次世代型太陽電池の材料設計と開発、第一原理計算による NMR量子コンピューターの材料設計と物性予測

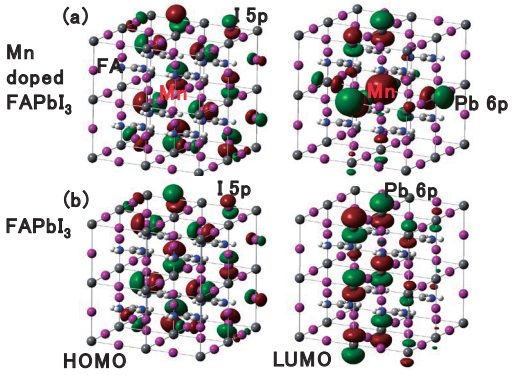
関連するSDGsの国際目標

工学部　材料化学科　　講師　　鈴木　厚志
研究分野：ペロブスカイト太陽電池、量子コンピュータ
研究室ＨＰ：:http://www.mat.usp.ac.jp/energy/hp

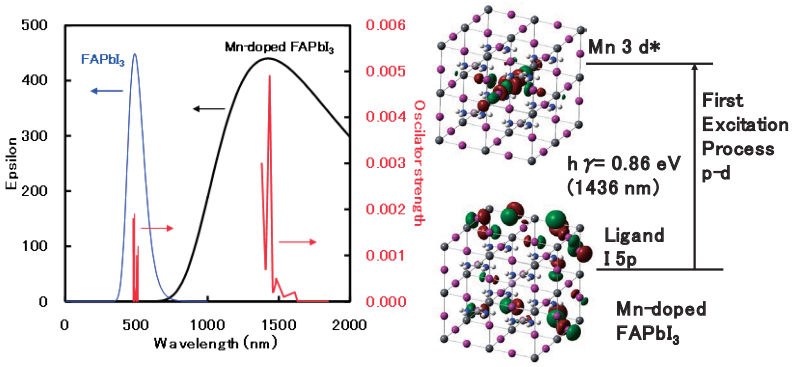
概要：次世代型太陽電池の材料設計と開発を行い、光起電力機構を明らかにしながら変換効率の向上を行っています。第一原理計算によるNMR量子コンピューターの材料設計を行い、量子ビットの大規模化、重ね合わせ状態を予測しながら量子計算の高速化を目指しています。

■ 次世代型太陽電池の材料設計と開発

次世代型太陽電池であるペロブスカイト系太陽電池の材料設計と開発を行い、変換効率の向上を行っています。フタロシアニン錯体のホール輸送特性の検討、表面形態、結晶性、光起電力特性などを明らかにしながら変換効率の向上を試みています。第一原理計算による材料設計と電子構造解析を行っています。



第一原理計算による電子構造の予測と光起電力機構の解明

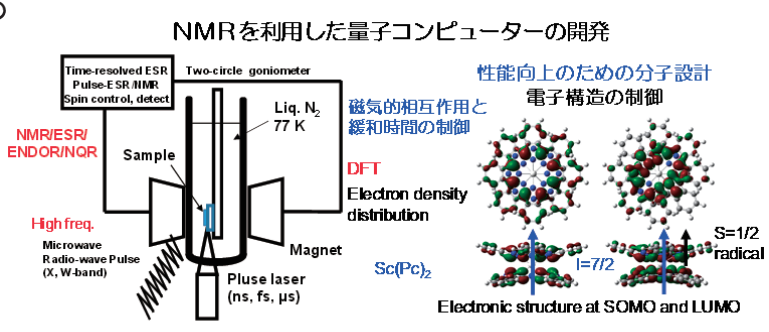


遷移金属導入系ペロブスカイト結晶の励起過程と吸収特性

■ 第一原理計算による量子コンピューターの材料設計と物性予測

第一原理計算によるNMR量子コンピューターの材料設計とともに量子ビットの大規模化、量子のもつれ、重ね合わせの予測を行いながら室温下の量子計算の高速化を目指しています。

金属内包フラーレンや金属錯体などの固体中の核スピンのスピン間相互作用を光照射による操作により量子ビットの重ね合わせ状態やコヒーレンス時間を制御することができます。



金属錯体を利用した量子コンピューターシステム

想定される応用技術分野
1. 高性能太陽電池、半導体材料
2. 金属内包フラーレン、金属錯体を利用した量子コンピューター、スピントロニクス材料
3. 情報科学、第一原理計算

期待されるビジネスイメージ
1. 次世代型高性能太陽電池の開発
2. 軽量化、フレキシブルな太陽電池の開発
3. 大規模量子コンピューターの開発、量子計算

＜特許・共同研究等の状況＞
「太陽電池およびその太陽電池の製造方法」 特開2019-145621
「量子コンピューター」 特願2012-200123