

## シミュレーションとインフォマティクスの融合による新エネルギー材料設計

理化学研究所計算科学研究センター 量子系分子科学研究チーム 中嶋 隆人

## 研究目標

Society5.0をはじめ、NESTI2050、環境省第5次環境基本計画、経産省第5次エネルギー基本計画、バイオ戦略2020など最近の多くの国家戦略において、SDGs達成のための再生可能エネルギー革新に向けた新材料・新技術の創出が求められています。材料分野は我が国の基盤産業のひとつであり、日本が先導し優位性を発揮できる技術分野です。

一方、材料設計においてマテリアルズ・インフォマティクスの活用が世界的に推進されており、材料開発の方法論は根本的に変わりつつあり、シミュレーションとインフォマティクスを基盤とした新技術により材料設計・探索を加速し、効率良く高性能な材料を提案することが可能となります。

本課題では、スーパーコンピュータ「富岳」と量子化学計算ソフトウェア「NTChem」を利用したシミュレーション技術と、インフォマティクス技術を融合的に活用したマテリアルズ・インフォマティクス技術確立し、エネルギー・環境問題の解決に繋がる高機能な新エネルギー材料の分子設計と探索を実験に先立って実現したいと考えています。そして、地元を中心とした産業界や実験グループと密接に連携することで提案した新エネルギー材料を実証し、将来的には製品化や社会実装に繋げることを目指していきます。

## 期待される成果と波及効果

期待される主な研究成果は、以下の3点です。

- ① 「富岳」の多CPU環境を有効に活用することができるマテリアルズ・インフォマティクス技術の確立
- ② 太陽電池、光触媒・人工光合成、次世代二次電池、海洋分解性ポリマーなどに対する新材料の実験に先立った提案
- ③ 量子コンピューティングとマテリアルズ・インフォマティクスの融合技術による新材料設計・探索の可能性の検証

また、中長期的なアウトリーチとしては、以下の3点を期待しています。

- ① 地元企業との連携による新エネルギー材料の社会実装に基づいたSDGsやSociety5.0の達成
- ② 開発したマテリアルズ・インフォマティクス技術の企業での普及と活用による製品開発の加速
- ③ 新エネルギー材料開発に関する研究協同組合の設置

