

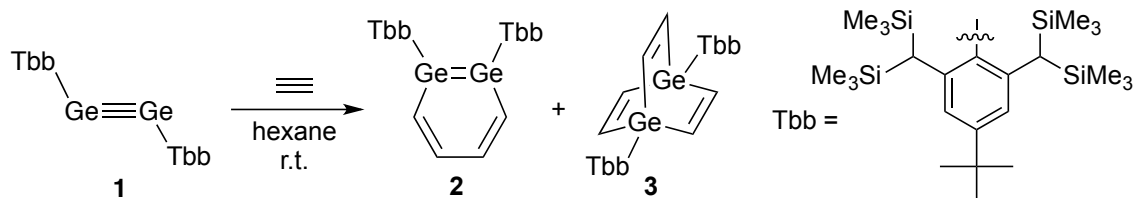
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析

Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Element Compounds

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系有機元素化学研究領域 郭 晶東

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において、Gaussian 09 プログラムによる量子化学計算により、高周期14 族元素であるゲルマニウムの三重結合化合物(ジゲルミン)の反応性を明らかにした。既に我々は、かさ高い置換基である Tbb 基(図参照)を活用することで、安定なジゲルミン **1** を合成・単離した。ジゲルミン **1** に対し、アセチレンを作用させたところ、1,2-ジゲルマベンゼン **2** とジゲルマバレン **3** が 61:22 の比で生成した。



これらの生成機構と、**2** が優先して生じることを検証する目的で、本反応経路を理論計算により求めることとした。計算には Gaussian 09 プログラムを用い、計算レベルは B3PW91/6-311G(3d,p)//B3PW91/3-21G(d)を用いた。分子モデルはリアル系について行うこととした。

上記量子化学計算の結果、**1** から共通の中間体 INT-2 を生じ、次のステップを律速として、**2** および **3** が生じることが分かった。活性化エネルギーは **2** を与える経路が **3** を与える経路よりも若干小さく、**2** が優先して生じることが示唆された。

発表論文(謝辞あり): Sugahara, T.; Guo, J.-D.; Sasamori, T.; Karatsu, Y.; Furukawa, Y.; Espinosa Ferao, A.; Nagase, S.; Tokitoh, N. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, *89*, 1375.

発表論文(謝辞なし): 特になし

