

「富岳」材料物理化学課題・「富岳」燃料電池課題 第2回合同公開シンポジウム（成果報告会）

2023年4月に発足しました文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理・化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」課題は、電池・触媒、磁性、高分子、構造材料の4つの材料分野について、ミクロスケールからの材料開発ブレークスルーを目指し、物理・化学の基本原理解に立脚した「富岳」を最大限活用する計算/データ科学研究を実行することで、世界最高水準の基礎研究遂行と我が国の産業競争力強化への貢献を達成することを目標に研究を推進してきました。同じく「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」課題は、燃料電池触媒層内のプロトン・酸素ガスの物質輸送機構解明のために、量子化学計算、分子動力学計算、機械学習、粗視化ダイナミクスを組み合わせたマルチスケール計算技術を開発し、一つの計算手法では到達することができない、広域な時空間領域での物質輸送機構を「富岳」を用いて解明することを目標に研究を推進してきました。今回の合同公開シンポジウムでは、両課題の令和6年度の研究成果を報告いたします。

本合同公開シンポジウム（成果報告会）では、課題責任者から主要成果を、若手研究者から最先端研究の成果を報告いたします。併せて、トヨタ自動車(株) 喜多尾様、筑波大学 朴先生、東京大学 藤堂先生から特別講演を賜ります。成果の公開・展開の機会といたしたく、皆様のご参加、宜しく願っております。

プログラム（敬称略）

13:30 開会挨拶：藤本 和士（関西大学）

13:35 来賓挨拶：栗原 潔（文部科学省）

13:40 「富岳」燃料電池課題成果報告：藤本 和士（関西大学）

14:00 「富岳」材料物理化学課題成果報告：館山 佳尚（物質・材料研究機構）

14:20 招待講演

『ポスト富岳』に向けたアプリケーション開発～何を準備すべきか～
朴 泰祐（筑波大学）

14:50 休憩

15:05 招待講演

物質科学のための量子コンピューティングとHPC
藤堂 眞治（東京大学）

15:35 「有限温度における磁気緩和定数の第一原理計算とデータ蓄積」
平松 諒也（産業技術総合研究所）

15:50 「バイアス電圧に依存した表面応力計算手法の開発とその適用」
萩原 聡（筑波大学）

16:05 休憩

16:20 招待講演

燃料電池開発の最前線と計算科学への期待
喜多尾 典之（トヨタ自動車株式会社）

16:50 「燃料電池中における H_3O^+ の拡散メカニズム」
北川 剛健（関西大学）

17:05 「燃料電池材料の階層的シミュレーションのためのプロトン量子性を含むQM/MM法の開発」
島崎 智実（横浜市立大学）

17:20 閉会挨拶：館山 佳尚（物質・材料研究機構）

日時：2025年3月11日（火）13:30～17:25

形式：オンライン開催（配信方法等は参加登録者に3月10日（月）に送信いたします。）

参加費：無料

参加登録：以下URLまたはQRコードの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://forms.gle/vUrugonTQAdvjSeAA>

主催：国立研究開発法人 物質・材料研究機構「富岳」材料物理化学課題、大学法人 関西大学「富岳」燃料電池課題

協賛：計算物質科学協議会、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新」、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業、計算物質科学人材育成コンソーシアム、物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター

後援：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、公益財団法人 計算科学振興財団、一般財団法人 高度情報科学技術研究機構
問い合わせ先：「富岳」材料物理化学課題 事務局 fugaku-mpc-office@ml.nims.go.jp

