#### サイエンティフィック・システム研究会 HPCフォーラム2016

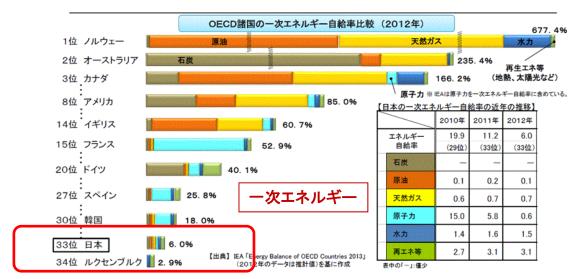




# ポスト「京」重点課題5 「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、 利用の新規基盤技術の開発」について

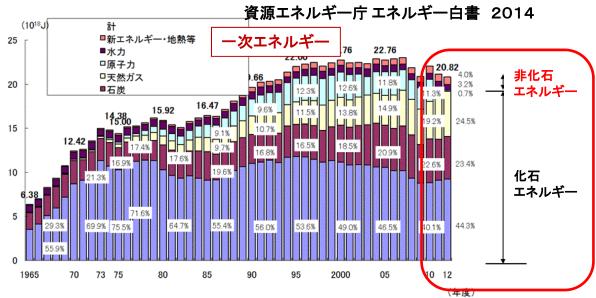
2016年8月26日 岡崎 進 自然科学研究機構 分子科学研究所 名古屋大学大学院工学研究科

# エネルギー問題は我が国喫緊の課題



低いエネルギー自給率と 高い化石エネルギー依存率

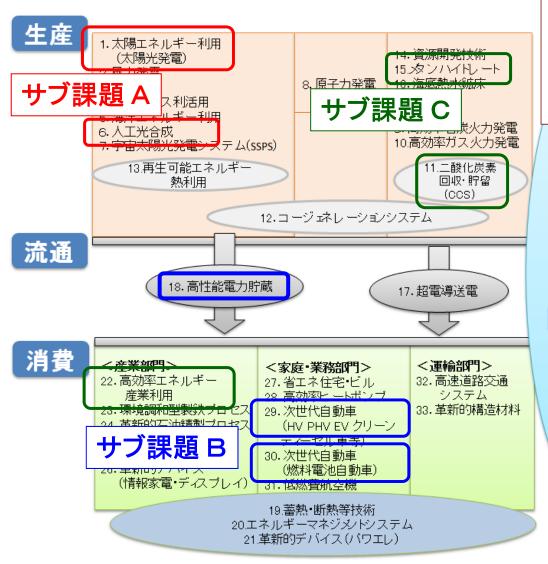
2012年 エネルギー自給率 6.0% (ー次エネルギー)



2012年 再生可能エネルギー 7.2% (一次エネルギー)

資源エネルギー庁エネルギー白書 2014

# 我が国のエネルギー主要技術課題



経済産業省 総合資源エネルギー調査会 基本政策分科会 (平成26年11月 第15回会合資料) 原子・分子のミクロな振る舞いが技術の中心的な役割を担っているため、 課題の解決には計算科学の支援が 不可欠となっているエネルギー技術

34.水素製造

35.水素輸送•貯蔵

36.水素利用

サブ課題 A 太陽光エネルギー新エネルギー源の創出・確保

- 太陽電池
- 人工光合成

サブ課題 B 電気エネルギー エネルギーの変換・貯蔵

- 二次電池
- 燃料電池

サブ課題 C 化学エネルギー エネルギー・資源の有効利用

- ・メタンハイドレート
- CO2
- 触媒

新規エネルギー資源と エネルギーの有効利用<sup>3</sup>

# 全体目標

#### 社会的意義

ポスト「京」を駆使することにより、太陽光エネルギー、電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い、実験研究者、産業界と連携して、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

### 科学的意義

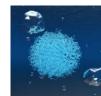
同時に、これまで計算機資源の不足により制限されていた孤立系 や部分系における単一現象の科学から脱却し、現実系である界面、 不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新し い学術的視点を確立し、科学的なブレークスルーを達成する。

サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保 - 太陽光エネルギー 太陽電池、人工光合成

サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵 - 電気エネルギー 燃料電池、二次電池

サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー メタンハイドレート、CO2、高効率触媒





# サブ課題A 新エネルギー源の創出·確保 ― 太陽光エネルギー

太陽電池と人工光合成は重要な低炭素の国産エネルギー源

- 技術的課題
  - 高性能太陽電池

低コスト化、高変換効率、長寿命

- 高効率水素発生光触媒、高効率CO₂固定触媒
- 課題解決のために計算に求められていること (本課題研究において実施)
  - 太陽電池のエネルギー変換効率要因の特定 短絡電流密度、開放電圧、曲線因子の計算、界面・モルフォロジー制御
  - 理論限界を超える、太陽電池の新機構提案 アップコンバージョン、ホットキャリア等
  - 金属錯体や半導体光触媒での水素発生機構解明と設計
  - CO₂固定法の指針開発(サブ課題Cとの連携)
- 開発アプリケーション
  - 太陽電池シミュレータ

主としてNTChemをベース

1万原子系の大規模TDDFT、QM/MM分子動力学、 非断熱遷移動力学

■ 人工光合成シミュレータ

主としてGELLANをベース

1020 の電子配置からなる励起状態計算 構造最適化、物性計算

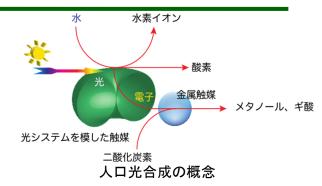
多核金属錯体

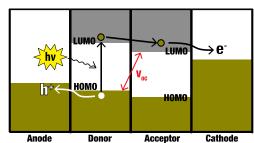
半導体光触媒

変換効率への寄与を構成要

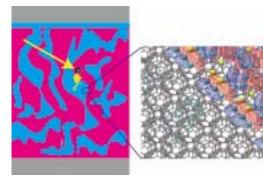
素ごとに定量的に理解した上

で、全体の変換効率を評価





変換効率 $(\eta)$  = 短絡電流密度 $(J_{sc})$ x 開放電圧(Voc) x 曲線因子(ff) / 入射光強度



高効率太陽電池のための界面制御 太陽電池の全系シミュレーションイメージ

## サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵

## ー 電気エネルギー

■ 技術的課題

- ・Liイオン電池

- 高エネルギー密度、高出力密度、高速充放電
- 次世代、次々世代雷池の構築

電池が電気自動車開発の成否の鍵 現在、激烈な国際開発競争

- 課題解決のために計算科学に求められていること (本課題研究において実施) 各電池共通の課題
  - 電極・電極被膜・電解質膜・電解液界面挙動の解明
    - 界面における電極反応、電極被膜生成、イオン輸送
  - 各電池部材の最適材料設計・探索
    - 高電圧・高エネルギー密度につながる正極・負極
    - 高イオン伝導度、高耐久性をもつ電解液・電解質・電解質膜
    - 白金代替触媒、短絡を防ぐセパレータ材
- 開発アプリケーション

電池共通基盤技術

各要素、電

池プロセスの

ミクロな理解

全電池ミュレータ

電極反応、電極被膜、電極界面 主としてstat-CPMDをベース

5,000原子系の電位一定の第一原理分子動力学計算

電解質膜、セパレータ、電極被膜、電解液と界面 主としてMODYLASをベース

数億原子系の古典分子動力学計算

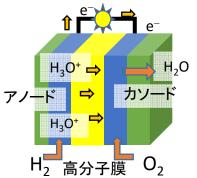
電池性能の マクロな理解

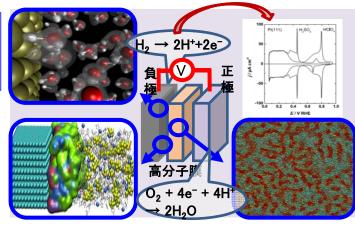
電流電圧曲線

電極界面の反応抵抗、輸送抵抗、電気二重層 information transfer による全電池過程の統合的理解



固体高分子形燃料電池





# サブ課題C エネルギー・資源の有効利用 - 化学エネルギー

メタンやCO₂等の分離・回収、貯蔵、変換、資源化 → ハイドレート利用、触媒開発、CO₂吸収材開発

#### ■技術的課題

- ハイドレートからのメタンの効率的採取技術
- 元素戦略に立脚した高性能触媒の開発
- CO₂の低コスト分離・回収、廃棄、資源化
- ■課題解決のために計算に求められていること (本課題研究において実施)
  - メゾスコピック系での相転移と安定・不安定性の解明
    - ・ハイドレートの分解の律速過程の解明とその解消法の提案、
    - ・メタン/CO,の高効率置換(CO,の廃棄)の可能性の検証
  - 触媒反応経路の全面探索技術の確立
    - · CO<sub>2</sub>還元を実現する高機能触媒提案
  - 低コストCO2回収を実現するMOFの設計

### ■開発アプリケーション

■ 多相共存MD シミュレータ

主としてMODYLASをベース 固相、液相、気相と界面を含む1,000万分子、1 $\mu$ sの 分子動力学計算

■ 触媒反応経路探索シミュレータ

NTChem+GRRM

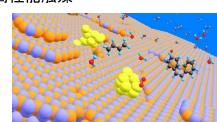
1.000原子の電子状態計算に基づく系統的経路探索

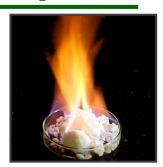
■ 凝縮相内化学反応シミュレータ

DC-DFTB-K

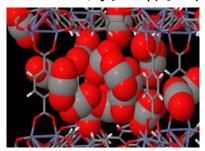
10万分子、サブナノ秒の全電子分子動力学計算

#### 高性能触媒

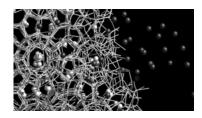




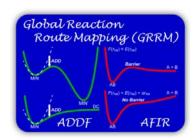
メタンハイドレートの燃焼



MOFへのCO2の吸収



メタンハイドレートの融解



触媒反応経路の全面探索

# 基盤アプリ設計開発

「京」で実績のあるグループが、その世界最高水準のアプリケーションをベースに開発

#### 成果の利活用産応協等

- 公開する。産業界と密接に連絡を取りながら、完成後の産業界への展開を前提に開発。
- ・エネルギー以外の広範な分野にも大きな波及効果

ソフトウェア名(開発者)・機能	京での性能実績	ポスト「京」計算例
ターゲット NTChem(中嶋) 汎用第一原理電子状態計算ソフト 化学反応計算	・アプリ 9,840原子軌道71,288ノード 実効効率 32% 世界最高レベルの超並列	太陽電池シミュレータ 凝縮相内化学反応シミュレータ 5千~1万原子系の励起状態DFT計算
GELLAN(天能) 階層的量子化学計算ソフト 高精度電子状態計算、 QM/MM分子動力学	5,520原子軌道21,672ノード 実効効率 32% 世界最高水準の 高精度計算	人工光合成シミュレータ 10 <sup>20</sup> 以上の電子配置からなる 超高精度励起状態計算と 構造最適化
MODYLAS (岡崎)汎用分子動力学計算ソフト自由エネルギー計算多相共存系分子動力学	8,000万原子系65,536ノード 実効効率 41% 世界最高クラスの高速計算	電池シミュレータ 多相共存系シミュレータ 1-10億原子系
stat-CPMD(館山) 第一原理分子動力学 反応自由エネルギー計算 固体電子論	2,400原子系 3,840ノード 実効効率 29%	<b>電池シミュレータ</b> 反応スクリーニング 5千規模の原子系多重化学反応

# 実施体制

### 実験、産業と連携したオールジャパンで研究を推進

実験、産業界と強力な連携体制を構築、一方で実施者は厳しく絞り込み(11名)

代表機関:分子科学研究所(岡崎進)

A.新エネルギー源の創出・確保 神戸大(天能(責))、AICS(中嶋)、 東京大(山下)

実施者

B.エネルギーの変換・貯蔵 東京大(杉野(責))、物材機構(館山)、 名古屋大(岡崎、長岡)

明確な責任体制

C.エネルギー・資源の有効利用 岡山大(田中(責))、北大(武次)、 早稲田大(中井)、分子研(奥村)

量子化学、固体電子論、分子動力学の有機的連携

触媒

ARPChem(瀬戸山(三菱化学)) CREST:相界面(花村(東工大))、 分子技術(山本(中部大))

ImPACT (伊藤(東大))

CREST:分子技術(山本(中部大)) JST-ALCA(魚崎(NIMS)) NEDO(太田(横浜国大))

元素戦略:触媒・電池(田中(京大

CREST:元素戦略(玉尾(理研)) CREST:分子技術(山本(中部大) 元素戦略:触媒·電池(田中(京大))

パートナープロジェクト実施者が直接参加・共同研究

実証

基盤ア

設計開発:理研AICS(中嶋)

ポスト「京」開発主体:理研AICS

産業界

[ソニー、パナソニック、IHI、MCHC R&D シナジーセンター、 RITE、旭化成、 旭硝子、豊田中研、 新日鐵住金、東東 エ、富士フィルム、 三菱樹脂、 産応協等] 大型実験施設 [SPring-8]

大型国家プロジェクト [元素戦略、ARPChem、 ImPACT、NEDO、JST-ALCA、JST-CREST、 JSTさきがけ、経産省未 利用熱エネルギー革新 的活用等]

#### 協力者

国内外研究機関

[実験研究者:井上(首都大)、今堀(京大)、中村、堂免、瀬川(東大)、但馬(理研)、石谷(東工大)、阿部(京大)、神谷(大阪市大)、沈(岡山大)、三野(名大)、山田(東大)、高田、久保(物材機構)、今西(三重大)、駒場(東理大)、原田(東大)、太田(横国大)、星永(千葉大)、内田(北大)、田(東大)、清水(北大)、野口(物材機構)、依馬(岡山大)、北川(京大)、中尾(RITE)、古川、鹿又(早大)]

計算機科学 [理研AICS、 東大情基セ、 名大情基セ、 北大情基セ、 神戸大、電通 大、慶大]

重点課題 重点課題① 重点化題⑥ 重点課題⑦ 国内外研究機関 「理論・計算科学者: 大阪相合FC-Cubic、 技術組合FC-Cubic、 京都工芸織総子、、 を大、東、大、大、 電通大、東北大、子母研、 国立交通大(韓国) 成均館大(韓国)

### 全体目標と期待される成果

ポスト「京」



サブ課題A 新エネルギーの創出・確保:太陽電池、人工光合成 サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵:燃料電池、二次電池 サブ課題C エネルギー・資源の有効利用:メタンやCO2の分離・

回収、貯蔵、触媒反応

- ○複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの全系シミュレーションの確立
- 〇実験研究者、産業界と連携、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立
- 〇現実系である界面、不均一性を有する電子、分子の複合現象を統合的に捉え得る新しい学術的視点を確立

