2024 年度

**創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】**

| | |
|---|---|
| 研究担当者 | 北條元 |
| 研究機関名 | 九州大学 |
| 所属部署名 | 大学院総合理工学研究院 |
| 役職名 | 准教授 |
| 研究課題名 | 革新的酸化物触媒実現のための格子酸素の反応性制御指針の確立 |
| 研究実施期間 | 2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日 |

**研究成果の概要**


$CeO_2$、$TiO_2$、各種ペロブスカイト型酸化物などの酸化物はそれ自身、またはそれに（貴）金属等を担持したものが種々の化学反応を促進する触媒として作用することが知られている。これらの酸化物の触媒活性は、しばしばその格子酸素の反応性に大きく左右されることから、格子酸素の反応性を制御するための指針を得ることは、学術的な観点だけでなく、応用的な観点からも重要な課題である。

本年度は $TiO_2$ エピタキシャル薄膜を用いた $Pt/TiO_2$ モデル触媒を開発し、$Ti^{3+}$の分布と Pt ナノ粒子の帯電状態を調べた。走査透過電子顕微鏡を用いた酸素の K 端の電子エネルギー損失分光測定により、Pt の直下で酸素空孔が形成されやすいことが明らかとなった。第一原理計算により酸素空孔形成エネルギーが Pt 周辺の $TiO_2$ 担体上で低下することも確認できた。X 線光電子分光測定と第一原理計算 Bader 電荷解析の結果、$TiO_2$(101)上の Pt ナノ粒子は負に帯電しており、酸素空孔が存在することにより $TiO_2$ から Pt への電荷移動が促進されることも確認できた。本研究によって担持金属触媒の触媒活性に重要な役割を果たす Pt の電荷状態が、担体の化学量論比を調整することで制御可能であることが明らかとなった。