

大規模シミュレーション技術を活用した新エネルギー変換材料の 創成に関する調査研究

(財)高度情報科学技術研究機構 手島 正吾

地球温暖化により気候、気象変動がより厳しくなるなか持続可能性の高い新エネルギー開発が急がれている。新エネルギーの中で、太陽光発電はすでに現実的な産業体系を形成しているが、その太陽電池の主流は光電変換材料として結晶系シリコンを利用する。しかし、約 10%程度の変換効率の向上は既に限界を迎え、高効率の光電変換材料又は方式を利用する次世代太陽電池研究、例えば、タンデム型シリコン薄膜、化合物、有機薄膜、有機色素増感太陽電池などそれぞれの方式と変換効率の向上を目指した、日米欧中韓などの間で熾烈な競争になっている。

その中心課題は新しい光電変換材料の開発にある。そこでは、光電変換材料として禁止帯域電位差が 1.3~1.4eV 付近にある新材料を開発することが目標となる。現状では、組成比で禁制帯幅を変えられる銅-インジウム系などの化合物光電変換材料が着目されるが、希少金属を含むことが難点である。一方、有機系では導電性ポリマー、カーボンナノチューブ、フラーレンなどを用いたナノ炭素の光電変換材料が研究されている。しかし、低い光電変換効率(約 4-5%)、インジウム系の透明電極の利用、熱、酸素等への耐久性などに課題が残る。こうした状況から、わが国の太陽電池戦略として、希少金属のような資源制約を受けず、しかも身近に豊富に存在し、また自然環境の重大な汚染・破壊を引き起こさず、さらに耐久性もあり、高い光電変換材料を開発する必要がある。

本調査研究では、わが国の技術レベル、資源制約、環境保全性、経済性、技術の優位性、市場競争性等を勘案し、物質構造に依存して禁制帯幅電位差を変えられるナノ炭素構造体に着目した。特に、物質構造面に負の曲率、内部に規則性のある空孔部を有する特異な構造体であり、その表面には他元素を化学修飾し易く、有用な機能を発現する予測されるマッカイ結晶(シュバルタイト)を新しい太陽電池向けの光電変換材として応用性を検討した。

マッカイ結晶はまだ実在しないが、国内での聞き取り調査及び文献調査により、本結晶の研究は、初期には海外が進んでいた。しかし、わが国では地球シミュレータの大規模シミュレーション技術が世界に先行して発達したことで、マッカイ結晶などの合成シミュレーションも一部可能となり、さらに実験的研究も進んでいることから日本の研究が海外よりもより進んだことが明らかになった。

このため、海外研究者からの直接的な意見聴取による調査は、わが国の先行概念(特に、理論モデリング法)の海外漏洩に繋がり易いため、弊社の他業務で出張する研究者に依頼して、間接的な状況調査、情報収集に留めた。その代わりに、その時間と経費をマッカイ結晶特性の大規模シミュレーション

シミュレーションに重点的に投入し、計画立案のための定量化データの集積に務めた。

この結果、試行的なシミュレーション結果から、禁止帯域の電位差が約0.64から0.94eVである。また軽量、強靱な機械特性など太陽電池向けの新しい光電変換材料として有望であることが分かった。また、マッカイ結晶太陽電池として、基本構成は単純で、希少金属の電極が不要である電池構造で、赤外光を利用し高性能化を図る電池構成の概念を案出した(図-1)。

新たな光電変換材料として、マッカイ結晶の創成、また太陽電池を開発に関する課題を調査した。その結果、新しい材料創成は実験的手法では相当な開発時間が必要となることから、シミュレーション先導又は援用による開発手法が必要であることが分かった。さら

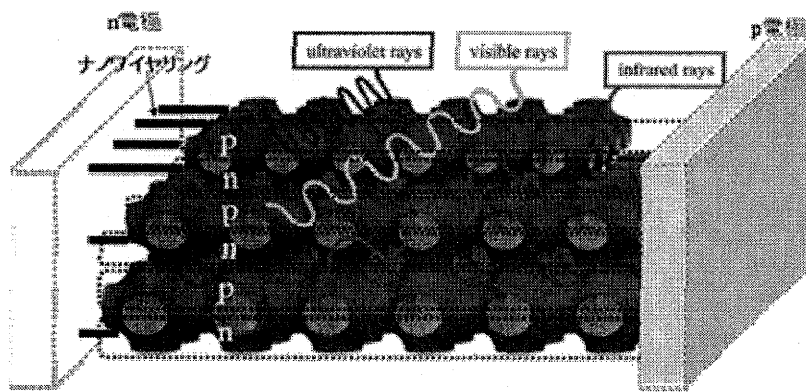


図-1 構成が単純で、希少金属の電極が不要である電池構造で、赤外光を利用し高性能化を図るマッカイ結晶太陽電池の基本構成の概念

に、マッカイ結晶の創成においては、合成過程及び原子組成変化、電子状態変化、強度、伝導率などの電子、熱、機械強度などの詳細な物性シミュレーションによる物質設計が必須である。特にマッカイ結晶の素材からの合成法の開発では、例えば、フラーレンから2次元膜の生成、3次元のマッカイ結晶への電子線照射などによる架橋反応など、莫大な数の原子、分子の動的振る舞いを高精度シミュレーションで予測し、プロセス開発を先導することが必要である。また太陽電池設計においては、高性能光電変換のためのマッカイ結晶への不純物添加、電子、正孔の移動状態等における動的、励起状態を精度良く把握することが必要である。これらの設計では、数百ミクロン級のメソスケールにまでナノ構造のマッカイ結晶特性を延伸させる、階層化した場合の新たな物性発現を考慮した大規模化、高精度化の高度なアプリケーションが必要であることが分かった。

こうした、高精度、大規模のシミュレーション設計等には、大規模、高性能の並列スーパーコンピュータが必須である。現状の並列スーパーコンピュータは、その演算素子を最大で約数十万から百万個へ大規模化し、約2ペタフロップスまで到達している、その性能

拡大を今後も継続され、2018年には約1000倍のエクサフロップス級まで拡大するとの予測である。このような超高性能スーパーコンピュータの資源は、理研が開発を進め、2012年運用開始予定の次世代スーパーコンピュータのように国家的に整備される予定であることから、新しい光電変換材料を用いた太陽電池の開発等に利用可能である。

以上の調査結果を基に、約6年程度の開発期間を想定する計画(案)を作成した。資源、経済、環境、技術など多面的な戦略において、日本に有利でまた世界にも貢献できる新しいエネルギー源を最先端の高性能スーパーコンピュータを利用して、素早く開発、実現することは、今後のわが国の新しい成長産業の創成への先例となろう。