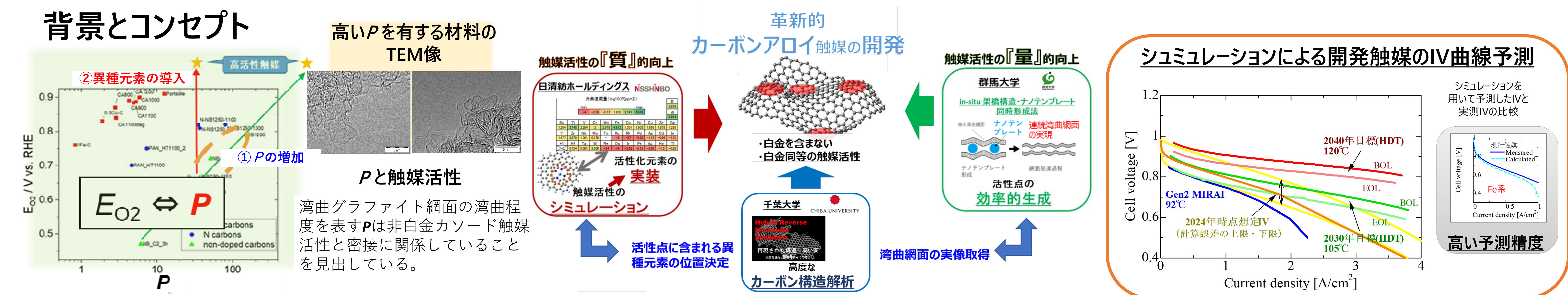


【現在の開発目標の背景】

2030年、2040年目標値を実現するための非白金カソード触媒ー連続した湾曲網面を持つカーボン担体に鉄以外の活性化元素を導入した触媒ーの開発研究を進める。この研究により、発電性能0.84 V@0.2 A/cm² 0.66 V@3.8 A/cm² を満たすための、材料工学的な道筋を明らかにする。なお、これらの触媒の活性は、予め日清紡HDの量子ー電気化学シミュレーションから予測されており、設定した目標が実現可能なものであることを確認している。

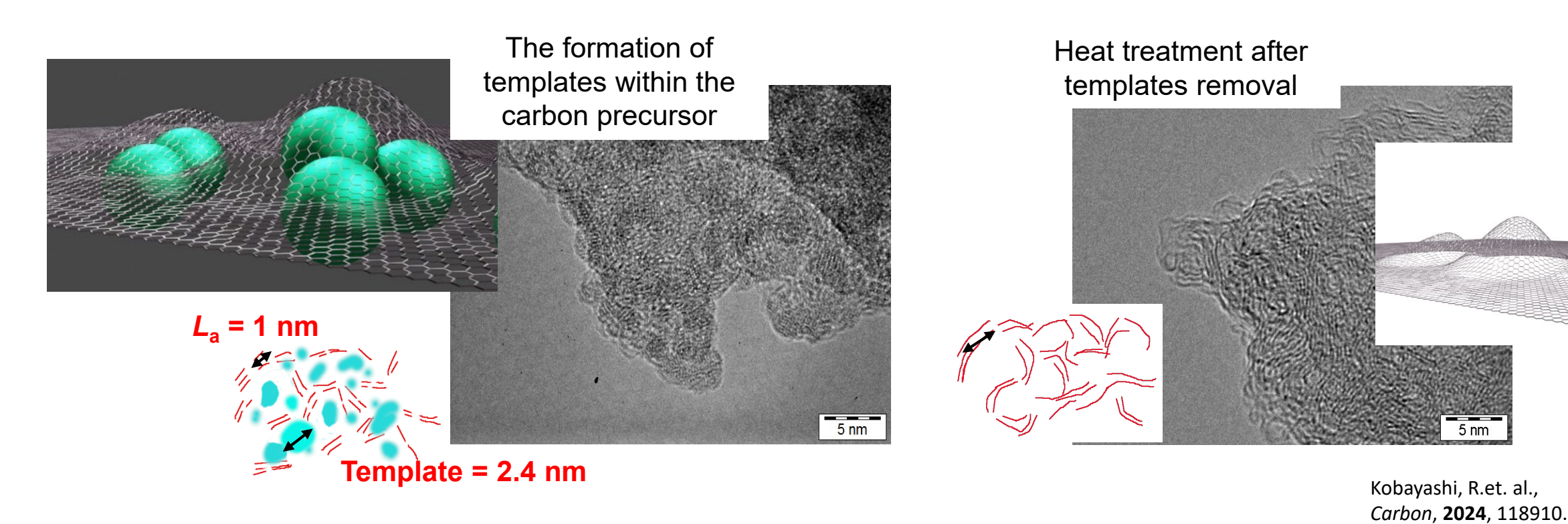
背景とコンセプト



成果①：HRMDシミュレーションによる触媒設計指針の提示とその検証

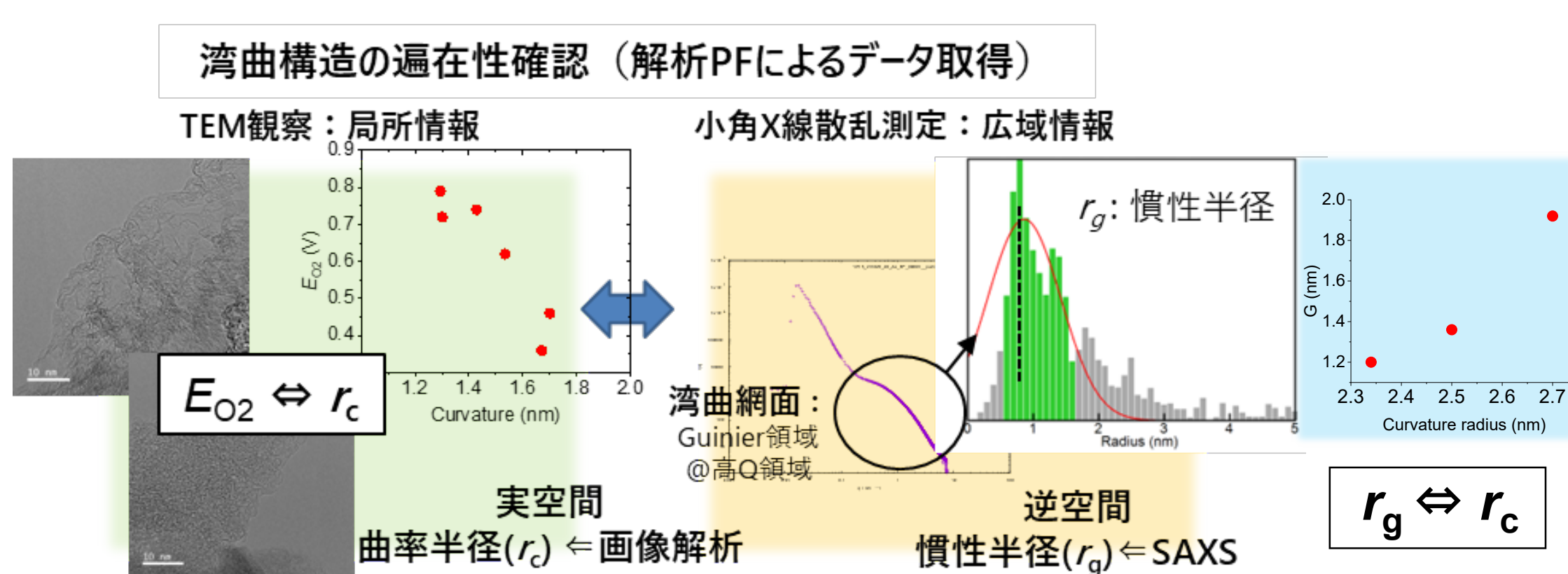
2021～2022 in-situ ナノテンプレート法による湾曲グラファイト網面の調製とその構造評価

(1) in-situナノテンプレート法



通常、平面構造を形成するグラファイト網面を湾曲させるために群馬大学ではin-situナノテンプレート法を開発した。本手法ではグラファイト網面の発達と同時に金属粒子を析出させ、数nmオーダーの湾曲グラファイト網面の調製を達成した。

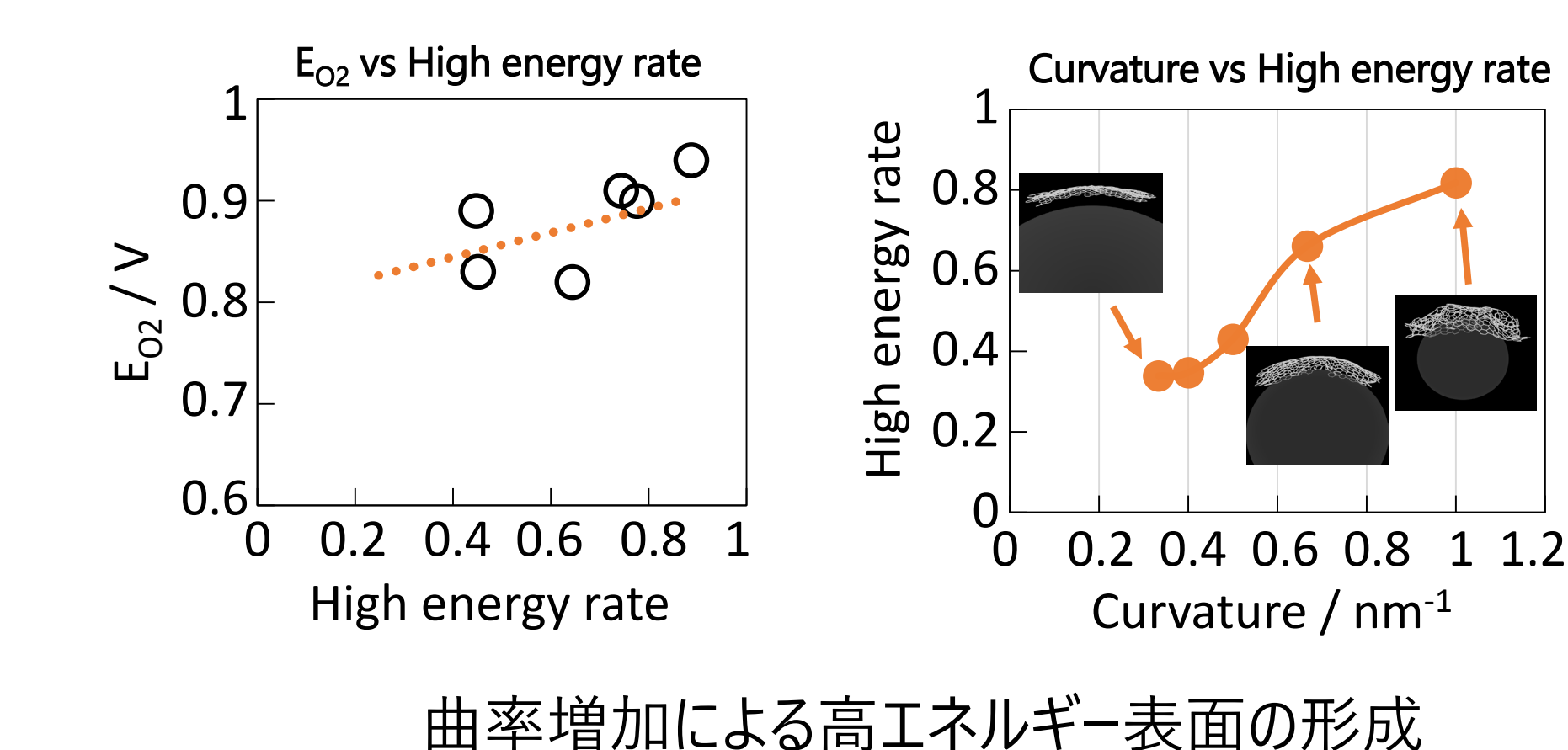
(2) TEMおよびSAXS測定による構造評価



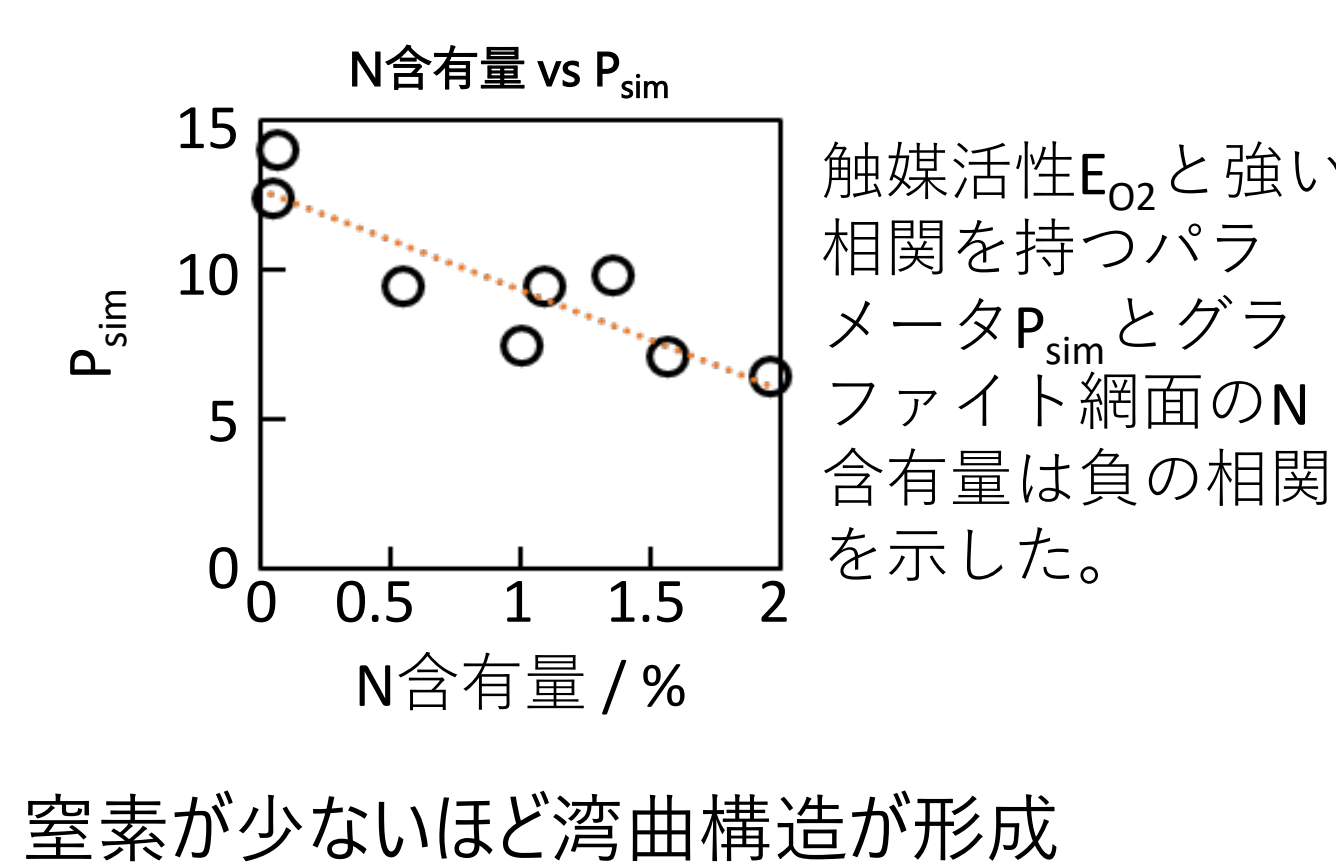
調製した湾曲グラファイト網面のTEMから湾曲構造の曲率半径 r_c を、SAXSでは慣性半径 r_g を求めたところこれらのパラメータは良い相関関係にあった。よって、in-situナノテンプレート法で調製した湾曲網面構造の偏在性を確認した。

2023 シミュレーションとカーボン合成の融合

(1) XRD-HRMDシミュレーションに基づく担体カーボン設計指針の提示

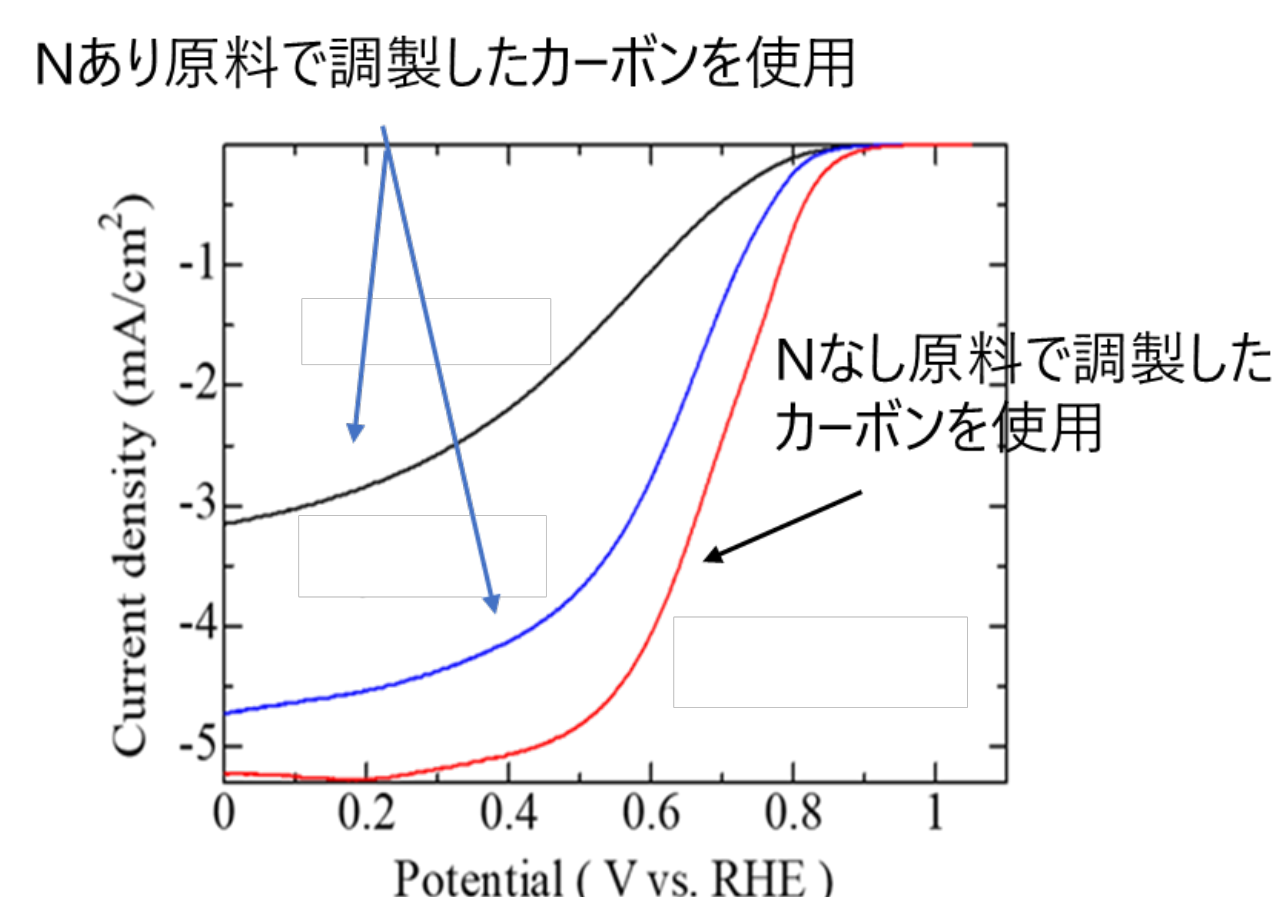


触媒活性 E_{O_2} とHigh energy rateには強い相関がみられ、高エネルギー構造を創ることで活性の向上が見込まれる。高エネルギー構造を創る方法を検討したところ、グラファイト網面の曲率を増加させることで、高エネルギー化されることが明らかとなった。



触媒活性 E_{O_2} と強い相関を持つパラメータ P_{sim} とグラファイト網面のN含有量は負の相関を示した。

(2) 触媒調製の実践による提示指針の実証

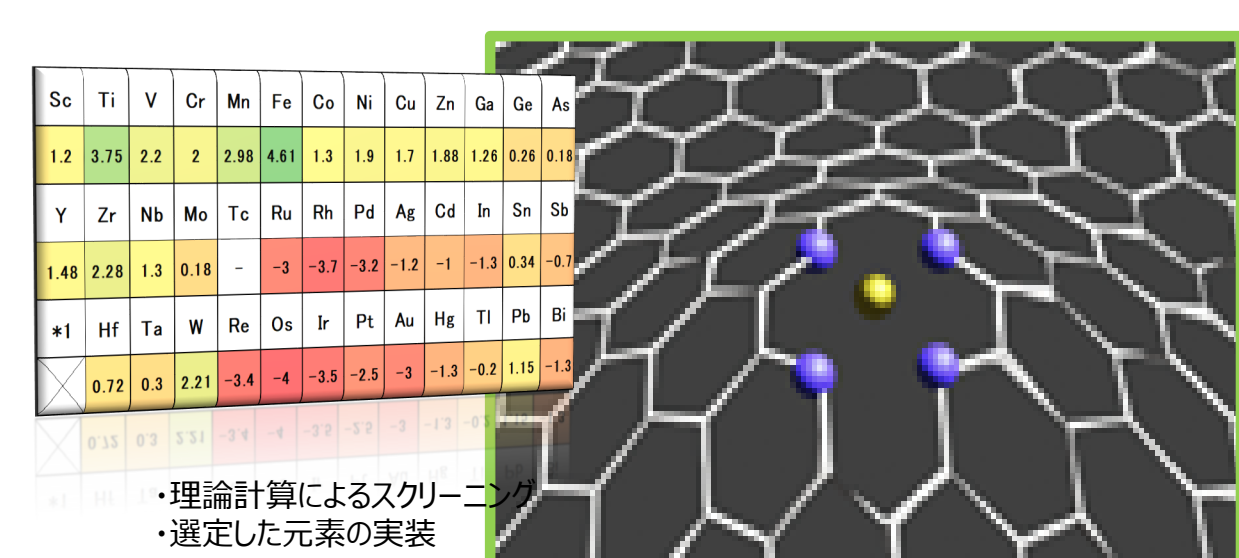


設計指針① テンプレート粒子径の減少

設計指針② 窒素不含原料の使用

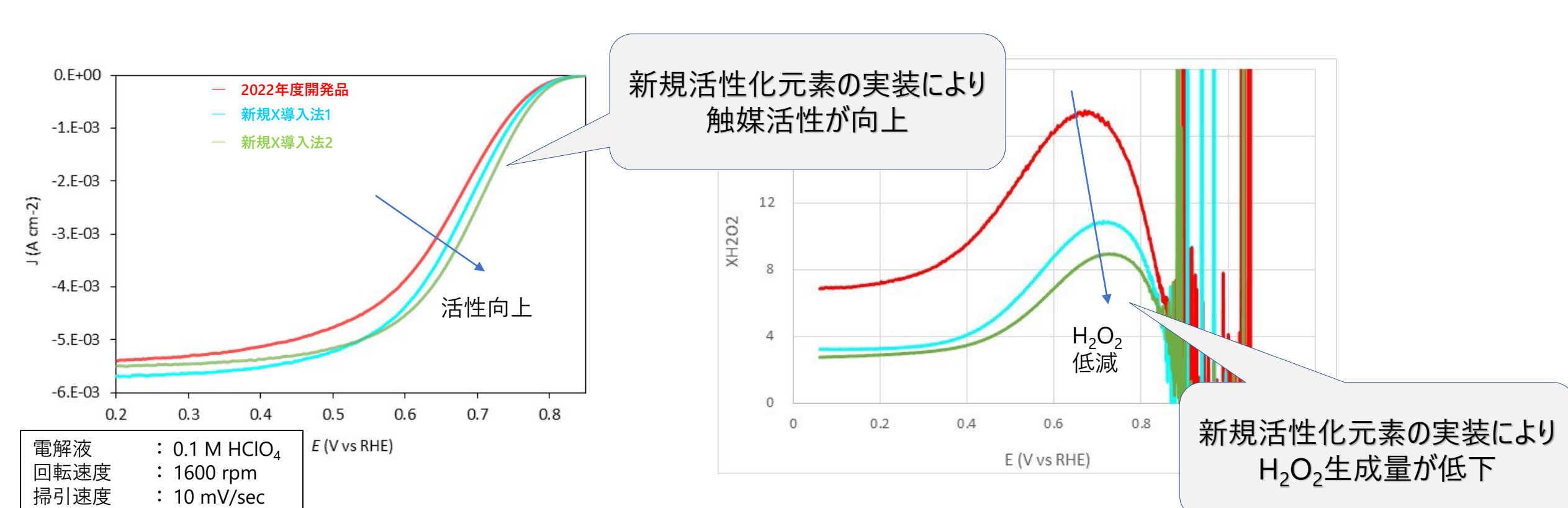
設計指針①、②に基づいた調製法により高活性をもたらすカーボン担体ならびに触媒を得た

成果②：Fe以外の活性化元素探索とその発電特性評価



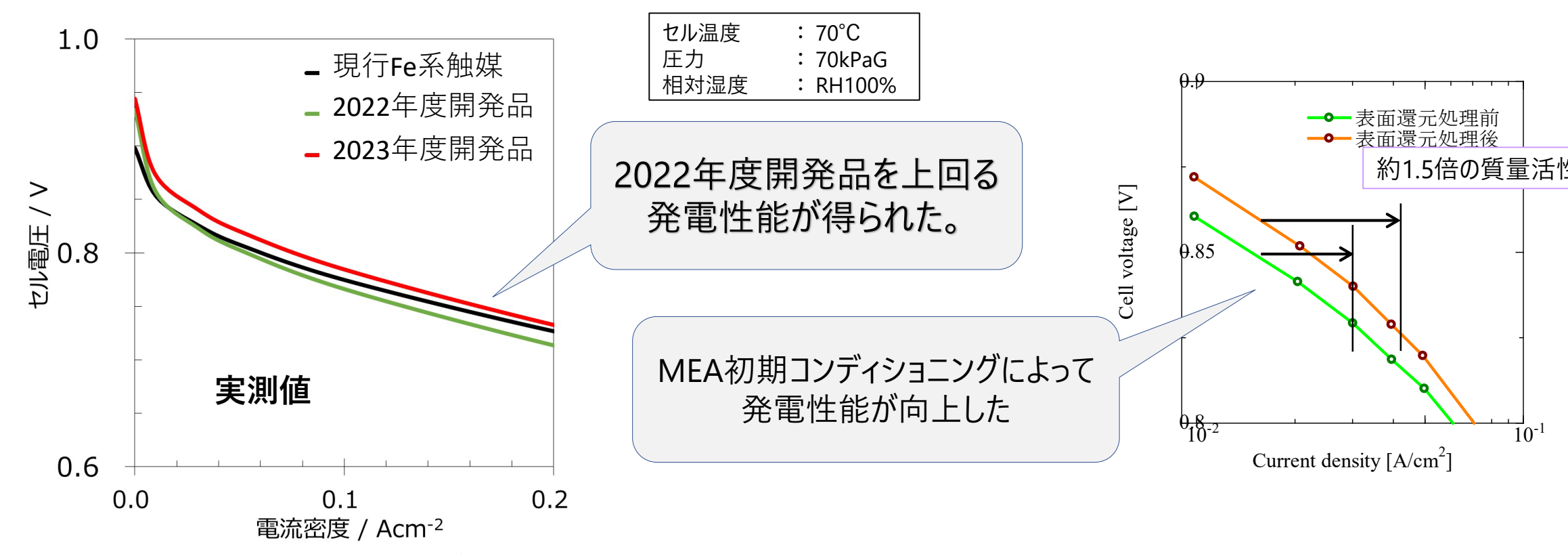
日清紡HDが有する「触媒性能予測技術」を用いてFeに替わる新規活性化元素を探索し、実装・性能評価する

(1) 計算化学による新規活性化元素のpick-upとその実装



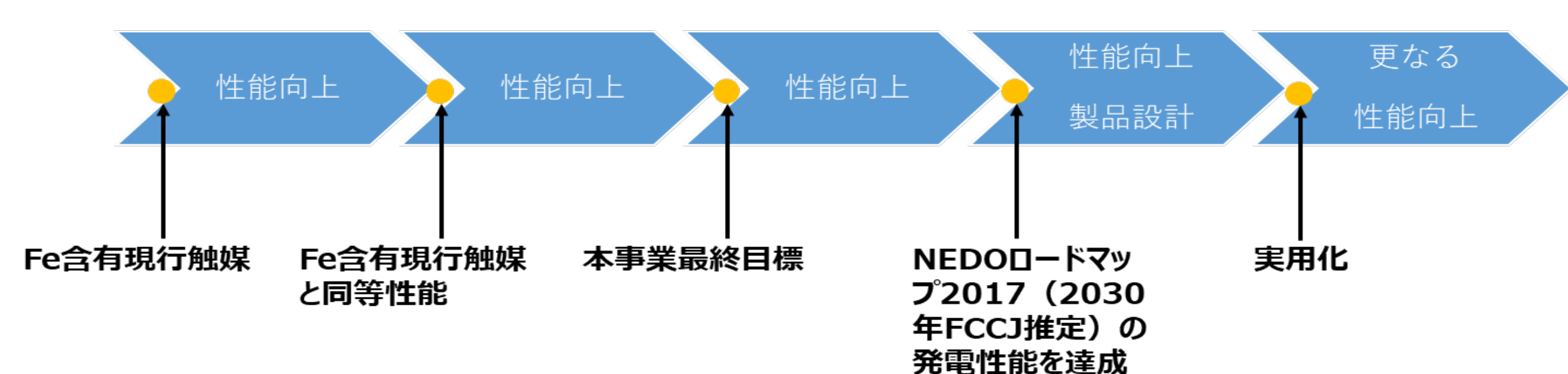
新規活性化元素によるORR特性の向上

(2) 新規活性化元素触媒を用いたMEA発電前処理法の確立



Pt/Cとは異なる活性化前処理法の発見とその実装によるMEA発電特性の向上

【日清紡ホールディングスによる実用化】



- ・2022年度末：Fe含有現行触媒と同等性能を達成
- ・2024年度末：本事業最終目標を達成
- ・2030年度末：製品開発完了（本事業の成果をもとに実施）
- ・2035年：実用化・事業化（日清紡ホールディングス）

(*) 発電性能0.84 V@0.2 A/cm² 0.66 V@3.8 A/cm²