

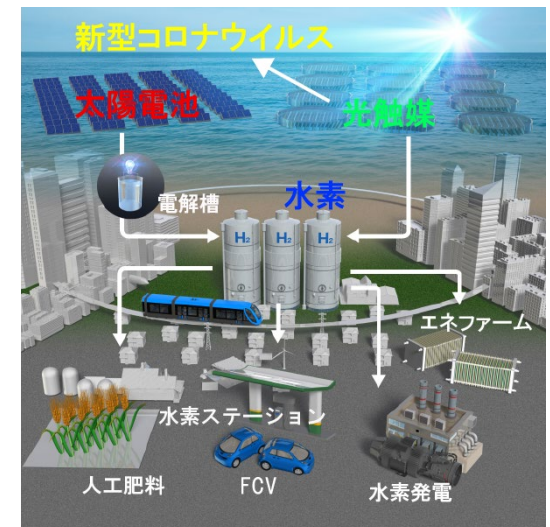
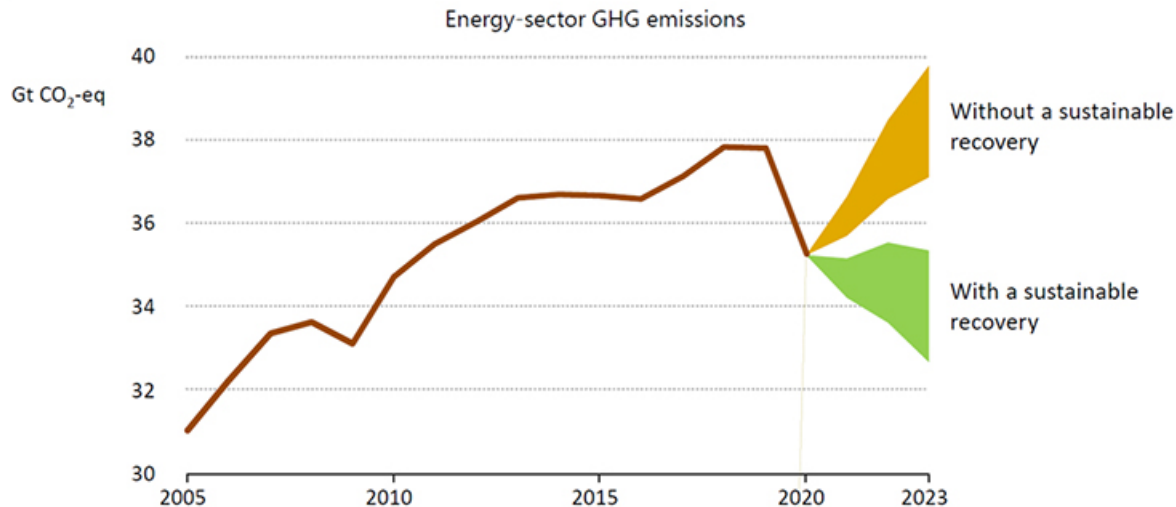
令和3年度
「富岳」成果創出加速プログラム申請

「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現

理化学研究所
計算科学研究センター
中嶋 隆人

光エネルギー変換によるグリーン・リカバリー社会の実現

- **アフター・ウィズコロナの社会**で、いかに経済や生活を立て直していくかが大きな課題。
- 経済復興策として**グリーン・リカバリー**が大きな関心。
持続可能な社会を実現しつつ、同時にコロナ禍から復興する。
- 国際エネルギー機関Sustainable Recovery報告書：太陽光などの再生可能エネルギーや低炭素電力の促進などに2021-2023年に年1兆ドルを投じると世界の経済成長を1.1%ポイント上昇(3年で日本のGDP一国分相当)させ、その後の長期的な経済成長も期待。



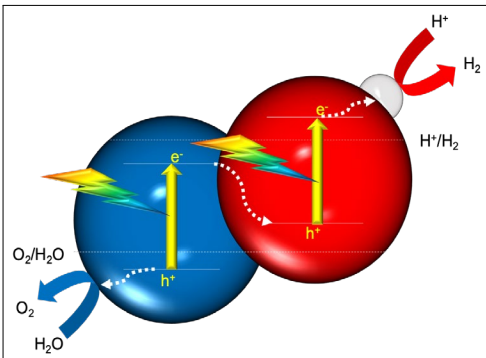
本課題

- 富岳を活用した**ハイパフォーマンス材料シミュレーション・インフォマティクス**を中核とした**DX技術**により、世界を牽引する実験グループ・企業組合と連携した革新的な**光エネルギー変換材料**を社会実装。
- 創出する大規模データに基づき高効率な**水素製造光触媒**と**高効率な太陽電池**を産業レベルで実現し、グリーン・リカバリーへ貢献。
- ウイルス不活性化により**感染症を克服する光触媒**を実装することでウィズコロナの安全・安心な社会の実現にも貢献。

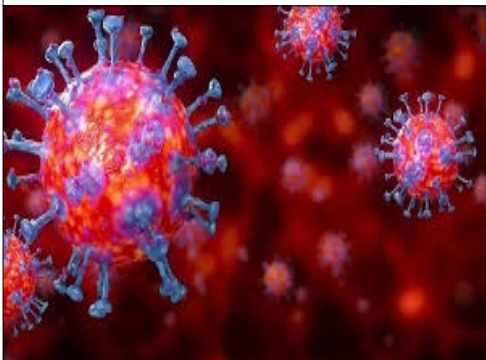
本プロジェクトの研究項目と実施機関

研究項目

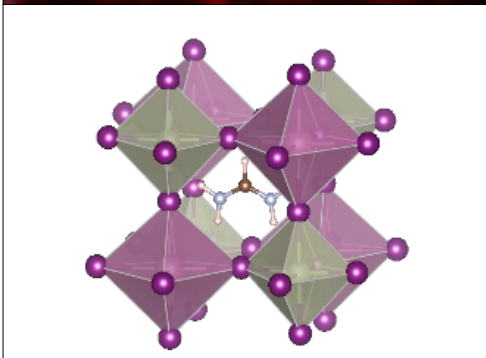
実施機関



**革新的な
水素製造光触媒
の実現**



**光触媒による
感染症対策**



**高効率非鉛化
ペロブスカイト
太陽電池
の新材料設計**

理研R-CCS

中嶋隆人

(松岡貴英, 川嶋英佑,
佐藤賢斗, 松岡聡,
今村俊幸, 黒田明義, 研究員A)

神戸大

天能精一郎

(土持崇嗣, 許恩華, 研究員B,
西口和孝, Andreas Grüneis)

奈良先端大

藤井幹也

(研究員C)

京都大

山下晃一

(金子正憲, 村岡梓)

ENEOS

入口広紀

富岳の新しい利用ーサイバー・フィジカルループ

カーボンニュートラル・SDGsの解決
水素エネルギー, 感染症対策, 電気エネルギー

他機関連携・他機関データ活用
による材料・デバイス開発

本課題による
材料・デバイス開発

オープン・クローズド戦略
オープンデータを理研等の国研と連携して公開

サイバー
データ

サイバー技術

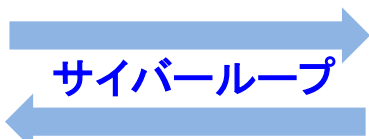
フィジカル技術

リアル
データ

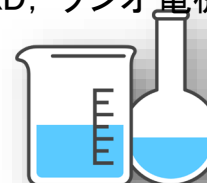
材料計算(富岳)
大規模材料計算データ
GELLAN, NTChem,
Quantum Espresso, VASP

AI(富岳)
計算と実験の
マルチモーダル学習, 転移学習
ベース最適化で広域・外挿探索

合成・評価
材料合成・デバイス試作
ARPCHEM(三菱ケミカル, 三井化学,
TOTO, INPEX帝石), ダイセルミライズ,
フジコー, CKD, ウシオ電機, 東芝



材料提案



サイバー・フィジカルループ (マルチ物性, リファインメント)

実施体制

エネルギー変換PJコンソーシアム

実施機関
理研R-CCS

協力機関
神戸大
奈良先端大
京都大
ENEOS

他の国プロ

連携機関
堂免、久富(信州大)
早瀬(電通大)
横野(九工大)
立川(神戸大)



水素製造
ARPChem
三菱ケミカル
三井化学
TOTO
INPEX帝石

太陽電池
フジコー
CKD
ウシオ電機
東芝

新型コロナ感染症
ダイセルミライズ

水素製造光触媒

ARPChemと連携。連携企業4社のフィジカルグループと連携したサイバー・フィジカルグループで革新的光触媒材料を実装。

感染対策光触媒

九工大・ダイセルミライズと連携。ウイルスの相互作用を制御した光触媒の量産システムを開発。

非鉛化ペロブスカイト太陽電池

電通大・連携企業4社と連携。非鉛化ペロブスカイト太陽電池の高耐久化、タンデム化技術を確立し、産業競争力を強化。

協力機関としてENEOSが参画。同社のインフォ技術を活用するとともに、開発するDX技術を同社で活用することで社会実装を加速。同社の若手研究者が参画することで企業人材を育成。

光エネルギー変換材料の計算科学分野における女性研究者の村岡准教授(日女大)と連携。

富岳AIとの連携

理研R-CCSの計算機科学メンバー(佐藤, 松岡, 今村, 黒田)が参画し、富岳を活用したインフォマティクス研究を加速。

光エネルギー変換の分野で世界トップレベルの実験研究者・関連国プロ、および実用化を目指す産業界との強力な産学連携体制を構築

年次計画

研究実施項目	令和3年度	令和4年度	令和5年度	令和6年度	令和7年度
革新的な水素製造光触媒の実現 <ul style="list-style-type: none">・ドーピングと酸素欠陥に対するAI構築・$\text{SrTiO}_3:\text{Al}$, TaN_3, $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$のドーピングシミュレーション・反応機構・表面計算による材料評価・サイバーフィジカルループによる新規水分解光触媒の提案	●	●	●		
光触媒による感染症対策 <ul style="list-style-type: none">・ホスト半導体でのドーパント拡散機構の解明・過酸化水素生成反応機構の解明・光触媒の露出表面での分解機構の解明・サイバーフィジカルループによるウイルス不活性光触媒提案	●	●	●	●	●
高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計 <ul style="list-style-type: none">・二重ペロブスカイトのハイスループット設計・高耐久ペロブスカイトのためのAI構築・サイバーフィジカルループによる高耐久非鉛PSCの提案・非鉛化ペロブスカイトの各種機構解明・連携機関との連携による実証	●	●	●	●	●

革新的な水素製造光触媒の実現

社会的意義

水素を大量に製造する安価な光触媒を使った水素社会の実現

世界的成果

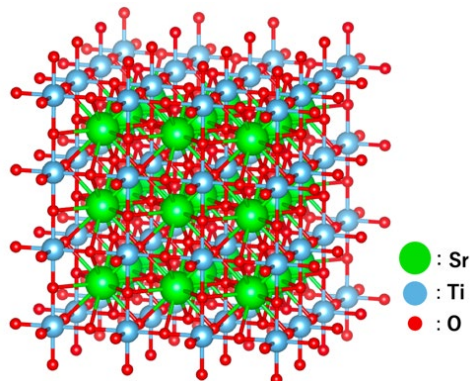
日本発の技術を使った世界最高水準の高効率な水素発生光触媒の実現

「富岳」
利用

大規模電子状態計算とAIを用いた
広範・多条件のドーピングと表面・界面のシミュレーション

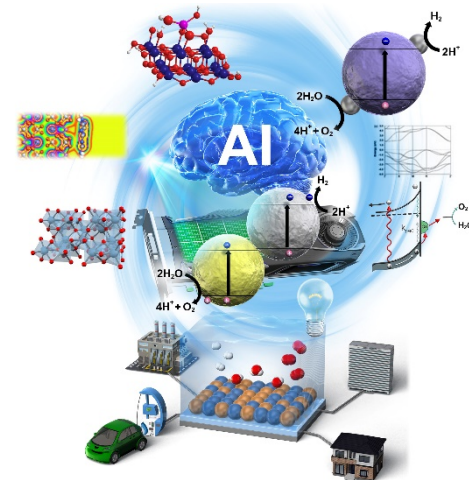


人工光合成化学プロセス技術研究協会（略称：ARPChem）と連携し、候補材料である $\text{SrTiO}_3:\text{Al}$ 、 Ta_3N_5 、 $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_5\text{S}_2$ を用いた高効率・可視光応答型光触媒の開発



HPC + AI + ARPChem

サイバー・フィジカルループによる最適なドーピング設計技術の開発（令和3-5年度）と実証（令和6-7年度）



- KPI:**
- ①「富岳」を用いた光触媒材料の網羅的な計算を実行し、AIにより最適光学応答と電荷分離特性を持つ半導体、助触媒、メディエータの組合せ探索を実現。
 - ②この結果を用いて、内部量子収率100%かつ可視光応答する光触媒材料探索を実現し、令和7年度に実験グループにてソーラー水素製造のモジュールを製造。
 - ③変換効率10%を超える高効率な光触媒の条件を連携先の企業技術組合に提案し、令和6年度までに合成・測定による実証実験を実施。

光触媒による感染症対策

社会的意義

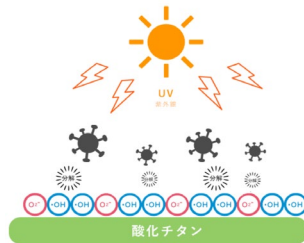
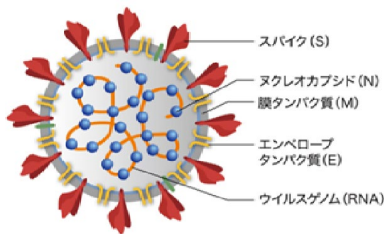
光触媒でウイルス感染症に強い安全安心な社会実現

世界的成果

広範なウイルスの不活性化光触媒の実現

「富岳」
利用

大規模量子化学計算によるウイルス不活性機構の解明
AIによるウイルス不活性化光触媒の材料設計
AIによる選択的過酸化水素生成光触媒の材料設計



連携参加者・横野（九工大）は光触媒酸化チタン露出表面を制御することにより、室内光による新型コロナウイルスの不活性化を世界に先駆けて実証

- ・ 不活性化効率が酸化チタンの露出結晶面に依存する連携参加者（横野）と共同でエンベロープを構成する脂質二重膜をモデルとした**一万原子系の量子化学計算**によるウイルス不活性機構の解明（令和3-6年度）
- ・ 光触媒効果向上に向けた**金属イオン担持光触媒**連携参加者（横野），連携機関（ダイセルミライズ）と連携し，**大規模量子化学計算**（令和3-5年度）と**AI**（令和6-7年度）による材料設計と社会実装
- ・ 光触媒による**過酸化水素の選択的生成**連携参加者（横野，立川）と共同で**大規模量子化学計算**（令和3-6年度）と**AI**（令和6-7年度）による材料設計

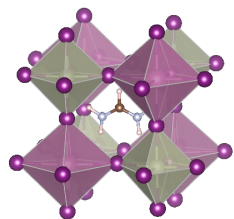
KPI: ①感染ウイルス不活性化のメカニズム解明. ②連携実験研究者と協力して、ウイルス感染症に対してより汎用性の高い光触媒創成・実証実験を行う. ③課題終了時まで、広範囲なウイルス感染症対策光触媒を社会に発信.

高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計

社会的意義 フレキシブルで設置場所を選ばない太陽光発電システムの実用化による豊かで持続可能な社会の実現

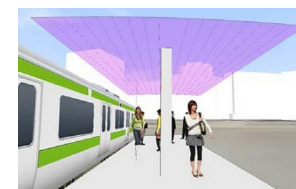
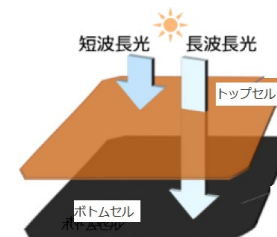
世界的成果 シリコン系を凌駕する非鉛化ペロブスカイト太陽電池の実用化

「富岳」利用 一千万種のハイスループットシミュレーションは「富岳」で初めて可能材料の粒界構造，耐劣化に関する大規模量子化学シミュレーション



連携参加者・早瀬（電通大）は錫ペロブスカイトのドーピングにより，非鉛化ペロブスカイト太陽電池として世界最高レベルの変換効率達成

- ・ 一千万種の二重ペロブスカイト材料のハイスループット・シミュレーションによる**太陽電池材料DBの構築**（令和3-7年度）
- ・ 高効率・高耐久化に向けた**AIによる最適化と連携参加者・早瀬**による実証（令和5-7年度）
- ・ **大規模量子化学計算とAI**による耐劣化に向けた粒界の構造制御と**連携機関**（フジコー，CKD，ウシオ電機）による実装（令和3-7年度）
- ・ **大規模量子化学計算とAI**によるタンデム・セル界面における欠陥構造制御と**連携機関**（東芝）によるフレキシブル・軽量の太陽電池の実装（令和5-7年度）

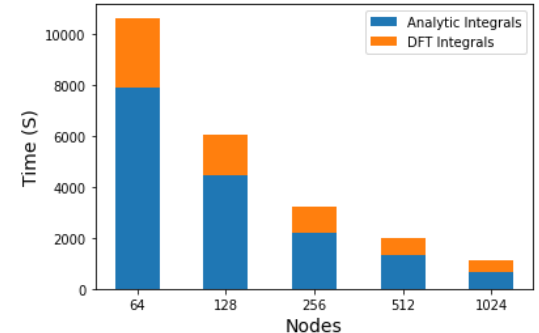


KPI: ①一千万種程度の非鉛化ペロブスカイトに対しハイスループット・シミュレーションで大規模な材料データベースを構築する。②マテリアルズ・スクリーニングで高効率・安定な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の材料探索を実現する。③実験グループと連携してシリコン太陽電池をボトムセルとした変換効率30%以上の高効率な非鉛ペロブスカイト・タンデム太陽電池を作製する。

準備状況

NTChemの開発

富岳において京と比較して**70倍以上の実行性能**を達成
富岳で高い並列性能を発揮できるようにチューニング済



富岳におけるNTChemの並列性能

GELLANの開発

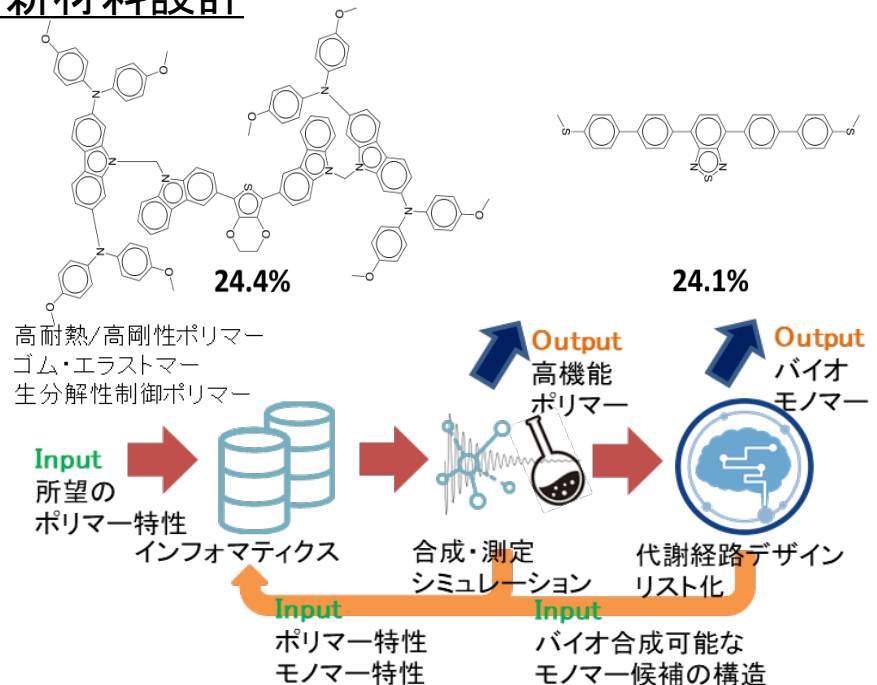
高精度なキャリア特性の取扱が可能なGF2-F12法計算部において、**京で60%以上の実効性能**を達成

京による非鉛化ペロブスカイト太陽電池・光触媒の新材料探索

京での第一原理DFT計算の結果を使った材料探索により**非鉛化ペロブスカイト太陽電池と可視光応答型水分解ペロブスカイト光触媒の新材料探索**を実現

ペロブスカイト太陽電池の正孔輸送材料の新材料設計

変換効率の予測モデルをNTChemによるシミュレーションデータ等から機械学習で構築し、変換効率が高くなるように正孔輸送材料の中心骨格と配位子の組合せを決定することで**新規正孔輸送材料を提案**



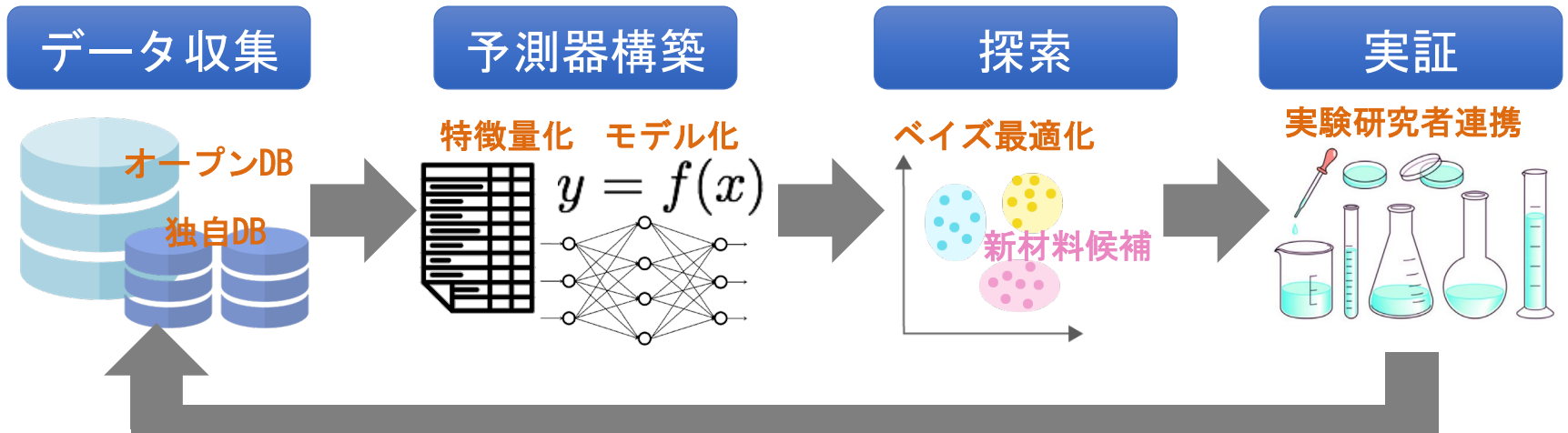
ポリマー・インフォマティクスによる高耐熱バイオポリマーの提案

シミュレーション-インフォ-実験を三位一体とした**ポリマー設計技術**を開発し活用することで、**バイオ合成可能な高耐熱ポリマーを実証**することに成功

準備状況

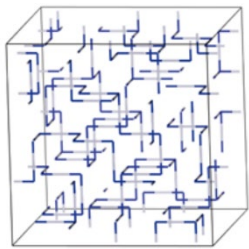
藤井Gではサイバー，サイバー・フィジカルループにより新材料創出を実現

主要成果：国内新材料特許出願2件，国外新材料特許出願2件（共に公開前）



関連成果：理論計算および実験のデータからAIを学習・活用

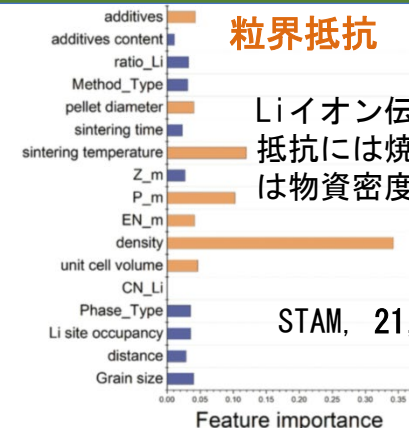
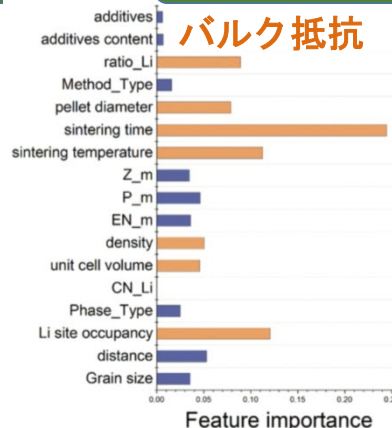
DFTとAIの融合で巨大系の物性推定



スーパーセルにおけるペロブスカイト酸窒化物のアニオンオーダーを小セルのデータから予測

J. of Ene. Chem., **36**, 7-14 (2019)

実験データからAIにより重要特徴量抽出

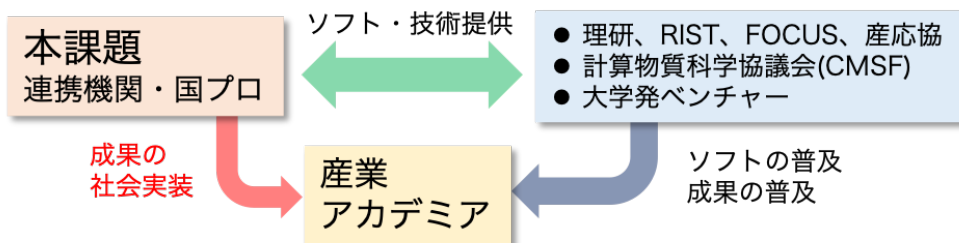


Liイオン伝導において、バルク抵抗には焼結時間、粒界抵抗には物資密度が重要

STAM, **21**, 712-725 (2020)

成果普及・アウトリーチとデータマネジメント

広報普及・アウトリーチ



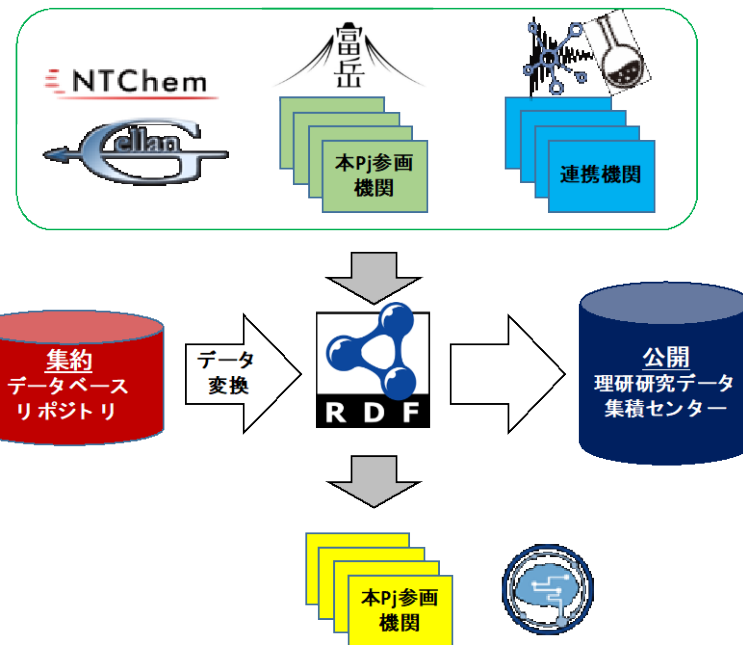
成果報告を含む会議計画

- 年1回(3月)成果報告会を兼ねた公開シンポジウムを開催
- 年1回(5月)計画検討会を開催
- 水素製造・感染症・太陽電池の3つのWGで3ヶ月に1回程度の情報交換
- 産業界と緊密に連携できる研究者育成のため、参画する若手主体の勉強会を開催

アウトリーチ活動

- FOCUSを通じた広報普及・アウトリーチ活動を予定
- 理研R-CCSとRISTを通じたソフトウェア講習会やマテリアルズ・インフォマティクス講習会の開催

データマネジメント



- プロジェクトで創出されるデータは、統一した記述方式でデータベース化
- データベースは理研・研究データ集積センター構想やNIMS・DPFC 材料データリポジトリの動向を踏まえ検討
- 公開可能データ、一定期間非公開が必要なデータ、その他に分類した取り扱い