

「革新的触媒の科学と創製」
平成 28 年度採択研究者

2018 年度
実績報告書

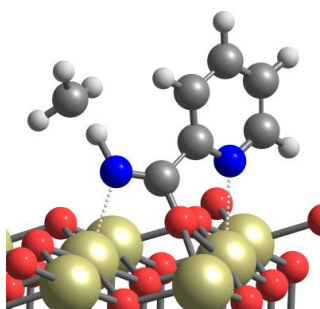
中山 哲

北海道大学触媒科学研究所
准教授

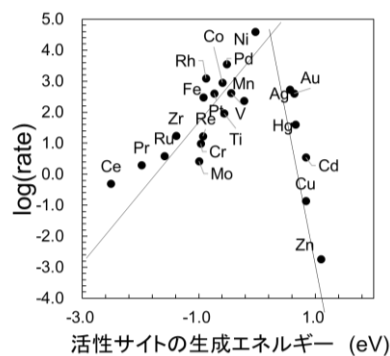
ナノスリット構造とハイブリッド化による in silico 触媒設計

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題では、第一原理計算手法を駆使し、固体酸化物や金属、有機化合物を複合的に組み合わせることによって出現する特異な反応場に注目し、メタンや低級アルカンの反応活性化に有効な触媒材料探索を目指している。固体酸化物／有機化合物のハイブリッド触媒に関しては、2-シアノピリジンが酸化セリウム上に特異吸着することで、アルカンの C-H 結合活性化に有効な触媒として機能することを示した。CN 基の N 原子が求電子的な性質を帯び、アルカンからラジカル的に水素を引き抜く機構で反応が進行していることが分かった。この触媒系は、反応基質によって強塩基またはレドックス触媒として機能する非常にユニークな触媒であることが示された。また、酸化セリウムに金属原子をドーピングすることによる表面改質効果の系統的評価を行い、反応速度に基づいた有効な金属ドーパントの探索を行った。その結果、Ni や Pd などのドーパントが有用であることが予測された。さらに、回帰分析を用いることで、反応に影響を与える因子の抽出と、それらを用いることによる未知のデータに対して予測精度の高いモデルの作成を行った。



酸化セリウム／2-シアノピリジン触媒
によるメタンの C-H 結合活性化



有効な金属ドーパントの探索

§ 2. 研究実施体制

①研究者:中山 哲 (北海道大学触媒科学研究所 准教授)

②研究項目

- ・固体酸化物／有機化合物のハイブリッド触媒の設計に関する第一原理計算
- ・ナノ空間反応場の設計に関する第一原理計算