

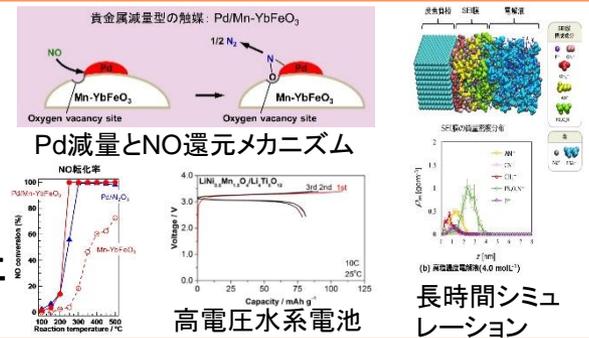
## 研究テーマ：高性能元素戦略自動車触媒と二次電池創成の方法論

## 第2期（H27～29年度）の研究目標

## 自動車触媒のPGM減量と高性能Na電池システム

- ◎触媒担体が関与する反応メカニズムの解明と担体探索
- ◎超高濃度溶液のNa電池への応用と発展
- ◎長時間シミュレーション手法の発展とその場観察システムの構築

→PGM減量三元触媒・高性能Na電池システムのプロトタイプを提示するとともに、作動メカニズムを解明し新規材料開発につなげる。シーズを元に企業と共同研究・開発に発展。



## H27～29年度の代表的な研究成果

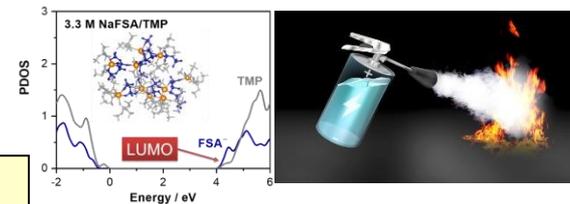
## ◆絶対安全消火性電解液TMP

- ✓消火性のある超高濃度電解液。安定で、高い耐電圧性。絶対安全。
- ✓カウンターアニオンLUMO出現による質の良いSEI膜生成。高いサイクル特性。
- ✓理論・計測に基づく溶液構造の決定。

高密度化・大型化・超寿命・安全性の確保に資する電解液の指針

(山田GL、館山)

J. Wang, Y. Yamada, K. Sodeyama, E. Watanabe, K. Takada, Y. Tateyama, A. Yamada, *Nat. Energy* 2018, 3, 22-29. JP2017-215587



電解質対アニオンに起因する溶液全体でのLUMOの形成が性能の高いSEI膜を形成。不燃性、消火性の電解液を実現。

◆Mn修飾六方晶YbFeO<sub>3</sub>一三元触媒

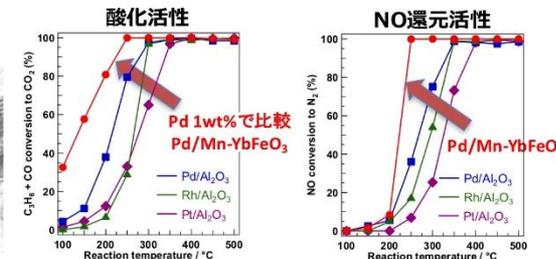
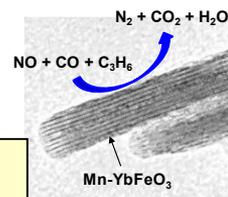
- ✓酸素欠陥によるNOの還元。理論予測によるMnK型NO還元機構。
- ✓Pdは、助触媒。触媒種の還元の低温化、NOの供給ゲートして働く。
- ✓Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>と比較して1/10のPd減量を達成。高い耐熱性。

酸素欠陥を利用したNO還元新MnK型メカニズム

(田中GL、細川、江原GL)

S. Hosokawa, R. Tada, T. Shibano, S. Matsumoto, K. Teramura, T. Tanaka, *Catal. Sci. Technol.* 2016, 6, 7868-7874.

PCT/JP2016/057771



新規NO還元メカニズムにより、酸素空孔でNOを還元。Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>担持PGM触媒に比べ低温活性の大幅増大。1/10までの減量を達成。

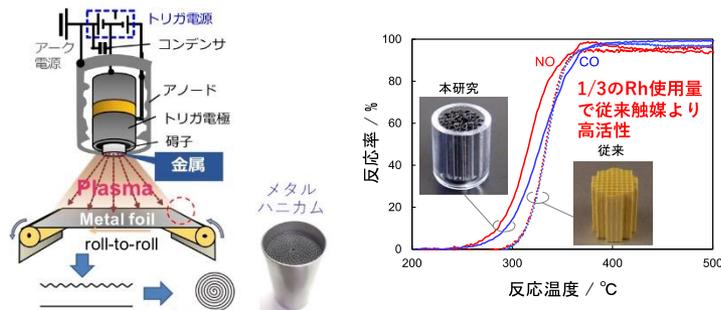
## ◆金属ナノ薄膜による高TOF発現—将来型三元触媒

- ✓アークプラズマ法により、ステンレスシートに二次元Rh箔の形成。
- ✓高いRh TOFの発現—NO還元速度の劇的な向上。
- ✓Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>と比較して1/3のRh減量を達成。

NO還元Rh特定指数面依存性予測の実証

(町田GL、芳田)

S. Hinokuma, S. Mitsui, H. Yoshida, M. Machida,  
Catal. Sci. Technol. 2015, 5, 4249-4257.  
JP2015-166264



アークプラズマ法によりSUSシートに数nmのRh箔を形成。SUSシートをメタルハニカムとし、1/3の減量達成。貴金属上での三元触媒機構に一石を投じた。

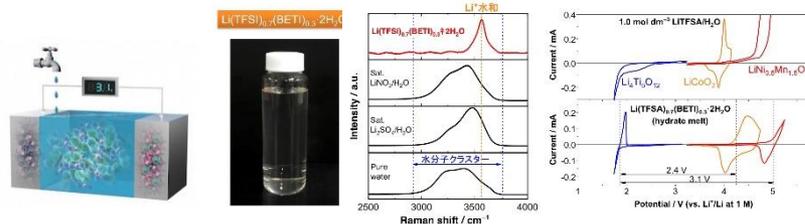
## ◆電解液の新展開—ハイドレートメルトによる高電圧水系電池

- ✓電位窓拡大による3V級フルセルを実現。
- ✓超高速反応、低コスト。
- ✓無毒・高安全、安全機構の簡素化→高エネルギー密度化。

安全・高電圧・高レートを實現する水系電解液

(山田GL、館山)

Y. Yamada, K. Usui, K. Sodeyama, S. Ko, Y. Tateyama, A. Yamada,  
Nat. Energy 2016, 1, 16129.  
PCT/JP2016/000167



ハイドレートメルト。水素結合が観測されない。全ての水分子はLi<sup>+</sup>イオンに配位。シミュレーションで確認。電位窓が広がり、3V高電圧フルセルを達成

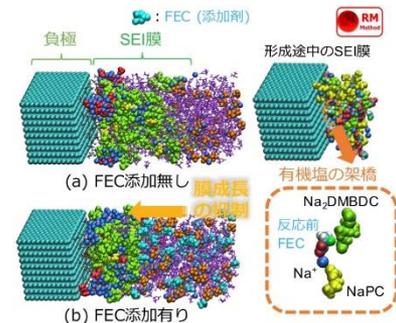
## ◆Red Moon法によるSEI膜生成の長時間シミュレーション

- ✓モンテカルロ法と分子動力学法に基づいた長時間シミュレーションが可能となった。
- ✓SEI膜生成を正確に再現することから、電池のサイクル特性の改善に有効。
- ✓高濃度電解液、一般の触媒反応にも転用可能。

SEI膜形成の長時間シミュレーション

(長岡、駒場GL)

N. Takenaka, H. Sakai, Y. Suzuki, P. Uppala, M. Nagaoka,  
JPCC 2015, 119, 18046-18055.  
N. Takenaka, T. Fujie, A. Bouibes, Y. Yamada, A. Yamada, M. Nagaoka,  
JPCC, 2018, 122, 2564-2571.



Red Moon法による、SEI膜生成のシミュレーション。添加剤の有無による差を再現している。