

5-9 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)

平成 24 年度に開始した「元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>」は、今年度で 4 年目を迎えた。本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る。ここでは昨年 3 月に分子研レターズ 71 号に報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトの本年度の特筆すべきことは、10 年計画の第 1 期 3 年間を終え、中間評価を受けたことである。その評価結果を受けて、これまで進めてきた自動車排ガス浄化触媒とナトリウムイオン電池の開発を研究ターゲットとして、より先鋭化させることとなった。また、さらに効率的なプロジェクトの展開を図るために研究体制もそれに見合った形に変更することとなった。

最近の外部向け事業としては、第 6 回公開シンポジウムを 3 月 18 日に東大本郷キャンパスにて開催し、第 7 回は 9 月 25 日に京大桂キャンパスにて開催し、それぞれ 100 名以上の参加者を得た。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とした「次世代 ESICB セミナー」も、昨年 12 月で 6 回を数えている。さらに内部的な研究交流会として「全体合同検討会」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。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た。合同検討会は、これまで触媒分野、電池分野別々に開催していたものだが、今回は同時に行い、両分野の共通の問題意識の醸成を図っている。また、分子研を会場として「電子論検討会」を開催し、実験分野における最新的话题を受けながら、理論研究として行うべき課題の抽出に努めている。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 10 回目を迎えている。

このようにプロジェクト内外の研究交流を積極的に行っており、実験と理論のインタープレイについては、成果として実験と理論の共著の論文も多く出てきている。今後はさらに触媒・電池開発を先導する理論計算科学の役割をより前面に押し出すことが期待され、この分野における理論計算の役割がますます重要なものとなってくものと考えられる。