

重い元素を含む有機無機化合物

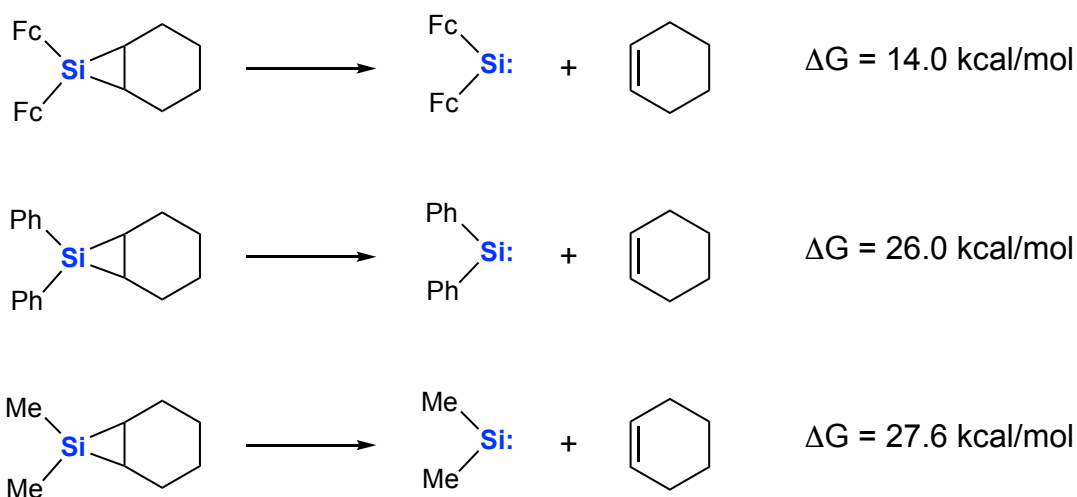
Organic-Inorganic Compounds Containing Heavier Main Group Elements

名古屋市立大学大学院理学研究科 笹森貴裕

(令和2年 10 月より筑波大学数理物質系)

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所・若宮淳志教授との共同研究に添って、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 16 プログラムによる量子化学計算により、高周期14族元素であるケイ素の二価化学種(シリレン)の性質を明らかにした。一般にケイ素二価化学種シリレンは、その空の 3p 軌道に起因する高い求電子性を有し、単離困難な活性化学種であることが知られている。近年は、速度論的安定化を施した特殊なシリレンについて、いくつか合成・単離例が報告され、シリレンが小分子活性化反応に活用できる有用な反応中間体であることが示されている。そこで、活性なシリレンを温和な条件で発生することができる適切な前駆体として、ケイ素-炭素-炭素三員環化合物「シリラン」を設計し、シリレン等価体としての機能を調べることにした。ケイ素上にどのような置換基を用いれば、温和な条件でシリレンを発生することのできるシリランとなりうるか、理論的に考察することとし、Gaussian 16 プログラムを用い、TDDFT 計算を行った。計算レベルは、B3PW91-D3(BJ)/6-311G(3d)を用いた。その結果、シリレンとシクロヘキセンの[1+2]環化付加体がシリレン前駆体として機能することが予想され、また、ケイ素上の置換基としては、フェニル基やメチル基よりも、フェロセニル基を導入した方が解離反応が有利に進行することが予想された。



発表論文(謝辞あり): Pan, Y.; Morisako, S.; Aoyagi, S.; Sasamori, T. *Molecules* **2020**, 25, 5917.

発表論文(謝辞なし): 特になし