

報道機関 各位

国立大学法人電気通信大学

水素社会のコストを劇的に下げる！ 安価な炭素触媒を「設計」で高性能化する指針を確立

【ポイント】

- * 「高価なプラチナ」を使わない
: 安価な炭素材料（窒素ドーピンググラフェン）が燃料電池の触媒としてプラチナ以上の性能を発揮する条件を解明。
- * 「電気の相性」が鍵
: 触媒とそれを載せる土台（基板）との間の「電子を引きつけるエネルギー（仕事関数）」の差が、性能を決定づけることを発見。
- * 水素社会を加速
: 勘に頼らない「理論的な設計図」により、安価で高性能な燃料電池の開発が劇的に加速。

【概要】

電気通信大学大学院情報理工学研究科基盤理工学専攻博士後期課程3年佐藤翔太氏と同専攻の中村淳教授のグループは、水素から電気を作る究極のクリーンエネルギーである「燃料電池」について、その普及の大きな壁となっている高価で希少なプラチナに代わり、安価な炭素材料である「窒素ドーピンググラフェン（※1）」を用いた触媒についてコンピュータシミュレーションを用いた解析を行い、触媒とそれを載せる土台（基板）との間の「電子を引きつけるエネルギー（仕事関数（※2）」が性能を左右する決定的な要因であることを突き止め、プラチナを超える性能を発揮する条件を解明しました。

また、この仕事関数の差を最適に調節することで、反応効率が山なりに変化する法則（ボルケーノ・トレンド（※3））があることを突き止めました。

本成果は、安価な燃料電池の実現に向けた画期的な指針となります。

【背景】

燃料電池は、水素と酸素から電気を作り、水しか排出しないため、地球温暖化対策の切り札として期待されています。しかし、酸素を水に変える反応（※4）を促す触媒には、非常に高価なプラチナが必要不可欠でした。世界中でプラチナに代わる安価な炭素触媒の研究が進められてきましたが、触媒を担持する土台（基板）が触媒の機能にどのように影響を及ぼすのかについて、統一的な見解はこれまでに得られていませんでした。

【手法】

研究チームは、コンピュータ上での精密なシミュレーション（第一原理計算（※5））を用い、炭素触媒（窒素ドーピンググラフェン）をさまざまな「土台（基板）」に載せた時の反応を詳細に調べました。特に、ナノメートルスケールの小さな隙間を介して、触媒と土台（基板）の間でどのように電子がやり取りされるかに注目しました。

【成果】

解析の結果、燃料電池触媒の性能は、土台（基板）となる材料が持つ「電子を引きつけるエネルギー（仕事関数）」によって支配されていることが判明しました。このエネルギーが大きすぎても小さすぎても性能は上がり、特定の「絶妙なバランス」になったときに効率が最大になる「山（ボルケーノ）型の法則」があることを発見しました。さらに、この「最適な電気のバランス」を実現する組み合わせを選択することで、安価な炭素材料触媒を用いて、高価なプラチナ触媒の性能を上回る効率で反応が進む条件があることを示しました。

【今後の期待】

これまでは「とりあえず混ぜて試してみる」といった試行錯誤に頼っていた新材料の開発が、今回の発見により、理論に基づいた正確な「設計図」に従って行えるようになります。これにより、燃料電池車や家庭用発電機のコストが大幅に下がり、誰もがクリーンな水素エネルギーを身近に利用できる社会の実現が大きく近づくこと期待されます。

（論文情報）

タイトル : Origin of the Volcano Trend in the ORR Activity of N-Doped Graphene Supported on Carbon Substrates: The Dominant Role of Work Function Differences

著者 : Shota Sato, Taichi Takashima, Akira Sumiyoshi, Ranferi Cancino Betancourt, Jun Nakamura*

掲載誌 : Langmuir ASAP Article

DOI : 10.1021/acs.langmuir.6c02318

（外部資金情報）

本研究は JSPS 科研費基盤研究(C) (JP24K08242) 並びに基盤研究(A) (JP23H00301) の支援を受けて行われました。

（用語説明）

※1 : 窒素ドーピンググラフェン

炭素原子が蜂の巣状に並んだ「グラフェン」に、わずかに窒素を混ぜた材料。安価で丈夫な触媒候補。

※2 : 仕事関数

仕事関数は、固体表面から電子を一つ取り出し、真空中（無限遠方）へ放出させるために必要な最小のエネルギー。すなわち固体がどれくらいのエネルギーで電子を引き付けるかを表す指標。

※3 : ボルケーノ・トレンド

ある条件を変化させたとき、グラフが火山（ボルケーノ）のように、ある一点で最高の性能を示す現象。

※4 : 酸素を水に変える反応

燃料電池の中で電気を作るために必要な化学反応。この反応がスムーズに進むほど、電池の性能が高くなる。

※5 : 第一原理計算

量子力学の基本方程式であるシュレディンガー方程式を、基礎的な物理定数のみを用いて原子レベルで解いて、物質の電子状態を計算する方法。

【連絡先】

<研究内容に関する事>

電気通信大学大学院情報理工学研究科

【職名】教授

【氏名】中村 淳

Tel : 042-443-5156 E-Mail : jun.nakamura@uec.ac.jp

<報道に関する事>

電気通信大学総務部総務企画課広報係

Tel : 042-443-5019 Fax : 042-443-5887

E-Mail : kouhou-k@office.uec.ac.jp