

C4 位を置換した *N*-ヘテロ環状カルベン-金錯体の合成と触媒反応への応用

(産総研¹・茨大院理工²・エヌ・イーケムキャット(株)³) ○稲葉 脩^{1,2}・深谷 訓久¹・崔 準哲¹・水崎 智照³・高木 由紀夫³・松本 和弘^{1,2}

Synthesis and Application of *N*-Heterocyclic Carbene-Gold Complexes with Substituent at C4 Position (¹AIST, ²Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University, ³N.E. CHEMCAT) ○Shu Inaba,^{1,2} Norihisa Fukaya,¹ Jun-Chul Choi,¹ Tomoteru Mizusaki,³ Yukio Takagi,³ Kazuhiro Matsumoto^{1,2}

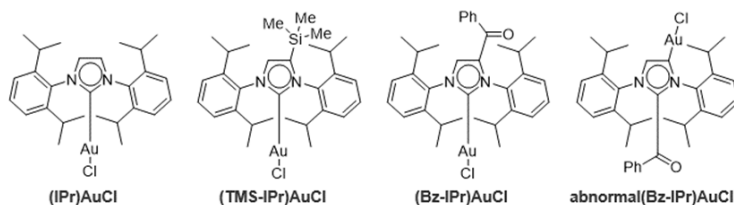
N-Heterocyclic carbene (NHC) is widely used as a ligand for metal complexes because of its strong electron-donating property and controllable steric effect by *N*-substituents located near the metal center. Bertrand et al. reported the introduction of various substituents on the C4 backbone of IPr (1,3-bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazol-2-ylidene), one of the representative NHCs¹⁾.

In this study, we synthesized novel gold complexes, (TMS-IPr)AuCl and (Bz-IPr)AuCl, in which an electron-donating trimethylsilyl group and an electron-withdrawing benzoyl group are introduced at the C4 position of IPr, respectively. We also isolated an abnormal type gold complex with a benzoyl group introduced at the C2 position and gold coordinated at the C4 position. In addition, the crystal structures of (TMS-IPr)AuCl, (Bz-IPr)AuCl, and the abnormal type (Bz-IPr)AuCl were unambiguously determined by X-ray crystallographic analysis.

Keywords : Metal complex Catalyst; Organic Synthesis; *N*-Heterocyclic Carbene; Gold

N-ヘテロ環状カルベン (NHC) は、一般に強い電子供与性を示し、金属中心近傍に配置される N 原子上の置換基による立体効果の制御が可能ことから、金属錯体触媒の配位子として幅広く利用されている。一方、Bertrand らは、代表的な NHC の 1 つである IPr (1,3-bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazol-2-ylidene) の C4 位のバックボーン炭素上に各種置換基を導入する手法を報告している¹⁾。

今回我々は、IPr の C4 位に電子供与性置換基のトリメチルシリル基、電子求引性置換基のベンゾイル基をそれぞれ導入した新規金錯体、(TMS-IPr)AuCl 及び (Bz-IPr)AuCl の合成を行った。また、ベンゾイル基の導入に関しては、C2 位にベンゾイル基が導入され、C4 位に金が配位したアブノーマル型の金錯体の単離にも成功している。加えて、(TMS-IPr)AuCl, (Bz-IPr)AuCl, アブノーマル型(Bz-IPr)AuCl のそれぞれについて、単結晶 X 線構造解析によりその結晶構造を明らかにしたので、詳細について報告する。



1) G. Bertrand et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 7264–7265.