



薬化学講座 准教授

東林 修平

ヒガシバヤシ シュウヘイ

博士（工学）

Associate Professor

Division of Advanced Molecular Chemistry

HIGASHIBAYASHI Shuhei

Ph.D. in Engineering

有機合成化学／生理活性物質／生体機能性分子／量子化学計算

Synthetic Organic Chemistry／
Biologically Active Organic Molecules／
Biofunctional Molecules／Quantum
Chemical Calculations

研究概要

生体機能性分子の新規合成法の開拓

医薬品やその候補となる生理活性天然有機化合物などの生体機能性分子の合成化学的供給は、有機合成化学者の重要な使命です。しかし、種々の官能基、ヘテロ原子、複素環を有する複雑な構造の有機化合物を効率的に合成するには、既存の反応・方法・試薬/触媒を用いるだけでは十分ではありません。含窒素天然有機化合物を主なターゲットとして、新しい合成反応、多段階合成法を研究し、生体機能性分子の効率的な生産に貢献することを目指しています。

分子の基礎的性質の解明

新しい合成法、反応試薬/触媒、生体機能性分子を開発するためには、構造、動的挙動、分子間相互作用、電子受容/供与、光吸収/発光などの分子の基礎的な物理化学的性質、化学反応性を明らかにし、理解することが重要です。各種実験化学的測定と計算化学を駆使して、分子の性質、反応性を総合的に理解し、新しい生体機能性分子の開発に繋がる研究を行っています。

実験化学と計算化学の協奏的手法による有機合成

近年、理論化学と計算機の進歩により、分子の性質や反応性を計算によって精密に分析、理解、予測することができるようになってきました。実験化学と計算化学を組み合わせることで、これまで理解が困難だった現象を理解したり、予測することが可能で、かつ効率的に研究を進められます。密度汎関数法を主とした量子化学計算を積極的に活用し、実験化学と計算化学を協奏的に用いた手法によって、新しい合成法の開発にチャレンジしています。

Development of Synthetic Methodology of Biofunctional Molecules - Synthesis of biofunctional molecules such as drugs and biologically active is an important task for synthetic organic chemists. Synthesis of complex molecules often suffered from inefficient conversions and the development of totally efficient syntheses are still difficult. We study the development of new synthetic methodology and efficient syntheses of nitrogen-containing natural products.

Elucidation of Fundamental Properties of Organic Molecules - For the development of new synthetic methodologies and biofunctional molecules, it is important to understand the fundamental physical and chemical properties of the molecules. We study the physicochemical properties of molecules by experimental measurements and theoretical calculations for the production of useful organic molecules.

Organic Synthesis by Synergetic Approach of Experiment and Computation - In recent years, quantum chemical calculation became a powerful tool for understanding and predicting properties and chemical reactivity of molecules. By employing the synergistic approach of experiment and computation, we challenge the development of new synthetic methodology of biofunctional molecules.

主な論文

- (1) Acid/base-regulated reversible electron transfer disproportionation of N-N linked bicarbazole and biacridine derivatives, *Chem. Sci.* **2015**, *6*, 4160.
- (2) Enantioselective synthesis of a chiral nitrogen-doped buckybowl, *Nature Commun.* **2012**, *3*, 891.
- (3) Total synthesis of siomycin A: completion of the total synthesis, *Chem. Asian J.* **2008**, *3*, 1013.

