

アミノ酸類の多段階合成と ^{13}C NMR 計算

(横浜市大院生命ナノ) ○及川 雅人

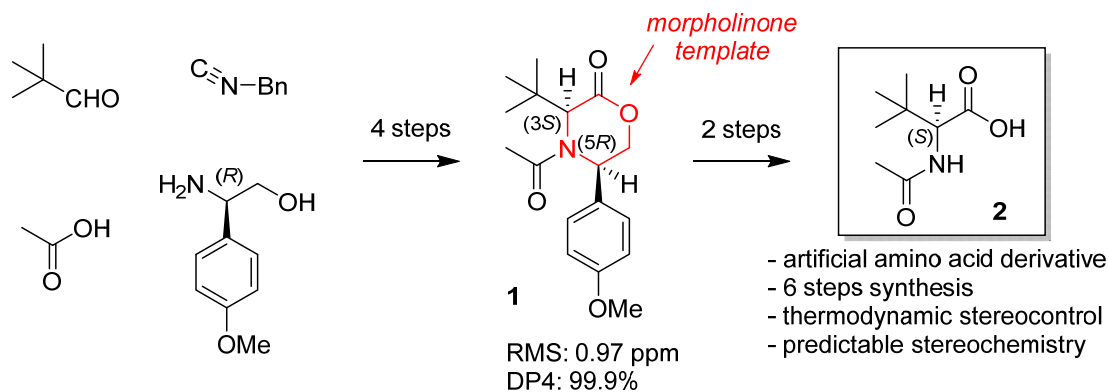
^{13}C NMR calculation for multi-step synthesis of amino acids

(Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University) ○Masato Oikawa

To design the key steps in multi-step synthesis of complex amino acids, we have been studied the strategy based on DFT calculation for analysis of the selectivities and the structures. Herein, we studied enantiospecific synthesis of amino acid derivative **2** via the chiral morpholinone **1**, stereospecifically prepared over four steps starting with Ugi four-component coupling reaction. Prediction of the stable conformers, thermodynamics, as well as the ^{13}C NMR profiles of the possible products were conducted employing $\omega\text{B97X-V/6-311+G(2df,2p)[6-311+G*]//\omega\text{B97X-D/6-31G*}$ model to establish an efficient route for synthesis of amino acid derivative. Other examples along the strategy will be also presented.¹⁾⁻³⁾

Keywords : Amino Acid; ^{13}C NMR; DFT calculation

多段階合成では鍵反応の設計が重要である。我々はそれをサポートすべく、DFT 計算による鍵反応の設計と、予想される生成物の構造解析について検討を行ってきた。本研究では、キラルなアミノ酸誘導体 **2** の合成に際し、Ugi 反応をはじめとする 4 段階により立体選択的に調製した morpholinone **1** を中間体とする経路を検討した。Morpholinone **1** の構築における選択性の予測と ^{13}C NMR 構造解析を DFT 計算 ($\omega\text{B97X-V/6-311+G(2df,2p)[6-311+G*]//\omega\text{B97X-D/6-31G*}$ model) により実施し、経路探索の効率化を実現したので、他の例も合わせて報告する¹⁾⁻³⁾。



1) Morokuma, K.; Irie, R.; Oikawa, M. *Tetrahedron Lett.* **2019**, *60*, 2067–2069

2) Oikawa, M.; Sugeno, Y.; Tukada, H.; Takasaki, Y.; Takamizawa, S.; Irie, R. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2019**, *92*, 1816–1823.

3) Tanaka, K.; Manabe, H.; Irie, R.; Oikawa, M. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2019**, *92*, 1314–1323.