

## 電極界面シミュレーションコードの開発とエネルギー変換問題への応用

東大物性研 杉野 修

エネルギー変換は物質界面を通して起こる。界面数原子層の構造が変換効率や耐性を決めることも多い。しかし、実験から界面の情報だけを拾い出すのは容易ではない。第一原理からの信頼できる計算が必要となるゆえんである。CMSI プロジェクトでは計算科学コミュニティが結束して、かつてない大掛かりなシミュレーションコード（計算アプリ）の開発、それに必要なアルゴリズムや計算理論の開発が行われている。特に、固液界面における電位差の制御、溶媒と固体表面の弱い相互作用の導入、軽元素の量子効果の導入、溶媒の揺らぎや pH 効果の取り扱い、など現状の電子状態理論で行える最高レベルの計算技術を動員したシミュレーションの実現を目指し、実際その一部が既に京コンピュータ上で動いている。

京コンピュータの稼働から既に3年近く経過し、これらの計算アプリを用いた応用計算の成果が上がってきている。元素戦略などの CMSI の外のプロジェクトと協力して電池のシミュレーションなどが積極的に行われ、実験との協働により実際に新たな物質系の提案が行われている。界面のような複雑な系においても、第一原理的なシミュレーションがいよいよアカデミックな領域を超えて戦略的に展開され始めているのである。本講演では、このような CMSI の活動について報告したい。

### 参考文献

濱田幾太郎、杉野修：表面科学 Vol. 34, No. 12, pp. 638-643, 2013. 特集「電極反応の計算シミュレーション」．白金電極上における水素発生反応の第一原理的理解に向けて