

Ni 錯体を用いた難関カップリング反応の開発

Development of Challenging Cross-Coupling Reactions Using Nickel Complexes

京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成領域 秋吉美里

研究成果概要

有機芳香族を基盤とする高分子材料の合成において、金属錯体を用いたカップリング反応技術は、導電性・光学特性・構造規則性を備えた分子性分子の創製において不可欠な基盤技術である。しかし、嵩高い置換基を有するアリール基質では反応が著しく低下する課題があり、分子設計のボトルネックとなっている。そこで本研究では、山本カップリングとして幅広く利用されている、Ni(0)-BPY (2,2'-bipyridine) 錯体を用いた C(sp²)-C(sp²) カップリングに着目し、その基質汎用性を高める新たな触媒設計を提案する。

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、最適な位置と長さのテザー導入 BPY の設計を行った。計算レベル B3LYP-D3(BJ)/6-31G (for H, C, N) – LANL2DZ (for Ni, Br)で行ったところ、エンタルピー、エントロピー、TS の計算から、有力な配位子の候補を絞った。

現在は、この配位子をもちいて、難解な嵩高い基質を用いたカップリング反応の開発を進めている。