

グローバル COE 統合物質科学セミナー 開催報告書

(理学研究科) 林 民生

研究集会名：理学研究科化学専攻 有機化学セミナー

演者：Dr. Eric A. B. Kantchev

Institute of Materials Research and Engineering, A*STAR, Singapore

(材料研究・工学研究所, シンガポール科学技術研究庁, シンガポール)

演題：Catalytic Behavior of Transition Metal Complexes of All-Carbon Ligands:
Insights from Density Functional Theory

(炭素配位子をもつ遷移金属錯体の触媒作用)

場所：京都大学大学院理学研究科化学専攻 理学部 6 号館 571 号室

日程：2011 年 12 月 15 日 16:30–18:00

総参加者概数：約 30 名

講演内容：

Eric A. B. Kantchev 博士は、有機合成化学及び遷移金属触媒反応に精通した理論計算化学者であり、今回は、炭化水素配位子を持つ遷移金属錯体を用いた触媒反応の機構について密度汎関数理論に基づく理論計算をおこない、そこで得られた知見を中心に講演をおこなった。まず、ニッケル(ビス π -アリル)触媒によるブロモアルカンとアルキルグリニャール反応剤とのクロスカップリング反応について取り上げ、触媒サイクルの各中間体及び遷移状態を示すとともに、酸化的付加の段階が律速であるという計算結果について述べた。続いて、ロジウム/キラルジエン錯体を用いた不斉 1,4-付加反応について、エナンチオ選択性の発現機構を中心に理論計算の結果を披露した。とくに、基質の配座やロジウムへの配位形式の可能性をすべて考慮に入れて詳細な計算をおこなった結果、エナンチオ選択性の発現モデルを提唱することに成功し、実験事実との良い整合性が得られることを示した。さらに、講演後には活発な質疑応答も行われ、大変有意義な講演会となった。

