

「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」

(独) 産業技術総合研究所
ナノシステム研究部門

コンソーシアムのご紹介

1) 背景・経緯

計算科学シミュレーションの大規模化、高度化にともない、従来扱うことが難しかった電気化学デバイス（蓄電池、燃料電池、光触媒、電気化学センサー等）の動作状態での原子・分子レベルでのシミュレーションが可能となってきました。電極-電解質界面での電気化学反応、イオン伝導や溶媒の分解反応などデバイス内で起こる多くの現象が第一原理シミュレーションを用いて扱われています。

電気化学デバイスの高性能化へ向けて、これらのシミュレーションが企業の開発現場で役立つことが期待されますが、最先端のシミュレーション研究のシーズと開発現場のニーズにギャップが存在します。また開発現場での課題設定とそれに合うシミュレーションモデルの構築、大規模な計算リソースの確保の難しさから、電池材料開発において、第一原理シミュレーションが普及しているとはいえない状況です。

2) 目的

産学官の研究現場で開発・利用されている様々な電気化学界面シミュレーション技術を、電気化学デバイスの研究開発に携わる技術者及び研究者へ普及します。また、基礎研究からものづくりの現場まで利用可能なシミュレーション技術基盤における知見・問題等について情報交換等を行い、電気化学界面シミュレーション技術を進展させ、関連産業の発展に寄与することを目的とします。

3) 事業概要

本コンソーシアムは、電気化学デバイスの開発を行っている関連機関が主体となって運営し、電気化学界面を扱うモデリングやシミュレーション技術の動向についての情報収集や、意見交換、研究会などの活動を通して、産学官における電気化学界面シミュレーションの普及および進化を行います。また、本コンソーシアムを核として産学官の連携を深め、共同研究プロジェクトの企画・提案を目指します。

本コンソーシアムでは目的を達成するために以下の事業を行う。

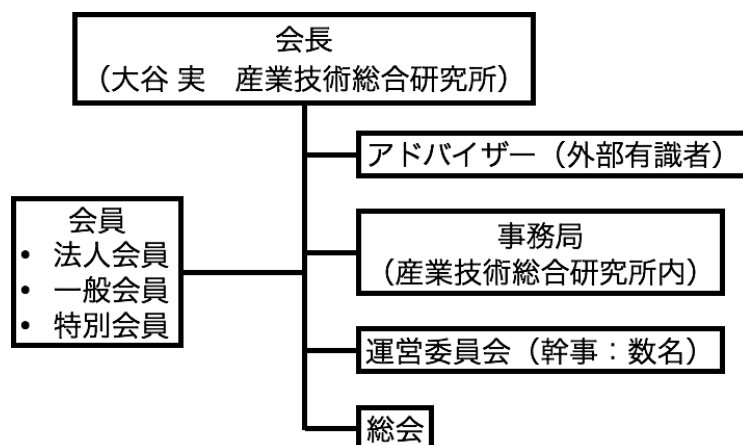
- ① 電気化学界面を扱うモデリングやシミュレーション技術の情報収集においては、専門家を交えたセミナーなどを行う。また、小規模なクラスターシステムからスーパーコンピュータを用いたシミュレーションまで、様々なタイプのシミュレーション技術の紹介や利用への橋渡しを行います。

- ② 電気化学界面シミュレーションの普及に関しては、研究会等を開催し様々な課題を抱える技術者及び研究者に意見交換の場を提供して、シミュレーションを用いた課題解決を目指します。
- ③ 上記活動を通して、会員間で議論を重ねて産学官共同研究プロジェクトの企画・提案を行います。

対象とする系は、蓄電池、燃料電池、キャパシタ、電気化学センサーなどの電気化学デバイスや、電気メッキ、電気防食などの電気化学的処理技術です。それらに関する諸材料の基礎的理解を微視的なレベルからのシミュレーションを用いて図ることのみならず、開発段階にあつて実用化までにはまだいくつかのハードルを越えねばならない材料の課題に関しても、シミュレーションの解析結果から課題解決のアイデアを生み出すことを目指します。

4) 体制

会長の下、会員として法人会員、一般会員及び特別会員を置き、別途アドバイザーを定めます。



- 法人会員：会費を納めた法人又は団体
年会費：一口10万円、一口あたり3名まで登録可能
- 個人会員：大学及び公的研究機関の研究者
年会費：無料
- 特別会員：国の行政機関、独立行政法人、社団法人及び財団法人並びに、本事業の推進を図るため会長が参加を必要と認めた者
年会費：無料

5) 期待される成果

本コンソーシアムにおいては、主な活動である研究会等を通じてのものづくりの現場に存在するシミュレーションに対するニーズやそれらを満たすためのシミュレーション技術に関して、緻密な情報収集や意見交換を行い、

様々な技術の融合や共同研究プロジェクトの創出を支援します。本コンソーシアム活動を通して以下の3つの成果が期待されます。

- 本コンソーシアムを核とした情報共有・交換の場を通じて、原子・分子レベルの計算シミュレーションを用いた問題解決のプロトコルを確立し、開発現場に横たわる課題をシミュレーションの解析結果を用いて解決をサポートする。
- 本コンソーシアムでは、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションのノウハウの提供も致します。外部のスーパーコンピュータの企業利用制度を活用した大規模シミュレーションへの展開も支援いたします。
- 官学の研究者と多数の企業が同一のコンソーシアムに参加して交流を行うことにより、産学官のシーズとニーズがマッチした新たな共同研究プロジェクトを創出され、会員各企業が将来的に求める有益な新規技術の開発を推進することが期待されます。

