

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、CO₂によるプロパン酸化脱水素に有効な(PtCoNi)(SnInGa)合金触媒(HEI)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。PtSnのPtサイトにCo, Niを、SnサイトにInをドーピングすることでFermi順位近傍にCoおよびNiの3dに由来する準位が現れ、結果としてdバンド中心が上昇し、CO₂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、またDFT計算から求めたCO₂やC₃H₈の活性化エネルギーはHEI触媒が最も低い値を示し、触媒活性の序列と矛盾しない結果が得られた。以上の結果から、計算により実験結果をよく再現できていること、および本計算モデルの妥当性が示された。[1]

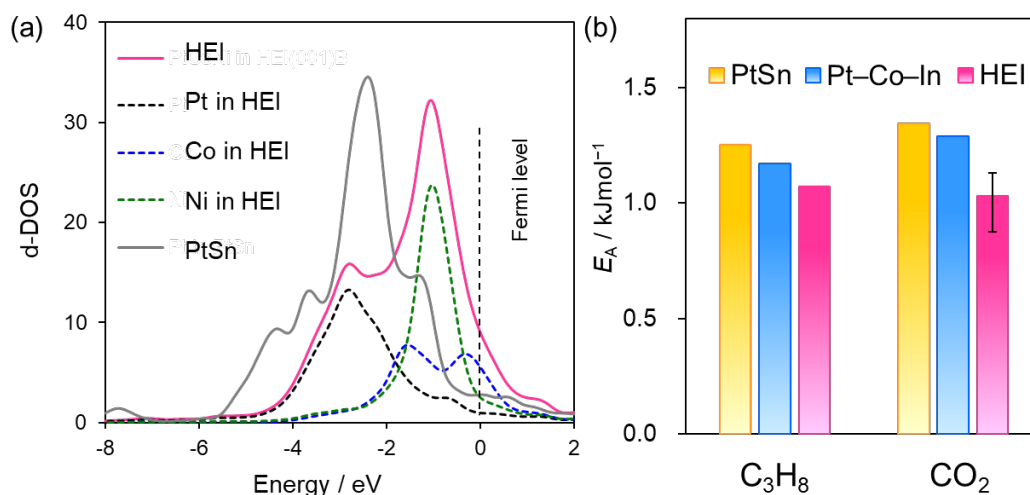


図1. DFT計算の概要 (a) (PtCoNi)(SnIn)モデル構造におけるd-DOSおよび、(b) 各触媒表面上でのC₃H₈脱水素およびCO₂活性化における活性化障壁の比較。

発表論文(謝辞あり)

[1] F. Xing, J. Ma, K. Shimizu, S. Furukawa, *Nat. Commun.*, **2022**, *13*, 5065.