

課題名 (タイトル) :

触媒的ラジカル反応の開発

利用者氏名 : ○五月女 宜裕

所属 : 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

我々は、分子の複雑性を効率的に向上させるための触媒反応の開発研究に取り組んでいる。本研究では、活性種としてラジカルに着目し、反応基質の結合解離定数を算出した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を利用し、各種フェノールの結合解離定数を算出するために、反応基質及びそのラジカル活性種の構造最適化及び振動計算を行った。反応基質は B3LYP/631G(d) レベルで計算を行い、ラジカル活性種には ROBB3LYP/631G(d) を用いた。

3. 結果

フェノール等の単純な反応基質に関しては、文献に記された計算値及び実験値とよい一致が得られた。一方、反応開発で焦点を当てるより複雑な反応基質を用いた場合には、特に ROB3LYP を用いた計算において、構造最適化がうまくいかない場合がみられた。

4. まとめ

文献既知の基質に関しては、総じてよい結果を得ることができた。

5. 今後の計画・展望

より複雑な反応基質についても精査を進める予定である。また、最近では、錯体触媒の X 線構造解析にも成功しており、これについても検討する予定である。