

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：	・触媒反応機構、被毒作用の電子論的解析 ・改良および新規触媒材料のデザイン
-----------------	--

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、長寿命化、代替材料による同特性の実現など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、分子選択性の高効率化
- (6) 水素液化におけるオルソ・パラ転換触媒の高効率化

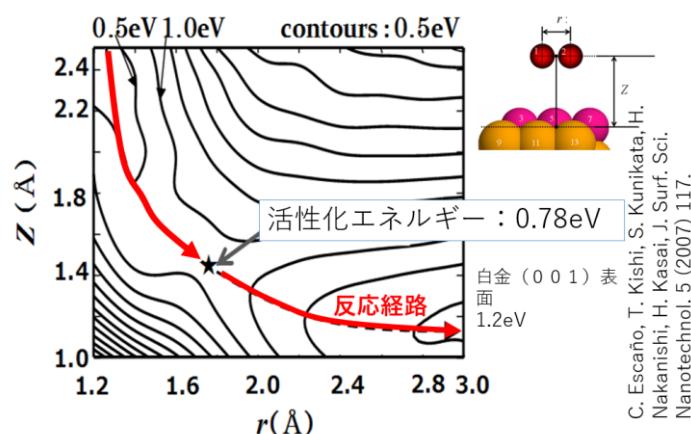
である。

デザインする物質系は、

- (1) 合金、酸化物の表面
- (2) 固体表面上およびサブ表面内のナノ構造体(薄膜、原子ワイヤ、ナノアイランド)
- (3) 合金ナノ粒子、コアシェルナノ粒子
- (4) 磁性表面、磁性薄膜
- (5) カーボンベースマテリアル

などである。

たとえば、図は、PEFCカソード反応の律速反応である酸素分子の乖離吸着反応を調べたものである。この反応の活性化エネルギーは、白金(001)面で、1.2eVと見積もられる。デザインした触媒表面(鉄上の白金原子薄膜表面)では、白金がスピニ偏極し、d_{zz}軌道のエネルギーがフェルミレベル近傍に移動する。この表面における活性化エネルギーは、0.78eVと従来用いられてきた白金表面より減少させることに成功した。



触媒材料特許：特許第 5234534 号、特許第 5110557 号、特許第 5002761 号

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)