

有機金属触媒化学における XAFS の活用

(大阪大学¹・阪大 ICS-OTRI²・理研 BDR³) ○植竹 裕太^{1,2,3}

Application of XAFS in organometallic chemistry (¹Osaka Univ., ²ICS-OTRI, Osaka Univ., ³RIKEN BDR) ○Yuta Uetake^{1,2,3}

X-ray absorption spectroscopy (XAS) is a powerful technique to analyze the electronic state and structure of molecules. However, its application to the mechanistic study on homogeneous catalytic reactions and the electronic structure analysis in organometallic complexes have been still limited. The speaker has developed measurement equipment and apparatus suitable for solution-phase XAS experiments, and has shown that this method is quite useful to understand the reaction mechanism and electronic nature of transition-metal complexes. In this presentation, I will show some examples from the previous studies that are considered to be useful for future XAS users in the field of organic chemistry.

Keywords : XAFS; homogeneous catalysts; electric structure analysis; local structure analysis

X線吸収分光法(XAS, XAFS)は、不均一系触媒や固体物性研究などの分野において、その局所構造や電子状態を明らかにする有用なツールであり、広く用いられている。一方で、有機溶媒を用いる均一系触媒反応においてはXASの活用はまだまだ一般的ではない。その理由として、XASからどのような物理情報が得られるかについてあまり知られていないことに加え、一般に不活性雰囲気が必要であることや、測定に必要な溶液セルについて情報公開・共有が行われて来なかったという背景がある。

本講演では、我々がこれまでに実施してきたXASを用いた均一系触媒反応のメカニズム研究や、有機金属錯体の電子状態解析の研究例を中心に、XASからどのような情報が得られ、どういった議論が可能なのかについて解説する¹⁻⁶。もともと有機合成化学が専門で、放射光分析を専門としていなかった研究者(講演者)がXASに取り組み、その過程で直面した問題や課題を共有することで、有機金属化学分野におけるXASの利活用を促進できたと思う。

- 1) K. Kasama, K. Kanomata, Y. Hinami, K. Mizuno, Y. Uetake, T. Amaya, M. Sako, S. Takizawa, H. Sasai, S. Akai, *RSC Adv.* **2021**, *11*, 35342–35350.
- 2) Q.-F. Xu-Xu, Y. Nishii, Y. Uetake, H. Sakurai, M. Miura, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 17952–17959.
- 3) T. Niwa, Y. Uetake, M. Isoda, T. Takimoto, M. Nakaoka, D. Hashizume, H. Sakurai, T. Hosoya, *Nature Catal.* **2021**, *4*, 1080–1088.
- 4) Y. Yamauchi, Y. Hoshimoto, T. Kawakita, T. Kinoshita, Y. Uetake, H. Sakurai, S. Ogoshi, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 8818–8826.
- 5) I. M. DiMucci, J. T. Lukens, S. Chatterjee, K. M. Carsch, C. J. Titus, S. J. Lee, D. Nordlund, T. A. Betley, S. N. MacMillan, K. M. Lancaster, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 18508–18520.
- 6) I. M. DiMucci, C. J. Titus, D. Nordlund, J. R. Bour, E. Chong, M. D. Kosobokov, C. D. Martin, N. Nebra, D. A. Vicic, S. Yruegas, S. N. MacMillan, J. Shearer, K. M. Lancaster, *ChemRxiv* **2022**, 10.26434/chemrxiv-2022-z7tc5-v2.