

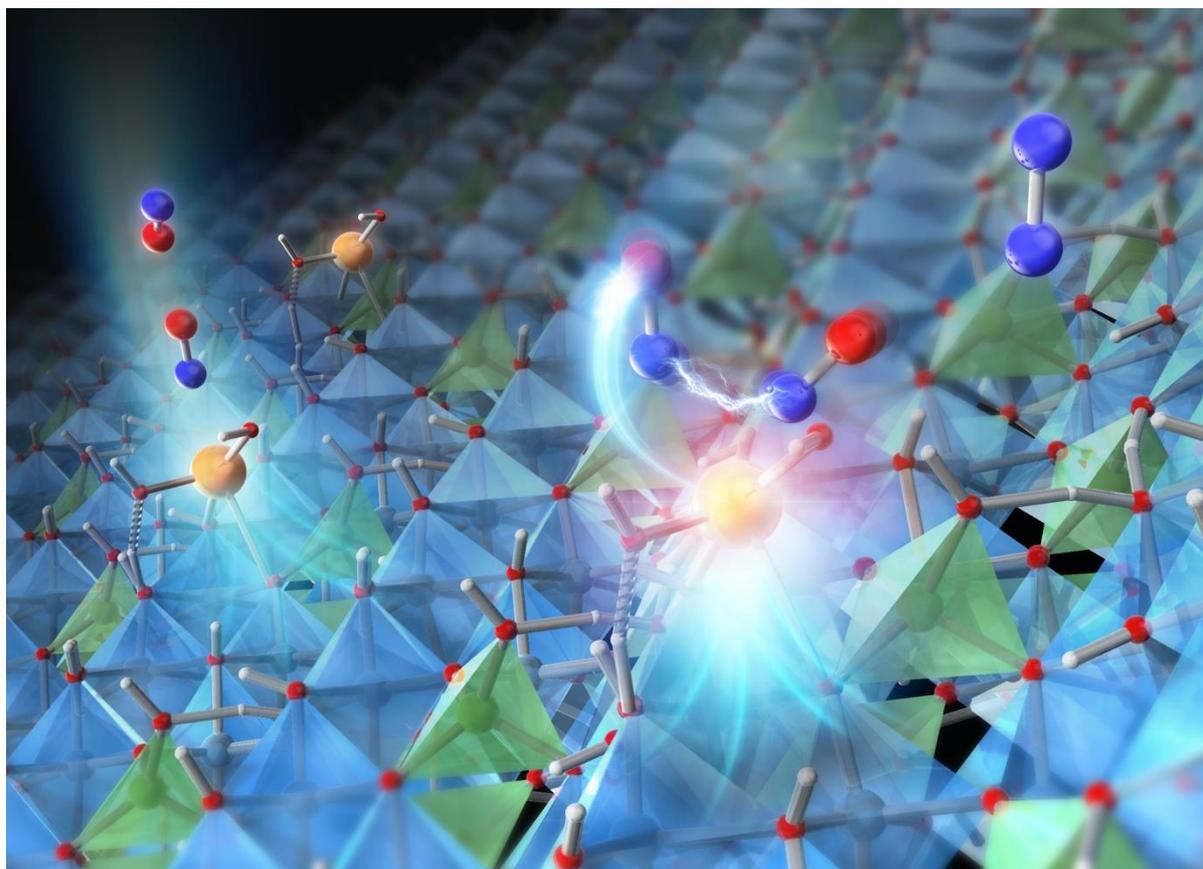
環境触媒が窒素酸化物を除去するメカニズムを理論的に解明 —自動車排ガス浄化触媒における触媒担体の役割—

概要

京都大学福井謙一記念研究センター 佐藤徹 教授、同工学研究科 細川三郎 特定准教授、寺村謙太郎 准教授、田中庸裕 教授らの研究グループは、自動車排ガス浄化触媒である銅/アルミナ触媒が窒素酸化物(NO_x)を効率よく除去するメカニズムを理論的に明らかにしました。

自動車排ガス浄化触媒は、自動車の排ガスから有害物質を除去する環境触媒です。通常の触媒には白金・ロジウム・パラジウムなどの希少元素が多量に用いられていますが、元素戦略上、希少元素フリーな触媒の開発が求められています。銅を触媒、アルミナ（酸化アルミニウム： Al_2O_3 ）を触媒担体とした銅/アルミナ触媒は、希少元素を用いていないにも関わらず、高い NO_x 除去性能を示すことが実験的に知られています。本研究グループは、この性能が担体と触媒の相互作用（アンカー効果）に起因することを見出しました。これは、上記のような希少元素以外でも、適切な担体と組み合わせれば高い性能を示し得ることを表しており、理論先導の新規な触媒の開発への応用が期待できます。

本研究成果は、2020年11月26日に英国王立化学協会の学術誌「Physical Chemistry Chemical Physics」のオンライン版に掲載されました。



1. 背景

自動車排ガス浄化触媒は、自動車の排ガスから有害物質(窒素酸化物, 一酸化炭素, 炭化水素)を除去するための環境触媒です。特に難しいとされているのが窒素酸化物(NO_x)の除去(還元)です。これまで、自動車排ガス浄化触媒には高価な希少元素(ロジウム, パラジウム, 白金)が広く用いられてきました。しかし近年、元素戦略の観点から、希少元素を用いない触媒の開発が求められています。本研究では、触媒に安価な銅元素を、触媒担体にアルミナを用いた銅/アルミナ触媒に着目しました。銅/アルミナ触媒は、希少元素を用いていないにも関わらず高い NO_x 還元性能を示すことが報告されています。

2. 研究手法・成果

本研究では、まずアルミナ等の金属酸化物表面の計算モデルを構築する一般的な手法(SSHT 法)を提案しました。また、本研究グループでは、化学反応がどこで起こるかを可視化して理解することのできる振電相互作用密度(VCD)理論を構築しています。SSHT 法により作成した銅/アルミナ触媒の計算モデルに VCD 理論を適用し、アルミナ担体が銅原子と相互作用することで、銅原子の NO 還元性能が向上することを理論的に明らかにしました。担体と触媒の相互作用はアンカー効果と呼ばれます。この知見は、適切に担体を選択してアンカー効果を駆使することで、安価な元素を用いた触媒の設計に利用できる可能性を示唆しています。

3. 波及効果、今後の予定

本研究では銅/アルミナ触媒を例として、自動車排ガス浄化触媒の NO_x 還元メカニズムを理論的に明らかにしました。この成果により、希少元素を含まない触媒の設計指針が定まりつつあります。これまで実験が先導して行われてきた触媒開発ですが、今後は理論側から新規材料を提案するような理論先導の研究を進めていく予定です。

4. 研究プロジェクトについて

本研究成果は文部科学省 元素戦略プロジェクト研究拠点形成型「京都大学 実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」ならびに JSPS 科研費 基盤研究 C の助成を受けて行われました。

<研究者のコメント>

本研究で開発した計算モデルを構築する手法は、本触媒に限らず固体表面をモデル化する手法として用いることができます。理論解析の結果から、安価な元素を用いた触媒を設計し、その実現をめざしていきたいと思えます。

<論文タイトルと著者>

タイトル A Theoretical Investigation into the Role of Catalyst Support and Regioselectivity of Molecular Adsorption on a Metal Oxide Surface: NO Reduction on Cu/γ -Alumina (金属酸化物表面における分子吸着の領域選択性と触媒担体の役割: Cu/γ -アルミナによる NO 還元)

著者 Wataru Ota, Yasuro Kojima, Saburo Hosokawa, Kentaro Teramura, Tsunehiro Tanaka, and Tohru Sato

掲載誌 Physical Chemistry Chemical Physics

DOI 10.1039/D0CP04895J