

排気ガス浄化用触媒シミュレーション

第一原理計算による貴金属/担体の相互作用と触媒活性についての解析

研究・開発機関：(株)豊田中央研究所 先端研究センター
 利用施設：大阪大学 サイバーメディアセンター
 計算規模：計算速度 5.3Tflops (20 ノード)
 利用ソフトウェア：第一原理分子動力学計算コード STATE*

Before

- 担体、貴金属、吸着分子という3種を含む原子スケールでの振る舞いが影響する系については、電子状態を考慮して解析する必要があります。
- 従来は計算負荷が非常に大きいため、ワークステーションなどでは十分な解析を行うことは困難でした。

After

- スーパーコンピュータを用いることで、吸着分子/貴金属/担体の原子スケールでの複雑かつ大きな系での電子状態解析を行い、その振る舞いを理解することが可能になりました。

背景と目的

排気ガス浄化の基準がより厳しくなることに加え、レアメタルの価格高騰の問題から、少ない貴金属量で高い浄化性能をもった触媒が求められています。また、排気触媒は高温かつ様々な雰囲気下に置かれることにより、初期状態の触媒構造から変化が起るため、触媒性能の劣化する現象も含めた上で、触媒設計を行う必要があります。

今まで、「貴金属表面と吸着分子」や「担体と貴金属の界面」という2種を含んだ系については様々な研究が行われてきましたが、「担体、貴金属、吸着分子」という3種を含む系については十分な解析が行われていませんでした。

一酸化炭素、窒素酸化物、炭化水素などの排気ガスの浄化触媒の設計を目的として、原子スケールでの吸着分子/貴金属/担体の相互作用を解析し、触媒活性についての評価を行いました。

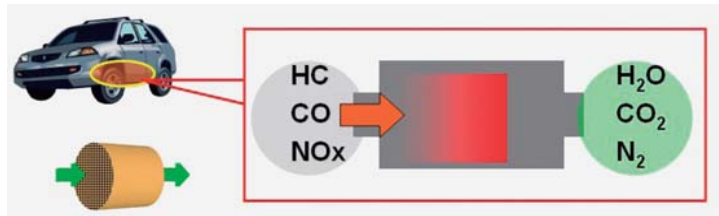


図1. 排気ガス浄化触媒に求められる機能

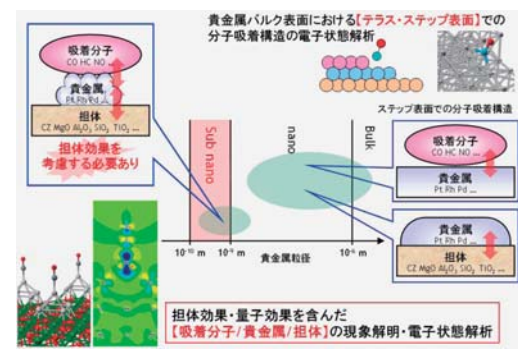


図2. 電子状態計算による排気浄化触媒の解析

利用成果

担体表面上の貴金属の電子状態が吸着分子に与える影響について、金属が1個の場合と5個の場合の2つのケースについて知見を得ることができました。1個の場合は、金属というよりもカチオンに近い電子状態になることがわかり、このような場合、触媒活性が金属触媒とは異なることがわかりました。

また、白金、ロジウム、パラジウムの3種類の元素についての比較を行うこともでき、どの元素が一番活性がよいのかということも議論できるようになりました。

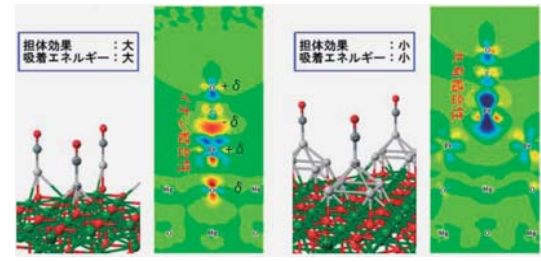


図3. 貴金属ナノクラスターにおける吸着エネルギーの評価
 左：貴金属原子1個のクラスター (Me₁)、右：貴金属原子5個のクラスター (Me₅)

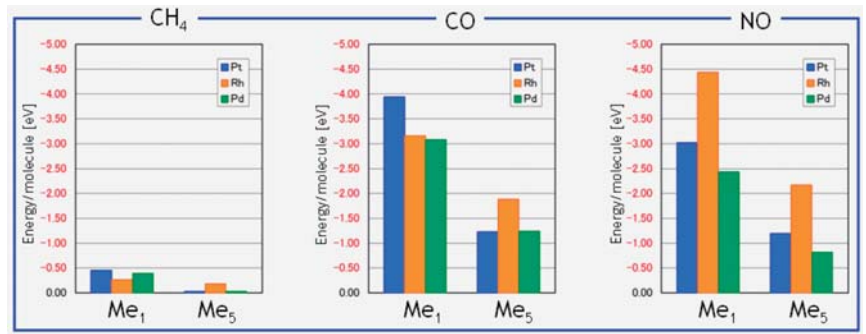


図4. 貴金属 (Pt, Rh, Pd) の単原子・5原子クラスターにおける分子 (CH₄, CO, NO) の吸着エネルギー