

第305回 化学科コロキウムのご案内

「触媒・電池元素戦略プロジェクトにおける電子論研究」

江原 正博 教授 (分子科学研究所／計算科学研究センター)

日時： 令和2年12月17日(木曜日) 16:20-17:50

場所： オンライン開催

(ZOOMアドレスは前日迄にご連絡致します)

要旨

触媒・電池元素戦略プロジェクトでは、貴金属を低減または代替した自動車排ガス浄化触媒やナトリウム二次電池の研究開発を行っています。これらの研究では、合成、計測、理論が協働して進めています。本発表では、最近の研究から理論(電子論)がどのように活用されているかを紹介します。特に、自動車排ガス浄化触媒で重要である合金クラスターの構造と電子状態、微粒子触媒の反応機構、高分散金属担持触媒について説明します。金属微粒子触媒の触媒活性は、量子効果、合金効果、担体効果などの要因があります。理論・計算化学ではこれらの要因を半定量的に解析することができ、触媒作用の解明や新しい触媒の設計に活用されています。

連絡先 東京都立大学 理学研究科 化学専攻 波田雅彦 内線3583 hada@tmu.ac.jp