

テーマ：有機イオン対の非平衡動力学、及び超酸性環境を利用した有機反応の開発

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。特に、発熱的な反応の後に余剰の振動エネルギーを保ったまま次の反応が起こる反応系をカノニカル遷移状態理論で記述する場合、理論系と実験系との差異が大きくなる。また、反応のポテンシャルエネルギー曲面において複雑な枝分かれが起こる場合においても単純な遷移状態理論では理解・予測ができない。

現在、歴史的に重要な化合物であるノルボルニルカチオンの反応及びエン反応について古典的な反応速度解析と第一原理分子動力学法を組み合わせた解析を行っており、統計力学理論の破綻とそれを越えた反応生成物の予測法が明らかになってきている。

また、有機合成化学的な研究としては、強酸溶媒中での種々の分子の変換反応を行っている。テトラヒドロイソキノリン環を有する化合物からのトリアリールメタンや多環式芳香族化合物の置換体への変換、及び 8-オキソベルビン類の変換へと応用した。