

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名：表面規整酸化物触媒の研究

2. 研究代表者：田 旺帝（北海道大学触媒化学研究センター 助教授）

3. 研究概要

本研究チームの目的は、構造が整った酸化物単結晶表面上に新規な金属ナノクラスター種を形成し、新規に開発した表面分析手法を用いてその構造と触媒物性との相関や反応メカニズムを原子・分子レベルで明らかにし、更なる環境触媒材料開発に向けた設計指針を得ることにある。

「単結晶酸化物表面を利用した新規金属ナノクラスターの調製、キャラクタリゼーションおよび触媒作用の研究」単結晶酸化物表面上に制御された金属ナノクラスターを作成し、走査プローブ顕微鏡によりモルフォロジーや吸着サイトを明らかにし、さらに、これまで困難だった単結晶酸化物表面上に高分散した金属クラスターの構造を偏光全反射蛍光 XAFS 法によりサブ 1nm の分解能で決定する。

「ナノ～メソ領域における金属酸化物表面上の Au の表面・境界面構造と物性」金属と担体である酸化物との境界面が触媒活性に重要な役割を果たしている。この酸化物と金属クラスターとの境界面における化学状態を分析するために、in-situ の EXPEEM(エネルギー選別 X 線光電子顕微鏡法)、XANAM(X 線支援非接触原子間力顕微鏡)を開発する。

「ケルビン顕微鏡による Pt/TiO₂ 担持触媒モデルの電荷移動計測の達成」固体表面の局所的な仕事関数を計測できるケルビンプローブ顕微鏡を用いて酸化物表面に吸着した遷移金属原子～ナノサイズクラスターの電荷移動を局所仕事関数の変化として計測する。

4. 中間評価結果

4 - 1. 研究の進捗状況と今後の見込み (4 - 2. 研究成果の現状と今後の見込み)

本研究チームの進捗は、やや出遅れていた印象があったが、ここに来て研究進捗が目に見えるようになってきている。次のような点で高く評価できる。

- ・ 単結晶酸化物表面上に制御された金属クラスターを作成し、走査プローブ顕微鏡 (STM)、偏光全反射蛍光 XAFS 法 (PTRF-XAFS)、HREELS(高分解能電子エネルギー損失分析分光器)により、モルフォロジー、吸着サイト、化学結合、吸着種同定などの精密キャラクタリゼーションを行った。
- ・ Al₂O₃(0001)、TiO₂(110)単結晶酸化物表面上に Ni を金属蒸着し、Ni の単原子吸着構造を3次元的はじめで決定することに成功した。
- ・ 回転対陰極型強力 X 線源とトロイダル型人工多層膜分光結晶による X 線集光によって、放射光施設とほぼ同程度の光源が得られるようにした。

- ・ 放射光 X 線 (KEK-PF) を利用できる NC-AFM 装置を試作し、X 線入射により変化したカンチレバー先端と試料表面間相互作用の変化による表面元素・化学マッピング像を取得した。
- ・ 二酸化チタン単結晶面に色素 (レチノールカルボン酸・フルオレセイン・ルテニウム N3 錯体) 単分子膜を作成し、マルチプレックス和周波分光と走査プローブ顕微鏡をもちいて分析評価し、巨視的分光法と顕微鏡法の併用が酸化物単結晶の化学分析に有効なことを実証した。
 今後は大西グループを含めて、触媒反応の解明に資するような表面を精密に解析する分析手段を開発して欲しい。

4 - 3 . 今後の研究に向けて

- ・ 本研究の目的は、構造が整った酸化物単結晶表面上に新規な金属ナノクラスター種を形成し、新規に開発した表面分析手法を用いてその構造と触媒物性との相関や反応メカニズムを原子・分子レベルで明らかにし、更なる環境触媒材料開発に向けた設計指針を得るように努める。
- ・ 大西グループも着実に成果を上げつつある。田グループと共通の試料を観測することにより、チーム全体としてのまとまりが感じられるようになる。複数の分析手法を併せて、一つのターゲットを設定してはどうか。
- ・ ケルビンプローブにより酸化物表面に担持した金属微粒子の局所的な電荷状態を実空間で観測できれば、波及効果も大きい。観測手法の開発に的を絞って、残りの期間で集中するのがよい。

4 - 4 . 戦略目標に向けての展望

- ・ 本研究チームは固体表面の基礎科学を専門的に研究している。従って、研究成果の環境応用については、直接的な応用でなくても、環境触媒で課題になっている重要な基礎的知見を得られれば良いと思う。例えば、担持貴金属触媒における、電荷移動、微細構造、perimeter の状態などに関する信頼性のある基礎的知見など。

4 - 5 . 総合的評価

- ・ 表面科学の立場から、環境触媒の研究者に「新しい概念、考え方」あるいは、「基礎的知見」を提供することに主眼をおいてもよい。
- ・ 電荷移動量の計測に独創的なアイデアが認められる。定量的な触媒電荷移動の研究については、サイズ効果、再現性の確立にも力を入れてほしい。