



<b>1. 利用の概略</b>
1) 利用目的・内容 電池電極における触媒反応を第一原理分子動力学計算により予測。電気分解の水素極に該当する Pt/水の固液界面を題材とした。
2) 利用意義（産業利用の観点から） 将来の化石資源価格の高騰が予想される中、燃料電池や二次電池に代表される化石資源に依存しないエネルギーデバイスの開発は、国産のエネルギー資源に乏しい我が国の産業にとって重要である。しかしながら、これらのデバイスの性能向上の鍵となる電極反応は実験だけでは解明しきれない点も多く、計算科学を活用した反応機構の解明が期待されている。
3) スーパーコンピューターを利用する必要性 本課題を実施するためには、数百原子の系におけるピコ秒オーダーの第一原理分子動力学計算が必要である。このような大規模な計算をデバイス開発の時間軸に合わせて行うには、スーパーコンピューターの活用は必須であると考えられる。
<b>2. 成果の概要</b>
1) 本利用で得られた成果（成果が得られなかった場合はその理由） ※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。 （ 1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他 ） 1. 計算科学 Pt/水の界面モデルを作成し、第一原理分子動力学で Pt 表面における水分子の反応ダイナミクスを追跡した。外部電場を印加すると水分子の酸素原子が Pt 表面方向へ配位し、結果、界面で電気二重層が形成されることが確認された。
2) 社会・経済への波及効果の見通し 本課題のような計算科学による反応ダイナミクスの解明は、エネルギーデバイスの性能向上、またそれによる低環境負荷社会の実現に、大きく貢献すると期待される。 また、必ずしも計算科学を専門としない企業の技術者が、有識者の協力を得つつもほぼ独力で本課題を遂行できたことは、将来のスーパーコンピューターの利用普及の観点からも意義が大きい。より多くの企業の技術者が、スーパーコンピューターと計算科学をデバイス開発に活用することを期待したい。
3) その他の成果 特になし。

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。