

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 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、平成28年度で5年目を終えようとしており、当初10年計画のちょうど折り返し点を迎えた。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。

本プロジェクトは、2年前の中間評価を受けて、触媒・電池分野の中でもこれまでも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。

最近の外部向け事業としては、「公開シンポジウム」が平成28年3月1日に第8回、10月31日に第9回がともに京大桂キャンパスにて開催され、それぞれ100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博士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、この1月で8回を数えている。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。また「電子論検討会」を電子論グループの主催で開催し、実験分野における最新の話題を受けながら、理論研究として行うべき課題の抽出に努めている。この検討会は、参加者全員の合宿形式で行い、実験・理論間の共同研究の醸成を図ってきている。平成28年12月にホテルコンコルド浜松を会場として3回目を開催したが、最近、その成果が形になって表にでてきたところである。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13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、触媒・電池開発を先導する理論計算科学の役割をより一層前面に押し出すことが強く期待され、この分野における理論計算の役割の重要性が高まってくるものと考えられる。