

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)

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>は2012年度に開始し、現在、プロジェクトは第三期を迎えようとしている。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、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いる。また電子論グループの活動では、分子科学研究所は連携機関として参画して研究を推進している。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、昨年度、第2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、ナトリウムイオン電池および次世代二次電池の開発を研究課題として、より先鋭化させて推進している。

最近の外部向け事業としては、「公開シンポジウム」が2019年3月1日に第14回が東大本郷キャンパス、2019年10月7日に第15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、継続して実施しており、15回を超えた。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24回を超えている。

電子論グループとしては、今後の研究の方向付けのために、毎年実施している「電子論検討会」を12月23、24日に合宿形式で開催した。若手の実験研究者に話題提供をしていただくとともに、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、中間評価以降の第三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も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くるものと考えている。