

Industrial Catalyst News

触媒学会工業触媒研究会

パラジウム化合物のベンゼン補足条件発見

1. 背景

自然科学研究機構分子科学研究所の村橋哲郎教授、山本浩二助教、柳井毅准教授、倉重祐輝助教らの研究グループは、パラジウム化合物が溶液中でベンゼンをとらえる仕組みを解明することに成功した。

パラジウム(Pd)は触媒として極めて重要な遷移金属の一種です。近年、有機溶媒や水に溶解するパラジウム化合物が触媒とする反応機構が解明され、反応設計が可能となりつつあります。しかし、工業的に重要な有機化合物であるベンゼンを溶媒中でどのように安定的に補足するのか謎でした。パラジウム化合物とベンゼンが結合する力は極めて弱いと信じられており、溶液中のパラジウム化合物がベンゼンを安定してとらえる現象自体がこれまで観測されたことはなかった。研究チームは、パラジウム原子が複数個集まって生じるパラジウムクラスターがベンゼンを安定的に捉える能力を持つ可能性に着眼して研究を進め、パラジウム3原子のクラスターがベンゼンを安定的に捉えることを初めて明らかにすることに成功した。

2. 成果

パラジウム原子の個数を制御し、パラジウムクラスターを溶液中で合成する手法を開発してきた。今回、3個のパラジウム原子を集合させたパラジウムクラスターが、ベンゼンを安定的に捉えることを観測することに成功

した。シクロオクタテトラエン(8員環有機分子)を背面配位子として用いるとパラジウムクラスターがベンゼンと強く結合することを発見しました。背面配位子として、6員環分子や7員環分子を用いた場合には、ベンゼンを安定的に補足できませんでした。8員環有機分子がベンゼンを補足する要因について、理論計算により究明した。

パラジウム原子4個のクラスターが、ナフタレンを安定的に補足させることも確認した。この場合もシクロオクタテトラエン(8員環有機分子)が背面配位子として優れている。

3. 今後の展開

ベンゼンとパラジウムクラスターの結合様式に対する理解が前進し、パラジウム触媒を用いたベンゼン環の分子変換反応のメカニズムを解明する上での重要な知見を与えると期待される。

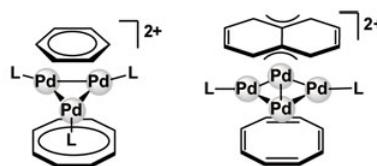


図 ベンゼンやナフタレンをとらえたパラジウムクラスターの分子構造 (L=アセトニトリル配位子)

(分子科学研究所 15/2/2 プレスリリース・
化工日 15/2/10 記事を基に作成)

(文責 広栄化学 井口 晃)