

2023 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的なマテリアル

2023 年度採択研究代表者

奥村 慎太郎

自然科学研究機構 分子科学研究所

助教

プラスチックを還元分解する革新的光触媒の創製

## 研究成果の概要

低分子エステルを還元する新規光触媒の開発に取り組んでいる。①エステルを還元できる高還元力を有すること・②可視光を吸収すること・③有機分子であること・④水中で機能すること、の4点を満たすように、*N*-BAP と名付けたイオン性有機光触媒を新たにデザインした。*N*-BAP の基底状態および励起状態における還元力・酸化力を DFT 計算によって見積もったところ、エステル還元で最低限必要な値を示したため、実際に *N*-BAP の合成を行った。*N*-BAP は市販の試薬から一段階で合成可能であった。次に *N*-BAP を用いて、ポリエステルと類似骨格を有するジエチルテレフタレート<sup>1</sup>の還元反応に取り組んだ。種々の反応条件検討の結果、アセトニトリルと水の混合溶媒中、無機塩存在下、*N*-BAP とジエチルテレフタレート<sup>1</sup>に対して、可視光を照射したところ、期待どおり、エステルの還元反応が進行し、対応するベンジルアルコールが高収率で得られた。合成した *N*-BAP に対して、紫外可視吸収分光、蛍光分光、サイクリックボルタンメトリーの測定を行ったところ、計算値と矛盾ない値が得られ、確かに可視光の吸収および高い還元力・酸化力を有することを明らかにした。光酸化還元触媒としてはこれまで、イリジウムやルテニウムなどの遷移金属錯体や 1,2,3,5-Tetrakis(carbazol-9-yl)-4,6-dicyanobenzene (4-CzIPN)<sup>2</sup>とよばれる有機分子などが広く利用されている。しかし、本研究のエステル光還元条件下、*N*-BAP に代えてこれらの光触媒を用いても、ベンジルアルコールはほとんど得られなかった。また、コントロール実験から、本エステル光還元では、可視光、光触媒、無機塩、水はすべて必須であることが分かった。