

課題名 (タイトル) :

触媒反応の機構研究

利用者氏名 :

○河村 伸太郎*,**

Elena Valverde Murillo**

村上 遼*

関根 大介**

理研での所属研究室名 :

*環境資源科学研究センター 触媒・融合研究グループ

**袖岡有機合成化学研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々の研究室では、遷移金属触媒を用いる含フッ素化合物の合成手法の開発研究を行なっている。反応開発において、機構の理解や触媒デザインは必要不可欠である。その際、量子化学計算によるモデリングおよびエネルギーの議論は、極めて有用である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian16 プログラムによって DFT 計算を行った。理論には B3LYP または MPWB1K を用い、基底関数には 6-31G(d, p)、Lan12DZ などを用いた。中間体および遷移状態の構造最適化、振動数解析、一点計算を行った。

3. 結果

銅触媒を用いたアルケンの含窒素複素環の形成を伴うペルフルオロアルキル化反応において、用いた銅触媒の役割について反応機構を議論した。計算結果は、我々の作業仮説を裏付けるとともに、機構に関する実験事実を説明するのに活用された。また、新規触媒の設計においても構造を詳細に可視化する際に利用した。

4. まとめ

量子化学計算によって、反応機構の詳細をより明確に説明することが可能になった。

5. 今後の計画・展望

モデリングによって新規遷移金属触媒の設計を行い、これをもとに実際に触媒を合成し、これを用いた反応の開発を進める。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

“*N*-Heterocycle-Forming Amino/Carboperfluoroalkylations of Aminoalkenes by Using Perfluoro Acid Anhydrides: Mechanistic Studies and Applications Directed Toward Perfluoroalkylated Compound Libraries”

Kawamura, S.; Dosei, K.; Valverde, E.; Ushida, K.; Sodeoka, M. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 12539.