



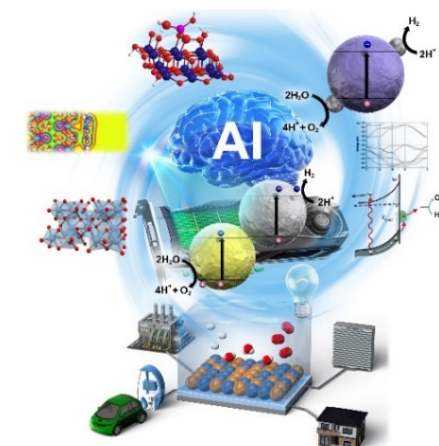
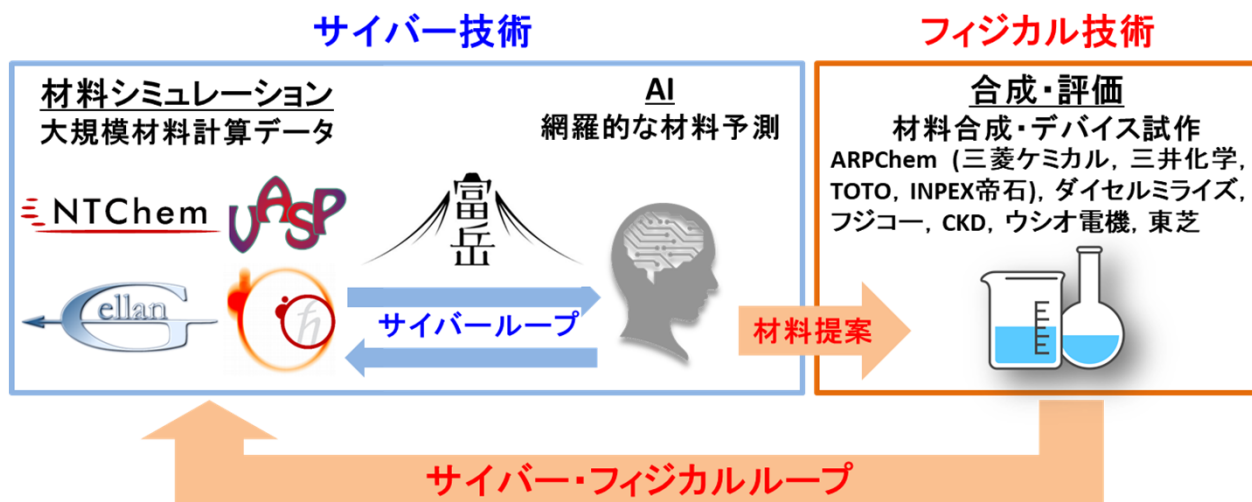
## 課題名：「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現

中嶋隆人  
(理化学研究所 計算科学研究センター・  
チームリーダー)

### 概要・目標

- ◆ 「富岳」での材料シミュレーション・インフォマティクスにより、企業組合との連携で革新的光エネルギー変換材料を社会実装する。光触媒による水素製造・ウイルス不活性化による感染症対策・高効率太陽電池の産業レベルでの実現を目指す。

### 実施体制・関係機関・詳細



#### 革新的な水素製造光触媒の実現 神戸大・奈良先端大

網羅的な計算とAIを活用した最適光学応答と電荷分離特性を持つ半導体、助触媒、欠陥の組合せ探索により、内部量子収率100%かつ可視光応答する光触媒材料探索を実現

#### ウイルス不活性化による感染症対策 神戸大・京大

光触媒による感染症ウイルス不活性化と過酸化水素選択的生成反応のメカニズムについて明らかにし、感染症対策機能を有する光触媒の高効率化と実用化を目指す。

#### 高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計 理研・京大・ENEOS

一千万種程度のペロブスカイトに対するハイスループット計算により、高効率・安定な非鉛化ペロブスカイト太陽電池の材料探索を実現し、変換効率30%以上の高効率な非鉛ペロブスカイト・タンデム太陽電池を提案する。

### 想定される具体的成果

- ◆ 企業組合との連携による日本発の技術を使った世界最高水準の変換効率10%超の水素発生光触媒の実現
- ◆ 感染症ウイルスを不活性化する光触媒と消毒用過酸化水素を高効率・選択的に生成する光触媒の社会実装
- ◆ シリコン系を凌駕する変換効率30%超の非鉛化ペロブスカイト太陽電池の実用化