

酸化付加反応の中間体モデル錯体の電子状態解明

最終更新日：2020/04/24

【プロジェクト代表者】
理科教育ユニット
教授
長澤 五十六

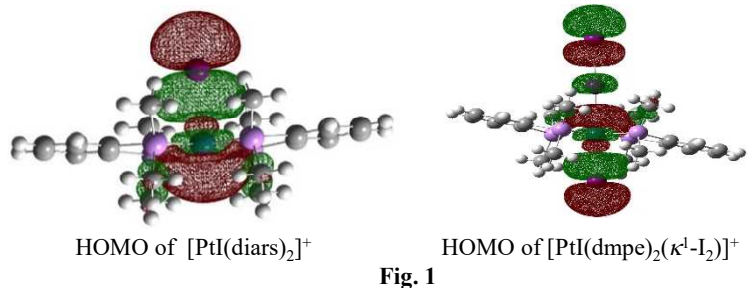
キーワード

・配位化学／錯体化学 ・酸化付加反応 ・白金錯体 ・金属錯体触媒

プロジェクトの内容（目的・方法・結果と意義）

目的: 酸化付加反応は金属錯体の触媒利用に深く関連する反応であり、その反応機構解明の研究は古くから興味を持たれてきた。筆者等がこれまでに得た研究成果を基に、三級アルシン系配位子を持つ白金錯体の理論化学計算をおこない、反応初期の反応機構解明を目的として研究をおこなった。

方法: 本研究では白金(II)錯体、 $[\text{PtI}(\text{diars})_2]^+$ 及び $[\text{PtI}(\text{dmpe})_2(\kappa^1\text{-I}_2)]^+$ の電子状態を考察するため、理論計算をおこなった。それぞれの単結晶X線構造解析の結果を初期構造に用い、量子化学計算プログラムパッケージ、Gaussian03によるDFT計算を、B3LYP法でおこなった。



結果と意義: 本研究で得られた五配位正方錘型錯体は、電子状態の検討から酸化付加反応の出発物質として考えられる。理論化学的研究は、 $[\text{PtI}(\text{diars})_2]^+$ には求電子剤が攻撃しやすい空間が存在し、ヨウ素分子がその部位を攻撃することで $[\text{PtI}(\text{diars})_2(\kappa^1\text{-I}_2)]^+$ が生成する反応過程を支持する結果を示した。

すなわち、 $[\text{PtI}(\text{diars})_2(\kappa^1\text{-I}_2)]^+$ は酸化付加反応の初期段階で生成する中間体の構造を示すものであり、酸化付加反応の反応機構解明に重要な役割を果たす物質であることを確認できた。

成果の応用可能性（私たちの活動の成果は、このような分野にこのように貢献することができます。）

- 1) 学問的観点では、無機化学(錯体化学)領域において、白金の化学に新たな構造化学の知見と、物理化学的性質に関する知見を与える。
- 2) 学問的観点では、無機化学(錯体化学)領域において、金属イオンの電子移動に関する新たな知見を与える。
- 3) 学問的観点では、無機化学(錯体化学)領域に止まらず、有機合成分野に対しても新たな知見を与える。
- 4) 工業的応用の観点では、新たな金属錯体触媒の開発に対する設計指針を与えることができ、例えば、二酸化炭素の還元反応などに応用できる金属錯体触媒の開発にヒントを与える可能性を有している。
- 5) 工業的応用の観点では、気体分子を吸着する能力を持った化合物の開発にヒントを与え、特定の化学物質に対するセンサー等の開発が期待できる。

このプロジェクトの形成に寄与した制度等

平成31年度学長裁量経費研究推進支援プロジェクト

プロジェクト構成員（所属・職名・氏名・役割分担）

福岡教育大学・教授・長澤五十六・研究の総括、研究の立案と各種機器測定の実行