

課題名(タイトル):

有機化合物の直裁的かつ選択的カップリング反応の開発

利用者氏名:

○イリエシュ ラウレアン(1)  
吉田 拓未(1)

理研における所属研究室名:

(1)環境資源化学研究センター・機能有機合成化学研究チーム

<p>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</p> <p>我々の研究室では今年度より理化学研究所にて研究を開始した。新規配位子を設計し、遷移金属触媒と上手く組み合わせることによって、有機化合物の革新的合成法を見出すことを目的として研究を行なっている。本研究では配位子設計が鍵となっており、量子化学計算と実験を併用して反応機構を理解した上で、配位子設計を行うことで、より良い配位子を合成することが可能である。</p>	<p>4. まとめ</p> <p>量子化学計算によって、反応機構の詳細について理解を深めることが出来、より良い配位子設計を行うことができた。</p>
<p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>Gaussian16 プログラムを用いて DFT 計算を行った。汎関数については B3LYP や M06 及び M06-2X を用い、基底関数には軽元素には 6-31G(d)、6-31++G(d,p)などを、重元素には LANL2DZ、SDD などを用いた。溶媒効果を考慮する場合は PCM 法等を用いた。これらの計算手法を用いて Opt コマンドを用いた中間体及び遷移構造の構造最適化や振動数解析、エネルギー一点計算を行った。また遷移状態や中間体が求まった際には、IRC 計算や NBO 解析などの計算も行なっている。</p>	<p>5. 今後の計画・展望</p> <p>実際の実験結果と合わせて理論計算を行うことで、より良い配位子の設計を行う。その後実際に配位子を合成し、実験を行うというサイクルを回すことで、目的の新規合成法の開発を目指す。</p>
<p>3. 結果</p> <p>有機化合物の直裁的かつ選択的カップリングを実現するために、新規配位子をいくつかデザインして、それぞれを反応に用いた場合の活性化エネルギーを求め、比較することにより候補配位子を見出すことに成功した。また単なる活性化エネルギーの比較だけでなく、NBO 計算などを用いた計算を併用することで、何故活性化エネルギーが変化したのかについても検討を行った結果、我々の作業仮説が裏付けられるとともに今後の配位子設計に対する重要な知見が得られた。</p>	