

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応
2. 研究代表者： 櫻井 英博（大阪大学大学院工学研究科 教授）  
共同研究者： 江原 正博（自然科学研究機構 計算科学研究センター 教授）

### 3. 事後評価結果

○評点:

**A 期待通りの成果が得られている**

○総合評価コメント:

本研究課題では、2種類以上の金属を混ぜ合わせてナノメートルサイズの大きさにした合金クラスターを用いて、金属の組み合わせ次第で従来の金属触媒では出来ない触媒機能を発現させることを目的に研究を実施した。

その結果、多核合金クラスターを用い、これまでの単独の金属ではできない触媒機能を発現させることに成功し、その原因を理論解析により明確にした。一例として、Pd/Au 合金クラスターが単独のPdでは不可能な低温での炭素-塩素結合の活性化及びUllmann反応を実現した。また、クラスター表面のPdとAuの協働作用による酸化的付加の活性化エネルギーの著しい減少と、引き続き生じる塩素の隣接金属へのスピルオーバー現象が本反応の鍵を握っていることを理論計算により明らかにした。

これらの成果は、多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応として顕著な反応特性を実験的及び理論的に示したものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。一方で、中間評価の際にも指摘したような、この反応系の応用展開にも端緒が見いだせる取組についても、今後期待したい。