18a-C11-6

Au ナノ粒子の CO 酸化における触媒活性化機構

The Mechanism for Emerging Catalytic Activity of Gold Nano-clusters in CO Oxidation Reaction

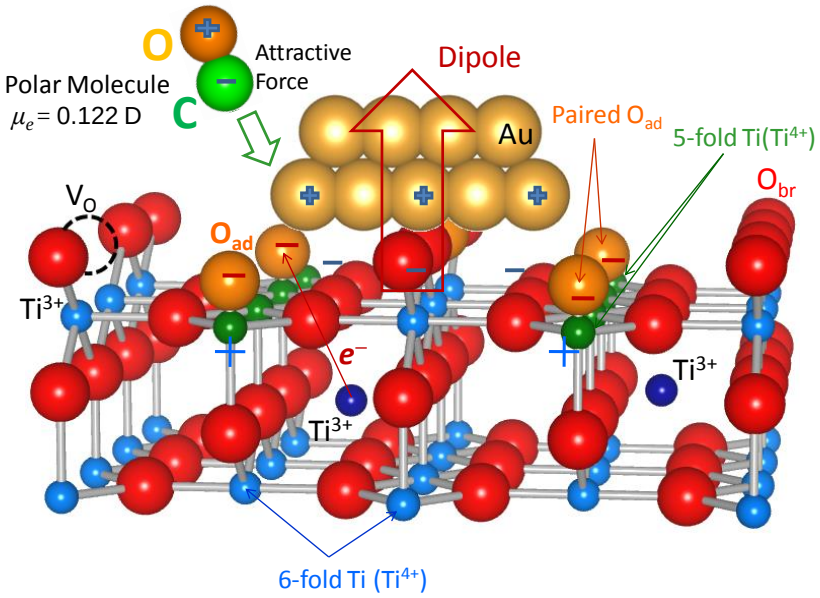
立命館大・総研[1]、立命大・理工[2]、九大・工[3]

○光原 圭[1]、松田 太志[2]，A. Visikovskiy[3]、城戸 義明[2]

Ritsumeikan Univ.[1,2], Kyushu Univ.[3], ○K. Mitsuhara[1], T. Matsuda[2], Anton Visikovskiy[3], Y. Kido[2]

E-mail: k-mitsu@se.ritsumei.ac.jp

ルチルなど酸化物微粒子に分散・担持された金ナノ粒子は、低温においても強い触媒活性を示すことが Haruta [1]によって示されたが、その機構は依然明らかにされていない。我々は、ルチル TiO_2(110)基板上に金ナノ粒子を形成し、CO 酸化に対する活性化の機構を、光電子分光・イオン散乱等によって解析した。ここで明らかにされたのは、（１）CO は５配位 Ti 列上に吸着した酸素と反応し、CO_2 となり脱離する、（２）金ナノ粒子より酸素吸着基板へ電荷移動が起こり、界面 Dipole が形成される、（３）金ナノ粒子の存在によって、この吸着酸素量は増大する、（４）吸着酸素量は同じでも、金ナノ粒子の存在によって、CO 酸化量は増大する、（５）最も活性化する金ナノ粒子のサイズは、２原子層高、平均直径 1.5 nm（~50 Au/cluster）である[2]。本講演では、以上の結果をもとに、ルチルに担持した金ナノ粒子の活性化機構として、(A) 界面 Dipole Model（下図参照）、(B) Cationic Cluster Model [3]、(C) d-band Model [4]について詳細に議論する。



[1] M. Haruta, T. Kobayashi, H. Sano, N. Yamada, Chem. Lett. **2** (1987) 405.

[2] K. Mitsuhara, H. Okumura, A. Visikovskiy, M. Takizawa, Y. Kido, J. Chem. Phys. **136** (2012) 124303.

[3] J.G. Wang and B. Hammer, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 136107.

[4] B. Hammer and J.K. Nørskov, Adv. Catal. **45** (2000) 71.

© 2013 年　応用物理学会