

安定で高性能なパラジウム触媒を開発

化学合成で広く使われているパラジウム（Pd）触媒について、安定性と高い触媒機能を兼ね備えた新しい物質を開発しました。このPd触媒は、空气中で長期間保存が可能な上、副反応を起こしにくいという特徴があり、効率的な有機材料合成や医薬品製造への応用が期待されます。

化学合成においては、物質を効率よく作るためにしばしば「触媒」が使われます。中でもパラジウム（Pd）触媒は、2010年にノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応でも用いられており、医薬品や有機EL材料の合成などに広く利用されています。しかし、従来のPd触媒は、空气中で不安定であったり、活性化の段階で目的とは異なる副反応が起こったりするなど、その扱いにくさが課題でした。

本研究では、Pd触媒の分子構造を工夫することにより、空气中でも長期間安定に保存でき、副反応を伴わずに働く新しいPd触媒を開発しました。これにより、よりクリーンで効率の良い化学反応が可能になります。

本成果は、医薬品や機能性材料の開発の他、工業生産におけるコスト削減や環境負荷の低減にも貢献すると期待されます。

研究代表者

筑波大学数理物質系

桑原 純平 准教授

研究の背景

化学合成では、目的の物質を効率よく作るために、しばしば「触媒（自身は変化せず、反応速度を変化させる物質）」が使われます。中でもパラジウム（Pd）触媒^{注1}は、医薬品や電子材料の製造に広く利用されており、異なる分子同士をつなぐ「クロスカップリング反応^{注2}」が2010年にノーベル化学賞を受賞したことから、その重要性がよく知られています。しかし従来のPd触媒は、空気中で分解しやすく取り扱いが難しいことや、反応の開始時に不要な副反応が起こることが課題でした。

研究内容と成果

本研究では、従来のPd触媒が抱えていた「安定性の低さ」と「活性化時の副反応の発生」という課題を同時に解決することを目指しました。Pd触媒の分子構造を工夫し、保管時にはPdを保護する部位を導入し、使用時にはそれらが速やかに外れて活性化されるよう設計したところ、空気中で安定に保管でき、使用時には副反応なく活性化状態に変わる新しいPd触媒の開発に成功しました（図1）。

このPd触媒は、空気中において固体だけでなく溶液中でも安定に存在でき、特別な条件を必要とせずに取り扱えるという利点があります。従来の触媒とは異なり、不活性な窒素ガスの雰囲気下で保管や操作を行う必要がなく、ユーザーフレンドリーな触媒と言えます。さらに、使用時には穏やかな加熱によって速やかに活性化し、触媒として高い機能を発揮します。安定化するために導入していた部位が外れることで活性化できるため副反応が起こらず、原料を無駄にすることなく目的の反応を効率よく進めることができます。

実際に、このPd触媒を用いた反応では、少量の触媒でも高い効率で反応が進み、従来技術と同等以上の性能を示しました（図2、表1）。また、有機ELや太陽電池材料の合成にも適用できることが確認されました。本研究成果は、化学合成をより簡便で効率的にするだけでなく、合成時における資源の節約や廃棄物の削減にも貢献するものです。

今後の展開

今後は、本Pd触媒を実際に新材料の合成に応用することで、より高精度かつ迅速な材料開発の実現を目指します。また、出願中の特許を基に社会実装を進め、医薬品や有機材料の製造現場で広く利用される技術へと発展させていきます。

参考図

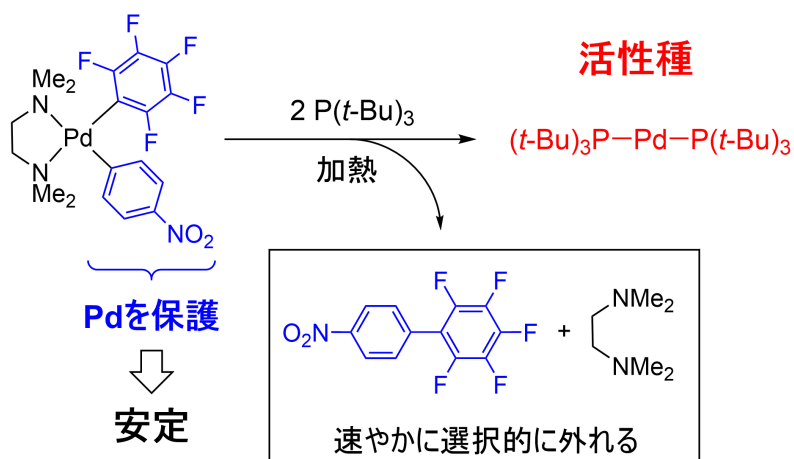


図1 本研究で開発した触媒の概要

青色で示したベンゼン環がPdを保護するため、空気中でも安定して存在できる。触媒として使用する

際には、カップリング反応に必要な試薬である $P(t\text{-Bu})_3$ (トリ-tert-ブチルホスフィン) を加えて加熱すると、このベンゼン環が外れて活性種 (赤色) が生成する。

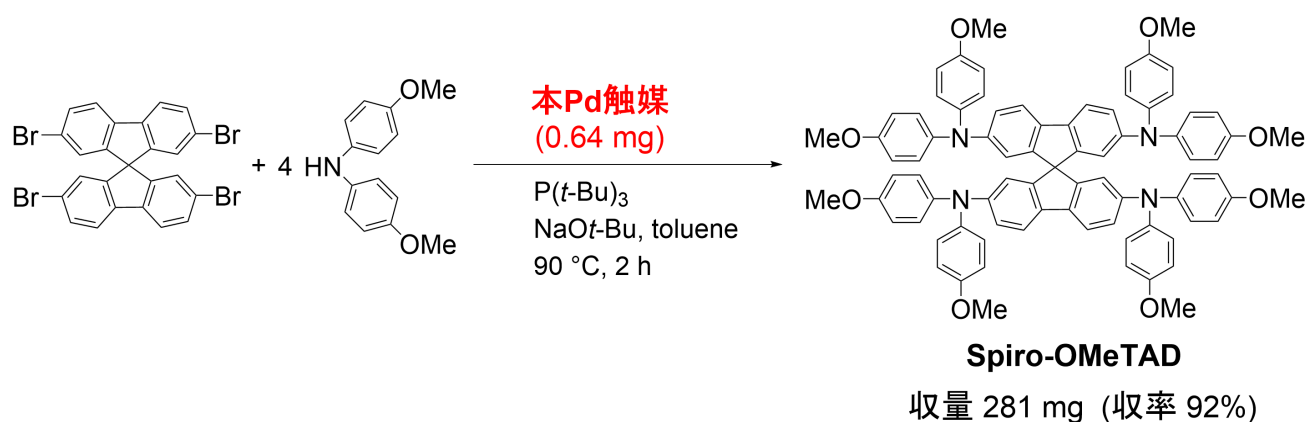
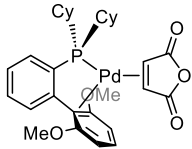


図2 本 Pd 触媒を用いた材料合成例

本 Pd 触媒を 0.64 mg 用いたところ、ペロブスカイト型太陽電池に用いられる材料である Spiro-OMeTAD が 281 mg 得られた。触媒 1 分子が反応に関わる回数を示す「触媒回転数」は 736 に達し、Spiro-OMeTAD の合成において、これまでに報告されている先行研究と比べて、最高の値を達成した (表 1)。

表 1 触媒の性能比較

	Pd 触媒	触媒量 / mol%	反応時間 / h	収率 / %	触媒回転数	触媒回転頻度 / h ⁻¹
本研究	本 Pd 触媒	0.5	2	92	736	368
従来技術 1	$Pd_2(dba)_3$	8	12	45	22.5	1.9
従来技術 2	 SPhos-Pd-MAH	1	24	81	324	13.5
従来技術 3	$Pd(OAc)_2$	8	24	75	37.5	1.6

従来技術1 N. J. Jeon, H. G. Lee, Y. C. Kim, J. Seo, J. H. Noh, J. Lee and S. Il Seok, *J. Am. Chem. Soc.*, 2014, **136**, 7837–7840.

従来技術2 J. Huang, M. Isaac, R. Watt, J. Becica, E. Dennis, M. I. Saidaminov, W. A. Sabbers and D. C. Leitch, *ACS Catal.*, 2021, **11**, 5636–5646.

従来技術3 S. Mattiello, G. Lucarelli, A. Calascibetta, L. Polastri, E. Ghiglietti, S. K. Podapangi, T. M. Brown, M. Sassi and L. Beverina, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, 2022, **10**, 4750–4757.

用語解説

注1) パラジウム (Pd) 触媒 (Pd catalyst)

金属の一種であるパラジウム (Pd) を含む触媒で、化学反応を速く、効率よく進める働きを持つ。特に分子同士をつなぐ反応に優れ、さまざまな合成反応に用いられる。

注2) クロスカップリング反応 (Cross-coupling reaction)

異なる2種類の分子をつなぎ合わせて新しい分子を作る反応で、Pd触媒を用いると高い効率で進行する。医薬品や電子材料の合成に広く利用されている。

研究資金

本研究は、触媒科学計測共同研究拠点 (25DS0873 and 26DS0930) の支援を受けて実施されました。

掲載論文

【題名】 Balancing Stability and Reactivity: A Robust Pd(II) Biaryl Precatalyst for Rapid Generation of Catalytically Active Pd(0) Species.

(安定性と反応性を両立した、活性Pd(0)種を迅速に生み出す高耐久Pd(II)ビアリール触媒)

【著者名】 W. Li, T. Iida, M. Kaneko, Z. Hu, T. Kanbara, and J. Kuwabara

【掲載誌】 *Inorganic Chemistry Frontiers*

【掲載日】 2026年5月27日 (オンライン先行公開)

【DOI】 10.1039/D6QI00664G

問い合わせ先

【研究に関すること】

桑原 純平 (くわばら じゅんぺい)

筑波大学 数理物質系 准教授

URL: <https://trios.tsukuba.ac.jp/researcher/0000000760>

【取材・報道に関すること】

筑波大学広報局

TEL: 029-853-2040

E-mail: kohositu@un.tsukuba.ac.jp