

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)
プログラムマネージャー：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元素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ム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。

(2021年10月追記)

本研究開発課題は、上記の評価を受け研究実施期間を1年間延長し、各用途における課題の解決、材料設計手法開発、量産化技術開発の3点を重点的に研究実施した。

固溶Pd/Ruは自動車排ガスのNO_x還元触媒として用いると、高温での繰り返し使用における固溶構造崩壊と活性劣化が問題であった。これまで研究してきた理論予測・解析を用いて、第三の元素の添加による混合エンタルピーの効果と配置エントロピーの効果で、固溶構造が安定化し還元活性を確実に維持可能であることを、Pd/Ru/Irナノ合金の繰り返し使用の検証で示すとともに論文発表した。工業的な製造法としてソルボサーマル連続製造技術でスケールアップ合成にも成功している。

また、化学プロセスで使用される高活性触媒への展開としては、混ざり合わない金属種を5種類、6種類と更に増やして固溶化に成功し、電極触媒として高活性であることを示した。具体的には、白金6元素で構成されるナノ合金が、エタノール酸化電極触媒として既報の触媒よりも高活性で、従来の金属触媒で達成できなかった12電子完全酸化反応が進行していることを明らかにした。多元素の固溶化によって形成される多様な活性点を持つ表面構造が高活性実現につながっており、原子レベルで混合する固溶合金が広い分野で応用される可能性を示唆した。

固溶合金が材料として産業で適用されるにあたっての課題を確実に解決するとともに、さらなる発展の可能性を示したことは、高く評価できる。今後、広く社会に貢献する技術となることを大いに期待する。

以上