

2014年10月2日



独立行政法人 理化学研究所
国立大学法人 東京大学

“「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会のお知らせ ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合成～

太陽光や天然資源などから電気エネルギーをいかに効率よく創成し、蓄積して利用するかが、社会的に大きな課題となっています。スーパーコンピュータ「京」を活用した HPCI 戦略プログラムを推進する計算物質科学イニシアティブ（代表機関：東京大学物性研究所）では、このエネルギー課題に戦略的に取り組んでいます。「京」により、原子や分子の動きと電子の動きを連携させたいくつかの計算手法を開発し、物質を介した光エネルギーや化学エネルギーと電気エネルギーの変換の実態をコンピュータ上でシミュレーションすることが可能となってきました。これらの計算手法は、各種電池などに用いる新材料開発に革新をもたらします。

今回の勉強会では、これまで「京」で得られた成果に加え、最前線で進めている研究をわかりやすくご紹介します。そして、「京」が私たちの生活に必要なエネルギーの課題にどのように寄与するのかをお示しします。さらに、開発がスタートしたポスト「京」スーパーコンピュータでは、どのようなことが新たに可能になるのかを紹介します。

一般社会に対して「京」やポスト「京」の役割をお伝えいただく際に、お役に立つものと期待しています。

1. 概要

(1) 開催日：2014年10月15日(水)14:00～16:30

(2) 場所：理化学研究所 計算科学研究機構1Fセミナールーム

兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1-26 ※アクセスは3ページをご参照ください。

(3) スケジュール：

- | | |
|-------------|---|
| 13:30 | 受付開始 |
| 14:00-14:10 | 「京」で飛躍する新物質開発とエネルギーの創成
計算物質科学イニシアティブ 統括責任者 東京大学 常行真司 |
| 14:10-14:20 | ビデオ上映「“リチウムイオン電池” ～分子の宇宙から未来の電池へ～」
理化学研究所 計算科学研究機構 広報国際室 |
| 14:20-14:40 | 「リチウムイオン電池」～高性能化と高安全性の両立に向けた取り組み～
物質・材料研究機構 館山佳尚 |
| 14:40-15:00 | 「燃料電池」～白金電極がなぜ電気エネルギーへの変換効率向上に有効なのかの謎を解明～
東京大学 杉野修 |
| 15:00-15:10 | 休憩 |
| 15:10-15:30 | 「太陽電池」～変換効率競争は、シリコン・有機薄膜からペロブスカイト型材料に新展開～
東京大学 山下晃一 |
| 15:30-15:50 | 「光合成」～エネルギーを生み出す化学反応の仕組みを解明へ～
神戸大学 天能精一郎 |
| 15:50-16:00 | ポスト「京」で目指すこと ～エネルギーの未来を拓く～
理化学研究所 計算科学研究機構 機構長 平尾公彦 |
| 16:00-16:30 | 交流会 |

2. ご説明の内容(要旨)

◆「京」で飛躍する新物質開発とエネルギーの創成

「京」により、物質のミクロな動きや変化によるエネルギー変換の実態を計算できるようになってきました。計算機の発展により導かれる計算手法の革新と、グリーンエネルギー社会の実現に向けたプロジェクトの取り組みを紹介します。

◆「リチウムイオン電池」～高性能化と高安全性の両立に向けた取り組み～

電気自動車、飛行機、スマートグリッドなどへの普及に向けて、さらなる高性能化と高安全性の両立が求められるリチウムイオン電池。新しい電解液や電極被膜に関し、「京」で革新した化学反応計算手法を利用して得られた、世界が注目する成果を紹介します。さらに、次世代蓄電池に向けた取り組みや、ポスト「京」で期待される成果を説明します。

◆「燃料電池」～白金電極がなぜ電気エネルギーへの変換効率向上に有効なのかの謎を解明～

燃料電池に用いられている白金電極。この電極上で生じている反応を複数の実験結果やその考察より理論式を導きだし、実態を計算で再現する手法開発に成功しました。この手法による、白金電極で水素エネルギーがどのように電気エネルギーに変換されるのか、なぜ白金が変換効率向上に有効なのかの、謎の解明を紹介します。また、この計算手法を利用した、白金低減、もしくは、白金代替のための電極材料の開発の取り組みを紹介します。

◆「太陽電池」～変換効率競争は、シリコン・有機薄膜からペロブスカイト型材料に新展開～

物質が太陽光を吸収して電気エネルギーへ変換される過程を明らかにする計算手法を開発しました。その手法により、有機薄膜新材料候補の変換効率の予測に成功しています。また、最近、第三の太陽電池として期待されている有機と無機のハイブリット構造のペロブスカイト太陽電池の高効率変換機構の新提案を行い、世界的な注目を集めています。これらの、最近の理論計算の展開を紹介します。

◆「光合成」～エネルギーを生み出す化学反応の仕組みを解明～

「光合成」の反応の中で、光エネルギーから電子エネルギーを介して化学エネルギーへ変換する際に重要な役割を果たすマンガンクラスター。このクラスターのように、多数の原子からなる物質中の電子が光エネルギーを吸収した状態を正確に表現する新しい計算手法を開発しました。この手法により、エネルギーを生み出す化学反応の仕組みをどのように解き明かそうとしているかを紹介いたします。また、人工光合成の実現に向けたポスト「京」への期待も紹介いたします。

◆ポスト「京」で目指すこと～エネルギーの未来を拓く～

計算機によるシミュレーションは自然現象の一部を切り取り、その投影を見ているにすぎません。しかし、測定や観測が不可能な目に見えない空間や時間の場でのシミュレーションは、科学事象の解明と予測に大きな役割を果たします。「京」が果たす役割と、ポスト「京」でとりくむ課題を紹介し、継続的な計算機開発のインパクトを説明します。

3. 参加申し込みなど

(1)参加対象:報道関係者。ただし、本勉強会と関連した研究者や企業の方なども参加可能です。

(2)参加申し込み

下記WEBサイト、もしくは、別紙の申込書にご記入のうえ、FAXで事前登録をお願いします。

“CMSI”で検索 ⇒イベント(<http://www.cms-initiative.jp/ja/events>) ⇒対象イベントをクリック

*締め切り:2014年10月10日(金)17:00

(3)個人情報

ご提供いただいた個人情報を本勉強会の参加者の把握の目的のために使用し、別途参加者の承諾を得ない限り

それ以外の目的には使用いたしません。

(4) 問い合わせ先

(問合せ先) 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 広報国際室 岡田 昭彦(おかだ あきひこ)

TEL:078-940-5625 FAX:078-304-4964 E-mail:aics-koho@riken.jp

東京大学物性研究所 計算物質科学イニシアティブ 事務局 古宇田 光(こうた ひかる)

TEL:04-7136-3279 FAX:04-7136-3441 E-mail:adm-office@cms-initiative.jp

(報道担当) 独立行政法人理化学研究所 広報室 報道担当

TEL:048-467-9272 FAX:048-462-4715 E-mail:ex-press@riken.jp

(5) 理化学研究所計算科学研究機構へのアクセス

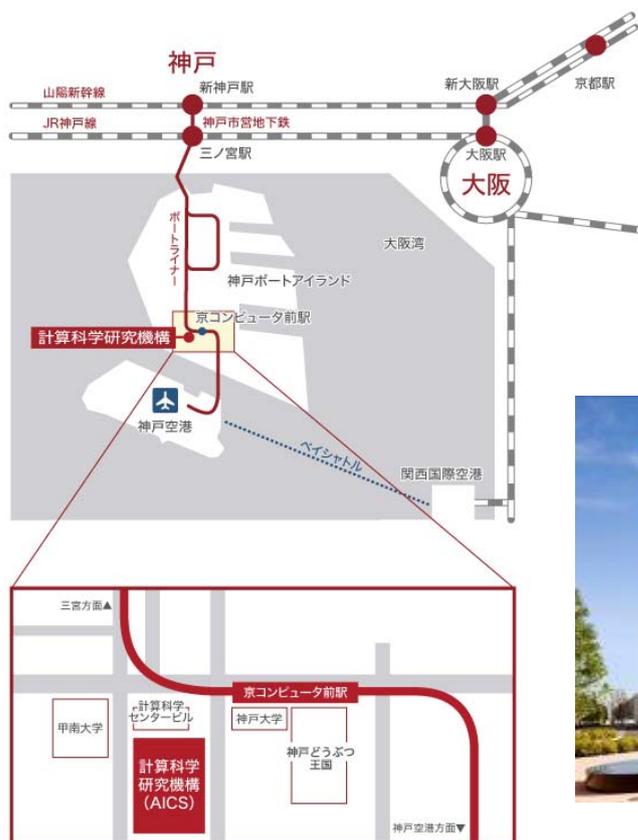
住所: 〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1-26

(新幹線等でお越しの方)

- ・新神戸駅より地下鉄で1駅 三宮下車、三宮より神戸空港行ポートライナーで約15分
京コンピュータ前駅下車徒歩3分

(飛行機でお越しの方)

- ・神戸空港より三宮行ポートライナーで約5分 京コンピュータ前駅下車徒歩3分



計算科学研究機構の外観

<補足説明>

(1) スーパーコンピュータ「京(けい)」

文部科学省が推進する「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」プログラムの中核システムとして、理化学研究所と富士通が共同で開発を行い、2012年9月に共用を開始した計算速度10ペタフロップス級のスーパーコンピュータ。

「京」の持つシミュレーション精度や計算速度の飛躍的な高さを活かした世界最高水準の成果が期待され、HPCI戦略プログラムの他、産官学を問わずあらゆる分野の課題を公募して、「京」で初めて実現できる研究課題を厳選して実施している。

(2) ポスト「京」スーパーコンピュータ

スーパーコンピュータ「京」の後継機。文部科学省が2014年度から開始した「ポスト「京」開発プロジェクト(フラッグシップ2020プロジェクト: FLAGSHIP2020 Project)」の開発主体として、理化学研究所 計算科学研究機構が開発・整備し、2020年度から運用を開始する予定。システムとアプリケーションを協調的に開発(協調設計: Co-design)し、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを目指す。

(3) HPCI戦略プログラム

「京」を中心としたHPCIを最大限に活用することによって、①画期的な成果の創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略的に取り組むべき5つの研究分野(戦略分野)において「研究開発」および「計算科学技術推進体制の構築」を推進する文部科学省のプログラム。

5つの研究分野(戦略分野)

・分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤(戦略機関: 理化学研究所)

・分野2 新物質・エネルギー創成

(戦略機関: 東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所)

・分野3 防災・減災に資する地球変動予測(戦略機関: 海洋研究開発機構)

・分野4 次世代ものづくり

(戦略機関: 東京大学生産技術研究所、宇宙航空研究開発機構、日本原子力研究開発機構)

・分野5 物質と宇宙の起源と構造

(戦略機関: 筑波大学、高エネルギー加速器研究機構、国立天文台)

* 戦略機関とは、各戦略分野における研究開発等を牽引する機関

(4) 計算物質科学イニシアティブ(CMSI; Computational Materials Science Initiative)

HPCI戦略プログラム 分野2の推進母体である研究ネットワーク。物性科学、分子科学、材料科学のコミュニティーを母体とし、大規模計算でサイエンスのブレークスルーを目指す全国の計算科学研究者で構成されている。

物質を分子・原子・電子レベルから総合的に理解することにより、超伝導物質、新機能性分子や電子デバイス、さらには各種電池やメタンハイドレート、構造材料など、新物質やエネルギーの創成に関する研究を戦略的に推進している。一方、将来「京」を活用する候補となる研究を、幅広く支援したり、開発したアプリケーションソフトの利用を促進したりする等、計算物質科学分野の振興活動を実施している。

(別紙)

FAX:078-304-4964

“「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会
参加申込書

会社名: _____

()

氏名: (ふりがな) _____

()

()

()

Email: _____

連絡先(携帯番号): _____

その他連絡事項: _____

締切:2014年10月10日(金)17:00

* 下記 WEB サイトでも受け付けています。

“CMSI”で検索 ⇒イベント(<http://www.cms-initiative.jp/ja/events>) ⇒対象イベントをクリック