

課題名 (タイトル) :

金属触媒を用いるクロスカップリング反応の機構解明

利用者氏名 : ○大塚 麻衣

所属 : 環境資源科学研究センター 先進機能元素化学研究チーム

<p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>金属触媒を用いたクロスカップリング反応の機構を、計算化学によって解明する。具体的には、所属研究チームによって開発された Pd 触媒存在下、アリールハライドとカルボランアニオン-銅錯体によるクロスカップリング反応の機構について、DFT 計算を用いて解析を行う。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>クロスカップリング反応におけるエネルギー変化を DFT 計算により算出することで、反応機構の解析を行う。</p> <p>具体的には、特にアリールパラジウム中間体とカルボランアニオン-銅錯体とのトランスメタル化反応について明らかにする。反応物、生成物の構造を最適化し、そこから TS 計算により遷移状態を求め、さらに IRC 計算を行うことでその構造が目的の反応の遷移状態であることを確認する。さらに、この計算をカルボランアニオンの種々の金属錯体について行うことで、反応機構について解析を行う。</p> <p>3. 結果</p> <p>カルボランアニオンと、銅をはじめとする様々な金属との錯体について計算を行い、各構造を求めた。それら錯体とアリールパラジウム種とのトランスメタル化反応について解析し、いくつかの金属錯体を用いた場合について、目的の反応の遷移状態であると思われる構造が得られた。現在、その精査とさらなる解析を行っている。</p> <p>4. まとめ</p> <p>所属研究チームにおいて開発された、カルボランアニオン-銅錯体のクロスカップリング反応の反応機構について、DFT 計算により解析を行っている。鍵とな</p>	<p>るトランスメタル化反応の遷移状態と思われる構造が求められ、現在更なる検討を行っている。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>DFT 計算の結果と実験化学的なデータを合わせて解析することで、反応機構について考察する。特に DFT 計算においては、種々の金属錯体との比較によって、銅錯体の優位性を明らかにしたい。</p>
---	---