

1P01

## 常温エステル交換スズ触媒の反応機構解明

○鈴木 哲也

東亜合成 (300-2611 つくば市大久保2 東亜合成つくば研究所)

### 緒言

野依教授等の開発した触媒「アミノプロピルスズ(トリイソプロポキシド) **I**」<sup>1)</sup>の反応機構解明を行った。この触媒は、室温でスムーズにエステル交換ができる触媒であり、従来のスズ系の触媒に比べて、数千倍の触媒活性を示す。この触媒の高活性の理由を、その反応機構を計算化学的に明らかにすることにより、解明することを目的とした。

### 計算方法

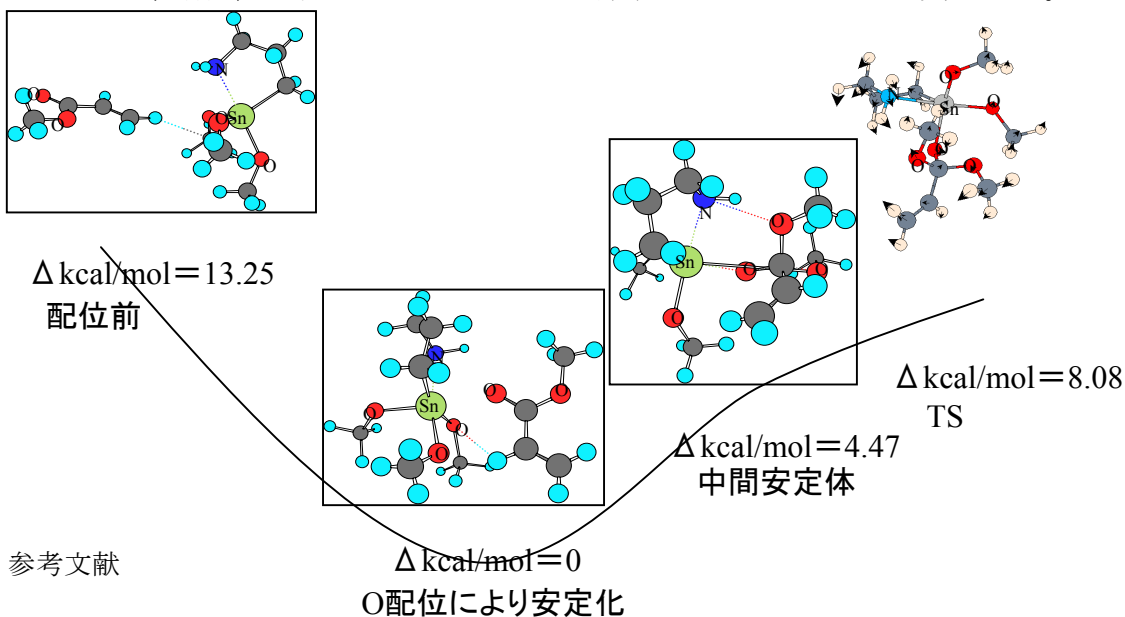
計算は、Gaussian98 3-21G\*及び、B3LYP/LANL2DZ/EXTRABASIS を用いて行った。また、インターフェイスとして、堀憲次(山口大工)らの開発したTSサーチを用いた。

**I**は、簡略化のためアミノプロピルスズ(トリメトキシサイド)とし、アクリル酸メチルと配位しているメトキシサイドとの交換反応をシミュレーションした。

### 結果

**I**の安定化構造を求めたところ、NがSnに配位する形が、配位子ない形に比べて20kcal/mol以上安定であり、配位するものとした。

アミノ基が、カルボニル炭素にアルコキシサイドが2つ結合した中間体の安定化に寄与することにより、活性化エネルギーが8Kcal/molと非常に小さくなるものと考察された。



1) 特開平 11-285642