



# ルチル $\text{TiO}_2$ 表面上で創り出される貴金属原子触媒の局所構造解析

織田晃, 木村友哉, 藤田堯久  
名古屋大学大学院工学研究科

キーワード：貴金属単原子

## 1. 背景と研究目的

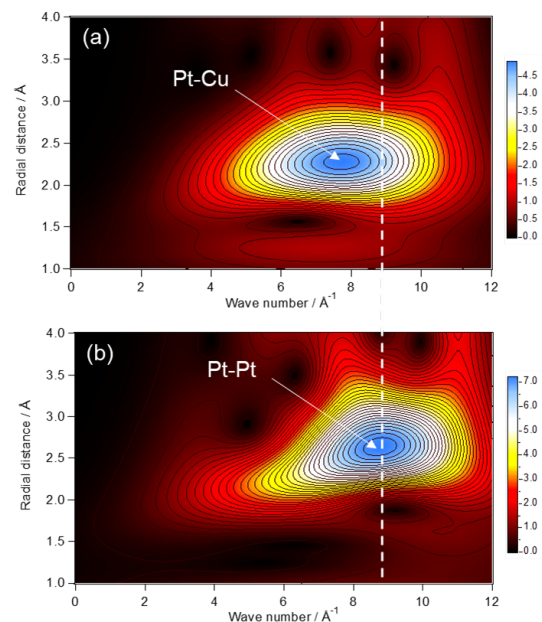
埋蔵量が豊富で安価な天然ガスを代替資源として活用する技術開発が望まれている。特に、様々な化学原料として利用でき、且つ輸送・貯蔵に適したアルコール、アルデヒド、カルボン酸への選択酸化プロセスの構築が望まれている。しかし、天然ガス中に含まれるメタン、エタンや大気中の酸素は高い安定性を有し、更には目的生成物が出発原料よりも酸化されやすいといった悪条件がそろうため、天然ガスを高効率に有用物質へ選択酸化する触媒の設計は今でも挑戦的課題として残っている。一方、我々は、極少量の Pt 原子を r- $\text{TiO}_2$  担持 Cu ナノ粒子に固定することで、エタンからアセトアルデヒドへの選択酸化に有効な反応場の設計に成功した。本研究ではその Pt 原子の局所構造解析を目的として Pt L<sub>III</sub>-edge XAFS スペクトルの測定と解析を行った。

## 2. 実験内容

r- $\text{TiO}_2$  担持 Cu ナノ粒子に 0.05 wt% の Pt を固定し、水素ガス流通下、300°C で焼成し、大気暴露させずに  $\text{N}_2$  ガス下で試料袋に封じた。この試料を Pt<sub>1</sub>Cu NP/r- $\text{TiO}_2$  と称する。Pt<sub>1</sub>Cu NP/r- $\text{TiO}_2$  について BL5S1 で Pt L<sub>III</sub>-edge XAFS 測定を蛍光法で行った。解析には Athena と ESRF で開発された wavelet transform (WT) 解析ソフトを用いた。WT パラメーターとして  $\kappa=7, \sigma=1$  を用いた。

## 3. 結果および考察

Pt<sub>1</sub>Cu NP/r- $\text{TiO}_2$  の Pt L<sub>III</sub>-edge XAFS スペクトルの EXAFS 領域から  $k^3\chi(k)$  関数を得た。これについて WT 描写して得た WT-EXAFS を **Figure 1a** に示す。比較として、Pt foil の結果も **Figure 1b** に示す。 $R = 2.3 \text{ \AA}$ ,  $k = 7.8 \text{ \AA}^{-1}$  にローブが観測された。一方、Pt foil の Pt-Pt 後方散乱は  $R = 2.6 \text{ \AA}$ ,  $k = 9.0 \text{ \AA}^{-1}$  で観測された。Pt<sub>1</sub>Cu NP/r- $\text{TiO}_2$  で観測された  $R = 2.3 \text{ \AA}$ ,  $k = 7.8 \text{ \AA}^{-1}$  のローブは Pt-Pt 後方散乱として帰属できない。Pt-Cu 後方散乱として帰属されるべきである。この帰属は Cu NP の格子縞上に Pt 原子が配列している様子が HAADF-STEM で直接観察された事実とよく合致する。従って、Pt 単原子触媒の反応場モデルの妥当性が本研究により更に強化された。



**Figure 1.** (a) Pt<sub>1</sub>Cu NP/r- $\text{TiO}_2$  と (b) Pt foil の WT-EXAFS.