

令和 3 年 6 月 4 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01693

研究課題名(和文) 水素エネルギー材料の次代設計のための量子論的モデリングの深化と応用

研究課題名(英文) Exploration and application of quantum modeling for next-generation design of hydrogen energy materials

研究代表者

君塚 肇 (Kimizuka, Hajime)

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：60467511

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：水素をエネルギー媒体として利用するための材料技術を確立するには、材料中における水素原子の振る舞いを理解し、材料設計に反映させることが重要である。本研究では、経路積分解析とレアイベント解析を統合させることで、原子核と電子からなる系を丸ごと第一原理的に扱う計算を可能にし、量子効果に由来する水素の特異な挙動を予測的に定量評価するための新規解析法を構築した。これにより、水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程の自由エネルギー地形を獲得し、水素の存在状態ならびに入出反応・移動過程のキネティクスを明らかにするとともに、水素吸蔵・透過性能を律速する因子を解析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

水素を次世代のエネルギー移送・発生の媒体として利用するための取組みが注目されているなか、直接的に検出・測定することが容易ではない材料中の水素の挙動を、理論的に予測・理解するためのアプローチを確立することが重要である。本研究により構築した手法は材料中の水素特性に対して高い予測能力を持ち、水素利用技術の高度化のための材料研究の促進に資するものである。また、本研究による成果は、既存の水素エネルギー材料の性能向上のみならず、新しい候補探索に対して有用な指針を与える。

研究成果の概要(英文)：To establish a materials technology for using hydrogen as an energy medium, it is important to understand the behavior of hydrogen atoms in materials and reflect it into the materials design. In this study, we developed a numerical framework for predicting the characteristic behaviors of hydrogen atoms due to the nuclear quantum effects based on the quantum mechanical natures of both electrons and nuclei, namely, the ab initio approach combining path-integral molecular dynamics simulations with rare events analysis. Using this method, we successfully evaluated the free-energy profiles for the diffusion and reaction processes of hydrogen in solids. Consequently, we elucidated the kinetic and thermodynamic properties of hydrogen and its isotopes in the typical models of hydrogen-permeation/barrier materials.

研究分野：計算材料科学

キーワード：水素透過・吸蔵 量子効果 自由エネルギー地形 第一原理経路積分解析 レアイベント解析

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、環境・エネルギー問題への意識の高まりから水素を次世代のエネルギー移送・発生媒体として利用するための取組みが注目されている。これを受けて、材料工学分野では、国内外で水素貯蔵・吸蔵および燃料電池等の水素利用技術の確立と普及のための研究開発が盛んに行われている。これらの水素利用技術においては、種々の水素エネルギー材料（即ち、水素吸蔵・貯蔵材、透過膜材、電解質・電極材等）内における水素原子の挙動を高度に制御することが求められるが、水素の反応・移動現象はそれらの性能を決める重要な因子となるため、材料内の水素の動的過程（例えば吸着、拡散、偏析、吸蔵等）の反応機構を詳細に理解することは水素に対する効率的な制御技術を確立する上で不可欠である。

その一方、材料中の水素の挙動を直接的に検出・測定することは現在でも容易ではなく、その詳細については明らかにされていない部分が多い。次世代を見据えた水素制御技術に関連する材料開発を推進するに当たって、水素の材料内における振る舞いを原子・電子レベルで予測・理解するためのアプローチを確立し、材料性能の理想値を実験とは独立に評価する手段を獲得することが必須であると考えられる。水素の挙動においては原子核の軽量性に起因する量子ゆらぎ（特に、離散的な振動エネルギー準位、トンネル効果等）が室温以上でも無視できない影響を及ぼすため、種々の水素エネルギー材料における水素の反応キネティクスを適切に評価するためには当該効果を陽に取り扱うことが欠かせない。これまで、原子核の量子効果に注目した原子・分子挙動に対する方法論は主に分子科学や表面物理の分野で発展してきたが、水素エネルギー材料系に対して適用が試みられた例は現状では少ない。これは、当該材料は一般に多電子、多原子核で構成されるため、電子論や量子統計力学に基づく量子論解析を直接的に実行することが困難であったことによる。

2. 研究の目的

本研究では、水素制御技術の高度化のための研究開発に貢献するため、原子核と電子の双方の量子効果に由来する水素の特異な挙動を予測的かつ定量的に評価するための新規の量子論的モデリング法を構築する。具体的には、経路積分計算と電子状態計算を連結した上で、遷移状態・活性化障壁を評価するレアイベント解析法と組み合わせることにより、原子核と電子の量子効果を取り入れた水素挙動解析のための新規の量子論的モデリング手法（即ち、第一原理経路積分レアイベント解析法）を構築することを目標とする。更に、合金系および錯体化合物系等の水素エネルギー材料の典型モデルにおける水素の吸着、拡散、捕捉、水素化物形成等の反応過程に関する詳細を獲得し、水素特有の量子的振る舞いが当該材料に与える影響を明確にするとともに、水素吸蔵・透過性能向上のための設計指針を得る。

3. 研究の方法

本研究では、(a)密度汎関数理論に基づく電子状態計算と経路積分法を直接連成させることで原子核と電子からなる系を丸ごと第一原理的に扱う計算を実現するとともに、(b)原子運動の時間スケールでは極めて稀にしか検出できないが物性を支配する重要な事象（“レアイベント”と称する）を重点的に抽出するための統計力学的手法を導入した「第一原理経路積分レアイベント解析」を展開する。これにより、複雑な相互作用が働く水素エネルギー材料中の水素の存在状態および反応過程の量子描像を解明し、有限温度における自由エネルギー地形を獲得する。水素の量子的振る舞いが強く関与する反応経路を、原子核と電子の双方について第一原理的に評価する試みは発展途上にあることから、他に先駆けて本解析法を水素エネルギー材料系に適用し、その有効性を示す。

本研究は、(a)第一原理経路積分レアイベント解析法の構築、(b)水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明、の2つのフェーズで実施する。

(a) 第一原理経路積分レアイベント解析法の構築

経路積分計算と電子状態計算を連結した上で、遷移状態・活性化障壁を評価するレアイベント解析法と組み合わせることにより、原子核と電子の量子効果を取り入れた水素挙動解析のための新規の量子論的モデリング手法（即ち、第一原理経路積分レアイベント解析法）を構築する。具体的には、これまでの研究を通じて構築済みの第一原理経路積分分子動力学法を拡張するとともに、遷移状態理論に基づく反応経路探索解析法やメタダイナミクス法を導入することで、原子核と電子の量子効果を取り入れた自由エネルギー地形を得るためのレアイベント解析を実現する枠組みを構築する。これにより、材料中の多様な水素の反応・移動過程に関する自由エネルギー地形を有限温度下で評価するための枠組みを実現するとともに、効率的な状態サンプリング法を開発・導入することで計算負荷の低減を図りつつ、適用範囲を拡大する。

(b) 水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明

構築した手法を活用して、水素エネルギー材料における主要なモデル系の材料表面における

水素分子の解離・吸着過程およびバルク中への侵入・拡散過程における自由エネルギー地形を第一原理的に評価し、水素吸蔵・放出性能を律速する因子の詳細を獲得する。更にはこれらに対する添加元素と格子ひずみの影響を明らかにし、水素反応性・移動性向上の指針となる物理的シナリオを明確化する。

4. 研究成果

水素利用技術の高度化のための研究開発に貢献するため、原子核と電子の双方の量子効果に由来する水素の特異な挙動を予測的かつ定量的に評価するための量子論的モデリング法を構築した。これにより、合金系等の水素エネルギー材料の典型モデルにおける水素の反応・移動過程のキネティクスに関する詳細を獲得し、水素特有の量子的振る舞いが当該材料に与える影響を明確にした。これまでに、以下に挙げる課題に取り組み成果を得た。

(a) 第一原理経路積分レアイベント解析法の構築

- ① 経路積分計算と電子状態計算を連結した上で、遷移状態・活性化障壁を評価するレアイベント解析法と組み合わせることにより、原子核と電子の量子効果を取り入れた水素挙動解析のための新規の量子論的モデリング手法（即ち、第一原理経路積分レアイベント解析法）のプロトタイプを構築した。これにより、標準的な電子状態計算（密度汎関数理論）で取り扱うことが出来る種々の材料中の多様な水素の反応・移動過程に関する自由エネルギー地形を評価するための枠組みを実現した。
- ② 第一原理経路積分レアイベント解析法のプロトタイプに対して改良を加え、経路積分分子動力学計算と **string** 法の組み合わせにより量子ゆらぎと熱ゆらぎの双方を取り入れることができる経路探索手法の構築を進めた。更に、安定・準安定状態から近傍の遷移状態を探索するための最緩勾配上昇法、ならびに量子ダイナミクスを取り扱うための近似手法である量子熱浴法に関するシステム実装を進めた。これにより、種々の材料中の多様な水素の反応・移動過程に関する自由エネルギー地形を評価するための枠組みの適用範囲を拡大させた。
- ③ これまでに構築した第一原理経路積分レアイベント解析法に関して、比較的複雑な反応素過程を有する場合に対しても適用範囲を広げるために、状態サンプリング法の高度化および効率化に取り組んだ。具体的には、系の量子ダイナミクスを近似的に記述する量子熱浴法を導入し、原子核の量子効果を考慮した金属結晶の基礎的な物理量（熱物性）および金属中水素の拡散係数を定量評価し、実験値との比較を通じて本手法の適用性を検証した。加えて、効率的サンプリングによる機械学習ポテンシャルの構築手法等に取り組み、実際の解析上重要となるレアイベント解析の枠組みを首尾よく構築した。

(b) 水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明

- ① 構築した手法を活用して、水素エネルギー材料における主要なモデル系の材料表面・界面における水素の吸着・固溶過程およびバルク中への侵入・拡散過程における自由エネルギー地形を第一原理的に評価し、水素吸蔵・透過性能を律速する因子の詳細を解析した。水素吸蔵・透過材料のモデル系として主要な金属水素化物を取り扱い、水素原子の表面吸着、粒界偏析、拡散における同位体効果等を解析し、当該系における水素の存在状態の量子描像を明らかにした。
- ② 水素吸蔵・透過材料のモデル系として重要なパラジウム水素化物を対象に、これまで実験的に認められていながらその機構の詳細が不明であった、パラジウム中の水素同位体（軽水素と三重水素）の拡散係数の逆転現象の全体描像を世界で初めて明らかにした。これは、水素同位体の量子状態を高温から低温までシームレスに記述できる当該手法を活用したことによって、ようやく解明に至ったものである。更に、超多量空孔構造内の水素原子の捕捉状態と構造安定性の機構を解明することに取り組んだ。
- ③ ②の成果を受けて、水素吸蔵・透過材料および触媒材料のプロトタイプとして注目される金属系を対象に、水素の溶解・拡散の基本メカニズムを明らかにした。これにより、実験データの不備・不足からこれまで合意が得られていなかった種々の金属（バナジウム、アルミニウム、銅、銀等）中の水素拡散係数の理論的予測値を提供することに成功した。また、格子欠陥が水素の溶解・拡散性に与える影響を明らかにするため、バナジウム粒界における水素の拡散・トラップ特性の定性評価に取り組んだ。これらを通じて、水素吸着・拡散の素過程において量子効果が顕在化する機構・条件を解明した。

以上の成果を通じて、構築した手法が材料中の水素特性に対して高い予測能力を持つことを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 君塚肇, 尾方成信, 志賀基之	4. 巻 75
2. 論文標題 経路積分法で探る金属中の水素の拡散メカニズム	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本物理学会誌	6. 最初と最後の頁 484-490
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11316/butsuri.75.8_484	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 B. Thomsen, M. Shiga	4. 巻 154
2. 論文標題 Nuclear quantum effects on autoionization of water isotopologs studied by ab initio path integral molecular dynamics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 084117-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0040791	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 T. Kondo, T. Sasaki, S. Ruiz Barragan, J. Ribas Arino, M. Shiga	4. 巻 42
2. 論文標題 Refined metadynamics through canonical sampling using time-invariant bias potential: A study of polyalcohol dehydration in hot acidic solutions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 156-165
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26443	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Y. Noguchi, M. Hiyama, M. Shiga, O. Sugino, H. Akiyama	4. 巻 153
2. 論文標題 Quantum-Mechanical Hydration Plays Critical Role in the Stability of Firefly Oxyluciferin Isomers: State-of-the-art Calculations of the Excited States	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 20110-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0031356	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Nagai, M. Okumura, K. Kobayashi, M. Shiga	4. 巻 102
2. 論文標題 Self-learning hybrid Monte Carlo: A first principles approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 041124(R)-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.041124	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 L. Yan, Y. Yamamoto, M. Shiga, O. Sugino	4. 巻 101
2. 論文標題 Nuclear quantum effect for hydrogen adsorption on Pt(111)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165414-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.165414	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hajime Kimizuka, Shigenobu Ogata, Motoyuki Shiga	4. 巻 100
2. 論文標題 Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024104-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.024104	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshifumi Noguchi, Miyabi Hiyama, Motoyuki Shiga, Hideo Akiyama, Osamu Sugino	4. 巻 15
2. 論文標題 Photoabsorption Spectra of Aqueous Oxyluciferin Anions Elucidated by Explicit Quantum Solvent	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 5474-5482
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.9b00392	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Kawashima, K. Ishimura, M. Shiga	4. 巻 150
2. 論文標題 Ab initio quantum mechanics/molecular mechanics method with periodic boundaries employing Ewald summation technique to electron-charge interaction: Treatment of the surface-dipole term	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124103-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5048451	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yong Lik Chang, Takehiko Sasaki, Jordi Ribas-Arino, Masahiko Machida, Motoyuki Shiga	4. 巻 23
2. 論文標題 Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 1662-1671
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b11615	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Motoyuki Shiga	4. 巻 -
2. 論文標題 Path Integral Simulations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering	6. 最初と最後の頁 1-22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-409547-2.11614-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Motoyuki Shiga, Mark E. Tuckerman	4. 巻 9
2. 論文標題 Finding Free-Energy Landmarks of Chemical Reactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 6207-6214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.8b01958	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計25件（うち招待講演 12件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 志賀基之
2. 発表標題 階層的並列化された第一原理経路積分計算
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開2020」（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Shiga
2. 発表標題 Studies and Special Lecture: Path Integral Simulations
3. 学会等名 37th Computational Materials Design (CMD) Workshop (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 原子シミュレーションに基づく転位運動と原子拡散の速度論的モデリング
3. 学会等名 日本金属学会2020年春期講演大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 福岡 敦史, 高橋 操平, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 第一原理計算によるパラジウム銀合金の水素透過性に関する研究
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 名田 巧, 平安山 涼, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 無拡散変態の変態経路探索の効率化のためのdimer法の改良
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Kimizuka
2. 発表標題 First-principles quantum modeling of diffusion of hydrogen isotopes in face-centered cubic metals
3. 学会等名 KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics & CAE 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka, Y. Iwai, M. Shiga, S. Ogata
2. 発表標題 Nuclear quantum effects on kink-pair nucleation on screw dislocations in iron: A centroid-based quantum transition state theory approach
3. 学会等名 4th International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4-2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 固体材料分野における古典分子動力学法の基礎と応用
3. 学会等名 2019年度計算科学ハンズオンセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇, 岩井 佑樹, 福井 浩毅, 志賀 基之, 尾方 成信
2. 発表標題 量子反応経路探索手法による鉄中らせん転位のキンク対形成過程の解析
3. 学会等名 日本計算工学会第24回計算工学講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩井 佑樹, 福井 浩毅, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 量子反応経路探索手法を用いた鉄中らせん転位の移動過程の自由エネルギー地形解析
3. 学会等名 日本材料学会第4回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Kimizuka, S. Ogata, M. Shiga
2. 発表標題 Mechanical tuning of hydrogen diffusivity in palladium: An ab initio path-integral molecular dynamics modeling
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 材料の強度・変形機構の解明に向けた原子・電子論的シミュレーションの活用
3. 学会等名 日本金属学会2018年秋期講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 Ab initio経路積分分子動力学法による面心立方金属中の水素同位体の存在状態と拡散キネティクスの解析
3. 学会等名 「レア・イベントの計算科学」第2回ワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Kimizuka, S. Ogata
2. 発表標題 Isotope effect on quantum diffusion of interstitial hydrogen in face-centered cubic metals
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 君塚 肇, 中西 亮太, 尾方 成信
2. 発表標題 経路積分分子動力学法による鉄中らせん転位の移動過程における量子効果の評価
3. 学会等名 日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 操平, 市岡 航平, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 第一原理計算を用いたバナジウム中の傾角粒界における水素の溶解・拡散挙動に関する研究
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会平成30年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩井 佑樹, 福井 浩毅, 石井 明男, 君塚 肇, 尾方 成信
2. 発表標題 低温下における鉄中らせん転位の移動障壁に関する原子論的解析
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会平成30年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 君塚 肇, 尾方 成信, 志賀 基之
2. 発表標題 パラジウム中の水素拡散の同位体効果に関する第一原理解析
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 志賀 基之
2. 発表標題 自由エネルギー面上の化学反応経路探索
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Shiga
2. 発表標題 Locating Free Energy Landmarks of Chemical Reactions
3. 学会等名 3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 志賀 基之
2. 発表標題 水素の量子効果を考慮した第一原理計算
3. 学会等名 第15回 水素量子アトムクス研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 志賀 基之
2. 発表標題 自由エネルギー面上における停留点の探索法
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 志賀 基之
2. 発表標題 分子シミュレーションにおけるレア・イベント解析手法
3. 学会等名 大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 志賀 基之
2. 発表標題 Introduction to path integral simulations
3. 学会等名 大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Shiga
2. 発表標題 Basics of biased sampling, umbrella sampling, WHAM, Bluemoon ensemble, quantum effects
3. 学会等名 Free Energy Chembio 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	志賀 基之 (Shiga Motoyuki) (40370407)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹 (82110)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------