



# 2D-XAFSによる水素スピルオーバーの拡散・還元挙動の観察

森 浩亮, 俊 和希

大阪大学大学院 工学研究科 マテリアル生産科学専攻

キーワード : 2D-XAFS、水素スピルオーバー、拡散距離、還元挙動

## 1. 背景と研究目的

水素スピルオーバーとは、固体材料上における原子状水素の拡散を指す。本現象で生み出された活性水素は、固体材料に貯蔵可能なだけでなく、金属イオンの還元や触媒反応の促進にも寄与する<sup>[1]</sup>。このような側面から本現象は次世代水素社会における新技術として、注目を集めている。水素スピルオーバーの効果を最大限引き出す固体材料の1つはTiO<sub>2</sub>である。本実験では、TiO<sub>2</sub>における水素スピルオーバーの拡散・還元挙動を2D-XAFSを用い、ミリメートルオーダーで長距離観察した。

## 2. 実験内容

実験はあいちシンクロトロン光センターのBL11S2で行った。5%H<sub>2</sub>流通下において、図1に示す複合化ペレットを加熱し、Zn K端の2D-XAFS mappingを取得した。その後、2D-XAFS-Viewerを用いてペレット上の各領域におけるXANESスペクトルを抽出した。Ref.として Zn<sup>2+</sup>/TiO<sub>2</sub>のみから成るペレットにも同様の実験を行った。抽出した各領域のスペクトルに対し、Athenaを用いてXANESの線形結合を行った。この際、還元前のスペクトルとZn foilのスペクトルを結合することで、各領域におけるZn<sup>2+</sup>イオンの還元度を得た。

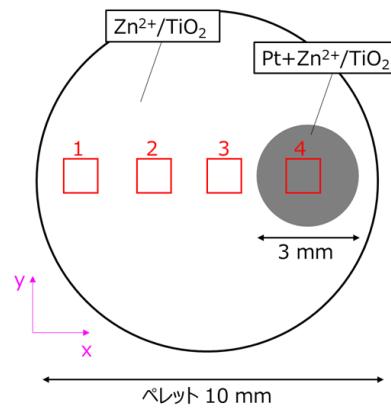
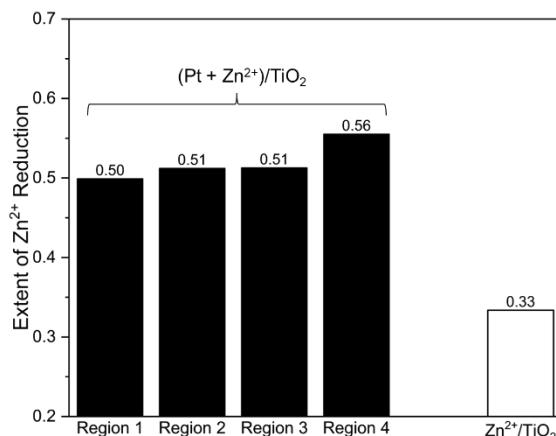


図1: 複合化ペレットの概略図

## 3. 結果および考察

150 °Cで水素還元した後の各領域におけるZn<sup>2+</sup>イオンの還元度を図2に示す。(Pt + Zn<sup>2+</sup>)/TiO<sub>2</sub>とZn<sup>2+</sup>/TiO<sub>2</sub>の複合化ペレットでは、(Pt + Zn<sup>2+</sup>)/TiO<sub>2</sub>から成るRegion 1の還元度は0.56と算出された。一方、本還元温度において、Ref.であるZn<sup>2+</sup>/TiO<sub>2</sub>のZn<sup>2+</sup>還元度は、0.33程度にとどまった。これらの結果は、Ptの存在によりTiO<sub>2</sub>上で水素スピルオーバーが発現し、Zn<sup>2+</sup>イオンの還元が促進されたことを示している。さらに、複合化ペレットではZn<sup>2+</sup>/TiO<sub>2</sub>のいずれの領域においても、Zn<sup>2+</sup>還元度が0.50以上と算出された。これは、水素スピルオーバーが引き起こす還元誘導効果がPtからミリメートルオーダー離れたTiO<sub>2</sub>上でも発現したことを示している。これまで、TiO<sub>2</sub>上において観測された水素スピルオーバーの最大拡散距離は1 μmである<sup>[2]</sup>。本実験結果は、水素スピルオーバーの拡散と還元が極めて長距離で発現することを、初めて示すものである。

図2: 150 °C 水素還元後におけるZn<sup>2+</sup>の還元度

## 4. 参考文献

- K. Shun, K. Mori, T. Kidawara, S. Ichikawa and H. Yamashita, *Nat. Commun.*, 2024, **15**, 6403.
- W. Karim, C. Spreafico, A. Kleibert, J. Gobrecht, J. VandeVondele, Y. Ekinci and J. A. van Bokhoven, *Nature*, 2017, **541**, 68-71.