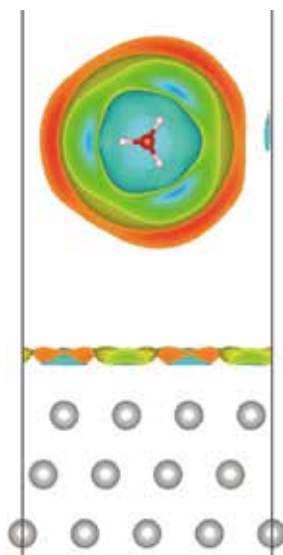


# 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(I) (ESM-RISM)

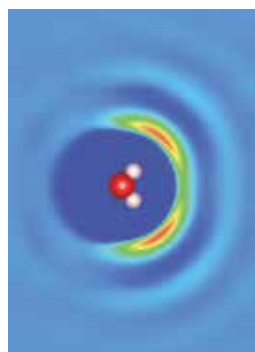
## シミュレータ概要

- ▶ 本シミュレータは、第一原理電子状態計算パッケージ(Qunatum ESPRESSO)に、固体と液体の界面における化学反応を扱う機能を加えて拡張したものです。
- ▶ 液体を扱う部分にはReference Interaction Site Model(RISM)を用いて、従来扱うことのできなかった、固液界面における化学反応を扱うことが可能となりました。
- ▶ 参照電極からの電極電位を定義することが可能であり、実験と直接比較可能な反応平衡電位や吸着電位の計算も行うことが可能です。

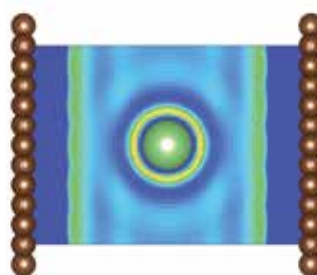
## ESM-RISMシミュレーション



燃料電池のプラチナ電極上のヒドロニウムイオン:ヒドロニウムイオンの周りには陰イオンと水が溶媒和しイオン雰囲気形成されている。プラチナ電極上には電解液による電気二重層が形成される。



水分子の周りの酸素分子の分布:水素結合により、水素原子の周りに酸素原子が多く配位していることが分かる。



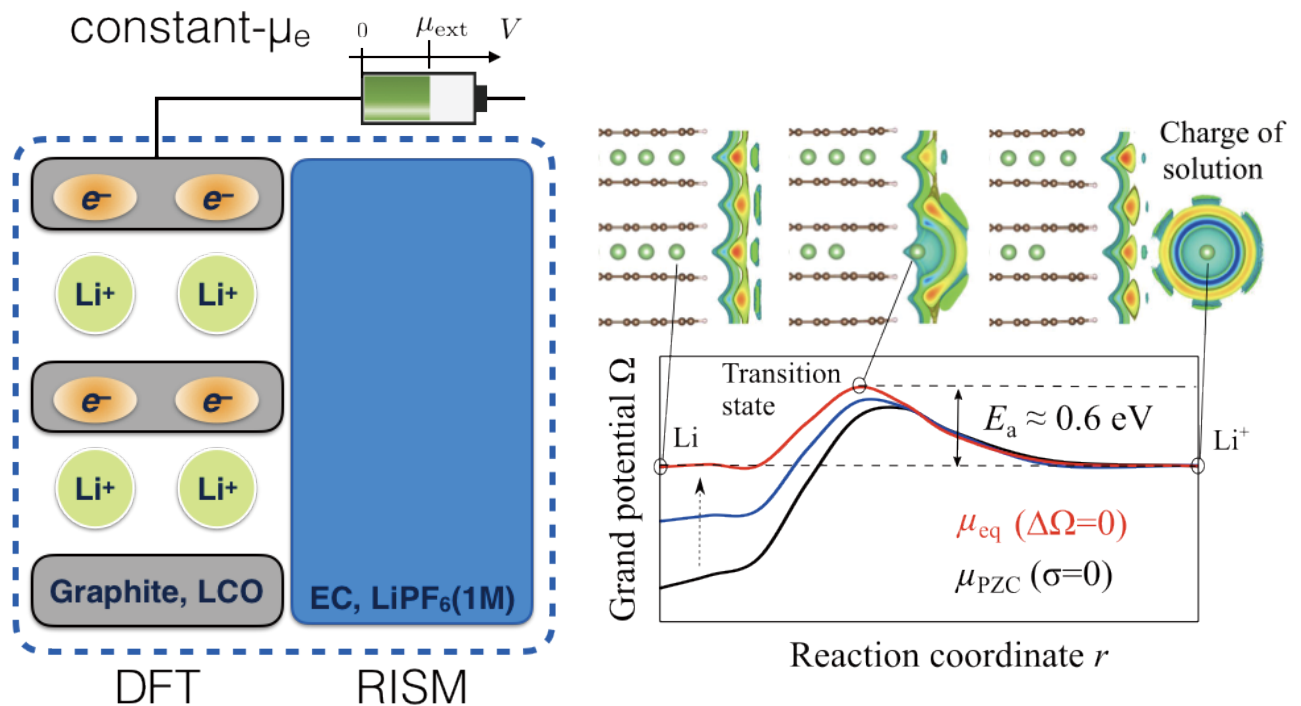
グラファイト層間に挿入されたカリウムイオンの周りの溶媒和構造:ナノスペースに挿入されたイオンの周りの溶媒和構造も可視化することができる。

## 主な機能

- ▶ 開放端の境界条件下におけるPoisson方程式とRISM方程式を連成させる機能を追加
- ▶ 電解質イオンに対するグランドカノニカルアンサンブルを実現
- ▶ 電解質イオンの化学ポテンシャルを一定に保ったバルク電解液のシミュレーション機能を追加
- ▶ 電解液及び電解質イオン分布の3次元分布データ及び溶媒和分子数を計算するための解析ツールを追加

## 想定用途

- ▶ 固体と液体の界面における電気化学反応のメカニズム解析
- ▶ 電極表面の電気化学反応電位の計算、電流・電圧曲線の解析
- ▶ 電極材料や電解液のスクリーニング計算
- ▶ 電気化学センサーや構造材料の腐食・防食のシミュレーションへも応用可能



ESM-RISMによるリチウム(Li)イオン電池負極シミュレーションの概念図: グラファイト電極の電極電位を制御したシミュレーションが可能となっている。

上図: 溶媒和された電解液中のLiイオンが、脱溶媒和しながら電極に侵入する様子  
下図: 脱溶媒和反応の自由エネルギープロファイル。平衡電位では始状態と終状態のエネルギーが一致している(赤線)

J. Haruyama, T. Ikeshoji, and M. Otani, J. Phys. Chem. C, 122, 9804(2018)

## 動作環境

- ▶ Fortran及びCコンパイラ、MPI、BLAS、LAPACK及びFFTライブラリーが必要

## ライセンス・配布方式

- ▶ 拡張部分はGNU General Public License version 2に従う
- ▶ 公開サイト ([https://staff.aist.go.jp/minoru.otani/esm-rism\\_download.html](https://staff.aist.go.jp/minoru.otani/esm-rism_download.html))より公開中
- ▶ 1D-RISM、3D-RISM及びRMM-DIIS (<https://github.com/nisihara1/q-e>)を利用

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により開発されたものです。また、図の描画にはVESTA (<https://jp-minerals.org/vesta/>)を利用しております。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】[u2m-sim-ml@aist.go.jp](mailto:u2m-sim-ml@aist.go.jp)

2020.04