

触媒・電池材料拠点：次に期待できるもの

03

ESICB: What comes next?

田中庸裕 tanakat@moleng.kyoto-u.ac.jp

京都大学大学院工学研究科

触媒・電池材料拠点 ESICB では、今後の情勢や資源利用などに鑑み、自動車排ガス浄化触媒における白金族元素の使用量の節減ならびに代替、リチウムやコバルトを使用しない蓄電池に関する方法論開発を推進している。

それぞれの分野において、得られたものは次のようなものである。

(1) 自動車排ガス浄化触媒

- ・Rh(111)面配向型ナノフィルム触媒による Rh 量節減
- ・MvK 型 NO 還元機構を活かした担体探索による Pd 量の節減。
- ・微量貴金属を含んだ合金ナノ粒子触媒を用いた貴金属使用量の節減
- ・三元触媒反応を二段階に分け、二種触媒をタンデム型配置にして、初めて貴金属フリーを実現。
- ・模擬排ガスをを用いた作用条件下オペランド計測

(2) 二次電池

- ・3.8 V 級アルオード型正極やキャパシタンス様負極である MXene などメカニズムも従来のものとは異なる多種多様なナトリウム電池電極を作成。
- ・超濃厚電解液の多彩な機能(高サイクル、高レート、高電圧作動、消火性、耐腐食性)
- ・ハイドレートメルトの発見(初の水系 3V 電池)
- ・マルチスケール電解液シミュレーション: 溶液の DOS から SEI 膜生成過程とその組成まで

これらの成果に関連する材料あるいは技術は、多くの産学連携・共同研究として発展・進行している。

最終期間である次の2年間に集中すべき研究は、次のとおりである。触媒分野においては、

- 1) 貴金属フリーの触媒の機作の解明、実用に耐えうる三元触媒材料の設計
 - 2) より低温(<200°C)で作動する三元触媒の開発
- 二次電池においては、
- 3) 実用的 Na 電池実現のためのハードカーボン負極の高性能化(高容量)
 - 4) 超濃厚電解液の高電圧耐性に基づいた高電圧正極の探索
 - 5) Na 全固体電池の実現

1)に関しては、何が NO の低温還元を妨げているのかをその場観察と電子論的手法で明らかにし、データサイエンス的手法で材料探索を進め、高耐熱性の触媒に発展させることが重要となる。

2)に関しては、低温でドミナントとなる MvK 型 NO 還元メカニズムを活用することが肝要になる。MvK 型 NO 還元メカニズムが展開される反応場を明らかにし、活性酸素種を実証していく。

3)負極に用いる元素の資源量や毒性を考慮すると、実際的な選択はハードカーボンである。原料、焼成温度など各種パラメータを最適化していく。

4)高エネルギー密度電池の製作方針としては、超濃厚溶液の耐電圧性に基づけば、高電圧系正極材料が一つの解である。Kも含め、高電圧系正極設計の方法論を立てる。

5)Na全固体電池作成におけるボトルネックは、固体電解質の伝導度である。Naイオンはルイス酸性が低く、類似構造ではLiイオンに比べ、移動度が高いと期待されるにも関わらず、これまで高い伝導度を持つ固体電解質は見出されていなかった。林らはNa₃SbS₄の一部SbをWで置換し、Na欠陥を形成したNa_{2.88}Sb_{0.88}W_{0.12}S₄が、基準物質であるLGPSを凌駕する伝導度を持つことを見出した[1]。

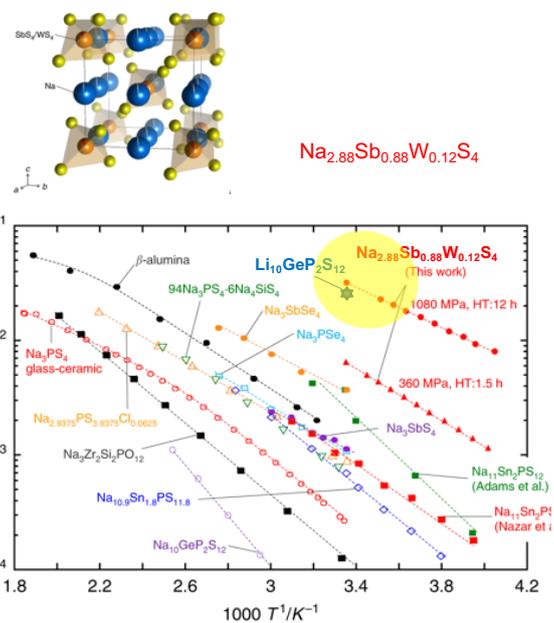


図 Na イオン固体電解質の伝導度と Na_{2.88}Sb_{0.88}W_{0.12} の構造

[共著者(所属)]

山田淳夫(東京大院工)・江原正博(分子研)

[参考文献]

[1] A. Hayashi et al. *Nat. Comm.* **10**, 5266 (2019)