

^{31}P NMR 測定, DFT 計算による水中機能ルイス酸触媒の酸性質評価と触媒活性の検討

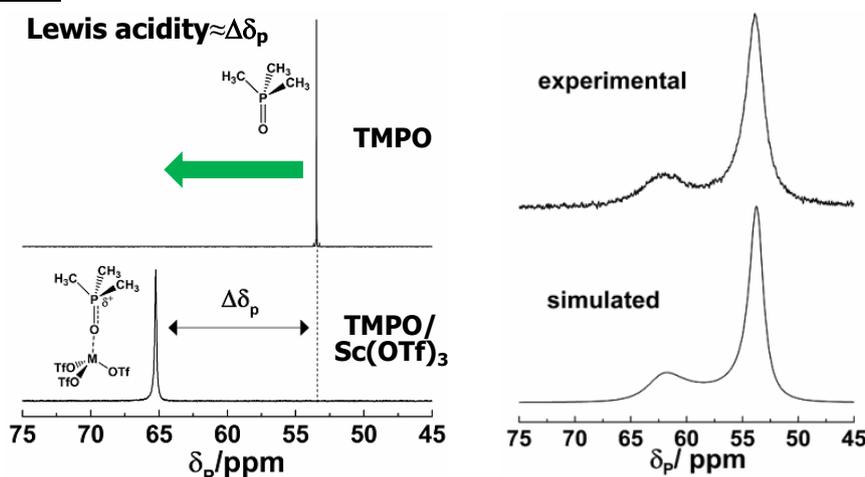
小糸祐介¹, 中島清隆¹, 小林久芳², 北野政明¹, 原亨和¹
(東京工業大学¹, 京都工芸繊維大学²)

ルイス酸触媒は金属カチオンサイトを活性点を持つ触媒で炭素-炭素結合形成反応に高い活性を示します。特に金属トリフラート($\text{Sc}(\text{OTf})_3$, $\text{Yb}(\text{OTf})_3$ etc.)や一部のゼオライト(Sn -Beta etc.), 酸化物(Nb_2O_5 , TiO_2 etc.)触媒は水中機能ルイス酸触媒として, 水中におけるアルドール化, アリル化反応, さらに糖変換反応などカルボニル基質を用いた反応に高いパフォーマンスを発揮します。

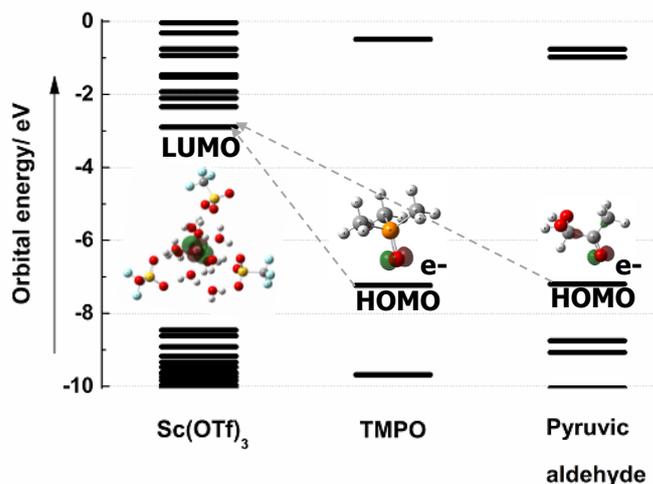
しかし, どのような触媒がより効果的に働くのか具体的な検討はなされていません。その理由は, 実際のカルボニル基質の反応に即した**水中機能ルイス酸触媒の酸性質の評価手法が存在しない**ためです。

そこで, 本研究では, 様々なカチオン種を持った金属トリフラートを

1) TMPO(トリメチルホスフィンオキシド)を用いた ^{31}P NMR 測定によるケミカルシフト, 線幅の評価



2) DFT 計算による LUMO エネルギー評価



によって比較し, **新しいルイス酸触媒の評価手法**を提案しました。

これらの手法によって評価されたルイス酸触媒の酸性質はピルビン酸アルデヒドから乳酸への異性化反応の触媒性能と良い一致を示し, **水中機能ルイス酸触媒設計の新たな指針**となることが期待されます。