

## PEFCの電極触媒劣化を解析するための計算化学手法の開発

(東北大<sup>\*1</sup>, 九州大<sup>\*2</sup>) 金桐賢<sup>\*1</sup>・金寶英<sup>\*1</sup>・鈴木愛<sup>\*1</sup>・坪井秀行<sup>\*1</sup>・古山通久<sup>\*2</sup>・  
 畠山望<sup>\*1</sup>・遠藤明<sup>\*1</sup>・高羽洋充<sup>\*1</sup>・久保百司<sup>\*1</sup>・宮本明<sup>\*1</sup>

高エネルギー効率を特徴とする固体高分子形燃料電池(PEFC)はその実用化が期待されているが、電池運転による触媒の性能劣化が課題となっている。また、白金は高価であるため、利用効率を向上させる必要がある。そのため、カソード触媒層における白金触媒の挙動を解析し、触媒の効率向上及び劣化現象の解析が求められるが、実験的方法では高価の白金を大量必要とし、また、様々な要因を解析するのは困難である。そこで、本研究では電極触媒劣化の解析や予測が可能な計算化学手法の開発を行った。

本研究では均一なモデルを用い、下記の3つの素反応による白金劣化を考慮した。

- (1) 白金溶解： $\text{Pt} \rightarrow \text{Pt}^{2+} + 2\text{e}^-$  :  $r_1$
- (2) 酸化白金の形成： $\text{Pt} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{PtO} + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$  :  $r_2$
- (3) 酸化白金の化学的溶解： $\text{PtO} + 2\text{H}^+ \rightarrow \text{Pt}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$  :  $r_3$

ここでは白金触媒劣化モデルを用いて 1.0V で 30000 秒運転した時、白金触媒の半径変化と溶解した白金量を求めた結果を下図に示す。これより、電池運転時間の経過とともに白金の粒径が減少し、白金イオン濃度が増加し、やがて定常状態に至ることがわかる。この結果は長時間にわたる運転による白金触媒の酸化、溶解と再析出が繰り返され触媒の比表面積が減少し、触媒能力が劣化する現象を捉えている。本シミュレータを用いることで、電池運転に伴う白金劣化を定量的に解析することが可能となった。今後は溶解された白金種の物質移動や粒子サイズ分布などより多岐にわたる要因を考慮しながら触媒劣化の解析を進めていきたい。

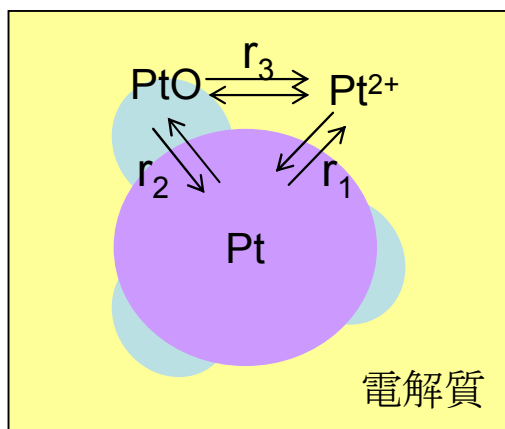


図1 考慮した反応の模式図

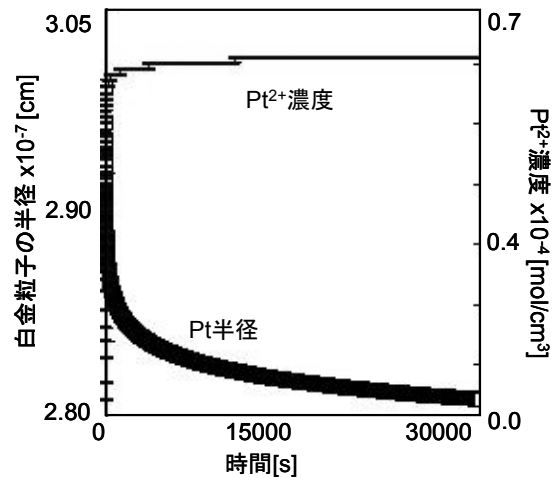


図2 白金粒径及び白金イオン濃度変化