

5-7 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6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越えている。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レ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、3年前に1回目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、リチウムイオン電池を代替する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29年2月27日に第10回が東大本郷キャンパス、10月4日に第11回が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若手研究員の講演を中心にして公開で開催している「次世代ESICBセミナー」も、昨年10月で9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。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19回目を迎えている。

電子論グループとしては、来年度に予定されている2回目の中間評価を見据えて、今後の研究の方向付けのために、昨年11月に「電子論 second kick-off 会議」を開催した。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、中間評価以降の第3期での研究の方向性、具体的な研究課題、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た。

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が、現状で十分とは考えていない。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役割を今後、より一層意識して研究を進めることが期待されており、この分野における理論計算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。