

反応性有機金属種の X 線吸収分光 (XAS) 分析を基盤とする反応機構研究

帝京科学大学/分子科学研究所 高谷 光

X 線吸収分光 (XAS) は測定試料の状態 (固体・液体・気体) を問わず、様々な元素を含む複雑系分子の同定・構造解析が可能な分析手法である。そのため、従来から固体触媒分野において広く用いられてきた他、近年では電池分野において必須の分析手段となっている。我々の研究グループでは、常磁性のため溶液 NMR による分析が困難な Fe 等の均一系 3d 金属触媒について、XAS を用いる活性種の同定・構造解析および反応機構解析に関する系統的な研究を推進している。本セミナーでは、XAS 測定と量子化学計算のインタープレイによって、NMR 等の従来型の分光手法では分析が困難な有機金属種の同定・構造決定に基づく反応機構研究について紹介する。



参考文献

- [1] R. Takahashi, A. Hu, P. Gao, Y. Gao, Y. Pang, T. Seo, J. Jiang, S. Maeda, H. Takaya, K. Kubota, H. Ito, “Mechanochemical Synthesis of Magnesium-based Carbon Nucleophiles in Air and Their Use in Organic Synthesis”, *Nature Commun.* **12**, 6691 (2021). ※Chemistry & Material Science 分野 2021 年トップ 25 論 (DL 数 1 位), 24125DL (2022/11/16 現在)
- [2] Y. Kanazawa, T. Mitsudome,* H. Takaya,* M. Hirano,* “Pd/Cu-Catalyzed Dehydrogenative Coupling of Dimethyl Phthalate: Synchrotron Radiation Sheds Light on the Cu Cycle Mechanism”, *ACS Catal.*, **10**, 5909 (2020)
- [3] R. Agata, H. Takaya, T. Iwamoto, T. Hatakeyama, K. Takeuchi, N. Nakatani, M. Nakamura,* “Iron-Catalyzed Cross Coupling of Aryl Chlorides with Alkyl Grignard Reagents: Synthetic Scope and FeII/FeIV Mechanism Supported by X-ray Absorption Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **92**, 381 (2019). BCSJ 賞

共催
エネルギー物質科学研究センター
JST CREST