

典型元素を活用した有機合成法の創出

Development of Molecular Transformation by means of Typical Elements

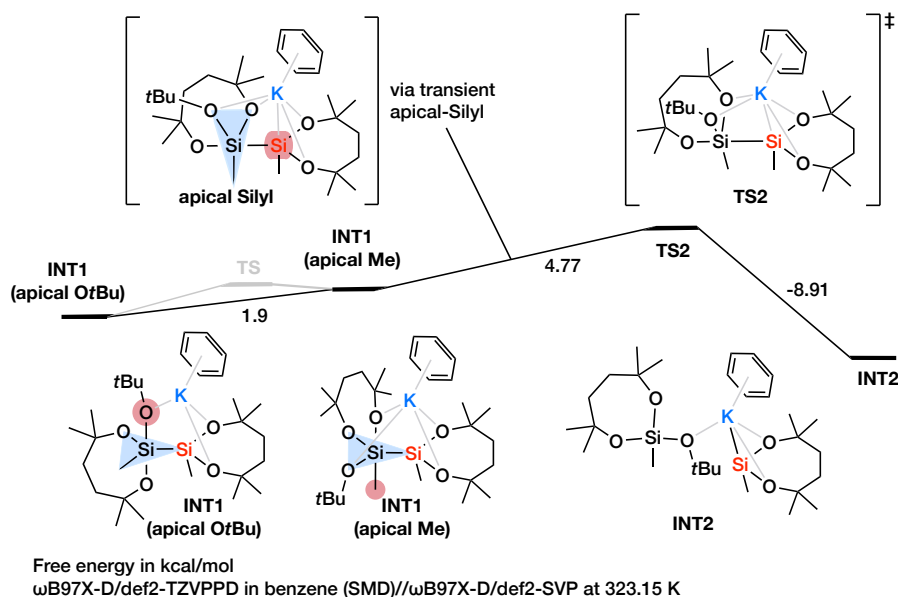
京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 有機化学研究室 下川 淳

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、典型元素のなかでもとくにケイ素を活用した新しい反応の開発とその理解を目的とした研究を行った。

有機ケイ素化合物は合成中間体や機能性材料として広く用いられており、現代の有機化学に不可欠な分子群である。しかしその合成法は、過酷な反応条件や不安定な反応剤を必要とする場合が多く、有機ケイ素化学のさらなる発展を促す上で大きな制約となっている。本年度は我々がすでに開発した7員環状ジアルコキシシリル基の構造をもったジシランに対して *tert*-ブトキシカリウムを用いた際にシリルカリウムが出る反応について詳細に検討した。

アルコキシドがジシランの一方のケイ素中心に付加した後に取りうる3つのシリカート構造 INT1 についていずれからシリルカリウムが脱離するプロセスが優先しうるかを計算し、アピカル位にメチル基をもったものから TS2 を経て反応が進行することが適切であるということを導くことができた。計算化学的手法によってケイ素ケイ素間結合の開裂に関する知見を得ることができた。



発表論文 準備中