

放射光X線で自動車触媒の動きをリアルタイムで観る 時間分解X線吸収分光での酸化還元評価

ユースケース提供

ダイハツ工業株式会社 パワートレイン制御開発部
株式会社キャタラー 第1製品開発部

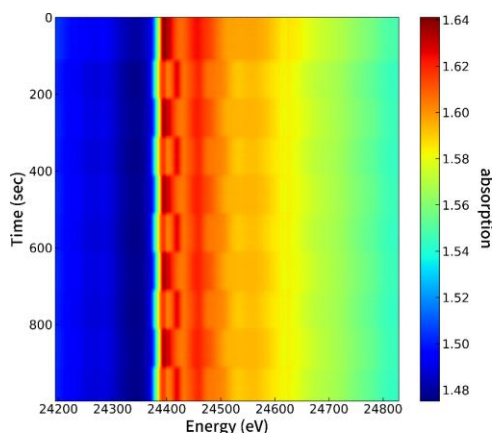
ワンポイント

- ・自動車の排ガスを浄化するために触媒が必要！ → 触媒は使用するにつれ劣化していく。。。
- ・触媒の劣化を検知するために酸化還元能力を利用！ → 触媒の中のどの元素が働いているか不明。。。

解決策：放射光X線を使って、個別の元素の酸化還元を評価

● 利用するデータ

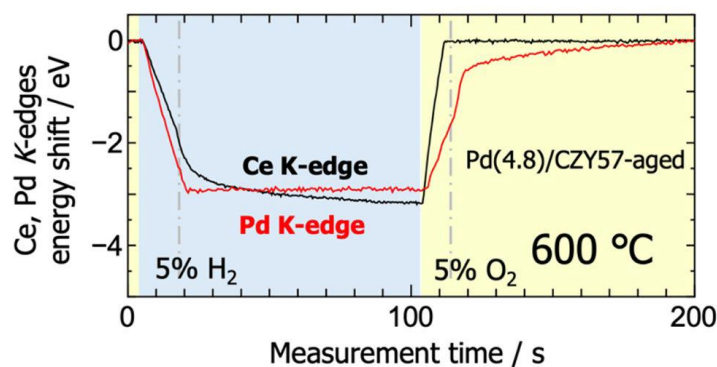
放射光による時間分解X線吸収分光



- 100秒毎に酸化ガスと還元ガスを切り替え、パラジウムのX線吸収分光データを時間分解観測
- ⇒ パラジウムの酸化状態を把握
 - ⇒ 他の元素の酸化速度も評価可能

● なにができる

自動車触媒の構成元素ごとの酸化還元反応速度を決定

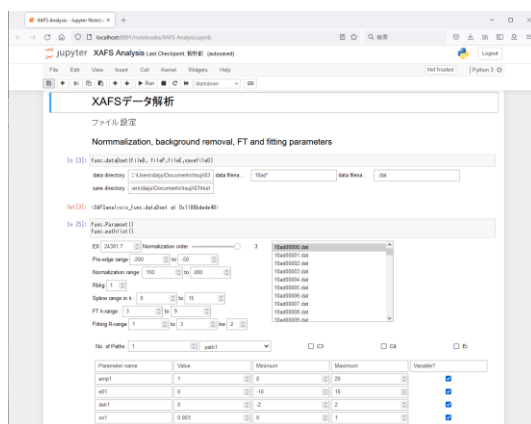


- 触媒を構成する、セリウム(Ce)とパラジウム(Pd)で、酸化還元反応様式の違いを検知！
- ⇒ 放射光で見た反応様式が触媒設計をアシスト

H. Tanaka *et al.*, SAE Technical Paper 2025-01-8474, 2025

● 解析の方法

実施機関が独自開発した連続データ解析プログラム



- 時間分解データは量が多くて処理が大変。。。
- ⇒ 実施機関が独自の連続解析プログラムを提供
 - ⇒ **Local**または**Jupyter notebook**環境下で動作
 - ⇒ **ARIM-mdx**上でも動作可能に

● 利用してみての感想

《利用のきっかけ》
共同研究者の大学教授からの紹介。

《利用する前と後での感想》
最初は難しそうだったが、共同研究者やスタッフのサポートがありうまくいった。他社でもニーズはあるのではと感じている。

《うまく利用するコツ》
競争力に直結する部分はオープンにしにくいので、最初にオープンとクローズの枠組みを作ることが必要。基礎的な部分は全体で共有することで業界の底上げにつながる。

《うまくいかなかった点は》
実環境に近い状態を作り出すための配管作業が、最初は難しかった。2回目以降は克服。



CONTACT
JAEA ARIM事務局
e-mail: harima-usersoffice@jaea.go.jp
URL: <https://arim.jaea.go.jp/jp/index.html>

どんな材料？ どんな実験？
どんな解析ツール？ ...
サポートページはこちら →



放射光X線で自動車触媒の動きをリアルタイムで観る 時間分解X線吸収分光での酸化還元評価

ユースケース提供
ダイハツ工業株式会社 パワートレーン制御開発部
株式会社キャタラー 第1製品開発部

このマップ作成と推定の対象材料や、解析に用いたデータ、ツール等について、以下のリンク先からより詳しい情報を知ることができます。

解析対象の材料

貴金属担持CeO₂-ZrO₂-Y₂O₃系複合酸化物自動車触媒

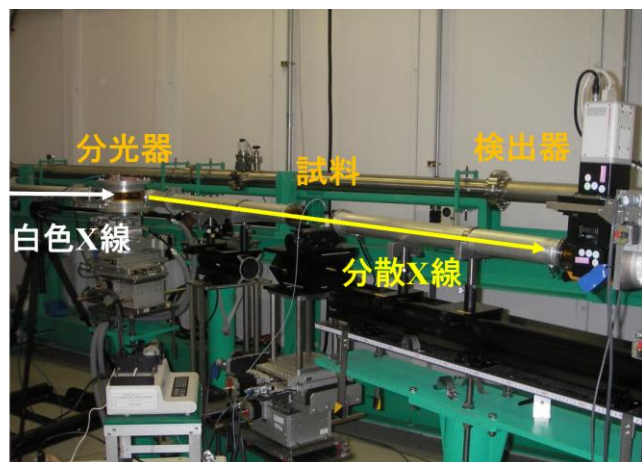
解析に利用した代表的なデータセット

1	データセット名	In-situ XAFS による 貴金属担持セリア系複合酸化物の酸素吸蔵放出機構の研究 (1)
	課題番号	JPMXP1223AE0021
	登録者／実施機関	辻卓也／日本原子力研究開発機構
	データセット URL	https://nanonet.go.jp/data_service/arim_data.php?mode=detail&code=1689&key=hkrnePu1lyMlguKK8likbLEAXxgOj52f&inst_array[]=18&display_order=0&display_result=0&page=1

解析に用いるツール、サンプルコードなど

- ・実施機関が独自に開発した、X線吸収分光データ一括解析プログラムを使用
- ・旧バージョン： Visual Basic + Fortan + R
- ・新バージョン： Python + Larchライブラリ
- ・LocalまたはJupyter notebook環境下で動作 → ARIM-mdx上へも移植済

データの基となる実験・装置



設備ID	AE-006
分類	状態分析（各種分光法（元素分析・振動モード・電子状態）を含む）>エックス線吸収端構造解析
設備名称	エネルギー分散型XAFS装置 (Energy-dispersive XAFS measuring station)
設置機関	日本原子力研究開発機構（JAEA）
設置場所	大型放射光施設（SPring-8）
メーカー名	カスタム
型番	カスタム

CONTACT

JAEA ARIM事務局
e-mail: harima-usersoffice@jaea.go.jp
URL: <https://arim.jaea.go.jp/jp/index.html>

どんな材料？ どんな実験？
どんな解析ツール？ ...
サポートページはこちら →

