

令和3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4年5月30日

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

館山 佳尚

目次

補助事業の名称	1
1. 補助事業の目的	1
2. 令和3年度（報告年度）の実施内容	1
2-1. 当該年度（令和3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	21
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
別添 学会等発表実績	35
(1) 活動報告	35
(2) 学会等発表実績	59
[1] 学会誌・雑誌等における論文掲載	59
[2] 学会等における招待講演・口頭発表・ポスター発表	65
① 招待講演	65
② 口頭発表	68
③ ポスター発表	73
[3] プレス発表	76
(3) 特許出願状況	77

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

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

1. 補助事業の目的

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

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

2. 令和3年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和3年度）の事業実施計画

令和3年度は、ポスト「京」重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを活用し、世界最高水準の研究開発成果の創出に取り組む。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施する。以下に具体的な事業実施内容について記載する。

(1) 研究開発

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

A) 二次電池

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

サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

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

令和3年度においては、本サブテーマを以下の4つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を遂行する。

①大規模計算による高性能電解液系のイオン輸送・界面反応機構の解明

stat-CPMD コード等を用いた第一原理 MD サンプリングをさらに推進し、高濃度電解液およびポストリチウムイオン電池 (Mg 金属電池など) の電解液のバルク領域および界面領域における、溶媒和・脱溶媒和状態、イオン拡散・輸送、酸化還元挙動について微視的理解を深化させ、高安全・高性能電池を得るための指針獲得を目指す。

②大規模電極－電解質界面モデルでの大域的界面構造の解明

Red Moon 法を用いて調製した固体電解質界面構造を解明して、大規模かつ高濃度の系の電極電解質界面のための最適化条件を探る。また、定電位 Red Moon 法を用いて、大規模系における電極分極を考慮した固体電解液層間 (SEI) 膜形成シミュレーションの実現を目指す。

③実在電極表面における電極電位に依存した電気化学反応の解明

反応経路自動探索法を用いた電気化学反応の経路探索シミュレーションを引き続き行う。令和 3 年度は、「富岳」の性能を引き出し効率よく経路探索を行うために、プログラムを高速化してシミュレーションを実施する。数ナノメートルサイズの実在電極をモデル化し、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最適化した力場を用いた古典 MD 計算によるイオン伝導度の電解液濃度依存性の解明

機械学習の手法で第一原理分子動力学 (MD) 計算における分子ダイナミクスを模倣するように最適化した AMOEBA 力場を行って、大規模 (1 万原子以上) かつ長時間 (10 ナノ秒以上) の古典 MD 計算を行う。これにより、イオン伝導度に影響する潜在因子と考えられる「カチオンとアニオンのクラスタリング」と「溶媒分子の脱着頻度」の濃度依存性を解明する。Li, BF₄, EC からなる系をリファレンスとし、Na や Mg、PF₆ や PC、錯イオンといった要素の働きを調べる。

(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大学院情報学研究科、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター、国立大学法人東北大学材料科学高等研究所)

サブテーマ A-2 「二次電池・全固体電池」

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

令和 3 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全固体電池向け高性能固体電解質の界面における反応・イオン輸送機能の解明

全固体電池の固体電解質内界面および固体電解質／電極界面でのイオン輸送・電子移動について効率なサンプリング手法を組み合わせた第一原理計算解析を実行し、イオン伝導度・電気化学的安定性に関する微視的理解を進化させる。その中で新規固体電解質探索も実行し、実験家・企

業への検証提案にも取り組む。

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

①第一原理モンテカルロ手法等を用い欠陥分布を考慮した大規模計算による温度や欠陥濃度による活性への影響の解明

第一原理モンテカルロ手法やその他のシミュレーションに基づき酸化物中のドーパントの分布を求め、さらに得られた分布に基づき酸素還元反応の反応エネルギーを計算し、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電極における酸素還元・CO酸化反応機構解明

N原子がドーピングされたグラフェンエッジに結合した単原子触媒の帯域的安定構造を機械学習法を用いて探索する。もとまった構造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。

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

①大規模界面モデルでの MD 計算によるプロトン、酸素、水素輸送の解析技術の確立

10⁶~10⁷ 原子規模の燃料電池電極四相界面モデルを構築し、全原子 MD 計算を実行する。これに基づき、界面における上記分子の浸透係数の評価、輸送機構の解析方法を確立する。

②電解質膜バルクにおける物質輸送マイクロ機構の解明

10⁵ 原子規模の高分子電解質膜バルクモデルを用いて、位置に依存する拡散係数と自由エネルギーから、プロトン、酸素、水素輸送のマイクロ機構を解明する。

(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、データの一時再利用と一般公開システムの構築を行う。

令和3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)を共有するプロトタイプシステムを用いて、複数シミュレーションの結果格納と利用について試行利用する。

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

(2) プロジェクトの総合的推進

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

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

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

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

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

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

2-2. 実施内容（成果）

（1）研究開発

令和3年度は、ポスト「京」重点課題5本格実施フェーズにて開発されたアプリケーションソフトウェアを利活用し、世界最高水準の研究成果の創出に取り組んだ。また、この成果創出を加速するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施した。以下に具体的な成果について記載する。

A) 二次電池

サブテーマA-1 「電解液系次世代二次電池（革新型液系二次電池）」

①大規模計算による高性能電解液系のイオン輸送・界面反応機構の解明

[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

次々世代電池のMg金属電池において、高性能を実現するため充放電を効率的に行える電解液設計および負極における溶解析出指針の獲得が重要な課題となっている。そこでstat-CPMD等を用いた第一原理計算探索・解析を実行し、Mg[Al(HFIP)₄]₂/G2電解液がMg²⁺の拡散に非常に有効であること、そして粒界を多く含むMg金属負極がスムーズな溶解析出につながることを理論的に実証した。

さらにNaイオン電池向けに最近開発された高容量負極について、謎であった充電時のイオン状態を第一原理計算から明らかにした。

[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]

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)₄]⁻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サンプリングが必要となる。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ている。負極界面系の計算においては金属状態を扱うことから、それに適したVASPを用いた。

[研究成果]

次々世代電池の一つとして、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)₄]₂/G3の開発が報告された。我々は「富岳」等を用いたCPMD/stat-CPMDによる第一原理MDサンプリングを本電解液系およびMg[Al(HFIP)₄]₂/G3、Mg[Al(HFIP)₄]₂/G2といった関連電解液系に適用し（図2-2-1-A-1）、Mg塩の解離性、溶媒和構造の特徴、溶媒和の還元分解耐性について明らかにしつつ、さらにMgイオンの輸送特性まで明らかにした。その結果、Mg[Al(HFIP)₄]₂/G2が高い輸率とイオン伝導度を持ちうることを示された。実際実験においてもMg[Al(HFIP)₄]₂/G2電解液が溶解析出効率を最大化することが観測され、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[1]。

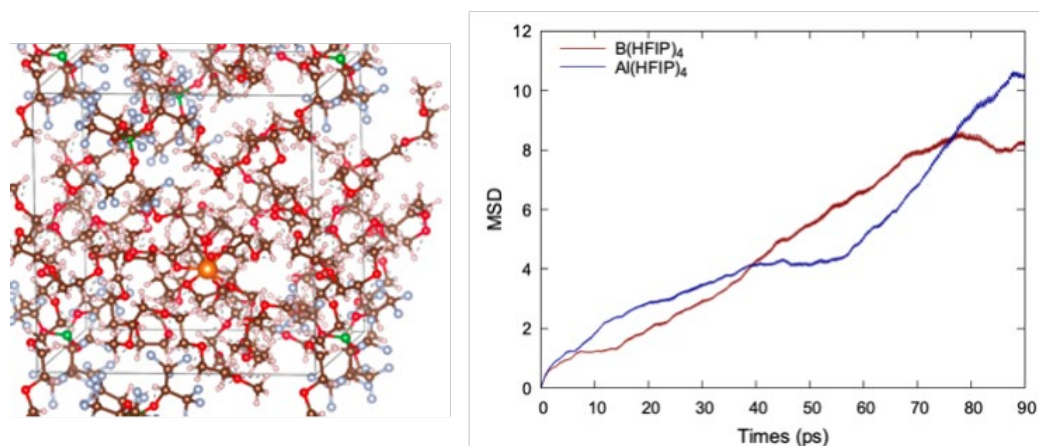


図 2-2-1-A-1. (左) Mg 金属電池高性能化を達成しうる Mg[B(HFIP)₄]₂/G3 電解液の第一原理 MD 計算により得られた平衡状態 (Mg : オレンジ、O : 赤、C : 茶、F : 青、B : 緑、H : 白)。(右) 第一原理 MD 計算により得られた Mg[B(HFIP)₄]₂/G3 および Mg[Al(HFIP)₄]₂/G3 電解液内の Mg イオンの平均自乗変位。

さらに Mg 金属負極の溶解析出効率を左右するもう一つの要因として Mg 金属へのドーパント挿入と粒界形成の影響が議論されてきた。この問題を解明すべく、我々は Mg 金属の 5 つの粒界モデル、5 つのドーパント系、多様なドーパント置換サイトを考慮した大量の第一原理計算を実行し、Ca ドープが粒界形成を促進し、その粒界からの Mg 溶解が容易になること実証した (図 2-2-1-A-2)。さらに Mg 析出も容易になることに対する新規理論の提案に至った [2]。

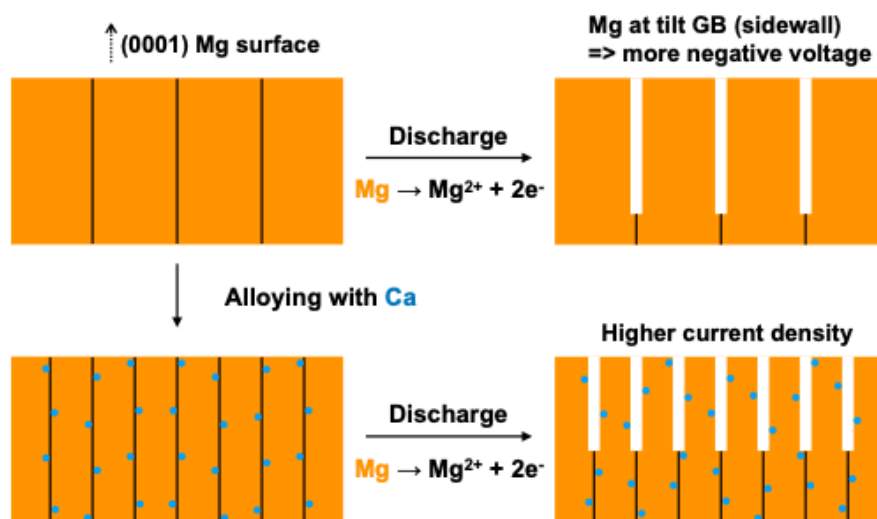


図 2-2-1-A-2. Mg 金属負極のドーパントおよび粒界に依存した溶解メカニズムの模式図。

次世代電池としてはNaイオン電池がより有望である。しかし、負極側の容量が、現行のLiイオン電池に匹敵する高エネルギー密度の達成や実用化の促進を阻害してきた。それに対し近年、これまでの1.5倍以上の容量を持つ新しいタイプのハードカーボン負極が合成された。そのメカニズムを解明し、負極設計指針の獲得を目指して、我々は第一原理計算によるハードカーボンモデル内のNaイオンの挿入状態をくまなく調べた結果、グラファイトには挿入しないNaイオンがハードカーボン内の1nm程度のポア（孔）であれば数層のクラスターを安定に形成しうることが示された。さらにそのクラスターの中心部でNaイオンは準金属的になっており、電位と安定性の両面で優位であることが示された（図2-2-1-A-3）。本研究で得られた知見はNaイオン電池実用化に大きく貢献する[3]。

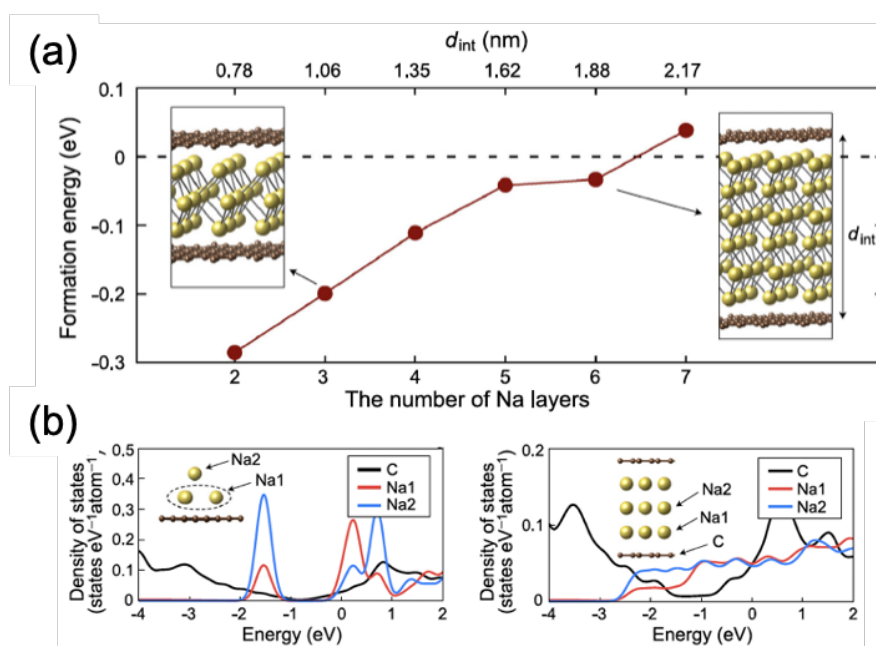


図2-2-1-A-3. (a) ハードカーボン内のポア（孔）におけるNaイオン挿入安定性。金属Naに比べて、孔内で4層程度のクラスターを作るほうが安定である。
(b) Naイオン挿入されたハードカーボン内のポアの電子状態。中心のNaは準金属的になっている。

[研究成果の社会実装について]

国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ JST 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」: 電気化学ポテンシャルと第一原理計算の融合による材料内のイオン伝導の理解

[参考文献]

- [1] Toshihiko Mandai, Yong Youn, Yoshitaka Tateyama, “Remarkable Electrochemical and Ion-Transport Characteristics of Magnesium-Fluorinated Alkoxyaluminate-Diglyme Electrolytes for Magnesium Batteries”, *Mater. Adv.* **2**, 6283–6296 (2021).
- [2] Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Masaki Matsui, Toshihiko Mandai, Hidetoshi Somekawa, Yoshitaka Tateyama, “Tuning the performance of a Mg negative electrode through grain boundaries and alloying toward the realization of Mg batteries”, *J. Mater. Chem. A* **9**, 15207–15216 (2021).
- [3] Yong Youn, Bo Gao, Azusa Kamiyama, Kei Kubota, Shinichi Komaba, Yoshitaka Tateyama, “Nanometer-size Na cluster formation in micropore of hard carbon as origin of higher-capacity Na-ion battery”, *npj Comput. Mater.* **7**, 48 (2021).

②大規模電極－電解質界面モデルでの大域的界面構造の解明

[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]

高濃度 Li 塩電解質溶液系に Red Moon (RM) 法を適用して、固体電解液相関 (SEI) 膜の延性を最適にする塩濃度があるという結果を得た。また、定電位 RM シミュレーションにより、電位差 1.0 から 4.0V の範囲で形成した SEI 膜では、膜厚が 1.0V で最小となることが分かった。ガス分子は無極性で揮発性が高く、SEI 膜の構造破壊を引き起こす。他方、負に帯電した還元生成物は、静電反発によって構造破壊を引き起こす。これら二つの効果のバランスが SEI 膜形成には重要であるという定電位充電の特徴が明らかとなった。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

- ・高濃度 Li 塩電解質溶液系における RM シミュレーションについて

計算モデルは、リン酸トリメチル (TMP) 800 分子、リチウムビスフルオロスルホニルアミド (LiFSA) 105-830 分子、電極炭素 3,020 原子分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 LAMMPS ベース RedMoon である。

- ・EC 電解液系における定電位 RM シミュレーションについて

計算モデルは、炭酸エチレン (EC) 1,700 分子、リチウムイオン 134 分子、PF₆-134 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定電位法を実装した LAMMPS ベース RedMoon である。

[研究成果]

LAMMPS をベースとした RedMoon アプリケーションを用いて、高濃度 Li 塩電解質溶液系に Red Moon (RM) 法を適用して、SEI 膜の延性を最適にする塩濃度があるという結果を得た。しかし、塩濃度が高くなると、機械的安定性が低下し、Li イオン電池の性能劣化につながるということが予想される。これは、塩濃度が高くなると、無機物に富んだ硬い SEI 層が形成されることに起因する。これらのことから、LiFSA 系電解液の適切な調整が、Li イオン電池の高性能化および耐久性向上に不可欠であると言え、実験結果を裏付ける計算結果を得た。また、エチレンカーボネート (EC) 系電解液からなる Li イオン電池において、実際の充電方法の一つである定電位充電に対応する SEI 膜形成 RM シミュレーションを行い、SEI 膜の性質の充電電位依存性を調査した。電位差 1.0 から 4.0V の範囲で形成した SEI 膜では、膜厚が 1.0V で最も薄くなることが明らかとなった (図 2-2-1-A-4)。SEI 膜が厚くなる要因としては、ガス分子効果とクーロン反発効果の二つが考えられる。エチレン (C₂H₄) は充電初期において電位差が小さいほど多く生成される。エチレン (ガス分子) は無極性で揮発性が高いため、電位差が小さいほどガス分子による SEI 膜の構造破壊を引き起こす。他方、負に帯電した還元生成物は電位差が大きいほど、クーロン反発によって構造破壊を引き起こす。これら二つの相反する効果によって、SEI 膜は 1.0 V で最も薄くなると考えられる。定電位 RM シミュレーションによって、SEI 膜形成にはこれらの効果が重要であるという定電位充電の特徴が明らかとなった。この計算の際、「富岳」を用いることで独立した初期条件で作

成した複数の計算 (20 サンプル程度) を行うことができ、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ことが可能となった。

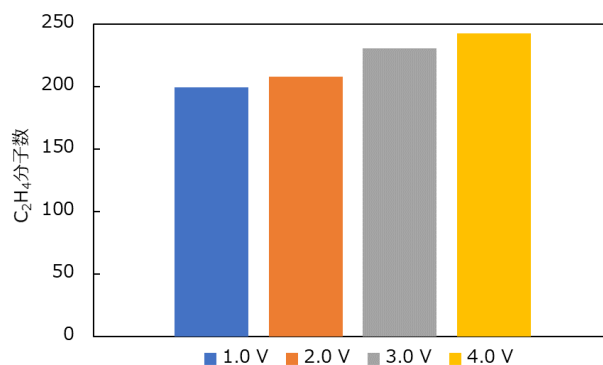


図 2-2-1-A-4. 各電位差における SEI 膜の膜厚。電位差の増加に対して単調増加する。

[研究成果の社会実装について]

国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

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

[参考文献]

- [1] 田中佑一、長岡正隆、第 35 回分子シミュレーション討論会、オンライン、岡山大学、2021 年 11 月
- [2] Amine Bouibes, Norio Takenaka, Kei Kubota, Shinichi Komaba, and Masataka Nagaoka, “Development of advanced electrolytes in Na-ion batteries: application of the Red Moon method for molecular structure design of the SEI layer”, *RSC Adv.* **12**, 971-984, (2022).
- [3] Masataka Nagaoka, Pacificchem2020, Online, Dec. 2021.

③実在電極表面における電極電位に依存した電気化学反応の解明

[担当責任者] 大谷実 (筑波大学計算科学研究センター)

[実施概要]

密度汎関数理論を用いた電子状態計算手法と古典溶液理論による溶媒分布計算手法のハイブリッドシミュレーション技術(ESM-RISM 法)の適用計算を行った。さらに、ESM-RISM と反応路自動探索法(GRRM 法)を組み合わせた、GRRM+ESM-RISM プログラムを開発し、金属と NaCl 水溶液の固液界面における水分子の分解反応に関するシミュレーションを行った。

[成果を得るため用いた計算モデル及び利用アプリケーション]

Quantum ESPRESSO(ESM-RISM ver)を使用し、以下のような計算モデルを用いて溶液環境パラメータなどを変えながら網羅的な計算を実行した。

- ・ 50 原子程度～500 原子程度を用いた様々な電極/電解液界面の計算モデル。
- ・ 数 100 原子程度の含水電極バルクモデルなど。

[研究成果]

筑波大学で開発している密度汎関数理論を用いた電子状態計算手法と古典溶液理論による溶媒分布計算手法のハイブリッドシミュレーション技術(ESM-RISM 法)の適用計算および計算手法高度化のためのプログラム開発を行なった。

具体的に適用計算は、固液界面の水分解反応の研究、粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究(図 2-2-1-A-5) [1]、一定電位下における水の拡散機構の解析(図 2-2-1-A-6) [2]、遷移金属硫化物電極と電解液の分解反応電位の研究、平衡論を用いた金属/水界面の腐食反応の研究、グラファイト負極に対する活性化障壁の電解液種依存性、酸素発生電極触媒材料の電子状態解析、アルミニウム材料の腐食電位の計算、セルロースの酸化還元電位の解析などを行った。計算手法高度化は、反応経路自動探索法と ESM-RISM 法の連成手法の開発、ESM-RISM 法に対する誘電補正した RISM の応用手法開発、ESM-RISM 法の高速度化手法の開発と実装などを行った。

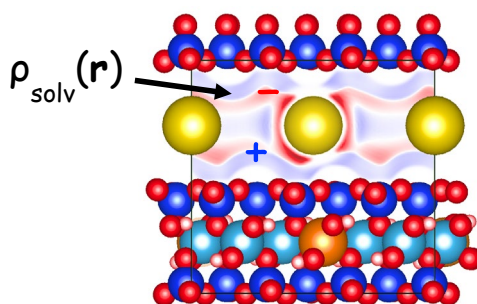


図 2-2-1-A-5. ESM-RISM を用いて計算した、Na-モンモリロナイトの水和構造。

$\rho_{\text{solv}}(r)$ は水の密度分布を表し、“-” と “+” はそれぞれ酸素過剰と水素過剰の領域を示す。

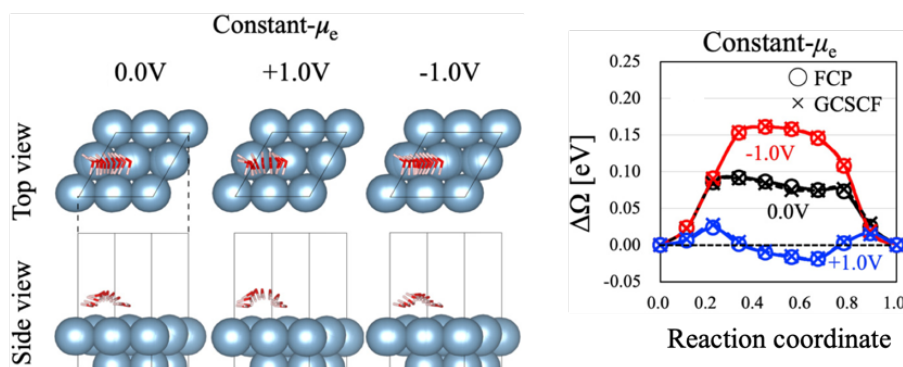


図 2-2-1-A-6. (左) Al(111)表面上の水のホッピング。

(右) グランドポテンシャルの経路依存性。計算においては、表面に印加する電圧を 0.0V、+0.1V、および-0.1V のパターンに関して計算を行った。

金属と NaCl 水溶液の固液界面における水分子の分解反応シミュレーションにより、反応種の荷電状態によって、界面領域の溶媒和構造が異なるとともに、塩の有無がエネルギー安定性に大きく影響することが明らかになった。真空表面の場合とも結果は大きく異なり、溶液環境効果の重要性を示すとともに、電極表面修飾等の触媒設計が可能となることが示された。

上記の研究・開発項目に加えて、クラスター展開法にベイズ最適化を組み合わせた安定構造探索プログラムの開発を行い、それを Li イオン電池の正極材料である LiCoO_2 の充放電過程における構造変化解析へ適用した。本手法の計算手続きを以下に述べる。まず、Li₀ 空孔サイトを導入した 03 型 LiCoO_2 (LCO) の構造を数万パターン作成し、その構造のクラスター関数を計算した。次に、それらの構造のいくつかについて、第一原理計算を行うことで形成エネルギーを算出する。そして、得られた形成エネルギーとクラスター関数を学習データとしたベイズ最適化により、次に計算すべき候補構造の抽出を行い、再度形成エネルギー計算を行う。この手続きを繰り返し実行し、Li, Co, O に対する 3 元系凸包解析から熱力学的に(準)安定な化合物を探索した。

今後は得られた安定構造から起電力を計算し、実験で得られた充放電曲線や放射光測定による構造解析と比較することで、本手法による計算予測精度の確認と充放電過程で変化する LCO の構造を計算科学の立場から決定していく予定である。

[研究成果の社会実装について]

- ・本課題で開発している ESM-RISM プログラムを利活用する予定の株式会社コベルコ科研の課題と株式会社豊田自動織機の課題の 2 件が「富岳」の一般課題で採択されている。
- ・本課題にも参画している電気化学界面シミュレーションコンソーシアムの会員企業と、共通の課題を設定して、より多くの産業界の研究者にシミュレーション技術を共有する。
- ・東京大学物性研究所のプログラム高度化プロジェクトにおいて、ESM-RISM プログラムの改良を行い、より効率的にシミュレーションを実施可能となる改良を加えている。

[参考文献]

- [1] Satoshi Hagiwara, Yasunobu Ando, Yuta Goto, Susumu Shinoki, and Minoru Otani, “Electronic, adsorption, and hydration structures of water-contained Na-montmorillonite and Na-beidellite through the first-principles method combined with the classical solution theory” , *Phys. Rev. Mater.* **6**, 025001-1-9 (2022).
- [2] Satoshi Hagiwara, Chunping Hu, Satomichi Nishihara, and Minoru Otani, “Bias-dependent diffusion of a H₂O molecule on metal surfaces by the first-principles method under the grand-canonical ensemble” , *Phys. Rev. Mater.* **5**, 065001-1-9 (2021).

④最適化した力場を用いた古典 MD 計算によるイオン伝導度の電解液濃度依存性の解明

[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]

種々のイオン濃度における古典分子動力学計算（MD 計算）とトポロジカルデータ解析を組み合わせて、電解液のイオン伝導度と溶液の構造的特徴の相関を評価した。濃度に応じて出現数が変わる多様な構造要素を非経験的に収集して定量化し、イオン伝導度を目的変数とした回帰分析を行うことで、電荷の輸送を実効的に担っているイオンの局所環境を解明することに成功した。

[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]

- ・約 4,000 原子からなる 0.5M-3.0M の濃度の LiBF_4/EC 電解液を計算モデルとした。
- ・古典 MD 計算にパラメータ最適化した AMOEBA 力場と TINKER を用いた。
- ・AMOEBA 力場のパラメータ最適化に VASP と独自拡張した遺伝的アルゴリズムを用いた。
- ・トポロジカルデータ解析に独自拡張した HomCloud を用いた。

[研究成果]

令和 2 年度に構築した手法を用いて、第一原理 MD 計算を参照系とした AMOEBA 力場のパラメータ最適化を行い、約 4,000 原子からなる 0.5M-3.0M の濃度の LiBF_4/EC 電解液を対象に、古典 MD 計算の結果から電解液のイオン伝導度を評価した。同時に、トポロジカルデータ解析（TDA）の手法を用いて電解液の原子構造が持つ幾何学的特徴を定量化（図 2-2-1-A-7）し、主成分分析（PCA）によって濃度の違いが電解液の構造のどこに現れるのかを調べた。系を構成する多様な原子種の組み合わせでこの作業を繰り返し、構造要素を非経験的に収集して、TDA と PCA により主成分値として定量化した（図 2-2-1-A-8）。

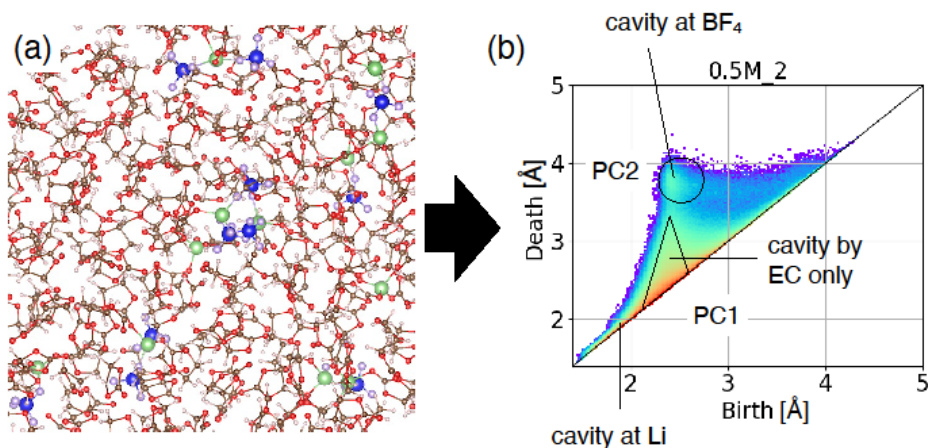


図 2-2-1-A-7. (a) LiBF_4/EC 系の古典 MD のスナップショット（Li：緑、B：青、F：薄紫、O：赤、C：茶、H：白）。
(b) C と O の原子位置の TDA で得られた 2 次のパーシステント図（PD2）。

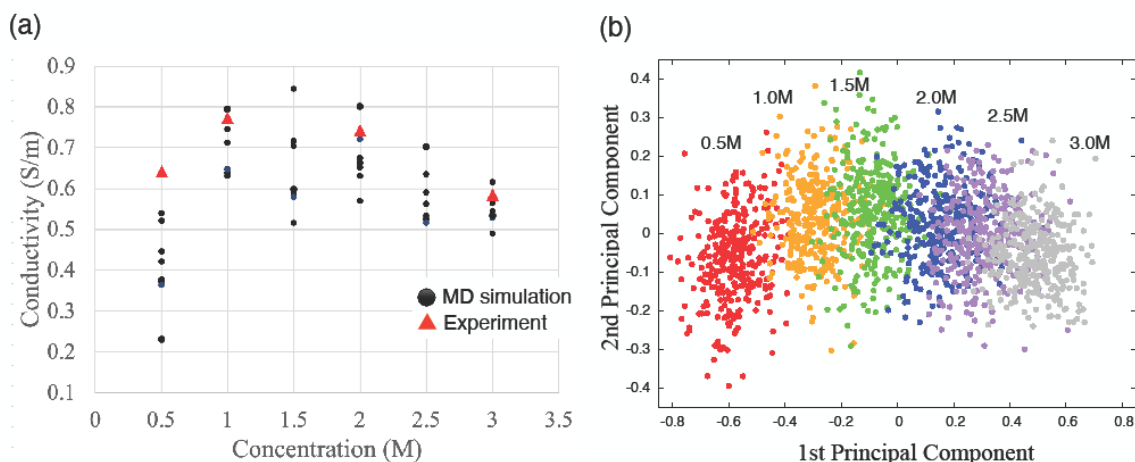


図 2-2-1-A-8. (a) LiBF_4/EC 系のイオン伝導度の濃度依存性 (●: MD 計算から評価したもの、▲: 実験値)。
 (b) 多くのスナップショットに対する PD2 の第 1 主成分と第 2 主成分のプロット (色は濃度の違いを表す)。

イオン伝導度を目的変数、構造要素を定量化した主成分値を説明変数とする回帰分析を行って寄与の大きな説明変数をスクリーニングし、陽イオンと陰イオンの局所環境に対応する主成分値 1 つずつからなる 2 つの説明変数で、幅広い濃度域のイオン伝導度を良好に (R^2 スコア 0.83) 線形回帰できた (図 2-2-1-A-9)。その起源を逆解析したところ、孤立イオンや鎖状イオンクラスターの末端に位置するイオンのように、電荷の輸送を実効的に担うイオンの局所環境を抽出できていることが分かった。Na や Mg、 PF_6 や PC、錯イオン等の要素についても評価と解析を進め、知見の幅が広がりつつある。

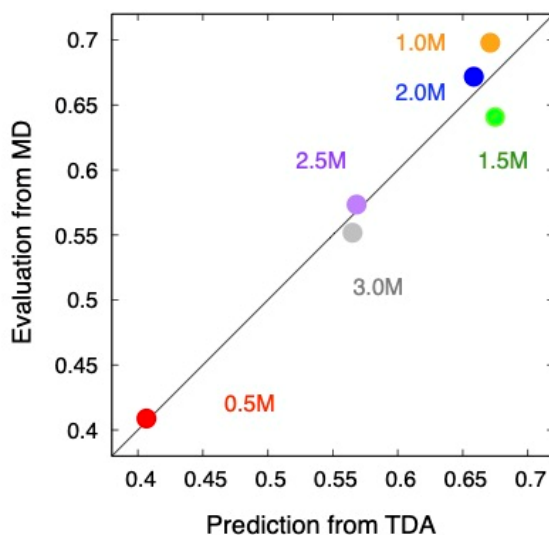


図 2-2-1-A-9. イオン伝導度の計算値 (横軸: Li と BF_4 に対応する各空洞の主成分値からの予測) と観測値 (縦軸: MD 計算からの直接評価)。

同様の手法を改良型 DPD モデルによる Nafion 型高分子電解質の粗視化モデルの大規模 MD 計算 (800 万粒子系) の結果に適用して、膜厚や水分含有率がラメラ構造や水の異方的拡散に与える影響を定量化することに成功した。これは超大規模 MD 計算のデータを次元削減しつつ有用な情報を発見/抽出する枠組みの実証という意義があり、得られたノウハウに基づいて、岡崎グループ (東大院新領域) が「富岳」を用いて生成した Nafion 型高分子電解質の全原子モデルの解析に着手することができた。

[研究成果の社会実装について]

大規模系の MD 計算からマクロな物性につながる有意な情報を得るには、系の緩和時間を考慮して熱力学的サンプリングを適切に行う必要がある。令和 3 年度の取り組みによって、TDA はその MD データが含む構造的特徴を 2 次元ヒストグラムの情報として可視化できると同時に、機械学習に親和性の良いベクトル情報としてコンパクトに定量化できることが分かった。これを踏まえ、NIMS の材料データプラットフォームセンター (DPFC) が運用するリポジトリ MDR-Closed を用いて「富岳」電池課題内のデータ駆動型研究を促進する取り組みを進めた。

主宰する「トポロジカルデータ解析コミュニティ」において、30 社超の材料系企業の研究者を対象としたセミナーとチュートリアルを開催し、TDA の手法の社会実装に努めた。

[参考文献]

- [1] Gao Xichan, 赤木和人 : 第 62 回電池討論会 (2021 年 12 月 2 日)

サブテーマA-2 「二次電池・全固体電池」

①全固体電池向け高性能固体電解質の界面における反応・イオン輸送機能の解明

[担当責任者] 館山佳尚 (物質・材料研究機構)

[実施概要]

高イオン伝導度と安定性を兼ね備えた固体電解質探索として、最近注目されている inverse Ruddlesden-Popper tetragonal (iRPt) 構造に着目し、ハイスループット第一原理計算と機械学習技術を用いて Li_4OBr_2 材料が有望であることを実験研究者へ提案した。後に実験合成で比較的高い性能を持つことが実証された。(本件は連携する JST プロジェクトの枠組みで実施し特許出願も行った。) また、これまでイオン伝導の抵抗成分として考えられていた粒界について、適切な構造条件を満たせばイオン伝導度は必ずしも低下しないことを、大規模第一原理分子動力学 (MD) 計算にて実証した。

[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。iRPt 構造固体電解質探索では 100-200 原子系と中規模サイズではあるものの 500 種類以上の組成の第一原理計算が必要となったことから、その並列・逐次実行をある程度自動化した。Garnet 型固体電解質粒界の第一原理 MD 計算は 500 原子系以上のスーパーセルの長時間サンプリングというまさにチャレンジングな計算であったが、「富岳」および HPC を最大限活用して妥当な統計性を確保した。

[研究成果]

全固体電池の実用化に向けて重要な課題となっているのが、(1) さらなる高いイオン伝導度を持つ固体電解質材料の開発と、(2) 界面における高抵抗化・劣化の抑制である。これまで、我々は (2) の解析のブレークスルーを目指した界面構造群サンプリング手法「ヘテロ界面 CALYPSO 法」を開発し、様々な電極 (遷移金属酸化物正極、Li 金属負極) と固体電解質界面の第一原理統計解析を行ってきた。

令和3年度は (1) について焦点をあて、高イオン伝導度と安定性を兼ね備えた固体電解質探索を行った。最近注目されている iRPt 構造に着目し、機械学習技術を用いて数万種類の組成から 500 種類をまずスクリーニングし、さらにハイスループット第一原理計算により 20 種類の有望材料を抽出した。その中から第一原理 MD 計算による Li イオン伝導度の計算を行った結果、 Li_4OBr_2 が安定性と高いイオン伝導を兼ね備えた材料として有望であることを提案した (図 2-2-1-A-10) [1]。この提案を受けて、実験家が合成を試み、ほぼ同じ組成の材料が実際に合成されるに至った。定量性についてまだ課題は残るものの、この合成材料も比較的高いイオン伝導度を示し、計算・データ研究から提案した候補材料が実際に合成され有望な材料であることが確認された [2]。材料合成は連携する JST プロジェクトの枠組みで実施し特許出願も行っている。

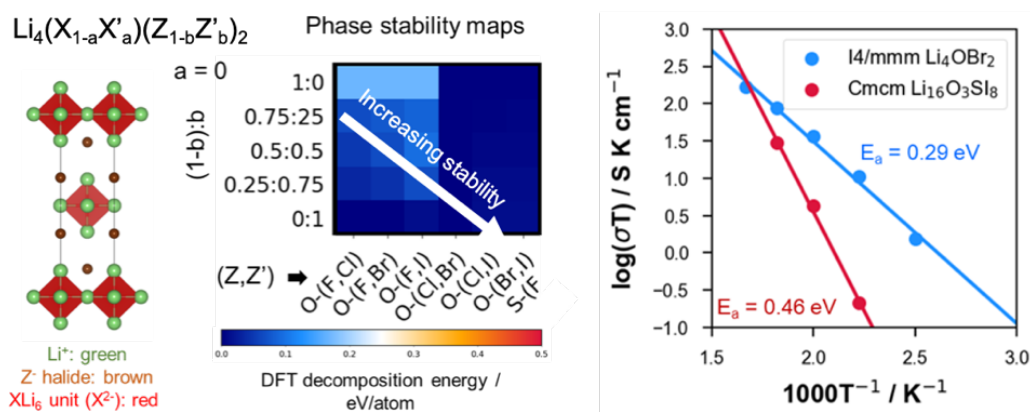


図 2-2-1-A-10. (左) irPt 構造群に対する第一原理計算による熱力学安定性マップ。(右) 第一原理 MD 計算により得られた有望材料の Li イオン伝導度。

上記の材料計算は結晶を仮定しているが、実際の固体電解質材料には多くの粒界が含まれる。そしてこの粒界がイオン伝導の抵抗成分として考えられてきた。これを微視的観点から確認するために我々は Garnet 型 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LLZO) 固体電解質の代表的な粒界に着目し、「富岳」等を利用した大規模第一原理 MD 計算を実行しイオン伝導度を見積もった。その結果 $\Sigma 3(112)$ 粒界という安定な（つまり現実的に多数存在しうる）粒界では、イオン伝導度はバルク並みであることが示された。イオン伝導度が低い $\Sigma 1(110)$ 粒界と比較することにより、この高い伝導度が、Li-Li 間の距離が適切に保たれていることが一要因となっていることが示された (図 2-2-1-A-11) [3]。

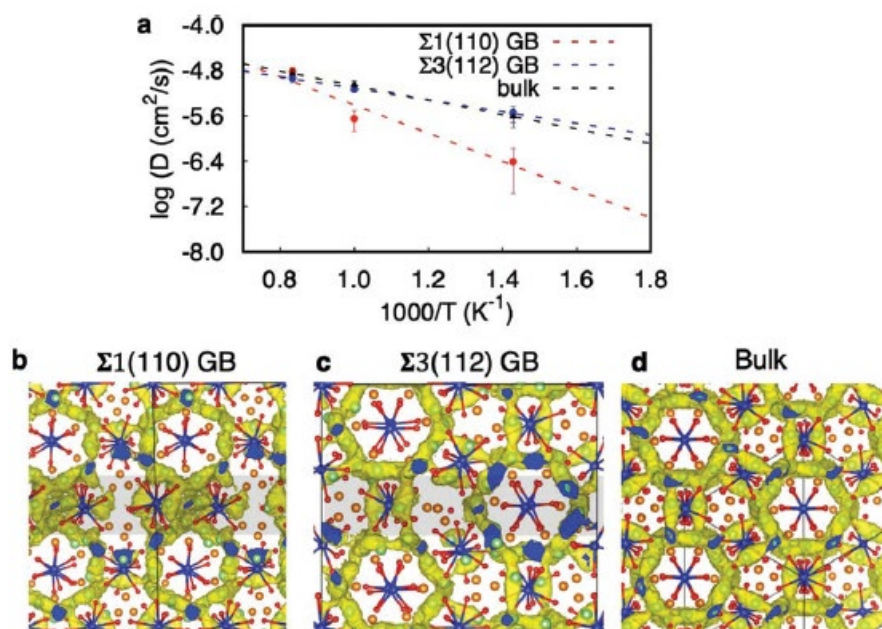


図 2-2-1-A-11. (a) 第一原理 MD により求められた Garnet 型固体電解質 $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ のバルクおよび $\Sigma 1$ 、 $\Sigma 3$ 粒界の Li イオン自己拡散係数。(b-d) 粒界近傍での Li イオン分布。Li : 緑、La : 橙、Zr : 紺、O : 赤

このように Li 間の相関がイオン伝導度に大きく寄与するという理論の実証にも本研究は大きく貢献している。

[研究成果の社会実装について]

国プロとの連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ JST 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高導電率固体電解質の探索
- ・ 文部科学省・科学研究費助成事業<新学術領域研究> 「蓄電固体界面科学」: 様々な固体電解質界面の電子・イオン移動に関する基礎学理構築
- ・ 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」: 様々な固体電解質界面の高温下でのイオン移動に関する基礎学理構築
- ・ 富士フイルム・奥野幸洋: 全固体電池材料の微視的機構解明

[参考文献]

- [1] Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama, “First-Principles DFT study on Inverse Ruddlesden-Popper Tetragonal Compounds as Solid Electrolytes for All-Solid-State Li⁺-Ion Batteries”, *Chem. Mater.* **33**, 5859–5871 (2021).
- [2] Shogo Wakazaki, Qiumin Liu, Randy Jalem, Takumi Nishikubo, Yuki Sakai, Naoki Matsui, Guowei Zhao, Kota Suzuki, Kei Shigematsu, Takafumi Yamamoto, Ryoji Kanno, Hena Das, Yoshitaka Tateyama, Masaki Azuma, “High-Pressure Synthesis and Lithium-Ion Conduction of Li₄OBr₂ Derivatives with a Layered Inverse-Perovskite Structure”, *Chem. Mater.* **33**, 9194–9201 (2021).
- [3] Bo Gao, Randy Jalem, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama, “Revealing Atomic-Scale Ionic Stability and Transport around Grain Boundaries of Garnet Li₇La₃Zr₂O₁₂ Solid Electrolyte”, *Adv. Energy Mater.* **12**, 2102151 (2022).

B) 燃料電池

サブテーマB-1 「燃料電池の電極界面反応」

①第一原理モンテカルロ手法等を用い欠陥分布を考慮した大規模計算による温度や欠陥濃度による活性への影響の解明

[担当責任者] 杉野修 (東京大学物性研究所)

[実施概要]

第一原理モンテカルロ計算・機械学習モデル構築・熱力学サンプリング連携フレームワークを持つオリジナルなアプリケーション abICS を用いて、酸化物電極触媒 ($t\text{-ZrO}_x\text{N}_{2-x}$) 中の酸素空孔およびドーパントの分布を求め、得られた電極表面上で合理的網羅計算を行い酸素還元反応の吸着中間物の構造とエネルギーを求め、触媒活性を調べた。

[成果を得るため用いた計算モデル]

計算モデル：百～二百原子からなる数百通りの表面スラブモデル(第一原理計算)、数千原子からなる数万ステップのモンテカルロ計算 (機械学習ポテンシャルによる計算)。

利用アプリケーション：第一原理モンテカルロ計算・機械学習モデル構築・熱力学サンプリング連携フレームワークを持つオリジナルなアプリケーション abICS、固体・溶液界面計算用の ESM-RISM。

[研究成果]

白金代替材料を用いた電極触媒の可能性を追求するために横浜国大を代表とする大型実験グループと連携して、酸化物電極触媒 ($t\text{-ZrO}_x\text{N}_{2-x}$) の燃料電池反応 (特に酸素還元反応) の活性を調べた。実験からは母物質 ($t\text{-ZrO}_2$) に数%の酸素空孔とそれと同数程度の窒素などの不純物を導入することにより、白金並みの開回路電圧が出ていることが示されたため、理論では上記欠陥が表面付近でどのように分布しているか、その結果どのような機構で酸素還元反応が起こるのか、その活性がどの程度であることが予想されるのか、といった問いに答えるためのシミュレーションを行った。電子状態が複雑な酸化物表面において不純物分布を計算するためには、第一原理モンテカルロ計算を行わなければならない。単純に見積もると場合の数は億をはるかに超え、高度なモンテカルロ法を用いても数百万通りの安定配置を求める必要があり、そのままでは「富岳」を用いても計算時間が足りない。そのため数千通りの安定配置を第一原理モンテカルロ計算から求め、その結果を機械学習して有効ポテンシャルを構築し、最終的に有限温度での不純物配置を求める方法を取り、「富岳」で実行可能なレベルに計算量を減らした。これらの計算をする機能はアプリケーション abICS に含めた (図 2-2-1-B-1)。

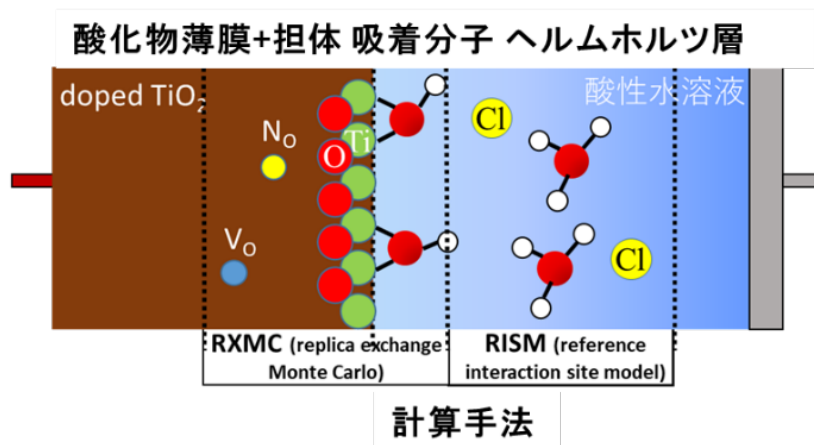


図 2-2-1-B-1. 欠陥を持つ酸化物と酸性水溶液の計算モデル。固体側の欠陥分布、液体側のイオン分布はそれぞれ abICS と ESM-RISM で求めた。

計算の結果、酸素空孔は構造を有して配置する一方、窒素不純物は表面第二層よりも深い位置にランダムに分布することなど実験と整合性を持った形で配置の特徴が明らかになった。さらに、この知見を反映させて電極表面をモデリングし、酸素還元反応の中間体の吸着エネルギーを第一原理計算し、反応の自由エネルギー曲線を得た (図 2-2-1-B-2)。ここでは、様々な反応中間体の構造をできるだけ網羅的に得るために、simulated annealing を含む様々な手法を適用した (合理的網羅計算)。この計算からは、上記不純物を導入せずとも白金並みの低い活性化エネルギーを示すことがわかった。またその活性は、不純物が存在しても計算精度の範囲内で変化がないことも分かった。このように「富岳」でなければできないような大規模な計算を行った結果、実験と一見不整合となるデータが得られた。この結果は実験サイドに提供し、実験結果の解釈の再考や電極開発の方針の再考などを促した。

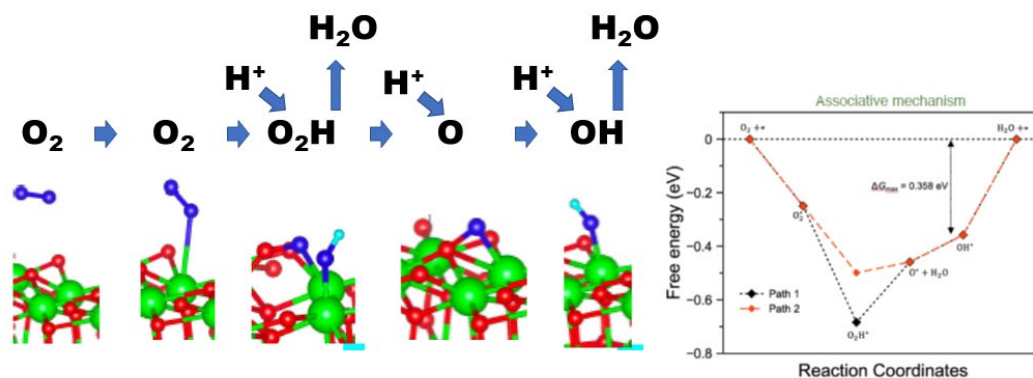


図 2-2-1-B-2. 酸素還元反応。

(左) association mechanism による反応経路の一つ。

(右) 対応する反応の自由エネルギー曲線 (黒)。酸素原子の移動が障害されている場合は赤線のような曲線となる。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。

一方計算ではこれまで軽視してきた吸着水の活性への影響を調べるために、電極水溶液界面のシミュレーションを追加で行い、さらに ESM-RISM のテスト計算を始めるなど、さらに実験を良く模擬したモデル構築を目指した研究を開始した。

[研究成果の社会実装について]

酸化物燃料電池電極触媒は、白金などの貴金属を使わず白金並みの活性と白金を超える耐久性を持つ材料として注目を浴び、NEDO の大型プロジェクトで開発が行われている。本研究は実践的な計算のためのアプリケーションの作成及びアプリケーションによる可能性実証が主要テーマであるが、計算結果をこのプロジェクトと共有することにより電極開発が進められている。

②第一原理計算によるグラフェン担持単原子電極における酸素還元・CO酸化反応機構解明

[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]

単原子Ptをグラフェンエッジに結合した構造について、第一原理電子状態計算と進化的アルゴリズム、ガウス過程回帰に基づく代理モデルを組み合わせた手法により、大域的に安定な構造を探索した。求まった構造に酸素還元反応やCO酸化反応の反応性を調べる上で重要な吸着子であるCOやOHなどの吸着状態を調べ、吸着エネルギーを求めた。

[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]

50-80個の原子からなるグラフェンリボンのエッジにPt単原子が結合した系について、第一原理電子状態計算と進化的アルゴリズムおよびガウス過程回帰を組み合わせた大域的安定構造探索手法により安定構造を求めた。さらにN原子をドーピングした系についても求めた。そこへ、CO、OH、H₂Oなどの吸着子の吸着状態を計算した。

[研究成果]

論文投稿中のため、詳細については割愛する。

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安定構造探索を広範囲に行い、反応過程を調べた。さらに、溶媒を含めた大規模な第一原理電子状態計算によりPtのグラフェンエッジへの安定状態、準安定状態について明らかにした。その知見をもとに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しつつある。

[研究成果の社会実装について]

・いくつかの有望な触媒構造が見つかったので、今後はそれらの触媒上でのCOの酸化反応過程についてシミュレーションを行い、その反応性が高いことを確認する。それらの結果をもとに、実験グループと討論を行っていく。

サブテーマB-2 「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送」

①大規模界面モデルでの MD 計算によるプロトン、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]

燃料電池カーボン集電材に対し、協力機関である企業の実験結果を再現する構造モデルを構築し、これに触媒である白金クラスター、アイオノマー、そして溶媒である水を加えて、現実系を十分精度よく記述する四相界面の作成手法を確立した。これに基づいて、4種類の含水率それぞれに対し、2種類のアイオノマーの膜厚での分子動力学計算（MD 計算）を開始した。

[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]

- ・約 65 万個および 110 万個の原子からなる電極 4 相界面
- ・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]

燃料電池開発企業と連携して、電極 4 相界面モデルの構築を行った（図 2-2-1-B-3）。界面は、カーボン集電材、白金触媒、アイオノマー、そして電解液で構成される。この中で、カーボン集電材の構造等は、スタック構造、表面の凹凸、 sp^3 炭素分率、官能基の面密度、白金の面密度、アイオノマー層の厚みなど、企業による実験結果に整合するように作成した。官能基の分布も第一原理計算結果に基づいて設定した。

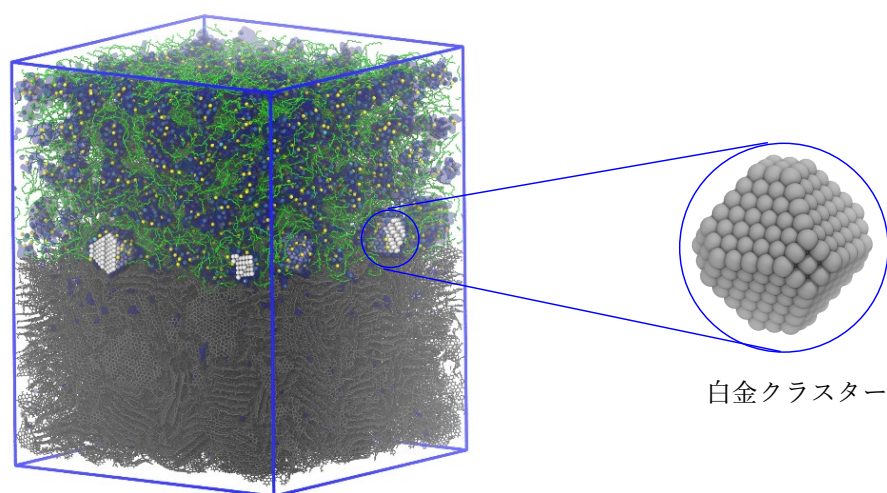


図 2-2-1-B-3. 燃料電池電極 4 相界面モデル。界面は、カーボン集電材、白金触媒、アイオノマー、電解液で構成される。原子数約 65 万。

界面構造は、含水率4種類とアイオノマーの膜厚2種類の、計8種類に対して作成した（図 2-2-1-B-4 には6種類掲載）。必要な原子数は、10 nmの膜厚で約65万原子、24 nmの膜厚で約110万原子であった。現在、これらに対して平衡化計算中であるが、得られた構造に基づいて、電解質膜バルクにおける水素や酸素の輸送に対する動的モンテカルロ（MC）法やグロータス機構によるプロトン移動を記述するEVBモデルなど、すでに確立してきたシミュレーション技術を適用して、電極界面における水素、酸素、並びにプロトン輸送の解析を行う予定である[1]。

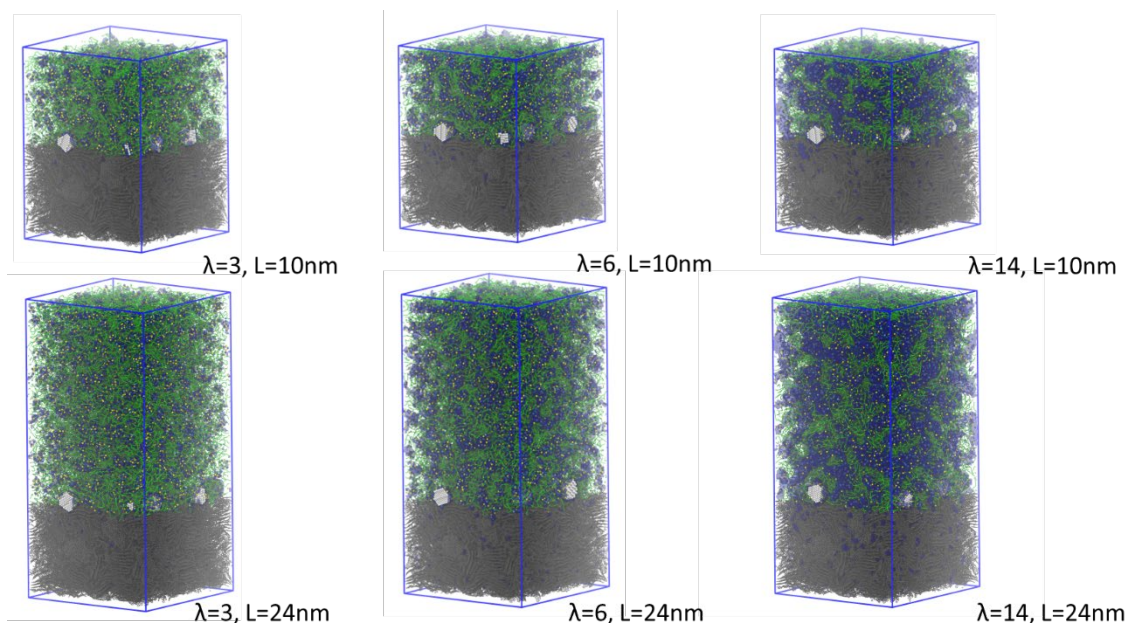


図 2-2-1-B-4. 様々な電極界面モデル。3種類の含水率それぞれに対し、2種類のアイオノマーの膜厚。原子数約65万（膜厚10 nm）、110万（膜厚24 nm）。

[研究成果の社会実装について]

国プロ・産業界との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ SIP バイオポリマー：分子動力学計算を用いた新規ポリマーの熱特性、力学特性の推算において連携。
- ・ 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, Kazushi Fujimoto, and Susumu Okazaki, “Three-dimensional free-energy landscape of hydrogen and oxygen molecules in polymer electrolyte membranes: Insight into diffusion paths”, *J. Chem. Phys.*, **156**, 044507 (2022).

②電解質膜バルクにおける物質輸送ミクロ機構の解明

[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]

位置に依存する拡散係数とポテンシャルを持つ系の拡散方程式を統計的に満足する分子の軌跡を生成する新規動的モンテカルロ（MC）法を提案し、確立した。これを用いて、すでに令和2年度までに求めている電解質膜バルクにおける位置に依存する拡散係数と自由エネルギーから水素の動的モンテカルロ法を実施し、実験値を良好に再現する浸透係数と輸送経路を得た。

[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]

- ・ 電解質膜基本セルの 32,768 メッシュ格子モデル
- ・ 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]

高分子電解質膜中でミクロに相分離している高分子相と水相の不均一性の空間スケールは 3~5 nm であり、そこで生じるエネルギー障壁を乗り越えてセルの端から端までの運動を追跡するためには、 $10^1 \mu s$ オーダーのシミュレーションが要求される。これは、「富岳」を用いても計算が困難である。

そこで、本研究においては、現実系を格子モデルに粗視化し、格子上の粒子の拡散運動を動的 MC 法によって追跡し、その軌跡を解析するという戦略をとる。つまり、不均一系を空間的に粗視化した上で、運動についても粗視化を施す。この準備として、令和2年度にはすでに電解質膜の基本セルをメッシュに分割して位置に依存する水素の拡散係数と自由エネルギーを求めた。空間を滑らかに記述するためには、32,768 個のメッシュを必要としたが、32,768 点の自由エネルギー計算は「富岳」ならではのものである。

令和3年度は、生成される粒子の軌跡がポテンシャルと拡散係数がともに位置に依存する拡散方程式を満たすという新たな Metropolis 型の遷移確率を導出し、これを用いて動的 MC 計算を実施した。これにより、水素分子の電解質膜中における大域的な拡散挙動が解析可能となり、得られた浸透係数は実験値と良い一致をみた（図 2-2-1-B-5） [1]。

動的 MC 計算の計算負荷は極めて軽く、すでに基本セルの左端から右端に至る 10,000 以上の水素の拡散経路を得ており、現在データサイエンス的な解析を行っているところである。

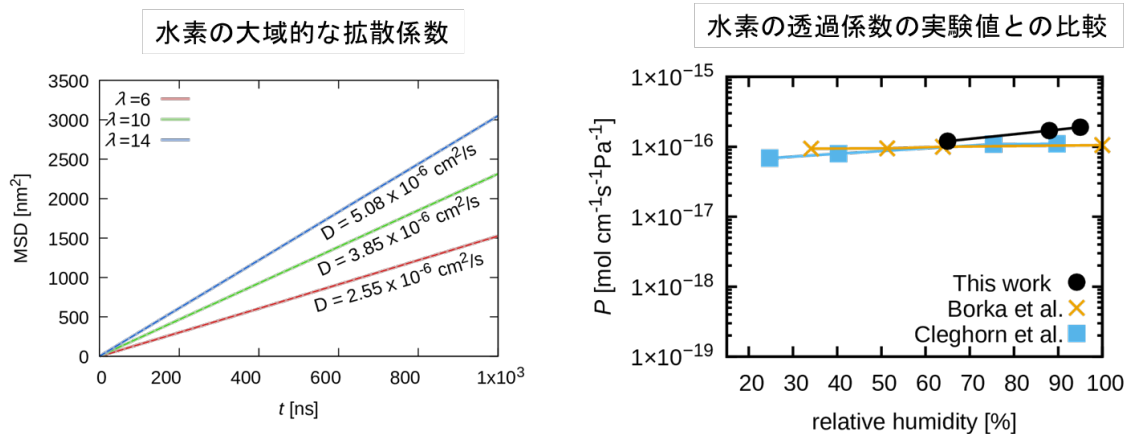


図 2-2-1-B-5. 位置に依存する拡散係数とポテンシャルから新規動的 MC 法で求めた高分子電解質膜中における水素のクロスリークに関わる大域的な拡散係数と、透過係数。透過係数の計算値は、実験値とよく一致している。

[研究成果の社会実装について]

国プロ・産業界との連携により、社会実装をさらに進めた。

- ・ SIP バイオポリマー：分子動力学計算を用いた新規ポリマーの熱特性、力学特性の推算において連携。
- ・ ムーンショット 二酸化炭素分離膜：分子動力学計算による分離機構の解明に連携。
- ・ ムーンショット 海洋プラスチック：マルチロックポリマーの強靱化において、分子動力学計算による力学特性の評価に連携。
- ・ 産業界：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, Akira Yoshimori, and Susumu Okazaki, “Dynamic Monte Carlo calculation generating particle trajectories that satisfy the diffusion equation for heterogeneous systems with a position-dependent diffusion coefficient and free energy”, *J. Chem. Phys.*, **156**, 154506 (2022).

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）を共有するプロトタイプシステムを用いて、複数シミュレーションの結果格納と利用について試行

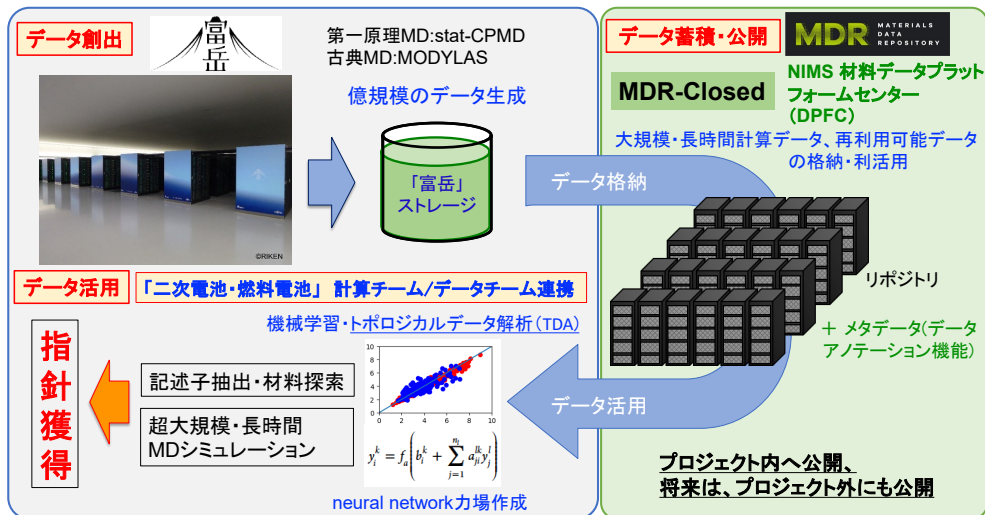
[担当責任者] 館山佳尚（物質・材料研究機構）

[実施概要]

材料データプラットフォームセンター（DPFC）が構築し運用する MDR-Closed のデータ共有プロトタイプシステムを試行利用した。「富岳」から出力される巨大な構造データから幾何学的な特徴を抽出し、データ科学的な材料探索を促進する道筋に目処がついた。

[実施成果]

「富岳」電池課題で得られたシミュレーションデータをデータ科学研究に活用するため、DPFC が構築し運用するリポジトリである MDR-Closed を試行利用した（図 2-2-1-C-1、図 2-2-1-C-2）。

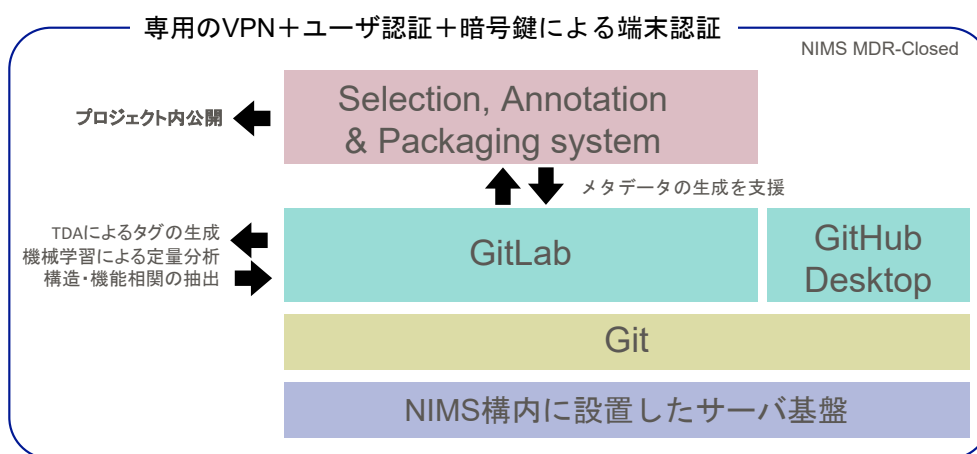


「富岳」電池課題でのデータリポジトリ(NIMS MDR-Closed)



古典分子動力学計算 (MD 計算) 結果のトポロジカルデータ解析 (TDA) と機械学習 (主成分分析) を組み合わせて、電解液のイオン伝導度の濃度依存性と相関を持つ因子を特定した。「富岳」で生成した大規模な構造データから幾何学的な特徴を抽出し、MDR-Closed を利用してデータ科学的な材料探索を促進する道筋に目処がついた (図 2-2-1-C-3)。

NIMSのMDR-Closedを介したデータ科学的アプローチ



「富岳」で生成した複雑かつ大規模な構造情報

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

機械学習による構造-物性相関の抽出を支援

図 2-2-1-C-3. 「富岳」電池課題データ科学的アプローチ。

NIMS の DPFC は、プロジェクト利用の MDR-Closed と公開用の MDR-Open の 2 種類のリポジトリを運用している。本課題の期間中は MDR-Closed を利用し、課題終了時に公開可能なシミュレーション結果データは MDR-Open に移行し公開を予定している。

(2) プロジェクトの総合的推進

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

- 統括会議：5/31、6/16、7/15、9/13、12/13、1/24 開催
- 実施者会議：5/31、10/18、11/16、12/28、1/26、3/16 開催

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

- 理論計算研究フォーラム（第4回）：6/16 開催
- 理論計算研究フォーラム（第5回）：9/29 開催
- 理論計算研究フォーラム（第6回）：2/7 開催
- 第2回公開シンポジウム（成果報告会）：3/11 開催
- 第12回材料系ワークショップ（共催）：10/6 開催
- 第13回材料系ワークショップ（共催）：2/9 開催
- 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会：12/8-9 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、研究成果説明ビデオ制作や研究活動を通じて積極的に公表した。

- 第2回公開シンポジウム（成果報告会）：3/11 開催
- 「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 講演・ポスター発表：3/14-15
- 「富岳」成果創出加速プログラム公開シンポジウム 講演・ポスター発表：3/29
- 富岳百景 Vol.5 「安全で高性能な次世代蓄電池の開発に計算科学・データ科学で貢献」掲載
- 研究成果説明ビデオ “「富岳」を利用した蓄電材料シミュレーション” 制作
- 研究成果の「富岳」電池課題ホームページ掲載

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

- 令和3年度通常総会 出席：5/31
- HPCI コンソーシアム意見交換会 参加：3/4

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。

- 計算工学ナビ VOL. 21 「富岳」電池課題の進捗と今後の展望 掲載
- 第50回（2021年度第2回）産応協セミナー 招待講演：2/24
- MODYLAS 講習会（共催）：2/24 開催

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

- 「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第4回）：5/21 開催
- 理論計算研究フォーラム（第4回）：6/16 開催
- 理論計算研究フォーラム（第5回）：9/29 開催
- 理論計算研究フォーラム（第6回）：2/7 開催
- MANA & GREEN The 12th Joint Seminar 共催：11/26
- MANA & GREEN The 13th Joint Seminar 共催：12/21

本事業の研究推進において計算資源の効率良い利活用のため、「富岳」計算資源をマネジメントしHPCI システムの計算資源追加の検討・調達を実施した。「富岳」の計算資源を有効利用し、追加配分の200万ノード時間を含め年間配分を100%使用した。また、HPCI システムの計算資源等を追加導入し利用した。「富岳」の低優先度ジョブ提供の対象課題となり低優先度ジョブを多数投入し実行待ち状態であったが、年度末の「富岳」の混雑は激しく投入した低優先度ジョブは実行されなかった。

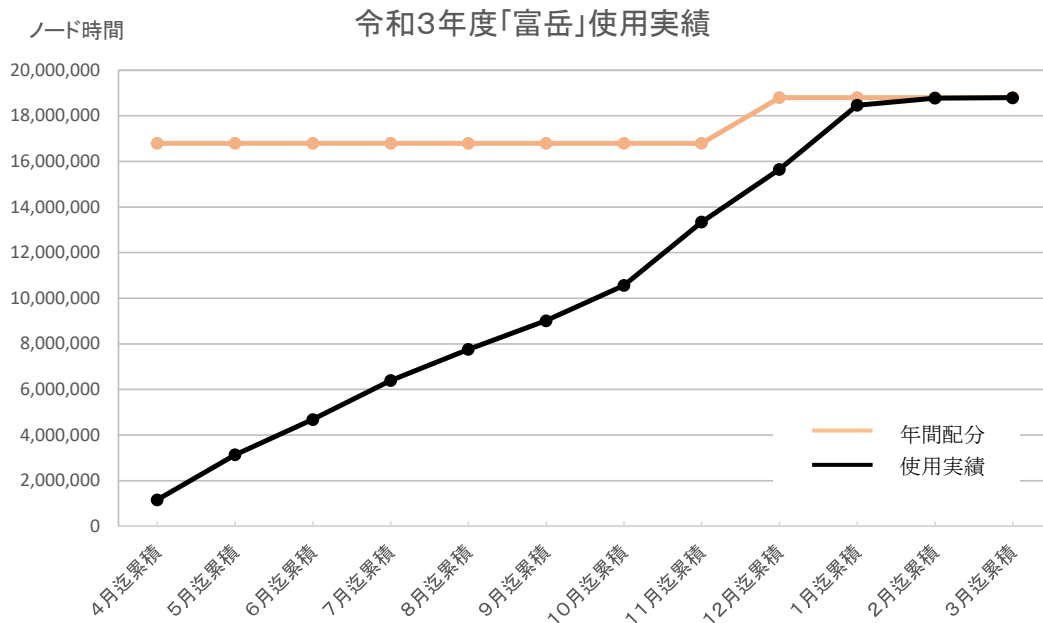


図 2-2-2-1. 令和3年度「富岳」使用実績。

2-3. 活動（研究会の活動等）

[シンポジウム・研究会等主催・共催・出展など]

日程	行事名	開催場所等
5/21	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング（第4回）	オンライン開催
5/31	第11回統括会議	メール審議
5/31	第10回実施者会議	メール審議
6/16	理論計算研究フォーラム（第4回）	オンライン開催
6/16	第12回統括会議	Webミーティング
7/15	第13回統括会議	メール審議
9/13	第14回統括会議	Webミーティング
9/29	理論計算研究フォーラム（第5回）	オンライン開催
10/ 6	第12回材料系ワークショップ（共催）	オンライン開催
10/18	第11回実施者会議	Webミーティング
10/28- 29	第8回HPCIシステム利用研究課題成果報告会（ポスター発表）	オンライン開催
11/16	第12回実施者会議	Webミーティング
11/26	MANA & GREEN The 12 th Joint Seminar（共催）	NIMSオーディトリウム+オンライン開催
12/8-9	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会	オンライン開催
12/13	第15回統括会議	メール審議
12/21	MANA & GREEN The 13 th Joint Seminar（共催）	NIMSオーディトリウム+オンライン開催
12/28	第13回実施者会議	Webミーティング
1/24	第16回統括会議	Webミーティング
1/26	第14回実施者会議	Webミーティング
2/ 7	理論計算研究フォーラム（第6回）	オンライン開催
2/ 9	第13回材料系ワークショップ（共催）	オンライン開催
2/24	第50回（2021年度第2回）産応協セミナー 招待講演	オンライン開催
2/24	MODYLAS講習会（共催）	オンライン開催
3/11	第2回公開シンポジウム（成果報告会）	オンライン開催
3/14-15	「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会	オンライン開催
3/16	第15回実施者会議	Webミーティング
3/29	「富岳」成果創出加速プログラム公開シンポジウム	オンライン開催

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) 研究開発	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 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 国立大学法人 筑波大学	計算科学研究センター 教授 大谷 実
	④ 国立大学法人 東北大学	材料科学高等研究所 准教授 赤木 和人
サブテーマA-2「二次電池・全固体電池」	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
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
	② 国立大学法人 東京大学	大学院新領域創成科学研究科 特任教授 岡崎 進
データマネージメントに係る取組	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚
(2) プロジェクトの総合的推進	国立研究開発法人 物質・材料研究機構	エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長 館山 佳尚

別添 学会等発表実績

(1) 活動報告

活動報告 K01	
会議名称	「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング (第4回)
日時	令和3年5月21日(金) 15:00 ~ 17:00
場所	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(富岳電池課題)
「富岳」アプリ実機チューニングチームミーティング(第4回)

日時: 2021年5月21日(金) 15:00 ~ 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ミーティング(第4回)

15:00 - 15:05	物材機構 課題責任者	館山 佳尚	はじめに
15:05 - 15:20	物材機構 副拠点長	館山 佳尚	stat-CPMDの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
15:20 - 15:35	名古屋大院工 助教	藤本 和士	MODYLASの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
15:35 - 15:50	山形大理学部 助教	笠松 秀輔	VASPの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
15:50 - 16:00	休憩		
16:00 - 16:15	大阪大院工 助教	稲垣 耕司	STATEの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
16:15 - 16:30	名古屋大院情 教授	長岡 正隆	RedMoonの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
16:30 - 16:45	筑波大計算科学研究センター 博士研究員	萩原 聡	QE&ESM-RISM/AFIRの「富岳」利用状況、有益情報や問題点等の情報交換
16:45 - 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 K02	
会議名称	「富岳」電池課題 第11回統括会議
日時	令和3年5月31日(月)
場所	メール審議
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	1. 「富岳」計算資源の配分管理について 2. その他

活動報告 K03	
会議名称	「富岳」電池課題 第10回実施者会議
日時	令和3年5月31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	1. 「富岳」計算資源の配分管理について 2. その他

活動報告 K04	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第4回）
日時	令和3年6月16日(水) 13:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	24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4回)

日時: 2021年6月16日(水) 13:00 ~ 17:30

場所: オンライン開催

プログラム ※1

富岳電池課題 理論計算研究フォーラム(第4回)

13:00 - 13:10 (東大物性研)	杉野 修	第4回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:10 - 13:55 東大物性研 特任准教授	福島 鉄也	「富岳を用いた磁性材料の探索」
13:55 - 14:35	出席者	討論
14:35 - 14:55	休憩	
14:55 - 15:40 大阪大学院工 助教	濱本 雄治	「進化的アルゴリズムとガウス過程回帰に基づく物質構造の大域的探索」
15:40 - 16:20	出席者	討論
16:20 - 16:40	休憩	
16:40 - 17:10	出席者	総合討論
17:10 - 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 K05	
会議名称	「富岳」電池課題 第12回統括会議
日時	令和3年6月16日(水) 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"> 1. 文部科学省令和3年度ヒアリング評価結果と委員コメントについて 2. 計算物質科学協議会との連携について 3. 成果報告説明ビデオ制作について <ul style="list-style-type: none"> • ビデオ制作の対象成果の選定 4. その他

活動報告 K06	
会議名称	「富岳」電池課題 第13回統括会議
日時	令和3年7月15日(木)
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"> 1. 「富岳」計算資源の上期配分撤廃の前倒しについて 2. その他

活動報告 K07	
会議名称	「富岳」電池課題 第14回統括会議
日時	令和3年9月13日(月) 18:00 ~ 19:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題今後の運営について 2. 物質科学・マテリアル関係プロジェクト連携について 3. 文部科学省 令和3年度進捗状況のヒアリングに向けて 4. 理論計算研究フォーラム(第5回)(9月29日(水)13:00-17:30) 5. その他

活動報告 K08	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第5回）
日時	令和3年9月29日(水) 13:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	30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5回)

日時: 2021年9月29日(水) 13:00 ~ 17:30

場所: オンライン開催

プログラム ※1

「富岳」電池課題 理論計算研究フォーラム(第5回)

13:00 - 13:10	東大物性研	杉野 修	第5回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:10 - 13:55	物材機構 NIMSポスドク研究員	Bo Gao	Structure Predictions for Solid-Solid Interface: Methods and Applications to All-Solid-State Batteries
13:55 - 14:35		出席者	討論
14:35 - 14:55	休憩		
14:55 - 15:15	東大物性研 特任研究員	Elvis Arguelles	Active Learning Replica-exchange Monte Carlo Simulations of Zirconium oxynitrides
15:15 - 15:35	東大物性研 特任研究員	Muhammady Shibghatullah	First-principle calculations of oxygen bonding characteristics and oxygen reduction reaction on zirconia and zirconium oxynitrides surfaces
15:40 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:40	休憩		
16:40 - 17:10		出席者	総合討論
17:10 - 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

講演は、全て英語での発表となります。

※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	第12回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和3年10月6日(水) 10:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	397名（内、企業209名）

▼ プログラム（敬称略）

司会：杉山 肇（産応協, 三菱ケミカル株式会社）

10:00-10:05	開会挨拶 草間 義紀（高度情報科学技術研究機構）
10:05-10:20	「富岳」を含むHPCI利用研究課題の募集と利用支援 齊藤 哲（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] ）
10:20-10:35	「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] ）
10:35-11:05	強相関第一原理手法を用いた有機固体DMIT塩の網羅的解析 井戸 康太（東京大学）
11:05-11:35	複合酸化物中のイオン配置不規則性—第一原理計算・機械学習モデル構築・統計熱力学連携シミュレーションによるアプローチ 笠松 秀輔（山形大学）（ 発表資料 [PDF] ）
11:35-12:05	高分子材料の全原子分子動力学計算 藤本 和士（名古屋大学）（ 発表資料 [PDF] ）
12:05-13:00	<ランチタイム>
13:00-13:30	先端的計算科学と半導体デバイス開発 押山 淳（名古屋大学）（ 発表資料 [PDF] ）
13:30-14:00	不規則合金の組成探索 三宅 隆（産業技術総合研究所）（ 発表資料 [PDF] ）
14:00-14:30	化学産業におけるDXとデータ科学 磯村 哲（株式会社三菱ケミカルホールディングス）
14:30-14:50	<休憩>
14:50-15:30	マテリアルズインフォマティクス概観：「JSTさきがけ」の成果を中心に 常行 真司（東京大学）
15:30-15:50	微細構造計測データ解析のための統計的機械学習 志賀 元紀（岐阜大学）（ 発表資料 [PDF] ）
15:50-16:00	<休憩>
16:00-17:15	パネルディスカッション「マテリアルDXへの計算データの貢献」 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：常行 真司（東京大学） / 磯村 哲（株式会社三菱ケミカルホールディングス） / 志賀 元紀（岐阜大学） / 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	HPCI・アプリケーション利用相談（希望者のみ）

*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K10	
会議名称	「富岳」電池課題 第11回実施者会議
日時	令和3年10月18日(月) 15:00 ~ 17:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 令和3年度研究成果・進捗状況について <ul style="list-style-type: none"> • A1：長岡先生、大谷先生、赤木先生 • A1・A2：館山先生 • B1：杉野先生、森川先生 • B2：岡崎先生 2. 第2回公開シンポジウムについて 3. 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会について 4. 第12回実施者会議開催日程について 5. 令和2年度成果の「富岳」電池課題ホームページ掲載について 6. 理論計算研究フォーラム（第6回）について 7. その他

活動報告 K11


会議名称	第8回 HPCI システム利用研究課題成果報告会 (ポスター発表)
日時	令和3年10月28日(木) 13:00 ~ 15:15、29日(金) 10:00 ~ 18:25
場所	オンライン開催

■ プログラム

時間	プログラム	
13:00 - 13:15	<ul style="list-style-type: none"> ● 主催者挨拶: 田島 保英 (一般社団法人高度情報科学技術研究機構 理事長) ● 共催者挨拶: 朴 泰祐 (一般社団法人HPCIコンソーシアム 理事長) ● 共催者挨拶: 松岡 聡 (国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター長) ● 来賓挨拶: 宅間 裕子 (文部科学省 研究振興局 参事官 (情報担当) 付計算科学技術推進室 室長) 	
13:15 - 13:55	基調講演: 青木 尊之 (東京工業大学 学部国際情報センター 教授) 「第二個電CPUス/コンを用いた凝縮シミュレーション」[PDF] ● 講演動画はこちら >> (アシリエーター: 加藤千幸 (東京大学 生産技術研究所))	ポスター 展示
13:55 - 14:35	基調講演: 吉川 研司 (筑波大学 計算科学研究センター 講師) 「富岳による宇宙論的ニュートリノのMasovシミュレーション」 (アシリエーター: 松元高志 (千葉大学 大学院理学研究科))	
14:35 - 15:15	基調講演: 齋 康太郎 (富士通株式会社 ミッション/イノベーション事業本部 HPC/ML事業部 言語/ソフトウェア部 部長) 「富岳向け富士通コンパイラの最適化とソースチューニング」 (アシリエーター: 中村 宏 (東京大学 大学院情報理工学系研究科))	
10月29日(金)	Session1: 特別講演 座長: 山本 有作 (電気通信大学)	
10:00 - 10:55	上田 修功 (NTT333カレッジ 科学基礎研究所 上田特別研究室長/理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長) 「データ駆動とモデル駆動を融合したシミュレーションベース機械学習」	
	Session2: 優秀成果発表賞課題による成果発表 座長: 山本 有作 (電気通信大学)	
10:55 - 11:25	乱流シミュレーションによる乱流混合輸送と雲マイクロ物理過程の解明 (hp200072) [PDF] 後藤 俊幸 (名古屋工業大学) ● 講演動画はこちら >>	
11:25 - 11:55	格子QCDによるハドロン力学の研究 (hp200108) [PDF] 赤星 友太郎 (京大大学)	
11:55 - 13:00	< 昼 食 >	
	Session3: 優秀成果発表賞課題による成果発表 座長: 佐藤 文雄 (東京大学)	
13:00 - 13:30	低次元多体相互作用と分子シミュレーションの統合による4次元イメージング法の確立 (hp200058) [PDF] 吉留 崇 (東北大学) ● 講演動画はこちら >>	
13:30 - 14:00	AIで効果化されたMD法による、蛋白質-リガンドの結合・解離自由エネルギー地形の算出 (hp200063) [PDF] 松後 順一 (兵庫県立大学)	ポスター 展示
14:00 - 14:15	< 休 憩 >	
	Session4: 優秀成果発表賞課題による成果発表 座長: 宮下 純二 (日本物理学会)	
14:15 - 14:45	国家戦略的性を促進する交換相関汎関数の開発 (hp200081) [PDF] 大戸 達彦 (大阪大学)	
14:45 - 15:15	電子部品材料開発を加速したマルチスケールシミュレーションの構築と誘電体材料への実証利用 (hp200015) [PDF] 中田 浩弥 (京セラ株式会社)	
15:15 - 15:45	時間依存密度行列繰り込み法によるモット絶縁体の光学伝導度のスペクトル形状解析 (hp200071) [PDF] 遠山 貴巳 (東京理科大学) ● 講演動画はこちら >>	
15:45 - 16:00	< 休 憩 >	
16:00 - 16:10	表彰・講評: 小柳 義夫 (成果報告会プログラム委員会 委員長)	
	Session5: ポスターセッション	
16:10 - 16:15	ポスターセッション説明	
16:15 - 18:20	ポスターセッション(Webex Meetings)	
18:20 - 18:25	閉会挨拶: 齋 康彦 (一般社団法人高度情報科学技術研究機構 特任センター長)	
- 18:45	Webex接続終了	


* 開催内容に変更となる場合があります。

ポスター



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)
課題代表者: 館山 佳尚 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

hp200131

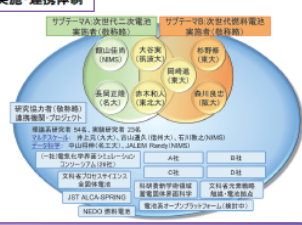


課題概要

二次電池 (エネルギー貯蔵) および燃料電池 (エネルギー変換) の次世代技術の確立とその実用化は、エネルギー・環境技術 (ET) 革命による持続可能な社会 (SDGs) 実現のための中心的課題です。このような中、物質・材料研究機構 (NIMS) が代表機関となって提案した「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」課題 (略称: 「富岳」電池課題) が、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムに採択されました。

本課題は、ポスト「京」重点課題5において育成された人材、整備されたアプリケーション資産、構築された産官学間の連携体制・人のネットワークを総動員し、左図の実施・連携体制で、二次電池および燃料電池の微視的機構を理解・解明し、かつ次世代電池開発に向けたシミュレーション・データ材料科学研究の社会実装を強力に推進することを目標としています。

実施・連携体制



サブテーマ: 次世代二次電池 (開発者: 佐藤 文雄) | サブテーマ: 次世代燃料電池 (開発者: 佐藤 文雄)

館山 佳尚 (NIMS) | 大西 康平 (京大) | 谷本 和典 (京大)

高島 定博 (京大) | 谷本 和典 (京大) | 長崎 裕樹 (京大)

研究拠点等 (発祥) | 連携機関 (協力) | 産官学連携 (協力)

富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター

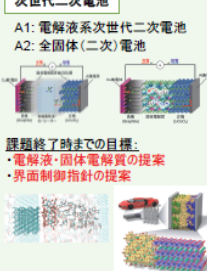
富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター

富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター

富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター | 富岳計算科学センター

次世代二次電池

A1: 電解液系次世代二次電池
A2: 全固体 (二次) 電池



課題終了時までの目標:
・電解液・固体電解質の提案
・界面制御指針の提案

A1: 電解液系次世代二次電池

定電流法・定電位法が可能なRed-MoonシミュレーションでのSEI膜形成で、定電位法ではCO₂が負極近傍により多く、EDC⁻存在量はより少なくなった。これが明らかになった。これは実験結果と一致する。

ESM-RISM法を実装したアプレ/AI/NaCl(aq)界面における電位計算の精度向上と、実験結果と比較した。得られた電位分布は実験結果とコンスタントな結果となっている。

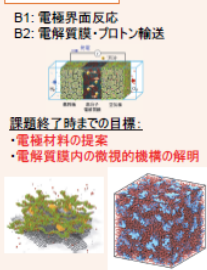
A2: 全固体 (二次) 電池

実用化の有力候補の酸化系固体電解質LLZOやLiPON系固体電解質LATPに対して、ヘド界面CALYPSO法による第一原理計算を適用し、界面のオン伝導度やアニオン反応に伴う新原理を提示した。

Uyup content
Annealing
LP

次世代燃料電池

B1: 電極界面反応
B2: 電解質膜・プロトン輸送



課題終了時までの目標:
・電極材料の提案
・電解質膜内の微視的機構の解明

B1: 電極界面反応

燃料電池次世代型電極 (ZrO₂) 構造及び酸素還元反応 (ORR) 活性の予測のため、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導入した。「富岳」でZrO₂表面のORR活性を計算した結果、白金表面より活性の高い吸着サイトが存在することが示された。

単原子触媒における酸素還元反応、およびFCO酸化反応において、第一原理電子状態計算手法と機械学習を組み合わせて物質の大域的な最適構造を求めた手法GOFEEを用いて白金がラファーンに担持する構造について探索した。水素原子の化学ポテンシャルで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。

B2: 電解質膜・プロトン輸送

電解質膜/ILIC等におけるプロトン、酸素、水素の浸透係数や移動経路等を、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た。移行の自由エネルギー変化を求め、検討したところ、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、水相は地形としては平坦であることが、水素と酸素では異なることが概ね同様な地形を示すことが判明した。

連絡先: NIMS 「富岳」電池課題事務局 <https://www.nims.go.jp/fugaku-denchi/> E-mail: fugakubcf-office@ml.nims.go.jp

活動報告 K12	
会議名称	「富岳」電池課題 第12回実施者会議
日時	令和3年11月16日(火) 17:00 ~ 19:00
場所	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"> 1. 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会について 2. 第2回公開シンポジウムについて 3. 理論計算研究フォーラム（第6回）について 4. その他

活動報告 K13	
会議名称	MANA & GREEN The 12 th Joint Seminar (共催)
日時	令和3年11月26日(金) 13:30 ~ 14:30
場所	NIMS オーディトリウム + オンライン開催
参加者	53名 (オンサイト: 23名、オンライン: 30名)


The 689th

MANA & GREEN


The 12th Joint Seminar

(Co-organised by MEXT Fugaku Battery & Fuel Cell Project)


The 78th




WPI-MANA
Virtual City of Workshops
10th - 28th November 2021



MANA
Nano Revolution
for the Future



Battery &
Fuel Cell
Fugaku



On-the-fly machine-learned inter-atomic potentials

Chair: Dr. Yoshitaka TATEYAMA (MANA PI / Deputy Director, GREEN)

Dr. Ryosuke Jinnouchi

(Toyota Central R&D Labs., Inc., Japan)

First principles molecular dynamics (FPMD) is a powerful method to predict properties of a wide variety of materials. However, predicting finite-temperature properties of complex systems is still challenging because of its limitations in time- and length-scales. Empirical interatomic potentials can extend the applicability of MD simulations, but their constructions always need a lot of human interventions, and constructed potentials often suffer from significant errors. Machine learned interatomic potential (MLP) is a promising method to solve the problems. Flexible functional forms of MLPs allow to accurately reproduce FP potential energy surfaces, and recently emerging active-learning schemes enable efficient constructions of MLPs. In this presentation, We present an active-learning scheme constructing MLPs on the fly during FPMD simulations [1,2]. Similarly to other MLP schemes [3,4,5], structures that appear during the MD simulations are mapped onto descriptors [6,7] representing atomic distributions, and the potential energy is described as a function of the descriptors. Bayesian inference provides a framework to estimate uncertainty in energies and forces predicted by the MLP. The estimation allows the machine to judge whether the predicted results can be used to update atomic positions in solving equation of motion or not. Only when the machine judges that the MLP is inaccurate, FP calculations are carried out. The obtained FPMD data is incorporated in the training dataset and is used to update the MLP. The MLP scheme has been successfully applied to predicting liquid-solid phase transitions [1], solid-solid phase transitions [8, 9, 10], thermal conductivity [10], and hydration free energies of ions and adsorbates [11,12]. After presenting these application examples, We present remained challenges in present MLP schemes particularly in applications to heterogeneous systems. Required improvements in the MLP scheme will be discussed.


Venue: Auditorium, 1F, WPI-MANA Bldg., Namiki-site / Zoom (Hybrid)

Date: November 26th, Friday **Time:** 13:30-14:30

Registration for both on-site & on-line: <https://forms.gle/W11hP951K59ebHSE8>

(*Registration Deadline: Evening on 25th November)

Contact: International Center for Materials Nanoarchitectonics (MANA) & Dr. Y. Tateyama at TATEYAMA.Yoshitaka -at- nims.go.jp



活動報告 K14	
会議名称	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会
日時	令和3年12月8日(水) 9:20 ~ 16:55、9日(木) 9:30 ~ 17:50
場所	オンライン開催
参加者	139名(内、企業:34名)

プログラム

● 12月8日(水)	
09:20	はじめに(押山)
	【座長:白石賢二】09:30-11:30 量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学(代表 今田 正俊)
09:30-10:05	今田 正俊(早稲田大学/豊田理研): 課題概要と実験連携 25分
10:15-10:33	山地 洋平(NIMS): 酸化化物高温超伝導体における電子の運動 18分
10:40-10:58	野村 悠祐(理研): AIニューラルネットワークを用いた量子多体ソルバー 18分
11:05-11:23	井戸 康太(東大物性研): 強相関電子系における励起スペクトルのための手法開発とPd(dmit) ₂ における基底状態の劇画的解析 18分
	ランチ 11:30-12:50
	【座長:館山 佳尚】12:50-14:50 環境適合型機能性化学品(代表 松林 伸幸) 20分
12:50-13:10	松林 伸幸(大阪大学): ポリマー系における溶解、吸着、相溶性の全原子解析 20分
13:20-13:40	尾形 修司(名古屋工業大学): 水分侵入による無機・有機界面でのプロトン移動と接着耐久性の低下 20分
13:50-14:10	藤本 和士(名古屋大学): 高分子材料の破壊とタフネス化の分子論 20分
14:20-14:40	泰岡 順治(慶應義塾大学): MD-GANを用いた分子動力学シミュレーションの拡散予測 20分
	Break
	【座長:今田 正俊】15:00-17:00 省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション(代表 押山 淳) 20分
15:00-15:20	押山 淳(名古屋大学): 課題の概要+ニューラルネットワークによるOFDFT開発 20分
15:30-15:45	白石 賢二(名古屋大学): GaN気相成長のミクロスコピックな過程の解明 15分
15:50-16:00	寒川 義裕(九州大学): GaN気相成長におけるデジタルツインの開発 10分
16:05-16:15	若田 潤一(Quemix)、立木 馨大(京都大学)、松下 雄一郎(Quemix、東工大): RSDFTの最近の展開と高品質SiC-MOS界面の実現 10分
16:20-16:35	小野 倫也(神戸大学): SiC/SiO ₂ 界面の原子構造解析: アニール後界面を中心に 15分
16:40-16:55	森 伸也(大阪大学): 省エネルギーデバイスのシミュレーション 15分

● 12月9日(木)	
	【座長:三宅 隆】09:30-11:30 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 館山 佳尚) 20分
09:30-10:00	館山 佳尚(NIMS): 「富岳」電池課題概要を全固体電池の材料課題解決への取組み 30分
10:10-10:30	岡崎 進(東大): 燃料電池電解質膜の不均一構造中における水蒸気、酸素の輸送 20分
10:40-10:58	大谷 実(筑波大): 「富岳」を利用した電気化学シミュレーションの産業応用 18分
11:05-11:23	赤木 和人(東北大): 構造的特徴を「ものさし」とした大規模データの「測定」 18分
	ランチ 11:30-12:50
	【座長:押山 淳】12:50-13:20 「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現(代表 中嶋 隆人)
12:50-13:10	中嶋 隆人(理研): 「富岳」光エネルギー変換材料課題の概要紹介 20分
	【座長:押山 淳】13:20-13:50 データ駆動型高分子材料研究を革新するデータ基盤創出(代表 吉田 亮)
13:20-13:40	吉田 亮(統計数理研究所): データ駆動型高分子材料研究を革新するデータ基盤創出 20分
	Break

<p>【座長：押山 淳】 14:00 - 14:40 招待講演：朴 泰祐（筑波大学） 富岳を含むHPCI資源を用いた計算科学に対する期待</p>
<p>【座長：松林 伸幸】 14:50 - 16:50 大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発（代表 三宅 隆）</p>
<p>14:50 - 15:10 三宅 隆（産総研）：磁石課題の概要 20分</p>
<p>15:20 - 15:40 合田 義弘（東工大）：磁性材料における有限温度磁性、相平衡、異相界面の電子論 20分</p>
<p>15:50 - 16:10 福島 敬也（東大物性研）：富岳を用いた磁性材料の探索とデータ解析 20分</p>
<p>16:20 - 16:40 石河 孝洋（NIMS）：進化的アルゴリズムによる新規磁石化合物の探索 20分</p>
<p>【座長：今田 正俊】 16:50 - 17:50 物質材料系課題のこれから（ディスカッション）</p>

活動報告 K15	
会議名称	「富岳」電池課題 第15回統括会議
日時	令和3年12月13日(月)
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"> 1. 令和3年度「富岳」追加計算資源について 2. その他

活動報告 K16	
会議名称	MANA & GREEN The 13 th Joint Seminar (共催)
日時	令和3年12月21日(火) 13:30 ~ 14:30
場所	NIMS オーディトリウム + オンライン開催
参加者	70名 (オンサイト: 24名、オンライン: 46名)

The 691st

MANA & GREEN

The 13th Joint Seminar

(Co-organised by MEXT Fugaku Battery & Fuel Cell Project)

The 79th






Quantum Computing and First-Principles Calculations: Seeking a Killer Application of Quantum Computers

Co-Chair: Dr. Y. TATEYAMA (MANA (PI) / GREEN) & Dr. A. Ishikawa (GREEN)

Prof. Wataru Mizukami

(Osaka University, Japan)

The development of quantum computers has made significant progress in recent years. Say, IBM announced a 127-qubit quantum computer on the 16th of this November. The realization of a fault-tolerant quantum computer with error correction is becoming a reality, although all the current quantum computers are without error corrections. In this light, the search for applications of quantum computers becomes more and more active. Among them, first-principles computation is attracting attention as a killer application. This talk starts with a brief description of quantum computers and explains why first-principles computing matters. Next, I illustrate the current status of first-principles computation using quantum computers, including our research results. Finally, I talk about the current challenges and outlooks in this field.

Venue: Auditorium, 1F, WPI-MANA Bldg., Namiki-site / Zoom (Hybrid)
Date: December 21st, Tuesday **Time:** 13:30-14:30
Registration for ONLINE participation: <https://forms.gle/vCF3p13C5PxFXMwb6>
(*Registration Deadline: Evening on 20th December)
Contact: Dr. Y. Tateyama at TATEYAMA.Yoshitaka -at- nims.go.jp & Dr. A. Ishikawa at ISHIKAWA.Atsushi -at- nims.go.jp



活動報告 K17	
会議名称	「富岳」電池課題 第13回実施者会議
日時	令和3年12月28日(火) 10:00 ~ 11:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 成果創出加速プログラム課題の進捗状況ヒアリングについて 2. 第2回公開シンポジウムについて 3. 令和3年度「富岳」追加計算資源の実施者グループ配分案について 4. 「富岳」電池課題事務局予算について 5. 理論計算研究フォーラム（第6回）について 6. その他

活動報告 K18	
会議名称	「富岳」電池課題 第16回統括会議
日時	令和4年1月24日(月) 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"> 1. 「富岳」電池課題の運営について 2. 文科省「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会について 3. 「富岳」電池課題 第2回シンポジウムについて 4. 理論計算研究フォーラム（第6回）（2月7日(月) 13:00-17:30）について 5. 令和3年度「富岳」電池課題計算資源について 6. その他

活動報告 K19	
会議名称	「富岳」電池課題 第14回実施者会議
日時	令和4年1月26日(水) 17:00 ~ 18:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、長岡、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題の運営について 2. 文科省「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会（3月14日-15日）について 3. 第2回公開シンポジウム（3月11日(金) 13:00-17:30）について 4. 理論計算研究フォーラム（第6回）（2月7日(月) 13:00-17:30）について 5. 令和3年度「富岳」電池課題計算資源について 6. その他

活動報告 K20	
会議名称	理論計算研究フォーラム（第6回）
日時	令和4年2月7日(月) 13:00 ~ 17:30
場所	オンライン開催
参加者	26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6回)

日時: 2022年2月7日(月) 13:00 ~ 17:30

場所: オンライン開催

プログラム ※1

「富岳」電池課題 理論計算研究フォーラム(第6回)

13:00 - 13:10	東京大学物性研究所	杉野 修	第6回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:10 - 13:55	筑波大学計算科学研究センター	大谷 実	3D-RISM/ESM-RISMの最近の適用研究
13:55 - 14:35		出席者	討論
14:35 - 14:55	休憩		
14:55 - 15:40	東北大学材料科学高等研究所	赤木 和人	構造情報のトポロジカルデータ解析による電解質系の定量的理解
15:40 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:40	休憩		
16:40 - 17:15		出席者	総合討論
17:15 - 17:30	東京大学物性研究所	杉野 修	まとめと次回開催テーマについて

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

活動報告 K21	
会議名称	第13回材料系ワークショップ（共催）
日時	令和4年2月9日(水) 10:00～17:30
場所	オンライン開催
参加者	341名（内、企業208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	開会挨拶 草間 義紀（高度情報科学技術研究機構）
10:05-10:20	「富岳」を含むHPCI利用研究課題の募集と利用支援 齊藤 哲（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] ）
10:20-10:40	「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）（ 発表資料 [PDF] ）
10:40-11:15	高分子物性自動計算システムRadonPyの開発と産学連携によるデータベース共創 林 慶浩（統計数理研究所）（ 発表資料 [PDF] ）
11:15-11:50	「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現 中嶋 隆人（理化学研究所）（ 発表資料 [PDF] ）
11:50-13:00	<ランチタイム>
13:00-13:35	NEDO超々プロジェクトでのデータ駆動型材料設計への取り組み 浅井 美博（産業技術総合研究所）（ 発表資料 [PDF] ）
13:35-14:10	高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発 藤元 伸悦（日鉄ケミカル&マテリアル株式会社）
14:10-14:45	FMO創薬コンソーシアムにおけるHPCIの利活用 福澤 薫（星薬科大学）（ 発表資料 [PDF] ）
14:45-15:20	信越化学における計算科学の適用と期待 大橋 健（信越化学工業株式会社）（ 発表資料 [PDF] ）
15:20-15:45	<休憩>
15:45-17:15	パネルディスカッション「計算データが導くマテリアル革新力強化に向けた産官学"共創の場"形成」 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：林 慶浩（統計数理研究所） / 藤元 伸悦（日鉄ケミカル&マテリアル株式会社） / 福澤 薫（星薬科大学） / 大橋 健（信越化学工業株式会社） / 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	HPCI・アプリケーション利用相談（希望者のみ）

*プログラムは予告なく変更する場合があります。

活動報告 K22	
会議名称	第50回(2021年度第2回)産応協セミナー 招待講演
日時	令和4年2月24日(木) 13:05 ~ 16:00
場所	オンライン開催

計算科学の発展と展望:「京」・「富岳」の活用事例を通して

プログラム

1日目〔2月22日(火)〕

13:00-13:10 開会挨拶

13:10-14:10 「全原子分子動力学シミュレーションによる高分子材料の研究」

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 物質系専攻 特任教授 岡崎 進

14:10-14:20 休憩

14:20-15:20 「「富岳」と同じプロセッサを搭載した富士通のスパコン
PRIMEHPC紹介とアプリケーション対応最新状況」

富士通株式会社 ミッションクリティカルシステム事業本部 HPCシステム事業部
システムビジネス部 シニアマネージャー 久間 登夫

15:20-15:30 休憩

15:30-16:30 「ハイパフォーマンスコンピューティングによる
ファイバステアリングCFRP成形技術の高度化」

東京大学 生産技術研究所 教授 吉川 暢宏

16:30-16:35 事務局連絡

2日目〔2月24日(木)〕

13:05-13:10 連絡

13:10-14:10 「「富岳」時代のシミュレーションとものづくり」

東京大学 生産技術研究所 教授 加藤 千幸

14:10-14:20 休憩

14:20-15:20 「「富岳」「京」による蓄電池内現象の可視化」

物質材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点(GREEN) 副拠点長 館山 佳尚

15:20-15:30 休憩

15:30-15:55 「「富岳」を含むHPCI利用研究課題の募集と利用支援」

高度情報科学技術研究機構 神戸センター・産業利用推進部 部長 齊藤 哲

15:55-16:00 閉会挨拶

活動報告 K23	
会議名称	MODYLAS 講習会（共催） -名古屋大学情報基盤センタースーパーコンピュータ「不老」Type I サブシステム（FX1000）を用いたハンズオン-
日時	令和4年2月24日(木) 13:00 ~ 17:00
場所	オンライン開催
参加者	10名（内、企業4名）

MODYLAS講習会

-名古屋大学情報基盤センタースーパーコンピュータ「不老」Type I サブシステム（FX1000）を用いたハンズオン-

2022年2月24日(木) 13:00~17:00 web講習会

MODYLASは、オープンソース（ライセンス許可制）の汎用古典分子動力学アプリケーションソフトウェアです。長距離静電相互作用の高速多重極展開法(FMM)による取り扱いを含め、ナノ分野・バイオ分野・高分子材料分野における分子動力学計算に必要な各種手法に対応しています。最新のスーパーコンピュータ上での高効率な並列計算が可能です。今回の講習会では、MODYLASを用いた大規模な古典分子動力学計算にご興味のある方を対象に、MODYLASの概要と基本的な使い方および高分子材料系での応用計算例を、名古屋大学情報基盤センターのスーパーコンピュータ「不老」Type I サブシステム（FX1000）を利用して、実際にMODYLASに触れていただきながら講習を行います。特に、初めてMODYLASを実行する民間企業の研究・技術者、実験研究者、大学院生のご参加を歓迎いたします。

▼ プログラム

13:00-13:40	MODYLASの概要の説明 基礎編
13:40-14:20	MODYLASの概要の説明 応用編
14:20-14:30	<休憩>
14:30-14:50	「不老」システムの紹介
14:50-15:00	FX1000へのログイン、演習環境設定
15:00-17:00	実習（適宜休憩）

*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 K24	
会議名称	第2回公開シンポジウム（成果報告会）
日時	令和4年3月11日（金）13:30～17:55
場所	オンライン開催
参加者	申込者数 269名（内、企業 161名） 参加者数 228名（内、企業 127名）最大同時接続者 202名



Battery & Fuel Cell 次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究（「富岳」電池課題）
第2回公開シンポジウム（成果報告会）実施報告

1. 開催趣旨

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」（「富岳」電池課題）は2020年4月の発足から約2年が経過しました。今回の第2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、2021年度の成果を「富岳」電池課題実施者グループからご報告いたします。併せて、山田淳夫教授（東大院工）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、宜しくお願いたします。

2. 実施概要

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構 「富岳」電池課題
 協賛：公益社団法人 電気化学会 電池技術委員会
 一般社団法人 日本固体イオニクス学会
 後援：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）
 公益財団法人 計算科学振興財団（FOCUS）
 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構（RIST）

日時：2022年3月11日（金）13:30～17:55

形式：オンライン開催

参加費：無料

参加申込者：269名（内、企業161名）

参加者：228名（内、企業127名）、最大同時接続者は202名

3. 第2回公開シンポジウム（成果報告会）プログラム

プログラム

- 13:30-13:35 開会挨拶：館山 佳尚（物材機構）
- 13:35-13:40 来賓挨拶：宅間 裕子（文部科学省）
- 13:40-13:50 「富岳」電池課題全体概要：館山 佳尚（物材機構）
- 13:50-14:35 招待講演
蓄電池研究における実験・理論計算・データ科学の”リアルタイム”融合
：山田 淳夫（東大院工）
- 14:35-14:45 休憩
- 14:45-15:10 二次電池のための分子シミュレーションと特性解析：長岡 正隆（名大院情）
- 15:10-15:35 3D-RISM法による粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究
：萩原 聡（筑波大）
- 15:35-16:00 構造的特徴に基づく電解質中のイオン伝導メカニズムの解析
：赤木 和人（東北大）
- 16:00-16:25 全固体電池材料のイオン輸送機構に関する計算予測：館山 佳尚（物材機構）
- 16:25-16:35 休憩
- 16:35-17:00 新型燃料電池のための第一原理物質科学シミュレーション
：杉野 修（東大物性研）
- 17:00-17:25 グラフェン担持単原子金属触媒による燃料電池電極触媒反応に関する研究
：森川 良忠（阪大院工）
- 17:25-17:50 MODYLASの開発および燃料電池高分子電解質膜、電極界面の全原子分子
動力学シミュレーション：藤本 和士（名大院工）
- 17:50-17:55 閉会挨拶：杉野 修（東大物性研）

「富岳」成果創出加速プログラム 「富岳」電池課題 第2回公開シンポジウム (成果報告会)



オンライン
開催
参加無料

2022年3月11日

13:30～17:55

「富岳」電池課題ホームページの第2回公開シンポジウムの「参加登録」フォームから申し込みをお願いします。

<https://www.nims.go.jp/fugaku-denchi/events/2021/20220311.html>

- 13:30-13:35 開会挨拶 館山 佳尚 (物質・材料研究機構 (NIMS))
- 13:35-13:40 来賓挨拶 宅間 裕子 (文部科学省)
- 13:40-13:50 「富岳」電池課題概要 館山 佳尚 (NIMS)
- 13:50-14:35 「蓄電池研究における実験・理論計算・データ科学の”リアルタイム”融合」
山田 淳夫 (東大院工)
- 14:35-14:45 休憩
- 14:45-15:10 「二次電池のための分子シミュレーションと特性解析」
長岡 正隆 (名古屋大)
- 15:10-15:35 「3D-RISM法による粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究」
萩原 聡 (筑波大)
- 15:35-16:00 「構造的特徴に基づく電解質中のイオン伝導メカニズムの解析」
赤木 和人 (東北大)
- 16:00-16:25 「全固体電池材料のイオン輸送機構に関する計算予測」
館山 佳尚 (NIMS)
- 16:25-16:35 休憩
- 16:35-17:00 「新型燃料電池のための第一原理物質科学シミュレーション」
杉野 修 (東大物性研)
- 17:00-17:25 「グラフェン担持単原子金属触媒による燃料電池電極触媒反応に関する研究」
森川 良忠 (阪大)
- 17:25-17:50 「MODYLASの開発および燃料電池高分子電解質膜、
電極界面の全原子分子動力学シミュレーション」
藤本 和士 (名古屋大)
- 17:50-17:55 閉会挨拶 杉野 修 (東大物性研)

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構 「富岳」電池課題

協賛：公益社団法人 電気化学会 電池池技術委員会
一般社団法人 日本固体イオニクス学会

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：
「富岳」電池課題事務局
fugakubfc-office@ml.nims.go.jp

活動報告 K25	
会議名称	「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会
日時	令和4年3月14日(月) 9:30 ~ 17:55、15日(火) 9:30 ~ 17:35
場所	オンライン開催
参加者	申込者数 387名、分野別セッション2 (材料) 参加者 131名



オンライン開催

公開シンポジウム 一般向け	3月29日(火) 10:00~	研究交流会 研究者向け	3月14日(月)・15日(火) 両日とも9:30~
------------------	--------------------	----------------	------------------------------

3月15日 分野別セッション2 (材料) での講演とポスター発表

講演3

前半

「富岳」電池課題の概要

館山 佳尚

物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点

後半

第一原理計算・機械学習・統計物理連携フレームワークによる複合酸化物中の欠陥秩序解明

笠松 秀輔

山形大学
学術研究院 (理学部担当)

活動報告 K26	
会議名称	「富岳」電池課題 第15回実施者会議
日時	令和4年3月16日(水) 17:00 ~ 19:00
場所	Web ミーティング
参加者	館山、杉野、岡崎、森川、大谷、赤木、事務局
議事	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「富岳」電池課題の令和4年度運営について 2. 令和4年度「富岳」計算資源について 3. 令和4年度事務局予算について 4. 第2回公開シンポジウムについて（実施報告） 5. 令和3年度成果報告について 6. その他

活動報告 K27	
会議名称	「富岳」成果創出加速プログラム公開シンポジウム
日時	令和4年3月29日(火) 10:00 ~ 17:05
場所	オンライン開催
参加者	申込者数 847 名、最大参加者 354 名



オンライン開催

公開シンポジウム 3月29日(火) 一般向け 10:00~	研究交流会 3月14日(月)・15日(火) 研究者向け 両日とも9:30~
---	---

講演5 “次世代 EV 開発に向けたバッテリー材料研究 on「富岳」” とポスター発表

講演5
次世代EV開発に向けた
バッテリー材料研究 on 「富岳」



館山 佳尚
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

セッション3: 材料

講演5
次世代EV開発に向けた
バッテリー材料研究 on 「富岳」
館山 佳尚
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



チェア：常行 真司
「富岳」成果創出加速
プログラム 領域総括/
東京大学 大学院理学系
研究科 教授

MORE

脱炭素社会に向けて電気自動車(EV)の開発競争が世界的に激化している。その核となるのが「バッテリー材料(蓄電池材料)」の開拓である。バッテリーを構成する正極・電解質・負極物質(欠陥・不純物も考慮した膨大なパターンが存在)及びそれらが接触する複雑な界面を含む材料内の「電子」と「イオン」の動きの制御が鍵となる。私たちは、量子力学・統計力学に基づく複雑な理論式を、機械学習技術とも連携しながら、「富岳」上で計算することによって、これまでの計算(および実験)では得られなかった様々な新しい機構・材料を見出しつつある。これらの最新「バッテリー材料」計算研究について紹介する。

(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
Tunable Doping of Rhenium and Vanadium into Transition Metal Dichalcogenides for Two-Dimensional Electronics	Shisheng Li, Jinhua Hong, Bo Gao, Yung-Chang Lin, Hong En Lim, Xueyi Lu, Jing Wu, Song Liu, Yoshitaka Tateyama, Yoshiki Sakuma, Kazuhito Tsukagoshi, Kazu Suenaga and Takaaki Taniguchi	Adv. Sci. 8 , 2004438 (2021). DOI:10.1002/adv.202004438	令和3年4月	国外
Nanometer-size Na cluster formation in micropore of hard carbon as origin of higher-capacity Na-ion battery	Yong Youn, Bo Gao, Azusa Kamiyama, Kei Kubota, Shinichi Komaba, Yoshitaka Tateyama	npj Comput. Mater. 7 , 48 (2021). DOI:10.1038/s41524-021-00515-7	令和3年4月	国外
Performance Research of Clustering Methods for Detecting State Transition Trajectories in Hemoglobin	Kei Takami, Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka	J. Comput. Chem. Jpn. 4 , 154-157 (2021). DOI:10.2477/jccj.2021-0014	令和3年4月	国内
A comparison of the brittle PMMA with the ductile PC on the elasticity and yielding from a molecular dynamics perspective	Zhiye Tang, Kazushi Fujimoto, Susumu Okazaki	Polymer 226 , 123809 (2021). DOI:10.1016/j.polymer.2021.123809	令和3年5月	国外
First-principles Study of the Morphology and Surface Structure of LaCoO ₃ and La _{0.5} Sr _{0.5} Fe _{0.5} Co _{0.5} O ₃ Perovskites as Air Electrodes for Solid Oxide Fuel Cells	Masanobu Nakayama, Katsuya Nishii, Kentaro Watanabe, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Takanori Itoh, Toru Asaka	Sci. Technol. Adv. Mater. Method, 1 , 24-33 (2021). DOI:10.1080/27660400.2021.1909871	令和3年5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
Tuning the performance of a Mg negative electrode through grain boundaries and alloying toward the realization of Mg batteries	Hong-Kang Tian, Randy Jalem, Masaki Matsui, Toshihiko Mandai, Hidetoshi Somekawa, Yoshitaka Tateyama	J. Mater. Chem. A 9 , 15207-15216 (2021). DOI:10.1039/d1ta02419a	令和3年 5月	国外
First-Principles DFT study on Inverse Ruddlesden-Popper Tetragonal Compounds as Solid Electrolytes for All-Solid-State Li ⁺ -Ion Batteries	Randy Jalem, Yoshitaka Tateyama, Kazunori Takada, Masanobu Nakayama	Chem. Mater. 33 , 5859-5871 (2021). DOI:10.1021/acs.chemmater.1c00124	令和3年 5月	国外
Bias-dependent diffusion of a H ₂ O molecule on metal surfaces by the first-principles method under the grand-canonical ensemble	Satoshi Hagiwara, Chunping Hu, Satomichi Nishihara, and Minoru Otani	Phys. Rev. Mater. 5 , 065001-1-9 (2021). DOI:10.1103/PhysRevMaterials.5.065001	令和3年 6月	国外
Materials informatics for discovery of ion conductive ceramics for batteries	Masanobu Nakayama	J. Ceram. Soc. Japan, 129 , 286-291 (2021). DOI:10.2109/jcersj2.21030	令和3年 6月	国内
Exploring the diffusion mechanism of Li ions in different modulated arrangements of La _{(1-x)/3} Li _x NbO ₃ with fitted force fields obtained via a metaheuristic algorithm	Zijian Yang, Robyn E. Ward, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Ryo Kobayashi	Solid State Ionics, 366-367 , 115662 (2021). DOI:10.1016/j.ssi.2021.115662	令和3年 6月	国外
Peculiarly fast Li-ion conduction mechanism in a succinonitrile-based molecular crystal electrolyte: a molecular dynamics study	Ryoma Sasaki, Makoto Moriya, Yuki Watanabe, Kazunori Nishio, Taro Hitosugi, Yoshitaka Tateyama	J. Mater. Chem. A 9 , 14897-14903 (2021). DOI:10.1039/D1TA02809J	令和3年 6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
Self-learning hybrid Monte Carlo method for isothermal-isobaric ensemble: Application to liquid silica	Keita Kobayashi, Yuki Nagai, Mitsuhiro Itakura, Motoyuki Shiga	J. Chem. Phys. 155 , 034106 (2021). DOI:10.1063/5.00553 41	令和3年 6月	国外
The mechanism of sorbitol dehydration in hot acidic solutions	Tomomi Kondo, Takehiko Sasaki, Motoyuki Shiga	J. Comput. Chem. 42 , 1783-1791 (2021). DOI:10.1002/jcc.267 10	令和3年 7月	国外
Boron position-dependent surface reconstruction and electronic states of boron-doped diamond(111) surfaces: an ab initio study	Le The Anh, Francesca Celine I. Catalan, Yousoo Kim, Yasuaki Einaga, Yoshitaka Tateyama	Phys. Chem. Chem. Phys. 23 , 15628- 15634 (2021). DOI:10.1039/d1cp006 89d	令和3年 7月	国外
Remarkable Electrochemical and Ion-Transport Characteristics of Magnesium-Fluorinated Alkoxyaluminate-Diglyme Electrolytes for Magnesium Batteries	Toshihiko Mandai, Yong Youn, Yoshitaka Tateyama	Mater. Adv. 2 , 6283-6296 (2021). DOI:10.1039/D1MA004 48D	令和3年 7月	国外
Mean force based temperature accelerated sliced sampling:Efficient reconstruction of high dimensional free energy landscapes	Asit Pal, Subhendu Pal, Shivani Verma , Motoyuki Shiga, Nisanth N. Nair	J. Comput. Chem. 42 , 1996-2003 (2021). DOI:10.1002/jcc.267 27	令和3年 8月	国外
Mixed-Salt Enhanced Chemical Vapor Deposition of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides	Shisheng Li, Yung- Chang Lin, Jinhua Hong, Bo Gao, Hong En Lim, Xu Yang, Yoshitaka Tateyama, Kazuhiro Tsukagoshi, Yoshiki Sakuma, Kazu Suenaga, Takaaki Taniguchi	Chem. Mater. 33 , 7301-7308 (2021). DOI:10.1021/acs.che mmater.1c01652	令和3年 9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
Molecular Dynamics Simulation of Li-Ion Conduction at Grain Boundaries in NASICON-Type $\text{LiZr}_2(\text{PO}_4)_3$ Solid Electrolytes	Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Ryo Kobayashi, Masanobu Nakayama, Naoki Watanabe	J. Phys. Chem. C, 125 , 23604-23612 (2021). DOI:10.1021/acs.jpcc.1c07314	令和3年 10月	国外
Ab initio study of nuclear quantum effects on sub- and supercritical water	Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	J. Chem. Phys. 155 , 194107 (2021). DOI:10.1063/5.0071857	令和3年 10月	国外
ヘモグロビンのアロステリック制御に関するデータ科学的研究 -四次構造変化に対する塩素イオンの役割-	田中美帆、高橋由芽、北村勇吉、長岡正隆	J. Comput. Chem. Jpn. 20 , 97-99 (2021). DOI:10.2477/jccj.2021-0045	令和3年 11月	国内
High-Pressure Synthesis and Lithium-Ion Conduction of Li_4OBr_2 Derivatives with a Layered Inverse-Perovskite Structure	Shogo Wakazaki, Qiumin Liu, Randy Jalem, Takumi Nishikubo, Yuki Sakai, Naoki Matsui, Guowei Zhao, Kota Suzuki, Kei Shigematsu, Takafumi Yamamoto, Ryoji Kanno, Hena Das, Yoshitaka Tateyama, and Masaki Azuma	Chem. Mater. 33 , 9194-9201 (2021). DOI:10.1021/acs.chemmater.1c02713	令和3年 11月	国外
Theoretical study on stability and ion transport property with halide doping of Na_3SbS_4 electrolyte for all-solid-state batteries	Randy Jalem, Bo Gao, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama	J. Mater. Chem. A 10 , 2235-2248 (2022). DOI:10.1039/D1TA07292G	令和3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
Revealing Atomic-Scale Ionic Stability and Transport around Grain Boundaries of Garnet $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ Solid Electrolyte	Bo Gao, Randy Jalem, Hong-Kang Tian, Yoshitaka Tateyama	Adv. Energy Mater. 12 , 2102151 (2022). DOI:10.1002/aenm.202102151	令和3年 12月	国外
Density Functional Theory and Machine Learning Based Analyses for Improved Surface Stability of a BaTiO_3 -Coated LiCoO_2 Positive Electrode Material	Kunihiro Ishida, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Takashi Teranishi, Naoki Watanabe	Phys. Stat. Sol. B, 2100526 (2021). DOI:10.1002/pssb.202100526	令和3年 12月	国外
Development of advanced electrolytes in Na-ion batteries: application of the Red Moon method for molecular structure design of the SEI layer	Amine Bouibes, Norio Takenaka, Kei Kubota, Shinichi Komaba and Masataka Nagaoka	RSC Advances. 12 , 971-984 (2021). DOI:10.1039/d1ra07333h	令和3年 12月	国外
Octahedral tilting and modulation structure in perovskite-related compound $\text{La}_{1/3}\text{NbO}_3$	Yusuke Sakai, Daisuke Urushihara, Toru Asaka, Koichiro Fukuda, Zijian Yang, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama	Phys. Stat. Sol. B, 2100561 (2022). DOI:10.1002/pssb.202100561	令和3年 12月	国外
Three-dimensional free-energy landscape of hydrogen and oxygen molecules in polymer electrolyte membranes: Insight into diffusion paths	Tetsuro Nagai, Kazushi Fujimoto, Susumu Okazaki	J. Chem. Phys. 156 , 044507 (2022). DOI:10.1063/5.0075969	令和4年 1月	国外
X-ray absorption spectra of aqueous cellobiose: Experiment and theory	Daisuke Akazawa, Takehiko Sasaki, Masanari Nagasaka, Motoyuki Shiga	J. Chem. Phys. 156 , 044202 (2022). DOI:10.1063/5.0078963	令和4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
Density Functional Theory Studies on Li Metal Electrode/Garnet-Type $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ Solid Electrolyte Interfaces for Application in All-Solid-State Batteries	Rinon Iwasaki, Kunihiro Ishida, Risa Yasuda, Koki Nakano, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Naoki Watanabe	Phys. Stat. Sol. B, 2100546 (2022). DOI:10.1002/pssb.202100546	令和4年 1月	国外
Chemical composition data-driven machine-learning prediction for phase stability and materials properties of inorganic crystalline solids	Taruto Atsumi, Kosei Sato, Yudai Yamaguchi, Masato Hamaie, Risa Yasuda, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Masayuki Karasuyama, Ichiro Takeuchi	Phys. Stat. Sol. B, 2100525 (2022). DOI: 10.1002/pssb.202100525	令和4年 2月	国外
Electronic, adsorption, and hydration structures of water-contained Na-montmorillonite and Na-beidellite through the first-principles method combined with the classical solution theory	Satoshi Hagiwara, Yasunobu Ando, Yuta Goto, Susumu Shinoki, and Minoru Otani	Phys. Rev. Mater. 6 , 025001 (2022). DOI:10.1103/PhysRevMaterials.6.025001	令和4年 2月	国外
Dynamic Monte Carlo calculation generating particle trajectories which satisfy diffusion equation for heterogeneous systems with position-dependent diffusion coefficient and free energy	Tetsuro Nagai, Akira Yoshimori, and Susumu Okazaki	J. Chem. Phys. 156 , 154506 (2022). DOI:10.1063/5.0086949	令和4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
蓄電池がもたらすグリーン社会	館山佳尚	応用物理学会 第155回 結晶工学分科会研究会 カーボンニュートラルに結晶工学が果たす役割- 地球温暖化問題の現状と解決に向けた最前線 - オンライン	令和3年 6月	国内
Microscopic Electrochemistry of Ion Transport at Heterogeneous Solid-Solid Interface in Li-Ion Battery	Yoshitaka Tateyama	IUMRS-ICA2021 Online	令和3年 10/3-8	国外
Ion and Electron Transfer at Interfaces in Solid-state Batteries Via First-principles Calculations	Yoshitaka Tateyama	International Battery Association 2021 Online	令和3年 10/24-29	国外
DFT study on interfaces in solid state battery via direct interface models	Yoshitaka Tateyama	3rd WORLD CONFERENCE ON SOLID ELECTROLYTES FOR ADVANCED APPLICATIONS: GARNETS AND COMPETITORS Online	令和3年 10/25-27	国外
トポロジカルデータ解析を用いた電池材料の構造情報の定量化	赤木和人	2021年日本表面真空学会学術講演会 オンライン	令和3年 11月	国内
電解質界面・電解質探索に関する計算・データ科学研究動向	館山佳尚	日本化学会 第15回技術開発フォーラム：全固体電池の最新動向 オンライン	令和3年 11月	国内
第一原理計算	館山佳尚	電気化学会関東支部第49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	令和3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
DFT approaches to electron and ion transfer in battery & DFT-based studies on battery issues	Yoshitaka Tateyama	EU-Japan workshop on HPC-based material sciences Online	令和3年 11/9-10	国内
触媒・蓄電池内の金属酸化物表面・界面過程の微視的理論	館山佳尚	第141回フロンティア材料研究所学術講演会 オンライン	令和3年 12月	国内
First-principles MD simulations of reduction/oxidation reactions in electrolyte solutions	Yoshitaka Tateyama	Pacificchem 2021 Online	令和3年 12/16-21	国外
「京」・「富岳」を用いた蓄電池内現象の見える化	館山佳尚	「第5回元素戦略シンポジウム」～革新的なマテリアルでカーボンニュートラルな社会を構築～ オンライン	令和4年 2/3-4	国内
理論計算による全固体電池の電子・イオン移動の可視化	館山佳尚	近畿化学協会コンピュータ化学会 第112回例会 公開講演会「電池材料と計算化学」 オンライン	令和4年 2月	国内
「富岳」「京」を用いた蓄電池内現象の可視化	館山佳尚	第50回産応協セミナー 計算科学の発展と展望：京・富岳の活用事例を通して オンライン	令和4年 2/22-24	国内
A Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems: Red Moon Methodology	Masataka Nagaoka	Norway-Japan symposium on theoretical and experimental chemistry of complex systems Online	令和4年 3月	国外

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
Na イオン電池開発に向けたマテリアル計 算・データ科学研究	館山佳尚	触媒・電池元素戦略研 究拠点 第19回公開シ ンポジウム オンライン	令和4年 3月	国内
次世代EV 開発に向けたバッテリーマテリ アル研究 on 「富岳」	館山佳尚	「富岳」成果創出加速プ ログラム 公開シンポジ ウム オンライン	令和4年 3月	国内

② 口頭発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
配置選択スキームによる定 pH ハイブリッド MC 法の開発：振動・電子遷移スペクトルへの応用	北村勇吉, Carlos Bistafa, 長岡正隆	第 23 回理論化学討論 会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
ラジカル重合シミュレーションによる立体規則性の再現および微視的機構の解釈	饒 子禎, 高柳昌 芳, 長岡正隆	第 23 回理論化学討論 会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
位置に依存した拡散係数の新規評価手法の開発：大規模不均一系における物質輸送解明にむけて	永井哲郎	第 23 回理論化学討論 会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
Red Moon 法による SN1 反応における構造異性体形成シミュレーション：鏡像体過剰率の決定因子について	鈴木雄一, 矢越 啓明, 古賀伸明, 長岡正隆	第 15 回分子科学討論 会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
高分子電解質膜におけるガス分子輸送の全原子分子シミュレーション研究	永井哲郎	第 70 回高分子討論会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
不均一系における物質輸送の分子機構解明に向けた一方法論 —動的モンテカルロ法の適用—	岡崎 進	第 15 回分子科学討論 会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
自由エネルギーと位置に依存した拡散係数による 高分子電解質膜におけるガス分子の物質輸送の解明	永井哲郎	第 15 回分子科学討論 会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
全原子分子動力学シミュレーションによる 高分子電解質膜における物質輸送	永井哲郎	日本物理学会 2021 秋 季大会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
全原子分子動力学計算による 高分子電解質膜中のガス分子の輸送の解明	永井哲郎	第 43 回溶液化学シン ポジウム オンライン	令和 3 年 10 月	国内
固体電解質相間膜とその形成過程の理論解析	長岡正隆	触媒・電池元素戦略研 究拠点第 18 回公開シ ンポジウム オンライン	令和 3 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
不均一系における物質輸送への分子シミュレーションからのアプローチ：計算手法の検討	岡崎 進	第 35 回分子シミュレーション討論会	令和 3 年 11 月	国内
不均一系における物質輸送への 分子シミュレーションからのアプローチ：高分子電解質膜への応用	永井哲郎	第 35 回分子シミュレーション討論会	令和 3 年 11 月	国内
イオン伝導度に影響する因子の理論的検討 （LiBF ₄ 塩／EC 電解液を例として）	Gao Xichan, 赤木和人	第 62 回電池討論会 ハイブリッド	令和 3 年 12 月	国内
Development of a highly parallelized general purpose molecular dynamics simulation program MODYLAS and its implementation on FUGAKU	岡崎 進	Pacificchem 2021 Online	令和 3 年 12 月	国外
Transportation of molecules under inhomogeneous environments of large systems: Position-dependent diffusion constant and free energy	永井哲郎	Pacificchem 2021 Online	令和 3 年 12 月	国外
高分子電解質膜中のガス拡散機構に関する分子動力的研究	永井哲郎	第 62 回電池討論会 ハイブリッド	令和 3 年 12 月	国内
Time series analysis of allosteric regulation of hemoglobin: Role of chloride ion on T-state stabilization	Miho Tanaka, Yume Takahashi, Yukichi Kitamura, Masataka Nagaoka	Pacificchem 2021 Online	令和 3 年 12 月	国外
A Computational Molecular Technology for Complex Chemical Reaction Systems: Red Moon Methodology	Masataka Nagaoka	Pacificchem 2021 Online	令和 3 年 12 月	国外
構造的特徴を「ものさし」とした大規模データの「測定」	赤木和人	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会 オンライン	令和 3 年 12/8-9	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
「富岳」を利用した電気化学シミュレーションの産業応用	大谷 実	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会 オンライン	令和3年 12/8-9	国内
燃料電池電解質膜の不均一構造中における水素、酸素の輸送	岡崎 進	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会 オンライン	令和3年 12/8-9	国内
「富岳」電池課題概要&全固体電池の材料課題解決への取組み	館山佳尚	「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題合同研究会 オンライン	令和3年 12/8-9	国内
不均一系における物質輸送の分子シミュレーション研究	永井哲郎	第4回分子集合系計算科学セミナー オンライン	令和4年 1月	国内
Ba-Li oxyhydride における集団運動の解析	杉野 修	計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共有事業報告会 2021 オンライン	令和4年 2月	国内
「富岳」「京」を用いた蓄電池内イオン・電子移動の見える化	館山佳尚	第23回エネルギー・環境材料研究拠点（GREEN）シンポジウム「革新的研究開発による蓄電池イノベーション」 オンライン	令和4年 3月	国内
構造的特徴に基づく電解質中のイオン伝導メカニズムの解析	赤木和人	「富岳」電池課題第2回公開シンポジウム（成果報告会） オンライン	令和4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
3D-RISM 法による粘土鉱物の層間カチオンの水和・吸着構造の研究	萩原 聡	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
MODYLAS の開発および燃料電池高分子電解質膜、電極界面の全原子分子動力学シミュレーション	藤本和士	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
新型燃料電池のための第一原理物質科学シミュレーション	杉野 修	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
「富岳」電池課題全体概要	館山佳尚	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
全固体電池材料のイオン輸送機構に関する計算予測	館山佳尚	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
二次電池のための分子シミュレーションと特性解析	長岡正隆	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
グラフェン担持単原子金属触媒による燃料電池電極触媒反応に関する研究	森川良忠	「富岳」電池課題第 2 回 公開シンポジウム（成 果報告会） オンライン	令和 4 年 3 月	国内
第一原理計算・機械学習・統計物理連携フレームワークによる複合酸化物中の欠陥秩序解明	笠松秀輔	「富岳」成果創出加速プ ログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	国内
「富岳」電池課題の概要	館山佳尚	「富岳」成果創出加速プ ログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	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
第一原理計算による金-水界面のポテンシャルの解析	片岡佑太，杉野 修	日本物理学会第 77 回 年次大会 オンライン	令和 4 年 3 月	国内

③ ポスター発表

発表した成果（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会等名）	発表した 時期	国内 ・外 の別
Li イオン電池における固体電解液相関膜の形成過程に対する電極電位依存性：高電位における還元反応の頻度増加と膜厚化	川瀬智元，田中佑一，長岡正隆	第 23 回理論化学討論会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
(Pyridylamido)Hf 触媒による連鎖移動型オレフィン重合反応の全原子シミュレーション：触媒構造がモノマー消費速度に及ぼす立体的影響	八十島克尚，三澤奈々，鈴木雄一，長岡正隆	第 23 回理論化学討論会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
Microscopic Analysis of the SEI Film Stability towards Optimizing Salt Concentration in Non-flammable Electrolyte: Role of Organic Layer on the Ductility of Salt-based SEI Film	Nisrine Sakaki, Amine Bouibes, Masataka Nagaoka	第 23 回理論化学討論会 オンライン	令和 3 年 5 月	国内
Li イオン電池の固体電解液相間膜の形成過程と安定性に関する電極電位の影響	川瀬智元，田中佑一，長岡正隆	第 15 回分子科学討論会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
(Pyridylamido)Hf 触媒による連鎖移動型オレフィン重合反応の全原子シミュレーション：触媒構造と連鎖移動がモノマー消費速度に及ぼす影響	八十島克尚，三澤奈々，鈴木雄一，長岡正隆	第 15 回分子科学討論会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
Microscopic Analysis of the SEI Layer Stability towards Optimizing Salt Concentration in Non-flammable Electrolyte: Role of Organic Layer on the Ductility of Salt-based SEI Layer	Nisrine Sakaki, Amine Bouibes, Masataka Nagaoka	第 15 回分子科学討論会 オンライン	令和 3 年 9 月	国内
ポリスチレンラジカル重合における立体規則性の温度依存性の解明：多配座解析による反応経路探索	饒子禎，高柳昌芳，長岡正隆	第 35 回分子シミュレーション討論会 オンライン	令和 3 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
Red Moon シミュレーションにおける化学反応の取り扱いについて：Li イオン電池の SEI 膜の形成過程における反応試行と MC ステップ	田中佑一，稲垣泰一，長岡正隆	第 35 回分子シミュレーション討論会 オンライン	令和 3 年 11 月	国内
Density functional theory on nitrogen (N) doped graphdiyne as electrocatalyst for oxygen reduction reaction (ORR)	Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Likai Yan, Yoshitada Morikawa	ISSS-9 Online	令和 3 年 11/28- 12/1	国外
Microscopic Analysis of FEC Additive Effect on SEI Layer Stability in Na-ion Batteries	Amine Bouibes, Nisrine Sakaki, Masataka Nagaoka	Material Research Meeting (MRM2021) 横浜・オンライン	令和 3 年 12 月	国内
Theoretical Study of the SEI Layer Stability towards Optimizing Salt Concentration in Non-flammable Electrolyte: The Effect of Organic Products on the Ductility of Salt-based SEI Layer	Nisrine Sakaki, Amine Bouibes, Masataka Nagaoka	Material Research Meeting (MRM2021) 横浜・オンライン	令和 3 年 12 月	国内
トポロジカルデータ解析を用いた電解液の構造とイオン伝導度の相関解析	赤木 和人, Xichan Gao	「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	国内
電圧を制御した環境下における水分子の金属表面拡散	大谷 実	「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	国内
大規模分子動力学計算とモンテカルロ計算の組み合わせによる燃料電池クロスリークの分子機構の解明	永井哲郎，岡崎進	「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	国内
Li イオン電池の SEI 膜の形成過程とその安定性に対する電極電位の影響	川瀬智元，田中佑一，長岡正隆	「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和 4 年 3/14-15	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
Density functional theory on nitrogen (N) doped graphdiyne as electrocatalyst for oxygen reduction reaction (ORR)	Yuelin Wang, Thanh Ngoc Pham, Likai Yan, Yoshitada Morikawa	「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 オンライン	令和4年 3/14-15	国内

- [3] プレス発表
特になし。

(3) 特許出願状況

補助事業名

「富岳」成果創出加速プログラム

次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究

代表機関名

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

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