



# 課題名：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

## 概要・目標

- ◆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・化学の基本原則に立脚した「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。

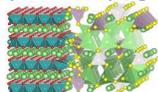
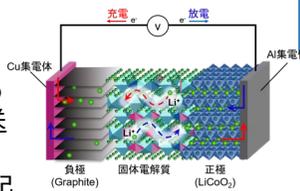
館山 佳尚

(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター センター長)

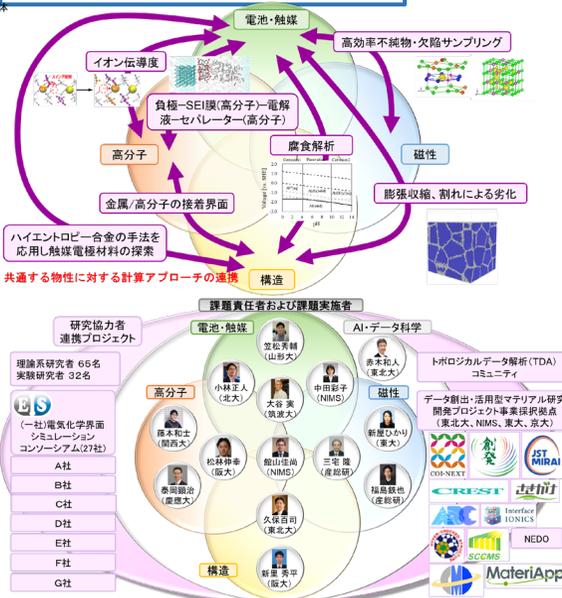
## 実施体制・関係機関・研究内容

### 電池・触媒材料

- ◆電極・電解質界面に関する割れなどの劣化とイオン輸送の相関の解明
- ◆界面の微視的構造・抵抗起源に関する有限温度効果・熱平衡状態の解明
- ◆大規模DFT/量子分子動力学計算とデータ科学による触媒反応・劣化機構の解明

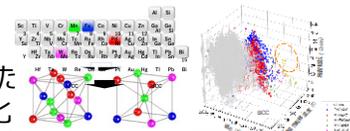


### 分野間連携・実施体制



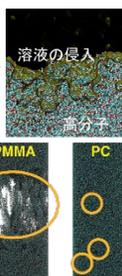
### 磁性材料

- ◆機械学習を活用した多目的変数最適化と材料記述子の抽出
- ◆高性能永久磁石材料・スピントロニクス材料の様々な磁気特性と構造安定性に対する計算データベースの構築
- ◆不規則系の有限温度特性に対する第一原理計算と電子論的機構解明



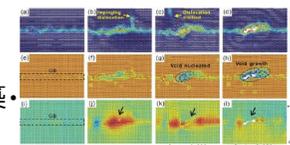
### 高分子材料

- ◆加水分解などが起こりうる官能基の周辺や界面への異種分子侵入の全原子解析
- ◆機械学習を用いた高分子内における水やCO<sub>2</sub>分子の長時間ダイナミクス解析
- ◆結晶・非晶高分子の破壊に対する低分子および油脂の影響の解明



### 構造材料

- ◆構造材料のミクロ組織構造が応力腐食割れと腐食摩耗に与える影響の解析
- ◆疲労破壊プロセスの自由エネルギー解析と寿命予測モデルの構築・検証



## 想定される具体的成果

- ◆電解液系蓄電池・全固体電池の高機能・長寿命をもたらす界面制御指針を提案、企業または国プロの実験研究者が試作物に活用
- ◆元素ドーブした磁性材料のハイスループット第一原理計算に基づいて、性能や原料価格の観点から組成を最適化
- ◆水や有機小分子の吸収や吸着を規定する高分子の構造特性を大規模全原子MDシミュレーションによって解明
- ◆ニューラルネットワークMDを用いて、10万原子以上の大規模系で腐食を伴う構造材料の劣化メカニズムを解明
- ◆企業コンソーシアムにおいて、大規模第一原理計算、大規模古典分子動力学計算、定電位計算、ハイスループット計算などのシミュレーション技術を社会実装