アドバンス・シミュレーション・ニュース

Vol.4, No.4（2026 年 10 月 13 日発行）

第 4 回アドバンス・シミュレーション・セミナー2026 開催報告

筑波大学　計算科学研究センター　量子物性研究部門

教授　大谷　実　様

「第一原理計算と古典溶液理論の融合で挑む電気化学界面」

アドバンス・シミュレーション・ニュースは、アドバンスソフト株式会社が 2021 年度から、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象として開催している「アドバンス・シミュレーション・セミナー」の開催報告と今後の開催予定をご案内するサービスです。

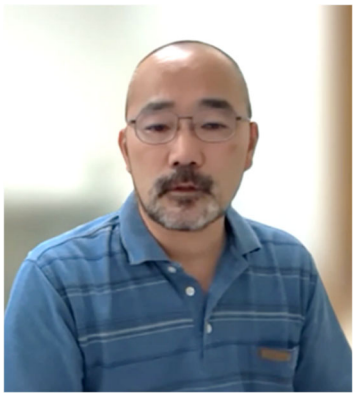
本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しています。

開催概要

○日時：2026 年 8 月 28 日（金）14:00～15:30
○開催方法：オンラインセミナー（Zoom にて開催）
○主催：アドバンスソフト株式会社　出版事業部
○講演概要

電池・燃料電池・水電解・金属腐食など、電気化学界面の現象は産業の広範な分野に現れる。その性能や耐久性は、電極と電解液が接する界面の微視的な反応や構造に支配される。本講演では、講演者らが開発した Effective Screening Medium（ESM）法、および DFT と古典溶液理論を融合した ESM-RISM 法を中心に、第一原理計算による電気化学界面シミュレーションの最新動向を紹介する。

電極電位を制御しながら反応中間体・界面構造・電気二重層を解析する手法を解説し、水素発生反応・電池界面・金属腐食への応用例と、Quantum ESPRESSO を用いた産業応用への展望を示す。



本稿は、2026 年 8 月 28 日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2026」において、大谷 実 様にご講演いただいた内容をアドバンスソフトがまとめたものです。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 界面計算の重要性と従来の課題

固体電極と電解液が接する電気化学界面における分子や電子の挙動を解明することは、現代の材料科学やエネルギー技術において極めて重要である。2000 年代初頭より燃料電池の白金電極やリチウムイオン電池の負極、二酸化炭素還元触媒などの性能向上や劣化原因の解明を目指し、量子力学に基づく第一原理計算の適用が精力的に進められてきた。近年では鉄やアルミニウムなど構造材料の腐食機構すなわち局所電池の形成と金属溶解の解析など、幅広い技術分野へと応用領域を次々と広げている。

界面で進行する化学反応や電荷移動は、デバイスの耐久性やエネルギー変換効率に直結する最も核心的なプロセスである。しかし実験的に界面の超微視的動態を直接観察することは容易ではない。サイクリックボルタンメトリーなどの優れた分光測定手法が存在するものの、具体的にどのような分子状態や

過渡的な構造変化がそれらのシグナルを生み出しているのかを正確に理解するには、計算科学との緊密な連携が不可欠となっている。

しかし電気化学界面のシミュレーションには根強い理論的難所が存在していた。界面には正負の電荷が不均一に分布する電気二重層が形成されるが、これを第一原理計算で正確に再現することは困難であった。電解液の遮蔽効果と電極表面の電子状態を同時に扱おうとすると数万原子規模の巨大なスーパーセルが必要となり、計算コストの観点から非現実的であった。さらに電極表面の電子移動反応は極めて短時間かつ極小スケールで進行するのに対し、電解液中のイオン拡散や溶媒分子の配向変化は空間的にも時間的にも非常に長大である。そのため全原子を一律の精度で扱うのではなく、短時間の量子反応領域と長時間の環境応答領域を論理的に切り分け、階層的にモデル化する新しい計算手法の開発が強く求められていた。

1.2. 境界条件の解決と有効遮蔽体法

電気化学界面の計算を原理的に困難にしていた主要因の一つが境界条件の問題である。標準的な密度汎関数法コードでは、三次元空間での周期境界条件が前提とされている。しかし電極表面に人為的に電圧を印加し強電場を生じさせる界面系に周期境界条件をそのまま適用すると、隣接する仮想セル間のクーロン相互作用が無限遠まで届いてしまうため、ノコギリ波状の非物理的な電場干渉やポテンシャルの歪みが必然的に発生してしまう。

この重大な課題を克服するため 2000 年代半ばに開発されたのが有効遮蔽体法である。この手法は、電極基盤の面内方向には周期境界条件を維持しつつ、表面に対して垂直な方向には開放境界条件を適用する混成境界条件を実現した。ポアソン方程式を解くにあたり、境界領域における誘電率分布を物理的要請に合わせて任意に設計可能とし、非物理的なクーロン干渉を完全に排除したグリーン関数を数学的に導出した。

具体的には、両側を真空とする孤立スラブモデル、片側に無限大の誘電率を持つ金属電極を配置して鏡像電荷を再現するモデル、両側に無限大の誘電率を置く平行板コンデンサーモデルがそれぞれ定義された。この手法の最大の成果は、従来の非物理的な一様背景電荷による電荷補償手法を完全に撤廃した点にある。静電ポテンシャルの変化を電極表面へ鏡像電荷として集約させることで、仮想的な外部電源を理論系に直接連結させることに成功した。これにより電極近傍に形成される強電場勾配と極性分子の配向変化を、第一原理計算の枠組み内で自然にシミュレートする道が拓かれた。

1.3. 定電位制御と溶媒理論の融合

界面電場の厳密な記述が可能となったものの、従来の第一原理計算には電子数一定という制約が依然として残されていた。実際の電気化学実験で制御される物理量は系内の電子数ではなく、参照電極に対する相対的な電位すなわちフェルミエネルギーである。電子数一定の計算系で反応が進むと電荷移動に伴い電極の電位が非物理的に変動してしまうため、実験条件を正しく再現するにはグランドカノニカルアンサンブルと呼ばれる定電位条件での計算が不可欠であった。

電子状態計算の途中で電位を直接制御しようとすると、電子数の急激な変動により計算が発振し破綻しやすいという課題があった。これを解決するため分子動力学法における拡張系アンサンブルの概念を応用した仮想電荷粒子法が開発された。系全体の総電子数を動的変数として扱い、瞬間的なフェルミエネルギーと目標値との差分を仮想粒子に対する物理的な力と定義する。この力に基づいて運動方程式を反復的に更新することで、計算の破綻を回避しながら電位を滑らかに目的の値へ追随させることが可能になった。

さらに長距離に及ぶスクリーニング効果を低コストで統合するため、積分方程式論である参照相互作用サイトモデルと有効遮蔽体法を理論的に融合させた手法が実現された。界面で電位を変化させる際、電極側には非整数の電荷が流入する。電解液側を通常の全原子分子動力学で扱うとイオン数は整数でしか変動できず、クーロンエネルギーが発散してしまう。そこに液体の積分方程式理論である RISM を組み込むことで空間的に連続な電荷密度が得られ、非整数の電荷変化に対しても完全に電場を遮蔽することが可能となり、理想的なハイブリッド理論がここに確立された。

1.4. 電池材料と触媒反応への応用

これらの革新的な手法群の確立により、これまで計算が極めて困難であった多様な電気化学現象の解析が可能となった。初期の代表的成果として地球シミュレータを活用した白金電極上における水の電気分解の直視シミュレーションが挙げられる。白金表面上のヒドロニウムイオンに強電場を印加し、数ピコ秒のタイムスケールで水素原子が解離して表面に吸着する過程を第一原理分子動力学により緻密に再現した。軌道解析により、電位印加に伴い白金表面が負に帯電し、白金と水素の混成軌道へ電子が移動して中性吸着水素が生成される微視的な機構が明確に解明された。

また蓄電デバイスの極小ナノ空間における特異現象の解明にも威力を発揮している。マキシンなどの二次元層状物質へアルカリ金属イオンが挿入される挙動の解析では、ルビジウムのような大きな金属イオンは緩やかな溶媒和構造をとるのに対し、小さなリチウムイオンは空間内で水分子を強固に固定化することが判明した。この剛直な水分子の配向に起因して過剰な遮蔽現象が生じ、通常の誘電応答とは逆の挙動を示す負のキャパシタンス効果が発現することが理論計算により裏付けられた。

さらにリチウムイオン電池におけるグラファイト負極界面の脱溶媒和プロセスの解析でも非常に重要な知見が得られている。リチウムイオンが溶媒和シェルを脱ぎ捨てて炭素層間へ挿入される際に生じる大きな界面抵抗について、電位を一定に保持しながら活性化エネルギーの変化を算出することで、実験値と極めて良く整合する反応障壁の定量評価に成功

した。その他、酸素発生反応における活性サイトの同定などでも多大な成果を挙げている。

1.5. 次世代手法の展望と今後の課題

電気化学界面の第一原理シミュレーションは過去二十五年間にわたり、定量的かつ実験対応型の優れた解析ツールへと大きな進化を遂げてきた。今日では世界的に主に三つの理論的流派へと集約されつつある。一つ目は極性連続体モデルを基礎としたジョイント密度汎関数理論、二つ目はそれに類するエンバイロンと呼ばれる手法、そして三つ目が本講演で紹介された分子論的ハイブリッド手法である。前二者は計算効率に優れる一方、分子の形状や水素結合ネットワークの微視的記述には課題を残す。対して参照相互作用サイトモデルをベースとする手法は、溶媒の構造的自由度を保ったまま液体論と直接連結できる点に明確な強みを持つ。

現在では計算プログラム自体の高速化も精力的に推進されている。独自の第一原理計算コードへのアルゴリズム実装プロジェクトにおいては、ボトルネックであった液体論部分の計算論理を大幅に改修し、全体の計算時間を劇的に短縮した。これによりかつては大型スーパーコンピュータを長期占有する必要があった大規模な界面シミュレーションが、研究室単位の身近な計算機環境でも現実的な時間内で実行可能になりつつある。

しかし現行の手法には Closure 方程式の数学的近似に依存するため自由エネルギーを完全に最適化できていないなど、いくつかの理論的限界も残されている。これらの課題を打開する次世代アプローチとして古典密度汎関数法との融合が強く期待されている。液体分布関数の厳密な定式化により高精度な溶媒応答を第一原理計算と完全結合させることが目的である。さらなる理論的発展を遂げることで全固体電池や金属腐食など、複雑な複合界面現象の解明に向けた役割は今後一層高まっていく。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

電極系などの電気化学界面のシミュレーションは、電池や触媒の研究開発において非常に重要な技術要素の一つである。しかしながら、電極における電子と電解液における電解質イオンを同時に矛盾なくグランドカノニカルアンサンブルとして扱う必要があり、旧来の第一原理計算や分子動力学計算などの手法では解析が不可能であった。

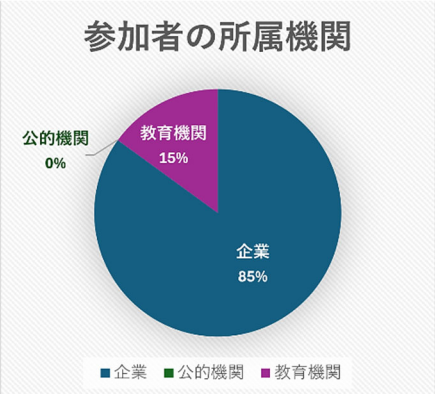
大谷先生の今回のご講演では、古典溶液論と第一原理計算を融合させた ESM-RISM などの手法を用いて電気化学界面におけるシミュレーションの困難さを打開するアプローチが紹介された。リチウムイオン電池などを対象としたいくつかの系に適用した事例なども紹介していただき、当該手法により電気化学界面のシミュレーションが大いに進展していることを知ることができた。また、現行の古典溶液論は精度や速度の面で不十分なところがあり、より実用的なシミュレーションのためには、理論やアルゴリズの改善に加えて機械学習と融合した手法などの開発の必要性を感じた。

【ご経歴】
2000 年 大阪大学大学院 博士後期課程修了、博士（理学）。筑波大学、東京大学、産業技術総合研究所を経て 2021 年より 筑波大学 計算科学研究センター 教授。

【ご研究内容】
専門は計算物質科学。特に電気化学界面の第一原理計算の手法開発と応用研究を行っている。開発した手法はオープンソースの第一原理計算コードに実装され、エネルギー材料・腐食研究などに活用されている。

参加者のご意見

申込者は 125 名、当日の参加者（視聴者）（社外）は 80 名でした。



参加者（視聴者）の内訳は、企業が 68 名、公的機関が 0 名、教育機関が 12 名でした。主な業種は、「材料/素材」、「半導体/電子部品」、「大学/教育機関」、でした。主な職種は、「研究/開発」、主な職種は、「研究/開発」でした。セミナー後のアンケートは、46 名からご回答いただきました。満足度の平均値は 10 点満点中 7.93 と高評価をいただいており、全体としてセミナーの満足度は高く、実務への参考になったというポジティブな意見が多くを占めました。

公開資料

ご講演の YouTube 動画は、右の QR コードからご覧いただくことができます。

ご講演の資料は、右の QR コードの「資料をダウンロードする」からログイン後、ダウンロードすることができます。ログインアカウントをお持ちでない方は、「資料をダウンロードする」から新規メンバー登録後、ログインしてダウンロードすることができます。

右の QR コードから過去のアドバンス・シミュレーション・セミナーの YouTube 動画をご覧いただくことができます。

2025 年度に開催したセミナーの各記事を一つにまとめて、24 ページの冊子として発行いたしました。全 10 回分の記事を一度にご覧いただけますので、ぜひお手元にてご一読いただけますと幸いです。

2026 年度の開催日程

アドバンス・シミュレーション・セミナー
2026 の開催要領
https://www.advancesoft.jp/seminar/41339/

No.	日程 受付状況	内容	テーマ
第 1 回	4 月 17 日（金） 終了	「HPC 構造解析と AI で試作レスは可能となるのか？」 東京大学　大学院新領域創成科学研究科　人間環境学専攻 教授　奥田 洋司　様	構造解析、AI
第 2 回	5 月 22 日（金） 終了	「半導体デバイスのマルチスケールシミュレーション」 東京大学　大学院工学系研究科　機械工学専攻 教授　泉 聡志　様	シミュレーション技術
第 3 回	7 月 17 日（金） 終了	「天の川銀河を星一つ一つまで再現したシミュレーション」 東京大学　大学院理学系研究科　天文学専攻 教授　藤井 通子　様	大規模 N 体 ／流体計算
第 4 回	8 月 28 日（金） 終了	「第一原理計算と古典溶液理論の融合で挑む電気化学界面」 筑波大学　計算科学研究センター　量子物性研究部門 教授　大谷 実　様	第一原理計算 ・電気化学
第 5 回	9 月 18 日（金） 終了	「数値計算・機械学習を活用した 触媒システム開発の課題と展望」 北見工業大学　工学部　機械電気系　地球環境工学科 エネルギー総合工学コース　准教授　植西 徹　様	実験と計算の融合
第 6 回	10 月 23 日（金） 受付中	「AI とシミュレーションが拓く シングルセル・空間オミクス創薬」 東京科学大学　総合研究院　難治疾患研究所 計算システム生物学分野　教授　島村 徹平　様	AI オミクス創薬
第 7 回	11 月 6 日（金） 受付中	「グローバル河川洪水シミュレーションは どう実現し、進歩したか？」 東京大学　生産技術研究所　准教授　山崎 大　様	全球河川シミュレーション
第 8 回	12 月 4 日（金） 受付中	「数学的難問から拓く次世代航空機開発」 東北大学　流体科学研究所　流動創成研究部門 准教授 焼野 藍子　様	理論と実践の融合
第 9 回	12 月 18 日（金） 受付準備中	「創薬 AI エージェントによるリード化合物の最適化」 株式会社 理論創薬研究所　代表取締役　吉森 篤史　様 （兼務）東京理科大学 薬学部 客員教授 （兼務）静岡県立大学 薬学部 客員教授	AI 創薬の新時代
第 10 回	2027 年 1 月 15 日（金） 受付準備中	「領域気象化学モデルによる 大気エアロゾルの数値シミュレーション」 気象庁　気象研究所　全球大気海洋研究部 主任研究官 梶野 瑞王 様	気象学・大気化学

【お問い合わせ先】
アドバンスソフト株式会社　出版事業部
〒101-0062　東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西
E-mail：office@advancesoft.jp　https://www.advancesoft.jp/

当社では随時人材の募集も行っております。
https://www.advancesoft.jp/recruit/

Copyright © 2026 AdvanceSoft Corporation. All right reserved.