

カーボンアロイ触媒における酸素還元反応機構の研究

研究背景

水素を燃料とする固体高分子形燃料電池 (PEFC) では、水素を負極で酸化し、空気から取りこんだ酸素を正極で還元することで化学エネルギーを電気エネルギーに変換します。PEFCの本格普及には白金に替わる安価で高効率の正極触媒の開発が必要です。

研究手法

電極反応においては電極電位を考慮する必要があるためシミュレーション法の開発が現在活発に行われています。我々は、Nørskovらによって提案された電極電位の取り扱いと第一原理分子動力学を組み合わせた比較的計算量の少ないシミュレーション法を開発し、カーボンアロイ触媒の活性点を探索しました。

対象物質

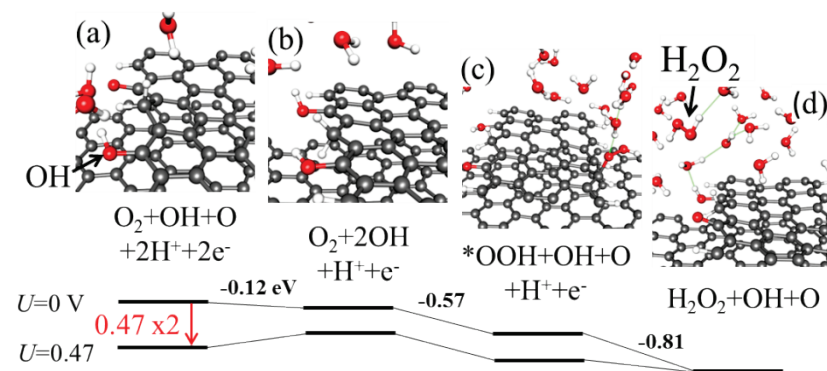
カーボンアロイ触媒 (CAC) は、グラファイト状炭素に窒素やホウ素などのヘテロ原子をドーピングすることによって触媒活性を付与したものです。CACの骨格は主に sp^2 炭素によって構成されているため窒素などをドーピングしたグラフェンナノリボンを計算対象としました。

成果と波及効果

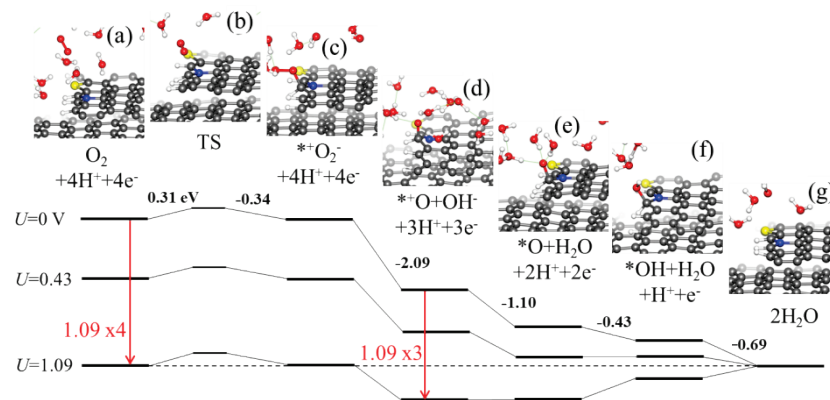
第一原理分子動力学に基づいた化学反応のシミュレーションによりCACにおける酸素還元反応機構の解明に成功しました。シミュレーションから得られた知見を基にしたCACの研究開発により安価で更に高性能の酸素還元触媒が実現すると期待されます。

最近の成果

• 2電子還元反応



• 4電子還元反応



関連論文

- T. Ikeda *et al.*, J. Phys. Chem. C **118**, 17616-17625 (2014).
- G. -L. Chai *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **136**, 13629-13640 (2014).



量子シミュレーション研究グループ 上席研究員 池田 隆司

E-mail: ikeda.takashi@qst.go.jp