

TSUBAME 共同利用 平成30年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 第一原理計算による電池・触媒メカニズム解明と新物質探索
英文: Materials science of batteries and catalysts via first principles calculation

館山 佳尚
Yoshitaka Tateyama

物質・材料研究機構
National Institute for Materials Science

邦文抄録

蓄電池・触媒の多くは電極および電解液から構成され、電極—電解液界面における化学反応および酸化還元反応が最も重要な素過程となっている。しかしながら埋もれた界面のその場観察はいまだに難しく、界面過程の微視的機構は不明な点が多い。我々はこのような界面過程について電子・原子状態を高精度に扱うことのできる第一原理計算を用いた理論計算研究を行ってきた。本プロジェクトでは TSUBAME を利用して、さらに微視的機構解明を進めるとともに新物質探索まで進めていくことを計画し、第一原理計算を実行する環境の整備を終える所まで到達した。

英文抄録

We have been working on reactions around buried interfaces between electrolyte and electrolyte in battery and catalyst by means of density functional theory based first-principles calculations with certain accuracy. In this project, we set up the first-principles calculation scheme on TSUBAME for future expensive studies on interesting battery and catalyst issues.

Keywords: 第一原理計算、蓄電池、触媒、表面・界面

背景と目的

蓄電池・触媒の多くは電極—電解液界面における化学反応および酸化還元反応が最も重要な素過程となっている。しかしこれらの界面過程の原子スケール描写は実験的にもいまだ難しく、予言性の高い理論計算のニーズが非常に高い。実際に当研究室では、第一原理計算解析をもとに電池・触媒反応における界面の微視的過程について予測・提案を行ってきており、それが実験研究の動機・駆動力となるケースを何度か経験してきた。また当研究室では「京」向けに開発した第一原理サンプリングコード stat-CPMD を始め、第一原理計算とより広範囲な構造・反応サンプリングを可能にするモジュール開発も進めている。

このような背景の下、本プロジェクトでは TSUBAME において、これらの計算プログラムの高効率化・高速化に行うことにより、それらを用いた電池・触媒系の界面過程に関する理論計算メカニズム解析をさらに発展的に進めることを目的とする。

概要

蓄電池・触媒界面の電子・原子スケール解析を行う

ためには、相応のスーパーセルサイズ(原子数)と構造サンプリングが必要となり、そのためにはプログラム最適化・高効率化がまず必要となる。2018 年度はこの計算技術的課題を中心的に取り組んだ。その結果、応用計算に進む準備ができた。

結果および考察

当研究室の蓄電池・触媒界面研究で用いている第一原理計算プログラム CPMD (高次並列化した stat-CPMD)および VASP に関して、TSUBAME 上でチューニングおよびベンチマークを行った。次年度以降の本格計算に進む準備ができた。

まとめ、今後の課題

当研究室で使用している第一原理計算プログラムを TSUBAME 上で実行可能な状態にした。またそれらの最適化・高速化について検討し、かつテスト計算を行った。今後、TSUBAME を用いた電池・触媒メカニズムに関する本格的な第一原理計算研究を実行していく予定である。