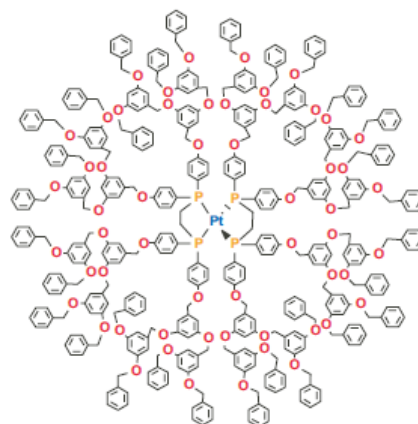


ディビジョン番号	12
ディビジョン名	触媒化学

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	8-1-4. ナノ錯体触媒

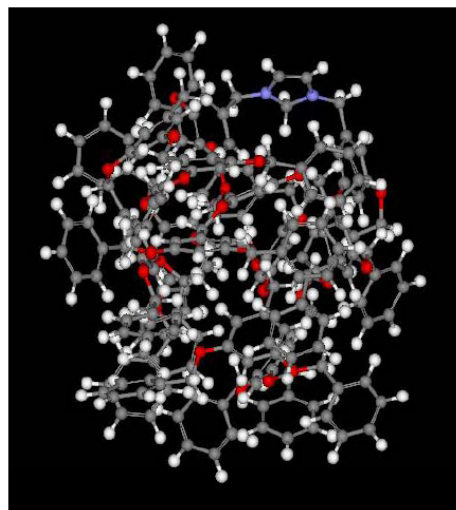
概要（200字以内）

従来の有機金属錯体触媒の開発は、触媒中心金属周辺数オングストローム圏内の修飾と最適化を主として行い、多くの成功を収めてきたが、一方限界に近づきつつもある。このため、有機金属錯体触媒の機能およびその効率を飛躍的に高めるためには、新たな概念の創出、そしてその実現が重要である。このような状況の下、右のような数ナノから数十ナノメートルの従来に比べより大きい触媒環境を有する均一系分子触媒の設計・合成は極めて重要である。



現状と最前線

ナノサイズ分子触媒の構築のためには、ナノの大きさを有する配位子の合成が重要となる。配位子をナノサイズ化する最も効率のいい方法の一つが dendrimer を利用することであろう。dendrimer は枝分かれを有する樹木状物質である。dendrimer の中心部は空間を多く有し「疎」であるのに対して、周辺部では立体的に混み合った「密」というように、興味ある立体構造の勾配を有している。この dendrimer 部位に触媒中心を配置するには、dendrimer 周辺部に触媒中心を複数個配置する方法と、dendrimer 中心部に一つの触媒中心を配置する方法がある。現状では、その合成の容易さから前者のものが多いが、上述の dendrimer の構造特性を十分に発揮するためには、後者のものが




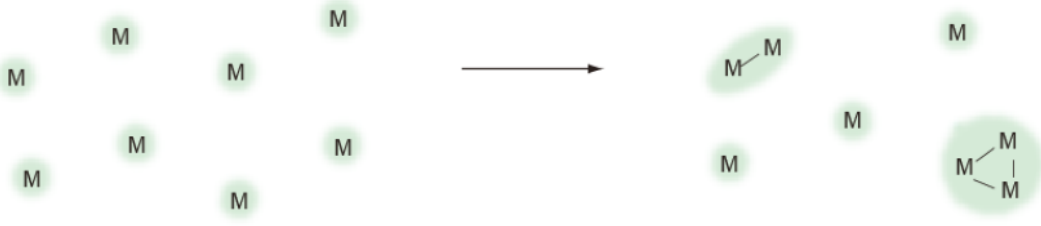
より重要になるであろう。右上の図は、後者の例の一つであるベンジルエーテル構造からなる柔軟な dendrimer 部位を有する N-複素カルベン配位子の構造である。


均一系の触媒環境をナノサイズ化することにより、これまでの均一系触媒にはない機能を付与できることが明らかになってきた。均一系触媒には、「中心金属の会合」と「配位子の過剰

配位」により触媒の活性および選択性が低下するという本質的な問題がある（下図）。しかし、触媒環境をナノサイズ化することにより、触媒中心金属の会合、凝集を防ぎ、金属黒などの析出がない触媒系の構築が可能になることが示された。さらに、 dendrimer配位子の触媒中心に配位する部位は空間的に空いており、周辺部は密であるという特性を活かすことにより、配位子の過剰配位を防ぐことも可能となった。これは、触媒中心からナノメートル以上離れた部位の影響が、触媒中心に強く現れる極めて顕著な例であり、ナノサイズを有しない触媒系では決して達成できない。

さらに、 dendrimerの世代（枝分かれの度合い）が上がるにつれて、触媒活性が上昇するという、いわゆる「正の dendrimer効果」も発見され、ナノサイズの触媒環境により、触媒活性、選択性が著しく向上する具体例が次々に見いだされている状況である。また、ナノ効果の解明など、他の学問分野に対する波及効果も大きい。

 触媒活性種の会合



 配位子の過剰配位



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. 分子認識能を有する均一系触媒の実現
 2. 実用均一系環境触媒の実現
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 1. ナノサイズ効果本質の解明。
 2. 酵素の選択性を凌駕する分子触媒の実現

キーワード

ナノ触媒, 環境触媒, 分子触媒, dendrimer, 高機能

(執筆: 辻 康之)