



演 題：第一原理計算に基づく電気化学反応解析

講 師：陣内 亮典 主席研究員
株式会社 豊田中央研究所



日 時：2025 年 12 月 5 日（金）14:30~16:00

場 所：理学部 2 号館 2－402 室

主 催：北海道大学大学院総合化学院

共 催：北海道大学化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）
北海道大学大学院工学研究院フロンティア化学教育研究センター

要 旨：本講演では第一原理計算に基づく電気化学反応の計算法の進展について説明する。燃料電池や二次電池の重要性が増すと共に、電気化学反応の中心となる物性、電極電位と電気二重層、の影響を近似的に取り込む電子状態計算法が発展した。そして現在、機械学習ポテンシャルの援用により、計算技術は近似を取り除いた恣意性のない真の第一原理計算へと向かいつつある。本講演では、電気二重層の連続体溶媒和モデルの発展と限界、これを超えようとする近年の進展について説明する。

連絡先：理学研究院化学部門 前田 理（内線：8118）

