

課題名 (タイトル) :

ポリエーテル系天然物の新規収束的合成法の開発

利用者氏名 : 斉藤竜男

所属 : 内山元素化学研究室

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
マイトトキシニンに代表される海洋産ポリエーテル系天然物の生物活性試験試料を迅速かつ大量に供給するため簡便かつ効率的な合成を行う必要がある。今回申請者は梯子状ポリエーテルの新規収束的合成法の開発を目的とする。
2. 具体的な利用内容、計算方法
最近発見した金(I)触媒を用いた新規中員環エーテル合成法の詳細な反応機構解析をもとに、本合成法の一般性を見出す。本環化反応は endo 環化、exo 環化の2つのルートが考えられそれぞれ異なる構造の成績体を与える。本研究では計算化学を駆使し、それぞれの遷移状態から選択性の議論を実験結果と併せて考察する。
3. 結果
様々な置換基を有する基質を用いて DFT 計算を用いた反応機構解析解析を行った。実際の合成で Baldwin 則に反する環化体が得られた基質では遷移状態のエネルギー計算の結果、実験事実を指示する結果を得た。その他現在のところ実験事実と異なる結果を与えていない。現在はさらに脱金化の段階の遷移状態についても計算をしている段階である。
4. まとめ
本合成法は基質の構造による立体選択的な環化反応であることが推察される。また脱金化の過程が反応全体に影響を与えている可能性も示唆された。
5. 今後の計画・展望
本合成法をさらに複雑な分子に応用し、検討を行う。さらに金触媒の配位子の効果についても計算して行く。