Institute for Catalysis

2016

共同利用・共同研究拠点 北海道大学 触媒科学研究所

Joint Usage/Research Center Institute for Catalysis, Hokkaido University





所長朝倉 清高

触媒科学研究所の役割と責任

触媒科学研究所は2015年10月1日より新たにスター トしました。旧触媒研究所(1943年~1989年)、触媒科 学研究センター(1989年~2015年)により培われた北 海道大学の触媒研究の伝統を受け継ぎ、異分野を取 り込んだ触媒科学を確立し、今後も触媒研究の国際 的共同利用・共同研究拠点として活動を続けます。

よく、研究所になって何が変わったのかと聞かれま す。実際には、触媒化学研究センターの時代に増員が 認められ、大きくなっていましたから、規模的には変わり ません。しかし大きく違っている点は、研究所になること で、自ら活動を決めるという点です。すなわち、自律する ということです。自律するということはその決定や行動 に自ら責任を持つことになります。私たち触媒科学研 究所はこの点を強く認識し、責任ある行動をとらないと いけないと思っています。しかし、これは勝手に決めて 良いと言うことではありません。外の皆さんのOpenで Fairなご意見・批判を誠実に聞き、そのご意見・批判を 所員一人一人には、自らの行動を正し、行動に対して 説明責任を果たすことを自覚することが求められます。 特に北海道大学触媒科学研究所の構成員として、研 究不正、研究費不正、ハラスメント防止ということに対 のためには、研究所内外とのコミュニケーションを密に して、様々な問題を解決することが重要と信じていま す。どうぞOpenでFairな議論をお願いします。

さて、研究所になってどういうサイエンスをやるのか ということですが、1つは、触媒化学研究センター時 媒の開発があります。そのために日々の最先端研究 をますます活発にしていこうと思います。もう一つの目 標は、そうして得られた知識をどう蓄積し、どう活用 するかといういわゆるCatalyst informaticsの確立 です。すでに、触媒科学研究所は触媒データベース を作り、公開しています。このデータベースをさらに拡 張し、AIを使って、知識を引き出することがCatalyst informaticsへとつながると思います。このCatalyst informaticsを今開始することで、30年後には、研究 を加速し、新しい科学の基盤を開くことになると思っ ています。そのために、産総研、理研、NIMSそして高 エネルギー加速器研究機構と連携し、このCatalyst Informaticsを確立する取り組みを開始しました。これ に北海道大学、他大学や企業を取り込み大きなコンソ シアムを作る活動を開始しています。一方で、情報セ キュリティーという大きな問題もあります。多くの方々か らのご協力と知恵を賜りたいと思っています。

従来通りの共同利用共同研究拠点活動と人類の 存続に関わる持続可能社会の実現に加え、30年先の 科学・技術を支え、イノベーションを実現するCatalyst Informaticsを柱に研究を展開して参ります。

どうぞご支援と忌憚ないご意見のほどよろしくお願 いします。

Greetings

"Institute and Center"

The new Institute for Catalysis (ICAT) is opened on October 1st 2015. Catalysis is the traditionally important and strongest field in Hokkaido University. Juro Horiuti started Research Institute for Catalysis in 1943. It was remodeled to the Catalysis Research Center (CRC) in 1989 as a Joint Usage/Research Center. We are succeeding the mission of the CRC and play a role of the joint Usage/Research Center in the catalyst field.

What is the difference between Institute and Center? A difference is the freedom and the responsibility. Institute has greater freedom. It means we have to decide by ourselves what is necessary for the development of our society related to catalysis science and technology. In this sense all members in ICAT have to recognize our mission to carry out good science and to stop misconduct in research and harassment. We have to behave ourselves honest and fair and take the accountability of our actions. At the same time we have to listen to any comments, criticisms and voices addressed to us in open and fair manners. We will decide based on these comments, criticisms and voices. The important point is to promote the communications with inside and outside. We welcome open and fair discussion and comments.

Next question may be what is the research target of ICAT. Our research target is to develop new catalysts necessary for the establishment of sustainable society. Our missions are not only to perform frontier research on catalysis but to encourage catalysis communities in their research and to expand catalysis research collaboration with other fields such as physics, biology, and environmental sciences.

We now initiate a new project to build up catalyst informatics for the future. We have made and open the catalysis database(http://133.50.165.193/ catdb/). Next challenge is to gather all data from the experiments directly, store them as big data and analyze them using AI(Artificial Intelligence) to derive the useful information to obtain new catalysts. We are collaborating with AIST, NIMS, RIEKN and KEK for the catalyst informatics and are trying to make a catalyst informatics consortium with people in academics and industry. The catalyst informatics will be another runner of ICAT in the global collaborations to attain catalyst-driven innovation. We need all your help and suggestions.

> Kiyotaka Asakura Director of Institute for Catalysis, Hokkaido University April 1st, 2016.









触媒表面研究部門

Catalyst Surface Research Division

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~q16691/index.html

表面をみて、つくって、あやつって

Observe, Create and Manipulate Surfaces

朝倉清髙 教授 (Kiyotaka ASAKURA) 髙草木達 准教授 (Satoru TAKAKUSAGI) 有賀寛子 助教 (Hiroko ARIGA) **脇坂祐輝** 特任助教 (Yuuki WAKISAKA) 大澤雅俊 研究推進支援教授 (Masatoshi OSAWA)

触媒作用を司る固体表面を原子レベルで見て、表面の構造や電子状態を解析し、反応機構の解明を行うとともに、触媒として興味深い表面を作って、反応を 操るのが研究室のミッションです。

たとえば、燃料電池触媒の研究に取り組み、動作 環境における表面構造の変化や電子状態の変化、高 速電子移動の解明に取り組んでいます(図1)。また、 分子科学研究所、高エネルギー加速器研究機構と共 同して、光吸収に伴い高速で変化する電子状態変化 とその緩和過程を原子レベルで解明する取り組みも 行っています(図2)。こうした研究を支える顕微鏡法 や分光法の開発も行っています。特に新しい量子ビー ムである陽電子、ミュオン、自由電子レーザを触媒に 応用し新しい表面の知見を得ている。 Our missions are observing the catalytically active solid surfaces on an atomic level to reveal the reaction mechanisms, making the catalytically interesting surfaces and manipulating the surface reactions (Fig. 1). For example, we have revealed the change of electronic state of central atoms and its evolution after the photoabsorption using pump-probe *in situ* XAFS in collaboration with IMS and KEK-PF (Fig. 2). We are challenging to develop new surface analysis methods. We applied the accelerator based beam techniques to the characterization of the surfaces such as positron, muon and free electron laser.

基礎研究系 Fundamental

Research





Fig. 1 EXAFS can be obtained from the sample with less than 10^{15} cm² Pt on Highly oriented pyrolytic graphite in the presence of electrolyte.

Fig. 2 WO₃ is a Z-scheme photocatalyst for water splitting. We collaborated with Prof. Bunsho Ohtani (ICAT), IMS and KEK-PF to reveal the evolution of electronic state after the photoabsorption process with a ps order time resolution using Pump-Probe XAFS method.

基礎研究系 Fundamental

Research

触媒理論研究部門

Catalysis Theory Research Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/

複雑分子系の理論化学計算手法による触媒原理の解明

Theoretical and Computational Approach to Catalytic Principles

長谷川淳也 教授 (Jun-ya HASEGAWA) 中山哲 准教授 (Akira NAKAYAMA) 中谷直輝 助教 (Naoki NAKATANI)

本部門では、電子状態、分子構造、動力学など多元 的な複雑性に由来する触媒原理を明らかにすることを 目的として研究を行っている。複雑な構造を持つ分子 系を計算するためのQM/MM法、化学反応の動態を 明らかにするAIMD法、熱的な分子構造揺らぎを考慮 する統計力学的解析手法、複雑電子系の高精度計算が 可能なDMRGなどの計算手法を開発するとともに、触 媒反応への応用に取り組んでいる。

2015年度は、1.モデル炭素触媒系における糖の加 水分解機構、2.メソポーラスシリカ担持Pt触媒のエチ レン低温酸化機構(図1)、3.固体酸化物と金属の界 面における酸素原子の移動を介した酸化還元プロセ ス(図2)、4.遷移金属錯体触媒を用いたアミドのヒド ロシラン還元反応のメカニズム、5.DMRGに基づく強 相関系理論の開発に関する研究を行った。(1,2は福岡 研、3は産総研、4は九州大、5はプリンストン大との共 同研究) To overcome multiple complexities in catalysis, we are developing an accurate theory for complex electronic structures, QM/MM method for large molecular systems, AIMD method for molecular simulations, and analytical methods based on quantum and statistical mechanics. These methods are applied to the catalytic reactions of organic catalysts, transition-metal reagents, heterogeneous catalysts.

Our research activities in 2015 is as follows: 1. Mechanism of hydrolysis by model carbon catalysts, 2. Mechanism of ethylene oxidation with Pt/mesoporous SiO₂ catalyst, 3. Redox process at the metal/metal-oxide interface by the first-principles molecular dynamics simulations. 4. Mechanism of the Pt catalyzed reduction of amide with bifunctional hydrosilane, 5. Development of density matrix renormalization group for calculating strongly-correlated systems.



Fig. 1 Complete oxidation of ethylene on the Pt₂/silica surface model.



Fig. 2 Redox process at the metal/metal-oxide interface.

表面分子科学研究部門

Surface Molecular Science Research Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/ye

固液界面反応動力学の高速振動分光解析と反応制御

Real-time Vibrational Spectroscopic Monitoring and Control of Reaction Dynamics at the Solid/Liquid Interface

朝倉 清高 教授 (兼任) (Kiyotaka ASAKURA) **叶深** 准教授 (Shen YE)

電極界面(固液界面)をはじめとする種々の界面の 構造ならびにそこでの化学反応過程を分子レベルで解 析し、応用することを目的に研究を展開している。研究 手段として、和周波発生振動分光法や原子間力顕微鏡 や電気化学的手法などを複合化して用いている。

主な研究テーマは、(1)金属空気二次電池やリチウム イオン二次電池の電極反応機構解明と新規触媒の開 発;(2)機能性物質の界面構造制御による機能性物質の 開発などである。

当研究室の研究の特徴は、反応が進行している界面 をリアルタイムに追跡するところにある。種々の表面 科学的アプローチを活用し、高感度で固液界面の分子 構造の解明を通じて、その反応機構の解明と新規機能 性材料の解明を目指している。 Our main interest lies in reactions that take place at solid/liquid, solid/gas, and solid/solid interfaces. Many surface science approaches, such as sum frequency generation (SFG) vibrational spectroscopy, atomic force microscope (AFM) and electrochemical techniques have been combined to investigate the mechanisms and kinetics of the reactions on the surface and interfaces. The main research activities are (1) Elucidation of the reaction mechanisms on the electrode / electrolyte solution interface in the Li-O₂ secondary battery and development of the novel electrocatalyst for the battery based on the design of the surface structure; (2) Development of the surface structures.

基礎研究系 Fundamental

Research





リチウム空気二次電池の原理 Li-O₂ Secondary Battery

物質変換研究部門

Catalytic Transformation Research Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/fukuoka/



再生可能エネルギー・環境保全のための固体触媒と反応の開発

Development of Heterogeneous Catalysts and Reactions for Renewable Energies and Environmental Protection

福岡 淳 教授 (Atsushi FUKUOKA) 中島清隆 准教授 (Kiyotaka NAKAJIMA) 小林広和 助教 (Hirokazu KOBAYASHI)

本部門では、固体触媒を分子レベルで設計し、再 生可能エネルギーの利用と環境保全のための反応に 応用する研究を行っている。再生可能エネルギーとし ては非食料バイオマスをとりあげ、固体触媒により有 用化学品に変換する研究を進めている。最近、木質バ イオマスを空気酸化して得られる弱酸点をもつ炭素 触媒がバイオマス自身を加水分解し、グルコースとキ シロースを高収率で生成することを見出した(図1)。 反応後に残る触媒とリグニンの固体残渣は同じ空気 酸化処理により、活性な触媒に戻すことができる。ま た、海洋バイオマスであるキチンの分解についても検 討している。

さらに、本部門ではメソポーラスシリカなどのメソ 多孔体の触媒機能について研究している。メソポーラ スシリカ担持白金触媒は、エチレンを低温で完全酸化 しCO2に変換できる。この触媒はエチレンによる野菜 や果物の熟成を抑制することから、冷蔵庫用の触媒 として実用化された。現在、触媒の構造-活性相関の 解明に取り組んでいる(図2)。 Our strategy is molecular design of heterogeneous catalysts and their application for utilization of renewable energies and environmental protection. One of our topics is conversion of non-food biomass to valuable chemicals by heterogeneous catalysts. We have recently found that air oxidation of woody biomass provides a weakly acidic carbon that can hydrolyze the woody biomass to glucose and xylose (Fig. 1). The solid residue containing the carbon catalyst and lignin after reaction is converted back to a fresh catalyst by the same air oxidation. We also study depolymerization of chitin.

Our interest also includes catalytic application of mesoporous materials. We reported high activity of Pt/mesoporous silica in low temperature oxidation of ethylene to CO_2 (Fig. 2). This catalyst is practically used in the latest models of refrigerators to inhibit aging of vegetables and fruits. We are studying the structure-activity relationship in this reaction.



Fig. 1 Self-contained system for hydrolysis of woody biomass.



Fig. 2 Proposed mechanism for low-temperature oxidation of ethylene over Pt/mesoporous silica.

触媒材料研究部門

Catalyst Material Research Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/shimizu/



理想的な化学品合成・自動車排ガス浄化を目指した多機能性触媒の設計

Design of Multifunctional Catalysis for Ideal Synthesis and Automotive Pollution Control

清水研一 教授 (Kenichi SHIMIZU) 鳥屋尾隆 助教 (Takashi TOYAO)

稀少金属資源の使用量を最小限に抑えたグリーン有 機合成、環境浄化用固体触媒の開発に取り組んでい る。種々のin situ分光法を駆使した触媒構造・反応機 構研究を通じて触媒構造 – 機能 – 性能の相関関係を 明確化し、触媒設計にフィードバックする。これまでの 研究から、機能の異なる複数の金属・酸化物種を近接 させた界面の設計が高機能触媒開発の鍵となることを 明らかにしており、本設計指針に基づき革新的機能を 有する新規固体触媒を創出する。これらを通して、現 在の世界的な課題である環境問題やエネルギー問題 解決への貢献を目指す。 Our aim is to design new heterogeneous catalysts for green organic reactions and automotive pollution control with minimum use of precious metal resources. Mechanistic and structural studies by various in situ spectroscopic methods establish the structure-activity relationship, which provides fundamental aspects for catalyst design. We have found that creation of multifunctional active sites at metal-support interfaces is a key factor for design of novel catalysts. We try to contribute to improvement in global energy and environmental situation by developing heterogeneous catalysts with innovative functions.



基礎研究系 Fundamental

Research

光触媒科学研究部門

Photocatalysis Research Division

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~k15391/

光触媒微粒子の設計 / 調製 / 評価と作用原理の解明

Design, Fabrication and Characterization of Photocatalyst Particles and Clarification of Mechanisms

大谷文章 教授 (Bunsho OHTANI) コワルスカ エバ 准教授 (Ewa KOWALSKA) 髙島舞 助教 (Mai TAKASHIMA)

光触媒としてはたらく微粒子の設計と調製、評価を おこなうとともに、光触媒反応の原理の解明をめざし ている.具体的には、(1) 光触媒活性に影響をおよぼ す電子トラップ密度のエネルギー分布をあらたに開発 した二重励起光音響分光法により測定し、これを光触 媒活性と比較することによって高活性光触媒の設計指 針をえた.(2) 超高強度の単色光連続光源をつかって 光触媒反応速度におよぼす光強度の影響を解析し、1 つの粒子中の励起電子あるいは正孔の密度に依存して 反応様式が異なることをあきらかにした.(3)精密制 御気相法チタニア合成装置をもちいて世界最高性能の 十面体形状アナタースチタニア光触媒を調製し(図1) 特性評価を行った.(4) ミクロな結晶構造およびマク ロな集合構造が規制されたフレークボール形状タング ステン酸ビスマス微粒子(図2)を水熱反応によって調 製し、その生成機構と光触媒反応中の電子移動反応機 構を解明した.

We are aiming to design, fabricate and characterize photocatalyst particles and to clarify the mechanism of their photocatalysis. double-beam photoacoustic spectroscopy (RDB-PAS) for evaluation of energy-resolved density of electron traps in photocatalyst particles to be compared with their photocatalytic activity; (2) examination of lightintensity dependence of photocatalytic reactions using an ultrahigh-intensity continuous monochromatic light source to find electron-transfer mechanism depending on the density of electrons or holes in a particle; (3) preparation of highly active titanium(IV) oxide (titania) photocatalyst particles (Fig. 1) using a newly developed gas-phase reactor; (4) development of metal oxide particles with micromacro hierarchical structure (Fig. 2) through hydrothermal reaction, and clarification of the mechanism of those particle formation and photocatalysis on them.





Fig. 2

分子触媒研究部門

Molecular Catalyst Research Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/takahashi/



有機金属化学を駆使して、新たな炭素骨格構築反応の開発を目指す!

Toward Novel Carbon-Carbon Bond Formation by Organometallic Chemistry

高橋保 教授 (Tamotsu TAKAHASHI) 宋志毅 助教 (Zhiyi SONG) 笠原二郎 研究推進支援教授 (Jiro KASAHARA)

当研究室では従来,炭素骨格の組み替えを活用した 高効率構築法の開発を目指し、前周期遷移金属上で炭 素一炭素結合切断と炭素一炭素生成反応を組みあわ せることによって、古典的な有機化学においては困難と されてきた様々な炭素骨格変換反応を見出している。

シクロペンタジエニル基は遷移金属錯体において, 通常は強く金属に結合した安定な配位子とされている が,近年我々のグループでは,チタン上でCp配位子が 驚くべき反応性を示すことを見出している。シクロペン タジエニル基を有するチタンニウム錯体1において、錯 体上のCp配位子とブタジエン部位のカップリング反応 が進行したのち、様々なジヒドロインデンチタン錯体 が生成することを見出している。これらの反応は、Cp 配位子を新たな炭素骨格構築のための炭素ユニットと して提供することに加え、炭素一炭素結合切断と生成 により、炭素骨格を組み替えることができる。

ベンゼン環が直線状に縮環した構造を有する「アセン」を出発物として、アセンの末端で二量化を行った後、順次炭素-炭素結合を形成することにより、完璧な立体選択性で種々の二次元アセンを構築するという合成手法を開発している。

Cleavage/formation of carbon-carbon bonds in organic molecules have been a major challenge in synthetic organic chemistry. By utilizing transition-metal reagents or catalysts, our research group has developed such reactions with unique modes of C-C bonds cleavage/formation.

Cyclopentadienyl (Cp) ligand has longtime been believed 'inert' on transition metals. However, in recent several years, our group has found that the Cp ligand on titanocene complexes was abnormally activated. Cp ligand of bis(cyclopentadienyl)titanacyclopentadiene complexes **1** was coupled with the dienyl moiety to give dihydroindenyl titanium complexes **2**. This dihydroindene moiety was then rearranged to give complexes **3**. Upon treating with additives, these titanium complexes were then converted to via a variety of organic compounds through a combination of C-C bond formation and cleavage.

Meanwhile, our group has developed a series of methods for the synthesis of substituted acenes. We are now trying to create novel method to get 2D acenes from acenes. In our method, dimerization of acenes at the first ring was realized successfully by Mn catalysts after introduction of OH group. Then, the remaining C-C bonds were combined one by one.



Scheme 1. Carbon-carbon bond formation and cleavage of Cp ligand on titanium



Scheme 2. Controllable synthesis of 2D acenes from acenes via carbon-carbon bond formations from one side to the other.

基礎研究系 Fundamental

Research

高分子機能科学研究部門

Macromolecular Science Research Division

http://polymer.cat.hokudai.ac.jp/

高分子・超分子の精密構造制御による機能性材料の開発

Control of Polymer and Supramolecular Structures Leading to Advanced Materials

中野 環 教授 (Tamaki NAKANO)

当部門では先端材料としての応用を目指して構造制 御された高分子および超分子を合成している。重合反 応の設計により、らせん、π-スタック型、ハイパーブラ ンチ型などの分子構造および高次構造の制御を実現 し、加えて、液晶等の分子間構造制御法も開発してい る。制御構造を有する高分子・超分子を用い、触媒、 発光、導電性、エネルギー移動、光学非線形特性、分 離、薬理活性等の高度な機能の発現に挑戦している。

当研究室ではπスタック型構造をビニルポリマーに 対して制御することに初めて成功した(図1)。πスタッ ク型ポリマーは特異な立体構造に基づいて、興味深い 光・電子物性を示す。光電子物性は主鎖共役系高分子 に特異的なものと考えられていたが、ビニルポリマー の構造制御により優れた材料が開発できることを明ら かにした。また、円偏光を用いたらせん高分子の合成 に成功し、さらに、光でらせんの向きをスイッチングす るらせん高分子系の開発も行っている(図2)。 Our research focuses on the synthesis of polymers and supramolecules having controlled structures including helix, π -stacked conformation, and hyperbranched morph and ordered liquid crystalline phases aiming at creating advanced materials showing catalytic activities, photo emission, conduction, energy transfer, non-linear optical properties, separation functions, and pharmaceutical activities.

We have succeeded in synthesis and structural elucidat ion of π -stacked vinyl polymer, poly(dibenzofulvene), for the first time (Fig. 1). Based on the π -stacked structure, this polymer shows valuable photo electronic properties that have been thought to be unique to main-chain conjuga ted polymers. Another goal is to create a polymer helix us ing light: we have for the first time prepared a preferredhanded helix on the basis of chirality of light (circularly po larized light) and further extended this work to a helicalsense switching driven/triggered by light (Fig. 2).



Fig. 1. Structure of poly(dibenzofulvene), the first π -stacked vinyl polymer.



Fig. 2. Chirality switching of helical polymer driven/ triggered by circularly polarized light (CPL).

研究開発部門

Research and Development Division

http://www.cat.hokudai.ac.jp/technological.html

産学官連携強化

Reinforcing the collaboration of government, industry and academia

西田まゆみ 教授 (Mayumi NISHIDA) 安田友洋 准教授 (Tomohiro YASUDA)

北海道大学触媒科学研究所・実用化推進系研究開 発部門は、産学連携強化をより進めることを目的とす る文部科学省の要請に応えて2014年4月からその活 動を開始しました。2015年4月には、北海道大学と国 立研究法人産業技術総合研究所との間にクロスアポイ ントメント制度が導入されたことを受けて、研究開発部 門のメンバーによる北大クロスアポイントメントチーム が産総研・触媒化学融合研究センター内に発足し、産 学官の橋渡しの役目を担うことになりました。その一 環として、2015年度に、北海道大学触媒科学研究所、 理化学研究所・環境資源科学研究センター及び計算科 学研究機構、産総研・触媒化学融合研究センター及び 人工知能研究センターの連携協力を仰ぎ、「キャタリス トインフォマティクスによる触媒開発」のプロジェクト を始動させました。

The Research and Development Division was started at the Institute for Catalysis (ICAT), Hokkaido University in 2014 at the request of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) to establish a close relationship between academia and industry. In April 2015, Hokkaido University, and the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), executed the contract to realize the cross-appointment system for the sake of reinforcing the collaboration of government, industry and academia. Then the crossappointment team being constituted of the Research and Development Division was newly set up in AIST. Utilizing the government-industry-academia network, the new program, "Catalyst Informatics", was launched by the cooperation among the Center for Sustainable Resources Science and the Advanced Institute for Computational Science, Riken, the Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry and the Artificial Intelligence Research Center, AIST.

実用化推進系 Practical

Applications



<u>触媒ターゲット研究アセンブリ Target Oriented Research Assembly</u>

触媒研究基盤開発クラスター

Research Cluster for Sustainable Catalyst

http://www.cat.hokudai.ac.jp/sustainable.html

触媒科学における研究拠点機能の先験的整備

Developing Fundamental Resources for Catalysis Research

Cluster Leader: 長谷川淳也 (Jun-ya HASEGAWA)

Member: 朝倉 清髙 (Kiyotaka ASAKURA, ICAT, Hokkaido Univ.) 清水研一 (Kenichi SHIMIZU, ICAT, Hokkaido Univ.) 高橋保 (Tamotsu TAKAHASHI, ICAT, Hokkaido Univ.) 西田まゆみ (Mayumi NISHIDA, ICAT, Hokkaido Univ.)

触媒科学技術の先端研究を推進・支援するための 共通基盤を先験的に整備すること、研究者コミュニ ティーとの研究協力体制を提案・構築すること、触媒 科学における新学際領域を戦略的に開拓することを 目的とした事業を行う。

(1)サステナブル触媒事業

持続可能な社会に向けた技術革新を可能とす る触媒科学技術の研究を推進・支援する。

(2)触媒高度実践研修プログラム事業

統合的触媒研究体制のもと、研究者の人材育 成、触媒開発支援をする。

(3)触媒データベース事業

触媒データベースの構築を継続し、複雑に進 化する触媒科学技術を体系化すると共に、新学 際領域としてキャタリスト・インフォマティクス の発展を企図する。

福岡 淳 (Atsushi FUKUOKA, ICAT, Hokkaido Univ.) 大谷文章 (Bunsho OHTANI, ICAT, Hokkaido Univ.) 中野 環 (Tamaki NAKANO, ICAT, Hokkaido Univ.)

This cluster is aiming at promoting advanced catalysis research. Our projects are to develop and maintain both hard and soft infrastructures in the institute, to promote and enhance the collaborations and cooperation in the community of catalysis science and engineering, and to develop the forefront of the interdisciplinary area related to catalysis. (1) Sustainable catalysis research project is to promote and support advanced catalysis researches as well as to introduce transcendental approaches in catalysis. (2) Training and education program is to contribute in developing human resources and in outreach activities to the society. (3) Database project is to accumulate experimental and XAFS information of catalytic systems and to develop catalysis informatics.



Figure 1. Top page of the web site of the catalyst database





規整表面ナノ構造研究クラスター

Research Cluster of Well-defined Surface Nanostructures

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~q16691/index.html

反応制御のための規整表面ナノ構造をつくる,みる

Create and Observe Well-defined Surface Nanostructures for Precise Reaction Control

Cluster Leader: 髙草木達 (Satoru TAKAKUSAGI)

Member: 清水研一 (Ken-ichi SHIMIZU, ICAT, Hokkaido Univ.) 佃達哉 (Tatsuya TSUKUDA, The Univ. of Tokyo) 原賢二 (Kenji HARA, Tokyo Univ. of Technology) 増田卓也 (Takuya MASUDA, NIMS) 近藤敏啓 (Toshihiro KONDO, Ochanomizu Univ.)

構造の規定された酸化物単結晶表面を機能性分子 や金属で様々に修飾することで、well-definedな表 面反応場を構築する。走査型トンネル顕微鏡(STM) や偏光全反射蛍光XAFS法を用いて原子・分子レベ ルでの幾何・電子構造評価を行うとともに、実際に触 媒活性を測定することで活性発現の起源を明らかに し、活性サイトの合理的設計のための指針を得る。

例えば酸化物上の金属ナノ粒子は担持金属触媒を はじめ、センサー、電子デバイスなど様々な材料に応 用されているが、凝集が起こりやすく、微少クラスター

(サイズが1 nm以下)を均一に十分な量担持するこ とが難しい。しかし酸化物表面を、あらかじめ金属と 強く相互作用する官能基を有する機能性分子で修飾 することで、図1のように金属を単原子状に分散でき る。機能性分子の被覆率と金属の導入量を変化させ ることで、サイズを制御した微小クラスターの調製が 可能になると期待できる。

[110]

[001]

八木一三 (Ichizo YAGI, Hokkaido Univ.)
 角山寛規 (Hironori TSUNOYAMA, Keio Univ.)
 魚崎浩平 (Kohei UOSAKI, NIMS)
 田旺帝 (Wan-Jae CHUN, International Christian Univ.)

展開型 Extensive

Research Section

The objective of our research group is to create welldefined active surface structures by modifying oxide single crystal surfaces with various functional molecules and metals. They are characterized at an atomic level by using advanced surface science techniques such as STM and PTRF-XAFS to elucidate the origin of the catalytic activity.

We are now focusing on metal nanoclusters on oxide surfaces because they are technologically important as oxide-supported metal catalysts, sensors, and electronic devices. It is not easy to prepare homogeneous subnanometer-sized clusters on oxides because they are easily aggregated to form large clusters although they are expected as the next generation catalysts or devices. We succeeded in preparing an atomically dispersed metal species by premodifying an oxide surface with functional molecules before metal deposition (Fig. 1), which may enable precise size control of subnanometer-sized clusters by controlling densities of the functional molecule and the deposited metal.



Figure 1. Atomically dispersed Au on TiO₂(110) premodified with *o*-MBA (mercaptobenzoic acid) molecules. バイオインターフェース研究クラスター

Research Cluster of Bio-Interface

http://www.cat.hokudai.ac.jp/ye

生体界面の分子構造を高感度で追跡する

Exploring the Bio-Interface in a Molecular Sensitivity

Cluster Leader: 叶深 (Shen YE)

Member: 村越敬 (Kei MURAKOSHI, Hokkaido Univ.) 葉金花 (Jinhua YE, National Institute for Materials Science)

物質の触媒活性や機能性はその物質の表面や界 面の原子・分子の配列構造に支配されている。我々 は,和周波発生(SFG)振動分光法や原子間力顕微鏡 (AFM)などの表面科学的手法を用い,生体膜をはじ めとする生体機能性材料の界面分子構造の解明を通 じて,その機能性発現の機構解明を分子レベルで実 現する。酵素やオゾンなどの様々な分子との反応に 伴う界面構造の高感度な追跡により,バイオインター フェースにおける反応の機構解明と生体機能性材料 の開発にも寄与する。さらに,金属空気電池などの二 次蓄電池の電極溶液界面構造のその場研究にも取り 組み,表面科学的視点から電極反応機構や反応速度 論の解明を通じて機能性電極触媒材料の開発や高性 能二次蓄電池の実用化に貢献する。 今堀博 (Hiroshi IMAHORI, Kyoto Univ.) 田中賢 (Masaru TANAKA, Kyushu Univ.)

Molecular structure at surface of a functional material plays important roles in its functionality and catalytic activity. Our research interest is focused on elucidation of relationship between the functionality and the molecular structures on the surface or interfaces of bio-membranes and functional materials at molecular level using sum frequency generation (SFG) spectroscopy and atomic force microscope (AFM). For example, the enzyme reaction on the lipid bilayer and the surface structure on the biopolymers on the bio-interfaces have been studied under *in situ* conditions. We are also investigating the electrode and solution interface in the Li-O₂ secondary battery in order to improve its stability and cycling ability by the surface structure control.



Figure 1. Scheme for SFG and AFM Measurements on the Bio-interface.



プラズモン光触媒研究クラスター

Research Cluster for Plasmonic Photocatalysis

http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~k15391/

環境浄化用プラズモン励起型光触媒の開発

Development of Plasmonic Photocatalysts for Environmental Applications

Cluster Leader: コワルスカ エバ (Ewa KOWALSKA)

Member: 髙草木達 (Satoru TAKAKUSAGI, ICAT, Hokkaido Univ.)

Agata MARKOWSKA-SZCZUPAK West Pomeranian Univ. of Technology, Poland) Christophe COLBEAU- JUSTIN (Paris-sud Univ., France) Saulius JUODKAZIS (Swinburne Univ., Australia) Sven RAU (Ulm Univ., Germany)

本研究クラスターでは、太陽光にふくまれる可視光 の波長領域において表面プラズモン共鳴吸収をもつ 光機能性ナノ粒子,すなわち,金,銀あるいは銅など の金属あるいは合金と広いバンドギャップをもつ半 導体からなる光触媒の開発をめざしている。これらの 光触媒を用いる紫外あるいは可視光照射下での汚染 物質分解の反応機構およびLSPR吸収により生じる電 場による光触媒活性向上の効果を検討し,主要な反 応条件および光触媒活性と物理化学的特性の相関を 明らかにする。さらにこのプラズモン光触媒に均一系 光触媒である金属錯体を修飾することにより、さらな る光触媒活性の向上と光吸収,キャリア移動および 酸化還元反応の機構を解明する。

阿部竜 (Ryu Abe, Kyoto Univ.) Hynd REMITA (Paris-sud Univ., France) Wojciech MACYK (Jagiellonian Univ., Poland) Adriana ZALESKA-MEDYNSKA (Gdansk Univ., Poland) Marcin JANCZAREK (Gdansk Univ. of Technology, Poland)

展開型 Extensive

Research Section

Our research focuses on development of plasmonic photocatalysis with ability of workingat visible range of solar spectrum, i.e. mono and bimetallic photocatalysts composed of gold, silver, copper, platinum and wide-band semiconductor. The influence of structural properties on the photocatalytic activity and the mechanism of chemical and microbiological (bacteria and fungi) pollutants degradation is investigated.

The mechanism of photocatalytic action under visible light irradiation will be studied by a few methods, e.g., photoacoustic spectroscopy (PAS), reversed double beam photoacoustic spectroscopy (RDB-PAS), time-resolved microwave conductivity (TRMC), electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy, fluorescence spectroscopy, quasi-Fermi level determination, action spectrum analysis. The influence of titania facets (101 and 001) on properties of metal deposits, and thus on resultant photo- and antimicrobial properties will be also examined.



Plasmonic photocatalyst

0-02 CH₃COOH

Fig. 2. Scheme of photodegradation of chemical and microbiological pollutants on titania (exposed with (101) facets) modified with NPs of gold and silver.



healthy bacteria cells

展開型 Extensive

Research Section

界面シミュレーション研究クラスター

Research Cluster for Computer Simulation of Interfaces

http://www.cat.hokudai.ac.jp/hasegawa/

量子シミュレーション手法の開発と界面プロセスの理論的解析

Development of the Methodology of Quantum Simulations and its Application to Chemical Processes at Interfaces

Cluster Leader: 中山哲 (Akira NAKAYAMA)

 Member: 清水研一 (Ken-ichi SHIMIZU, ICAT, Hokkaido Univ.)
 高草木達

 武次徹也 (Tetsuya TAKETSUGU, Hokkaido Univ.)
 中村恒夫

 Nisanth N. NAIR(Indian Institute of Technology Kanpur, India)

本研究クラスターでは、固体表面および固/液・固/ 固界面における触媒反応プロセスのメカニズム解明と 理論的設計法の確立を目指し、第一原理分子動力学 法やQM/MM法などの量子シミュレーション手法をも とに方法論の開発と応用研究を推進する。具体的には 以下の項目に重点を置く。

(a) 不均一系触媒反応における熱揺らぎと溶媒効果の検討

不均一系触媒における熱力学的な効果に着目した 触媒機能解析を行う。自由エネルギー曲面に基づく 解析を重点的に行い、エントロピーや溶媒の効果を 検討する。

(b)酸化物半導体の電極界面における酸化還元過程 に関する理論的研究

酸化物と金属の電極界面の構造と酸素イオンの移動を介した酸化還元過程の理論的モデリングを行い、界面構造と電子伝導の相関を第一原理計算により明らかにする。

(c) 周期境界QM/MM計算手法の開発

大規模系への適用に向けて、第一原理計算の計算 コストを大幅に下げるために、周期境界QM/MM 法の開発を行う。特に固体酸化物をMM領域とし て、周期境界DFT法との接合に重点を置いた手法開 発を行う。



Fig. 1 Redox process at the metal/metal-oxide interface

高草木達 (Satoru TAKAKUSAGI, ICAT, Hokkaido Univ.) 中村恒夫 (Hisao NAKAMURA, AIST)

Our research focuses on the understanding and theoretical modeling of interfaces (solid/liquid, solid/solid interfaces) with the help of computer simulations such as the first-principles molecular dynamics simulations and QM/MM methods.

In particular, we focus on the following topics.

(a) Ab initio thermodynamics and solvent effects on the catalytic process.

(b) Theoretical modeling of the electron transport and redox process at the metal-oxide/metal interfaces.

(c) Development of the QM/MM method for periodic systems and its application to heterogeneous catalysis.



Fig. 2. First-principles simulations of solid/ liquid interface

酸塩基触媒研究クラスター

Research Cluster for Acid-Base Catalysis

http://www.cat.hokudai.ac.jp/fukuoka/



高性能の固体酸塩基触媒を開発し,植物由来炭水化物から 必須化学品の原料を得る

Development of novel solid acid-base catalysts for the conversion of abundant carbohydrates in nature to platform molecules for bulk chemical production

Cluster Leader: 中島清隆 (Kiyotaka NAKAJIMA)

Member: 長谷川淳也 (Jun-ya HASEGAWA, ICAT, Hokkaido University)

一國伸之 (Nobuyuki ICHIKUNI, Chiba University)

本倉健 (Ken MOTOKURA, Tokyo Institute of Technology) Barbara ONIDA (The Politecnico di Torino, Italy)

近年、化石資源に依存しない資源循環型社会の構 築が求められており、反応性の高い植物由来炭水化 物を原料とした必須化学品原料の合成が重要な課題 となっている。本研究クラスターでは、固体酸化物の 水存在下における酸塩基触媒作用、特にこれまで検 討されていなかった電子欠損金属サイトと電子過多 な格子酸素の酸塩基性質を解明し、環境低負荷を志 向した水溶液内でのバルクケミカル原料合成に取り 組む。主な検討内容は、多様な植物由来の炭水化物 を中心とする化合物群 (糖類、高級脂肪酸およびその エステルなど)からカルボン酸、ケトン、アルデヒド、オ レフィン類などを高収率で獲得する反応系の構築で ある。特に塩基サイトによる正・逆縮合反応の制御が 可能となれば、C2~C4を中心とした低分子量炭化 水素からC12を大幅に上回る高分子量炭化水素合成 の道筋が確立できる。

神谷裕一 (Yuichi KAMIYA, Hokkaido University) 横井俊之 (Toshiyuki YOKOI, Tokyo Institute of Technology) Emiel J.M. HENSEN (Eindhoven University of Technology, The Netherlands)

Chemical production from renewable and easily accessible carbohydrates in nature is increasingly important in recent years for the development of sustainable society. Plant-derived carbohydrates, which show higher reactivity than fossil fuel-derived hydrocarbons, can be converted to attractive platform molecules (furans, organic acids, ketones, aldehydes, olefin, etc.) by acid-base catalysis in the presence of water. In this project, acid and base functionality of electron-deficient metal species and electron-rich lattice oxygen sites, respectively, on metal oxides has been studied for the carbohydrates conversion in the presence of water. Precise control of basicity for oxide catalysts would enable selective production of various small (C2-C4) and large (> C12) hydrocarbons though fragmentation and condensation reactions. The resulting molecules can be used as sustainable resources for the production of a variety of industrially important chemicals.



Conceptual illustration of acidbase pair on metal oxide surface available for carbohydrates conversion in water

多様化する研究の技術支援

Technical Support in Response to Various Special Needs of Scientists

http://www.cat.hokudai.ac.jp/technical/

研究支援技術部では、研究者からの規格外の特殊 な要望に迅速に対応し、ガラス・金属製の実験器具・ 装置の開発・製作・改良、本研究所機器・設備・ネット ワーク管理などの多岐にわたる技術補助を行い、本 研究所の高度な研究を支えている。また、講習会を開 催し、研究者と技術部との連携を高めるとともに、実 習を通して安全な研究を支援している。センターから 研究所へ、触媒化学から触媒科学へ変わり、より多様 化する研究を技術的面から支援している。

第一研究機器開発班:数百種類以上の装置・器具の開発・製作経験を活かした精度・実用度の高いガラス加工を行っています。

第二研究機器開発班:金属・樹脂・セラミックスの 加工を行っており、主に真空部品・光学部品・電気化 学セル等を製作しています。汎用の工作機械を用いた 加工から、自動プログラムを用いたNC加工までさま ざまな機械工作を行っています。

研究機器管理班:本研究所の走査型電子顕微鏡, 透過電子顕微鏡,X線光電子分光装置,吸着測定装 置,核磁気共鳴装置などの機器管理、ネットワーク管 理を行っています。 The Technical Division is composed of Research Equipment Development Teams No. 1 and No. 2 and the Research Equipment Management Team.

Research Equipment Development Team No. 1 manufactures glassware commonly used in chemical experiments as well as special glassware that is not commercially available, such as vacuum pumps and special spectrochemical cells.

Research Equipment Development Team No. 2 is in charge of metal processing, welding, and the construction of equipment such as ultra-high vacuum systems.

The Research Equipment Management Team is responsible for maintaining common-use equipment, such as SEM, TEM, XPS, and NMR.

Our mission is to contribute to research at ICAT through technical support. We aim to make user-friendly, highly efficient equipment as requested, through active discussion and consultation with the researchers from the early stages of development. Although we have many years of experience in glassblowing and metal processing, we make every effort to acquire new skills.



第一研究機器開発班製作物

第二研究機器開発班作業風景

共同利用・共同研究拠点としての本研究所は、次の共同研究 事業等を行っています。

1 共同利用·共同研究

本研究所は、平成22年度から文部科学省の認定を受け、 触媒化学研究の共同利用・共同研究拠点として、より深化し た共同研究を進めることとしております。

本学外の研究者が研究代表者となり、本研究所の教員を 研究分担者として研究所において共同実施するもので、研究 課題があらかじめ設定されている「戦略型」(年1回公募)及び 申請者自らが研究課題を設定する「提案型」(年3回公募)の 種類の区分により公募を行います(採択された課題に対して は、研究所から研究費が支給されます。)。

2 各種研究会の開催

(1)研究討論会

平成16年度まで開催していた研究発表会と研究討論会 を統合させ、平成17年度からは研究討論会として、全国の 研究者による講演及び本研究所各部門・クラスターの研究 成果発表・討論を行っています。

(2)国際研究集会

諸外国の研究者を招聘して、触媒化学の特定テーマに ついてシンポジウムを開催するもので、平成2年から開催 しております。平成18年からは、年1回海外においても開 催しております。

(3)情報発信型国際シンポジウム

「日本が誇る先駆的研究成果を『日本の研究機関の主導 で』海外において情報発信する」というコンセプトの基で 企画・運営されており、年2回開催しています。 We support research on catalysis and related fields through the Joint Usage/Research Center Program and symposiums.

1. Joint Usage/Research Center Program

The Institute for Catalysis has been authorized by MEXT as a Joint Usage/Research Center for catalysis. Through this program, we provide financial and technical support to joint research projects with our staff. The program is open to researchers at both universities and public research institutions. There are two categories for applications: target-set projects and target-proposed projects. Applications are accepted once a year for target-set projects and three times a year for target-proposed projects. Applications with whom they wish to collaborate.

2. Symposium

(1) Research Symposium

The Research Symposium which showcases research activities at the Institute for Catalysis is held every year. Special lectures are delivered by invited speakers.

(2) International Symposium

We have organized many international symposia on specific themes in catalytic chemistry featuring the participation of distinguished researchers from various countries. Our international symposia have been held in several countries, including Germany, USA, France, and Sweden.

(3) ICAT International Symposium

We organize two international symposia per year. These symposia are operated under our philosophy that a Japan's own research institution should take the initiative in dissemination of information in overseas countries on pioneering research outcome which Japan takes pride in.

統合物質創製化学研究推進機構 MEXT Project of Integrated Research Consortium on Chemical Sciences

本研究所は、名古屋大学・京都大学・九州大学の国際的化学 研究拠点と協同して異種学術領域を包含する新たな物質合成 概念を創出する「統合物質創製化学推進機構」を形成し、先導 的研究を推進して,科学と科学技術の革新と新産業の創出を 促す新学術基盤の構築および次世代中核研究者の育成を図 ります。

We participate in Integrated Research Consortium on Chemical Sciences composed of the prestigious research institutes of Nagoya University, Kyoto University and Kyushu University and ICAT which creates novel areas of chemical synthesis at the interdisciplinary level. This project also aims to realize new innovations in science and technology, to promote new industries, and to cultivate the younger generation.



国際交流 International Collaborations

本研究所では、諸外国との国際交流の一環として部局間協定 を締結しています。
1)締結先:中国・石油大学(北京)化工学院 締結年月日:平成13年12月7日
2)締結先:中国·華東師範大学化学系 締結年月日:平成17年3月18日
3)締結先:ドイツ・マックスプランク協会 フリッツハーバ研究所
締結年月日:平成17年12月26日 4)締結先:アメリカ・デラウェア大学
触媒科学技術センター
締結年月日:平成19年7月9日 5)締結先:中国·厦門大学
固体表面物理化学国家重点実験室 締結年月日:平成19年10月9日
6)締結先:中国·中国科学院大連化学物理研究所 触媒基礎国家重点実験室
締結年月日:平成19年10月10日 7)締結先:アメリカ・アイオワ州立大学
理工技術研究所 締結年月日:平成21年3月10日
8)締結先:イギリス・カーディフ大学 カーディフ触媒研究所
締結年月日:平成22年1月26日 9)締結先:ポーランド・ポーランド科学アカデミー
触媒·表面化学研究所 締結年月日:平成22年3月15日
10)締結先:ポーランド・西ポメラニアン大学
化学·環境工学研究所 締結年月日:平成22年3月17日
11) 締結先: ポーランド・グダンスク工科大学 締結年月日: 平成22年3月18日
12)締結先:フランス・リル第1大学-リル中央学院 触媒・固体化学研究ユニット
締結年月日:平成23年1月17日 13)締結先:アメリカ・パーデュー大学サイエンス学部
締結年月日:平成26年4月26日 14)締結先:ポーランド・ヤギャボ大学化学科
締結年月日:平成28年4月 15)締結先:アメリカ・サウスカロライナ大学
化学工学科 締結年月日 : 平成28年4月
触媒科学研究所 国際ネットワーク

To promote international exchange, we have concluded agreements with its counterparts in many other countries.

- 1) School of Chemical Engineering, China University of Petroleum, China (December 7, 2001)
- Department of Chemistry, East China Normal University, China (March 18, 2005)
- 3) Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, Germany (December 26, 2005)
- 4) Center for Catalytic Science and Technology, Delaware University, USA (July 9, 2007)
- 5) State Key Laboratory of Physical Chemistry of Solid Surfaces, Xiamen University, China (October 9, 2007)
- 6) State Key Laboratory of Catalysis, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, China (October 10, 2007)
- 7) Institute for Physical Research and Technology, Iowa State University, USA (March 10, 2009)
- 8) Cardiff Catalysis Institute, Cardiff University, UK (January 26, 2010)
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poland (March 15, 2010)
- 10) Institute of Chemical and Environment Engineering, WestPomeranian University of Technology in Szczecin, Poland (March 17, 2010)
- 11) Gdansk University of Technology, Poland (March 18, 2010)
- 12) Unité de Catalyse et de Chimie du Solide Université Lille 1 et Ecole Centrale de Lille, France (January 17, 2011)
- 13) College of Science, Purdue University, USA (April 26, 2014)
- 14) Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, Poland (April, 2016)
- Department of Chemical Engineering, University of South Carolina, USA (April, 2016)



触媒科学研究所 案内図



交通アクセス 地下鉄南北線「北18条」駅より徒歩20分

※構内循環バスは、平日15分間隔(時間帯によっては10分間隔)で事務局裏から発車しております。
※一般車両は北20条東門から入構願います。原則として車両入構料300円が必要です。
※タクシー等については、西側の石山通から進入し、建物付近での降車も可能です。

北海道大学触媒科学研究所

〒001-0021 札幌市北区北21条西10丁目 Institute for Catalysis, Hokkaido University, Sapporo, JAPAN TEL(代)011-716-2111(内9104) FAX 011-706-9110 E-mail:k-shomu@jimu.hokudai.ac.jp Homepage:http://www.cat.hokudai.ac.jp/

