

所属：工学部・工学研究科 分子素材工学専攻 分子設計化学講座 計算化学研究室

 助教 **大西 拓** (おおにし たく)

カテゴリ) 理学(数学・物理学等)、素材、環境・エネルギー

《一言アピール》 量子化学計算を用いて、エネルギー問題や地球環境問題の解決にいかすことのできる新規機能性材料の開発を行っています。

研究テーマ

Research Themes

■ 放射性セシウム高吸着物質のマテリアルデザイン

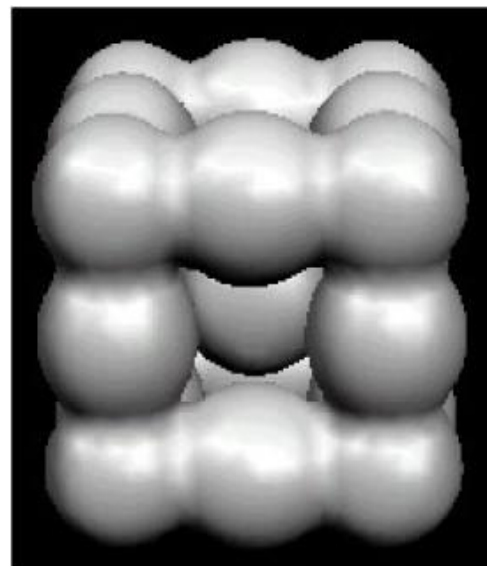
放射性セシウムによる土壤汚染は、福島だけに限らず、世界中で深刻な問題となっている。土壤からセシウムを取り除くために、放射性セシウム高吸着物質の開発が期待されている。セシウムイオンの理論解析を行うことによって、新物質のマテリアルデザインを行う。

■ 燃料電池に用いる酸化物イオン伝導体、 プロトン伝導体のマテリアルデザイン

固体酸化物燃料電池(SOFC)用のイオン伝導体に対して、そのイオン伝導メカニズムを明らかにすることによって、従来にない高いイオン伝導性を示す材料の開発を行っている。これまでに、アルミニウム系ペロブスカイト、チタン系ペロブスカイトにおいて、それぞれ、高酸化物イオン伝導性、高プロトン伝導性を示すことを明らかにした。

■ 二次電池に用いるリチウムイオン伝導体、 ナトリウムイオン伝導体のマテリアルデザイン

これまで、リチウムイオン二次電池用の優れたリチウムイオン伝導体の開発を行ってきた。マンガン系ペロブスカイトにおいて、熱耐久性に優れたリチウムイオン伝導体となることを明らかにした。最近、リチウムイオンばかりでなく、ナトリウムイオン伝導体の開発も行っている。常温で作動するナトリウム硫黄電池の実現を目指している。



計算機シミュレーションによるペロブスカイト型金属固体の電子密度
(三重大学全学シーズ集HPより)

応用分野

- 放射性物質吸着剤
- 燃料電池
- 二次電池材料

保有機器・装置

- 大型計算機システム(極限ナノエレクトロニクスセンター内)

論文

- T. Onishi, Advances in Quantum Chemistry vol. 64, 31-81 (2012) (Review)

講演実績

- 大西 拓、FC EXPO 2012 第8回国際水素燃料電池展
- 大西 拓、FC EXPO 2011 第7回国際水素燃料電池展
- T. Onishi, Lithium Battery Power 2011 (USA)

- 三重大学教員紹介

<http://kyoin.mie-u.ac.jp/profile/1183.html>

☆詳細は、HPをご覧ください。