



「電子励起状態が単原子触媒の構造や
ダイナミクスに与える影響の解明」

國貞 雄治 工学研究院
附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター
マルチスケール機能集積研究室

email: kunisada@eng.hokudai.ac.jp

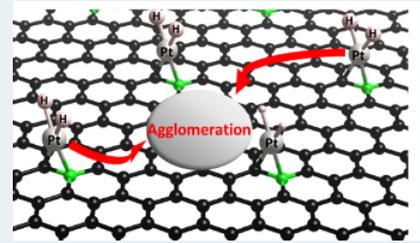
研究室HP <https://lifm.eng.hokudai.ac.jp/>

関連キーワード「第一原理計算/水素/単原子触媒/吸着・拡散」



研究の目的

- ・クリーンエネルギー社会の実現のためには、
触媒における貴金属の使用量削減が重要です
- ・貴金属の使用量削減方法の一つとして、
触媒の微細化が広く用いられています
- ・単原子触媒はクラスター化・ナノ粒子化により、
触媒活性が低下します
- ・本研究では、光などの外場による電子励起が
触媒のダイナミクスに与える影響の解明を目指します



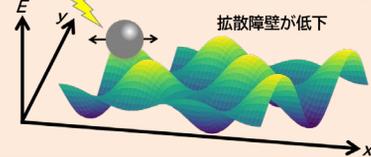
S. Hasegawa, Y. Kunisada,
N. Sakaguchi,
ACS Omega 4 (2019)
6573-6584.

研究内容

- ・第一原理計算を用いて
光照射による単原子触媒の
拡散障壁変化を評価します
- ・密度汎関数理論に基づき、
電子温度変化の影響を調査します
- ・時間依存密度汎関数理論に基づき、
バンド間励起の影響を調査します

研究成果

- ・電子温度の上昇とともに
拡散障壁の低減が見られました
- ・バンド間励起の計算に関し、
計算パラメータの最適化を行いました



期待される効果・貢献

- ・光照射などの環境下で劣化しにくい触媒材料の選定を加速させます
- ・高価な貴金属の使用量の削減は、資源リスクの低減に直結します。



研究室Webサイト



Researchmap

