

研究タイトル：**計算機マテリアルデザインによる  
触媒反応解析と触媒デザイン**



氏名：	中西 寛／NAKANISHI, Hiroshi	E-mail：	nakanishi@akashi.ac.jp
職名：	教授	学位：	工学博士
所属学会・協会：	日本物理学会, 応用物理学会, 日本表面真空学会, 日本中間子科学会		
キーワード：	第一原理計算, 触媒反応, 省貴金属触媒, 脱貴金属触媒		
技術相談 提供可能技術：	<ul style="list-style-type: none"> <li>・触媒反応機構、被毒作用の電子論的解析</li> <li>・改良および新規触媒材料のデザイン</li> </ul>		

**研究内容：**

密度汎関数理論を基にした第一原理計算は、現実の物質系に対しある一定の精度で電子状態が計算でき、一定の範囲で定量的に物性を評価できる。既存の物質材料において、その物性発現機構を電子レベルから解明できる利点を活用し、既存材料の特性を凌駕する高効率化、被毒抑制、長寿命化、元素代替を目指した計算機マテリアルデザインの研究を行っている。

現在の主要ターゲットは、

- (1) 各種燃料電池電極反応の高効率化、省貴金属化、脱貴金属化、副反応の低減
- (2) 内燃機関の排ガス浄化触媒の脱貴金属化、高効率化
- (3) 水素燃料生成触媒の高効率化、副反応の低減
- (4) 生活環境の揮発性有機化合物浄化触媒の省貴金属化、脱貴金属化、
- (5) 燃料電池等の電解質におけるイオン伝導性、分子選択制の高効率化
- (6) 水素液化におけるオルソ・パラ転換触媒の高効率化

である。

デザインする物質系は、

- (1) 合金、酸化物のナノ粒子
- (2) 表面内ナノ構造体(薄膜、原子ワイヤ、ナノアイランド)
- (3) 磁性表面、磁性薄膜
- (4) カーボンベースマテリアル(グラフェン、カーボンナノチューブ、フラーレン)

などである。

触媒材料特許：

- 特許第 6843383 号、「遷移金属代替金属材料」
- 特許 6832010 号、「耐コーキング作用を有するメタンの活性化触媒」
- 特許第 6805435 号、「コアシェル触媒および反応促進方法」
- 特許第 5991662 号、「窒素酸化物浄化触媒、及びその製造方法」
- 特許第 5234534 号、「N4キレート型2量化金属錯体からなる電池用電極触媒の性能評価方法」
- 特許第 5110557 号、「燃料電池用電極触媒の性能評価方法及びその探索方法」
- 特許第 5002761 号、「オキソポルフィリン系電極触媒材料」



1640 コア・クラスター計算機

**提供可能な設備・機器：**

名称・型番(メーカー)	