

# 金の触媒作用における新しいメカニズムの提案—ナノ双晶の役割—

東北大 蔡安邦, 亀岡聡, スロバキア科学アカデミー M. Krajci

## 1. バルク Au 触媒における高CO酸化活性の発現

従来不活性とされてきたAuは、ナノ粒子化することによりCO酸化に対し高い活性を示すという春田ら<sup>1)</sup>の発見以来、その触媒起源について様々な視点で議論がなされてきた。しかし、バルク型のポーラスAuにおいても高い低温CO酸化活性を示すことが報告され、<sup>2,3)</sup> ナノ粒子化ならびに担体との接合界面以外の活性起源を考える必要が生じた。

## 2. 双晶境界表面でのW-Chain サイト (CN=6) の形成

最近、Al<sub>2</sub>Au をリーチング処理して調製したポーラスAuのリガメント中に多数のナノスケールの双晶が観察され(図1)、このナノ双晶と触媒活性の関連が注目されるようになった。<sup>3)</sup> 特に、双晶境界に存在する原子は通常の表面原子に比べて配位数が小さく、特異な活性サイトになりえる。双晶は面欠陥であるために、図1に示されるように双晶境界が必ず表面に突き出て多数の活性点を形成する。また、面心立方構造のAuでは双晶が(111)面で積層不整になることから、双晶面は{111}であり、双晶方向は{112}となる。結果的に双晶境界表面ではステップ{112}面が表面に現れ、通常のステップ{112}面 (>CN=7) に比べて、図1に矢印で記している配位数の少ない (CN=6) 原子サイトが大量に形成することになる (W-chain row)。エネルギー計算において、これらのサイトでは酸素ならびにCOの吸着エネルギーが低くなっており、有力な触媒活性サイトとなることが明らかとなった。

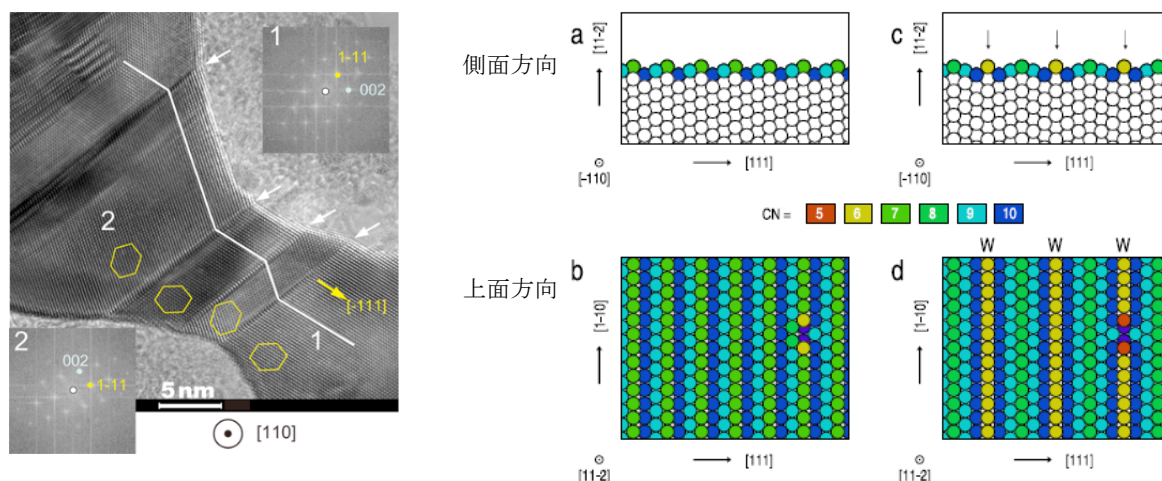


図1 ポーラスAuの高分解能TEM像とステップ{211}面における表面原子の配列と配位数 (CN) ; (a, b) 通常のステップ{211}面, (c, d) 双晶境界Wのあるステップ{211}面

## 文献

- 1) M. Haruta, N. Yamada, T. Kobayashi, S. Iijima, *J. Catal.*, **115**, 301 (1989).
- 2) S. Kameoka, T. Tanabe, K. Miyamoto, A.P. Tsai, *J. Chem. Phys.*, **144**, 034703 (2016).
- 3) M. Krajci, S. Kameoka, A.P. Tsai, *J. Chem. Phys.*, **145**, 084703 (2016).