

## テーマ：有機化学反応機構の理論的・実験的解析、及びテトラヒドロイソキノリン環の多点プロトン化による開裂

有機化学反応の反応性を定量的に記述する理論としては一般的にカノニカル遷移状態理論が知られているが、本理論は一定温度下の完全な熱平衡系を仮定したカノニカル分布を仮定しているため、そもそも非平衡系である化学反応の記述を行う上で根本的な欠陥を抱えている。現在、統計的理論の改良を志向した実験・理論研究を行っている。

また、有機合成化学的な研究としては、テトラヒドロイソキノリン環の多点プロトン化による開裂反応を行っている。通常、テトラヒドロイソキノリンは CN 結合の開裂に対して安定であるが、超強酸を溶媒として用いることで多点プロトン化しジカチオン・トリカチオンを発生させると C-N 開裂体が安定化され、有機合成において利用可能な中間体を生じる。本研究ではこれを材料化学的に興味深いトリアリールメタンや多環式芳香族化合物の置換体の合成へと応用した。