

戦略的創造研究推進事業
－CRESTプログラム－

研究領域「環境保全のためのナノ構造制御触媒
および新材料の創成」

研究領域中間評価用資料

平成 18 年 3 月 14 日

1. 戦略目標

戦略目標：環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製（平成14年度設定）

1. 名称

環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製（平成14年度設定）

2. 具体的な達成目標

原子・分子レベルで物質の組織・構造の制御等を行い、機能触媒及び循環可能な新材料等の環境保全材料並びに、高効率エネルギー変換システム等のエネルギー利用高度化材料の開発を目指す。この際、原子・分子レベルでの組織・構造の制御から求める材料開発までを総合的に推進する。

このため、2010年代に実用化・産業化を図るべく、以下のような成果等を目指す。

- ・太陽電池、熱電変換素子、超伝導電力貯蔵・超長距離送電、燃料電池、水素貯蔵用材料のナノ組織制御による画期的な高性能化
- ・環境に余分な負荷を与えず、資源を無駄なく利用し、エネルギー効率を極限まで高めた、高速・高効率・高選択的物質変換プロセスと循環型エネルギーシステムを実現するためのナノ構造制御触媒の設計指針の確立及び調製技術の開発
- ・ナノスケールオーダーの孔径の微小な空間を持つ物質の微細構造を制御した、新たな触媒、分離膜、物質担体、光デバイス、電子デバイス等の創製
- ・熱効率70%を可能とする超高効率ガスタービン材、片手でも持ち上がる自動車ボディ材、その他金属・セラミックス・高分子及びカーボンナノチューブ等の新素材を複合した新機能を持つコンポジット材料の開発
- ・高機能・多機能化のためのナノ組織の設計の実現及び、地球温暖化防止・省エネルギーなどの環境材料、高度情報通信社会実現のための磁性材料等の革新的な金属材料の創製

3. 目標設定の背景及び社会経済上の要請

経済のグローバル化と国際競争の激化等に伴う産業競争力の低下、雇用創出力の停滞といった現下の経済社会の課題を科学技術、産業技術の革新により克服し、我が国の産業競争力を強化し、経済社会の発展の礎を着実に築くことが不可欠である。このような革新的な科学技術、産業技術の発展の鍵を握るものとして、ナノレベルで制御された物質創製、観測・評価等の技術であるナノテクノロジーが、近年急速に注目されている。

具体的には、多機能、多段階に機能する触媒、エネルギー貯蔵・変換効率の飛躍的に向上した材料開発等が特に求められる。

また、これらの実用化・産業化の目標を達成するためには、ナノレベルでの計測・評価、加工、数値解析・シミュレーションなどの基盤技術開発や、革新的な物性、機能を有する新物質創製への取組みが必須である。

なお、総合科学技術会議分野別推進戦略（平成13年9月）においても、環境・エネルギー分野においては、国家的・社会的課題の克服のため、「環境保全・エネルギー利用高度化材料」が5つの重点領域の1つとして位置づけられているところである。

4. 目標設定の科学的な裏付け

将来の我が国経済社会の持続的な発展のため、リデュース、リユース、リサイクルを実現し、かつ廃棄物の適正処分や自然循環機能の活用等を図ることにより、天然資源の消費が抑制され、環境負荷が可能な限り低減される循環型社会の構築を図ることが必要である。物質・材料技術は、このような資源循環型技術の中でも主要な役割を担う技術の1つである。

また、エネルギー分野においても、エネルギーインフラを高度化していくために必要な研究開発として、燃料電池、太陽光発電のためのエネルギー変換材料、エネルギー機器・インフラ等各種材料の開発が求められているところである。

産業界においてもその取り組みの強化が図られている環境保全・エネルギー利用高度化材料については、既存の材料分野を越えた多機能・多段階に機能する触媒等の環境保全材料、革新的にエネルギー変換効率を向上させた燃料電池材料等のエネルギー利用高度化材料をはじめとした各種のナノ構造制御材料開発により積極的な取り組みを行うことが必要不可欠。

具体的には、

- ・エネルギー貯蔵・変換材料については、既に、太陽電池、2次電池、水素吸蔵材料等様々な材料や製品が作られているが、エネルギー変換効率が未だ不十分であることから、ナノ組織制御材料により効率向上を目指すことが必要である。
- ・高効率生産、環境浄化、エネルギー変換用などの触媒は現在までにおいても、多大な進化を遂げてきているが、ナノ構造を完全に制御した触媒により、必要な機能を単一の触媒上に付与する技術開発、多段階の合成プロセスについて、次々に機能する触媒開発、光機能触媒開発等への取り組みが求められている。
- ・複合剤の研究は、金属系、セラミックス系、高分子系等既に様々な分野で進められているが、製造コスト、特性劣化の問題等により、製品としては、スポーツ用材料といった比較的小型の製品に限られている。発電用ガスタービン等、大型構造部材への応用のためにナノ複合化が急務である。

5. 重点研究期間

ナノテクノロジー分野については、競争が激しく多くの研究領域を推進する必要があるため初年度のための公募とし、次年度以降には新たに同じ研究領域での公募は行わない。1研究課題は概ね5年の研究を実施する。(なお、優れた研究成果をあげている研究課題については、厳正な評価を実施した上で、研究期間の延長を可能とする。)

2. 研究領域

「環境保全のためのナノ構造制御触媒および新材料の創成」(平成14年度発足)

【領域の概要】

本研究領域は、ナノオーダーで構造・組織等を制御することにより、これまでになく高効率・高選択的にかつ環境負荷を低く化学物質等を合成あるいは処理することが可能な新触媒・新材料・システム、環境負荷の低い新材料等を創製し、環境改善・環境保全に資する研究を対象とする。

具体的には、環境負荷の高い合成プロセスをナノ構造制御触媒等により低環境負荷型に代替する技術に係わる研究、高効率分離・吸着機能・高立体選択的表面・触媒等の高

機能・新機能を有するナノ構造材料等の創製に係わる研究、すなわちグリーンナノケミストリーに加え、排ガス・排水中に含まれる化学物質、環境中に存在する化学物質等を高効率・高選択的に分離・除去、分解、無害化するナノ構造制御触媒の開発に係わる研究、これらを組み込んだシステムの創製に係わる研究、ナノ空間機能を反応場として活用したナノリアクター等の創製を目指す研究、環境負荷の低いナノ制御構造材料に係わる研究等が含まれる。

3. 研究総括

氏名 **御園生 誠**

(所属：製品評価技術基盤機構、 役職：理事長)
(東京大学 名誉教授)

4. 採択課題・研究費

(百万円)

採択 年度	研究代表者	所属・役職	研究課題	(採択 - 2006/3) 研究費累計
平成 14 年度	魚住 泰広	分子科学研究所 教授	水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属 触媒創成	329.9
	奥原 敏夫	北海道大学 教授	グリーン化学合成のための酸化物クラスタ高機能触 媒の開拓	436.4
	黒田 一幸	早稲田大学 教授	高度に制御されたナノ空間材料の創製	364.7
	辰巳 敬	東京工業大学 教授	有機無機複合相の自在変換によるグリーン触媒の 創製	224.7
	田 旺帝	北海道大学 助教授	高機能規整酸化物表面創生	171.4
	辻 康之	北海道大学 教授	ナノ制御空間を有する均一系分子触媒の創製	221.4
	寺岡 剛靖	九州大学 教授	ナノ構造制御ペロブスカイト触媒システムの構築	203.3
	持田 勲	九州大学 産学連携センター 特任教授	表面最適化炭素ナノ繊維の新規環境触媒機能	348.5
	八嶋 建明	宮崎大学 特任客員研究員	ナノ制御置換型金属酸化物触媒による選択酸化反 応の制御と応用	206.2
平成 15 年度	山元 公寿	慶応大学 理工学部 教授	精密自在制御型ナノ触媒の創製	147.3
平成 16 年度	中村振一郎	(株)三菱化学科学 技術研究センター	分子の特性を最大に引き出すナノサイズ構造体が つくる場の研究	122.6
			総 研 究 費 (H14-17)	2776.4

5. 研究総括のねらい

【領域の中で実現をねらった事項や研究成果について。科学技術・国民生活・社会経済等に対するインパクトなど、特に留意した事項。】

環境を維持改善する技術は、時代の喫緊の要請であり、その重要性はいうまでもない。中でも、環境負荷の小さい製造・製品技術や環境汚染物質を除去する技術など化学技術に寄せられる期待は非常に大きい。

本領域では、ナノサイエンス、テクノロジーを基礎として、環境保全・改善に顕著に貢献する「化学プロセス」「化学材料」のための、基礎及び応用の研究を推進する。ここで、『ナノ』とは、新規なナノ構造あるいは新規なナノ構造合成法を意味する。また、『環境への貢献』とは、(1) ナノ構造制御触媒による高効率、高選択的反応を実現し、環境負荷を大幅に低減すること〈グリーンケミストリー〉、(2) ナノ構造制御により有害化学物質を効率的に除去・分解する触媒を実現すること〈環境触媒〉、(3) その他の環境改善に寄与するナノ化学機能材料の開発である。

6. 選考方針

条件として、まず、

- (1) 上記 5. に述べたねらいに合致する研究計画であり、
- (2) 研究代表者がこのねらいをよく理解していること、
- (3) 計画を遂行するに必要な十分なポテンシャルと実績を持っていること

をあげた。ただし、ここでいう実績とは、当該研究計画に直接関わることでなくても良いが、研究者が伸び盛りで意欲の高いことを求めた。次に、基礎と応用のバランスについて、領域全体でバランスが取れていればよいこととし、基礎主体の研究から、応用への志向性の強いものまで幅広いスペクトルとなるように配慮した。ただし、基礎にあっては、応用あるいは工学研究において鍵となるものを目指すよう期待した。他方、応用志向の研究にあっても、ナノ構造を基礎として、機能を理解し設計するよう求めた。また、領域全体としては、ナノテクノロジーの進歩と環境改善技術のバランスがよくはかれるように配慮した。

採択された課題を全体としてみると、基礎から応用、物質・材料合成から機能設計、グリーン合成から環境保全技術のバランスがとれており、また、代表者をはじめメンバーの意欲はいずれも高く、これらの分野の進展に貢献する大きな成果が期待されるものとなっている。

7. 領域アドバイザー

アドバイザー名	所属	役職	任期
小野 嘉夫	東京工業大学	名誉教授	平成 14 年 8 月 - 現在
堂免 一成	東京大学 大学院工学系研究科	教授	
川合 真紀	東京大学 新領域創成科学研究科	教授	
小倉 克之	千葉大学 工学部 共生応用化学科	教授	
瀬戸山 亨	(株) 三菱化学科学技術研 究センター	ポラスマテリアル研 究所長	
鯉江 泰行	(株) 東ソー/ (財) 相模中 央化学研究所	企画室長/事務局長・ 研究企画部長	
指宿 堯嗣	(社) 産業環境管理協会	常務理事	平成 16 年 8 月 - 現在
志賀 昭信	ルモックス技研	化学コンサルタント	
村橋 俊一	岡山理科大学/大阪大学	客員教授/名誉教授	

人選・依頼にあたっての考え方

- (1) 上記ねらいをよく理解し、その分野で一級の実績があり、かつ、公正な方であること、
- (2) アドバイザー全体として、触媒（均一、不均一系）、材料合成、環境化学技術分野のバランスがとれていること、
- (3) 産業界の現役リーダーおよびベテランをできるだけ多く依頼し、実用の可能性、実用のためのポイント等のアドバイスを早い段階で得られること、
- を考慮して選考依頼した。

8. 研究領域の運営

前記 5. に述べた基本的なねらいに加えて、サイエンスあるいはテクノロジーとして質の高い研究であることが重要であることを、領域全体のシンポジウム、ワークショップの全てに出席し、また、研究チームミーティング等にもできるだけ参加して訴えた。これらのミーティングと研究者グループとの面談をとおしての討論を合わせると、その回数はこれまでに 30 回を超えている。

研究としては、ほぼ全部のチームが高い水準の成果を出しているので、余り心配はしていない。本ナノ領域の運営として留意していることは、以下の通りである。

- ・ 基礎に近い研究にあっては、環境技術に性急に関連付けるよりも、むしろ、工学的基盤となる研究を進めるよう、領域総括の専門である環境触媒上の実用における重要課題を示して、研究者に自ら基盤となりうるテーマを選ぶよう助言している。
- ・ 応用に近いテーマでは、すでに幾つかの成功例が出かかっている。これらについては、その方向を支援すると同時に、ナノテクノロジーとしての科学的基礎付けにも配慮するよう求めている。
- ・ それらの中間にあるチームは、化学としての水準と応用の方向性の健全さに配慮するよう、適宜アドバイザーの支援を得つつ、面談あるいはメールによって助言をしている。
- ・ 新しく参加したチームについては、基本方針の理解を求めつつ、当面自由に研究を進めて貰っている。
- ・ また、所属の変化等があって進捗の遅れている 1 チームについては、関連する分野の研究者に新たに参加を求めて強化を図っている。

9. 研究の経過

全体として基礎、応用のバランスが取れてきて、次第にコーヒーレントな研究領域の進展が見られるようになってきている。平成 18 年度前半が山場であり、この年度が、基礎及び応用において大いに成果があがるものと考えている。

【特筆すべき成果】

1. 応用研究

- ・ 新規ナノ多孔質材料（辰巳）および酸化物ナノクラスター（水野、奥原）を触媒として高効率な触媒反応を実現した。
- ・ カーボンナノファイバーのナノ構造を制御して高機能環境材料と電池材料を開発、実用の目処をたてた（持田）。

2. 基盤的研究

- ・ 数種の新規なナノ多孔質材料の合成に成功した（黒田、稲垣、辰巳、Nature, Science に数報）。キラルな新規物質にエナンチオ選択的な相互作用が見出された。
- ・ 新規ナノクラスター触媒および両親媒性触媒をそれぞれ合成し、広く有機合成に適用できることを明らかにしてグリーンケミストリーのツールとして注目された（魚住、佃）。
- ・ 環境触媒設計のカギとなる貴金属―単体相互作用の直接測定法の開発に目処が立った（田、大西）。

- 3. 寺岡チームは基礎から応用にわたる研究をシステマチックに推進中で、基礎、応用両面で期待される。辻、山元チームは、それぞれ極めて興味深いナノ構造物質を合成し、現在応用の可能性を探索中である。

10. 総合所見

いうまでもなく、環境の維持改善は時代の要請であり、環境負荷が小さく安全な製造・製品技術や環境汚染物質を効率的に除去・無害化する技術など、環境化学技術に寄せられる期待は大きい。本領域は、ナノサイエンス、ナノテクノロジーを基礎として、環境保全・改善に顕著に貢献する「化学プロセス」「化学材料」を実現するための、基礎及び応用の研究を推進するもので、時代の要請にマッチした研究領域である。

5. に述べたねらいのもとに選考された一線級の研究者らは、基礎と応用のバランスがよく取れており、いずれも研究意欲が高く、それぞれに優れた成果をあげているだけでなく、次第に、領域全体としてのコヒーレントな進展を見せはじめ、領域目標にふさわしい基礎が

ら応用にわたる成果が上げつつある。例えば、国外論文発表は、Nature, Science 6 報を含め 528 報に、特許は 71 件にのぼる。昨年末開催した国際シンポジウム (PACIFICHEM2005、ハワイ) は多くの参加者を得て活発な討論があり、本領域のレベルの高さを示すこととなった。

成果は、独創的なナノ細孔材料、斬新なマクロ配位子錯体、固体表面のナノ構造測定のようなナノサイエンスから、高機能を有するナノ触媒・環境材料、ナノカーボン材料などの広い応用分野にわたっている。基礎にあっては、科学としてインパクトがあるだけでなく、応用のための基盤として期待されるものであり、応用にあっては、実用化に近い成果を含んでいる。

以上、本領域の研究は全体としては順調に進みつつある。平成 18 年度には、効果的な共同研究の推進、研究資源の機動的投入、アドバイザーを含む外部からの適切な助言により各研究者のラストスパートを積極的に支援して、一層の成果をあげたいと考えている。

領域評価用資料 添付資料（CRESTタイプ）

研究領域 「環境保全のためのナノ構造制御触媒および新材料の創成」

1. 応募件数・採択件数

H14年度：

応募総数は63件、大学55件、法人8件で、内容を主題で分けると、グリーン有機合成関連24件、環境触媒・材料・システム18件、環境材料合成15件、その他（バイオ、光など）6件であった。提案には、均一系、不均一系触媒のナノレベル制御により有機合成、汚染物質無害化の機能を向上させることを目指したものが比較的多かった。ただし、これらには、ナノ制御のアイデアに独自性が見出せないもの、グリーン化学のキーワードを含むだけで環境改善への貢献が明確に考察されていないものも少なからずあった。選考にあたっては上記二つのキーワードを重視し、書類による一次選考と面接による最終選考により選考した。いずれか一方のキーワードに関してとくに優れている提案は他が現段階で不十分であっても将来性を勘案しながら採択の方向で検討したが、領域全体としてはナノテクノロジーの進歩と環境改善への貢献の二つがバランスよくはかれるように配慮した。しかし、合成効率の向上のみの提案や構造解析のみの提案などは対象としなかった。

H15年度：

応募は22件、うち大学14、高専1、産総研・財団など6、企業1であった。当年度は採択予定数は少なかったため、山元公寿チーム（慶応大）のみが選ばれた。

H16年度：

「環境ナノ触媒」領域としての募集はなかった。

「数学的手法に基づくモデル化・シミュレーションによりナノテクノロジー分野別バーチャルラボの研究の推進に寄与・貢献しうる研究提案」

対象9領域 応募数 55件 採択数 6件

上記のうち「環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製」

対象2領域 応募数 13件 採択数 2件

上記のうち1件、中村振一郎チーム（三菱化学）が本領域に所属することになった。

採択年度	応募件数	採択件数
平成14年度	63	9
平成15年度	22	1
平成16年度	13※	1
採択数 計		11

※ 平成16年度は戦略目標（3目標）毎に公募し、ナノテク分野別バーチャルラボ9領域全体で選考した。

2.主要業績

「環境ナノ触媒」 中間評価 (H14/10-H17/9) 業績集計表 (外部発表・特許件数)

参 加 年 度	研究チーム名	論 文 発 表				口頭発表		特 許			その他	コメント
		国内	国外	NATURE	SCIENCE	国内	国外	国内	国外(PCT)	非 JST 出願	(総説、著書、総合論文など)	
H14/9 参加	魚住チーム	0	27	0	0	62	19	7	0	4	12	
	奥原チーム	7	50	0	0	172	37	0	0	10	11	
	黒田チーム	5	116	3	1	116	61	8	1	4	22	
	辰巳チーム	20	73	1	1	138	40	4	1	2	16	
	田チーム	1	34	0	0	88	42	3	1	1	12	
	辻チーム	5	77	0	0	151	22	3	1	3	8	
	寺岡チーム	5	23	0	0	82	16	1	0	3	0	
	持田チーム	2	34	0	0	106	48	1	1	6	30	
	八嶋チーム	0	8	0	0	21	5	1	0	0	0	
H15 参加	山元チーム	0	37	0	0	99	14	0	0	4	18	
H16 参加	中村チーム	1	3	0	0	17	7	0	0	1	3	(H17/上期)
	合 計	46	482	4	2	1052	311	28	5	38	134	

注) . NATURE, SCIENCE は、国外の内数。 各研究代表者の代表的な論文を1～3報程度抽出し、論文毎に概要を記載する。

研究チームの代表論文リスト

代 表 論 文 リ ス ト

研究チーム名： 魚住チーム

1	著者	UOZUMI, Yasuhiro; NAKAO, Ryu
	論文タイトル	Catalytic Oxidation of Alcohols in Water under Atmospheric Oxygen by Use of an Amphiphilic Resin-Dispersion of Nano-Palladium Catalyst
	ジャーナル	Angewandte Chemie International Edition 2003 , 194
	日本語抄録	両親媒性高分子に Pd ナノ粒子を分散させる新手法を開拓し、また調製した高分子分散ナノ Pd 触媒によって水中でのアルコール酸素酸化を実現した。
2	著者	TAKENAKA, Kazuhiro; MINAKAWA, Maki; UOZUMI, Yasuhiro
	論文タイトル	NCN Pincer Palladium Complexes: Their Preparation via a Ligand Introduction Route and Their Catalytic Properties
	ジャーナル	Journal of the American Chemical Society 2005 , 12273
	日本語抄録	ナノ金属粒子の発生前駆物質と期待される金属内包環状錯体（メタラサイクル）の新規調製法を開発しその錯体形成経路の機構究明を実施するとともに、調製したメタラサイクル（Pd）の利用によって5億回を越える触媒回転（6500回転／秒）の超効率炭素-炭素結合形成を達成した。
3	著者	H. Tsunoyama, H. Sakurai, Y. Negishi, and T. Tsukuda
	論文タイトル	Size-specific catalytic activity of polymer-stabilized gold nanoclusters for aerobic alcohol oxidation in water
	ジャーナル	Journal of the American Chemical Society 2005 , 9374
	日本語抄録	ポリマー保護金クラスターが水中に分散した状態で、分子状酸素を酸化剤としてアルコールを酸化することを見出した。顕著なサイズ依存性が観測された。速度論的測定から反応機構について議論した。

研究チーム名： 奥原チーム

1	著者	Yoshinori Sakamoto, Kyosuke Nakamura, Rie Kushibiki, Yuichi Kamiya, Toshio Okuhara
	論文タイトル	A two-stage catalytic process with Cu-Pd cluster/active carbon and Pd/beta-zeolite for removal of nitrate in water
	ジャーナル	Chemistry Letters

	日本語抄録	Cu-Pd ナノクラスタは、水中の NO ₃ ⁻ を高選択的に NO ₂ ⁻ へと還元する。また、Pd/B ゼオライトは、水中の NO ₂ ⁻ を高選択的に N ₂ と N ₂ O へと還元する。これら 2 つを触媒とする、2 段法プロセスを提案する。この 2 段法プロセスは、100 ppm の NO ₃ ⁻ を N ₂ へと高選択的に還元し、かつ副生する NH ₃ を飲料水の規制値(0.5 ppm)程度に抑制できた。
2	著者	Kyosuke Nakamura, Yasuyuki Yoshida, Ikko Mikami, Toshio Okuhara
	論文タイトル	Cu-Pd/beta-zeoliet as highly selective catalysts for hydrogenation of nitrate with hydrogen to harmless products
	ジャーナル	Chemistry Letters
	日本語抄録	種々のゼオライトを担体として Cu-Pd/ゼオライト触媒を調製し、水中硝酸イオンの還元除去を行った。βゼオライトを担体とした触媒は、硝酸イオンを N ₂ へと高選択的に還元できた。
3	著者	Naoto Horita, Miki Yoshimune, Yuichi Kamiya, Toshio Okuhara
	論文タイトル	Cs ₂ .5H _{0.5} PW ₁₂ O ₄₀ bonded to an amine functionarized SiO ₂ as an excellent water-tolerant solid acid
	ジャーナル	Chemistry Letters
	日本語抄録	Cs ₂ .5H _{0.5} PW ₁₂ O ₄₀ ナノ微粒子を、アミノプロピルシランで修飾した SiO ₂ 表面に固定化した、新規な材料を合成した。この触媒材料は、Cs ₂ .5H _{0.5} PW ₁₂ O ₄₀ と同等の水中酸触媒活性を示すとともに、水に不溶で、濾過によって触媒回収もできる優れた水中固体酸であった。
4	著者	Y. Nakagawa, K. Kamata, M. Kotani, K. Yamaguchi, N. Mizuno
	論文タイトル	Polyoxovanadometalate-Catalyzed Selective Epoxidation of Alkenes with Hydrogen Peroxide
	ジャーナル	Angew. Chem. Int. Ed., 44, 5136 (2005).
	日本語抄録	二核バナジウム置換ポリオキソメタレート触媒の、過酸化水素を酸化剤とするオレフィンエポキシ化反応に対する液相均一系での触媒活性を検討し、この触媒が高活性、高過酸化水素有効利用率、特異な反応選択性を示すことを明らかにした。
5	著者	R. Kawamoto, S. Uchida, N. Mizuno
	論文タイトル	Amphiphilic Guest Sorption of K ₂ [Cr ₃ O(OOCC ₂ H ₅) ₆ (H ₂ O) ₃] ₂ [α-SiW ₁₂ O ₄₀] Ionic Crystal
	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc., 127, 10560 (2005)
	日本語抄録	ポリオキソメタレートを構成要素とする多孔性結晶固体について、対カチオンであるクロム三核錯体にアルキル置換基を導入した結果、この多孔性結晶固体が両親媒性を示し、水よりも極性有機分子を多量に収着することを明らかにした。
6	著者	M. Matsushita, K. Kamata, K. Yamaguchi, N. Mizuno
	論文タイトル	Heterogeneously Catalyzed Aerobic Oxidative Biaryl Coupling of 2-Naphthols and Substituted Phenols in Water

	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc., 127, 6632 (2005)
	日本語抄録	アルミナ担持ルテニウム触媒が、分子状酸素を酸化剤とする水中に於けるフェノール類の酸化的カップリング反応に高い活性を示すことを見出し、その反応機構を詳細に解明した。

研究チーム名： 黒田チーム

1	著者	H. Miyata, T. Suzuki, A. Fukuoka, T. Sawada, M. Watanabe, T. Noma, K. Takada, T. Mukaide and K. Kuroda
	論文タイトル	Silica Films with a Single-Crystalline Mesoporous Structure
	ジャーナル	Nature Materials, 3, 651-656 (2004).
	日本語抄録	ポリイミドでコーティングシラビング処理を施した基板上に 3 次元構造を有するメソ構造体薄膜を形成させることで、ケージ状のメソ細孔がセンチメートルスケールで単結晶様に配列したシリカ薄膜の合成に世界で初めて成功した。
2	著者	A. Shimojima, Z. Liu, T. Ohsuna, O. Terasaki, K. Kuroda
	論文タイトル	Self-Assembly of Designed Siloxane Oligomers with Alkyl Chains into Silica-Based Hybrid Mesostructures
	ジャーナル	Journal of the American Chemical Society, 127, 14108-14116 (2005).
	日本語抄録	分子設計されたシロキサンオリゴマーの自己組織化によって、界面活性剤などの鋳型を用いずに、様々なシリカメソ構造体が見いだされた。また、焼成による多孔体化にも成功した。
3	著者	P. L. Dhepe, M. Ohashi, S. Inagaki, M. Ichikawa, A. Fukuoka
	論文タイトル	Hydrolysis of Sugars Catalyzed by Water-Tolerant Sulfonated Mesoporous Silicas
	ジャーナル	Catalysis Letters, 102, 163-169 (2005).
	日本語抄録	ショ糖とデンプンの加水分解反応において、スルホン化メソポーラスシリカは水中で使える固体酸触媒となり、既存固体酸よりも高活性を示すことを見いだした。
4	著者	M. P. Kapoor, S. Inagaki, S. Ikeda, K. Kakiuchi, M. Suda, T. Shimada
	論文タイトル	An Alternate Route for the Synthesis of Hybrid Mesoporous Organosilica with Crystal-like Pore Walls from Allylorganosilane Precursors
	ジャーナル	Journal of the American Chemical Society, 127, 8174-8178 (2005).
	日本語抄録	アリル基を有する有機橋かけシランを前駆物質とすることによって、アルコキシドを用いずに結晶性の骨格を有するハイブリッドメソポーラス物質を得る新規な合成ルートを開発した。
5	著者	R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, Y. Kubota, R. V. Belosludov, T. C. Kobayashi, H. Sakamoto, T. Chiba, M. Takata, Y. Kawazoe and Y. Mita

	論文タイトル	Highly Controlled Acetylene Accommodation in a Metal-Organic Microporous Material
	ジャーナル	Nature, 436, 238-241 (2005).
	日本語抄録	アセチレンを極めて選択性高く吸着する多孔性物質でを発見した。アセチレンは、高温の炎を作るための燃料としてよく使われかつ、化学工業やエレクトロニクス産業でも広範囲に利用されている。しかしながら、アセチレンは圧縮しすぎると爆発するため、大量に貯蔵するのがむずかしいものである。今回の多孔性の有機金属化合物を使うことにより、性質が非常に似ているアセチレンと二酸化炭素を効率よく分離できる可能性があることを発見した。

研究チーム名：辰巳チーム

1	著者	Carloa Rodriguez-Abreu, Teruki Izawa, Kenji Aramaki, Arturo Lopez-Quitela, K. Sakamoto, H. Kunieda
	論文タイトル	Structural Evolution during the Synthesis of Mesoporous Silica in Fatty Acid/Aminoalkoxysilane/Water/Systems
	ジャーナル	<i>J. Phys. Chem. B</i> , 108 , 20083-20089 (2004).
	日本語抄録	ラウリン酸にアミノプロピルトetraエトキシシラン (APTES) を加えた水溶液系で形成されるラメラ液晶にテトラエチルオルトシリケート (TEOS) を加えた時のシリカの縮合に伴う構造変化を小角X線散乱測定により調べた。その結果、反応前から存在する界面活性剤の形成するラメラ液晶から界面活性剤-シリカ複合体へ逐次的に構造変換が起こることが分かった。
2	著者	Shunai Che, Alfonso E. Garcia-Bennett, Toshiyuki Yokoi, Kazutami Sakamoto, Hironobu Kunieda, Osamu Terasaki, Takashi Tatsumi
	論文タイトル	Mesoporous Silica of Novel Structures with Periodic Modulations Synthesized by Anionic Surfactant Templating Route
	ジャーナル	<i>Nature Materials</i> , 2 , 801-805 (2003).
	日本語抄録	アニオン性界面活性剤を用いて構造規則性の高いメソポーラスシリカ AMS-1 から AMS-9までの合成に成功した。特に、アミノ酸由来のキラルなアニオン性界面活性剤を用いて合成した AMS では電子顕微鏡観察により規則的な“相の変調”、つまり、すなわち超格子の生成が観察された。
3	著者	Shunai Che, Zheng Liu, Tetsu Ohsuna, Kazutami Sakamoto, Osamu Terasaki, Takashi Tatsumi
	論文タイトル	Synthesis and Characterization of Chiral Mesoporous Silica
	ジャーナル	<i>Nature</i> , 429 , 281-284 (2004).
	日本語抄録	アミノ酸をアシル化したアニオン性界面活性剤を界面活性剤とし、第4級アンモニウム塩を含んだアルコキシシラン類と一般的なテトラエトキシシランの両方をケイ素源とすることで、キラルな規則性メソ構造シリカを合成することに初めて成功した。シリカは六角柱のロッドがねじれた形態をしており、その内部には、縦方向に約 2 nm 程の均一な細孔が蜂の巣状に規則的に配列し、外側と同じらせんを描いていることが明らかとなった。らせんの向きは左まき:右まきが 75:25 であった。

研究チーム名：田チーム

1	著者	K. Ijima, Y. Koike, W.-J. Chun, Y. Saito, Y. Tanizawa, T. Shido, Y. Iwasawa, M. Nomura, and K. Asakura
---	----	--

	論文タイトル	A local structure of low coverage Ni species on the alpha-Al ₂ O ₃ (0001) surface-A polarization dependent EXAFS study
	ジャーナル	Chemical Physics Letters, 384(1-3): p. 134-138(2004)
	日本語抄録	偏光全反射蛍光 XAFS(Polarization dependent Total-Reflection Fluorescence XAFS; PTRF-XAFS)により Ni 単原子の Al ₂ O ₃ (0001)での吸着構造を検討した。その結果、両表面において Ni 原子は表面酸素と結合を作り、吸着サイトが担体酸化物の結晶構造を考えた時の仮想カチオンサイトに相当することが分かった。
2	著者	Suzuki, S., Y. Koike, K. Fujikawa, W.-J. Chun, M. Nomura and K. Asakura
	論文タイトル	A possibility of XANAM (X-ray aided non-contact atomic force microscopy)
	ジャーナル	Chemistry Letters, 2004. 33(5): p. 636-637.
	日本語抄録	Au L3 吸収端付近の X 線エネルギーをシリコン表面に形成した Au アイランドに照査しながら、非接触原子間力顕微鏡(Nc-AFM)のカンチレバーの周波数変動を測定した。その結果、Au L3 吸収端にて、明確な周波数変動によるピークが得られた。これにより、エネルギー可変 X 線と Nc-AFM を組み合わせたこれまでに類のない新たなナノレベル化学マッピング手法が展開できる。
3	著者	A. Sasahara, H. Uetsuka and H. Onishi
	論文タイトル	Individual Na Adatoms on TiO ₂ (110)-(1x1) Surface Observed by Kelvin Probe Force Microscope
	ジャーナル	Japanese Journal of Applied Physics, 43, p. 4647-4650, 2004.
	日本語抄録	TiO ₂ (110)単結晶面に蒸着した Na 単一原子から基板への電荷移動による仕事関数変化をケルビンプローブ顕微鏡を使って計測した。予想どおり Na→TiO ₂ 方向の電子移動を検出して、単一原子スケールの位置分解能でモデル触媒表面の電荷移動を計測する目途がたった。これまで XPS による結合エネルギーシフトから多数粒子の平均として求めていた電荷移動量を、単一粒子ごとに個別計測する評価技術として確立することをねらう。

研究チーム名： 辻 チーム

1	著者	H. Aoyama, M. Tokunaga, J. Kiyosu, T. Iwasawa, Y. Obora, Y. Tsuji
	論文タイトル	Kinetic Resolution of Axially Chiral 2,2'-Dihydroxy-1,1'-biaryls by Palladium Catalyzed Alcoholysis
	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc, 127 10474-10475 (2005).
	日本語抄録	軸不斉アリール化合物を光学活性ナノサイズジアミン配位子-パラジウム触媒存在下、ビニルエーテル部位のアルコール分解による速度論的光学分割により高効率かつ高選択的に合成する方法を見いだした。本結果はナノ触媒環境が不斉触媒反応にも極めて重要であることを示すものである。
2	著者	T. Fujihara, Y. Obora, M. Tokunaga, H. Sato and Y. Tsuji

	論文タイトル	Dendrimer N-Heterocyclic Carbene Complexes with Rhodium(I) at the Core
	ジャーナル	Chem. Commun. 4526-4528 (2005).
	日本語抄録	デンドリマー部位を有するN-ヘテロ環カルベン-ロジウム(I)触媒を合成した。この触媒をケトン類のヒドロシリル化反応に用いたところデンドリマーの世代が上がるほど触媒活性が高いという極めて興味ある結果を得た。本結果は注目論文として、Chem. Comm.誌掲載号の表紙を飾った。
4	著者	Shoken Nagao, Hidetake seino, Masanobu Hidai, and Yasushi Mizobe
	論文タイトル	Preparation of Chalcogenolato-Bridged Dinuclear Tp*Rh-Cp*Ru Complexes and Binding of Dioxygen to Their Ru Sites
	ジャーナル	Dalton Trans., 2005, 3166-3172
	日本語抄録	チオラート、セレンラート、およびテルロラート配位子で架橋されたロジウム-ルテニウム新規二核錯体を合成し、そのルテニウムサイト上で酸素分子が容易に配位活性化されることを明らかにした。本論文は、本誌の hot article に選ばれた。

研究チーム名: 寺岡チーム

1	著者	湯浅 雅賀, 酒井 剛, 島ノ江 憲剛, 寺岡 靖剛, 山添 昇
	論文タイトル	Exploration of Reverse Micelle Synthesis of Carbon-Supported LaMnO ₃
	ジャーナル	Journal of The Electrochemical Society, 151 (9) A1477-A1482 (2004)
	日本語抄録	逆ミセル法によって LaMnO ₃ ナノ粒子を調製する際に使用する最適な界面活性剤の探索や調製温度、界面活性剤添加量による粒子径の制御などの検討を行った。
2	著者	今泉 心, 島ノ江 憲剛, 寺岡 靖剛, 三浦 則夫, 山添 昇
	論文タイトル	Preparation of Carbon-Supported Perovskite-Type Oides LaMn _{1-y} FeyO ₃ Based on Reverse Hohogeneous Method
	ジャーナル	Journal of The Electrochemical Society, 151 (10) A1559-A1564 (2004)
	日本語抄録	金属イオン水溶液を強アルカリに滴下することで急激な pH 変化によって LaMn _{1-y} FeyO ₃ ナノ粒子を調製し、Fe 置換量と LaMn _{1-y} FeyO ₃ の粒子径および酸素還元活性の関係について調べた。
3	著者	湯浅 雅賀, 酒井 剛, 島ノ江 憲剛, 寺岡 靖剛, 山添 昇
	論文タイトル	Reverse Micelle-Based Preparation of Carbon-Supported La _{1-x} SrxMn _{1-y} FeyO ₃ for Oxygen Reduction Electrode
	ジャーナル	Journal of The Electrochemical Society, 151 (10) A1690-A1695 (2004)
	日本語抄録	逆ミセル法によって La _{1-x} SrxMn _{1-y} FeyO ₃ を調製し、Sr および Fe の置換限界や Sr および Fe の置換量と酸素還元活性との関係を調べた。

研究チーム名： 持田チーム

1	著者	S. Lim, S.H. Yoon, I. Mochida, J.H. Chi.
	論文タイトル	Surface modification of carbon nanofiber with high degree of graphitization
	ジャーナル	J. Phys. Chem. B 2004, 108, 1533-1536
	日本語抄録	CNF の機械的・化学的処理を行い、その表面性質を改質する事によって黒鉛化度が変化することを発見し、その機構を解明した。
2	著者	Seongyop Lim, Seong-Ho Yoon, Yoshiki Shimizu, Hangi Jung, Isao Mochida
	論文タイトル	Surface Control of Activated Carbon Fiber by Growth of Carbon Nanofiber
	ジャーナル	Langmuir
	日本語抄録	CNF の表面修飾とハンドリング性を上げるために、活性炭素繊維との複合体を調製した。触媒担持後適切な酸化ガス化によって表面積の大きな損害なしで CNF-ACF の複合体が形成できた。CNF の ACF 上での成長機構をモデル化した。
3	著者	Seong-Ho Yoon, Seongyop Lim, Seong-hwa Hong, Isao Mochida, Bei An, Kiyoshi Yokogawa
	論文タイトル	Carbon nanorod as a structural unit of carbon nanofibers
	ジャーナル	Carbon 42 (2004) 3087-3095
	日本語抄録	炭素ナノ素 (Carbon nanorod) を CNF の単位構造として定義し、単位構造に基づいた 3 次元構造モデルを提案した。

研究チーム名： 八嶋チーム

1	著者	K. Tabata, T. Kawabe, Y. Yamaguchi, E. Suzuki, T. Yashima
	論文タイトル	Selective oxidation of methane over $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{O}_2$
	ジャーナル	Journal of Catalysis 231 (2005) 430-437
	日本語抄録	ゾルゲル法で作製した $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{O}_2$ ($x=0-0.5$) を触媒とし、メタンの選択酸化反応を行った。最も低温活性の高かった $\text{Sn}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}\text{O}_2$ のメタンの酸化活性は 653 K から上昇した。HCHO は同様に 653 K 辺りから現れ、853 K でピークを示した。このときの選択率は 14% であった。
2	著者	Y. Yamaguchi, K. Tabata, T. Yashima
	論文タイトル	First-principles calculations on the surface electronic and reactive properties of M/SnO_2 ($\text{M}=\text{Ge}, \text{Mn}$)
	ジャーナル	Journal of Molecular Structure; THEOCHEM 714(2005) 221-233.
	日本語抄録	M/SnO_2 ($\text{M}=\text{Ge}, \text{Mn}$) の (110) 表面の電子状態を第 1 原理で計算した。ブリッジング酸素と NO との反応性の違いを明らかにした。
3	著者	R. Kikuchi, Y. Iwasa, H. Yamamoto, T. Takeguchi, and K. Eguchi
	論文タイトル	Partial Oxidation of CH_4 and C_3H_8 over Hexaaluminate-Type Oxides
	ジャーナル	Appl. Catal. A: Gen., 281 61-67 (2005)

	日本語抄録	アルコキシド法を用いてヘキサアルミネート触媒($\text{BaM}_x\text{Al}_{12-x}\text{O}_{19-\alpha}$ 、 $\text{M}=\text{Ru}, \text{Pd}, \text{Pt}, \text{Ni}$)を作製し、 CH_4 および C_3H_8 の部分酸化反応活性を評価した。
--	-------	--

研究チーム名： 山元 公寿

1	著者	Reina Nakajima, Masanori Tsuruta, Masayoshi Higuchi, and Kimihisa Yamamoto
	論文タイトル	Fine Control of the Release and Encapsulation of Fe Ions in Dendrimers through Ferritin-like Redox Switching
	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc.
	日本語抄録	フェリチン蛋白の金属貯蔵放出機能を持つ新物質発見
2	著者	Norifusa Satoh, Toshio Nakashima, and Kimihisa Yamamoto
	論文タイトル	Metal-assembling Dendrimers with a Triarylamine Core and their Application to a Dye-Sensitized Solar Cell
	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc.
	日本語抄録	デンドリマー(精密金属集積高分子)を用いた初めての太陽電池を実現
3	著者	Takane Imaoka, Reiko Tanaka, Sachiko Arimoto, Makoto Sakai, Masaaki Fujii and Kimihisa Yamamoto
	論文タイトル	Probing Stepwise Complexation in Phenylazomethine Dendrimers by a Metallo-Porphyrin Core
	ジャーナル	J. Am. Chem. Soc.
	日本語抄録	精密金属集積機能を物理化学手法を駆使し実証

3. 受賞等 (集計日：2006/1/13)

N0	受賞者名	賞の名称	授与者名	受賞日 (時期)
1	辰巳 敬	文部科学大臣表彰 科学技術省	文部科学大臣	H17/3
2	辰巳 敬	触媒学会賞	触媒学会	H15/3
3	稲垣 伸二	文部科学大臣表彰 科学技術省	文部科学大臣	H17/3
4	稲垣 伸二	日本化学会学術賞	日本化学会	H17/3
5	山添 昇	紫綬褒章	日本国政府	H15/3
6	山田 陽一	日本薬学会 研究奨励賞	日本薬学会	H17/3
7	山元 公寿	日本高分子学会 Wiley 賞	高分子学会	H17/9
8	大西 洋	矢崎学術奨励賞	矢崎科学技術記念財団	H16/3

相当顕著なものに絞って、研究領域全体から選択する。
集計日、「平成15年〇月×日現在」と日付を記載する。

4. シンポジウム等

研究領域主催のシンポジウムについて表にする。

(H18年1月31日 現在)

{環境ナノ触媒} 領域主催のシンポジウム、ワークショップなど

NO	会議の名称	時 期	場 所	発 表	目的、参加者など	memo
1	公開シンポジウム 「環境ナノ触媒」	2003/12/5	東 京 コクヨホール	口頭発表 10、 ポスター40 件	参加者：180 人 キックオフ	領域主催
2	合同ワークショップ 「環境ナノ触媒」	2004/6/25	札 幌 JST 北海道プラ ザ	奥原（&水野）、辻、田 、黒 田、寺岡	参加者：60 人 特別講演：堂免一成	領域主催
3	公開シンポジウム 「環境ナノ触媒」	2004/11/26	東 京 コクヨホール	特別講演：小野嘉夫、 口頭発表 9 件、 ポスター 41 件	参加者:320 人、企業の研究者が多数参加（約 120 人）。	領域主催
4	合同ワークショップ 「環境ナノ触媒」	2005/6 /17,18	福岡 JST 活用プラザ	持田、魚住 、辰巳、山元、 黒田、中村	参加者：70 人、 特別講演：瀬戸山亨	領域主催
5	PACIFICHEM2005 Nano-structured Catalysys for Environmental Conservation	2005/12 /16,17,18	ハワイ、ホノル ル、Hilton Hawaiian Village	口頭発表（40 件、内 JST13 件） ポスタ（97 件、内 JST 60 件）	参加者：約 300 人、 PACIFICHEM2005 の Symposium #55 として開催 （JST 後援）Pacific Basin Countries の研究者との交 流。Co-organizer；Prof.M.Misono, Prof.Kung, Prof.Moon、Dr.S.Matsuda.	領域主催 （JST 後援）
6	Mesoporous Crystals and Related nano-structured Materials	2004/6/1-2	スウェーデン スウェーデン科 学アカデミー	招待講演（11 件、内黒田、 寺崎、稲垣の発表を含む）ポ スター25 件	参加者:150 人（JST 後援） Organizer:寺崎治 世 界各国より若手研究者が多数参加 6/3-5 若手研究者向 けワークショップ開催	黒田チーム
7	Creation of Nanoscale Designed Surfaces and their Electronic and Catalytic Properties	2005/9/24, 25	慶應義塾大学、三 田キャンパス	口頭発表 12 件、ポスタ 16 件	領域横断シンポジウム（中嶋領域と共同、JST Joint International Symposium ） 参加者:約50人	田チーム

8	3 Countries Workshop “Carbon Material to Save The Earth” (1)	2003/10/13-15	Tsinghua Univ. Beijing, China	口頭発表 27、 ポスター17 件	参加者:360 人 中国、日本の企業から参加者多数 日中共同主催	持田チーム
9	3 Countries Workshop“Carbon Material to Save The Earth” (2)	2004/9/6-9	Hotel KijimaBeppu, Japan	口頭発表 19(特別講演 6 件)、 ポスター25 件	参加者:62 人九大 (JST)主催	
10	3 Countries Workshop “Carbon Material to Save The Earth” (3)	2005/6/29 – 7/1	Hongin Hotel Taejon, Korea	口頭発表 19 (特別講演 6 件)、 ポスター27 件	参加者:130 人 韓国(エネルギー研究所) – 九大 (JST) – 清華大学共同主催	
11	The 2nd Japan–China Workshop on Environmental Catalysis and Eco-materials	2005/10 /24,25	福岡, 福岡 リーセントホテル	招待講演 2 件, 口頭発表 28 件, ポスター発表 17 件	参加者:46 人(中国側 28 人, 日本側 18 人) 招待講演:御園生誠, 山添昇	寺岡チーム

5. その他の重要事項（新聞・雑誌・テレビ等）研究領域をアピールする視点より、研究領域全体から相当顕著な案件があれば記載する。

新聞発表、TV，雑誌などの主要報道リスト

1	発表の名称	水中に分散した金クラスターのサイズ特異的触媒作用の発見
	発表者（研究G）	佃達哉 【魚住チーム】
	発表の内容	化学的に調製した金クラスターを水中に分散し、さまざまなアルコール分子の酸化過程を追跡した。その結果、1.3nm の金クラスターは室温・空気雰囲気下でアルコールを効率良く酸化するが、サイズを 10nm 程度まで大きくすると活性が失われることを初めて見いだした。微小金クラスター表面では酸素分子が吸着し、これが活性種として働きアルコール類を酸化するものと結論した。さらに、1.3nm 金クラスターは、室温下ではパラジウムなどの遷移金属クラスターよりも高い活性を示すことがわかった。
	報道機関と発表日	中日新聞(7月6日朝刊)、毎日新聞(7月6日朝刊)
2	発表の名称	貴金属・有機・メソ多孔体 複合ナノ触媒を開発
	発表者（研究G）	犬丸啓（広島大サブグループ） 【奥原チーム】
	発表の内容	メソ多孔体のナノ空間に貴金属微粒子を導入、さらに空間内壁に有機基を導入して反応場を制御した触媒を開発した。貴金属がパラジウム、有機基がクロロプロピルシランの複合ナノ触媒は、 α,β -不飽和アルデヒドの水素化反応に対して、炭素-酸素二重結合のみを選択的に水素化した。
	報道機関と発表日	化学工業日報、2005年9月16日
3	発表の名称	塗料や薬品の間原料新触媒で効率合成
	発表者（研究G）	水野 哲孝、日本触媒 【奥原チーム】
	発表の内容	過酸化水素を用いたオレフィンのエポキシ化触媒開発
	報道機関と発表日	日経産業新聞（10面）、2003年5月9日
4	発表の名称	アセチレンの安定化に成功
	発表者（研究G）	北川進 【黒田チーム】
	発表の内容	ナノサイズの穴を持つ物質にアセチレン分子を規則的に配列し爆発性のアセチレンガスを高密度で安定化させることに京都大学大学院工学研究科の北川教授らのグループが成功した
	報道機関と発表日	産経新聞 2005年7月14日、日経産業新聞 2005/7/14、京都新聞、NHK 総合TV など
5	発表の名称	ナノテク便り 多孔質のシリカ薄膜作製

	発表者（研究G）	黒田一幸 【黒田チーム】
	発表の内容	キヤノン先端融合研究所は早稲田大学理工学部の黒田一幸教授（応化）らと共同で、大きさが約8ナノ（ナノは10億分の1）メートルの均一の細孔が規則正しく立体的に並んだ二酸化ケイ素（シリカ）薄膜を作製した。
	報道機関と発表日	日経産業新聞 2004年11月29日、日経ナノビジネス 2004/11/22
6	発表の名称	新聞記事
	発表者（研究G）	辰巳 敬 【辰巳チーム】
	発表の内容	ゼオライトの構造の改良により有機物をよく吸収するゼオライトを開発した。ゼオライトに親油性を与え、水の存在下でも形状選択的な炭化水素吸着能を示した。より多量の有害物質を吸着する材料となった。
	報道機関と発表日	日本経済新聞 2003/4/18、日経産業新聞、日本工業新聞、化学工業日報など
7	発表の名称	新聞記事
	発表者（研究G）	辰巳 敬 【辰巳チーム】
	発表の内容	キラルな分子の一方だけを選んで合成できる無機触媒の開発に王手をかけた、細長い孔がらせんを描きながら無数に通っているシリカでそのねじれの向きによってキラルな分子の一方を選択的に導く。
	報道機関と発表日	日刊工業新聞 2004/5/20、毎日新聞、化学工業日報など
8	発表の名称	原子レベルで表面を観察
	発表者（研究G）	大西洋（大西 G） 【田チーム】
	発表の内容	界面選択的な振動分光法として知られる和周波分光法の実効感度を100倍以上増強する手法を開発した
	報道機関と発表日	日経産業新聞 2004年3月24日
9	発表の名称	ナノサイズのパラジウム分子触媒を開発
	発表者（研究G）	辻 康之 【辻チーム】
	発表の内容	ナノサイズパラジウム分子触媒の開発により、カルボニル化合物を穏和な条件下で高収率で合成することに成功した。多量の重金属を使わずに、環境保全に寄与できる。
	報道機関と発表日	日経ナノビジネス（2005年5月16日号）
10	発表の名称	デンドリマー
	発表者（研究G）	山元 公寿 【山元チーム】
	発表の内容	次世代材料の新しい新素材：デンドリマーを紹介
	報道機関と発表日	朝日新聞 2004年10月30日

6. その他の添付資料 研究領域独自の資料等があれば、リストアップした上で添付する。

(1) 添付資料 1.

公開シンポジウム (2003/12/5) の発表題目

(2) 添付資料 2.

公開シンポジウム (2004/11/26) の発表題目

(3) 添付資料 3.

PACIFICHEM2005 シンポジウム #55 (2005/12/16-18) の口頭発表スケジュール

(巻末に添付)

7 研究課題別中間評価結果

7-1 研究課題名: 「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創成」

7-1-2 研究代表者: 魚住泰広(分子科学研究所、教授)

7-1-3 研究概要

(1) 高分子ゲル相担持疎水性ナノ反応場を利用した遷移金属触媒反応

従来「heterogeneous switching」にとどまってきた分子性触媒の固定化に対し、高分子ゲル担体の特性を新たなアドバンテージとして付与した高機能固定化触媒創製を展開する。特に両親媒性高分子ゲル固相上に疎水性遷移金属錯体を固定化することでナノサイズ疎水性反応ポケットを発生させ、基質との疎水性相互作用を駆動力とした反応加速効果を獲得し高度な触媒活性を示す水中機能性固定化触媒を開拓する。

(2) 水中での高選択的触媒反応

特に E-factor 顕著に高い立体選択的変換プロセスを標的とする。基本的には(1)で展開・開発した水中機能触媒の不斉化を計画している。目標としては、炭素-炭素結合形成反応としての水中不均一不斉触媒プロセスの実現を目指す。立体選択的炭素-水素結合形成では例えば野依触媒など従来の大きな蓄積があるが、炭素-炭素結合形成は不斉工程として未成熟な反応形式である。

7-1-4 中間評価結果

7-1-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

- 高分子ゲル担持による不均一水中触媒は、既に大きなブレイクスルーを達成した段階で CREST 研究を開始し、本研究期間においては着実に成熟度・完成度をましている。本研究期間での特筆すべき成果はエンイン基質の環化異性化反応の開発と、それを足場としたヒドリンダン骨格(テルペン類などの合成素子)の極めてグリーン度の高い合成である。他にアリル位置置換反応、ヘック反応、カルボニル化反応、交差カップリング(鈴木反応、菌頭反応)(以上 Pd 触媒)、アルキン環化三量化、ヒドロホルミル化、マイケル付加(以上 Rh 触媒)が水中で固定化触媒によって円滑に進行することを見出したのは高く評価できる。
- 本触媒系が有機溶媒中の反応と比較して、濃度効果だけでは説明できないケースがあると思われるので、今後この点を追求するとさらなる発展が見込める。

7-1-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

- ・ 本研究チームは、活性の高いパラジウム触媒系を構築し、この触媒系が水層の有機合成を一般的に行えることを明確にするとともに、不斉合成反応にも展開できることを示しており、科学的な貢献は高い。
- ・ 今後は、基礎研究からこの反応系を実用的利用に発展されることが望まれる。そのためには、この触媒系が他よりすぐれている反応を見出すことが重要であろう。

7-1-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 今後は、水中の反応の反応速度が速いという特性を活用する反応への更なる展開や、酸化付加の速度をあげるにより塩化アリール体など通常のパラジウム触媒反応が困難な課題の解決を期待したい。
- ・ 本研究チームは活発に研究を展開しているので、今後は特に環境改善にインパクトのある反応系の創出をお願いする。

7-1-4-4 戦略目標に向けての展望

- ・ 本研究は、「ナノ反応場」での触媒作用や「ナノ金属粒子・ナノクラスター」を利用した触媒反応を開拓し、「環境」に調和した水中での新触媒活性を求めるものである。また E-Factor の大きな精密不斉合成や難処理廃棄物を排出するアルコール酸化に取り組むものであり、「環境」「ナノ」をずばり中心に据えた研究推進といえる。
- ・ 本触媒系による水中での化学反応が、有機溶媒を使用しないから環境に調和したものであるとはアприオリには言い切れないので、分離、精製などを含めて合成プロセス全体としての環境負荷（エネルギー、出発原料、副生物/廃棄物などのリスクなど）を考察すべきであろう。この点を踏まえて、実用化が有望なプロセスを選択することが重要である。

7-1-4-5 総合的評価

- ・ 有機合成に汎用性のある新規な高機能ナノ触媒系を創出している点は、科学的に大きな貢献であり高く評価できる。
- ・ 水中反応のメリットを更に追及して、困難な反応への展開を期待する。
- ・ 水溶媒、超臨界は必ずしも環境に優しいわけではないので、本当に環境改善にインパクトのあるグリーン反応を創出してください。

7-2-1 研究課題名： グリーン化学合成のための酸化物クラスター高機能触媒の開発

7-2-2 研究代表者： 奥原 敏夫 （北海道大学大学院、地球環境科学研究院、教授）

7-2-3 研究概要：

【酸触媒グループ】 本研究グループは、廃棄物を出さない「先進的グリーン化学プロセス」の創成と「硝酸汚染地下水の無害化技術」の確立を当初目標に設定した。いずれも、高機能触媒の開発が鍵となる。これを実現可能な材料として、金属酸化物クラスター、金属ナノクラスター、酸化物ナノ微粒子がある。その利点は、(1)原子レベルで基本単位的设计ができる、(2)基本単位の3次元集積（ナノ構造）構造や、(3)ナノ構造体表面やナノ細孔内反応場の疎水性を

制御することで、触媒性能の大幅な向上や、全く新しい触媒機能の発現が期待できることである。金属酸化物クラスターとして、ヘテロポリ酸に着目した。ヘテロポリ酸は分子性の酸化物クラスターであり、Keggin 構造や Dawson 構造という基本構造を保持したまま構成成分を交換することで、基本構造を設計できる。

【酸化触媒グループ】 本研究グループは、分子状酸素及び過酸化水素を酸化剤とした、有害な副生成物を与えることのない高効率な炭化水素選択酸化反応プロセスの基盤となる触媒の開発を目的とする。分子性金属酸化物クラスターにおける触媒活性点構造を原子レベルで制御した上で、それらを 3 次元空間に規則的に固定化・自己組織化配列すること（サブナノ領域からナノスケールまでの構造制御）により、触媒活性点の近傍に基質・酸化剤の活性化及び反応場となる親水性・疎水性空間を構築した新規な固体酸化触媒の開発を行う。具体的な達成目標は以下の通りである。

① 1nm 程度までの分子サイズを有するサブナノサイズの金属酸化物クラスター分子であるポリオキシメタレート触媒における触媒活性点構造の精密制御と、分子状酸素や過酸化水素を酸化剤とする選択酸化反応系の構築。

② ポリオキシメタレートの静電的自己組織化能に基づいた、ナノサイズの細孔を有する新規多孔性ポリオキシメタレート結晶固体の構築と、その吸着特性・触媒特性を活用した環境材料及び分子状酸素や過酸化水素を酸化剤とする選択酸化反応触媒系の開発。

7-2-4 中間評価結果

7-2-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み（4-2. 研究成果の現状と今後の見込み）

【酸化触媒グループ】

- ・ 酸化物クラスター触媒としてヘテロポリ酸に注目し、①S を中心元素とするヘテロポリ酸の合成とその酸性度評価、②SiO₂ へ担持した薄層あるいはナノ粒子ヘテロポリ酸の水中酸触媒としての有効性、③疎水ナノ空間の構築や多孔性のニオブ酸化物の合成と触媒反応への適用など、グループ全体として水中酸触媒反応について基礎研究ベースで進捗は順調である。今後、有望な合成プロセスの選択と企業と連携した研究体制の構築に期待したい。
- ・ 金属クラスター触媒による硝酸一亜硝酸イオンの処理は、実用化を強く意識した研究であり、二段法によって NH₃ 生成を抑制した処理が可能なことを示したのは評価できる。
- ・ 今後、既存の処理法と比較して、本処理法の優位性を具体的に示すことが求められる。触媒の耐久性の実地下水による評価も必要と思われる。
- ・ 具体的には、次のような研究に進展が見られた。

[1] 固体酸触媒の基本ユニットの分子設計： Dawson 型の H₄S₂W₁₈O₆₂ の合成

[2] 薄層ヘテロポリ酸による低環境負荷化学合成： SiO₂ 担体上にヘテロポリ酸を薄層担持

[3] ヘテロポリ酸塩ナノ微粒子ハイブリッド水中固体酸： Cs_{2.5}H_{0.5}PW₁₂O₄₀ ナノ微粒子を、3-アミノプロピルトリエトキシシランで修飾した SiO₂ 表面に固定化した

[4] 硝酸汚染地下水の無害化技術： Pd-Cu ナノクラスター触媒による 2 段階プロセス

[5] 硝酸汚染地下水の無害化技術： Cu-Pd 触媒による 1 段階プロセス Cu-Pd/活性炭の表面に撥水化を施すことで、低水素分圧での高活性かつ水素を非常に有効に利用できる。

【酸化触媒グループ】

- ・ ポリオキシメタノールを出発物質としてナノ構造を制御したナノ酸化触媒系を構築する手法を開発したこと、これらの触媒が過酸化水素による種々のオレフィンのエポキシ化反

応を効率的に進行させることを示したことは高く評価できる。

- ・ 分子状酸素によるアルコール等の酸化反応に有効な触媒を見いだしたことは、真の意味での環境調和型化学プロセスにつながるものであり、今後もさらに力を入れてほしい。
- ・ 具体的には、以下の研究で進展が見られた。
 - ① ポリオキシメタレート触媒：過酸化水素を酸化剤とするアルケンエポキシ化反応触媒について、活性点を構成する金属核種及びその配列、クラスター分子の全体構造に応じて特異な反応性が発現することを明らかにした。
 - ② ポリオキシメタレートの静電的自己組織化能を利用した、ナノサイズの細孔を有する新規多孔性ポリオキシメタレート結晶固体の構築。
 - ③ 環境調和型の有機合成反応（分子状酸素によるアルコール、アミン、アルキルアレーン、ナフトール類の選択酸化等）に対して高活性なアルミナ担持水酸化ルテニウム触媒の開発。

7-2-4-3 今後の研究に向けて

【酸触媒グループ】

- ・ 固体酸全般に広く視点が広がっていて学術的にも応用研究としても高いレベルにある。学術的なことをやりながら応用もやるという基本スタンスはあるが、企業と連携するにはもう一歩ふみこんで使える材料にして欲しい。
- ・ パラジウム－銅クラスター触媒の調製と硝酸汚染地下水の無害化技術は大変興味深い成果である。実践的な成果を明確にされることを期待したい。欧州では関連する研究が活発に行われているようだが、本研究が科学的に独創的である点を比較検討して明示する必要があるのではないか。
- ・ 今後の展開が多いに期待されるものの一つは、疎水性ナノ空間／表面とヘテロポリ酸およびヘテロポリ酸塩とのコンポジット化である。水中で高性能を発揮する固体酸触媒の実現に期待したい。

【酸化触媒グループ】

- ・ ヘテロポリ酸の自在合成とこれを用いる過酸化水素酸化反応の開拓により、研究が進展し、学術的にもしっかりした成果が得られており、この分野に対する貢献度は高い。
- ・ シリカ表面にイオン溶液を付した触媒系の特性の把握、不斉合成への展開、難易度の高い基質の酸化など、今後の発展が期待できる。
- ・ 今後、この触媒系がもっとも得意とするエポキシ化反応を選択し、企業と連携して実用化開発を進めてほしい。
- ・ 液相均一系における過酸化水素を酸化剤とするアルケンエポキシ化に対し、高活性・高選択性のバナジウム及びタングステン触媒を見出した。今後、不斉エポキシ化触媒にチャレンジしてもらいたい。
- ・ 過酸化水素を使うからグリーンであるというだけでなく、過酸化水素の製造も含めて、エポキシ化反応のグリーン度を評価することも必要であろう。

7-2-4-4 戦略目標に向けての展望

【酸触媒グループ】

本研究グループは、ナノ構造を制御した高機能触媒を開発し、これにより廃棄物を出さない「先進的グリーン化学合成プロセス」の創成と「硝酸汚染地下水の完全無害化技術」の構築を目標として研究を行っている。前者は「環境保全」であり、後者は「環境修復」である。これらの研究テーマは、戦略目標に直接寄与できる。特に、化学工業における硫酸法プロセ

スの環境に与える影響は大きく、固体酸触媒プロセスへの変換が望まれている。また近年、硝酸イオンによる地下水汚染は、日本だけでなくヨーロッパ、アメリカなど世界的に顕在化しており、固体触媒を使った浄化法の実用化が望まれている。

【酸化触媒グループ】

- ・ 本研究グループは、ポリオキソメタレートが無機分子触媒と捉え、分子状酸素や過酸化水素といった、“環境に優しい”酸化剤を用いた**グリーン**酸化プロセスの開発を目指している。戦略目標に沿った研究である。
- ・ 今後は、固体触媒とか選択性が良いという一般的定性的な説明ではなく、どれか良い反応例を挙げて、具体的に環境改善にどれだけ寄与するか定量的なアセスをやる必要がある。

7-2-4-5 総合的評価

【酸触媒グループ】

- ・ 酸化物クラスター触媒としてヘテロポリ酸に注目し、水中酸触媒反応等について基礎研究ベースで十分な成果を出しつつある。
- ・ パラジウム-銅クラスター触媒の調製と硝酸汚染地下水の無害化技術は興味深い成果である。実践的な成果を明確にされることを期待したい。

【酸化触媒グループ】

- ・ ポリオキソメタレートを出発物質としてナノ構造を制御したナノ酸化触媒系を構築する手法を開発したこと、これらの触媒が過酸化水素による種々のオレフィンのエポキシ化反応を効率的に進行させることを示したことは評価できる。
- ・ 開発した反応が環境改善にどれだけ寄与するか定量的なアセスをする必要があろう。

7-3-1 研究課題名： 高度に制御されたナノ空間材料の創成

7-3-2 研究代表者： 黒田 一幸 （早稲田大学、理工学部、教授）

7-3-3 研究概要：

- ・ 本研究では、組成・構造が精密に制御された新規ナノ空間の創製を目指す。同時に電子顕微鏡学や中性子線回折法に基づく構造解析を基に、構造機能相関を調べることを目的とする。計画推進にあたってナノ空間創製を第一目的とするが、触媒応用を含む様々な応用展開も図る。
- ・ 層状ケイ酸塩等の規則構造ユニットを有するケイ酸塩を出発物質に選定し、シリカメソ多孔体の結晶性の向上及び表面構造の制御を可能とする合成技術を開発しつつあり、結晶性メソポーラスシリカ合成という未踏分野の開拓を目指している。周期構造を保持したシリカメソ構造体（メソポーラスシリカ前駆物質）に関する研究を中心に、シリカ骨格内の周期構造保持を可能とする有機修飾技術の開発を行っている。また、層状結晶の層間に適切な官能基を、空間分布を設計しつつ、挿入することによりゼオライトと同様な分子ふるい機能を有するナノ空間材料が設計される。
- ・ メソポーラス有機シリカ系では内部空間の修飾により新たな触媒反応を見出しつつあり、さらに環境触媒への応用を目指した研究を展開しつつある。加えて、外部刺激により細孔や骨格構造が変化する多孔性配位高分子に注目し、水素結合による選択的ホスト-ゲスト間相互作用の場、更には新たなゲスト反応場としての細孔構築を目的とし、内孔の修飾を基にゲスト選択性及び触媒能の向上を検討する。

7-3-4 中間評価結果

7-3-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

・多くの新規物質、およびその合成法に進展がみられ、研究は順調に進行していると評価できる。具体的には以下のような研究で大きな進展が見られた。

- 1) 層状ケイ酸塩からの新メソポーラスシリカの創製：ケイ酸骨格中に周期構造を有するメソポーラスシリカを合成可能であることを実験的に証明した。
- 2) 新高規則性メソポーラス金属の創製：LLC 液晶中での金属析出において、還元剤による無電解析出法を適用し、金属核発生や核成長を精緻にコントロールすることにより、今までにない高規則性のメソポーラス構造を得ることに成功している。
- 3) 高配向性メソポーラスシリカ薄膜の合成：鋳型である界面活性剤の選択によってメソ細孔の配向がマクロスケールで制御された薄膜の作製を試みた。得られた薄膜は、ケージ状のメソ細孔がセンチメートルスケールで配向した 3 次元ヘキサゴナル構造を有することがわかった。
- 4) ヘムタンパク質模倣反応場の構築：＜稲垣グループ＞
- 5) 高機能多孔性配位高分子の合成：選択的ゲスト分子の吸脱着に伴う結晶－非結晶相転移を示し、ホスト－ゲスト相互作用が示唆された。＜北川グループ＞
- 6) キラルメソ多孔体の構造解析：＜寺崎グループ＞
- 7) バイオマスの化学変換：スルホン化メソポーラスシリカを固体酸触媒として用い、デンプンの加水分解反応を検討した。＜福岡グループ＞

・メソ多孔体の創製に研究の進展が見られたので、今後はこれを利用する技術展開に力を注いでほしい。

7-3-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

- ・メソポーラスシリカ系を中心に組成と構造が制御された材料の合成とその解析、さらに構造の安定性、材料としての耐久性などを検討し、ナノ空間材料開発の基礎研究として大きな成果を挙げている。
- ・触媒反応への展開については進展が少し遅れている。バイオマスの化学的変換も面白いテーマであるが、さらにこれらの新材料でなければできないファインケミカルの合成反応への応用も目指してほしい。
- ・今後の応用展開では、環境負荷物質の処理（吸着、分解）の分野には多くの既存技術があるので、対象とする物質を慎重に選択する必要がある

7-3-4-3 今後の研究に向けて

- ・メソポーラスなシリカを様々な新しい手法で構築しており、今後も研究の進展が期待できる。具体的な課題として、メソポーラス金属を塗布し膜を作ること、磁場をかけてメソポーラスシリカの配列を行うこと、鋳型を用いないシリカ系メソ構築体の直接合成を行うことなど極めて興味深い成果が得られているので、さらに技術の完成度をあげて、応用展開を進めるとよい。
- ・新規材料の応用展開の一つとしての触媒反応の開発に関しては、kinetics の考え方に注意する必要がある。この研究チームは研究者数が多いので、研究者相互の連携研究に期待したい。
- ・過去 3 年間で蓄積したナノ空間材料の設計手法および構造・機能評価の知見を基に、下記のような研究を展開する。
 - 1) 完全垂直配向メソポーラスシリカ薄膜の合成
 - 2) メソポーラス金属の応用
 - 3) かご型ケイ酸種を構造単位とするメソ多孔体の合成
 - 4) 二次元空間を利用した新規機能性材料の設計：－Si(OR)₃基や－SiCl₃基を有機分子の両端に有するシリル化剤を合成し、オクトシリケートに対し反応させることで、無機層間を有機分子で規則的に架橋した構造を設計する。
 - 5) 酵素類似の機能を有するメソポーラス物質の合成
 - 6) 機能多孔性配位高分子の合成

7) バイオマスの化学資源化

7-3-4-4 戦略目標に向けての展望

新規メソ多孔体の創製について、大きな研究成果が得られているので、これらを機能・利用する今後の応用展開に期待が持てる。戦略目標の環境改善への直接の寄与では、

- ① 福岡グループによるバイオマスの資源化、稲垣グループによる酵素モデル反応
- ② 層状ケイ酸塩を出発物質とした合成プロセスで得られたシリカ系メソポーラス物質は有害物質を完全分解する触媒、吸着除去する新プロセスを実現する方向に進んでいる。
- ③ メソ多孔体を触媒：耐水性のあるメソ多孔体も得られたので、これを発展させて触媒性能を把握したい。
- ④ 超強酸触媒：アルカンの異性化は高オクタン価ガソリン基材の製造。
が挙げられる。

7-3-4-5 総合的評価

- ・ メソポーラスシリカ系を中心に構造が制御された材料の合成、解析、さらに構造の安定性などを検討し、ナノ空間材料の基礎研究として顕著な成果をあげている。
- ・ 稲垣グループや北川グループの結果も含め、ナノ多孔質材料の合成、構造、物性を体系化されることを期待したい。今後は、環境技術への寄与、あるいは環境に直接かかわらなくとも remarkable な応用例を探すことが期待される。

7-4-1 研究課題名：有機無機複合相の自在変換によるグリーン触媒の創製

7-4-2 研究代表者： 辰巳 敬 （東京工業大学 資源化学研究所）

7-4-3 研究概要

- ・ 既存のプロセスをよりグリーンなゼオライト触媒プロセスで代替していくためには触媒の活性、選択性、寿命の更なる改善が必要である。この分野で有望な酸化触媒としてのチタノシリケートとして、結晶性の大細孔径の Ti-ベータ (BEA)、Ti-モルデナイト (MOR)、Ti-MCM-22(MWW)と非晶性ではあるがメソポーラスな Ti-MCM-41と Ti-MCM-48の合成に成功し、嵩高い分子の選択酸化に有効であることを示した。また、触媒表面の疎水化による選択性・寿命の向上などの高機能化を世界に先駆けて行ってきた。本研究では有機テンプレートによって導かれる有機無機複合相のソフト性を利用して、ゼオライト、メソポーラスモレキュラーシーブ構造を自在に変換し、所望の細孔構造、細孔サイズ、ならびに精密制御された活性点を有するメタロシリケート触媒材料を合成して、化学工業のグリーン化に応用することを目標にした。
- ・ メソポーラス物質ならびにゼオライトの合成法の高度精密化により、ナノ構造変換ならびに細孔内反応場サイズの調節と細孔内活性サイトのマイクロ構造の制御に新しく精緻な方法論を系統的に展開し、これまでの研究の一般化、系統化への展開を図る。
- ・ ゼオライトについては、従来の方法とは全く異なったアプローチをとり、MWW結晶構造の構築とチタン種の骨格挿入を切り離すことによって、3次元ゼオライト構造と2次元の層構造の可逆的な変換原理を発見し、新規のポスト合成を実現した。この原理を応用して、Ti-MWWと同様なメタロシリケート触媒、さらにはゼオライト的なマイクロ構造を持ちながらメソオーダーの秩序も有する新規な物質系の創製を目指す。

7-4-4 中間評価結果

7-4-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

マテリアル合成と触媒としての応用が連携して進行しているのが評価できる。特にこのプロジェクトの前半では、次の2点で大きな進展があったのが評価できる。

- ・ ゼオライト触媒の高機能化：層状前駆体から由来するゼオライトについて、層と3次元結晶の間の可逆的な構造変換という前例のない方法で調製した Ti-MWW 触媒は過酸化水素を酸化剤としたアルケンエポキシ化に非常な高活性を示した。
- ・ キラルなメソポーラスシリカの合成：アニオン性界面活性剤を用いて得られるメソ多孔体の

中でも、もっとも特異で興味深い構造がキラルならせん状の細孔を持ったメソポーラスシリカである。C₁₄のアシル-L-アラニンを用いることによって得られたメソポーラスシリカは、六角柱のロッドがねじれた形態をしており、その六角柱の内部には、縦方向に約 2 nm 程の均一な細孔が蜂の巣状に規則的に配列し、外側と同じらせんを描いていることが明らかとなった。ゼオライト、メソポーラスシリカの合成に新しい発想を取り入れ、新材料の開発が進んでおり、今後の大きな展開が期待できる。特に、キラルメソポーラスシリカの合成はさらに展開が期待できるが、その詰め方を充分に考えて、材料という視点と反応という視点から進められるようにしてもらいたい。

7-4-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

プロジェクト前半で大きな成果があり、さらなる発展が期待できる。特に、

- ・ 層と 3 次元結晶の間の可逆的な構造変換という新方法によって、一連のチタノシリケートを合成し、従来の TS-1 よりもアルケンのエポキシ化反応に高い触媒活性を有する
- ・ アミノ酸由来のキラルなアニオン性界面活性剤を用いて合成したメソポーラスシリカが、キラルならせん状の細孔をもつ

ことを示したのは、材料合成の大きな成果である。今後、グリーン触媒として目標とする反応を絞り込み、従来のプロセスと比較して、どのような点で、どの程度、環境負荷低減に貢献できるかを明示されることを期待したい。

7-4-4-3 今後の研究に向けて

本研究チームは、ホウ素を含まないメソポーラスシリカ構造体やキラルなメソポーラスシリカなど新しい構造体を創出しており、その触媒活性の評価は検討中であるが、その発展性は高いと評価できる。今後は、触媒反応は進行するという域にとどめず、従来の関連する反応に比べてどのような長所、特徴があるかについても踏み込んで検討することが望まれる。特に、次のテーマではさらに発展を期待したい。

- ・ 層状化合物の持つシラノール基を脱水重縮合させることによってシートが連なった 3 次元網目構造のゼオライトを合成できることは近年急速に知られて来たが、この際に、外部からシリカ源や他の元素を含む化合物を共存させることによって、層間にそれらの元素を挿入させ、層間に由来する拡大した細孔の構造体を得るという新規な方法論を開発する。
- ・ 「キラリティ」の認識ができる固体材料、固体表面の創製、固体ナノ空間の活用を目標に掲げ、キラル触媒材料の合成、不斉触媒設計、そして触媒性能・吸着性能などを研究する。

7-4-4-4 戦略目標に向けての展望

本研究チームの成果は、学術的に高くその量も大きいですが、具体的な産業界への出口の image を作って行かなければならないと思う。一般的に言って、一つの材料（触媒）の工業プロセスへの展開は時間が掛るので、企業との共同研究などを考えてもらいたい。特に、開発した Ti-MWW は従来の TS-1 に比べて、数倍高い活性を示す。今後、合成法のスケールアップ、寿命などの検討を進めて、グリーン環境触媒としての実用化を目指してほしい。

7-4-4-5 総合的評価

- ・ 層と 3 次元結晶の間の可逆的な構造変換という新方法によって、一連のチタノシリケートを合成し、従来の TS-1 よりもアルケンのエポキシ化反応に高い触媒活性を有することを示したことは評価できる。
- ・ キラルなアニオン性界面活性剤を用いて合成したメソポーラスシリカが、キラルならせん状の細孔をもつユニークな材料を合成したことは大きな成果である。
- ・ 今後、グリーン触媒として目標とする反応を絞り込み、どの程度、環境負荷低減に貢献できるかを明示することを期待したい。

7-5-1 研究課題名： 表面規整酸化物触媒の研究

7-5-2 研究代表者： 田 旺帝 （北海道大学、触媒化学研究センター、助教授）

7-5-3 研究概要：

本研究チームの目的は、構造が整った酸化物単結晶表面上に新規な金属ナノクラスター種を形成し、新規に開発した表面分析手法を用いてその構造と触媒物性との相関や反応メカニズムを原子・分子レベルで明らかにし、更なる環境触媒材料開発に向けた設計指針を得ることにある。

○「単結晶酸化物表面を利用した新規金属ナノクラスターの調製、キャラクタリゼーションおよび触媒作用の研究」 単結晶酸化物表面上に制御された金属ナノクラスターを作成し、走査プローブ顕微鏡によりモルフォロジーや吸着サイトを明らかにし、さらに、これまで困難だった単結晶酸化物表面上に高分散した金属クラスターの構造を偏光全反射蛍光 XAFS 法によりサブÅの分解能で決定する。

○「ナノ～メソ領域における金属酸化物表面上の Au の表面・境界面構造と物性」 金属と担体である酸化物との境界面が触媒活性に重要な役割を果たしている。この酸化物と金属クラスターとの境界面における化学状態を分析するために、in-situ の EXPEEM(エネルギー選別 X 線光電子顕微鏡法)、XANAM (X 線支援非接触原子間力顕微鏡)を開発する。

○「ケルビン顕微鏡による Pt/TiO₂ 担持触媒モデルの電荷移動計測の達成」 固体表面の局所的な仕事関数を計測できるケルビンプローブ顕微鏡を用いて酸化物表面に吸着した遷移金属原子～ナノサイズクラスターの電荷移動を局所仕事関数の変化として計測する。

7-5-4 中間評価結果

7-5-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み (7-5-4-2 研究成果の現状と今後の見込み)

本研究チームの進捗は、やや出遅れていた印象があったが、ここに来て研究進捗が目に見えるようになってきている。次のような点で高く評価できる。

- ・ 単結晶酸化物表面上に制御された金属クラスターを作成し、走査プローブ顕微鏡 (STM)、偏光全反射蛍光 XAFS 法 (PTRF-XAFS)、HREELS (高分解能電子エネルギー損失分析分光器)により、モルフォロジー、吸着サイト、化学結合、吸着種同定などの精密キャラクタリゼーションを行った。
- ・ Al₂O₃(0001)、TiO₂(110)単結晶酸化物表面上に Ni を金属蒸着し、Ni の単原子吸着構造を 3 次元的是じめて決定することに成功した。
- ・ 回転対称型強力 X 線源とトロイダル型人工多層膜分光結晶による X 線集光によって、放射光施設とほぼ同程度の光源が得られるようにした。
- ・ 放射光 X 線 (KEK-PF) を利用できる NC-AFM 装置を試作し、X 線入射により変化したカンチレバー先端と試料表面間相互作用の変化による表面元素・化学マッピング像を取得した。
- ・ 二酸化チタン単結晶面に色素 (レチノールカルボン酸・フルオレセイン・ルテニウム N3 錯体) 単分子膜を作成し、マルチプレックス和周波分光と走査プローブ顕微鏡をもちいて分析評価し、巨視的分光法と顕微鏡法の併用が酸化物単結晶の化学分析に有効なことを実証した。

今後は大西グループを含めて、触媒反応の解明に資するような表面を精密に解析する分析手段を開発して欲しい。

7-5-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 本研究の目的は、構造が整った酸化物単結晶表面上に新規な金属ナノクラスター種を形成し、新規に開発した表面分析手法を用いてその構造と触媒物性との相関や反応メカニズムを原子・分子レベルで明らかにし、更なる環境触媒材料開発に向けた設計指針を得ることに務める。
- ・ 大西グループも着実に成果を上げつつある。田グループと共通の試料を観測することにより、チーム全体としてのまとまりが感じられるようになる。複数の分析手法を併せて、一つのターゲットを設定してはどうか。
- ・ ケルビンプローブにより酸化物表面に担持した金属微粒子の局所的な電荷状態を実空間で観測できれば、波及効果も大きい。観測手法の開発に的を絞って、残りの期間を集中されるのがよい。

7-5-4-4 戦略目標に向けての展望

- ・ 本研究チームは固体表面の基礎科学を専門的に研究している。従って、研究成果の環境応用については、直接的な応用でなくても、環境触媒で課題になっている重要な基礎的知見を得られれば良いと思う。例えば、担持貴金属触媒における、電荷移動、微細構造、perimeterの状態など関する信頼性のある基礎的知見など。
- ・

7-5-4-5 総合的評価

- ・ 表面科学の立場から、環境触媒の研究者に「新しい概念、考え方」あるいは、「基礎的知見」を提供することに主眼をおいてもよい。
- ・ 電荷移動量の計測に独創的なアイデアが認められる。定量的な触媒電荷移動の研究については、サイズ効果、再現性の確立に力を入れてほしい。

7-6-1 研究課題名：「ナノ制御空間を有する均一系分子触媒の創成」

7-6-2 研究代表者：辻 康之（北海道大学、触媒化学研究センター、教授）

7-6-3 研究概要

数ナノから数十ナノメートルのより大きい触媒環境を有する均一系分子触媒を設計・合成する。このようなナノサイズを有する分子触媒システムにおいては、分子認識能などの従来にない高度の選択性、また酵素において見られるアロステリック効果のような、触媒活性点から遠い部位の触媒中心に対する効果などが達成され、革新的な触媒システムを構築できると考えた。本チームの研究目的は、均一系遷移金属分子触媒に、ナノオーダーで制御された空間を導入することにより、画期的な活性および選択性を示す分子触媒システムを創りあげることである。

（１）辻 グループ（超分子相互作用部位を有するナノサイズ分子触媒の開発）

柔軟あるいは剛直なデンドリマー部位を有するナノサイズ配位子、半球型ナノサイズ部位、およびカリックスアレーン部位を有するナノサイズ配位子などの一連のナノ制御空間を有する新規リン、窒素、ならびにカルベン配位子の設計ならびに合成を行う。そして、得られたこれらのナノサイズ配位子を用いて、高い触媒活性が期待できる後周期遷移金属錯体触媒に配位させることにより種々の分子触媒反応を行う。

（２）溝部グループ（遷移金属多核構造を有するナノサイズ錯体の合成とその機能解明）

各種有機および無機反応において触媒として、またそれ自身機能材料としても有用である遷移金属クラスターについて、様々な金属の組成・構造を有する遷移金属多核骨格の合理的な構築法の探索を広汎に行い、一般性の高い種々の反応経路を確立する。

（３）吉澤グループ（ナノサイズ効果の理論的研究）

均一系分子触媒および金属酵素をナノ反応場として捉え、これらの構造と反応性について密度汎関数法および化学動力学法を駆使して詳細に調べる。本研究では、最高レベルの理論化学計算を駆使して均一系分子触媒および金属酵素のもつナノサイズ効果の本質を明らかにする。

7-6-4 中間評価結果

7-6-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

- ・ 辻研究グループは、デンドリマー、カリックスアレーン、半球型などの超分子相互作用を有するナノサイズの配位子を合成し、均一系分子触媒合成し、それらの触媒を用いた触媒反応の研究を展開した。2,3,4,5-テトラフェニルフェニル基ならびにその高世代デンドリマー部位を有するピリジン配位子を合成した。これらの配位子は酢酸パラジウムと容易に錯化し、極めて高い触媒活性を有する錯体を与えた。
- ・ 新しいコンセプトに基づく配位子設計に進展が認められる。特に、芳香族系で高い活性を有するホスフィン配位子の開発は、新しい配位子のあり方を提案しており、学術への貢献は顕著であるといえる。具体的な応用については、更に検討が必要であろう。

7-6-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

- ・ 剛直な縮合芳香環を配位子とする dendritic 系や柔軟な dendritic 系を新たに構築し、優れた触媒活性を生み出すことを示した。このような配位子設計理念が普遍性を持つことを初めて明確に示した成果は高く評価できる。
- ・ 今後、前者の触媒系でフェニル基をシクロヘキシル基に置き換えるなど触媒活性を高めることや、パラジウム以外の金属への中心金属の変換など更なる研究の展開に期待したい。

7-6-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 本研究チームの大きな目的は、分子触媒の空間的な広がり・大きさと触媒活性の関係を明らかにすることである。
- ・ 高度な dendritic 型やボール型錯体触媒を開発されているが、今後の展開一つは、配位子場の高度化による触媒活性の増強・維持で、さらに展開することが期待される。もう一つは、dendritic 内部空間への触媒金属の隔離を利用した基礎的な研究で、この方向でも大いに研究されたい。
- ・ 今後は、さらに検討する変換反応の範囲を広げ、より高いレベルの選択性が望まれている反応、あるいは従来の均一系触媒反応では達成不可能であるような選択性および活性が必要な重要反応についても研究を進めてゆきたい。

7-6-4-4 戦略目標に向けての展望

- ・ 均一系触媒は、ただ触媒活性および反応の選択性をあげるだけで、「環境触媒」と呼ぶことが出来るのか？という疑問がよく聞かれるが、触媒活性および反応の選択性を高めることこそ有用な環境触媒への重要なアプローチの一つではないか。本チームでは、均一系分子触媒の触媒活性と選択性の革新的な向上を、分子触媒系に高度に制御されたナノサイズ触媒環境を付与することにより、達成しようとの戦略に基づき、研究を展開している。

新しい触媒系での応用展開・実用化には時間が掛かる。本研究も具体的な出口を見つけるのに苦慮している。酸化的脱水素は target を考えれば産業界の need はあると思う。例えばシクロヘキサノールのシクロヘキサノンへの脱水素など。

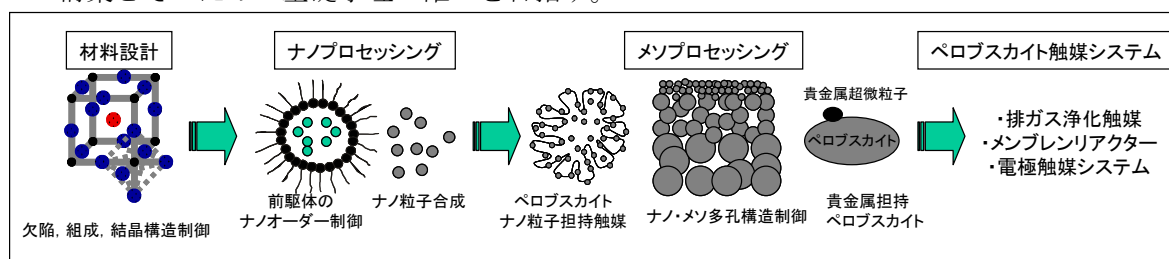
7-6-4-5 総合的評価

- ・ 剛直な縮合芳香環を配位子とする dendritic 系や柔軟な dendritic 系を新たに構築し、優れた触媒活性を生み出すことを示したことは評価できる。
- ・ 今後、本触媒系でパラジウム以外の金属への中心金属の変換など更なる研究の展開に期待したい。
- ・ 析出しない Pd 触媒というだけでなく、(固体の Pd 触媒では代替できない)、環境面から見てインパクトのある反応をお考え頂けるとよい。

7-7-1 研究課題名：「ナノ構造制御ペロブスカイト触媒システムの開発」

7-7-2 研究代表者：寺岡 靖剛（九州大学、教授）

7-7-3 研究概要：本研究チームではペロブスカイトを基盤材料に用いて、機能と構造を「ナノからメソ、マクロへサイズ階層的に制御」することにより、環境・エネルギー分野で重要な排ガス浄化触媒、電極触媒、膜反応器、環境物質計測デバイスなどの高性能触媒システムの構築とそのための基礎学理の確立を目指す。



1) **ナノ・メソプロセッシング**：以下に示す高性能触媒（システム）の構築の基盤となるペロブスカイトナノ前駆体、ナノ粒子の湿式合成法およびメソ・マクロオーダーでの精緻な二次構造の構築方法を検討する。

2) **排ガス浄化触媒**：貴金属の触媒機能を最大限に発揮できる助触媒としてのペロブスカイトの材料設計・探索とガソリン車用高性能三元触媒の創製、およびペロブスカイト触媒被覆ディーゼルパティキュレート（PM）除去フィルターの開発を目指す。

3) **電極触媒**：アルカリ型酸素還元電極用のペロブスカイトー炭素複合ガス拡散電極、固体酸化物形燃料電池（SOFC）用電極について、ナノーメゾーマクロ階層構造電極の構築法の確立と高性能化を目指す。

4) **薄膜型メンブレンリアクター**：混合導電性ペロブスカイトを用いた省エネルギー型酸素透過膜、メタンの合成ガスへの酸化用メンブレンリアクター（POM-MR）について、材料探索、メンブレンリアクターシステムの構築手法の確立を目指す。

5) **環境物質計測デバイス**：ペロブスカイト厚膜・薄膜を用いた水溶液中のリン酸水素イオンなどの環境イオンセンサ、大気中のオゾンセンサなどの環境物質計測デバイスの開発を目指す。

7-7-4 中間評価結果

7-7-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み（7-7-4-2 研究成果の現状と今後の見込み）

- ・ 「ペロブスカイトをベースとして、ナノからメソ、マクロへサイズ階層的に機能と構造を制御する」というコンセプトを明示して、排ガス浄化触媒、酸素還元電極、燃料電池用電極、酸素製造膜としての実用化を目指した研究開発を行い、それぞれ成果を挙げていることを評価できる。
- ・ それぞれの分野に既存の材料、技術があり、今後2年間の間に目指す目標を設定することが望まれる。
- ・ 環境センサーについては、実用的に必要な感度、精度を把握して、適切な目標を設定して研究開発をされたい。

7-7-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 貴金属にかわる触媒としてペロブスカイト型酸化物を独自に合成しており、これらの具体的な応用研究も多方面で検討されており、興味ある成果が期待できる。
- ・ 改良研究の域を出ない恐れのある課題もあるので、この際学術的な独創性の裏づけを明確にしておくとともに、幅広い応用研究の中で重点研究課題の絞込みが必要な時期に来ているのではないかとと思われる。
- ・ 今後は材料開発だけでなく、システムの開発も必要となるため、産業との共同研究が必要になるであろう。

7-7-4-4 戦略目標に向けての展望

本研究チームのターゲットは、環境・エネルギー分野で重要な排ガス浄化触媒、酸素還元および燃料電池電極触媒システム、酸素透過型メンブレンリアクターに加えて、化学的、電気化学的触媒機能と密接に関連した水溶液中（主にリン酸水素イオン）および大気中（主にオゾン）の環境物質用のセンサであり、本領域の戦略目標そのものである。「実用性をもったペロブスカイト環境関連触媒システムの構築」を目指し、実用化も視野に入れている。

7-7-4-5 総合的評価

- ・ 貴金属にかわる触媒としてペロブスカイト型新規酸化物材料を独自に合成し、また、具体的な応用研究も広く検討しており、興味ある成果が期待できる。

- ・ 研究テーマが多岐に渡っているが、構造、メカニズムについて科学、工学など基礎の部分により明確に出来ると良い。重要なテーマについては基礎的学術的探求もお願いしたい。

7-8-1 研究課題名：表面最適化炭素ナノ繊維の新規環境触媒機能

7-8-2 研究代表者： 持 田 勲 （九州大学、産学連携センター、特任教授）

7-8-3 研究概要

炭素ナノ繊維（CNF）の多様な径、構造、表面構造に着目し、優れたエネルギー環境材料として実用化の基盤を構築し、関心の企業への技術移転、共同研究による産学間のフィードバック応答を円滑に進め、実用化に向けた課題を解決することを目標とした。CNF の微細構造を解明し、構造に基づく物性発現を重視した。即ち、ナノ材料の構造－機能相関を常に念頭において、求める機能を実現する構造とその誘導を試みた。具体的には次のような研究を実施する。

- ① 多様な CNF の選択的大量合成法の構築により、多様な CNF サンプルの提供を可能にする。
- ② CNF の微細構造を解明し、ナノロッド、ナノプレートから構成されていることを見出している。この微細構造に基づき、CNF を用いる FED 電子放射電極材、触媒担体への応用を試みる。
- ③ CNF の表面酸化によるメソ孔、表面官能基の導入、炭素繊維や酸化物との複合化し、CNF 複合機能材を開発する。特に、リチウムイオン電極材料への適用、実用化を考える。
- ④ CNF を活性炭/繊維状吸着剤として、DeSO_x 能の改善と向上を図る。
- ⑤ ナノパティキュレート捕捉を視野に入れて新規な大気環境保全機能を開発する。

7-8-4 中間評価結果

7-8-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

- ・ CNF の選択合成に成功し、大量合成についてもほぼ見通しが得られていること、CNF の用途開発を積極的に行い、リチウム電池電極材料、長寿命な電子放射電極材料について実用化に向けた企業との共同開発が進んでいること、排煙脱硫能力の高い CNF を複合化した活性炭素繊維の開発など、CNF のエネルギー・環境問題への応用に向けて順調に研究が進んでいると評価できる。
- ・ 企業と連携して応用面に力を入れている点は評価できる。

7-8-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

- ・ 以下のような研究成果を得ており、高く評価できる。
 - (1) 選択合成、大量合成：合成用触媒金属、合金、担体を選択し、フィード並びに反応温度を制御することで多様な CNF の結果を基に縦型固定床反応器を設計・製造し、最大 100g/バッチの CNF 製造を行い、サンプルを提供している。
 - (2) CNF の 3 次元構造解析と単位構造の特定
 - (3) FED 電極材の機能性 CNF 開発：本研究チームの開発した FED 用 CNF 製造技術成果に企業が注目し 2-3 年内の実用化を目指して共同研究に着手した。
 - (4) 燃料電池用担体としての機能性 CNF の調製
 - (5) 水素化脱水素化触媒担体としての CNF：CNF 担持 Ru 触媒を開発
 - (6) 脱硫触媒としての CNF 及びナノチェーンの調製・応用
- ・ 今後は、ナノファイバーの形状と性能との関係など、サイエンスとしての探求・前進についても、留意してほしい。

7-8-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 産業界へ積極的に材料を紹介し、企業との共同研究を一層進め、実用化を図られたい。以下のような点に注意して研究を推進すること。
 - (1) NF の大量合成装置の完成により CNF 供給能力が拡大するので、さらに応用範囲の拡大に努める。
 - (2) CNF 複合材料について技術移転を検討し、既に金属 Si 粒子 - CNF 複合体の利用に努力している。今後、シリカ - CNF、アルミナ - CNF、マグネシア - CNF、金属酸化物 CNF について

も用途拡大に取り組む。

- (3) 総合的な材料であることから複数メーカーとの共同開発が不可欠であることを認識し、信頼されるパートナーとしての地位を得る。

7-8-4-4 戦略目標に向けての展望

本研究チームは、各種のカーボンナノファイバーの合成方法、及びその構造解析に基づき、新規応用展開、特にエネルギーと環境のための利用技術開発を目標としている。具体的には、

- ① 高機能性材料による省エネルギーハイテク機能の実現
- ② 高効率エネルギー変換、貯蔵機能の実現
- ③ 大気環境の改善
- ④ 大気環境負荷の小さい燃料の製造

を目指しており、戦略目標に沿ったテーマである。今後、企業との連携をさらに密接にし、実用にいたる技術を開発して欲しい。

7-8-4-5 総合的評価

- ・ CNF の選択合成に成功し、大量合成についてもほぼ見通しが得られていること、リチウム電池電極材料、長寿命な電子放射材料、排煙脱硫能力の高い CNF/活性炭素繊維の開発など、CNF のエネルギー・環境問題への応用に向けて順調に研究が進んでいることは高く評価できる。
- ・ ナノ粒子のリスクについて注意しておきたい。
- ・ 用途開発に偏っているきらいがあり、材料特性を科学的に解明する点にも注力されるとよい。面白い材料ゆえに学術面での追究も期待したい。

7-9-1 研究課題名： 「ナノ制御置換型金属酸化物触媒による選択酸化反応の制御と応用」

7-9-2 研究代表者： 八嶋 建明（宮崎大学、特任客員研究員）

7-9-3 研究概要

1. ナノ反応場を利用した高選択環境触媒の合成と評価

金属酸化物表面層の特定サイトにある金属元素を、他種の金属元素を含む有機金属化合物を用いて置換した、ナノオーダーで二次元的に制御された置換型金属酸化物触媒の合成技術確立し、低環境負荷型プロセスである酸素によるメタン直接選択酸化反応において未だ到達されていない高選択率・高転化率で含酸素化合物の生成を可能にする触媒の研究開発を行う。メタンの酸素を用いた選択酸化触媒として、これまでに見出したゾルゲル法で調製したゲルマニウム置換型酸化スズ (Ge/SnO_2) を超えるメタノール合成への高選択性を目標としている。

2. 金属ナノデポジット微構造の生成機構と環境触媒への応用

環境負荷の低減および環境保全、エネルギー高度利用を促進する機能性触媒の開発研究の中で、従来の触媒調製法とは全く異なった概念で金属ナノデポジット微構造が生成する調製条件を明確にする。この方法は、複合酸化物均一相を一旦形成させ、相分離条件へ変化させることにより金属をデポジットさせるものである（例： Pt-SnO_2 系）。この金属デポジットは均一相からの生成なので、母体酸化物と極めて強い相互作用が期待でき、その組成や構造、化学的性質は均一相とも通常の担持金属粒子とも異なり、新しい環境触媒の開発が期待できる。

7-9-4 中間評価結果

7-9-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み

- ・ 八嶋/田畑グループ：メタンの酸化によるメタノールの直接合成に関しては、実験データの取得が十分でなく、開始時と状況は変わらない。さらに本反応系を展開しようとしているが、基本的な視点に立って考え直す必要がある。
- ・ 江口グループ：金属デポジット触媒は、 SnO_2 担持貴金属触媒では特異的な H_2 および CO 吸着挙動を示し、水素燃料電池において、通常耐 CO 被毒電極として用いられている PtRu/C

よりも高いCO耐性を持つことが示された。

- ・ 研究チーム全体として、再構築が望まれる。

7-9-4-2 研究成果の現状と今後の見込み

- ・ ゲルマニウム－酸化錫系触媒によりメタンのメタノールへの酸化反応が可能であることが見出されているが、反応場と選択性の関係、定量的なデータを調べ、そろそろ研究成果の報告がほしい。
- ・ 研究チーム全体の推進方法及び研究テーマ全般に、あと2年で出来る範囲で最適と思われる計画について考えていただきたい。

7-9-4-3 今後の研究に向けて

メタンからメタノールを製造する技術は工業的にも意義があるが、後2年間でどこまで有意な触媒が開発されるか憂慮される。可能性としては、反応系を再考することも想定すべきであろう。

7-9-4-4 戦略目標に向けての展望

(4-3.に同じ)

7-9-4-5 総合的評価

- ・メタンからメタノールの選択合成については、研究開始時に比べ顕著な進歩があったとはいいいがたい。基本的な視点に立って考え直す必要があるのではないか。
- ・他の研究グループの研究進捗状況も考慮し、全体計画の調整が必要であろう。残された期間に出来る範囲で最適と思われる計画について考えていただきたい。

7-10-1 研究課題名： 精密自在制御型ナノ触媒の創成

7-10-2 研究代表者： 山元 公寿 （慶応大、教授）

7-10-3 研究概要：

本研究は、世界にさきがけ開発した dendritic 型の金属精密集積超分子を追求し、金属の数を精密かつ自在に制御した触媒、いわゆる精密自在集積型ナノ触媒を創製する。この材料を鍵として、単分散クラスターや連続多電子移動など新概念の創出を目指す。

近年のナノテクノロジーや精密合成の進歩に伴って、次世代の環境触媒を目指したナノ材料は界面や有機構造体の中に多種金属を場所と個数を厳密に配置することが強く望まれているが、いまだ実現されていない。金属の数を精密に決めた自在な制御法が鍵とされているが、本超分子錯体を用いる方法はこの要望に見合う新しい方法論と成りえる。全く新しい精密自在制御型ナノ触媒の創出を目指して、（1）精密自在金属集積法の確立、（2）金属クラスターの創製 （3）多電子移動触媒への展開 に焦点を絞って推進する。

7-10-4 中間評価結果

7-10-4-1 研究の進捗状況と今後の見込み（7-10-4-2 研究成果の現状と今後の見込み）

- ・ 金属の数、順番、種類を制御した精密金属集積分子の合成が進捗し、大きな成果が出ており、ユニークな研究分野を形成したものと高く評価できる。

- ・ 次の分野で興味あるデータが出ており、さらに発展が期待できる。
 - 1) 精密金属集積の確定、
 - 2) 金属集積の自在制御：球状樹状高分子の電子勾配を外側が最も電子密度が大、
 - 3) 多電子移動触媒への展開、
 - 4) 長寿命電荷分離

7-10-4-3 今後の研究に向けて

- ・ 独創的な材料設計ができており、特異な材料の特性が科学的によく追究されている。多様な用途への展開が研究されているが、既存技術とのコストパフォーマンスを含めた比較検討も必要である。
- ・ 精密金属集積分子をベースとして、 TiO_2 クラスタ、Pt カーボンクラスタ、ポルフィリン dendrimer などの新規材料を開発し、触媒等としての展開を図っているが、研究対象あるいは目標が多岐に渡っている。

7-10-4-4 戦略目標に向けての展望

- ・ 環境・エネルギーへの利用を意識することは必要であるが、今後、対象/目標をしぼることが必要であろう。
- ・ 応用展開先は、環境触媒という範囲に留まることなく、「ナノ」全体への寄与も評価対象とする方が、広がり大きい研究と位置づけられるのではないか。

7-10-4-5 総合的評価

- ・ 精密に金属をグラジェント集積した dendrimer 錯体の研究は着実に進んでいる。化学としても面白く、一層の発展を期待する。
- ・ 応用展開は、柱になるものをじっくりと探していただきたい。