

ディビジョン番号	12
ディビジョン名	触媒化学

大項目	1. 触媒キャラクタリゼーション
中項目	1-1. 種々の触媒解析法
小項目	1-1-2. その場観察 XAFS

概要（200字以内）

EXAFS は X 線吸収分光法であり、その場での触媒構造を観察できる手法である。高圧高温の実用触媒反応の実験も可能となり、自動車触媒、燃料電池等の開発に EXAFS が広く使われている。さらに今後時分割 XAFS との組み合わせ一活性点の反応中の構造変化を追跡できると期待される。

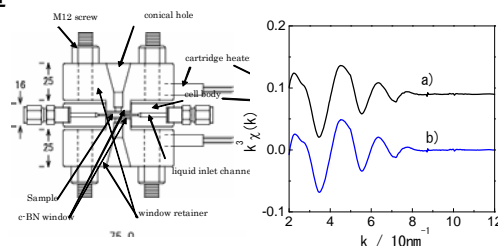


図 高温高圧液相流通反应用 XAFS セル (左) とそれによる脱硫条件下 XAFS の結果

現状と最前線

EXAFS は、X 線の内殻電子吸収現象を利用した手法であり、吸収原子周辺の構造を与える。X 線は、気相や液相を透過し、気相や液相共存下の固体の構造を知ることができる。多くの触媒反応において、反応中と反応前後の構造は異なることがあり、構造をその場観測することは触媒の反応メカニズムの解明や新規触媒開発に不可欠である。反応条件下での測定については、高圧ガス存在下で、X 線透過窓を冷やすことで、100-200 気圧という高圧下での測定が可能となっている。一方、液相共存下においても、cBN などの新しい高温高圧に耐える窓材の開発により、100 気圧、600 度程度の実用触媒反応領域まで可能になっている。産業界からも多くの注目を集め、実用触媒への適用もなされている。赤外吸収法、生成物分析、X 線回折など他の手法と連携した取り組みがなされている。

将来予測と方向性

・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

1. μs オーダの高速時間分解測定の実現と反応中間体の同定と構造決定

分散型 XAFS 装置を用いて、ストロボライク測定を行い、反応中間体を同定し、構造を決定する。

2. マイクロビーム化と不均一実サンプル測定の実反応条件測定の実現

触媒は元々不均一であり、反応中も不均一状態になると考えられ、EXAFS はその平均構造を与えるため、詳細な構造研究に限界がある。そこで、マイクロビームを実現し、サンプルの

局所構造のみを測定することで、詳細の構造を得る。

X線自由電子レーザーによるポンププローブ法の開発

・10年後までに解決・実現が望まれる課題

1. fs オーダの超高速時間分解測定の実現と反応中間体構造変化の追跡

fs の構造変化を直接観察する。このためには、XFEL, ERL といった超高輝度の白色 X 線源の実用化が欠かせない。

2. ナノビームの実現

ナノビームを実現し、活性点 1 個の EXAFS の測定を実現させ、構造の詳細を得る。

3. 高速構造解析による実時間

膨大な時空間スペクトルデータから構造を高速に推定し、その構造変化を時々刻々計算するソフトウェアの開発

キーワード

EXAFS , In-situ EXAFS, X線回折, operant XAFS

(執筆者：朝倉清高)