

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計

2. 個人研究者名

小坂谷 貴典（自然科学研究機構分子科学研究所 助教）

3. 事後評価結果

触媒の表面状態および吸着中間体のオペランド分光研究を目的として、赤外分光装置と軟 X 線雰囲気光電子分光装置を立ち上げ・改良し、従来と比べて高い圧力雰囲気下での評価・解析技術を構築しました。開発した赤外分光装置と光電子分光装置を駆使して、反応中における触媒表面の化学状態・酸化状態解析や吸着中間体の同定・定量を行うことにより、触媒の酸化状態より反応効率が影響を受けること、また、活性サイトが触媒表面の気相分子との相互作用で形成されることを突き止め、メタンの酸化カップリング (OCM) 反応機構を解明した点は高く評価できます。今後、反応温度とガス分圧下における第一原理計算との連携や、高輝度・高分解能の放射光利用などを積極的に進め、OCM 反応の微視的過程の解明を始め、統一的な学理を構築することを期待しています。

研究の進め方について、解析装置の開発を着実、かつ計画的に進め、それらを活用して領域内での共同研究を積極的に行い多くの興味深い研究成果が得られており、論文文化に繋げていることは評価します。オペランド分光を駆使した触媒反応機構への提言も期待しています。

採択時は計測技術の専門家という印象が強かったですが、さきがけ研究期間に国内外の触媒研究者と積極的な連携を通して、詳細なメカニズム検証を積み上げ、自身の研究実証に繋げることで研究の幅を広げ、研究者として一段高いレベルに到達できており、大きく飛躍した一人であると考えます。

(2021 年 9 月追記)

なお、本課題は新型コロナウイルスの影響を受けて 6 ヶ月間研究期間を延長し、パラジウム触媒表面上でのメタン部分酸化反応のオペランド分光測定、また、パラジウム合金を用いた水素吸脱着過程の光電子分光測定を行いました。その結果、パラジウム触媒上での  $^{13}\text{C}$  同位体を用いたメタン部分酸化反応の測定結果から、メタン転換反応の反応機構を突き止め、また、水素雰囲気中でのパラジウム合金触媒表面の水素吸脱着過程のリアルタイム分光測定により、パラジウム合金と水素間の相互作用など、重要な知見を得ることができました。さらに、延長期間内にさきがけ研究者との共著論文の発表も行いました。各分野の研究者との共同研究を通して今後のイノベーションに向けたさらなる展開を期待しています。