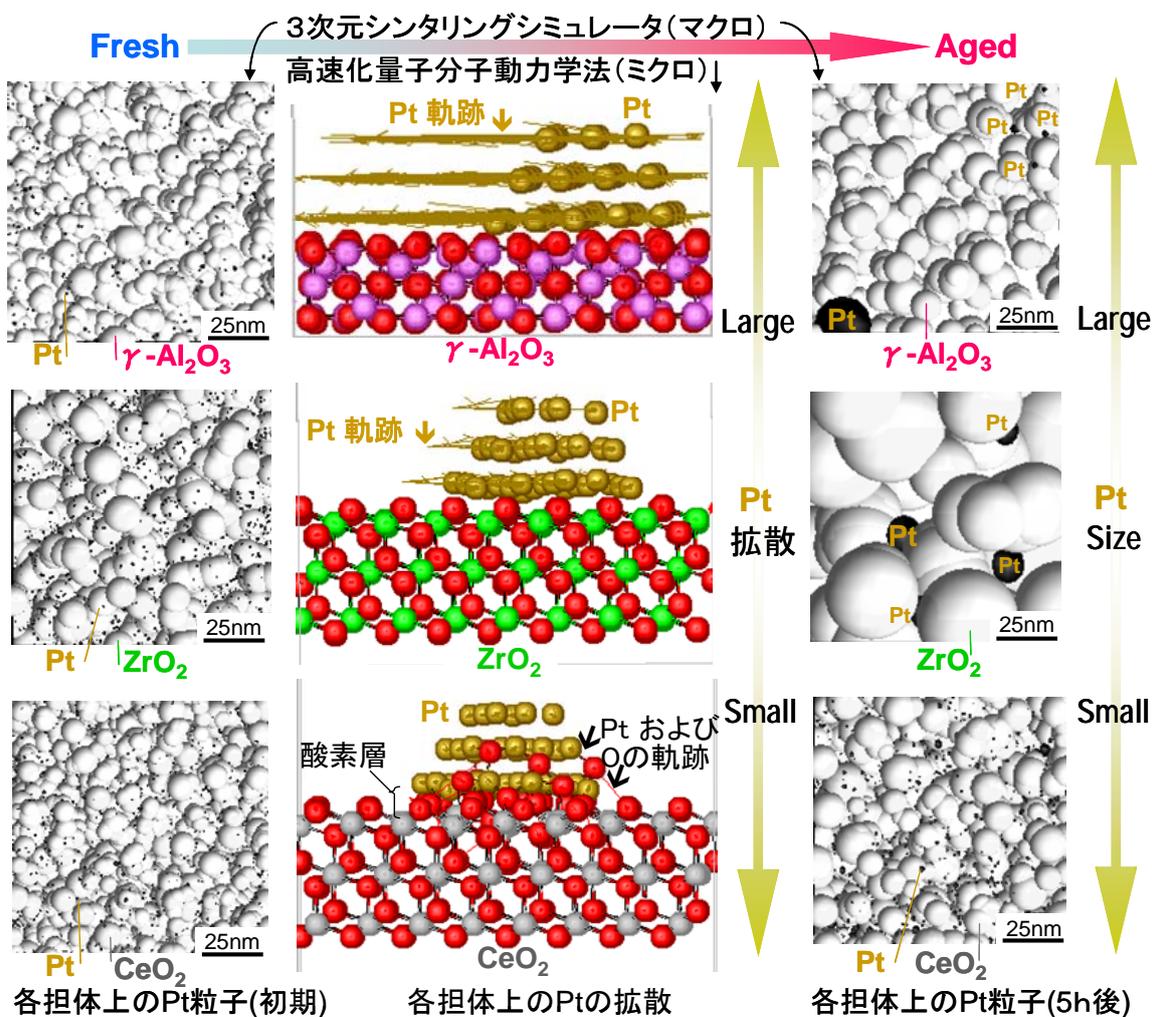


触媒のシンタリングおよび粒成長に関する理論的研究

(東北大) ○鈴木 愛・中村 勝善・佐藤 亮・大串 巧太郎・古山 通久・坪井 秀行・
 畠山 望・遠藤 明・高羽 洋充・Del Carpio Carlos A.・久保 百司・宮本 明

通常、触媒の経時劣化は試作品や法規制ごとに耐久性能を評価する実験的手法で確認されている。耐久してみて初めて高耐久品が絞り込めても同じ品質の製品を再び作れなかったり、実験的耐久手法そのものに要する時間と労力の効率化や省エネの観点からも、理論的代替手法が望まれている。このような背景から、貴金属ナノ微粒子のシンタリングに関して、異種担体上のPtの有限温度下における拡散形態を、理論的に導出し比較した。Ptと担体との結合が強いほどPtは拡散しにくくなる様子が明らかとなった。電子状態の解析から、Ptの拡散は γ - Al_2O_3 上では激しく、 ZrO_2 上では小規模となり、 CeO_2 表面上ではPt層との間に酸素層が形成され、Ptは担体とPt-O-Ce結合で固定される為、ほとんど拡散できない状態である事が明らかとなった。これは、実験が提案する“Pt/セリア触媒のPtシンタリング抑制機構”^{1,2}を良く説明できる結果である。こうした異種担体上の貴金属の拡散といった微視的な材料の特徴を、粒子を扱う μm 規模の巨視的計算に反映させると、長時間に亘るシンタリングの経時特性も理論的に予測できるようになる³。今後は更に、多岐にわたる材料や耐久条件を考慮しながら、より実践的な課題に取り組み、適用範囲を拡充させていくことを考えている。



- 1) Y. Nagai et al., *Journal of Catalysis*, 242, 103, 2006
- 2) M. Hatanaka et al., *Catalysts and Catalysis*, 50-5, 428, 2008 (in Japanese)
- 3) A. Suzuki et al., *Catalysts and Catalysis*, 50-6, 429, 2008 (in Japanese)