

令和6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7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6年度（報告年度）の実施内容	1
2-1. 当該年度（令和6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	42
E) AI・データ科学	47
(2) プロジェクトの総合的推進	50
2-3. 活動（研究会の活動等）	52
2-4. 実施体制	54
別添 学会等発表実績	57
(1) 活動報告	57
(2) 学会等発表実績	77
[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載	77
[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	99
[3] プレス発表	105
(3) 特許出願状況	106

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6年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和6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6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・電極触媒をミクロスケールで見た場合、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6年度においては、以下の7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次世代蓄電池の電極・電解質界面におけるイオン輸送機構や劣化に関わる電気化学反応機構の解明及び応力効果の解析

ヘテロ界面 CALYPSO 法等を用いた電極材料-コート層-固体電解質界面の安定構造探索を様々な系で実行し、電極・電解質界面周辺に現れる応力効果による歪みと Li イオン伝導性や界面反応性の相関について微視的理解を進める。

②機械学習と組み合わせた、高イオン伝導度固体電解質材料の計算材料設計と記述子抽出

固体電解質の安定性解析コードをさらに進化させ、多様な固体電解質群のイオン拡散係数のハイスループット計算を実行することで、高イオン伝導固体電解質の探索を行う。さらにプロトン伝導へのコード拡張を進める。

③ナノ粒子のサイズ、形状、担体との相互作用の解析

前年度から引き続き行う大規模第一原理計算プログラム CONQUEST におけるマルチサイト法の「富岳」での速度検証に基づき、計算の効率化を図る。マルチサイト法を用いて、孤立金属ナノ粒子の構造、電子状態のサイズ・サイト依存性の解析に取り組む。

④界面反応および電極劣化反応の機構解明・格子振動効果を入れた CE+B0（クラスター展開+ベイズ最適化）法における有限温度凸包の構築

ESM-RISM における電圧制御コードを用いた電極反応シミュレーションを実施する。前年度では、CE 法に有限温度での振動効果を取り入れた計算のフレームワークを開発し、典型合金でのテストを行った。典型合金も配置と振動エントロピーの協奏により、原子の規則・不規則転移温度が確認できた。令和6年度では、LiCoO₂などの正極材料に適用することで、振動エントロピーが与えるカチオンミキシングへの影響を調べる。

⑤abICS フレームワークのガラス系への拡張・ガラス材料へ適用し、構造-物性相関を解析

abICS フレームワークを用いてガラスの回折実験データを再現し、かつエネルギー的に妥当な3次元構造を予測し、リング解析やパーシステントホモロジーを活用して構造物性相関を解析する。

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年度から継続）

前年度に引き続き、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。前年度は表面計算が主であったが、令和6年度は特に多元系酸化物を対象とした吸着電子構造データベースの構築を進める。

⑦高精度電子状態計算による触媒反応機構の精緻な解明

主に電極触媒反応を対象とし、触媒反応機構の解明を進めるとともに、劣化シミュレーションを開始する。特に、前年度より「富岳」向けの整備・準備を行った分割統治法に基づく大規模周期境界量子化学計算プログラムを用いた高精度電子状態計算により検討を行う。

(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6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永久磁石材料のデータ蓄積、データ科学手法を用いた物性の解析

遷移金属合金や希土類遷移金属化合物の第一原理網羅計算を実行し、電子状態、構造安定性、磁気物性に関する計算データを蓄積する。得られたデータに対してデータ科学手法を適用し、組成・構造と物性値の相関を解析する。

②スピントロニクス材料における磁気異方性のハイスループット計算とデータ蓄積

異方的ポテンシャルを取り扱えるフルポテンシャル KKR 法を高度化しつつ、磁気異方性データを高精度で創出する。ターゲットはスピントロニクス材料、永久磁石材料材料であり、データ駆動型研究に資する磁性材料データベースを構築する。

③磁気メモリ材料を対象とした物性データ蓄積を可能にするワークフロープログラムの構築とデータ蓄積

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。開発した手法やワークフロープログラムを用い物性データの蓄積を開始する。

(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6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非イオン性の高分子界面への水やCO₂、イオンの吸着自由エネルギーの全原子解析

非イオン性の高分子が構成する界面への小分子（水やCO₂、イオンなど）の吸着を、吸着種の親水性や疎水性を変えて全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションと自由エネルギー計算によって解析し、自由エネルギー分割によって吸着を規定する分子間相互作用を検討する。

②機械学習を用いた非イオン性高分子内における水やCO₂分子の長時間ダイナミクス解析

非イオン性高分子内における水分子やCO₂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非晶性高分子に、油脂を接触させた破壊シミュレーションを実施し、非晶性高分子破壊に対する油脂の影響を解明

前年度に、実験値を再現する油脂のモデリングに成功した。令和6年度は、この油脂をポリスチレン基板に接触させ状態で破壊シミュレーションを実施する。油脂の物性とソルベントクラックの有無についての関係を解明する。

(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6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構造材料の腐食摩耗メカニズムの解析

構造材料の劣化現象の解明に向けて、構造材料の腐食摩耗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、構造材料の腐食摩耗メカニズムの解析を実施する。

②構築したNNP（ニューラルネットワーク原子間ポテンシャル）を用いた繰り返し負荷MD（分子動力学）試験による疲労破壊プロセスの解析

前年度に構築したニューラルネットワーク原子間相互作用を用いて、令和6年度は、繰返し応力下での転位運動シミュレーションを行い、転位運動に伴う欠陥生成過程の解析を実施する。加えて、水素環境が欠陥生成過程に及ぼす影響を明らかにする。

(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6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固体電解質のイオン伝導度に寄与する構造的特徴の抽出

固体電解質中でのイオン伝導経路にトポロジカルデータ解析を適用して定量化し、局所原子構造の空間分布と対応づける。これにより、バルクと界面の混在する系において実質的なイオン伝導に寄与する構造的特徴を解明する。モデル固体電解質として $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2(\text{NH}_3\text{BH}_3)_2$ 系を、電極・電解質界面として館山グループの系を扱う。

(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課題内のさらなる連携、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、令和6年度は前年度の活動をさらに進め、研究会(3回程度開催予定)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6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次世代蓄電池の電極・電解質界面におけるイオン輸送機構や劣化に関わる電気化学反応機構の解明及び応力効果の解析

[令和6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-固体電解質界面の安定構造探索を様々な系で実行し、電極・電解質界面周辺に現れる応力効果による歪みと Li イオン伝導性や界面反応性の相関について微視的理解を進める。

[担当責任者] 館山 佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。全固体電池の実用化に対するボトルネックとして正極材料-固体電解質界面における副反応（構造変化）、イオン移動抵抗が課題となっている。これらのメカニズムを理論計算から明らかにするために、我々は固固界面構造の高効率探索法・界面 CALYPSO 法を開発してきた。令和6年度は界面劣化・抵抗を低減する効果を持つ界面コート層に着目し、代表的コート層 LiNbO_3 と同構造を持つ LiTaO_3 との比較を通して、界面のイオン移動障壁および正極格子酸素の欠損抑制が重要な因子であることを実証した。さらに、この酸素欠損がどのような条件で顕在化するかを明らかにするために代表的な LiCoO_2 正極界面を用いて、表面界面付近における遷移金属移動と酸素欠損の関連性を明らかにした。これらの知見は正極界面制御の重要な指針を提示するものとなっている。

[成果を得るため用いた計算モデル、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抵抗や劣化の制御であり、それらを改善する役割を持つコート層の設計・高度化である。コート層材料の最有望株と目されてきた LiNbO_3 が近年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。そこで我々は 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、我々が開発してきた界面 CALYPSO 法による固固界面高効率探索を用いて行った。正極にはモデル材料として LiCoO_2 を用いた (図 2-2-1-A-1)。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。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 0 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。

コート層は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予想外の結果を得た。さらに界面の多様なイオン拡散経路に対して、空孔機構に基づいた活性化障壁を Nudged Elastic Band (NEB) 法第一原理計算により求めた。その結果 LiNbO_3 界面の方が LiTaO_3 よりも界面活性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。一方で正極界面における酸素発生観点でみると LiNbO_3 の方が抑制効果が高いことがわかった [2-2-1-A-1]。

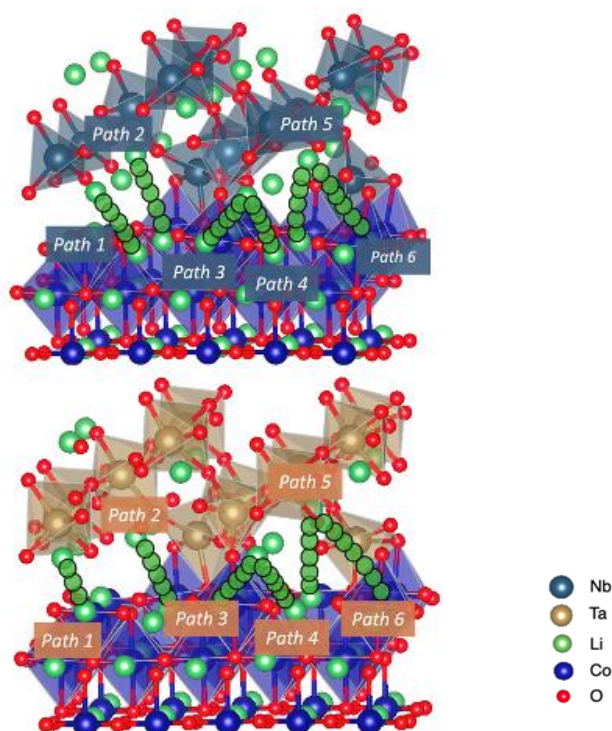


図 2-2-1-A-1. $\text{LiNbO}_3/\text{LiCoO}_2$ (上図) 及び $\text{LiTaO}_3/\text{LiCoO}_2$ (下図) の界面構造モデルにおける Li^+ イオン拡散経路群。

さらに、この酸素欠損がどのような条件で顕在化するかを明らかにするために代表的な LiCoO_2 正極界面を用いて、表面界面付近における遷移金属移動と酸素欠損の関連性を明らかにした (図 2-2-1-A-2)。 Li^+ 充電状態が進むと表面における酸素空孔の形成エネルギーが減少し、さらに遷移金属が Li 層に移動することが顕著にみられ、両者が相乗効果を持つことが示された。これらの知見は正極界面制御の重要な指針を提示するものとなっている [2-2-1-A-2, 2-2-1-A-3]。

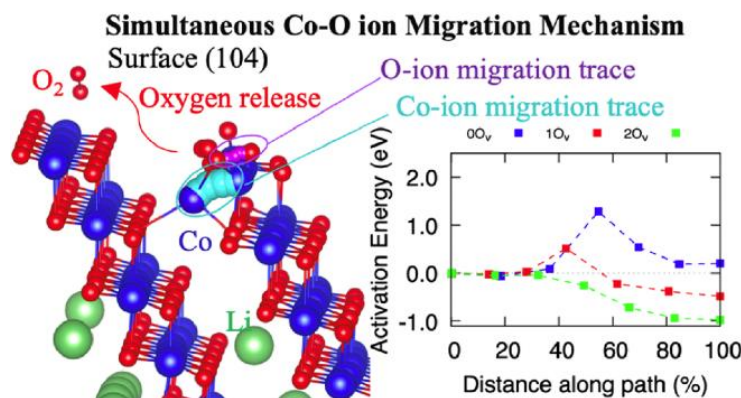


図 2-2-1-A-2. Li_xCoO_2 表面において、充電時に Co 移動と O 欠損が同時に起こりスピネル構造変化を促進するメカニズムの実証。

[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。

- ・ 文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト 「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点 (東京大学)」: 高イオン伝導度固体電解質のハイスループット第一原理計算スクリーニングフローの構築と高イオン伝導度 Na 系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」: 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拡張
- ・ 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
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究> 「蓄電固体界面科学」: 様々な固体電解質界面の電子・イオン移動に関わる学理の拡張 (粒界偏析、デンドライト成長、ハイスループットフロー、イオン相関)
- ・ 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
- ・ JST-GteX 蓄電池領域 「資源制約フリーなナトリウムイオン電池の開発」 Na イオン電池正極材料の劣化解析

[参考文献]

- [2-2-1-A-1] 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 (2024).
- [2-2-1-A-2] Huu Duc Luong, Zizhen Zhou, Yoshitaka Tateyama, "Simultaneous migration mechanism of Co-O couple toward spinel-like Co₃O₄ formation on Li_xCoO₂ surfaces", *J. Power Sources*, **641**, 236854 (2025).
- [2-2-1-A-3] Yoshitaka Tateyama, "Microscopic electrochemistry for interface ionics based on DFT calculation", Workshop on Interfacial Chemistry and Charge Transfer for Energy Storage and Conversion, Telluride, CO, USA.

②機械学習と組み合わせた、高イオン伝導度固体電解質材料の計算材料設計と記述子抽出

[令和6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進化させ、多様な固体電解質群のイオン拡散係数のハイスループット計算を実行することで、高イオン伝導固体電解質の探索を行う。さらにプロトン伝導へのコード拡張も進める。

[担当責任者] 館山 佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。我々が開発している固体電解質の安定性解析のための DFT サロゲートモデル EwaldSolidSolutionn に対して、初期原子構造と元素セットを自由に組み合わせできるように拡張することにより、より多くの構造・イオン配置のスクリーニングができるようになった。さらにプロトン化合物探索フローもあらたに組み込み、実際の材料に適用した。

[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を目的に、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 EwaldSolidSolution を作成・拡張している。本プログラムは MPI 並列化を行うことで億オーダーのイオン配置のエネルギー評価を数分オーダーで可能としている。これは「富岳」においても非常に有効であることが確認された。

[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。これに関して我々は前年度に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。EwaldSolidSolution は、エバルトエネルギーによる簡素な安定性評価であるが、DFT 計算と一致した安定性傾向を示すことがわかり、イオン性化合物に対する DFT サロゲートモデルになりうることが示された。このオリジナル版はデータベース内の物質から遺伝的アルゴリズムで元素配置を発展させながら探索するというものであったが、令和6年度は原子構造と元素のセットを切り分けて自由に組み合わせできるように拡張することにより、より広いイオン配置空間の探索が可能になり、より多くの構造・イオン配置のスクリーニングができるようになった（図 2-2-1-A-3）。さらに、酸素と結合すると特徴を持つプロトン配置についても適用可能な計算を組み込み、実際のプロトン化合物に適用したところ、多くの物性を再現することができた（図 2-2-1-A-4）、[2-2-1-A-4, 2-2-1-A-5, 2-2-1-A-6]。

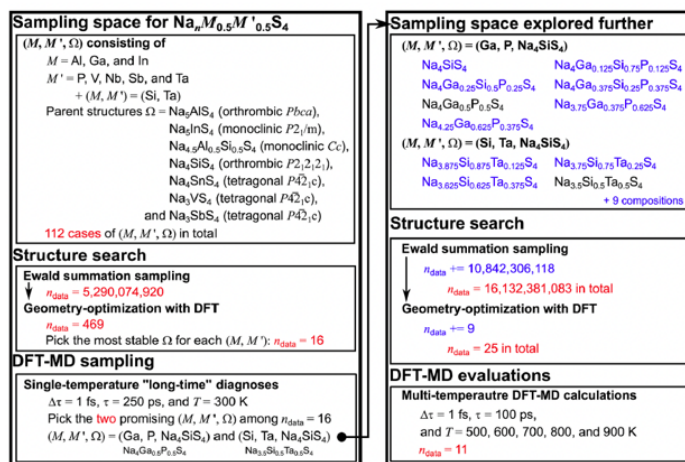


図 2-2-1-A-3. EwaldSolidSolution 拡張版（原子構造と元素セットの結合による初期構造セット）の高イオン伝導度固体電解質探索フロー。

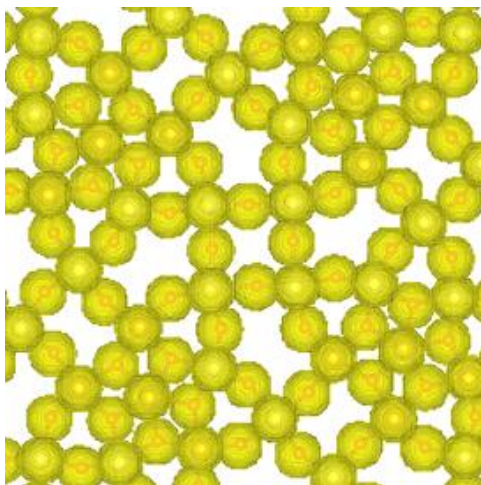


図 2-2-1-A-4. アニオン周辺を集中探索するプロトン配置用の EwaldSolidSolution 探索の模式図。

[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。

- ・ 文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト 「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点（東京大学）」：高イオン伝導度固体電解質のハイスループット第一原理計算スクリーニングフローの構築と高イオン伝導度 Na 系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」：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

グ手法の拡張

- ・ 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
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業＜新学術領域研究＞ 「蓄電固体界面科学」：様々な固体電解質界面の電子・イオン移動に関わる学理の拡張（粒界偏析、デンドライト成長、ハイスループットフロー、イオン相関）
- ・ 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
- ・ JST-GteX 蓄電池領域「資源制約フリーなナトリウムイオン電池の開発」Naイオン電池正極材料の劣化解析

[参考文献]

- [2-2-1-A-4] Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, "Computational discovery of stable Na-ion sulfide solid electrolytes with high conductivity at room temperature", *J. Mater. Chem. A*, **12**, 20879 (2024).
- [2-2-1-A-5] Kosuke Kawai, Seong-Hoon Jang, Yuta Igarashi, Koji Yazawa, Kazuma Gotoh, Jun Kikkawa, Atsuo Yamada, Yoshitaka Tateyama, Masashi Okubo, "Proton Intercalation into an Open-Tunnel Bronze Phase with Near-Zero Volume Change", *Angew. Chem. Int. Ed.* e202410971 (2024).
- [2-2-1-A-6] Yoshitaka Tateyama, "Microscopic Elucidation of Ion Transport in Cathodes, Solid Electrolytes and Their Interfaces Via Atomistic Simulations", IMLB2024 (The 22nd International Meeting on Lithium Batteries), AsiaWorld Expo., Hong Kong.

③ナノ粒子のサイズ、形状、担体との相互作用の解析

[令和6年度の事業実施計画]

前年度から引き続き行う大規模第一原理計算プログラム CONQUEST におけるマルチサイト法の「富岳」での速度検証に基づき、計算の効率化を図る。マルチサイト法を用いて、孤立金属ナノ粒子の構造、電子状態のサイズ・サイト依存性の解析に取り組む。

[担当責任者] 中田 彩子 (物質・材料研究機構)

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。マルチサイト法で行われる対角化計算を高速化するために、CONQUEST に並列固有値計算ソルバ ELPA を導入した。また、マルチサイト法を用いた大規模第一原理計算により、直径 0.5 nm から 5.5 nm までの Au および Pt ナノ粒子の構造最適化を行い、構造、電子状態のサイズ依存性を系統的に解析した。

[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]

大規模第一原理計算には、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では、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。金属ナノ粒子系の計算では、Au および Pt ナノ粒子に関して直径 0.5 nm (13 原子) ~5.5 nm (3871 原子) までを取り扱っている。

[研究成果]

マルチサイト法で行われる対角化計算を高速化するために、CONQUEST に並列固有値計算ソルバ ELPA を導入した。ELPA は密行列演算を得意とするソルバであり、従来の非縮約基底関数より密になりやすいマルチサイト関数での計算に有利であると期待できる。対角化に ScaLAPACK を用いた場合と比べて、自前のクラスターマシンでは若干の高速化を示した。次年度には「富岳」での大規模並列計算における速度検証を行いたい。

また、マルチサイト法を用いた大規模計算により、直径 0.5 nm から 5.5 nm までの Au および Pt ナノ粒子の構造最適化を行い、構造、電子状態のサイズ依存性を系統的に検討した。Au、Pt 双方において、粒子サイズが小さいときには粒子全体がバルクと比べて収縮している一方、粒子サイズが大きくなってくると、ナノ粒子の表面から 2~3 層までの原子間距離が短縮している一方で内側の層ではバルクに近い結合長に収束してくることが示された。その際、Pt では直径 2nm 程度からバルクの結合長に収束するのに対し、Au では直径 4nm を超えてもバルクの結合長より短縮していることが分かり、Au のほうがナノ粒子化による構造変化の影響を受けやすいことが分かった (図 2-2-1-A-5)。

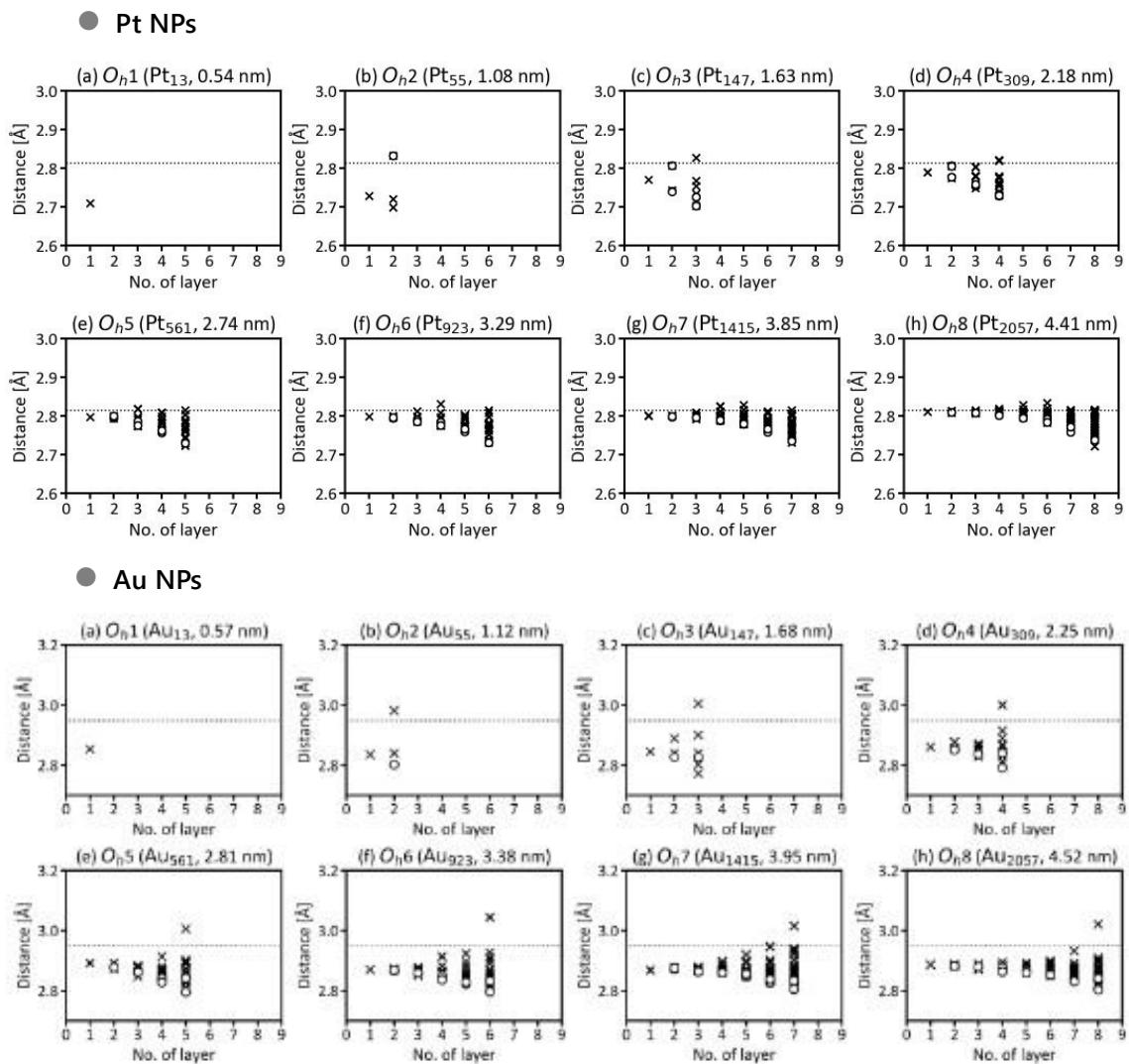


図 2-2-1-A-5. Pt および Au ナノ粒子における結合長のサイズ依存性。
点線はバルクにおける結合長。

電子状態に関しては、Pt、Au とも、小さなサイズでは離散的であるのに対し、直径 2nm 程度のサイズから電子状態が金属的に収束してくることが確認された。金属ナノ粒子の物性が直径 2 nm 程度を境に大きく変化することは実験的に数多く報告されていたが、本研究における大規模電子状態計算によって、粒子サイズによる電子状態変化を系統的・定量的に示すことに成功した。また、前年度に提案した局所電子状態の統計解析により、電子状態のサイト依存性を二次元で定量的に評価することができた。ナノ粒子の電子状態変化は主に表面、表面第 2 層までで起こっており、それより内側の層では電子状態が収束していることが図示された。また表面内においては、頂点および(111)面の原子が、辺や(100)面の原子とは大きく異なっていることが示された (図 2-2-1-A-6)、[2-2-1-A-7]。

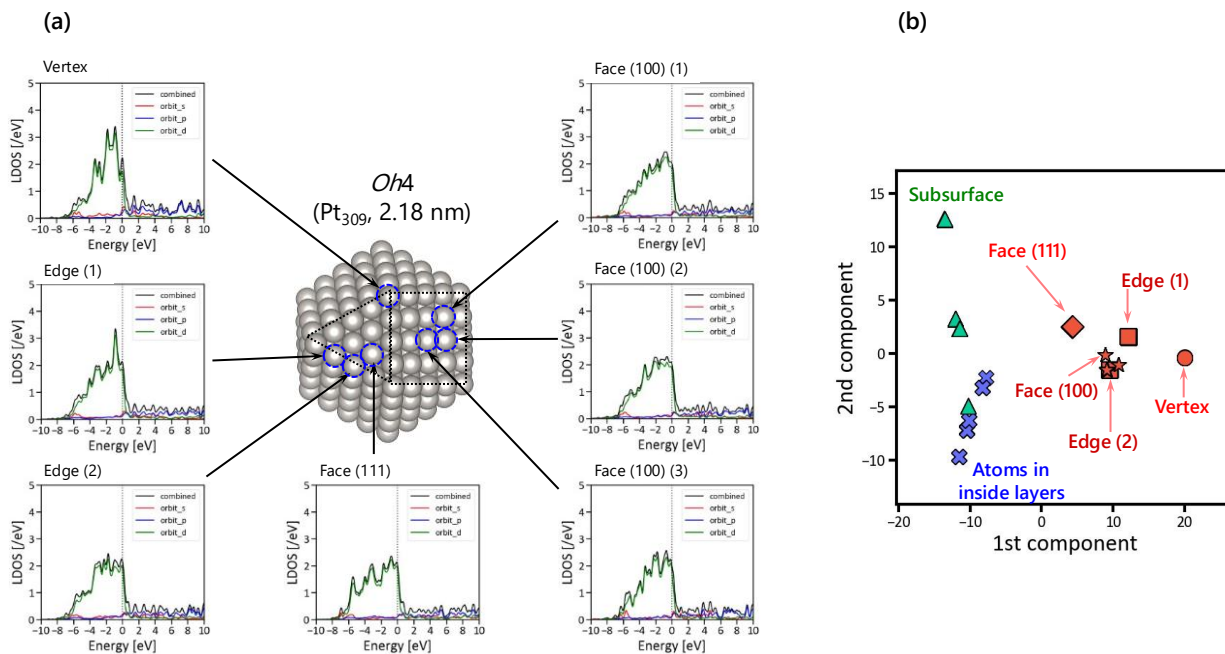


図 2-2-1-A-6. (a) 局所状態密度 (LDOS) のサイズ依存性、
(b) LDOS に基づく主成分分析図。

赤、緑、青は表面、表面第 2 層、内側の層における原子の LDOS、
丸、四角、ひし形、星形はナノ粒子表面の頂点、辺、(111)面、
(100)面における原子の LDOS に相当する。

[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。

- ・ 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
- ・ GteX 水素領域「革新的材料による次世代燃料電池システムの構築」：Pt ナノ粒子触媒の安定性、電子状態のサイズ依存性の解析

[参考文献]

- [2-2-1-A-7] 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 (2024).

④界面反応および電極劣化反応の機構解明・格子振動効果を入れた CE+B0（クラスター展開+ベイズ最適化）法における有限温度凸包の構築

[令和6年度の事業実施計画]

ESM-RISMにおける電圧制御コードを用いた電極反応シミュレーションを実施する。前年度では、CE法に有限温度での振動効果を取り入れた計算のフレームワークを開発し、典型合金でのテストを行った。典型合金も配置と振動エントロピーの協奏により、原子の規則・不規則転移温度が確認できた。令和6年度では、LiCoO₂などの正極材料に適用することで、振動エントロピーが与えるカチオンミキシングへの影響を調べる。

[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。手法開発と並行して、以下の界面反応とベイズ最適化に関する成果を得た。第一原理計算と記述子不要の証拠理論を組み合わせ、多元素合金空間からC₂生成選択的CO₂還元触媒を高効率に探索した。その結果、In-PdやIn-Cuなどの特定の4元合金において高いC₂選択性が示されることを理論的に予測し、実験では見出しにくい新たな触媒設計指針を提示した。

[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]

利用アプリケーション：Quantum ESPRESSO (QE) を使用した。計算モデル：BCCおよびFCC派生型構造を基にした1~4元素の合金の(001)、(011)表面をもつスラブ構造(4層、8~16原子)と、COやCを吸着させた構造を対象とした。「富岳」上で、多数の構造の並列計算を行い、高効率なスクリーニングを実施した。

[研究成果]

令和6年度は、多元素合金を対象としたC₂生成選択的電気化学的CO₂還元触媒の高効率探索を実施。「富岳」の大規模並列計算性能を活かし、第一原理計算と記述子不要の証拠理論を組み合わせることで、高次元の組成空間から有望な触媒候補を効率的に探索する枠組みを構築した。

具体的には、41元素を対象とし、Inorganic Crystal Structure Databaseに登録された3元合金構造とその(001)、(011)表面をモデルとしたスラブ構造(4層、8~16原子)にCOやCを吸着させた系について、Quantum ESPRESSO (QE)を用いて第一原理計算を実施。並列での大量ジョブ投入により、多数の構造のエネルギー評価を短期間で完了し、これにより、吸着エネルギーや反応中間体の安定性に基づくC₂生成選択性の予測を可能とした(図2-2-1-A-7)。

得られた計算データを基に、証拠理論に基づくベイズ最適化を適用。記述子を用いずに高次元の情報をそのまま扱える点が大きな特徴であり、従来の機械学習手法では困難であった構造・組成の複雑性を乗り越えるアプローチとなった。その結果、In-PdやIn-Cuなどの4元合金においてC₂生成選択性が高まる可能性を理論的に予測(図2-2-1-A-8)。これらの元素単体ではそのような選択性が確認されておらず、合金化による協奏的効果が示唆された[2-2-1-A-8]。

この成果は、「富岳」による大規模な並列第一原理計算を行うことで初めて得られたものであり、従来の計算リソースでは計算時間・組合せ数の制約により実現不可能だった探索空間の把握を可能とした。また、記述子不要のアプローチにより、これまで困難とされてきた結晶構造や面方位依存性を含む高次元設計空間の探索に成功。材料探索の新たな方向性を示す重要な一歩となった。

今後は、理論的に得られた候補材料の実験検証を進めるとともに、本手法を他の反応系や材料分野に展開し、第一原理計算と機械学習の融合によるマテリアルズ・インフォマティクスの深化を図る。

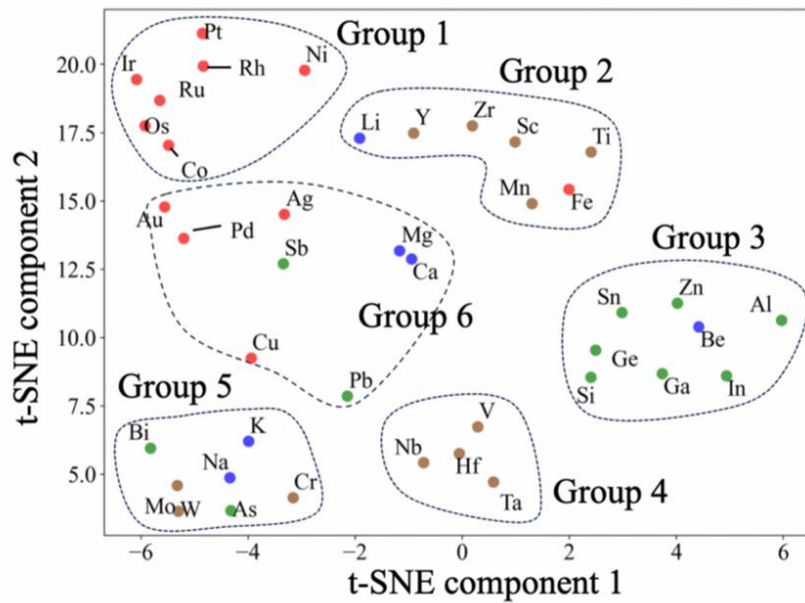


図 2-2-1-A-7. 証拠理論と t-SNE による CO₂還元特徴の元素地図。

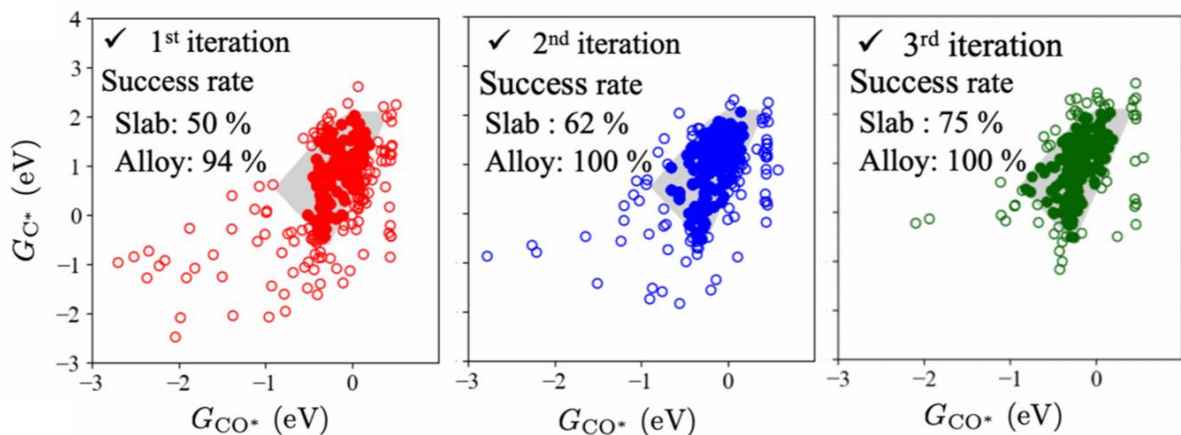


図 2-2-1-A-8. 自己学習を取り入れた証拠理論による 4 元合金触媒の探索。

[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社との企業共同研究による成果

[参考文献]

- [2-2-1-A-8] Fumiaki Kuroda, Masaya Ibe, Minoru Otani, “Screening Multicomponent Alloys Using Evidence Theory and High-Throughput DFT Calculations for C2-Selective eCO₂RR” , *J. Phys. Chem. C*, **128**, 17302-17312 (2024).

⑤abICS フレームワークのガラス系への拡張・ガラス材料へ適用し、構造－物性相関を解析

[令和6年度の事業実施計画]

abICS フレームワークを用いてガラスの回折実験データを再現し、かつエネルギー的に妥当な3次元構造を予測し、リング解析やパーシステントホモロジーを活用して構造物性相関を解析する。

[担当責任者] 笠松 秀輔 (山形大学 学術研究院)

[実施概要]

上記実施計画を遂行した。いくつかのガラス系で熔融急冷によるガラス形成のシミュレーションを行い、回折実験データを概ね再現することに成功した。さらに、リング解析やパーシステントホモロジー解析によって、従来の逆モンテカルロ解析から考えられていたよりも強い中距離秩序を見出した。固溶体系についても、酸化物表面の欠陥偏析やペロブスカイト酸化物中のドーパント分布の計算に abICS を適用し、得られた構造を用いた分子動力学計算から、不規則性が触媒の安定性や物質輸送に及ぼす影響を解明した。

[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]

統計熱力学サンプリングや分子動力学計算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。

[研究成果]

令和6年度は配置のモンテカルロ計算に加えて、連続空間でのモンテカルロ計算や分子動力学計算でもサロゲートモデルの活用に取り組んだ。特に、従来計算対象としてきた結晶性の固溶体に加えて、ガラスの不規則構造とその物性について取組を加速した。

ガラスは不規則といえどもある程度の規則性を有することが回折実験データから分かっているが、その3次元構造については未解明な点が多い。第一原理分子動力学計算によって、熔融・急冷によるガラス形成をシミュレーションすることは可能だが、シミュレーションできる時間、および空間スケールの制限により、回折実験データを定量的に再現することはできておらず、実験と対応する構造が得られない。そこで、ガラス系を念頭に、第一原理計算を再現する機械学習ポテンシャルを能動学習によって半自動的に構成するフレームワークの検討を行い、計算の大規模化、高速化を図った。典型的なネットワークガラス物質である GeO_2 ガラス、および、超イオン伝導ガラスである $\text{AgI-As}_2\text{Se}_3$ ガラスにおいて応用計算を行い、回折実験データを非常に良く再現する構造を得ることに成功した。多元系ガラスについて、実験データを用いずに回折実験データを定量的に再現することができたのは、我々が知る限り世界初である。得られた構造に対するリング解析やパーシステントホモロジー解析によって、従来の逆モンテカルロ法とは本質的に異なる、より中距離秩序が強い構造が「正解」であることも分かった (図 2-2-1-A-9)、[2-2-1-A-9]。また、イオン伝導度についても、数千原子以上の大規模モデルに対して長時間 (>100ns) の計算を

行うことで、実験を定量的に再現することに成功した。つまり、ガラス物質であっても、組成や合成条件による構造の変化、それに伴う物性変調が予測可能であることを明らかにした。

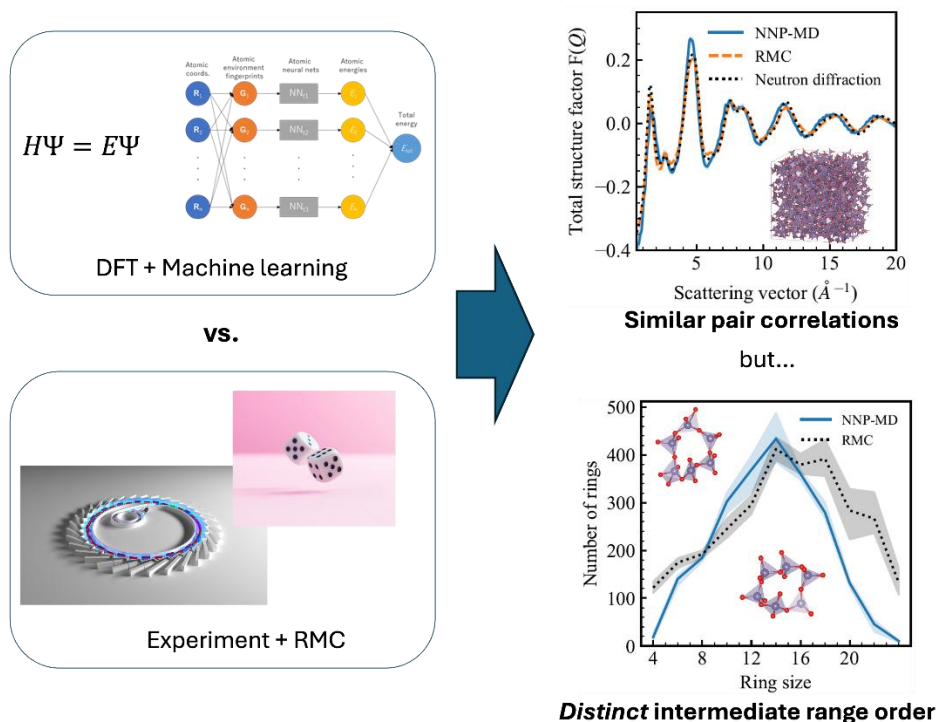


図 2-2-1-A-9. 第一原理計算+機械学習ポテンシャルを用いた物理ベースのモデリングで逆モンテカルロ (RMC) 法と同様の構造因子が得られるものの、中距離秩序は大きく異なる。

固溶体系については、酸素還元触媒への応用を念頭に、窒素ドーパ ZrO_2 の表面偏析と、それに伴う表面プロトン輸送の変調の解析を行った。ドーパント窒素が内部に偏析することで安定化し、酸素空孔が表面に高濃度に現れることで水分子による被毒を抑える効果があることを明らかにした (図 2-2-1-A-10)、[2-2-1-A-10]。

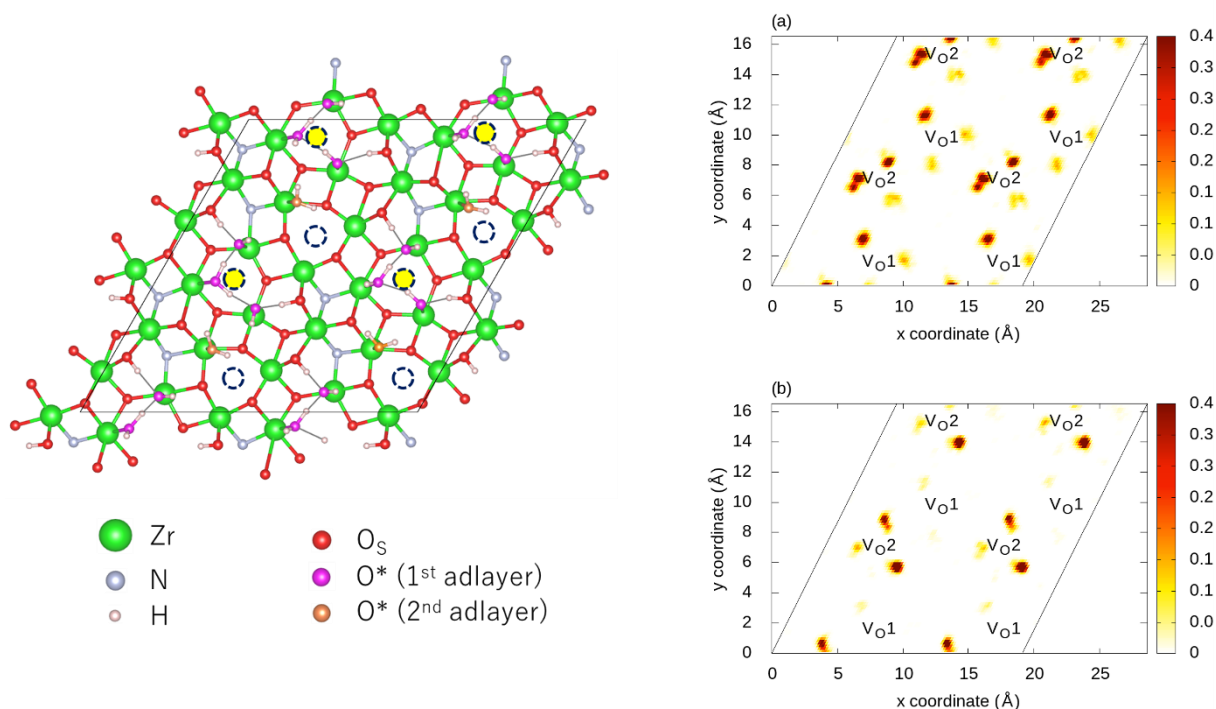


図 2-2-1-A-10. 酸化物表面の欠陥偏析を abICS によって解明し、酸素欠陥が水被毒の影響を受けにくい ORR 活性点として存在することを解明。

[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。

- ・ 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/スケーリング則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[2-2-1-A-10]
- ・ 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-9] Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki, “Comparison of intermediate-range order in GeO₂ glass: Molecular dynamics using machine-learning interatomic potential vs reverse Monte Carlo fitting to experimental data”, *J. Chem. Phys.* **161**, 204103 (2024).
- [2-2-1-A-10] Akitaka Nakanishi, Shusuke Kasamatsu, Jun Haruyama, Osamu Sugino, “Defect Segregation, Water Layering, and Proton Transfer at Zirconium Oxynitride/Water Interface Examined Using Neural Network Potential”, *J. Phys. Chem. C*, **129**, 2403 (2025).

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年度から継続）

[令和6年度の事業実施計画]

前年度に引き続き、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。前年度は表面計算が主であったが、令和6年度は特に多元系酸化物を対象とした吸着電子構造データベースの構築を進める。

[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。実験研究者と共同で行っているNiを母材とする4元系酸化物による酸素発生電極触媒の最適化のため、前年度に開始した吸着電子構造データベースの構築をすすめた。具体的には、OpenMXを用いて中間体種と考えられているOH、OOH吸着エネルギーを収集した。

[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]

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]

前年度にデータベース化した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) (図2-2-1-A-11)の電極表面に対して、酸素発生反応(OER)中間体として考えられるOHおよびOOHを吸着させた状態の計算を行った。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。前年度、元素記述子と表面データベースからの記述子を同時に用いたベイズ最適化により、OER活性の最適化を加速したのと同様、今後はこの吸着データベースからの記述子も利用することにより、電極触媒最適化の加速を図る。さらに、対象を他の組成の電極に対して広げ、多様な電極触媒の最適化に対して利用できるように拡充する。

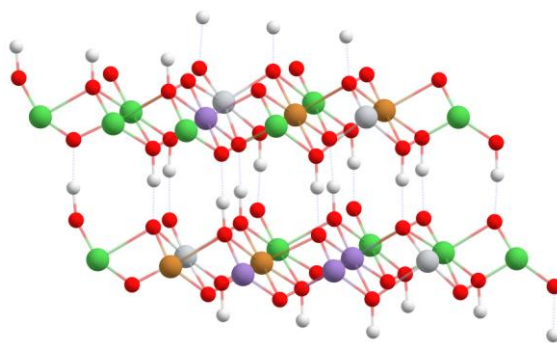


図2-2-1-A-11. $Ni_3XYZO_{12}H_6$ 表面の96原子モデルの例
(黄緑：Ni、赤：O、白：H)。

[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 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

⑦高精度電子状態計算による触媒反応機構の精緻な解明

[令和6年度の事業実施計画]

主に電極触媒反応を対象とし、触媒反応機構の解明を進めるとともに、劣化シミュレーションを開始する。特に、前年度より「富岳」向けの整備・準備を行った分割統治法に基づく大規模周期境界量子化学計算プログラムを用いた高精度電子状態計算により検討を行う。

[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。高精度な post Hartree-Fock 計算法の一つである MP2 法に対して周期境界分割統治 (DC) 計算プログラムを拡張した。本手法では DC 法の局所性を活かすことにより、Bloch 基底のような周期的な基底関数ではなく局所基底をそのまま用いる。さらに、強い電子相関を取り扱うことのできる射影 UHF 法に DC 法を拡張した DC-PUHF 法の開発も行った。

[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]

ab initio 高精度分割統治 (DC) 量子化学計算法は、量子化学計算プログラム GAMESS を改変して実装した。特に MP2 計算については、全体を分割した部分系ごとに通信を行わずに計算する実装をした。

[研究成果]

前年度に *ab initio* 分割統治 (DC) 量子化学計算法を Hartree-Fock (HF) 法のレベルで周期境界条件に対応させたプログラムを開発したが、令和6年度はより高精度な post HF 計算法の一つである MP2 法に対して周期境界 DC 計算プログラムを拡張した。プログラム実装は、すでに孤立系に対する DC 法を実装済みの GAMESS を改変して行った。本手法では、周期境界 DC-HF 法により構築した局所的な Fock 行列から部分系の分子軌道を構築し、部分系ごとに MP2 エネルギーを求める (図 2-2-1-A-12)。このアルゴリズムでは、部分系ごとの MP2 エネルギーの計算は独立しているため、階層的な並列化を用いて高い並列化効率で実装できることを、すでに示している。周期境界 DC-HF 法も含めて、「富岳」向けのチューニングも並行して行った。

MP2 法で扱えるのは弱い電子相関である。触媒反応を精緻に扱うためには、強い電子相関も取り扱えることが望ましいものの、分割型大規模量子化学計算で強い電子相関を取り扱う手法は確立されていない。そこで、スピン汚染を含む UHF 波動関数から純粋なスピン状態を射影して取り出すことで、強い電子相関を定量的に取り込むことができる射影 UHF 法と DC 法を組み合わせた手法とその計算プログラムの開発に取り組んだ。

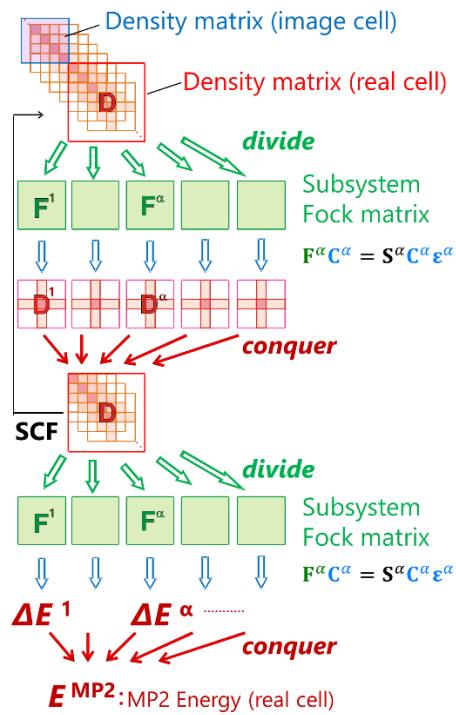


図 2-2-1-A-12. 周期境界 DC-MP2 計算の過程。

[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 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永久磁石材料のデータ蓄積、データ科学手法を用いた物性の解析

[令和6年度の事業実施計画]

遷移金属合金や希土類遷移金属化合物の第一原理網羅計算を実行し、電子状態、構造安定性、磁気物性に関する計算データを蓄積する。得られたデータに対してデータ科学手法を適用し、組成・構造と物性値の相関を解析する。

[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。永久磁石材料 CeCo_5 に対する La や Fe の添加の効果を調べるため、フルポテンシャル KKR 法を用いて $(\text{Ce, La})(\text{Fe, Co})_5$ の磁気異方性定数 K_0 と磁化 J_s を系統的に計算した。その結果、(1) CeCo_5 と比べると K_0 は Fe 少量添加で増大すること、(2) K_0 が最大となる $\text{CeCo}_{4.7}\text{Fe}_{0.3}$ について、形成エネルギーの値が負であること、(3) $\text{CeCo}_{4.7}\text{Fe}_{0.3}$ は CeCo_5 に比べて J_s も高いことがわかった。

[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]

AkaiKKR やフルポテンシャル KKR では、グリーン関数が波数とエネルギーに依存するため、それらをグループ化して OpenMP による並列化を行っている。また、材料パラメータに対しては、MPI を用いて網羅計算を実施している。

[研究成果]

$\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ や SmCo_5 は希土類磁石の代表的な主相化合物である。これらの化合物は高磁化、高結晶磁気異方性、高キュリー温度を有するが、Nd, Sm 等の希土類を用いている。フェライトは、希土類元素を用いないが、磁気特性は劣る。これらのギャップを埋める化合物として CeCo_5 が注目される。Ce は希土類の一種であるが、資源リスクがなく、有効活用することが期待されている。その磁気特性を向上し手段として、La や Fe のドーピングが考えられる。Fe は資源リスクの観点からも利用することが望ましい。これらの背景のもと、我々は、 $(\text{Ce, La})(\text{Fe, Co})_5$ の磁気異方性定数 K_0 と磁化 J_s を系統的に計算した。

計算は密度汎関数理論に基づいた第一原理計算で、Full-potential KKR 法を用いた。不規則合金の取り扱いにはコヒーレントポテンシャル近似 (Coherent Potential Approximation, CPA) を適用した。CPA はシングルサイト近似で、短距離相関は無視されるが、大きなスーパーセルを用いることなく不規則相を記述することができる。組成を系統的に変えた第一原理計算を実行し、 K_0 と J_s の第一原理計算データを蓄積した。

図 2-2-1-B-1 に K_0 の計算結果を示す。La 濃度、Fe 濃度の 2 次元平面上で K_0 は非単調な振る舞いをする事が確認できる。 CeCo_5 と比べると、 LaCo_5 の K_0 は小さく、La 濃度の増加とともに K_0 は単調に減少する。一方、 CeCo_5 から出発して Co を Fe に部分置換すると、Fe 少量添加で増大し、 $\text{CeCo}_{4.7}\text{Fe}_{0.3}$ 付近 K_0 が最大となり、それより Fe 濃度が高いと K_0 は減少する。生成エネルギーは

CeCo₅で負（安定）で、La 濃度、Fe 濃度の増加とともに単調に減少する。一方、磁化は CeCo₅を起点とすると、La 濃度、Fe 濃度の増加とともに単調に増加する。すなわち、磁気異方性、生成エネルギー、磁化は組成の変化に対して異なる変化を示し、それらのバランスを考慮して組成最適化を行うことが求められる。K_uが最大となる CeCo_{4.7}Fe_{0.3}については、形成エネルギーの値は負であった。

図 2-2-1-B-2 に J_s -K_u プロットを示す。CeCo_{4.7}Fe_{0.3}は CeCo₅に比べて J_sも高い。したがって、CeCo₅に Fe 少量添加することは磁石性能を向上させるために有用である[2-2-1-B-1]。

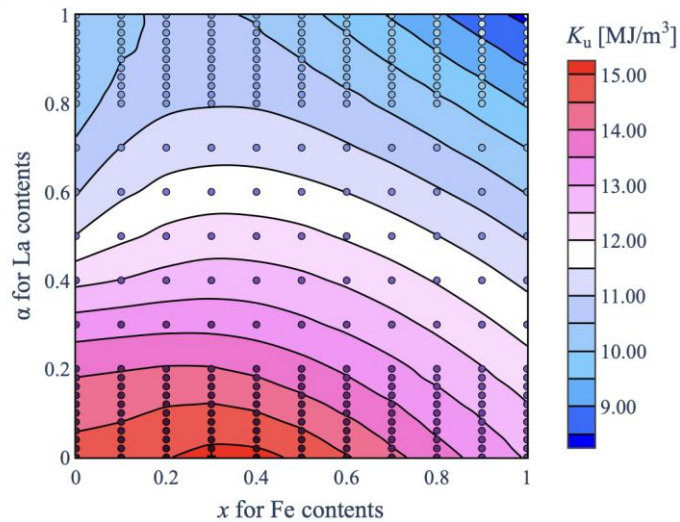


図 2-2-1-B-1. Ce_{1-α}La_αCo_{5-x}Fe_xにおける磁気異方性定数 K_u の計算値。

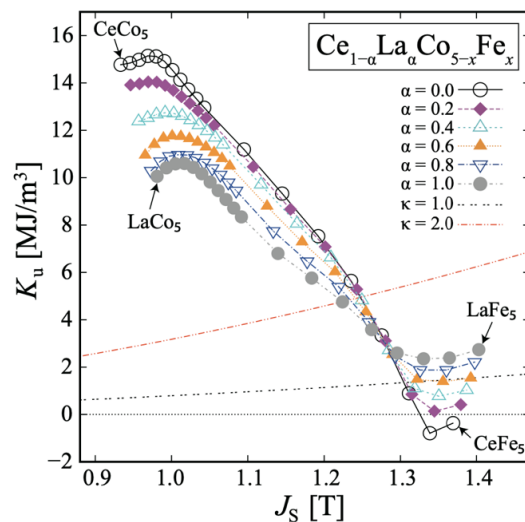


図 2-2-1-B-2. Ce_{1-α}La_αCo_{5-x}Fe_xにおける磁気異方性定数 K_u と磁化 J_s の計算値。

[研究成果の社会実装について]

国プロおよび企業との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ 文科省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) 磁性材料研究拠点 (DXMag) と連携し、「富岳」で得られた計算データを用い、DxMT での DX 研究に活用
- ・ DXMag において、計算-実験連携を推進
- ・ 本プロジェクトと同様の手法を用いて企業連携で他の材料系へ展開中

[参考文献]

- [2-2-1-B-1] Haruki Okumura, Tetsuya Fukushima, Taro Fukazawa, Takashi Miyake, Hisazumi Akai, Masako Ogura, “Optimizing the composition of (Ce,La)(Co,Fe)₅ for permanent magnet applications using density functional theory”, *J. Phys. - Condens. Matter*, **37**, 015802 (2025).

②スピントロニクス材料における磁気異方性のハイスループット計算とデータ蓄積

[令和6年度の事業実施計画]

異方的ポテンシャルを取り扱えるフルポテンシャル KKR 法を高度化しつつ、磁気異方性データを高精度で創出する。ターゲットはスピントロニクス材料、永久磁石材料材料であり、データ駆動型研究に資する磁性材料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。フルポテンシャル KKR 法を高度化することで有限温度の磁気異方性を計算可能にした。具体的には電子・フォノン散乱と電子・マグノン散乱を記述できる電子状態計算手法の開発を行った。また、高機能磁性材料のデータ駆動探索に資する高品質のデータを創出するために、有限温度下の磁性合金の磁気モーメントについて網羅的に計算を実行した。異なる組成、格子定数、磁性状態、温度ごとに計算を進め、約 13 万件のデータの蓄積に成功した。

[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]

AkaiKKR やフルポテンシャル KKR では、グリーン関数が波数とエネルギーに依存するため、それらをグループ化して OpenMP による並列化を行っている。また、材料パラメータに対しては、MPI を用いて網羅計算を実施している。今回、多層膜の計算には遮蔽 KKR 法を用いており、複雑な多層膜でも電子状態と伝導計算がオーダーN で計算されるように拡張を行った。

[研究成果]

磁性・スピントロニクス材料の磁気特性 (磁気モーメント、キュリー温度、磁気異方性等) は組成、体積、温度によって大きく影響を受ける。現実のデバイスは絶対零度で動作しているわけではないので、第一原理計算を用いて高機能磁性・スピントロニクス材料をデザインするには有限温度における電子状態や磁気特性を定量的に評価できる必要がある。磁性・スピントロニクス材料で主となる温度励起はフォノンとマグノンであり、これらは電子フォノン、電子マグノン散乱を介して電子状態に強く影響を与える。KKR グリーン関数法とコヒーレントポテンシャル近似に基づいた AkaiKKR コードはこれらの散乱を記述可能である。

本研究では、有限温度下における磁性合金の磁気特性を、AkaiKKR と「富岳」を用いて網羅的に計算した。異なる組成、格子定数、磁性状態、温度ごとに計算を実施し、現在までに約 13 万件の電子状態と磁気特性のデータを蓄積している。これらは磁性材料のデータ駆動型材料設計に利用価値の高い高品質な磁気物性データである。我々は、網羅計算によって蓄積されたデータを用いて有限温度におけるスレーター・ポーリング曲線を描くことに成功した (図 2-2-1-B-3)。本研究により、有限温度でフォノンやマグノンがどのような合金に対して大きく影響を与えるか、また頑強であるかという知見を得ることが可能になった (図 2-2-1-B-4)。例えば、Cr や Mn を含む合金の磁気特性は、室温で励起されるフォノンによって大きく劣化するが、その他の合金の磁気特

性は有限温度程度であればフォノンに対して頑強である。このような知見は、使用環境に適した磁性材料を探索に非常に有効であると期待できる。

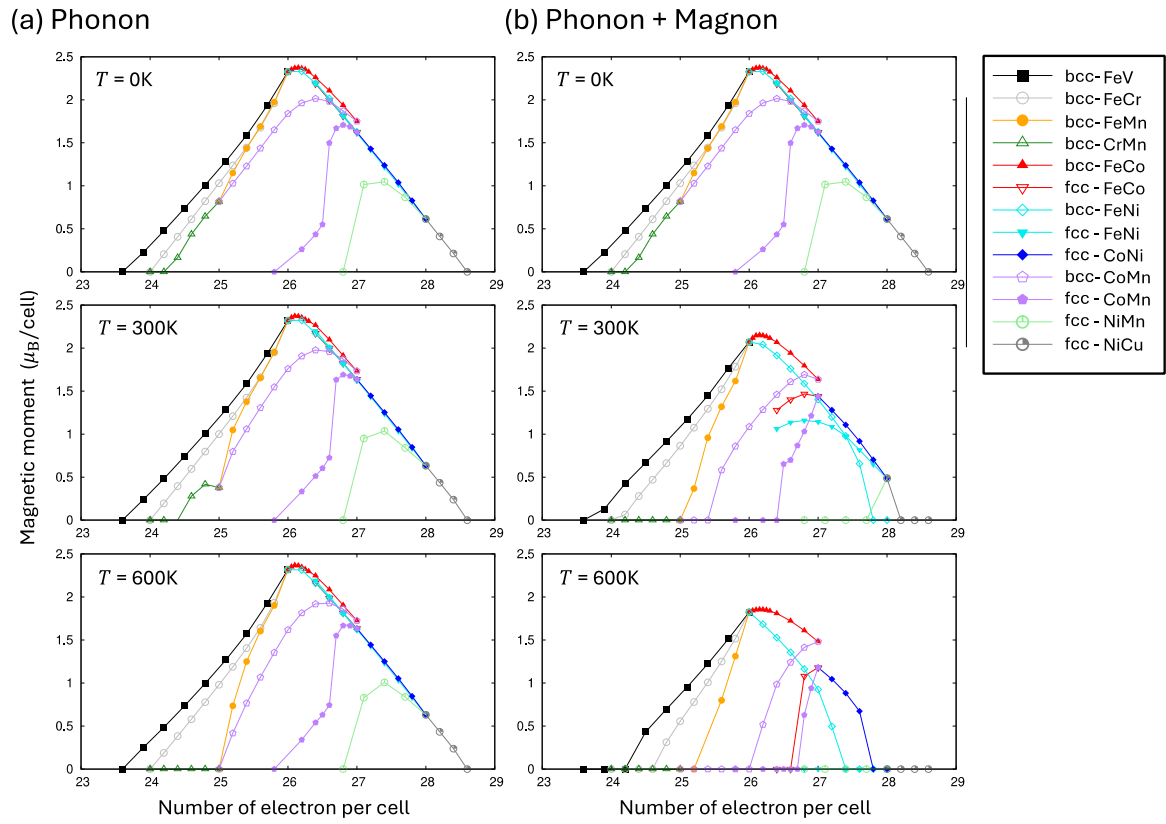
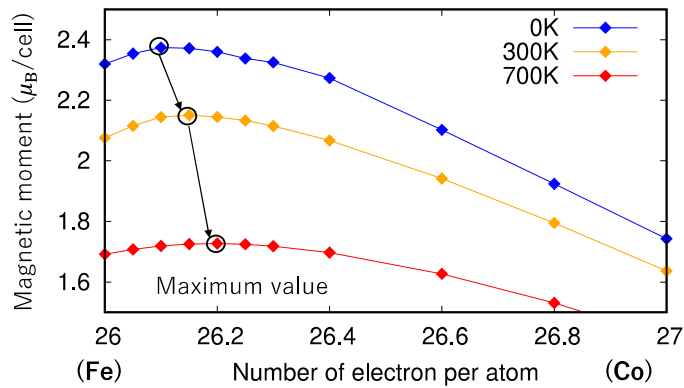


図 2-2-1-B-3. 有限温度におけるスレーター・ポーリング曲線。

(a) Compositional change in maximum magnetic moment of FeCo



(b) Density of states of $\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}$ and $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}$

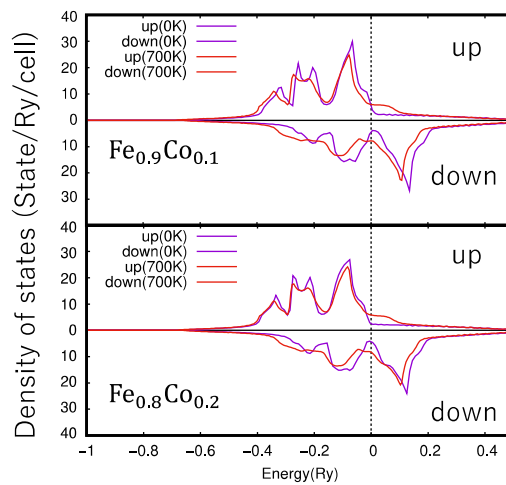


図 2-2-1-B-4. (a) FeCo の磁気モーメントの温度依存性

(b) 有限温度における $\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1}$ と $\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2}$ の状態密度。

[研究成果の社会実装について]

科学研究費助成事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。

- ・ 科研費「学術変革領域研究 (B) (No. 23H03802、23H03805)」との連携
- ・ 科研費「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (No. JPMXP1122715503)」との連携
- ・ 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

③磁気メモリ材料を対象とした物性データ蓄積を可能にするワークフロープログラムの構築とデータ蓄積

[令和6年度の事業実施計画]

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。開発した手法やワークフロープログラムを用い物性データの蓄積を開始する。

[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。KKR グリーン関数法とコヒーレントポテンシャル近似に立脚したAkaiKKRコードを拡張し、Fe/MgO/Fe多層膜の有限温度における電子状態を、経験的パラメータを用いることなく計算することに成功した。また、Disorderd Local Moment (DLM) 法により磁気緩和定数の温度依存性を計算し、実験と整合する結果が得られた。網羅計算も実行しており、物性データの蓄積が着実に進んでいる。

[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]

AkaiKKR やフルポテンシャル KKR では、グリーン関数が波数とエネルギーに依存するため、それらをグループ化して OpenMP による並列化を行っている。また、材料パラメータに対しては、MPI を用いて網羅計算を実施している。今回、多層膜の計算には遮蔽 KKR 法を用いており、複雑な多層膜でも電子状態と伝導計算がオーダーNで計算されるように拡張を行った。

[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た。本手法はこれまで金属スピントロニクス材料や強磁性半導体など多様な材料系へと適用範囲を拡大しており、有限温度における電子状態や磁性、伝導特性を予測するだけでなく、実験値の再現にも成功している。より現実のデバイスに即した計算を実行するために、異種材料間の界面を含むヘテロ構造や積層構造への拡張に取り組んだ。標準物質として磁気メモリ材料として用いられる Fe/MgO/Fe ヘテロ構造材料に適用した。図 2-2-1-B-5 は電子状態密度の計算結果で、温度効果により電子状態がなめらかになるふりが確認できた。このように、本計算手法は計算可能な材料空間を順調に拡張しており、磁気抵抗比の有限温度特性の定量的な評価にも取り組んでいる。

また、スピントロニクスデバイスの大容量・低消費エネルギー化に向けては、小さな磁気緩和定数を持つ磁性材料の探索が求められる。デバイスの動作環境を踏まえた材料探索に向け、温度を考慮した磁気緩和定数 FeCoNi 系合金における網羅計算を実施した。本研究では BCC/FCC 構造の FeCoNi 三元合金での磁気緩和定数の網羅計算を実施した。図 2-2-1-B-6 は室温における磁気緩和

定数の計算結果である。デバイス動作温度である室温では、BCC 構造を持つ $\text{Fe}_{0.75}\text{Co}_{0.25}$ が最小の磁気緩和定数を示すことが見て取れるが、この結果は実験と整合するものである。このことから本手法による材料探索に対する有効性が示された。また、図 2-2-1-B-7 に示すように、得られた磁気緩和定数と電子状態密度を比較したところ両者には強い相関が見られた。いずれの温度でも同様の相関が確認され、電子状態密度は磁気緩和定数の記述子として利用可能であることが示唆された。このように、計算可能な物性値の幅も拡張しており、実験と整合する高精度な第一原理予測が可能となっている。このことは、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と期待される。

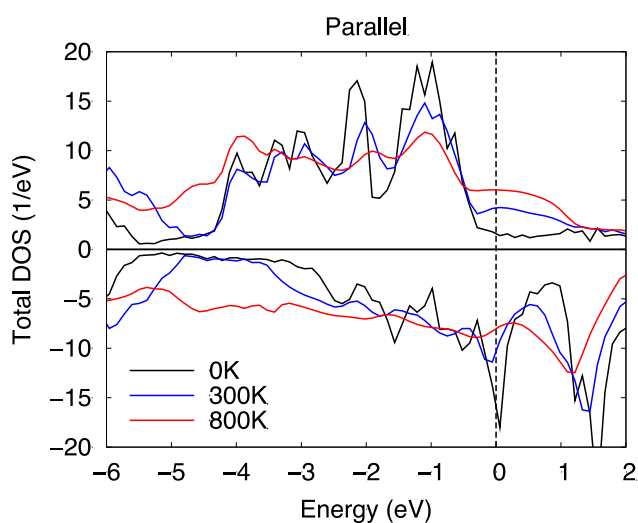


図 2-2-1-B-5. Fe/Mg0/Fe における電子状態密度の計算結果。
金属層間の磁気状態が平行の場合を示している。

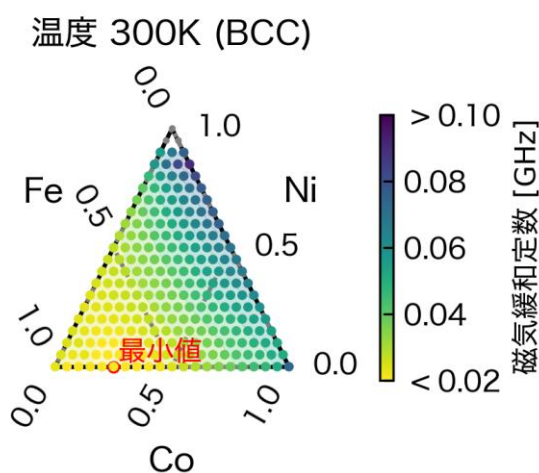


図 2-2-1-B-6. BCC-FeCoNi 三元合金での室温での磁気緩和定数の計算結果。
赤棒で囲われた箇所は最小値を示す組成を表している。

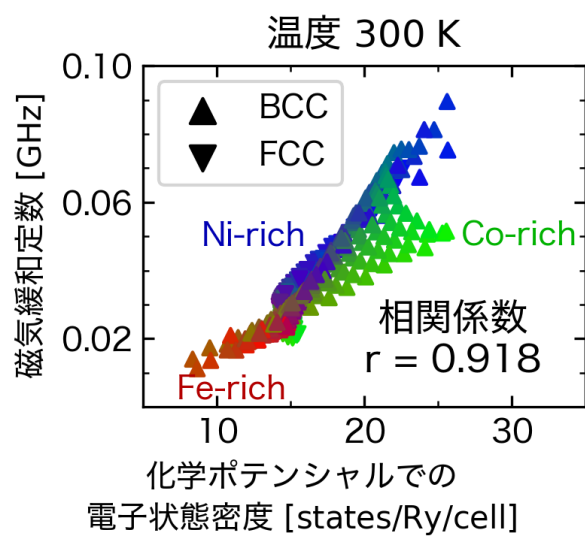


図 2-2-1-B-7. FeCoNi 三元合金の室温における磁気緩和定数と電子状態密度との相関。

[研究成果の社会実装について]

科学研究費助成事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。

- ・ 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 (No. JPMXP1122715503) との連携

C) 高分子材料

①非イオン性の高分子界面への水やCO₂、イオンの吸着自由エネルギーの全原子解析

[令和6年度の事業実施計画]

非イオン性の高分子が構成する界面への小分子（水やCO₂、イオンなど）の吸着を、吸着種の親水性や疎水性を変えて全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションと自由エネルギー計算によって解析し、自由エネルギー分割によって吸着を規定する分子間相互作用を検討する。

[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。高分子を疎水基板に結合させた高分子ブラシ膜では、高分子の親水性が高いほど水中における高分子膜の防汚性が向上するものと一般に考えられているが、広いブラシ密度で強親水と弱親水高分子鎖の比較を行うことで、中程度のブラシ密度ではブラシの層構造のために弱親水性の高分子鎖が強い防汚性を示すことが明らかとなった。

[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]

系の粒子数を10⁴~10⁵個のオーダーとし、初期配置を変えた多数の計算（ブラシ系で10本、水中の孤立鎖で50本）を行うことで運動の遅い高分子の静的物性を高い精度で求めた。MD計算には、「富岳」に標準的にインストールされているGROMACSを用いた。本研究の粒子数では、70%を超える高い並列化効率の計算となった。

[研究成果]

水中の固体表面への有機物の付着は、医療器具の汚染や分離膜の透過性の悪化などの問題を引き起こし、親水高分子を基板表面に結合してブラシ状の膜を作ることで有機物の付着を抑制することができる。そこで、付着を効率的に防ぐために、高分子ブラシ膜への吸着の分子機構の解明が求められている。しかし、水中の高分子と吸着分子の相互作用を扱うには全原子モデルが必須であり、計算コストの高さのために高分子ブラシの全原子計算はほとんど行われてこなかった。本研究では、高分子種、ブラシの表面密度、および、吸着種の種類を網羅的に変えて、高分子ブラシへの吸着を規定する相互作用を解析する。このような解析は、「富岳」の利用によってはじめて可能になっている[2-2-1-C-1]。

非イオン性であり弱親水的な高分子であるpoly(2-hydroxyethyl methacrylate) (PHEMA)が構成するブラシ膜と強親水的なpoly(carboxybetaine methacrylate) (PCBMA)のブラシ膜のMD計算を行った(図2-2-1-C-1)。側鎖に親水基があるとブラシ膜内部に水が侵入するが、側鎖の極性はバルクの水より低いためにイオンの吸着を防ぎ、また、中性の吸着分子と高分子の相互作用は分散力のために引力的であるものの、高分子の立体反発によって基板への強い吸着が抑制される。また、PHEMAとPCBMAの比較によって、強親水的な側鎖が存在するとブラシ内部の水に立体反発を強める効果と分散力を弱める効果があることを見出した。

グラフト密度（面積あたりの鎖数）が高い場合と低い場合は、親水性の強い PCBMA がより強い防汚性を示した。これは多くの高分子で見られる結果であるが、一方、中程度のグラフト密度では PHEMA の吸着抑制能の方が優れていた。PHEMA が密な層を作り基板への汚れの付着を防ぐことに由来する。この機構の一般性を確かめるため、水中の孤立鎖の MD 計算をもとに粗視化モデルを構築する手法を開発した。「富岳」の計算機資源を前提とした高コストで高精度なモデル化である。粗視化モデルの構築により、タンパク質のような大きな吸着分子でも、基板が疎水的で高分子鎖が十分に長ければ、中程度のグラフト密度で PCBMA より PHEMA の防汚性が高くなることが確認された（図 2-2-1-C-2）、[2-2-1-C-2]。

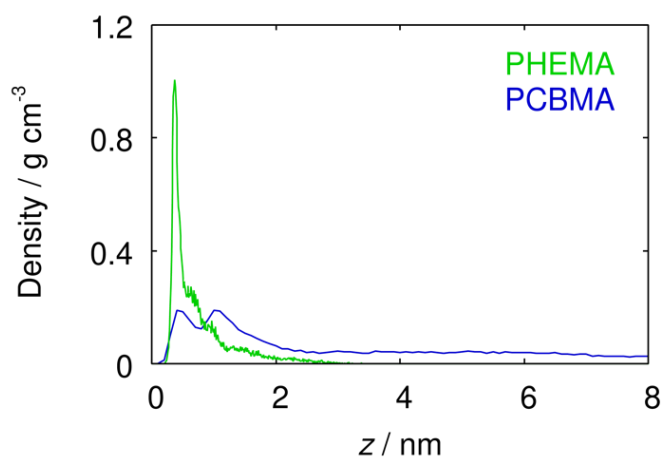


図 2-2-1-C-1. 全原子 MD 計算で得られた PHEMA (緑) と PCBMA (青) の高分子ブラシの密度分布。
 z は基板位置からの法線距離であり、 $z = 0$ を基盤の位置とする。
 $z = 0.4 \text{ nm}$ の鋭いピークが示すように PHEMA は基板の近くに分子吸着を妨げる密な層を形成する。

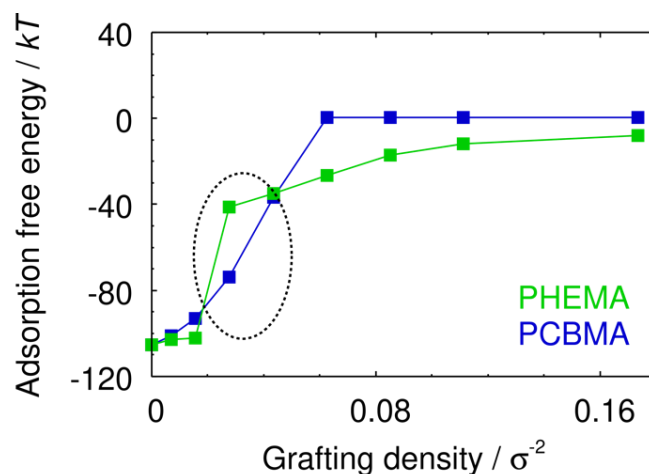


図 2-2-1-C-2. 粗視化モデルで計算された PHEMA (緑) ならびに PCBMA (青) 高分子ブラシ上のモデルタンパク質の吸着自由エネルギー。
 全原子シミュレーションの場合と同様に、中間密度における PHEMA の高い防汚性が確認できる。

[研究成果の社会実装について]

企業 8 社との共同研究により、社会実装をさらに進めた。

[参考文献]

- [2-2-1-C-1] Takuma Yagasaki, Nobuyuki Matubayasi, “Molecular Dynamics Study of the Antifouling Mechanism of Hydrophilic Polymer Brushes”, *Langmuir*, **39**, 13158-13168 (2023).
- [2-2-1-C-2] Takuma Yagasaki, Nobuyuki Matubayasi, “High Antifouling Performance of Weakly Hydrophilic Polymer Brushes: A Molecular Dynamics Study”, *Langmuir*, **40**, 15046-15058 (2024).

②機械学習を用いた非イオン性高分子内における水や CO₂ 分子の長時間ダイナミクス解析

[令和6年度の事業実施計画]

非イオン性高分子内における水分子や CO₂ 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。前年度にプロトタイプとして開発した予測の安定性を増すことが確認されていた MD-GAN 改良版を、非イオン性高分子内における水や CO₂ 分子を含む様々な系に適用して長時間ダイナミクス解析を実施した。分子のダイナミクスの違いにより予測の安定性が異なることが確認されたため、これを解消するためにパラメータのチューニングを実施した。この結果適用を試した系においては、ばらつきを 1/5 程度にすることに成功した。

[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]

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]

論文投稿準備中のため、詳細については割愛する。

MD-GAN は、WGAN-GP という深層学習モデルを基に構成されている。このモデルは、生成器と識別器という 2 つのニューラルネットワークが競い合うことで学習を進める仕組みである。学習では、MD シミュレーションで得られた実データと生成器が作ったデータを比較し、精度を高めていく。本研究では、このモデルに Self-Attention (セルフアテンション) を導入した。

MD-GAN に Self-Attention を導入した MD-GAN 改良版を、非イオン性高分子内における水や CO₂ 分子を含む様々な系に適用して長時間ダイナミクス解析を実施した。その結果ばらつきを 1/5 程度にすることに成功した[2-2-1-C-3, 2-2-1-C-4, 2-2-1-C-5]。

[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-3] Kota Sakaki, Katsuhiko 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, 23-28, Jun., 2024

[2-2-1-C-4] 榊光太, 遠藤克浩, 泰岡顕治, “拡散ダイナミクスを予測する機械学習モデルの改良”, 水・蒸気性質シンポジウム 2024, 東京, 日本, 2024年10月22日-10月22日

[2-2-1-C-5] 榊光太, 遠藤克浩, 泰岡顕治, “機械学習による拡散ダイナミクスの予測”, 第38回分子シミュレーション討論会, 兵庫, 日本, 2024年12月02日-12月04日

③非晶性高分子に、油脂を接触させた破壊シミュレーションを実施し、非晶性高分子破壊に対する油脂の影響を解明

[令和6年度の事業実施計画]

前年度に、実験値を再現する油脂のモデリングに成功した。令和6年度は、この油脂をポリスチレン基板に接触させ状態で破壊シミュレーションを実施する。油脂の物性とソルベントクラックの有無についての関係を解明する。

[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。前年度に作成した油脂のモデリングを用い、この油脂をポリスチレン基板に接触させ状態で破壊シミュレーションを実施した。高速引張条件下では3種類の油脂間に顕著な差異は認められなかったが、遅速引張速度でシミュレーションを行ったところ、実験結果と定性的に一致する破壊挙動が得られた。

[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]

MPI 並列と OpenMP 並列を併用することで大規模並列計算を実現した。高分子系では、実験で得られた絡み合い点間分子量などの破壊特性に重要なパラメータを再現した。シミュレーション系の総原子数は約 100 万原子である。

[研究成果]

企業との共同研究での秘密保持協定に抵触するため、詳細については割愛する。

本研究では、炭素鎖長が短いモデル油脂 1 種および炭素鎖長は同等で二重結合の状態が異なる油脂 2 種を対象に、OPLS-AA 力場を用いた分子動力学シミュレーションを実施し、各油脂の静的・動的性質が実験値を良好に再現することを確認した。

これらの巨大系での大規模計算は高並列が可能なスーパーコンピュータ「富岳」を用いたことにより初めて得られた結果である。

[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。

- ・共同研究先(食品メーカー)と成果の知財化
- ・固体-液体界面を持つ系へのモデリング技術の応用(GteX)
- ・界面を持つ高分子のモデリング技術の応用(CREST)

D) 構造材料

①構造材料の腐食摩耗メカニズムの解析

[令和6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、構造材料の腐食摩耗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、構造材料の腐食摩耗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、水環境下における CrMnFeCoNi ハイエントロピー合金 (HEA) の引張および摩擦シミュレーションを行い、元素ごとの腐食反応の傾向を解析した。その結果、Cr と Mn は酸化されやすいことが理解された。Fe は主に1つの OH 基との結合が形成されやすく、Ni は他の元素に比較して酸化されにくいことがわかった。このような腐食反応の傾向の解明は、HEA の耐食性向上に向けた組成の最適化に貢献すると考えられる。

[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+ は、MPI と OpenMP のハイブリッド並列が実装されており、金属材料系で約 100 万原子の大規模計算を実現している。現在、約 100 万原子からなる多結晶モデルを用いた応力腐食割れシミュレーションも進行中である。

[研究成果]

前年度までに構築した機械学習ポテンシャルを用いて、水環境下で引張、および摩擦シミュレーションを行った。図 2-2-1-D-1(a) に示すモデルを用いて引張シミュレーションを行った結果、合金表面で腐食反応が見られた。この腐食反応の元素ごとの傾向を解析した。図 2-2-1-D-1(b) は各金属元素に対する酸素原子との結合数の時間変化を示す。各金属元素は、イオン化傾向順に酸素原子との結合を作りやすいことがわかり、特に Cr と Mn は他の 3 元素に比べて非常に結合数の上昇が著しく、酸化膜の主成分となると考えられる。また、図 2-2-1-D-1(c) は各金属元素に対する酸素原子との配位数の分布を示す。Fe, Co, Ni に比較して、Cr と Mn は酸素原子との配位数が多く、酸化膜の骨格を形成していると示唆される。さらに、図 2-2-1-D-1(d) は各金属元素に対する酸素原子との結合の種類とその割合を示す。M は金属原子を表し、それぞれ金属原子に酸素原子が 1 つ結合したものを M-O、OH 基が結合したものを M-OH、水分子が吸着したものを M-H₂O、酸素原子が二つの金属原子を繋ぐような結合を M-O-M とした。まず Cr と Mn は似た傾向を示した一方で、Mn の方が M-H₂O の割合が高く M-OH の割合が低いことがわかった。これは Mn に吸着した水分子から水素原子が解離する反応が、Cr よりも起きにくいことを示す。また、Fe は他の 4 元素と比べて M-OH の割合が高く、OH 基との結合が比較的安定であると考えられる。Co は Fe と同等の酸化傾向を示し、M-O-M の割合が非常に高いという特徴を示した。Ni は酸化量が非常に少ないが、酸

素原子との配位に関しては Cr や Mn と似た傾向を示した。このような金属元素ごとの酸化反応の解明は、HEA の耐食性向上に向けた組成の最適化に貢献すると考えられる。

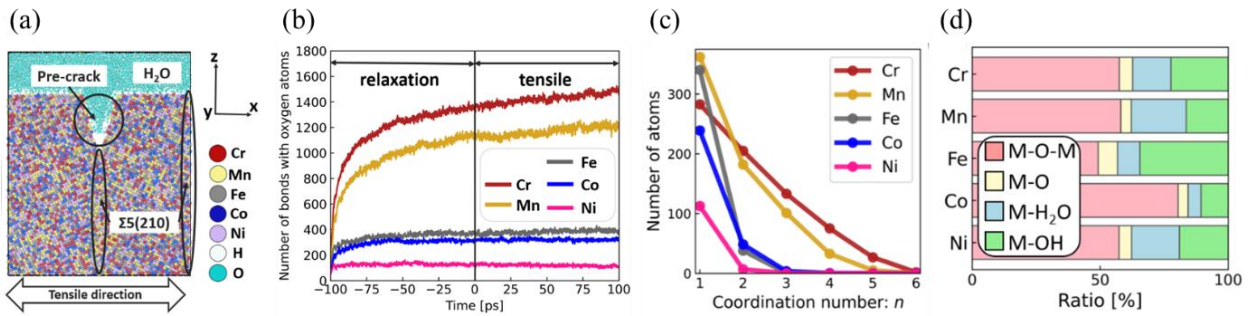


図 2-2-1-D-1. (a) CrMnFeCoNi ハイエントロピー合金の引張シミュレーションモデル、各金属元素に対する (b) 酸素原子との結合数の経時変化、(c) 酸素原子との配位数の分布、および (d) 酸素原子との結合の種類とその比率。

また、図 2-2-1-D-2 に示すように、ハイエントロピー合金を正弦波状に切り出した基板の間に水分子を配置したモデルを作成し、摩擦シミュレーションを行った。その結果、凸部同時の接触時 (55ps) に合金にせん断応力がかかり、凸部先端が HCP 相へ転移することで積層欠陥が形成された。摩擦を繰り返していくと、232 ps 経過後にはわずかに摩耗する様子も見られた。このように、CrMnFeCoNi 系ハイエントロピー合金では、積層欠陥の形成を経て摩耗が進行することが明らかになった。

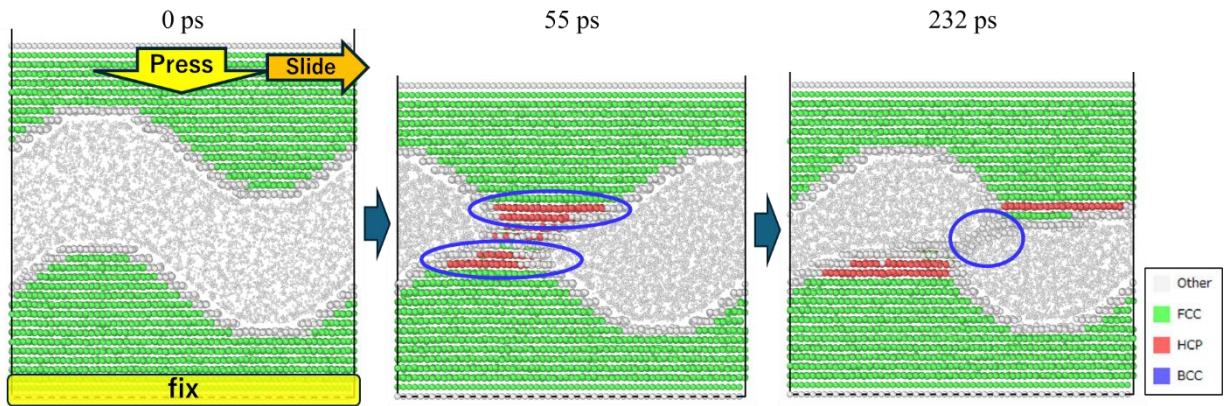


図 2-2-1-D-2. CrMnFeCoNi ハイエントロピー合金摩擦シミュレーションモデルと構造変化のスナップショット。

②構築した NNP（ニューラルネットワーク原子間ポテンシャル）を用いた繰返し負荷 MD（分子動力学）試験による疲労破壊プロセスの解析

[令和 6 年度の事業実施計画]

前年度に構築したニューラルネットワーク原子間相互作用を用いて、令和 6 年度は、繰返し応力下での転位運動シミュレーションを行い、転位運動に伴う欠陥生成過程の解析を実施する。加えて、水素環境が欠陥生成過程に及ぼす影響を明らかにする。

[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。ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いてせん断負荷中の転位の運動と空孔および空孔水素複合体との相互作用を解析した。その結果、水素と結合していない空孔および 1 つの水素原子と結合した空孔は、転位との接触時に転位に取り込まれるが、2 つ以上の水素原子と結合した空孔は安定であり転位に取り込まれることがないことや、転位に取り込まれた空孔は転位線に沿って高速拡散し、他の空孔と結合して空孔クラスターを形成することがあることを示した。

[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]

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、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。「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長時間計算を高速に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、前年度に構築したニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いて、せん断変形下におけるらせん転位の運動と空孔および空孔水素複合体との相互作用を求めた。水素を含まない空孔においては、転位と空孔が接触することにより、空孔がらせん転位へと吸収され、転位の運動にともない離れた場所に放出される様子が見られた。このことから、鉄中の空孔はらせん転位に吸収されたのち、転位線に沿って高速に拡散すると考えられる。また、転位が複数の空孔と接触しながら移動する場合、空孔同士が結合し、複空孔やクラスターを形成する様子が観察された。これは、転位と空孔の相互作用により既存の空孔が高速で拡散することで、空孔クラスターの形成が促進される可能性を示唆している。水素原子一つが空孔と結合し、複合体を形成している場合、水素原子は空孔内にトラップされ外への拡散はほとんど見られないが、複合体が転位と接触した場合、空孔が転位に取り込まれ、水素が取り残される様子が確認できた（図 2-2-1-D-3）。しかし

ながら、水素原子が2個以上空孔にトラップされている場合、複合体は転位の接触では吸収されず、転位が通過した後も同じ位置にとどまることを確認した(図2-2-1-D-4)。このことから、水素環境下で空孔が複数の水素原子により安定化されることにより、空孔が転位の移動に対する障害物として機能すると考えられる。

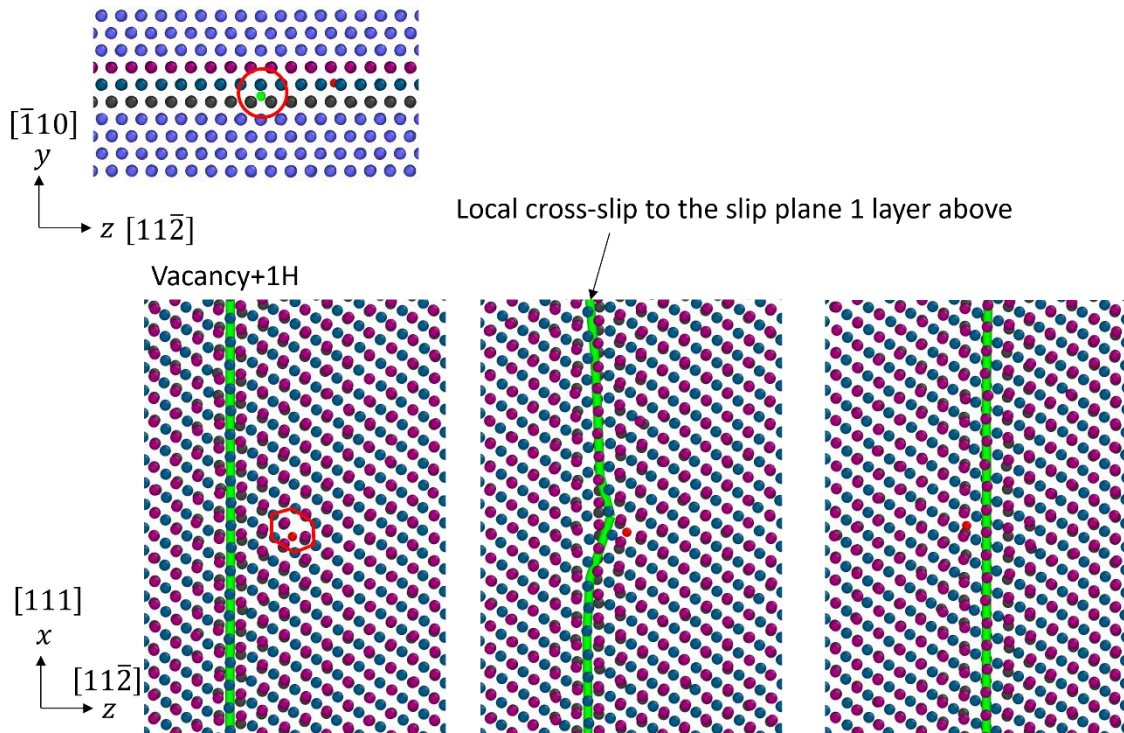


図2-2-1-D-3. らせん転位と空孔-水素複合体(水素原子1個)の相互作用による原子配置の変化。
赤色の原子は水素原子を表し、緑色の線は転位を表す。
水素原子1個と結合した空孔は転位との接触により吸収・高速拡散し、水素原子が取り残される。

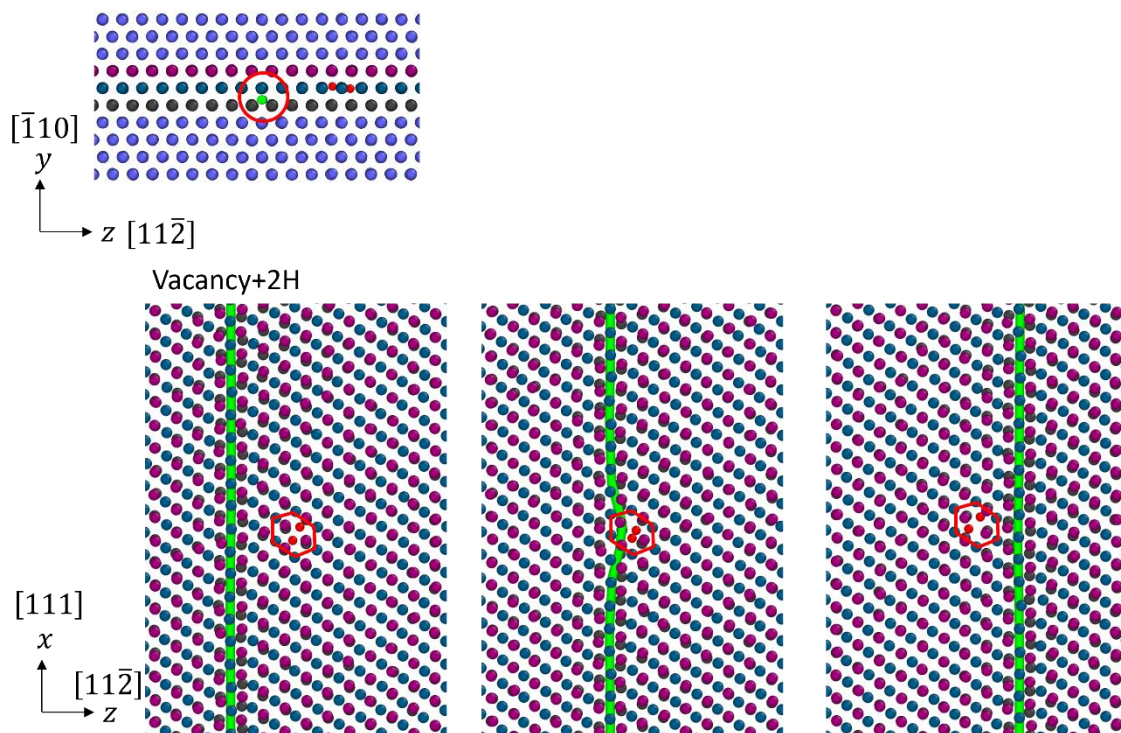


図 2-2-1-D-4. らせん転位と空孔-水素複合体(水素原子 2 個)の相互作用による原子配置の変化。

赤色の原子は水素原子を表し、緑色の線は転位を表す。

複数の水素原子により空孔が安定化することで、転位との接触後も吸収されずに留まり続ける。

[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 DxMT プロジェクト, 「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

E) AI・データ科学

①固体電解質のイオン伝導度に寄与する構造的特徴の抽出

[令和6年度の事業実施計画]

固体電解質中でのイオン伝導経路にトポロジカルデータ解析を適用して定量化し、局所原子構造の空間分布と対応づける。これにより、バルクと界面の混在する系において実質的なイオン伝導に寄与する構造的特徴を解明する。モデル固体電解質として $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2(\text{NH}_3\text{BH}_3)_2$ 系を、電極・電解質界面として館山グループの系を扱う。

[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。固体電解質でのイオン伝導機構の解明を目的として、分子動力学計算データのトポロジカルデータ解析を行った。粒界を持つモデル固体電解質系では界面での準安定な配位状態がイオンを動きやすくしていた。実用材料である NASICON では、伝導度が低い系のイオン分布が大域的／局所的な秩序を形成して動きにくくなる一方、イオン伝導度の高い系では協奏的な動きを示唆する結果が得られた。

[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]

トポロジカルデータ解析は計算エンジンである HomCloud と機械学習を組み合わせた python スクリプトを開発した。MD 計算の各時刻での原子配列データを対象とし、HomCloud の処理部を時刻について並列処理することで効率よく解析できた。巨大な系でも部分系に分割することで必要な情報を取り出せる。

[研究成果]

まずモデル固体電解質 ($\text{Mg}(\text{BH}_4)_2(\text{NH}_3\text{BH}_3)_2$ 系) を対象とし、前年度捉えた Mg イオンの準安定構造群が Mg イオンの拡散にどのように寄与しているのかをトポロジカルデータ解析 (TDA) によって調べた。古典 MD 計算データから H 原子が作る空洞のうち Mg 原子を内包するものだけを抽出して幾何学的特徴を積算し、結晶／アモルファス／結晶粒界の3種の系を比較したところ、高いイオン伝導性を示すアモルファスと結晶粒界では配位分子の置換に相当する準安定構造に対応する特徴まで十分な頻度で出現している様子を捉えることができた (図 2-2-1-E-1)。また、Mg イオン拡散における準安定構造の出現順序 (素過程) を熱力学的な重みつきで抽出する手がかりも得られた。

次に、マイクロ構造とマクロ物性の相関から実用材料を探索する目的で、セラミックス系固体電解質である 18 種類の NASICON の長時間 (1ns) の第一原理 MD 計算データ (約 150 原子系) の TDA を行った。Na 原子とそれ以外の骨格部分に分けてリング構造と空洞構造の幾何学的特徴を抽出してイオン伝導度との相関を調べた。イオン半径を考慮しても骨格の構造とイオン伝導度との間に有意な関係は見られなかった一方で、Na イオンの配列の特徴 (特にリング構造) は系によって大きく異なり、イオン伝導度が非常に小さな系では Na イオンの分布が骨格構造を反映した大域的

な秩序を、伝導度が比較的小さな系ではクラスタ様の局所的な秩序を形成して動きにくくなっていた。これに対し、伝導度の大きな系での Na イオン分布は協奏性と乱雑性の共存を示唆するものであり、MD 計算における Na イオンの分布から伝導度の高低を予測する手掛かりが得られた (図 2-2-1-E-2)。しかし、Na イオンの拡散挙動は骨格との相互作用を反映しているはずであり、材料探索の観点からも骨格の情報を活用したい。「富岳」を活用した第一原理 MD 計算で大量に取得できる電子密度分布に対する TDA が次の一手となる。

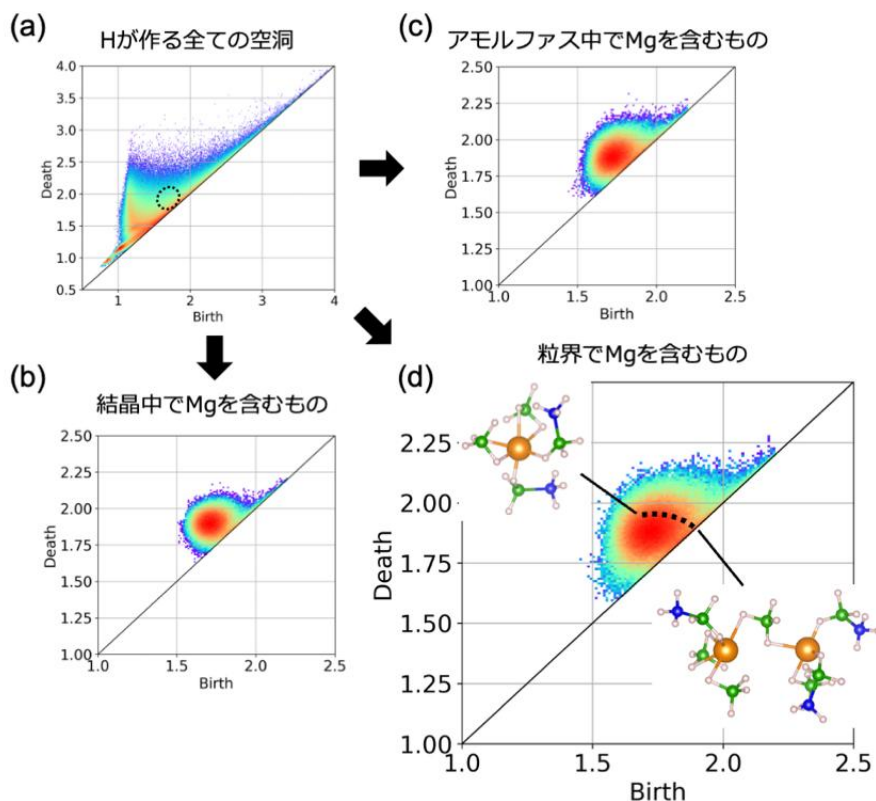


図 2-2-1-E-1. 温度 400K における Mg 系固体電解質 $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2(\text{NH}_3\text{BH}_3)_2$ の H 原子による「空洞」のパーシステント図。

(a) 全ての空洞を記録したもの。点線で丸く囲んだ部分に Mg を内包する空洞の情報が混在している。

(b) 結晶中で Mg を内包するもの。

(c) アモルファス中で Mg を内包するもの。

(d) 結晶粒界で Mg を内包するもの。

アモルファス中と同様に結晶中よりも Birth-Death の分布が広がっており、点線で示す拡散経路に沿って対角線に達するまで密度（構造の出現頻度）が保たれている様子が分かる。原子模型の色は 橙:Mg, 緑:B, 青:N, 白:H。

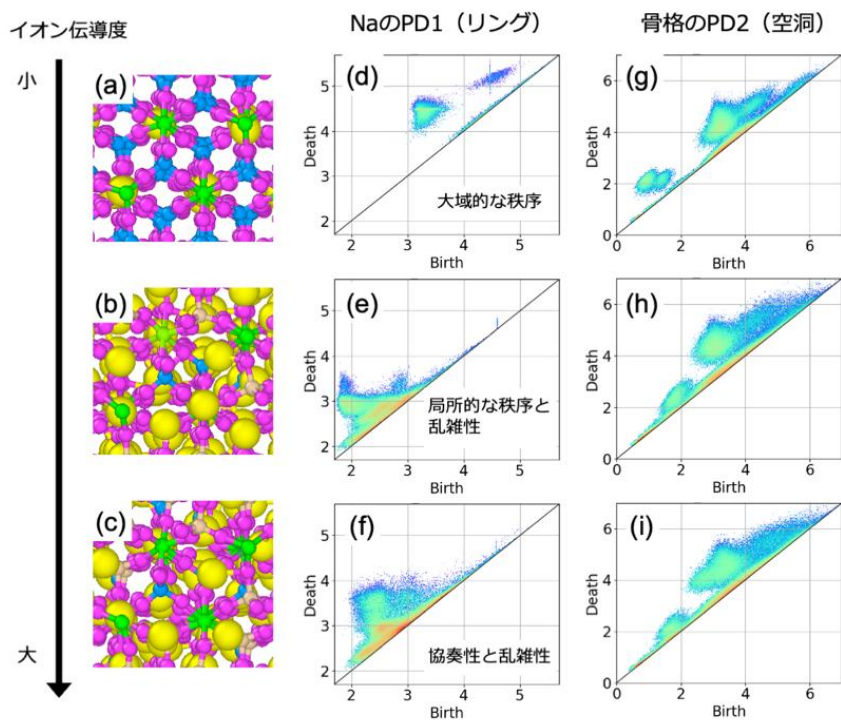


図 2-2-1-E-2. MD のスナップショットや構造の幾何学的特徴をイオン伝導度の順に並べて表示したもの。

(a)-(c)NASICON の原子配置。黄:Na, 緑:Zr, マゼンタ:O, 青:P。

(d)-(f)Na 原子からなるリング構造のパーシステント図は伝導度の大小で大きく異なる。(g)-(i)Na 原子以外の骨格についてのパーシステント図は特徴に明確な違いがない。

[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構造データベースを生成
- ・ 文科省の DxMT プロジェクトにおいて本手法を用い、金属材料に引張変形を加えた際の積層欠陥の成長メカニズムを解析
- ・ JST の GteX プロジェクトにおいて本手法を用い、水素貯蔵材料における水素の拡散プロセスを解析

(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・調整にあたった。

- 統括会議（4回開催）：6/27、1/6、1/28、2/27 開催
- 実施者会議（2回開催）：10/3、11/1 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課題内のさらなる連携、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、令和6年度は前年度の活動をさらに進め、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3回）：5/20 開催
- 第2回合同公開シンポジウム（成果報告会）：3/11 開催
- 第18回材料系ワークショップ（共催）：10/11 開催
- 第19回材料系ワークショップ（共催）：2/19 開催

また、プロジェクトで得られた成果は論文発表（48報）・オープンアクセス、シンポジウム・研究会、広報・ホームページや研究活動を通じて積極的に公表した。

- 第2回合同公開シンポジウム（成果報告会）：3/11 開催
- 第4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）：12/25
- 第4回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会（パネリスト対応、ポスター発表）：2/21
- 第11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）：10/24-25
- シンポジウム開催情報等のホームページ掲載

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、今後の展開に資した。

- HPCI コンソーシアム令和6年度通常総会（出席）：5/23
- 次世代計算基盤に係る調査研究 新計算原理チーム報告会（参加）：5/29
- 次世代計算基盤に係る調査研究合同ワークショップ（参加）：12/27
- 「次世代計算基盤のユーザビリティに関する提言」についての意見交換会（参加）：2/28

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 2024年度第1回研究会（講演）：5/30
- EIS コンソーシアム 2024年度第2回研究会（講演）：7/31
- EIS コンソーシアム 2024年度第3回研究会：1/31

- EIS コンソーシアム 2024 年度第 4 回研究会 : 3/27
- 第 45 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) : 9/2-6
- 第 46 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) : 2/17-21

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ていった。

- 研究フォーラム (第 3 回) : 5/20 開催
- 第 2 回合同公開シンポジウム (成果報告会) : 3/11 開催

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 システムの計算資源追加の検討・調達を実施した。「富岳」の計算資源を有効利用し、課題配分の 100% を使用した。

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
5/20	研究フォーラム（第3回）	オンライン開催
5/23	HPCIコンソーシアム令和6年度通常総会（出席）	オンライン開催
5/29	次世代計算基盤に係る調査研究 新計算原理チーム 報告会（参加）	オンライン開催
5/30	EISコンソーシアム 2024年度第1回研究会（講演）	オンサイト（(株)クロスアビリティ会議室）とオンラインのハイブリッド開催
6/27	第6回統括会議	メール審議
7/31	EISコンソーシアム 2024年度第2回研究会（講演）	筑波大学東京キャンパス121講義室、122講義室
9/ 2-6	第45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
10/ 3	第5回実施者会議	オンライン開催
10/11	第18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
10/24- 25	第11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
11/ 1	第6回実施者会議	メール審議
12/25	第4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
12/27	次世代計算基盤に係る調査研究合同ワークショップ ～フィージビリティスタディ結果報告～（参加）	オンサイト（東京大学 伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール）とオンラインのハイブリッド開催
1/ 6	第7回統括会議	メール審議
1/28	第8回統括会議	メール審議
1/31	EISコンソーシアム 2024年度第3回研究会	オンサイト（(株)クロスアビリティ会議室）とオンラインのハイブリッド開催
1/31	マテリアル戦略総合シンポジウム2025（参加）	オンサイト（東京ビッグサイト会議棟 レセプションホール）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
2/17-21	第46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
2/19	第19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
2/21	第4回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 (パネリスト、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
2/27	第9回統括会議	メール審議
2/28	「次世代計算基盤のユーザビリティに関する提言」についての意見交換会 (参加)	オンサイト(日比谷国際ビルコンファレンススクエア 8E)とオンラインのハイブリッド開催
3/11	第2回合同公開シンポジウム (成果報告会)	オンライン開催
3/27	EISコンソーシアム 2024年度第4回研究会	オンサイト((株)クロスアビリティ会議室)とオンラインのハイブリッド開催

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 グループリーダー 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 グループリーダー 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 グループリーダー 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 グループリーダー 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
	⑦：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 研究センター長 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 研究センター長 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

業務項目	担当機関	担当責任者
	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
	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 グループリーダー 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 研究センター長 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

業務項目	担当機関	担当責任者
	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
	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	研究フォーラム (第3回)
日時	令和6年5月20日(月) 13:30 ~ 16:30
場所	オンライン開催
参加者	20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3回)

日時: 2024年5月20日(月) 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3回)

13:30 - 13:35	大阪大学 大学院基礎工学研究科	新里 秀平	研究フォーラム(第3回)開催趣旨
13:35 - 14:15	島根大学 材料エネルギー学部	榎木 勝徳	第一原理計算を利用した準安定状態の遷移過程の考察
14:15 - 14:50		出席者	討論
14:50 - 15:05	休憩		
15:05 - 15:45	東北大学 金属材料研究所	福島 省吾	大規模分子動力学シミュレーションのための機械学習ポテンシャルの応用例
15:45 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:30	大阪大学 大学院基礎工学研究科	新里 秀平	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 02	
会議名称	HPCI コンソーシアム令和6年度通常総会
日時	令和6年5月23日(木) 15:00 ~ 17:00
場所	オンライン開催
議事	<p>【2024年度HPCIソフトウェア賞授賞式】</p> <p>1. 定足数の確認・開会宣言</p> <p>【来賓挨拶】文部科学省 栗原潔室長</p> <p>2. 審議事項】</p> <p>① 議案第1号 令和5年度事業報告</p> <p>② 議案第2号 令和5年度会計報告および監査報告</p> <p>③ 議案第3号 令和6年度事業計画</p> <p>④ 議案第4号 令和6年度予算計画</p> <p>⑤ 議案第5号 「次世代計算基盤を利用した成果の最大化に向けて」の提言について</p> <p>⑥ 議案第6号 令和6年度役員を選任</p> <p>⑦ 議案第7号 理事長候補、副理事長候補を選任</p> <p>⑧ 議案第8号 総会議長、副議長の選任分野間連携について</p> <p>3. 報告事項</p> <p>① 報告第1号 会員の入退会について</p> <p>② その他（議事録署名人の選任、他）</p> <p>4. 閉会宣言</p>

活動報告 03	
会議名称	次世代計算基盤に係る調査研究 新計算原理チーム報告会
日時	令和6年5月29日(水) 13:00 ~ 17:00
場所	オンライン開催

プログラム（敬称略）

13:00-13:05 文科省よりご挨拶

13:05-13:20 全体の概要 天野英晴（慶應チーム）

13:20-14:00 NISQ アルゴリズムの最新動向 柚木清司（理研 RQC チーム）

14:00-14:40 量子コンピュータとスパコンの連携 佐藤三久（理研 R-GCS チーム）

休憩

14:50-15:30 FTQC 最新動向 谷本輝夫（九州大学チーム）

15:30-16:10 量子アニーラの現状 小松一彦、百瀬真太郎（東北大・NEC チーム）

16:10-16:50 量子コンピュータシミュレータの現状 近藤正雄（富士通株式会社、慶應チーム）

16:50-17:00 2024 年度の活動 渡辺宙志（慶應チーム）

活動報告 04	
会議名称	EIS コンソーシアム 2024 年度第 1 回研究会
日時	令和6年5月30日(木) 13:30 ~ 16:30
場所	オンサイト((株)クロスアビリティ会議室)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

講師：清水 康司先生（産業技術総合研究所 研究員）

講演 1

タイトル：ニューラルネットワークを用いた電場印加下でのイオン挙動計算手法の開発

概要：本研究では、原子構造から各イオンのボルン有効電荷を予測するニューラルネットワークモデルを開発した。本手法を用いてLi3PO4材料中における電場印加下でのイオン挙動を調べたのでその内容について紹介する。

講演 2

タイトル：ニューラルネットワークポテンシャルを用いた荷電N空孔を含むGaNの物性評価

概要：荷電欠陥の性質の理解は半導体材料開発において重要である。本研究では荷電欠陥を取り扱うためのニューラルネットワークポテンシャル（NNP）手法を開発し、異なる荷電状態のN空孔を含むGaNを対象材料としてNNPを作成した。作成したNNPを用いて荷電N空孔を含むGaNの諸物性を評価したので、その内容について紹介する。

活動報告 05	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第6回統括会議
日時	令和6年6月27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. 「富岳」材料物理化学課題での「富岳」ポイントの運用について 2. 「富岳」材料物理化学課題での「富岳」優先実行枠の前期配分について 3. その他

活動報告 06	
会議名称	EIS コンソーシアム 2024年度第2回研究会
日時	令和6年7月31日(水) 12:30 ~ 16:30
場所	筑波大学東京キャンパス 121 講義室、122 講義室

プログラム

12:30~12:40 開会の挨拶

12:40~13:40 講演1 中山 将伸先生(名古屋工業大学 教授)
「深層学習力場を利用した蓄電池界面の反応解析」

内容：本講演では、高速・高精度計算が可能な深層学習力場を用い、
電極 | 電解質界面でのイオン交換反応や分解反応の詳細を
原子スケールから評価した研究例を紹介する。

13:40~13:50 休憩

13:50~14:50 講演2 大谷 実(筑波大学 教授)
「固液界面シミュレーション技術の最近の応用例の紹介」

内容：ESM-RISMのを用いた固液界面シミュレーションの
高効率酸素発生反応触媒に適用した事例や、反応路自動探索法との
連成計算の事例を紹介します。

14:50~15:00 休憩

15:00~16:30 ポスター・企業紹介パネル展示

17:00~ 交流会

[馳走ダイニング文蔵](#) 茗荷谷駅徒歩5分

活動報告 07	
会議名称	第45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6年9月2日(月)～6日(金)
場所	オンライン開催



COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN(CMD®) WORKSHOP
LIVE! ONLINE

第45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
45th 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年秋季集中講義・実習 — Autumn 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は参加確定者をごちから招待いたしますので、事前にアカウントを作ってお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): 2024年9月2日(月)～9月6日(金) (2nd September - 6th September, 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7月21日(日) (21st July, 2024)



活動報告 08	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第5回実施者会議
日時	令和6年10月3日(木) 17:15 ~ 19:15
場所	オンライン開催
参加者	館山、三宅、泰岡、藤本、福島、笠松、久保、新里、赤木、中田、小林、新屋、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」材料物理化学課題 令和6年度10月以降の予定 2. 次期フラグシップシステムについて 3. 研究フォーラムの第二シーズン企画 4. 合同公開シンポジウム(第2回)(2025年3月11日開催) 5. 文部科学省令和6年度「富岳」課題推進WGによる進捗状況ヒアリングについて 6. 第4回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会(企画案)について 7. 「富岳」成果創出加速プログラム 課題代表者会議 8. 「富岳」利用に関する tips 情報交換 9. Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations について 10. その他

活動報告 09

会議名称	第18回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和6年10月11日（金）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	303名（内、企業207名）会場53名、オンライン250名

プログラム（敬称略）

司会：北畑 雅弘(産応協, 東レ株式会社)

10:00-10:05	開会挨拶 齊藤 哲(高度情報科学技術研究機構)
10:05-10:20	「富岳」・HPCIの利用制度と支援～新しいことを中心に～ 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	Web技術が拓く材料シミュレーションの未来 岩田 潤一(株式会社 Quemix) (発表資料 [PDF] )
11:10-11:45	量子コンピューティングとHPC 藤堂 真治(東京大学) (発表資料 [PDF] )
11:45-12:45	<ランチタイム・展示&情報交換>
12:45-13:20	高分子物性自動計算ソフトウェアRadonPyとSIM2REAL転移学習のスケールアップ 吉田 亮(統計数理研究所) (発表資料 [PDF] )
13:20-13:55	プログラミング言語と大規模言語モデル 小町 守(一橋大学) (発表資料 [PDF] )
13:55-14:30	生成AIを活用した計算物質科学ソフトウェア開発事例の紹介 吉見 一慶(東京大学) (発表資料 [PDF] )
14:30-15:05	最近のGPUとプログラミングモデル 田浦 健次朗(東京大学) (発表資料 [PDF] )
15:05-15:20	<休憩>
15:20-17:15	パネルディスカッション「マテリアルサイエンスを次世代技術でどう進化させるか」 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：藤堂 真治(東京大学)/ 吉田 亮(統計数理研究所)/ 小町 守(一橋大学)/ 田浦 健次朗(東京大学)/ 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) ● HPCI産業利用の紹介 ● 文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)データ連携部会中核機関の取り組み ● 物性研究所 共同利用スパコン関連事業の取り組み *会場のみ

活動報告 10

会議名称	第11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6年10月24日(木) ~ 25日(金)
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24日(木)

時間	プログラム(敬称略)
13:30 - 13:40	<ul style="list-style-type: none"> 主催者挨拶: 田島 保英 (一般財団法人高度情報科学研究機構 理事) 幹事者挨拶: 伊藤 聡 (一般社団法人HPCIコンソーシアム 理事長) 共催者挨拶: 松原 聡 (国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター長) 共賛挨拶: 栗原 謙 (文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)計算科学技術推進室 室長)
第4回HPCIコンソーシアムシンポジウム 開催テーマ: HPC技術の産業展開	
13:40 - 14:20	基調講演: 加藤 千幸 (日本大学理工学部工学研究所 上席研究員/東京大学 名誉教授) 「HPCを駆使した流体シミュレーションの産業応用の拡大に向けて」 (ファシリテーター: 坪倉 誠 (理化学研究所計算科学研究センターチームリーダー/神戸大学大学院システム情報学研究科 教授))
14:20 - 15:00	基調講演: 福澤 薫 (大阪大学大学院薬学研究科 教授) 「FMO創薬コンソーシアムにおけるHPCIの活用と産学連携」 (ファシリテーター: 白井 宏樹 (理化学研究所計算科学研究センターコーディネーター))
15:00 - 15:40	基調講演: 大谷 実 (筑波大学計算科学研究センター 教授) 「電気化学界面シミュレーションで加速する材料開発: HPCの産業利用へ目線して」 (ファシリテーター: 茂本 真 (ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター 技師長))
15:40 - 16:00	< 休憩 >
16:00 - 17:30	パネル・ディスカッション 「産学連携によるHPC技術の産業界への展開と今後の課題」 コーディネーター: 坪倉 誠 (理化学研究所計算科学研究センターチームリーダー/神戸大学大学院システム情報学研究科 教授) 佐野 健太郎 (理化学研究所計算科学研究センターチームリーダー) 加藤 千幸 (日本大学理工学部工学研究所 上席研究員/東京大学 名誉教授) 福澤 薫 (大阪大学大学院薬学研究科 教授) 白井 宏樹 (理化学研究所計算科学研究センターコーディネーター) 大谷 実 (筑波大学計算科学研究センター 教授) 茂本 真 (ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター 技師長)

10月25日(金)

時間	プログラム(敬称略)
9:55 - 10:00	スケジュール説明
Session1: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 望月 祐志 (立教大学 教授)	
10:00 - 10:25	HPCを活用したFMO創薬プラットフォームの構築 (hp230131) [PDF] 福澤 薫 (大阪大学) ● 講演動画はこちら
10:25 - 10:50	伝熱伝導率の高精度評価と伝熱伝導率に基づく分子デザイン (hp230003) [PDF] 神谷 成毅 (兵庫県立大学) ● 講演動画はこちら
Session2: 特別基調講演 ファシリテーター: 小柳 義夫 (高度情報科学研究機構 サイエンスアドバイザー)	
10:50 - 11:30	佐藤 三久 (理化学研究所 計算科学研究センター 量子HPC連携プラットフォーム部門 部門長) 「量子パソコン連携計算のためのプラットフォームの構築を目指すJHPC Quantumプロジェクト」 ● 講演動画はこちら
11:30 - 12:30	< 昼食 >
Session3: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 岡武 慶 (福岡大学 教授)	
12:30 - 12:55	高エネルギー天体現象中の量子運動論のニュートリノ輸送シミュレーション (hp230033) 長倉 洋樹 (自然科学研究機構国立天文台) ● 講演動画はこちら
12:55 - 13:20	高解像度長時間シミュレーションで解明する重中性子星合体の大局的振舞い (hp230084) [PDF] 木内 健太 (マックスプランク重力物理学研究所) ● 講演動画はこちら
Session4: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 広橋 謙 (東京科学大学 教授)	
13:20 - 13:45	「富岳」を用いた原子力技術研究所のフルスケール3次元FEMモデルによるマルチバースシミュレーション (hp230061) [PDF] 宮村 倫司 (日本大学) ● 講演動画はこちら
13:45 - 14:10	高圧水素酸素ロケットエンジン低温燃料噴射引き起こす強い燃焼振動機構の解明 (hp230167) 下山 凌空 (北海道大学) ● 講演動画はこちら
14:10 - 14:20	< 休憩 >
Session5: 優秀成果受賞課題による成果発表 ファシリテーター: 立川 仁典 (横浜市立大学 教授)	
14:20 - 14:45	水中のポリマーブラシの防汚機構 (hp230019) [PDF] 矢ヶ崎 寿樹 (大阪大学) ● 講演動画はこちら
14:45 - 15:10	ポリイソブレンの伸縮結晶化の挙動を解明する大規模UAAMD計算の実現 (hp220215) 飯田 克美 (筑波大学)
15:10 - 15:35	表彰・謝辞: 小柳 義夫 (成果報告会プログラム委員会 委員長)
Session6: ポスターセッション ※現地会場のみ	
15:35 - 16:15	コアタイム1
16:15 - 16:55	コアタイム2
16:55 - 17:35	コアタイム3
17:35 - 17:40	閉会挨拶: 森 賢博 (一般財団法人高度情報科学研究機構 神戸センター長)

発表ポスター

hp230205

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
(「富岳」材料物理化学課題)


課題代表者: 植山 佳尚 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター グループリーダー

課題概要

電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野において、マイクロスケールからの材料開発プロセスを目指し、「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施することで、世界最先端の基礎研究を遂行し、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に貢献することを目的としています。

電子・イオン・原子・分子といった粒子系のシミュレーションを中心に、スピントロニクス材料や分子を主な対象とし、それらに支配する量子力学、熱力学、統計力学などを土台とする物理・化学分野の計算手法を用いながら、高機能性・長寿命化(劣化抑制)に資するマイクロスケールメカニズムに立脚した材料探索や制御機構の解明を目指します。

実施・連携体制



電池・触媒材料

研究内容: 電解質電極表面に関する新たな分子の存在・機能の解明、電極材料の劣化抑制に関する有機・無機材料・量子化学的解明、電極材料の分子動力学シミュレーションによる電極反応の解明

磁性材料

研究内容: 磁性材料を用いた多目的な数値計算と磁性材料の設計・最適化、磁性材料の分子動力学シミュレーションによる磁性材料の設計・最適化

高分子材料

研究内容: 高分子材料の分子動力学シミュレーションによる材料の設計・最適化、高分子材料の分子動力学シミュレーションによる材料の設計・最適化

構造材料

研究内容: 構造材料の分子動力学シミュレーションによる材料の設計・最適化、構造材料の分子動力学シミュレーションによる材料の設計・最適化

令和5年度の主な成果

電池・触媒材料

イオン性阻液に一般に対して適用可能な、エネルギーの高効率サブリングが可能コード「EwaldSolidSolution」を開発し、得られた構造安定性順序がDFT計算と一致する、DFT計算サポートモデルとなったことを実証した。「EwaldSolidSolution」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施した。

磁性材料

スピントロニクス材料でのデータ駆動型研究の基盤となる高精度データ創出のため、AkaiKRKコード、フルポテンシャルKKRコード、ハイスループット計算ツールを高度化し、フォノン・マグノン散乱をコヒーレントポテンシャル近似に立脚した計算可能なコードを開発した。スピントロニクス材料を対象に「富岳」を活用した模擬計算によるデータの蓄積(蓄積、強磁性転移温度、電気抵抗率)とデータ駆動型を実施し、100万件を超える物性データを創出した。

高分子材料

金属モデルを用いた分子動力学シミュレーションでポリエチレンテレフタレート(PET)の結晶状態と非晶状態のそれぞれに対する小分子(水性のアルコール)の溶解挙動(溶解自由エネルギー)を計算した。比較で単純なポリエチレン(PE)、結晶度で密度が下がるポリスチレン(PS)、PETより親水性的なセルロースも計算した。エチレングリコールのような環状の分子が高分子への水の侵入に及ぼす影響を定量化した。また、非晶部分と結晶部分の溶解性や拡散性の差は、高分子骨格の空隙構造によって決まることが明らかになった。

構造材料

異なる材料の分子動力学シミュレーションでポリエチレンテレフタレート(PET)の結晶状態と非晶状態のそれぞれに対する小分子(水性のアルコール)の溶解挙動(溶解自由エネルギー)を計算した。比較で単純なポリエチレン(PE)、結晶度で密度が下がるポリスチレン(PS)、PETより親水性的なセルロースも計算した。エチレングリコールのような環状の分子が高分子への水の侵入に及ぼす影響を定量化した。また、非晶部分と結晶部分の溶解性や拡散性の差は、高分子骨格の空隙構造によって決まることが明らかになった。

連絡先: NIMS「富岳」材料物理化学課題事務局 <https://www.nims.go.jp/projects/igmp/> Email: igmp@nims.go.jp

活動報告 11

会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第6回実施者会議
日時	令和6年11月1日(金)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、大谷、泰岡、藤本、福島、笠松、久保、新里、赤木、中田、小林、新屋、事務局
議事	1. 「富岳」材料物理化学課題の公開シンポジウムの開催形式について 2. その他

活動報告 12

会議名称	第4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6年12月25日(水) 13:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	716名

プログラム (敬称略)

SESSION 1

「富岳」で社会課題に挑戦する！
(政策対応利用課題からの発表)

講演 1
「富岳」を用いた大規模なAIの事前学習
東京科学大学 総合研究院 スーパーコンピューティング研究センター 教授 横田 雅央

講演 2
次世代気象レーダによる未来のゲリラ豪雨予測
～大阪・関西万博におけるリアルタイム配信の実証～
総務省 国際戦略局 技術政策課研究推進室 眞土原 大介

SESSION 3

科学はAIでどう進化する？～AI for Science～

パネルディスカッション
コーディネータ
教育系YouTuber、SNSインフルエンサー ヨビノリたくみ

パネリスト (4名)
「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 高橋 桂子 (早稲田大学)
「富岳」成果創出加速プログラム 課題代表者 藤本 和士 (関西大学)
大須賀 健 (筑波大学)
伊井 仁志 (東京科学大学)

SESSION 2

シミュレーションとAIを組み合わせたら何が出来る？
(「富岳」成果創出加速プログラムからの発表)

概要説明
「富岳」成果創出加速プログラムの各課題 (20課題) の概要紹介
「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 / 早稲田大学 ナノ・ライフ創研研究機構 上級研究員・研究院教授 高橋 桂子

講演 3
燃料電池の未来を切り開く、
「富岳」を使った新しいシミュレーション技術
関西大学 化学生命工学部 准教授 藤本 和士

講演 4
シミュレーションとAIで解明する宇宙の構造と進化
筑波大学 計算科学研究センター 教授 大須賀 健

講演 5
「富岳」で実現するヒト脳循環デジタルツイン
～医用計測データ、計算機シミュレーション、AI技術の融合～
東京科学大学 工学院 機械系 教授 伊井 仁志

発表ポスター

領域：産業競争力の強化 (③)

課題番号: hp240224 | 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・創製

電子・イオンの高精度・高効率計算 @ 「富岳」による新理論・新物質開拓

講師: 館山 佳尚 (物質・材料研究機構 GREEN グループリーダー)

概要: 電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの物質・材料分野において、ミクロスケールからの開発アプローチを目指し、量子力学や統計力学の基本原理に立脚した「富岳」を最大限活用する計算/データ科学研究を興行し、物質・材料の特性に関する新しい理論・原理を提案するとともに、我が国の産業競争力強化につながる新物質・材料開発に貢献する。

実施体制・関係機関・研究内容: 電池・触媒材料、磁性材料、高分子材料、構造材料の各分野の連携体制と研究内容を示す図表。

想定される自体的成果: 電池・触媒材料、磁性材料、高分子材料、構造材料に関する具体的な成果と応用事例。

「富岳」によるミクロスケールの「材料科学・技術」の革新は産業・社会に対して多大なインパクトを与え、それによる革新的な材料開発は蓄エネルギー・省エネルギー技術の進展、耐久性の向上などに寄与し、カーボンニュートラル社会の実現に大きく貢献します。

活動報告 13

会議名称	次世代計算基盤に係る調査研究合同ワークショップ～フィージビリティスタディ結果報告～
日時	令和6年12月27日(金) 13:00～17:20
場所	オンサイト(東京大学 伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール)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	内容	資料
12:30	受付開始	
第一部		
13:00-13:05	開会挨拶 田浦 健次朗 (「次世代計算基盤に係る調査研究」プログラムディレクター)	
13:05-13:35	研究報告Ⅰ システム調査研究の概要と検討結果 近藤 正章 (理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー)	スライド資料 (PDF 約 9.5MB) 
13:35-14:05	研究報告Ⅱ システム調査研究の概要と検討結果 牧野 淳一郎 (神戸大学 大学院理学研究科 特命教授 / 附属惑星科学研究センター センター長)	スライド資料 (PDF 約2MB) 
14:05-14:35	研究報告Ⅲ 新計算原理調査研究の概要と検討結果 天野 英晴 (東京大学大学院工学系研究科附属 システムデザイン研究センター 上席研究員)	スライド資料 (PDF 約 4.9MB) 
14:35-15:05	研究報告Ⅳ 運用技術調査研究の概要と検討結果 堀 敏博 (東京大学 情報基盤センター 教授)	スライド資料 (PDF 約 8.2MB) 
15:05-15:20	休憩	
第二部		
15:20-15:45	ポスト富岳時代を見据えた、新たな政府のスパコン戦略の展望 栗原 潔 (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長)	スライド資料 (PDF 約 8.5MB) 
15:45-17:15	パネルディスカッション テーマ：今後の次世代計算基盤開発・整備の在り方 モデレーター： 小林 広明 (「次世代計算基盤に係る調査研究」プログラムディレクター) パネリスト： 市村 強 (東京大学 教授) 栗原 潔 (文部科学省 計算科学技術推進室長) 小島 照之 (Kotoba Technologies, Inc. CEO) 高木 亮治 (宇宙航空研究開発機構 准教授) 焼野 藍子 (東北大学 准教授)	
17:15-17:20	閉会挨拶 朴 泰祐 (「次世代計算基盤に係る調査研究」プログラムディレクター)	
18:00-	意見交換会	

活動報告 14	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第7回統括会議
日時	令和7年1月6日(月)
場所	メール審議
参加者	館山、三宅、松林、久保、事務局
議事	1. 「富岳」材料物理化学課題での「富岳」優先実行枠の後期配分について 2. その他

活動報告 15	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第8回統括会議
日時	令和7年1月28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	1. 第2回合同公開シンポジウムのプログラムについて 2. その他

会議名称	EIS コンソーシアム 2024 年度第 3 回研究会
日時	令和 7 年 1 月 31 日(金) 13:30 ~ 16:30
場所	オンサイト((株)クロスアビリティ会議室)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

講師：陣内 亮典先生（株式会社 豊田中央研究所）

講演 1

タイトル：カーネル法を用いる機械学習ポテンシャルと自律学習アルゴリズム

概要：カーネル法に基づき、第一原理分子動力学シミュレーション中に計算から得られるエネルギー・力・応力テンソルを自律的に学習し、機械学習ポテンシャルを生成するアルゴリズムとその背景にある各種理論とを説明する。

講演 2

タイトル：機械学習ポテンシャルを援用する酸化還元電位の第一原理計算：均一溶液から固液界面まで

概要：機械学習ポテンシャルを援用し、有限温度第一原理分子動力学シミュレーションに基づく熱力学積分法により、均一溶液や固液界面での電子・プロトン移動反応の酸化還元電位を計算する方法を説明する。また一般化密度勾配近似等の効率的であるが精度に問題を来すことのある方法と、ハイブリッド汎関数等の高精度であるが計算量の多い方法とのエネルギー・力・応力テンソルの差を学ぶ Δ -ML法により、両者の自由エネルギー差を熱力学摂動法により計算し、酸化還元電位を高精度に得る方法も説明する。

活動報告 17

会議名称	マテリアル戦略総合シンポジウム 2025
日時	令和7年1月31日(金) 10:00 ~ 17:15
場所	オンサイト(東京ビッグサイト会議棟 レセプションホール)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム (敬称略)

【開会挨拶】 10:00-10:10

10:00-10:05 文部科学省

10:05-10:10 宝野 和博 (物質・材料研究機構理事)

【基調講演1】 10:10-10:40

宅間 祐子 (文部科学省研究振興局 参事官 (ナノテクノロジー・物質・材料担当)
(併) 内閣府科学技術・イノベーション推進事務局参事官)
「マテリアル革新力強化戦略に基づく政府の取組について」

【基調講演2】 10:40-11:15

吉田 亮 (統計数理研究所 マテリアルズインフォマティクス研究推進センター長)
「データ駆動型材料研究におけるデータ基盤の在り方: AI活用の視点から」

【特別講演】 11:15-11:50

John A. Schlueter (Program Director, DMREF, NSF)
The Designing Materials to Revolutionize and Engineer Our Future (DMREF) Program at the National Science Foundation (NSF)

【昼食】 11:50-13:10

【Session 1: マテリアルDXプラットフォーム構想の進展】 13:10-14:50

13:10-13:30

戸津 盛太郎 (東北大学)
「多様なデバイス開発を加速させる加工プロセスデータ収集・利活用の取り組み」

13:30-13:50

馬場 善信 (名古屋大学)
「名古屋大学ARIMハブ拠点におけるバイオマテリアル・バイオデバイスのデータ駆動型研究開発支援」

13:50-14:10

源 聡 (物質・材料研究機構)
「マテリアルDXプラットフォーム連携が切り拓くデータ駆動型材料研究の未来」

14:10-14:30

一杉 太郎 (東京大学)
「データ・ロボット駆動科学の世界的動向と将来展望」

14:30-14:50

吉見 享祐 (東北大学)
「材料ミクロ組織を取り入れた構造材料研究のためのDXアプローチ」

【コーヒーブレイク】 14:50-15:20

【Session 2: マテリアルDXプラットフォームを活用した研究開発の推進】 15:20-16:00

15:20-15:40

赤尾 慎吾 (ポールウェーブ株式会社)
「ポールSAWセンサの社会実装、超小型可搬ガスクロマトグラフ」

15:40-16:00

幾原 雄一 (東京大学)
「ARIM東京大学発の新しい評価技術と手法」

【休憩】 16:00-16:10

【Session 3: データ駆動で加速するマテリアルイノベーション】 16:10-17:10

16:10-16:30

奥野 好成 (株式会社レゾナック)
「レゾナックでのデータ駆動型材料開発DXの取組み紹介とマテリアルDXプラットフォームへの期待」

16:30-16:50

宇治原 敬 (株式会社UJ-Crystal, 名古屋大学)
「SiC溶液成長法における機械学習技術とその応用」

16:50-17:10

藤井 祥也 (奈良先端科学技術大学院大学)
「デジタル技術によるクローズドループを用いた材料設計とプロセス開発」

【閉会挨拶】 17:10-17:15

栗原 和枝 (文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト プログラムディレクター)

活動報告 18

会議名称	第46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7年2月17日(月) ~ 21日(金)
場所	オンライン開催



COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN(CMD®) WORKSHOP
LIVE! ONLINE

第46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
46th 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 2025年春季集中講義・実習 — Spring 2025

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

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

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

開催期間 (WHEN): 2025年2月17日(月) ~ 2月21日(金) (17th - 21st February, 2025)

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): 2025年1月19日(日) (19th January, 2025)

活動報告 19

会議名称	第19回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和7年2月19日(水) 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	223名(内、企業130名)会場31名、オンライン192名

プログラム（敬称略）

司会：北畑 雅弘(産総研, 東レ株式会社)

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の利用制度と支援～新しいことを中心に～ 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 香余子(高度情報科学技術研究機構) (発表資料 [PDF] )
10:35-11:10	JCAHPCの新スパコンMiyabiに向けたアプリケーションのGPU移行の取り組み 下川辺 隆史(東京大学) (発表資料 [PDF] )
11:10-11:45	ARIM-mdxデータシステム:材料研究向け実験・シミュレーションの統合データプラットフォーム 華井 雅俊(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	ポリマー・低分子の相溶性予測と転移学習におけるデータの重要性 白鳥 和矢(三菱ケミカル株式会社) (発表資料 [PDF] )
13:35-14:10	未踏原子層から探る未来材料 松田 巖(東京大学) (発表資料 [PDF] )
14:10-14:45	HPC向け先端半導体実装の最新技術トレンド、および実装材料への要求と課題 川野 連也(東京大学) (発表資料 [PDF] )
14:45-15:20	計算科学アプローチによる半導体科学・工学そしてデバイス製造プロセス 押山 淳(名古屋大学) (発表資料 [PDF] )
15:20-15:40	<休憩>
15:40-17:15	パネルディスカッション「日本の半導体復活に向けたデバイス 材料戦略とは～」 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：松田 巖(東京大学)/ 押山 淳(名古屋大学)/ 川野 連也(東京大学)/ 茂本 勇(産総研, 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) ● 文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)データ連携部会中核機関の取り組み ● 物性研究所 共同利用スパコン関連事業・人材育成事業の取り組み ● HPCI産業利用の紹介 *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 20

会議名称	第4回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会
日時	令和7年2月21日(金) 10:00 ~ 17:30
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	内容/Contents
10:00-10:05	Opening 文部科学省 研究開発局参事官(情報担当) 付 計研科学技術推進室長 栗原 潔 「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 高橋 佳子
10:05-11:35	Panel Discussion / パネルディスカッション ポスト「富岳」への期待 ~若手研究者の視点から~ (仮称) モデレーター: 「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 常行 貴司 パネリスト: 笠松 秀輔 (山形大学) 亀谷 幸希 (明治大学) 信太 美 (大阪大学) 藤田 航平 (東京大学) 森脇 可奈 (東京大学)
Lunch Time	
Oral Session / 口頭発表 座長: 「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 藤井 彦雄	
12:45-13:15	Development of a smart in-situ visualization environment for efficient knowledge acquisition from large-scale numerical simulations / Naohisa Sakamoto 大規模数値シミュレーションからの効率的な知見獲得を目指したスマートin-situ可視化環境の開発 / 坂本 尚久 (神戸大学大学院システム情報学研究科)  Recently, in-situ visualization, in which simulation and visualization are performed simultaneously, has been attracting attention as a method to compensate for the shortcomings of scientific visualization in large-scale numerical simulations on a supercomputer scale. However, this method requires a great deal of time and effort to identify interesting phenomena from a large number of visualized images output from a highly accurate simulation. Our research group is developing a method to efficiently and automatically visualize important clues for scientific analysis and interpretation of phenomena reproduced by numerical simulations, aiming to realize a smart in-situ visualization environment that can reduce the time required to obtain scientific knowledge from numerical simulations. In this talk, I will discuss my research group's past efforts and latest research results on in-situ visualization. 近年、スーパーコンピュータ規模での大規模数値シミュレーションにおいて、可視化の欠点を補う手法のひとつとして、シミュレーションと可視化を同時に行うin-situ可視化が注目されている。しかし、この手法では、高精度に計算されたシミュレーション結果に対して、大量の可視化画像が出力されるため、そのなかから興味深い現象を探索するまでに多大な時間と労力を要する。我々の研究グループでは、数値シミュレーションで再現される現象の科学的な解釈・解釈のための重要な手がかりを効率的に自動可視化する方法を開発し、数値シミュレーションから科学的知見を得るための所要時間を短縮することでスマートin-situ可視化環境の実現を目指している。本講演では、私の研究グループのin-situ可視化に関するこれまでの取り組みと最新の研究成果についてお話しする。
13:15-13:45	Sunspot fine structure revealed with Fugaku / Hideyuki Hotta 「富岳」で明らかにする太陽黒点の微細構造 / 堀田 英之 (名古屋大学)  The Sun is an interesting object in which plasma and magnetic fields interact at various scales and whose details can be observed. The most characteristic structure is the sunspot. Although sunspots have been observed for a very long time, the origin of the fine structures known as penumbra and Evershed flows has not been clarified. We will present these fine structures realized by the super-high-resolution simulations achieved at Fugaku. We will also present the activities of our group. 太陽はさまざまなスケールでプラズマと磁場が相互作用し、その詳細を解明することで驚くべき興味深い天体で、最も特徴的な構造は黒点である。非常に広くから観察のある黒点であるが、半影部やエーシェッド流れと呼ばれる微細構造は黒点から明らかになっていない。本研究では、「富岳」で達成した超高分解能シミュレーションにより実現したこれらの微細構造について紹介する。講演では我々のグループの取り組みについて紹介する。

Sim2Real materials informatics with automated molecular simulation for polymer materials / Yoshihiro Hayashi
自動分子シミュレーションを用いた高分子材料におけるSim2Realマテリアルズインフォマティクス / 林 慶浩 (統計数理研究所)



13:45-14:15

To overcome the lack of experimental data in data-driven polymer materials research, we created RadonPy, an automated molecular simulation system, and a polymer properties database with more than 100,000 data using the Fugaku supercomputer. Research on materials informatics with simulation-to-real (Sim2Real) transfer learning for integrated analysis of computational and experimental data will be presented.
データ駆動型高分子材料研究における実験データの不足をシミュレーションデータで補うことを目的とし、自動分子シミュレーションシステムRadonPyの開発と、スーパーコンピュータ「富岳」を用いた10万件を超える高分子特性データベースを開発した。シミュレーションと実験データを統合解析するためのSimulation-to-real (Sim2Real) 転移学習に関するマテリアルズインフォマティクスの研究を紹介する。

Break

14:30-15:30	Poster Session -1st Core time for questions- (1st) ポスターセッション(質疑対応コアタイム前半)
15:30-16:30	Poster Session -2nd Core time for questions- (1st) ポスターセッション(質疑対応コアタイム後半)
16:30-17:10	Poster Session -Free time- (1st) ポスターセッション (フリータイム)
17:10-17:25	Next Generation Researcher Award Ceremony 次世代研究者賞 授与式 「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 常行 貴司
17:25-17:30	Closing 「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括 常行 貴司

活動報告 21	
会議名称	「富岳」材料物理化学課題 第9回統括会議
日時	令和7年2月27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	<ol style="list-style-type: none"> 1. 令和6年度「富岳」計算資源利用状況について 2. 令和7年度「富岳」計算資源の分野配分について 3. その他

活動報告 22	
会議名称	「次世代計算基盤のユーザビリティに関する提言」についての意見交換会
日時	令和7年2月28日(金) 13:00 ~ 15:30
場所	オンサイト(日比谷国際ビルコンファレンススクエア 8E)とオンラインのハイブリッド開催
議題	<ol style="list-style-type: none"> 1. 次世代計算基盤『ポスト富岳』の検討状況について 2. 次世代計算基盤に係る運用技術調査研究の検討状況について 3. 「次世代計算基盤のユーザビリティに関する提言」(案)の説明と参加者との意見交換

活動報告 23

会議名称	第2回合同公開シンポジウム（成果報告会）
日時	令和7年3月11日(火) 13:30～17:25
場所	オンライン開催
参加者	122名（内、企業41名）

プログラム（敬称略）

プログラム（敬称略）※1

第2回合同公開シンポジウム（成果報告会）

セッション1 座長：松林 伸幸（大阪大学 大学院基礎工学研究科）

13:30 - 13:35	関西大学 化学生命工学部	藤本 和士	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	栗原 潔	来賓挨拶
13:40 - 14:00	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) 成果報告
14:00 - 14:20	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) 成果報告
14:20 - 14:50	筑波大学 計算科学研究センター	朴 泰祐	招待講演 『ポスト富岳』に向けたアプリケーション開発～何を準備すべきか～

14:50 - 15:05 休憩

セッション2 座長：秦岡 顕治（慶應義塾大学 理工学部・理工学研究科）

15:05 - 15:35	東京大学 大学院理学系研究科	藤堂 眞治	招待講演 物質科学のための量子コンピューティングとHPC
15:35 - 15:50	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	平松 諒也	有限温度における磁気緩和定数の第一原理計算とデータ蓄積
15:50 - 16:05	筑波大学 計算科学研究センター	萩原 聡	バイアス電圧に依存した表面応力計算手法の開発とその適用

16:05 - 16:20 休憩

セッション3 座長：藤本 和士（関西大学 化学生命工学部）

16:20 - 16:50	トヨタ自動車株式会社 電動化・環境材料技術部	喜多尾 典之	招待講演 燃料電池開発の最前線と計算科学への期待
16:50 - 17:05	関西大学 大学院理工学研究科	北川 剛健	燃料電池中における H_3O^+ の拡散メカニズム
17:05 - 17:20	横浜市立大学 理学部	島崎 智実	燃料電池材料の階層的シミュレーションのためのプロトン量子性を含むQM/MM法の開発
17:20 - 17:25	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	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 24

会議名称	EIS コンソーシアム 2024 年度第 4 回研究会
日時	令和 7 年 3 月 27 日(木) 13:30 ~ 16:30
場所	オンサイト((株)クロスアビリティ会議室)とオンラインのハイブリッド開催

プログラム

講演

13:30-14:10 講演

講師: 田中 悠太様 (ENEOS株式会社)

講演タイトル:

汎用原子レベルシミュレータMatlantisによる材料開発 ~電気化学界面を中心に~

概要:

汎用原子レベルシミュレータMatlantisは、汎用性の高い機械学習力場をコア技術とする。

Matlantisを用いることで、結晶はもちろん、アモルファス、界面のエネルギー・力を追加学習なしに計算可能である。加えて、96元素任意の組み合わせが計算対象のため、現象理解に留まらず材料スクリーニングに繋げやすい。講演では、Matlantisの説明後、電気化学界面での反応が重要な触媒や電池の材料開発にMatlantisを適用した事例を紹介する。

14:20-14:40 WG活動に関して

腐食WG主査: 五十嵐 誉廣 (日本原子力研究開発機構)

マテリアルズインフォマティクスWG主査: 黒田 文彬 (筑波大学)

14:50-15:50 パネルディスカッション

パネリスト: 田中 悠太、五十嵐 誉廣、黒田 文彬

モデレーター: 大谷 実 (筑波大学)

(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	Off-center positioning of helium in a vacancy in metals	Jin-Li Cao, Wen-Qiang Xie, Jian-Bo Lin, Xin-Fu He, Vei Wang, Shigenobu Ogata, Wen-Tong Geng	J. Nucl. Mater. 592 , 154965 (2024).	令和6年 4月
2	Solvation dynamics on the diffusion timescale elucidated using energy-represented dynamics theory	Kazuya Okita, Natsuumi Ito, Nozomi Morishita-Watanabe, Hiroshi Umakoshi, Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	Phys. Chem. Chem. Phys. 26 , 12852-12861 (2024).	令和6年 4月
3	Simple and complex sorption-solution isotherms for membrane polymers: A statistical thermodynamic fluctuation theory	Seishi Shimizu, Ondřej Vopička, Karel Friess, Nobuyuki Matubayasi	Physica A, 642 , 129753 (2024).	令和6年 4月
4	Variation of first pop-in loads in nanoindentation to detect chemical short-range ordering in the equiatomic Cr-Co-Ni medium-entropy alloy	Le Li, Jun-Ping Du, Shigenobu Ogata, Haruyuki Inui	Acta Mater. 269 , 119775 (2024).	令和6年 5月
5	Unveiling interatomic distances influencing the reaction coordinates in alanine dipeptide isomerization: An explainable deep learning approach	Kazushi Okada, Takuma Kikutsuji, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 160 , 174110 (2024).	令和6年 5月
6	Sorption Hysteresis: A Statistical Thermodynamic Fluctuation Theory	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir, 40 , 11504-11515 (2024).	令和6年 5月
7	In-layer inhomogeneity of molecular dynamics in quasi-liquid layers of ice	Ikki Yasuda, Katsuhiro Endo, Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka	Comm. Chem. 7 , 117 (2024).	令和6年 5月
8	Synergistic Solvation as the Enhancement of Local Mixing	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	J. Phys. Chem. B, 128 , 5713-5726 (2024).	令和6年 6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	Theoretical search for characteristic atoms in supported gold nanoparticles: A large-scale DFT study	Shengzhou Li, Tsuyoshi Miyazaki, Ayako Nakata	Phys. Chem. Chem. Phys. 26 , 20251-20260 (2024).	令和6年 6月
10	Tunable interstitial and vacancy diffusivity by chemical ordering control in CrCoNi medium-entropy alloy	Yangen Li, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata	npj Comput. Mater. 10 , 134 (2024).	令和6年 6月
11	Data-Driven Cycle Life Prediction of Lithium Metal-Based Rechargeable Battery Based on Discharge/Charge Capacity and Relaxation Features	Qianli Si, Shoichi Matsuda, Youhei Yamaji, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	Adv. Sci. 2402608 (2024).	令和6年 6月
12	Influence of cholesterol on hydrogen-bond dynamics of water molecules in lipid-bilayer systems at varying temperatures	Kokoro Shikata, Kento Kasahara, Nozomi Morishita Watanabe, Hiroshi Umakoshi, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 161 , 015102 (2024).	令和6年 7月
13	A methodology of quantifying membrane permeability based on returning probability theory and molecular dynamics simulation	Yuya Matsubara, Ryo Okabe, Ren Masayama, Nozomi Morishita Watanabe, Hiroshi Umakoshi, Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 161 , 024108 (2024).	令和6年 7月
14	High Antifouling Performance of Weakly Hydrophilic Polymer Brushes: A Molecular Dynamics Study	Takuma Yagasaki, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir, 40 , 15046-15058 (2024).	令和6年 7月
15	LiNbO ₃ and LiTaO ₃ Coating Effects on the Interface of the LiCoO ₂ Cathode: A DFT Study of Li-Ion Transport	Zizhen Zhou, Huu Duc Luong, Bo Gao, Toshiyuki Momma, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Mater. Interfaces, 16 , 42093-42099 (2024).	令和6年 8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
16	Computational discovery of stable Na-ion sulfide solid electrolytes with high conductivity at room temperature	Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	J. Mater. Chem. A, 12 , 20879 (2024).	令和6年 8月
17	Proton Intercalation into an Open-Tunnel Bronze Phase with Near-Zero Volume Change	Kosuke Kawai, Seong-Hoon Jang, Yuta Igarashi, Koji Yazawa, Kazuma Gotoh, Jun Kikkawa, Atsuo Yamada, Yoshitaka Tateyama, Masashi Okubo	Angew. Chem. Int. Ed. e202410971 (2024).	令和6年 8月
18	Bias-dependent surface stress by density functional theory combined with the effective screening medium method	Satoshi Hagiwara, Shoji Ishibashi, Minoru Otani	Phys. Rev. B, 110 , 155409 (2024).	令和6年 10月
19	Screening Multicomponent Alloys Using Evidence Theory and High-Throughput DFT Calculations for C2-Selective eCO ₂ RR	Fumiaki Kuroda, Masaya Ibe, Minoru Otani	J. Phys. Chem. C, 128 , 17302-17312 (2024).	令和6年 10月
20	Predicting room-temperature conductivity of Na-ion super ionic conductors with minimal number of easily-accessible descriptors	Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	Adv. Energy Sustain. Res. 5 , 2400158, (2024).	令和6年 10月
21	Optimizing the composition of (Ce,La)(Co,Fe) ₅ for permanent magnet applications using density functional theory	Haruki Okumura, Tetsuya Fukushima, Taro Fukazawa, Takashi Miyake, Hisazumi Akai, Masako Ogura	J. Phys.-Condens. Matter, 37 , 015802 (2025).	令和6年 10月
22	Point-defect chemistry for ionic conduction in solid electrolytes with isovalent cation mixing	Takafumi Ogawa, Kazuyuki Sato, Kazuhiro Mori, Shunsuke Kobayashi, Hiroki Moriwake, Yuichi Ikuhara, Akihide Kuwabara	J. Mater. Chem. A, 12 , 31173 (2024).	令和6年 10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
23	Temperature Dependence of Hydrotropy	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	J. Phys. Chem. B, 128 , 10915-10924 (2024).	令和6年 10月
24	Temperature and loading-rate dependent critical stress intensity factor of dislocation nucleation from crack tip: Atomistic insights into crack at slant wtin boundaries in Nano-twinned TiAl alloys	Rong Fu, Zhiyuan Rui, Junping Du, Shihao Zhang, Fanshun Meng, Shigenobu Ogata	J. Mater. Sci. Technl. 222 , 290-303 (2025).	令和6年 10月
25	Disconnection units of twinning in body-centered-cubic metals	Gaobing Wei, Hongxian Xie, Jun-Ping Du, Tingting He, Guanghong Lu, Shigenobu Ogata	Acta Mater. 280 , 120325 (2024).	令和6年 11月
26	強磁性半導体の特異な伝導特性	新屋 ひかり	セラミックス 59, 784-787 (2024).	令和6年 11月
27	Hydrogen and vacancy concentrations in α -iron under high hydrogen gas pressure and external stress: A first-principles neural network simulation study	Shihao Zhang, Shihao Zhu, Fanshun Meng, Shigenobu Ogata	Int. J. Hydrogen Energy, 90 , 246-256 (2024).	令和6年 11月
28	Emerging computational and machine learning methodologies for proton-conducting oxides: materials discovery and fundamental understanding	Susumu Fujii, Junji Hyodo, Kazuki Shitara, Akihito Kuwabara, Shunsuke Kasamatsu, Yoshihiro Yamazaki	Sci. Technol. Adv. Mater. 25 , 2416383 (2024).	令和6年 11月
29	Comparison of intermediate-range order in GeO ₂ glass: Molecular dynamics using machine-learning interatomic potential vs reverse Monte Carlo fitting to experimental data	Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	J. Chem. Phys. 161 , 204103 (2024).	令和6年 11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
30	Neural network potential for dislocation plasticity in ceramics	Shihao Zhang, Yan Li, Shuntaro Suzuki, Atsutomo Nakamura, Shigenobu Ogata	npj Comput. Mater. 10 , 266 (2024).	令和6年 11月
31	Dual influence of protonation on Li-ion transport in garnet solid electrolytes: A first-principles study	Feye-Feng Lu, Huu Duc Luong, Seong-Hoon Jang, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Hong-Kang Tian	J. Power Sources, 628 , 235906 (2025).	令和6年 11月
32	A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of a-Fe-C binary system	Fan-Shun Meng, Shuhei Shinzato, Shihao Zhang, Kazuki Matsubara, Jun-Ping Du, Peijun Yu, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata	Acta Mater. 281 , 120408 (2024).	令和6年 12月
33	Molecular Mechanistic Analysis of Liquid-Crystalline Polymers Composed of p-Hydroxybenzoic Acid I Thermal Properties	Kazushi Fujimoto, Hiroaki Ishikawa, Minoru Shimooka, Toshihiro Kaneko, Susumu Okazaki	J. Phys. Chem. B, 129 , 524-531 (2025).	令和6年 12月
34	Mechanism of solute hardening and dislocation debris-mediated ductilization in Nb-Si alloy	Bo-Qing Li, Irene J. Beyerlein, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata, Wei-Zhong Han	J. Mater. Sci. Technol. 203 , 167-179 (2024).	令和6年 12月
35	Flexible framework of computing binding free energy using the energy representation theory of solution	Kazuya Okita, Yusei Maruyama, Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 162 , 034103 (2025).	令和7年 1月
36	Gas and Liquid Isotherms: The Need for A Common Foundation	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Langmuir, 41 , 2103-2110 (2025).	令和7年 1月
37	Defect Segregation, Water Layering, and Proton Transfer at Zirconium Oxynitride/Water Interface Examined Using Neural Network Potential	Akitaka Nakanishi, Shusuke Kasamatsu, Jun Haruyama, Osamu Sugino	J. Phys. Chem. C, 129 , 2403 (2025).	令和7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
38	Solvent-Environment Dependence of the Excess Chemical Potential and Its Computation Scheme Formulated through Error Minimization	Stefan Hervø-Hansen, Kazuya Okita, Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Theory Comput. 21 , 1064-1077 (2025).	令和7年 1月
39	Atomistic analysis of nematic phase transition in 4-cyano-4'-n-alkyl biphenyl liquid crystals: Sampling for the first-order phase transition and the free-energy decomposition	Shunsuke Ogita, Yoshiki Ishii, Go Watanabe, Hitoshi Washizu, Kang Kim, Nobuyuki Matubayasi	J. Chem. Phys. 162 , 054905 (2025).	令和7年 2月
40	Dislocation plasticity in c-axis nanopillar compression of wurtzite ceramics: A study using neural network potentials	Shihao Zhang, Shigenobu Ogata	J. Am. Ceram. Soc. e20406 (2025).	令和7年 2月
41	Atomistic simulation of Guinier-Preston zone nucleation kinetics in Al-Cu alloys: A neural network-driven kinetic Monte Carlo approach	Heting Liao, Jun-Ping Du, Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata	Comput. Mater. Sci. 251 , 113771 (2025).	令和7年 2月
42	Development of a force field for ATP - how charge scaling controls self-association	Tuan Minh Do, Nobuyuki Matubayasi, Dominik Horinek	Phys. Chem. Chem. Phys. 27 , 6325-6333 (2025).	令和7年 2月
43	Constant-Current Nonequilibrium Molecular Dynamics Approach for Accelerated Computation of Ionic Conductivity Including Ion-Ion Correlation	Ryoma Sasaki, Yoshitaka Tateyama, Debra J. Searles	PRX Energy 4 , 013005 (2025).	令和7年 2月
44	Ab initio path-integral simulations of hydrogen-isotope diffusion in face-centred cubic metals	Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata, Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	J. Phys.-Condens. Matter, 37 , 193001 (2025).	令和7年 3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
45	Formation of three-dimensional dislocation networks in α -iron twist grain boundaries: Insights from first-principles neural network interatomic potentials	Fan-Shun Meng, Jiu-Hui Li, Shuhei Shinzato, Kazuki Matsubara, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata	Comput. Mater. Sci. 253 , 113812 (2025).	令和7年 3月
46	Unveiling kink band formation mechanism in MAX phases	Rana Hossain, Shigenobu Ogata	commun. Mater. 6 , 51 (2025).	令和7年 3月
47	Simultaneous migration mechanism of Co-O couple toward spinel-like Co ₃ O ₄ formation on Li _x CoO ₂ surfaces	Huu Duc Luong, Zizhen Zhou, Yoshitaka Tateyama	J. Power Sources, 641 , 236854 (2025).	令和7年 3月
48	Multiplicativity in Solubility Isotherms	Seishi Shimizu, Nobuyuki Matubayasi	Ind. Eng. Chem. Res. 64 , 833-842 (2025).	令和6年 12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	First-Principles Calculation Study on Degradation-Related Phenomena around Cathode/Solid Electrolyte Interfaces in Solid-State Battery	Yoshitaka Tateyama	2024 MRS SPRING MEETING & EXHIBIT Seattle Convention Center Summit, WA, USA	令和6年 4月
2	Chemical ordering kinetics in medium entropy alloys: impact on diffusion and deformation	Shigenobu Ogata	International Workshop on Materials Behavior at Micro- and Nano-Scale Xi-an, China (Online)	令和6年 5月
3	情報科学×材料科学 人工知能で「材料の個性」の原点を探る	福島 鉄也	日本真空工業会第38回定時社員総会記念講演会 東京大神宮マツヤサロン、東京	令和6年 5月
4	結晶系およびガラス系イオン伝導体の熱力学およびダイナミクスの第一原理基シミュレーション	笠松秀輔	第25回 超イオン導電体物性研究会（第88回 固体イオニクス研究会） 松江テルサ、島根	令和6年 6月
5	磁性材料における物性データ創出とその活用	福島 鉄也	みちのく磁性談話会 東北大学、富山	令和6年 6月
6	Large-scale DFT calculations on size and site dependences of electronic structures in metallic nanoparticle catalysts	Ayako Nakata, Shengzhou Li, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	The 8th Japan-Czech-Slovakia International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS8) Hokkaido Univ., Hokkaido	令和6年 6月
7	第一原理計算が示唆する正極、固体電解質およびその界面の微視的イオン輸送機構	館山 佳尚	第421回電池技術委員会 早稲田大学、東京	令和6年 6月
8	Microscopic Elucidation of Ion Transport in Cathodes, Solid Electrolytes and Their Interfaces Via Atomistic Simulations	Yoshitaka Tateyama	IMLB2024 (The 22nd International Meeting on Lithium Batteries) AsiaWorld Expo., Hong Kong	令和6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	Microscopic Elucidation of Battery “Interfaces” and “Ionics” Via Atomistic Simulations	Yoshitaka Tateyama	Kick-off Meeting of JST ASPIRE project - International Collaboration Network for Innovative Battery Technology and Net-Zero Society- Waseda University, Tokyo	令和6年6月
10	High-Throughput DFT-level Self-Diffusion Coefficient Calculation for Na-ion Sulfide SEs + Electronic States Discussion	Yoshitaka Tateyama	Workshop bridging between theory and experiment on all-solid-state battery materials Suzukake-dai campus, Tokyo Institute of Technology, Kanagawa	令和6年6月
11	Atomistic Simulation of Chemical Ordering in Medium Entropy Alloys Driven by Neural Networks: Formation Kinetics and Impact on Mechanical and Diffusion Properties	Shigenobu Ogata, Junping Du, Yangen Li	WCCM2024 Vancouver, Canada	令和6年7月
12	蓄電池内部のカチオンダイナミクスに関する高度分子動力学シミュレーション	館山 佳尚	令和6年度中性子産業利用報告会 秋葉原、東京	令和6年7月
13	Nanometer-size Na cluster formation in micropore of hard carbon suggested by DFT calculations	Yoshitaka Tateyama	UK-Japan Next-Generation Batteries Seminar King's College London, London, UK	令和6年7月
14	ATOMISTIC MODELING OF HYDROGEN IMPACT ON METALS	Shigenobu Ogata	ICES2024 Marina Bay Sands Expo & Convention Centre, Singapore	令和6年8月
15	固体イオニクスと計算物質科学	笠松秀輔	第9回東北イオニクス研究会合同ゼミ合宿 鳴子観光ホテル、宮城	令和6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
16	On-Lattice Machine Learning Model for Lattice Monte Carlo Simulations of Complex Oxides with First-Principles Accuracy	Shusuke Kasamatsu	XXth Rencontres du Vietnam: Materials Informatics: Accelerating Materials Research and Design with Artificial Intelligence, ICISE, Quy Nhon, Vietnam	令和6年 8月
17	第一原理計算による磁性材料データの創出とその活用	福島 鉄也	NIMS 磁石パートナーシップ 第12回磁石研究会 オンライン	令和6年 8月
18	Large-scale Quantum Chemical Calculation with Divide-and-conquer Method and Analysis of Reaction Network	小林 正人	1st SmoleQ Meeting アクトシティ浜松、静岡	令和6年 8月
19	Acceleration and Analysis of Molecular Dynamics Simulation using Machine Learning	Kenji Yasuoka	2024 ATOMS Seminar Series (Universidade Federal do Rio de Janeiro) Online	令和6年 8月
20	Microscopic electrochemistry for interface ionics based on DFT calculation	Yoshitaka Tateyama	Workshop on Interfacial Chemistry and Charge Transfer for Energy Storage and Conversion Telluride, CO, USA	令和6年 8月
21	2分子反応理論と分子動力学シミュレーションによる分子会合過程の物理化学的解析	笠原 健人	日本物理学会第79回年次大会 北海道大学、北海道	令和6年 9月
22	Transport phenomena in complex systems elucidated using molecular dynamics simulations and bimolecular reaction theory	Kento Kasahara	AMDP2024 徳島大学、徳島	令和6年 9月
23	Bi(Fe, Co)O _x における超軌道分裂の理論的アプローチ	福島 鉄也	強制的秩序とその操作に関わる夏の学校 あいぽーと佐渡、新潟	令和6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
24	量子化学計算の展開：超大規模計算とハイスループット計算	小林 正人	令和6年度化学系学協会東北大会 秋田大学、秋田	令和6年 9月
25	ハイスループット計算とデータ科学による触媒・電極の反応機構解析と活性予測	小林 正人	第134回触媒討論会 名古屋大学、愛知	令和6年 9月
26	Strain Effects on Li-ion Transport around Cathode-Coating Interfaces: A DFT Study	Yoshitaka Tateyama	The 14th Japan-France Joint Meeting on Battery Matsue, Shimane	令和6年 9月
27	計算科学に基づいたデータ統合型磁性材料開発	三宅 隆	日本金属学会 2024 秋期講演大会 大阪大学、大阪	令和6年 9月
28	abICS Framework for ab initio Statistical Thermodynamics of Complex Oxides Accelerated by Machine Learning	Shusuke Kasamatsu	MS&T 2024, David L. Lawrence Convention Center, Pittsburgh, PA, USA	令和6年 10月
29	Discovery of unconventional proton-conducting oxides: computational screening and interpretable machine learning based on defect chemistry	Susumu Fujii, Yuta Shimizu, Junji Hyodo, Akihide Kuwabara, Yoshihiro Yamazaki	The Fourteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC14) 東京科学大学すずかけ台キャンパス、神奈川	令和6年 10月
30	Recent advances in divide-and-conquer quantum chemistry: toward large scale and beyond	Masato Kobayashi	11th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-2024) Qingdao, China	令和6年 10月
31	Concerted Phenomena on Chemical Reactions at Nano-Scale and Mechanics at Meso-Scale in Friction and Wear Processes Revealed by Large-Scale Molecular Dynamics Simulations	Momiji Kubo	11th Congress of International Society of Theoretical Chemical Physics Qingdao, China	令和6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
32	All-Atom Energetics of Cosolvent Effects on Peptide Aggregation	Tuan Minh Do, Dominik Horinek, Nobuyuki Matubayasi	第46回溶液化学シンポジウム 千葉大学、千葉	令和6年 10月
33	All-Atom Analysis of Crystal Growth and Its Modulation By MD Simulation and Free-Energy Calculation	Nobuyuki Matubayasi	2024 AIChE Annual Meeting San Diego Convention Center, USA	令和6年 10月
34	A Methodology of Quantifying Membrane Permeability Based on Returning Probability Theory and Molecular Dynamics Simulation	Kento Kasahara, Nobuyuki Matubayasi	2024 AIChE Annual Meeting San Diego Convention Center, USA	令和6年 10月
35	環状高分子のトポロジカルガラス	金 鋼	第36回高分子加工技術討論会 名古屋市工業研究所、愛知	令和6年 10月
36	ミクロとマクロをつなぐ『かたち』	赤木 和人	数学と材料科学 2024 東北大学青葉山キャンパス、宮城	令和6年 10月
37	A methodology of quantifying membrane permeability based on bimolecular reaction theory	Kento Kasahara	Physical chemistry seminar University of California Riverside, USA	令和6年 11月
38	強相関材料の電子状態と伝導特性を計算可能な第一原理計算コードの開発とBi(Fe, Co)O _x への適用	福島 鉄也	第18回物性科学領域横断研究会 神戸、兵庫	令和6年 11月
39	Mechanical Response Mechanisms during Compression Fracture of Polymer Particles	藤本 和士	Summit of Materials Science 2024 and GIMRT User Meeting 2024 Tohoku University, Miyagi	令和6年 11月
40	高分子材料系の分子シミュレーション	藤本 和士	日本化学会 新領域研究グループ「分子統計化学の開拓」研究会 愛媛大学、愛媛	令和6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
41	Molecular Simulation and Machine Learning for Friction Mechanism	Kenji Yasuoka	France-Japan CREST Workshop on Nanomechanics, Multiscale Mechanics and Tribology LTDS, Ecole centrale de Lyon, France	令和6年11月
42	機械学習を活用した高分子シミュレーションの基礎と応用	泰岡 顕治	高分子学会 24-1 高分子計算機科学研究会 オンライン	令和6年11月
43	Theoretical elucidation of microscopic Na-ion state/dynamics in NIB electrodes and (solid) electrolyte	Yoshitaka Tateyama	The 9th International Conference on Sodium Batteries (ICNaB) Richland, WA, USA	令和6年11月
44	Interface Chemistry and Ion Transport in Solid-State Battery Materials by Advanced DFT-based Calculations	Yoshitaka Tateyama	The 8th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment (ENGE2024) Jeju Shinhwa World, Jeju, Korea	令和6年11月
45	Multi-Scale Simulations for Interfacial Electrochemical Processes	Minoru Otani	12th Singapore International Chemistry Conference(SICC-12) Singapore Expo, Singapore	令和6年12月
46	第一原理計算に基づく点欠陥の熱平衡濃度解析とその応用例	小川 貴史、田口 綾子、フィッシャー クレイグ、森分 博紀、桑原 彰秀	第34回日本MRS年次大会 横浜市開港記念会館、神奈川	令和6年12月
47	第一原理計算を用いた磁性材料探索	福島 鉄也	阪大スピントロニクスセンター研究会 大阪大学、大阪	令和6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
48	有限温度における磁気緩和定数の第一原理計算	平松 諒也	阪大スピントロニクスセンサー研究会 大阪大学、大阪	令和6年 12月
49	RE2Fe14Bにおける結晶磁気異方性定数の第一原理計算	奥村 晴紀	阪大スピントロニクスセンサー研究会 大阪大学、大阪	令和6年 12月
50	格子振動および磁気励起を考慮した第一原理計算における二元合金の磁気特性	北 玲男	阪大スピントロニクスセンサー研究会 大阪大学、大阪	令和6年 12月
51	First-principles study on anomalous temperature-dependent transport properties	新屋 ひかり	阪大スピントロニクスセンサー研究会 大阪大学、大阪	令和6年 12月
52	高分子材料系の大規模全原子分子動力学シミュレーションの実践的研究	藤本 和士	第38回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和6年 12月
53	大規模DFT計算と統計解析による担持金属ナノ粒子触媒の活性サイト探索	中田 彩子	令和6年度触媒学会コンピュータの利用研究会セミナー 東北大学東京オフィス会議室A, 東京	令和6年 12月
54	Advanced MD Study on Ion Transport in Battery Solid Electrolyte	Yoshitaka Tateyama	2024 Taiwan-Japan Joint Symposium ~ Beyond our Future with People, Intelligence and Materials Nishijin Plaza, Kyusyu Univ. Fukuoka	令和6年 12月
55	第一原理計算による磁性材料探索	福島 鉄也	マグノン・フォノン研究会 ホテル大野屋、静岡	令和7年 1月
56	データ創出・活用型磁性材料研究	三宅 隆	マグノン・フォノン研究会 ホテル大野屋、静岡	令和7年 1月
57	強磁性半導体の有限温度特性	新屋 ひかり	マグノン・フォノン研究会 ホテル大野屋、静岡	令和7年 1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
58	Analysis of electronic structures in large systems by large-scale DFT and machine learning (tentative)	Ayako Nakata, Shengzhou Li, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP2025) RIKEN, hyougo	令和7年 1月
59	Solvent-composition dependence of equilibria in solution: linear and nonlinear regimes	Nobuyuki Matubayasi	Sugadaira Winter Workshop 2025 on "The role of fluctuations and dynamics in bio and soft matter" Sugadaira, Nagano	令和7年 1月
60	Microscopic Ion Transport Mechanism in Cathodes, Solid Electrolytes and Their Interfaces Via Atomistic Simulations	Yoshitaka Tateyama	Advanced Green-Energy Materials Conference (AGEM) National Cheng Kung University, Taiwan	令和7年 1月
61	分子シミュレーションと2分子反応理論の連携による 会合動力学の系統的解析	笠原 健人	Koopman 作用素周辺の理論・データ解析研究会 オンライン	令和7年 2月
62	非従来型イオン伝導体から探る高イオン伝導性への展望	桑原彰秀、小川貴史、イ・ギョンソ、設楽一希、森分博紀	日本セラミックス協会2025年年会 サテライトプログラム 材料特性と構造研究会「イオン伝導体の現状と将来展望」 静岡大学浜松キャンパス、静岡	令和7年 3月
63	第一原理計算を用いた酸化物界面の電子論的研究	福島 鉄也、 新屋 ひかり	強的秩序とその操作に関わる夏の学校 東京大学、東京	令和7年 3月
64	Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Chemical-Reaction-Induced Fracture and Wear Processes at Solid-Liquid Interface	Momiji Kubo	Joint March Meeting and April Meeting: Global Physics Summit 2025 Anaheim, USA	令和7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
65	Interface Chemistry and Ion Transport in Battery Materials by Advanced DFT-based Calculations	Yoshitaka Tateyama	Understanding Surfaces and Interfaces: A Symposium Celebrating 7 Decades of Service (of Prof. Michael L. Klein), Kyoto Campus, Temple University Japan, Kyoto	令和7年 3月
66	All-Atom Energetics of Cosolvent Effects on Peptide Aggregation	Nobuyuki Matubayasi	Understanding Surfaces and Interfaces: A Symposium Celebrating 7 Decades of Service Temple University Japan, Kyoto	令和7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	All-Atom Energetics of Cosolvent Effects on Peptide Aggregation	Tuan Minh Do, Dominik Horinek, and Nobuyuki Matubayasi	第 26 回理論化学討論会 筑波大学、茨城	令和 6 年 5 月
2	機械学習分子動力学法に基づいたハイエントロピー合金における応力腐食割れに対する Al 添加の影響	福島 省吾、中島 快、 工藤 龍太郎、大谷 優 介、尾澤 伸樹、久保 百 司	日本コンピュータ化学会 2024 春季年会 東京工業大学、東京	令和 6 年 6 月
3	機械学習ポテンシャル分子動力学法による水環境下 CrMnFeCoNi 合金の引張シミュレーション	中島 快、工藤 龍太 郎、蘇 怡心、福島 省 吾、大谷 優介、尾澤 伸 樹、久保 百司	日本コンピュータ化学会 2024 春季年会 東京工業大学、東京	令和 6 年 6 月
4	Heterogeneous Molecular Dynamics in Quasi-liquid Layers of Ice Surface Using Molecular Dynamics Simulation	Ikki Yasuda, Katsuhiro Endo, Noriyoshi Arai, Kenji Yasuoka	18th International Conference on the Properties of Water and Steam Boulder, USA	令和 6 年 6 月
5	Graph Neural Network Based Parameter Design Method for Liquid, Ice, and Clathrate Hydrate Phase Analysis”	Satoki Ishiai, Katsuhiro Endo, Paul E. Brumby, Amadeu K. Sum, Kenji Yasuoka	18th International Conference on the Properties of Water and Steam Boulder, USA	令和 6 年 6 月
6	Ab Initio Statistical Thermodynamics of Dopant Segregation and Space Charge Formation at Metal/Ionic Conductor Interfaces	Shusuke Kasamatsu, Tatsumi Aoyama, Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi	24th International Conference on Solid State Ionics Queen Elizabeth II Centre, London	令和 6 年 7 月
7	分子動力学計算によるトリアシルグリセロールの物性と分子構造の関係	藤本 和士、北村 勇稀、 目時 潤也、岸 健汰、 辻野 祥伍、吉村 和馬、 平井 浩	日本食品科学工学会第 71 回大会 名城大学、愛知 ※台風のため、オンライ ンのみに	令和 6 年 8 月
8	証拠理論とハイスループット DFT 計算による C2 選択的 eCO2RR 多元合金の探索	黒田文彬、井部将也、大 谷実	第 79 回日本物理学会 北海道大学、北海道	令和 6 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
9	Al(111)表面におけるバイアス電位に依存した表面応力の第一原理計算	萩原聡, 石橋章司, 大谷実	第79回日本物理学会 北海道大学、北海道	令和6年 9月
10	A neural network interatomic potential study of α -Fe-C binary system	Fanshun Meng, Junping Du, Shuhei Shinzato, Kazuki Matsubara, Shigenobu Ogata	MMM11 Prague, Czech Republic	令和6年 9月
11	Machine learned interatomic potential for atomic simulation of dislocation plasticity in ceramics	Shihao Zhang, Shigenobu Ogata	MMM11 Prague, Czech Republic	令和6年 9月
12	(Ba, Ca)F ₂ フッ化物イオン伝導体の第一原理計算	小川 貴史, 佐藤 和之, 森 一広, 小林 俊介, 森分 博紀, 幾原 雄一, 桑原 彰秀	日本セラミックス協会 第37回秋季シンポジウム 名古屋大学東山キャンパス、愛知	令和6年 9月
13	CrMnFeCoNiAl _x ハイエントロピー合金に対する機械学習ポテンシャルの構築と分子動力学法に基づいた引張シミュレーション	福島 省吾, 中島 快、大谷 優介、尾澤 伸樹、久保 百司	金属学会 大阪大学豊中キャンパス、大阪	令和6年 9月
14	機械学習分子動力学法によるCrMnFeCoNi系ハイエントロピー合金の応力腐食割れに対する組成依存性の解析	中島 快、福島 省吾、蘇 怡心、大谷 優介、尾澤 伸樹、久保 百司	金属学会 大阪大学豊中キャンパス、大阪	令和6年 9月
15	RE ₂ Fe ₁₄ Bにおける磁化容易軸の第一原理計算	奥村 晴紀	日本金属学会 2024年秋季公演大会 大阪大学、豊中	令和6年 9月
16	Epitaxial growth and characterization of superconducting Al thin films grown on strained ferromagnetic semiconductor (In, Fe)As	Hiroataka Hara, Keita Ishihara, Le Duc Anh, Hikari Shinya, Hiroshi Katayama-Yoshida, Masaaki Tanaka	International Conference on Molecular-Beam Epitaxy (ICMBE) 2024 Matsue, Shimane	令和6年 9月
17	L10秩序合金/2次元物質界面の原子スケール構造の第一原理計算	遠藤 竜佑、植本 光治、松本 尚弥、ヴェルガラ サミュエル、新屋 ひかり、永沼 博、小野 倫也	2024年第85回応用物理学会秋季学術講演会 新潟	令和6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
18	高分子溶融体におけるシアシニングの鎖剛性依存性とその分子論的理解	金 鋼、坂巻 雄飛、後藤 頌太、松林 伸幸	日本物理学会第 79 回年次大会 北海道大学、北海道	令和 6 年 9 月
19	環状高分子の絡み合いに関するパーシステントホモロジー解析	後藤 頌太、中村 壮伸、Davide Michieletto、金 鋼、松林 伸幸	日本物理学会第 79 回年次大会 北海道大学、北海道	令和 6 年 9 月
20	ゆらぐ脂質膜界面近傍にある水和構造とダイナミクス解析手法の開発	四方 志、笠原 健人、金 鋼、松林 伸幸	日本物理学会第 79 回年次大会 北海道大学、北海道	令和 6 年 9 月
21	パーシステントホモロジーと機械学習による GeO ₂ ガラスの中距離秩序解析	松谷 健太、笠松 秀輔、白杵 毅	日本物理学会 第 79 回年次大会 北海道大学、北海道	令和 6 年 9 月
22	機械学習力場による超イオン伝導ガラス AgI-As ₂ Se ₃ のイオンダイナミクス解析	荒川 泰政、笠松 秀輔、白杵毅	日本物理学会 第 79 回年次大会 北海道大学、北海道	令和 6 年 9 月
23	ポリマー系における溶解と相溶性の全原子解析	松林 伸幸	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
24	分子シミュレーションによる機能性高分子近傍にある水分子の水素結合状態の解明	金 鋼、四方 志、菊辻 卓真、八十島 亘宏、松林 伸幸	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
25	All-atom molecular dynamics study of the antifouling mechanism of hydrophilic polymer brushes	Takuma Yagasaki and Nobuyuki Matubayasi	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
26	分子シミュレーションに基づくアニオン交換膜のイオン輸送特性に関する動力学解析	笠原 健人、奈良 悠里、金 鋼、松林 伸幸、八木 清、田中 学	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
27	全原子分子動力学シミュレーションによる高分子微粒子圧縮破壊時の力学応答メカニズムの解明	高橋 一輝、稗田 吉希、加藤 稔、藤本 和士	第 36 回 高分子加工技術討論会 名古屋市工業研究所、愛知	令和 6 年 10 月
28	膜透過過程を記述する理論的手法の開発	笠原 健人、松原 優弥、岡部 涼、松林 伸幸	第 46 回溶液化学シンポジウム 千葉大学、千葉	令和 6 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
29	ゆらぐ脂質膜界面近傍の水和水へコレステロールが与える影響の分子動力学解析	四方 志、笠原 健人、金鋼、松林 伸幸	第 46 回溶液化学シンポジウム 千葉大学、千葉	令和 6 年 10 月
30	Composition Dependence on Stress Corrosion Cracking of CrMnFeCoNi-based High Entropy Alloys by Machine Learning Molecular Dynamics Simulation	Kai Nakajima, Shogo Fukushima, Yixin Su, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo	WINDS2024 Fairmont Orchid, Hawaii, USA	令和 6 年 12 月
31	全原子分子動力学シミュレーションによる 高分子微粒子圧縮破壊時の応力応答と分子メカニズムの解明	高橋 一輝、稗田 吉希、加藤 稔、保田 侑亮、藤本 和士	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
32	レプリカ交換法の最適化：一次相転移への大規模並列計算のアプローチ	小和口昌愛, Paul E. Brumby, 泰岡顕治	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
33	全原子ならびに粗視化シミュレーションによる親水高分子ブラシの防汚性の研究	矢ヶ崎 琢磨、松林 伸幸	第 38 回分子シミュレーション討論会 姫路市文化コンベンションセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
34	二分子反応理論に基づく膜透過現象の動力学解析	笠原 健人、松原 優弥、岡部 涼、松林 伸幸	第 38 回分子シミュレーション討論会 姫路市文化コンベンションセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
35	GPU によるエネルギー表示法プログラム ERmod の高速化	丸山 豊、松林 伸幸	第 38 回分子シミュレーション討論会 姫路市文化コンベンションセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
36	機械学習分子動力学法で見る超イオン伝導ガラス AgI-As ₂ Se ₃ の構造とイオンダイナミクス	荒川 泰政、笠松 秀輔、白杵毅	第 49 回固体イオニクス討論会 千里ライフサイエンスセンター、大阪	令和 6 年 12 月
37	全原子モデルを用いたポリマー相溶性の自由エネルギー解析	松林 伸幸	第 12 回ソフトマター研究会 大阪大学基礎工学部シグマホール、大阪	令和 6 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
38	Study on Elucidating the Physical Properties of Spintronics Materials	新屋 ひかり	「スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク（Spin-RNJ）」シンポジウム / Spin-RNJ 2024 年度報告会 大阪大学、大阪	令和7年 2月
39	固体電解質中のイオンダイナミクスのトポロジカルデータ解析	赤木 和人	第72回応用物理学会 春季学術講演会 東京理科大学野田キャンパス、千葉	令和7年 3月
40	全原子分子シミュレーションによる高分子微粒子の圧縮破壊と領域依存性の解明	高橋 一輝、稗田 吉希、 加藤 稔、保田 侑亮、 藤本 和士	日本化学会第105春季年会 関西大学、大阪	令和7年 3月
41	「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）成果報告	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」第2回合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和7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
42	有限温度における磁気緩和定数の第一原理計算とデータ蓄積	平松 諒也	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」第2回合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和7年 3月
43	バイアス電圧に依存した表面応力計算手法の開発とその適用	萩原 聡	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」第2回合同公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和7年 3月
44	First-principles study of finite-temperature magnetic properties of binary alloys	Reo Kita, Taro Fukazawa, Takashi Miyake, Tetsuya Fukushima	APS March meeting 2025 Anaheim, USA	令和7年 3月
45	溶媒自由エネルギー計算に基づく構造エントロピーの厳密な計算方法	加地 涼真、Stefan Hørvø-Hansen、松林 伸幸	日本化学会 第105春季年会(2025) 関西大学 千里山キャンパス、大阪	令和7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	機械学習力場を用いた大規模シミュレーションによる銀イオン伝導ガラス AgI-As ₂ Se ₃ のイオンダイナミクス解析	荒川 泰政、笠松 秀輔、白杵 毅	物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の現在と未来」 東京大学 物性研究所、千葉	令和6年 4月
2	Investigation of the first sharp diffraction peak in GeO ₂ glass based on persistent homology analysis and machine learning techniques	Kenta Matsutani, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	2024 Glass & Optical Materials Division Annual Meeting, Las Vegas, USA	令和6年 5月
3	Ab initio DC-PBC 法：アモルファスの機能発現を解明する計算化学プラットフォームの確立	小川 絃、西田 叡倫、赤間 知子、小林 正人、武次徹也	第26回理論化学討論会 筑波大学、茨城	令和6年 5月
4	中性アミノ酸側鎖類似分子の PHEMA ブラシに対する吸着挙動の解析	一井 桜、矢ヶ崎 琢磨、松林 伸幸	第26回理論化学討論会 筑波大学、茨城	令和6年 5月
5	First-principles study of magnetocrystalline anisotropy in Nd ₂ Fe ₁₄ B	奥村 晴紀	International Conference on Magnetism 2024 ボローニャ、イタリア	令和6年 6月
6	DC-xTB-MD: A general-purpose, enormously large-scale quantum chemical calculation method	Masatsugu Nishida, Kotaro Fujiwara, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry 北海道大学、北海道	令和6年 6月
7	Enhanced MD-GAN for Stable Prediction of Molecular Dynamics Simulation Data	Kota Sakaki, Katsuhiko Endo, Kenji Yasuoka	18th International Conference on the Properties of Water and Steam Boulder, USA	令和6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
8	Ion Dynamics Analysis of Superionic Conducting Glass AgI-As ₂ Se ₃ by Machine Learning Force Field	Taisei Arakawa, Shusuke Kasamatsu, Takeshi Usuki	24th International Conference on Solid State Ionics Queen Elizabeth II Centre, London	令和6年 7月
9	Accurate atomistic study on hydrogen solubility in α -iron at high H ₂ pressures	Shihao Zhu, Fanshun Meng, Shihao Zhang, Shigenobu Ogata	ICCES2024 Marina Bay Sands Expo & Convention Centre, Singapore	令和6年 8月
10	Theoretical study on hydrogen diffusion influenced screw dislocation motion in body-centered cubic iron	Jiaqin Xu, Shuhei Shinzato, Fanshun Meng, Shigenobu Ogata	ICCES2024 Marina Bay Sands Expo & Convention Centre, Singapore	令和6年 8月
11	Theoretical prediction of lifetime in graphene under cyclic loading	Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata	ICCES2024 Marina Bay Sands Expo & Convention Centre, Singapore	令和6年 8月
12	Chemical ordering effect on self-interstitial and vacancy diffusion in CrCoNi medium entropy alloy	Yangen Li, Shigenobu Ogata	MMM11 Prague, Czech Republic	令和6年 9月
13	欠陥化学計算と機械学習による非従来型プロトン伝導性酸化物の発見	藤井 進、清水 雄太、兵頭 潤次、桑原 彰秀、山崎 仁丈	第18回固体イオニクスセミナー 筑波山ホテル青木屋、茨城	令和6年 9月
14	Bi(Fe,Co)O _x における超軌道分裂の理論的アプローチ	福島 鉄也	第85回応用物理学会秋季学術講演会 朱鷺メッセ、新潟	令和6年 9月
15	全原子分子動力学シミュレーションによる高分子微粒子圧縮破壊時の力学応答メカニズムの解明	高橋 一輝、稗田 吉希、加藤 稔、藤本 和士	第73回 高分子討論会 新潟大学、新潟	令和6年 9月
16	機械学習ポテンシャルを用いた超イオン伝導ガラス AgI-As ₂ 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18回 固体イオニクスセミナー 筑波山ホテル青木屋、茨城	令和6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	環状高分子の絡み合いに関するパーシステントホモロジー解析	後藤 頌太、中村 壮伸、Michieletto Davide、金 鋼、松林 伸幸	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
18	ゆらぐ脂質膜界面近傍にある水和構造とダイナミクスの分子動力学解析	四方 志、笠原 健人、金 鋼、松林 伸幸	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
19	含水した親水性高分子系での水分子に関する分子動力学解析	橋本 貴欣、四方 志、金 鋼、松林 伸幸	第 73 回高分子討論会 新潟大学、新潟	令和 6 年 9 月
20	DC-MP2-PBC: Fast and accurate quantum chemical calculation for large-scale periodic systems	Gen Ogawa, Masatsugu Nishida, Tomoko Akama, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	11th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-2024) Qingdao, China	令和 6 年 10 月
21	DC-PUHF: Toward large-scale quantum chemical calculation including static correlation	Masatsugu Nishida, Sosei Kasaya, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	11th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-2024) Qingdao, China	令和 6 年 10 月
22	大規模系の静的電子相関を記述する分割統治射影 UHF 法の開発	笠谷 颯生、西田 叡倫、小林 正人、武次 徹也	日本コンピュータ化学会 2024 秋季年会 室蘭、北海道	令和 6 年 10 月
23	拡散ダイナミクスを予測する機械学習モデルの改良	榑光太、遠藤克浩、泰岡 顕治	水・蒸気性質シンポジウム 2024 東京	令和 6 年 10 月
24	Large-Scale DFT Calculations on Size and Site Dependences of Atomic and Electronic Structures in Metallic Nanoparticle Catalysts	Ayako Nakata, Shengzhou Li, Tsuyoshi Miyazaki	PRiME2024 Hawaii Convention Center. Honolulu, USA	令和 6 年 10 月
25	高分子溶融体の分子形状解析によるシアシニングの理解	坂巻 雄飛、後藤 頌太、金 鋼、松林 伸幸	第 72 回レオロジー討論会 山形テルサ、新潟	令和 6 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
26	水中の PHEMA ブラシに対する中性アミノ酸側鎖類似分子の吸着挙動解析	一井 桜、矢ヶ崎 琢磨、松林 伸幸	水・蒸気性質シンポジウム 2024 慶應義塾大学、東京	令和 6 年 10 月
27	DC-MP2-PBC : アモルファス材料への量子化学的アプローチ	小川 紘、西田 叡倫、赤間 知子、小林 正人、武次 徹也	第 18 回物性科学領域横断研究会 神戸、兵庫	令和 6 年 11 月
28	スピン揺らぎを踏まえた磁気特性の第一原理計算	平松 諒也	データ創出・活用型磁性材料研究拠点 第 5 回成果報告会 NIMS、茨城	令和 6 年 12 月
29	2-14-1 系における結晶磁気異方性定数の第一原理計算	奥村 晴紀	データ創出・活用型磁性材料研究拠点 第 5 回成果報告会 NIMS、茨城	令和 6 年 12 月
30	第一原理計算における有限温度下の二元合金の磁気特性	北 玲男	データ創出・活用型磁性材料研究拠点 第 5 回成果報告会 NIMS、茨城	令和 6 年 12 月
31	全原子分子動力学シミュレーションによる高分子微粒子圧縮破壊時の力学応答メカニズムの解明	高橋 一輝、稗田 吉希、加藤 稔、保田 侑亮、藤本 和士	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
32	分子動力学計算による油脂の物性の比較解析	北村 勇稀、目時 潤也、岸 健汰、辻野 祥伍、吉村 和馬、平井 浩、藤本 和士	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
33	daisy chain 擬ロタキサンの会合メカニズムおよび安定性の解明	後藤 亨佑、保田 侑亮、津田 進、西山 豊、藤本 和士	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
34	機械学習による拡散ダイナミクスの予測	榊光太、遠藤克浩、泰岡 顕治	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 年 12 月
35	分子動力学シミュレーションを用いたゴム-氷界面のプレメルト層の解析	小島拓海、安田一希、佐藤碧海、荒井規允、泰岡 顕治	第 38 回分子シミュレーション討論会 アクリエひめじ、兵庫	令和 6 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
36	トポロジカルガラスの起源解明： 環状高分子に対するパーシステントホモロジー解析	後藤 頌太、中村 壮伸、 Michieletto Davide、金 鋼、松林 伸幸	第 38 回分子シミュレー ション討論会 姫路市文化コンベンショ ンセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
37	水中の PHEMA ブラシに対する中性 アミノ酸側鎖類似分子の吸着挙動 解析	一井 桜、矢ヶ崎 琢磨、 松林 伸幸	第 38 回分子シミュレー ション討論会 姫路市文化コンベンショ ンセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
38	生体応用される含エーテル基親水 性高分子と水素結合する水分子に 関する分子動力学解析	橋本 貴欣、四方 志、金 鋼、松林 伸幸	第 38 回分子シミュレー ション討論会 姫路市文化コンベンショ ンセンター、兵庫	令和 6 年 12 月
39	流体効果のある高分子集合系の粗 視化分子動力学シミュレーション	林 真史、坂巻 雄飛、後 藤 頌太、金 鋼、松林 伸幸、杉山 和靖	第 12 回ソフトマター研究 会 大阪大学基礎工学部シグ マホール、大阪	令和 6 年 12 月
40	生体適合性材料に応用される高分 子と水素結合する水分子の分子動 力学解析	橋本 貴欣、四方 志、金 鋼、松林 伸幸	第 12 回ソフトマター研究 会 大阪大学基礎工学部シグ マホール、大阪	令和 6 年 12 月
41	分子動力学計算による油脂の物性 の比較解析	北村 勇稀、目時 潤也、 岸 健汰、辻野 祥伍、吉 村 和馬、平井 浩、藤本 和士	第 4 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 7 年 2 月
42	All-atom and coarse-grained molecular dynamics study of the antifouling mechanism of hydrophilic polymer brushes	Takuma Yagasaki	第 4 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 5 階アキバホール、東京	令和 7 年 2 月
43	機械学習力場で見える超イオン伝導 ガラス AgIAs ₂ Se ₃ の構造とイオン ダイナミクス	荒川 泰政、笠松 秀輔、 臼杵 毅	JST 創発的研究支援事業 自発的融合の場 『第 2 回 材料への新規解 析・計測手法の適用』 ひびき野、群馬	令和 7 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
44	全原子分子シミュレーションによる高分子微粒子の脆性破壊と局所分子配向の解明	高橋 一輝、稗田 吉希、 保田 侑亮、加藤 稔、 藤本 和士	精密ネットワークポリマー研究会 第18回若手シンポジウム 早稲田大学、東京	令和7年 3月
45	Comprehensive Analysis of Polyethylene Glycol Solvation: Structural Insights, a Novel BAR-Based Framework, and Kirkwood-Buff Theory	Stefan Hervø-Hansen, Kazuya Okita, Kento Kasahara, Jakub Polák, Zuzana Součková, Daniel Ondo, Jan Heyda, Nobuyuki Matubayasi	凝縮系の理論化学 2025 沖縄県市町村自治会館、 沖縄	令和7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	脂質膜に含まれる水分子がコレステロールにより強く束縛されるメカニズムを解明 ～ゆらぐ膜での水分子の動きを知るシミュレーション手法を開発～	金 鋼	大阪大学、日本の研究.com	令和6年 7月
2	フッ化物イオン電池向け固体電解質における同価数の陽イオン混合によるイオン伝導度向上のメカニズムを解明 ～新たな材料設計指針に基づく次世代蓄電池の開発を加速～	小川 貴史、佐藤 和之、森 一広	ファインセラミックセンター、高エネルギー加速器研究機構、京都大学、Science Portal、日本の研究.com、テック・アイ技術情報研究所、Nanoniele	令和6年 11月
3	非平衡理論を駆使しイオン伝導度計算の高速高精度化に成功 ～次世代電池材料の開発を加速～	佐々木 遼馬	東京科学大学、JST、日本の研究.com、テック・アイ技術情報研究所、ニッポンふるさとプレス	令和7年 2月
4	AIを活用し化学反応の理解を自動化する仕組みを開発 ～深層学習による反応機構の解明をより容易に～	金 鋼	大阪大学、九州大学、分子科学研究所、日本の研究.com	令和7年 3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
06	なし							