

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	浅子壮美
研究機関名	理化学研究所
所属部署名	環境資源科学研究センター
役職名	上級研究員
研究課題名	配向電場による非対称化を鍵とする反応制御
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

配向電場による反応制御の可能性は理論化学者により古くから検討されているが、実験的に実証されるようになったのはごく最近になってからである。そのような研究例は基盤上に基質を固定して外部電場を印加するような大掛かりな装置を必要とするものであり、反応のスケールアップも困難である。本研究では、分子性触媒内に人工的に誘起した配向電場を利用して「非対称化された反応場」を創発することにより、物質変換反応の選択性や速度を制御することを目標としている。

本年度は、研究の鍵となる双性イオン配位子として、ビピリジンの長軸方向(Y 軸)に配向電場をもたせたビピリジン誘導体の合成を達成し、単離・構造決定した。分子間相互作用を弱め溶解性を向上させる適切な置換基の導入により実験操作性が向上し、ビピリジン誘導体や合成中間体の溶解性・反応性・安定性に関する知見を得ることができた。また、これらの知見をもとにスピロビピリジンを基盤とした Z 軸配位子の合成にも着手し、目的物の生成を確認している。得られた配位子を用いて芳香族炭化水素の炭素-水素結合変換反応を試みたところ、選択性が僅かに向上するとの結果を得た。

現在、電場の大きさや共役の有無を変えた配位子群の合成に取り組むとともに、量子化学計算を用いた配位子・基質設計および反応解析を進めている。