

界面分子変換研究会

1. 研究会の目的

表面化学と実用触媒の研究者コミュニティの有機的な交流を目指して、「表面化学と触媒設計の融合研究会」が2009年4月に発足した。これまで6年間にわたって、筑波大学の中村潤児(2009-2011)、大阪大学の福井賢一(2012-14)を世話人代表として、チュートリアルなどの教育・啓蒙活動や各種ワークショップによる学術活動を行ってきた。その結果、表面化学と実用触媒の研究者間の理解と連携が深化した。しかし、基礎学理に裏打ちされた設計指針に基づいて高性能実用触媒を創出することは、依然として挑戦的な課題である。これを実現するためには、合成、構造評価、反応解析の先端的技術をもつ実験家と、多様で複雑な触媒作用に通底する根本原理をあぶり出す理論家の協同が不可欠である。そこで本研究会では、前述の研究会を名称変更した上で発展的に再構築し、表面や界面での触媒反応の機構を原子・分子の視点から議論する場を提供することを目的としている。

2. 今年度の活動と今後の予定

平成27年度の主な事業は、基礎講座「第6回表面化学チュートリアル」の開催、触媒討論会へのセッション参加、Pacifichem2015でのセッション開催、日本表面科学会とのシンポジウムの共催である。

「表面化学チュートリアル」は、学生など表面化学の初学者や、学生時代にこの分野について必ずしも十分な教育を受けられないまま研究に従事している企業研究者を対象とし、表面化学及び触媒作用のメカニズムに関する基礎的な概念の理解を目指すもので、本研究会では2010年から毎年1回開催している。今年度は2015年9月29日(火)、30日(水)の2日間にわたって、東京大学で開催した。企業からの参加者も含めて、35名(学会正会員7名、非会員5名、学生23名)の参加があった。初日は、表面構造、表面電子状態、表面ダイナミクス、表面反応、金属表面化学など触媒に関係する基礎的な概念が中心で、2日目は、モデル触媒概論、界面計算科学、半導体、酸化物の各表面上での化学、など各論に踏み込んだ内容の構成とした。講義資料冊子を配布し、本研究会の世話人3名を含む5名の講師で実施した。また、初日の夕方には主催者の佃教授の研究室の見学ツアーを実施した。受講者へのアンケートの結果、これまで通り高い満足度が得られていることが分かった。来年度以降も、受講者の要望も踏まえつつ、触媒作用を理解する基礎としての表面化学の裾野を拓げる活動として継続して行く予定である。

秋の第116回触媒討論会では、研究会セッションを開催した。特別講演として原亨和教授(東工大)による「新しいアンモニア合成触媒」、依頼講演として江原正博教授(分子研)による「担持金属ナノクラスターの触媒作用に関する理論解析」を開講した。多様な触媒の電子状態、構造、反応機構、触媒設計などについて17件の優れた一般講演があり、原子・分子レベルでの有意義な議論が行われた。

Pacifichem2015において2015年12月16-18日にわたってセッション”Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research”を主催し、広範な触媒分野における実験と理論の有機的な連携の現状と展望について議論を行った。Homogeneous catalysts, heterogeneous

catalysts, modeling of catalyts photocatalysts and biocatalysts に関わる口頭講演 70 件、およびポスター22 件の発表があった。

2016 年 3 月 3 日-4 日に福岡大学七隈キャンパスにおいて開催予定の、日本表面科学会触媒表面科学研究部会が主催するシンポジウム「実用触媒と表面化学との融合」を共催する。表面科学的な手法による触媒反応の研究は 50 年の歴史があるが、未だにその知見は実用触媒に十分に役立っているとは言い難い。シンポジウムの講演者の多くが、日本表面科学会触媒表面研究部会と本研究会の両方に所属しており、表面科学と触媒科学の接点を模索する。

H28 年度は、本研究会は活動の継続申請をし、以下のような事業を予定している。

①基礎講座「第 7 回表面化学チュートリアル」の開催

例年どおり、表面化学及び触媒作用のメカニズムに関する基礎的な概念の習得を目的にした基礎講座を開催。(9 月～11 月の間の 2 日間、関東地区で開催予定)

②ワークショップの開催

③第 118 回触媒討論会での研究会セッションの開催

3. 世話人

世話人代表：佃 達哉（東京大）

秋田知樹（産総研），朝倉清高（北大），阿部 竜（京大），一國伸之（千葉大），内田さやか（東大），江原正博（分子研），大西 洋（神戸大），奥村 和（工学院大），奥村光隆（阪大），久保百司（東北大），久保田 純（福岡大），近藤 寛（慶應大），薩摩 篤（名大），宍戸哲也（首都大），白石康浩（阪大），竹田精治（阪大），唯 美津木（名大），館山佳尚（NIMS），田中庸裕（京大），富重圭一（東北大），中村潤児（筑波大），野村淳子（東工大），原 賢二（東京工科大），原 亨和（東工大），藤谷忠博（産総研），福井賢一（阪大），森川良忠（阪大），安松久登（豊田工大），山内美穂（九大），山方 啓（豊田工大），山下弘巳（阪大），吉信 淳（東大），渡邊佳英（豊田中研）