

課題名 (タイトル) :

フィサリンの合成研究

利用者氏名 : 森田 昌樹

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

ホオズキの苦味成分であるフィサリンは、種々の興味深い生物活性を有するがその生物活性発現機構は未解明である。我々は、フィサリンの特徴的なかご型構造に着目し、フィサリンとその構造類縁体の合成を行なっている。フィサリンの ABC 環部を Diels-Alder 反応によって構築する計画であり、基質の反応性(軌道関数および遷移状態)を計算化学的手法によって予備的に検討することとした。

なると考えている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 09 を利用し、約 20 種類のモデル化合物に対して、構造最適化及び軌道関数の計算を行った。計算法は主に密度汎関数法を用い、基底関数は 6-311G(d)を用いた。

3. 結果

置換基が軌道関数に与える影響に関して一定の知見を得た。結果に基づき実際に化合物を合成し、Diels-Alder 反応を検討したが、これまでのところ生成物を得ることができなかった。

4. まとめ

フィサリンの AB 環部を与える Diels-Alder 反応のモデル化合物の反応性を軌道関数計算によって検討し、置換基が反応性に与える影響について知見を得た。

5. 今後の計画・展望

実際の合成によって得られた知見も参考にして Diels-Alder 反応の新たなモデル化合物を設計し、その反応性について検討を行いたい。また、反応の選択性についても遷移状態計算を行うことで、実際の反応との比較により有益な議論が可能に