

令和 4 年 6 月 14 日現在

機関番号：24403

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H02438

研究課題名(和文) 第一原理計算に基づく金属・空気二次電池用の二機能性触媒の探索

研究課題名(英文) Exploration of bifunctional catalysts for metal-air batteries via first-principles calculations

研究代表者

池野 豪一 (IKENO, Hidekazu)

大阪府立大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：30584833

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では理論計算と実験を組み合わせ、遷移金属複合酸化物における原子構造と酸素発生反応(OER)および酸素還元反応(ORR)触媒特性の相関を明らかにすること目的とした。主な成果として、ポストスピネル構造を有する複合酸化物が高いOER触媒特性を示すことを実験的に見出した。また、第一原理計算によりその反応機構を原子レベルで検討し、これまでの酸化物とは異なる新しいOER反応サイクルを提案した。さらに、遷移金属複合酸化物のカチオンサイトに複数の元素を混合すると、一部の反応サイトにおいてOER・ORR活性が向上することを電子状態計算から明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究を通して、OER・ORR触媒の材料設計において原子配列を変化させることにより活性を向上させるというコンセプトが機能することを実証することができた。また、特定の結晶構造に対して、固溶体化して複数の元素を混合することでOER・ORR特性が向上する現象に対して、電子状態計算から定量的に評価することが可能であることを示した。本研究で用いた計算手法は電気化学触媒に留まらず、任意の触媒反応において汎用的に利用できるものであり、学術的応用が広がることが期待される。これらの計算手法を用いることで新規触媒材料設計に有用な知見が得られ、材料探索が加速し、革新的な触媒材料の開発に資すると考えられる。

研究成果の概要(英文)：The objective of this study was to clarify the correlation between atomic structure and catalytic properties for oxygen evolution reaction (OER) and oxygen reduction reaction (ORR) in transition metal complex oxides through a combination of theoretical calculations and experiments. As a main result, it was found experimentally that composite oxides with post-spinel structure exhibit high OER catalytic properties. The reaction mechanism was investigated at the atomic level by first-principles calculations, and a new OER reaction cycle was proposed, which is different from that of conventional oxides. Furthermore, electronic structure calculations revealed that the OER/ORR activity is enhanced at some reaction sites when multiple elements are mixed at the cationic sites of transition metal composite oxides.

研究分野：材料科学

キーワード：計算材料科学 第一原理計算 電気化学触媒 遷移金属酸化物

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 正極活物質として大気中の空気、負極活物質として金属を用いる金属・空気二次電池は、重量あたりの理論エネルギー密度がリチウムイオン二次電池の数十倍にも達することから、次世代の大容量蓄電池としての応用を見据えて盛んに研究が行われている。一方、金属・空気二次電池の空気極では、充電時には酸素発生反応 (Oxygen Evolution Reaction; OER)、放電時には酸素還元反応 (Oxygen Reduction Reaction; ORR) が起こる (図1参照)。これらの化学反応は、金属・空気電池の充放電過程における律速過程であり、二次電池としての実用化を妨げる大きな要因となっている。そのため、空気極での OER・ORR の活性化エネルギーを共に低下させ、反応速度を向上させるための二機能性触媒の開発が喫緊の課題である。

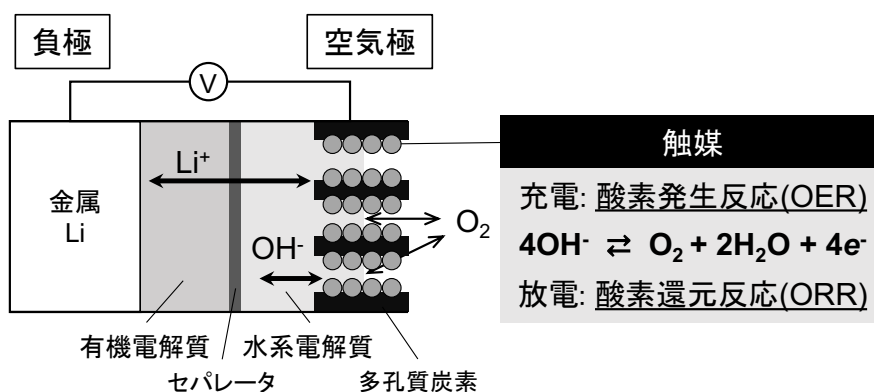


図1 有機-水系電解質を用いた金属・空気二次電池の構成と電極反応

(2) 空気極用の触媒としては Pt や RuO<sub>2</sub> がしばしば用いられる。前者は ORR に対して、後者は OER に対してそれぞれ高い触媒活性を示すことが知られている物質である。しかし、これらの触媒は貴金属を含むため、車載用電池等の市場規模の大きな製品への応用を考えると、経済的コストや埋蔵資源量といった観点から好ましくない。より安価で埋蔵量が豊富な元素を利用した新しい OER・ORR 触媒の開発が強く望まれる。

(3) これまでに、一部の単純ペロブスカイト遷移金属酸化物が、実用 OER 触媒の RuO<sub>2</sub> よりも高い活性を示すことが報告されている[1]。他にもスピネル構造、二重ペロブスカイト構造などの遷移金属複合酸化物において OER・ORR 触媒特性が調べられている。また我々の研究グループにおいて、四重ペロブスカイト構造を有する遷移金属酸化物が同じ元素で構成される単純ペロブスカイト構造の酸化物よりも高い OER 活性を示すことを発見した[2]。この結果は、結晶構造(原子配列)を変化させることで、触媒活性を向上させることが可能であることを示している。

(4) スラブモデルを用いた電子状態計算により、単純ペロブスカイト型遷移金属酸化物表面における OER・ORR 反応中間体の吸着エネルギーおよび理論過電圧の評価を行い、その反応機構を明らかにする基礎的研究も行われている[3]。この手法はあらゆる遷移金属酸化物に対して適用可能であり、様々な構造バリエーションを持つ化合物に対して系統的な計算を行うことで、触媒特性の予測と材料探索が可能となる。

### 2. 研究の目的

(1) 本研究では、異常高原子価遷移金属イオンを含む複合酸化物を対象として、第一原理計算を用いて OER・ORR 触媒反応の自由エネルギー変化および過電圧を評価し、その触媒特性を予測する。

(2) 同時に同種元素からなる様々な構造バリエーションの化合物に対して系統的な評価を行い、体系的に整理することで、原子構造と触媒活性の相関を明らかにすると共に、新たな OER・ORR 二機能性触媒の材料設計指針を提案する。

### 3. 研究の方法

(1) 遷移金属複合酸化物の構造分類と構造-機能相関の解明

研究の第一段階として、検討対象となる物質の候補の選定が重要となる。本研究では、結晶構高い OER 触媒活性を示す傾向がある周期表後半の異常高原子価イオン(Mn<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+/4+</sup>,

Co<sup>3+/4+</sup>など)を含み、かつ化学量論組成を取る複合酸化物を対象とする。結晶構造データベースから前述の条件を満たす物質を選択し、さらに、カチオンの配位多面体の形状とその連結様式等を考慮して、幾つかの類似構造グループに分類する。以下の(2)、(3)で収集された計算・実験データを元に、原子構造と触媒活性の相関を調べる。

## (2) 第一原理計算による触媒反応機構の解明

高活性な OER・ORR 触媒あるいはその候補物質を対象として、スラブモデルを用いた第一原理計算を行う。具体的には、水溶液中で幾つかの平衡状態を仮定した上で、

- 触媒の熱力学的安定性の検討
- 表面エネルギーの計算による安定表面構造の評価
- 安定表面における OER・ORR 中間体の吸着サイトの決定
- 理論過電圧の評価

の4つの項目について検討する。これらの結果から、個々の物質に対して OER・ORR 触媒の反応機構を原子レベルで明らかにする。

## (3) 材料合成と触媒特性評価

(1)で選択した候補物質を合成し、その OER・ORR 触媒特性を評価する。必要に応じて、超高压合成法を用いることで、強い酸化雰囲気を作り出し、異常高原子価イオンを含む多様な物質を合成することができる。X 線回折、SEM による表面観察、ガス吸着測定、熱分析など基礎物性の評価と共に、pH などの条件を変化させた電気化学測定を行う。一連の実験から、構造-機能相関の検討に必要なデータを収集する。

## 4. 研究成果

### (1) ポストスピネル型構造を有する新規酸化物 OER 触媒の発見と反応機構の解明

① この研究では、原子構造を変化させることにより OER・ORR 触媒性能を最大化するという考え方に立脚して新規材料探索を進めた。遷移金属複合酸化物の結晶構造を、カチオンの配位多面体の連結様式から整理し、候補物質の選定を行った。候補物質の一つとして、ポストスピネル型構造を有する CaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (B = Cr, Mn, Fe)がある。この物質は、図 2(a),(b) に示すように、貴金属酸化物触媒として利用されているルチル構造の RuO<sub>2</sub> と同様に辺共有した配位八面体が一軸方向に整列した構造を有している。これらの物質を合成し、OER 触媒特性を評価したところ、同じ化学種で構成されている単純ペロブスカイト型酸化物 LaBO<sub>3</sub> やスピネル型構造を有する ZnB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> よりも高い OER 触媒活性を示すことを発見した (図 2(c) 参照)。

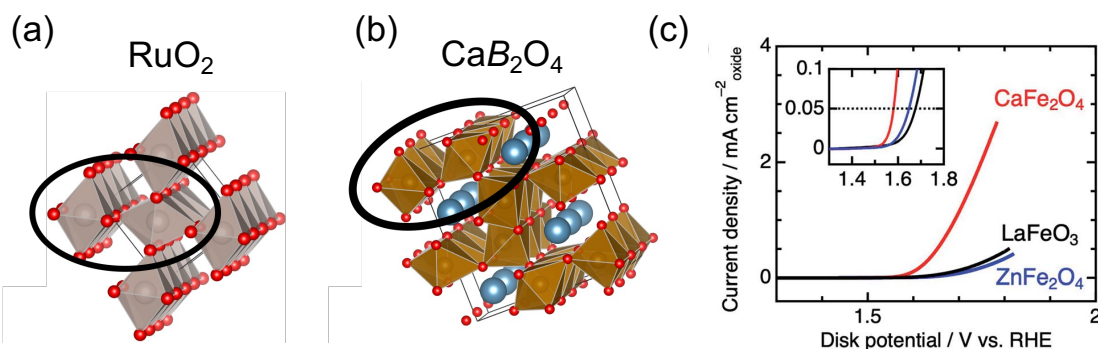


図 2. (a) RuO<sub>2</sub> (ルチル構造) および (b) CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (ポストスピネル構造) の結晶構造。  
(c) LaFeO<sub>3</sub>、ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>、および CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> のリニアスイープボルタノグラム。

② CaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub> が OER 高活性を示す理由を調べるために、CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> を対象としてスラブモデルを用いた密度汎関数理論計算により OER の理論過電圧を求めた。複数の反応機構を検討したところ、図 3 (b)に示す反応サイクルにおいて最も理論過電圧が低くなった。このサイクルでは、吸着子の酸素原子と隣接する八面体の酸素サイトが結合して O<sub>2</sub> 分子を放出する過程が含まれており、単純ペロブスカイト構造の遷移金属酸化物ルチル構造の RuO<sub>2</sub> とは異なる反応機構が働いていることが示唆された。

これらの結果は、結晶構造を変化させることで反応機構が変化し、OER 活性が変化することを示しており、原子配列を変化させることにより触媒活性を向上させるという本研究のコンセプトが機能することを実証するものである。

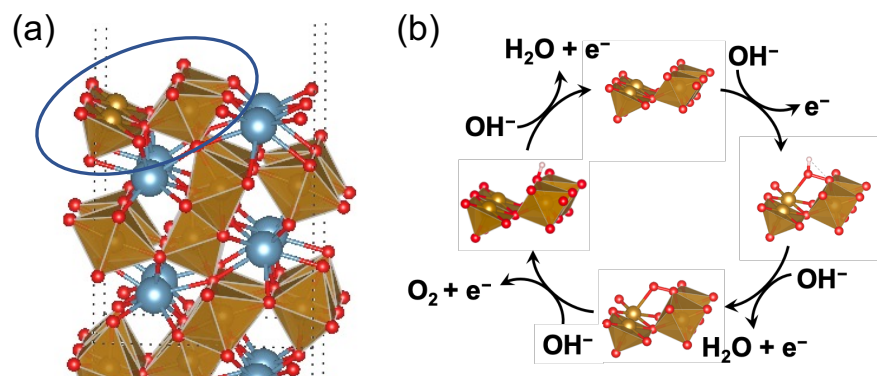


図 3. (a) CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (001)面スラブモデル。(b) 最も理論過電圧が低い OER の反応サイクル。

(2) 単純ペロブスカイト型酸化物におけるカチオン混合が OER・ORR 活性に与える影響の微視的メカニズム

① ペロブスカイト酸化物 ABO<sub>3</sub> において、各カチオンサイトに複数の元素を混合することにより OER・ORR 活性を最大化する研究が多数行われている。本研究においても、CaBO<sub>3</sub> の B サイトに Fe と Co を混合することにより、エンドメンバーである CaCoO<sub>3</sub> や CoFeO<sub>3</sub> のよりも OER 活性が向上することを実験的に見出した。その起源を調べるために、第一原理計算を実施した。固溶体の電子状態計算には、Special Quasi-random Structure (SQS) モデルを用い、単純ペロブスカイト酸化物の OER 活性と関連のある B-O イオン間の電荷移動エネルギー(Δ)を計算した。その結果を図 4(a) に示す。図 4(b) に示すように CaFe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> においては、B サイトを Fe と Co がランダムに占有しているため、配位環境が異なる Fe サイトが出現する。その結果 Δにも分散が生じ、一部の Fe サイトにおいて、エンドメンバーである CaFeO<sub>3</sub> よりも Δが低下する。これらのサイトは OER 活性が高いため、これらのサイトで優先的に反応が進行することによって、OER 活性が向上することが考えられる。

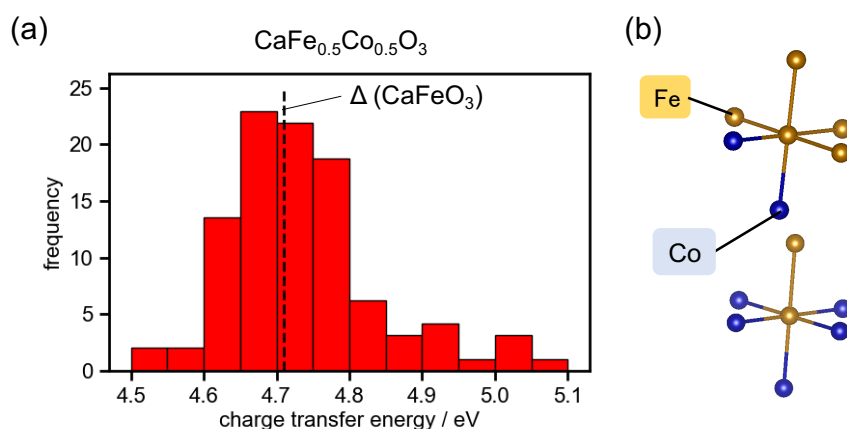


図 4. (a) CaFe<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> の Fe と隣接 O イオン間の電荷移動エネルギー Δ の分布。破線は CaFeO<sub>3</sub> における Fe-O 間の電荷移動エネルギー。(b) 選択した 2 つの B サイトカチオン周辺の配位環境。単純化のため Ca、O 原子は非表示。

② B サイトに複数カチオン混合することで ORR 活性が向上する例が報告されている。本研究では、Co と Mn を混合した系を対象として、SQS モデルに基づくスラブモデルを用いて全ての B サイトにおける ORR 理論過電圧を計算した。使用した LaMn<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub> の SQS モデルと表面構造の例を図 5 (a), (b) に示す。図 5 (c) は各 Co, Mn サイト理論過電圧を昇順に並べたものである。図から分かるように、B サイトに Co と Mn がランダムに配置することで一部のサイトで理論過電圧が低下していることが分かる。過電圧が低いサイトで反応中間体の原子構造を精査したところ、の中間体において吸着後の構造が変化し、中間体の安定性が変化することで理論過電圧が低下していることが分かった。

これらの結果より、カチオンサイトに複数元素が混合することにより局所的な原子配列のバリエーションが生じ、一部のサイトで OER・ORR 活性が向上することが分かった。また、SQS モデルを用いることで、固溶体のようなランダムネスを含む構造に対する触媒活性を電子状態の観点から定量的に議論することが可能であることを示した。

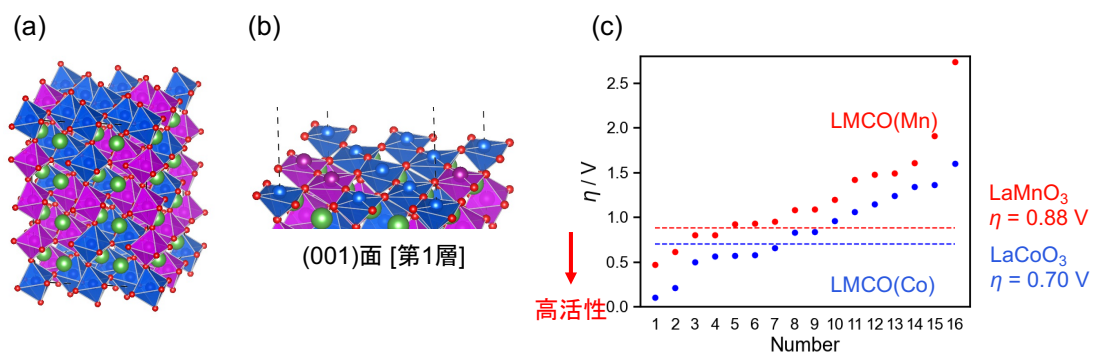


図 5. (a)  $\text{LaMn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_3$  (LMCO) の SQS モデル(160 原子)。 (b) SQS モデルの(001)面の一つの層における表面モデル。 (c) LMCO の各 Mn,Co サイトにおける ORR の理論過電圧。破線は  $\text{LaMnO}_3$  および  $\text{LaCoO}_3$  における理論過電圧を示す。

<引用文献>

- [1] Zhu *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 3897 (2015).
- [2] Yamada *et al.*, *Adv. Mater.* **29**, 1603004 (2017).
- [3] Man *et al.*, *Chem. Cat. Chem.* **3**, 1159 (2011).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Yamada Ikuya, Kinoshita Masaya, Oda Seiji, Tsukasaki Hirofumi, Kawaguchi Shogo, Oka Kengo, Mori Shigeo, Ikeno Hidekazu, Yagi Shunsuke	4. 巻 32
2. 論文標題 Enhanced Catalytic Activity and Stability of the Oxygen Evolution Reaction on Tetravalent Mixed Metal Oxide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 3893 ~ 3903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c00061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takemura Shota, Takeda Takashi, Nakanishi Takayuki, Koyama Yukinori, Ikeno Hidekazu, Hirosaki Naoto	4. 巻 22
2. 論文標題 Dissimilarity measure of local structure in inorganic crystals using Wasserstein distance to search for novel phosphors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 185 ~ 193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2021.1899555	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 de Groot Frank M.F., Hidekazu Ikeno, et al.	4. 巻 249
2. 論文標題 2p x-ray absorption spectroscopy of 3d transition metal systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	6. 最初と最後の頁 147061 ~ 147061
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elspec.2021.147061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 山田幾也、池野豪一、八木俊介	4. 巻 63
2. 論文標題 四重ペロブスカイト酸化物の酸素発生触媒特性	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 触媒	6. 最初と最後の頁 83 ~ 88
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuichi Okazaki, Yuta Kato, Yuta Kizawa, Seiji Oda, Kai Uemura, Takuya Nishio, Fuminari Fujii, Shintaro Fujinari, Masaya Kinoshita, Takao Odake, Hayato Togano, Takashi Kamegawa, Shogo Kawaguchi, Hajime Yamamoto, Hidekazu Ikeno, Shunsuke Yagi, Kouhei Wada, Kyo-Hoon Ahn, Atsushi Hariki, Ikuya Yamada	4. 巻 -
2. 論文標題 Metamagnetic Behavior in a Quadruple Perovskite Oxide	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 in print
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c03432	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 H. Togano, K. Asai, S. Oda, H. Ikeno, S. Kawaguchi, K. Oka, K. Wada, S. Yagi, I. Yamada	4. 巻 4
2. 論文標題 Highly active hydrogen evolution catalysis on oxygen-deficient double-perovskite oxide PrBaCo2O6-	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 1519-1529
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0qm00056f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Uchimura, I. Yamada	4. 巻 -
2. 論文標題 A robust thermal-energy-storage property associated with electronic phase transitions for quadruple perovskite oxides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 in press
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cc01715a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 I. Yamada, M. Kinoshita, S. Oda, H. Tsukasaki, S. Kawaguchi, K. Oka, S. Mori, H. Ikeno, S. Yagi	4. 巻 32
2. 論文標題 Enhanced Catalytic Activity and Stability of the Oxygen Evolution Reaction on Tetravalent Mixed Metal Oxide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 3893-3903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c00061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okazaki Yuichi, Oda Seiji, Takamatsu Akihiko, Kawaguchi Shogo, Tsukasaki Hirofumi, Mori Shigeo, Yagi Shunsuke, Ikeno Hidekazu, Yamada Ikuya	4. 巻 12
2. 論文標題 Highly active postspinel-structured catalysts for oxygen evolution reaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 5094 ~ 5104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RA00448H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikeno Hidekazu, Urasaki Masato	4. 巻 61
2. 論文標題 Reduced-Shifted Conjugate-Gradient Method with Seed Switching for Calculating X-ray Absorption Spectra	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1462 ~ 1467
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MN2019044	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Okazaki Yuichi, Yamada Ikuya, Yagi Shunsuke	4. 巻 61
2. 論文標題 Oxygen Evolution Catalysis for Iron Oxides with Various Structures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 1523 ~ 1526
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MN2019043	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 八木俊介、和田光平、結城潤一、劉偉、池野豪一、山田幾也
2. 発表標題 四重ペロブスカイト型酸化物CaCu <sub>3</sub> Fe <sub>4</sub> O <sub>12</sub> の酸素発生触媒活性
3. 学会等名 日本セラミックス協会第33回秋季シンポジウム
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 池野豪一、宮本直幸
2. 発表標題 機能コア解析に向けたEELSの機械学習
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池野豪一
2. 発表標題 機械学習によるスペクトル解析の高度化
3. 学会等名 日本化学会 第101春季年会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福井暁人、尾上弘晃、板井駿、石倉恵子、池野豪一、長田貴弘、土方優、Jenny Pirillo、吉村武、芦田淳、藤村紀文、桐谷乃輔
2. 発表標題 夾雑溶液下における2次元半導体 MoS <sub>2</sub> とアミド系分子間の特異的相互作用
3. 学会等名 日本化学会 第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. Ikeno
2. 発表標題 Extracting orbital specific information from resonant inelastic X-ray scattering by the relativistic many-electron calculations
3. 学会等名 The 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science and 3rd International Symposium on Nano-materials, Technology, and Application (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名	H. Togano, I. Yamada, K. Asai, H. Ikeno, S. Oda, S. Kawaguchi, K. Oka, K. Wada, and S. Yagi
2 . 発表標題	Hydrogen evolution reaction catalysis of double perovskite-type cobalt oxides
3 . 学会等名	The 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science and 3rd International Symposium on Nano-materials, Technology, and Application (国際学会)
4 . 発表年	2019年

1 . 発表者名	Y. Okazaki, I. Yamada, S. Oda, H. Ikeno, and S. Yagi
2 . 発表標題	Oxygen evolution reaction catalysis of post-spinel structure oxides
3 . 学会等名	The 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science and 3rd International Symposium on Nano-materials, Technology, and Application (国際学会)
4 . 発表年	2019年

1 . 発表者名	S. Oda, H. Ikeno, Y. Okazaki, and I. Yamada
2 . 発表標題	Electronic structures and catalytic properties for oxygen evolution reaction of spinel and related oxides
3 . 学会等名	The 5th International Symposium on Frontiers in Materials Science and 3rd International Symposium on Nano-materials, Technology, and Application (国際学会)
4 . 発表年	2019年

1 . 発表者名	岡崎湧一, 山田幾也, 池野豪一, 八木俊介
2 . 発表標題	ポストスピネル酸化物の酸素発生反応触媒活性
3 . 学会等名	第14回日本セラミックス協会関西支部学術講演会
4 . 発表年	2019年

1. 発表者名 尾田誠司, 岡崎湧一, 山田幾也, 池野豪一
2. 発表標題 AB204の電子状態と酸素発生触媒特性
3. 学会等名 日本金属学会2019年秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 八木俊介, 池野豪一, 山田幾也
2. 発表標題 酸素発生触媒研究の最前線と今後の課題
3. 学会等名 表面技術協会第140回講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梅野隼人, 山田幾也, 浅井海成, 池野豪一, 尾田誠司, 河口彰吾, 岡研吾, 和田光平, 八木俊介
2. 発表標題 高压処理によるペロブスカイト型酸化物の酸素量制御と水素発生触媒活性
3. 学会等名 第60回年高压討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木下雅也, 尾田誠司, 塚崎裕文, 森茂生, 岡研吾, 河口彰吾, 八木俊介, 池野豪一, 山田幾也
2. 発表標題 酸素発生触媒活性を示す遷移金属複合酸化物におけるFe・Co混合シナジー効果
3. 学会等名 2019年度第3回関西電気化学研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木下雅也, 尾田誠司, 塚崎裕文, 森茂生, 岡研吾, 河口彰吾, 八木俊介, 池野豪一, 山田幾也
2. 発表標題 鉄・コバルト複合酸化物の酸素発生触媒活性
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 内村祐, 山田幾也
2. 発表標題 四重ペロブスカイト型酸化物の電子相転移に伴う蓄熱特性
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岡崎湧一, 山田幾也, 尾田誠司, 池野豪一, 八木俊介
2. 発表標題 ポストスピネル酸化物における結晶構造と酸素発生触媒活性の相関
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 梅野隼人, 山田幾也, 浅井海成, 池野豪一, 尾田誠司, 河口彰吾, 岡研吾, 和田光平, 八木俊介
2. 発表標題 ペロブスカイト型コバルト酸化物の水素発生触媒活性
3. 学会等名 第58回セラミックス基礎科学討論会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

大阪府立大学 工学研究科 物質・化学系専攻 マテリアル工学分野 計算材料科学研究グループ  
<http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/cms/>  
大阪府立大学 大学院工学研究科 物質・化学系専攻 マテリアル工学分野 材料プロセス制御研究グループ  
<http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/hpl/>  
大阪府立大学 工学研究科 物質・化学系専攻 マテリアル工学分野 計算材料科学研究グループ  
<http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/cms/>  
大阪府立大学 大学院工学研究科 物質・化学系専攻 マテリアル工学分野 超高压合成材料研究グループ  
<http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/hpl/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	山田 幾也  (Yamada Ikuya)  (30378880)	大阪府立大学・工学(系)研究科(研究院)・教授    (24403)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------