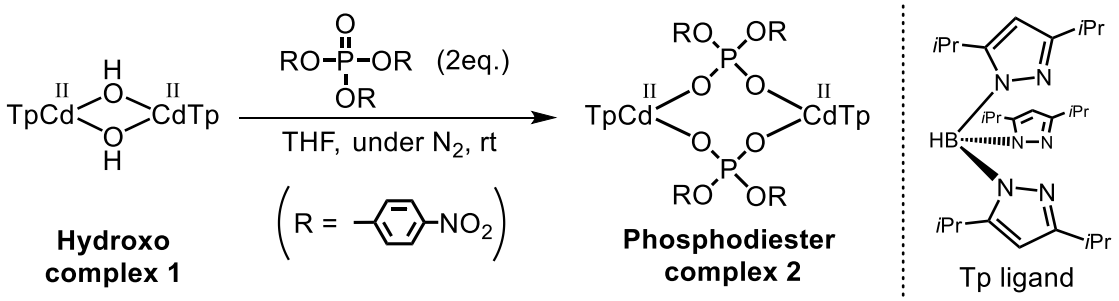
ビス(μ-ヒドロキソ)二核カドミウム錯体によるリン酸トリエステルの加水分解

(茨大院理工[1]・茨城高専[2]・東工大化生研[3]・神奈川大院工[4]) ○大原朋海[1]・吾郷友宏[1]・細谷孝明[1]・大平和成[1]・小松﨑秀人[2]・田中裕也[3]・穐田宗隆[3]・引地史郎[4]
Hydrolysis of tris-phosphate ester by a dinuclear bis(μ-hydroxo) cadmium complex ([1]*Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University*, [2]*National Institute of Technology (KOSEN), Ibaraki College*, [3]*Laboratory for Chemistry and Life Science, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology*, [4]*Graduate School Engineering, Kanagawa University*) ○ Tomomi Oohara[1], Tomohiro Agou[1], Takaaki Hosoya[1], Kazunari Ohira[1], Hidehito Komatsuzaki[2], Yuya Tanaka[3], Munetaka Akita[3], Shiro Hikichi[4]

Metal hydroxide species are considered to be the active species of enzymes that catalyze the reversible hydration of carbon dioxide and the hydrolysis of phosphate esters and amide compounds. We have previously reported the synthesis and reactivity of dinuclear cadmium bis(μ-hydroxo) complex **1** bearing a tris(3,5-diisopropylpyrazolyl)borate ligand (Tp) toward carbon dioxide. In this presentation, we report the hydrolysis reaction of tris-phosphate ester by complex **1**. When two equivalents of tris(4-nitrophenyl) phosphate were treated by the complex **1**, the hydrolysis reaction of the phosphate proceeded to form a dinuclear cadmium complex **2** containing two phosphate diester bridges, which was confirmed by X-ray structural analysis. The details of the molecular structure and reaction mechanism will also be reported.
Keywords : Cadmium complex, Tris(pyrazolyl)borate , Tris-phosphate ester, Hydrolysis

金属ーヒドロキソ種は、二酸化炭素の可逆的水和に加えリン酸エステルやアミド類の加水分解を触媒する酵素の活性種と考えられており、そのモデル錯体研究が盛んに行われている。我々はこれまでに、トリスピラゾリルボレート配位子(Tp)を用いた二核カドミウムビス(μ-ヒドロキソ)錯体 **1** を合成し、これが二酸化炭素と反応して二核カドミウム μ-カルボナト錯体が生成することを報告してきた[1)]。本発表では、錯体 **1** がリン酸エステルの加水分解を行うことが分かったので報告する。錯体 **1** の THF 溶液に 2 当量のリン酸トリス(4-ニトロフェニル)を室温下で 16 時間反応させた後、アセトン/メタノール混合溶媒から得た単結晶を X 線構造解析したところ、リン酸エステルの P-OR 結合一つが加水分解されて生じたリン酸ジエステル 2 分子が架橋した二核カドミウム錯体 **2** が得られたことが分かった。本発表では、錯体 **2** の構造や反応機構についても併せて報告する。



1) 大原朋海、吾郷友宏、大平和成、小松﨑秀人、田中裕也、穐田宗隆、引地史郎、第 11 回 CSJ 化学フェスタ 2021、P1-088、2021 年 10 月 19 日.

© The Chemical Society of Japan