

Title	低温CO酸化反応に活性なPd系合金触媒の探索と活性評価システムの構築
Sub Title	Design of Pd based alloy catalyst for low-temperature CO oxidation and development of reactivity test system.
Author	豊島, 遼(Toyoshima, Ryo)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2020
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2019. )
JaLC DOI	
Abstract	<p>本研究では自動車排気ガス浄化に利用される「三元触媒」の高性能化に向けて低温一酸化炭素(CO)酸化反応に有効なPd系合金触媒の探索とその触媒活性評価システムの構築を行った。具体的な研究の流れとしては、①低温時でも高活性を示すと報告されるPd-Au合金の触媒合成法の確立とそのキャラクタリゼーション、②質量分析計を備えた触媒活性評価装置の開発とその解析方法の確立を行った。助成額50万円は当初の予定通り、真空装置用パーツ、金属試料、評価装置支持用のアルミフレームの購入費用に充てた。</p> <p>触媒合成では、一般に広く利用されるポアフィリング法を採用した。任意の比率でPd(NO)<sub>3</sub>水溶液とHAuCl<sub>4</sub>水溶液を混合した後、担体となる酸化アルミ粉末に含浸した。これを電気炉で500℃に焼成することでPd-Au合金触媒を得た。触媒のキャラクタリゼーションは、X線光電子分光(XPS)、透過電子顕微鏡(TEM)、X線回折(XRD)で実施した。触媒合成、キャラクタリゼーションの繰り返しにより、Pd-Au合金触媒の適切な合成条件を決定した。</p> <p>評価装置開発では、触媒反応を行うセルと反応ガスを分析する質量分析計を備えた真空チャンバを立ち上げた。従来から活性評価装置自体は研究室で所有していたが、セルを小型化してより高効率な測定を可能とした。作製した装置を用いて、種々の条件で触媒活性を評価した。また対照試料として、Pd-Au単結晶の評価も実施した。最終的に「CO/O<sub>2</sub>ガス混合比」と「Pd-Au合金組成比」に対する「触媒活性化温度」の3次元図を作成し、最適なガス混合比や組成を決定するための指針を得ることに成功した。</p> <p>現在、得られた結果に基づいて更なる触媒合成と評価を継続している。また並行して多様な条件の中から効率的に高活性条件を探索するための統計学的手法"ベイズ最適化"のプログラムを作成中である。これを用いることでより迅速に適切な合金組成を決定するプロセスを確立する予定である。</p> <p>The aim of this study is the improvement of the catalytic performance of the "three-way catalyst" for automobile exhaust gas purification. For a high-throughput survey of candidate materials, the development of a catalytic activity testing system was carried out. It is well known that Pd-based alloy catalysts are effective for low-temperature carbon monoxide (CO) oxidation reaction. The research-flow is described as follows: (1) establishment and characterization of a catalyst synthesis method for Pd-Au alloys that are reported to exhibit high activity even at low temperatures; (2) development of a catalyst activity testing system equipped with a mass spectrometer. The research grants (50,000) were used to purchase vacuum equipment parts, metal samples, and aluminum frames to support the vacuum chamber, as originally planned. In the catalyst synthesis, a pore-filling method, which is widely used for industrial products, was employed. After mixing of Pd(NO)<sub>3</sub> aq. and HAuCl<sub>4</sub> aq., the mixture was impregnated into aluminum oxide powder as a substrate. This was fired at 500 deg. C in an electric furnace to obtain a Pd—Au alloyed catalyst. Characterization of the catalyst was performed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), transmission electron microscope (TEM), and X-ray diffraction (XRD). By repeating catalyst synthesis and characterization, optimal synthesis conditions for Pd-Au alloy catalyst were determined.</p> <p>In the development of the testing system, a vacuum chamber equipped with a gas cell for performing the catalytic reaction and a mass spectrometer for analyzing the reaction gas was installed. The catalytic activity was monitored under various conditions. Finally, a three-dimensional diagram of "catalyst activation temperature", "CO / O<sub>2</sub> gas mixture ratio" and "Pd-Au alloy composition ratio" was created, and guidelines for determining the optimal gas mixture ratio and composition are obtained.</p> <p>Currently, further synthesis and evaluation of the catalyst are ongoing based on the obtained results. We are also developing a program for a statistical method "Bayesian optimization" to efficiently survey for highly active conditions from various conditions. Using this, we plan to establish a process for determining the appropriate alloy composition more quickly.</p>
Notes	
Genre	Research Paper

URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2019000007-20190278">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2019000007-20190278</a>
-----	---

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

研究代表者	所属	理工学部	職名	助教(有期)	補助額	500 (特B)千円
	氏名	豊島 遼	氏名 (英語)	Ryo Toyoshima		
研究課題 (日本語)						
低温 CO 酸化反応に活性な Pd 系合金触媒の探索と活性評価システムの構築						
研究課題 (英訳)						
Design of Pd based alloy catalyst for low-temperature CO oxidation and development of reactivity test system.						
1. 研究成果実績の概要						
<p>本研究では自動車排気ガス浄化に利用される「三元触媒」の高性能化に向けて低温一酸化炭素(CO)酸化反応に有効な Pd 系合金触媒の探索とその触媒活性評価システムの構築を行った。具体的な研究の流れとしては、①低温時でも高活性を示すと報告される Pd-Au 合金の触媒合成法の確立とそのキャラクタリゼーション、②質量分析計を備えた触媒活性評価装置の開発とその解析方法の確立を行った。助成額 50 万円は当初の予定通り、真空装置用パーツ、金属試料、評価装置支持用のアルミフレームの購入費用に充てた。</p> <p>触媒合成では、一般に広く利用されるポアフィリング法を採用した。任意の比率で Pd(NO)<sub>3</sub> 水溶液と H<sub>2</sub>AuCl<sub>4</sub> 水溶液を混合した後、担体となる酸化アルミ粉末に含浸した。これを電気炉で 500°C に焼成することで Pd-Au 合金触媒を得た。触媒のキャラクタリゼーションは、X 線光電子分光(XPS)、透過電子顕微鏡(TEM)、X 線回折(XRD)で実施した。触媒合成、キャラクタリゼーションの繰り返しにより、Pd-Au 合金触媒の適切な合成条件を決定した。</p> <p>評価装置開発では、触媒反応を行うセルと反応ガスを分析する質量分析計を備えた真空チャンバを立ち上げた。従来から活性評価装置自体は研究室で所有していたが、セルを小型化してより高効率な測定を可能とした。作製した装置を用いて、種々の条件で触媒活性を評価した。また対照試料として、Pd-Au 単結晶の評価も実施した。最終的に「CO/O<sub>2</sub> ガス混合比」と「Pd-Au 合金組成比」に対する「触媒活性化温度」の 3 次元図を作成し、最適なガス混合比や組成を決定するための指針を得ることに成功した。</p> <p>現在、得られた結果に基づいて更なる触媒合成と評価を継続している。また並行して多様な条件の中から効率的に高活性条件を探索するための統計学的手法“ベイズ最適化”のプログラムを作成中である。これを用いることでより迅速に適切な合金組成を決定するプロセスを確立する予定である。</p>						
2. 研究成果実績の概要 (英訳)						
<p>The aim of this study is the improvement of the catalytic performance of the “three-way catalyst” for automobile exhaust gas purification. For a high-throughput survey of candidate materials, the development of a catalytic activity testing system was carried out. It is well known that Pd-based alloy catalysts are effective for low-temperature carbon monoxide (CO) oxidation reaction. The research-flow is described as follows: (1) establishment and characterization of a catalyst synthesis method for Pd-Au alloys that are reported to exhibit high activity even at low temperatures; (2) development of a catalyst activity testing system equipped with a mass spectrometer. The research grants (¥500,000) were used to purchase vacuum equipment parts, metal samples, and aluminum frames to support the vacuum chamber, as originally planned.</p> <p>In the catalyst synthesis, a pore-filling method, which is widely used for industrial products, was employed. After mixing of Pd(NO)<sub>3</sub> aq. and H<sub>2</sub>AuCl<sub>4</sub> aq., the mixture was impregnated into aluminum oxide powder as a substrate. This was fired at 500 deg. C in an electric furnace to obtain a Pd-Au alloyed catalyst. Characterization of the catalyst was performed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), transmission electron microscope (TEM), and X-ray diffraction (XRD). By repeating catalyst synthesis and characterization, optimal synthesis conditions for Pd-Au alloy catalyst were determined.</p> <p>In the development of the testing system, a vacuum chamber equipped with a gas cell for performing the catalytic reaction and a mass spectrometer for analyzing the reaction gas was installed. The catalytic activity was monitored under various conditions. Finally, a three-dimensional diagram of “catalyst activation temperature”, “CO / O<sub>2</sub> gas mixture ratio” and “Pd-Au alloy composition ratio” was created, and guidelines for determining the optimal gas mixture ratio and composition are obtained.</p> <p>Currently, further synthesis and evaluation of the catalyst are ongoing based on the obtained results. We are also developing a program for a statistical method “Bayesian optimization” to efficiently survey for highly active conditions from various conditions. Using this, we plan to establish a process for determining the appropriate alloy composition more quickly.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			