



安価で高活性な水電解用 カルシウム-鉄酸化物触媒を開発

東京工業大学の菅原勇貴助教、鎌田慶吾准教授、山口猛央教授と物質・材料研究機構の石川敦之主任研究員、館山佳尚グループリーダーらの研究グループは、水電解による水素製造のための電極触媒として、カルシウムと鉄から成る非常に安価で高活性な複合酸化物 CaFe_2O_4 を開発した。

現在風力/太陽光由来の電気を用いた水電解による水素製造が注目されている。当研究グループは、リンゴ酸を用いたゾルゲル法により鉄原子同士が密に結晶化した複合酸化物 CaFe_2O_4 を合成した。当触媒の表面反応を第一原理計算(密度汎関数法)により解析した結果、触媒表面の近接した鉄3原子が協働して

反応サイトを担う「multi-iron-site メカニズム」の存在が判明し、高い触媒活性が予想された。実際に水電解アノード反応に対する CaFe_2O_4 の表面比活性を測定すると、他の鉄系複合酸化物およびベンチマーク触媒である酸化イリジウムをも上回る、優れた活性を示した。

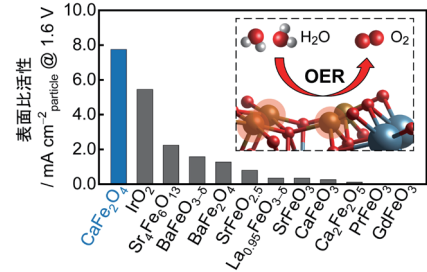
本研究で開発した CaFe_2O_4 は、極めて安価、低毒性、簡便合成、そして高い触媒活性という利点があり、脱炭素ソリューションとしてのエネルギー変換技術の普及拡大の観点で重要な成果である。

この成果の一部はNEDOの委託業務(JPNP14021)の一環として、またJST さきがけおよびHPCIの助成により得られた。

東京工業大学
科学技術創成研究院 化学生命科学研究所
助教 菅原勇貴
連絡先: 〒 226-8503 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259, R1-17
E-mail: sugawara.y.aa@m.titech.ac.jp

物質・材料研究機構
エネルギー・環境材料研究拠点
主任研究員 石川敦之
連絡先: 〒 305-0044 茨城県つくば市並木 1-1
E-mail: ISHIKAWA.Atsushi@nims.go.jp

URL <https://www.titech.ac.jp/news/2021/049081>
[2021年6月7日]



チタン酸バリウムナノキューブの合成と その粒子表面の原子配列の可視化

セラミックコンデンサは、携帯電話やパソコンなどに幅広く利用されており、主に主にチタン酸バリウム (BaTiO_3) が使われている。 BaTiO_3 は強誘電体としての性質を有し、この誘電特性を向上させることはさらなる高性能小型電子デバイスの開発につながる。本研究では結晶面(ファセット)が露出した BaTiO_3 のナノキューブ化に取り組み、さらに粒子表面の原子配列の可視化を目指した。粒子両面の原子配列を明らかにすることは、革新的な材料の創生につながり、粒子表面の科学という新しい研究分野を切り拓く。

80°Cでの BaTiO_3 の合成

BaTiO_3 ナノキューブの合成に取り組んでいる過程で、80°Cという低温で BaTiO_3 を合成できることを見出した。一般に、 BaTiO_3 は1000°C以上での焼成を必要とするが、本研究では原料である酸化チタン (TiO_2) の粒

径に着目し、25nm以下の TiO_2 ナノ粒子を用いて溶液反応を行うことによって、40°C以上で BaTiO_3 が生成することを確認し、80°Cで BaTiO_3 単一相が合成できることを見出した。

BaTiO_3 ナノキューブの合成

一般にナノ粒子は界面活性剤を使用して合成を行うが、本研究では BaTiO_3 の粒子表面を利用した材料設計を目指すため、界面活性剤を使用せずに BaTiO_3 のナノキューブ化に挑戦し、平均粒径37nmという微細な BaTiO_3 ナノキューブの合成を可能にした。

BaTiO_3 ナノキューブの粒子表面の原子配列を可視化

BaTiO_3 はペロブスカイト構造を有しているが、 BaTiO_3 の粒子内部は単位格子に起因する規則正しい原子配列をしているのに対し、 BaTiO_3 ナノキューブ粒子の再表面はチタンカラムのレイヤーで構成されている、すなわち表面再構成を本研究で明らかにした(図)。

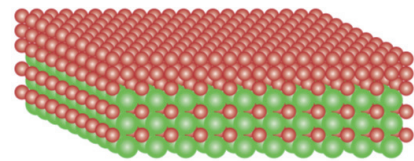


図 BaTiO_3 ナノキューブの表面再構成
(赤色: チタン原子, 緑色: バリウム原子)

[連絡先] 〒 316-8511 茨城県日立市中成沢町 4-12-1
E-mail: kouichi.nakashima.pilot@vc.ibaraki.ac.jp
URL: <http://nakashima.biochem.ibaraki.ac.jp/>
[文献] K.Nakashima, K. Onagi, Y. Kobayashi, T. Ishigaki, Y. Ishikawa, Y. Yoneda, S. Yin, M. Kakihana, T. Sekino, ACS Omega, 6, 9410-9425 (2021).

[2021年6月18日]