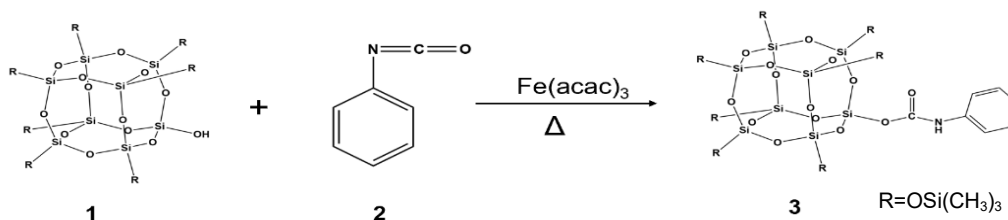


カルバモイル基を有する Q_8^H 誘導体の合成と性質(東理大創域理工¹⁾ (産業技術総合研究所²) ○山本凌雅¹・五十嵐正安²・山本一樹¹・郡司天博¹Synthesis of Q_8^H derivatives having carbamoyl group and their properties(¹Faculty of Science and Technology, Tokyo university of science, ²National Institute of Advanced Industrial Science and Technology) ○Ryoga Yamamoto¹, Masayasu Igarashi², Kazuki Yamamoto¹, Takahiro Gunji¹

Urethane compounds are synthesized mainly from alcohol and isocyanate and are widely used in industry. However, few examples have been reported of the synthesis of silylurethane from isocyanate and silanol which are mainly composed from silicon. In this study, we report the reactivity of silanols with isocyanates using Q_8^H , a caged silsesquioxane (POSS) with eight silanol vertices as a bulky substituent. Compound **3** was obtained by the reaction of Q_8^H with phenylisocyanate under heating conditions using $Fe(acac)_3$ as catalyst. Identification was performed by ^{29}Si NMR and ESI-MS spectra. ^{29}Si NMR showed signals each for the Q^3 and Q^4 structures, and ESI-MS showed a signal of the desired compound at $m/z=1198.0$. When compound **3** was stored at 0°C under a nitrogen atmosphere, the compound was stable after one week.

Keyword: silylurethane, Polyhedral Oligomeric Silsesquioxanes, Organic-inorganic hybrid

ウレタン化合物は主にアルコールとイソシアネートの反応により合成され、その安定性から工業的に広く利用されている。しかし、炭素と同族のケイ素からなるシランールを用いてシリルウレタンを合成した例はほとんど報告されておらず、また、それらの性質の評価も不十分である。そこで本研究では、次のスキームに従い、かご型シルセスキオキサン(POSS) Q_8^H を用いてシリルウレタンを合成し、そのイソシアネートとの反応性を検討したので報告する。



まず、 Q_8^H とトリクロロメチルシランをピリジン存在下 THF 中で室温で反応させ、 Q_8^H の 7 つのシランールをシリル化した **1** を合成した。次に、**1** とフェニルイソシアネート **2**、 $Fe(acac)_3$ をヘキサン中 75°C で 6 時間反応させることで **3** を得た。

反応生成物の ^{29}Si NMR 及び ESI-MS スペクトルを測定したところ、 ^{29}Si NMR では Q^3 , Q^4 構造によるシグナルがそれぞれ一つずつ見られ、ESI-MS では $m/z=1198.0$ に **3** の組成式と一致するシグナルが見られたことから、**3** の生成を推定した。**3** を窒素雰囲気下 0°C で保存したところ 1 週間経過しても分解がみられなかった。