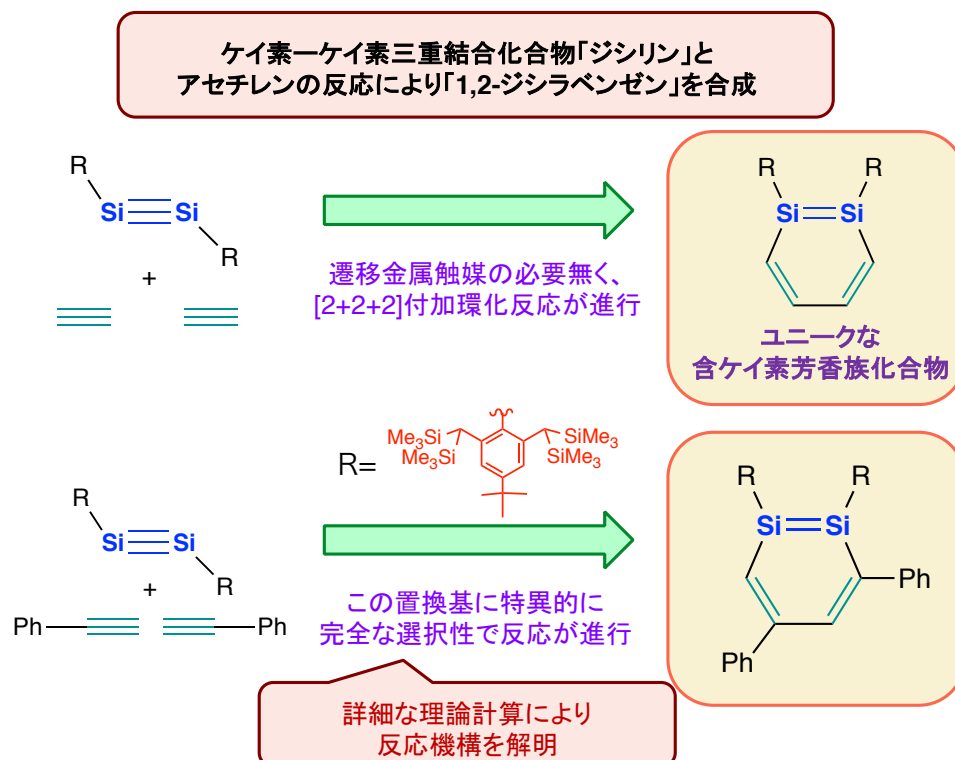


新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析
Theoretical Studies on the Reactions of Novel Main Group Element Compounds

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族元素であるケイ素を二つ含む 1,2-ジシラベンゼンについて、その生成機構を明らかにした。かさ高い置換基である Tbb 基 (2,6-[CH(SiMe₃)₂]-4-*t*-Bu-phenyl) を有するケイ素-ケイ素三重結合化合物とフェニルアセチレンとの反応により、3,5-ジフェニル-1,2-ジシラベンゼンが選択的に得られることが実験的に分かっている。そこでまず、Gaussian 09 プログラムを用い、反応経路計算を行った。B3PW91-D3(BJ)/3-21G* の計算レベルにて、構造最適化を行い、B3PW91-D3(BJ)/lanl2dz+d for Si, 6-31G(d) for C,H レベルにて振動数計算およびIRC 計算を行い反応経路を確かめた。その結果、1,2-ジシラシクロブタジエンを鍵中間体とする反応経路を明らかにし、高い選択性を合理的に説明できる結果を与えることができた。



発表論文(謝辞あり): Sugahara, T.; Guo, J.-D.; Hashizume, D.; Sasamori, T.; Nagase, S.; Tokitoh, N. *Dalton Trans.* **2018**, 47, 13318-13322.

発表論文(謝辞なし): 特になし