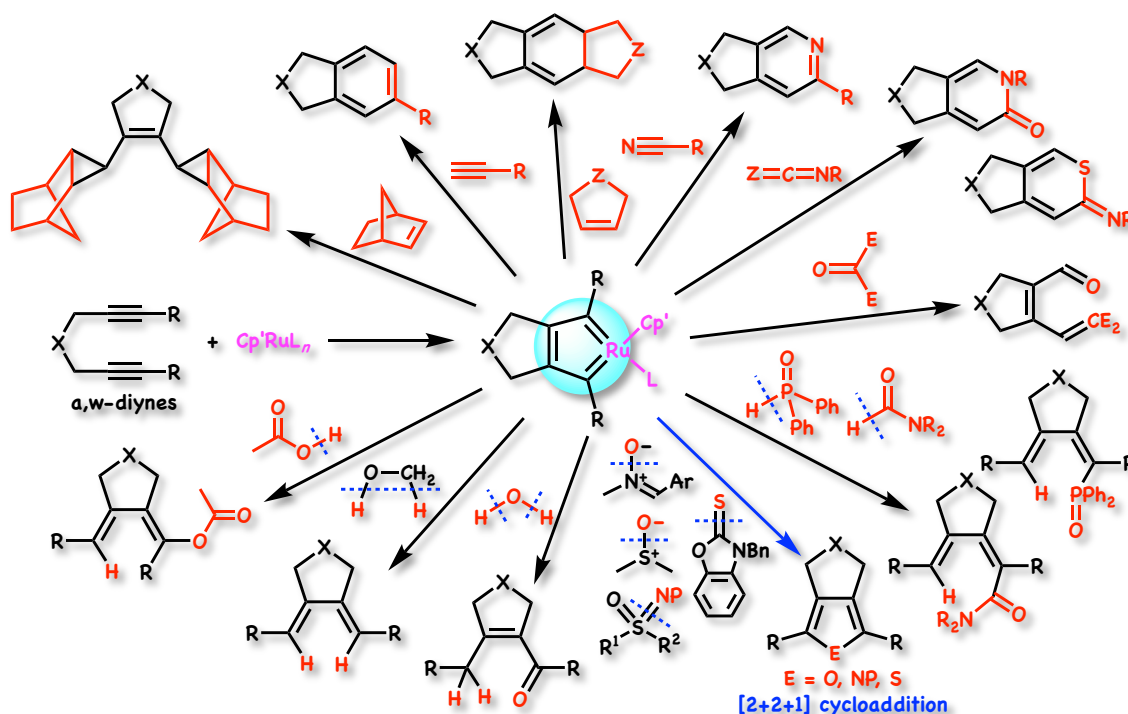


DFT 計算に導かれたルテニウム触媒反応開発

山本 芳彦 (名大院創薬)

シクロペンタジエニル型配位子をもつルテニウム錯体 ($\text{Cp}'\text{RuL}_n$) を触媒として用いると、 α, ω -ジインの多様な環化反応が進行する。これら環化反応では、2つの金属-炭素二重結合を含む環状ルテニウム錯体中間体 (ルテナシクロペンタトリエン、下図中央) が鍵となっている。演者らは、DFT計算による反応機構解析と実験を組み合わせ、この環状ルテニウム錯体中間体のユニークな反応性、即ちビスカルベンとしての挙動を調査してきた。本講演では、理論-実験双方向研究を通して α, ω -ジインの触媒的 [2+2+1] 環化反応を開発した経緯について述べる。



参考文献

- (1) K. Yamashita, Y. Yamamoto, H. Nishiyama, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 7660.
- (2) K. Matsui, M. Shibuya, Y. Yamamoto, *ACS Catal.* **2015**, *5*, 6468.
- (3) K. Matsui, M. Shibuya, Y. Yamamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 15397.
- (4) K. Matsui, M. Shibuya, Y. Yamamoto, *Communications Chemistry* **2018**, *1*, #21.
- (5) Account: Y. Yamamoto, *Synlett* **2017**, *28*, 1250.