

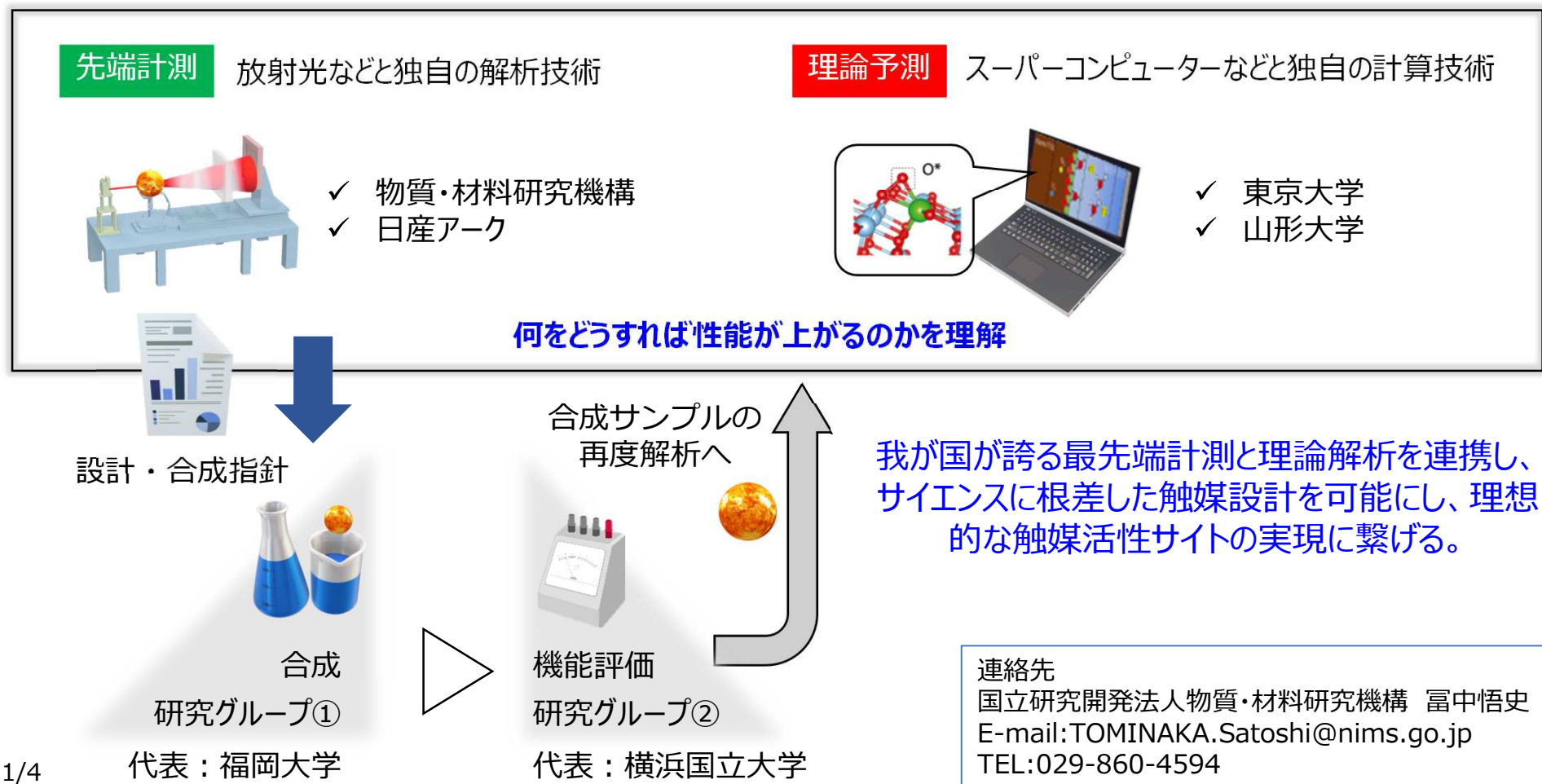
事業名：燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業/水素利用等高度化
 先端技術開発/超高電位を目指した酸化物カソードの開発・先端計測と理論解析による触媒能発現機構の解明
 発表者名：物質・材料研究機構、東京大学、山形大学、日産アーク

A-28

○事業概要

目的：酸化物触媒の本質を理解することで、Pt触媒を凌駕する理想的な触媒の開発を目指す。

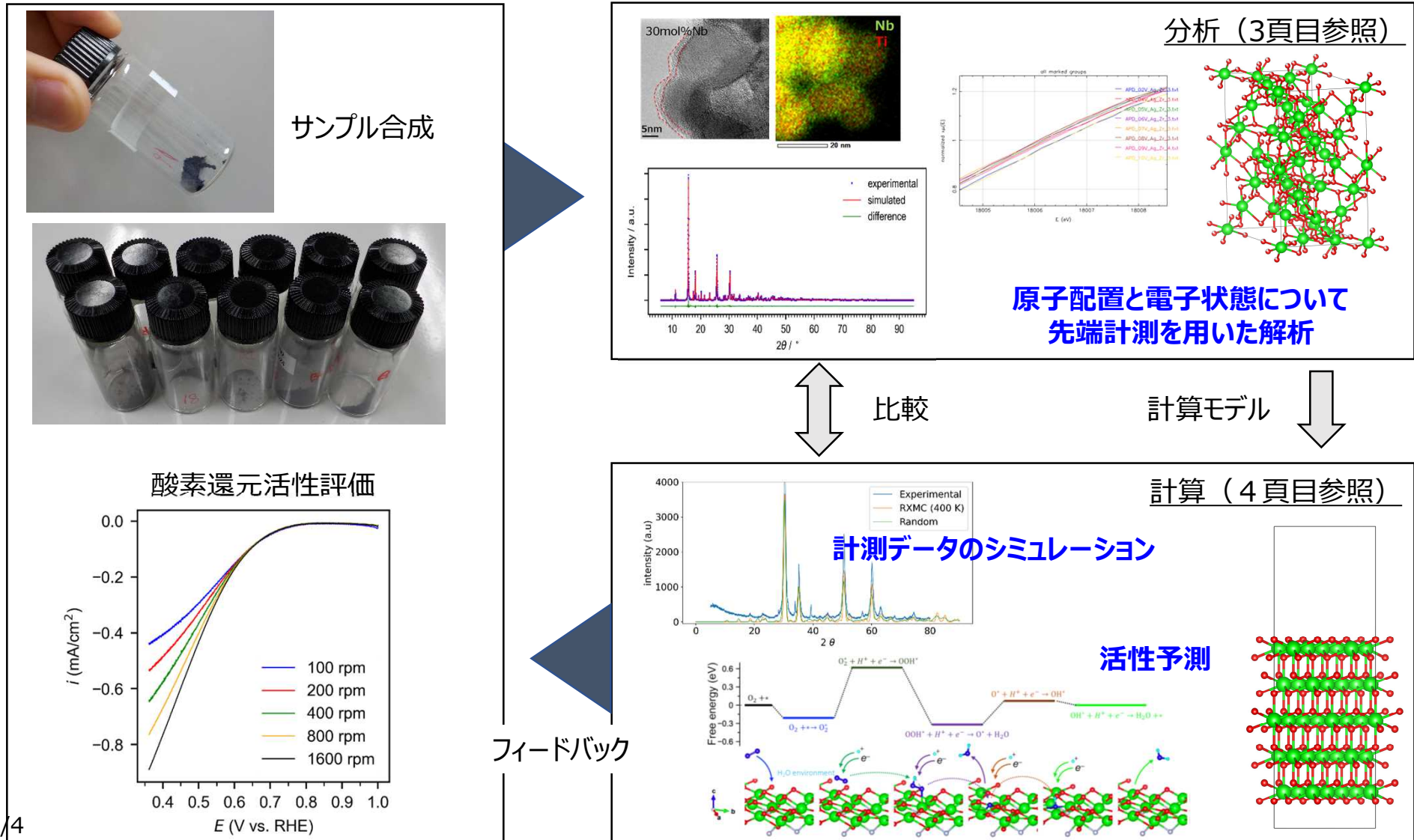
背景：多様な構造を有する酸化物は貴金属触媒を凌駕する理想的な触媒活性サイトを形成する可能性が理論予測されているものの、現実の触媒の理解は充分ではなく、性能支配因子が不明である。



計測と計算の協奏

A-28

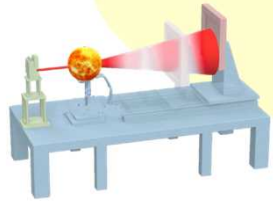
- 多様な酸化物触媒の中で何をどうするか？
- 過去の知見が比較的多い酸化ジルコニウム系に焦点を当て、実験と理論の両方から深く理解を目指す



複雑な材料をいかに分析するか？

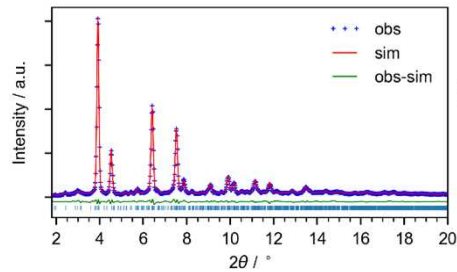
SPring-8などの大型施設

+
データ解析
+
計算化学

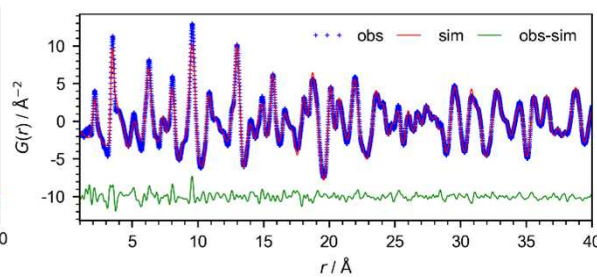


構造解析

X線回折解析

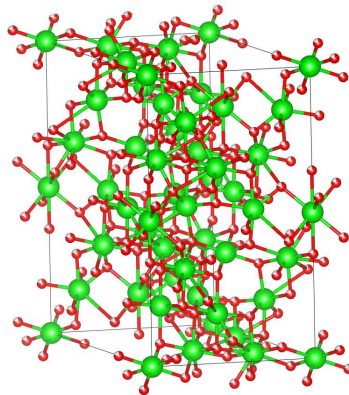


二体分布関数解析



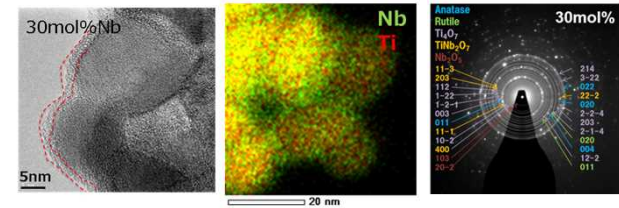
他の計測データも含めて、シミュレーションを行いながら原子の配置を決定

原子の配置・構造の歪に至るまで解明
(計算化学との橋渡し情報)



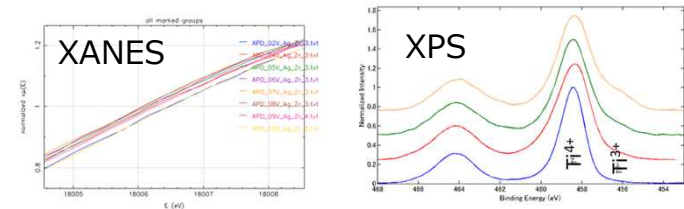
3/4 原子配置 (原子構造) を軸に実験と理論の比較が可能に

電子顕微鏡観察



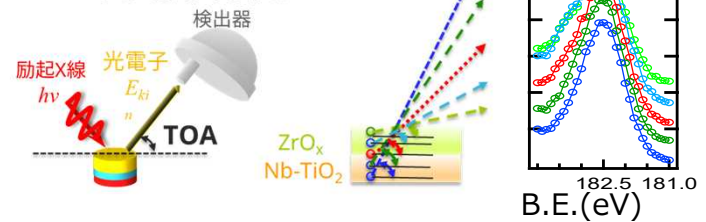
元素分布・サイズ・結晶構造などの評価
(空間分布の理解へ)

X線吸収分光・光電子分光



サンプルの元素ごとの電子状態解析
(価数を含めた組成の理解へ)

角度分解高エネルギー
光電子分光

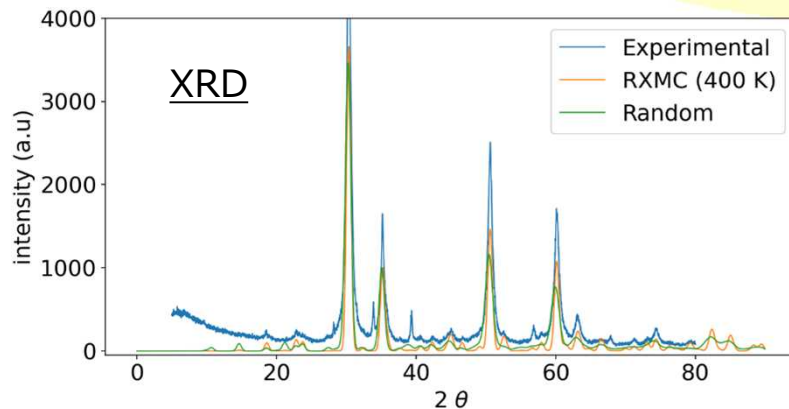
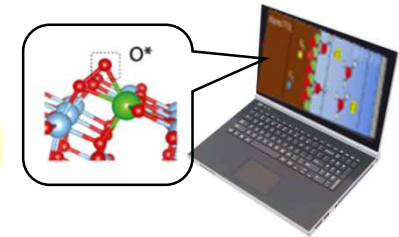


触媒の表面近傍の深さ方向の分析
(界面状態の理解へ)

複雑な現実をいかに計算するか？

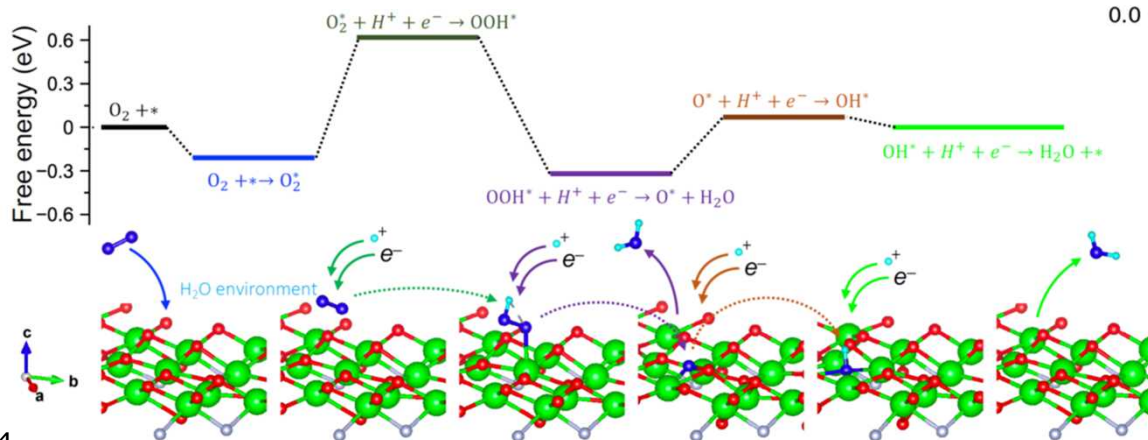
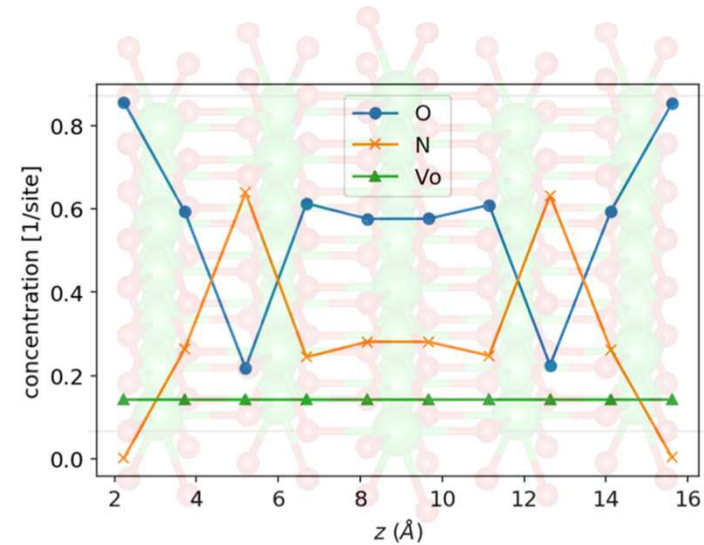
A-28

「富岳」などの大規模スーパーコンピュータ
 +
 第一原理計算
 +
 機械学習を活用した大規模統計熱力学サンプリング



実験と比較できるシミュレーションデータ
 (XRD, PDF, XAFS etc.)

実験では分析が容易ではない界面状態の理解



吸着中間体を理解することで活性予測

酸素空孔や窒素不純物の働きにより反応の障壁が下がり、白金を超えた活性を示す様子が明らかになった。