

合金材料の触媒作用に関する理論的研究
Theoretical study on catalysis of alloy material

大阪大学 大学院工学研究科 応用化学専攻

中谷 勇希

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、メチルシクロヘキサン脱水素に高い選択性・耐久性を示す Pt_3Sb 金属間化合物について、DFT 計算を利用した詳細な解明を行った。従来の金属間化合物では得られない”歪んだ” Pt_3 アンサンブルサイトが表面に露出することが判明した。それによって、通常の歪みのない Pt_3 サイトと比べて生成物トルエンの吸着構造が大きく変化し、①副反応（脱メチル化）が抑制されるだけでなく、②トルエンの脱離も促進されることで選択性が向上し、高い耐久性を示すことが明らかとなった。本研究は現在、論文投稿中である。

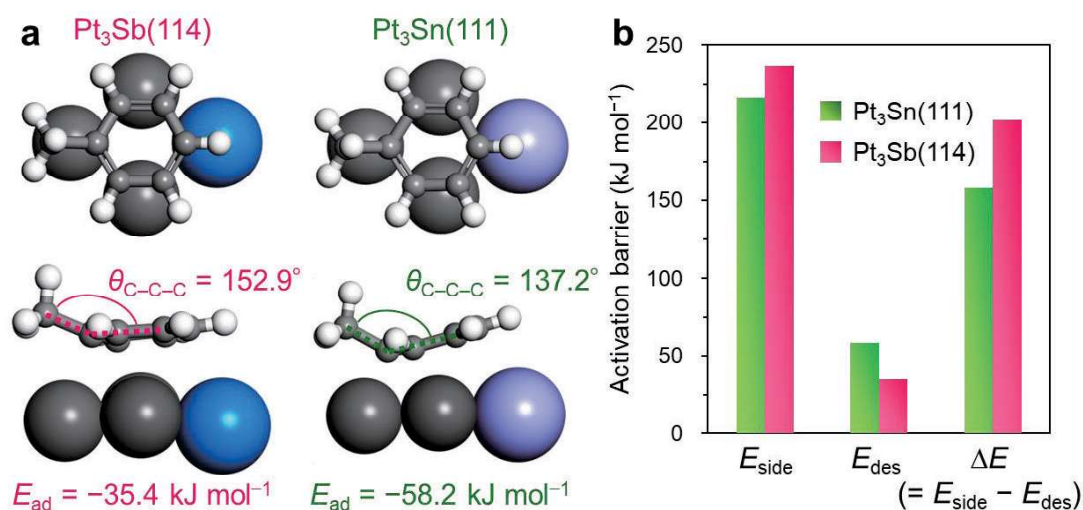


図 1. $\text{Pt}_3\text{Sb}(114)$ と $\text{Pt}_3\text{Sn}(111)$ 表面上での DFT 計算の結果. (a) 生成物トルエンの吸着構造. (b) トルエンからの副反応への活性化障壁 (E_{side}), 脱離障壁 (E_{des})およびそれらの差 ($\Delta E = E_{\text{side}} - E_{\text{des}}$).

発表論文(謝辞あり)

[1] Y. Nakaya, A. Okada, S. Furukawa, submitted