

## CHA ゼオライト内 In ヒドリドの局所構造解析とエタン脱水素触媒作用

(北大触媒研<sup>1</sup>・京大触媒電池<sup>2</sup>) ○前野 禅<sup>1</sup>・安村 駿作<sup>1</sup>・呉 暁鵬<sup>1</sup>・鳥屋尾 隆<sup>1,2</sup>・清水 研一<sup>1,2</sup>

Speciation and Ethane Dehydrogenation Catalysis of Isolated Indium Hydrides in CHA Zeolites (<sup>1</sup>*Institute for Catalysis, Hokkaido University*, <sup>2</sup>*Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, Kyoto University*) ○Zen Maeno,<sup>1</sup> Shunsaku Yasumura,<sup>1</sup> Xiaopeng Wu,<sup>1</sup> Takashi Toyao,<sup>1,2</sup> Ken-ichi Shimizu<sup>1,2</sup>

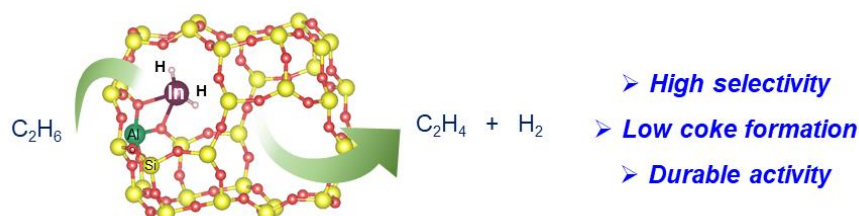
Hydrides in/on solid materials play key roles in heterogeneously-catalyzed hydrogenations and dehydrogenations. However, their characterizations are complicated owing to the complexity and analytical difficulty of solid surfaces. The studies of formation and catalysis of surface hydrides are formidable research subjects.

In this work, we found the formation of isolated In hydrides in CHA zeolite and their unique catalysis for nonoxidative dehydrogenation of ethane by combination of experimental and theoretical studies. The isolated  $[\text{InH}_2]^+$  ions on Al sites were formed by  $\text{H}_2$  treatment of In-exchanged CHA zeolite (In-CHA) at high temperature ( $> 773 \text{ K}$ ) as revealed by *in situ* Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy and the vibration analysis using density functional theory (DFT) calculations. The  $[\text{InH}_2]^+$  ions serve as the catalytically active site to promote selective ethane dehydrogenation, leading to low coke formation and high durability.

**Keywords :** Isolated surface hydrides; Indium; CHA zeolite; Ethane dehydrogenation

固体表面に生成する金属ヒドリド種(表面金属ヒドリド)は、固体触媒による水素化・脱水素反応の活性点として重要な表面化学種である。表面金属ヒドリドは一般に不安定であるため、その構造並びに触媒機能の解明は、固体触媒の分野において重要な研究の一つである。

我々は、高温  $\text{H}_2$  雰囲気下にて、In 導入 CHA ゼオライト(In-CHA)に表面ヒドリド種が生成することを見出した。*In situ* 分光と振動数計算から、その構造が $[\text{InH}_2]^+$ であることが分かった。In-CHA は高選択的なエタン脱水素反応を促進し、90 h 以上の耐久性を示した。速度論解析と遷移状態計算に基づいたメカニズム解析により、ゼオライト内 $[\text{InH}_2]^+$ が高選択的なエタン脱水素反応の活性点であることが示唆された。<sup>1,2)</sup>



- 1) Z. Maeno, S. Yasumura, X. Wu, M. Huang, C. Liu, T. Toyao, K. Shimizu, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 4820.
- 2) Z. Maeno, X. Wu, S. Yasumura, T. Toyao, Y. Kanda, K. Shimizu, *Catalysts* **2020**, *10*, 807.