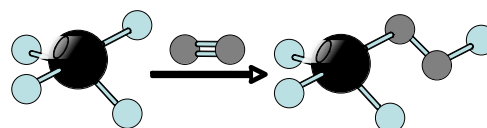


ディビジョン番号	5
ディビジョン名	錯体化学・有機金属化学

大項目	2. 有機金属化学
中項目	2-3. 有機遷移金属化合物
小項目	2-3-4. 炭素-水素結合切断反応

概要（200字以内）

化学工業の持続可能な発展のためには、原子利用効率の高い反応プロセスに移行せざるを得ない。炭素-水素結合の切断反応を基礎とする触媒的分子変換反応は、日本発の先駆的な反応が多いにもかかわらず、未だにメタンなどの未利用資源の有効利用、有機ファインケミカル製品の製造などにおいて十分な活用が行われていないため、基礎研究からフィージビリティスタディに至るまでの幅広い研究振興が必要とされる。

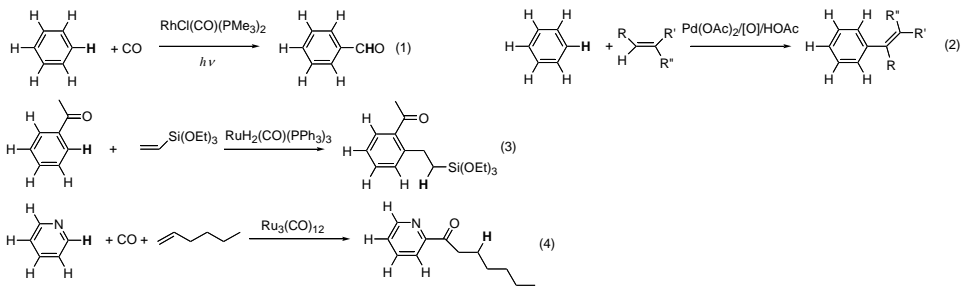


炭素-水素結合の切断反応による分子変換反応のモデル図

現状と最前線

現代の化学工業から排出される固体破棄物は、その70%がハロゲン塩であるとされており、物質を扱うすべての産業の基盤である化学工業が持続可能な発展を行うためには、価格競争力があり、かつ原子利用効率が高い反応プロセスへの移行が、国際競争力の維持・発展のために必要である。アメリカ化学工業会のまとめによると、現代の最新反応プロセスの90%が触媒反応であるため、触媒反応における高原子利用効率反応の開発が急務であり、2020年においてもアメリカ化学工業会が世界のリーダーシップを維持するためには、今後、分子触媒を重要研究課題の1つとするよう政策提言されている¹。炭素-水素結合の活性化反応は、このような分子触媒における主要な研究テーマであり、世界規模で研究開発が推進されている。

遷移金属錯体を用いた不活性な炭素-水素結合の切断反応は、1960年代から報告が行われているが、触媒反応は極めて限られていた。1990年前後から(1)坂倉/田中らのロジウム(I)錯体を用いたベンゼンと一酸化炭素からベンズアルデヒドの合成、(2)藤原らの芳香族化合物のアルケニル化反応、(3)村井/垣内らのルテニウム(II)を用いた芳香族ケトンのアルキル化反応、(4)茶谷/村井らのピリジン、一酸化炭素、アルケンの3成分連結反応など、研究室スケールの合成では日本発の触媒反応が知られるようになった。この間、アンカーとなる官能基を金属中心に結合させることにより結合の切断へ誘導する方法、高度配位不飽和種を創成する方法、ジボランを用いてアルキルボランを合成する方法などの有効性が明らかとされてきた。



これらの反応の社会的意義は、(1)メタンなどの未利用資源の有効利用、(2)主に有機ファインケミカル製品などの多品種少量生産プロセスにおける代替プロセスの提供が考えられる。

【メタンなどの未利用資源の有効利用】

現在の石油可採年数は49年であるが、確認埋蔵量の70%が比較的政情不安定なOPECに偏在し、国際競争力と安全保障上の問題、および温室効果ガス削減の観点から、非石油由来のメタンなどの有効利用が急務であり、本分野における一層の研究拡大が社会的要請である。

【有機ファインケミカル製品製造における石油代替効果】

有機ファインケミカル製品の製造において以下の石油代替効果が期待される。すなわち、科学技術戦略推進機構による統計では、現在生産されている有機ファインケミカル製品は約10,000種類であり、生産工程は平均5工程、平均生産量は年間10 tonである。また、副生成物の生成量は各工程あたり10重量%と見積もられている。このうち1重量%の製品の1段階の工程が、直接官能基化により削減され、その反応工程に関わる製品の10倍量の溶媒の蒸発と廃棄物処理が不要になると仮定した場合²、わずかに有機ファインケミカル製品の製造量の1重量%相当のプロセス変更により、年間当たり、原油換算で2,000 kLの省エネルギー効果が期待され、二酸化炭素排出量としては年間1,600 tonの大幅削減が可能である。

(1) Vision 2020, American Chemical Industries, TMCTG, 1995.

(2) 溶媒の蒸発潜熱 200 kcal/kg、原油発熱量 10,000 kcal/L、廃棄物処理には1 tonあたり2 kLの原油が必要であると計算

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

高活性かつ実用に耐えうる分子触媒の開発。

メタンの効率変換反応に関する基礎研究や素反応過程の解明など基礎的研究の拡充と理解。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

遷移金属錯体を用いた炭素-水素結合切断反応段階を含む有機ファインケミカル製品の商業的生産。本技術によるメタンなどの未利用資源の商業的有効利用。

キーワード

炭素-水素結合の活性化、未利用資源の有効利用、原子利用効率、分子触媒、直接官能基化

(執筆者： 平野雅文)