



「第一原理計算によるGX材料の物性解析と性能設計」

國貞 雄治 工学研究院

附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター
マルチスケール機能集積研究室

email: kunisada(at)eng.hokudai.ac.jp

研究室HP <https://lifm.eng.hokudai.ac.jp/>

関連キーワード「第一原理計算/水素/単原子触媒/吸着・拡散」

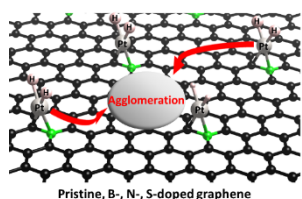
○キャッチコピー

第一原理計算を基軸とした原子・電子スケールからの先端材料解析と新材料設計

○研究の内容紹介

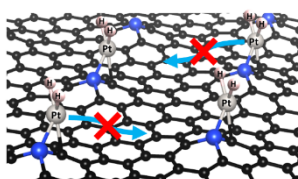
化学結合や電子状態の正確な評価が可能な第一原理計算を用いて、GX材料の物性とその起源を解析しています。得られた知見に基づき、新たな材料の設計・探索を進めています。特に、GX材料の省貴金属化、各種プロセスの省エネルギー化、カーボンニュートラルの実現を目指し、以下の研究を推進しています。

- ・省貴金属・長寿命な触媒材料の開発
- ・触媒や二次電池への応用を目指した新規二次元セラミックスの合成・構造評価
- ・水素透過特性の制御による水素分離膜・水素遮蔽膜の設計

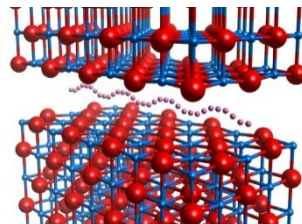


Pristine, B-, N-, S-doped graphene

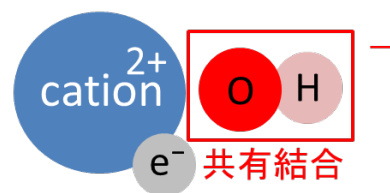
ACS Omega 4 (2019) 6573.



O-, Si-, P-doped graphene
Monovacant graphene



ACS Omega 9 (2024) 13738.



PhysChemPhys 20 (2019) 1369.
Int. J. Hydrog. Energy 97 (2025) 1327.

○社会実装への可能性

- ・貴金属使用量を大幅に削減できる高効率・長寿命な単原子触媒
- ・炭素系や二次元セラミックスなどの非貴金属触媒の開発
- ・水素貯蔵・輸送や核融合発電に求められる耐水素脆化保護皮膜の設計

○産業界や自治体等へのアピールポイント

- ・燃料電池、水素貯蔵、次世代電池、耐水素脆化、防食など、GX実現に直結する多様な技術課題に対応
- ・TEM, STM, AFMなど最先端顕微鏡による材料解析を通じた共同研究実績が多数

研究室Webサイト



Researchmap

