

課題名 (タイトル) :

ポリエーテル系天然物の新規収束的合成法の開発

利用者氏名 : 齊藤 竜男

所属 : 和光研究所 基幹研究所 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

マイトトキシシンに代表される海洋産ポリエーテル系天然物の生物活性試験試料を迅速かつ大量に供給するため簡便かつ効率的な合成を行う必要がある。今回申請者は梯子状ポリエーテルの新規収束的合成法の開発を目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

各段階の反応における分子の詳細な情報を得るために計算化学を積極的に利用し合成研究を展開する。具体的には DFT 計算を用いて分子内異性化反応の中間体及び基質の立体構造を正確に把握し反応条件を効率的に見出す。

3. 結果

DFT 計算により、ピラン環におけるオレフィンの異性化において、アルケン部位の置換基が立体構造に与える影響は大きく、実際の合成実験結果との比較により反応条件の絞り込むことができた。

4. まとめ

本研究の分子内異性化反応において計算化学を利用することにより反応条件の設定に大きく貢献した。

5. 今後の計画・展望

合成実験の結果と合わせ最適条件の確立を行う。