

電極触媒の電子状態解析
Electronic Structures of Electrocatalysts

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 工業電気化学分野 宮崎 晃平

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、次世代の電気化学エネルギーデバイスであるアルカリ形燃料電池および金属-空気二次電池で用いられる酸素電極触媒の電子状態解析を行った。

特にペロブスカイト型酸化物を中心に、酸素還元および酸素発生反応の反応エネルギー変化を検討し、実験的に得られているペロブスカイト型酸化物の B サイト金属依存性や結晶面依存性を理論的に支持する結果が得られた。

今後は、酸素の不定比性などが酸化物触媒の物性に与える影響について、より詳細に検討を進める予定である。