

課題名 (タイトル) :

有機化合物のコンホメーション、エネルギー解析

利用者氏名 : 平井 剛

所属 : 和光研究所 基幹研究所 袖岡有機合成化学研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々は、天然有機化合物を元に新たな分子を設計・合成し、その生物活性を調べることを研究している。有機化合物は、しばしば柔軟な構造を持つため、どの形の構造 (コンホメーション) がどのようなエネルギー状態にあるのかを知るには、計算化学的手法が必要となる。本年度は、主にハロゲンを含む有機化合物の構造計算に取り組んだ。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を利用し、各種ハロゲン化有機化合物の構造最適化計算を実行した。計算法は主に HF 法、もしくは密度汎関数法を用い、基底関数は主に 6-311+G(d,p) を用いた。

3. 結果

一部のフッ素原子を含む化合物において、基底関数によって構造最適化がうまく行かない場合が見られた。他の系に関しては、水中での計算も含め、概ね良好な結果を得た。

4. まとめ

計算構造と実際の有機化学反応の結果に、総じて良い一致が見られた。

5. 今後の計画・展望

今後は、最近見出したユニークな新規反応の遷移状態構造の計算に取り組みたいと考えている。