

触媒・電池材料領域現状と課題

京大院工、京大 ESICB 田中 庸裕

「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」が掲げるミッションは、1) 電子論が主導する希少元素を用いない触媒材料・二次電池材料の創出、2) 触媒・電池における複合・複雑系の界面現象の科学の深化とそれに伴う、新機構、新概念、新法則の発見と創出、3) 触媒・電池分野で世界を先導し続ける為の次世代人材の養成、の3点である。ターゲットとなる主な元素は、触媒においては、白金族の Pt、Pd、Rh であり、これらの白金族ナノ金属粒子を固体上に展開した担持触媒であり、これらの金属使用量を減量あるいは白金族元素を汎用元素に置換し、触媒パフォーマンスを下げること無く更に向上させることを目的としている。一方、二次電池に関しては、ゲスト Li がターゲットとなっている。現行のリチウムイオン電池を凌駕するナトリウムイオン電池を開発することが中心課題である。

担持触媒においては、ナノ粒子のモルフォロジー、小分子活の活性化やその活性サイト、担体とナノ粒子との相互作用、高温下/触媒条件下のナノ粒子のダイナミクス等を詳細に調べる必要がある。すなわち、固体上でのナノ粒子と吸着分子の幾何学的情報ならびに電子状態を理論/実験の双方からキャラクターゼーションすることが重要である。理論計算科学では、最終的には、金属酸化物表面上の数 10~数 1000 の原子からなるナノ粒子に対して、化学的精度の電子状態計算をせねばならない。現状では、数原子からなるモデル粒子と担体との相互作用を調べている状態であり、計算手法の開発も含め更なる飛躍が望まれる。実験的には、X 線吸収スペクトルが最も有効である。固体表面のナノ粒子と吸着小分子の相互作用に関しては、中性子あるいは X 線の非弾性散乱スペクトルが有効な手段であると考えている。

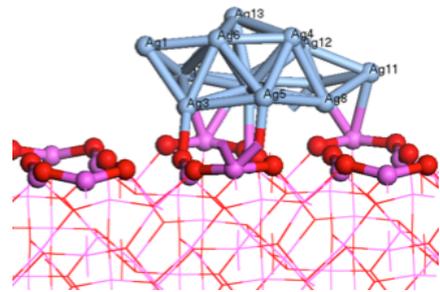


図1 θ -アルミナ上での Ag₁₆ クラスタモデル

二次電池においては、正極・負極物質の探索/設計、電解質溶媒の設計/開発、電極-溶媒界面での化学現象の解明が研究課題となる。電解質溶媒、あるいは、電極-溶媒界面でのダイナミクスにおいては、例えば、リチウムイオン電池の負極近傍で生じる溶媒分子の重合といった SEI 膜形成の初期過程が、CP(Car-Parrinello)-MD 法により一部解明された。また、重合過程をパラメ

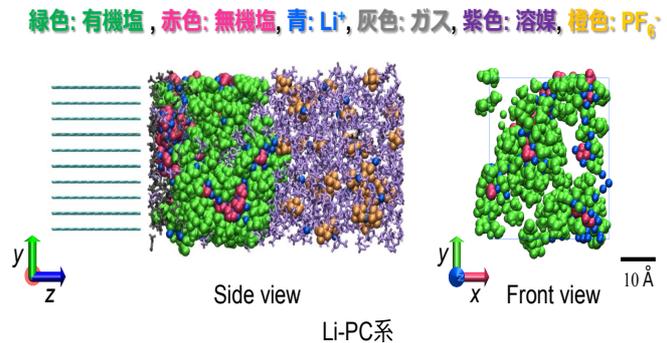


図2 Li-PC 系の SEI 膜シミュレーション

タ化した MC-MD 法により、SEI 膜が初めて再現された。ゲストイオンの移動過程には中性子散乱が、SEI 膜の組成を調べるには硬 X 線による XPS が、さらに、充放電による中心元素の酸化還元挙動には X 線吸収スペクトルが、重要な役割を果たす。