

有機活性種を駆使した新規反応開発と機能性物質の合成
Development of Novel Transition-Metal Catalyzed Transformation

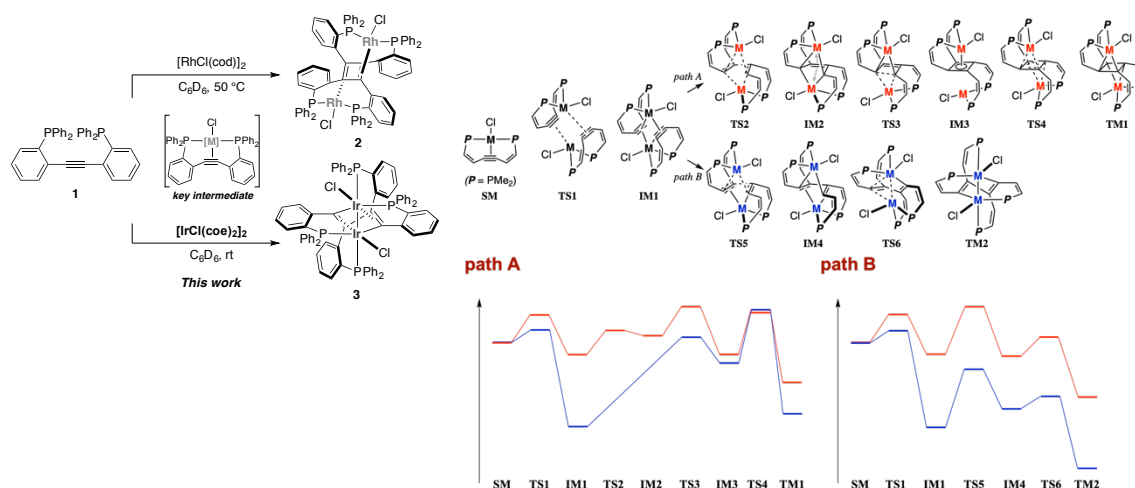
京都大学大学院工学研究科 物質エネルギー化学専攻

岡本 和紘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、我々が最近見出した特異な二核構造を有するロジウムあるいはイリジウム錯体の形成機構について DFT 計算を行った。

多核錯体は複数の金属中心の協働的作用によって、単核錯体にはない反応性が期待できる。一方、その合成手法の多くは既存の骨格を基に合成するテンプレート合成に限られており、新たな合成手法の開発が求められている。我々は骨格内にアルキンを含むビスホスフィン配位子 **1** の後周期遷移金属との錯形成反応とその構造変化について研究しており、ロジウムあるいはイリジウムとの錯形成反応において、特異な骨格を有する二核錯体 **2, 3** が生成することを見出している。このように配位子内に反応点としてアルキンを導入することで、単純な配位子骨格から、骨格の変形を利用して一段階で複雑な二核構造の構築に成功している。本研究では、用いる金属種に応じて錯形成挙動が異なる理由を調査した。DFT 計算の結果から、ロジウム、イリジウムいずれの場合もアルキンが配位した単核錯体の二量化を経て生成しており、二つの金属種の違いは、二量体からの反応性の違いに起因することを見出している。本研究成果は、*Bull. Chem. Soc. Jpn.* 誌に掲載された。



発表論文(謝辞あり)

Sasakura, K.; Okamoto, K.; Sakaki, S.; Ohe, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, in press (doi:10.1246/bcsj.20200036).