

## 平成18年度顕在化ステージ 事後評価報告書

シーズ顕在化プロデューサー所属機関名：東ソー・ファインケム株式会社

研究リーダー所属機関名：京都大学

課題名：鉄系触媒を用いるクロスカップリング反応の開発

### 1. 顕在化ステージの目的

遷移金属触媒存在下に、有機ハロゲン化合物と有機金属化合物との反応により、炭素-炭素結合を形成させる合成法は、「クロスカップリング反応」と総称される。本反応は、希少で高価なパラジウム系触媒や毒性の高いニッケル系触媒を必須とするため、工業化の妨げとなっている。

・本研究は、安全で安価な鉄系触媒を用いる「クロスカップリング反応」技術の開発を目指すものである。「クロスカップリング反応」は、特に機能材料(液晶材料・有機EL材料等)や医薬品の探索研究分野で急速に普及している。安全で安価な鉄系触媒を用いて、汎用性の高い反応技術が確立できれば、国際競争力のある生産体制が日本国内に実現できるものと期待される。

### 2. 成果の概要

#### 大学の研究成果

- ・フッ化物イオンとカルベン配位子からなる相乗型の新規配位子系が、鉄触媒による「熊田-玉尾カップリング反応」の反応制御に有効な新規配位子であることを発見した。本新規鉄触媒ビアールクロスカップリング反応は、医薬や機能材料で多用される非対称ビフェニル合成等に、広く利用できることが明らかとなった。またこの新規配位子系は、ニッケルやコバルトなどの鉄族元素触媒を用いたクロスカップリング反応の制御にも有効であることを見出した。
- ・鉄系触媒による「鈴木-宮浦カップリング反応」を世界に先駆けて開発した。同反応は過剰量のホウ素化合物を必要とするなどまだまだ課題が残るが、第一級のハロゲン化アルキルに加えて通常カップリングが困難な第二級のハロゲン化アルキルに対しても収率良くアリール基を導入できることを明らかとした。

#### 企業の研究成果

- ・京都大学が開発した「クロスカップリング反応技術(新規触媒法)」が利用可能な工業化ターゲットを設定した。
- ・京都大学が開発した新規触媒の安全性データを取得し、工業的に安全に取り扱うことができることを確認した。

### 3. 総合所見

挑戦的である当初の目標がほぼ達成され、特許も出願されている。実用化まではまだ距離があるが、市場性を検証しつつ、是非とも実用化を図っていただきたい。