

◁研究会報告▷

第11回 CRC 国際シンポジウム 「XAFS 分光の最前線とその触媒・界面への応用」報告

朝倉 清高 (北海道大学触媒化学研究センター)

2000年8月2日, 3日の2日間第11回 CRC 国際シンポジウム「XAFS 分光の最前線とその触媒・界面への応用」が北海道札幌市で開催された。このシンポジウムは、北海道大学にある全国共同研究機関触媒化学研究センター (CRC: Catalysis Research Center) が主催するもので、毎年触媒、表面、界面に関係ある様々なテーマで開催されてきた。本年は第11回国際 XAFS 会議が、兵庫県赤穂市で開催されるので、そのポストシンポジウムを企画し、幸いにも CRC の国際シンポジウムとして採用され、CRC を主催、科学技術振興事業団戦略的基礎研究岩澤プロジェクトの共催、放射光学会、触媒学会の協賛を得て、北海道大学理学部大講堂で開催することができた。XAFS と触媒に関する国際シンポジウムないしは Workshop は過去に1992年東京、1996年 Baltimore で開催されており、奇しくもその4年目に当たる本年3回目の国際シンポジウムをふたたび日本で開催することができた。特に、今回のテーマは、触媒活性点構造の静的なキャラクタリゼーションあるいは精密構造決定のための XAFS というよりも、触媒反応と XAFS との関連に焦点を当て、特に触媒や表面の持つ動的な側面を浮き彫りするというものであった。従って、招待講演者としては、時間分解 XAFS や in-situ 条件 XAFS あるいは、反応物の XAFS を直接扱っている研究者に絞った。

参加者94名とこじんまりとしていたが、招待者11人をはじめとする21人の海外からの参加者を得て、20件の口頭発表、24件のポスター発表が行われ、熱心な議論が交わされた。質問時間を8分とったが、ほとんどの講演で、8分の枠内で質疑が止まらず、座長が苦勞していた。この2日間は札幌も35度を超える猛暑であったが、会議の熱気が伝わったかのようにと評された。XAFS と表面化学ということに問題点を絞ったことが、こうした熱心な議論につながったものと考えている。

J. Rehr (USA), L. G. M. Pettersson (Sweden) は、XANES (X-ray absorption near edge structure) に関する理論の講演を行ったが、それぞれ多重散乱法や DFT (密度汎関数法) による XANES 解析理論の確立を目指したもので、さらなる発展が期待された。時間分解型 XAFS では、現在主流の2つの方法、Dispersive XAFS (分散型

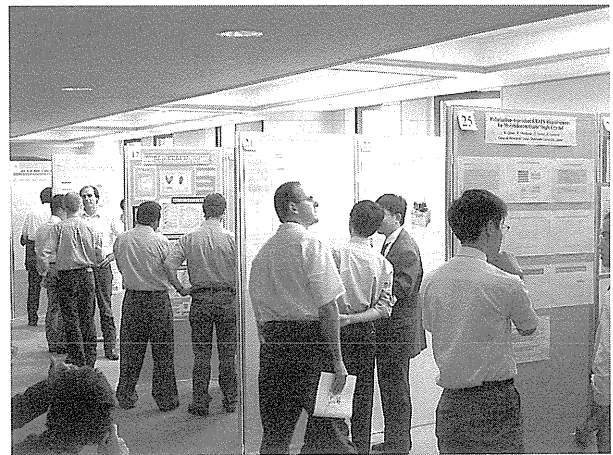


写真1 ポスターの風景

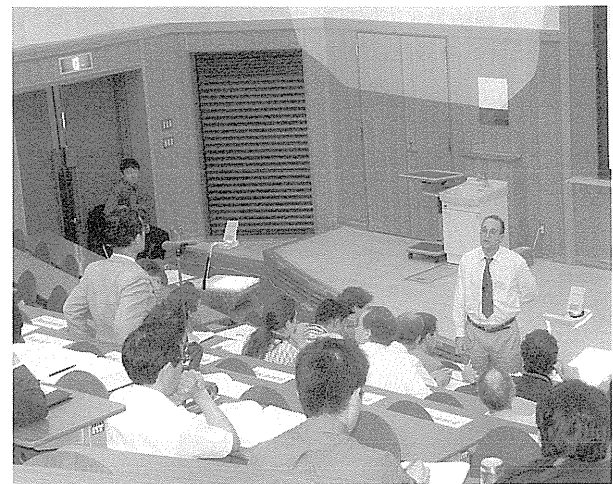


写真2 質疑応答 (北大理学部大講堂)

XAFS) と Quick XAFS (高速スキャン型 XAFS) に関する講演がそれぞれ数件あった。高い時間分解能を得るには、DXAFS が有利であるが、きれいなスペクトルを得るという意味では、Q-XAFS に軍配が上がる感じである。Q-XAFS では、蛍光 X 線による低濃度サンプルの測定が可能であることは、Q-XAFS の魅力といえよう。R. Frahm は Q-XAFS の最新の発展として、Piezo 素子をつ

かってモノクロメータを高速にうごかす piezo-QEXAFS を発表し、その時間分解能が20 ms と言うことであった。また、Ressler らは、Dispersive XAFS により700 K という高温下における還元反応中の MoO_3 の動的構造変化の測定に成功したと報告した。Bando らは、高圧下の CO_2 水素化反応を *in-situ* 条件下で XAFS 測定に成功した例を示した。Grunwaldt, Dent, Bazin らの講演では、XAFS のみのデータだけでなく、反応物の分析や XRD の測定を同時に行い、総合的な研究を進めることの重要性が示された。こうした研究が一般化すれば、触媒構造と反応活性との関係を一層深く理解できるようになるであろう。L. Tröger らは、100素子の Silicon drift 蛍光検出器により高計数率が実現された研究成果を報告した。このような、実験的にも、理論的にも新しい発展は、触媒の XAFS 研究に新たな局面をもたらしている。特に現在注目を集めている結晶性多孔質物質の XAFS 研究に関しては、多くの研究成果が報告された。T. Shido らは、DXAFS により Y 型ゼオライト中の $\text{Mo}(\text{CO})_6$ の熱分解挙動を詳細に検討して、Mo ダイマー形成のメカニズムを示した。M. Ichikawa らは、メソポーラス物質中の Pt ナノ細線の形成とそ

のキャラクタリゼーションに関する XAFS の結果について報告し、R. Prins は Fe, Co の ZSM-5 への吸着の様子を注意深い解析により明らかにした。また均一系の触媒に関する XAFS の応用については、J. S. Lee らがワッカ反応への応用を述べた。一方、吸着種を中心とする軽元素の XAFS に関しても興味深い報告が続いた。Matsushima らは、NEXAFS と角度分解昇温脱離法とを併用して、活性サイトの特定を行い、Thornton らは酸化物表面上の炭化水素の NEXAFS を測定し、その表面構造と反応との関わりを明らかにした。Yokoyama らは、吸着種の XMCD 測定により、磁性薄膜と吸着種との相互作用が明らかになることを示した。

本会議を終えて、XAFS 分光法は、触媒、表面化学において、その動的なキャラクタリゼーション法として、欠かすことのできない手法になっているものと言う認識を再確認できた。本会議録は来年 Topics in Catalysis に掲載される予定である。

最後に財政援助をいただいた文部省に感謝いたします。また、本会議開催に多大のご協力をいただいた理学電機、テクノスに感謝いたします。