

小分子活性化を基盤とした量子化学計算による新規反応設計

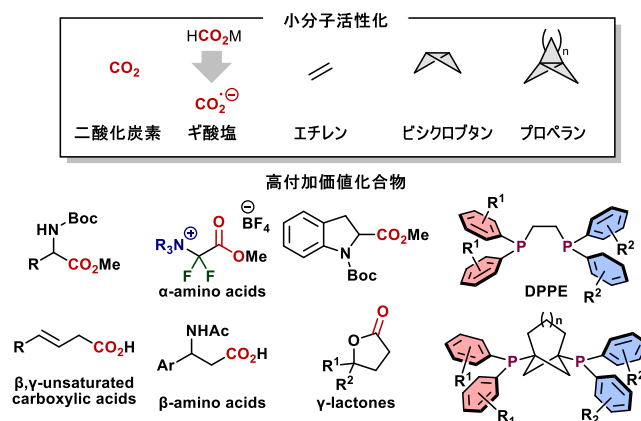
(北大 WPI-ICReDD¹・JST-ERATO²) ○美多 剛^{1,2}

Design of Novel Reactions Utilizing Quantum Chemical Calculations Based on Small Molecule Activation (¹WPI-ICReDD, Hokkaido Univ., ²JST-ERATO) ○Tsuyoshi Mita^{1,2}

The development of novel molecular transformation reactions leveraging organic synthetic chemistry is a critical challenge in building a sustainable society, and numerous organic reactions have been proposed to date. Among these, approaches utilizing small molecules, such as CO₂, an abundant and readily available carbon resource, have garnered significant attention. We have successfully developed new organic synthetic methods employing such small molecules, enabling the efficient synthesis of high-value-added compounds. More recently, leveraging the low computational cost of small molecules, we have also succeeded in incorporating quantum computational chemistry into reaction design.

Keywords : Organic Synthesis

有機合成化学を駆使した新しい分子変換反応の開発は、持続可能な社会の構築において重要な課題であり、これまでに多くの有機反応が提案されてきた。特に入手が容易な炭素資源である CO₂ などの小分子を活用する手法は注目を集めている。発表者は、これらの小分子を利用した新たな有機合成手法を開発し、高付加価値化合物を効率的に合成することに成功してきた¹。さらに最近では、小分子化合物の低計算コストという特徴を活かし、量子計算化学を取り入れた反応設計にも成功した^{2,3}。本講演では、これらの成果について紹介する。



References:

- 1) (a) Mita, T.; Chen, J.; Sugawara, M.; Sato, Y. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, *50*, 1393-1396. (b) Michigami, K.; Mita, T.; Sato, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 6094-6097.
- 2) (a) Takano, H.; Katsuyama, H.; Hayashi, H.; Kanna, W.; Harabuchi, Y.; Maeda, S.; Mita, T. *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 7034. (b) Takano, H.; Katsuyama, H.; Hayashi, H.; Harukawa, M.; Tsurui, M.; Shoji, S.; Hasegawa, Y.; Maeda, S.; Mita, T. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2023**, *62*, e202303435. (c) Krishnan, C. G.; Takano, H.; Katsuyama, H.; Kanna, W.; Hayashi, H.; Mita, T. *JACS Au* **2024**, *4*, 3777-3787.
- 3) (a) You, Y.; Kanna, W.; Takano, H.; Hayashi, H.; Maeda, S.; Mita, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 3685-3695. (b) Mangaonkar, S. R.; Hayashi, H.; Takano, H.; Kanna, W.; Maeda, S.; Mita, T. *ACS Catal.* **2023**, *13*, 2482-2488.