

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 理工学部 応用化学科

岩本 貴寛

研究成果概要

金属-炭素結合への不飽和結合の挿入反応は、有機金属化学において一般的な素反応過程であり、また挿入反応を利用した有用な触媒反応も数多く知られている。一方、逆反応に対応する β -炭素脱離の研究も古くからおこなわれており、これらの研究は挿入反応の制御に関する重要な知見を与えるだけでなく、独自の炭素-炭素結合活性化反応を可能にする。これまでに知られている β -炭素脱離はアルキル錯体やアルコキシ錯体からアルケンやカルボニル化合物を与えるものが大多数を占めており、アルキンなどの三重結合挿入反応の逆プロセスであるアルケニル金属種からの β -炭素脱離に関する研究は前周期遷移金属を用いた一例に限られていた。ごく最近、当研究室では Cp^* 配位子を持つロジウム錯体がアルキンとの反応によりアルケニル基の交換反応を示すことを見出し、また種々の実験から本交換反応がアルケニルロジウム種の β -炭素脱離を経由していることを明らかにした。

本反応の反応機構に関する知見を得るために、Gaussian 09(B3PW91/SDD+6-311G(d))により中間体および遷移状態の最適化を行った。その結果、想定していたアルケニルロジウム種からの β -炭素脱離に対応する反応経路が求まり、またエネルギーや構造に関する詳細な知見も得られた (Figure 1)。

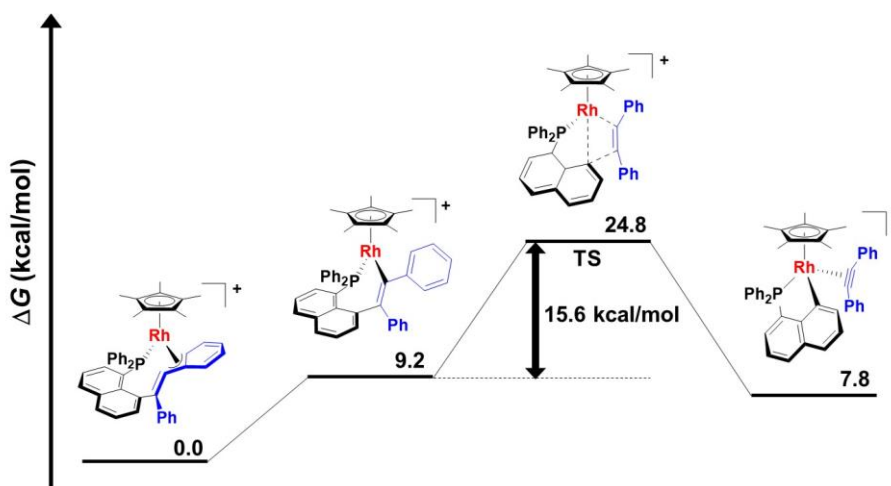


Figure 1. β -Carbon elimination of alkenyl rhodium complex.

発表論文(謝辞あり)なし

発表論文(謝辞なし)なし