

規則性合金の触媒作用に関する理論的研究
Theoretical study on catalysis of ordered alloys

京都大学 触媒電池元素戦略研究拠点 古川 森也

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、 CO_2 によるプロパン酸化脱水素に有効な PtCoIn 合金触媒の作用機構について DFT 計算を利用した詳細な機構解明を行った。 Pt_2In_3 に Co をドーピングすることで Fermi 順位近傍に Co 3d に由来する順位が現れ、結果として d バンド中心が上昇し、 CO_2 の吸着と活性化や C-H 活性化が促進され結果として反応が大幅に促進されることが判明した(図 1) [1]。また、振動計算により自由エネルギーダイアグラムを作成し、microkinetic modeling を行うことで反応速度定数および反応速度を計算し、 CO_2 の活性化過程が律速段階であること、また Co の導入により CO_2 活性化が大幅に促進されることが同じく示された。[1]

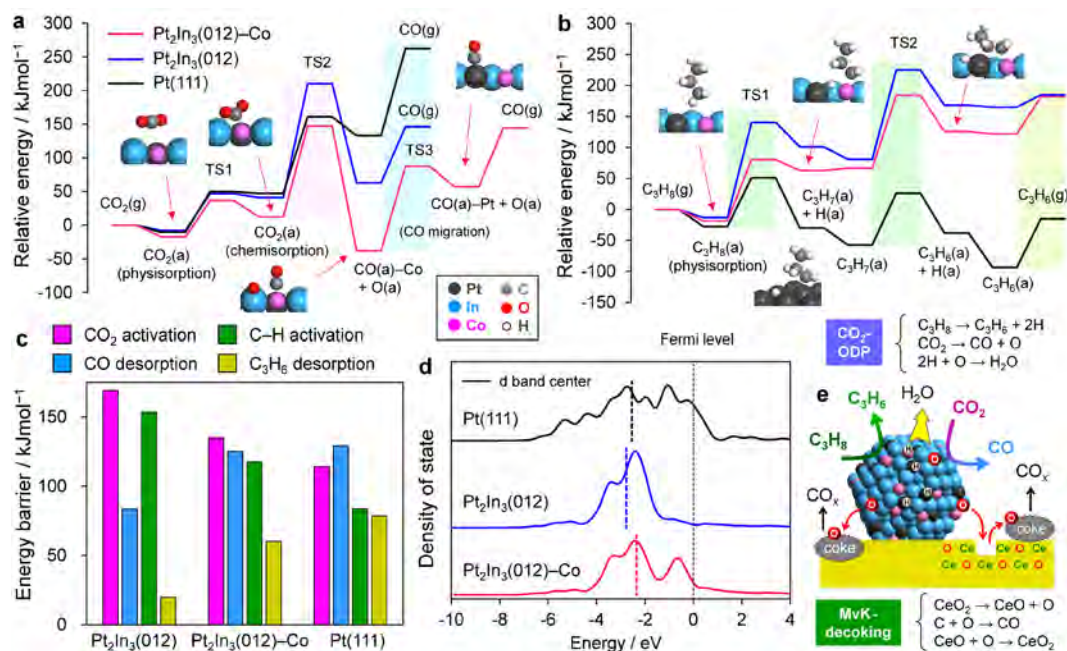


図 1. PtCoIn およびその他触媒上での(a) CO_2 還元および(b) C_3H_8 脱水素のエネルギーダイアグラムおよび(c)活性化障壁と(d) d バンド構造、(e) 触媒反応機構。

発表論文(謝辞あり)

[1] F. Xing, Y. Nakaya, S. Yasumura, K. Shimizu, S. Furukawa, *Nat. Catal.*, **2022**, 5, 55.