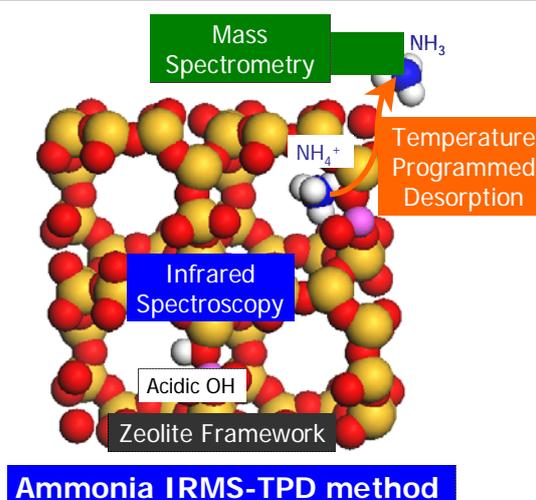


ディビジョン番号	12
ディビジョン名	触媒化学

大項目	1. 触媒キャラクタリゼーション
中項目	1-2. Operando 観測
小項目	1-2-2. IRMS-TPD と DFT 計算

概要（200字以内）

赤外線分光鏡（IR）と質量分析計（MS）を併用するアンモニアの IRMS-TPD（昇温脱離）実験によって、ゼオライト中にある固体酸点（ブレンステッド酸とルイス酸）の位置、構造、酸強度、量のすべてが正確に測定される。測定結果は、DFT（密度汎関数）計算により理論的に確認される。これらの酸点上における酸触媒反応が正確に測定され、活性サイト上の酸触媒反応が合理的に説明される。これらの結果にもとづき、酸触媒の設計が合理的に行なわれる。



現状と最前線

ゼオライトの固体酸は、石油精製などの工業的に重要な反応の活性サイトとしてだけでなく、物理化学的にもきわめて興味深い研究対象である。IR, NMR を初めとするゼオライトそのもののスペクトル測定, NH₃, CO, ピリジンをプローブとする吸着測定, それに熱量測定などがその代表的な実験手法であり、数え切れないほどの多くの研究が報告されてきた。一方、理論的な解析が進歩しつつある。このような多大な研究にもかかわらず、酸点の理解について、研究者間に不一致がみられるのが現状であり、現在さまざまな点からの検討が進んでいる。

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
ゼオライト中のブレンステッド酸およびルイス酸発現の完全理解。
ゼオライト固体酸点研究のための DFT 計算手法の確立。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
比較的簡単な触媒反応の *in situ* (オペランド) 測定。
ゼオライト酸点の耐久性 (ことに耐水蒸気性) の向上。

キーワード

ゼオライト, 酸量, 酸強度, ブレーンステッド酸, ルイス酸

(執筆者: 丹羽 幹)