

# 環境触媒反応・生体内触媒反応におけるエネルギーの形態変化機構

筑波大学 数理物質系 物質工学域 武安光太郎

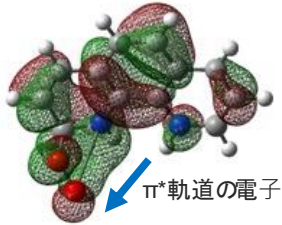
不均一系触媒反応は、脱炭素化社会の鍵であるだけでなく、生体内でもミトコンドリア等でのエネルギー産生を担う。反応全体のメカニズムが明らかになれば、それに基づいた革新的な反応システムや材料の設計、あるいは生態系においては医療技術の開発につながる。しかしながら、長い歴史を持つ  $\text{CO}_2$ -メタノール転換反応においてさえ、素過程の全容は明らかになっておらず、理解の進んでいない反応系も多い。これには、反応メカニズムの解明には、反応全体の速度、活性点の決定、中間体の測定と、多くの情報を統合することが必要になるという背景がある。私達は実用触媒とモデル触媒の比較に加えて、オペラント分光、第一原理計算、数理モデル計算を総合的に組み合わせ、 $\text{CO}_2$ 転換反応、燃料電池のカソード極反応、ミトコンドリア内反応の反応メカニズムの解明と、反応システムの設計を行ってきた。特に、 $\text{CO}_2$ -メタノール転換反応のエネルギーダイアグラムの作成、窒素ドープカーボン触媒の活性劣化メカニズムと高活性触媒の開発に関する成果を中心に紹介し、混成電位を利用した新たな触媒反応系とミトコンドリア内の熱産生メカニズムについての進捗にも触れたい。

一方、これらの研究を根底でつなげるのが、触媒反応における（非平衡）散逸構造の理解という側面である。物質表面の触媒反応は、エネルギーが、化学ポテンシャル、電位（電場）、結合、振動、熱へと、形態を変化させる非平衡過程である。このエネルギーが形態を変化させる仕組み・構造を知ることが、触媒反応のメカニズムを知ることであり、新しい物質操作技術や、生化学機能の根源的理解へとつながるといえる。不均一系触媒反応の散逸構造の理解は、 $\text{CO}$ 酸化反応や電気化学的振動の数理化までで止まっており、混成電位系、生体反応への一般化を目指していきたい。

## 局所電場 ⇒ 反応

窒素ドーパカーボン触媒  
燃料電池カソード極反応の劣化メカニズム

窒素ドーパカーボン燃料電池電極触媒



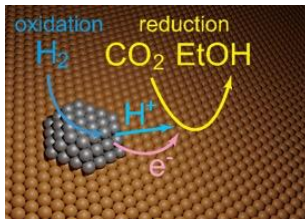
水和抑制による反応促進機構と新触媒の開発



## 化学ポテンシャル ⇒ 局所電場 ⇒ 反応

反応系と生成系の化学ポテンシャル差を  
反応駆動力とする”混成電位駆動型”触媒反応

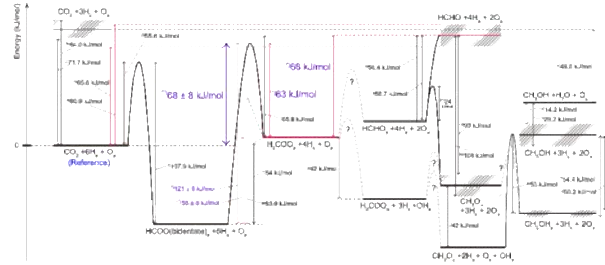
システム Pd/Cu, Ru/Co触媒



## 化学ポテンシャル ⇒ 反応

CO<sub>2</sub>-メタノール合成におけるエネルギーダイアグラム

Cu(111), Cu/ZnO系触媒

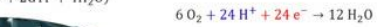
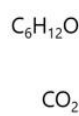
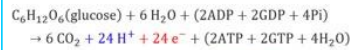


反応律速過程の解明・促進メカニズム



## 化学ポテンシャル ⇒ 局所電場 ⇒ 反応 ⇒ 熱産生

生体内のミトコンドリアにおける熱産生機構



Mitochondria