

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-7. クラスタ
小項目	1-7-6. 金クラスタの触媒特性

概要（200字以内）

金は化学的に不活性とされてきたが、直径 10 nm 以下のナノ粒子として酸化鉄などの表面に分散・固定化すると、200 °C以下の低温では、パラジウムや白金より優れた触媒特性を発現することがわかっている。金の直径をさらに小さくして、2 nm 以下（原子数 300 個以内）のクラスタにすると、量子サイズ効果による電子構造の変化、特異的に安定な立体構造、担体との相互作用の相乗的組み合わせが画期的な触媒を生み出すことが期待される。

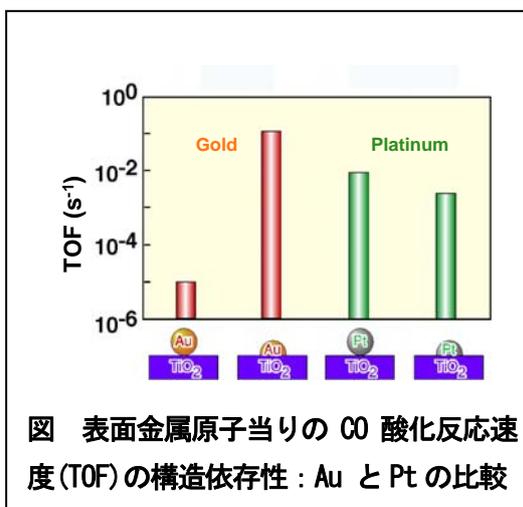


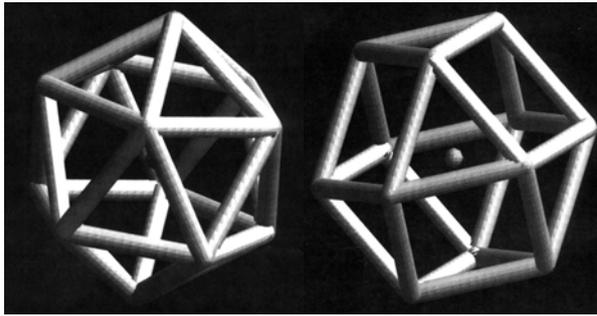
図 表面金属原子当りの CO 酸化反応速度 (TOF) の構造依存性: Au と Pt の比較

現状と最前線

金は化学的に不活性であるとされてきた。しかし、直径 2-5 nm 程度のナノ粒子として酸化鉄などの担体上に分散・固定化すると、表面でのエッジやコーナーの比率が 10% 以上となり、これらが新しい吸着サイトを提供すること、および金ナノ粒子と担体との接合界面周縁部が高い化学反応性を持つことから、200 °C以下の低温ではパラジウムや白金より優れた触媒特性を発現する [M. Haruta et al., J. Catal. 115 (1989) 301]。この発見を契機に金の触媒作用に世界的に関心が高まり、2005 年現在、年間 700 編以上の学術論文が発表されるようになっている。

EU では液相空気酸化によるアルコール、炭化水素類からの有用化合物の選択的合成が精力的に研究されており、ドイツではグルコース水溶液の空気酸化によるグルコン酸合成が実用化の段階に入っている。米国では、表面科学および計算科学の立場からの基礎研究と実用反応に関する応用研究が活発になされている。中国、台湾では、最近金触媒の研究者が急増しており、選択的水素化、高分子担体を用いた CO₂ の係わる有機合成反応などの分野で先導的な成果を挙げている。これに対し、日本では研究者層が限られていたが、最近になって JST の CREST がスタートして、金クラスタに焦点を当てた研究を進め世界をリードする体制ができつつある。

近い将来には、金の粒子径をさらに小さくして、直径 2 nm 以下のクラスタにすることにより、劇的な物性変化を引き出し、さらに担体との相互作用を上乗せすることにより、革新的な化成品合成プロセスや常温空気清浄を可能にする触媒の開発が期待される。その理由は、こ



正二十面体

立方八面体

図1. 13原子金クラスターの立体構造（頂点に12原子、内部に1原子存在）。担体がMg(OH)₂の時、-73℃でのCO酸化に活性であるのは正二十面体。[D.H.A.Cunningham et al., J.Catal.177(1998)1].

の寸法（原子数300個以内）になると、電子構造がバルク金属とは異なり断続的な電子準位をとる、正四面体、立方八面体、正二十面体、いかなる構造など多様な立体構造をとりえる、担体との電子授受が物性に与える影響が大きいからである。

寸法を制御した金クラスターを、種々の金属酸化物（例えば、Al₂O₃, TiO₂, CeO₂）、活性炭やカーボンナノチューブなどの炭素材料、高分子マイクロビーズや dendrimer などのソフトマテリアルに分散・固定化することにより、それぞれに特異な反応場を形成できるので、新しい反応の開拓が期待される。

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) 原子数300個以内の金クラスターを直接一段で担持する手法の開発
 - 2) 新しい担体の発掘：メソ孔金属酸化物、活性炭、ナノカーボン、高分子微粒子、 dendrimer 等への拡張。
 - 3) 新しい反応の探索：バイオマス由来の化合物を原料とする化学反応や液相空気酸化による有用物質の省エネルギー一段合成反応などのグリーンケミストリーの開拓。
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 - 1) 金クラスターの寸法、立体構造、電子構造を的確に制御する手法の開発。
 - 2) 金クラスターの寸法（原子数）、立体構造、電子構造、および担体の物理・化学特性と触媒機能との関連の解明と新しいグリーン化学プロセスの実用化。
 - 3) 金クラスターの光学特性、電磁気特性などの物性解明と医療分野への応用展開。

キーワード

金、触媒、クラスター、サイズ効果、担体効果、バイオマス化学、グリーンケミストリー

(執筆者： 春田 正毅)