

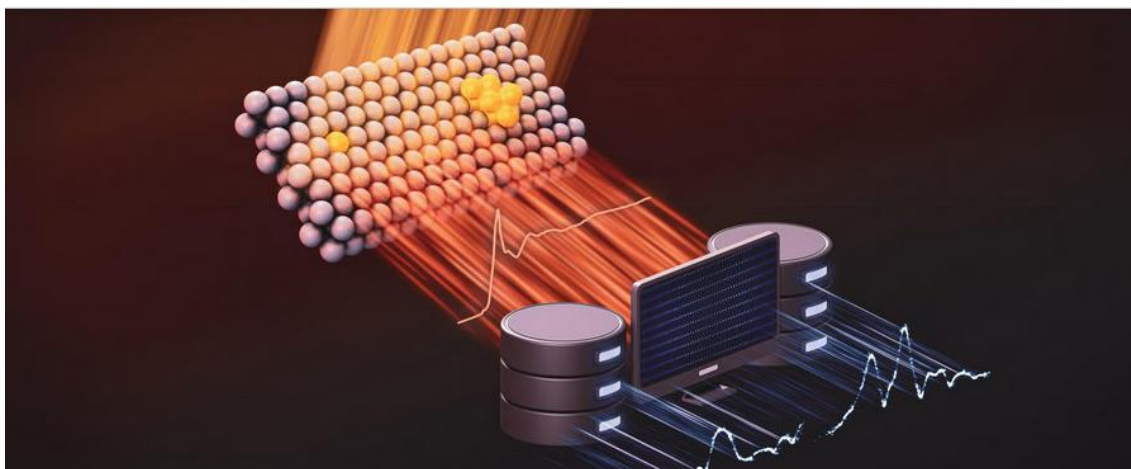
【環境・省資源分野】

仮訳

触媒の進展を促進する先駆的な新ツール（米国）

2025 年 1 月 8 日

著者： [Carol Tseng](#)



SLAC とカリフォルニア大学デービス校の研究者らが、単一原子触媒の活性部位に関するより定量的な情報を特定するソフトウェア、MS-QuantEXAFSを開発した。同ソフトウェアは、単一原子触媒上の白金原子と白金ナノ粒子の割合を計算し、構造と触媒活性の関連付けを試みる研究者らを支援する。

(Greg Stewart/SLAC National Accelerator Laboratory)

パン作りからより効率的に原料を燃料に変換する作業まで、[触媒](#)は日常生活を支援する驚くべき役割を担っている。今回、SLAC の研究者らは、単一原子触媒と呼ばれる有望で有益な新材料の発見プロセスをスピードアップする方法を開発した。

何十年もの間、触媒は縁の下の力持ちとして日常生活を支えてきた。この働き者は、パン作りにおける酵母や、より効率的かつ持続的に原料から燃料を作る人工的な触媒のように、出発物質をより少ないエネルギーで製品や燃料に変換する。単一原子触媒と呼ばれる有望で有益な新材料が登場しているが、研究者らはそれらをより深く理解するための新たな方法を必要としている。より具体的には、活性部位と呼ばれる化学反応の起こる部位の構造が、活性と呼ばれる化学反応を加速する触媒の能力にどのように影響するかを解明したいと考えている。

そのための重要な一歩として、米国エネルギー省(DOE)の [SLAC 国立加速器研究所](#)の [スタンフォード シンクロトロン放射光源 \(SSRL\)](#) の研究者らは、カリフォルニア大学デービス校 (UC Davis) の研究チームと協力し、現行の方法に比べてはるかに短時間で、単一原子触媒の活性部位の構造に関するより定量的な詳細を提供する新しいソフトウェアツールを開発した。この研究の成果は [Chemistry-Methods](#) に掲載されている。

通常、触媒では、不活性な担体上にナノメートルサイズの金属原子のクラスター、つまり金属ナノ粒子を固定している。触媒反応中は表面の原子のみが活性部位として機能し、ナノ粒子内部の原子は使用されていない。各金属原子の利用率を最大化するため、研究者らは有望なアイデアを思いついた。それは、個々の金属原子が担体上に分散されている単一原子触媒である。

この触媒の設計と開発には、活性部位の構造を理解し、それを活性と関連付ける必要がある。その構造についてさらに詳しく知るために、同様な単一原子触媒のケーススタディとして、研究者らは酸化マグネシウムの担体上に固定した単一の白金原子を使用した。同研究の主執筆者で、先般 UC Davis にて博士号を取得した Rachita Rana 氏は、隣接する原子の数や距離等、活性部位の原子の周囲の平均環境を明らかにする、拡張 X 線吸収微細構造 (EXAFS) 分光法と呼ばれる手法を採用した。従来、EXAFS データでは、候補となる数十～数百の構造を評価して最適なものを選択するが、Rana 氏は、密度汎関数理論(DFT)と呼ばれる理論計算手法と EXAFS を組み合わせることで、分析プロセスの自動化を提案した。このソフトウェアの最初のバージョンである [QuantEXAFS](#) では、1 種類の原子、この場合では白金原子の構造を特定した。

実際の触媒には、単一原子とナノ粒子の両方が含まれている。Rana 氏は [QuantEXAFS](#) をベースにコードの機能を拡張することで、それらの割合を特定し、その構造に関するより具体的な情報を提供した。「MS-QuantEXAFS は活性部位の特定に役立つだけでなく、特定の部位でのそれらの割合を定量化し、データ分析プロセス全体を自動化します」と同氏は説明する。

「これを手動で行った場合、通常は数日から数か月がかかります。MS-QuantEXAFS の使用により、ローカルコンピュータでこの分析を一晩で完了できるでしょう」。

研究チームは次に、MS QuantEXAFS の準備を整え、科学コミュニティに向けて公開したいと考えている。「このツールは、触媒研究者にとって大変役立つものです」と Rana 氏は言う。本研究論文の共著者で SSRL の著名な科学者でもある Simon R. Bare 氏もこれに同意し、特に次世代の学生向けのトレーニングクラスにもこれを含める予

定であることを付け加えた。

本研究は DOE 科学局が支援した。SSRL は DOE 科学局のユーザー施設である。

Citation: Rachita Rana et al., Chemistry-Methods, 21 November 2024
([10.1002/cmtd.202400020](https://doi.org/10.1002/cmtd.202400020))

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、SLAC 国立加速器研究所の記事“Pioneering new tool will spur advances in catalysis”（<https://www6.slac.stanford.edu/news/2025-01-08-pioneering-new-tool-will-spur-advances-catalysis>）を翻訳したものである。