

白金使わない電極触媒開発

「世界初」理論的機構解明

九大、旭化成

九州大学の北川宏招聘教授（現在は京大教授）、古山通久教授、旭化成の木下昌三主幹研究員らは、新しい多孔性材料による電極触媒の開発と理論的機構解明に世界で初めて成功した。白金などの貴金属を使用しないことから、安価な電極触媒の開発につながるものと期待される。ドイツの応用化学誌 *Angewandte Chemie International Edition* のオンライン速報版で公開される。

エタノール エネルギー取り出し

活性炭に代表される吸着剤は、分子を取り込み吸着する役割を果たす物質であり、多孔性物質と呼ばれている。活性炭やゼオライトに比べて高いガス選択吸着性を示す多孔性金属錯体は、高効率分離・濃縮機能を有する多孔性物質として90年代後半から注目され、世界中で研究開発が進められている。特に最近では、二酸化炭素を選択的に高効率で吸着する多孔性金属錯体がいくつか開発され、それらの特異な柔軟構造により脱着時のエネルギーが少なくて済むことから、炭酸ガス削減技術の観点からも注目されている。他方、こ

の材料を燃料電池などの電極触媒に応用する技術にも関心が寄せられているが、これまで、電極触媒活性を示す多孔性金属錯体の開発には誰も成功していなかった。北川教授はこれまでの研究で、ルベアン酸銅を構成単位とする多孔性金属錯体が混合伝導性を有することを発見しており、この物質の触媒機能の確認が急務になっていた。今回、多孔性金属錯体の一種で混合伝導性を有するルベアン酸銅誘導体に対して、バイオマス系燃料電池の電極触媒を想定し、エタノールの吸着能と酸化能について調べ

た。その結果、室温で銅2原子当たり0.8分子のエタノールを吸着することがわかった。さらに、ルベアン酸銅誘導体を塗布したカーボン電極を用いて電気化学測定を行った結果、電解液中にエタノールを添加すると、エタノールがない場合に比べ、0.4 eV 付近の酸化波のピークが増大することがわかった。このことは、エタノールが極めて低い電位で酸化されることを示している。また、酸化反応で生成した生成物を、ガスクロマトグラフィーで同定した結果、アセトアルデヒドが生成していることが

わかった。

ルベアン酸銅誘導体とエタノールとの相互作用エネルギーおよび、ルベアン酸銅とエタノールプロトン脱離後の相互作用を量子化学計算手法の一つである密度汎関数法（DFT）法で計算した結果、ルベアン酸銅とエタノールとの相互作用は大きい一方でプロトン脱離後の相互作用は小さいことがわかった。このことは、エタノールの吸着は促進さ

れる一方で、反応後は逆に脱離が促進されることを示しており、エタノールが極めて低い電位で酸化されたことを頭付けるものと言える。これまで触媒作用と混合伝導性を併せ持つ多孔性材料の報告はなく、今回の結果は新しいタイプの多孔性材料を開発したものとと言える。貴金属触媒と同レベルの極めて低い電位でバイオ燃料であるエタノールからエネルギーを取り出せることが明らかになり、非白金系でありながら高効率に働く電極触媒であることがわかった。

得られた多孔性電極触媒は、燃料極、固体高分子電解質、触媒の3つで作られる三相界面の問題を抜本的に解決するものであり、高効率な電極触媒の開発が大きく前進することが期待され

る。また白金などの貴金属を使用しないことから、バイオマスを原料とする燃料電池の開発が促進されることが期待される。