

ディビジョン番号	6
ディビジョン名	有機化学

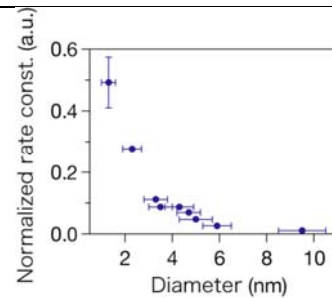
大項目	1. 酸化・還元
中項目	1-2. アルコールの酸化
小項目	1-2-2. 金属ナノ粒子による酸化

概要（200字以内）	
<p>金属ナノ粒子は、バルク金属とも単核錯体触媒とも異なる活性を示し、特に環境調和型のアルコールの空気酸化触媒として期待されている。近年の電子顕微鏡の発展に伴い評価法が確立し研究が急速に進展している。現在パラジウム、金、白金などのナノ粒子触媒が実用に近いレベルで開発されている。今後ナノ粒子の保護マトリクス設計、粒子サイズの制御方法などが開発され、反応に応じたテーラーメイド触媒の実現が期待される。</p>	

現状と最前線	
<p>金属微粒子は、バルク金属と比べて構成原子に対する表面原子の割合が大きく、特にナノメートルスケールまでサイズダウンしたときにその効果が顕著になり、触媒活性が大きく向上する。また、ナノサイズクラスターは量子サイズ効果により吸着過程や電子移動過程がサイズ依存的であり、バルク金属とも単核錯体とも異なる特異な触媒活性を示すことが知られている。さらに微粒子触媒は担持型触媒への展開が容易であるため、実用的触媒開発の点でも注目を集めている。透過型電子顕微鏡（TEM）などの測定技術の発達および一般化により触媒の評価方法が確立しつつあり、最近著しい研究の進展が見られている。</p> <p>アルコール酸化反応に関しても、金属ナノ粒子の持つ高い活性を活かした触媒開発が80年代後半頃から精力的に行われている。現在は金属ナノ粒子として、パラジウム、白金、金が主な研究対象であり、特に酸化剤として空気（酸素）を用いる空気酸化触媒系の検討を中心に行われている。空気を酸化剤として用いる場合、副生成物が水だけであり、従来の金属酸化剤を化学量論量用いる反応と比べ環境調和型プロセスを確立できる。</p> <p>現在の課題とその取り組みに関して以下に3点取り上げる。</p>	

1) 触媒反応機構の解明とサイズ選択性

化学的に安定で、かつバルクでは見られない特異な触媒特性を示す金ナノ粒子を中心に触媒反応機構に関する検討が進められており、酸化活性に対する顕著なサイズ依存性など重要な知見が得られている。しかし、現段階では単一組成のナノ粒子触媒の調製手法がなく、平均値としての議論にとどまっている。理論的には



金ナノクラスター触媒におけるアルコール酸化のサイズ依存性

粒子のサイズ依存性は個数単位で顕著に変わることが予想されており、将来反応基質に応じた最適な触媒をテーラーメイドで調製するためには、ナノ粒子のサイズ選択的調製技術が重要となることが予想される。また用いる金属によって反応機構が異なるため、他の金属ナノ粒子触媒に関しても、分子レベルでの機構解明が望まれる。

2) 反応および実用的レベルの触媒開発

現在、上記の金属においてそれぞれ汎用有機合成反応に適応可能なレベルの空気酸化触媒が開発され、実際に学術論文等では利用例が見られるようになってきている。また回収・再利用可能なシステムも実現している。しかしながら、錯体触媒や量論量反応と比べ、反応の選択性（基質・位置・立体選択性など）は不十分であり、金属ナノ粒子の保護分子として用いられるマトリクス設計が今後重要な課題となることが予想される。

3) 元素戦略としての他の金属ナノ粒子触媒の開発

貴金属ナノ粒子触媒に換わり、より安価で安定供給可能な金属ナノ粒子を用いて触媒を開発することが望まれている。ただし、金属表面の反応は極めて元素依存的であるので、合金、あるいは混合金属クラスターなどの活用が重要である。

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

- 1) 高（基質・位置・立体）選択性を達成できる触媒（マトリクス）の開発
- 2) 工業プロセスに使用可能な空気酸化触媒系の確立
- 3) より安価な金属ナノ粒子触媒の開発

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

- 1) ナノ粒子のサイズの完全選別と各粒子サイズにおける触媒機構の解明
- 2) 反応系に応じたテーラーメイド触媒の実現

キーワード

環境調和型触媒、空気酸化、サイズ選別、テーラーメイド触媒、元素戦略

（執筆者：櫻井 英博）