

高周期典型元素を含む新規結合様式の創出

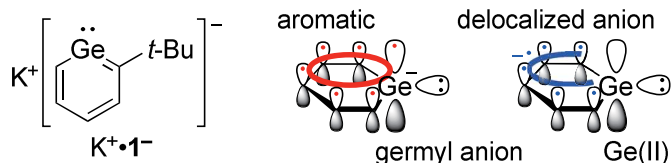
Synthesis of Compounds Having Novel Bonds of Heavier Main Group Elements

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 水畑 吉行

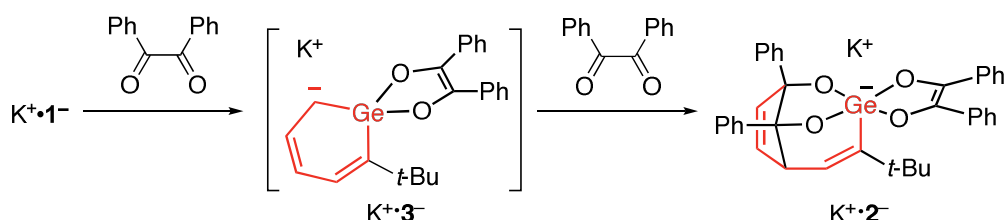
研究成果概要

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、Ge 核置換フェニルアニオン **1**⁻ (*ACIE* **2017**, *56*, 4588)とベンジル(ジフェニルエタンジオン)の反応機構に対する検証を行った。

1⁻は、母体であるフェニルアニオンと同様、環全体に電子が非局在化した芳香族化合物としての性質を



示す一方、フェニルアニオンでは無視できる二価ゲルマニウムとしての性質の関与が重要であることを理論計算から明らかにしてきた。これら性質の二面性を反応性の面から検証すべく、14 族元素二価化学種と[1+4]環化付加反応をおこすベンジルとの反応を行ったところ、ベンジル 2 分子が関与した五配位ゲルマネート **2**⁻を与えることが分かった。**2**⁻の形成において種々の経路が考えられたため、Gaussian16 プログラムを用いて、考えられる中間体および遷移状態の構造最適化およびエネルギーの算出、IRC 計算を行った。その結果、本反応は **1**⁻の二価化学種性を反映した **3**⁻の形成が第一段階として合理的であることを明らかにした。



発表論文(謝辞あり)

- (1) Tsuji, S.; Nishino, R.; Tokitoh, N.; Yamada, H.; Mizuhata, Y. *Main Gr. Met. Chem.*, **2024**, *47*, 20230031.
- (2) Uchida, D.; Yukimoto, M.; Tokitoh, N.; Yamada, H.; Mizuhata, Y. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **2024**, *650*, e202400131.
- (3) Miyazaki, K.; Yamamoto, K.; Yamauchi, M.; Mizuhata, Y.; Matsuda, H.; Shioya, N.; Hasegawa, T.; Aratani, N.; Yamada, H. *J. Porphyrins Phthalocyanines*, in press.

発表論文(謝辞なし)

- (1) Hatakenaka, R.; Urabe, K.; Ueno, S.; Yamauchi, M.; Mizuhata, Y.; Yamada, H.; Mikata, Y.; Kamijo, S.; Tani, F.; Murafuji, T. *Chem. Eur. J.*, **2025**, *31*, e202404679.