

2020年（令和2年）5月13日
株式会社豊田中央研究所

ナノクラスタ触媒の性能の起源解明と予測に初めて成功

株式会社豊田中央研究所は、トヨタ自動車株式会社と共同で、原子数個からなるクラスタ触媒の化学状態と触媒性能の関係を解明し、この発見に基づき、触媒として最適な原子数を予測する方法の確立に成功しました。

貴金属として代表的なプラチナ(Pt)は、燃料電池の酸素還元反応や、自動車の排ガス浄化過程の一つである一酸化炭素(CO)酸化反応などの触媒材料として特に重要です。しかしPtは資源量が乏しく高価なため、代わりとなる触媒材料の探索や、Ptクラスタをナノレベルで制御することによる使用量低減について努力がなされています。クラスタの直径が数ナノメートルまで小さくなると、クラスタとそれを保持する担体材料との間の相互作用が重要になります。例えば、20個までの原子で構成される大きさが1ナノメートル以下のナノクラスタの場合、70%以上の原子が担体材料と直接接触しているため、触媒反応に対する担体材料の影響は無視できないと考えられます。しかし、その担体材料の触媒性能に対する影響、そしてその物理的な描像は明らかではありませんでした。

本研究では、Pt原子の数を原子一個単位で厳密に制御したモデルクラスタ触媒を作製し、そのCO酸化反応性を調べることで、①小さくなり過ぎた原子数個の触媒では触媒活性が低いこと、②その原因が担持体との界面に存在する低配位なPt原子にあること、さらに、③その低配位なPt原子の数と触媒活性に強い相関関係があることを明らかにしました。こうして得られたPt原子の数と触媒活性の相関関係をもとに、原子数個のクラスタの触媒活性の予測に成功しました。本研究で得られた知見は、次世代の様々な触媒設計に役立つことが期待されます。

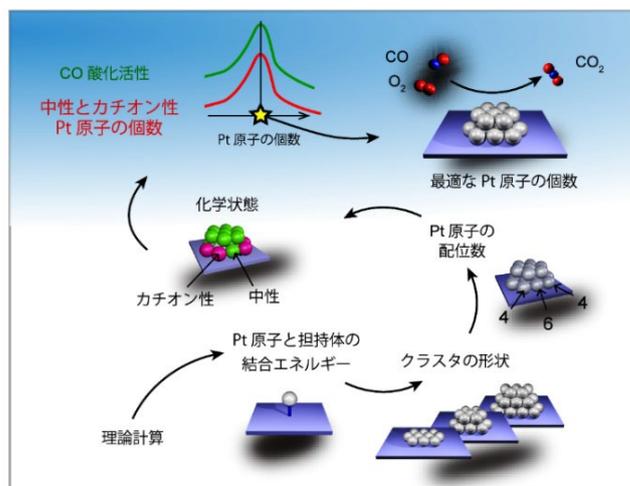
本成果は、4月20日付で、英国の科学雑誌「Nature Communications」に掲載されました。

【論文情報】

タイトル: CO oxidation activity of non-reducible oxide-supported mass-selected few-atom Pt single-clusters

著者: Atsushi Beniya, Shougo Higashi, Nobuko Ohba, Ryosuke Jinnouchi, Hirohito Hirata and Yoshihide Watanabe

DOI: 10.1038/s41467-020-15850-4



CO酸化触媒活性が最大になるPtクラスタサイズの予測方法の概略図。
本研究で明らかにした触媒活性とPt原子の配位数との相関関係を利用することで、
サイズが異なるクラスタのCO酸化触媒活性をそれぞれ予測することが可能となった。

Reprinted and modified from Nat. Commun., 11, No. 1888 (2020), © 2020 Springer Nature.