

シミュレーションとインフォマティクスによる太陽電池材料設計・探索

(理研) ○中嶋 隆人

Solar Cell Materials Design and Exploration by Simulation and Informatics (RIKEN) ○Takahito Nakajima

We aim to realize material and molecular designs and exploration of next-generation solar cell materials by integrating materials simulation and informatics using the supercomputer “Fugaku” and HPC and to demonstrate the proposed novel materials in collaboration with industry and experimental groups for social implementation. In my presentation, I will introduce our recent efforts for this goal.

Keywords : Quantum Chemistry Simulation; Materials Informatics; Perovskite Solar Cells; Fugaku

計算機の性能が上がるのに伴って、シミュレーション技術を活用し、合成に先立った分子設計や材料設計が可能になってきている。様々な分子や材料に対して精度の高い量子化学計算に基づき網羅的かつ系統的なハイスループット・シミュレーションを実施することで、大規模な材料データベースを構築し、所望の機能に対する発現原理や動作原理が良くわかっている場合は、それらの原理に基づいて構築したデータベースの中からスクリーニングすることで所望の性質を持つ最適な分子や材料の候補を提案することが今後ますます増えてくるだろう。

一方で、発現原理や動作原理が確立されていない場合は、シミュレーションだけで膨大な分子や材料の中から所望の性質を与え得る化合物を見つけ出すことは困難である。しかしながら、そのような場合でも実験による実測データと量子化学計算や分子動力学計算で得られた膨大なシミュレーションデータに基づいてインフォマティクスを使って分析すれば、未知の化合物の性質を予測することができて、より高性能・高機能な新しい分子や材料を発見することができる。また、所望の性質に関連が高い物性が何かも見つけることができて、そこから設計指針を確立することも可能となる。

われわれは、これらの両方のアプローチに基づき、「富岳」に代表されるスーパーコンピュータを利用した材料シミュレーションとインフォマティクスを活用することで、次世代に向けた太陽電池材料の材料・分子設計と探索を実現し、さらに、産業界や実験グループと連携することで提案した新材料を実証し社会実装につなげることを目標にしている。本講演ではそのためのわれわれのこれまでの取組みを紹介する。