて、構造材料の応力腐食割れシミュレーション用に化学反応に対応したニューラルネットワークポテンシャルを構築するとともに、構築したニューラルネットワークポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションにより、構造材料の応力腐食割れメカニズムの解析を実施する。

②構造材料変形・破壊解析用 NN 原子間相互作用の構築

構造材料の寿命予測に向けて、構造材料として広く用いられている鉄を対象として、転位の運動・核生成による変形および粒界やき裂先端を起点とした破壊過程に、環境因子として水素の影響を包括的に取り扱うことのできる高精度ニューラルネットワーク原子間相互作用を構築し、その高速化と繰り返し応力下での転位運動解析のため繰り返し応力下での転位の運動を原子レベルでシミュレートする。

(研究協力機関: 国立大学法人東北大学 金属材料研究所、国立大学法人大阪大学 大学院基礎工学研究科)

E) AI・データ科学

本研究課題では、高分子、溶液、アモルファス、多結晶といった単結晶以外の材料状態に対する計算ビッグデータ創出とデータ科学手法の適用による高機能・長寿命材料の提案や記述子抽出に取り組むが、これらの非結晶系では特徴量の定義がまだ自明ではない。そこで、大規模 MD 計算やハイスループット計算と機械学習とを橋渡しするトポロジカルデータ解析（トポロジカルな構造記述子を設計）に取り組む。これを用いることで、熱平衡状態周辺での準安定状態の分布の定量化や、劣化の進行・破壊の前兆に対応する構造変化の抽出などを行う。

令和5年度においては、以下に示す成果を目指して研究を遂行する。

①高分子材料の引張破壊の詳細解析と電極・電解質界面の安定状態サンプリングの支援

トポロジカルデータ解析（TDA）により藤本グループの高分子鎖の引張破壊 MD 計算データを詳細解析し、破壊の前兆や起点となる構造変化を抽出する。また、館山グループの電極・電解質界面を対象として位相的特徴量空間における MD データの分布を調べ、準安定状態の同定を行う。

(研究協力機関：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との連携・調整にあたる。

電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野における国内外の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を企画・実施する。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)、MateriApps (物質科学シミュレーションのポータルサイト)、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) などとの連携を通して、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。

研究推進での計算資源の効率的な利活用のため「富岳」計算資源のマネジメント、さらに HPCI システム等の計算資源追加の検討・調達を実施する。

(研究協力機関：国立大学法人筑波大学 計算科学研究センター、国立大学法人山形大学 学術研究院、国立大学法人北海道大学 大学院理学研究院、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東京大学 大学院工学系研究科、国立大学法人大阪大学 大学院基礎工学研究科、学校法人慶應義塾、学校法人関西大学、国立大学法人東北大学 金属材料研究所、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2年度-令和4年度「富岳」成果創出加速プログラムにて開発・「富岳」向けに高度化したアプリケーションソフトウェアを利活用し、電池・触媒材料、磁性材料、高分子材料、構造材料の4つの材料分野について、「富岳」を最大限活用する物理-化学の基本原理に立脚した計算/AI・データ科学研究を実行し、世界最高水準の基礎研究を遂行しつつ、産業界との連携による我が国の産業競争力強化と Society 5.0・カーボンニュートラル社会の実現貢献に取り組んだ。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。

以下に令和5年度の具体的な成果について記載する。

A) 電池・触媒材料

①次世代蓄電池（主に全固体電池）の電極・電解質界面の準安定状態サンプリングと構造・電子状態データの解析

[令和5年度の事業実施計画]

ヘテロ界面 CALYPSO 法等を用いた電極材料-コート層-固体電解質界面の準安定構造探索を様々な系で実行し、Li 原子の安定性、界面反応性および界面電子状態に関する統一的理解を推進する。

[担当責任者] 館山 佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

ヘテロ界面 CALYPSO 法等を用いた電極材料-コート層-固体電解質界面の準安定構造探索を様々な系で実行し、Li 原子の安定性、界面反応性および界面電子状態に関する統一的理解を推進した。特に、最有力コート層である LiNbO_3 系が実は劣化することが近年明らかとなってきたことから、その要因を解明すべく LiNbO_3 系と類似構造を持つ LiTaO_3 系の LiCoO_2 正極界面を比較し、歪み効果の重要性を指摘した。関連して、 LiCoO_2 正極の充放電状態および応力・歪み環境下における、Li イオン伝導度についても網羅的な DFT-MD 計算を実行し、その影響について明らかにした。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

ヘテロ界面 CALYPSO 法は様々な DFT 計算コードに wrapper として導入可能であるが、その中で蓄電池に特徴的な遷移金属酸化物の電子状態収束性に優れる VASP と連結したプログラムを構築している。この計算効率の鍵となるのが VASP による DFT 計算部分であり、「富岳」においてハイブリッド並列化も含めた並列化効率向上を図った。

[研究成果]

全固体 LIB の車載実用化に向けた最重要課題の一つが、正極活物質-硫化物固体電解質の界面に挿入され、界面抵抗や劣化を改善する役割を持つコート層の設計・高度化である。このコート層の有望材料として LiNbO_3 が長い間注目されてきた。しかし、近年この LiNbO_3 系が電気化学的に劣化する現象が観測され、 LiNbO_3 系の微視的メカニズムの理解と、コート層に対する指導原理の両

者の再検討が必要となっている。

予言性の高い理論計算手法（主に第一原理計算）を用いて、全固体 LIB 内の電解質、コート層、電極の主要な界面について、原子スケールの構造、イオン伝導性、電子状態を明らかにし、それらの結果を整理することで界面 Li イオン伝導の抵抗要因や、界面劣化に関する一般化された概念の提示を試みている。

令和 5 年度は、上述の LiNbO_3 の特徴を区別することを目的に、同一構造を持ち金属種だけが異なる LiTaO_3 との比較研究を進めた。正極にはモデル材料として LiCoO_2 を用いた。界面 CALYPSO 法を用いて、 $\text{LiNbO}_3/\text{LiCoO}_2$ および $\text{LiTaO}_3/\text{LiCoO}_2$ 界面の安定構造をまず求め、続いて電子状態を解析した（図 2-2-1-A-1）。界面状態の生成によりバルクに比べてバンドギャップは縮小するがまだゼロにはならず、完全放電状態ではコート層への電子伝導性はまだ低いという結果が得られた。ただし充電が開始された場合、コート層数層は酸化されるリスクも観察された。

コート層は界面抵抗を抑制する、つまり界面イオン移動を促進する効果がある。このイオン移動性を見積もる方法の一つに界面近傍の各 Li サイトの Li 化学ポテンシャル（Li 空孔形成エネルギー）の評価がある。我々の界面安定構造モデルに対してその評価を行うと LiNbO_3 の方が LiTaO_3 に比べて Li が不安定であるという結果を得た。つまり、 LiNbO_3 への Li 挿入はやや難しいということが示唆された[2-2-1-A-1]。

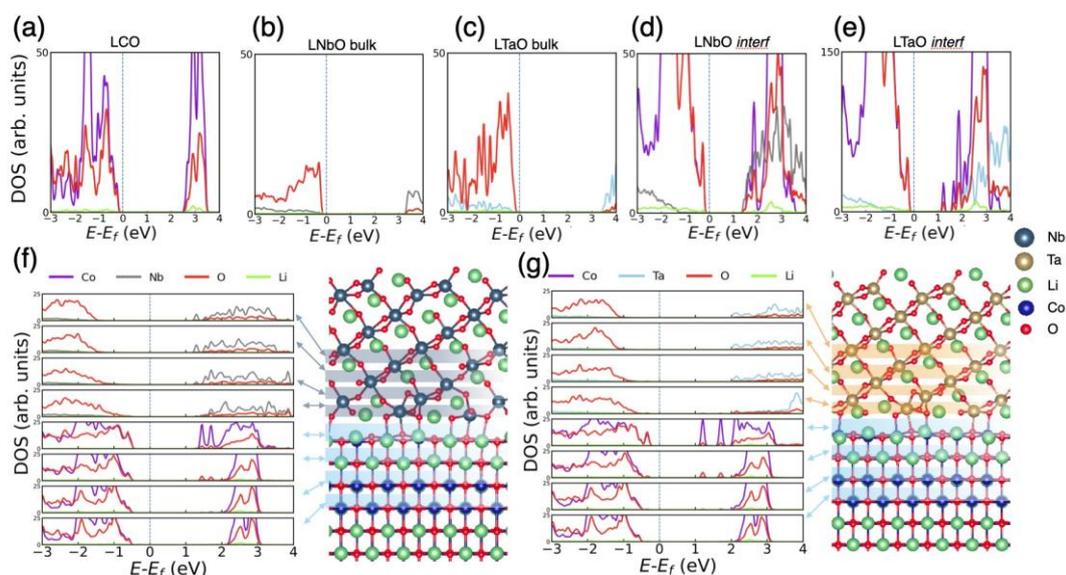


図 2-2-1-A-1. $\text{LiNbO}_3/\text{LiCoO}_2$ 及び $\text{LiTaO}_3/\text{LiCoO}_2$ の安定構造に対する界面電子状態。

(a)–(e) バルクおよび界面スーパーセルの Projected density of states (PDOS)。

(f) $\text{LiNbO}_3/\text{LiCoO}_2$ の界面における層分割 DOS (Layered DOS)。

(g) $\text{LiTaO}_3/\text{LiCoO}_2$ の界面における層分割 DOS。

さらに速度論的評価を行うために、界面の多様なイオン拡散経路に対して（当該計算モデルで6経路を選択）（図2-2-1-A-2）、空孔機構に基づいた活性化障壁をNudged Elastic Band (NEB)法を用いた第一原理計算により求めた。その結果LiNbO₃界面の方がLiTaO₃よりも界面活性化障壁が平均として約0.2eV程度高いという傾向が得られた。この傾向はコート層のLi化学ポテンシャルの傾向（LiNbO₃の方が高いという傾向）と一致している[2-2-1-A-2, 2-2-1-A-3]。

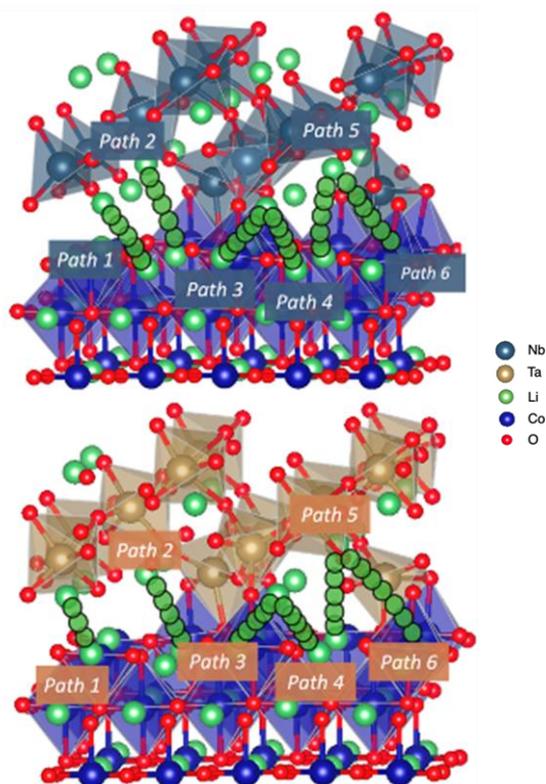


図2-2-1-A-2. LiNbO₃/LiCoO₂（上図）及びLiTaO₃/LiCoO₂（下図）の界面構造モデルにおけるLi⁺イオン拡散経路群。

[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。

- ・データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) 「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 (DX-GEM) (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
- ・JST COI-NEXT 政策重点分野 (環境エネルギー分野) 「先進蓄電池研究開発拠点 (ABC)」: 固体電解質自己拡散係数のハイスループット第一原理計算フローの構築と高効率固溶体安定性スクリーニング手法の開発
- ・NEDO SOLiD-Next 「次世代全固体蓄電池材料の評価・基盤技術開発/次世代全固体LIB基盤技術開発」: 正極・固体電解質間に挿入されるコート層効果の電子移動・イオン移動に対する微視

的知見の獲得

- ・ 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）
- ・ 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-1] Zizhen Zhou, Claudio Cazorla, Bo Gao, Huu Duc Luong, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama, "First-Principles Study on the Interplay of Strain and State-of-Charge with Li-Ion Diffusion in the Battery Cathode Material LiCoO_2 ", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **15**, 53614–53622 (2023).
- [2-2-1-A-2] Zizhen Zhou, Huu Duc Luong, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama, "LiNbO₃ and LiTaO₃ coating effects on the interface of the LiCoO₂ cathode: A DFT study of Li-ion Transport", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **16**, 42093–42099 (2024).
- [2-2-1-A-3] Yoshitaka Tateyama, "Advanced DFT-MD Study on Ion Transport in Solid Electrolyte: Grain Boundary and Ion Correlation", IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 (SUNTEC Singapore, Singapore).

②DFT レベル MD による固体電解質の拡散係数・イオン伝導度のハイスループット計算の実行

[令和5年度の事業実施計画]

固体電解質の安定性解析コードをさらに効率化し、多様な固体電解質群の拡散係数ハイスループット計算を実行することで、固体電解質内のイオン伝導度を支配する記述子の理解をより高度化する。

[担当責任者] 館山 佳尚 (物質・材料研究機構)

[実施概要]

固体電解質の安定性解析コードをさらに効率化し、多様な固体電解質群の拡散係数ハイスループット計算を実行することで、固体電解質内のイオン伝導度を支配する記述子の理解をより高度化した。特に、安定性については多くの固体電解質を包含するイオン性固溶体一般に対して適用可能な、エネルギーの高効率サンプリングが可能なコード“EwaldSolidSolution”を開発[2-2-1-A-4]し、さらに得られた構造安定性順序が DFT 計算によるそれと一致する、いわゆる DFT 計算サロゲートモデルとなっていることを実証した。これを用いて、NASICON(Na Super Ionic Conductor)系に関する高イオン伝導度材料探索等を実行した。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

イオン性固溶体の安定構造サンプリングとして、エバルト和を主体とする簡略化した表記によるエネルギー評価プログラムを作成した。その中で、様々な配置を効率的に計算するための並列化アルゴリズムを開発し、実装した。同様の機能をもつ並列化されていない標準プログラムに対して数桁のスピードアップが実現でき、211,266,225 個と 235,702,467 個のサイト配置を 1223.2 秒と 1187.9 秒で計算することができた。

[研究成果]

我々が取り組んでいる固体電解質内のカチオンダイナミクスデータ (自己拡散係数など) のハイスループット計算フローをより有効にするためには、このイオン性を持つ固溶体の安定構造探索における高効率化も欠かせない。しかし、ユニットセル内のサイト配置が膨大な組み合わせをもつ多項分布によって生成されるため、安定なサイト配置のサンプリングが容易でない。この問題に立ち向かうべく、我々は高速な多項分布サンプリングアプリケーション「EwaldSolidSolution」を開発した[2-2-1-A-4]。EwaldSolidSolution は、辞書順に並ぶサイト配置 (最大 1.7×10^{308} 個) の多項分布に対して大規模な並列処理を行い、初期のサイト配置の Ewald クーロン相互作用エネルギーを計算し、それから変動するサイトのみを更新していく (図 2-2-1-A-3)。

計算コストを評価するために、スーパーコンピュータ「富岳」の 960 コア (20 ノード) を用い、 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ および $\text{Na}_3\text{Zr}_2\text{Si}_2\text{P}_2\text{O}_{12}$ の安定なサイト配置を探索した。 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ のユニットセルには 216 個、 $\text{Na}_3\text{Zr}_2\text{Si}_2\text{P}_2\text{O}_{12}$ のユニットセルには 160 個のイオンサイトが含まれており、それぞれ 211,266,225 個と 235,702,467 個のサイト配置を、1223.2 秒と 1187.9 秒で全探索することができた。さらに、密度汎関数理論計算によるエネルギーと Ewald クーロン相互作用エネルギーとの

間には正の相関が見られた (図 2-2-1-A-4)。これにより、EwaldSolidSolution が安定なサンプルを効率的に特定できることが示された。EwaldSolidSolution はイオン性固溶体の材料設計を促進することが期待される [2-2-1-A-5, 6, 7]。

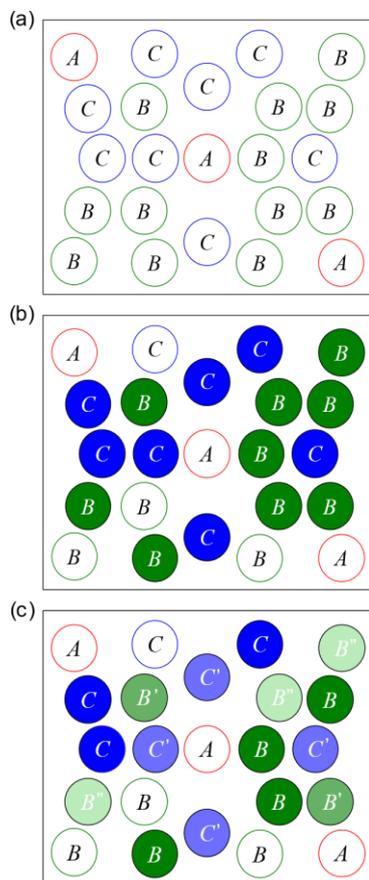


図 2-2-1-A-3. EwaldSolidSolution コードで用いられている元素置換によるイオン配置の時間発展に関するサンプリングワークフロー。
[2-2-1-A-4]

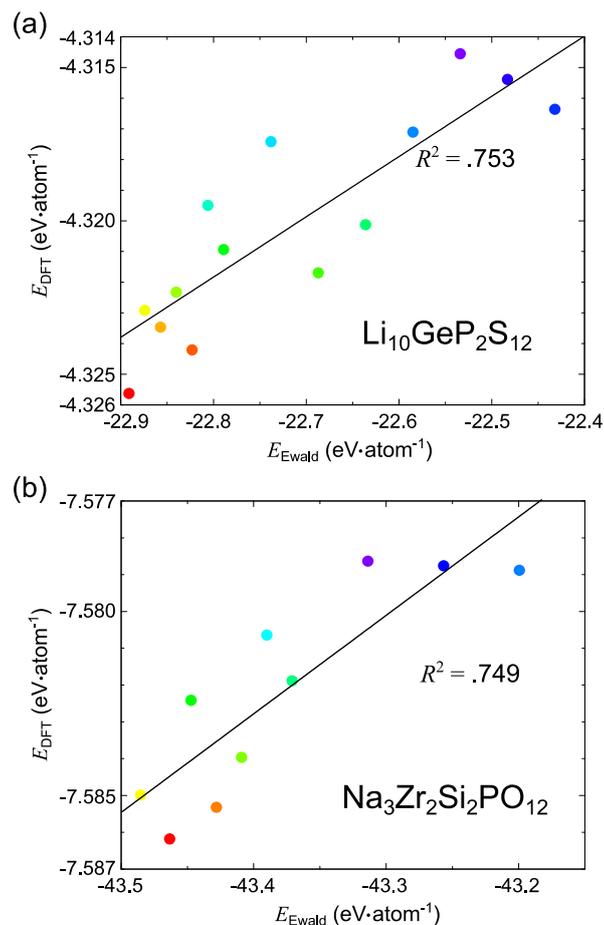


図 2-2-1-A-4. 密度汎関数理論計算におけるエネルギーと Ewald クーロン相互作用エネルギーの正の相関。

(a) $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ 、(b) $\text{Na}_3\text{Zr}_2\text{Si}_2\text{PO}_{12}$ 。

[2-2-1-A-4]

[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。

- ・ データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) 「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 (DX-GEM) (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
- ・ JST COI-NEXT 政策重点分野 (環境エネルギー分野) 「先進蓄電池研究開発拠点 (ABC)」: 固体電解質自己拡散係数のハイスループット第一原理計算フローの構築と高効率固溶体安定性スクリーニング手法の開発
- ・ NEDO SOLiD-Next 「次世代全固体蓄電池材料の評価・基盤技術開発/次世代全固体 L I B 基盤技術開発」: 正極・固体電解質間に挿入されるコート層効果の電子移動・イオン移動に対する微視的知見の獲得

- ・ 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）
- ・ 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-4] Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, "EwaldSolidSolution: A High-Throughput Application to Quickly Sample Stable Site Arrangements for Ionic Solid Solutions", *J. Phys. Chem. A*, **127**, 5734-5744 (2023).
- [2-2-1-A-5] 張 成燾、ハレム ランディ、館山 佳尚, "イオン性固溶体の安定サイト配置の効率的サンプリングに向けたアルゴリズム開発", 日本物理学会第 78 回年次大会(2023) (東北大学), 令和 5 年 9 月.
- [2-2-1-A-6] Jang Seonghoon, "高並列計算によるイオン性固溶体の構造探索－計算の完全自動化への取り組み", 計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新 (DDCoMS) 公開シンポジウム (東北大学), 令和 6 年 3 月.
- [2-2-1-A-7] Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, "Predicting room-temperature conductivity of Na-ion super ionic conductors with minimal number of easily-accessible descriptors", *Adv. Energy Sustain. Res.* **5**, 2400158, (2024).

③CONQUEST におけるマルチサイト法による大規模第一原理計算の速度検証と効率化

[令和5年度の事業実施計画]

金属ナノ粒子触媒の大規模第一原理計算にはマルチサイト法を用いる必要があり、CONQUEST に実装されているマルチサイト法の効率化へ向けて「富岳」での速度検証を行う。

[担当責任者] 中田 彩子 (物質・材料研究機構)

[実施概要]

CONQUEST マルチサイト法の「富岳」での速度検証の結果、疎行列積に関する並列化効率は高いものの、ボトルネックである対角化計算の更なる高速化が必要であることが分かり、ELPA 疎行列演算ライブラリを用いた対角化計算の効率化に取り組んでいる。さらに、金属ナノ粒子触媒において、大規模第一原理計算と統計解析の連携により、膨大な計算結果から特異的な電子状態をもつ原子・サイトを効率的・客観的に判別する手法の提案を行った。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

大規模 DFT 計算には、独自に開発している CONQUEST プログラムを用いている。並列計算効率の見積もりにはバルクシリコン系を用い、オーダーN 法では 10 万原子程度までの計算から高い strong scaling 性能を確認している。マルチサイト法では、対角化部分の高速化に取り組んでおり、金ナノ粒子をターゲットとしたテスト計算に取り組んでいる。

[研究成果]

CONQUEST の「富岳」での速度検証の結果、疎行列積に関する並列化効率は高く、10 万原子系程度まで高い strong scaling を示すことを確認した。一方、マルチサイト法における計算のボトルネックである対角化計算の更なる高速化が必要であることが分かり、ELPA 疎行列演算ライブラリを用いた対角化計算の効率化に取り組んでいる。

さらに、金属ナノ粒子触媒において、大規模第一原理計算と統計解析の連携により、膨大な計算結果から特異的な電子状態をもつ原子・サイトを効率的・客観的に判別する手法の提案を行った。マルチサイト法を用いて粒径を 0.5nm~4.5nm まで変化させてナノ粒子の構造や電子状態を計算した結果、粒径が小さいときは離散的な電子状態をもつ金属クラスター的な性質であるのに対し、2nm 程度から金属的な電子状態に収束してくることが示された。また、粒子内の各原子の状態密度を計算し、電子状態のサイト依存性を検討した。大規模系では粒子数が膨大であり、計算結果を目の目で比較していくことは困難である。そこで、局所状態密度の違いを主成分分析(PCA)を用いて2次元に落とし込むことで、どのサイトの電子状態がどの程度異なるかをドメイン知識に基づかずに客観的に解析する方法を提案した。その結果、ナノ粒子の電子状態は表面、表面第2層までは特異的であるものの、より内側の層ではほぼ収束していることが明示され、また表面内における頂点の特異性などのサイト依存性も客観的に示すことができた。さらに、同手法を担持ナノ粒子の電子状態にも応用し、ナノ粒子内のどの原子がどの程度担体からの影響を受けているかを主成分得点の変化から定量化することができるようになり、反応性との関連性も示された(図

2-2-1-A-5)、[2-2-1-A-8]。

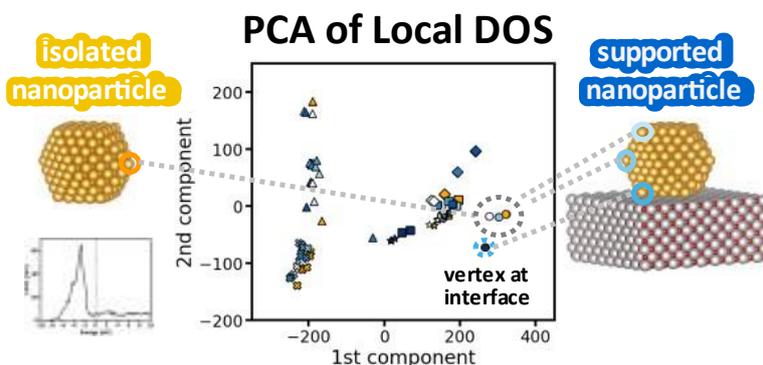


図 2-2-1-A-5. 孤立ナノ粒子および担持ナノ粒子の局所状態密度(LDOS)に関する主成分分析(PCA)図。

孤立ナノ粒子に対する主成分ベクトルを用いて担持ナノ粒子のLDOSを射影した。孤立ナノ粒子の主成分得点(黄)と担持ナノ粒子の主成分得点(青、濃色ほどMgO(100)担体表面に近い)を原子ごとに比較することで、担持によって各原子がどの程度電子状態に影響を受けたかを判別することができる。

[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。

- ・ JST さきがけ「反応制御科学」：金属ナノ粒子の電子状態コントロールによる反応制御に関する理論研究
- ・ 科研費学術変革領域研究 A「超秩序構造科学」：中距離秩序構造が材料の物性に与える影響の理論解析

[参考文献]

- [2-2-1-A-8] Shengzhou Li, Tsuyoshi Miyazaki, Ayako Nakata, “Theoretical search for characteristic atoms in supported gold nanoparticles: A large-scale DFT study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**, 20251-20260 (2024).

④ESM-RISM における、NEB 計算と MD 計算の電圧制御コードの速度検証と効率化・同一の化学組成を持つ材料に対する格子振動効果を含む自由エネルギー計算検証

[令和 5 年度の事業実施計画]

電気化学界面における反応機構及び電極劣化機構の解明に向けて、ESM-RISM 法と電圧制御した NEB 法を組み合わせた計算法を Quantum ESPRESSO に実装し、その計算速度検証と効率化を行う。動作に問題がなければ、実際の電気化学反応に応用し、その実用性を示す。自由エネルギー検証では、電極材料に対するフォノン計算を行い、有限温度での振動効果が電極構造の安定性に与える影響を調べる。また、CE+BO 法による振動効果を含む自由エネルギー凸包計算プログラムの開発を行う。

[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]

上記実施計画を遂行した。方法論開発と並行して、以下の 3 つの成果を得た。バイアス印加した菱形硫化ホウ素/アルカリ水溶液界面における表面第二層の格子欠陥が関与した酸素発生反応機構を明らかにした。反応経路自動探索法と ESM-RISM を組み合わせた方法論を構築した。CE+BO 法の高速化とリチウムイオン電池の正極材料である Li-Co-O 系への応用から、充放電曲線の予測と電極材料の構造変化に伴う Li イオン伝導性の低下要因を明らかにした。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

ESM-RISM 法や CE+BO 法で用いた Quantum ESPRESSO コードは、MPI+OMP のハイブリッド並列化および並列数値計算ライブラリの利用によって高速化されている。これらの工夫によって、100 から 400 原子数程度の系が第一原理計算の枠組みで取り扱えている。

[研究成果]

菱形硫化ホウ素 (r-BS) /アルカリ水溶液界面における酸素発生反応 (OER) 機構を ESM-RISM 法 +バイアス印加法により解析を行った。反応中間体に対する自由エネルギープロファイルの解析から、ホウ素欠陥が活性中心であると考えられる。実際に OER 平衡電位に設定したバイアスを印加することで、表面第二層にホウ素欠陥を持つ界面には正電荷が蓄積し、アルカリ溶液中における OER のトリガーとなる OH⁻イオンをより引きつけやすいことがわかった (図 2-2-1-A-6)。したがって、表面第二層にホウ素欠陥を持つ表面が活性中心であると考えられた[2-2-1-A-9]。

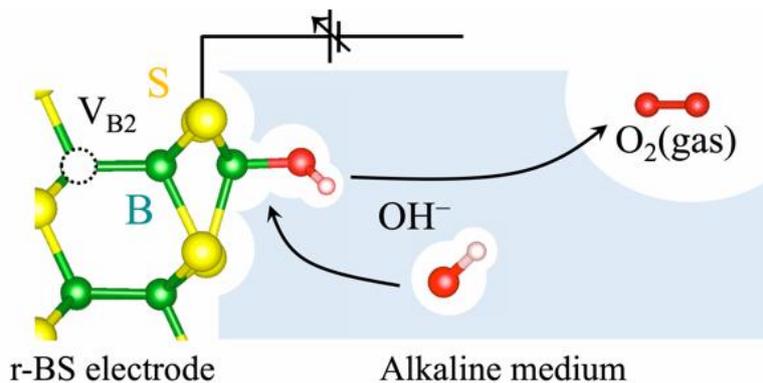


図 2-2-1-A-6. バイアス印加した菱形硫化ホウ素/アルカリ溶液界面における酸素発生反応（黄：S、緑：B、赤：O、白：H）。

反応経路自動探索法と ESM-RISM を組み合わせた手法を開発し（図 2-2-1-A-7）、ベンチマークとして Cu(111)/NaCl 水溶液界面における水分子の分解反応に適用した。例えば、分解反応過程における電荷移動量を調べると、最大でおよそ 2 個程度の電荷を Cu(111) 表面に与えていることがわかった。この結果から、バイアス印加を行うことで反応の活性化障壁に影響を与えることが示唆された[2-2-1-A-10]。

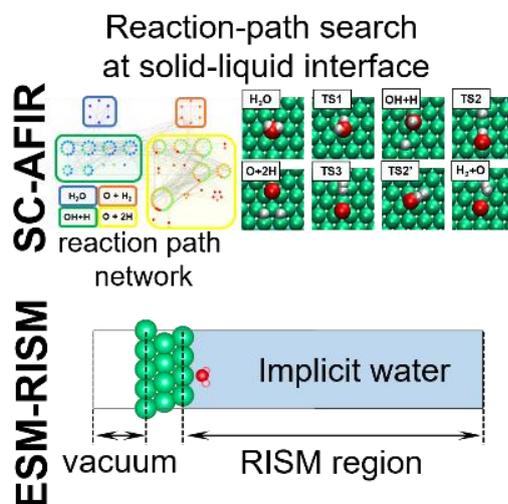


図 2-2-1-A-7. 固液界面反応自動探索手法。

CE+B0 法による熱力学的凸包の構築における最適化過程を高速化し、リチウムイオン電池の正極材料である Li-Co-O 系へ適用した。B0 法における最適化指標に凸包から計った形成エネルギーを採用することで CE+B0 を高速化することを可能とした。構築した Li-Co-O 系の凸包から、有限温度系では、Li が希薄になると酸素脱離が起こることがわかった（図 2-2-1-A-8）。Li が完全に抜けた CoO₂ で酸素脱離が進行すると、母構造が持つ層状構造が崩れ重量密度が増加する構造が生じることがわかった。NEB 法によって Li イオン伝導の活性化エネルギーを調べたところ、重量密度の増加に比例して活性化エネルギーも増加した。したがって、電極材料における酸素脱離を防ぐ

工夫が Li イオン電池の高容量化にとって必要と考えられる[2-2-1-A-11]。

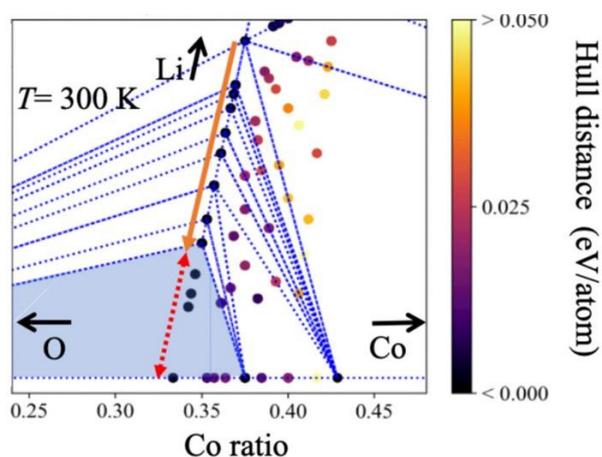


図 2-2-1-A-8. CE+BO 法で得られた Li-Co-O 系の熱力学凸包 (300K)。
薄い青で表示したエリアでは、 O_2 ガス、 $Li_{1/3}CoO_2$ と $CoO_{5/3}$ の状態に三層分離が起こる。

以上の成果は全て、小～中規模サイズの系に対してさまざまなパラメータ空間を網羅する数値計算が必要となる。そのため、膨大な計算ノードを有する「富岳」あるいは「富岳」に類似するタイプのスパコンの利用が必須であると考えられる。

[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。

- ・ r-BS 電極の OER 触媒への応用は、JST A-STEP (研究成果最適展開支援プログラム) で実験研究者と共同で実施。
- ・ OER 触媒への応用と CE+BO 法を利用した成果は、それぞれ科研費若手プロジェクトと連動。
- ・ 研究成果を用いて企業と「富岳」産業利用を実施。

[参考文献]

- [2-2-1-A-9] Satoshi Hagiwara, Fumiaki Kuroda, Takahiro Kondo, Minoru Otani, “Electrocatalytic Mechanisms for an Oxygen Evolution Reaction at a Rhombohedral Boron Monosulfide Electrode/Alkaline Medium Interface”, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 50174–50184 (2023).
- [2-2-1-A-10] Taisuke Hasegawa, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, Satoshi Maeda, “A Combined Reaction Path Search and Hybrid Solvation Method for the Systematic Exploration of Elementary Reactions at the Solid-Liquid Interface”, *J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 8796–88804 (2023).
- [2-2-1-A-11] Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani, “Structural changes in the lithium cobalt dioxide electrode: A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization”, *Phys. Rev. Mater.* **7**, 115402 (2023).

⑤abICS フレームワークへの超並列モンテカルロ計算 (population annealing) 実装・イオン伝導体バルクおよび界面のイオン分布の解析

[令和5年度の事業実施計画]

不規則材料に対応した abICS の高度化と電池材料への適用に向けて、Population annealing 法を abICS に実装し、超並列実行が可能か検証を行い、並列性能の評価を行う。また、これを用いたイオン伝導体バルクおよびその界面の統計熱力学シミュレーションを実施し、イオン分布の解析を行う。

[担当責任者] 笠松 秀輔 (山形大学 学術研究院)

[実施概要]

Population annealing モンテカルロ法の実装を完了し、1000 レプリカ並列以上でのサンプリング速度向上を確認した。各レプリカ内部の並列計算も合わせた多重並列化の実装とテスト計算が進行中である。また、ハイスループット計算による新機能材料発見のためのフレームワーク開発も行い、新規プロトン伝導性酸化物の開発に成功した。

イオン伝導体材料については、La/LiNbO₃ や LiTi₂(PO₄)₃ などの Li 電解質について格子モードでのモンテカルロ計算を実施し、構造が不安定であることが判明した。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

現状では、統計熱力学サンプリングに必要な原子配置のエネルギーを予測する機械学習モデルを訓練するための大量データ生成に「富岳」を活用しており、100-500 原子程度の電解質バルクや界面モデルで、1つの材料系あたり約 10000 通りの配置を第一原理計算している。配置は abICS に実装した能動学習を使って生成している。

今後は、オリジナルの統計熱力学サンプリングフレームワーク abICS に実装した population annealing 法を用いて、超並列モンテカルロサンプリングにも「富岳」を活用する予定である。

[研究成果]

本研究では、「富岳」が可能とする中規模・大量計算によって第一原理計算データ生成を行い、これを再現するサロゲートモデルを能動学習し、そのモデルを用いた超並列モンテカルロサンプリング計算によって熱力学データの生成を行う abICS フレームワークの高度化を進めている (図 2-2-1-A-9)、[2-2-1-A-12]。また、今後多数の不規則材料系に対する熱力学データ生成が可能になっていくことを念頭に、新機能材料発見のためのフレームワークの開発も行う。

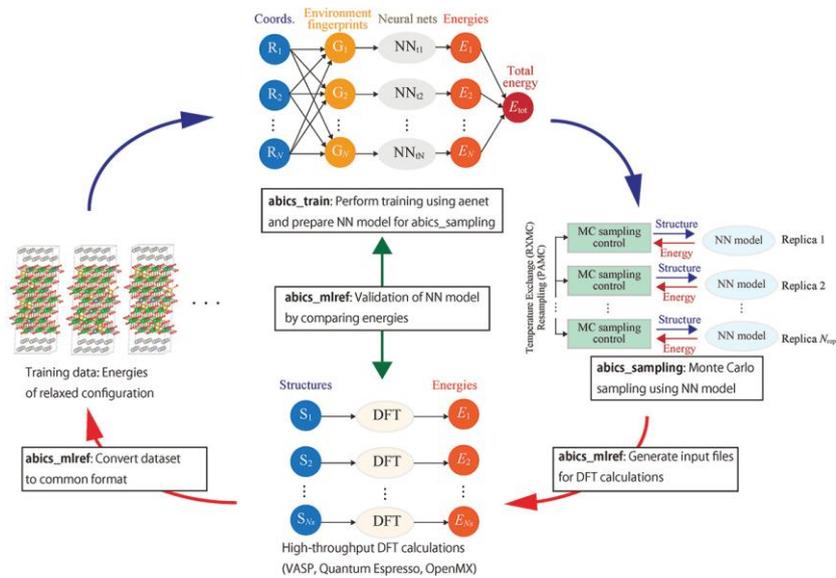


図 2-2-1-A-9. abICS の能動学習フレームワーク。

abICS の高度化について、令和 5 年度は超並列モンテカルロサンプリング手法として知られる population annealing モンテカルロ法の abICS への実装を完了し、1000 レプリカ並列以上のサンプリング速度向上を確認した。また、熱力学条件に即した計算を実施するため、自由エネルギー計算を可能にする熱力学積分法や化学ポテンシャル一定計算を可能にするグランドカノニカルアルゴリズムを実装し、Li 電極活物質で妥当な充電曲線が得られた (図 2-2-1-A-10)。一方、イオン伝導体材料については、La/LiNbO₃ や LiTi₂(PO₄)₃ などの Li 電解質についてモンテカルロ計算を試みたが、想定以上に構造が不安定であることがわかり、このため十分なサンプリング効率が得られなかった。今後はこの問題を解決するため、連続空間モードでのモンテカルロ計算を試みる予定である。

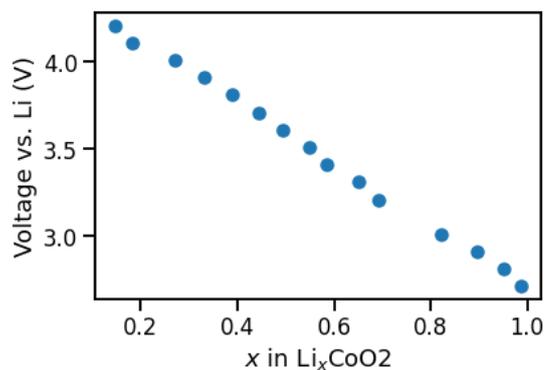


図 2-2-1-A-10. 電位一定のグランドカノニカル計算。

新機能材料発見のためのフレームワーク開発については、ハイスループット第一原理欠陥化学フレームワークを開発し、解釈可能な機械学習を組み合わせることで、プロトン伝導性酸化物の設計指針を確立し、新規固体電解質を発見することに成功した[2-2-1-A-13]。プロトン伝導性発

現に不可欠な欠陥反応、つまりドーパント固溶による酸素空孔形成と、酸素空孔を介した水和反応のエネルギーを立方晶酸化物について網羅的に求め、機械学習により2つの反応の支配因子を定量的に解明するとともに、非従来型プロトン伝導性酸化物の有力候補を特定した(図2-2-1-A-11)。実際に合成したPb添加 $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ は、構成元素と構造の2つの観点で世界初のプロトン伝導体であった。今後、abICSによる高濃度欠陥系の計算と組み合わせることで、新材料発見の可能性が飛躍的に高まることが期待できる。

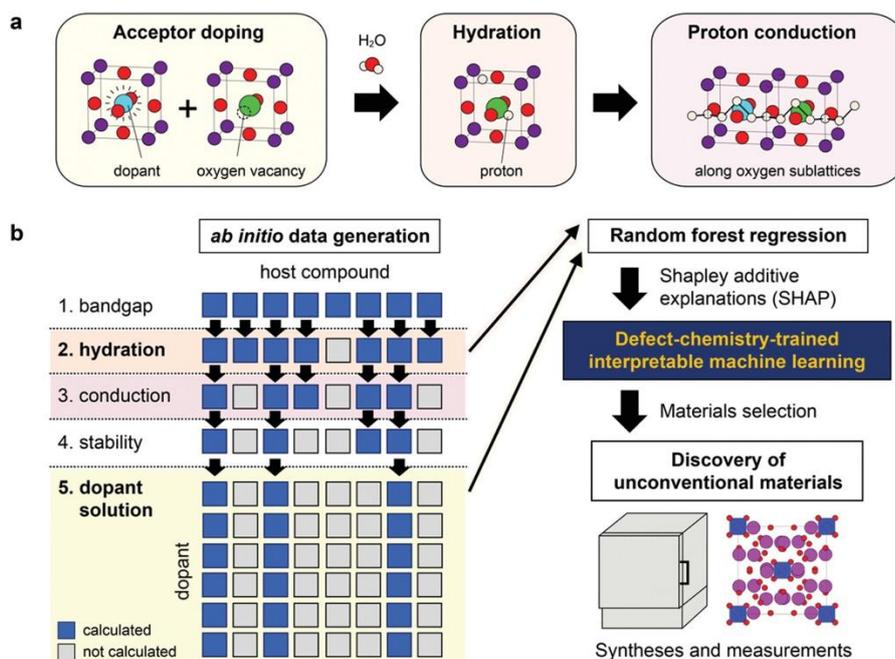


図2-2-1-A-11. ハイスループット欠陥化学計算フレームワークと解釈可能な機械学習による非従来型プロトン伝導性酸化物の発見。

[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。

- ・ JST CREST「革新材料開発(細野総括)」 「実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製(山崎PI)」との連携でプロトン伝導性酸化物新規発見[2-2-1-A-13]、プロトン伝導性発現の根源的理解の探究[2-2-1-A-14]
- ・ NEDO「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業/水素利用等高度化先端技術開発/スケールアップを脱するカソード触媒の基盤研究:酸化物をベースとした非白金触媒の理解」との連携で酸化物触媒表面の計算を実施中(preprint: [2-2-1-A-15])
- ・ 科研費新学術領域「蓄電固体界面科学」に公募研究で参画し、電極や電解質材料に関する共同研究を実施
- ・ JST 創発的研究支援事業に研究代表者として参画し、材料分野を中心に共同研究を推進

[参考文献]

[2-2-1-A-12] Shusuke Kasamatsua, Yuichi Motoyamab, Kazuyoshi Yoshimib, Tatsumi Aoyama,

“Configuration sampling in multi-component multi-sublattice systems enabled by ab Initio Configuration Sampling Toolkit (abICS)” , *Sci. Technol. Adv. Mater. Meth.* **3**, 2284128 (2023). [Focus Issue Review]

[2-2-1-A-13] Susumu Fujii, Yuta Shimizu, Junji Hyodo, Akihide Kuwabara, Yoshihiro Yamazaki, “Discovery of Unconventional Proton-Conducting Inorganic Solids via Defect-Chemistry-Trained, Interpretable Machine Learning” , *Adv. Energy Mater.* **13**, 2301892 (2023).

[2-2-1-A-14] Kenta Hoshino, Shusuke Kasamatsu, Junji Hyodo, Kentaro Yamamoto, Hiroyuki Setoyama, Toshihiro Okajima, Yoshihiro Yamazaki, “Probing Local Environments of Oxygen Vacancies Responsible for Hydration in Sc-Doped Barium Zirconates at Elevated Temperatures: In Situ X-ray Absorption Spectroscopy, Thermogravimetry, and Active Learning Ab Initio Replica Exchange Monte Carlo Simulations” , *Chem. Mater.* **35**, 2289–2301 (2023).

[2-2-1-A-15] Akitaka Nakanishi, Shusuke Kasamatsu, Jun Haruyama, Osamu Sugino, “Theoretical analysis of zirconium oxynitride/water interface using neural network potential” , *J. Phys. Chem. C*, accepted. arXiv:2307.11296

⑥ハイスループット計算の実行による触媒表面吸着データの蓄積

[令和5年度の事業実施計画]

表面及び吸着構造モデルに対するハイスループット量子化学計算により、表面吸着電子構造データベースを作成する。また、次年度以降の高精度及び大規模計算に向けて、分割統治計算プログラムの「富岳」向けの整備を行う。

[担当責任者] 小林 正人（北海道大学 大学院理学研究院）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。Ni を母材とする4元系酸化物による酸素発生電極触媒性能の最適化を実験研究者と共同で行うため、電極表面電子構造データベースの作成を今回の探索範囲内で完了し、また、吸着電子構造データベースの構築を開始した。また、次年度以降の高精度及び大規模計算に向けて、高精度分割統治（DC）量子化学計算プログラムを周期境界条件計算に対応できるようにして、「富岳」を用いて大規模構造モデルに対する固体計算を行う準備を行った。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

ハイスループット電子状態計算は酸化物表面を96原子/cellでモデル化し、「富岳」にインストールされているOpenMXを用いて実行した。ケース数が多いため、各計算は1~2ノード並列で実行している。

[研究成果]

Ni を母材とする4元系酸化物 $Ni_3XYZO_{12}H_6$ ($X, Y, Z = Sc, Ti, Mn, Fe, Co, Cu, Zn, Zr, Mo, Ta$) の電極表面を96原子/cellモデル（図2-2-1-A-12）で計算した。120通りの各組合せに対して、置換位置を変えた12通りのモデルを用意し、合計1440構造に対してDFT計算を実行して、電荷などの記述子をそろえた。計算には局所数値基底を用いるOpenMXプログラムを用い、交換相関汎関数にはPBEを使った。「富岳」を利用することにより、全1440構造の一点計算を半日程度と高速に得ることができた。実験の共同研究者が、仕込み比で計算した酸化物と同じ金属比となるように120通りの組合せすべてについて電極の作成を行い、実際の電極性能を評価した。酸素発生が開始する過電圧が最も低くなる組合せを最適材料とし、この材料を発見するまでにベイズ最適化で要する試行回数をシミュレーションした（100回の平均、図2-2-1-A-13）。記述子としては、①XYZの元素を表すベクトル、②XYZの元素特性、③計算化学で得た記述子、及びこれらの複合を用いた。ベイズ最適化には、PHYSBO（optimization tool for PHYSics based on Bayesian Optimization）を用いた。計算化学で得た記述子を用いることにより、ランダムに探索するよりも効率的に最適材料の発見ができたが、①~③の記述子を単独で用いる場合には、XYZの元素に関する記述子を用いる方がより効率的に発見できたことがわかる。これは、今回の探索範囲と条件の中では、電極にMoが含まれるものが有意に高い活性を示したため、元素そのものに関するパラメータが有利であったためだと考えられる。しかし、計算化学的記述子と複合して用いることにより、探索をより効率的に行うことができることが分かった。現在は、これらの表面に対して表面吸着種と

して OH と OOH を考えた吸着電子構造データベースの構築を進めている。

次年度以降の高精度及び大規模計算による触媒劣化機構解明に向けて、*ab initio* 分割統治量子化学計算（令和 5 年度は DC Hartree-Fock）プログラムを周期境界条件計算に対応できるようにした。一般的に周期境界条件計算は平面波や Bloch 基底のような周期的な基底関数を用いるが、本手法は DC 法の特徴を活かして局所基底をそのまま用いる。「富岳」の効果的な利用のため、並列化やチューニングを継続的に行っている。また、摂動論により電子相関を含む計算への拡張を進めている。

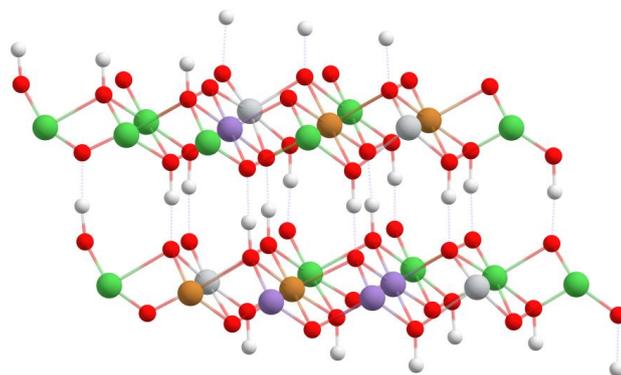


図 2-2-1-A-12. $\text{Ni}_3\text{XYZO}_{12}\text{H}_6$ 表面の 96 原子モデルの例（黄緑：Ni、赤：O、白：H）。

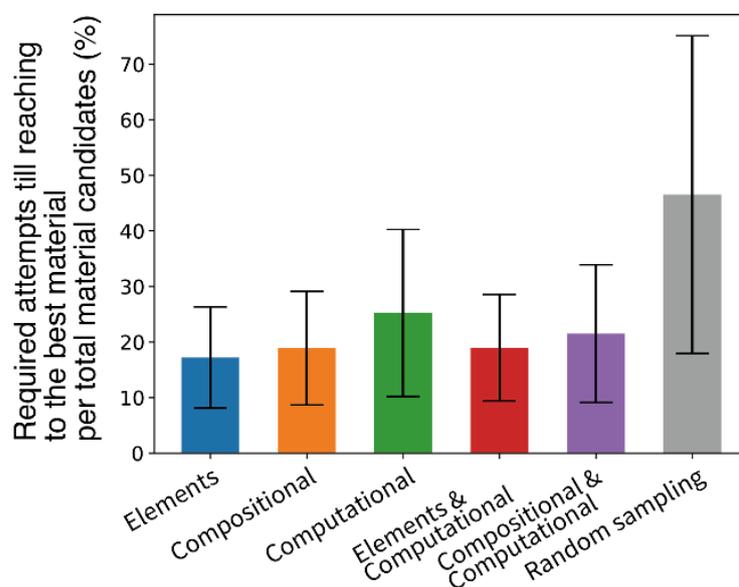


図 2-2-1-A-13. 最高性能の材料に到達するまでにベイズ最適化の試行に要する回数の平均。

[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。

- ・ JST 未来社会創造事業「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域との連携
- ・ JST 革新的 GX 技術創出事業 (GteX) との連携
- ・ 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 (DX-GEM) との連携

B) 磁性材料

①磁性体の第一原理計算手法の高度化、永久磁石材料のデータ創出

[令和5年度の事業実施計画]

第一原理計算により遷移金属合金の計算を実行する。組成、磁気構造などを変えた系統的計算を行い、全エネルギー、磁気モーメント、キュリー温度のデータを創出する。

[担当責任者] 三宅 隆 (産業技術総合研究所)

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。フルポテンシャル KKR (Korringa-Kohn-Rostoker) 法を用いて、遷移金属合金 $Y(\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu})_5$ の網羅計算を実行した。その結果、母物質の $Y\text{Co}_5$ に比べて、Fe を添加することにより、磁化と磁気異方性が高くなることがわかった。さらに、Ni の同時添加は安定性を向上させることが判明し、高磁化・高磁気異方性・高安定性を実現する $Y(\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni})_5$ の最適組成を見出すことに成功した。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

KKR グリーン関数法は、一電子コーンシャム方程式に対するグリーン関数を多重散乱理論により計算する。それゆえ、線型応答理論との組み合わせにより、一般的に困難とされる磁性体の伝導特性などの計算も可能である。KKR グリーン関数法では球対称、異方的ポテンシャルに限らず、結晶のグリーン関数をシングルサイト散乱項と多重散乱項に分解する。シングルサイト散乱項は原点における数値的不安定性が存在するが計算コストはオーダーN である。一方、多重散乱項はダイソン方程式を解く必要があるため、オーダー N^3 のコストを必要とし、並列化による高速化が必要になる。周期性のある結晶では、グリーン関数は波数空間で取り扱われ、波数とエネルギーの関数となる。我々はこれらをグループ化し OpenMP による並列化を実施した。材料パラメーターに対しては、MPI を用いて並列化を行っている。データ蓄積加速のため、KKR 法で重要となるエネルギー積分範囲のパラメーターは自動的に決定されるよう工夫を施している。

[研究成果]

現代の高性能永久磁石は、遷移金属 (Fe, Co など) と希土類を主成分とする希土類磁石である。前者は高い飽和磁化とキュリー温度に欠かせない。一方、後者は保磁力の源泉である結晶磁気異方性を高くするために有効である。主相化合物としては、 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_3$, $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$, SmCo_5 などが知られており、元素置換による物性の最適化や希少金属の使用量削減に注目が集まっている。

令和5年度は、 SmCo_5 の結晶構造である CaCu_5 型構造に注目し、ランタノイドを用いない $Y\text{Co}_5$ を出発点とし、Co, Ni, Cu を添加した場合の磁気物性値と安定性について調べた。計算には KKR 法を用い、化学的な不規則性を扱うためコヒーレントポテンシャル近似 (Coherent Potential Approximation, CPA) を適用した。

$Y(\text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu})_5$ について組成を変えて非化学量論組成の密度汎関数理論計算を実行した。第一原理網羅計算により、726 組成の結晶磁気異方性定数 K_0 と飽和磁化 J_s を計算した。図 2-2-1-B-1

に結果を示す。YCo₅の K_u と J_s の値は、実線の交点に対応する。全組成のうち K_u と J_s が最大となる組成は YFe₃Co₂ であった[2-2-1-B-1, 2]。

Fe 添加による相安定性の低下を抑制するため、Ni を添加した合金も計算した。図 2-2-1-B-2 に、 K_u と J_s の Ni 濃度 (z) 依存性を示す。 K_u は、 z が 0.4 以下の範囲で YCo₅ と同程度以上の値を示す。

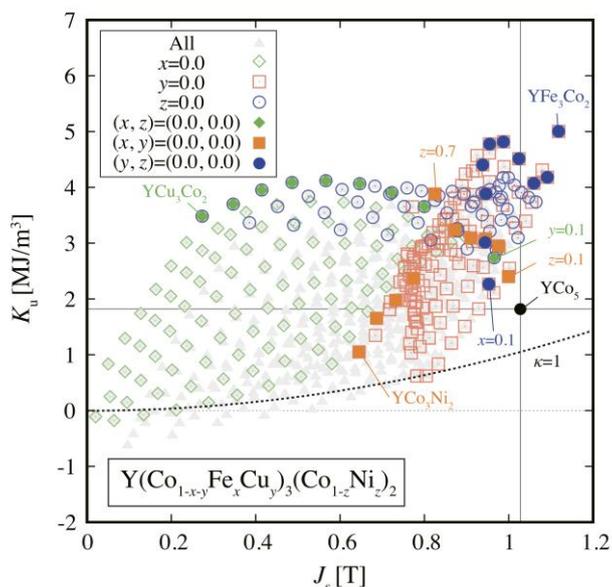


図 2-2-1-B-1. Y(Fe, Co, Ni, Cu)₅ の K_u と J_s の網羅計算 (726 組成)。黒点が YCo₅ の K_u と J_s に対応。

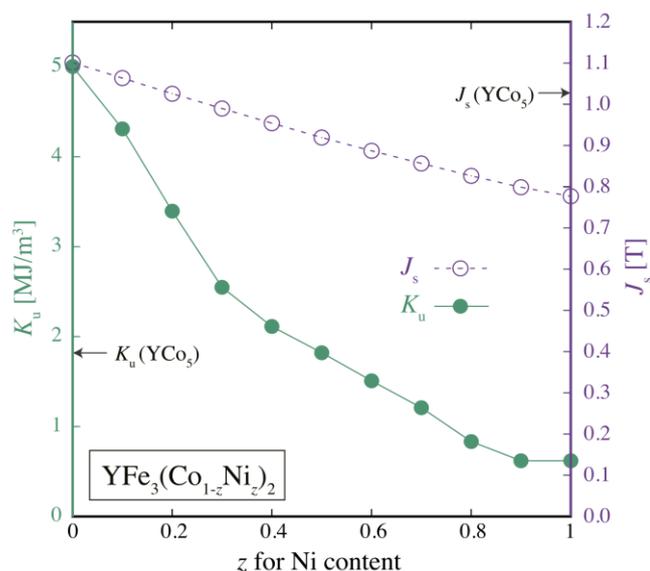


図 2-2-1-B-2. YFe₃(Co_{1-z}Ni_z)₂ の K_u と J_s の計算値。相安定性のため Ni を添加すると K_u と J_s は減少する。

[研究成果の社会実装について]

- ・データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) に計算データを提供し、計算実験連携による材料開発を推進。

[参考文献]

- [2-2-1-B-1] Haruki Okumura, Tetsuya Fukushima, Hisazumi Akai, Masako Ogura, “First-principles calculation of magnetocrystalline anisotropy of $Y(\text{Co, Fe, Ni, Cu})_5$ based on full-potential KKR Green’s function method”, *Solid State Commun.* **373-374**, 115257 (2023).
- [2-2-1-B-2] 福島 鉄也、奥村 晴紀、北 玲男、深澤 太郎、三宅 隆、新屋 ひかり, “磁性材料における物性データ創出とその活用”, 日本金属学会 2023 年秋季講演大会 (富山大学), 令和 5 年 9 月.

②スピントロニクス材料の電気抵抗率を対象としたハイスループット計算とデータ蓄積

[令和5年度の事業実施計画]

AkaiKKR コードを用いたハイスループット計算の高度化を行い、物性ビッグデータを自動創出する。また、フォノンやマグノンの影響を考慮するための計算手法の開発を行い、スピントロニクス材料をターゲットとしたユニークなデータベースを構築する。

[担当責任者] 福島 鉄也（産業技術総合研究所）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。スピントロニクス材料のハイスループット計算のため AkaiKKR コードとフルポテンシャル KKR コード用の網羅計算ツールの拡張を行った。本ツールは不規則系材料に特化しており、磁化、キュリー温度、電気抵抗率等の材料開発にとって利用価値の高いデータを創出可能である。本ツールを用いることで 5 元・6 元磁性合金を対象に網羅計算を実行し 100 万件を超える物性データを創出した。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

KKR グリーン関数法は、一電子コーンシャム方程式に対するグリーン関数を多重散乱理論により計算する。それゆえ、線型応答理論との組み合わせにより、一般的に困難とされる磁性体の伝導特性などの計算も可能である。KKR グリーン関数法では球対称、異方的ポテンシャルに限らず、結晶のグリーン関数をシングルサイト散乱項と多重散乱項に分解する。シングルサイト散乱項は原点における数値的不安定性が存在するが計算コストはオーダーN である。一方、多重散乱項はダイソン方程式を解く必要があるため、オーダー N^3 のコストを必要とし、並列化による高速化が必要になる。周期性のある結晶では、グリーン関数は波数空間で取り扱われ、波数とエネルギーの関数となる。我々はこれらをグループ化し OpenMP による並列化を実施した。材料パラメーターの対しては、MPI を用いて並列化を行っている。データ蓄積加速のため、KKR 法で重要となるエネルギー積分範囲のパラメーターは自動的に決定されるよう工夫を施している。

[研究成果]

スピントロニクスの分野では、電子の持つ電荷とスピンをナノテクノロジーにより制御し、次世代省エネルギーデバイスの構築を目指す。代表的なものはトンネル磁気抵抗素子を用いた MRAM (Magnetoresistive RAM) である。このようなデバイスでは、電子スピンの起因するスピン伝導を制御することにより不揮発性等の機能を実現する。第一原理計算の発展に従い、磁性発現のメカニズム解明が進み電子状態との相関性が明確になっている。しかし、伝導特性の理解はそう単純ではない。それゆえ、データ駆動型研究により、スピン伝導の理解や新規スピントロニクス材料の探索が有用であると示唆されている。

スピントロニクス材料におけるデータ駆動型研究の基盤になる高精度のデータを創出するため、AkaiKKR コード、フルポテンシャル KKR コード、そしてハイスループット計算ツールを高度化した。また、有限温度における物性を精査するために、フォノン・マグノン散乱をコヒーレントポ

テンシカル近似に立脚し計算可能なコードを開発した[2-2-1-B-3]。本コード群と「富岳」を用いてスピントロニクス材料（磁性合金、磁性窒化物、磁性高エントロピー合金）を対象に網羅計算を実施しデータの蓄積（磁化、強磁性転移温度、電気抵抗率）とデータベース化を実施した（図2-2-1-B-3, 4）。磁性高エントロピー合金では6元系にまで対象を拡張し、100万件を超えるデータ数の蓄積に成功している。このデータ数は「富岳」を利用しないと達成できない量である。今後、構築したデータベースに立脚し、スピントロニクス材料における伝導特性と電子状態の相関性を解析するとともに、新規スピントロニクス材料のデータ駆動探索を引き続き実施していく[2-2-1-B-4]。

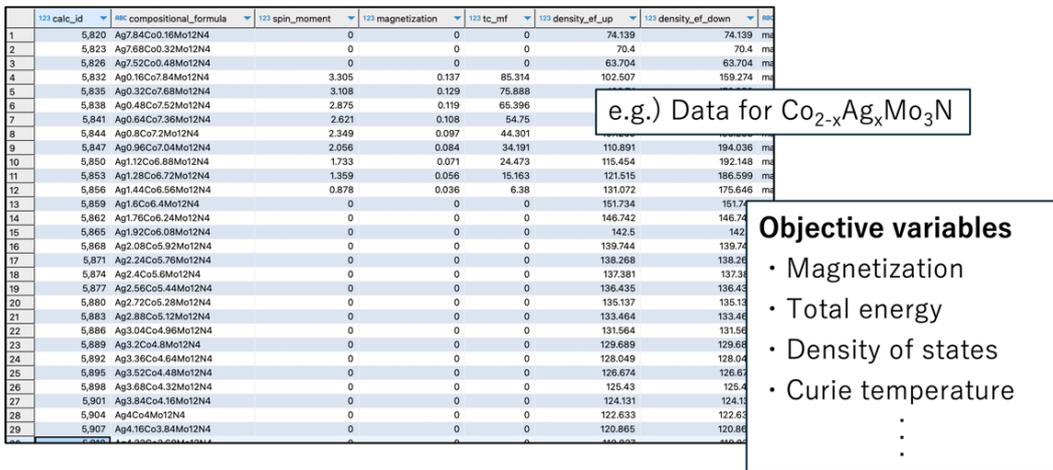


図2-2-1-B-3. β -Mn 構造を有する $\text{A}_{2-x}\text{B}_x\text{Mo}_3\text{N}$ スピントロニクス材料の網羅計算と計算データの蓄積。

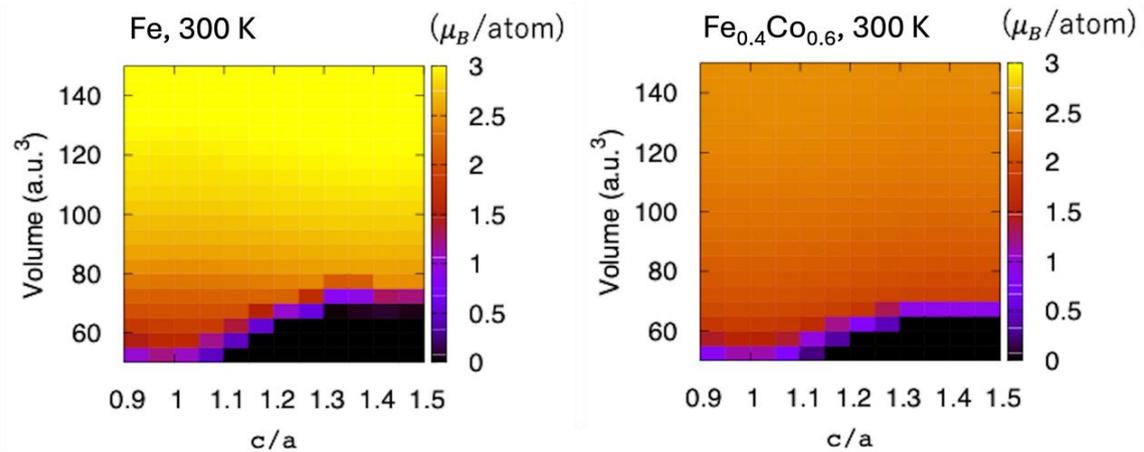


図2-2-1-B-4. AkaiKKR によって計算された Fe と FeCo 合金における有限温度磁気モーメントの体積依存性。

[研究成果の社会実装について]

- ・データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) に計算データを提供し、計算実験連携による材料開発を推進。
- ・東京大学工学系研究科スピントロニクス学術連携研究教育センターとの連携及びネットワーク拠点の整備。

[参考文献]

- [2-2-1-B-3] Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Shinobu Ohya, Hiroshi Katayama-Yoshida, “Theoretical study on the origin of anomalous temperature-dependent electric resistivity of ferromagnetic semiconductor”, *APL Mater.* **11**, 111114 (2023).
- [2-2-1-B-4] 福島 鉄也、“大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発”、サイエントیفック・システム研究会（神戸国際会議場），令和5年10月。

③磁気メモリ材料における有限温度の磁気・伝導特性を定量的に評価する手法の開発

[令和5年度の事業実施計画]

第一原理計算を用いた磁気メモリ材料の特性データ創出の一環として、磁気メモリ材料の設計に向け、デバイス動作温度における物性の予測を行う。特に、有限温度磁性や電気伝導特性の予測手法の開発を行う。また、ヘテロ界面構造を用いた磁気メモリ材料における有限温度の磁気抵抗比を定量的に評価する手法を開発する。

[担当責任者] 新屋 ひかり（東京大学 大学院工学系研究科）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。有限温度における磁気特性や伝導特性を定量的に評価する手法を様々な物質系に対応できるよう開発を行った。また、本手法を温度に対して特異な電気伝導特性を示す強磁性半導体(Ga, Mn)As に適用し、実験値の再現とメカニズムの解明を行った。本成果は国際学術誌 APL Materials に掲載された。さらに、東京大学からプレスリリースされ、複数のメディアで報道された。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

KKR グリーン関数法は、一電子コーンシャム方程式に対するグリーン関数を多重散乱理論により計算する。それゆえ、線型応答理論との組み合わせにより、一般的に困難とされる磁性体の伝導特性などの計算も可能である。KKR グリーン関数法では球対称、異方的ポテンシャルに限らず、結晶のグリーン関数をシングルサイト散乱項と多重散乱項に分解する。シングルサイト散乱項は原点における数値的不安定性が存在するが計算コストはオーダーN である。一方、多重散乱項はダイソン方程式を解く必要があるため、オーダーN³ のコストを必要とし、並列化による高速化が必要になる。周期性のある結晶では、グリーン関数は波数空間で取り扱われ、波数とエネルギーの関数となる。我々はこれらをグループ化し OpenMP による並列化を実施した。材料パラメーターの対しては、MPI を用いて並列化を行っている。データ蓄積加速のため、KKR 法で重要となるエネルギー積分範囲のパラメーターは自動的に決定されるよう工夫を施している。

[研究成果]

社会実装を念頭にした磁気メモリ材料の開発を進めるためには、デバイスが使用される環境に応じた物性予測を正確に行う必要がある。このため、本研究では磁気メモリ材料を想定したヘテロ界面や積層構造における、有限温度での磁性および伝導特性の評価技術の高度化を実施している。

本手法は現時点で金属系のスピントロニクス材料にのみ適用されてきたが、令和5年度は適用範囲を拡大するために強磁性半導体である(Ga, Mn)As に着目した。強磁性半導体は半導体と磁性体両方の特性を同時に併せ持っており、「信号を制御するだけでなく情報の記憶もできるトランジスタ」といった高機能デバイスの創出が期待される材料である。(Ga, Mn)As は有名な強磁性半導体の一つであり、低温では金属的、高温では半導体的な電気伝導特性を示すことが知られてい

る。ところが(Ga, Mn)As における特異なふるまいの原因は未解明であったため、本研究では新たに開発した「有限温度における電気伝導特性を予測可能な第一原理計算手法」を駆使し、この謎の解明に取り組んだ。まず、(Ga, Mn)As における結晶中に自然発生する不純物欠陥が電子状態に与える影響を調べた(図 2-2-1-B-5)。その結果、低温域では、格子間 Mn 原子において生じるスピンのゆらぎが電気伝導を大きく妨げる役割を果たしていることがわかった。一方、高温域では電気伝導を主に担っている As の電子状態が原子振動により変化することで、抵抗が小さくなることが明らかとなった。さらに、温度効果により影響を受けた電子状態を考慮して電気伝導特性を予測したところ、実験値を定量的に再現することに世界で初めて成功した(図 2-2-1-B-6)、[2-2-1-B-5]。(Ga, Mn)As における特異なふるまいは 30 年の長きにわたる謎であったため、本成果は強磁性半導体の応用開発につながる重大な成果であると言える。

本計算手法は上述のように計算可能な材料空間を順調に拡張しており、ヘテロ界面や積層構造を用いた磁気メモリ材料における有限温度の磁気抵抗比を定量的に評価する手法の開発も実施している。今後は多様な材料系に適用することで、あらゆる分野での材料開発において開発期間の短縮やコストの削減に大いに貢献することが期待される。

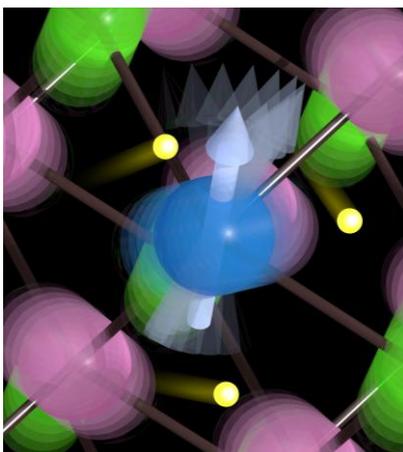


図 2-2-1-B-5. 電子散乱の模式図。

原子振動やスピンゆらぎにより電子が散乱されることで電子状態が変化する。

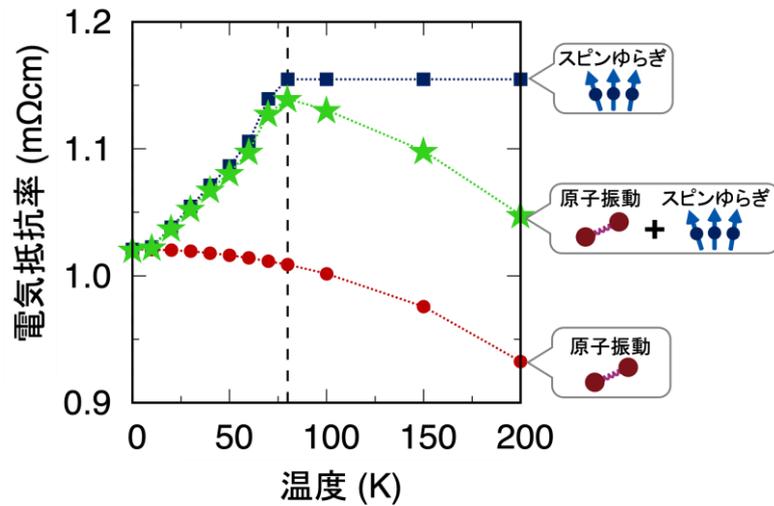


図 2-2-1-B-6. 電気抵抗率の温度依存性の計算結果。
原子振動とスピンゆらぎによる温度効果を同時に考慮することで実験値の再現に成功した。

[研究成果の社会実装について]

科学研究費助成事業や国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ 科研費「若手研究 (No. 22K14285)」との連携
- ・ 科研費「学術変革領域研究 (B) (No. 23H03802、23H03805)」との連携
- ・ データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) との連携

[参考文献]

- [2-2-1-B-5] Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Shinobu Ohya, Hiroshi Katayama-Yoshida, “Theoretical study on the origin of anomalous temperature-dependent electric resistivity of ferromagnetic semiconductor”, *APL Mater.* **11**, 111114 (2023).

C) 高分子材料

①エステルなどの分子内サイト近傍に対する水の侵入の全原子自由エネルギー解析

[令和5年度の事業実施計画]

高分子集合系に侵入し劣化の要因となりうる不純物（水やガス、イオン）など小分子の溶解および吸着の自由エネルギーを、高分子を構成する原子団に沿って空間を分割した上で計算し、小分子の侵入を規定する分子間相互作用成分を検討する。

[担当責任者] 松林 伸幸（大阪大学 大学院基礎工学研究科）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションおよび自由エネルギー計算によって、高分子媒質への低分子の溶解性を調べた。エステル基や水酸基のような親水基が存在すると、高分子への水の侵入が促進される。また、非晶部分と結晶部分の溶解性の差は、バルク密度ではなく高分子媒質の構造変化によって決ま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、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

分子動力学シミュレーションには GROMACS を用いた。これは「富岳」にもインストールされており、高い並列化効率を持つ。系の粒子数は 10^5 程度としたが、個々の計算条件について初期条件を変えた多数の独立な計算を行うことで分子運動の遅い高分子集合系への溶解自由エネルギーを高い精度で求めている。

[研究成果]

エステル基を持つ汎用高分子は多い。飲料容器や衣料繊維など様々な用途で利用される polyethylene terephthalate (PET) は代表例であり、試料内部では結晶部分と非晶部分が混在している（図 2-2-1-C-1）。本研究では、全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションによって、PET の結晶状態と非晶状態のそれぞれに対する小分子の溶解自由エネルギーを計算した。また、比較として、単純な polyethylene (PE)、結晶化により密度が下がる polystyrene (PS)、PET より親水的なセルロースの計算を行った。溶解分子は極性のある水、および、対照として無極性の窒素とした。常温における高分子の運動は極めて遅い。そのため、温度を調整しながら十分に緩和させる必要がある。さらに、様々な配置状態を考慮するために、初期条件を変えた多数の独立なシミュレーションも必要である。「富岳」の大規模資源がなくては難しい計算であった。また、溶解性を規定する分子間相互作用成分を同定するために、溶解自由エネルギーを溶解分子と高分子の間の静電相互作用、van der Waals 相互作用、および、高分子媒質の構造変化に起因する寄与に分割した（図 2-2-1-C-2）。

水と窒素を比較すると、静電相互作用は極性の高い前者の溶解性を促進し、van der Waals 成分はサイズの大きい後者の溶解に有利に働く。特に、PET におけるエステル基およびセルロースの水酸基が水の溶解性の向上に顕著に働くことが分かった。また、水と窒素の両方について、PS 以外の高分子では結晶は非晶に比べると溶解性は顕著に低い。PS が例外となるのは、結晶構造に水

や窒素のサイズに相当する空孔が存在するためである。逆に、PE、PET、セルロースでは、溶解分子の導入の際に空孔を生成する必要があるが、硬い構造を持つ結晶では空孔生成の自由エネルギー損失が大きいために高分子媒質の構造変化が反発的に働き、結晶への溶解性を大きく下げる。

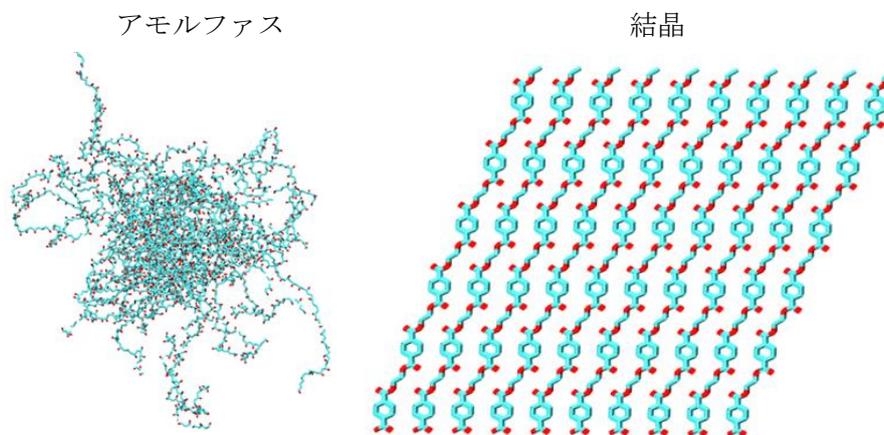


図 2-2-1-C-1. 非晶および結晶状態における PET 集合系のスナップショット。常温では高分子の運動が遅く、平衡構造のアンサンブルを得るために大きな計算資源が必要である。

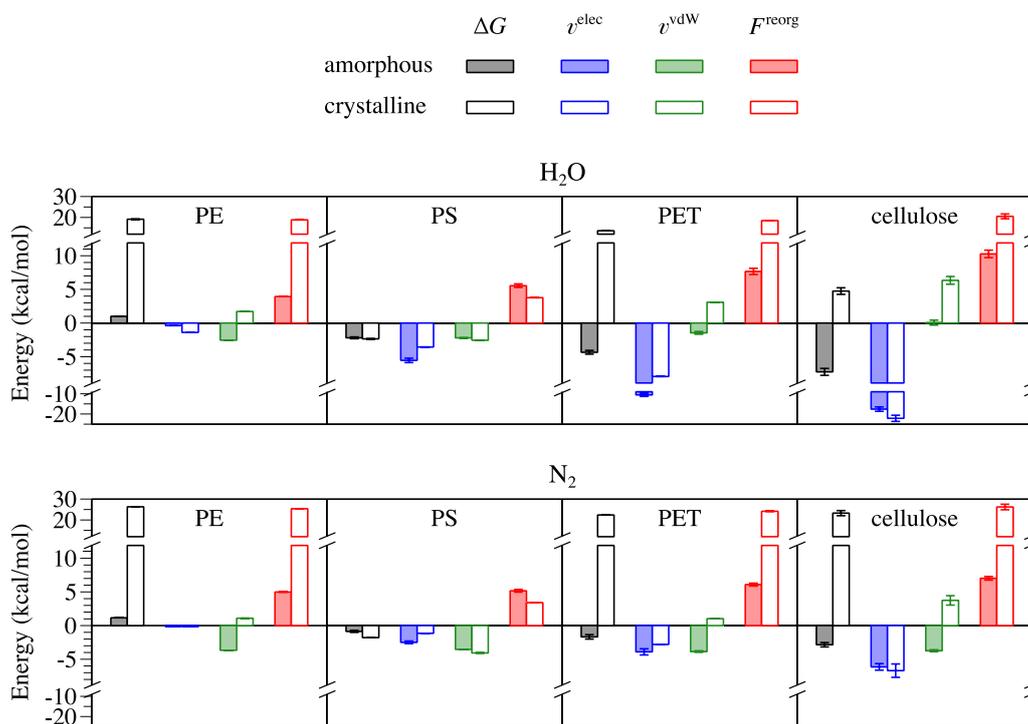


図 2-2-1-C-2. 非晶ならびに結晶状態の PE、PS、PET、および、セルロースへの水と窒素の溶解自由エネルギー ΔG とその成分分割。

v^{elec} と v^{vdW} は、それぞれ、溶解分子と高分子の間の静電相互作用成分と van der Waals 成分を表し、 F^{reorg} は溶解分子の導入に伴う高分子媒質の構造変化からの寄与である。

[研究成果の社会実装について]

企業との共同研究により、社会実装をさらに進めた。

- ・ A社とのバイオ由来高分子材料に関する共同研究
- ・ B社との環境適合型高分子材料に関する共同研究
- ・ その他7社との共同研究

②機械学習を用いた高分子内における水分子の長時間ダイナミクス解析

[令和5年度の事業実施計画]

高分子内における水分子の分子動力学シミュレーションを実施し、その短時間の時系列データを用いて GAN を取り入れた機械学習 MD-GAN を活用して、長時間ダイナミクスを解析する。

[担当責任者] 泰岡 顕治（慶應義塾大学）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。深層学習手法の GAN の不安定性から発する MD-GAN の不安定性を軽減するために、機械学習手法の再検討を行い、結果のばらつきを 1/5 程度にすることに成功した。また、高分子内の水分子の拡散に関するシミュレーション結果を用いて、分子ダイナミクスの違いを自動的に検知する機械学習手法を適用し、短時間の分子運動の違いと拡散係数の相関性を見出した。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

分子動力学シミュレーションには GROMACS を使用した。GROMACS は並列計算にチューニングされているため、大規模での実行が可能である。また、機械学習には、PyTorch を使用して記述した自作のソフトウェアを用いて「富岳」で実行した。

[研究成果]

これまでに MD-GAN を用いて短時間の時系列データから長時間の時系列データを予測することに成功してきているが、GAN の不安定性から来る学習の不安定性が問題になっていた。機械学習のアルゴリズムを見直すことにより、安定性を向上することに成功した。具体的には、MD-GAN の中にあるディープニューラルネットワークのうち時間発展のディープニューラルネットワークに入力要素間の依存関係を抽出するモデルである Self-Attention を導入した。Self-Attention は 3 つの段階から成っている。1 つ目の段階で入力シーケンス内の任意の要素と他の全要素の間の類似度に基づいて重みを計算する。2 つ目の段階でこれらの重みをソフトマックス関数によって正規化する。3 つ目の段階でこれらの重みをシーケンス内の対応する要素と組み合わせることで、Attention スコアを出力するものである。これらを「富岳」で実行することにより、多くの試みを実行することが可能となった。

また、分子ダイナミクスの違いを自動的に検知する機械学習手法によりいくつかの系で分子ダイナミクスと物性値の関係性を結びつけることに成功してきていた。例えば、タンパク質とリガンドの系で、リガンドを変えた際の自由エネルギーの違いと分子ダイナミクスの違いを関係づけたり、潤滑油の系において分子種とずり速度を変えた際の粘度と分子ダイナミクスの違いと関係づけたりしている。本研究では、高分子内の水分子の分子動力学シミュレーションデータから分子の運動について解析をして（図 2-2-1-C-3）、短時間の分子ダイナミクスと長時間から求められる拡散係数を関係付けることができた（図 2-2-1-C-4）、[2-2-1-C-1]。

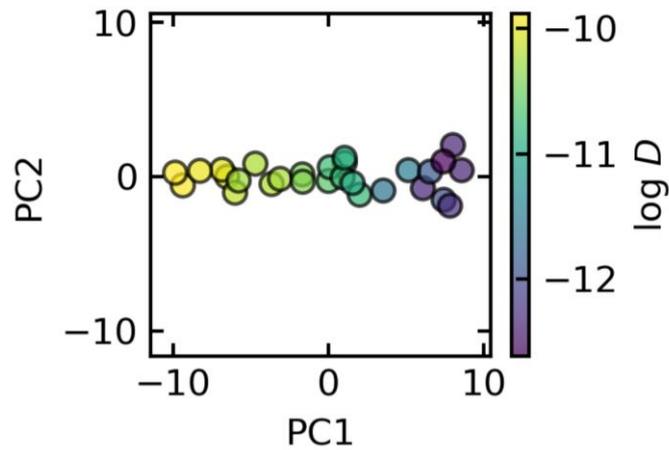


図 2-2-1-C-3. 分子ダイナミクスの違いを自動検知する機械学習の結果。分子のダイナミクスの違いを Wasserstein 距離を用いて計算し、その結果を二次元空間に写像した結果である。PC1 と PC2 は写像した時の軸である。

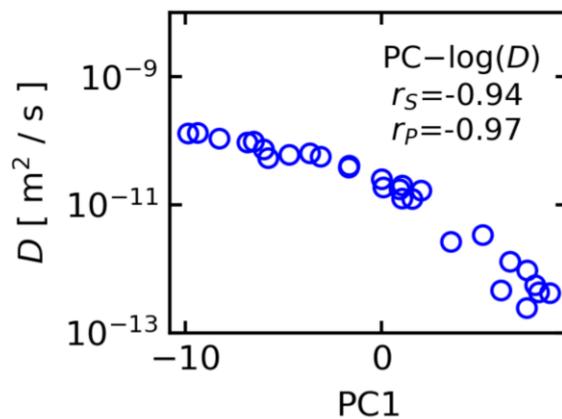


図 2-2-1-C-4. 分子ダイナミクスの違いを自動検知する機械学習の結果と拡散係数の比較。
 r_s は Spearman の順位相関係数、 r_p は Pearson の積率相関係数を表している。

[研究成果の社会実装について]

- ・ JST CREST「氷-ゴム界面摩擦機構のマルチスケール解明」で、氷界面におけるプレメルト層の解析に応用した。
- ・ 企業との共同研究：ソフトウェアメーカーとの共同研究により、本プロジェクトの成果をもとにして様々な系への応用を実施している。

[参考文献]

- [2-2-1-C-1] Kota Sakaki, Katsuhiro Endo, Kenji Yasuoka, “Enhanced MD-GAN for stable prediction of molecular dynamics simulation data”, 18th International Conference on the Properties of Water and Steam, Boulder, USA, June 23-28, 2024

③低分子溶液や油脂の溶解自由エネルギーを計算する。また、高分子鎖が溶液に溶けた状態の安定性の解明

[令和5年度の事業実施計画]

高分子が低分子溶液または油脂に溶けた際の安定性の自由エネルギーを計算する。自由エネルギー計算にはエネルギー表示法や熱力学的積分法を用いる。自由エネルギーを要素に分割することで安定化の分子論を解明する。

[担当責任者] 藤本 和士 (関西大学)

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。高分子が低分子溶液または油脂に溶解した際の安定性を定量的に評価する目的で、3種類のトリグリセリド油脂分子のモデリングを実施し、これらのトリグリセリドに関する静的及び動的熱力学的性質の実験データを良く再現した。さらに、ポリスチレンと油脂を接触することにより、油脂に溶解する際の界面構造を得た。アクリル系樹脂のエタノール水溶液への自由エネルギーを計算し、80%エタノール水溶液が最も安定であることがわかった。

[成果を得るため用いた計算モデル、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

3種類のトリグリセリドの計算は最大で65万原子系であった。高分子材料とトリグリセリドを接触させた系は100万原子系になる。効率的な並列化計算のために分子動力学計算では領域分割法によって計算を行っている。「富岳」の使用ノード数を増やすことにより、原子数が増えても長時間の計算が可能であった。

[研究成果]

トリグリセリドのモデリング：本研究の最終目的は、油脂が高分子材料に及ぼす影響を分子レベルから解明することである。3種類のトリアシルグリセロール (TAG) を対象に、分子動力学 (MD) 計算を実施した。これら3種類のTAGが現実の物理化学特性を再現できるか検証を行った。3種類のTAGの界面張力 (γ)、密度 (ρ)、凝集密度エネルギー (E_c^d) を計算した結果、界面張力および密度がよく実験値を再現しており、本MD計算のモデリングが妥当であることがわかった。界面張力は炭素鎖が短い油脂よりも長い油脂の方が大きい、その差は2割程度であった。一方で、密度に関しては炭素鎖が長い油脂の方が低いことがわかった。しかしながら、油脂の集まりやすさ、高分子との親和性に関係するこれら3つの物理量には大きな差がなかった。次に、動的熱力学量である拡散係数を3種類のTAGについて計算を行った。MD計算で得られる拡散係数は系サイズ依存性があるため、複数の系のサイズを計算し、線型フィッティングから実験と比較できる拡散係数 (D^∞) を得る必要がある。この計算には巨大系の長時間計算が必要であり、「富岳」の利用により初めて得られる。2種類のTAGの D^∞ は同じ値であり、もう1種類の D^∞ に比べて5倍大きな値であった。このように、静的熱力学量は3種類の間で差がないにも関わらず、動的熱力学量は大きく異なることが明らかとなった (図2-2-1-C-5)。

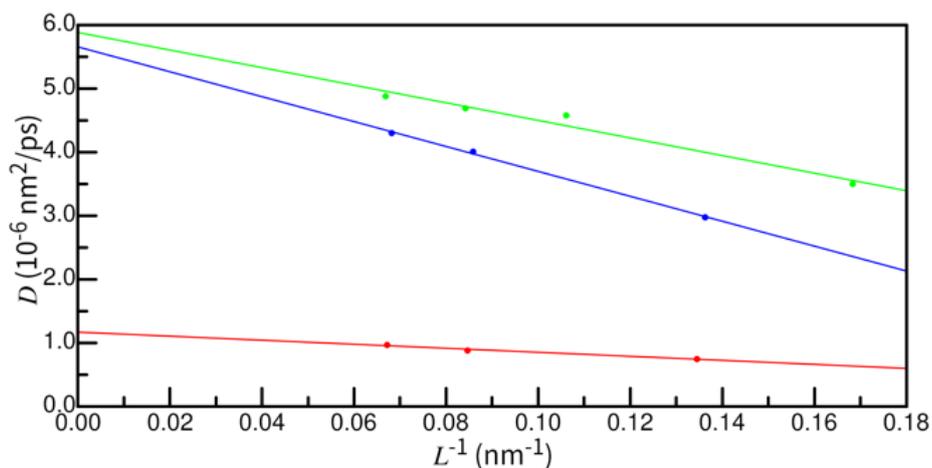


図 2-2-1-C-5. 様々な MD セルサイズにおける 8:0 (緑)、18:1 (赤)、18:3 (青) トリグリセリドの拡散係数。

実線はそれぞれの値を最小二乗法によりフィッティングした直線。y 切片が実験と比較可能な拡散係数であり、8:0、18:1、18:3 それぞれ 6.0×10^{-12} 、 1.2×10^{-12} 、 5.7×10^{-12} m^2/s であった。

高分子の自由エネルギー計算: アクリル樹脂の 0%~100% エタノール水溶液に関する溶解自由エネルギーを計算した。80% エタノール水溶液が最も安定であることがわかった。溶解自由エネルギーを vdW 項と Coulomb 相互作用項に分割したところ、エタノールの割合が少ないほど vdW 項は不利に働く。一方、エタノールの割合が多いほど Coulomb 相互作用項は有利に働く事が明らかとなった。つまり、これらのトレードオフの関係により 80% エタノール水溶液が最も安定となる事がわかった (表 2-2-1-C-1)。

表 2-2-1-C-1. アクリル系高分子 10 量体のエタノール水溶液への溶解自由エネルギー。

Solvent		ΔG (kJ/mol)
Water (mol%)	Ethanol (mol%)	
100	0	64.45
80	20	11.17
60	40	-1.38
40	60	-7.57
20	80	-10.1
0	100	-9.02

[研究成果の社会実装について]

企業および国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ 油脂メーカーとの共同研究
- ・ 自動車メーカーとの共同研究
- ・ 開発方法論の JST 革新的 GX 技術創出事業 (GteX) 課題への適用
- ・ 開発方法論の JST CREST「力学的安定性と選択的分解性を兼備した循環型高分子微粒子材料の創成」課題への適用

D) 構造材料

①構造材料の応力腐食割れメカニズムの解析

[令和5年度の事業実施計画]

構造材料の劣化現象の解明に向けて、構造材料の応力腐食割れシミュレーション用に化学反応に対応したニューラルネットワークポテンシャルを構築するとともに、構築したニューラルネットワークポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションにより、構造材料の応力腐食割れメカニズムの解析を実施する。

[担当責任者] 久保 百司（東北大学 金属材料研究所）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。機械学習分子動力学法に基づき、水環境下の CrMnFeCoNi 系ハイエントロピー合金に対する引張シミュレーションを行った。その結果、引張が進むにつれて、合金表面において Cr と Mn が豊富な酸化層が形成されたこと、主に粒界付近で水素・酸素原子の合金内への侵入が生じていることが分かった。このような局所的な構造変化やゆがみがハイエントロピー合金の機械的強度を下げる要因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、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

当研究室で開発した機械学習分子動力学シミュレータ Laich+ [2-2-1-D-1]は、MPI と OpenMP のハイブリッド並列が実装されており、金属材料系で 100 万原子の大規模計算を実現している。本研究で行ったモデルはまだ 6 万原子程度だが、将来的には 100 万原子程度の多結晶モデルを用いた応力腐食割れシミュレーションを計画している。

[研究成果]

第一原理分子動力学シミュレーションを行い、機械学習ポテンシャル (MLP) の訓練用のデータセットを作成した。Cr, Mn, Fe, Co, Ni からなる Cantor 合金のバルク・表面、 H_2O 、スピネル型酸化物のデータを収集した。得られた構造を学習データとして、MLP モデル Allegro を用いて学習を行った。図 2-2-1-D-1 に示すように、 $\Sigma 5(012)$ の粒界と予亀裂を持ち、金属元素が等分率で含まれるモデルを作成した。当研究室で開発した機械学習分子動力学ソフトウェア Laich+ [2-2-1-D-1]を用いて引張シミュレーションを行った。

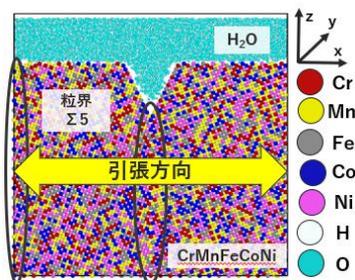


図 2-2-1-D-1. Cantor 合金を用いた水環境下における引張シミュレーションモデル。

合金表面において金属元素と水分子の反応が見られた。図 2-2-1-D-2 にひずみ 10%における、各金属元素の Cantor 合金表面付近における Z 座標の分布を示す。ひずみ 10%において、表面付近では Cr と Mn の割合が高くなっており、Cr と Mn が豊富な酸化層が形成されていることが分かった。この酸化層の形成に伴い、表面から少し合金内部に入った領域では Cr と Mn の欠乏層が形成されている。このような Cr と Mn の酸化が優先的に起こる傾向は、実験における Cantor 合金の酸化傾向と一致している。長時間腐食されて形成された Cr と Mn の酸化層に応力がかかると合金の破断につながるという報告もあり、Cr と Mn の酸化層が腐食割れに悪影響を与えると考えられる。

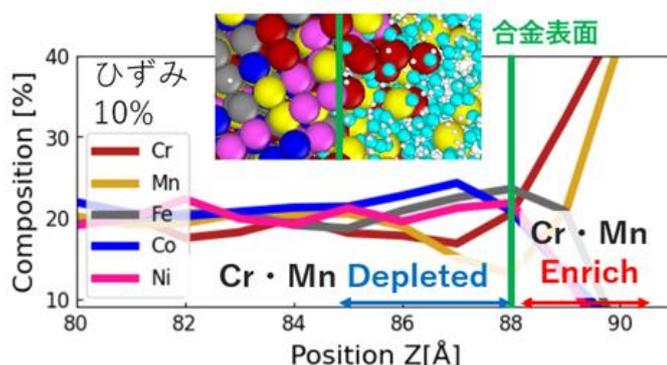


図 2-2-1-D-2. ひずみ 10%における、各金属元素の Cantor 合金表面付近における Z 座標の分布。

また、ひずみの増大に伴って、水素原子と酸素原子の合金内への侵入が見られた。図 2-2-1-D-3(a), (b)はそれぞれ Cantor 合金内における水素原子と酸素原子の X 座標の分布と侵入深度の分布を表す。図 2-2-1-D-3(a)からは、侵入の大半が粒界付近で生じていることが分かる。図 2-2-1-D-3(b)からは、侵入した酸素原子の多くは表面から 5 Å 程度の侵入深度に留まっているのに対し、水素原子は最大 20 Å まで侵入していることが分かる。つまり、粒界では多くの水素原子が深くまで侵入していることが観察できた。先行研究において、CrCoNi 合金では粒界から水素の侵入が見られており、それが合金の強度や延性に影響を与えるという報告がある。そのため、Cantor 合金においても、腐食環境で水素原子が粒界に侵入することは機械特性の低下につながると思われる。

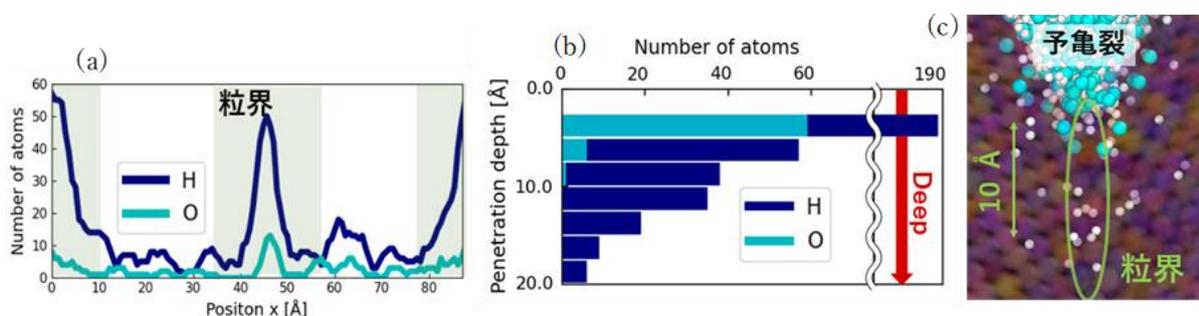


図 2-2-1-D-3. Cantor 合金内における水素原子と酸素原子の (a) X 座標の分布と (b) 侵入深度の分布、及び (c) 予亀裂を持つ粒界付近のスナップショット。

[参考文献]

- [2-2-1-D-1] Ryutaro Kudo, Yusuke Ootani, Shogo Fukushima, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo, “Neural network molecular dynamics simulation on friction-induced chemical reactions of Si₃N₄ in water and ethylene glycol environments” , *Chem. Lett.* **53**, upae114 (2024).

②構造材料変形・破壊解析用 NN 原子間相互作用の構築

[令和5年度の事業実施計画]

構造材料の寿命予測に向けて、構造材料として広く用いられている鉄を対象として、転位の運動・核生成による変形および粒界やき裂先端を起点とした破壊過程に、環境因子として水素の影響を包括的に取り扱うことのできる高精度ニューラルネットワーク原子間相互作用を構築し、その高速化と繰り返し応力下での転位運動解析のため繰り返し応力下での転位の運動を原子レベルでシミュレートする。

[担当責任者] 新里 秀平 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。鉄水素系 NN 原子間相互作用を構築し、鉄の各種材料特性および水素の影響について検証した。構築した原子間ポテンシャルは鉄のらせん転位特性をよく再現し、材料中水素及び材料表面での水素分子の解離・生成を伴う水素の侵入および脱離のダイナミクスを精度よく計算できることを確認した。このポテンシャルを用いてらせん転位を含む鉄単結晶の中規模変形シミュレーションを実施し、水素の添加によりらせん転位の多重交差すべりによる点欠陥形成が促進され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、並列化手法及びアプリケーション高度化等]

現在提案されている機械学習原子間ポテンシャルを用いた計算においてボトルネックとなっているのは、従来の経験的原子間ポテンシャルと比べて一原子あたりのエネルギーおよび力の計算に時間を要することである。そこで、本サブ課題では「富岳」を利用した計算においてはLAMMPSを使用し、領域分割による大規模な並列化（～300 ノード並列）を行うことで各プロセッサに割り当てられる原子の数を削減した。これにより 10 万原子スケールの中規模モデルを用いた計算を短時間で実施することができた。

[研究成果]

構造材料において長寿命化を達成するためには、腐食や疲労に代表されるような長時間にわたる材料劣化現象のメカニズム解明およびそれらを考慮した信頼性の高い寿命予測が不可欠である。そこで本サブ課題では、繰り返し応力下における材料寿命予測モデルを構築することを目的とし、令和5年度は予測モデルの構築に当たって不可欠である破壊、塑性変形、格子欠陥の熱力学・動力学およびそれらと環境水素原子との相互作用を包括的に扱うことのできる NN 原子間ポテンシャルを構築した。具体的には、まず水素を含む α 鉄に関する 100 原子未満の小規模な系に対する第一原理計算を Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) により実施し、原子構造とエネルギーとの対応関係を求めた。その後、それらを教師データとして DeePMD-kit によるニューラルネットワーク原子間ポテンシャルの学習を行い、VASP による第一原理計算との比較を行った。その結果、構築した原子間ポテンシャルによるエネルギーと力の予測値が第一原理計算をよく再現することが確認できた (図 2-2-1-D-4)、[2-2-1-D-2]。また、材料内部の水素拡散や表面での水素

の侵入・脱離プロセスをはじめとする幅広い材料特性を再現できることも確認した。特に、構築した NN 原子間ポテンシャルは、従来の経験的原子間ポテンシャルでは定性的にも再現ができていなかった鉄のらせん転位芯のエネルギー特性についても第一原理計算を定量的に再現できる。

次に、構築した原子間ポテンシャルを用いてらせん転位を含む鉄単結晶モデルのせん断変形シミュレーションを実施し、らせん転位運動に対する水素の影響を解析した。この計算により水素の添加によりらせん転位の多重交差すべりによる点欠陥形成が促進されることを示した (図 2-2-1-D-5)。らせん転位の多重交差すべりをともなう運動の解析には十分な長さのらせん転位をモデル化する必要がある、10 万原子オーダーの中規模以上モデルを用いた計算の実施が不可欠である。「富岳」を用いた大規模並列計算によりニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた中規模モデルの MD 計算を短時間で実施することが可能となった。

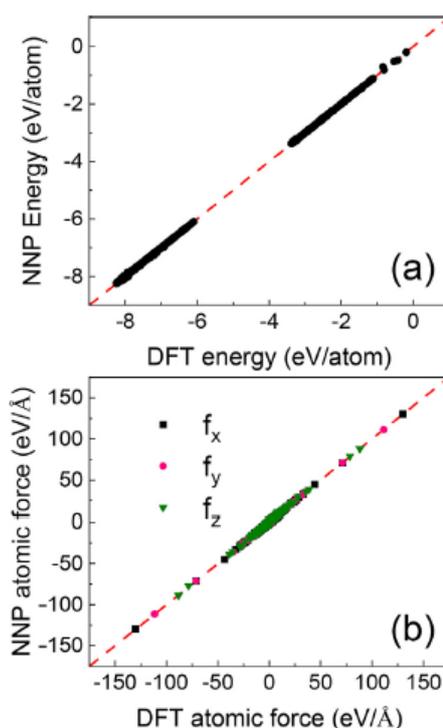


図 2-2-1-D-4. 構築した原子間ポテンシャルにより予測した (a) ポテンシャルエネルギー・(b) 原子間力と第一原理計算との比較。

構築した原子間ポテンシャルは教師データだけでなく、学習に使用していない検証用データの構造に関しても第一原理計算の結果をよく再現している [2-2-1-D-2]。

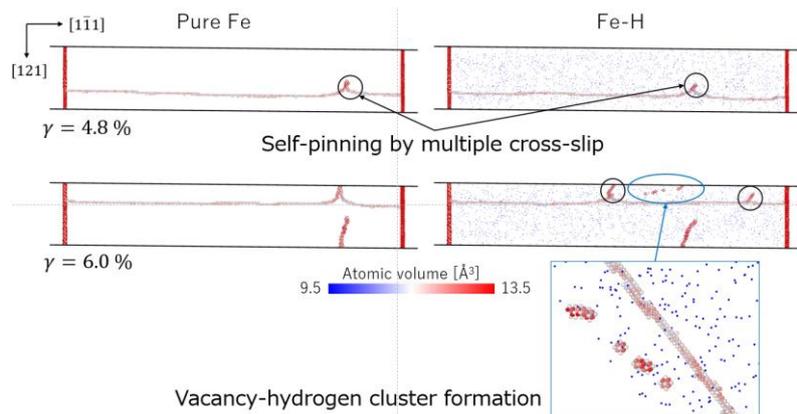


図 2-2-1-D-5. 構築した原子間ポテンシャルを用いた中規模せん断変形シミュレーションで観察された原子構造。

水素原子と欠陥（表面、転位、点欠陥）周囲の鉄原子のみを表示し、原子体積で色付けしている。水素環境下ではらせん転位の多重交差すべりによる欠陥生成が促進され、さらに生成された点欠陥（原子空孔）と水素が結合することにより安定化することを示した。

[研究成果の社会実装について]

- ・ 極限環境対応構造材料開発研究拠点 (RISME) におけるデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) (「富岳」成果創出加速プログラム DDCoMS) との連携：水素極限環境下における変形・破壊データの創出

[参考文献]

- [2-2-1-D-2] Shihao Zhang, Fanshun Meng, Rong Fu, Shigenobu Ogata, “Highly efficient and transferable interatomic potentials for α -iron and α -iron/hydrogen binary systems using deep neural networks”, *Comput. Mater. Sci.* **235**, 112843 (2024).

E) AI・データ科学

①高分子材料の引張破壊の詳細解析と電極・電解質界面の安定状態サンプリングの支援

[令和5年度の事業実施計画]

トポロジカルデータ解析 (TDA) により藤本グループの高分子鎖の引張破壊 MD 計算データを詳細解析し、破壊の前兆や起点となる構造変化を抽出する。また、館山グループの電極・電解質界面を対象として位相的特徴量空間における MD データの分布を調べ、準安定状態の同定を行う。

[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]

上記実施計画を遂行した。大規模で複雑な原子構造を穴 (リングや空洞) の情報に基づいて2次元ヒストグラムとして定量化できるトポロジカルデータ解析 (TDA) の手法を用いて分子動力学 (MD) 計算データを解析し、高分子鎖の引張破壊における破壊の起点とメカニズムを、Mg 系固体電解質の界面におけるイオン種の安定状態の分類と同定をそれぞれ行った。

[研究成果]

原子座標セットのような離散点データが持つリングや空洞といった「穴」を定量的に捉えるパーシステントホモロジーを用いると 3N 次元データを2次元の散布図に次元圧縮することができる。これを活用して、大規模かつ複雑な構造を持つ系の MD 計算などから理解の本質につながる構造変化の要点や非自明な秩序構造を取り出し解析する枠組みが TDA である。令和5年度は、高分子材料の引張破壊の理解と固体電解質界面におけるイオンの安定状態のサンプリングを支援する目的で TDA の適用可能性を調べた。

高分子の引張破壊については、藤本グループから提供された 100 万粒子系のメタクリル酸メチルエステル (PMMA) およびポリカーボネート (PC) の MD データを解析した。系に含まれる pore (空洞) の時間発展を調べたところ、PMMA, PC ともに破断に至るまで pore 数が単調減少していた (図 2-2-1-E-1 上段)。特に $t=5$ までの初期変形での減少が急であり、pore の大きさと空間分布を可視化して追跡したところ小さな pore が合体して大きな pore に成長していた。また、PMMA では pore サイズの成長が空間的な局在するのに対して PC では pore の成長が均一に進むなど、破壊の前兆や起点となる事象を捉えることができた (図 2-2-1-E-1 下段)。解析には 20GB 超のメモリを要するが、第3世代 Xeon サーバの 1core を用いてスナップショットあたり 30 分程度の計算時間であった。

固体電解質におけるイオンの安定状態の解析は Mg 系の界面構造を含む 5000 原子程度の MD データを対象に行った (図 2-2-1-E-2)。Mg を除いた原子座標セットが作る全ての空洞から Mg 原子を内包するもののみを選んでパーシステント図を再構成し、多様な構造で構成されるアモルファス系から再構成したパーシステント図との差を調べたところ、界面特有のイオン構造を検出することができた (図 2-2-1-E-3)。これにより TDA がイオンの準安定状態のサンプリングを支援できることを示せた。

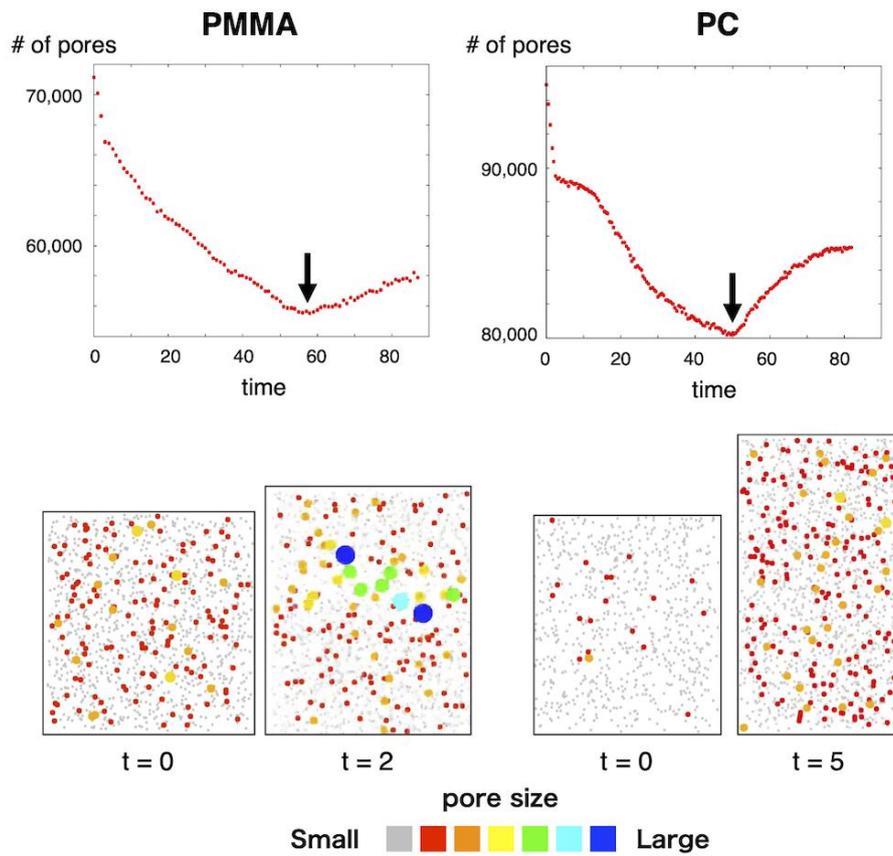


図 2-2-1-E-1. (上段) PMMA および PC の引張破壊シミュレーションにおける pore (空洞) の数の時間発展。矢印は破断のタイミングを示す。
 (下段) 初期構造 (t=0) および初期の引張変形 (PMMA:t=2, PC:t=5) における pore のサイズとその空間分布。

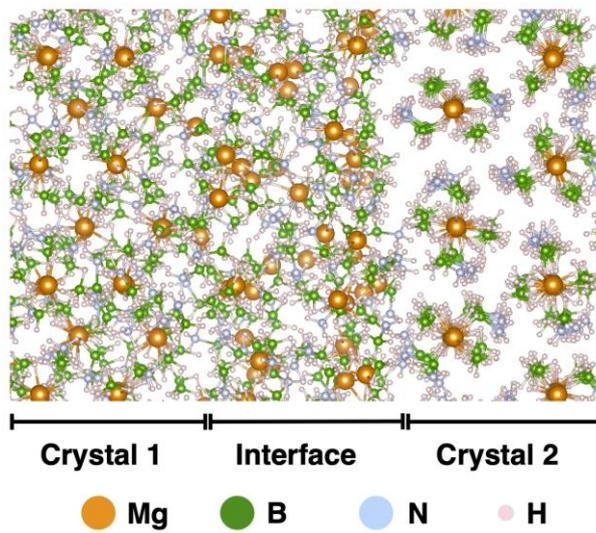


図 2-2-1-E-2. Mg 系固体電解質 $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2(\text{NH}_3\text{BH}_3)_2$ の結晶界面の MD 計算のスナップショット。

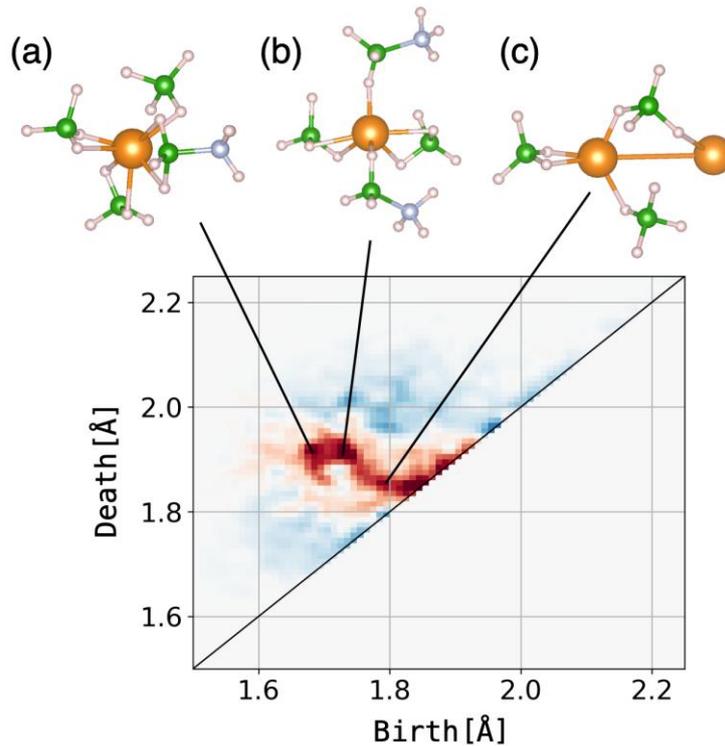


図 2-2-1-E-3. Mg 以外の原子が作る空洞のパーシステント図（形やサイズの特徴を定量化した 2 次元ヒストグラム）について界面系とアモルファス系の差を調べたもの。

赤が界面系に特有の空洞、青がアモルファス系に特有の空洞を示す。赤の濃い領域の典型的なイオン構造を(a)-(c)に示す。(b)は結晶中の安定なイオン構造に対応する。準安定な構造として(a)や(c)が捉えられた（オレンジ：Mg、グリーン：B、ライトブルー：N、ピンク：H）。

[研究成果の社会実装について]

企業および国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ A社との共同研究において本手法を用い、アモルファス保護膜の特性を系統探索
- ・ データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) において本手法を用い、金属材料の劣化プロセスを評価
- ・ JST 革新的GX技術創出事業 (GteX) プロジェクトにおいて本手法を用い、水素貯蔵材料の水素取込みプロセスを解析

(2) プロジェクトの総合的推進

本研究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・調整を実施しプロジェクトを推進した。

- 統括会議（5回開催）：8/10、12/13、12/26、2/7、3/15 開催
- 実施者会議（4回開催）：5/27、8/23、1/4、3/30 開催

電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野における国内外の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。

- 研究フォーラム（第1回）：10/31 開催
- 研究フォーラム（第2回）：12/26 開催
- 合同公開シンポジウム（成果報告会）：2/29 開催
- 第16回材料系ワークショップ（共催）：10/3 開催
- 第17回材料系ワークショップ（共催）：2/6 開催

また、プロジェクトで得られた成果は論文発表（21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、以下のとおり積極的に公表した。

- 合同公開シンポジウム（成果報告会）：2/29 開催
- 第3回スーパーコンピュータ「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）：12/1
- 第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会（ポスター発表）：3/12
- 第10回 HPCI システム利用研究課題成果報告会（ポスター発表）：10/25-26
- シンポジウム開催情報等のホームページ掲載

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5年度通常総会（出席）：5/19
- 「次世代計算基盤を利用した成果の最大化に向けて」に関する意見交換会（参加）：1/15

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）、MateriApps（物質科学シミュレーションのポータルサイト）、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）などとの連携を通して、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。

- EIS コンソーシアム 2023年度第1回研究会（講演）：8/29
- EIS コンソーシアム 2023年度第2回研究会（講演）：10/26
- EIS コンソーシアム 2023年度第4回研究会（講演）：3/14
- 第43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（協賛）：9/4-

- 第44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 (協賛) : 2/19-23
- 第9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 (講演) : 9/4

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。

- 研究フォーラム (第1回) : 10/31 開催
- 研究フォーラム (第2回) : 12/26 開催
- 合同公開シンポジウム (成果報告会) : 2/29 開催

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 HPCI システムの計算資源の追加について検討した。「富岳」の計算資源を有効利用し、課題配分の 82.7%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
5/19	HPCIコンソーシアム令和5年度通常総会（参加）	オンライン開催
5/27	第1回実施者会議（キックオフ）	東京大学工学部2号館会議室5
8/10	第1回統括会議	メール審議
8/23	第2回実施者会議	メール審議
8/29	EISコンソーシアム 2023年度第1回研究会（講演）	オンサイト（ビジョンセンター東京駅前 701）とオンラインのハイブリッド開催
9/ 4-8	第43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（協賛）	オンライン開催
9/ 4	第9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（講演）	オンサイト（秋葉原UDX カンファレンス）とオンラインのハイブリッド開催
10/ 3	第16回材料系ワークショップ（共催）	オンサイト（秋葉原UDX NEXT-1）とオンラインのハイブリッド開催
10/25-26	第10回「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会（ポスター発表）	オンサイト（THE GRAND HALL）とオンラインのハイブリッド開催
10/26	EISコンソーシアム 2023年度第2回研究会（講演）	オンサイト（ビジョンセンター東京駅前 702）とオンラインのハイブリッド開催
10/31	研究フォーラム（第1回）	オンライン開催
12/ 1	第3回スーパーコンピュータ「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
12/13	第2回統括会議	メール審議
12/26	第3回統括会議	メール審議
12/26	研究フォーラム（第2回）	オンライン開催
1/ 4	第3回実施者会議	メール審議
1/15	「次世代計算基盤を利用した成果の最大化に向けて」に関する意見交換会（参加）	オンサイト（秋葉原UDX カンファレンスRoom A, B）とオンラインのハイブリッド開催

日程	行事名	開催場所等
2/ 6	第17回材料系ワークショップ（共催）	オンサイト（秋葉原UDX NEXT-1）とオンラインのハイブリッド開催
2/ 7	第4回統括会議	メール審議
2/19-23	第44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（協賛）	オンライン開催
2/29	合同公開シンポジウム（成果報告会）	オンライン開催
3/12	第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会（ポスター発表）	オンサイト（富士ソフトアキバプラザ アキバホール）とオンラインのハイブリッド開催
3/14	EISコンソーシアム 2023年度第4回研究会（講演）	オンサイト（ビジョンセンター東京八重洲 905）とオンラインのハイブリッド開催
3/15	第5回統括会議	メール審議
3/30	第4回実施者会議	オンライン開催

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・環境材料研究センター センター長 館山 佳尚
サブ課題A 「電池・触媒材料」	国立研究開発法人物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究センター センター長 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・環境材料研究センター センター長 館山 佳尚
	②：国立研究開発法人物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究センター センター長 館山 佳尚
	③：国立研究開発法人物質・材料研究機構	ナノアーキテクトニクス材料研究センター 主幹研究員 中田 彩子
	④：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
	⑤：国立大学法人山形大学	学術研究院（理学部担当） 准教授 笠松 秀輔
	⑥：国立大学法人北海道大学	大学院理学研究院 准教授 小林 正人
サブ課題B 「磁性材料」	国立研究開発法人産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム付き 三宅 隆
	①：国立研究開発法人産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム付き 三宅 隆
	②：国立研究開発法人産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム長 福島 鉄也
	③：国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 特任准教授 新屋 ひかり
サブ課題C 「高分子材料」	国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 教授 松林 伸幸
	①：国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 教授 松林 伸幸

業務項目	担当機関	担当責任者
	②：学校法人慶應義塾	理工学部・理工学研究科 教授 泰岡 顕治
	③：学校法人関西大学	化学生命工学部 准教授 藤本 和士
サブ課題D 「構造材料」	国立大学法人東北大学 金属材料研究所	計算材料学センター センター長・教授 久保 百司
	①：国立大学法人東北大学 金属材料研究所	計算材料学センター センター長・教授 久保 百司
	②：国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 助教 新里 秀平
サブ課題E 「AI・データ科学」	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
(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・環境材料研究センター センター長 館山 佳尚
	国立研究開発法人物質・材料研究機構	ナノアーキテクトニクス材料研究センター 主幹研究員 中田 彩子
	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
	国立大学法人山形大学	学術研究院（理学部担当） 准教授 笠松 秀輔
	国立大学法人北海道大学	大学院理学研究院 准教授 小林 正人
	国立研究開発法人産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム付き 三宅 隆
	国立研究開発法人産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム長 福島 鉄也
	国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 特任准教授 新屋 ひかり
	国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 教授 松林 伸幸

業務項目	担当機関	担当責任者
	学校法人慶應義塾	理工学部・理工学研究科 教授 泰岡 顕治
	学校法人関西大学	化学生命工学部 准教授 藤本 和士
	国立大学法人東北大学 金属材料研究所	計算材料学センター センター長・教授 久保 百司
	国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 助教 新里 秀平
	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

別添 学会等発表実績

(1) 活動報告

活動報告 01	
会議名称	HPCI コンソーシアム令和5年度通常総会
日時	令和5年5月19日(金) 16:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
議事	0. 2023年度HPCI ソフトウェア賞授賞式 1. 定足数の確認・開会宣言 2. 審議事項 ① 議案第1号 令和4年度事業報告 ② 議案第2号 令和4年度会計報告および監査報告 ③ 議案第3号 令和5年度事業計画 ④ 議案第4号 令和5年度予算計画 3. 報告事項 ① 報告第1号 会員の入退会について ② 報告第2号 「HPCI システムの今後の在り方」に関する調査検討について ③ その他（議事録署名人の選任、他） 4. 閉会宣言

活動報告 02	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第1回実施者会議（キックオフ）
日時	令和5年5月27日(土) 13:30 ~ 21:45
場所	場所：東京大学工学部2号館4階 電気系会議室5（本郷キャンパス）、他
参加者	館山、三宅、松林、大谷、笠松、小林、福島(鉄)、新屋、藤本、久保、福島(省)、新里、尾形、事務局
議事	1. 研究実施内容・予定および開発・利用アプリ説明 2. 分野間連携について 3. 総合討論Ⅰ（課題運営、社会実装、データマネージメントについて） 4. 総合討論Ⅱ（「富岳」有効活用、DX 課題との連携、HPC 材料分野の発展について） 5. 高分子分野に関する討論 6. その他

活動報告 03	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第1回統括会議
日時	令和5年8月10日(木)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	1. 課題での「富岳」ポイントの運用について 2. その他

活動報告 04	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第2回実施者会議
日時	令和5年8月23日(水)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、大谷、泰岡、藤本、福島(鉄)、笠松、久保、福島(省)、新里、赤木、中田、小林、新屋、事務局
議事	1. 課題での「富岳」ポイントの運用について 2. その他

活動報告 05	
会議名称	EIS コンソーシアム 2023 年度第 1 回研究会
日時	令和 5 年 8 月 29 日(火) 13:30 ~ 16:00
場所	オンサイト(ビジョンセンター東京駅前 701)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

松林 伸幸先生 (大阪大学 教授)

講演 1

「溶液系における密度汎関数理論とエネルギー表示」

内容：

溶液系の密度汎関数理論を構成し、エネルギー座標の考え方に基づく次元縮減手法について述べる。溶液、ポリマー、タンパク質系などソフトな分子集合系における物質分配機能（溶解や吸着など）を規定する自由エネルギーの分子レベル解析に進む。

講演 2

「ソフト分子集合系の物質分配機能の解析」

内容：

エネルギー表示法を用いたソフト分子集合系の機能解析について述べる。ポリマーへの小分子の溶解や吸着、ミセルや脂質膜など自己組織化集合系への異種分子の分配、さらに、タンパク質の凝集への共溶媒効果などの事例を紹介する。

活動報告 06

会議名称	第43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 (協賛)
日時	令和5年9月4日(月)～8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43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
43rd 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年秋季集中講義・実習 — Autumn 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おいて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9月4日(月)～9月8日(金) (4th september - 8th September, 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): 2023年7月23日(日) (23rd July, 2023)

活動報告 07

会議名称	第9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
日時	令和5年9月4日(月) 9:30 ~ 17:30
場所	オンサイト(秋葉原UDX カンファレンス)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム (敬称略)

9:00	受付開始	
9:30-10:15	第1セッション：施設と登録機関の現状	座長：野間 敬 (CROSS)
9:30-9:45	開会挨拶 5分×3	雨宮 慶幸 (JASRI) 柴山 充弘 (CROSS) 林 周平 (文部科学省)
9:45-10:15	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 「富岳」、HPCI/RIST	木村 滋 (JASRI) 松浦 直人 (CROSS) 齊藤 哲 (RIST)
10:15-10:30	休憩(Coffee Break)	
10:30-12:00	第2セッション：データ駆動型研究 I	座長：吉澤 香奈子 (RIST)
10:30-11:15	2-1 「大型実験施設を活用したデータ駆動型マテリアルサイエンス」	小野 寛太 (大阪大学)
11:15-12:00	2-2 「第一原理計算データを活用したデータ駆動型 物質・材料研究」	安藤 康伸 (産業技術総合研究所)
12:00-13:20	ランチ	
13:20-15:05	第3セッション：自動測定と自動計算	座長：岡崎 伸生 (CROSS)
13:20-14:05	3-1 「大型実験施設×スパコン×デジタルが切り拓く新しい研究開発環境」	一杉 太郎 (東京大学)
14:05-14:35	3-2 「SPring-8構造生物学ビームライン 自動測定システム (ZOO) の現状」	平田 邦夫 (RIKEN/SPring-8)
14:35-15:05	3-3 「高分子物性自動計算システムRadonPyの開発と産学連携によるデータプラットフォームの共創」	林 慶浩 (統計数理研究所)
15:05-15:20	休憩(Coffee Break)	
15:20-16:35	第4セッション：データ駆動型研究 II	座長：筒井 智嗣 (JASRI)
15:20-15:50	4-1 「富岳におけるベイズ推定を用いた全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) のデータ解析」	星 健夫 (核融合科学研究所)
15:50-16:35	4-2 「大型実験施設とスーパーコンピュータをハブとしたビックデータ駆動型高分子材料設計」	沼田 圭司 (京都大学)
16:35-16:40	講演終了時の挨拶 (オンライン参加者はここで終了)	田島 保英 (RIST)
16:40-17:30	第5セッション：(講演者との意見交換・利用相談・情報交換・ポスター展示) ポスター発表 ・ JASRI ・ CROSS ・ RIST ・ DxMT ・ NanoTerasu 会場のみ	
17:30	閉会挨拶	社本 真一 (CROSS)

活動報告 08

会議名称	第16回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和5年10月3日(火) 10:00～17:30
場所	オンサイト(秋葉原UDX NEXT-1)とオンラインのハイブリッド開催
参加者	196名(内、企業117名)会場32名、オンライン164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」・HPCIの利用申請と利用支援 齊藤 哲(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:20-10:35	「富岳」に整備されている材料系アプリケーションと「富岳」Open OnDemand 吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:35-11:10	物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御：「富岳」材料物理化学課題 館山 佳尚(物質・材料研究機構, 東京工業大学) (発表資料 [PDF] )
11:10-11:45	量子凝縮系における励起状態のため数値シミュレーション 井戸 康太(東京大学) (発表資料 [PDF] )
11:45-13:00	<ランチャタイム・展示・情報交換>
13:00-13:35	有機材料の機能解明に向けた第一原理シミュレーション 島崎 智実(横浜市立大学) (発表資料 [PDF] )
13:35-14:10	計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新 久保 百司(東北大学) (発表資料 [PDF] )
14:10-14:45	初歩から始める分子シミュレーション～目指すは「富岳」活用～ 本田 康(HPCシステムズ株式会社) (発表資料 [PDF] )
14:45-15:00	<休憩>
15:00-17:15	パネルディスカッション「夢とロマンを社会実装につなげるクラウドシステムとは」 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：庄司 文由(理化学研究所)/ 高原 浩志(計算科学振興財団)/ 久保 百司(東北大学)/ 本田 康(HPCシステムズ株式会社)/ 茂本 勇(産応協, ダイキン工業株式会社)/ 宅間 裕子(文部科学省)
17:15-17:30	展示 & 情報交換会(HPCI利用相談) ● 新しいHPCI計算資源の紹介、裸眼立体視のデモ等 *会場のみ

*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 09

会議名称	第10回「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会
日時	令和5年10月25日(水)～26日(木)
場所	オンサイト(THE GRAND HALL)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム (敬称略)

10月25日(水)

時間	プログラム (敬称略)
13:30 - 13:50	<ul style="list-style-type: none"> 主催者挨拶: 田島 保夫(一般財団法人高度情報科学技術研究機構 理事長) 共催者挨拶: 富田 流文(一般社団法人HPCIコンソーシアム 理事長) 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) 来賓挨拶: 田分 政秀(文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室 室長)
13:50 - 14:35	基調講演: 三澤 貴宏(東京大学物性研究所 特任准教授) 「強相関電子系を取り扱うソフトウェア開発とその活用」[PDF]  ● 講演動画はこちら  (リリナー: 藤堂 真治(東京大学大学院理学系研究科 教授))
14:35 - 15:20	基調講演: 杉山 裕樹(一般財団法人阪神高速先進技術研究所 調査研究部(前阪神高速道路株式会社)上席研究員) 「流体-構造物連成解析による長大斜張橋の耐風設計の高度化」[PDF]  ● 講演動画はこちら  (リリナー: 野澤 剛二(清水建設株式会社技術研究所 副所長))
15:20 - 15:50	<休憩>
15:50 - 17:20	パネル・ディスカッション 「富岳」、これからの利用と若手プロジェクト・リーダーによる先進アプリ開発への期待 コーディネータ: 高木 尊之(東京工業大学学術国際情報センター 副センター長 / 教授) パネリスト: 伊井 仁志(東京理科大学システムデザイン研究科 准教授) 松永 康佑(埼玉大学大学院理工学研究科 准教授) 藤本 和士(関西大学化学生命工学部 化学・物質工学科 准教授) 高木 亮治(宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授) 大須賀 健(筑波大学 計算科学研究センター 教授) 山崎 剛(筑波大学数理解析学 准教授)

ポスター
展示

10月26日(木)

時間	プログラム (敬称略)
10:00 - 10:05	スケジュール説明
Session1: 優秀成果賞受賞課題による成果発表 ファシリテータ: 松林 伸幸(筑波大学 教授)	
10:05 - 10:15	部品の行列構造から抽出される線形の積張 [he220074][PDF]  土藤 昇人(静岡大) ● 講演動画はこちら 
10:15 - 11:05	高次元量子回路の最適化に向けた量子線形の積張の高速化 [he220148][PDF]  金岡 博(筑波大学) 加藤 誠(理研) ● 講演動画はこちら 
11:05 - 11:15	ブラックホール質量減少における電磁放射の特性解明 [he220277][PDF]  川崎 洋平(筑波大) ● 講演動画はこちら 
11:15 - 12:15	<休憩>
Session2: 特別講演 ファシリテータ: 小柳 義夫(高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー)	
12:15 - 13:15	橋田 理央(東京工業大学 学術国際情報センター 教授) 「「富岳」、改善の状況における大規模計算をリアルタイム学習手法の導入とAI for Science に向けた国際連携」[PDF]  ● 講演動画はこちら 
Session3: 優秀成果賞受賞課題による成果発表 ファシリテータ: 真藤 直樹(理研) 佐藤 隆(理研) 主任研究員	
13:15 - 13:45	How viral proteins interfere the interactions of p53 protein with DNA [he220107][PDF]  チャンフズイ(東京工業大) *英語 ● 講演動画はこちら 
13:45 - 14:15	全粒大豆ラジエーション処理シミュレーション [he220058][PDF]  松本 修平(筑波大) ● 講演動画はこちら 
14:15 - 14:25	<休憩>
Session4: 優秀成果賞受賞課題による成果発表 ファシリテータ: 河野 秀俊(量子科学技術研究機構 プロジェクトディレクター)	
14:25 - 14:55	塩化亜鉛分子を主成分とする有機的ケイ素材料 [he220191][PDF]  大塚 幸弘(株式会社アリアストン)
14:55 - 15:25	格子QCDを用いた素粒子素粒子物理の精密計算 [he220560][PDF]  佐々木 勝一(筑波大) ● 講演動画はこちら 
15:25 - 15:50	表彰・謝辞: 小柳 義夫(成果報告会プログラム委員会 委員長)
Session5: ポスターセッション *聴衆参加のみ	
15:50 - 16:30	コアタイム1
16:30 - 17:10	コアタイム2
17:10 - 17:50	コアタイム3
17:50 - 17:55	閉会挨拶: 高 善嗣(一般財団法人高度情報科学技術研究機構 特任センター長)

ポスター
展示

活動報告 10

会議名称	EIS コンソーシアム 2023 年度第 2 回研究会
日時	令和 5 年 10 月 26 日(木) 13:30 ~ 16:30
場所	オンサイト(ビジョンセンター東京駅前 702)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

講演 1

赤井 久純先生 (大阪大学 招聘教授)

タイトル: KKR法およびKKR-CPA法の基礎とその実装

概要: 第一原理電子状態計算の一つであるKKR法および不規則合金など不規則性に由来する電子散乱が存在する場合の計算に適したKKR-CPA法の考え方とその実装について説明する。

13:30~14:15 講演 (前半)

14:15~14:30 休憩

14:30~15:15 講演 (後半)

講演2

福島 鉄也先生 (産業技術総合研究所 研究チーム長)

タイトル: AkaiKKRコードを用いたマテリアルデザイン

概要: 本発表では、AkaiKKRコードとスーパーコンピューターによる磁性材料データの創出について詳細を説明するとともに、データ科学を用いた機構解明・材料探索について紹介する。

15:30~16:30 講演

活動報告 11	
会議名称	研究フォーラム (第1回)
日時	令和5年10月31日(火) 13:30 ~ 16:30
場所	オンライン開催
参加者	31名

プログラム (敬称略)

文部科学省 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム
「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」
研究フォーラム(第1回)

日時: 2023年10月31日(火) 13:30 ~ 16:30

場所: Webミーティング

プログラム ※1

「富岳」材料物理化学課題 研究フォーラム(第1回)

13:30 - 13:35	関西大学 化学生命工学部	藤本 和士	研究フォーラム(第1回)開催趣旨
13:35 - 14:15	大阪大学 大学院基礎工学 研究科	笠原 健人	分子動力学と統計力学に基づくタンパク 質-リガンド結合の速度論解析
14:15 - 14:50		出席者	討論
14:50 - 15:05	休憩		
15:05 - 15:45	福岡大学 理学部化学科	永井 哲郎	分子シミュレーションによる不均一系に おける物質輸送への展開
15:45 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:30	関西大学 化学生命工学部	藤本 和士	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 12

Table with 2 columns: 会議名称 (第3回スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム), 日時 (令和5年12月1日(金) 10:00 ~ 17:30), 場所 (オンライン開催), 参加者 (680名)

プログラム (敬称略)

9:45 受付開始
10:00~10:10 オープニング ご挨拶 文部科学省
<セッション①>
10:10~10:35 内閣府における長周期地震動の検出
10:35~11:00 豪雨防災、台風防災に資する数値予報モデル開発
11:00~11:25 経済活動と感染拡大防止の両立の実現のための「飛沫シミュレーション」の実施
11:25~11:50 「富岳」を基軸とした創薬DXプラットフォームの構築
11:50~13:30 休憩

<セッション②>
13:30~13:50 「富岳」成果創出加速プログラムの概要紹介
13:50~14:15 AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築
14:15~14:40 シミュレーションとAIで解き明かす太陽地球環境変動
14:40~15:05 計算機科学が拓く未来のモビリティ
15:05~15:30 包括的計測情報による多様なデータ同化と特異的振動活動の探求
15:30~15:50 休憩

富岳 産業競争力の強化
富岳創出加速プログラム
課題番号: hp230203
課題名: 物理・化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御
分野: 電池・触媒・磁性・高分子・構造材料
分野別課題(併行・相次ぎ)
分野別課題(並行)
分野別課題(相次ぎ)
分野別課題(連携)

<セッション③>
15:50~16:50 パネルディスカッション (テーマ: 計算科学の未来、AIとの融合)
16:50~17:10 質疑応答
17:10 クロージング

活動報告 13	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第2回統括会議
日時	令和5年12月13日(水)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 公開シンポジウムの開催形態について 2. 公開シンポジウムの正式名称について 3. その他

活動報告 14	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第3回統括会議
日時	令和5年12月26日(火)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 合同公開シンポジウムの開催候補日について 2. その他

活動報告 15

会議名称	研究フォーラム (第2回)
日時	令和5年12月26日(火) 14:30 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	27名

プログラム (敬称略)

文部科学省 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム
「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」
研究フォーラム(第2回)

日時: 2023年12月26日(火) 14:30 ~ 17:30

場所: Webミーティング

プログラム ※1

「富岳」材料物理化学課題 研究フォーラム(第2回)

14:30 - 14:35	山形大学 学術研究院(理学部担当)	笠松 秀輔	研究フォーラム(第2回)開催趣旨
14:35 - 15:15	山形大学 学術研究院(理学部担当)	笠松 秀輔	配置エネルギーモデルの能動学習を組み合わせた固溶体・複合酸化物系のアンサンブルサンプリング
15:15 - 15:50		出席者	討論
15:50 - 16:05	休憩		
16:05 - 16:45	大阪大学 大学院工学研究科	藤井 進	格子欠陥のインフォマティクスによる新規プロトン伝導体の発見
16:45 - 17:20		出席者	討論
17:20 - 17:30	山形大学 学術研究院(理学部担当)	笠松 秀輔	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 16	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第3回実施者会議
日時	令和6年1月4日(木)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、大谷、泰岡、藤本、福島(鉄)、笠松、久保、福島(省)、新里、赤木、中田、小林、新屋、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 令和5年度研究開発成果について 2. 分野間連携について 3. 令和6年度研究計画と予算配分について 4. その他

活動報告 17	
会議名称	「次世代計算基盤を利用した成果の最大化に向けて」に関する意見交換会
日時	令和6年1月15日(月)
場所	オンサイト(秋葉原UDX カンファレンス Room A, B)とオンラインのハイブリッド開催
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 次世代計算基盤に係る調査研究での検討状況の紹介 2. 「次世代計算基盤を利用した成果の最大化に向けて」提言案の紹介 3. 参加者との意見交換 4. その他

活動報告 18

会議名称	第17回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和6年2月6日（火）10:00～17:30
場所	オンサイト（秋葉原UDX NEXT-1）とオンラインのハイブリッド開催
参加者	318名（内、企業215名）会場25名、オンライン293名

プログラム（敬称略）

司会：杉山肇(産応協, 三菱ケミカル株式会社)/ 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」・HPCIの利用申請と利用支援 齊藤 哲(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:20-10:35	「富岳」における材料系アプリケーションの利用について 吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:35-11:10	DxMTデータ連携部会中核機関におけるデータ連携と活用 源 聡(物質・材料研究機構) (発表資料 [PDF] )
11:10-11:45	デジタル技術を用いたClosed Loop材料開発 藤井 幹也(奈良先端科学技術大学院大学) (発表資料 [PDF] )
11:45-13:00	<ランチタイム・展示&情報交換>
13:00-13:35	第一原理計算と機械学習による物質探索とナノ構造解析 溝口 照康(東京大学) (発表資料 [PDF] )
13:35-14:10	材料開発とAI関連発明 菅野 智子(東京大学) (発表資料 [PDF] )
14:10-14:45	企業における計算物質科学とMIを活用した高分子材料設計 北畑 雅弘(東レ株式会社) (発表資料 [PDF] )
14:45-15:00	<休憩>
15:00-17:15	パネルディスカッション「企業で役立つ計算物質科学のあり方とは」 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：松岡 智代(株式会社QunaSys)/ 佐藤 弘一(株式会社プリダストン)/ 小野 裕己(日本ゼオン株式会社)/ 大越 孝洋(パナソニック ホールディングス株式会社)/ 茂本 勇(産応協, ダイキン工業株式会社)
17:15-17:30	展示&情報交換会(HPCI利用相談) ● 新しいHPCI計算資源の紹介、裸眼立体視のデモ等 ● MatDaCsのポスター紹介 *会場のみ

*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 19

会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第4回統括会議
日時	令和6年2月7日(水)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none">1. 「富岳」ポイントによる優先実行について2. 令和5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 20

会議名称	第44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 (協賛)
日時	令和6年2月19日(月) ~ 23日(金)
場所	オンライン開催

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
LIVE! ONLINE 講習

第44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
44th 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 2024年春季集中講義・実習 — Spring 2024

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目の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): 2024年2月19日(月) ~ 2月23日(金) (19th February - 23rd February, 2024)

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): 2024年1月21日(日) (21st January, 2024)

活動報告 21

会議名称	合同公開シンポジウム（成果報告会）
日時	令和6年2月29日(木) 13:30～18:10
場所	オンライン開催
参加者	153名（内、企業68名）（来賓、講演者、座長および課題実施者（計21名）を除く）

プログラム（敬称略）

文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」
 「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」
 合同公開シンポジウム（成果報告会）

主催： 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 「富岳」材料物理化学課題、学校法人 関西大学「富岳」燃料電池課題
 協賛： 計算物質科学協議会
 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新」
 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業
 計算物質科学人材育成コンソーシアム
 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター
 後援： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
 公益財団法人 計算科学振興財団
 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

日時： 2024年2月29日 13:30～18:10

場所： オンライン開催

プログラム（敬称略）※1

合同公開シンポジウム（成果報告会）

セッション1 座長： 中田 彩子（物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター）			
13:30 - 13:35	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター	館山 佳尚	開会挨拶
13:35 - 13:40	文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)付計算科学技術推進室	国分 政秀	来賓挨拶
13:40 - 13:45	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター	館山 佳尚	「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」(「富岳」材料物理化学課題) 課題概要
13:45 - 13:50	関西大学 化学生命工学部	藤本 和士	「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」(「富岳」燃料電池課題) 課題概要
13:50 - 14:20	株式会社 豊田中央研究所	金城 友之	招待講演 高分子電解質溶液の乾燥過程のシミュレーション ～全原子モデルに基づいた粗視化と大規模化で見えてきたこと～
14:20 - 14:40	福岡大学 理学部	永井 哲郎	燃料電池触媒層内部の物質輸送解明に向けた自由エネルギーと拡散係数の機械学習モデルの作成
14:40 - 14:55	トヨタ自動車株式会社	岡村 優希	燃料電池触媒層におけるTest Particle Insertion Methodを用いた酸素局所自由エネルギー解析
14:55 - 15:05	休憩		
セッション2 座長： 藤本 和士（関西大学 化学生命工学部）			
15:05 - 15:35	情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮	招待講演 高分子物性自動計算によるデータ創出とデータ駆動型材料研究の実践
15:35 - 15:55	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター	館山 佳尚	蓄電池電極材料の劣化に関わる応力下・充電条件下におけるイオン伝導機構の解明：DFT-MDサンプリング
15:55 - 16:10	山形大学 学術研究院(理学部担当)	笠松 秀輔	多元系固溶体材料の第一原理計算・機械学習・アンサンブルサンプリング連携フレームワークの開発
16:10 - 16:30	大阪大学 大学院基礎工学研究科	矢ヶ崎 琢磨	親水高分子ブラシによる不純物侵入阻害の分子機構
16:30 - 16:45	慶應義塾大学 理工学部	安田 一希	教師なし機械学習に基づく高分子内水分子の拡散性評価手法
16:45 - 16:55	休憩		
セッション3 座長： 大谷 実（筑波大学 計算科学研究センター）			
16:55 - 17:10	産業技術総合研究所 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター	奥村 晴紀	FPKKR法を用いた磁気異方性の第一原理計算とデータの創出
17:10 - 17:30	産業技術総合研究所 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター	福島 鉄也	磁性材料のための基盤的シミュレーションコードの高度化とデータの創出
17:30 - 17:50	東北大学 金属材料研究所	久保 百司	ニューラルネットワークポテンシャル分子動力学ソフトウェアの開発とハイエントロピー合金への応用
17:50 - 18:05	大阪大学 大学院基礎工学研究科	新里 秀平	ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた水素環境下における鉄の変形・破壊解析
18:05 - 18:10	関西大学 化学生命工学部	藤本 和士	閉会挨拶

※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 22

会議名称	第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会
日時	令和6年3月12日(火) 10:00 ~ 18:00
場所	オンサイト(富士ソフトアキバプラザ アキバホール)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム (敬称略)

時間/Time	講演会場/AKIBA HALL	ポスター会場/ Reception Hall
10:00-10:10	開会 文部科学省研究開発政策課(情報担当) 付 計算科学技術推進室長 関分 政秀 「富岳」成果創出加速プログラム 領頭総括 藤井 幸義	
Oral Session 1 座長: 「富岳」成果創出加速プログラム 領頭総括 藤井 幸義		
10:15-10:45	Kokkos: ポータブル並列プログラミング環境の取り組みについて Kokkos: Performance Portable Parallel Programming Framework for Heterogeneous Node Architectures Oak Ridge National Laboratory (ORNL) Keita Teranishi, Group Leader, Programming Systems 米連エネルギー省が推進するエクサスケール・コンピュータインフラプロジェクトによって開発されたKokkosは、C++のためのライブラリで、ハードウェアに依存しない実行実行環境を提供する。現在、100以上のプロジェクトで導入され、世界最大のスーパーコンピュータの多くで活用されている。この講演では、Kokkosが持つ機械学習プログラミングモデル、アプリケーションの移植への貢献、さらには米連エネルギー省のエクサスケールコンピュータへ向けての開発及び利用状況について説明する。	
10:45-11:15	生成AIを支えるHPC技術 HPC Technology Behind Generative AI 東京工業大学先端情報センター 教授 横田 達央 ChatGPTに代表される生成AIはインターネットやスマートフォンのように社会生活のあり方を変える革新的な技術であり、Society 5.0における研究開発、経済社会、安全確保などあらゆる側面の基盤技術となることが予想される。生成AIの学習には膨大なデータと計算資源が必要であり、その基盤はデータ及び計算資源の確保に強い難関に達して向上し続けることが継続的に示されている。OpenAIやGoogleなどは最先端のハードウェアとソフトウェアの両方を導入している。また、このような大規模な学習にはHPCの先端技術が応用されている。本講演では生成AIに用いられるHPC技術について紹介する。	
11:15-11:45	ビッグデータ同化: 「富岳」を使った30秒毎に更新するリアルタイム天気予報の東京オリンピック・パラリンピック期間中の実証実験 Big Data Assimilation: Real-time 30-second-refresh Heavy Rain Forecast Using Fugaku during Tokyo Olympics and Paralympics 理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー 三好 達正 2021年の東京オリンピック・パラリンピック期間中、「富岳」の11580ノード(約7%)を専有利用し、30秒毎に更新するリアルタイム天気予報の実証実験に成功した。逐月1ヶ月の実証期間中、30分未満での予報精度を得るのに約3分以内の処理時間(time-to-solution)を達成し、合計7524時間の予報を発生した。従来の1時間毎に更新するシステムに比べ120倍の精度であり、他に等に見えないビッグデータ同化システムとして2013年より継続的に開発してきた。リアルタイムの計算速度を実現するため、単機実装並列を活用し、並列I/Oの工夫を凝らしたほか、適切な実験パラメータ設定を見つけた。	
Lunch Time		
13:00-13:45		Poster Session (1st) (質疑対応コアタイム前半 / 1st Core time for questions)
13:45-14:30		Poster Session (2nd) (質疑対応コアタイム後半 / 2nd Core time for questions)
Break		
Oral Session 2 座長: 「富岳」成果創出加速プログラム 領頭総括 高橋 桂子		
15:00-15:40	凝相・流体構造連成シミュレーションのGPU実装 GPU Implementation of Multiphase Flow and Fluid-structure Interaction 東京工業大学先端情報センター 教授 青木 啓之 極小を用いた流相シミュレーションはスタンダード計算に基いていて、均一格子であればGPUで計算することは比較的容易である。乱流界面があったり移動境界があったりすると従来の解法を動的に配置しなければならず、AMR活発的負荷分散が必要となる。そのGPU実装の方法と、それらを使った高度な流体構造連成問題のアプリケーション例を示す。また、既存のCPUコードからGPUコードへの移植と、そのメインテナンスについても議論を行う。 【参考文献】 青木啓之: スーパーコンピュータの最新動向と高度シミュレーション, 化学工学, 特集 2020年に向けた化学工学系系連成シミュレーション, 第86巻 第3号, PP.112-115, (2022)	
15:40-16:20	次世代計算基盤に関するFeasibility Studyの状況〜ユーズは何を準備すべきか〜 「富岳」成果創出加速プログラム 領頭総括 東京大学計算科学研究センター長 朴 泰祐 2022年8月頃から開始された、文科省次世代計算基盤に関する調査研究、いわゆる「ポスト富岳Feasibility Study」は2024年度末まで実施される。計4チーム中、理研研究所及び神戸大学をそれぞれ中心とする2チームが基本となるシステムの調査研究を進めている。システム構築はすべてCPU向けでなく、京や富岳にはなかった高負荷並列を備えることを想定しており、世界の標準である高負荷並列となる並列性、信頼性に組み込む見込みである。本講演ではこれまでの研究開発の概況と、今後、フラッグシップシステムのユーズとしてどのような構築をしていくべきかについて、公認できる範囲での情報共有を行う。各チームは様々な企業とのNDAに基づいて詳細な議論をしており、その部分については割愛する。	
16:20-16:40	次世代研究者賞 授与式 / Next Generation Researcher Award Ceremony	
16:40-16:45	閉会 「富岳」成果創出加速プログラム 領頭総括 常行 貞司	
Break		
閉会后(1時間程度) / After closing (about 1 hour)		懇話会(参加費要・任意参加) / Reception with fee (Optional)

11:30-18:00 ポスター展示時間/Poster exhibition hours

活動報告 23

会議名称	EIS コンソーシアム 2023 年度第 4 回研究会
日時	令和 6 年 3 月 14 日(木) 13:30 ~ 16:30
場所	オンサイト(ビジョンセンター東京八重洲 905)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

講師 1 : 庄司 光男氏 (筑波大学 教授)

前半 (45分)

タイトル: 酵素反応解析法の基礎と新しい構造探索手法(GLAS)

概要: 生体内での化学反応は効率的に進行しており、その分子論的機構解明は、化学や生物学的観点のみならず、工学的応用に対しても重要である。酵素反応解析で用いられる手法の基礎と独自開発を進めている新しい構造探索手法(GLAS)について解説する。

後半 (45分)

タイトル: サルコシンオキシダーゼと銅含有アミン酸化酵素における反応機構

概要: 実際に理論解明を行ってきた酵素反応の例として、サルコシンオキシダーゼと銅含有アミン酸化酵素を取り上げ、理論解明された反応機構について議論する。関連する実験結果についても紹介する。

講師 2 : 長谷川 太祐氏 (筑波大学 主任研究員)

(30分)

タイトル: 金属/溶液界面における化学反応経路探索: ESM-RISM法とSC-AFIR法を融合したハイブリッド手法による計算事例

概要: 以前、ESM-RISM法とSC-AFIR法を融合した電気化学界面シミュレーション技術の紹介をした。本講演では、この技術を用いた金属/溶液界面における水分子の分解反応に関するシミュレーション結果を紹介する。

活動報告 24	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第5回統括会議
日時	令和6年3月15日(金)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 令和5年度「富岳」計算資源利用状況について 2. 令和6年度「富岳」計算資源の分野配分について 3. 「富岳」ブリーフィング内容の説明 4. 課題での「富岳」利用方針について 5. その他

活動報告 25	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第4回実施者会議
日時	令和6年3月30日(土) 10:00 ~ 12:00
場所	オンライン開催
参加者	館山、三宅、松林、大谷、福島(鉄)、笠松、久保、新里、中田、小林、新屋、福島(省)、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 令和5年度研究状況報告 2. HPCI 計画推進委員会、「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会の情報共有・議論 3. 令和5年度成果報告書の作成について 4. 令和6年度「富岳」利用について 5. 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
1	First-principles calculation of magnetocrystalline anisotropy of $Y(\text{Co, Fe, Ni, Cu})_5$ based on full-potential KKR Green's function method	Haruki Okumura, Tetsuya Fukushima, Hisazumi Akai, Masako Ogura	Solid State Commun. 373-374 , 115257 (2023).	令和5年 7月
2	All-atom molecular dynamics study of the impact fracture of glassy polymers. III: Compressive fracture of PC and PMMA	Kazushi Fujimoto, Hiroaki Ishikawa, Zhiye Tang, Susumu Okazaki	Polymer 283 , 126276 (2023).	令和5年 8月
3	Unraveling the Glass-like Dynamic Heterogeneity in Ring Polymer Melts: From Semiflexible to Stiff Chain	Shota Goto, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	ACS Polym. Au 3 , 437- 446 (2023).	令和5年 8月
4	Direct Observation of Vacancy-Cluster-Mediated Hydride Nucleation and the Anomalous Precipitation Memory Effect in Zirconium	Si-Mian Liu, Shi- Hao Zhang, Shigenobu Ogata, Hui-Long Yang, Sho Kano, Hiroaki Abe, Wei-Zhong Han	Small 2300319 (2023).	令和5年 8月
5	Molecular Dynamics Study of the Antifouling Mechanism of Hydrophilic Polymer Brushes	Takuma Yagasaki, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir 39 , 13158- 13168 (2023).	令和5年 9月
6	Sorption from Solution: A Statistical Thermodynamic Fluctuation Theory	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir 39 , 12987- 12998 (2023).	令和5年 9月
7	Discovery of Unconventional Proton-Conducting Inorganic Solids via Defect-Chemistry-Trained, Interpretable Machine Learning	Susumu Fujii, Yuta Shimizu, Junji Hyodo, Akihide Kuwabara, Yoshihiro Yamazaki	Adv. Energy Mater. 13 , 2301892 (2023).	令和5年 9月
8	Cooperativity in Sorption Isotherms	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir 39 , 13820- 13829 (2023).	令和5年 9月

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
9	Elucidating protein-ligand binding kinetics based on returning probability theory	Kento Kasahara, Ren Masayama, Kazuya Okita, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 159 , 134103 (2023).	令和5年 10月
10	Electrocatalytic Mechanisms for an Oxygen Evolution Reaction at a Rhombohedral Boron Monosulfide Electrode/Alkaline Medium Interface	Satoshi Hagiwara, Fumiaki Kuroda, Takahiro Kondo, Minoru Otani	ACS Appl. Mater. Interfaces 15 , 50174-50184 (2023).	令和5年 10月
11	First-Principles Study on the Interplay of Strain and State-of-Charge with Li-Ion Diffusion in the Battery Cathode Material LiCoO ₂	Zizhen Zhou, Claudio Cazorla, Bo Gao, Huu Duc Luong, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Mater. Interfaces 15 , 53614-53622 (2023).	令和5年 11月
12	Structural changes in the lithium cobalt dioxide electrode: A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization	Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani	Phys. Rev. Mater. 7 , 115402 (2023).	令和5年 11月
13	Theoretical study on the origin of anomalous temperature-dependent electric resistivity of ferromagnetic semiconductor	Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Shinobu Ohya, Hiroshi Katayama-Yoshida	APL Mater. 11 , 111114 (2023).	令和5年 11月
14	Free-energy decomposition of salt effects on the solubilities of small molecules and the role of excluded-volume effects	Stefan Hervø-Hansen, Daoyang Lin, Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	Chem. Sci. 15 , 477-489 (2023).	令和5年 11月
15	Configuration sampling in multi-component multi-sublattice systems enabled by ab Initio Configuration Sampling Toolkit (abICS)	Shusuke Kasamatsu, Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi, Tatsumi Aoyama	Sci. Technol. Adv. Mater. Meth. 3 , 2284128 (2023).	令和5年 12月
16	On-lattice 機械学習モデルを用いた固溶体のアンサンブルサンプリング	笠松秀輔	アンサンブル, 26 巻, p. 48-54 (2024)	令和6年 1月

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
17	A deep-neural network potential to study transformation-induced plasticity in zirconia	Jin-Yu Zhang, Gael Hynh, Fu-Zhi Dai, Tristan Albaret, Shi-Hao Zhang, Shigenobu Ogata	J. Eur. Ceram. Soc. 44 , 4243-4254 (2024).	令和6年 1月
18	Actual Amount Adsorbed as Estimated from the Surface Excess Isotherm	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir 40 , 1666-1673 (2024).	令和6年 1月
19	Biased Bowl-Direction of Monofluorosumanene in the Solid State	Yumi Yakiyama, Minghong Li, Dongyi Zhou, Tsuyoshi Abe, Chisato Sato, Kohei Sambe, Tomoyuki Akutagawa, Teppei Matsumura, Nobuyuki Matubayasi, Hidehiro Sakurai	J. Am. Chem. Soc. 146 , 5224-5231 (2024)	令和6年 2月
20	Novel approach for designing order parameters of clathrate hydrate structures by graph neural network	Satoki Ishiai, Katsuhiko Endo, Paul E. Brumby, Amadeu K. Sum, Kenji Yasuoka	J. Chem. Phys. 160 , 064504 (2024).	令和6年 2月
21	Highly efficient and transferable interatomic potentials for α -iron and α -iron/hydrogen binary systems using deep neural networks	Shihao Zhang, Fanshun Meng, Rong Fu, Shigenobu Ogata	Comput. Mater. Sci. 235 , 112843 (2024).	令和6年 2月

[2] 国際会議・シンポジウムにおける招待講演・口頭・ポスター発表

① 招待講演

項番	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
1	金属負極－電解質界面の計算科学研究動向	館山 佳尚	近化電池セミナー「金属負極二次電池の現状と展望」 大阪科学技術センター、大阪	令和5年 4月
2	量子化学的電子描像に基づくがん光免疫療法薬剤の分子機構解明と薬剤・反応設計	小林 正人	量子生命科学会第5回大会 大阪大学、大阪	令和5年 5月
3	ソフトマターの分子動力学計算と機械学習	泰岡 顕治	OCTA20 周年記念講演会 名古屋大学、愛知	令和5年 5月
4	Unravelling the Fast Li-ion Conduction Mechanism in Li(FSA)(SN) ₂ Molecular Crystal: A Molecular Dynamics Study	Yoshitaka Tateyama	2023 Japan-Taiwan Nano Material and Biomedicine Workshop NIMS 並木地区オーディトリウム、茨城	令和5年 5月
5	KKR グリーン関数法を用いたマテリアルデザイン	福島 鉄也	第2回「第一原理計算と機械学習の進歩と調和」研究会 大阪大学、大阪	令和5年 6月
6	Large-scale DFT calculations for materials with complex structures	Ayako Nakata	The 6th China-Japan-Korea Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-VI) 成均館大学、韓国	令和5年 6月
7	理論計算によるイオン伝導度研究の最新動向	館山 佳尚	第24回超イオン導電体物性研究会（第84回固体イオニクス研究会） NIMS 並木地区オーディトリウム、茨城	令和5年 6月
8	On coating layer effects between SE and CAM in SSB: (New) microscopic electrochemistry based on DFT calculations	Yoshitaka Tateyama	Interface Ionics Symposium 2023 Singapore	令和5年 6月

項番	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
9	Advanced DFT-MD Study on Ion Transport in Solid Electrolyte: Grain Boundary and Ion Correlation	Yoshitaka Tateyama	IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 SUNTEC Singapore, Singapore	令和5年 6月
10	分子会合ダイナミクスを記述する理論的手法の開発	笠原 健人	研究会「理論化学若手セミナー」 京都大学、京都	令和5年 7月
11	分子動力学と2分子反応理論に基づく分子会合過程の記述	笠原 健人	次世代若手研究者による応用計算・理論化学研究会 筑波大学、茨城	令和5年 7月
12	Artificial neural network interatomic potential based atomistic modeling of hydrogen impact on metals	Shigenobu Ogata	Thermec 2023 Vienna, Austria	令和5年 7月
13	幾何学を使ってマイクロ構造とマクロ物性をつなぐ	赤木 和人	日本MRS「水素科学技術連携研究会」 東北大学片平キャンパス、宮城	令和5年 7月
14	Xia-Bian-Kais transformation combined with Bayesian optimization	Masato Kobayashi	CQuERE Seminar オンライン	令和5年 7月
15	創薬研究のための分子動力学シミュレーションデータを用いた機械学習	泰岡 顕治	第447回CBI学会講演会：創薬研究を加速する計算科学の新潮流～量子化学、分子動力学、機械学習の融合～ オンライン	令和5年 7月
16	Energetics Analyzed by MD Simulation and Solvation Theory for Partitioning Functions of Molecular Aggregates with Nanoscale Inhomogeneity	Nobuyuki Matubayasi	26th IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics (ICCT-2023) Senri Life Science Center, Osaka	令和5年 8月
17	ソフト分子集合系の物質分配機能の解析	松林 伸幸	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム ビジョンセンター東京駅前、東京	令和5年 8月

項番	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
18	Revealing the hidden dynamics of confined water in acrylate polymers: Insights from hydrogen-bond lifetime analysis	Kang Kim	9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems 幕張メッセ、千葉	令和5年 8月
19	Atomistic description of molecular binding processes based on bimolecular reaction theory	Kento Kasahara	9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems 幕張メッセ、千葉	令和5年 8月
20	微小材料の変形 ― 原子拡散の効果 ―	尾方 成信	日本金属学会微小力学研究会 2023 小樽、北海道	令和5年 8月
21	Theoretical study on temperature-dependent electrical transport properties based on the first-principles approach	Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Hiroshi Katayama- Yoshida	EU-Japan Workshop on Spintronics and Quantum Transformation (Spin-QX 2023) Forschungszentrum Jülich (Research Center), Germany	令和5年 8月
22	深層学習による分子動力学シミュレーションの高速化と自動解析	泰岡 顕治	近畿化学協会 コンピュータ化学部会 公開講演会 第116回例会 大阪科学技術センター、大阪	令和5年 8月
23	分子動力学に基づいてタンパク質-リガンド結合を解析する統計力学手法の開発	笠原 健人	生体分子凝縮体セミナー オンライン	令和5年 9月
24	Modeling the impact of hydrogen on metals	Shigenobu Ogata	2023 Monie A. Ferst Award Symposium in Honor, Sidney Yip	令和5年 9月

項番	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
25	Interfacial space charge from first-principles statistical thermodynamics accelerated by machine learning	Shusuke Kasamatsu	Petite XII: An International Workshop on the Defect-Chemical Nature of Solids Schloss Edesheim, Germany	令和5年 9月
26	酸化物ヘテロ界面における超軌道分裂の学理構築と巨大界面応答材料のスクリーニング	福島 鉄也	強制的秩序とその操作に関わる 第17回 夏の学校 リファレンスキャナルシティ 博多、福岡	令和5年 9月
27	All-atom Molecular Dynamics Study of Fracture of Glassy Polymers	Kazushi Fujimoto	ICMS2023 National Taiwan University, Taipei	令和5年 9月
28	高分子材料の大規模分子動力学計算	藤本 和士	第132回 触媒討論会 北海道大学、北海道	令和5年 9月
29	Acceleration and Analysis of Molecular Dynamics Simulations with Deep Learning Method	Kenji Yasuoka	The 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) National Taiwan University, Taipei, Taiwan	令和5年 9月
30	Large-scale DFT calculations using multi-site support functions for materials with complex structures	Ayako Nakata, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC 2023) Hokkaido Univ., Hokkaido	令和5年 9月
31	磁性材料における物性データ創出とその活用	福島 鉄也	日本金属学会 2023 年秋季公演大会 富山大学、富山	令和5年 9月
32	電池内の電子・イオン移動に関する計算科学	館山 佳尚	第84回応用物理学会秋季学術講演会 シンポジウム：表面・界面における電子・イオン移動に基づくエネルギー変換の最前線 熊本城ホール、熊本	令和5年 9月

項番	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
33	All-Atom Analysis of Intermolecular Interactions in Polymeric Materials: Water Absorption and Mutual Miscibility	Nobuyuki Matubayasi	International Conference on Chemistry and Material Science (IC2MS) 2023 Grand Mercure Mirama Hotel, Indonesia	令和5年 10月
34	Free Energetics of Solvation Analyzed through All-Atom MD Simulation and a Density-Functional Method	Nobuyuki Matubayasi	The 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) National Taiwan University, Taiwan	令和5年 10月
35	Explaining of reaction coordinates in complex molecular systems using deep learning and XAI: Application to alanine dipeptide isomerization	Kang Kim	The 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) National Taiwan University, Taiwan	令和5年 10月
36	Elucidating protein-ligand binding kinetics based on bimolecular reaction theory	Kento Kasahara	The 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) National Taiwan University, Taiwan	令和5年 10月
37	水圏における水分子の動的様態を評価するシミュレーション技術の開発とその応用	金 鋼	CSJ 化学フェスタ 2023 タワーホール船堀、東京	令和5年 10月
38	Study of Electrochemical Interfaces Using DFT and the Classical Liquid Theory Hybrid Simulations	Minoru Otani	244th ECS Meeting Gothenburg, Sweden	令和5年 10月
39	Ab initio thermodynamics of ion configurations in many-component oxides using an on-lattice neural network model	Shusuke Kasamatsu	The 24th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-24) Fudan University, China	令和5年 10月
40	大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発	福島 鉄也	サイエンティフィック・システム研究会 神戸国際会議場、兵庫	令和5年 10月

項番	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
41	計算化学を用いたがん光免疫療法薬剤の分子機構解明と薬剤・反応設計	小林 正人	第9回北海道大学部局横断シンポジウム オンライン	令和5年 10月
42	First-Principles Calculations of Temperature-Dependent Electrical Transport Properties	Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Kazunori Sato, Shinobu Ohya, Hiroshi Katayama-Yoshida	The 24th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-24) Fudan University, China	令和5年 10月
43	Advanced MD Study on Ion Transport in Battery Solid Electrolyte	Yoshitaka Tateyama	Structure and Dynamics of Chemical and Biomolecular Systems (SDCBS23) IIT Kanpur, India	令和5年 10月
44	第35回高分子加工技術討論会	藤本 和士	一般社団法人日本レオロジー学会 高分子加工技術研究会 名古屋市工業研究所、愛知	令和5年 10月
45	物理 - 化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御：「富岳」材料物理化学課題	館山 佳尚	第16回材料系ワークショップ～アカデミアと社会を結ぶ「富岳」の利用に向けて～ 秋葉原 UDX、東京	令和5年 10月
46	説明可能なAIによる分子シミュレーションデータ解析の高度化とメカニズムの解明	金 鋼	第9回電子状態理論シンポジウム 早稲田大学、東京	令和5年 11月
47	グラフニューラルネットワークによるガラス形成液体の構造分類と Attention 機構による分類根拠の説明	金 鋼	液体・ガラスへのデータ駆動アプローチ - グラフニューラルネットワークとその周辺 - 兵庫県立大学、兵庫	令和5年 11月

項番	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
48	Synthesizable discovery of unconventional proton-conducting oxides by computation and machine learning for defect chemistry	Susumu Fujii, Yuta Shimizu, Junji Hyodo, Akihide Kuwabara, Yoshihiro Yamazaki	The 15th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM15) and The 13th International Conference on High-Performance Ceramics (CICCC-13) Shenzhen, China	令和5年 11月
49	ハイスループット計算化学を活用した表面・触媒の解析と予測	小林 正人	2023年度触媒学会「水素の製造と利用に関するシンポジウム」 東京大学、東京	令和5年 11月
50	Interface Chemistry and Ion Transport in Batteries Revealed by Advanced First-Principles Calculations	Yoshitaka Tateyama	Japanese-German Joint Seminar on Sustainable Batteries MEET Hall, Germany	令和5年 11月
51	機械学習原子間相互作用を用いた構造材料の原子シミュレーション	尾方 成信	DDCoMS-PCoMS-RISME 計算物質科学セミナーシリーズ 2023 -計算科学によるデータ創出、活用に向けて- オンライン	令和5年 12月
52	Ab Initio Thermodynamic Sampling of Millions of Configurations in Many-Component Oxides Accelerated by Machine Learning	Shusuke Kasamatsu, Tatsumi Aoyama, Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi, Akihide Kuwabara, Takafumi Ogawa, Junji Hyodo, Yoshihiro Yamazaki	Advanced Materials Research Grand Meeting MRM2023 / IUMRS-ICA2023 Kyoto International Conference Center, Kyoto	令和5年 12月

項番	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
53	Large-scale DFT calculations using CONQUEST code for materials with complex structures	Ayako Nakata, Shengzhou Li, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP2024) RIKEN, Saitama	令和6年 1月
54	界面化学における AI を用いた分子動力学計算の長時間化と自動解析	泰岡 顕治	第41回コロイド界面技術シンポジウム ヒトとAIの界面～データサイエンスと生体界面化学との融合～ 同志社東京オフィス、東京	令和6年 1月
55	機械学習技術を用いた分子動力学シミュレーションの長時間予測と自動解析	泰岡 顕治	第28回 関西大学 先端科学技術シンポジウム 100周年記念会館（関西大学）、大阪	令和6年 1月
56	Cosolvent effects on peptide aggregation studied with all-atom MD, solvation theory, and variational theorem	Nobuyuki Matubayasi	Telluride Science Winter Workshop "The Role of Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function" Ah Haa School for the Arts, USA	令和6年 1月
57	高分子に閉じ込められた水の水素結合状態と動的性質に対する分子動力学解析	四方 志	日本水・蒸気性質協会 2023年度第5回全体会議 ハイブリッド開催	令和6年 3月
58	機械学習による分子シミュレーションの高速化と自動解析	泰岡 顕治	日本物理学会 2024年春季大会 オンライン	令和6年 3月
59	Large-scale DFT calculations for nanoarchitectonics	Ayako Nakata, Shengzhou Li, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	APS March Meeting 2024 Minneapolis Convention Center, USA	令和6年 3月

項番	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
60	ハイスループット計算と機械学習を活用した固溶体中イオン配置の統計熱力学サンプリング	笠松 秀輔	計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS 次世代研究者セミナー 東北大学金属材料研究所講堂、宮城	令和6年 3月
61	産総研のデータ駆動型材料研究開発	三宅 隆	MI（マテリアルズインフォマティクス）シンポジウム 多機関による材料データ相互利用の最前線 日刊工業新聞西日本支社、大阪	令和6年 3月

② 口頭発表

項番	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
1	Bridging microscopic structures and ionic conductivity in liquid electrolyte based on topological data analysis	Xichan Gao, Kazuto Akagi	AIMR-Cambridge JRC Kick-off Workshop 2023 Tohoku University, Miyagi	令和5年 4月
2	大規模 DFT 計算と機械学習の連携による担持金属ナノ粒子触媒の電子状態解	李 盛洲、宮崎 剛、 中田 彩子	第 25 回理論化学討論会 資生堂 S/PARK ホール、神奈川	令和5年 5月
3	Configuration Sampling in Many-component Oxides and Their Interfaces Using an On-lattice Neural Network Model	Shusuke KASAMATSU, Yuichi MOTOYAMA, Kazuyoshi YOSHIMI, Ushio MATSUMOTO, Akihide KUWABARA, Takafumi OGAWA	International Conference on Materials for Advanced Technologies 2023 Singapore	令和5年 6月
4	Designing Novel Antiperovskite-type Solid Electrolytes for All-solid-state Batteries by High-throughput DFT and Machine Learning	Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama	IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 SUNTEC Singapore, Singapore	令和5年 6月
5	Evaluation of Battery Positive-electrode Performance with Ab-initio Simultaneous Calculations of the Electronic and Ionic Conductivities	Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	IUMRS-ICAM & ICMAT 2023 SUNTEC Singapore, Singapore	令和5年 6月
6	All-Atom Analysis of Intermolecular Interactions in Polymeric Materials: Water Absorption and Mutual Miscibility	Nobuyuki Matubayasi	The 13th SPSJ International Polymer Conference (IPC 2023) Sapporo Convention Center, Sapporo	令和5年 7月
7	Topological structure analysis of ZnCl ₂ liquid and glass using neural network potentials molecular dynamics	Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems Makuhari Messe, Chiba	令和5年 8月

項番	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
8	環状高分子の構造がトポロジカルガラスをもたらす機構の解明	後藤 頌太、金 鋼、松林 伸幸	第 72 回高分子討論会 香川大学、香川	令和 5 年 9 月
9	分子の脂質膜透過現象を記述する理論的手法の開発	松原 優弥、昌山 廉、笠原 健人、松林 伸幸	第 17 回分子科学討論会 2023 大阪 大阪大学、大阪	令和 5 年 9 月
10	アニオン交換膜内のイオン輸送に関する動力学解析	笠原 健人、奈良 悠里、松林 伸幸、八木 清、田中 学	第 17 回分子科学討論会 2023 大阪 大阪大学、大阪	令和 5 年 9 月
11	環状高分子の構造がトポロジカルガラスをもたらす機構の解明	後藤 頌太、金 鋼、松林 伸幸	日本物理学会第 78 回年次大会 東北大学、宮城	令和 5 年 9 月
12	Defect-chemistry-trained machine learning for rapid discovery of Unconventional Proton-Conducting Oxides	Susumu Fujii, Yuta Shimizu, Junji Hyodo, Akihide Kuwabara, Yoshihiro Yamazaki	The 21st International Conference on Solid-State Protonic Conductors (SSPC-21) Nishijin Plaza, Fukuoka	令和 5 年 9 月
13	Hydration-active sites in heavily Sc-doped BaZrO3 from first-principles statistical thermodynamics accelerated by machine learning	Shusuke Kasamatsu, Junji Hyodo, Yoshihiro Yamazaki	The 21st International Conference on Solid-State Protonic Conductors (SSPC-21) Nishijin Plaza, Fukuoka	令和 5 年 9 月
14	3価カチオン添加ジルコン酸バリウム中のプロトン伝導と局所格子歪み	設楽 一希、桑原 彰秀、奥山 勇治、兵頭 潤次、山崎 仁丈	日本セラミックス協会 第 36 回秋季シンポジウム 京都工芸繊維大学、京都	令和 5 年 9 月
15	分子動力学計算による高分子破壊と分子構造の解析	藤本 和士、石川 博明、湯 之也、岡崎 進	第 72 回高分子討論会 香川大学、香川	令和 5 年 9 月
16	Molecular Simulation of the Behavior of the Premelt Layer at the Ice-rubber Interface	T. Sato, Ikki Yasuda, Y. Kobayashi, Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka	9th International Tribology Conference Fukuoka	令和 5 年 9 月

項番	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
17	Temperature-dependent Molecular Dynamics of Ice Premelting at Different Faces of Hexagonal Ice Crystal	Ikki Yasuda, Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka	9th International Tribology Conference Fukuoka	令和5年 9月
18	膜タンパク質 AQP4 を介した浸透圧格差による水分子透過のシミュレーション	栗林 直信、平野 秀典、山本 詠士、泰岡 顕治	日本流体力学会年会 2023 東京農工大学、東京	令和5年 9月
19	第一原理計算+古典溶液理論による菱面体硫化ホウ素電極/アルカリ水溶液界面における酸素発生反応の研究	萩原 聡、黒田 文彬、Linghui Li、近藤 剛弘、大谷 実	日本物理学会第78回年次大会 東北大学、宮城	令和5年 9月
20	イオン相関を考慮したイオン伝導度の計算高速化に向けた新規非平衡MD法の開発	館山 佳尚、佐々木 遼馬、一杉 太郎	日本物理学会第78回年次大会 東北大学、宮城	令和5年 9月
21	イオン性固溶体の安定サイト配置の効率的サンプリングに向けたアルゴリズム開発	張 成燾、ハレム ランディ、館山 佳尚	日本物理学会第78回年次大会 東北大学、宮城	令和5年 9月
22	アニオン交換膜のイオン輸送特性に関する分子動力学解析	笠原 健人、奈良 悠里、金 鋼、松林 伸幸、八木 清、田中 学	第45回溶液化学シンポジウム 山形テルサ、山形	令和5年 10月
23	Dependence of Proton Diffusivity on Dopant Concentration in Yttrium-doped Barium Zirconate; First-Principles Study	Kazuki Shitara, Akihide Kuwabara, Yuji Okuyama, Yoshihiro Yamazaki	244th ECS Meeting Gothenburg, Sweden	令和5年 10月
24	Machine Learning for Molecular Dynamics Simulation	Kenji Yasuoka	Japan-Vietnam Bilateral Symposium on Science and Engineering for Space and the Earth 2023 (JVBSSESE 2023), Vietnam	令和5年 10月

項番	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
25	Kazuo Yamada and Nobuyuki Matubayasi	Kazuo Yamada, Nobuyuki Matubayasi	データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全循環型バイオアダプティブ材料の創出拠点 若手研究者 WORKSHOP OSAKA 2023 大阪アカデミア、大阪	令和5年 10月
26	クラスター展開とベイズ最適化の複合的アプローチを用いた LiCoO ₂ の充放電過程における構造変化の研究	黒田 文彬、萩原 聡、大谷 実	第49回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和5年 11月
27	Molecular dynamics analysis of interaction between screw dislocation motion and hydrogen diffusion in BCC iron	Shuheii Shinzato, Jiaqin Xu, Fan-Shun Meng, Shigenobu Ogata	PRICM11 済州国際コンベンションセンター、韓国	令和5年 11月
28	欠陥化学を解釈可能な機械学習モデルの構築と非ペロブスカイト型プロトン伝導体の発見	藤井 進、清水 雄太、兵頭 潤次、桑原 彰秀、山崎 仁丈	第49回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和5年 11月
29	銀イオン系混合ガラスの局所構造と超イオン伝導	笠松 秀輔、高橋 和樹、齋藤 琴音、荒川 泰政、臼杵 毅	第49回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和5年 11月
30	CrMnFeCoNi 系ハイエントロピー合金の機械特性に対する Al 添加の影響：機械学習分子動力学シミュレーション解析	福島 省吾、中島 快、工藤 龍太郎、浅野 優太、大谷 優介、尾澤 伸樹、久保 百司	日本コンピュータ化学会 2023 年秋季大会 レクザムホール、香川	令和5年 11月
31	機械学習分子動力学法を用いた FCC 型 CrMnFeCoNi 系ハイエントロピー合金の引張シミュレーション	中島 快、工藤 龍太郎、福島 省吾、蘇 怡心、浅野 優太、大谷 優介、尾澤 伸樹、久保 百司	日本コンピュータ化学会 2023 年秋季大会 レクザムホール、香川	令和5年 11月

項番	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
32	Evaluation on Battery positive-electrode performance with simultaneous ab initio calculations of both electronic and ionic conductivities	Huu Duc Luong, Chenchao Xu, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	第 49 回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和 5 年 11 月
33	First Principles Study on the Interplay of Strain and State of Charge with Li Diffusion in Lithium Cobalt Oxide Cathode Material	Zizhen Zhou, Claudio Cazorla Silva, Huu Duc Luong, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	第 49 回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和 5 年 11 月
34	Computational design of solid electrolytes for all-solid-state batteries by high-throughput first-principles calculations and machine learning techniques	Randy Jalem	第 49 回固体イオニクス討論会 北海道大学、北海道	令和 5 年 11 月
35	第一原理計算による高エネルギー密度有機正極活動質の探索と解析	館山 佳尚、加賀爪 明子、八尾 勝、松田 翔一、魚崎 浩平	第 64 回電池討論会 大阪府立国際会議場、大阪	令和 5 年 11 月
36	Ab initio Study on Degradation Mechanism through Spinel-like Co_3O_4 Formation on Li_xCoO_2 Surface	Huu Duc Luong, Zizhen Zhou, Yoshitaka Tateyama	第 64 回電池討論会 大阪府立国際会議場、大阪	令和 5 年 11 月
37	Features from discharge/charge and relaxation to predict battery cycle life by machine learning	Qianli Si, Shoichi Matsuda, Youhei Yamaji, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	第 64 回電池討論会 大阪府立国際会議場、大阪	令和 5 年 11 月
38	First-principles study on the interplay of strain and state-of-charge with Li-ion diffusion in the LiCoO_2	Zizhen Zhou, Claudio Cazorla, Duc Huu Luong, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	第 64 回電池討論会 大阪府立国際会議場、大阪	令和 5 年 11 月

項番	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
39	Theoretical study on the stability and synthesis of anion-substituted antiperovskite electrolytes	Randy Jalem	第 64 回電池討論会 大阪府立国際会議場、大阪	令和 5 年 11 月
40	Atomistic study on screw dislocation motion in BCC iron-hydrogen system	Shuhei Shinzato, Fan-Shun Meng, Jiaqin Xu, Shigenobu Ogata	MRM2023 京都国際会館、京都	令和 5 年 12 月
41	Molecular Dynamics Simulation on Stress Corrosion Cracking of High Entropy Alloys in Water Environment	Shogo Fukushima, Ryutaro Kudo, Chang Liu, Yuta Asano, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo	WINDS2023 Outrigger Kona Resort and Spa, Kailua-Kona, United States	令和 5 年 12 月
42	Ab initio 分割統治 (DC) 計算の周期系への拡張	小川 紘、西田 叡 倫、赤間 知子、小林 正人、武次 徹也	化学系学協会北海道支部 2024 年冬季研究発表会 北海道大学学術交流会 館、北海道	令和 6 年 1 月
43	「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」（「富岳」材料物理化学課題） 課題概要	館山 佳尚	スーパーコンピュータ 「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和 6 年 2 月

項番	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
44	蓄電池電極材料の劣化に関わる応力下・充電条件下におけるイオン伝導機構の解明 : DFT-MD サンプリング	館山 佳尚	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
45	多元系固溶体材料の第一原理計算・機械学習・アンサンブルサンプリング連携フレームワークの開発	笠松 秀輔	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
46	親水高分子ブラシによる不純物侵入阻害の分子機構	矢ヶ崎 琢磨	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月

項番	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
47	教師なし機械学習に基づく高分子内水分子の拡散性評価手法	安田 一希	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
48	FPKKR法を用いた磁気異方性の第一原理計算とデータの創出	奥村 晴紀	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
49	磁性材料のための基盤的シミュレーションコードの高度化とデータの創出	福島 鉄也	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月

項番	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
50	ニューラルネットワークポテンシャル分子動力学ソフトウェアの開発とハイエントロピー合金への応用	久保 百司	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
51	ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた水素環境下における鉄の変形・破壊解析	新里 秀平	スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」・「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和6年 2月
52	Molecular dynamics study of hydrogen effect on screw dislocation motion and their interaction	Shuhei Shinzato, Jiaqin Xu, Fan-Shun Meng, Shigenobu Ogata	TMS2024 Hyatt Regency Orlando, United States	令和6年 3月
53	高分子中に閉じ込められた水分子の状態を評価する分子動力学シミュレーション解析	金 鋼、四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、松林 伸幸	化学工学会 第89年会 大阪公立大学、大阪	令和6年 3月
54	周期境界条件を考慮した ab initio 分割統治 (DC) 法の開発	小川 絃、西田 叡倫、赤間 知子、小林 正人、武次 徹也	日本化学会第104春季年会 日本大学理工学部、千葉	令和6年 3月

③ ポスター発表

項番	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
1	Structure of GeO ₂ Glass Using Neural Network Potential Molecular Dynamics -Suppression of Intermediate-range Order with Pressure	Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	Beyond Imperfections: New Structure-Property Relationships in Ceramics and Glasses Bad Honnef, Germany	令和5年 5月
2	DC-xTB-MD 法: 複合欠陥を含む超大規模系のための汎用的な量子化学計算手法の開発 【最優秀ポスター発表賞受賞】	西田 叡倫、藤原 孝太郎、小林 正人、武次 徹也	第25回理論化学討論会 資生堂 S/PARK ホール、神奈川	令和5年 5月
3	Application of a graph neural network in structure classification for water, ice, and clathrate hydrates	Satoki Ishiai, Katsuhiro Endo, Paul E. Brumby, Kenji Yasuoka	10th International Conference on Gas Hydrates Suntec Singapore International Convention & Exhibition Centre, Singapore	令和5年 7月
4	Non-Gaussianity and dynamic heterogeneity in ring polymer melts	Shota Goto, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (9 IDMRCS) Makuhari Messe, Chiba	令和5年 8月
5	New diffusion theory of molecular liquids based on the energy representation solution theory	Kazuya Okita, Kento Kasahara, and Nobuyuki Matubayasi	9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (9 IDMRCS) Makuhari Messe, Chiba	令和5年 8月
6	Estimating miscibility of the long-chain polymer mixtures using all-atom model	Kazuo Yamada, Nobuyuki Matubayasi	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月

項番	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
7	Structural changes in LiCoO ₂ electrode: A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization	Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月
8	Oxygen evolution reaction at the rhombohedral boron mono-sulfide electrode/alkaline medium interface	Satoshi Hagiwara, Fumiaki Kuroda, Linghui Li, Takahiro Kondo, Minoru Otani	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月
9	Analysis of lithium-ion diffusion for all-solid-state battery using unsupervised machine learning of molecular dynamics simulation	Ikki Yasuda, R. Kawada, H. Yamazaki, Kenji Yasuoka	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月
10	Cage occupancy analysis in sll clathrate hydrates from isothermal-isobaric Gibbs ensemble Monte Carlo simulations	H. Kishimoto, Paul E. Brumby, Kenji Yasuoka	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月
11	Self-supervised learning method for molecular dynamics simulations using graph neural network to obtain molecular geometry features	Satoki Ishiai, Katsuhiro Endo, Kenji Yasuoka	CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics Kobe International Conference Center, Hyogo	令和5年 8月
12	Revealing the hidden dynamics of confined water in acrylate polymers: Insights from hydrogen-bond lifetime analysis	Kokoro Shikata, Takuma Kikutuji, Nobuhiro Yasoshima, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi	The 7th International Soft Matter Conference, ISMC2023 Osaka International Convention Hall, Osaka	令和5年 9月

項番	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
13	高分子に閉じ込められた水の水素結合状態とダイナミクスに関する分子動力学解析	四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、金 鋼、松林 伸幸	第 17 回分子科学討論会 2023 大阪 大阪大学、大阪	令和 5 年 9 月
14	Pressure-induced structural transitions in GeO ₂ glass based on topological data analysis	Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order Evian-les-Bains, France	令和 5 年 9 月
15	Molecular Study of Solvent Effects on Polymer Materials	Kazushi Fujimoto, Minoru Shimooka, Satoru Kanaya	EMLG/JMLG 2023 Bordeaux University, France	令和 5 年 9 月
16	Local-moment disorder 状態での Y-Fe, Y-Co 化合物の磁気相互作用の電子論的解析	黒田 文彬、深澤 太郎、三宅 隆	日本物理学会第 78 回年次大会 東北大学、宮城	令和 5 年 9 月
17	Surface Premelting of Ice Ic using Molecular Dynamics Simulation	Ikki Yasuda, Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka	15th International Conference on the Physics and Chemistry of Ice Hokkaido Univ., Hokkaido	令和 5 年 9 月
18	Graph Neural Networks Classify Molecular Geometry and Design Novel Order Parameters of Ice and Water	Satoki Ishiai, Katsuhiro Endo, Kenji Yasuoka	15th International Conference on the Physics and Chemistry of Ice Hokkaido Univ., Hokkaido	令和 5 年 9 月
19	Molecular dynamics simulation of small molecules dissolved in polymer	Kenshin Mukae, Hidekazu Kojima, Nobuyuki Matubayasi	The 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023) National Taiwan University, Taiwan	令和 5 年 10 月

項番	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
20	高分子に閉じ込められた水の水素結合状態とダイナミクスに関する分子動力学解析	四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、金鋼、松林 伸幸	CSJ 化学フェスタ 2023 タワーホール船堀、東京	令和 5 年 10 月
21	アモルファスに対する複合的ドーピングの機能解明に向けた汎用的な超大規模計算手法の開発	西田 叡倫、藤原 孝太郎、小林 正人、武次 徹也	第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 タワーホール船堀、東京	令和 5 年 10 月
22	Analysis of initial changes in the pore permeable to cations in channelrhodopsin-2	Kenta Shobu, Yoshinori Hirano, Kenji Yasuoka	The 6th International Conference on Molecular Simulation Taiwan	令和 5 年 10 月
23	Modelling of hydrogen diffusion influenced screw dislocation motion in BCC iron	Jiaqin Xu, Shuhe Shinzato, Fan-Shun Meng, Shigenobu Ogata	PRICM11 済州国際コンベンション センター、韓国	令和 5 年 11 月
24	磁性材料における物性データ創出とその活用	福島 鉄也	第 17 回物性科学領域横断 研究会 名古屋工業大学、愛知	令和 5 年 11 月
25	DC-xTB-MD プログラムの開発と大規模周期系の量子分子動力学計算	藤原 孝太郎、西田 叡倫、小林 正人、武次 徹也	日本コンピュータ化学会 2023 秋季年会 レクザムホール、香川	令和 5 年 11 月
26	分子動力学シミュレーションを用いた AQP4 を介した水分子透過の方向性に関する研究	栗林 直信、山本 詠士、平野 秀典、泰岡 顕治	水・蒸気性質シンポジウム 2023 慶應義塾大学、東京	令和 5 年 11 月
27	機械学習を用いた水分子の結晶構造解析	石合 智貴、遠藤 克浩、Paul E. Brumby、Amadeu K. Sum、泰岡 顕治	水・蒸気性質シンポジウム 2023 慶應義塾大学、東京	令和 5 年 11 月
28	モンテカルロシミュレーションを用いたクラスレートハイドレートの相図と充填率解析	岸本 寛隆、Paul E. Brumby、泰岡 顕治	水・蒸気性質シンポジウム 2023 慶應義塾大学、東京	令和 5 年 11 月
29	ポリマーに対する水の溶解性の MD 解析	向江 謙心、小嶋 秀和、矢ヶ崎 琢磨、松林 伸幸	水・蒸気性質シンポジウム 2023 慶應大学、東京	令和 5 年 11 月

項番	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
30	高分子に閉じ込められた水の水素結合状態と動的性質に対する分子動力学解析	四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、金鋼、松林 伸幸	水・蒸気性質シンポジウム 2023 慶應大学、東京	令和 5 年 11 月
31	A combined approach with cluster expansion and Bayesian optimization: Structural changes in LiCoO ₂ electrode	Fumiaki Kuroda, Satoshi Hagiwara, Minoru Otani	MRM 2023 (Advanced Materials Research Grand Meeting), Kyoto	令和 5 年 12 月
32	Theoretical study on hydrogen diffusion influenced screw dislocation motion in body-centered cubic iron	Jiaqin Xu, Shuhei Shinzato, Fan-Shun Meng, Shigenobu Ogata	MRM2023 京都国際会館、京都	令和 5 年 12 月
33	First-principles calculations of temperature-dependent electrical transport properties for Tunnel magnetoresistance (TMR) devices	Hikari Shinya, Tetsuya Fukushima, Hiroshi Katayama-Yoshida, Masafumi Shirai	MRM2023/IUMRS-ICA2023 Kyoto International Conference Center, Kyoto	令和 5 年 12 月
34	Analysis of trade-off relations between magnetization, Curie temperature and price in ThMn ₁₂ -type magnet compounds and multi-objective Bayesian optimization for obtaining Pareto Front	Taro Fukazawa and Takashi Miyake	MRM2023/IUMRS-ICA2023 Grand Meeting Kyoto International Conference Center, Kyoto	令和 5 年 12 月
35	GEMC/MD 法を用いたメタンハイドレートの三相平衡曲線の導出	岸本 寛隆、Paul E. Brumby、Amadeu K. Sum、泰岡 顕治	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
36	クラスレートハイドレートの核生成系におけるグラフニューラルネットワークを用いた構造解析	石合 智貴、遠藤 克浩、Amadeu K. Sum、泰岡 顕治	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
37	分子シミュレーションを用いた claudin-5 タンパク質の構造的性質の解析	石岡 遼大、平野 秀典、小和口 昌愛、荒井 規允、浅井 誠、泰岡 顕治	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
38	I RE 1 共有結合性インヒビターがタンパク質の構造変化に与える影響についての分子動力学的研究	平野 秀典、沖本 憲明、藤田 茂雄、泰岡 顕治、泰地 真弘人	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月

項番	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
39	膜タンパク質 AQP4 を介した浸透圧格差による水分子透過のシミュレーション	栗林 直信、山本 詠士、平野 秀典、泰岡 顕治	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
40	分子動力学シミュレーションを用いた ChR2 のアミノ酸置換による構造変化の解析	菖蒲 健太、平野 秀典、泰岡 顕治	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
41	環状高分子におけるトポロジカルガラスの動的不均一性	後藤 頌太、金 鋼、松林 伸幸	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
42	小分子のポリマー中への溶解の MD 解析	向江 謙心、小嶋 秀和、矢ヶ崎 琢磨、松林 伸幸	第 37 回分子シミュレーション討論会 県民ホール、福井	令和 5 年 12 月
43	高分子官能基に影響を受け閉じ込められた水分子の水素結合状態に関する分子動力学解析	四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、金鋼、松林 伸幸	第 11 回ソフトマター研究会 東京大学生産技術研究所 コンベンションホール、東京	令和 5 年 12 月
44	Stress Corrosion Cracking Simulation of High Entropy Alloys by Molecular Dynamics Method based on Neural Network Potential	Kai Nakajima, Ryutaro Kudo, Shogo Fukushima, Yuta Asano, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo	TMS 2024 Annual Meeting & Exhibition Hyatt Regency Orlando, USA	令和 6 年 3 月
45	固溶体の第一原理基熱力学計算フレームワーク abICS の開発 【第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 次世代研究者賞】	笠松 秀輔	第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 富士ソフトアキバプラザ、東京	令和 6 年 3 月
46	逆モンテカルロ法とニューラルネットワークポテンシャル法による GeO ₂ ガラスの中距離秩序解析	松谷 健太、笠松 秀輔、臼杵 毅	第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 富士ソフトアキバプラザ、東京	令和 6 年 3 月

項番	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
47	機械学習力場を用いた大規模シミュレーションによる超イオン伝導ガラス $\text{AgI-As}_2\text{Se}_3$ のイオンダイナミクス解析	荒川 泰政、笠松 秀輔、臼杵 毅	第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 富士ソフトアキバプラザ、東京	令和6年 3月
48	第一原理計算による遷移金属系での温度効果を含めた磁気特性評価	平松 諒也	第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 富士ソフトアキバプラザ、東京	令和6年 3月
49	$\text{A}_2\text{-xBxMo}_3\text{N}$ 系を対象とした磁性材料探索	北 玲男	第3回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 富士ソフトアキバプラザ、東京	令和6年 3月

[3] プレス発表

項番	掲載された成果	発表者氏名	発表メディア	発表時期
1	高分子のまわりにいる水がゆるく水素結合する様子を解明 血液適合性に優れる医用高分子材料のメカニズム理解に貢献	金 鋼	日刊工業新聞、大阪大学、他	令和5年 5月
2	環状の高分子は「穴」を突き抜け互いに絡み合う 高分子の「かたち」によって絡み合いの性質が異なることを発見	金 鋼	大阪大学、理研 R-CCS、日本の研究.com、他	令和5年 8月
3	非従来型プロトン伝導体の効率的探索手法を世界で初めて開発・実証 ～計算・データ科学・実験の有機的融合による新たな材料設計指針～	清水 雄太、兵頭潤次、山崎 仁丈、藤井 進、桑原 彰秀	日本経済新聞、九州大学、JST、大阪大学、JFCC、他	令和5年 9月
4	強磁性半導体を示す特異なふるまいの謎を解明！ 一新しい第一原理計算手法が導き出したメカニズムとは—	新屋 ひかり、大矢 忍、吉田 博、福島 鉄也、佐藤和則	日本経済新聞、ニュースイッチ（日刊工業新聞社）、オンライン情報サイト、東京大学、他	令和5年 11月
5	単一分子だけで異なる誘電応答性を示す結晶作成に成功 お椀型分子で省プロセス・省コストの物性制御が可能な誘電材料に期待	焼山 佑美	日本経済新聞、MONOist（アイティメディア）、オンライン情報サイト、東北大学、大阪大学、他	令和6年 2月

(3) 特許出願状況

補助事業名

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

(次世代超高速電子計算機システム利用の成果促進)

「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」

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
05	なし							