

平成18年度顕在化ステージ 事後評価報告書

シーズ顕在化プロデューサー所属機関名：旭化成ケミカルズ株式会社

研究リーダー所属機関名：大阪大学

課題名：ヘテロ環化合物の触媒的な超効率合成と産業利用

1. 顕在化ステージの目的

本研究では旭化成ケミカルズ - 大阪大学の連携により、ファインケミカルズ原料として有用な新規ヘテロ環化合物の触媒的な合成法を開発することを目的とした。反応剤、触媒としては有機スズを基軸として高活性、高機能化を図った。まず基質として炭素源に α -ジカルボニル化合物、窒素源にイソシアナートを用いてスズ求核種との三成分等量反応を行ない、ワンポットでのヘテロ環合成を達成することを目的とした。次に上記等量反応の機構を考察し、スズの触媒化反応を設計した。すなわち α -ヒドロキシカルボニル類、イソシアナートを出発原料とし、副成物を全く伴わない高原子効率的反応を開発することを目的に研究を遂行した。

2. 成果の概要

大学の研究成果

ヘテロ環化合物は生理活性物質等に含まれる重要な化合物であり、立体構造を精密に制御したものや新規な化合物を簡便な方法で製造することは重要課題である。本研究では、高い求核性をもつスズ試薬の特徴を利用して、まず α -ジカルボニル化合物、アリルスズ種、イソシアナートの三成分ワンポット反応でのオキサゾリジノン合成を達成した。クロチルスズを用いた反応では、簡単な操作でヘテロ環生成物側鎖における位置および立体選択性を完全に制御することができた。特に旭化成ケミカルズとの共同作業により等量反応の反応機構からスズの触媒反応化を検討した結果、新規ヘテロ環化合物を触媒的に創製する技術を確立できた。

企業の研究成果

ヘテロ環化合物は有機材料等に含まれる重要な化合物であり、新規な化合物を触媒反応などの簡便な方法で製造することは重要課題である。本研究では大阪大学でのスズを用いた三成分等量反応の反応機構を考察した上、さらにスズの特徴を巧みに活かし、高効率スズ触媒反応を設計した。その結果、アルコキシスズ化合物を触媒として使い、さらにマイクロ波照射技術を組み合わせることにより、 α -ヒドロキシカルボニル類およびイソシアナートから、種々の新規なヘテロ環化合物を触媒的に創製する高原子効率反応を提供することができた。

3. 総合所見

当初の挑戦的な目標に対し、主要な目標である炭酸ガスの利用反応についてはその可能性を見出すには至っていないが、イソシアナート利用反応では一定の成果が得られた。ただし、研究期間中に特許の申請がなく、今後の研究開発に支障がないよう配慮する必要がある。