

「金ナノ粒子触媒の実環境での原子スケール可視化によるメカニズム解析」

（平成 19～23 年度 特別推進研究（課題番号：19001005）

「金属ナノ触媒粒子による気体反応メカニズムの原子・電子構造的解析」

所属（当時）・氏名：大阪大学・産業科学研究所・教授・竹田 精治

1. 研究期間中の研究成果

・背景 化学的に不活性な金をナノ粒子にして酸化物に担持するとさまざまな化学反応を促進する触媒となることが 1980 年代に春田正毅（研究分担者）らによって発見された。このような金属ナノ粒子の触媒能の起源は触媒化学のみならず、燃料電池やエネルギー、環境、ナノテクノロジーに関わる各分野、さらに科学全般、産業界にいたるまで大きな関心をもたれている。本研究開始当初、各種顕微鏡法による観察や計算科学的な検証が行われていたが、本当に実環境下での触媒特性を説明しているのかが疑問であり、実際に触媒として機能している環境下での原子スケール実時間観察が待望されていた。

・研究内容及び成果の概要 特殊な環境制御・透過電子顕微鏡（ETEM）を開発して、実環境下の金属ナノ粒子触媒を原子スケールその場観察することに成功した。観察した試料は春田らが特別に調製した金ナノ粒子触媒および白金ナノ粒子触媒であった。原子スケールの観察データは、香山正憲（連携研究者）らの第一原理計算解析と連携して、さらに触媒化学的測定と考察も加えて解析した。その結果、活性な触媒構造が原子スケールで明らかにされ、さらに触媒表面に吸着した気体分子の可視化も実現できた。予想をはるかに超える奥行きがある新しい発見があり、一酸化炭素の室温酸化において従来、未確定であった一酸化炭素の吸着サイト、酸素解離反応の活性サイトが実空間で解析できた（図 1）。

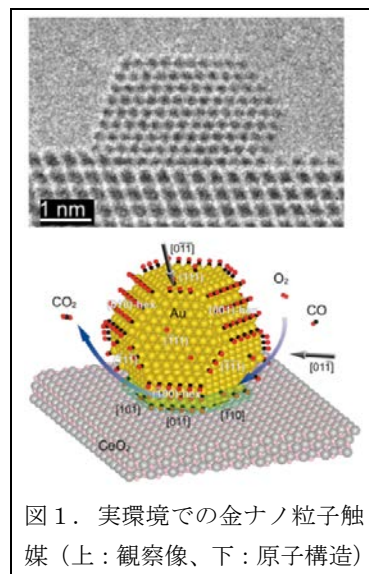


図 1. 実環境での金ナノ粒子触媒（上：観察像、下：原子構造）

2. 研究期間終了後の効果・効用

・研究期間終了後の取組及び現状 ETEM 法を触媒化学へ広く応用するために国内のみならず海外の触媒化学者とも共同研究を進めた。さらに高速な現象を観察するための ETEM 法に関する技術開発も進め、今後の ETEM 法の発展のために国際的な研究グループと協力した。また、本研究で、気体分子と相互作用する金属表面の原子スケール動的解析が可能となり、さらに進めて「電場下での」相互作用による新現象を見いだした。また、金ナノ粒子触媒による一酸化炭素の室温酸化は、金ナノ粒子と担体の接合界面で優先的に起こると考えられており、本質的に活性な金触媒の動的な構造単位の決定を目指して研究を進めた。

・波及効果 モデル触媒ではなく実用性能を確認した金ナノ粒子触媒について、その常温触媒特性の発現機構を本研究では直接、ETEM で観測して、有毒な一酸化炭素の酸化・無害化反応に関する反応機構が明らかにされた。担体となる卑金属酸化物の役割や金ナノ粒子の寸法効果に関する理解が可能となり、化成品（高分子の原料など）の革新的製造プラントの商業運転が日本や中国で始まってきた。触媒化学、第一原理解析そして電子顕微鏡の専門家が結集した本研究の成果は、有害な原料を使わない、有毒物質を排出しない、欲しいものだけを選択的に合成するなど、シンプルな化学プロセスの実用化の波の引き金になっており、その社会的意義は大きいと考えられる。