

密度汎関数法を用いた NO 還元用代替触媒探索
DFT-based screening of NO reduction catalyst

福岡工業大学工学部生命環境化学科 蒲池高志

研究成果概要

現在ガソリン車の排ガスに含まれる NO_x を還元する触媒として Pd、Pt、Rh などのレアメタルが使われている。これらレアメタルに大きく依存しない社会の構築は長期的課題であり、「元素戦略」として様々な取り組みがなされている。本研究では、密度汎関数法を用いた網羅的な計算により、NO_x を還元する触媒として最適な2成分合金を探索している。これまでの計算から、N-O 結合開裂の活性化エネルギーは金属の表面エネルギーと関連していることが明らかとなっている。これまでに、密度汎関数計算に基づいた AFLOW データベースに登録されている 337 種類の2成分合金について、最も安定な面の表面エネルギーを京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの CASTEP プログラムを用いて決定した。令和元年度は、各種遷移金属表面上のステップについて、N-O 結合開裂および N₂、O₂ 生成活性化エネルギーや反応熱を計算しており、将来的にインフォマティクスに役立つ相関関係を見出したい。

発表論文(謝辞あり)

1. “Linear Correlations between Adsorption Energies and HOMO Levels for the Adsorption of Small Molecules on TiO₂ Surfaces”

T. Kamachi, T. Tatsumi, T. Toyao, Y. Hinuma, Z. Maeno, S. Takakusagi, S. Furukawa, I. Takigawa, K. Shimizu, *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 20988-20997, (2019).

発表論文(謝辞なし)

1. “Auto-Generation of Corrugated Nonpolar Stoichiometric Slab Models”

Y. Hinuma, T. Kamachi, N. Hamamoto, *Materials Transactions*, **61**, 78-87, (2020).

2. “Machine Learning for Catalysis Informatics: Recent Applications and Prospects”

T. Toyao, Z. Maeno, S. Takakusagi, T. Kamachi, I. Takigawa, K. Shimizu, *ACS Catalysis* **10**, 2260-2297, (2020).

Y. Hinuma, T. Toyao, T. Kamachi, Z. Maeno, S. Takakusagi, S. Furukawa, I. Takigawa, K. Shimizu, *The Journal of Physical Chemistry C*, **122**, 29435-29444, (2018).