



# 担持金属クラスター触媒の XAFS による構造解析

上口 賢

理化学研究所 環境資源科学研究センター

キーワード：新物質，モリブデン，担持クラスター，XAFS

## 1. 背景と研究目的

微小クラスターを固定化した担持体は発光や導電性、触媒活性等、様々な機能を備える材料として近年盛んに研究されている。クラスター構造の詳細な分析には XAFS 測定がよく用いられる。本研究では有機配位子を有する分子性モリブデン (Mo) クラスター錯体について、加熱活性化処理に伴う構造変化を XAFS 測定により調べた。今回得られた結果は各機能の発現温度等と照合しその発現の構造的要因・機構を解明する上で極めて有用な情報となる。

## 2. 実験内容

合成した Mo クラスターを炭素担体に含浸法にて担持した。得られた担持クラスターについて、未処理試料および 150 または 200、250、300、450、400 °C で処理した試料をガラス製セルに封入し Mo K-edge を用い透過法にて XAFS を測定した。また比較のために窒化ホウ素で希釈した非担持クラスターの測定も行った。

## 3. 結果および考察

規格化した XAFS スペクトルおよび EXAFS フーリエ変換スペクトルを Fig. 1 に示す。担持後のクラスターでは担持前のクラスターに比べ両スペクトルともほぼ同じであり、担持によりクラスターの構造にほとんど変化がなかったことがわかる。担持後、加熱処理したクラスターについては処理温度 200 °C 以下では振幅やピーク強度が減少するものの両スペクトルに大きな変化は見られなかった。一方、処理温度 250 °C 以上では XAFS スペクトルにおいて 20.15 keV より高エネルギー側の振動が変わり、EXAFS フーリエ変換スペクトルにおいて Mo-Mo によるピークが消失した。これらのことから、担体上のクラスター骨格は加熱処理温度の上昇につれ 200 °C までは維持されるが、250 °C 付近で壊れることが示唆された。現在各スペクトルについて詳細な解析を実施中である。

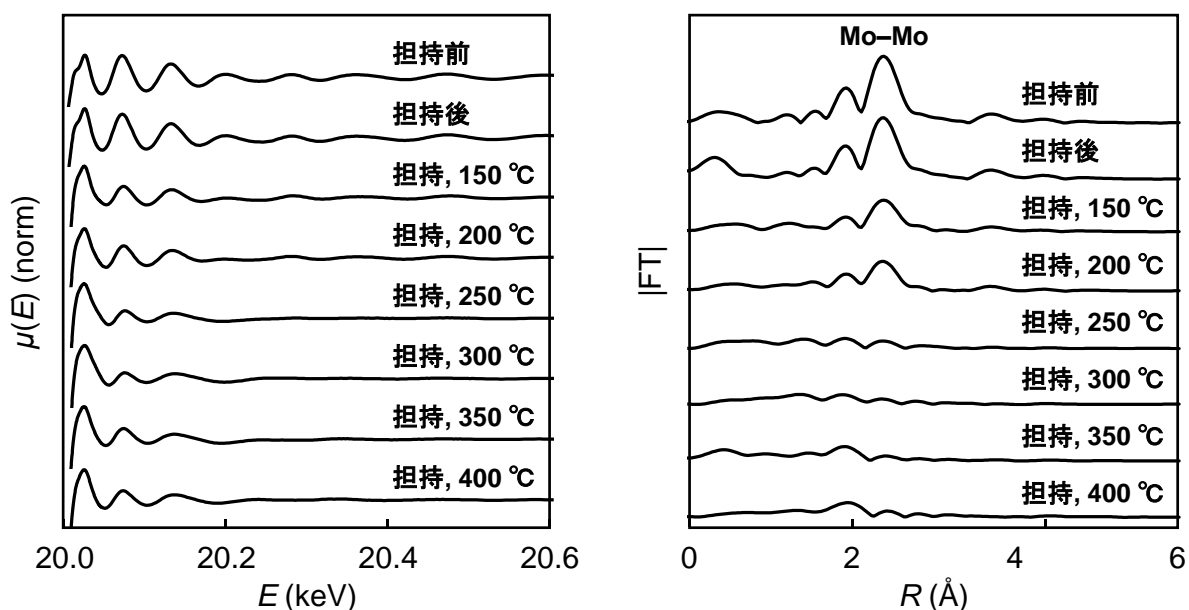


Fig.1 担持 Mo クラスターの XAFS および FT EXAFS スペクトル