

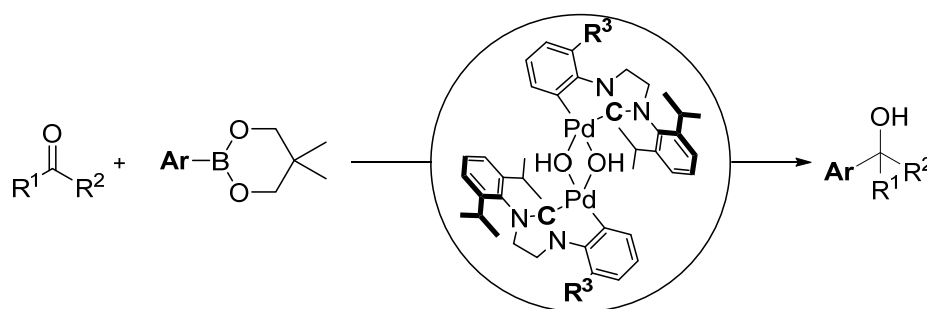
## ヒドロキシ基で架橋した NHC 配位シクロメタル化パラジウム錯体の触媒作用

(電機大院工<sup>1</sup>・電機大工<sup>2</sup>) 奥田 雄太<sup>1</sup>・但野 龍<sup>2</sup>・清水 未紀<sup>1</sup>・○山本 哲也<sup>1,2</sup>  
 Catalysis of NHC Coordinated Cyclometalated Palladium Hydroxide Complexes (<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering, Tokyo Denki University*, <sup>2</sup>*Department of Applied Chemistry, Tokyo Denki University*) Yuta Ouda,<sup>1</sup> Ryu Tadano,<sup>2</sup> Minoru Shimizu,<sup>1</sup> ○Tetsuya Yamamoto<sup>1,2</sup>

Bulky NHC-coordinated cyclometallated palladium complexes with bridging chloro ligands exhibit the excellent catalytic activity for the 1,2-addition of arylboron compounds to carbonyl compounds in the present of an excess amount of base. Herein, we report newly synthesized CYP with bridging hydroxy ligands acted as a highly efficient catalyst for the 1,2-addition of arylboronates to various carbonyl compounds including unactivated ketones under base-free condition.

**Keywords :** palladium, boron, 1,2-addition, hydroxide ligand, DFT calculations

塩素で架橋された *N*-ヘテロ環カルベン(NHC)を支持配位子とするシクロメタル化パラジウム錯体はロジウムに似た触媒作用を示し、塩基性条件下においてアリールボロン酸類のカルボニル化合物への求核付加反応を触媒する。<sup>1</sup> この触媒反応において塩基の添加は必須であり、塩基を添加しない場合ほとんど反応は進行しない。本研究では、塩素架橋をヒドロキシ基架橋とした塩基性 NHC 配位シクロメタル化パラジウム錯体を合成し、その触媒作用を評価した。結果として、さらなる塩基の添加を必要とせず、アリールボロン酸エステルのカルボニル化合物への求核付加反応が円滑に進行した。発表では、反応機構に関する DFT 計算の結果についても併せて報告する。



1) a) Y. Okuda, *et al. ChemCatChem*, **2020**, *12*, 6291–6300; b) T. Yamamoto, *et al. Adv. Synth. Catal.* **2014**, *356*, 3525–3529.