

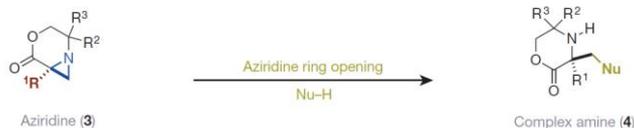
## Q and A

### 1. 求核剤を共存させたときの条件は何か。

すべて同じ条件でなかったため、一つの式に  
まとめた状態で反応条件を書けなかった。

ただ、基本的にはアジリジン 1 当量、求核剤

3 当量、ルイス酸（化学量論量 or 触媒量）で反応を行っている。

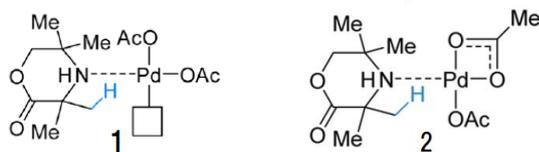


### 2. モノアミン錯体よりもビスアミン錯体が安定となる理由は何か。

アミンは、強力なシグマドナーのリガンドであるため、パラジウムに対して配位しやすい。一方、アミンが配位したパラジウム錯体は電子豊富なためアミンが配位しづらくなる。これら二つの力が競合した結果、アミンがパラジウムに対して二つ配位したビスアミン錯体が最も熱力学的に安定な状態ではないかと考えられる。

### 3. モノアミン錯体は 1（下図）のような形で存在しているのか。

アセテートは二座で配位した時の方が熱力学的に安定なため 2（下図）で存在している  
と考えられる。



### 4. ビスアミン錯体をどのように単離、X線結晶構造解析をしたか。

原料のピペリジン（2.5 mmol）、酢酸パラジウム（1.0 mmol）をクロロホルム 15ml 中  
で室温 18 時間攪拌する。その後、クロロホルムを元の 1/3 に濃縮し、石油エーテルを  
添加すると固体が析出し、石油エーテルで固体を洗ったものを X 線結晶構造解析を行っ  
た。

### 5. 第三級アミンでもパラジウムに配位するのか。

第三級アミンの一つである N,N-dimethylbenzylamine（右図）は確かにパラジウムに  
対して配位し、パラジウムの触媒サイクルを妨げている。（Zhangjie Shi の J. AM.  
CHEM. SOC. 2007, 129, 7666 の報告例）

