

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 : 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。当研究室では、フィサリンの特徴的な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きた。フィサリンの AB 環部は Diels-Alder 反応で構築することを計画した。そこで、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調査することを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

前年度に引き続き、Gaussian 09 を利用し、数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。また、より実際の系に近い複雑な化合物に対する構造最適化も試みた。計算法は主に分子軌道法、密度汎関数法を用いた。

3. 結果

幾つかのモデル化合物では計算が収束しなかったものの、構造最適化で得た立体配座と実際に合成した Diels-Alder 生成物の NMR データから、立体配座を推定することができた。

4. まとめ

フィサリンの AB 環部を与える Diels-Alder 反応の生成物の構造最適化により、生成物の立体配座についての一定の知見を得た。

5. 今後の計画・展望

遷移状態計算により、反応の立体選択性を議論する計画である。選択性を発現する要因が明らかになれば、より効率的に生成物を得る合成戦略の設計指針となると考えている。