

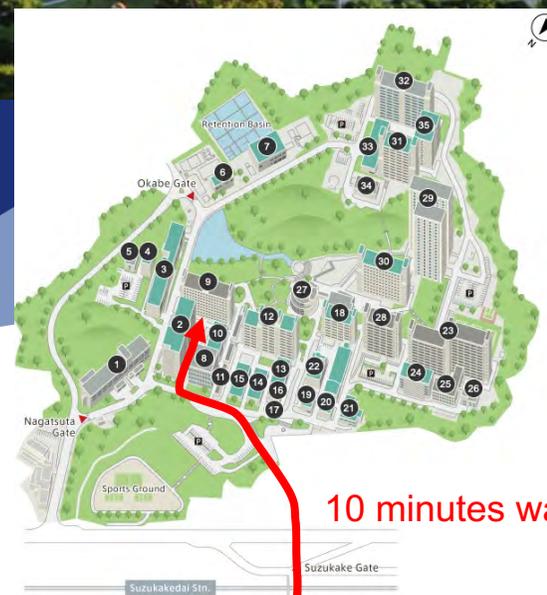


館山佳尚・安藤康伸研究室
総合研究院 化学生命科学研究所
すずかけ台キャンパス R1棟3階

Computational & Data-driven
MAterials CHemistry (CD-Mach) Group

ホームページ:

<https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp>



10 minutes walk

すずかけ台駅



Institute of
SCIENCE TOKYO



2024年4月に発足した比較的新しい研究室です

研究対象: Carbon Neutralityに貢献するエネルギー・環境デバイス(電池・触媒等)の材料

研究目的: 電子・イオン・分子レベルの基礎理論研究/応用への指針・材料提案

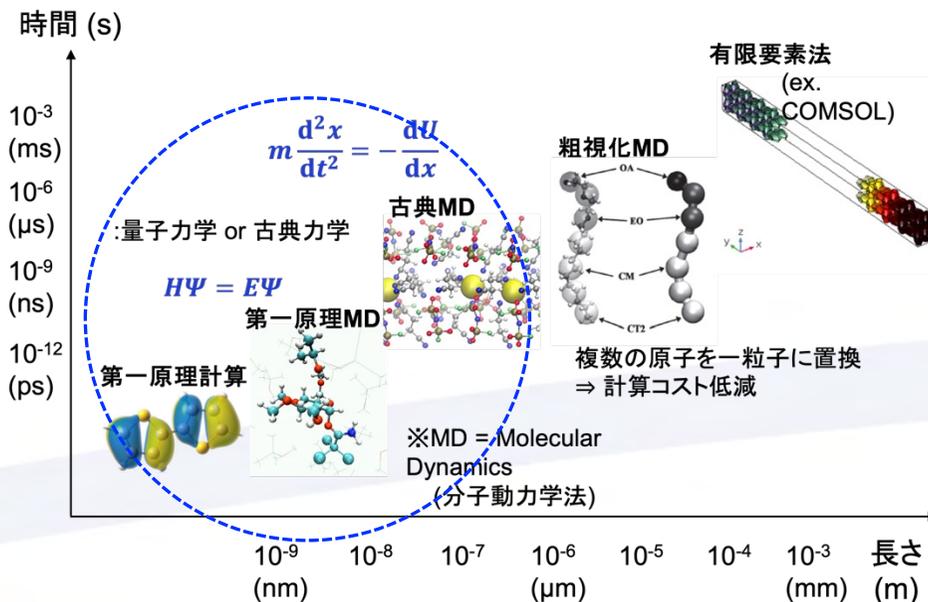
研究方法:

- 先駆的計算科学(スーパーコンピュータ利用 / 大規模長時間計算)
- 先駆的データ科学(マテリアルズインフォマティクス)

* 実験ではなく、コンピュータを使った「理論・計算・情報」による研究を実践



富岳↑ TSUBAME↓



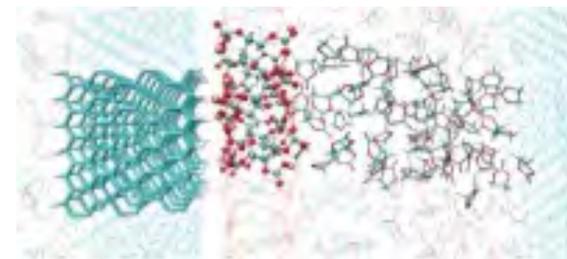
主に館山研

主に安藤研

研究室の売り

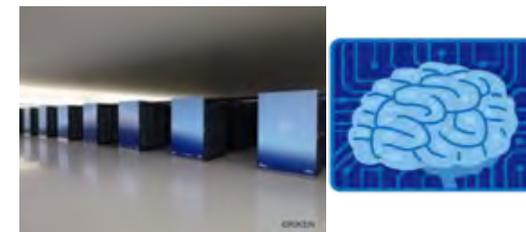
#最先端の計算材料科学研究ができる。

- ・ 電子・分子系の先端計算スキルが身に付く。
- ・ 「富岳」「TSUBAME4.0」などスパコンをバンバン使える。
- ・ 常識を覆すような理論や手法を作れる可能性がある。



#最先端のマテリアルズ・インフォマティクス研究ができる。

- ・ 先端データ科学手法のスキルが身に付く。
- ・ これまでにないデータ解析手法を作れる可能性がある。



#電池・触媒の最先端研究ができる。エネルギー問題に貢献。

- ・ 多数の電池・触媒の国家プロジェクトの理論班として貢献。



#国際連携に身近に参画できる。

Brown大, Houston大(米国), CNR-IOM(イタリア),
Queensland大(豪州), Cambridge大(英国),
インド工科大Kanpur (インド)等との共同研究
海外著名研究者が当研究室訪問・滞在＝触れ合う機会多数



#ワークライフバランスがとりやすい。

どこにいても(研究室に来なくても)計算・解析できる。
一方、研究議論については出勤必須。時間の融通はきく。



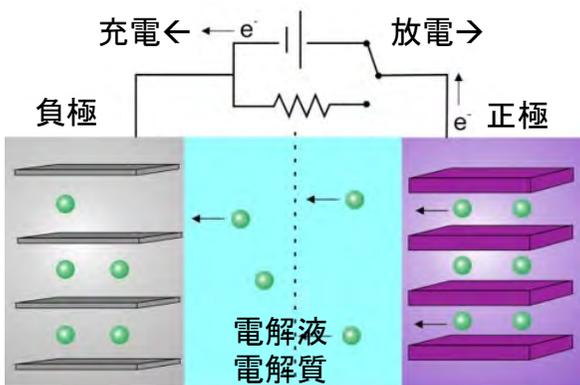
館山教授の研究テーマ

大規模第一原理計算(量子力学計算)・分子動力学(MD)計算＋機械学習

Li-ion電池, Na-ion電池, 全固体電池など様々な蓄電池のメカニズム解明と指針提案

負極
材料探索
容量・電圧
電子・イオン伝導

負極～電解質界面
SEI膜・界面被膜
イオン伝導・抵抗
デンドライト成長



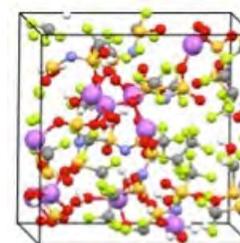
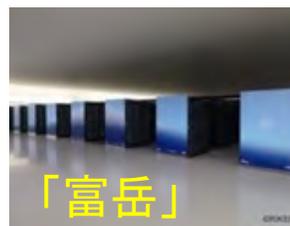
電解液・電解質
溶媒和・脱溶媒和
イオン伝導・抵抗
電位窓
添加剤・塩・濃度依存性
融点・沸点・引火点

全体
充放電曲線
容量維持率
クーロン効率

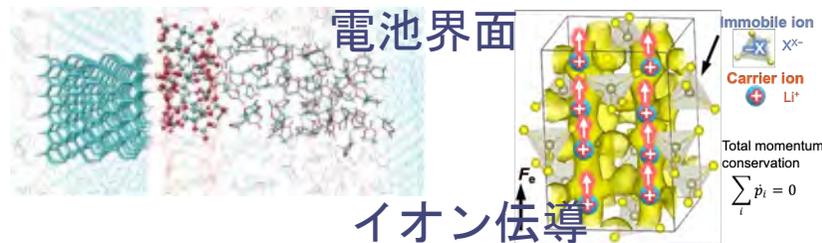
正極
容量・電圧
安定性(相転移)
イオン伝導・抵抗
電子伝導
集電体腐食

正極～電解質界面
イオン伝導・抵抗
酸化分解
界面被膜・緩衝層
膨張・収縮
金属溶出

キーワード: 界面、イオニクス、酸化還元、電気化学、非平衡、理論再構築



第一原理MD
還元分解



蓄電池に関する理論計算研究では国内最大手

多数のメジャー論文雑誌に成果発表: <https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp/output/>

J. Am. Chem. Soc. (IF=15.7), Chem. Mater. (IF=7), Adv. Energy Mater. (IF=26), J. Mater. Chem. A (IF=9.5)
npj Comput. Mater. (IF=11.9), Adv. Sci. (IF=14.1), J. Power Sources (IF=9.2) [IF = Impact Factor]
プレスリリースも多数。計算研究ではIF=3-5が標準的。

B4,M1からでも計算スキル向上可能

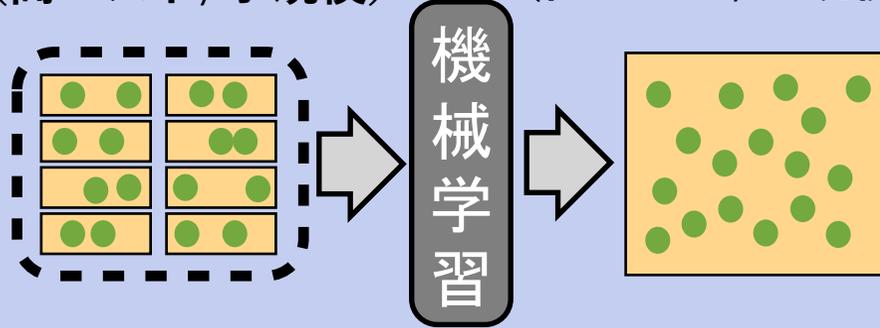


安藤准教授の研究テーマ：計算・情報・数理に基づく材料科学の推進

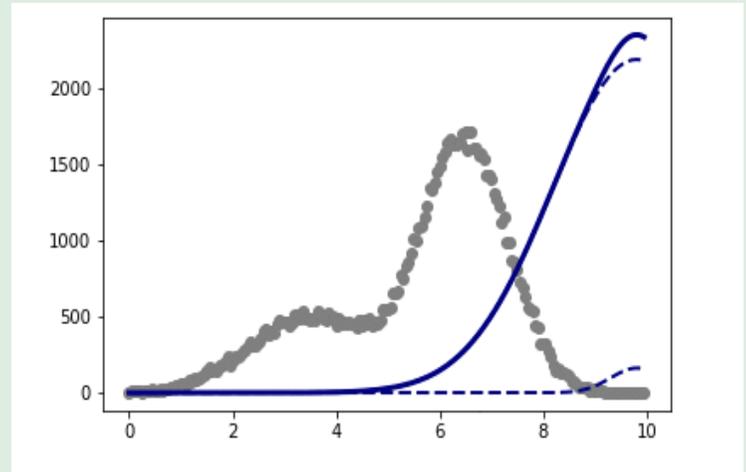
機械学習による分子動力学の拡張研究

第一原理計算
(高コスト/小規模)

機械学習MD
(低コスト/大規模)



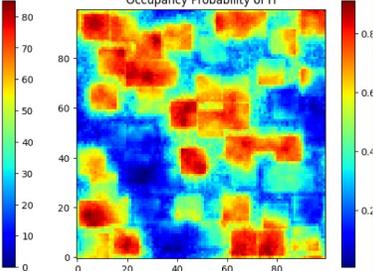
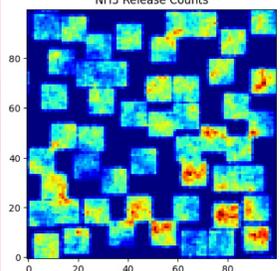
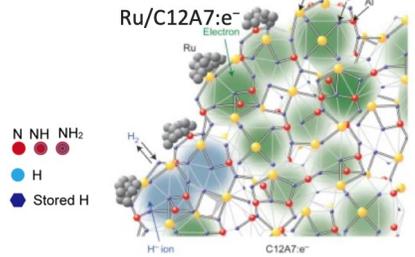
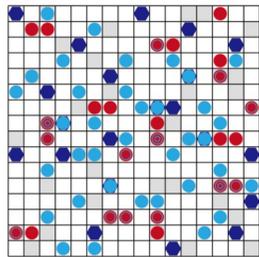
自動データ解析技術の開発



イオン滞留学

科研費・学術変革(A)

イオンの流れを「車」に見立ててモデル化



Keyword:

- 数理学
- 電池材料
- 触媒材料
- 非平衡・集団運動

おわりに

当然、セミナーやイベントはそこそこあります。ただ飲み会は多い方ではありません。



研究キーワード

計算分子・材料科学、High-Performance Computing (HPC)

マテリアルズインフォマティクス、AI技術

電池（蓄電池）・触媒；カーボンニュートラル

電子、イオン、分子；基礎原理、応用指針、材料提案

電気化学、界面科学、イオニクス；量子力学、統計力学、反応速度論

計算シミュレーション/AI技術を用いたエネルギー・環境材料研究に興味があればぜひ一緒に研究しましょう！問合せお待ちしております！

E-mail: tateyama@cls.iir.isct.ac.jp

yasunobu.ano@cls.iir.isct.ac.jp

ホームページ: <https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp>

館山

安藤

