

2025年10月6日

長岡技術科学大学

1-オクテンを選択的に3つだけつなげる 新しいチタン触媒を開発 —化学原料の効率的な合成に向けた新技術—

ポイント

- 正電荷を持つ新規配位子^{注1}を導入したチタン錯体触媒^{注2}を開発。
- 1-オクテンを選択的に3つだけつなげる新しい触媒反応を実証。
- 化学原料の生産コストの削減に貢献する技術基盤を開拓。

概要

長岡技術科学大学工学研究院物質生物系の戸田智之助教らの研究グループは、新たに独自設計したチタン錯体触媒を開発し、1-オクテンという小さな分子を「選択的に3つつなげる（トリマー化^{注3}）」反応を実証しました。これまで、重合反応では分子の長さや形を思い通りに制御するのは難しいとされてきましたが、本研究により狙った長さを選択的に合成できる新しい道が開かれたこととなります。今回の成果は学術誌 *Chemical Communications* に掲載され、論文の図が同誌の外側裏表紙（outside back cover）に採用されました。



Showcasing research from Professor Toda's laboratory,
Department of Materials Science and Bioengineering,
Nagaoka University of Technology, Niigata, Japan.

Synthesis and structure of titanium complexes with
phosphonium-bisphenolate ligands ([$\text{Ti}(\text{D}_3\text{PH})_2$]⁺) and
their catalytic trimerization of 1-octene

Depiction of titanium phosphonium-bisphenolate complexes
mediating the selective trimerization of α -olefins, where
1-octene follows the catalyst's orchestration, forming
trimers that elegantly 'dance' in a visually striking molecular
landscape.

Image reproduced by permission of Tomoyuki Toda from
Chem. Commun., 2025, **61**, 15594.

As featured in:



See Tomoyuki Toda et al.,
Chem. Commun., 2025, **61**, 15594.

図1（表紙画像）：本研究のイメージ（*Chemical Communications* 外側裏表紙に採用）

Image reproduced by permission of Tomoyuki
Toda et al. from *Chem. Commun.* Published by
the Royal Society of Chemistry.

詳細

【研究の背景】

α -オレフィンの1つである1-オクテンは、化学工業において広く使われる基本原料です。1-オクテンをつなげていく反応（オリゴマー化・重合）により、ポリアルファオレフィンとよばれる物質が合成され、これはエンジンオイルなどに使われる合成潤滑剤の主要な原料として利用されています。しかし、このような分子をつなげる反応の進み具合を思い通りに制御することは難しく、狙った通りに**特定の長さ・形の分子**（オリゴマーや高分子）だけを作ることは、材料合成分野の長年の課題です。化学反応を引き起こす“触媒”は、この反応の進み方や生成物の種類を左右するため、その設計が重要になります。今回の研究では、どのような触媒であれば、1-オクテンを“選択的に3つだけつなげる（トリマー化）”ことができるのか（図2）、分子レベルで設計・検証しました。

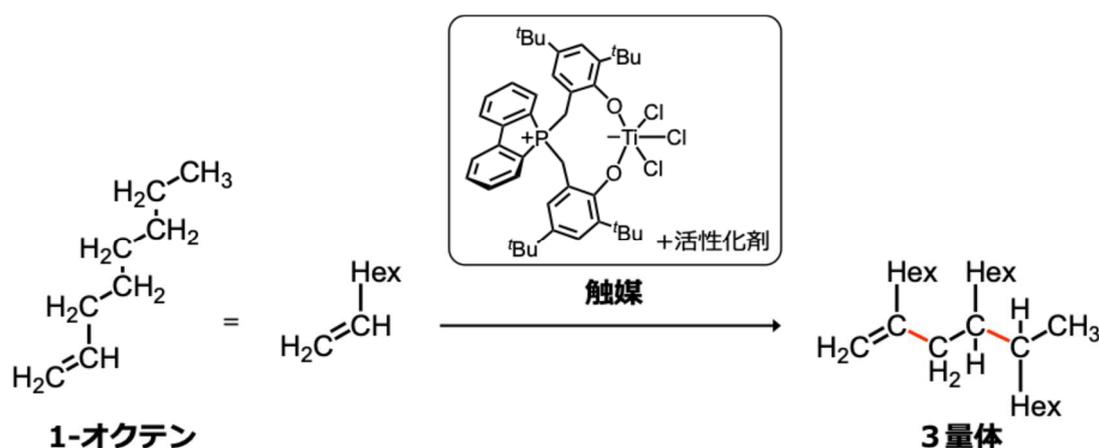


図2：開発した触媒による、1-オクテンの選択的トリマー化の化学反応式。

【研究の内容と成果】

新しい触媒分子の設計・合成・構造の確認

研究チームは、金属元素のチタンを中心として、正に帯電するリン原子を含むホスホニウムとビスフェノール骨格を組み合わせた新規配位子を含む、チタン錯体触媒を合成しました。合成したチタン錯体について、核磁気共鳴分光法^{注4}、元素分析^{注5}、単結晶X線構造解析^{注6}（図3）などの多面的な構造解析を実施し、狙い通りの分子の形や結合の様子になっていることを明らかにしました。

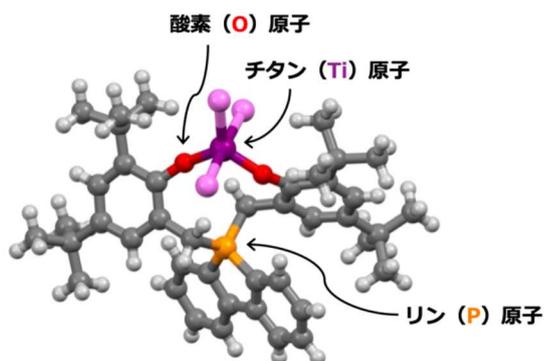


図 3 (触媒の構造)：合成したチタン錯体の分子構造 (単結晶 X 線構造解析により明らかになった分子の構造を掲載)。

触媒としての評価

このチタン錯体を用いて、1-オクテンの連結反応を実施したところ、**選択的にトリマー化**できることが実証されました。副反応として1-オクテンが「3つ」ではなく、2つ、4つ、5つ以上つながる反応が抑えられ、狙った通りに3つのみがつながった分子のみを優先して生成する点が大きな特徴です。

【今後の展開】

工業的応用の可能性：選択的なオリゴマー合成が可能になれば、後工程の分離・精製コストや廃棄物を減らし、より効率的に高付加価値化学品を作れる可能性があります。例えば潤滑剤原料や特殊モノマーの精密合成などが想定されます。

触媒設計の指針提供：今回の「プラスの電荷を持つ配位子」を使ったアプローチは、他の金属や他のアルケン類 (別の原料) に対しても有効な触媒設計指針となり得ます。

基礎科学的価値：分子設計が反応の選択性に与える影響を明確に示した点で、触媒化学や錯体化学の理解を深めます。

ただし、工業化にはスケールアップや耐久性評価、安全性評価が必要となり、さらなる性能の改善も必要となります。

【研究成果の公表】

本研究成果は、学術誌 *Chemical Communications* に掲載されました。

論文タイトル：**Synthesis and structure of titanium complexes with phosphonium-bisphenolate ligands “{P⁺[O₂]}H₂” and their catalytic trimerization of 1-octene**

著者名：Tomoyuki Toda, Yu Cheng and Katsuhiko Takenaka

掲載誌：Chemical Communications, 2025, 61, 15594.

掲載日：2025年9月2日

DOI：<https://doi.org/10.1039/D5CC04541J>

【用語解説】

(注1) **配位子 (はいいし)**：金属の“手”のように働いて、金属にくっつく（結合する）分子。大きさや金属に結合する強さにより、触媒の性質を大きく左右する。

(注2) **触媒 (しょくばい)**：化学反応を速くしたり、ある特定の方向に進めやすくしたりする物質。触媒自体は消費されず、何度も繰り返し同じ反応を起こすことができる。化学や材料の研究だけでなく、工業的な生産プロセスでも非常に重要。

(注3) **トリマー化**：同じ分子が3つつながって新しい大きな分子になる反応。三量化反応。

(注4) **核磁気共鳴分光法 (NMR)**：強い磁場の中で原子の核を共鳴させ、その応答から分子の中で原子がどのようにつながっているかを調べる方法。分子の構造や環境を知ることができる。医療で使われる MRI も同じ原理を利用。

(注5) **元素分析**：物質に含まれる炭素・水素・窒素などの割合を測定し、分子式を確かめる方法。合成した化合物が意図した通りの組成を持つかを確認できる。

(注6) **単結晶 X 線構造解析**：化合物の単結晶に X 線を当て、回折パターンから原子の並びを決める方法。分子の形を直接確かめることができる。