

新物質から新エネルギーへ

FROM NEW MATERIALS TO NEW ENERGY

常行真司（東京大学）

Shinji TSUNEYUKI, The University of Tokyo

計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 統括責任者

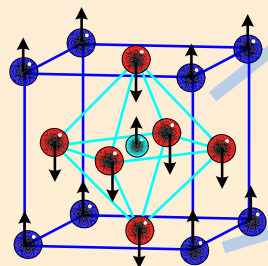
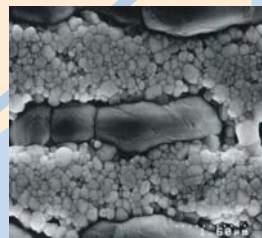
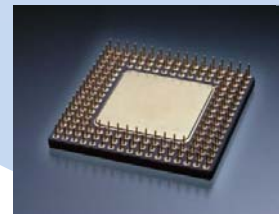
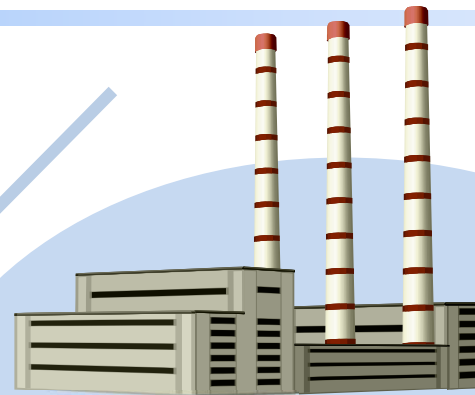


物質科学とエネルギー

原子が集まって、分子や結晶、ガラスなどの**物質**になったとき、初めて現れる特徴や性質がある。

P.W. Andersonの言葉
"More is different."
(数が多いと何かが変わる)

発電所



1nm(ナノメートル)

1 μ m(ミクロン)

1mm(ミリメートル)

1m(メートル)

1km(キロメートル)

1/1000

1/1000

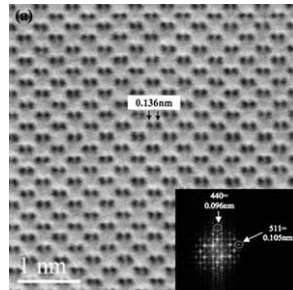
1/1000

1/1000

原子配列を見る計測手法



電子顕微鏡



日本電子(株) : JEM-ARM200F



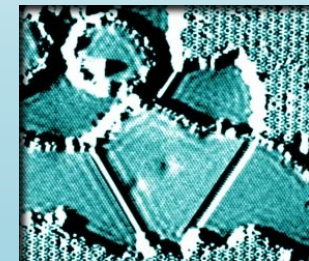
SPring-8/SACLA



大強度陽子加速器施設(J-PARC)



走査型プローブ顕微鏡

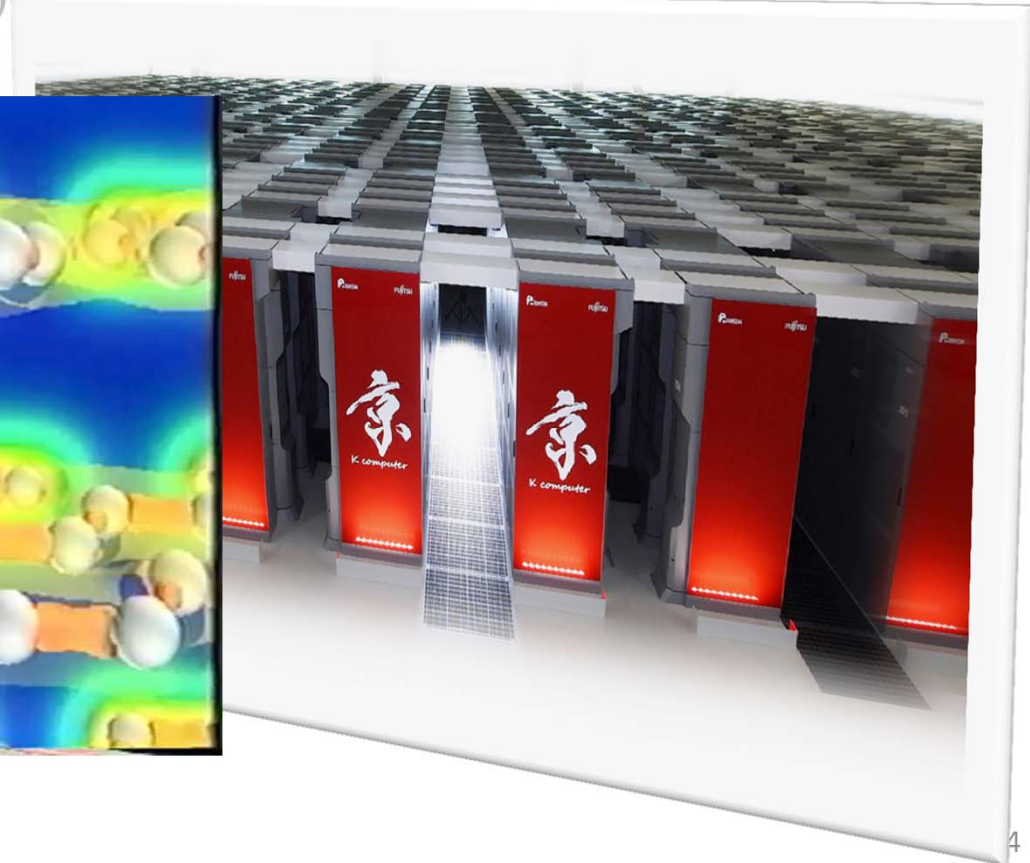
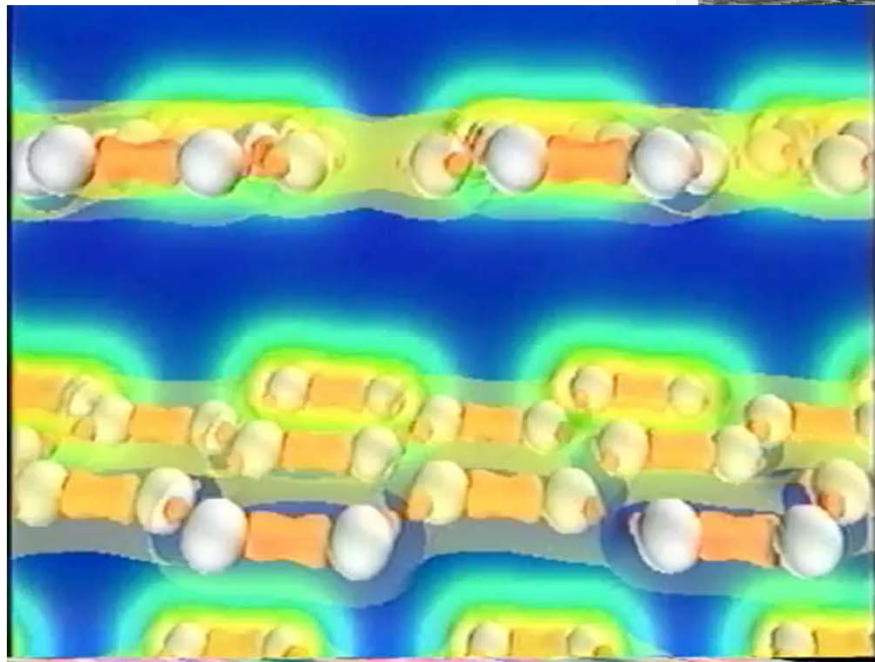


(株)ユニソク: USM1400

原子配列を見るもう一つの手段

物理の**基本原理**に基づく計算機シミュレーション

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\mathbf{r}) + V_{xc}[\rho(\mathbf{r})] \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$



「計算物質科学イニシアティブ (CMSI)」

CMSIは「京」とともに生まれた
計算物質科学の全国ネットワーク組織
「物性科学」 + 「分子科学」 + 「材料科学」

<http://cms-initiative.jp>



創る

- 発電機(磁石)
- 燃料電池
- 太陽電池
- 熱電池



運ぶ

- 変圧器
- 送電線
- 熱輸送



エネルギー問題を解決する
物質・材料の科学

蓄える

- 蓄電池(二次電池)
- 蓄熱
- 水素貯蔵



大切に使う

- 電子デバイス
- モーター(磁石)
- 触媒, 酵素



新しい半導体デバイスによる省エネ効果

半導体を1/2省電力化⇒3,750億円分省エネに

- ◆国内5%の約500億kWh（2010年）、7500億円分はIT機器が消費
- ◆次世代半導体で省エネ化を促進（原理的には1/10の省エネ化可能）
⇒消費電力1/2の改善を想定すると3,750億円の削減可能

従来型トランジスタ



トランジスタサイズが20nmよりも小さくなると、電流が回路から漏れる

次世代ナノワイヤ型トランジスタ

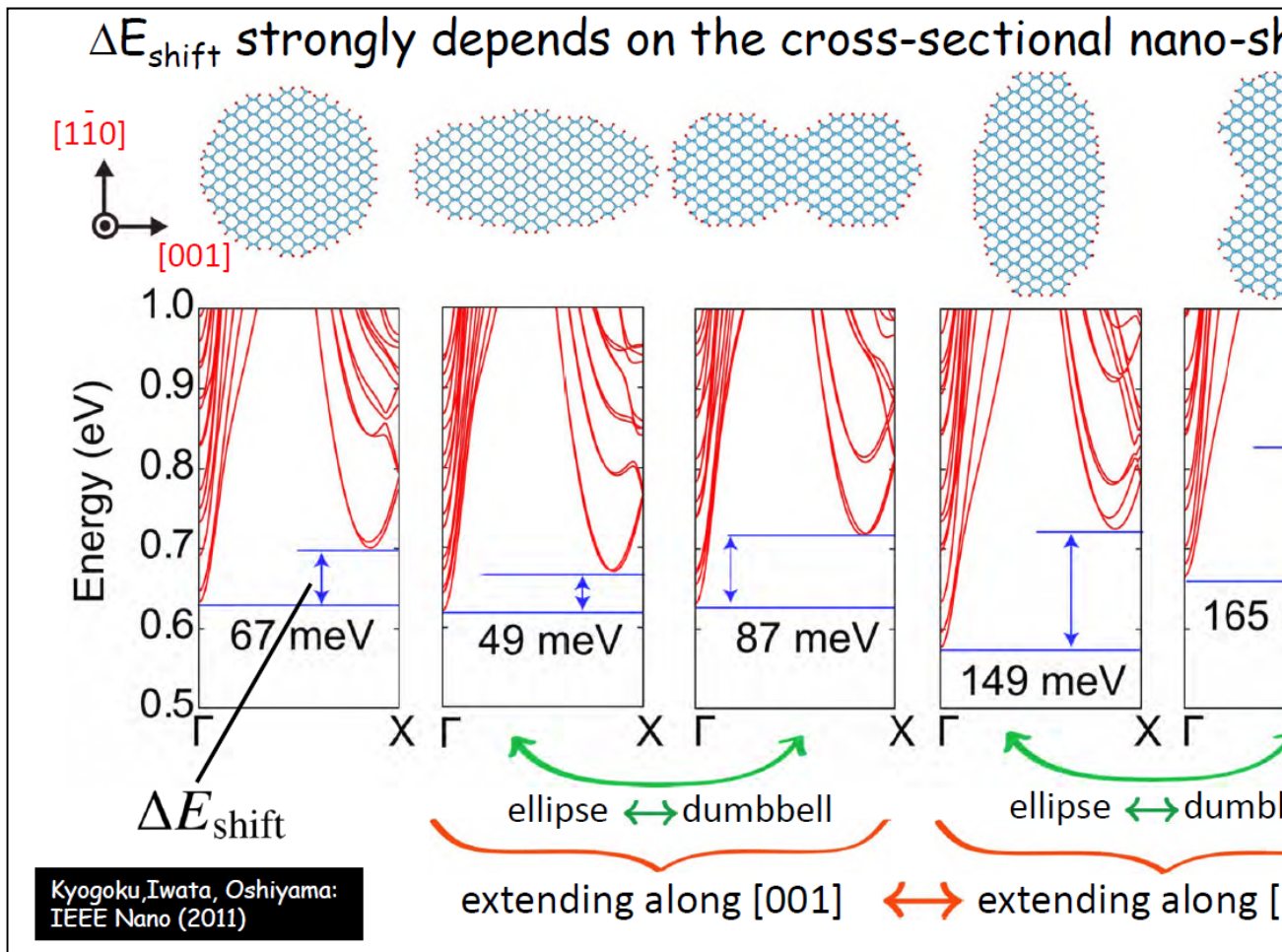


トランジスタの周囲にゲートを設けると、電流がもれにくく消費電力が下がる(1/3以下)

Siナノワイヤーの断面形状効果

世界初となる数万原子系の精密な電子状態計算により、デバイス特性を予測

押山G(東大)



「京」を用いた研究成果「シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算」を、ハイ・パフォーマンス・コンピューティング(高性能計算技術)に関する国際会議SC11で発表し、ゴードン・ベル賞で最高性能賞を受賞。



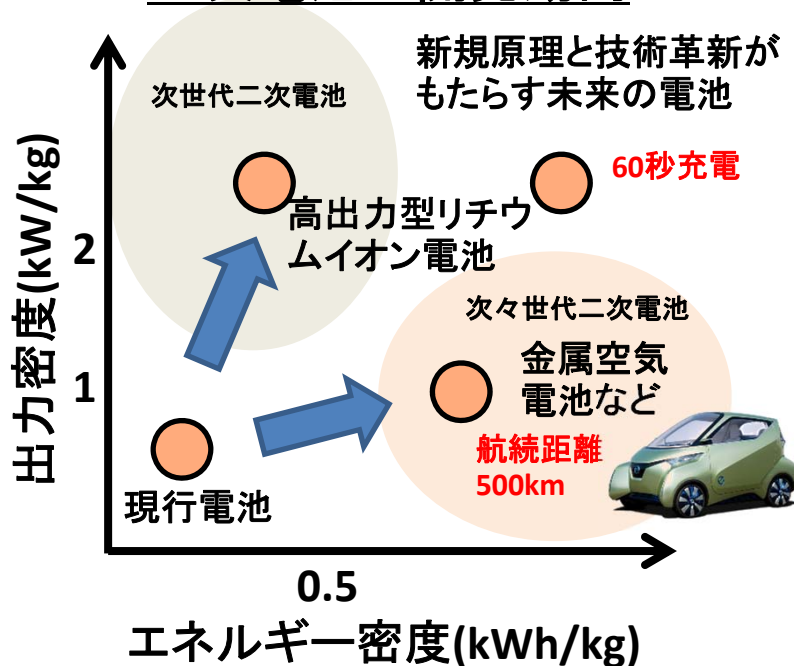
京コンピュータによる初期の研究成果例

新しい電池材料による創エネ・蓄エネの効果

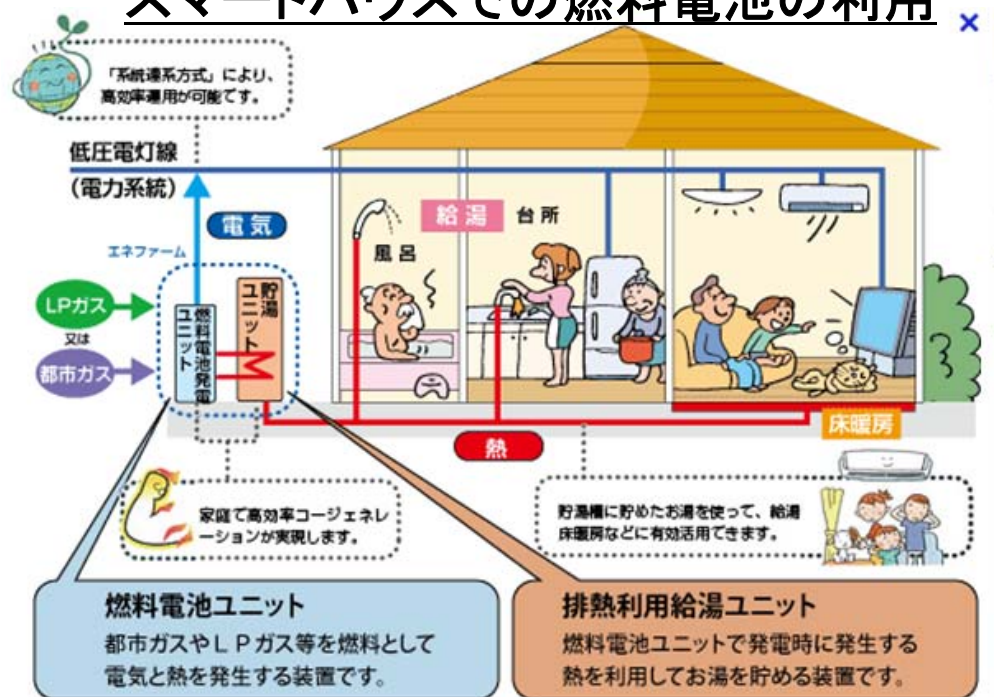
低コストで安定な電池 ⇒ 安定した電力供給

- ◆燃料電池市場 700億円 (世界 2011年) ⇒ 5兆円 (2025年) 予測 [富士経済]
- ◆大型2次電池市場: 1.2兆円 (2012年) ⇒ 4兆円 (2020年) 予測 [富士経済]
- ◆急速に需要が高まる電池市場で、性能の鍵となる電極材料、電解液の開発に貢献することで、製品の差異化が可能となる

二次電池の開発動向

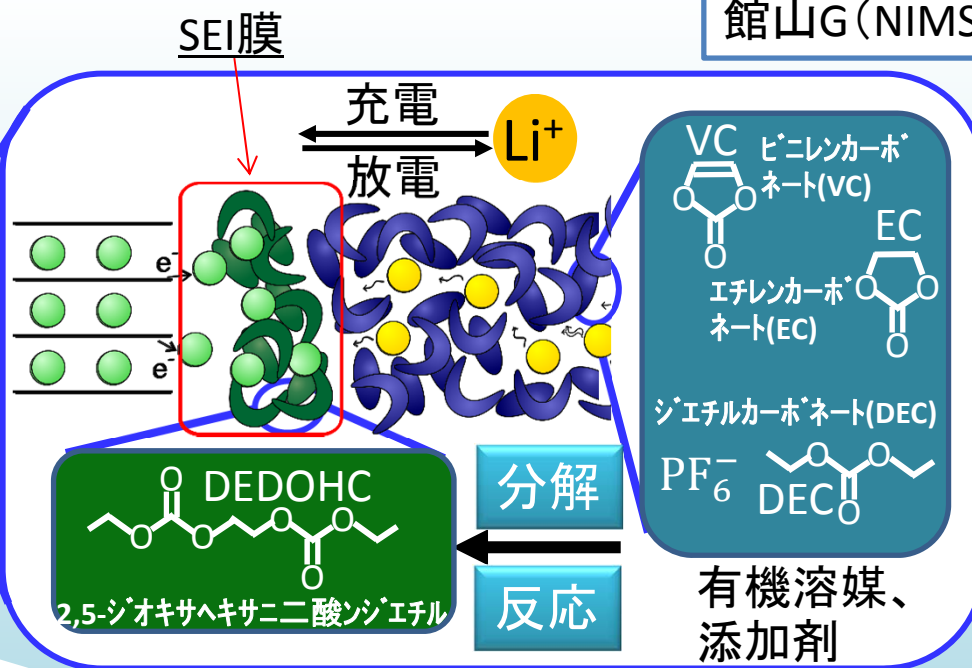
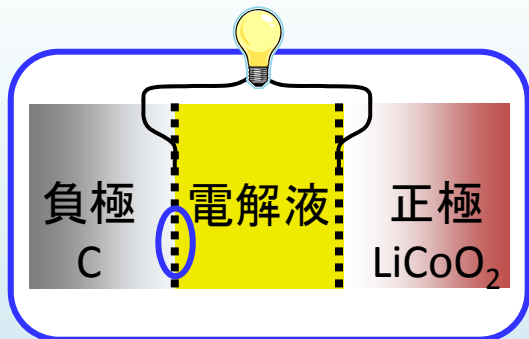


スマートハウスでの燃料電池の利用



電極・電解液界面の化学反応

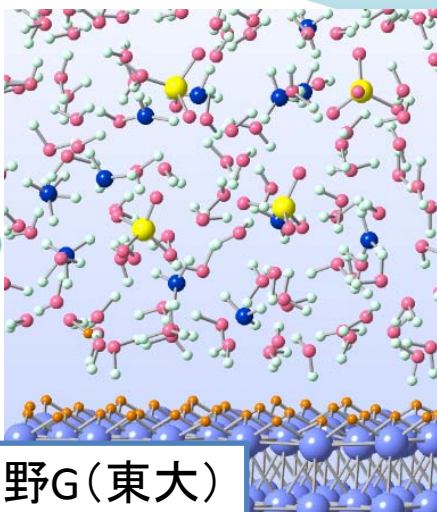
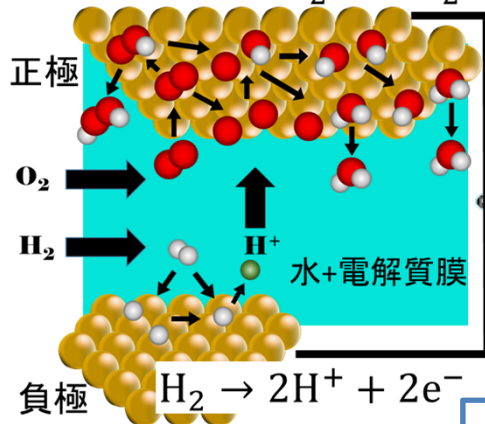
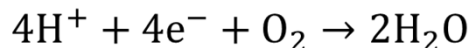
リチウムイオン電池



館山G (NIMS)

燃料電池

固体高分子形燃料電池 (PEFC)



杉野G (東大)

【現状】モデル化した理想界面で電極反応を計算し、**電極材料や電解質の電池性能への影響を定性的に評価。**

【将来】複雑な反応を現実の電極構造のもとで定量的に評価し、**最適な電極材料や電解質の組合せを探索。**

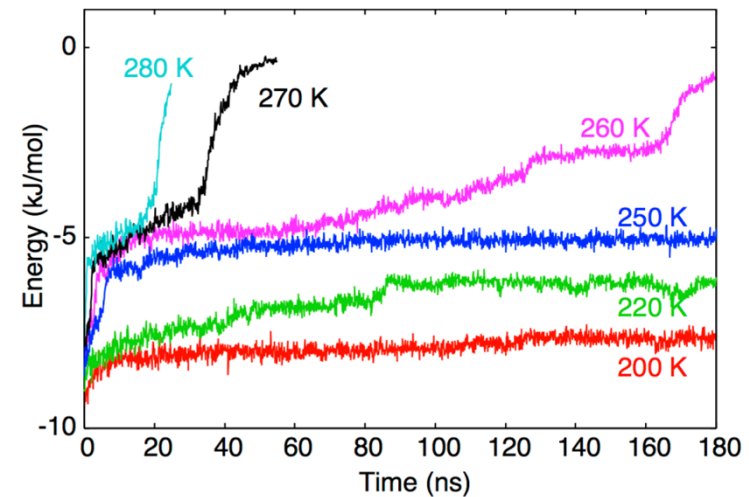
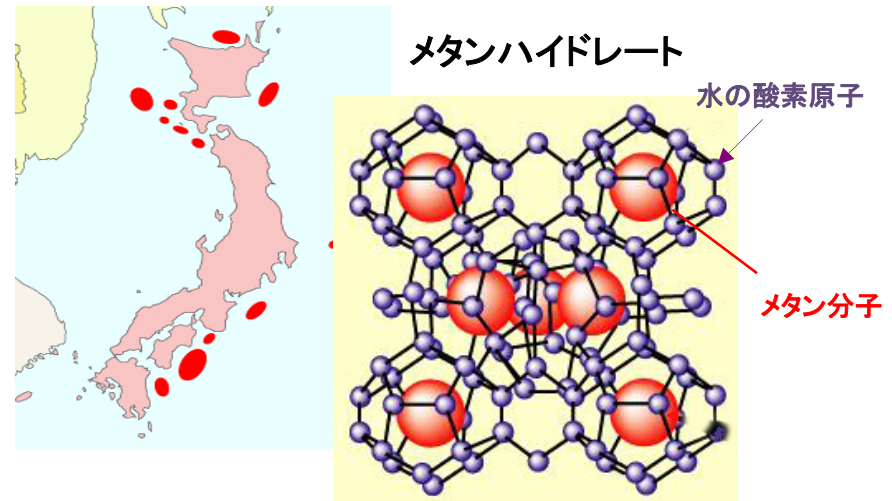
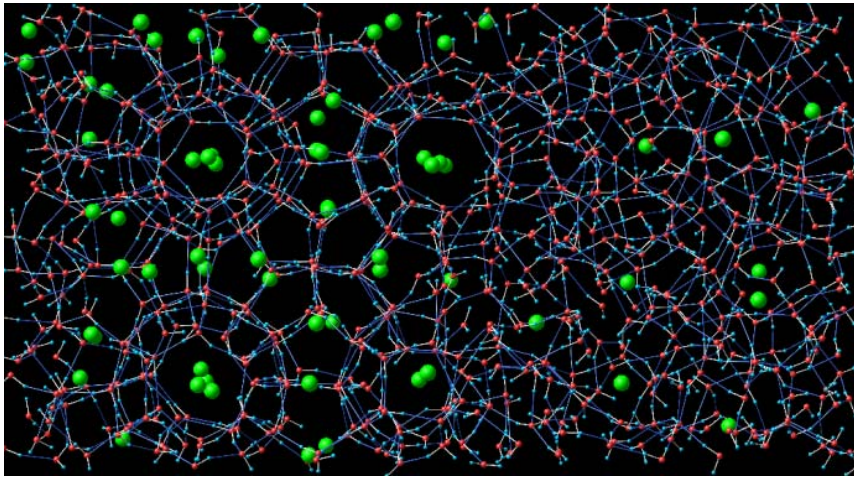
メタンハイドレートの融解機構

メタンハイドレートは日本近海に豊富に存在

CO₂の放出量は石油の70%以下

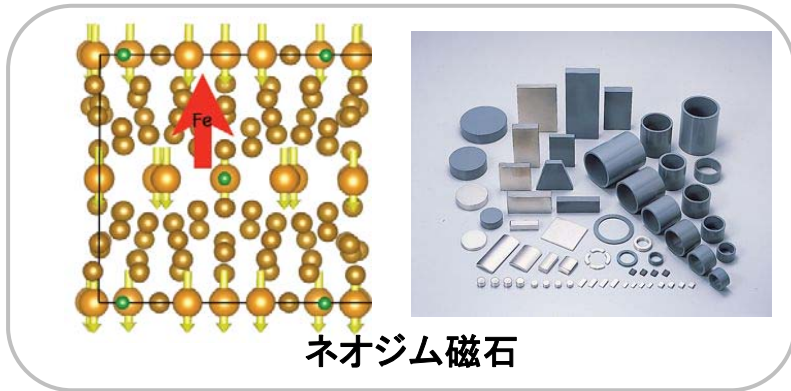
海底での減圧法を主とする採取が計画されており、**効率的なメタン採取法が必要**

田中G(岡山大)

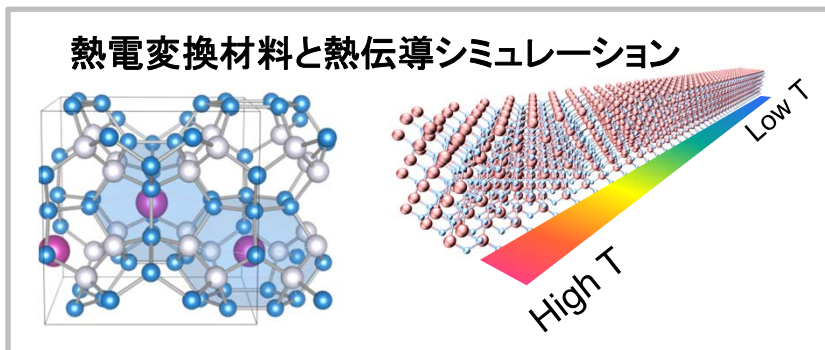
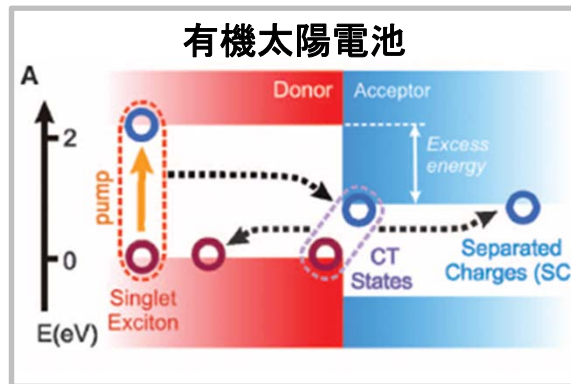
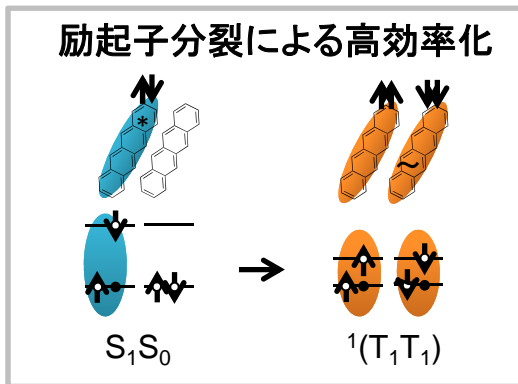


ハイドレート融解の大規模シミュレーションにより、気泡の効果と温度による融解機構の違いを発見。

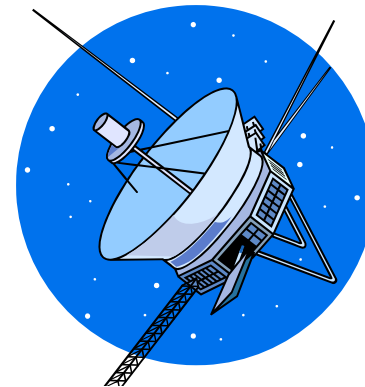
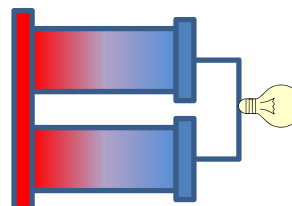
【CMSIの研究課題】 電気を創る



発電機



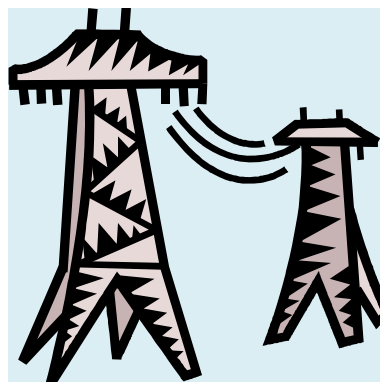
熱電変換素子



【CMSIの研究課題】 電気を運ぶ

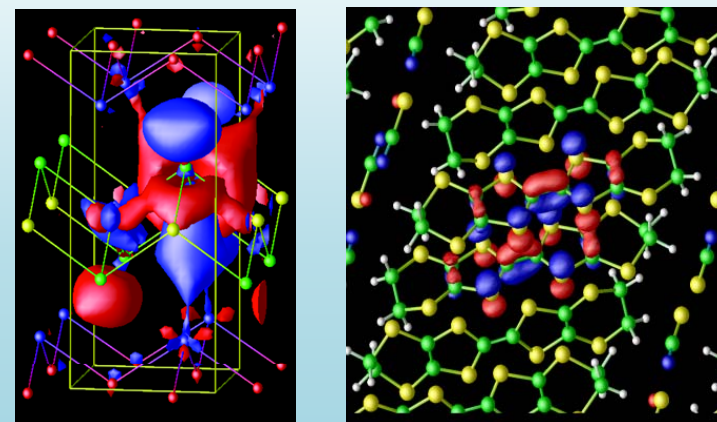
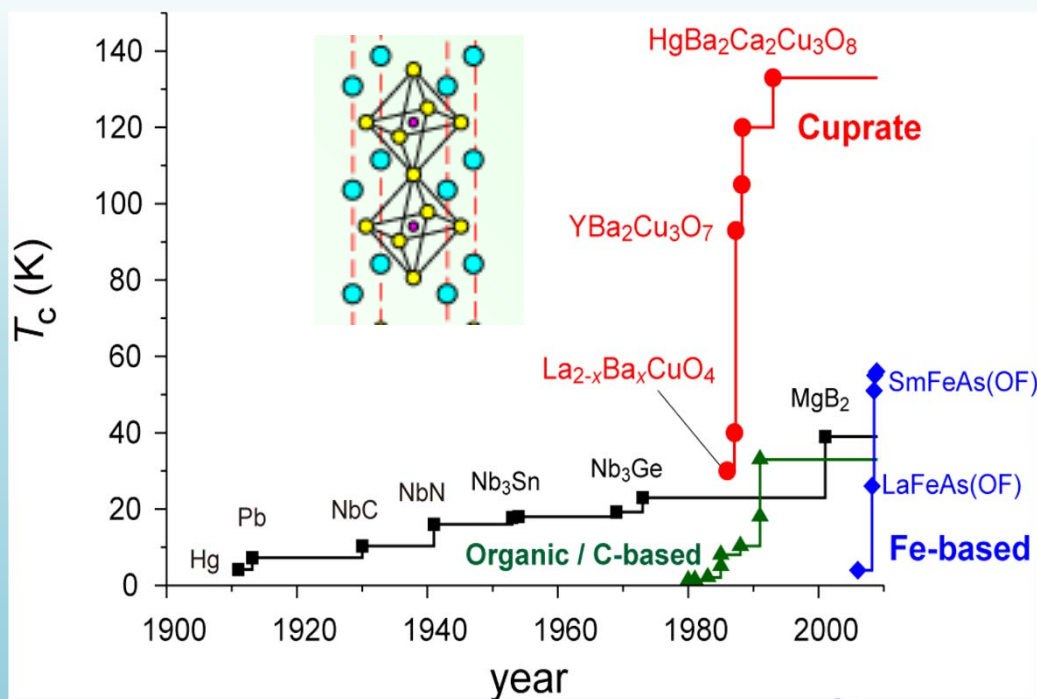
超伝導体

エネルギーロス
のない送電線
磁気浮上
医療用MRI



パワーエレクトロニクス用 半導体材料 SiC

大容量パワーモジュールを適用
した鉄道車両用補助電源装置
(三菱)
太陽光発電、送電でのパワーコ
ンディショナー、インバーター



超伝導のメカニズムと
物質依存性の解明

京／ポスト京による これからの計算物質科学

計算機シミュレーションによる新物性の**機構解明**と定量的な**物性予測**、**物質設計**



- 新物質・新材料の知財早期確保
- 開発期間短縮



東京書籍 高校教科書「物理II」より

試作実験、評価する計測との連携が鍵(元素戦略プロジェクトで実践)

