

밀도범함수 이론 계산을 이용한 메커니즘 연구 및 리간드 디자인: 브로민화 아릴기의 상온 아민화 반응을 위한 구리 촉매 개발

Room Temperature Cu-Catalyzed Amination of Aryl Bromides Enabled by DFT-Guided Ligand Design

계산화학은 컴퓨터 시뮬레이션을 통해 물질의 구조와 특성을 구현하고, 이를 이용해 화학 문제를 해결하는 학문입니다. 밀도범함수 이론(DFT)은 이러한 시뮬레이션에 사용할 수 있는 여러 계산 방법론 중 하나로, 분자의 전자구조 및 에너지를 얻는 데 사용되며 이 방법론의 빠른 속도와 상대적 정확성 덕분에 계산화학을 이용한 화학반응의 메커니즘 연구에 널리 사용됩니다. 이번 발표에서는, DFT 계산을 얻은 분자의 에너지를 통해 어떤 방식으로 메커니즘 연구를 하는지 간단히 살펴보고, 계산화학을 통해 디자인한 새로운 구리 촉매의 개발 과정 및 성과를 소개할 것입니다. 해당 리간드는 (1) 구리의 전자 밀도를 증가시키고, 촉매와 기질 사이의 π - π interaction 을 유도하여 속도 결정 단계인 브로민화 아릴기의 산화적 첨가 반응을 촉진하고, (2) π -interaction 을 통해 활성화된 구리 촉매를 안정화하는 방향으로 디자인되었으며, 이를 통해 기존에 어려웠던 구리 촉매를 이용한 복합 브로민화 아릴기의 상온 알킬 아민화를 가능하게 한 것에 의의가 있습니다.

Computational chemistry implements the structure and properties of molecules and solids through computer simulation and employs the result to solve chemical problems. Density functional theory (DFT) is one of the methods that is widely used to obtain a molecule's electronic structure and energy due to its quick speed and relative accuracy. In this presentation, the way for the mechanism study harnessing DFT calculated energy will be briefly explained, and the procedure and performance of the new copper catalyst, which is designed based on DFT guidance, will be introduced. This ligand was designed to (1) increase the electron density on Cu and induce π - π interaction between the ligand and substrate, thereby facilitating the rate of oxidative addition, and (2) stabilize the active anionic Cu-complex via a π -interaction. Under optimized conditions, structurally diverse aryl and heteroaryl bromides and a broad range of alkyl amine nucleophiles, including pharmaceuticals bearing multiple functional groups, were efficiently coupled at room temperature.

