

ディビジョン番号	12
ディビジョン名	触媒化学

大項目	8. 均一系錯体触媒
中項目	8-1. 錯体触媒設計
小項目	8-1-1. ヘテロ金属分子触媒

概要（200字以内）

現在の高い文明を維持しつつ地球環境への負荷の少ない科学・技術が求められる今日、触媒は必要不可欠な物質である。遷移金属は、ファインケミカルズ、医薬品、機能材料を合成するための触媒として機能するが、異種金属の協同効果を利用した分子機能触媒は、多核の錯体分子の構造を明らかにすることができるようになった現在、無限の可能性を秘めた新しい触媒材料として期待される。元素化学を超える新たな領域の構築の基礎となる。

異核遷移金属間協同効果に基づく新触媒の昇龍石



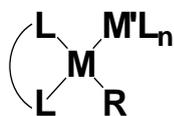
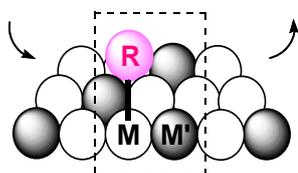
現状と最前線

触媒は、石油化学品、ファインケミカルズ、医農薬品の製造中間体などを合成するための必要不可欠であり、触媒化学は技術革新や社会基盤を支える重要な学術である。遷移金属化合物は、これらの分子変換反応における触媒として重要な役割を果たしてきた。均一系触媒分野では、遷移元素の特長を生かした反応が次々と見出され、高分子化学、有機合成化学を一変させてきた。一方、不均一系触媒が主流である工業触媒は、その反応機構は分子レベルでは解明されていないものの、基幹物質の製造には必要不可欠なものとなっている。これらの分子変換反応では、二つ以上の異種遷移金属の混合又は化学結合を通して全く新しい触媒機能を生み出す“いわゆる協同効果”や“協奏機能”が見出されることが多い。この機能を分子レベルで解明し、その特徴を基盤とする未来の触媒を構築することが急務である。

これまで、多くの触媒反応は単一金属種によるものとして理解されてきた。これは複雑な活性種の構造を人工的に構築や、その構造や反応性を解析の難しさによるもので、異種金属多核種が無視されてきたわけではない。しかし21世紀に入り分子構造の解析手段が飛躍的に進歩したため、この未踏分野への挑戦が可能になった。例えば、パラジウム-コバルト結合を有するヘテロ二核錯体のパラジウム-炭素結合への一酸化炭素の挿入反応は単核錯体に比べて数十倍速い。これは、いわゆる異種金属間による相乗効果であるが、触媒の分子構造や反応機構を実験的理論的に解析すると、二つの金属上を有機基がいたりきたり動くことによって達

成されていることが明らかになった。この基礎的知見は、チエタンの触媒的カルボニル化に応用され、効率的触媒反応へと展開された。このようなヘテロ金属種の協同効果は固体触媒や工業触媒では数多く知られているが、その分子化学はほとんど分かっておらず、経験的なものである。また、金属種の組み合わせは、ほぼ“無限”にあると考えられるので、あらゆる金属の組み合わせによる協同効果に関する分子レベルでのヘテロ金属分子触媒に関する研究は、有用な触媒反応を開拓するだけでなく、全く新しい学問領域さえを生み出す研究領域と考えられる。

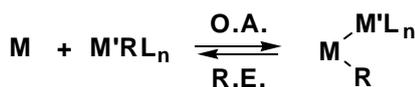
異種金属間協同効果を基盤とした触媒の創製



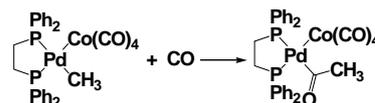
Synthesis of Simplest Models for Bimetallic Catalyst:

R = alkyl, allyl, aryl, alkoxide, amide, etc

(1) Analysis of Fundamental Reactions:



R group can freely move on bimetallic surface

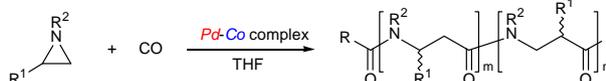


Co metal enhances CO-insertion at Pd

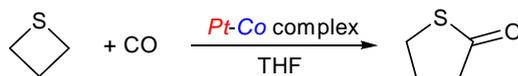
(2) Concert Catalysis Based on Synergy of Two Transition Metals:

For example:

Copolymerization



Thiolactone Synthesis



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

体系的な異種金属クラスターおよび複核錯体の合成法の確立

分子触媒における協同効果や協奏効果の開拓

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

協奏機能をもつ触媒系の創出と工業触媒への応用

協奏機能効果の分子レベルでの解明

キーワード

有機金属錯体、協奏機能触媒、分子変換、クラスター錯体、協同効果、相乗効果

(執筆者：小宮三四郎)