

平成23年度科学研究費助成事業（科学研究費補助金）実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

      2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 特別研究員奨励費      4. 研究期間 平成23年度～平成24年度
5. 課題番号 

	2	3	・	9	3	7	4
--	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題名 光電子回折法を軸とした新規触媒解析手法の確立

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
	マツイ 松井	ヒロスケ 公佑	物質創成科学研究科 特別研究員(DC1)

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

下欄には、当該年度に実施した研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、交付申請書に記載した「研究の目的」、「研究実施計画」に照らし、600字～800字で、できるだけ分かりやすく記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

水素化脱硫触媒として研究が進む Ni<sub>2</sub>P は、従来触媒と比較して高活性であることから、次世代触媒として期待が持たれている。しかし、反応に寄与する触媒表面及び、表層下の構造や電子状態は明らかにされておらず、観察手段も確立されていないのが現状である。そのため、新規触媒の開発の際には膨大なコストと時間を要し、早急な取り組みが必要とされる環境や経済への対策に大きな障壁となっている。

我々は、二次元表示型球面鏡分析機(DIANA)を開発し、SPRing-8 BL25SU に設置し、光電子回折法(PED)による半導体・金属表面などの原子構造解析を推し進めてきた。また最近、X線光電子分光(XPS)やX線吸収分光(XAS)などの各種分光測定と組み合わせた“回折分光法”を考案し、サイト選択的な局所電子状態の解析に成功している。本課題ではこれらの手法の適用により、触媒の活性点に着目した状態観察を行い、原子レベルでの触媒活性発現の機構解明を目指す。また、得られた情報を実触媒開発にフィードバックし、“触媒開発における新規戦略”として確立することを目標とする。

本年度は Ni<sub>2</sub>P 単結晶(10-10)面を用いて、触媒反応前の基板情報の収集を行った。内殻の Ni 3p と P 2p を励起して、各励起原子周りの構造情報を持つ PED パターンを測定し、パターン中の原子サイトの帰属を行った。また、PED と Ni-L 端 XAS を組み合わせた測定を行い、XAS スペクトル中のサイト情報をパターン変化から観察したところ、スペクトル中に2つの原子サイト情報が含まれていることを見出した。これは、Ni<sub>2</sub>P 中に Ni の原子サイトが2つ存在していることに対応しており、従来、第一原理計算などにより予測的に行われてきた電子状態と原子構造の帰属を、実験的に直接観察することに成功した。

10. キーワード

- |             |             |            |                       |
|-------------|-------------|------------|-----------------------|
| (1) 光電子回折   | (2) X線光電子分光 | (3) X線吸収分光 | (4) Ni <sub>2</sub> P |
| (5) 水素化脱硫反応 | (6)         | (7)        | (8)                   |

11. 現在までの達成度

下欄には、交付申請書に記載した「研究の目的」の達成度について、以下の区分により自己点検による評価を行い、その理由を簡潔に記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。  
 <区分>①当初の計画以上に進展している。 ②おおむね順調に進展している。 ③やや遅れている。 ④遅れている。

(区分) ②おおむね順調に進展している
(理由) 本研究では水素化脱硫触媒として期待が持たれている Ni <sub>2</sub> P の触媒活性の発現機構の解明を目指し、原子分解能・元素選択性を持つ光電子回折法を用いて Ni <sub>2</sub> P 単結晶基板の解析を行っている。今年度の成果により、基板情報のデータの収集ができた。本課題では、外部施設である SPring-8 を利用して研究を行っているが、順調に課題が採択されており、交付申請書に記した通りの成果を上げることに成功している。また、国内外への対外発表も活発に行っており、これは次年度も継続して行っていく予定である。

12. 今後の研究の推進方策

本研究課題の今後の推進方策について簡潔に記述すること。研究計画の変更あるいは研究を遂行する上での問題点があれば、その対応策なども記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

今年度、触媒反応前の基板情報の収集を行った。光電子回折法と Ni-L 端 X 線吸収分光(XAS)を組み合わせた測定を行い、XAS スペクトル中に 2 つの原子サイト情報が含まれることを見出した。次年度は触媒反応後の基板情報の取得を目指す。2 つのサイトの電子状態を区別して観察できることから、反応前後の基板情報を比較することで、Ni <sub>2</sub> P 中のどの原子サイトが反応に寄与しているか見極めることができると考えられる。これは触媒開発において、どの表面構造が反応に活性であるか知ることができる重要な知見である。また、本手法の汎用性を確かめるために、燃料電池のカソード材料であるグラファイト基板上 Pt 微粒子を試料として同様な実験を行い、表面構造及び電子状態と触媒活性の関係を調べていきたい。
--

13. 研究発表（平成 23 年度の研究成果）

※ 「13. 研究発表」欄及び「14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況」欄において記入欄が不足する場合には、適宜記入欄を挿入し、それによりページ数が増加した場合は、左端を糊付けすること。

【雑誌論文】 計 ( 1 ) 件      うち査読付論文 計 ( 1 ) 件

著者名	論文標題				
F. Matsui, T. Matsushita, M. Hashimoto, K. Goto, N. Maejima, <b>H. Matsui</b> , Y. Kato, H. Daimon	Negative Photoelectron Diffraction Replica in Secondary Electron Angular Distribution				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁
Journal of Physical Society, Japan	有	81	2	01	2 013601-1 013601-4
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10. 1143/JPSJ.81.013601					

著者名	論文標題				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)					

著者名	論文標題				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)					

〔学会発表〕計（ 3 ）件    うち招待講演 計（ 0 ）件

発表者名	発表標 題		
Hirosuke Matsui	LAYER-RESOLVED ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURE ANALYSIS OF GRAPHENE ON 4H-SiC(0001) BY PHOTOELECTRON DIFFRACTION SPECTROSCOPY		
学会等名	発表年月日	発表場 所	
13th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces	平成23年7月4日	Institute of Physics of the Academy of Sciences of the Czech Republic (Prague, Czech)	

発表者名	発表標 題		
Hirosuke Matsui	Atomic and electronic structures of catalytic Ni <sub>2</sub> P surfaces		
学会等名	発表年月日	発表場 所	
The 6th International Symposium on Surface Science	平成23年12月13日	タワーホール船堀 (船堀, 東京)	

発表者名	発表標 題		
松井公佑	二次元光電子回折分光法による脱硫触媒Ni <sub>2</sub> P(10-10)の局所原子構造・電子状態解析		
学会等名	発表年月日	発表場 所	
第108回触媒討論会	平成23年9月22日	北見工業大学 (北見, 北海道)	

〔図 書〕 計（ 0 ）件

著者名	出版 社			
	書 名	発行年	総ページ数	

14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出 願〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取 得〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

15. 備考

※ 研究者又は所属研究機関が作成した研究内容又は研究成果に関するwebページがある場合は、URLを記載すること。

--