

つい最近帰国した若手研究者からの欧州と日本での博士に対する認識の差に関する話題提供は大変興味深く、また企業の研究者からは、現在、少なくとも化学系企業では、如何に博士人材が求められているかが実感を持って語られました。一方で、大学で先端的な研究を推進している現場からは、現在の新卒の就職活動

の状況を大きく変える必要があるという認識が述べられ、早急なアクションの必要性を感じさせるものでした。

今回は初めて対面とオンラインのハイブリッド開催となりました。講演者等関係者と、所内の参加者以外は、数名を除き殆どがオンラインでの参加でしたが、総参加者は約130名で、昨年

同様、広い職域・地域・年齢層からの参加があり、活発な議論が行われました。ハイブリッド開催特有の技術的な問題点も明らかになりましたが、今後解決できればと思います。この形式は、来年度以降も採用する価値はあるだろうと感じています。

(岡本 裕巳 記)

事業報告

文科省マテリアル先端リサーチインフラ事業

報告：物質分子科学研究領域 横山 利彦

SOCIETY5.0やSDGsの実現、希少資源代替・循環技術の革新による資源の海外依存を解消するため、今世紀において我が国は調和のとれた科学技術革新を一層推進する必要があります。革新的な新機能物質材料を創製し早期の社会実装を達成しなければなりません。我が国の科学研究力を研究論文数の視点で見ると、2000年代前半をピークに横ばいとなっており、これは大学院生をはじめとする研究者人口の減少が一要因でしょう。このような現況において、2021年度から文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ(Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan, ARIM)事業が始動しました。最先端装置の共用、高度専門技術者による技術支援に加え、新たにリモート・自動化・ハイスループット対応型の先端設備を導入し、装置利用に伴い創出されるマテリアルデータを、利活用しやすいよう構造化した上で提供することが目的です。この事業は物質・材料研究機構(NIMS)をセンター拠点として、全国25の大学・研究機関がそれぞれに重要技術領域を担います。各領域

に強みを持つ先端設備群を提供するハブ機関と、特徴的な装置・技術を持つスポーク機関からなるハブ&スポーク体制を形成し、利用者の方々の研究開発のパートナーとして貢献します。本事業は、2012年度から10年にわたり実施してきたナノテクノロジープラットフォームにより培ってきた技術基盤を十分に活かしつつ、データ収集・利活用という新しい視点を加え、これからの10年、新しい取組みに挑んでいくものです。

分子科学研究所は7つの重要技術領域のうち「マテリアルの高度循環のための技術」領域のスポーク機関となり、ハブのNIMS、スポークの名古屋工業大学、電気通信大学とともに、マテリアル高度循環を主な支援対象としながら、共用促進・マテリアルデータ創出を担っていくことになりました。ハブ・スポーク機関が有する種々の先端機器の共用を通じて、代替材料や再生材料由来の物質合成、材料削減に資する触媒

反応の可視化などマテリアル循環に関わる支援をするとともに、創出されたデータを効率よく収集・蓄積・構造化し、その利活用を図ることで、持続可能なマテリアルのデータ駆動型研究開発に貢献します。これまで構築してきた基盤研究インフラ(最先端機器共用と高度専門技術支援)とものづくり支援の経験を活かし、分子科学研究所機器センター等の先端機器共用を継続的に実施し、計算科学研究センターとの連携を通して機器共用から創出されたマテリアルデータを収集し利活用を行います。



触媒・電池元素戦略プロジェクト

報告：計算科学研究センター 江原 正博

近年、エネルギー・資源問題や国家エネルギー安全保障などへの対応が求められ、その科学技術面からの重要な対策の一つに元素戦略があります。現代社会に不可欠な自動車触媒や二次電池において、白金族元素やリチウムが用いられていますが、白金族元素は産出量が少なく、年間使用量は産出量を上回っています。また、リチウムは地球上の存在分布が偏るという地政学的なリスクがあり、存在量も電気自動車を中心となる時代には枯渇することが予測されます。したがって、白金族元素やリチウム使用の低減はわが国のエネルギー・資源問題解決のみならず、地球規模での資源問題、エネルギー問題を解決し、持続的社會を実現するために、極めて重要な課題と言えます。

このような社会情勢の中、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>が2012年度～2021年度の10年間にわたり実施されました。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、触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いて推進されました。本プロジェクトの特色は、各領域が材料創製グループ、解析評価グループ、電子論グループの3

グループで構成され、特に電子論グループが理論計算によって全体の研究活動を先導することが期待されていたことです。触媒・電池材料領域での電子論グループの活動は、分子科学研究所が連携機関として参画して中心的な役割を担いました。触媒・電池材料に関わる様々な元素戦略研究が行われましたが、プロジェクトの中心課題は、貴金属の使用を低減した高性能な自動車排ガス浄化触媒およびナトリウムイオン電池の開発となりました。代表的な自動車触媒材料の研究結果としては、貴金属低減触媒であるRhナノシートやSr-Ti系酸素貯蔵材料、また、貴金属フリー触媒であるタンデム型触媒の開発があります。今後、自動車業界では電動化が急速に進むと考えられますが、一方で低温活性に優れた排ガス浄化触媒が重要となり、これらの触媒開発の進展と社会実装が期待されます。一方、ナトリウムイオン電池材料としては、高電圧を示す鉄系ナトリウムイオン電池正極材料、高濃度電解液、高容量の黒リン負極材料などが開発されました。これらはナトリウムイオン電池を構成する材料としての実用化が期待されま

す。本プロジェクトの特色であった理論

計算先導による研究推進の重要な成果としては、これまで実験と理論の交流が少なかった触媒・電池の材料開発分野に共同研究が進展したことです。触媒・電池材料は複雑系であり、プロジェクト開始当初は理論的手法が必ずしも確立していませんでした。電子論グループでは、これらの複雑系を研究するための理論開発から開始し、実験と協力して具体的な研究課題に取り組んできました。その結果、これらの複雑系の理論研究が飛躍的に進展し、触媒・電池の研究分野に物理化学に基づく新しい学理や開発指針が得られました。プロジェクトの完了時期には、実験・理論の共同研究・共同開発が日常的に実施されるようになりました。今後、実験・理論の協働によって、これらの研究分野が益々発展することを期待しています。

