

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 異種物質との接合を利用した金クラスター触媒の機能設計

2. 研究代表者： 春田 正毅（首都大学東京大学院都市環境科学研究科 教授）

### 3. 研究概要

金は化学的に不活性な金属であるが、直径 2 nm、原子数 300 個以内のクラスターになると、その化学的性質が劇的に変化する。本研究は、このような金クラスターを種々の卑金属酸化物、炭素（豊富なナノ構造を有する）、高分子（ソフトマテリアル）と接合することにより、その物性をさらに広範、かつ飛躍的に変化させ、環境に優しい化学プロセスを生み出す新規触媒の探求を行うものである。

### 4. 中間報告結果

#### 4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

##### (1) 研究の進捗状況

本研究は、明解な実験計画と人的資源の配置により、おおむね順調に進んでおり、その過程で幾つかの新発見も成されている。金クラスターの作製法が次第に確立され、酸化物、炭化物、高分子等担体の種類も増加していることから、異種物質との接合状態が多様になりつつある。この種の展開により、金触媒の本質を明らかにする可能性が増したと思われる。触媒活性と金粒子サイズ効果の関係は、数多くのデータより明確となった。一方、接合界面の性質やモルフォロジーとの関係についての理解は遅れがちで、世界をリードする研究拠点、知的集積拠点となるためには、この点の解明が不可欠となろう。

応用面において、金触媒の触媒活性を包括的に探索し、プロピレンの選択酸化など新たな成果が得られている。それらは、金触媒の実用性を立証する上からも価値が高い研究項目である。

##### (2) 研究体制

金触媒の先駆者である研究代表者を中心にオールジャパン体制が組み立てられており、活発な研究が実行されている。多くのグループの参加にもかかわらず、定期的な会議や、代表者のグループ訪問による実地検証など並々ならぬ努力で、研究全体をコヒーレントなものにしている点は高く評価される。

#### 4-2. 今後の研究に向けて

サイズ効果、担体効果を調べながら機能開拓を進めるという方向性は妥当である。プロジェクトの前半は多グループによる発散的なアプローチが効果的であるが、後半はまとめ上げるリーダーシップが重要となる。グループ数が多いだけに、まとめるポイントについて十分留意されたい。具体的には、接合面の解析による担体の役割、基質結合サイトの直接観察などを通して、新たな展開が期待されると考える。このためには、その方面の分野の専門家との共同研究も必要となろう。今後の研究期間において、本研究チームの研究成果の価値をより高めるための戦略を検討し、明確にした上で、各グループに徹底して頂きたい。例えば、

- (1) なぜ金が触媒活性を示すのか、その物理的・化学的解明。
- (2) 金触媒の特異的性質とその活用による社会的なインパクト。
- (3) 今後の金触媒科学の動向予測と戦略的重点目標の明確化。

などが挙げられる。

金の地球上の存在量を考慮すると、その触媒活性の特徴と制御の可能性が判明すれば、科学技術の進歩に大きく貢献できると思われる。そのためには、構造解析・機構解明において、もう一段の進展を期待したい。

#### 4-3. 総合評価

これまでに、金クラスターの合成と機能応用について顕著な進展が見られ、今後も大きな成果が期待できる。一方、構造・物性面では本格的な研究展開はこれからである。最近、触媒作用が金／担体界面に由来するとの結果が出てきたようであるが、その点では、今後  $\text{TiO}_2$  以外の担体の検討を行う中で十分な解明がなされることを期待する。また、界面効果を除いた「サイズ効果」にどのような本質的な意味があるのかも明確にして頂きたい。構造解析、物性評価については、チーム内に留まらず幅広く共同研究を行い、多角的に検討することが重要であると思われる。

応用面においては、プロピレンの酸化によるプロピレンオキシドの製造が、既存の方法で大規模に行われているので、金触媒による新法が成功すれば工業的なインパクトは大きい。まずは選択率の向上がポイントであろうが、転化率が低い点も気になる。反応工学(触媒反応速度論)的な解析も今後必要と思われる。その他、金でないと進まないような新規かつ実用性の高い反応が見つかれば、さらなる発展が期待できる。