

課題名 (タイトル) :

トリフルオロメチル化反応およびトリフルオロメチル化化合物の誘導化反応の機構解析

利用者氏名 : ○河村 伸太郎\*\*、薄井 嘉彦\*\*

所属 : \*環境資源科学研究センター 触媒・融合グループ

\*\*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、これまで新規トリフルオロメチル化反応の開発研究および反応機構の実験的な解明を行ってきた。量子化学計算によって想定された反応機構における遷移状態、中間体のフロンティア軌道およびエネルギーを議論することを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Guassian09 プログラムによって量子化学計算を行った。理論は主に B3LYP を用い、基底関数には 6-31+G(d) および LanL2DZdp を選択し、構造最適化および振動数解析を行った。

3. 結果

銅触媒および超原子価ヨウ素試薬を用いるトリフルオロメチル化反応の機構を検証した。実験的に明らかにした反応中間体のエネルギーの比較および分子軌道を議論した。量子化学計算によって得られた結果は、我々が想定した反応機構を支持するものであった。

4. まとめ

計算化学によって、実験的に推定した反応機構を裏付けることができた。

5. 今後の計画・展望

遷移状態を求めることで、より詳細な議論をしたいと考えている。