

令和6年度 未来研究ラボシステム 研究成果報告書

研究種目：個人研究 研究期間：令和6年10月～令和7年9月（予定）

研究課題名：光電気協働作用による遷移金属触媒反応の開発

ラボ長

所属：大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 機能物質化学領域

職位 助教 氏名：藤井 郁哉

研究成果：

本研究課題では、光・電気エネルギーと遷移金属触媒を協奏的に活用することにより、入手容易で安定な出発原料から、複雑かつ有用な有機分子へと直接変換する新たな合成方法論の開拓を目指す（図1）。具体的には、電解装置およびLED光源を用いた光電気協奏触媒作用により、高エネルギーの触媒活性種を創出し、さらに配位子設計を通じて遷移金属触媒による選択的合成を実現することを目的とする。適切な触媒系および基質の二重活性化を図ることで、立体選択性・化学選択性・位置選択性を精密に制御し、ベンゼン、二酸化炭素、窒素分子といった安定な出発原料から高付加価値な複雑有機分子への変換を可能とする。



図1. 本研究課題の概略図

令和6年度においては、光反応装置および電解反応装置のセットアップを行った。さらに、可視光駆動型触媒を用いた不飽和化合物へのジアリール化反応やアミノ二官能基化反応を含む、5種類の新規触媒反応を見出した。これらは、いずれも従来の熱反応では進行が困難であり、合成化学的に新規性の高い変換反応である。現在、それらの成果について論文投稿に向けた検討・研究を継続している。くわえて、最終的な目標である光電気協働作用を利用した遷移金属触媒反応の開発に向け、光電気活性配位子を設計・合成した。以下に、これらの成果の詳細を報告する。

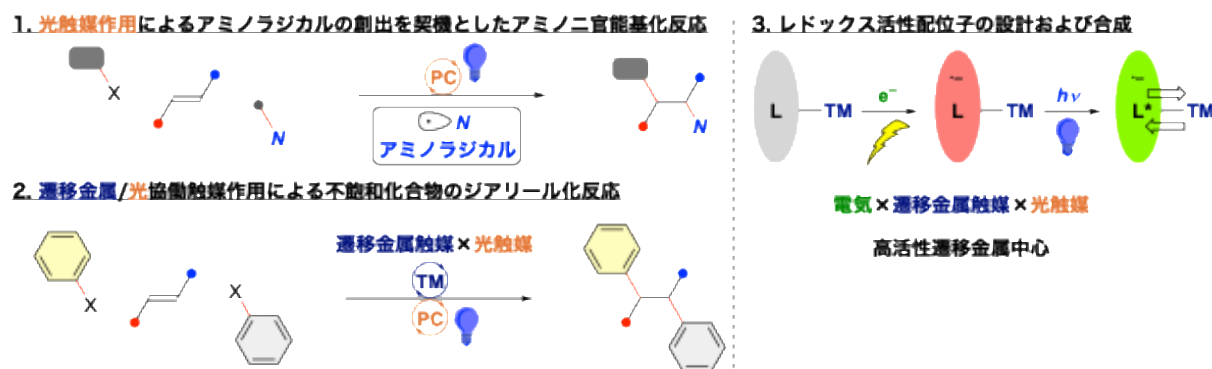


図2. 研究成果の概要

・光触媒を用いたアミノ二官能基化反応の開発

アミノラジカルは極めて高い反応性を示すとともに、従来の熱的条件では達成が困難なアンチマルコフニコフ型選択性を実現できるため、アミノ化反応において極めて有用である。また、得られるアミン化合物は医薬品をはじめとした生物活性分子の基本構造として重要であり、本研究課題は創薬化学において高い意義を有する。

本研究では、適切に設計されたアミノラジカル前駆体を用いることで、穏和な条件下でアミノラジカルを効率的に発生できることを見出した。さらに、これらの前駆体を用いることで、アルケンに対するアミノ二官能基化反応が進行することを明らかにした。本手法により、従来法では合成が困難であった分子構造を簡便に構築可能であることを示した。今後は、論文投稿に向けたデータ収集を進めるとともに、本研究で得られた知見を基盤として、光電気触媒を活用した新たな遷移金属触媒反応の開発に向けた触媒設計および反応機構の解明を進める予定である。

・新規可視光／遷移金属協働触媒反応の開発

アルケンの二官能基化は、入手容易な出発物質からビシナル型の置換パターンを導入することで分子の構造多様性を高める重要な手法である。中でも 1,2-ジアリール化構造は、天然物や生物活性分子中に頻出する重要なモチーフである。

本研究では、可視光応答型光触媒と遷移金属触媒との協働効果に着目し、従来の方法では構築が困難であった骨格を、安価かつ入手容易な出発物質から合成可能とする手法を開発した。今後は、反応の立体選択性の制御および基質適用範囲のさらなる拡張に向けた研究を継続し、反応一般性の向上を目指す。

・光電気協働作用による遷移金属触媒反応の検討

本研究では、理論計算に基づく配位子設計とその合成を行い、得られた配位子と白金触媒を組み合わせて、光および電気エネルギーを協働的に利用した芳香族化合物の骨格編集反応の可能性を探索した。現時点では、目的とする生成物は未だ得られていないものの、今後、反応量論的な条件での検討を通じて詳細な反応解析を行う予定である。加えて、多様な遷移金属触媒および配位子の組合せについて検討を進めることで、本反応系に適した条件の最適化を図る。最終的には、光電気協働作用を活用した新規触媒反応の実現を目指す。

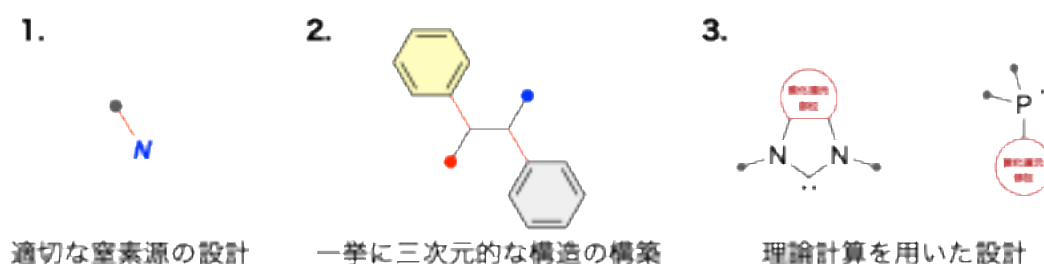


図 3. 研究成果

研究経費（R6 年度）の内訳：

備品費	消耗品費	旅費	謝金	その他	合計
0 円	450,000 円	0 円	0 円	0 円	450,000 円

共同研究者等：

(1) 共同研究者（氏名・所属）

新谷 亮・大阪大学・基礎工学研究科・教授

(2) 研究協力者（氏名・所属・学年（学生の場合））

森 泰平・基礎工学研究科・博士前期課程 1 年

発表論文等（令和 7 年 3 月 31 日現在）：

〔雑誌論文〕 なし

〔著書〕 なし

〔学会発表〕 藤井郁哉・新谷亮、[F]2403-2am-01、「有機光レドックス触媒による芳香族ヨウ化物を用いたシリルエノールエーテルのアリアル化反応」、日本化学会第 105 春季年会、2025 年 3 月 27 日、関西大学 千里山キャンパス

〔その他〕 なし

外部資金獲得状況・申請状況：

JSPS 科研費 2025 年度 「若手研究」に申請、採択内定

参考となる HP 等：

<https://researchmap.jp/fujiikuya>