

5-8 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 (文部科学省)

平成 24 年度に開始した本プロジェクトは、今年度で 3 年目を迎え、研究活動も本格化し、顕著な成果も出始めている。触媒・電池材料領域は京都大学に研究拠点を置いており、分子科学研究所は電子論グループの連携機関として参画している。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り、具体的には、自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発である。

本研究拠点の行事である「公開シンポジウム」は年 2 回開催が定例化され、本年も 3 月 19 日に第 4 回を東大本郷キャンパスにて、10 月 14 日に第 5 回を京大桂キャンパスにて開催した。公開シンポジウムでは 3 件の招待講演に加えて、触媒、電池、電子論各グループからの研究報告が行われている。また、本プロジェクトで活動している博士研究員の講演を中心にした「次世代 ESICB セミナー」も本年 10 月までに合計 4 回、開催した。内部的な研究交流会として、年 2 回のペースで「触媒・電子論合同検討会」および「電池・電子論合同検討会」を開催し、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。これらの合同検討会では、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なされている。またこれ以外にも「電子論検討会」や「電子論分科会」を開催しており、理論研究独自の方法論開発や触媒・電池研究への応用に関係する共通の話題について議論を行っている。昨年度から 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した講演会も随時開催しており、現在で 8 回目を迎えた。