

# 2020年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

## 調査研究報告書(公開版)

### 【研究題目】

最先端シミュレーション・実験の融合による次世代電極過程科学の確立を目指す調査研究

### 【整理番号】

TK20-011

### 【代表機関】

物質・材料研究機構

### 【調査研究代表者(氏名)】

坂牛 健

### 【TIA 内連携機関：連携機関代表者】

東京大学、杉野 修

### 【TIA 外連携機関】

なし

### 【報告書作成者】

坂牛 健

### 【報告書作成年月日】

2021年03月26日

### 【連携推進(具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等)】

共同研究の準備のための議論・討論をオンライン会議で行い、今後の連携の深化や研究の方向性について確認した。また、第12回TIAシンポジウム(<https://www.tia-nano.jp/page/page000495.html>)に参加することで、当該研究を幅広く社会に広報すると共に、研究代表者の自己紹介動画を掲載することで、具体的にどのようなモチベーションとコンセプトで研究を日々推進しているかを説明した。また、国際連携を一層強化するため、英国化学会誌 PCCP に当該分野に関わる招待総説を執筆した。執筆者として、最先端の電極過程研究に関わるトップ研究者を世界中から集めた。これらの、活動により当該研究の連携推進に成功したと言える。

### 【調査研究内容(実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果)】

主な研究成果として、実験と理論の協働を深化するための方法論について検討した。具体的には、現在までどの程度、電極反応を理論として描写できていて、それがどの程度実験で観測されているのかを包括的に調査した。成果の一部として、以下の論文を発表した。

[1] K Sakaushi, Physical Chemistry Chemical Physics, 22, 11219–11243 (2020).

[2] K Sakaushi, T Kumeda, S Hammes-Schiffer, MM Melander, O Sugino, Physical Chemistry Chemical Physics 22, 19401–19442 (2020).

[3] K Sakaushi, K Uosaki, Current Opinion in Electrochemistry 26, 100661 (2021).

### 【今後の活動予定】

今年度の活動により、最先端計算科学による量子電極過程の理解がどの程度のレベルにあるのかを把握した。こうした今年度の成果を基盤に、当該グループで研究を遂行するための競争的資金に積極的に応募していく予定である。

以上