

令和2年度高性能汎用計算機高度利用事業  
「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた  
計算・データ材料科学研究」  
成果報告書

令和3年5月28日  
国立研究開発法人 物質・材料研究機構

館山 佳尚



## 目次

補助事業の名称	1
1. 補助事業の目的	1
2. 令和2年度（報告年度）の実施内容	1
2-1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画	1
2-2. 実施内容（成果）	6
(1) 研究開発	6
A) 二次電池	6
B) 燃料電池	20
C) データマネジメントに係る取組	29
(2) プロジェクトの総合的推進	31
2-3. 活動（研究会の活動等）	33
2-4. 実施体制	34
3. 学会等発表実績	35
(1) 活動報告	35
(2) 学会等発表実績	56
[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載	56
[2] 学会等における招待講演・口頭発表・ポスター発表	60
① 招待講演	60
② 口頭発表	62
③ ポスター発表	66
[3] プレス発表	67
(3) 特許出願状況	68

## 補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

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

### 1. 補助事業の目的

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

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

### 2. 令和2年度（報告年度）の実施内容

#### 2-1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画

令和2年度は、重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを利活用し、世界最高水準の研究開発成果の創出に取り組む。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施する。以下に具体的な事業実施内容について記載する。

#### (1) 研究開発

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

#### A) 二次電池

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

#### サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

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

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

#### ①高機能電解液系等の界面におけるイオン輸送・反応機構の第一原理解析

高濃度電解液ではイオン伝導機構に関して様々な仮説が存在する。これらについて、電子状態と分子動力学 (MD) を同時に扱う第一原理 MD サンプリングを stat-CPMD を用いて実行し、微視的機構の理解を深化させる。さらに多様な電解液について界面付近における脱溶媒和反応、イオン・電子移動反応の解析を stat-CPMD 等を用いて実行し、電極界面におけるイオニクスの微視的機構を明らかにする。

## ②電極—電解質界面モデルでの大域的界面構造の解析

Red Moon 法に定電位 (静電ポテンシャル) 法を組み合わせ、現実の充電条件 (電位依存等) を反映したシミュレーションを実現する。さらに、充電電位に伴って変化する電極分極を考慮し Red-Moon(RM) シミュレーションを実行して高濃度化した電解液系の Solid Electrolyte Interphase (SEI) 膜形成のための最適化条件を探る。

## ③反応経路自動探索法を用いた、電解質溶液の電極電位に依存した分解反応経路探索

電極電位を制御しながら電気化学反応をシミュレートすることが可能な ESM-RISM プログラムを用いて電解質溶液の分解反応を扱い、その反応経路を探索する手法を確立する。これにより、電極電位に依存した分解反応の詳細を明らかにし、電解質及び電極表面の設計指針を提示する。

## ④二次電池系の溶媒和イオン液体や有機電解液の古典力場のデータ科学的手法による最適化

二次電池電解液系を対象に、溶媒和イオン液体や有機電解液の古典 MD 計算の力場パラメータをデータ科学的手法により最適化する。これにより、AMOEBA 型の力場を用いて密度汎関数法での分子ダイナミクスを再現できるようにする。得られた力場パラメータを用いて、広範囲の濃度条件での大規模かつ長時間の古典 MD シミュレーションを実施する。計算結果をトポロジカルデータ解析などの手法で調べ、系のイオン伝導に影響する潜在的な因子を解明する。

(研究協力機関：国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学院情報学研究科、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

## サブテーマ A-2 「二次電池・全固体電池」

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

令和 2 年度においては、本サブテーマは以下の成果を目指して研究を遂行する。

### ①全固体電池固体電解質界面の反応・イオン輸送機構の解析

硫化物電解質—電極間の安定構造、界面イオン輸送、緩衝層効果について、最新の界面構造探索手法 (ヘテロ界面 CALYPSO 法) を用いた第一原理計算解析を実行し、微視的機構の解明を進める。

さらに酸化物電解質—酸化物正極界面についても同様の第一原理計算解析を実行し、電極界面・粒界とイオン輸送の相関について吟味する。また硫化物・酸化物とも高性能電解質のための主要因子抽出や材料探索を行う。

## B) 燃料電池

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

### サブテーマB-1 「燃料電池の電極界面反応」

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

令和2年度においては、本テーマを以下の3つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を遂行する。

#### ①反応エネルギー計算に基づく酸素還元活性の予測手法の確立

第一原理による反応エネルギー計算に基づく酸素還元活性の予測手法を確立し、酸化物表面における遷移金属不純物および酸素欠陥との関連を解明する。そこから得られる活性向上指針を連携実験家に示す。

#### ②第一原理計算によるグラフェン担持単原子系電極における反応機構解明

グラフェンエッジに結合した単原子触媒における酸素還元反応、およびCO酸化反応についてその反応過程を調べる。グラフェンの担体効果に加えて、溶媒を含めた大規模な第一原理電子状態計算を実行し、実験グループとの協働によりその反応機構の全貌を明らかにする。

#### ③ドーパされたグラフェンにおける単原子触媒の安定構造や電子状態の解析

窒素、ホウ素、酸素、水酸基などがドーパされたグラフェンに単原子触媒が結合する構造、安定性、電子状態を第一原理電子状態計算により求め、実験的研究との整合性について確かめ、ドーパントの役割を明らかにする。

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

### サブテーマB-2 「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」

電解質膜バルクや電極4相界面そのものがプロトン、酸素、水素といった活物質の輸送を担い、分子レベルの機能としてこれを制御している。このため、電解質膜や4相界面のより一層の高性能化、高耐久性化、薄膜化、コストダウンがさらなる実用化、普及に向けた大きな課題となって

いる。そのため、全原子 MD シミュレーションによる、高分子電解質膜のプロトンや水素、酸素の輸送係数の予測や力学特性の評価を迅速に行う技術、また燃料電池界面における物質輸送の微視的な機構からの高性能電極界面の設計技術を確立し、企業等へと技術移転を行う。

令和2年度においては、本サブテーマは以下の成果を目指して研究を遂行する。

#### ①中規模電解質膜モデルでのプロトン、酸素、水素輸送の解析技術の確立

「富岳」実機を用いて MODYLAS のチューニングを行い、高並列、高速計算プログラムを完成させる。また、 $10^6$ 原子規模の高分子電解質膜バルクモデルを用いて、位置に依存するプロトン、酸素、水素の拡散係数と自由エネルギーの評価技術を確立する。

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

#### C) データマネジメントに係る取組

材料分野のデータレポジトリを構築している物質・材料研究機構のデータプラットフォームセンター(DPFC)と連携し、データの蓄積・共同研究内再利用と一般公開システムへの連携について構築する。

令和2年度においては、以下の成果を目指して研究を遂行する。

①研究者間でデータ(シミュレーション結果等)を共有するフローを DPFC と検討し、共有システムのプロトタイプを作成する。

#### (2) プロジェクトの総合的推進

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

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

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

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

(研究協力機関：国立大学法人東京大学物性研究所、国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科、国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学大学院情報学研究科、国立大学法人大阪大学大学院工学研究科、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

## 2-2. 実施内容（成果）

### （1）研究開発

令和2年度は、重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを活用し、世界最高水準の研究成果の創出に取り組んだ。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施した。以下に具体的な成果について記載する。

#### A) 二次電池

##### サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

###### ①高機能電解液系等の界面におけるイオン輸送・反応機構の第一原理解析

[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

###### [実施概要]

令和2年度は、有力な分子結晶における特異な Li イオン伝導機構および Mg 金属電池に対する有力電解液における Mg イオン伝導・溶媒和機構について、高精度力場および CPMD/stat-CPMD による分子動力学計算を行い、新原理を提示した。特に後者は、次世代 Mg 金属電池応用の成否を握る電解液であり応用上のインパクトが高い。

###### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

新規分子性結晶については Li 塩 108 分子とスクシノニトリル(SN)溶媒 216 分子を合わせて 3,000 原子以上のスーパーセルを構築し、高精度化した力場による高速 MD サンプルングを行った。Mg 金属電池向け有望電解液については嵩高いアニオン[B(HFIP)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>とエーテル系鎖状溶媒 G3 という複雑な系で最低 500 原子のスーパーセルと多数の異なる初期構造を用いた第一原理 MD サンプルングが必要となる。それに対して、「京」・「富岳」向けのチューニングを実施してきた CPMD/stat-CPMD を用いることで、並列性・高速性が担保された第一原理 MD 計算が実行可能となった。

###### [研究成果]

現行の Li イオン電池で用いられている有機電解液は、イオン伝導度は高いものの、安全性や耐久性の面で多くの課題がある。それを解決すべく様々な電解液・電解質が提案されているが、最近高いイオン伝導度を有する有機分子結晶 LiFSA/SN<sub>2</sub>が報告された。しかしその分子構造は MOF (Metal Organic Framework) 形式を持ち、Li イオンも骨格に含まれることから、高いイオン伝導度の起源については謎であった。そのイオン伝導機構を明らかにすべく我々は高精度化した力場を用いた長時間 MD サンプルング解析を「富岳」等を用いて実行した。十分なサンプルングや様々な条件での仮想実験を行った結果、この MOF 骨格を構成する溶媒 SN のスイング動作が同じく骨格内の Li イオンを高速に輸送しうることを実証した (図 2-2-1-A-3)。得られた知見は連携する科研費新学術領域「蓄電固体界面科学」の高速イオン伝導を有する有機分子結晶研究に対して指針を与えるものとなっている。

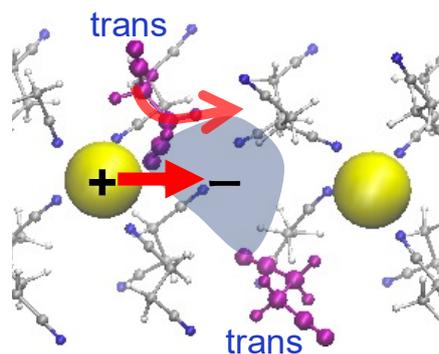


図 2-2-1-A-3. 計算により得られた LiFSA/SN<sub>2</sub> 分子結晶における高速 Li イオン伝導メカニズム。SN 分子のスイングが重要な役割を果たす (Li イオン : 黄)。

次世代蓄電池の一つとして、高エネルギー密度が期待できる Mg 金属電池がある。しかし、Li イオンと異なり Mg イオンは+2 価であることから、他のイオンとの静電相互作用が強すぎて蓄電池動作はほとんど実証できていない。最近この Mg 金属電池の動作を可能にする電解液 Mg[B(HFIP)<sub>4</sub>]<sub>2</sub>/G3 の開発が報告された。しかし、なぜこの電解液が良いパフォーマンスを示すのかについては不明のままであった。我々は「富岳」等を用いた CPMD/stat-CPMD による第一原理 MD サンプリングをこの複雑系に適用し、Mg イオン周辺の溶媒和構造の特徴として完全解離 (または溶媒が介在するイオンペア) 状態になること、還元に強い溶媒が Mg イオン周辺に配位することで、電解液全体の還元分解を抑えていることが明らかになった (図 2-2-1-A-4)。さらに我々は Mg イオンの輸送特性についても解析を進行中である。これらの結果は連携する JST ALCA-SPRING の Mg 金属電池の実用化に向けた材料設計に対して重要な知見を与える。

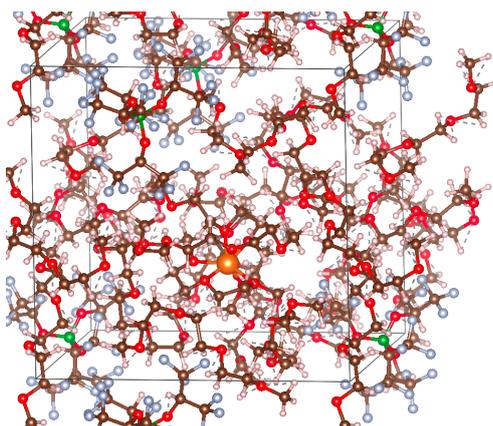


図 2-2-1-A-4. 第一原理 MD 計算から提示された次世代 Mg 金属電池の有力電解液である Mg[B(HFIP)<sub>4</sub>]<sub>2</sub>/G3 電解液の特徴的な溶媒和構造 (Mg : オレンジ、O : 赤、C : 茶、F : 青、B : 緑、H : 白)。

[研究成果の社会実装について]

- ・ JST ALCA 次世代蓄電池 (ALCA-SPRING) : Mg 金属電池実用化に資する最有力電解液の微視的機構解明、有力材料探索
- ・ 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 触媒・電池元素戦略研究拠点」: 最高レベルエネルギー密度を有する難黒鉛化炭素負極の充放電機構の解明
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究> 「蓄電固体界面科学」: 様々な全固体電池正極-固体電解質界面の電子・イオン移動に関する基礎学理構築

[参考文献]

- [1] R. Sasaki, M. Moriya, Y. Watanabe, K. Nishio, T. Hitosugi, Y. Tateyama, “Peculiarly fast Li-ion conduction mechanism in a succinonitrile-based molecular crystal electrolyte: a molecular dynamics study”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 14897-14903 (2021).

## ②電極—電解質界面モデルでの大域的界面構造の解析

[担当責任者] 長岡正隆 (名古屋大学大学院情報学研究科)

### [実施概要]

LAMMPS を用いた、定電荷法に基づいたハイブリッド並列計算と定電位法に基づいたフラット MPI 並列計算を「富岳」「不老」で実行可能にし、この LAMMPS をベースとした RedMoon アプリを用いた Red-Moon (RM) シミュレーションも実行可能にした。定電位 RM シミュレーションでは定電荷のものとは比べて、無機物が負極近傍により多く存在する結果となった。これは実験結果と一致している。つまり、定電圧条件により可変になる電極表面電荷の影響によって、計算結果と実験結果との、より定量的な一致が期待できると言える。

### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

計算モデルはエチレンカーボネート (EC) 1,700 分子、Li イオン 134 分子、PF<sub>6</sub><sup>-</sup> 134 分子、電極炭素 7,040 原子分子、合計 25,112 原子からなる系である。利用アプリケーションは当研究室で開発した RedMoon アプリと定電位法を実装した LAMMPS である。

### [研究成果]

LAMMPS を用いた、定電荷法に基づいたハイブリッド並列計算と定電位法に基づいたフラット MPI 並列計算を「富岳」「不老」で実行可能にし、この LAMMPS をベースとした RedMoon アプリを用いた RM シミュレーションも実行可能にした。これにより、従来よりも高速に RM シミュレーションを行うことが可能となった。このことは、RM シミュレーションの結果が統計的に有意であることを示すために、独立した初期条件で作成した複数 (最低 10 個) の計算を行うべきという観点から、非常に重要である。

またこれらのアプリを用いて、EC 系電解液からなる Li イオン電池における、実際の充電方法の一つである定電圧充電に対応する Solid Electrolyte Interphase (SEI) 膜形成 RM シミュレーションを行い、その結果を定電荷法によるものと比較することで、定電位法の有効性を調査した。定電位・定電荷 RM シミュレーションにより形成した SEI 膜を解析した結果、その構成分子の分布に違いが見られた。具体的には、定電位法では CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> が負極近傍により多く存在し、また EDC<sup>2-</sup> (ethylene dicarbonate) の存在量がより少なくなっていることが明らかとなった (図 2-2-1-A-3, 図 2-2-1-A-4)。この結果は無機物が負極近傍に存在するという実験結果と一致している。すなわち、定電位法を用いた RM シミュレーションを行うことで、定電圧条件により可変になる電極表面電荷の影響によって、計算結果が実験結果とより定量的に一致することが期待できる。

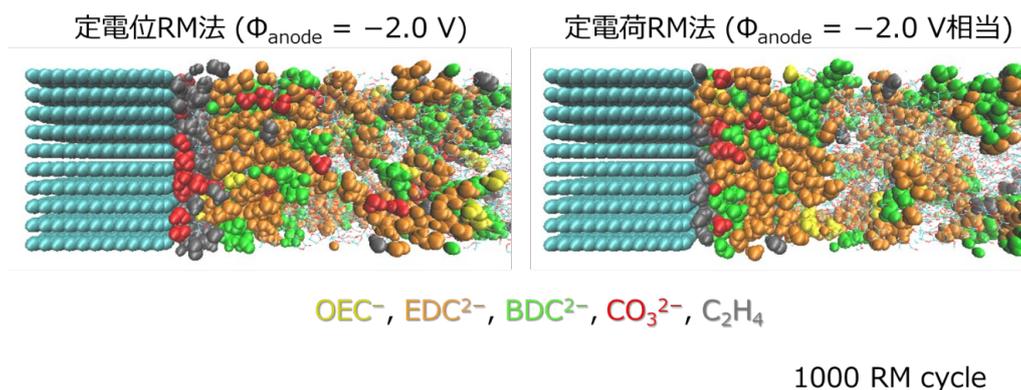


図 2-2-1-A-3. 定電位法と定電荷法を用いた RM シミュレーションの 1000 RM サイクルでのスナップショット。定電位法では定電荷法よりも炭酸イオン(CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>)が負極近傍に多く存在していることがわかった。

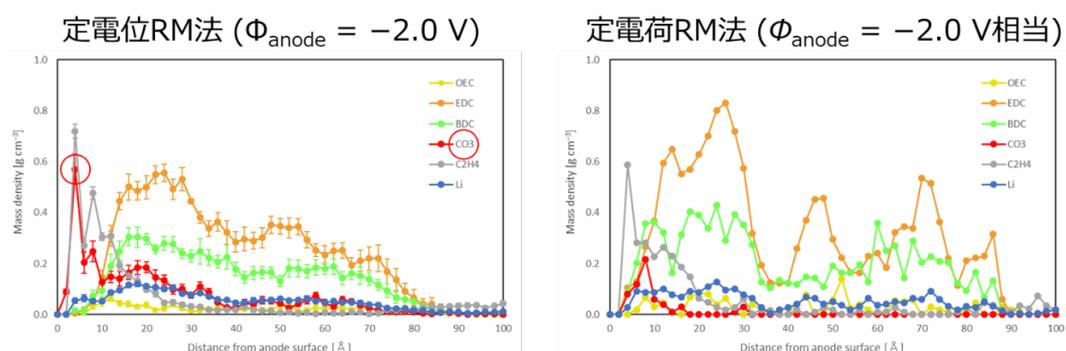


図 2-2-1-A-4. SEI 膜構成分子の数密度分布。定電位法では定電荷法よりも負極近傍での CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> のピークが大きく、また EDC<sup>2-</sup> のピークが小さくなっている。この結果は無機物(CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>)が負極近傍に存在するという実験結果と一致している。

[研究成果の社会実装について]

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

[参考文献]

- [1] A. Bouibes, S. Saha, M. Nagaoka, “Theoretically Predicting the Feasibility of Highly-Fluorinated Ethers as Promising Diluents for Non-flammable Concentrated Electrolytes”, *Scientific Reports*, **10**, 21966 (2020).

### ③反応経路自動探索法を用いた、電解質溶液の電極電位に依存した分解反応経路探索

[担当責任者] 大谷実 (産業技術総合研究所)

#### [実施概要]

ESM-RISM 法を実装したプログラムを実際の電気化学界面における問題に適用しつつ、反応経路探索プログラムの動作確認を実施した。ESM-RISM 法の計算精度の確認および金属/水界面における腐食反応を調べ、主に次の知見を得た。ESM-RISM 法による溶媒和自由エネルギーは従来の暗黙的溶媒模型のそれより高精度で計算可能である。ESM-RISM 法と反応速度論モデルを組み合わせることで実験結果と整合する腐食電位を得ることができる。

#### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

Quantum ESPRESSO (ESM-RISMver) を使用し、以下のような計算モデルを用いて計算を実行した。

51 原子からなる Cu(111) 表面+H<sub>2</sub>O 分子模型、およそ 50 から 100 原子からなる Al(111) と Al(100) 表面模型、数原子から 100 原子程度からなる CO<sub>2</sub> 還元反応 (CO<sub>2</sub>+BH<sub>4</sub><sup>-</sup>+(n-1)H<sub>2</sub>O →BH<sub>3</sub>OH<sub>2</sub>+HCOO<sup>-</sup>+nH<sub>2</sub>O) 模型など。以上の模型に対して数 10 パターンから 100 パターン程度の計算条件でサンプリングした。

#### [研究成果]

令和 2 年度は、反応経路自動探索法の計算エンジンとして動作する ESM-RISM 法を実装した Quantum ESPRESSO コードの最適化及び反応経路自動探索法の動作確認を行った。また、最適化したコードに実装されている ESM-RISM 法の計算精度の確認と実際の電気化学界面への応用として、Al/NaCl(aq) 界面における腐食電位の計算を行った。

ESM-RISM 法の計算精度の確認では、様々な明示的溶媒和構造に対して、ESM-RISM 法と従来の暗黙的溶媒和模型によって求めた溶媒和自由エネルギーを調べた。計算は、バルク溶液中の CO<sub>2</sub> の還元反応を対象に行なった。暗黙的溶媒模型による計算から得られた溶媒和自由エネルギーを、第一原理分子動力学法の結果と比較した。その結果、ESM-RISM 法は精度よく溶媒和自由エネルギーを計算することが可能であることがわかった。このことから、溶液分子やイオンの構造を考慮する理論である ESM-RISM 法は溶媒和構造を比較的精度よく再現していると考えられる。また、カウンターイオンや第一溶媒和圏の水分子を明示的に配置したモデルに対する計算結果はどの暗黙的溶媒模型でも非常に近い値となった。このことから、連続体近似を用いるタイプの暗黙的溶媒模型は注目する分子から見た第一溶媒和圏より遠くのバルク溶液の効果を良く記述するモデルとなっていると考えられる。従って、ESM-RISM 法は連続体近似を用いるタイプの暗黙的溶媒模型と比較して、第一溶媒和圏の溶媒和構造を比較的精度よく記述していると考えられる (図 2-2-1-A-5) [1]。

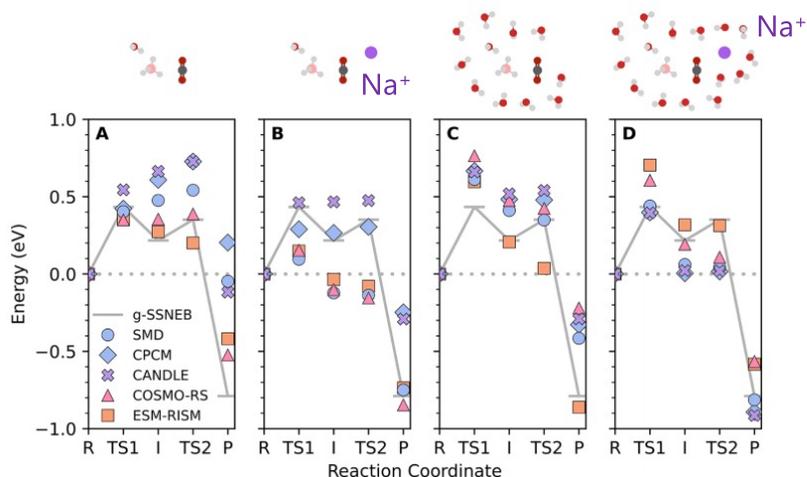


図 2-2-1-A-5. 様々な暗黙的溶媒和模型により計算した反応座標に沿ったエネルギープロファイル。

Al/NaCl(aq) 界面における腐食電位の計算では、酸性水溶液と Al 電極界面における腐食反応モデルの構築と速度論をベースとした Tafel 式から腐食電位を計算する方法を提案した。腐食反応では、一般に考えられるアノード反応:  $\text{Al(s)} \rightarrow \text{Al}^{3+}(\text{aq}) + 3\text{e}^{-}(\text{M})$  に加えて、NaCl 水溶液中の  $\text{Cl}^{-}$  が  $\text{Al}^{3+}$  と反応して錯体を形成する反応に対しても腐食反応モデルを考えた。次に ESM-RISM 法から得られた腐食反応に対するアノードとカソード反応の平衡電位から、腐食電位を Tafel 外挿法から反応速度論に基づく形式で計算する方法を考えた。以上のようなモデルを用意し、ESM-RISM 法から腐食電位計算を行い、実験結果と比較した。得られた腐食電位は電位制御によって Al 表面を清浄化した実験結果とコンシステントな結果が得られた (図 2-2-1-A-6) [2]。

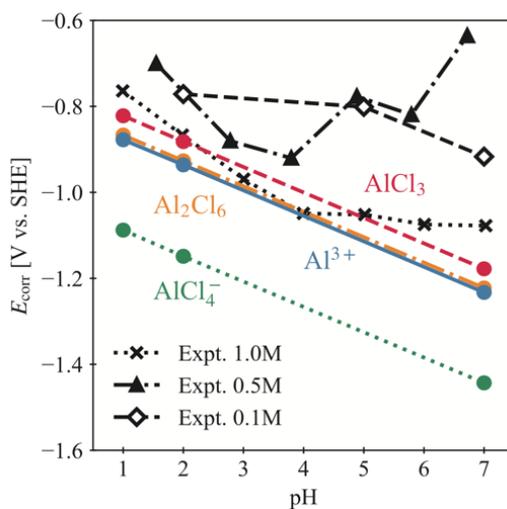


図 2-2-1-A-6. Al/NaCl(aq) 界面における腐食電位の計算結果。

[研究成果の社会実装について]

下記の企業や機関と連携

- ・ 産業界：神戸製鋼所、クニミネ工業、(株)UACJ など
- ・ 理論研究：日本原子力研究開発機構、ピッツバーグ大など

[参考文献]

- [1] Alex M. Maldonado, Satoshi Hagiwara, Tae Hoon Choi, Frank Eckert, Kathleen Schwarz, Ravishankar Sundararaman, Minoru Otani and John A. Keith, “Quantifying Uncertainties in Solvation Procedures for Modeling Aqueous Phase Reaction Mechanisms”, *J. Phys. Chem. A* **125**, 154 (2021).
- [2] Koichi Kano, Satoshi Hagiwara, Takahiro Igarashi and Minoru Otani, “Study on the free corrosion potential at an interface between an Al electrode and an acidic aqueous NaCl solution through density functional theory combined with the reference interaction site model”, *Electrochimi. Acta* **377**, 138121 (2021).

#### ④二次電池系の溶媒和イオン液体や有機電解液の古典力場のデータ科学的手法による最適化

[担当責任者] 赤木和人（東北大学材料科学高等研究所）

##### [実施概要]

第一原理計算を参照系として、遺伝的アルゴリズムにより力場パラメータを最適化する手法を確立した。LiBF<sub>4</sub>/EC系に適用したところ、広い濃度範囲でイオン伝導度が実験と良い一致を示した。そのミクロな構造解析によって電解液探索の指針となる知見を得た。また、マグネシウム塩を含む固体電解質の評価も実施した。

##### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

計算モデル：

- ① LiBF<sub>4</sub>/EC：第一原理計算は約 400 原子系、古典 MD 計算は約 4,000 原子系
- ② Mg(BH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>BH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>：第一原理計算は約 300 原子系、古典 MD 計算は約 6,000 原子系

利用アプリケーション：

- ・ VASP（第一原理計算）
- ・ Tinker（AMOEBA 力場の古典 MD 計算）
- ・ in-house コード（遺伝的アルゴリズムによる力場パラメータ最適化）

##### [研究成果]

系のエネルギーと個々の原子に働く力の両方を参照するように拡張した遺伝的アルゴリズムを用いて、第一原理 MD 計算での分子ダイナミクスを再現するように古典力場パラメータを最適化する枠組みを作成した（図 2-2-1-A-7）。約 400 原子の LiBF<sub>4</sub>/EC 系を対象に、van der Waals 相互作用を記述できる rev-vdW-DF2 汎関数に対して AMOEBA 力場の最適化を行い、イオンの溶媒和構造や動径分布関数などの顕著な改善が確認できた。

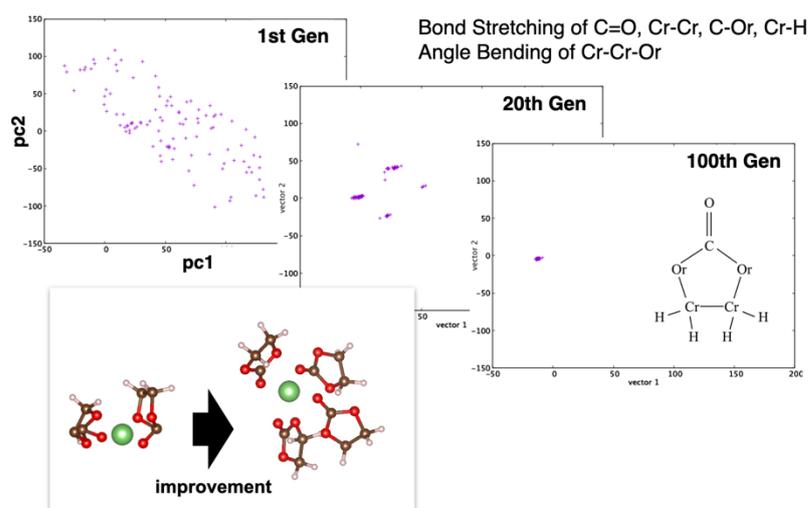


図 2-2-1-A-7. 遺伝的アルゴリズムによる力場パラメータ進化の「遺伝子ベクトル」主成分分析による 2 次元マップ。

この力場を用いて LiBF<sub>4</sub>/EC 系の 0.1M から 3.0M までの広い濃度領域で約 4,000 原子・10 ナノ秒の MD 計算を行ったところ、各測定濃度において実験値と良い一致を示すイオン伝導度が得られた (図 2-2-1-A-8)。そこで、イオン伝導度に影響を与える因子を解明するために、拡散挙動に関する諸量とミクロな構造を詳細に調べると、カチオンとアニオンの会合度、およびイオンに対する EC 分子の脱着頻度という 2 つの要素が重要であることが示唆された。前者は Li イオンの有効濃度に関係しており、クラスタではアニオンの数比が大きくなる傾向があるため高濃度でも一定の割合で単独の Li イオンが存在する様子が見られた。後者は Li イオンがいわゆる vehicle モデルのみで移動するのではなく、溶媒と構造の組み替えの寄与も無視できないことを示す新しい知見である。このことは、カチオン-アニオン間、およびイオン-溶媒分子間の相互作用エネルギーなどに基づいて有力な候補となる系をデータ科学的に選定するための指針を与えるものと期待される。

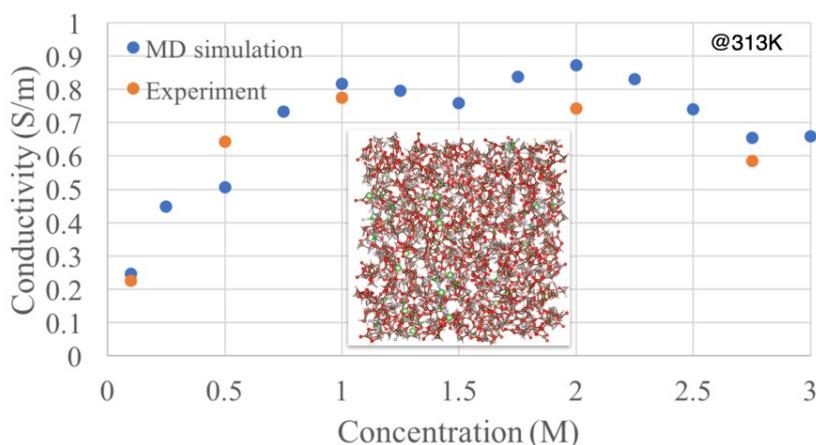


図 2-2-1-A-8. 最適化された AMOEBA 力場による MD 計算で得られた LiBF<sub>4</sub>/EC 系の Li イオン伝導度の濃度依存性 (計算値：青、実験値：橙)。

また、多価イオンを含む系への本手法の適用可能性を調べるため、マグネシウム塩を含む固体電解質系 Mg(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>BH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>の評価も試行した。約 6,000 原子の系で結晶、アモルファス、結晶モデル界面における Mg イオンの拡散挙動を調べたところ、界面が主な拡散経路となることを示す結果が得られ、インピーダンス測定などの実験結果と整合した。

[研究成果の社会実装について]

- ・ 東北大学材料科学高等研究所 (AIMR) の折茂グループ (新学術領域研究：ハイドロジェノミクス) との水素化ホウ素系固体電解質の共同研究
- ・ 大谷グループの ESM-RISM 法における相互作用パラメータ (力場) の改良
- ・ Cambridge 大学の James Elliott グループとのプロトン伝導膜の共同研究 (粗視化パラメータの生成)

[参考文献]

- [1] Gao Xichan, 赤木和人：第61回電池討論会（2020年11月19日）
- [2] 赤木和人：電気化学会東北支部 第51回セミコンファレンス（2020年12月6日）

## サブテーマA-2 「二次電池・全固体電池」

### ①全固体電池固体電解質界面の反応・イオン輸送機構の解析

[担当責任者] 館山佳尚 (物質・材料研究機構)

#### [実施概要]

全固体電池実用化の有力な候補となる酸化物系固体電解質 LLZO やリン酸系固体電解質 LATP とその電極界面に対して、ヘテロ界面 CALYPSO 法による第一原理計算を適用し、界面のイオン輸送やアニーリング反応について新原理を提示した。また世界最高イオン導電率を持つ Na 系硫化物固体電解質の第一原理 MD 解析から、イオン導電率を決めるあらたな記述子を明らかにした。

#### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

全固体電池は固体系であることと遷移金属を含むことから主に VASP を用いた計算実行を行った。LiCoO<sub>2</sub>正極-LATP 固体電解質界面では、計算が困難な遷移金属を含む 360 原子の界面スラブと真空領域を含むスーパーセルを用いて、多数のイオン配置の計算を高効率に実行した。Na イオン系硫化物固体電解質群 Na<sub>3-x</sub>M<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub>S<sub>4</sub> の記述子探索では拡散係数計算のために複数初期構造かつ長時間の第一原理 MD サンプリングを行う必要があり、そのためスーパーセル内の原子数は 64 程度を採用した。

#### [研究成果]

全固体電池の実用化に向けたボトルネックの一つに、安定性の高いと考えられる固体電解質、特に酸化物系であっても、電極界面においては化学的・電気化学的不安定性が生じ、かつイオン輸送抵抗が高くなるという課題が存在する。その微視的機構を解明する上でまず安定な界面構造群を抽出するという作業が必要となる。そこで我々が世界で初めて開発した粒子群最適化法を取り入れたヘテロ固固界面サンプリング手法、ヘテロ界面 CALYPSO 法、を用いる。この手法は構造探索ラインを複数にすることが可能で並列化との相性も良い。本手法を用いた第一原理計算 (VASP を利用) を「富岳」等で実行することで、Li 金属負極/LATP リン酸系固体電解質/LCO 正極界面系の界面状態解析を行った。特に正極界面においては、第一原理計算がこれまで苦手としてきた温度効果について切り込み、界面形成時とアニール (昇温) 時における界面の電子およびイオン移動について多くの知見を得た (図 2-2-1-A-9) [1]。さらに提示された予測について、科研費新学術領域「蓄電固体界面科学」との連携による実験研究が行われ、確かに予測が正しいことが証明された。これらの結果を基に、界面イオン抵抗等の微視的機構に関する知見も得られた。このような固固界面解析は、計算コストは非常に高いが、「富岳」の利用によって様々な新知見が得られる可能性を秘めている。

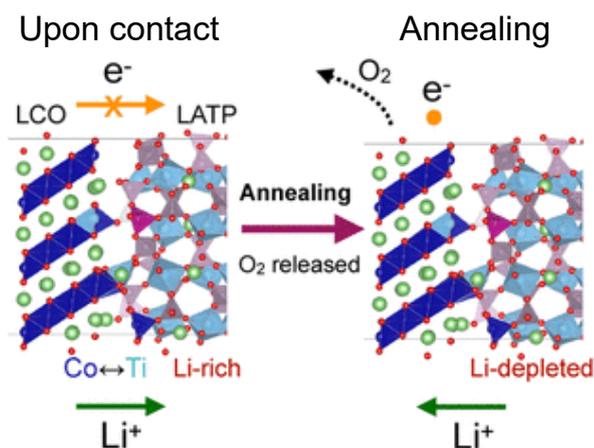


図 2-2-1-A-9. 直接界面モデルを用いた DFT 大規模計算により得られた、接触時およびアニーリング時の  $\text{LiCoO}_2$  正極-LATP 固体電解質界面の電子移動および Li イオン移動の新メカニズム。

カーボンニュートラルに向けて蓄電池大量利用が想定される中、地球上で豊富に存在する Na をベースにした蓄電池の実用化も急務と言える。その一つ、Na イオン全固体電池にむけた固体電解質の合成も盛んに行われており、近年 Na イオン系硫化物固体電解質  $\text{Na}_3\text{SbS}_4$  とその関連材料群が Na イオン系で世界最高導電率を達成したことが報告された。我々はこの材料を精査することによりイオン伝導度を決める記述子を求めることを目的に、大量・長時間の第一原理 MD サンプリングを行った。その結果 W (タングステン) 12%ドーピングによりイオン伝導度が格段にあがり、その重要因子としては従来説であるイオンがサイト間を移動する際のボトルネック体積に加えて、イオンの各サイト (Wyckoff サイト) の体積も重要な記述子であることを見出した (図 2-2-1-A-10) [2]。これらの知見は、全固体電池システム (硫化物・酸化物) の設計に対して重要な知見を提供するものとなっている。

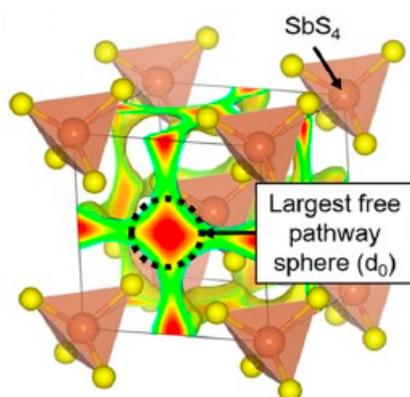


図 2-2-1-A-10. DFT-MD サンプリング計算により、Na イオン伝導の新規記述子としてえられた wyckoff サイト体積の概略図 (Sb : 茶、S : 黄)。

[研究成果の社会実装について]

- ・ 富士フイルム・奥野幸洋：全固体電池界面網羅的探索・界面制御指針獲得
- ・ JST ALCA 次世代蓄電池 (ALCA-SPRING)：酸化物系固体電解質の有力材料探索
- ・ 文部科学省・元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> 「京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点」：全固体 Na イオン電池の実用化に資する世界最高導電率固体電解質の微視的機構解明
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究> 「蓄電固体界面科学」：様々な全固体電池正極-固体電解質界面の電子・イオン移動に関する基礎学理構築
- ・ 文部科学省・材料の社会実装に向けたプロセスサイエンス構築事業「全固体電池を実現する接合プロセス技術革新」：様々な全固体電池正極-固体電解質界面の高温化における挙動に対する基礎学理構築

[参考文献]

- [1] H.-K. Tian, R. Jalem, B. Gao, Y. Yamamoto, S. Muto, M. Sakakura, Y. Iriyama, Y. Tateyama, “Electron and Ion Transfer across Interfaces of the NASICON-Type LATP Solid Electrolytes with Electrodes in All-Solid-State Batteries: A Density Functional Theory”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **12**, 54752-54762 (2020).
- [2] R. Jalem, A. Hayashi, F. Tsuji, A. Sakuda, Y. Tateyama, “First-Principles Calculation Study of Na<sup>+</sup> Superionic Conduction Mechanism in W- and Mo-Doped Na<sub>3</sub>SbS<sub>4</sub> Solid Electrolytes”, *Chem. Mater.* **32**, 8373-8381 (2020).

## B) 燃料電池

### サブテーマB-1 「燃料電池の電極界面反応」

#### ①反応エネルギー計算に基づく酸素還元活性の予測手法の確立

[担当責任者] 杉野修（東京大学物性研究所）

#### [実施概要]

燃料電池次世代型電極( $ZrO_2$ )の構造及び酸素還元反応(ORR)活性を予測するために、第一原理からのモンテカルロ計算および反応経路探索を行うことを目的とし、計算アプリの「富岳」上への導入を行うと共にスパコンでのプロダクトランを行った。酸化物表面における欠陥分布を求め、得られた構造に基づく ORR 活性に関する知見を連携する実験家に示し、今後の活性向上のための指針について議論した。

#### [成果を得るため用いた計算モデル]

計算には、空乏層とヘルムホルツ層を考慮した界面モデルを用い、第一原理からのモンテカルロ計算を行うことにより空乏層内の欠陥分布を求めることができる。欠陥として、実験では酸素空孔や異元素ドーパントの導入が検討されているが、どのような元素を用いるべきかについて計算から予測することができる。

#### [研究成果]

本研究では、燃料電池次世代型電極( $ZrO_2$ )の構造及び酸素還元反応(ORR)活性を予測し、得られた知見をもとに今後の活性向上のための議論を連携する実験家と行っていく。令和2年度はその準備のために、第一原理からのモンテカルロ計算および反応経路探索計算を実際にスパコンに導入してプロダクトランを開始すると共に、性能が「富岳」上でどこまで出せるかの調査を行った。

プロダクトランにおいては、欠陥と不純物を導入した  $ZrO_2$  の様々な表面に対して ORR 活性を調べた結果、本表面では白金合金などの金属表面と異なり、様々な活性を持つ吸着サイトが存在し、その中には白金表面より活性の高いものが含まれていることが示された。計算に用いた表面モデルとして、経験的に想定したものに加えて、第一原理からのモンテカルロ計算から求めたものに対して行い、その計算からは構造と活性との関係を示唆する結果が得られつつある(図 2-2-1-B-1, 図 2-2-1-B-2)。これら計算結果に関しては、実験家と共有しながら実験へのフィードバックを行ったり、実験結果との相違点に基づき計算条件の改善に用いたりしながら有効活用が行われている。計算、実験、産業界の連携に向けた一歩が進められたと考えている。

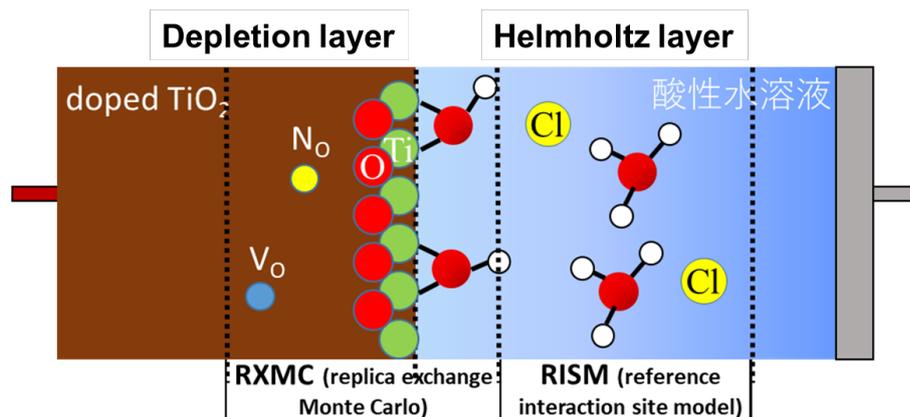


図 2-2-1-B-1. 酸化物電極の構造探索のための第一原理モンテカルロ計算。本計算ではヘルムホルツ層(Helmholtz layer)に加えて空乏層(depletion layer)を考慮した欠陥分布の予測を行う。

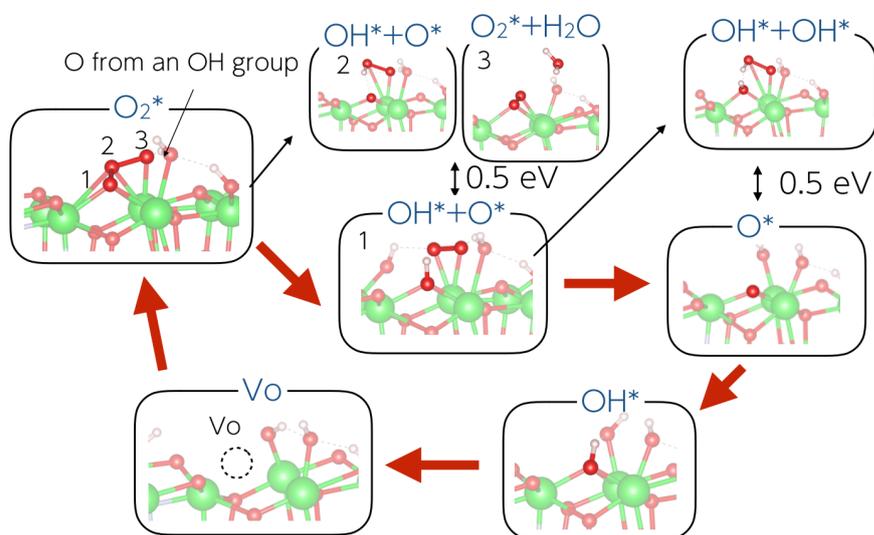


図 2-2-1-B-2. 酸化物電極での酸素還元反応経路の探索計算。第一原理計算を用いて酸素還元反応の中間体の安定性を求め、活性に関する知見を得る。

「富岳」への導入と性能調査に関しては、手持ちのワークステーションとは計算機の設定が異なるなどの原因から、並列計算時のメモリ転送が想定通りに行われず、まだアプリの調整や「富岳」の設定変更等により調整している段階である。同様の問題は当初他のスパコンでも起こったがこれについてはかなり解決している。

[研究成果の社会実装について]

NEDO のプロジェクトを通じて実験研究者や企業研究者と連携をしながら共同研究が進められている。

[参考文献]

- [1] 笠松 秀輔, 松本 潮, 小川 貴史, 桑原 彰秀, 本山 裕一, 吉見 一慶: 日本物理学会 2020 年秋期大会 (2020 年 9 月 10 日)
- [2] 春山 潤, 高木 繁治, 下田 景士, 渡邊 巖, 袖山 慶太郎, 池庄司 民夫, 大谷 実: 第 61 回 電池討論会 (2020 年 11 月 18 日)

## ②第一原理計算によるグラフェン担持単原子系電極における反応機構解明

[担当責任者] 森川良忠 (大阪大学大学院工学研究科)

### [実施概要]

令和2年度はグラフェンエッジに結合した単原子触媒における酸素還元反応、およびCO酸化反応において、まず、グラフェンの担体効果を明らかにするため、グラフェンに白金(Pt)が結合する構造について第一原理電子状態計算手法と機械学習法を組み合わせ安定状態のみならず、準安定状態も含めて明らかにした。

### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

炭素 31-38 原子、水素原子 5-12 原子、Pt 一原子からなる系を第一原理電子状態計算プログラム GPAW と機械学習法による大域的構造最適化プログラム Global Optimization with First-principles Energy Expressions (GOFEE)を使用。

### [研究成果]

令和2年度はグラフェンエッジに結合した単原子触媒における酸素還元反応、およびCO酸化反応において、まず、グラフェンの担体効果を明らかにするため、グラフェンにPtが結合する構造について第一原理電子状態計算手法と機械学習法を組み合わせ広範な構造探索を行った。Ptは高分子固体電解質燃料電池において、燃料極、酸素極の電極触媒材料として使用されているが、燃料極においてはCOによる被毒、酸素極においては低活性の問題があり、いずれも他の遷移金属との合金化によりこれらの問題を回避することが提案されている。最近、グラフェンに担持した単原子Pt触媒が、これらの反応に対して高活性であることが議論され注目を集めている。しかしながら、Ptがどのようにグラフェンに担持されているか、構造自体がまだ未解明であった。そこで、本研究では、第一原理電子状態計算手法と機械学習を組み合わせ物質の大域的な最適構造を求める手法GOFEEを用いて、Ptがグラフェンに担持される構造について、調べた。グラフェンナノリボン、および、グラフェンフレークの構造を用いて、モデルに含まれる炭素原子や水素原子の数を系統的に変えて最適化構造を求めた。その結果、以前、系統的に調べて求めた結果に対して、水素原子の化学ポテンシャルの関数として求めた最も安定な構造はほぼ全て再現でき、さらに、準安定な構造がいくつか見出された(図2-2-1-B-3)。

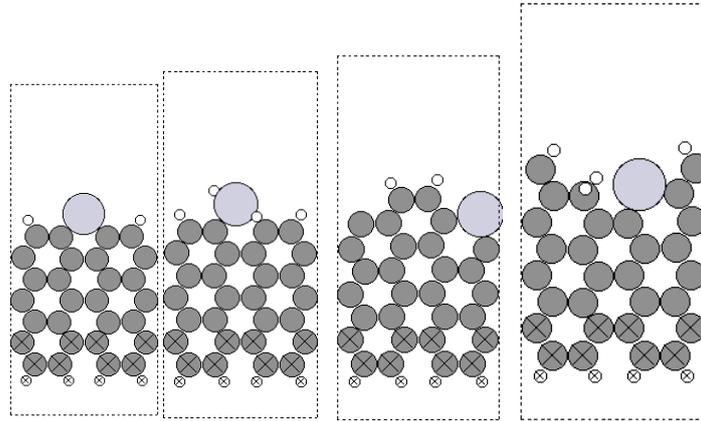


図 2-2-1-B-3. 第一原理電子状態計算と機械学習法とを組み合わせで求めた Pt のグラフェンエッジ構造 (Pt : 灰、C : 黒、H : 白)。

[参考文献]

- [1] S. E. M. Putra, F. Mutaqien, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, Y. Morikawa : 日本物理学会 2020 秋季大会 (2020 年 9 月 9 日)
- [2] 入口拓也, 濱田幾太郎, 森川良忠 : 日本物理学会 2021 春季大会 (2021 年 3 月 15 日)

### ③ドーピングされたグラフェンにおける単原子触媒の安定構造や電子状態の解析

[担当責任者] 森川良忠 (大阪大学大学院工学研究科)

#### [実施概要]

令和2年度は、窒素がドーピングされたグラフェンに単原子触媒が結合する構造について、第一原理電子状態計算手法と機械学習法を組み合わせることで広範な構造探索を行なった。それによって、Pt単原子が、窒素ドーピンググラフェンに結合する際の安定性、電子状態を第一原理電子状態計算により求め、実験的研究との整合性について確かめ、ドーパントがPtに結合した際の安定・準安定構造をいくつか明らかにした。

#### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

炭素 31-38 原子、水素原子 5-12 原子、Pt 一原子からなる系を第一原理電子状態計算プログラム GPAW と機械学習法による大域的構造最適化プログラム Global Optimization with First-principles Energy Expressions (GOFEE) を使用。

#### [研究成果]

Pt は高分子固体電解質燃料電池において、燃料極、酸素極の電極触媒材料として使用されているが、燃料極においては CO による被毒、酸素極においては低活性の問題があり、いずれも他の遷移金属との合金化によりこれらの問題を回避することが提案されている。最近、グラフェンに担持した単原子 Pt 触媒が、これらの反応に対して高活性であることが議論され注目を集めている。さらに、窒素などをドーピングすることにより、耐久性が向上することが実験的に示唆されており、窒素ドーピングの影響について系統的に調べた。それによって、Pt 単原子が、窒素ドーピンググラフェンに結合する際の安定性、電子状態を第一原理電子状態計算により求め、実験的研究との整合性について確かめ、ドーパントが Pt に結合した際の安定・準安定構造をいくつか明らかにすることができた (図 2-2-1-B-4)。

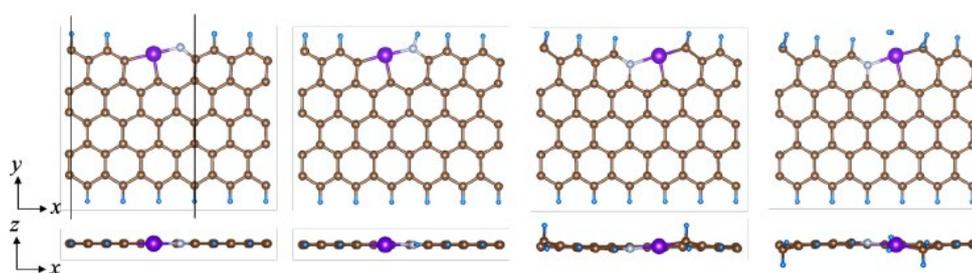


図 2-2-1-B-4. ドーパントが Pt に結合した安定・準安定構造 (Pt:紫、N:白、C:黄、H:青)。

## サブテーマB-2 「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」

### ①中規模電解質膜モデルでのプロトン、酸素、水素輸送の解析技術の確立

[担当責任者] 岡崎進（東京大学大学院新領域創成科学研究科）

#### [実施概要]

電解質膜バルクや電極界面におけるプロトン、酸素、水素の大域的な浸透係数を、位置に依存する自由エネルギーと拡散係数から評価する新規方法論を確立し、まずは水素と酸素に対し、電解質膜バルク内部の位置に依存した自由エネルギーを求め、一方で位置に依存した拡散係数の計算に着手した。これらにより、輸送のメカニズムを明らかにしつつある。

#### [成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・ 約 17 万個の原子からなる高分子電解質膜
- ・ 分子動力学計算
- ・ 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS

#### [研究成果]

燃料電池性能を決める重要な因子のひとつである高分子電解質膜中におけるプロトン輸送、ならびにエネルギー損失の主要な因子である水素と酸素のクロスリークの制御技術の確立に向けて、電解質膜中におけるプロトン、酸素、水素輸送の分子機構の解明が待たれている。本研究においては、電解質膜バルクや電極界面のような不均一系におけるこれら物質輸送をマイクロに記述するために、輸送される物質の位置に依存した自由エネルギーと拡散係数から大域的な浸透係数や物質の膜中の移動経路等々を評価する方法論について検討を進めてきた[1]。令和2年度は、これまでに構築してきた高分子電解質膜モデルを用いて、水素と酸素の気相から電解質膜中への移行の自由エネルギーを評価し、「富岳」上で高性能 MODYLAS[2]を用いて位置に依存する拡散係数の計算に着手した。

図 2-2-1-B-5 は、計算に用いた電解質膜（含水率 $\lambda=6$ ）の高分子相と水相を別々に示す。図から明らかのように、系は複雑に入り組んだ 3~5 nm 程度の不均一性を構造に有しており、通常の MD 計算では大域的な浸透係数を評価することは不可能である。

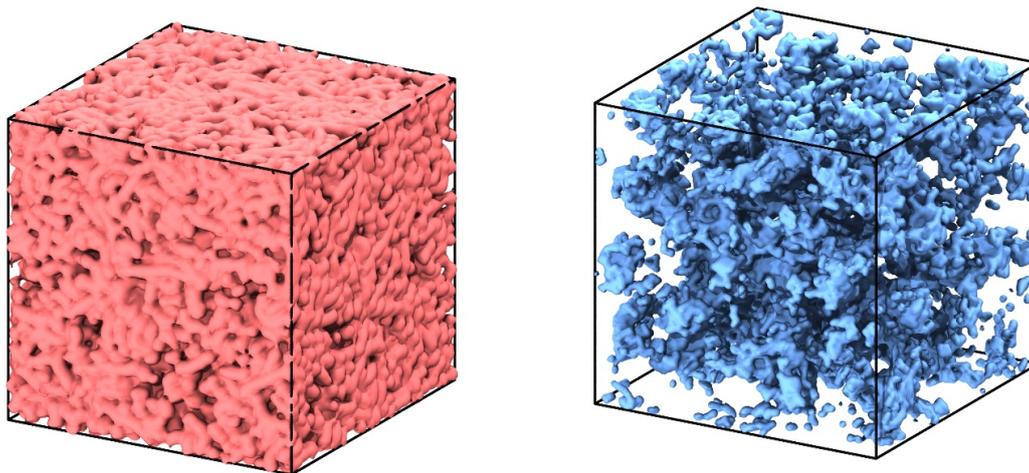


図 2-2-1-B-5. (左) 高分子電解質膜の高分子相 (右) 高分子電解質膜の水相。

このため、水素、酸素の浸透係数の新規方法論に必要な位置に依存する移行の自由エネルギーを求め、一方で位置に依存する拡散係数の評価に着手した。図 2-2-1-B-6 は、水素と酸素の気相から高分子電解質膜内部へ三次元的に求めた移行の自由エネルギー変化の一断面図である。自由エネルギーマップの詳細な検討から、水素、酸素のいずれにとっても高分子相に安定領域と不安定領域が同時に多く存在している一方、水相は値としてはその中間であるが地形としては平坦である。また、水素と酸素とでは、値は異なるが概ね同様な自由エネルギー地形を示していることも興味深い。高分子相と水相とどちらが移動経路になるかは拡散係数の評価後に行う予定の動的モンテカルロ法の実行まで待たねばならないが、これらは高分子電解質膜構造の設計にも関係し、非常に興味深い。

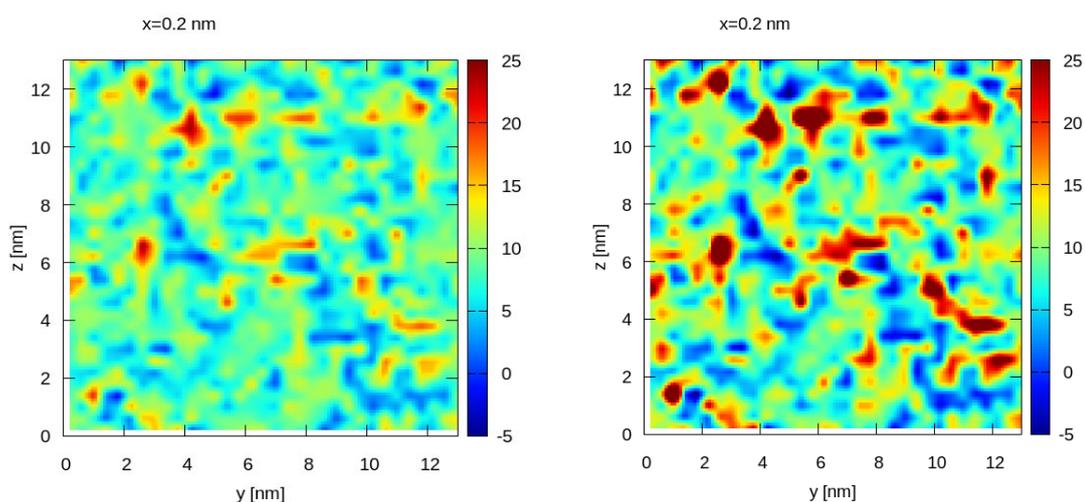


図 2-2-1-B-6. (左) 水素の電解質膜中への移行の自由エネルギー  
(含水率  $\lambda=6$ , 単位は kJ/mol)。  
(右) 酸素の電解質膜中への移行の自由エネルギー  
(含水率  $\lambda=6$ , 単位は kJ/mol)。

プロトン輸送についても、プロトン移動反応も含む EVB モデルによるシミュレーションプログラムの MODYLAS への実装を終了したところであり、今後精度検証等を経て、プロトンの解析も開始する。

[研究成果の社会実装について]

- SIP バイオポリマー：分子動力学計算を用いた新規ポリマーの熱特性、力学特性の推算において連携
- NEDO 超先端材料超高速開発：炭素分離膜、NIPS プロセスの分子動力学計算において連携
- ムーンショット 二酸化炭素分離膜：分子動力学計算による分離機構の解明に連携
- ムーンショット 海洋プラスチック：マルチロックポリマーの強靱化において、分子動力学計算による力学特性の評価に連携
- 産業界：5社との共同研究を通して、社会実装を目指している。

[参考文献]

- [1] Tetsuro Nagai, Shuhei Tsurumaki, Ryo Urano, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda, and Susumu Okazaki, “Position-Dependent Diffusion Constant of Molecules in Heterogeneous Systems as Evaluated by the Local Mean Squared Displacement”, *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 7239–7254 (2020).
- [2] Yoshimichi Andoh, Shin-ichi Ichikawa, Tatsuya Sakashita, Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki, “Algorithm to minimize MPI communications in the parallelized fast multipole method combined with molecular dynamics calculations”, *J. Comput. Chem.* **42**, 1073 (2021).

## C) データマネジメントに係る取組

①研究者間でデータ（シミュレーション結果等）を共有するフローを材料データプラットフォームセンター（DPFC）と検討し、共有システムのプロトタイプを作成

### [実施概要]

本課題でのデータマネジメントは、材料分野のデータリポジトリ構築を進めている物質・材料研究機構の材料データプラットフォームセンター（DPFC）と連携し、「富岳」で実行したシミュレーション結果を DPFC が運用するリポジトリ（MDR-Closed）に格納し、データ科学研究と連携するためのプロトタイプを構築した。

### [実施成果]

「富岳」電池課題で得られるシミュレーションデータとデータ科学研究に必要なデータ形式との連結フローを基に DPFC と定期的な議論会合を持ち、プロトタイプとして DPFC が運用するリポジトリの中から MDR-Closed を選定して「富岳」電池課題が占有利用できる領域を確保し、さらに「富岳」電池課題実施者が MDR-Closed へアクセスするための経路と手順を整備した。課題実施者の研究課題毎に格納データへのアクセス権の詳細設定を可能としたため、実施者毎に研究テーマにあわせたデータ格納領域の作成を可能としている。構築した領域を活用しシミュレーションとデータ科学との連携を促進し早期の成果創出を目指すため、プロトタイプとして「富岳」での stat-CPMD と VASP のシミュレーション実行結果の一部を蓄積し、データ科学連携による研究を開始した（図 2-2-1-C-1）。

DPFC のリポジトリは、プロジェクト利用の MDR-Closed と一般公開用の MDR-Open の 2 種類を運用している。本課題の期間中は、MDR-Closed を利用し、課題終了後は MDR-Open にシミュレーション結果データを移行し公開を予定している。

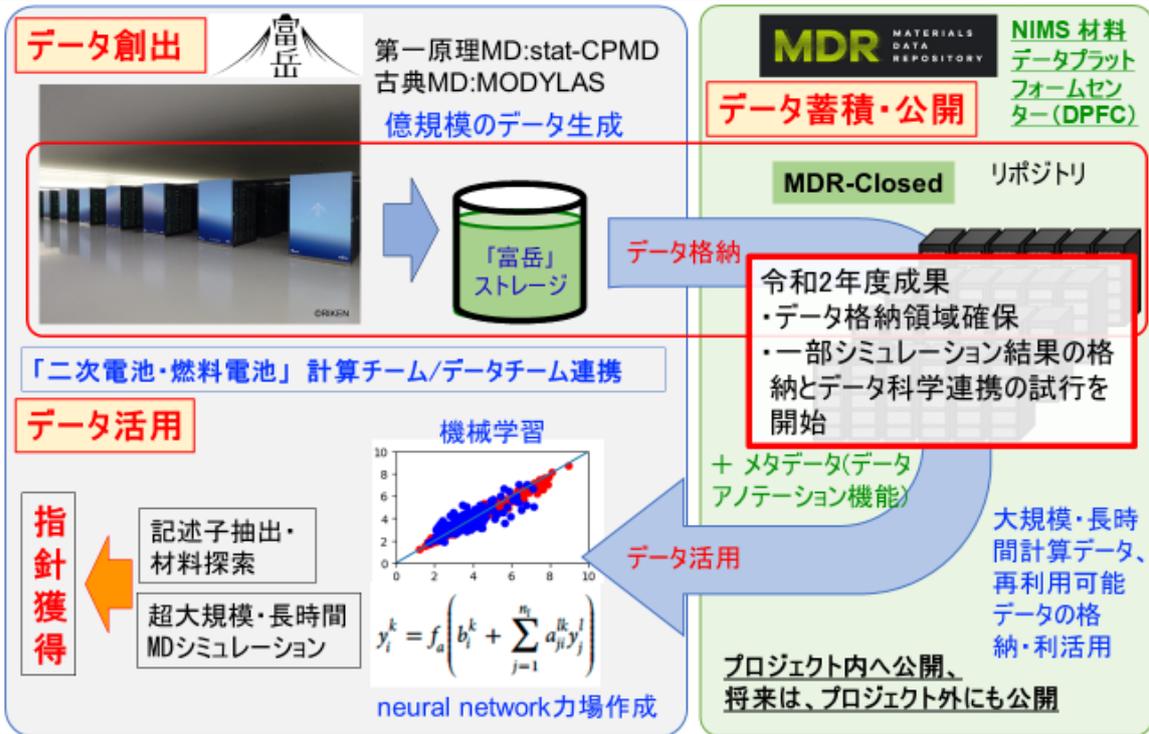


図 2-2-1-C-1. 計算・データ科学連携。

## (2) プロジェクトの総合的推進

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

- 統括会議：4/15、5/13、6/12、6/30、7/7、10/19、11/26、1/20、3/23 開催
- 実施者会議：4/23、5/15、6/15、7/13、8/20、11/30、3/30 開催

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

- 理論計算研究フォーラム（第1回）：8/20 開催
- 理論計算研究フォーラム（第2回）：11/26 開催
- 理論計算研究フォーラム（第3回）：3/12 開催
- 富岳電池課題キックオフ Web ミーティング：6/17 開催
- 第1回公開シンポジウム（成果報告会）：3/21 開催
- 第10回材料系ワークショップ（共催）：10/16 開催
- 第11回材料系ワークショップ（共催）：2/10 開催

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

- NIMS WEEK 2020 出展：11/27
- HPCI フォーラム出展：3/9
- 第1回公開シンポジウム（成果報告会）：3/21 開催

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

- 令和2年度通常総会出席：5/27
- 第3回調査検討ワーキンググループ参加：11/26

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

- 電気化学界面コンソーシアム 2020 年第1回研究会招待講演：10/2
- 「富岳」利用の情報・注意事項等説明会：11/11、12

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

- 理論計算研究フォーラム（第1回）：8/20 開催

- 理論計算研究フォーラム（第2回）：11/26 開催
- 理論計算研究フォーラム（第3回）：3/12 開催
- 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第1回）：5/26 開催
- 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第2回）：6/24 開催
- 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第3回）：9/29 開催

## 2-3. 活動（研究会の活動等）

[シンポジウム・研究会等主催・共催・出展など]

日程	行事名	開催場所等
4/15	第2回統括会議	Webミーティング
4/23	第3回実施者会議	メール審議
5/13	第3回統括会議	Webミーティング
5/15	第4回実施者会議	メール審議
5/26	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング (第1回)	オンライン開催
6/12	第4回統括会議	Webミーティング
6/15	第5回実施者会議	メール審議
6/17	富岳電池課題キックオフWebミーティング	オンライン開催
6/24	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング (第2回)	オンライン開催
6/30	第5回統括会議	Webミーティング
7/ 7	第6回統括会議	Webミーティング
7/13	第6回実施者会議	Webミーティング
8/20	第7回実施者会議	NIMS409, 410室+Webミーティング
8/20	理論計算研究フォーラム（第1回）	NIMS409, 410室+オンライン開催
9/29	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング (第3回)	オンライン開催
10/16	第10回材料系ワークショップ（共催）	オンライン開催
10/19	第7回統括会議	Webミーティング
11/11	「富岳」利用の情報・注意事項等説明会	オンライン開催
11/12	「富岳」利用の情報・注意事項等説明会	オンライン開催
11/26	第8回統括会議	Webミーティング
11/26	理論計算研究フォーラム（第2回）	オンライン開催
11/27	NIMS WEEK 2020（出展）	オンライン開催
11/30	第8回実施者会議	メール審議
1/20	第9回統括会議	メール審議
2/10	第11回材料系ワークショップ（共催）	オンライン開催
3/ 9	HPCIフォーラム（出展）	オンライン開催
3/12	理論計算研究フォーラム（第3回）	オンライン開催
3/21	第1回公開シンポジウム（成果報告会）	オンライン開催
3/23	第10回統括会議	Webミーティング
3/30	第9回実施者会議	Webミーティング

## 2-4. 実施体制

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

### 3. 学会等発表実績

#### (1) 活動報告

活動報告 K01	
会議名称	富岳電池課題 第2回統括会議
日時	2020年4月15日(水) 11:00 ~ 12:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 「富岳」利用者チームおよび利用形態案について 2. 事務局経費の変更案について 3. 課題名称案について 4. 実施者会議の開催について 5. 公開シンポジウム開催延期について 6. その他

活動報告 K02	
会議名称	富岳電池課題 第3回実施者会議
日時	2020年4月23日(木)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	1. 「富岳」利用者チームおよび利用形態案について 2. 事務局経費の変更案について 3. 課題名称案について 4. 公開シンポジウム開催延期について 5. その他

活動報告 K03	
会議名称	富岳電池課題 第3回統括会議
日時	2020年5月13日(水) 16:00 ~ 17:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題キックオフ webex ミーティングについて</li> <li>2. 統括会議と実施者会議の位置付けについて</li> <li>3. 実験研究者にお願いする役割について</li> <li>4. 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業について</li> <li>5. 名古屋大学「不老」計算資源について</li> <li>6. 今年度富岳電池課題で主催開催するイベントについて</li> <li>7. その他</li> </ol>

活動報告 K04	
会議名称	富岳電池課題 第4回実施者会議
日時	2020年5月15日(金)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題キックオフ webex ミーティングについて</li> <li>2. 統括会議と実施者会議の位置付けについて</li> <li>3. 実験研究者にお願いする役割について</li> <li>4. 計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業について</li> <li>5. 名古屋大学「不老」計算資源について</li> <li>6. 今年度富岳電池課題で主催開催するイベントについて</li> <li>7. その他</li> </ol>

活動報告 K05	
会議名称	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第1回）
日時	2020年5月26日(火) 14:00 ~ 17:00
場所	オンライン開催
参加者	18名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
「富岳」アプリ実機チューニングチーム webミーティング

日時: 2020年5月26日(火) 14:00 ~ 17:00

場所: webミーティング

### プログラム ※1

#### 「富岳」アプリ実機チューニングチーム webミーティング

14:00 - 14:10	物材機構 課題責任者	館山 佳尚	はじめに
14:10 - 14:20		出席者	自己紹介
14:20 - 14:40	東大院新領域 特任助教	永井 哲郎	MODYLASの状況について
14:40 - 15:00	山形大理 助教	笠松 秀輔	VASPの状況について
15:00 - 15:20	阪大院工 助教	稲垣 耕司	STATEの状況について
15:20 - 15:30			休憩
15:30 - 15:50	産総研 産総研特別研究員	萩原 聡	QE&ESM-RISM/AFIRの状況について
15:50 - 16:10	物材機構 グループリーダー	館山 佳尚	stat-CPMDの状況について
16:10 - 17:00		出席者	総合討論

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

活動報告 K06	
会議名称	富岳電池課題 第4回統括会議
日時	2020年6月12日(金) 11:00 ~ 12:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題キックオフ webex ミーティング(6月17日開催)について</li> <li>2. 企業連携・社会実装促進企画案について</li> <li>3. 「計算技術研究会」開催案について</li> <li>4. NIMS 材料データプラットフォームセンター(DPFC)との連携について</li> <li>5. 富岳電池課題第1回公開シンポジウムについて</li> <li>6. その他</li> </ol>

活動報告 K07	
会議名称	富岳電池課題 第5回実施者会議
日時	2020年6月15日(月)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題キックオフ webex ミーティング(6月17日開催)について</li> <li>2. 企業連携・社会実装促進企画案について</li> <li>3. 「計算技術研究会」開催案について</li> <li>4. NIMS 材料データプラットフォームセンター(DPFC)との連携について</li> <li>5. 富岳電池課題第1回公開シンポジウムについて</li> <li>6. その他</li> </ol>

活動報告 K08	
会議名称	富岳電池課題キックオフ Web ミーティング
日時	2020年6月17日(水) 13:00 ~ 15:30
場所	オンライン開催
参加者	36名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
キックオフ webミーティング

日時: 2020年6月17日(水) 13:00 ~ 15:30  
場所: webミーティング

### プログラム ※1

#### 富岳電池課題 キックオフ

13:00 - 13:15 (物材機構)	館山 佳尚	富岳電池課題全体概要
13:15 - 13:25 (物材機構)	館山 佳尚	サブテーマA-1「二次電池:電解液系次世代二次電池」 サブテーマA-2「二次電池:全固体電池」
13:25 - 13:30 (名大院情)	長岡 正隆	サブテーマA-1「二次電池:電解液系次世代二次電池」
13:30 - 13:35 (産総研)	大谷 実	サブテーマA-1「二次電池:電解液系次世代二次電池」
13:35 - 13:40 (東北大材料科学研)	赤木 和人	サブテーマA-1「二次電池:電解液系次世代二次電池」
13:40 - 13:45 (東大物性研)	杉野 修	サブテーマB-1「燃料電池:電極界面反応」
13:45 - 13:50 (阪大院工)	森川 良忠	サブテーマB-1「燃料電池:電極界面反応」
13:50 - 13:55 (東大院新領域)	岡崎 進	サブテーマB-2「燃料電池:電解質膜・プロトン輸送」
13:55 - 14:50	出席者全員	自己紹介(1分未満)
14:50 - 15:10		総合討論・事務連絡(謝辞・「富岳」利用・データマネージメント)
15:10 - 15:15 (東大物性研)	杉野 修	まとめ
15:15 - 15:30		予備

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

活動報告 K09	
会議名称	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第2回）
日時	2020年6月24日(水) 10:00 ~ 12:00
場所	オンライン開催
参加者	15名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第2回）

日時: 2020年6月24日(水) 10:00 ~ 12:00

場所: webミーティング

### プログラム ※1

#### 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第2回）

10:00 - 10:05	物材機構	課題責任者	館山 佳尚	はじめに
10:05 - 10:20	物材機構	グループリーダー	館山 佳尚	stat-CPMDの状況について
10:20 - 10:30	物材機構	主任研究員	JALEM Randy	VASPの状況について
10:30 - 10:40	阪大院工	助教	稲垣 耕司	STATEの状況について
10:40 - 10:50	東大院新領域	特任助教	永井 哲郎	MODYLASの状況について
10:50 - 11:00	産総研	産総研特別研究員	萩原 聡	QE&ESM-RISM/AFIRの状況について
11:00 - 11:15	物材機構	グループリーダー	館山 佳尚	今後の「富岳」利用について
11:15 - 12:00			出席者	総合討論

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

活動報告 K10	
会議名称	富岳電池課題 第5回統括会議
日時	2020年6月30日(火) 11:00 ~ 12:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題 産業連携促進制度について</li> <li>2. 「富岳」計算資源配分の方針について</li> <li>3. 富岳電池課題第1回公開シンポジウムについて</li> <li>4. 富岳電池課題 理論計算研究フォーラム開催について</li> <li>5. その他</li> </ol>

活動報告 K11	
会議名称	富岳電池課題 第6回統括会議
日時	2020年7月7日(火) 20:00 ~ 21:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 富岳電池課題 計算資源配分の方針について</li> <li>2. 計算物質科学スパコン共用事業利用枠の分子研申請値総点数について</li> <li>3. その他</li> </ol>

活動報告 K12	
会議名称	富岳電池課題 第6回実施者会議
日時	2020年7月13日(月) 17:00 ~ 19:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和2年度の会議・イベント費用と計算機資源獲得費用について</li> <li>2. 令和2年度富岳電池課題の計算資源配分について</li> <li>3. 理論計算研究フォーラムの開催について</li> <li>4. その他</li> </ol>

活動報告 K13	
会議名称	富岳電池課題 第7回実施者会議
日時	2020年8月20日(木) 17:00 ~ 18:00
場所	NIMS409, 410 室+Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 成果創出と成果公開について</li> <li>2. 富岳電池課題謝辞について</li> <li>3. 富岳電池課題グループ毎の計算資源配分と利用者一覧</li> <li>4. 公開シンポジウムを学会共催シンポジウム形式で開催することについて</li> <li>5. 特別研究協力者候補者の審議について</li> <li>6. 【ご紹介】令和2年度「富岳」試行的利用課題（早期利用課題）募集</li> <li>7. その他</li> </ol>

活動報告 K14	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第1回）
日時	2020年8月20日(木) 13:00～17:00
場所	NIMS409, 410室+オンライン開催
参加者	21名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
理論計算研究フォーラム(第1回)

日時: 2020年8月20日(木) 13:00～17:00  
場所: NIMS 並木地区 共同研究棟 4階 409,410室 + Webミーティング

### プログラム ※1

#### 富岳電池課題 理論計算研究フォーラム(第1回)

13:00 - 13:05 (東大物性研)	杉野 修	理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:05 - 13:35 (産総研)	大谷 実	大谷グループ研究トピックス(オンライン発表)
13:35 - 14:05 (東北大材料科学研)	赤木 和人	赤木グループ研究トピックス(オンライン発表)
14:05 - 14:35 (名大院情)	長岡 正隆	長岡グループ研究トピックス(オンライン発表)
14:35 - 14:55	休憩	
14:55 - 15:25 (東大物性研)	杉野 修	杉野グループ研究トピックス(発表時間がなくなったため次回へ延期)
15:25 - 15:55 (東大院新領域 特任助教)	永井 哲郎	岡崎グループ研究トピックス(オンライン発表)
15:55 - 16:25 (物材機構 主任研究員)	JALEM Randy	AI・データ科学との連携事例
16:25 - 16:55		総合討論
16:55 - 17:00 (東大物性研)	杉野 修	まとめ

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

活動報告 K15	
会議名称	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第3回）
日時	2020年9月29日(火) 10:00 ~ 11:20
場所	オンライン開催
参加者	16名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第3回）

日時： 2020年9月29日(火) 10:00 ~ 11:20  
場所： webミーティング

### プログラム ※1

#### 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第3回）

10:00 - 10:20	物材機構	課題責任者	館山 佳尚	はじめに
10:20 - 10:30	物材機構		館山 佳尚	stat-GPMDの「富岳」実機チューニング結果について
10:30 - 10:40	東大院新領域	特任助教	永井 哲郎	MODYLASの「富岳」実機チューニング結果について
10:40 - 10:50	山形大理	助教	笠松 秀輔	VASPの「富岳」実機チューニング結果について
10:50 - 11:00	阪大院工	助教	稲垣 耕司	STATEの「富岳」実機チューニング結果について
11:00 - 11:10	名古屋大院情報学研究科	研究員	田中 佑一	RedMoonの「富岳」実機チューニング結果について
11:10 - 11:15	産総研	産総研特別研究員	萩原 聡	QE&ESM-RISM/AFIRの「富岳」実機チューニング結果について
11:10 - 11:20			出席者	総合討論

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

活動報告 K16	
会議名称	第10回材料系ワークショップ（共催）
日時	2020年10月16日（金）10:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	370名（内、民間企業219名）

▼ プログラム（敬称略）発表資料をアップロードしました。

司会：杉山 肇（産応協，三菱ケミカル株式会社）

10:00-10:05	<b>開会挨拶</b> 塩原 紀行（高度情報科学技術研究機構）
10:05-10:35	<b>スーパーコンピュータ「富岳」の概要</b> 佐藤 三久（理化学研究所）
10:35-10:50	<b>「富岳」における利用制度</b> 草間 義紀（高度情報科学技術研究機構）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
10:50-11:10	<b>「富岳」における材料系アプリケーションの利用について</b> 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
11:10-11:40	<b>実験・理論・計算を統合する新たな分光光学手法で迫る高温超伝導の起源</b> 山地 洋平（東京大学）
11:40-12:40	<ランチタイム>
12:40-13:10	<b>磁石材料組織の第一原理電子論による検討</b> 合田 義弘（東京工業大学）
13:10-13:40	<b>次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究</b> 館山 佳尚（物質・材料研究機構）
13:40-14:10	<b>高分子系における溶解・吸着・相溶性・粘弾性の全原子解析</b> 松林 伸幸（大阪大学）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
14:10-14:25	<休憩>
14:25-14:55	<b>窒化物半導体技術への計算科学の貢献</b> 白石 賢二（名古屋大学）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
14:55-15:25	<b>化学製品開発へのインフォマティクスの活用</b> 池端 久貴（旭化成株式会社）
15:25-15:30	<休憩>
15:30-17:15	<b>パネルディスカッション「マテリアル革新力強化に向けた計算データの戦略的な創出・保存・活用について」</b> モデレータ：古宇田 光（計算物質科学協議会，東京大学） パネリスト：小川 浩司（文部科学省） / 出村 雅彦（物質・材料研究機構） / 大友 季哉（KEK物構研 / J-PARCセンター） / 尾崎 泰助（計算物質科学協議会，東京大学） / 茂本 勇（産応協，東レ株式会社） / 奥田 基（高度情報科学技術研究機構）
17:15-17:30	<b>HPCI・アプリケーション利用相談（希望者のみ）</b>

\*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K17	
会議名称	富岳電池課題 第7回統括会議
日時	2020年10月19日(月) 15:00 ~ 17:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 令和2年度事務局予算について 2. 「富岳」計算資源の利用方針について 3. 成果報告（論文、招待講演等）のホームページ掲載について 4. 理論計算研究フォーラム（第2回）について 5. 文部科学省令和3年度概算要求について（HPCI計画推進委員会傍聴報告） 6. その他

活動報告 K18	
会議名称	「富岳」利用の情報・注意事項等説明会
日時	2020年11月11日(水) 17:30 ~ 18:00
場所	オンライン開催
参加者	9名 説明者2名 合計11名

活動報告 K19	
会議名称	「富岳」利用の情報・注意事項等説明会
日時	2020年11月12日(木) 17:30 ~ 18:00
場所	オンライン開催
参加者	6名 説明者2名 合計8名

活動報告 K20	
会議名称	富岳電池課題 第8回統括会議
日時	2020年11月26日(木) 17:30 ~ 18:30
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和2年度事務局予算について</li> <li>2. 第1回公開シンポジウム（成果報告会）について</li> <li>3. その他</li> </ol>

活動報告 K21	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第2回）
日時	2020年11月26日(木) 14:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	22名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
理論計算研究フォーラム（第2回）

日時： 2020年11月26日(木) 14:00～17:30

場所： Webミーティング

### プログラム ※1

#### 富岳電池課題 理論計算研究フォーラム（第2回）

14:00 - 14:10（東大物性研）	杉野 修	第2回理論計算研究フォーラム開催趣旨
14:10 - 14:50（東大物性研）	杉野 修	杉野グループ研究トピックス
14:50 - 15:30（阪大大学院工学研究科）	森川 良忠	森川グループ研究トピックス
15:30 - 15:50	休憩	
15:50 - 16:45（山形大理学部）	笠松 秀輔	固体中のイオン配置不規則性の第一原理熱力学サンプリングと機械学習による加速
16:45 - 17:15	出席者	討論
17:15 - 17:30（東大物性研）	杉野 修	まとめと次回開催テーマについて

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

活動報告 K22	
会議名称	NIMS WEEK 2020 (出展)
日時	2020年11月27日(金) 10:00 ~ 17:00
場所	オンライン開催

活動報告 K23	
会議名称	富岳電池課題 第8回実施者会議
日時	2020年11月30日(月)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和2年度事務局予算について</li> <li>2. 富岳電池課題グループ毎の計算資源配分と利用者一覧</li> <li>3. 公開シンポジウムを学会共催シンポジウム形式で開催することについて</li> <li>4. その他</li> </ol>

活動報告 K24	
会議名称	富岳電池課題 第9回統括会議
日時	2021年1月20日(水)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和2年成果報告について</li> <li>2. 理論計算研究フォーラム(第3回)開催について</li> <li>3. その他</li> </ol>

活動報告 K25	
会議名称	第11回材料系ワークショップ（共催）
日時	2021年2月10日（水）10:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	445名（内、民間企業273名）

▼ プログラム（敬称略）発表資料をアップロードしました。

司会：杉山 肇（産応協, 三菱ケミカル株式会社）

10:00-10:05	<b>開会挨拶</b> 新宮 哲（高度情報科学技術研究機構）
10:05-10:20	<b>「富岳」における利用制度</b> 草間 義紀（高度情報科学技術研究機構）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
10:20-10:45	<b>「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況</b> 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
10:45-11:05	<b>極微細半導体デバイスの量子輸送シミュレーション</b> 森 伸也（大阪大学）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
11:05-11:25	<b>ポリマー/金属接着界面の強度と劣化に関する第一原理的シミュレーション</b> 尾形 修司（名古屋工業大学）
11:25-11:45	<b>機械学習を用いた量子多体波動関数表現：物理の難問であるフラストレーションのある量子スピン系への適用</b> 野村 悠祐（理化学研究所）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
11:45-12:45	<ランチタイム>
12:45-13:05	<b>進化的アルゴリズムによる新物質探索</b> 石河 孝洋（物質・材料研究機構）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
13:05-13:25	<b>物質データ解析の高度化に向けたデータ駆動型研究の試み</b> 安藤 康伸（産業技術総合研究所）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
13:25-13:55	<b>三井化学におけるマテリアルズ・インフォマティクスの取組と今後の課題</b> 向田 志保（三井化学株式会社）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
13:55-14:15	<休憩>
14:15-15:05	<b>スパコン・ロボット・ビッグデータを活用した材料研究戦略：～理論家が自分で材料合成する時代がやってきた～</b> 一杉 太郎（東京工業大学）（ <a href="#">発表資料 [PDF]</a> ）
15:05-15:35	<b>材料開発のDXに向けた協調戦略</b> 河野 禎市郎（旭化成株式会社）
15:35-15:45	<休憩>
15:45-17:15	<b>パネルディスカッション「マテリアルDXが牽引する産官学連携と人材育成の革新」</b> モデレータ：古宇田 光（計算物質科学協議会, 東京大学） パネリスト：一杉 太郎（東京工業大学） / 河野 禎市郎（旭化成株式会社） / 茂本 勇（産応協, 東レ株式会社） / 奥田 基（高度情報科学技術研究機構）
17:15-17:30	<b>HPCI・アプリケーション利用相談（希望者のみ）</b>

\*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K26	
会議名称	HPCI フォーラム（出展）
日時	2021年3月9日(火) 10:30 ～ 18:00
場所	オンライン開催

## 「富岳」電池課題の展示

課題番号 hp200131

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

本課題（富岳電池課題）は、将来のET（エネルギー・環境技術）革命において中心的役割を果たす二次電池および燃料電池の次世代技術の開発や実用化に向けて、重要課題の微視的機構解明およびそれをもとにした材料探索・反応制御の指針提案を、「富岳」を用いた先端的計算・データ材料科学研究により推進し、熾烈な国際競争の中での我が国の産業競争力強化、カーボンニュートラル・脱炭素社会実現に貢献する。



**館山 佳尚**  
物質・材料研究機構

WEBサイトをみる >



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

活動報告 K27	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第3回）
日時	2021年3月12日（金）13:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	23名

## プログラム



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム  
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」  
理論計算研究フォーラム（第3回）2020年度成果報告

日時： 2021年3月12日（金） 13:00～17:30  
場所： Webミーティング

### プログラム ※1

#### 富岳電池課題 理論計算研究フォーラム（第3回）2020年度成果報告

13:00 - 13:05	（東大物性研）	杉野 修	第3回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:05 - 13:20	（物材機構）	館山 佳尚	サブ課題A-1「二次電池：電解液系次世代二次電池」の成果 サブ課題A-2「二次電池：全固体電池」の成果
13:20 - 13:35	（名大院情）	長岡 正隆	サブ課題A-1「二次電池：電解液系次世代二次電池」の成果
13:35 - 13:50	（産総研）	大谷 実	サブ課題A-1「二次電池：電解液系次世代二次電池」の成果
13:50 - 14:05	（東北大材料科学研）	赤木 和人	サブ課題A-1「二次電池：電解液系次世代二次電池」の成果
14:05 - 14:20	休憩		
14:20 - 14:35	（東大物性研）	杉野 修	サブ課題B-1「燃料電池：電極界面反応」の成果
14:35 - 14:50	（阪大院工）	森川 良忠	サブ課題B-1「燃料電池：電極界面反応」の成果
14:50 - 15:05	（東大院新領域）	永井 哲郎	サブ課題B-2「燃料電池：電解質膜・プロトン輸送」の成果
15:05 - 15:15	（九大工学研究院）	井上 元	特別研究協力者の研究紹介
15:15 - 15:25	（信州大先鋭材料研究所）	古山 通久	特別研究協力者の研究紹介（実在系構造に基づく計算科学）
15:25 - 15:40	休憩		
15:40 - 15:50	（物材機構）	館山 佳尚	stat-CPMDの「富岳」実機チューニング結果について
15:50 - 16:00	（東大院新領域）	岡崎 進	MODYLASの「富岳」実機チューニング結果について
16:00 - 16:10	（山形大）	笠松 秀輔	VASPの「富岳」実機チューニング結果について
16:10 - 16:20	（阪大院工）	稲垣 耕司	STATEの「富岳」実機チューニング結果について
16:20 - 16:30	（産総研）	大谷 実	QE&ESM-RISM/AFIRの「富岳」実機チューニング結果について
16:30 - 16:40	（名大院情）	田中 佑一	RedMoonの「富岳」実機チューニング結果について
16:40 - 17:25	出席者		全体討論
17:25 - 17:30	（東大物性研）	杉野 修	まとめと次回開催テーマについて

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

活動報告 K28	
会議名称	第1回公開シンポジウム(成果報告会)
日時	2021年3月21日(日) 13:00 ~ 15:40
場所	日本化学会第101春季年会(2021)併催シンポジウム オンライン開催
参加者	申込者数168名(内、民間企業56名)、常時90名程度の方が接続



## Battery & 次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・ Fuel Cell データ材料科学研究(富岳電池課題)

### 第1回公開シンポジウム(成果報告会) 実施報告

#### 1. 開催趣旨

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」(富岳電池課題)は、2020年4月に発足し、将来のET(エネルギー・環境技術)革命において中心的役割を果たす二次電池(蓄電池)および燃料電池の次世代技術の開発や実用化に向けて、重要課題の微視的機構解明およびそれをもとにした材料探索・反応制御の指針提案を、「富岳」を用いた先端的計算・データ材料科学研究により推進してきました。今回の第1回公開シンポジウム(成果報告会)では、課題責任者から富岳電池課題の概要と富岳電池課題の実施者の中から4名の研究者が2020年度の成果をご報告いたします。併せて、魚崎浩平フェロー(物材機構)に特別講演をしていただきます。成果の公開・展開の機会といたしたく、皆様のご参加、宜しく願いいたします。

#### 2. 実施概要

主催: 物質・材料研究機構 富岳電池課題

後援: スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産協/ICSCP)

公益財団法人 計算科学振興財団(FOCUS)

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)

日時: 2021年3月21日(日) 13:00 ~ 15:40

形式: 日本化学会第101春季年会(2021)併催シンポジウム オンライン開催

参加費: 無料

参加者数: 申込者数168名(内、民間企業56名)、常時90名程度の方が接続されていました。

#### 3. 第1回公開シンポジウム(成果報告会)プログラム

##### プログラム

13:00-13:05 開会挨拶 : 館山 佳尚(物材機構)

13:05-13:10 来賓挨拶(ビデオメッセージ) : 宅間 裕子(文部科学省)

13:10-13:25 富岳電池課題全体概要 : 館山 佳尚(物材機構)

13:25-13:55 招待講演

持続可能な社会における電気化学エネルギー変換の重要性と計算科学への期待 : 魚崎 浩平(物材機構)

13:55-14:15 電気化学界面シミュレーション技術の社会実装と電池材料への適用

(サブ課題A-1) : 大谷 実(産総研)

14:15-14:35 休憩

14:35-14:55 大規模第一原理計算による全固体電池電解質界面のイオン・電子状態解明

(サブ課題A-2) : 館山 佳尚(物材機構)

14:55-15:15 燃料電池反応の計算科学と次世代型電極の実現に向けた計算予測

(サブ課題B-1) : 杉野 修(東大物性研)

15:15-15:35 燃料電池高分子電解質膜バルク中における物質輸送の分子動力学計算による研究(サブ課題B-2) : 岡崎 進(東大院新領域)

15:35-15:40 閉会挨拶 : 杉野 修(東大物性研)

**日時：2021年3月21日（日） 13:00～15:40**

形式：日本化学会第101春季年会(2021)併催シンポジウム オンライン開催  
(配信方法は参加登録時に表示)

参加費：無料

参加登録：日本化学会第101春季年会(2021) 併催シンポジウム、または「富岳電池課題」サイト内にある第1回公開シンポジウム（成果報告会）のページから、「参加登録」よりフォームに必要事項をご記入の上お申し込みください。

<https://confit.atlas.jp/guide/event/csj101st/static/CoSymp#Csympo5>

<https://www.nims.go.jp/fugaku-denchi/events/2020/20210320.html>

日本化学会第101春季年会(2021)の参加有無に関わらず、どなたでもご参加いただけます。



## 「富岳電池課題」第1回公開シンポジウム

(成果報告会)

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」（富岳電池課題）は2020年4月の発足から約1年が経過しました。本第1回公開シンポジウム（成果報告会）では、富岳電池課題の概要を課題責任者から、2020年度の成果を富岳電池課題実施者の中から4名の研究者がご報告いたします。併せて、魚崎浩平フェロー（物材機構）に特別講演をしていただきます。成果の公開・展開の機会といたしたく、皆様のご参加、宜しくお願いいたします。

### プログラム

13:00-13:05 開会挨拶：館山 佳尚（物材機構）

13:05-13:10 来賓挨拶

13:10-13:25 富岳電池課題全体概要：館山 佳尚（物材機構）

13:25-13:55 招待講演

「持続可能な社会における電気化学エネルギー変換の重要性と計算科学への期待」  
：魚崎 浩平（物材機構）

13:55-14:15 電気化学界面シミュレーション技術の社会実装と電池材料への適用  
(サブ課題A-1)：大谷 実（産総研）

14:15-14:35 休憩

14:35-14:55 大規模第一原理計算による全固体電池電解質界面のイオン・電子状態解明  
(サブ課題A-2)：館山 佳尚（物材機構）

14:55-15:15 燃料電池反応の計算科学と次世代型電極の実現に向けた計算予測  
(サブ課題B-1)：杉野 修（東大物性研）

15:15-15:35 燃料電池高分子電解質膜バルク中における物質輸送の分子動力学計算による研究  
(サブ課題B-2)：岡崎 進（東大院新領域）

15:35-15:40 閉会挨拶：杉野 修（東大物性研）



主催：物質・材料研究機構 富岳電池課題  
後援：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
公益財団法人 計算科学振興財団  
一般財団法人 高度情報科学技術研究機構  
問い合わせ先：物質・材料研究機構「富岳電池課題」事務局  
[fugakubfc-office@ml.nims.go.jp](mailto:fugakubfc-office@ml.nims.go.jp)



活動報告 K29	
会議名称	富岳電池課題 第10回統括会議
日時	2021年3月23日(火) 16:30 ~ 18:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和3年度事務局予算について</li> <li>2. 令和3年度富岳電池課題計算資源配分について</li> <li>3. 令和2年度成果報告作成について</li> <li>4. その他</li> </ol>

活動報告 K30	
会議名称	富岳電池課題 第9回実施者会議
日時	2021年3月30日(火) 17:00 ~ 18:30
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 令和3年度事務局予算について</li> <li>2. 令和3年度富岳電池課題計算資源配分について</li> <li>3. 令和2年度成果報告作成について</li> <li>4. 理論計算研究フォーラム(第4回)について</li> <li>5. その他</li> </ol>

(2) 学会等発表実績

[1] 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
Dopant arrangements in Y-doped BaZrO <sub>3</sub> under processing conditions and their impact on proton conduction: a large-scale first-principles thermodynamics study	Shusuke Kasamatsu, Osamu Sugino, Takafumi Ogawa, and Akihide Kuwabara	J. Mater. Chem. A <b>8</b> , 12674 (2020). DOI:10.1039/d0ta01 741h	2020年 6月	国外
Hybrid Functional Study of H-Abstraction from Methane by Li-Doped, Pristine and Stepped MgO(100) and MgO(110) Surface	Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama	Catal. Lett. <b>73</b> (2020). DOI:10.1007/s10562 -020-03358-x	2020年 8月	国外
High Formability and Fast Lithium Diffusivity in Metastable Spinel Chloride for Rechargeable All-Solid-State Lithium-Ion Batteries	Naoto Tanibata, Masashi Kato, Shuta Takimoto, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Hirofumi Sumi	Adv. Ener. & Sustain. Res. <b>1</b> , 2000025(1-7) (2020) DOI:10.1002/aesr.2 02000025	2020年 9月	国外
First-Principles Calculation Study of Na <sup>+</sup> Superionic Conduction Mechanism in W- and Mo-Doped Na <sub>3</sub> SbS <sub>4</sub> Solid Electrolytes	Randy Jalem, Akitoshi Hayashi, Fumika Tsuji, Atsushi Sakuda, Yoshitaka Tateyama	Chem. Mater. <b>32</b> , 8373-8381(2020) DOI:10.1021/acs.ch emmater.0c02318	2020年 9月	国外
All-atom molecular dynamics study of impact fracture of glassy polymers. II: Microscopic origins of stresses in elasticity, yielding and strain hardening	Zhiye Tang, Kazushi Fujimoto, Susumu Okazaki	Polymer <b>207</b> , 122908 (2020) DOI:10.1016/j.poly mer.2020.122908	2020年 10月	国外
Design of Interfaces and Phase Interfaces on the Cathode Catalysts for Polymer Electrolyte Fuel Cells	Gen Inoue, Sakae Takenaka	chem. lett., <b>50</b> , 136-143 (2021) DOI:10.1246/cl.200 649	2020年 10月	国外

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
Comparative Study on Sulfide and Oxide Electrolyte Interfaces with Cathodes in All-Solid-State Battery via First-Principles Calculations	Yukihiro Okuno, Jun Haruyama, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Energy Mater. <b>3</b> , 11061-11072 (2020) DOI:10.1021/acsaem.0c02033	2020年 10月	国外
Electron and Ion Transfer across Interfaces of the NASICON-Type LATP Solid Electrolytes with Electrodes in All-Solid-State Batteries: A Density Functional Theory Study via an Explicit Interface Model	Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Bo Gao, Yuta Yamamoto, Shunsuke Muto, Miyuki Sakakura, Yasutoshi Iriyama, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Mater. Interfaces, <b>12</b> , 54752-54762 (2020) DOI:10.1021/acsam.0c16463	2020年 11月	国外
Theoretically Predicting the Feasibility of Highly-Fluorinated Ethers as Promising Diluents for Non-flammable Concentrated Electrolytes	Amine Bouibes, Soumen Saha, Masataka Nagaoka	Scientific Reports <b>10</b> , 21966, (2020) DOI:10.1038/s41598-020-79038-y	2020年 12月	国外
Position-dependent diffusion constant of molecules in the heterogeneous systems as evaluated by the local mean squared displacement	Tetsuro Nagai, Shuhei Tsurumaki, Ryo Urano, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinod, Susumu Okazaki	J. Chem. Theory Comput. <b>16</b> , 7239-7254 (2020) DOI:10.1021/acs.jctc.0c00448	2020年 12月	国外
Theoretical Elucidation of the Effect of Counteranions on the Olefin Polymerization Activity of (Pyridylamido)Hf(IV) Catalyst by QM and REMD Studies: MeB(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> <sup>-</sup> vs. B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> <sup>-</sup>	Nana Misawa, Yuichi Suzuki, Soumen Saha, Nobuaki Koga, Masataka Nagaoka	Organometallics <b>40</b> , 48-62 (2021) DOI:10.1021/acs.organomet.0c00698	2020年 12月	国外

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
Efficient Experimental Search for Discovering a Fast Li-Ion Conductor from a Perovskite-Type $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ (LLNO) Solid-State Electrolyte Using Bayesian Optimization	Zijian Yang, Shinya Suzuki, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Masayuki Karasuyama, and Ichiro Takeuchi	J. Phys. Chem. C <b>125</b> , 152–160 (2021) DOI:10.1021/acs.jpcc.0c08887	2020年 12月	国外
Quantifying Uncertainties in Solvation Procedures for Modeling Aqueous Phase Reaction Mechanisms	Alex Maldonado, Satoshi Hagiwara, Tae Hoon Choi, Frank Eckert, Kathleen Schwarz, Ravishankar Sundararaman, Minoru Otani, John Keith	J. Phys. Chem. A <b>125</b> , 154–164 (2021) DOI:10.1021/acs.jpca.0c08961	2021年 1月	国外
A Constant-pH Hybrid Monte Carlo Method with a Configuration-Selection Scheme Using the Zero Energy Difference Condition: Elucidation of Molecular Diffusivity Correlated with a pH-Dependent Solvation Shell	Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka Nagaoka	J Chem. Theory Comput. <b>17</b> , 1030– 1044 (2021) DOI:10.1021/acs.jctc.0c00939	2021年 1月	国外
Atomistic Simulation of the Polymerization Reaction by a (Pyridylamido)hafnium(IV) Catalyst: Counteranion Influence on the Reaction Rate and the Living Character of the Catalytic System	Nana Misawa, Yuichi Suzuki, Kentaro Matsumoto, Soumen Saha, Nobuaki Koga, Masataka Nagaoka	J. Phys. Chem. B <b>125</b> , 1453–1467 (2021) DOI:10.1021/acs.jpcb.0c10977	2021年 1月	国外

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
A First-Principle Microkinetics for Homogeneous-Heterogeneous Reaction: Application to Oxidative Coupling of Methane Catalyzed by Magnesium Oxide	Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama	ACS Catal. <b>11</b> , 2691-2700 (2021). DOI:10.1021/acscatal.0c04104	2021年 2月	国外
First-principles Study of Microscopic Electrochemistry at the LiCoO <sub>2</sub> Cathode/LiNbO <sub>3</sub> Coating/ $\beta$ -Li <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> Solid Electrolyte Interfaces in an All-Solid-State Battery	Bo Gao, Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama	ACS Appl. Mater. Interfaces <b>13</b> , 11765-11773 (2021). DOI:10.1021/acscami.0c19091	2021年 3月	国外
Study on the free corrosion potential at an interface between an Al electrode and an acidic aqueous NaCl solution through density functional theory combined with the reference interaction site model	Koichi Kano, Satoshi Hagiwara, Takahiro Igarashi, and Minoru Otani	Electrochim. Acta <b>377</b> , 138121 (2021) DOI:10.1016/j.electacta.2021.138121	2021年 3月	国外
Algorithm to minimize MPI communications in the parallelized fast multipole method combined with molecular dynamics calculations	Yoshimichi Andoh, Shin-ichi Ichikawa, Tatsuya Sakashita, Noriyuki Yoshii, Susumu Okazaki	J Comput Chem. <b>42</b> , 1073-1087 (2021) DOI:10.1002/jcc.26524	2021年 3月	国外

[2] 学会等における招待講演・口頭発表・ポスター発表

① 招待講演

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Multi-scale Theoretical Simulation for the Heterogeneous Catalysis	Atsushi Ishikawa	Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment オンライン	2020年 8月	国際
密度汎関数理論と微視的反応速度論を基礎とした触媒活性の理論的予測	石川 敦之	第126回触媒討論会 オンライン	2020年 9月	国内
蓄電池材料・現象の先端的第一原理計算研究	館山 佳尚	電気化学界面シミュレーションコンソーシアム 2020年第1回研究会 東京（オンライン）	2020年 10月	国内
次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究	館山 佳尚	第10回材料系ワークショップ ～「富岳」時代の物質科学シミュレーションの新展開～ 東京（オンライン）	2020年 10月	国内
Collaboration among Computation, Experiments and Mathematics toward Next Generation Battery	Kazuto Akagi	The 4th Symposium for The Core Research Cluster for Materials Science Online	2020年 11月	国内
DFT Sampling Studies on Interface Ionics at Heterogeneous Solid-Solid Interfaces in Batteries	Yoshitaka Tateyama	ENGE 2020 online	2020年 11月	国際
第一原理計算	館山 佳尚	電気化学会関東支部第48回先端科学セミナー 電気化学のための計算化学入門 オンライン	2020年 11月	国内
全固体電池開発に向けた計算・データ科学研究：富岳電池課題の取組	館山 佳尚	第61回電池討論会 オンライン	2020年 11月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
拡張アンサンブル法・第一原理計算連携フレームワークによる固体中の不規則性の大規模サンプリング	笠松 秀輔	物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」 オンライン	2020年 12月	国内
トポロジカルデータ解析による電解質材料の特徴抽出	赤木 和人	電気化学会東北支部 第51回セミコンファレンス オンライン	2020年 12月	国内
全固体電池材料の最新計算・データ科学研究	館山 佳尚	第7回電池材料解析ワークショップ オンライン	2020年 12月	国内
Computational design and exploration of novel solid electrolytes for all-solid state batteries by DFT and machine learning	Randy Jalem	e-ASIA Joint Research Program Online Workshop on “Materials Informatics” オンライン	2021年 1月	国際
DFT calculation study on Li metal / LLZO electrolyte interfaces: stability and ion transport	Yoshitaka Tateyama	Interface IONICS online symposium 2021 Spring online	2021年 3月	国際
不均一系触媒反応の先進的第一原理計算研究	館山 佳尚	日本化学会第101春季年會 中長期テーマシンポジウム 革新的触媒の創製：光や電場などを用いた触媒反応 オンライン	2021年 3月	国内
Theoretical Analysis of Microscopic Interface Ionics at Heterogeneous Solid-Solid Interfaces in Batteries	Yoshitaka Tateyama	PRiME 2020 online	2020年 10月4-9日	国際
DFT-based understanding of ion transfer at heterogeneous solid-solid interfaces in batteries	Yoshitaka Tateyama	CECAM Flagship Workshop: MATERIALS DESIGN FOR ENERGY STORAGE AND CONVERSION: THEORY AND EXPERIMENT オンライン	2021年 3月2-5日	国際

② 口頭発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
位置に依存した拡散係数の新規評価方法に基づく不均一系における物質輸送	永井 哲郎	日本物理学会 2020 年秋季大会 オンライン	2020 年 9 月	国内
電極層内の粒子分散状態が全固体電池特性に及ぼす影響	井上 元, 宗 マグヌス, 平手 隆晴, 柘植 義文	化学工学会 第 51 回秋季大会 (2020) オンライン	2020 年 9 月	国内
対アニオンの影響に着目した (pyridylamido)Hf 触媒によるオレフィン重合反応活性に関する計算化学的解析	三澤 奈々, 鈴木 雄一, 古賀 伸明, 長岡 正隆	分子科学討論会オンライン討論会 2020 オンライン	2020 年 9 月	国内
機械学習ポテンシャルによる第一原理熱力学配置サンプリングの加速	笠松 秀輔, 松本 潮, 小 川 貴史, 桑 原 彰秀, 本 山 裕一, 吉 見 一慶	日本物理学会 2020 年秋期大会 オンライン	2020 年 9 月	国内
Adsorption and Decomposition of Formic Acid on the Cu(111) Surface	S. E. M. Putra, F. Mutaqien, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, Y. Morikawa	日本物理学会 2020 年秋季大会 オンライン	2020 年 9 月	国内
第一原理計算を用いた Li 挿入グラフアイトの安定性の解析	春山 潤, 高 木 繁治, 下 田 景士, 渡 邊 巖, 袖山 慶太郎, 池庄 司 民夫, 大 谷 実	第 61 回電池討論会 オンライン	2020 年 11 月	国内
水素化ホウ素固体電解質中の Mg の拡散挙動の理論的研究	Gao Xichan, 赤木 和人	第 61 回電池討論会 Online	2020 年 11 月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
A Theoretical Study for Revealing the Mechanism of Sodiation in Hard Carbon for High Capacity Anode	Yong Youn, Azusa Kamiyama, Kei Kubota, Shinichi Komaba, Yoshitaka Tateyama	ENGE 2020 online	2020年 11月	国際
Mg(B(HFIP) <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> 系電解質におけるMg金属析出反応機構の解明	トウルソン フィロラ, 山 本 健太 郎, 万代 俊 彦, 館山 佳 尚, 中西 康 次, 内山 智 貴, 渡邊 稔 樹, 金村 聖 志, 内本 喜 晴	第 61 回電池討論会 オンライン	2020年 11月	国内
ガーネット型 Li <sub>7</sub> La <sub>3</sub> Zr <sub>20</sub> Li <sub>12</sub> /Li 金属負極界面の安定性・酸化還元に関する第一原理計算研究	GAO Bo, JALEM Randy, 館山 佳尚	第 61 回電池討論会 オンライン	2020年 11月	国内
炭酸リチウム SEI/グラファイト負極界面における Li イオン輸送の第一原理計算解析	館山 佳尚, 袖山 慶太郎	第 61 回電池討論会 オンライン	2020年 11月	国内
高分子電解質膜および燃料電池電極界面における物質輸送機構解明に向けた分子動力学計算新規手法開発	永井 哲郎	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム オンライン	2021年 2月	国内
Pt(111)表面上におけるメタノール脱水素化反応の第一原理的研究	入口拓也, 濱 田幾太郎, 森 川良忠	日本物理学会 2021 春季大会 オンライン	2021年 3月	国内

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
電気化学界面シミュレーション技術の社会実装と電池材料への適用	大谷 実	日本化学会第 101 春季年会 富岳電池課題第 1 回公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	2021 年 3 月	国内
燃料電池高分子電解質膜バルク中における物質輸送の分子動力学計算による研究	岡崎 進	日本化学会第 101 春季年会 富岳電池課題第 1 回公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	2021 年 3 月	国内
燃料電池反応の計算科学と次世代型電極の実現に向けた計算予測	杉野 修	日本化学会第 101 春季年会 富岳電池課題第 1 回公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	2021 年 3 月	国内
大規模第一原理計算による全固体電池電解質界面のイオン・電子状態解明	館山 佳尚	日本化学会第 101 春季年会 富岳電池課題第 1 回公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	2021 年 3 月	国内
ヘテロ固固界面構造探索手法の開発と全固体電池界面への適用	GAO Bo, JALEM Randy, 館山 佳尚	日本セラミックス協会第 33 回秋季シンポジウム オンライン	2020 年 9 月 2-4 日	国内
Inevitable Critical Issues of Fluorinated Alkoxyborate-based Electrolytes in Magnesium Battery Applications	Toshihiko Mandai, Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama	PRiME 2020 online	2020 年 10 月 4- 9 日	国際

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
Electron and ion modulation at the NASICON solid-electrolyte/electrode interfaces at static and operating conditions in all-solid-state batteries: A DFT study	Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Bo Gao, Yoshitaka Tateyama	PRiME 2020 online	2020年 10月4- 9日	国際
スクシノニトリル系分子結晶電解質の高速リチウムイオン伝導機構の分子動力学解析	佐々木 遼馬, 守谷 誠, 渡 邊 佑紀, 西 尾 和記, 一 杉 太郎, 館 山 佳尚	電気化学会第88回大会 オンライン	2021年 3月22- 24日	国内

③ ポスター発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
外部応力と体積変化を考慮した全固体電池の電池特性シミュレーション	布下 敬太, 平手 隆晴, 木村 直樹, 井上 元, 柘植 義文	化学工学会 第 51 回秋季大会 (2020) オンライン	2020 年 9 月	国内
計算、観察、機械学習による多孔質電極構造特性の推定	石川 翔太, 宋 マグヌス, 木村 直樹, 井上 元, 柘植 義文	化学工学会 第 51 回秋季大会 (2020) オンライン	2020 年 9 月	国内
古典密度汎関数理論を用いた Lennard-Jones・剛体球系の分布関数計算	春山 潤, 杉野 修	日本物理学会 2020 年秋期大会 オンライン	2020 年 9 月	国内
Evaluation of effect of volume expansion on cell performance of all-solid-state batteries with 1D simulation	Keita Nunoshita, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge, Naoki Kimura	2020 年 電気化学秋季大会 (PRiME2020 : 第 8 回日米合同大会) online	2020 年 10 月	国際
Numerical Simulation with Multi-Network Model and Discrete Element Method for Dynamic Structure Change and Cell Performance of All-Solid-State Batteries	Ryusei Hirate, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge, Naoki Kimura	2020 年 電気化学秋季大会 (PRiME2020 : 第 8 回日米合同大会) online	2020 年 10 月	国際
Simulation of Correlation Estimation of Porous Structure Properties of Secondary Battery Using Machine Learning	Shota Ishikawa, Gen Inoue, Yoshifumi Tsuge, Naoki Kimura	2020 年 電気化学秋季大会 (PRiME2020 : 第 8 回日米合同大会) online	2020 年 10 月	国際
不均一系における位置に依存した拡散係数 の新規手法の提案	永井 哲郎	第 34 回分子シミュレーション討論会 オンライン	2020 年 12 月	国内

[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
メタン転換固体触媒の性能を理論計算で予測 ～さまざまな材料探索が加速し脱炭素社会へ～	Atsushi Ishikawa, Yoshitaka Tateyama	日本経済新聞、BtoB プラットフォーム業界 Ch、Tii 技術情報	2021年 3月	国内

### (3) 特許出願状況

補助事業名

「富岳」成果創出加速プログラム

次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究

代表機関名

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

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