京都大学　構造材料元素戦略研究拠点

実施者

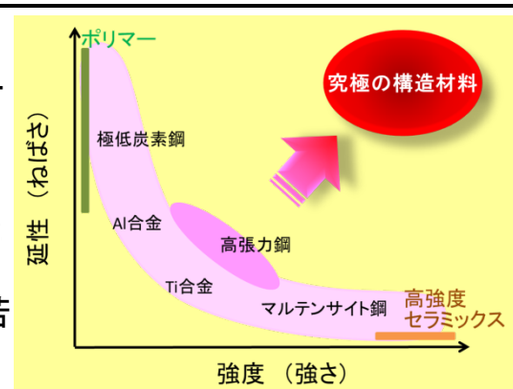
京都大学、東京大学、物質・材料研究機構
大阪大学、産業技術総合研究所、日本原子力研究開発機構
ファインセラミックスセンター、東京大学物性研

背　景

わが国の安心・安全ならびに産業にとって構造材料は極めて重要である．そして、NbやMoなどの希少元素の大半は構造材料において消費されている．したがって、元素戦略に立脚した研究開発は、経済効果のみならず資源リスクの回避という安全保障の観点からも重要課題となる．

目　的

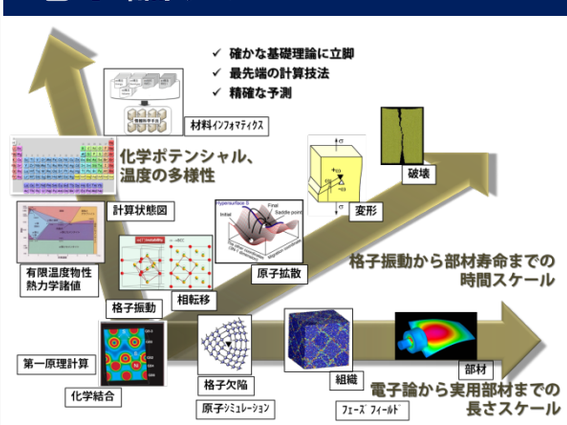
強いものは脆く、ねばいものは弱いという構造材料の固定概念を打破し、「強さ」と「ねばさ」を具備する**究極の特性**へのブレーク・スルーを、希少元素の添加によるのではなく、電子、原子のスケールからマイクロメートルに及ぶ組織制御によって達成すること．そのために構造材料のフロンティアを、電子論と最先端の計測技法という新しいツールを駆使して開拓すること、そして次世代を担う強力な若手人材を育成することを目指す．

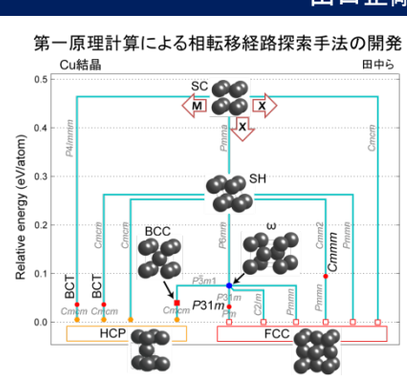


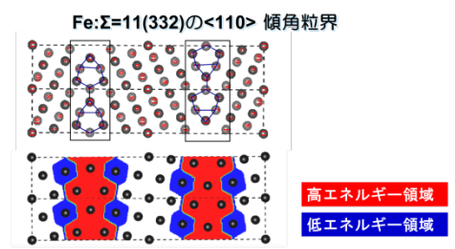
研究概要・成果

電子論グループ

GL　田中　功（京大）　PI　尾方成信（阪大）　香山正憲（産総研）
山口正剛（原子力機構）　常行真司（東大物性研）

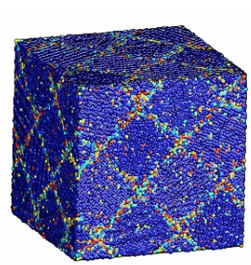




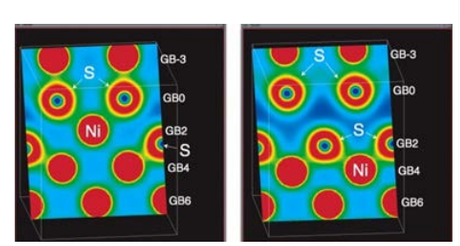


ボロノイスキームによる第一原理局所エネルギー解析法の開発
香山による

構造材料の「強さ」と「ねばさ」の起源を、電子論に遡って追究し、最適な化学組成と組織を精確に設計するために、確かな基礎理論に立脚し、最先端の計算技法を活用したマルチスケール計算を行っている．



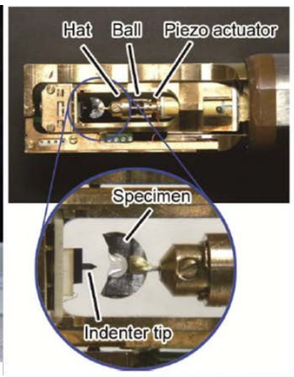
Cuナノ結晶の変形挙動：分子動力学計算
尾方による

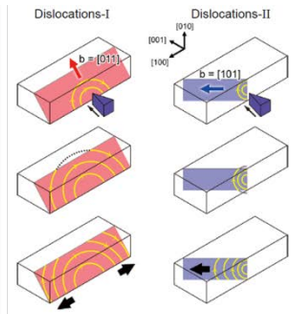


Ni粒界強度の偏析による変化：
第一原理計算：山口による

解析・評価グループ

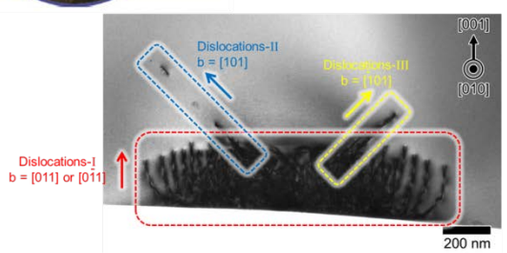
GL　幾原雄一（東大），　PI　乾　晴行（京大）





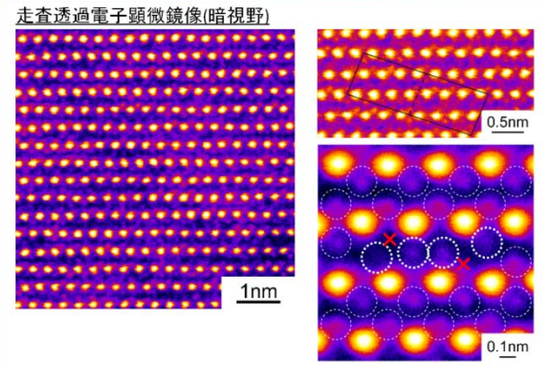
構造材料の「強さ」と「ねばさ」の起源を、実験的に追及するために、最先端の電子顕微鏡技術を活用している．またSPring-8やJ-PARC活用による解析・評価も積極的に進める．

透過電子顕微鏡内
ナノインデンテーション法による
$SrTiO_3$結晶中の転位挙動の
直接観察（幾原ら）



空孔規則相$ReSi_{1.75}$の空孔直接観察

走査透過電子顕微鏡像(暗視野)

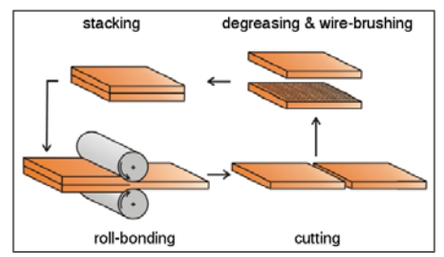


材料創製グループ

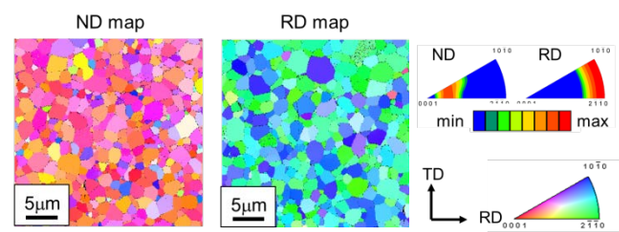
GL　津崎兼彰（NIMS），　PI　辻　伸泰（京大）
松原秀彰（JFCC）

電子論グループ、解析・評価グループと密接連携し、「強さ」と「ねばさ」を具備する材料創製を目指すとともに、産業応用を視野に入れた実用材料の最適制御指針を獲得する．

NIMSの材料創製装置インフラ群
（津崎グループ）



バルクナノメタルを創るARBプロセス
世界25ヶ国で使用
（辻ら）



純チタンバルクナノメタルを創製し、単相超微細粒材における特異な強度と均一延性の両立を発見（辻ら）

対外活動状況

- 電子論―解析・評価―材料創製の3グループでの徹底的な討論と、積極的な国際、学際交流
- 産学官、わが国の構造材料に関する戦略プロジェクトとの意思疎通、意見交換、またそれを可能とする風通し良い仕組みの構築
- スパコン京や大型量子ビーム施設との密接連携、活用
- 横断的な学会活動、広報活動

2012/8/3　第1回シンポジウム
（京都大学 福井謙一記念センター）

2012/11/ 7　第2回シンポジウム
（京都大学 東京オフィス）
～ 放射光や中性子実験施設を利用した構造材料研究の新展開 ～

2014/ 3/ 11-12
第2回国際ワークショップ
（京都大学 楽友会館）
2nd ESISM International Workshop
"Fundamental Issues of Structural Materials"

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

実施者

京都大学、東京大学、分子科学研究所

背　景

・現代化学工業を支える触媒，自動車排ガス浄化等の環境触媒，これらの触媒の活性成分の多くは白金族を始めとする希少元素である。
・蓄電池としてその需要が高まっているリチウムイオン電池のゲストであるリチウムも我が国ではほとんど産出しない。
・これらの希少元素はほとんど全てを輸入に頼っており，かつ，限られた地域にしか産出しない。
・希少元素の利用を極力抑え，あるいは，汎用元素と代替することは，喫緊の国家的課題である

目　的

触媒・電池の界面現象の科学を深化させ，理論主導により希少元素フリーの触媒・電池材料を設計・開発することが目的である。

研究体制

京大中核拠点には材料創製グループリーダー（拠点長を兼ねる）をおき，材料創製，解析評価，電子論各グループを集結させ触媒・電池に関わる理論予測や解析評価に基づき触媒材料，電池材料の創製を行い，基礎研究から実証研究にわたる広い範囲をカバーする。加えて，次代を担う人材の総合的育成にも力を入れる。

連携機関である東京大学には，解析評価グループリーダーをおき，大型量子ビーム施設を用いた解析評価ならびに理論予測に基づく材料創製の基礎的研究を中心に展開する。もう一方の連携機関である分子科学研究所においては，電子論グループリーダーをおき，触媒電池の界面現象を解析するための方法論の開発を行うとともに，最適材料の理論予測を行う。

さらに，これら3つの連携機関を縦断した触媒グループと電池グループを形成し，広角的に研究を推進する。

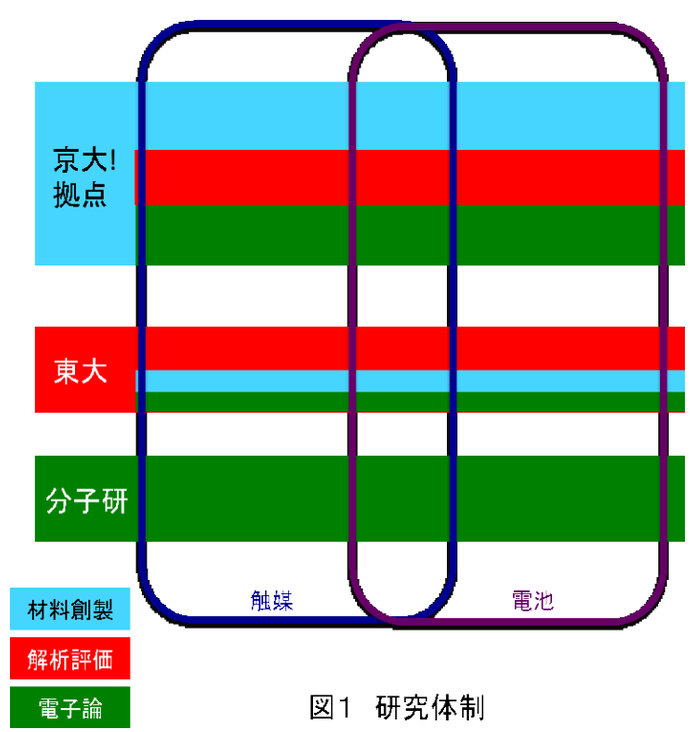


図1　研究体制

研究概要

電子論G

① 理論の深化，方法論（インフラ）の開発
② 既存材料への方法論の応用／方法論のfeasibilityの確認

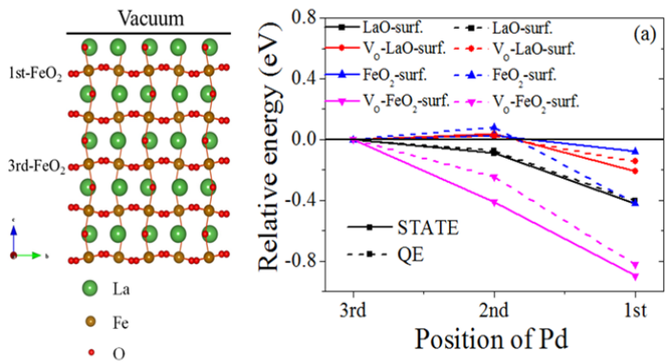


図2 ペロブスカイト酸化物に貴金属がドープされた系の構造安定性

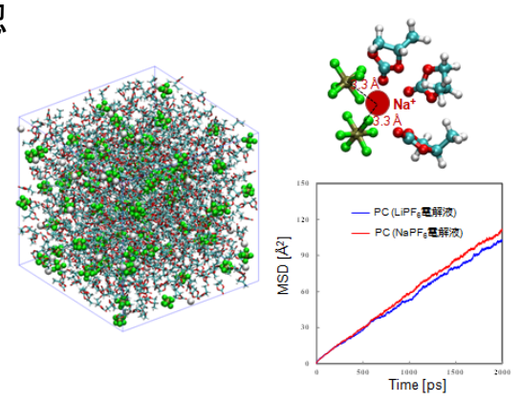


図3　電解液のシミュレーション：Li^+, Na^+イオンの拡散速度

解析評価G

① 担持金属ナノ粒子のキャラクタリゼーション
② ナトリウム電池材料のキャラクタリゼーション

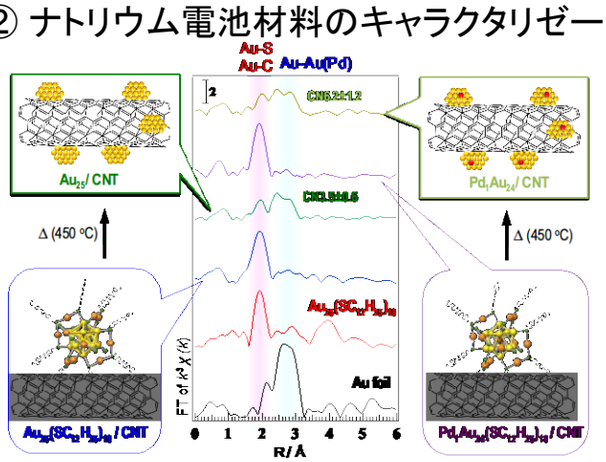


図4 CNT担持金属クラスターの構造解析

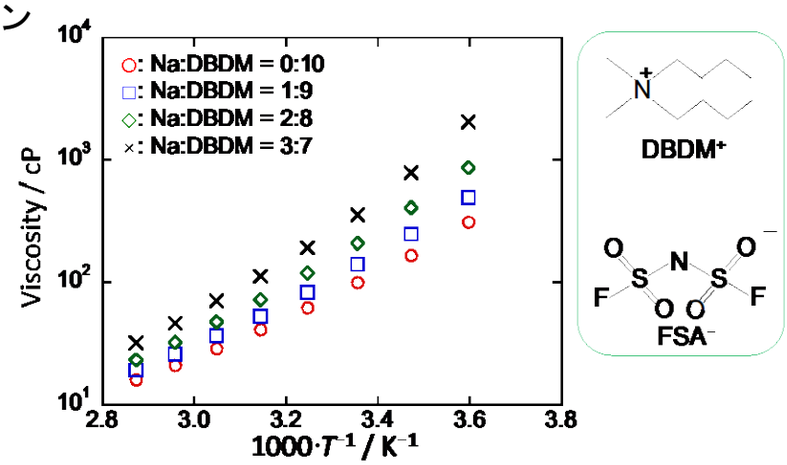


図5 Na二次電池用Na[FSA]-[DBDM][FSA]系イオン液体の粘性率特性

材料創製G

① 金属ナノ粒子の合成
② ナトリウム電池材料の創成

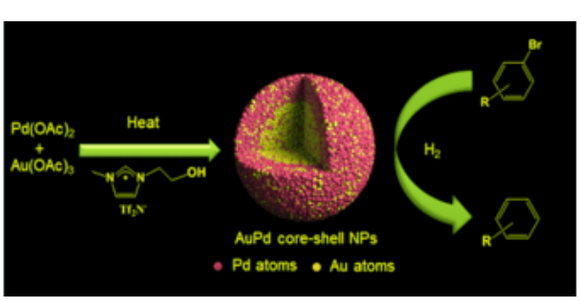


図6 コアシェル構造のPd-Auナノ粒子による脱ハロゲン反応

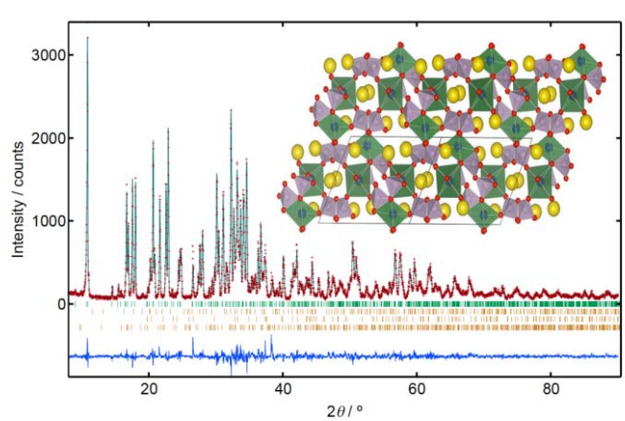


図7　Naイオン電池正極材料$Na_2FeP_2O_7$

（研究代表者：京都大学大学院工学研究科　田中庸裕）