

## エネルギー部会 幹事会資料 燃料電池・電池分科会 活動報告

### 1. 燃料電池・電池分科会幹事 (敬称略)

代表：伊原 学\* (東工大)

副代表：大友順一郎\* (東大)

幹事：山口猛夫\* (東工大)、中川紳好\* (群馬大)、古山通久\* (九大)、福長 博 (信州大)、  
津久井茂樹 (大阪府大)、竹中 壮 (九州大)、菊地隆司 (東大)

\*エネルギー部会幹事

### 2. 活動報告および計画

#### 2011年度秋季大会 シンポジウム

##### 「次世代エネルギーデバイスおよびその関連技術の展開－材料・プロセス・システム－」

エネルギー部会、材料・界面部会、反応工学部会の部会横断型シンポジウム

##### 【概要】

燃料電池、太陽電池、二次電池等の次世代エネルギーデバイス技術およびその関連技術は、低炭素社会の実現に向けたキーテクノロジーです。近未来社会におけるそれら新技術の幅広い浸透のためには、個別の材料開発やプロセス技術開発だけでなく、その周辺技術の開発、およびシステムの観点からの評価も重要です。本シンポジウムでは、燃料電池、太陽電池、二次電池等のエネルギーデバイスおよびその関連技術（電池材料・電極触媒合成、デバイスプロセス、システム評価等）に関する講演を広く募集し、材料、プロセス、システムの研究に基づく幅広い視点から化学工学ならではの討論を行います。また、本シンポジウムは、エネルギー部会、材料界面部会、反応工学部会の共催による部会横断型シンポジウムです。多くの方々のご参加をお待ちしております。

オーガナイザー：

- 菊地隆司(東大)、竹中 壮 (九大)、津久井茂樹 (大阪府大)、田巻孝敬 (東工大)、  
阪本浩規 (大阪ガス)、大友順一郎(東大)

##### 共催行事：

第6回稲盛フロンティア研究講演会

主催：九州大学 稲盛フロンティア研究センター

共催：化学工学会エネルギー部会燃料電池・電池分科会、触媒学会コンピュータの利用研究会、  
カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所

##### 【概要】

蓄電池・燃料電池や関連する触媒などエネルギー技術において界面現象の解明は計算科学の活用は有効である。界面現象の界面に向けて、計算科学の基礎・基盤技術から応用まで講演をいただき、討論を行った。

##### ●講演プログラム

13:00～ 挨拶

13:10～ 長嶋雲兵 (産業技術総合研究所)

- ゼオライト鑄型炭素 (ZTC) の水素吸着点に関する経路積分分子動力学
- 13:50～ 川島雪生 (九州大学)  
徐冷法による分子クラスターの安定構造探索
- 14:20～ 塩田淑仁 (九州大学)  
高原子価金属オキソ種の電子状態とその反応性に関する量子化学計算
- 14:50～ 休憩
- 15:20～ 稲富雄一 (九州大学)  
並列FMOプログラムのOpenFMOの高性能化について
- 15:50～ 五十木秀一 (日本SGI株式会社)  
核力にVan der Waalsポテンシャルを付加したときの陽子 - 重陽子 3 核子散乱の検証  
～核力は湯川型ポテンシャルのみで記述すべきか?～
- 16:20～ 石元孝佳 (九州大学)  
固体高分子形燃料電池の高耐久化・高性能化に向けた計算化学的アプローチ
- 16:50～ 小倉鉄平 (九州大学)  
固体酸化物形燃料電池の高耐久化・高性能化に向けた計算化学的アプローチ
- 17:30～ 懇親会