

平成26年度(基盤研究(S))研究概要(採択時)

【基盤研究(S)】

理工系(化学)



研究課題名 フラッシュケミストリーの深化と新展開

京都大学・大学院工学研究科・教授

よしだ じゅんいち
吉田 潤一

研究課題番号: 26220804 研究者番号: 30127170

研究分野: 合成化学

キーワード: ファインケミカルズ、フローマイクロリアクター、機活性種

【研究の背景・目的】

有機合成化学は生物活性物質や機能性材料などの合成を通じ広範な分野に大きく貢献してきたが、依然として合成法が発展上の律速となっている場合が多いことも否めない。現在利用されている合成反応の多くはフラスコを用いて開発されたものである。しかし、フラスコは分子レベルやマクロなレベルから見ても必ずしも最適な反応環境とは限らない。合成化学をさらに発展させ時代の要請に即応させるためには、今までに蓄積された莫大な知識に立脚し再構築するとともに、新しい視点や斬新な手法を導入し、新たな高みへと飛躍する必要がある。

本研究の目的は、フローマイクロリアクターの特性を生かして短寿命活性種を制御し、高い選択性で反応時間秒～ミリ秒オーダーの超高速合成反応を行うフラッシュケミストリーを深化させるとともに進化させ、従来とは異なる新しい合成化学の分野を開くことである。具体的には、フローマイクロリアクター中で合成条件下での速度解析を行い、得られた定量的なデータによる速度論に基づいた合理的反応設計によりフラスコでは実現困難な新規分子変換法を開拓するとともに、さらに一般的かつ実践的な合成法へと広く展開する。

【研究の方法】

本研究では、フラッシュケミストリーの深化と体系化をめざす。その目的のために、各種有機活性種(有機アニオン種、有機カチオン種、ベンザイン、カルベノイドなど)について、生成と分解の速度論的解析を行い、得られた速度や活性化エネルギー等の定量的データに基づいた合理的反応設計により新反応開発(有機金属反応、光反応、気液反応、電解反応)へと展開するとともに、有用な高次機能性化合物の実践的合成へと成熟させる。

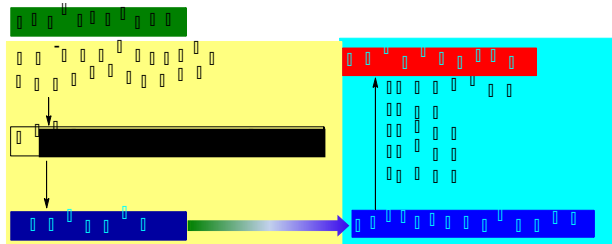


図1. 研究計画・方法の概要

具体的には、高性能低温フーリエ赤外分光装置(FT-IR)など備えたフローマイクロリアクター装置を開発し、短寿命活性種の直接観測を行うことによ

り、活性種の構造や安定性に関する知見を得る。

活性種生成方法として、通常の実験剤を用いるフローマイクロリアクターだけでなく、フロー型電解装置および光化学反応装置も開発する。

また、フローマイクロリアクターを用い温度-滞留時間マッピングを行うことにより、有機活性種の生成速度と分解速度の定量的な解析を行う。特に、寿命が非常に短い不安定有機活性種の生成と分解の定量化を実現するためには、数ミリ秒以下の高速混合や数ミリ秒オーダーの滞留時間制御、さらには超精密温度制御(デバイスの材質の検討)を可能とする次世代型のマイクロデバイスの開発が不可欠である。

そして、速度解析で得られた定量的なデータに基づき、有機活性種の高次制御を基軸とする一般性の高い新反応開発法を確立する。

【期待される成果と意義】

今までのフラスコ化学では、不安定活性種を扱うためには、温度を下げて寿命を長くするという方法、が用いられてきた。それに対してフラッシュケミストリーでは、温度を下げるのではなく時間を短くしかも精密に秒～ミリ秒単位で制御することにより、不安定な活性種の利用を可能にする点が学術的な特色であり独創的である。また、合成条件下での反応速度解析を行い、反応開発に定量性を導入することが大きな特色であり独創的な点である。本研究によって、反応開発のスピードと信頼性を飛躍的に向上させることができ、有機合成化学全体から見ても大きな学術的意義がある。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Flash Chemistry. Fast Organic Synthesis in Microsystems, Yoshida, J. Wiley, 2008.
- Flash chemistry: flow chemistry that cannot be done in batch. Yoshida, J.; Takahashi, Y.; Nagaki, A. *Chem. Commun.* 2013, 49, 9896.

【研究期間と研究経費】

平成26年度-30年度
147,700千円

【ホームページ等】

<http://www.sbchem.kyoto-u.ac.jp/yoshida-lab/yoshida@sbchem.kyoto-u.ac.jp>