

5-4 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10年間のプロジェクトとして開始し、2021年度に最終年度を迎えた。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リポートに報告して以降の研究拠点の活動を概括する。

本プロジェクトでは、触媒・電池分野の中でも希少元素低減または希少元素フリーの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、主な研究課題として推進してきた。

最終年度の外部向け事業としては、2021年11月15日に第18回、2022年3月8日に第19回公開シンポジウムをオンライン形式で開催し、それぞれ200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、19回となった。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、研究開発を推進した。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た。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きた。

電子論グループとしては、研究の方向付けのために毎年合宿形式で実施していた「電子論検討会」は新型コロナウイルス感染拡大の影響で開催できなかったが、「触媒・電子論合同検討会」「電池・電子論合同検討会」において、研究交流を深める努力を行った。これらの検討会では、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た。最終年度において、元素戦略研究の成果のまとめ、特に学理構築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い、本プロジェクトでは実験と理論の協働は成功したと言える。特に、最近では実験と理論の共著の論文が多く出ている。理論・計算科学が触媒・電池材料開発を先導する、という本プロジェクトの目的を果たせたと考えており、プロジェクト完了後もこの分野における理論・計算科学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。