

畑中美穂（はたなかみほ）

【研究課題名】柔らかな不斉触媒を用いる



水中での高立体選択的反応の機構解明

京都大学福井謙一記念研究センター フェロー

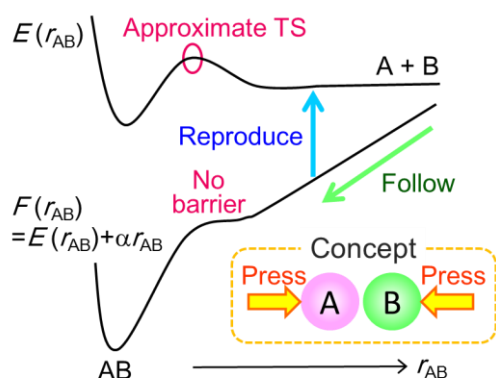
【E-mail】 miho@fukui.kyoto-u.ac.jp

【専門】理論化学

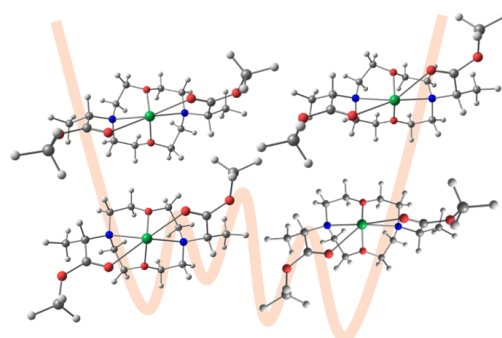
【キーワード】ランタノイドの化学、自動反応経路探索、不斉触媒

ランタノイド錯体をはじめとする、柔らかな構造を持つ不斉触媒を用いる反応の機構を明らかにします。特に、柔らかな構造の触媒がどのように立体選択性を制御するのかを明らかにし、より高立体選択的な反応を可能にする触媒の設計を目指します。

〈研究グループアクティビティー〉

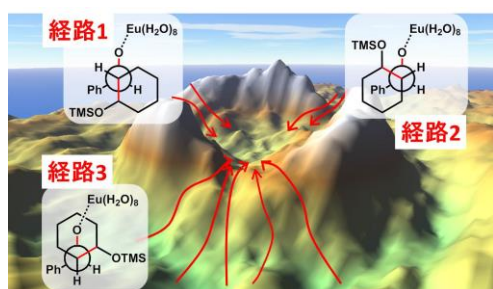
人工力誘起反応法による
反応機構解析

人工力を用いて反応障壁をなくすことで、効率良く反応経路を探索

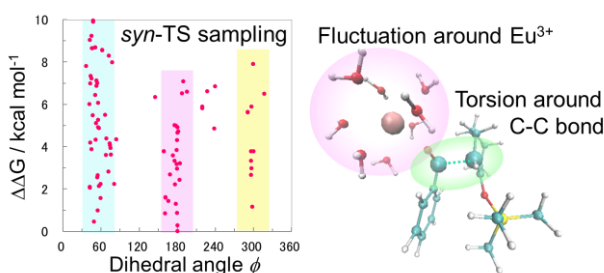
柔軟なランタノイド触媒の
構造分布の研究

非調和下方歪追跡法を用いた
Eu-DOTA 誘導体不斉触媒の
異性体構造の探索

人工力誘起反応法を用いた遷移状態の網羅的探索



(a) 基質の配向・錯体の配位構造のゆらぎにより、多数の遷移状態が存在



(b) C-C 結合生成段階の遷移状態の分布

Miho Hatanaka

【Research Subject】 Theoretical study of highly stereoselective aqueous reactions catalyzed by flexible chiral complexes



Fellow

Fukui institute for Fundamental Chemistry

Kyoto University

【E-mail】 miho@fukui.kyoto-u.ac.jp

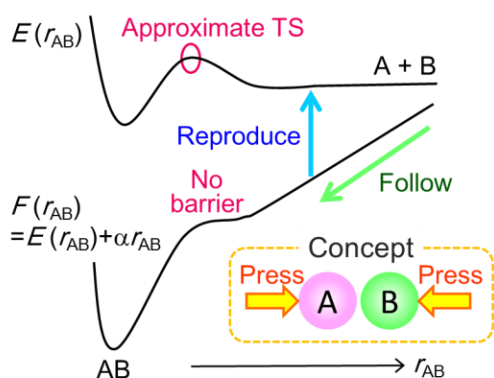
【Speciality】 Theoretical Chemistry

【Keywords】 Lanthanide Chemistry, Global reaction root mapping,
Chiral catalysts

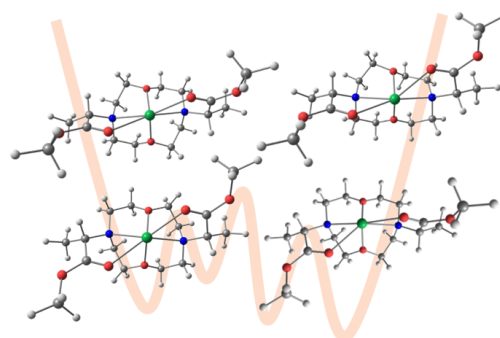
I investigate the catalytic reactions using flexible chiral complexes, such as lanthanide complexes. I focus on the mechanism how the flexible catalysts control the stereoselectivity and design highly stereoselective reaction systems.

Research Group Activity

Reaction mechanism analysis by the AFIR method

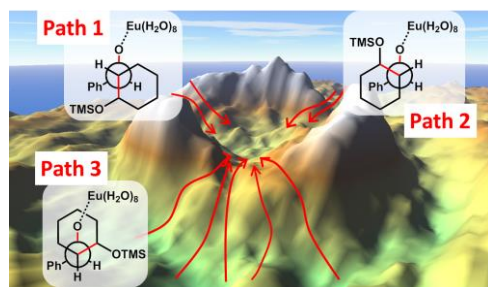


Geometrical distribution of flexible lanthanide catalysts

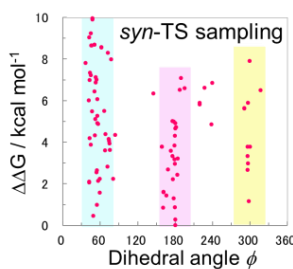


Exploration of conformers of chiral Eu-DOTA derivative by the ADD-following method

Exhaustive exploration of transition states (TSs) by the AFIR method



(a) Many TSs exist due to the orientation between substrates and the fluctuation of coordination structure around lanthanide



(b) Distribution of TSs for C-C bond formation

