

5-6 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点 Elements Strategy Initiative for Catalysis and Battery (ESICB) (文部科学省)

文部科学省による元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>は2012年度に10年間のプロジェクトとして開始し、2021年度に最終年度を迎える。元素戦略プロジェクトは磁石材料、触媒・電池材料、電子材料、構造材料の4領域から構成され、その中で触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いている。また電子論グループの活動では、分子科学研究所は連携機関として参画して研究を推進している。本プロジェクトのミッションは、汎用元素を利用した高性能な触媒と二次電池の開発である。ここでは昨年度分子研りポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトでは、触媒・電池分野の中でも希少元素低減または希少元素フリーの自動車排ガス浄化触媒と、ナトリウムイオン電池および次世代二次電池の開発を研究課題として、より先鋭化させて推進している。

最近の外部向け事業としては、2020年3月4日に予定していた第16回公開シンポジウムが新型コロナウイルス感染拡大の影響で延期になり、2021年11月10日に第16回、2021年3月10日に第17回をオンライン形式で開催し、それぞれ200名近くの参加者を得た。また、本プロジェクトで活動している若手研究員の講演を中心に公開で開催している「次世代ESICBセミナー」も、継続して実施しており、17回を超えた。さらに内部的な研究交流会として「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」を年2回ずつ開催し、実験と理論研究の交流を促進しながら、研究開発を推進している。合同検討会では実験・理論双方から、研究の進展の報告が行われ、ポスター発表による議論がされている。さらにESICBコロキウムとして、この分野における内外の著名な研究者を招へいた講演会も随時開催しており、現在で24回を超えている。

電子論グループとしては、研究の方向付けのために毎年合宿形式で実施している「電子論検討会」は新型コロナウイルス感染拡大の影響で開催を延期しているが、「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」において、研究交流を深める努力を行っている。これらの検討会では、これまで理論・計算研究が触媒・電池の元素戦略研究にどのように貢献できたかを議論し、最終年度における研究の方向性、今後どのように元素戦略研究に貢献できるかについて議論を重ねている。

このようにプロジェクト内外の研究交流も積極的に行っており、近年では実験と理論の協働は成功しており、実験と理論の共著の論文が多く出ている。理論・計算科学が触媒・電池材料開発を先導する、というプロジェクト本来の目的を果たせてきていると考えており、この分野における理論・計算科学の役割の重要性がさらに高まっていくものと考えている。