

研究開発課題別事後評価結果

1. 研究開発課題名：元素間融合を基軸とする物質開発と応用展開

2. 研究代表者：北川 宏(京都大学 大学院理学研究科 教授)

プログラスマネージャー：岡部 晃博 (科学技術振興機構)

3. 事後評価結果

本研究開発課題は、状態密度の制御「状態密度エンジニアリング」の概念に基づいた新規ナノ合金材料の機能設計・予測の原理を確立するとともに、産業界での応用に望ましい物性を持つ新規ナノ合金材料を創出し、量産化技術の確立を目指す研究開発である。バルク状態では相分離してしまう 2 種類の金属を原子レベルで固溶化させた成果を基に、研究開発を進めてきた。

自動車排ガス処理や各種化学反応の触媒として、活性評価、活性点や固溶構造のオペランド解析等で原理解明を進めた。これまでの知見に第一原理シミュレーションを組合せた理論予測・解析を用いて選択した元素を 2 元系に追加し多元化することが、耐熱性や触媒性能等の向上につながることを実証した。排ガス触媒としての Rh 以上の活性を示す固溶 Pd/Ru 合金では、多元化により固溶構造崩壊が完全に抑制されることを見いだした。このほか、ナノ合金の固溶度を規定する方法論の確立や、一定組成での結晶構造の作り分けの成功など、学理面でも大きく進展した。

社会実装に向けては、異なる機関の研究者が協働しながら、ユーザー情報に基づく用途開発をプログラスマネージャー主導で実施し、新用途を見いだしたことは評価できる。従来のスプレー法に代わり、ソルボサーマル法の連続製造技術を確立したことも大きな成果である。還元速度や冷却速度等の精密制御で 1nm 級の合金を確実に生成可能となったことで用途探索が加速され、これまでできなかった元素の組合せの固溶合金も製造可能となり、実用化への可能性が大きく広がった。

以上のことから、優れた成果が得られたと評価する。

多数の研究者が役割を担い合い、企業での評価のフィードバックを受けて研究開発を行い、潜在的ニーズを拾い上げてきた。今後、ユーザー企業をより強く巻き込むことで社会実装が期待できる。そのためにも、シミュレーションを取り入れた効率的な材料設計・開発を進め、スケールアップ生産検討を継続していただきたい。

以上