

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、高度に酸化され縮環したユニークなかご型構造を有する。また、フィサリンには、種々の興味深い生物活性が報告されている。当研究室では、特徴的なかご構造の生物活性への寄与を明らかにするため、有機合成化学を駆使し、天然物を含むかご型構造のフォーカスライブラリーの構築を目指している。本合成研究では、特に反応の立体制御が鍵となるため、設計した基質の構造最適化や遷移状態探索によって、反応の立体選択性に対する予備的な検討、或いは結果に対する考察を加えることを目的とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は、Gaussian 09 を利用し、基質の構造最適化並びに遷移状態の探索を行った。計算法は、半経験的手法で構造最適化した後、密度汎関数法を用いた。密度汎関数法における基底関数は、主として 6-31G(d) を用いた。

3. 結果

実際に検討した反応に対して、遷移状態探索を試みた。その結果、想定される立体化学のうち、一部の遷移状態構造を得ることができた。得られた構造の振動数計算を行い、目的とする反応サイトであることを確認した。異なる結果を与える、複数の置換基パターンで同様に遷移状態構造を求めたが、反応サイトのコンホメーションに顕著な違いは見られなかった。

4. まとめ

実際に実施した有機合成反応の遷移状態を探索した。分子内の置換基による反応点のコンホメーションへの影響を検討したが、顕著な違いは見られず、他の要因が影響していることが示唆された。

5. 今後の計画・展望

引き続き、他の立体化学を与える遷移状態の探索

を行う。活性化エネルギー等の比較を行うことで、望みの立体化学を与える基質の設計に繋げたい。