

令和 2 年 5 月 7 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05752

研究課題名(和文) 貴金属ナノクラスター触媒の示すソフトルイス酸性に関する構造活性相関の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study of structure-activity relationship for soft Lewis acidity of noble metal nanocluster catalysts

研究代表者

奥村 光隆 (Okumura, Mitsutaka)

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号：40356712

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：貴金属クラスターおよび貴金属担持クラスター触媒のソフトルイス酸性触媒活性の発現機構を理論的に検討した。

孤立クラスターを用いた3,4-DABEの異性化反応に関してクラスターサイズと電荷を変化させて検討を行ったところ中性クラスターよりも正電荷を帯びたクラスターの方が一般的に触媒反応の活性化障壁が低下することが明らかとなった。特に吸着サイトとなる金属原子の有する正電荷の大きさが大きくなると活性化障壁が低下するという明確な相関があることが理論計算から明らかとなった。またクラスターが酸化物に担持された場合には界面貴金属原子サイトでの活性化障壁が中性状態であっても比較的低下することが示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

触媒化学における貴金属と金属酸化物などの間のヘテロ接合効果は大変興味深い題材であるとともに、この現象を解明することは触媒化学分野における触媒機能発現機構解明に大変大きな示唆を与えるものである。そこで、我々は従来の均一触媒では数多く報告されていたソフトルイス酸性触媒活性が、なぜ担持触媒ではあまり報告されてこなかったかとソフトルイス酸性触媒活性の発現機構を理論的に明確にした。このことは、貴金属のヘテロ接合界面に対する一般的な概念構築に重要な示唆を与えるものであった。

研究成果の概要(英文)：The reaction mechanisms of the soft Lewis acid catalytic activity over noble metal clusters and noble metal supported cluster catalysts were theoretically examined.

The isomerization of 3,4-DABE in isolated clusters was investigated by changing the cluster size and their charges. The activation barrier for the catalytic reaction was generally lower in positively charged clusters than neutral clusters. In particular, theoretical calculations revealed that there is a clear correlation that the activation barrier decreases as the magnitude of the positive charge of the metal atom of the adsorption site increases. When the clusters are supported by metal oxides, the activation barrier at the interfacial noble metal atom sites is relatively low even in the neutral model system.

研究分野：量子化学

キーワード：ソフトルイス酸性触媒活性 量子化学 触媒化学 異性化反応 反応機構 ヘテロ接合

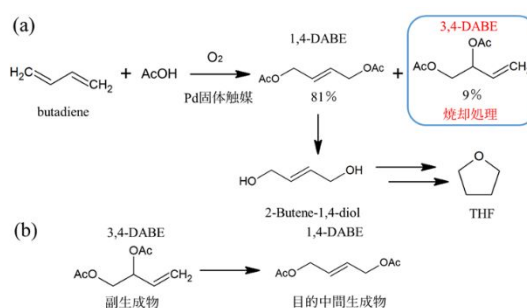
様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

正電荷を帯びた貴金属原子を内包する均一系触媒では、ソフトルイス酸触媒として機能するものが数多く報告されている。しかしながら貴金属ナノ粒子担持触媒系において、均一系触媒のように高いソフトルイス酸触媒として機能するものは、報告されていない。例えば、金触媒は、均一系触媒ではソフトルイス酸触媒として機能するが、不均一系触媒系では、金ナノ粒子担持触媒は一般に酸化触媒としての機能が際立っており、ソフトルイス酸触媒としての機能は報告されていない。そこで、金ナノ粒子担持触媒などでソフトルイス酸触媒として機能する条件は何なのか、また金以外の貴金属触媒でソフトルイス酸触媒として機能する触媒はあるのかという観点に関して研究を実施した。

2. 研究の目的

均一系触媒において、金やパラジウムなどの貴金属触媒が、ソフトルイス酸的機能を発現するとともに、様々な触媒反応に応用されている。これらは主に貴金属のカチオン種と不飽和炭化水素との相互作用に起因するものである。一方、貴金属ナノ粒子担持触媒では酸化還元反応が得意であるが、それ以外の反応への展開は極めて少ない。この点に鑑み、ソフトルイス酸性が貴金属ナノ粒子担持触媒のどのような構造や電子



Scheme 1 DABE 触媒機構の概要

状態で発現可能であるかを、第一原理計算による反応機構解明と、理論計算から得られる物性値との相関関係をもとに検討し、触媒機能の原理解明と触媒設計の作業指針を確立することが本課題の目的とした。

そこで、ソフトルイス酸メカニズムで進行する貴金属担持触媒上におけるいくつかの反応に対して検討を行った。この報告書では、3,4-DABE (but-3-ene-1,2-diyl diacetate) から 1,4-DABE (but-2-ene-1,4-diyl diacetate) への異性化反応の結果を報告することにする。まず、この研究の工業的背景について述べる。butadiene から THF を製造する工程 (Scheme1) で副反応物として 3,4-DABE が約 9% 副生し、年間数千トン焼却処理されている。この 3,4-DABE を中間反応の目的生成物である 1,4-DABE に変換することで、よりグリーンな製造工程を実現できるため、非常に有用である。そのため、金属錯体上での直接変換反応は、アリル中間体を經由する手法やソフトルイス酸機構で進行する手法が報告されている。また、工業利点を多く持つ貴金属ナノ粒子担持触媒上での本反応の研究が村山、徳永ら (第 122 回触媒討論会, 1H18) によって報告されている。電荷中性の Au ナノ粒子を担体に担持した Au ナノ粒子担持触媒上において、担体の種類にかかわらず本反応は進行する。それに対して、電荷中性の Pd ナノ粒子や Pt ナノ粒子を担持した貴金属ナノ粒子担持触媒上においてはほとんど反応が進行しない。この Au ナノ粒子担持触媒の示す特異な反応性の原因を解明することを第一の目的とする。さらに、担体として CeO₂ や ZrO₂ を用いた場合、Au ナノ粒子担持触媒はよりよい触媒活性を示す。この担体の種類による触媒活性触媒活性の違いが何に起因するのかを解明することを第二の目的とする。

3. 研究の方法

クラスターモデルの計算では、交換相関汎関数として PBE1PBE を、基底関数は Au に対してのみ LANL2DZ、それ以外の原子種 (C, H, O) には 6-31+G* を、有効内殻ポテンシャル (ECP) は Au にのみ LANL2DZ を用いた。構造の最適化と静止点 (すなわち、反応物、中間安定状態、生成

物、遷移状態 (TS)) の振動周波数の計算を実行した。構造の最適化、固有反応座標 (IRC) および遷移状態の探索中に対称性の制約は課されていない。すべての静止点は、Hessian 計算により、安定状態 (虚数振動数なし) と遷移状態 (虚数振動一つ) のどちらかに決定されている。エネルギーは零点振動補正を加えたエネルギーを表示している。

貴金属と担体を接合したモデル上で Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) を用いて、周期境界条件下でのスピン分極 DFT+U 計算を行った。内殻領域の電子は projector augmented wave (PAW) 法を用いて、カットオフエネルギーを 400eV に設定した。構造最適化に対して 0.03eV⁻¹ の閾値、1×1×1 の k 点、交換相関汎関数として Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 交換相関汎関数を用いた。Au に対して 10 (5d¹⁰ 6s¹), Ce に対して 12 (4f¹ 5d¹ 6s²), O に対して 6 (2s² 2p⁴), C に対して 4 (2s² 2p²), H に対して 1 (1s¹) の価電子を計算に用いた。過去の研究に基づいて、Hubbard correction の U_{eff} の値 (U_{eff} = U - J) は Ce の f 軌道に対して 5.0eV の値を用いた。それぞれの原子の電荷を決定するために bader 法を用いた。結合距離を指標として、安定状態から次の安定状態へポテンシャルエネルギーサーフェスの SCAN 計算を実行し、遷移状態はその結果から得た初期構造から dimer 法、もしくは DIIS 法で構造最適化することにより得た。(このポテンシャルエネルギーサーフェスの SCAN 計算において、指標とした二つの原子間の結合距離を制限し、バルクで固定した CeO₂ を除く全ての原子に対して構造緩和を行った。)

4. 研究成果

Au 錯体触媒上でソフトルイス酸機構を介して進行する時、この反応は環化した中間安定状態を経由することが提唱されている。貴金属担持触媒上においても、同様のメカニズムで反応が進行していることが報告されているため、環化した中間安定状態を経由することが予想される。この中間環化安定状態 (IM1) において、貴金属が axial 型の中間体と equatorial 型の中間体のどちらを経由するのかを検証した。

両方の環状中間安定状態を経由する二つの反応経路を Au₅⁰ クラスタと Au₅⁺¹ クラスタ上で計算した。この時、より多く生成する trans 体が生成する反応経路で計算を行った。この計算で得たエネルギーダイアグラムを Figure 2 に示す。この結果、両方の Au クラスタ上で equatorial 位に貴金属がついて反応が進行する方が、活性化障壁が小さいために有利であることが分かった。経由する中間安定状態の構造によって、安定状態 (INI, IM1, FIN) のエネルギーは、そう大きく変化ない。しかし、axial 型の中間体を形成すると TS1 と TS2 の両方でエチレン部位の二重結合の回転を伴う。この回転のため、活性化障壁が大きくなるため、equatorial 位に貴金属が吸着した中間

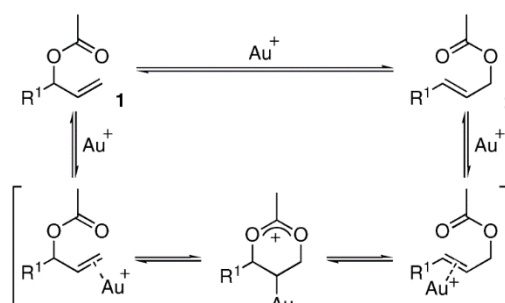


Figure 1 提唱されている反応機

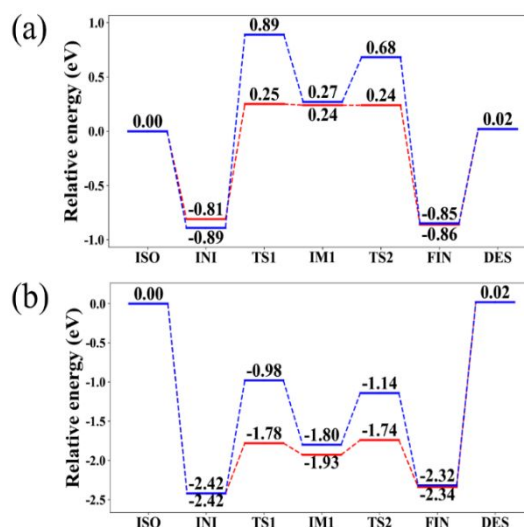


Figure 2 equatorial 型中間体と axial 型中間体のそれぞれを経由する反応経路の比較 (a) Au₅⁰ クラスタ上での反応 (b) Au₅⁺¹ クラスタ上での反応

環化安定状態 (IM1) を経由する反応経路で反応が進行することが明らかになった。

以上のことから、正電荷を持つ金クラスターがやはりソフトルイス酸触媒として機能する可能性を示した。そこで、さらにクラスター触媒のモデルとして、Pd、Pt そして、Au の原子数と全体の価数を変化させたクラスターモデル (Pd_n^x ($n=1 \sim 6, x=0, +1, +2$), Pt_n^x ($n=1 \sim 6, x=0, +1, +2$), Au_n^x ($n=1 \sim 6, 11 \sim 13, 19, 20, x=0, +1$)) を用いて、元素種、クラスターサイズ、電荷に関する触媒機能の相関性を検討した。Au のみ、11~13 核や 19、20 核のクラスターモデルを採用したのは、11 核以上のクラスターで初めて三次元の最安定構造をとることが報告されているためである。それぞれのクラスターモデル上で、スピン多重度を変化させ、最も安定な構造のクラスターを計算に用いた。クラスター上での吸着点は、配位数の少ないサイトが活性点となる傾向が一般的に多いため配位数の少ない金属原子を優先して計算した。ここで特に表記がなければ、各安定状態 (INI, IM1, FIN)、各遷移状態 (TS1, TS2)、各脱離状態 (ISO, DES) と表している。また、反応前の 3,4-DABE とクラスターモデルのエネルギーの和を基準 (0.00eV) として計算した相対エネルギーを表示する。反応物の吸着エネルギー (E_{ad}) は $E_{ad}=E_{INI}-E_{ISO}$ として定義し、生成物の脱離エネルギー (E_{de}) は $E_{de}=E_{DES}-E_{FIN}$ として定義する。

一部の 0 価のクラスターモデル (Pd_n^0 , $n=1, 2, 4-6$) 上では、環化の遷移状態 (TS1) と脱環化の遷移状態 (TS2) をとらずに 1 つの環状の活性化状態をとる。この環状中間安定状態の安定性については 4.2.4 章で詳細に議論する。また、一部の一原子当たりの正電荷が大きいクラスター (Pd_4^+ (FIN), Pt_2^+ (FIN), Pt_3^+ (INI, FIN), Pt_4^+ (FIN)) 上では、五員環を形成した安定状態が形成される。これらの五員環安定状態をとる原因は、これらのクラスターが通常カウンターアニオンなしに安定に存在できないような強い正電荷をもつためであると推測される。

まず、例として 6 核電荷中性のクラスター ($\text{Pd}_6^0, \text{Pt}_6^0, \text{Au}_6^0$) 上での反応経路計算の結果を用いて、電荷中性の貴金属種による触媒活性の違いを比較する。Au クラスター上での基質の吸着エネルギー (-0.61eV) は、Pd クラスター上と Pt クラスター上の吸着エネルギー (Pd: -1.61eV, Pt: -2.23eV) と比べてかなり小さい。電荷中性クラスターにおいて最大の活性化障壁は、貴金属種にかかわらず TS1 である。反応温度 150 を考慮に入れると、Au の活性化障壁 (1.04eV) は反応が進行するが、Pd や Pt の活性化障壁 (Pd: 2.01eV, Pt: 1.72eV) では反応はほとんど進行しないことが示唆される。しかし、 Au_6^0 上においても、TS1 の活性化障壁 (1.04eV) は、INI の状態から基質が脱離するエネルギー (0.61eV) に比べてかなり大きいので、0 価の Au クラスター上では反応自体は進行するが、反応速度は遅く、良い触媒活性は示さないことが予想される。

0 価のクラスター上での活性化障壁の高さの違いを検討するために、エネルギーダイアグラムを詳細に検討すると、Pd や Pt に比べて、Au ではエチレン部位吸着状態の安定化エネルギーが 1eV 以上小さいことが見て取れる。これらの原因を検討するために、INI の 逆供与の指標を比べた。また、比較対象として吸着物である 3,4-DABE (but-3-ene-1,2-diyl diacetate) とそのエチレン部位を単結合にした butane-1,2-diyl diacetate のデータも比較した。逆供与の指標として、吸着部位の C-C 結合距離と H-C-C-H の二面角を用いた。この時、C-C 結合長はにおける C1、C2 の結合距離を、H-C-C-H 二面角は H1、C1、C2、H2 の順でとった二面角を用いた。C-C 結合距離は、Pd6 で 1.40、Pt6 で 1.42 に対して、Au6 では、1.37 とより二重結合の結合距離 (1.33) に近くなる。また、H-C-C-H 二面角も Pd6 で 157.7°、Pt6 で 153.0° に対して、Au6 では 168° と同様に平面性が高い。これらの 逆供与の指標から、0 価において Pd や Pt に比べて、Au の 逆供与が小さいことが読み取れる。

まとめると、0 価の Pd や Pt は 逆供与により、エチレン部位吸着状態 (INI, IM1) が安定かされるため、IM1 と INI のエネルギー差が大きくなる。その結果、環化の活性化障壁 (TS1) が大きくなる。それに対して、0 価の Au 上では 逆供与が強くは起こらないため、IM1 と INI の

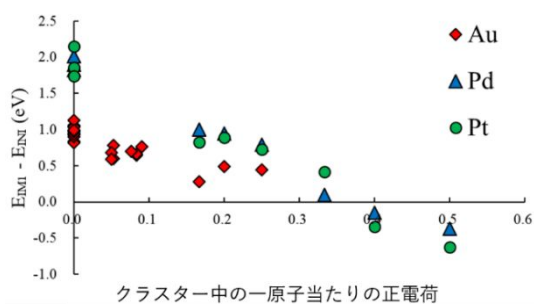


Figure 3 中間状態の不安定化と原子あたりの正電荷の相関関係

エネルギー差が大きくなる。その結果として、Pd と Pt に比べて、Au 上では活性化障壁が小さくなることが明らかとなった。これらの結果を、計算から得られた物性パラメータを用いて回帰分析を行ったところ、吸着状態と中間状態のエネルギー差がクラスター上の電荷をクラスター無いの原子数で除したものとよい相関があることが示された。この結果を、Figure 3 に示す。

この結果は、元素によって多少の差はあるものの、クラスターの正電荷と反応の進行しやすさに、相関関係があり、正電荷を有する貴金属元素の重要性を明確に示すものである。

そこで、次に、中性でもソフトルイス酸触媒活性を示す金クラスターをセリアに担持した場合のモデル触媒 (Figure 4) について、同様に触媒反応を検討した。

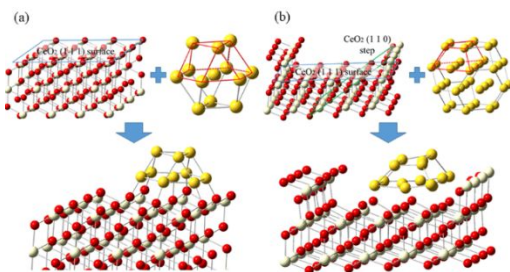


Figure 4 Au/CeO₂ スラブモデルの構造 (a) Au₁₀/CeO₂ (111), (b) Au₁₄/CeO₂ (stepped)

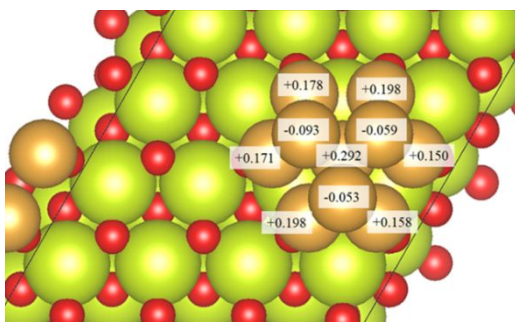


Figure 5 Au/CeO₂ スラブモデルの電荷

この計算から Au₁₀/CeO₂ (111) を計算例として説明する。Au₁₀/CeO₂ (111) の金クラスターの電荷は、Figure 5 に示す。孤立クラスターとは異なり大きな正電荷は、界面第 1 層の金原子にのみ存在している。そこで、第 1 層と第 2 層の金原子に対して孤立クラスターとどのような反応を検討した。その結果、第 1 層の反応は第 2 層に比べて吸着エネルギーは小さくなるが、活性化障壁は小さくなり、反応が進行しやすくなっている。この結果は、孤立クラスターと同様であるとともに、担持触媒系では、反応が、界面で進行する可能性を示している。このような電荷分布は、以前から報告されているもので、孤立クラスター系では電荷分布が露出原子サイトで平準化される傾向があるが、担持クラスター系では界面に正電荷が局在するという異なる傾向がある

ことが明確になった。白金に対しても検討を行ったが、白金担持触媒モデルでは、単純に正電荷を持つことが重要なことでは無く、白金周りに配位する元素が重要であることも示された。これらの結果から、不均一系触媒においてソフトルイス酸触媒反応を効率的に行うには、界面が重要であるとともに、塩素などを吸着させナノ粒子の表面に正電荷を有するサイトを増やすことが必要となることが明らかとなった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hayashi Akihide, Ato Yoshinori, Tada Kohei, Koga Hiroaki, Kawakami Takashi, Yamanaka Shusuke, Okumura Mitsutaka	4. 巻 16
2. 論文標題 Theoretical Investigation of Surface Oxidation of NiO/Au Core-Shell Catalyst	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 242 ~ 246
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2018.242	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tada Kohei, Koga Hiroaki, Okumura Mitsutaka, Tanaka Shingo	4. 巻 701
2. 論文標題 Estimation of spin contamination error in dissociative adsorption of Au ₂ onto MgO(001) surface: First application of approximate spin projection (AP) method to plane wave basis	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 103 ~ 108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2018.03.064	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ato Yoshinori, Hayashi Akihide, Koga Hiroaki, Tada Kohei, Kawakami Takashi, Yamanaka Shusuke, Okumura Mitsutaka	4. 巻 40
2. 論文標題 Theoretical study of correlations between the coordination structures and catalytic activities in polymer-stabilized Au nanocluster catalysts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 222 ~ 228
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25375	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kitakawa Colin, Maruyama Tomohiro, Onari Junta, Mitsuta Yuki, Kawakami Takashi, Okumura Mitsutaka, Yamaguchi Kizashi, Yamanaka Shusuke	4. 巻 24
2. 論文標題 Linear Response Functions of Densities and Spin Densities for Systematic Modeling of the QM/MM Approach for Mono- and Poly-Nuclear Transition Metal Systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 821 ~ 821
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules24040821	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koga Hiroaki, Tada Kohei, Hayashi Akihide, Ato Yoshinori, Okumura Mitsutaka	4. 巻 147
2. 論文標題 High NOx Reduction Activity of an Ultrathin Zirconia Film Covering a Cu Surface: A DFT Study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Catalysis Letters	6. 最初と最後の頁 1827 ~ 1833
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10562-017-2086-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koga Hiroaki, Tada Kohei, Hayashi Akihide, Ato Yoshinori, Okumura Mitsutaka	4. 巻 46
2. 論文標題 Potential of Titania-covered Ag Catalysts for NOx Reduction: A DFT Study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 456 ~ 459
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.161121	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Takuya, Murayama Toru, Sakaguchi Norihito, Okumura Mitsutaka, Ishida Tamao, Haruta Masatake	4. 巻 57
2. 論文標題 Carbon Monoxide Oxidation by Polyoxometalate-Supported Gold Nanoparticulate Catalysts: Activity, Stability, and Temperature- Dependent Activation Properties	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 1523 ~ 1527
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201710424	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 安渡佳典、林亮秀、川上貴資、山中秀介、石田玉青、徳永信、奥村光隆
2. 発表標題 Au-Ni 触媒のヘテロ接合効果に関する理論的研究
3. 学会等名 第122回触媒討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 信藤紘樹、林哲矢、林亮秀、安渡佳典、川上貴資、山中秀介、奥村光隆
2. 発表標題 金担持触媒のソフトルイス酸的挙動に関する理論的研究
3. 学会等名 第122回触媒討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安渡佳典、林亮秀、川上貴資、山中秀介、石田玉青、徳永信、奥村光隆
2. 発表標題 Au-Ni 触媒のヘテロ接合効果に関する理論的研究
3. 学会等名 第123回触媒討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 信藤紘樹、林哲矢、林亮秀、安渡佳典、川上貴資、山中秀介、奥村光隆
2. 発表標題 貴金属担持触媒のソフトルイス酸的挙動に関する理論的研究
3. 学会等名 第123回触媒討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 Theoretical study for the hetro-junction effect of Au catalysts
3. 学会等名 ICPAC2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 Theoretical Study for Catalysis by Au NCs
3. 学会等名 Asiannano2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 安渡佳典、林亮秀、川上貴資、山中秀介、奥村光隆
2. 発表標題 ポリマー固定化金ナノクラスター触媒の小僧と活性相関に対する理論的研究
3. 学会等名 第11回分子化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 古賀裕明、多田幸平、林亮秀、安渡佳典、奥村光隆
2. 発表標題 金属酸化物/金属逆接合におけるNO-CO反応の密度汎関数法による検討
3. 学会等名 第120回触媒討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 ヘテロ接合界面を用いた触媒機能発現に関する理論的研究
3. 学会等名 第120回触媒討論会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 Theoretical investigation for Catalysis by Gold
3. 学会等名 香港大学大阪大学ジョイントシンポジウム（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 Theoretical Investigation of the catalytic activities for Au cluster catalysts
3. 学会等名 GratamaWorkshop2017（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥村光隆
2. 発表標題 Catalysis by Au Nanoclusters: Interplay of Theoretical Calculations and Experiments
3. 学会等名 AWEST2017（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 奥村光隆, 林亮秀, 安渡佳典, 石田玉青, 村山美乃, 徳永信
2. 発表標題 金ナノクラスター触媒におけるアリルアルコールの異性化反応に関する理論的研究
3. 学会等名 第121回触媒討論会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----