

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科学科 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相関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。平成30年度は、8種類の金属について、N-O 結合開裂および N₂O₂ 生成活性化エネルギーや反応熱を計算し、活性化エネルギーが表面エネルギーと高い相関関係にあることが判明した。この結果に基づき、将来的には新触媒の開発につなげたい。

発表論文(謝辞なし)

1. “Combined theoretical and experimental study on alcoholysis of amides on CeO₂ surface: A catalytic interplay between Lewis acid and base sites”
T. Kamachi, S. M. A. H. Siddiki, Y. Morita, Md. N. Rashes, K. Kon, T. Toyao, K. Shimizu, K. Yoshizawa, *Catalysis Today*, **303**, 256-262, (2018).
2. “Dynamic Kinetic Resolution of N-Protected Amino Acid Esters via Phase-Transfer Catalytic Base Hydrolysis”
E. Yamamoto, K. Wakafuji, Y. Furutachi, K. Kobayashi, T. Kamachi, M. Tokunaga, *ACS Catalysis* **8**, 5708-5713, (2018).
3. “Density Functional Theory Calculations of Oxygen Vacancy Formation and Subsequent Molecular Adsorption on Oxide Surfaces”
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).