

高活性遷移金属錯体の合成による新反応開拓

Development of New Reaction Based on Novel Transition Metal Catalysts

中央大学工学部応用化学科

岩本 貴寛

研究成果概要

芳香族化合物の骨格の一部を金属に置き換えたメタラ芳香族化合物は、その特異な電子状態に対する基礎化学的興味から大きな注目を集めている。すでに、多様なメタラ芳香族分子が合成され、またそれらの電子状態を反映した特徴的な反応性も見出されつつある。一方、芳香族の化学は共役系拡張を基軸に発展してきた。 π 共役系の拡張は電子状態に大きな擾動を与え、ひいては新たな機能性共役分子の創製に繋がることから、一般的な芳香族分子においては活発に研究されている。しかし、 π 拡張したメタラ芳香族分子は合成法の欠如から限られた例しかなく、そのため π 拡張が物性や反応性に及ぼす効果は明らかではない。

当研究室では、CH 活性化を巧みに利用することで、ベンゼンおよびベンゾフラン環が縮環したイリダオキサベンゼン錯体 **1** および **2** のワンポット合成に成功している。本化合物の芳香族性に関する知見を得るために、Gaussian 16により種々の電子状態評価を行った。NICS から化合物 **1** および **2** のいずれも既知のイリダベンゼンと同程度の NICS 値を示したことから、共役系拡張後も芳香族性が維持されていることが示唆された (Figure 1)。

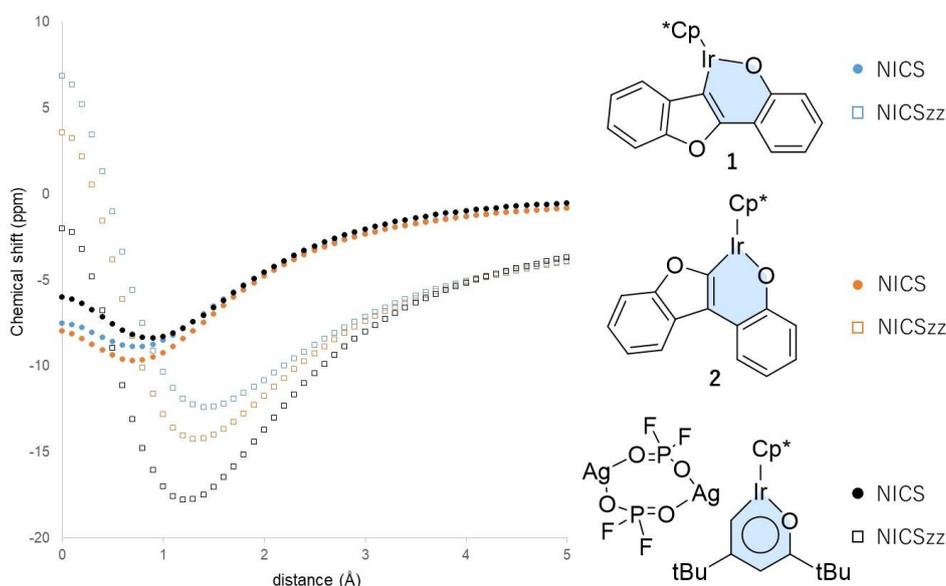


Figure 1. Scan of NICS_{isotropic} and NICS_{zz} values calculated at GIAO-B3LYP/6-311G** (C, H, O) and SDD (Ir) with GD3BJ.

発表論文 (謝辞あり)

Iwamoto, T.; Saito, K.; Mitsubo, T.; Kuwabara, T.; Ishii, Y. *Organometallics* **2023**, *42*, 167-173.