

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名：  $\pi$ 空間を有する金属オキシ種によるメタン酸化

2. 個人研究者名

人見 穰（同志社大学理工学部 教授）

3. 事後評価結果

メタンの酸化反応に酵素（メタンモノオキシターゼ）の設計原理を応用した遷移金属錯体触媒の開発において、当初想定したメタンの  $\pi$ 空間への取り込みによる酸化反応は達成されませんでした。鉄錯体を基本とした触媒設計コンセプトを発展させることにより、アルカンなどの炭素—水素結合の酸化反応に対して高い活性と選択性を有する触媒の開発、その反応メカニズムの解明、新たな反応系の探索など、様々な興味深い知見が得られたことは高く評価できます。さらに、これらの錯体触媒を電極触媒として用いることで鉄五価オキシ種の発生とそれによるエポキシ化反応の実証は興味深い成果であると思います。

研究の進め方について、鉄錯体の配位子の選択、二量化など広い視点から研究を展開し、いずれも精密な同定技術、立体構造や鉄レドックス特性解析などでレベルの高い実験を遂行しました。また、電気化学的手法の取り込みや装置開発、理論計算研究者との共同研究の実施など、研究の幅を広げたことは研究者としての幅・視野を広げる大きな契機になったことと思います。また錯体化学に対する深い見識にもとづき常に積極的に活発な議論を行い、領域内の活性化に大きく貢献しました。

直ぐに工業プロセスへの展開という研究ステージではありませんが、得られた研究成果は鉄錯体触媒化学としての学術的価値は大きく、関連物質の精密合成への展開に繋がることが期待されます。

（2021年9月追記）

なお、本課題は新型コロナウイルスの影響を受けて6ヶ月間研究期間を延長し、電気化学的酸化により得られている鉄4価オキシ種、鉄5価オキシ種のうち、室温において安定に発生可能である鉄4価種に絞り、触媒活性種と反応性の詳細な検討を行いました。その結果、活性種として極めて稀な鉄4価ヒドロキシ種であることを突き止め、さらに、C-H結合解離エンタルピーの異なる基質との反応速度を決定し、既に報告されている鉄4価とは異なる反応性を有することを新たに見出しました。研究期間の延長により、幾つかの新しい知見が得られ、さらに新規な触媒開発への足掛かりに繋がるものと思います。