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（拠点　代表研究者：田中　庸裕）
連携機関：東京大学、分子科学研究所

背　景

触媒：化成品合成用触媒や自動車排ガス浄化触媒などの触媒の多くは白金族を始めとする希少元素が必要不可欠である。
電池：スマートフォン、モバイルPC等小型端末から電気自動車やハイブリッド車に至るまで様々な工業製品に用いられ、需要が急増している電池に用いられているリチウムもほぼ輸入に頼っている。

上記材料に用いられる希少元素は限られた地域でしか産出されず、地政学的なリスクがあり調達安定性の確保が求められており、使用量の抑制、或いは、汎用元素での代替は喫緊の国家的課題

目　的

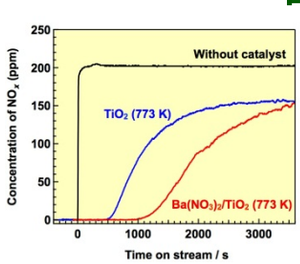
触媒・電池の共通要素である表面／界面現象の科学的理解を深化させ、理論主導により、希少元素の低減、最終的には希少元素に依らない触媒・電池材料を実現することを目的とする

研究概要

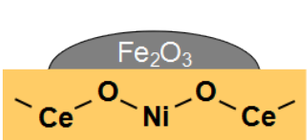
	触媒	電池
電子論G	反応機構等の理論の深化、物質探索手法や特性予測手法等の研究基盤の開発	電子レベルに遡ったナトリウム電池用材料の候補探索と性能予測手法確立
解析評価G	担持金属ナノ粒子の構造・電子状態等のキャラクタリゼーション	ナトリウム電池材料の構造や充放電挙動等のキャラクタリゼーション
材料創製G	金属・無機材料ナノ粒子の合成、及び、構造制御	ナトリウム電池材料を構成する正極・負極・電解質材料の合成

研究成果

自動車用触媒

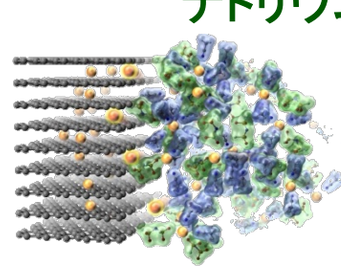


ディーゼルNOx貯蔵触媒
ディーゼルNOx貯蔵のための光触媒を利用したPGMフリー触媒
特願2014-205647

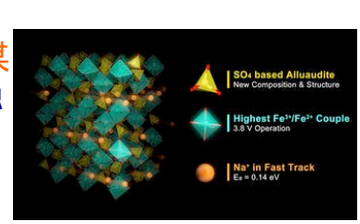


PGMフリー三元自動車触媒
Fe-Ni 2相複合化合物で三元触媒の挙動を実現
特願2014-145457

ナトリウム二次電池



急速充電のための新規超高濃度電解液の開発
新規超高濃度Li[TFSA]/アセトニトリル電解液で5分で充電
JACS DOI：10.1021/ja412807w
特願2014-098660



Na-Feでリチウムイオン電池を超える
新しいNa-Fe化合物で3.8Vの高電圧・数分の充放電を実現
Nature Comm.
DOI:10.1038/ncomms5358

京都大学　構造材料元素戦略研究拠点（ESISM）

実施者

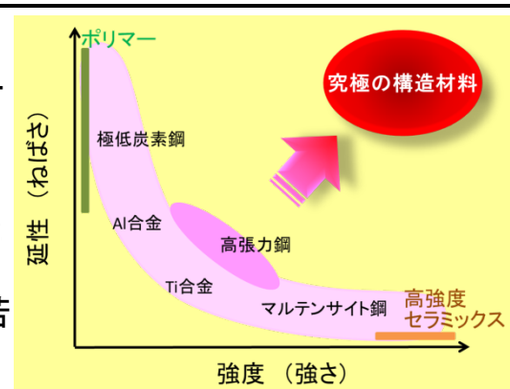
京都大学（拠点　代表研究者：田中 功）
連携機関：東京大学、物質・材料研究機構
大阪大学、産業技術総合研究所、日本原子力研究開発機構
ファインセラミックスセンター、東京大学物性研究所

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．



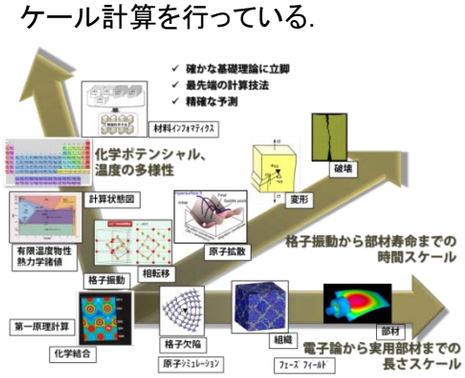
研究概要・成果

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）

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．

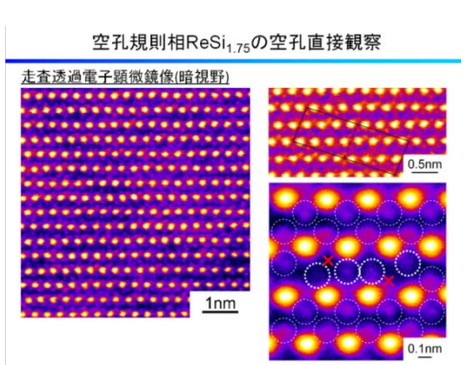


解析・評価グループ

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．

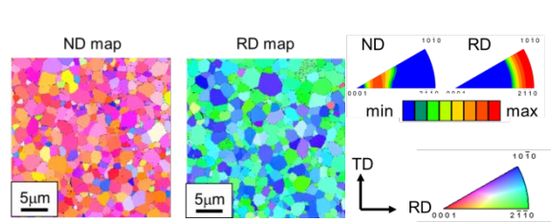


材料創製グループ

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．



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