

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

|        |                          |
|--------|--------------------------|
| 研究担当者  | 石川 亮                     |
| 研究機関名  | 東京大学                     |
| 所属部署名  | 工学系研究科                   |
| 役職名    | 特任准教授                    |
| 研究課題名  | 3次元・ダイナミック原子分解能電子顕微鏡法の開発 |
| 研究実施期間 | 2023年4月1日～2024年3月31日     |

**研究成果の概要**

TiO<sub>2</sub>(110) 基板に担持した貴金属ナノ粒子は代表的な不均一触媒であり、選択的な物質合成や排ガス処理などの触媒材料として広く用いられている。今年度は、これまでに開発を行ってきた高時間分解型電子顕微鏡法を用いることにより、TiO<sub>2</sub>(110) 基板上に形成された白金3量体の原子ダイナミクスの追跡を行った。高温において触媒活性が高いため、電子顕微鏡中で 250°C 以上に加熱した状態で観察を行った。40 ミリ秒の時間分解能で観察を行うため、各フレームにおける像質は大幅に低下するものの、TiO<sub>2</sub> 基板由来のコントラストを取り除くなどの画像処理により、白金3量体の追跡に成功した。電子顕微鏡法では観察方向に投影された2次元像しか得られないものの、金属が稠密な構造で安定化することを仮定することにより、3次元構造の再生を試みた。実験像から再生した3次元構造をインプットとして、第一原理計算により構造およびエネルギーを評価した結果、実験と良い整合性を示した。すなわち、白金3量体は正三角形を保持しつつ、3次元回転と並進により TiO<sub>2</sub>(110) 表面を運動していることが明らかとなった。白金はカチオンとして存在するため、基板のチタンを避け、酸素原子との結合・切断を繰り返しながら移動していることが分かった。白金がチタン上に配置する場合には、面外方向に回転することにより、チタンと十分な原子間距離を取っていることが、3次元構造解析を通して初めて明らかとなった。本研究で開発を行った高速電子顕微鏡法は、原子スケールでの輸送現象を明らかにする新たな実験手法として今後の応用が期待される。