

文部科学省「元素戦略プロジェクト」の 平成21年度採択課題の概要

- 化学ポテンシャル図に立脚した多元系機能材料の精密制御
(京都大学 宇田哲也)
- 有機分子を活物質に用いた二次電池の高性能化と充放電機構の解明
(大阪大学 森田 靖)
- 複合界面制御による白金族元素フリー機能性磁性材料の開発
(筑波大学 喜多英治)
- エコフレンドリーポストリチウム二次電池の創製
(九州大学 岡田重人)

化学ポテンシャル図に立脚した多元系機能材料の精密制御

京都大学 宇田哲也

背景

希少金属の使用量低減においては、汎用元素の組み合わせによる3元以上の多元系における材料開発が有望です。

目的

化学熱力学的手法に第一原理計算によるエネルギー計算を組み合わせ、太陽電池、燃料電池、生体材料への汎用元素の利用促進を目指します。

内容

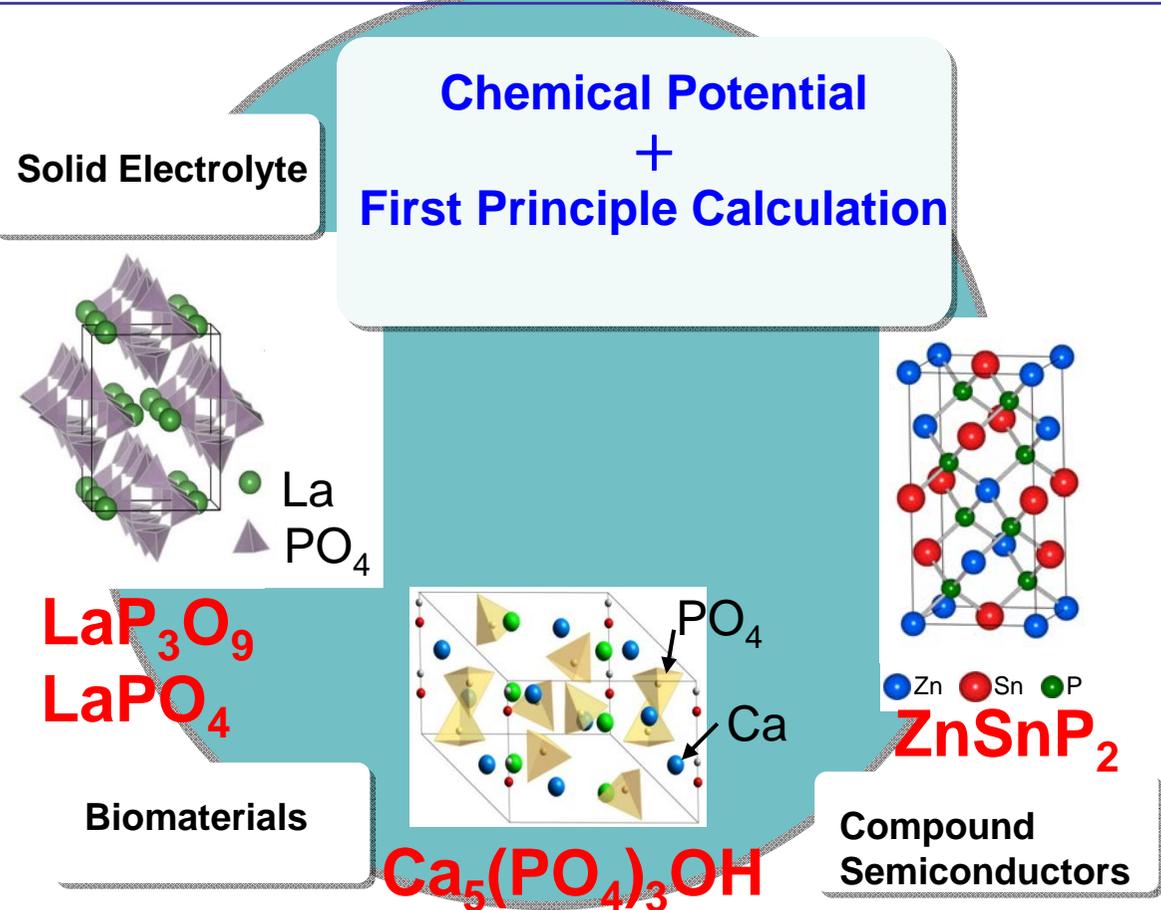
化学ポテンシャル図の考え方をを用いた、安定性の評価、反応メカニズムの推定、新合成プロセスの確立を、第一原理計算結果と融合させながら実行する。

①多元系における第一原理計算と化学熱力学を融合させる計算手法の確立

②燃料電池用プロトン伝導体

③太陽電池用化合物半導体

④微量ドーパントによる生体用セラミックス材料の高機能化



有機分子を活物質に用いた二次電池の高性能化と充放電機構の解明

大阪大学 森田 靖

背景

コバルト酸化物を主成分とするリチウムイオン二次電池に代る新しい高性能蓄電デバイスの開発が、他国への資源依存度が小さい新先端技術産業の基盤拡充の観点から待望されています。

目的

縮合π電子系有機分子を電極活物質に用いた二次電池を高性能化します。また、電池デバイス内の微小空間変化や電子状態を可視化する新技術を開拓します。

内容

①電極活物質となる有機分子の設計・合成

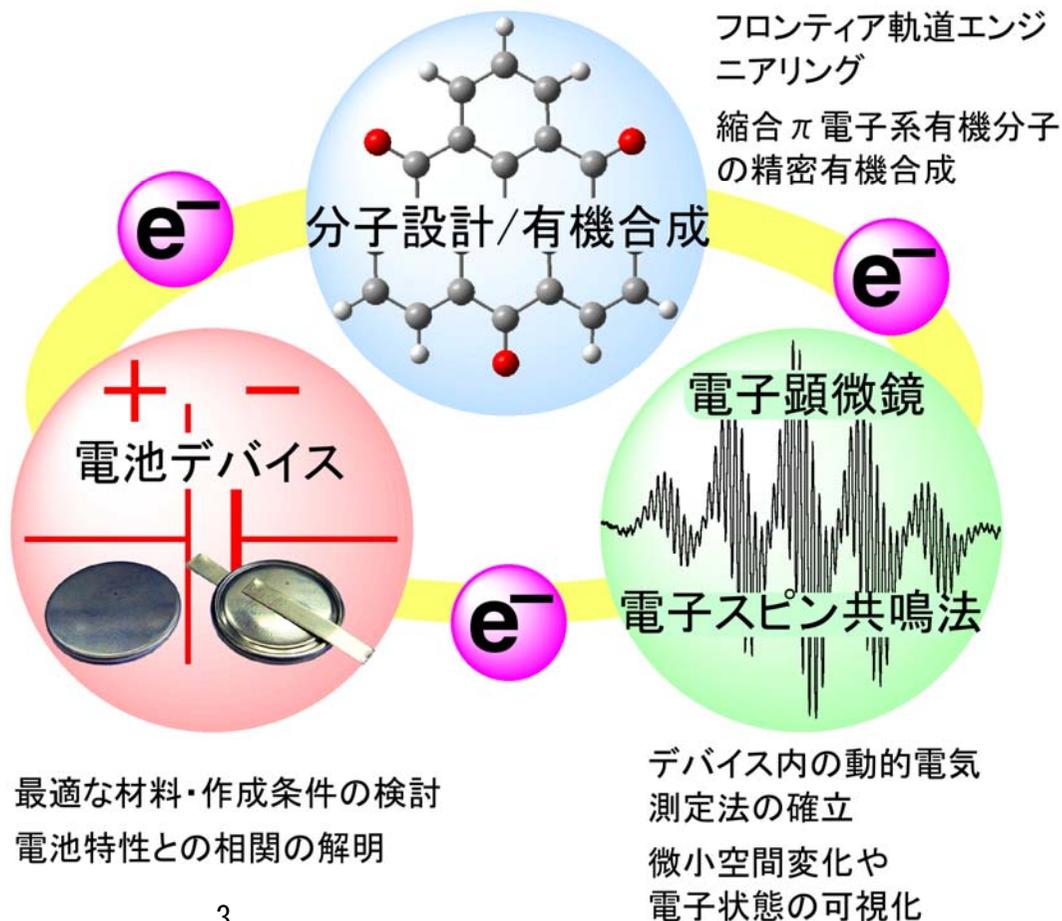
量子化学的計算手法を活用したフロンティア軌道エンジニアリングと精密有機合成

②最適デバイス化手法の確立

有機分子活物質に特化したデバイス化条件・部材の検討

③微視的電子状態の可視化

高分解能電子顕微鏡や *in situ* ESR法を用いた微小空間変化や電子状態を可視化する新技術の開発



複合界面制御による白金族元素フリー機能性磁性材料の開発

筑波大学 喜多英治

背景

情報機器の基幹コンポーネントであるハードディスクでは、記録媒体やヘッドに白金族希少金属の白金やルテニウムが使用されていて、これらに依存しない材料開発が期待されています。

目的

これまで希少金属が中心的な役割を担っていた磁気層間結合や垂直磁気異方性を、フェライト強磁性体と金属の界面の機能で創出し、稀少金属を使わない磁性材料の開発を行います。

内容

①配向酸化物薄膜のスパッタ成長

生産性の高いスパッタ法での高品位スピネル酸化物の成長方法を開発

②複合界面反平行結合の制御

スピネル酸化物と金属界面での反平行結合の機構を解明し実用特性の実現

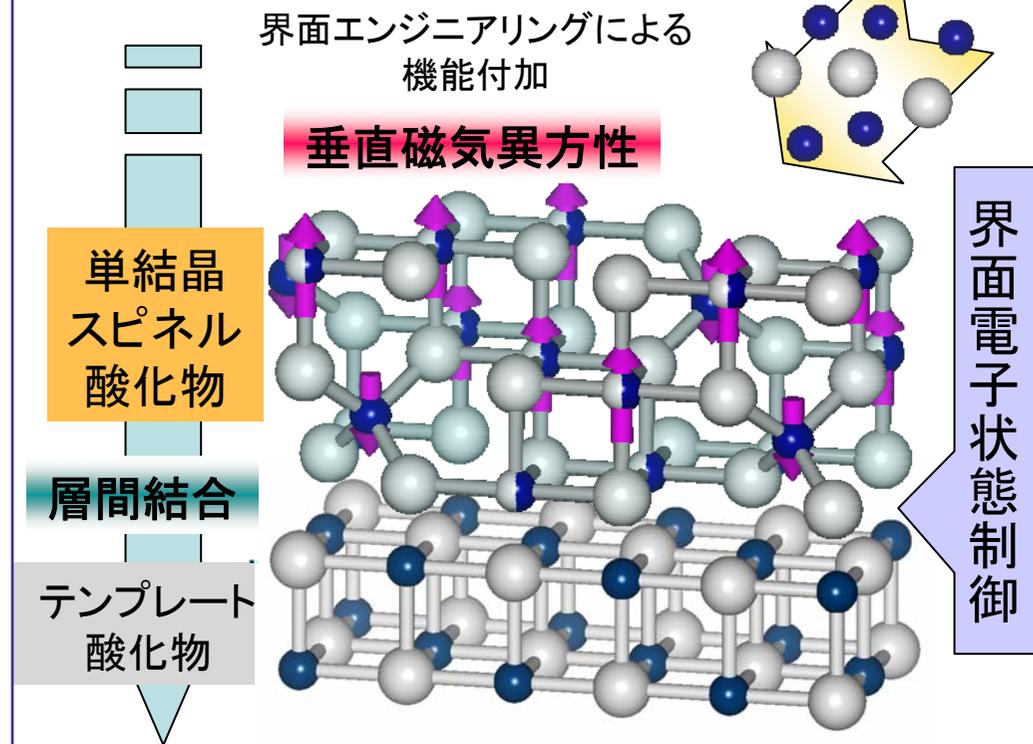
③フェライト垂直磁化膜の達成

界面制御によりCoフェライトの垂直磁気異方性の制御方法を探索

④定量計算理論モデルの確立

層間結合・磁気異方性を包括的に扱う理論手法を開拓し、材料開発に指針を提供

スパッタ法による酸化物薄膜作製



白金族フリー磁気記録、新規酸化物材料開発

エコフレンドリーポストリチウムイオン二次電池の創製

九州大学 岡田重人

背景

リチウムイオン二次電池の用途が小型携帯機器から電気自動車やスマートグリッドへと急拡大するのに伴い、負極用のリチウム、正極用のコバルト等の希少金属資源が切迫しています。

目的

資源枯渇の不安のないNa系負極／鉄系正極二次電池系を実現することで、我が国が戦略商品と位置づける携帯電話や電気自動車の電源供給の不安を材料レベルから抜本的に解消します。

内容

①ナトリウムイオン電池用正極開発

ナトリウムイオンに対しホスト構造となりうる頂点骨格構造をレアメタルフリー非酸化物系をベースに探索

②ナトリウムイオン電池用負極開発

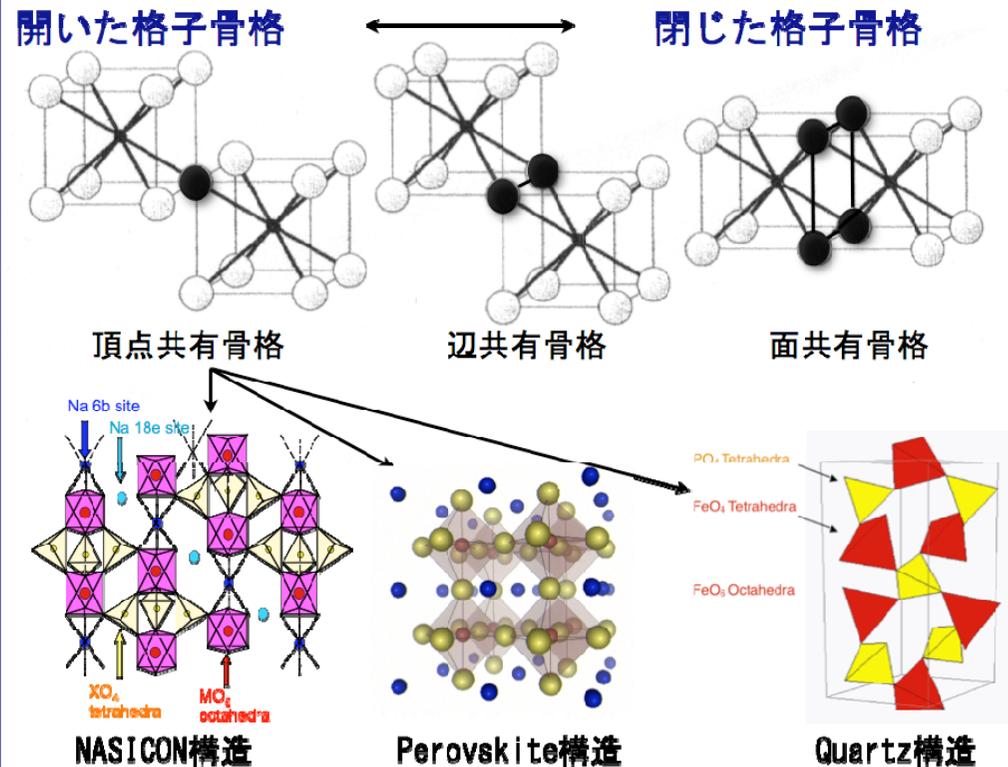
カーボンナノスフィア等の新材料やハードカーボンを中心にナトリウム吸蔵に適した炭素材料を探索

③ナトリウムイオン電池用電解質開発

ナトリウム包接効果のあるポリエーテル系第三成分を添加したイオン液体をベースに探索

④ナトリウムイオン電池の創製

上記①～③の要素材料を元にナトリウムイオン電池を創製、その可逆充放電特性を実証



ナトリウムホスト化合物候補物質群