

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 C 環部を閉環メタセシス反応で構築することを計画した。閉環メタセシス反応の前駆体の最安定配座、並びに生成物の安定性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、構造最適化を行った。また、必要に応じて、特定の二面角に関する Scan も行った。計算法は主に半経験的分子軌道法、密度汎関数法を用いた。

3. 結果

総じて、基質の置換基が高くなるほど、期待する配座への回転障壁が高くなり、目的の反応が進行しにくくなることが予想された。また、生成物の安定性の検討から、最適な結合生成位置を推定した。これらの知見を基に実際に基質を合成して反応を試みたところ、概ね、計算結果を反映した結果が得られた。

4. まとめ

フィサリンの C 環部を構築する変換メタセシス反応における最適な基質を計算化学的に予測し、基質設計に際し有用な知見を得た。

5. 今後の計画・展望

残る課題は、C 環部存在下での AB 環部構築であり、昨年度までに得た知見と併せ、特に立体選択性に関する予測を行いたいと考えている。