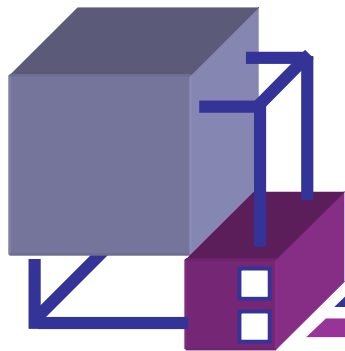


# DENE<sup>B</sup>™

*Oxo-Tethered Ruthenium(II) Complex*



## 不斉水素移動触媒の開発

—水素を使わない超高効率触媒的不斉還元—

高砂香料工業株式会社  
ファインケミカル事業部

 TAKASAGO



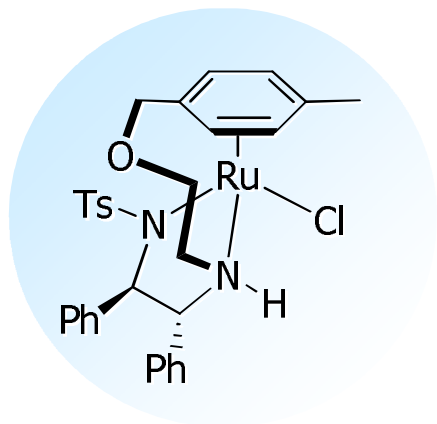
# DENE<sup>TM</sup>; *Oxo-Tethered Ruthenium(II) Complex*

特殊設備を必要としない超高活性触媒的不斉還元技術;  
スクリーニング、工業化が容易

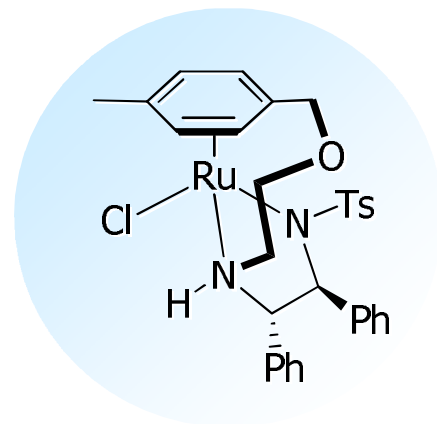
1. 高い触媒活性
2. 高いエナンチオ選択性
3. 広い基質適応範囲

触媒使用量が最大**57分の1**に削減  
光学純度改善工程がスキップできる

(*R,R*)-Ts-DENE<sup>B</sup>



(*S,S*)-Ts-DENE<sup>B</sup>





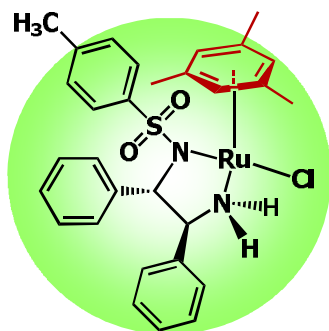
# 不斉水素移動反応; *Asymmetric Transfer Hydrogenation*

## 既存技術...

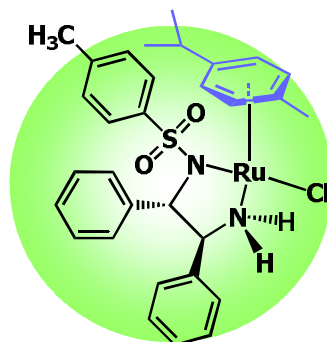
長所... a) 触媒の取扱いが容易, b) 分子状水素を必要としない,  
c) 特別な設備( 高圧 )が不要

短所... a) 触媒活性が低い( S/C=500程度 ), b) 基質が限定される

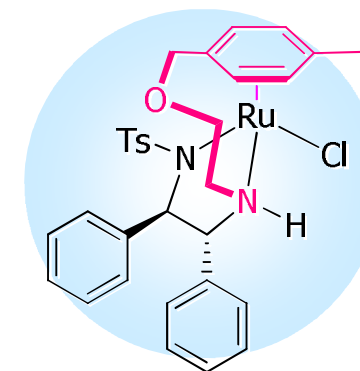
## 既存触媒\*



RuCl(TsDPEN)(Mesitylene)



RuCl(TsDPEN)(p-Cymene)



**Ts-DENEB™**

\**J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 2521

*J. Am. Chem. Soc.* Accepted  
DOI: 10.1021/ja207283t

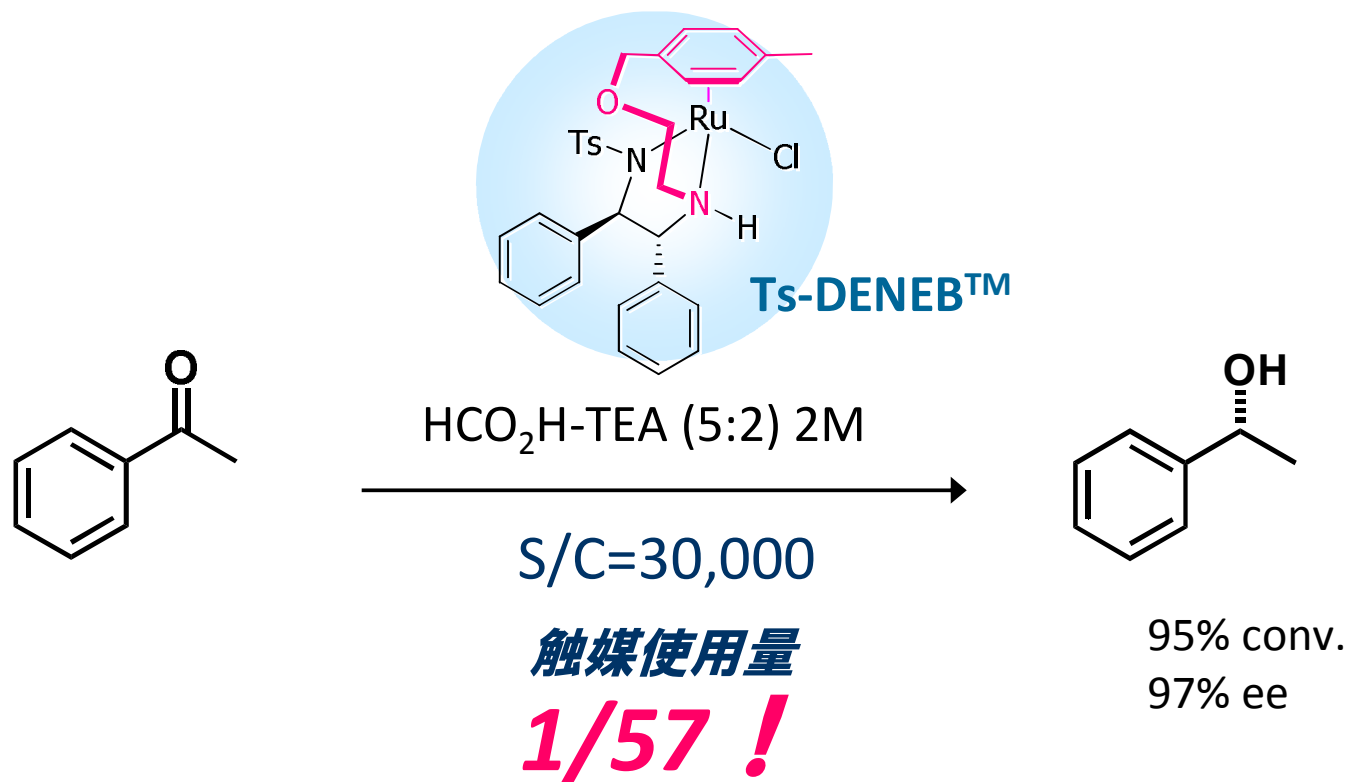
S/C = Substrate mol/ Catalyst mol; 基質に対する触媒投入量.

TON (Turnover Number); 触媒回転数. 触媒1分子が行う物質変換量.

例) TON = 10,000; 触媒1分子が10,000倍の分子を物質変換する.



# 特長1. 超高活性



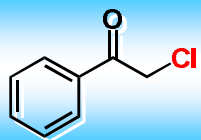
- 触媒使用量を大幅に削減
- 反応液中Ru含量が減り、精製工程が簡略に



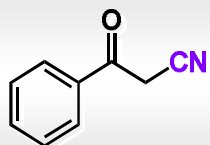
## 特長2. 広がる基質適応範囲

### 1. 従来型でも対応可能だった基質

触媒使用量の削減、光学純度改善

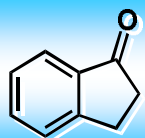


RuCl(TsDPEN)(Mesitylene); S/C = 500, 97.7% conv., Sel. 66.1%, 90.9% ee  
Ts-DENEb; S/C = 1,000, 97.7% conv., Sel. > 95%, 97.3% ee

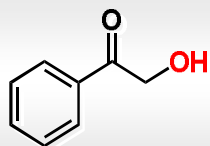


RuCl(TsDPEN)(*p*-Cymene); S/C = 500, 23.0% conv., 86.0% ee  
Ts-DENEb; S/C = 1,000, 100% conv., 94.7% ee

### 2. 既存触媒では攻略できなかった基質



RuCl(TsDPEN)(Mesitylene); S/C = 500, 17.4% conv., 90.1% ee  
Ts-DENEb; S/C = 1,000, 97.1% conv., 98.4% ee

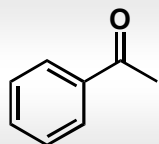


RuCl(TsDPEN)(Mesitylene); S/C = 300, 5.3% conv., 6.5% ee  
Ts-DENEb; S/C = 1,000, 97.6% conv., 96.0% ee



# 産業上の利点

## 1. 超高活性



RuCl(TsDPEN)(Mesitylene);  
Ts-DENEb;

S/C = 500, >98% Conv. 98% ee  
S/C = 30,000, 95% Conv. 97% ee



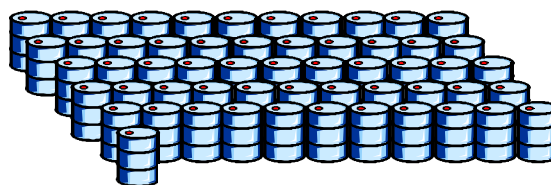
RuCl(TsDPEN)(Mesitylene)



Product  
98kg



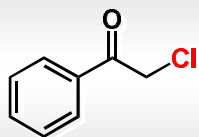
Ts-DENEb



Product  
5,699kg

触媒1kg当りの生産量;  
**57倍!!**

## 2. 経済性; Rh 触媒との比較



RhCl(TsDPEN)(Cp\*);  
Ts-DENEb;

S/C = 1,000, > 99% Conv. 96% ee  
S/C = 1,000, 98% Conv. 97% ee



Rh

M.W.  
102.91



Ru

M.W.  
101.07

触媒における金属コスト;  
**10% 以下に削減!!**



# お問い合わせ先

## 高砂香料工業株式会社 ファインケミカル事業部

144-8721 東京都大田区蒲田5-37-1  
ニッセイアロマスクエア17F  
(03)5744-0531



<http://www.takasago.com>