

畑中美穂（はたなかみほ）

【研究課題名】柔らかな不斉触媒系の立体選択性制御機構の解明



近畿大学 助教

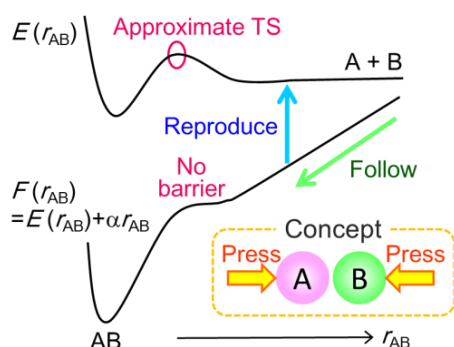
【E-mail】 hatanaka@chem.kindai.ac.jp

【専門】理論化学

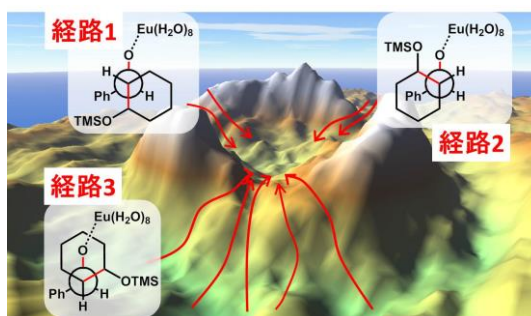
【キーワード】自動反応経路探索(GRRM)・人工力誘起反応法(AFIR)・不斉触媒反応

水存在下における反応では、柔らかな構造を持つ不斉触媒が多く用いられています。本研究では、そのような反応系の反応機構を調べることで、柔らかな不斉触媒が立体選択性を発現するための「鍵」を見つけることを目指します。

〈研究グループアクティビティー〉

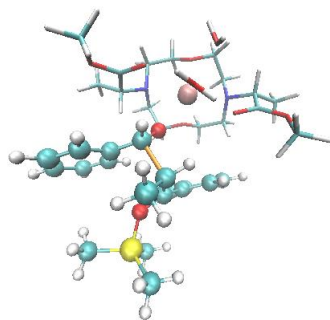
人工力誘起反応法による
反応経路探索

人工力を用いて反応障壁を消すことで、効率良く反応経路を探索

人工力誘起反応法を用いる
遷移状態の網羅的探索

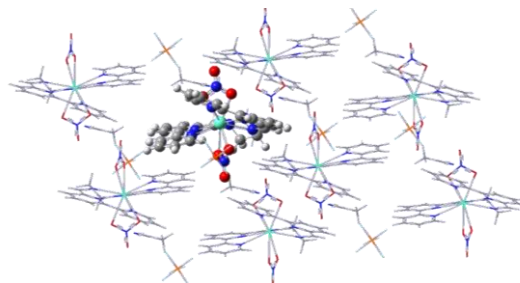
遷移状態を網羅的に探索することで立体選択性の定量的な議論が可能に

遷移状態の解析



反応の進行と共に、
配位構造が揺らぐ様子を追跡

発光材料への応用



GRRM をランタノイド化合物の発光・
消光過程の探索に応用することも可能

Miho Hatanaka

【Research Subject】 Mechanism of Stereoselectivity of Flexible Catalytic Reaction Systems



Assistant Professor
Kindai University

【E-mail】 hatanaka@chem.kindai.ac.jp

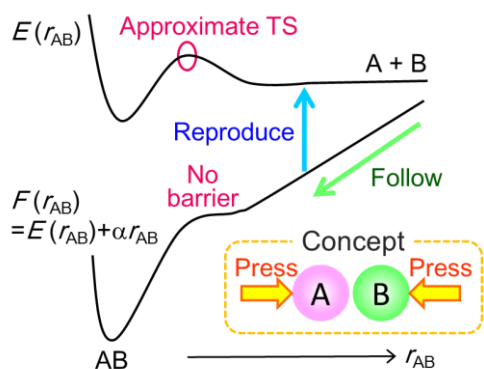
【Speciality】 Theoretical Chemistry

【Keywords】 Global Reaction Route Mapping (GRRM), Artificial Force Induced Reaction (AFIR) method, Chiral catalytic reaction systems

I focus on aqueous reaction systems catalyzed by flexible chiral complexes. The key to control the stereoselectivity in aqueous media is discussed by comparing the mechanisms of several stereoselective reaction systems.

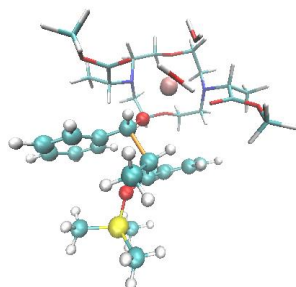
Research Group Activity

Reaction mechanism analysis by the AFIR method



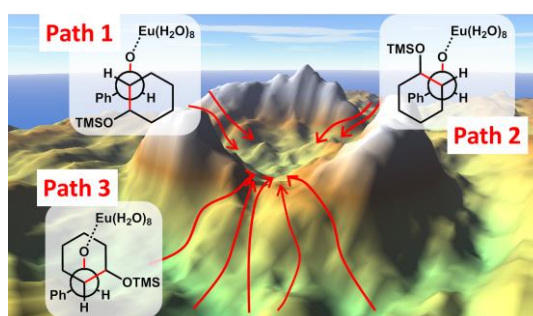
Efficient exploration of reaction pathways by removing reaction barriers

Analysis of the TSs



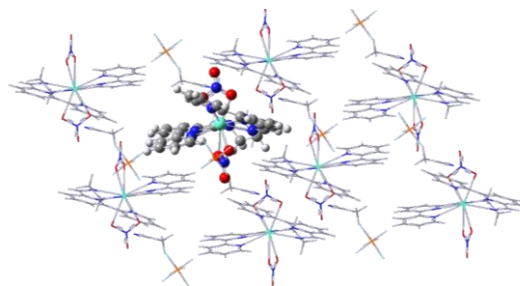
The fluctuation of coordination structure during the reaction can be followed

Exhaustive exploration of TSs by the AFIR method



The stereoselectivity can be discussed quantitatively by considering transition states (TSs) exhaustively

Luminescent materials



Application of the GRRM strategy for the lanthanide luminescent materials