

平成 30 年度 文部科学省

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する
アプリケーション開発・研究開発

平成 30 年度

「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、
利用の新規基盤技術の開発」

成果報告書

令和元年 5 月 31 日

大学共同利用機関法人自然科学研究機構

分子科学研究所

岡崎 進

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所が実施した平成30年度「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」の成果を取りまとめたものです。

目次

1. 委託業務の題目	1
2. 実施機関（代表機関）	1
3. 委託業務の目的	1
4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容	1
4-1. 実施計画	1
4-2. 実施内容（成果）	5
4-2-1. 全体概要	5
4-2-2. サブ課題 A 新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー	8
4-2-3. サブ課題 B エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー	20
4-2-4. サブ課題 C エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー	34
4-2-5. 基盤アプリ設計・開発	49
4-2-6. プロジェクトの企画・改善提案	56
4-2-7. プロジェクトの総合的推進	56
4-3. 活動（研究会等）	59
4-4. 実施体制	61
別添 1 学会等発表実績等	
別添 2 実施計画	

1. 委託業務の題目

「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」

2. 実施機関（代表機関）

代 表 機 関	機関名	大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所					
	所在地	〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中 38 番地					
	課題 責任者	ふりがな 氏 名	おかざき すすむ 岡崎 進	生年 月日	西暦 1954年 9月 9日 (64 歳) ※2019年 4月 1日現在		
		所属部署名	理論・計算分子科学研究領域	役職	教授		
		連絡先	Tel. 0564-55-7460 Fax. 0564-54-2254 E-mail okazaki@ims.ac.jp				
	事務 連絡 担当者	ふりがな 氏 名	しまだ まさあき 嶋田 匡晃	/			
		所属部署名	国際研究協力課産学連携係			役職	係長
		連絡先	Tel. 0564-55-7134 Fax. 0564-55-7119 E-mail r7136@orion.ac.jp				

3. 委託業務の目的

本委託業務では、ポスト「京」を活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の重点課題⑤ エネルギー問題の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発に取り組み、世界を先導する成果を創出することを目的として、産学官共同研究体制の下、我が国における物質にかかわる計算科学の総力をあげてエネルギーの高効率な“創出”、“変換・貯蔵”、“利用”の新規基盤技術の開発を行う。本業務は、以下の3つのサブ課題で構成する：サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保、サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵、サブ課題C エネルギー・資源の有効利用。

このため、大学共同利用機関法人自然科学研究機構を代表機関とし、国立大学法人神戸大学、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人東京大学大学院工学系研究科、国立大学法人東京大学物性研究所、国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人名古屋大学大学院工学研究科、国立大学法人岡山大学、国立大学法人北海道大学、及び学校法人早稲田大学を分担機関として本業務を実施する。

4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容

4-1. 実施計画

①サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー（再委託先：国立大学法人神戸大学、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人東京大学大学院工学系研究科）

イ) 光合成シミュレータの開発（再委託先：国立大学法人神戸大学）

GELLAN量子化学プログラムをベースとした光合成シミュレータでPHF法とモデル空間量子モンテカルロ法による強相関ソルバーとアルゴリズムの高度化を行い、多核遷移金属錯体を用いた検

証を行う。さらに、出口研究に向けた半導体光触媒に関するバンドアラインメントとキャリア特性の応用計算を実施する。

ロ) 太陽電池シミュレータの開発 (再委託先: 国立研究開発法人理化学研究所)

数千~1万原子から成る大規模な分子系の励起状態計算の実現に向けて、昨年度までに開発した基底状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムと太陽電池シミュレータを高度化する。また励起状態計算に対しても、メモリ分割版プログラムの高度化に着手する。更に、有機系太陽電池のエネルギー変換機構を解明するための手法や非断熱励起状態ダイナミクス、およびそれらのためのプログラムの高度化作業を実施する。加えて、有機系太陽電池のキーとなる電荷移動状態を正確に表現することができる新たな交換汎関数を開発する。

ハ) 有機太陽電池の高効率化の研究 (再委託先: 国立大学法人東京大学大学院工学系研究科)

有機太陽電池における光エネルギー変換高効率化を目指し、ノンフラレンアクセプター/ドナー界面での大規模励起状態計算により電荷分離過程を解明する。

また、ペロブスカイト太陽電池および水分解光触媒の光誘起キャリア緩和機構解明に向けて、大規模励起状態計算により、光励起生成エキシトンの特性とキャリア緩和過程を解明する。

②サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー (再委託先: 国立大学法人東京大学物性研究所、国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人名古屋大学大学院工学研究科)

イ) 全電池シミュレータの総合的开发 (再委託先: 国立大学法人東京大学物性研究所)

平成29年度までに開発したDFT+RISM法に基づき電極界面での等温吸着曲線を求め、それに基づき得られる電流電圧曲線(cyclic voltammetry)を実験と比較することにより手法の信頼性の確認を行う。

また、遷移金属酸化物の酸素還元反応に関する第一原理計算を継続して行い、実験結果と比較しながら白金代替電極材料の高活性化のための物質探索を進める。

ロ) 全電池シミュレータの要素技術開発 (再委託先: 国立研究開発法人物質・材料研究機構)

ポスト「京」に向けた第一原理分子動力学(MD)自由エネルギー計算アプリstat-CPMDの高効率化に目処をつけ、高機能化(バイアス機能、サンプリング改良、トポロジカル解析連携、グリーン関数手法連携など)を更に進める。

それらをベースに、リチウムイオン電池、次世代二次電池の電解液特性解析(溶媒和構造、電気化学安定性、イオン伝導性など)、電解液探索、界面被膜構造探索、界面被膜特性解析を進め、高性能電解液、被膜の設計指針を構築する。さらに古典MD法との連動性も高める。

ハ) 全電池シミュレーション技術の開発研究 (再委託先: 国立大学法人名古屋大学大学院情報学研究科)

100万原子規模の反応シミュレーションの実現を目標として、Red Moon法プログラムのさらなる高並列化・高速化に着手する。

電極電位の制御条件下での二次電池用電解液の電極近傍における溶媒構造の解析と被膜形成シミュレーションを実施する。複雑な表面構造を持つ電極モデルを用いた電極-電解液界面のMDシミュレーションを実施し、溶媒構造の表面構造依存性を解析する。

ニ) 全電池シミュレータの基盤技術の開発研究 (再委託先: 国立大学法人名古屋大学大学院工学研究科)

MODYLASの高度化・開発を継続する。特に、平成29年度に開発したFMMおよび粒子対計算に関わる新規通信アルゴリズムならびに新規FMM演算アルゴリズムのMODYLASへの実装を行う。さらに、ホットスポットに対してSIMD最適化を行う。

また、全電池シミュレータの重要な構成要素である三相界面など不均一環境下での物質輸送に対する解析手法の開発に着手するとともに、電解質膜中でのグロータス機構を含むプロトン移動について継続して研究を行う。

③サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー (再委託先: 国立大学法人岡山大学、国立大学法人北海道大学、学校法人早稲田大学)

イ) メタンや水素ハイドレート実用基盤の確立 (再委託先: 国立大学法人岡山大学)

種々のハイドレートの温度・圧力に加えて組成も含めた空間における熱力学的安定性の基礎原理を構築する。さらに、これに基づいてセミクラスレートの安定性の基礎原理を明らかにする。

ロ) 触媒反応経路探索計算 (再委託先: 国立大学法人北海道大学)

平成29年度は、反応経路自動探索プログラムGRRMとSMASHの連結ソフトウェアの整備を進め、さらにGRRMとNTChemの連結に着手した。平成30年度は、GRRMとSMASHおよびGRRMとNTChemの連結ソフトウェアの並列効率向上にむけてコードのチューニングを行い、超並列環境で触媒反応の反応経路自動探索計算を実現する。

ターゲットとする触媒としては、我々が実験グループと連携して提案した非白金系燃料電池触媒候補のBN/Auに焦点をあてさらなる高機能化に取り組むとともに、CO₂有効資源化触媒の機構解明に着手する。

ハ) CO₂吸収シミュレーションのための超並列電子状態計算法 (再委託先: 学校法人早稲田大学)

シミュレータの開発では、メタダイナミクス法の階層的並列化により構造サンプリングと自由エネルギー計算の可用性向上を図る。また、メモリ使用量の削減に関するアルゴリズムを検討し、従来100万原子系であったDC-DFTB計算を1000万原子系で実現する。さらに、MOFなどの材料系を取り扱うための遷移金属を含む計算パラメータのさらなる高精度化を進める。

実証計算では、平成29年度までに開発した速度論モデルによる反応性解析手法を大規模混合アミン溶液系に適用し、化学吸収法の高性能化に資する知見を得る。また、可用性向上により効率化した自由エネルギー計算手法により、アミン-CO₂系素反応の多次元反応自由エネルギー地形解析を実行する。

ニ) メタンハイドレートの溶融や貯蔵に向けた新規技術の理論

メタンハイドレートの分子動力学シミュレーションの多ノードマシンでの並列化効率を高めるため、演算と通信のオーバーラップ、プロセス間通信パターン改良及び通信量削減を含めた通信時間削減アルゴリズムを開発し、平成29年度に開発したメモリ削減アルゴリズムと組み合わせる。

④基盤アプリ設計・開発（再委託先：国立研究開発法人理化学研究所）

コデザインワーキンググループを継続開催することにより、ターゲットアプリに関するコデザインを推進する。また、コデザインワーキンググループ活動の成果をもとにポスト「京」に向けた基盤アプリの高度化を進める。

⑤プロジェクトの企画・改善提案（再委託先：国立大学法人名古屋大学大学院工学研究科、国立大学法人神戸大学）

プロジェクト推進上の課題、或いは課題になると思われる事項について、幅広く検討を行い、課題責任者と協議し、プロジェクトを遅滞なく推進するための企画や改善策を運営委員会へ提案する。併せて、プロジェクト推進のために課題責任者の補佐を行う。

⑥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に運営していくため、運営委員会などの開催等、参画各機関の連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、必要に応じて調査或いは外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの推進に資する。プロジェクトで得られた成果については、広報や研究活動を通じて積極的に公表し、今後の展開に資する。加えて、上記①から③で開発するシミュレータのコアとなる基盤アプリ

（NTChem, GELLAN, MODYLAS, stat-CPMD）について、ポスト「京」開発ベンダーと協力してポスト「京」をターゲットとした高度化を実施し、基盤アプリと連携し課題解決にあたるアプリケーションを整備していく。

尚、本プロジェクトのサブ課題間は勿論、重点課題⑥を含む関連するプロジェクトとのコミュニケーションを密に行う。また、国内外のエネルギー関連課題の調査研究により産業界の実ニーズを把握すると共に、実験研究の進展をタイムリーに取り込むための民間企業研究者・実験研究者と定期的に交流する。これらの目的のために、公開の研究会などの企画・実施を行う。

ポスドク（研究員）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、将来のステップアップまで見据えた登用、人材育成の取り組みを継続していく。

4-2. 実施内容（成果）

4-2-1. 全体概要

本重点課題では、ポスト「京」を駆使することにより、太陽電池、人工光合成による新エネルギーの創出・確保、燃料電池、二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵、また、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など、太陽光エネルギー、電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い、実験研究者、産業界と連携して、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立し、同時に、これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し、現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立し、科学的なブレークスルーを達成することを目指している。

平成30年度の成果は以下の通りであり、ポスト「京」に向けたプログラム開発、研究開発が順調に進んでいる。

サブ課題A：太陽電池シミュレータを構成する NTChem（汎用第一原理電子状態計算ソフト、コーデザインのターゲットアプリ）において、基底・励起状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムの開発と、有機系太陽電池の機構解明のための手法開発を行った。

人工光合成シミュレータを構成する基盤アプリ GELLAN（階層的量子化学計算ソフト）においては、ポスト PHF 法において律速段階となる二電子積分の縮約を、高いロードバランスで分散並列させ、大規模非線形方程式に現れる零空間を反復的に取り除く新規手法を開発した。また、モデル空間量子モンテカルロ法を省メモリで高速に実行できるように高度化並列実装した。更に、新規の強相関ソルバーとして、完全結合クラスター還元法を開発した。

実証研究においては、有機太陽電池の高効率化を目指し、ノンフラレンアクセプター分子のF置換による電荷分離過程への影響を大規模励起状態計算により明らかにし、電荷分離過程の自由エネルギー解析のシミュレーション手法を開発した。ペロブスカイト酸化物SrNbO₃の水分解光触媒機構を第一原理計算により明らかにし、またペロブスカイト酸窒化物のアニオン配列を機械学習を用いて予測した。

可視光応答型ペロブスカイト半導体に対し、「京」を利用した第一原理計算スクリーニングに基づき適切な材料を提案した。また、ポスト PHF 法を用いて、[Fe₂S₂(SCH₃)₄]²⁻のスピ状態計算による Heisenberg 結合定数の高精度予測を行った。更に、バトラー式と HSE06 汎関数の計算を組み合わせ、ペロブスカイト半導体のバンドギャップを求め、実験との比較を行った。

サブ課題B：二次電池の電極・電界液界面計算のためのアプリ開発として、第一原理計算stat-CPMDの大規模並列対応を行い、量子古典混合計算手法RedMoonの高並列化のためのLAMMPS導入をおこなった。燃料電池電極界面の第一原理計算については、開発したDFT+RISM法を高並列可能なSTATEへ展開し、サイクリックボルタンメトリー（電流電圧曲線）計算予測の目処をつけた。固

体高分子の古典分子動力学計算MODYLASの性能向上のため、新規FMM演算アルゴリズムの実装等を行った。

実証研究においては、二次電池メカニズム解明に関しては、電解液系及び遷移金属酸化物正極-電解液界面における微視的機構を明らかにした。また、電極近傍における溶媒構造の解析と被膜形成シミュレーションを実施し知見を得た。燃料電池については、白金表面上での水素の吸着エネルギーを高精度に予測した。また、三相界面など不均一環境下での物質輸送に対する解析手法の開発に着手し、位置に依存する拡散係数の評価方法を開発し検証した。

サブ課題C：ハイドレートについては、温度、圧力、そしてゲストのモル分率を独立変数としてハイドレート生成条件を求める基礎原理の更なる展開を図り、それに基づいたソフトの開発により種々のゲスト分子の取り扱いが可能となった。また、包接水和物による天然ガスパイプラインの詰まりを防ぐ速度論的阻害剤の分子機構を大規模分子動力学シミュレーションにより明らかにした。

高機能触媒開発については、GRRM/SMASHにより C_4H_{10} の反応経路網羅探索を実施した。GRRM/NTChemの稼働を確認し、さらにGRRMを任意のMPI並列電子状態計算ソフトウェアと連結できるmpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手した。Cuクラスター触媒によるNO解離に対し反応経路探索+インフォマティクス解析を行い、さらに窒素ドープ炭素触媒の微視的機構解明に成功した。

CO₂分離・回収については、凝縮相内化学反応シミュレータの高速化に向けて階層的MPI並列メタダイナミクス計算の機能を実装し、また、省メモリ並列計算のアルゴリズム開発を行い、取り扱える原子系サイズを1000万原子以上に拡張した。立体障害を持つ単一および混合アミン溶液系の大規模化学反応シミュレーションを実施し、CO₂吸収反応経路に関する解析を進めた。

基盤アプリ開発：ターゲットアプリであるNTChemについて、ホットスポットの高速化、メモリ分割版アルゴリズム、単精度-倍精度混合精度化に加えてファイル読み込み時間を削減し、ポスト「京」における当初計画の性能実現の見通しを得た。また、基盤アプリ設計・開発WGを2回開催し、基盤アプリと課題アプリDC-DFTB-Kの高度化を推進した。

プロジェクトの推進のため、運営委員会(5回)及び諮問委員会(3回)を開催した。本課題で得られた成果を広報するために、研究成果説明CG制作、分子科学研究所一般公開、理研計算科学研究センター一般公開出展や研究成果の重点課題5ホームページ掲載などを行った。尚、産業界の実ニーズを把握すると共に、実験研究の進展をタイムリーに取り込むため、重点課題5第2回 実験・産業との連携シンポジウム、第5回公開シンポジウムや産応協との意見交換会等を開催し、情報発信と収集に努めた。また、本課題で開発するアプリ利用人材を育成することを狙って、大規模並列量子化学計算プログラムSMASH講習会を2回開催するとともに、量子化学(参

加者 87 名、講師 9 名)、分子シミュレーション(参加者 129 名、講師 16 名)のスクールなどを開催した。更に、「京」計算機資源の利用について管理を行い、計画的に配分値を使いきった(101% 利用)。

4-2-2. サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー

[責任者]天能精一郎（神戸大）

[実施者]天能精一郎（神戸大）、中嶋隆人（理研）、山下晃一（東京大）

[研究の背景と目的]

太陽光を利用して高効率エネルギー変換を行うための理論的研究を行う。対象を光合成系と有機系太陽電池とし、前者では、植物の光合成における明反応の仕組みを電子状態計算により明らかにし、人工光合成系の設計指針への可能性を探ると共に、金属錯体や半導体光触媒での水分解反応機構に関する基礎研究を行う。また、有機薄膜太陽電池の高効率化に向けて、分子設計とモルフォロジーや界面の制御に関する理論研究を行う。得られた知見をもとに、エネルギー変換効率の高い有機系太陽電池や人工光合成を実現するための新規エネルギー材料をシミュレーションと実験の共同研究により見出し、資源問題の解決に貢献する。

化石燃料を輸入に頼る我が国では、それに代替する化学原料の確保が重要な課題である。太陽光によって水分解を行う人工光合成では、水素燃料の利用やCO₂との合成触媒反応による化学品の製造が期待され、実用化に向けた研究開発が国プロとして進められている。その一方で、高効率の水分解を実現する光触媒の開発には未解決な要因が多く、計算科学的なアプローチを援用した集約的な開発が必要である。本研究項目では、主に階層的量子化学プログラムGELLANをベースとした光合成シミュレータを開発し、ポスト「京」の十分な活用を可能にする基盤技術の整備を行う。更に、開発されたアプリケーションを用いて、半導体光触媒や植物を模した多核金属錯体の反応メカニズムの解明を行い、高効率の光触媒設計の明確な指針を示す。

一方、太陽光発電は太陽電池を用いて光起電力効果を利用し、太陽光エネルギーを電気エネルギーへ直接変換できる発電方式であり、無尽蔵にある太陽エネルギーの有効利用として、再生可能エネルギー創生の要である。太陽電池は光吸収材料あるいはデバイス形態などにより、多くの種類に分類されるが、光吸収層に有機化合物を用いた有機太陽電池は、軽量、フレキシブルで意匠性が高く、塗布プロセスにより安価に製造することができることから、次世代太陽電池の主流になると期待され、現在世界中で活発な研究開発競争が行われている。本課題では、有機太陽電池における光エネルギー変換の高効率化を目指し、NTChemを中心とした太陽電池シミュレータを開発することにより、太陽光により生成したエキシトン（クーロン相互作用した電子-正孔対）の有機電子供与体（ドナー材料）・有機電子受容体（アクセプター材料）界面での電荷分離過程を高効率に起こす有機物材料を探索する。またドナー・アクセプター活性層界面のモルフォロジーについて、高効率化に有効なバルク構造の実現プロセスを分子論的に明らかにする。

[研究成果の概要]

[アプリ開発]

太陽電池シミュレータを構成するNTChemでは、基底・励起状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムの開発と、有機系太陽電池の機構解明のための手法開発を行った。

人工光合成シミュレータを構成する基盤アプリGELLANでは、ポストPHF法において律速段階となる二電子積分の縮約を、高いロードバランスで分散並列させ、大規模非線形方程式に現れる零空間を反復的に取り除く新規手法を開発した。また、モデル空間量子モンテカルロ法を省メモリで高速に実行できるように高度化並列実装した。更に、新規の強相関ソルバーとして、完全結合クラスター還元法を開発した。

[実証研究]

有機太陽電池の高効率化を目指し、ノンフラーレンアクセプター分子のF置換による電荷分離過程への影響を大規模励起状態計算により明らかにし、電荷分離過程の自由エネルギー解析のシミュレーション手法を開発した。ペロブスカイト酸化物 SrNbO_3 の水分解光触媒機構を第一原理計算により明らかにし、またペロブスカイト酸窒化物のアニオン配列を機械学習を用いて予測した。

可視光応答型ペロブスカイト半導体に対し、「京」を利用した第一原理計算スクリーニングに基づき適切な材料を提案した。また、ポストPHF法を用いて、 $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$ のスピ状態計算によるHeisenberg結合定数の高精度予測を行った。更に、バトラー式とHSE06汎関数の計算を組み合わせ、ペロブスカイト半導体のバンドギャップを求め、実験との比較を行った。

[サブ課題A内活動]

実験研究者や企業研究者と一層の連携のため、2018年12月11日に北海道大学プロンティア化学教育研究センター 2階 レクチャーホールで開催した第2回実験・産業との連携シンポジウムにて、パネルディスカッション等で共通の課題や連携の課題について議論した。

イ) 光合成シミュレータの開発

[実施者]天能精一郎 (神戸大)

[実施担当]土持崇嗣、上島基之、XU ENHUA、島崎智美 (神戸大)

[実施概要]

ポストPHF法において律速段階となる二電子積分の縮約を、高いロードバランスで分散並列させた。同手法の大規模非線形方程式に現れる零空間を反復的に取り除く新規手法を開発した。又、モデル空間量子モンテカルロ法を省メモリで高速に実行できるように高度化並列実装した。更に、新規の強相関ソルバーとして、完全結合クラスター還元法を開発した。

ポスト PHF 法を用いて、 $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$ のスピンの状態計算による Heisenberg 結合定数の高精度予測を行った。又、バトラー式と HSE06 汎関数の計算を組み合わせ、ペロブスカイト半導体のバンドギャップを求め、実験との比較を行った。

[開発アプリケーションと計算モデル]

ポストPHF法における計算対象であるm-ベンザインと $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$ はそれぞれ40個、184個の電子を持つ分子であり、基底関数にはcc-pVTZ, SVPを用いた。半導体計算ではペロブスカイト ABO_3 の計算を行った。(A=Sr, Ba, Fe, Co, Ni, Pb, Mo, Cd; B=Ti) 汎関数はPBEでサンプルK点はMonkhorst法で $6 \times 6 \times 6$ のセルサイズをとり、520Ryをエネルギーカットオフとした。

[並列計算の方法と効果]

ポスト PHF 法の一つである、結合クラスター近似 (ECCSD) 法の二電子励起演算子の占有電子ペアに対する MPI/OpenMP ハイブリッド並列を行い、高いロードバランスでの並列化に成功した。又、モデル空間量子モンテカルロ (MSQMC) 法においても MPI/OpenMP ハイブリッド並列を進めた。具体的には従来は Flat MPI で実装されていた Walker の分散を OpenMP の指示行を加えてスレッド間での Walker 分散を行った。

[研究成果]

ポスト PHF において最も計算コストの高いステップは、仮想軌道のみからなる分子積分 ($ab|cd$) と CI 係数 $t(cd, ij)$ の縮約であり、仮想軌道数が占有軌道数の数倍～数十倍必要になる高精度計算においては、この部分が計算時間のほぼ全てを占めていた。平成 30 年度は、電子ペア ij に対して分散する MPI-OpenMP ハイブリッド並列実装を行い、これを平成 29 年度で達成した分子積分を用いない省メモリ計算法と組み合わせることにより、高いロードバランスで並列化することに成功した。占有軌道数が 28、仮想軌道数が 432 である m -ベンザイン分子に対して適用したところ、32 コアで 25 倍程度の加速化が得られた。また、CC にスピン射影を用いる結合クラスター近似 (ECCSD) 法では大規模非線形方程式を解く必要があるが、一電子・二電子励起空間が過完備であり、内包される零空間を取り除かなければならない。このためには通常、大規模行列の特異値分解が必須となるが、これを小規模な部分空間内で解き、反復的に解を収束させていく新たな手法を開発した。これにより、今までメモリ・計算量の両面で実

行不可能であった計算が非常に低コストで可能になり、ECCSD の適用範囲を大きく押し広げることに成功した[1]。

従来のモデル空間量子モンテカルロ (MSQMC) 法では倍精度変数を用いて行列式のバイナリ表現を行なっていたため、最大 64 軌道を超える完全活性空間 (FCI) 問題を取り扱えなかった。そこで行列式のバイナリ表現を多倍長化し、任意の軌道の FCI 問題を取り扱えるように拡張した。また従来の MSQMC 法は Flat MPI 実装であったため Walker のメモリ分散において AlltoAll 通信のコストが顕著であった。MPI/OpenMP ハイブリッド並列実装したことでその通信コストを約 1/8 に削減することができ、高度化を実現できた。ハイブリッド並列では分子積分などがメモリ共有されるので省メモリ化も同時に達成できた。このように現行の MSQMC は従来よりも大きな完全活性空間での計算を省メモリで高速に実行可能である。水素発生系錯体として $[\text{Fe}_2\text{S}_2]^{2+}$ (8.6×10^{27} 次元の FCI 問題) を用いて新規の MSQMC のテスト計算を行った。京コンピュータを用いればシミュレーション可能であり、妥当な FCI エネルギーを与えることが実証された。

結合クラスター理論を用いた、新しい強相関ソルバーの開発も行った。4 次までの交換子をあらわに展開することにより、任意の励起演算子を含む完全結合クラスター法を実現した。更に、射影空間と交換子にスクリーニングを施すことにより完全結合クラスター還元法 (FCCR 法) の開発に成功した。FCCR 法は、電子の静的相関と動的相関を同時に取り扱う事が可能で、多核遷移金属錯体からなる光合成系の電子状態の精密計算が可能である[2]。

半導体を含むバルク系の電子状態計算では密度汎関数理論に基づく第一原理計算が有効であるが、バンドギャップの過小評価など電子相関効果の取り扱いがボトルネックとなっており、現在でも様々な計算手法が議論されている。このようなバルク系における強相関計算に対する新しいアプローチとして、バルク系の局所模型をポスト HF 計算に基づく量子化学計算によって解析する数値計算手法を提案した。ここでは、バルク系に対する HF 計算から Bloch 波動関数を計算し、そこから得られる最局在 Wannier 関数 (MLWF) を基底関数とする有効ハミルトニアン (即ち Fock 行列と相互作用行列) を評価し、バルク系の局所模型である強相関クラスターモデルを導出した。これによって、半導体光触媒の性能評価を含めたバルク系の高精度な電子状態計算を行う数値計算手法の確立が期待される。

水素発生系モデルの遷移金属錯体 $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$ のように複雑に縮退した分子では、分子振動モードに隠れてしまうほど非常に小さなエネルギー分裂を引き起こし、実験的に解析を行うのは困難である。遷移金属錯体の計算によく用いられる密度汎関数理論では Heisenberg 結合定数の予測が 310 cm^{-1} と、既知の類似化合物 $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{S}_2\text{-}o\text{-xy1})_2]^{2-}$ の実験値 $148 \pm 8 \text{ cm}^{-1}$ から大きく乖離しており信頼性に乏しいことが知られている。そこで高精度な計算による予測を行うことを目的として、ポスト PHF 法を用いて Heisenberg 結合定数を算出した。その結果、配置間相互作用 (ECISD+Q) 及び ECCSD ではスピンギャップ $s=1$ に対して、 $162.1, 184.3 \text{ cm}^{-1}$ となり、 $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{S}_2\text{-}o\text{-xy1})_2]^{2-}$ の実験値を程良く再現し合理的な結果となった (図 4-2-2-1) [3]。一方でより高コストな密度行列繰り込み群法 SCF (DMRG-SCF) では 234.6 cm^{-1} であるが、これは十分な

動的電子相関を加えておらず定量的結果に至らなかったためと考えられる。以上から、遷移金属錯体計算におけるポスト PHF 法の優位性を示せた。

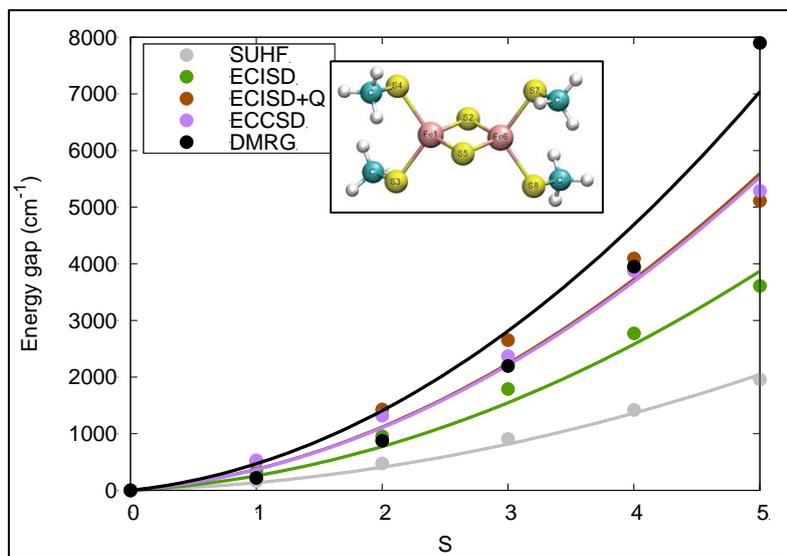


図 4-2-2-1. ポスト PHF 法を用いた $[\text{Fe}_2\text{S}_2(\text{SCH}_3)_4]^{2-}$ 遷移金属錯体におけるスピングャップ (横軸) と Heisenberg モデルへのフィット

Z-Scheme 型人工光合成の材料を理論設計するためには吸収波長や酸化還元準位を定量的に求める方法論の確立は必須である。そこで紫外可視光吸収帯を有する ABO_3 型ペロブスカイト半導体の価電子帯上端 (VBM)、伝導帯下帯 (CBM)、バンドギャップを定量的評価するために様々な計算手法を用いて電子状態計算を行い、網羅的な方法論の探索を行なった。バンドギャップを高精度に計算するためには重原子効果や多体相互作用を考慮しなければならない。そこでスピン軌道相互作用やオンサイトクーロン反発、HF 交換項の寄与を比較し、密度汎関数理論 GGA, HSE06, GGA+U, GGA+SO など VASP を用いてバンド計算を行なった。汎関数は HF 交換項が含まれる HSE06 がバンドギャップの 1eV 誤差内程度で定量的な結果を与えることがわかった。HSE06 でスラブ模型を用いればバンド曲がり定量的に計算可能ではあるが、計算コストが大きいいため、材料のスクリーニングには適さない。一方、Butler らの経験的手法では、バンドギャップと電気陰性度から簡易にバンドの情報が出る。HSE06 と Xu らの電気陰性度パラメータを用いてバンドギャップ計算したところ、実験値を半定量的に再現し (図 4-2-2-2)、本手法がスクリーニングに有効であると考えられる。

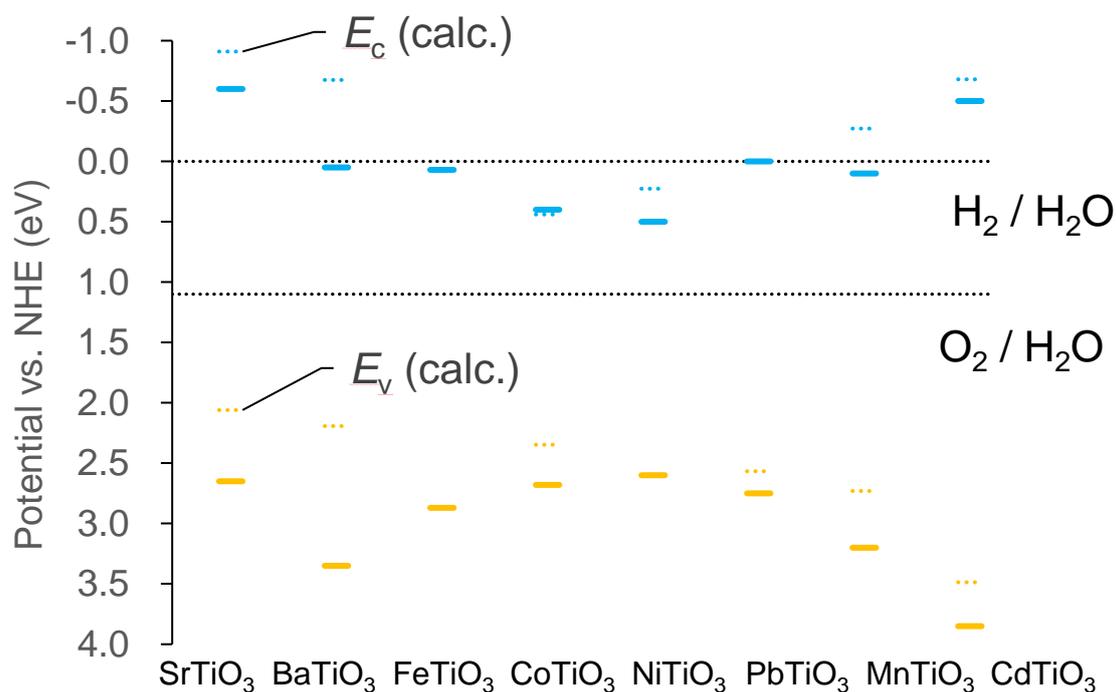


図4-2-2-2. 計算によって得られた水素標準電極を基準としたときの酸化還元準位
(実線：実験値、破線：計算値)

[研究成果の利活用について]

これまで開発されたソルバーの検証のために、実験研究者との共同研究の課題を進めた。

[今後について]

人工光合成シミュレーターを成す強相関ソルバーは、PHF 法、PostPHF 法、MSQMC 法の MPI-OpenMP ハイブリッド並列が進み、新規の完全結合クラスター還元法の開発も行われた。今後はアプリケーションソフトウェアの高度化を継続すると共に、最局在化ワニエ有効模型に適用し、定量的なバンド構造の予測を進める事により、有効な半導体光触媒の材料設計や界面付近でのバンド曲がりを含めた面依存性やデバイス特性の予測に展開する。

[参考文献]

- [1] T. Tsuchimochi and S. L. Ten-no, *J. Chem. Phys.*, **149** 044109 (2018).
- [2] E. Xu, M. Uejima, and S. L. Ten-no, *Phys. Rev. Lett.*, **121** 113001 (2018).
- [3] T. Tsuchimochi and S. L. Ten-no, *J. Comput. Chem.*, **40** 267-280 (2019).

ロ) 太陽電池シミュレータの開発

[実施者]中嶋隆人 (理研)

[実施担当]神谷宗明、中塚温、嶺澤範行、米原丈博、澤田啓介、植村渉 (理研)

[実施概要]

基底・励起状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムの開発と、有機系太陽電池の機構解明のための手法開発を行った。

可視光応答型ペロブスカイト半導体に対し、「京」を利用した第一原理計算スクリーニングに基づき適切な材料を提案した。

[開発アプリケーションと計算モデル]

本プロジェクトで開発している太陽電池シミュレータは、分子科学計算ソフトウェア NTChem をベースにしている。

計算モデル：数千～1万原子から成る大規模な分子系の基底・励起状態計算、29,160種類の可視光応答型ペロブスカイト半導体材料候補

実証研究利用アプリケーション：NTChemをベースにした密度汎関数法・時間依存密度汎関数法計算プログラム、NTChem、VASP

[並列計算の方法と効果]

数千～1万原子から成る大規模な分子系の基底・励起状態計算の実現に向けて、密度汎関数法計算プログラムに対し、「京」で採用されているTofu高次元トラスネットワークアーキテクチャを有効に利用したアルゴリズムを設計することで通信を隠蔽し、さらに我々が開発した高並列疎行列ライブラリNTPolyを使って疎行列演算することで大規模な密度汎関数法計算を実現した。また、密度汎関数法における相関交換ポテンシャルの数値積分計算部のループの並列構造に変更を加え、さらに高コスト部に対しスレッド並列化を施すことで、「京」での計算処理を約30倍に高速化することができた。

[研究成果]

数千～1万原子から成る大規模な分子系の励起状態計算の実現に向けて、平成29年度までに開発した基底状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムと太陽電池シミュレータを高度化した。「京」で採用されているTofu高次元トラスネットワークアーキテクチャを有効に利用したアルゴリズムを設計することで通信を隠蔽し、さらに我々が開発した高並列疎行列ライブラリNTPolyを使って疎行列演算することで大規模な密度汎関数法計算を実現した(図4-2-2-3) [1]。

また、密度汎関数法に基づいた励起状態計算に対しても、メモリ分割版プログラムの高度化に着手した。密度汎関数法における相関交換ポテンシャルの数値積分計算部のループの並列構造に変更を加え、さらに高コスト部に対しスレッド並列化を施すことで、「京」での計算処理を約30倍に高速化することができた[2]。

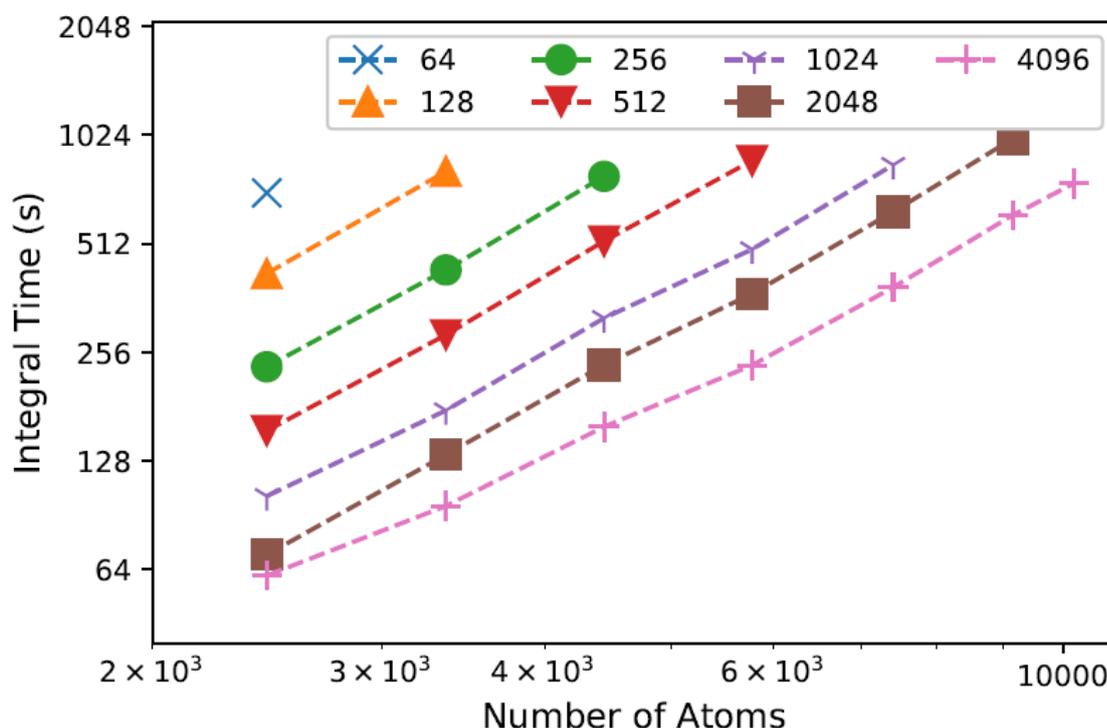


図 4-2-2-3. 開発した三次元分散並列計算アルゴリズムに基づいた 2 電子積分部 (Coulomb 積分と HF 交換積分) の計算時間 (横軸: 原子数, 縦軸: 計算時間)

更に、有機系太陽電池のエネルギー変換機構を解明するための手法や非断熱励起状態ダイナミクス、およびそれらのためのプログラムの高度化作業を実施した[3]。加えて、有機系太陽電池のキーとなる電荷移動状態を正確に表現することができる新たな交換汎関数を開発した。

太陽電池シミュレータの実証研究として、可視光応答型ペロブスカイト半導体に対し、29,160個という膨大な数の組み合わせの化合物を選び出し、これらの化合物に対して「京」を利用した第一原理計算を実施し、元素戦略的なハイスループット・スクリーニングに基づき、適切な材料を効率よく探索した。その結果、6個の安価な元素だけからなるペロブスカイト半導体の候補化合物を発見した。d0/d10電子配置を持つペロブスカイト窒素酸化物と部分占有d電子を持つペロブスカイト酸化物が適切なバンドギャップとバンド端位置を持つ可視光応答型半導体に適していることを設計指針として提案することもできた[4]。

また、ペロブスカイト太陽電池の新規正孔輸送材料の材料設計のために、太陽電池シミュレータを活用した量子化学シミュレーションを「京」で実施する準備計算と推測のための機械学習技術の構築を始めた。

[研究成果の利活用について]

平成 29 年度に引き続き、RIST と連携し、NTChem の最新版の導入、実行シェル等の準備、チュートリアル、ドキュメントの整備等を提供することで、ユーザの利便性向上、成果の早期の最大化、システムの効率的な利用、ユーザのすそ野拡大等、を図ることを目的として、「京」及びその他の HPCI を構成するシステム(HPCI システム)において NTChem の利用環境を整備した。

[今後について]

最終年度は、数千~1 万原子から成る大規模な太陽電池材料に対して基底状態に加えて励起状態での挙動や物性のシミュレーションを可能とする太陽電池シミュレータを完成させる。また、今後は、量子化学プログラム、第一原理バンド計算プログラム、分子動力学計算プログラム、デバイスシミュレータをシームレスに連結させ、ミクロからマクロまでの連成計算を実現できる太陽電池統合シミュレータを開発し、そのシミュレータを利用した成果創出に向けた実証研究を行う。

[参考文献]

- [1] W. Dawson, 澤田啓介, 神谷宗明, 中嶋隆人, シミュレーション学会誌, 投稿準備中.
- [2] M. Kamiya, T. Nakajima, “Relativistic time-dependent density-functional theory for molecular properties”, in *Frontiers of Quantum Chemistry*, edited by M. Wójcik, H. Nakatsuji, B. Kirtman, Y. Ozaki (Springer), 223-247 (2018).
- [3] T. Yonehara, N. Minezawa, T. Nakajima, “Excited-State Dynamics in NTChem”, in *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, edited by Y. Ozaki, M. J. Wojcik, J. Popp (Wiley), 43-78 (2019).
- [4] K. Sawada, T. Nakajima, “High-throughput screening of perovskite oxynitride and oxide materials for visible-light photocatalysis”, *APL Mater.* **6**, 101103 (2018).

ハ) 有機太陽電池の高効率化の研究

[実施者]山下晃一（東京大）

[実施担当]川嶋英佑、金子正徳（東京大）

[実施概要]

有機太陽電池の高効率化を目指し、ノンフラレンアクセプター分子の F 置換による電荷分離過程への影響を大規模励起状態計算により明らかにし、電荷分離過程の自由エネルギー解析のシミュレーション手法を開発した。ペロブスカイト酸化物 SrNbO_3 の水分解光触媒機構を第一原理計算により明らかにし、またペロブスカイト酸窒化物のアニオン配列を機械学習を用いて予測した。

[計算モデル]

有機太陽電池を構成する数百原子からなるノンフラレンアクセプター/ドナー界面
5×5×5 のスーパーセルからなるペロブスカイト型半導体

[研究成果]

有機太陽電池における光エネルギー変換高効率化を目指し、ノンフラレンアクセプター/ドナー界面での大規模励起状態計算により電荷分離過程を解明した。ドナー分子 (PTB7) とノンフラレンアクセプター分子 (ITIC)、F 置換後のアクセプター分子 (IT4F) の複合体について電荷移動距離、電荷移動量を時間依存密度汎関数計算により解析した結果、F 置換により開放電圧 V_{oc} は減少するが、電荷移動距離、電荷移動量共に増加することが明らかとなり、短絡電流密度 J_{sc} の増加、またアクセプター分子での光吸収増加により光電変換効率が向上すると考えられる。また有機太陽電池における、クーロン引力で束縛された電子-正孔対の分離メカニズムに関して、キャリアの拡散に伴うエントロピーの寄与を、モンテカルロ計算により計算し、電子-正孔対の分離過程の自由エネルギーに閾値が存在することを明らかにした。クーロン相互作用は、分離距離の増大にともない徐々に減少し続けるが、キャリアの拡散に伴うエントロピー寄与の増加により、電子-正孔対の分離過程の自由エネルギーは、分離距離 6nm で最大値を有する。すなわち、現実的な BHJ モルフォロジーを考慮すると、界面から分離距離が 6nm に達した後、電子と正孔はエントロピー拡散によって分離することが分かった (図 4-2-2-4) [1]。

水分解光触媒の光誘起キャリア緩和機構解明に向けて、大規模励起状態計算により、光励起生成エキシトンの特性を解明した。 d^1 型水分解光触媒として期待されるペロブスカイト SrNbO_3 について光学ギャップに関わる光励起のメカニズムを第一原理計算により明らかにした。金属的なバンド構造から表面プラズモンによる光励起エキシトン生成の可能性は否定できないが、Sr 欠陥・0 空孔によりフェルミ準位を変えることで光学ギャップを制御できること、また A サイトカチオン置換により光吸収が向上することから水分解光触媒としての可能性を示した。さらにペロブスカイト型酸窒化物 BaNbO_3N を例にして、機械学習に基づいて、大規模

スーパーセルにおけるアニオン配列を迅速に予測できることを示し、大規模第一原理計算と併用し、現実的な要素配置に基づいて複雑な組成を有する機能材料の特性を予測する手段を開発した (図 4-2-2-5) [2, 3]。

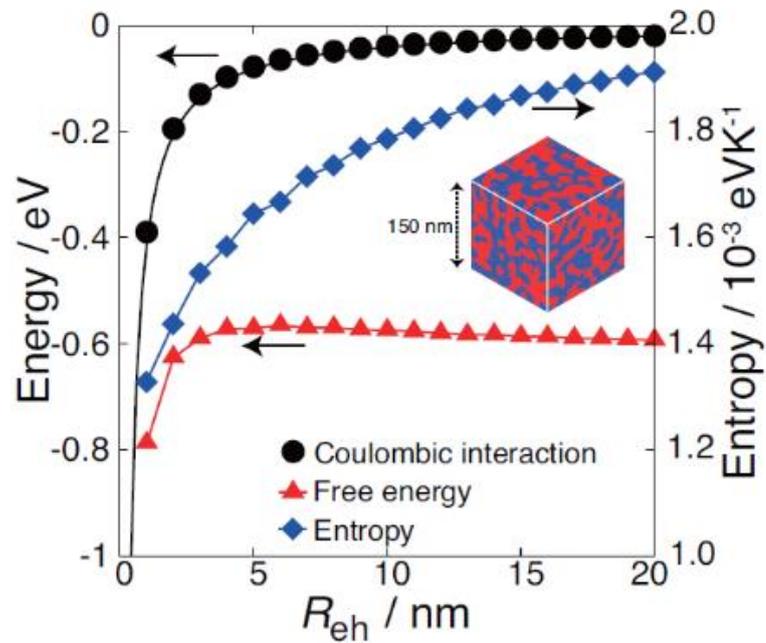


図 4-2-2-4. 電子と正孔の距離 R_{eh} についての、クーロンポテンシャル (黒)、自由エネルギー (赤色)、およびエントロピー (青色) 変化

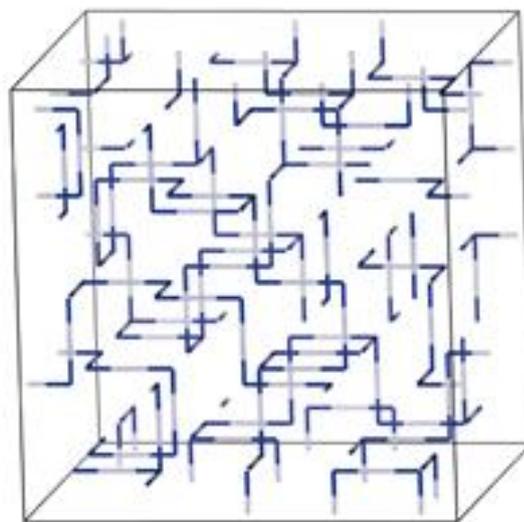


図 4-2-2-5. 機械学習で予測された $5 \times 5 \times 5$ のスーパーセルにおけるペロブスカイト酸窒化物 BaNbO_2N のアニオンオーダー

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

家教授（阪大産研）：F置換ノンフラレンアクセプター分子の材料設計に関して共同研究を開始した。

堂免教授（ArpChem, 信州大）：水分解光触媒、ペロブスカイト酸窒化物の構造とバンドギャップに関して共同研究を行った。

工藤教授（東理科大）：半導体化合物のバンド端に関して共同研究を行った。

[今後について]

有機太陽電池における光エネルギー変換高効率化を目指し、引き続きノンフラレンアクセプター/ドナー界面での大規模励起状態計算によりノンフラレンアクセプター材料の理論設計を行う。これまで短絡電流密度、開放電圧向上のメカニズム解明について注力してきたが、今後は大規模シミュレーションによるBHJモルフォロジーに関するデータ生成と機械学習を組み合わせ、フィルファクター向上のメカニズムについて検討する。また水分解光触媒材料に関しては光生成キャリアの寿命と材料欠陥との関連について研究を進める。

[参考文献]

- [1] “Entropy Promotes Charge Separation in Bulk Heterojunction Organic Photovoltaics”, Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita, J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, in press (2019)
- [2] “First-principles study on visible light absorption of defected SrNbO₃”, Masanori Kaneko, Kenji Mishima, Koichi Yamashita, J. Photochemistry & Photobiology A: Chemistry, **375**, 175-180 (2019)
- [3] “Regression model for stabilization energies associated with anion ordering in perovskite-type oxynitrides”, Masanori Kaneko, Mikiya Fujii, Takashi Hisatomi, Koichi Yamashita, Kazunari Domen, Journal of Energy Chemistry, **36**, 7-14 (2019)

4-2-3. サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー

[責任者] 杉野修 (東京大)

[実施者] 杉野修 (東京大)、館山佳尚 (物材機構)、長岡正隆、岡崎進 (名古屋大)

[研究の背景と目的]

太陽光発電などを用いて創生された一次エネルギーを化学エネルギーとして安定に貯蔵し、消費時に電気エネルギーに変換して利用するためのインフラの構築が始まっている。蓄電社会や水素社会の実現にとって最も重要な基盤技術は、二次電池技術と燃料電池技術である。これらの電池は電気自動車や燃料電池自動車、家庭用電源装置として既に商用化され、今後普及が見込まれている。それだけでなく、今後はスマートグリッドや産業用電源等の大型用途への二次電池利用が始まる。これらの推進のためには、電池の低コスト化、高信頼性、高耐久性、汎用元素の利用等が求められる。二次電池の開発に加え燃料電池に関しても、白金触媒と高分子膜を用いた固体高分子形燃料電池が燃料電池車用や家庭用電源として期待されており、今後の普及にはより低価格な触媒と高分子膜等による耐久性や信頼性・エネルギー効率の向上が不可欠となる。

近年、「京」コンピュータを用いた高度計算機利用において各部材の材料や材料界面で起こっている現象に対して原子・分子スケールでの計算が行われ、最新の実験結果と組み合わせた微視的な構造の決定や機構の解明につなげることが可能になってきた。この最新の科学的手法を電池開発に向けて更に発展させ、諸外国に先駆けて現実の電池開発で利用可能な基盤技術として開発・提供することは、わが国の競争力を高める重要な要素となる。

そこで本サブ課題では、これまで開発してきた各シミュレーション手法を相補的に組み合わせて界面を総合的にミュレートできるアプリへと発展させる。これを用いて、電極・電極被膜・電解質膜・電解液界面挙動に関する学理の構築、電池性能の予測、さらに各電池部材の最適材料設計・探索を目指した総合的な研究活動を行う。

[研究成果の概要]

サブ課題Bでは、二次電池の電極・電界液界面におけるstat-CPMDを用いた第一原理計算およびRed Moonを用いた量子古典混合計算手法を構築し、Liイオン電池における負極界面膜の研究を進めた。燃料電池に関してはESM-RISMを用いた第一原理計算およびMODYLASを用いた古典分子動力学計算を開発・改良し、固体高分子形燃料電池における電極界面並びに高分子の研究を進めた。

[アプリ開発]

燃料電池電極界面の第一原理計算については、開発したDFT+RISM法によるプログラムの、高並列計算が可能なSTATEへの移植を開始した。この完成により、サイクリックボルタンメトリー（電流電圧曲線）を非経験的かつ実効的に計算予測をすることが可能となる。燃料電池固体

高分子の古典分子動力学計算の性能向上のため、新規FMM演算アルゴリズムの実装、圧力テンソル計算ルーチンの開発、FMM計算の正則化、開発したMS-EVBモデルコードのMODYLASへの実装等を行った。

二次電池電極の第一原理計算については、stat-CPMDの開発をポスト「京」に向けてメモリを削減し、大規模系計算に向けてI/O並列化を完成した。またRed Moon法に基づく計算の並列化効率を向上させるために、MDソルバにLAMMPSを用い新しいRed Moonの構築・整備を行った。

[実証研究]

燃料電池電極触媒としての白金表面上での水素の吸着エネルギーを、RPA(Random Phase Approximation)法に基づき高精度に予測した。白金代替電極触媒として注目される酸化物の表面が高活性を示す理由を説明した。さらに、酸化物表面を高精度にモデリングする第一原理モンテカルロ計算手法を開発した。三相界面など不均一環境下での物質輸送に対する解析手法の開発に着手し、位置に依存する拡散係数の評価方法を開発し検証した。電解質膜中でのグロータス機構を含むプロトン移動について研究を継続した。

二次電池メカニズム解明に関しては、電解液系に関する微視的物性の解析に加えて、遷移金属酸化物正極—電解液界面における電解液分子の吸着状態及び酸化還元反応、化学反応について世界に先駆けた第一原理計算解析を実行し、その微視的機構を明らかにした。電極電位の制御条件下での二次電池用電解液の電極近傍における溶媒構造の解析と被膜形成シミュレーションを実施した。負の電極電位により、溶媒が電極表面第一層で強く配向することが分かった。

[サブ課題B内活動]

サブ課題Bでは、サブ課題会議(7/5、10/10、3/1)を開催し、研究の進捗について情報交換を行うと共に、全電池シミュレータの今後の研究開発についての議論を行なった。

イ) 全電池シミュレータの総合的開発

[実施者] 杉野修 (東京大)

[実施担当] 笠松秀輔、春山潤、山本良幸、Lei YAN (東京大)

[実施概要]

DFT+RISM法に基づいて開発した電極界面の第一原理計算プログラムの、高並列計算が可能な電子状態計算パッケージSTATEへの移植を開始し、作業を順調に進めた。これにより、サイクリックボルタンメトリー (電流電圧曲線) 実験を非経験的に予測することができるアプリを高速動作させ、実効的な計算予測をするための見込みがたった。

RPA法に基づき、白金表面上での水素の吸着エネルギーを高精度に予測することに成功した。また、ハイスループット計算に基づき、白金代替電極触媒として注目される酸化物表面が高活性を示す理由を説明することに成功した。さらに、酸化物表面を高精度にモデリングするため、第一原理モンテカルロ計算手法を開発し、その可能性を実証した。

[開発アプリケーションと計算モデル]

電気二重層効果を考慮した電極表面 (最大数百原子規模) に対して、密度汎関数理論に基づく電子状態計算やエネルギーの計算を行うのが本計算モデルであり、これを高並列計算が可能なSTATEにインストールしてシミュレーションを行う。

[並列計算の方法と効果]

STATEは逆格子ベクトル、バンド、k点に関して3重並列化されており100-1000並列が可能である。本アプリでは、この外側に原子配置に関する (モンテカルロやNEB) サンプリングに関する並列ループが回るため、プロダクトランでは数万並列が達成できる。モンテカルロ法では自明並列計算が可能のため、ポスト「京」での実効性能が期待できる。

[研究成果]

燃料電池のサイクリックボルタンメトリー (CV:電流電圧曲線) を予測できるアプリの開発のために、電気二重層効果を考慮した第一原理計算手法を発展させた。そのため、高並列計算が可能な電子状態計算パッケージSTATEに、溶液側の電気二重層 (ヘルムホルツ層) をRISM法に基づき考慮できる手法を移植する作業を開始し、これを順調に進めた。この金属電極系のための手法開発に加えて、半導体電極系のための手法開発も行った。すなわち、導電性担体・半導体・溶液界面において固体側の電気二重層 (空乏層) をab initio MC法に基づき考慮できるプログラムを開発した。また、通常密度汎関数 (DFT) 計算では吸着エネルギーが正しく再現できないため、RPAに基づき補正するための方法を試した。また、水素原子の量子効果を考慮するため、経路積分第一原理計算手法に基づく方法の検討も行った。以上のように、実効的な計算予測をするための非経験的なCV予測を行うという目標に向かって、開発を進展させた (図4-2-3-1)。

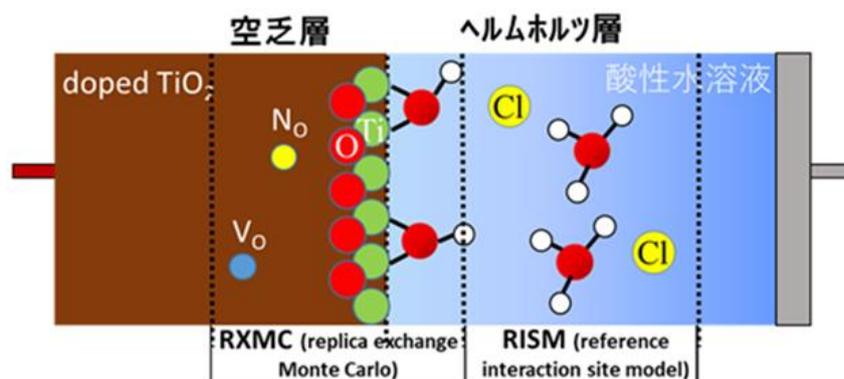


図 4-2-3-1. 半導体理論と溶液論を組み合わせた電池シミュレーションの構築
空乏層とヘルムホルツ層を考慮した電極触媒のシミュレーション手法を開発した。
溶液側での研究から、白金電極における従来の DFT 計算を補う方法として、RPA 法
などを用いた手法が有効であることがわかった。半導体側での研究から、酸化物触
媒が白金よりも高活性を示す原因が説明できた。また、活性度向上のための物質設
計指針を提示した。

従来の第一原理DFT計算は白金表面上での水素の吸着エネルギーを過大評価し、高精度予測ができない。そこでRPA法に基づく高精度計算手法を用いることにより、実験をよく再現できることを示した。また、吸着サイトが水素原子の量子効果によって主に決まる様子を、詳細に示した[1]。これに加えて酸化物系半導体電極が、なぜ白金を超える酸素還元反応活性を示すのかについて、ハイスループット計算に基づいてその可能性を示すことができた。この計算の定量性を高め、より現実的な不純物分布の下で計算が可能になるように、ab initio MC法を開発した[2]。ab initio MDによるアプローチが固固界面では必ずしも有効ではないが、本計算手法ではポテンシャル障壁を乗り越えて速やかに熱平衡状態をサンプリングすることができることを示した。本計算手法はポスト京のような超並列機があって初めて実行可能となるものである。

[研究成果の利活用について]

NEDOの酸化物カソード触媒開発のプロジェクトにおいて、ZrO₂やTiO₂が高活性を示す理論説明を与えることができた[3]。さらに、活性化向上のための指針を与えるなど触媒開発に貢献した。

[今後について]

燃料電池のサイクリックボルタンメトリー (CV:電流電圧曲線) を予測できるアプリの開発のために、電気二重層効果を考慮した第一原理計算手法を発展させた。金属電極系および半導体電極系のための手法開発を行った。金属系に対しては計算精度の向上、半導体系に対しては新たな計算手法の開拓、ハイスループット計算による説明および開発指針の提案を行った。今後、ポスト京でのプロダクトランを意識した開発を行う予定である。

[参考文献]

- [1] L. Yan, Y. Sun, Y. Yamamoto, S. Kasamatsu, I. Hamada, and O. Sugino, “Hydrogen adsorption on Pt(111) revisited from random phase approximation”, *J. Chem. Phys.*, **149**, 164702 (2018).
- [2] S. Kasamatsu and O. Sugino, “Direct coupling of first-principles calculations with replica exchange Monte Carlo sampling of ion disorder in solids”, *J. Phys.*, **31**, 085901 (2019).
- [3] 山本良幸、笠松秀輔、杉野修「遷移金属酸化物 ZrO_2 を用いた電極触媒の計算機予測」燃料電池 vol. **18**, 33 (2018).

ロ) 全電池シミュレータの要素技術開発

[実施者] 館山佳尚 (物材機構)

[実施担当] Randy JALEM、袖山慶太郎、Ashu CHOUDHARY、Xichan GAO (物材機構)

[実施概要]

基盤アプリ stat-CPMD の開発に関しては、ポスト「京」のアーキテクチャに対応する形でメモリ削減に取り組むとともに、大規模系計算に向けた I/O 並列化の実装を完成させた。

「京」利用による二次電池メカニズム解明に関しては、電解液系に関する微視的物性の解析に加えて、遷移金属酸化物正極-電解液界面における電解液分子の吸着状態及び酸化還元反応、化学反応について世界に先駆けた第一原理計算解析を実行し、その微視的機構を明らかにした。また触媒系の遷移金属酸化物界面の解析と合わせて統合的な理解を進めている。さらに表面反応速度論、固固界面構造探索、電解液機械学習などに関する手法開発にも着手した。

[開発アプリケーションと計算モデル]

密度汎関数理論による電子状態計算をベースにした高精度第一原理分子動力学サンプリングを様々な系で実施。統計精度向上に向けて複数初期構造による統計サンプリングを行い、反応 (自由) エネルギープロファイルの計算には constrained 手法を用いた。利用アプリケーションとしては stat-CPMD および姉妹コードである CP を用いた。

[並列計算の方法と効果 (性能)]

stat-CPMD の並列化は、平面波基底、バンドインデックス、熱力学積分・多重サンプリングに対して MPI 並列化、FFT などの電子状態計算カーネル部分に対してスレッド並列化を行なっている。これらにより「京」上で浮動小数点演算効率 30% 以上 (最大で) を達成し、5000 原子以上の系のテスト計算に成功した。最近はさらなるメモリ使用の改良とそれに付随した I/O の並列化を行った。

[研究成果]

多重並列化による高効率化学反応自由エネルギー計算を目的とする基盤アプリ stat-CPMD については、昨年度 FFT 等の電子状態計算カーネルの高速化が終了し、ひとまず目標値である 5000 原子以上の系に対する第一原理サンプリング計算の実施に成功した。一方で、ポスト「京」コンピュータのアーキテクチャが徐々に明らかになり、大規模計算におけるメモリのボトルネック化が想定される事態となったことから、平成 30 年度はメモリ削減に関する調査および実装を行なった。また、I/O 負荷および親プロセスのメモリ負荷の軽減に向けた各 MPI プロセスからへの直接 I/O の実装も終了した。これにより大規模計算実行時の困難さが軽減できると考えられる。さらに stat-CPMD の公開に向けた環境整備をスタートさせたところである。

現在、大型蓄電池の開発に向けた基礎基盤技術の開発が盛んに行われているが、実用化にはさらなる高性能化、安全性向上が必要となる。しかし、実験観察の困難さも相まってその原子・分子レベルでの実態はまだわかっていない。

このような電極界面被膜 (SEI膜) や新規電解液微視的物性、電解液劣化の微視的機構を明らかにするためには、量子力学に基づいた予言性の高い第一原理サンプリングシミュレーションが必要となる。しかし第一原理計算は計算コストが非常に大きく、多数の原子・分子が関わる複雑な構造・現象の取り扱いには限度がある。私たちは「京」コンピュータなどの大規模スパコンを高効率利用可能な第一原理計算プログラム (stat-CPMD) の改良・開発を行うことで、電池の動作温度における原子・分子の複雑なダイナミクス・化学反応を精度よくかつ1ジョブで計算できるようにした。

平成30年度の成果としては、これまで集中して調べてきた高濃度電解液系の電気化学耐性に関する微視的機構に加えて、正極側で用いられる遷移金属酸化物と電解液の界面における電解液反応の第一原理サンプリング解析に取り組んだ (図4-2-3-2) [1]。高電位正極として知られる $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ と EC 電解液界面の電解液分子吸着状態、電気化学および化学反応に関する第一原理分子動力学サンプリング解析を行い、電解液 EC 分子の界面吸着分布は downward と upward の二種類が混在することを理論的に示した。さらに電子状態解析から、吸着だけでは EC 電解液分子の酸化は起こりにくく、界面水素移動反応がトリガーとなることが示唆された。最終的に、電解液 EC 分子から CO_2 ガスが生成される分解反応の反応エネルギープロファイルを得ることができた。触媒系においても遷移金属酸化物/水界面の CeO_2/Pt cluster/ H_2O 系の電子・プロトン移動の機構解明を行い、それらの結果を俯瞰することによって、酸化物界面の一般的な学理の抽出に取り組んでいる [2]。

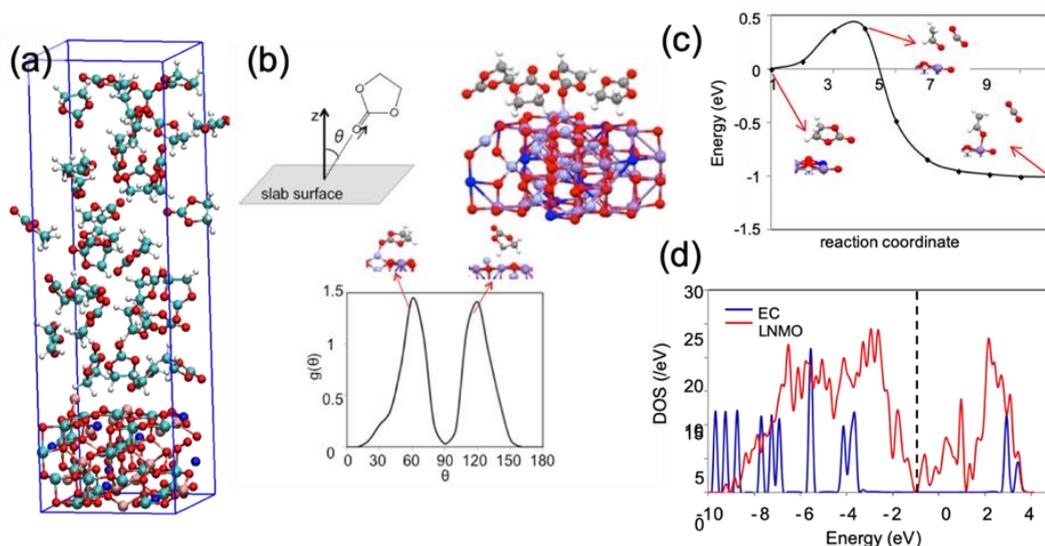


図 4-2-3-2. 高電位正極 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ /EC 電解液界面の電解液分子吸着状態、電気化学および化学反応に関する第一原理分子動力学サンプリング解析。

(a) 界面シミュレーションに用いたスーパーセル。(b) 電解液 EC 分子の吸着分布。downward と upward の二種類が混在することが理論的に示唆された。(c) 電解液 EC 分子の表面における分解反応の反応エネルギープロファイル。表面への水素移動がトリガーとなり CO_2 が生成することが示された。(d) 表面電子状態密度。吸着だけで酸化反応が起こらないことを示唆。

また我々は電解液・固体電解質に関するデータ生成のためのハイスループット第一原理計算および機械学習解析についても研究を進め、記述子や有望材料の提案を行うことにも取り組んでいる[3]。さらに実験（国プロ）・企業との連携を積極的に推進し、電池内の複雑な原子・分子挙動の解明を強力に進めている。

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

共同研究（実験研究者、産業界）

- ・ 東京大学・山田淳夫教授、山田裕貴講師
- ・ 富士フイルム・奥野幸洋主任研究員

他プロジェクトへの展開

- ・ 文部科学省元素戦略プロジェクト研究拠点形成型・京都大学「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点
- ・ JSTイノベーションハブ構築支援事業・情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI2I)
- ・ JST先端的低炭素化技術開発・次世代蓄電池（ALCA-SPRING）
- ・ 科研費特別推進
- ・ JST-ACCEL

アプリケーション公開

- ・ webでの公開に向けた準備に着手した。

[今後について]

基盤アプリ開発に関してはstat-CPMDの大規模計算適用向けのメモリ関係のチューニングを行い、達成目標計算をスムーズな実行を可能にした。今後は自由エネルギー計算機能の高度化にさらに取り組む。第一原理計算による二次電池機構解析についてはすでに世界トップグループとなっており、今後も深い洞察をもとに斬新な新規概念・メカニズムの提案を行える研究、新規計算科学・データ科学アプローチを鋭意進めていく。

[参考文献]

[1] Yukihiro Okuno, Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Ganes Shukri, Yoshitaka Tateyama, *J. Phys. Chem. C* **123**, 2267–2277 (2019).

“Structures, Electronic States, and Reactions at Interfaces between $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Cathode and Ethylene Carbonate Electrolyte: A First-Principles Study”

[2] Lucie Szabova, Matteo Farnesi Camellone, Fabio Negreiros Ribeiro, Vladimir Matolin, Yoshitaka Tateyama, Stefano Fabris, *J. Phys. Chem. C* **122**, 27507–27515 (2018).

“Dynamical Solvent Effects on the Charge and Reactivity of Ceria-Supported Pt Nanoclusters”

[3] Keitaro Sodeyama, Yasuhiko Igarashi, Tomofumi Nakayama, Yoshitaka Tateyama,

Masato Okada, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 22585–22591 (2018).

“Liquid electrolyte informatics using an exhaustive search with linear regression”

ハ) 全電池シミュレーション技術の開発研究

[実施者]長岡正隆 (名古屋大)

[実施担当]稲垣泰一、Amine BOUIBES (名古屋大)

[実施概要]

MDソルバに依存するRedMoonの並列化効率を向上させるために、MDソルバにLAMMPSを用いたLAMMPSベースの新しいRedMoonの構築・整備を行った。

電極電位の制御条件下での二次電池用電解液の電極近傍における溶媒構造の解析と被膜形成シミュレーションを実施した。負の電極電位により、溶媒が電極表面第一層で強く配向することが分かった。これは、被膜形成が溶媒の還元から始まることを示唆している。

[開発アプリケーションと計算モデル]

計算モデル：リチウムイオン二次電池の炭素電極とエチレンカーボネート (EC) 電解液との界面系 (約1, 200, 000原子)。利用アプリケーション：MDソルバとして静電位制御機能を実装したLAMMPSを利用。また、Red Moon法プログラムを独自に開発。

[並列計算の方法と効果 (性能)]

RedMoonの並列化効率を向上させるために、MDソルバにLAMMPSを用いたLAMMPSベースの新しいRedMoonの構築・整備を行った。これにより100万原子系以上でもRedMoon計算が可能となった (図4-2-3-3)。また、大規模系において律速となりうる反応候補探索ルーチンを並列化することで、計算のさらなる効率化を行った。

[研究成果]

電極静電位一定の条件下でのMD計算を可能としたLAMMPSプログラムをLAMMPSベースの新しいRedMoonに組み込むことで、電極表面の電子分極効果を考慮した被膜形成シミュレーションを可能にした。MDソルバに関しては、大規模系での安定かつ効率的な計算を実現させるために、電極静電位一定条件を満たす電子分極の取扱いに拡張系の方法を採用した。また、MDソルバとは別に、RedMoonの化学反応の採択・棄却を扱うルーチンを修正した。これによって、被膜形成においてはQM/MM計算で得られた生成物比と同等な結果を古典力場計算のみからでも得られることを確認し、RedMoonの応用範囲を拡張した。

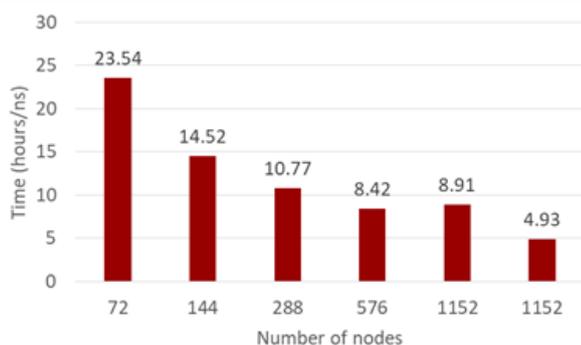


図 4-2-3-3. 120 万原子系におけるノード数に応じた計算時間 (時間/ns)

電極表面の電子分極効果を考慮し、電極に負の静電位をかけることにより、溶媒としてのエチレンカーボネート (EC) が電極表面第一層で強く配向することが分かった。これから、被膜形成がECの還元から始まることが確かとなった。また、被膜形成シミュレーションを行った結果、これまでの電極分極が無い場合に比べ、被膜構成要素の一つである炭酸イオンが電極表面に強く吸着し続けることが明らかとなった。これは、電極へのリチウムイオン挿入のメカニズムに強く影響する被膜-電極界面の構造に関する有用な知見である。さらに電池作動環境下で予測される被膜構造変化の分子機構を調査した。ここでは、(1)被膜は熱運動では容易に崩壊せずに逆に凝集すること、(2)電極表面の静電環境の変化に対して被膜構造は鈍感であること、(3)被膜の構成要素として存在するリチウムイオンの拡散が、電解液に接した被膜構造を壊すこと、を明らかにした。これらの結果が偶然でないことを示すために独立した複数の膜構造を用意しなければならないこと、そして非常に遅い被膜構造変化を追うために合計で数 μ s以上のMDシミュレーションが必要であることから、「京」の使用が非常に重要である、と言える。

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

共同研究 (実験研究者)

- ・駒場慎一教授 (東京理科大学) との共同研究 (Naイオン電池の添加剤効果に関する研究)
- ・山田淳夫教授 (東京大学) との共同研究 (濃厚電解液を用いた二次電池の被膜形成に関する研究)

他プロジェクトへの展開

- ・京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット (拠点長: 京大院工・田中庸裕教授)

[今後について]

Red Moon法プログラム (RedMoon)へ電極電位を制御する機能を実装し、被膜形成などの電気化学反応シミュレーションの高度化を達成した。また、「京」およびポスト「京」の利用を想定した超並列計算に対応可能なLAMMPSベースのRedMoonの開発が完了した。今後は、本シミュレータを活用し、実験研究者と共に濃厚電解液などの有望材料に対する共同研究を実施すると共に、RedMoonにより得られた被膜構造を用いて、イオン抵抗を推算する新規シミュレーション技術を開発する予定である。

[参考文献]

- [1] A. Bouibes, N. Takenaka, T. Fujie, K. Kubota, S. Komaba, M. Nagaoka, *ACS Appl. Mater. Interface*, **10**, 28525–28532 (2018).
- [2] T. Inagaki, N. Takenaka, M. Nagaoka, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 29362–29373 (2018).
- [3] T. Fujie, N. Takenaka, Y. Suzuki, M. Nagaoka, *J. Chem. Phys.*, **149**, 044113 (2018).

二) 全電池シミュレータの基盤技術の開発研究

[実施者]岡崎進 (名古屋大)

[実施担当]篠田渉、吉井範行、安藤嘉倫、藤本和士、張家超 (名古屋大)

[実施概要]

MODYLASの高度化・開発を継続した。特に、平成29年度に開発した新規通信アルゴリズムならびに新規FMM演算アルゴリズムのMODYLASへの実装を行った。一方で、圧力テンソル計算ルーチンの開発、FMM計算の正則化、MS-EVBモデルコードのMODYLASへの実装を行った。単精度・倍精度混合演算化についても精度検証を行った。

全電池シミュレータの重要な構成要素である三相界面など不均一環境下での物質輸送に対する解析手法の開発に着手するとともに、電解質膜中でのグロータス機構を含むプロトン移動について継続して研究を行った。前者では特に位置に依存する拡散係数の評価方法を開発し、その検証を行うとともに、これを用いた物質輸送係数評価の方法論開発を行った。

[開発アプリケーションと計算モデル]

MODYLASにおいては、全原子ならびに粗視化モデルのMD計算が可能となるようアプリを設計し、開発中である。ほぼすべての古典力場に対応しており、テーブルポテンシャルも利用でき、分子系は汎用的にシミュレーションできる。主として100万原子を超える大規模系に対して有効である。プロトン移動に関しては、VothらによるEVBモデルを採用した。

[並列計算の方法と効果 (性能)]

FMM計算、対相互作用計算共に、原子座標、多極子等の新規MPI通信アルゴリズムMTD法を提案し、MODYLASに実装した。これにより、従来の1/2の通信量で必要情報をノード間で交換することが可能となった。

プロトン移動を記述するプログラムについては、単コアでのプロトタイプ版を用いて研究を行ったが、これまでにMODYLASに実装し、並列化方針についても検討を行った。

[研究成果]

MODYLASの計算は大きく分けてFMM計算部の演算と通信、対相互作用計算部の演算と通信とからなる。この中で、平成29年度までにFMM演算に対して基底関数のsolid harmonicsへの置換、漸化式、多極子の対称性の利用、極座標軸の回転による単純化など新規アルゴリズムの実装を行い、相互作用直接計算において演算時間を約40%削減し、FMM演算の演算量を約1/6にまで削減し、演算時間も1/4に削減することに成功してきた。平成30年度は、新規な通信アルゴリズムMTD法を開発し、これをMODYLASに実装することにより、相互作用直接計算、FMM計算共に通信時間を約50%削減した。一方で、計算精度の劣化を伴わない相互作用直接計算の単精度・倍精度混合演算化、またFMM計算の完全単精度化を行い、SIMDの有効利用、通信量の削減の目途を得た。また、プロトタイプコードにおいてFMM計算の正則化を行い、全エネルギー保存を格段に改善した。このように、1億原子系に対してMD計算1ステップを3msで実行する最終目標の実

現に着実に近づきつつある。

MODYLASの計算機能としては、FMM計算における圧力テンソル計算ルーチンを開発し、MODYLASに実装した。また、hydroniumイオンによる単純な輸送に加えて、化学反応の組み換えによるプロトン移動反応、さらにはグロートス機構をも含むプロトン輸送を記述できるEVBモデルの1コア版をMODYLASに実装し、並列化方針について検討を行った。自由エネルギー計算に関しても、MODYLASにおいて熱力学積分法を必要に応じた形式で汎用的に利用できるよう、相互作用関数中への摂動パラメータ λ の導入やFMM計算におけるbackground chargeの取り扱いの整備等を行い、いずれもMODYLASに実装した。また、燃料電池電極4相界面の解析のために白金に関わる新規相互作用関数を導入したほか、高分子系の計算に必要な相互作用関数、初期構造に発生プログラム等の整備を行った。

平成30年度はアプリの開発に集中し、サイエンス研究については予備的な検討を行ったのみである。その中で、不均一系において位置に依存する自己拡散係数の数値的に厳密な新規計算方法を提案し、水中の低分子を用いて検証を行った。この方法に基づくと、計算精度の低い従来のランジュバン方程式もしくは一般化ランジュバン方程式の成立を仮定した近似的な方法と異なり、ほぼ正しい自己拡散係数を得ることができた（表4-2-3-1）。

表 4-2-3-1. 新規方法論で計算した水中の低分子の自己拡散係数。
検証のため、バルク水中で行ったテスト計算。

	Present method	Marrink-Berendsen	True value	$\times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ <i>resolution/Å</i>
H ₂ O	4.6	3.5	4.4	5
O ₂	4.5	2.5	4.0	5
H ₂	8.3	3.8	10.1	10

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

- ・ ImPACT伊藤プログラムとの連携
- ・ NEDO超々プロジェクトとの連携
- ・ 花王、トヨタ自動車、資生堂、東レ等との共同研究

[今後について]

ほぼアプリ開発に集中して開発、研究を進めてきている。その成果は着実に得られつつあり、今年度までに開発した各モジュールをMODYLASへと集約、実装し、研究に用いる実用ソフトとしての高性能アプリを実現した。一方で、来年度からはポスト京を前提としたチューニングを進めてさらに高性能化を図るとともに、サイエンス研究も本格的に開始し、成果創出フェーズに向けた準備を進める。

[参考文献]

- [1] A.-T. Kuo, K. Takeuchi, A. Tanaka, S. Urata, S. Okazaki, W. Shinoda, "Exploring the effect of pendent side chain length on the structural and mechanical properties of hydrated perfluorosulfonic acid polymer membranes by molecular dynamics simulation", *Polymer*, **146**, 53-62 (2018).
- [2] R. S. Payal, K. Fujimoto, C. Jang, W. Shinoda, Y. Takei, H. Shima, K. Tsunoda, S. Okazaki, "Molecular mechanism of material deformation and failure in butadiene rubber: Insight from all-atom molecular dynamics simulation using a bond breaking potential model", *Polymer*, **170**, 113-119 (2019).
- [3] K. Fujimoto, R. S. Payal, T. Hattori, W. Shinoda, M. Nakagaki, S. Sakaki, S. Okazaki, "Development of dissociative force field for all-atomistic molecular dynamics calculation of fracture of polymers", *J. Comp. Chem.* accepted (2019).

4-2-4. サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー

[責任者] 田中秀樹 (岡山大)

[実施者] 田中秀樹 (岡山大)、武次徹也 (北海道大)、中井浩巳 (早稲田大)、奥村久士 (分子研)

[研究の背景と目的]

エネルギー資源を輸入に頼る我が国では、エネルギーの有効な循環が国家的重要課題である。本サブ課題では、化学エネルギーの新規な資源開発と貯蔵の効率化を目指す。エネルギー・環境問題解決に必須であるメタンとCO₂の分離・回収、貯蔵、変換にわたる化学エネルギーの高度利用を目指して、ポスト「京」を活用できるアプリケーションを開発し、企業や実験研究者との緊密な連携をとりつつエネルギー多消費型工業プロセスを革新する。そのために、化学エネルギー創成・消費の根幹となるメタンハイドレートの資源化およびCO₂の分離・回収、貯蔵による化石燃料の安定的利用、さらに高機能触媒の開発を実施する。

水は地球上に普遍的に存在する無害で環境負荷の少ない物質であり、資源および貯蔵媒体、また蓄冷物質として水の利用を図ることは、化学エネルギーの創生とエネルギーサイクル構築の観点から、極めて重要である。日本近海に埋蔵されているメタンハイドレートからのメタンの生産と貯蔵、また環境負荷の少ないハイドレートの別の有効な利用法として、水素やオゾンの安全な貯蔵法の実用化に対する指針の提供を目的とする。ハイドレートはCO₂の廃棄手段の候補でもあり、メタンハイドレートにCO₂を注入し、メタンハイドレート中のメタンをCO₂に置換しつつ、有用なメタンを得る可能性を、理論的基盤に基づきダイナミクスを含めて検証する。また、水の相転移時の大きな潜熱を利用して、新規な蓄冷材料を開発することが強く期待されている。このうち、セミクラスレートを主とする蓄冷材は、構造や熱力学等の基礎的な情報が未解明であり、これらを微視的観点から基礎原理を解明して、実用化につなげる。

一方、物質科学分野において、触媒はエネルギー問題を解決する鍵を握る。本課題では、産業界に需要のある「触媒反応機構解明のための反応経路探索技術」を確立し、理論が先導する高収率高選択性の新規触媒設計というアプローチの実現を目指す。国内ではここ十年ほど貴金属をユビキタス元素に置き換える元素戦略プロジェクトが進められており、実験と理論計算の協働が重要視されている。白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発が実現すれば、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成することができる。

更に、地球温暖化防止をはじめとする環境諸問題の対策と、化石燃料の有効利用によるエネルギーの安定供給が可能な社会を築いていくため、CO₂排出量の大幅な削減が求められている。この目標達成に向けて、工場や発電所などの大規模排出源からCO₂を分離・回収する技術が近年注目を集めている。我が国でも回収したCO₂を地中深くに輸送し貯留する手段 (CCS) の実証試験が開始しているが、実用化促進にはCO₂分離・回収のコスト削減が求められている。そのためには、反応条件の制御および材料の高性能化が必要である。ここにおいて計算科学を用いた微視的視点からの反応原理の究明、および系統的な物質の特性評価が課題解決を加速するアプロ

ーチとして期待されている。本研究では、超並列電子状態計算に基づく大規模CO₂分離・回収シミュレーションとその解析を実現するアプリケーションの構築を行う。これを用いてCO₂の効率的な分離・回収に資する革新的材料を理論先導で設計し、CO₂問題の解決に貢献する。

[研究成果の概要]

ハイドレートの利用や高機能触媒開発、CO₂分離・回収に向けた以下のような成果が得られた。

温度、圧力、そしてゲストのモル分率を独立変数としてハイドレート生成条件を求める基礎原理の更なる展開を図り、それに基づいたソフトの開発を通じて種々のゲスト分子の取り扱いが可能となった。また、包接水和物による天然ガスパイプラインの詰まりを防ぐ速度論的阻害剤の分子機構を大規模分子動力学シミュレーションにより明らかにした。

GRRM/SMASHによりC₄H₁₀の反応経路網羅探索を実施した。GRRM/NTChemの稼働を確認し、さらにGRRMを任意のMPI並列電子状態計算ソフトウェアと連結できるmpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手した。Cuクラスター触媒によるNO解離に対し反応経路探索+インフォマティクス解析を行い、さらに窒素ドーパ炭素触媒の微視的機構解明に成功した。

凝縮相内化学反応シミュレータの高速化に向けて階層的MPI並列メタダイナミクス計算の機能を実装し、また、省メモリ並列計算のアルゴリズム開発を行い、取り扱える原子系サイズを1000万原子以上に拡張した。立体障害を持つ単一および混合アミン溶液系の大規模化学反応シミュレーションを実施し、CO₂吸収反応経路に関する解析を進めた。

[サブ課題C内活動]

実験研究者や企業研究者と一層の連携を図るため、サブ課題Cが主体となって、「化学エネルギーの有効利用」をテーマにした第2回実験・産業との連携シンポジウム(2018年12月11日)を北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール(鈴木章ホール)にて開催し、実験研究者のご講演、計算側からのポスター発表などにおける質疑応答など共通の課題や連携の課題について議論した。

イ) メタンや水素ハイドレート実用基盤の確立

[実施者] 田中秀樹 (岡山大)

[実施担当] 松本正和、矢ヶ崎琢磨 (岡山大)

[実施概要]

温度、圧力、そしてゲストのモル分率を独立変数としてハイドレート生成条件を求める基礎原理と、それに基づいたソフトの種々のゲストへの拡張を行った。さらに、包接水和物や氷の結晶構造を作成するアプリを、より多数の氷種などを扱えるようにした。

包接水和物による天然ガスパイプラインの詰まりを防ぐ速度論的阻害剤の分子機構を大規模分子動力学シミュレーションにより明らかにした。また、モル分率も含めたハイドレート生成条件を、エタン・プロパンや希ガスに応用して、メタンなどのゲスト分子の占有率を温度と圧力に対して予測し、実験との良い一致が確認された。

[利用アプリケーション]

約26,000の水分子、1,500のゲスト分子、阻害剤高分子からなる系の分子動力学計算によって速度論的阻害剤の機構を研究した。ハイドレート構造の作成にはGenIce、分子動力学計算にはGROMACSを用いた。

[研究成果]

メタンハイドレートの資源化や海底へのCO₂廃棄の実現には、その熱力学的安定性の評価が不可欠である。そのために、我々は温度(T)、圧力(p)、そしてゲストのモル分率(x_g)を独立変数としてハイドレート生成条件を求める基礎原理を見出し、それに基づいたソフト開発をメタン以外の天然ガスや希ガスに拡張した。

結晶の理論研究のためには、まずその構造を生成する必要がある。包接水和物や共存する氷のほとんどはプロトン無秩序結晶であり、また系全体を無分極とする必要があり、その構造の生成は容易ではない。我々は、様々な包接水和物や氷の構造を生成できる新しいアプリ、GenIceを開発し、これを順次改良して生成できる氷種を増加させた。

これまでの研究で我々は速度論的阻害剤(Kinetic Hydrate Inhibitor, KHI)と呼ばれるポリマーによる包接水和物の生成遅延化がGibbs-Thomson効果によることを明らかにした。これを基にして、KHIのサイズ効果に関する新しいモデルを提唱した。分子動力学シミュレーションを用いて、このモデルの重要なパラメータである包接水和物への吸着自由エネルギーをPVCapについて計算した。我々のモデルは、実験で示されているPVCapのサイズ効果を良く再現することができた。このモデルはさらに、大きなポリマーと小さなポリマーの混合物の性能が高いこと、ならびに、ガスハイドレートには機能しない四級アンモニウムカチオンがTHF(tetrahydrofuran)ハイドレートに対しては有効なKHIとなる機構についても包括的に説明

することができた (図4-2-4-1) [1]。

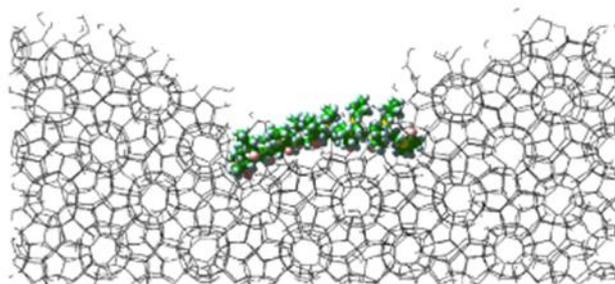


図 4-2-4-1. 包接水和物の表面に吸着するポリマーによる結晶成長の速度低下

ハイドレートが安定に存在できる条件を、分子間相互作用のみから計算する方法を提案し、それを幾つかの炭化水素や希ガスハイドレートに適用した。すなわち、van der Waals and Platteeuwに基づく統計熱力学理論を発展させて、ハイドレートとゲスト相もしくは水の2相共存条件を、自由エネルギー計算から求めることで、完全な相平衡の記述を行い、炭化水素や希ガスに適用した。この結果、炭化水素の安定な組成範囲は極めて多様であり、特にエタンが特徴的であることを発見した。また、水とハイドレートが共存するときのメタンの溶解度の温度依存性は、通常とは逆であることを示し、その原因がメタンの化学ポテンシャルの急激な低下にあることを見出した (図4-2-4-2) [2]。

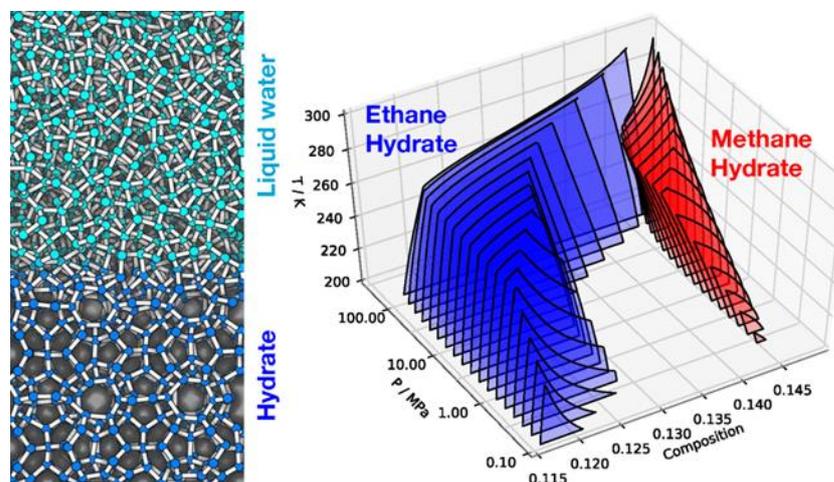


図 4-2-4-2. 水と共存するハイドレート (左) とメタンおよびエタンハイドレートの、温度、圧力、組成に関する相図

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

1. メタンハイドレートを試掘している東北大圓山グループとの連携
2. パナソニックとの蓄冷材としての応用を目指しての共同研究

3. 氷構造の生成ソフトの公開

[今後について]

包接水和物の速度論的阻害剤の吸着と成長遅延化機構を明らかにした。実験研究に対し、従来より高性能な阻害剤を設計する指針を提供することを目指し、阻害剤の重合度の効果や核生成への影響などを明らかにしてきた。また、水(氷)、ゲスト、そして包接水和物からなる系の相図を求める手法を確立し、多数のゲスト分子種に適用してきた。

今後、蓄冷材として期待されるセミクラスレートのMDシミュレーションなどにより、その構造と安定性を解明する。また、MDシミュレーションと基礎理論の両面から、ハイドレートにおけるメタンと二酸化炭素の置換時のエネルギー収支等についての解明をする。

[参考文献]

- [1] T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka, "Molecular Dynamics Study of Kinetic Hydrate Inhibitors: The Optimal Inhibitor Size and Effect of Guest Species", *J. Phys. Chem. C* **123**, 1806-1816 (2018).
- [2] H. Tanaka, T. Yagasaki, M. Matsumoto, "On the phase behaviors of hydrocarbon and noble gas clathrate hydrates: Dissociation pressures, phase diagram, occupancies, and equilibrium with aqueous solution", *J. Chem. Phys.* **149**, 074502, 1-15 (2018).

ロ) 触媒反応経路探索計算

[実施者]武次徹也 (北海道大)

[実施担当]前田理、小林正人、岩佐豪、高敏、小野ゆり子、長谷川淳也、中山哲 (北海道大)

[実施概要]

GRRM/SMASHにより C_4H_{10} の反応経路網羅探索を実施した。GRRM/NTChemの稼働を確認し、さらにGRRMを任意のMPI並列電子状態計算ソフトウェアと連結できるmpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手した。Cuクラスター触媒によるNO解離に対し反応経路探索+インフォマティクス解析を行い、さらに窒素ドーピング炭素触媒の微視的機構解明に成功した。

[開発アプリケーションと計算モデル]

銅クラスター触媒 (Cu_{13}) によるNO解離反応に対し、GRRM/Turbomoleにより反応経路探索計算を行い、インフォマティクス解析を実施。 C_4H_{10} に対しGRRM/SMASHにより網羅的反應経路探索を行い、436の素反応過程の反応経路を計算 (図4-2-4-3)。GRRMは開発者版を利用。

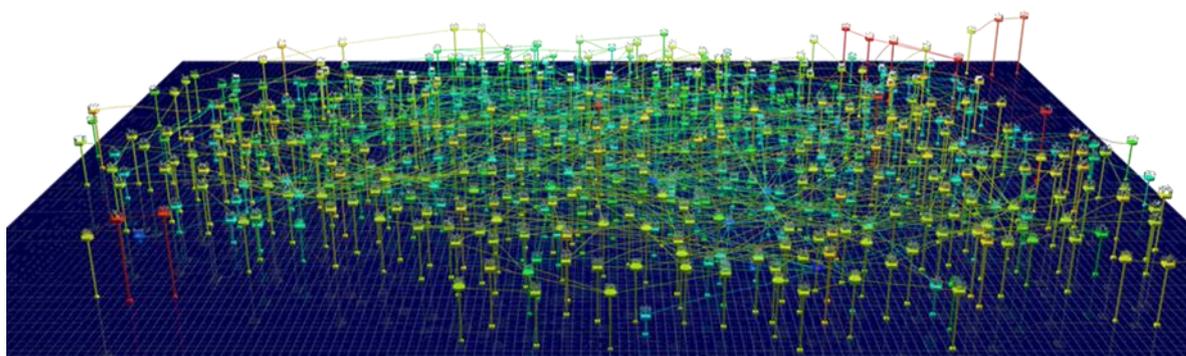


図 4-2-4-3. GRRM/SMASH で求めた C_4H_{10} 分子の反応経路ネットワーク (平衡構造 : 129, 遷移状態構造 : 436) を開発中の GRRM 解析可視化ソフトウェアにより可視化した図。二次元上に平衡構造および遷移状態構造を配置し、エネルギーの高さを縦棒の長さと色で表現している。縦棒の上部に各分子構造が描画されている。

[並列計算の方法と効果]

MPIコミュニケーターをGRRM制御 (1 node使用)、複数の電子状態計算制御用(それぞれ複数 node使用)に分割し、MPI並列によるGRRMと量子化学計算プログラムの超並列計算を可能にした (図4-2-4-4)。名大FX100においてGRRM/SMASHを動作させ、さらにGRRM/NTChemの稼働を確認した。任意のMPI並列電子状態計算ソフトウェアを用いたGRRM超並列計算を可能とするため、mpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手した。膨大なデータ処理に向けて、GRRM解析可視化ソフトウェアの開発も進めた。

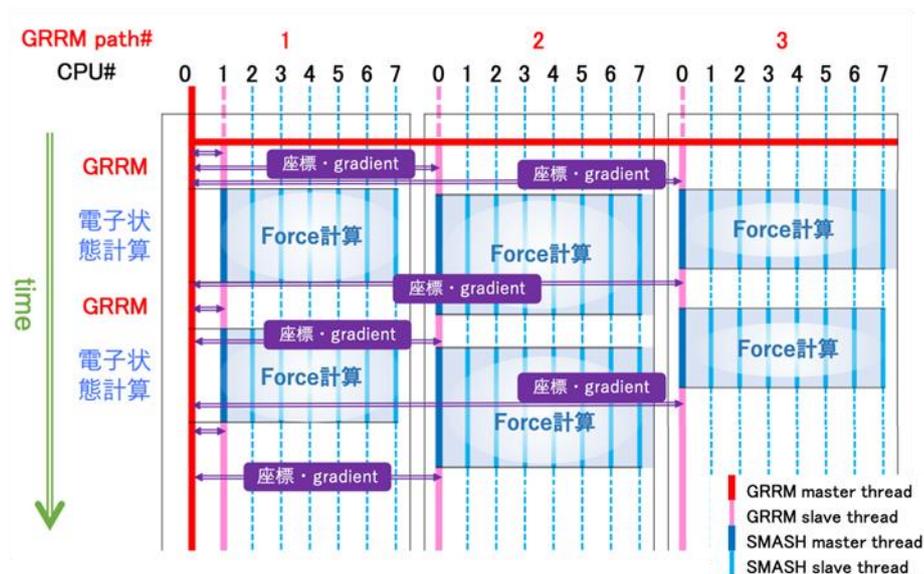


図 4-2-4-4. 反応経路自動探索プログラム GRRM と超並列電子状態計算プログラム (SMASH or NTChem) を一体化したプログラムの概念図。反応経路探索は複数の CPU 群 (赤字) に分けて並列で実施され、個々の反応経路探索は複数の CPU (黒字) による超並列電子状態計算により実施される。

[研究成果]

反応経路自動探索プログラム (GRRM) の超並列化電子状態計算ソフトウェアとの連結を含む高度化と、応用課題として理論-実験連携による未知の触媒反応機構解明および新規触媒の開発を目指した研究を進めている。アプリ開発については、SMASH, NTChemに限定せず任意の MPI 並列電子状態計算ソフトウェアを用いた GRRM 超並列計算を可能とするため、mpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手し、反応経路自動探索計算の超並列計算を実施した。さらに京およびポスト京で得られる膨大な出力ファイルをデータベース化し、可視化を行うソフトウェアの作成に取り組んだ。また、銅クラスター触媒を例として GRRM による反応経路自動探索計算で得られる多数の遷移状態構造のデータに対しインフォーマティクスに基づく解析を行い、反応障壁を支配する要因を特定することに成功した[1]。

より出口を指向した課題として、実験と連携して窒素ドープ炭素材料の酸素還元反応 (ORR) への触媒活性における窒素ドープの効果を詳細に調べた[2, 3]。窒素ドープ炭素触媒を表すモデルとして 12×12 スーパーセルからなるグラフェンの中に約 1.5 nm の細孔を導入し、様々な形で窒素ドープを行って ORR 中間体の吸着状態に対し DFT 計算を行った。その結果、グラファイト位置に窒素をドープした炭素触媒における小さな細孔のジグザグ状のエッジが活性サイトであることが示され、さらに窒素ドープ量について 0.4 原子% (ピリジン位置またはグラファイ

ト位置に窒素原子を1つドーブ) から7.3原子%(グラファイト位置に窒素原子を均一にドーブ) まで変化させその効果を調べたところ、最初のプロトン共役電子移動 (PCET) が電位を決める素過程であり、吸着酸素分子の構造と窒素ドーブの様式が反応経路とORR活性に繊細に影響することが示された。本研究により炭素材料が微量な窒素導入で活性な酸素還元電極触媒になる仕組みが明らかとなり、NIMS-北大の合同でプレス発表を行った (図4-2-4-5) [2]。

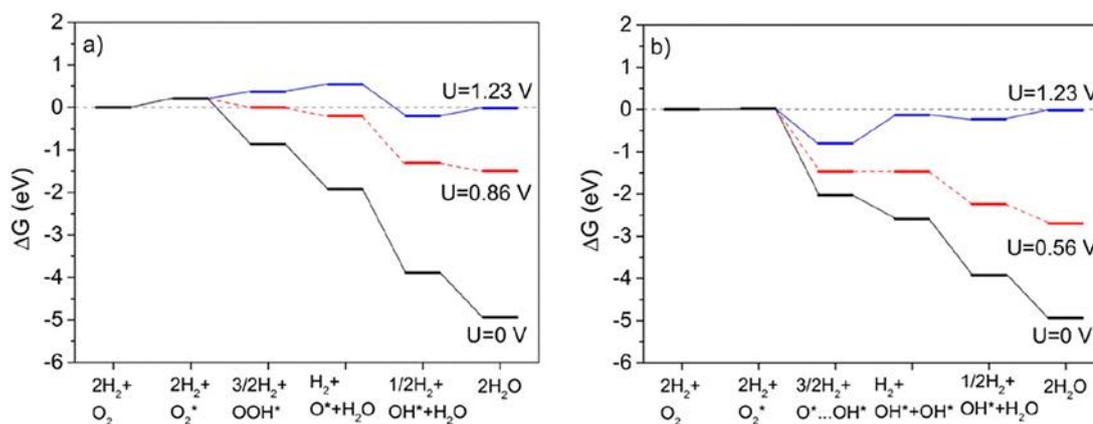


図 4-2-4-5. 理論計算により得られたグラファイト位置に窒素ドーブした炭素触媒モデルのジグザグ状のエッジにおける 4 電子酸素還元反応過程の自由エネルギー変化：

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

共同研究 (実験研究者)

- ・NIMS 魚崎浩平フェロー実験グループと非白金酸素還元触媒の窒素ドーブした炭素触媒の微視的触媒機構を解明

他プロジェクトへの展開

- ・元素戦略projectと連携し、反応経路自動探索プログラムGRRMの表面触媒反応経路探索への拡張・遷移状態構造のインフォマティクス解析を試みている。

アプリケーション公開

- ・北海道大学前田理教授のグループで人工力誘起反応法を含む新機能を搭載した反応経路自動探索法プログラムGRRM17を配布

[今後について]

任意のMPI並列電子状態計算ソフトウェアを用いたGRRM超並列計算を可能とするため、mpi_comm_spawnを用いた並列機能の実装に着手し、反応経路自動探索計算の超並列計算を実施した。今後はGRRM/NTChemの連結ソフトウェアにより触媒反応の反応経路自動探索計算を試みる。二次元材料に基づく非白金燃料電池触媒およびCO₂の有効資源化触媒に対して未知の触媒反応機構の解明を目指す。

[参考文献]

- [1] T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K. Shimizu, S. Maeda, and T. Taketsugu, "Combined Automated Reaction Pathway Searches and Sparse Modeling Analysis for Catalytic Properties of Lowest Energy Twins of Cu₁₃," *J. Phys. Chem. A*, **123**, 210-217 (2019).
- [2] K. Sakaushi, M. Eckardt, A. Lyalin, T. Taketsugu, R. J. Behm, and K. Uosaki, "Microscopic Electrode Processes in the Four-Electron Oxygen Reduction on Highly Active Carbon-Based Electrocatalysts," *ACS Catalysis*, **8**, 8162-8176 (2018).
NIMSとの共同研究でプレス発表(2018/8/9)
「炭素材料が微量な窒素導入で活性な酸素還元電極触媒になる仕組み
～非白金族電極触媒を用いた酸素還元反応の微視的機構解明への一歩～」
- [3] M. Eckardt, K. Sakaushi, A. Lyalin, M. Wassner, N. Hüsing, T. Taketsugu, and R. J. Behm, "The Role of Nitrogen-doping and the Effect of the pH on the Oxygen Reduction Reaction on Highly Active Nitrided Carbon Sphere Catalysts," *Electrochimica Acta*, **299**, 736-748 (2019).

ハ) CO₂吸収シミュレーションのための超並列電子状態計算法

[実施者] 中井浩巳 (早稲田大)

[実施担当] 吉川武司、西村好史、周建斌 (早稲田大)

[実施概要]

凝縮相内化学反応シミュレータを用いた反応自由エネルギー計算を効率よく実行するため、階層的MPI並列メタダイナミクス計算の機能を実装した。また、省メモリ並列計算のアルゴリズム開発を行い、従来数百万原子系にとどまっていたサイズの取り扱いを100万原子以上に拡張した。

立体障害を持つ単一および混合アミン溶液系の大規模化学反応シミュレーションを実施し、CO₂吸収反応経路に関する解析を進めた。

[開発アプリケーションと計算モデル]

利用アプリケーションは、分割統治法に基づく大規模量子分子動力学計算を可能とするDC-DFTB-Kである。階層的並列メタダイナミクス計算の動作確認は、シクロブテンの開環反応を対象として検証した。メモリ削減アルゴリズムの性能評価では、純水系 (最大13,891,500原子) を取り扱った。アミン溶液系のCO₂吸収シミュレーションでは、約3,000原子からなる基本セルを用いた。アミン、水、CO₂によって構成されるモデルに加えて、反応中間体や生成物が初期構造に含まれる系についても検討を行った。

[並列計算の方法と効果]

DC-DFTB-Kは、MPIとOpenMPのハイブリッド並列により低次スケーリング電子状態計算を達成している。メタダイナミクスにおけるサンプリングに関する並列化軸を新たに導入することで、高効率に自由エネルギー地形をサンプリングする計算を実行できるようにした (図4-2-4-6)。また、メモリ使用量のボトルネックとなる演算を反復することにより、大規模計算におけるメモリ条件の制約を緩和するアルゴリズムの開発・実装を行った。

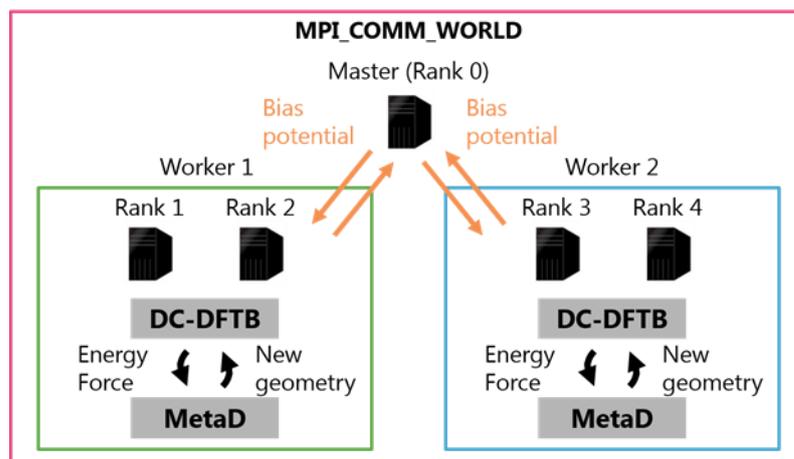


図 4-2-4-6. DC-DFTB-K の階層的並列化イメージ。

管理プロセス (Master) が、実行プロセス (Worker) で行われる電子状態計算 (DC-DFTB) に基づくメタダイナミクスシミュレーション (MetaD) から得られるバイアスポテンシャルを MPI 通信によって集積制御する。

[研究成果]

DC-DFTB-Kでは、計算モデルをいくつかの部分系に分割してMPIプロセスに割り当てた超並列計算に対応している。小～中規模の解析において大規模計算資源をフル活用するため、複数の初期構造を準備した上で同時にメタダイナミクスシミュレーションを実行し、自由エネルギー地形を計算する手法を整備した。シクロブテンを用いたテスト計算において、図4-2-4-7 (a)の開環反応が起こるまでに要したトラジェクトリ当たりの平均および合計のメタダイナミクスシミュレーション時間を図4-2-4-7 (b)に示す。トラジェクトリ当たりの平均時間は、サンプリングに用いるwalkerの数が増加するに連れてほぼ線形に減少し、今後の応用に向けて実用的な実装であることが示唆された。

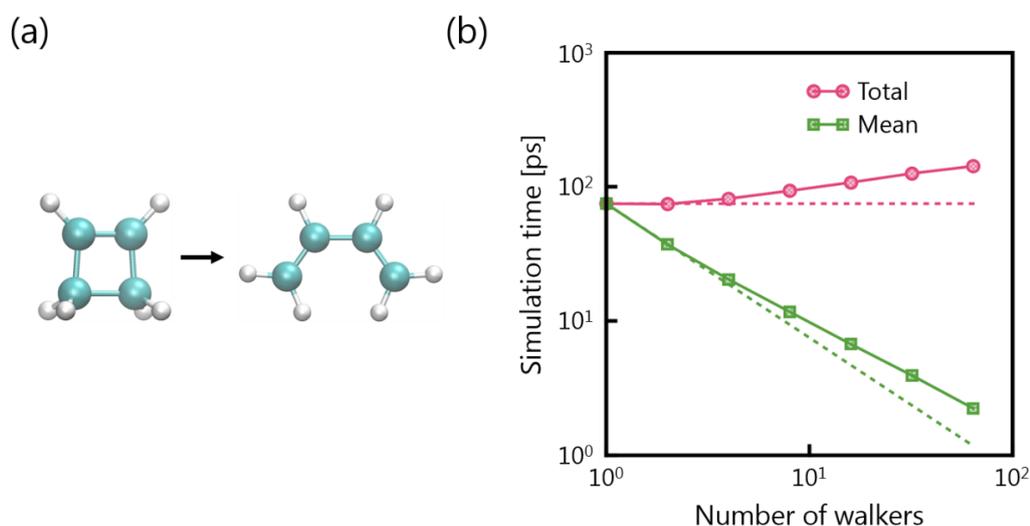


図 4-2-4-7. (a) テスト系として用いたシクロブテンの開環反応における構造変化。

(b) 開環反応が起こるまでに要したメタダイナミクスシミュレーション時間のサンプリング(walker)数依存性。点線は理想的なシミュレーション時間の変化、実線は本実装によって得られた計算結果を表す。

従来のDC-DFTB-Kでは、分割した部分系の計算に必要なデータ全てをメモリ上に確保して計算を実行してきた(in-core法)。しかしながら、一部の配列は原子数とノードに割り当てられた部分系の数の積に比例する要素数を必要とするため、数百万原子以上の系に対する計算の実行は「京」数千ノード程度の資源を用いても不可能であった。そこで該当する演算を複数回繰り返すことでメモリ使用量を削減するアルゴリズム(direct法)の開発と純水系を用いた性能評価を行った。その結果、表4-2-4-1に示すように従来法と比較して3倍弱程度計算時間が増加するものの、図4-2-4-8に示すように「京」2000ノード以上を用いてこれまでよりも一桁大きなサイズとなる1000万原子系を計算することに成功した。大規模ベンチマーク計算を実行する上で「京」の計算資源は不可欠であった。

表 4-2-4-1. 「京」における純水系の DC-DFTB2 シミュレーション 1 ステップにかかる計算時間(s)の従来法(in-core)とメモリ削減アルゴリズム(direct)での比較

Number of nodes	Number of atoms	In-core	Direct
500	1,093,500	110.8	272.6
1,000	1,500,000	93.3	242.7
2,000	1,996,500	78.6	218.6
4,000	2,592,000	65.0	181.3
8,000	3,295,500	52.3	163.8

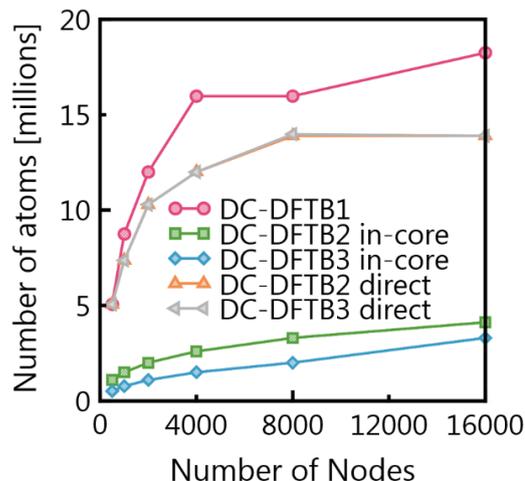


図 4-2-4-8. 「京」において DC-DFTB シミュレーション 1 ステップの計算を実行可能な純水系に含まれる原子数のノード数依存性の従来法(in-core)とメモリ削減アルゴリズム(direct)での比較

アミン溶液を用いたCO₂化学吸収において、立体障害を持つアミン種はCO₂分離・回収過程に必要な熱エネルギーコストなどの観点から注目されている。立体障害を持つアミン種では、従来のシミュレーションで見出されてきたカルバメート生成反応によるCO₂吸収より重碳酸イオン生成反応によるCO₂吸収が提唱されている。重碳酸イオン生成反応の機構として、酸塩基反応を経由する経路、カルバメートの加水分解により進行する経路、およびカルバメート生成時の反応中間体である双性イオンが分解する経路が考えられる。そこで、初期構造において溶液の組成が異なる系のシミュレーションを複数実行したが、いずれのトラジェクトリにおいても実行したシミュレーション時間内では重碳酸イオン生成反応は観測されなかった。メタダイナミクスを用いた効率的な構造サンプリングの可能性を探るため、アプリ開発で実装した階層的並列化手法を水溶液中での重碳酸イオン生成に関する自由エネルギー計算に適用した。小規模モデルから得られた2次元の自由エネルギー曲面を図4-2-4-9に示す。予備的に見積もられた反応の自由エネルギー障壁(約8.6 kcal/mol)は、実験値(11.8 kcal/mol)とまずまずの一致を示すことがわかった。

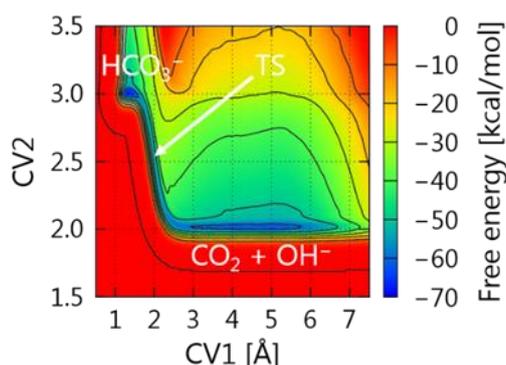


図 4-2-4-9. 階層的並列 DC-DFTB メタダイナミクスシミュレーションから求めた水溶液中の重碳酸イオン生成反応に対する 2 次元自由エネルギー曲面。CV1 は CO₂ の C 原子と OH- の O 原子間の距離を、CV2 は CO₂ の C 原子に対する O 原子の配位数を表す。

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

アプリケーションの公開

- ・DC-DFTB-Kを分子動力学計算用にカスタマイズしたプログラムDCDFTBMDのバイナリをアカデミックフリーで公開[1, 2]

公開ビデオの企画・作成

- ・最近までの成果を含めて、「CO₂分離・回収」について、ビデオを作成し、YouTubeに公開した。

[今後について]

アプリ開発では、DC-DFTB-Kに階層的並列化シミュレーション手法の機能を追加することで、効率的な自由エネルギー計算への対応を行った。また、メモリ使用量削減アルゴリズムを開発し、従来の実装では計算不可能であった1000万原子系を大規模並列計算で取り扱うことに成功した。今後、省メモリ化によって増加した計算時間を最小限に抑えるための高度化ならびにポスト「京」に向けたさらなるメモリ使用量削減の取り組みが課題となる。

応用研究では、立体障害を持つアミン溶液中でのCO₂吸収シミュレーションにおいて想定していた反応経路が観測されなかったため、メタダイナミクスへの切り替えの模索とその初期検討にとどまった。今後は、大規模系に対するメタダイナミクスシミュレーションの実行と解析を進める予定である。

[参考文献]

- [1] Y. Nishimura, H. Nakai, J. Comput. Chem. **40**, 1538 (2019).
- [2] Y. Nishimura, T. Yoshikawa, H. Nakai, J. Comput. Chem. Jpn. **17**, A21 (2018).

二) メタンハイドレードの溶融や貯蔵に向けた新規技術の理論

[実施者] 奥村久士 (分子研)

[実施担当] 伊藤暁、石村和也 (分子研)

[実施概要]

超音波をかけることによるメタンハイドレードのメカニカルな溶融のシミュレーションを行うための分子動力学計算アプリにおいて、演算と通信のオーバーラップ、プロセス間通信パターン改良による通信時間削減アルゴリズムを開発し実装した。エネルギー計算1回当たりの通信時間がほぼ半減した。さらにノード内並列化効率を高めるため、ノード内計算負荷分散改良アルゴリズムを開発した。

[開発アプリケーションと計算モデル]

周期境界条件下でサインカーブ状に時間変化する圧力をかける分子シミュレーションでは180原子からなる炭化水素を対象とした。

[並列計算の方法と効果]

ポスト「京」のノード当たりの通信性能の「京」からの向上幅はCPU性能に比べて小さいと予測され、ポスト「京」での大規模計算では通信時間がボトルネックになる可能性がある。そこで、通信時間を削減するため、非同期通信であるMPI_Isend、MPI_Irecvを用いて演算と通信をオーバーラップさせた。「京」で実証計算をしたところ、エネルギー計算1回当たりの通信時間がほぼ半減した。

[研究成果]

「京」のハードウェア及び診断ツール(基本プロファイラ、詳細プロファイラ)を使い、MPI通信パターンごとのデータ転送量と時間、サブルーチンごとの実行時間を調べながら開発を行うことで、演算と非同期通信のオーバーラップ構成を最適化した。計算全体だけではなく一部区間のみでの測定も行い、演算時間を詳細に解析してオーバーラップ可能な領域を特定して、効率的に改良を行うことができた。その結果、演算時間にはほとんど影響を与えることなく通信時間を大幅に削減することができた(表4-2-4-2)。

通信性能と演算性能の比率を考慮すると、ポスト「京」では通信がボトルネックになりやすいが、本年度の改良により、ポスト「京」での通信時間の割合増加による並列化効率低下は大きく抑えられると考えられる。

表 4-2-4-2. 演算と通信のオーバーラップによる通信時間の変化

	ノード数	96	192
改良前	計算実行時間	1089.9	421.9
	(うち通信時間)	9.7	8.7
改良後	計算実行時間	1082.2	416.7
	(うち通信時間)	5.2	3.4

通信時間が半減

[研究成果の利活用について]

成果の利活用のため、以下のように連携している。

他プロジェクトへの展開

- ・重点課題6(アプリケーション ABINIT-MP)へ複数の機能に関してソースコード提供

[今後について]

通信と演算をオーバーラップさせることにより、超音波をかけるメタンハイドレードの分子動力学シミュレーションアプリケーションの通信時間を大幅に削減することができた。また、ノード内並列化効率を高めるため、ノード内計算負荷分散改良アルゴリズムを開発した。今後このアルゴリズムの性能をメニーコアマシンで実証する。

[参考文献]

- [1] “First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base”, Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa, J. Chem. Theory Comput., 2018, **14**, 3643-3655.

4-2-5. 基盤アプリ設計・開発

[責任者]中嶋隆人（理研）

[背景と目的]

ポスト「京」を有効に活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションを開発するため、本重点課題では4つの基盤アプリケーションを設定する。「京」で実効的な超並列計算の実績があり、本重点課題で共通に利用できる観点から、量子化学計算プログラム（NTChem、GELLAN）、分子動力学計算プログラム（MODYLAS）、第一原理計算プログラム（stat-CPMD）の4つを基盤アプリケーションとし、ポスト「京」での超並列計算で実効性が上がるように設計開発を行う。

コデザインを推進する重点課題アプリ5ワーキンググループ（WG）での活動を通して得られる情報を参考にして基盤アプリのグランドデザインを進める。早期から理研あるいはハードウェア・ベンダーのコンサルティングを受け、更にベンダーによる最適化作業も活用しながら、平成31年度のポスト「京」の試用に向けて、ポスト「京」を有効に活用できる基盤アプリを開発していく。

[成果の概要]

重点課題アプリ5WGを継続開催することにより、ターゲットアプリに関するコデザインを推進した。ターゲットアプリであるNTChemを使った「京」のベースライン測定結果と演算・通信アルゴリズム特性の評価に基づいて、ポスト「京」カーネル選定妥当性を検証した。また、ポスト「京」でのターゲット問題におけるカーネル性能評価妥当性も検証した。ポスト「京」ターゲット問題計算を実現するために、ホットスポットの高速化、メモリ分割版アルゴリズム、単精度-倍精度混合精度化に加えてファイル読み込み時間を削減し、ポスト「京」における当初計画の性能実現の見通しを得た。

また、基盤アプリ設計・開発WGを2回開催し、外注を含む基盤アプリの高度化を推進した。その中で課題アプリDC-DFTB-Kについても高速化を実施した。

(1) NTChem 汎用第一原理電子状態計算ソフト

[開発目標]

「京」においては数百原子までの分子の励起状態の量子化学計算が実現されているが、有機系太陽電池におけるヘテロジャンクションを含めた現実系界面のシミュレーションには10,000原子規模の取扱いが不可欠である。メモリ分割を施した効率の良い並列アルゴリズムを開発・実装する。

計算規模：原子数 五千～1万

[開発内容]

サブ課題Aにて記載したように以下の開発を行った。また、後述するコデザイン活動を推進

した。基底・励起状態に関する密度汎関数法計算のためのメモリ分割版プログラムの開発と、有機系太陽電池の機構解明のための手法開発を行った。

数千～1万原子から成る大規模な分子系の励起状態計算の実現に向けて、平成29年度までに開発した基底状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムと太陽電池シミュレータを高度化した。「京」で採用されているTofu高次元トラスネットワークアーキテクチャを有効に利用したアルゴリズムを設計することで通信を隠蔽し、さらに我々が開発した高並列疎行列ライブラリNTPolyを使って疎行列演算することで大規模な密度汎関数法計算を実現した[1]。

また、密度汎関数法に基づいた励起状態計算に対しても、メモリ分割版プログラムの高度化に着手した。密度汎関数法における相関交換ポテンシャルの数値積分計算部のループの並列構造に変更を加え、さらに高コスト部に対しスレッド並列化を施すことで、「京」で計算処理を約30倍に高速化することができた[2]。

更に、有機系太陽電池のエネルギー変換機構を解明するための手法や非断熱励起状態ダイナミクス、およびそれらのためのプログラムの高度化作業を実施した [3]。加えて、有機系太陽電池のキーとなる電荷移動状態を正確に表現することができる新たな交換汎関数を開発した。

NTChemワークショップの第9回(3/15、理研 計算科学研究センター)を開催し、ソフトの普及に努めた。

[参考文献]

- [1] W. Dawson, 澤田啓介, 神谷宗明, 中嶋隆人, シミュレーション学会誌, 投稿準備中.
- [2] M. Kamiya, T. Nakajima, “Relativistic time-dependent density-functional theory for molecular properties”, in *Frontiers of Quantum Chemistry*, edited by M. Wójcik, H. Nakatsuji, B. Kirtman, Y. Ozaki (Springer), 223-247 (2018).
- [3] T. Yonehara, N. Minezawa, T. Nakajima, “Excited-State Dynamics in NTChem”, in *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, edited by Y. Ozaki, M. J. Wojcik, J. Popp (Willey), 43-78 (2019).

(2) GELLAN 階層的量子化学計算ソフト

[開発目標]

「京」では高精度F12理論の超並列実装が行われており、ナノ分子のポストハートリーフック計算が実現化されている。高効率光エネルギー変換の解明には、これに加えて 10^{20} の完全CI次元を持つ擬縮重系や励起状態の分子構造と電子物性の計算手法を開発する。

[開発内容]

サブ課題Aにて記載したように以下の開発を行った。ポストPHF法において律速段階となる二電子積分の縮約を、高いロードバランスで分散並列させた。同手法の大規模非線形方程式に現れる零空間を反復的に取り除く新規手法を開発した。又、モデル空間量子モンテカルロ法を省メモリで高速に実行できるように高度化並列実装した。更に、新規の強相関ソルバーとして、完全結合クラスター還元法を開発した。

1) ポストPHF法

ポストPHFにおいて最も計算コストの高いステップは、仮想軌道のみからなる分子積分 ($ab|cd$) とCI係数 $t(cd, ij)$ の縮約であり、仮想軌道数が占有軌道数の数倍～数十倍必要になる高精度計算においては、この部分が計算時間のほぼ全てを占めていた。平成30年度は、電子ペア ij に対して分散するMPI-OpenMPハイブリッド並列実装を行い、これを平成29年度で達成した分子積分を用いない省メモリ計算法と組み合わせることにより、高いロードバランスで並列化することに成功した。占有軌道数が28、仮想軌道数が432である m -ベンザイン分子に対して適用したところ、32コアで25倍程度の加速化が得られた。

2) 結合クラスター近似 (ECCSD) 法[1][3]

また、CCにスピン射影を用いる結合クラスター近似 (ECCSD) 法では大規模非線形方程式を解く必要があるが、一電子・二電子励起空間が過完備であり、内包される零空間を取り除かなければならない。このためには通常、大規模行列の特異値分解が必須となるが、これを小規模な部分空間内で解き、反復的に解を収束させていく新たな手法を開発した。これにより、今までメモリ・計算量の両面で実行不可能であった計算が非常に低コストで可能になり、ECCSDの適用範囲を大きく押し広げることに成功した。

3) モデル空間量子モンテカルロ (MSQMC) 法

従来のモデル空間量子モンテカルロ (MSQMC) 法では倍精度変数を用いて行列式のバイナリ表現を行っていたため、最大64軌道を超える完全活性空間 (FCI) 問題を取り扱えなかった。そこで行列式のバイナリ表現を多倍長化し、任意の軌道のFCI問題を取り扱えるように拡張した。また従来のMSQMC法はFlat MPI実装であったためWalkerのメモリ分散においてAlltoAll通信のコストが顕著であった。MPI/OpenMPハイブリッド並列実装したことでその通信コストを約1/8に削減することができ、高度化を実現できた。ハイブリッド並列では分子積分などがメモリ共有されるので省メモリ化も同時に達成できた。このように現行のMSQMCは従来よりも大きな完全活性空間での計算を省メモリで高速に実行可能である。水素発生系錯体として $[\text{Fe}_2\text{S}_2]^{2+}$ (8.6×10^{27} 次元のFCI問題) を用いて新規のMSQMCのテスト計算を行った。京コンピュータを用いればシミュレーション可能であり、妥当なFCIエネルギーを与えることが実証された。

4) 完全結合クラスター還元法(FCCR法) [2]

結合クラスター理論を用いた、新しい強相関ソルバーの開発も行った。4次までの交換子をあらわに展開することにより、任意の励起演算子を含む完全結合クラスター法を実現した。更に、射影空間と交換子にスクリーニングを施すことにより完全結合クラスター還元法(FCCR法)の開発に成功した。FCCR法は、電子の静的相関と動的相関を同時に取り扱う事が可能で、多核遷移金属錯体からなる光合成系の電子状態の精密計算が可能である。

5) バルク系の電子状態計算

半導体を含むバルク系の電子状態計算では密度汎関数理論に基づく第一原理計算が有効であるが、バンドギャップの過小評価など電子相関効果の取り扱いがボトルネックとなっており、現在でも様々な計算手法が議論されている。このようなバルク系における強相関計算に対する新しいアプローチとして、バルク系の局所模型をポストHF計算に基づく量子化学計算によって解析する数値計算手法を提案した。そこでは、バルク系に対するHF計算からBloch波動関数を計算し、そこから得られる最局在Wannier関数(MLWF)を基底関数とする有効ハミルトニアン(即ちFock行列と相互作用行列)を評価し、バルク系の局所模型である強相関クラスターモデルを導出した。これによって、半導体光触媒の性能評価を含めたバルク系の高精度な電子状態計算を行う数値計算手法の確立が期待される。

[参考文献]

- [1] T. Tsuchimochi and S. L. Ten-no, J. Chem. Phys., **149** 044109 (2018).
- [2] E. Xu, M. Uejima, and S. L. Ten-no, Phys. Rev. Lett., **121** 113001 (2018).
- [3] T. Tsuchimochi and S. L. Ten-no, J. Comput. Chem., **40** 267-280 (2019).

(3) MODYLAS 汎用分子動力学計算ソフト

[開発目標]

原子数：1億～10億

計算時間：2～20 ms/step

特に高分子系への展開のため、化学結合のすり抜け等による平衡化の加速、引っ張り、圧縮、せん断、ねじれ等の機械的摂動の印加、化学結合の切断過程の記述、粗視化モデルの導入、応力分布、ひずみ分布、弾性率分布等の解析、プロトン移動における量子性の考慮、界面を有するヘテロ系でのイオン伝導度の解析等を可能とする。

[開発内容]

サブ課題Bにて記載したようにMODYLASの高度化・開発を継続した。特に、平成29年度に開発した新規通信アルゴリズムならびに新規FMM演算アルゴリズムのMODYLASへの実装を行った。一方で、圧力テンソル計算ルーチンの開発、FMM計算の正則化、MS-EVBモデルコードのMODYLASへの実装を行った。単精度・倍精度混合演算化についても精度検証を行った。

MODYLASの計算は大きく分けてFMM計算部の演算と通信、対相互作用計算部の演算と通信とからなる。この中で、平成29年度までにFMM演算に対して基底関数のsolid harmonicsへの置換、漸化式、多極子の対称性の利用、極座標軸の回転による単純化など新規アルゴリズムの実装を行い、相互作用直接計算において演算時間を約40%削減し、FMM演算の演算量を約1/6にまで削減し、演算時間も1/4に削減することに成功してきた。平成30年度は、新規な通信アルゴリズムMTD法を開発し、これをMODYLASに実装することにより、相互作用直接計算、FMM計算共に通信時間を約50%削減した。一方で、計算精度の劣化を伴わない相互作用直接計算の単精度・倍精度混合演算化、またFMM計算の完全単精度化を行い、SIMDの有効利用、通信量の削減の目的を得た。また、プロトタイプコードにおいてFMM計算の正則化を行い、全エネルギー保存を格段に改善した。このように、1億原子系に対してMD計算1ステップを3msで実行する最終目標の実現に着実に近づきつつある。

MODYLASの計算機能としては、FMM計算における圧力テンソル計算ルーチンを開発し、MODYLASに実装した。また、hydroniumイオンによる単純な輸送に加えて、化学反応の組み換えによるプロトン移動反応、さらにはグロータス機構をも含むプロトン輸送を記述できるEVBモデルの1コア版をMODYLASに実装し、並列化方針について検討を行った。自由エネルギー計算に関しても、MODYLASにおいて熱力学積分法を必要に応じた形式で汎用的に利用できるよう、相互作用関数中への摂動パラメータの導入やFMM計算におけるbackground chargeの取り扱いの整備等を行い、いずれもMODYLASに実装した。また、燃料電池電極4相界面の解析のために白金に関わる新規相互作用関数を導入したほか、高分子系の計算に必要な相互作用関数、初期構造に発生プログラム等の整備を行った。

(4) stat-CPMD 第一原理分子動力学ソフト

[開発目標]

燃料電池・二次電池の現実的な電極-電解質界面の第一原理計算解析を行うには5千原子以上の計算セルによる長時間分子動力学サンプリングが必要となる。負荷の高い電子状態計算カーネル部分のさらなるチューニングによって、実行効率の低下を最小限にしながらこの規模のセルサイズの第一原理分子動力学を可能とし、さらなるサンプリングの多重並列化を実装して10万オーダーのノード数利用を実現する。

計算規模：原子数 五千規模

機能：・サンプリング並列化、マルチプル並列化

- ・QM/MMなどの連成シミュレーションに向けたインターフェース開発
- ・反応自由エネルギー計算手法の高効率化
- ・電気化学反応・界面酸化還元反応の記述手法開発
- ・電子相関、自己相互作用補正、長距離力の導入など電子状態計算の改良

[開発内容]

サブ課題Bにて記載したように以下の開発を行った。基盤アプリstat-CPMDの開発に関しては、ポスト「京」のアーキテクチャに対応する形でメモリ削減に取り組むとともに、大規模系計算に向けたI/O並列化の実装を完成させた。

多重並列化による高効率化学反応自由エネルギー計算を目的とする基盤アプリstat-CPMDについては、昨年度FFT等の電子状態計算カーネルの高速化が終了し、ひとまず目標値である5000原子以上の系に対する第一原理サンプリング計算の実施に成功した。一方で、ポスト「京」コンピュータのアーキテクチャが徐々に明らかになり、大規模計算におけるメモリのボトルネック化が想定される事態となったことから、平成30年度はメモリ削減に関する調査および実装を行なった。また、I/O負荷および親プロセスのメモリ負荷の軽減に向けた各MPIプロセスからへの直接I/Oの実装も終了した。これにより大規模計算実行時の困難さが軽減できると考えられる。さらにstat-CPMDの公開に向けた環境整備をスタートさせたところである。

(5) コデザイン

[目的]

ポスト「京」プロジェクトでは、アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調によりアプリケーションとシステムを協調設計していく。重点課題に関するアプリケーション開発およびポスト「京」開発において、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関との間で、ポスト「京」のシステムアーキテクチャ等とアプリケーションの設計開発に関し、相互に要求性能・機能や評価結果等についてのフィードバックを行いながら設計開発を同時に進める。重点課題5では、コデザインの対象アプリ（ターゲットアプリ）としてNTChemを選出している。また、ターゲットアプリケーションに対するコデザインの成果およびチューニングのノウハウをマニュアル化することで、他のアプリケーションの高度化へ繋げる。

[実施内容]

重点課題アプリ5(コデザイン)WGを12回開催し、NTChemのボトルネックであるRI-MP2計算における密行列演算の性能改善に注力している。平成30年度のコデザイン詳細設計3(~8月)と詳細設計4(8月~)の中では、以下を行った。

- ポスト「京」性能推定手法および推定値の精査
 - ・「京」 ベースライン測定結果および演算・通信アルゴリズム特性の評価に基づくカーネル選定妥当性の検証
 - ・ポスト「京」ターゲット問題におけるカーネル性能評価妥当性の検証
- NTChemの性能向上の取り組み
 - a. 並列数の限界の突破：メモリ分割、通信データ量削減(データ圧縮)

b. ホットスポットの高速化：行列積演算71.2%⇒ポスト「京」にチューニングされたDGEMMの活用

c. 一部に単精度計算導入：メモリ量、演算時間、通信時間削減

単精度でもエネルギー誤差は許容範囲に

d. メモリ量削減アルゴリズム開発：12.2GB →7.7 GBに削減（ポスト「京」CMG内）

e. ファイル読み込み時間削減

これらにより、「京」と比して40倍以上の性能向上が得られる見積もりとなり、ポスト「京」における当初計画の性能実現の見通しを得た。

○高度化技術の展開：チューニングのドキュメント化、シミュレータの活用へ

また、コードザイン活動の中で、ポスト「京」システムへの要求として、一番効率良く行列積計算ができる自動行列サイズ選択機能（自動タイリング機能）をもったDGEMM及びSGEMM（倍精度及び単精度行列行列積ルーチン）と組込み関数の高速化を要請した。

4-2-6. プロジェクトの企画・改善提案

プロジェクト推進上の課題、或いは課題になると思われる事項について、幅広く検討を行い、課題責任者と協議し、プロジェクトを遅滞なく推進するための企画や改善策を運営委員会へ提案した。併せて、プロジェクト推進のために課題責任者の補佐を行った。

4-2-7. プロジェクトの総合的推進

本プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、以下のように運営委員会の開催及び運営委員会メール審議を行い、参画各機関の連携・調整し、事業を推進した。

8/1 第13回運営委員会：平成30年度事業計画方針、公開シンポジウム及び若手勉強会等の行事等について協議した。

8/31 運営委員会メール審議：中間評価での指摘事項対応のため、インフォマティクス活用ワーキンググループ設立と活動内容等について審議を行った。事後、インフォマティクス活用WGの活動を開始した。

12/10 第14回運営委員会：平成31年度事業計画及び第6回公開シンポジウムの日程・場所等について協議を行った。

1/8 運営委員会メール審議：平成31年度所要経費及び事務局経費内訳について審議した。

3/28 運営委員会メール審議：平成31年度事業計画、第6回公開シンポジウムの日程・場所等について審議した。

また、諮問委員会の開催及び諮問委員会メール審議を行い、実施計画や研究内容等について質疑応答を行い、指摘を頂いた点について改善に努力した。

5/28 諮問委員会メール審議：中間評価での指摘事項の対応を反映した実施計画の審議を行った。事後、中間評価指摘事項対応を開始した。

1/8 第7回諮問委員会：平成30年度末ヒアリング対応及び平成31年度研究開発計画についての質疑応答を行った。

2/15 諮問委員会メール審議：平成31年度実施体制の変更に伴い修正した実施計画の審議を行った。

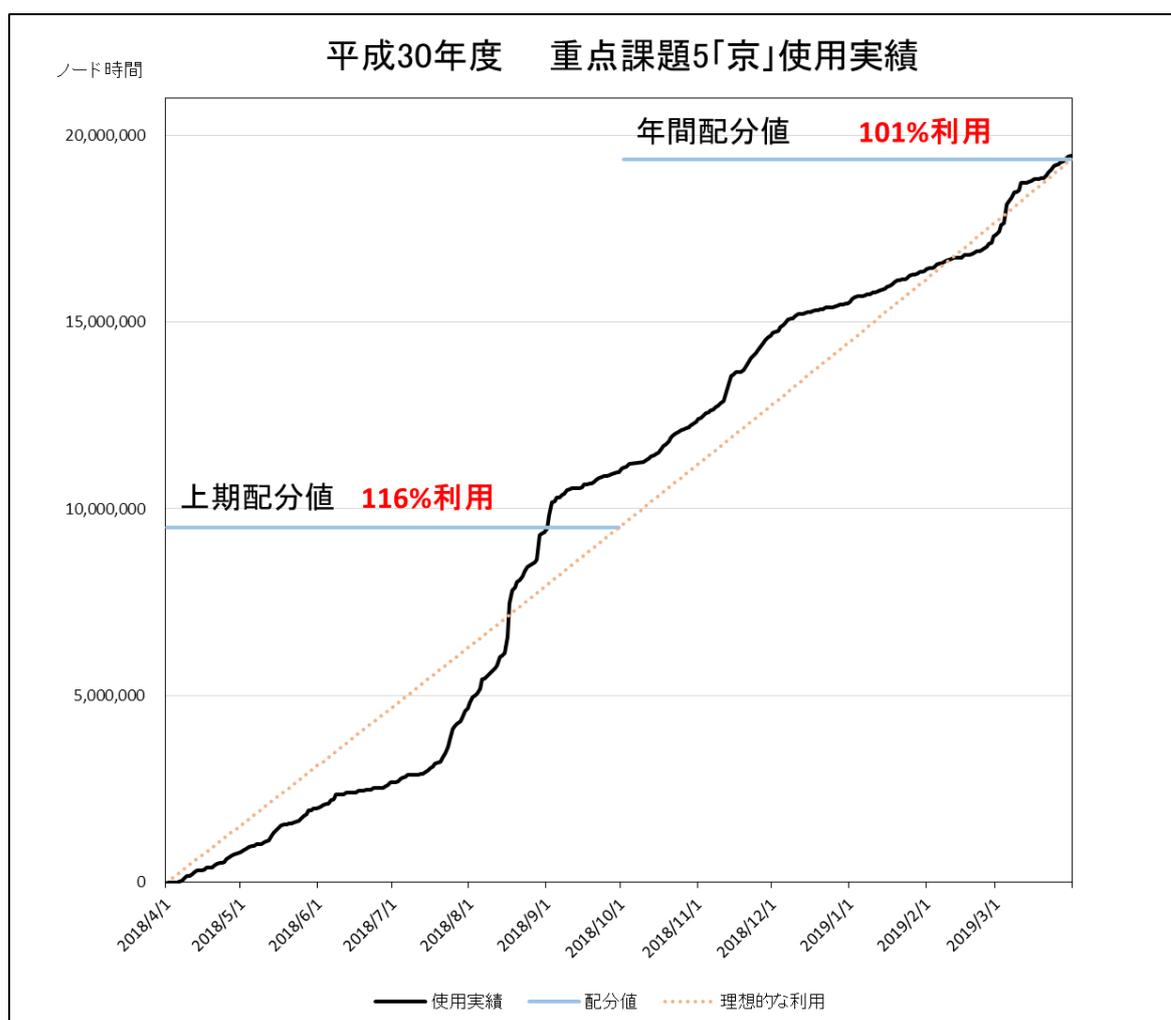
本プロジェクトで得られた成果については、広報や研究活動を通じて積極的に公表し、今後の展開に資した（研究成果説明CG制作、10/20 分子科学研究所一般公開出展、11/23 理研計算科学研究センター一般公開出展、研究成果の重点課題5ホームページ掲載）。

ポスト「京」に向けて開発するシミュレータのコアとなる基盤アプリ（NTChem、GELLAN、MODYLAS、stat-CPMD）及びDC-DFTB-Kについては、研究者による機能の開発と並行して、ポスト「京」開発ベンダーとポスト「京」をターゲットとした高度化や性能向上のための調査を実施した（外注）。

民間研究者や実験研究者との連携を深めるため、重点課題5第2回 実験・産業との連携シ

ンポジウム「テーマ：化学エネルギーの有効利用」(12/11)で、実験研究者4名に特別講演をお願いし、共通の課題や連携について議論した。また、重点課題5第5回公開シンポジウム(12/11-12)では、本プロジェクトからは口頭発表(14件)とポスター発表(35件)を行い、参加した企業研究者も含めて情報・意見交換を行った。更に、5年後、10年後の企業でのHPC利用について、産応協がまとめた「産業シミュレーション・ロードマップ」をもとに、産応協と意見交換(12/10)を行った。また、第6回材料系ワークショップ～大規模シミュレーションと機械学習の新展開～(10/12)、第7回材料系ワークショップ～第一原理計算と実験のデータ同化による材料開発手法～(2/8)を高度情報科学技術研究機構と共催した。

ポスドク(研究員)については、第1回若手勉強会(8/20-22)を開催し、若手研究者間で共通の課題や計算科学手法等について密な議論を行った。また、第5回公開シンポジウムにおいて口頭発表またはポスター発表により、自らの情報発信と議論を通じたコミュニティでのネットワーク作りを実践することとした。また、本課題で開発するアプリを利活用する人材の育成を狙って、大規模並列量子化学計算プログラムSMASH講習会を2回開催するとともに、量子化学(参加者87名、講師9名)、分子シミュレーション(参加者129名、講師16名)のスクールなどを開催した。



計算資源を効率良く利活用するために計算資源のマネジメントを実施した。「京」の計算資源は、サブ課題毎に、上期と下期に分けて利用量が割り当てられている。毎月サブ課題の計算資源の利用状況を確認し、利用が滞っているサブ課題には状況を確認し、計算資源の計画的利用や利用計画の見直しを促した。以上のような「京」の計算資源のマネジメントにより、上期は下期配分量の前倒し利用で116%、下期は年間配分量を使い切り、低優先度実行の制度を利用して利用率101%となり、配分計算資源を有効に利用することができた。

4-3. 活動（研究会等）

[研究会等主催・共催・出展など]

日程	行事名	開催場所等
4/26	第9回連携推進ワークショップ	ステーションコンファレンス万世橋 303
5/28	諮問委員会メール審議	メール審議
7/ 5	第10回連携推進ワークショップ	ステーションコンファレンス万世橋 405A
8/ 1	第13回運営委員会	TKP 名古屋ルーセントタワー 16F 会議室B
8/17	インフォマティクス活用ワーキンググループ	TKP名古屋ルーセントタワー 16F 会議室L
8/20- 22	第1回若手勉強会	TKP レクトーレ熱海桃山 カンファレンスルーム 参加者：25名
8/31	運営委員会メール審議	メール審議
9/ 3- 9/ 6	ポスト「京」重点課題5 オータムカレッジ -分子シミュレーション-	岡崎コンファレンスセンター 参加者129名、講師16名、合計145名
9/12- 9/14	第22回分子シミュレーション（2018年度）夏の学校（協賛）	三国観光ホテル 参加者39名、講師3名、合計42名
10/10	第11回連携推進ワークショップ	ステーションコンファレンス万世橋 406
10/12	第6回材料系ワークショップ(共催)	秋葉原UDX 4階 NEXT-1 参加者91名、内企業68名
10/18	第12回連携推進ワークショップ	キャンパスプラザ京都 京都大学サテライト講習室（6階・第8講習室）
10/20	分子科学研究所一般公開2018(出展)	自然科学研究機構分子科学研究所
11/23	理研計算科学研究センター一般公開(出展)	理化学研究所計算科学研究センター
12/ 6	ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラムSMASH講習会	高度計算科学研究支援センター 2F実習室 参加者6名、講師1名、合計7名
12/10	産応協「産業シミュレーション・ロードマップ」について意見交換会	北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室
12/10	第14回運営委員会	北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室
12/11	第2回実験・産業との連携シンポジウム	北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール(鈴木章ホール) 参加者110名、内企業9名
12/11- 12/12	第5回公開シンポジウム	北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール(鈴木章ホール) 参加者110名、内企業9名
9/ 3- 9/ 6	ポスト「京」重点課題5 ウィンタースクール -量子化学-	岡崎コンファレンスセンター 参加者87名、講師9名、合計96名

1/ 8	運営委員会メール審議	メール審議
1/ 8	第7回諮問委員会	AP品川 10階 Dルーム
2/ 8	第7回材料系ワークショップ(共催)	秋葉原UDX 4階 NEXT-1 参加者86名、内企業56名
2/13	ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラムSMASH講習会 - 名古屋大学情報基盤センターCX400を用いたハンズオン-	名古屋大学高等総合研究館308号室 参加者10名、講師1名、合計11名
2/15	諮問委員会メール審議	メール審議
3/ 1	第13回連携推進ワークショップ	ステーションコンファレンス万世橋 303
3/15	第9回NTChemワークショップ(共催)	理研計算科学研究センター
3/28	運営委員会メール審議	メール審議

4-4. 実施体制

業 務 項 目	実 施 場 所	担 当 責 任 者
①サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー	イ) 国立大学法人神戸大学	大学院科学技術イノベーション研究科 教授 天能 精一郎
	ロ) 国立研究開発法人理化学研究所	計算科学研究センター チームリーダー 中嶋 隆人
	ハ) 国立大学法人東京大学	大学院工学系研究科 教授 山下 晃一
②サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー	イ) 国立大学法人東京大学	物性研究所 准教授 杉野 修
	ロ) 国立研究開発法人物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 グループリーダー 館山 佳尚
	ハ) 国立大学法人名古屋大学	大学院情報学研究科 教授 長岡 正隆
	ニ) 国立大学法人名古屋大学	大学院工学研究科 教授 岡崎 進
③サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー	イ) 国立大学法人岡山大学	異分野基礎科学研究所 教授 田中 秀樹
	ロ) 国立大学法人北海道大学	大学院理学研究院 教授 武次 徹也
	ハ) 学校法人早稲田大学	先進理工学部 教授 中井浩巳
	ニ) 大学共同利用機関法人自然科学研究機構 分子科学研究所	理論・計算分子科学領域 准教授 奥村 久士
④基盤アプリ設計・開発	国立研究開発法人理化学研究所	計算科学研究センター チームリーダー 中嶋 隆人
⑤プロジェクトの企画・改善提案	国立大学法人名古屋大学	大学院工学研究科 教授 岡崎 進
	国立大学法人神戸大学	大学院科学技術イノベーション研究科 教授 天能 精一郎
⑥プロジェクトの総合的推進	大学共同利用機関法人自然科学研究機構 分子科学研究所	分子科学研究所 教授 岡崎 進

平成30年度

「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、
利用の新規基盤技術の開発」

成果報告書 別添1

目次

(1) 会議開催報告	1
K01 第13回運営委員会	1
K02 運営委員会メール審議	3
K03 第14回運営委員会	4
K04 運営委員会メール審議	7
K05 運営委員会メール審議	7
K06 諮問委員会メール審議	8
K07 第7回諮問委員会	8
K08 諮問委員会メール審議	9
K09 第9回連携推進ワークショップ -電池	9
K10 第10回連携推進ワークショップ -電池	9
K11 インフォマティクス活用ワーキンググループ	10
K12 第11回連携推進ワークショップ -電池	10
K13 第12回連携推進ワークショップ -元素戦略(電池・触媒)	10
K14 第13回連携推進ワークショップ -電池	11
K15 第1回若手勉強会(CSE 1st Young Researcher Workshop)	12
K16 ポスト「京」重点課題5 オータムカレッジ -分子シミュレーション-	16
K17 第22回分子シミュレーション(2018年度)夏の学校(協賛)	17
K18 基盤アプリ設計開発ワーキング	17
K19 第6回材料系ワークショップ~大規模シミュレーションと機械学習の新展開~(共催)	18
K20 ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラム SMASH 講習会	19
K21 産応協「産業シミュレーション・ロードマップ」について意見交換会	19
K22 第2回 実験・産業との連携シンポジウム「テーマ:化学エネルギーの有効利用」、 第5回公開シンポジウム	20
K23 ポスト「京」重点課題5 ウィンタースクール -量子化学-	24
K24 第7回材料系ワークショップ~第一原理計算と実験のデータ同化による材料開発手法~(共催)	26
K25 ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラム SMASH 講習会 -名古屋大学情報基盤センターCX400を用いたハンズオン-	27
K26 第9回 NTChem ワークショップ(共催)	28
K27 基盤アプリ設計開発ワーキング	29
(2) 会議参加報告	30
S01 HPCI コンソーシアム平成30年度通常総会	30
S02 第1回システム・アプリケーション連携推進委員会	30
S03 第4回計算物質科学連絡会議	31

S04	分子科学研究所一般公開 2018(出展)	31
S05	第 5 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～ポスト「京」への移行期を迎える HPCI～	32
S06	2018 年度 理研計算科学研究センター一般公開(出展)	33
S07	第 2 回システム・アプリケーション連携推進委員会	34
S08	ポスト「京」の成果創出に向けた意見交換会	34
S09	京×ポスト京 シンポジウム ～シミュレーション・AI・ビッグデータ～	35
S10	第 6 回ポスト「京」性能評価環境説明会	36
S11	第 5 回計算物質科学連絡会議	36
(3)	CODEZAIN 検討会議報告	37
C01	重点課題アプリ 5 精度確認検討会	37
C02	第 42 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	37
C03	第 43 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	37
C04	第 44 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	38
C05	第 45 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	38
C06	重点課題アプリ 5 アプリ検討会議	38
C07	第 46 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	39
C08	第 47 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	39
C09	第 48 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	39
C10	第 49 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	40
C11	アプリケーション検討会	40
C12	アプリケーション検討会	40
C13	第 51 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	41
C14	アプリケーション検討会	41
C15	アプリケーション検討会	41
C16	第 52 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	42
C17	アプリケーション検討会	42
C18	第 53 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ	42
(4)	学会等発表実績	43
1.	学会等における口頭・ポスター発表	43
(a)	口頭発表	43
(b)	ポスター発表	62
(c)	招待講演	94
2.	学会誌・雑誌等における論文掲載	106
3.	プレス発表	117
(5)	特許出願状況	118

(1) 会議開催報告

会議開催報告 K01	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第13回運営委員会
日時	2018年8月1日(水) 10:00～12:10
場所	TKP名古屋ルーセントタワー 16F 会議室B
参加者	岡崎、天能、中嶋、山下、杉野、館山(TV)、長岡、田中、武次(TV)、中井、 CSE事務局

重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第13回運営委員会議事概要

日時：2018年8月1日(水) 10:00～12:10

場所：TKP名古屋ルーセントタワー 16F 会議室B

参加予定：岡崎、天能、中嶋、山下、杉野、館山(TV)、長岡、田中、武次(TV)、中井、
CSE事務局

議題案 司会 天能

I. 確認事項

前回(3/1)議事録案、議事概要案 天能 資料1、資料2

○異議無く承認した。

II. 報告事項

1. 平成29年度成果報告書について 天能 別冊資料1、2

2. 実施計画の更新について 天能 別冊資料3

○成果報告書の提出時に、実施計画書を修正した旨の報告があった。

3. HPCI コンソーシアム平成30年度通常総会(5/31開催) 加藤 資料3

○HPCI コンソの提言の中に、成果創出フェーズの実施方法の記述があり、本プロジェクトの成果創出、評価について意見を交換した。

4. 総合科学技術・イノベーション会議(CSTI) 評価専門調査委員会 ポスト「京」の開発の中間評価(6/21開催) 加藤 資料4

○ポスト「京」の中間評価(第1回目)について、事務局より報告があった。

5. 基盤アプリ高度化WG 中嶋 資料5

○コデザインの進捗、高度化予算の配分について報告があった。

6. 第2回実験・産業との連携シンポ、第5回公開シンポについて 田中 資料6

○シンポジウムの講演者などが決まったことについて報告あった。

7. 次世代電池ビデオのYouTube公開について 石谷 資料7

○YouTube分子研チャンネルでビデオを公開した旨の報告があった。

8. サブ課題Cの研究成果紹介ビデオ制作について 中井 資料8
 ○CO₂分離・回収について、パリ宣言も含めて紹介する予定との報告があった。「京」、ポスト「京」及びアプリ開発にも触れて欲しいとの意見があった。
9. 第1回若手勉強会について 加藤 資料9
 ○雇用PDも含めて22名が参加登録あり、先生方への参加要請があった。
10. 「京」及びFX100の計算資源使用実績報告 加藤 資料10
 ○京については、8月から各サブ課題内共有とすることの報告があった。

III. 審議事項

- インフォマティクス活用WGについて提案があり、メンバーや体制について引き続き審議していくことになった。
 会議後：メンバーや活動内容を検討し、運営委員メール審議にて別添資料「インフォマティクス活用ワーキンググループ設立について」を承認した。
- 8月の若手勉強会での議論と、12月のシンポジウムにインフォマティクス活用WGのセッションを設けることとした。

IV. 依頼事項

- (1) 平成31年度「京」運用停止(6ヶ月か9ヶ月を予定)の対応について 岡崎/加藤 資料11
 ○「京」停止後の計算機資源について議論し、前倒しで研究開発を進めることとした。
- (2) 重点課題5ホームページに掲載する成果説明の確認依頼 加藤
 ○時間が超過したため、別途、メールにて依頼することにした。
- (3) 論文の謝辞への重点課題5掲載依頼 加藤 資料12
 ○時間が超過したため、別途、メールにて依頼することにした。
- (4) 第7回諮問委員会(来年1月AP品川開催予定)の日程調整 加藤
 ○時間が超過したため、別途、メールにて依頼することにした。

V. 今後の予定

- 9月7日(金) 15:00-16:30 文部科学省 平成29年度額の確認調査@分子研第2会議室
 10月10日(水) 10:00-17:00 サブ課題B会議@秋葉原ステーションコンファレンス万世橋 406
 10月20日(土) 分子研一般公開
 11月2日(金) HPCI 成果報告会(予定)
 11月23日(土) 理研R-CCS 一般公開
 12月10日(月) 15:00-17:00 第14回 運営委員会@北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室
 12月11日(火) 10:00-12:10、12日(水) 9:30-16:10 第5回公開シンポジウム@北海道大学フロンティア化学教育研究

センター 2F レクチャーホール
（鈴木章ホール）

12月11日(火) 13:30-17:45 第2回実験・産業との連携シンポジウム@北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール
（鈴木章ホール）

12月11日(火) 18:05-19:35 懇親会（会費：5,000円予定）@北海道大学ファカルティハウス「エンレイソウ」

1月8日(火) 15:00-17:00 第7回諮問委員会@AP品川 10階 Dルーム

VI. 別冊資料

- (1) 平成29年度成果報告書 別冊資料1
(2) 平成29年度成果報告書 別添1（会議開催等報告、学会等発表実績）別冊資料2
(3) 実施計画（平成29年度成果報告書 別添2） 別冊資料3
以上

会議開催報告 K02	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 運営委員会メール審議
日時	2018年8月31日(金)
審議項目	インフォマティクス活用ワーキンググループ（IA-WG）設立について 以下の項目についてメール審議にて承認された。 ・ IA-WG のメンバーおよび活動内容 ・ IA-WG 開催時の諸費用（旅費、会議費等）を CSE 事務局経費から支出すること

会議開催報告 K03	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第14回運営委員会
日時	2018年12月10日(月) 15:30～17:30
場所	北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室
参加者	岡崎、天能、中嶋、山下、杉野、館山、長岡、田中、武次、中井、奥村、 CSE事務局

重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」
第14回運営委員会議事概要

日時：2018年12月10日(月) 15:00～17:30

場所：北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室

参加：岡崎、天能、中嶋、山下、杉野、館山、長岡、田中、武次、中井、奥村、CSE事務局
議事 司会 天能

I. 確認事項

前回(8/1)議事録案、議事概要案 天能 資料1、資料2

○特に異議無く承認した。

II. 報告事項

1. HPCI 計画推進委員会(第36回) 加藤

○HPCI 計画推進委員会でポスト「京」利活用促進WGが設置された旨の報告があった。

2. 総合科学技術・イノベーション会議(CSTI) 評価専門調査委員会
ポスト「京」の開発の中間評価 加藤 資料3

○中間評価の結果が良好でポスト「京」の製造が始まる旨の報告があった。

3. ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するワーキンググループ(第1回)
加藤 資料4

○ポスト「京」利活用促進WGの第1回会合が11/8にあり、後3回で、次回12/18の予定との報告があった。

4. 基盤アプリ設計・開発WG 中嶋

○WG報告は、公開シンポジウムで行うとの報告があった。

5. インフォマティクス活用推進WG 館山 資料6

○WGの趣旨、体制、活動と、公開シンポジウムのセッションについて報告があった。

6. 計算物質科学連絡会議 天能 資料7

○8/2に開催された連絡会議について報告があった。

7. 元素戦略(触媒・電池)と重点課題5との連絡会 天能
10月18日(木) @キャンパスプラザ京都

○開催された連絡会について報告があった。今後も連携を深めていくこととした。

8. サブ課題Cの研究成果紹介ビデオ制作状況 中井
 ○製作状況及び公開シンポで試写を行う旨の報告があった。
9. 第1回若手勉強会 加藤 資料8
 ○8/20に開催した勉強会について報告があった。次回、来年度の幹事は、名大の藤本さん。
10. 「京」及びFX100の計算資源使用実績 加藤 資料9
 ○「京」について100%を超える見込み、基盤センター利用も検討中との報告があった。
11. 第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会 加藤 資料10
 ○11/2に開催した報告会について報告があった。
12. 第6回材料系ワークショップ 石谷 資料11
 ○10/12に開催したワークショップについて報告があった。
13. 理研R-CCS、分子研一般公開 石谷、加藤 資料12
 ○各々の一般公開について報告があった。

III. 審議事項

- 最終年度を迎えるにあたって 岡崎
 ○後一年でプロジェクトが終わるので、大きな成果を出して頂きたい旨の話があった。
- (1) 平成31年度経費・事務局経費について 天能 資料13
 ○仮置き予算(2.4億円)の配分について承認した。
- (2) 平成31年度「京」、基盤センター、名大FX100計算資源配分方針 加藤 資料14
 ○基盤センターを含めた配分方針について提案があり、配分方針について承認した。
- (3) 平成31年度諮問委員、運営委員の委嘱について 加藤 資料15
 ○来年度についても現在の運営委員、諮問委員に継続してお願いする旨の提案があり、承認した。
- (4) 第3回実験・産業との連携シンポジウム、第6回公開シンポジウム(最終報告会)の日程及び開催場所について 石谷 資料16
 ○協議の結果、日程は仮決めとして2020年3月9日(月)、10日(火)に、東京で行うこととした。
- (5) 材料系ワークショップ 加藤 資料21
 ○共催することを承認した。
- (6) R-CCS国際シンポジウムについて(追加議題) 中嶋
 ○R-CCS国際シンポジウム(2/18, 19)における成果発表、パネリストについて依頼があり、候補者を選出した。

IV. 依頼事項

- (1) 平成31年業務計画書作成等のスケジュール 加藤 資料17
 ○業務計画の作成スケジュール他について説明があった。
- (2) 論文の謝辞への重点課題5掲載依頼 加藤 資料18
 ○謝辞の記載について依頼があった。

V. その他

(1) 分子研 2019 年度 計算物質科学スパコン共用事業枠 利用募集 加藤 資料 19
○応募〆切り 1/31 で、サブ課題毎に纏めるので、事務局〆切りを 1/29 としたいとのお知らせがあった。

(2) 物性研 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業枠
2019 年度前期募集 加藤 資料 20
○応募〆切り 12/28 で、個別に申請して欲しいとのお知らせがあった。

VI. 今後の予定

12 月 11 日(火) 10:00-12:20、12 日(水) 9:30-16:50 第 5 回公開シンポジウム@北海道
大学フロンティア化学教育研究
センター 2F レクチャーホー
ル (鈴木章ホール)

12 月 11 日(火) 13:30-17:45 第 2 回実験・産業との連携シンポジウム@北海道大学フロ
ンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール
(鈴木章ホール)

12 月 11 日(火) 18:05-19:35 懇親会 (会費 : 5,000 円予定) @北海道大学ファカルティ
ハウス「エンレイソウ」

1 月 8 日(火) 15:00-17:00 第 7 回諮問委員会@AP 品川 10 階 D ルーム

1 月 17 日(木) 10:00-15:30 文科省平成 30 年度成果ヒアリング(発表 10 分、質疑 15 分)

2 月 8 日(金) 第 7 回材料系ワークショップ@東京・秋葉原 UDX 4F NEXT-1

4 月 4 日(木) 平成 30 年度成果報告(概要)〆切り

5 月 7 日(火) 平成 30 年度成果報告(詳細)〆切り

以 上

会議開催報告 K04	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 運営委員会メール審議
日時	2019年1月8日(火)
審議項目	令和元年度（平成31年度）所要経費について 以下の項目についてメール審議にて承認された。 <ul style="list-style-type: none"> ・令和元年度（平成31年度）所要経費の変更（仮置き総額を216,466千円に） ・第14回運営委員会で承認した所要経費からCSE事務局減額案（計算資源確保費用、広報活動費等の見直し）

会議開催報告 K05	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 運営委員会メール審議
日時	2019年3月28日(木)
審議項目	令和元年度（平成31年度）行事計画と実施計画について、 以下の項目についてメール審議にて承認された。 <ul style="list-style-type: none"> ・令和元年度（平成31年度）行事計画（第6回シンポジウム、諮問委員会、運営委員会の開催） ・本格実施最終年度となる令和元年度（平成31年度）にあたり実施計画の確認

会議開催報告 K06	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 諮問委員会メール審議
日時	2018年5月28日(月)
審議項目	文部科学省の中間評価指摘事項に対応する実施計画の修正について 以下の項目についてメール審議にて承認された。 ・インフォマティクス活用ワーキンググループの取り組みについて ・実施計画の内容を具体的にすべく見直し

会議開催報告 K07	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第7回諮問委員会
日時	2019年1月8日(木) 15:00～17:15
場所	AP 品川 10階 Dルーム
参加者	[諮問委員] 辰巳、金村、工藤、茂本、三上、藪下、横川 [重点課題5] 岡崎、山下、天能、杉野、田中、中嶋、CSE事務局 [オブザーバ] 文科省 坂下室長、松岡
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 第7回諮問委員会開催にあたり 2. 文科省平成30年度末ヒアリングに向け、重点課題5の取り組み状況、成果と計画について 3. 重点課題5の研究開発の進捗、成果と計画について <ol style="list-style-type: none"> (1) サブ課題A (2) サブ課題B (3) サブ課題C (4) 基盤アプリ設計開発 4. その他 <ol style="list-style-type: none"> (1) 今後の成果評価に伴う秘密情報の取り扱いについて (2) 平成31年度諮問委員委嘱について (3) 平成31年度予算について

会議開催報告 K08	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 諮問委員会メール審議
日時	2019年2月15日(金)
審議項目	令和元年（平成31年度）の実施体制を反映した実施計画の修正について 以下の項目についてメール審議にて承認された。 ・サブ課題Aの再委託先を変更

会議開催報告 K09	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第9回連携推進ワークショップ -電池
日時	2018年4月26日(木) 11:00 ~ 17:00
場所	ステーションコンファレンス万世橋 303
参加者	杉野、館山、長岡、岡崎、森川、濱田、大谷、赤木、CSE事務局
議事	1. 実施計画の確認 2. 研究成果説明ビデオの企画について 3. 二次電池に関する研究状況について 4. その他

会議開催報告 K10	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第10回連携推進ワークショップ -電池
日時	2018年7月5日(木) 11:00 ~ 17:00
場所	ステーションコンファレンス万世橋 405A
参加者	杉野、館山、岡崎、森川、大谷、赤木、飯塚、YAN、安藤、GAO、笠松、山本、木村、CSE事務局
議事	1. 研究分担説明図の確認 2. 研究進捗状況について 3. その他

会議開催報告 K11	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 インフォマティクス活用ワーキンググループ
日時	2018年8月17日(金) 16:00 ~ 18:00
場所	TKP 名古屋ルーセントタワー 16F 会議室 L
参加者	館山、岡崎、天能、CSE 事務局
議事	1. インフォマティクス活用ワーキンググループ設立について 2. 活動内容等について 3. その他

会議開催報告 K12	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第11回連携推進ワークショップ -電池
日時	2018年10月10日(水) 11:00 ~ 17:00
場所	ステーションコンファレンス万世橋 406
参加者	杉野、館山、長岡、岡崎、森川、濱田、大谷、赤木、CSE 事務局
議事	1. 研究進捗状況について 2. その他

会議開催報告 K13	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第12回連携推進ワークショップ -元素戦略（電池・触媒）
日時	2018年10月18日(木) 15:00 ~ 17:00
場所	キャンパスプラザ京都 京都大学サテライト講習室（6階・第8講習室）
参加者	元素戦略：田中、江原、太田 重点課題5：岡崎、天能、山下
議事	1. プロジェクトの取り組み状況について 2. 連携や課題について意見交換 3. その他

会議開催報告 K14	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第13回連携推進ワークショップ -電池
日時	2019年3月1日(金) 10:00 ~ 15:00
場所	ステーションコンファレンス万世橋 303
参加者	杉野、岡崎、森川、濱田、赤木、春山、笠松、Yan、Gao、Choudhary、山本、岡本、CSE事務局
議事	1. 研究進捗状況について 2. その他

会議開催報告 K15	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第1回若手勉強会 (CSE 1st Young Researcher Workshop)
日時	2018年8月20日(月)～22日(水)
場所	TKP レクトーレ熱海桃山 カンファレンスルーム
参加者	25名

プログラム

Day1, August 20th

13:00 - 13:30	受付/Registration
13:30 - 14:00	挨拶・説明等/Opening address and announcement
14:00 - 15:20	<p>研究発表(サブ課題B) /Oral Presentation(Branch B) Chair: Masato Kobayashi</p> <ul style="list-style-type: none"> • Noriyuki Yoshii (Nagoya University), “Extensions of the Fast Multipole Method” • Taichi Inagaki (Nagoya University), “Constant potential MD simulation method and its applications to electrochemical interfaces “ • Xichan Gao (National Institute for Materials Science), “Improved Polarizable Dipole-Dipole Interaction Model for Hydrogen Bonding, Stacking, T-Shaped and X-H$\cdots\pi$ Interactions “ • Ashu Choudhary (National Institute for Materials Science), “Revisiting Grignard Reagent Based Electrolytes in Magnesium-ion Battery: A first principles study”
15:50 - 17:10	<p>研究発表(サブ課題B) /Oral Presentation(Branch B) Chair: Takashi Tsuchimochi</p> <ul style="list-style-type: none"> • Yoshimichi Ando (Institute for Molecular Science), “Performance improvements of software MODYLAS for the post-K computer” • Shota Iizuka (National Institute for Materials Science),

	<p>“van-der-Waals effects on organic liquids”</p> <ul style="list-style-type: none"> • Jiachao Zhang(Nagoya University), “Consideration of accelerating MODYLAS by utilizing single-precision SIMD on Post-K” • Yoshiyuki Yamamoto(The University of Tokyo), “First-principles simulation of TiO₂electrocatalyst for polymer electrolyte fuel cell”
18:00 - 19:30	夕食 /Dinner
19:30 - 22:00	懇親会・情報交換会(討論「インフォマティクス活用について」) /Discussion with food and drink (“HPC and materials informatics”)

Day2, August 21st

9:30 -10:30	<p>研究発表(サブ課題 A)/Oral Presentation(Branch A) Chair:Shota Iizuka</p> <ul style="list-style-type: none"> • Keisuke Sawada(RIKEN Center for Computational Science), “Development of large-scale ab initio quantum chemical code based on massively-parallel sparse-matrix library” • Motoyuki Uejima(Kobe University), “Massively parallel implementation of model space quantum Monte Carlo method” • Takashi Tsuchimochi(Kobe University), “Development of symmetry-projectionmethods targeting artificial photocatalysts”
11:00 - 12:00	<p>研究発表(サブ課題 A)/Oral Presentation(Branch A) Chair:Shusuke Kasamatsu</p> <ul style="list-style-type: none"> • Noriyuki Minezawa(RIKEN Center for Computational Science), “Trajectory surface hopping simulation toward understanding the mechanisms of photovoltaic solar cells” • Enhua Xu(Kobe University), “A Full Coupled-Cluster Reduction

	<p>For Accurate Description Of Strong Electron Correlation”</p> <ul style="list-style-type: none"> • Takehiro Yonehara(RIKEN Center for Computational Science), “Development of quantum dynamics methods for investigating a light energy conversion”
12:00 - 14:00	昼食、休憩/Lunch, Break
14:00 - 15:40	<p>研究発表 (サブ課題 C) Oral Presentation(Branch C) Chair:Kazushi Fujimoto</p> <ul style="list-style-type: none"> • Kazuya Ishimura(Institute for Molecular Science), “Algorithm development for massively parallel quantum chemistry calculations “ • Masato Kobayashi(Hokkaido University), ” Recent Trends on Catalyst Informatics “ • Yoshifumi Nishimura(Waseda University), “Recent developments of divide-and-conquer density-functional tight-binding molecular dynamics method” • Takuma Yagasaki(Okayama University), “Phase diagram of TIP4P/2005 water “ • Chien-Pin Chou(Waseda University), “Recent Development on Density-Functional Tight-Binding Parameterization “
16:10 - 17:10	<p>研究発表 (サブ課題 B) Oral Presentation(Branch B) Chair:Keisuke Sawada</p> <ul style="list-style-type: none"> • Shusuke Kasamatsu(The University of Tokyo), “Direct coupling of first-principles calculation with replica exchange Monte Carlo sampling of ion disorder in solids • Yan Lei(The University of Tokyo), “Hydrogen Adsorption on Pt(111) Revisited from Random Phase Approximation” • Kazushi Fujimoto(Nagoya University), “Fracture Simulation of a Glassy Polymer by all-atomistic Molecular Dynamics Calculation”
18:00 - 19:30	夕食/Dinner

19:30 - 22:00	懇親会・情報交換会(発表「現時点でのポスト京公開情報紹介」など) /Discussion with food and drink (“Open information of Post-K Computer”)
---------------	--

Day3, August 22rd

9:30- 12:00	実習、意見交換会/Group exercise
12:00 - 13:30	昼食 Lunch
13:30 - 15:00	実習、意見交換会/Group exercise

会議開催報告 K16	
会議名称	ポスト「京」重点課題5 オータムカレッジ -分子シミュレーション-
日時	2018年9月3日(月)～6日(木)
場所	岡崎コンファレンスセンター
参加者	129名 講師16名 合計145名

プログラム

第1日目：2018年9月3日(月)

- 12:30-13:15 受付
 13:15-13:30 開会式
 13:30-15:00 松本充弘(京都大学)「シミュレーションの全体像・概論」
 15:10-16:40 吉井範行(名古屋大学)「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」
 16:50-18:20 奥村久士(生命創成探究センター)「各種統計アンサンブルの生成法」

第2日目：2018年9月4日(火)

- 9:00-10:30 三上益弘(慶應義塾大学)「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」
 10:40-12:10 甲賀研一郎(岡山大学)「統計力学」
 12:10-13:30 昼食
 13:30-15:00 森田明弘(東北大学)「コンピューター・シミュレーションと理論化学」
 15:10-16:40 篠田 渉(名古屋大学)「階層的分子モデリング-粗視化の方法について-」
 16:50-18:20 松林伸幸(大阪大学)「自由エネルギー計算」
 18:30-18:50 樋渡保秋(金沢大学)「コンピューター・レジェンド：三博士の紹介」
 19:00-20:30 懇親会

赤字：台風接近のため中止。

第3日目：2018年9月5日(水)

- 9:00-10:30 長岡正隆(名古屋大学)「化学反応と分子シミュレーション」
 10:40-12:10 岡崎圭一(分子科学研究所)「反応速度論とマルコフモデル」
 12:10-13:30 昼食
 13:30-15:00 高田彰二(京都大学)「機械学習と分子シミュレーション」
 15:00-15:05 上田 颯(京都大学)「分子シミュレーションスクール開講に寄せて」
 15:10-16:40 杉井泰介(株式会社日立製作所)「企業における材料系事例を中心とした分子シミュレーションの取り組み」
 16:50-18:20 藤崎弘士(日本医科大学)「生体分子の構造変化経路サンプリング」

第4日目：2018年9月6日(木)

9:00-10:30	伊藤篤史 (核融合科学研究所) 「プラズマ-物質相互作用のシミュレーション」
10:40-12:10	芝 隼人 (東北大学) 「ガラス動力学のシミュレーション - モデル・計算・解析」
12:15-12:30	閉会式・修了書授与

会議開催報告 K17	
会議名称	第 22 回分子シミュレーション (2018 年度) 夏の学校 (協賛)
主催	分子シミュレーション研究会
日時	2018 年 9 月 12 日 (水) ~ 14 日 (金)
場所	三国観光ホテル
参加者	39 名 講師 3 名 合計 42 名

会議開催報告 K18	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 基盤アプリ設計開発ワーキング
日時	2018 年 9 月 21 日 (金) 13:00 ~ 14:00
場所	TV 会議 (理研、神戸大学、名古屋大学、分子研)
参加者	中嶋、天能、岡崎、CSE 事務局
議事	1. 高度化進捗状況とポスト「京」に関する情報共有 2. その他

会議開催報告 K19	
会議名称	第 6 回材料系ワークショップ～大規模シミュレーションと機械学習の新展開～（共催）
主催	一般財団法人 高度情報科学技術研究機構
日時	2018 年 10 月 12 日(金) 10:00 ～ 17:30
場所	秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1
参加者	91 名 内企業 68 名

プログラム

司会：宮内 敦(高度情報科学技術研究機構)

10:00-10:05	開会挨拶 塩原 紀行(高度情報科学技術研究機構)
10:05-10:35	材料系アプリケーションとデータベースの紹介：HPCI 利用支援 吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構)
10:35-11:10	A I と科学者の協創による材料開発 岩崎 悠真(日本電気株式会社)
11:10-11:45	統合シミュレータ「OCTA」と機械学習のシナジー 坂下 竜一(東ソー株式会社)
11:45-12:50	<ランチタイム>
12:50-13:25	電極材料開発と電池デバイス設計の橋渡しとしての各種シミュレーション技術 井上 元(九州大学)
13:25-14:00	汎用 MD 計算ソフトウェア MODYLAS の開発および最近の応用事例 安藤 嘉倫(分子科学研究所)
14:00-14:35	大規模分子シミュレーションと溶液理論の融合によるソフト分子集合系の自由エネルギー解析 松林 伸幸(大阪大学)
14:35-14:50	<休憩>

14:50-15:10	「京」からポスト「京」への移行期における課題募集と利用支援 草間 義紀(高度情報科学技術研究機構)
15:10-15:45	SPACIER：材料シミュレーションと機械学習の融合 吉田 亮(統計数理研究所)
15:45-15:55	<休憩>
「ポスト「京」へ向けた機械学習と材料シミュレーションの新アルゴリズム」	
15:55-17:00	パネルディスカッション モデレータ：古宇田 光(東京大学物性研究所) パネリスト：吉田 亮(統計数理研究所) / 松林 伸幸(大阪大学) / 茂本 勇(東レ株式会社) / 奥田 基(高度情報科学技術研究機構)
17:00-17:30	HPCI・アプリケーション利用相談、情報交換(希望者のみ)

会議開催報告 K20	
会議名称	ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラム SMASH 講習会
日時	2018年12月6日(木) 13:00 ~ 16:30
場所	高度計算科学研究支援センター 2F 実習室
参加者	6名 講師1名 合計7名

会議開催報告 K21	
会議名称	産応協「産業シミュレーション・ロードマップ」について意見交換会
日時	2018年12月10日(月) 15:00 ~ 15:30
場所	北海道大学 ファカルティハウス「エンレイソウ」第1会議室
参加者	産応協：茂本、竹内、石田 重点課題5：岡崎、天能、中嶋、山下、杉野、館山、長岡、田中、武次、中井、奥村、CSE事務局

会議開催報告 K22	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 第2回 実験・産業との連携シンポジウム「テーマ：化学エネルギーの有効利用」(11日)、第5回公開シンポジウム(11日、12日)
日時	2017年12月11日(火)～12日(水)
場所	北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール (鈴木章ホール)
参加者	110名 内企業9名

プログラム

第2回実験・産業との連携シンポジウム [テーマ：化学エネルギーの有効利用]

■第1日目：12月11日(火) 13:30～17:45

セッション1

座長：田中 秀樹 (岡山大異分野基礎科学研)

13:30 - 13:35	ご挨拶	荒井 宏明(文部科学省)
13:35 - 13:40	ご挨拶	平尾 公彦 (理研 顧問)
13:40 - 13:45	ご挨拶	長谷川 淳也 (北大触媒科学研 所長)
13:45 - 14:05	ポスト「京」重点課題5全体概要	岡崎 進 (分子研/名大院工)
14:05 - 14:55	招待講演「海底の燃える氷で電気を作るー海洋メタンハイドレートによる洋上発電への課題ー」	圓山 重直 (八戸高専/東北大)
14:55 - 15:45	招待講演「CCS, CCU で求められる二酸化炭素分離膜性能」	川上 浩良 (首都大東京 都市環境)
15:45 - 16:05	休憩	

セッション2

座長：武次 徹也 (北大院理)

16:05 - 16:55	招待講演「人工光合成と三元触媒上での NO 還元」	田中 庸裕 (京大院工)
16:55 - 17:45	招待講演「Computational Chemistry: A Catalyst Industrial Perspective」	長岡 修平 (ジョンソン・マッセイ・ジャパン)
17:45 - 18:05	移動休憩	

懇親会

18:05 - 19:35	【懇親会】ファカルティハウス「エンレイソウ」 会費 5,000円予定
---------------	------------------------------------

第5回公開シンポジウム

■第1日目：12月11日(火) 10:00~12:20

セッション1：サブ課題C および 基盤アプリ設計・開発 WG

座長：長岡 正隆 (名大院情報)

10:00 - 10:10	サブ課題C (進捗概要)	田中 秀樹 (岡山大学異分野基礎科学研)
10:10 - 10:40	サブ課題C「メタン、炭化水素ハイドレートの安定性と相変化の理論と計算」	田中 秀樹 (岡山大学異分野基礎科学研)
10:40 - 11:10	サブ課題C「理論計算に基づく触媒反応機構解明と未知触媒探索へむけて」	武次 徹也 (北大院理)
11:10 - 11:40	サブ課題C「CO ₂ 吸収シミュレーションのための超並列量子分子動力学法の開発」	中井浩巳、西村好史、周建斌 (早大先進理工)
11:40 - 12:20	基盤アプリ設計・開発 WG「基盤アプリ設計・開発と重点課題アプリ 5WG におけるポスト「京」に向けた取り組み」	中嶋 隆人(理研 R-CCS)、石村 和也 (分子研)
12:20 - 13:30	昼食休憩 ポスター貼り出し@ホワイエ	

■第2日目：12月12日(水) 9:30~16:50

セッション2：サブ課題B

座長：奥村 久士 (分子研)

9:30 - 9:40	サブ課題B (進捗概要)	杉野 修 (東大物性研)
9:40 - 10:10	サブ課題B「二次電池電解液の新規開発へ向けた複合反応系の計算化学」	長岡 正隆 (名大院情報)
10:10 - 10:40	サブ課題B「貴金属系および酸化物系電極界面の第一原理シミュレーション」	杉野 修 (東大物性研)
10:40 - 11:10	サブ課題B「燃料電池の電極4相界面における物質輸送分子機構の解明に向けて」	岡崎 進 (名大院工)
11:10 - 11:40	サブ課題B「電解液および界面過程のシミュレーションに向けたコード開発と応用」	館山 佳尚 (物材機構)

セッション3：ポスターセッション

11:40 - 12:40	ポスターセッション@ホワイエ (2F) ポスター貼り出し期間：12/11(火) 13:30 - 12/12(水) 12:40
12:40 - 14:00	昼食休憩 ポスター撤去

セッション4：インフォマティクス活用WG

座長：山下 晃一（東大院工）

14:00 - 14:10	インフォマティクス活用WG「重点課題5インフォマティクス活用WGについて」	館山 佳尚（物材機構）
14:10 - 14:35	インフォマティクス活用WG「材料シミュレーションとベイズ最適化を用いた全固体電池材料の探索」	ハレム ランディ ² 、中山将伸 ¹ （名工大 ¹ 、物材機構 Green ² ）
14:35 - 14:50	インフォマティクス活用WG「マテリアルズ・インテグレーションによるエネルギー材料の開発」	中嶋 隆人（理研 R-CCS）
14:50 - 15:00	小休憩	

セッション5：サブ課題A

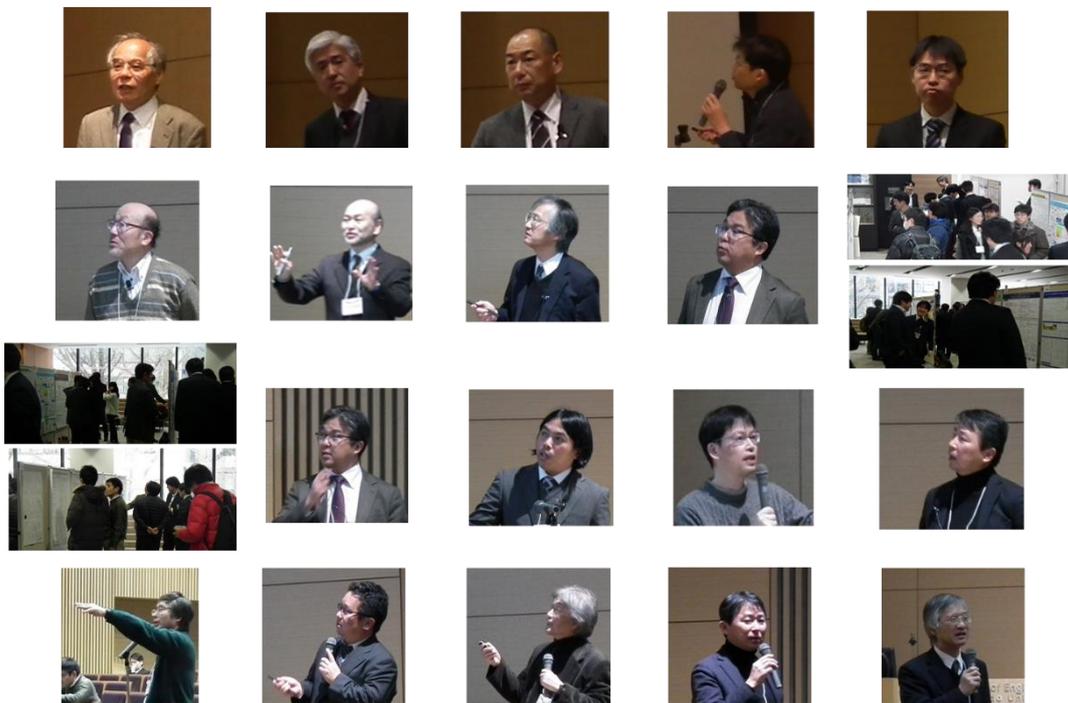
座長：中井 浩巳（早大先進理工）

15:00 - 15:10	サブ課題A（進捗概要）	天能 精一郎（神戸大院科学技術イノベーション）
15:10 - 15:40	サブ課題A「ポスト京に向けた、高精度強相関ソルバーの開発状況」	天能 精一郎（神戸大院科学技術イノベーション）
15:40 - 16:10	サブ課題A「大規模分子計算に向けた密度汎関数計算法の開発」	○神谷 宗明 ^{1,2} 、中嶋 隆人 ¹ （理研 R-CCS ¹ 、岐阜大地域科学 ² ）
16:10 - 16:40	サブ課題A「計算科学による太陽光エネルギー変換の機構解析と材料探索」	山下 晃一（東大院工）
16:40 - 16:50	まとめ	

当日のご挨拶、ご講演の様子（第2回実験・産業との連携シンポジウム）



当日のご講演の様子（第5回公開シンポジウム）



会議開催報告 K23	
会議名称	ポスト「京」重点課題5 ウィンタースクール -量子化学-
日時	2018年12月17日(月)～19日(水)
場所	岡崎コンファレンスセンター
参加者	87名 講師9名 合計96名

プログラム

12月17日(月)

司会：藤田貴敏(分子研)

13:25 - 13:40 開会式：岩田末廣校長

13:40 - 15:10 小林正人 先生(北海道大学)
「Hartree-Fock(-Roothaan)法：理論概要から詳細、数値結果まで」

15:20 - 16:50 中谷直輝 先生(首都大学東京)
「電子相関と post-HF 法」

17:00 - 18:30 神谷宗明 先生(岐阜大学)
「密度汎関数理論の基礎」

12月18日(火)

司会：小野純一(早稲田大)

9:00 - 10:30 福田良一 先生(京都大学)
「電子励起状態の計算化学」

10:40 - 12:10 原渕祐 先生(北海道大学)
「量子化学計算を用いた反応経路解析」

12:10 - 13:30 昼食

司会：大越昌樹(早稲田大)

13:30 - 15:00 岸亮平 先生(大阪大学)
「量子化学に基づく分子物性の予測と解釈」

15:10 - 16:40 和佐田祐子 先生(名古屋工業大学)
「Gaussian による SCF および構造最適化計算の実際」

16:50 - 17:50 受講者の研究発表 (poster) 受講者の研究発表 (poster) ポスター発表

18:00 - 19:30 懇親会

12月19日(水)

司会：石村和也(分子研)

9:00 - 10:30 清野淳司 先生(早稲田大学)
「相対論的量子化学における理論・計算手法の基礎」

10:40 - 12:10 白井聡一 先生(豊田中央研究所)
「企業の材料研究における量子化学の役割」

12:15 - 12:30 修了証授与、閉会式：岩田末廣 校長

会議開催報告 K24	
会議名称	第7回材料系ワークショップ～第一原理計算と実験のデータ同化による材料開発手法～（共催）
主催	一般財団法人 高度情報科学技術研究機構
日時	2019年2月8日(金) 10:00 ～ 17:30
場所	秋葉原 UDX 4階 NEXT-1
参加者	86名 内企業56名

プログラム

司会：白鳥 和矢(三菱ケミカル株式会社, 産応協)

10:00-10:05	開会挨拶 塩原 紀行 (高度情報科学技術研究機構)
10:05-10:35	材料系アプリケーションとその利用について 吉澤 香奈子 (高度情報科学技術研究機構)
10:35-11:10	OpenMXに基づく電気化学界面系のシミュレーションおよび解析 大脇 創 (株式会社日産アーク)
11:10-11:30	「京」からポスト「京」へ 奥田 基 (高度情報科学技術研究機構)
11:30-12:30	<ランチタイム>
12:30-13:05	大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発と応用計算 石村 和也 (分子科学研究所)
13:05-13:40	自己学習モンテカルロ法：機械学習を用いたモンテカルロ法の高速化 永井 佑紀 (日本原子力研究開発機構)
13:40-14:15	第一原理計算と実験のデータ同化による結晶構造予測 藤堂 眞治 (東京大学)
14:15-14:35	<休憩>
14:35-15:10	フェーズフィールド法に基づくデータ同化研究の最前線 長尾 大道 (東京大学地震研究所)
15:10-15:45	材料データプラットフォームの構築：材料計測データの高効率収集と自動可読化 吉川 英樹 (物質・材料研究機構)
15:45-15:55	<休憩>
「計算と実験のデータ同化で何かできるのか」	
15:55-17:00	パネルディスカッション モデレータ：古宇田 光 (東京大学物性研究所)

	パネリスト：藤堂 眞治（東京大学） / 茂本 勇（東レ株式会社, 産応協） / 長尾 大道（東京大学地震研究所） / 吉川 英樹（物質・材料研究機構）
17:00-17:30	HPCI・アプリケーション利用相談、情報交換（希望者のみ）

会議開催報告 K25	
会議名称	ポスト「京」重点課題5 大規模並列量子化学計算プログラム SMASH 講習会 -名古屋大学情報基盤センターCX400 を用いたハンズオン-
日時	2019年2月13日(水) 13:00 ~ 16:30
場所	名古屋大学高等総合研究館 308 号室
参加者	10名 講師1名 合計11名

会議開催報告 K26	
会議名称	第9回 NTChem ワークショップ (共催)
日時	2019年3月15日(金) 13:00 ~ 18:10
場所	理研計算科学研究センター

プログラム

- 13:00-13:05 **開会挨拶** 中嶋 隆人 (理化学研究所) : Takahito Nakajima (RIKEN)
- 13:05-13:30 松岡 貴英 (理化学研究所) : Takahide Matsuoka (RIKEN)
『 NTChem を利用した研究報告 』
- 13:30-14:05 樋山 みやび (群馬大学) : Miyabi Hiyama (Gunma Univ.)
『 紅色光合成細菌の反応中心における置換基効果の理論的研究 』
- 14:05-14:25 コーヒーブレイク
- 14:25-15:00 石田 豊和 (産業技術総合研究所) : Toyokazu Ishida (AIST)
『 計算科学によるタンパク質の糖鎖認識機構の解析 』
- 15:00-15:35 大戸 達彦 (大阪大学) : Tatsuhiko Ohto (Osaka Univ.)
『 単一分子接合の第一原理伝導計算 』
- 15:35-16:10 常田 貴夫 (物質材料研究機構) : Takao Tsuneda (NIMS)
『 反応軌道エネルギー論の展開 』
- 16:10-16:30 コーヒーブレイク
- 16:30-17:05 安池 智一 (放送大学) : Tomokazu Yasuike (The Open Univ. of Japan)
『 開放系電子状態理論による界面分子の光誘起非断熱ダイナミクス 』
- 17:05-17:40 北浦 和夫 (理化学研究所) : Kazuo Kitaura (RIKEN)
『 NTChem の入力データ作成支援 GUI プログラム NTDefineG の紹介 』
- 17:40-18:05 NTChem 利用に関する意見交換会
- 18:05-18:10 **閉会挨拶** 中嶋 隆人 (理化学研究所) : Takahito Nakajima (RIKEN)
- 18:10-20:00 NTChem 利用相談会 + 懇談会 (同会場)

会議開催報告 K27	
会議名称	「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」 基盤アプリ設計開発ワーキング
日時	2019年3月22日(金) 13:00 ~ 14:30
場所	TV 会議 (理研、神戸大学、名古屋大学、分子研)
参加者	中嶋、天能、岡崎、CSE 事務局
議事	1. 2019年度高度化予算の配分案について 2. ポスト「京」性能評価結果の公開ガイドラインについて 3. その他

(2) 会議参加報告

会議参加報告 S01	
会議名称	HPCI コンソーシアム平成 30 年度通常総会
日時	2018 年 5 月 31 日(木) 16:00 ~ 18:00
場所	東京大学生産技術研究所 「中セミナー室 1」 (An401・402)
参加者	加藤
議事	1. 平成 29 年度事業報告 2. 平成 29 年度会計報告および監査報告 3. 平成 30 年度事業計画 4. 平成 30 年度予算計画 5. 「フラッグシップ計算機停止期間における HPCI の資源提供の在り方とポスト「京」への移行について」の提言について 6. HPCI システムの運用方針に関する提言について 7. 平成 30 年度役員を選任 8. 理事長候補、副理事長候補の選任 9. 総会議長、副議長の選任 10. 報告 会員の入退会について 11. その他

会議参加報告 S02	
会議名称	第 1 回システム・アプリケーション連携推進委員会
日時	2018 年 6 月 20 日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理化学研究所計算科学研究機構東京分室 会議室
参加者	中嶋
議事	1. 詳細設計(3) 報告書について 2. コデザイン文書・チューニングマニュアルについてポスト「京」性能評価環境 (性能推定ツール、理研シミュレータ) について 3. 情報公開スケジュールや公開資料の開示等について 4. その他

会議参加報告 S03	
会議名称	第4回計算物質科学連絡会議
日時	2018年8月2日(木) 15:00 ~ 17:00
場所	ステーションコンファレンス東京 402-C
参加者	岡崎、天能
議事	計算物質科学の重点課題5、重点課題7、萌芽的課題、PCoMS、Mi ² i 間の連携のための情報交換

会議参加報告 S04	
会議名称	分子科学研究所一般公開2018(出展)
主催	自然科学研究機構 分子科学研究所
日時	2018年10月20日(土) 10:00 ~ 17:00
場所	分子科学研究所

会議参加報告 S05	
会議名称	第5回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 ～ポスト「京」への移行期を迎える HPCI～
日時	2018年11月2日(金) 10:00～18:00
場所	THE GRAND HALL (品川)
参加者	岡崎、加藤

プログラム

- 10:00 - 10:20 開会挨拶：関 昌弘 (一般財団法人高度情報科学技術研究機構 理事長)
開会挨拶：美濃 導彦 (国立研究開発法人理化学研究所 理事)
来賓挨拶：坂下 鈴鹿 (文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室 室長)
来賓挨拶：加藤 千幸 (一般社団法人 HPCI コンソーシアム 理事長)
- 10:20 - 10:50 特別講演：松岡 聡 (理化学研究所 計算科学研究センター長)
「「ポスト京」からさらに未来の HPC と AI の融合」[PDF]
- 10:50 - 12:20 パネルディスカッション：「京」からポスト「京」へ ～期待と課題
モデレーター：小林 広明 (東北大学大学院 教授)
パネリスト：朴 泰祐 (HPCI 連携サービス委員会 委員長、筑波大学大学院 教授)
加藤 千幸 (HPCI コンソーシアム理事長、東京大学 教授)
伊藤 宏幸 (産応協 前実行委員長、ダイソ工業(株) リサーチコーディネーター)
吉田 亮 (統計数理研究所 教授)
奥田 基 (高度情報科学技術研究機構 神戸センター 副センター長)
- 12:20 - 13:10 < 昼食 >
- 13:10 - 15:10 Session1：ポスターセッション
- Session2：優秀成果賞受賞課題による成果発表
座長：田中 成典 (神戸大学)
- 15:10 - 15:25 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築 (hp170036)
荒木 望嗣 (京都大学 医学研究科)
- 15:25 - 15:40 HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築 (hp170183)
福澤 薫 (星薬科大学 薬学部 薬品物理化学教室)
- 15:40 - 15:55 分子シミュレーションによるヌクレオソーム結合様式の網羅的探索 (hp170066)
石田 恒 (量子科学技術研究開発機構)

15:55 - 16:10 膜輸送タンパク質の大規模構造変化を伴う反応機構の解明手法の開発
(hp170141)

岩橋 千草 (理化学研究所 計算科学研究センター)

16:10 - 16:30 < 休憩 >

Session3 : 優秀成果賞受賞課題による成果発表

座長 : 大川 正典 (広島大学)

16:30 - 16:45 不安定核生成の予言へ向けた時間依存密度汎関数法の拡張とその応用
(hp170007)

関澤 一之 (新潟大学 研究推進機構 超域大学院)

16:45 - 17:00 電子・イオンプラズマにおける3次元 Weibel-流体不安定性による磁場
生成と粒子加速 (hp170125)

高本 亮 (東京大学 理学系研究科 地球惑星科学専攻)

17:00 - 17:15 ヘテロ界面電子系の電気応答特性の解明と電子デバイス設計 (hp170074)

野田 真史 (筑波大学 計算科学研究センター)

17:15 - 17:30 ゲリラ豪雨予測を目指した「ビッグデータ同化」の研究 (hp170178)

三好 建正 (理化学研究所 計算科学研究センター)

17:30 - 17:55 表彰、講評 : 小柳 義夫 (成果報告会プログラム委員会 委員長)

17:55 - 18:00 閉会挨拶 : 高津 英幸 (一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸セ
ンター長)

会議参加報告 S06	
会議名称	2018年度 理研計算科学研究センター一般公開(出展)
主催	理化学研究所 計算科学研究センター
日時	2018年11月23日(土) 10:00 ~ 16:30
場所	理化学研究所 計算科学研究センター

会議参加報告 S07	
会議名称	第2回システム・アプリケーション連携推進委員会
日時	2018年12月25日(火) 11:00 ~ 12:00
場所	理化学研究所計算科学研究センター東京分室 会議室
参加者	岡崎
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. アプリケーション性能情報の開示対象拡大について 2. ポスト「京」性能評価環境（性能推定ツール、理研シミュレータ）について 3. コデザイン文書・チューニングマニュアルの状況について 4. ポスト「京」に関する公開情報について 5. その他

会議参加報告 S08	
会議名称	ポスト「京」の成果創出に向けた意見交換会
日時	2019年1月31日(木) 14:00 ~ 16:00
場所	TKP 東京駅セントラルカンファレンスセンター・ホール 10A
参加者	加藤
プログラム	<ol style="list-style-type: none"> 1. 趣旨説明 一般社団法人 HPCI コンソーシアム 理事長 加藤千幸 2. ポスト「京」の開発計画等について 文部科学省研究振興局計算科学技術推進室 室長 坂下鈴鹿 3. ポスト「京」の開発状況について 理化学研究所 R-CCS フラッグシップ 2020 プロジェクト プロジェクトリーダー 石川 裕、副プロジェクトリーダー 佐藤三久 4. 「HPCI システムの今後の運営の在り方に関する調査検討ワーキンググループ」における論点の紹介 一般社団法人 HPCI コンソーシアム 副理事長 常行真司 5. ポスト「京」の成果創出に向けたパネルディスカッション 6. 閉会挨拶 一般社団法人 HPCI コンソーシアム 副理事長 常行真司

会議参加報告 S09	
会議名称	京×ポスト京 シンポジウム ～シミュレーション・AI・ビッグデータ～
日時	2019年1月18日(金) 13:00～16:45
場所	日本橋ライフサイエンスハブ (室町ちばぎん三井ビルオフィス棟8階)
参加者	加藤
プログラム	<p>13:00-13:05 開会挨拶 関 昌弘(高度情報科学技術研究機構 理事長)</p> <p>13:05-13:15 挨拶 文部科学省</p> <p>13:15-13:45 講演：スーパーコンピュータの歴史から将来を見る 小柳 義夫(高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー/東京大学名誉教授)</p> <p>13:45-14:15 講演：高速道路ネットワークの地震リダンダンシー評価の可能性 金治 英貞(阪神高速道路株式会社神戸建設部 部長)</p> <p>14:15-14:45 講演：計算シミュレーションの高分子材料基盤技術開発に向けた期待 中瀬古 広三郎(住友ゴム工業株式会社 技監)</p> <p>14:45-15:05 コーヒーブレイク (産業利用相談会)</p> <p>15:05-15:35 講演：カジュアルなスーパーコンピューター 鬼頭 周(ソフトバンク株式会社 常務執行役員 事業開発統括ソリューション戦略開発室長)</p> <p>15:35-16:05 講演：人工知能とシミュレーション 辻井 潤一(産業技術総合研究所人工知能研究センター センター長)</p> <p>16:05-16:35 講演：次世代高性能 ARM プロセッサによる HPC と AI の統合 松岡 聡(理化学研究所計算科学研究センター センター長)</p> <p>16:35-16:45 閉会挨拶 松岡 聡(理化学研究所計算科学研究センター センター長)</p>

会議参加報告 S10	
会議名称	第6回ポスト「京」性能評価環境説明会
日時	2019年1月25日(金) 13:30 ~ 16:00
場所	理化学研究所計算科学研究センター C104-2 東京分室会議室
参加者	安藤、石村
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. ポスト「京」性能評価環境の概要 2. ポスト「京」システム・プロセッサの仕様と特徴 3. 性能評価と性能チューニングの概要 4. ポスト「京」性能推定ツールについて 5. Arm クラスタについて 6. ポスト「京」プロセッサシミュレータについて 7. その他

会議参加報告 S11	
会議名称	第5回計算物質科学連絡会議
日時	2019年3月1日(金) 14:00 ~ 16:00
場所	ステーションコンファレンス東京 402-A
参加者	岡崎、天能
議事	計算物質科学の重点課題5、重点課題7、萌芽的課題、PCoMS、Mi ² i 間の連携のための情報交換

(3) コデザイン検討会議報告

コデザイン検討会議報告 C01	
会議名称	重点課題アプリ 5 精度確認検討会
日時	2018 年 4 月 11 日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	澤田、石村
議事	1. 重点課題 5 開発アプリのターゲット問題における精度確認について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C02	
会議名称	第 42 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ
日時	2018 年 4 月 25 日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	3. 重点課題 5 開発アプリの性能評価について 4. その他

コデザイン検討会議報告 C03	
会議名称	第 43 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ
日時	2018 年 5 月 30 日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題 5 開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C04	
会議名称	第44回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年6月27日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C05	
会議名称	第45回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年7月17日(火) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C06	
会議名称	重点課題アプリ5アプリ検討会議
日時	2018年7月30日(月) 13:00 ~ 15:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. NTChem/RI-MP2プログラムにおいて、メモリ使用量削減による通信時間の増加を抑える方法の検討 2. その他

コデザイン検討会議報告 C07	
会議名称	第46回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年8月29日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C08	
会議名称	第47回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年9月26日(水) 15:00 ~ 17:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C09	
会議名称	第48回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年10月31日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C10	
会議名称	第49回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2018年11月21日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C11	
会議名称	アプリケーション検討会
日時	2018年11月30日(金) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 各重点課題アプリ性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C12	
会議名称	アプリケーション検討会
日時	2018年12月14日(金) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 各重点課題アプリ性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C13	
会議名称	第 51 回重点課題アプリ 5 ワーキンググループ
日時	2019 年 1 月 8 日(火) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	石村
議事	1. 重点課題 5 開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C14	
会議名称	アプリケーション検討会
日時	2019 年 1 月 18 日(金) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター 東京分室会議室
参加者	石村
議事	1. 各重点課題アプリ性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C15	
会議名称	アプリケーション検討会
日時	2019 年 2 月 15 日(金) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター 東京分室会議室
参加者	石村
議事	1. 各重点課題アプリ性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C16	
会議名称	第52回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2019年2月27日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	上島、土持
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C17	
会議名称	アプリケーション検討会
日時	2019年3月15日(金) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター 東京分室会議室
参加者	石村
議事	1. 各重点課題アプリ性能評価について 2. その他

コデザイン検討会議報告 C18	
会議名称	第53回重点課題アプリ5ワーキンググループ
日時	2019年3月19日(火) 10:00 ~ 12:00
場所	理研 計算科学研究センター
参加者	土持、石村
議事	1. 重点課題5開発アプリの性能評価について 2. その他

様式第 2 1

(4) 学会等発表実績

委託業務題目「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」

機関名 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所

1. 学会等における口頭・ポスター発表

(a) 口頭発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
量子化学プログラム GELLAN の開発	Ladoczki Bence、天能精一郎	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
Massively parallel implementation of model space quantum Monte Carlo method	上島基之、天能精一郎	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 1 回若手勉強会	2018 年 8 月	国内
イニシエーター近似の摂動補正に関する研究	土持崇嗣、天能精一郎	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 4 回公開シンポジウム	2018 年 9 月	国内
量子化学プログラム GELLAN の開発	上島基之、天能精一郎	第 1 2 回分子科学討論会	2018 年 9 月	国内

ポスト京に向けた、高精度強相関ソルバーの開発状況	天能 精一郎	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
基盤アプリ設計・開発と重点課題アプリ5WGにおけるポスト「京」に向けた取り組み	中嶋隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
マテリアルズ・インテグレーションによるエネルギー材料の開発	中嶋隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
大規模分子計算に向けた密度汎関数計算法の開発	神谷宗明、中嶋隆人	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

計算科学による太陽光エネルギー変換の機構解析と材料探索	山下 晃一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
光エネルギー変換の理論・計算化学	山下 晃一	化学技術推進協会先端科学・材料技術部会・コンピュータケミストリ分科会次世代CCWG講演会(東京)	2018年7月	国内
光エネルギー変換の理論・計算化学	山下 晃一	スパコンプロフェッショナル(金属材料研究所)	2018年6月	国内
貴金属系および酸化物系電極界面の第一原理シミュレーション	杉野 修	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
First-principles simulation of TiO ₂ electrocatalyst for polymer electrolyte fuel cell	山本良幸	重点課題5第1回若手勉強会	2018年8月	国内
First-Principles Study of Oxygen Reduction Reaction at Defective TiO ₂ surfaces	山本良幸	Cancun, Mexico, Americas International Meeting on Electrochemistry and Solid State Science	2018年10月	国外

第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発とイオン結晶の不規則性への応用	笠松秀輔	東京大学物性研究所、物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の今と未来」	2018年4月	国内
Direct coupling of first-principles calculation with replica exchange Monte Carlo sampling of ion disorder in solids	笠松秀輔	LecTore Atami-Momoyama, 重点課題5 第1回若手勉強会 (CSE 1st Young Researcher Workshop)	2018年8月	国内
第一原理熱力学サンプリングによる酸化物中の欠陥間相互作用の解析	笠松秀輔	湯沢ニューオータニ、第14回固体イオニクスセミナー	2018年9月	国内
第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発と欠陥を有するイオン結晶への応用	笠松秀輔	同志社大学京田辺キャンパス、日本物理学会2018年秋期大会	2018年9月	国内
vdW-DF+U TiO_2 description of solid oxygen in ambient pressure and its magnetic-field induced phase transition	笠松秀輔	Kashiwanoha Conference Center, 16th International Conference on Megagauss Field Generation and Related Topics	2018年9月	国内
第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発と欠陥を有するイオン結晶への応用	笠松秀輔	東北大学金属材料研究所、PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会	2018年10月	国内

第一原理熱力学サンプリングによる酸化物中の欠陥間相互作用の解析	笠松秀輔	京都大学吉田キャンパス、第44回固体イオニクス討論会	2018年12月	国内
First-Principles Study on the Microscopic Origin of Interfacial Resistance between Oxide Cathode and Sulfide Electrolyte in All Solid State Battery	館山佳尚, 春山潤, 袖山慶太郎	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
Combined experimental and computational investigation on the electrochemical reactivity of garnet-type solid electrolyte in an all-solid-state battery cell	Randy Jalem, Yasuyuki Morishita, Takashi Okajima, Yuki Kondo, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
Computational Investigation on Oxide Electrolytes with Garnet Structure and Conduction-Pathway-Blocking Dopants	Randy Jalem, Ryosuke Natsume, Masanobu Nakayama	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit	2018年4月	国外
NO + CO Reaction on Rh Surface: DFT Investigation Combined with Microkinetic Analysis	石川敦之, 館山佳尚	The 7th JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium	2018年5月	国外
Reversible O redox in Layered Hexagonal Transition Metal Oxides for Na Ion Battery Cathodes with High Potential and High Capacity	M. H. N. Assadi, 大久保将史, 山田淳夫, 館山佳尚	ACEMD18, Australian Computationally enhanced Materials Design 18	2018年7月	国外
第一原理計算・微視的反応論・反応工学に基づくメタン酸化カップリング活性と選択性の理論予測	石川敦之, 館山佳尚	第12回分子科学討論会	2018年9月	国内

第一原理計算と微視的反応速度論に基づく理論計算によるメタン酸化カップリングの活性と選択性の予測	石川敦之, 館山佳尚	第 122 回触媒討論会	2018 年 9 月	国内
DFT Study on CO ₂ Reduction on Boron-doped diamond Electrode	館山佳尚, Maofeng Dou, 飯塚将太, 栄長泰明	69th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry	2018 年 9 月	国外
Investigation of Interface Reaction between LiCoO ₂ and Sulfide Electrolyte in an All-Solid-State Battery from First-Principle Structure Prediction Method	Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, 館山佳尚	第 59 回電池討論会	2018 年 11 月	国内
層状構造を持つ Li(NixCoyMnz)O ₂ 正極材料の表面欠陥に関する第一原理計算解析	Shukri Ganes, Jalem Randy, 館山佳尚	第 59 回電池討論会	2018 年 11 月	国内
Efficient search of novel ion conductive ceramics by combining first-principles calculations and materials informatics	Randy Jalem, Kenta Kanamori, Ichiro Takeuchi, Yoshitaka Tateyama, Masanobu Nakayama	第 59 回電池討論会	2018 年 11 月	国内
Theoretical Study on Termination Dependent Redox Reactivity of Boron Doped Diamond / Water Interface	飯塚将太, 夏井啓介, 栄長泰明, 館山佳尚	2018 Materials Research Society Fall Meeting	2018 年 11 月	国外
Surface Orientation Dependence of Oxygen Vacancy and Ni/Li Cation Mixing Defects Formation in Li(Ni _{0.8} Co _{0.1} Mn _{0.1})O ₂ Cathode Materials	Ganes Shukri, Randy Jalem, 館山佳尚	2018 Materials Research Society Fall Meeting	2018 年 11 月	国外

電解液および界面過程のシミュレーションに向けたコード開発と応用	館山 佳尚	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
重点課題5インフォマティクス活用WGについて	館山 佳尚	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
材料シミュレーションとベイズ最適化を用いた全固体電池材料の探索	ハレム ランディ、中山 将伸	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
電極分極効果とイオン液体界面カイネティクス	稲垣 泰一	研究会「凝縮系の理論化学 2019	2019年3月	国内
二次電池負極界面における不動態被膜形成に関する計算化学的研究	長岡 正隆	触媒・電池元素戦略研究拠点第14回公開シンポジウム(東京大学)	2019年3月	国内
Toward Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems including Biological Macromolecules	Masataka Nagaoka	The Role of Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function(Telluride, USA)	2019年1月	国外

二次電池電解液の新規開発へ向けた複合反応系の計算化学	長岡 正隆	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
Microscopic Mechanism of FEC Concentration Effect on SEI Film Formation in Na-ion Batteries	Amine Bouibes, Norio Takenaka, Takuya Fujie, Kei Kubota, Shinichi Komaba, and Masataka Nagaoka	6th Edition of the International Renewable and Sustainable Energy Conference (Rabat, Morocco)	2018年11月	国外
Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium Ion Batteries :A Computational Chemical Study based on Red Moon Methodology	Masataka Nagaoka	Physical Chemistry Seminar (Boston University, USA)	2018年8月	国外
複合化学反応系の理論化学・計算化学に向けて	長岡正隆	ワークショップ「複合系の理論化学・計算化学:最近の研究状況と展望」(京都大学福井謙一記念研究センター)	2018年4月	国内
高速多重極展開法の適用可能なシミュレーションセル形状の拡張	吉井 範行、安藤 嘉倫、岡崎 進	第21回理論化学討論会	2018年5月	国内
ガラス状高分子 PMMA の衝撃破壊に関する分子論的研究	藤本和士, 服部智成, 篠田 渉, 岡崎 進	第21回理論化学討論会	2018年5月	国内

Extensions of the Fast Multipole Method(高速多重極展開法の拡張)	吉井 範行	重点課題5第1回 若手勉強会	2018年8 月	国内
Performance improvements of software MODYLAS for the post-K computer	Yoshimichi Ando	重点課題5第1回 若手勉強会	2018年8 月	国内
Consideration of accelerating MODYLAS by utilizing single-precision SIMD on Post-K	Jiachao Zhang	重点課題5第1回 若手勉強会	2018年8 月	国内
Fracture Simulation of a Glassy Polymer by all atomistic Molecular Dynamics Calculation	Kazushi Fujimoto	重点課題5第1回 若手勉強会	2018年8 月	国内
脂質組成に非対称性をもつモデル脂質二重層膜の分子動力学計算	安藤 嘉倫, 早川 志保 岡 崎 進	第12回分子科学討 論会	2018年9 月	国内
異方性の高いシミュレーションセルにおける高速多重極展開法	吉井範行, 安 藤嘉倫, 岡崎 進	第12回分子科学討 論会	2018年9 月	国内
非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究	藤本和士, 服 部智成, 篠田 渉, 岡崎 進	第12回分子科学討 論会	2018年9 月	国内
非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 I: 脆性材料 - PMMA	藤本和士, 湯 之也, パヤル ラジディー プ, 篠田 渉, 岡崎 進	第67回高分子討論 会	2018年9 月	国内
非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 II: 延性材料 - PC	藤本和士, 湯 之也, 篠田 渉, 岡崎 進	第67回高分子討論 会	2018年9 月	国内
周期境界条件下における静電相互作用の surface term	吉井範行, 安 藤嘉倫, 岡崎 進	第32回分子シミュ レーション討論会	2018年11 月	国内
非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 II: 分子論的解釈	湯之也, 藤本 和士, 篠田渉, 岡崎進	第32回分子シミュ レーション討論会	2018年11 月	国内

ポスト「京」重点課題5 全体概要	岡崎 進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第2回実験・産業との連携シンポジウム	2018年12月	国内
燃料電池の電極4相界面における物質輸送分子機構の解明に向けて	岡崎 進	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
Molecular Study of Impact Fracture of Amorphous Polymer I: Brittle Material - PMMA	Kazushi Fujimoto, Zhiye Tang, Rajdeep Payal, Wataru Shinoda and Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018年12月	国外
メタン、炭化水素ハイドレートの安定性と相変化の理論と計算	田中 秀樹	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
固体酸化物への金属ドーピングによる表面改質効果の系統的評価	中山哲	第3回触媒インフォマティクス研究会	2018年4月	国内
メタン活性化の計算化学とインフォマティクス	大塚勇起, 中山哲, 長谷川淳也	第3回触媒インフォマティクス研究会	2018年4月	国内

CeX (X=F, H)の擬縮退電子状態に対するスピン軌道相互作用を考慮した精密計算	近藤有輔、小林正人、赤間知子、野呂武司、武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
非一様電場下でのラマン分光計算手法の開発	竹中将斗、岩佐豪、武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
静的反応経路網に基づくAIMD古典軌道解析	堤拓朗、原渕祐、小野ゆり子、前田理、武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
シリカ担持白金触媒によるエチレンの完全酸化反応機構の解析: C=C結合活性化メカニズムに関する理論的研究	宮崎玲、中谷直輝、横谷卓郎、中島清隆、福岡淳、長谷川淳也	第2回統合物質(IRCCS)若手の会	2018年6月	国内
金チオラートクラスターの高位励起状態と発光	岩佐豪、蝦名昌徳、原渕祐、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会(札幌)	2018年7月	国内
Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/CeO ₂ Interface: First-Principle Simulations	Akira Nakayama, Toshiyuki Sugiyama, Masazumi Tamura, Ken-ichi Shimizu, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国外
近接場、クラスターの励起状態と触媒: TURBOMOLEとVASP	岩佐豪	ESICB若手研究会触媒・電池の実践的理論化学の最前線(千歳)	2018年8月	国内

液体インジウムによるメタンの脱水素多量化機構に関する理論的研究	大塚 勇起, 中山 哲, 西川 祐太, 荻原 仁志, 山中 一郎, 長谷川 淳也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
プラズモン場を用いたラマン分光理論	竹中将斗, 岩佐豪、武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
分割統治型 MP2 計算における誤差自動制御スキームの開発	藤森俊和, 小林正人, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
多次元尺度構成法に基づく固有反応座標および反応経路ネットワークの可視化	堤拓朗、小野ゆり子、荒井迅、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算 - 固体酸化物触媒を用いた反応機構の理論的解析 -	杉山 利行, 中山 哲, 長谷川 淳也	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018 年 9 月	国内
インジウム金属液体によるメタンの脱水素多量化反応に関する理論的研究	大塚勇起, 中山哲, 長谷川淳也, 西川祐太, 荻原仁志, 山中一郎	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018 年 9 月	国内
機械学習を利用した第一原理 MD トrajジェクトリの自動分類	小林正人、原 遡祐、堤拓朗、小野ゆり子、瀧川一学、武次徹也	日本コンピュータ化学会 2018 秋季年会 (弘前)	2018 年 11 月	国内

理論計算に基づく触媒反応機構解明と未知触媒探索へむけて	武次 徹也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
光免疫療法における細胞障害メカニズムに関する計算化学的研究	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・小川美香子・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算: 固体酸化物触媒を用いた反応機構の理論的解析	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
金属ドーピングされた酸化セリウムを用いたメタンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
分子結晶における励起状態と発光過程の理論的解明	岩佐豪	ソフトクリスタル領域会議	2019年1月	国内
表面モデル計算データベースの作成とメタン水蒸気改質触媒活性の評価	小野田遼・黒田悠介・小林正人・武次徹也	日本化学会第99春季年会(甲南大学)	2019年3月	国内
多次元データ縮約法に基づいた固有反応座標及び反応経路ネットワークの可視化	堤拓朗・小野ゆり子・荒井迅・武次徹也	日本化学会第99春季年会(甲南大学)	2019年3月	国内

ヒドロキシメチルフルフラールの安定性に関する理論的研究	田代啓介・小林正人・中島清隆・武次徹也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019年3月	国内
ケイ素フタロシアニンの軸配位子開裂反応：癌光免疫療法薬剤の細胞障害機構に関する計算化学的検討	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・小川美香子・武次徹也	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019年3月	国内
Study of the substitution and solvation effect on the trans → cis photoisomerization of cinnamate derivatives	S. KINOSHITA, Y. INOKUCHI, Y. EBATA, K. INOUE, K. NAGAMORI, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA, T. TAKETSUGU	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019年3月	国内
Mechanochemical Selective Activation in Competing Chitin Hydrolysis Reactions	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019年3月	国内
Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	日本化学会第99春季年会（甲南大学）	2019年3月	国内

金クラスター触媒上での酸素によるピペリドンの C-H 結合活性化機構に関する理論的研究	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	日本化学会第 99 春季年会 (甲南大学)	2019 年 3 月	国内
金属ドーピングされた酸化セリウムを用いたメタンの C-H 結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	日本化学会第 99 春季年会 (甲南大学)	2019 年 3 月	国内
量子化学計算を用いた光免疫療法における細胞障害メカニズムの検討	原田芽生・小林正人・安藤完太・高倉栄男・武次徹也・小川美香子	日本薬学会第 139 年会 (千葉)	2019 年 3 月	国内
大規模化学反応シミュレーション手法の開発とその応用～分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法を中心に～	中井浩巳	東京大学第 319 回化学システム工学専攻公開セミナー	2018 年 4 月	国内
理論/実験化学におけるインフォーマティクスの活用例とその問題点	清野淳司	第 5 回さきがけ研究会	2018 年 4 月	国内
2 成分 picture change 補正相対論的密度汎関数理論の開発	五十幡康弘、大山拓郎、速水雅生、清野淳司、中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるキャリアイオン拡散の理論的解析	大越昌樹、周建斌、中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
Artificial Intelligence for Quantum Chemistry	Hiromi Nakai	7th JCS symposium 2018	2018 年 5 月	国外

光受容タンパク質の機構解明に向けた分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発	河本奈々、吉川武司、小野純一、中井浩巳	日本コンピュータ化学会 2018 春季年会	2018 年 6 月	国内
基盤研究(S)の概要	中井浩巳	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018 年 9 月	国内
GPU を用いた分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学プログラムの高速化	吉川武司	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018 年 9 月	国内
バクテリオロドプシンのプロトン移動ダイナミクス	小野純一	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018 年 9 月	国内
大規模励起状態シミュレーション手法の開発と PYP への応用	河本奈々	基盤研究(S)「光受容タンパク質の量子的分子動力学シミュレーションによる遍在プロトンの機能解明」	2018 年 9 月	国内
分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)計算プログラムの開発・整備と応用	西村好史	PCoMS シンポジウム&計算物質科学スパコン共用事業報告会 2018	2018 年 10 月	国内
機械学習を用いた Orbital-free 密度汎関数理論計算手法の開発	影山椋、清野淳司、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	第 41 回ケモインフォマティクス討論会	2018 年 10 月	国内

DC-DFTB-MD プログラムの公開	中井浩巳、西村好史、吉川武司	日本コンピュータ化学会 2018 秋季年会	2018 年 11 月	国内
Theoretical Analysis on Solution Structure and Ion Conduction Mechanism in Superconcentrated Electrolyte Solution for Na-ion Battery	Masaki Okoshi, Chien-Pin Chou, Hiromi Nakai	5th International Conference on Sodium Batteries	2018 年 11 月	国外
プログラムの開発・公開とその先に	中井浩巳	量子会	2018 年 11 月	国内
Na イオン二次電池用高濃度電解液における溶液構造とキャリアイオン拡散機構の理論的解析	大越昌樹、周建斌、中井浩巳	第 59 回電池討論会	2018 年 11 月	国内
ナトリウム金属の高効率析出溶解反応を可能にするフッ素フリー電解液	土肥恭輔、山田裕貴、大越昌樹、小野純一、周建斌、中井浩巳、山田淳夫	第 59 回電池討論会	2018 年 11 月	国内
バクテリオロドプシンの 1 段階目のプロトン移動過程に対する DC-DFTB-MD シミュレーション	小野純一、今井みの莉、西村好史、中井浩巳	第 32 回分子シミュレーション討論会	2018 年 11 月	国内
CO2 吸収シミュレーションのための超並列量子分子動力学法の開発	中井浩巳、西村好史、周建斌	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
Recent Advances of Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations for Catalysts and Batteries Applications	Aditya Wibawa Sakti	次世代 ESICB セミナー 2019-1	2019 年 3 月	国内

イリジウム触媒によるベンズアニリド類の位置選択的かつエナンチオ選択的C-H 共役付加ならびに反応機構解析	栗田久樹、高島千波、五十幡康弘、高野秀明、Kyalo Stephen Kanyiva、中井浩巳、柴田高範	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
ジアザジボレチジン-シクロブタジエンBNアナログの分子・電子構造と励起状態特性	庄子良晃、Ryzhii Ivan、五十幡康弘、王祺、中井浩巳、生駒忠昭、福島孝典	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
大規模単参照型静的相関手法の開発	土井俊輝、吉川武司、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
イリジウム触媒を用いたベンズアニリド類のC-H結合活性化反応における相対論効果の解析	高島千波、五十幡康弘、栗田久樹、高野秀明、柴田高範、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
機械学習を用いた post-Hartree-Fock 電子相関モデルの開発	櫛嶋拓朗、五十幡康弘、清野淳司、吉川武司、影山椋、中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
基盤アプリ設計・開発と重点課題アプリ5WGにおけるポスト「京」に向けた取り組み	石村 和也	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program SMASH	Kazuya Ishimura	International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019	2019年1月	国内
---	-----------------	---	---------	----

(b) ポスター発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
錯体系強相関ソルバーの超並列実装と半導体系触媒の理論開発	上島 基之	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
Full coupled cluster reduction for strong electron correlations	Xu Enhua	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
AGP 状態を用いたより大きな基底関数系による分子系の記述	植村 渉	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
分子集合系における光励起電子動力学の解明に向けた理論計算手法の開発	米原 丈博	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

太陽電池設計に向けた非断熱分子動力学シミュレーションの実装	嶺澤範行	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
PTB7/ITIC 非フラーレン型有機薄膜太陽電池における電荷移動メカニズムの理論的研究	太田希, 村岡梓, 山下晃一	第12回分子科学討論会(福岡国際会議場)	2018年9月	国内
Development of Organic Solar Cell Simulators for Material Design	Eisuke Kawashima, Koichi Yamashita	計算科学アライアンス国際シンポジウム(RECS 2018)(東京大学本郷キャンパス 小柴ホール)	2018年9月	国内
Na イオン電池負極材料 Sn における充放電過程と NMR の理論的研究	工藤慧, 村岡梓, 児玉涼介, Saeid Arabnejad, 山下晃一	日本コンピュータ化学会秋期年会(弘前大学)	2018年11月	国内
有機無機鉛ハライドペロブスカイト・クラスターの励起状態	近藤 友美, 村岡 梓, 山下晃一	日本コンピュータ化学会秋期年会(弘前大学)	2018年11月	国内
Mechanism of charge transfer in polymer/fullerene-free type organic solar cell	Nozomi Ohta, Azusa Muraoka, Koichi Yamashita	APS March Meeting	2019年3月	国外
Regression model for stabilization energies associated with anion ordering in Perovskite materials	Masanori Kaneko, Mikiya Fujii, Takashi Hisatomi, Koichi Yamashita, Kazunari Domen	Advances in Organic and Hybrid Electronic Materials (Dubrovnik, Croatia)	2019年3月	国外

Organic Photovoltaics Simulators for Material Design	Eisuke Kawashima, Koichi Yamashita	Advances in Organic and Hybrid Electronic Materials (Dubrovnik, Croatia)	2019年3月	国外
欠陥のあるTiO ₂ における酸素還元反応中間体の吸着エネルギー間との関係	山本 良幸	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
Solvation and nuclear quantum effects for hydrogen adsorption on Pt(111)	Yan Lei	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
チタニア表面における欠陥誘起の酸素還元反応	山本良幸	東京大学物性研究所、物性研スパコン共同利用・CCMS 合同研究会	2018年4月	国内

Ab initio Pourbaix diagram of defective oxide: A feasibility study of SCAN and ACFDT-RPA functional	山本良幸	ISSP, UTokyo, The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations	2018年7月	国内
TiO ₂ -酸性溶液界面における酸素還元反応の第一原理計算	山本良幸	同志社大学京田辺キャンパス、日本物理学会秋季大会	2018年9月	国内
TiO ₂ 電極触媒の電気化学的安定性の第一原理計算	山本良幸	東北大学片平キャンパス、PCoMS シンポジウム&スパコン共用事業成果報告会 2018	2018年11月	国内
First-principles study of hydrogen adsorption on Pt	山本良幸	奈良先端科学技術大学院大学、第12回物性科学領域横断研究会	2018年11月	国内
First-principles design of TiO ₂ electrocatalyst for oxygen reduction reaction	山本良幸	TIA かけはしポスター交流会 2018「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」	2018年12月	国内
First-principles study of hydrogen adsorption on Pt	山本良幸	奈良先端科学技術大学院大学、第12回物性科学領域横断研究会	2018年12月	国内

DFT+U and molecular dynamics study of H ₂ O interaction with metal/ceria materials	Lucie Szabova, Matteo Farnesi Camellone, Fabio Negreiros Ribeiro, 館山佳尚, Vladimir Matolin, Stefano Fabris	The 7th JCS (Japan-Czech-Slovak) Symposium	2018年5月	国外
First-Principles Study on Adsorption and Decomposition of Carbonate Electrolyte Molecules at LiNi _{0.5} Mn _{1.5} O ₄ Cathode Interface	館山佳尚, 奥野幸洋, 後瀉敬介, 袖山慶太郎	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
Grignard Reagent Based Electrolytes in Magnesium-Ion Battery : A First-Principles Study	Ashu Choudhary, 袖山慶太郎, 館山佳尚	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
Surveying Ilmenite Type 4d Transition Metal Oxides for Na Ion Battery Cathodes with High Potential and High Capacity	M. H. N. Assadi, 大久保將史, 山田淳夫, 館山佳尚	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外
Computational Investigation on the Sodium Ion Transport Property of Oxyfluorinated Titanium(IV) Phosphate Na ₃ Ti ₂ P ₂ O ₁₀ F for Sodium Ion Battery Application	Randy Jalem, Ryosuke Natsume, Masanobu Nakayama	19th International Meeting on Lithium Batteries (IMLB2018)	2018年6月	国外

NO + CO Reaction on Rh Surface: First Principle Density Functional Theory Investigation Combined with Microkinetic Analysis	石川敦之, 館山佳尚	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis (ICAT)	2018年8月	国外
Structure Search and Property Analysis of Interfaces between LiCoO ₂ Cathode and Sulfide Electrolyte in Solid-State Battery via DFT-CALYPSO Method	Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, 館山佳尚	International Workshop on Computational Design and Discovery of Novel Materials	2018年9月	国外
Towards Efficient Search of Novel Fast Ionic Conductors by Combining DFT Methods and Informatics Approaches	Randy Jalem, Kenta Kanamori, Yusuke Noda, Tam Le, Ichiro Takeuchi, Yoshitaka Tateyama, Masanobu Nakayama	International Workshop on Computational Design and Discovery of Novel Materials	2018年9月	国外
Development of a General Representation Scheme for Crystalline Solids by Combining Real Values from Voronoi Partitioning Features of Atomic Positions and Atomic Property Data	Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	The Thomas Young Centre and its partners; the University of Kent, University of Oxford, Queen's University Belfast and the University of Southampton	2018年9月	国外
Combining DFT Methods and Informatics Approaches for Efficient Search of Novel Fast Ion Conductors	Randy Jalem	NIMS Week 2018	2018年9月	国内

Theoretical Study on Termination Dependent Redox Reactivity of Boron Doped Diamond / Water Interface	飯塚将太, 夏井啓介, 栄長泰明, 館山佳尚	14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14)	2018年10月	国外
DFT Investigations of Surface Defects in Li(NixCoyMnz)O ₂ Layered Materials: Promising Cathode for Next Generation Battery	Ganes Shukri, Randy Jalem, 館山佳尚	14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14)	2018年10月	国外
ポストリチウムイオン電池に向けた電解質界面・被膜の物性解明と材料設計	館山佳尚	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内
炭素ダイヤモンド電極界面の触媒・化学反応に関する第一原理計算解析	濱田幾太郎, 館山佳尚	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内
Development of Polarizable Force Field for Lithium-ion Battery Applications	Xichan Gao	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

Grignard Reagent and beyond : The electrolytes for Mg ion batteries	Ashu Choudhary	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
非晶質炭素電極モデルを用いた電極電解液界面の分子動力学シミュレーション解析	藤江拓哉、竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	日本化学会第99春季年会	2018年3月	国内
分子動力学法による非晶質炭素電極モデルを用いた電極-電解液界面構造の解析	藤江拓哉、竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	研究会「凝縮系の理論化学2019(石垣市民会館)	2019年3月	国内
二次電池におけるSEI膜形成シミュレーションに関する研究開発	藤江 拓哉、稲垣泰一	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム(北海道大学フロンティア化学教育研究センター 2F レクチャーホール)	2018年12月	国内
分極可能な電極表面モデルが与えるイオン液体分子の界面カイネティクスへの影響	稲垣泰一、長岡正隆	第32回分子シミュレーション討論会(産業技術総合研究所 つくば中央キャンパス内共用講堂)	2018年11月	国内
定電位分子動力学法を用いたLiイオン電池における固体電解液相間(SEI)膜の構造安定性の解析	松田圭太郎、稲垣泰一、長岡正隆	第32回分子シミュレーション討論会(産業技術総合研究所 つくば中央キャンパス内共用講堂)	2018年11月	国内

Application of QM/MM-Red Moon Method to Solid Electrolyte Interphase Film Formation in Lithium-ion Battery System	Takuya Fujie, Norio Takenaka, Yuichi Suzuki, and Masataka Nagaoka	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	国内
リチウムイオン電池における不働態被膜の構造安定性の理論的解析	稲垣泰一、松田圭太郎、長岡正隆	PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018 (東北大学片平キャンパス金属材料研究所)	2018年10月	国内
水系 Li イオン電池用ハイドレートメルト電解液の電極界面における微視的構造	竹中規雄、稲垣泰一、長岡正隆	第12回分子科学討論会 (福岡国際会議場)	2018年9月	国内
イオン液体による金電極電位シフトの理論的解析	稲垣泰一、竹中規雄、長岡正隆	第12回分子科学討論会 (福岡国際会議場)	2018年9月	国内
Microscopic Origin of the SEI Formation Difference Between in Cis- and in Trans-2,3-Butylene Carbonate Based Electrolyte	Kasumi Miyazaki, Norio Takenaka, Takuya Fujie Eriko Watanabe, Atsuo Yamada, Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内

Macroscopic Mechanisms of SEI Film Formation in Li-Ion Batteries with Highly Concentrated Electrolyte	Norio Takenaka, Takuya Fujie, Amine Bouibes, Yuki Yamada, Atsuo Yamada, and Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内
Microscopic Effect of FEC Additive Concentration on SEI Film Formation in Na-ion Batteries	Amine Bouibes, Norio Takenaka, Takuya Fujie, Kei Kubota, Shinichi Komaba, and Masataka Nagaoka	the 19th International Meeting on Lithium Batteries (Kyoto International Conference Center)	2018年6月	国内
trans/cis ブチレンカーボネート電解液中で形成される SEI 膜の相違とその微視的起源	宮崎かすみ、竹中規雄、藤江拓哉、渡部絵里子、山田裕貴、山田淳夫、長岡正隆	第 21 回理論化学討論会	2018年5月	国内
大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発	安藤 嘉倫、坂下達哉、吉井 範行、岡崎 進	第 21 回理論化学討論会	2018年5月	国内
Solvent effect on lateral interaction between two cholesterol molecules in lipid bilayers	A. Matsuoka, Y. Andoh and S. Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	国外

Molecular dynamics study of collective dynamics of surfactant molecular assemblies	Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	国外
Molecular Dynamics Study on Hydrogen Dynamics through Polymer Electrolyte Membranes	K. Takeuchi, A. T. Kuo, A. Tanaka, S. Urata, W. Shinoda and S. Okazaki	Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan	2018年11月	国外
親水性ナノチャンネル内における水の液膜の負圧安定性メカニズムの解明	伊藤有毅, 安藤嘉倫, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
脂質二重層膜中のコレステロール二分子間側方相互作用にリン脂質および水が果たす役割の解明	松岡漢斗, 安藤嘉倫, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発	安藤嘉倫, 坂下達哉, 吉井範行, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
不均一系の物質輸送の理解に向けて、位置に依存する自己拡散係数の再検討	弦巻周平, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
分子動力学計算によるポリスチレンの衝撃破壊における分子論	伊藤直紀, 藤本和士, 湯之也, 篠田渉, 岡崎進	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
高分子電解質膜の水素透過性の分子動力学法による研究	竹内琴乃, An-Tsung Kuo, 浦田新吾, 岡崎進, 篠田渉	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内

非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 I: 延性と脆性	藤本和士、湯之也、Rajdeep Payal 篠田渉、岡崎進	第 32 回分子シミュレーション討論会	2018 年 11 月	国内
高速多重極展開法の分極可能モデルへの適用	吉井 範行	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発	安藤 嘉倫	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
Research on accelerating MODYLAS through maximum SIMD on Post-K via Mixed-Precision	張 家超 (ZHANG JIACHAO)	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
位置に依存する拡散係数、透過係数の再考 -不均一系における物質輸送の理解に向けて-	弦巻 周平	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内

Empirical Valence Bond の MODYALS へ の実装	藤本 和士	ポスト「京」重点 課題 5「エネルギー の高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用 の新規基盤技術の 開発」第 5 回公開 シンポジウム	2018 年 12 月	国 内
A molecular dynamics study of the molecular origin of the ductile rupture of PC	Zhiye Tang, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda and Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018 年 12 月	国 外
包接水和物の速度論的阻害剤の最適サ イズとゲスト依存性	矢ヶ崎 琢磨	ポスト「京」重点 課題 5「エネルギー の高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用 の新規基盤技術の 開発」第 5 回公開 シンポジウム	2018 年 12 月	国 内
銅クラスターと NO 解離反応触媒: 反応 経路自動探索法とスパースモデリング 解析	岩佐豪、佐藤 貴暁、高敏、 Andrey Lyalin、小林 正人、高木牧 人、前田理、 武次徹也	新学術領域研究 「精密制御反応 場」公開ワークシ ョップ「理論と実 験の融合による高 難度物質変換の反 応機構解明にむけ て」(札幌)	2018 年 5 月	国 内
Au クラスター触媒によるピペリドン の脱水素機構: クラスターの荷電状態 と反応活性の関連性について	宮崎玲、金雄 傑、吉井大 地、谷田部孝 文、山口和 也、水野哲 孝、長谷川淳 也	新学術領域研究 「精密制御反応 場」公開ワークシ ョップ「理論と実 験の融合による高 難度物質変換の反 応機構解明にむけ て」(札幌)	2018 年 5 月	国 内

固体酸化物触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する理論的研究	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
Theoretical Study on Enantioselective of Palladium Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
Theoretical Study on Rh-Catalyzed Hydrosilylation of C=C and C=O Double Bonds	L. Zhao, N. Nakatani, Y. Sunada, H. Nagashima, J. Hasegawa	新学術領域研究「精密制御反応場」公開ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
近接場光と分子の相互作用：多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンの比較	岩佐豪、海老澤修一、武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
分割統治 MP2 計算における相関バック領域の自動決定	藤森俊和, 小林正人, 武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
固有反応座標に基づく CF ₂ CF ₀ +解離過程の理論的研究	織田耕平, 堤拓朗, 古屋謙治, 武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内
Pd クラスタ触媒による C-X 結合解離反応の理論的研究	岩渕雄太, 高敏, 武次徹也	第21回理論化学討論会(岡崎)	2018年5月	国内

4f 電子の凍結近似による希土類錯体の簡便な基底・励起電子状態計算	大場祐汰, 小林正人, 武次徹也	第 21 回理論化学討論会 (岡崎)	2018 年 5 月	国内
振動マッピング-AIMD 法による動的エネルギー分割の試み	小西里緒, 高敏, 堤拓朗, 小野ゆり子, 原渕祐, 武次徹也	第 21 回理論化学討論会 (岡崎)	2018 年 5 月	国内
Au クラスタ触媒によるピペリドンの脱水素機構: クラスタの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第 21 回理論化学討論会 (岡崎)	2018 年 5 月	国内
固体酸化物触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する第一原理計算	杉山利行, 中山哲, 長谷川淳也	第 21 回理論化学討論会 (岡崎)	2018 年 5 月	国内
金属ドーブされた酸化セリウムを用いた低級アルカンの C-H 結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第 21 回理論化学討論会 (岡崎)	2018 年 5 月	国内
Application of informatics techniques to quantum chemical calculations of catalyst and surface adsorption systems	Masato Kobayashi, Haruka Onoda, Takeshi Iwasa, Maki Nakahara, Min Gao, Andrey Lyalin, Makito Takagi, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu	7th JCS (Japan-Czech-Slovak) SYMPOSIUM (Quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences) (PRAGUE)	2018 年 5 月	国外

Enantioselective Hydrosilylation of Styrene Catalyzed by Palladium Catalyst with Chiral Polymeric Ligands	M. Ratanasak, , T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	Computational Catalysis for Sustainable Chemistry	2018年6月	国外
Automatic error control scheme for the divide-and-conquer electronic structure calculation	Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	16TH INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY (16th-ICQC), (Menton, France)	2018年6月	国外
Theoretical Analysis of Mechanically Induced Selective Hydrolysis of Chitin	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	16TH INTERNATIONAL CONGRESS OF QUANTUM CHEMISTRY (16th-ICQC), (Menton, France)	2018年6月	国外
Au クラスタ触媒によるピペリドンの脱水素機構: クラスタの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第58回オーロラセミナー	2018年7月	国内
A DFT mechanistic study on the complete oxidation of ethylene by silica supported Pt catalyst: C=C activation via ethylene dioxide intermediate	Ray Miyazaki, Naoki Nakatani, Takuro Yokoya, Kiyotaka Nakajima, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	9th CSE Summer School 2018 (Sapporo)	2018年7月	国内

7 配位希土類錯体の構造・発光に関する理論的研究	赤間知子、小林正人、柳澤慧、北川裕一、中西貴之、長谷川靖哉、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会 (札幌)	2018年7月	国内
CeX(X = F, H)のスピ軌道相互作用を考慮した擬縮退電子状態に関する理論的研究	近藤有輔、小林正人、赤間知子、野呂武司、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会 (札幌)	2018年7月	国内
励起プロトン移動由来発光性亜鉛錯体の励起状態と発光機構	蝦名昌徳、岩佐豪、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会 (札幌)	2018年7月	国内
希土類錯体の発光過程を標的とする簡便な量子化学計算手法の構築	大場祐汰、小林正人、武次徹也	第30回配位化合物の光化学討論会 (札幌)	2018年7月	国内
A DFT study of C-H bond activation of methane over transition metal-doped CeO ₂ catalyst	Masahiro Iseka, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
Theoretical Study on Conversion of Methane to Higher Hydrocarbons by Liquid-Metal Indium	Y. Ohtsuka, A. Nakayama, Y. Nishikawa, H. Ogihara, I. Yamanaka, J. Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
Theoretical Insights in Mechanochemical Selective Chitin Hydrolysis	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内

Reaction mechanism of the direct synthesis of dimethyl carbonate from CO ₂ and methanol over metal-oxide catalysis: a theoretical study	Toshiyuki Sugiyama, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
Enantioselective Hydrosilylation of Styrene Catalyzed by Palladium Catalyst with Chiral Polymer Ligands	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
Photocatalytic CO ₂ reduction mechanism of fac-[Re(bpy)(CO) ₃ Cl]	Maximilian J. Krämer, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
Theoretical study for dehydrogenation mechanism of 1-methyl-4-piperidone on Au cluster catalysis: relationship between charge state and catalytic activity	Ray Miyazaki, Xiongjie Jin, Daichi Yoshii, Takafumi Yatabe, Kazuya Yamaguchi, Noritaka Mizuno, Jun-ya Hasegawa	Pre-conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis	2018年8月	国内
金属ドーブされた酸化セリウムを用いた低級アルカンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第58回分子科学若手の会 夏の学校	2018年8月	国内

Au クラスタ触媒によるピペリドンの脱水素機構: クラスタの荷電状態と反応活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第 58 回分子科学若手の会 夏の学校	2018 年 8 月	国内
Rh クラスタの NO 還元に関する理論的研究	近藤有輔, 岩佐豪, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
励起プロトン移動由来発光性亜鉛錯体の配位子の発光挙動に関する理論的研究	蝦名昌徳, 岩佐豪, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
スチルベン誘導体に関する励起状態分岐反応の理論的解明	堤拓朗, 山本梨奈, 原渕祐, 前田理, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
Theoretical study on aryl isocyanides adsorbed on the metal surface	Ben Wang, Min Gao, Tetsuya Taketsugu	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
AIMD および電子ダイナミクスを用いた解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + e^-$ に関する理論的研究	小山拓也, 赤間知子, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
固有反応座標に基づく $\text{CF}_3^+ + \text{CO}$ 反応の理論的研究	織田耕平, 堤拓朗, 古屋謙治, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
Rh クラスタの NO 還元に関する理論的研究	岩渕雄太, 高敏, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内
振動マッピング法による 1,2-ブタジエンの AIMD 古典軌道の解析	小西里緒, 高敏, 堤拓朗, 小野ゆり子, 原渕祐, 武次徹也	第 12 回分子科学討論会 2018 (福岡)	2018 年 9 月	国内

Theoretical Study of Ruthenium Catalyzed Enantioselective Asymmetric Dehydrative Cyclization of ω -Hydroxy Allyl Alcohol	Manussada Ratanasak, Shinji Tanaka, Masato Kitamura, Jun-ya Hasegawa	第12回分子科学討論会2018(福岡)	2018年9月	国内
Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Hiroyuki Meichin, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	第12回分子科学討論会2018(福岡)	2018年9月	国内
h-BN/Au(111)に担持した金クラスターの水素発生反応に対する触媒活性に関する理論的研究	高敏、中原真希、Andrey Lyalin、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内
励起プロトン移動由来の発光を引き起こす配位子の励起状態に関する理論的研究	蝦名昌徳、岩佐豪、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内
プラズモン触媒を用いた酸素解離反応の反応経路	竹中将斗、岩佐豪、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内
分割統治電子相関計算に対する誤差の自動制御化	藤森俊和、小林正人、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内
Theoretical Study on Arylisocyanide Molecules Adsorbed on the Pt(111) Surface	Wang Ben, Min Gao, T. Taketsugu	化学反応経路探索のニューフロンティア2018(福岡)	2018年9月	国内

AIMD・電子ダイナミクスによる解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + e^-$ に関する理論的研究	小山拓也、赤間知子、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア 2018 (福岡)	2018年9月	国内
固有反応座標に基づく $\text{CF}_3^+ - \text{CO}$ 衝突反応の理論的研究	織田耕平、堤拓朗、古屋謙治 2、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア 2018 (福岡)	2018年9月	国内
C-X 結合解離反応における Pd クラスタ触媒の活性支配因子の理論的研究	岩渕雄太、高敏、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア 2018 (福岡)	2018年9月	国内
1, 2-ブタジエン励起緩和過程のダイナミクスの振動マッピング解析	小西里緒、高敏、堤拓朗、小野ゆり子、原渕祐、武次徹也	化学反応経路探索のニューフロンティア 2018 (福岡)	2018年9月	国内
量子化学計算と実験条件のスパースモデリングによる触媒活性評価	小林正人、小野田遼、武次徹也	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018年9月	国内
Theoretical Study on Enantioselective of Palladium Catalyzed Asymmetric Hydrosilylation of Styrene with Helical Poly(quinoxaline-2, 3-diyl) Chiral Phosphine Ligand	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018年9月	国内
金属ドーブされた酸化セリウムを用いたメタンの C-H 結合活性化に関する理論的研究	伊勢家正裕, 中山哲, 長谷川淳也	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018年9月	国内
金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究: 荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第 122 回触媒討論会 (函館)	2018年9月	国内

Electronic Structure Origin of Mechanochemically Activated Chitin Depolymerization	Danjo De Chavez, Atsushi Fukuoka, Jun-ya Hasegawa	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018年10月	国内
金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究: 荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018年10月	国内
h-BN/Au(111)に担持金クラスターの安定性と水素発生反応に関する理論的研究	高敏, 中原真希, Andrey Lyalin, 武次徹也	統合物質創製化学研究推進機構 第4回国内シンポジウム	2018年10月	国内
表面モデル計算データベースの作成とその活用	小野田遼, 黒田悠介, 小林正人, 武次徹也	日本コンピュータ化学会 2018 秋季年会 (弘前)	2018年11月	国内
超並列電子状態計算ソフトウェアとGRRMの連結による大規模系反応経路探索に向けた試み	小野 ゆり子	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
Au ₂₅ (SR) ₁₈ ⁻ の高位励起状態	岩佐 豪	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

古典的多次元尺度構成法に基づく反応経路地図の可視化	堤 拓朗	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
二酸化炭素とメタノールからの炭酸ジメチル合成に関する第一原理計算-固体酸化物触媒を用いた反応機構の理論的解析-	杉山 利行	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構に関する理論的研究: 荷電状態と触媒活性の関連性について	宮崎 玲	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study	Liming Zhao	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
金属ドーブされた酸化セリウムを用いた低級アルカンのC-H結合活性化に関する理論的研究	伊勢家 正裕	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内

Theoretical Study of Ruthenium Catalyzed Enantioselective Asymmetric Dehydrative Cyclization of w-Hydroxy Allyl Alcohol	Manussada Ratanasak	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
表面モデル計算データベースを活用したメタン水蒸気改質反応の活性予測	小野田 遼	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
金属クラスターとアンモニアの相互作用	毛利広野・岩佐豪・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
SiO ₂ -MgO系高温融体のDFTB-MDシミュレーションとその構造解析	宮越洸二・小林正人・小野寺陽平・小原真司・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
o-ニトロフェノールの励起状態プロトン移動に関する理論的研究	和田諒・堤拓朗・新田優輝・関川太郎・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
配位子保護金クラスターの触媒機構	高原里奈・岩佐豪・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内
ヒドロキシメチルフルフラールの安定性に関する計算化学的研究	田代啓介・小林正人・中島清隆・武次徹也	化学系学協会北海道支部2019年冬季研究発表会(札幌)	2019年1月	国内

Controlled Intersystem Crossing in Iron Porphycene Substituted Myoglobin for Cyclopropanation Reaction: a Theoretical Study	Liming Zhao, Akira Nakayama, Koji Oohora, Hiroyuki Meichin, Takashi Hayashi, Jun-ya Hasegawa	IRCCS The 2nd International Symposium	2019年1月	国内
Reaction Mechanism of the Direct Synthesis of Dimethyl Carbonate from CO ₂ and Methanol over Metal-Oxide Catalysis: a Theoretical Study	Toshiyuki Sugiyama, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	IRCCS The 2nd International Symposium	2019年1月	国内
Theoretical Study on Geometry Effect on the Catalytic Activity of Gold Clusters	Gao Min, Andrey Lyalin, Satoshi Maeda, Tetsuya Taketsugu	IRCCS The 2nd International Symposium	2019年1月	国内
Studies on metal nanocluster catalyst with informatics and automated reaction path search	Masato Kobayashi	PRESTO International Symposium on Materials Informatics (東京)	2019年2月	国内
金クラスター触媒上での酸素によるピペリドンのC-H結合活性化機構に関する理論的研究	宮崎玲, 金雄傑, 吉井大地, 谷田部孝文, 山口和也, 水野哲孝, 長谷川淳也	第123回触媒討論会(大阪市立大)	2019年3月	国内

単核 ReO_xCeO_2 触媒による脱酸素脱水反応の理論的研究	保坂龍, 中山哲, 田村正純, 中川善直, 富重圭一, 長谷川淳也	第 123 回触媒討論会(大阪市立大)	2019 年 3 月	国内
分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法に基づく大規模励起状態ダイナミクス	河本奈々, 吉川武司, 小野純一, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
Local Hybrid Functionals within the Infinite-Order Douglas-Kroll-Hess Method	Toni Maier, 五十幡康弘, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
有限温度における時間依存密度汎関数法の開発	土井俊輝, 吉川武司, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
円錐交差構造における電子状態に関する理論的研究	稲森真由, 五十幡康弘, 王祺, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
重み付きヒストグラム解析法のメタダイナミクスへの拡張とシクロファンの異性化反応への応用	小野純一, 西村好史, 黄毅聰, 鹿又宣弘, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
機械学習による半局所運動エネルギー密度汎関数の開発: 計算精度の記述子依存性	清野淳司, 影山椋, 藤波美起登, 五十幡康弘, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
機械学習を用いた反応条件最適化シミュレータの開発	藤波美起登, 清野淳司, 中井浩巳	第 21 回理論化学討論会	2018 年 5 月	国内
ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造に関する理論的研究	稲森真由, 五十幡康弘, 王祺, 中井浩巳	日本コンピュータ化学会 2018 春季年会	2018 年 6 月	国内

メタダイナミクスに基づく重み付きヒストグラム解析法の開発とシクロファン異性化反応への応用	小野純一、西村好史、黄毅聰、鹿又宣弘、中井浩巳	日本コンピュータ化学会 2018 春季年会	2018 年 6 月	国内
Development of picture-change corrected relativistic density functional theory	Yasuhiro Ikabata, Takuro Oyama, Masao Hayami, Junji Seino, Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018 年 6 月	国外
Divide-and-conquer-based higher-order electron-correlation methods	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018 年 6 月	国外
群知能を用いたアミン-CO ₂ 吸収反応に対する速度論解析	長門澄香、清野淳司、中井浩巳	第 12 回分子科学討論会	2018 年 9 月	国内
密度汎関数強束縛法に基づくペロブスカイト太陽電池におけるキャリア特性の研究	浦谷浩輝、周建斌、中井浩巳	第 12 回分子科学討論会	2018 年 9 月	国内
機械学習による電子密度最適化のための運動ポテンシャル汎関数の開発	影山棕、清野淳司、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	第 12 回分子科学討論会	2018 年 9 月	国内
機械学習を用いた交換相関汎関数の開発	櫛島拓朗、五十幡康弘、清野淳司、影山棕、藤波美起登、中井浩巳	第 12 回分子科学討論会	2018 年 9 月	国内
Large-scale quantum-mechanical molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin	Junichi Ono, Minori Imai, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	第 56 回日本生物物理学会年会	2018 年 9 月	国内

Development of large-scale excited-state calculation method and applied research on photoactive yellow protein	Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Hiromi Nakai	第56回日本生物物理学会年会	2018年9月	国内
反応予測に寄与する量子化学的記述子の解析	藤波美起登、清野淳司、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018年10月	国内
有機反応における高い収率を与える溶媒のデータ科学的探索	前川原大貴、藤波美起登、清野淳司、一色遼大、山口潤一郎、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018年10月	国内
インフォマティクスを用いた結合エネルギー密度解析手法の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	第41回ケモインフォマティクス討論会	2018年10月	国内
バクテリオロドプシンのプロトン輸送ダイナミクスに関する理論的研究	小野純一、今井みの莉、西村好史、中井浩巳	第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会	2018年11月	国内
分割統治法に基づく有限温度単参照静的相関手法の開発	土井俊輝、吉川武司、中井浩巳	日本コンピュータ化学会2018秋季年会	2018年11月	国内
バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション	岡田千果、小野純一、西村好史、中井浩巳	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内
Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Carbonaceous Species Diffusion on (100)- γ -Al ₂ O ₃ Surface	Aditya Wibawa Sakti, Chien-Pin Chou, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	第32回分子シミュレーション討論会	2018年11月	国内

DC-DFTB-MD プログラムの開発と公開	西村好史、吉川武司、中井浩巳	第 32 回分子シミュレーション討論会	2018 年 11 月	国内
Density-Functional Tight-Binding Parameterization: Accumulated Wisdom and New Directions	周建斌、中井浩巳	第 32 回分子シミュレーション討論会	2018 年 11 月	国内
バクテリオロドプシンの 1 段階目のプロトン移動過程に対する DC-DFTB-MD シミュレーション	小野純一、今井みの莉、西村好史、中井浩巳	第 32 回分子シミュレーション討論会	2018 年 11 月	国内
Post-Hartree-Fock 相関エネルギー密度の機械学習による相関エネルギー計算手法の開発	五十幡康弘、櫛島拓朗、清野淳司、影山椋、藤波美起登、中井浩巳	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
大規模化学反応シミュレーションに向けた DC-DFTB プログラムの開発と整備	西村好史、中井浩巳	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
Recent Development of Density-Functional Tight-Binding Parameterization	周建斌、中井浩巳	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内
インフォマティクスを利用した軌道非依存密度汎関数理論計算手法の開発	清野淳司、影山椋、藤波美起登、五十幡康弘、中井浩巳	ポスト「京」重点課題 5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」第 5 回公開シンポジウム	2018 年 12 月	国内

インフォマティクス手法を取り入れた結合エネルギー密度解析の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
円錐交差構造における電子状態的な支配因子の探索	稲森真由、五十幡康弘、王祺、中井浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の二段階並列化	河本奈々、吉川武司、中井浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
機械学習を用いた化学反応の予測と反応条件の最適化	藤波美起登、前川原大貴、清野順次、中井浩巳	ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」第5回公開シンポジウム	2018年12月	国内
ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造における電子状態的な支配因子の探索	稲森真由、五十幡康弘、王祺、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018年12月	国内
大規模励起状態ダイナミクス法の開発とその応用	河本奈々、吉川武司、小野純一、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018年12月	国内
インフォマティクス手法を導入したエネルギー密度解析手法の開発	中村海里、清野淳司、中井浩巳	第8回量子化学スクール	2018年12月	国内

カチオン性金属触媒を用いた C-H 活性化反応に対する理論的研究	高島千波、五十幡康弘、中井浩巳	第 8 回量子化学スクール	2018 年 12 月	国内
バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対する大規模量子的分子動力学シミュレーション	岡田千果、小野純一、西村好史、中井浩巳	第 8 回量子化学スクール	2018 年 12 月	国内
Rh/CeO ₂ 界面における NO-CO 反応の理論的解析	藤代天佑、大越昌樹、中井浩巳	第 8 回量子化学スクール	2018 年 12 月	国内
Rh 上の NO+CO 反応の理論的解析に向けた密度汎関数強束縛法パラメータの精度検証	中村崇久、周建斌、大越昌樹、中井浩巳	第 8 回量子化学スクール	2018 年 12 月	国内
Orbital-free density functional theory with semi-local machine-learned kinetic energy density functional	Junji Seino, Ryo Kageyama, Mikito Fujinami, Yasuhiro Ikabata, Hiromi Nakai	さきがけ「マテリアルズインフォマティクス」国際会議	2019 年 2 月	国内
有限温度密度汎関数強束縛法による Rh ナノクラスターの安定性・反応性の解析	中村崇久、周建斌、土井俊輝、吉川武司、大越昌樹、中井浩巳	日本化学会第 99 春季年会	2019 年 3 月	国内
機械学習を用いた有機反応における最適溶媒選択手法の開発	前川原大貴、藤波美起登、清野淳司、一色遼大、山口潤一郎、中井浩巳	日本化学会第 99 春季年会	2019 年 3 月	国内
Development of Massively Parallel Software for Quantum Chemistry Calculations	Kazuya Ishimura	7th Japan-Czech-Slovak Symposium	2018 年 5 月	国外

SMASH: Massively Parallel Software for Quantum Chemistry Calculations	Kazuya Ishimura	16th International Congress of Quantum Chemistry	2018年6月	国外
Pythonを用いた大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の制御	石村和也	第21回理論化学討論会	2018年5月	国内

(c) 招待講演

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	The 7th (Japan-Czech-Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry	2018年5月	国外
Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST2018)	2018年6月	国外
Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms	天能精一郎	The Molecular Electronic Structure in Metz (MESM)	2018年8月	国外
Full coupled cluster reduction	天能精一郎	Mainz-Kobe joint workshop on solving the full configuration interaction problem	2018年11月	国外
Stochastic and deterministic coupled-cluster approaches for accurate treatment of strong electron correlations	天能精一郎	Quantum Simulations: From Chemistry to Materials Science	2018年12月	国外
“京”で新機能材料を探索する	中嶋隆人	早稲田大学先進理工学部応用化学科主催セミナー，西早稲田	2018年5月	国内

Quantum Chemistry on the K Computer	T. Nakajima	ISC High Performance 2018, Frankfurt	2018年6月	国外
京を利用した第一原理計算による材料設計手法	中嶋隆人	技術情報協会 第一原理計算による材料設計, 解析手法と活用事例, 五反田	2018年10月	国内
Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites & Lead-Free Perovskites $\text{Cs}_2\text{Au}_2\text{I}_6$	Koichi Yamashita	nanoGe-FallMeeting 18, Fundamental Aspects of Perovskite Solar Cells and Optoelectronics (スペイン)	2018年10月	国外
Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites	Koichi Yamashita	256th ACS National Meeting Computational Photocatalysis: Modeling of Photophysics & Photochemistry at Interfaces (米国)	2018年8月	国外
Charge Separation and Charge Carrier Trapping of Lead Iodide Perovskites	Koichi Yamashita	CMCEE2018 (シンガポール)	2018年7月	国外
High precision required for electrochemical interface simulations	杉野修	東京両国 CSW2019	2019年1月	国外
Insights from Computational Modeling and Experiments on the Li-Ion Dynamics and Electrochemical Stability of Garnet-Based Solid Electrolytes	Randy Jalem	233rd ECS Meeting	2018年5月	国外

Interfacial ionics and electronics in battery and catalyst	館山佳尚	Simulations (and theory) in Physical chemistry: an International Kermesse in Paris	2018年5月	国外
Combining First-Principles DFT Calculations and Informatics to Search for Novel Fast Ionic Conductors (第一原理計算とインフォマティクスを利用した新規イオン伝導体探索)	Randy Jalem	JST さきがけ第2回 公開シンポジウム	2018年8月	国内
DFT Sampling Calculation Studies on Electrode / Electrolyte Interfaces in Li Ion Batteries	館山佳尚	12th Japan-France Joint Seminar on Batteries	2018年9月	国外
Insights from Computational Modeling and Experiment on the Ionic Diffusion and Electrochemical Stability of Garnet-Type Oxide Electrolytes for All-Solid-State Lithium Ion Batteries	Randy Jalem	12th Japan-France Joint Seminar on Batteries	2018年9月	国外
蓄電池の技術課題に対する第一原理計算研究	館山佳尚	PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018	2018年10月	国内
電池界面イオニクスに関する第一原理統計サンプリング研究	館山佳尚	2018年日本表面真空学会学術講演会	2018年11月	国内
DFT sampling approaches to microscopic interfacial processes in batteries and catalysts	館山佳尚	Computational Sciences Workshop 2019	2019年1月	国外
First -principles sampling simulation approaches to battery science and thechnology	館山佳尚	第1回 R-CCS 国際シンポジウム	2019年2月	国外

Theoretical Study on Redox Reactions at Boron-Doped Diamond / Water Interfaces	Shota Iizuka, Zdenek Futera, Takeshi Watanabe, Keisuke Natsui, Yasuaki Einaga, Yoshitaka Tateyama	JST-ACCEL「ダイヤモンド電極の物質科学と応用展開」国際シンポジウム	2019年3月	国外
複雑な凝集系化学反応の分子シミュレーション技術の現状と将来展望	長岡正隆	第43回産協セミナー(東京都)	2019年2月	国内
計算分子技術 Red Moon 法によるコンピュータ科学	長岡正隆	スーパーコンピューターワークショップ2018(自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター)	2019年1月	国内
Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries: A Computational Chemical Study based on Red Moon Methodology	M. Nagaoka	IRSEC' 18 - 6th International Renewable and Sustainable Energy Conference (Rabat, Morocco)	2018年12月	国外
Red Moon Methodology: A Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems - Its Theoretical Treatment and Applications -	M. Nagaoka	26th International Conference on Current Trends in Computational Chemistry (CCTCC) (Jackson, USA)	2018年11月	国外
計算分子技術 Red Moon 法によるコンピュータ化学 - 二次電池電解液開発と触媒重合研究への展開 -	長岡正隆	日本コンピュータ化学会2018秋季年会 (弘前大学 創立50周年記念会館)	2018年11月	国内

Red Moon Methodology: A computational molecular technology of complex chemical reaction systems - Its theoretical treatment and applications -	M. Nagaoka	11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2018) (Toledo, Spain)	2018年7月	国外
Toward Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Applications of Red Moon Methodology	M. Nagaoka	24th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (Faro, Portugal)	2018年7月	国外
A Computational Chemical Study Based on Red Moon Methodology: Microscopic Additive Effect on SEI Film Formation in Sodium-Ion Batteries	M. Nagaoka	Institute of Inorganic Chemistry Seminar (Bratislava, Slovakia)	2018年5月	国外
A Computational Molecular Technology of Complex Chemical Reaction Systems: Red Moon Methodology - Its Theoretical Treatment and Applications -	M. Nagaoka	Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium on Theoretical Chemistry (Prague, Czech Republic)	2018年5月	国外
All-Atomistic Molecular Dynamics Calculation of Impact Fracture of Glassy Polymers	K. Fujimoto, W. Shinoda, and S. Okazaki	First International Conference on 4D Materials and Systems (4DMS) 第1回 4Dマテリアル・システムに関する国際会議	2018年8月	国外
エネルギー課題に電子、原子、分子のミクロな立場から挑戦するーポスト京重点課題⑤ー	岡崎 進	PCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018	2018年10月	国内

All-Atomistic Molecular Dynamics Study of Impact Fracture of Glassy Polymers	Susumu Okazaki	28th Annual Meeting of MRS-Japan 2018	2018年12月	国外
非晶性樹脂衝撃破壊の全原子分子動力学シミュレーション	岡崎 進	高分子学会東海支部 2018 東海シンポジウム 主題＝高分子計算科学とその利用	2019年1月	国内
An Interesting Twist in Liquid Water	M. Matsumoto	The 8th SFG Symposium	2018年10月	国外
固有反応座標と動力学効果	武次徹也	ワークショップ「複合系の理論化学・計算化学：最近の研究状況と展望」(京都)	2018年4月	国内
理論と実験のインタープレイから生まれた新しい触媒：BN/Au	武次徹也	新学術領域研究「精密制御反応場」ワークショップ「理論と実験の融合による高難度物質変換の反応機構解明にむけて」(札幌)	2018年5月	国内
Dynamic Reaction Routes beyond the IRC network	T. Taketsugu	7th JCS (Japan-Czech-Slovak) SYMPOSIUM (Quantum chemistry, from methodology to applications in organic, inorganic, biochemistry and material sciences), (PRAGUE)	2018年5月	国外

大規模系の量子化学計算とデータ科学を利用した量子化学計算結果の解析・触媒への応用	小林正人	分子科学研究所講演会（岡崎）	2018年5月	国内
双極子近似を超えた光と分子の相互作用：未知の光学現象と光反応と分子科学の未来	岩佐豪	分子研研究会「光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて」（岡崎）	2018年6月	国内
Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	PERCH-CIC Congress X: 2018 International Congress for Innovation in Chemistry	2018年7月	国外
Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	Special seminar	2018年7月	国外
Reaction Path Concept in Quantum Chemistry and Dynamics Effects	T. Taketsugu	Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, TSRC workshop (Telluride)	2018年7月	国外
Methane to Ethane Conversion by Liquid Metal Indium: A DFT Mechanistic Study	Y. Ohtsuka, Y. Nishikawa, H. Ogihara, I. Yamanaka, J. Hasegawa	2018 International Symposium on Advancement and Prospect of Catalysis Science & Technology	2018年7月	国外

Theoretical suggestion and experimental proof for functionalization of h-BN by gold as electrocatalysts for ORR and HER	T. Taketsugu	256th ACS National Meeting "Fundamental Understanding of Catalysis at Interface through Computational Approach" (Boston)	2018年8月	国外
インフォマティクスと反応経路自動探索を活用した触媒・表面吸着系の計算・解析・予測	小林正人	さきがけ「マテリアルズ・インフォマティクス」第2回公開シンポジウム (東京)	2018年8月	国内
インフォマティクスと人工知能・機械学習チュートリアル	小林正人	ESICB 若手研究会 触媒・電池の実践的理論化学の最前線 (千歳)	2018年8月	国内
Catalytic reactions at the liquid/metal-oxide interface: first-principle molecular dynamics simulation	A. Nakayama	The 8th IUPAC International Conference on Green Chemistry	2018年9月	国外
Role of the Acid-Base and Redox Sites on Catalytic Reactions at the Liquid/Metal-Oxide Interface: First-Principle Simulations	A. Nakayama	Nanotalk	2018年9月	国外
分子結晶における励起状態と発光過程の理論的解明	岩佐豪	ソフトクリスタル領域会	2018年10月	国内
Computational Chemistry with Constraint Force	J. Hasegawa	A Satellite Symposium to celebrate Prof. Kenichi Fukui's 100th birthday	2018年10月	国内

Exploring the Enantioselective Mechanism of Pd Catalyst with Polyquinoxaline Ligand for Asymmetric Hydrosilylation of Styrene	M. Ratanasak, T. Yamamoto, M. Suginome, J. Hasegawa	2019 National Symposium for Molecular Chirality	2018年10月	国外
Ab initio MD analysis based on a reaction path network	T. Taketsugu	INTERNATIONAL CONGRESS ON PURE & APPLIED CHEMISTRY Langkawi (ICPAC Langkawi) 2018, Langkawi, Malaysia	2018年10月	国外
クラスターモデルにおけるアンモニアと金属の相互作用	岩佐豪	第4回アンモニア合成・利用研究会	2018年11月	国内
Quantum chemical studies for cluster catalysis: Case study of NO dissociation with Cu ₁₃	T. Iwasa	Johnson Matthey Japan Academic Conference 2018	2018年11月	国内
Calculation, Analysis, and Prediction for Catalyst and Surface Adsorption Systems with Informatics Techniques and Automated Reaction Path Search	M. Kobayashi	2nd International Workshop on Phase Interfaces Science for Highly Efficient Energy Utilization (Baltimore, USA)	2018年11月	国外
第一原理反応ダイナミクスと触媒・光反応における実験との協働	武次徹也	第1回 ICR _e DD ミーティング (札幌)	2018年12月	国内
On-the-fly molecular dynamics approach to photoisomerization of stilbene derivatives	T. Taketsugu	10th Aisan Photochemistry Conference (APC2018) (Taipei, Taiwan)	2018年12月	国外
クラスター触媒の理論研究	岩佐豪	ESICB 電子論検討会 (浜松)	2018年12月	国内

反応経路ネットワークを超えた動的反応描像構築にむけて	武次徹也	JACI 公益社団法人新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 コンピュータケミストリ分科会 講演会 (東京)	2019年1月	国内
量子ビーム実験・宇宙実験・データ駆動型構造モデリングの協奏によるガラス・超高温融体の構造物性研究 (招待)	小原真司、小野寺陽平、田原周太、小山千尋、田丸晴香、増野敦信、岡田純平、水野章敏、織田裕久、渡邊勇基、仲田結衣、尾原幸治、小林正人、袖山慶太郎、志賀元紀、村上元彦、正木匡彦、J. K. R. Weber、石川毅彦、坂田修身	第5回放射光連携研究ワークショップ「先端計測とインフォマティクスによる可視化物質科学の発展」(東京)	2019年2月	国内
Theoretically inspired new catalyst: boron nitride with gold	Tetsuya Taketsugu	The 20th GREEN Symposium (Tsukuba)	2019年2月	国内
第一原理計算に基づく電子励起状態反応素過程とダイナミクスの解明(招待)	武次徹也	日本化学会第99春季年会 (甲南大学)	2019年3月	国内
開殻電子系が関与する反応の理論化学: 系間交差のポテンシャル面	長谷川淳也	日本化学会第99春季年会 中長期企画講演「開殻性分子種: ファジーボンドが拓く新たな化学」(甲南大学)	2019年3月	国内

Fast Quantum Chemical Simulations using the Density-Functional Tight-Binding Method	Chien-Pin Chou	The 2018 Chemistry Research Symposium, ChRS2018	2018年5月	国外
大規模化学反応シミュレーション手法の実現に向けて～分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の開発と応用～	中井浩巳	東工大講演会	2018年6月	国内
What is the Best Choice of Embedding-Fragmentation Scheme for Practical Quantum Chemical Simulation?	Hiromi Nakai	16th International Congress of Quantum Chemistry (16-ICQC)	2018年6月	国外
理論・計算・実験化学とインフォマテイクスの融合研究	清野淳司	分子研・理論・計算分子科学領域セミナーシリーズ	2018年6月	国内
光受容タンパク質の機能解明を目指した大規模励起状態ダイナミクス手法の開発とその応用	吉川武司	第7回新化学技術研究奨励賞	2018年6月	国内
Divide-and-Conquer density-functional tight-binding molecular dynamics simulations for the primary proton transfer in bacteriorhodopsin	Junichi Ono	Telluride workshop on "Multi-scale quantum mechanical analysis of condensed phase systems: methods and applications"	2018年7月	国外
人工知能を用いた化学反応の予測と反応条件の最適化	清野淳司	技術情報協会・講習会 触媒開発における人工知能、計算科学の活用-新しい触媒の探索、設計の具体的手法-	2018年8月	国内

計算化学とインフォマティクスに関する基礎講座	中井浩巳	顔料物性講座	2018年11月	国内
表面触媒反応に対する大規模シミュレーション	中井浩巳	2018年日本表面真空学会学術講演会	2018年11月	国内
Development of Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization	Chien-Pin Chou	The 4th China-Japan-Korea a Workshop on Theoretical & Computational Chemistry (CJK-WTCC4)	2019年1月	国外
大規模化学反応シミュレーションプログラム DCDFBMD の開発と応用	中井浩巳	スーパーコンピューターワークショップ 2018 「理論・計算科学の挑戦：量子化学とシミュレーションからの展望」	2019年1月	国内
データ科学と理論・計算化学の融合	中井浩巳	日本化学会第99春季年会	2019年3月	国内
Acceleration of divide-and-conquer density tight-binding method on GPU	Takeshi Yoshikawa, Hiromi Nakai	GTC 2019	2019年3月	国外
大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発と応用計算	石村 和也	第7回材料系ワークショップ	2019年2月	国内
Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program SMASH and its Applications	Kazuya Ishimura	34th Computational Materials Design (CMD) Workshop	2019年2月	国内

2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
Orbital-invariant spin-extended approximate coupled-cluster for multi-reference systems	土持崇嗣、天能精一郎	J. Chem. Phys., 149 044109 (2018)	2018年7月	国外
Full coupled-cluster reduction for accurate description of strong electron correlation	許恩華、上島基之、天能精一郎	Phys. Rev. Lett., 121 113001 (2018)	2018年9月	国外
Monte Carlo explicitly correlated many-body Green's function theory	C. M. Johnson, A. E. Doran, 天能精一郎、S. Hirata	J. Chem. Phys., 149 174112 (2018)	2018年11月	国外
Extending spin-symmetry projected coupled-cluster to large model spaces using an iterative null-space projection technique	土持崇嗣、天能精一郎	J. Comput. Chem., 40 267-280 (2019)	2018年12月	国外
Massively parallel sparse matrix function calculations with NTPoly	W. Dawson, T. Nakajima	Comput. Phys. Commun. 225 , 154-165 (2018). 10.1016/j.cpc.2017.12.010	2018年4月	国外
Theoretical study on mesoscopic-size impurity effects in the charge separation process of organic photocells	T. Shimazaki, M. Tashiro, T. Nakajima	Phys. Chem. Chem. Phys. 20 , 14846-14854 (2018). 10.1039/c7cp08125a	2018年5月	国外
High-throughput screening of perovskite oxynitride and oxide materials for visible-light photocatalysis	K. Sawada, T. Nakajima	APL Mater. 6 , 101103 (2018). 10.1063/1.5041784	2018年10月	国外

Antisymmetrized geminal powers with larger chemical basis sets	W. Uemura, T. Nakajima	Phys. Rev. A 99 , 012519 (2019). 10.1103/PhysRevA.99.012519	2019年1月	国外
Investigations on the charge transfer mechanism at donor/acceptor interfaces in the quest for descriptors of organic solar cell performance	Azusa Muraoka, Mikiya Fujii, Kenji Mishima, Hiroki Matsunaga, Hiroaki Benten, Hideo Ohkita, Shinzaburo Ito, Koichi Yamashita	Phys. Chem. Chem. Phys., 20 , 12193 (2018)	2018年4月	国外
Two-dimensional optical excitations in mixed valence Cs ₂ Au ₂ I ₆ fully inorganic double perovskite	Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita and Maurizia Palummo	J. Mater. Chem. C, 6 , 10197–10201 (2018)	2018年9月	国外
Nature of the Electronic and Optical Excitations of Ruddlesden-Popper Hybrid Organic-Inorganic Perovskites: The Role of the Many-Body Interactions	Giacomo Giorgi, Koichi Yamashita and Maurizia Palummo	J. Phys. Chem. Lett., 9 , 5891–5896 (2018)	2018年9月	国外

Molecular QAIM Topology Is Sensitive to Relativistic Corrections	James S. M. Anderson, Juan I. Rodríguez, Paul W. Ayers, Daniel E. Trujillo-González; Andreas W. Goetz; Jochen Autschbach, F. L. Castillo-Alvarado, Koichi Yamashita	Chemistry: A European Journal, 25 , 2538-2544 (2019)	2019年1月	国外
Significance of hydrogen bonding and other noncovalent interactions in determining octahedral tilting in the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ hybrid organic-inorganic halide perovskite solar cell semiconductor	Pradeep Varadwaj, Arpita Varadwaj, Helder M. Marques, and Koichi Yamashita	Scientific Reports, 9(1):50 (2019)	2019年1月	国外
Regression model for stabilization energies associated with anion ordering in perovskite-type oxynitrides	Masanori Kaneko, Mikiya Fujii, Takashi Hisatomi, Koichi Yamashita, Kazunari Domen	Journal of Energy Chemistry, 36 , 7-14 (2019)	2019年1月	国外

Effect of Nuclear Motion on Charge Transport in Fullerenes	Saeid Arabnejad, Amrita Pal, Koichi Yamashita, Sergei Manzhos	Frontiers in Energy Research, 7:3, 1-7 (2019)	2019年1月	国外
First-principles study on visible light absorption of defected SrNbO ₃	Masanori Kaneko, Kenji Mishima, Koichi Yamashita	J. Photochemistry & Photobiology A: Chemistry, 375 , 175-180 (2019)	2019年2月	国外
Simulation of Conductive Atomic Force Microscopy of Organic Photovoltaics by Dynamic Monte Carlo Method	Eisuke Kawashima, Mikiya Fujii, Koichi Yamashita	Chem. Lett. (doi:10.1246/cl.190041) (2019)	2019年3月	国内
Hydrogen adsorption on Pt(111) revisited from random phase approximation	Lei Yan, Yang Sun, Yoshiyuki Yamamoto, Shusuke Kasamatsu, Ikutaro Hamada, and Osamu Sugino	Journal of Chemical Physics 149, 164702 (2018)	2018年10月	国外
Direct coupling of first-principles calculations with replica exchange Monte Carlo sampling of ion disorder in solids	Shusuke Kasamatsu and Osamu Sugino	Journal of Physics: Condensed matter 31, 085901 (2019).	2019年2月	国外
First-Principles Microkinetic Analysis of NO + CO Reactions on Rh(111) Surface toward Understanding NO _x Reduction Pathways	Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama	J. Phys. Chem. C 122 , 17378-17388	2018年7月	国外

Structures, Electronic States, and Reactions at Interfaces between $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Cathode and Ethylene Carbonate Electrolyte: A First-Principles Study	Yukihiro Okuno, Keisuke Ushirogata, Keitaro Sodeyama, Ganes Shukri, Yoshitaka Tateyama	J. Phys. Chem. C 123 , 2267-2277	2019年1月	国外
リチウムイオン電池 Solid Electrolyte Interphase (SEI) に関する第一原理計算研究	館山佳尚	J. Comput. Chem. Jpn. 18 , 18-28	2019年2月	国内
In Situ Spectroscopic Study on the Surface Hydroxylation of Diamond Electrodes	Seiji Kasahara, Taiga Ogose, Norihito Ikemiya, Takashi Yamamoto, Keisuke Natsui, Yasuyuki Yokota, Raymond A. Wong, Shota Iizuka, Nagahiro Hoshi, Yoshitaka Tateyama, Yousoo Kim, Masashi Nakamura, Yasuaki Einaga	Anal. Chem. 91 , 4980-4986	2019年3月	国外

Microscopic Elucidation of Solid-Electrolyte Interphase (SEI) Film Formation via Atomistic Reaction Simulations: Importance of Functional Groups of Electrolyte and Intact Additive Molecules	Norio Takenaka, Masataka Nagaoka	The Chemical Record, 19 , 799-810 (2019)	2019年3月	国外
The crucial role of electron transfer from interfacial molecules in the negative potential shift of Au electrode immersed in ionic liquids	T. Inagaki, N. Takenaka, and M. Nagaoka	Physical Chemistry Chemical Physics, 20 , 29362 (2018)	2018年10月	国外
Atomistic chemical computation of Olefin polymerization reaction catalyzed by (pyridylamido)hafnium(IV) complex: Application of Red Moon simulation	K. Matsumoto, M. Takayanagi, Y. Suzuki, N. Koga, and M. Nagaoka	Journal of Computational Chemistry, 40 , 421 (2019)	2018年10月	国外
Concentration Effect of Fluoroethylene Carbonate on the Formation of Solid Electrolyte Interphase Layer in Sodium-Ion Batteries	A. Bouibes, N. Takenaka, T. Fujie, K. Kubota, S. Komaba, and M. Nagaoka	ACS Applied Materials & Interfaces, 10 , 28525 (2018)	2018年8月	国外
Red Moon methodology compatible with quantum mechanics/molecular mechanics framework: Application to solid electrolyte interphase film formation in lithium-ion battery system	T. Fujie, N. Takenaka, Y. Suzuki, and M. Nagaoka	The Journal of Chemical Physics, 149 , 044113 (2018)	2018年7月	国外
Cost-Effective Method for Free-Energy Minimization in Complex Systems with Elaborated Ab Initio Potentials	C. Bistafa, Y. Kitamura, M. T. C. Martins-Costa, M. Nagaoka, and M. F. Ruiz-López	Journal of Chemical Theory and Computation, 14 , 3262, (2018)	2018年5月	国外

Exploring the effect of pendent side chain length on the structural and mechanical properties of hydrated perfluorosulfonic acid polymer membranes by molecular dynamics simulation	A.-T. Kuo, K. Takeuchi, A. Tanaka, S. Urata, S. Okazaki, W. Shinoda	Polymer, 146 , 53-62	2018年5月	国外
Difference in molecular mechanisms governing changes in membrane properties of phospholipid bilayers induced by addition of nonionic and zwitterionic surfactants	Y. Andoh, S. Kitou, S. Okazaki	J. Mol. Liquids, 271 , 933-941	2018年9月	国外
Molecular mechanism of material deformation and failure in butadiene rubber: Insight from all-atom molecular dynamics simulation using a bond breaking potential model	R. S. Payal, K. Fujimoto, C. Jang, W. Shinoda, Y. Takei, H. Shima, K. Tsunoda, S. Okazaki	Polymer, 170 , 113-119	2019年3月	国外
Development of dissociative force field for all-atomistic molecular dynamics calculation of fracture of polymers	K. Fujimoto, R. S. Payal, T. Hattori, W. Shinoda, M. Nakagaki, S. Sakaki, S. Okazaki	J. Comp. Chem. accepted.		国外
Phase Diagrams of TIP4P/2005, SPC/E, and TIP5P Water at High Pressure	T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Chem. B 122 , 7718-7725 (2018).	2018年7月	国外
On the Phase Behaviors of Hydrocarbon and Noble Gas Clathrate Hydrates: Dissociation Pressures, Phase Diagram, Occupancies, and Equilibrium with Aqueous Solution	H. Tanaka, T. Yagasaki, M. Matsumoto	J. Chem. Phys. 149 , 074502, 1-15 (2018).	2018年8月	国外

Phase diagram of ice polymorphs under negative pressure considering the limits of mechanical stability	T. Matsui, T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Chem. Phys. 150 , 041102, 1–6 (2019).	2019年1月	国外
Molecular Dynamics Study of Kinetic Hydrate Inhibitors: The Optimal Inhibitor Size and Effect of Guest Species	T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka	J. Phys. Chem. C 123 , 1806–1816 (2019).	2019年1月	国外
Lithiation Products of a Silicon Anode Based on Soft X-ray Emission Spectroscopy: A Theoretical Study	A. Lyalin, V. G. Kuznetsov, A. Nakayama, I. V. Abarenkov, I. Tupitsyn, I. E. Gabis, K. Uosaki, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. C, 122 , 11096–11108 (2018).	2018年5月	国外
A First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base	K. Yanai, K. Ishimura, A. Nakayama, and J. Hasegawa	J. Chem. Theory Comput., 14 , 3643 (2018).	2018年6月	国外
Defect-induced efficient dry reforming of methane over two-dimensional Ni/h-boron nitride nanosheet catalysts	Y. Cao, P. Maitarad, M. Gao, T. Taketsugu, H. Li, T. Yan, L. Shi, and D. Zhang	App. Catal. B: Environ., 238 , 51–60 (2018).	2018年7月	国外
Visualization of the Intrinsic Reaction Coordinate and Global Reaction Route Map by Classical Multidimensional Scaling	T. Tsutsumi, Y. Ono, Z. Arai, and T. Taketsugu	J. Chem. Theory Comput., 14 , 4263–4270 (2018).	2018年7月	国外

Microscopic Electrode Processes in the Four-Electron Oxygen Reduction on Highly Active Carbon-Based Electrocatalysts	K. Sakaushi, M. Eckardt, A. Lyalin, T. Taketsugu, R. J. Behm, and K. Uosaki	ACS Catalysis, 8 , 8162-8176 (2018).	2018年7月	国外
On-the-fly molecular dynamics study of the excited-state branching reaction of α -methyl-cis-stilbene	T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, R. Yamamoto, S. Maeda, and T. Taketsugu	Chem. Phys., 515 , 564-571 (2018).	2018年8月	国外
Theoretical investigations on hydrogen peroxide decomposition in aquo	T. Tsuneda and T. Taketsugu	Phys. Chem. Chem. Phys., 20 , 24992-24999 (2018).	2018年9月	国外
Constraint Structure Optimization to a Specific Minimum Using Ionization Energy	I. Harada, A. Nakayama, J. Hasegawa	J. Comput. Chem., 40 , 507-514 (2019)	2018年10月	国外
Ab initio surface hopping excited-state molecular dynamics approach on the basis of spin-orbit coupled states: An application to the A-band photodissociation of CH ₃ I	M. Kamiya and T. Taketsugu	J. Comput. Chem., 40 , 456-463 (2019).	2018年11月	国外
CO ₂ Adsorption on Ti ₃ O ₆ ⁻ : A Novel Carbonate Binding Motif	S. Debnath, X. Song, M. Fagiani, M. Weichman, M. Gao, S. Maeda, T. Taketsugu, W. Schöllkopf, A. Lyalin, D. Neumark, and K. Asmis	J. Phys. Chem. C, 123 , 8439-8446 (2019).	2018年12月	国外

Combined Automated Reaction Pathway Searches and Sparse Modeling Analysis for Catalytic Properties of Lowest Energy Twins of Cu ₁₃	T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K. Shimizu, S. Maeda, and T. Taketsugu	J. Phys. Chem. A, 123 , 210-217 (2019).	2019年1月	国外
Soft X-ray Li-K and Si-L _{2,3} Emission from Crystalline and Amorphous Lithium Silicides in Lithium-ion Batteries Anode	A. Lyalin, V. G. Kuznetsov, A. Nakayama, I. V. Abarenkov, I. Tupitsyn, I. E. Gabis, K. Uosaki, and T. Taketsugu	J. Electrochem. Soc., 166 , A5362-A5368 (2019).	2019年1月	国外
The Role of Nitrogen-doping and the Effect of the pH on the Oxygen Reduction Reaction on Highly Active Nitrided Carbon Sphere Catalysts	M. Eckardt, K. Sakaushi, A. Lyalin, M. Wassner, N. Hüsing, T. Taketsugu, and R. J. Behm	Electrochimica Acta, 299 , 736-748 (2019).	2019年1月	国外
Ab initio surface hopping molecular dynamics on the dissociative recombination of CH ₃ ⁺	T. Taketsugu and Y. Kobayashi	Comp. Theo. Chem., 1150 , 1-9 (2019).	2019年1月	国外
Low-lying Excited States of hqxcH and Zn-hqxc Complex: Toward Understanding Intramolecular Proton Transfer Emission	M. Ebina, Y. Kondo, T. Iwasa, T. Taketsugu	Inorg. Chem., 58 , 4686-4698 (2019).	2019年3月	国外
Perspective on Density-Functional Tight-Binding Parameterization towards Transition Metals	周建斌、中井浩巳	分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル 20, 8 (2018)	2018年1月	国内

分割統治型密度汎関数強束縛 (DC-DFTB) 法に対する最近の開発と応用	西村好史、中井浩巳	分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル 20 , 18-23 (2018)	2018年1月	国内
光受容タンパク質の機構解明に向けた分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発	河本奈々、吉川武司、小野純一、中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn 17 , 127 (2018)	2018年10月	国内
Development of Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Method for Theoretical Research on Li-ion Battery	Chien-Pin Chou, Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	Chem. Rec. 19 , 746-757 (2019).	2018年11月	国外
Development of Large-Scale Excited-State Calculations Based on the Divide-and-Conquer Time-Dependent Density Functional Tight-Binding Method	Nana Komoto, Takeshi Yoshikawa, Junichi Ono, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	J. Chem. Theory Comput. 15 , 1719-1727 (2019)	2019年1月	国外
DCDFTBMD: Divide-and-Conquer Density Functional Tight-Binding Program for Huge-System Quantum Mechanical Molecular Dynamics Simulations	Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai	J. Comput. Chem. 40 , 1538-1549 (2019)	2019年3月	国外
DCDFTBMD プログラムの公開	西村好史、吉川武司、中井浩巳	J. Comput. Chem. Jpn 17 , A21 (2018)	2019年3月	国内
First-Order Interacting Space Approach to Excited-State Molecular Interaction: Solvatochromic Shift of p-Coumaric Acid and Retinal Schiff Base	Kazuma Yanai, Kazuya Ishimura, Akira Nakayama, Jun-ya Hasegawa	J. Chem. Theory Comput., 2018, 14 , 3643-3655	2018年6月	国外

3. プレス発表

掲載された成果	発表者氏名	発表メディア	発表時期	国内・外の別
データサイエンスで効率的に全固体電池材料の最適化予測に成功	Randy Jalem, 中山将伸, 竹内一郎, 金森研太, 山崎久嗣, 斎藤俊哉	物質・材料研究機構、名古屋工業大学	2018年4月	国内
人工知能(AI)の頭の中を解読する手法を開発	Randy Jalem	日刊工業新聞	2018年6月	国内
Revisions to standard theory provide clues to understanding phase behavior of clathrate hydrates	H. Tanaka, T. Yagasaki, and M. Matsumoto	American Institute of Physics Scilight	2018年8月	国外
炭素材料が微量な窒素導入で活性な酸素還元電極触媒になる仕組み～非白金族電極触媒を用いた酸素還元反応の微視的機構解明への一歩～	坂牛健, Markus Eckardt, Andrey Lyalin, 武次徹也, R. Jürgen Behm, 魚崎浩平	NIMS-北海道大学 プレスリリース (ACS Catalysis, 8 , 8162-8176 (2018)に掲載)	2018年8月	国内
Solving the mystery in vibrational spectrum of PtCO in argon matrix	小野ゆり子、八木清、高柳敏幸、武次徹也	Advances in Engineering 社のサイト(カナダのリサーチ会社)	2018年9月	国外
量子力学的なプロトン移動による電流生成の確認に成功	坂牛健, Andrey Lyalin, 武次徹也, 魚崎浩平	NIMS-北海道大学 プレスリリース (Phys. Rev. Lett., 121, 236001 (2018)に掲載)	2018年12月	国内

(5) 特許出願状況

委託業務題目「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」

機関名 大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所

業務コード	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
14120014	30	なし							

公開版

「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、
利用の新規基盤技術の開発」
実施計画

平成31年2月7日

大学共同利用機関法人自然科学研究機構
分子科学研究所

岡崎 進

改訂履歴

版	項目	ページ	主な改訂内容（概要）
初版 平成 28 年 2 月 29 日			初版発行
第 2 版 平成 29 年 6 月 12 日	—	—	諮問委員会のご指摘、実験研究者からの意見等を反映し更新
	改訂履歴	—	新規追加
	1. (1)	1	表 1-1 国内外の主な関連プロジェクトを最新情報に更新
	1. (2)	3	サブ課題 B を諮問委員会のご指摘、実験研究者からの意見等を反映し更新
	1. (3)	5～6	サブ課題 B を諮問委員会のご指摘、実験研究者からの意見等を反映し更新
	1. (3)	6～7	サブ課題 C の計画を具体化
	1. (4)	9	エネルギーの変換・貯蔵でサブ課題 B の更新に対応し訂正
	1. (5)	11～18	サブ課題 A は具体化・詳細化、サブ課題 B は諮問委員会のご指摘、実験研究者からの意見等を反映し更新、サブ課題 C は具体化・詳細化
	1. (6)	19	図 1-2 推進体制を最新情報に更新
	1. (6)	20	図 1-3 運営体制に担当者氏名、所属を追加
	1. (6)	23～27	表 1-2 平成 29 年度以降の実施体制を最新情報に更新
	1. (7)	33	平成 29 年度分を配分量に更新
	2-2.	47～55	サブ課題 B エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギーを諮問委員会のご指摘、実験研究者からの意見等を反映し更新
	2-3.(3)	59～61	目標・期待される成果を具体化
	2-4-4.	66	stat-CPMD を最新情報に更新
	別紙 1	72～73	平成 29 年度の体制に変更
	別紙 2	74	所要経費区分を「委託契約事務処理要領の改正（H29 年 3 月 17 日付け）」に対応し変更
	別紙 3	75	平成 29 年度分を配分量に更新
別紙 4	76	平成 29 年度分を配分量に更新	
別紙 5	77～80	最新情報に更新	
第 3 版	—	—	中間評価指摘事項を受け更新

平成 29 年 12 月 22 日	1. (3)	8	図 1-1 ポスト「京」でなければできない研究をより具体化・詳細化
	1. (5)	10	人工知能技術とシミュレーションの融合を作成、それに伴い 1. 実施概要の以降の項番を変更
	1. (7)	19	図 1-2 推進体制を最新情報に更新
	1. (7)	21	図 1-4 研究開発における連携についてを最新情報に更新
	2-4-5	68	表 2-4-1 基盤アプリ設計開発を最新情報に更新
	4.	72~80	中間評価時の指摘事項への対応状況を作成
第 4 版 平成 30 年 3 月 26 日	—	—	平成 30 年度予算および「京」計算資源配分決定を反映し更新
	1. (8)	33	平成 30 年度分を配分量に更新
	別紙 2	83	平成 30 年度の所要経費に更新
	別紙 3	84	平成 30 年度分を配分量に更新
	別紙 4	85	平成 30 年度分を配分量に更新
第 5 版 平成 30 年 5 月 31 日	—	—	諮問委員会の審議結果を反映し更新
	1. (2)	3~4	研究開発内容を最新情報に更新、具体化・詳細化
	1. (3)	6	サブ課題 B の計画を具体化・詳細化
	1. (3)	7	サブ課題 C の計画を具体化・詳細化
	1. (4)	9	最新情報に更新
	1. (5)	10~11	諮問委員会の審議結果及び運営委員会の検討結果を反映し更新
	1. (5)	11	図 1-2 インフォマティクス活用ワーキンググループ設置を追加、それに伴い 1. 実施概要の以降の図の項番を変更
	1. (6)	12~20	年次計画を具体化・詳細化
	1. (7)	21~22	実施体制を最新情報に更新
	1. (7)	21	図 1-3 推進体制を最新情報に更新
	1. (7)	22	図 1-4 運営体制を最新情報に更新
	1. (7)	23	図 1-5 研究開発における連携についてを最新情報に更新
	1. (7)	25~30	表 1-2 平成 30 年度以降の実施体制を最新情報に更新
	1. (7)	33~35	表 1-3 人員計画を最新情報に更新
	2-1. (5)	48~49	実施体制を最新情報に更新
	2-1. (5)	48	図 2-1-6 サブ課題 A 実施体制を最新情報に更新
	2-2. (2)	51~53	実施内容を最新情報に更新、具体化・詳細化
2-2. (3)	54	計画を具体化・詳細化	

	2-2.(5)	57~58	実施体制を最新情報に更新
	2-3.(2)	60~61	実施内容を最新情報に更新、具体化・詳細化
	2-3.(3)	62~63	計画を具体化・詳細化
	2-3.(4)	64	具体化・詳細化
	2-3.(5)	64~66	実施体制を最新情報に更新
	2-3.(5)	66	図 2-3-7 サブ課題 C 実施体制を最新情報に更新
	2-4-5.	70	最新情報に更新
	2-4-5.	70	図 2-4-1 コデザインと重点課題間連携を最新情報に更新
	4.	75	図 4-1 出口に向けた産業界との連携を最新情報に更新
	4.	78	図 4-2 成果利活用の道筋を最新情報に更新
	4.	83	表 4-2「京」を中核とする HPCI システム：利用実績のあるアプリケーションを更新
	4.	84	図 4-3 大型国家プロジェクトとの連携を最新情報に更新
	別紙 1	85~86	平成 30 年度の体制に更新
	別紙 2	87	平成 28 年度経費を確定値に更新
第 6 版 平成 31 年 2 月 7 日	—	—	実施体制の変更、平成 31 年度予算および「京」計算資源配分決定を反映し更新
	1.(5)	11	図 1-2 インフォマティクス活用ワーキンググループ設置を最新情報に更新
	1.(7)	21~22	実施体制を最新情報に更新
	1.(7)	21	図 1-3 推進体制を最新情報に更新
	1.(7)	22	図 1-4 運営体制を最新情報に更新
	1.(7)	23	図 1-5 研究開発における連携についてを最新情報に更新
	1.(7)	25~30	表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制を最新情報に更新
	1.(8)	34	平成 31 年度分を配分值に更新
	2-1.(2)	36~38	実施体制を最新情報に更新
	2-1.(5)	41	実施体制を最新情報に更新
	2-1.(5)	41	図 2-1-6 サブ課題 A 実施体制を最新情報に更新
	2-4-5.	59	図 2-4-1 コデザインと重点課題間連携を最新情報に更新
	4.	63	図 4-1 出口に向けた産業界との連携を最新情報に更新
	4.	64	図 4-2 成果利活用の道筋を最新情報に更新

	4. (6)	66	参加者数を最新情報に更新
	4.	67	表 4-2「京」を中核とする HPCI システム：利用実績のあるアプリケーションを最新情報に更新
	4. (7)	67	大型国家プロジェクトとの連携数を最新情報に更新
	4.	68	図 4-3 大型国家プロジェクトとの連携を最新情報に更新
	別紙 1	69～70	平成 31 年度の体制に更新
	別紙 2	71	平成 29 年度を確定値に、平成 31 年度所要経費に更新
	別紙 3	72	平成 31 年度分を配分量に更新
	別紙 4	73	平成 31 年度分を配分量に更新

内容

1. 実施概要	1
(1) 目的・意義	1
(2) 研究開発内容	2
(3) 目標・期待される成果	4
(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ	8
(5) 機械学習やデータサイエンスの技術活用の検討	10
(6) 年次計画	12
(7) 実施体制	21
(8) 必要計算資源	34
2. 研究開発内容詳細	35
2-1. サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 – 太陽光エネルギー	35
(1) 目的・意義	35
(2) 実施内容	36
(3) 目標・期待される成果	39
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	40
(5) 実施体制	41
2-2. サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 – 電気エネルギー	42
(1) 目的・意義	42
(2) 実施内容	42
(3) 目標・期待される成果	45
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	48
(5) 実施体制	48
2-3. サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 – 化学エネルギー	50
(1) 目的・意義	50
(2) 実施内容	51
(3) 目標・期待される成果	53
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	55
(5) 実施体制	55
2-4. 基盤アプリ設計・開発	57
2-4-1. NTChem	57
2-4-2. GELLAN	57
2-4-3. MODYLAS	57
2-4-4. stat-CPMD	57
2-4-5. コデザイン	58
3. 採択時の留意事項への対応状況	61
4. 中間評価時の指摘事項への対応状況	63

別紙 1	実施機関一覧	69
別紙 2	所要経費	71
別紙 3	「京」の計算資源量	72
別紙 4	「京」以外の計算資源量	73
別紙 5	用語の説明書	74

1. 実施概要

(1) 目的・意義

ポスト「京」を駆使することにより、太陽電池、人工光合成による新エネルギーの創出・確保、燃料電池、二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵、また、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など、太陽光エネルギー、電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い、実験研究者、産業界と連携して、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

同時に、これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し、現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立し、科学的なブレークスルーを達成する。

国内外における主な関連プロジェクトを表 1-1 にまとめる。実験主体のプロジェクトが多く、計算はマテリアルゲノム中心であり、基本原理に基づく計算は小規模である。米国 DOE 傘下の計算機センターにおいては、2016 年から導入の始まるプリ・エクサシステムへのアプリケーション移行のプロジェクトが行われている。当面、メニコアアーキテクチャ等への移行が主目的にみえる。但し、その発展・成果については、競合する可能性が高く注視していく必要がある。国内の実験プロジェクトには、本課題研究者が直接参加することも含め密接に連携していく。

表 1-1 国内外の主な関連プロジェクト

プロジェクト名	目的、内容	備考
JCESR	 計算・データ科学からの蓄電池材料設計が目標	インフォマティクス中心
JCAP	 自然光合成比10倍効率化	実験主体
FCH2	 水素利用の燃料電池開発と実用化	実験主体
NETL	 ハイドレートの発掘で日本とも共同開発	実験主体
MIT CCSPD	 CO2分離・回収	実験主体
NESAP	 プリエクサシステムに向けたアプリ移植・チューニング	計算機移行が主目的
CAAR	 プリエクサシステムに向けたアプリ移植・チューニング	計算機移行が主目的
ESP	 プリエクサシステムに向けたアプリ移植・チューニング	計算機移行が主目的
863計画	 車載用リチウムイオン電池開発	実験主体？
973計画	 革新的電池開発(リチウム硫黄電池、リチウム空気電池など)	実験主体？
Battery2020	 中大型リチウムイオン電池開発	実験主体？
揚水発電代替	 革新的電池開発(マグネシウム電池、リチウム金属電池、全固体電池等)	実験主体？
ARPCHEM	 人工光合成	実験主体 【連携】
NEDO	 太陽光発電の発電コスト低減	実験主体 【連携】
JST CREST	 エネルギー高効率利用のための相界面科学	実験主体 【連携】
JST ALCA-SPRING	 先端的低炭素化技術開発 特別重点領域次世代蓄電池	実験+計算 【連携】
内閣府ImPACT	 超薄膜化・強靱化「しなやかなタフポリマー」の実現	実験+計算 【連携】
元素戦略プロジェクト 拠点形成型	 京大ESICB 実験・理論融合による触媒・電池研究	実験+計算 【連携】
経産省RISING II	 RISINGで得られた成果の2030年の実用化に向けて更に発展	実験主体

資源小国である我が国にとって、エネルギー問題の解決は喫緊の重要課題である。本重点課題において確立する技術は、新エネルギー源としての太陽光利用、また自動車産業の根幹を変革する可能性を持つ低コスト電気自動車、燃料電池車の世界に先駆けた開発、さらには、ハイドレートからのメタン資源の確保、高性能触媒の開発によるエネルギー多消費型工業プロセスの革新、CO₂問題の解決による化石燃料の安定的利用の実現を目的としており、いずれも国家的課題の解決に大きく貢献するものである。さらには、安価な太陽電池や二次電池は発展途上国のエネルギー問題を大幅に改善するものであり、地球規模での資源、環境問題の解決にもつながる国際貢献が可能となる。

(2) 研究開発内容

本重点課題では上記の目的を達成するために、サブ課題A「新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー」、サブ課題B「エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー」、サブ課題C「エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー」を設定し、ポスト「京」を最大限に活用するアプリケーション開発により各サブ課題での目標を実現する。開発内容の概要は以下の通りである。

サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー

高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出を目指す。複雑なスピン状態を含む天然・人工光合成系の素反応から物質設計までを取り扱える統合的な計算手法を確立し、水分解反応の本質解明と新エネルギー創出に有望な物質探索を行う。また、太陽電池の物質設計とモルフォロジー・界面の制御に貢献できるシミュレータの開発を行い、高効率太陽電池の実現に向けた計算的アプローチを推進することにより次世代のエネルギー資源の創出に貢献する。

人工光合成の物質設計と実用化を目的とした光合成シミュレータの開発と、高効率な太陽電池の予測を可能にする太陽電池シミュレータの開発を行う。

光合成シミュレータでは、複雑なスピン状態を伴う多核金属錯体の電子状態の正確な取り扱いを可能にする強相関ソルバーの開発を行い、ESR や EDNMR をプローブとした応用に展開する。大規模な量子エンタングルメントを取り扱う新規な理論と数値解法を進展させ、光合成の機構解明をポスト「京」で始めて可能とする。基礎となる天然光合成系については Kok サイクルの各酸化状態での水分解サイトの構造決定を行い、反応機構を明らかにする。半導体光触媒については、大規模な時間依存密度汎関数計算によるバンドギャップと水の酸化還元準位とのバンドアライメント最適化を行う。

更に、上記研究で開発した光合成シミュレータを用い、新規光触媒設計と助触媒の最適化の応用研究を行う。

太陽電池シミュレータではメモリ分割を施した時間依存密度汎関数法を開発し、数千～1万原子規模のドナー・アクセプター界面での電荷分離状態のシミュレーションを行うと共に、領域分割によるアプローチも検討する。更に、有機電子供与体・有機電子受容体の相互作用と光誘起による電子物性に強く依存する I_{sc} を飛躍的に増加させる有機物材料の設計指針を明らかにする。

更に、上記研究で開発した太陽電池シミュレータを用い、ペロブスカイト太陽電池の光電荷移動機構や自由キャリア機構の解明に向けた研究を行う。

これらの目標を達成し、出口に向けた成果を創出するために、サブ課題 A では、岡山大学、大阪市立大学をはじめとする実験研究者と共同研究を行い、また、ARPCHEM、NEDO、CREST 及び元素戦略などの国家プロジェクトと連携し、更に三菱ケミカル等の民間企業との連携も行っていく。

サブ課題 B エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー

第一原理電子状態理論に基づく電極反応の計算と分子動力学法に基づく電解質の計算を統合させることにより、均一系の化学・表面物性・粗視化に基づく材料科学的なアプローチでは理解が困難であった二次電池や燃料電池の分子論を構築する。またこの方法を用いて、測定が困難な電極界面を解明しそれを二次電池や燃料電池の電流電圧曲線等の予測につなげ、信頼性の向上に貢献できる手法を確立する。これを用いて次世代・次々世代電池技術の重要問題に挑戦し、蓄電・水素エネルギー社会の実現に貢献する。

本サブ課題は、電極シミュレーション、イオン輸送・電解質膜シミュレーションから成るシミュレータを開発し、電極界面の微視的挙動の解析を実現する。これを用いて、サイクリック・ボルタメトリー（電流電圧曲線）計算や界面酸化還元反応の計算を行いながら、電極界面が関わる問題の解決が可能なレベルにシミュレータを発展させる。電極シミュレーションでは、アプリケーションソフトウェア stat-CPMD、STATE を拡張し、電位差が印加された状況下等での反応自由エネルギーの計算を可能にし、その手法の有効性をリチウムイオン電池や燃料電池で確認した後に、全固体電池、ナトリウムイオン電池、リチウム空気電池などの次世代二次電池や白金代替燃料電池へと展開する。イオン輸送・電解質膜シミュレーションでは、主として MODYLAS による古典分子動力学シミュレーションに基づいて二次電池電極界面、燃料電池三相界面等の不均一系におけるイオン輸送の分子機構を解明する。更に、アプリケーションソフトウェア RedMoon により、電極-電解液界面の SEI 膜形成機構の解明を行う。リチウムイオン電池系の界面被膜形成に電解液組成などが与える効果を原子レベルから解析する。

これらの目標を達成し、出口に向けた成果を創出するために、サブ課題 B では、物材機構、東京理科大、SPRING-8 等をはじめとする実験研究者と共同研究を行い、また、ImPACT、JST-ALCA、NEDO、CREST 及び元素戦略などの国家プロジェクトと連携し、更にトヨタ自動車、富士フィルム、日産アーク、昭和電工等の民間企業との連携も行っていく。

サブ課題 C エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー

化学エネルギー創成から消費に至る過程において、メタンや CO₂ の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発し、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用への橋渡しとするための指針を提供する。そのために、電子状態理論と分子動力学法を基盤とした統合シミュレーション技術を構築し、実用的な物質設計に向け分子レベルからの指針を提供する。ハイドレート分解によるメタン資源の採取方法の効率化、燃料電池非白金系触媒の開発、アミンをはじめ高効率材料を用いた CO₂ の分離・回収技術の発展に貢献することにより、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。

化学エネルギーを対象とする本サブ課題は、ハイドレート、触媒、CO₂分離・回収から構成される。エネルギー資源として大量に存在するメタンハイドレートの効率的採取法の開発を目指して、大規模長時間MDシミュレーションを実施して、メソスケールでの解離の機構解明、解離の律速過程の探索を行ない、効率的な融解法への指針を得る。更に、ポスト「京」を駆使した大規模な構造探索から、蓄冷材としてのセミクラスレートの性能の向上のための包括的な評価を行う。触媒では、反応経路自動探索法をNTChemに連成し、CO₂有効資源化と燃料電池非白金系触媒に焦点を当てた研究を行う。CO₂分離・回収では、分割統治法を中心としたアプリの高度化を行い、消費エネルギーコストを削減する新規アミンの提案・最適なアミン混合比の予測を行う。更に、溶液系だけでなく金属有機構造体(MOF)やゼオライトのような多孔質材料を用いた手法に関する技術確立する。

これらの目標を達成し、出口に向けた成果を創出するために、サブ課題Cでは、北大等をはじめとする実験研究者と共同研究を行い、また、CREST及び元素戦略などの国家プロジェクトと連携し、更にパナソニック、三菱ケミカル、IHI等の民間企業との連携も行っていく。

(3) 目標・期待される成果

サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保—太陽光エネルギー

アウトプット成果:

・平成29年度終了時

数千~1万原子から成る大規模な分子系の励起状態計算の実現に向けて、基底状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムを完成させ、太陽電池シミュレータに実装する。有機系太陽電池のエネルギー変換機構を解明するための手法とプログラムを開発し、太陽電池シミュレータに実装する。又、光合成シミュレータにおいては、ポスト「京」による光合成系の理論研究を可能にする計算手法と分光学的プローブの基本設計とプロトタイプ実装を終了する。

更に、上記研究で開発した光合成シミュレータを用いた新規光触媒への応用研究を実施すると共に、太陽電池シミュレータを用い、ペロブスカイト太陽電池の光電荷移動機構を解明する。

・本格実施フェーズ終了時

10²⁰以上の複雑な電子配置が重要な寄与をする電子系の高精度計算が可能な光合成シミュレータを完成させ、複雑な組成を持つ半導体光触媒や、電子相関が強くこれまで取り扱いが困難であった多核金属錯体による人工光合成系の定量的な取り扱いを可能にする。また、太陽電池シミュレータを完成させる。数千~1万原子から成る大規模な太陽電池材料の基底状態に加えて励起状態での挙動や物性のシミュレーションを可能とする。

光合成シミュレータを用いた新規光触媒設計と助触媒の最適化を行う。また、太陽電池シミュレータを用いペロブスカイト太陽電池の高効率性に関わる自由キャリア機構を解明する。更に、ドナー・アクセプター界面の電子的特性を明らかにすることにより有機系太陽電池などの実用化のめどとされる変換効率15%に向けた提案を行う。

・ポスト「京」運用開始5年後

天然の光合成系を模倣した新規触媒の開発を行う。(1)可視光領域で水から水素を効率良く作ることのできる光触媒の理論設計、(2)水を分解して酸素を取り出す高効率な金属錯体触媒のシミュレーション設計を実現する。太陽電池シミュレータの幅広い分野での活用・普及を行うと共に、太陽電池のさらなる高効率化を目指して、新規変換機構に基づく太陽電池に関する知見を得る。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始5年後

企業との連携によるプロトタイプ実証が開始される。

・ポスト「京」運用開始10年後

企業との連携による製品化が目指される。分子・物質レベルのミクロな情報から材料の物性や挙動を予測できるマテリアルデザインのための総合的なモデリング/シミュレーション環境を提供し、触媒、医薬品、ポリマー、燃料電池、太陽電池、強相関物質などをターゲットとして多くの分野のニーズに資する統合シミュレータとして普及する。

サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵—電気エネルギー

アウトプット成果：

・平成29年度終了時

二次電池に関しては、固体電子論に基づく計算プログラムを発展させ、数千原子規模の電極界面に対して電極反応等の自由エネルギー計算が可能なシミュレータを、stat-CPMD、STATEをベースに開発する。また、混合MC/MD反応法プログラムを発展させ、数十万原子規模の電極・電極被膜界面での反応シミュレーションを行えるシミュレータを開発する。燃料電池に関しては、燃料電池電極界面の構造や反応自由エネルギーを計算することが可能な電極シミュレータを、第一原理分子動力学法(STATE, stat-CPMD)をベースに開発する。また、高分子電解質膜など100万~1,000万原子の高分子系に対して分子動力学計算による相分離構造の解析や破壊シミュレーションが可能なシミュレータを、MODYLASをベースに開発する。

これらのシミュレータを用い、リチウムイオン電池やナトリウムイオン電池の電解液探索、被膜形成過程に電解液組成などが与える効果の原子レベルの解析や二次電池電極界面近傍、燃料電池三相界面でのイオン輸送など、電池材料としての機能発現の分子過程の解明を行う。また、燃料電池の反応・輸送抵抗を予測するのに必要な物性値の導出、遷移金属酸化物などの白金代替物質の構造や反応に関する電極シミュレーションを行い、電極開発に資する。

・本格実施フェーズ終了時

二次電池に関しては、固体電子論に基づく計算プログラムを用いた5000原子規模の反応自由エネルギー計算が可能になるシミュレータを開発する。また、混合MC/MD反応法による数十nmオーダーの厚みを有する現実のSEI膜との直接比較が可能な100万原子規模のシミュレータを開発する。燃料電池に関しては、電極界面の構造や反応自由エネルギーの計算効率や精度を向上させ、界面構造等と反応機構や反応抵抗との関連を解明することが可能な電極シミュレータを開発する。高分子電解質膜

に特徴的な大域的構造とそれに由来する膜強度やイオン伝導度、また電極・電解質膜界面等の解析が可能な1億～10億原子系に対する分子動力学計算を実現するシミュレータを開発する。上記、微視的シミュレーションから得られる反応抵抗や輸送抵抗に基づいて、電流電圧曲線の予測計算を可能なレベルのシミュレータとして発展する。開発シミュレータの産業界等への技術移転を開始する。

これらのシミュレータを用い、二次電池に関しては、リチウムイオン電池等の電極界面被膜や電解液の反応性・イオン伝導性を解析し、また力場計算連携解析・材料関連の機械学習解析も実行し、より高効率かつ高安全性をもつ電解液・電解質材料の設計指針を提案する。加えて、ポストリチウムイオン電池の有力候補である全固体電池の電解質-電極界面におけるイオン輸送や、リチウム空気電池や多価イオン電池における電解液-電極反応に関してもポスト京利用に向けた予備的な成果を得る。燃料電池に関しては、遷移金属酸化物などの白金代替物質の活性向上のための組成や構造に関する設計指針を獲得する。標準的な電解質膜に対して乾湿サイクルによるモルフォロジー変化を明らかにするとともに、破壊の分子機構を解明する。加えて、プロトンの輸送、酸素や水素の遮断など電池材料としての機能発現の分子過程を解明する。更に、電解質膜開発に関しては内閣府 ImPACT プロジェクト「しなやかタフポリマー」と連携し、開発企業と共同で、社会的に緊急度の高い強靱で高耐久性、高信頼性を持つ実用的な自動車用燃料電池の電解質膜の設計指針を提供し、「京」を用いた先行的成果としてコンセプトカーの試作につなげる。

・ポスト「京」運用開始5年後

開発シミュレータを用いた二次電池や燃料電池の電流電圧曲線の計算技術を確立させるとともに、大域的モルフォロジーと微視的な電極反応の関連を明確にするなど電池の微視的理論を充実させる。次世代二次電池や燃料電池の反応機構に関する微視的理論を発展させ、材料開発に貢献する。また、シミュレーション技術の産業界への移転を始める。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始5年後

「京」およびポスト「京」によって提案あるいは確認された電池の部材の商品化がいくつか行われる。電気自動車、燃料電池車の開発やスマートグリッド社会の構築が加速する。開発シミュレータが企業等で用いられ始め、開発期間の短縮に貢献する。

・ポスト「京」運用開始10年後

蓄電社会、水素社会の構築が進んだ結果、自然エネルギーの全エネルギーに対する割合が増加する。全電池シミュレータ技術が普及し、電池開発に不可欠な基盤となる。

サブ課題C エネルギー・資源の有効利用—化学エネルギー

アウトプット成果：

・平成29年度終了時

化学エネルギー創成から消費に至る過程の、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の計算科学における開発を目指す。ハイドレートを用いた物質貯蔵に関して、高効率、低エネルギーコスト低環境負荷で貯蔵・廃棄するため、自由エネルギー計算や数十万原子規模の分子系、ミリ秒のシミュレーションにより最適条件を提示する。更に、蓄冷材としてのセミクラスレートについて、未解明の構造や

熱力学的特性の解析方法を開発する。触媒設計では反応経路自動探索プログラムを NTChem に連結させ、京の上での反応経路探索計算を可能にする。更に、金属ナノクラスターによる触媒反応の全面経路探索を行い、サイズ効果やクラスター構造変化の効果について知見を得る。CO₂ について、100 万原子規模の化学反応ダイナミクスに必要な DFTB などのアプリケーションの大枠の開発、また拡散と反応性の関係を明らかにする。更に、力場 (DFTB パラメータ) の拡張を実施して、MOF などの多孔質材料の CO₂ 吸収量や吸収速度、回収に必要な熱量などの基礎的知見を獲得する。

・本格実施フェーズ終了時

化学エネルギー創成から消費に至る過程について、計算科学により高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用へ橋渡しとするための指針を提供する。ハイドレートについては、最大数千万原子規模の分子系、ミリ秒程度のシミュレーションを行い、生成解離機構を解明し、マクロなシミュレーションヘデータを提供することにより、メタンの効率的回収の指針を得ることに貢献する。更に、メタン資源化と CO₂ 投棄のために、メタンハイドレート中のメタンの CO₂ への置換機構を解明するとともに、蓄冷材としてのセミクラスレートの構造と潜熱の基礎原理を確立する。触媒設計では、反応経路自動探索プログラムを NTChem と連結し反応経路自動探索を実現し、1000 原子程度の複雑な触媒反応機構を調べる計算手法を開発する。CO₂ 有効資源化の触媒や燃料電池非白金系触媒へと適用し、高機能触媒設計に資する知見を得る。CO₂ 分離・回収では、アミンの pKa 依存性など 100 万原子程度の大規模系解析に基づいて、最適な反応条件の提案を行う。更に、CO₂ 分離・回収候補となる MOF などの多孔質材料の指針を吸収量や吸収速度、回収に必要な熱量の観点から示す。

・ポスト「京」運用開始 5 年後

メタン、水素を長時間貯蔵するために、ハイドレートの分解を緩和する“自己保存効果”を高める手法の開発、CO₂ 固定の高機能触媒、サブ課題 B と連携した燃料電池非白金系触媒、最適化されたアミン吸収液に対するより定量的な CO₂ 吸収特性の予測を実現する。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始 5 年後

ハイドレートに対する低環境負荷が一般に認められ、また反応経路自動探索計算や凝縮相内化学反応シミュレーションが化学プロセスや材料設計で普及する。

・ポスト「京」運用開始 10 年後

メタンハイドレート由来のメタンが利用されるようになり、反応経路自動探索法が産業界に普及し、合理化されたプロセスに基づく CO₂ 分離・回収技術の実証試験が進み産業化がなされる。

上に述べたような分子過程が重要なエネルギー技術においては、複雑に絡みあった電子、分子の振る舞いが中心的な役割を担っている場合が多い。しかしながら一般的に、これまでの計算科学研究は、均一系に対するものでしかなかった。このため、理想的な要素に対するモデル研究にとどまっており、構成要素が複合して形成されている実在系の現象を直接取り扱うことができていない。ここにおいて、ポスト「京」を用いた超大規模並列シミュレーションにより、広域なヘテロ複合系の計算を実行し、そこで初めて生起する重要な現象を世界に先駆けて解明する。これにより、エネルギー問題の解決の鍵となっている分子過程を計算科学的に明らかにし、実験研究者と協力しながら問題解決に向けて一

歩を踏み出すことが可能となる。このような研究は学術的にも意義が高く、ポスト「京」なくしては不可能であり、ポスト「京」の利用による明確な投資効果を有している。その例を図 1-1 に示す。

例えば、「京」においては 1000 原子までの分子の励起状態の量子化学計算が実現されているが、有機太陽電池の開発に必要なヘテロジャンクションを含めた現実系界面のシミュレーションには 10000 原子規模の取扱いが不可欠である。この計算を終えるには「京」では 1 年を必要とし成果は見込まれない。

また例えば、「京」においては燃料電池高分子電解質膜だけからなる系に対する分子動力学計算は可能である。しかしながら、実際の開発研究においては高分子電解質膜と電解液からなる系が触媒層に圧着されている数億原子からなる現実系に対する計算が必要となる。この計算は「京」では数年かかり実質的に研究不可能である。ポスト「京」においては、新規アルゴリズム開発も含めて 2 から 20ms/MDstep の実現を目標としており、その場合 1 週間以下で計算を終了できる。

	京	ポスト「京」
サブ課題A 新規エネルギー資源の創出・確保	小規模系励起状態計算 ・光合成系 厳密計算 20原子、$\approx 10^9$の電子配置 ・有機太陽電池 単一相、 1,000原子	高精度大規模系励起状態計算 ・光合成系 厳密計算 (完全CI解) 実用化 1,000原子、10^{20}以上の電子配置の組合せ ・有機太陽電池 現実系界面 (ドナーア クセプター界面)、 10,000原子
サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵	個別部材のシミュレーション ・電極反応 数千原子規模の第一原理計算 ・電解質膜 数百万原子系 のMD計算	全電池シミュレータ ・二次電池 ・燃料電池 ・反応自由エネルギーと物質移動に基づいた電流電圧曲線、電極界面のマイクロ機構解明 5,000原子 の第一原理計算と 数億原子 のMD計算の統合
サブ課題C エネルギー・資源の有効利用	・メタンハイドレートの融解 数十万原子規模分子シミュレーション ・均一触媒反応 数十原子 の反応経路探索 ・CO ₂ の分離・回収、アミン水溶液 5,000原子系 のQM-MD計算	・ハイドレートの分離・貯蔵、蓄冷機能 数千万原子規模分子シミュレーション ・不均一触媒表面反応 1,000原子系 の反応経路探索 ・CO ₂ の化学吸収法の最適化 ・MOFなどの固体吸収材の設計 100万原子系 のQM-MD計算

図 1-1 ポスト「京」でなければできない研究

(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

本重点課題で取り扱うエネルギー技術においては、いずれも電子や分子のマイクロな振る舞いが中心的な役割を果たしている。このような分子レベルの情報は実験のみからでは得ることは難しく、開発指針も経験のみから定めることは困難である。このため、エネルギーシステムにおける分子のマイクロな理解は、新規材料の合理的な理論設計と機能制御の開発において最も重要なファクターとなっている。

本課題は実験研究者、企業研究者との連携に基づいて課題解決を目指すものであり、以下のように実験と

計算の相互的な関係、課題全体における計算科学の位置づけ、役割は明確である。

まず「新エネルギー源の創出・確保」における太陽光エネルギー技術全体の課題は、低コスト、汎用元素、高変換効率、長寿命の高性能太陽電池の開発と、高効率水素発生光触媒の開発である。これらを実現するにあたって特に計算科学に求められていることは、前者に対しては短絡電流密度、開放電圧、曲線因子の計算、界面・モルフォロジー制御や電荷再結合等の太陽電池のエネルギー変換効率要因の特定であり、また、アップコンバージョン、ホットキャリア、熱電変換利用等の理論限界を超える太陽電池の新機構提案である。また、後者に対しては、金属錯体や半導体光触媒での水素発生機構解明と設計、CO₂固定法の指針開発である。このため、上述したように太陽電池シミュレータならびに人工光合成シミュレータの開発を行うことが強く求められており、これらに基づいて実験研究者、企業研究者と連携して新しい原理に基づく太陽電池、光触媒の開発につなげる。

「エネルギーの変換・貯蔵」における電気化学エネルギー技術全体の課題は、二次電池、燃料電池共に、ひとえに低コスト化、高信頼性、高耐久性、汎用元素利用の電池開発である。そこにおいては特に高エネルギー密度、高出力密度、高速充放電を実現することが求められているが、さらには次世代、次々世代電池の構築もすでに要求されている。これらの課題解決のために計算科学に求められていることは、一つは各種電池共通課題として、電極反応、電極被膜生成、イオン輸送に関わる電極/電極被膜・電解質膜/電解液界面挙動の解明である。もう一つは、高電圧・高エネルギー密度に繋がる正極・負極、高イオン伝導度、高耐久性を持つ電解液・電解質・電解質膜、さらには燃料電池における白金代替触媒など種々の電池に個別な電池部材の最適材料設計、材料探索である。このため、電極反応、電極被膜、電極界面の研究を進めることができ、また電解質膜、電極被膜と電解液との界面を研究するシミュレータの開発が不可欠となっており、これらは information transfer により電極界面の反応抵抗、輸送抵抗、電気二重層などを統合して、CV 曲線のシミュレーションを可能とすることが期待されている。これら計算科学の課題を解決し、その上で ImPACT、元素戦略、JST-ALCA など大規模国家プロジェクト等において実験研究者、企業研究者と連携し、自動車産業で日本が優位に立ち得る高性能燃料電池、二次電池の開発へと繋げるとともに、次世代、次々世代電池開発を加速化する。

「エネルギー・資源の有効利用」における化学エネルギー技術全体の課題は、ハイドレートからのメタンの効率的採集技術の確立、元素戦略に立脚した高性能触媒の開発、CO₂の低コスト分離・回収、廃棄、資源化である。これらの中で計算科学に具体的に求められていることは、ハイドレート分解の律速過程の解明とその消去法の提案、メタン/CO₂の高効率変換の可能性の検証であり、CO₂還元を実現する高機能触媒の提案、低コストで CO₂回収を実現するアミン系吸収剤の設計、また MOF など新規吸収媒体の提案である。これには、多相共存シミュレータ、触媒反応経路探索シミュレータ、凝縮相内化学反応シミュレータの開発を要し、これらを用いた大規模計算に基づいて上述の課題解決に向けた提案、設計・開発指針の提示を行い、メタンハイドレートの資源化、CO₂の低コスト分離・回収、廃棄、資源化を分子技術、元素戦略の実験研究者とともに実現する。

このような技術は単にエネルギー問題に限られることなく広く応用され、我が国の産業の革新的発展に大きく貢献することが期待されるが、同時に基礎科学分野においても大きなブレークスルーをもたらすものである。

本課題の成功は、自動車産業、化学産業、電機産業等に極めて大きな波及効果をもたらすことが期待される。たとえば低コスト高性能電気自動車や燃料電池車は、自動車メーカーが激しい国際競争の

下に開発を進めており、この分野で市場を制することは我が国に計り知れない利益をもたらす。中核技術となる電池本体の中でも特に新規材料の開発がその鍵を握っており、産業界や実験研究者と手を携えた計算科学研究が大きな変革をもたらす。また、たとえば人工光合成系の研究においては、酸素発生を促す物質の電子状態に加えて、それを制御する周辺環境との相関が最も重要となる。この複合現象の解明は、新エネルギー創成の出発点となるものであり、今後 20 年の研究の方向性を決定するなど、我が国の産業・経済への大きな波及効果が期待される。

また、本課題では孤立系や部分系における単一現象の科学から脱却し、現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立することができ、科学的にも大きな革新をもたらすことが期待される。

本課題において開発した高精度量子化学計算、大規模第一原理計算、超大規模分子動力学計算などの方法論、アプリケーションは化学、物理、材料、生物分野等に適用できるものであり、エネルギー問題に限ることなく、広く他分野での展開も予想され、研究ツールとして重点課題 1、6、7等へ提供する。

開発アプリケーションは、ポスト「京」に限ることなく情報基盤センターや共同利用研等のインフラにおいても効率的に稼働するよう設計、開発し、またスーパーコンピューティング技術産業応用協議会等と連携して、産業利用を念頭に置いて使い勝手のよいアプリケーションとなるよう開発する。これにより、既存のスーパーコンピュータはもちろんのこと、企業内のシステムにおいても広く展開、利用されることが期待できる。また、開発したシミュレータは、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会ならびに重点課題6、7等と連携し、産業界での利用促進、普及を図る。

(5) 機械学習やデータサイエンスの技術活用の検討

本重点課題では、「複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーション」に基づきエネルギーの基盤技術を研究開発している。即ち、研究対象となる物質は無限に存在する。限られた時間・計算機資源の中で、研究成果を最大化するためには、機械学習やデータサイエンスの活用はきわめて重要である。本重点課題ではポスト「京」に向けたシミュレータ開発に注力しているところではあるが、課題参加者においては、他プロジェクト等も含め機械学習やデータサイエンスの技術活用に関し、既に以下のような研究を推進している。

- ・スーパーコンピュータを利用したハイスループット・コンピューティングに基づいたマテリアルズ・インフォマティクスによる太陽電池と半導体光触媒の新材料設計(理研 R-CCS 中嶋)
- ・機械学習による最適な太陽電池材料と半導体光触媒材料のシミュレーション設計に向けたデータベース作成(理研 R-CCS 中嶋)
- ・ハイスループット第一原理 MD 計算による構造-物性相関のデータベース化(物材機構 館山)
- ・電解液・界面被膜トラジェクトリのパーシステントダイアグラム解析(物材機構 館山)
- ・高分子破壊標準データベースプロトタイプ構築(名大 岡崎)
- ・粒子間相互作用パラメータの最適化による、より正確な物性予測の可能性追求(岡山大 田中)
- ・機械学習と反応経路地図を活用した吸着・触媒活性の評価・解析(北大 武次)
- ・機械学習と反応経路地図を活用した化学反応 MD トラジェクトリの自動分類(北大 武次)
- ・DFTB 計算パラメータ開発で群知能の一つである粒子群最適化法を用いた最適解の探索(早大 中井)

これらの研究を活かし、機械学習やデータサイエンスの技術活用を検討する。物質予測に向けた研究にはスーパーコンピュータと人工知能を合わせた活動が重要であり、エネルギー変換・エネルギー貯蔵・物

質変換に向けた材料探索のためのインフォマティクス活用ワーキンググループ(責任者:館山佳尚・物材機構)を設置し、エネルギー問題への積極的活用の可能性を組織的に検討する。本ワーキンググループにて、特に先行的に実施しているスーパーコンピューターと人工知能を組み合わせた研究から、本重点課題内で横断的に活用可能な事例を選定し、注力して研究を推進する。

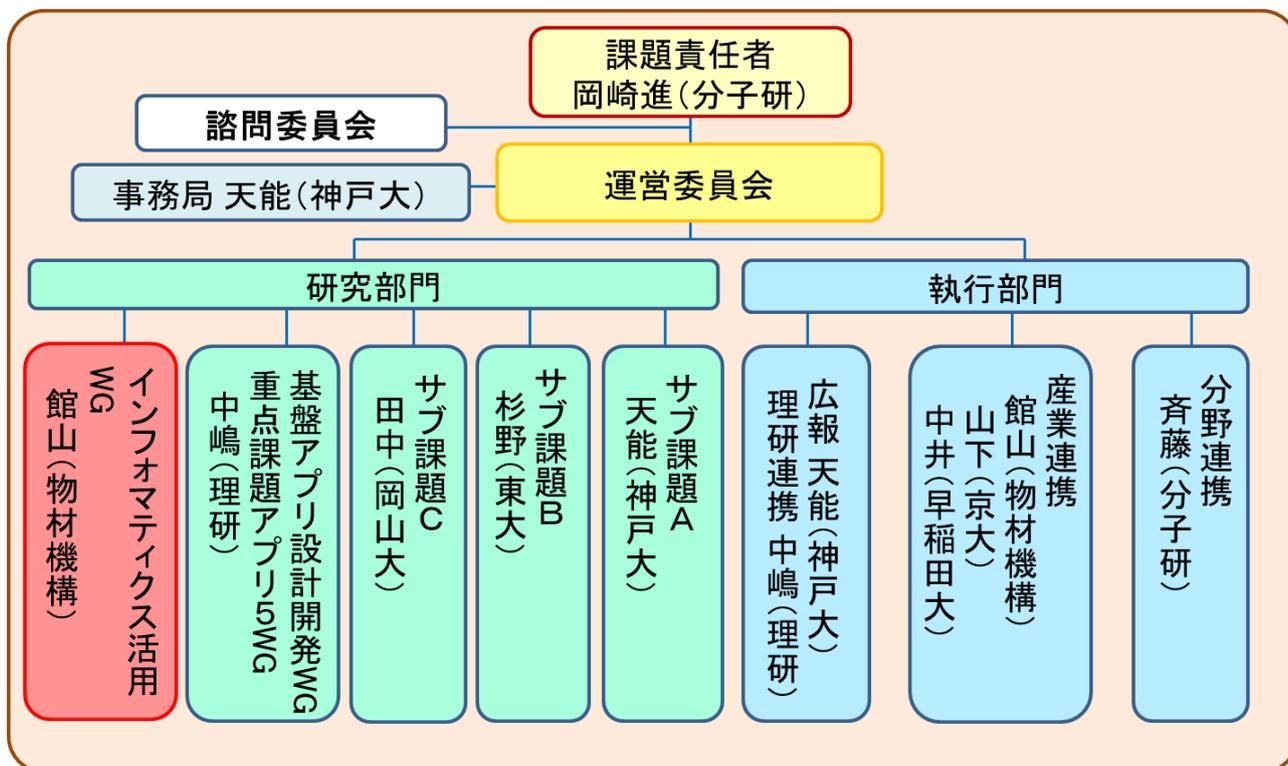


図 1-2 インフォマティクス活用ワーキンググループ設置

(6) 年次計画

課題全体	中間目標 (平成29年度)	シミュレータの基幹機能の整備
	最終目標 (平成31年度)	シミュレーション技術の確立と実証と先行的成果の創出

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ			
	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題A 新エネルギー源の 創出・確保 - 太陽 光エネルギー (神戸大学・天能精 一郎)	<p>(目標) シミュレータと 研究体制の明確 化</p> <p>(実施内容) ・ 光合成用の強 相関電子状態ソ ルバ (3種類) の 仕様と大規模 DFT・TDDFT法の並 列化規格決定</p> <p>・ 実験や企業と の連携の組織化</p>	<p>(目標) シミュレータ開 発</p> <p>(実施内容) 【人工光合成】 ・ GELLAN 強相関ソルバPHF 法の開発(二次収 束SUHF法、エネル ギー勾配法)</p> <p>・ マンガンクラ スタのスピン状 態の検証</p>	<p>(目標) シミュレータ開 発継続と予備検 証</p> <p>(実施内容) 【人工光合成】 ・ GELLAN 強相関ソルバPHF 法の開発継続(二 次収束SUHF法、エ ネルギー勾配法)</p> <p>・ 強相関ソルバ ポストPHF法 (スピン拡張理 論)の開発</p> <p>・ モデル空間量 子モンテカルロ (MSQMC)法の開発</p> <p>・ マンガンクラ スタのスピン状 態の検証</p>	<p>(目標) シミュレータ開 発継続と早期成 果創出</p> <p>(実施内容) 【人工光合成】 ・ GELLAN 強相関ソルバPHF 法(二次収束SUHF 法、エネルギー勾 配法)構造最適化 法の開発</p> <p>・ 強相関ソルバ ポストPHF法 (スピン拡張理 論)の高度化</p> <p>・ モデル空間量 子モンテカルロ (MSQMC)法の開発</p> <p>・ 多核遷移金属 錯体触媒への応 用</p>	<p>(目標) シミュレータ開 発継続と早期成 果創出</p> <p>(実施内容) 【人工光合成】 ・ GELLAN エンベッディン グ法への拡張、 PHF法(二次収束 SUHF法、エネル ギー勾配法)の高度 化</p> <p>・ 強相関ソルバ ポストPHF法 (スピン拡張理 論)の高度化</p> <p>・ モデル空間量 子モンテカルロ (MSQMC)法の高度 化</p> <p>・ 多核遷移金属 錯体触媒の計算 実証、応用</p>	<p>(目標) シミュレータの 検証</p> <p>(実施内容) 【共通】 各種手法の最終 調整。光合成と太 陽電池系に関する 大規模実証計 算。高性能アプリ を用いた、ポスト 「京」供用開始前 の試用</p> <p>【人工光合成】 ・ GELLAN ・ PHF法(二次収 束SUHF法、エネル ギー勾配法)の高 度化、強相関ソル バ ポストPHF法 (スピン拡張理 論)の高度化</p> <p>・ 多核遷移金属 錯体触媒の計算 実証、応用</p>

		<p>【太陽電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ NTChem <p>大規模DFTの開発</p> <p>・ 励起状態ダイナミックス法の理論構築とプログラムの開発</p> <p>・ 小規模ヘテロジャンクションの検証</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 光合成シミュレータを用いた新規光触媒設計に向けたクラスターモデルの構築 <p>【太陽電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ NTChem <p>大規模DFTの開発継続、TDDFTを検討</p> <p>・ 励起状態ダイナミックス法の理論構築とプログラムの開発</p> <p>・ 太陽電池の励起状態計算検証</p> <p>・ 有機無機ハイブリッド系のペロブスカイト太陽電池材料の発電機構の解明と非鉛化に向けた理論材料設計</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 水分解光触媒材料のクラスターモデルの構築 <p>【太陽電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ NTChem <p>メモリ分割版DFTプログラムの開発、大規模TDDFTの開発</p> <p>・ 非断熱過程＋項間交差を含む励起状態ダイナミックス法の開発</p> <p>・ ノンフラーレンアクセプター有機材料の探索</p> <p>・ ペロブスカイト材料のクラスターモデルの構築</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 水分解光触媒材料の大規模励起状態計算 <p>【太陽電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ NTChem <p>メモリ分割版TDDFTプログラムの開発</p> <p>・ 非断熱過程＋項間交差を含む励起状態ダイナミックス法プログラムの開発</p> <p>・ ドナー・ノンフラーレンアクセプター界面の大規模励起状態計算</p> <p>・ ペロブスカイト太陽電池材料の大規模な計算実証、励起状態計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 水分解光触媒材料の光励起キャリアの緩和過程の解明 <p>【太陽電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ NTChem <p>メモリ分割版TDDFTプログラムの完成・整備・高度化</p> <p>・ 非断熱過程＋項間交差を含む励起状態ダイナミックス法プログラムの開発及び高度化</p> <p>・ ドナー・ノンフラーレンアクセプター界面の電荷分離過程の解明</p> <p>・ ペロブスカイト太陽電池材料の発電機構の解明</p>
--	--	---	--	---	---	---

		【共通】 ・モルフォロジ シミュレーシ ョンのため MODYLAS等との連 携			【共通】 ・各種アプリケ ションのアル ゴリズムの最適 化	
--	--	---	--	--	--	--

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ			
	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題B エネルギーの変換・ 貯蔵 - 電気エネルギー (東京大学・杉野 修)	(目標) 体制の構築 (実施内容) ・ stat-CPMD、 MODYLASの調査的 利用とその高度 化に向けた調査 ・ 実験家や産業 界をまじえた研 究体制の構築	(目標) シミュレータ基 本設計 (実施内容) ・ stat-CPMD、 MODYLASの高度化 の調査・検討 ・ 全系シミュ レーションの調査・検 討	(目標) シミュレータ詳 細設計・開発と早 期成果創出へ向 けた詳細計画 (実施内容) 【二次電池】 ・ stat-CPMDの電 子状態計算カー ネルの高度化 ・ リチウムイ オン電池界面被膜・ 新規電解液の特 性計算 ・ RedMoon（混 合MC/MD反応法）の 京上での動作、10 万原子規模実現 と多様な酸化還 元反応や重合反 応の機能実装 ・ 負極-電解液界 面でのSEI膜形 成シミュレーシ ョン（10万原子	(目標) シミュレータ骨 格部分の開発と 早期成果創出へ 向けた課題の解 決 (実施内容) 【二次電池】 ・ stat-CPMDの大 規模計算・酸化還 元反応計算に向 けた高度化 ・ リチウムイ オン電池界面被膜 解析・次世代電池 の電極材料探索 ・ RedMoon高並 列MDソルバー連携、 高速化、高並 列化、電位制御など 機能高度化着手、 数十万原子規模 拡大へ着手 ・ 複雑な電極モ デルを用いた数 十万原子規模のS EI膜形成シミュ	(目標) シミュレータ高 度化と早期成果 創出 (実施内容) 【二次電池】 ・ stat-CPMDのポ スト「京」アーキ テクチャに向け た拡張 ・ 次世代電池界 面被膜・新規電解 液の特性計算 ・ 力場計算連携 解析・材料関連の 機械学習解析 ・ RedMoon電位制 御など機能高度 化継続、100万原 子規模に向けて 拡大へ着手 ・ 電極-電解液界 面における被覆 膜形成等の生成 機構の解明	(目標) シミュレータ検 証と早期成果創 出 (実施内容) 【二次電池】 ・ stat-CPMDのポ スト「京」アーキ テクチャでの化 学反応計算検証 ・ 次々世代電池 まで含めた新規 電池材料設計 ・ RedMoon電位制 御や物性推算機 能などの高度化 実装、100万原子 規模実現 ・ SEI膜形成シミ ュレーションに よるSEI膜の輸送 特性の理論予測

			<p>規模)により滑らかなSEI膜形成に添加物が有効であることが判明</p> <p>【燃料電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STATE：固体電子論と溶液理論に基づく電極計算の試作 ・白金電極の電流電圧曲線の予備計算に着手 ・白金代替電極物質の活性化機構の予測に着手 <p>・電解質膜のモルフォロジーの機構解明</p> <p>・MODYLAS：リファクタリング、FMM新規アルゴリズム定式化、メニコ</p>	<p>レーションに着手</p> <p>【燃料電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STATE：電極計算の高度化 ・電流電圧曲線の計算の精度向上に着手 ・活性の不純物依存性の予測 <p>・MODYLAS：FMM新規アルゴリズム実装、粒子対計算新規通信方式の</p>	<p>【燃料電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STATE：個体電子論と溶液理論を組み合わせたアプリ(高度化されたアプリ)の開発 ・高度化されたアプリを用いたシミュレーションによるCV実験の再現 ・様々な酸化物電極を用いた高活性化の指針の獲得 ・高度化されたアプリの白金代替電極への適用 <p>・MODYLAS：短精度・SIMD化、FMM計算新規通信方式の実装、新規数</p>	<p>【燃料電池】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STATE：高度化されたアプリの確立 ・電流電圧曲線の計算予測手法の確立 ・酸化物電極の高活性化のための理論の構築 ・高度化されたアプリの白金代替電極への適用と高活性化指針獲得 <p>・MODYLAS：短精度・SIMD化、ロードインバランスの解消、通信チュ</p>
--	--	--	--	---	--	--

			<p>ア (FX100, Phi) 対応</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ MODYLAS : 力学的特性評価諸機能、テーブルポテンシャルの整備 ・ 電解質膜の乾湿サイクルに伴う膜構造変化の解明 	<p>開発、粒子対演算量削減</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ MODYLAS : プロトン移動シミュレーション ・ 電解質膜のプロトン移動、ガス移動機構の解明 	<p>学アルゴリズムの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ MODYLAS : 不均一環境下の物質輸送評価手法 ・ 燃料電池三相界面物質輸送機構の解明 	<p>ーニング、演算チューニング</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ MODYLAS : 不均一環境下の物質輸送評価手法 ・ 燃料電池三相界面物質輸送機構の解明
--	--	--	---	--	--	---

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ			
	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー (岡山大学・田中秀樹)	<p>(目標) 化学エネルギー等に対するアプリ仕様の検討と体制の構築</p> <p>(実施内容) ・ポスト「京」に向けて開発すべきアプリケーションの仕様と具体的な研究開発課題の検討、平成27年度以降の実施計画を策定</p>	<p>(目標) 基盤アプリの開発への協力とそれに関連するソフトウェアの開発</p> <p>(実施内容) 【ハイドレート】 ・メタンハイドレート生成融解ダイナミクスとの連携 (水モデルTIP4Pの組み込み)</p> <p>・超音波融解シミュレーションの手法開発</p>	<p>(目標) 基盤アプリの開発への協力と各課題に特化したソフトウェアの開発と一部実行</p> <p>(実施内容) 【ハイドレート】 ・メタン、CO₂、水素貯蔵のためのハイドレートの利用効率化のプログラム開発 (安定性基礎理論の展開)</p> <p>・蓄冷材としてのセミクラスレートについて、未解明の構造や熱力学的特性の解析方法を開発</p> <p>・超音波融解シミュレーションの並列計算手法開発</p>	<p>(目標) 基盤アプリの開発への協力と各課題に特化したソフトウェアの開発と実行</p> <p>(実施内容) 【ハイドレート】 ・大規模系におけるメタンハイドレート解離機構の解明、多成分ハイドレートへの安定性理論の応用</p> <p>・蓄冷材としてのセミクラスレートについて、未解明の構造や熱力学的特性の解析方法を開発</p> <p>・超音波融解シミュレーションの省メモリ手法開発</p>	<p>(目標) 基盤アプリと各課題に特化したソフトウェアの開発・実行による化学エネルギー有効利用に関する知見の集積</p> <p>(実施内容) 【ハイドレート】 ・メタン、水素などの物質貯蔵のためのハイドレート生成のシミュレーション法の確立</p> <p>・セミクラスレートの安定性の基礎理論の構築</p> <p>・超音波融解シミュレーションの高並列時の通信時間削減</p>	<p>(目標) 基盤アプリと各課題に特化したソフトウェアの実行による化学エネルギー有効利用の検証</p> <p>(実施内容) 【ハイドレート】 ・ポスト「京」でのハイドレートを利用したエネルギー資源開拓、分離・回収、貯蔵法への展開</p> <p>・セミクラスレートの安定性の展開</p> <p>・超音波融解シミュレーションの超高並列に向けた計算負荷分散向上、高度化</p>

		<p>・ハイドレート融解機構の解明</p> <p>【触媒】</p> <p>・担持金属ナノクラスター触媒の反応機構検討</p> <p>・非白金燃料電池触媒BN/Auの高機能化を実験グループと連携して実現</p> <p>【CO₂の分離・回収】</p> <p>・DC-DFTB-Kの高度化準備とCO₂吸収反応に対する温度依存性の検証</p>	<p>・ハイドレート成長機構の解明</p> <p>【触媒】</p> <p>・反応経路自動探索法と超並列電子状態プログラムの連結(GRRMとSMASHの連結)</p> <p>・金属ナノクラスターによる触媒反応の自動経路探索を行い、クラスター構造変化の効果について知見を獲得</p> <p>【CO₂の分離・回収】</p> <p>・DC-DFTB-Kの高度化とCO₂吸収反応に対するアミン種、濃度依存性の検証</p>	<p>・CO₂置換機構の解明</p> <p>【触媒】</p> <p>・反応経路自動探索法による重要触媒反応の機構解明法の検討</p> <p>・GRRMとSMASH・NTChemを連携し、「京」での反応経路探索計算を実現</p> <p>・非白金燃料電池触媒BN/Auの更なる高機能化</p> <p>【CO₂の分離・回収】</p> <p>・NTChemへの線形スケーリング理論、凝縮相内高精度熱力学量計算の導入と混合アミン溶液の配</p>	<p>・セミクラスレートの安定性の予測と蓄冷材の効率予測</p> <p>【触媒】</p> <p>・反応経路自動探索法の燃料電池非白金系触媒への適用</p> <p>・GRRMとSMASH・NTChemを連携した反応経路探索計算の効率化、高度化</p> <p>・非白金燃料電池触媒BN/Auの更なる高機能化</p> <p>・CO₂有効資源化触媒の機構解明</p> <p>【CO₂の分離・回収】</p> <p>・NTChemの高速化、DC-DFTB-Kとの連結とCO₂吸収反応に対する反応自由エネルギー一図の作成</p>	<p>・セミクラスレートの生成融解機構速度と機構の解明</p> <p>【触媒】</p> <p>・反応経路自動探索法のCO₂固定触媒についての検証</p> <p>・GRRMとSMASH・NTChemを連携した反応経路探索計算の効率化、高度化</p> <p>・非白金燃料電池触媒BN/Auの更なる高機能化</p> <p>・CO₂有効資源化触媒の機構解明と探索</p> <p>【CO₂の分離・回収】</p> <p>・ポスト「京」に向けた凝縮相内化学反応シミュレータの最終調整と新規アミンの提案、その効率</p>
--	--	---	---	---	--	---

		<ul style="list-style-type: none"> ・電荷間相互作用計算の効率化 ・塩基性水溶液の基礎的性質の評価 	<ul style="list-style-type: none"> ・電荷間相互作用計算の効率化 ・金属元素に対するDFTB計算パラメータの開発 ・力場 (DFTBパラメータ) の拡張を実施して、幅広いアミン溶液やMOFなどの多孔質材料の吸収性能に対する基礎的知見を獲得 	<p>合比に対する反応性の解析</p> <ul style="list-style-type: none"> ・自由エネルギー計算手法の導入、領域分割法による高速化 ・金属元素に対するDFTB計算パラメータの開発 ・力場 (DFTBパラメータ) の拡張を実施して、幅広いアミン溶液やMOFなどの多孔質材料の吸収性能に対する基礎的知見を獲得 	<ul style="list-style-type: none"> ・自由エネルギー計算のサンプリングの並列化 ・動的フラグメント分割計算の効率化、高度化 ・金属元素に対するDFTB計算パラメータの開発 ・CO₂吸収反応のアミン種配合比依存性の検討 ・多孔質材料によるCO₂分離・回収過程の検討 	<p>の検討</p> <ul style="list-style-type: none"> ・動的フラグメント分割計算の効率化、高度化 ・CO₂吸収反応の自由エネルギー地形解析、金属種依存性の検討
--	--	--	---	--	---	---

(7) 実施体制

重点課題の全体推進体制を図 1-3 に示す。分子科学研究所を代表機関（重点課題責任者：岡崎進・分子研）とし、サブ課題 A「新エネルギー源の創出・確保 — 太陽光エネルギー」（責任者：天能精一郎・神戸大）、サブ課題 B「エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー」（責任者：杉野修・東大物性研）、サブ課題 C「エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー」（責任者：田中秀樹・岡山大）の小委員会と基盤アプリ設計開発委員会（責任者：中嶋隆人・理研 R-CCS）から成る。代表機関は「HPCI 戦略プログラム分野 2（新物質・エネルギー創成）」における分子科学分野の戦略機関であり、各責任者は「京」を用いた重点課題で高い実績を有している分子科学と物性科学の研究者から選定した。

サブ課題 A は天能（神戸大）が光合成シミュレータ、中嶋（理研）が太陽電池シミュレータの開発を行い、山下（京大）が光触媒や有機薄膜太陽電池における実証研究を主として行う。サブ課題 B では、館山（物材機構）と岡崎（名大）、長岡（名大）が二次電池シミュレーションを、杉野（東大）と岡崎（名大）が燃料電池シミュレーションを主として担当する。サブ課題 C では、田中（岡山大）と奥村（分子研）がハイドレートによるメタン生成やメタンや水素貯蔵の効率化を、触媒を武次（北大）、CO₂ 分離・回収を中井（早大）が担当する。アプリケーション開発については、サブ課題とは独立の基盤アプリ設計開発委員会が推進を行う。既に「京」で実績を有する NTChem（理研）、GELLAN（神戸大）、MODYLAS（名大）、stat-CPMD（物材機構）をポスト「京」における基盤アプリに設定し、ポスト「京」の開発主体である理研 R-CCS とのコデザインによる連携のもとで開発を進める。サブ課題間で情報共有、連携して開発・利用するとともに、神戸大や理研、情報基盤センターに所属する計算科学者と連携して効果的な開発を進める。

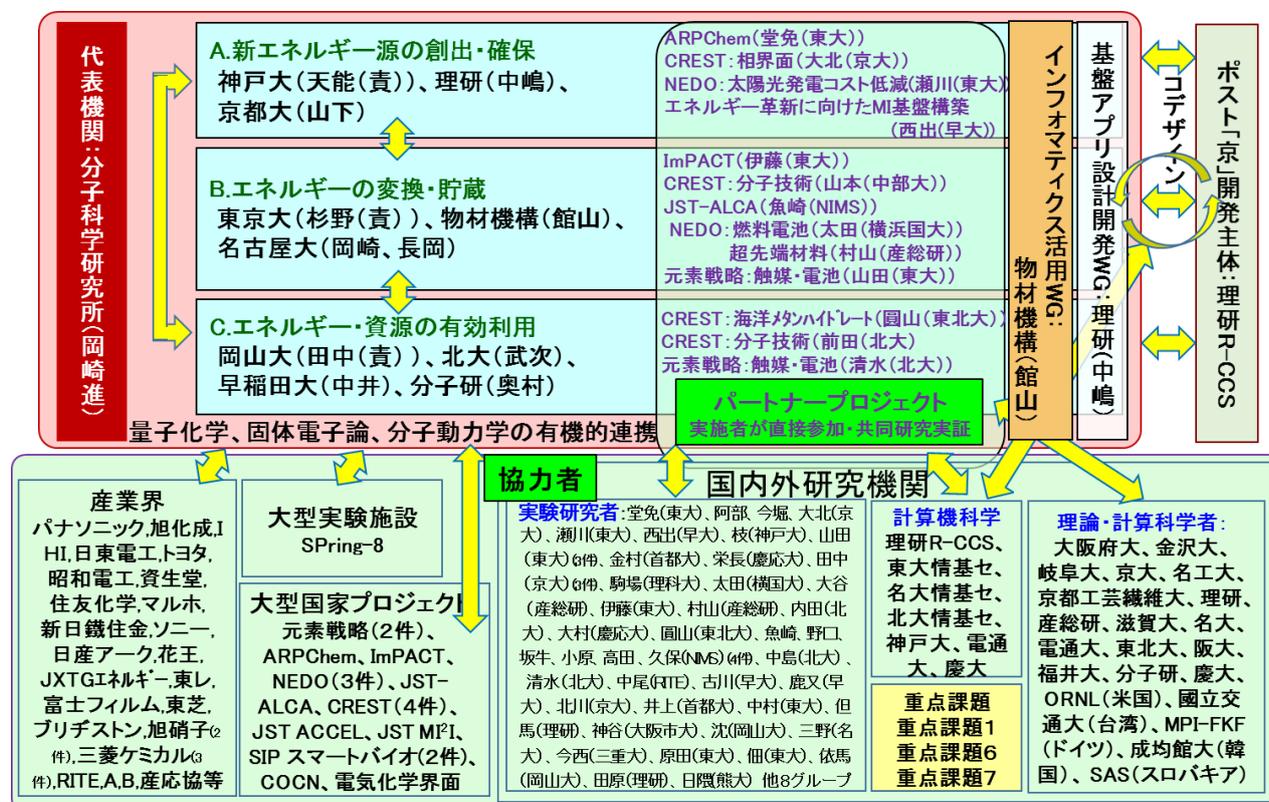


図 1-3 推進体制 実験、産業と連携したオールジャパンで研究を推進

運営体制は図 1-4 及び表 1-2 の通りである。前述の研究部門に加え、広報、産業連携、分野間連携を担う執行部門を運営委員会の下に置く。運営委員会は必要に応じて当該分野の有識者から成る諮問委員会に諮問し重点課題の運営を推進する。

本重点課題は、他のポスト「京」重点課題、大型プロジェクト、実験・大型施設、産業との連携体制を構築している（図 1-5）。ポスト「京」のコーデザインでは、重点課題 1、6、7 の SubWG への参画を行う事により、アプリケーション高度化の情報を共有すると共に、類似計算手法を含む推進体制で相乗効果を図っている。重点課題の多くの分担者は、ImPACT（タフポリマー：東大）、CREST（相界面、分子技術、元素戦略）、元素戦略（触媒・電池：京大 ESICB）などの大型プロジェクトを推進しており、エネルギー関連の情報共有による緊密な連携の下で推進を行う。又、企業との連携によるプロトタイプングや NEDO, ARPCHEM, JST-ALCA との連携体制の構築が進んでいる。協力する実験研究者は SPring-8、検討中の SACLA、J-PARC 等の大型実験施設を利用しており、成果創出に向けて協調した開発体制となっている。更に、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会に協力し、開発されるアプリケーションの産業利用の観点から産業連携を進めて行く。

重点課題内での連携を図 1-6 に示す。アプリケーションソフトウェア、触媒、CO₂ 固定を中心に各サブ課題と基盤アプリ設計開発が有機的な協力を可能にする。

重点課題推進においては、計算技術と応用分野における高い専門性から、業務委託に依らない博士人材の登用が不可欠である（表 1-3）。必要な人員の根拠については、2 章で各サブ課題の詳細を記載している。本重点課題では、①アプリケーションの産業利用と、計算により方向付けられる製品化に伴う産学連携と委託、②外国人博士研究員の登用と国際連携によって、現代のアカデミアの情勢に則したキャリア支援を可能にする人材登用に配慮する。

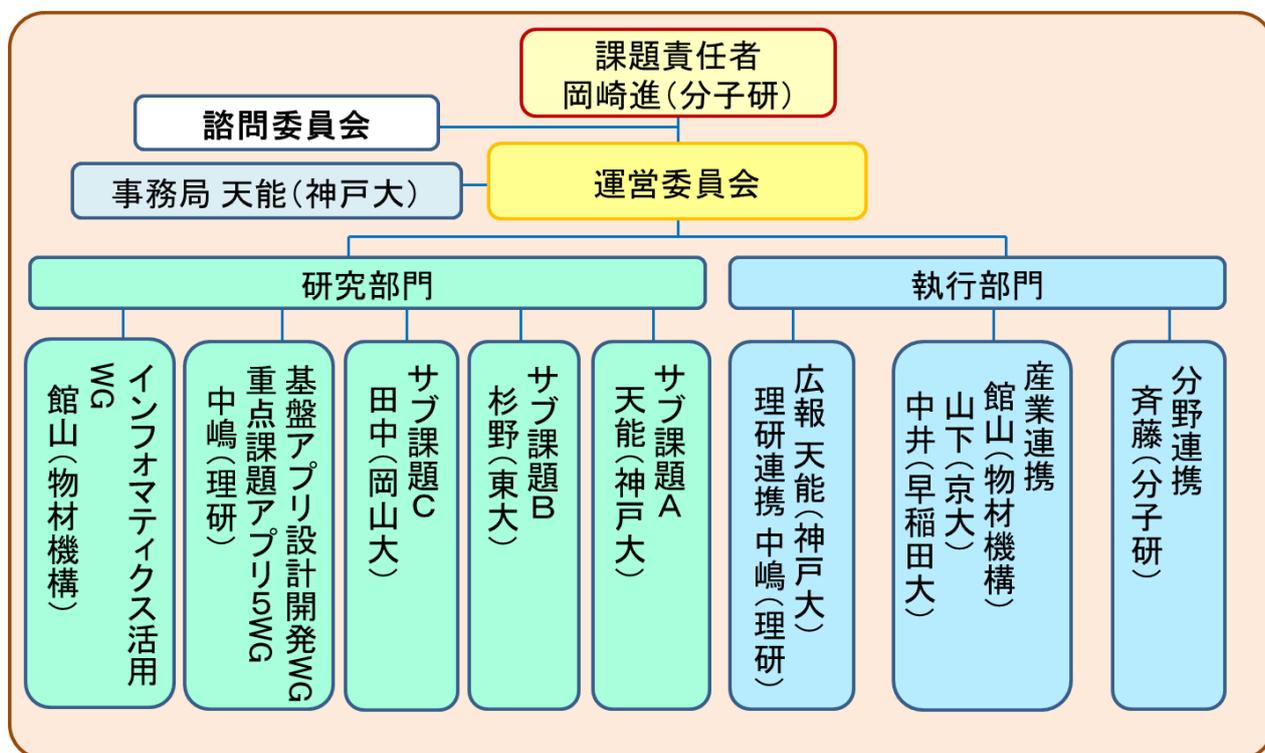


図 1-4 運営体制

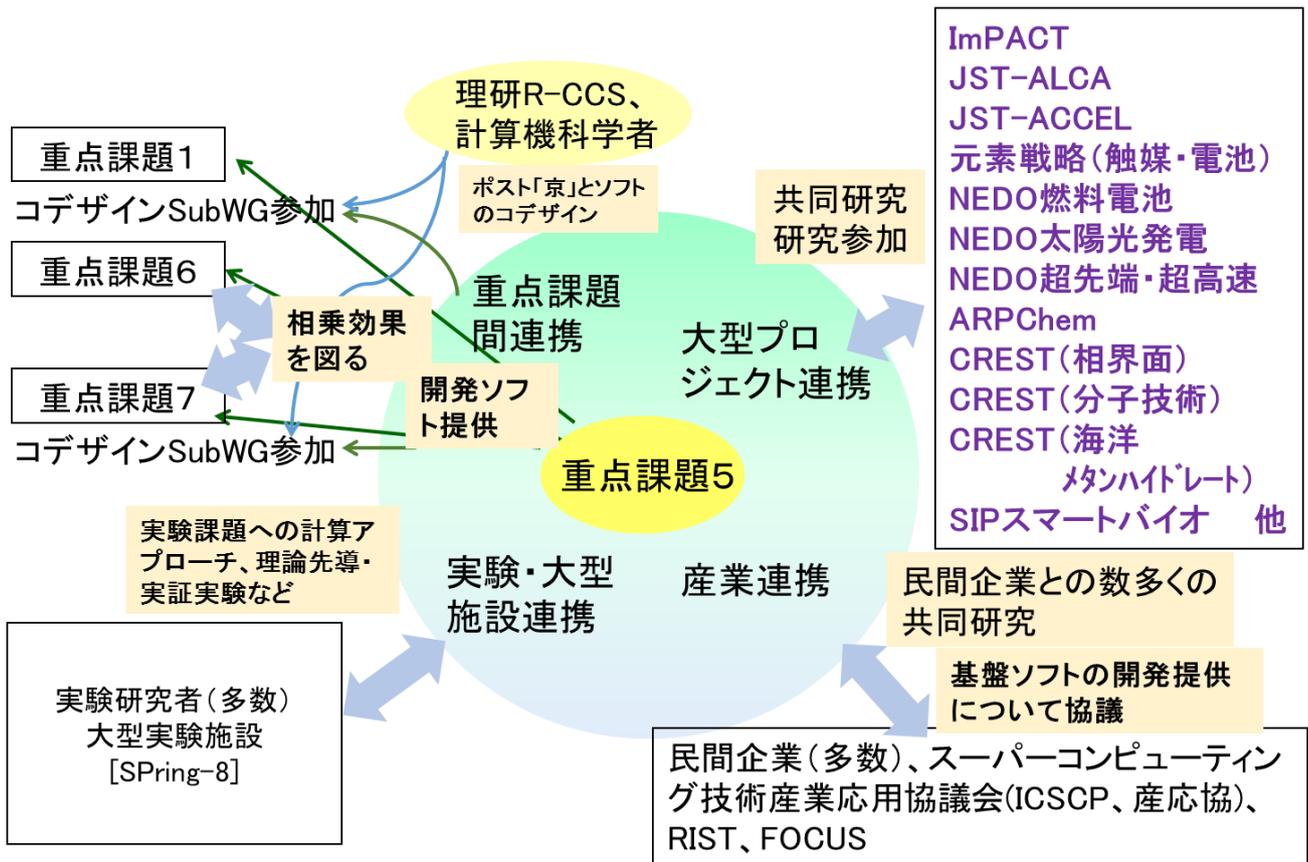


図 1-5 研究開発における連携について

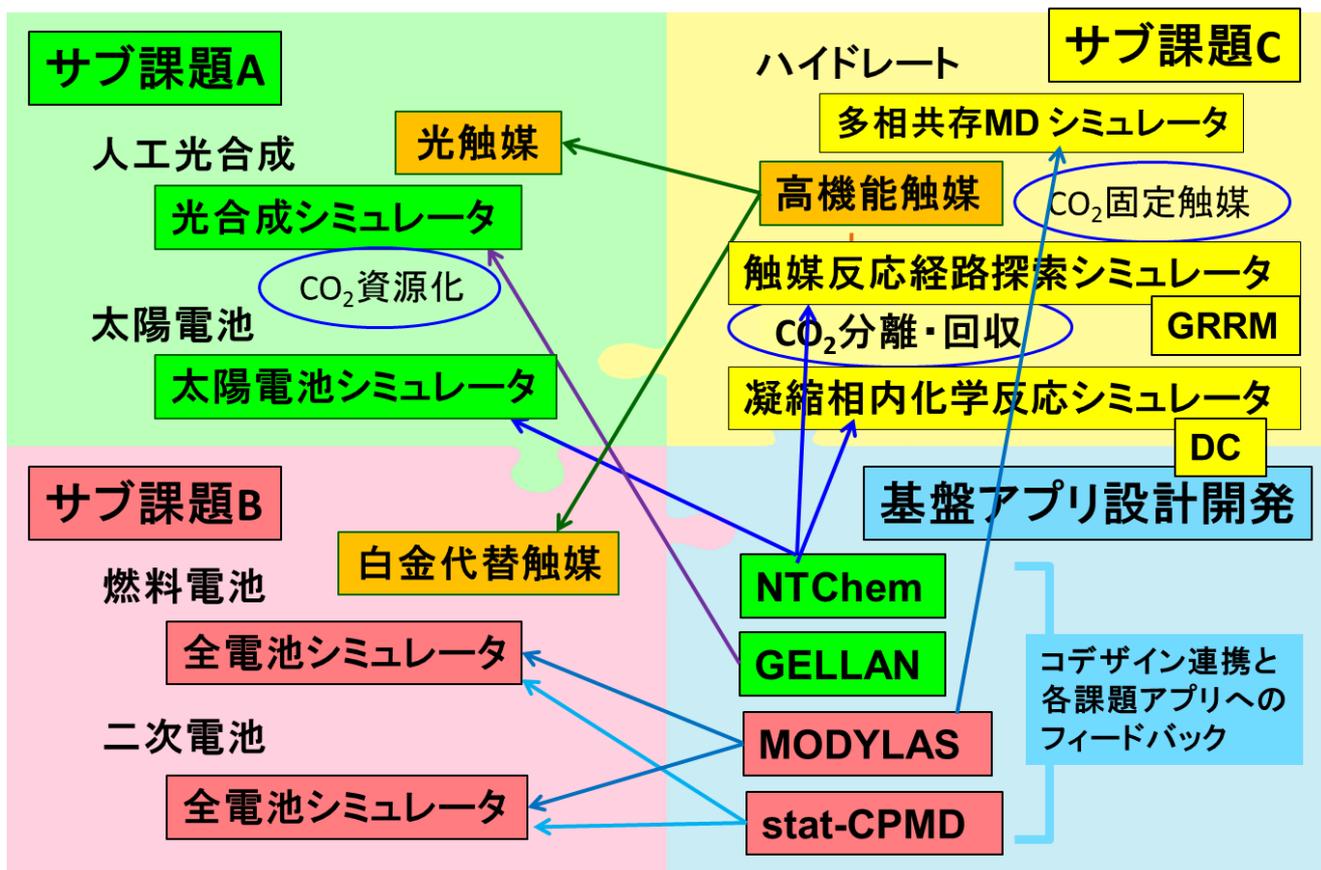


図 1-6 重点課題 5 内連携

【開発アプリ普及、人材育成】

主として HPCI 戦略分野 2 における計算分子科学研究拠点(戦略機関 分子科学研究所、現 TCCI)活動の中でポスト「京」において重要な事業を引き継ぐ。本重点課題では、開発する基盤アプリをベースに種々のシミュレータへと展開するが、これらを普及させるため、ポスト「京」上等で利活用するアカデミアや産業界の人材の育成、アプリケーションの普及活動を行う。

上記の目的のため、関係機関、他重点課題、他プロジェクト等と連携し、以下の取り組みを行う。但し、実際に本重点課題に割り当てられた予算に応じて取捨選択を行う。

①基盤開発アプリ利用人材育成

②基盤開発アプリのアカデミア・産業界への普及

本重点課題で開発する量子化学、分子動力学法等のアプリケーションは、特に重点課題 1、5、6、7 に共通の基盤として重要なため、上記事業はこれら重点課題間で連携をとって取り組む。さらに、人材育成に関しては、東北大が代表機関となって進めている「計算物質科学人材育成コンソーシアム」事業（責任者：毛利哲夫教授、分子研責任者：斉藤真司教授）と連携し、実施する。

①基盤開発アプリ利用人材育成

基盤アプリの普及を目的とし、学生・実験研究者・企業研究者を対象として、HPCI 戦略分野 2 で従来実施してきたウィンターカレッジにおける分子シミュレーション、量子化学の 2 コースを継続的に開講することを検討する。

②基盤開発アプリのアカデミア・産業界への普及

重点課題 5 で開発する基盤アプリ等については、京コンピュータ、分子研計算科学研究センター、計算科学振興財団 (FOCUS) に整備し、アカデミア (京、分子研)、産業界 (京、FOCUS) の利用を推進する。このため、基盤アプリ等の情報を計算科学研究センターのホームページに掲載する。特に産業利用の促進にあたっては、産応協で検討している「産業基盤ソフト」構想と連携し、産業への一層の普及を図る。このとき、FOCUS、RIST 等とも一層の連携を推進する。これに加えて、必要に応じて基盤開発アプリを各情報基盤センターや物性研、金材研などの共同利用研計算機センター等にも提供する。

表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制-1

() : 年齢、H31 年 4 月 1 日現在

実 施 項 目	代表機関・分担機関	課題責任者、サブ課題責任者、サブ課題実施者
【運営委員会】 本格実施項目の検討および承認	名大院・工／分子研 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 理研・R-CCS 京都大学 学際融合教育研究センター 東大・物性研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 名大院・情報 岡山大・異分野基礎科学研究所 北大院・理 早大・理工 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研	◎岡崎 進 (64) 天能 精一郎 (54) 中嶋 隆人 (51) 山下 晃一 (66) 杉野 修 (57) 館山 佳尚 (48) 長岡 正隆 (60) 田中 秀樹 (63) 武次 徹也 (54) 中井 浩巳 (54) 奥村 久士 (43) 斉藤 真司 (53)
【諮問委員会】 プロジェクトの進捗状況の把握・評価・改善提言・指導等	製品評価技術基盤機構 慶大院・理工 首都大東京院・都市環境 東理大・理 東レ 慶大・理工 神戸大・先端融合研究環	◎辰巳 敬 (71) ○三上 益弘 (67) 金村 聖志 (61) 工藤 昭彦 (58) 茂本 勇 (46) 藪下 聡 (64) 横川 三津夫 (59)
【事務局】 本格実施項目全体の原案作成	名大院・工／分子研 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 京都大学 学際融合教育研究センター	◎岡崎 進 (64) 天能 精一郎 (54) 山下 晃一 (66)
【課題小委員会】 (1) サブ課題 A	神戸大院・科学技術イノベーション研究科 理研・R-CCS 京都大学 学際融合教育研究センター	◎天能 精一郎 (54) 中嶋 隆人 (51) 山下 晃一 (66)

注 1. ◎ : 委員長、小委員会代表者、○ : 副委員長

表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制-2

() : 年齢、H31 年 4 月 1 日現在

実 施 項 目	代表機関・分担機関	課題責任者、サブ課題責任者、サブ課題実施者
(2) サブ課題 B	東大・物性研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 名大院・情報 名大院・工／分子研	◎杉野 修 (57) 館山 佳尚 (48) 長岡 正隆 (60) 岡崎 進 (64)
(3) サブ課題 C	岡山大・異分野基礎科学研究所 北大院・理 早大・理工 自然科学研究機構・分子研	◎田中 秀樹 (63) 武次 徹也 (54) 中井 浩巳 (54) 奥村 久士 (43)
(4) 基盤アプリ設計開発	理研・R-CCS 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 名大院・工／分子研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点	◎中嶋 隆人 (51) 天能 精一郎 (54) 岡崎 進 (64) 館山 佳尚 (48)
【分野間連携 WG】	分子研 名大院・情報 北大院・理 京都大学 学際融合教育研究センター 名大院・工／分子研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 早大・理工	◎斉藤 真司 (53) 長岡 正隆 (60) 武次 徹也 (54) 山下 晃一 (66) 岡崎 進 (64) 館山 佳尚 (48) 中井 浩巳 (54)
【産業連携 WG】	物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 京都大学 学際融合教育研究センター 早大・理工	◎館山 佳尚 (48) 山下 晃一 (66) 中井 浩巳 (54)
【広報 WG】	神戸大院・科学技術イノベーション研究科 理研・R-CCS 自然科学研究機構・分子研	◎天能 精一郎 (54) 中嶋 隆人 (51) 奥村 久士 (43)
【インフォマティクス活用 WG】	物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 理研・R-CCS	◎館山 佳尚 (48) 中嶋 隆人 (51)

注 1. ◎ : 小委員会代表者または WG 責任者

表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制-3

() : 年齢、H31 年 4 月 1 日現在

実 施 項 目	代表機関・分担機関	課題責任者、サブ課題責任者、サブ課題実施者、協力者等
<p>【プロジェクトの総合的推進】</p> <p>【研究部門】</p> <p>(1) サブ課題 A</p> <p>(2) サブ課題 B</p>	<p>北大院・理 早大・理工</p> <p>名大院・工／分子研</p> <p>神戸大院・科学技術イノベーション研究科 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 理研・R-CCS 理研・R-CCS 理研・R-CCS 理研・R-CCS 理研・R-CCS 岐阜大／理研・R-CCS 岐阜大／理研・R-CCS 京都大学 学際融合教育研究センター 京都大学 学際融合教育研究センター 日本女子大</p> <p>東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 物材機構・統合型材料開発・情報基盤部門</p>	<p>武次 徹也 (54) 中井 浩巳 (54)</p> <p>◎岡崎 進 (64)</p> <p>◎天能 精一郎 (54) 土持 崇嗣 (36) Xu Enhua (36) 西口 和孝 (34) 常田 貴夫 (50) ○中嶋 隆人 (51) 嶺澤 範行 (43) 米原 丈博 (44) 植村 涉 (33) 川嶋 英佑 (28) 神谷 宗明 (42) 中塚 温 (36) ○山下 晃一 (66) 金子 正徳 (27) 村岡 梓 (42)</p> <p>◎杉野 修 (57) 春山 潤 (34) 笠松 秀輔 (32) YAN, Lei (30) Azhikodan Dilna (31) ○館山 佳尚 (48) CHOUDHARY Ashu (34) JALEM Randy (36) GAO Xichan (31) 袖山 慶太郎 (43)</p>

注 1. ◎ : サブ課題責任者、○ : サブ課題実施者

表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制-4

() : 年齢、H31 年 4 月 1 日現在

実施項目	代表機関・分担機関	課題責任者、サブ課題責任者、サブ課題実施者、協力者等
(2) サブ課題 B (続き)	名大院・情報 名大院・情報 名大院・情報 名大院・工／分子研 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 名大院・工 玉川大・工 阪大院・工 阪大院・工 阪大院・工 阪大院・工 産総研・機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター 東北大・AIMR 名工大院・物質工 富士フィルム 日産アーク 株式会社東芝 大阪府大院・理 名大・未来材料・システム研究所 滋賀大・データサイエンス教育研究センター 京大・ESICB 福井大院・工 京都工芸繊維大院・工芸科学 九州工大・情報工学院	○長岡 正隆 (60) 北村 勇吉 (31) 田中 佑一 (29) ○岡崎 進 (64) 篠田 渉 (48) 藤本 和士 (34) 吉井 範行 (47) 安藤 嘉倫 (41) 張 家超 (31) 永井 哲郎 (33) 坂下 達哉 (35) 森川 良忠 (52) 濱田 幾太郎 (45) 稲垣 耕司 (54) 木崎 栄年 (39) 大谷 実 (47) 赤木 和人 (48) 中山 将伸 (44) 奥野 幸洋 (48) 大脇 創 (46) 塚越 隆行 (32) 麻田 俊雄 (52) 安田 耕二 (50) 高柳 昌芳 (38) 竹中 規雄 (37) 玉井 良則 (53) 藤原 進 (52) 入佐 正幸 (56)

注 1. ◎ : サブ課題責任者、○ : サブ課題実施者

表 1-2 平成 31 年度以降の実施体制－6

() : 年齢、H31 年 4 月 1 日現在

研究項目	代表機関、分担機関、協力機関	課題責任者、サブ課題責任者、サブ課題実施者、協力者等
(4) 基盤アプリ設計 開発	理研・R-CCS 岐阜大／理研・R-CCS 神戸大院・科学技術イノベーション研究科 名大院・工／分子研 物材機構・エネルギー・環境材料研究拠点 東大・物性研 産総研・機能材料コンピュータデザイン研究センター 東北大・AIMR 物材機構・情報統合型物質・材料研究拠点 名工大院・物質工 阪大院・工 阪大院・工 阪大院・工 富士フィルム 日産アーク 慶大・理工 電通大・情報理工 金沢大院・自然科学 金沢大院・自然科学 大阪府大院・理 名大・未来材料・システム研究所	◎中嶋 隆人 (51) 中塚 温 (36) 天能 精一郎 (54) 岡崎 進 (64) 館山 佳尚 (48) 杉野 修 (57) 大谷 実 (47) 赤木 和人 (48) 袖山 慶太郎 (43) 中山 将伸 (44) 森川 良忠 (52) 濱田 幾太郎 (45) 稲垣 耕司 (54) 奥野 幸洋 (48) 大脇 創 (46) 泰岡 顕治 (52) 成見 哲 (48) 長尾 秀実 (56) 川口 一朋 (38) 麻田 俊雄 (52) 安田 耕二 (50)

注 1. ◎ : サブ課題責任者、○ : サブ課題実施者

表 1-3 人員計画-1

サブ課題A				
No.	H30	H31	主な役割	分担内容
1	1	1	ソフト開発	光合成シミュレータの開発と高度化 (PHF 法とそのエネルギー勾配法)
2	1	1	ソフト開発	光合成シミュレータの開発と高度化 (量子モンテカルロ法とそのエネルギー勾配法)
3	1	1	応用計算	光合成シミュレータによる新規光触媒の物質設計
4	1	1	ソフト開発	太陽電池シミュレータの開発と高度化 (特に高精度な励起状態の計算手法)
5	1	1	ソフト開発	太陽電池シミュレータの開発と高度化 (特に大規模な分子系に対し励起状態を取り扱う計算法)
6	1	1	ソフト開発	太陽電池シミュレータの開発と高度化 (特に非断熱過程を含む励起状態ダイナミクスの手法とそのプログラム)
7	1	1	ソフト開発	太陽電池シミュレータの開発と高度化 (特に非断熱過程を含む励起状態ダイナミクスとそのため密度汎関数法の改良)
計	7	7		
サブ課題B				
No.	H30	H31	主な役割	分担内容
1	1	1	ソフト開発	全電池シミュレータ (stat-CPMD) の二次電池系への応用の推進 (次世代電池界面被膜・新規電解液の特性計算)
2	1	1	応用計算	全電池シミュレータ (stat-CPMD) の二次電池系への応用の推進 (力場計算連携解析・材料関連の機械学習解析)
3	1	1	応用計算	高度化されたアプリを用いたシミュレーションによる CV 実験の再現
4	1	1	応用計算	様々な酸化物電極を用いた高活性化の指針獲得
5	1	1	応用計算	高度化されたアプリの白金代替電極への適用
6	1	1	ソフト開発	全電池シミュレータの開発と高度化 (Red Moon 法プログラムの電位制御等の高度化)
7	1	1	応用計算	全電池シミュレータ (RedMoon) の二次電池系への応用推進 (電極-電解液界面における被覆膜等の生成機構の解明)

8	1	1	ソフト 開発	MODYLAS : FMM 新規並列アルゴリズムの実装
9	1	1	ソフト 開発	MODYLAS : FMM 新規数学アルゴリズムの開発
10	1	1	ソフト 開発	MODYLAS : 演算の単精度化、SIMD 最適化
11	1	1	応用 計算	全電池シミュレータ (MODYLAS) の三相界面における実証
計	11	11		
サブ課題C				
No.	H30	H31	主な 役割	分担内容
1	1	1	応用計 算	MODYLAS を用いてセミクラスレートを含む多成分ハイドレートの MD シミュレーションにおける実証
2	1	1	ソフト 開発	量子・古典混合 (QM/MM) 分子動力学シミュレーションを行うための高速量子化学計算のソフト開発
3	1	1	ソフト 開発	反応経路自動探索法+NTChem をベースにした触媒反応経路探索プログラムの開発
4	1	1	ソフト 開発	凝縮相内化学反応シミュレータの開発と CO ₂ 化学吸収液の最適化
5	1	1	ソフト 開発	DFTB パラメータの開発と MOF-CO ₂ 系への応用
計	5	5		

表 1-3 人員計画-2

まとめ				
グループ	職種	H30	H31	累計
サブ課題 A	事業担当職員 (PD など)	7	7	14
サブ課題 B	事業担当職員 (PD など)	11	11	22
サブ課題 C	事業担当職員 (PD など)	5	5	10
事務局	事業担当職員	1	1	2
	補助者	3	3	6
合計	事業担当職員	24	24	48
	補助者	3	3	6

(8) 必要計算資源

「京」の計算資源量

(単位：ノード時間/年、H31年度のみノード時間/4ヶ月)

	H27年度	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
必要計算資源量	1,806,531	19,345,320	19,345,320	19,345,320	6,335,883

※配分値

「京」以外の計算資源量

(単位：「京」換算ノード時間/年)

	H27年度	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
必要計算資源量	684,000	7,800,000	8,025,000	7,660,635	7,886,535

※H31年度は配分値

「京」について、H27年度は下期(6ヶ月)だけであり、基盤アプリの開発・実証トライアルに250,000ノード時間 x 4本、その他のアプリ開発・準備研究に200,000ノード時間 x 6件と見積もった(配分値:1,806,531ノード時間)。H28年度は、当初、申請時の計算資源量と同等と見込んだが、予算値の確定により実施内容の見直しを行った結果、「京」で必要な計算資源量は27,000,000ノード時間となった(配分値:19,345,320ノード時間)。H29年度以降については、この見積値を採用した。

「京」以外については、シミュレータ等開発のための利用、あるいは「京」の実行準備として利用すること、「京」のような大規模実行は可能性が低いことから、「京」よりも低めに計画している。前述の見直しに併せて「京」以外の計算資源量も計画の見直しを行い、H29年度、H30年度と先行的成果のための計算が増えることを考慮した。利用する計算センターは、名古屋大学情報基盤センターと、H28年度からは分子研計算科学研究センターを予定している。但し、H30年度以降は、「京」の運用状況により、大幅な増加が必要となる可能性がある。

2. 研究開発内容詳細

2-1. サブ課題 A 新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー

(1) 目的・意義

太陽光を利用して高効率エネルギー変換を行うための理論的研究を行う。対象を光合成系と有機系太陽電池とし、前者では、植物の光合成における明反応の仕組みを電子状態計算により明らかにし、人工光合成系の設計指針への可能性を探ると共に、金属錯体や半導体光触媒での水分解反応機構に関する基礎研究を行う。また、有機薄膜太陽電池の高効率化に向けて、分子設計とモルフォロジーや界面の制御に関する理論研究を行う。得られた知見をもとに、エネルギー変換効率の高い有機系太陽電池や人工光合成を実現するための新規エネルギー材料をシミュレーションと実験の共同研究により見出し、資源問題の解決に貢献する。

石油を輸入に頼る我が国では、それに代替する化学原料の確保が重要な課題である。太陽光によって水分解を行う人工光合成では、水素燃料の利用やCO₂との合成触媒反応による化学品の製造が期待され、実用化に向けた研究開発が国プロとして進められている。その一方で、高効率の水分解を実現する光触媒の開発には未解決な要因が多く、計算科学的なアプローチを援用した集約的な開発が必要である。本研究項目では、主に階層的量子化学プログラム GELLAN をベースとした光合成シミュレータを開発し、ポスト「京」の十分な活用を可能にする基盤技術の整備を行う。更に、開発されたアプリケーションを用いて、半導体光触媒や植物を模した多核金属錯体の反応メカニズムの解明を行い、高効率の光触媒設計の明確な指針を示す。

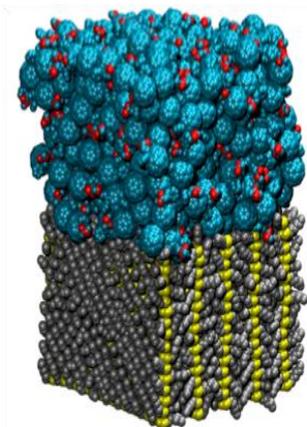


図 2-1-1 有機太陽電池のドナー・アクセプター界面

一方、太陽光発電は太陽電池を用いて光起電力効果を利用し、太陽光エネルギーを電気エネルギーへ直接変換できる発電方式であり、無尽蔵にある太陽エネルギーの有効利用として、再生可能エネルギー創生の要である。太陽電池は光吸収材料あるいはデバイス形態などにより、多くの種類に分類されるが、光吸収層に有機化合物を用いた有機太陽電池は、軽量、フレキシブルで意匠性が高く、塗布プロセスにより安価に製造することができることから、次世代太陽電池の主流になると期待され、現在世界中で活発な研究開発競争が行われている。本課題では、有機太陽電池における光エネルギー変換の高効率化を目指し、NTChem を中心とした太陽電池シミュレータを開発することにより、太陽光により生成したエキシトン（クーロン相互作用した電子-正孔対）の有機電子供与体（ドナー材料）・有機電子受容体（アクセ

プター材料) 界面 (図 2-1-1) での電荷分離過程を高効率に起こす有機物材料を探索する。またドナー・アクセプター活性層界面のモルフォロジーについて、高効率化に有効なバルク構造の実現プロセスを分子論的に明らかにする。

(2) 実施内容

研究項目 1 人工光合成

沈・神谷らにより光化学系 II (PSII) の酸素発生中心であるマンガクラストの高分解能 X 線構造が明らかにされ (図 2-1-2)、植物を模した人工光合成系の開発や類似の錯体構造を持つ活性中心のデザインが期待されている。鉄やマンガクから成る多核金属錯体の複雑なスピン状態や水分解反応を詳細に研究するためには、強い電子相関を定量的に取り扱う必要がある。これを実現するために、モデル空間量子モンテカルロ法とスピンプロジェクションの手法の主に二つの強相関ソルバからなる光合成シミュレータの開発を行う。励起状態に対するエネルギー勾配法を整備し、電荷分離や反応中間体の構造を特定する。ESR や EDNMR スペクトルをプローブとすることによりモデルの検証を行うとともに、ルテニウム錯体や半導体光触媒表面での反応についても理論的な知見を集め、有効な人工光合成系の設計に必要な条件を集約的に研究する。

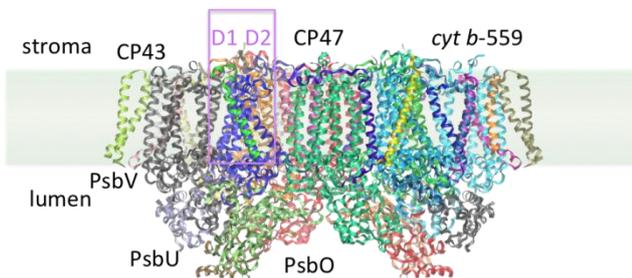


図 2-1-2 高分解 X 線スペクトルで得られた PSII の構造

天然光合成系については、実験研究と連携してシミュレーション研究を実行し、太陽光を用いた水分解反応のメカニズムと研究成果の人工光合成への展開を目的とした実験-理論の相互協力研究を先行成果として実施する。シミュレーションの有用性は XRD や XFEL の分解能では不可能な水素原子の位置を含む構造最適化が可能であるのみならず、水分解反応の遷移状態の構造解明、さらには反応で生成するプロトン-電子結合輸送反応のダイナミクスの解明など実験的研究が困難な問題を解明しうるところにある。本研究では特に、大規模分子計算を可能にする NTChem と十分な計算資源を使うことで、未だ議論の余地が残されている光合成水分解サイトの構造決定を行う。水分解反応は Kok サイクルと呼ばれる 5 段階の触媒サイクルで進行する (図 2-1-3)。沈・神谷らの XRD 構造は S1 状態と称される最も安定状態で観測されたものであるが、現在 X 線損傷の程度が問題になっており、その心配のない XFEL 実験による精密化が進行中である。一方、S0、S1、S2、S3 状態における水分解触媒サイト CaMn405 クラスターの Mn-Mn 距離、Ca-Mn 距離は EXAFS による実測値が報告されているが、S1 以外の状態の XRD、XFEL の実験値は未

だ報告されていない。そこで、本研究ではこれらの状態に対し可能な構造を大規模 QM/MM 法を使い、構造計算、電子状態解析計算、スピン状態解析計算により解明する。

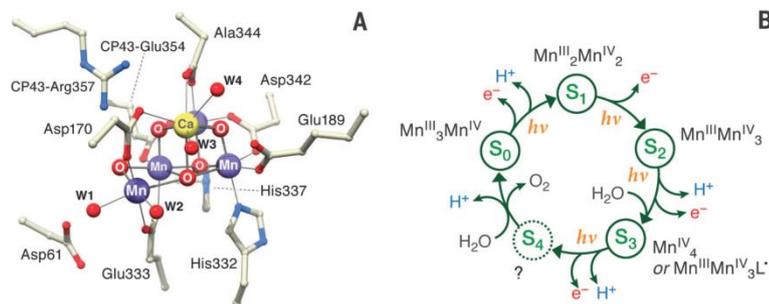


図 2-1-3 酸素発生中心(OEC)の構造と Kok サイクル

更に、太陽光エネルギーを化学エネルギーに変換する光触媒に関しても材料設計を行う。特に水直接分解により水素と酸素の発生を担う光触媒材料について、従来よりも長波長の光を吸収する光触媒材料を探索する。無機化合物あるいはそれらを種々に組み合わせた固溶体を大規模クラスターでモデル化し、時間依存密度汎関数法計算によりバンドギャップの理論的予測を行う。さらに異種元素ドーピングなどにより、バンドギャップ、水の酸化還元準位とのバンドアライメントの最適化を行う。光合成シミュレータを用いた新規光触媒設計と助触媒の最適化の応用研究を行う。

強相関ソルバを含む人工光合成シミュレータの開発、新規光触媒設計等は神戸大（天能）、PSII の研究は理研（中嶋）、半導体光触媒の材料設計は京大（山下）が主に行う。

研究項目 2 太陽電池

有機太陽電池では、まず①太陽光によって、②有機電子供与体でエキシトンが生成し、③有限の寿命で相界面を拡散し、④ドナー・アクセプター異種界面で電荷分離し、⑤電荷移動（キャリア輸送）される。光照射時に両端子を解放した場合の出力電圧を開放電圧 V_{oc} 、短絡した場合の電流を短絡電流 I_{sc} 、最大出力と $V_{oc} \cdot I_{sc}$ の比を FF とすると、変換効率は $V_{oc} \cdot I_{sc} \cdot FF$ を入射光エネルギーで割ることにより与えられる。単結晶シリコンでは 30% に迫るデータもあるが、現在、最も効率の高い有機太陽電池でも 12% であり、実用化に向けて、変換効率の向上が急務である。

高効率の太陽電池を実現するには、開放電圧や短絡電流の向上のために電荷再結合等の損失要因を取り除く必要があり、分子設計と界面・モルフォロジー制御による統合的な物質デザインが要求される。有機系を中心にスピン制御や熱電変換機構に基づく高効率太陽電池を実現するための大規模電子状態シミュレータの開発をおこない、1 万原子規模からなるヘテロ接合界面の励起状態・電荷分離状態の研究を行う。さらに、10 万原子規模の動力学シミュレーションに基づくバルク接合とメソスコピックな構造形成・冷却過程の研究を行い、太陽電池に関わる重要な問題の解決を図る。

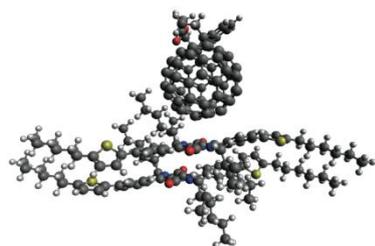


図 2-1-4 有機太陽電池のドナー・アクセプター界面のモデル

高い変換効率を有する太陽電池材料のシミュレーション設計を実現するために、NTChem を中心に備えることで太陽電池シミュレータを開発する。具体的には、数千~1 万原子規模の大規模分子系であるドナー・アクセプター界面 (図 2-1-4) での電荷分離状態をシミュレーションするため、励起状態における電子状態計算を可能にする時間依存密度汎関数法に対してメモリ分割を施した効率の良い並列アルゴリズムを開発し、そのプログラムを実装する。加えて、より大規模なドナー・アクセプター界面での電荷移動・電荷分離過程をシミュレーションするため、大規模な分子系を領域分割して選択的に励起状態を取り扱う計算法を新たに開発し、シミュレータに実装する。現状の時間依存密度汎関数法計算で用いられている交換相関汎関数では有機系太陽電池のエネルギー変換機構においてもっとも重要な過程だと考えられる電荷移動状態を正確に記述することが難しいため、電荷移動状態を正確に表現することができる新たな交換相関汎関数の開発も同時に行う。有機系太陽電池のエネルギー変換機構を確立するため、開発した励起電子状態計算法に基づいて電子移動カップリングを見積もる手法および、非断熱過程を含む励起状態ダイナミクスの手法とそのプログラムを開発し、太陽電池シミュレータに実装する。

有機太陽電池の変換効率が低い原因として、まず有機物材料の誘電率が小さく、光吸収により生成した電子-正孔対がドナー・アクセプター材料界面へ拡散する過程で容易に再結合することが上げられる。さらに界面での電荷移動状態の再結合 (Geminate Recombination) や電荷分離後の自由な電子と正孔の再結合 (Bimolecular Recombination) が変換効率を下げる主要な素過程として考えられる。これらの要素を種々のドナー・アクセプター界面について解析し、変換効率との相関を明らかにする。 V_{oc} がドナー材料の HOMO とアクセプター材料の LUMO の軌道エネルギー差に相関することから、これまで計算化学に基づいた有機分子材料設計が行われてきたが、変換効率の理論的限界は 10 数%と予測され、実用化のめどとされる変換効率 15%に向けては、 I_{sc} を飛躍的に増加させる有機物材料設計指針が不可欠である。 I_{sc} は有機電子供与体・有機電子受容体の相互作用と光誘起による電子物性に強く依存しており、高精度な電子状態計算により予測可能である。これらの電子物性は物質の誘電率に依存するので、無機物に匹敵する高い誘電率をもつ有機物材料の設計による高効率化を目指す。

更に、太陽電池シミュレータを用い、ペロブスカイト太陽電池の光電荷移動機構や自由キャリア機構の解明に向けた研究を行う (図 2-1-5)。

太陽電池シミュレータは理研 (中嶋) が主体となって開発を行い、新規手法を用いた有機系太陽電池の高効率化と次世代太陽電池設計の実証は京大 (山下) が主導的に行う。

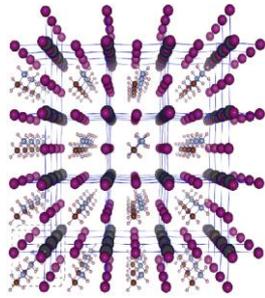


図 2-1-5 鉛ペロブスカイト材料の構造

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果：

・平成29年度終了時

電子相関理論と密度汎関数の両面からポスト「京」による光合成系の理論研究を可能にする計算手法及び、構造や反応機構に関して実験研究と関連づける分光学的プローブの基本設計とプロトタイプ実装を行う。太陽電池シミュレータにおいては、大規模な分子系の励起状態計算の実現に向けて、数千から1万原子系の基底状態に関する密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムを完成させ実装する。有機系太陽電池のエネルギー変換機構を解明するため、電子移動カップリングを見積もる手法および、非断熱過程を含む励起状態ダイナミクスの手法とそのプログラムを開発し、太陽電池シミュレータに実装する。

上記研究で開発した光合成シミュレータを用いた新規光触媒への応用研究を実施すると共に、太陽電池シミュレータを用い、ペロブスカイト太陽電池の光電荷移動機構を解明する。

・本格フェーズ終了時

10²⁰以上の複雑な電子配置が重要な寄与をする電子系の高精度計算を可能とする光合成シミュレータが完成し、複雑な組成を持つ半導体光触媒の吸収特性・反応制御や、電子相関が強くこれまで取り扱いが困難であった多核金属錯体による人工光合成系の定量的な取り扱いを可能とする。天然光合成系において、未だXRD・XFEL構造の得られていないS2状態の最も確からしい構造をシミュレーションにより確定し、今後のXFELの実験に有用な知見を与えると同時に、人工光合成系で水分解反応を実現するために重要となる金属錯体の構造因子に関し有用な情報を提案する。

数千から1万原子系の大規模な分子系の励起状態に関する時間依存密度汎関数計算のためのメモリ分割版プログラムを完成させ、太陽電池シミュレータに実装する。太陽電池シミュレータを使うことで、大規模な太陽電池材料の基底状態と励起状態での挙動や物性をシミュレーションし、短絡電流 I_{sc} を飛躍的に増加させる有機物の材料設計に必要な励起状態ダイナミクス計算が可能になる。

光合成シミュレータを用いた新規光触媒設計と助触媒の最適化を行う。また、太陽電池シミュレータを用いペロブスカイト太陽電池の高効率性に関わる自由キャリア機構を解明する。更に、ドナー・アクセプター界面の電子的特性と変換効率との相関に基づいて、 I_{sc} を飛躍的に増加させる有機物材料設計を行い、実験研究者との連携で高効率な太陽電池を実現すると共に、実用化のめどとされる変換効率15%に向けた提案を行う。

・ポスト「京」運用開始5年後

天然と既存の人工光合成系の機構解明を行うとともに、新規の半導体および多核金属錯体による人工光合成系の設計を行いプロトタイプ実証への指針を明確化する。

天然光合成系で得られた知見をもとに、天然の光合成系に学び模倣した人工光合成のための新規触媒開発を行う。可視光領域で水から水素を効率良く作ることでできる光触媒の理論設計を実現する。

人工光合成化学プロセス技術研究組合（ARPCHEM）はNEDOプロジェクトで太陽エネルギーを利用した光触媒による水からの水素製造で2015年3月世界最高レベルでの太陽光エネルギー変換効率2%を達成し、2021年度末10%達成を目指しているが、大規模理論計算による光触媒材料探索により同プロジェクトと連携することにより、目標達成に寄与できる。

太陽電池のさらなる高効率化を目指して、企業と連携して分子レベルからメソスコピックな物質デザインを進め、太陽光を無駄なく使うためのアップコンバージョン、ダウンコンバージョン等による新規変換機構に基づく太陽電池、新規有機物を用いたタンデム型太陽電池、また熱電変換とのハイブリッド型太陽電池の知見を得る。

ソフトウェアの普及とユーザーの利便性の向上を考え、シミュレータの入力支援プログラムや可視化などの入出力の機能を充実させることでシミュレータの幅広い分野での活用・普及に努める。また、サブ課題Cと連携してGRRM法を用いた網羅的な化学反応経路探索などの機能を拡張することで、太陽電池シミュレータの適用範囲を太陽電池材料に限らず、不均一系の触媒設計にも利用できるようにする。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始5年後

開発されたシミュレータが普及する。新規変換機構に基づく太陽電池について企業との連携によるプロトタイプ実証を開始する。

・ポスト「京」運用開始10年後

シミュレータによる高効率な光エネルギー変換物質の研究が産学で一般化する。新規変換機構に基づく太陽電池について企業との連携により世界に先駆けて実証する。

分子・物質レベルのミクロな情報から材料の物性や挙動を予測できるマテリアルデザインのための総合的なモデリング/シミュレーション環境を提供し、触媒、医薬品、ポリマー、燃料電池、太陽電池、強相関物質などの製品化をターゲットとして多くの分野のニーズに資する統合シミュレータとして普及する。

(4)「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

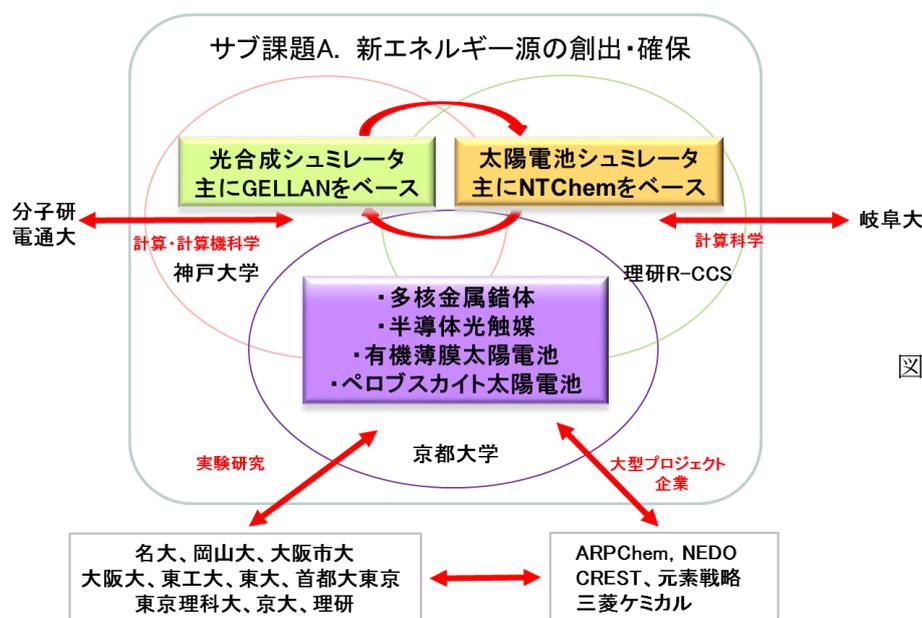
「京」ではナノスケールのデバイス材料のポストハートリーフック計算が行われ、高精度なエナジエティックスや開放電圧に関連するイオン化エネルギーの計算が行われている。モデル空間量子モンテカルロ法においても、マンガクラストのスピン状態の計算が行われ、著しい成果をあげている。人工光合成系の統合シミュレーションには 10^{20} 以上の電子配置を用いた高精度計算による実証が不可欠であるが、「京」では数年から数10年の計算リソースが要求され、実現が不可能である。ポスト「京」で開

発する人工光合成シミュレータでは、このような計算が1週間から1ヶ月程度で可能となり、計算機による光合成物質の設計の実現性が見えて来る。

太陽電池関連の計算については、「京」において数百原子までの分子の励起状態の量子化学計算が実現されているが、有機系太陽電池におけるヘテロジャンクションを含めた現実系界面のシミュレーションには10,000原子規模の取扱いが不可欠である。メモリ分割を施した効率の良い並列アルゴリズムを開発・実装することで、「京」では1年（計算資源の問題で実際には京では不可能）を必要として成果を見込むことができない計算をポスト「京」により1週間で終了することが可能となる。

(5) 実施体制

サブ課題Aの実施体制を図2-1-6に示す。光合成シミュレータの開発は天能（神戸大）が、太陽電池シミュレータは中嶋（理研）が主体となって開発を行う。シミュレータの開発には、計算科学者（岐阜大、電通大、分子研）と計算機科学者（神戸大、理研）との協力の下でポスト「京」の仕様と言語を十分に考慮した上で進める。又、山下（京大）を中心に、太陽電池と光触媒の先行的な応用研究を行い、ポスト「京」運用に向けた知見の蓄積を行う。太陽電池に加え天然光合成やARPCHEMで研究を進める実験研究者を中心とした連携体制を整備するとともに、プロトタイピングに向けた企業との協力を図る。



2-2. サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 — 電気エネルギー

(1) 目的・意義

太陽光発電などを用いて創生された一次エネルギーを化学エネルギーとして安定に貯蔵し、消費時に電気エネルギーに変換して利用するためのインフラの構築が始まっている。蓄電社会や水素社会の実現にとって最も重要な基盤技術は、二次電池技術と燃料電池技術である。これらの電池は電気自動車や燃料電池自動車（図 2-2-1）、家庭用電源装置として既に商用化され、今後急速な普及が見込まれている。それだけでなく、今後はスマートグリッドや産業用電源等の大型用途への利用が始まる。これらの推進のためには、電池の低コスト化、高信頼性、高耐久性、汎用元素の利用等が求められる。より優れた二次電池の開発に加え、燃料電池に関しても、白金触媒と高分子膜を用いた固体高分子形燃料電池が燃料電池車やエネファームとして商用化されているが、今後の普及には、より低価格な触媒と高分子膜等による耐久性や信頼性・エネルギー効率の向上が不可欠となる。



図 2-2-1 燃料電池車

近年、「京」コンピュータを用いた高度計算機利用において各部材のバルク特性にとどまらず材料界面で起こっている現象に対しても原子・分子スケールでの計算がおよびつつあり、最新の実験結果と組み合わせた微視的な構造の決定や機構の解明につなげることが可能になってきた。この最新の科学的手法を電池開発に向けて更に発展させ、諸外国に先駆けて現実の電池開発で利用可能な基盤技術として開発・提供することは、わが国の競争力を高める重要な要素となる。

そこで本サブ課題では、実験では決してみることのできない電極界面近傍での反応と物質移動のミクロ機構を、ポスト「京」を用いて明らかにすることに注力し、実験研究者と協力して、電池全体過程を明らかにしていく。このため、これまで開発してきたシミュレーション手法を多様かつ複雑な電池過程に適用できるように全電池シミュレータを微視的理論に基づいて発展させる。これを用いて、電極・電極被膜・電解質膜・電解液界面挙動に関する学理を構築し、各電池部材の最適材料設計・探索を目指した総合的な研究活動を行う。

(2) 実施内容

実験科学者・企業研究者と連携を取りながら、様々な計算手法（第一原理 MD、古典 MD、QM/MM 法、Red Moon 法（混合 MC/MD 反応法）など）を駆使して全電池シミュレータを発展させ電極・電解質界面を含むナノスケールの構造や電池過程の解明が可能であり、しかもそれに基づいた材料設計や電池特性の予測についても実行可能にする。

研究項目 1 二次電池

リチウムイオン電池の電解液および電極-電解液界面における電子状態と原子配置に関する第一原理分子動力学計算 (図 2-2-2) および、化学反応の効果を取り入れた Red Moon 計算 (混合 MC/MD 反応計算) を発展させ、電極-電解液界面の構造および特性を予測可能とする。電池機能を左右する界面保護膜 (SEI 膜: Solid-Electrolyte Interphase 膜) の形成機構に注目し SEI 膜を通したイオンの電極内部への移動のシミュレーションを行うことにより電極や電解液などの材料設計につなげるための手法を構築する。この目的のために stat-CPMD の反応自由エネルギー計算機能の強化や RedMoon の計算規模の拡大等を行い、より現実的な状況下での計算の高精度化を果たす。構築されたシミュレータをリチウムイオン電池に適用して早期成果創出を行うとともに、次世代二次電池の問題に取り組む。

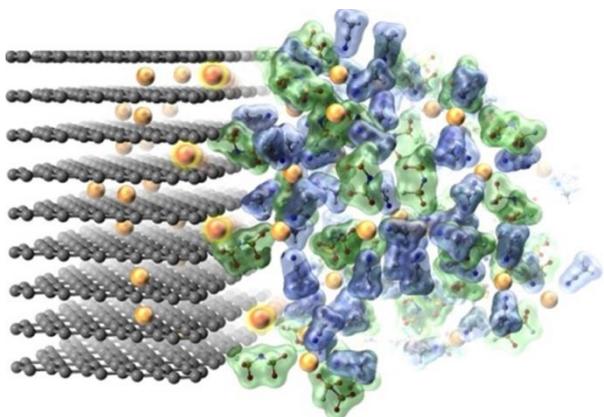


図 2-2-2 電極被膜・電解液界面

次世代二次電池においては、全固体電池やナトリウムイオン電池等が重要となる。これらにも対応できるように電極-固体電解質界面への計算の拡張を行うとともに、イオン半径やルイス酸性の異なるイオンに関するイオン輸送の向上等を目指した物質探索が可能なシミュレータを構築する。さらに次々世代電池においては、リチウム空気電池や多価イオン電池における界面酸化還元反応の制御等が問題になる。これらの問題への対応も視野に入れたシミュレータ開発を行う。また、材料探索に資するシミュレーションも行い早期成果を創出する。

また、二次電池における不均一環境下でのイオン輸送など電池材料としての機能発現の分子過程を解明する。このため、古典分子動力学シミュレーションに基づいて、イオン輸送の最適化のために必要な電極界面近傍のイオン伝導度の解析手法を確立する。特に、位置に依存するイオン移動の評価方法を確立し、全原子シミュレーションに基づいて、樹脂表面の化学的状態や表面からの距離の関数として伝導度を評価する。

stat-CPMD を用いた第一原理シミュレーションは物材機構 (館山)、MODYLAS を用いた分子動力学シミュレーションは名大院工 (岡崎)、RedMoon を用いた混合 MC/MD 反応シミュレーションは名大院情報 (長岡) がそれぞれ担当する。また、この三者および東大物性研 (杉野) が連携して各シミュレーション結果に基づき電池としての機能を予測するための手法を構築する (図 2-2-3)。

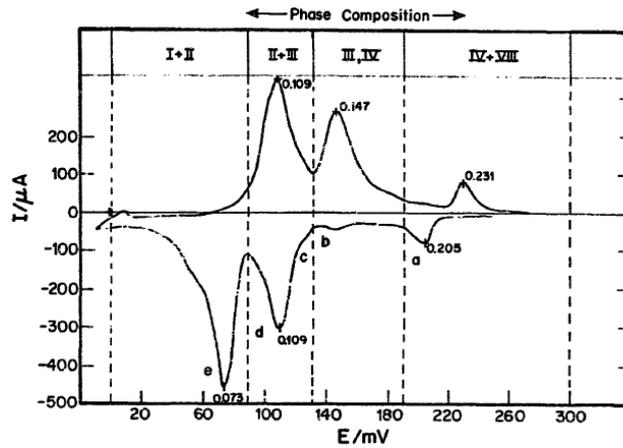


図 2-2-3 CV 曲線

出典：J. Electroanal. Chem. 421, 79 (1997)

研究項目 2 燃料電池

高効率で高耐久性な燃料電池の電極触媒 (図 2-2-4) の実現に向けて、固体電子論と溶液理論を組み合わせることにより電位差印可に起因して形成される電気二重層を的確に取り扱い、電極界面の構造や反応自由エネルギーを計算することが可能な電極シミュレータを、第一原理分子動力学法 (STATE) をベースに開発する。燃料電池反応機構を解明したり反応抵抗を予測したりするのに必要な物性値を電極シミュレーションに基づき導出する。また、遷移金属酸化物電極などの構造や反応に関する電極シミュレーションを行い、次世代の白金代替燃料電池材料の開発指針の獲得を実験グループと共同で目指す。

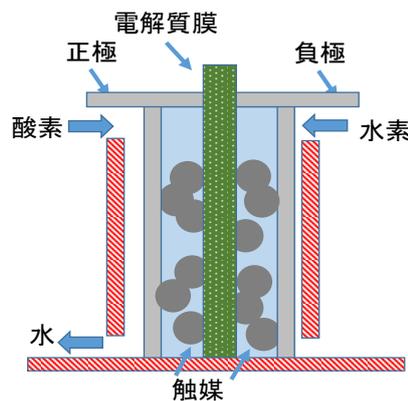


図 2-2-4 燃料電池の模式図

強靱で高性能な高分子電解質膜 (図 2-2-5) の実現に向けて、電解質膜に特徴的な大域的構造とそれ由来する膜強度やイオン伝導度等を記述するために必要な 1000 万～1 億原子で構成される高分子大規模系に対する分子動力学計算を可能にするシミュレータを、MODYLAS をベースに開発する。これに基づいて、標準的な電解質膜に対して乾湿サイクルによるモルフォロジー変化を明らかにするとともに、破壊の分子機構を解明する。またプロトンの輸送、酸素や水素の遮断など電池材料としての機能発現の

分子過程を解明する。さらには、電極-アイオノマー-カーボン集電体三相共存界面における構造モデルを提供し界面構造と輸送抵抗の関連を明確にし、上記反応抵抗とあわせることにより燃料電池としての機能予測の確立に貢献する。

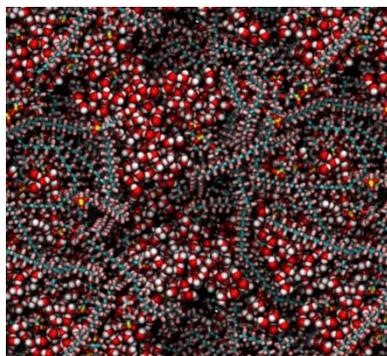


図 2-2-5 燃料電池高分子
電解質膜

電極シミュレーションは、東大物性研（杉野）が担当し、電解質膜シミュレーションは名大院工（岡崎）が担当する。反応抵抗や輸送抵抗等に関する物性値を獲得し、燃料電池の CV 曲線の予測が可能な全電池シミュレータの構築を目指す。

（3）目標・期待される成果

研究項目 1 二次電池

アウトプット成果：

・平成 29 年度終了時

次のようなりチウムイオン電池の電極-電解液界面およびその近傍での構造や反応輸送特性をシミュレーションするための手法が構築され、材料開発に資する知見も早期創出される。stat-CPMD を用いて数千原子規模での第一原理反応自由エネルギー計算を実行可能にする。これをリチウムイオン電池の電解液-電極界面に適用して SEI 膜の形成機構と特性、ならびに、その電極構造や電解液依存性を原子レベルから解析可能にする。また、既存の電解液を高耐久化するための知見を得て開発に貢献する。

また、RedMoon を用いた混合 MC/MD 反応法プログラムを発展させ、多様な酸化還元反応や重合反応を汎用的に取扱うための典型的な MC プロトコルを実装し、原子間結合の生成および切断、分子の並進移動などを汎用的にシミュレート可能にする。さらに、数十万原子規模の系に対して混合 MC/MD 反応シミュレーションを可能とする。

さらに、100 万～1000 万原子系の古典分子動力学計算に基づいて、二次電池セパレータ界面等の不均一環境下でのイオン輸送の最適化が可能となるイオン伝導度の解析手法を確立する。

・本格実施フェーズ終了時

stat-CPMD を用いた反応自由エネルギー計算を発展させ、計算規模の拡大および計算対象の次世代・次々世代二次電池への拡張を行う。実験的知見の少ないナトリウムイオン電池等に対しても界面の構造や界面保護膜の形成機構、界面でのイオン輸送、電極反応等が予測可能なシミュレータを開発する。また、これを用いた各種電池過程のシミュレーションを行い早期成果を創出する。特に電解液開発への貢献が期待できる。5000 原子規模 stat-CPMD あるいは STATE に電位差を印加する機能を導入する。これを用いて、リチウムイオン電池や次世代・次々世代電池の電解液を探索して候補物質を提案する。また、リチウムイオン電池の SEI 膜の形成機構、膜中のリチウムイオン輸送機構を提案する。次世代・次々世代電池に関しても電解液-電極界面反応の微視的機構を提案する。

RedMoon を用いた界面での酸化・還元および重合反応シミュレーションを 100 万原子規模に拡大する。また、RedMoon に電極電位を制御する機能を導入する。これを、リチウムイオン電池や次世代・次々世代電池の負極での SEI 膜形成に適用し、実問題解決に向けた応用計算を実施する。この膜モデルを用いて、stat-CPMD 等によるシミュレーションから得られた情報も活用し、膜の形成機構やイオン輸送特性の予測を行う。

古典分子動力学シミュレーションに基づいて、電極界面近傍等位置に依存するイオン移動度の評価方法を確立し、また高分子の破壊を可能とする 1 億~10 億原子系を取り扱うことのできるシミュレータを MODYLAS をベースに開発する。上記の成果を基に、固体電子論第一原理計算と古典分子動力学計算を組み合わせて全電池シミュレータを発展させ、イオンの輸送特性に関する知見を実験とも連携して、電極や電解液の材料設計指針の獲得を行う。

・ポスト「京」運用開始 5 年後

リチウムイオン電池に対して開発シミュレータを適用し、第一原理計算をベースにした二次電池の電流電圧曲線解析を行う。これを用いて、企業研究者や実験研究者と共同で材料設計を行う。また、開発シミュレータの産業界等への技術移転を始める。さらに、リチウム空気電池や多価イオン電池など、次々世代二次電池における電解液および電解液-電極界面の反応機構を解明し、材料開発に貢献する。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始 5 年後

「京」およびポスト「京」によって提案あるいは確認された電解液または電極材料の幾つかの商品化が行われる。電気自動車開発やスマートグリッド社会構築が加速する。開発シミュレータが企業等で用いられ始め、開発期間の短縮に貢献する。

次世代、次々世代二次電池の電解液-電極界面での反応輸送シミュレーションが本格稼動して、実験データを補う形で計算結果が得られるようになる。電池過程の理解が飛躍的に進む。また、材料開発への理論の貢献が増すと同時に、実験・開発・理論がチームを構成して研究を行なう体制が普通にとられるようになる。

・ポスト「京」運用開始 10 年後

蓄電社会、水素社会の構築が進んだ結果、自然エネルギーの全エネルギーに対する割合が増加する。開発シミュレータ技術が普及し、電池開発に不可欠な基盤となる。

研究項目 2 燃料電池

アウトプット成果：

・平成 29 年度終了時

次の様な燃料電池の電極電解質界面に関するシミュレータが開発され、反応過程やイオン輸送過程の理解を進める。また、次世代の燃料電池等の開発に資する早期成果を創出する。

第一原理分子動力学法 (STATE) をベースに固体電子論と溶液理論を組み合わせることにより、燃料電池電極界面の構造や反応自由エネルギーを計算することが可能な電極シミュレータを開発する。これと並行して 100 万～1,000 万原子の高分子電解質膜に対して分子動力学計算による相分離構造の解析やイオン輸送および破壊のシミュレーションが可能なシミュレータを、MODYLAS をベースに開発する。

これらのシミュレータを用い、燃料電池の反応機構の解明や反応抵抗、輸送抵抗等の電池機能を予測するのに必要な物性値を導出する。また、遷移金属酸化物などの白金代替物質の構造や反応に関する電極シミュレーションを行い、高効率高耐久な電極開発に資する。さらに、高分子電解質膜の性能向上に向けた材料設計指針を得る。

・本格実施フェーズ終了時

燃料電池電極界面の構造や反応自由エネルギーの計算効率や精度を向上させ、界面構造等と反応機構や反応抵抗との関連を解明することが可能な電極シミュレータを開発する。また高分子電解質膜に特徴的な大域的構造とそれに由来する膜強度やイオン伝導度、また電極・電解質膜界面等の解析が可能な 1 億～10 億原子系に対する分子動力学計算を実現するシミュレータを開発する。これらのシミュレーションを組み合わせ、電流電圧曲線を求めることを可能にし、微視的情報から電池機能を予測する手法を構築し、全電池シミュレータを発展させる。

これらのシミュレータを用い、遷移金属酸化物などの白金代替物質を用いた次世代型燃料電池の活性向上のための組成や構造に関する設計指針を獲得する。標準的な電解質膜に対して乾湿サイクルによるモルフォロジー変化を明らかにするとともに、破壊の分子機構を解明する。またプロトンの輸送、酸素や水素の遮断など電池材料としての機能発現の分子過程を解明する。

更に、電解質膜開発に関しては総理府 ImPACT プロジェクト「しなやかタフポリマー」(代表：伊藤耕三) と連携し、開発企業と共同で、社会的に緊急度の高い強靱で高耐久性、高信頼性を持ちながら高プロトン伝導性を備えた実用的な自動車用燃料電池電解質膜の設計指針を実験結果のフィードバックを得ながら提供し、開発に貢献する。これにより、「京」を用いた先行的成果として実際に路上で運転されるコンセプトカーの試作につなげる。

・ポスト「京」運用開始 5 年後

シミュレーション研究の蓄積に基づき、電極付近での酸化還元反応と電解質膜の大域的構造の関連を解明する。開発シミュレータを産業界等へ技術移転し、産学連携による高出力、高耐久性のための燃料電池材料の設計指針を提案する。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始5年後

ポスト「京」によるシミュレーションにより、燃料電池の高性能化、高耐久化のための研究が促進される。開発シミュレータが企業等で用いられ始め、開発期間の短縮に貢献する。

・ポスト「京」運用開始10年後

水素社会の構築に必要な家庭用、自動車用燃料電池の低価格化、耐久年数の伸長が進み、自然エネルギーの全エネルギーに対する割合が増加する。開発シミュレータ技術が普及し、電池開発に不可欠な基盤となる。

(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「京」では、古典 MD 計算で数百万—一千万原子規模（サイズとしては 50nm^3 スケール）のサンプリングが可能となっている。これは多孔質膜の不均一性を記述するための最低限必要なサイズでしかない。第一原理 MD 自由エネルギー計算では千原子規模（サイズとしては 2nm^3 スケール）のサンプリングが可能となっており、電解液や界面系のシンプルな酸化還元反応を取り扱える程度となっている。

ナノ細孔により構成される多孔質膜を取り扱った電解質膜設計を行う場合 1-10 億原子系の古典 MD 計算を要する。また全電池シミュレータに向けた電解質膜と電極、電解液の三相界面の研究にもポスト「京」を用いた大規模な計算が不可欠である。第一原理 MD については電解液-電極界面の化学反応・イオン輸送が複合した過程の取り扱いが要求され、原子数で五千規模の系の大規模サンプリングが必要となる。新規開発の手法をポスト「京」に適用することにより、既存のアルゴリズムでは「京」を用いて2年かかる計算が10日で行えるようになるものと考えている。

(5) 実施体制

サブ課題 B の実施体制を図 2-2-6 に示す。二次電池シミュレーションは、館山（物材機構）、岡崎（名大院工）、長岡（名大院情報）が主に担当し、燃料電池シミュレーションは杉野（東大物性研）、岡崎（名大院工）が主に担当する。シミュレーションソフトを互いに参照、ないし、連携させて動作させるための開発を行い、全電池シミュレータとして統合する。

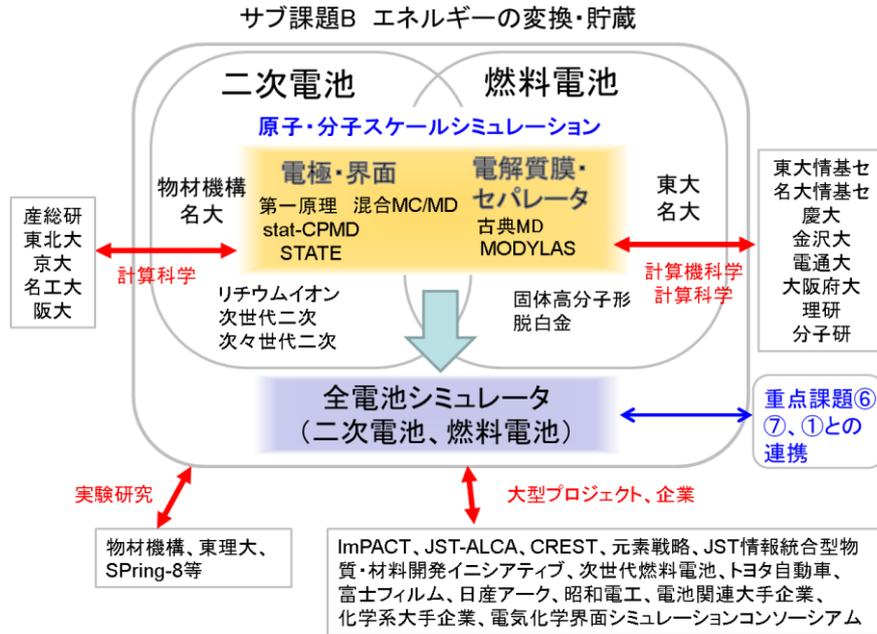


図 2-2-6 サブ課題 B 実施体制

計算科学・理論科学・計算機科学の連携体制については、大谷（産総研）、赤木（東北大）、袖山（物材機構）、濱田（阪大）、中山（名工大）、森川（阪大）、奥野（富士フィルム）、大脇（日産アーク）、泰岡（慶応大）、長尾（金沢大）、成見（電通大）、麻田（大阪府大）らが研究協力者として参画し、二次電池に関連する計算研究を遂行するとともに、全電池シミュレータ作成に協力する。また南（理研）ら計算機科学者とも連携し、さらなる分子動力学プログラムの高効率化を進める。

また、燃料電池研究については、重点課題6「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」と連携し、本重点課題において量子力学、古典力学などの基礎方程式から出発したシミュレーションに基づいて得られる燃料電池の原子、分子レベルの情報、微視的な情報（最大空間スケール 100nm）を、重点課題6において流体力学（例えば格子ボルツマン法）などに基づいて実施する巨視的なシステムシミュレーション（格子ひとつの大きさは 20nm、扱う空間は 20 μ m）に提供し、そこで検討される水循環や燃料ガスの供給（気液2相流）など電池運転条件の最適化の研究に貢献する。同時に、課題⑥で得られる電池材料の置かれた巨視的環境を本課題で実施する微視的シミュレーションに反映させ、より現実的な実験条件下での材料研究を進める。

MODYLAS 開発については、東大情報基盤センター、名古屋大情報基盤センターとのメニコアに対応したアルゴリズムを用いた高速化・最適化の共同研究、グランドデザインに関わる理研、慶大、電通大、金沢大、分子研からの知識・情報の提供、そして、コデザインについて重点課題1、7と協力・連携する。一方、stat-CPMD、STATEについては同じ平面波基底プログラムが関連する重点課題7サブ課題G、東大物性研と連携をしながら開発を進める。

2-3 サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 — 化学エネルギー

(1) 目的・意義

エネルギー資源を輸入に頼る我が国では、エネルギーの有効な循環が国家的重要課題である。本サブ課題では、化学エネルギーの新規な資源開発と貯蔵の効率化を目指す。エネルギー・環境問題解決に必須であるメタンと CO₂ の分離・回収、貯蔵、変換にわたる化学エネルギーの高度利用を目指して、ポスト「京」を活用できるアプリケーションを開発し、企業や実験研究者との緊密な連携をとりつつエネルギー多消費型工業プロセスを革新する。そのために、化学エネルギー創成・消費の根幹となるメタンハイドレートの資源化および CO₂ の分離・回収、貯蔵による化石燃料の安定的利用、さらに高機能触媒の開発を実施する。

水は地球上に普遍的に存在する無害で環境負荷の少ない物質であり、資源および貯蔵媒体、また蓄冷物質として水の利用を図ることは、化学エネルギーの創生とエネルギーサイクル構築の観点から、極めて重要である。日本近海に埋蔵されているメタンハイドレートからのメタンの生産と貯蔵、また環境負荷の少ないハイドレートの別の有効な利用法として、水素やオゾンの安全な貯蔵法の実用化に対する指針の提供を目的とする。ハイドレートは CO₂ の廃棄手段の候補でもあり、メタンハイドレートに CO₂ を注入し、メタンハイドレート中のメタンを CO₂ に置換しつつ、有用なメタンを得る可能性を、理論的基盤に基づきダイナミクスを含めて検証する。一方、水の相転移時の大きな潜熱を利用して、新規な蓄熱材料を開発することが強く期待されている。このうち、セミクラスレートを主とする蓄冷材は、構造や熱力学等の基礎的な情報が未解明であり、これらを微視的観点から基礎原理を解明して、実用化につなげる。

一方、物質科学分野において、触媒はエネルギー問題を解決する鍵を握る。本課題では、産業界に需要のある「触媒反応機構解明のための反応経路探索技術」を確立し、理論が先導する高収率高選択性の新規触媒設計というアプローチの実現を目指す。国内ではここ十年ほど貴金属を豊富元素に置き換える元素戦略プロジェクトが進められており、実験と理論計算の協働が重要視されている。白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発が実現すれば、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成することができる。

更に、地球温暖化防止をはじめとする環境諸問題の対策と、化石燃料の有効利用によるエネルギーの安定供給が可能な社会を築いていくため、CO₂ 排出量の大幅な削減が求められている。この目標達成に向けて、工場や発電所などの大規模排出源から CO₂ を分離・回収する技術が近年注目を集めている。我が国でも回収した CO₂ を地中深くに輸送し貯留する手段 (CCS) の実証試験が開始しているが、実用化促進には CO₂ 分離・回収のコスト削減が求められている。そのためには、反応条件の制御および材料の高性能化が必要である。ここにおいて計算科学を用いた微視的視点からの反応原理の究明、および系統的な物質の特性評価が課題解決を加速するアプローチとして期待されている。本研究では、超並列電子状態計算に基づく大規模 CO₂ 分離・回収シミュレーションとその解析を実現するアプリケーションの構築を行う。これを用いて CO₂ の効率的な分離・回収に資する革新的材料を理論先導で設計し、CO₂ 問題の解決に貢献する。

(2) 実施内容

研究項目1 ハイドレート

エネルギー資源として大量に存在するメタンハイドレート（図2-3-1）の効率的採取法の開発を目指した、大規模長時間MDシミュレーションを実施して、メソスケールでの解離の機構解明、解離の律速過程とその解消法の探索を行なう。特に、実用化に最も有望であると考えられている減圧法では、ハイドレートの低い熱伝導や不純物中でのガスの移動も考慮する必要がある、これらを境界条件に取り入れた大規模なシミュレーションから、効率的な融解法への指針を得る。また、メカニカルな融解法の開拓を目指した、シミュレーションについても開発を行う。

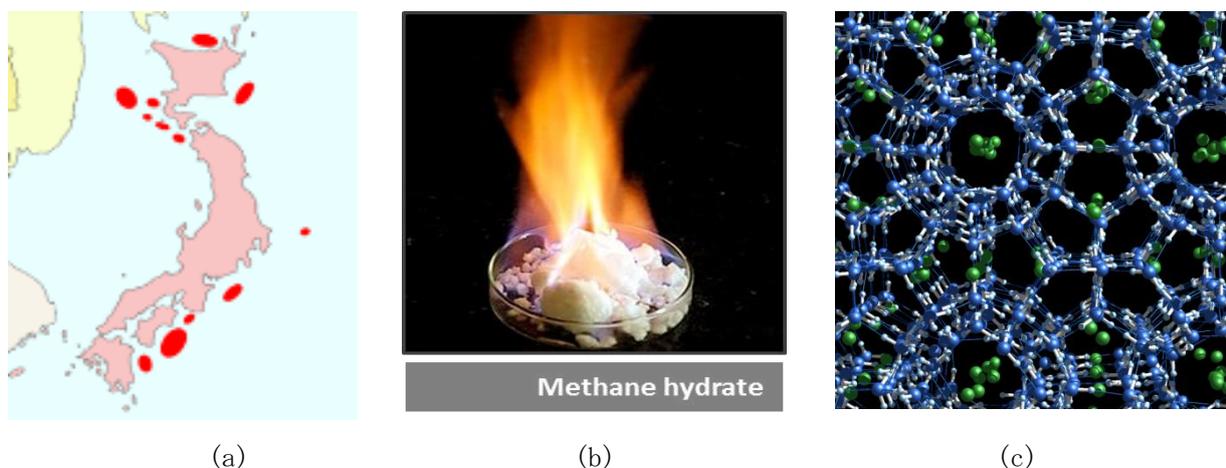


図2-3-1 メタンハイドレートの資源分布(a)、燃える氷としてのメタンハイドレート(b)とその分子配置(c)

メタン・水素・CO₂の貯蔵媒体としてのハイドレートの活用と高性能化を図るために、理論計算に基づき、結晶の安定性を補助する適切な添加分子種を提案する。自己保存効果とは、特定の条件において、ハイドレートの分解が著しく抑制される現象であり、ハイドレートを貯蔵媒体として利用する場合には有用だが、そのメカニズムは未解明である。このために、自己保存効果のシミュレーション、ハイドレートを安定化する分子の探索、結晶化過程のシミュレーションと自由エネルギー計算を行なう。一方、パイプラインによるガス輸送や深海底の石油採掘では、ハイドレートの形成は時としてパイプを塞栓させ、大きな事故につながる。これまでに多くの物質が速度論的なハイドレート生成阻害剤として開発されているが、その分子論的機構は未だ示されていない。自由エネルギー計算、阻害剤存在下の結晶成長シミュレーションなどによりこれを明らかにする。

これまで、我が国の近海に豊富に存在するメタンハイドレートからメタンを回収するための「メタンハイドレート資源開発研究コンソーシアム」が組織され、試掘は行われているが、コストの問題は未解決である。このような国家的課題に対して、ポスト「京」を駆使した大規模な構造探索から、蓄冷材としてのセミクラスレートの性能の向上のための包括的な評価を行い、東北大学や企業との連携・共同研究により、実用化に対する問題解決の一端を担う。

以上は、岡山大（田中）が、分子研（奥村）、産総研（石田）と協力して推進する。

研究項目 2 触媒

武次、前田（北大）が中嶋（理研）と協力し、反応経路自動探索法（図 2-3-2）を NTChem に連結して一般的に未知の触媒反応機構を解明する反応経路探索計算技術を確立する。これを産業界で重要な革新的触媒の理論設計へと適用し、具体的指針を実験家に提供する。大規模計算によって初めて可能となる触媒反応の实在環境モデル（例えば担持金属微粒子触媒であれば基板の欠陥、溶媒を露わに考慮し、単位セルを現況の十倍以上に広げるなど、図 2-3-3 参照）を構築し、経験的描像を排した反応経路探索計算によって理論先導型の触媒設計の実現につながる研究を展開する。



図 2-3-2 反応経路自動探索法

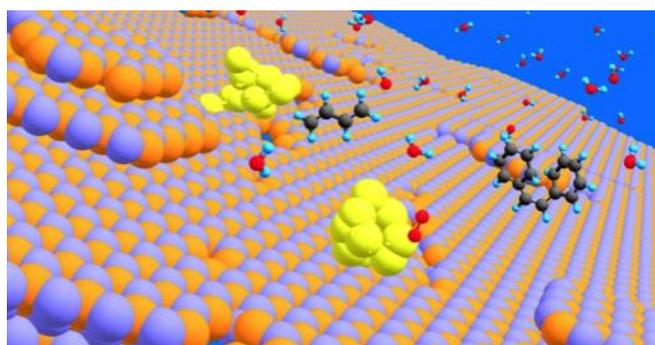


図 2-3-3 担持金属微粒子触媒の描像

具体的触媒反応として CO_2 固定化と酸素還元反応(ORR)を取り上げる。 CO_2 は研究項目 1、3 で貯蔵、分離・回収の対象となっているが、本項目では CO_2 変換による有効資源化を目指す（サブ課題内連携）。有機合成化学実験の立場から CO_2 固定の触媒開発を先導する依馬（岡山大）及びQM/MM 計算技術を有する長谷川（北大）と連携し、大規模な反応経路探索計算を実施して CO_2 固定高機能触媒の実現を目指す。ORR 触媒についてはサブ課題 B の高効率燃料電池開発の目標に挙がっており、サブ課題間連携として取り組む。燃料電池では酸素極での ORR 触媒として白金が使用されており、非白金触媒の探索が世界的に行われている。武次は魚崎（物材機構）との共同研究で、本来絶縁体である窒化ホウ素（BN）を金表面に担持すると電子状態が変化し、ORR 触媒として機能することを実験的に示した。しかしその微視的機構は未解明である。本項目では反応経路自動探索法と連結した NTChem を適用して BN/Au を触媒とする ORR の反応経路探索を行い、反応機構を明らかにして酸素還元能発現の起源を特定し、より高機能な非白金系酸素還元触媒の開発を試みる。

研究項目 3 CO_2 の分離・回収

CO_2 分離・回収は、溶液中または固体表面で起こる物理的あるいは化学的な変化を伴う複雑な現象であることから、特に凝縮相中の熱力学的安定性の評価と反応ダイナミクスの実行に適した凝縮相内化学反応シミュレータを開発する。前者では、基盤アプリ NTChem と線形スケールリング法の 1 つである分割統治法 (DC) 法を組み合わせることにより、高精度大規模電子状態計算に基づく定量的な熱力学量計算を可能とする。後者では、密度汎関数理論に基づく強束縛近似 (DFTB) 法に対する線形スケールリングを達成した補助アプリ DC-DFTB-K の超並列化およびパラメータの拡充を図ることにより、100 万原子規模、サブ

ナノ秒の化学反応シミュレーションに到達する。

CO₂分離・回収プロセスの合理化における急務な課題の1つは、実用に最も近い化学吸収法で用いられるアミン吸収液の性能向上である。高度化された NTChem および DC-DFTB-K プログラムを活用し、CO₂ 吸収過程・放散過程で生じる反応の詳細を熱力学的視点と動力学的視点の両面から明らかにする。アミンの種類とその混合比による吸収量・吸収速度の違いや、反応温度や吸収液の濃度など反応制御可能性に関する検討から得られる知見を用いて、消費エネルギーコストを削減する新規アミンの提案・最適なアミン混合比の予測を行う。更に、溶液系だけでなく金属有機構造体 (MOF) やゼオライトのような多孔質材料の高機能性発現を支配する基礎原理の究明に取り組む (図 2-3-4)。CO₂ 分離・回収については、中井 (早大) が担当する。

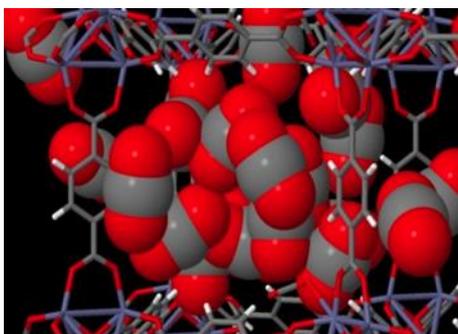


図 2-3-4 MOF による CO₂ の吸収過程

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果：

・平成29年度終了時

化学エネルギー創成から消費に至る過程の、高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の計算科学における開発を目指す。

ハイドレートを用いたエネルギーと物質貯蔵に関しては、自由エネルギー計算や数十万原子規模の分子系、ミリ秒のシミュレーションからの生成解離ダイナミクスの解明により、高効率、低エネルギーコスト低環境負荷で貯蔵(メタン、水素、オゾンなど)・廃棄(CO₂など) するための、温度、圧力、共存物質についての最適条件を提示する。更に、セミクラスレートの蓄冷材としての実用化には融解のエネルギー収支が極めて重要であるが、その構造や熱力学的特性が未解明である。このために、新たなアルゴリズムにより巨大な分子配置に関するデータから効率的に複雑な構造をエネルギーと関連付けて解析する方法を開発する。触媒設計では反応経路自動探索プログラムを NTChem に連結させ、京の上での反応経路探索計算を可能にする。更に、金属ナノクラスターによる触媒反応の全面経路探索を行い、サイズ効果やクラスター構造変化の効果について知見を得る。CO₂ について、100 万原子規模の化学反応ダイナミクスに必要な DFTB などのアプリケーションの大枠の開発作業を完了する。CO₂ 分離・回収エネルギーコストの大部分を占めるアミン吸収液の反応熱削減を目指し、反応系中にある化合物の拡散係数と放散時の反応性との関係を系統的なシミュレーションから明らかにする。更に、MOF などの材料を幅広く取り扱うため、金属を含む原子の組み合わせに対応する DFTB 力場の拡張を行い、CO₂ 吸収材料としての吸収

量や吸収速度、回収に必要な熱量などの基礎的知見を獲得する。

・本格実施フェーズ終了時

化学エネルギー創成から消費に至る過程について、計算科学により高効率な分離・回収、貯蔵、相互変換法の実用へ橋渡しとするための指針を提供する。

基盤となる反応経路自動探索法と NTChem との連結、MD シミュレーション、DFTB 法の長距離相互作用計算の効率化や DC 法における部分系処理の並列性能の向上など、課題に必要な計算手法の高機能化を達成する。さらに、固体や溶液の自由エネルギー計算や凝縮相内化学反応シミュレータの開発を完了し、ポスト「京」運用開始早期よりアプリケーションの実行と速やかな成果創出が可能な体制を整える。

ハイドレートについては、最大数千万原子規模の分子系、ミリ秒程度の、大規模長時間のシミュレーションを行い、現実的な条件におけるハイドレートの生成解離機構を明らかにする。また、90 年分以上と言われる天然ガス資源の採掘の実用化へ、産総研などで行われているマクロなシミュレーションへのミクロな観点からの計算データの提供などを通じて、メタンの効率的回収の指針を得ることに貢献する。更に、メタンと CO₂ 置換によるメタン資源化と CO₂ 投棄の熱力学とダイナミクスを明らかにする。蓄冷材に対して、セミクラスレートハイドレートの安定性原理の確立を行う。触媒設計では、超並列計算に基づく反応経路自動探索を実現し、1000 原子程度の複雑な触媒反応機構を調べる手法を開発する。CO₂ 固定と燃料電池非白金系触媒へと適用し、高機能触媒設計への知見を得る。CO₂ 分離・回収では、アミンの p*K*_a 依存性など 100 万原子程度の大規模系解析結果から、アミンの混合比、反応温度や吸収液の濃度など最適な反応条件の提案を行う。更に、多孔質材料を用いた CO₂ 分離・回収反応メカニズムを解明し、候補となる材料の指針を吸収量や吸収速度、回収に必要な熱量の観点から示す。

・ポスト「京」運用開始 5 年後

大規模実証計算を実行し、メタン、水素のハイドレート貯蔵のための自己保存効果をより高める手法の開発、CO₂ 固定の高機能触媒、サブ課題 B と連携した燃料電池非白金系触媒、最適化されたアミン吸収液に対するより定量的な CO₂ 吸収特性の予測を実現する。これらに対して、実験研究者および企業研究者と連携して実証開発を推進する。

アウトカム成果：

・ポスト「京」運用開始 5 年後

ハイドレートに対する低環境負荷が一般に認められ、また反応経路自動探索計算や凝縮相内化学反応シミュレーションが化学プロセスや材料設計といったナノスケールを対象とする計算科学分野で普及する。

・ポスト「京」運用開始 10 年後

メタンハイドレートのより効率的な分解法に基づくメタン採取の産業化がなされ、メタンハイドレート由来のメタンが利用されるようになる。反応経路自動探索法が新規触媒開発の標準的アプローチとして産業界に普及し、合理化されたプロセスに基づく CO₂ 分離・回収技術の実証試験が進み産業化がなされる (図 2-3-5)。



図 2-3-5 排気ガスから CO₂ を効率的に分離回収する
技術の実用化

(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「京」を用いた数十万原子規模の分子系時間 100 ns のメタンハイドレートの融解シミュレーションを行い、過飽和限界付近や溶質の添加による融解ダイナミクスを解析して、ハイドレートの分解速度を、メタンの泡の発生を促進・抑制することにより制御する方法を提案した (図 2-3-6)。

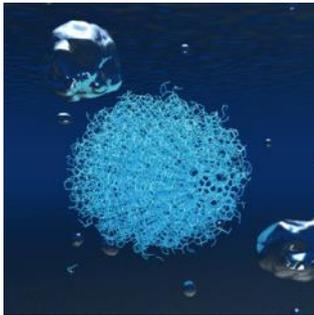


図 2-3-6 京を用いたメタンハイドレート融解の
シミュレーション

ポスト「京」では、ハイドレートの分離・貯蔵機能や蓄冷材としての性能を探索する。ハイドレートの生成過程やセミクラスレートの平衡状態の計算には、従来の計算の 100 倍程度の計算資源を要するので、ポスト「京」が不可欠である。触媒については、数十原子が含まれる小規模分子系の均一触媒反応の経路探索は既存のスパコンで可能であるが、千原子程度が関わる不均一触媒表面反応経路の探索はポスト「京」がなければ不可能である。CO₂ の分離・回収では化学反応を伴うために、5 千原子系、100 ps 程度の電子状態計算に基づく分子動力学シミュレーションを実行している。化学吸収法の最適化や MOF などの固体吸収材の設計には、取り扱う系のサイズがさらに増加する必要がある。例えば、典型的な計算では、「京」では 5 年の時間を要するため、ポスト「京」でなければ本課題は実現できない。

(5) 実施体制

サブ課題 C の実施体制を図 2-3-7 に示す。理論と計算科学は、田中 (岡山大) と奥村 (分子研) がハイドレートの融解や生成のダイナミクスの解明によるメタン生成やメタンや水素貯蔵の効率化を担当し、また石田 (産総研) が田中と協力して蓄冷剤としてのセミクラスレート等の可能性を検討する。ここで主に使用する基盤アプリは MODYLAS であるが、この開発の一部を担当することにより、ソフト開発からシミュレーションの実施まで目標の達成が可能な体制となっている。

触媒については、武次 (北大) と長谷川 (北大触媒科研) が協力して研究を推進する。実験グループ

として、魚崎・野口（物材機構）[電極触媒]、清水（北大触媒科研）[担持金属微粒子触媒]、佃（東大）[金属微粒子触媒]、依馬（岡山大）[CO₂固定触媒]と協力する。

中井（早大）が開発と実証を進める CO₂ 分離・回収において、アプリケーション開発では化学反応シミュレーションの遂行範囲を広げるため、DFTB 法を用いた応用計算を長年展開している IRLE (ORNL、米国)、WITEK (國立交通大、台湾) のグループと協調して、パラメータ開発を始めとした同技術のさらなる汎用化を展開する。シミュレーションでは、アミン吸収液、MOF など様々な材料について多様な条件の系統的評価を実施する。そこで得られた膨大なデータからより効率的に情報を抽出するため、情報化学分野のみならずデータマイニングを実施できる数学・数理科学分野との連携を検討する。最適な化学吸収液の設計においては、LEE (成均館大、韓国) との国際共同研究により理論研究から混合アミンによる反応機構解明を行い、古川（早大）や鹿又（早大）の実験研究者と実証を進める。産業界との連携では、本事業より提供する理論的知見を参考に、企業において低反応熱アミン吸収液を調整し性能評価を実施するとともに、プロセス全体の統合試験から最終的なエネルギーコスト低減の効果を見積り、産業化への足がかりとする。MOF の構造設計においては、北川（京大）からの協力を得て研究を推進する。

サブ課題C エネルギー・資源の有効利用

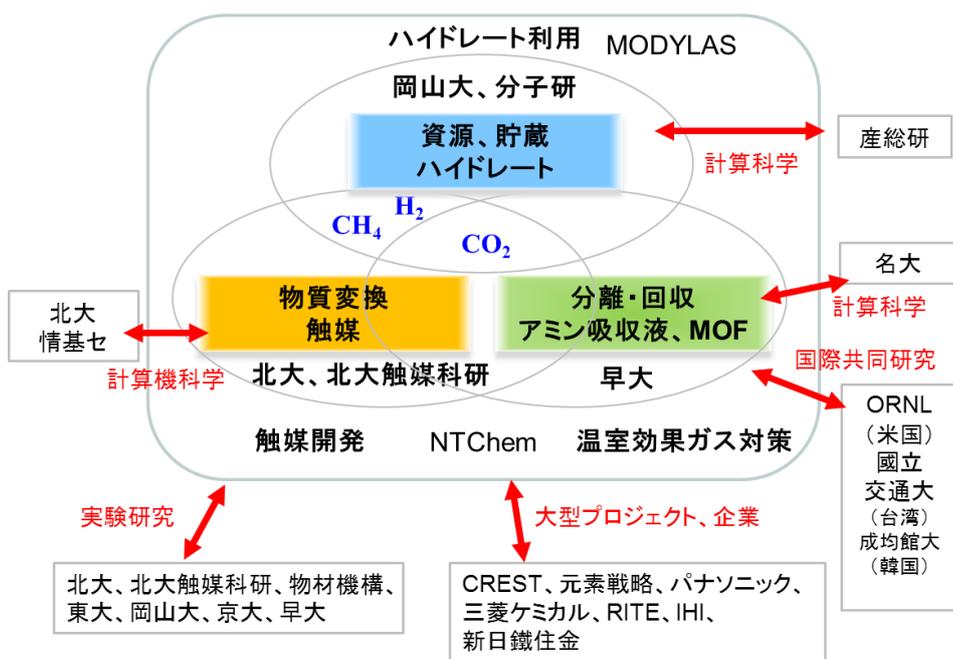


図 2-3-7 サブ課題C 実施体制

2-4. 基盤アプリ設計・開発

ポスト「京」を有効に活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーションを開発するため、本重点課題では 4 つの基盤アプリケーションを設定する。京で実効的な超並列計算の実績があり、本重点課題で共通に利用できる観点から、量子化学計算プログラム (NTChem、GELLAN)、分子動力学計算プログラム (MODYLAS)、第一原理計算プログラム (stat-CPMD) の 4 つを基盤アプリケーションとし、ポスト京での超並列計算で実効性が上がるように設計開発を行う。

平成 27 年後半にポスト「京」の基本的な仕様が決まることを前提として、コデザイン・サブ WG での活動を通して得られる情報を参考にして基盤アプリのグランドデザインを進める。早期から理研あるいはハードウェア・ベンダーのコンサルティングを受け、更にベンダーによる最適化作業も活用しながら、平成 31 年度のポスト「京」の試用に向けて、ポスト「京」を有効に活用できる基盤アプリを開発していく。

2-4-1. NTChem

開発目標

「京」においては 1,000 原子までの分子の励起状態の量子化学計算が実現されているが、有機系太陽電池におけるヘテロジャンクションを含めた現実系界面のシミュレーションには 10,000 原子規模の取扱いが不可欠である。メモリ分割を施した効率の良い並列アルゴリズムを開発・実装する。

計算規模：原子数 五千～1 万

2-4-2. GELLAN

開発目標

「京」では高精度 F12 理論の超並列実装が行われており、ナノ分子のポストハートリーフォック計算が実現化されている。高効率光エネルギー変換の解明には、これに加えて 10^{20} の完全 CI 次元を持つ擬縮重系や励起状態の分子構造と電子物性の計算手法を開発する。

2-4-3. MODYLAS

開発目標

原子数：1 億～10 億

計算時間：2～20 ms/step

特に高分子系への展開のため、化学結合のすり抜け等による平衡化の加速、引っ張り、圧縮、せん断、ねじれ等の機械的摂動の印加、化学結合の切断過程の記述、粗視化モデルの導入、応力分布、ひずみ分布、弾性率分布等の解析、プロトン移動における量子性の考慮、界面を有するヘテロ系でのイオン伝導度の解析等を可能とする。

2-4-4. stat-CPMD

開発目標

「京」においては 数千原子サイズの系の第一原理分子動力学サンプリングが 10 sec/step 前後で実現してきた。これは FFT などのカーネル部分のチューニングによるものである。さらに反応自由エネルギープロファイル計算のサンプリングの MPI 並列化が実装した。これらにより数千ノードの自由エネルギー

ー計算において実行効率 29%、SIMD 化率 73%が実現している。

今後、燃料電池・二次電池の電極-電解質界面の現実系第一原理シミュレーションを行うには5千原子規模でのサンプリングが必要となる。カーネル部分のさらなるチューニングによって、実行効率の低下を最小限にしながらこのサイズの第一原理分子動力学を可能とし、さらなるサンプリング並列化、マルチプル並列化を実装してフルノードの利用を可能とする。

計算規模：原子数 五千規模

機能：・サンプリング並列化、マルチプル並列化

- ・QM/MM などの連成シミュレーションに向けたインターフェース開発
- ・反応自由エネルギー計算手法の高効率化
- ・電気化学反応・界面酸化還元反応の記述手法開発
- ・電子相関、自己相互作用補正、長距離力の導入など電子状態計算の改良

2-4-5. コデザイン

ポスト「京」プロジェクトでは、アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調によりアプリケーションとシステムを協調設計していく。重点課題に関するアプリケーション開発およびポスト「京」開発において、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関との間で、ポスト「京」のシステムアーキテクチャ等とアプリケーションの設計開発に関し、相互に要求性能・機能や評価結果等についてのフィードバックを行いながら設計開発を同時に進める。このために、各重点課題から1つないし2つのターゲットアプリケーションを選定し、ターゲットアプリケーションに対するコデザインの成果およびチューニングのノウハウをマニュアル化することで、他のアプリケーションの高度化へ繋げる。ターゲットアプリケーションの選定基準は下記のとおりである。

- 1) 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること。
- 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、コデザインできるものであること。
- 3) 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、コデザインおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること。

これらの観点から、本重点課題からはNTChemをターゲットアプリケーションに選定し、密行列演算を共通基盤としてコデザインすることに設定した。コデザインサブワーキンググループ（以下、コデザイン SubWG）を中心とするコデザイン推進体制を整え、2015年度4月から2週間に1回程度の頻度でコデザイン SubWGを開催している。コデザイン SubWG体制を図2-4-1に示す。コデザイン作業は2つのフェーズにわけられ、下記のような推進計画である。

1. 第1フェーズ（基本設計期間、～2015年8月）

理研 R-CCS は各実施機関と相談の上、基本設計時に使用するターゲットアプリおよび問題サイズを決める。各実施機関は実施機関側コデザイン責任者および実務担当者を決め、理研 R-CCS とともにターゲットアプリケーションを用いて、アーキテクチャ、システムソフトウェアのコデザインを行う。

2. 第2フェーズ（2015年秋～2018年3月）

各実施機関のコデザイン実務担当者は理研 R-CCS とともにコンパイラやシステムソフトウェア、プログラミング環境、ライブラリの協調設計及び詳細設計を行う。コデザインの成果を基にアプリケ

ーションチューニング方法のドキュメント化を行う。

上記の知見を、各実施機関のコードデザイン責任者および実務担当者が中心となり展開し、実施機関内の新規アプリ開発・アプリチューニングを行う。理研 R-CCS は、R-CCS 側コードデザイン責任者を中心に適宜 WG を組織化し、これに対する支援を行う計画となっている。

- **重点課題5** コードデザインSubWG (高精度分子軌道法) **NTChem**
 - 対象アプリ: NTChem (RI-MP2電子相関計算)
 - コードデザイン観点: 密行列演算性能、SIMD幅、集団通信レイテンシ
 - 理研側コードデザイン責任者: (理研) 中嶋
 - 実施機関側コードデザイン責任者: (分子研/名大) 岡崎
 - SubWG主催者: [正](理研) 三上、[副](神戸大) 上島
 - 実働メンバー: (理研) 三上、南、(岐阜大) 中塚、(富士通) 井上、佐治
 - オブザーバー: (名大) 安藤 (阪大) 稲垣
- **重点課題1** コードデザインSubWG (分子動力学法) **GENESIS**
 - 正式メンバー: (名大) 安藤
- **重点課題7** コードデザインSubWG (密度汎関数法) **RSDFT**
 - 正式メンバー: (阪大) 稲垣

図 2-4-1 コードデザインと重点課題間連携

表2-4-1 基盤アプリ設計開発

責任者：(理研R-CCS) 中嶋隆人

アプリケーション名	ポスト「京」	「京」での性能実績、他	活用シミュレータ
ターゲットアプリ 1 NTChem	汎用第一原理電子状態計算ソフト 化学反応計算 →1万原子系 励起状態計算	360原子 9,840原子軌道 71,288ノード、実効効率 32% 世界最高レベルの超並列	太陽電池シミュレータ
基盤アプリ 2 GELLAN	階層的量子化学計算ソフト QM/MM分子動力学 → 10^{20} 以上の電子配置からなる 超高精度励起状態計算	10^9の電子配置 120原子 5,520原子軌道 21,672ノード、実効効率 32% 世界最高水準の 高精度計算	人工光合成シミュレータ
基盤アプリ 3 MODYLAS	汎用分子動力学計算ソフト 自由エネルギー計算、多相共存系 →10億原子系 超大規模分子動力学計算	8,000万原子系 65,536ノード 実効効率 41% 世界最高クラスの高速度計算	全電池シミュレータ
基盤アプリ 4 stat-CPMD	第一原理分子動力学ソフト 反応自由エネルギー計算 →5千原子系 電極反応	2,400原子系 3,840ノード 実効効率 29%	全電池シミュレータ

補助的アプリケーション： STATE、RedMoon、GRRM、DC-DFTB-K、SMASH

3. 採択時の留意事項への対応状況

指摘事項（罫線内）：

(1) 課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、産業界側の実ニーズを十分に把握し、本事業の成果を社会において広く活用できる具体的な道筋を明確にすること。

1章および2章各サブ課題の(2)実施内容と(3)目標・期待される成果に反映済み。

(2) 相乗効果が期待される他プロジェクト等と密に連携して取り組むとともに、役割分担を明確にすること。

1章(6)実施体制と2章各サブ課題の(3)目標・期待される成果、(5)実施体制に反映済み。

(3) 実験研究の進展をタイムリーに取り込むことのできる実験研究者との連携体制を明確にすること。また、成果の受け渡しについて、産業界とのきめ細やかな連携体制を明確にすること。

1章(6)実施体制と2章各サブ課題の(3)目標・期待される成果、(5)実施体制に反映済み。

(4) 本提案のサブ課題Aについては、材料物性に関わる部分のみを議論とした場合であっても、励起状態の計算のみで太陽電池の変換効率を定量的に求めることは難しいと考えられる点を含め、(1)の指摘やポスト「京」の必要性を検討及び具体化すること。

2-1. サブ課題Aの(3)目標・期待される成果、(4)「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと、(5)実施体制に反映済み。

(5) 本提案のサブ課題Bについては、重点課題6（革新的クリーンエネルギーシステムの実用化）において取り組まれる電池関連の研究開発ともコミュニケーションを図り、相乗効果を図ることができる体制を明確にすること。

2-2. サブ課題Bの(5)実施体制に反映済み。

(6) 人件費の占める割合が大きいですが、本プロジェクトで雇用する研究者（ポスドク等）の人員計画を明確にするとともに、将来のステップアップまで見据えた登用、人材育成の取組の計画を明確にすること。

人員計画については、1.(6)及び表1-3に記載済み。

(7) (追加指摘事項) 本提案と、重点課題6（革新的クリーンエネルギーシステムの実用化）、重点課題7（次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成）と方法論に共通性があることから、重点課題間の効果的な連携や産業界との協力体制の一本化を検討した上で、体制を具体化すること。

1.(4)に記述しているように、本課題において開発した高精度量子化学計算、大規模第一原理計算、超大規模分子動力学計算などの方法論、アプリケーションは化学、物理、材料、生物分野等に適用できるもので

あり、エネルギー問題に限ることなく、広く他分野での展開も予想され、研究ツールとして重点課題1、6、7等へ提供する。また、開発アプリケーションは、ポスト「京」に限ることなく情報基盤センターや共同利用研等のインフラにおいても効率的に稼働するよう設計、開発し、またスーパーコンピューティング技術産業応用協議会等と連携して、産業利用を念頭に置いて使い勝手のよいアプリケーションとなるよう開発する。これにより、既存のスーパーコンピュータはもちろんのこと、企業内のシステムにおいても広く展開、利用されることが期待できる。また、開発したシミュレータは、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会ならびに重点課題6、7等と連携し、産業界での利用促進、普及を図る。

さらに、重点課題7との連携については、基盤アプリのコードesignの過程を共有するため重点課題5より重点課題7のコードesign・サブWGに委員を派遣している。

4. 中間評価時の指摘事項への対応状況

指摘事項（罫線内）：

(1) 課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、産業界側の実ニーズを十分に把握し、本事業の成果を社会において広く活用できる具体的な道筋を明確にすること。

1章および2章各サブ課題の(2)実施内容と(3)目標・期待される成果に反映済み。特に本事業の成果を社会において広く活用できる具体的な道筋の一つとして、複数の企業(27社)と共同研究を進めている。現在の共同研究の状況を図4-1に示す。これは、分子科学研究所を中心として、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)、高度情報科学技術研究機構(RIST)、計算科学振興財団(FOCUS)の協力も得て、継続している研究会・シンポジウム(事例紹介)⇒スクール開催(人材育成・基礎知識提供)⇒アプリ講習会(開発アプリ普及)⇒共同研究・大型国家プロジェクトとの連携⇒研究会・シンポジウム(事例紹介)⇒・・・のスパイラルにより、得られた実績である(図4-2参照)。

今後は、産業界側の実ニーズの把握のため、産応協の「HPCアプリの将来像に関する意見交換」等の取組に協力・参画する。また、基盤アプリ等を整備しているRIST、FOCUSからも産業界側の実ニーズに関する情報を入手していく。さらに本事業の成果を社会において広く活用できる具体的な道筋を発展させるため、重点課題5産業連携ワーキンググループの活動を発展させ、広報と協力し、プレスリリース、ホームページやメーリングリスト等により、本重点課題の成果や企業での活用成果を広報・周知する。これらにより、企業側の関心を高めると共に、共同研究推進窓口を設置し対応していく。



図 4-1 出口に向けた産業界との連携

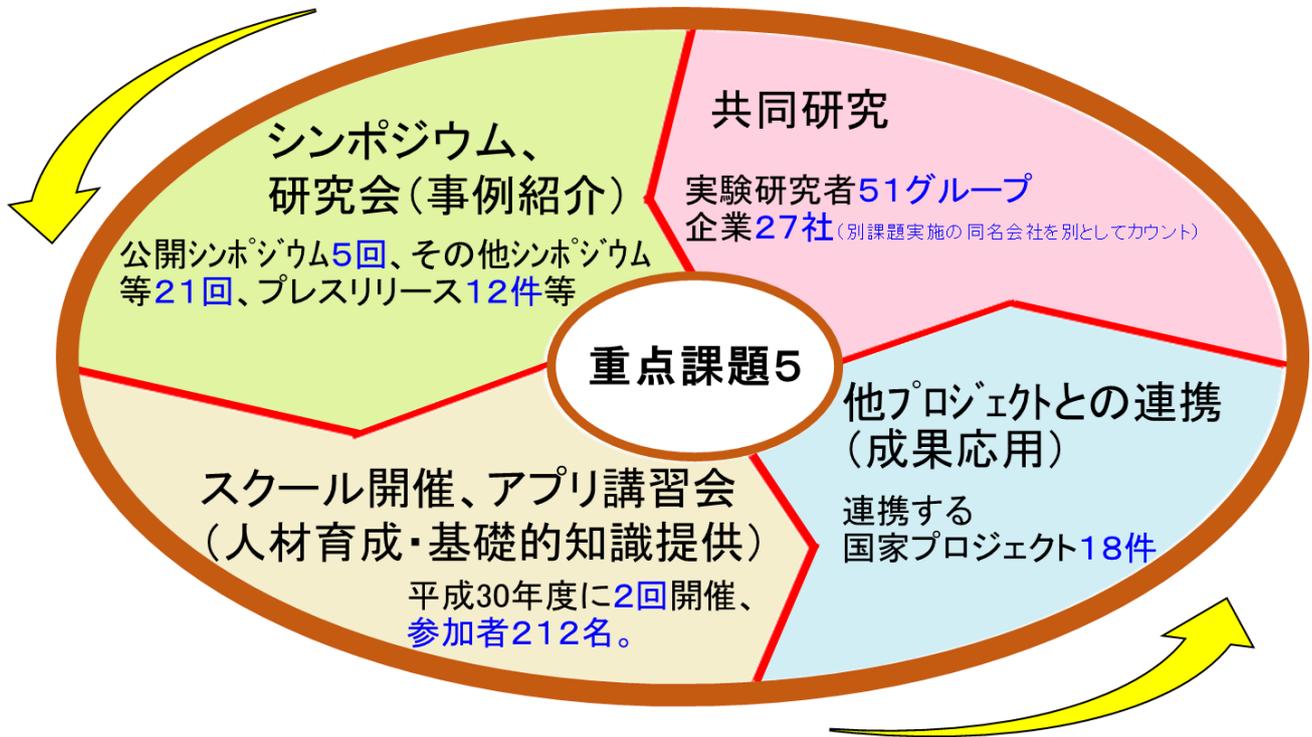


図 4-2 成果利活用の道筋

(2) 情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数は、事業の成果を議論する上で1つの指標となりうるため、分野の特性を考慮の上、論文数、学会発表数の達成目標値を設定すること。

重点課題5全体で、年度毎の論文数の目標を60本とし、年度毎の学会発表数の目標を270件とする。

(3) 予備計算などを通じて、サイエンス的な目標を明確にすること。その目標に対して、ポスト「京」でいつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのかを明確にすること。その時点でポスト「京」で初めてできる画期的な利活用について具体的に説明すること。

本格実施フェーズ終了時の目標（最終目標、～平成31年度）を、サイエンス的な目標、アプリケーション開発目標および産業界での活用目標に分類し、表4-1に記載する。

(4) 当初計画には人工知能との融合はないが、物質予測に向けた研究にはスーパーコンピュータと人工知能を合わせた活動も重要であり、それを考慮して計画の調整を行うこと。

「機械学習やデータサイエンスの技術活用の検討」を、1. 実施概要に(5)として追記する。

「京」	主な最終目標(～H31年度)	ポスト「京」
小規模系励起状態計算 ・光合成系 厳密計算 20原子、 10^9 の電子配置 ・有機太陽電池 単一相、 1,000原子	サブ課題A 人工光合成シミュレータ 太陽電池シミュレータ 基盤アプリ NTCChem、GELLAN ・光合成： 10^{20} 以上の励起電子配置厳密計算 ・太陽電池：数千～10,000原子励起状態計算 ・半導体光触媒や多核金属錯体の人工光合成系での励起電子の精密な記述による ニューパラダイムの確立 ・太陽電池自由キャリア機構、ドナー・アクセプター界面特性解明 ・有機太陽電池の変換効率15%に向けた提案 ・材料インフォマティクス手法を駆使した太陽電池と半導体光触媒の新規材料設計 ・新規光触媒設計、助触媒の最適化 先行的成果 高効率有機太陽電池	高精度大規模系励起状態計算 ・光合成系 厳密計算(完全CI解)実用化 1,000原子、 10^{20} 以上の電子配置の組合せ ・有機太陽電池 現実系界面(ドナー・アクセプター界面)、 10,000原子
個別部材のシミュレーション ・電極反応 数千原子規模の第一原理計算 ・電解質膜 数百万原子系のMD計算	サブ課題B 全電池シミュレータ(二次電池、燃料電池) 基盤アプリ stat-CPMD、MODYLAS ・電極反応：5,000原子系反応計算 ・高分子電解質膜など：1～10億原子系物質移動解析 ・電極界面の精密な描像の確立 ・新規材料・新型電池の機能性の予測理論の構築 ・高効率かつ高安全性な電解液・電解質材料の設計指針 ・燃料電池白金代替物質の設計指針 先行的成果 電気自動車用Liイオン電池 先行的成果 車載用高分子形燃料電池	全電池シミュレータ ・二次電池 ・燃料電池 ・反応自由エネルギーと物質移動に基づいた電流電圧曲線、電極界面のマイクロ機構解明 5,000原子第一原理計算と数億原子MD計算の統合
・メタンハイドレートの融解 数十万原子規模の分子系のMD計算 ・均一触媒反応 数十原子の反応経路探索 ・CO ₂ の分離・回収 5,000原子系のQM-MD計算	サブ課題C ・数千万原子規模分子シミュレーション ・ハイドレート生成解離機構解明、蓄冷材セキラスレート構造・潜熱基礎原理確立 ・メタン効率的回収貢献 ・1,000原子触媒反応機構解析手法開発 ・CO ₂ 有効資源化触媒や燃料電池非白金系触媒の高機能触媒設計貢献 ・100万原子系大規模解析にて、アミン最適反応条件やMOFなど多孔質材料の指針提案	・ハイドレート分離・貯蔵、蓄冷機能 数千万原子規模分子シミュレーション ・不均一触媒表面反応 1,000原子系反応経路探索 ・CO ₂ の化学吸収法最適化 ・MOFなどの固体吸収材設計 100万原子系のQM-MD計算

表4-1 主な最終目標 (赤字：サイエンス的目標、青字：産業界での活用目標、黒字：手法等アプリケーション開発目標)
別添 2-65

(5) 開発アプリの国際的優位性を客観的指標に基づいて明確にすること。

国際的によく利用されているアプリケーションと開発する基盤アプリとを比較し、優位点とそれにより可能となることを整理したが非公開資料のため掲載しない。

(6) 各コードの普及策を検討すること。

従来通り、重点課題5で開発する基盤アプリの普及を目的とし、学生・実験研究者だけでなく企業研究者をも対象として、HPCI 戦略分野2で実施してきた分子シミュレーション、量子化学の2コースを引き続き開講する（平成30年度参加人数：計212名、分子研において11年前から継続中）。また、基盤アプリを、「京」コンピュータ、岡崎共通研究施設計算科学研究センター（RCCS）、計算科学振興財団（FOCUS）等に整備し、講習会を高度情報科学技術研究機構（RIST）及びFOCUSと協力して実施していくことで、産業界（「京」、FOCUS）、アカデミア（「京」、RCCS）の利用を推進する。RIST調べによる利用実績を表4-2に示す。これらの取り組みの成果により、基盤アプリのNTChemとMODYLASは、利用アプリの上位にランクインしている。さらに、産業界側の実ニーズの把握のために産協協の「HPCアプリの将来像に関する意見交換」等の取組に協力・参画する。

今後、RISTに協力することにより、HPCIセンターへ開発アプリの整備を進める。特に産業への普及促進のため、GUIによる簡易な操作と計算結果の可視化機能を実現するためプリポストソフトとの結合を検討していく。尚、既に開発アプリのMODYLAS、DC-DFTBとSMASHは、クロスアビリティ社のWinmostar（分子モデリング・可視化ソフトウェア）との連携機能が実装されている。NTChemやGELLANについても現在検討中である。

順位	アプリ名	(利用・申請)課題数			分野(手法)	開発種別
		合計	学術	産業		
1	GROMACS	27	24	3	古典MD	海外OSS
2	OpenFOAM	18	5	13	CAE/気象・防災	海外OSS
3	MODYLAS	16	14	2	古典MD	国プロ
4	FrontFlow/blue(FFB)	14	5	9	CAE/気象・防災	国プロ
5	FrontFlow/red(FFR)	12	5	7	CAE/気象・防災	国プロ
6	GENESIS	11	11	0	古典MD	国プロ
7	LAMMPS	10	4	6	古典MD	海外OSS
7	Quantum ESPRESSO	10	7	3	第一原理計算(平面波基底)	海外OSS
7	VASP	10	9	1	第一原理計算(平面波基底)	商用
10	NTChem	9	9	0	量子化学計算	国プロ
10	SCALE	9	9	0	気象・防災	国プロ
10	LANS3D	9	8	1	CAE	独自開発

※H27年度利用報告書及びH28年度の不採択課題を含む課題申請書(合計384課題)より集計
出典: H30年10月12日 第6回材料系ワークショップ RIST講演資料

表 4-2 「京」を中核とする HPCI システム: 利用実績のあるアプリケーション

(7) 本計算科学から、他の関連(実験)プロジェクトへの大きな波及を目指して、個別課題への対応だけでなく、ポスト「京」の戦略的活用のための総合的な枠組みを検討すること。

大型国家プロジェクト(元素戦略、ARPCHEM、ImPACT等)との連携(18件)は現在も進めている(図4-3、図1-3:P.21、図1-5:P.23参照)が、今後、ポスト「京」の戦略的活用のための総合的な枠組みとして当該サブ課題責任者、サブ課題実施者を中心とした、プロジェクト連携推進会議設置を検討する。また、大型実験施設:Spring-8(登録機関JASRI)、J-PARC(登録機関CROSS)、「京」(登録機関RIST)とは、連携利用シンポジウムの開催などを通して、今後も関連(実験)プロジェクトのニーズを把握する。

更に、第5期科学技術基本計画の重要政策課題のひとつである「エネルギーの安定的確保とエネルギー利用の効率化」及びその次の科学技術基本計画への展開も見据えて、本重点課題の成果(エネルギーの新規基盤技術)とポスト「京」を戦略的に活用するため、前述の枠組みも活用し将来の計画を検討する。

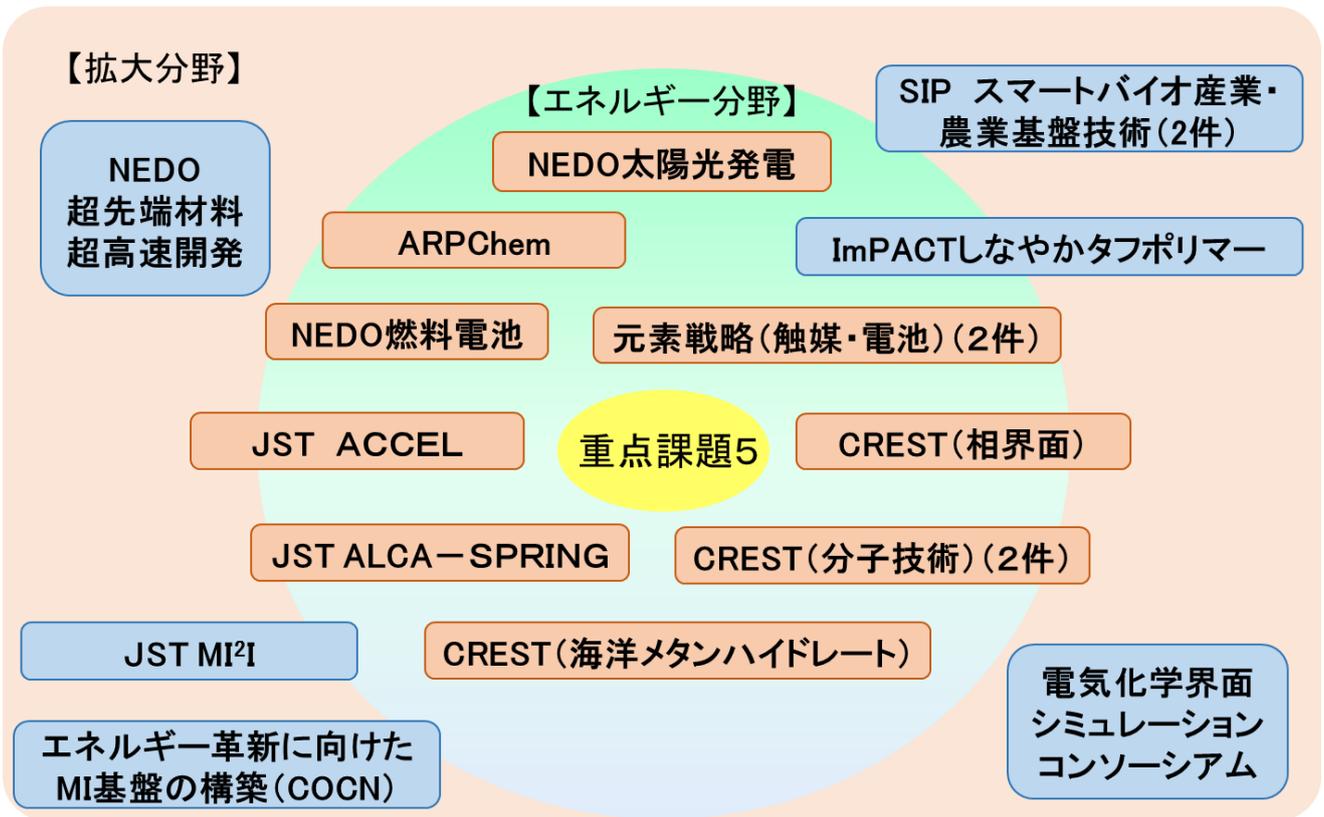


図4-3 大型国家プロジェクトとの連携

(別紙1) 実施機関一覧

	実施機関／協力機関	備考
	自然科学研究機構 分子科学研究所	代表機関 (課題責任者) 岡崎 進
サブ課題A	神戸大学	分担機関 (サブ課題責任者) 天能 精一郎
	理化学研究所	分担機関 (サブ課題実施者) 中嶋 隆人
	京都大学 学際融合教育研究センター	分担機関 (サブ課題実施者) 山下 晃一
	大阪市立大学 大学院理学研究科	協力機関
	大阪大学 産業科学研究所	協力機関
	岡山大学 異分野基礎科学研究所	協力機関
	岐阜大学 大学院地域科学研究科	協力機関
	京都大学 大学院工学研究科	協力機関
	京都大学 大学院工学研究科/WPI-iCeMS	協力機関
	JXTGエネルギー	協力機関
	自然科学研究機構 分子科学研究所	協力機関
	首都大学東京 大学院都市環境化学研究科	協力機関
	Slovak Academy of Sciences	協力機関
	電気通信大学 大学院情報理工学研究科	協力機関
	東京工業大学 大学院理工学研究科	協力機関
	東京大学 大学院工学系研究科	協力機関
	東京大学 大学院総合文化研究科	協力機関
	東京大学 大学院理学系研究科	協力機関
	名古屋大学 大学院理学研究科	協力機関
	日本女子大学	協力機関
	Max Planck Institute for Solid state research	協力機関
	三菱ケミカル株式会社	協力機関
	理化学研究所 創発機能高分子研究チーム	協力機関
サブ課題B	東京大学(物性研究所)	分担機関 (サブ課題責任者) 杉野 修
	物質・材料研究機構	分担機関 (サブ課題実施者) 館山 佳尚
	名古屋大学(大学院情報科学研究科)	分担機関 (サブ課題実施者) 長岡 正隆
	名古屋大学(大学院工学研究科)	分担機関 (サブ課題実施者) 岡崎 進
	AGC株式会社	協力機関
	大阪大学 大学院工学研究科	協力機関
	大阪府立大学 大学院理学系研究科	協力機関
	金沢大学 大学院自然科学研究科	協力機関
	九州工業大学 情報工学研究院	協力機関
	京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科	協力機関
	京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット	協力機関
	慶應義塾大学 理工学部	協力機関
	神戸大学 大学院工学研究科	協力機関
	産業技術総合研究所	協力機関
	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	協力機関
	滋賀大 データサイエンス教育研究センター	協力機関
	昭和電工株式会社	協力機関
	住友化学株式会社	協力機関
	玉川大学 工学部	協力機関
	電気通信大学 情報理工学部	協力機関
	東京大学 情報基盤センター	協力機関
	東京大学 大学院工学研究科	協力機関

	実施機関／協力機関	備考
	東京大学 大学院新領域創成科学研究科	協力機関
	東京大学 物性研究所	協力機関
	東京理科大学理学部応用化学科	協力機関
	株式会社東芝	協力機関
	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構	協力機関
	東レ株式会社	協力機関
	トヨタ自動車株式会社	協力機関
	名古屋工業大学 大学院物質工学専攻	協力機関
	名古屋大学 情報基盤センター	協力機関
	名古屋大学 未来材料・システム研究所	協力機関
	株式会社日産アーク デバイス機能解析部	協力機関
	日東電工株式会社	協力機関
	福井大学 大学院工学研究科	協力機関
	富士フイルム株式会社	協力機関
	物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点	協力機関
	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点	協力機関
	ブリヂストン株式会社	協力機関
	三重大学 大学院工学研究科	協力機関
	三菱ケミカル株式会社	協力機関
	三菱樹脂株式会社	協力機関
	横浜国立大学 大学院工学研究院	協力機関
	理化学研究所 計算科学研究センター	協力機関
サブ課題C	岡山大学	分担機関 (サブ課題責任者) 田中 秀樹
	北海道大学	分担機関 (サブ課題実施者) 武次 徹也
	早稲田大学	分担機関 (サブ課題実施者) 中井 浩巳
	自然科学研究機構 分子科学研究所	分担機関 (サブ課題実施者) 奥村 久士
	株式会社IHI 技術開発本部 基盤技術研究所	協力機関
	Oak Ridge National Laboratory、米国	協力機関
	岡山大学 大学院自然科学研究科	協力機関
	京都大学 大学院工学研究科/WPI-iCeMS	協力機関
	京都大学 大学院工学研究科	協力機関
	慶應義塾大学 理工学部 機械工学科	協力機関
	産業技術総合研究所 機能材料コンピュータリサーチ研究センター	協力機関
	首都大学東京 都市教養学部	協力機関
	新日鐵住金株式会社 先端技術研究所	協力機関
	成均館大学校、韓国	協力機関
	台湾國立交通大學、台湾	協力機関
	太陽誘電株式会社	協力機関
	(公財)地球環境産業技術研究機構(RITE) 化学研究グループ	協力機関
	東京大学 大学院理学系研究科化学専攻	協力機関
	東北大学 流体科学研究所	協力機関
	パナソニック株式会社	協力機関
	物質・材料研究機構	協力機関
	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点	協力機関
	北海道大学 情報基盤センター	協力機関
	北海道大学 触媒科学研究所	協力機関
	北海道大学 大学院工学研究院	協力機関
	北海道大学 大学院理学研究院	協力機関
	三菱ケミカル株式会社	協力機関
	早稲田大学 先進理工学部	協力機関

(別紙 5)

用語の説明書

[アルファベット順]

CO₂ 分離・回収技術

工場や発電所などの発生源で化石燃料の燃焼により生じる排ガスから温室効果ガスの主成分である CO₂ を大規模かつ選択的に取り除くことで大気中への放出を抑制する。地球温暖化問題の有効な対策法として注目を集めており、例えば分離・回収に続く輸送、貯留を含めた CCS (Carbon Capture and Storage) は、2050 年までの CO₂ 累積排出削減量の 14 % に寄与する技術であると国際エネルギー機関の CO₂ 放出削減シナリオでは試算されている。実用化に向けて、アミンと CO₂ の化学反応を利用する化学吸収法などの技術開発が進んでいるが、CO₂ 削減効果に対するエネルギーコストが高く早急な効率改善が望まれている。

DC-DFTB-K

密度汎関数強束縛 (DFTB) 法に分割統治 (DC) 法を組み合わせることにより線形スケーリングを達成し、さらに、京コンピュータなどの超並列環境に適したアルゴリズムを採用している。化学反応を伴う分子動力学 (MD) シミュレーションで威力を発揮する。

GELLAN

超高精度量子化学計算ソフトウェア、F12 理論を含むポストハートリー・フォック法の超並列計算、任意の励起状態の計算を可能にする量子モンテカルロ (MS QMC) 法、対称性射影演算子を活用した強電子相関問題への拡張や一般化混成軌道法によるマルチスケールモデル等の機能を有している。

GRRM

反応経路自動探索法のプログラム。電子状態計算ソフトウェアと連結して利用し、化学反応の遷移状態構造と反応経路を恣意性なく網羅的に自動探索する。

MODYLAS

汎用分子動力学計算ソフトウェア、材料・ナノ・バイオ分野における分子動力学計算に必要な各種手法を備えている。また、FMM 法に基づいた長距離力の計算により高効率の超並列計算を実現し、1 億原子を超える大規模系の長時間計算が可能。

NTChem

汎用の量子化学計算ソフトウェア、大規模分子の基底・励起状態の電子状態と化学反応計算、重原子分子計算、様々な物性値計算を可能とする。「京」の 71,288 ノードを使用した 9,840 原子軌道の計算において 32% の実行効率を達成。

RedMoon

Red Moon 法 (混合 MC/MD 反応法) のアプリケーションプログラム。電極-電解液界面系での反応シミュレーションを可能とする。

SMASH

大規模並列電子状態計算プログラム、Hartree-Fock、DFT や MP2 エネルギー及び分子構造計算が可能。機能毎にモジュール化されており、他のアプリケーションプログラムとの連携が容易である。

stat-CPMD

第一原理計算コード CPMD をベースに、機能を追加し「京」向けに高速化・高次並列化したアプリケーションプログラム。「京」において数千原子サイズの系の第一原理分子動力学サンプリングを、10 sec/step 前後で実現している。さらに並列化された反応自由エネルギープロファイル計算機能を実装している。

STATE

第一原理分子動力学計算のための計算アプリ。特に、金属電極を含んだ計算を可能とする。

[五十音順]

イオン液体 (Ionic Liquid, IL)

カチオン・アニオンのみから構成される熔融塩であり、特に室温付近に融点を持つイオン液体 (RTIL) が研究の中心となっている。不揮発性、高い熱・化学的安定性、イオン組み合わせによる特性の制御などの特徴が知られており、水や有機溶媒に続く溶媒として関心を集めている。

開放電圧

何も接続していない開放状態での電圧のこと。太陽電池が起こす最大限の電圧と見なすことが出来、性能の目安となる。

金属有機構造体 (Metal Organic Framework, MOF)

金属イオンと有機配位子間の相互作用により形成される周期性の高い結晶性化合物である。構成要素の種類によって形状の精密制御が可能であるという特徴を有する。架橋構造であるため内部に空間を持ち、それを活かしたガス分子の吸着や触媒反応の反応場への適用が期待されている。

空間電荷層

二つの物質が接触する界面に生じる電荷が集積したり欠乏したりする領域。通常は電子について用いられる。

固体高分子形燃料電池

水素イオン輸送型の燃料電池。低温動作し、しかも高速な運転の開始停止ができるため、車載用の燃料電池としての用途がある。電極触媒として白金合金を用いるため高価で、普及を図るためには白金使用量を減らす必要がある。

次世代二次電池

リチウムに代わって、資源がより豊富で偏在化していないナトリウムを利用したナトリウムイオン電池、劣化の主要因となっている電解液をより安全・安定な無機固体電解質に置き換えた全固体電池などを指す。その先に 1 価イオンの代わりに Mg などの 2 価イオンを用いた多価イオン電池やリチウム酸化物を正極に用いて蓄電エネルギーを理論的に 10 倍程度に押し上げられるリチウム空気電池などもその次の世代として検討されている。

ゼオライト

ケイ素とアルミニウムが酸素を介して結合することにより形成される多孔質な結晶構造である。天然鉱物として産出されるものばかりでなく、人工的に合成することも可能である。イオン交換材料や吸着剤、触媒など多方面に幅広く利用されている。

セミクラスレート

メタンハイドレートと同様に水とゲスト分子から成るが、ゲスト分子は籠に入りきらないほど大きく、水分子の一部をゲストが置き換えたうえで、空洞も占有しているハイドレートである。ゲスト分子の選択により、融解温度を氷点よりもかなり高くすることも可能であり、効率的な蓄冷材の候補である。

多核金属錯体

金属活性中心を複数含む錯体。生命現象では光化学システムを担うマンガングラスタや鉄イオウ系が代表的であり、新奇な触媒の発見が期待されている。

第一原理計算

物質内部の多数の電子の状態を量子力学的方程式に基づいて取り扱う理論である密度汎関数理論をベースにした経験パラメータを利用しない高精度な計算シミュレーション。運動方程式を用いて原子・分子のダイナミクスまで行うのが第一原理分子動力学計算。

短絡電流

外部電圧が0V時の電流であり、電流の最大値を意味する。太陽電池の特性を表す指標の一つである。

蓄冷材

ここでは、車載などの短時間冷風維持のための低温材料を指す。相転移による大きな潜熱を利用した物質が有効であり、セミクラスレートやパラフィンが候補である。

電位

電極と電解液の間の電位差のことを指す。電気化学のもっとも基本的な概念。

電荷再結合

電荷分離からキャリア移動へ辿り着く以前に生じる電荷-正孔再結合のことであり、太陽電池や光合成系の性能低下の最大の原因である。

電気二重層

固液界面に生じる電荷が集積したり欠乏したりする領域。通常溶液側のイオン分布の変調による電位変化領域を指す。

電極界面被膜 (Solid Electrolyte Interphase: SEI 膜)

リチウムイオン電池の電極上にできる、電解液分子が分解することで出来る皮膜。電解液の余剰分解を制御するための低い電気伝導性と高出力に向けたリチウムイオン高伝導性、そして繰り返し充放電に対する安定性などが求められている。

燃料電池

水素イオン (プロトン) 輸送型と酸素イオン輸送型に大別される。前者の代表格としては、燃料極 (負極) で水素イオン (プロトン) が生成し、それが固体高分子でできた電解質膜を通過して空気極 (正極) 側に移動し、空気極上で空気中の酸素と結合して水を生成することで発電する固体高分子形燃料電池がある。一方、空気極上で酸素イオンが生成し、固体酸化物電解質を通過して燃料極にてプロトンと結合して水が生成するタイプの固体酸化物形燃料電池が後者の代表格である。

分子動力学計算

原子間力を経験ポテンシャルで記述し、運動方程式を用いて原子・分子のダイナミクス・サンプリングを行う計算手法。より大規模・長時間の計算シミュレーションが可能となる。

ヘテロ接合

バンド構造の異なる半導体からなる接合であり、ダイオードや太陽電池を形成することが出来る。

メタンハイドレート

ホスト分子の水とゲスト分子であるメタンからなる結晶であり、低温・高圧下で安定に存在する。水分子どうしが水素結合をしてできた籠状の空洞にメタンは包接されている。液体の水にはメタンは殆ど溶解しない(0.001%以下)が、メタンハイドレートでは15%近くとなる。日本近海を含む地球上の様々な場所にメタンハイドレートが豊富に存在し、海底のメタンハイドレートを採掘する技術開発が進められている。また、メタンの中規模の貯蔵として、大気圧下-20℃で安定であることから、-160℃を要する液化法よりもエネルギー効率が良いとされている。

モルフォロジー

物質のメソスコピックな組織形成。有機薄膜太陽電池では励起子やキャリア輸送といった、デバイスの性能を決定付ける大きな要因である。

有機溶媒

有機分子からなる液体。水に比べて高電圧まで分解耐久性があることから、高電圧が特徴のリチウムイオン電池に多用される。一方、燃えやすいという欠点も持つ。

リチウムイオン二次電池

リチウムイオンを用いた充電電池。リチウム酸化物の正極、炭素系物質の負極の間にリチウム塩（リチウムイオンと陰イオンの化合物）を溶かした有機溶媒系の電解液と高分子膜でできたセパレータを挿入したものが代表的な構成。重量あたりの蓄電エネルギーが大きい特徴を持つ。しかし電解液の劣化、リチウムイオン材料のコストといった技術的課題も残っている。