



一般社団法人
日本固体イオニクス学会

The Solid State Ionics Society of Japan

SSI-J Letter No.100

CONTENTS

目次	1
第1回計算イオニクス研究会(第78回固体イオニクス研究会)報告	2
第47回固体イオニクス討論会開催のご案内	3
第79回固体イオニクス研究会開催のご案内	4
今年度より年会費請求時期が1月になりました	5
お知らせ	5
本年度年会費・連絡事項	7



第1回計算イオニクス研究会(第78回固体イオニクス研究会)報告

世話人 ファインセラミックスセンター 桑原 彰秀

コンピュータの性能の飛躍的な向上と解析プログラムの進歩により、計算機シミュレーションは材料科学における重要な解析手法としての地位を確立したと言えます。量子力学の理論に基づいて材料の持つ物性情報を得る第一原理計算に加えて、最近では機械学習や人工知能(AI)を積極的に活用するマテリアルズ・インフォマティクスへの期待が高まりつつあります。こうした背景を踏まえ、固体イオニクス学会では「計算イオニクス研究会」を立ち上げることになりました。

2021年7月28日(水)に第1回計算イオニクス研究会(第78回固体イオニクス研究会)が開催されました。新型コロナウイルスの国内での感染状況を鑑みて、今回はWeb会議システムを使って開催し、発表は招待講演のみにしました。Web上での開催ということで、参加者がどの程度確保できるか当初は不安もありましたが、結果として57名の参加者が集まり、研究会は盛況に終えることができました。当会において、計算機シミュレーションに対する関心の高さを実感した次第です(Web形式にすることで長距離の移動が不要になって参加しやすくなったことも要因の一つかもしれません)。なお、参加者の内訳ですが、大学等および研究機関から47名(うち学生22名)、企業から10名となっていました。

招待講演は、東京大学 渡邊聡 教授、名古屋工業大学 中山将伸 教授、筑波大学 大谷実 教授、東京工業大学 熊谷悠 准教授、大阪大学 藤井進 助教の5名の先生方に行って頂きました。渡邊先生からは「機械学習ポテンシャルによる固体電解質および固体電解質-電極界面でのイオン挙動の解析」という題目で、第一原理計算の計算結果を教師データとして構築した機械学習ポテンシャル(ニューラルネットワークポテンシャル)による固体中のイオンの拡散挙動や欠陥形成挙動を解析した結果について紹介を頂きました。中山先生からは「Liイオン導電性 NASICON 型材料の固固界面構造と材料計算」という題目でハイスループット第一原理計算による固体電解質の電位窓計算、第一原理計算から構築した機械学習ポテンシャルを用いた界面モデルでの大規模分子動力学シミュレーションについての紹介がありました。大谷先生からは「第一原理計算と溶液理論の融合による電気化学界面シミュレーション:電池材料や腐食への応用」という題目で、電極電位を考慮した電気化学界面シミュレーション技術、その応用としてリチウムイオン2次電池におけるLiイオンの脱溶媒和反応を介した黒鉛層間への充電反応、腐食電位計算の実例を紹介して頂きました。熊谷先生からは「非金属物質中の点欠陥を対象とした系統的第一原理計算」という題目で、機能性酸化物の点欠陥形成エネルギーに関する計算材料データベースの構築へ向けたソフトウェア開発に関する現況を紹介して頂きました。大阪大学の藤井先生からは「ソフトなアニオンを有する新規逆ペロブスカイト化合物の結晶構造とアルカリイオン伝導」という題目で、通常のペロブスカイト型構造と陽イオン陰イオンの配置が入れ替わった特徴的な結晶構造を持つ逆ペロブスカイト化合物である立方晶 M_3XCh ($M = Li, Na$; $X = H, F$; $Ch = O, S, Se, Te$) における Li^+/Na^+ のイオン伝導挙動とフォノン物性の関係について発表を行って頂きました。

いずれの先生方からも大変興味深い内容の研究紹介を行って頂き、参加者からの質疑応答も活発に行われ、盛会のうちに研究会を終えることができました。本研究会の開催にご協力いただいた学会事務局、招待講演を引き受けて頂いた先生方をはじめとして全ての参加者の皆様にこの場を借りて感謝申し上げます。第2回計算イオニクス研究会の開催も企画いたしますので、引き続きよろしくお願いいたします。次回の研究会を開催する頃には、新型コロナウイルスの状況が改善され、対面での開催ができることを祈念しています。

第47回固体イオニクス討論会開催のご案内

日時： 2021 年 12 月 8 日（水）～10 日（金）

場所： あわぎんホール（徳島県郷土文化会館）（徳島市藍場町 2 丁目 14 番地）および
ライブ配信のハイブリッド開催（ZOOM・VIMEO を使用）

※オンライン開催に変更する場合があります。

主催： 日本固体イオニクス学会

協賛： 応用物理学会、高分子学会、電気化学会、日本金属学会、日本鉄鋼協会、日本物理学会

討論方法

- ・ 討論会としての趣旨を鑑みて、講演は ZOOM を用いたライブ配信とします。
- ・ ライブ配信の動画を記録し、会期終了後 1 週間オンデマンド配信します。
（1 週間後に動画は削除されます）
- ・ 配信画面ではコメント投稿による発表者との質疑・討論が可能です。
（おおよその討論時間帯を設定する予定）
- ・ 参加者ごとに ID・パスワードを発行し、ライブ配信、オンデマンド配信、コメント機能へのアクセスを可能とします。

討論主題

1. 新規なイオン導電性固体の創製と利用技術
2. 固体内イオン移動機構の解明
3. 電池・燃料電池材料の基礎

スケジュール(各締切日)

講演申込：2021 年 10 月 22 日(金) ※10 月 15 日から延長後、締め切りました。

講演要旨：2021 年 11 月 15 日(月)

参加申込（予約登録）：2021 年 11 月 15 日(月)

参加登録費（予定）（カッコ内は予約登録締切後）

主催学会個人会員：5,000 円（6,000 円）

主催学会法人会員：5 名まで無料、6 名から個人会員と同じ

協賛学会会員： 7,000 円（8,000 円）

非会員(学生除く)：9,000 円（10,000 円）

学生： 3,000 円（4,000 円）

問合せ先

第 47 回固体イオニクス討論会事務局

〒770-8506 徳島市南常三島町 2-1 徳島大学理工学部

代表世話人 中村 浩一

TEL/FAX: 088-656-7577

E-mail: 47symposium@gmail.com

Web: <https://www.ssi-j.org/symp/ssij47/index.html>

第79回固体イオニクス研究会開催のご案内

研究会テーマ:「プロトン伝導体の研究最前線」—機械学習や第一原理計算を活用した材料開発の新たな潮流と燃料電池開発の現状、課題および今後の方向性—

主催: 日本固体イオニクス学会

協賛: 日本化学会, 電気学会, 日本金属学会, 日本セラミックス協会, 日本物理学会

日時: 2021 年 11 月 17 日 (水) 13:00 - 18:00

場所: オンライン開催

研究会プログラム (発表 25 分, 議論 25 分)

13:00 - 13:05 開会挨拶 日本固体イオニクス学会・会長 石原 達己

13:05 - 13:55 東京工業大学理学院化学系 八島 正知
本質的な酸素欠損層と八面体配列によるプロトン伝導体のデザイン

13:55 - 14:05 休憩

14:05 - 14:55 九州大学稲盛フロンティア研究センター 兵頭 潤次
実験データと機械学習を活用した新規プロトン伝導性酸化物の加速的探索

14:55 - 15:05 休憩

15:05 - 15:55 山形大学学術研究院 (理学部担当) 笠松 秀輔
高並列第一原理熱力学計算を用いた高速プロトン伝導の根源的理解

15:55 - 16:05 休憩

16:05 - 16:55 北海道大学工学研究院 青木 芳尚
プロトンセラミックス燃料電池におけるカソード界面分極の低減

16:55 - 17:05 休憩

17:05 - 17:55 パナソニック 山内 孝祐
プロトン伝導性燃料電池開発の現状, 課題および今後の方向性—企業の視点から—

17:55 - 18:00 閉会挨拶

参加費

本会会員 (個人会員 1,500 円, 法人会員 5 名まで無料, 6 名から個人会員と同じ),
協賛学会会員 2,000 円, 一般 3,000 円, 学生 500 円

参加申込および参加費振込締切

2021 年 11 月 4 日 (木)

申込方法

2021 年 11 月 4 日 (木) までにホームページ上からお申込の上, 参加費をお振込みください。

振込先: 【みずほ銀行】 本郷支店 普通 2 9 0 8 2 2 2

一般社団法人日本固体イオニクス学会 フリガナ:「シャ)ニホンコタイイオニクスガッカイ」

問合せ先: 九州大学 兵頭 潤次

Email: proton@ifrc.kyushu-u.ac.jp, TEL: 092-802-6967

世話人: 九州大学エネルギー研究教育機構 山崎 仁丈

今年度より年会費請求時期が1月に変わりました

今年度（2021(令和3)年10月1日～2022(令和4)年9月30日）の年会費は、2022年1月に請求させていただきますのでよろしくお願いいたします。

2021(令和3)年7月7日付で請求しました年会費は、前年度（2020(令和2)年10月1日～2021(令和3)年9月30日）分となります。

お知らせ

イベントの開催状況については随時更新しておりますので、お申込みやご参加の前に本会ホームページのご確認をよろしくお願いいたします。

〈2021年〉

（協賛） 第62回電池討論会

日 時：2021(令和3)年11月30日(火)～12月2日(木)

主 催：電気化学会 電池技術委員会

場 所：(ハイブリッド開催)

パシフィコ横浜・ノース（横浜市西区みなとみらい1-1-1）

詳 細：<https://sec.tobutoptours.co.jp/2021/denchi62/>

（協賛） 第30回 SOFC 研究発表会

日 時：2021(令和3)年12月16日(木)～17日(金)

主 催：SOFC 研究会

場 所：オンライン開催

〈2022年〉

（主催） 第48回固体イオニクス討論会

日 時：2022(令和4)年12月（予定）

場 所：宮城県（予定）

世話人：東北大学 小俣 孝久 氏

（主催） 第23回超イオン導電体物性研究会（第80回固体イオニクス研究会）

日 時：2022(令和4)年2月27日(日)～28日(月)

場 所：大阪府（対面開催予定）

世話人：摂南大学 神嶋 修 氏

（主催） 第16回固体イオニクスセミナー

日 時：夏季（予定）

場 所：東北地方

世話人：東北大学 中村 崇司 氏

(共催) 17th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-2020)

日 時：2022(令和4)年9月(予定)

主 催：Asian Society for Solid State Ionics

場 所：名古屋工業大学 NITech Hall (愛知県名古屋市昭和区御器所町)

詳 細：<https://acssi2020.chem.mie-u.ac.jp/index.html>

(協賛) JST さきがけ「電子やイオン等の能動的制御と反応」領域・オンライン公開シンポジウム

日 時：2022(令和4)年1月8日(土)

主 催：科学技術振興機構 (JST)

場 所：オンライン開催

(関連国際会議) 23rd International Conference on Solid State Ionics (SSI-23)

日 時：2022(令和4)年7月17日(日)～22日(金)

主 催：International Society for Solid State Ionics

場 所：Boston Park Plaza Hotel, Boston, MA, USA

アブストラクト提出締切：2021(令和3)年12月15日(水)

参加登録開始：2022(令和4)年4月下旬

詳 細：<https://www.mrs.org/ssi-23>

本年度年会費・連絡事項

2021（令和3）年10月1日より本学会の第10事業年度に入りました。前年度（2020（令和2）年10月1日～2021（令和3）年9月30日）の年会費を2021（令和3）年7月7日付で請求させていただいております。まだお振込みでない方は、7月にお送りしたニュースレターNo.99に同封された請求書に記載されている振込先に納入をお願いいたします（名誉会員の方を除きます）。

御所属や連絡先等の変更がございましたら、学会事務局まで至急ご連絡下さいますようお願い申し上げます。



原稿募集

SSI-J Letter
年2～4回発行予定

プロジェクト紹介、成果紹介、公募など何でもお寄せ下さい。また、学会のメーリングリストやWebでの紹介も受付けておりますので、事務局までご連絡下さい。



◆事務局連絡先◆ [mail ssij@ssi-j.org](mailto:ssij@ssi-j.org)

一般社団法人 日本固体イオニクス学会事務局

〒980-8577

宮城県仙台市青葉区片平2-1-1

東北大学多元物質科学研究所 雨澤研究室内

Tel 022-217-5341

Fax 022-217-5343

Mail ssij@ssi-j.org

Web <https://www.ssi-j.org>